

ЭКСПРЕСС-МЕТОДИКА ЭКОЛОГИЧЕСКОГО НОРМИРОВАНИЯ МАЛОИЗУЧЕННЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ

Веденина Н.В., Дербишер Е.В., Овдиенко Е.Н., Дербишер В.Е.

*Волгоградский государственный технический университет
Волгоград, Россия.*

В современной нормативной экологической литературе для вредных веществ установлены основных четыре класса опасности, которые распространяются на вредные вещества, содержащиеся в сырье, продуктах и полупродуктах. Для отходов предусматривается также пятый класс опасности. При этом класс опасности связывают прежде всего с токсичностью, под которой понимают меру несовместимости вещества с жизнью человека. В количественном выражении это величина обратная абсолютному значению среднесмертельной дозы ($1/LD_{50}$) или концентрации (LC_{50}).

Экспериментальное определение конкретных токсикологических характеристик веществ на основе которых определяется класс опасности как нормативный индикатор, является сложной дорогостоящей и длительной процедурой во многих случаях изыскательской, предпроектной и проектной деятельности малооправданной с экономической точки зрения, когда можно для поддержки принятия нормирующих решений использовать ориентировочные (расчетные) значения классов опасности веществ. В данной работе в качестве отправного пункта, для разработки экспресс-методики вычисления расчетного класса опасности малоизученных веществ, использовалась гипотеза о наличии связи между классом опасности вещества и усредненными характеристиками состава и физико-химических свойств генеральной и выборочной совокупностей веществ, распределенных по классам опасности.

Выполнена следующая работа:

- на основе известных данных сформированы обучающие выборки веществ в соответствии с четырьмя классами их опасности;
- сформированы экзаменационные выборки;
- разработан статистический образ класса опасности вещества;
- разработана экспресс - методика распознавания класса опасности;
- проведен численный эксперимент.

Выборочный статистический образ классов опасности представлен в табл.1.

Расчет проводился с использованием фазового расстояния Пирсона.

$$D = w \sum_{i=1}^k |X_i - T_i|,$$

где: X_i – координаты классифицируемого объекта в K - мерном пространстве;

T_i – координаты центра класса,

w - весовой коэффициент учитывающий число X_i и T_i равный $(n+k)^{-1}$; n – число элементов в классе опасности, k – число факторов участвующих в вычислении.

Выборочный статистический образ классов опасности вредных веществ

Таблица 1

| Класс опасности | Размерность | Элементный состав, % | | | | | | | |
|-----------------|---------------------|----------------------|-------|-------|-------|-------|-------|--------|----------|
| | | С | Н | О | N | Hal | S | Другие | ММ |
| | | X_1 | X_2 | X_3 | X_4 | X_5 | X_6 | ... | X_{14} |
| I | % | 47,27 | 4,00 | 19,96 | 4,00 | 11,08 | 2,76 | 10,96 | 185,97 |
| | В условных единицах | 0 | 0 | 1 | 0,84 | 0,08 | 1 | 1 | 1 |
| II | % | 53,38 | 4,84 | 16,19 | 4,79 | 9,63 | 0,00 | 0,57 | 146,24 |
| | В условных единицах | 0,67 | 0,23 | 0,67 | 1 | 0 | 0 | 0,05 | 0,58 |
| III | % | 51,74 | 6,39 | 17,02 | 4,68 | 16,58 | 1,46 | 2,11 | 131,61 |
| | В условных единицах | 0,49 | 0,64 | 0,74 | 0,98 | 0,26 | 0,53 | 0,19 | 0,42 |
| IV | % | 56,35 | 7,73 | 8,76 | 0,00 | 27,26 | 0,00 | 0,00 | 92,28 |
| | В условных единицах | 1 | 1 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| Размах | % | 9,08 | 3,73 | 11,29 | 4,79 | 17,63 | 2,76 | 10,96 | 93,69 |

Пример экспресс - расчета дан ниже. Вещество: 4-Амино-3,5-дихлорбензолсульфонамид (II класс опасности); брутто – формула: $C_6H_6Cl_2N_2O_2S$;

Содержание элементов, %: $C(X_1)=29,91$; $H(X_2)=250,0$; $O(X_3) = 13,27$; $N(X_4)=11,62$; $Hal(X_5)=29,40$; $S(X_6)=13,30$; $X_7=0,001$; $MM(X_8) = 241,13$;

Число параметров, участвующих в расчете: $S_{ai} = 8$.

