

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт геохимии им. А.П. Виноградова
Сибирского отделения Российской академии наук**

УТВЕРЖДЕНА

на заседании Ученого совета ИГХ СО РАН

Протокол № 4 от 18 марта 2022 г.

Директор

ИГХ СО РАН

 д.г.-м.н. А.Б. Перепелов



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

ФТД.02 Методы физико-химического моделирования в Науках о Земле

Направление подготовки: 05.04.01 Геология

направленность "Геохимия, минералогия и геоэкология"

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очная

Иркутск 2022 г.

Содержание

1. Цели и задачи дисциплины	3
2. Место дисциплины в структуре ОПОП:	3
3. Требования к результатам освоения дисциплины	3
4. Объем дисциплины и виды учебной работы	4
5. Содержание дисциплины (модуля)	4
5.1. Содержание разделов и тем дисциплины (модуля). Все разделы и темы нумеруются	4
5.1.1. Введение. Общие сведения о законах термодинамики.	4
5.1.2. Термодинамические основы учения о метасоматозе	5
5.1.3. Реконструкции термодинамических обстановок ранних этапов формирования нефрита	5
5.1.5. Моделирование основных этапов процессов выветривания	5
5.1.8. Методы обработки и интерпретации результатов физико-химического моделирования	5
5.2. Разделы дисциплины и междисциплинарные связи с обеспечиваемыми (последующими) дисциплинами	5
5.3. Разделы дисциплин и виды занятий	5
6.1. План самостоятельной работы студентов	6
6.2. Методические указания по организации самостоятельной работы студентов	7
7. Примерная тематика курсовых работ (проектов) Ошибка! Закладка не определена.	
8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля):	7
а) основная литература	7
б) дополнительная литература	7
в) программное обеспечение	8
г) базы данных, информационно-справочные и поисковые системы	8
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины	8
10. Образовательные технологии:	9
10.1. Оценочные средства (ОС):	9
10.2. Оценочные средства текущего контроля	9
10.3. Оценочные средства для промежуточной аттестации (в форме экзамена или зачета).	9

1. Цели и задачи дисциплины

Цель изучения дисциплины - помочь студентам в освоении основ химической термодинамики и овладении методами физико-химического моделирования геохимических процессов.

Задачи дисциплины:

- ознакомление с феноменологическим подходом, который использует термодинамика для решения физико-химических проблем метаморфизма и метасоматоза;
- обучение представлению моделей геохимических процессов в терминах термодинамики, а также методам обработки экспериментальных данных;
- освоение методов физико-химического исследования геохимических процессов с целью определения условий формирования горных пород и становления континентальной коры.

2. Место дисциплины в структуре ОПОП:

Курс «Методы физико-химического моделирования в Науках о Земле» в соответствии с учебным планом для направления 05.03.01 «Геология» и федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования по направлению подготовки 05.03.01 «Геология», утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации №954 от 7.08.2014 г. относится к *вариативной части*.

Курс «Методы физико-химического моделирования в геологии» занимает важное место в подготовке геологов. Курс позволяет обобщить и практически использовать знания, полученные при освоении базовых курсов химии, физики и геологии. Физико-химическое моделирование формирует современное мировоззрение, и позволяет специалистам самостоятельно рассматривать процессы, управляющие формированием геологических тел и пород. У специалистов, практически освоивших методы моделирования, появляется возможность существенно расширить круг своих знаний в области химической термодинамики и проводить самостоятельные исследования химических процессов, происходящих при том или ином явлении.

Студент должен владеть основами химической термодинамики, способами расчета и согласования термодинамических данных, особенностями компьютерного представления геохимических моделей, принципы термодинамического моделирования в условиях неопределенности исходной термодинамической информации. Освоение данной дисциплины не возможно без изучения курсов «Химия», «Физика», «Минералогия», «Петрография», «Геохимия».

Курс предшествует освоению следующих дисциплин: «Аналитические методы экологических исследований», а также подготавливает студентов к написанию выпускной квалификационной работы.

