

**Державна служба України з надзвичайних ситуацій
Національна академія наук України
Український гідрометеорологічний інститут**

ЗАТВЕРДЖЕНО
Вченю радою
Українського
гідрометеорологічного інституту
Протокол №7-1735 від 31 жовтня 2023 р.



Директор Українського
гідрометеорологічного інституту
Володимир ОСАДЧИЙ
жовтня 2023 р.

**РОБОЧА ПРОГРАМА
навчальної дисципліни**

МОДЕЛЮВАННЯ ХІМІЧНОГО СКЛАДУ ПОВЕРХНЕВИХ ВОД

Освітньо-наукова програма	Науки про Землю
Галузь знань	10 Природничі науки
Спеціальність	103 Науки про Землю
Рівень вищої освіти	Третій (освітньо-науковий)
Освітній ступінь	Доктор філософії
Вид дисципліни	Вибіркова

Викладач: Осадча Наталія Миколаївна, доктор географічних наук, професор, старший науковий співробітник, завідувач відділу гідрохімії УкрГМІ ДСНС України та НАН України

Робочу програму навчальної дисципліни «Моделювання хімічного складу поверхневих вод» розроблено на основі освітньо-наукової програми Науки про Землю підготовки здобувачів вищої освіти освітнього ступеня Доктор філософії за спеціальністю 103 Науки про Землю та відповідних нормативних документів

Укладач:

Завідувач відділу гідрохімії,
д.г.н., проф.

Осадча Н.М.

Осадча Наталія Миколаївна, доктор географічних наук, старший науковий співробітник, завідувач відділу гідрохімії УкрГМІ ДСНС України та НАН України

Робочу програму обговорено та схвалено

на засіданні відділу гідрохімії

Протокол № 4 від «19 листопада 2023 р.

Завідувач відділу

д.г.н., проф. Осадча Н.М.

Гарант освітньо-наукової програми


чл.-кор. НАН України
Осадчий В.І.

ВСТУП

Згідно навчального плану підготовки аспірантів, дисципліна «Моделювання хімічного складу поверхневих вод» викладається аспірантам УкрГМІ ДСНС та НАН України впродовж одного семестру обсягом 120 годин, з них 60 годин аудиторних занять (28 годин лекційних, 30 годин семінарських занять, 2 години консультацій та 60 годин самостійної роботи). У курсі передбачено 2 змістових модулі та 2 модульні контрольні роботи. По закінченню семестру аспіранти здають залік.

Мета навчальної дисципліни «Моделювання хімічного складу поверхневих вод» полягає у формуванні в аспірантів цілісної системи знань щодо основних природних і антропогенних чинників, які обумовлюють хімічний склад поверхневих вод, їхній вплив на екологічний стан і якість води, а також методів і способів оцінки впливу.

Основні завдання навчальної дисципліни: формування уявлення про основні природні (гідрологічні, фізико-хімічні та гідробіологічні) процеси, що визначають вплив на формування хімічного складу вод, характеристику дії антропогенних чинників. Сутність методів визначення емісійних потоків речовин із диференціацією на точкові та дифузні джерела. Моделювання потоків окремих компонентів та розроблення заходів для компенсації негативного впливу.

Аспірант повинен знати: перелік прямих та опосередкованих природних чинників, що визначають хімічний склад води, встановлювати характеристики їхнього впливу, визначати кількісні параметри окремих чинників та оцінювати їхню взаємозалежність. Основи терmodинамічного моделювання та розрахунку дифузійних потоків. Аспірант повинен знати сучасні методи аналітичного визначення головних іонів, біогенних елементів, органічних речовин відповідно до міжнародних стандартів. Володіти методами сепарації розчинених і завислих форм, фракційного аналізу донних відкладів

Аспірант повинен вміти виокремити та класифікувати природні та антропогенні фактори формування хімічного складу природних вод; провести кількісну оцінку окремих чинників, виконати терmodинамічне моделювання фізико-хімічної поведінки окремих компонентів, моделювати стан карбонатно-кальцієвої рівноваги, прогнозувати трансформацію хімічного складу води за різних умов. Методи розрахунку дифузійного потоку речовин у міжфазовій взаємодії. Оцінювати вплив точкових та дифузійних джерел. Проблеми моделювання біогенного забруднення вод та розробки заходів з їх мінімізацією.

