

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 взаимодействия «вода-порода»

Авторы-составители: Борисов М.В., Шваров Ю.В.

Уровень высшего образования:

Магистратура

Направление подготовки:

05.04.01 Геология

Направленность (профиль) ОПОП:

Экологическая геология

Магистерская программа:

Экологическая геология

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 – обеспечение подготовки магистров в области новейших технологий расчета равновесного состояния и моделирования сложных многокомпонентных гетерогенных природных систем.

Задачи: освоение методов количественного численного термодинамического моделирования на ЭВМ геохимических процессов, в том числе процессов взаимодействия в системах «вода-порода» на основе современных теоретических и методических представлений и практических приемов решения геохимических задач широкого спектра.

1. Место дисциплины в структуре ОПОП ВО – вариативная часть, блок дисциплин профессиональный, тип - дисциплины по выбору (модуль «Экологическая геохимия»), 1 г/о, семестр 2.

2. Входные требования для освоения дисциплины, предварительные условия:

освоение дисциплин Информатика, Общая химия, Основы неорганической химии, Минералогия с основами кристаллографии, Геология месторождений полезных ископаемых, Общая геохимия, Геохимия элементов, Экологическая геохимия, Экологическая геохимия природных вод, Основы физической геохимии и др.

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

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

ОПК-5.М Способность использовать современные вычислительные методы и компьютерные технологии для решения задач профессиональной деятельности

Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю):

знать: теоретические основы, принципы и методы термодинамического моделирования на ЭВМ природных процессов, возможности и ограничения равновесно-динамических моделей геохимических процессов, основные используемые вычислительные программы, методы и источники (геологические и физико-химические) получения входной информации для построения моделей.

уметь: формулировать задачи термодинамического моделирования на основе анализа геолого-геохимической информации, выполнять на компьютере термодинамическое моделирование многокомпонентных гетерофазных систем в широком диапазоне физико-химических условий, интерпретировать результаты термодинамического моделирования для целей реконструкции и расшифровки природных геологических процессов.

владеть: навыками и приемами работы с пакетом программ термодинамического моделирования HCh, включая поиск и подготовку исходной информации для моделирования, проведение циклов вычислений, обработку и графическое отображение результатов моделирования.

4. Формат обучения – лекционные и практические занятия.

5. Объем дисциплины (модуля) составляет 2 з.е., в том числе 26 академических часов, отведенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (13 часов – лекции, 13 часов – практические занятия), 46 академических часа на самостоятельную работу обучающихся. Формы текущего контроля - устные опросы, сдача расчетно-графических работ и др. Форма промежуточной аттестации – экзамен.

6. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и виды учебных занятий

Краткое содержание дисциплины (аннотация):

Анализируются современные методы расчета равновесного состава сложных многокомпонентных гетерогенных геохимических систем и принципы численного моделирования на ЭВМ геохимических процессов, приводятся примеры равновесно-динамических моделей эндогенных и экзогенных систем. На практических занятиях при решении задач осваиваются методы количественного численного термодинамического моделирования на ЭВМ геохимических процессов, в том числе процессов взаимодействия в системах «вода-порода».

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), Форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе				Самостоятельная работа обучающегося, часы <i>(виды самостоятельной работы – эссе, реферат, контрольная работа и пр. – указываются при необходимости)</i>
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем) Виды контактной работы, часы				
		Занятия лекционного типа	Занятия практического типа	Занятия семинарского типа	Всего	
Раздел 1. Методология моделирования геохимических процессов.		4			4	Собеседование, 2 часа
Раздел 2. Структура пакета программ HCh: программы Main, Gibbs, Unitherm.		2			2	Собеседование, 2 часа
Раздел 3. База данных Unitherm		2	2		4	1 расчетно-графическая работа, 6 часов
Раздел 4. Программа Gibbs Опции. Размещение основных рабочих баз и файлов.		2	2		4	1 расчетно-графическая работа, 6 часов
Раздел 5. Анализ равновесного состояния системы (насыщенность природных вод по минералам, диаграммы растворимости)		2	4		6	4 расчетно-графические работы, 8 часов
Раздел 6. Модели гидротермального рудообразования. Принципы и подходы при интерпретации данных		1	5		6	2 расчетно-графические работы, 12 часов
Промежуточная аттестация <i>экзамен</i>						10
Итого	72				26	46

Содержание разделов дисциплины:

Методология моделирования геохимических процессов

Модели и их соотношения, локальные равновесия, равновесия и динамика, расчет равновесного состояния и моделирование процесса, задачи моделирования с примерами.

