

УДК 004.942, 550.46

АППАРАТ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ КАК ПОДСИСТЕМА ПРОГНОЗИРОВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ГЕОЛОГО-ГЕОХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ДЛЯ ГЕОГРАФИЧЕСКИХ ИНФОРМАЦИОННЫХ СИСТЕМ

© В.А. Абрамова¹, А.В. Паршин², В.А. Романов³

¹Институт природных ресурсов, экологии и криологии СО РАН, 672014, Россия, г. Чита, ул. Недорезова 16а.

²Иркутский национальный исследовательский технический университет, 664074, Россия, г. Иркутск, ул. Лермонтова, 83.

^{2,3}Институт геохимии им. А.П. Виноградова СО РАН, 664033, Россия, г. Иркутск, ул. Фаворского, 1а.

На примере решения прогнозных геоэкологических задач рассматриваются преимущества и недостатки двух современных подходов к моделированию результатов геолого-геохимических процессов: компьютерного физико-химического моделирования (ФХМ) и традиционных ГИС-технологий. Обосновываются преимущества технологии компьютерного ФХМ в решении данного класса задач, анализируются недостатки современного этапа развития средств ФХМ. Отмечается, что традиционный ГИС-подход для прогнозирования требует данных мониторинговых исследований, что резко снижает его применимость на недостаточно изученных объектах и территориях. В свою очередь, одним из основных недостатков технологии ФХМ предлагается считать невозможность представления результатов расчетов в виде карт и схем. Анализируются способы реализации картографирования результатов термодинамического моделирования. Приводятся основные методические позиции геоинформационного подхода к обработке данных ФХМ, обеспечивающего количественный расчет и картографирование последствий вероятных геохимических процессов. Полученные результаты позволяют предположить дальнейшее развитие аппарата физико-химического моделирования как подсистемы ГИС.

Ключевые слова: физико-химическое моделирование; геоинформационные технологии; геоэкологическое прогнозирование.

PHYSICO-CHEMICAL MODELING AS A GEOLOGICAL AND GEOCHEMICAL PROCESS RESULT FORECASTING SUBSYSTEM FOR GEOGRAPHIC INFORMATION SYSTEMS

V.A. Abramova, A.V. Parshin, V.A. Romanov

Institute of Natural Resources, Ecology and Cryology SB RAS, 16a Nedorezov St., Chita, 672014, Russia.

National Research Technical University, 83 Lermontov St., Irkutsk, 664074, Russia.

A.P. Vinogradov Institute of Geochemistry SB RAS, 1a Favorsky St., Irkutsk, 664033, Russia.

On the example of the solution of forecasting geoeological problems the advantages and disadvantages of the two current approaches to modeling the results of geological and geochemical processes – computer physico-chemical modeling (PCM) and traditional GIS technologies – are considered. The paper substantiates the advantages of a computer physico-chemical modeling technology in solving the problems of this class and analyzes the shortcomings of the current stage of PCM tools development. It is noted that the prediction by means of the

¹Абрамова Вера Александровна, младший научный сотрудник, тел.: 89242771752, e-mail: vera_abramova79@mail.ru

Abramova Vera, Junior Researcher, tel.: 89242771752, e-mail: vera_abramova79@mail.ru

²Паршин Александр Вадимович, кандидат геолого-минералогических наук, руководитель совместной научно-исследовательской лаборатории геологической информатики ИГХ СО РАН и ИРНТУ, тел.: 89027666990, e-mail: sarhin@geo.istu.edu

Parshin Aleksandr, Candidate of Geological and Mineralogical sciences, Head of the Joint Research Laboratory of Geological Information Science of A.P. Vinogradov Institute of Geochemistry and Irkutsk National Research Technical University, tel.: 89027666990, e-mail: sarhin@geo.istu.edu

³Романов Виктор Александрович, кандидат геолого-минералогических наук, главный специалист лаборатории геохимии рудообразования и геохимических методов поисков, тел.: (3952) 422645, e-mail: romanov@igc.irk.ru

Romanov Viktor, Candidate of Geological and Mineralogical sciences, Chief Specialist of the Laboratory of Ore Genesis and Geochemical Prospecting Methods, tel.: (3952) 422645, e-mail: romanov@igc.irk.ru

traditional GIS approach requires the data of monitoring studies, which drastically reduces its applicability to the insufficiently studied objects and territories. It is proposed to treat the inability to submit the calculation results in the form of maps and charts as one of the main drawbacks of the PCM technology. The ways of implementing the mapping of thermodynamic modeling results are analyzed. The basic methodological provisions of the geoinformation approach to PCM data processing that provides a quantitative calculation and mapping of the effects of possible geochemical processes are given. Obtained results suggest that the apparatus of physico-chemical modeling will continue to develop as a GIS subsystem.

