

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Ордена Ленина и Ордена Октябрьской Революции Институт геохимии и
аналитической химии им. В.И. Вернадского Российской академии наук
(ГЕОХИ РАН)

ПРИНЯТО

Ученым советом ГЕОХИ РАН

Протокол № 4 от 22.04 2022 г.



УТВЕРЖДАЮ

И.О. директора ГЕОХИ РАН

д.х.н. Хамизов Р.Х.

"22" 04 2022 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
«Моделирование геохимических процессов»

Область науки: 1 Естественные науки

(шифр и наименование)

Группа научных специальностей: 1.6 – Науки о Земле и окружающей среде

(шифр и наименование)

Научная специальность: 1.6.4 «Минералогия, кристаллография. Геохимия, геохимические методы поисков полезных ископаемых»

(шифр и наименование)

Форма обучения: Очная

Вид итогового контроля: зачет

(Зачет/Дифференцированный зачет/Экзамен)

Москва 2022

1. Цели и задачи освоения дисциплины

Целью физико-химического моделирования геохимических процессов является теоретическое описание важнейших сторон этих процессов с помощью фундаментальных физических и химических законов и известных фундаментальных констант веществ для количественного понимания движущих сил и механизмов этих сложных процессов, а также прогноза их результатов.

2. Место дисциплины в структуре ОП

Дисциплина «Моделирование геохимических процессов» входит в образовательный компонент программы аспирантуры и является дисциплиной по выбору обучающихся для получения более глубоких знаний по специальности.

3. Результаты освоения программы дисциплины

В результате освоения дисциплины аспирант должен:

Знать: современные способы использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности, современное состояние науки в области геохимии, геоэкологии.

Уметь: выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования.

4. Структура и содержание дисциплины

Приведенная ниже таблица отражает распределение учебного времени, отводимого на освоение основных разделов курса. Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных единицы (72 часа).

Наименование дисциплины	Объем учебной работы (в часах)						Вид итогового контроля	
	Всего	Всего аудит.	Из аудиторных					Сам. Работа
			Лекц.	Лаб.	Прак.	КСР.		

Моделирование геохимических процессов	72	28	28	-	-		44	Зачет
---------------------------------------	----	----	----	---	---	--	----	-------

Обучение по дисциплине заканчивается прохождением промежуточной аттестации по ней в объеме 1 зачетной единицы (36 часов).

Содержание разделов дисциплины:

Содержание раздела (темы)	Количество часов
<i>Лекции</i>	
1. Цели и задачи моделирования геохимических процессов. Особенности гидротермальных и гидрогеохимических процессов как объектов термодинамического и кинетико-термодинамического моделирования. Сочетание массопереноса и химических взаимодействий. Основные принципы, постулаты и ограничения термодинамического моделирования. Минералого-геохимическая информация для выбора входных данных и проверки адекватности модели..	2
2. Основные понятия и термины термодинамики многофазных систем. Водные, газообразные, твердые растворы; единицы измерения концентраций; понятие активности; соотношения между активностью и концентрацией; химический потенциал компонента раствора; условия фазовых равновесий	4
3. Расчет химических равновесий в закрытых или частично открытых изобарно-изотермических многокомпонентных системах – ключевая составляющая термодинамического моделирования взаимодействий в системах «раствор-порода-газ». Свободная энергия системы. Постановка задачи минимизации функции свободной энергии, основные алгоритмы.	2
4. Демонстрация проведения расчетов равновесий с использованием комплекса «GEOCHEQ». Наиболее известные программы и связанные с ними базы термодинамических данных.	4
5. Кинетико-термодинамическое моделирование протекания химических взаимодействий вода-порода во времени. Лимитирующие стадии процесса. Постулаты. Кинетические уравнения реакций растворения минералов. Принцип частичного равновесия. Дизайн модели. Примеры расчета необратимой эволюции систем вода-порода.	2
6. Методы равновесной термодинамики. А) Результаты моделирования процесса равновесной конденсации газа солнечного состава и их влияние на космогонию и космохимию. В) Образование атмосферы Титана в условиях подледного океана – термодинамическая модель и следствия из нее.	2
7. Изучение эволюции вещества в ранней Солнечной системе: от пылевых кластеров до планетных тел. Математические модели коагуляции пылевых фрактальных кластеров, модели гравитационного сжатия пылевых сгущений, аккумуляции крупных тел Изучение ударных процессов в ранней Солнечной системе. Образование родительских тел метеоритов.	2
8. Моделирование тепловых процессов в космохимии. А) Гравитационная дифференциация каменных и каменно-ледяных тел. В) Моделирование тепловых процессов при изучении состава кометных ком и их соответствия составу кометных ядер.	2

