

# OECD原則に基づく 構造活性相関モデルのバリデーション

生分解性予測システム(CERI モデル)  
； エキスパート予測

The logo for NITE, consisting of the lowercase letters "nite" in a bold, blue, sans-serif font.

2006 年 6 月 23 日  
(独)製品評価技術基盤機構  
化学物質管理センター

## 実施体制

本報告書に記載されているバリデーション結果は、第2回NITE構造活性相関委員会(2004年12月16日)においてレビューが行われた。当委員会の委員を以下に示す。

米澤義堯 (独)産業総合技術研究所化学物質リスク管理研究センター総括研究員 (委員長)

赤松美紀 京都大学大学院農学研究科 助教授

大川秀郎 福山大学生命工学部 教授

茂岡忠義 横浜国立大学大学院環境情報研究院 教授

松尾昌季 摂南大学薬学部 教授

---

### 本報告書に関する連絡先

(独)製品評価技術基盤機構 化学物質管理センター

安全審査課 構造活性相関チーム

櫻谷 (e-mail: sakuratani-yuki@nite.go.jp)

## 目次

要約 .....	1
1. バリデーシヨンの目的.....	2
2. バリデーシヨンに用いた資料.....	2
3. モデルのキャラクタリゼーション .....	2
4. 当機構が実施した予測性の評価 .....	5
5. 評価.....	8
参考文献.....	8
付録 1. バリデーシヨンセットとして用いた既存化学物質 200 物質 .....	10

## 要約

OECD (Q)SAR バリデーション原則に基づき、生分解性予測システム(CERI モデル)が、未点検既存化学物質の中から難分解性の物質をスクリーニングする使用目的に対し受容可能であるか否かを評価した。本モデルは、OECD301C 試験条件下における化学物質の分解度を予測するものであり当該使用目的に適したエンドポイントを有していた。本モデルは、構造情報を判定条件としたフローチャート分類により予測がなされる。分類のための判定条件は、エキスパートの経験則に基づいて作成されている。検討の結果、これらの予測アルゴリズムは、当該使用目的の想定内において科学的妥当性が十分であると判断した。本モデルは一般有機化合物全般に対して使用可能であり当該使用目的に適したものである。1321 物質の試験データを用いた外部バリデーションにおける難分解予測の的中率は 82%、難分解物質の特定率は 84%であり、当該使用目的に対し十分な予測性を有していると判断した。当該使用目的においてはメカニズ的な解釈は必ずしも必要とされないが、本モデルが提供するこれらの情報は当該使用目的に有用であると評価した。これらの結果から、本モデルは当該使用目的に対し受容可能であり、十分効果的に活用できると判断した。

## 1. バリデーシヨンの目的

化学物質によるヒト健康や環境へのリスクを最小化するため、化学物質審査規制法(化審法)が対象とする 2 万種類以上の未点検既存化学物質においては、科学的根拠に基づいた優先順位による合理的かつ効率的な試験の遂行が求められている。構造活相関委員会では、安全性点検事業において優先的に試験を実施すべき物質を選定するため、既存化学物質名簿の第 2 類から第 5 類に該当する年間製造・輸入量 10t 以上(平成 13 年度実績)の未点検既存化学物質(2220 物質)について、生分解性・生物濃縮性を構造活性相関により評価することを実施項目の一つとしている。評価は、以下の 2 段階で行う。

- ① コンピュータソフトウェアを用いたスクリーニング
- ② 専門家の総合判断による個別物質評価

スクリーニングでは、多様な物質の中から難分解性・高蓄積性の可能性の高い物質を特定し、その結果を基に総合評価を実施する物質の選定を行う。総合評価では、より信頼性の高い評価を与えるため、各物質に対し専門家が総合判断を行う。

本文書では、上記スクリーニングの生分解性評価に使用する構造活性相関モデルとして、生分解性予測システムCERIモデルが受容可能かどうか、OECD (Q)SARバリデーシヨン原則<sup>1)</sup>に基づき評価した結果を報告する。

## 2. バリデーシヨンに用いた資料

CERIモデルは、化審法の既存化学物質の生分解性試験データをトレーニングセットとし、旧通産省プロジェクトの下、化学物質評価研究機構(CERI)が開発したソフトウェアであり、インターネット上で、無料で使用することが可能である<sup>2)</sup>。本システムの予測法は、エキスパートフローによるものと SAR式によるものがあるが、両者の予測が異なる場合は、エキスパート予測が優先される。従って本レポートでは、エキスパート予測のみに対して評価を行った。

今回調査に利用した資料は、以下のとおり。

- ソフトウェア公開ホームページ
- プロジェクト報告書<sup>3)</sup>
- 原著論文<sup>4)</sup>

## 3. モデルのキャラクターゼーション

### 3-1. エンドポイント

本モデルは、OECDテストガイドライン 301C法<sup>5)</sup>の試験条件下における化学物質の分解性を予測するものである。OECD301 法は、化学物質と好気性微生物の混合体を添加した水溶液中において、生化学的学的酸素要求量(BOD)が測定され、4 週間後のBOD分解度が 60%以上となることが、良分解性の基準とされている。

本モデルでは、物質を骨格構造と置換基の組み合わせにより、

- (1) 良分解性（OECD301法で28日目のBOD分解度が60%以上の可能性が高い）
- (2) 難分解性（OECD301法で28日目のBOD分解度が60%以上の可能性が低い）
- (3) 予測困難

以上、3つのグループに分類し、生分解性を予測する。

### 3-2. アルゴリズム

本モデルでは、構造情報を判定条件としたフローチャート分類により、予測がなされる。分類のための判定条件は、エキスパートの経験則に基づいて作成されている。図1に示すように、予測対象物質は、まず、骨格構造により10のグループに大別され、次に、骨格構造に付く置換基の種類、位置、数等に基づき、より詳細な分類がなされ、最終的に、難分解、良分解、予測困難のいずれかのグループに分類される。例えば、骨格構造においては、分子量が大きく、環数が多いものほど難分解側に予測されるように判定条件が作成されている。置換基においては、ハロゲンやニトロ基等が、分解性を阻害する因子として認識されており、同一の骨格構造においては、これらが多いものほど難分解側に予測される。一方、水酸基やカルボン酸基等は、生分解性を促進する因子として認識されており、同一の骨格構造においては、これらが多いものほど良分解側に予測される。

