

УДК 004.413+004.94+551.2.03::536.21
DOI: 10.47148/1609-364X-2021-1-51-73

© В.И. Васильев, Е.В. Васильева, Н.С. Жатнуев

В.И. Васильев, Е.В. Васильева, Н.С. Жатнуев

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

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

V.I. Vasiliev, E.V. Vasilieva, N.S. Zhatnuev

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)

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.

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

Поступила 07.12.2020
Доработана 28.02.2021

Принята к печати 01.03.2021

Введение

Очевидно, что в геологических, геофизических, геохимических исследованиях, вообще в любых исследованиях в области наук о Земле на современном этапе развития научной деятельности нельзя обойтись без компьютера. Любой российский ученый использует персональный компьютер и как средство набора и редактирования текстов (презентаций), и как инструмент для обработки различного рода изображений, и как средство для расчетов (чаще всего таких, как обработка таблиц, например, в Microsoft Excel). Несомненно, все используют компьютер и компьютерные сети как средства связи и удаленного получения информации, а также ее классификации, обработки и хранения. Несколько меньший круг научных работников (но все же очень широкий) пользуется научными компьютерными инструментами – *специализированным прикладным программным обеспечением* (СППО) сторонних производителей, – это те, кто занимается того или иного рода моделированием явлений и процессов, происходящих в природе. И, к сожалению, весьма узок круг ученых и/или групп ученых, способных самостоятельно создавать СППО, необходимое в исследованиях. А такая необходимость становится определяющей в моделировании недоступных для прямого изучения в настоящее время объектов, например глубинных явлений и процессов – таких, как эволюция плюмов и вмещающей их среды.

Авторы представляют мантийный плюм как систему мантийно-коровых мигрантов (рис. 1) – горячих флюидо- и/или магмозаполненных полостей, последовательно, но неравномерно поднимающихся от ядра до хрупкой земной коры через твердую пластичную мантийную среду посредством флюидо- и/или магморазрыва вследствие избыточного давления, возникающего в полостях за счет разности плотностей заполняющего полость вещества и вмещающей среды [16, 15, 20, 19, 18, 17, 8]. Термин «флюидоразрыв» мы применяем здесь по прямой аналогии с хорошо известными «гидроразрывом» и «магморазрывом» [3] как наиболее соответствующие, по нашему мнению, сущности данного явления. Термин применялся и ранее, например в работах [26, 39], но применительно к искусственному пластичному флюиду, применяемому для разрушения хрупких горных пород.

Для моделирования температурных переходов от горячей оси плюма (охлаждающегося адиабатически) к невозмущенной внешней среде мантии и коры, имеющей геотермический градиент, была создана версия 3.0 программы *Vladi Gead*. Она позволяет рассчитывать латеральное распределение температур среды для любых глубин остановки

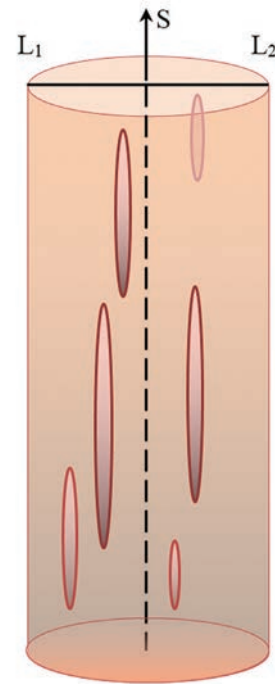


Рис. 1. Идеализированная схема медиальной части плюма. S – ось симметрии, L_1, L_2 – диаметр «канала» плюма, рассматриваемого как реологически ослабленная зона, в которой движутся мантийно-коровые мигранты

Fig. 1. An idealized diagram of the medial part of the plume. S is the axis of symmetry, L_1, L_2 is the diameter of the «channel» of the plume, considered as a rheologically weakened zone in which mantle-crustal migrants move.

мантийно-корового мигранта в зависимости от времени эволюции системы [10]. Входными данными модельных расчетов служат: глубина системы, количество и глубины прочностных барьеров, время подъема мигранта на каждом интервале между барьерами, время простоя мигранта на каждом прочностном барьере, профили региональной геотермы, плюмовой адиабаты и плотности внешней среды. Программа выдает численные и графические результаты с возможностью автоматического сохранения на заданных шагах по времени.

В новой версии 4.0 в программу *Vladi Gead* [36] добавлен новый модуль расчета нестационарной теплопроводности (РНТ) перехода адиабата – геотерма в вертикальном профиле при любом (равномерном или неравномерном) вертикальном развитии плюма с возможностью учета нагрева дневной поверхности. На примере разработки и испытания модуля РНТ покажем необходимость и возможность компьютерного моделирования геологических объектов на базе собственного СППО.

Программа *Vladi Gead 4.0* написана для операционных систем семейства Microsoft Windows 98/Me/XP/Vista/7/8/10 на языке C++ в интегрированной

среде разработки Borland C++ Builder. В дальнейшем при изложении методики создания СППО используется терминология, принятая в этом языке и в этой среде разработки (согласно справочному руководству [1]).

Актуальность проблемы

Стороннее коммерческое СППО имеет множество несомненных *достоинств*, среди которых следующие. Во-первых, и в-главных, оно создается профессиональными программистами и коллективами программистов, т.е. чаще всего является технически оптимизированным и качественным. Во-вторых, при легальном использовании оно имеет постоянное сопровождение, обновление и техническую поддержку. В-третьих, СППО современных производителей совместимо с широким кругом общеупотребительных систем (таких, как Microsoft Office, AutoCAD, ArcGIS, Corel, Adobe Photoshop и мн. др.) либо на уровне форматов файлов, либо по технологиям DCOM, OLE, CORBA и т.п. В-четвертых, немаловажным достоинством является именно распространенность такого СППО: его знают и используют многие, и всегда можно обсудить методы работы и способы построения той или иной модели с коллегами и в интернет-сообществах. Наряду с несомненными достоинствами, стороннее коммерческое СППО обладает как собственными (объективными), так и ситуативными (субъективными) *недостатками*.

К *собственным недостаткам* относится, в первую очередь, обычное несоответствие (или неполное соответствие) между непосредственными нуждами ученого-исследователя и нуждами производителя. Такой порядок вещей, наверное, нет необходимости объяснять подробно: понятно, что производитель, стремясь к расширению продаж и балансируя между качеством и затратами, предпочтет реализовывать в своем СППО только широко востребованные методы и учитывать только общепризнанные параметры. Однако *никто лучше самого исследователя не может знать, что и каким образом должна выполнять программа, как удобнее и какие именно вводить исходные данные и как удобнее и какие именно получать результаты*.

Второй объективный недостаток стороннего коммерческого СППО – это закрытость алгоритмов и методов. Научный работник, использующий достаточно сложное коммерческое СППО, становится исключительно *пользователем*: он не имеет возможности обосновать правильность расчетов и достоверность результатов иначе, как ссылкой на авторитет производителя СППО. Сама программа, по сути, является «черным ящиком», и, следовательно, любой метод моделирования с ее помощью для

пользователя является методом «черного ящика». Так, сокрытие и инкапсуляция из прогрессивных достоинств программирования нередко превращаются в недостатки для *пользователя*.

Третий объективный недостаток следует из первого и второго: недостающие в одном СППО методы и возможности приходится возмещать за счет использования дополнительного программного обеспечения, что, в свою очередь, ведет к проблеме передачи данных между разнородными программами разных производителей в режиме исполнения. А такой интерфейс практически никогда не поставляется в комплектах коммерческого СППО вследствие конкуренции между производителями.

Приведем показательный пример из собственного опыта авторов. В конце 1990-х – начале 2000-х годов нами проводилось изучение тепломассопереноса в магматогенно-гидротермальных системах областей развития современного вулканизма [6]. Исследования велись с использованием программной разработки Центра моделирования геосистем «МоГеос» [13] (для моделирования теплопереноса и динамики потоков в дисперсных системах) и программного комплекса «Селектор-С» (для моделирования локальных равновесий по Д.С. Коржинскому [23] при растворении/отложении вещества в инфильтрационных и диффузионных процессах). Программный комплекс «Селектор-С», разработанный в Институте геохимии им. А.П.Виноградова СО РАН коллективом ученых и профессиональных программистов под руководством И.К. Карпова, предназначен для расчета минеральных равновесий с учетом компонентов водного раствора и газовой фазы в сложных физико-химических системах методом минимизации термодинамических потенциалов [22, 40]. Моделирование в идеальном случае должно было проводиться по проекту, изображенному на рис. 2. Предполагалось в сформированной модели в программе тепломассопереноса рассчитывать кондуктивную составляющую теплопередачи, затем моделировать дискретный шаг конвекции с объемом и составом раствора, полученным из расчета локального равновесия на ПК «Селектор-С». После этого – рассчитывать перенос тепла этим раствором (конвективная составляющая теплопередачи) и полученные на текущем шаге данные снова передавать в ПК «Селектор-С». Реализовать такой проект не удалось из-за закрытости внутренней структуры и невозможности сопряжения разного СППО силами авторов. Все, что можно было сделать на том этапе исследований, – это попытаться вручную (в MS Excel) обрабатывать и переносить данные из одного СППО в другое (рис. 3). Это привело к сведению количества итераций до минимума, и корректных

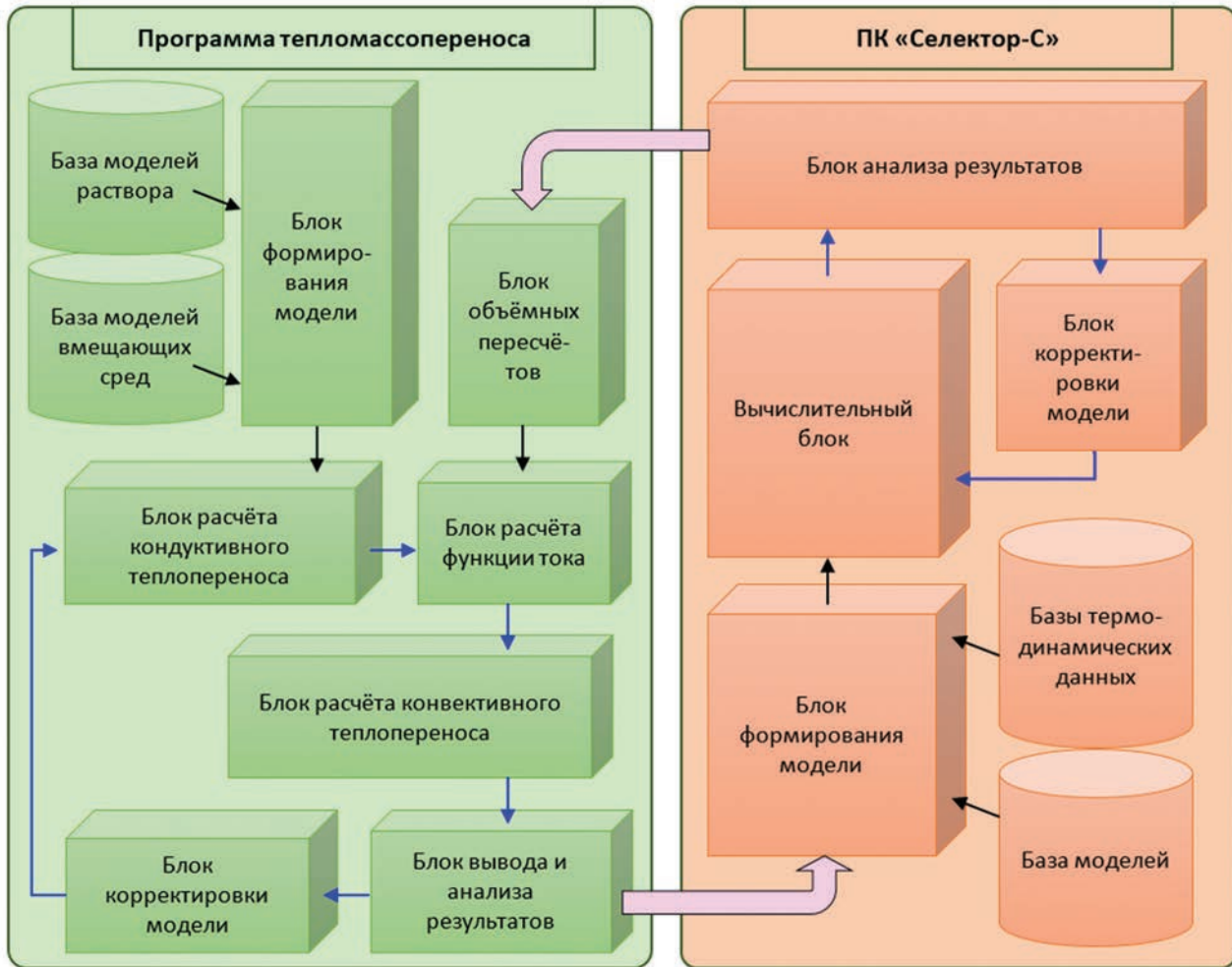


Рис. 2. Проект необходимых внутренних и внешних связей СППО для моделирования теплопереноса в магматогенно-гидротермальной системе и программного комплекса «Селектор-С» для учета растворения/отложения вещества в инфильтрационных и диффузионных процессах. Черными стрелками показана внутренняя передача данных, синими – главные циклы программ, крупными розовыми – внешняя передача данных

