



定量构效关系 (QSAR) 在环境化学 中的进展与方法*

白 迺 彬

(中国科学院生态环境研究中心)

摘要 定量构效关系 (QSAR) 是化学品安全评价中有用的工具之一, 本文叙述它的应用背景、基本原理、学科历史进展、概念模型、数学模型和算法, 着重介绍作者开发的实用量子化学计算程序包, 用以产生分子结构参数, 所建立的化学物质毒性数据库可用来获取大量生物活性数据, 还可用模式识别程序包构筑构效定量关系。本文对其研究前景也作了叙述。

定量构效关系 (Quantitative Structure Activity Relationship, QSAR) 表示一种化学数据的数学分析方法。QSAR 方法建立的某种数学模式可对化合物的分子结构与化学或生物活性的关系给予定量描述, 从而达到据其预测尚未研究的化学行为的目的。多年来, QSAR 在化学中已获得有成效的应用, 最近又大量地用于环境化学中, 在筛选和预报环境污染物毒性及其他环境效应方面有重要的实用价值。

一、应用背景

QSAR 方法在环境化学中有其应用背景。据美国化学文摘社统计, 1983 年前登记的化合物达 6 百万种之多, 且以日登记千种的速度迅速增加。当然, 其中的 75% 仅在实验室内做过描述, 真正在生活和生产中得到使用的化学物质估计为 10 万种^[1,2]。其中, 到底有多少化学物质有毒? 它们对人类及其依赖的生存环境有何危害? 这是目前人们十分关注而又下大力量解决的问题。据美国国立职业安全与卫生研究所出版的“有毒化学物质登录”(RTECS) 数据库所载, 有过毒性实验报道的化合物, 1982 年版载入 2 万余

种, 1985 年版载入 6 万余种, 1987 年版载入达 9 万种。新版包括农用化学品或农药 3 415 种, 致肿瘤化学品 3 642 种, 药品 47 994 种, 致突变化学品 8 226 种, 有机金属化合物 549 种, 生殖效应化学品 4 755 种, 天然产物 6 191 种, 刺激皮肤及眼睛化学品 3 505 种^[3]。但是, 对环境影响有较为全面、确切、算得上进行过化学品安全评价的环境污染物为数尚少。例如, 到八十年代中期, 录入联合国环境规划署潜在有毒化学品登记中心 (IRPTC) 的《有毒有害化学品环境标准及管理法规》数据库中的化合物仅含 5 百种^[4]。故从数目来看, 我们目前了解的似为冰山一角。再从财力来看, 做好此项工作也殊非易事。美国环保局估计^[5]: 平均每个化学品环境生物浓度测试费为 6 千至 1 万美元; 急性皮肤毒性测试费为 2 千 5 百至 4 千 5 百美元; 双周吸入毒性测试费为 2 万至 2 万 5 千美元; 2 年吸入毒性测试费为 1 百万至 1.5 百万美元; 2 年饮食毒性测试费为 3 百万至 4 百万美元。动物毒理试验费用相当惊人, 且从人力、物力来看, 即使把世界上所有可进行动物毒理试

* 本课题得到国家科学技术委员会和中国科学院的资助。

验能力皆估计在内,目前每年只能评价 1 千至 1.6 千种化学品^[1]。这就是说,就评价现有的环境污染物,也需要 50 年以上。可以断言,逐个评价的方法无论如何也做不完现有的和将来产生的化学品的安全评价工作,事实上也全然没有做这种繁琐工作的必要。制定全面规划,科学地进行该项工作乃当务之急,而 QSAR 方法不失为优良的辅助工具之一。

