

ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Наименование дисциплины

МОДЕЛИРОВАНИЕ ГЕОХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ НА ЭВМ

Рекомендуется для направления подготовки

020700 «Геология»

магистерская программа «Геохимия»

Квалификация (степень) выпускника

магистр

1. Цели и задачи освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины «Моделирование геохимических процессов на ЭВМ» является обеспечение подготовки магистров в области новейших технологий расчета равновесного состава сложных многокомпонентных гетерогенных геохимических систем, включая освоение методов численного моделирования на ЭВМ геохимических процессов, на основе современных теоретических и методических представлений и практических примеров решения геохимических задач широкого спектра.

2. Место дисциплины в структуре ООП:

Дисциплина «Моделирование геохимических процессов на ЭВМ» находится в блоке профильных дисциплин вариативной части магистерской программы Геохимия. Дисциплина «Моделирование геохимических процессов на ЭВМ» логически и содержательно-методически взаимосвязана с дисциплинами базовой части профессионального цикла бакалавра по профилю Геохимия (Минералогия, Кристаллохимия, Основы физической геохимии, Геохимические методы поисков полезных ископаемых, Петрография с кристаллооптикой, Геология полезных ископаемых, Экспериментальная геохимия, Термодинамика геохимических процессов и др.)

3. Требования к результатам освоения дисциплины:

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций:

- способность к поиску, критическому анализу, обобщению и систематизации научной информации, к постановке целей исследования и выбору оптимальных путей и методов их достижения (М-СК-2);
- способность самостоятельно ставить конкретные задачи научных исследований в области в области геологии, геохимии, экологической геологии и решать их с помощью современной аппаратуры, оборудования, информационных технологий, с использованием новейшего отечественного и зарубежного опыта (М-ПК-2);
- способность свободно и творчески пользоваться современными методами обработки и интерпретации комплексной геохимической и эколого-геологической информации для решения научных и практических задач, в том числе находящихся за пределами непосредственной сферы деятельности (М-ПК-6);

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

знать: теоретические основы, принципы и методы термодинамического моделирования на ЭВМ природных геохимических процессов, возможности и ограничения равновесно-динамических моделей геохимических процессов, основные используемые вычислительные программы, методы и источники (геологические и физико-химические) получения входной информации для построения моделей.

уметь: формулировать задачи термодинамического моделирования на основе анализа геолого-геохимической информации, выполнять на компьютере термодинамическое моделирование многокомпонентных гетерофазных систем в широком диапазоне физико-химических условий, интерпретировать результаты термодинамического моделирования для целей реконструкции и расшифровки природных геологических процессов.

владеть: навыками и приемами работы с пакетом программ термодинамического моделирования HCh, с пакетами моделирования магматических процессов МАГМОД, КОМАГМАТ, КриМинал, включая поиск и подготовку исходной информации для моделирования, проведение циклов вычислений, обработку и графическое отображение результатов моделирования.

4. Структура и содержание дисциплины «Моделирование геохимических процессов на ЭВМ».

Общая трудоемкость дисциплины составляет 6 зачетных единиц, 216 часов.

Структура дисциплины

№ п/п	Раздел дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов (трудоемкость в часах)				Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра) Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
				Лекции	семинары	практ. занятия, лаб. работы	самост. работа	
1	Методология моделирования геохимических процессов.	2	1			5	5	Собеседование
2	Структура пакета программ HCh: программы Main, Gibbs, Unitherm.	2	2-3			10	25	Прием практических заданий и собеседование
3	Модели гидротермального рудообразования. Принципы и подходы при интерпретации данных	2	4-6			15	48	Прием практических заданий и собеседование
4	Анализ современного состояния проблемы магматической эволюции.	2	7			5	5	Собеседование
5	Кумуляционная модель кристаллизационной дифференциации	2	8			5	5	Собеседование
6	Конвекционно-кумуляционная модель кристаллизационной дифференциации. Структура пакетов МАГМОД и КОМАГМАТ – достижения и ограничения.	2	9-10			10	40	Прием практических заданий и собеседование
7	Программа КриМинал, принципы алгоритма	2	11			5	20	Прием практических заданий и собеседование
8	Подходы к решению задачи прогноза магматогенного рудообразования	2	12			5	8	Прием практических заданий и собеседование

Содержание дисциплины

Методология моделирования геохимических процессов

Модели и их соотношения, локальные равновесия, равновесия и динамика, расчет равновесного состояния и моделирование процесса, задачи моделирования с примерами.