Fig. 2. The project of the necessary internal and external connections of specialized applied software for modeling heat and mass transfer in the magmatogenic-hydrothermal system and the «Селектор-С» software package for taking into account the dissolution/deposition of matter in infiltration and diffusion processes. The black arrows show the internal data transfer, blue – the main program cycles, the large pink arrows – external data transfer

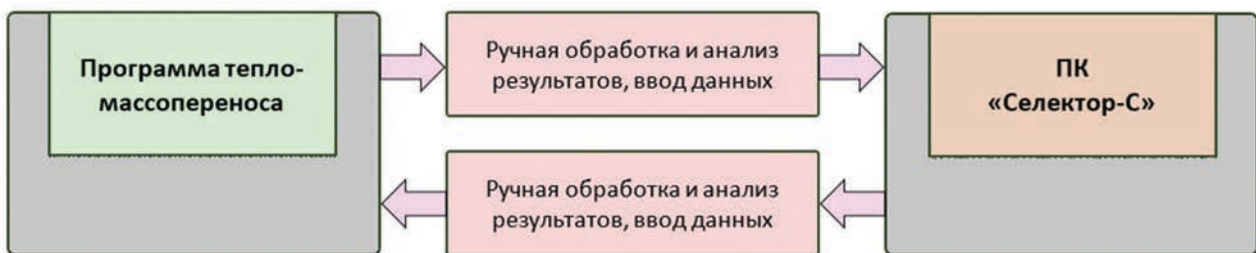


Рис. 3. Реальная схема, которую пришлось применять авторам при попытке моделирования теплопереноса в магматогенно-гидротермальной системе с учетом растворения/отложения вещества гидротермами

Fig. 3. The real scheme that the authors had to apply when trying to simulate heat and mass transfer in a magmato-genic-hydrothermal system, taking into account the dissolution/deposition of matter by hydrothermal waters

результатов удалось добиться только спустя длительное время, после собственных программных разработок. Так, проблема передачи данных в сторону СППО «помогла» задержать развитие наших научных исследований по моделированию тепло-массопереноса в магматогенно-гидротермальных системах на несколько лет [11].

Наконец, четвертый недостаток – это необходимость обучения, сложность, стоимость и длительность которого с ростом сложности СППО растет геометрически; многие сложные научные программные комплексы уже практически невозможно освоить самостоятельно. Часто пользователь, проходя все новые курсы обучения, становится в конце концов специалистом-оператором ЭВМ, нередко отодвигая на второй план научные исследования как таковые.

Ситуативные недостатки, как понятно из названия, являются следствием конкретной ситуации, сложившейся в российских научно-исследовательских учреждениях. Авторы живут и работают в Российской Федерации, целевую аудиторию данной статьи видят тоже преимущественно в российской научной среде, следовательно, за редким исключением, читатель сам прекрасно осведомлен о сложившемся положении.

Поэтому первым субъективным недостатком обсуждаемого СППО является его недоступная для подавляющего большинства исследователей стоимость. Для примера, не называя конкретного производителя (во избежание рекламы и иных последствий), приведем расценки одной из IT-компаний на действительно серьезный и мощный программный комплекс для моделирования широкого круга физических и химических процессов (табл. 1).

Эта компания в течение нескольких лет рассылает свои предложения по российским научно-исследовательским организациям и специализируется на сетевых приложениях типа «сервер-клиент», т.е. вычислительные мощности находятся на удаленном сервере, с персонального компьютера пользователя на сервер посылаются пакеты входных данных и настройки, а после расчетов на компьютер возвращаются результаты. Цены на компиляцию (создание автономного приложения на компьютере пользователя) указаны отдельно. Отметим, что этот прайс-лист предназначен специально для бюджетных научных и образовательных учреждений, т.е. цены существенно снижены. Если специализированные научные учреждения в крупных центрах российской науки могут себе позволить такие средства, то обычный геологический НИИ, где непосредственно

Таблица 1

Расценки современной IT-компания за программный комплекс для моделирования физических и химических процессов (в российских рублях на конец 2019 года). Приведены цены лицензий для 1 персонального компьютера (ПК) и «плавающей» (сетевая лицензия для одного авторизованного пользователя с возможностью соединения с сервером с любого персонального компьютера). Названия модулей видоизменены и цены округлены до 100 000 рублей (кроме цены за обучение) в целях сокрытия информации о компании

Table 1. Rates of a modern IT company for a software package for modeling physical and chemical processes (in Russian rubles at the end of 2019). The prices of licenses for 1 personal computer and «floating» (network license for one authorized user with the ability to connect to the server from any personal computer) are shown. The names of the modules have been changed and the prices have been rounded to the nearest 100 000 rubles (excluding tuition fees) in order to conceal information about the company

Продукция (услуга)	Лицензия на 1 ПК		«Плавающая» лицензия	
	Один год	Бессрочная	Один год	Бессрочная
Клиентская платформа	400 000	800 000	800 000	1 500 000
Модуль электродинамических расчетов	1 600 000	3 200 000	3 200 000	6 300 000
Модуль теоретической механики и акустики	1 600 000	3 100 000	3 100 000	6 200 000
Модуль гидродинамики и тепловых расчетов	1 600 000	3 100 000	3 100 000	6 200 000
Модуль химических расчетов	1 300 000	2 600 000	2 600 000	5 100 000
Модуль оптимизации и трассировки	500 000	1 000 000	1 000 000	2 000 000
Средства интеграции со сторонними приложениями	1 700 000	3 200 000	3 200 000	6 600 000
Средство компиляции автономных приложений	600 000		1 100 000	
Обучение (1 место, за 1 день)				25 000

компьютерным физическим и/или химическим моделированием занимаются всего несколько человек, вряд ли приобретет такое СППО, и даже средства грантов не являются здесь выходом из положения.

Второй недостаток также касается финансовой стороны проблемы. Он состоит в том, что производители как коммерческого СППО, так и операционных систем в целях увеличения продаж новых версий со временем перестают поддерживать предыдущие версии своих и сторонних продуктов. Так, целый ряд вполне пригодного СППО перестал работать в новых версиях Microsoft Windows, и производителям пришлось разрабатывать новые, совместимые версии своих программных продуктов. Но новые версии операционных систем необходимы, так как они предназначены для работы на все более современных и производительных компьютерах. А прикладная функциональность новых версий СППО в большинстве случаев практически не меняется, и пользователям приходится оплачивать полную цену, по сути, только за новый дизайн СППО. Второй вариант – производитель по каким-то причинам вообще не разрабатывает современную версию; в этом случае перед пользователем встает выбор: или продолжать работать на «медленном» компьютере с устаревшей операционной системой, или отказаться от использования необходимого ему СППО и искать аналоги, которых может и не существовать. Примером может служить все тот же программный комплекс «Селектор-С» [22, 40], лицензионные версии которого, имеющиеся у авторов и прекрасно работающие с конца 1990-х годов по настоящее время, несовместимы с 64-разрядной ОС Microsoft Windows. Полноценные аналоги этого СППО авторам неизвестны.

Третий недостаток проявляется в свете направленности в последние годы политики Российской Федерации по информационным технологиям, а также непредсказуемости внешней политики некоторых других государств, в которых производится СППО. Становится потенциально возможной проблема доступности самого программного обеспечения, связанная с проблемами долговременности процесса импортозамещения, нелегальных копий и защитой авторских прав. Любое СППО может неожиданно оказаться «вне закона», либо могут оказаться «вне закона» как раз те распространенные программы и операционные системы, совместимость с которыми так привлекала пользователя.

Конечно, достоинства и недостатки стороннего СППО не ограничиваются вышесказанными, и каждый ученый сам выбирает необходимый ему в исследованиях инструмент. Но, по мнению авторов, очевидно, что наука нуждается в «острых»

инструментах, «заточенных» под конкретные задачи, причем в таких инструментах, которые могут быть изменены и дополнены непосредственно в процессе модельной научной работы в соответствии с нуждами исследователя. Здесь можно провести аналогию с физическим экспериментом, в котором ученый, наблюдая течение эксперимента, может при необходимости остановить конкретный опыт и внести исправления не только в условия его проведения, но и в конструкцию самой экспериментальной установки. Такой подход, несомненно, позволит получать лучшие результаты.

Сегодня любое серьезное фундаментальное естественнонаучное исследование является междисциплинарным, даже мультидисциплинарным. Не говоря уже о теснейшей связи между собственно науками о Земле (геология, геофизика, геохимия, геодинамика и др.), группа ученых в области геонаук должна иметь в своем составе и физика, и химика, и математика, и программиста... Почему же последнее пока встречается редко? Ответ на этот вопрос, по мнению авторов, заключается в проблеме недостатка образования и финансов, а также инертности некоторых ученых. Вопрос *образования* встает, в первую очередь, перед поколением молодых ученых-исследователей вследствие перманентной «реформы» российского образования. Авторы этой статьи с более чем двадцатилетним педагогическим стажем в вузах и аспирантуре хорошо видят практическую деградацию образованности большинства выпускников высшей школы и аспирантуры (речь не идет о престижных образовательных учреждениях крупных центров). Выпускник «среднего» по стране университета чаще всего не имеет широкого, действительно университетского образования, потому что большинство российских университетов сейчас – это профильные вузы, бывшие институты, добавившие к своим специальностям экономику, право и менеджмент. *Инертность*, напротив, более характерна для консервативного круга некоторых возрастных ученых. Замыкает проблему недостаток *финансирования*, который одинаково пагубен для фундаментальных исследований в любом возрасте и приводит к тому, что даже широко образованный и активный исследователь «среднего» научного учреждения не имеет финансовой возможности создать свою междисциплинарную научную группу и снабдить ее исследовательским инструментарием. Фундаментальная наука *должна финансироваться «сверху»*, она никогда не сможет самоокупаться, как прикладные инновационные исследования. Лучше потерять на этом средства вследствие отсутствия ожидаемых результатов, чем остановить фундаментальные исследования вообще, что практически

происходит сейчас в большинстве периферийных НИИ.

За последние два десятка лет научной и педагогической деятельности авторы разработали ряд прикладных компьютерных программ, помогающих моделировать наблюдаемые или гипотетические природные объекты. Ряд программ зарегистрирован авторами в Роспатенте [31-36], некоторые были использованы в учебно-образовательном процессе. Также нами были опубликованы несколько работ методического и методологического характера, предлагающих и формализующих применение объектно-ориентированного подхода (ООП) при компьютерном моделировании природных явлений [12, 5, 7]. Такой опыт позволил определить основные принципы проектирования, реализации и использования прикладного программного обеспечения для моделистов в области наук о Земле, которые могут быть полезны широкому кругу ученых-исследователей, а также студентам геологических специальностей. Желание поделиться опытом, а также заинтересованность научно мыслящих коллег побудили авторов подготовить данную работу.

Отметим особо, что речь идет только об инструменте исследований, необходимом ученому, и о способе получения ученым этого инструмента. Ведь практически все «признанные» (а точнее – проплаченные и проафишированные) в мире стандарты и методологии разработки СППО (стандарты SWEBOK, PMBOK, PRINCE2, модели CMMI, RUP, XP, Scrum) ориентированы отнюдь не на фундаментальную науку, а на коммерческое продвижение, на «бизнес», поэтому основным понятием в жизненном цикле программного обеспечения стал IT-проект и его «эффективный менеджмент». Например, один из наиболее известных и популярных стандартов ведения IT-проектов «Projects In Controlled Environments 2» (PRINCE2), являющийся «de facto» стандартом для руководства проектами в современной Европе [25], устанавливает такие принципы организации проектов: постоянная оценка соответствия проекта потребностям бизнеса; выделение определенных ролей с ответственностью и правами; ориентация на коммерческий результат (главное – именно результат, а не процессы его достижения). Этот же стандарт требует непосредственно от разработчиков фокусироваться на следующем: соответствие потребностям бизнеса («бизнес-кейс»); организационная структура проекта; финансовое состояние проекта; планирование; управление рисками; управление изменениями; отчетность [38]. В отличие от таких «признанных» стандартов, предлагаемый подход к созданию и использованию СППО для научного моделирования ни в коей мере не является и не должен

быть коммерческим, потому что *фундаментальная наука и коммерция несовместимы*.

Отметим также, что все программные продукты, созданные авторами, не предназначались для продажи и разрабатывались для решения текущих проблем, с которыми авторы сталкивались в научных исследованиях. Но законным правообладателем авторских программ, зарегистрированных в Роспатенте, является научное учреждение, которое может распоряжаться ими по усмотрению руководства и без согласия авторов, в том числе и в коммерческих целях.

Постановка задачи

Первой, *методологической задачей* данной работы является формализация процесса создания СППО как инструмента моделирования определенного геологического процесса.

