



МИНОБРНАУКИ РОССИИ

федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«ИРКУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

ФГБОУ ВО «ИГУ»

Кафедра геологии нефти и газа



УТВЕРЖДАЮ

Декан геологического факультета

С.П. Примины
С.П. Примины

25 апреля 2022 г.

Рабочая программа дисциплины

ЭЛК.ДВ.04.02 Моделирование бассейнов и нефтегазоносных систем

Специальность **21.05.02 Прикладная геология**

Специализация **Геология месторождений нефти и газа**

Квалификация выпускника - **Горный инженер-геолог**

Форма обучения **заочная**

Согласовано с УМК геологического факультета

Протокол № *4* от «*22*» апреля 2022 г.

Председатель
Летунов С.П. *Летунов*

Рекомендовано кафедрой:

Протокол № *8*

От «*15*» апреля 2022 г.

Зав. кафедрой
С.П. Примины *Примины*

Иркутск 2022 г.

Содержание

	стр.
I. Цели и задачи дисциплины	3
• Место дисциплины в структуре ОПОП.	3
II. Требования к результатам освоения дисциплины	3
III. Содержание и структура дисциплины	5
4.1 Содержание дисциплины, структурированное по темам, с указанием видов учебных занятий и отведенного на них количества академических часов	5
4.2 План внеаудиторной самостоятельной работы обучающихся по дисциплине	7
4.3 Содержание учебного материала	8
4.3.1 Перечень семинарских, практических занятий и лабораторных работ	12
4.3.2. Перечень тем (вопросов), выносимых на самостоятельное изучение в рамках самостоятельной работы студентов	13
4.4. Методические указания по организации самостоятельной работы студентов	14
4.5. Примерная тематика курсовых работ (проектов)	14
• V. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	14
• а) перечень литературы	14
б) дополнительная литература	14
в) список авторских методических разработок	14
г) базы данных, поисково-справочные и информационные системы	14
VI. Материально-техническое обеспечение дисциплины	15
6.1. Учебно-лабораторное оборудование:	15
6.2. Программное обеспечение:	15
6.3. Технические и электронные средства обучения:	16
VII. Образовательные технологии	16
VIII. Оценочные материалы для текущего контроля и промежуточной аттестации	17

I. Цели и задачи дисциплины:

Цели:

- освоение теоретических основ геолого-геохимического метода анализа углеводородных систем; - приобретение практических навыков применения метода бассейнового моделирования при решении региональных, поисковых и разведочных задач в нефтегазовой геологии.

Задачи:

- изучить основы сбора и подбора необходимого и достаточного исходного материала (данных) для проведения бассейнового моделирования;
- изучить алгоритмы построения геолого-геохимических моделей
- ознакомление студентов с основами термодинамики для решения физико-химических проблем в геохимии;
- обучение представлению моделей геохимических процессов в терминах термодинамики, а также методам обработки экспериментальных данных;
- анализ геологической информации, интерпретация результатов и формулировка выводов.

II. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОПВО

2.1. Учебная дисциплина ЭЛК.ДВ.04.02 Моделирование бассейнов и нефтегазоносных систем относится к части элективных дисциплин.

2.2. Для изучения данной учебной дисциплины необходимы знания, умения и навыки, формируемые предшествующими дисциплинами: «Химия», «Общая геология», «Физическая химия».

2.3. Перечень последующих учебных дисциплин, для которых необходимы знания, умения и навыки, формируемые данной учебной дисциплиной: «Новые технологии при разведке и добыче нефти и газа».

III. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Процесс освоения дисциплины направлен на формирование компетенций в соответствии с ФГОС ВО и ОПВО по данному направлению подготовки 21.05.02 Прикладная геология:

Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с индикаторами достижения компетенций

Компетенция	Индикаторы компетенций	Результаты обучения
ПК-1 <i>Способен осуществлять сбор, анализ, интерпретацию, систематизацию и обобщение геолого-геофизической, геохимической и промысловой информации.</i>	ИДК_{ПК-1.1} <i>Осуществляет сбор и структурирование поступающей промысловой информации</i>	Знать правила постановки и проведения геолого-геохимических исследований Уметь обрабатывать полученные результаты, анализировать и осмысливать их с учётом имеющихся литературных данных; - представлять итоги выполненной работы в виде отчётов, рефератов, статей, оформленных соответствующим образом. Владеть: навыками

		<p>проведения эксперимента и методами обработки его результатов</p>
	<p>ИДК_{ПК}-1.2 <i>Проводит обработку и интерпретацию геолого-геофизической, геохимической и промысловой информации</i></p>	<p>Знать принципы постановки и проведения геолого-геохимических исследований; Уметь решать стандартные задачи профессиональной деятельности на основе методов равновесной термодинамики с применением технологии компьютерного моделирования физико-химических процессов протекающих в осадочных бассейнах -Владеть современными методами анализа и математической обработки петрологического и петрохимического материала с применением компьютерного моделирования</p>

