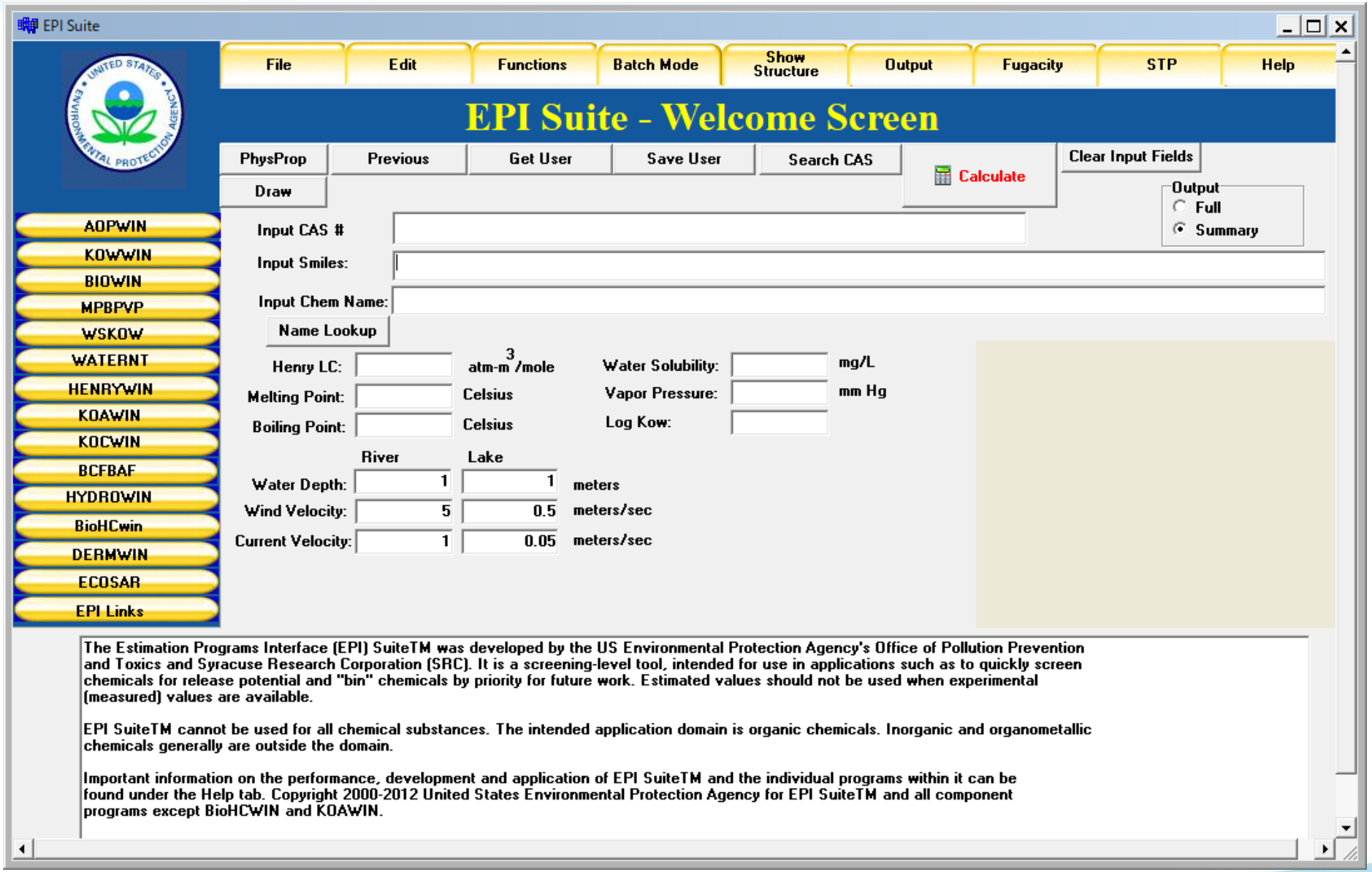
生分解性/蓄積性に関連したQSARとリードアクロス・最新動向

（独） 製品評価技術基盤機構（NITE）
化学物質管理センター
財津　由梨

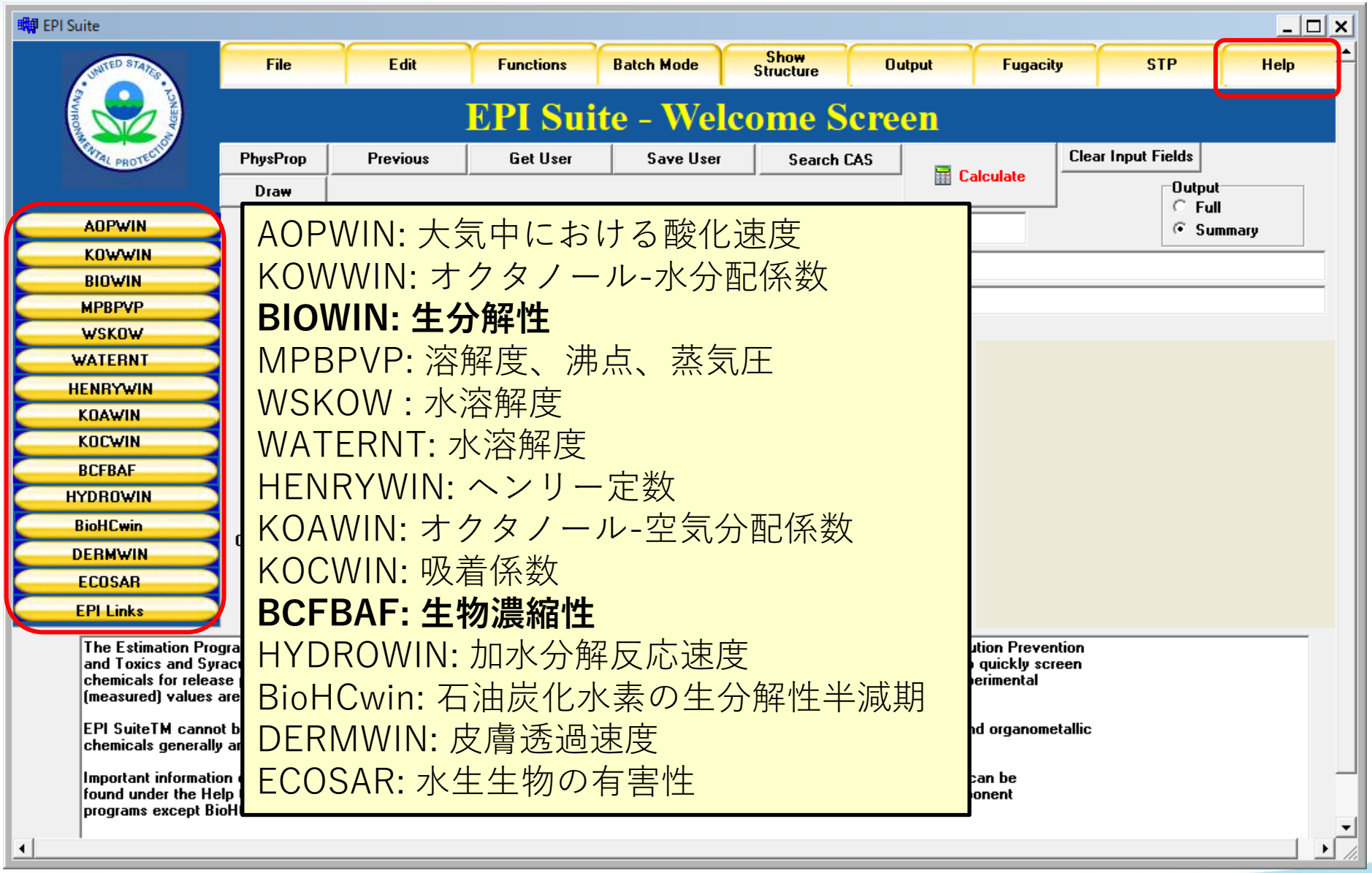
目次

- 分解性QSAR：BIOWIN5、6
- 蓄積性QSAR：BCFBAF
- QSAR Toolboxを用いたBCF予測
- 最新動向：QSAR Assessment Framework

EPI Suiteのメイン画面



EPI Suiteに搭載されているモデル

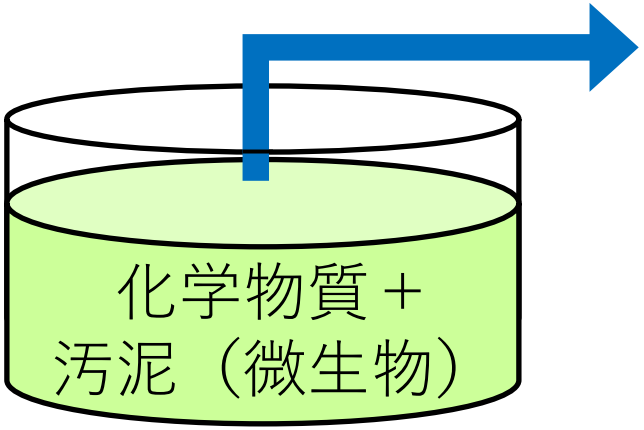


AOPWIN: 大気中における酸化速度
KOWWIN: オクタノール-水分配係数
BIOWIN: 生分解性
MPBPVP: 溶解度、沸点、蒸気圧
WSKOW : 水溶解度
WATERNT: 水溶解度
HENRYWIN: ヘンリー定数
KOAWIN: オクタノール-空気分配係数
KOCWIN: 吸着係数
BCFBAF: 生物濃縮性
HYDROWIN: 加水分解反応速度
BioHCwin: 石油炭化水素の生分解性半減期
DERMWIN: 皮膚透過速度
ECOSAR: 水生生物の有害性

分解性QSAR：BIOWIN5、6

分解度試験

- ✓ 微生物等による化学物質の分解性を評価するための試験
- ✓ 化審法ではOECD TG 301C/F法の分解度試験結果から評価
- ✓ BOD分解度＜60％で難分解判定

