



中华人民共和国国家标准

GB/T 24780—2009

化学品性质(Q)SAR模型的验证指南 理化性质

Guidance on the validation of (Q)SAR models for chemicals properties—
Physicochemical properties

2009-12-15 发布

2010-07-01 实施

中华人民共和国国家质量监督检验检疫总局
中国国家标准化管理委员会 发布

中 华 人 民 共 和 国
国 家 标 准
化 学 品 性 质 (Q)SAR 模 型 的 验 证 指 南
理 化 性 质

GB/T 24780—2009

*

中 国 标 准 出 版 社 出 版 发 行
北 京 复 兴 门 外 三 里 河 北 街 16 号
邮 政 编 码 : 100045

网 址 www.spc.net.cn

电 话 : 68523946 68517548

中 国 标 准 出 版 社 秦 皇 岛 印 刷 厂 印 刷

各 地 新 华 书 店 经 销

*

开 本 880×1230 1/16 印 张 0.5 字 数 10 千 字

2010 年 2 月 第 一 版 2010 年 2 月 第 一 次 印 刷

*

书 号 : 155066 · 1-40057

如 有 印 装 差 错 由 本 社 发 行 中 心 调 换

版 权 专 有 侵 权 必 究

举 报 电 话 : (010)68533533

前 言

本标准参考采用经济合作与发展组织(OECD)指南文件 ENV/JM/MONO(2007)2《(定量)结构-活性关系[(Q)SAR]模型的验证的指南文件》(英文版),其有关的技术内容与上述文件完全一致。

本标准附录 A 为资料性附录。

本标准由全国危险化学品管理标准化技术委员会(SAC/TC 251)提出并归口。

本标准负责起草单位:国家质检总局进出口化学品安全研究中心。

本标准参加起草单位:中国检验检疫科学研究院、湖北出入境检验检疫局、中化化工标准化研究所、山东出入境检验检疫局。

本标准主要起草人:程艳、陈会明、李晞、宋乃宁、周新、崔海容、郭坚。

本标准系首次发布。

引 言

欧盟于 2007 年 6 月 1 日立法通过《化学品的注册、评估、授权和限制法规》(以下简称 REACH 法规),并于 2008 年 6 月 1 日正式实施。该法规实施以后对进入欧盟市场上的化学品进行统一管理。我国为应对欧盟 REACH 法规,制定了化学品安全系列标准,等同转化了欧盟 REACH 法规的相关技术内容。

欧盟 REACH 法规和联合国《全球化学品统一分类和标签制度》(GHS)为了减少动物试验,明确规定了(Q)SAR 模型预测方法在特定情况下可用于化学品性质的预测。

本标准是为了应对欧盟 REACH 法规,在技术指标上参考采用了 OECD 指南文件 ENV/JM/MONO(2007)2《(定量)结构-活性关系[(Q)SAR]模型的验证的指南文件》(英文版)和 REACH 技术法规 EUR 21866 EN 2005《(定量)结构-活性关系的特征:初步指南》(英文版),并且其有关的技术内容与上述文件完全一致,建立了化学品理化性质(Q)SAR 模型的验证指南。

化学品性质(Q)SAR 模型的验证指南

理化性质

1 范围

本标准规定了化学品理化性质(Q)SAR 模型的验证指南。
本标准适用于现有的以及将来开发的各种(Q)SAR 模型。

2 术语和定义

下列术语和定义适用于本标准。

2.1

符合度 goodness-of-fit

对模型运行进行评价的信息量的最小绝对量,表达了在建模集中模型描述符估算变量的程度。

2.2

适用度 robustness

当对建模集实施干扰以及当模型从受干扰的建模集中重新建立时,模型参数的稳定性以及因此而导致的预测结果的稳定性,提供了模型参数对建模集变化的敏感性的指示。

2.3

预测能力 predictivity

对所建模型预测化学物质性质的能力的评价,采用对测试集中的化学物质性质的预测来进行评价。

3 验证原则

3.1 确定的终点。

3.2 明确的运算算法。

3.3 确定的应用范围。

3.4 对符合度、适用度和预测能力的合适的评价。

3.5 如果可能,提供机制解释。

4 验证原则阐述

4.1 确定的终点

4.1.1 在采用(Q)SAR 模型对化学品理化性质进行预测时,常用的终点为物理化学参数,包括熔点/凝点、沸点、蒸汽压、水溶解度、正辛醇/水分配系数(K_{ow})、相对密度、表面张力、闪点等。

4.1.2 在采用(Q)SAR 模型对化学品理化性质进行预测时,常用的描述符包括正辛醇/水分配系数(K_{ow})、水溶解度、分子质量、分子体积等。

4.1.3 一个确定的终点至少包含以下因素:

- 产生建模集数据的详细信息;
- 测试方案的不同不会导致终点数值的明显不同;
- 测试方案内部因素的不同不会导致结果的不同;
- (Q)SAR 预测的化学品对象的范围包含在测试方案的化学品对象范围内;
- (Q)SAR 预测的终点与测试方案的终点相同;