

# AI 赋能化学物质健康风险防控技术研讨会

## (第二轮通知)

AI 技术的快速发展，为化学物质风险防控技术发展带来新的机遇。为推动外源化学物质的健康与环境风险防控，服务于新污染物的源头治理工作，保障生态环境安全和人民健康，促进计算毒理学、灾害与应急毒理学、人工智能毒理学等相关学科发展、学术交流与合作，定于 2025 年 5 月 8 日至 11 日，在新疆石河子市召开“AI 赋能化学物质健康风险防控技术研讨会”。

同期举办“计算毒理学建模竞赛”(附件 1)和“化学物质与健康”科普作品比赛(附件 2)，欢迎各单位组织青年学生参赛。详见本通知附件。

### 1. 会议主办单位

中国毒理学会计算毒理学专业委员会

中国毒理学会灾害与应急毒理学专业委员会

中国毒理学会人工智能毒理学专业委员会（筹）

### 2. 会议承办及协办单位

#### (1) 承办单位

石河子大学

新疆大学

浙江师范大学

化工绿色过程兵团重点实验室省部共建国家重点实验室培育基地

#### (2) 协办单位

环境化学与生态毒理学国家重点实验室

国科大杭州高等研究院

大连市化学品风险防控及污染防治技术重点实验室

### 3. 会议名誉主席

江桂斌 院士

### 4. 会议共同主席(排名不分先后)

陈景文、王永安、伯晓晨

## 5. 会议学术委员会

卞倩、伯晓晨、曹东升、曹慧明、陈达、陈嘉斌、陈金合、  
陈景文、戴家银、丁日高、杜可军、杜现礼、樊柏林、方明亮、  
冯鸿儒、高士祥、高向景、顾爱华、管娜、何松、洪新宇、  
黄超、黄梅、李斌、李春正、李桦、李津、李雪花、  
梁勇、林思勤、刘倩、刘树深、刘文彬、楼建林、骆媛、  
孟文琪、穆云松、彭晓波、曲瑞娟、戎志毅、邵兵、欧阳钢锋、  
施建宇、史薇、隋昕、孙铭学、唐贊、王斌、王陈、  
王亚麟、王永安、魏东斌、吴诚堃、夏传海、肖凯、谢宏彬、  
闫兵、杨剑明、杨晓溪、叶俏、易忠胜、于海瀛、岳同涛、  
张爱茜、张聪恪、张宏、张宏亮、张磊、张庆竹、张秀辉、  
张永红、赵斌、赵春燕、赵艳梅、赵云峰、朱浩、祝凌燕、  
庄汉平、庄树林、邹仲敏

## 6. 会议组织委员会

艾力江、鲍正好、卞倩、岑金凤、陈嘉斌、陈秀荣、杜现礼、  
何松、黄海保、姜北、郎思敏、李晨光、李花伦、李松凌、  
李宛莹、林学洋、刘纪昌、刘平、楼建林、鲁建江、马广才、  
毛冠超、孟文琪、裴文波、裴志鹏、森巴提、孙铭学、欧阳张翼、  
孙炜强、孙阳阳、隋昕、万江、王俪儒、王雪玉、尉小旋、  
魏东斌、夏梦、肖凯、徐小琳、徐庆强、解怀君、于海瀛、  
张坤、张珊珊、张欣康、张艺馨、战俊磊、庄树林

## 7. 会议主题

包括但不限于：

- (1) 外源化学物质的毒性作用机制、不利结局网络分析
- (2) 化学品的健康风险防护、健康风险应急管理技术
- (3) 外源化学物质的大数据分析、AI赋能的计算毒理学模型
- (4) 定量构效关系与毒性外推、新污染物风险预测
- (5) 外源化学物质毒性的高通量测试、检测与分析技术
- (6) 化学品及新污染物危害性的分子模拟预测
- (7) 基于高内涵数据的毒性识别与预测技术