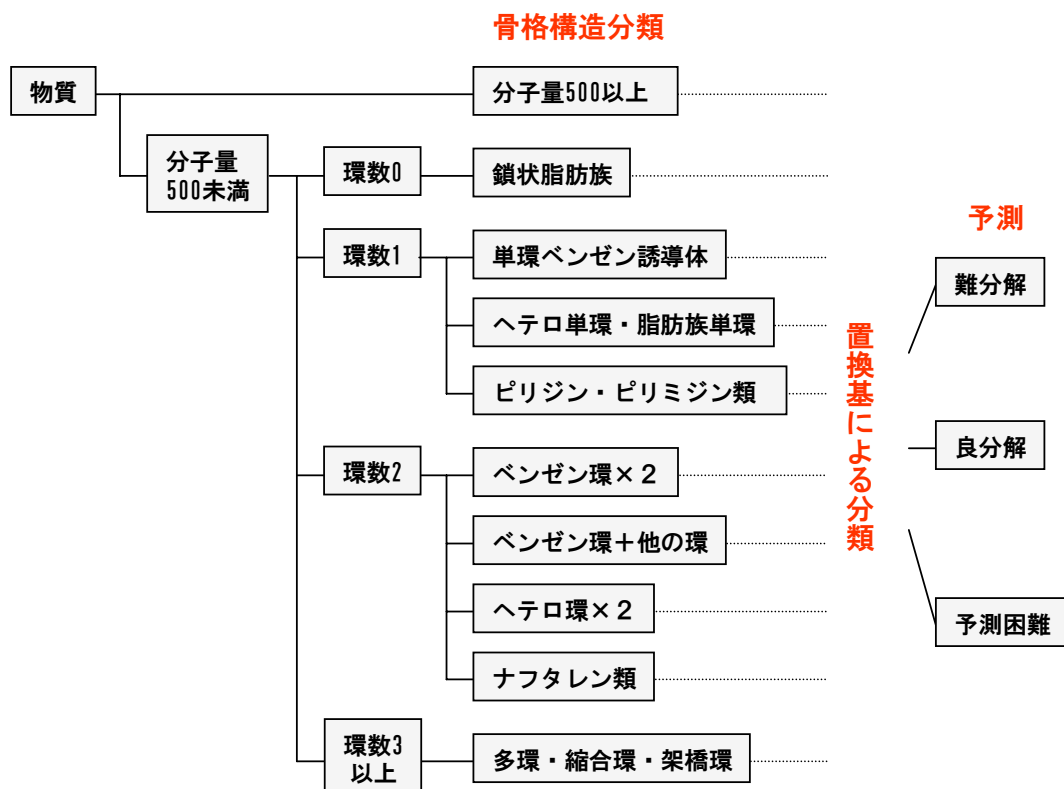


図1. 経験則フローの概要

全フローについては、付録 2 に示す。例えば、クロロベンゼン、フェノールでは図 2 に示すようなフロー経路により予測がなされる。

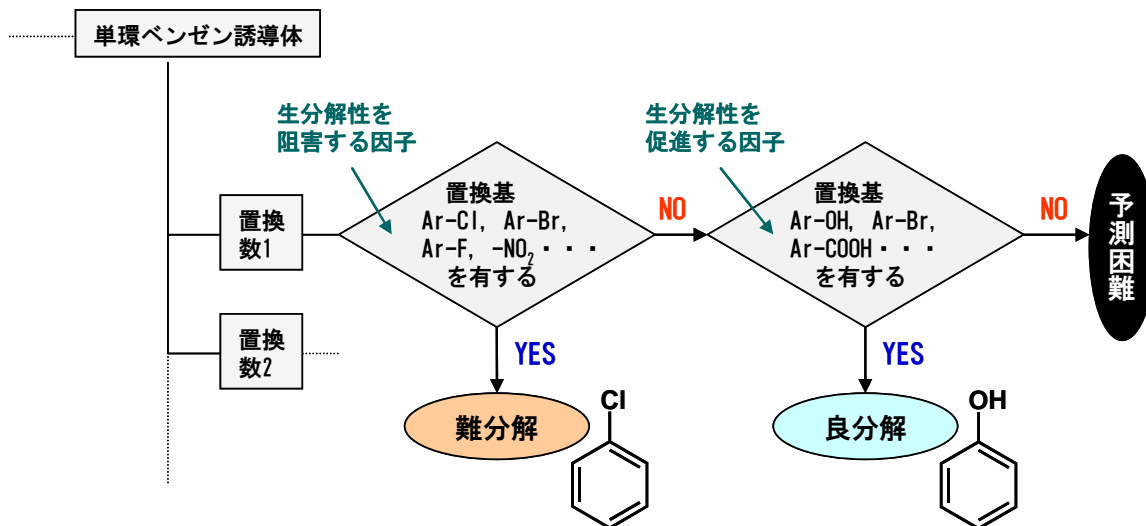


図 2. 経験則フローによるクロロベンゼン、フェノールの予測経路

### 3-3. 適応領域

データ不足のため、経験則の作成が困難な物質群は、“予測困難”のグループへ分類される。また、天然化学物質等、特異な分解パターンを示すものの予測結果は一致しなかったとの説明がなされている。

### 3-4. 適合度、頑健性、予測性

#### 3-4-1. 適合度

トレーニングセットは、化審法既存化学物質安全性点検データ集<sup>6)</sup>に記載されている標準条件で試験された 615 物質。どの物質を選択したのか示されていない。このデータ集には、物質名、化学構造、CAS番号が記載されている。トレーニングセットでは、BOD値は 3 回の測定によるBOD値の平均値が用いられているが、データ集には、最大値と最小値しか記載されていない。