对于环境决策者而言,可从众多的环境污染物中,选取排放量较大者,或者数量不大但其毒性较大者,或者毒性虽小却难于降解,易于在生物体内积累者,或者能成为某类污染物之代表者,予以优先监测,优先评价。近年来,美国和荷兰已分别建议 129 种及 43 种重点污染物名单,其它国家也纷纷列出黑名单和灰名单。在此工作中, QSAR 起着数据处理以进行计算机辅助择优作用。明显看出,总工作量将因此极大减少,且不致降低承担风险的能力。这类“软”课题研究,无疑有良好的社会效益与经济效益。对于环境管理工作而言,要统观全局,必须“胸中有数”,即应建造大型毒性数据库,环境标准与法规数据库,分子结构及物理化学参数数据库等做为化学品安全评价工作之后盾。美国环保局掌握此类数据库达数十个。QSAR 方法有益于数据库设计,数据质量评价和数据智能管理,或者干脆就是大数据库中的一个子库。美国环保局所属化学情报系统 (CIS)^[6],到 1983 年为止,有十类,22 个数据库。数据分析与模式识别 (ARTHUR) 程序包为其中之一,它就是典型的 QSAR 方法程序包。对于环境信息工作者而言, QSAR 方法有助于从大量情报中最大量提取有关环境污染物结构、毒性或其它环境效应关系之有用信息。它将环境污染物分门别类处理,总结规律,形成总体模式。几年来,已出版了几册 QSAR 在环境化学中应用文章专集^[7]。这类基础工作,虽然与化学品安全评价没有直接相通的关系,但却提供了概念、规律和模式。对于环

境实验工作者而言, QSAR 方法可以优化筛选方案,降低工作量。例如,要评价三取代基苯,一类常见的环境污染物,由于存在 90 类取代基、组合排列后将有 72 万 9 千个衍生物,洋洋大观,任何实验室也担当不了如此重任。应用 QSAR 方法,可在先人不充分的数据基础上,进行分类和优先级排队。实验后,尚可据实验数据建立模式,预报其它,使筛选量呈百倍、千倍地减少。在开题,实验过程及后期数据处理诸阶段,皆有裨益。

因此,早在 1977 年美国环保局 Veith 博士在 Winolsor 召开的大湖水质国际会议上指出:“鉴于环境化学污染物的多样性和复杂性,建议采用 QSAR 方法预测环境化学物质的生物活性及其环境特性”。1978 年美国 and 加拿大制订的“大湖水质协议”中,提出早期报警系统,要求发展和使用 QSAR 方法^[8]。最近,美国环保局采取许多措施,专门立项,开发 QSAR 方法及计算机应用程序,并致力于应用^[9]。

二、历史进展^[5]

QSAR 学科简史见表 1,介绍百余年来学科形成的重要阶段,各阶段提出的基本概念,诸如:活性基、受体、分配系数、电子效应参数、空间效应参数和线性自由能模型,以及若干应用实例。应该着重指出,是 Hansch 创立了 QSAR 学科,并为之工作数十年之久。他所提出的线性自由能模型:

$$\log(1/c) = a + b \log P - C(\log P)^2 + dE_s + eM_R + f\sigma \quad (1)$$

现在仍为许多 QSAR 工作者所沿用。

近二十年来,学科沿三方面进一步发展:

