УДК 550.(34.012+34.06):004.(6+9)

DOI: 10.47148/1609-364X-2021-2-33-46

Опыт создания прикладного программного обеспечения для моделирования глубинных тепловых процессов (на примере моделирования нестационарной теплопроводности над мантийным плюмом в модуле VLADI GEAD 4.0)

(продолжение, начало в №1 2021)

© 2021 г. — В.И. Васильев, Е.В. Васильева, Н.С. Жатнуев

ФГБУН Геологический институт СО РАН, Улан-Удэ, Республика Бурятия, Россия; geovladi@ginst.ru; zhat@ginst.ru

Поступила 07.12.2020 г.

Принята к печати 01.06.2021 г.

Ключевые слова: прикладное программирование, компьютерное моделирование, нестационарная теплопроводность, мантийно-коровый мигрант, интервал «адиабата-геотерма», Vladi Gead 4.0.

Аннотация: В работе обоснована необходимость и рассмотрена методология собственной (силами исследователя моделиста) разработки специального прикладного программного обеспечения как инструмента для моделирования геологических процессов. Представлено понятие мантийного плюма как системы мантийно-коровых мигрантов, последовательно поднимающихся от ядра до хрупкой земной коры через твердую пластичную мантийную среду посредством магмо- и/или флюидоразрыва. Предложено средство компьютерного моделирования теплового возмущения над мантийным плюмом в процессе его вертикального развития с возможностью сохранения, обработки и интерпретации полученной числовой и графической информации. Получены зависимости между глубинами вертикального распространения плюма, геометрическими и температурными интервалами релаксации теплового возмущения во вмещающей среде и геодинамическими параметрами. Предложен способ оценки теплового расширения среды на основе значений внутренних итерационных переменных в процессе исполнения программы.

Для цитирования: Васильев В.И., Васильева Е.В., Жатнуев Н.С. Опыт создания прикладного программного обеспечения для моделирования глубинных тепловых процессов (на примере моделирования нестационарной теплопроводности над мантийным плюмом в модуле VLADI GEAD 4.0) // Геоинформатика. – 2021. – № 2. – С. 33–46. DOI: 10.47148/1609-364X-2021-2-33-46.

An approach to creating application software for modeling of the deep heat processes (on the example of modeling non-stationary thermal conductivity above a mantle plume in the VLADI GEAD 4.0 MODULE)

(continued, beginning in # 1 2021)

© 2021 — V.I. Vasiliev, E.V. Vasilieva, N.S. Zhatnuev

Geological Institute of Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, Ulan-Ude, Republic of Buryatia, Russia; geovladi@ginst.ru; zhat@ginst.ru

Received 07.12.2020

Accepted for publication 01.06.2021

Key words: applied programming, computer modeling, non-stationary thermal conductivity, mantle-crust migrant, adiabatic-geothermal interval, Vladi Gead 4.0.

Abstract: The work substantiates the necessity and considers the methodology of own (by the researcher-modeler's own effort) development of special applied software as a tool for modeling geological processes. The concept of a mantle plume as a system of mantle-crustal migrants, sequentially rising from the core to the fragile earth's crust through a solid plastic mantle medium by the magma- and/or fluid fracture, is presented. A tool for computer modeling of thermal disturbance above a mantle plume in the process of its vertical development with the ability to save, process and interpret the obtained numerical and graphic information is proposed. Dependences are obtained between the depths of vertical propagation of the plume, geometric and temperature intervals of relaxation of thermal disturbance in the host medium, and geodynamic parameters. A method for assessing the thermal expansion of a medium based on the values of internal iterative variables during program execution is proposed.

For citation: Vasiliev V.I., Vasilieva E.V., Zhatnuev N.S. An approach to creating application software for modeling of the deep heat processes (on the example of modeling non-stationary thermal conductivity above a mantle plume in the VLADI GEAD 4.0 MODULE). Geoinformatika. 2021;(2):33–46. DOI: 10.47148/1609-364X-2021-2-33-46. In Russ.

Расчет модели

Следующий блок «Расчет» содержит рабочую таблицу динамики процесса, которая отображает текущее состояние модели и недоступна для редактирования. До запуска расчета в таблице дублируются данные из блока «Ввод и редактирование» страницы «Модель», а именно: глубины, литостатические давления, теплоемкости, теплопроводности, температуропроводности и температуры, принятые за предварительные (см. блок «Теплофизические параметры системы»). В таблице отображаются текущие итерационные значения температур на каждом уровне развития плюма.

Расчет температурного возмущения среды на каждом уровне заключается в решении дифференциального уравнения теплоемкости с зависящей от глубины плотностью и с зависящими от температуры теплоемкостью и коэффициентом теплопроводности:

$$\rho(h) \cdot c_{p}(T) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial h} \left(\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial h} \right), 0 < h < H_{1}, (9)$$

где T — температура; t — время; h — глубина; H_1 — глубина текущего прочностного барьера; $\rho(h)$ — плотность среды, рассчитанная для глубины h по данным табл. 2; $c_p(T)$ — изобарная теплоем-кость среды, рассчитанная по формулам (2)–(5); $\lambda(T)$ — коэффициент теплопроводности среды, рассчитываемый итерационно. Граничные условия в случае постоянной температуры поверхности

записываются как:

$$t = 0: T = T(h), 0 < h < H_1;$$
(10)

$$h = 0: T = 0, t > 0;$$
 (11)

$$h = H_1 : T = T_1, t > 0, \tag{12}$$

где T_1 – температура в верхней точке плюма на глубине прочностного барьера H_1 (рассчитывается по адиабате). В случае учета нагрева дневной поверхности условие (9) изменится на:

$$h = 0: T = T_{n}, t > 0, \tag{13}$$

где T_n – искомая температура поверхности. Алгоритм решения уравнения (9) на равномерной сетке по глубине основан на методе конечных разностей [14] и аналогичен описанному нами ранее [7] с абсолютно устойчивой неявной разностной схемой [6].

Расчет начинается после нажатия соответствующей кнопки в нижней части данного блока.

