

УДК 004.67; 574.24

**РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ ЭКОЛОГИЧЕСКОГО НОРМИРОВАНИЯ
С ПРИМЕНЕНИЕМ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ**

Н.В. Веденина

Предложен программный комплекс для определения расчетного класса опасности химических соединений и малоизученных веществ на основе системного анализа и обработки информации об их элементном составе, а также выборочных физико-химических и токсикологических характеристик их классификационных моделей. С помощью предложенного программного комплекса представляется возможным более точно выполнить прогноз экологической опасности химических соединений и малоизученных веществ. Даны описания реализации программного комплекса на языке C# с использованием технологии Microsoft.NET.

Ключевые слова: химические соединения, малоизученные вещества, элементный состав, физико-химические и токсикологические характеристики, модель вредного вещества, обработка информации, системный подход, программный комплекс.

Введение

Современный период развития общества характеризуется сильным влиянием на него информационных технологий, использующих совокупность средств и методов сбора, обработки и передачи данных для получения информации нового качества о состоянии объекта, процесса или явления (информационного продукта) [1]. В настоящее время существенно увеличивается значение информационных технологий в различных областях человеческой деятельности, в том числе и в области охраны окружающей среды. Это позволяет контролировать состояние природной среды, влияние вредных и опасных факторов производственной среды на человека, своевременно реагировать и принимать меры к снижению или полному устранению негативного воздействия этих факторов. Развитие современных предприятий, уделяющих необходимое внимание соблюдению требований действующего законодательства в области экологии, охраны труда и промышленной безопасности, немислимо без внедрения и функционирования соответствующих информационных систем.

Экологическое законодательство определяет права и обязанности организаций, учреждений, общественных объединений и граждан по обеспечению условий безопасного проживания на территории республики, а также гарантии прав граждан со стороны государства на здоровую и благоприятную для жизни окружающую среду; определяет экологические требования к хозяйственной и иной деятельности, особенно требования контроля и надзора в области охраны окружающей среды, меры и условия наказания за нарушение природоохранного законодательства.

В задачи экологического нормирования входит оценка экологической опасности веществ посредством анализа, экспертизы и присвоения им класса опасности [2].

Для оценки экологической опасности химических веществ требуется значительная и дорогостоящая экспериментальная работа по установлению следующих показателей: предельно допустимой концентрации, средней смертельной дозы и концентрации, коэффициента возможного ингаляционного отравления, зоны острого и хронического действия. В то же время во многих случаях в предпроектной и проектной деятельности при экологической экспертизе достаточно использовать прогнозную оценку классов опасности, которую в дальнейшей работе, например, при продвижении новых веществ на рынок, можно (и нужно) уточнить и экспериментально подтвердить. На это указывают и нормативные документы [3] «...на период, предшествующий проектированию производства, должны временно устанавливаться ориентировочные безопасные уровни воздействия (ОБУВ) путем расчета по физико-химическим свойствам или путем интерполяции и экстраполяции в рядах, близких по строению соединений или по показателям острой опасности».

Актуальность данной проблемы влечет за собой необходимость разработки механизмов, средств и систем, позволяющих эффективно выполнить прогноз опасности малоизученных химических веществ на стадии проектирования, существенно сократив объем экспериментальной работы, что значительно упростит выбор экологически безопасного вещества по экономическим и временным показателям.

Основной целью работы является разработка инструментария для оценки и прогнозирования экологической опасности малоизученных химических веществ на основе системного анализа и обработки информации об их элементном составе, а также выборочных физико-химических и токсикологических характеристик их классификационных моделей.

Постановка задачи

Для постановки задачи оценки (прогнозирования) классов опасности веществ, в частности, по справочным характеристикам, необходимо применение современных информационных технологий с их возможностью добывать и преобразовывать информацию. В данном случае требуется обработка информации о физико-химических характеристиках веществ и изучение количественной связи физико-химических характеристик с классом опасности.