1. 分子拓扑编码

表 1 述及的分子结构编码,以实验值为基础综合而成。多年研究结果表明分子结构的确决定其效应,于是,有人设想不做实验,仅从分子结构图形进行拓扑解析,找出结构

表 1 QSAR 学科进展简史

年代	学者	贡 献
1848	Blake	进行了硝酸铅和醋酸铅毒性研究,指出毒性起源于铅,为结构活性关系首次研究.
1880	Arrhenivis	进行了盐类生物活性研究,指出活性来自酸根,提出了活性基概念.
1878	Langlay	进行了药物对人体作用研究,指出作用系在人体的一定负责部位,提出了受体概念.
1910	Ehrlich	首次用“受体”一词表征与毒物起作用的生物体内化学集团.奠定了模拟毒物——受体结合的基础.
1899	Richet	发现醇和醚水溶性愈强,毒性愈小.首次用油水分配系数说明某些有机化合物的麻醉作用性能.
1930	Louis	以 σ 常数做为描述苯环上取代基的电子效应之标度.
1931	Hammett	发现多类化学反应平衡常数与 σ 常数存在线性关系.
1953	Ormered	用 σ 常数成功地解释了斑纹幼虫参与下的化合物水解作用.
1950	Taft	将 Hammett 观点扩展到脂肪族,并引进了空间效应指数 E_s . 它大为改进仅以 σ 常数所描述的线性关系.
1960	Hansch	建议用油水分配系数之对数来描述毒物在体内的输送过程.引入 $\log P$ 后,有效地解释了均相水溶液系统的反应动力学行为,继而扩展到毒物-受体作用的多相反应系统,提出了疏水性参数概念.
1964	Hansch	假设取代基对药物或毒物-受体间作用为疏水性、电子、空间及输送诸因素之综合,从而构筑了定量的线性自由能模型,取名为 QSAR,形成了学科.

元,继而综合原子数目,原子种类及原子间键连方式等三方面因素,经过简单代数运算而构造出分子拓扑编码.表2列出有代表性的几种分子拓扑编码.有趣的是,它们居然与其效应数据有良好的对应性,这点可能是与其较为全面地反映了整体分子特性有关,既简易又实用的特点为 QSAR 研究打开了方便之门,于是这类编码便发展起来.

2. 电子构型编码

大型计算机的出现,及应用量子化学的

表 2 分子拓扑编码

年代	学者	编 码
1947	Wiener	路径数
1956	Alterburg	多项式指数
1964	Gorolon	图形指数
1971	Hoseya	Z 指数
1975	Randic	分枝指数
1976	Kier	分子连接指数

发展为构筑电子构型编码提供了可能.诸如最高占据轨道能级、最低未占轨道能级、原子净电荷、键能、相对活化能等参数更易于帮助 QSAR 研究深入到分子水平.特别是实验难于测定的毒物——受体作用中间产物,或体内代谢产物致毒前兆体的量子化学研究,从反应历程角度使 QSAR 研究深化.

此外,分子折射度 MR 与其电子构型密切相关,使用有效,甚至可为校正其它编码与问题中肯程度的参照物.这可能是由于 MR 为分子极性的量度,而极性又影响到毒物——受体作用强度,继而影响前兆体的环境效应.

3. 计算机的应用

Hansch 线性自由能模型,从数学方法来讲,是个多维数据处理问题.视所研究系统的复杂性而定,可以由几维到数十维之多,如此规模的多元统计分析,难以用纸笔运算.早期的 QSAR 研究被限制于系列化合物简单对比的规模窄小的系统,难于实际应用.计算机的出现帮助人们建立和实现多维空间的基本概念,多维空间是 QSAR 数学模型,诸如模式识别、聚集分析的基础.20 年来,计算机运算速度快,贮存数据容量大,多元统计分析、量子化学应用程序及辅助作图程序不断开发与完善,极大地推动了 QSAR 与实际应用相结合,使其视野放大,可处理多类复杂的环境体系.

三、概念模式

一般毒物——受体作用业已殊多复杂,

若扩展到环境污染物——受体作用，又多一层复杂性。当化学品释放到环境后，经历暴露、不同程度迁移、转化，到达其归宿，是个复杂的链过程，其中任何一环皆可与受体作用。再者，环境化学品常形成二次污染，或以很低的浓度存贮于生物体内，对其生物浓度测定尚欠成熟，无疑给 QSAR 在环境化学领域研究工作带来特殊困难。所幸，几十年来，若干研究工作证明：其一，化合物分子反应能力与其结构及物理化学性质有关；其二，环境中化学品对生物或生物目标分子间的作用服从化学反应基本规律；其三，化学品在生物体内的分布、传递过程亦可近似地用 Henry 定律加以阐明。因此，毫不奇怪，可以在亲水-亲脂性参数、电子参数、空间参数、量子化学参数与毒性、环境命运参数，诸如生物吸收，生物积累参数间找到经验的对应关系。QSAR 方法可以由化学领域扩展应用到环境化学领域。

