

Составил: С.П. Смышляев, д. ф.-м. н., профессор кафедры метеорологических прогнозов
РГГМУ

© Смышляев С.П. 2020
© РГГМУ, 2020.

1. Цели освоения дисциплины

Дисциплина «Численное моделирование формирования и эволюции химического загрязнения атмосферы» является одной из основных дисциплин специализации, формирующих компетенции магистров по направлению 05.04.05 – Прикладная гидрометеорология, обучающихся по профилю подготовки – Прикладная метеорология.

Цель дисциплины – освоение обучающимися современных методов расчета изменчивости качества воздуха, определяемого содержанием химически активных газов и аэрозолей.

Основной задачей дисциплины является ознакомление будущих магистров

- с основными методами численного моделирования процессов образования и трансформации атмосферных газов и аэрозолей в нижней атмосфере;
- с процессами влияния химического состава атмосферы на качество воздуха;
- с особенностями одновременного изменения погоды и химического состава нижней атмосферы.

2. Место дисциплины в структуре ОПОП

Дисциплина «Численное моделирование формирования и эволюции химического загрязнения атмосферы» для направления подготовки 05.04.05 – Прикладная гидрометеорология относится к дисциплинам вариативной части профессионального цикла подготовки магистров по профилю подготовки «Прикладная метеорология».

Для освоения данной дисциплины, обучающиеся должны освоить разделы дисциплин: «Математика», «Вычислительная математика», «Физика», «Механика жидкостей и газа», «Физика атмосферы», «Динамическая метеорология», «Численные методы математического моделирования», «Дополнительные разделы численных методов решения задач гидродинамики». Параллельно с дисциплиной «Численное моделирование формирования и эволюции химического загрязнения атмосферы» изучаются такие дисциплины, как: «Дополнительные главы математики», «Технические аспекты гидродинамического моделирования атмосферных процессов», «Моделирование общей циркуляции атмосферы». Дисциплина «Численное моделирование переноса атмосферных примесей» является базовой для освоения дисциплин: «Физические основы формирования климата», «Основные закономерности общей циркуляции атмосферы», «Основы теории Солнечно-Земных связей».

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций:

Код компетенции	Компетенция
ОК-1	Способность к абстрактному мышлению, анализу, синтезу
ОК-2	Готовность действовать в нестандартных ситуациях, нести социальную и этическую ответственность за принятые решения
ОПК-3	Способность выявить естественнонаучную сущность проблем, возникающих в ходе профессиональной деятельности, проводить их качественно-количественный анализ
ОПК-5	Готовность делать выводы и составлять практические рекомендации по использованию результатов научных исследований

ПК-1	Понимание и творческое использование в научной деятельности знаний фундаментальных и прикладных разделов специальных гидрометеорологических дисциплин
-------------	---

В результате освоения компетенций в рамках дисциплины «Численное моделирование формирования и эволюции химического загрязнения атмосферы» обучающийся должен:

Знать:

- научное состояние проблемы контроля и прогноза содержания химически активных газовых и аэрозольных примесей в нижней атмосфере;
- методы научных исследований в области численного моделирования изменчивости качества воздуха;
- методику решения диагностических и прогностических задач изменчивости качества воздуха.

Уметь:

- формулировать задачи научных исследований, находить оптимальные пути их решения, организовывать выполнение научных программ;
- применять современные численные методы и другие количественные технологии в научных исследованиях и прогностических разработках по численному моделированию изменчивости качества воздуха;
- пользоваться численными моделями состава нижней атмосферы;
- составлять научные отчеты и статьи о постановке, методах, результатах и практических приложениях научных исследований;
- проводить численные эксперименты по моделированию изменчивости качества воздуха.

Владеть:

- современными методами численного прогноза погоды и качества воздуха;
- способами учета взаимодействия физических и химических процессов в нижней атмосфере.

Иметь представление

о состоянии научной проблемы изменения качества воздуха и влиянии изменчивости содержания атмосферных газов и аэрозолей на состояние окружающей среды и экономическое развитие.

