

мического строения. В основу метода положен принцип «распознавания образа с учителем». Программа дает возможность пользователю: а) создавать и редактировать «обучающую» выборку из изученных веществ; б) проводить аналогичные операции с таблицей структурных фрагментов — дескрипторов; в) формировать обучающее правило («обучать» программу при каждой новой выборке и новых дескрипторах); г) прогнозировать класс опасности для новых химических соединений.

Указанный выше набор программных средств еще не охватывает все аспекты деятельности врача-токсиколога, требующие использования вычислительной техники. При всем многообразии этих приложений в данной области основной и важнейшей задачей санитарной токсикологии, где они должны быть применены в полном объеме, остается оценка зависимости «концентрация (доза) — время — эффект (ответ)» при определении пороговых и недействующих концентраций (доз) вредных веществ при гигиеническом регламентировании вредных веществ. В. Г. Ковязин [3] и В. А. Копаневым и соавт. [6] было предложено использовать при оценке этих зависимостей методы многомерной статистики — критерий Т-квадрата Хотеллинга и так называемое «расстояние Махаланобиса» соответственно. При этом было предложено использовать эти критерии в сочетании с математическим планированием эксперимента, что существенно повышает корректность процедуры определения пороговых доз и концентраций [3]. Эти задачи в рамках настоящего проекта не были реализованы в виде специальных программных продуктов, так как являются, по-нашему мнению, достаточно универсальными. В частности, для

их решения с положительным результатом были апробированы известные пакеты программ «Statgraphics» и «Surfer» (США).

Рассматриваемый программный комплекс был апробирован в Республиканском информационно-аналитическом центре ГКСЭН РФ и рекомендован для практического использования на территории Российской Федерации.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бочков П. Е., Бедкина Л. Б., Макаров Е. В., Сердюк Л. А. Гибкие организационные АСУ.—М., 1989.
2. Зацепин В. М., Нигматуллин Р. С. Обзор инф. сер. «химические средства защиты растений».—М., 1988.
3. Ковязин В. Г. // Гиг. и сан.—1987.— № 12.—С. 50—53.
4. Ковязин В. Г. // Гиг. труда.—1992.— № 1.—С. 27—30.
5. Курляндский Б. А., Шитиков В. К., Тихонов В. Н. // Гиг. и сан.—1986.— № 1.—С. 53—55.
6. Определение порога подострого действия и оценка дополнительной информативности эффектов (при изолированном и совместном действии химических веществ).—Метод рекоменд.—М., 1991.
7. Справочник по базам данных на оптических дисках по химии, токсикологии, медицине и охране окружающей среды/А. П. Сучков и др.—М., 1991.
8. Справочник по зарубежным базам данных в области химии, биологии и медицины, доступным через международные компьютерные сети/А. П. Сучков и др.—М., 1991.
9. Справочник по прикладной статистике. В 2-х т. Т. 1: Пер. с англ./Под ред. Э. Ллойда, У. Ледермана, Ю. Н. Тюрина.—М., 1989.
10. Сударинов Л. Г., Петрова В. А. Перспективные направления развития информатики и компьютерной технологии в здравоохранении.—Тез. докл. Всесоюз. научн. конф. М., 1986.—С. 13—15.
11. van Noordwijk A. J., van Noordwijk J. // Arch. Toxicol. 1988.—Vol. 61.—P. 333—343.
12. Registry of Toxic Effects of Chemical Substances. National Institute for Occupational Safety and Health USA.: U. S. Government Printing office, Washington. (1985—1986 Edition).—1988.—Vol. 1—5.

Поступила 23.07.93.

УДК 614:615.9

БАЗЫ ДАННЫХ ПО САНИТАРНОЙ ТОКСИКОЛОГИИ, ГИГИЕНЕ И СМЕЖНЫМ ОБЛАСТЯМ НА МАГНИТНЫХ НОСИТЕЛЯХ ИНФОРМАЦИИ

В. Г. Ковязин

Татарский республиканский регистр потенциально токсичных химических веществ
(директор—В. Г. Ковязин) Госкомсанэпиднадзора (председатель—В. В. Морозов)
Республики Татарстан

В настоящее время компьютерная информационная технология стала неотъемлемой принадлежностью всех

международных и многих национальных программ по охране окружающей среды и здоровья человека. Эти

методы начинают внедряться в практику отечественного санитарного надзора [1, 2, 5, 6], в том числе в Республике Татарстан [3, 4].