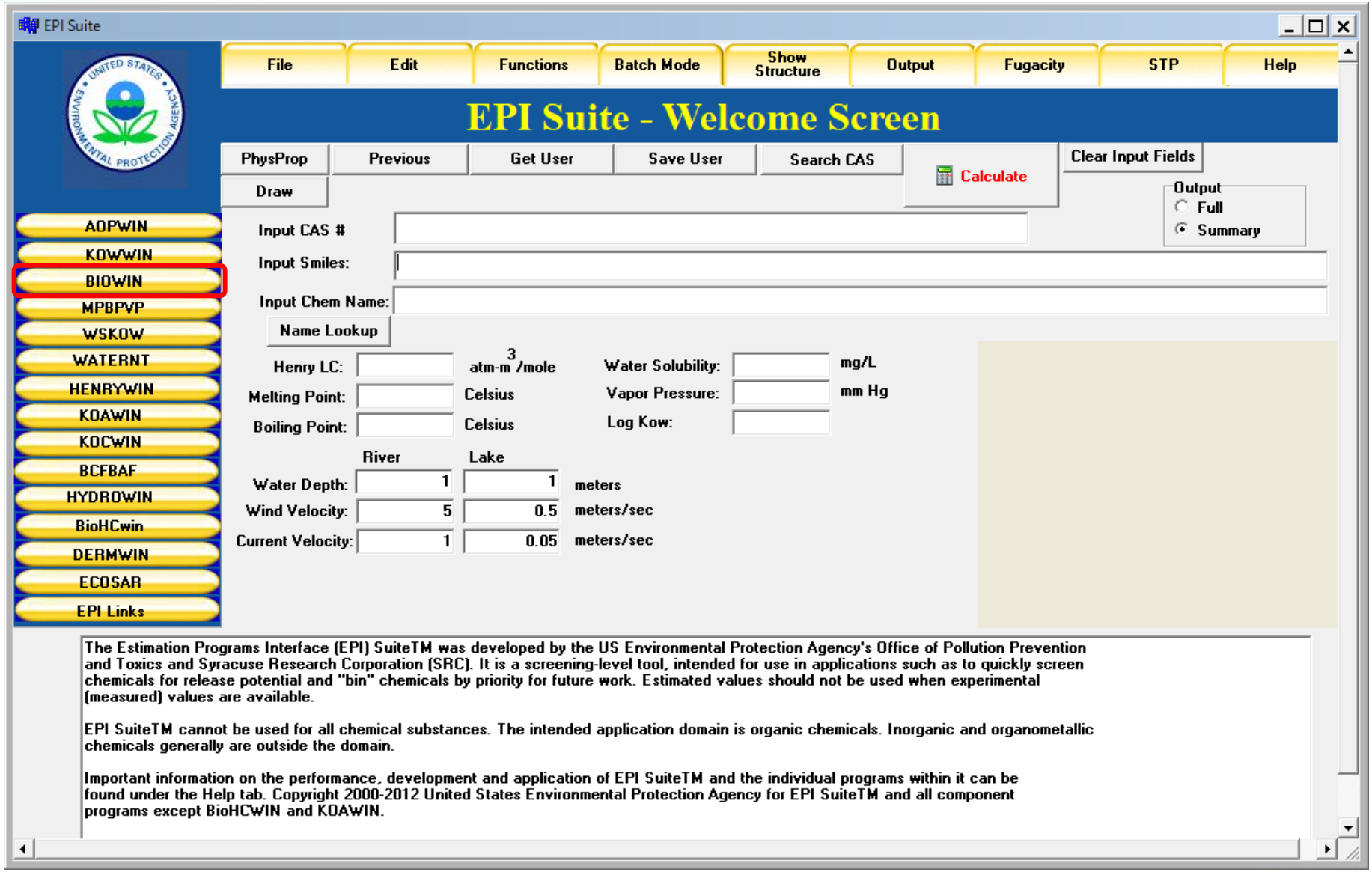


酸素消費量を測定

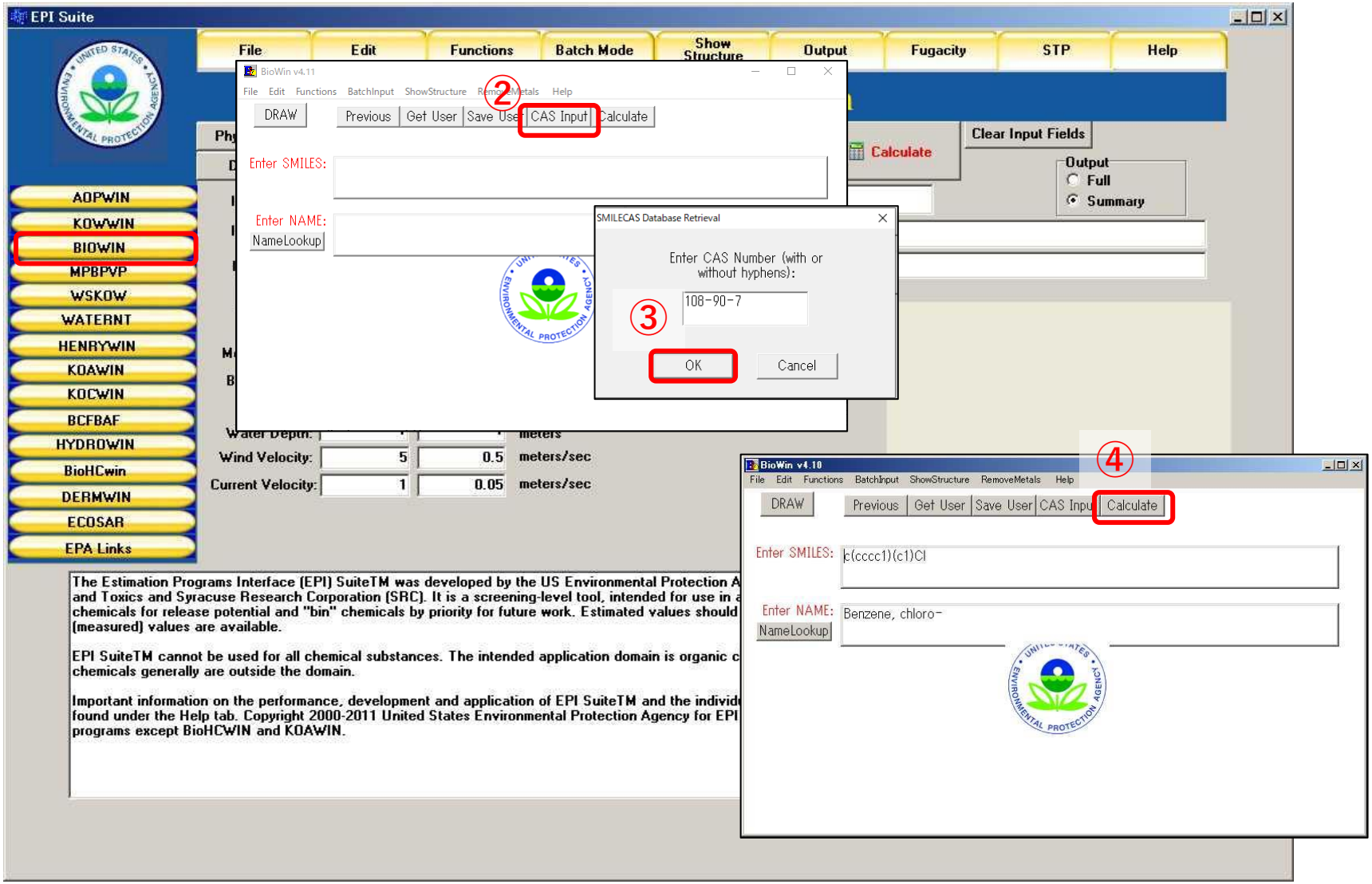
試験期間：28日間

$$\text{BOD分解度（\%）} = \frac{\text{酸素消費量の測定値}}{\text{化学物質が完全に酸化された場合に必要な理論的酸素要求量}}$$

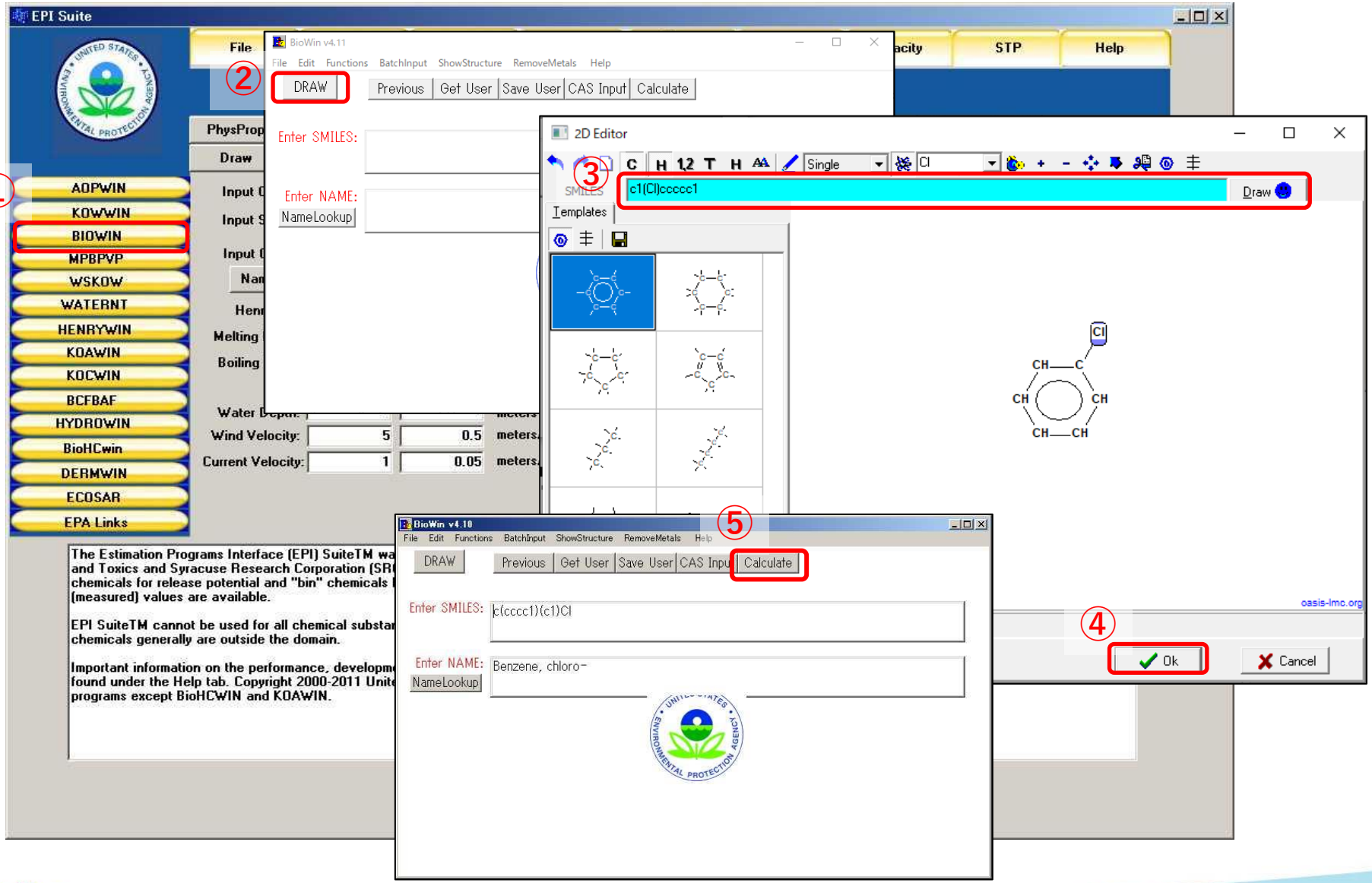
BIOWINの計算方法



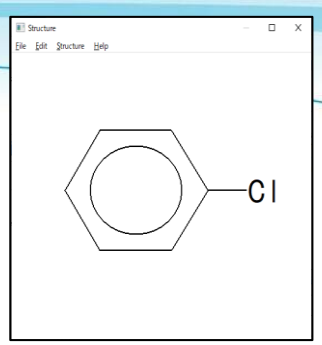
CAS RNによるSMILES入力



構造描画によるSMILES入力



BIOWIN予測結果



Bio Results

Print Save Results Copy Remove Window Help

```
SMILES : c1(CL)ccccc1
CHEM   :
MOL FOR: C6 H5 CL1
MOL WT : 112.56
-------------------------- BIOWIN v4.10 Results ----------------------------

  Biowin1 (Linear Model Prediction)    :  Biodegrades Fast
  Biowin2 (Non-Linear Model Prediction):  Biodegrades Fast
  Biowin3 (Ultimate Biodegradation Timeframe):  Weeks
  Biowin4 (Primary  Biodegradation Timeframe):  Days-Weeks
  Biowin5 (MITI Linear Model Prediction)    :  Not Readily Degradable
  Biowin6 (MITI Non-Linear Model Prediction):  Not Readily Degradable
  Biowin7 (Anaerobic Model Prediction):  Does Not Biodegrade Fast
  Ready Biodegradability Prediction:  NO

------+-----+-----------------------------------------+---------+---------
 TYPE | NUM |       Biowin1 FRAGMENT DESCRIPTION      |  COEFF  |  VALUE
------+-----+-----------------------------------------+---------+---------
 Frag |  1  |  Aromatic chloride   [-CL]              | -0.1824 | -0.1824
 Frag |  1  |  Unsubstituted phenyl group (C6H5-)     |  0.1281 |  0.1281
 MolWt|  *  |  Molecular Weight Parameter             |         | -0.0536
 Const|  *  |  Equation Constant                      |         |  0.7475
============+=========================================+=========+=========
   RESULT   |    Biowin1 (Linear Biodeg Probability)  |         |  0.6396
============+=========================================+=========+=========


------+-----+-----------------------------------------+---------+---------
 TYPE | NUM |       Biowin2 FRAGMENT DESCRIPTION      |  COEFF  |  VALUE
------+-----+-----------------------------------------+---------+---------
 Frag |  1  |  Aromatic chloride   [-CL]              | -2.0155 | -2.0155
 Frag |  1  |  Unsubstituted phenyl group (C6H5-)     |  1.7991 |  1.7991
 MolWt|  *  |  Molecular Weight Parameter             |         | -1.5983
============+=========================================+=========+=========
```

BIOWIN1～7の予測結果が出力される。

BIOWIN1～7の予測結果を算出するのに使用された、部分構造の数と分子量が出力される。

nite BIOWINヘルプより

BIOWIN 1～7の違い

	分解性データ		回帰式
	トレーニングセット	予測値	
BIOWIN1	好気性条件下の分解度試験結果に基づくデータ	素早く分解する確率を連続変数で予測、0.5以上であれば素早く分解する	線形回帰式
BIOWIN2			非線形回帰式
BIOWIN3	本質的生分解（無機化するまでの分解）が完了するのに要する時間の専門家による推定値	本質的生分解が完了するのに要する時間を表す	線形回帰式
BIOWIN4	一次生分解性（一段階目の分解）が完了するのに要する時間の専門家による推定値	一次生分解が完了するのに要する時間を表す	線形回帰式
BIOWIN5	OECD 301C試験から得たれた良分解性（１）/難分解性（0）のデータ	素早く分解する確率を連続変数で予測、0.5以上であれば良分解性	線形回帰式
BIOWIN6			非線形回帰式
BIOWIN7	嫌気性条件下の分解度試験結果に基づくデータ	素早く分解する確率を連続変数で予測、0.5以上であれば素早く分解する	線形回帰式

nite BIOWINヘルプより

生分解性予測モデル（例：BIOWIN5）

42の部分構造及び分子量を記述子とし、下式により予測がなされる。

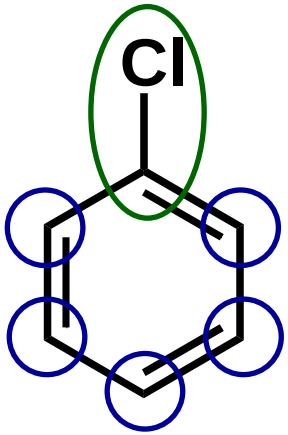
Yj が0.5以上で易分解性、0.5未満で難分解性と判定される。

$$Y_j = a_0 + a_1 f_1 + a_2 f_2 + \cdots + a_n f_n + a_m MW$$

- Y_j： 物質Jが易分解性となる可能性
- f_n： 物質Jの部分構造nの数
- a_n： 部分構造nの回帰係数
- MW： 分子量
- a_m： 分子量の回帰係数
- a_0： 定数項

