

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

УТВЕРЖДАЮ
Декан геологического факультета
МГУ имени М.В.Ломоносова
чл.-корр. РАН Еремин Н.Н.



«25» сентября 2025г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Наименование дисциплины (модуля):

Вар – Петрологическое моделирование

Уровень высшего образования:

магистратура

Направление подготовки/ специальность:

05.04.01 Геология

Профиль программы магистратуры:

Геохимия

Магистерская программа:

Петрология

Форма обучения:

Очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методическим Советом Геологического факультета
(протокол № 6 от 8 сентября 2025 г.)

Москва 2025

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 05.03.01 Геология, утвержденным приказом по МГУ от 21.12.2021 № 1404 (в действующей редакции).

Год приема на обучение: 2024

© 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 является формирование системы теоретических знаний и практических навыков в области количественного моделирования фазовых равновесий и геохимических процессов в магматических и метаморфических системах. Курс направлен на подготовку специалиста, способного самостоятельно выбирать и применять современные программные комплексы для реконструкции параметров петрогенеза.

Задачи

- изучение термодинамических основ и алгоритмов, лежащих в основе современного программного обеспечения для петрологических расчетов (минимизация свободной энергии Гиббса, расчеты фазового соответствия);
- освоение интерфейса и функциональных возможностей специализированных программ;
- формирование навыков интерпретации результатов моделирования для решения конкретных научных задач: определение Р-Т параметров минеральных равновесий и реконструкция механизмов эволюции магматических расплавов.

Краткое содержание дисциплины (аннотация):

Дисциплина «Петрологическое моделирование» посвящена изучению теоретических основ и получению практических навыков работы с современными программными комплексами для количественной реконструкции природных процессов. В рамках курса рассматриваются методы построения фазовых диаграмм и псевдосекций в программах, расчеты равновесной и фракционной кристаллизации в системах, а также комплексное моделирование эволюции магматических камер. Особое внимание уделяется использованию вычислительных методов для решения задач профессиональной деятельности и применению специализированного ПО для интерпретации данных минералогической термометрии и барометрии.

1. Место дисциплины в структуре ОПОП: Дисциплина «Петрологическое моделирование» относится к вариативной части, дисциплина профиля по выбору студента, курс – II, семестр – III.

2. Входные требования для освоения дисциплины, предварительные условия: освоение дисциплин «Петрология», «Теория фазового соответствия», «Минералогия».

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

Компетенции выпускников (коды)	Индикаторы достижения компетенций	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с индикаторами достижения компетенций
ОПК-5.М	ОПК-5.М. Способность использовать современные вычислительные методы и компьютерные технологии для решения задач профессиональной деятельности	Знать: Основные принципы работы современных петрологических программных комплексов и заложенные в них физико-химические модели. Возможности вычислительных методов для расчета фазовых равновесий и численного моделирования геологических процессов. Уметь: Выбирать оптимальный программный алгоритм и вычислительный метод для решения конкретной задачи петрологического исследования. Готовить входные данные и настраивать параметры расчетов в специализированном программном обеспечении
СПК-3.М	СПК-3.М. Способность использовать методы численного моделирования и специальные программы для решения практических и научных петрологических задач.	Владеть: Навыками работы в интерфейсах современных программ для получения количественных данных о состоянии природных систем и методами компьютерной обработки и визуализации результатов моделирования в виде диаграмм и графиков.

4. **Объем дисциплины:** Объем дисциплины: **1** з.е., в том числе **28** академических часов на контактную работу обучающихся с преподавателем (**14** ак.часов практических занятий и **14** ак.часов семинаров), **8** академических часов на самостоятельную работу обучающихся, форма промежуточной аттестации – зачет (в третьем семестре).

5. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических 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) Виды контактной работы, часы				Самостоятельная работа обучающегося, часы (виды самостоятельной работы – эссе, реферат, контрольная работа и пр. – указываются при необходимости)
		Занятия лекционного типа	Занятия практического типа	Занятия семинарского типа	Всего	
Раздел 1. Введение и петрологическое моделирование. Принципы и постановка задачи			2	2	4	
Раздел 2. Моделирование фазовых равновесий в Perple X и THERMOCALC			3	3	6	
Раздел 3. Моделирование фазовых равновесий в MELTS, PETROLOG, COMAGMAT			3	3	6	
Раздел 4. Комплексное моделирование взаимодействия процессов ассимиляции, фракционирования и пополнения магматической камеры (AFC/RAFC)			2	2	4	
Раздел 5. Моделирование мантийного плавления			2	2	4	
Раздел 6. Принципы интерпретации и верификации результатов моделирования			2	2	4	
Промежуточная аттестация <i>зачет</i>						8
Итого	36	28				8

Содержание разделов дисциплины:

Раздел 1. Введение и петрологическое моделирование. Принципы и постановка задачи

Предмет и задачи петрологического моделирования в современной геологии. Понятие о прямой и обратной задачах термодинамики. Обзор современных методов численного моделирования фазовых равновесий: минимизация свободной энергии Гиббса и расчет констант равновесия. Роль термодинамических баз данных (Holland & Powell, Berman) и моделей активности твердых растворов минералов. Структура петрологического исследования: от выбора объекта и подготовки аналитических данных (составы пород и минералов) до построения численной модели. Ограничения и допущения при моделировании природных систем.

Раздел 2. Моделирование фазовых равновесий в Perple_X и THERMOCALC

Архитектура и алгоритмы программного комплекса Perple_X. Подготовка файлов, выбор компонентного состава системы и уравнений состояния флюидов. Построение многокомпонентных фазовых диаграмм: псевдосекции (P-T, T-X, P-X профили). Расчет модального состава фаз, теоретической плотности и сейсмических скоростей. Основы работы в THERMOCALC: метод «average P-T» и расчет мультивариантных равновесий. Сравнительный анализ программ при изучении метаморфических комплексов и процессов субдукции.

Раздел 3. Моделирование фазовых равновесий в MELTS, PETROLOG, COMAGMAT

Принципы моделирования магматических процессов. Программная среда MELTS: расчет ликвидусных температур, последовательности кристаллизации и равновесного плавления в силикатных системах. Особенности работы с программой PETROLOG: учет влияния летучих компонентов (H₂O, CO₂) и расчет окислительно-восстановительного потенциала. Программный комплекс COMAGMAT: моделирование формирования расслоенных интрузий и расчет фазового соответствия в системе «минерал-расплав» для различных геодинамических обстановок.

Раздел 4. Комплексное моделирование взаимодействия процессов ассимиляции, фракционирования и пополнения магматической камеры (AFC/RAFC)

Динамические модели эволюции магматических систем. Введение в Magma Chamber Simulator (MCS). Математическое описание процессов взаимодействия корового вещества (ассимилянта) с первичными расплавами. Моделирование фракционной кристаллизации, совмещенной с ассимиляцией (AFC) и периодическим пополнением камеры новыми порциями расплава (RAFC). Энергетический баланс кристаллизующейся системы. Оценка влияния термического режима вмещающих пород на состав производных магм.

Раздел 5. Моделирование мантийного плавления

Специфика численного описания процессов в верхней мантии. Моделирование декомпрессионного плавления мантийного перидотита и пироксенита. Использование специализированных модулей pMELTS и параметрических подходов. Расчет состава первичных магм, степени частичного плавления и состава твердого остатка (рестита). Оценка влияния содержания воды и малых компонентов на положение солидуса мантии. Построение моделей плавления для срединно-океанических хребтов и зон горячих точек.

Раздел 6. Принципы интерпретации и верификации результатов моделирования

Методология проверки достоверности полученных моделей. Сопоставление теоретических трендов дифференциации с реальными данными по природным объектам (вариационные диаграммы Харкера, петрохимические тренды). Применение результатов моделирования для прецизионной геотермобарометрии. Оценка чувствительности моделей к вариациям входных параметров (состава, давления, фугитивности кислорода). Визуализация данных: построение изолиний составов (изоплет) и их наложение на природные тренды составов минералов. Подготовка итогового отчета по петрологическому моделированию объекта исследования.

6. Фонд оценочных средств для оценивания результатов обучения по дисциплине (модулю):

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

Для текущего контроля проводятся устные опросы по материалам предыдущих занятий.

