

# ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ГИДРОГЕОХИМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Юзвяк К.

Варшавский университет, Польша

В исследованиях химического состава подземных вод, факторов и процессов его формирования, широкое распространение в последние годы получило гидрогеохимическое моделирование. Гидрогеохимические модели классифицируют на три основные группы:

- модели растворения минералов и форм субстанций в воде;
- балансовые гидрогеохимические модели;
- динамические модели миграции веществ.

В гидрогеохимическом моделировании, конструируя модель, можно использовать один из двух подходов:

- разработку "прямой модели", которая служит для прогнозирования изменений химического состава вод вследствие протекания гипотетических реакций (указанных автором модели);
- подготовку "обратной модели", которая предназначена для оценки интенсивности и роли (в количественном выражении) каждого отдельного геохимического процесса в формировании вод определенного состава.

Для гидрогеохимического моделирования в настоящее время широко используется американская программа PHREEQC, которая позволяет рассчитать:

- концентрацию химических элементов;
- активность растворов и каждого отдельного элемента;
- pH, Eh;
- формы распространения веществ;
- показатели насыщения раствора;
- перенос молекул в состоянии равновесия в обратимых и необратимых реакциях;
- ионный обмен;
- поверхностное комплексообразование;
- равновесие газовой фазы при установленном объеме;
- адвекцию веществ;
- растворение и кристаллизацию минералов;
- смешивание вод;

- окисление и редуцирование;
- эффекты температурных изменений;
- эффекты испарения;
- явление дисперсии;
- баланс молярного содержания изотопов в обратных моделях;
- эффекты участия органических веществ;
- кинетику реакции.