- (8) 替代化学品的生成式人工智能设计技术
- (9) 基于智能算法的新型化学物质快速应对技术
- (10) 面向药物早期毒性评价和药物设计的人工智能模型

## 8. 会议日程 (详细日程请见后续通知)

日期	安排	地点
5月8日全天	报到	石河子恒和华星酒店
5月9日上午	开幕式、大会报告	石河子恒和华星酒店
5月9日下午	分会报告	石河子恒和华星酒店
5月10日上午	分会报告	石河子恒和华星酒店
5月10日下午	研究生专场 期刊编辑谈写作专场	石河子恒和华星酒店
5月11日全天	党建活动	石河子150团
5月12日上午	离会	石河子市

## 9. 参会注册、缴费

参会代表如果是中国毒理学会会员，缴纳 2000 元/人的会议注册费；如不是中国毒理学会会员，缴纳 2200 元/人的会议注册费。

参会学生如果是中国毒理学会会员，缴纳 1600 元/人的注册费(凭证件)；如不是中国毒理学会会员，缴纳 1800 元/人的注册费(凭证件)。

注册费用于会议场地和相关设施的租用，参会人员的住宿费和差旅费自理。

参会注册、缴费和酒店房间预订等工作都在会议网站上进行，  
请各位参会代表登录中国毒理学会网页 <http://www.chntox.org>，在学术会议-注册缴费中找“AI 赋能化学物质健康风险防控技术研讨会”进行注册及其他流程；也可以直接连接会议网址：

<http://cstmeeting.chntox.org/meeting/83>

本次会议采用网上缴费及网上电子发票开具，如无法通过中国毒理学会网站缴费，还可通过支付宝报名及转账。(转账备注“姓名+石河子会议”)。

### 注册/缴费方式 1.

报名网站扫码支付(如微信/支付宝)，

<http://cstmeeting.chntox.org/meeting/83>

实时到账，缴费成功自助开具电子发票（线上开票时间为工作日 9: 00-17: 00）。

#### 注册/缴费方式 2.

支付宝扫码注册/缴费，点“立即报名”，登陆后选择参加“AI 赋能化学物质健康风险防控技术研讨会”实时到账，缴费成功自助开具电子发票（线上开票时间为工作日 9: 00-17: 00）。



#### 注册/缴费方式 3.

单位线下转账，开户名称：中国毒理学会；开户行：工商银行；账号：9558850200000851415。

注：单位转账请备注参会人姓名。财务确认到账后(一般 2 天内确认)，参会者可登录注册网站开具电子发票。

### 10. 摘要提交

请参会者准备 A4 纸不超过 2 页的摘要，于 4 月 25 日前提交到会议注册网址 <http://cstmeeting.chntox.org/meeting/83>，或发送至邮箱 comtox@rcees.ac.cn。摘要格式见附件 3。

欢迎无法到会的委员和专家提交摘要。

### 11. 住宿与交通信息

会议酒店：石河子市北四东路 2 号，石河子恒和华星酒店。房间可以通过电话预订，住宿费用由参会者承担。

酒店信息如下：



## 12. 加入中国毒理学会

非会员请直接到学会官网([www.chntox.org](http://www.chntox.org))左下角，“会员之家”点击申请入会，填写个人信息申请入会，发展来源选择“计算毒理专业委员会”即可。

个人会费四年一次缴纳：200 元/4 年/每人；终身会费：600 元/每人。

如您单位会员较多，可申请团体会员，交纳团体会费：6000 元/4 年。

## 13. 联系人

(1) 魏东斌，中国科学院生态环境研究中心(总联系人)