Keywords: physico-chemical modeling; geoinformation technologies; geoecological forecasting.

Современные концепции рационального природопользования подразумевают сопровождение хозяйственной деятельности по освоению месторождений геоэкологическими исследованиями, позволяющими контролировать антропогенное воздействие и прогнозировать его последствия. В связи с этим возникает потребность в создании и совершенствовании экономических и эффективных механизмов геоэкологического мониторинга и прогнозирования. Методы и средства контроля не могут являться полностью универсальными и должны быть построены с учетом выявленных региональных или локальных факторов, учитываемых при моделировании воздействий производства [6]. Стандартным подходом для решения задач геоэкологического контроля признаны геоинформационные системы [8], основным вариантом представления геоэкологической обстановки являются карты и схемы, при этом аномальные по качеству среды участки должны быть однозначно выделены цветом или знаком [8, 6], а также при необходимости сопровождаться диаграммами, графиками, подписями. Современные ГИС-системы эффективно обеспечивают информационный поток, выраженный как последовательность сбора данных, их хранения, обработки и представления в удобном для анализа виде.

Являясь отраслевым стандартом и имея очевидные преимущества по сравнению с другими способами обработки и визуализации геоинформации, классические ГИС имеют очевидное слабое место в классе задач, связанных с прогнозированием результатов потенциально возможных процессов. Действительно, основным механизмом прогнозирования в традиционных ГИС-системах является

использование механизмов регрессии и экстраполяции, примененных к имеющейся в базе данных информации. В случае решения задач охраны окружающей среды на уже эксплуатируемых объектах имеется мониторинговая информация, которая позволяет принимать обоснованные решения исходя из накопленных данных или по крайней мере данных об участках-аналогах. Однако в случаях, когда необходимо оценить возможные последствия хозяйственной деятельности на неосвоенных объектах, находящихся на недостаточно изученных площадях или территориях, характеризующихся уникальными условиями природной среды, такой информации не имеется. Выполнение обычного геоэкологического мониторинга в таком случае не обеспечивает решение прогнозных задач, поскольку он невозможен до фактической реализации воздействия на окружающую среду, при этом требует значительных ресурсов и времени. Успешное решение прогнозных задач невозможно без усовершенствования общепринятого геоинформационного подхода. Экономичное и эффективное с точки зрения геологии решение должно позволять реконструкцию вероятных геохимических процессов и их последствий для окружающей среды на основе ограниченного набора входных параметров (химических и пространственных кондиций объектов-источников вещества, количества атмосферных осадков, температурных условий и т.п.).

В данной постановке задачи из существующих средств компьютерного моделирования геолого-геохимических процессов и их последствий для окружающей среды наибольший интерес вызывают технологии физико-химического моделирования (ФХМ) [3, 11, 12, 13].

Под ФХМ понимается моделирование физико-химических процессов, протекающих в сложных системах (мульти- и мегасистемах), связанных между собой потоками вещества и энергии. ФХМ основано на методе минимизации термодинамических потенциалов [3]. В физико-химических моделях могут учитываться условия, выражающие кинетические ограничения, метастабильные состояния, удерживающие отдельные компоненты и фазы от распада, которые в обычных термодинамических моделях не рассматриваются.

На данный момент широко известно, что с помощью компьютерного моделирования можно более детально изучить, а также количественно воссоздать и предсказать ход протекания физико-химических процессов в неравновесных природно-техногенных системах [11]. Исходными данными для термодинамических расчетов в первую очередь выступают химический состав исходных веществ, а также внешние условия, в которых находится система (температура T и давление P). Математические алгоритмы современных средств ФХМ позволяют перейти от ограниченного набора исходных химических данных к конечным формам веществ, например корректно реконструировать результаты процесса выветривания, что соответствует задаче вычисления количества и форм веществ, образующихся при взаимодействии отвалов горных пород с атмосферой и осадками. Это означает, что, имея ограниченную информацию о породах и рудах осваиваемого объекта, климатической обстановке и проект инфраструктуры месторождения, можно реконструировать геохимические процессы, которые, возможно, произойдут в запроектированной ситуации, рассчитать выделяемые из отвалов и хвостов состав, формы и количество веществ-загрязнителей. Важным преимуществом такого подхода является гибкая адаптация расчета под внешние условия окружающей среды конкретной территории.

