

## Роль стандартных форматов описания в передаче информации

Описан международный опыт построения информационных систем на основе гармонизированных шаблонов ОЭСР, приведены предложения по развитию в России системы регулирования обращения химической продукции и веществ с учетом международного опыта внедрения гармонизированных шаблонов ОЭСР, в том числе для поддержки экспорта продукции отечественного химического комплекса

# И

нформация давно является ключевым фактором в решении задач во многих областях деятельности, но с увеличением объемов доступной информации решающее значение приобретает не ее количество, а пригодность к использованию, то есть к обработке, передаче и хранению. Одним из принципов наилучших практик регулирования является принятие решений на основе достоверной информации. В случае регулирования обращения химических веществ и продукции мы имеем дело с большим массивом информации, включающим в себя разнородные сведения из различных источников. Большое количество информации и источников вызывает затруднения не только при обработке данных, но и при их выборе: какие можно признать достоверными, на какие следует опираться при выработке регуляторных решений? Таким образом, для эффективного анализа и применения информации необходимо обеспечить ее единое представление и структурирование, отвечающее рассматриваемым задачам.

Актуальность наличия стандартных шаблонов описания для области регулирования химических веществ и продукции может быть прослежена как на национальном, так и на международном уровне. На национальном уровне принятие решений, связанных с химическими веществами и продукцией, входит в компетенцию ряда органов исполнительной власти и других организаций, что делает необходимым обмен информацией между ними. Так, в Российской Федерации с информацией о химических веществах и продукции работают: Минпромторг России — в аспекте регулирования обращения химической продукции; Минприроды России — в плане воздействия

на окружающую среду; МЧС России — при организации химической защиты населения; Минздрав России — в рамках воздействия на организм человека особо опасных факторов химической природы; Минтранс России — в целях регулирования перевозок. Очевидно, что и предприятия — производители химической продукции являются непосредственными участниками процессов регулирования обращения химических веществ и продукции, будучи участниками информационного обмена.

Актуальность проблемы на международном уровне обусловлена тем, что количество химических веществ, находящихся в настоящее время в обращении, чрезвычайно велико и исследование их свойств стало слишком сложной задачей для одного государства, поэтому международное сотрудничество в данной области необходимо. Кроме того, даже при получении информации об одном и том же химическом веществе разными странами, эти данные могут значительно различаться. Различия в формате представления данных только усугубляют имеющиеся проблемы и затрудняют разработку согласованной позиции, приводят к несогласованным результатам при подтверждении соответствия, нескоординированным мерам обеспечения безопасности и потере преимуществ при экспорте продукции.

Авторы рассматривают решение задачи стандартизации форматов представления информации, предложенное Организацией экономического сотрудничества и развития (ОЭСР), и на конкретных примерах показывают, насколько сложные и серьезные задачи они позволяют решать.

Гармонизированные шаблоны ОЭСР (OECD Harmonised Templates,

### И.А. Косоруков

заместитель начальника отдела химии Федерального государственного унитарного предприятия «Всероссийский научно-исследовательский институт стандартизации материалов и технологий» (ФГУП «ВНИИ СМТ»), Москва, Россия

### Е.В. Збитнева

начальник отдела регуляторных практик ФГУП «ВНИИ СМТ», Москва, Россия

### Н.М. Муратова

заместитель директора по науке ФГУП «ВНИИ СМТ», Москва, Россия, N.muratova@vnicstmv.ru, канд. хим. наук

### ключевые слова

информационные системы, гармонизированные шаблоны, ОЭСР, химическая продукция, структура описания

ОНТ) являются стандартными форматами представления информации, предназначенными для передачи данных по исследованиям свойств химических веществ и их влияния на здоровье человека либо окружающую среду (например, такие свойства, как гидролиз, способность вызывать раздражение кожи, токсичность при многократном воздействии). Гармонизированные шаблоны — это технические руководства по структурированию информации и разработке систем управления базами данных, предназначенные для дальнейшего развития этих баз.

На основе гармонизированных шаблонов, после адаптации их к какому-либо формату представления информации, можно разработать как формы ввода данных, так и инструменты для их передачи, учитывающие специфику какой-либо конкретной базы данных [1].

Гармонизированные шаблоны ОЭСР описывают все элементы данных, относящиеся к отчетам по исследованиям, формат, в котором информация должна быть введена и храниться, а также содержат дополнительную

справочную информацию по заполнению, предназначенную для конечного пользователя (рис. 1).

