



KAPITAŁ LUDZKI
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI

Projekt współfinansowany przez
Unię Europejską w ramach
Europejskiego Funduszu
Społecznego

UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI
FUNDUSZ SPOŁECZNY



Nazwa przedmiotu		Kod ECTS	
Modelowanie w ochronie środowiska		7.2.0599	
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot			
Katedra Chemii i Radiochemii Środowiska			
Studia			
wydział	kierunek	poziom	drugiego stopnia
Wydział Chemii	Ochrona środowiska	forma	stacjonarne
		moduł	Podstawowa
		specjalnościowy	Podstawowa
		specjalizacja	Podstawowa
Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)			
prof. dr hab. Tomasz Puzyn; mgr Anna Rybińska-Fryca; mgr Ewelina Wyrzykowska; dr inż. Karolina Jagiełło; dr Agnieszka Gajewicz-Skrętna			
Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin		Liczba punktów ECTS	
Formy zajęć		2	
Wykład, Ćw. laboratoryjne		zajęcia - 30 godz.	
Sposób realizacji zajęć		konsultacje - 2 godz.	
zajęcia w sali dydaktycznej		praca własna studenta - 18 godz.	
Liczba godzin		RAZEM: 50 godz. - 2 pkt. ECTS	
Wykład: 15 godz., Ćw. laboratoryjne: 15 godz.			
Termin realizacji przedmiotu			
2021/2022 zimowy			
Status przedmiotu		Język wykładowy	
obowiązkowy		polski	
Metody dydaktyczne		Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne	
- Wykład z prezentacją multimedialną		Sposób zaliczenia	
- lab.komputerowe-wykonanie ćwiczeń, analiza i dyskusja nad wynikami		Zaliczenie na ocenę	
		Formy zaliczenia	
		- zaliczenie pisemne	
		- zaliczenie ustne	
		- kolokwium	
		Podstawowe kryteria oceny	

Wykład:

- Zaliczenie pisemne składające się z kilkunastu pytań testowych oraz kilku pytań otwartych (zadań) obejmujących zagadnienia wymienione w treściach programowych wykładu oraz ćwiczeń laboratoryjnych.
- Warunkiem uzyskania pozytywnej oceny z zaliczenia pisemnego jest zdobycie minimum 51% punktów możliwych do uzyskania z testu. Skala ocen jest zgodna z obowiązującym na Uniwersytecie Gdańskim regulaminem studiów.
- Studenci, którzy uzyskali w pierwszym terminie zaliczenia pisemnego wynik 51% i więcej, a chcą podwyższyć ocenę, mogą zgłosić się na zaliczenie ustne. Ocena końcowa jest w tym przypadku średnią arytmetyczną z ocen uzyskanych na zaliczeniu pisemnym i ustnym.
- Zaliczenie ustne jest obowiązkowe dla studentów, którzy uzyskali z zaliczenia pisemnego wynik pomiędzy 41% a 50%. W tym przypadku na student otrzymuje szansę uzupełnienia punktów brakujących do uzyskania oceny dostatecznej (omawia sposób poprawnego rozwiązania zadań z zaliczenia pisemnego). W tym przypadku nie ma możliwości poprawienia oceny z pierwszego terminu zaliczenia na wyższą.
- Negatywna ocena z zaliczenia (pisemnego i ustnego) musi być poprawiona podczas dodatkowego zaliczenia odbywającego się w oparciu o te same zasady co zaliczenie w pierwszym terminie.

Ćwiczenia laboratoryjne:

- Samodzielne wykonanie wszystkich trzech ćwiczeń w pracowni komputerowej. Nieobecność można odrobić podczas zajęć z inną grupą ćwiczeniową lub w trakcie konsultacji u prowadzącego.
- Potwierdzenie umiejętności prezentacji uzyskanych wyników oraz ich naukowej dyskusji poprzez uzyskanie pozytywnej oceny z trzech sprawozdań obejmujących wykonane ćwiczenia.
- Zaliczenie wszystkich trzech kolokwium wejściowych obejmujących podstawowe zagadnienia teoretyczne niezbędne do poprawnego wykonania ćwiczenia. Niezaliczone kolokwia należy poprawić w dodatkowym terminie wyznaczonym przez prowadzącego na zakończenie semestru (poza zajęciami).
- Ocena końcowa z ćwiczeń jest średnią ważoną ze średnich arytmetycznych ocen otrzymanych z (i) kolokwium pisemnych (waga 40%), oraz (ii) sprawozdań obejmujących wykonane ćwiczenia (waga 60%). Ocena może być podwyższona o połowę studentom szczególnie aktywnie uczestniczącym w dyskusji naukowej podczas zajęć.

