

Герцюк Микола Модестович

Державний університет інформаційно-комунікаційних технологій, Київ

ORCID 0000-0003-2946-9673

АНАЛІЗ МЕТОДІВ АВТОМАТИЗОВАНОЇ ОЦІНКИ ТОКСИЧНОСТІ ХІМІЧНИХ РЕЧОВИН

Анотація: Стаття присвячена аналізу методів і програмних рішень для оцінки токсичності хімічних речовин у навколишньому середовищі. Проблема забруднення довкілля токсичними речовинами набуває особливої актуальності, зокрема у зв'язку з можливими наслідками військових дій та промислових аварій. Важливим етапом ліквідації наслідків надзвичайних ситуацій є оцінка токсичності речовин, що потрапили у довкілля, та прогнозування їхнього впливу на екосистеми та здоров'я людини. У цьому контексті автоматизовані рішення стають ключовими інструментами, що дозволяють значно прискорити аналіз та підвищити точність оцінки ризиків.

У роботі розглянуто переваги та недоліки сучасних рішень для оцінки токсичності хімічних речовин, таких як ChemSteer, ECOSAR, EPI Suite, GaBi, SimaPro, USETox та ToxTool, що використовуються для прогнозування наслідків забруднень. Основна увага приділяється їх застосуванню для оцінки екологічного впливу токсичних речовин. Вимогами до ефективного програмного забезпечення є можливість оцінки рівня токсичності речовин на основі хімічного аналізу, забезпечення комплексної оцінки токсичності кількох речовин та автоматизація процесів аналізу.

Аналіз систем показав, що кожне з розглянутих рішень має свої особливості та обмеження. Наприклад, ChemSteer добре підходить для прогнозування викидів, але не враховує токсичність конкретних речовин. ECOSAR та EPI Suite ефективні у прогнозуванні токсичності органічних речовин, проте мають обмежений спектр застосування. GaBi та SimaPro спеціалізуються на оцінці життєвого циклу, але не забезпечують детального аналізу хімічної токсичності. USETox та ToxTool містять бази даних токсичності, проте обмежені у можливостях автоматизованого аналізу складних сумішей речовин.

Висновки підкреслюють необхідність розробки інтегрованого рішення, яке б забезпечувало комплексну оцінку токсичного впливу, враховуючи специфічні умови та вимоги до прогнозування наслідків забруднення. Подальші дослідження можуть бути спрямовані на створення ефективніших інструментів для моніторингу навколишнього середовища та мінімізації негативного впливу забруднень.

Ключові слова: інформаційні технології, методи прогнозування, автоматизовані системи, моделювання забруднень, бази даних токсичності, алгоритми оцінки.

Gertsyuk Mykola

State University of Information and Communication Technologies, Kyiv

ORCID 0000-0003-2946-9673

ANALYSIS OF METHODS FOR AUTOMATED ASSESSMENT OF CHEMICAL TOXICITY

Abstract: The article is devoted to methods and software solutions for assessing the chemical substances toxicity in environment analysis. Environmental pollution with toxic substances problem is becoming increasingly relevant, particularly due to military actions and industrial accidents potential consequences. A crucial step in mitigating emergencies effects is the substances toxicity assessment that have spread to the environment and their impact prediction on ecosystems and human health. In this context, automated solutions serve as key tools that significantly accelerate analysis and improve risk assessment accuracy.

A study examines modern solutions for assessing chemical toxicity advantages and disadvantages. These are ChemSteer, ECOSAR, EPI Suite, GaBi, SimaPro, USETox, and ToxTool, which are used to predict pollution consequences. The primary focus lies in their application environmental impact of toxic substances

evaluating. Effective software requirements include substances toxicity levels assessing ability based on chemical analysis, multiple substances comprehensive toxicity assessment providing, and analysis processes automation.

System's analysis showed that each of the reviewed solutions has its unique features and limitations. For example, ChemSteer is well-suited for emissions forecasting but does not consider toxicity of specific substances. ECOSAR and EPI Suite are effective in predicting the toxicity of organic compounds but have limited application scope. GaBi and SimaPro specialize in life cycle assessment but do not provide detailed chemical toxicity analysis. USETox and ToxTool contain toxicity databases but have limited complex substance mixtures automated analysis capabilities.