Так как шаблоны могут быть использованы для различных исследований или публикаций, содержащих результаты исследований, проведенных как в соответствии с существующими руководствами ОЭСР, так и без их учета, они должны быть достаточно гибкими и универсальными. Это подразумевает наличие:

- ▶ структурированных элементов (например, поля ввода данных, поля выбора значений, комментарии в виде свободного текста, таблицы установленного формата), часть которых может не иметь отношения к определенному отчету по исследованию;
- ▶ полей выбора значений в соответствии с определенными руководствами по исследованиям и испытаниям, содержащих наиболее широко используемые фразы, часть которых может не иметь отношения к какому-либо конкретному применению;
- ▶ справочной информации, которая объясняет, для какого типа информа-

**Рис. 1.** Пример визуального отображения гармонизированного шаблона ОЭСР  
[An example of visual displaying of harmonised template by OECD]

#### OECD Template #1: Appearance/physical state/colour (Version 2-June 2012)

The following table gives a detailed description of the type of information prompted for by the data entry fields. Elements provided to guide the user include predefined picklist phrases, freetext templates and context-sensitive help texts. In addition, technical elements are provided, i.e. field and data types, explanations for use in Data Element Dictionary (DED) and the xml schema. The conventions used are explained in part [Introduction and Format of OECD Harmonised Templates](#).

| Field number    | Field description<br>[Field label] | 1. Field type<br>2. Data type<br>3. Group ID<br>4. Max occ.<br>5. Detail level<br>6. Picklist code | Remarks, Picklist, Freetext template   | Help text   | Explanation for use in Data Element Dictionary (DED)                              | XML Schema  |
|-----------------|------------------------------------|--|--|---|---|---|
|                 | ADMINISTRATIVE DATA                |  | REMARKS:<br>Under this main heading, fields are subsumed for identifying the purpose of the record (e.g., 'key study'), the type of result (e.g., experimental study), data warning indication (if any), reliability indicators, and flags for indicating the regulatory purpose envisaged and/or any confidentiality restrictions. This kind of data characterise the relevance of a study summary and may therefore be displayed on top of each template. For detailed guidance, refer to <i>Administrative data</i> . |   |   |   |
| SE04 01.00 0215 | DATA SOURCE<br>[Data source]       | 1. HEAD-1<br>2. Heading level 1<br>3. [N/A]<br>4. 1<br>5. 1<br>6. [N/A]                            |  |   | Main heading under which generic 'Data source' fields are subsumed.               |   |
| SE04 01.00 0219 | Reference<br>[Reference]           | 1. HEAD BLOCK<br>2. Block label<br>3. g16<br>4. 10<br>5. 1<br>6. [N/A]                             |  | Indicate the bibliographic reference of the study report or publication the study summary is based on. Always enter the primary reference in the first block of fields (i.e. Sort no. = 1), if there are more than one reference to be cited. Copy this block of fields for specifying any other references related to this record (e.g. report of a preliminary study or other documentation). If results of a study report have been published, indicate the full citation of that publication(s) in addition to the reference of the original study. | Heading of field block 'Reference'  |   |
| SE04 01.00 0220 | Reference type<br>[Reference type] | 1. LIST-OPEN<br>2. STRING/255  | Picklist Values:<br>study report   other company data   publication  | Indicate the type of reference, e.g. 'Study report' or 'Publication'. Select 'Other company data' to characterise any unpublished information from a  | Indicator specifying the type of reference, e.g. 'Study report' or 'Publication'. | <!--EndpointStudyReport--><br><!--scientificPart--> |

ции предназначено определенное поле, но не обязательно указывает, требуется ли данная информация для конкретного случая.

Однако большинство шаблонов учитывают требования к исследованиям, содержащиеся в руководствах Организации экономического сотрудничества и развития.

Степень сложности данных шаблонов соответствует требованиям к информации об исследованиях и испытаниях. Гармонизированные шаблоны ОЭСР являются своеобразным мостом между регуляторами, научным сообществом и промышленностью, позволяющим общаться и понимать предъявляемые требования. Используя данные шаблоны, регулятор, научное сообщество и промышленность могут легко обмениваться данными о результатах исследований в электронном виде. Для того чтобы разработчики информационных систем могли создавать анкеты и/или системы управления базами данных на основе гармонизированных шаблонов, у каждого шаблона имеется соответствующая ему XML-схема, то есть формат экспорта, основанный на языке разметки информации, предназначенном

для ввода, обмена, хранения и управления информацией [1].