Sposób weryfikacji założonych efektów uczenia się

Sposób weryfikacji przyswojonej wiedzy:

Podczas zaliczenia pisemnego sprawdzana jest wiedza studenta na temat podstawowych zagadnień związanych z problematyką ochrony środowiska oraz oceną ryzyka dla związków chemicznych, wymienia narzędzia stosowane w ocenie ryzyka; omawia przykłady modeli wykorzystywanych w ochronie środowiska, wymienia zalety i ograniczenia poszczególnych typów modeli (K_OŚII_W02, K_OŚII_W04).

Sposób weryfikacji nabycia umiejętności:

Po ukończeniu kursu każdy student stawia hipotezy badawcze oraz dobiera metody, techniki i narzędzia badawcze w celu weryfikacji postawionej hipotezy; analizuje dane doświadczalne z wykorzystaniem metod statystycznych oraz konstruuje i przeprowadza walidację modeli QSAR/QSPR; wykorzystuje dostępne modele mające zastosowanie w ocenie ryzyka chemicznego (K_OŚII_U04).

Sposób weryfikacji nabrania kompetencji społecznych:

Po ukończeniu kursu każdy student: jest przekonany o korzyści stosowania metod komputerowych w ochronie środowiska oraz rozumie potrzebę dalszego kształcenia się w zakresie działań związanych z ochroną środowiska (K_OŚII_K08).

Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi**A. Wymagania formalne**

Brak (przedmiot na I roku studiów).

B. Wymagania wstępne

- umiejętność obsługi komputera w zakresie podstawowym (kopiowanie plików i uruchamianie aplikacji w systemie operacyjnym Windows/Linux, arkusz kalkulacyjny, przeglądarka stron WWW);
- wiedza i umiejętności w zakresie chemii fizycznej, prawa ochrony środowiska i toksykologii w zakresie przewidzianym programem studiów I stopnia;
- znajomość języka angielskiego na poziomie biegłości B2 Europejskiego Systemu Opisu Kształcenia Językowego.

Cele kształcenia

- Zaznajomienie studentów z problematyką oceny ryzyka stwarzanego przez substancje chemiczne, w tym z zasadami funkcjonowania europejskiego systemu REACH oraz wynikających z niego obowiązków prawnych.
- Zapoznanie studentów z możliwościami i ograniczeniami metod modelowania wykorzystywanych w ochronie środowiska ze szczególnym uwzględnieniem modeli QSAR/QSPR oraz MM.
- Zapoznanie studentów z dostępnym oprogramowaniem oraz możliwościami jego wykorzystania w procesie oceny ryzyka chemicznego.
- Wykształcenie umiejętności samodzielnego zaplanowania i przeprowadzenia elementów oceny ryzyka chemicznego w oparciu o metody modelowania oraz aktywnej postawy wobec pojawiających się problemów.
- Wykształcenie umiejętności poprawnego przygotowania raportu (sprawozdania) z przeprowadzonych badań ze szczególnym uwzględnieniem trzech elementów: (i) prezentacji wyników, (ii) dyskusji uzyskanych rezultatów oraz (iii) poprawnego sformułowania wniosków z przeprowadzonego modelowania.
- Uwrażliwienie studentów na problemy ochrony własności intelektualnej i praw autorskich.

