

计算(预测)毒理学:化学品风险预测与管理工具

陈景文

Citation: [科学通报](#) **60**, 1749 (2015); doi: 10.1360/csb2015-60-19-1749

View online: <https://engine.scichina.com/doi/10.1360/csb2015-60-19-1749>

View Table of Contents: <https://engine.scichina.com/publisher/scp/journal/CSB/60/19>

Published by the [《中国科学》杂志社](#)

Articles you may be interested in

[Computational toxicology: oriented for chemicals risk assessment](#)

SCIENTIA SINICA Chimica **46**, 222 (2016);

[化合物的预测毒理学和数据库开掘](#)

Chinese Science Bulletin **45**, 360 (2000);

[Progress in computational toxicology for evaluation of thyroid disrupting effects of chemicals](#)

Chinese Science Bulletin **60**, 1761 (2015);

[计算RNA组学: 非编码RNA结构识别与功能预测](#)

SCIENTIA SINICA Vitae **40**, 294 (2010);

[早期地球海洋水化学分带的理论预测](#)

SCIENTIA SINICA Terrae **45**, 1829 (2015);

计算(预测)毒理学: 化学品风险预测与管理工具

化学品污染被联合国环境规划署列为影响人类生存与发展的全球性重大环境问题之一^[1]。化学品风险防控的一个重要瓶颈是,基于传统实验测试评价化学品环境风险性的速度(2~3年/种),远低于新化学品进入市场的速度(~1000种/年),已导致10万种以上的大量既有化学品未经风险评价而在市场上使用^[2]。因此,必须发展快速、高效的化学品风险预测与管理技术^[3]。

计算毒理学技术被认为是一种高效、高通量地进行化学品风险预测与管理的技术^[3]。计算毒理学亦称预测毒理学,其核心是基于计算化学、计算生物学等方法,构建计算机模型,为筛选和评价化学品的环境暴露、危害和风险性提供高通量的决策支持工具^[4]。

发达国家非常重视计算毒理学研究,美国于2003年实施了计算毒理学研究计划,在2005年专门成立了国家计算毒理学中心(NCCT)。美国国家研究委员会(NRC)在2007年提出了战略性文件“21世纪的毒性测试:远景和策略”,倡导改变以活体动物实验为主的传统毒性测试体系,向基于高通量体外测试和计算毒理学等方法的毒性测试体系转型^[5]。2009年,美国国家环境保护局(EPA)进一步提出化学品毒性评价战略计划,该计划拟连续20年、每年投入1亿美元来实现NRC的远景战略^[4]。欧盟计划投入高达24亿欧元,并专门成立了健康与消费者保护研究所(IHCP)等机构,来加强化学品风险预测与管理技术的研究^[6]。

我国是化学品生产、使用和进出口的第一大国,2010年中国化学品销售产值达7540亿美元。中华人民共和国环境保护部《化学品环境风险防控“十二五”规划》指出,我国突发性化学品污染事件频繁发生,持久性有机污染物(POPs)、内分泌干扰物(EDCs)等引起的环境损害与人体健康问题日益显现,风险防控形势日趋严峻。因此,我国亟需研发具有自主知识产权的化学品风险预测与管理技术。

与发达国家相比,我国在计算毒理学研究方面有较大差距,从事此方面研究的队伍薄弱。2012年,我国科学技术部和美国EPA续签了合作谅解备忘录,计算毒理学被列为合作内容之一。2015年4月,美国NCCT的主任Russell S. Thomas博士和常务副主任Kevin M. Crofton博士受邀来访,参加了在厦门召开的“International Symposium on Chemicals Risk Prediction and Management”并做了大会报告。希望通过与发达国家的合作,促进我国计算毒理学方面的研究工作。

习近平主席说,“打铁还需自身硬”。我国计算毒理学的学科发展,需要我国相关领域专家学者的共同努力。为呼吁和推动该学科发展,《科学通报》特组织了本专题,共征集到8篇文章^[7-14],内容涵盖计算系统毒理学、计算模拟方法、环境内分泌干扰效应模拟、生态毒性及联合毒性、污染物环境行为模拟等方面。希望这8篇文章起到抛砖引玉的作用,希望我国计算毒理学研究工作像喷薄欲出红日那样蓬勃开展。

陈景文

(大连理工大学环境学院,工业生态与环境工程教育部重点实验室,大连 116024)

参考文献

- 1 Geiser K, Edwards S. Instruments and approaches for the sound management of chemicals. In: Kemf E, ed. Global Chemicals Outlook—Towards Sound Management of Chemicals. United Nations Environment Programme, 2013
- 2 Judson R, Richard A, Dix D J, et al. The toxicity data landscape for environmental chemicals. Environ Health Perspect, 2009, 117: 685-695
- 3 Collins F S, Gray G M, Bucher J R. Toxicology—Transforming environmental health protection. Science, 2008, 319: 906-907

- 4 Kavlock R, Dix D. Computational toxicology as implemented by the US EPA: Providing high throughput decision support tools for screening and assessing chemical exposure, hazard and risk. *J Toxicol Env Health Pt B Crit Rev*, 2010, 13: 197–217
- 5 Krewski D, Acosta D Jr, Andersen M, et al. Toxicity testing in the 21st century: A vision and a strategy. *J Toxicol Env Health Pt B Crit Rev*, 2010, 13: 51–138
- 6 Hartung T, Rovida C. Chemical regulators have overreached. *Nature*, 2009, 460: 1080–1081
- 7 李杰, 李柯佳, 张臣, 等. 计算系统毒理学: 形成、发展及应用. *科学通报*, 2015, 60: 1751–1760
- 8 杨先海, 陈景文, 李斐. 化学品甲状腺干扰效应的计算毒理学研究进展. *科学通报*, 2015, 60: 1761–1770
- 9 王婷, 林志芬, 田大勇, 等. 有机污染物的混合毒性 QSAR 模型及其机制研究进展. *科学通报*, 2015, 60: 1771–1780
- 10 潘柳荫, 吕翊, 庄树林. 分子动力学模拟在有机污染物毒性作用机制中的应用. *科学通报*, 2015, 60: 1781–1788
- 11 邵红巍, 闻洋, 苏丽敏, 等. 有机污染物在鱼体内临界浓度研究进展. *科学通报*, 2015, 60: 1789–1795
- 12 张馨元, 谢宏彬, 尉小旋, 等. 计算模拟掺氮碳纳米管与水中芳香类污染物的吸附作用. *科学通报*, 2015, 60: 1796–1803
- 13 吴惠丰, 曹璐璐, 李斐, 等. 典型持久性有机污染物与抑癌基因相互作用的分子模拟与验证. *科学通报*, 2015, 60: 1804–1809
- 14 陈浮, 刘树深, 余沫, 等. 基于咪唑离子液体与荧烛荧光素酶的结合模式预测混合物毒性. *科学通报*, 2015, 60: 1810–1819