Система контролю знань та умови складання заліку. Навчальна дисципліна «Природні та техногенні чинники формування хімічного складу поверхневих вод» оцінюється за модульно-рейтинговою системою. Вона складається з 2 модулів. Результати навчальної діяльності аспірантів оцінюються за 100-бальною шкалою, яка відповідно переводиться в національну шкалу (відмінно, добре, задовільно, незадовільно) та шкалу Європейської кредитно-трансферної системи – ЄКТС (A,B,C,D,E,FX,F). Відповідність шкал оцінювання та критерії визначення рівнів досягнень аспірантів показано в таблиці 1.

Таблиця 1

Переведення 100-бальної шкали оцінювання в національну шкалу та шкалу ЄКТС

Оцінка за 100-бальною шкалою	Оцінка за національною шкалою		Оцінка за шкалою ЄКТС
	диференційована	у формі заліку	
90 – 100 (творчий рівень)	5 (відмінно)	зараховано	A
85 – 89 (високий рівень)	4 (дуже добре)		B
70-79 (достатній рівень)	4(добре)		C
65-69 (задовільний рівень)	3 (задовільно)		D
60-64	3(достатньо)		E

(задовільний рівень) 35-59 (низький рівень)	2 (нездовільно з можливістю повторного складання)	не зараховано з можливістю повторного складання заліку/екзамену	EF
0-34 (нездовільний рівень)	2 (нездовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни)	не зараховано з обов'язковим повторним вивченням дисципліни	F

Аспірант отримує підсумкову оцінку, яка розраховується як середньозважене оцінок за кожен з двох модулів у семестрі та оцінки за залік за наступною формuloю:

	Змістовий модуль 1 (3M ₁)	Змістовий модуль 2 (3M ₂)	Залік	Разом (підсумкова оцінка)
Вагові коефіцієнти (%)	30% k ₁ =0,3	30% k ₂ =0,3	40% k _{зал} =0,4	100%
Максимальна оцінка в балах	100	100	100	100
Оцінка (бали)	15*	45	40	100

Розрахунок підсумкової оцінки (зваженої):

$$PO = 3M_1 \times k_1 + 3M_2 \times k_2 + KPM \times k_{зал} .$$

При оцінюванні кожного із змістових модулів враховується відвідування аспірантом аудиторних занять та виконання ним самостійних робіт, робота на семінарських заняттях, а також результати виконання модульних контрольних робіт. Оцінювання окремих видів навчальної роботи студента здійснюється у балах:

- письмові контрольні роботи – 20 балів (*на семестр 2 модульні контрольні роботи по 10 балів максимум кожна*);
- письмові самостійні роботи – 10 балів (*на семестр 2 письмові самостійні роботи по 5 балів максимум кожна*);
- усна відповідь – 20 балів (по одному балу за одну відповідь на кожному занятті);
- заохочувані бали (відвідування, підготовка рефератів) – 20 балів.

Якщо за результатами модульно-рейтингового контролю аспірант отримав середнє арифметичне за два змістовні модуля менше ніж 60 балів, то він не допускається до заліку і вважається таким, що не виконав усі види робіт, які передбачаються навчальним планом на семестр з дисципліни.

ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ДИСЦИПЛІНИ

№ п/п	Назва теоретичних блоків	Кількість годин				
		Всього	Аудиторних	Лекцій	Семінари	Самостійна робота
	Модуль 1	60	30	14	16	30
1	Вступ	2	2	2	-	-
2	Термодинамічне моделювання поведінки речовин у водних екосистемах	30	18	8	10	12
3	Хімічні форми окремих елементів та окисно-відновні взаємодії	28	10	4	6	18
	Модуль 2	60	30	16	14	30
4	Моделювання емісійних потоків хімічних речовин та заходів із запобігання їхнього негативного впливу	32	16	8	8	16
5	Фізико-математичне моделювання та заходи зменшення негативних впливів	26	12	6	6	14
	Консультації	2	2	2		
	ВСЬОГО	120	60	30	30	60