Для достижения поставленной цели необходимо выполнить следующее.

- На основе анализа предметной области сформировать обучающие и экзаменационные выборки веществ в соответствии с четырьмя классами их опасности.
- Проанализировать закономерности связи выборочных факторов (элементного состава, физико-химических свойств) с классами опасности веществ.
- На основе системного анализа и обработки имеющейся информации об элементном составе и выборочных физико-химических характеристик разработать статистическую модель вредного вещества по каждому классу опасности.
- Разработать методику и инструментальные средства для определения расчетного класса опасности.
- Провести численный эксперимент, доказывающий достоверность метода классификации на основе использования расчетного класса опасности вредных веществ.

При решении задач экологического нормирования веществ необходимо учитывать следующее.

1. Должна существовать устойчивая связь между отдельными характеристиками веществ (составом, физико-химическими свойствами, структурой) и их наборами и экологическими параметрами (классом опасности).
2. Набор характеристик реального и диагностируемого вещества должен быть сопоставим и доступен для обычного эксперта.
3. Оценка экологических параметров должна быть достоверной и обеспечивать возможность принятия решения.

Из рассмотренных выше условий важнейшим является первое, так как именно оно обеспечивает возможность достоверной экологической оценки веществ на основе анализа других свойств.

В процессе работы были составлены и проанализированы специальные таблицы, в которых собраны данные об известных классифицированных органических веществах. На основе этих данных были подсчитаны среднеарифметические значения элементного состава, молекулярной массы и физико-химических характеристик, которые характеризуют класс опасности как специфический набор вредных веществ. Далее выдвинута гипотеза, что между средними значениями характеристик веществ в наборах и классом опасности существует некая зависимость.

Таким образом, модель вредного вещества можно представить в виде

$\text{DangerMatter} = \langle \text{Kl}, \text{EI}[], \text{In}, \text{Fxx}[], \text{MM}, \text{Sp} \rangle$,

где Kl – класс опасности вещества; EI[] – элементный состав вредного вещества; In – стехиометрические коэффициенты брутто-формулы вредного вещества; Fxx[] – физико-химические характеристики вредного вещества; MM – молекулярная масса вещества, Sp – процентное содержание элементов вредного вещества.

Исходя из предложенной модели, был проведен анализ элементного состава EI[] статистического образа. Фрагменты обучающей выборки веществ для анализа и прогнозирования экологической опасности даны частично в виде статистических образов классов опасности вредных веществ (таблица). В результате исследования зависимости класса опасности вредных веществ Kl от элементного состава EI[] и физико-химических характеристик Fxx[] были получены диаграммы, одна из которых представлена на рис. 1.

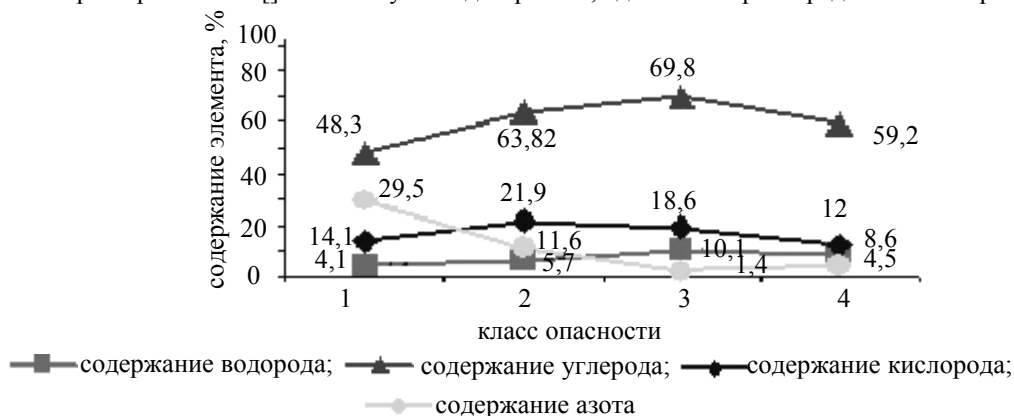


Рис. 1. Зависимость среднего арифметического содержания углерода, водорода, кислорода и азота в статистическом образе от класса опасности

Прогнозирование расчетного класса опасности неизвестного вредного вещества проводилось 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, равный $(n+k)^{-1}$; n – число элементов в классе опасности, k – число факторов, участвующих в вычислении.