Гармонизированный шаблон может быть представлен в стандартной форме, в виде таблицы, при этом каждому шаблону соответствует XML-файл, содержащий всю информацию в формате, используемом для передачи и хранения данных. Каждый шаблон состоит из следующих основных разделов:

- ▶ служебная информация;
- ▶ информация об источниках;
- ▶ информация об используемых материалах и методах;
- ▶ результаты и их обсуждение;
- ▶ сводные комментарии и приложения;
- ▶ выводы и заключения.

В настоящее время экспертами ОЭСР разработано в общей сложности 126 гармонизированных шаблонов по различным аспектам, касающимся химических веществ: физико-химические свойства, разложение и накопление химических веществ в почве, воде или воздухе, токсическое влияние на окружающую среду и здоровье человека.

Последние разработанные шаблоны — шаблоны по промежуточному воздействию (ОНТ 201), а также по видам использования и воздействию химических веществ (ОНТ 301 —



## OECD Harmonised Templates for Reporting Chemical Test Summaries

### OECD Harmonised Templates

Introduction to OECD Harmonised Templates (OHT)  
Development of OHT  
Format and conventions used for OHT  
TEMPLATES  
Picklists  
All Templates and Background Material  
All XML Schemata  
UPDATE Overview  
OHT - Frequently Asked Questions  
Contact us

1/1/2016 - OECD Harmonised Templates

### OECD Harmonised Templates

#### Description of templates, XML Schema and Schematron

An OECD template is a guide for structuring data entry/database management systems for reporting a summary of the results of a test on a chemical to determine its properties or effects on human health and the environment (e.g., hydrolysis, skin irritation, repeat dose toxicity etc.). These templates can be used for reporting summary results for testing on any type of a chemical (e.g., pesticides, biocides, industrial chemicals).

The templates are aimed at developers of database systems as they prescribe the formats by which such information can be entered into and maintained in database. By using these templates, governments and industry will easily be able to electronically exchange test study summary information. In order for information technology developers to build data entry screens and/or database systems based on the OECD Harmonised Templates which can generate data files that can be imported into other database systems, each template has a corresponding **XML schema** (i.e. a common electronic data export/import format which describes the data structure) and a **schematron** which describes the relation / condition and constraints / or validation rules between multiple fields. For example, for the "Acute toxicity to fish" template, there is an "Acute toxicity to fish" XML schema and an "Acute toxicity to fish" schematron.

Note: The harmonised templates are not data entry screens. Each OECD template lists all of the data elements which could be relevant for a summary of a study as well as the format in which the information should be entered and stored electronically. Instructions are provided for IT developers regarding programming of data entry tools, as well as help texts for subsequent users of these data entry tools.

The following background information is also provided on templates: introduction to all templates, the format and conventions used for the templates, as well as frequently asked questions.

**Рис. 2.** Раздел сайта ОЭСР, содержащий информацию о гармонизированных шаблонах ОЭСР [A part of OECD website with the information about harmonized template by OECD]

ОНТ 306). Более подробную информацию о гармонизированных шаблонах ОЭСР можно найти в соответствующем разделе официального сайта ОЭСР по электронному адресу: <http://www.oecd.org/ehs/templates/> (рис. 2).

Основные преимущества гармонизированных шаблонов ОЭСР:

- ▶ упрощение обмена информацией о результатах испытаний между промышленностью и регулятором;
- ▶ эффективный поиск в базах данных по различным запросам;
- ▶ отсутствие обязательных требований по применению (гармонизированные шаблоны — это не требование ОЭСР, это рекомендации, решающие задачу гармонизации).

В настоящее время существует ряд информационных инструментов, основанных на гармонизированных шаблонах ОЭСР, наиболее известные из них — IUCLID, а также глобальный портал данных по химическим веществам eChemPortal [2], программное обеспечение для определения и заполнения пробелов (эко)токсикологической информации для оценки опасности химических веществ QSAR Toolbox [3] и база знаний по исследованиям неблагоприятных путей воздействия AOP-KB [4].