本モデルは、経験則フローによる予測であり、回帰式での内部確認に用いられているような、適合度、頑健性などの統計的な評価はできない。トレーニングセットの 615 物質での難分解的中率が 81%、良分解的中率が 85%、予測困難が 52 物質であると報告されている。難分解的中率、良分解的中率を算出した物質数は記載されていない。

#### 3-4-2. 頑健性

本バージョンは頑健性の評価はなされていない。

### 3-4-3. 予測性

本モデル開発以後に試験がなされた化審法既存化学物質 510 物質を用いて、外部確証がなされている。化審法既存化学物質のデータは公開されているが、このうち、どの物質が選択されたのかは記載されていない。フォールスネガティブとなった一部の物質のみ構造が示されている。外部確証による的中率は、難分解予測で 89% (270/304)、良分解予測で 69% (106/154)、総合で 83% (376/458)と報告されている。

### 3-5. メカニズム

本モデルは、メカニズム的な解釈はなされていない。

## 4. 当機構が実施した予測性の評価

### 4-1. バリデーショナルセット

以下の 2 つのデータセットをバリデーショナルセットとして使用した。

- ① 化審法既存化学物質安全性点検試験データ<sup>6)</sup>。第 2 類から第 5 類に該当する有機低分子化合物(混合物を除く)で、BIOWIN5、BIOWIN6、CATABOL、CERIモデルいずれのトレーニングセットに含まれておらず、OECD301C法(4週間)において試験された 200 物質(難分解 121 物質、良分解 79 物質)の試験データを選択。平均分子量は 226。
- ② 平成 13 年度までに届出られた化審法新規化学物質の試験データ。第 2 類から第 5 類に該当する有機低分子化合物(混合物を除く)で、OECD301C 法(4週間)において試験された 1121 物質(難分解 808 物質、良分解 313 物質)を選択した。平均分子量は 289。

### 4-2. 用語の定義

本文書で使用する用語は以下のように定義した。

**難分解性**……………BOD 分解度が 60%未満のもの

**良分解性**……………BOD 分解度が 60%以上のもの

**難分解予測的中率**……難分解性と予測した物質のうち、実測が難分解性である物質の割合。

**良分解予測的中率**……良分解性と予測した物質のうち、実測が良分解性である物質の割合。

**難分解物質特定率**……バリデーショナルセット全体において実測が難分解性である物質のうち、難分解性と予測された物質の割合。

**良分解物質特定率**……バリデーショナルセット全体において実測が良分解性である物質のうち、良分解性と予測された物質の割合。

### 4-3. 総合的な予測能力

バリデーショナルセットに含まれる各物質の化学構造を CERI モデルに入力し生分解性の予測を行ったところ、既存物質では 174 物質(87%)に対して、新規物質では 989 物質(88%)に対して予測がなさ



れた。付録 1 にバリデーショナルセットのうち既存化学物質の 200 物質について、CAS 番号、名称、化学構造、BOD 分解度実測値、CERIモデル予測値を示す。新規化学物質については公表しない。

#### 4-4. バリデーショナルセット全体に対する難分解性の予測能力

表 1 に各物質カテゴリに対する予測結果の集計を表 2 に的中率と特定率をまとめた。全体として、CERI モデルが難分解性と予測した 953 物質のうち 779 物質(的中率 82%)が実測においても難分解性であり、トレーニングセットに含まれる実測が難分解性の 929 物質のうち 779 物質(特定率 84%)を難分解性と予測した。

表 1. 各物質カテゴリに対する CERI モデルによる予測結果の集計

カテゴリ	予測難分解		予測良分解		予測なし		合計	
	実測 難分解	実測 良分解	実測 難分解	実測 良分解	実測 難分解	実測 良分解	実測 難分解	実測 良分解
全物質	779	174	58	152	92	66	929	392
既存化学物質	84	22	22	46	15	11	121	79
新規化学物質	695	152	36	106	77	55	808	313
2類	89	54	44	107	27	31	160	192
3類	156	43	7	38	31	29	194	110
4類	234	23	1	0	18	3	253	26
5類	300	54	6	7	16	3	322	64
MW<100	20	6	10	19	2	1	32	26
100<MW≤200	208	92	25	78	34	32	267	202
200<MW≤300	228	40	12	40	26	20	266	100
300<MW≤400	133	21	8	12	12	5	153	38
400<MW≤500	90	8	2	3	8	4	100	15
500<MW≤600	36	3	1	0	4	2	41	5
MW>600	64	4	0	0	6	2	70	6
エステル基 あり	130	74	15	81	16	28	161	183
エステル基 なし	649	100	43	71	76	38	768	209

表 2. 各物質カテゴリに対する BIOWIN5 の予測精度

物質カテゴリ	的中率 (%)		特定率 (%)	
	難分解 予測	良分解 予測	難分解 物質	良分解 物質
全物質	82	72	84	39
既存化学物質	79	68	69	58
新規化学物質	82	75	86	34
2類	62	71	56	56
3類	78	84	80	35
4類	91	0	92	0
5類	85	54	93	11
MW<100	77	66	63	73
100<MW≤200	69	76	78	39
200<MW≤300	85	77	86	40
300<MW≤400	86	60	87	32
400<MW≤500	92	60	90	20
500<MW≤600	92	0	88	0
MW>600	94	-	91	0
エステル基 あり	64	84	81	44
エステル基 なし	87	62	85	34

図 3 に、分解度予測値に対する実測難分解物質数及び実測良分解物質数のヒストグラムを示す。

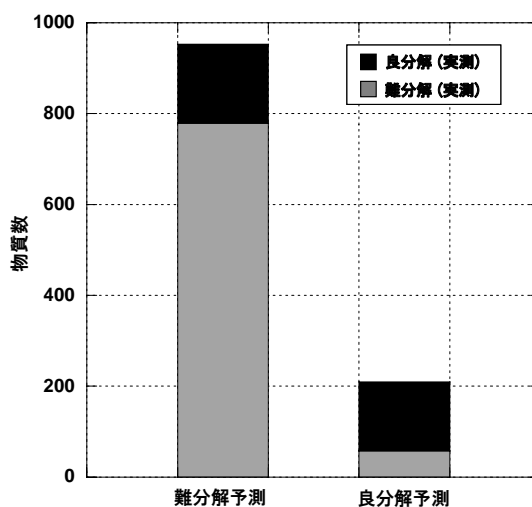


図 3. バリデーションセットにおける分解度予測に対する実測試験結果のヒストグラム

#### 4-5. バリデーションセット全体に対する良分解性の予測能力

良分解性の予測能力は、難分解性の予測能力と比較して低く、CERIモデルが良分解性と予測した 210 物質のうち 152 物質(的中率 72%)が実測においても良分解性であり、バリデーションセットに含まれる実測が良分解性の 392 物質のうち 152 物質(特定率 39%)を良分解性と予測した。

