




Modelowanie w ochronie środowiska

Część 1. Wprowadzenie

dr hab. Tomasz Puzyń, profesor nadzwyczajny
Pracownia Chemometrii Środowiska



LABORATORY OF ENVIRONMENTAL
CHEMOMETRICS

Organizacja zajęć

- Kontakt:
 - e-mail: t.puzyn@qsar.eu.org
 - telefon (sekretariat): (58) 523 5248
- Konsultacje:
 - poniedziałki i czwartki w godz. 15:00 – 16:00,
Wydział Chemii UG, pok. G315
- Strona WWW: www.qsar.eu.org
- Ćwiczenia laboratoryjne
- Egzamin



2





Wykłady w innym terminie

- 23.10
- 30.10
- 13.11

3

Czym jest model?



MODEL - przedmiot badań, podobna oryginału, której badanie pozwala otrzymać informacje na temat rzeczywistości.

4

UNIVERSYTET GDAŃSKI CHEMIA UG

Podstawowy podział modeli

- **Modele fizyczne** - procesy i zjawiska są symulowane w mniejszej skali (np. w laboratorium)
- **Modele matematyczne** - procesy i zjawiska są badane przy użyciu opisu matematycznego i techniki komputerowej. Modele te można podzielić na:
 - **modele probabilistyczne**, w których opis zjawisk i procesów realizowany jest przy wykorzystaniu danych empirycznych (pomiarowych) oraz metod statystycznych i chemometrycznych;
 - **modele deterministyczne**, w których wykorzystuje się teoretyczny opis fizycznych i chemicznych procesów zachodzących w przyrodzie.