Тем не менее современные технологии ФХМ имеют существенные ограничения в применимости. К важнейшему с позиций их широкого внедрения в практику геоэкологической деятельности авторы относят невозможность представления результатов расчетов в картографическом виде, связанную с отсутствием поддержки пространственных позиций. Это ограничение на данный момент не позволяет напрямую использовать подсистемы ФХМ в составе геоинформационных систем геоэкологического прогнозирования. Решение этой проблемы имеет большое значение не только для охраны окружающей среды, но также и для других типов задач в науках о Земле и смежных дисциплинах, в том числе обеспечения поисков и разведки месторождений полезных ископаемых.

В данной работе проблема геоинформационной обработки и картографического представления данных ФХМ рассматривается на примере проекта освоения Удоканского месторождения меди [10]. Его освоение планируется к 2022 году, в настоящее время разработан проект [7], который определяет места расположения хозяйственных объектов, кондиции хвостов и отвалов и прочие необходимые для оценки воздействия на окружающую среду параметры. Выбор данного объекта в качестве модельного связан с особенностями геохимических процессов и сложностью их реконструкции традиционными ГИС-средствами: месторождение расположено в условиях криолитозоны, последние работы [1, 2, 5] указывают на то, что классические представления о ходе и результатах процессов криогенного выщелачивания меди из сульфидных руд не вполне соответствуют их реальному ходу. Авторами был апробирован метод термодинамического моделирования применительно к изучению криогеохимических процессов в отвалах сульфидных руд [2] и сформирована научная основа прогнозирования результатов процессов выщелачивания загрязняющих окружающую среду компонентов, в частности меди,

которая вместе с прочим включает кинетические особенности процессов.

Для выполнения физико-химического моделирования использовалась среда «Селектор», которая наряду с HCN и Chemical WorkBench является одной из лидирующих сред моделирования в России. Результаты ФХМ представлены в виде таблицы значений молярного (обычно) или массового количества вещества по всем вероятно образующимся формам соединений, вычисленного для определенных химических и весовых кондиций объекта-источника и взаимодействующих с ним частей атмосферы и гидросферы (рис. 1).

Итоговыми материалами должны стать типичные для геоэкологических работ карты и схемы, отражающие качество среды или же степень воздействия на нее. Традиционные мониторинговые наблюдения предполагают измерения качества среды по сети точек, в нашем же случае из отчета [7] известны источник (отвалы и хвосты) и результаты фи-

зико-химического моделирования возможных процессов выветривания, происходящих в них [1]. В этом случае возникает проблема распределения полученных результатов на определенную площадь.

В данном примере рассмотрено хвостохранилище № 2 Удоканского месторождения (рис. 2), поскольку карьеры и их отвалы в экологическом плане представляют собой меньшую опасность, чем хвосты от горно-обогатительного комбината, так как в них складированы в основном вмещающие оруденение породы, а руда поступает на фабрики по извлечению полезных металлов, в данном случае это медь. В хвостах же складированы рудные отходы после обогащения и частичного извлечения меди.

Вынос компонентов из пород и руд и участки повышенных концентраций образующихся веществ в водах и рыхлых отложениях формируют потоки или ореолы рассеяния, которые возможно картировать и классифицировать в

name phase	volume, cm ³	mole quantity	mass, g	density, g/cm ³	weight %
AqueousSol.	1172.43806	6.54532e+01	1542.8813	1.31596e+00	0.15412
Gas	705086997.28842	3.46664e+04	999479.2500	1.41753e-03	99.83603
CuSO4(H2O)5	0.00000	3.95302e-01	98.7013	0.00000e+00	0.00986
Icel	0.00000	1.24159e-04	0.0022	0.00000e+00	0.00000

chemical composition	disparity balance mass	molality	mg/kgH2O	dual solution	chemical potential	log molality
C	10.2124902	1.7961e-10	1.072e+01	1.287e+05	-185.46967	-91459
N	5.5105e+04	2.6994e-09	1.352e+00	1.894e+04	2.68201	1323
Cu	0.7706303	7.3826e-09	3.939e-01	2.503e+04	-87.64814	-43221
S	0.7706303	2.2036e-09	3.939e-01	1.263e+04	-255.20013	-125845
H	111.0168715	7.2094e-09	1.339e+00	1.350e+03	-57.66575	-28436
O	1.4312e+04	1.6419e-08	2.703e+01	4.325e+05	1.66262	820
e	0.0000e+00	2.8011e-13	57.00043	28108		

