

**KAPITAŁ LUDZKI**
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCIProjekt współfinansowany przez
Unię Europejską w ramach
Europejskiego Funduszu
Społecznego**UNIA EUROPEJSKA**
EUROPEJSKI
FUNDUSZ SPOŁECZNY

Nazwa przedmiotu		Kod ECTS	
Komputerowa ocena ryzyka chemicznego		7.2.0558	
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot			
Katedra Chemii i Radiochemii Środowiska			
Studia			
wydział	kierunek	poziom	pierwszego stopnia
Wydział Chemii	Ochrona środowiska	forma	stacjonarne
		moduł	wszystkie
		specjalnościowy	wszystkie
		specjalizacja	wszystkie
Nazwisko osoby prowadzącej (osób prowadzących)			
prof. dr hab. Tomasz Puzyn; dr Agnieszka Gajewicz-Skrętna; dr inż. Karolina Jagiełło			
Formy zajęć, sposób ich realizacji i przypisana im liczba godzin		Liczba punktów ECTS	
Formy zajęć		3	
Wykład, Ćw. laboratoryjne		zajęcia - 45 godz.	
Sposób realizacji zajęć		konsultacje - 5 godz.	
zajęcia w sali dydaktycznej		praca własna studenta - 25 godz.	
Liczba godzin		RAZEM: 75 godz - 3 ECTS	
Ćw. laboratoryjne: 30 godz., Wykład: 15 godz.			
Termin realizacji przedmiotu			
2022/2023 letni			
Status przedmiotu		Język wykładowy	
fakultatywny (do wyboru)		polski	
Metody dydaktyczne		Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne	
<ul style="list-style-type: none"> - Wykład z prezentacją multimedialną - wykonywanie zestawu ćwiczeń w pracowni komputerowej na podstawie instrukcji otrzymanej od prowadzącego, połączone z analizą i dyskusją uzyskanych wyników w formie pisemnego sprawozdania. 		Sposób zaliczenia	
		Zaliczenie na ocenę	
		Formy zaliczenia	
		Wykład: •zaliczenie pisemne z pytaniami testowymi i otwartymi (zadaniami) oraz zaliczenie ustne (uzupełnienie egzaminu pisemnego). Ćwiczenia laboratoryjne: •wykonywanie zestawu ćwiczeń w laboratorium komputerowym oraz pisemna prezentacja uzyskanych wyników po każdym ćwiczeniu (sprawozdania), •pisemne kolokwium wejściowe przed każdym ćwiczeniem, •ustalenie oceny zaliczeniowej na podstawie ocen cząstkowych.	
		Podstawowe kryteria oceny	

Wykład:
Zaliczenie pisemne składające się z kilkunastu pytań testowych oraz kilku pytań otwartych (zadań) obejmujących zagadnienia wymienione w treściach programowych wykładu i ćwiczeń laboratoryjnych.
Warunkiem uzyskania pozytywnej oceny z zaliczenia pisemnego jest zdobycie minimum 51% punktów możliwych do uzyskania. Skala ocen jest zgodna z obowiązującym na Uniwersytecie Gdańskim regulaminem studiów.
Studenti, 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 egzaminu pisemnego wynik pomiędzy 41% a 50%. W tym przypadku na student otrzymuje szanse 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 zaliczenia poprawkowego odbywającego się w oparciu o te same zasady co zaliczenie w pierwszym terminie.

Ćwiczenia laboratoryjne:
Samodzielne wykonanie wszystkich zadanych 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 ze sprawozdań obejmujących wykonane ćwiczenia.
Zaliczenie wszystkich 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. Niezaliczenie ćwiczeń laboratoryjnych skutkuje niedopuszczeniem do zaliczenia wykładu do chwili uzyskania zaliczenia.

Sposób weryfikacji założonych efektów kształcenia

Sposób weryfikacji przyswojenia wiedzy:

Zaliczenie pisemne z pytaniami otwartymi i testowymi (K_OŚI_W02; K_OŚI_W03)

Sposób weryfikacji nabycia umiejętności:

Sprawozdania z ćwiczeń, kolokwia wejściowe (K_OŚI_U02)

Sposób weryfikacji nabrania kompetencji społecznych:

Obserwacja pracy studenta na zajęciach laboratoryjnych oraz wykładach (K_OŚI_K02; K_OŚI_K05)

Określenie przedmiotów wprowadzających wraz z wymogami wstępnymi

A. Wymagania formalne

chemia ogólna

B. Wymagania wstępne

posiadanie wiedzy podstawowej z zakresu chemii oraz nauk przyrodniczych

Cele kształcenia

Zaznajomienie studentów z obecnym stanem wiedzy i poziomem zaawansowania komputerowych metod przewidywania toksyczności rekomendowanych w rozporządzeniu REACH jako metody alternatywne.

Zapoznanie studentów z metodologią QSAR, read-across i ich współczesnymi wyzwaniami.

Zapoznanie studentów z dostępnym oprogramowaniem, które może być użyte w modelowaniu toksyczności substancji chemicznych.

Treści programowe

A. Problematyka wykładu:

Najważniejsze komputerowe metody przewidywania toksyczności.

Źródła danych eksperymentalnych do modelowania QSAR i read-across.

Metody wstępnej kontroli danych: problem brakujących danych oraz tzw. punktów odbiegających, transformacje zmiennych, normalizacja rozkładu, badanie korelacji i kowariancji pomiędzy zmiennymi.

Idea i metody obliczania deskryptorów strukturalnych.

Wykorzystanie metod analizy podobieństwa oraz metod read-across do grupowania toksycznych związków chemicznych.

Etapy budowania i walidacji modeli QSAR i read-across. Wiarygodność modeli QSAR i read-across. Kryteria jakości dla modeli QSAR występujące w REACH oraz w regulacjach prawnych innych państw (Japonia, USA).