Второй, не менее важной *прикладной задачей* является практическое обоснование успешности первой задачи: обоснование того, что созданный инструмент действительно может успешно применяться в моделировании процесса. Таким обоснованием будет математическая симуляция теплофизической эволюции градиентной верхнемантийной и/или коровой среды (глубины 0-600 км) над адиабатическим плюмом, достигшим прочностного барьера на заданной глубине (рис. 4), или над последовательно развивающимся вверх плюмом с любым заданным шагом, кратным шагу дискретной сетки внешней среды. В рамках этой же задачи должна быть предусмотрена возможность сохранять промежуточные и конечные результаты в приемлемом для исследователя виде.

Авторы рассматривают плюм как долгоживущую систему, формирование и развитие которой можно описать следующим образом. Земное ядро является источником восстановленного флюида [27, 28, 14], который накапливается на границе жидкое ядро – твердая мантия. Накопление происходит вследствие значительной скорости газовой эмиссии и невозможности вещества нижней мантии поглотить этот флюид или сразу пропустить его вверх [16]. Из-за конвекции во внешнем жидком ядре скопления флюида локализуются в пространственно-ограниченных областях над восходящими ветвями конвективных ячеек, что может служить объяснением анизотропии слоя D". Таким образом формируются накапливающие флюид линзы – горизонтальные полости (камеры), описанные Н.Л. Добрецовым как мантийные «воронки» [14]. Образование множества таких флюидных линз и их взаимодействием с веществом нижней мантии можно объяснить природу суперсвеллов слоя D", которые, по данным [44], имеют не просто термальную природу, а являются вещественными неоднородностями [16].

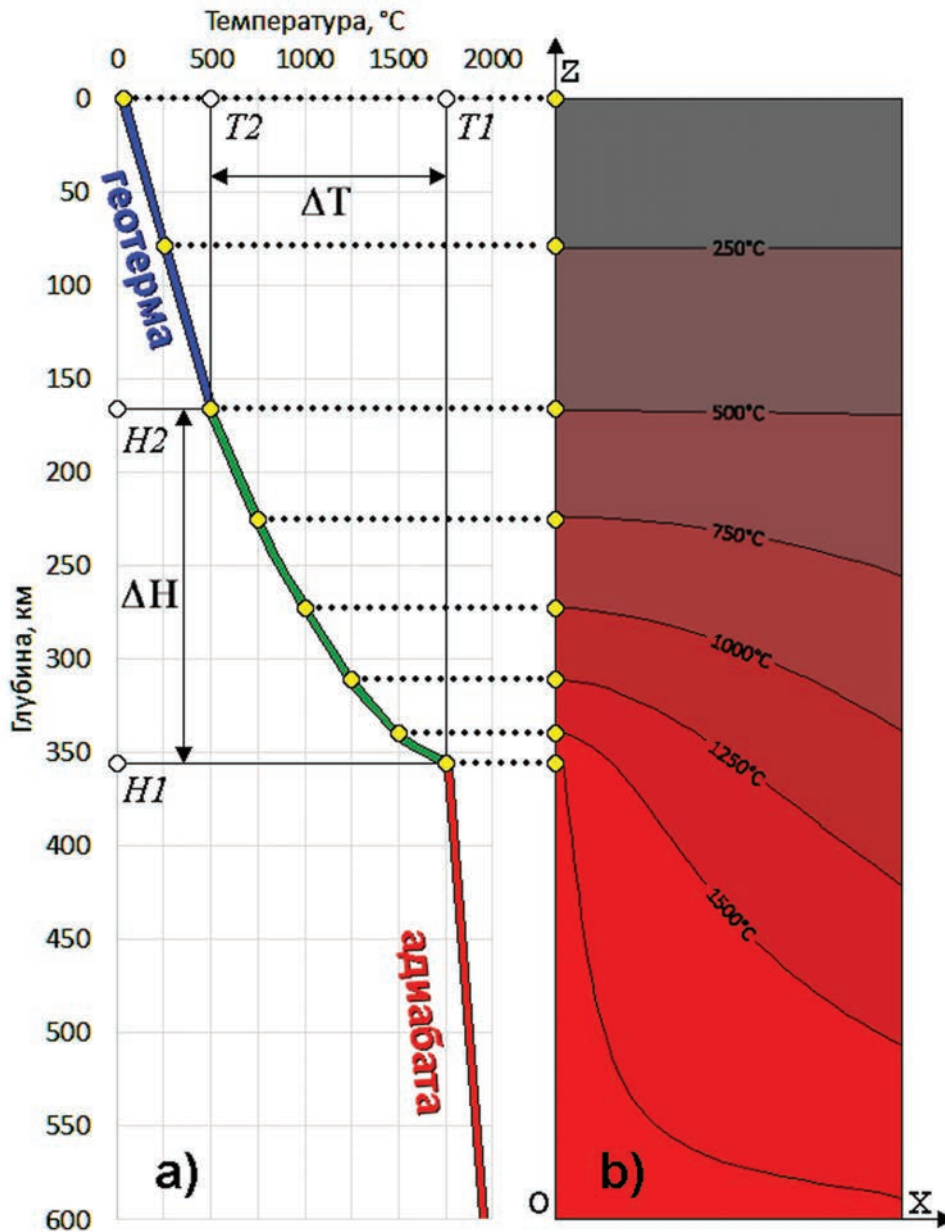


Рис. 4. Схема прикладной задачи.

Симметричный относительно оси OZ мантийный плюм распространяется, адиабатически охлаждаясь, до прочностного барьера на глубине H1. Постоянно подпитываемые его мигранты поддерживают на глубине H1 температуру T1. Через некоторое время тепловое возмущение распространится в интервале ΔH до глубины H2, причем температура в этом интервале будет изменяться от плюмовой T1 на глубине H1 до геотермической T2 на глубине H2. Основной задачей является определение формы кривой температурного графика в интервале глубин ΔH (характера изменения температуры ΔT) в любой момент времени.

a) График изменения температуры при тепловом возмущении спокойной геотермы при адиабатическом вертикальном распространении плюма до глубины H1,

b) Проекция графика на полуплоскость идеализированного температурного разреза верхней мантии и земной коры. Правая граница разреза бесконечно удалена от OZ и характеризуется спокойной геотермой

Fig. 4. Scheme of the applied problem.

A mantle plume, symmetric about the OZ axis, propagates with adiabatic cooling to a strength barrier at depth H1. The migrants constantly feeding it maintain the temperature T1 at the depth H1. After some time, the thermal disturbance will propagate in the interval ΔH to the depth H2, and the temperature in this interval will vary from plume T1 at depth H1 to geothermal T2 at depth H2. The main task is to determine the shape of the curve of the temperature graph in the interval of depths ΔH (the nature of the change in temperature ΔT) at any time.

a) A graph of temperature changes during a thermal disturbance of a quiet geotherm with an adiabatic vertical propagation of a plume to a depth of H1,

b) Projection of the graph onto the half-plane of the idealized temperature section of the upper mantle and the earth's crust. The right boundary of the section is infinitely distant from the OZ and is characterized by a calm geotherm

Однако бесконечно разрастаться эти линзы не могут, и при достижении критического размера, обусловленного критическим избыточным давлением [17, 16, 8], они прорываются путем «флюидоразрыва» (по аналогии с гидроразрывом), трансформируясь в вертикальную замкнутую полость – мигрант, и уходят вверх в мантию [14]. Условие прорыва записывается как:

$$\int_0^{h+L} g\rho_c(h+L)d(h+L) - \int_0^h g\rho_c h dh - \int_h^{h+L} g\rho_M L dL \geq \sigma_c, \quad (1)$$

где h – глубина кровли полости; L – высота полости; g – ускорение силы тяжести; ρ_c – плотность среды; ρ_M – плотность вещества мигранта (флюида); σ_c – предел прочности среды на разрыв [9]. Первые два члена в левой части выражения (1) – это литостатические давления внешней среды в подошве и кровле полости соответственно; третий член – гидростатическое давление в подошве камеры. Таким образом, вся левая часть выражения до знака « \geq » равна избыточному давлению вещества в полости [8].

В начальный момент после прорыва высота полости сопоставима с латеральными размерами линзы при сохранении того же объема, что много больше ее исходной высоты [8]. Это, согласно выражению (1), предопределяет мгновенный рост избыточного давления, величина которого становится много выше прочности мантии и способствует быстрому старту полости вверх [16]. Благодаря пластичности мантии и высокой температуре флюида среда за поднявшимся мигрантом «закрывается», очевидно, сохраняя след химического взаимодействия флюид-мантия (если такое не исключается высокой скоростью его подъема), а в слое D" начинает формироваться новая линза.

Формируемый таким образом поток мигрантов при достижении верхней мантии и литосферы может прерываться горизонтальными областями повышенной прочности среды – барьерами, прочность и конфигурация которых зависит от глубины и геодинамической обстановки [21, 46, 8]. На таких прочностных барьерах развитие плюма вверх останавливается на время, необходимое для подпитки его очередными порциями мигрантов. Вещество, дискретно поставляемое мигрантами под барьер, распространяется по латерали, формируя грибовидную «шапку» плюма, до тех пор, пока вертикальный размер этой новой «линзы» не превысит критическую высоту согласно тому же выражению (1), после чего произойдет новый прорыв, и так далее. Заметим, что реологическая расслоенность литосферы может быть весьма сложной, где хрупкие слои сменяются пластичными и снова хрупкими на значительную глубину от поверхности [46, 16].

Таким образом, плюм как система мигрантов имеет общую столбообразную или вытянутую цилиндрическую форму с изгибами, обусловленными движениями мантии и литосферы, и утолщениями, определяемыми реологическими свойствами их сред. За счет постоянного движения горячих мигрантов в этом столбе должна поддерживаться температура, близкая к адиабатической. Для моделирования необходимо хотя бы в первом приближении оценить, от чего зависят размеры этого «цилиндра». Очевидно, что его высота будет определяться временем и скоростью развития (активности) плюма, причем последняя напрямую зависит от количества барьеров и их прочности. Исходный диаметр такого идеализированного плюма будет определяться конфигурацией исходной полости в слое D" и реологическими свойствами вмещающей среды, влияющими на форму мигрантов. Также вероятно, что очень большие вертикальные полости в пластичной среде мантии при достаточно быстрой скорости подъема становятся неустойчивыми и дробятся на меньшие, аналогично дроблению больших пузырей воздуха при подъеме в жидкости [16].

Заметим, что поднимающийся посредством мигрантов флюид «сдвигает» солидус мантии в сторону низких температур, следовательно, при пересечении адиабатой «мокрого» солидуса мантии последняя будет плавиться. Ассимилируя расплав или магму, мигрант из чисто флюидного становится флюидо-магматическим. В состав его вещества в таком случае, кроме окисленных кислородом мантии в процессе подъема водорода и углерода, будут включаться и химически и/или механически захваченные другие компоненты мантии и литосферы.

Методика моделирования

Описав методологическую и прикладную задачи, перейдем к рассмотрению их решения. Сначала, согласно плану, изложим методику создания инструмента моделирования – модельного СППО, затем покажем, как с его помощью формируется и исследуется вышеописанная концептуальная модель.

Принципы проектирования графического интерфейса приложения

Под графическим интерфейсом приложения (ГИП) подразумевается экранное представление программы, позволяющее пользователю управлять приложением с помощью устройств ввода, обычно – мыши и клавиатуры. Мы умышленно не используем общепринятый термин «*graphical user interface (GUI)*» [1], чтобы подчеркнуть направленность разработки СППО – не коммерческую (для потенциального

покупателя и пользователя), а для собственных нужд исследователей.

При проектировании ГИП необходимо помнить, что разработка, настройка, тестирование каждой модели – это длительный процесс, следовательно, моделист проводит перед формой приложения длительные сеансы работы, привыкая к определенному расположению компонентов на форме, т.е. привыкает к *областям (концентрации) внимания*. Он привыкает к тому, что основные (определяющие) входные данные расположены, к примеру, слева вверху, диаграммы – справа, для получения текущей информации о расчете и состоянии модели он переводит свой взгляд вниз. Если искомые компоненты будут находиться строго в соответствующих его ожиданиям областях внимания, работа с СППО будет комфортной, в противном случае постоянно будут возникать неудобства. Поскольку предлагаемое СППО разрабатывается для собственных нужд, необходимо выработать определенный порядок расположения областей внимания (а следовательно, и визуальных компонентов), который отвечает предпочтениям разработчика-моделиста, и в дальнейшем неуклонно его придерживаться.

Применительно к такому СППО основные принципы проектирования ГИП должны предусматривать для потенциального моделиста:

- 1) строгую последовательность действий при первоначальном формировании модели;
- 2) доступность изменения максимума параметров в уже сформированной модели;
- 3) «прозрачность» выполнения максимума действий при формировании и расчете модели;
- 4) возможность в любой момент расчета прервать его с сохранением текущих данных;
- 5) разумный минимализм в дизайне (как можно проще, но не примитивнее).