Расчет равновесий. Алгоритмы расчета, их классификация и возможности; данные для расчетов и их источники; результаты расчетов; особенности интерпретации результатов, типичные затруднения.

Постановка геологической модели. Исходные данные и их контроль (породы, растворы, минералы); альтернативные модели; набор элементов; упрощения модели.

Формирование физико-химической модели. Термодинамические данные и их выбор (включение и исключение фаз); коэффициенты активности; источники данных. Верификация результатов моделирования и анализ этих данных; корректировка моделей. Параметры - T, P, отношение порода/вода и др.

Структура пакета программ HCh

Структура. Программы Main, Unitherm (UT), Gibbs. Принципы их взаимодействия. Директория HCh – типы данных в ней.

База данных Unitherm

База термодинамических данных Unitherm. Типы веществ в базе и форматы ввода информации: встроенные, базисные частицы, комплексы, чистые фазы, реальные газы. Файлы *.bin и *.ref. Способы расчета данных в базе (просмотр ref и инструкции). Создание рабочей базы данных. Работа с базой и просмотр всех опций. Дополнительные возможности базы данных Unitherm: условные значки в записях названий или формул (,g; ,l; запятые и пробел), реальный и идеальный газ, подмножество базы данных, пользовательский элемент, расчет направления реакций. Расчеты различных термодинамических величин: f, Δg реакции. Способы вывода данных.

Программа Gibbs.

Принципы работы программы Gibbs. Опции для управления расчетами. Размещение основных программ и рабочих баз и файлов. Типы создаваемых файлов – стехиометрии, формата ввода составов, состава, управляющего (*.st, *.bl, *.in, *.ct).

Анализ равновесного состояния системы.

Формирование задачи - индивидуальные фазы, водный раствор, жидкость, твердый раствор, вполне подвижный компонент, газовый раствор (их характеристика). Файл *.stg.

Расчет равновесного состояния системы – диаграммы растворимости. Формирование файлов: *.st, *.bl, *.in и *.ct. Расчет отдельных точек и сечения многомерной диаграммы. Вывод результатов (*.lst и *.re). Работа с данными. Файл *.rex. Ввод данных в Excel. Построение графиков. Анализ системы.

Модели гидротермального рудообразования.

Геологическая, физико-химическая, математические модели. Методические приемы моделирования. Результаты. Верификация результатов моделирования. Принципы и подходы при интерпретации данных.

Равновесно-динамические задачи - мобилизация компонентов из вмещающих пород и формирование полиметаллических жил при разных условиях. Создание файлов: *.st, *.bl, *.in, *.ct. Предварительный просмотр результатов. Вывод результатов и типы выходных данных. Остановка счета и его продолжение. Возможности внесения изменений. Работа с результатами. Опции счета. Ввод данных в Excel. Построение графиков и анализ данных.

Рекомендуемые образовательные технологии

При реализации программы дисциплины «Моделирование взаимодействия вода-порода» используются следующие технологии. При проведении практических занятий применяется компьютерная графика (ПК и компьютерный проектор), разбор примеров применения методов компьютерного моделирования при решении различных задач геологии, технологических процессов, экспериментальных исследований и др., а также – интерактивная форма занятий в виде деловых игр на конкретном материале. При проведении занятий используется компьютерный

класс кафедры геохимии, набор специализированных программ по подготовке данных для моделирования и проведения расчетов в различных системах.

7. Фонд оценочных средств (ФОС) для оценивания результатов обучения по дисциплине (модулю)

7.1. Типовые контрольные задания или иные материалы для проведения текущего контроля успеваемости.