Dependent components:	gT cal/mole	molality	mole quantity	mg/kgH2O or wt.%	log mole	coeff. activity	log cf. activ.	ln activity
AqueousSol.								
CO2*	-89103	1.0718e+01	1.021248967613e+01	4.7168e+05	1.030	1.2556	0.099	-1.630
Cu+2	16106	8.3454e-02	7.952043172731e-02	5.3032e+03	-1.079	0.4018	-0.396	-7.625
HNO3*	-20785	1.7939e-02	1.709365946176e-02	1.1304e+03	-1.746	0.8441	-0.074	-8.420
H2SO4-	-176745	3.7917e-01	3.61299790335e-01	3.6807e+04	-0.421	2.2691	0.356	-4.380
N2*	7024	6.3773e-03	6.076739708551e-03	1.7865e+02	-2.195	0.7983	-0.098	-9.510
HNO3-	-22274	7.1421e-01	6.805462180693e-01	4.4284e+04	-0.146	2.0380	0.309	-3.854
O2*	6755	1.4314e-03	1.363940155709e-03	4.5803e+01	-2.844	0.7475	-0.126	-11.070
SO4-2	-174507	7.8722e-03	7.501163192358e-03	7.5623e+02	-2.104	4.4496	0.648	-7.581
Cu(HO3)2	-33183	3.0359e-01	2.892805053052e-01	5.6940e+04	-0.518	1.2909	0.111	-5.166
CuSO4	-161442	6.8504e-03	6.527552452481e-03	1.0934e+03	-2.164	1.2909	0.111	-8.958
H+	1587	9.4222e-01	8.978079975080e-01	9.4970e+02	-0.026	0.4503	-0.347	-5.087
H2O	-55925	5.5510e+01	5.289370150957e+01	1.0000e+00	1.744	1.0000	0.000	-0.213
Gas								
N2	2758		2.7551772499229e+04	77.22	4.440	0.9992	-0.000	-0.231
O2	2421		7.114654492010e+03	22.78	3.852	0.9986	-0.001	-1.585
CuSO4(H2O)5								
CuSO4(H2O)5	-446049		3.953018224005e-01	100.00	-0.403	1.0000	0.000	0.000
Icel								
H2O	-56010		1.241588470714e-04	0.00	-3.906	1.0000	0.000	0.000

Рис. 1. Пример представления результатов расчетов в среде физико-химического моделирования «Селектор»

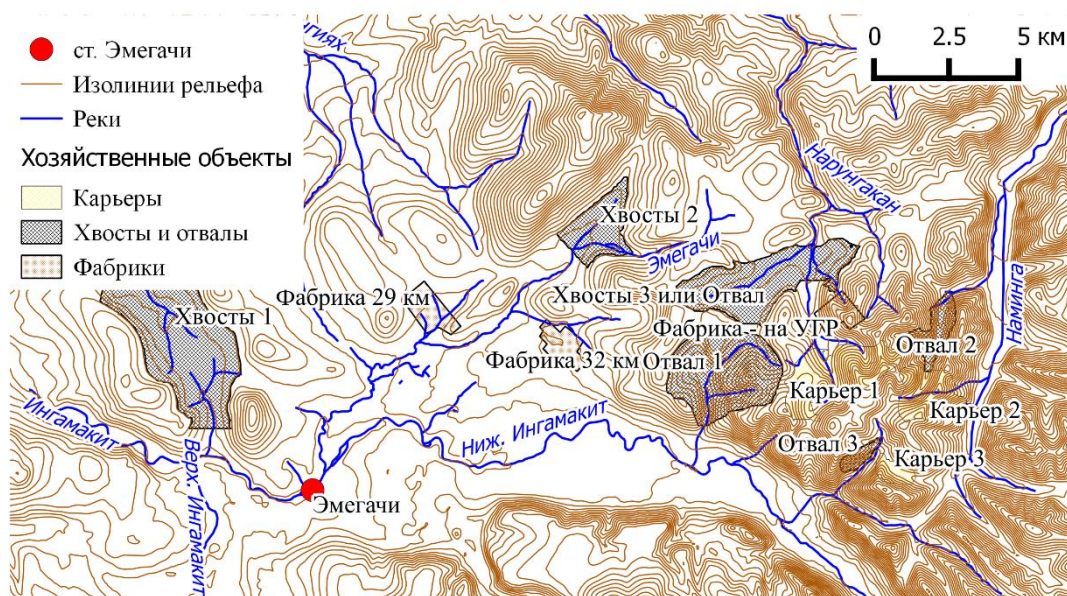


Рис. 2. Хозяйственные объекты Удоканского месторождения (по [7] с изменениями авторов)

соответствии с общепринятыми ПДК, ПДВ или же региональным геохимическим фоном. Для картирования концентраций меди на площади в первую очередь необходимо вычислить количество вещества, выделяющегося из складированных пород и руд в течение определенного времени, на второй стадии научно обоснованным образом распределить результаты на территорию. Можно предложить по крайней мере три способа такого расчета.