Conclusions highlight an integrated solution development necessity that ensures toxic impacts comprehensive assessment, considering specific conditions and requirements for pollution impact forecasting. Future research may focus on creating more efficient tools for environmental monitoring and minimizing the negative pollution effects.

Keywords: *information technologies, forecasting methods, automated systems, pollution modeling, toxicity databases, assessment algorithms.*

1. **Вступ.** Проблема забруднення навколишнього середовища токсичними речовинами відіграє важливу роль, оскільки, окрім підприємств та населення, що можуть бути забруднювачами, наслідки військових дій також можуть спричинити забруднення навколишнього середовища. Одним з етапів ліквідації наслідків надзвичайної ситуації є оцінка токсичності речовин, що потрапили у навколишнє середовище разом викидами та вибухами.

Загальна схема оцінки полягає у проведенні комплексного хімічного аналізу з метою якісної та кількісної ідентифікації речовин та оцінці отриманих результатів. Для цього існують методи та комплексні рішення, що дозволяють провести оцінку та прогнозування наслідків забруднення середовища. В контексті існуючих методів оцінки та комплексних рішень, сучасні автоматизовані рішення відіграють важливу роль, оскільки дозволяють значно прискорити аналіз та мінімізувати час для проведення досліджень.

Дана робота розглядає основні аспекти існуючих автоматизованих рішень, їх переваги, недоліки, та можливість використання таких систем з метою проведення комплексної оцінки їх небезпеки та токсичності.

2. **Мета і задачі дослідження.** Таким чином, метою даного дослідження є огляд методів та рішень, що дозволяють провести оцінку наслідків забруднення середовища токсичними речовинами.

Завданнями даного дослідження є:

- огляд існуючих автоматизованих рішень для оцінки викидів токсичних речовин;
- огляд їх переваг та недоліків;
- надання рекомендацій щодо оцінки наслідків надзвичайних ситуацій.

3. **Результати дослідження.** Дослідження сучасного стану теми показує, що існує велика кількість рішень, призначених для оцінки викидів наслідків забруднення середовища токсичними речовинами. Зокрема, існують агенції, як ЕРА[1], однією з цілей якої є збір існуючих рішень, що покликані вирішити зазначену та подібні проблеми. Також, існують різні наукові організації та продуктові ІТ компанії, що вирішують зазначену проблему, розробляючи різні рішення.

Серед великої кількості рішень, вибрані ті, що мають підтримку та, на перший погляд, можуть вирішити поставлену задачу. До таких відносяться наступні:

- ChemSteer;
- ECOSAR;
- EPI Suite;
- GaBi Sphera Solutions;

- SimaPro;
- USETox;
- ToxTool.

Вимогами до такого рішення є:

1. Можливість оцінки рівня токсичності досліджуваних речовин на основі результатів хімічного аналізу. Забезпечення можливості оцінювати токсичність речовин, виходячи з даних хімічного аналізу хроматографічним методом, є основною вимогою до програмного забезпечення. Це передбачає здатність рішення працювати з конкретними хімічними речовинами, ідентифікованими у зразках, і виконувати розрахунки токсичності з урахуванням їхніх фізико-хімічних властивостей. Такий функціонал дає змогу адаптувати програму до реальних умов, у яких необхідно оцінити вплив певних речовин на екосистему чи здоров'я людини.

2. Наявність функціоналу для проведення комплексної оцінки токсичності у межах декількох речовин. Комплексна оцінка токсичності передбачає аналіз взаємодії кількох речовин, що особливо актуально для складних хімічних викидів або сумішей. Наявність такого функціоналу дозволяє програмному забезпеченню оцінювати реальний вплив забруднень, де речовини можуть діяти речовини можуть посилювати або, навпаки, зменшувати токсичний ефект одна одної та, як наслідок, автоматизувати процес оцінки, оскільки, такі комплексні аналізи проводяться шляхом ручного дослідження. Це значно розширює можливості аналізу, забезпечуючи більш точне прогнозування екологічного впливу або ризиків для здоров'я.

Проаналізувавши переваги/недоліки та проблеми, що вирішують дані рішення, можна, або застосувати вибране(-і), або сформулювати вимоги до рішення, що вирішить зазначену проблему.