Соседний блок «Диаграммы» занимает всю правую часть формы (рис. 8) и позволяет следить за ходом расчета вертикального распространения плюма с помощью диаграмм изменения профилей теплоемкости, теплопроводности, температуропроводности и искомых температур во времени. Здесь же выводятся текущие значения прогоночных коэффициентов α и β , которые могут быть использованы при интерпретации результатов (см. ниже).

Так же, как и на странице «Модель», во всех блоках описываемой страницы доступно копирование

Рис. 8. Реализация страницы «Динамика» в модуле PHT Vladi Gead 4.0

Fig. 8. Implementation of the "Dynamics" page in the Vladi Gead 4.0 non-stationary thermal conductivity module



 A — панель параметров с таблицей редактирования уровней, В — рабочая таблица динамики, С — диаграммы изменения теплоемкости, теплопроводности, температуропроводности и искомого температурного профиля
A — a parameter panel with a table for editing levels, B — a working table of dynamics, C — diagrams of changes in heat capacity, thermal conductivity,

R - a parameter panel with a table for eating levels, <math>B - a working table of aynamics, C - alagrams of changes in heat capacity, thermal conductivity, thermal diffusivity and the desired temperature profile

Рис. 9. Реализация страницы «Статистика» в модуле PHT Vladi Gead 4.0

Fig. 9. Implementation of the «Statistics» page in the Vladi Gead 4.0 non-stationary thermal conductivity module

Порядок	СОХ (Конди, 2005)	Время, годы	Н Уровень, км	Н Релаксация, км	Н Интервал, км	Т Уровень, "С	Т Релаксация, *C	Т Интервал, °С	Alfa среднее	Beta среднее	СОХ (Конди, 2005)
1	Уровень 600 км	1000	600	122	478	2150.000	1328.078	821.922	0.90706	156.67030	0.907
2	Уровень 590 км	1000	590	122	468	2149.000	1328.078	820.922	0.90709	156.08130	0.907
3	Уровень 580 км	1000	580	122	458	2148.000	1328.078	819.922	0.90712	155.49020	0.907
4	Уровень 570 км	1000	570	122	448	2147.000	1328.078	818.922	0.90715	154.89700	0.907
5	Уровень 560 км	1000	560	122	438	2146.000	1328.078	817.922	0.90718	154.30150	0.907
6	Уровень 550 км	1000	550	122	428	2145.000	1328.078	816.922	0.90721	153.70360	0.907
7	Уровень 540 км	1000	540	122	418	2144.000	1328.078	815.922	0.90724	153.10310	0.907
8	Уровень 530 км	1000	530	122	408	2143.000	1328.078	814.922	0.90727	152.49980	0.907
9	Уровень 520 км	1000	520	122	398	2142.000	1328.078	813.922	0.90729	151.89360	0.90/
10	Уровень 510 км	1000	510	122	388	2141.000	1328.078	812.922	0.90732	151.28430	8 0.907
11	Уровень 500 км	1000	500	122	378	2140.000	1328.078	811.922	0.90734	150.67160	
12	Уровень 490 км	1000	490	122	368	2139.000	1328.078	810.922	0.90736	150.05540	₹ 0.907
13	Уровень 480 км	1000	480	122	358	2138.000	1328.078	809.922	0.90738	149.43550	0.907
14	Уровень 470 км	1000	470	122	348	2137.000	1328.078	808.922	0.90740	148.81170	0.907
15	Уровень 460 км	1000	460	122	338	2136.000	1328.078	807.922	0.90742	148.18380	0.907
16	Уровень 450 км	1000	450	122	328	2135.000	1328.078	806.922	0.90744	147.55140	0.907
17	Уровень 440 км	1000	440	122	318	2134.000	1328.078	805.922	0.90745	146.91440	0.907
18	Уровень 430 км	1000	430	122	308	2133.000	1328.078	804.922	0.90747	146.27210	0.907
19	Уровень 420 км	1000	420	122	298	2132.000	1328.078	803.922	0.90748	145.62370	0.907-
20	Уровень 410 км	1000	410	122	288	2131.000	1328.078	802.922	0.90748	144.97200	0.907-
21	Уровень 400 км	1000	400	122	278	2130.000	1328.078	801.922	0.90746	144.35390	0.907
22	Уровень 390 км	1000	390	122	268	2129.000	1328.078	800.922	0.90741	143.78380	Н уровень, км
23	Уровень 380 км	1000	380	122	258	2128.000	1328.078	799.922	0.90736	143.20670	
24	Уровень 370 км	1000	370	122	248	2127 000	1328 078	798 922	0.90730	142 62220	Ось Х Н уровень, км 🔽 🔽 Маркеры
0										A	Ось Ү Ала среднее

A — таблица данных, В — диаграмма, на которой могут быть отображены зависимости между любыми двумя параметрами таблицы
A — a data table, B — a diagram that can display dependencies between any two table parameters

в буфер обмена расчетных данных в табличном и графическом виде посредством нажатия «быстрых» кнопок (независимо от переключателя автоматического сохранения в bmp-формате).

Страница «Статистика» обеспечивает табличный доступ к результатам моделирования и простой инструмент для выявления зависимостей между полученными данными — диаграмму с изменяющимися параметрами, откладываемыми на координатных осях (рис. 9).

Страница «Настройка» содержит три блока настроек, которые позволяют по-разному проводить моделирование и получать результаты.

Блок «Начальные и граничные условия» содержит четыре переключателя. Первый включает режим «продолженного расчета», т.е. позволяет на каждом последующем уровне (прочностном барьере) принимать за начальные условия результаты расчета на предыдущем. Это, в совокупности с малым шагом по глубине, позволяет наиболее корректно моделировать последовательное развитие плюма. При отключенном режиме будут моделироваться разные варианты глубины остановки плюма без связи между ними. Второй переключатель может отключать режим постоянной геотермы, что необходимо при расчете нагрева поверхности, а также в случае, когда «невозмущенная» геотерма неизвестна, но температура поверхности остается постоянной (см. пример на рис. 10). Третий переключатель накладывает граничное условие на температуру поверхности: либо она рассчитывается решением уравнения (9), либо задается постоянной. Четвертый переключатель накладывает такое же граничное условие на верхнюю

точку плюма: либо ее температура остается постоянной (соответствует адиабате), либо охлаждается с течением времени.

