

© КОЛЛЕКТИВ АВТОРОВ, 2017

УДК 614.7:616-092.12

Новиков С.М.¹, Фокин М.В.², Шашина Т.А.¹, Додина Н.С.¹

TERA – РОССИЙСКАЯ ИНФОРМАЦИОННО-ПРОГНОЗИРУЮЩАЯ СИСТЕМА: ОПЫТ ПРИМЕНЕНИЯ В ОЦЕНКЕ РИСКА ДЛЯ ЗДОРОВЬЯ

¹ ФГБУ «Центр стратегического планирования и управления медико-биологическими рисками здоровью» Минздрава России, 119121, Москва;

² ГБОУ ВПО «Первый Государственный медицинский университет им. И.М. Сеченова» Минздрава России, 119991, Москва

Представлена уникальная российская компьютерная информационно-прогнозирующая система TERA (Tools for Environmental Risk Assessment), которая предназначена для выполнения исследований по оценке риска для здоровья, связанного с воздействием химических соединений, загрязняющих различные объекты окружающей среды. Рассмотрены основные расчётные модули, системы специализированных баз данных, а также основная идентификационная таблица TERAbase, позволяющие соблюсти все методические требования и рекомендации, предусмотренные санитарным законодательством как для выполнения, так и для экспертизы научно-практических работ по оценке риска для здоровья населения, аккредитации и сертификации органов по оценке риска. Показаны направления решения проблемы информационного обеспечения работ по оценке риска для здоровья.

Ключевые слова: информационно-прогнозирующая система; оценка риска; базы данных; информационное обеспечение.

Для цитирования: Новиков С.М., Фокин М.В., Шашина Т.А., Додина Н.С. TERA – Российская информационно-прогнозирующая система, опыт применения в оценке риска для здоровья. *Гигиена и санитария*. 2017; 96(11): 1088-1090. DOI: <http://dx.doi.org/10.18821/0016-9900-2017-96-11-1088-1090>

Для корреспонденции: Новиков Сергей Михайлович, д-р мед. наук, проф., вед. науч. сотр. лаб. оценки риска и ущербов здоровью населения ФГБУ «Центр стратегического планирования и управления медико-биологическими рисками здоровью» Минздрава России, 119121, г. Москва. E-mail: novikserg46@mail.ru

Novikov S.M.¹, Fokin M.V.², T. A. Shashina¹, Dodina N.S.¹

TOOLS FOR ENVIRONMENTAL RISK ASSESSMENT (TERA) – RUSSIAN INFORMATION-FORECASTING SYSTEMS, EXPERIENCE OF APPLICATION FOR HEALTH RISK ASSESSMENT

¹Center for Strategic Planning and Management of Biomedical Health Risks, Moscow, 119121, Russian Federation;

²I.M. Sechenov First Moscow State Medical University, Moscow, 119991, Russian Federation

There is presented a unique Russian computer information and predictive TERA (Tools for Environmental Risk Assessment) system aimed to carry on studies of the assessment of health risk related to the impact of chemical compounds that pollute the various environmental objects. There are considered main calculation modules of specialized databases, as well as the main identification table - TERAbase, allowing to observe all the methodological requirements and recommendations provided by the sanitary legislation, for doing so and for the examination of scientific and practical work on risk assessment to public health, accreditation and certification for risk assessment bodies. There is indicated the direction of solving the problem of information support for risk assessment work for health.

Key words: information and forecasting systems; risk assessment; database; information support.

For citation: Novikov S.M., Fokin M.V., T. A. Shashina, Dodina N.S. Tools for Environmental Risk Assessment (TERA) – Russian information-forecasting systems, experience of application for health risk assessment. *Gigiena i Sanitaria (Hygiene and Sanitation, Russian journal)* 2017; 96(11): 1088-1090. (In Russ.). DOI: <http://dx.doi.org/10.18821/0016-9900-2017-96-11-1088-1090>

For correspondence: Sergey M. Novikov, MD, PhD, DSci., professor, leading researcher of the Laboratory of assessment of risks and damages for the health of the population of Center for Strategic Planning and Management of Biomedical Health Risks, Moscow, 119121, Russian Federation. E-mail: novikserg46@mail.ru

Information about authors:

Novikov S.M., <http://orcid.org/0000-0002-8657-5424>; Dodina N.S., <http://orcid.org/0000-0001-6693-922X>

Conflict of interest: The authors declare no conflict of interest.