ChemSteer

ChemSteer є спеціалізованим програмним забезпеченням типу настільного додатку для ОС Windows для оцінки викидів токсичних речовин. Основний принцип проведення прогнозування полягає у використанні прогнозних методів, в основі яких лежать емпіричні моделі та формули, алгоритми прогнозування (що визначають можливі сценарії поширення речовин), алгоритми оцінки ризиків та бази даних хімічних властивостей. ChemSteer, також, інтегрований із нормативними екологічними вимогами ЕРА, які дозволяють оцінити якість промислових процесів з точки зору екології на основі відповідності промислових процесів екологічним нормам.

Як метод так і програма, розроблялась для виробників промислової продукції. Таким компаніям часто потрібні рішення для прогнозування ризиків. Тому, в продукт працює на основі методів прогнозування і оцінка ризиків здійснюється через прогнозування [2].

Перевагами продукту є робота відповідно до різних екологічних стандартів та можливість аналізу великої кількості процесів. Завдяки автоматизованому аналізу, система дозволяє оцінювати потенційні екологічні ризики на основі заданих параметрів.

Серед недоліків можна виділити відсутність можливості прогнозування нетипових процесів та обмежена сфера використання, оскільки не дозволяє оцінити наслідки забруднення середовища конкретними хімічними речовинами, а лише прогнозує самі викиди.

Таким чином, програмне забезпечення дозволяє оцінити ризики, але не дозволяє оцінити небезпеку, що можуть нести самі хімічні речовини, а отже не відповідає поставленим вимогам.

ECOSAR

ECOSAR є автоматизованою системою, що прогнозує токсичність водних ресурсів. Представляє собою настільний додаток на ОС Windows. В основі додатку присутні моделі, що дозволяють створювати сценарії для оцінки моментальної та довготривалої токсичності. В основі рішення лежить метод прогнозування заснований на методі групування даних та

кореляції: метод групує структурно подібні органічні хімікати з вже відомими даними про ефект речовин та проводить кореляцію з заданими хіміко-фізичними властивостями. Додатково, має інтеграційну функцію з EPI Suite для розширення можливостей рішення.

Загалом, може бути використаний для наукових досліджень.

Серед переваг можна виділити можливість проведення аналізу, використовуючи моделі моментальної та довготривалої токсичності, що дає можливість проводити ґрунтовну оцінку наслідків.

Недоліками системи є обмеження щодо можливості моделювання лише у водному середовищі, обмежена робота лише з органічними речовинами і обмежена точність результатів. Разом, ці складові можуть давати похибку в системі оцінки.

Таким чином, система може надати доволі широкий інструментарій для оцінювання, але недоліки обмеження можливості моделювання лише у водному середовищі та обмежена точність та спектр роботи з речовинами не дозволить провести оцінку будь-якого процесу, а отже не відповідає поставленим вимогам [3].

EPI Suite

EPI Suite є програмним забезпеченням для автоматизованої оцінки властивостей хімічних речовин. Представляє собою настільний додаток для ОС Windows. Система містить 17 модулів для проведення аналізу, що дозволяють прогнозувати різні аспекти властивостей. Інструменти мають наступні властивості:

- оцінка зміни агрегатних станів та інших фізичних процесів, що впливають на речовину;
- прогнозування долі хімічних речовин в навколишнього середовищі, зокрема таких процесів, як поширювання, розкладання, накопичування в ґрунті, воді, повітрі;
- прогнозування ефекту хімічних речовин на різні організми в екосистемі;
- оцінка біоаккумуляції, що моделює наскільки хімічні речовини можуть накопичуватися в організмах.

Функціонал введення хімічних речовин у якості вхідних даних має інтеграцію з таким різними хімічними нотаціями, як CAS-номер, Smiles нотацію, або повну назву хімікату.

Перевагами продукту є можливість проведення оцінки, використовуючи декілька моделей прогнозування. Інтуїтивно зрозумілий графічний інтерфейс (рис. 1) сприяє швидкій навігації та аналізу отриманих результатів.