Также в этом блоке задается точность вычислений ε , которая используется при расчете последовательных приближений температуры в неявной конечно-разностной схеме:

$$\varepsilon \ge \frac{\max_{i} \left| T_{i}^{s+1} - T_{i}^{s} \right|}{\max_{i} \left| T_{i}^{s+1} \right|}, \tag{14}$$

где i = 2, 3, ..., N-1 — шаги по глубине, N — количество таких шагов; T_i^s — расчетная температура в точке i на текущем временном шаге; T_i^{s+1} — расчетная температура в точке i на следующем временном шаге. Другими словами, это точность расчета температуры методом конечных разностей.

Блок «Процесс расчета» также содержит четыре переключателя, определяющих поведение программы в течение и после окончания расчета. Первый переключатель позволяет задавать паузу после расчета распределения температуры на каждом уровне с выводом сообщения и возможностью либо продолжить, либо прервать расчет. Второй переключатель определяет, на какую страницу переключатель определяет, на какую страницу переключается программа при нажатии кнопки «Расчет»; таким образом моделист может сразу следить за расчетом в удобном для него представлении. Третий и четвертый переключатель позволяют закрыть программу и выключить компьютер после длительного расчета.



Рис. 10. Результаты промежуточного сохранения графических данных в модуле PHT Vladi Gead 4.0

Fig. 10. Results of intermediate saving of graphic data in the Vladi Gead 4.0 non-stationary thermal conductivity module

А — возможный расчетный профиль температуры в геодинамической обстановке СОХ (красный график) в момент времени 1000 лет при отключенном режиме постоянной геотермы. Физико-геологическая интерпретация следующая: плюм адиабатически развился до прочностного барьера на глубине 400 км и остановился. На этой глубине за счет притока мигрантов поддерживается постоянная температура ~ 1960 °C. При отсутствии других источников тепла и при постоянной температуре поверхности температурный профиль над плюмом (глубины 0–400 км) с течением времени будет выравниваться в соответствии с теплофизическими свойствами вмещающей среды. Для сравнения показана предполагаемая геотерма (зеленый график), которую моделист мог априори задать как исходную. В — Соответствующий профиль температуропроводности среды в геодинамической обстановке СОХ, рассчитанный по формуле (8) с теплоемкостями, полученными по уравнению (3), и коэффициентами теплопроводности, рассчитанными по уравнению (7)

A — possible calculated temperature profile in the geodynamic environment of the MOR (red graph) at the moment of time 1000 years with the constant geotherm mode turned off. The physico-geological interpretation is as follows: the plume adiabatically developed to a strength barrier at a depth of 400 km and stopped. At this depth, due to the influx of migrants, a constant temperature of ~1960°C is maintained. In the absence of other heat sources and at a constant surface temperature, the temperature profile above the plume (depths of 0–400 km) will level out over time in accordance with the thermophysical properties of the host medium. For comparison, the estimated geotherm is shown (green graph), which the modeler could a priori set as the initial one. B — The corresponding profile of the thermal diffusivity of the medium in the geodynamic environment of the MOR, calculated by the formula (8) with the heat capacities obtained by the equation (3), and the thermal conductivity coefficients calculated by the equation (7)

Блок «Вывод результатов» позволяет настроить следующие детали вывода информации: во-первых, показывать на диаграммах давление вместо глубины (и наоборот); во-вторых, сохранять или не сохранять в отдельные графические файлы диаграммы результатов для каждого этапа (уровня); и, в-третьих, сохранять поэтапные таблицы результатов в один текстовый файл или в отдельные файлы.

По умолчанию страница «Настройка» невидима и появляется после выбора соответствующего пункта главного меню или нажатия клавиши «F4». Выход со страницы с сохранением изменений в настройках организован с помощью кнопки «OK» в правом нижнем углу страницы, без сохранения нажатием клавиши «Esc».

Для вывода и анализа результатов моделирования предусмотрено несколько способов. Все таблицы модуля PHT Vladi Gead 4.0 (включая страницу «Статистика») снабжены интерфейсом частичного или полного копирования с помощью всплывающего меню или «горячих» клавиш. Скопированные в буфер обмена данные имеют формат массива текстовых строк со значениями, разделенными табуляцией, поэтому легко могут быть вставлены, например, в документ Microsoft Excel и подвергнуты любой дальнейшей обработке. Также можно установить режим автоматического сохранения расчетных таблицы и диаграмм после каждого этапа (уровня) расчета (страница «Настройка») и через любое количество временных шагов внутри каждого этапа (страница «Расчет»). Кроме того, в программе предусмотрены кнопки для копирования диаграмм и собственная страница для начальной статистической обработки полученных данных.

Закончив описание всех страниц модуля РНТ Vladi Gead 4.0, проведем серию простейших расчетов и проанализируем полученные результаты. Будем моделировать вертикальное развитие плюма с глубины 600 км до поверхности в четырех геодинамических обстановках, предусмотренных в программе: срединно-океанических хребтов, океанических бассейнов, континентальных платформ и архейских щитов. В каждом случае будем задавать одни и те же входные данные, режим и настройки (табл. 4).

Табл. 4. Входные данные модели

Tab. 4. Input data of the model

Блок	Параметр	Значение	Ссылка
Главная панель	Общая глубина, км Шаг по глубине, км Исх. глубина плюма, км Плотностной профиль λ°, Вт/(м⋅К)* Расчет теплоемкостей Расчет исх. тепловых величин Адиабата (поверхность), °С Адиабата (градиент), °С/км Геотерм	600 1 600 PREM 3,8 ПК «Селектор» Дифференцированный 1550 0,508 СОХ, ОБ, КП, АЩ**	[19] [2] [12, 17] [20] [19] [18]
Параметры времени	Расчетное время на каждом уровне, лет Шаг по времени, лет	100 5	
Уровни	Первый уровень, км Шаг, км Количество	600 50 12	
Настройка	Продолженный расчет Не охлаждать ниже геотермы Нагрев поверхности Охлаждение плюма Точность расчета	Да Да Нет Нет 1E-05	

* Коэффициент теплопроводности при нормальных условиях (293,15 К, 1 бар).