3. Требования к результатам освоения дисциплины

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций:

способностью использовать знания в области геологии, геофизики, геохимии, гидрогеологии и инженерной геологии, геологии и геохимии горючих ископаемых, экологической геологии для решения научно-исследовательских задач (в соответствии с направленностью (профилем) подготовки) (ПК-1);

способностью в составе научно-исследовательского коллектива участвовать в интерпретации геологической информации, составлении отчетов, рефератов, библиографий по тематике научных исследований, в подготовке публикаций (ПК-3);

научно-производственная деятельность:

готовностью применять на практике базовые общепрофессиональные знания и навыки полевых геологических, геофизических, геохимических, гидрогеологических, нефтегазовых и эколого-геологических работ при решении производственных задач (в соответствии с направленностью (профилем) программы бакалавриата) (ПК-4);

В результате изучения дисциплины студент должен:

Знать:

Основы химической термодинамики.

Принципы термодинамического моделирования эндогенных и экзогенных процессов.

Уметь:

Применять методы и компьютерные программы обработки геохимической информации.

Интерпретировать полученную информацию, излагать в устной и письменной форме результаты своего исследования и аргументировано отстаивать свою точку зрения в дискуссии.

Использовать профессиональные базы данных термодинамических величин, работать с распределенными базами геолого-геохимического профиля.

Владеть:

Способами расчета и согласования термодинамических данных.

Особенностями компьютерного представления геохимических моделей.

Принципами термодинамического моделирования в условиях неопределенности исходной термодинамической информации.

4. Объем дисциплины и виды учебной работы

Вид учебной работы	Всего часов / зачетных единиц	Семестры			
		5	6	7	8
Аудиторные занятия (всего)	5				52
В том числе:				-	-
Лекции	2				2
Практические занятия (ПЗ)	3				3
Самостоятельная работа (всего)	10				10
В том числе:				-	-
<i>Моделирование геохимических процессов</i>	5				5
Вид промежуточной аттестации (зачет)	1				1
Контактная работа (всего)	3				3
Общая трудоемкость	20				20
зачетные единицы	3				3

5. Содержание дисциплины

5.1. Содержание разделов и тем дисциплины. Все разделы и темы нумеруются

5.1.1. Ведение. Общие сведения о законах термодинамики.

Предмет термодинамики. Общие замечания и основные определения. Обратимые и необратимые процессы. Объекты и методы исследования. Уравнения состояния. Математические соотношения, связывающие параметры состояния. Энергия. Внутренняя энергия. Теплота и работа. Первое начало термодинамики. Применение первого начала термодинамики к химическим реакциям. Термохимия. Энтальпия образования и энтальпия сгорания. Фазовые превращения. Правило фаз Гиббса. Стабильность фаз.

Коэффициенты активности ионов. Методы расчета активности.

Химическое равновесие. Закон действующих масс и гомогенное химическое равновесие.

Термины и символы. Источники, погрешность и согласованность термодинамической информации.

Теоретические основы расчета физико-химических равновесий в сложных многофазных гетерогенных системах.

5.1.2. Термодинамические основы учения о метасоматозе

Основные понятия метасоматической петрологии. Правило фаз и его применение в парагенетическом анализе метаморфических пород. Использование закономерностей изменения состава минералов в геотермобарометрии. Термодинамические потенциалы. Физико-химическое моделирование геохимических процессов: решение прямых и обратных задач. Рассматриваются принципы постановки задачи и способы формирования физико-химических моделей и способы определения факторов метаморфизма, его граничные условия.

5.1.3. Реконструкции термодинамических обстановок ранних этапов формирования протолита метаморфических толщ

Анализ причин изменения физико-химических условий в земной коре. Термодинамические основы учения о метаморфизме, закономерности изменения состава минералов в термодинамических расчетах. Определения исходного состава метаморфических пород. Геохимические особенности современных осадочных и вулканических пород, характерных для определенных геодинамических обстановок. Расшифровка истории развития прибайкальских метаморфических комплексов на примере физико-химических моделей. Численные примеры моделирования равновесного состава пород при погружении в зонах спрединга, контактовый метаморфизм. Решение прямых и обратных задач моделирование метаморфических процессов.

5.1.4. Моделирование основных этапов процессов выветривания

Определение с помощью физико-химических моделей роли исходно состава о субстрата в выветривания.

5.1.5. Тестовые модели природных и техногенных процессов

Приводятся примеры исследования с помощью термодинамических моделей ряда физико-химических явлений (образования тяжелых углеводородов, процессы получения солнечного кремния).

