

ФАНО РОССИИ

**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ ГЕОХИМИИ ИМ. А.П. ВИНОГРАДОВА
СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК**

УТВЕРЖДАЮ
Директор ИГХ СО РАН

д.г.-м.н. А.Б. Перепелов
« ____ » _____ 2018 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

**ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ГЕОХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ**

Направление 05.06.01 «Науки о Земле»,
направленность 25.00.36 «Геоэкология (по отраслям)»

Код по учебному плану Б1.В.ДВ.1.1

Очная форма обучения

Иркутск, 2018

Содержание

1. Общие положения	3
1.1. Цели и задачи дисциплины.....	3
1.2. Место дисциплины в структуре ООП	3
1.3. Перечень компетенций, установленных ФГОС	3
2. Объем дисциплины и виды учебной работы	5
3. Содержание дисциплины.....	5
3.1. Содержание разделов дисциплины.....	5
3.2. Перечень лекций.....	6
3.3. Перечень семинарских занятий.....	7
3.4. Содержание самостоятельной работы.....	8
4. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	8
5. Материально-техническое обеспечение дисциплины	9
6. Образовательные технологии.....	10
7. Фонд оценочных средств.....	10
7.1. Оценивание обучающегося по дисциплине	10
7.2. Список вопросов к зачету	11

1. Общие положения

1.1. Цели и задачи дисциплины

Цель дисциплины «Термодинамическое моделирование геохимических процессов» – получить знания об основах химической термодинамики и овладеть методами физико-химического моделирования геохимических процессов.

В задачи дисциплины входит:

- ознакомить обучающихся с феноменологическим подходом, который использует термодинамика для решения физико-химических проблем в геохимии;
- обучить построению моделей геохимических процессов в терминах термодинамики, а также методам обработки экспериментальных данных.

1.2. Место дисциплины в структуре ООП

В соответствии учебным планом аспирантов, обучающихся в рамках направления «Геоэкология (по отраслям)», и Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре 05.06.01 «Науки о Земле» (уровень подготовки кадров высшей квалификации) (Приказ № 870 от 30.07.2014) дисциплина «Термодинамическое моделирование геохимических процессов» относится к вариативной части профессионального цикла.

Дисциплина базируется на знаниях и навыках, приобретенных студентами в рамках изучения дисциплин специалитета и магистратуры высших учебных заведений.

Знания и навыки, полученные аспирантами при изучении данного курса, необходимы при подготовке и написании выпускной квалификационной работы, а также при подготовке к сдаче государственного экзамена по направленности 25.00.36 «Геоэкология (по отраслям)».

Дисциплина читается для аспирантов второго года обучения.

1.3. Перечень компетенций, установленных ФГОС

Аспиранты по направлению подготовки 05.06.01 «Науки о Земле», направленность 25.00.05 «Геоэкология (по отраслям)» в результате изучения дисциплины «Термодинамическое моделирование геохимических процессов», в соответствии с

задачами профессиональной деятельности и целями основной образовательной программы, должны овладеть следующими компетенциями:

Универсальные компетенции:	
УК-1	Способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях
УК-2	Способность проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки
УК-3	Готовностью участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач
УК-4	Готовностью использовать современные методы и технологии научной коммуникации на государственном и иностранном языке
УК-5	Способностью планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития
Общепрофессиональные компетенции:	
ОПК-1	Способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий
ОПК-2	Готовность к преподавательской деятельности по основным образовательным программам высшего образования
Профессиональные компетенции:	
ПК-1	Способность использования фундаментальных основ геохимии и смежных с ней наук о Земле при решении геоэкологических задач
ПК-2	Способность оценить влияние различных типов антропогенного воздействия на природную среду
ПК-4	Способность проводить теоретические и экспериментальные геоэкологические исследования, включающие анализ изменения геосфер в целом
ПК-5	Готовность применить методы физико-технического моделирования для различных геоэкологических задач

В результате прохождения данной дисциплины обучающийся должен:

Знать:

- механизмы процессов минералообразования и рудообразования;

- принципы постановки и проведения петрографических, петрологических и геохимических исследований;

- современные методы анализа и математической обработки петрологического и петрохимического геоэкологического материала с применением компьютерного моделирования.

Уметь:

- выбирать методы компьютерного моделирования, исходя из конкретных задач геоэкологических исследований;

- обрабатывать и анализировать результаты с учётом литературных данных;

- представлять итоги выполненной работы в виде отчётов, рефератов, статей, оформленных соответствующим образом.

Владеть:

- методами компьютерного моделирования.