Acknowledgment: The study had no sponsorship.

Received: 17 February 2017

Accepted: 05 July 2017

Информационное обеспечение токсикологических работ и оценки риска является общемировой проблемой, успешно решаемой во многих странах путём создания соответствующих баз данных (БД). Приоритетнейшей задачей при этом является обеспечение общедоступности таких БД. Для этого они создаются за счёт государственных средств и национальных программ в отличие от многочисленных коммерческих БД и систем прогноза.

В начале 90-х годов прошлого века С.М. Новиков и группа учёных на основе накопленных токсикологических данных создали прогнозирующую систему и банк данных SARETbase [1]. Компьютерная информационно-прогнозирующая система Saret предназначена для анализа связей «структура – свойство», «структура – активность», «свойство – свойство» и оценки токсикометрических и экотоксикологических характеристик 8500 веществ в экотоксикологии [2]. В последующий период на осно-

ве SARETbase была создана компьютерная система TERA (Tools for Environmental Risk Assessment).

Система TERA предназначена для выполнения исследований по оценке риска для здоровья, связанного с воздействием химических соединений (ХС), загрязняющих различные объекты окружающей среды. TERA состоит из нескольких расчётных модулей, системы специализированных баз данных, а также основной идентификационной таблицы – TERAbase. В ней сосредоточена информация о 17 351 ХС (на октябрь 2016 г.). Идентификация веществ осуществляется по регистрационным номерам CAS (Chemical Abstracts Service), RTECS (Registry of Toxic Effects of Chemical Substances), названию химического соединения, синонимам и торговым наименованиям (русским и английским), номеру государственной регистрации в Российском регистре потенциально токсичных химических и биологических веществ, коду выброса в атмосферу, брутто-формуле, химическим классам, внешнему виду, химической структуре. Последняя хранится в виде линейной записи SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry Specification, спецификации упрощённого представления молекул в строке ввода) и в химической структурной библиотеке, состоящей из файлов в международном mol-формате (MDL Molfile) [3]. Возможен просмотр и редактирование химических структур. Поиск информации осуществляется по любым идентификационным характеристикам, возможны также фильтрация и экспорт данных во всех стандартных форматах (*txt, *html, *dbf, *db, *csv, *xls).

В TERAbase представлены сведения о 18 наиболее экологически значимых физико-химических свойствах (коэффициенты распределения, растворимость в воде, давление паров, константа закона Генри и др.). В блоке «Токсичность» приведены параметры острой токсичности при разных путях введения ХС. В TERAbase представлены также сведения о раздражающем действии на орган зрения и кожные покровы, пороги раздражающего действия при ингаляции для человека, мышей, крыс, кроликов и кошек. Дано описание характера запаха и значения порогов запаха для воды и вдыхаемого воздуха. Приведены пороги острого токсического действия при ингаляционном и пероральном поступлении, пороговые и максимальные недействующие дозы и концентрации при подостром и хроническом воздействии. Общее число показателей в основной идентификационной БД составляет 188. Число подсобных БД, непосредственно поддерживающих функционирование TERA, – 48, общее число БД в системе, доступных через основной модуль – более 250. Обновление информации и UPDATE проводится ежедневно.

В блоке «Гигиенические нормативы» представлены предельно допустимые концентрации (ПДК) для атмосферного воздуха, воздуха рабочей зоны, почвы, воды водных объектов, а также значения ПДК для водоёмов рыбохозяйственного назначения. Приведены допустимые уровни воздействия для воздуха рабочей зоны, установленные различными агентствами США (ACGIH, OSHA, NIOSH), и значения концентраций, непосредственно опасных для жизни и здоровья (IDLH). Блок «Экотоксичность» включает информацию о токсичности для водорослей, микроорганизмов, дафний и разных видов рыб. В TERAbase представлены также коды опасности и их расшифровка в соответствии с классификацией ЕС, характеристики риска и безопасных условий обращения с химическим веществом. В блоке «Специфическое действие» приведены оценки канцерогенности по классификациям МАИР, NTP, NIOSH, OSHA, ACGIH, ОЕННА. С учётом современного законодательства (система REAH) введены показатели DNEL для системных и локальных эффектов, классы Крамера и соответствующий им NOAEL. В этом же разделе представлены обобщённые оценки мутагенности, эмбриотоксичности, сенсибилизирующего действия, тератогенного и гонадотропного действия, а также приведены критические органы и системы организма, поражаемые данным химическим соединением. В блоке «Референтные уровни воздействия» содержатся сведения о референтных (безопасных) дозах и концентрациях, факторах канцерогенного потенциала, критических органах и системах, в первую очередь поражаемых при низких уровнях

воздействия вещества. Отчёт о свойствах вещества выводится в формате *txt или *html.