<p>9. Экспериментальное моделирование геохимических процессов:</p> <p>Основные типы аппаратуры, используемые для экспериментального моделирования геохимических процессов, основные геохимические задачи, решаемые с использованием экспериментальных установок высокого давления и температуры.</p>	2
<i>Знакомство с оборудованием Института</i>	
<p>Установки высокого давления твердого сжатия типа цилиндр-поршень для опытов при давлениях (P) до 25 кбар и температурах (T) 1000- 1550 °С и типа наковальни с тороидальной лункой для опытов при P< 70 кбар и T=1200–1700°С.</p> <p>Установки высокого газового давления (типа газовая бомба) с внутренним нагревом для изучения минеральных равновесий в присутствии летучих компонентов при давлениях до 10 кбар и температурах до 1400 С.</p> <p>Высокотемпературная установка с регулируемым режимом кислорода и водорода для изучения окислительно-восстановительных реакций в силикатных системах при нормальном давлении температурах до 1400 °С</p> <p>Высокотемпературная установка с кислородными электрохимическими ячейками для измерения собственной летучести кислорода природных минералов;</p> <p>Высокотемпературная центрифуга для изучения динамического разделения магматических расплавов, кристаллов; металлических и сульфидных фаз.</p> <p>Методы подготовки образцов к экспериментам и изучения продуктов экспериментов.</p>	6

5. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы аспирантов

Самостоятельная работа подкрепляется учебно-методическим и информационным обеспечением, включающим учебники, учебно-методические пособия, конспекты лекций. Основные виды самостоятельной работы: в читальном зале библиотеки, в домашних условиях с доступом к ресурсам Интернет.

Основной контроль знаний осуществляется во время лекционных занятий (в начале или в конце занятия преподаватель задает вопросы аспирантам).

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

6.1. 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. и др. Методы геохимического моделирования и прогнозирования в гидрогеологии. М., Недра, 1988, 254 с.

3. Карпов И.К. Физико-химическое моделирование на ЭВМ в геохимии. Новосибирск, Наука. Сиб. отд-ние, 1981, 247 с.
4. Мироненко М.В., Букаты М.Б., Чарыкова М.Н., О.В. Чудаев. Глава 6. Компьютерное моделирование физико-химических процессов в системе вода-порода. В кн.: «Геологическая эволюция и самоорганизация системы вода-порода». Т. 1 Новосибирск. Изд-во Сиб. отд. РАН. с.171-220.
5. Кармайкл И., Ойгстер Х. (редакт.) Термодинамическое моделирование в геологии. Минералы, флюиды и расплавы. М., «Мир». 1992. 532 с.
6. Жариков В.А. Основы физической геохимии. М., МГУ-Наука, 2005, 654 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.
7. Меллош Г. Образование ударных кратеров: геологический процесс. М.: Мир. 1994. 336 с. (*Melosh H. J. Impact cratering - A geologic process. Oxford Monographs on Geology and Geophysics, No 11. Oxford University Press. N.Y., Clarendon Press. Oxford. 1989. 245 pp.*).
8. Термодинамическое моделирование в геологии. Под ред. И.Кармайкла, Х.Ойгстера. М., Мир, 1992, 534 с.
9. Шваров Ю.В. HCh: новые возможности термодинамического моделирования геохимических систем, предоставляемые Windows// Геохимия, 2008, № 8, 898-903.
10. Инструкция пользователя пакета программ HCh. МГУ, 2009. – <http://www.geol.msu.ru/deps/geochems/soft/index.html>
11. Термодинамическое моделирование в геологии . Минералы, флюиды и расплавы (под.ред. И.Кармайкла и Х.Ойгстера) М.:Мир. 1992, 534 с.
12. Яковлев О.И., Диков Ю.П., Герасимов М.В. Роль ударно-испарительной дифференциации на стадии аккреции Земли// Геохимия. 2000. N 10. С. 1027-1045.
13. Research techniques for high pressure and high temperature (Ed G.S. Ulmer N.Y. Springer, 1971 , 367 p.