IV. СОДЕРЖАНИЕ И СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

**Объем дисциплины составляет 4 зачетные единицы, 144 часа,
в том числе 0,1 зачетные единицы, 5 часов на зачет**

Из них реализуется с использованием электронного обучения и дистанционных образовательных технологий 0 часов

Из них 0 часа – практическая подготовка

Форма промежуточной аттестации: зачет

4.1 Содержание дисциплины, структурированное по темам, с указанием видов учебных занятий и отведенного на них количества академических часов

№ п/п	Раздел дисциплины/темы	Семестр	Всего часов	Из них практическая подготовка обучающихся	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу обучающихся, практическую подготовку и трудоемкость (в часах)			Самостоятельная работа	Формы текущего контроля успеваемости; Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
					Контактная работа преподавателя с обучающимися				
					Лекции	Семинарские /практические /лабораторные занятия	Консультации		
1	Раздел 1. Введение. Основы бассейнового моделирования – цели, возможности и ограничения, нефтяная система и ее элементы.	5	21			1		20	Устный опрос
2	Раздел 2. Типы осадочных бассейнов, история их развития и термической эволюции)		23		2	1		20	Устный опрос
3	Раздел 3. Общие сведения о законах термодинамики.	5	22			2		20	Устный опрос

№ п/п	Раздел дисциплины/темы	Семестр	Всего часов	из них практическая подготовка обучающихся	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу обучающихся, практическую подготовку и трудоемкость (в часах)			Самостоятел ьная работа	Формы текущего контроля успеваемости; Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
					Контактная работа преподавателя с обучающимися				
4	Раздел 4. Характеристика современных программных комплексов физико-химического моделирования.	5	24		2	2		20	Устный опрос
5	Раздел 5. Сведения о программном комплексе «Селектор».		22			2		20	Устный опрос
6	Раздел 6. Методы и способы моделирования прикладных геохимических задач.		27			2		25	Устный опрос
Итого часов			139		4	10		125	

План внеаудиторной самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

Семестр	Название раздела, темы	Самостоятельная работа обучающихся			Оценочное средство	Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы
		Вид самостоятельной работы	Сроки выполнения	Трудоемкость (час.)		
3	Раздел 1. Введение. Основы бассейнового моделирования – цели, возможности и ограничения, нефтяная система и ее элементы.	Работа с литературными источниками	в течении семестра	20	Устный опрос	Указано в разделе V настоящей программы
	Раздел 2. Типы осадочных бассейнов, история их развития и термической эволюции)	Работа с литературными источниками	в течении семестра	20	Устный опрос	Указано в разделе V настоящей программы
	Раздел 3. Общие сведения о законах термодинамики.	Работа с литературными источниками	в течении семестра	20	Устный опрос	Указано в разделе V настоящей программы
	Раздел 4. Характеристика современных программных комплексов физико-химического моделирования.	Работа с литературными источниками	в течении семестра	20	Устный опрос	Указано в разделе V настоящей программы
	Раздел 5. Сведения о программном комплексе «Селектор».	Работа с литературными источниками	в течении семестра	20	Устный опрос	Указано в разделе V настоящей программы
	Раздел 6. Методы и способы моделирования прикладных геохимических задач.	Работа с литературными источниками	в течении семестра	25	Устный опрос	Указано в разделе V настоящей программы
Общая трудоемкость самостоятельной работы по дисциплине (час)				125		
Из них объем самостоятельной работы с использованием электронного обучения и дистанционных образовательных технологий (час)				0		

Содержание учебного материала

Раздел 1. Введение. Основы бассейнового моделирования – цели, возможности и ограничения, нефтяная система и ее элементы.

Раздел 2. Типы осадочных бассейнов, история их развития и термической эволюции).

Раздел 3. 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.

Термодинамическая активность. 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.

Раздел 4. Характеристика современных программных комплексов физико-химического моделирования.

Основные этапы развития методов физико-химического моделирования (историческая справка). Методические и теоретические вопросы, связанные с использованием ЭВМ в физико-химическом моделировании в геохимии. Минимизация энергии Гиббса (сравнительное описание существующих программ) Понятие открытых и закрытых систем по Д.С. Коржинскому. Принцип стабильного, метастабильного, частичного равновесия, расчет необратимой эволюции геохимических систем. Обратные физико-химические задачи.