1. Выполнить расчет с помощью среды ФХМ в молярных концентрациях. В этом случае для получения массового количества образующегося вещества необходимо выполнить пересчет из молярных концентраций, который сам по себе представляет не всегда простую научно-техническую задачу.

2. Некоторые среды ФХМ, в том числе специальные версии ПК «Селектор» [11], поддерживают расчет не только в молярных концентрациях, но и в единицах массы вещества. К сожалению, в любом случае в результате термодинамического моделирования получится конечный объем вещества, которое будет выделяться за неопределенное время, тогда как экспериментальное изу-

чение кинетики процесса физико-химического выветривания позволяет не только получить временную характеристику, но и определить степень воздействия на окружающую среду в конкретный временной промежуток.

3. Выполнить две серии физико-химического расчета: с учетом региональных параметров среды и без них, определить коэффициент поправки «за региональную геохимию». В модельном примере роль региональной поправки играет влияние соединений азота на ход криогеохимических процессов. Ранее полученные данные указывают на увеличение привноса меди в раствор на величину до 30% [1, 2, 5]. Результаты расчетов, в которых не учитывалось влияние регионального геохимического фактора – соединений азота (NO_2) техногенного происхождения, можно считать аналогом классических представлений о процессе выветривания, принимающихся за основу при традиционном расчете потоков рассеяния.

На первом этапе разработки подхода к геоинформационной обработке и картографированию результатов ФХМ за основу был взят третий метод. Использована классическая методика рас-

чета потока рассеяния от рудного объекта [9], изучаемый элемент – медь. Основные методические положения такого расчета сводятся к следующим позициям.

1. Определяется гидрометрический створ или створы, в данном случае имелась информация только по одному пункту – Эмегачи (см. рис. 2). Отсутствие детальной гидрометрической информации вполне типично для слабоизученных территорий, поисковые исследования методом поисков по потокам рассеяния сопровождаются гидрометрическими исследованиями, однако с позиций решения прогнозных геоэкологических задач на неосвоенных территориях выполнение таких работ невозможно. По данным с имеющегося пункта можно определить годовой вынос вещества в целом и ежегодный слой денудации, необходимые для определения влияния техногенной нагрузки на уровни содержания меди в воде, взвесьях и донке, то есть на экологию района.

2. Рассчитывается величина ежегодного слоя денудации в бассейне реки, в данном случае р. Нижний Ингамакит. При этом используются литературные данные по плотности стекаемого вещества и по количеству вещества, транспортируемого по дну реки (1/10 от взвесей) [9].

3. Далее необходимы данные по содержаниям меди в воде и во взвесьях для расчетов коэффициента ее водной миграции. В классическом подходе могут быть использованы данные из литературных источников. Так, из [9] следует, что в растворе миграция меди равна 60%, а во взвесьях – 40%. Эти данные рассчитаны для пород, где медь присутствует в виде примеси в акцессорных минералах. Естественно, коэффициент водной миграции меди в реках, дренирующих Удоканское месторождение, будет намного выше, так как в зоне гипергенеза минералы меди неустойчивы, однако научно обоснованные значения для недостаточно изученных объектов, как правило, в литературе отсутствуют.

4. Рассчитываются возможные содержания меди во взвесьях и в воде по гидрометрическому створу. По этой станции в поток рассеяния попадет материал карьеров и отвалов № 1 и № 3, а также хвосты 2 в верховьях рч. Эмегачи. Рассчитываются их площади и объем годового сноса материала.

В результате модельного расчета привнос меди в воду из хвостов по ст. Эмегачи обеспечил дополнительное содержание меди в 1 л воды в 1,28 мкг. Картографическое представление расчета представлено на рис. 3, а.

Анализ методики и полученной картосхемы показывает недостатки традиционного расчета. Во-первых, используется значительное количество литературных данных, в первую очередь гидрометрических, детальность расчета напрямую зависит от наличия и детальности этой информации и делает расчет в условиях, когда гидрометрическая информация отсутствует, невозможным. В приведенном примере всей площади влияния отвалов на водотоки присвоена единая концентрация меди в 7,6 мкг/л при фоне в 6,3, поскольку расчет опирается на один гидрометрический створ, при этом очевидно, что на коротких расстояниях содержания меди в воде будут в десятки и сотни раз выше приведенной величины. Во-вторых, используются литературные зависимости о количестве и соотношениях вещества, выделяющегося в воды и донные осадки, которые являются универсальными и не учитывают специфику геохимических процессов в конкретных природных условиях, имеющую, как показано в настоящей работе, определяющее значение. Так, в предыдущих работах [1, 4] показано, что совокупность природных и антропогенных факторов интенсифицирует выщелачивание меди из сульфидных руд в среднем на 30% при рассмотрении годового цикла. Исходя из этого, внесение поправки по третьему варианту расчета представляется возможным, однако такой вариант не обеспечивает решения проблемы недостаточной простран-

ственной детальности геоэкологического прогноза и вовсе невозможен при отсутствии корректной гидрометрической информации.