** Температурный профиль в разных геодинамических обстановках: СОХ — срединно-океанический хребет, ОК — океанический бассейн, КП — континентальная платформа, АЩ — архейский щит.

Результаты и их интерпретация

Результаты расчета исходного состояния модели

На рис. 11,12 представлены диаграммы расчетных плотностей (два варианта, аппроксимированные по [1] и [19], см. табл. 2), профилей температуры (плюмовая адиабата по [20] и четыре варианта геотерм для разных геодинамических обстановок, аппроксимированные по [18]), а также расчетных теплоемкостей и коэффициентов теплопроводности исходного состояния среды. Диаграммы созданы в Microsoft Excel; как выглядят графические результаты непосредственно в модуле PHT Vladi Gead 4.0, можно увидеть на рис. 10.

Очевидно, что профили теплофизических свойств (рис. 12) похожи на профили температуры (рис. 11 В) за исключением скачка в самом низу диаграмм, т.к. исходная глубина плюма — 600 км.

Результаты моделирования эволюции плюма

Итак, вертикальное распространение плюма моделировалось от глубины 600 до 50 км с шагом в 50 км, причем на каждом шаге время теплового возмущения среды составляло 100 лет с шагом по времени 5 лет. Таким образом, средняя скорость плюма составила 0,5 км/год или ~1,37 м/сутки, что коррелируется с полученными нами ранее данными о скоростях подъема мигрантов, рассчитанным по уравнениям П. фон Риттингера, Д.Н. Аллена и П.В. Лященко [5].

На рис. 13 для разных геодинамических обстановок показаны наложенные друг на друга расчетные распределения температур при последовательном вертикальном развитии плюма.

Одним из наиболее важных расчетных параметров является «размах» теплового возмущения: на какую величину различаются температуры геотермы и адиабаты на каждом уровне (интервал температур) и на какое расстояние вверх от уровня распространяется повышение температуры среды относительно геотермы (интервал глубин). Эти параметры приведены на диаграммах рис. 14.

При разработке собственного СППО моделисту доступны все «внутренние» данные программы — те данные, которые в коммерческом СППО ин-капсулируются, скрываются («data hiding») или просто не выводятся в процессе работы программы.



Рис. 11. Расчетные плотности и температуры исходного состояния модельной среды *Fig. 11. Estimated density and temperature of the initial state of the model medium*

А — Профили плотностей по В.Ю. Бурмину [1] и по модели PREM [19]. В — Плюмовая адиабата и геотермы для различных геодинамических обстановок по [18] *Геотермы* (1–5): 1 — срединно-океанический хребет (СОХ); 2 — океанический бассейн (ОБ); 3 — континентальная платформа (КП); 4 — архейский щит (АЩ); 5 — адаибата

A — Density profiles according to V.Yu. Burmin [1] and according to the PREM model [19]. B — Plume adiabat and geotherms for different geodynamic settings according to [18]. Geotherms (1–5): 1 — mid-ocean ridge (COX), 2 — oceanic basin (OG), 3 — continental platform (KП), 4 — Archean shield (AЩ); 5 — adiabata

Рис. 12. Расчетные изобарные теплоемкости и коэффициенты теплопроводности исходного состояния среды

Fig. 12. Calculated isobaric heat capacities and thermal conductivity coefficients of the initial state of the medium



А — Профили теплоемкости, вычисленные по уравнению (3). В — Профили коэффициентов теплопроводности, вычисленные по уравнению (7). Обозначения геодинамических обстановок: см. рис. 11

A — Heat capacity profiles calculated according to equation (3). B — Profiles of thermal conductivity coefficients, calculated according to equation (7). Geodynamic settings: see fig. 11

Некоторые из таких данных зачастую становятся полезными для интерпретации результатов моделирования. В нашем случае это касается прогоночных коэффициентов в решении уравнений (9)–(13) методом конечных разностей.

Способ прогонки основывается на предположении, что искомые неизвестные связаны рекуррентным соотношением:

$$T_{h}^{n+1} = \alpha_{h} \cdot T_{h-1}^{n+1} + \beta_{h}, \qquad (15)$$

где T — температура; α_i и β_i — прогоночные коэффициенты; h — шаги по глубине (N-1, N-2, ..., 1), N — конечное число шагов; n — временные шаги (0, 1, ..., τ -1, τ); τ — конечное число временных шагов. Другими словами, чтобы получить температуру на глубине h в следующий момент времени n + 1,

Рис. 13. Расчетные профили температуры с переходами адиабата — геотерма на различных уровнях развития плюма (глубины от 600 до 50 км с шагом в 50 км) в разных геодинамических обстановках

Fig. 13. Calculated temperature profiles with adiabat–geotherm transitions at different levels of plume development (depths from 600 to 50 km with a step of 50 km) in different geodynamic settings



Геодинамические обстановоки: СОХ — срединно-океанический хребет; ОБ — океанический бассейн; КП — континентальная платформа; АЩ — архейский щит

Geodynamic settings: COX — mid-ocean ridge; ОБ — oceanic basin ; КП — continental platform; АЩ — Archean shield

Рис. 14. Расчетные интервалы температур (А) и глубин (В) теплового возмущения при дискретном вертикальном распространении плюма в разных геодинамических обстановках

Fig. 14. Calculated ranges of temperatures (A) and depths (B) of thermal disturbance with discrete vertical propagation of a plume in different geodynamic settings



Геодинамические обстановки (1–4): 1 — срединно-океанический хребет (СОХ); 2 — океанический бассейн (ОБ); 3 — континентальная платформа (КП); 4— архейский щит (АЩ)

Geodynamic settings (1–4): 1 – mid-ocean ridge (COX); 2 – oceanic basin (OG); 3 – continental platform (KП); 4 – Archean shield (АЩ)