分解性に対する各部分構造の寄与を数値で表現（回帰式モデル）

【クロロベンゼンの予測結果】



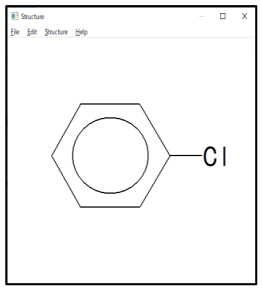
記述子	回帰係数	数量	合計
Ar-Cl	-0.0392	1	-0.0392
Ar-H	0.0004	5	0.0020
MW	-0.00158	113	-0.1775
定数項			0.5544
合計			0.3397

0.5未満なので難分解予測

J. Tunkel et al., *Environ. Toxicol. Chem.* **19** (2000) 2478.

BIOWIN5、BIOWIN6の出力結果

- 化審法生分解性試験条件下（OECD301C法）において、BOD分解度が60％以上となる確率を連続変数で予測
- 0.5未満で難分解性予測、0.5以上で良分解性予測
- BIOWIN5では線形回帰式、BIOWIN6では非線形の回帰式により予測



Bio Results

Print　Save Results　Copy　Remove Window　Help

TYPE	NUM	Biowin5 FRAGMENT DESCRIPTION	COEFF	VALUE
Frag	1	Aromatic chloride [-CL]	-0.0392	-0.0392
Frag	5	Aromatic-H	0.0004	0.0020
MolWt	*	Molecular Weight Parameter		-0.1775
Const	*	Equation Constant		0.5544
RESULT		Biowin5 (MITI Linear Biodeg Probability)		0.3397

TYPE	NUM	Biowin6 FRAGMENT DESCRIPTION	COEFF	VALUE
Frag	1	Aromatic chloride [-CL]	-0.7609	-0.7609
Frag	5	Aromatic-H	0.0342	0.1709
MolWt	*	Molecular Weight Parameter		-1.9473
RESULT		Biowin6 (MITI Non-Linear Biodeg Probability)		0.2942

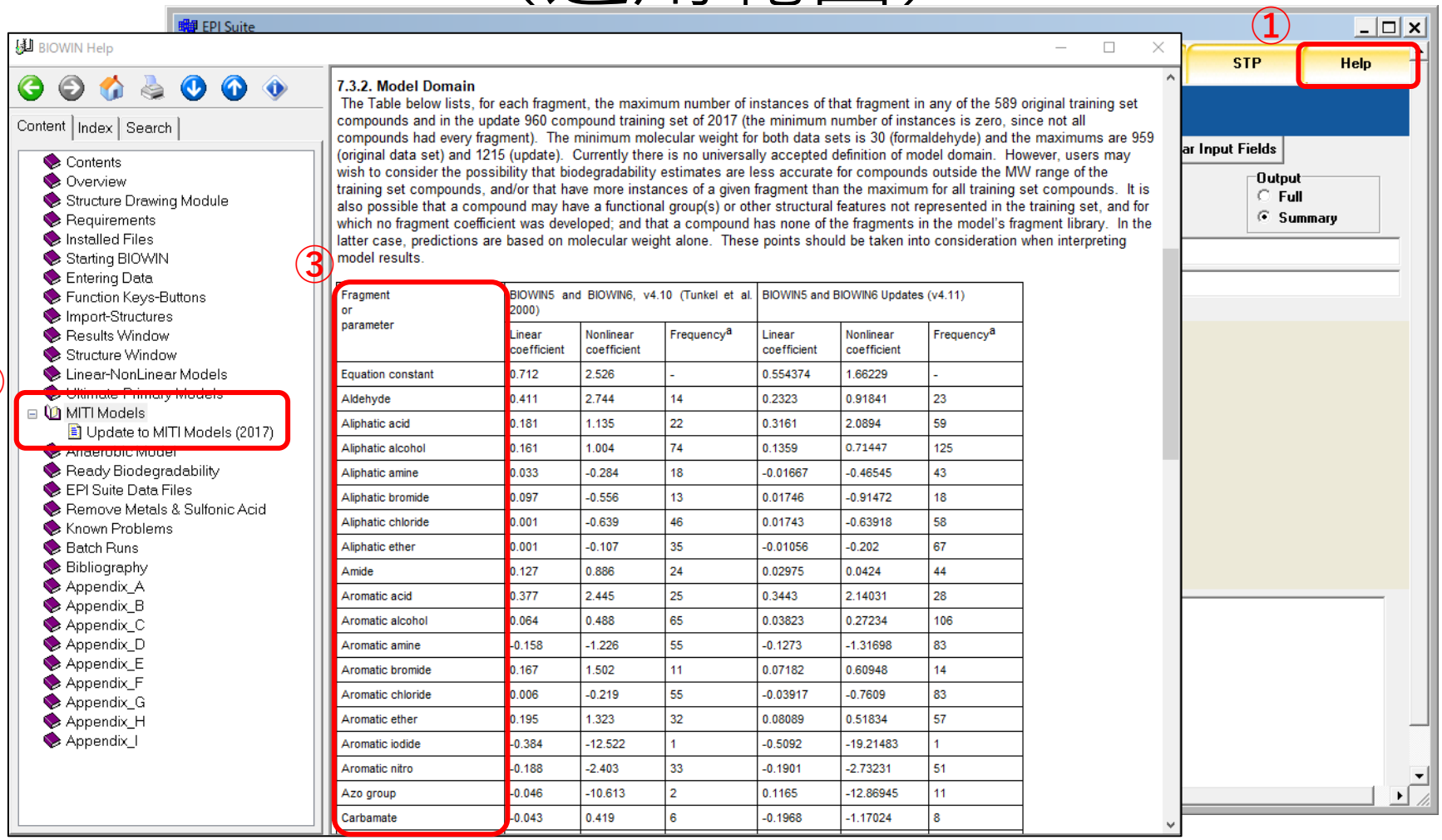
A Probability Greater Than or Equal to 0.5 indicates --> Readily Degradable
A Probability Less Than 0.5 indicates --> NOT Readily Degradable

BIOWIN5
（0.5未満なので難分解性予測）

BIOWIN6
（0.5未満なので難分解性予測）

nite BIOWINヘルプより

BIOWIN5、BIOWIN6出力結果の信頼性（適用範囲）



7.3.2. Model Domain

The Table below lists, for each fragment, the maximum number of instances of that fragment in any of the 589 original training set compounds and in the update 960 compound training set of 2017 (the minimum number of instances is zero, since not all compounds had every fragment). The minimum molecular weight for both data sets is 30 (formaldehyde) and the maximums are 959 (original data set) and 1215 (update). Currently there is no universally accepted definition of model domain. However, users may wish to consider the possibility that biodegradability estimates are less accurate for compounds outside the MW range of the training set compounds, and/or that have more instances of a given fragment than the maximum for all training set compounds. It is also possible that a compound may have a functional group(s) or other structural features not represented in the training set, and for which no fragment coefficient was developed; and that a compound has none of the fragments in the model's fragment library. In the latter case, predictions are based on molecular weight alone. These points should be taken into consideration when interpreting model results.

Fragment or parameter	BIOWIN5 and BIOWIN6, v4.10 (Tunkel et al. 2000)			BIOWIN5 and BIOWIN6 Updates (v4.11)		
	Linear coefficient	Nonlinear coefficient	Frequency[a]	Linear coefficient	Nonlinear coefficient	Frequency[a]
Equation constant	0.712	2.526	-	0.554374	1.66229	-
Aldehyde	0.411	2.744	14	0.2323	0.91841	23
Aliphatic acid	0.181	1.135	22	0.3161	2.0894	59
Aliphatic alcohol	0.161	1.004	74	0.1359	0.71447	125
Aliphatic amine	0.033	-0.284	18	-0.01667	-0.46545	43
Aliphatic bromide	0.097	-0.556	13	0.01746	-0.91472	18
Aliphatic chloride	0.001	-0.639	46	0.01743	-0.63918	58
Aliphatic ether	0.001	-0.107	35	-0.01056	-0.202	67
Amide	0.127	0.886	24	0.02975	0.0424	44
Aromatic acid	0.377	2.445	25	0.3443	2.14031	28
Aromatic alcohol	0.064	0.488	65	0.03823	0.27234	106
Aromatic amine	-0.158	-1.226	55	-0.1273	-1.31698	83
Aromatic bromide	0.167	1.502	11	0.07182	0.60948	14
Aromatic chloride	0.006	-0.219	55	-0.03917	-0.7609	83
Aromatic ether	0.195	1.323	32	0.08089	0.51834	57
Aromatic iodide	-0.384	-12.522	1	-0.5092	-19.21483	1
Aromatic nitro	-0.188	-2.403	33	-0.1901	-2.73231	51
Azo group	-0.046	-10.613	2	0.1165	-12.86945	11
Carbamate	-0.043	0.419	6	-0.1968	-1.17024	8

予測対象物質の分子量、部分構造の数が、トレーニングセットの範囲に収まらない場合は、予測結果の信頼性が比較的低くなると考えられる。

nite BIOWINヘルプより

BIOWIN5、BIOWIN6出力結果の信頼性（バリデーション結果）

【BIOWIN5、6（ver.4.11）の正答率】

	パラメーター	BIOWIN 5	BIOWIN 6
トレーニングセットによる検証	難分解性	494/575 (85.9%)	490/575 (85.2%)
	良難分解性	275/385 (71.4%)	300/385 (77.9%)
	合計	769/960 (80.1%)	790/960 (82.3%)
バリデーションセットによる検証	難分解性	253/292 (86.6%)	253/292 (86.6%)
	良難分解性	128/185 (69.2%)	147/185 (79.5%)
	合計	381/477 (79.8%)	400/4877 (83.7%)

BIOWIN5、6どちらのモデルでも、おおむね70%以上の予測精度

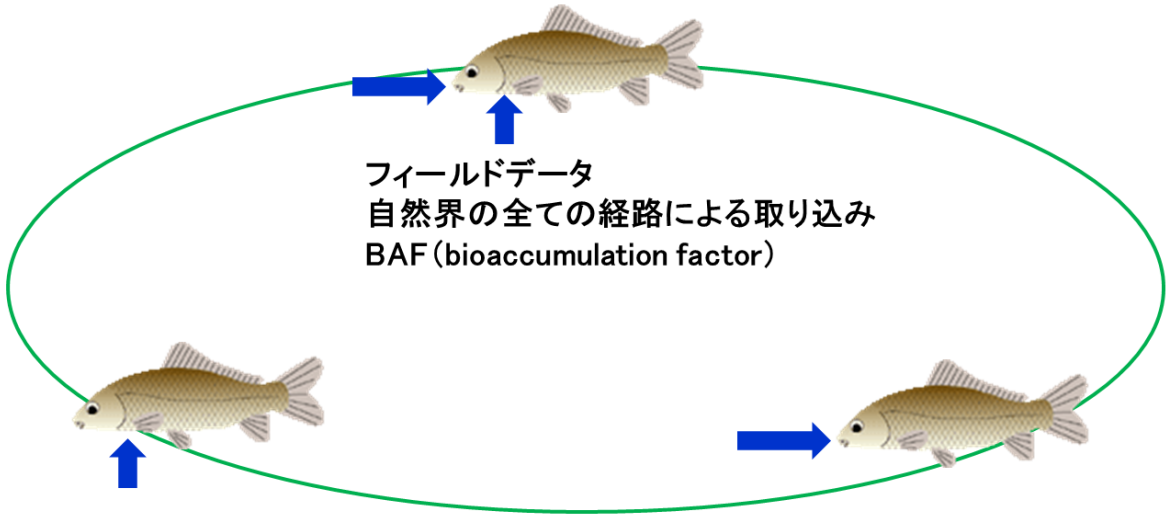
蓄積性QSAR：BCFBAF

濃縮度試験

化審法では、濃縮度試験の結果から生物蓄積性を評価

濃縮度試験の概要

生物蓄積性に係る知見



フィールドデータ
自然界の全ての経路による取り込み
BAF（bioaccumulation factor）

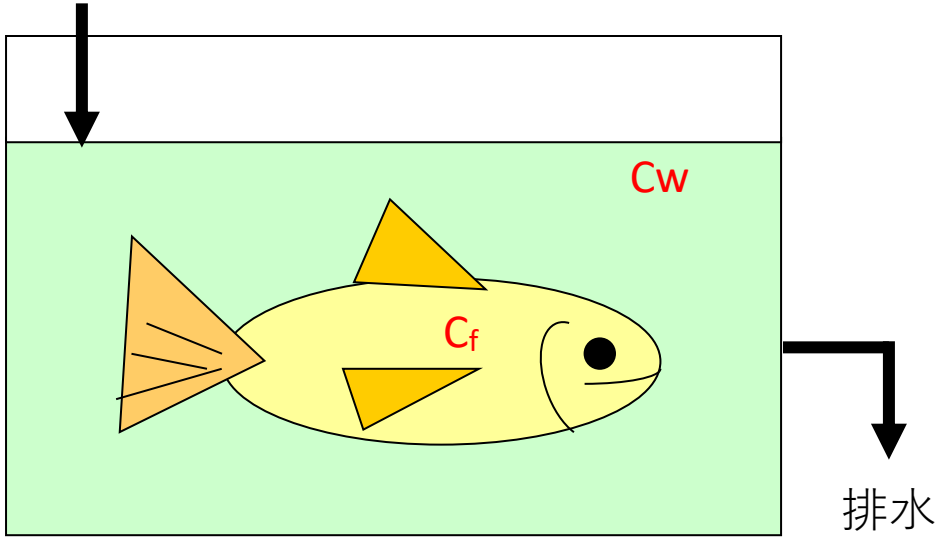
ラボデータ
えらや体表を通じての直接的取り込み
BCF（bioconcentration factor）
水暴露法
化審法濃縮度試験・OECDTG305