我们在前人的基础上^[10]所建议的 QSAR 概念模式示于图 1。化学品在环境中经过暴露、迁移和转化过程，到达生物体，透过生物膜、体内输送，到达受体。最终效应的前兆体

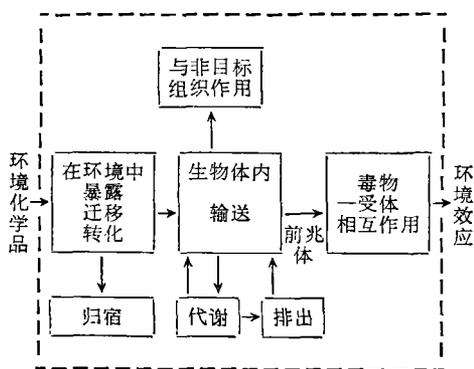


图1 环境化学中 QSAR 概念模式

与受体作用，产生效应后果，诸如致变、致癌、中毒或积累等。最终效应前兆体一般与原始的化学品不同。此外，在环境中，化学品因各种因素作用，可以产生旁路反应，脱离产生最终效应主链条。在体内，输送过程亦可与其

它不产生最终效应后果的各类组织作用，或者代谢排出体外。尽管毒物-受体间作用一步步进行历程的细节，尚知之甚浅，但可从图 1 虚线框外的过程输入和产出两端响应性来考虑问题，建立模式。

四、数学模式

有了概念模式，建造数学模式就顺理成章了。一般说来，它由四部分工作组成。对应于概念模式的系统输入、产出，要分别建造结构数据和效应数据矩阵；对应于概念模式的输入、产出间的响应性，要建造定量数学式，并实现其算法。最后是所建立数学模式质量评定。

1. 建造效应数据矩阵

应用 QSAR 方法研究某一具体问题能否成功，关键在于样本矩阵内数据集合质量。要求效应数据稳定，有代表性。工作总是从数据质量评价着手，通过一元或多元统计分析，检验和剔除离群点，判定其统计分布特征^[11]。离群点与整体集合行为根本不同，若不剔除，会干扰工作进行，以致得到错误的结论。效应数据来源于实验测定和收集文献数据，大型数据库在 QSAR 研究中作用不小。以 RTECS 库为例^[12]，其典型输出列于表 3。可以看出，仅毒性一词，含义就十分丰富。其中有刺激数据、致突变数据、生殖效应数据、致肿瘤数据、急性毒性数据及远期毒性数据等等。每个数据项内还包括试验方法、受试动物、物质浓度、剂量及毒性评价等内容。有时，数据离散性过大，可以等级标度，甚至仅指出性质大致归类。至于生物降解量、生物积累量和生物降解产物分布，只能在定性归类基础上讨论。

2. 建造结构数据矩阵

环境化学中的 QSAR 研究，常用的电子构型编码为 MR、传输编码为 BCF 和溶剂化参数 SP，拓扑编码为分子连接指数 χ 。

生物浓缩系数 BCF 是化学物质在生物

表 3 化学物质毒性库典型输出^[12]

