

## 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 основные 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:

$$D_I = (|47,27 - 29,91| + |4,00 - 2,50| + |19,96 - 13,27| + |4,00 - 11,62| + |11,06 - 29,40| + |2,76 - 13,30| + |10,96 - 0,00| + |185,97 - 241,13|) \cdot 0,063 = 8,08.$$

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.