

第二届计算毒理培训班通知(第二轮)

时间：2019年4月28—29日

地点：广州

一、培训背景

2018年4月，“第一届计算毒理培训班”在美丽的海滨城市大连举行，培训班得到了来自多家高校、科研院所及企业同仁的热情响应，培训现场讨论活跃。在与会代表的鼓励和支持下，大连思利科环境科技有限公司协同杭州以勒标准技术有限公司将于**2019年4月29日（第六届全国生态毒理学大会后1天）在广州召开第二届计算毒理培训班**。

计算毒理学已成为环境研究、毒理学研究和风险评估的重要手段，在化学品、农药和药品等产品和化学物质的产品设计、安全评价与风险评估中得到越来越广泛的应用。总结第一届计算毒理培训班的经验成果，本次培训班将继续在QSAR的基本概念和理论操作上着重进行讲解。此外，我们将引进量子计算与分子对接等技术内容，为大家介绍计算毒理学的前沿知识，更好的为科技工作者和企业管理人员提供全面的知识技能。

二、培训内容

本次培训班将从QSAR模型基础知识、软件操作与应用、量子计算与分子对接几个方面对QSAR进行全面的解读与培训。我们将邀请曾在Environmental Science & Technology, Chemosphere等知名期刊多次发表QSAR相关文章的高校专家学者，以真实发表的QSAR模型作为案例为我们亲自授课。

培训课程结束后，你可以了解和掌握以下内容：

1) 计算毒理学与QSAR背景

- 计算毒理学与QSAR基本原理
- QSAR模型建立与验证的OECD导则

2) QSAR建模理论

- 活性终点分析与确定
- 数据库查询与数据搜集
- 分子结构描述符计算与筛选
- 构建QSAR模型—算法详解
- QSAR模型预测效果—内部验证与外部验证
- QSAR模型应用域表征

3) 计算毒理学理论

- 量子化学计算概念与方法
- 分子对接概念与方法

4) 实战操作

- 常用建模软件操作演练
- QSAR报告撰写及报告分析要点
- 欧盟和美国现有模型工具分享与介绍

三、课程安排

第一部分	计算毒理学与QSAR背景介绍	
08:30-09:20	致 辞	
08:40-09:20	计算毒理学研究和应用背景	唐伟豪 大连理工大学
第二部分	QSAR原理和实战	
09:20-09:40	QSAR模型构建及验证的OECD导则	李斐 中国科学院烟台海岸带研究所
09:40-10:00	建模数据的搜集与常用数据库简介	李斐 中国科学院烟台海岸带研究所
10:00-10:20	茶 歇	
10:20-10:50	化学物质的计算机表示与分子描述符概述	杨先海 南京理工大学
10:50-11:40	QSAR模型算法及模型筛选指标	杨先海 南京理工大学
11:40-13:00	午 休	
13:00-13:30	QSAR模型稳健性及预测效果：内部验证与外部验证	杨先海 南京理工大学
13:30-14:00	QSAR模型应用域：概念及表征	杨先海 南京理工大学
第三部分	量子化学计算及其在QSAR中的应用	
14:00-14:30	量子化学方法及量化描述符：原理、概念及软件简介	徐童 大连理工大学
14:30-14:50	案例：酞酸酯类化合物的碱催化水解反应机理与QSAR模型	徐童 大连理工大学
14:50-15:10	茶 歇	
第四部分	分子对接及其在QSAR中的应用	
15:10-15:40	分子对接方法：原理、注意事项及软件简介	杨先海 南京理工大学
15:40-16:00	案例：溴代阻燃剂对人体甲状腺激素受体的干扰与QSAR模型	杨先海 南京理工大学
第五部分	QSAR报告与软件	
16:00-16:20	QSAR报告撰写及报告分析要点	黄伟 杭州以勒标准技术有限公司
16:20-17:00	欧美现有模型工具分享与介绍	刘羽晨 杭州以勒标准技术有限公司

四、培训对象

本次培训班面向QSAR初级研究人员，适合环境、生物、毒理专业的老师、学生，化工、农药、医药、化妆品等企业研究人员、实验室以及相关管理人员参加；尤其是适合于计划构建QSAR模型、预测物质毒性、开展风险评估的研究人员。