Текущий контроль усвоения дисциплины осуществляется при сдаче каждым магистрантом выполненных расчетных работ. При проведении самостоятельной работы предполагается обработка результатов расчетов и построение необходимой графики, выполненных при проведении практических занятий (8 расчетных задач), и проведение дополнительных расчетов. Подготовка сообщений о свойствах исследованных систем.

Перечень расчетно-графических заданий для проведения текущего контроля:

1. Ввод в базу данных Unitherm и редактирование информации: твердая фаза, газ; базисный ион; комплекс. Проверка введенных данных
2. Расчеты в системе $H_2O-O_2-N_2-CO_2$. Система открыта по атмосфере Земли. Условия - $25^{\circ}C$ и 1 бар. Редактирование файлов. Способы открытия и закрытия системы.
3. Расчеты в системе $SiO_2-H_2O-CO_2$ с редактированием файлов стехиометрии и других, открытая система, расчет стабильного и метастабильного равновесий с SiO_2 (am).
4. Расчеты в системе $CaCO_3-H_2O-NaCl-CO_2$. Влияние температуры, парциального давления CO_2 и концентрации $NaCl$ на растворимость кальцита.
5. Расчет насыщенности конкретных природных вод по кальциту. Способы ввода данных по составам природных вод. Погрешности исходных анализов и их исправление. Вывод данных и анализ результатов.
6. Расчет равновесного состояния системы $MgO-SiO_2-H_2O-CO_2-NaCl$. Данные - минералы; частицы; форматы ввода составов; составы для расчета; условия. Анализ диаграммы растворимости: характер растворимости минералов, минералы устойчивые при взаимодействии с водой или водным раствором при различных температурах и давлениях. Построение необходимой графики при использовании программы Excel.
7. Модель мобилизации компонентов из гранита при T-P (15-компонентная система, 30 волн взаимодействия, особенности файлов стехиометрии, формата ввода состава, состава, управляющего). Построение необходимой графики при использовании программы Excel.
8. Модель реакционного формирования жилы выполнения при разных условиях по T и P. Различные возможности вывода результатов расчетов. Анализ результатов и построение необходимой графики при использовании программы Excel.

7.2. Типовые контрольные задания или иные материалы для проведения промежуточной аттестации.

Примерный перечень вопросов и задач при промежуточной аттестации:

1. Геологическая, физико-химическая и математическая модели. Классификация алгоритмов для расчета равновесий в многокомпонентных гетерогенных системах.
2. Равновесно-динамическое моделирование: методология, принципы, подходы к анализу неравновесных и необратимых природных процессов.
3. Геохимическая необходимость и возможность расчета метастабильных равновесий (твердые фазы, растворы).
4. Структура программного комплекса NCh. Возможности при определении фазового состава системы. Типы создаваемых файлов.
5. База данных Unitherm. Типы вводимых данных. Главные функции и дополнительные возможности программы.
6. Составить управляющий файл для расчета взаимодействия в системе "порода-раствор" в задаче по мобилизации компонентов. Один реактор с породой и через него проходит 20 порций раствора постоянного состава. Описать процесс с помощью одноволновой модели.

7. Составить управляющий файл (начальный и основной шаги) для расчета титрования одного раствора другим.
8. Составить управляющий файл для расчета взаимодействий при смешении двух растворов при различных их соотношениях (10 смесей от чистого раствора 1 до чистого раствора 2, общее количество раствора остается постоянным).
9. Составить управляющий файл для расчета растворимости кальцита при T и P по кривой насыщенного пара воды в интервале температур от 25 до 300°C с шагом 25°C.
10. Составить управляющий файл для расчета растворимости кальцита при 25°C и давлении насыщенного пара воды при парциальном давлении CO₂ от 10⁻⁶ до 10⁻¹ бар (шаг 0.5 порядка).

Шкала и критерии оценивания результатов обучения по дисциплине.

