

УДК 004.89+004.912+004.5+004.93'1+519.7

Коротенко Г.М.

Национальный технический университет
«Днепровская политехника»

Коротенко Л.М.

Национальный технический университет
«Днепровская политехника»

Харь А.Т.

Национальный технический университет
«Днепровская политехника»

ОНТОЛОГИЧЕСКАЯ КЛАССИФИКАЦИЯ ХИМИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ ТЕХНОГЕННОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ В ЗАДАЧАХ СОЦИАЛЬНО-ГИГИЕНИЧЕСКОГО МОНИТОРИНГА

В статье исследуются методики описания и анализа загрязняющих веществ техногенного происхождения для создания специализированной онтологии, выступающей в качестве концептуальной модели процесса классификации химических веществ техногенного происхождения. Описываются структура предметной области, компонентный состав, уровни взаимодействия и возможные связи такой онтологии.

Ключевые слова: здоровье населения, техногенное влияние, экологические факторы, химические вещества, социально-гигиенический мониторинг, онтологии.

Постановка проблемы. Сложное экологическое положение и высокий уровень заболеваемости населения Украины заставляют медиков и экологов искать новые пути улучшения качества здоровья граждан, важное место среди которых занимают исследования средств снижения риска, связанного с вредным воздействием загрязнения окружающей среды. По данным ВОЗ (63 сессия Всемирной ассамблеи здравоохранения, п. 11.18 предварительной повестки дня от 25 марта 2010 г. (A63/21)), более 25% заболеваний мирового населения обусловлено экологическими факторами, в т. ч. воздействием химических веществ техногенного происхождения [1, с. 1]. В общем контексте ООН рассматривает вопрос защиты «здоровья человека» [там же] на основе регулирования химических веществ с точки зрения сектора здравоохранения. Статистические данные показывают, что от непреднамеренных отравлений ежегодно умирают примерно 355 тыс. человек, причем две трети случаев смерти наблюдаются в развивающихся странах [1, с. 2]. Медико-санитарные вопросы и роль сектора здравоохранения в Стратегическом подходе к международному регу-

лированию химических веществ на пути к достижению цели 2020 г. и на последующий период задекларированы ВОЗ в качестве одного из основных направлений работы по укреплению здоровья населения Земли [2, с. 1].

Анализ последних исследований и публикаций. Крупные промышленные мегаполисы имеют развитую инфраструктуру и являются местонахождением большого количества промышленных объектов. Поскольку наличие промышленного производства является прямой предпосылкой для возникновения техногенно-гигиенического риска здоровью населения индустриальных городов [3, с. 139], возникает необходимость усовершенствования методики описания и анализа загрязняющих веществ техногенного происхождения.

Согласно данным [4, с. 99], независимыми международными организациями официально зарегистрировано более 600 наименований подобных веществ, однако информация о них зачастую является разнородной, разноформатной и содержится, как правило, в большом количестве различных источников. Современные города выбрасывают в атмосферу и водную среду около 1 000 хи-

мических соединений [5, с. 23]. По данным работы [6, с. 3], в 1985 г. в мире было зарегистрировано семимиллионное вещество, а в настоящее время насчитывается более 20 млн индивидуальных химических веществ. В соответствии с другими данными, по документам ООН, на 2010 г. в международной системе CAS было зарегистрировано более 50 млн химических веществ. При этом из их общего количества исследовано меньше 1%. Сегодня Европейское химическое агентство (ЕХА) вынуждено констатировать ситуацию, при которой «каждый 3 случай заболевания людей в ЕС вызван факторами химической этиологии. Ежегодно около 5 млн человек умирают от воздействия опасных химикатов [7, с. 1]. Авторы доклада обращают внимание на огромные экономические потери в результате химической опасности, особенно в развивающихся странах. Предполагается, что между 2005 и 2020 гг. заболевания и травмы, связанные с использованием пестицидов в сельском хозяйстве в странах Африки к югу Сахары, могут обернуться потерями в размере \$90 млрд. Кроме того, согласно данным доклада, в настоящее время в мировом обиходе находится примерно 140 тыс. химических веществ. Лишь часть из них тщательно исследована на предмет возможного воздействия на здоровье человека и окружающую среду. Таким образом, возникает необходимость использования компьютерных технологий объединения знаний из различных информационных ресурсов в виде баз данных и знаний, онтологий знаний и предметных областей, т. н. метаонтологий [8, с. 1].