Основные признаки проявленности формируемых компетенций в результате освоения дисциплины «Численное моделирование формирования и эволюции химического загрязнения атмосферы» сведены в таблице.

Соответствие уровней освоения компетенции планируемым результатам обучения и критериям их оценивания

Этап (уровень) освоения компетенции	Основные признаки проявленности компетенции (дескрипторное описание уровня)				
	1.	2.	3.	4.	5.
минимальный	не владеет	слабо ориентируется в терминологии и содержании	Способен выделить основные идеи текста, работает с критической литературой	Владеет основными навыками работы с источниками и критической литературой	Способен дать собственную критическую оценку изучаемого материала
	не умеет	не выделяет основные идеи	Способен показать основную идею в развитии	Способен представить ключевую проблему в ее связи с другими процессами	Может соотнести основные идеи с современными проблемами
	не знает	допускает грубые ошибки	Знает основные рабочие категории, однако не ориентируется в их специфике	Понимает специфику основных рабочих категорий	Способен выделить характерный авторский подход
базовый	не владеет	плохо ориентируется в терминологии и содержании	Владеет приемами поиска и систематизации, но не способен свободно изложить материал	Свободно излагает материал, однако не демонстрирует навыков сравнения основных идей и концепций	Способен сравнивать концепции, аргументированно излагает материал
	не умеет	выделяет основные идеи, но не видит проблем	Выделяет конкретную проблему, однако излишне упрощает ее	Способен выделить и сравнить концепции, но испытывает сложности с их практической привязкой	Аргументированно проводит сравнение концепций по заданной проблематике
	не знает	допускает много ошибок	Может изложить основные рабочие категории	Знает основные отличия концепций в заданной проблемной области	Способен выделить специфику концепций в заданной проблемной области
продвинутый	не владеет	ориентируется в терминологии и содержании	В общих чертах понимает основную идею, однако плохо связывает ее с существующей проблематикой	Видит источники современных проблем в заданной области анализа, владеет подходами к их решению	Способен грамотно обосновать собственную позицию относительно решения современных проблем в заданной области
	не умеет	выделяет основные идеи, но не видит их в развитии	Может понять практическое назначение основной идеи, но затрудняется выявить ее основания	Выявляет основания заданной области анализа, понимает ее практическую ценность, однако испытывает затруднения в описании сложных объектов анализа	Свободно ориентируется в заданной области анализа. Понимает ее основания и умеет выделить практическое значение заданной области
	не знает	допускает ошибки при выделении рабочей области анализа	Способен изложить основное содержание современных научных идей в рабочей области анализа	Знает основное содержание современных научных идей в рабочей области анализа, способен их сопоставить	Может дать критический анализ современным проблемам в заданной области анализа

4. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетные единицы, 72 часа.

Объем дисциплины	Всего часов
	Очная форма обучения
Общая трудоемкость дисциплины	144 часа
Контактная работа обучающихся с преподавателями (по видам аудиторных учебных занятий) – всего:	56
в том числе:	
лекции	28
практические занятия	28
семинарские занятия	-
Самостоятельная работа (СРС) – всего:	88
в том числе:	
курсовая работа	-
контрольная работа	-
Вид промежуточной аттестации (зачет/экзамен)	Экзамен

4.1. Структура дисциплины

Очное обучение

2020 г. набора

№ п/п	Раздел и тема дисциплины	Семестр	Виды учебной работы, в т.ч. самостоятельная работа студентов, час.			Формы текущего контроля успеваемости	Занятия в активной и интерактивной форме, час.	Формируемые компетенции
			Лекции	Семиры Лабораг. Практич.	Самост. работа			
1	Атмосферные газы и аэрозоли нижней атмосферы и их экологическая роль.	3	2	2	8	Вопросы на лекции	2	ОПК-3 ОПК-5 ПК-1 ОК-1
2	Физические и химические процессы, влияющие на изменчивость содержания атмосферных газов и аэрозолей в нижней атмосфере.	3	2	2	12	Вопросы на лекции	4	ОПК-3 ОПК-5 ПК-1 ОК-1 ОК-2
3	Влияние локальных процессов на изменение качества воздуха.	3	2	2	10	Вопросы на лекции	2	ОПК-3 ОПК-5 ПК-1 ОК-1 ОК-2