Treści programowe

A. Problematyka wykładu:

1. Modele i modelowanie: pojęcie modelu; podstawowy podział modeli (fizyczne i matematyczne); przykłady modeli wykorzystywanych w ochronie środowiska; zalety i ograniczenia modeli.
2. Problematyka zanieczyszczenia środowiska substancjami chemicznymi: wypadki związane z niekontrolowanym uwolnieniem substancji chemicznych do środowiska; historia ochrony środowiska przed substancjami chemicznymi; źródła zanieczyszczeń chemicznych i przegląd najważniejszych substancji uznanych za niebezpieczne; krajowe oraz między-narodowe strategie i regulacje w zakresie ochrony środowiska przed substancjami chemicznymi (m. in. Rozporządzenie REACH); podstawowe założenia oceny ryzyka stwarzanego przez zanieczyszczenia chemiczne; właściwości fizyko-chemiczne związku o kluczowym znaczeniu dla oceny ryzyka chemicznego; procesy rozprzestrzeniania się związków chemicznych w środowisku; trwałość i degradacja związków chemicznych; zjawiska bioakumulacji i biomagnifikacji w sieciach troficznych; pojęcie toksyczności i rodzaje efektów toksycznych; związki chemiczne określane akronimami PBT oraz vPvB.
3. Modele zależności pomiędzy strukturą chemiczną a aktywnością/właściwościami (ang. Quantitative Structure-Activity Relationships QSAR oraz Quantitative Structure-Property Relationships, QSPR) jako przykłady matematycznych modeli probabilistycznych wykorzystywanych w ocenie ryzyka stwarzanego przez związki chemiczne: idea modelowania QSAR/QSPR; deksyptory struktury chemicznej; ocena jakości dostępnych danych eksperymentalnych wykorzystywanych w modelowaniu; konstruowanie i walidacja modeli QSAR/QSPR; dostępne modele mające zastosowanie w ocenie ryzyka chemicznego (EPI-Suite, PBT Profiler, SPARC).
4. Wielokomponentowe modele rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń chemicznych w środowisku (ang. Multimedia mass-balance Models) jako przykłady matematycznych modeli deterministycznych: pojęcie wielo-komponentowego modelu środowiska; zastosowania modeli wielokomponentowych; poziomy kompleksowości i podstawowe założenia poszczególnych typów modeli; podział modeli ze względu na zasięg regionalny; dane wejściowe do modelu i ich źródła; przykłady powszechnie wykorzystywanych modeli wielokomponentowych; idea modelowania w oparciu o połączenie technik QSPR-MM; tworzenie scenariuszy narażenia w oparciu o modelowanie komputerowe.
5. Modele fizyczne wykorzystywane w ocenie ryzyka: zalety i ograniczenia modeli fizycznych; przykłady modeli fizycznych znajdujących zastosowanie do wyznaczania właściwości fizykochemicznych (np. model podziału związku pomiędzy oktanol i wodę), minimalizowania emisji (np. model spalarni odpadów), przewidywania procesów transportu w środowisku (np. tunel wiatrowy), przewidywania bioakumulacji (np. modele akwariowe) oraz toksyczności (badania toksyczności in vitro).

B. Problematyka ćwiczeń laboratoryjnych:

1. Najważniejsze właściwości fizykochemiczne mające wpływ na trwałość i rozprzestrzenianie się związków chemicznych w środowisku naturalnym; sporządzenie pełnej charakterystyki ryzyka wybranych substancji chemicznych metodą oceny punktowej.
2. Ilościowe modelowanie zależności pomiędzy strukturą chemiczną a właściwościami chemicznymi (QSPR) dla nowych związków chemicznych; krytyczna ocena uzyskiwanych wyników; poprawne przygotowanie raportu (sprawozdania) z przeprowadzonych badań ze szczególnym uwzględnieniem trzech elementów: (i) prezentacji wyników, (ii) dyskusji uzyskanych rezultatów oraz (iii) poprawnego sformułowania wniosków z przeprowadzonego modelowania; problematyka ochrony własności intelektualnej i praw autorskich.
3. Modelowanie całkowitej trwałości i mobilności badanych związków w środowisku w oparciu o modele wielokomponentowe (MM); krytyczna ocena uzyskiwanych wyników; poprawne przygotowanie raportu (sprawozdania) z przeprowadzonych badań ze szczególnym uwzględnieniem trzech elementów: (i) prezentacji wyników, (ii) dyskusji uzyskanych rezultatów oraz (iii) poprawnego sformułowania wniosków z przeprowadzonego modelowania; problematyka ochrony własności intelektualnej i praw autorskich.