ЗМІСТ ДИСЦИПЛІНИ

№ з/п	Назва теми	Кількість годин		
		лекції, семінари	самостійна робота	
МОДУЛЬ 1				
Тема 1. ВСТУП				
1	Предмет і завдання дисципліни. Основні поняття.	2	-	
ТЕМА 2. ТЕРМОДИНАМІЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПОВЕДІНКИ РЕЧОВИН У ВОДНИХ ЕКОСИСТЕМАХ				
2	Принципи хімічної термодинаміки	4	2	
3	Моделювання седиментації речовин	4	2	
4	Поняття про комплексутворення та основні ліганди природних вод.	6	4	
5	Гумусові речовини – основний ліганд поверхневих вод України	4	4	
ТЕМА 3. ХІМІЧНІ ФОРМИ ОКРЕМІХ ЕЛЕМЕНТІВ ТА ОКИСНО-ВІДНОВНІ ВЗАЄМОДІЇ				
6	Моделювання хімічних форм окремих елементів у воді (на прикладі важких металів)	4	9	
7	Моделювання окисно-відновних взаємодій	4	9	
МОДУЛЬ 2				
Тема 4. МОДЕЛЮВАННЯ ЕМІСІЙНИХ ПОТОКІВ ХІМІЧНИХ РЕЧОВИН				
8	Метод масового балансу.	4	4	
9	Поняття про емісію та коефіцієнт утримання вод.	6	8	
10	Вплив землекористування на емісію забруднюючих речовин. Вплив сільськогосподарського виробництва на забруднення вод. Розрахунок балансу агросистеми			
11	Статистичне моделювання. Концептуальні моделі	4	4	
Тема 5. СТАТИСТИЧНЕ ТА ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ				
12	Статистичне моделювання. Концептуальні моделі.	4	4	
13	Фізико-математичні моделі	6	6	
14	Розроблення заходів зменшення впливу окремих елементів на стан вод	4	4	

Загальний обсяг 120 год.,
 у тому числі:
 лекції та семінари – 58 год,
 консультації – 2 год,
 самостійна робота – 60 год.

ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

МОДУЛЬ 1

ТЕМА 1. Вступ

ТЕМА 2. ТЕРМОДИНАМІЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПОВЕДІНКИ РЕЧОВИН У ВОДНИХ ЕКОСИСТЕМАХ

Лекція 1 Принципи хімічної термодинаміки.

Закони хімічної термодинаміки. Методи констант рівноваги та мінімізації енергії Гіббса.

Лекція 2 Моделювання седиментації речовин.

Гомогенні та гетерогенні рівноваги водних систем. Правило Гіббса, фазова рівновага. Побудова кривої сорбції. Термодинамічне моделювання седиментації.

Лекція 3 Поняття про комплексоутворення та основні ліганди природних вод.

Процес комплексоутворення. Поняття про ліганди. Лабільні та стійкі комплекси. Вплив комплексоутворення на міграційну здатність елементів.

Лекція 4. Гумусові речовини – основні ліганди поверхневих вод України.

Поняття гумусових речовин, їхній фракційний поділ, методи визначення. Закономірності поширення у поверхневих водах України. Проблема встановлення констант комплексоутворення з важкими металами.

Лекція 5 Моделювання хімічних форм окремих елементів у воді (на прикладі важких металів).

Основні підходи до моделювання. Термодинамічний розрахунок фізико-хімічних форм металів. Метод констант рівноваги. Метод мінімізації вільної енергії Гіббса.

Лекція 6 Моделювання хімічних форм окремих елементів у воді (на прикладі важких металів.)

Особливості міграції заліза і мангану. Мінеральні та органічні комплекси перехідних металів.

Лекція 7 Моделювання окисно-відновних взаємодій.

Окисно-відновний потенціал. Моделювання окиснення заліза при переході від підземних до поверхневих вод. Залізо закисне і окисне. Моделювання взаємопереходів мангану 2+ та 4+.

МОДУЛЬ 2

ТЕМА 6. МОДЕЛЮВАННЯ ЕМІСІЙНИХ ПОТОКІВ ХІМІЧНИХ РЕЧОВИН

Лекція 8. Метод масового балансу (експортних коефіцієнтів).

Принцип методу масового балансу. Емісійний потік від атмосферних випадінь, методологія розрахунку емісії від атмосферних випадінь.

Лекція 9. Моделювання емісійного потоку від населення. Методологія розрахунку емісії від сільськогосподарських земель.

Емісійний потік від населення, методологія розрахунку емісії від міського і сільського населення. Методологія розрахунку емісії від забудованих територій. Методологія розрахунку емісії від орних земель. Методологія встановлення експортного коефіцієнту від сільськогосподарських земель.

Лекція 10. Вплив землекористування на емісію забруднюючих речовин. Вплив сільськогосподарського виробництва на забруднення вод. Розрахунок балансу агросистеми. Оцінка емісії від ерозійних процесів.

Вплив землекористування на емісію забруднюючих речовин. Критерії оцінки впливу сільськогосподарського виробництва на забруднення вод. Методологія розрахунку балансу агросистеми. Методологія розрахунку емісії від луків і пасовищ. Методологія розрахунку емісії від ерозійних процесів. Рівняння ерозії ґрунту Швебса, рівняння MUSLE.