Система TERA объединяет около 50 специализированных таблиц, содержащих сведения о пороговых уровнях воздействия с учётом продолжительности воздействия экспонируемых групп населения, тяжести ожидаемых эффектов. Приведены нормативы допустимых воздействий, установленные ВОЗ, Евросоюзом, правительственными организациями Канады, Швеции, США и отдельными штатов. В состав специализированных таблиц входят также наиболее приоритетные мировые базы данных IRIS, HEAST, RAIS, ITER и др. Широко представлена информация эпидемиологических исследований, позволяющая оценивать ущерб здоровью населения при кратковременных и длительных воздействиях ХС атмосферного воздуха. Возможен просмотр полнотекстовых документов, поиск и обновление информации через Интернет.

Прогноз многочисленных экологически значимых физико-химических свойств осуществляется с использованием специализированных прогнозных модулей или интегрированной системы EpiSuite, рекомендованной Агентством США по защите окружающей среды. В системе предусмотрен пересчёт единиц измерений различных показателей. Для идентификации приоритетных веществ в систему включены модули моделирования межсредового распределения химических соединений между 7 объектами окружающей среды (модель MacKay D. Level 1), оценки канцерогенной и токсической опасности, ранжирования компонентов промышленных выбросов в атмосферу.

Оценка риска здоровью осуществляется либо экспресс-методом для отдельных сред по величине коэффициентов и индексов токсической опасности, по значениям канцерогенных рисков, либо путём характеристики кумулятивной экспозиции, обусловленной поступлением химических соединений в организм человека ингаляционно, перорально, наожно из всех основных объектов окружающей среды. Например, для воды открытых водоёмов или почвы могут быть рассчитаны риски, связанные с заглатыванием взрослыми или детьми, ингаляционным воздействием испаряющегося ХС, поступлением вещества через кожные покровы. Полученные результаты отображаются в виде трёхмерного графика, иллюстрирующего зависимость величины риска от пути поступления вещества в организм и воздействующей среды. Система обеспечивает возможность работы с большим числом загрязняющих веществ. Суммарная оценка рисков осуществляется с учётом критических органов/систем организма, поражаемых теми или иными ХС. Добавлена возможность оценки канцерогенного риска с учётом органотропности. Так могут быть выполнены все методические требования и рекомендации, предусмотренные санитарным законодательством [4].

Система TERA позволяет осуществлять прогноз дополнительного числа случаев нарушений состояния здоровья (по более 30 исходам воздействия) различных групп населения при кратковременных и хронических воздействиях типичных веществ, загрязняющих городской атмосферный воздух (диоксиды азота и серы, озон, оксид углерода, взвешенные вещества и др.), определять атрибутивную долю влияния атмосферных загрязнений на существующие показатели смертности и заболеваемости, анализировать эффективность различных сценариев природоохранных мероприятий. Данный блок системы был использован для оценки рисков здоровью населения и выявления приоритетных загрязняющих веществ в период неблагоприятной санитарно-эпидемиологической ситуации в г. Москве во время лесных пожаров 2002 г.

Система TERA и её отдельные модули прошли апробацию в более 100 исследованиях по оценке риска здоровью населения в ряде практических и научных учреждений, в том числе в Роспотребнадзоре [5, 6].

В частности, с помощью системы TERA проводится экспертная оценка пилотных работ при аккредитации и сертификации органов по оценке риска Федеральным центром гигиены и эпидемиологии Роспотребнадзора. При этом мы столкнулись с рядом проблем, касающихся, прежде всего доступности информации об изменяющихся нормативах, их легитимности для применения в практике Роспотребнадзора [7–10].