ラボデータ
餌の摂取による間接的取り込み
BMF（biomagnification factor）
餌料投与法
OECDTG305に新たに追加された試験方法
化審法濃縮度試験（平成30年4月1日追加）

水暴露法

BCF=5,000L/kgが高蓄積性の判定基準

試験水（水、化学物質、酸素etc.）



化審法の試験法 （OECD TG 305)

方式：流水式、２濃度区（または1濃度区）

魚種：コイ（主に）

試験温度：２５±２℃

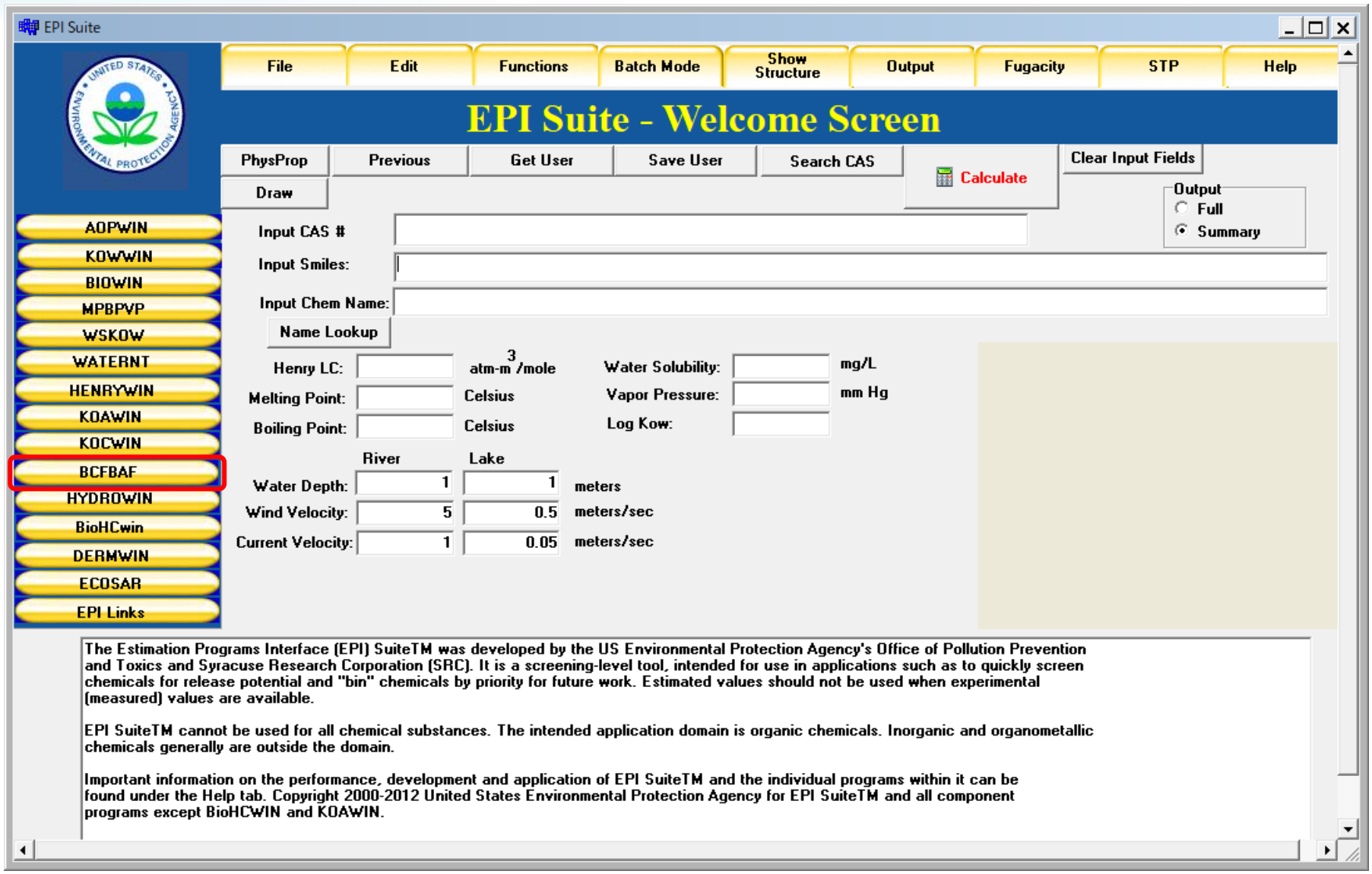
暴露期間：２８日間（主に）

生物濃縮係数（ＢＣＦ）＝ C_f / C_w

C_f : 平衡時の魚体中の化学物質濃度

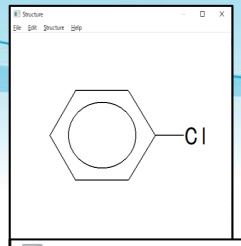
C_w: 平衡時の水中の化学物質濃度

BCFBAFの計算方法



⇒予測対象物質の入力方法はBIOWINと同様

BCFBAFの予測結果



BCFBAF Results

Print Save Results Copy Remove Window Help

```
SMILES : c1(CL)ccccc1
CHEM   :
MOL FOR: C6 H5 CL1
MOL WT : 112.56
---------------------------------- BCFBAF v3.01 ----------------------------------
Summary Results:
  Log BCF (regression-based estimate, wet-wt)
  Biotransformation Half-Life (days)  (10 g fish)
  Log BAF (Arnot-Gobas upper trophic):  1.40  (BAF = 25 L/kg wet-wt)

Experimental BCF-kM Database Structure Match:
---------------------------------------------
  Name      :  Benzene, chloro-
  CAS Num   :  000108-90-7
  Log BCF   :  1.25  (BCF = 17.8 L/kg wet-wt)
  BCF Data  :  BCF NonIonic Training Set
  Log Bio HL:  -1.019  (Bio Half-life = 0.0957 days)
  Bio Data  :  kM Training Set

============================
BCF (Bioconcentration Factor):
============================
Log Kow  (estimated)  :  2.64
Log Kow (experimental):  2.84
Log Kow used by BCF estimates:  2.84

Equation Used to Make BCF estimate:
   Log BCF = 0.6598 log Kow - 0.333 + Correction

      Correction(s):                    Value
       No Applicable Correction Factors

   Estimated Log BCF =  1.541  (BCF = 34.74 L/kg wet-wt)
```

実測値情報

回帰式によるBCF予測結果
（logKowによる回帰式と補正係数）

BCFBAF Results

Print Save Results Copy Remove Window Help

```
==========================================
Whole Body Primary Biotransformation Rate
==========================================
```

TYPE	NUM	LOG BIOTRANSFORMATION FRAGMENT DESCRIPTION	COEFF	VALUE
Frag	1	Aromatic chloride [-CL]	0.3778	0.3778
Frag	1	Unsubstituted phenyl group (C6H5-)	-0.6032	-0.6032
Frag	5	Aromatic-H	0.2664	1.3319
Frag	1	Benzene	-0.4277	-0.4277
L Kow	*	Log Kow = 2.84 (experimental)	0.3073	0.8729
MolWt	*	Molecular Weight Parameter		-0.2886
Const	*	Equation Constant		-1.5371
RESULT		LOG Bio Half-Life (days)		-0.2740
RESULT		Bio Half-Life (days)		0.532
NOTE		Bio Half-Life Normalized to 10 g fish at 15 deg C		

```
Biotransformation Rate Constant:
 kM (Rate Constant):  1.303 /day (10 gram fish)
 kM (Rate Constant):  0.7326 /day (100 gram fish)
 kM (Rate Constant):  0.412 /day (1 kg fish)
 kM (Rate Constant):  0.2317 /day (10 kg fish)

Note: For Arnot-Gobas BCF & BAF Methods, Experimental Km Half-Life Used:
   Exp Km Half-Life = -1.019 days (Rate Constant = 7.241/ day)
Arnot-Gobas BCF & BAF Methods (including biotransformation rate estimates):
   Estimated Log BCF (upper trophic) =  1.398  (BCF = 25 L/kg wet-wt)
   Estimated Log BAF (upper trophic) =  1.398  (BAF = 25 L/kg wet-wt)
   Estimated Log BCF (mid trophic)   =  1.399  (BCF = 25.05 L/kg wet-wt)
   Estimated Log BAF (mid trophic)   =  1.399  (BAF = 25.05 L/kg wet-wt)
   Estimated Log BCF (lower trophic) =  1.387  (BCF = 24.39 L/kg wet-wt)
   Estimated Log BAF (lower trophic) =  1.388  (BAF = 24.41 L/kg wet-wt)

Arnot-Gobas BCF & BAF Methods (assuming a biotransformation rate of zero):
   Estimated Log BCF (upper trophic) =  1.873  (BCF = 74.72 L/kg wet-wt)
   Estimated Log BAF (upper trophic) =  1.915  (BAF = 82.14 L/kg wet-wt)
```

生体内分解予測結果
（部分構造の数と
logKow、分子量）

Arnot-Gobasモデルによる
BCFとBAF予測結果

BCFBAF回帰式（非イオン性物質）予測方法

非イオン性物質

1．化学構造からlogKowを推計（またはlogKow（実測値）を入力）

2．logKowに応じた計算方法で予測

A)	logKow < 1	定数値による予測（BCF=3.2）
B)	1 ≤ logKow ≤ 7	予測式（１）を用いる
C)	7 < logKow	予測式（２）を用いる

$$\text{Log BCF} = 0.6598\ \text{Log Kow} - 0.333 + \Sigma\ \text{correction factors}$$

$(n = 396,\ r^2 = 0.792,\ Q^2 = 0.78,\ \text{std dev} = 0.511,\ \text{avg dev} = 0.395)$

式（１）

$$\text{Log BCF} = -0.49\ \text{Log Kow} + 7.554 + \Sigma\ \text{correction factors}$$