#### 4-6. 各カテゴリに対する難分解性の予測能力

表 2 に示したように、各類においては、2 類に対する予測性が最も低く(的中率は 62%、特定率は 56%)であった。次いで 3 類に対する予測性が低く(的中率は 78%、特定率は 80%)であった。4 類・5 類については的中率・特定率が共に 90%程度となった。

分子量については、低いほど予測性が低く、分子量 100 未満の物質に対する的中率は 77%、特定率は 63%、分子量 100 以上 200 未満の物質に対する的中率は 69%、特定率は 78%であった。分子量が 200 以上のものに対しては、的中率・特定率共に 80%を超えた。

CERI モデルは、エステル基の分解性を高めに見積もる傾向があり、エステル基を有する物質の的中率は 66%であった。

#### 4-7. 各カテゴリに対する良分解性の予測能力

表 2 に示したように、2 類に対しては的中率が 71%で特定率が 56%、3類に対しては的中率が 84%であったが特定率は 35%と低かった。5 類に対する的中率は低く 54%程度で、特定率も 11%と低かった。4 類に関しては共に 0%という結果に終わった。

分子量では的中率が全体的に 60~70%程度と大差なく、良分解性物質特定率においても明確な分

子量依存性はみられなかった。

## 5. 評価

### 5-1. エンドポイント

CERI モデルでは、OECD301C 法による試験条件下における生分解性を予測するとの記述がなされている。CERI モデルのトレーニングセットは、OECD301C 法によって行われた試験データであり、この結果が適切に分類されるように、経験則フローの構築がなされているため、エンドポイントに対する関連付けはなされており、当該目的に適したエンドポイントを有していると判断する。

### 5-2. アルゴリズム

本モデルは、経験則フローにより生分解性の予測が行われる。その全フローは、システム中には表示されないが、公開資料には示されており、使用者が予測の再現をできるものと判断する。また、このフローをレビューした結果、本モデルの科学的な妥当性は、当該使用目的に対し十分なものであると判断する。

### 5-3. 適応領域

データ不足のため、予測が難しい場合は、“予測困難”のグループへ分類される。経験則フローをレビューした結果、本モデルは、当該使用目的に適した適応領域を有していると判断する。

### 5-4. 適合度、頑健性、予測性の評価

本モデルは、経験則フローによる予測であり、適合度、頑健性の評価は不可能であるが、外部バリデーションによる予測性が実証されれば、当該使用目的には差し支えないものと判断する。また、外部バリデーションの結果から、当該使用目的に対し、十分な予測性を有しているものと判断する。

### 5-5. メカニズム

本モデルは、メカニズム的な解釈はなされていないが、当該使用目的においては差し支えないものと判断する。

### 5-6. 結論

以上により、本モデルは、当該使用目的に対し、受容可能であると判断する。

## 参考文献

1) OECD. (2004). The Report from the Expert Group on (Quantitative) Structure-Activity Relationships [(Q)SARs] on the Principles for the Validation of (Q)SARs. OECD Series on

Testing and Assessment Number 49. OECD, Paris.

2) <http://qsar.cerij.or.jp/cgi-bin/QSAR/index.cgi?e>

3) 1. 平成 10 年度通商産業省工業技術院委託調査化学物質総合安全手法開発簡良試験方法の開発:生分性予測システムの開発報告書、2. 平成 13 年度 NEDO 既存化学物質安全性点検事業の加速化プロジェクト報告書

4) Hiromatsu, K.; Yakabe, Y.; Katagiri, K.; Nishihara, T., Prediction for biodegradability of chemicals by empirical flowchart. *Chemosphere* 2000, 41, 1749-1754.

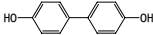
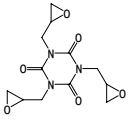
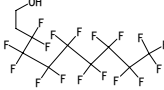

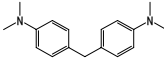
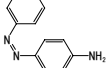
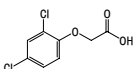
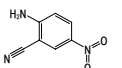
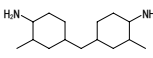
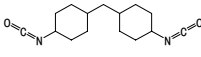
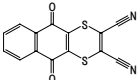
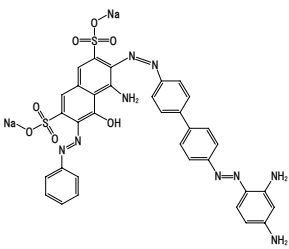
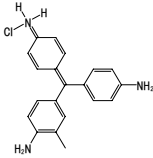
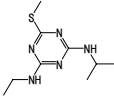
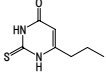
5) OECD. (1982). The Organization for Economic Co-operation and Development Guide Line for Testing of Chemicals. OECD, Paris, Section 301C.

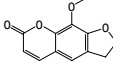
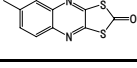


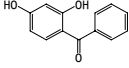
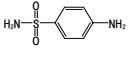
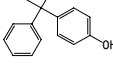
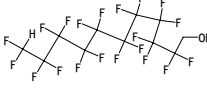
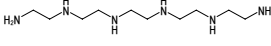
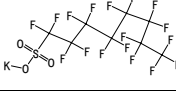
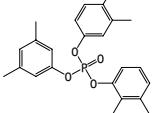
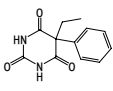
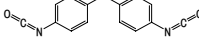
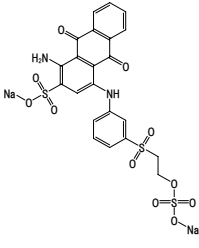

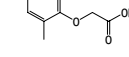
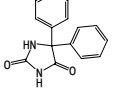
6) Chemicals Inspection and Testing Institute. (1992). Biodegradation and Bioaccumulation Data of Existing Chemicals Based on the CSCL Japan. Japan Chemical Industry Ecology-Toxicology & Information Center, Tokyo.