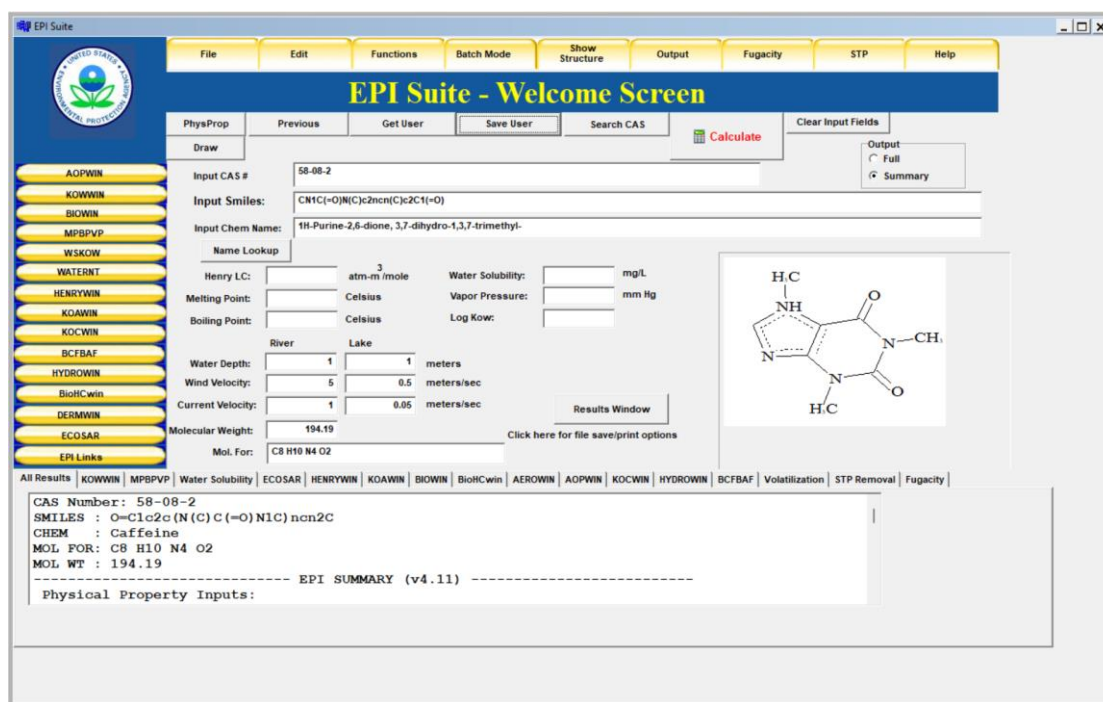


Рис. 1 Скріншот вікна EPI Suite

Програмне забезпечення, також має деякі недоліки. Ними є необхідність введення інформації про хімічну речовину, замість використання бази даних та відсутність можливості автоматизованої постобробки результатів, що особливо важливо, оскільки згенерований результат має бути додатково інтерпретований. Також, відсутній функціонал для комплексного аналізу речовини, що спричиняє необхідність в аналізі кожної речовини окремо, що знижує ефективність обробки великих масивів даних. [4].

Таким чином, EPI Suite є потужним програмним рішенням для прогнозного моделювання властивостей хімічних речовин, однак відсутність можливості комплексної обробки даних і постобробки результатів обмежує його застосування для комплексного аналізу, а отже не відповідає другій вимозі.

GaVi

GaVi є програмним забезпеченням, розробленим компанією Sphera Solutions, що аналізує життєвий цикл навколишнього середовища.

Система використовує методи комп'ютерного моделювання та обробки великих масивів даних для оцінки екологічного впливу продуктів, процесів і підприємств на всіх етапах їхнього життєвого циклу. Таким чином, основним завданням є оцінка екологічного впливу протягом життєвого циклу.

Однією з ключових технологічних можливостей GaVi присутня інтеграція з базами даних, що містять екологічні характеристики матеріалів та процесів. Такий підхід дозволяє автоматизувати збір та аналіз даних, що підвищує точність прогнозування та скорочує час для проведення аналізу.

Перевагами застосування є робота зі стандартами, відповідність міжнародним та стандартам та адаптація до корпоративних стандартів, та моделювання складних процесів.

До недоліків можна віднести відсутність детальної документації, висока вартість рішення та необхідність оновлення бази даних.

