

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего
профессионального образования
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
Геологический факультет

УТВЕРЖДАЮ

Декан Геологического факультета
академик

_____ /Д.Ю.Пушаровский/

«__» _____ 20 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Гидрогеохимическое моделирование

Автор-составитель: проф. А.В. Лехов

Уровень высшего образования:

Бакалавриат

Направление подготовки:

05.03.01 Геология

Направленность (профиль) ОПОП:

Гидрогеология, инженерная геология, геокриология

Форма обучения:

Очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методическим Советом Геологического факультета
(протокол № _____, _____)

Москва 20__

Рабочая программа дисциплины (модуля) разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки «Геология» (*программы бакалавриата, магистратуры, реализуемых последовательно по схеме интегрированной подготовки*) в редакции приказа МГУ от 30 декабря 2016 г.

Год (годы) приема на обучение – 2017.

© Геологический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова

Программа не может быть использована другими подразделениями университета и другими вузами без разрешения факультета.

Цель и задачи дисциплины

Цель курса "Гидрогеохимическое моделирование" – развитие у обучающегося устойчивого, логически связанного, комплекса знаний о процессах формирования химического состава подземных вод, способах количественного исследования и прогноза изменения составов вод в зависимости от гидрогеологических и антропогенных условий.

Задачи: определить ведущие процессы формирования и трансформации состава подземных вод в зависимости от геохимической и гидрогеологической обстановки территории; получить знания об основных компонентах состава вод, отражающих те или иные техногенные воздействия на природную геологическую среду; определить место и роль методов термодинамического моделирования взаимодействий в системе вода–порода–воздух в общих и специальных, объектно-ориентированных исследованиях; освоить современный понятийно-терминологический аппарат и методике моделирования; получить знания об общих взаимосвязях гидрогеодинамических и гидрогеохимических процессов.

1. Место дисциплины в структуре ОПОП ВО

Вариативная часть, профессиональный цикл, профессиональные дисциплины, обязательный спецкурс, курс – III семестр – 6.

2. Входные требования для освоения дисциплины, предварительные условия

Освоение дисциплин «Общая геология», «Общая химия», «Химия физическая, коллоидная», «Гидрогеология», «Гидрогеохимия», «Грунтоведение».

Дисциплина необходима в качестве предшествующей для дисциплин «Гидрогеоэкология», «Нефтегазовая гидрогеология», дисциплин магистерской программы «Физико-химическая гидрогеодинамика», а также для научно-исследовательской работы и выполнения выпускных квалификационных работ.

3. Результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с требуемыми компетенциями выпускников

Компетенции выпускников, формируемые (полностью или частично) при реализации дисциплины:

- ОПК-3.Б Способность решать стандартные задачи профессиональной деятельности в соответствии с профилем подготовки (формируется частично),
- ПК-2.Б Способность использовать знание теоретических основ фундаментальных геологических дисциплин при решении научно-исследовательских задач профессиональной деятельности (формируется частично).
- СПК-2.Б Способность проводить моделирование изучаемых гидрогеологических, инженерно-геологических и геокриологических процессов

Планируемые результаты обучения по дисциплине

Знать: современное состояние описания процессов формирования состава подземных вод, получить представления о комплексировании их для построения моделей трансформации составов вод в условиях равновесных процессов взаимодействия фаз и внутри фаз.

Уметь: использовать физико-химические расчеты для оценки распределения миграционных форм элементов; применять современные методы прогноза формирования составов подземных вод и определять основные процессы их трансформаций.

Владеть: приемами формализации задач формирования состава подземных вод и их математического моделирования с оценкой их качества для использования в хозяйственно-питьевых и промышленных целях.

4. ФОРМАТ ОБУЧЕНИЯ

Лекционные и лабораторные занятия.

5. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ

Объем составляет 3 з.е., в том числе 39 академических часов, отведенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (13 часов – занятия лекционного типа, 26 часов – занятия лабораторного типа), 69 академических часов на самостоятельную работу, в том числе 2 час групповые консультации и 8 часов мероприятия текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации. Форма промежуточной аттестации – экзамен

6. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

6.1. КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (АННОТАЦИЯ):

Курс "Гидрогеохимическое моделирование" состоит из двух разделов: 1) описание основных процессов трансформации вещества в геологической среде и 2) практическое моделирование работы с гидрогеохимической информацией, трансформаций составов подземных вод и пород, миграции подземных вод при смене техногенного влияния. Описание процессов базируется на фундаментальных представлениях, полученных из прослушанных ранее курсов с конкретизацией гидрогеологических проблем. Объяснения доводятся до простых аналитических расчетов. Вторая часть курса включает обучение работы с программой моделирования гидрогеохимических процессов HCh и ее основных блоков. Дополнительно рассматриваются проблемы использования других программ. Все задачи выполняемые в ходе обучения построены по принципу от простого исследования поведения гидрогеохимической системы в разных внешних условиях до сложных моделей миграции промстоков с максимально возможным на данном уровне учетом процессов массообмена и трансформаций веществ.

Таблица 1. Распределение трудоемкости дисциплины по разделам и темам

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), Форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем) Виды контактной работы, часы				Самостоятельная работа обучающегося, часы
		Занятия лекционного типа	Занятия лабораторного типа	Занятия семинарского типа	Всего	
Модели физико-химических процессов формирования состава подземных вод (классификация процессов, гидрогеохимическая система, гомогенные и гетерогенные процессы, растворение газов, минералов, ионный обмен)		9	6		15	4 расчетно-графические работы 20 часов
Математическое моделирование формирования состава подземных вод (построение моделей, программы моделирования, статические задачи, динамические задачи)		4	20		24	9 расчетно-графических работ 39 часов
Промежуточная аттестация – экзамен						10
Итого	108	13	26		39	69

6.2. СОДЕРЖАНИЕ РАЗДЕЛОВ ДИСЦИПЛИНЫ

Раздел – Физико-химические процессы и модели преобразований вещества в гидрогеологической системе

- Классификация гидрогеохимических процессов. Общая модель процессов трансформации.
- Гидрогеохимическая система. Открытая и закрытая. Принципы локального и частичного равновесия. Концентрация и активность, уравнение Дебая-Хюккеля. Активность твердых фаз.
- Гомогенные процессы. Комплексообразование в растворах. Роль органических лигандов и коллоидов.
- Гетерогенные процессы. Растворение газов. Закон Генри. Влияние температуры. Высаливание. Концентрации газов в почвах.
- Растворение и осаждение минералов. Механическое ингибирование. Возможность равновесного подхода.
- Ионный обмен и сорбция. Точка нулевого заряда. Запись реакций. Конвенции гетеровалентного ионного обмена. Емкость обменного комплекса и сумма обменных катионов.

Раздел – термодинамическое равновесное моделирование миграции подземных вод

- Программа термодинамического моделирования HCh. Составные части. Этапы создания модели.
- Динамическая задача миграции раствора в породах. Уравнение одномерной миграции с физико-химическими преобразованиями. Численное решение – расщепление по процессам. Вычислительная реализация – управляющая программа.
- Окислительно-восстановительные процессы на примере сульфидов. Формирование задачи с реально возможными преобразованиями.
- Моделирование миграции с учетом ионного обмена. Включение всех процессов.
- Обзор других программ моделирования. Общие черты формирования и решения задачи.

6.3. СОДЕРЖАНИЕ ПРАКТИЧЕСКИХ (ЛАБОРАТОРНЫХ) ЗАНЯТИЙ

Раздел – простые аналитические расчеты

- Равновесие воды с углекислым газом при разных температурах.
- Расчет форм уголекислоты в зависимости от pH.
- Растворение гипса в дистиллированной воде. Влияние комплексообразования. Влияние добавок хлорида натрия.
- Растворение кальцита в открытой с углекислому газу системе и в закрытой.

Раздел – компьютерное моделирование

- Обработка химического анализа с освоение основных шагов создания модели.
- Равновесие воды с сульфатом кальция. Изменение внешних параметров. Влияние добавок постороннего электролита.
- Равновесие известняка с водой в зоне аэрации и в зоне полного водонасыщения. Влияние температуры зоны аэрации.
- Испарение грунтовых вод. Очередность осаждения минералов.
- Смешивание вод различного состава. Пример поступления вулканических вод в море с формированием осадка.
- Окисление пирита в зоне аэрации при снижении уровня подземных вод.
- Реализация динамической задачи миграции подземных вод и интерпретация результатов.
- Миграция рассолов с ионным обменом и растворением/осаждением минералов.

- Развитие задачи – гидродинамическая дисперсия, разбавление природными водами по пути миграции.

6.4. РЕКОМЕНДУЕМЫЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Применяются образовательных технологии в форме лекций и практических работ. Учебный материал подаётся с использованием современных средств визуализации.

Для моделирования используется основная программа HCh (Ю.В. Шваров) и PHREEQC в целях ознакомления. В практических занятиях сопровождение учебного процесса компьютером с демонстрационным экраном.

Самостоятельная работа студентов заключается в выполнении домашних заданий, самостоятельном изучении ряда вопросов с составлением рефератов.

7. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ (ФОС) ДЛЯ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

7.1. ТИПОВЫЕ КОНТРОЛЬНЫЕ ЗАДАНИЯ ИЛИ ИНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ

Текущий контроль усвоения дисциплины осуществляется при сдаче каждым студентом выполненных расчетных работ. Для текущего контроля студентов в ходе семестра проводятся контрольные опросы и работы.

ПРИМЕРНЫЙ ПЕРЕЧЕНЬ ВОПРОСОВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ:

- Перевод концентраций из одной размерности в другую.
- Плотность насыщенного раствора NaCl
- Концентрация соли в насыщенном растворе NaCl в г/л, моль/л, экв/л, г/кг H₂O, моль/кг H₂O
- ПДК основных макро- и микро- компонентов состава подземных вод.
- Растворимость гипса в г/л, моль/л, см³/л
- Формула смешивания двух-трех растворов соли в разных концентрациях и исходных объемах.
- Различие конвенций ионного обмена – Гейнса-Томаса и Ванселова.
- Алгоритм моделирования задачи смешивания составов подземных вод.
- Алгоритм динамической задачи формирования состава подземных вод.

РАСЧЕТНЫЕ ДОМАШНИЕ ЗАДАНИЯ:

- Виды выражения концентраций веществ (молярность, моляльность и т.д.), перевод значений в разные виды.
- ПДК основных компонентов состава подземных вод.
- Расчет и построение графиков зависимости распределения форм угольной кислоты от pH раствора.
- Расчет равновесия гипса с водой при изменении ионной силы раствора.
- Подготовка химического анализа воды в обычной форме к расчету равновесия – перевод размерностей, пересчет на 1 кг H₂O.
- Мольный объем веществ. Сравнение с мольным объемом воды.
- Деструкция радиоактивных элементов.
- Состав воздуха атмосферферы, почвы.
- Влияние солёности раствора на растворимость минералов.
- Вещества пород – сорбенты. Емкости обменного комплекса.
- Решение простых задач растворения кальцита и гипса с использованием программы PHREEQC (руководство на английском языке).

7.2. ТИПОВЫЕ КОНТРОЛЬНЫЕ ЗАДАНИЯ ИЛИ ИНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ.

ПРИМЕРНЫЙ ПЕРЕЧЕНЬ ВОПРОСОВ ПРИ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ:

1. Классификация процессов. Гидрогеохимическая система, выделение, состав, размер.
2. Формы выражения концентрации веществ в подземной воде, породе и воздухе. Пересчеты из одной в другую. Ионная сила раствора. Коэффициенты активности ионов (уравнение Дебая-Хюккеля).
3. Простая модель процессов. Основной постулат химической кинетики, закон действия масс. Константа равновесия.
4. Комплексообразование. Деструкция.
5. Состав воздуха (основные газы). Активность и растворимость газов. Коэффициент высаливания. Концентрации углекислого газа в почве.
6. Аналитический расчет растворимости углекислого газа и pH раствора.
7. Расчет форм уголекислоты в зависимости от pH.
8. Растворение/осаждение – основные процессы, индекс насыщения.
9. Модель химической кинетики растворения/осаждения минерала. Гомогенное осаждение.
10. Аналитический расчет равновесия гипса. Зависимость растворимости гипса от концентрации NaCl.
11. Аналитический расчет растворимости кальцита в зоне аэрации.
12. Процесс ионного обмена. Обменный комплекс твердых веществ и его состав.
13. Запись реакций ионного обмена. Гомовалентный и гетеровалентный обмен.
14. Принципы расчета химического равновесия. Формирование гидрогеохимической системы и вспомогательных форм (бланк, ввод).
15. Формирование модели смешивания составов в разных пропорциях.
16. Обоснование модели конвективного переноса по трубке тока.
17. Переход модели переноса к каскаду реакторов (проточные реакторы), формирование задачи, чтение результатов.