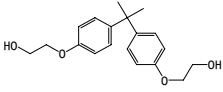
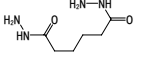
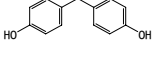
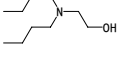
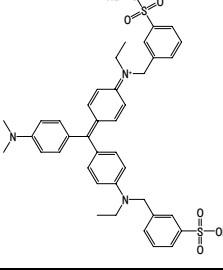
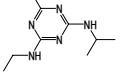
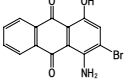

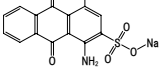

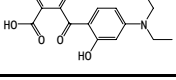
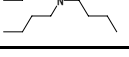

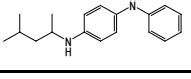

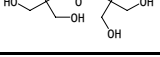

6) [http://www.safe.nite.go.jp/english/kizon/KIZON\\_start\\_hazkizon.html](http://www.safe.nite.go.jp/english/kizon/KIZON_start_hazkizon.html)

付録1. バリデーションセットとして用いた既存化学物質200物質

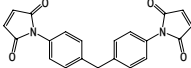

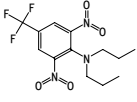
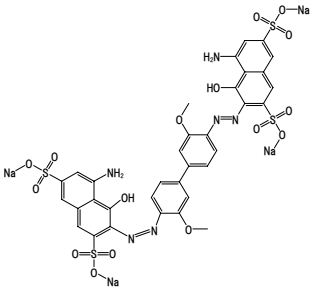
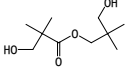

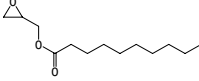
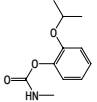
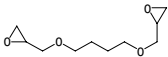


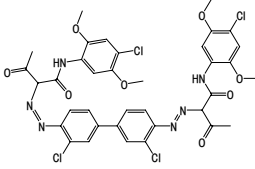
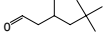
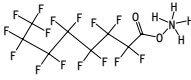


No	CAS_No.	物質名	化学構造	BOD実測値 (%)	予測
1	556-61-6	Methyl Isothiocyanate	<chem>SC#N</chem>	-20	難分解
2	3785-34-0	ethylene_bromoacetate	<chem>BrCC(=O)OCCOC(=O)CBr</chem>	-11	難分解
3	26172-55-4	5-Chloro-2-Methyl-4-Isothiazolin-3-One	<chem>Cc1c(Cl)sc(=O)n1</chem>	-4	難分解
4	12122-67-7	zineb	<chem>C1CN(S(=O)N1)S(=O)N</chem>	0	
5	4098-71-9	3-Isocyanatomethyl-3,5,5-trimethylcyclohexyl_isocyanate	<chem>CC1(C)C(C)C(C)C(C1)C(=O)N=C</chem>	0	難分解
6	57-13-6	Urea	<chem>NC(=O)N</chem>	0	良分解
7	122-01-0	4-Chlorobenzoylchloride	<chem>ClC(=O)c1ccc(Cl)cc1</chem>	0	難分解
8	75-64-9	tert-Butylamine	<chem>CC(C)(C)N</chem>	0	難分解
9	540-84-1	2,2,4-Trimethylpentane	<chem>CC(C)(C)CC(C)C</chem>	0	難分解
10	75-08-1	Ethyl_mercaptan	<chem>CCS</chem>	0	難分解
11	52-51-7	2-Bromo-2-nitropropane-1,3-diol	<chem>BrC(O)(O)C(=O)N</chem>	0	難分解
12	7299-99-2	hexanoic_acid_2-ethyl-2,2-bis_(2-ethyl-1-oxohexyl)oxy_methyl-1,3-propanediyl_ester	<chem>CCCCCCCC(=O)OCC(OCC(=O)CCCC)OC(=O)CCCC</chem>	0	難分解
13	83-41-0	1,2-Dimethyl-3-nitrobenzene	<chem>Cc1c(C)cccc1[N+](=O)[O-]</chem>	0	難分解
14	5329-12-4	2,4,6-Trichlorophenylhydrazine	<chem>Nc1c(Cl)c(Cl)c(Cl)cc1NN</chem>	0	難分解
15	4286-23-1	Isopropenylphenol	<chem>CC(=C)c1ccc(O)cc1</chem>	0	予測困難
16	88-26-6	2, 6-Di-t-butyl-4-hydroxymethylphenol	<chem>CC(C)(C)c1c(O)ccc(CO)c1C(C)(C)C</chem>	0	難分解
17	615-58-7	2,4-Dibromophenol	<chem>Oc1cc(Br)cc(Br)c1</chem>	0	難分解
18	117-08-8	Tetrachlorophthalic anhydride	<chem>O=C1OC(=O)c2c(Cl)c(Cl)c(Cl)c2Cl1</chem>	0	難分解
19	2840-28-0	3-Amino-4-chlorobenzoic acid	<chem>Nc1cc(Cl)ccc1C(=O)O</chem>	0	難分解
20	2078-54-8	2,6-Diisopropylphenol	<chem>CC(C)c1c(O)ccc(C(C)C)c1</chem>	0	難分解