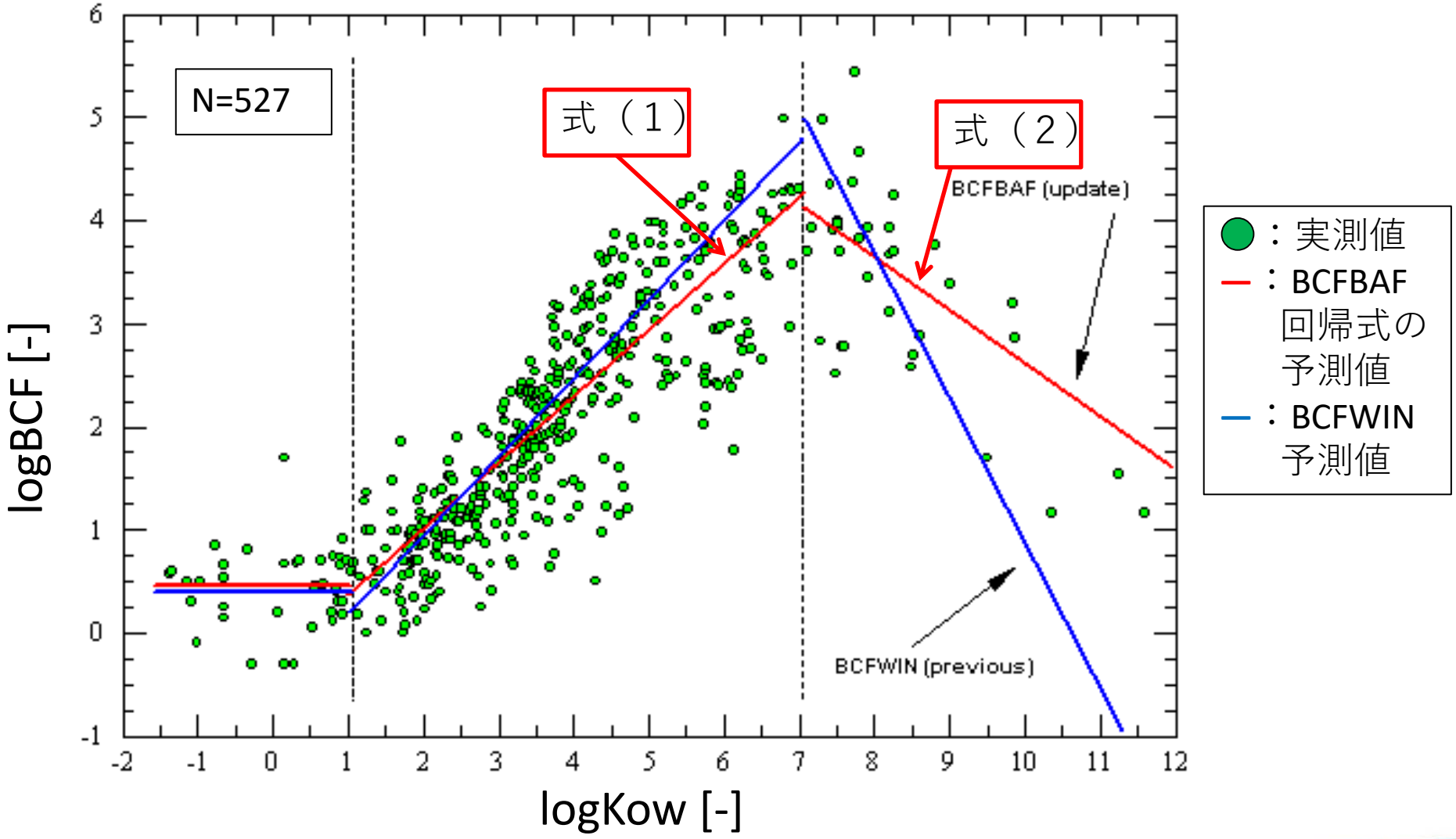
$(n = 35,\ r^2 = 0.634,\ Q^2 = 0.57,\ \text{std dev} = 0.538,\ \text{avg dev} = 0.396)$

式（２）

※Correction factors：　各骨格及び官能基毎の補正係数

nite BCFBAFヘルプより

BCFBAF回帰式（非イオン性物質）予測結果と実測値



nite BCFBAFヘルプより

BCFBAF回帰式（イオン性物質）予測方法

イオン性物質

１．化学構造からlogKowを推計（またはlogKow（実測値）を入力）

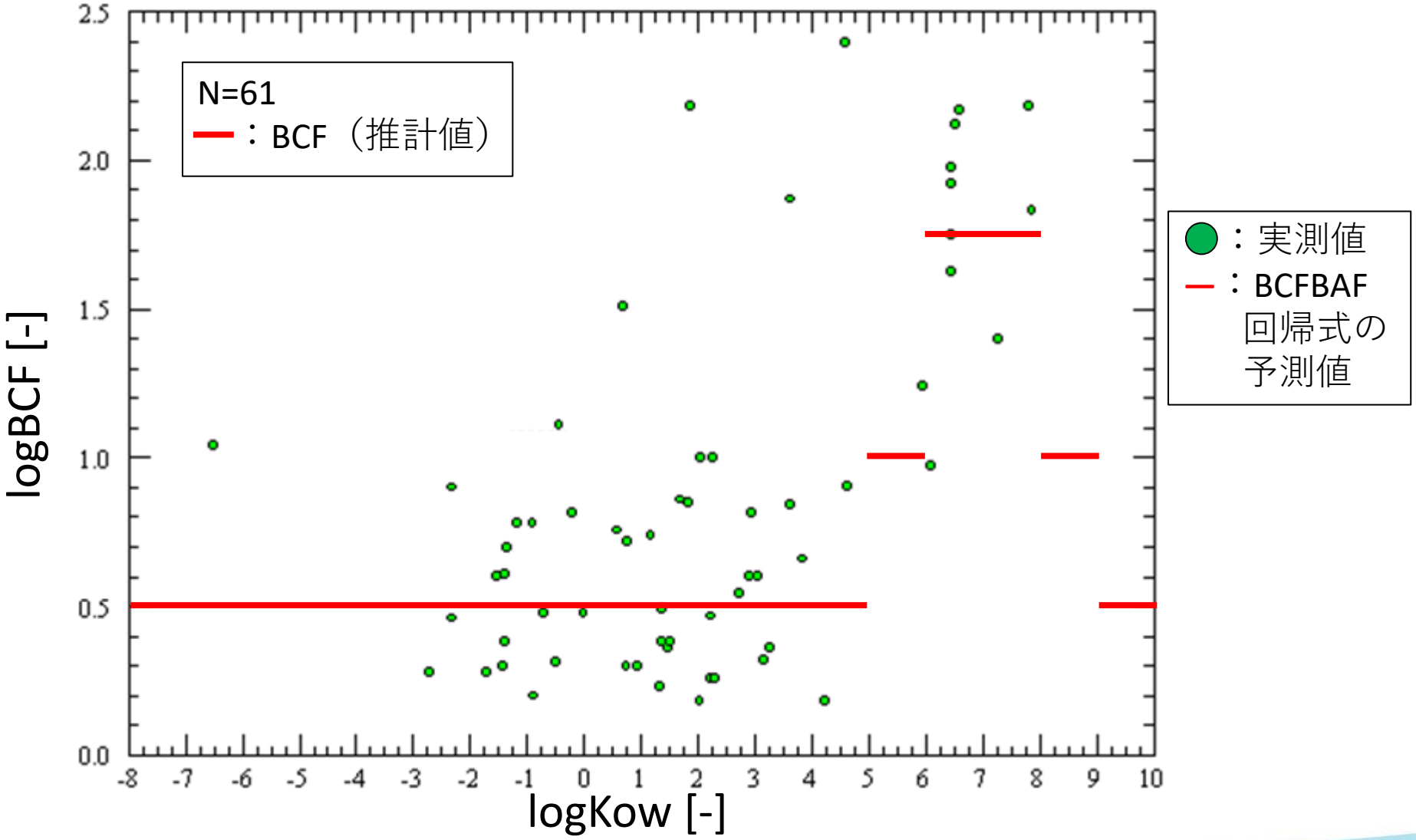
２．logKowに応じて定性値による予測

logKow ≤ 5	logBCF=0.5	(BCF=3.2)
5 < logKow ≤ 6	logBCF=1.0	(BCF=10)
6 < logKow ≤ 8	logBCF=1.75	(BCF=56.2)
8 < logKow ≤ 9	logBCF=1.0	(BCF=10)
9 < logKow	logBCF=0.5	(BCF=3.2)

