

ГЕОСНЕQ – КОМПЛЕКС ДЛЯ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ГЕОХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

М.В. Мироненко, Н.Н. Акинфиев*, Т.Ю. Мелихова*

Институт геохимии и аналитической химии им. В.И.Вернадского РАН, Москва

*Московская государственная геологоразведочная академия, Минвуз, Москва

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 99-05-65545)

Вестник ОГГГН РАН № 5 т.1(15) 2000

URL: http://www.scgis.ru/russian/cp1251/h_dgggms/5-2000/term10

Программный комплекс **ГЕОСНЕQ** состоит из четырёх крупных блоков: 1) термодинамическая база данных и утилиты работы с ней; 2) блок утилит расчёта термодинамических свойств компонентов; 3) блок расчёта равновесного состава системы; 4) блок расчёта коэффициентов активности компонентов водного и газового растворов.

1. **База термодинамических данных** построена на основе широко известного пакета SUPCRT92 [1] и допускает изменения и дополнения, вносимые пользователем. В частности, в настоящей версии комплекса база SUPCRT92 дополнена расширениями [2,3,4], согласованными с SUPCRT92 и использующими тот же HKF [5] формат данных. Таким образом, база данных программного комплекса **ГЕОСНЕQ** в настоящее время содержит 194 минерала, 18 газов и 954 водных компонента.

Утилиты работы с базой термодинамических данных включают в себя: сервис выбора независимых компонентов (химических элементов) задачи; автоматизированный выбор из базы данных компонентов, совместимых с заданными независимыми компонентами; дальнейший отбор пользователем компонентов для исключения из задачи; задание параметров состояния (температура и давление). Данные утилиты реализованы инструментальными средствами **MICROSOFT ACCESS** под управлением **WINDOWS 95**.

2. **Расчёт термодинамических свойств компонентов** для заданных температуры и давления проводится: для воды - по фундаментальному многопараметрическому уравнению Хилла [6]. Расчёт электростатических свойств H_2O проводится по алгоритму Арчера-Ванга [7]; для минералов и чистых газов - по трёхчленному уравнению Майера-Келли. Имеется возможность учёта фазовых превращений минералов при повышенных температурах и давлениях. Для этого в базе данных введены соответствующие поля для минералов, испытывающих 2 фазовых перехода, 3 фазовых перехода и т. д. и написаны соответствующие расчётные утилиты; для компонентов водной фазы (ионов и нейтральных молекул) - по уравнению состояния Хелгесона-Киркхэма-Флауэrsa (HKF) [5]. Использование этого уравнения позволяет рассчитывать предельные термодинамические свойства водных частиц в широком диапазоне температур (0 – 1000°C) и давлений (1 – 6000 бар).

3. **Расчёт равновесного состава системы.** Создана программа **СНЕМЕQ** минимизации функции свободной энергии системы, составленной неидеальными растворными фазами. Программа реализует метод выпуклого симплекса [8].

4. **Расчет коэффициентов активности компонентов фаз производится:** для водного раствора - по модели Питцера или Дебая-Хюккеля; для газового раствора - по уравнению Пенга-Робинсона [10].

Современное состояние модели. Современное состояние базы данных позволяет рассчитывать химические равновесия в системах, составленных твердыми фазами постоянного состава, и/или водным раствором (модель Дебая-Хюккеля) и/или идеальным газовым раствором.

Ниже показана схема взаимодействия блоков базы термодинамических данных и вычислительных модулей программного комплекса **ГЕОСНЕQ**. Серым цветом закрашены уже созданные и отлаженные блоки программного комплекса. Не закрашенные блоки находятся в процессе создания. При этом отдельные крупные блоки еще не взаимодействуют между собой (такие модули на диаграмме связаны пунктирными стрелками).

1. Johnson J.W., Oelkers E.H., and Helgeson H.C. SUPCRT92: A software package for calculating the standard molal thermodynamic properties of minerals, gases, aqueous species, and reactions from 1 to 5000 bars and 0° to 1000°C. // Comp. Geosci., 1992. V. 18. P. 899-947.
2. Shock E.L., Sassani D.C., Willis M., Sverjensky D.A. Inorganic species in geologic fluids: Correlations among standard molal thermodynamic properties of aqueous ions and hydroxide complexes. // Geochim. Cosmochim. Acta, 1997. V. 61. P. 907-950.
3. Shock E.L., Helgeson H. C., Sverjensky D.A. Calculation of the thermodynamic properties of aqueous species at high pressures and temperatures: Standard partial molal properties of inorganic neutral species. // Geochim. Cosmochim. Acta, 1989. V. 53. P. 2157-2183.
4. Акинфиев Н.Н., Зотов А.В. Термодинамическое описание хлоридных, гидросульфидных и гидроксокомплексов Ag(I), Cu(I) и Au(I) в диапазоне температур 25 – 500°C и давлений 1 – 2000 бар. // Геохимия, 2000, в печати.
5. Tanger IV J.C., Helgeson H.C. Calculation of the thermodynamic and transport properties of aqueous species at high pressures and temperatures: Revised equations of state for standard partial molal properties of ions and electrolytes. // Amer. J. Sci., 1988. V.288. P. 19-98.
6. Hill P.G. A unified fundamental equation for the thermodynamic properties of H_2O . // J. Phys. Chem. Ref. Data, 1990. V. 19. P. 1233-1274].
7. Archer D.G., Wang . The dielectric constant of water and Debye-Hückel limiting law slopes. // J. Phys. Chem. Ref. Data, 1990. V. 19. P. 371-411.
8. de Capitani C. and T.H. Brown The computation of chemical equilibrium in complex systems containing non-ideal solutions. // Geochim. Cosmochim. Acta, 1987. V. 51. P. 2639-2152.
9. Peng D.Y. and Robinson D.B. // Ind. Eng. Chem. Fundam., 1976. V.15 P.90.