Класс опасности	Статистический образ вредного вещества	Содержание элементов (элементный состав), % (по нормированной брутто-формуле)						
		C	H	O	N	Cl	S	другие
I	$C_{7,32}H_{7,39}O_{2,32}N_{0,53}Cl_{0,58}S_{0,16}Pb_{0,05}Hg_{0,05} + \text{фхх}$	47,27	4,00	19,96	4,00	11,06	2,76	...
II	$C_{6,50}H_{7,03}O_{1,48}N_{0,50}Cl_{0,40}F_{0,48}Si_{0,03} + \text{фхх}$	53,38	4,84	16,19	4,79	9,63	0,00	...
III	$C_{5,67}H_{8,35}O_{1,40}N_{0,44}Cl_{0,42}F_{0,07}Br_{0,07}S_{0,06}K_{0,06}Na_{0,02} + \text{фхх}$	51,74	6,39	17,02	4,68	16,58	1,46	...
IV	$C_{4,33}H_{7,08}O_{0,50}Cl_{0,42}F_{0,54} + \text{фхх}$	56,35	7,73	8,67	0,00	27,26	0,00	...

Таблица. Фрагменты статистических образов веществ в четырех классах опасности

Основной результат

На основе данного метода разработаны информационная структура, алгоритмы и инструментальные средства программного комплекса для прогнозирования экологической опасности химических веществ [4]. Алгоритм прогнозирования экологической опасности химического вещества путем определения расчетного класса опасности представлен на рис. 2.

Программный комплекс представляет собой симбиоз двух компонентов: банка данных опасных химических веществ и соединений; модуля прогнозирования экологической опасности химических соединений и малоизученных веществ.

Банк данных содержит информацию об известных опасных химических веществах и соединениях, данные по их элементному составу, физико-химическим и токсикологическим характеристикам.

Банк данных программного комплекса выполняет следующие функции:

- надежное сохранение информации и данных в файлах;
- обеспечение возможности просмотра и модификации, а также ввода данных.

Подсистемы программного комплекса выполняют следующие функции:

- подсистема расчета класса опасности
 - расчет метрики фазового расстояния до определенного класса опасности;
 - расчет расстояния до центра класса опасности;
 - вычисление ближайшего класса опасности;
- подсистема хранения сведений о веществах
 - банк данных химических веществ;
- подсистема визуализации
 - ввод и отображение элементов брутто-формулы;
 - вывод класса опасности вещества;
 - вывод расчета класса опасности и всех компонент;
 - графическая интерпретация брутто-формулы.

Программный комплекс реализован на языке C# с использованием технологии Microsoft.NET и СУБД MS SQL. Для начала работы программы необходимо задать элементы, входящие в состав брутто-формулы вещества. Выбранные элементы показываются на схематичном изображении формулы вещества, после чего задается их количество. По результатам проведения расчета отображается отчет, содержащий информацию о промежуточных шагах вычислений и классе опасности вещества.

Пример прогнозирования класса опасности для фталевого ангидрида – высокомолекулярного соединения, применяемого в промышленности – приведен на рис. 3.

