

# IUCLID 4 ガイダンス文書の付録 3

## データセットの作成・インポート・ エクスポート・マージ

バージョン：2003年12月5日

作成依頼者 (Prepared on behalf of the)

**Organisation for Economic Co-operation and Development**  
(OECD ; 経済協力開発機構)

Environment, Health and Safety Division (環境・保健・安全性部門)

2 rue Andre Pascal

75775 Paris Cedex 16, France

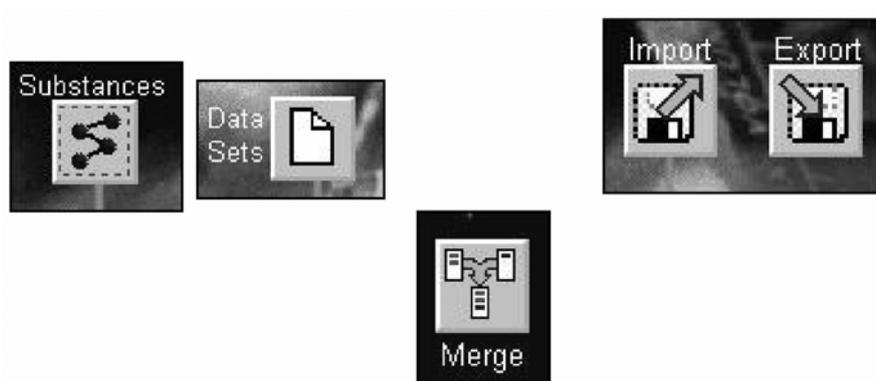
作成者 (by)

**Fraunhofer Institute of Toxicology and Experimental Medicine (Fraunhofer ITEM)**

**Department of Chemical Risk Assessment (化学物質リスク評価部門)**

Nikolai-Fuchs-Str. 1

30625 Hannover, Germany



## プロジェクト概要

文書の表題 :	IUCLID 4 ガイダンス文書の付録 3 : データセットの作成・インポート・エクスポート・マージ
バージョン :	最終ドラフト (OECD による校正用)
日付 :	2003 年 12 月 5 日
作成者 :	Gerhard Rosner (Fraunhofer ITEM 社顧問) (電子メール : rosner@toxconsult.de)
契約機関 :	Fraunhofer Institute of Toxicology and Experimental Medicine (Fraunhofer ITEM) Nikolai-Fuchs-Str. 1 30625 Hannover, Germany Dpt. of Chemical Risk Assessment (化学物質リスク評価部門) (責任者 : Inge Mangelsdorf)
依頼者 (スポンサー) :	Organisation for Economic Co-Operation and Development (OECD : 経済協力開発機構) - Environment, Health and Safety Division (環境・保健・安全性部門) (責任者 : Bob Diderich, 電子メール : bob.diderich@oecd.org.)

### 注 :

本ガイダンス文書は通常、オリジナルのレイアウトと画像を保持するため、**Portable Data Format (pdf 形式)** で提供されている。本ファイルを表示させるには、**Version 5.0 以上の Acrobat(R) Reader** が必要である。**Acrobat(R) Reader** はいつでも **Adobe 社ホームページ (<http://www.adobe.com>)** からダウンロードしてインストールすることができる。

## 序文

本マニュアルは、2000年12月14日付け「IUCLID 3.1」ガイダンス文書の改訂版として作成された「IUCLID 4」ガイダンス文書の一部である。

本文書は、「IUCLID 4」ソフトウェアのユーザーによる IUCLID データセットの管理（具体的には、新規データセットの作成、データセットのインポートとエクスポート、データセットのマージ）を支援することを目的として作成された。

### 注：

本ガイダンス文書は、IUCLID ソフトウェアに添付されているテクニカルマニュアルの代替となるものではない。必要に応じて、テクニカルマニュアルも参照することが望ましい。