No	CAS_No.	物質名	化学構造	BOD実測値 (%)	予測
21	92-88-6	4,4'-Dihydroxy-diphenyl		0	難分解
22	2451-62-9	1,3,5-Tris(2,3-epoxypropyl)isocyanuric acid		0	難分解
23	678-39-7	2-(Perfluorooctyl)ethanol		0	難分解
24	87-62-7	2,6-Dimethylaniline		0	難分解
25	101-61-1	4,4'-Methylene bis(N,N'-dimethylaniline)		0	難分解
26	60-09-3	4-(Phenylazo)aniline		0	難分解
27	94-75-7	2,4-Dichlorophenoxyacetic acid		0	難分解
28	17420-30-3	2-Cyano-4-nitroaniline		0	難分解
29	6864-37-5	2,2'-Dimethyl-4,4'-methylenebis(cyclohexylamine)		0	難分解
30	5124-30-1	Methylenebis(1,4-cyclohexylene) diisocyanate		0	難分解
31	3347-22-6	2,3-Dicyano-1,4-dithianthraquinone (Dithianon)		0	難分解
32	1937-37-7	4-amino-3-[[[4'-[(2,4-diaminophenyl)azo][1,1'-biphenyl]-4-yl]azo]-5-hydroxy-6-(phenylazo)-2,7-Naphthalenedisulfonic acid, disodium salt		0	難分解
33	632-99-5	4-((aminophenyl)(4-imino-2,5-cyclohexadien-1-ylidene)methyl)-2-methyl-benzenamine, monohydrochloride (C.I. basic violet 14 magenta)		0	難分解
34	834-12-8	2-Ethylamino-4-isopropylamino-6-methylthio-s-triazine (Ametryne)		0	難分解
35	51-52-5	2,3-dihydro-6-propyl-2-thioxo-4(1H)-Pyrimidinone (Propylthiouracil)		0	難分解

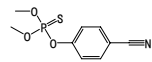
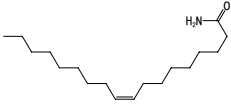
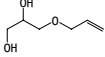
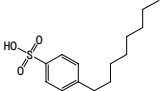



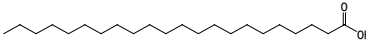
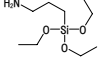
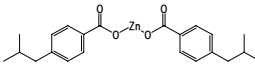
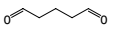
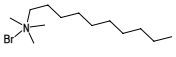
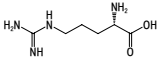

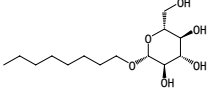
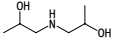
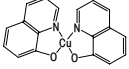



No	CAS_No.	物質名	化学構造	BOD実測値 (%)	予測
36	298-81-7	9-methoxy-7H-furo(3,2-g)benzopyran-7-one		0	難分解
37	2439-01-2	Quinomethionate 6-Methyl-1,3-dithiolo[4,5-b]quinoxalin-2-one		0	難分解
38	10222-01-2	2-Cyano-2,2-dibromoacetamide		0	難分解
39	2409-55-4	phenol, 2-(1,1-dimethylethyl)-4-methyl-		0	難分解
40	131-56-6	methanone, (2,4-dihydroxyphenyl)phenyl-		0	難分解
41	63-74-1	p-Aminosulfonamide		0	難分解
42	599-64-4	4-(1-Methyl-1-phenylethyl)phenol		0	難分解
43	307-70-0	1,1,11-Trihydroperfluoro_undecanol		0	難分解
44	4067-16-7	Pentaethylenehexamine		0	難分解
45	2795-39-3	Perfluorooctane sulfonic acid, potassium salt		0	難分解
46	25155-23-1	tri(dimethylphenyl)phosphate		0	良分解
47	50-06-6	5-ethyl-5-phenyl-2,4,6-(1H,3H,5H)pyrimidinetrione		0	難分解
48	101-68-8	4,4'-Diphenylmethane diisocyanate		1	難分解
49	2580-78-1	Reactive_blue-19		1	難分解
50	99-88-7	4-Isopropylaniline		1	予測困難
51	94-74-6	(4-Chloro-2-methylphenoxy)acetic acid		1	難分解
52	57-41-0	5,5-Diphenyl-2,4-imidazolidinedione (phenytoin)		1	難分解

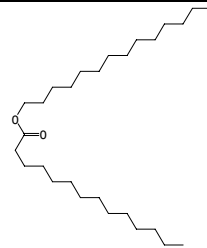

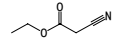
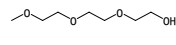

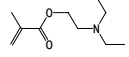

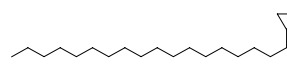
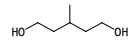
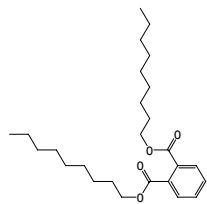
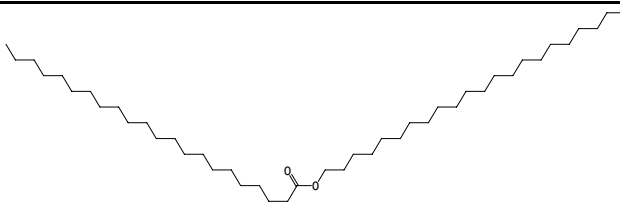
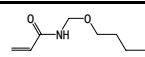
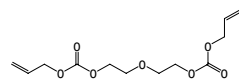
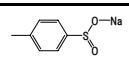
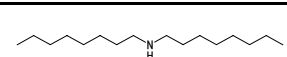

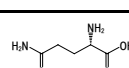
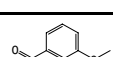
No	CAS_No.	物質名	化学構造	BOD実測値 (%)	予測
53	598-09-4	$\beta$ -Methylepichlorohydrin		1	難分解
54	901-44-0	ethanol, 2,2'-(1-methylethylidene)bis(4,1-phenyleneoxy)_bis-		1	難分解
55	1071-93-8	Adipic dihydrazide		1	難分解
56	620-92-8	4,4'-dihydroxydiphenylmethane		1	難分解
57	102-81-8	2-(Dibutylamino)ethanol		1	予測困難
58	1694-09-3	benzenemethanaminium, N-(4-((4-(dimethylamino)phenyl)(4-ethyl((3-sulfophenyl)methyl)amino)phenyl)methylene)-2,5-cyclohexadien-1-ylidene)-N-ethyl-3-sulfo-, hydroxide, inner salt, sodium salt		1	難分解
59	1912-24-9	2-chloro-4-ethylamino-6-isopropylamino-1,3,5-triazine (Atrazine)		1	難分解
60	116-82-5	9,10-anthracenedione, 1-amino-2-bromo-4-hydroxy-		1	難分解
61	691-37-2	4-Methyl-1-pentene		1	良分解
62	6258-06-6	1-Amino-4-bromoanthraquinone-2-sulfonic acid sodium		1	難分解
63	62-55-5	Thioacetamide		1	難分解
64	5809-23-4	benzoic acid, 2-(4-(diethylamino)-2-hydroxybenzoyl)-		1	難分解
65	102-82-9	Tri-n-butylamine		2	難分解
66	115-70-8	2-Amino-2-ethyl-1,3-propanediol		2	良分解
67	793-24-8	N-(1,3-Dimethylbutyl)-N'-phenylparaphenylenediamine		2	難分解
68	108-99-6	2-methylpyridine		3	良分解
69	126-58-9	Dipentaerythritol		3	良分解
70	106-87-6	1,2-Epoxy-4-(epoxyethyl)cyclohexane		3	難分解