原著論文（logBCF=0.75）から更新されている。

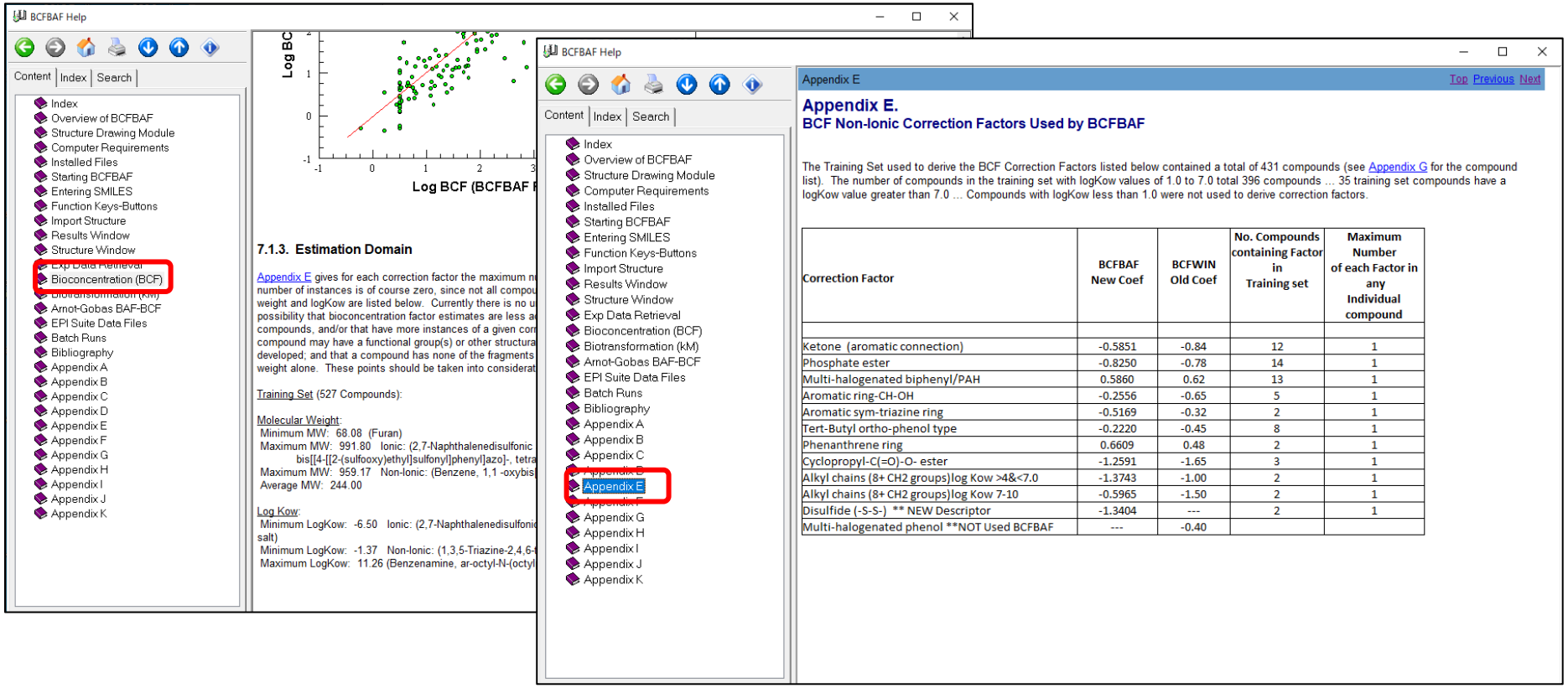
BCFBAFヘルプ
原著論文(Meylan et al., 1999)より

BCFBAF回帰式（イオン性物質）予測結果と実測値



nite BCFBAFヘルプより

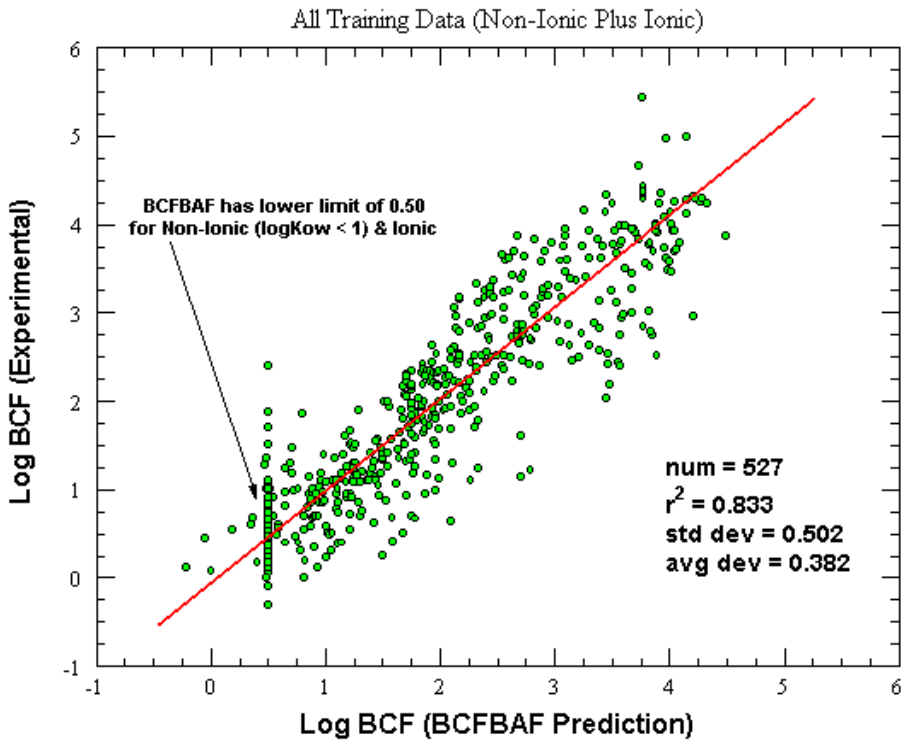
BCFBAF回帰式
予測結果の信頼性（適用範囲）



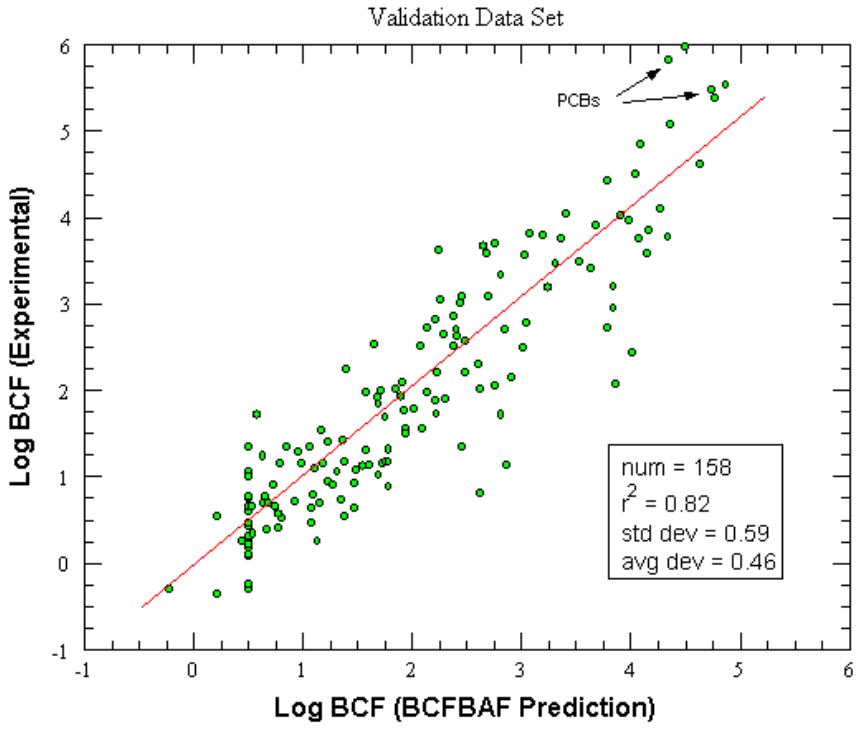
予測対象物質の分子量やlog Kow、補正係数の出現数、部分構造の数がトレーニングセットの範囲に収まらない場合は、予測結果の信頼性が比較的低くなると考えられる。

nite BCFBAFヘルプより

BCFBAF回帰式予測結果の信頼性（バリデーション結果）



トレーニングセットによる検証



バリデーションセットによる検証

nite BCFBAFヘルプより

生体内分解速度予測方法

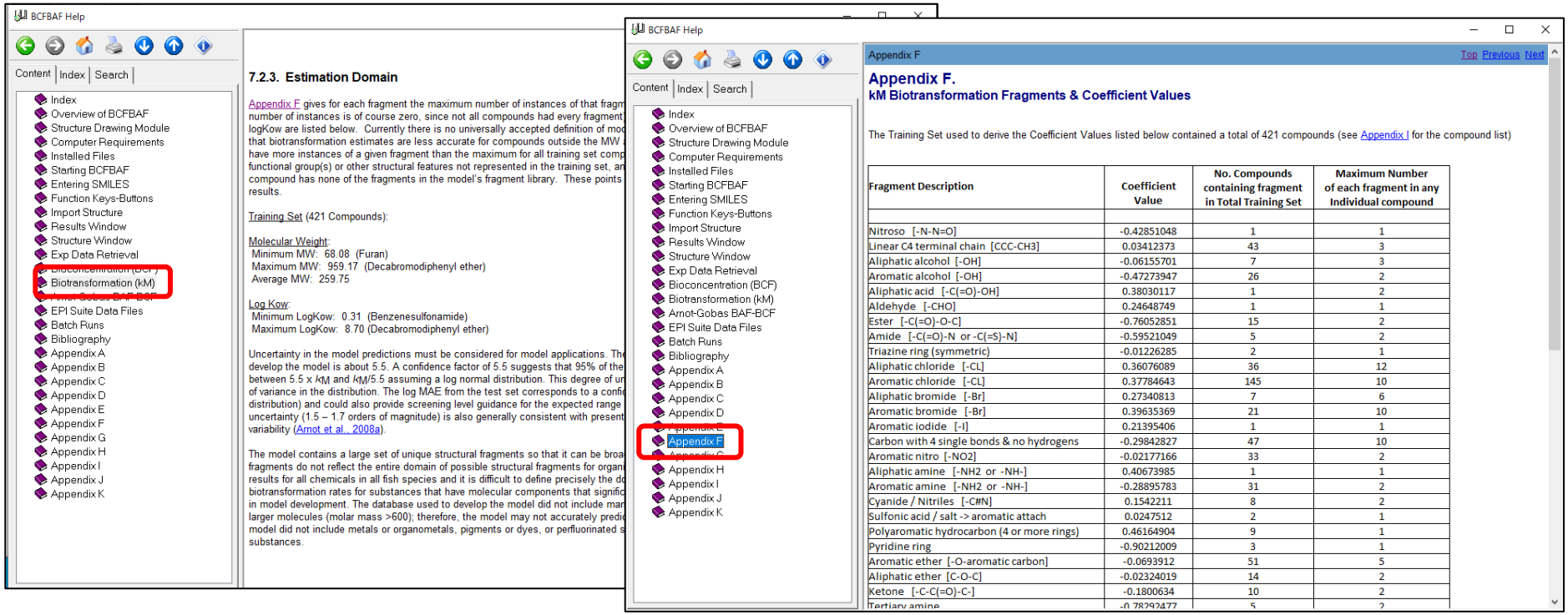
１．化学構造からlogKowを推計（またはlogKow（実測値）を入力）

$$\text{Log kM/Half-Life (in days)} = 0.30734215*\text{LogKow} - 0.0025643319*\text{MolWt} - 1.53706847 + \sum(F_i*n_i)$$

kM ：生体内分解速度定数
Half-life ：生体内分解半減期
MolWt ：分子量
$\sum(F_i*n_i)$：各骨格及び官能基毎の補正係数とそれらの数の積分の合計

nite BCFBAFヘルプより

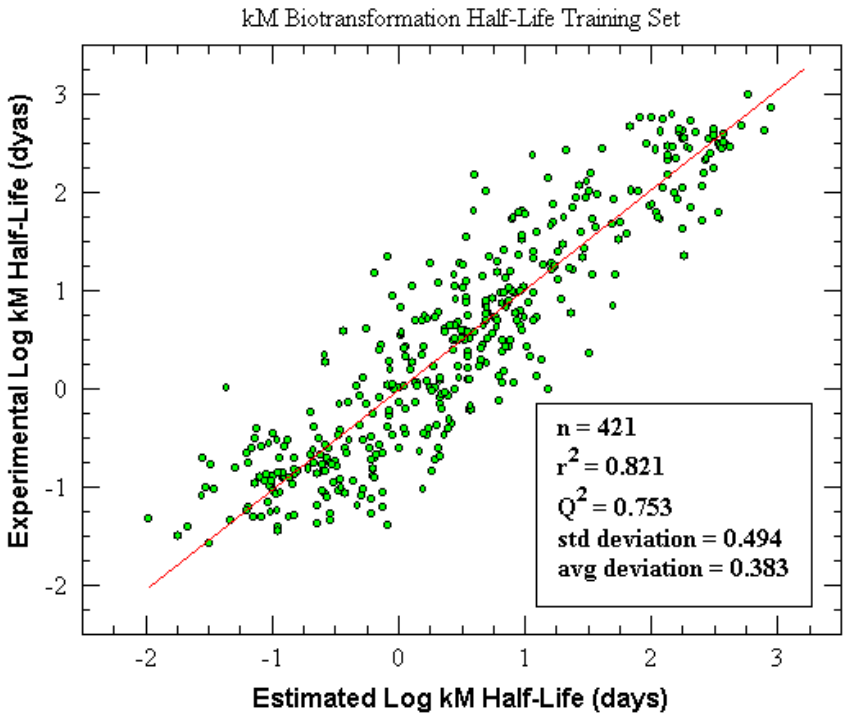
生体内分解速度予測結果の信頼性（適用範囲）



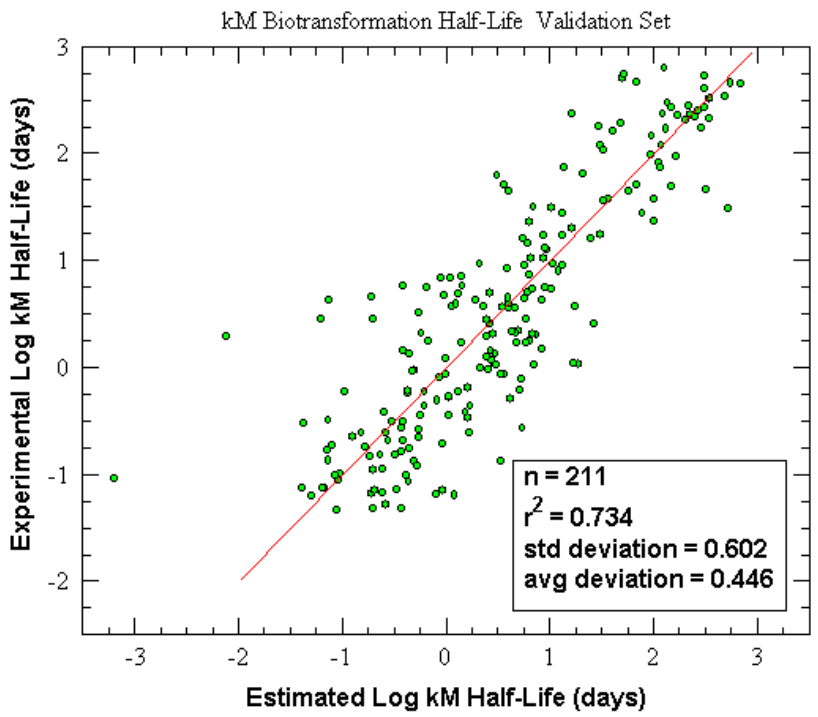
- トレーニングセットに含まれておらず、生体内変化プロセスに大きな影響を与える部分構造を持つ物質は正しく予測できない場合がある。
- 生理的pHで解離する物質や分子量が600以上の物質は正しく予測できない場合がある。
- 金属、有機金属、顔料、染料、過フッ化化合物には使用されるべきではない。

nite BCFBAFヘルプより

生体内分解速度予測結果の信頼性（バリデーション結果）



トレーニングセットによる検証



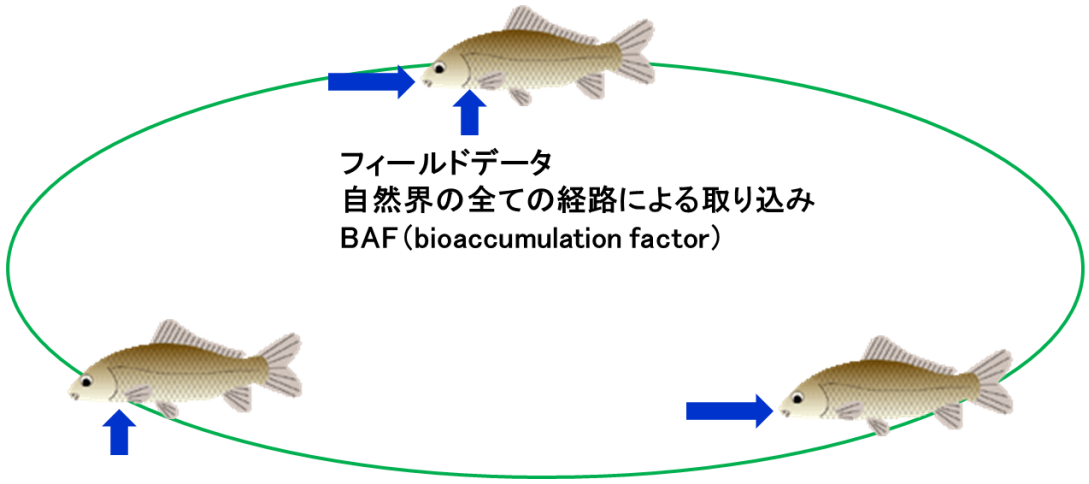
バリデーションセットによる検証

Arnot-Gobasモデル予測方法

1．化学構造からlogKowを推計（またはlogKow（実測値）を入力）
2．魚類についての3つの栄養段階（upper, middle, lower）ごとに、次ページに掲載する式で、 BCF とBAFを予測

濃縮度試験の概要

生物蓄積性に係る知見



フィールドデータ
自然界の全ての経路による取り込み
BAF（bioaccumulation factor）

ラボデータ
えらや体表を通じての直接的取り込み
BCF（bioconcentration factor）
水暴露法
化審法濃縮度試験・OECDTG305

ラボデータ
餌の摂取による間接的取り込み
BMF（biomagnification factor）
餌料投与法
OECDTG305に新たに追加された試験方法
化審法濃縮度試験（平成30年4月1日追加）