五、时间及地点

1. 时间：

2019年4月29日 培训报告（2019年4月28日下午注册报到）

2. 地点：

广州祈福酒店

广东省广州市番禺区市广路祈福酒店（详见附件：酒店预订及交通指南）

六、培训班报名

1. 报名方式：

1) 会议回执报名：请填写报名回执并发邮件至会务组（max.liu@jirehchina.com，报名回执见附件）

参会报名截止到2019年04月26日

2) 现场报名

2. 培训费用：

1) 预注册：预注册代表通过银行转账的形式预交注册费，注册费为1500元/人，预注册交费的截止日期为2019年3月26日。

2) 常规注册：常规注册代表通过银行转账的形式交注册费，注册费为1600元/人，常规注册交费的截止日期为2019年4月26日。

3) 现场注册：现场注册代表可通过现金或刷公务卡的方式交注册费，注册费为1800元/人。

注：会议注册费包括会务费、资料费、讲课费、培训证书、会议期间餐饮等费用。由大连思利科环境科技有限公司统一开具增值税普通发票。参会代表的差旅费、住宿费自理。

3. 缴费方式：

1) 网上转账：

户名：大连思利科环境科技有限公司

账号：411907190010601

开户行：招商银行大连星海支行

2) 报到时现场缴纳注册费（现金/公务卡）

注：网上转账请务必备注姓名和单位

七、联系我们

如需咨询会议相关信息，可联系：

联系人 1：

吴世哲（大连思利科环境科技有限公司）

联系电话：15542382578

电子邮箱：postmaster@silico.cn

联系人 2：

刘羽晨（杭州以勒标准技术有限公司）

联系电话：0571-85190521

传 真：0571-85190557

电子邮箱：max.liu@jirehchina.com



附件1：讲师介绍

李 斐 中国科学院烟台海岸带研究所，副研究员，中国科学院青年创新促进会会员。2004年获得大连理工大学环境工程学士学位，2010年获得大连理工大学环境科学博士学位。针对日趋严重的海岸带环境污染现状，开展了面向机制探索的海岸带典型污染物毒理效应及风险评价的研究工作。通过整合传统毒理学、系统生物学以及计算毒理学，阐明了生物对海岸带环境污染物的响应机制，评价了海岸带污染物的生态风险性，为海岸带环境污染物的环境容量的计算提供基础数据与生物学依据。承担了国家自然科学基金重点（子课题）、面上项目、青年基金和国际科学基金（IFS）、参与了国家973计划课题、863重大项目课题等研究，至2019年3月，发表论文50多篇，授权发明专利3项，参与编写英文专著1部，中文专著2部。

杨先海 南京理工大学环境与生物工程学院，讲师。E-mail: xhyang@njjust.edu.cn。主要从事化学品与生物大分子相互作用机制与污染物的内分泌干扰效应的QSAR模型预测等相关研究，在Chemical Research in Toxicology, Chemosphere等期刊上发表多篇SCI论文。在计算毒理学，尤其是QSAR建模领域具有丰富经验，作为863计划项目骨干参与开发CPTP软件平台。国家自然科学基金青年基金项目负责人。

唐伟豪 大连理工大学环境学院，博士在读。E-mail: twh1991@mail.dlut.edu.cn。研究方向为机器学习技术在计算毒理学中的应用，在Environmental Science & Technology, Chemosphere等环境领域知名期刊发表多篇SCI论文，并以第一作者身份在Journal of Environmental Science and Health, Part C发表综述论文，探讨深度学习技术在计算毒理学中的应用。

徐 童 大连理工大学环境学院，博士在读。E-mail: tongxu1992@mail.dlut.edu.cn。主要研究方向为有机污染物水解反应的计算模拟及化学品环境分配参数的QSAR模型预测。在《环境化学》、Environmental Science & Technology等环境领域国内外知名期刊发表论文，参与编写国内环境计算化学与毒理学方向的首部专著《环境计算化学与毒理学》

刘羽晨 杭州以勒标准技术有限公司风险评估中心负责人。E-mail: max.liu@jirehchina.com。大连理工大学环境学院环境工程硕士毕业。从事欧盟REACH、BPR、PPP，美国EPA FIFRA下的化学品、农药注册登记和风险评估工作以及QSAR预测分析。曾在欧盟联合研究中心动物试验替代方法实验室（JRC EURL ECVAM）学习替代方法和风险评估等前沿技术。

黄 伟 杭州以勒标准技术有限公司高级法规咨询师，浙江工业大学农药学硕士毕业。现主要从事欧盟REACH、韩国K-REACH、China REACH等化学品法规注册工作，同时也从事农药登记风险评估及国内化学品风险评估等工作。

附件2：参会回执

请完整填写以下回执并于2019年04月26日前将回执发送至：max.liu@jirehchina.com

单位名称					
单位地址					
姓名	职务/职称	性别	手机	座机	邮箱
纳税人识别号 (税号)	单位名称： 纳税人识别号： 开户银行： 开户账号： 单位注册地址： 单位联系电话：				
住宿预订信息（祈福酒店/祈福国际公寓）					
是否入住	是：祈福酒店（ ）祈福国际公寓（ ） 否：（ ）				
标准间	____间	合住（ ）	单住（ ）	单人间	____间
注：请认真填写以上各项内容，用于提前整理现场签到信息、预订房间、发票开具和邮寄等。会务组将根据回执上的开票信息开具发票，并根据地址会后邮寄发票，请务必确保开票信息和地址的准确性。					

附件3：酒店预订及交通指南

会议会场及会议指定酒店为祈福集团旗下的祈福酒店和祈福国际公寓。祈福酒店和祈福国际公寓为会议参会人员指定入住酒店，祈福会展中心为会议会场所在。祈福酒店位于广州市番禺区市广路，是一间口碑极佳的四星级酒店，汇集环球美食、精彩娱乐、炫丽灯光、特色景致于一体，尽享吃、喝、玩、乐、游、娱、购的尊尚体验，日夜精彩！酒店邻近长隆旅游度假区、大夫山森林公园、番禺博物馆、广州塔等众多旅游热点，是商务、会议、旅游、度假的最佳选择！

1. 房型列表

祈福酒店	
豪华大床房	500元/间夜（含双早）
豪华双床房	500元/间夜（含双早）
祈福国际公寓	
豪华大床房	450元/间夜（含双早）
豪华双床房	450元/间夜（含双早）

2. 交通指引

祈福酒店地理位置优越，邻近广州火车南站，交通四通八达，祈福车站交通枢纽提供全面的地面交通工具，机场快线直达白云机场，往返广州南站、广州市区、香港、深圳、拱北的巴士班次频密，往来珠三角及港澳地区都十分便利。