необходимо знать температуру на предыдущей глубине и прогоночные коэффициенты. Алгоритм расчета α_i и β_i через температуры, плотности, теплоемкости и коэффициенты теплопроводности среды хорошо известен и подробно описан, например, в работе Г.В. Кузнецова и М.А. Шеремета [14], и использовался нами в работах [5, 6]. Здесь же обратим внимание на то, что прогоночные коэффициенты, по сути своей, являются коэффициентами в линейных уравнениях касательных (вида $y = \alpha x + \beta$) к графикам температуры как функции глубины во всех точках переходов от адиабаты к геотерме (см. рис. 4 и 13), а изменение их является функцией модельного времени. Следовательно, тангенс угла наклона касательной в некоторой точке перехода адиабата — геотерма является производной температуры по глубине *dT/dH* и равен прогоночному коэффициенту α в данной точке; коэффициент β характеризует смещение пересечения касательной с осью температуры, т.е. потенциальную температуру линейной геотермы с градиентом а. Поскольку наши расчеты основаны на теплофизических свойствах среды, включая геометрию и плотность, характер теплового возмущения в ней за модельный шаг времени при постоянном давлении можно записать как

$$\frac{T}{T_0} \propto H_0 \frac{\partial T}{\partial H} \approx H_0 \frac{\Delta T}{\Delta H} , \qquad (16)$$

где ΔH и ΔT — пространственный и температурный интервалы теплового возмущения за отрезок времени, H_0 — глубина изменения температуры на величину ΔT . Принимая во внимание, что при модельных расчетах ∂T — это изменение за единицу времени, т.е. предыдущая температура T_0 по соотношению (15) изменяется до $\alpha T_0 + \beta$, в результате из уравнения (16) получаем для коэффициента α следующее выражение:

$$\frac{1}{\alpha} \propto \frac{1}{H_0} \frac{\partial H}{\partial T} , \qquad (17)$$

а это формула коэффициента линейного теплового расширения. Таким образом, текущие значения коэффициента α могут характеризовать изменение плотности среды в результате расширения при тепловом возмущении, а коэффициент β «уравновешивает» единицы измерения (глубины и температуры) как подгоночный параметр. В случае сильно анизотропной среды это, несомненно, касается только одного измерения — глубины. Усредненные по уровням расчетные значения прогоночных коэффициентов сведены в диаграммы (рис. 15).

Итак, прогоночные коэффициенты являются коэффициентами в уравнениях касательных к графику зависимости температуры от глубины в интервалах между адиабатой и геотермой. Опираясь на вышеприведенное, предположим, что поскольку нами установлена и численно выражена связь между глубинами и температурами на модельных уровнях (рис. 13), то усредненные по времени распространения тепла на конкретных глубинах (в нашем слу-



Рис. 15. Усредненные по уровням расчетные прогоночные коэффициенты α (A) и β (B) для разных геодинамических обстановок *Fig. 15.* Level-averaged calculated sweep coefficients α (A) and β (B) for different geodynamic settings

Обозначения геодинамических обстановок: см. рис. 14 Geodynamic settings: see fig. 14

чае уровнях прочностных барьеров) коэффициенты a_{cp} и β_{cp} могут быть использованы для численного представления изменения коэффициентов линейного теплового расширения модельной среды с глубиной (рис. 16). Для этого в координатах «глубина (H) — параметр ($H/a_{cp} + \beta_{cp}$)» соединим одной линией (черного цвета на рис. 16) точки глубин дискретного развития плюма (точки уровней, момент времени τ — начало расчета для каждого уровня), а другой линией (красного цвета) — точки конечных глубин (точки релаксации теплового возбуждения, момент времени $\tau + \Delta \tau$ окончания временного периода расчета на данном уровне). Здесь мы используем величину, обратную a_{cp} , следуя выражению (17).

Расстояние по горизонтали между линиями на любой глубине пропорционально среднему линейному тепловому расширению модельной среды при нагреве от геотермической температуры до расчетной; расстояние же по вертикали пропорционально тепловому потоку в модельный шаг времени — подобию изменяющейся силе тока по электротепловой аналогии. Чтобы получить числовое значение коэффициента линейного теплового расширения, необходимо привести единицы измерения к одной системе (метры, кельвины) и отнести длину полученных горизонтальных отрезков в единицах этой системы к абсциссе (уровню по глубине).

Как видим на диаграмме (рис. 17), рассчитанные таким образом коэффициенты линейного теплового расширения α_L модельной среды для разных геодинамических обстановок легли на одну кривую, что является аргументацией в пользу правильности нашего метода: коэффициенты зависят только от внутренних свойств среды, а модельная среда одна и та же в каждой геодинамической обстановке. Их значения попадают в интервал 1,091×10⁻⁶ — 1,335×10⁻⁵ К⁻¹, что также согласуется со справочными литературными данными по значениям а, для эндогенных пород [13, 15]. Напомним, что наши расчеты учитывали увеличивающуюся с глубиной плотность среды, поэтому график на рис. 17 показывает уменьшение α_r с глубиной, но не обратно пропорциональное плотности, а «замедляющееся» благодаря росту температуры. Отметим также, что квадрат коэффициента линейного теплового расширения обратно пропорционален модулю упругости, что хорошо показано, например, для двухкомпонентных неорганических стекол [16] и может быть использовано геофизиками в изучении напряжений в веществе верхней мантии и литосферы.

В заключение заметим, что в некоторых работах [15] встречается не совсем верное, по нашему мнению, толкование правила Грюнайзена как постулирующего независимость коэффициента теплового расширения твердого тела от внутренней природы вещества, ставя его в зависимость только от температуры тела:

$$\alpha_{\nu}T_{\rm nn} = f\left(\frac{T}{T_{\rm nn}}\right),\tag{18}$$

где α_v — коэффициент объемного теплового расширения, T_{nn} — температура плавления, T — приведенная температура [15]. Между тем, это правило вводит именно зависимость данного коэффициента

Рис. 16. Диаграммы для расчета линейного теплового расширения модельной среды в различных геодинамических обстановках *Fig. 16.* Diagrams for calculating the linear thermal expansion of the model medium in various geodynamic settings

1 — глубины уровней (прочностных барьеров) в моменты остановок вертикального развития плюма (τ); 2 — глубины теплового возмущения геотермы за модельное время на этих уровнях (τ + Δτ); 3 — температурные и пространственные интервалы теплового возмущения в начале (глубина 600 км) и в конце (глубина 50 км) моделируемого вертикального развития плюма.

