

# КАРТОГРАФИЧЕСКОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Шестаков С.А.

*Институт геохимии СО РАН, г. Иркутск, shestakov@igc.irk.ru*

Необходимость и важность проведения геоэкологического мониторинга озера Байкал несомненна. Систематические наблюдения ведутся с 60-х годов прошлого столетия. В настоящее время их ведут Росгидромет, Росводресурсы и научные организации страны. Всеми участвующими в этом процессе государственными структурами признана необходимость в совершенствовании методов наблюдений и средств обработки, контроля и представления получаемых данных.

Режимные измерения и контроль состава приповерхностного слоя вод всей акватории озера проводится ФГБУ «Востсибрегионводхоз» – подразделением Федерального агентства водных ресурсов. Измерения осуществляются в режиме реального времени с помощью специально оборудованных судовых лабораторий по 13 гидрофизикохимическим параметрам [Аналитический отчет, 2009] (температура, цветность, растворенный кислород, рН, Eh,  $\text{NO}_2^-$ ,  $\text{NO}_3^-$ ,  $\text{NH}_4^+$ , Cl,  $\text{SO}_4^{2-}$ ,  $\text{PO}_4^{3-}$ , Fe, УЭП). Также в точках сети пробоотбора проводится отбор образцов воды для анализа в стационарной лаборатории (рис. 1).

Существующая система наблюдений имеет следующие недостатки:



**Рис. 1. Точки пробоотбора.**

1. Недостаточно полный набор показателей;
2. Чувствительность используемого оборудования зачастую недостаточна;
3. Высокая вероятность сбоев и отказов оборудования и ПО в сложных экспедиционных условиях.

Эффективным средством решения обеих задач представляется использование методов и средств термодинамического моделирования, позволяющих на основании ограниченного набора аналитических данных реконструировать компонентный состав вод. Существуют примеры работ [Чудненко, 2010; Кашик, 1994; Эпов, 2002], в которых убедительно показана возможность такой реконструкции. Особый интерес представляет потенциальная возможность выявления в природной воде, веществ, не входящих в перечень непосредственно определяемых, в том числе, загрязнителей высоких категорий опасности.

Первым шагом к созданию необходимого обеспечения является создание модели чистой природной воды на основе реальных данных наблюдений. Такая модель должна выступать эталоном, при сравнении с которым могут быть обнаружены аномалии водной среды. В качестве источника данных использовалась БД «Байкал-Аквामониторинг», содержащая данные гидрохимического мониторинга озера за 2009-2012 годы [Паршин, 2013], а также данных из литературных источников [Falkner, 1991, Галазий, 1989, Вотинцев, 1961, Грачев, 2001]. Для моделирования применялся программный комплекс «Селектор», разрабатываемый в лаборатории физико-химического моделирования Института геохимии СО РАН [Чудненко, 2010].

Полученная модель позволит верифицировать корректность работы аналитического оборудования на борту судна и, в случае выявления сбоя, оперативно переснять проблемный участок, не дожидаясь результатов анализов стационарной лаборатории. Кроме того, с ее помощью появится возможность проверить согласованность или несогласованность реальных, в том числе литературных данных. Сравнение данных измерений с установившимся равновесным состоянием, полученным в результате моделирования, подтверждает их правильность либо указывает на ошибку. Планируется дальнейшее совершенствование модели на основе новой гидрохимической информации, полученной более точными методами. Следующим шагом является реализация автоматизированной системы взаимодействия аппарата физико-химического моделирования и базы данных наблюдений, которая в качестве электронного эксперта стала бы незаменимым средством для специалистов, ответственных за принятие решений по геоэкологической безопасности байкальского региона.

#### *Литература:*

*Falkner K.K., Measures C.I., Herbelin S.E., Edmond J.M., Weiss R.F. The major and minor element geochemistry of Lake Baikal // Limnology and Oceanography, 1991, 3, P. 413-423.*

*Галазий Г.И. Байкал в вопросах и ответах // Иркутск: Восточно-Сибирское книжное издательство, 1989.*

*Вотинцев К. К. Гидрохимия озера Байкал // М.: Изд. АН СССР, 1961. – С. 311.*

*Грачев М.А. О современном состоянии экологической системы озера Байкал // Иркутск: ЛИИ СОРАН, 2001 г.*

*Паршин А.В., Шестаков С.А., Чудненко К.В., Савельев Е.П. Критерии оценки геоэкологического состояния вод оз. Байкал // Вода: химия и экология, 2013, № 9. С. 25-31.*

*Аналитический отчет о результатах наблюдений за состоянием водных объектов в зоне деятельности ФГУ «Востсибрегионводхоз» за 2008 год // Иркутск: Федеральное агентство водных ресурсов, 2009.*

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

*Кашик С.А., Карпов И.К., Ломоносов И.С., Мазилев В.Н. Химический состав взвеси в озере Байкал по данным физико-химического моделирования // ДАН, 1994, т. 335, № 3, с. 359-361.*

*Эпов В. Н., Бычинский В. А., Дудинский В. Ф. Определение форм элементов в воде озера Байкал с помощью термодинамического моделирование на основе экспериментальных данных // Аналитика и контроль, 2002, №1, с. 81-90.*

*Паршин А.В., Шестаков С.А., Чудненко К.В. Информационно-аналитическая ГИС-система гидрогеохимического мониторинга приповерхностного слоя вод озера Байкал (БД «Байкал-аквामониторинг»): свидетельство No2013620406 Рос. Федерации // заявл. 28.01.2013; оп.*