Однако на сегодняшний день на Украине не существует баз знаний химических веществ техногенного происхождения, также как и онтологий, которые могли бы выступить основой для подобных баз знаний.

Постановка задания. Целью данной работы является построение и описание структуры специализированной онтологии, выступающей в качестве концептуальной модели процесса классификации химических веществ техногенного происхождения, создающих многочисленные риски здоровью населения [9, с. 12; 10, с. 8].

Изложение основного материала исследования. При разработке интеллектуальных систем, основанных на знаниях, зачастую используются онтологии предметных областей (далее – ПО), которые представляют собой набор определенных понятий ПО и их взаимосвязей. В настоящее

время разработаны онтологии и их модели для различных предметных областей. В качестве примеров можно привести модели онтологии физической и органической химии, некоторых разделов аналитической химии [11, с. 84], оптимизирующих преобразований программ [12, с. 90] и медицинской диагностики [13, с. 244].

Онтология, описывающая конкретную предметную область, включает в себя совокупность терминов и отношений, семантически значимых для данной предметной области, а также правил, согласно которым можно строить утверждения об элементах ПО. Для каждого термина онтология задает объем обозначенного им понятия. Все множество терминов онтологии можно условно разделить на две группы: термины, которые используются при формализации знаний (онтология знаний) и термины, используемые при задании входных и выходных данных решаемых с помощью онтологии задач (онтология действительности) [14, с. 6; 15, с. 8; 16, с. 9]. Существуют также онтологии, в которых присутствуют только термины, принадлежащие к одной из вышеописанных групп.

Онтологию химии, как и любую онтологию, можно представить в виде системы понятий знаний (далее – СПЗ) и системы понятий действительности (далее – СПД) (рис. 1).

Термины СПЗ химии используются при описании значений свойств химических элементов, химических веществ и реакций. Множество значений терминов СПЗ входит в базу знаний химии, которая, кроме этих значений, содержит также множество законов химии, представленных в виде логических утверждений. В каждом разделе химии (физическая, неорганическая, аналитическая, органическая и т. д.) рассматриваются различные свойства элементов, веществ и реакций.

Определение многоуровневых онтологий. Сложно структурированные предметные области, к которым относится техноэкология¹, имеют иерархическое строение, как с последовательным, так и с параллельным расположением подразделов. В данном случае отдельные разделы онтологии подобной ПО имеют сходную структуру, для определения которой может использоваться онтология более высокого уровня общности (онтология онтологии).

В свою очередь, между онтологиями более высоких уровней общности также может наблюдаться сходство, которое может быть описано в терминах онтологий еще более высокого уровня [3, с. 140].

¹ Техноэкология – наука о техногенных факторах влияния на окружающую среду.

В онтологии знаний техноэкологии можно выделить следующие разделы (рис. 1): «Антропогенное воздействие на окружающую среду» и «Техногенно-экологический мониторинг». Раздел «Антропогенное воздействие на окружающую среду» включает в себя «Загрязнение атмосферы», «Загрязнение гидросферы», «Загрязнение литосферы», «Акустическое и электромагнитное загрязнение», «Радиационное загрязнение», «Антропогенное воздействие на экосистемы». Раздел «Техногенно-экологический мониторинг», в свою очередь, состоит из подразделов «Экологический мониторинг», «Социально-гигиенический мониторинг», «Экологический аудит и экспертиза», «Экологическая сертификация», «Анализ риска», «Технические средства защиты от антропогенных загрязнений», «Технологии обращения с промышленными отходами». Рассмотрим в качестве примера подраздел

«Загрязнение атмосферы», включающий области «Физическое загрязнение атмосферного воздуха», «Химическое загрязнение атмосферного воздуха», «Нормирование качества атмосферного воздуха». Однако подраздел «Загрязняющие вещества техногенного происхождения» одновременно относится и к областям «Анализ риска» и «Социально-гигиенический мониторинг» раздела «Техногенно-экологический мониторинг», поскольку различные категории терминов (рис. 1), одновременно описывающих одни и те же химические вещества, относятся также и к различным подразделам онтологии (к примеру, классификации загрязняющих веществ).