Остальные пояснения в тексте. Обозначения геодинамических обстановок: см. рис. 11

1 — depths of levels (strength barriers) at the moments of stopping of the vertical development of the plume (τ) ; **2** — the depths of thermal disturbance of the geotherm for the model time at these levels ($\tau + \Delta \tau$); **3** — the temperature and spatial intervals of thermal disturbance at the beginning (depth 600 km) and at the end (depth 50 km) of the simulated vertical development of the plume. The rest of the explanations are in the text. Geodynamic settings: see fig. 11



Рис. 17. Расчетные коэффициенты линейного (вертикального) теплового расширения модельной среды Fig. 17. Calculated coefficients of linear (vertical) thermal expansion of the model medium

Результаты для всех геодинамических обстановок легли строго на одну кривую. Пояснения в тексте The results for all geodynamic settings fit strictly on one curve. Explanations are in the text

от температуры плавления как внутренней природы вещества. Действительно, согласно критерию Линдеманна, плавление начинается тогда, когда усредненная амплитуда колебания атомов достигает некоторого критического значения:

$$T_{\rm nn} = \frac{x_m^2}{9\hbar^2} r_s^2 A k_B \theta , \qquad (19)$$

где $T_{\rm пл}$ — температура плавления, \hbar — постоянная Планка, $k_{\rm B}$ — постоянная Больцмана, A — атомная масса, $r_{\rm s}$ — средний радиус элементарной ячейки, $x_{\rm m}$ — критическая амплитуда колебания атомов, θ — температура Дебая, при которой возбуждаются все моды колебаний в данном твердом теле. Очевидно, что последние четыре характеристики и есть параметры внутренней природы вещества.

Выводы

В заключение постараемся, насколько возможно, объективно оценить нашу работу, сделав следующие выводы:

1. В работе подробно рассмотрено современное состояние проблемы СППО в российской науке с акцентом на периферийные научные учреждения. Описаны достоинства и, главным образом, недостатки стороннего СППО. Согласно мнению авторов, не требует дальнейших доказательств необходимость создания собственного, «заточенного» под нужды исследователя СППО силами научных групп и коллективов вне зависимости от близости научного учреждения к столицам и крупным научным центрам. Трудность заключается в том, что хорошо дотируемые центры, в отличие от провинциальных, располагают возможностью привлечения профессиональных программистов, специалистов по математической физике и др., не говоря уже о техническом и программном обеспечении. Замыкается круг: чтобы увеличить финансирование, нужно проводить высокоуровневые исследования; чтобы проводить такие исследования, необходимо финансирование. Вариант выхода из такой ситуации и предложен авторами.

2. Сделана попытка методологического осмысления процесса создания собственного СППО методами ООП. Подробно «разобрана» методика быстрого проектирования удобного интерфейса СППО на базе уже несколько несовременной, но легко доступной платформы Borland C++ Builder.

3. Предложена оригинальная концептуальная модель плюма, подкрепленная многолетними физическими [9, 11, 10] и численными [4, 8, 5, 6, 7] экспериментами. Такая концепция имеет множество природных подтверждений, включая сейсмические «гвозди» [2] на ранних этапах существования плюма. Для численных экспериментов в рамках этой концептуальной модели создан описанный в работе модуль PHT программы Vladi Gead 4.0.

4. Рассмотрены формирование и расчет простой модели в созданном модуле. Описаны необходимые при формировании модели входные данные и методы расчета параметров исходного состояния моделируемой системы (глубинного разреза литосферы и мантии): плотностей, давлений, теплофизических свойств и температур. Со ссылками на прошлые работы авторов показана методика численного решения уравнения теплопроводности для частного случая представленной концепции.

5. На простом примере моделирования теплового возмущения над дискретно развивающимся вверх плюмом успешно показано, насколько многообразными и значительными могут быть результаты моделирования даже при таких, наиболее общих входных данных. Несомненно, корректность результатов любого моделирования основывается исключительно на двух факторах: во-первых, правильные входные данные и, во-вторых, правильность их использования. Поэтому при моделировании конкретного явления в конкретной обстановке конкретного региона входные данные должны быть уточнены и иметь более сложную структуру — этим обеспечивается первый фактор. Второй фактор, по нашему мнению, достаточно подробно рассмотрен в данной работе.

6. Особое внимание при интерпретации результатов уделено тепловому расширению модельной среды, так как этот процесс напрямую связан с напряжениями, возникающими в верхней мантии и литосфере, а значит, определяет развитие сейсмических процессов в зоне развития плюмов. Правильность использования усредненных по уровням прогоночных коэффициентов в качестве характеристик теплового расширения среды может быть дискуссионна, но в первом приближении выглядит корректной, что и попытались обосновать авторы. В любом случае полученные зависимости весьма интересны и практически недоступны при работе со сторонним, коммерческим СППО.

Работа выполнена в рамках проекта АААА-А21-121011390003-9 «Рудообразующие системы разновозрастных складчатых поясов южного обрамления Сибирского кратона: геолого-генетические модели месторождений благородных, редких и цветных металлов».

Литература

1. Бурмин В.Ю. Распределение плотности и упругих параметров в Земле // Физика Земли. – 2006. – № 7. – С. 76–88.

2. Бабаев В.В., Будымка В.Ф., Сергеева Т.А., Домбровский М.А. Теплофизические свойства горных пород. – М. : Недра, 1987. – 156 с.

3. Вадковский В.Н. Субвертикальные скопления гипоцентров землетрясений — сейсмические «гвозди» // Вестник Отделения наук о Земле РАН. – 2012. – Т. 4. – NZ1001. DOI: 10.2205/2012NZ000110.