Применение этих принципов покажем при рассмотрении визуальных элементов формы приложения, принципиальная схема размещения которых показана на рис. 5.

Авторы считают предпочтительным разработку СППО с одной (главной) формой. Многооконные и многодокументные (MDI) приложения допустимы только в случае крайней необходимости, поскольку создают сразу несколько проблем как в реализации, так и в использовании, среди которых:

- проблема реализации и согласования интерфейсов окон и форм, ведущих к чаще всего неоправданному усложнению разработки СППО;
- проблема динамического выделения памяти для форм в приложениях MDI (на современном этапе развития компьютерной техники нет

необходимости в строгой экономии оперативной памяти, как это требовалось раньше);

- проблема сохранения и передачи данных между модулями разных форм (в случае использования дискового пространства добавляется и проблема своевременного открытия, закрытия и индексации временных файлов).

Рассмотрим схему (рис. 5) подробнее. **Заголовок окна 1** главной формы приложения (далее – просто формы) не должен содержать никакой важной для моделирования информации. Практика показывает, что этот элемент окна Microsoft Windows часто остается в «слепой зоне» внимания моделиста, поэтому достаточно названия самой программы и ее версии.

Наличие **главного меню и панели «быстрых» кнопок 2** (компоненты TMainMenu и TToolBar) зависит от предпочтений разработчика. В случае их наличия необходимо командами меню и кнопок представить весь арсенал действий, предусмотренных в программе, поскольку при длительной работе с программой человек привыкает к определенной последовательности действий, движений и жестов. Если моделист привык задействовать меню или панель «быстрых» кнопок, то ему будет неудобно всякий раз вспоминать, какая команда отдается из главного меню, какая – другими компонентами или «горячими» клавишами.

В наших программах принято интуитивно понятное расположение визуальных компонентов на главной форме приложения, предполагающее движение внимания моделиста при создании и редактировании модели в привычных направлениях: сначала в направлении слева направо, затем – сверху вниз (стрелки на рис. 5).

В одномодульном приложении (рис. 5a) или отдельном модуле комплекса (рис. 5b) на форме слева располагается **главная панель 3** ввода тех входных данных, которые с наименьшей вероятностью потребуют изменения в процессе создания и редактирования модели. Несмотря на советы многих пособий и справочников по программированию, для этих данных рекомендуется использовать глобальные переменные, т.к. при их изменении должна, по сути, формироваться новая модель. Главная панель реализуется визуальными компонентами класса TGroupBox (или TPanel с несколькими TGroupBox), обязательно снабжается заголовками и всегда остается на виду с целью постоянного информирования моделиста о входных данных модели. Ввод данных осуществляется с помощью стандартных компонентов классов TEdit, TComboBox, TCheckBox, TRadioButton, TButton и т.п. Ввод каждого тематического блока входных данных на главной панели должен заканчиваться нажатием предусмотренной

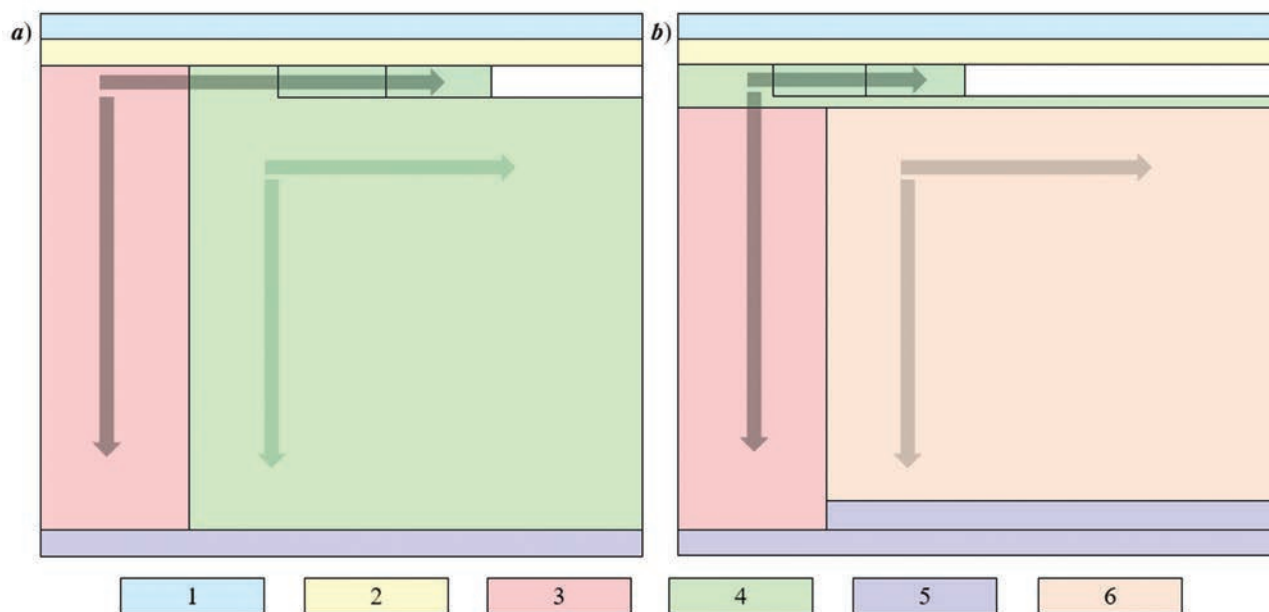


Рис. 5. Проектирование ГИП: а) в простом (одномодульном) приложении; б) в программном комплексе (многомодульном приложении). 1 – заголовок окна MS Windows; 2 – главное меню и панель «быстрых» кнопок (опционально); 3 – панель ввода основных входных данных («главная панель»); 4 – рабочий набор вкладок (страниц); 5 – панель состояния; 6 – отдельный модуль комплекса. Стрелками показаны основные направления движения внимания пользователя. Остальные пояснения в тексте

Fig. 5. Designing the graphical interface of the application: a) in a simple (single-module) application; b) in a soft-ware package (multi-module application). 1 – title of the MS Windows window; 2 – main menu and a panel of «quick» buttons (optional); 3 – input panel for the main input data («main panel»); 4 – a working set of tabs (pages); 5 – status bar; 6 – a separate module of the complex. The arrows show the main directions of movement of the user's attention. The rest of the explanations are in the text

кнопки (например, класса TButton), служащим, во-первых, командой инициализации соответствующих глобальных переменных, во-вторых, командой записи в служебный файл (см. ниже) текущих входных параметров (которые могут быть использованы и при последующих запусках программы), и, в-третьих, неким подсознательным триггером для моделиста: «кнопка нажата – закончено описание определенной части объекта, переходим к следующей». Пример главной панели модуля PHT Vladi Gead 4.0 представлен на рис. 6.

Панель состояния 5 (компонент TStatusBar) в самом низу формы (модуля) (рис. 5) информирует исследователя о *текущем* состоянии модели и/или этапа расчета. Здесь же полезно размещать информацию о редактировании входных и исходных расчетных данных (сохранены/изменены).

Все пространство формы справа от главной панели занимает рабочий **набор вкладок (или страниц) 4**, реализуемый компонентами классов TTabControl или TPageControl (рис. 5).

На **первой странице** (компонент класса TTabSheet) в табличной форме размещаются расчетные параметры исходного состояния моделируемого

объекта, дискретизированные геометрически. Например, в случае моделирования вертикального подъема магматического мигранта в пластичной среде, таблицы содержат исходные физические свойства мантийной среды для каждой точки подъема, через которую будет проходить мигрант. Эти данные рассчитываются непосредственно из заданных на главной панели формы начальных условий и должны быть доступны для ручного редактирования в любое время до запуска процесса их изменения. Таблица реализуется в виде компонента класса TStringGrid, в котором данные, изменить которые невозможно без изменения входных данных на главной панели, помещаются в первых, фиксированных («fixed») столбцах.

Здесь же (в отдельном блоке/блоках) рекомендуется расположить графические компоненты, способные визуально отображать исходное состояние объекта и результаты ручного редактирования его параметров в виде диаграмм, 1-2-3D-изображений или анимации. Графическое представление данных удобно оформлять в виде координатных плоскости или пространства с одной постоянной осью, в то время как на другой или других осях откладывать

параметр по выбору исследователя. Например, представление распределения параметров модели по глубине реализуется через компонент класса TChart с возможностью выбора параметра, откладываемого по оси абсцисс, через компонент класса TComboBox.

Блоки таблицы и графического представления рекомендуется разделить компонентом класса TSplitter для возможности изменения их размеров с хранением текущих размеров в служебном файле (см. ниже). Последнее удобно при последующих сохранениях графики – изображения на разных стадиях моделирования и даже при разных запусках программы будут одного, сохраненного размера. Такую же процедуру необходимо реализовать для размера и положения (оконное, развернутое) всей формы приложения.

Пример такой страницы, реализованной в модуле PHT Vladi Gead 4.0, показан на рис. 7.

Вторая страница рабочего набора служит непосредственно для моделирования изменений (динамики) объекта. В левой части страницы рекомендуется отдельно от главной панели формы разместить панель настроек течения времени, содержащую поля ввода (компоненты класса TEdit) и выбора (компоненты классов TComboBox, TCheckBox, TRadioButton и т.п.) единиц измерения времени, различных временных интервалов и шагов. Если расчет модели включает в себя повторяющиеся наборы действий на разных этапах, то удобно организовать ввод характеристик этих этапов в виде небольших редактируемых таблиц (компонентов класса TStringGrid) с предварительно задаваемым количеством строк. Например, при расчете вертикального движения порции флюида через мантию необходимо для каждого реологического слоя мантии рассчитывать скорость подъема порции, которая будет зависеть от входных параметров этого слоя. Значит, целесообразно организовать ввод модельного количества таких слоев с помощью компонента класса TEdit и кнопки (компонент класса TButton), которые будут устанавливать соответствующее количество строк в компоненте класса TStringGrid – таблице с заголовками столбцов «№», «Глубина», «Параметр 1», «Параметр 2», ... и т.д. Ввод параметров в таблицу моделист завершит нажатием еще одной кнопки-триггера (см. выше). Каждая таблица с сопутствующими компонентами (полями ввода, кнопками, кнопками-триггерами и т.п.) должна располагаться в отдельном блоке.

Всю остальную площадь «динамической» страницы должны занимать компоненты, в которых во время расчета модели будут в реальном времени отображаться текущие расчетные данные. Рекомендуется так же, как и на первой странице, организовать их как в виде таблицы, так и в графическом виде

с возможностью сохранения в любой момент расчета в текстовом и графическом форматах посредством «горячих клавиш» или нажатия предусмотренных кнопок. Полезно также реализовать возможность автоматического сохранения промежуточных и конечных результатов через заданное количество шагов (итераций, этапов и т.п.) по желанию моделиста.

Таблица текущих данных (компонент класса TStringGrid) должна содержать основные данные для каждого этапа расчета, причем рекомендуется настроить формат и ширину таблицы по умолчанию таким образом, чтобы окончательный, наиболее важный результат для каждого этапа располагался в одном, самом правом столбце. По окончании отдельного этапа расчета соответствующий ему столбец автоматически пролистывается, уступая место столбцу следующего этапа. Остальные столбцы слева предназначены для вспомогательных данных и должны быть фиксированными. Этим достигается фокусирование внимания моделиста на текущем этапе расчета. Примером такой реализации может служить таблица текущего расчета, реализованная на странице «Динамика» в модуле PHT Vladi Gead 4.0 и показанная на рис. 8. Здесь изменяющиеся в расчете, но не результирующие теплофизические параметры размещены в фиксированных столбцах слева; в самом правом же рабочем столбце выводится только результат – расчетный профиль температуры по глубине для каждого этапа расчета – текущего прочностного барьера.

Текущие характеристики самого процесса расчета (этап расчета, номер итерации, время с начала расчета, оставшееся время и т.п.) лучше выводить в панели состояния – в предусмотренных для этого экземплярах класса TStatusPanels соответствующей ширины.

Третью страницу рабочего набора целесообразно посвятить *интерпретации результатов* моделирования. Интерпретация результатов компьютерного моделирования является одновременно самой уязвимой и самой индивидуально ориентированной частью исследований. Поэтому именно в *организации представления результатов и инструментов их обработки* давать какие-либо рекомендации наиболее сложно. Попытаемся все же сформулировать их в общем виде.

Во-первых, в ГИП и программном коде должна быть обязательно предусмотрена возможность вывода *любых* промежуточных расчетных данных. Эта необходимость объясняется тем, что моделист в процессе обработки и интерпретации результатов будет выявлять некоторые закономерности и связи, которые потребуют разбора и объяснения. Такой процесс часто требует отладки программы, при которой

приходится находить влияющие и зависимые факторы; при этом заранее неизвестно, какой именно фактор является влияющим или зависимым. Напомним аналогию моделирования на собственном СППО с физическим экспериментом, в котором ученый, наблюдая течение эксперимента, может при необходимости остановить конкретный опыт и внести исправления не только в условия его проведения, но и в конструкцию самой экспериментальной установки.