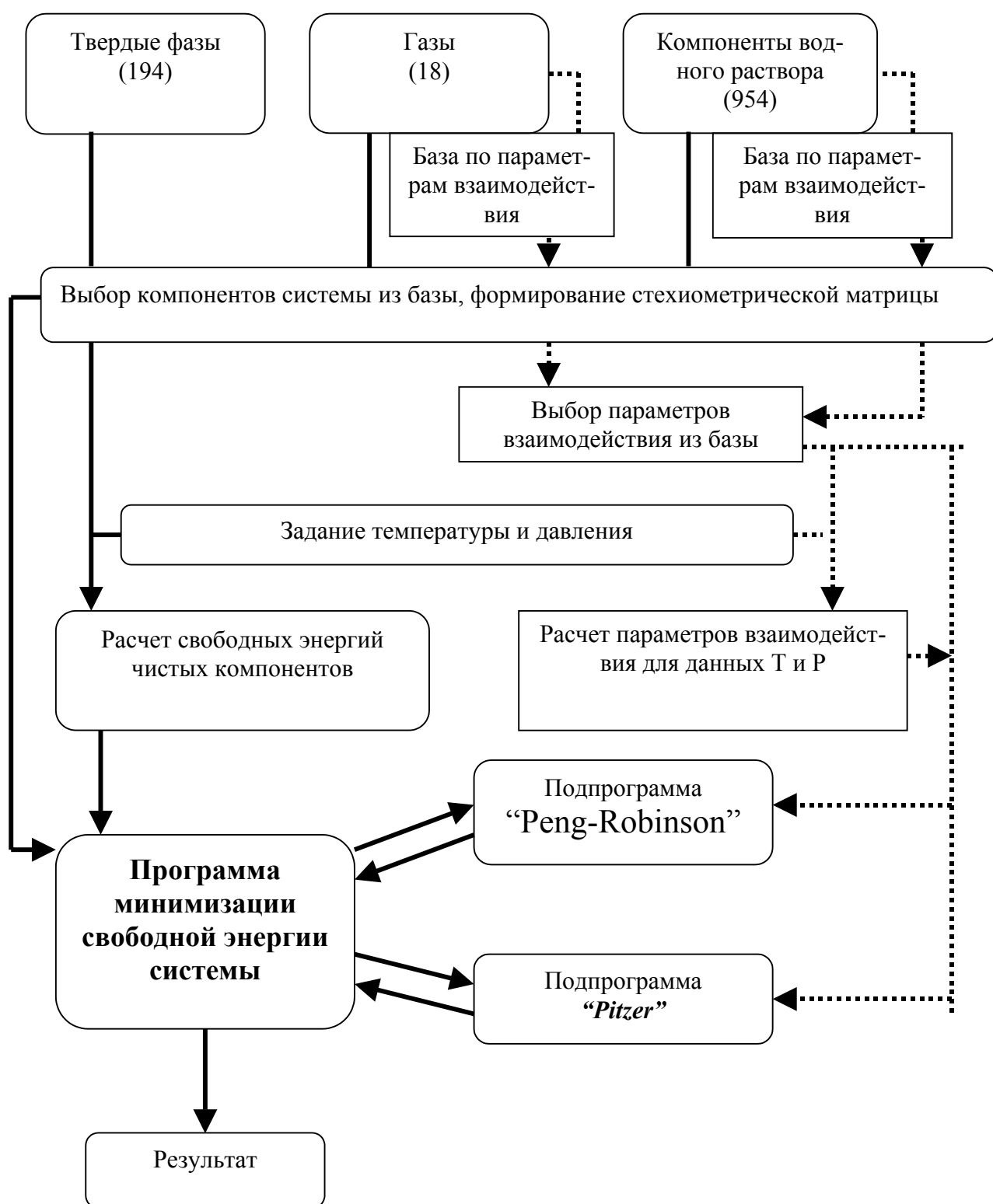
База термодинамических данных

Схема взаимодействия блоков базы термодинамических данных и вычислительных модулей модели:

законченные блоки модели



действующие связи между блоками



незаконченные блоки модели



связи между блоками должны быть установлены

