

Картографическое
представление результатов
физико-химического
моделирования

Шестаков С.
А.

ИГХ СО РАН

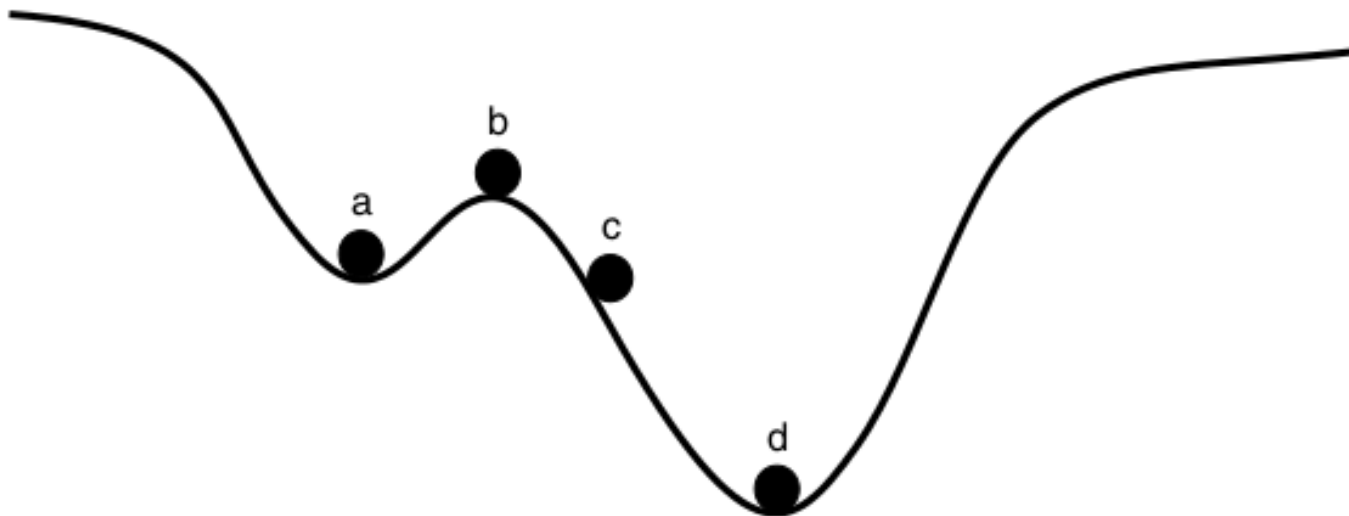
Термодинамическое равновесие

- - состояние термодинамической системы, в которое она самопроизвольно приходит через достаточно большой промежуток времени в условиях изоляции от окружающей среды, после чего параметры состояния системы уже не меняются со временем.

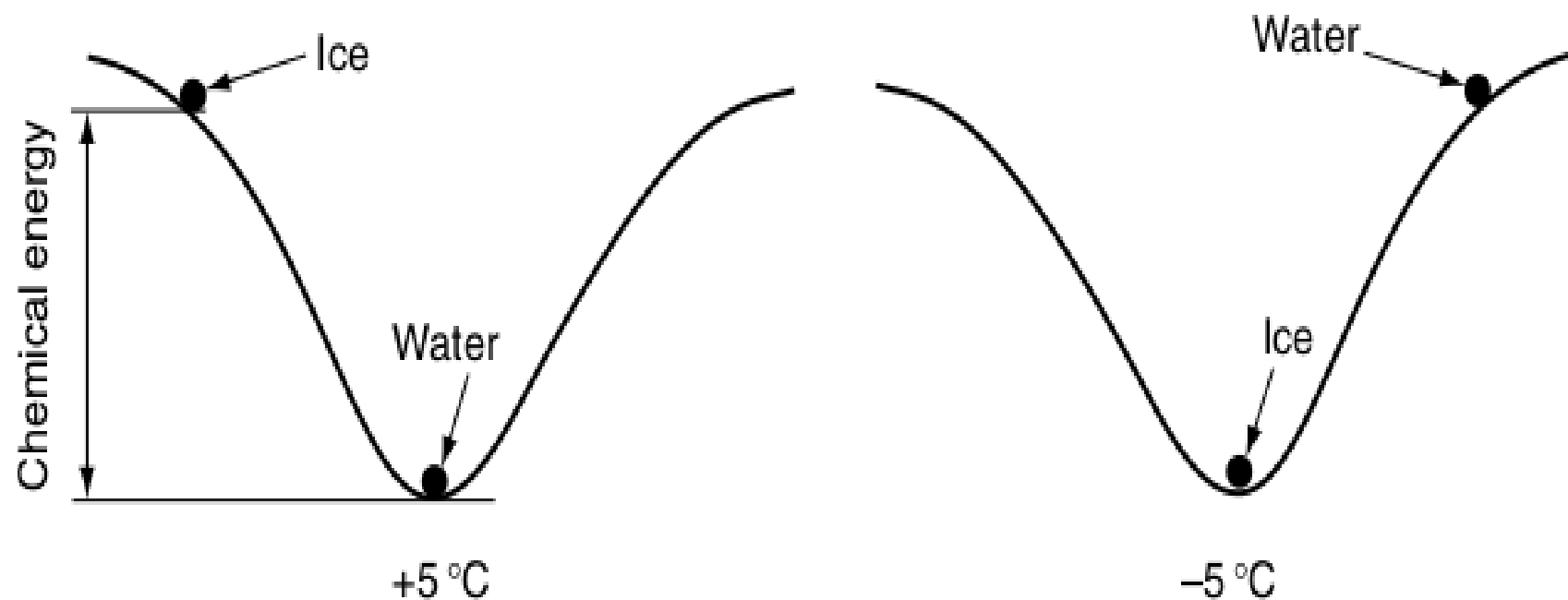
- система находится в термодинамическом равновесии тогда, когда термодинамический потенциал системы, соответствующий независимым в условиях опыта переменным, минимален.
- Например, при заданных объёме и температуре должна быть минимальна свободная энергия, а при заданных давлении и температуре — термодинамический потенциал (энергия) Гиббса