本マニュアルは、多数の IUCLID ユーザーの要望に応え、データセットに関する詳細なステップバイステップ・ガイドを提供することに重点を置いたものとなっている。

## 目次

1	新規データセットの作成.....	5
1.1	ユーザーが使用しているIUCLIDインストール環境における、化学物質の識別情報作成 (Substance Administration [物質管理]) .....	6
1.2	化学物質データセットの作成 (Data Set Administration [データセット管理]) .....	10
2	データセットのインポートとエクスポート.....	14
2.1	データセットのインポート.....	17
2.2	データセットのエクスポート.....	21
3	データセットのマージ.....	23
3.1	シナリオ 1 : 2つのデータセット、異なる企業/機関の名称、同一の物質.....	25
3.1.1	別の化学物質データセットへの化学物質データセットのマージ.....	25
3.1.2	選択した記録 (データ) のみのマージ.....	28
3.2	シナリオ 2 : 2つのデータセット、異なる作成日、同一の企業/機関、同一の物質 .....	29
3.3	シナリオ 3 : 2つのデータセット、同一の企業/機関、同一の作成日、同一の物質 .....	29
3.3.1	IUCLIDの機能を利用した、データセットのコピーの作成.....	29
3.3.2	エクスポートファイルの編集によるデータセットのコピーの作成.....	30
3.4	シナリオ 4 : 2つのデータセット、異なる物質.....	31

## 1 新規データセットの作成

IUCLID 4 ガイダンス文書や「Getting Started (基本的な使用法)」マニュアル<sup>\*)</sup>でも説明されているとおり、IUCLIDでは下記の2種類のデータセットを使用することができる。

- 「化学物質データセット」
- 「カテゴリー/テンプレートデータセット」

通常、特定の物質に関するデータを入力する場合は、あらかじめその物質のデータセット (化学物質データセット) を作成しておく必要がある。カテゴリー/テンプレートデータセットが必要となるのは、該当する項で説明するとおり、特殊な場合に限られる。

IUCLID は下記の2つの種類を区別することを念頭においておく必要がある。

- 「化学物質 (またはカテゴリー/テンプレート) の識別情報作成」: これは、データセットの識別情報を入力 (=作成) するうえで不可欠な前提条件である。この操作に該当する IUCLID の用語は「Substance Administration (物質管理)」である (カテゴリー/テンプレートの場合は「Category/Template Administration (カテゴリー/テンプレート管理)」である)。
- 「化学物質データセット (またはカテゴリーデータセット) の識別情報作成」: この操作に該当する IUCLID の用語は、「Data Set Administration (データセット管理)」(もしくは、「Category/Template Data Set Administration (カテゴリー/テンプレートデータセット管理)」) である。

上記の機能は、IUCLID ウィンドウの下記の場所から利用することができる。

- **スプラッシュスクリーン (起動画面)**: 目的のアイコンをクリックする (図 1 の点線で囲った円内を参照) ;
- **メニューバー**: [File: Create/Delete Data Sets (ファイル: データセットの作成/削除)] をクリックし、目的のタスクを選択する
- **ツールバー**: 「Substance Administration (物質管理)」ボタンまたは「Data Set Administration (データセット管理)」ボタンをクリックする (注: カテゴリー機能はツールバーからは利用できない)。