К числу наиболее известных баз данных, имеющих рубрики, позволяющие хранить и получать информацию по санитарной токсикологии, гигиене и сопредельным областям (здорово-охранение, фармакология, фармация, химия, использование пестицидов в сельском хозяйстве, их опасность для биосферы и по другим сопредельным областям), относятся следующие: AGRI, AGRC, ANAB, ASFA, BEIL, CHEM, CBNB, CIND, PLAN, CSNB, DHSS, DIOC, EMED, FSTA, IPAB, JAPI, MART, MEDL, NTIS, OCAB, PHAR/PHDI, POLL, PTBN, CNAM, SCIN, TOXL, WOPI.

В последнее время наряду с традиционной для развитых стран сетевой информационной технологией активно распространяется информация на оптических (лазерная запись) компакт-дисках (ОКД). Согласно каталогу «CD-ROMs in print 1990» в мире уже выпускаются тысячи наименований БД на ОКД. Объем информации, которую можно записать на одном ОКД, достигает 550 мегабайт, что позволяет, минуя информационную сеть, использовать непосредственно на персональном компьютере такие крупные базы данных, как CHEM-BANK, MSDS, PESTICIDE DISC и др.

В СНГ и странах ближнего зарубежья из указанных выше БД фактически известны лишь RTECS NIOSH и CHEM (Chemical Abstracts Service—CAS), имеющиеся в ряде научных организаций в виде печатных изданий США.

Отличительной особенностью БД RTECS NIOSH [12] является ее фактографический характер: в тексте в закодированном виде указываются конкретные дозы веществ, токсический эффект этих доз с указанием органа-мишени и вида токсического действия (иногда в градирированном виде, например, для веществ-канцерогенов и irritантов). Указанные особенности БД RTECS NIOSH, как показывает наш опыт, делают ее наиболее «дружественной» для токсиколога-экспериментатора, так как наличие формализованных описаний свойств веществ позволяет осуществлять запросы с учетом любого из

Структура профиля данных МРПТХВ

Номер	Содержание файла
1.	Идентификаторы, свойства и классификация
2.	Производство/торговля
3.	Производственные процессы
4.	Применение
5.	Пути поступления в окружающую среду
6.	Содержание в различных средах (потери, устойчивость концентрации, поступление в организм человека)
7.	Исследования путей превращения вещества в окружающей среде (биотрансформация, фототрансформация, гидролиз, сорбция, испарение, окисление, исследования в модельных экосистемах)
8.	Судьба вещества в окружающей среде
9.	Хемобиокинетика (абсорбция, распределение, фактор биоконцентрации, метаболизм, выведение)
10.	Токсичность для млекопитающих
11.	Исследования специфического действия (влияние на биохимические процессы, канцерогенность, мутагенность, нейротоксичность, влияние на поведение, сенсибилизация, комбинированное действие, раздражающее действие, иммунотоксичность, влияние на репродуктивную функцию, тератогенность)
12.	Влияние на организмы в окружающей среде (токсичность для водных организмов, токсичность для наземных организмов)
13.	Отбор, подготовка и анализ проб
14.	Разливы и выбросы
15.	Лечение отравления
16.	Обработка и удаление отходов
17.	Рекомендации/законодательные механизмы.

имеющихся дескрипторов. Вместе с тем в RTECS нет данных о физико-химических свойствах веществ, их воздействии на объекты биосферы, фирмах-производителях, объеме производства, методах безопасности при транспортировке и др.

В качестве примера другой организации БД может быть упомянута БД OHMTADS, в которой содержатся номенклатурные характеристики веществ, информация по физико-химическим свойствам, правила хранения и транспортировки, реакционная способность, методы обнаружения в объектах биосферы, данные о пожаро- и взрывоопасности, опасности для окружающей среды, основные токсикологические характеристики для диких и сельскохозяйственных живот-

ных, токсичность для растений, действие на человека, меры безопасности при аварийных выбросах, общие сведения об опасности, поведение в окружающей среде и др., всего 126 полей, собранных в указанные выше группы.