Состояния термодинамической системы

- a – метастабильное состояние
- b, c – нестабильные состояния
- d – стабильное состояние



Влияние температуры на систему



Система линейных уравнений

[illegible]

				H ₂ O	
H ⁺	OH ⁻	O	H ₂ O	2	
1 x1	1 x2	0 x3	2 x4	2 x5	H
0 x1	1x2	1x3	1x4	2 x5	O

				H ₂ O	
H ⁺	OH ⁻	O	H ₂ O	2	
1 x ₁	1 x ₂	0 x ₃	2 x ₄	2 x ₅	H
0 x ₁	1 x ₂	1 x ₃	1 x ₄	2 x ₅	O

$x_1, x_2, x_3, x_4, x_5 - ?$

				H ₂ O	
H ⁺	OH ⁻	O	H ₂ O	2	
1 x ₁	1 x ₂	0 x ₃	2 x ₄	2 x ₅	H
0 x ₁	1 x ₂	1 x ₃	1 x ₄	2 x ₅	O

$C(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5)$

min

Введение

- Гидрохимический мониторинг на протяжении последних 50 лет является важнейшей частью системы контроля экологического состояния вод озера Байкал
- Недостатки действующих программ гидрохимических наблюдений отмечались неоднократно и признаны на государственном уровне
- Совершенствование системы является

Различные взгляды на недостатки системы гидрохимического мониторинга:

- Достоверность получаемых данных требует подтверждения.
- Используемые критерии выявления аномальных состояний природной среды не соответствуют региональной системе.
- Критикуется ограниченный набор показателей

Цель и задачи

- Создание технологий физико-химического моделирования представимого средствами ГИС
- Создание модели(ей) природной воды
- Проверка работы на данных реальной программы мониторинга
- Оценка применимости и перечня потенциально-решаемых задач
- Нахождение способов картографических выражений

Точки отбора проб



Фрагмент таблицы классов атрибутов

Атрибут	Класс атрибута	Минимальное значение	Максимальное значение
PO4	1	0	0,015
	2	0,015	0,02
	3	0,02	0,04
	4	0,04	0,5
NO2	1	0	0,02
	2	0,02	0,03
	3	0,03	0,08
	4	0,08	0,5
NO3	1	0	0,1
	2	0,1	0,4
	3	0,4	5
	4	5	10
NH4	1	0	0,02
	2	0,02	0,03
	3	0,03	0,04
	4	0,04	0,5

