

нических веществ по структурным фрагментам молекулы.

Для задач санитарной токсикологии создан программный комплекс АСНИ.

Приоритетным направлением в научных исследованиях курса профессиональных болезней является изучение

патологических состояний, вызванных химическими факторами производств и вибрацией. Для студентов и субординаторов разработаны методические рекомендации «Вибрационная болезнь» (З. М. Берхеева, 1992).

Поступила 20.03.94.

УДК 613.63

## ИНФОРМАЦИОННЫЕ И ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ В САНИТАРНОЙ ТОКСИКОЛОГИИ

В. Г. Ковязин

*Кафедра гигиены труда и профзаболеваний (зав.— член-корр. РАМН,  
проф. Н. Х. Амиров) Казанского медицинского института*

Компьютерная технология является в настоящее время общепризнанным фактором интенсификации научных исследований в санитарной токсикологии и смежных научных дисциплинах.

По нашему мнению, наиболее перспективным, универсальным и представляющим междисциплинарный интерес является метод классификации и прогноза класса опасности органических веществ по структурным фрагментам молекулы, описание которого приводится в данной публикации. Для реализации метода была разработана специальная программа BYES/4 в двух вариантах: а) для ПЭВМ с очень низкими техническими возможностями — «Электроника ДЗ-28» и б) версия для ПЭВМ типа IBM PC XT/AT.

Наиболее сложной, трудоемкой и практически не формализуемой операцией при использовании этих программ является ручное кодирование химических структур. Альтернативным вариантом может стать автоматическое кодирование с помощью базы данных RTECS NIOSH или других БД, имеющих структурный код Висвессера [1].

Предложенный метод многомерной классификации универсален. В качестве предикторов могут быть использованы не только структурные коды, но и ранжированные данные токсикометрии, физико-химические свойства и др. Число прогнозируемых кластеров и вид прогнозируемого эффекта (вместо класса опасности: мутагенные, канцерогенные и др.) задается поль-

зователем путем ввода в систему новой «обучающей» выборки данных.

Процедура прогноза класса опасности заключается в вычислении апостериорной вероятности ( $\hat{Pr}(W_i/x)$ ) одного из  $k$  (1, 2, ...,  $i$ , ...,  $k$ ) классов в зависимости от наличия в структуре исследуемого вещества конкретного сочетания структурных фрагментов таблицы по формуле Вайеса, предполагающей аддитивный характер априорных вероятностей:

$$\hat{Pr}(W_i|x) = \frac{p_i/n \prod_{j=1}^p (n_{ij}/n_i)^{x_j} (1-n_{ij}/n_i)^{1-x_j}}{\sum_{m=1}^k p_m/n \prod_{j=1}^p (n_{mj}/n_m)^{x_j} (1-n_{mj}/n_m)^{1-x_j}}$$

где  $p$  — число веществ в «обучающей» выборке;  $p_i$  — число веществ  $i$  класса опасности;  $p_{ij}$  — число веществ, имеющих в  $i$  классе  $j$  структурный фрагмент;  $p$  — общее число структурных фрагментов;  $k$  — число классов опасности;  $x_j = 1$  при наличии в молекуле структурного фрагмента  $j$ ,  $x_j = 0$  (ноль) — при его отсутствии.

В качестве структурных фрагментов эмпирически были выбраны сочетания, устойчиво встречающиеся в «обучающей» выборке» (см. табл.). Код не отражает повтор фрагментов, их положение (орто-, мета-, пара- и др.) и не может быть использован в качестве полноценного дескрипторного языка химических структур.

Одним из вариантов применения программных средств BYES/4 может быть решение клинических диагности-

Структурные фрагменты, использованные для прогноза класса опасности (с сокращением: п - число веществ, в которых встречается структурный фрагмент)

Код	Символ фрагмента и его наименование	п	
<b>Фрагменты-заместители (X):</b>			
4	-H	Водород	282
	-F	Фтор	45
	-Cl	Хлор	132
	-Br	Бром	14
	-I	Иод	1
...	-OH	Спирты, фенолы	45
...	...	...	...
<b>Корневые фрагменты гомол. рядов (R):</b>			
29	CH <sub>4</sub>	Метан	58
30	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	Этан	41
31	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	Пропан	19
...	...	...	...
<b>Вторичные структуры:</b>			
66	R-O-R	Простые эфиры	23
67	R-C(=O)-R	Кетоны	22
68	R-C(=S)-R	Тиоэфиры	7
69	R-C(=O)-O-R	Сложные эфиры	36
70	R-NH <sub>2</sub> R-N(H)-R R-N(R)-R	Амины	33
...	...	...	...
91	R-S(=O)(OH)-N-NH <sub>2</sub>	Сульфогидразины	1
92	R-N(C(=S)-S-C(=S)-N)-R	Дитиокарбаматы (тиурам и его производные)	1

ческих задач, например дифференциальная диагностика, выделение новых

УДК 614.872:616.8-008.615+616.891

## ПОГРАНИЧНЫЕ НЕРВНО-ПСИХИЧЕСКИЕ РАССТРОЙСТВА У ЛИЦ, ПОДВЕРГАЮЩИХСЯ ВОЗДЕЙСТВИЮ ФИЗИЧЕСКИХ ФАКТОРОВ ПРОИЗВОДСТВА

К. К. Яхин

*Кафедра психиатрии (зав.—проф. Д. М. Менделевич)  
Казанского медицинского института*

Анализ литературы показывает, что в среднем от 40 до 80% рабочих промышленных предприятий подвергаются воздействию шума выше предельно допустимых нормативов. Сенсорная депривация является относительно мало изученным фактором, значение которого для психического здоровья становится все более ясным в течение последних десятилетий и встречается у рабочих на предприятиях электронной и химической промышленности, при освоении новых территорий (полярная ночь) и пространств (космические полеты, подводные пространства).

нозологических форм в профпатологии или экпатологии и др. В качестве дескрипторов распознаваемого образа, точнее, стандарта болезни или изучаемого патологического состояния с доклиническим статусом в этом случае должны быть использованы клинические симптомы и данные лабораторных исследований, представленные в альтернативной форме, например: результаты анализа в пределах нормы (+) или за ее пределами (-).

### ЛИТЕРАТУРА

1. Евтюгин Г. А., Ковязин В. Г., Корень Н. А., Семанов Д. А. Структурный код Виссесера.— Основные правила: Руководство для студентов.— Казань, 1991. Часть 1.

Поступила 17.01.94.

### INFORMATIONAL AND COMPUTATIONAL METHODS IN SANITARY TOXICOLOGY

V. G. Kovyazin

#### Summary

The use of the methods of biometry as statistical simulation of the «biological norm» state, estimate of the «dose (concentration) — time—effect (response)» relationship by mathematical experimental design methods, prediction of the danger class of organic substances according to structural fragments of the molecule, classification method using Baies's training procedure is suggested.

Психические расстройства, обусловленные собственно производственными факторами, являются дезадаптационными психическими нарушениями, в генезе которых имеют значение недостаточность систем психической адаптации. В других случаях они возникают из-за превышения интенсивности воздействия факторов окружающей среды «индивидуальных барьеров психической адаптации» личности.

Клинико-иммунологический анализ выявил, что показатели распространенности пограничных психических расстройств (ППР) среди обследованных нами лиц значительно выше