Загалом, програмне забезпечення є доволі широким і призначене, переважно, для науковців, компаній та інших зацікавлених сторін, що мають широку експертизу. Проте його використання зосереджене на аналізі процесів, а не на детальному вивченні хімічних властивостей речовин. Це обмежує його застосування для задач, пов'язаних із хімічною аналітикою та токсикологічними дослідженнями. [5]. Таким чином, рішення не відповідає поставленим вимогам.

SimaPro

SimaPro є програмним забезпеченням, розробленим з метою оцінки екологічного впливу людської діяльності на навколишнє середовище на основі цифрового моделювання життєвого циклу. Оцінка відбувається через моделювання наслідків людської діяльності.

Система використовує алгоритми обробки даних та прогнозного аналізу, для оцінки впливу використання ресурсів, виробництва, транспортування, утилізації та інших процесів на довкілля.

Є широкою системою. Працює відповідно до концепції моделювання процесів роботи з сировиною в рамках життєвого циклу показаного на рис. 2.

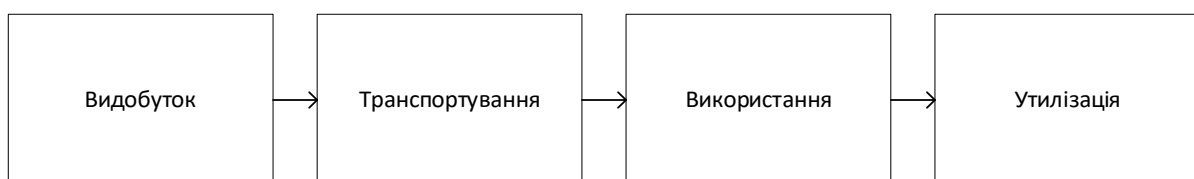


Рис. 2 Схема моделювання процесів роботи з сировиною

Кінцевими користувачами, переважно, є інженери-екологи, що оцінюють вплив діяльності суспільства на навколишнє середовище.

Перевагами застосунку є розширена база даних із можливістю інтеграції з додаткових джерел, гнучкість та масштабованість моделей для проведення оцінки та відповідність міжнародним стандартам. Ці особливості дозволяють адаптувати програму до різних сценаріїв оцінки життєвого циклу продуктів і процесів.

Недоліками програми є висока собівартість програмного забезпечення (що обмежує її доступність для невеликих підприємств), вузька направленість моделей та необхідність мати широку експертизу для проведення аналізу.

Загалом, SimaPro є широкою системою, але працює по концепції моделювання процесів в рамках життєвого циклу. Таким підхід передбачає прогнозування екологічних процесів. Однак, не має можливості оцінки ризиків, пов'язаних з токсичністю [6].

USETox

USETox є застосунком, що оцінює хімічні речовини у таких продуктах, як продукти особистої гігієни, будівельні матеріали, іграшки, тощо. Представляє собою xls файл, що дозволяє проводити обчислення. Містить моделі, що оцінюють рівень токсичності для навколишнього середовища. Інтегрується з широкими екологічними базами даних, що містять параметри матеріалів, енергетичних потоків і викидів.

Загалом, модуль передбачає оцінку за такими вхідними як вибір речовини зі списку речовин, визначення продукту і умов використання, визначення кількості викинутої речовини. На основі цих даних має можливість здійснити оцінку.

Перевагами є наявність бази даних хімічних речовин та наявність вузьких моделей, що прогнозують токсичність.

Недоліками є відсутність єдиної бази даних, що оновлюється (логіка впровадження передбачає оновлення програмного забезпечення разом із базою даних), відсутність інтеграції з іншими базами даних, відсутність можливості проведення комплексної оцінки за декількома речовинами та відсутність традиційного користувачького інтерфейсу (замість цього, використовується xls файл).

Такий застосунок може вирішити поставлену проблему, тобто оцінювати токсичність речовини. Однак, його застосування обмежене в контексті оцінки токсичних ризиків та детального аналізу хімічних речовин. Отже, програмне забезпечення не відповідає другій вимозі [7].

ToxTool

ToxTool — це веб-орієнтована інформаційна система для оцінки токсичності хімічних речовин, що використовує бази даних та алгоритми пошуку наукової інформації. Система надає можливість аналізу хімічних сполук за токсикологічними, біологічними та фізико-хімічними властивостями.