Общее число параметров: $S_{ni} = 8$.

Весовой коэффициент: $w_i = (n + k)^{-1} = (8 + 8)^{-1} = 0,063$.

1. Метрическое расстояние до центра набора веществ первого класса опасности:

$$D_I = (|47,27 - 29,91| + |4,00 - 2,50| + |19,96 - 13,27| + |4,00 - 11,62| + |11,08 - 29,40| + |2,76 - 13,30| + |10,96 - 0,00| + |185,97 - 241,13|) \cdot 0,063 = 8,08.$$

2. Метрическое расстояние до центра набора веществ второго класса опасности:

$$D_{II} = (|53,38 - 29,91| + |4,84 - 2,50| + |16,19 - 13,27| + |4,79 - 11,62| + |9,63 - 29,40| + |0,00 - 13,30| + |0,57 - 0,00| + |146,24 - 241,13|) \cdot 0,063 = 18,41.$$

3. Метрическое расстояние до центра набора веществ третьего класса опасности:

$$D_{III} = (|51,74 - 29,91| + |6,39 - 2,50| + |17,02 - 13,27| + |4,68 - 11,62| + |16,58 - 29,40| + |1,46 - 13,30| + |2,11 - 0,00| + |131,61 - 241,13|) \cdot 0,063 = 10,88.$$

4. Метрическое расстояние до центра набора веществ четвертого класса опасности:

$$S_{ai} = 7; S_{ni} = 8; w_i = (7 + 8)^{-1} = 0,067.$$

$$D_{IV} = (|56,35 - 29,91| + |7,73 - 2,50| + |8,67 - 13,27| + |0,00 - 11,62| + |27,26 - 29,40| + |0,00 - 13,30| + |92,28 - 241,131|) \cdot 0,067 = 14,22.$$

В данном случае минимальное значение D : $D_I = 8,08$. Таким образом, 4-Амино-3,5-дихлорбензолсульфонамид диагностируется как вещество первого класса опасности. Диагностирование следует считать правильным, так как прогнозируемая токсичность вещества (по классу опасности) не занижается по сравнению с экспериментальными значениями. Расчет с использованием нормированных данных выполняется аналогично. Экзаменационная проверка экспресс - методики определения расчетного класса опасности химических соединений (органических веществ) с использованием элементного состава веществ. Обобщенные результаты, характеризующие достоверность тестирования приведены в табл. 2.

Достоверность оценок класса опасности вредных веществ по результатам тестирования экзаменационных выборок

Таблица 2

| Условия тестирования | Класс опасности | | | | Среднее значение |
|--|-----------------|-------|-------|-------|------------------|
| | I | II | III | IV | |
| Число соединений в контрольной выборке, интерполяция/экстраполяция | 5/5 | 15/17 | 15/16 | 15/18 | $\Sigma = 106$ |
| Достоверность тестирования, % | | | | | |
| Экстраполяция | 100 | 96 | 98 | 92 | 96,5 |
| Интерполяция | 80 | 81 | 84 | 76 | 80,3 |

Таким образом, предлагаемая методика позволяет с достоверностью в первом классе - 90,0 %; во втором классе - 88,5 %; в третьем классе - 91,0 %; в четвертом классе – 84,0 %; в среднем по контрольным выборкам - 88,4 % проводить прогнозирование класса опасности веществ. Это выше в среднем на 12 – 14 % по сравнению с известными методиками.

Развитие работы продолжится в следующих направлениях:

- по мере накопления новых данных о свойствах вредных веществ, совершенствование обучающих и контрольных выборок;
- развитие представлений о статистическом образе вредного вещества с учетом его структурных характеристик;
- перевод базы данных и вычислений, на компьютерную основу и создание автоматизированной системы оценки класса опасности малоизученных веществ (структур) в режиме свободного доступа;
- разработка методики практических и лабораторных работ в учебном процессе высшей школы по расчету класса опасности веществ на основе использования их элементного состава и других характеристик.