6.2. Дополнительная литература:

1. Мироненко М.В., Золотов М.Ю. Равновесно-кинетическая модель взаимодействий вода-порода. Геохимия. 2012. №1. с. 3-9.

2. Мироненко М.В., Мелихова Т.Ю., Золотов М.Ю., Акинфиев Н.Н. (2008) GEOCHEQ_M – комплекс для термодинамического и кинетического моделирования геохимических процессов. Версия 2008 года. URL: http://www.scgis.ru/russian/cp1251/h_dgggms/1-2008/informbul-1_2008/mineral-22.pdf
3. Арискин А.А., Бармина Г. С. Моделирование фазовых равновесий при кристаллизации базальтовых магм. М., Наука, МАИК «Наука/Интерпериодика», 2000, 363 с.
4. Базилевский А.Т., Иванов Б.А., Флоренский К.П. и др. Ударные кратеры на Луне и планетах. М.: Наука, 1983. 226 с.
5. Борисов М.В. Геохимические и термодинамические модели жильного гидротермального рудообразования. М.: Научный мир, 2000, 360 с.
6. Борисов М.В., Бычков Д.А., Шваров Ю.В. Геохимические структуры полиметаллических жил выполнения и параметры гидротермального рудообразования// Геохимия, 2006, №11, 1218-1239.
7. Бычков А.Ю. Геохимическая модель современного рудообразования в кальдере Узон (Камчатка). М., ГЕОС, 2009, 124 с.
8. Френкель М.Я. Тепловая и химическая динамика дифференциации базитовых магм. – М., Наука, 1995, 239 с.
9. Кадик А.А., Лебедев Е.Б., Хитаров Н.И. Вода в магматических расплавах. М. Наука, 1971. 267 с.
10. Кадик А.А., Луканин О.А. Дегазация мантии при плавлении. М.: Наука, 1986. 98 с.
11. Яковлев О.И., Диков Ю.П., Герасимов М.В., Влотска Ф., Хут Й. Экспериментальное изучение факторов, определяющих состав лунного реголита //Геохимия. 2003. N 5. С. 467-481.

7. Образовательные технологии

При осуществлении образовательного процесса по дисциплине используются: персональный компьютер с необходимым программным обеспечением для работы устройства, а также для демонстрации презентаций MS PowerPoint.

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

- 8.1. Лекционная аудитория, оборудованная проекционным оборудованием и доступом в сеть «Интернет».
- 8.2. В специализированных лабораториях ГЕОХИ имеются в наличии:

- Установки высокого давления твердого сжатия типа цилиндр-поршень и типа наковальни с тороидальной лункой.
- Установки высокого газового давления (типа газовая бомба) с внутренним нагревом для изучения минеральных равновесий в присутствии летучих компонентов.
- Высокотемпературная установка с регулируемым режимом кислорода и водорода для изучения окислительно-восстановительных реакций в силикатных системах при нормальном давлении температурах до 1400 °С
- Высокотемпературная установка с кислородными электрохимическими ячейками для измерения собственной летучести кислорода природных минералов;
- Высокотемпературная центрифуга для изучения динамического разделения магматических расплавов, кристаллов; металлических и сульфидных фаз.

9. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

9.1. Форма контроля знаний:

9.1.1. Текущий контроль знаний в течение всего курса осуществляется с помощью контрольных вопросов.

9.1.2. Промежуточная аттестация – зачет, который проходит в устной форме по вопросам.

9.2.1. Оценочные средства (устные вопросы).