4	Роль атмосферного переноса изменчивости качества воздуха.	3	2	2	12	Вопросы на лекции	2	ОПК-3 ОПК-5 ПК-1 ОК-1 ОК-2
5	Роль вертикального переноса изменчивости качества воздуха.	3	6	4	10	Вопросы на лекции	2	ОПК-3 ОПК-5 ПК-1
6	Численное моделирование локальных процессов изменения химического состава нижней атмосферы.	3	6	4	12	Вопросы на лекции	6	ОПК-3 ОПК-5 ПК-1 ОК-1 ОК-2
7	Численное моделирование влияния атмосферного переноса на изменение качества воздуха.	3	4	6	12	Вопросы на лекции	2	ОПК-3 ОПК-5 ПК-1
8	Влияние глобальных процессов на изменение качества воздуха.	3	4	6	12	Вопросы на лекции	6	ОПК-3 ОПК-5 ПК-1 ОК-1 ОК-2
ИТОГО: 144 ч.			28	28	88		18	

4.2. Содержание разделов дисциплины

4.2.1. Атмосферные газы и аэрозоли нижней атмосферы и их экологическая роль.

Малые газы нижней атмосферы. Их влияние на качество воздуха, экологические проблемы с ними связанные. Пространственные и временные масштабы изменчивости малых газов нижней атмосферы. Особенности переноса малых газов в тропосфере. Методы изучения газового состава атмосферы.

4.2.2. Физические и химические процессы, влияющие на изменчивость содержания атмосферных газов и аэрозолей в нижней атмосфере.

Физические и химические процессы, определяющие изменчивость малых газов в атмосфере. Взаимодействие и обратные связи между физическими и химическими процессами в атмосфере. Единицы измерений содержания малых газов в атмосфере. Проблема моделирования распределения и изменчивости малых газов в нижней атмосфере. Постановка задачи. Виды моделей.

4.2.3. Влияние локальных процессов на изменение качества воздуха.

Особенности химических процессов в районах с интенсивными выбросами загрязняющих веществ в атмосферу. Создание сжатых схем химических реакций для зон с интенсивным загрязнением. Методы моделирования перераспределения атмосферных газов в региональном масштабе. Распространение солнечной радиации в Земной атмосфере. Прохождение солнечной радиации через плоско-параллельную и сферическую атмосферу. Оптическая масса атмосферы. Полный поток коротковолновой радиации в атмосфере.

Параметризация процессов фотодиссоциации в уравнениях баланса газовых примесей. Радиационный баланс Земли как планеты. Нагрев атмосферы при поглощении солнечной радиации атмосферными газами. Парниковый эффект и его простейшая модель. Возмущение радиационного баланса при увеличении концентраций парниковых газов.

4.2.4. Роль атмосферного переноса в изменчивости качества воздуха.

Горизонтальный перенос массы в атмосфере. Процессы, влияющие на глобальное перераспределение газов и аэрозолей. Методы моделирования глобального переноса. Проблема переноса массы через полюс и методы его моделирования.

4.2.5. Роль вертикального переноса в изменчивости качества воздуха.

Особенности вертикального переноса в атмосфере. Силы плавучести и устойчивость в атмосфере. Потенциал для влияния атмосферных малых газов на изменения климата. Глобальное потепление и влияние малых газов на этот процесс. Радиационные эффекты атмосферного аэрозоля. Моделирование влияния малых газов на изменения климата.

4.2.6. Численное моделирование локальных процессов изменения химического состава нижней атмосферы.