Примерный перечень вопросов для проведения устных опросов:

1. В чём состоит принципиальное различие между прямой и обратной задачами термодинамики применительно к петрологическому моделированию? Приведите примеры геологических задач, решаемых каждым из подходов.
2. Охарактеризуйте роль термодинамических баз данных Holland & Powell и Berman в численном моделировании фазовых равновесий. Какие ограничения накладывает выбор базы данных на интерпретацию результатов?
3. Каковы основные допущения и ограничения при моделировании природных минеральных систем? Как они влияют на достоверность получаемых термодинамических оценок?
4. Опишите алгоритм подготовки входных данных для построения псевдосекции в Perple_X: выбор компонентного состава системы, уравнений состояния флюидов и моделей активности твёрдых растворов.
5. Что такое псевдосекция (P–T, T–X, P–X)? Объясните, какую петрологическую информацию несут поля устойчивости минеральных ассоциаций и изоплеты составов минералов на псевдосекции.
6. Сравните методологические подходы Perple_X и THERMOCALC при изучении метаморфических комплексов. В каких ситуациях предпочтителен метод «average P–T» программы THERMOCALC?
7. Опишите принципы моделирования равновесной кристаллизации и равновесного плавления силикатных систем в программе MELTS. Какие входные параметры являются обязательными для корректного расчёта?
8. В чём состоят особенности учёта летучих компонентов (H_2O , CO_2) и окислительно-восстановительного потенциала при моделировании в программе PETROLOG? Как фугитивность кислорода влияет на последовательность кристаллизации?
9. Для каких геологических объектов и задач наиболее целесообразно применение программного комплекса COMAGMAT? Охарактеризуйте его возможности при моделировании расслоенных интрузий.
10. Объясните физический смысл и математическое описание процесса AFC (ассимиляция + фракционная кристаллизация). Каков энергетический баланс системы и почему он принципиален для корректности модели?
11. В чём отличие модели RAFC от стандартной AFC? Опишите, как периодическое пополнение магматической камеры новыми порциями расплава отражается на составе дифференциатов.
12. Каковы специфические особенности численного описания декомпрессионного плавления мантийного перидотита? Как содержание воды и состав малых компонентов влияют на положение солидуса и степень частичного плавления?

13. Сравните подходы к моделированию мантийного плавления для срединно-океанических хребтов и зон горячих точек. Какие параметры модели принципиально различаются в этих двух геодинамических обстановках?
14. Как проводится верификация результатов петрологического моделирования? Опишите процедуру сопоставления теоретических трендов дифференциации с природными данными на вариационных диаграммах Харкера.
15. Что такое анализ чувствительности модели? Какие входные параметры (состав системы, давление, фугитивность кислорода и др.) оказывают наибольшее влияние на результаты моделирования фазовых равновесий, и как это учитывается при интерпретации?

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

Примерный перечень вопросов при промежуточной аттестации:

1. В чем заключается принципиальное различие между «прямой» и «обратной» задачами петрологического моделирования?
2. Какие термодинамические потенциалы минимизируются при расчете фазовых равновесий в различных программных комплексах?
3. Дайте характеристику основным термодинамическим базам данных (Holland & Powell, Berman): в чем их различия и области применения?
4. Что такое модели активности твердых растворов и почему они критически важны для точности моделирования?
5. Какие допущения принимаются при моделировании закрытых и открытых петрологических систем?
6. Каков алгоритм подготовки входного файла (build) в программном комплексе Perple_X?
7. Что такое «псевдосекция» и чем она отличается от классической фазовой диаграммы?
8. Как в Perple_X реализуется расчет модального состава фаз и их химических параметров?
9. Каким образом выбираются уравнения состояния флюида (H₂O, CO₂) при расчете метаморфических равновесий?
10. В каких случаях для решения петрологических задач предпочтительнее использовать метод «Average P-T» в THERMOCALC?
11. Как построить изоплеты составов минералов и как их использовать для оценки P-T параметров?
12. Какие физико-химические ограничения существуют у моделей семейства MELTS (pMELTS, Rhyolite-MELTS)?
13. Опишите процедуру моделирования процесса фракционной кристаллизации в программе MELTS.
14. В чем заключаются особенности алгоритма программы PETROLOG при расчете равновесия оливин-расплав?
15. Как в программе PETROLOG учитывается влияние содержания воды на температуру ликвидуса?
16. Каковы основные возможности программного комплекса COMAGMAT для моделирования расслоенных интрузивов?
17. Как производится верификация модели кристаллизации по природным данным в COMAGMAT?
18. Опишите физический смысл модели AFC (ассимиляция плюс фракционная кристаллизация).
19. В чем преимущество программы Magma Chamber Simulator по сравнению с классическими моделями ДеПаоло?
20. Как в MCS задаются параметры «стены» (вмещающих пород) и «магмы» для расчета теплового баланса?
21. Что такое процесс RAFC и какие геологические ситуации он описывает?
22. Как по результатам моделирования в MCS определить долю ассимилированного вещества в итоговом расплаве?
23. Каковы особенности моделирования декомпрессионного плавления мантии?