电话：136 7124 8159，E-mail: comtox@rcees.ac.cn

(2) 骆 媛，军事科学院军事医学研究院

电话：158 1033 5398，E-mail: luoyuan2006@163.com

(3) 何 松，军事科学院军事医学研究院

电话：15210588715，E-mail: hes1224@163.com

(4) 鲁建江，石河子大学化学化工学院

电话：135 1993 8096，E-mail: lujj@shzu.edu.cn



## 附件1:

### 计算毒理学建模竞赛通知

为促进计算毒理学的学科发展，推动智慧环境与健康交叉学科人才的培养，中国毒理学会计算毒理学专业委员会及灾害与应急毒理学专业委员会联合举办“计算毒理学建模竞赛”。

#### 一、竞赛内容

本次大赛提供化学品的雄激素受体拮抗剂(AR)活性数据集，邀请参赛选手利用机器学习算法对其进行建模预测。

雄激素受体(AR)属于核受体超家族中的类固醇受体，介导广泛的发育和生理反应，在男性性分化和青春期性成熟、维持精子形成、调节男性促性腺激素等方面尤为重要。研究表明，双酚A(BPA)等化学品通过拮抗AR发挥雄激素干扰效应，影响胎儿、婴儿以及儿童的大脑发育、行为和前列腺发育。

提供4834种化合物的SMILES码，及其能否拮抗AR的分类数据作为训练集，1209种化合物的SMILES码作为验证集，参赛者需基于训练集进行建模，对验证集化合物的AR拮抗活性进行分类预测。选手可以使用分子指纹、描述符、分子图等多模态特征表征分子结构，并基于各种机器学习、深度学习算法训练模型、自主开发模型或采用数据增强技术以提升预测性能。

#### 二、参赛资格

1. 参赛人员须为高校全日制在校本科生、硕士生或博士生，在校生身份以竞赛通知正式发布之日为准。
2. 每个参赛项目团队人数不得超过3人，每人只能参加1个团队。

3. 每个参赛项目可邀请 1 名指导老师，指导老师须为参赛成员单位正式在职教师。比赛过程中，一旦发现提交的材料存在虚假、抄袭或者侵犯他人知识产权，将被取消参赛资格。

### 三、参赛时间

#### 1. 报名时间

2024 年 11 月 15 日-2025 年 1 月 31 日

#### 2. 参赛时间

2025 年 2 月 1 日-2025 年 3 月 30 日

#### 3. 颁奖时间

2025 年 5 月 10 日

### 四、赛事流程

#### 1. 报名阶段

团队负责人发送邮件至 [comtox@rcees.ac.cn](mailto:comtox@rcees.ac.cn) 进行报名，写明团队成员、负责人、成员所在单位、年级、邮箱、联系电话，指导教师姓名、职称、联系电话。报名完成后，参赛团队负责人、成员、指导老师均不得变更。

#### 2. 比赛阶段

各团队应根据题目完成不超过 1000 字的参赛方案，包括技术方案和预期效果等信息，作为评审的主要依据。可同时制作项目介绍 PPT 技术报告等辅助材料。

#### 3. 提交阶段

团队负责人发送文件至邮箱 [comtox@rcees.ac.cn](mailto:comtox@rcees.ac.cn) 进行结果提交。

### 五、竞赛资源下载

赛题及提交模板在比赛开始时以邮件形式发放。

## **六、评选标准**

根据验证集预测结果的受试者工作特征曲线下面积( $A_{ROC}$ )、精度-召回率曲线下面积( $A_{PRC}$ )、召回率( $R_{TP}$ )、精度( $R_P$ )、加权准确率( $R_{BA}$ )值综合排序，进行排名。

根据经济合作与发展组织(OECD)发布的定量构效关系(QSAR)评估导则，参赛选手需要表征模型的应用域，并根据应用域覆盖范围提供模型在验证集上预测的可靠性。会务组将选出验证集中90%在应用域内的分子，评估应用域内分子的指标效果，并进行综合排序和排名。

## **七、奖项设置**

一等奖1个，二等奖3个，三等奖5个，颁发获奖证书等。

## **八、知识产权**

1. 本大赛提供的赛题数据仅用于比赛本身，不得在比赛范围外使用或对外传播。
2. 比赛过程中产生数据归主办方所有。
3. 比赛过程中，选手所使用的算法、工作流程等的知识产权都归属开发者所有。