Во-вторых, непосредственно в программе должно быть реализовано средство графического представления зависимости между любыми входными и/или расчетными параметрами модели для оперативной предварительной оценки предположений моделиста.

В-третьих, вывод описанных табличных и графических данных должен быть одинаково доступен как во время расчета, так и по его окончании; т.е. необходимо предусмотреть возможность какой-то интерпретации уже в процессе расчета – интерпретации текущих расчетных данных.

Данную страницу предлагается организовать для накопительного вывода статистической информации в табличном и графическом видах в реальном времени расчета (с тем чтобы моделист сам мог выбрать для наблюдения за расчетом либо страницу «Динамика», либо страницу «Статистика»). Предлагаем использовать для этого сводную таблицу (компонент класса TStringGrid), столбцы которой будут содержать значения практически всех без исключения переменных программы, имеющих смысловую научную нагрузку. Строки будут соответствовать этапам или итерациям расчета. Стоит предусмотреть и программно реализовать функцию выделения в таблице только одного столбца, подобно свойству goRowSelect подмножества Options компонента класса TStringGrid. В этом случае можно при перемещении фокуса по столбцам таблицы автоматически отображать диаграмму в координатах «строки (этапы, итерации и т.п.) – значения параметра в выбранном столбце». Такую диаграмму проще всего выводить в компоненте класса TChart в блоке справа от таблицы, обязательно предусмотрев возможность взаимного изменения размеров табличного и графического блоков (компонент класса TSplitter). В модуле PHT Vladi Gead 4.0 описанным способом реализована страница «Статистика».

Страница настроек. На завершающей странице рабочего набора удобно поместить технические настройки программы. Это избавляет от необходимости создавать для настроек дополнительную форму и реализовывать передачу данных между главной и дополнительной формами. Предлагается по умолчанию сделать эту страницу невидимой, «спрятать» ярлык

данной страницы (свойство TabVisible компонента TTabSheet) и обеспечив доступ к ней через главное меню или «горячие» клавиши, а выход – обработкой нажатия привычной клавиши, например «Esc», или щелчком мыши на ярлыке другой страницы. Невидимая страница не мешает работе с моделью и появляется только по явному вызову.

Настройки на данной странице целесообразно сгруппировать в три блока: блок условий, блок процесса и блок вывода результатов расчета. Важно исключить в этих блоках возможность ввода каких-либо конкретных значений: все настройки должны осуществляться *выбором* (компоненты классов TRadioGroup, TCheckBox и т.п., а также компоненты-диалоги), исключая только установку точности расчета. Конкретные числовые значения входных параметров, начальных и граничных условий будут задаваться на главной панели или на странице «Динамика», как описано выше.

Блок настроек условий расчета предназначен для установки начальных и граничных условий, которые не будут меняться от запуска к запуску программы долгое время, например в течение работы над определенной серией моделей. Очевидно, что набор конкретных условий, задаваемых здесь, будет индивидуален для каждого моделиста. Из универсальных условий упомянем только точность конечного расчета или расчета значений различных переменных.

Блок настроек процесса расчета служит для указания выполняемой программе, как именно себя вести в процессе и по окончании расчета: на какую страницу переключаться при нажатии клавиши «Расчет», делать ли паузу по окончании каждого этапа расчета и т.п. При предполагаемом длительном процессе расчета здесь можно предусмотреть возможность выхода из программы или выключения компьютера по его окончании.

Блок настроек вывода результатов должен содержать технические настройки для вывода и автоматического сохранения расчетных данных: нюансы вывода графической и табличной информации, путь к файлам сохранения по умолчанию, выбор между сохранением данных в один файл или несколько файлов, формат сохранения и т.п.

Таким образом, страницу настроек необходимо включать в рабочий набор с целью в максимальной мере индивидуализировать программу для своего удобства. Понятно, что, поскольку постулируется возможность и даже необходимость развития программы в процессе использования, такую страницу можно оставить и полупустой, для того чтобы со временем добавлять настройки для новых реализованных возможностей программы.

Также очевидно, что необходимо предусмотреть сохранение всех настроек в служебный файл сразу при закрытии страницы.

Служебный файл. Как мы писали выше, разработка СППО для собственных нужд исследователей избавляет от необходимости сокрытия или шифрования данных. Поэтому хорошей практикой авторы считают хранение «по умолчанию» введенных исходных данных, а также настроек моделирования и ГИП в *служебном файле* обычного текстового формата. Операция открытия файла и записи в него данных реализуется в виде функции и вызывается в обработчике событий OnClick кнопок-триггеров главной панели и вкладок (страниц). Другая функция открывает служебный файл и читает из него данные при очередном запуске приложения и вызывается, например, в обработчике OnCreate формы приложения.

Формирование модели

При работе над прикладной задачей будем исходить из принципов методики комплексного компьютерного моделирования природных объектов, подробно описанной нами ранее [12, 5]. Методика включает в себя этап геометрической дискретизации объекта, этап определения физических параметров в каждом элементе дискретизации, этап физико-химических расчетов (в данном случае опускаемый как стоящий немного «в стороне» от главного направления работы) и динамический этап изменения объекта. Любое геологическое явление или процесс, согласно методике, рассматривается с позиций объектно-ориентированного подхода как *объект* – совокупность *свойств*, внешних *событий* (среди которых главное – течение времени) и *реакций* объекта на такие события [12].

Формирование модели модуля PHT Vladi Gead 4.0 начинается с ввода и выбора входных данных на **главной панели** (рис. 6). Входные данные разделены на тематические блоки.

Блок «Геометрия системы и плотность среды» содержит поля ввода для общей глубины моделируемой системы H и шага по глубине (высоты подсистемы) h в км. Здесь же задается глубина остановки плюма для предварительного расчета исходных теплофизических характеристик системы. В поле выбора устанавливается профиль плотности ρ , соответствующий воззрениям пользователя. На данный момент предлагается выбор из двух профилей: по модели PREM [47] и по В.Ю. Бурмину [4], графики которых были аппроксимированы кусочно-линейной регрессией (табл. 2).

Эти данные позволяют рассчитать профиль литостатического давления по зависимости:

The screenshot shows a software interface with three main sections:

- Геометрия системы и плотность среды:** Includes input fields for 'Общая глубина, км' (600), 'Шаг по глубине, км' (1), and 'Глубина плюма, км' (540). A dropdown menu shows 'Dziewonski, Anderson, 1981 (PREM)'. A 'Установить' button is at the bottom.
- Теплофизические параметры системы:** Includes a field for 'K°, Вт/(м·К)' (3.8). A dropdown for 'Расчёт теплоёмкости, Дж/(кг·К)' shows 'Berman, Aranovich (1996)'. Another dropdown for 'Расчёт исходных тепловых величин' shows 'дифференцированный'. A 'Установить' button is at the bottom.
- Адиабата, °C:** Includes a field for 'На поверхности' (1550) and 'Шаг по глубине' (1). A 'Установить' button is at the bottom.
- Геотерма, °C:** Includes radio buttons for 'готовая' (selected) and 'градиент'. A dropdown shows 'COX (Конди, 2005)'. A 'Далее' button is at the bottom.

Рис. 6. Пример реализации главной панели в модуле PHT Vladi Gead 4.0.

Показаны тематические блоки «Геометрия системы и плотность среды» и «Теплофизические параметры системы».

В последнем выделены подблоки «Адиабата» и «Геотерма».

В каждом блоке предусмотрена кнопка-триггер «Установить».

При нажатии кнопки «Далее» на базе входных данных главной панели рассчитывается исходное состояние модели (см. рис. 7)

Fig. 6. An example of the implementation of the main panel in the Vladi Gead 4.0 non-stationary thermal conductivity module. Thematic blocks System geometry and density of the medium and Thermophysical parameters of the system are shown. The last block is subdivided into sub-blocks Adiabata and Geotherm. Each block has a «Set» trigger button. When you click the «Next» button, the initial state of the model is calculated based on the input data of the main panel (see fig. 7)

Таблица 2

Коэффициенты в уравнениях вида $\rho = kH + b$ кусочно-линейной регрессии профилей плотности среды (кг/м³) до глубины $H = 660$ км

Table 2. Coefficients in equations of the form $\rho = kH + b$ piecewise-linear regression of the profiles of the medium density (kg/m³) to depth $H = 660$ km

по А.М. Dziewonski, D.L. Anderson (PREM) [52]			по В.Ю. Бурмину [4]		
Интервал глубин, км	k	b	Интервал глубин, км	k	b
[0; 3]	0,3333	1 020,0	[0; 41]	0,001 292 683	2,600 000 000
(3; 4]	1 579,0000	-3 716,0	(41; 116]	0,000 804 054	2,766 229 730
(4; 15]	0,0909	2 599,6	(116; 132]	0,000 826 667	3,103 280 000
(15; 16]	299,0000	-1 884,0	(132; 295]	0,000 894 444	3,281 038 889
(16; 24]	0,1250	2 898,0	(295; 660]	0,000 773 197	3,471 133 784
(24; 25]	479,7600	-8 613,2			
(25; 220]	-0,1090	3 383,5			
(220; 221]	76,2800	-13 422,0			
(221; 400]	0,6004	3 303,1			
(400; 401]	180,5300	-68 669,0			
(401; 660]	1,2666	3 215,9			

$$P_H = \sum_{i=1}^{H/h} \rho_i \cdot g \cdot h, \tag{2}$$

где P_H – литостатическое давление на глубине H от поверхности; h – шаг по глубине; ρ_i – средняя плотность среды на i -м шаге; $i = 1, 2, \dots$

Блок «Теплофизические параметры системы». Здесь задаются коэффициент теплопроводности среды (Вт/(м·К)) при нормальных условиях ($T = 20^\circ\text{C}$) и способ расчета теплоемкости. Теплоемкость – основной теплофизический параметр, необходимый для расчетов, поэтому уделим ему особое внимание. На данный момент в модуле РНТ предлагаются три варианта расчета удельной теплоемкости при постоянном давлении.

Первый вариант соответствует полуэмпирической зависимости согласно [43, 50]:

$$c_p(T, K) = 1618,27 - \frac{12538,9}{\sqrt{T}} - \frac{173,7 \cdot 10^7}{T^3} \text{ Дж/(кг} \cdot \text{К)}. \tag{3}$$

Второй вариант расчета – более точный, но и более трудоемкий – по стандартному ступенчатому уравнению зависимости теплоемкости от температуры с табличными коэффициентами $a, b, c, d, e, f, g, h, i$ [40]:

$$c_p(T, K) = a + b \cdot T + c \cdot T^{-2} + d \cdot T^2 + e \cdot T^{-3} + f \cdot T^3 + g \cdot T^{-0,5} + h \cdot T^{-1} + i \cdot \ln T. \tag{4}$$

Для нормативного пиролита теплоемкость может быть рассчитана средневзвешенно (оливин,

клино- и ортопироксен и гранат в отношении 4:1:1:1) [41], согласно правилу Неймана-Коппа [29], через коэффициенты из баз данных, также входящих и в программный комплекс «Селектор-С» [22, 40] (табл. 3).

При расчете удельной теплоемкости необходимо учитывать входящий в состав мантии флюид, который в первом приближении можно считать чисто водным. Если принять шаг по глубине h таким, чтобы в пределах расчетной подсистемы не было фазовых переходов II рода, то удельную теплоемкость в этой подсистеме можно считать экстенсивной аддитивной величиной, а значит,

$$c = c_w m_w + c_R(1 - m_w), \tag{5}$$

где c – искомая общая теплоемкость, c_w – теплоемкость воды, c_R – теплоемкость пиролита, m_w – содержание воды в долях от единицы.

Третий вариант основан на аппроксимации расчетных данных с помощью комбинации функций Планка-Эйнштейна [51]:

$$c_p(T) = 3R \sum_i a_i \frac{(\Theta_i / T)^2 e^{\Theta_i / T}}{(e^{\Theta_i / T} - 1)^2}, \tag{6}$$

где a_i и Θ_i ($i = 1, 2, \dots$) – варьируемые параметры. Такой подход применим в случае необходимости экстраполяции значений теплоемкости в широком интервале температур, для которых отсутствуют экспериментальные калориметрические данные [37].

Для более сложного состава необходимо привлечь теорию осцилляторов Эйнштейна (с правилом Дюлонга-Пти для высоких температур)

Таблица 3

Ненулевые коэффициенты уравнений теплоемкости, аппроксимированные по [48, 42, 49] для форстерита Fo₉₀ (Ol), диопсида (Cpx), энстатита (Opx) и пирропа (Gar)

Table 3. Nonzero coefficients of heat capacity equations, approximated by [53, 47, 55] for forsterite Fo₉₀ (Ol), diopside (Cpx), enstatite (Opx) and pyrope (Gar)

Коэффициенты	Ol	Cpx	Opx	Gar
<i>a</i>	207,254 44	280,370 26	134,064 65	640,704 29
<i>b</i> ·10 ³	14,428 73	16,421 78	19,832 16	0
<i>c</i> ·10 ⁻⁵	-20,842 80	-54,991 15	-24,490 47	-47,017 70
<i>e</i> ·10 ⁻⁷	-11,623 74	92,181 89	27,914 31	0
<i>g</i> ·10 ⁻¹	-193,547 66	-181,247 95	-120,056 95	-454,198 30

или фононную модель Дебая (для средних температур) [30], что выходит за рамки данной работы, но, в принципе, несложно реализуемо при наличии соответствующих справочных данных.