5

UNIVERSYTET GDAŃSKI CHEMIA UG

Model emisji spalin samochodowych



6

UNIVERSYTET GDAŃSKI CHEMIA UG

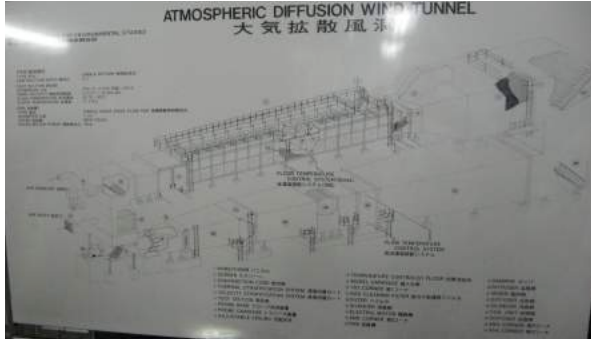
Model emisji spalin samochodowych



7

UNIVERSYTET GDAŃSKI CHEMIA UG


Tunel wiatrowy



8

UNIVERSITÄT DUISBURG ESSEN CHEMIA US

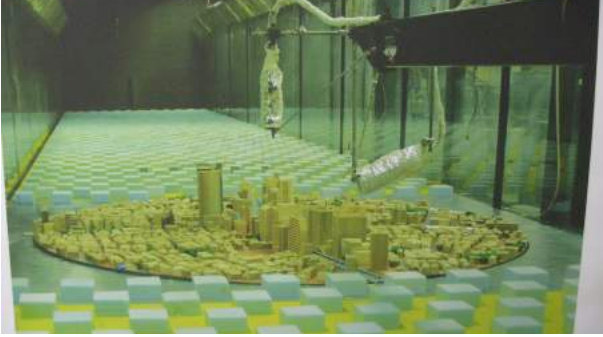
Tunel wiatrowy



9

UNIVERSITÄT DUISBURG ESSEN CHEMIA US

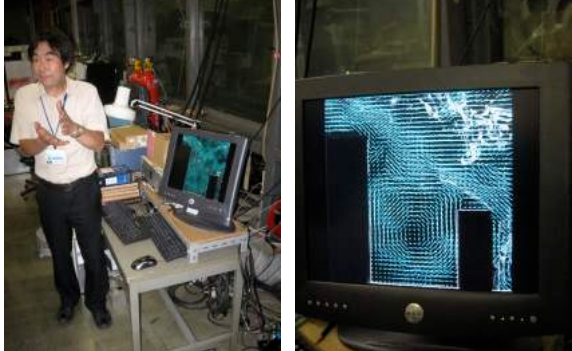
Tunel wiatrowy



10

UNIVERSITÄT DUISBURG ESSEN CHEMIA US

Tunel wiatrowy



11

UNIVERSITÄT DUISBURG ESSEN CHEMIA US

Rozprzestrzenianie się zanieczyszczeń z autostrad w Tokyo



12

UNIVERSITÄT DUISBURG ESSEN CHEMIA US

Rozprzestrzenianie się zanieczyszczeń z autostrad w Tokyo

13

UNIVERSITÄT DUISBURG ESSEN CHEMIA US

Rozprzestrzenianie się zanieczyszczeń z autostrad w Tokyo

14

UNIVERSITÄT DUISBURG ESSEN CHEMIA US

Wpływ miejsca umieszczenia rury wydechowej

15

UNIVERSITÄT DUISBURG ESSEN CHEMIA US

Modele toksyczności *in vitro*

16

Modele toksyczności *in vivo*



17

Modele matematyczne (probabilistyczne)

Modele zależności pomiędzy strukturą chemiczną a właściwościami / aktywnością
Quantitative Structure-Property Relationships (QSPR)
Quantitative Structure-Activity Relationships (QSAR)

x_1 →
 x_2 →
 x_3 →

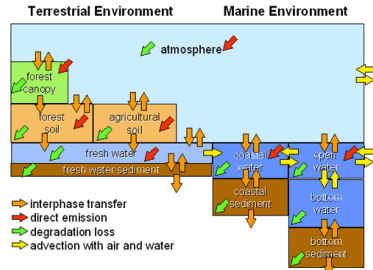
Model QSAR/QSPR → y

Deskrytory struktury chemicznej → Właściwości/aktywność związku

18

Modele matematyczne (deterministyczne)

Wielokomponentowe modele rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń chemicznych w środowisku
Multimedia Mass-balance models (MM)



→ interphase transfer
→ direct emission
→ degradation loss
→ advection with air and water



<http://www.nilu.no>

19

W jakim celu wykorzystuje się modelowanie w ochronie środowiska?

- zdobycie nowej wiedzy o badanym zjawisku
- analiza zebranych danych (np. z monitoringu środowiska)
- symulacje, analiza scenariuszy
- przewidywanie
- ocena potencjalnych skutków oddziaływania danego czynnika na zdrowie człowieka i środowisko
- dostarczenie danych, niezbędnych do podejmowania strategicznych decyzji

20

Program zajęć

1. Wprowadzenie
2. Problem zanieczyszczenia środowiska substancjami chemicznymi i konieczność oceny ryzyka chemicznego
3. Właściwości związków chemicznych o kluczowym znaczeniu dla oceny ryzyka
4. Modelowanie zależności pomiędzy strukturą chemiczną a właściwościami / aktywnością (QSPR/QSAR)
5. Modelowanie procesów transportu i deponowania zanieczyszczeń chemicznych w środowisku (MM)

21




Bibliografia

- T. Puzyn, J. Leszczynski, M. T. D. Cronin (red.): Recent Advances in QSAR Studies: Methods and Applications, Springer 2010.
- D. Mackay: Multimedia Environmental Models, The Fugacity Approach, Lewis Publishers 2001.
- M. M. Clark: Transport Modeling for Environmental Engineers and Scientists, John Wiley & Sons Inc. 1996.
- J. L. Schnoor: Environmental Modeling: Fate and Transport of Pollutants in Water, Air and Soil, John Wiley & Sons Inc. 1996.
- Guidance Document on the Use of Multimedia Models for Estimating Overall Environmental Persistence and Long-Range Transport, Series on Testing and Assessment 45; OECD Environment, Health and Safety Publications: Paris, France 2004.
- M. T. Markiewicz: Podstawy modelowania rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń w powietrzu atmosferycznym, Oficyna Wydawnicza Politechniki Warszawskiej, Warszawa 2004.
- J. Mazerski: Postawy chemometrii. Wydawnictwo Politechniki Gdańskiej, Gdańsk 2000.

22