5.1.6. Методы обработки и интерпретации результатов физико-химического моделирования

Практические занятия, самостоятельное решение контрольных задач, построение графиков отражающих взаимосвязь равновесного состава и независимых параметров состояния систем.

5.2 Разделы дисциплины и междисциплинарные связи с обеспечиваемыми (последующими) дисциплинами

№ п/п	Наименование обеспечиваемых (последующих) дисциплин	№№ разделов и тем данной дисциплины, необходимых для изучения обеспечиваемых (последующих) дисциплин							
1.	Аналитические методы экологических исследований	5.1.1						5.1.7	5.1.8

5.3. Разделы дисциплин и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела	Виды занятий в часах					
		Лекц.	Практ. зан.	Семина	Лаб. зан.	СРС	Всего
1.	Ведение. Общие сведения о законах термодинамики	2	2			4	8

2.	Термодинамические основы учения о метаморфизме	4	4			6	4
3.	Основные положения термодинамики метасоматических процессов	4	4			8	16
4.	Методы обработки и интерпретации результатов физико-химического моделирования	2	2			6	10

6. Перечень семинарских, практических занятий и лабораторных работ

№ п/п	№ раздела и темы дисциплины (модуля)	Наименование семинаров, практических и лабораторных работ	Трудоемкость (час.)	Оценочные средства	Формируемые компетенции
1	2	3	4	5	6
1.	5.1.1. Общие сведения о законах термодинамики	Два начала термодинамики, термодинамический потенциал, правило фаз Гиббса	2	зачет	ПК-1,3,4
2	5.1.4 Основные положения термодинамики метасоматических процессов	Факторы равновесия при метасоматозе. Фильтрационный эффект и режим кислотности-щелочности.	4	зачет	ПК-1,3,4
3	5.1.6 Моделирование процессов контактово-реакционного метасоматоза	Формирование физико-химических моделей образования апосерпентинового нефрита	4	зачет	ПК-1,3,4

6.1. План самостоятельной работы студентов

№ нед.	Тема	Вид самостоятельной работы	Задание	Рекомендуемая литература	Количество часов
1	5.1.4 Основные положения термодинамики метасоматических процессов	реферат	Написание реферата по одной из предложенных тем	Осн. Лит.1-5 Доп. Лит. 3,4.	8
2	5.1.6 Моделирование процессов контактово-реакционного метасоматоза	Моделирование геологических процессов применением компьютерных программ	Формирование физико-химических моделей образования апокарбонатного нефрита	Осн. Лит.1-5 Доп. Лит. 1-5.	6
3	5.1.7 Тестовые модели природных и техногенных процессов	Моделирование геологических процессов применением компьютерных программ	Сформировать модель углеобразования (минеральные компоненты углей)	Осн. Лит.1-5 Доп. Лит. 1-6.	6

Примерные темы для рефератов:

1. Математические методы обработки геохимических данных и ЭВМ-моделирование
2. Представление об атмосферах и гидросферах планет как геохимических системах
3. Физико-химические факторы гидротермального минералообразования
4. Об особенностях использования термобарогеохимических методов в петрологических исследованиях
5. Реализация физико-химических законов в метасоматическом процессе

6.2. Методические указания по организации самостоятельной работы студентов

Самостоятельная работа студентов проводится для закрепления основных разделов лабораторных занятий данной дисциплины. Бакалаврам геологии прививаются навыки систематизации фактического материала, построения на этой основе выводов об условиях и механизмах образования горных пород, расшифровке истории их эволюции.

Моделирование осуществляется на программном комплексе «Селектор»

Прежде чем приступить к практическому моделированию, студент должен сформулировать ответы на следующие вопросы:

- каков химический состав исследуемого объекта
- из каких веществ (компонентов, минералов, соединений) состоит исследуемый объект?
- каковы независимые параметры существования моделируемой системы (температура, объем, давление и т.д.)?
- как взаимосвязана система с окружающей средой?
- открыта она или закрыта, и, если открыта, то в отношении каких параметров состояния?

На начальной стадии организации самостоятельной работы студент должен сформулировать задачу исследования. Затем производится описание внешних условий (независимых параметров состояния), в которой находится система, ее химический состав. Затем формируется набор фаз, образование которых вероятно в данной системе. Требуется также определить, какие параметры системы необходимо рассчитать.