Применение принципов химической кинетики к атмосферным химическим процессам. Столкновительная теория химических процессов в атмосфере. Параметризация трехмолекулярных процессов в уравнении баланса газов. Параметризация процессов мономолекулярного распада. Жесткость системы уравнений баланса газовых примесей в атмосфере. Требования к численным методам решения уравнений химической кинетики. Явные и неявные методы решения уравнений химической кинетики. Полуаналитический квазистационарный метод решения уравнений химической кинетики. Полуявные итерационные методы решения уравнений химической кинетики в атмосфере. Многошаговые явно-неявные методы. Методы высокого порядка аппроксимации, метод Гира.

4.2.7. Численное моделирование влияния атмосферного переноса на изменение качества воздуха.

Численное решение уравнений баланса газовых примесей. Метод шагов по времени. Временные масштабы и времена жизни атмосферных газов. Метод расщепления уравнений баланса газовых примесей. Метод переменных направлений для расчета переноса газов в атмосфере. Адвективная и потоковая формы уравнения переноса атмосферных газов. Методы решения уравнения переноса в адвективной форме. Методы решения уравнения переноса в потоковой форме. Полулагранжевая схема переноса газовых примесей.

4.2.8. Влияние глобальных процессов на изменение качества воздуха.

Взаимодействие физических и химических процессов в региональном и глобальном масштабах. Влияние состава атмосферы на численный прогноз погоды. Интегрированное моделирование одновременного изменения погоды и качества воздуха. Модели химической погоды. Онлайн и офлайн взаимодействие моделей численного прогноза погоды и качества воздуха в глобальном и региональном масштабах. Моделирование влияния опасных явлений погоды на изменения состава атмосферы.

4.3. Семинарские, практические, лабораторные занятия, их содержание

№ п/п	№ раздела дисциплины	Тематика занятий	Форма проведения	Формируемые компетенции
1	1	Аппроксимация производных и уравнений с частными производными.	Практическая работа	ОПК-3 ОПК-5 ОК-1 ОК-2
2	2	Решение уравнений химической кинетики.	Практическая работа	ОПК-3 ОПК-5 ОК-1 ОК-2
3	3	Аппроксимация уравнений модели переноса газов в региональном масштабе.	Практическая работа	ОПК-3 ОПК-5 ПК-1 ОК-1 ОК-2
4	4	Практическое использование оффлайн- и онлайн-схем моделирования качества воздуха.	Практическая работа	ОПК-3 ОПК-5 ПК-1
5	5	Схемы расщепления физических и химических процессов.	Практическая работа	ОПК-3 ОПК-5 ПК-1 ОК-1 ОК-2
6	6	Решение уравнений изменения качества воздуха.	Практическая работа	ОПК-3 ОПК-5 ПК-1

Семинарских и лабораторных занятий учебным планом не предусмотрено.

5. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов и оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

5.1. Текущий контроль

а). Образцы тестовых заданий текущего контроля

Вопросы на лекции:

1. Как малые газы атмосферы влияют на качество воздуха?
2. Какие основные процессы влияют на изменение качества воздуха?
3. В чем разница влияния газов и аэрозолей на качество воздуха?

4. *Какие фундаментальные законы определяют уравнения изменения качества воздуха?*
5. *Что такое вторичные загрязнители атмосферы?*
6. *В чем состоит применение химической кинетики к атмосферным процессам?*
7. *Как учесть одновременное влияние локальных процессов и переноса на качество воздуха?*
8. *Как глобальные процессы могут повлиять на локальное качество воздуха?*

б). Примерная тематика рефератов, эссе, докладов

Выполнение рефератов, эссе и докладов по данной дисциплине не предусмотрено учебным планом.

в). Примерные темы курсовых работ, критерии оценивания

Выполнение курсовых работ по данной дисциплине не предусмотрено учебным планом.