Особое место в приведенном перечне занимает программное обеспечение IUCLID — флагман внедрения гармонизированных шаблонов ОЭСР. IUCLID для химической промышленности — это ключевое программное решение, обеспечивающее соответствие требованиям регламента Европейского союза REACH и ряда других регламентов ЕС. IUCLID упомянут в статье 111 регламента REACH как инструмент для сбора и передачи данных и является официальным инструментом, при помощи которого компании, регистрирующие химические вещества в REACH, формируют и предоставляют информацию в Европейское химическое агентство (ECHA). Кроме того, IUCLID используется для решения более широкого круга задач, не связанных с регламентом REACH. В настоящее время действует шестая версия

IUCLID [6], полностью включающая все 126 шаблонов.

Программа учитывает самые современные тенденции, наблюдаемые в химической промышленности, в ней нашли отражение законодательные акты Европейского союза, Соединенных Штатов Америки, Японии, а также согласованная на глобальном уровне система классификации и маркировки (GHS). Предыдущая, пятая версия IUCLID являлась первой системой, которая полностью реализовала гармонизированные шаблоны ОЭСР [4].

Программное обеспечение IUCLID поддерживается ECHA, Европейским бюро по химическим веществам (ECB), Институтом здоровья и защиты потребителя и Объединенным исследовательским центром (JRC) Европейской комиссии.

Особенности шестой версии (более удобный и простой интерфейс пользователя, возможности взаимодействия со сторонними программными продуктами и расширение функционала) облегчают распространение гармонизированных шаблонов ОЭСР. Отдельно стоит упомянуть о том, что новая версия предоставляет возможности для перевода интерфейса на другие языки (в том числе русский) и гибкой настройки для целей регулирования обращения химических веществ на национальном уровне. Также Европейское химическое агентство рассматривает возможность представлять функционал IUCLID как онлайн-сервис или «облачный» сервис с тем, чтобы IUCLID стал доступен пользователю с любого компьютера, имеющего выход в интернет, вместе со всей информацией, введенной пользователем в его базу данных.

Некоторые развитые страны уже приступили к внедрению гармонизированных шаблонов в информационные системы, участвующие в регулировании обращения химических веществ и продукции. Так, Канада подписала Меморандум о понимании с ECHA [7], предполагающий обмен опытом по управлению информацией о химических веществах и использованию гармонизированных шаблонов. Китай,

Южная Корея и Тайвань также планируют применять предоставление документов в электронном виде, в том числе используя их стандартизированные формы.

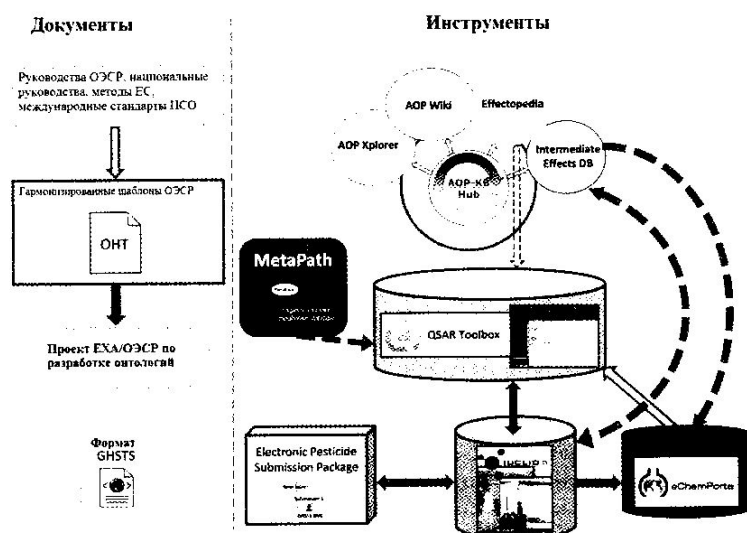
Приведенные преимущества, однако, лежат на поверхности, поэтому стоит сделать шаг вперед, чтобы найти другие преимущества, которые может предоставить использование стандартных шаблонов, увидеть роль гармонизированных шаблонов в совершенствовании существующих практик регулирования.