Лекція 11. Поняття про емісію та коефіцієнт утримання вод

Поняття про емісію та хімічний стік. Основні чинники формування. Кількісне визначення внутріводомових процесів. Коефіцієнт утримання та основні підходи до його визначення. Буферна ємність.

Лекція 12. Статистичне моделювання. Концептуальні моделі.

Основні підходи побудови статистичної моделі хімічного стоку за наявності та відсутності даних спостережень. Визначення концептуальних моделей. Характеристика моделі MONERIS та практика її застосування у басейні Дунаю.

Лекція 13. Фізико-математичні моделі

Визначення фізико-математичних моделей. Характеристика моделі SWAT та практика її застосування у басейні Десни.

Лекція 14. Розроблення заходів зменшення впливу окремих елементів на стан вод

Прогнозування основних агрохімічних прийомів зменшення біогенного забруднення вод (сівозміни, дози добрив, вибір культур, захисні полоси). Кодекс кращих сільськогосподарських практик та Нітратна директиви.

IV. Навчально-методична карта дисципліни (2023 р.)

Всього 120 годин, лекції – 28 годин, семінари – 30 годин, консультації – 2 год, самостійна робота – 60 годин, залік.

Тиждень	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII							
Модуль				Модуль 1			Модуль 2								
Лекція	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	
Дата	07.11		14.11		21.11		28.11		5.12		12.12		19.12		26.12
Теорет. розділ	Поняття про комплексоутворення та основні ліганди природних вод.		Термодинамічне моделювання поведінки речовин у водних екосистемах		Хімічні форми окремих елементів та окисно-відновні взаємодії		Моделювання емісійних потоків хімічних речовин та заходів із запобігання їхнього негативного впливу		Фізико-математичне моделювання та заходи зменшення негативних впливів						
Моделювання хімічних форм окремих елементів у воді (на прикладі важких металів)															
Гумусові речовини – основний ліганд поверхневих вод України.															
Моделювання окисно-відновних взаємодій.															
Метод масового балансу (експортних коефіцієнтів).															
Моделювання емісійного потоку від населення. Методологія розрахунку емісії від сільськогосподарських земель.															
Вплив землекористування на емісію забруднюючих речовин. Вплив сільськогосподарського виробництва на забруднення вод. Розрахунок балансу агросистеми. Оцінка емісії від ерозійних процесів.															
Поняття про емісію та коефіцієнт утримання вод															
Статистичне моделювання. Концептуальні моделі.															
Фізико-математичні моделі															
Розроблення заходів зменшення впливу окремих елементів на стан вод															
Тема лекції															

Самост. робота	Вивчення програмного матеріалу
Види контролю	<p>Контрольна робота № 1</p> <p>Контрольна робота № 2</p>

РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА

Основна

1. Бек М. Химия равновесий реакций комплексообразования / М. Бек ; [пер. с английского]. – М. : Мир.– 1973.– 420 с.
2. Гаррелс Р. М. Растворы, минералы, равновесия / Р. М. Гаррелс, Ч. А. Крайст. – М. : Мир, 1982. – 367 с.
3. Дривер Дж. Геохимия природных вод / Дривер Дж. ; пер. с англ. – М. : Мир, 1985. – 440 с.
4. Линник П. Н. Формы миграции металлов в пресных поверхностных водах / П. Н. Линник, Б. И. Набиванец. – Л. : Гидрометеоиздат, 1986. – 269 с.
5. Хільчевський В.К., Осадчий В.І., Курило С.М. Основи гідрохімії. - К.: Ніка-Центр, 2012. - 300 с.
6. Allison J. D. MINTEQA2/PRODEFA2, a geochemical assessment model for environmental systems: Version 3.0 user's manual. / J. D. Allison, D. S. Brown, K. J. Novo-Gradac // U. S. Environmental Protection Agency. – Athens : GA, 1990. – 106 p.
7. Arnold J. G., Kiniry J. R., Srinivasan R., Williams J. R., Haney E. B. Neitsch S. L. Soil and Water Assessment Tool Input/output file documentation Version 2009. Water Resources Institute, Texas A&M University System, College Station, Texas, USA, 2011.
8. Dodds W. K. Freshwater ecology: concepts and environmental applications. Academic Press, 2002.
9. Malago A., Venhor M., Gericke A., Vigiak O., Bouraoui F., Grizzetti B., Kovacs A. Modelling nutrient pollution in the Danube River Basin: a comparative study of SWAT, MONERIS and GREEN models: Joint Research Centre technical reports (JRC99193). 2015. doi:10.2788/156278.
10. Osadchy V., Nabyvanets B., Linnik P., Osadcha N., Nabyvanets Ju. Processes Determining Surface Water Chemistry, -Springer, 2016.- 240 p
11. Salomons W. Metals in the hydrocycle / W. Salomons, U. Förstner. – Berlin, Heidelberg: Springer–Verlag, 1984. – 352p.
12. Venohr M., Hirt U., Hofmann J. et all Modelling of Nutrient Emissions in River Systems – MONERIS – Methods and Background/ Internat. Rev. Hydrobiol. **96** 2011 5 435–483

