E – Charakteristika studijního předmětu

Název studijního předmětu	**Modelování chemických a biologických procesů**				
Typ předmětu	povinný			**dopor. ročník / semestr**	3/Z
Rozsah studijního předmětu	2+2	**hod. za týden**	4	**kreditů**	5
Jiný způsob vyjádření rozsahu					
Způsob zakončení	zkouška			**Forma výuky**	přednášky, cvičení
Další požadavky na studenta					

Vyučující	**Ing. Jan Šembera, Ph. D.**

Stručná anotace předmětu

Stručná anotace předmětu
V rámci předmětu budou studenti seznámeni se základy simulace chemických a biologických procesů zejména v souvislosti se sanacemi. Důraz bude kladen na zvládnutí simulačních softwarů a pochopení jejich omezení a mezí aplikovatelnosti a postupů získání potřebných parametrů.

Témata přednášek:
chemické procesy
1.-2. Rovnovážné a kinetické děje, možnosti vyjádření koncentrace látek v roztoku, sorpce a srážení minerálů, matematické vyjádření těchto jevů
3. Numerické řešení rovnovážných dějů
4. Numerické řešení kinetických dějů a kombinace rovnovážných dějů s kinetickými
5. Softwarové prostředky simulace chemických a geochemických procesů
6. Parametry rovnovážných dějů; termodynamické databáze a jejich meze použití
7. Způsoby získávání parametrů kinetických dějů
8. Možnosti zjednodušení výpočtu simulovaných jevů – důvody, podmínky a postupy
9.-10. Praktický příklad – simulace sanace organického znečištění půdy užitím nanoželeza
biologické procesy
11. Vymezení studovaných biologických procesů, analogie k chemickým procesům
12. Způsoby získávání parametrů biologických dějů
13.-14. Praktický příklad – simulace sanace organického znečištění půdy užitím laktátů

Cvičení u počítačů s GWB, Phreeqc a MSOffice budou navazovat na přednášky

Studijní literatura a studijní pomůcky