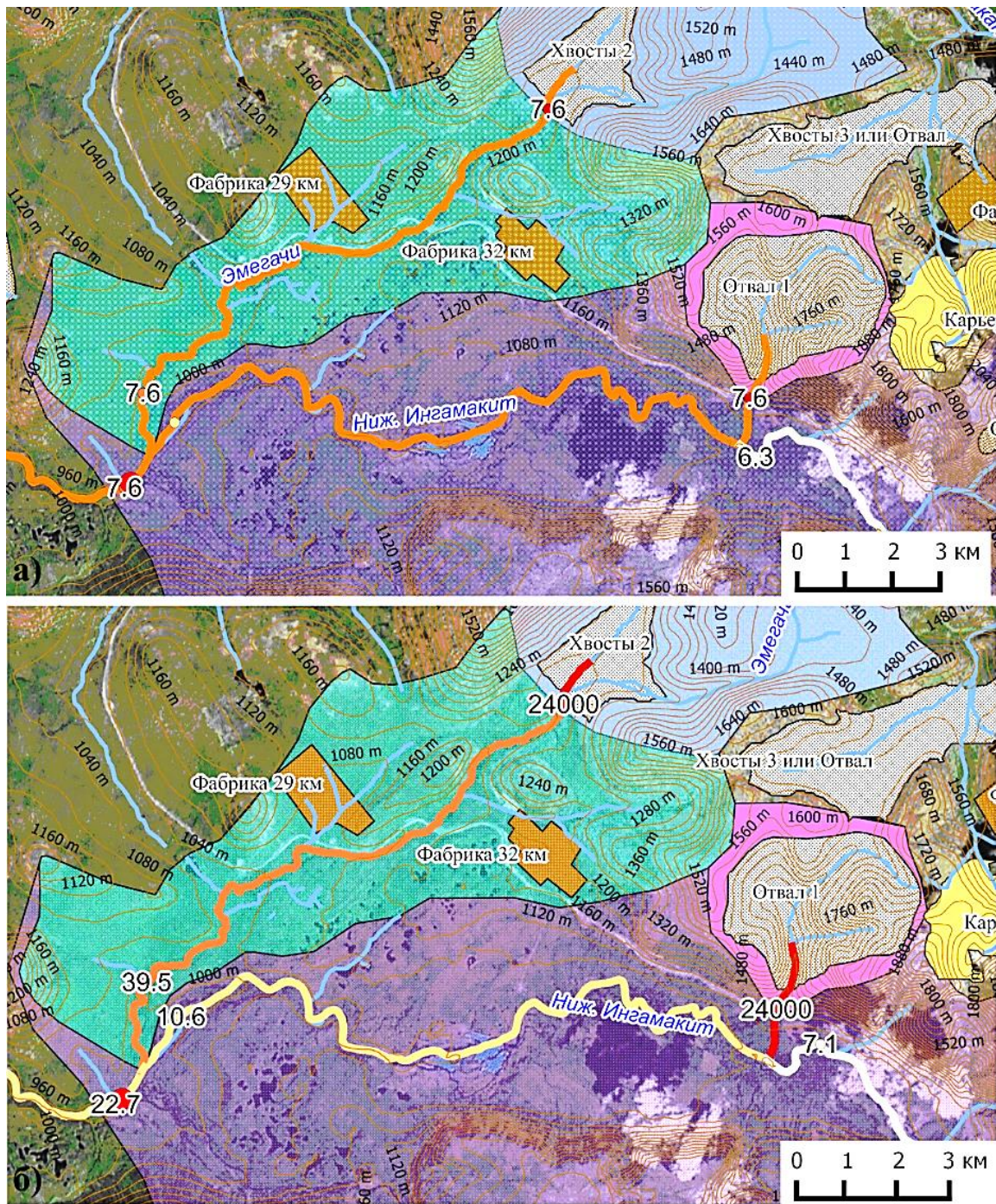
Обозначенные недостатки представляется возможным преодолеть путем реализации геоинформационного подхода, для чего методика расчета потока рассеяния была глубоко модернизирована. Количество вещества, получаемое из отвалов, вычислено в большей степени не на основе коэффициентов гипергенной устойчивости минералов и гидрометрических данных, а получено путем физико-химического моделирования. В качестве исходных данных для моделирования используется проектная масса и химические кондиции отвалов и хвостов, метеорологические данные о среднегодовом или сезонном количестве атмосферных осадков, приходящихся на выделенную по цифровой модели рельефа площадь водосборов, соответствующих конкретному отвалу и водотоку, p/T -условия известны из литературы. Все пространственные параметры получены ГИС-методами. Результаты расчета представлены на рис. 3, б.