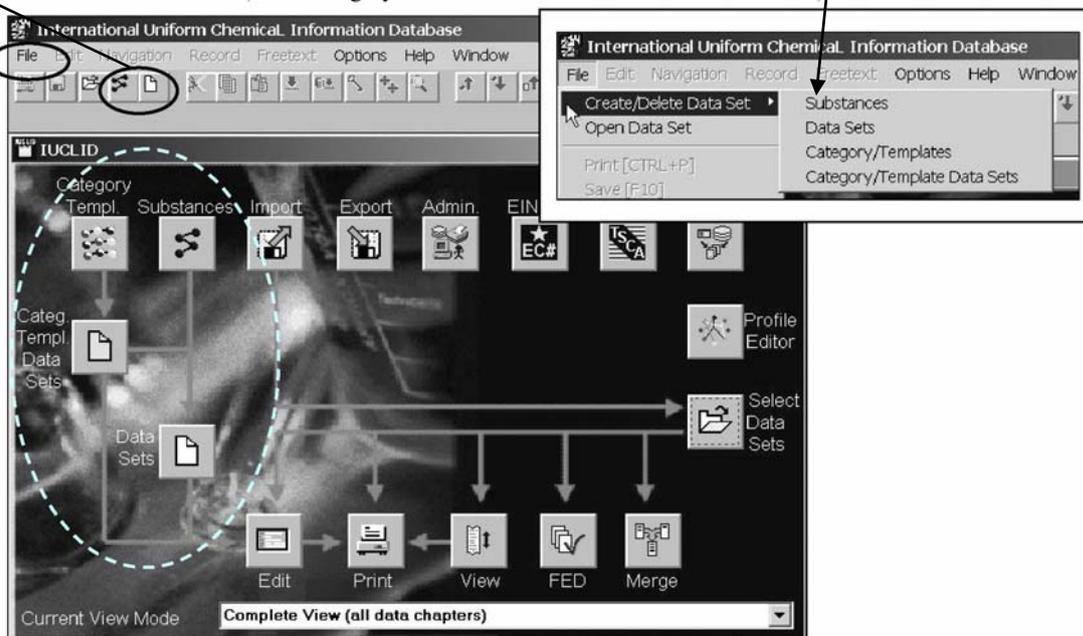


図 1. 新規データセットの作成：  
IUCLID 4 のスプラッシュスクリーン、メニューバー、ツールバーにおける機能

<sup>\*)</sup> Technidata : IUCLID 4.0 - Getting Started (基本的な使用法 ; IUCLIDソフトウェアの「Help (ヘルプ)」メニューから利用できるマニュアル)

### 1.1 ユーザーが使用している IUCLID インストール環境における、化学物質の識別情報作成 (Substance Administration [物質管理])

本項では、ユーザーが使用している IUCLID インストール環境において新規の化学物質の識別情報を作成する方法について説明する。新規の化学物質の識別情報作成は、化学物質データセットを作成するうえで不可欠な前提条件である。