Web-представление данных мониторинга

Байкал - аквамониторинг

Home

About

Contact

Экспедиция 1

Экспедиция 2

Экспедиция 3

Экспедиция 4

14.09 - 18.09.2010

NO₂

NO₃

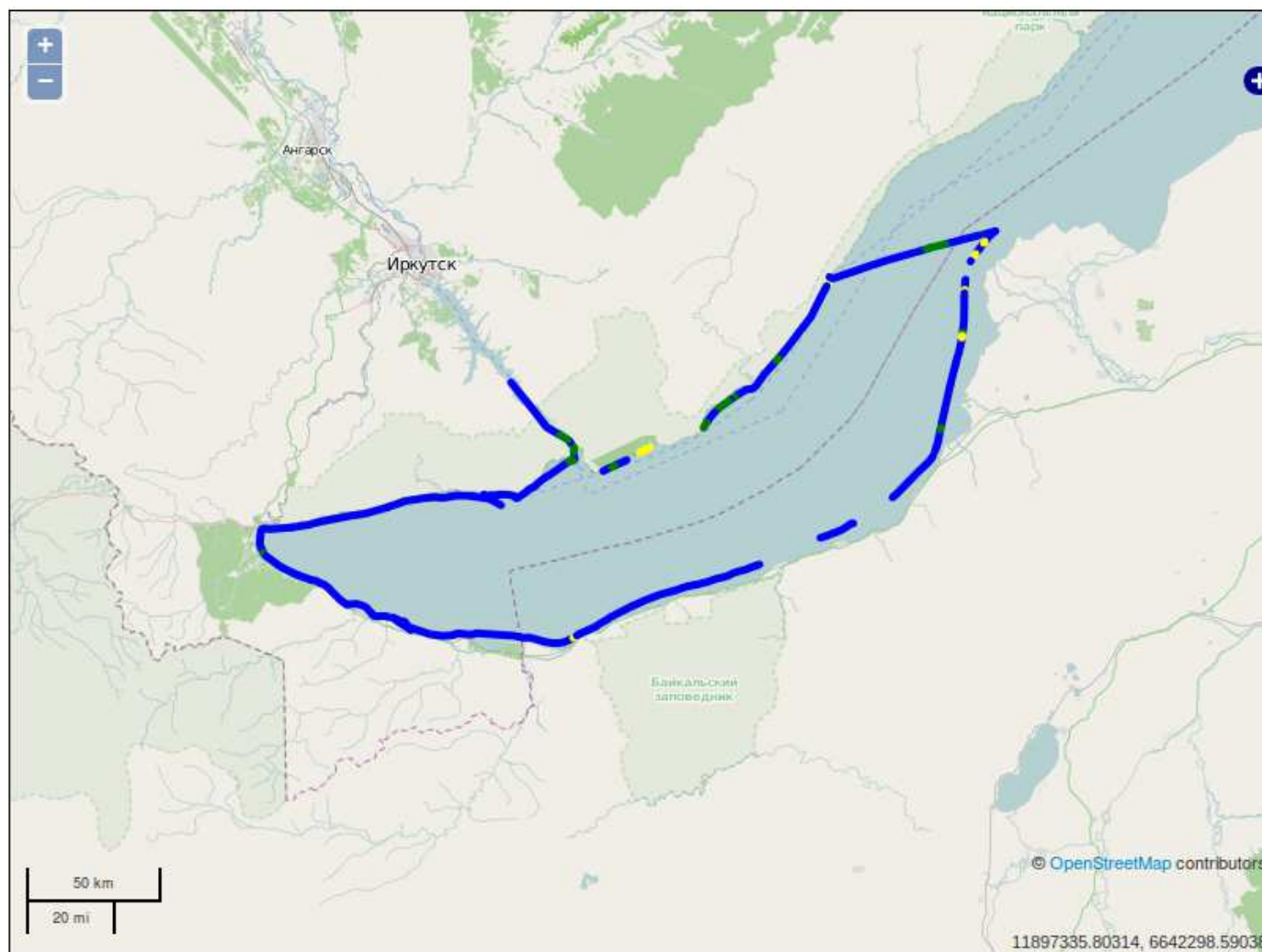
Fe

NH₄

Cl

Colour

SO₄



Фрагмент таблицы с лабораторными данными, используемыми для моделирования

	Al	NH4	pH	HCO3	Fe	Cd	K	Ca	Co	Si	Mg	Mn	Cu	Na
Мыс Покойный	<0,01	0.32	7.84	61.33	0.013	<0,0001	0.64	15.7	<0,001	0.375	3	<0,001	<0,001	2.75
г. Заворотная	<0,01	0.2	7.74	63.77	0.01	<0,0001	2.37	17.5	<0,001	0.698	2.5	<0,001	<0,001	2.75

гов по результатам ф

log mg/kg H₂O

1

Веществ

log mg/kg H₂O

1

Заключение

Полученные результаты
позволяют с уверенностью
говорить о применимости
физико-химического
моделирования при проведении
мониторинга экологического
состояния Байкала

В настоящее время продолжаются
работы по следующим направлениям:

Спасибо за внимание