Принцип, положенный в основу формирования БД OHMTADS,—максимально возможный охват сведений о конкретном химическом веществе,—получил свое дальнейшее развитие в Международном регистре потенциально токсичных химических веществ (МРПТХВ) программы ЮНЕП ООН [9—12]. Структура профиля данных МРПТХВ включает для каждого вещества 17 специализированных записей (файлов) (см. табл.), связывающихся между собой с помощью «ключей»—идентификаторов веществ, которые приводятся в каждом из 17 файлов. При государственном комитете санитарно-эпидемиологического надзора Республики Татарстан создан Татарский республиканский регистр потенциально токсичных химических веществ (ТР РПТХВ). ТР РПТХВ является официальным дистрибутором информации РМПТХВ на территории республики и проводит регистрацию химической продукции, используемой в регионе, оказывает другие информационные услуги заинтересованным организациям. Татарский республиканский регистр располагает информационными ресурсами, включающими базы данных на магнитных носителях RTECS, OHMTADS, МРПТХВ, ведет свою оригинальную автоматизированную базу данных. Кроме того, ТР РПТХВ имеет тесные контакты, предполагающие в дальнейшем постоянную факс-модемную связь с информационными службами по санитарной и экологической токсикологии в Российской Федерации, ближнем зарубежье и с головным учреждением МРПТХВ в Женеве. ТР РПТХВ принимал участие в Международном семинаре по организации информационного обслуживания, ко-

торый проводился специалистами МРПТХВ и Российским центром международных проектов (г. Вильнюс).

ЛИТЕРАТУРА

1. Голубева Е. Я., Сальникова Л. С., Сахарова Е. В. и др. Материалы Всесоюзной научной конференции в г. Ереване (13—14 сентября 1988 г.) / Под ред. И. В. Саноцкого. — Ереван, 1988.
2. Горбачев Н. Б., Гребельный В. М. Исследования эффектив. средств индивидуальной защиты для работ. с х-ва. — Орел, 1988.
3. Ковязин В. Г., Семанов Д. А., Шерман А. С. Математические методы в химии (ММХ-7): Тез. докладов VII Всесоюзной конференции. — Казань, 1991.
4. Ковязин В. Г., Семанов Д. А., Каратай Ш. С., Елькина Н. Н. Окружающая среда и здоровье населения: Тез. докл. научно-практ. конф. Поволжского региона (18—19 декабря 1990 г.) — Казань, 1990.
5. Курляндский Б. А., Шитиков В. К., Тихонов В. Н. // Гиг. и сан. — 1986. — № 1. — С. 53—55.
6. Леценко Я. А., Семенов Г. Л. // Гиг. и сан. — 1988. — № 9. — С. 24—28.
7. Международный Регистр Потенциально Токсичных Химических Веществ: Программа ООН по окружающей среде / Перевод и издание проекта СССР—ЮНЕП/МРПТХВ «Контроль опасности химических веществ для здоровья человека и окружающей среды». — М., 1985.
8. Международный Регистр Потенциально Токсичных Химических Веществ (Часть А): АМПТХВ. Программа ООН по окружающей среде. Женева, Швейцария: Описание и инструкция по отбору и представлению данных для МРПТХВ / Перевод и издание СТП проекта СССР—ЮНЕП/МРПТХВ «Контроль опасности химических веществ для здоровья человека и окружающей среды». — М., 1985.
9. Международный Регистр Потенциально Токсичных Химических Веществ / Пер. с англ. / МРПТХВ ЮНЕП ООН. — Paris, France, 1992.
10. Саноцкий И. В., Сидоров К. К., Сальникова Л. С. и др. // Гиг. труда. — 1989. — № 8. — С. 59—61.
11. Справочник по базам данных на оптических дисках по химии, токсикологии, медицине и охране окружающей среды / А. П. Сучков, Л. Д. Сычкова, М. В. Фадеева, А. А. Яник. — М., 1991.
12. Registry of Toxic Effects of Chemical Substances. National Institute for Occupational Safety and Health USA: U. S. Government Printing office, Washington. (1985—1986 Edition). — 1988. — Vol. 1—5.
13. Santodonato J., Bush C., Howard et al. // Environ. Toxicol. and Chem. — 1987. — Vol. 6. — P. 921—927.

Поступила 01.09.93.