RTECS Accession	AG6825000
Prime Name	ACETIC ACTD, (2,4-DICHLOROPHENOXY)-
CAS Registry Number	000094757
Molecular Formula	C8-H6-Cl2-03
Synonym	ACIDE 2,4-DICHLORO PHENOXYACETIQUE(French)
Synonym	AGROTECT
Update Time (YYMM)	8701
Molecular weight	221, 04
Class of Compound	Agricultural Chemica
Wiswesser Line Notation	QU10R BG DG
Irritation Data	skn-rbt 500 mg/24H MLD "Sbornik Uysledku Toxixologickeho Uysetreni Latek A Pripravku," J.U. Marhold, Institut Pro Uychovu Uedoucicn Pracovniku Chemickeho Prumyclu Praha, Czechoslovakia, 1972 -,279, 72
Mutation Data	dnd-esc 20 umol/L Mutation Research, (Elsevier/North Holland Biomedical Press, P.O. Box 211, 1000 AE Amsterdam, Netherlands) V, 1-1964-89, 95, 81
Reproductive Effects Data	1T48 orl-rat TDLo:220 ug/kg (1-220 preg) Gigena i Sanitariya, (English Translation is HYSAAU), (v/o "Mezhdunarodnaya Kniga," Kuznetskii Most18, Moscow G-200, U.S.S.R.) V, 1-1936-50(10), 76, 85
Toxicity Data	orl-mam LD50:375 mg/kg Science, (American Assoc. for the Advancement of Science, 1515 Massachusetts Ave., NW, Washington, DC 20005) V, 1-1895-165, 465, 69
Reviews	TOXICOLOGY REVIEW Residue Reviews, (Springer Verlag New York, Inc., Service Center, 44 Hartz way, Secaucus, NJ 07094) V, 1- 1962-59, 1, 75
Standards and Regulations	DOT-HAZARD:ORM-A; LABEL:NONE Code of Federal Regulations, (U.S. Government printing, Office, Supt. of Doc, Washington, DC 20402) 49, 172, 101, 86
NTP, NIOSH, & EPA Status	EPA GENETOX PROGRAM 1986, Positive: In vivo cytogenetics-nonhuman bone marrow
NTP, NIOSH, & EPA Status	EPA GENETOX PROGRAM 1986, Positive: In vitro cytogenetics-human lymphocyte; Plant chromosome

体内的浓度与水体中的浓度达到平衡时二者浓度之比。BCF 高,意味着生物体内环境化学品残留大。一般说来,它与分子形状、大小和面积有关,需由实验测定,在预报水生生物的长期毒性时,相当有用。

分子连接指数 x 的定义为点价乘积平方根的倒数和^[13]:

$$M_x = \sum_k^N (\sqrt{\delta_i \delta_j \delta_k \delta_l})_k^{-1} \quad (2)$$

式中, δ 为分子中某碳原子与相邻碳原子所构成的价键数, i, j, k, l 为分子结构中依次排列的碳原子。 M 为阶数, $M + 1$ 为 δ 乘积项中元数, N 为乘积项数。面对分子结构复杂

情况,可做环状结构,键不饱和度及杂原子校正。因应用效果好,故常被引用。

3. 数学模式算法

由于环境效应数据常用大类或等级表示,故而常用判别等级效果良好的聚集分析和模式识别^[14]。聚集分析将结构数据类似元聚集生成树,树中类似元聚集为簇。环境化学系统的类似性常用多维空间点群间距离或相关系数表达。在任何水平的聚集分析中,簇内成员彼此相似,与其它簇的成员明显区别,不同的簇对应于不同的环境效应。模式识别在计算时将效应编码矩阵估计在内,因此较聚集分析为细致。首先是特征选择,

在诸多结构参数中选取那些对效应最有影响的结构编码,构成维数较少的特征空间。其次是分类识别,在特征空间内构筑模式,将学习样本集合归类。最后是检验集合中未知属性样本归类,预报,及图象显示。SIMCA 是典型的模式识别方法,最近应用广泛^[15,16]。其算法核心是类似性线性表达:

$$y_{ik}^{(q)} = d_i^{(q)} + \sum_{a=1}^{A_q} \beta_{ia}^{(q)} \theta_{ia}^{(q)} + \varepsilon_{ik}^{(q)} \quad (3)$$