Расчет равновесий. Алгоритмы расчета, их классификация и возможности; данные для расчетов и их источники; результаты расчетов; особенности интерпретации результатов, типичные затруднения.

Постановка геологической модели. Исходные данные и их контроль (породы, растворы, минералы); альтернативные модели; набор элементов; упрощения модели.

Формирование физико-химической модели. Термодинамические данные и их выбор (включение и исключение фаз); коэффициенты активности; источники данных. Верификация результатов моделирования и анализ этих данных; корректировка моделей. Параметры - T, P, отношение порода/вода и др.

Структура пакета программ HCh

Структура. Программы Main, Unitherm (UT), Gibbs. Принципы их взаимодействия. Директория HCh – типы данных в ней.

База термодинамических данных Unitherm. Типы веществ в базе и форматы ввода информации: встроенные, базисные частицы, комплексы, чистые фазы, реальные газы. Файлы *.bin и *.ref. Способы расчета данных в базе (просмотр ref и инструкции). Создание рабочей базы данных. Работа с базой и просмотр всех опций. Дополнительные возможности базы данных Unitherm: условные значки в записях названий или формул (.g; .l; запятые и пробел), реальный и идеальный газ, подмножество базы данных, пользовательский элемент, расчет направления реакций. Расчеты различных термодинамических величин: f, g реакции. Способы вывода данных.

Дополнительные программы - OptimB и OptimC. Их назначение и использование.

Принципы работы программы Gibbs. Опции для управления расчетами. Размещение основных программ и рабочих баз и файлов. Типы создаваемых файлов – стехиометрии, формата ввода составов, состава, управляющего (*.st, *.bl, *.in, *.ct).

Формирование задачи - индивидуальные фазы, водный раствор, жидкость, твердый раствор, вполне подвижный компонент, газовый раствор (их характеристика). Файл *.stg.

Расчет равновесного состояния системы – диаграммы растворимости. Формирование файлов: *.st, *.bl, *.in и *.ct. Расчет отдельных точек и сечении многомерной диаграммы. Вывод результатов (*.lst и *.re). Работа с данными. Файл *.tex. Ввод данных в Excel. Построение графиков. Анализ системы.

Равновесно-динамические задачи - мобилизация компонентов из вмещающих пород и модель формирования полиметаллических жил при разных T и P. Создание файлов: *.st, *.bl, *.in, *.ct. Предварительный просмотр результатов. Вывод результатов и типы выходных данных. Остановка счета и его продолжение. Возможности внесения изменений. Работа с результатами. Опции счета. Ввод данных в Excel. Построение графиков и анализ данных.

Модели рудообразования.

Геологическая, физико-химическая, математические модели. Методические приемы моделирования. Результаты. Верификация результатов моделирования. Принципы и подходы при интерпретации данных.

Современное состояние изученности земного магматизма.

Характеристика разнообразия изверженных пород Земли. Анализ гипотез магматической эволюции. Невозможность решения проблемы магматической эволюции на понятийном уровне. Необходимость количественного моделирования.

Характеристика моделей.

Различные типы моделей: статические – динамические, физические – математические, аддитивные – системные. Обоснование выбора динамической математической системной модели. Выделение в проблеме магматической эволюции двух аспектов – термодинамического и динамического.

Модель оседания кристаллов в застойной магме с примитивной термодинамикой.

Пространственно-временная структура кумуляционной модели. Основные характеристики модельных тел, сформировавшихся по механизму кристаллизации и оседания кристаллов в застойной магме. Верификация на материале дифференцированных силлов Сибирской платформы. Черты сходства и различия природных и модельных тел. Обоснование перехода к модели следующего поколения – конвекционно-кумуляционной.

Модель оседания кристаллов в конвектирующей магме с примитивной термодинамикой.

Пространственно-временная структура конвекционно-кумуляционной модели. Доказательство реалистичности этой модели для дифференцированных долеритовых силлов. Возможность и целесообразность перехода к моделям, реалистично воспроизводящим равновесную кристаллизацию многокомпонентных силикатных систем.