2. Объем дисциплины и виды учебной работы

Вид учебной работы	Трудоемкость, часов		
	Всего	Семестр	
		№3	№4
Общая трудоемкость дисциплины	108	-	108
Аудиторные занятия, в том числе:	20	-	
лекции	10	-	10
практические/семинарские занятия	10	-	10
Самостоятельная работа	88	-	88
Вид промежуточной аттестации (итогового контроля)	Зачет	-	Зачет

3. Содержание дисциплины

3.1. Содержание разделов дисциплины

1. Общие сведения о законах термодинамики.

2. Характеристика современных программных комплексов физико-химического моделирования.

3. Сведения о программном комплексе «Селектор». Особенности применения программного комплекса «Селектор» к моделированию геолого-геохимических процессов.

4. Методы и способы моделирования прикладных геохимических задач.

5. Способы расчёта, согласования и обработки термодинамической информации.

3.2. Перечень лекций

Лекция 1. Общие сведения о законах термодинамики

1.1. Предмет термодинамики. Основные определения.

1.2. Обратимые и необратимые процессы.

1.3. Объекты и методы исследования.

1.4. Математические соотношения, связывающие параметры состояния.

1.5. Энергия. Внутренняя энергия. Теплота и работа.

1.6. Первое начало термодинамики. Применение первого начала термодинамики к химическим реакциям. Термохимия. Энтальпия образования и энтальпия сгорания. Фазовые превращения. Правило фаз Гиббса. Стабильность фаз.

Лекция 2. Общие сведения о законах термодинамики (продолжение)

1.1. Термодинамическая активность. Общие замечания и определения. Коэффициенты активности ионов. Методы расчета активности.

1.2. Химическое равновесие и закон действующих масс.

1.3. Третье начало термодинамики. Тепловая теорема Нернста. Применение тепловой теоремы Нернста к реакциям между конденсированными реагентами.

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

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

Лекция 3. Характеристика современных программных комплексов физико-химического моделирования

1.1. Основные этапы развития методов физико-химического моделирования (историческая справка).

1.2. Методические и теоретические вопросы, связанные с использованием ЭВМ в физико-химическом моделировании в геохимии.

1.3. Минимизация энергии Гиббса (сравнительное описание существующих программ).

Лекция 4. Характеристика современных программных комплексов физико-химического моделирования (продолжение)

1.1. Понятие открытых и закрытых систем по Д.С. Коржинскому.

1.2. Принцип стабильного, метастабильного, частичного равновесия, расчет необратимой эволюции геохимических систем.

1.3. Обратные физико-химические задачи.

Лекция 5. Сведения о программном комплексе «Селектор»

1.1. Базы моделей.

1.2. Блок формирования моделей.

1.3. Система баз данных.

1.4. Вычислительный блок.

1.5. Визуализация и анализ полученных результатов.

1.6. Корректировка и уточнение модели.

3.3. Перечень семинарских занятий

№ п/п	Наименование работ	Трудоемкость (часы)	Оценочные средства	Формируемые компетенции
1	Исходные термодинамические данные	2	отчет	ОПК-1, ОПК-2, ПК-1, ПК-5
2	Термодинамическое моделирование геохимических процессов	2	отчет	ОПК-1, ОПК-2, ПК-1, ПК-4, ПК-5
3	Геохимические приложения: физико-химические модели природных процессов	2	отчет	ОПК-1, ОПК-2, ПК-1, ПК-4, ПК-5
4	Физико-химическая модель морской воды	2	отчет	ОПК-1, ОПК-2, ПК-1, ПК-5
5	Модель углеводородной системы	2	отчет	ОПК-1, ОПК-2, ПК-1, ПК-5

3.4. Содержание самостоятельной работы

№ п/п	Вид работ	Трудоемкость (часы)
1	Повторение лекционного материала (проработка лекций, учебной литературы)	14
2	Подготовка к практическим занятиям	10
3	Самостоятельное изучение теоретической части дисциплины	32
4	Подготовка докладов и презентаций, предложенных для самостоятельного изучения теоретической части	12
5	Подготовка к зачету	20
	Всего	88

4. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

а) Основная литература

1. Борисов М.В. Термодинамика геохимических процессов/ М.В. Борисов, Ю.Б. Шваров. – М.: Изд-во. МГУ, 1992. – 256 с.
2. Булах А.Г. Методы термодинамики в минералогии. – Л: Изд-во Недр, 1968. – 176 с.
3. Гаррелс Р.М., Крайст И.Л. Растворы, минералы, равновесия. – М.: Мир, 1968. – 386 с.
4. Исаев В.П. Термодинамические аспекты геохимии природных газов, I, II части. – Иркутск: Иркут. гос. ун-т, 1991. – 300 с.
5. Карпов И.К. Физико-химическое моделирование на ЭВМ в геохимии. – Новосибирск: Наука, 1981. – 240 с.
6. Кашик С.А. Формирование минеральной зональности в корях выветривания. – Новосибирск: Наука, 1989. – 161 с.
7. Белов Г.В. Термодинамическое моделирование: методы, алгоритмы, программы. Москва: Научный мир, 2002. – 184 с.
8. Бажин Н.М., Иванченко В.А., Пармон В.Н. Термодинамика для химиков. Москва: Химия, 2004. – 426 с.
9. Осипов А.И. Термодинамика вчера, сегодня, завтра. Часть 1. Равновесная термодинамика // Соросовский образовательный журнал, 1999, №4, с. 79-85. – Режим доступа: <http://window.edu.ru/resource/074/21074>

10. Осипов А.И. Термодинамика вчера, сегодня, завтра. Часть 2. Неравновесная термодинамика // Соросовский образовательный журнал, 1999, №5, с. 91-97. – Режим доступа: <http://window.edu.ru/resource/678/20678>

11. Cemic L. Thermodynamics in Mineral Sciences. An Introduction / L. Cemic. – Berlin Springer, 2005. – 386 p. – Библиогр.: с. 371 – 379.

б) Дополнительная литература

1. Дорогокупец П.И. Карпов И.К. Термодинамика минералов и минеральных равновесий. – Новосибирск: Наука. 1984. – 185 с.

2. Дроздовская А.А. Химическая эволюция океана и атмосферы в геологической истории Земли. – Киев: Наукова Думка, 1990. –208 с.

3. Крайнов С.Р., Рыженко Б.Н., Швец Б.Н. Геохимия подземных вод. – М.: Наука, 2004. – 678 с.

4. Ватолин Н.А., Моисеев Г.Л., Трусков Б.Г. Термодинамическое моделирование в высокотемпературных неорганических системах. Москва: Металлургия, 1994. – 352 с.

г) электронные ресурсы

1. Образовательные ресурсы Интернета <http://www.alleng.me/index.htm>

2. Единое окно доступа к образовательным ресурсам:
http://window.edu.ru/library?p_rubr=2.2.74.9.13

3. Экологический портал России и стран СНГ: <http://www.ecologysite.ru>

4. Электронно-библиотечная система <https://e.lanbook.com/>

5. Словари и энциклопедии <http://dic.academic.ru>

6. Информационные Интернет-ресурсы Геологического факультета МГУ
<http://geo.web.ru>

7. Издательство Сибирского отделения Российской Академии Наук
<http://www.sibran.ru>

8. Научная электронная библиотека <http://elibrary.ru>

5. Материально-техническое обеспечение дисциплины

При проведении лекционных и самостоятельных занятий по основным разделам дисциплины используются компьютеры, ноутбук, мультимедийный проектор, иллюстративный материал в форме презентаций. При выполнении лабораторных работ студенты используют аналитические данные (результаты спектрального количественного, микрозондового, химического, нейтронно-активационного и др. анализов) и коллекции горных пород и минералов, находящихся в собственности ИГХ СО РАН.

6. Образовательные технологии

При освоении дисциплины используются следующие сочетания видов учебной работы с методами и формами активизации познавательной деятельности аспирантов для достижения запланированных результатов обучения и формирования компетенций: на лекционных занятиях – дискуссии, IT-методы, индивидуальное обучение и обучение на основе опыта; на лабораторных занятиях – дискуссия, работа в команде, индивидуальное обучение.

Для достижения поставленных целей преподавания дисциплины реализуются следующие средства, способы и организационные мероприятия:

- изучение теоретического материала дисциплины на лекциях с использованием компьютерных и интерактивных технологий;

- самостоятельное изучение теоретического материала дисциплины с использованием Интернет-ресурсов, информационных баз, методических разработок, специальной учебной и научной литературы;

- закрепление теоретического материала при проведении лабораторных занятий с использованием демонстрационного и наглядного (графического) материалов, специальной литературы, выполнение индивидуальных заданий по диагностике природных минеральных ассоциаций.

7. Фонд оценочных средств

Промежуточная аттестация проводится:

- по окончании 4-го семестра в форме зачёта, выставляется оценка «зачтено» или «не зачтено».

