



# 中华人民共和国国家标准

GB/T 24779—2009

---

## 化学品性质(Q)SAR模型的验证指南 卫生毒理性质

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

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

## 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、江苏出入境检验检疫局。

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,建立了化学品卫生毒理性质(Q)SAR 模型的验证指南。

# 化学品性质(Q)SAR模型的验证指南

## 卫生毒理性质

### 1 范围

本标准规定了化学品卫生毒理性质(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

##### 分子描述符 **molecular descriptor**

分子的结构或物理化学性质,或者能够代表分子特殊性质的分子结构的一部分,被用作(Q)SAR模型的独立变量。

#### 2.2

##### 终点 **endpoint**

能被测量因而能被模型化的任何物理化学的、生物的或者环境的效应。

#### 2.3

##### 应用范围(AD) **applicability domain**

模型在给定的可靠性条件下,对化学品性质进行预测时的响应和化学结构的范围。

#### 2.4

##### 运算算法 **algorithm**

从化学品的结构和/或物理化学性质的信息来预测终点的方法和过程。

#### 2.5

##### 建模集 **training set**

用来建立(Q)SAR模型的化合物,能从中得到有关化合物的测量性质或效应。

#### 2.6

##### 测试集 **test set**

测试集与建模集相对应,是指不包含在建模集中的一系列化合物,被用于对(Q)SAR模型的预测能力进行评价。

### 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模型对化学品卫生毒理性质进行预测时,常用的终点为卫生毒理学参数,包括