

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

УТВЕРЖДАЮ
и.о. декана Геологического факультета
чл.-корр. РАН _____/Н.Н.Ерёмин/
«__» _____ 20__ г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Гидрогеохимическое моделирование

Автор-составитель: Лехов А.В.

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

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*).

Год (годы) приема на обучение: 2022

© 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

Целью курса "Гидрогеохимическое моделирование" – развитие у обучающегося устойчивого, логически связанного, комплекса знаний о процессах формирования химического состава подземных вод способами 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.

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 программами моделирования гидрогеохимических процессов PHREEQC и HCh и их 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 проток с максимально возможным на данном уровне учетом процессов массообмена и трансформаций веществ.

1. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП – относится к вариативной части ОПОП, является дисциплиной по выбору. Варианты: относится к вариативной части ОПОП, является обязательной для освоения;

2. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия: базируется на знаниях по дисциплинам Освоение дисциплин «Общая геология», «Общая химия», «Химия физическая, коллоидная», «Гидрогеология», «Гидрогеохимия», «Грунтоведение».

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с требуемыми компетенциями выпускников.

Компетенции выпускников (коды)	Индикаторы (показатели) достижения компетенций	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), сопряженные с компетенциями
ОПК-3.Б.Способен решать стандартные задачи профессиональной деятельности в соответствии с профилем подготовки.	Б.ОПК-3. И-1. Использует типовые подходы и методы при решении задач профессиональной деятельности. Б.ОПК-3. И-2. Владеет базовыми навыками получения информации (полевой, камеральной,	Знать: современное состояние описания процессов формирования состава подземных вод, Уметь: использовать физико-химические расчеты для оценки распределения миграционных форм элементов;

	<p>лабораторной) для решения стандартных задач профессиональной деятельности в соответствии с профилем подготовки.</p> <p>Б.ОПК-3. И-3. Владеет базовыми навыками обработки и интерпретации информации при решении стандартных задач профессиональной деятельности в соответствии с профилем подготовки.</p>	
<p>СПК-2.Б Способен проводить моделирование изучаемых гидрогеологических, инженерно-геологических и геокриологических процессов</p>	<p>Б-СПК -1.2 Владеет навыками сбора, систематизации и интерпретации данных гидрогеологических исследований для проведения геофильтрационной и геомиграционной схематизации гидрогеологических процессов и связанных с ними инженерно-геологических и геокриологических процессов. Умеет разрабатывать геофильтрационные и геомиграционные модели для достаточно простых гидрогеологических условий, оценивать результаты прогнозных расчетов техногенного влияния на подземные воды</p>	<p>Знать: получить представления о комплексировании процессов формирования состава подземных вод для построения моделей трансформации составов вод в условиях равновесных процессов взаимодействия фаз и внутри фаз.</p> <p>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.</p> <p>Владеть: приемами формализации задач формирования состава подземных вод и их математического моделирования с оценкой их качества для использования в хозяйственно-питьевых и промышленных целях.</p>

4. Объем дисциплины (модуля) составляет **3** з.е., в том числе **39** академических часов на контактную работу обучающихся с преподавателем, **69** академических часа на самостоятельную работу обучающихся. Форма промежуточной аттестации – экзамен

5. Формат обучения не предполагает электронного обучения и использования дистанционных образовательных технологий (за исключением форс-мажорных обстоятельств – пандемии и т.п.)

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

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), Форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе								
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем)				Самостоятельная работа обучающегося <i>Виды самостоятельной работы, часы</i>				
		Занятия лекционного типа	Занятия лабораторного типа	Занятия семинарского типа	Всего	Расчетно-графические работы	Работа с литературой (включая подготовку доклада)	Подготовка реферата	Подготовка к контрольному опросу	Всего
Модели физико-химических процессов формирования состава подземных вод (классификация процессов, гидрогеохимическая система, гомогенные и гетерогенные процессы, растворение газов, минералов, ионный обмен)	35	9	6		15	20				20
Математическое моделирование формирования состава подземных вод (построение моделей, программы)	63	4	20		24	39				39

моделирования, статические задачи, динамические задачи)										
Промежуточная аттестация <i>экзамен</i>	10	<i>экзамен</i>				10				
Итого	108	39				69				

Содержание лекций, семинаров

Содержание лекций Содержание тем раскрывать (минимум 50 слов)

Тема (раздел) 1 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.