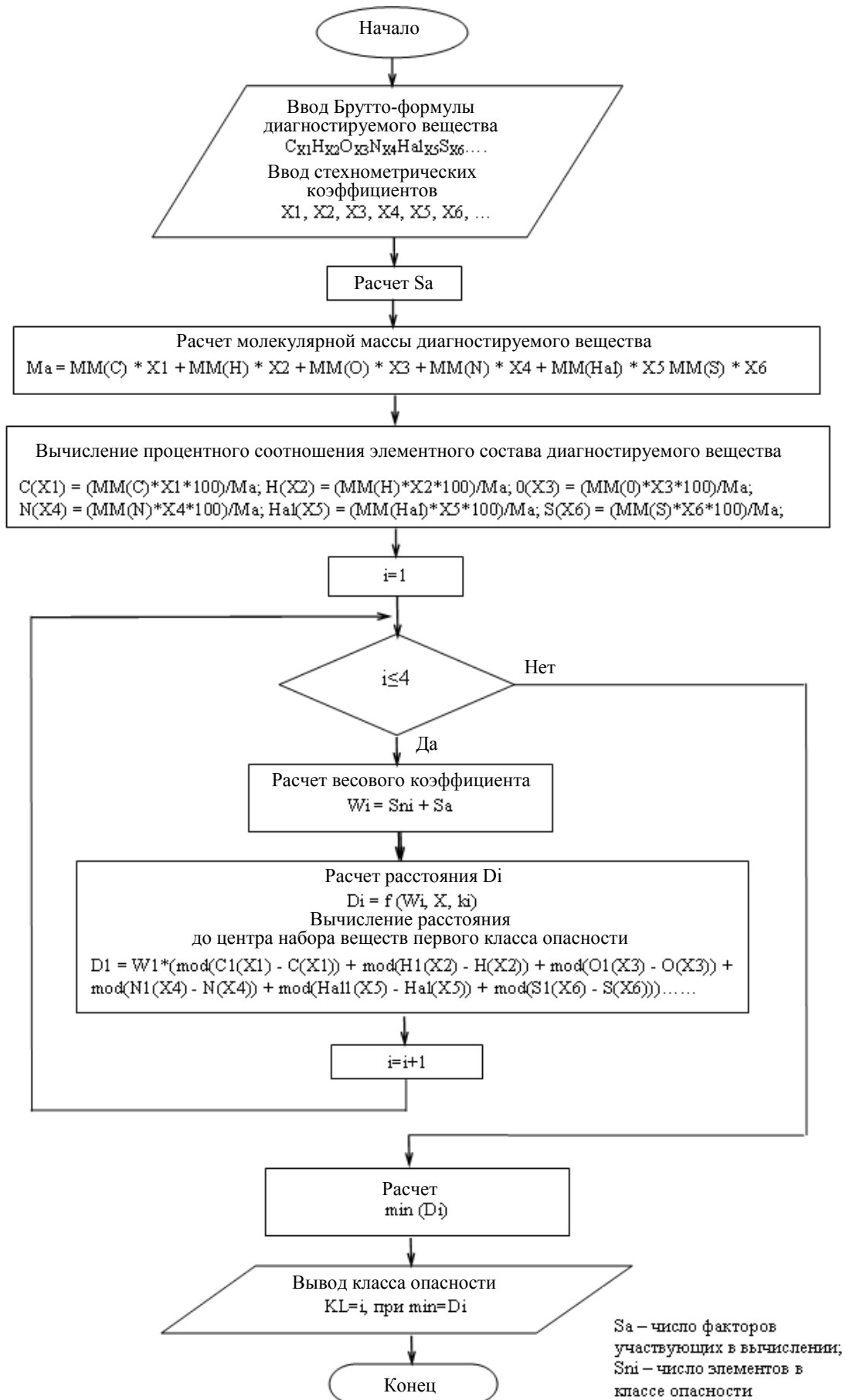


Рис. 2. Алгоритм прогнозирования экологической опасности химических веществ

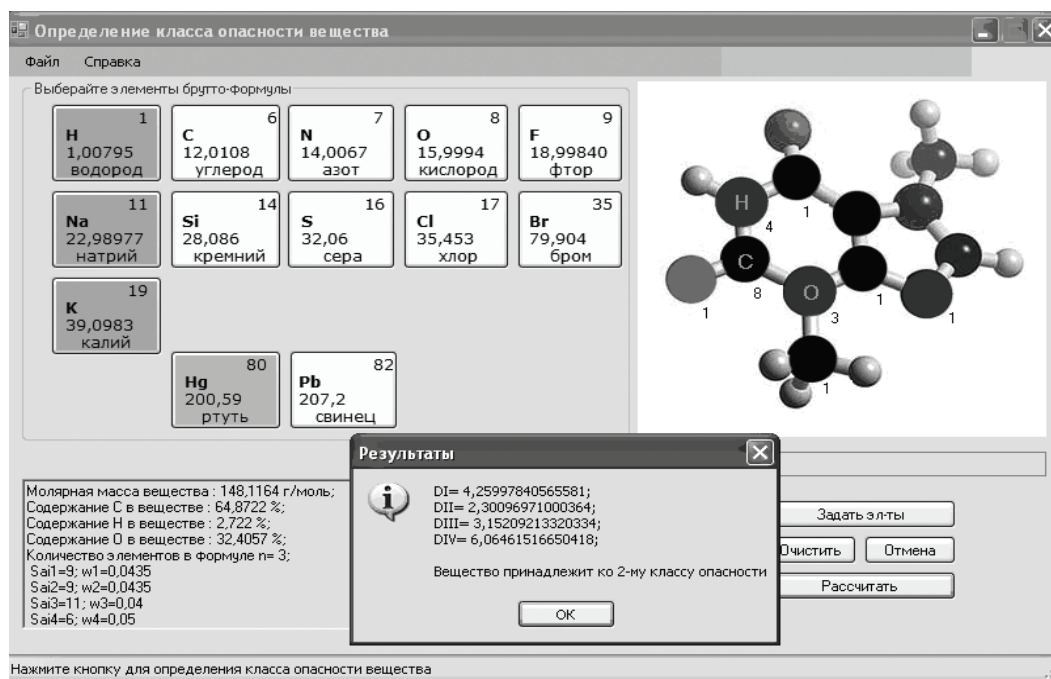


Рис. 3. Результаты определения класса опасности фталевого ангидрида

Заключение

В данной работе новыми являются следующие положения и результаты.

1. Разработаны статистические образы четырех классов опасности веществ.
2. Разработаны модели состава опасного вещества каждого класса.
3. Установлен ряд новых закономерностей, позволяющих проводить теоретическую (расчетную) экологическую классификацию малоизученных органических веществ.
4. Разработана методика оценки и прогнозирования экологической опасности малоизученных веществ и химических соединений.
5. На основе результатов исследования разработана информационная структура, алгоритмы и инструментальные средства для определения расчетного класса опасности малоизученных веществ. Средняя достоверность оценки по данным вычислительного эксперимента – не ниже 88,4%.

Возможны следующие перспективные направления работы:

- 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;
- развитие банка данных вредных химических соединений и веществ;
- разработка интеллектуальных процедур определения класса опасности новых и малоизученных химических соединений и веществ.

Литература

1. Веденина Н.В. Анализ и прогнозирование опасности химических соединений и веществ / Н.В. Веденина, А.Г. Кравец // Изв. ВолгГТУ. – 2010. – № 3.
2. ГОСТ 12.1.007-76. Вредные вещества. – Введ. 01.01.1977. – М.: Изд-во стандартов, 1976. – 7 с.
3. ГОСТ 12.1.005-88. Общие санитарно-гигиенические требования к воздуху рабочей зоны. – Введ. 01.01.89. – М.: Изд-во стандартов, 1988. – 48 с.
4. Камаев В.А. Разработка и применение модели автоматизированной системы управления информационными процессами к задаче мониторинга состояния оборудования / В.А. Камаев, В.В. Лежебоков // Вестник компьютерных и информационных технологий. – 2009. – № 9. – С. 18–22.

Веденина Наталья Валерьевна – Волгоградский филиал ООО «Проманалитика», ведущий специалист, n.v.vedenina@mail.ru