9.2.2. Перечень примерных контрольных вопросов для текущего контроля знаний:

1. Геохимические системы «раствор-порода-газовая фаза»; температура, давление, методы оценки; валовый химический состав; закрытые и открытые системы; принцип локального равновесия; допущение о большой скорости химических взаимодействий.

2. Водные, газообразные, твердые растворы; единицы измерения концентраций; понятие активности; соотношения между активностью и концентрацией; химический потенциал компонента раствора; условия фазовых равновесий

3. Система линейных уравнений баланса масс; независимые и зависимые компоненты; функция свободной энергии системы; постановка задачи расчета равновесия, эквивалентность использования свободной энергии и констант равновесия реакций; линейное и выпуклое программирование.

4. Последовательность действий при расчете равновесий в среде GEOCHEQ. Способы задания баланса систем.

5. Кинетические уравнения конгруэнтного растворения минералов; расчет материального баланса промежуточных систем через кинетику растворения; модель как последовательность частичных равновесий во времени.

9.2.3. Список вопросов для зачёта по дисциплине

1. В чем заключаются основные особенности термодинамического и кинетико-термодинамического моделирования гидротермальных и гидрогеохимических процессов?
2. Какая минералого-геохимическая информация необходима для выбора входных данных и проверки адекватности модели?
3. Термодинамические основы моделирования взаимодействий в системах «раствор-порода-газ». Постановка задачи минимизации функции свободной энергии.
4. Какие основные алгоритмы используются для создания моделей?
5. Структура и алгоритмы расчетов программного комплекса «GEOCHEQ».
6. Наиболее известные базы термодинамических данных, используемых для численного моделирования геохимических процессов.
7. Какие основные принципы заложены при кинетико-термодинамическом моделировании протекания химических взаимодействий вода-порода во времени?
8. Кинетические уравнения реакций растворения минералов. Принцип частичного равновесия.
9. Моделирование процесса равновесной конденсации газа солнечного состава, основные результаты и их значение для космогонии и космохимии.
10. Математические модели коагуляции пылевых фрактальных кластеров, модели гравитационного сжатия пылевых сгущений и аккумуляции крупных планетных тел.
11. Модельные подходы при изучении ударных процессов в ранней Солнечной системе при формировании метеоритных и планетных тел.
12. Основные принципы и алгоритмы, используемые при моделировании тепловых процессов в космохимии.
13. Какие основные типы установок высокого давления и температуры используются для экспериментального моделирования геохимических процессов?
14. Установки высокого давления твердого сжатия (устройство основных типов, используемые материалы, P-T параметры), основные геохимические задачи, решаемые с использованием этого типа экспериментальных установок.
15. Установки высокого газового давления (типа газовая бомба) с внутренним нагревом (устройство основных типов, используемые материалы, P-T параметры), основные геохимические задачи, решаемые с использованием этого типа экспериментальных установок.
16. Высокотемпературные центрифуги: устройство, параметры, основные геохимические задачи, решаемые с использованием этого типа экспериментальных установок.

17. Твердотельные электрохимические ячейки: физико-химические принципы их устройства, область применения в геохимических исследованиях.

Рабочая программа составлена в соответствии с Федеральными государственными требованиями:

- приказ Минобрнауки РФ № 951 от 20 октября 2021г. «Об утверждении федеральных государственных требований к структуре программ подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре), условиям их реализации, срокам освоения этих программ с учетом различных форм обучения, образовательных технологий и особенностей отдельных категорий аспирантов (адъюнктов)» (зарегистрирован 23.11.2021 № 65943).

Автор (ы): кандидат геолого-минералогических наук Мироненко Михаил
Викторович
доктор химических наук Дорофеева Вера Алексеевна
доктор геолого-минералогических наук Луканин Олег Александрович

ЛИСТ РЕГИСТРАЦИИ ИЗМЕНЕНИЙ

№ листа изменений или наименование элемента приложения	№ протокола Ученого Совета (секции Уч. Совета)	Дата заседания Ученого Совета (секции Уч. Совета)	Всего листов в документе	Подпись зам. директора по научной работе