5.2. Методические указания по организации самостоятельной работы

В течение семестра студент обязан самостоятельно прорабатывать материал, изложенный на лекциях, для чего рекомендуется использовать сделанные на лекциях конспекты, изучить основную и дополнительную литературу, предоставленные преподавателем презентации лекций. Освоение материалов и выполнение практических работ проходит при регулярных консультациях с преподавателем, для чего предоставлена возможность использовать удаленный доступ (Интернет).

5.3. Промежуточный контроль:

экзамен

5.4. Перечень вопросов к экзамену:

1. Вычислить содержание атмосферных загрязнителей при заданных отношениях смеси.
2. Оценить время жизни первичных загрязнителей атмосферы.
3. Рассчитать скорость образования вторичных загрязнителей при заданных концентрациях первичных загрязнителей атмосферы?
4. Оценить вертикальное перемешивание первичных загрязнителей при заданных коэффициентах турбулентности.
5. Сравнить атмосферный перенос коротко и долгоживущих загрязнителей.
6. Оценить скорость гравитационного осаждения аэрозольных частиц разных размеров.

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

а) основная литература:

1. Физика и химия атмосферы. Курс лекций. КОМФ УрГУ. 2012 - ftp://remotesensing.ru/PhysChemAtm_lecture1.ppt.
2. Алоян А.Е. Моделирование динамики и кинетики газовых примесей и аэрозолей в атмосфере – М.: Наука. – 2008. - 416 с.
3. Jacob D. Introduction to atmospheric chemistry. 4th Edition. 2011. - <http://acmg.seas.harvard.edu/people/faculty/djj/book/index.html>.
4. Flynn G. The kinetics of atmospheric ozone. Columbia University. 2012. - http://www.columbia.edu/itc/chemistry/chem-c2407/hw/ozone_kinetics.pdf

б) дополнительная литература:

1. Brasseur G., Orlando J.J., Tyndall G.S. Atmospheric chemistry and global change – Oxford University Press, 1999.
2. Seinfeld J. Atmospheric chemistry and physics. From air pollution to climate change. – J.Wiley & sons, Inc., New Jersey, USA, 2006.
3. Jacobson M.Z. Fundamentals of atmospheric modeling – Cambridge University Press, 2005. – 813 p.

в) программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

1. Электронный ресурс. <http://acmg.seas.harvard.edu/education.html>

2. Электронный ресурс. <http://www.columbia.edu/itc/chemistry/chem-c2407/hw/>
3. Электронный ресурс. ftp://remotesensing.ru/PhysChemAtm_lecture1.ppt
4. Электронный ресурс. <http://www.theozonehole.com/aboutus.htm>
5. Электронный ресурс. <http://www.learner.org/courses/envsci/unit/text.php?unit=2&secNum=0>
6. Электронный ресурс. http://www.ccpo.odu.edu/SEES/ozone/oz_class.htm
7. Электронный ресурс. <http://rpw.chem.ox.ac.uk/atmos.html>

7. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Вид учебных занятий	Организация деятельности студента
Лекции (темы №1-6)	<p>Написание конспекта лекций: кратко, схематично, последовательно фиксировать основные положения, выводы, формулировки, обобщения; помечать важные мысли, выделять ключевые слова, термины.</p> <p>Проверка терминов, понятий, технических характеристик с помощью интернет ресурсов с выписыванием толкований в тетрадь. Обозначить вопросы, термины, материал, который вызывает трудности, пометить и попытаться найти ответ в рекомендуемой литературе.</p> <p>Если самостоятельно не удастся разобраться в материале, необходимо сформулировать вопрос и задать преподавателю на лекции, на консультации, или с использованием удаленного доступа через Интернет</p>
Практические занятия (темы №1-6)	<p>Проработка рабочей программы, уделяя особое внимание целям и задачам структуре и содержанию дисциплины.</p> <p>Конспектирование источников.</p> <p>Работа с конспектом лекций, подготовка ответов к контрольным вопросам, просмотр рекомендуемой литературы и работа с текстом. Решение тестовых заданий, решение задач и другие виды работ.</p>
Подготовка к зачету	<p>При подготовке к зачету необходимо ориентироваться на конспекты лекций, рекомендуемую литературу, вопросы для подготовки к зачету и т.д.</p>

