

UNIVERSYTET GDAŃSKI
CHEMIA UG

Modelowanie w ochronie środowiska

Część 5. Wielokomponentowe modele rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń chemicznych w środowisku

dr hab. Tomasz Puzyń, profesor nadzwyczajny
Pracownia Chemometrii Środowiska

LABORATORY OF ENVIRONMENTAL CHEMOMETRICS

UNIVERSYTET GDAŃSKI
CHEMIA UG

Model wielokomponentowy

POPCYCLING-BALTIC PROJECT

Approach – Compartmental Mass Balance Model

Formulated in Fugacity Terms

2

UNIVERSYTET GDAŃSKI
CHEMIA UG

Model wielokomponentowy

<http://www.nilu.no>

3

UNIVERSYTET GDAŃSKI
CHEMIA UG

Zastosowania modeli MM

- Repozytoria wiedzy
- Narzędzie badawcze – np. badanie wpływu poszczególnych komponentów środowiska na transport i deponowanie substancji chemicznych
- Narzędzie wspomagające opracowywanie strategii ochrony środowiska i podejmowanie strategicznych decyzji w tym zakresie
- Narzędzie umożliwiające grupowanie zanieczyszczeń obecnych w środowisku, ze względu na trwałość i potencjał rozprzestrzeniania się
- Narzędzie wspomagające ocenę ryzyka dla nowych substancji chemicznych

4

Poziom	Kluczowe założenia	Uzyskiwane informacje
I	<ul style="list-style-type: none"> System zamknięty Stan równowagi Stan stacjonarny 	<ul style="list-style-type: none"> Ogólna informacja o podziale określonej ilości związku pomiędzy poszczególne komponenty
II	<ul style="list-style-type: none"> System otwarty Stan równowagi Stan stacjonarny 	<ul style="list-style-type: none"> Przewidywanie całkowitej trwałości (ang. <i>overall persistence, P_{OV}</i>) Identyfikacja komponentów ważnych w procesie usuwania związku Względny wpływ adwekcji i degradacji na usuwanie związku z poszczególnych komponentów
III	<ul style="list-style-type: none"> System otwarty Brak równowagi Stan stacjonarny 	<ul style="list-style-type: none"> Wpływ scenariusza emisji na transport i deponowanie związku Lepsze przewidywanie LRTP i P_{OV}
IV	<ul style="list-style-type: none"> System otwarty Brak równowagi Dynamiczny 	<ul style="list-style-type: none"> Badanie wpływu zmieniających się w czasie warunków na transport i deponowanie związku

Stan stacjonarny a stan równowagi

D. Mackay (2001) Multimedia Environmental Models

Zasięg regionalny modeli MM

- Modele standardowe (ang. generic)** – modele używające domyślnych (uśrednionych) parametrów charakteryzujących środowisko. Pozwalają badać wpływ właściwości fizykochemicznych związku na P_{OV} i LRTP, grupować związki pod względem mobilności w środowisku itd. Przykład: The OECD Tool.
- Modele regionalne (ang. region-specific)** – wykorzystują dane charakteryzujące konkretny obszar. Najlepiej nadają się jako narzędzie wspomagające decyzje administracyjne. Przykłady: ELPOS, SimpleBOX, EUSES, CalTox, ChemCAN.
- Modele wielostrefowe (ang. multi-zone)** – bardziej złożona struktura, pozwalająca na podział na „podmodele” reprezentujące poszczególne obszary lub strefy klimatyczne. Wykorzystywane do badań rozprzestrzeniania się związków w skali całego Globu z uwzględnieniem różnic wynikających ze specyfiki poszczególnych obszarów, np. warunków panujących w różnych strefach klimatycznych, różnym zalesieniu, liczby zbiorników wodnych przypadającej na jednostkę powierzchni itd. Przykłady: GloboPOP, CliMoChem, BETR.

Dane wejściowe do modelu MM

- Dane charakteryzujące **środowisko**:
 - liczba i rodzaj komponentów środowiska
 - „mięszkość” poszczególnych komponentów
 - średnia temperatura powietrza i wód
 - średnia prędkość wiatru
- Dane dotyczące **emisji**:
 - ilość wyemitowanego związku / szybkość emisji
 - do którego komponentu następuje emisja
- Dane opisujące **właściwości fizykochemiczne związku**:
 - współczynniki podziału
 - prężność pary
 - rozpuszczalność w wodzie
 - temperatura topnienia i wrzenia
 - czasy połowicznego zaniku
 - stała kwasowa (związki ulegające dysocjacji)

Dane charakteryzujące środowisko

D. Mackay (2001) Multimedia Environmental Models

9

Scenariusze emisji

- Do którego z **komponentów** nastąpiła emisja?
- W jakiej **ilości** została wyemitowana substancja?
- Czy emisja ma charakter **ciągły czy incydentalny**?

10

Źródła danych fizykochemicznych dla substancji

ENV/JM/MONO(2004)5

Według zaleceń OECD należy zachowywać następującą hierarchię źródeł, z których czerpie się dane fizykochemiczne do modelowania MM:

- Dane eksperymentalne uzyskane przy wykorzystaniu powszechnie akceptowanego protokołu (np. zgodnie z wytycznymi OECD)
- Inne dane eksperymentalne
- Dane eksperymentalne dla substancji chemicznej o podobnej strukturze
- Dane pochodzące z QSPR
- Oszacowanie przez eksperta lub wartość domyślna

11

Idea modelowania QSPR-MM

T. Puzyn, HOMING 2008.


12

Jakość modeli QSPR-MM

T. Puzyn. (2011) J. Hazard. Mater. 192, 970-977.

Model	Origin of the partition coefficients	Origin of the persistence data
I	Experimental	Experimental
II	Predicted with L-QSPR models	Experimental
III	Predicted with EPI-Suite	Experimental
IV	Experimental	Predicted with PCA-KNN QSPR model
V	Predicted with L-QSPR models	Predicted with PCA-KNN QSPR model
VI	Predicted with EPI-Suite	Predicted with PCA-KNN QSPR model

	P _{ov}	CTD	TE
I-II	p = 0.98 r = 0.90	p = 1.00 r = 1.00	p = 0.98 r = 0.90
I-III	p = 1.00 r = 1.00	p = 0.96 r = 0.90	p = 1.00 r = 1.00
I-IV	p = 0.75 r = 0.62	p = 0.96 r = 0.90	p = 1.00 r = 1.00
I-V	p = 0.75 r = 0.62	p = 0.96 r = 0.90	p = 0.98 r = 0.90
I-VI	p = 0.79 r = 0.71	p = 0.96 r = 0.90	p = 0.98 r = 0.90

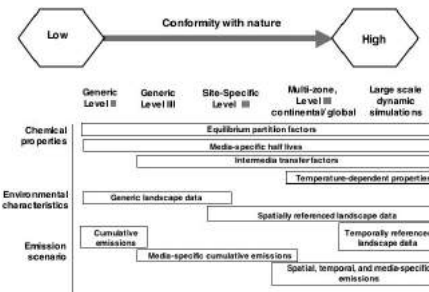


13

Wybór najodpowiedniejszego modelu MM

OECD [ENV/JM/MONO(2004)5]

Continuum of models available for Pov and LRT



14