

«УТВЕРЖДАЮ»  
Декан геологического факультета МГУ  
академик Д.Ю. Пущаровский  
«2» сентября 2015 года



### **Рабочая программа дисциплины (модуля) Моделирование геохимических процессов**

1. Код и наименование дисциплины (модуля) **Моделирование геохимических процессов**
2. Уровень высшего образования – подготовка научно-педагогических кадров в аспирантуре.
3. Направление подготовки 05.06.01. Науки о Земле. Направленность программы Геохимия, геохимические методы поиска полезных ископаемых
4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП **Относится к вариативной части, курс по выбору в 3 семестре второго года обучения**
5. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

<b>Формируемые компетенции (код компетенции)</b>	<b>Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)</b>
УК-1	З1 (УК-1) <b>Знать</b> теоретические основы, принципы и методы термодинамического моделирования на ЭВМ природных геохимических процессов. У1 (УК-1) <b>Уметь</b> формулировать задачи термодинамического моделирования на основе

	анализа геолого-геохимической информации.
ОПК-1	31( ОПК-2) <b>Знать</b> возможности и ограничения равновесно-динамических моделей геохимических процессов У1 (ОПК-2) <b>Уметь</b> выполнять на компьютере термодинамическое моделирование многокомпонентных гетерофазных систем в широком диапазоне физико-химических условий.
ПК-2	31(ПК-2) <b>Знать</b> основные используемые вычислительные программы, методы и источники (геологические и физико-химические) получения входной информации для построения моделей. У1 (ПК-2) <b>Уметь</b> интерпретировать результаты термодинамического моделирования для целей реконструкции и расшифровки природных геологических процессов.

Оценочные средства для промежуточной аттестации по дисциплине (модулю) приведены в Приложении.

6. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:

Объем дисциплины (модуля) составляет 6 зачетных единиц, всего 218 часов, из которых 28 часов составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (8 часов занятия лекционного типа, 20 часов занятия семинарского типа (семинары, научно-практические занятия, лабораторные работы и т.п.), 16 часов групповые консультации, 12 часов индивидуальные консультации, 5 часов мероприятия текущего контроля успеваемости, мероприятия промежуточной аттестации, 160 часов составляет самостоятельная работа аспиранта.

7. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия **отсутствуют**

8. Образовательные технологии (отметить если применяется электронное обучение и дистанционные технологии). Применяется электронное обучение.

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

**Аннотация.**

Анализируются современные методы расчета равновесного состава сложных многокомпонентных гетерогенных геохимических систем и принципы численного моделирования геохимических процессов, приводятся примеры равновесно-динамических моделей эндогенных и экзогенных процессов. Обсуждается проблема тепло-массо-переноса в магматических процессах и обращается внимание на то, что только с использованием современных методов ЭВМ-моделирования можно построить корректные модели эволюции магматических систем в пространстве-времени геологических процессов. Рассматриваются методы построения ЭВМ-моделей охлаждения и затвердевания пластовых магматических тел и результаты моделирования. На этой основе обсуждаются геохимические закономерности строения расслоенных магматических комплексов основных и ультраосновных пород.

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), часы из них					Самостоятельная работа обучающегося, часы из них			
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости коллоквиумы, практические контрольные занятия и др.)*	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п..	Всего
Тема 1 Методология моделирования геохимических процессов.		2	0	0	0		2			

Тема 2 Структура пакета программ HCh: программы Main, Gibbs, Unitherm.		0	4	4	2		8	12		
Тема 3. Модели гидротермального рудообразования. Принципы и подходы при интерпретации данных	2						2	10		
Тема 4. Анализ современного состояния проблемы магматической эволюции.		4				2	6	10		
Тема 5. Кумуляционная модель кристаллизационной дифференциации	2						2	10		
Тема 6. Конвекционно-кумуляционная модель кристаллизационной дифференциации. Структура пакетов МАГМОД и КОМАГМАТ – достижения и ограничения.		4					4	10		
Тема 7. Программа КриМинал, принципы алгоритма		4					4	20		
Тема 8. Подходы к решению задачи прогноза магматогенного рудообразования	2					2	4	20		

<b>Промежуточная аттестация</b>	Зачет	2						XX		
<b>Итого</b>	8	16				4		160		

10. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы аспирантов.

11. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и дополнительной учебной литературы
- Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»
- Перечень используемых информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса, включая программное обеспечение, информационные справочные системы (при необходимости):
- Описание материально-технической базы.

а) 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. Под ред. И.Кармайкла, Х.Ойгстера. М., Мир, 1992, 534 с.
4. Жариков В.А. Основы физической геохимии. М., МГУ-Наука, 2005, 654 с.
5. 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.
6. Шваров Ю.В. HCh: новые возможности термодинамического моделирования геохимических систем, предоставляемые Windows// Геохимия, 2008, № 8, 898-903.
7. Инструкция пользователя пакета программ HCh. МГУ, 2009. – <http://www.geol.msu.ru/deps/geochems/soft/index.html>
8. Френкель М.Я., Ярошевский А.А., Арискин А.А., Бармина Г.С., Коптев-Дворников Е.В., Киреев Б.С. Динамика внутрикамерной дифференциации базитовых магм. М., Наука, 1988, 214 с.
9. Френкель М.Я. Тепловая и химическая динамика дифференциации базитовых магм. – М., Наука, 1995, 239 с.
10. Арискин А.А., Бармина Г. С. Моделирование фазовых равновесий при кристаллизации базальтовых магм. М., Наука, МАИК «Наука/Интерпериодика», 2000, 363 с.