Результаты обучения	«Неудовлетворительно»	«Удовлетворительно»	«Хорошо»	«Отлично»
Знания: принципы и методы термодинамического моделирования на ЭВМ природных процессов, возможности и ограничения равновесно-динамических моделей, основные программы, источники входной информации для моделирования.	Знания отсутствуют	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Систематические знания
Умения: формулировать задачи моделирования на основе геолого-геохимической информации, выполнять на компьютере термодинамическое моделирование многокомпонентных гетерофазных систем, интерпретировать результаты моделирования для целей реконструкции и расшифровки природных процессов.	Умения отсутствуют	В целом успешное, но не систематическое умение, допускает неточности непринципиального характера	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение использовать возможности программных комплексов.	Успешное умение использовать возможности термодинамического моделирования для решения геохимических задач.
Владения: навыками и	Навыки владения	Фрагментарное владение	В целом сформированны	Владение методами

приемами работы с пакетом программ HCh, включая поиск и подготовку исходной информации для моделирования, проведение циклов вычислений, обработку и графическое отображение результатов.	отсутствуют	методикой, наличие отдельных навыков	е навыки использования программных комплексов, но имеется определенная неуверенность.	моделирование на ЭВМ для решения генетических задач в процессах с участием пород и природных водных растворов..
--	-------------	--------------------------------------	---	---

8. Ресурсное обеспечение:

А) Перечень основной и дополнительной литературы.

- основная литература:

1. Борисов М.В., Шваров Ю.В. Термодинамика геохимических процессов. М., МГУ, 1992, 254 с.
2. Крайнов С.Р., Шваров Ю.В., Гричук Д.В....Борисов М.В. и др. Методы геохимического моделирования и прогнозирования в гидрогеологии. М., Недра, 1988, 254 с.
3. Термодинамическое моделирование в геологии. М., Мир, 1992, 534 с.
4. Жариков В.А. Основы физической геохимии. М., МГУ-Наука, 2005, 654 с.
5. Шваров Ю.В. HCh: новые возможности термодинамического моделирования геохимических систем, предоставляемые Windows// Геохимия, 2008, № 8, 898-903.
6. Инструкция пользователя пакета программ HCh. МГУ, 2009. – <http://www.geol.msu.ru/deps/geochems/soft/index.html>

- дополнительная литература:

1. Карпов И.К. Физико-химическое моделирование на ЭВМ в геохимии. Новосибирск, Наука, 1981, 248 с.
2. Борисов М.В. Геохимические и термодинамические модели жильного гидротермального рудообразования. М.: Научный мир, 2000, 360 с.
3. Гричук Д.В. Термодинамические модели субмаринных гидротермальных систем. М.: Научный мир, 2000, 304 с.
4. Борисов М.В., Бычков Д.А., Шваров Ю.В. Геохимические структуры полиметаллических жил выполнения и параметры гидротермального рудообразования// Геохимия, 2006, №11, 1218-1239.
5. Шваров Ю.В. Алгоритмизация численного равновесного моделирования динамических геохимических процессов. Геохимия, 1999, № 6, 646-652.
6. Бычков А.Ю. Геохимическая модель современного рудообразования в кальдере Узон (Камчатка). М., ГЕОС, 2009, 124 с.
7. Shvarov Yu., Bastrakov E. HCh: a software package for geochemical equilibrium modelling. User's Guide. Australian Geological Survey Organisation (Department of industry, science & resources), Canberra, 1999, 56 p.

Б) Перечень лицензионного программного обеспечения Microsoft Office Excel, Microsoft Office PowerPoint (при необходимости).

В) Перечень профессиональных баз данных и информационных справочных систем

Г) программное обеспечение и Интернет-ресурсы (лицензионное программное обеспечение не требуется): пакет программ HCh (автор Ю.В.Шваров, кафедры геохимии МГУ). <http://www.geol.msu.ru/deps/geochems/soft/index.html>

Д) Материально-технического обеспечение: компьютерный класс на 6-7 мест, оборудованный персональными компьютерами, мультимедийный проектор и экран для демонстрации презентаций. Пакет программ HCh (автор Ю.В.Шваров, кафедра геохимии МГУ).

9. Язык преподавания – русский.

10. Преподаватель (преподаватели) – Борисов М.В., Шваров Ю.В.

11. Автор (авторы) программы – Борисов М.В., Шваров Ю.В.