Тема (раздел) 2. 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. 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.

План проведения семинаров.

Простые аналитические расчеты

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

Компьютерное моделирование

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

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

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 студентом выполненных расчетных работ. Для текущего контроля студентов в ходе семестра проводятся контрольные опросы и работы.

Примерный перечень вопросов (тестов) 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 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 (экзамене, зачете) (не менее 20 вопросов):

1. Классификация процессов. Гидрогеохимическая система, выделение, состав, размер.
2. Формы выражения концентрации веществ в подземной воде, породе и воздухе. Пересчеты из одной в другую.
3. Ионная сила раствора. Коэффициенты активности ионов (уравнение Дебая-Хюккеля).
4. Простая модель процессов. Основной постулат химической кинетики, закон действия масс. Константа равновесия.
5. Комплексообразование. Деструкция.

6. Состав воздуха (основные газы). Активность и растворимость газов. Коэффициент высаливания. Концентрации углекислого газа в почве.
7. Аналитический расчет растворимости углекислого газа и pH раствора.
8. Расчет форм угольной кислоты в зависимости от pH.
9. Растворение/осаждение – основные процессы, индекс насыщения.
10. Модель химической кинетики растворения/осаждения минерала. Гомогенное осаждение.
11. Аналитический расчет равновесия гипса. Зависимость растворимости гипса от концентрации NaCl.
12. Аналитический расчет растворимости кальцита в зоне аэрации.
13. Процесс ионного обмена. Обменный комплекс твердых веществ и его состав.
14. Запись реакций ионного обмена. Гомовалентный и гетеровалентный обмен.
15. Принципы расчета химического равновесия. Формирование гидрогеохимической системы и вспомогательных форм (бланк, ввод).
16. Формирование модели смешивания составов в разных пропорциях.
17. Обоснование модели конвективного переноса по трубке тока.
18. Переход модели переноса к каскаду реакторов (проточные реакторы), формирование задачи, чтение результатов.
19. Варианты вывода результатов моделирования в программе PHREEQC
20. Окислительно-восстановительные реакции и особенности моделирования систем, где такие реакции играют роль.

Шкала и критерии оценивания результатов обучения по дисциплине (экзамен).

(Рекомендуемые виды оценочных средств могут быть дополнены.)

Результаты обучения, соответствующие виды оценочных средств	«Неудовлетворительно»	«Удовлетворительно»	«Хорошо»	«Отлично»
Знания (письменный или устный опрос,)	Знания отсутствуют	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Систематические знания
Умения (письменный или устный опрос,)	Умения отсутствуют	В целом успешное, но не систематическое умение, допускает неточности не принципиального характера	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы в умении владения физико-химическим и расчетами	Успешное умение использовать физико-химические расчеты применительно к формированию составов подземных вод
Навыки (владения, опыт деятельности) (письменный или устный опрос,)	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. кафедры 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: (до 10 наименований)

- 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
- Langmuir D. Aqueous environmental geochemistry. 1997.
- Merkel, Broder J., Britta Planer-Friedrich, and Darrell Kirk Nordstrom. "Groundwater geochemistry." A practical guide to modeling of natural and contaminated aquatic systems 2 (2005).

Б) Перечень программного обеспечения:

- лицензионное

Программа равновесного термодинамического моделирования HCh,

нелицензионные и свободного доступа

пакет программ Open Office,

Программа термодинамического моделирования PHREEQC

В) Перечень профессиональных баз данных и информационных справочных систем:

- Базы данных входят в состав используемых программ

Г) Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» (при необходимости)

HCh. Шваров Ю.В. Программа HCh, руководство –

<http://www.geol.msu.ru/deps/geochems/soft/index.html>. Раздел HCh для Windows

PHREEQC. Appello C.A.J. Phreeqc – <http://www.hydrochemistry.eu/>

PHREEQC. Parkhurst D.L., Appello C.A.J. Description of Input and Examples for PHREEQC Version 3 – <https://www.usgs.gov/software/phreeqc-version-3>

Д) Материально-технического обеспечения:

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. Преподаватель (преподаватели):

Лехов А.В., Лямина Л.А.

11. Разработчики 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