Kryteria jakości modelu QSAR sugerowane przez OECD, które muszą być spełnione, aby wyniki zostały uznane za wiarygodne.

Wytyczne Wspólnotowego Centrum Badawczego w zakresie QSAR.

B. Problematyka ćwiczeń laboratoryjnych:

Rola jakości danych eksperymentalnych i chemometryczne metody wstępnej oceny jakości danych.

Przygotowanie modeli cząsteczek w zapisie współrzędnych wewnętrznych.

Optymalizacja geometrii molekuly przy wykorzystaniu metod kwantowo-mechanicznych, oraz obliczenia deskryptorów struktury.

Metody analizy podobieństwa (hierarchiczna analiza skupień – HCA, analiza głównych składowych – PCA)

Podstawowe techniki w modelowaniu QSAR.

Metody klasyfikacji i grupowania toksycznych związków chemicznych – metody read-across.

Przegląd gotowych modeli komercyjnie dostępnych na rynku.

Wykaz literatury

A.1. wykorzystywana podczas zajęć

Instrukcje do ćwiczeń przygotowywane 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 dyrektywy 1999/45/WE oraz uchylające rozporządzenie Rady (EWG) nr 793/93 i rozporządzenie Komisji (WE) nr 1488/94, jak również dyrektywy Rady 76/769/EWG i dyrektywy Komisji 91/155/EWG, 93/67/EWG, 93/105/WE i 2000/21/WE.

OECD 2004: Guidance Document on the Use of Multimedia Models for Estimating Overall Environmental Persistence and Long-Range Transport, OECD Environment, Health and Safety Publications, Paris, France.

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. Puzyń, 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:

J. B. Czermiński, A. Iwasiewicz i in.: „Metody statystyczne w doświadczeniach chemicznych”, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 1992 lub wersja starsza tej książki zatytułowana „Metody statystyczne dla chemików”.

Praca zbiorowa pod redakcją H. Kassyk-Rokickiej: „Statystyka. Zbiór zadań”. Polskie Wydawnictwo Ekonomiczne, Warszawa 1997.

S. D. Brown, R. Tauler, B. Walczak (red): Comprehensive chemometrics: Chemical and biochemical data analysis. Amsterdam: Elsevier, 2009

R. Kramer: Chemometric techniques for quantitative analysis. New York: Marcel Dekker, Inc, 2005

D. Zuba, A Parczewski (red.): Chemometria w analizie: wybrane zagadnienia. Kraków: Wydawnictwo Instytutu Ekspertyz Sądowych, 2008

JM. Dobosz: Wspomagana komputerowo statystyczna analiza danych. Warszawa: Akademicka Oficyna Wydawnicza EXIT, Warszawa 2004

Kierunkowe efekty kształcenia

K_OŚI_W02 – Charakteryzuje związki i zależności pomiędzy różnymi dyscyplinami nauk ścisłych i przyrodniczych, wykorzystuje wiedzę z zakresu matematyki, fizyki, chemii i biologii w opisie pojęć, koncepcji oraz zasad w ochronie środowiska

K_OŚI_W03 – Operuje metodami i narzędziami matematycznymi, statystycznymi i informatycznymi w opisie i interpretacji zjawisk i procesów zachodzących w środowisku

K_OŚI_U02 – Planuje, dobiera właściwy sprzęt i aparaturę badawczo-pomiarową oraz wykonuje pomiary fizyko-chemiczne oraz eksperymenty; dokonuje analizy wyników i na ich podstawie formułuje wnioski

K_OŚI_K05 - Identyfikuje poziom swojej wiedzy i umiejętności, wykazuje potrzebę aktualizowania wiedzy o środowisku i jego ochronie, wykazuje potrzebę ciągłego dokształcania się zawodowego i rozwoju osobistego

K_OŚI_K02 - Pracuje indywidualnie wykazując inicjatywę i

Wiedza

Po ukończeniu kursu każdy student:

wie na czym polega proces konstruowania oraz walidacji modelu QSAR zgodnie z zaleceniami OECD;

zna podstawowe rodzaje deskryptorów struktury chemicznej oraz metody ich obliczania;

wskazuje zastosowania metod QSAR i read across w projektowaniu leków, chemii kosmetyków, chromatografii, chemii fizycznej, a także w ocenie ryzyka stwarzanego przez nowe związki chemicznych;

wymieni główne wyzwania stojące przed metodami QSAR i read-across;

zna oprogramowanie wykorzystywane w modelowaniu QSAR i read-across; rozumie zasady funkcjonowania systemu REACH w Europie oraz wynikające z niego obowiązki prawne;

wskazuje związki/grupy związków chemicznych stanowiących duże zagrożenie dla zdrowia człowieka i środowiska przyrodniczego.

Umiejętności

Po ukończeniu kursu każdy student:

potrafi samodzielnie zbudować prosty model QSAR i read-across, poprawnie przeprowadzić jego walidację oraz wykonać predykcję zmiennej zależnej na

samodzielność w działaniach, efektywnie współdziała w zespole pełniąc w nim różne role	podstawie wartości deskryptorów struktury; krytycznie weryfikuje uzyskane rezultaty modelowania i jest w stanie odnieść je do panujących obecnie przepisów.
	Kompetencje społeczne (postawy) Po ukończeniu kursu każdy student: dostrzega korzyści z wykorzystania metod QSAR i read-across w kontekście społecznym (poprawa jakości życia społeczeństwa) i ekonomicznym (ograniczenie kosztów badań); rozumie potrzebę dalszego kształcenia się; wykazuje kreatywność w pracy grupie; wykazuje odpowiedzialność za wykonywaną pracę.
Kontakt	
tomasz.puzyn@ug.edu.pl	