Существуют и другие множества терминов, которые обладают некоторыми общими свойствами. Поэтому правомерным является вывод о существовании онтологии второго уровня, которая является результатом анализа онтологии первого уровня. Эта

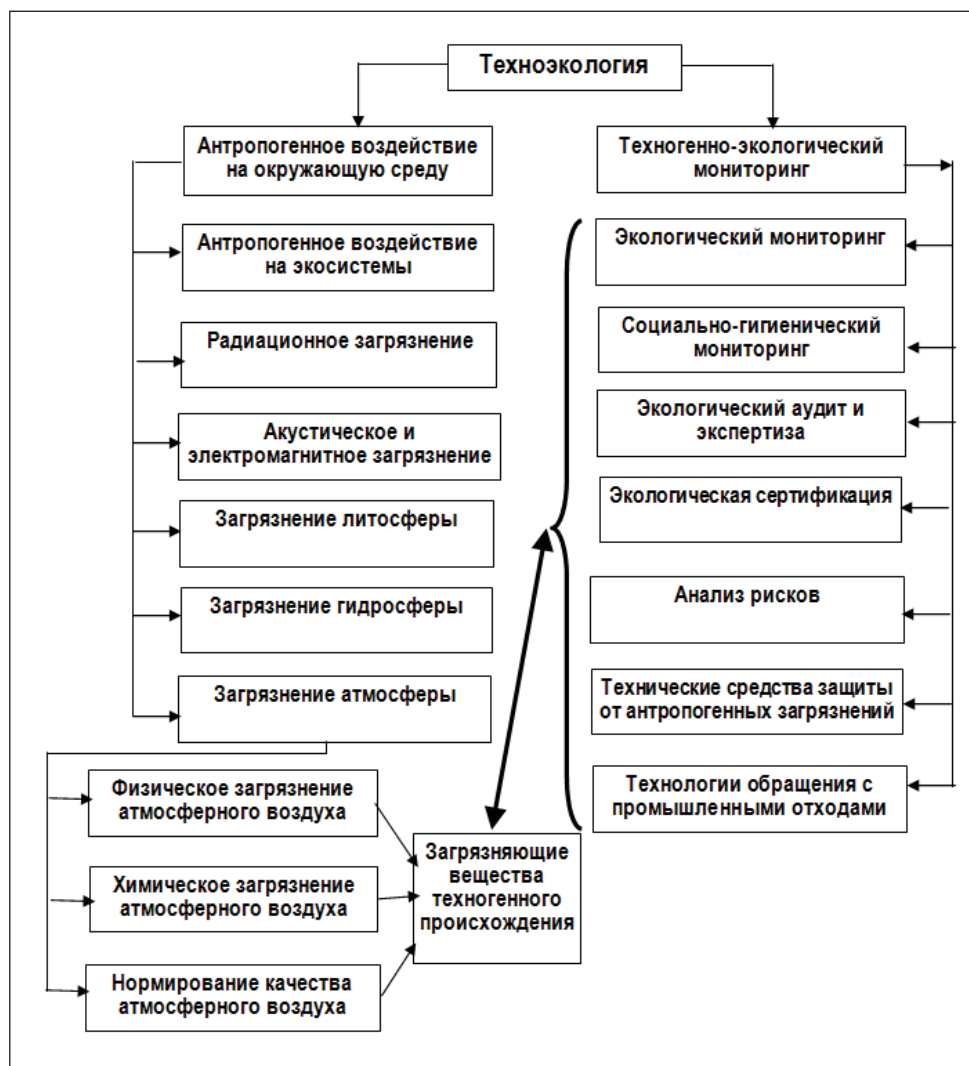


Рис. 1. Фрагмент структурной схемы онтологии предметной области «Техноэкология»

онтология, по сути, является онтологией онтологии первого уровня. Ее термины определяют множества и свойства элементов этих множеств. Например, для рассмотренного примера онтология второго уровня будет содержать термины «классы химических веществ», «запрещающие списки», «токсикологические классы» и т. д.