Таблица 2. Шкала и критерии оценивания результатов обучения по дисциплине.

Результаты обучения	«Неудовлетворительно»	«Удовлетворительно»	«Хорошо»	«Отлично»
<u>Знания:</u> Современное состояние описания процессов формирования состава подземных вод, получить представления о комплексировании их для построения моделей трансформации составов вод в условиях равновесных процессов взаимодействия фаз и внутри фаз.	Знания отсутствуют	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Систематические знания
<u>Умения:</u> Использование физико-химических расчетов для оценки распределения миграционных форм элементов; применение современных методов прогноза формирования составов подземных вод и определение основных процессов их трансформаций	Умения отсутствуют	В целом успешное, но не систематическое умение, допускает неточности непринципиального характера	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы в умении владения физико-химическими расчетами	Успешное умение использовать физико-химические расчеты применительно к формированию составов подземных вод
<u>Владения:</u> Приемы формализации задач формирования состава подземных вод и методы математического моделирования	Навыки владения приемами методами отсутствуют	Фрагментарное владение приемами и методами	В целом навыки сформированы, некоторые методы освоены недостаточно	Владение приемами и методами решения задач

8. РЕСУРСНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

А) ПЕРЕЧЕНЬ ОСНОВНОЙ И ДОПОЛНИТЕЛЬНОЙ ЛИТЕРАТУРЫ.

Основная литература:

- Лехов А.В., Гидрогеохимическое моделирование / конспект. кафедра гидрогеологии Геологического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова, сервер кафедры гидрогеологии. 2019
- Киреева Т.А. Гидрогеохимия. / Учебное пособие, Гриф УМО/НМС.
http://wiki.web.ru/wiki/Геологический_факультет_МГУ:Гидрогеохимия. 2016

Дополнительная литература:

- Борисов М.В., Шваров Ю.В. Термодинамика геохимических процессов – М.: Изд. МГУ. 992

- Гаррелс Р.М., Крайст Ч.Л. Растворы, минералы, равновесия. М.: Мир.1968
- Драйвер Дж. Геохимия природных вод. – М.: Мир.1985
- Калачева Е.Г., Котенко Т.А. Химический состав и условия формирования Верхне-Юрьевских термальных источников (о. Парамушир, Курильские острова). – Вестник КРАУНЦ. Науки о земле, 2013. № 2. Вып. 22. С. 55-68
- Лехов А.В. Физико-химическая гидрогеодинамика / Учебник. – КДУ, 2010
- Appelo C.A.J., Postma D. Geochemistry, groundwater and pollution. – Rotterdam, Balkema, 2005

Б) ПЕРЕЧЕНЬ ЛИЦЕНЗИОННОГО ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ

- Программа равновесного термодинамического моделирования HCh,
- Программа термодинамического моделирования PHREEQC,
- Программы представления отчетов Microsoft Office.

В) ПЕРЕЧЕНЬ ПРОФЕССИОНАЛЬНЫХ БАЗ ДАННЫХ И ИНФОРМАЦИОННЫХ СПРАВОЧНЫХ СИСТЕМ

Базы данных входят в состав используемых программ

Г) ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ И ИНТЕРНЕТ-РЕСУРСЫ

- HCh. Шваров Ю.В. Программа HCh, руководство – <http://www.geol.msu.ru/deps/geochems/soft/index.html>. Раздел HCh для Windows
- PHREEQC. Appelo C.A.J. Phreeqc – <http://www.hydrochemistry.eu/>
- PHREEQC. Parkhurst D.L., Appelo C.A.J. Description of Input and Examples for PHREEQC Version 3. – <https://www.usgs.gov/software/phreeqc-version-3>

Д) МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОГО ОБЕСПЕЧЕНИЕ

- а) помещения – аудитория, рассчитанная на группу из 15 учащихся.
- б) оборудование – мультимедийный проектор, компьютеры – 8 шт, доска, мел или маркеры.

9. ЯЗЫК ПРЕПОДАВАНИЯ

русский.

10. ПРЕПОДАВАТЕЛИ

Лехов А.В., Картунов Е.В.

11. АВТОР ПРОГРАММЫ

Лехов А.В.

Московский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова, Геологический факультет, кафедра Гидрогеологии,
 профессор А.В. Лехов. 8-495-939-54-98; 8-915-361-13-99; avlekhov@gmail.com