4. Васильев В.И. Численное моделирование динамики тепломассопотоков и минералообразования в гидротермальной системе срединно-океанических хребтов // Вопросы геологии континентов и океанов : тезисы докладов школы-семинара российских делегатов XXXI Международного геологического конгресса (НИС «Акад. Иоффе», Калининград – Рио-де-Жанейро – Калининград, 27 июня – 9 сент. 2000 г.). – М. : Научный мир, 2001. – С. 51.

5. Васильев В.И., Васильева Е.В., Жатнуев Н.С., Санжиев Г.Д. Параметры образования и эволюции мантийно-корового мигранта // Геоинформатика. – 2019. – № 2. – С. 34–42.

6. Васильев В.И., Жатнуев Н.С., Васильева Е.В. Нестационарные теплофизические расчеты в диапазоне плюмовая адиабата—геотерма // Ультрамафит-мафитовые комплексы: геология, строение, рудный потенциал : материалы конференции (16—20 сентября 2019 г.). — Иркутск : Изд-во «Оттиск», 2019. — С. 76—82.

7. Васильев В.И., Жатнуев Н.С., Васильева Е.В. Расчет теплового возмущения термоградиентной среды при подъеме мантийно-корового мигранта // Геоинформатика. – 2019. – № 4. – С. 46–53.

8. *Васильев В.И., Чудненко К.В., Жатнуев Н.С., Васильева Е.В.* Компьютерное моделирование геологических объектов на примере разреза зоны субдукции // Геоинформатика. – 2009. – № 3. – С. 15–29.

9. Васильева Е.В., Васильев В.И., Жатнуев Н.С., Санжиев Г.Д. Тектонофизическое исследование динамики флюидозаполненных полостей в твердой пластичной среде // Тектонофизика и актуальные вопросы наук о Земле : Материалы Третьей тектонофизической конференции в ИФЗ РАН (Москва, 8–12 октября 2012 года). – М. : ИФЗ РАН, 2012. – Т. 1. – С. 265–268.

10. Жатнуев Н.С., Васильев В.И., Санжиев Г.Д. Восходящая миграция флюидов в мантии, концептуальная, расчетная и аналоговая модели // Отечественная геология. – 2013. – № 3. – С. 24–30.

11. Жатнуев Н.С., Рычагов С.Н., Васильев В.И., Васильева Е.В. Влияние реологических свойств земной коры на локализацию рудообразующих гидротермально-магматических систем // Вулканология и сейсмология. – 2012. – № 3. – С. 59–72.

12. Карпов И.К. Физико-химическое моделирование на ЭВМ в геохимии. – Новосибирск : Наука, 1981. – 247 с.

13. Коротких А.Г. Теплопроводность материалов. – Томск : Изд-во Томского политехнического университета, 2011. – 97 с.

14. Кузнецов Г.В., Шеремет М.А. Разностные методы решения задач теплопроводности. – Томск : Изд-во Томского политехнического университета, 2007. – 172 с.

15. Петрунин Г.И., Попов В.Г. Теплофизические свойства вещества Земли. – М. : Физический факультет МГУ, 2011. – Часть 1. – 68 с.

16. Сандитов Д.С., Сыдыков Б.С. Модуль упругости и коэффициент теплового расширения стеклообразных твердых тел // Физика твердого тела. – 2014. – Т. 56. – № 5. – С. 970–972.

17. *Чудненко К.В.* Термодинамическое моделирование в геохимии: теория, алгоритмы, программное обеспечение, приложения. – Новосибирск : ГЕО, 2010. – 287 с.

18. Condie K.C. Earth as an evolving planetary system. – Amsterdam; Boston : Elsevier Academic Press, 2005. – 578 p.

19. Dziewonsk A.M., Anderson D.L. Preliminary reference Earth model // Physics of the Earth and Planetary Interiors. – 1981. – V. 25. – Issue 4. – pp. 297–356. DOI: 10.1016/0031-9201(81)90046-7.

20. *Hirschmann M.M.* Water, melting, and the deep Earth H2O cycle // Annual Review of Earth and Planetary Sciences. – 2006. – V. 34. – pp. 629–653. DOI: 10.1146/annurev.earth.34.031405.125211.

References

1. Burmin V.Yu. Distribution of density and elastic parameters in the Earth. Izvestiya. Physics of the Solid Earth. 2006;42(7):608–620. DOI: 10.1134/ S106935130607007X.

2. Babaev V.V., Budymka V.F., Sergeeva T.A., Dombrovsky M.A. Teplofizicheskie svoistva gornykh porod [Thermophysical properties of rocks]. Moscow: Nedra; 1987. 156 p. [In Russian].

3. Vadkovsky V.N. Subvertikal'nye skopleniya gipotsentrov zemletryasenii – seismicheskie "gvozdi" [Sub-vertical clusters of earthquake hypocenters – seismic "nails"]. Vestnik Otdelenia nauk o Zemle RAN. 2012;4:NZ1001. DOI: 10.2205/2012NZ000110. [In Russian].

4. *Vasiliev V.I.* Chislennoe modelirovanie dinamiki teplomassopotokov i mineraloobrazovaniya v gidrotermal'noi sisteme sredinno-okeanicheskikh khrebtov [Numerical modeling of the dynamics of heat and mass flows and mineral formation in the hydrothermal system of mid-oceanic ridges]. In: Voprosy geologii kontinentov i okeanov : tezisy dokladov shkoly-seminara rossiiskikh delegatov XXXI Mezhdunarodnogo geologicheskogo kongressa (NIS «Akad. Ioffe», Kaliningrad – Rio de Janeiro – Kaliningrad , 27 June – 9 September 2000). Moscow: Nauchnyi mir; 2001. P. 51. [In Russian].

5. Vasiliev V.I., Vasilieva E.V., Zhatnuev N.S., Sanzhiev G.D. Parameters of origin and evolution of the mantle-crust migrant. Geoinformatika. 2019;2:34–42. [In Russian].

6. *Vasiliev V.I., Zhatnuev N.S., Vasilieva E.V.* Non-stationary thermophysical calculations in the range of plume adiabatic–geotherm. In: Ul'tramafitmafitovye kompleksy: geologiya, stroenie, rudnyi potentsial : materialy konferentsii (16–20 September 2019). Irkutsk: Izd-vo «Ottisk»; 2019. pp. 76–82. [In Russian].