Современное термодинамическое моделирование [Акинфиев, 1995; Борисов, 2000; Гричук, 2000; Белов, 2002; Геологическая эволюция..., 2005; Пальянова, Колонии, 2007; Гаськова, Букаты, 2008; Рыженко, 2008; Karpov et al., 1997, 2002; Mironenko et al., 2000; Kulik, 2006; Dolejs, Wagner, 2008] представляет основу компьютерного исследования процессов физико-химического взаимодействия и превращения вещества в природных и технологических системах, включая частично равновесные и метастабильные процессы растворения, отложения, кристаллизации, фракционирования, ассимиляции, смешения, контаминации, испарения, конденсации, горения, взрыва. Ключевое значение в таких разработках принадлежит вычислительным алгоритмам и методам, с помощью которых рассчитываются химические равновесия с определением компонентного и фазового состава сложных многокомпонентных, многофазовых и многоагрегатных природных систем.

Исторически сложилось так, что в настоящее время существует два параллельно развиваемых подхода в постановке и решении задач расчета химических равновесий. Первый основан на формализме стехиометрических уравнений реакций и константах их равновесия - расчет по реакциям, второй - на привлечении математического аппарата выпуклого программирования - метод минимизации. Расчет по реакциям использовался химиками и технологами еще в докомпьютерную эру развития науки. С появлением компьютеров различные схемы расчетов по реакциям были формализованы в виде обобщенных математических моделей химических равновесий [Brinkley, 1946, 1947; Boll, 1960; Bethke, 1996], разработаны вычислительные алгоритмы и составлены компьютерные программы. Среди зарубежных геохимиков программы, в основу которых положен метод констант равновесия, получили широкое распространение при изучении процессов взаимодействия "вода - горные породы", главным образом благодаря пионерным работам Г. Хельгесона [Helgeson, 1967, 1968, 1969, 1970; Helgeson et al., 1969, 1970]. Им к началу 1970-х гг. были разработаны математическая модель, вычислительный алгоритм, методы

формирования базы термодинамических данных с участием компонентов водных растворов электролита; создана компьютерная программа и (что, по-видимому, главное) показан принципиально новый подход к моделированию физико-химических процессов с учетом их необратимости на примере модели образования метасоматической зональности.

Большинство же зарубежных геохимиков и петрологов в подавляющем числе случаев используют серийные рабочие компьютерные программы расчета взаимодействия типа "вода – горные породы", основанные на алгоритмах расчета химических равновесий по константам стехиометрических уравнений реакций [Kharaka et al., 1988; Plummer, 1992; Nordstrom et al., 1993; Parkhurst, Appelo, 1999]. Нельзя сказать, что о возможностях метода минимизации зарубежные геохимики информированы в меньшей мере, чем о расчетах по реакциям. Ими опубликованы работы в ведущих геохимических и петрологических журналах, в которых отмечаются преимущества метода минимизации, предложены различные вычислительные алгоритмы, созданы компьютерные программы, работа этих программ продемонстрирована учебными и тестовыми примерами [Eriksson, 1971, 1974; Eriksson, Rozen, 1973; Harvie, Weare, 1980; Ghiorso, 1985; Capitani, Brown, 1987; Harvie et al., 1987]. С помощью методов минимизации предприняты попытки решения отдельных задач геохимии и петрологии [Heald, Naughton, 1962; Shimazu, 1967; Holloway, Reese, 1974; Saxena, Eriksson, 1983; Harvie et al., 1984]. Среди этих работ необходимо в качестве исключения выделить и отметить замечательные исследования Марка Гиорсоу и Яна Кармайкла [Ghiorso, Carmichael, 1980, 1985; Ghiorso, 1985, 1987]. В течение первой половины 1980-х гг. они осуществили беспрецедентную научную программу сквозного решения проблемы компьютерного моделирования эволюционных физико-химических процессов в системах с участием магм основного состава. Программа включает создание базы входных термодинамических данных, в том числе компоненты расплава, теоретическое обоснование и математическую постановку, создание вычислительного алгоритма и программы, и в итоге получены нетривиальные геохимические результаты, дающие новое, более глубокое понимание и объяснение термодинамическим механизмам селективной магматической дифференциации и взаимодействия основных интрузий с вмещающими породами.

Но в целом, даже с учетом работ М. Гиорсоу и Я. Кармайкла, по сравнению с масштабами распространения компьютерных программ расчета равновесий по константам равновесия программы на основе алгоритмов минимизации распространены за рубежом в существенно меньшей степени. Они применяются эпизодически, от случая к случаю, в основном теми, кто их создает.

Раздел 5. Сведения о программном комплексе «Селектор».

Селектор-Windows является интегрированной модульной системой открытой архитектуры. Полный комплект *Селектор* представляет совокупность модулей, объединенных с информационной средой в единый комплекс. Макроструктура *Селектор* включает следующие основные функциональные и информационные блоки.

