

Аннотация
к рабочей программе учебной дисциплины
«Математическое моделирование процессов в компонентах природы»
по направлению 20.04.02 «Природообустройство и водопользование»
(направленность (профиль) «Водоснабжение, водоотведение, рациональное использование
и охрана водных ресурсов»)

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единицы.

Форма контроля: экзамен.

Предполагаемые семестры: очное – 2, заочное - 2.

Целью изучения дисциплины «Математическое моделирование процессов в компонентах природы» является изучение основ математического моделирования, классификации математических моделей, построение математических моделей различных систем и их исследование с помощью метода численного моделирования, планирование численных экспериментов и интерпретация полученных результатов.

Задачей курса является: формирование у студентов теоретических знаний и практических навыков в области математического моделирования.

Учебная дисциплина «Математическое моделирование компонентов в процессах природы» входит в Б1.Б.01. Для освоения дисциплины необходимы знания, полученные при изучении следующих дисциплин:

- геоинформационные системы;
- компьютерные технологии в водохозяйственном проектировании.

Краткое содержание дисциплины:

Общие сведения о моделировании

Основные понятия и определения моделирования. Математическое моделирование: стохастическое, детерминированное моделирование, моделирование продуктивности растений, основные особенности природных сред.

Принципы описания природно-техногенных физико-химических систем.

Термодинамическая (физико-химическая) система. Обмен веществом и энергией с внешней средой. Твердые, жидкие и газообразные фазы. Компоненты физико-химических систем. Термодинамическое состояние систем и его описание на основе законов равновесной и неравновесной (синергетика) термодинамики. Закон действия масс, как основа моделирования физико-химических процессов. Константа равновесия, произведение растворимости и активности, квотант и параметр насыщения/недонасыщенности реакций. Определение направления протекания реакций и процессов.

Термодинамические данные и параметры моделей. Гидрогеохимические процессы и принципы их математического описания.

Изменения энергии Гиббса, энтропии, теплоемкости и объема в ходе физико-химических взаимодействий. Стандартные термодинамические параметры веществ, химических реакций и физико-химических процессов. Справочники и электронные базы термодинамических данных. Методы расчета свободных энергий и констант равновесия. Учет давления и температуры. Уравнения теплоемкости и изменения объема. Определение термодинамических констант равновесия.

Растворение/осаждение, окисление/восстановление, фазовые переходы, сорбция и ионный обмен, радиоактивный распад, химическая и биodeградация, дисперсия, диффузия. Принципы и методы математического описания геохимических и гидрогеохимических процессов.

Моделирование геохимических процессов в компонентах природы

Способы формализации уравнений химических и физико-химических взаимодействий: элементный, предопределенных химических и элементарных реакций. Принципы описания состояния геохимических систем с помощью методов «минимизации свободной энергии» и «констант равновесия». Учет неидеальности компонентов системы с использованием метода активности Льюиса. Экспериментальное определение (измерение) и теоретический расчет активностей компонентов растворов, минералов и газов. Определение термодинамических параметров и констант равновесия процессов. Способы и уравнения моделирования комплексообразования, растворения-осаждения, окислительно-восстановительных реакций,

эвазии и инвазии газов. Основные способы моделирования физико-химической и биохимической сорбции, ионного обмена, радиоактивного распада и биодegradации. Учет рН и Eh растворов, давления и температуры в ходе моделирования.

В результате изучения дисциплины магистр должен обладать следующими общекультурными, общепрофессиональными и профессиональными компетенциями:

ОПК-5: способность профессионально использовать современное научное и техническое оборудование и приборы, а также профессиональные компьютерные программные средства;

ОПК-7: способностью обеспечивать высокое качество работы при проектировании, строительстве и эксплуатации объектов природообустройства и водопользования, при проведении научно-исследовательских работ;

ПК-7: способность разрабатывать и вести базы экспериментальных данных, производить поиск и выбор методов и моделей для решения научно-исследовательских задач, проводить сравнение и анализ полученных результатов исследований, выполнять математическое моделирование природных процессов.

Заведующая кафедрой _____



Петрова И. Ю.