Конвекционно-кумуляционная модель с реалистичной термодинамикой.

Выведение системы уравнений ликвидусных термобарометров с использованием двухрешёточной модели строения силикатных расплавов. Моделирование равновесий силикатных базитовых расплавов с минералами – твёрдыми растворами: оливином, авгитом, ортопироксеном, пижонитом, плагиоклазом, а также магнетитом и ильменитом.

Верификация нового поколения конвекционно-кумуляционной модели (КОМАГМАТ) на материале долеритовых силлов и крупных расслоенных интрузивов. Перспективные пути решения проблем ритмической расслоенности и магматогенного оруденения (медно-никелевого, хромититового, платинометального и титано-ванадиевого).

5. Рекомендуемые образовательные технологии

При реализации программы дисциплины «Моделирование геохимических процессов на ЭВМ» используются следующие технологии. При проведении практических занятий применяется компьютерная графика (ПК и компьютерный проектор), разбор примеров применения методов компьютерного моделирования при решении различных задач геологии, технологических процессов, экспериментальных исследований и др., а также – интерактивная форма занятий в виде деловых игр на конкретном материале. При проведении занятий используется компьютерный класс кафедры геохимии, широкий набор специализированных программ по подготовке данных для моделирования и проведения расчетов в различных системах.

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

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 (твёрдые фазы, растворы).
4. Структура программного комплекса NCh. 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 CO₂ от 10⁻⁶ до 10⁻¹ 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.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины:

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. Коптев-Дворников Е.В., Киреев Б.С. Пчелинцева Н.Ф., Хворов Д.М. Распределение кумулятивных парагенезисов, породообразующих и второстепенных элементов в вертикальном разрезе Кивакского интрузива (Олангская группа интрузивов, Северная Карелия)// Петрология, 2001, №1, с. 3-27.
9. Бычкова Я.В., Коптев-Дворников Е.В. Ритмическая расслоенность кивакского типа: геология, петрография, петрохимия, гипотеза формирования// Петрология, 2004, №3, с. 281-302.
10. Коптев-Дворников Е.В., Арьяева Н.С., Бычков Д.А. Уравнение термобарометра для описания сульфид-силикатной ликвации в базитовых системах // Петрология, 2012, Т. 20, № 5, С. 1–18.

в) программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

Пакет программ HCh (автор Ю.В.Шваров, кафедра геохимии МГУ).
<http://www.geol.msu.ru/deps/geochems/soft/index.html>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

8.1. Оборудование

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

8.2. Материалы

Пакет программ HCh (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).

9. Краткое содержание дисциплины (аннотация)

Анализируются современные методы расчета равновесного состава сложных многокомпонентных гетерогенных геохимических систем и принципы численного моделирования на ЭВМ 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.

10. Учебно-методические рекомендации для обеспечения самостоятельной работы студентов

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 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 SiO_2 (am).
6. Расчеты в системе $\text{CaCO}_3\text{-H}_2\text{O-NaCl-CO}_2$. Влияние температуры, парциального давления CO_2 и концентрации 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.
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 Киваккского 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.

Разработчики:

Кафедра геохимии
геологического факультета
МГУ имени М.В.Ломоносова
Рабочий телефон, мобильный
телефон, (495)939-25-59, 8-926-
247-44-80, e-mail:

borisov@geol.msu.ru

Заведующий кафедрой М.В. Борисов

Кафедра геохимии
геологического факультета
МГУ имени М.В.Ломоносова
Рабочий телефон, мобильный
телефон, e-mail: (495) 939-49-62,
8-915-168-74-39

ekoptev@geol.msu.ru

Ст.научн.сотрудник

Е.В. Коптев-Дворников

Эксперты:

Российский государственный
геологоразведочный университет
им. Серго Орджоникидзе (МГРИ-
РГГРУ)

Профессор

Н.Н. Акинфиев

Кафедра геохимии
геологического факультета
МГУ имени М.В.Ломоносова

Доцент

А.Ю. Бычков

Программа одобрена на заседании Ученого совета Геологического факультета МГУ
(протокол № от)