1. Базы моделей. Файлы готовых к использованию моделей: тестовые, учебные, эталонные, рабочие модели наиболее распространенных систем типа морской воды, воды озера Байкал, атмосферы, углеводородной системы С-Н-О-N. Если решаемой проблеме удастся сопоставить соответствующую модель из базы, то это может значительно ускорить начальный процесс формирования и отладки модели. База открыта к дополнению новых моделей исследователя.

2. Блок формирования моделей. Производится сборка физико-химических моделей различного типа, включая многорезервуарные мегасистемы. Исследователь задает список потенциально возможных в равновесии фаз и зависимых компонентов и состав системы по независимым компонентам, а также согласно входным директивам -сценарий моделирования. Модель может включать следующие виды сценариев:

1. В зависимости от условий существования выбирается один из шести термодинамических потенциалов: $G(T,P)$ - потенциал Гиббса; $A(T,V)$ - потенциал

Гельмгольца; $-S(H,P)$ - изобарно-изоэнтальпийный потенциал; $-S(U,V)$ - изохорно-изоэнергетический потенциал; $U(S,V)$ - изохорно-изоэнтروпийный потенциал;

$H(S,P)$ - изобарно-изоэнтропийный потенциал. Кроме того, можно максимизировать потенциал Гиббса, меняя знак на противоположный у линейных членов функции $G(T,P)$.

2. Выбирается тип модели, в зависимости от характера равновесия: полного, метастабильного или частичного.

3. В случае моделирования сложных моделей, состоящих из нескольких систем, формируются многорезервуарная модель.

4. Если необходимо оценить влияние неопределенности входных термодинамических данных, химического состава системы по независимым компонентам, коэффициентов активности зависимых компонентов, температур и/или давления на конечное решение, задается модель расчета в условиях неопределенности.

5. Решение обратной задачи определения температуры и давления по известному вектору состава зависимых компонентов подразумевает формирование модели геотермобарометра.

3. Система баз данных. Включает несколько баз исходных термодинамических данных. Представляет собой компьютерный справочник с программными средствами управления, расчета термодинамических характеристик в широкой области температур и давлений, проверки и сопоставления данных из различных источников, а также обработки, корректировки и визуализации термодинамических данных компонентов водного раствора электролита, газов, жидких углеводородов и конденсированных фаз. Система баз данных постоянно совершенствуется. Она всегда доступна к расширению. Систематически производится ее пополнение и корректировка.

4. Вычислительный блок. В этом блоке рассчитываются термодинамические параметры в зависимости от температуры, давления и коэффициентов активности и/или фугитивности. В расчетах изотермических изменений термодинамических функций используются: уравнения зависимости изменения объема конденсированных фаз от температуры и давления в базах данных Helgeson et al., 1978, Berman, 1988, Holland and Powell, 1990;

уравнения состояния Ли-Кеслера жидких и газообразных углеводородов; полуэмпирические состояния газов в приведенных параметрах, охватывающие большую область высоких температур и давлений. Термодинамические свойства компонентов водного раствора в области до 1000 °C и 5000 бар рассчитываются по модифицированной модели НКФ Хельгесона - Киркхена - Флауэрса (Helgeson et al., 1981; Tanger and Helgeson, 1988). Коэффициенты активности компонентов водного раствора электролита вычисляются по уравнению Дебая-Хюккеля в модификации Хельгесона (Helgeson et al., 1981). Расчет равновесного фазового и компонентного состава системы осуществляется путем минимизации изобарно-изотермического потенциала (Karпов et al., 1997, 2002). В вычислительном блоке реализован один из самых эффективных алгоритмов выпуклого программирования - метод внутренних точек (МВТ) с одно- и двухсторонними ограничениями на искомые величины. МВТ - одна из модификаций метода возможных направлений Зойтендейка. Выбор начального приближения осуществляется автоматически, с применением модифицированного симплекс-метода. По сравнению с другими применяющимися у нас и за рубежом алгоритмами минимизации, МВТ демонстрирует исключительно высокую эффективность в решении задач химической термодинамики, поставленных как задачи выпуклого программирования.

5. Визуализация и анализ полученных результатов. Специальный программный модуль позволяет выводить на экран табличное и графическое представление результатов моделирования, а также, при необходимости, экспортировать данные в другие программы обработки текстовой и графической информации в среде Windows.

б. *Корректировка и уточнение модели* . На этом шаге делается оценка полученных результатов и, если есть такая необходимость, вносятся в модель соответствующие изменения и уточнения и расчет повторяется.

Особенности применения программного комплекса «Селектор» к моделированию геолого-геохимических процессов.