Для водотоков первого и второго порядков расход воды определен как количество H_2O из атмосферных осадков в год, приходящийся на площадь полигона водосбора. Очевидно, такой расчет не вполне правомерен для крупных водотоков, таких как Нижний Ингамакит, однако для них имеется литературная гидрометрическая информация. Значение концентрации меди в растворе присваивается конкретному участку водотока, то есть каждый участок русла между соприкосновениями с другими водотоками представляет собой отдельный векторный объект. При впадении такого водотока в водоток более крупного порядка с неустановленной гидрометрией выполняется понижение концентрации загрязняющего компонента пропорционально соотношению площадей водосборов. Такой подход представляется авторам правомерным для гидросети, представ-

ленной небольшими по длине водотоками, после впадения которых в крупную реку целесообразно переходить на интерполяцию значений в соответствии с классическими представлениями о переносе веществ в растворе. К недостаткам описанного алгоритма можно отнести то, что определенный участок русла характеризуется единой концентрацией, которая на самом деле относится к его нижней точке. Этот недостаток возможно устранить серией пространственных расчетов, включающей разделение водотока на отрезки небольшой длины, расчетом площади водосбора, приходящейся на каждую из этих точек и соответствующей интерполяцией значений, однако наибольший интерес представляет нагрузка на небольшие по длине водотоки в пределах лицензионного участка, поэтому усложнение алгоритма было признано несоответствующим задаче. Несмотря на это приведенный алгоритм в условиях недостатка первичных данных значительно более детален и информативен, чем классический подход к расчету потоков рассеяния.

Обращает на себя внимание существенное отличие в концентрации меди в воде на ст. Эмегачи: по результатам классического расчета она достигает 7,6 мкг/л, в то время как решение прямой задачи дает концентрацию более 20 мкг/л. Это объяснимо двумя факторами: во-первых, занижением реальных концентраций вещества в растворе, поскольку формулы 1950-х гг. не учитывали особенности криогеохимических процессов, в частности осложненных влиянием техногенного азота, а во-вторых, уже в четырех километрах ниже по течению р. Нижний Ингамакит впадает в р. Ингамакит, и концентрация по ГИС-расчету в этой точке приблизится к классической.

Существует определенная сложность сопоставления полученных значений с реальными данными полевых исследований. На рассматриваемый район отсутствуют данные регулярного гидрохимического мониторинга, а значения



Условные обозначения

- | | |
|------------------------------------|------------------------|
| ● гидрометрическая станция Эмегачи | Объекты инфраструктуры |
| — Изолинии рельефа | ■ Карьеры |
| — Реки | ■ Отвалы |
| Концентрация меди, мкг | ■ Строения |
| — фон | Площадки водосборов |
| — 6.3000 - 50 | ■ руч. Эмегачи |
| — 50 - 1000.0000 | ■ р. Нижний Ингамакит |
| — 1000.0000 - 24000.0000 | |

Рис. 3. Вероятная среднегодовая концентрация меди в водотоках в районе месторождения Удокан, вычисленная по классической методике (а) и на основе геоинформационного подхода и данных ФХМ (б); цифрами показана концентрация меди, мкг/л

концентраций меди в воде в различные сезоны года могут отличаться от приведенных среднегодовых величин на порядки, поскольку они зависят от сезонных колебаний уровня стока воды (в летний период сток превышает 85% годового) и особенностей активного протекания криогеохимических процессов (выщелачивание значительно усиливается в зимнее время [1, 2, 5]). Однако геохимическая интерпретация результатов и оценка геоэкологических последствий от освоения месторождения Удокан все же представляется возможной по крайней мере на качественном уровне. Заметно, что на коротких расстояниях (до первых километров) содержания меди в воде довольно высоки, в водотоках первого порядка они достигают экстремальных значений, а в водотоках второго порядка превышают фон в несколько раз. Такие аномальные содержания наблюдаются на расстоянии до нескольких километров от рудного источника. Это подтверждают исследования [4]: в водах Удокана содержания меди изменяются в интервале от 1,9 до 353 мкг/л, а в штольневых водах – до 15 мг/л, что в значительной степени соответствует проведенным расчетам, согласно которым максимальная концентрация меди в водах отвалов достигает 24 мг/л. Выполненный расчет показывает, что концентрации меди значительно понижаются при интерполяции результатов на значительно более протяженные реки, имеющие площадь бассейна водосбора в несколько сотен квадратных километров; нагрузка становится незначительной. В данном случае все отвалы хвостохранилищ расположены в верховьях небольших по площади рек и ручьев, впадающих в реки с большой протяженностью и водосборной площадью, что значительно снижает отрицательную экологическую нагрузку на окружающую среду в региональном масштабе и позволяет считать ее допустимой. Однако водотоки в пределах лицензионной площади при данных проектных решениях предпо-

жительно могут быть значительно загрязнены.