При решении задачи стандартизации форматов описания следует определить, каким образом необходимо структурировать информацию. Нужно учитывать поставленные цели, ведь перед нами стоит не только задача обмена данными. В этом случае решением мог бы стать любой стандартный формат описания. Одно из требований к гармонизированному шаблону — возможность дальнейшего использования имеющейся информации. Чтобы подняться на следующую ступень использования информации, когда накопленное количество, подчиняясь известному закону, переходит в качество, необходимо перейти от понятия «информация» к понятию «знание». Так, например, в рамках проекта Phoenix

регуляторные органы Канады (Министерство природных ресурсов и Министерство здравоохранения) объединяют все данные, которые когда-либо были собраны в ходе различных процессов регулирования химических веществ, чтобы привести их в единый формат и затем использовать в более сложных системах управления информацией, цель которых — аналитическое сопровождение и поддержка принятия решений в сфере обращения химических веществ. Понимая все преимущества совокупности большого количества информации и подходящих средств ее обработки, регуляторы заинтересованы в получении новых данных. Органы власти Канады не только подписали Меморандум о понимании с Европейским химическим агентством, но и ведут работу по подписанию соглашений с отдельными форумами об обмене информацией о химических веществах (SIEF) [9]. Производители химической продукции, входящие в SIEF, также заинтересованы в том, чтобы выполнение регуляторных требований в различных странах не было сопряжено с излишними трудностями получения и оформления необходимых для соответствия данных. Им было бы удобнее выгружать эти сведения из своих баз данных (например, IUCLID) и в таком виде представлять регулятору.

Одним из примеров перехода к более структурированным форматам данных является разработка онтологий. Онтология — это способ описания знаний, целью которого является их компьютерная обработка. Подход, основанный на онтологиях, был использован для разработки программного обеспечения ОЭСП — QSAR Toolbox, позволяющего находить пробелы в части токсикологической и экотоксикологической информации о химических веществах и устранять их при помощи различных подходов, в том числе научно апробированных вычислительных моделей «структура-свойство». Цель разработки онтологий — стандартизация и систематизация существующих баз данных, содержащих информацию о свойствах химических веществ. Не-

**Рис. 3.** Схема обмена информацией в ЕС [11]  
[Scheme of information exchange in EU]



смотря на то, что гармонизированные шаблоны предоставляют полноценную базу для разметки данных, они недостаточно формализованы и оставляют много полей, куда предполагается вписывать свободный неструктурированный, а следовательно, затрудняющий понимание компьютером текст. Применение онтологии — это способ перейти к новому представлению информации, позволяющий проводить ее автоматическое осмысление. Так, например, при разработке онтологии по канцерогенности, помимо данных, содержащихся в гармонизированных шаблонах, были применены термины из словаря NCI Thesaurus — Национального института США по изучению рака, а также онтология по анатомии мышей и онтология словаря клинических терминов. Эффективность подобного подхода подтверждается широким функционалом программы QSAR Toolbox [10].

Использование стандартных форматов обмена информацией, таких как гармонизированные шаблоны ОЭСР, позволяет создать эффективную инфраструктуру для решения задач регулирования обращения химических веществ и продукции. Примером подобной инфраструктуры является система обмена информацией, сложившаяся в Европейском союзе, общая схема которой приведена на рис. 3. Существующие документы, такие как руководства ОЭСР, национальные руководства, межгосударственные стандарты, предоставили хорошую основу для разработки гармонизированных шаблонов ОЭСР. Дальнейшая разработка шаблонов позволит создавать различные он-

тологии, представляющие доступную информацию в виде не только удобном для человека, но и подходящем для компьютерной обработки с возможностью получения новых данных.

Представители Европейской комиссии в выступлениях, касающихся гармонизированных шаблонов ОЭСР, заявляют, что в XXI веке данные и информация для науки — это деньги, в таком случае формат представления информации — это валюта. Аналогично тому, как для развития экономики требуется единая валюта и мощная банковская система, так и в данном случае требуется единая валюта в виде единых стандартных форматов представления информации. В роли банковской системы выступают различные информационные узлы, примером которых является eChemPortal, AOP-KB или другие общедоступные базы данных о свойствах химических веществ. Приняв предложенное сравнение, можно сформулировать следующий вывод: развивая в России систему регулирования обращения химической продукции и веществ, необходимо обеспечить функционирование достаточно развитой банковской системы и обращение единой валюты так, чтобы как предприятия-экспортеры, так и предприятия, нацеленные на внутренний рынок, смогли без особых усилий расплачиваться единой валютой и проводить операции конвертации из одной валюты в другую. Для этих целей необходимо создавать и развивать стандартные форматы описания продукции, делая выводы, где и как учитывать международный опыт. ■