报名注册即代表认同主办方以上声明。

## **九、工作小组**

庄树林、于海瀛、李延伟、刘娴、解怀君、谭皓月、王浩博

## 附件2：

# 第一届化学物质与健康科普作品竞赛

为普及化学物质的健康风险知识，服务化学物质风险防范及新污染物治理，中国毒理学会计算毒理学专业委员会、灾害与应急毒理学专业委员会联合举办“化学物质与健康科普作品竞赛”。

## 一、竞赛内容

参赛选手围绕“化学物质与健康”主题制作相关科普作品，作品包括动画、视频、绘画、PPT等形式；要求观点正确、主题鲜明、内容充实、结构清晰、表述准确、通俗易懂、制作精美；视频类时长不超过4分钟。

## 二、参赛要求

1. 参赛人员须为高校全日制在校本科生、硕士生或博士生，在校生身份以作品提交之日为准。

2. 每个参赛团队人数不得超过3人，每人只能参加1个团队。每个参赛项目可邀请1名指导老师，指导老师须为参赛成员单位正式在职教师。

3. 参赛作品须为团队成员原创作品，不得委托第三方制作。如果使用AI制作，须注明制作软件及运行环境，作品的创作思路及提示词等。

4. 比赛过程中，一旦发现提交的材料存在虚假、抄袭或者侵犯他人知识产权，将被取消参赛资格。

## 三、参赛时间

1. 报名时间：2024年11月15日-2025年1月31日

2. 作品提交时间：2025年2月1日-2025年3月30日

3. 颁奖时间：2025年5月10日

## 四、参赛方式

报名方式：团队负责人或个人均通过邮件进行报名。报名完成后，参赛团队负责人、成员、指导老师均不得变更。

作品提交方式：由团队负责人或个人通过邮件进行参赛作品提交，

并附不超过 500 字的作品创作说明。

报名及作品邮件投递邮箱地址：comtox@rcees.ac.cn

## 五、奖项设置

一等奖：1个，二等奖：3个，三等奖：5个

获奖选手颁发荣誉证书并择优推荐至中国毒理学会校园科普大赛。

## 六、工作小组

骆媛、杜现礼、鲍正好、孙铭学、隋昕

### 附件3：摘要格式

#### 题目：黑体小二号字体

姓名(参会人名下加下划线)<sup>1</sup>, 姓名<sup>2</sup>, 姓名<sup>2</sup>, 姓名<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup> 地址

<sup>2</sup> 地址

\* 通讯人邮箱地址

关键词：四号宋体(关键词不多于五个，逗号隔开)

正文(摘要限制篇幅1-2页；若有文献，以<sup>[X]</sup>上标格式)：宋体，小四；1.25行距；段前0，段后0.5行。

#### 参考文献(以下提供文献格式)

- [1] Liu J.; Gao B. B.; Clermont A.C.; Blair P.; Chilcote T.J.; Sinha S.; Flaumenhaft R.; Feener E. P. Hyperglycemia induced cerebral hematoma expansion is mediated by plasma kallikrein. *Nat Medicine*, 2011, 17, 206-210.
- [2] Abid K.; Rochat B.; Lassahn P.G.; Stöcklin R.; Michalet S.; Brakch N.; Aubert J.F.; Vatansever B.; Tella P.; De Meester I.; Grouzmann E. Kinetic study of Neuropeptide Y (NPY) proteolysis in Blood and Identification of NPY3-35, A new peptide generated by plasma kallikrein. *J Biol Chem*, 2009, 284-37, 24715-24724.
- [3] Batterham R.L.; Bloom S.R. The gut hormone peptide YY regulates appetite. *Ann N Y Acad Sci*, 2003, 994, 162-168.