Расчет исходных теплофизических параметров среды, как видно из формул (3)-(6), полностью зависит от температурного профиля. В модуле РНТ предусмотрены четыре варианта профиля для предварительного расчета. *Первый вариант* – предварительный профиль соответствует геотерме, следовательно, сначала на каждом временном шаге будут рассчитываться теплоемкость и теплопроводность среды, а затем, в соответствии с ними, повышаться ее температура. *Второй вариант* – предварительный профиль соответствует адиабате, значит, сначала рассчитывается разогрев среды (например, в результате других видов теплопередачи), а затем – ее теплофизические характеристики. *Третий вариант* – предварительный профиль температуры усредняется между геотермой и адиабатой; этот вариант предусмотрен для совместимости с будущими версиями программы, в которых возможен учет различного вклада разных типов теплопередачи, и пока не используется. Рекомендуются *четвертый вариант* – дифференцированный, именно для него задается предварительная глубина остановки плюма на главной панели, ниже которой предварительный профиль – адиабатический, а выше – геотермический; такой вариант наиболее корректно оценит теплофизику в случае последовательного роста плюма.

Далее следуют подблоки температурных профилей среды и адиабаты. Подблок «Адиабата» позволяет задать потенциальную температуру [20] плюма и градиент температуры в градусах/шаг по глубине. Подблок «Геотерма» позволяет задать исходный (невозмущенный) температурный профиль двумя способами. Первый аналогичен

заданию адиабаты: устанавливается температура на поверхности и градиент в градусах/шаг по глубине. Во втором способе предлагается выбор из заранее подготовленных температурных профилей, хранящихся в служебном файле. Обычная комплектация программы включает четыре профиля для геодинамических обстановок срединно-океанических хребтов, океанических бассейнов, континентальных платформ и архейских щитов, аппроксимированных по данным К. Конди [45].

Установка входных данных завершается нажатием кнопки «Далее», после чего становится видимым **набор страниц**, занимающий основную часть формы.

Страница «Модель» (рис. 7). При появлении первой страницы набора рассчитываются и становятся доступными для редактирования исходные параметры модели как в табличном виде (блок «Ввод и редактирование»), так и в виде диаграмм их зависимости от глубины (блок «Диаграммы»).

В таблице приводятся расчетные литостатические давления (в барах), плотности (кг/м³), значения температуры по адиабате и геотерме (°С), теплоемкости (Дж/(кг·К)), коэффициентов теплопроводности (Вт/(м·К)) и температуропроводности (м²/с) на каждом шаге по глубине. Коэффициент теплопроводности мантийных пород при различных температурах рассчитывается по формуле А.В. Тихомирова [2]:

$$\lambda(T, K) = 0,047 \lambda_0^{4,98} T^{0,171 \lg T - 1,611 \lg \lambda_0 + 0,12} \text{ Вт/(м·К)}, \quad (7)$$

где λ_0 – теплопроводность при нормальных условиях, заданная на главной панели.

Влияние давления на теплопроводность твердых тел слабее температурного, выражается в основном через плотность [24] и отдельно в программе не учитывается.

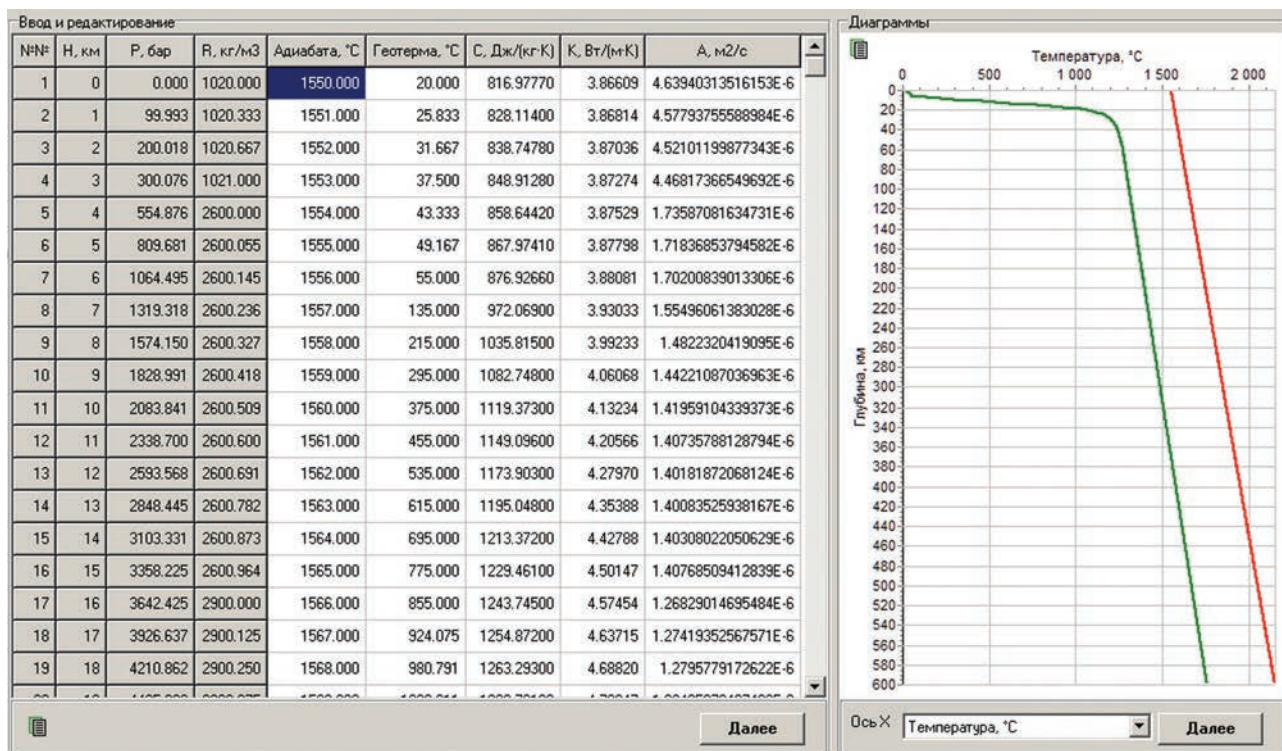


Рис. 7. Реализация страницы «Модель» для расчета исходного состояния модели в модуле PHT Vladi Gead 4.0. Слева в табличной форме показаны расчетные параметры для каждого шага вертикального распространения плюма; они доступны для редактирования (кроме фиксированных столбцов 1-4, для изменения данных в которых необходимо вернуться к главной панели) и дублируются справа в виде набора диаграмм (компонент класса TChart) с возможностью выбора параметра (компонент класса TComboBox), откладываемого по оси абсцисс

Fig. 7. Implementation of the «Model» page for calculating the initial state of the model in the Vladi Gead 4.0 non-stationary thermal conductivity module. On the left, in tabular form, the calculated parameters are shown for each step of the plume's vertical propagation; they are available for editing (except for fixed columns 1-4, to change the data in which you need to return to the main panel) and are duplicated on the right as a set of diagrams (a component of the TChart class) with the option to select a parameter (a component of the TComboBox class), plotted along the abscissa axis

Температуропроводность α получаем из рассчитанных выше коэффициента теплопроводности λ , теплоемкости c_p и плотности ρ :

$$\alpha = \frac{\lambda}{c_p \rho} \tag{8}$$

Уже на этом этапе построения модели доступно копирование в буфер обмена расчетных исходных данных в табличном и графическом (векторном) форматах посредством нажатия предусмотренных «быстрых» кнопок. Редактирование завешается нажатием кнопки «Далее» в блоке таблицы, после чего измененные параметры отображаются на диаграммах. По оси ординат всех диаграмм откладывается глубина (литостатическое давление), по оси абсцисс может быть отложен любой параметр из таблицы. Графики температур геотермы и адиабаты могут быть построены на одной диаграмме. Нажатие кнопки

«Далее» в блоке диаграмм завершает геометрический и физический этапы формирования модели (см. рис. 6) и передает управление следующей странице.

Страница «Динамика» (рис. 8). Здесь в левой части располагается панель динамических параметров модели с несколькими блоками. В блоке «Параметры времени», согласно положениям методики комплексного компьютерного моделирования, задаются характеристики главного внешнего события – течения времени: сначала выбираются единицы времени – длительность модельного момента (млн лет, тыс. лет, годы, месяцы, недели, сутки, часы, минуты, секунды), затем задается время расчета теплового возмущения по умолчанию (в выбранных моментах времени) и временной шаг расчета.

Напомним, что решение прикладной задачи нашей работы предполагает не только стационарный расчет теплового возмущения при «помещении»

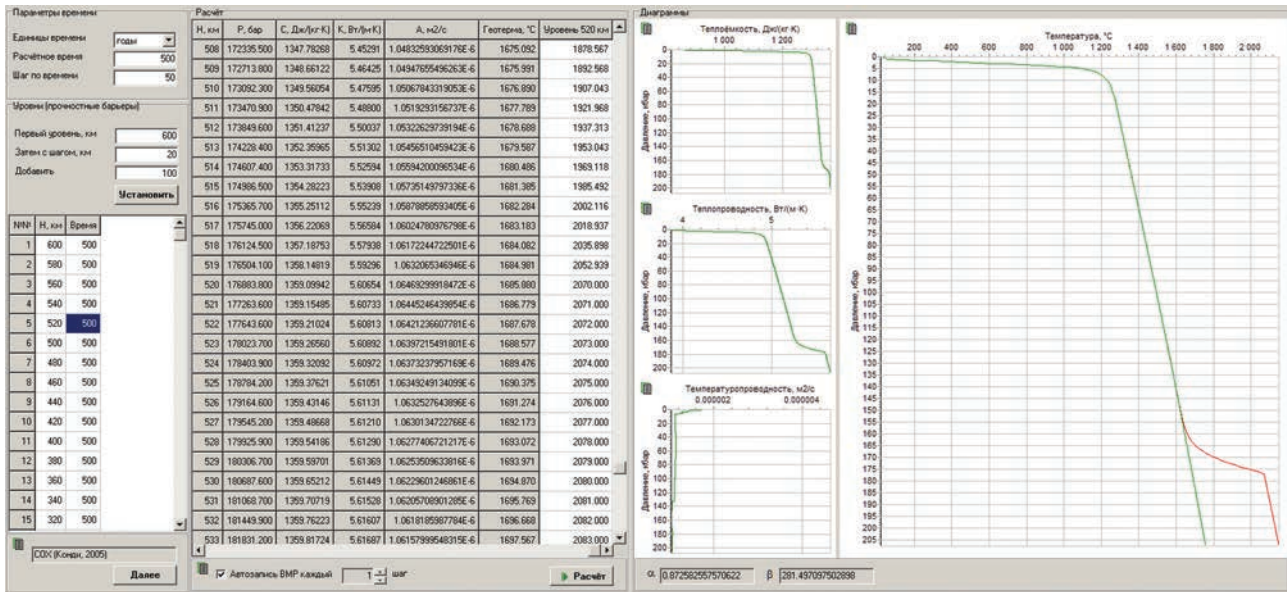


Рис. 8. Реализация страницы «Динамика» в модуле PNT VladI Gead 4.0. Слева расположена панель параметров с таблицей редактирования уровней, посередине – рабочая таблица динамики, справа – диаграммы изменения теплоемкости, теплопроводности, температуропроводности и искомого температурного профиля

Fig. 8. Implementation of the «Dynamics» page in the VladI Gead 4.0 non-stationary thermal conductivity module. On the left there is a parameter panel with a table for editing levels, in the middle – a working table of dynamics, on the right – diagrams of changes in heat capacity, thermal conductivity, thermal diffusivity and the desired temperature profile

адиабатического плюма на определенную глубину, но и расчет последовательного распространения тепла при развитии плюма. Параметры для такого расчета задаются в следующем блоке – «Уровни (прочностные барьеры)». Это глубина первого, самого глубокого уровня (откуда начинаем расчет), в км, шаг роста плюма и количество таких уровней. Данные уровни можно рассматривать как чисто математически – как дискретную сетку движения, так и с геологической точки зрения – как прочностные барьеры, на которых останавливаются мантийно-коровые мигранты на время, необходимое для достижения избыточным давлением величины прочности вмещающей среды с последующим дальнейшим распространением плюма. После нажатия кнопки-триггера появляется доступная для редактирования таблица из трех столбцов: «№ уровня», «Глубина», «Время». В ней можно задать временной интервал, в течение которого плюм «задерживается» на каждом уровне (прочностном барьере). В математико-физическом смысле – это скорость вертикального распространения плюма, в геологическом – мера прочности среды на каждом барьере, так как при постоянном режиме привноса глубинного вещества мигрантами под прочностной барьер время достижения плюмом критического избыточного давления прямо пропорционально

прочности вмещающей среды. Здесь же находится напоминание о принятой геодинамической обстановке. Рядом предусмотрен также переключатель автоматического сохранения диаграмм в формате битовой матрицы (*.bmp) через любое количество итерационных циклов на каждом уровне.