Arnot-Gobasモデル予測方法

$$BCF = (1 - L_B) + \left(\frac{k_1 \cdot \phi}{(k_2 + k_E + k_G + k_M)}\right) \quad BAF = (1 - L_B) + \left(\frac{k_1 \cdot \phi + (k_D \cdot \beta \cdot \tau \cdot L_D \cdot Kow)}{(k_2 + k_E + k_G + k_M)}\right)$$

L_B: 生物中脂質含有率 L_D: 食物連鎖最下位生物中脂質含有率	0.107 (upper), 0.0685 (middle), 0.0598 (lower) 0.01
k_1: 取込速度定数 k_D: 食餌経由取込速度定数	$k_1 = {1}/{((0.01 + 1/Kow) \cdot w^{0.4})}$ $k_D = {0.02 \cdot w^{-0.015} \cdot e^{0.06 \cdot T}}/{(5 \cdot 10^{-8} \cdot Kow + 2)}$ w: 体重 (1.53 (upper), 0.184 (middle), 0.096 (lower)kg) T: 温度 (10 ℃)
ϕ: 水中フリー溶存態割合	$\phi = {1}/{(1+\chi_{POC} \cdot 0.35 \cdot Kow \cdot + \chi_{DOC} \cdot 0.08 \cdot Kow)}$ χ_{POC}: 有機炭素粒子態濃度 (5×10^{-7} g/ml) χ_{DOC}: 有機炭素溶存対濃度 (5×10^{-7} g/ml)
k_2: 排泄度定数	$k_2 = {k_1}/{(L_B \cdot Kow)}$
k_E:ふん便排出速度定数	$k_E = 0.125 \cdot k_D$
k_G: 成長速度定数	$k_G = 0.000502 \cdot w^{-0.2}$
k_M: 代謝変換速度定数	実測値又はQSAR予測結果
β:食物網中生物濃縮係数 τ: 食物連鎖最大希釈率 (食物網中生物の代謝能を表す)	62.7 (upper), 30.1 (middle), 16.1(lower) $\tau = (0.0065/(k_M + 0.0065))^{n-1}$ n:栄養相互作用数

Arnot-Gobasモデル予測結果の信頼性（適用範囲）

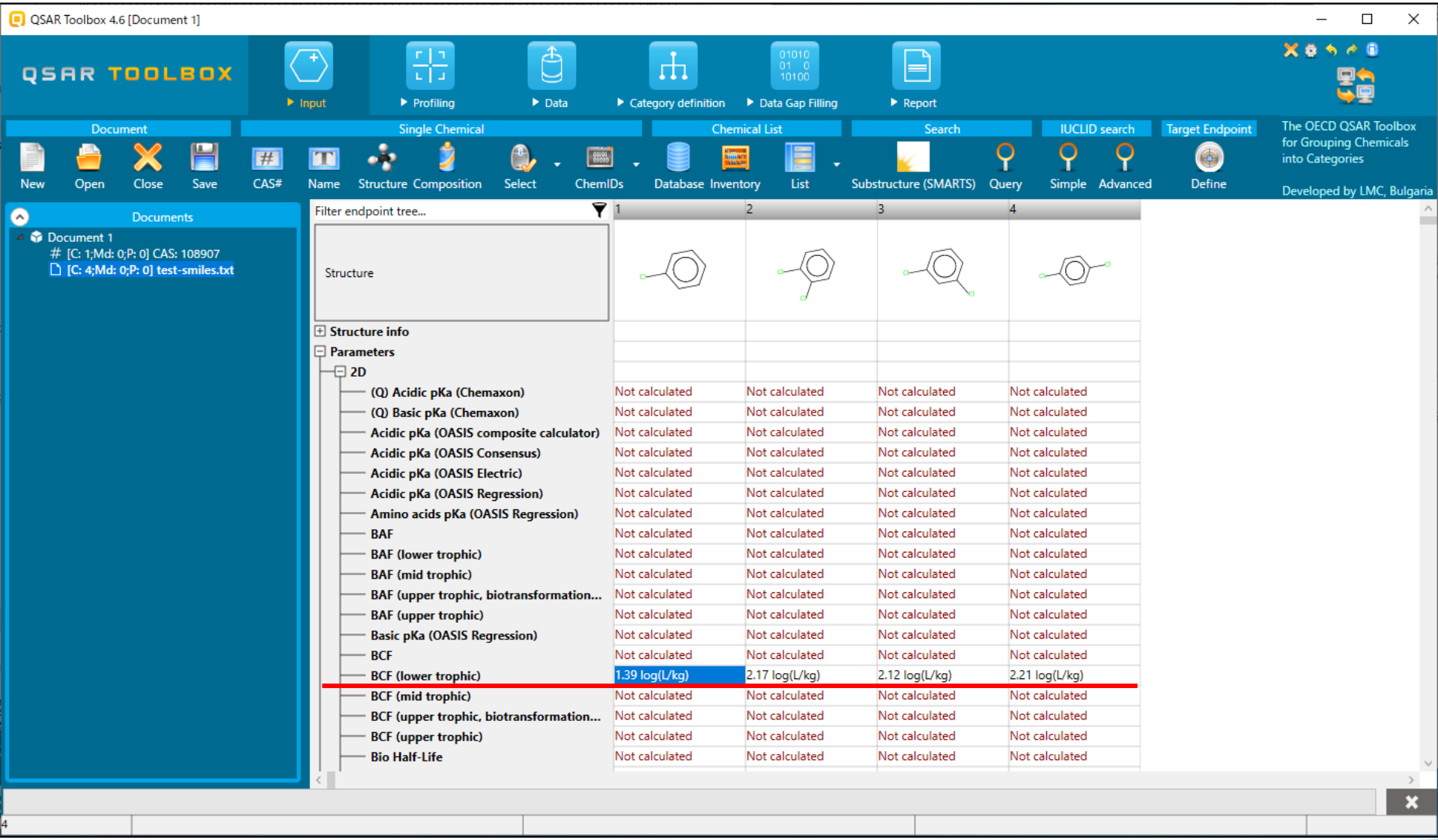
- logKow予測値>9の物質については、不確実性が非常に高い。
- イオンになりやすい物質、顔料と染料又はペルフルオロ化合物に本モデルを適用することは推奨しない。

（考慮事項）

- 甲殻類やプランクトンの代謝量予測モデルがなく考慮していない。これらの種で代謝されやすい物質については、過大評価となっている可能性がある。
- 本モデルでは、生物中脂質含有率「0.107 (upper), 0.0685 (middle), 0.0598 (lower)」を使用しているが、多くのラボでの実測値は0.03-0.05である。このため、回帰式による式よりも高い値を予測する可能性がある。