此式相当于结构编码矩阵 $y_{ik}^{(q)}$ 之台勒展开。 A_q 为选取的对表达问题已足够了的主成份数。角标 q 代表数据所属类,每类一个模型,有利于较为细致地处理多类问题。计算变量的模型势和判别势以剔除那些数值较低,即与效应属类关系不大的结构编码。在特征空间内,做学习样本结构编码主成份分析,确定 A_q ; 继而将选定的主成份与样本结构编码做线性回归分析,得到类模型。计算检验集合的样本到两类间的距离和 F 值,据此可明确地将检验集合中样本派到合理一类之中,达到预报目的。

我们仿照美国化学信息系统中的 ARTHUR 程序包^[17],开发了应用量子化学程序包和以模式识别为主的多元统计分析程序包^[18]。前者包括 HMO、PPP、EHMO、CNDO、INDO 和 MINDO 等程序,以产生结构编码。后者包括多元回归分析、主成份分析、因子分析、一般聚集分析、模糊聚集分析、判别分析和模式识别(线性映照、非线性映照和 SIMCA)方法。可在 VAX-11/780,亦有部分可在 PC/AT 机上进行运算。

4. 质量评定

由于效应数据本身离散性较大,相关系数或标准差等统计指标难于对模型质量进行

判断。对于聚集分析和模式识别来讲,错分点百分数为常用的经验指标,即:

$$P = N_1/N \quad (4)$$

N_1 为错分点数, N 为样本总数。方法简单、明确,说明问题。显而易见, $1 - P$ 为正确分类率,当其超过 0.80 时,即可认为计算结果满足统计标准。事实证明,对于 QSAR 研究的一般课题,只要结构编码选择得当,总会达到、甚至常常超过该统计分析水平。

参 考 文 献

- [1] Maugh II T.H., *Science*, **199** (4325), 162 (1978).
- [2] Maugh II, T.H., *Science*, **220** (4360), 293 (1983).
- [3] 白迺彬,计算机世界,(41),20(1988).
- [4] 中国预防医学科学院环境卫生监测所 IRPTC 中国登记处编译,有毒有害化学品环境标准及管理法规,北京,1988 年.
- [5] Speece, R. E., *Environ. Sci. Technol.*, **22**(6), 606(1988).
- [6] Heller, S.R., *Environ. Sci. Technol.*, **13**(7), 798 (1979).
- [7] K.L.E.Kaiser, *QSAR in Environmental Toxicology*, D. Reiolel Publishing Company, Dordrecht, 1984.
- [8] 袁宝珊,环境研究与监测,(2),61(1988).
- [9] U.S. EPA, *Research Outlook 1986*, Washington, D. C., 1986.
- [10] 洼田种一等,化学领域,增刊(122),43(1979)
- [11] 杜敏,白迺彬,环境科学,**10**(2),81(1989)
- [12] 王忠成,计算机与应用化学,**5**(3),218(1988)
- [13] 王连生,环境科学丛刊,**10**(3),1(1989)
- [14] 福永圭之介,统计图形识别导论,科学出版社,1978 年.
- [15] 王忠成,环境地球化学与健康,263—265 页,地震出版社,1987 年.
- [16] Wold, S. Sjöström, M. *Chemometrics: Theory and Application*, pp. 243—282 ACS, Washington D.C., 1977.
- [17] Harper, A.M. and Duewer, D.L. et al., *Chemometrics: Theory and Application*, pp. 14—52, ACS, Washington D.C., 1977.
- [18] 白迺彬,环境化学,**6**(1),78(1987).

(收稿日期: 1989 年 11 月 17 日)

in general survey of technical chemicals and investigation of potential pollution sources.

Determination of ^{90}Sr , ^{137}Cs , Ca and K in Milk by Radiochemical and Chemical Method. Sha Lianmao, Wang Zhihui, Wang Fenghua (China Institute for Radiation Protection, Taiyuan): *Chin. J. Environ. Sci.*, **11**(2), 1990, pp. 51

A method for determining low-level radioactive nuclides in milk for intercomparison by WHO-IRC is presented in this paper. The results show that the values of ^{90}Sr , ^{137}Cs , Ca concentration appear to be agreement with IRC reference values. Some problems concerning the effect on analytical accuracy have been discussed as well.