Работа выполнена в рамках проекта IX.136.1.2 НИР ПФНИ ГАН «Исследование факторов, определяющих закономерности развития сейсмического процесса и сейсмическую опасность Прибайкалья», № государственной регистрации АААА-А16-116121550016-3.

ЛИТЕРАТУРА

1. Архангельский А.Я. Программирование в С++ Builder. – М. : Бином, 2000. – 1152 с.
2. Бабаев В.В., Будымка В.Ф., Сергеева Т.А., Домбровский М.А. Теплофизические свойства горных пород. – М. : Недра, 1987. – 156 с.
3. Бабичев А.В., Полянский О.П., Коробейников С.Н., Ревердатто В.В. Математическое моделирование магморазрыва и формирования даек // Доклады РАН. – 2014. – Т. 458, № 6. – С. 692-695.
4. Бурмин В.Ю. Распределение плотности и упругих параметров в Земле // Физика Земли. – 2006. – № 7. – С. 76-88.

5. Васильев В.И. Объектно-ориентированный подход в компьютерном моделировании геологических явлений и процессов // Вестник ИрГСХА, 2013. – Вып. 57, ч. 1. – С. 79-86.
6. 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. – М. : Научный мир, 2001. – С. 51.
7. Васильев В.И., Васильева Е.В. Применение методики комплексного компьютерного моделирования природных объектов в экологической геологии // Экологическая геология: теория, практика и региональные проблемы : мат-лы IV Научно-практической конференции, Петрозаводск, 30 сентября – 02 октября 2015 г. – Воронеж : Научная книга, 2015. – С. 205-208.
8. 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.
9. Васильев В.И., Жатнуев Н.С., Васильева Е.В. Нестационарные теплофизические расчеты в диапазоне плюмовая адиабата–геотерма // Ультрамафит-мафитовые комплексы: геология, строение, рудный потенциал : мат-лы конференции. – Иркутск : Изд-во «Оттиск», 2019. – С. 76-82.
10. 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.
11. Васильев В.И., Жатнуев Н.С., Рычагов С.Н., Васильева Е.В., Санжиев Г.Д. Массоперенос и минералообразование в магматогенно-гидротермальных системах по результатам численного физико-химического моделирования // Литосфера. – 2010. – № 3. – С. 145-152.
12. Васильев В.И., Чудненко К.В., Жатнуев Н.С., Васильева Е.В. Комплексное компьютерное моделирование геологических объектов на примере разреза зоны субдукции // Геоинформатика. – 2009. – № 3. – С. 15-30.
13. Гунин В.И. Новая трехмерная математическая модель тепломассопереноса в пористых средах и ее возможности // Геоэкология. – 2003. – № 4. – С. 355-370.
14. Добрецов Н.Л. Геологические следствия термохимической модели плюмов // Геология и геофизика. – 2008. – Т. 49, № 7. – С. 587-604.
15. Жатнуев Н.С. Динамика глубинных магм // Доклады РАН. – 2010. – Т. 430, № 6. – С. 787-791.
16. Жатнуев Н.С. Трансмантийные (интрателлурические) флюиды: новая модель плюмов и плюмового магматизма // Геология и геофизика. – 2016. – Т. 57, № 8. – С. 1445-1454.
17. Жатнуев Н.С. Трансмантийные флюидные потоки и происхождение плюмов // Доклады РАН. – 2012. – Т. 444, № 1. – С. 50-55.
18. Жатнуев Н.С. Трещинные флюидные системы в зоне пластических деформаций // Доклады РАН. – 2005. – Т. 404, № 3. – С. 380-384.
19. 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.
20. Захаров В.С., Смирнов В.Б. Физика Земли. – М. : Инфра-М, 2016. – 328 с.
21. Иванов С.Н. Зоны пластичных и хрупких деформаций в вертикальном разрезе литосферы // Геотектоника. – 1990. – № 2. – С. 3-14.
22. Карпов И.К. Физико-химическое моделирование на ЭВМ в геохимии. – Новосибирск : Наука, 1981. – 247 с.
23. Коржинский Д.С. Физико-химические основы анализа парагенезисов минералов. – М. : Изд-во АН СССР, 1957. – 184 с.
24. Коротких А.Г. Теплопроводность материалов. – Томск : Изд-во ТПУ, 2011. – 97 с.
25. Крайчик А.С., Найденышева Е.Г. Применение методологии PRINCE2 в реализации проектов государственно-частных партнерств // Неделя науки СПбПУ : мат-лы научной конференции с международным участием. – СПб. : Изд-во СПбПУ, 2016. – С. 56-58.
26. Кю Н.Г. Создание методов и средств флюидо-разрыва горных пород : автореферат дис. ... докт. тех. наук : 01.02.07. – Новосибирск : ИГД СО РАН, 1999. – 32 с.
27. Летников Ф.А. Сверхглубинные флюидные системы Земли и проблемы рудогенеза // Геология рудных месторождений. – 2001. – Т. 43, №4. – С. 291-307.
28. Летников Ф.А., Дорогокупец П.И. К вопросу о роли сверхглубинных флюидных систем земного ядра в эндогенных геологических процессах // Доклады РАН. – 2001. – Т. 378, №4. – С. 535-537.
29. Мейер К. Физико-химическая кристаллография. – М. : Металлургия, 1972. – 480 с.
30. Петрунин Г.И., Попов В.Г. Теплофизические свойства вещества земли. Часть 1. – М. : Изд-во МГУ, 2011. – 68 с.
31. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ 2018664295. Российская Федерация. Vladi DiStat – программа для расчета

- двумерных распределений физических полей и вязкости земной коры / В.И. Васильев, Н.С. Жатнуев, Е.В. Васильева ; правообладатель ФГБУН ГИН СО РАН (RU). – №2018662448 ; заявл. 06.11.2018 ; зарегистрир. 14.11.2018 ; опубл. 14.11.2018, Официальный бюллетень «Программы для ЭВМ. Базы данных. Топологии интегральных микросхем», № 11.
32. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ 2018664801. Российская Федерация. Vladi Collision – программа моделирования коллизии литосферных плит / В.И. Васильев ; правообладатель ФГБУН ГИН СО РАН (RU). – № 2018662091 ; заявл. 01.11.2018 ; зарегистрир. 22.11.2018 ; опубл. 22.11.2018, Официальный бюллетень «Программы для ЭВМ. Базы данных. Топологии интегральных микросхем», № 12.
33. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ 2019613716. Российская федерация. Vladi Joint – программа для статистического моделирования поведения систем случайных поднимающихся флюидозаполненных трещин (полостей) в пластичной среде / Васильев В.И. ; правообладатель ФГБУН ГИН СО РАН (RU). – №2019612638 ; заявл. 14.03.2019 ; зарегистрир. 21.03.2019 ; опубл. 21.03.2019, Официальный бюллетень «Программы для ЭВМ. Базы данных. Топологии интегральных микросхем», № 4.
34. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ 2019613814. Российская федерация. Vladi OverPressure – программа для параметрического моделирования образования и эволюции мантийно-корового мигранта / Васильев В.И., Васильева Е.В., Жатнуев Н.С.; правообладатель ФГБУН ГИН СО РАН (RU). – №2019612231 ; заявл. 06.03.2019 ; зарегистрир. 22.03.2019 ; опубл. 22.03.2019, Официальный бюллетень «Программы для ЭВМ. Базы данных. Топологии интегральных микросхем», № 4.
35. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ 2019617548. Российская федерация. Vladi DisTerm – программа для двумерного моделирования теплового возмущения термоградиентной среды при внедрении магматического мигранта / Васильев В.И. ; правообладатель ФГБУН ГИН СО РАН (RU). – №2019616467 ; заявл. 03.06.2019 ; зарегистрир. 17.06.2019 ; опубл. 17.06.2019, Официальный бюллетень «Программы для ЭВМ. Базы данных. Топологии интегральных микросхем», № 6.
36. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2019667677. Российская федерация. Vladi Gead – программа для теплофизических расчетов в диапазоне плюмовая адиабата – региональная геотерма / В.И. Васильев, Н.С. Жатнуев, Е.В. Васильева ; правообладатель ФГБУН ГИН СО РАН (RU). – №2019666681 ; заявл. 16.12.2019 ; зарегистрир. 26.12.2019 ; опубл. 26.12.2019, Официальный бюллетень «Программы для ЭВМ. Базы данных. Топологии интегральных микросхем», № 1.
37. Успенская И.А., Дружинина А.И., Жирякова М.В., Тифлова Л.А., Скворцова Е.Г., Блудова Н.Г. Расчет термодинамических функций по результатам измерений теплоемкости методом адиабатической вакуумной калориметрии. – М. : МГУ, 2019. – 30 с.
38. Учебник 4СЮ. Настольная книга IT-директора. – URL: <https://book4cio.ru/> (дата обращения: 07.10.2020).
39. Цыганков Д.А. Основные геометрические параметры трещин, формируемых с применением пластичных флюидов // Горный информационно-аналитический бюллетень. – 2015. – № 6. – С. 267-271.
40. Чудненко К.В. Термодинамическое моделирование в геохимии: теория, алгоритмы, программное обеспечение, приложения. – Новосибирск : Академ. изд-во «ГЕО», 2010. – 287 с.
41. Akaogi M., Tanaka A., Ito E. Garnet-ilmenite-perovskite transitions in the system $Mg_4Si_4O_{12}-Mg_3Al_2Si_3O_{12}$ at high pressures and high temperatures: phase equilibria, calorimetry and implications for mantle structure // *Phys. Earth Planet. Inter.* – 2002. – No. 132. – P. 303-324.
42. Berman R.G. Internally-consistent thermodynamic data for minerals in the systems: $Na_2O-K_2O-CaO-MgO-FeO-Fe_2O_3-Al_2O_3-SiO_2-TiO_2-H_2O-CO_2$ // *J. Petrol.* – 1988. – No. 29. – P. 445-522.
43. Berman R.G., Aranovich L.Ya. Optimized standard state and solution properties of minerals: I. Model calibration for olivine, orthopyroxene, cordierite, garnet, and ilmenite in the system $FeO-MgO-CaO-Al_2O_3-TiO_2-SiO_2$ // *Contrib. Mineralogy and Petrology.* – 1996. – V. 126. – P. 1-24.
44. Burke K., Steinberger B., Torsvik T.H., Smethurst M.A. Plume generation zones at the margins of Large Low Shear Velocity Provinces on the core-mantle boundary // *Earth Planet. Sci. Lett.* – 2008. – V. 265. – No. 1-2. – P. 49-60.
45. Condie K.C. *Earth as an evolving planetary system.* – Elsevier Academic Press, 2005. – 578 p.
46. Corti G., Bonini M., Conticelli S., Innocenti F., Manetti P., Sokoutis D. Analogue modeling of continental extension: a review focused on the relations between the patterns of deformation and the presence of magma // *Earth-Science Reviews.* – 2003. – V. 63. – P. 169-247.
47. Dziewonski A.M., Anderson D.L. Preliminary reference Earth model // *Phys. Earth Planet. Inter.* – 1981. – No. 25. – P. 297-356.
48. Helgeson H.C., Delany J.M., Nesbitt H.W., Bird D.K. Summary and critique of the thermodynamic properties

of rock-forming minerals // *Am. J. Sci.* – 1978. – No. 278A. – P. 1-229.

49. Holland T.J.B., Powell R. An internally consistent thermodynamic data set for phases of petrological interest // *Journal of Metamorphic Geology.* – 1998. – V. 16. – No. 3. – P. 309-343.

50. McKenzie D., Jackson J., Priestley K. Thermal structure of oceanic and continental lithosphere // *Earth Planet. Sci. Lett.* – 2005. – No. 233. – P. 337-349.

51. Voronin G.F., Kutsenok I.B. Universal method for approximating the standard thermodynamic functions of solids // *J. Chem. Eng. Data.* – 2013. – V. 58. – No. 7. – P. 2083-2094.

REFERENCES

1. Arkhangelsky A.Ya. Programming in C ++ Builder. Moscow : Binom. 2000. 1152 p.

2. Babaev V.V., Budymka V.F., Sergeeva T.A., Dombrovsky M.A. Thermophysical properties of rocks. Moscow : Nedra, 1987. 156 p.

3. Babichev A.V., Polyansky O.P., Korobejnikov S.N., Reverdatto V.V. Mathematical modeling of magma fracture and dike formation // *Reports of the Russian Academy of Sciences.* 2014. V. 458. No. 6. P. 692-695.

4. Burmin V.Yu. Distribution of density and elastic parameters in the Earth // *Physics of the Earth.* 2006. No. 7. P. 76-88.