Уникальная российская информационная система, интегрирующая как отечественную, так и практически всю приоритетную зарубежную информацию о токсикологических показателях, необходимых для оценки риска при острых и подострых воздействиях ХС на разные группы населения всеми релевантными путями, несомненно, требует всемерной постоянной государственной поддержки и развития. В частности, крайне важно создание специализированного интернет-портала для публикации и широкого обсуждения новых или обновляемых параметров по оценке риска здоровью населения.

Финансирование. Исследование не имело спонсорской поддержки.

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Литература (п. 3 см. References)

- Новиков С.М., Пороиков В.В., Тертичников С.Н., Семеновых Л.Н., Филимонов Д.А. Анализ тенденций в развитии информационных технологий и обоснование концепции разработки банка токсикологических данных SARETBASE. *Гигиена и санитария*. 1995; 84(1): 29–33.
- Информационно-прогнозирующая система SARET для анализа связи структура-активность в экотоксикологии. Available at: <http://erh.ru/dok/metod02.php>
- Р 2.1.10.1920–04. Руководство по оценке риска для здоровья населения при воздействии химических веществ, загрязняющих окружающую среду. М.; 2004.
- Унгуряну Т.Н., Новиков С.М. Проблемные вопросы, основанные на ретроспективном анализе опубликованных работ по оценке риска в городах России за 1998–2012 годы. В кн.: Ракманин Ю.А., ред. *Научно-методологические и законодательные основы совершенствования нормативно-правовой базы профилактического здравоохранения: Проблемы и пути их решения. Материалы Пленума Научного совета по экологии человека и гигиене окружающей среды Российской Федерации*. М.: МГУ; 2012: 453–6.
- Фокин М.В., Пархоменко В.В., Куличенко О.А., Менакер А.Л. Результаты оценки риска для здоровья населения от воздействия выбросов ООО «РН-Туапсенефтепродукт» в атмосферу. В кн.: *Опыт использования методологии оценки риска здоровью населения для обеспечения санитарно-эпидемиологического благополучия. Труды Всероссийской научно-практической конференции с международным участием*. Ангарск: РИО АГТА; 2012: 65–8.
- Новиков С.М., Фокин М.В., Унгуряну Т.Н. Современные проблемы развития отечественной методологии оценки риска здоровью. В кн.: *Актуальные проблемы медицины в России и за рубежом. Сборник научных трудов по итогам международной научно-практической конференции. Выпуск II*. Новосибирск; 2015: 52–4.
- Новиков С.М., Фокин М.В., Унгуряну Т.Н. Проблемы методологии и стратегии оценки риска для здоровья населения от воздействия химических веществ. В кн.: *Методологические проблемы изучения, оценки и регламентирования химического загрязнения окружающей среды и его влияние на здоровье населения. Материалы пленума Научного совета по экологии человека и гигиене окружающей среды Российской Федерации*. М.; 2015: 311–4.
- Новиков С.М., Фокин М.В., Унгуряну Т.Н. Актуальные вопросы методологии и развития доказательной оценки риска здоровью населения при воздействии химических веществ. *Гигиена и санитария*. 2016; 95(8): 711–6.
- Новиков С.М., Шашина Т.А., Унгуряну Т.Н., Додина Н.С., Фокин М.В. Проблемы приемлемости в современной методологии управления рисками. В кн.: *Современные методологические проблемы изучения, оценки и регламентирования факторов окружающей среды, влияющих на здоровье человека. Материалы Международного Форума Научного совета Российской Федерации по экологии человека и гигиене окружающей среды, посвященного 85-летию ФГБУ «НИИ ЭЧ и ГОС им. А.Н. Сысина» Минздрава России. Том 2*. М.; 2016: 95–8.