Wykaz literatury

A. Literatura wymagana do ostatecznego zaliczenia zajęć (zdania egzaminu):

A.1. wykorzystywana podczas zajęć

- Skrypt i instrukcje do ćwiczeń przygotowane przez prowadzących zajęcia.
- Rozporządzenie (WE) nr 1907/2006 Parlamentu Europejskiego i Rady z dnia 18 grudnia 2006 r. w sprawie rejestracji, oceny, udzielania zezwoleń i stosowanych ograniczeń w zakresie chemikaliów (REACH) i utworzenia Europejskiej Agencji Chemikaliów, zmieniające dyrektywę 1999/45/WE oraz uchylające rozporządzenie Rady (EWG) nr 793/93 i rozporządzenie Komisji (WE) nr 1488/94, jak również dyrektywę Rady 76/769/EWG i dyrektywy Komisji 91/155/EWG, 93/67/EWG, 93/105/WE i 2000/21/WE.
- UN-ECE 1998: Protocol to the 1979 convention on long range transboundary air pollution on persistent organic pollutants and executive body decision 1998/2 on information to be submitted and the procedure for adding substances to annexes I, II or III to the protocol on persistent

organic pollutants. Document: ECE/EB.AIR/60, United Nations, New York, Geneva.

- UNEP 2001: Final act of the conference of plenipotentiaries on the Stockholm convention on persistent organic pollutants. Document: UNEP/POPS/CONF/4., United Nations Environment Programme, Stockholm.
- T. Puzyn, J. Leszczynski, M. T. D. Cronin: Recent Advances in QSAR Studies: Methods and Applications. ?Springer (2010). ISBN: 978-1-4020-9782-9.
- The OECD software tool for screening chemicals for persistence?and long-range transport potential?Fabio Wegmann, Laurent Cavin, Matthew MacLeod, Martin Scheringer, Konrad Hungerbuhler Environmental Modelling & Software 24 (2009) 228–237.
- OECD 2002: Report of the OECD/UNEP Workshop on the Use of Multimedia Models for Estimation Overall Environmental Persistence and Long-Range Transport in the context of PBTs/POPs Assessment, OECD Environment, Health and Safety Publications, Paris, France.
- OECD 2004: Guidance Document on the Use of Multimedia Models for Estimativ Overall Environmental Persistence and Long-Range Transprt, OECD Environment, Health and Safety Publications, Paris, France.
- Puzyn T., Mostrąg A., Suzuki N., Falandysz J. QSPR-based estimation of the atmospheric persistence for chloronaph-thalene congeners. Atmos. Environ. 42 (2008) 6627-6636.

A.2. studiowana samodzielnie przez studenta

- G.W vanLoon, S.J. Duffy: Chemia środowiska. Wydawnictwo Naukowe PWN (2008). ISBN: 978-83-01-15324-3.
- T. Puzyn, A. Mostrąg-Szlichtyng, N. Suzuki, M. Haranczyk. Metody chemometryczne w ocenie ryzyka: ilościowe zależności pomiędzy strukturą chemiczną a właściwościami (QSPR) dla nowych rodzajów zanieczyszczeń chemicznych. W: Zuba D., Parczewski A. (Eds.): Chemometria w nauce i praktyce. Wydawnictwo Instytutu Ekspertyz Sądowych, Kraków (2009). ISBN: 978-83-87425-38-8.