б) 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. Коптев-Дворников Е.В., Ярошевский А.А., Френкель М.Я., Кристаллизационная дифференциация интрузивного магматического расплава. V. Оценка реальности седиментационной модели// Геохимия, 1979, №4, с. 488-508.
8. Семенов В.С., Коптев-Дворников Е.В., Берковский А.Н., Киреев Б.С., Пчелинцева Н.Ф., Васильева М.О. Расслоенный троктолит-габброноритовый интрузив Ципринга: геологическое строение, петрология// Петрология, 1995, №3, с. 1-23.
9. Коптев-Дворников Е.В., Киреев Б.С. Пчелинцева Н.Ф., Хворов Д.М. Распределение кумулятивных парагенезисов, породообразующих и второстепенных элементов в вертикальном разрезе Киваккского интрузива (Олангская группа интрузивов, Северная Карелия)// Петрология, 2001, №1, с. 3-27.
10. Бычкова Я.В., Коптев-Дворников Е.В. Ритмическая расслоенность киваккского типа: геология, петрография, петрохимия, гипотеза формирования// Петрология, 2004, №3, с. 281-302.

### **Материально-техническое обеспечение дисциплины**

#### Оборудование

Компьютерный класс на 6-7 мест, оборудованный персональными компьютерами, мультимедийный проектор и экран для демонстрации презентаций.

#### Материалы

Пакет программ NCh (автор Ю.В.Шваров, кафедра геохимии МГУ).

Пакеты программ МАГМОД и КОМАГМАТ (авторы М.Я.Френкель, А.А.Арискин, ГЕОХИ РАН, Е.В.Коптев-Дворников, кафедра геохимии МГУ)

Программа КриМинал (авторы Д.А.Бычков и Е.В.Коптев-Дворников, кафедра геохимии МГУ).

12. Язык преподавания. Русский.

13. Преподаватель (преподаватели).

Кафедра геохимии

геологического факультета

Заведующий кафедрой, профессор

М.В. Борисов

МГУ имени М.В.Ломоносова

Рабочий телефон, мобильный телефон, e-mail: 939-25-59, 8-926-247-44-80, borisov@geol.msu.ru

Кафедра геохимии

геологического факультета

Ст.научн.сотрудник

Е.В. Коптев-Дворников

МГУ имени М.В.Ломоносова

Рабочий телефон, мобильный телефон, e-mail: 939-49-62, 8-915-168-74-39, ekoptev@geol.msu.ru

**Оценочные средства для промежуточной аттестации по дисциплине (модулю) Моделирование геохимических процессов на основе карт компетенций выпускников**

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине	КРИТЕРИИ и ПОКАЗАТЕЛИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине					ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА
	1	2	3	4	5	
<i>31 (УК-1) Знать</i> теоретические основы, принципы и методы термодинамического моделирования на ЭВМ природных геохимических процессов.	отсутствие знаний	фрагментарные представления о методах термодинамического моделирования на ЭВМ природных геохимических процессов.	сформированные представления о методах термодинамического моделирования на ЭВМ природных геохимических процессов.	сформированные представления о теоретических основах, принципах и методах термодинамического моделирования на ЭВМ природных геохимических процессов.	Систематизированные о теоретических основах, принципах и методах термодинамического моделирования на ЭВМ природных геохимических процессов.	Реферат
<i>31( ОПК-2) Знать</i> возможности и ограничения равновесно-динамических моделей геохимических процессов	отсутствие знаний	фрагментарные представления о возможностях равновесно-динамических моделей геохимических процессов	сформированные представления о возможностях равновесно-динамических моделей геохимических процессов	сформированные представления о возможностях и ограничениях равновесно-динамических моделей геохимических процессов	Системные знания о возможностях и ограничениях равновесно-динамических моделей геохимических процессов, в том числе с учетом зарубежного опыта	Устный опрос
<i>31(ПК-2) Знать</i>	отсутствие знаний	фрагментарные представления об основных	сформированные представления об	сформированные представления об	Системные знания об основных используемых	Реферат с докладом на семинаре