С помощью ПК "Селектор" поставлено и решено большое количество задач в различных областях применения химической термодинамики в геохимии, петрологии, технологических приложениях. Отметим лишь некоторые основные результаты, получение которых стало возможным главным образом потому, что в руках исследователей был такой мощный инструмент физико-химического моделирования, как ПК "Селектор". Это модели изменения атмосферы в докембрии [Дроздовская, 1990]; гипергенных процессов рудообразования [Кашик, Карпов, 1978]; процессов, протекающих в латеритных корах выветривания [Копейкин, 1988]; минерало-образования в высокотемпературных флюидных системах [Павлов, 1992]; расчет тепловых балансов геохимических процессов [Чудненко, Карпов, 1990а]; образования железомарганцевых конкреций на дне морей и океанов [Грамм-Осипов, 1991]; обоснования термодинамической устойчивости углеводородов в земной коре и верхней мантии [Зубков, 2005]; осадкообразования в Балтийском море [Kulik et al., 2000]; образования эпитермальных золоторудных месторождений северо-востока России [Карпов и др., 2001а; Кравцова и др., 2003]; почвообразования [Шоба и др., 1992; Шоба, Карпов, 2004]; экологических задач Кольского Севера [Мазухина, 2005]; взаимодействия подземных вод с горными породами в зоне гипергенеза [Дутова, 2004]; изучения диспропорционирования и фракционирования углерода в природных водах [Павлов и др., 2008]; развития надстеносферных флюидных систем [Шарапов, 2005]; геокатализ [Шарапов и др., 2007]; геотермобарометрия [Чудненко и др., 2007]; моделирование минеральных ассоциаций в метаморфических породах [Авченко и др., 2009].

Раздел 6. Методы и способы моделирования прикладных геохимических задач.

Взрыв - быстрое расширение вещества до объема, во много раз превышающего его первоначальные размеры. Значительное разрушающее действие взрывчатых веществ (ВВ) связано не с экстремальным запасом энергии, содержащемся в ВВ, а с тем, что энергия концентрирована в весьма малом объеме и скорость ее выделения исключительно высока. Детонация является особым типом экзотермической реакции, сопровождаемой ударной волной и протекающей с такой большой скоростью, что вся энергия, заключенная в ВВ, освобождается до того момента, когда наступает сколько-нибудь заметное расширение вещества.

Поскольку взрывные процессы играют важную роль не только в военном деле, но и в природных и технологических системах, в частности, при проведении геолого-разведочных работ, их изучению посвящено большое количество достаточно подробных и обстоятельных исследований [Андреев, Беляев, 1960; Баум и др., 1975].

В связи с разработкой теоретических основ генезиса углеводородов весьма актуальной в последние годы стала проблема детонации тяжелых углеводородов как объяснение природы землетрясений вследствие химических взрывов в литосфере и верхней мантии Земли [Карпов и др., 1998; Зубков, 2005]. На глубине 7-120 км существует энергетический барьер относительно нисходящих и восходящих потоков тяжелых углеводородов. В интервале 60-120 км этот барьер достигает максимальных значений. Здесь объемная энергетическая емкость метастабильных тяжелых углеводородов сопоставима с энергетической емкостью мощных взрывчатых веществ - тринитротолуола и нитроглицерина.

Продемонстрируем на простой термодинамической модели, каким образом можно рассчитать температуру, давление и характеристики продуктов взрыва при адиабатическом превращении вещества в собственном объеме. В качестве минимизируемого термодинамического потенциала примем $-S(U, V)$. Этот выбор предопределен тем обстоятельством, что моделируемый процесс происходит в изохорических условиях,

которые задаются первоначальным объемом метастабильной системы. Энергия, заключенная в данном объеме метастабильной системы, это не только химическая энергия, но также "термическая" и "внутренняя механическая" энергия, которые соответствуют производству TS (температура и энтропия) и PV с отрицательным знаком [Коржинский, 1957]. Поэтому другие термодинамические функции не дают столь полного представления об энергетическом запасе такой метастабильной системы.