Основою ToxTool є вбудована база даних, що містить метадані та детальну інформацію про токсичні речовини. Інтерфейс реалізований у вигляді веб-додатка, що спрощує доступ до платформи та взаємодію з даними.

Хоча, документація для аналізу рішення відсутня, демонстраційні матеріали дають можливість оцінити можливості роботи з додатком. Скріншот сторінки з оцінкою показано рис 3.

До основних можливостей відносяться оцінка речовин за призначенням, хімічними, токсикологічними та біологічними властивостями, можливість більш глибоко проаналізувати визначену речовину через функціонал пошуку існуючих публікацій за даною темою та взаємодія з базою даних, що містить, як метадані, так і детальну інформацію про речовину.

Перевагами застосунку є наявність інформації в базі даних, що описує інформацію про токсичні властивості речовини, зручний користувачький інтерфейс, та наявність детальної та наукової інформації про речовину (що дає можливість здійснювати широку оцінку і використовувати матеріали для проведення наукових досліджень), зручний користувачький інтерфейс.

The screenshot displays the ToxTool web application interface. The top navigation bar includes the ToxTool logo, a search bar, and a user profile for 'marco.panza'. The main content area shows a table of 3948 records, with the first 17 records displayed. The table columns are: Id, INCI, CAS, EINECS, Cosmetic function, and Date modified. The records listed are:

Id	INCI	CAS	EINECS	Cosmetic function	Date modified
5929	MENTHYL ETHYLAMIDO OXALATE	1122460-01-8		skin conditioning	2022-07-13 12:2
5928	MENTHA VIRIDIS (SPEARMINT) EXTRACT	84696-51-5 / 90064-01-0	283-656-2	fragrance, oral care	2022-07-13 12:2
4264	MELALEUCA ALTERNIFOLIA OIL	85085-48-9 / 8022-72-8 / 68647-73-4	285-377-1 / - / -	Antioxidant, Perfuming	2022-07-13 12:2
4263	MELALEUCA ALTERNIFOLIA (TEA TREE) OIL	85085-48-9 / 8022-72-8 / 68647-73-4	285-377-1 / - / -	Antioxidant, Perfuming	2022-07-13 12:2
4262	MELALEUCA ALTERNIFOLIA (TEA TREE) L.E.	85085-48-9 / 8022-72-8 / 68647-73-4	285-377-1 / - / -	Antioxidant, Perfuming	2022-07-13 12:0
4176	LYCUM BARBARUM FRUIT EXTRACT	85085-46-7	285-375-0	Astringent, Hair conditioning, Skin conditioning	2022-07-13 11:5
4175	LYCUM BARBARUM (MARRUBION VINE) F..	85085-46-7	285-375-0	Astringent, Hair conditioning, Skin conditioning	2022-07-13 11:4
4155	LINUM USITATISSIMUM (LINSEED) SEED OIL	8001-26-1	232-278-6	Perfuming, skin conditioning	2022-07-13 11:1
4111	LAURYL PEG-9 POLYDIMETHYLSILOXYETH.	-	-	Hair conditioning, Skin conditioning, Surfactant, emulsifier	2022-07-13 11:1
4069	LACTOSE	63-42-3	200-559-2	Humectant, skin conditioning	2022-07-13 11:0
5927	HYSSOPUS OFFICINALIS EXTRACT	84603-66-7	283-266-2	fragrance, tonic	2022-07-13 11:0
3894	HYDROLYZED RICE PROTEIN	156715-40-1	-	Antistatic, hair conditioning, skin conditioning	2022-07-13 10:5
3889	HYDROLYZED PEA PROTEIN	222400-29-5	-	antistatic, emollient, hair conditioning, hair conditioning, skin conditioning	2022-07-13 10:2

Рис. 3 Скріншот ToxTool

Недоліками є відсутність документації до програмного забезпечення (хоча, цей фактор нівелюється наявністю демонстраційної версії), відсутність інструментів для обробки інформації, що ускладнює аналіз та відсутність метричних даних про показники токсичності, що тягне за собою необхідність мати широку експертизу в тематиці хімічних та токсичних властивостях речовин.

