

Nazwa przedmiotu		Kod ECTS	
Modelowanie w ochronie środowiska		7.2.0322	
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. UG, dr hab. Tomasz Puzyn; dr Agnieszka Gajewicz; mgr Piotr Urbaszek; mgr Łukasz Lubiński; dr Karolina Jagiełło; mgr Katarzyna Odziomek			
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.			
Cykl dydaktyczny			
2016/2017 zimowy			
Status przedmiotu		Język wykładowy	
obowiązkowy		polski	
Metody dydaktyczne		Forma i sposób zaliczenia oraz podstawowe kryteria oceny lub wymagania egzaminacyjne	
<ul style="list-style-type: none"> - Wykład z prezentacją multimedialną - lab.komputerowe-wykonanie ćwiczeń, analiza i dyskusja nad wynikami 		Sposób zaliczenia	
		Zaliczenie na ocenę	
		Formy zaliczenia	
		<ul style="list-style-type: none"> - 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 kolokwiów 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) kolokwiów 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 kształcenia**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; zna przykłady modeli wykorzystywanych w ochronie środowiska, potrafi wymienić zalety i ograniczenia poszczególnych typów modeli.

Sposób weryfikacji nabycia umiejętności:

Po ukończeniu kursu każdy student: potrafi odpowiednio stawiać hipotezy badawcze oraz dobiera właściwe metody, techniki i narzędzia badawcze w celu weryfikacji postawionej hipotezy (K_W02, K_W04); potrafi analizować dane doświadczalne z wykorzystaniem metod statystycznych oraz potrafi konstruować i przeprowadzić walidację modeli QSAR/QSPR (K_U05); potrafi wykorzystać dostępne modele mające zastosowanie w ocenie ryzyka chemicznego.

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_K03).

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.

Efekty kształcenia (obszarowe i kierunkowe)

- K_W02 stawia hipotezy i analizuje wyniki wykorzystując metody statystyczne oraz modelowanie w ochronie środowiska;
- K_W04 wybiera metody, techniki i narzędzia badawcze stosowane w ochronie środowiska;
- K_U05 analizuje dane doświadczalne z zakresu ochrony środowiska metodami statystycznymi oraz modelowania z wykorzystaniem technik i narzędzi informatycznych;
- K_K03 łączy zachowywanie się w sposób profesjonalny w każdej sytuacji z ponoszeniem pełnej odpowiedzialności w zakresie działań związanych z ochroną środowiska i przestrzeganiem zasad etyki zawodowej;

Wiedza

Po ukończeniu kursu każdy student:

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 chemicznych w skali regionalnej i całego globu oraz podstawowe z prawa fizyczne i chemiczne, w oparciu o które te teorie zostały sformułowane;
4. wie na czym polega proces konstruowania oraz walidacji modelu QSAR zgodnie z zaleceniami OECD;
5. wie na czym polega proces konstruowania oraz walidacji modelu MM zgodnie z zaleceniami OECD;
6. zna zasady prezentowania wyników przeprowadzonych badań modelowych.

Umiejętności

Po ukończeniu kursu każdy student:

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 przyrodniczym;
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 przeprowadzonego modelowania.

Kompetencje społeczne (postawy)

Po ukończeniu kursu każdy student:

1. dostrzega 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