24. Чем отличается плавление сухого перидотита от плавления в присутствии летучих компонентов при численном расчете?
25. Как оценить степень частичного плавления (F) по данным программных комплексов pMELTS/pHMELTS?
26. Каким образом моделируется состав рестита после извлечения расплава?
27. Какие существуют критерии подобия между результатами численного моделирования и природными объектами?
28. Источники неопределенности и ошибок в петрологическом моделировании: как их минимизировать?
29. Как использовать вариационные диаграммы (например, диаграммы Харкера) для проверки адекватности модели?
30. Каким образом результаты численного моделирования могут быть интегрированы в общую петрогенетическую модель изучаемого региона?

Шкала и критерии оценивания результатов обучения по дисциплине применяется для всех типов контроля

Оценка результатов обучения, <i>соответствующие виды оценочных средств</i>	Незачет	Зачет
Знания принципов работы современных петрологических программных комплексов и заложенные в них физико-химические модели и возможностей вычислительных методов для расчета фазовых равновесий и численного моделирования геологических процессов.)	Фрагментарные знания или отсутствие знаний	Сформированные систематические знания или общие, но не структурированные знания
Умения выбирать оптимальный программный алгоритм и вычислительный метод для решения конкретной задачи петрологического исследования и готовить входные данные и настраивать параметры расчетов в специализированном программном обеспечении	В целом успешное, но не систематическое умение или отсутствие умений	Успешное и систематическое умение или в целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности непринципиального характера)
Владения навыками работы в интерфейсах современных программ для получения количественных данных о состоянии природных систем и методами компьютерной обработки и визуализации результатов моделирования в виде диаграмм и графиков.	Наличие отдельных навыков или отсутствие навыков	Сформированные навыки (владения), применяемые при решении задач или, в целом, сформированные навыки (владения), но используемые не в активной форме

7. Ресурсное обеспечение

- Перечень основной и дополнительной учебной литературы

а) основная литература:

1. Connolly J.A.D. Perple_X: Phase Diagram Calculation, Thermobarometry, and Modeling Phase Fractionation
2. Holland T.J.B. & Powell R. An Improved and Extended Internally Consistent Thermodynamic Dataset for Phases of Petrological Interest.
3. Ghiorso M.S. & Gualda G.A. An Algorithm for the Calculation of Phase Equilibria in Magmatic Systems (MELTS)
4. Арискин А.А., Бармина Г.С. Моделирование фазовых равновесий при кристаллизации базальтовых магм
5. Bohrson W.A. et al. Magma Chamber Simulator (MCS): Thermodynamic Modeling of Magma Evolution

б) дополнительная литература: нет

- Перечень лицензионного программного обеспечения: нет
- Перечень профессиональных баз данных и информационных справочных систем: нет
- Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»: нет
- Описание материально-технической базы:
 - а) помещение – аудитория, рассчитанная на группу из 15 учащихся
 - б) оборудование – персональные компьютеры с выходом в Интернет, мультимедийный проектор, экран;

8. Язык преподавания – русский.

9. Преподаватель: к.г.-м.н. В.Д. Щербаков

10. Разработчики программы: – к.г.-м.н. В.Д. Щербаков