основные используемые вычислительные программы, методы и источники (геологические и физико-химические) получения входной информации для построения моделей.		используемых вычислительных программах.	основных используемых вычислительных программах.	основных используемых вычислительных программах, методах и источниках (геологические и физико-химические) получения входной информации для построения моделей	вычислительных программах, методах и источниках (геологические и физико-химические) получения входной информации для построения моделей	
<i>У1 (УК-1) Уметь</i> формулировать задачи термодинамического моделирования на основе анализа геолого-геохимической информации.	отсутствие умений				Самостоятельно формулирует задачи термодинамического моделирования на основе анализа геолого-геохимической информации.	Устный опрос
<i>У1 (ОПК-2) Уметь</i> выполнять на компьютере термодинамическое моделирование многокомпонентных гетерофазных систем в широком диапазоне физико-химических условий.	отсутствие умений				Самостоятельно выполняет на компьютере термодинамическое моделирование многокомпонентных гетерофазных систем в широком диапазоне физико-химических условий.	Реферат
<i>У1 (ПК-2) Уметь</i> интерпретировать результаты термодинамического моделирования для целей реконструкции и расшифровки	отсутствие умений				Проводит интерпретацию результатов термодинамического моделирования для целей реконструкции и расшифровки природных	Реферат

природных геологических процессов.					геологических процессов.	
------------------------------------	--	--	--	--	--------------------------	--

### Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

При проведении самостоятельной работы предполагается обработка результатов расчетов, выполненных при проведении практических занятий (17 расчетных задач), и подготовка сообщений о свойствах исследованных систем.

#### *Тематика заданий для самостоятельной работы*

1. Ввод и редактирование данных: твердая фаза, газ; базисный ион; комплекс.
2. Расчет  $\Delta g$  для конкретных реакций.
3. Расчет параметров модели Хельгесона-Киркхама-Флауерса (HKF) по программе OptimB.
4. Расчет параметров модели Рыженко-Брызгалина (BR) по программе OptimC.
5. Расчеты в системе  $\text{SiO}_2\text{-H}_2\text{O-CO}_2$  с редактированием файлов стехиометрии и других, открытая система, расчет стабильного и метастабильного равновесий с  $\text{SiO}_2$  (am).
6. Расчеты в системе  $\text{CaCO}_3\text{-H}_2\text{O-NaCl-CO}_2$ . Влияние температуры, парциального давления  $\text{CO}_2$  и концентрации  $\text{NaCl}$  на растворимость кальцита.
7. Расчет равновесного состояния системы  $\text{MgO-SiO}_2\text{-H}_2\text{O-CO}_2\text{-NaCl}$ . 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.
8. Модель мобилизации компонентов из гранита при T-P (15-компонентная система, 30 волн взаимодействия, особенности файлов стехиометрии, формата ввода состава, состава, управляющего).
9. Модель реакционного формирования жилы выполнения при разных T-P. Различные возможности вывода результатов расчетов. Анализ результатов и построение необходимой графики.
10. Разработка оливинового геохимического термометра для программы КОМАГМАТ.
11. Моделирование влияния давления на равновесную кристаллизацию базитовых магм с использованием программы КОМАГМАТ.
12. Моделирование влияния летучести кислорода на равновесную кристаллизацию базитовых магм с использованием программы КОМАГМАТ.
13. Моделирование влияния содержания воды на равновесную кристаллизацию базитовых магм с использованием программы КОМАГМАТ.
14. Построение оптимальной модели формирования Кивакского расслоенного интрузива с использованием программы КОМАГМАТ.
15. Построение оптимальной модели формирования эффузивной серии Ключевского вулкана с использованием программы КОМАГМАТ.
16. Разработка оливинового ликвидусного термобарометра для программы КриМинал.
17. Моделирование влияния давления на равновесную кристаллизацию базитовых магм с использованием программы КриМинал. Сравнение с результатами моделирования по программе КОМАГМАТ.

### ***Перечень контрольных вопросов и задач***

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 HCh. Возможности при определении фазового состава системы. Типы создаваемых файлов.
5. База данных Unitherm. Типы вводимых данных. Главные функции и дополнительные возможности программы. Вспомогательные программы OptimB и OptimC, их предназначение.
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 CO<sub>2</sub> от 10<sup>-6</sup> до 10<sup>-1</sup> бар (шаг 0.5 порядка).
11. Что такое магматическая эволюция? В чём её отличие от дифференциации? Доказательства реальности магматической эволюции. Термодинамический и динамический аспекты магматической эволюции. Гипотезы магматической эволюции (классификация).
12. Последовательность научного решения проблемы. Типы количественных моделей (примеры).
13. Природные дифференцированные магматические комплексы. Степень их привлекательности для верификации генетических построений.
14. Начальные и граничные условия кумуляционной модели кристаллизационной дифференциации. Аксиоматика кумуляционной модели. Главные особенности динамики кумуляционной модели. Результаты верификации.
15. Конвекционно-кумуляционная модель: обоснование, способ реализации, особенности динамики, верификация.
16. Проблема ритмической расслоенности мафит-ультрамафитовых дифференцированных интрузивов. Геохимическая термометрия: принцип метода, применение для ритмической расслоенности.
17. Закономерности строения (последовательность кумулятов в вертикальном разрезе, чему она отвечает) и рудоносности расслоенных интрузивов. Принцип котектического насыщения.
18. Главные отличия модельных тел, сформировавшихся по механизмам конвекционно-кумуляционному и направленной кристаллизации. Принципиальное противоречие в строении модельных тел – продуктов направленной кристаллизации и природных расслоенных интрузивов.