8. Информационные технологии, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

Тема (раздел) дисциплины	Образовательные и информационные технологии	Перечень программного обеспечения и информационных справочных систем
Темы 1 и 6	<p><u>информационные технологии</u></p> <p>1. чтение лекций с использованием слайд-презентаций,</p> <p>2. организация взаимодействия с обучающимися посредством электронной почты</p> <p>3. использование архивов данных, ассимилированных в модель UK Met Office и MERRA2, пакет прикладных программ, предназначенных для анализа и диагностики волновых процессов и нелинейных взаимодействий в атмосфере.</p> <p><u>образовательные технологии</u></p> <p>1. интерактивное взаимодействие педагога и студента</p> <p>2. сочетание индивидуального и</p>	<p>1. Пакет Microsoft Excel, PowerPoint.</p> <p>2. Электронно-библиотечная система ГидроМетеоОнлайн http://elib.rshu.ru</p> <p>3. Использование сайта кафедры метеорологических прогнозов: http://ra.rshu.ru/mps/dwn/apogor/Динамика/ http://ra.rshu.ru/mps/dwn/apogor/Нелинейные_процессы/</p> <p>4. Данные ре-анализов NASA: http://gmao.gsfc.nasa.gov/research/merra/</p> <p>5. Данные ре-анализов NASA: http://gmao.gsfc.nasa.gov/products/document_s/MERRA_File_Specification.pdf</p> <p>6. Данные ре-анализов UK MET OFFICE http://badc.nerc.ac.uk/browse/badc/ukmo-assisim</p> <p>7. Данные ре-анализов UK MET OFFICE http://badc.nerc.ac.uk/help/software/xconv/index</p>

	коллективного обучения	8. Программный пакет GrADs, предназначенный для визуализации четырехмерных (долгота, широта, высота и время) распределений метеорологических полей 9. Трехмерная модель общей циркуляции средней и верхней атмосферы 10. Использование сайта лаборатории моделирования средней и верхней атмосферы и кафедры метеорологических прогнозов: http://ra.rshu.ru , http://ra.rshu.ru/mp .
--	------------------------	---

9. Материально-техническое обеспечение дисциплины

1. **Учебная аудитории для проведения занятий лекционного типа** – укомплектована специализированной (учебной) мебелью, набором демонстрационного оборудования и учебно-наглядными пособиями, обеспечивающими тематические иллюстрации, соответствующие рабочим учебным программам дисциплин (модулей).
2. **Учебная аудитории для проведения занятий семинарского типа** - укомплектована специализированной (учебной) мебелью, техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации, оснащенная компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечено доступом в электронную информационно-образовательную среду организации
3. **Учебная аудитория для групповых и индивидуальных консультаций** - укомплектована специализированной (учебной) мебелью, техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации.
4. **Учебная аудитория для текущего контроля и промежуточной аттестации** - укомплектована специализированной (учебной) мебелью, техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации.
5. **Помещение для самостоятельной работы** – укомплектовано специализированной (учебной) мебелью, оснащено компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечено доступом в электронную информационно-образовательную среду организации.

10. Особенности освоения дисциплины для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья

Обучение обучающихся с ограниченными возможностями здоровья при необходимости осуществляется на основе адаптированной рабочей программы с использованием специальных методов обучения и дидактических материалов, составленных с учетом особенностей психофизического развития, индивидуальных возможностей и состояния здоровья таких обучающихся (обучающегося).

При определении формы проведения занятий с обучающимся-инвалидом учитываются рекомендации, содержащиеся в индивидуальной программе реабилитации инвалида, относительно рекомендованных условий и видов труда.

При необходимости для обучающихся из числа инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья создаются специальные рабочие места с учетом нарушенных функций и ограничений жизнедеятельности.