5. Vasiliev V.I. Object-oriented approach in computer modeling of geological phenomena and processes // *Bulletin of IrSAU.* 2013. Issue 57, Part 1. P. 79-86.

6. Vasiliev V.I. Numerical modeling of the dynamics of heat and mass flows and mineral formation in the hydrothermal system of mid-oceanic ridges // *Problems of geology of continents and oceans : Abstracts of the school-seminar of the Russian delegates of the XXXI International Geological Congress.* Moscow : Scientific world. 2001. P. 51.

7. Vasiliev V.I., Vasilieva E.V. Application of the methodology of complex computer modeling of natural objects in ecological geology // *Ecological geology: theory, practice and regional problems: Materials of the IV Scientific and practical conference.* Petrozavodsk, 30.09 – 02.10.2015. Voronezh : Scientific book. 2015. P. 205-208.

8. Vasiliev V.I., Vasilieva E.V., Zhatnuev N.S., Sanzhiev G.D. Parameters of origin and evolution of the mantle-crust migrant // *Geoinformatics.* 2019. No. 2. P. 34-42.

9. Vasiliev V.I., Zhatnuev N.S., Vasilieva E.V. Non-stationary thermophysical calculations in the range of plume adiabat – geotherm // *Ultramaficite-mafic complexes: geology, structure, ore potential. Conference materials.* Irkutsk: Publishing house «Ottisk». 2019. P. 76-82.

10. Vasiliev V.I., Zhatnuev N.S., Vasilieva E.V. Calculation of thermal disturbance of a thermogradient medium during the rise of a mantle-crustal migrant // *Geoinformatics.* 2019. No. 4. P. 46-53.

11. Vasiliev V.I., Zhatnuev N.S., Rychagov S.N., Vasilieva E.V., Sanzhiev G.D. Mass transfer and mineral formation in magmatogenic-hydrothermal systems based on the results of numerical physicochemical modeling // *Lithosphere.* 2010. No. 3. P. 145-152.

12. Vasiliev V.I., Chudnenko K.V., Zhatnuev N.S., Vasilieva E.V. Complex computer modeling of geological objects on the example of a subduction zone section // *Geoinformatics.* 2009. No. 3. P. 15-30.

13. Gunin V.I. A new three-dimensional mathematical model of heat and mass transfer in porous media, and its capabilities // *Geoecology.* 2003. No. 4. P. 355-370.

14. Dobretsov N.L. Geological consequences of the thermochemical model of plumes // *Geology and Geophysics.* 2008. V. 49. No. 7. P. 587-604.

15. Zhatnuev N.S. Dynamics of deep magmas // *Reports of the Russian Academy of Sciences.* 2010. V. 430. No. 6. P. 787-791.

16. Zhatnuev N.S. Trans-mantle (intra-telluric) fluids: a new model of plumes and plume magmatism // *Geology and Geophysics.* 2016. V. 57. No. 8. P. 1445-1454.

17. Zhatnuev N.S. Trans-mantle fluid flows and the origin of plumes // *Reports of the Russian Academy of Sciences.* 2012. V. 444. No. 1. P. 50-55.

18. Zhatnuev N.S. Fracture fluid systems in the zone of plastic deformations // *Reports of the Russian Academy of Sciences.* 2005. V. 404. No. 3. P. 380-384.

19. Zhatnuev N.S., Vasiliev V.I., Sanzhiev G.D. Upward migration of fluids in the mantle. Conceptual, computational and analogue models // *Domestic geology.* 2013. No. 3. P. 24-30.

20. Zakharov V.S., Smirnov V.B. Physics of the Earth. Moscow : Infra-M, 2016. 328 p.

21. Ivanov S.N. Zones of plastic and brittle deformations in the vertical section of the lithosphere // *Geotectonics.* 1990. N. 2. P. 3-14.

22. Karpov I.K. Physicochemical modeling on a computer in geochemistry. Novosibirsk : Science, 1981. 247 p.

23. Korzhinsky D.S. Physicochemical foundations of the analysis of mineral paragenesis. Moscow : Publishing house of the USSR Academy of Sciences, 1957. 184 p.

24. Korotkikh A.G. Thermal conductivity of materials. Tomsk : TPU Publishing House, 2011. 97 p.

25. Kraychik A.S., Naydenysheva E.G. Application of the PRINCE2 methodology in the implementation of public and private partnership projects // *SPBPU Science Week. Materials of a scientific conference with international participation.* St. Petersburg : SPBPU Publishing House, 2016. P. 56-58.

26. Kyu N.G. Creation of methods and means of fluid fracturing of rocks. Abstract dissertation. doc. tech. sciences. Novosibirsk : IGD SB RAS, 1999. 32 p.
27. Letnikov F.A. Superdeep fluid systems of the Earth and problems of ore genesis // *Geology of ore deposits*. 2001. V. 43. No. 4. P. 291-307.
28. Letnikov F.A., Dorogokupets P.I. On the question of the role of superdeep fluid systems of the earth's core in endogenous geological processes // *Reports of the Russian Academy of Sciences*. 2001. V. 378. No. 4. P. 535-537.
29. Meyer K. Physical and chemical crystallography. Moscow : Metallurgy. 1972. 480 p.
30. Petrunin G.I., Popov V.G. Thermophysical properties of the substance of the earth (Part 1). Moscow : MSU Publishing House, 2011. 68 p.
31. Certificate of state registration of a computer program No. 2018664295. The Russian Federation. «Vladi DiStat» – software for calculating two-dimensional distributions of physical fields and viscosity of the Earth's crust / V.I. Vasiliev, N.S. Zhatnuev, E.V. Vasilieva ; copyright holder GIN SB RAS (RU). – No. 2018662448 ; declared 06.11.2018 ; register. 14.11.2018 ; publ. 14.11.2018, The official bulletin «Computer programs. Database. Topologies of Integrated Circuits». No. 11.
32. Certificate of state registration of a computer program No. 2018664801. The Russian Federation. «Vladi Collision» – lithospheric plate collision modeling program / V.I. Vasiliev ; copyright holder GIN SB RAS (RU). – No. 2018662091 ; declared 01.11.2018 ; register. 22.11.2018 ; publ. 22.11.2018, The official bulletin «Computer programs. Database. Topologies of Integrated Circuits». No. 12.
33. Certificate of state registration of a computer program No. 2019613716. The Russian Federation. «Vladi Joint» – a software for statistic modeling of behavior of random uprising fluid-filled fissures (cavities) systems in plastic medium / V.I. Vasiliev ; copyright holder GIN SB RAS (RU). – No. 2019612638 ; declared 14.03.2019 ; register. 21.03.2019 ; publ. 21.03.2019, The official bulletin «Computer programs. Database. Topologies of Integrated Circuits». No. 4.
34. Certificate of state registration of a computer program No. 2019613814. The Russian Federation. «Vladi OverPressure» – a software for parametric modeling of the formation and evolution of a mantle-crust migrant / V.I. Vasiliev, E.V. Vasilieva, N.S. Zhatnuev ; copyright holder GIN SB RAS (RU). – No. 2019612231 ; declared 06.03.2019 ; register. 22.03.2019 ; publ. 22.03.2019, The official bulletin «Computer programs. Database. Topologies of Integrated Circuits». No. 4.
35. Certificate of state registration of a computer program No. 2019617548. The Russian Federation. «Vladi DisTerm» – a software for two-dimensional modeling of thermal perturbation of thermogradient medium during magmatic migrant ingress / V.I. Vasiliev; copyright holder GIN SB RAS (RU). – No. 2019616467 ; declared 03.06.2019 ; register. 17.06.2019 ; publ. 17.06.2019, The official bulletin «Computer programs. Database. Topologies of Integrated Circuits». No. 6.
36. Certificate of state registration of a computer program No. 2019667677. The Russian Federation. «Vladi Gead» – a software for thermos-physical calculations in the range of plume adiabat – regional geotherm / V.I. Vasiliev, N.S. Zhatnuev, E.V. Vasilieva ; copyright holder GIN SB RAS (RU). – No. 2019666681 ; declared 16.12.2019 ; register. 26.12.2019 ; publ. 26.12.2019, The official bulletin «Computer programs. Database. Topologies of Integrated Circuits». No. 1.
37. Uspenskaya I.A., Druzhinina A.I., Zhiryakova M.V., Tiflova L.A., Skvortsova E.G., Bludova N.G. Calculation of thermodynamic functions based on the results of heat capacity measurements by the method of adiabatic vacuum calorimetry. Moscow : Moscow State University, 2019. 30 p.
38. 4CIO Tutorial. Handbook of the IT director. URL: <https://book4cio.ru/> (date of access: 07.10.2020).
39. Tsygankov D.A. The main geometric parameters of cracks formed with the use of plastic fluids // *Mining information and analytical bulletin*. 2015. No. 6. P. 267-271.
40. Chudnenko K.V. Thermodynamic modeling in Geochemistry: theory, algorithms, software, applications. Novosibirsk : Academic Publishing House «GEO», 2010. 287 p.
41. Akaogi M., Tanaka A., Ito E. Garnet-ilmenite-perovskite transitions in the system $Mg_4Si_4O_{12}-Mg_3Al_2Si_3O_{12}$ at high pressures and high temperatures: phase equilibria, calorimetry and implications for mantle structure // *Phys. Earth Planet. Inter.* 2002. No. 132. P. 303-324.
42. Berman R.G. Internally-consistent thermodynamic data for minerals in the systems: $Na_2O-K_2O-CaO-MgO-FeO-Fe_2O_3-Al_2O_3-SiO_2-TiO_2-H_2O-CO_2$ // *J. Petrol.* 1988. No. 29. P. 445-522.
43. Berman R.G., Aranovich L.Ya. Optimized standard state and solution properties of minerals: I. Model calibration for olivine, orthopyroxene, cordierite, garnet, and ilmenite in the system $FeO-MgO-CaO-Al_2O_3-TiO_2-SiO_2$ // *Contrib. Mineralogy and Petrology*. 1996. V. 126. P. 1-24.
44. Burke K., Steinberger B., Torsvik T.H., Smethurst M.A. Plume generation zones at the margins of Large Low Shear Velocity Provinces on the core-mantle boundary // *Earth Planet. Sci. Lett.* 2008. V. 265. No. 1-2. P. 49-60.
45. Condie K.C. Earth as an evolving planetary system. Elsevier Academic Press. 2005. 578 p.

46. Corti G., Bonini M., Conticelli S., Innocenti F., Manetti P., Sokoutis D. Analogue modeling of continental extension: a review focused on the relations between the patterns of deformation and the presence of magma // *Earth-Science Reviews*. 2003. V. 63. P. 169-247.
47. Dziewonski A.M., Anderson D.L. Preliminary reference Earth model // *Phys. Earth Planet. Inter.* 1981. No. 25. P. 297-356.
48. Helgeson H.C., Delany J.M., Nesbitt H.W., Bird D.K. Summary and critique of the thermodynamic properties of rock-forming minerals // *Am. J. Sci.* 1978. No. 278A. P. 1-229.
49. Holland T.J.B., Powell R. An internally consistent thermodynamic data set for phases of petrological interest // *Journal of Metamorphic Geology*. 1998. V. 16. No. 3. P. 309-343.
50. McKenzie D., Jackson J., Priestley K. Thermal structure of oceanic and continental lithosphere // *Earth Planet. Sci. Lett.* 2005. No. 233. P. 337-349.
51. Voronin G.F., Kutsenok I.B. Universal method for approximating the standard thermodynamic functions of solids // *J. Chem. Eng. Data*. 2013. V. 58. No. 7. P. 2083-2094.

Продолжение статьи читайте в следующем номере.

Информация об авторах

Information about authors

Васильев Владимир Игорьевич, кандидат геолого-минералогических наук, научный сотрудник Федерального государственного бюджетного учреждения науки Геологический институт Сибирского отделения Российской академии наук (ГИН СО РАН). Россия, 670047, Республика Бурятия, г. Улан-Удэ, ул. Сахьяновой, д. 6а. E-mail: geovladi@yandex.ru, geovladi@ginst.ru.

Vasiliev Vladimir Igorevich, PhD of geology, Science 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.

Васильева Евгения Владимировна, кандидат геолого-минералогических наук, научный сотрудник Федерального государственного бюджетного учреждения науки Геологический институт Сибирского отделения Российской академии наук (ГИН СО РАН). Россия, 670047, Республика Бурятия, г. Улан-Удэ, ул. Сахьяновой, д. 6а. E-mail: geovladi@ginst.ru.

Vasilieva Eugenia Vladimirovna, PhD of geology, Science 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.

Жатнуев Николай Сергеевич, доктор геолого-минералогических наук, старший научный сотрудник Федерального государственного бюджетного учреждения науки Геологический институт Сибирского отделения Российской академии наук (ГИН СО РАН). Россия, 670047, Республика Бурятия, г. Улан-Удэ, ул. Сахьяновой, д. 6а. E-mail: zhat@ginst.ru.

Zhatnuev Nikolay Sergeevich, 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.