Переход к следующему уровню происходит тем же способом: если в онтологии второго уровня существуют термины, обладающие некоторым общим свойством, то можно ввести термин, обозначающий множество, которому будут эти термины принадлежать. Термины онтологии более высокого уровня будут задавать имена более общих множеств понятий. Для рассмотренного примера такими терминами могут быть термины «собственные свойства сущностей» (множество функций, областью определения которых является множество сущностей некоторого типа, а область значений зависит от термина, задающего название свойства). В этом случае также появляются термины, обозначающие вспомогательные понятия. В рассмотренном примере таким термином является термин «типы сущностей», который обозначает множество названий типов сущностей (его значением могут быть термины «химические элементы», «химические вещества» и т. д.).

Переход к онтологии более высокого уровня позволяет описать более общие свойства предмет-

ной области. Переход от онтологии более высокого уровня к онтологии более низкого уровня происходит посредством задания терминов, принадлежащих множествам, обозначенным терминами онтологии более высокого уровня.

Для этой предметной области была разработана трехуровневая онтология. Ее структура приведена на рис. 2.

Примерами терминов онтологии третьего уровня являются следующие термины: типы сущностей, сущности, собственные свойства сущностей, совместные свойства сущностей. Каждый тип сущностей представляет собой некоторое множество сущностей; каждая сущность может иметь имя, быть представлена числом, быть логическим значением либо кортежем значений.

Множества сущностей различных типов не пересекаются. Характеристикой каждой сущности является ее тип. Каждая сущность может иметь свой набор собственных свойств. Онтология второго уровня представляет собой множество онтологий разделов, т. е. представляет собой совокупность модулей, соответствующих разделам. Термины онтологии раздела – это представители множеств терминов онтологии химии. Например, для органической химии сущности бывают химическими элементами, веществами, органическими соединениями, реакциями и т. д. Онтология первого уровня



Рис. 2. Структура подраздела «Загрязняющие вещества техногенного происхождения»

для каждого раздела представляет собой множество онтологий подразделов – модулей онтологии первого уровня. Каждый модуль онтологии первого уровня содержит определение связанных множеств терминов. Например, в онтологии первого уровня для физической химии [17, с. 39; 18, с. 282; 19, с. 143; 19, с. 3] могут быть выделены следующие модули: «Элементы», «Вещества», «Реакции», «Основы термодинамики», «Термодинамика. Химические свойства», «Термодинамика. Физические свойства», «Термодинамика. Связь физических и химических свойств», «Химическая кинетика». В первых трех модулях определяются термины, описывающие свойства сущностей соответствующего типа. В модуле «Основы термодинамики» определены термины, используемые при описании общих свойств термодинамических систем и их компонентов. Состояния термодинамической системы могут изменяться в ходе физико-химического процесса. Состояния процесса задаются в дискретные моменты наблюдения. В разделе «Термодинамика. Физические свойства» определены термины, используемые при описании фазовых превращений веществ в ходе процесса, без учета химических превращений. В разделе «Термодинамика. Химические свойства» определены термины, используемые при описании химических превращений веществ в ходе процесса, без учета фазовых превращений. И, наконец, в разделе «Термодинамика. Связь физических и химических свойств» определены термины, используемые при описании физико-химических процессов. В разделе «Химическая кинетика» определены термины, описывающие динамику прохождения процессов.

Таким образом, модули онтологии первого уровня определяют свойства сущностей каждого типа. Схема определения свойства фиксируется в онтологии третьего уровня. Конкретный набор сущностей каждого типа, а также значения их свойств задаются в знаниях раздела. Знания также имеют модульную структуру [8, с. 2]. Деление знаний на модули совпадает с делением на модули онтологии первого уровня.