References

- Novikov S.M., Poroykov V.V., Tertichnikov S.N., Semenov L.N., Filimonov D.A. Analysis of trends in the development of information technology and study the toxicological data bank development concept SARETBASE. *Gigiena i sanitariya*. 1995; 84(1): 29–33. (in Russian)
- Information and predictive SARET system for the analysis of structure-activity relation in ecotoxicology. Available at: <http://erh.ru/dok/metod02.php> (in Russian)
- Herráez A. Biomolecules in the Computer: Jmol to the rescue. *Biochem. Mol. Biol. Educ.* 2006; 34(4): 255–61.
- R 2.1.10.1920–04. Guidance of human health risk assessment from environmental chemicals. Moscow; 2004. (in Russian)
- Unguryanu T.N., Novikov S.M. Problematic issues based on the retrospective analysis of the published works on a risk assessment in the cities of Russia in 1998–2012. In: Rakhmanin Yu.A., ed. *Scientific and Methodological and Legislative Bases of Improvement of Standard and Legal Base of Preventive Healthcare: Problems and Ways of Their Decision. Materials of Plenum of Scientific Council on Human Ecology and Environmental Health of the Russian Federation [Nauchno-metodologicheskie i zakonodatel'nye osnovy sovershenstvovaniya normativno-pravovoy bazy profilakticheskogo zdoravookhraneniya: Problemy i puti ikh resheniya. Materialy Plenuma Nauchnogo soveta po ekologii cheloveka i gigiene okruzhayushchey sredy Rossiyskoy Federatsii]*. Moscow: MGU; 2012: 453–6. (in Russian)
- Fokin M.V., Parkhomenko V.V., Kulichenko O.A., Menaker A.L. The results of the risk assessment for the health effects of emissions from «RN-Tuapsepetroleum» in the atmosphere. In: *Experience in the Use of Risk Assessment Methodology for Public Health to Ensure the Health and Disease. The Works of the All-Russian Scientific-practical Conference with International Participation [Opyt ispol'zovaniya metodologii otsenki riska zdorov'yu naseleniya dlya obespecheniya sanitarno-epidemiologicheskogo blagopoluchiya. Trudy Vserossiyskoy nauchno-prakticheskoy konferentsii s mezhduнародnym uchastiem]*. Angarsk: RIO AGTA; 2012: 65–8. (in Russian)
- Novikov S.M., Fokin M.V., Unguryanu T.N. Modern problems of development of the national health risk assessment methodologies. In: *Actual Problems of Medicine in Russia and Abroad. Collection of Scientific Papers on the Results of the International Scientific-practical Conference. Issue II [Aktual'nye problemy meditsiny v Rossii i za rubezhom. Sbornik nauchnykh trudov po itogam mezhduнародnoy nauchno-prakticheskoy konferentsii. Vypusk II]*. Novosibirsk; 2015: 52–4. (in Russian)
- Novikov S.M., Fokin M.V., Unguryanu T.N. Problems of methodology and risk assessment strategies for public health from exposure to chemicals. In: *Methodological Problems in the Study, Assessment and Regulation of Chemical Pollution and its Impact on Public Health. Materials of the Plenum of Scientific Council for Human Ecology and Environmental Health of the Russian Federation [Metodologicheskie problemy izucheniya, otsenki i reglamentirovaniya khimicheskogo zagryazneniya okruzhayushchey sredy i ego vliyaniye na zdorov'e naseleniya. Materialy plenuma Nauchnogo soveta po ekologii cheloveka i gigiene okruzhayushchey sredy Rossiyskoy Federatsii]*. Moscow; 2015: 311–4. (in Russian)
- Novikov S.M., Fokin M.V., Unguryanu T.N. Recent methodological issues and the development of evidence-based risk assessment to human health when exposed to chemicals. *Gigiena i sanitariya*. 2016; 95(8): 711–6. (in Russian)
- Novikov S.M., Shashina T.A., Unguryanu T.N., Dodina N.S., Fokin M.V. Acceptability problems in modern risk management methodology. In: *Modern Methodological Problems of the Study, Assessment and Regulation of Environmental Factors Affecting Human Health. Proceedings of the International Forum of the Scientific Council of the Russian Federation for Human Ecology and Environmental Health, Dedicated to the 85th anniversary of the FGBU «A.N. Sytin Research Institute of Human Ecology and Environmental Health» of Ministry of Health of the Russian Federation. Volume 2 [Sovremennye metodologicheskie problemy izucheniya, otsenki i reglamentirovaniya faktorov okruzhayushchey sredy, vliyayushchikh na zdorov'e cheloveka. Materialy Mezhdunarodnogo Forumy Nauchnogo soveta Rossiyskoy Federatsii po ekologii cheloveka i gigiene okruzhayushchey sredy, posvyashchennogo 85-letiyu FGBU «NII ECh i GOS im. A.N. Syšina» Minzdrava Rossii. Tom 2]*. Moscow; 2016: 95–8. (in Russian)