4.3.1. Перечень семинарских, практических занятий и лабораторных работ

№ п/п	№ раздела и темы дисциплины	Наименование семинаров, практических и лабораторных работ	Трудоемкость (час.)		Оценочные средства	Формируемые компетенции* (индикаторы)
			Всего часов	практическая подготовка		
1	2	3	4	5	6	7
1	Раздел 1	Какие задачи можно решать, применяя метод бассейнового моделирования? Определение понятий: нефтегазоносный бассейн, главная зона нефтеобразования, нефтематеринская порода, коллектор, флюидоупор, катагенез, пиролиз.	1		устный опрос, зачет задания	ПК-1 ИДК _{ПК1.1} ИДК _{ПК1.2}
2	Раздел 2	Типы осадочных бассейнов. Определите по разрезу мощность и возраст (продолжительность) самой поздней эрозии в выделенном сегменте.	1		устный опрос, зачет задания	ПК-1 ИДК _{ПК1.1} ИДК _{ПК1.2}
3	Раздел 3	Общие сведения о законах термодинамики. Основные соотношения термодинамических величин.	2		устный опрос, зачет задания	ПК-1 ИДК _{ПК1.1} ИДК _{ПК1.2}
4	Раздел 4	Характеристика современных программных комплексов физико-химического моделирования. Методы расчёта значений термодинамических потенциалов при высоких температурах и давлениях	2		устный опрос, зачет задания	ПК-1 ИДК _{ПК1.1} ИДК _{ПК1.2}
5	Раздел 5	Сведения о программном комплексе «Селектор». Расчёт равновесного состава систем методом минимизации термодинамических потенциалов	2		устный опрос, зачет задания	ПК-1 ИДК _{ПК1.1} ИДК _{ПК1.2}
6	Раздел 6	Методы и способы моделирования прикладных геохимических задач.	2		устный опрос, зачет задания	ПК-1 ИДК _{ПК1.1} ИДК _{ПК1.2}

	Примеры исследования с помощью моделей явлений	исследования с термодинамических физико-химических				
--	--	--	--	--	--	--

4.3.2. Перечень тем (вопросов), выносимых на самостоятельное изучение студентами в рамках самостоятельной работы (СРС)

№ пп/п	Тема	Задание	Формируемая компетенция	ИДК
1	Раздел 1. Соотношение элементов нефтяных систем с литотипами	Конспект, реферат	ПК-1	ИДК _{ПК1.1} ИДК _{ПК1.2}
2	Раздел 2 Классификация осадочных бассейнов. Термальная история осадочных бассейнов.	Конспект.	ПК-1	ИДК _{ПК1.1} ИДК _{ПК1.2}
3	Раздел 3. Методы расчёта значений термодинамических потенциалов при высоких температурах и давлениях.	Конспект	ПК-1	ИДК _{ПК1.1} ИДК _{ПК1.2}
4	Раздел 4. Исследование процессов формирования минеральной зональности в корах выветривания на различных породах в закрытых и открытых условиях.	Реферат, презентация	ПК-1	ИДК _{ПК1.1} ИДК _{ПК1.2}
5	Раздел 5. Особенности применения программного комплекса Селектор для моделирования процессов формирования тяжелых углеводородов	Реферат, презентация.	ПК-1	ИДК _{ПК1.1} ИДК _{ПК1.2}
6	Раздел 6. Способы расчета, согласования и обработки термодинамической информации	Реферат.	ПК-1	ИДК _{ПК1.1} ИДК _{ПК1.2}

Методические указания по организации самостоятельной работы студентов

Студентам предложены темы для самостоятельного углубленного изучения дисциплины. Самостоятельная работа включает изучение фондовой, учебной литературы и материалов из сети Интернет, их конспектирование и обсуждение на практическом занятии.

4.5. Примерная тематика курсовых работ (проектов)

написание курсовых работ по дисциплине не предусмотрено учебным планом

V. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

а) основная литература

1. Чудненко, К.В. Термодинамическое моделирование в геохимии: теория, алгоритмы, программное обеспечение, приложения; ред. В. Н. Шарапов ; Рос. акад. наук, Сиб. отд-ние, Ин-т геогр. - Новосибирск : Гео, 2010. - 287 с.
2. Авченко О.В., Чудненко К.В., Александров И.А. Основы физико-химического моделирования минеральных систем / М.: Наука, 2009. – 229 с.
3. 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.
4. Френкель Д., Смит Б. Принципы компьютерного моделирования молекулярных систем. От алгоритмов к приложениям / М. : Науч. мир, 2013. - 559 с.

б) дополнительная литература

1. 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.
2. 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.
3. 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.
4. Крайнов С.Р. Геохимия подземных вод/ С.Р.Крайнов, Б.Н.Рыженко, Б.Н.Швец. – М.: Наука, 2004. – 678 с.

в) список авторских методических разработок:

1. Бычинский В.А., Исаев В.П., Тупицын А.А. Физико-химическое моделирование в нефтегазовой геохимии. Часть 1. Теория и методология физико-химического моделирования: Учебное пособие.-Иркутск: ИГУ, 2004.-131с.
2. Бычинский В.А., Исаев В.П., Тупицын А.А. Физико-химическое моделирование в нефтегазовой геохимии. Часть 2. Модели гетерогенных систем: Учебное пособие.-Иркутск: ИГУ, 2004.-150с.

