

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**

**Моделирование гидрогеохимических процессов в подземных водах**

Автор-составитель: проф. А.В. Лехов

**Уровень высшего образования:**  
*Магистратура (ММ)*

**Направление подготовки:**  
**05.04.01 Геология**

**Магистерская программа:**  
**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 – 2019.

© 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, спецкурс по выбору, курс – 1 семестр – 1.

### **2. Входные требования для освоения дисциплины, предварительные условия**

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

Дисциплина необходима в качестве предшествующей для дисциплин магистерской программы, 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 Способность применять на практике знания фундаментальных и прикладных 3 разделов дисциплин, определяющих профиль подготовки

ОПК-4 Способность использовать современные вычислительные методы и компьютерные технологии для решения задач профессиональной деятельности

ПК-1 Способность самостоятельно проводить научные исследования с помощью современного оборудования, информационных технологий, с использованием новейшего отечественного и зарубежного опыта

ПК-2 Способность создавать и исследовать модели изучаемых объектов на основе использования теоретических и практических знаний в области геологии

СПК-1 Способность систематизировать, обобщать и анализировать результаты региональных гидрогеологических исследований формирования естественных ресурсов и эксплуатационных запасов подземных вод

### **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 гомогенных и гетерогенных процессов.

**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, лабораторные и семинарские занятия.

#### **5. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ**

Объем оставляет 3 з.е., в том числе 42 академических часа, отведенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (14 часов – занятия лекционного типа, 14 часов – занятия лабораторного типа, 14 часов – занятия семинарского типа), 66 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 – зачет

#### **6. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ**

##### **6.1. КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (АННОТАЦИЯ):**

Курс "Моделирование гидрогеохимических процессов в подземных водах" 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)	<b>Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем)</b>				Самостоятельная работа обучающегося, часы
		<b>Виды контактной работы, часы</b>				
		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)		12	4	2	18	4 расчетно-графические работы 20 часов
Математическое моделирование формирования состава подземных вод (построение моделей, программы моделирования, статические задачи, динамические задачи)		2	10	12	24	9 расчетно-графических работ 40 часов
Промежуточная аттестация – зачет						6
<b>Итого</b>	<b>108</b>	<b>14</b>	<b>14</b>	<b>14</b>	<b>39</b>	<b>66</b>

## 6.2. СОДЕРЖАНИЕ РАЗДЕЛОВ ДИСЦИПЛИНЫ

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

- Классификация и общая модель гидрогеохимических процессов.
- Гидрогеохимическая система. Открытая и закрытая. Принципы локального и частичного равновесия. Концентрация и активность, уравнения Дебая-Хюккеля, Питцера. Активность твердых фаз.
- Внутрифазные процессы. Комплексообразование в растворах. Органические лиганды и коллоиды.
- Межфазные процессы. Растворение газов. Закон Генри. Влияние температуры. Высаливание. Концентрации газов в почвах.
- Межфазные процессы. Растворение и осаждение минералов. Механическое ингибирование. Возможность равновесного подхода.
- Межфазные процессы. Ионный обмен и сорбция. Запись реакций. Гомовалентный и гетеровалентный ионного обмен. Емкость обменного комплекса и сумма обменных катионов. Модель сорбции.

### **Раздел – термодинамическое равновесное моделирование миграции подземных вод**

- Программа термодинамического моделирования NCh. 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 железа. Формирование задачи с реальными реакциями.
- Моделирование миграции с учетом ионного обмена. Комплексообразование 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 сильного электролита.
- 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 и в целях ознакомления PHREEQC. 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 H<sub>2</sub>O, моль/кг H<sub>2</sub>O
- ПДК основных макро- и микро- компонентов состава подземных вод.
- Растворимость гипса в г/л, моль/л, см<sup>3</sup>/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 H<sub>2</sub>O.
- Мольный объем веществ. Сравнение с мольным объемом воды.
- Деструкция радиоактивных элементов.
- Состав воздуха атмосферы, почвы.
- Влияние солености 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	«Незачет»	«Зачет»
<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.	Фрагментарные знания	Общие достаточно структурированные 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	не систематическое умение, допускает принципиальные ошибки	В целом успешное умение владения физико-химическими расчетами
<u>Владения:</u> Приемы формализации задач формирования состава подземных вод и методы математического моделирования	Фрагментарное владение приемами и методами	В целом навыки сформированы

## 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](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
- Дривер 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 12 учащихся.

б) оборудование – мультимедийный проектор, компьютеры – 7 шт, доска, мел или маркеры.

## 9. ЯЗЫК ПРЕПОДАВАНИЯ

русский.

## 10. ПРЕПОДАВАТЕЛИ

Лехов А.В., Картунов Е.В.

## 11. АВТОР ПРОГРАММЫ

Лехов А.В.