Выводы. Разработка и создание онтологии химических веществ техногенного происхождения

может выступить инструментом повышения эффективности оценки многофакторных негативных воздействий техногенной среды на организм человека и определения множества результирующих факторов подобных воздействий.

Также это позволит повысить точность проведения разнообразных оценок воздействия химических веществ на здоровье субъектов исследования в процессе решения задач оценки рисков разнообразных заболеваний населения, а также проведения не только социально-гигиенического и экологического, но и многих других видов мониторинга.

Как следует из определения, многоуровневая онтология предметной области является модульной. Модуль онтологии определяет связанные между собой термины, которые могут относиться к одному разделу данной ПО либо образовывать связанную систему понятий данной ПО, которая может использоваться при определении других систем понятий этой же ПО. Деление онтологии на модули позволяет получить структурированное описание онтологии сложной ПО. Модульность онтологии делает ее описание легко модифицируемым: при изменении связанных понятий достаточно изменить их определение только в одном модуле. Кроме того, добавление новых понятий происходит посредством добавления новых модулей. Добавление новых разделов также сводится к добавлению новых модулей в соответствующую онтологию. Модульность онтологии ПО влечет за собой модульность знаний ПО. При этом одному модулю онтологии ПО может соответствовать один модуль знаний ПО. Такое свойство онтологии позволяет создавать интеллектуальные системы, в которых могут изменяться как знания, так и онтологии. Редакторы онтологий следующего уровня могут строиться по онтологии предшествующего уровня. В настоящее время методы создания таких редакторов существуют [21, с. 49]. Онтология высокого уровня определяет все множества терминов, которые существуют в предметной области, и задает свойства терминов из этих множеств. Таким образом, с использованием имен множеств могут быть даны формулировки всех классов задач, решаемых в предметной области, и разработаны методы решения этих задач.

Список литературы:

1. Стратегический подход к международному регулированию химических веществ. Доклад секретариата. 2010. URL: http://apps.who.int/iris/bitstream/handle/10665/4859/A63_21-ru.pdf;jsessionid=C7D92489723866751E918DA3DB0B7CBC?sequence=1.
2. Предварительная повестка дня Семидесятой сессии Всемирной ассамблеи здравоохранения и сроки и место проведения Сто сорок первой сессии Исполнительного комитета. 2017. URL: http://apps.who.int/gb/ebwha/pdf_files/EB140/B140_44-ru.pdf.