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

Электронная библиотека Московского государственного университета экономики, статистики и информатики (МГУЭСИ) – www.ibc.mesi.ru

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
 Всероссийский институт научной информации по техническим наукам (ВИНИТИ) – www.fuji.viniti.msk.su
 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
 Нефтегазовая вертикаль - www.ngv.ru
 Oil Gas Journal – www.ogj.com
 Нефть России. Oil of Russia – www.press.lukoil.ru
 Нефть и капитал – www.oilcapital.ru
 Нефть, газ и право – www.oilgaslaw.ru
 ТЭК России. Нефтегазодобывающая и нефтеперерабатывающая промышленность – www.ratex.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
Электронно-библиотечные системы (ЭБС) ИГУ
 1. Электронный читальный зал «БиблиоТех» (адрес доступа <https://isu.bibliotech.ru>)
 2. ЭБС «Издательство «Лань» (адрес доступа <http://e.lanbook.com>)
 3. ЭБС Национальный цифровой ресурс «РУКОНТ» (адрес доступа <http://rucont.ru>)
 4. ЭБС «Айбукс» (адрес доступа <http://ibooks.ru>)
 5. Образовательная платформа «Юрайт» (адрес доступа <https://urait.ru>)

VI. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

6.1. Учебно-лабораторное оборудование:

Компьютерный класс геологического факультета (ауд. 221). Оборудован техническими средствами обучения: Компьютеры – моноблоки ROSCOM с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду организации, проектор CASIOXL-V-2, ноутбук ASUSK50NGseries, экран на треноге Da-LiteVersatol 178*178, колонки.

6.2. Программное обеспечение:

№	Наименование программного продукта	Кол-во	Обоснование для пользования ПО (Лицензия, Договор, счёт, акт или иное)	Дата выдачи лицензии	Срок действия права пользования
1	GoogleChrome 57.0.2987.133 (ежегодно обновляемое ПО)	Условия правообладателя	Условия использования по ссылке: https://www.google.ru/chrome/browser/privacy/eula_text.html	Условия правообладателя	бессрочно
2	Microsoft Office 2003 Win32 Russian Academic OPEN No Level	40	Номер Лицензии Microsoft 41251593	24.10.2006	бессрочно

3	Corel Draw Graphics Suite X6 AE	3	1031 Государственный контракт № 03-019-13	11.06.2013	бессрочно
4	Acrobat Professional 11 AcademicEdition License Russian Multiple Platforms Adobe	20	Договор подряда 04-040-12 от 21.09.2012	31.07.2015	бессрочно

6.3. Технические и электронные средства:

При реализации программы дисциплины аудиторские занятия проходят с использованием стационарного мультимедийного проектора и персонального компьютера для демонстрации презентаций материала в лекционной аудитории, оборудованной экраном.

Электронные средства обучения по дисциплине размещены на образовательном портале ИГУ (educa.isu.ru).

Для материально-технического обеспечения дисциплины используются: компьютерный класс геологического факультета ИГУ, в котором все компьютеры имеют выход в сеть «Интернет» и установленное специальное программное обеспечение ArcGISforServerEnterpriseAdvancedLabKit для самостоятельной работы студента по моделированию геологических систем.

VII. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Обучение производится с использованием частично электронного обучения и дистанционных образовательных технологий: Образовательный портал ИГУ educa.isu.ru

В рамках дисциплины предусмотрено участие в видеоконференциях, проводимых научными институтами. Ссылки на проводимые мероприятия обновляются в электронной среде educa.isu.ru

Практикуется экскурсия в лабораторию моделирования геохимических процессов Института геохимии им. А.П. Виноградова СО РАН. Студенты могут познакомиться с научными проектами в области моделирования, задать свои вопросы ученым и попробовать самостоятельно разработать и описать термодинамическую модель геологических процессов, используя в дальнейшем полученные данные для написания курсовых проектов, дипломов или тезисов на конференцию.

Наименование тем занятий с использованием активных форм обучения:

№	Тема занятия	Вид занятия	Форма / Методы интерактивного обучения	Кол-во часов
1	Сведения о программном комплексе «Селектор».	практическое занятие	Групповые дискуссии, анализ ситуации	2
2	Методы и способы моделирования прикладных геохимических задач.	практическое занятие	Групповые дискуссии, анализ ситуации	2
Итого часов				4

