

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 (ММ)**

**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», уровень магистратуры (ММ) 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:**

Знания в части общекультурной и общенаучной подготовки – на уровне требований Образовательного стандарта МГУ, направление «Геология», уровень бакалавриат; знания в области геологии – в соответствии с требованиями вступительного экзамена в магистратуру (общие вопросы, вопросы профиля «Геохимия»).

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

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

ОПК-4 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** – практические занятия.

**5. Объем дисциплины (модуля)** составляет 3 з.е., в том числе 52 академических часов, отведенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (52 часов – практические занятия), 56 академических часа на самостоятельную работу обучающихся. Формы текущего контроля - устные опросы, сдача расчетно-графических работ и др. Форма промежуточной аттестации – зачет.

**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. Базы данных.			4		4	Собеседование, 2 часа
Раздел 2. Структура пакета программ HCh: программы Main, Gibbs, Unitherm.			4		4	Собеседование, 4 часа
Раздел 3. База данных Unitherm			12		12	2 расчетно-графическая работа, 8 часов
Раздел 4. Дополнительные программы: OptimV и OptimC			4		4	2 расчетно-графическая работа, 4 часов
Раздел 5. Программа Gibbs Опции. Размещение основных рабочих баз и файлов.			4		4	1 расчетно-графическая работа, 6 часов
Раздел 6. Анализ равновесного состояния системы (насыщенность природных вод по минералам, диаграммы растворимости)			8		8	3 расчетно-графические работы, 8 часов
Раздел 7. Модели взаимодействия вода-порода			8		8	1 расчетно-графическая работа, 9 часов
Раздел 6. Модели жильного рудообразования. Подходы при интерпретации данных			8		8	1 расчетно-графические работы, 10 часов
Промежуточная аттестация <i>зачет</i>						5
<b>Итого</b>	<b>108</b>		<b>52</b>			<b>56</b>

## Содержание разделов дисциплины:

Содержание практических занятий (темы и задачи).

**Тема 1.** Модели и их соотношения, локальные равновесия, равновесия и динамика, расчет равновесного состояния и моделирование процесса, задачи моделирования с примерами. Расчет равновесий. 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.

1. Структура и характеристики баз данных (справочники, форматы, стандартизация и др.). Работа со справочной литературой и электронными базами термодинамических данных.

**Тема 2.** Структура пакета программ HCh. Программы Main, Unitherm (UT), Gibbs. Принципы их взаимодействия. Директория HCh – типы данных в ней.

2. Знакомство с основными принципами функционирования программ.

**Тема 3.** 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; запятое и пробел), реальный и идеальный газ, подмножество базы данных, пользовательский элемент, расчет направления реакций. Расчеты различных термодинамических величин: f, Δg реакции. Способы вывода данных.

3. Ввод в базу данных Unitherm и редактирование информации: твердая фаза, газ; базисный ион; комплекс. Проверка введенных данных.

4. Расчет Δg реакций и определение P-T условий равновесия. Формирование задачи и проведение расчетов.

**Тема 4.** Дополнительные программы: OptimB и OptimC.

5. Ввод необходимой информации. Оптимизация коэффициентов модели НКФ (программа OptimB) и параметров модели BR (программа OptimC) для частиц водного раствора. Сопоставление с экспериментальными данными. Погрешности оптимизации.

**Тема 5.** 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).

6. Расчеты в системе H<sub>2</sub>O-O<sub>2</sub>-N<sub>2</sub>-CO<sub>2</sub>. Система открыта по атмосфере Земли. Условия - 25°C и 1 бар. Редактирование файлов. Способы открытия и закрытия системы.

7. Расчеты в системе SiO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O-CO<sub>2</sub> с редактированием файлов стехиометрии и других, открытая система, расчет стабильного и метастабильного равновесий с SiO<sub>2</sub> (am).

8. Расчеты в системе CaCO<sub>3</sub>-H<sub>2</sub>O-NaCl-CO<sub>2</sub>. Влияние температуры, парциального давления CO<sub>2</sub> и концентрации NaCl на растворимость кальцита.

**Тема 6.** 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.

9. 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.

10. 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.

**Тема 7.** Модели взаимодействия вода-порода. Равновесно-динамические задачи - мобилизация компонентов из вмещающих пород. Постановка задачи. Создание необходимых файлов. Файлов и ввод данных. Работа с результатами. Ввод данных в Excel.

11. 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.

**Тема 8.** Модели гидротермального рудообразования. Геологическая, физико-химическая, математические модели. Методические приемы моделирования. Результаты. Верификация результатов моделирования. Принципы и подходы при интерпретации данных. Работа с результатами. Опции счета. Ввод данных в Excel. Построение графиков и анализ данных. Равновесно-динамические задачи - 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.

12. 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.

### **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 (10 расчетных задач), и проведение дополнительных расчетов. Подготовка кратких 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. Расчет  $\Delta G$  реакций и определение P-T условий равновесия. Формирование задачи и проведение расчетов.
3. Ввод необходимой информации. Оптимизация коэффициентов модели НКФ (программа OptimB) и параметров модели BR (программа Optimc) для частиц водного раствора. Сопоставление с экспериментальными данными. Погрешности оптимизации.

4. 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.

5. 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).

6. Расчеты в системе  $CaCO_3-H_2O-NaCl-CO_2$ . Влияние температуры, парциального давления  $CO_2$  и концентрации  $NaCl$  на растворимость кальцита.

7. 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.

8. 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.

9. 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.

10. 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  $300^\circ C$  с шагом  $25^\circ C$ .
10. Составить управляющий файл для расчета растворимости кальцита при  $25^\circ C$  и давлении насыщенного пара воды при парциальном давлении  $CO_2$  от  $10^{-6}$  до  $10^{-1}$  бар (шаг 0.5 порядка).

## **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, кафедра 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.