3. Коротенко Л.М., Коротенко Г.М., Харь А.Т. Перспективы применения онтологических моделей для повышения эффективности анализа экологических и других взаимосвязанных с ними рисков. Матеріали ІІІ Всеукраїнського з'їзду екологів з міжнародною участю (Вінниця, 21–24 вересня 2011 р.). Т. 1. Вінниця: ВНТУ, 2011. С. 139–141.
4. Щербань Н.Г., Мясоєдов В.В., Шевченко Е.А., Савченко В.Н. Методические аспекты использования методологии оценки риска здоровью населения при воздействии факторов окружающей среды в Украине и России. Вестник Харьковского национального университета имени В.Н. Каразина. Серия «Медицина». 2010. Вып. 19 (898). С. 97–103.
5. Хавкина Т.К. Химико-физическое загрязнение окружающей среды и его последствия для человека (терато-мута-канцерогенез). Саратов: 2013. 320 с.
6. Лепешко П.Н., Бондаренко Л.М. Токсиколого-гигиеническая оценка новых химических веществ, внедряемых в производство: учеб.-метод. пособ. Минск: 2017. 55 с.
7. Ежегодно около пяти миллионов человек умирают в результате воздействия опасных химикатов. 2012. URL: <https://news.un.org/ru/story/2012/09/1208261>.
8. Шалфеева Е.А. Метод оценивания свойств многоуровневых онтологий. 2009. URL: <http://math.nsc.ru/conference/zont09/reports/16Shalfeeva.pdf>.
9. Онищенко Г.Г., Новиков С.М., Рахманин Ю.А., Авалиани С.Л., Буштуева К.А. Основы оценки риска для здоровья населения при воздействии химических веществ, загрязняющих окружающую среду. М., 2002. 408 с.
10. Пазынич В.М., Севальнев В.В., Таранов В.В. Мониторинг здоровья населения в связи с действием факторов окружающей среды в деятельности санитарно-эпидемиологической службы. Довкілля і здоров'я. 2002. № 3 (22). С. 7–9.
11. Артемьева И.Л., Рештаненко Н.В. Интеллектуальная система, основанная на многоуровневой онтологии химии. Программные продукты и системы. 2008. № 1. С. 84–87.
12. Артемьева И.Л. Многоуровневые математические модели предметных областей. Искусственный интеллект. 2006. № 4. С. 85–94.
13. Мельник К.В., Ершова С.И. Проблемы и основные подходы к решению задачи медицинской диагностики. Системи обробки інформації. 2011. Вип. 2 (92). С. 244–248.
14. Литвин В.В. Мультиагентні системи підтримки прийняття рішень, що базуються на прецедентах та використовують адаптивні онтології. Штучний інтелект. 2009. Вип. 2. С. 24–33.
15. Linkova Zdenka, Nedbal Radim, Rimnac Martin. Building Ontologies for GIS. Part 2. Technical report № 938. 2005. 14 p. (Institute of Computer Science. Academy of Sciences of the Czech Republic).
16. Коротенко Г.М., Шевченко К.В. Перспективы применения онтологических моделей для оценки значимости показателей и индикаторов, применяемых в социально-гигиеническом мониторинге. Cutting-edge science – 2015: materials of The XI International scientific and practical conference. (Sheffield, April 30 – May 7 2015). Vol. 25. On Ecology, Geography and Geology. Sheffield. 2015. С. 6–10.
17. Mansingh G., Osei-Bryson M.-K., Reichgelt H. Building ontology-based knowledge maps to assist knowledge process outsourcing decisions. Knowledge Management Research & Practice. 2008. Vol. 7. P. 37–51.
18. Madina J., Bowersb S., Schildhauera M., Penningtond D., Villac F. An ontology for describing and synthesizing ecological observation data. Ecological Informatics. 2007. Vol. 2. P. 279–296.
19. Mounce S.R., Brewster C., Ashley R.M., Hurley L. Knowledge Management for More Sustainable Water Systems. Journal of Information Technology in Construction. 2010. Vol. 15. P. 140–148.
20. Защита окружающей среды Европы. Четвертая оценка. Глава 2. Окружающая среда, здоровье и качество жизни. 2.5. Опасные химические вещества. Копенгаген: ЕАОС. 2007. URL: https://www.eea.europa.eu/ru/publications/state_of_environment_report_2007_1/chapter2.pdf/at_download/file.
21. Горшков С. Введение в онтологическое моделирование. М., 2016. 165 с.

ОНТОЛОГІЧНА КЛАСИФІКАЦІЯ ХІМІЧНИХ РЕЧОВИН ТЕХНОГЕННОГО ПОХОДЖЕННЯ У ЗАДАЧАХ СОЦІАЛЬНО-ГІГІЄНІЧНОГО МОНІТОРИНГУ

У статті досліджуються методики опису й аналізу забруднюючих речовин техногенного походження для створення спеціалізованої онтології, яка виступає в якості концептуальної моделі процесу класифікації хімічних речовин техногенного походження. Описуються структура предметної області, компонентний склад, рівні взаємодії і можливі зв'язки такої онтології.

Ключові слова: здоров'я населення, техногенний вплив, екологічні фактори, хімічні речовини, соціально-гігієнічний моніторинг, онтології.

**ONTOLOGICAL CLASSIFICATION CHEMICAL SUBSTANCES
OF TECHNOGENIC ORIGIN IN SOCIAL-HYGIENIC MONITORING TASKS**

In the article explores description and analysis methods of polluting substances of technogenic origin are for creating a specialized ontology that serves as a conceptual model for the classification process of technogenic origin chemical substances. The structure of the subject area, the components composition, the levels of interaction and possible connections of such an ontology are described.

Key words: *health of the population, technogenic influence, environmental factors, chemical substances, socio-hygienic monitoring, ontologies.*