VIII. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

Индекс и наименование компетенции и ИДК	Признаки проявления компетенции/дескриптора (ов) в соответствии с уровнем формирования в процессе освоения дисциплины
<p style="text-align: center;">ПК-1 <i>Способен осуществлять сбор, анализ, интерпретацию, систематизацию и обобщение геолого-геофизической, геохимической и промысловой информации</i></p> <p style="text-align: center;">ИДК_{ПК-1.1} <i>Осуществляет сбор и структурирование поступающей промысловой информации</i></p> <p style="text-align: center;">ИДК_{ПК-1.2} <i>Проводит обработку и интерпретацию геолого-геофизической, геохимической и промысловой информации</i></p>	<p><u>Базовый уровень:</u></p> <p>Знает физико-химические условия протекания геологических процессов; основы термодинамики</p> <p>Умеет обрабатывать полученные результаты, анализировать и осмысливать их с учётом имеющихся литературных данных; представлять итоги выполненной работы в виде отчётов, рефератов, статей, оформленных соответствующим образом; формулировать цели и задачи для моделирования различных процессов;</p> <p>Владеет навыками поиска информации в сети Интернет и библиотеках;</p> <p><u>Повышенный уровень:</u></p> <p>Знает принципы и методы анализа и математической обработки петрологического и петрохимического материала с применением компьютерного моделирования</p> <p>Умеет осуществлять сбор и обработку исходной информации для создания модели геологического процесса; создавать термодинамические модели заданного геологического процесса;</p> <p>Владеет методиками подготовки данных для компьютерного моделирования; навыками научной работы</p>

Оценочные материалы текущего контроля формируются в соответствии с ЛНА университета

Оценочные материалы по данной дисциплине представлены в виде списка вопросов для собеседования, которые помогают выявить сформированность профессиональных компетенций ПК-1 у обучающихся.

Примерный список вопросов для собеседования:

1. Термодинамическая система.
2. Подразделения систем по числу компонентов, по числу фаз. Изолированные, закрытые, открытые системы.
3. Что такое фаза термодинамической системы?
4. Что такое компонент термодинамической системы?
5. Что такое параметры термодинамической системы?

Оценочные материалы для промежуточной аттестации в форме зачета.

Материалы для проведения текущего и промежуточного контроля знаний студентов:

№ п/п	Вид контроля	Контролируемые темы (разделы)	Компетенции, компоненты которых контролируются
1.	Зачет	1-5	ПК-1 ИДК _{ПК1.1} ИДК _{ПК1.2}

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. Обратные физико-химические задачи. (Выделение четырех классов обратных физико-химических задач.).
13. 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. Согласование, расчет, корректировка термодинамических свойств индивидуальных веществ. (Согласование последовательным или цепочечным методом, метод Гордона.) Выбор критерия согласования. Критический анализ и оптимальное согласование термодинамических свойств индивидуальных веществ.
15. Свободная энергия по Гиббсу, методы расчета значений термодинамических потенциалов в условиях высоких температур, формы представления зависимости теплоемкости от температуры.
16. Источники и базы термодинамических данных (основные требования базам т.д.) ключевые и базисные термодинамические величины (простые вещества, элементы, окислы.)
17. Методология построения модели и определение задач моделирования. постановка задачи: выбор зависимых и независимых параметров состояния системы, тип модели: система, мегасистема, реактор.
18. Метастабильное равновесие. Выбор минимизируемого термодинамического потенциала. Исходные данные: выбор независимых компонентов и химический состав системы, выбор фаз и зависимых компонентов. Дополнительные ограничения.
19. Геохимические приложения: физико-химические модели природных процессов.
20. Исследование термодинамической модели устойчивости системы $C-H$ в P, T - условиях земной коры.
21. Исследование термодинамической модели преобразования органического вещества в системе “Водный Раствор - Породы - Нефть - Кероген”.

22. Исследование влияния парциального давления CO_2 и окислительно-восстановительного потенциала на преобразование органического вещества.
22. Расчет состава гидротермальных растворов и растворенных в них газов в зависимости от P, T - условий земной коры и состава вмещающих пород.
23. Обработка и интерпретация результатов физико-химического моделирования.
23. Химические потенциалы независимых компонентов как инструмент корректировки и расчета неизвестных термодинамических потенциалов зависимых компонентов.
24. Степень протекания процесса как характеристика относительного времени взаимодействия подсистем.
25. Термодинамическое моделирование в условиях неопределенности введение в проблему. Погрешности исходной термодинамической информации. Предшествующие работы. предлагаемый подход. формулировка и задание интервалов неопределенности, критерии выбора оптимальных решений.
26. Работа с базами данных ПК "Селектор-С" расчет термодинамических свойств. Переаппроксимация уравнений теплоемкости особенности.

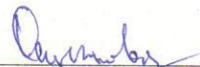
Разработчики:



 (подпись)

доцент
 (занимаемая должность)

В.А. Бычинский
 (инициалы, фамилия)



 (подпись)

старший преподаватель
 (занимаемая должность)

А.В. Ощепкова
 (инициалы, фамилия)

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО № 953 от 12.08.2020 по специальности 21.05.02 Прикладная геология и специализации «Геология месторождений нефти и газа».

Программа рассмотрена на заседании кафедры геологии нефти и газа
 «15» апреля 2022 г.

Протокол № 8 Зав. Кафедрой  С.П. Примина

Настоящая программа, не может быть воспроизведена ни в какой форме без предварительного письменного разрешения кафедры-разработчика программы.