Додаткова

1. Адамсон А. Физическая химия поверхностей / А. Адамсон ; [пер. с англ. Канд. хим. наук И. Г. Абидора]. – М. : Изд. “Мир”, 1979. – 568с.

2. Айвазян С. А. Прикладная статистика. Исследование зависимостей / Айвазян С. А., Енюков И. С., Мешалкин Л. Д. – М. : Финансы и статистика, 1985. – 487 с.
3. Алекин О. А. Сток растворенных веществ с территории СССР / О. А. Алекин, Л. В. Бражникова. – М. : Наука, 1964. – 144 с.
4. Алекин О. А. Факторы, нарушающие пресыщенность растворов карбоната кальция / О. А. Алекин, Н. П. Моричева // Гидрохимические материалы. – 1964. – Т. 37. – С. 42–48.
5. Аналітична хімія поверхневих вод / Б.Й.Набиванець, В.І.Осадчий, І.М.Осадча та ін. – К.: Наукова думка, 2007. – 455 с.
6. Варшал Г. М. О состоянии минеральных компонентов в поверхностных водах / Г. М. Варшал // Проблемы аналитической химии. Методы анализа природных и сточных вод. – М. : Наука, 1977. – Т. 5. – С. 94–107.
7. Гидрология и гидрохимия Днепра и его водохранилищ / [Денисова А. И., Тимченко В. М., Нахшина В. М. и др.]. – Киев : Накова думка, 1989. – 216 с.
8. Гідрохімічний довідник / В.І.Осадчий, Б.Й.Набиванець, Н.М.Осадча, Ю.Б.Набиванець. – К.: Ніка-Центр, 2008. – 655.
9. Глазовская М.А. Геохимия природных и техногенных ландшафтов СРСР / М.А.Глазовская. – М.: Высшая школа, 1988. – 328 с.
10. Горев Л. Н. Гидрохимические равновесия / Л. Н. Горев, В. И. Пелешенко. – К. : изд. КГУ, 1979. – 111с.
11. Гріссбах Р. Теория и практика ионного обмена / Р. Гріссбах. – М. : Іностр. лит., 1963. – 499с.
12. Елпатьевский П. В. Геохимия миграционных потоков в природных и природно-техногенных геосистемах / П. В. Елпатьевский. – М. : Наука, 1993. – 253 с.
13. Крайнов С. Р. Геохимические модели прогноза формирования качества подземных вод / С. Р. Крайнов // Водные ресурсы. – 1999. – Т. 26. – № 3. – С. 322–334.
14. Крайнов С. Р. Гидрогеохимия / С. Р. Крайнов, В. М. Швец. – М. : Недра, 1992. – 462 с.
15. Осадчий В. І. Методологічні основи дослідження чинників та процесів формування хімічного складу поверхневих вод України : автореф. дис. докт. геогр. наук. : спец. 11.00.07 “Гідрологія суші, водні ресурси, гідрохімія” / В. І. Осадчий. – К., 2008.– 32 с.
16. Сніжко С. І. Теорія і методи аналізу регіональних гідрохімічних систем / С. І. Сніжко. – К. : Ніка-Центр, 2006. – 283 с.

17. Moriasi D. N., Arnold J. G., Van Liew M.W., Bingner R. L., Harmel R. D., Veith T. L. Model evaluation guidelines for systematic quantification of accuracy in watershed simulations. *Am. Soc. Agric. Biol. Eng.* 2007. Vol. 50 (3). P. 885–900.
18. Osadchy V. Modelling of trace metal migration forms in water of the Dnieper reservoirs / V. Osadchy, N. Osadcha, Yu. Nabyvanets // *Ekologija* (Vilnous). – 2003. – N2. – P.63–67.