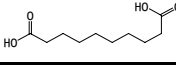

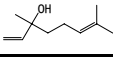
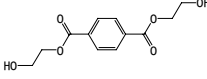
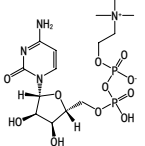

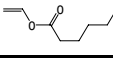
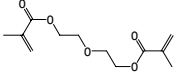
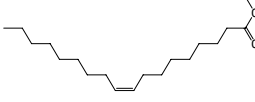


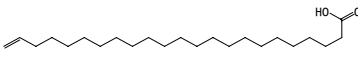



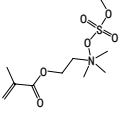

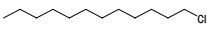

No	CAS_No.	物質名	化学構造	BOD実測値 (%)	予測
71	13676-54-5	1,1'-(Methylenedi-4,1-phenylene)bismaleimide		3	難分解
72	533-74-4	2-Thioxo-3,5-dimethyltetrahydro-2H-1,3,5-thiadiazine		4	難分解
73	1582-09-8	2,6-Dinitro-N,N-dipropyl-4-trifluoromethyl-aniline (Trifluralin)		4	難分解
74	2429-74-5	3,3'-[(3,3'-dimethoxy[1,1'-biphenyl]-4,4'-diyl)bis(azo)]bis[5-amino-4-hydroxy-2,7-Naphthalenedisulfonic acid, tetrasodium salt		4	難分解
75	1115-20-4	2,2-Dimethyl-3-hydroxypropyl 2,2-dimethyl-3-hydroxypropionate		5	良分解
76	335-67-1	Perfluorooctanoic acid		5	難分解
77	26761-45-5	neodecanoic acid, 2,3-epoxypropyl ester		5	良分解
78	114-26-1	2-Isopropoxyphenyl-N-methylcarbamate		5	予測困難
79	2425-79-8	1,4-Butanediol diglycidyl ether		5	難分解
80	144-54-7	N-Methyldithiocarbamic acid		6	
81	7580-85-0	2-tert-butoxyethanol		6	難分解
82	5567-15-7	Pigment Yellow 83		6	難分解
83	5435-64-3	3,5,5-Trimethylhexanal		7	難分解
84	3825-26-1	Ammonium pentadecafluorooctanoate		7	
85	89-98-5	Chlorobenzaldehyde		8	難分解
86	2219-82-1	2-(1,1-Dimethylethyl)-6-methyl-phenol		9	難分解

No	CAS_No.	物質名	化学構造	BOD実測値 (%)	予測
87	18375-66-1	n-octadecyl-d-gluconamide		11	予測困難
88	40220-08-4	2-Propenoic acid, (2,4,6-trioxo-1,3,5-triazine-1,3,5-(2H,4H,6H)-triylo)tri-2,1-eth		12	難分解
89	627-82-7	Diglycerin		13	予測困難
90	629-54-9	Hexadecanamide		13	良分解
91	822-06-0	Hexamethylene diisocyanate		14	難分解
92	60-24-2	2-Mercaptoethanol		19	難分解
93	6375-47-9	3-Amino-4-methoxyacetanilide		22	難分解
94	55107-14-7	Methyl pivaloylacetate		23	難分解
95	79-39-0	Methacrylamide		24	良分解
96	87-68-3	hexachlorobutadiene		24	難分解
97	124-68-5	2-Amino-2-methylpropanol		25	良分解
98	27605-76-1	Probenazole		26	難分解
99	110-78-1	n-Propyl isocyanate		28	難分解
100	140-53-4	(p-Chlorophenyl)acetonitrile		31	難分解
101	7659-86-1	2-Ethylhexylthioglycolate		32	難分解
102	924-42-5	2-propenamide, n-(hydroxymethyl)-		32	良分解
103	1752-30-3	Acetone thiosemicarbazone		33	難分解
104	120-93-4	Ethyleneurea		36	難分解
105	156-87-6	3-Amino-1-propanol		37	良分解
106	3061-75-4	Docosanamide		40	良分解
107	107-11-9	Allylamie		41	良分解
108	124-19-6	n-Nonyl Aldehyde		44	良分解

No	CAS_No.	物質名	化学構造	BOD実測値 (%)	予測
109	2636-26-2	O-(4-cyanophenyl) O,O-dimethyl phosphorothioate (Cyanophos)		45	予測困難
110	301-02-0	Oleamide		46	良分解
111	123-34-2	3-Allyloxy-1,2-propanediol		47	良分解
112	25321-43-1	p-n-Octylbenzene_sulfonic_acid		47	予測困難
113	109-64-8	1,3-Dibromopropane		48	難分解
114	66-25-1	hexanal		50	良分解
115	108-23-6	Isopropyl chloroformate		51	難分解
116	112-85-6	Docosanoic acid		52	良分解
117	919-30-2	3-Aminopropyl-triethoxysilane		54	良分解
118	38861-88-0	Zinc_4-isobutylbenzoate		58	
119	111-30-8	Glutaraldehyde		59	良分解
120	2082-84-0	n-Decyltrimethylammonium bromide		59	
121	74-79-3	L-Arginine		60	予測困難
122	107-68-6	N-Methyltaurine		62	良分解
123	29836-26-8	1-O-Octyl-β-D-glucopyranoside		63	難分解
124	110-97-4	di-2-Propanolamine		64	予測困難
125	10380-28-6	Copper 8-hydroxyquinolate (Copper-oxinate)		64	
126	78-97-7	Acetaldehydecyanohydri ne		66	予測困難
127	69-65-8	D-Mannitol		67	予測困難
128	3006-82-4	tert-butyl=2-ethylperoxyhexate		67	難分解