Выводы. Установлено, что использование технологии ФХМ в основе геоинформационного подхода позволяет более эффективно решить задачи прогнозирования результатов воздействия на окружающую среду в условиях минимума полевой информации (по сравнению с традиционными способами).

Показан способ перевода удельного количества вещества в потоки рассеяния, что представляет собой первый вариант геоинформационного моделирования по данным ФХМ. Является перспективной интеграция аппарата ФХМ как инструмента в пользовательскую среду ГИС в виде модуля, что на современном техническом уровне не представляет значительной сложности [12].

Применение рассматриваемой технологии к модельному объекту показывает, что влияние антропогенной деятельности по освоению месторождения Удокан в региональном масштабе можно считать допустимым.

Разработанная методология и геоинформационная технология обеспечивают более корректное визуальное представление результатов потенциально возможных геолого-геохимических процессов в региональных геохимических условиях. Предложенный подход применим к широкому кругу геологических задач.

Библиографический список

1. Абрамова В.А., Будяк А.Е., Паршин А.В. Влияние соединений азота на протекание криогеохимических процессов в отвалах рудных месторождений (на примере Кодаро-Удоканской зоны) // *Фундаментальные исследования*. 2013. № 11–6. С. 1186–1190.
2. Абрамова В.А., Паршин А.В., Будяк А.Е. Физико-химическое моделирование влияния соединений азота на протекание геохимических процессов в криолитозоне // *Криосфера Земли*. 2015. № 3. С. 40–47.

3. Бычинский В.А., Исаев В.П., Тупицын А.А. Физико-химическое моделирование в нефтегазовой химии. Ч. 1. Теория и методология физико-химического моделирования. Иркутск: Изд-во ИГУ, 2004. 131 с.

4. Замана, Л.В., Чечель Л.П., Усманов М.Т. Рудные элементы в гидрогеохимических ореолах некоторых типов месторождений Забайкалья // Проблемы поисковой и экологической геохимии Сибири: материалы науч. конф., посвящ. 100-летию профессора Томского политехнического университета П.А. Удодова. Томск: Изд-во ТПУ, 2003. С. 156–159.

5. Маркович Т.И. Процессы гидрохимического окисления сульфидов тяжелых металлов с участием азотистой кислоты: автореф. дис. ... канд. хим. наук. Новосибирск, 1999. 20 с.

6. Критерии оценки геоэкологического состояния вод оз. Байкал / А.В. Паршин, С.А. Шестаков, К.В. Чудненко, Е.П. Савельев // Вода: химия и экология. 2013. № 9 (63). С. 24–31.

7. Отчет о предварительной экологической и социальной оценке проекта «Удокан» [Электронный ресурс]. URL: <http://www.bgk-udokan.ru/Socialresponsibility> (17 апреля 2015).

8. Паршин А.В. Геоинформационное обеспечение мониторинга поверхностного слоя вод озера Байкал:

дисс. ... канд. геолог.-минералог. наук. Иркутск, 2012. 157 с.

9. Романов В.А. Потоки рассеяния: сток вещества с суши и водная миграция элементов // Отечественная геология. 2002. № 5–6. С. 46–50.

10. Удокан: геология, рудогенез, условия освоения / А.Б. Птицын, Л.В. Замана, Г.А. Юргенсон [и др.]. Новосибирск: Наука, 2003. 160 с.

11. Чудненко К.В. Термодинамическое моделирование в геохимии: теория, алгоритмы, программное обеспечение, приложения // Новосибирск: Академическое изд-во «Гео», 2010. 287 с.

12. Шестаков С.А. Возможности облегченного интерфейса создания физико-химических моделей [Электронный ресурс] // Студенческий научный форум: материалы VII Междунар. студ. электрон. науч. конф. URL: www.scienceforum.ru/2015/1216/14747 (17 апреля 2015).

13. GEM-Selektor geochemical modeling package: Revised algorithm and GEMS3K numerical kernel for coupled simulation codes / D.A. Kulik, T. Wagner, S.V. Dmytrieva, G. Kosakowski, F.F. Hingerl, K.V. Chudnenko, U.R. Berner // Computational Geosciences. 2013. № 1 (17). P. 1–24.

Статья поступила 23.06.2015 г.