7. Vasiliev V.I., Zhatnuev N.S., Vasilieva E.V. Calculation of thermal perturbance of the thermogradient medium during the rise of the mantle-crustal migrant. *Geoinformatika*. 2019;4:46–53. [in Russian].

8. Vasiliev V.I., Chudnenko K.V., Zhatnuev N.S., Vasilieva E.V. Computer modeling of geological objects by the example of subduction zone section. *Geoinformatika*. 2009;3:15–29. [in Russian].

9. Vasilieva E.V., Vasiliev V.I., Zhatnuev N.S., Sanzhiev G.D. Tektonofizicheskoe issledovanie dinamiki flyuidozapolnennykh polostei v tverdoi plastichnoi srede [Tectono-physical study of the dynamics of fluid-filled cavities in a solid plastic medium]. In: Tektonofizika i aktual'nye voprosy nauk o Zemle : Materialy Tret'ei tektonofizicheskoi konferentsii v IFZ RAN (Moscow, 8–12 October 2012). Moscow: Institute of Physics of the Earth RAS; 2012. V. 1. pp. 265–268. [In Russian].

10. Zhatnuev N.S., Vasiliev V.I., Sanzhiev G.D. The ascending migration of fluids in mantle, the conceptual, rated and analogous models. Otechestvennaya Geologiya. 2013;3:24–30. [In Russian].

11. Zhatnuev N.S., Vasiliev V.I., Vasilieva E.V., Rychagov S.N. The influence of rheologic crustal properties of the crust on the location of ore-forming hydrothermal magmatic systems. Journal of volcanology and seismology. 2012;6(3):184–196. DOI: 10.1134/s0742046312030062.

12. Karpov I.K. Fiziko-khimicheskoe modelirovanie na EVM v geokhimii [Physical and chemical computer modeling in geochemistry]. Novosibirsk: Nauka; 1981. 247 p. [In Russian].

13. Korotkikh A.G. Teploprovodnost' materialov [Thermal conductivity of materials]. Tomsk: Tomsk: Polytechnic Universuty; 2011. 97 p. [In Russian].

14. *Kuznetsov G.V., Sheremet M.A.* Raznostnye metody resheniya zadach teploprovodnosti [Difference methods for solving problems of heat conduction]. Tomsk: Tomsk Polytechnic Universuty; 2007. 172 p. [In Russian].

15. *Petrunin G.I., Popov V.G.* Teplofizicheskie svoistva veshchestva Zemli [Thermophysical properties of the substance of the Earth]. Moscow: Moscow State University Faculty of Physics; 2011. Part 1. 68 p. [In Russian].

16. Sanditov D.S., Sydykov B.S. Modulus of elasticity and thermal expansion coefficient of glassy solids. *Physics of the solid state*. 2014;56(5):1006–1008. DOI: 10.1134/S1063783414050242.

17. Chudnenko K.V. Termodinamicheskoe modelirovanie v geokhimii: teoriya, algoritmy, programmnoe obespechenie, prilozheniya [Thermodynamic modeling in geochemistry: theory, algorithms, software, applications]. Novosibirsk: GEO; 2010. 287 p. [In Russian].

18. Condie K.C. Earth as an evolving planetary system. Amsterdam; Boston: Elsevier Academic Press, 2005. 578 p.

19. Dziewonski A.M., Anderson D.L. Preliminary reference Earth model. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*. 1981;25(4):297–356. DOI: 10.1016/0031-9201(81)90046-7.

20. *Hirschmann M.M.* Water, melting, and the deep Earth H2O cycle. *Annual Review of Earth and Planetary Sciences*. 2006;34:629–653. DOI: 10.1146/annurev.earth.34.031405.125211.

Информация об авторах

Васильев Владимир Игоревич

Кандидат геолого-минералогических наук, научный сотрудник ФГБУН Геологический институт СО РАН Республика Бурятия, 670047 Улан-Удэ, ул. Сахьяновой, д. 6a e-mail: geovladi@yandex.ru, geovladi@ginst.ru ORCID ID: 0000-0001-5168-843X ResearcherID: B-1078-2016

Васильева Евгения Владимировна

Кандидат геолого-минералогических наук, научный сотрудник ФГБУН Геологический институт СО РАН Республика Бурятия, 670047 Улан-Удэ, ул. Сахьяновой, д. 6a e-mail: geovladi@ginst.ru ORCID ID: 0000-0003-3463-3781

Жатнуев Николай Сергеевич

Доктор геолого-минералогических наук, старший научный сотрудник ФГБУН Геологический институт СО РАН Республика Бурятия, 670047 Улан-Удэ, ул. Сахьяновой, д. 6a e-mail: zhat@ginst.ru ORCID ID: 0000-0003-3040-8923

Information about authors

Vladimir I. Vasiliev

Candidate of Geological and Mineralogical Sciences, Researcher Geological Institute of Siberian Branch of Russian Academy of Sciences (GIN SB RAS). 6A, Sakhyanova str., Ulan-Ude, Republic of Buryatia, 670047, Russia e-mail: geovladi@yandex.ru, geovladi@ginst.ru ORCID ID: 0000-0001-5168-843X ResearcherID: B-1078-2016

Eugenia V. Vasilieva

Candidate of Geological and Mineralogical Sciences, Researcher Geological Institute of Siberian Branch of Russian Academy of Sciences (GIN SB RAS). 6A, Sakhyanova str., Ulan-Ude, Republic of Buryatia, 670047, Russia. e-mail: geovladi@ginst.ru ORCID ID: 0000-0003-3463-3781

Nikolay S. Zhatnuev

Doctor of Geological and Mineralogical Sciences, Senior Researcher Geological Institute of Siberian Branch of Russian Academy of Sciences (GIN SB RAS). 6A, Sakhyanova str., Ulan-Ude, Republic of Buryatia, 670047, Russia e-mail: zhat@ginst.ru ORCID ID: 0000-0003-3040-8923