B. Literatura uzupełniająca

- Falandysz J. (1999): Polichlorowane bifenyle (PCBs) w środowisku: chemia, analiza, toksyczność, stężenia i ocena ryzyka. Fundacja Rozwoju Uniwersytetu Gdańskiego, Gdańsk.
- Klasmeier J., Matthies M., Macleod M., Fenner K., Scheringer M., Stroebe M., Le Gall A. C., McKone T., Van De Meent D., Wania F. (2006): Application of multimedia models for screening assessment of long-range transport potential and overall persistence. Environ. Sci. Technol. 40, 53-60.
- Wania F., Mackay D. (1995): A Global Distribution Model for Persistent Organic-Chemicals. Sci. Total Environ. 160-61, 211-232.
- Gouin T., Mackay D., Jones K. C., Harner T., Meijer S. N. (2004): Evidence for the "grasshopper" effect and fractionation during long-range atmospheric transport of organic contaminants. Environ. Pollut. 128, 139-148.

Kierunkowe efekty uczenia się	Wiedza
<p>K_OŚII_W02 stawia hipotezy i analizuje wyniki wykorzystując metody statystyczne oraz modelowanie w ochronie środowiska;</p> <p>K_OŚII_W04 wybiera metody, techniki i narzędzia badawcze stosowane w ochronie środowiska;</p> <p>K_OŚII_U04 w sposób krytyczny analizuje dane doświadczalne z zakresu ochrony środowiska metodami statystycznymi oraz modelowania z wykorzystaniem technik i narzędzi informatycznych;</p> <p>K_OŚII_K08 Inicjuje i bierze pod uwagę w działalności organizacyjnej aktywność na rzecz środowiska społecznego i interesu publicznego</p>	<p>Po ukończeniu kursu każdy student:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. wskaże wady i zalety wykorzystywania modeli w ochronie środowiska; 2. rozumie zasady funkcjonowania systemu REACH w Europie oraz wynikające z niego obowiązki prawne; 3. zna najważniejsze teorie opisujące procesy rozprzestrzeniania się? zanieczyszczeń? che-micznych w skali regionalnej i całego globu oraz podstawowe z prawa fizyczne i che-miczne, w oparciu o które te teorie zostały sformułowane; 4. wie na czym polega proces konstruowania oraz walidacji modelu QSAR zgodnie z zale-ceniami OECD; 5. wie na czym polega proces konstruowania oraz walidacji modelu MM zgodnie z zalece-niami OECD; 6. zna zasady prezentowania wyników przeprowadzonych badań modelowych.
	<p>Umiejętności</p> <p>Po ukończeniu kursu każdy student:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. potrafi podać przykłady zastosowania modeli fizycznych i matematycznych (z podziałem na modele probabilistyczne i deterministyczne) we współczesnej ochronie środowiska; 2. potrafi powiązać właściwości chemiczne związku z jego losami w środowisku przyrodni-czym; 3. wykorzystuje dostępne modele QSPR (EPI-Suite, PBT Profiler, SPARC) do wyznaczenia właściwości fizykochemicznych związku; 4. wykorzystuje dostępne modele MM (OECD Tool) do określenia całkowitej trwałości oraz potencjału rozprzestrzeniania się związku chemicznego w środowisku; 5. krytycznie weryfikuje uzyskane rezultaty modelowania; 6. potrafi poprawie przygotować raport (sprawozdanie) z przeprowadzonych badań ze szczególnym uwzględnieniem trzech elementów: (i) prezentacji wyników, (ii) dyskusji uzyskanych rezultatów oraz (iii) poprawnego sformułowania wniosków z przeprowadzo-nego modelowania.
	Kompetencje społeczne (postawy)

Po ukończeniu kursu każdy student:

1. dostrzeże potrzebę przeprowadzania oceny ryzyka dla nowoprojektowanych związków chemicznych w kontekście społecznym (poprawa jakości życia społeczeństwa);
2. potrafi uczestniczyć w dyskusji o problemach współczesnej ochrony środowiska opierając się na rzetelnie zweryfikowanych argumentach naukowych;
3. rozumie potrzebę dalszego kształcenia się;
4. wykazuje możliwie samodzielne, aktywne podejście do problemów oraz kreatywność w pracy samodzielnej i zespołowej;
5. wykazuje nienaganną postawę etyczną w zakresie własności intelektualnej i praw autor-skich.

Kontakt

tomasz.puzyn@ug.edu.pl