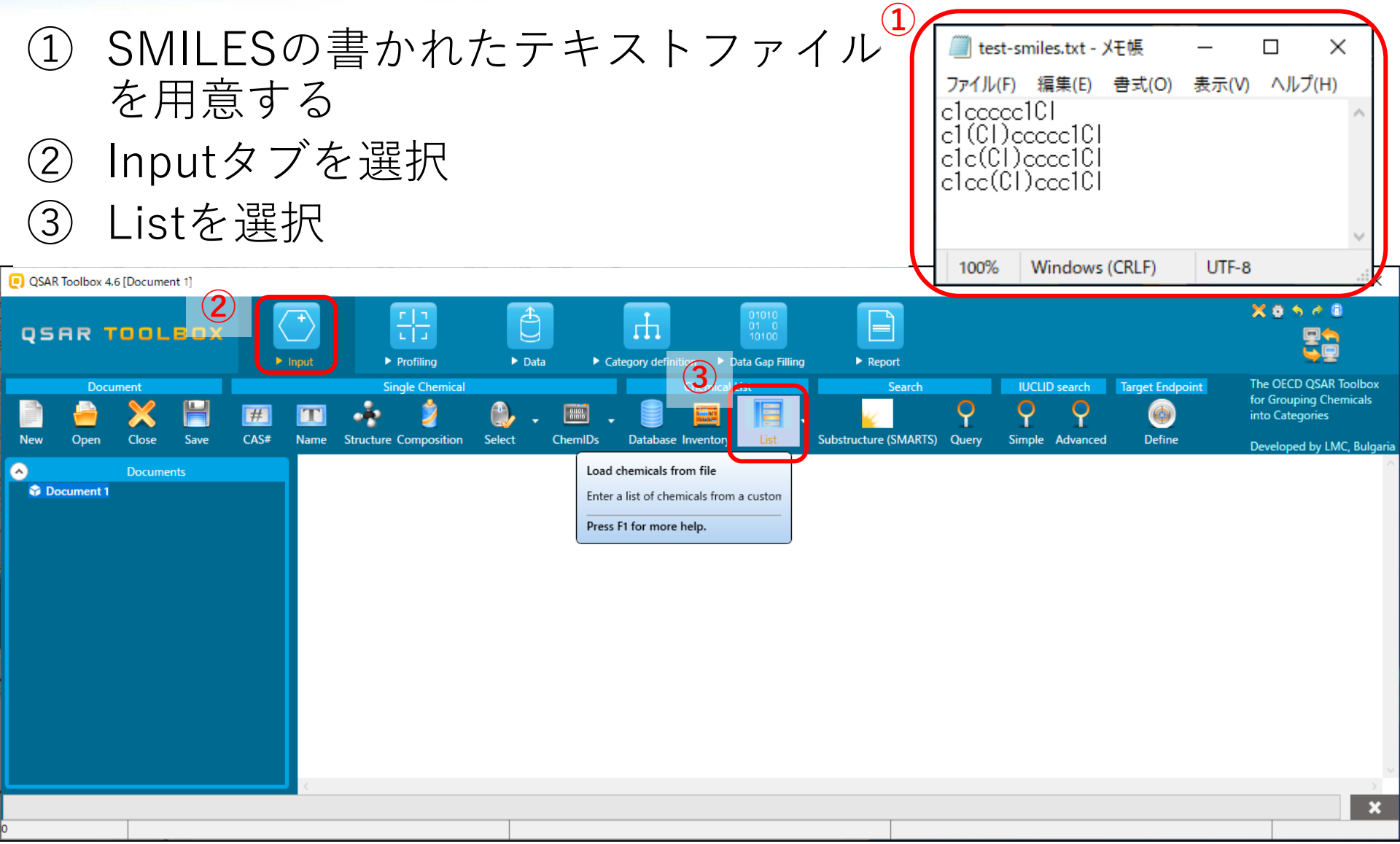
QSAR Toolboxを用いたBCF予測

QSAR Toolboxを用いたBCF予測の方法

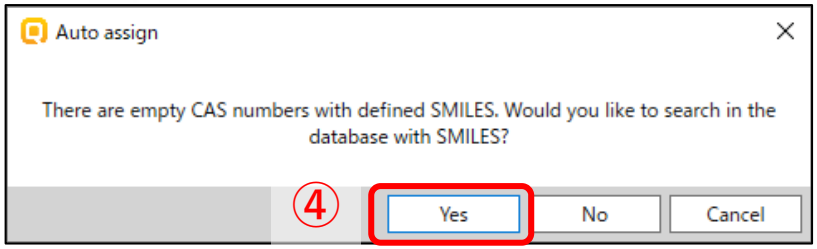


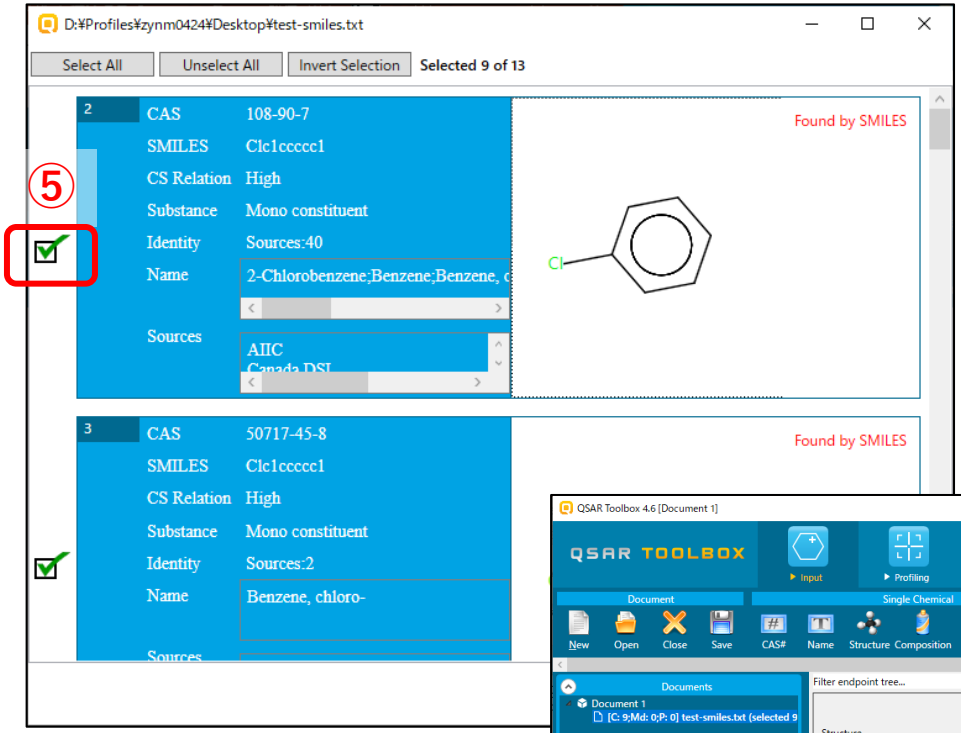
構造リストで入力する①

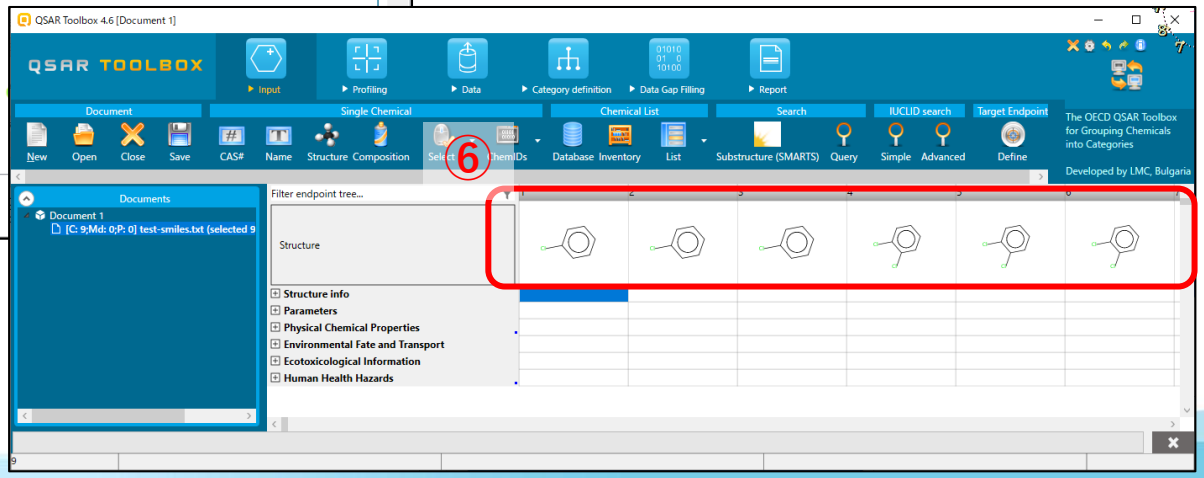
① SMILESの書かれたテキストファイルを用意する
② Inputタブを選択
③ Listを選択



構造式リストで入力する②





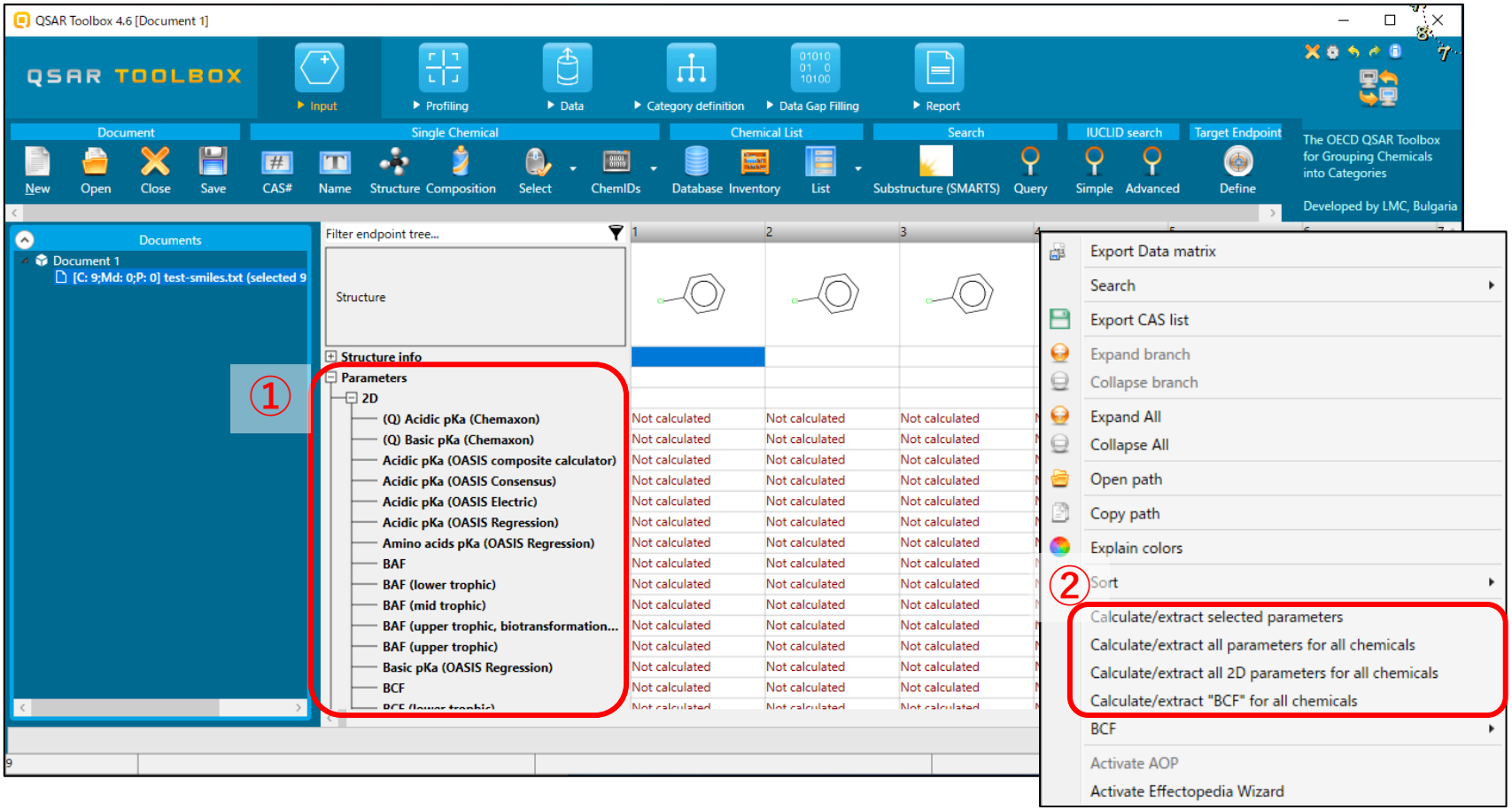


④ CAS番号を検索するか選択（データ検索をする場合はCASが必要）

⑤ CAS番号を検索した場合は、QSAR Toolboxに登録されている物質のうちどのデータを使うかを選択

⑥ 構造リストが入力完了

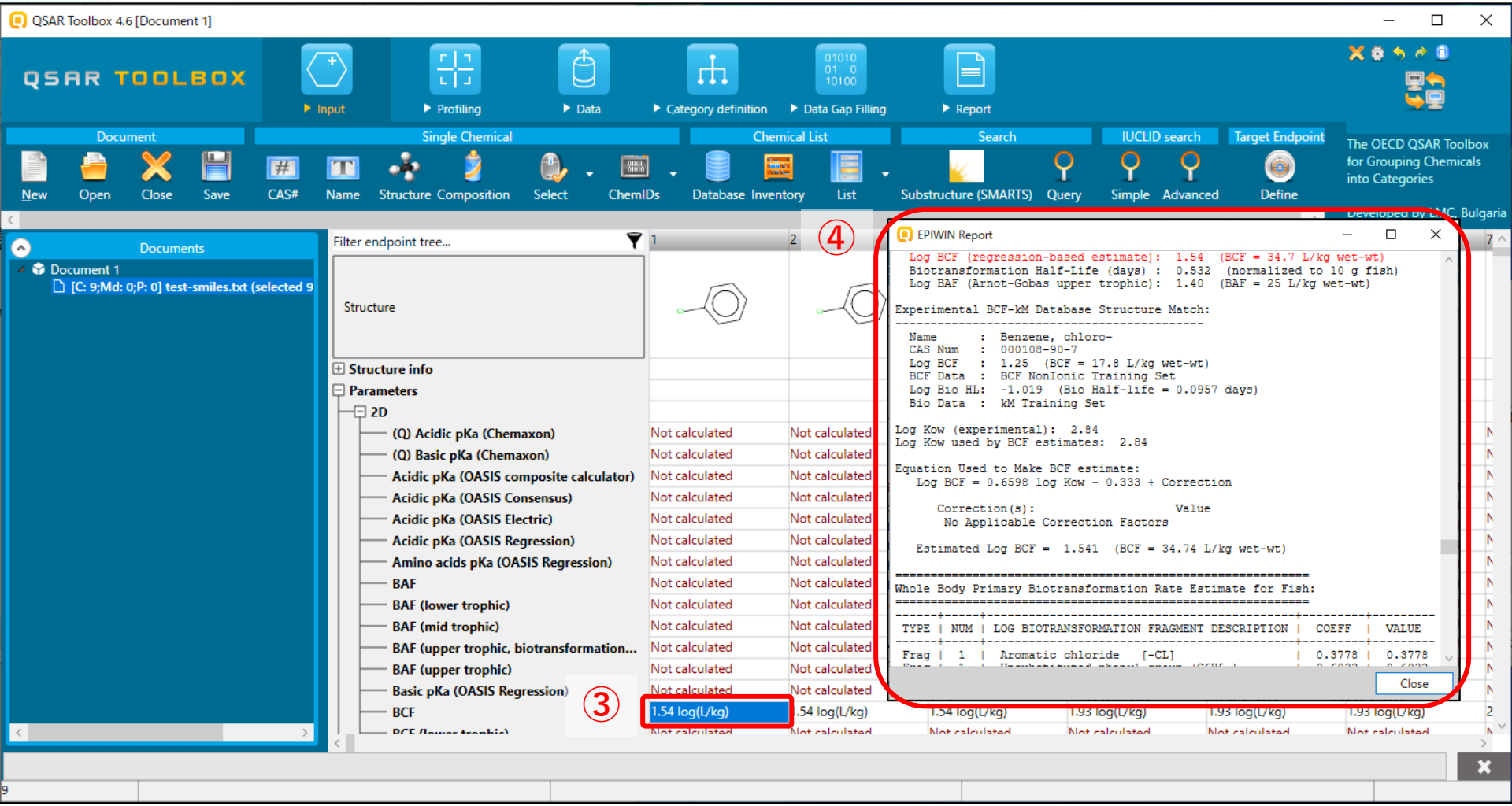
QSAR ToolboxでのBCF計算①



① Parameters→2D（左側の＋記号をクリック）

② 計算したい項目で右クリックして「Calculate / extract」のいずれかを選択

QSAR ToolboxでのBCF計算②



③ BCF予測値をダブルクリック

④ 計算結果の詳細が確認可能

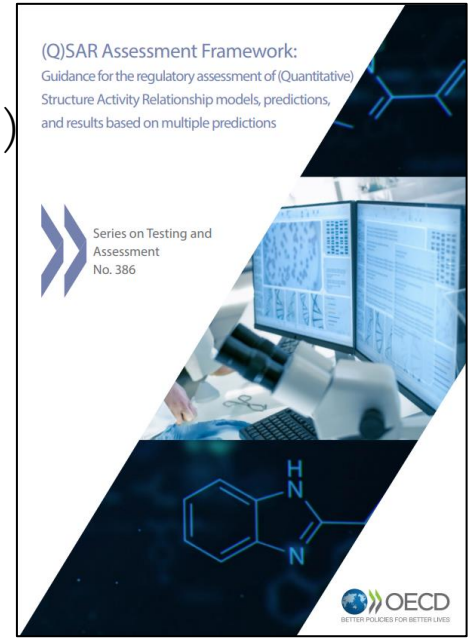
最新動向：
QSAR Assessment Framework

QSAR Assessment Framework

QSAR予測結果を規制のために使用できるか
チェックリストをもとに評価する枠組み

- 基本事項をまとめたガイダンスを策定

  Guidance for the regulatory assessment of (Quantitative) Structure Activity Relationship models, predictions, and results based on multiple predictions



- チェックリストを使用して評価
  - QSARモデルチェックリスト
  - 予測チェックリスト
  - 結果チェックリスト

  （複数モデルの予測を組み合わせて評価する場合）
- NIHS、JaCVAM、NITEもワーキンググループに参画

https://www.oecd.org/chemicalsafety/risk-assessment/qsar-assessment-framework.pdf
https://www.oecd.org/chemicalsafety/risk-assessment/oecd-qsar-toolbox.htm

ご静聴ありがとうございました

- 分解性QSAR：BIOWIN5、6
- 蓄積性QSAR：BCFBAF
- QSAR Toolboxを用いたBCF予測
- 最新動向：QSAR Assessment Framework

ご質問等はこちらへ　hess@nite.go.jp