затем следует формирование модели, описанное в учебном пособии (Бычинский В.А., Исаев В.П., Тупицын А.А. Физико-химическое моделирование в нефтегазовой геохимии. Ч. 2. Модели гетерогенных систем: Учебное пособие. – Иркутск: Иркут. ун-т, 2004. – 158 с.)

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля):

а) основная литература

1. *Авченко О.В., Чудненко К.В., Александров И.А.* Основы физико-химического моделирования минеральных систем / М.: Наука, 2009. – 229 с.
2. *Жариков В.А.* Основы физико-химической геохимии: учебник // Из-во Московского Университета: Наука, 2005, 654 С.
3. *Чудненко, К.В.* Термодинамическое моделирование в геохимии: теория, алгоритмы, программное обеспечение, приложения; ред. В. Н. Шарапов ; Рос. акад. наук, Сиб. отделение, Ин-т геогр. - Новосибирск : Гео, 2010. - 287 с.
4. *Шмидт Ф.К. И.В. Расина* Основы моделирования и оптимизации физико-химических процессов: учеб. пособие / Иркутский гос. ун-т, Сибирская акад. права, эконом. и упр. - Иркутск : Изд-во ИГУ, 2012. - 359 с.
5. *Френкель Д., Смит Б.* Принципы компьютерного моделирования молекулярных систем. От алгоритмов к приложениям / М. : Науч. мир, 2013. - 559 с.

б) дополнительная литература

1. *Жариков В.А.* Основы физико-химической петрологии // Из-во Московского Университета. 1976. 420 С.
2. *Дорокупец П.И., Карпов И.К.* Термодинамика минералов и минеральных равновесий. –

Новосибирск: Наука, 1984 185 С.

3. Каганович Б.М. Технология термодинамического моделирования. Редукция моделей движения к моделям покоя /Рос. акад. наук, Сиб. отд-ние, Ин-т систем энергетики им. Л. А. Мелентьева . - Новосибирск : Наука, 2010. - 236 с.
4. Зубков В.С. Термодинамическое моделирование системы С-Н-N-O-S в РТ-условиях верхней мантии / Иркутский гос. ун-т . - Иркутск : Изд-во ИГУ, 2005. - 179 с.
5. Тупицын А.А., Мухетдинова А. В., Бычинский В.А Подготовка термодинамических свойств индивидуальных веществ к физико-химическому моделированию высокотемпературных технологических процессов / Изд-во ИГУ, 2009. - 303 с.
6. Крайнов С.Р. Геохимия подземных вод/ С.Р.Крайнов, Б.Н.Рыженко, Б.Н.Швец. – М.: Наука, 2004. – 678 с.
7. Ярославцев А.Б. Основы физической химии. – М.: Научный мир, 2000. – 232 с.

в) программное обеспечение

Windows Professional XP SP3 / Windows 7/8/10, MS Office 2003-2010; моделирование производится на программном комплексе «Селектор-С»

г) базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

Научная библиотека Российского государственного университета нефти и газа им. И.М. Губкина – www.gybkin.ru

Научная библиотека МГУ – www.lib.msm.su

Библиотека Санкт-Петербургского университета – www.unilib.neva.ru

Научно-техническая библиотека СибГТУ – www.lib.sibstru.kts.ru

Российская Государственная библиотека – www.rsl.ru

Государственная публичная научно-техническая библиотека – www.gpntb.ru

Библиотека естественных наук РАН – www.ben.irex.ru

Всероссийская государственная библиотека иностранной литературы – www.libfl.ru

Библиотека Академии наук – www.spb.org.ru/ban

Национальная электронная библиотека – www.nel.ru

Библиотека ВНИИОЭНГ - www.vniioeng.mcn.ru

Российская национальная библиотека, г. Санкт-Петербург – www.nlr.ru

Геология нефти и газа – www.geoinform.ru

Газовая промышленность – www.gas-journal.ru

Нефтяное хозяйство – www.oil-industry.ru

Oil Gas Journal – www.ogj.com

Нефть России. Oil of Russia – www.press.lukoil.ru

Известия вузов «Геология и разведка» - www.msgpa.edu.ru

Мировая энергетическая политика – www.wep.ru

Минеральные ресурсы России. Экономика и управление – www.geoinform.ru

Geological Society of America Bulletin – www.geosociety.org/pubs/journals.ru

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Компьютерный класс геологического факультета (ауд. 221).