A Survey of $^{239+240}\text{Pu}$ and ^{238}Pu in Main Foodstuff of China. Han Shouling et al. (Liaoning Provincial Institute of Labour Hygiene, Shenyang): *Chin. J. Environ. Sci.*, **11**(2), 1990, pp. 55

Radioactive plutonium isotopes in 16 samples of the main foodstuff collected from nine provinces and autonomous regions of China have been determined by means of radiochemical separation, electrodeposition and alpha-spectrum measurements. The results show that specific radioactivities of both $^{239+240}\text{Pu}$ and ^{238}Pu in the foodstuff vary from 1×10^{-4} Bq/kg to 1×10^{-3} Bq/kg, the concentrations of ^{238}Pu in foodstuff are less than $^{239+240}\text{Pu}$. However, by way of exception, the specific radioactivities of $^{239+240}\text{Pu}$ and ^{238}Pu in tea samples are 7.41×10^{-3} Bq/kg and 1.33×10^{-3} Bq/kg respectively.

Advances of Quantitative Structure Activity Relationship (QSAR) in Environmental Chemistry and Its Methodology. Bai Naibin (Research Center for Eco-Environmental Sciences, Academia Sinica, Beijing): *Chin. J. Environ. Sci.*, **11**(2), 1990, pp. 62

QSAR is a useful means in safety assessment of chemicals. This article describes its application background, fundamental principles, evolution, conception model, mathematical model and algorithm, from which the author and his assistants have developed a software package of applied quantum chemistry with a purpose of producing the molecular structure descriptors. In the software a chemical substance toxicity database has been carried out so as to acquire lots and lots of biological activity data of chemicals, and in order to set up the relationship between molecular structure and its biological activity, a pattern recognition software has been applied. Finally, the perspective of QSAR research in environmental chemistry has

been discussed in this article.

Microbial Degradation of Pesticides. Zheng Zhong (Zhejiang Agricultural University, Hangzhou): *Chin. J. Environ. Sci.*, **11**(2), 1990, pp. 68

A general description on microbial degradation of pesticides is given in this review. The subject covers following aspects: isolation of the microbe-degraders, biodegradation pathway of some pesticides, and characteristics of microbial metabolism and involved enzymes. The practical approaches to biological detoxification of pesticides have also been discussed.

On the Environmental Characteristics and Changes in Northwestern Arid Area of China. Ma Ruijun (Department of Geography, Northwest Normal University, Lanzhou): *Chin. J. Environ. Sci.*, **11**(2), 1990, pp. 76

With a comparative approach, the author discusses theoretically the arid causes in the northwestern area of China from the viewpoints of its formation course, space structure, heat and moisture conjunction, natural factors and human activities on the environment as well.

Fuzzy Comprehensive Assessment of Environmental Quality by Computer Performance. Liu Hui, Wang Feiyue (Wuhan University): *Chin. J. Environ. Sci.*, **11**(2), 1990, pp. 81

This paper presents a fuzzy mathematical model designed for comprehensive assessment of environmental quality by means of IBM PC computer. The model has been applied successfully to the atmospheric environmental assessment in Wuhan.

Radioactive Impact Assessment of Returning the Coal-Ash Storage Sites of the Power Stations into Farmland. Wang Bing (Society of Environmental Protection of Handan Prefecture, Hebei Province): *Chin. J. Environ. Sci.*, **11**(2), 1990, pp. 84

The radionuclide contents of coal ash from the power stations in Handan Area are higher than that in the local soil except ^{40}K . However, this situation doesn't affect the sites to be reformed into farmland. The results of detection show that radionuclide contents in wheat, maize and rice which were planted on the farmland are not different from those planted on ordinary ones, and the additional radiation dosage received annually by the peasants working in the coal-ash storage sites is only 1% of the limit stipulated by Chinese authorities concerned.