No	CAS_No.	物質名	化学構造	BOD実測値 (%)	予測
129	3234-85-3	Myristyl_myristate		67	良分解
130	109-83-1	2-Methylaminoethanol		68	良分解
131	105-56-6	Ethyl cyanoacetate		68	良分解
132	112-35-6	Triethylene glycol monomethyl ether		69	良分解
133	106-94-5	1-Bromopropane		70	良分解
134	105-16-8	2-Diethylaminoethyl methacrylate		70	良分解
135	586-62-9	1,4-Terpinolene		72	難分解
136	19780-16-6	1,2-Epoxyeicosane		73	良分解
137	4457-71-0	3-Methyl-1,5-pentanediol		74	良分解
138	28553-12-0	Bis(7-metyloctyl)=phthalate		74	良分解
139	17671-27-1	Behenyl_behenate		75	難分解
140	1852-16-0	2-propenamide, n-(butoxymethyl)-		76	難分解
141	142-22-3	Allyl Diglycol Carbonate		76	良分解
142	824-79-3	Benzenesulfonic acid, 4-methyl-, sodium salt		76	予測困難
143	1120-48-5	Dialkyl (or alkenyl, C 8-24) complex amine Di-n-octylamine		77	良分解
144	598-78-7	2-Chloropropionic acid		77	難分解
145	56-85-9	L-Glutamine		77	良分解
146	591-31-1	m-Methoxybenzaldehyde		78	良分解

No	CAS_No.	物質名	化学構造	BOD実測値 (%)	予測
147	105-45-3	Methyl_acetoacetate		78	良分解
148	7620-77-1	Lithium 12-hydroxystearate		78	
149	112-80-1	Oleic_acid		78	良分解
150	111-82-0	Methyl_dodecanoate		78	良分解
151	111-17-1	3,3'-Thiodipropionic acid		78	難分解
152	101-43-9	Cyclohexyl methacrylate		78	難分解
153	6104-30-9	urea_n,n''-(2-methylpropylidene)bis-		78	難分解
154	299-28-5	Calcium_gluconate		79	
155	102-01-2	Acetoacetanilide		79	良分解
156	108-32-7	2-Oxo-4-methyl-1,3-dioxolan		79	難分解
157	110-93-0	6-Methyl-5-hepten-2-one		79	良分解
158	122-03-2	Cuminaldehyde		81	良分解
159	2881-83-6	ethyl p-anisoylacetate		81	予測困難
160	89-32-7	1, 2, 4, 5-Benzenetetracarboxylic acid anhydride		82	難分解
161	143-28-2	9-Octadecen-1-ol		82	良分解
162	822-16-2	Sodium_stearate		83	良分解
163	7360-38-5	propane-1,2,3-triyl 2-ethylhexanoate		85	予測困難
164	556-52-5	2,3-Epoxy-1-propanol		85	良分解
165	1338-41-6	Sorbitan_monooctadecanoate		88	難分解
166	97-88-1	n-Butyl_methacrylate		88	良分解

No	CAS_No.	物質名	化学構造	BOD実測値 (%)	予測
167	84-66-2	Diethyl_phthalate		88	良分解
168	688-84-6	2-Ethylhexyl_methacrylate		88	良分解
169	111-20-6	1,8-Octanedicarboxylic acid		89	良分解
170	623-33-6	Ethyl_glycinate_hydrochloride		89	
171	78-70-6	3,7-Dimethyl-1,6-octadien-3-ol		90	良分解
172	959-26-2	1,4-benzenedicarboxylic acid, bis(2-hydroxyethyl) ester		90	良分解
173	987-78-0	Cytidine-5'-diphosphocholine		91	難分解
174	105-67-9	2,4-dimethylphenol		91	難分解
175	3050-69-9	Vinyl_n-hexanoate		91	良分解
176	2358-84-1	Diethylene glycol dimethacrylate		91	良分解
177	112-62-9	Oleic acid methyl ester		91	良分解
178	107-10-8	n-Propylamine		92	良分解
179	112-82-3	1-bromohexadecane		92	良分解
180	65119-95-1	22-Tricosenoic acid		93	良分解
181	107-83-5	2-Methylpentane		93	良分解
182	105-38-4	Vinyl propionate		93	良分解
183	123-08-0	p-Hydroxybenzaldehyde		94	良分解
184	6891-44-7	[2-(Methacryloyloxy)ethyl]trimethylammonium methyl sulfate		94	
185	21368-68-3	DL-Camphor		94	難分解
186	112-52-7	1-Chlorododecane		95	良分解
187	1120-71-4	1,2-Oxathiolane 2,2-dioxide (1,3-Propane Sultone)		95	難分解

No	CAS_No.	物質名	化学構造	BOD実測値 (%)	予測
188	107-19-7	2-Propyn-1-ol		95	難分解
189	120-51-4	Benzyl_benzoate		96	難分解
190	584-03-2	1,2-Butanediol		96	良分解
191	5896-54-8	Sodium_1-pentadecanesulfonate		96	難分解
192	104-87-0	Tolylaldehyde		97	良分解
193	56-89-3	L-Cystine		98	難分解
194	767-00-0	Paraoxybenzonitrile		98	良分解
195	84-69-5	Diisobutyl Phthalate		98	良分解
196	5726-19-2	2-Methylcyclohexyl acetate		99	難分解
197	25415-84-3	2-Ethylhexyl=butylate		100	良分解
198	112-50-5	Triethylene glycol monoethyl ether		103	良分解
199	75-21-8	Ethylene_oxide		107	難分解
200	106-88-7	1,2-Epoxybutane		109	良分解