7.1. Оценивание обучающегося по дисциплине

Оценка	Требования к знаниям
«зачтено»	Глубоко и прочно усвоил программный материал, исчерпывающе, последовательно, четко и логически стройно его излагает, умеет тесно увязывать теорию с практикой, свободно справляется с задачами, вопросами и другими видами применения знаний, не затрудняется с ответом при видоизменении заданий, использует в ответе материал научной литературы, правильно обосновывает принятое решение, владеет разносторонними навыками и приемами выполнения практических задач.
«зачтено»	Твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, не допускает существенных неточностей в ответе на вопрос, правильно применяет теоретические положения при решении практических

	вопросов и задач, владеет необходимыми навыками и приемами их выполнения.
«зачтено»	Имеет знания только основного материала, но не усвоил его деталей, допускает неточности, недостаточно правильные формулировки, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, испытывает затруднения при выполнении практических работ.
«не зачтено»	Не знает значительной части программного материала, допускает существенные ошибки, неуверенно, с большими затруднениями выполняет практические работы.

7.2. Список вопросов к зачету

1. Что такое термодинамическая система.
2. Что такое фаза термодинамической системы.
3. Что такое компонент термодинамической системы.
4. Что такое параметры термодинамической системы.
5. Что такое экстенсивные и интенсивные параметры термодинамической системы.
6. Как термодинамические системы подразделяются в зависимости от их внутреннего содержания.
7. Что такое изотермический процесс.
8. Что такое изобарный процесс.
9. Что такое изохорный процесс.
10. Что такое изоэнтальпийный процесс.
11. Условия равновесия для изолированной термодинамической системы.
12. Что такое химический потенциал термодинамической системы
13. Понятие о моделировании и моделях в геохимии.
14. Предмет термодинамики. О некоторых термодинамических понятиях и терминах. Полезные формальные соотношения.
15. Термодинамические потенциалы, физические константы, единицы измерения, обозначения, стандартные состояния. Источники, погрешность и согласованность термодинамической информации.
16. Основные этапы развития методов физико-химического моделирования (историческая справка).
17. Методические и теоретические вопросы, связанные с использованием ЭВМ в физико-химическом моделировании в нефтегазовой геохимии.

18. Минимизация энергии Гиббса (сравнительное описание существующих программ).
19. Понятие открытых и закрытых систем по Д.С. Коржинскому
20. Принцип стабильного, метастабильного, частичного равновесия, расчет необратимой эволюции геохимических систем.
21. Согласование, расчет, корректировка термодинамических свойств индивидуальных веществ. Выбор критерия согласования. Критический анализ и оптимальное согласование термодинамических свойств индивидуальных веществ.
22. Источники и базы термодинамических данных, ключевые и базисные термодинамические величины (простые вещества, элементы, окислы.)
23. Методология построения модели и определение задач моделирования. постановка задачи: выбор зависимых и независимых параметров состояния системы, тип модели: система, мегасистема, реактор.
24. Выбор минимизируемого термодинамического потенциала. Исходные данные: независимые компоненты и химический состав системы, выбор фаз и зависимых компонентов.
25. Геохимические приложения: физико-химические модели природных процессов.
26. Исследование термодинамической модели устойчивости системы $C-H$ в P, T - условиях земной коры.
27. Расчет состава гидротермальных растворов и растворенных в них газов в зависимости от P, T - условий и состава вмещающих пород.
28. Обработка результатов физико-химического моделирования.
29. Химические потенциалы независимых компонентов как инструмент корректировки и расчета неизвестных термодинамических потенциалов зависимых компонентов.
30. Степень протекания процесса как характеристика относительного времени взаимодействия подсистем.
31. Термодинамическое моделирование в условиях неопределенности. Погрешности исходной термодинамической информации. Задание интервалов неопределенности, критерии выбора оптимальных решений.
32. Работа с базами данных ПК "Селектор-С" расчет термодинамических свойств. Переаппроксимация уравнений теплоемкости.

Программа составлена в соответствии с приказом Министерства образования и науки РФ от 19.11.2013 №1259 «Об утверждении Порядка организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре)», на основании Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению подготовки 05.06.01 Науки о земле (уровень подготовки кадров высшей квалификации) (Приказ № 870 от 30.07.2014 г.), Порядка организации и осуществления образовательной деятельности по программам подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре (Приказ № 1259 от 19.11.2013 г. в редакции Приказа Минобрнауки РФ от 05.04.2016 № 373) и Письма Рособрнадзора от 17 апреля 2006 г. N 02-55-77ин/ак.

Составители рабочей программы:

Бычинский В.А., к.г.-м.н.
(ФИО, ученая степень, ученое звание)

(подпись)

Полетаева В.И., к.г.-м.н.
(ФИО, ученая степень, ученое звание)

(подпись)

Ответственный за аспирантуру:

Шалаев А.А., к.ф.-м.н.
(ФИО, ученая степень, ученое звание)

(подпись)

« ____ » _____ 20__ г.