ToxTool є сучасним веб-рішенням для пошуку та довідкового аналізу токсичних речовин, однак через відсутність засобів моделювання та автоматизованої обробки даних система більше орієнтована на інформаційну підтримку, ніж на комплексну аналітику. Тому, не відповідає поставленим вимогам.

4. Висновки

Проаналізовані автоматизовані рішення демонструють ефективність застосування інформаційних технологій для оцінки токсичності викидів та їх впливу на навколишнє середовище. Також показують, що концепцією вирішення проблеми оцінки викидів токсичних речовин є оцінка екологічного впливу речовин на населення та навколишнє середовище в рамках життєвого циклу експлуатації. Для проведення досліджень пов'язаних з екологічним впливом токсичних речовин на навколишнє середовище, рекомендується використовувати ChemSteer, ECOSAR, EPISuite, GaBi та ToxTool.

Інженери-екологи, для дослідження впливу речовин на екосистему, можуть використовувати ECOSAR, GaBi, SimaPro та USETox, оскільки переважно націлені на моделювання конкретних сценаріїв.

Такий підхід оцінює екологічну складову навколишнього середовища та дозволяє оцінити екологічні показники. Однак, питання оцінки впливу токсичних речовин на навколишнє середовище здійснюється шляхом комплексного хімічного аналізу та оцінювання токсичності вручну, що тягне за собою збитки. Особливо критично проблема може виникнути при настанні надзвичайної ситуації.

Таким чином, постає необхідність у дослідженні та розробці рішення, за допомогою якого комплексна оцінка токсичного впливу хімічних речовин на навколишнє середовища, або населення може бути здійснена. Попередню схему процесу оцінки такого рішення показано на рис. 4.

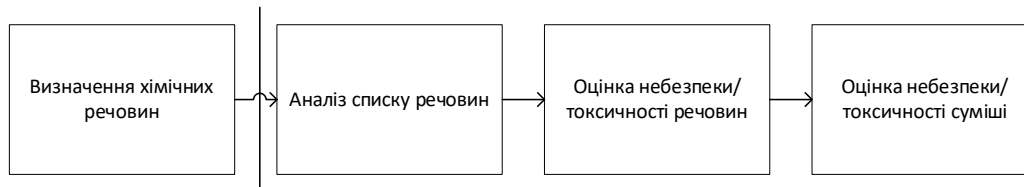


Рис. 4 Попередня схема процесу оцінки такого рішення

Як видно з рис. 4, початковим етапом є визначення списку хімічних речовин, на основі, наприклад, хроматографічного аналізу, або іншого підходу. Наступними етапами є аналіз, оцінка списку речовин на предмет токсичності та небезпеки та оцінка токсичності та небезпеки суміші в цілому: ці процеси мають бути розроблені в рамках розробки зазначеного рішення.

Очевидно, що описана система не заміняє, а лише доповнює існуючі методи з метою поліпшення їх ефективності.

Список використаної літератури

1. U.S. Environmental Protection Agency. Офіційний сайт. URL: <https://www.epa.gov/>.
2. ChemSTEER User Guide. Chemical Screening Tool for Exposures and Environmental Releases. May 2015. URL: https://www.epa.gov/sites/default/files/2015-05/documents/user_guide.pdf.
3. Ecological Structure Activity Relationships (ECOSAR) Predictive Model | US EPA. URL: <https://www.epa.gov/tsca-screening-tools/ecological-structure-activity-relationships-ecosar-predictive-model>.
4. Download EPI Suite™ - Estimation Program Interface v4.11 | US EPA. URL: <https://www.epa.gov/tsca-screening-tools/download-epi-suite-estimation-program-interface-v411>.
5. Overview of GaBi Envision. URL: <https://gabi.unilever.com/envision/api/help/user> (дата звернення: 18.09.2024).
6. Learn and connect – SimaPro. URL: <https://simapro.com/learn-and-connect/> (дата звернення: 17.09.2024).
7. Bijster M., Guignard C., Hauschild M., Huijbregts M., Jolliet O., Kounina A., Magaud V., Margni M., McKone T., Posthuma L., Rosenbaum R. K., van de Meent D., van Zelm R. USEtox® 2.0 Documentation (Version 1.1). Denmark, 2018.