*Статья поступила  
в редакцию 19.05.2016*

### Список литературы

1. <http://www.echemportal.org/echemportal/index>.
2. <http://www.qsartoolbox.org/>.
3. <https://aopkb.org/>.
4. <http://uclid.eu/index.php?fuseaction=home.project>.
5. <https://uclid6.echa.europa.eu>.
6. [https://newsletter.echa.europa.eu/home/-/newsletter/entry/3\\_10\\_mou](https://newsletter.echa.europa.eu/home/-/newsletter/entry/3_10_mou).
7. Mamta Patel. Seeking common ground on data formats, Chemical watch, Global Business Briefing November 2014 (<https://chemicalwatch.com/21973/seeking-common-ground-on-data-formats>).
8. Geraint R. ECHA and Canadian agencies say co-operation has borne fruit, Chemical watch, Global Business Briefing December 2013/January 2014; <https://chemicalwatch.com/17735/echa-and-canadian-agencies-say-co-operation-has-borne-fruit>.
9. Lord Ph. Development of a toxicological Ontology for the OECD QSAR Toolbox, October 4, 2012; <http://bio-ontologies.knowledgeblog.org/351>.
10. Diderich B. The OECD Environment, health and safety programme. 2014.

## The Standard Descriptive Formats Role in the Information Transfer

**I.A. Kosorukov**, Deputy Chief, Chemistry Department, Federal State Enterprise, All-Russian Research Institution for Standardization of Materials and Technology (VNI SMT), Moscow, Russia

**E.V. Zbitneva**, Head, Regulatory Practices Department, VNI SMT, Moscow, Russia

**Dr. N.M. Muratova**, Deputy Head for Science, VNI SMT, Moscow, Russia, N.muratova@vnicsmv.ru

### key words

information systems, harmonized templates, OECD, chemical production, description structure

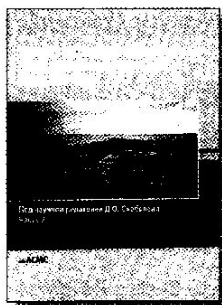
We devote this article to the approach to solving tasks in the Descriptive Structure of chemicals research and testing. It is suggested by the Committee of Chemistry by the OECD. Developed within the Committee of standard templates, storage and transmission of information (harmonized OECD templates) describes all elements of data, dedicated to reports on researches and testing, including format in which the information should be entered and formed. We construe international experience of building informational systems based on harmonized templates of the OECD (IUCLID, QSAR Toolbox, eChemPortal, AOP-KB) and we provide suggestions on Russian regulatory system for the treatment of chemical products and substances development, taking into account international experience implementing harmonized templates the OECD, including exports of domestic chemical complex support.

### References

1. <http://www.echemportal.org/echemportal/index>.
2. <http://www.qsartoolbox.org/>.
3. <https://aopkb.org/>.
4. <http://iuclid.eu/index.php?fuseaction=home.project>.
5. <https://iuclid6.echa.europa.eu>.
6. [http://newsletter.echa.europa.eu/home/-/newsletter/entry/3\\_10\\_mou](http://newsletter.echa.europa.eu/home/-/newsletter/entry/3_10_mou).
7. Mamta Patel. Seeking common ground on data formats, Chemical watch, Global Business Briefing November 2014 (<https://chemicalwatch.com/21973/seeking-common-ground-on-data-formats>).
8. Geraint R. ECHA and Canadian agencies say co-operation has borne fruit, Chemical watch, Global Business Briefing December 2013/ January 2014; <https://chemicalwatch.com/17735/echa-and-canadian-agencies-say-co-operation-has-borne-fruit>.
9. Lord Ph. Development of a toxicological Ontology for the OECD QSAR Toolbox, October 4, 2012; <http://bio-ontologies.knowledgeblog.org/351>.
10. Diderich B. The OECD Environment, health and safety programme. 2014.

### НОВАЯ КНИГА

Под научной редакцией Д.О. Скобелева



## Учебно-методический материал по наилучшим доступным технологиям

Часть 2. М.: АСМС, 2016. — 72 с.

Представлена информация, подготовленная в рамках участия специалистов Бюро НДТ в Российско-шведском проекте по внедрению НДТ. Основное внимание уделено процедуре выдачи комплексных экологических разрешений и порядку установления нормативов для промышленных предприятий. Материал адресован специалистам, для которых первоочередной интерес представляет опыт практического применения принципов наилучших доступных технологий и комплексных экологических разрешений.

По вопросам приобретения обращайтесь по адресу: Академия стандартизации, метрологии и сертификации (АСМС), 109443, Москва, Волгоградский пр-т, 90, корп. 1. Тел. / факс: 8 (499) 742 4643. Факс: 8 (499) 742 5241. E-mail: info@asms.ru