В компьютерном классе установлен электронный вариант «Атлас всех нефтегазовых месторождений мира» Millennium Energy Atlas The Petroleum Economist LTD. 2000 г.

Мультимедийный проектор, ноутбук, экран. Оверхед и серия копий фрагментов для демонстраций к лабораторным занятиям.

9. Образовательные технологии:

Применяется второй тип образовательной технологии - «преподаватель - аудитория» т.е. диалогическая форма обращения с целью мобилизации, просвещения в контексте профессиональной направленности. Основная форма общения с большой аудиторией лекция. При таком типе важную роль играет момент рациональной подачи материала и новой информации. Этот тип аудиторного обучения характерен для высшей школы. На семинарах возможно применение третьего типа «учитель - группа», с непосредственной коммуникацией между группой обучаемых.

10. Оценочные средства (ОС):

10.1. Оценочные средства для входного контроля (могут быть в виде тестов с закрытыми или открытыми вопросами).

Оценочным средством для входного контроля бакалавров геологии является собеседование.

10.2. Оценочные средства текущего контроля

Оценочные средства текущего контроля бакалавров геологии сформированы в соответствии с «Положением о балльно-рейтинговой системе Иркутского Госуниверситета». Учитывается посещаемость и успеваемость за аттестационный период.

Текущий контроль осуществляется посредством проведения устного опроса.

Оценочные средства для устного опроса

1. Основные этапы развития методов физико-химического моделирования
2. Минимизация энергии Гиббса (сравнительное описание существующих программ)
3. Принцип стабильного, метастабильного, частичного равновесия, расчет необратимой эволюции геохимических систем.
4. Методология построения модели и определение задач моделирования.
5. Постановка задачи: выбор зависимых и независимых параметров состояния системы, тип модели: система, мегасистема, реактор.
6. Выбор минимизируемого термодинамического потенциала.
7. Исходные данные: выбор независимых компонентов и химический состав системы, выбор фаз и зависимых компонентов.
8. Моделирование этапов необратимой эволюции геохимических систем.
9. Источники и базы термодинамических данных (основные требования базам ТД). Ключевые и базисные термодинамические величины (простые вещества, элементы, окислы).
10. Степень протекания процесса как характеристика относительного времени взаимодействия подсистем.
11. Построение графиков и диаграмм по результатам моделирования. Работа с базами данных.

10.3. Оценочные средства для промежуточной аттестации (в форме экзамена или зачета).

Форма итогового контроля по данной дисциплине – зачёт с оценкой.

ПРИМЕРНЫЙ СПИСОК ВОПРОСОВ К ЗАЧЕТУ

1. Понятие о моделировании и моделях в геохимии.
2. Методические и теоретические вопросы, связанные с использованием ЭВМ в физико-химическом моделировании в геохимии.
3. Основные положения химической термодинамики.
4. Предмет термодинамики. О некоторых термодинамических понятиях и терминах.

- Полезные формальные соотношения.
5. Термодинамические потенциалы, физические константы, единицы измерения, обозначения, стандартные состояния. Источники, погрешность и согласованность термодинамической информации.
 6. Теоретические основы расчета физико-химических равновесий в сложных многофазных гетерогенных системах.
 7. Основные этапы развития методов физико-химического моделирования (историческая справка).
 8. Методические и теоретические вопросы, связанные с использованием ЭВМ в физико-химическом моделировании в нефтегазовой геохимии.
 9. Минимизация энергии Гиббса (сравнительное описание существующих программ).
 10. Понятие открытых и закрытых систем по Д.С. Коржинскому
 11. Принцип стабильного, метастабильного, частичного равновесия, расчет необратимой эволюции геохимических систем.
 12. Исходные термодинамические данные. Методы термодинамической обработки экспериментальной данных в геохимии и петрологии. (Расчет по методу второго закона термодинамики, расчет по методу третьего закона термодинамики.)
 14. Свободная энергия по Гиббсу, методы расчета значений термодинамических потенциалов в условиях высоких температур, формы представления зависимости теплоемкости от температуры.
 16. Степень протекания процесса как характеристика относительного времени взаимодействия подсистем.

Автор-составитель рабочей программы:

к.г.м.н В.А. Бычинский

Настоящая программа, не может быть воспроизведена ни в какой форме без предварительного письменного разрешения отдела аспирантуры и магистратуры ИГХ СО РАН.