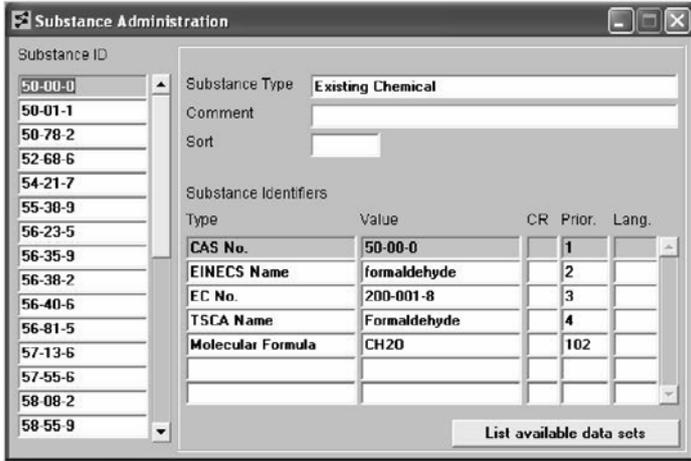
この作業を開始する前に、下記の点に留意する必要がある。

- IUCLID のデータベースでは、1 つの物質に対して 1 つの識別情報の記録しか挿入できない。したがって、当該物質の識別情報がすでに作成済みの場合は、この項を飛ばして「Data Set Administration (データセット管理)」(1.2 項を参照)に進むことができる。「Data Set Administration (データセット管理)」では、当該物質に対して複数のデータセットを作成することができる。
- 識別情報を作成する物質は、物質の定義に準じて、特定の化学物質でも、規制上の理由から個別の物質として扱われる混合物でもよい。
- 識別子には CAS 番号を用いることが望ましい (CAS 番号が使用できる場合)。
- CAS 番号が利用できない場合や適用できない場合は、一般名、製品名、組成などの他の識別子を第 1 識別子(primary identifier)として入力することが望ましい (例:『sample substance IU (サンプル物質 IU)』)。
- **警告:** 物質の識別情報が、CAS 番号のような明確な登録番号を用いて作成されていない場合、不注意によりその物質の識別情報を 2 回以上作成してしまう恐れがある。IUCLID では、たとえ物質の名称を若干異なる名称で入力しても (たとえば、『RESIN XY』の代わりに『Resin XY』や『Resin-XY』と入力しても)、『Substance ID already exists (その物質の ID はすでに存在する)』といった警告メッセージが表示されることはない。  
ヒント: 考え得る別のスペルや大文字を用い、物質の (トランケートされた) 名称についてクエリを数回実行することにより、「Substance ID (物質の識別情報)」の表を確認する必要がある。たとえば、(i) 『%XY%』、(ii) 『%xy%』、(iii) 『%%esin%』、(iv) 『%RESIN%』、(v) 『%Resin%』などについて検索する (下記のステップ 2 を参照)。
- データセットのヘッダーには、第 1 から第 3 までの識別子しか表示されない。
- 他の目的で追加の化学物質データセットが作成される可能性があるため、データセットに関連する具体的な情報の入力フィールドとしては「Substance Administration (物質管理)」の「Comment (コメント)」フィールドは適さない。代替として、「Comment field of the data set identification part (データセットの識別情報の領域(part)のコメントフィールド)」を使用すること (1.2 項を参照)。
- 化学物質カテゴリーの**構成物質**や**複雑な混合物**に該当する物質の場合は、本ガイダンス文書の付録 1『化学物質カテゴリー』または付録 2『混合物』を参照のこと。

## クイック・ステップ・ガイド

- |       |   |   |
|-------|---|---|
| 1.    |  | 「Substance Administration (物質管理)」を選択する  |
| 2.    |  | 目的の物質について「Substance ID (物質の識別情報)」の表を確認する。<br>当該物質についてすでに識別情報が作成されている場合は、物質の識別子が適切に設定されているかどうかを確認する。 |
| 3.~4. |  | 目的の物質に関する新規の記録を挿入し、新規の物質を入力するか EINECS / TSCA リストから選択する  |
| 5.~6. | 物質の識別子を入力して保存する   | 物質に関する情報と識別子を入力し、新規の物質について作成した記録を保存する<br>変更を保存する (新規の物質の記録が作成される)                                   |

## 詳細なステップバイステップ・ガイド

- |    |  |   |
|----|--|---|
| 1. | <p>[File: Create/Delete Data Sets: Substances (ファイル:データセットの作成/削除:化学物質)] を選択するか、<br/>「Substance Administr. (物質管理)」アイコンをクリックする</p>  | <p>結果: 「Substance Administration (物質管理)」ダイアログボックスが開き、利用可能な (すなわち、識別情報作成済みの) すべての物質が、対応する識別子とともに一覧表示される</p>    |
| 2. | <p>「Substance ID (物質の識別情報)」の表を確認する</p>    | <p>識別情報の表において、目的の物質の識別情報がすでに作成済みである場合には、ステップ 5 に進んで物質の識別子が適切に設定されているかどうかを確認する。</p> <p>ヒント: 上記の識別情報の表に膨大な数の入力がある場合は、クエリーを実行して目的の物質を取得する (「Query (クエリー)」アイコンまたは &lt;F4&gt;/&lt;F5&gt; キー)。たとえば、&lt;F4&gt;2437%&lt;F5&gt; と入力することにより、『2437』で始まる ID を検索することができる。</p> <p>このクエリーは大文字と小文字を区別するので注意が必要である。『C18%』と入力した場合と、『c18%』と入力した場合とでは、クエリー実行後の結果が異なる。</p> |

3. 新規の記録を挿入する



物質を選択または入力する

目的とする物質が識別情報の表に存在しない場合は、下記を実施する。

- マウスポインタが「Substance ID (物質の識別情報)」の表に位置していることを確認する。
- <F6>キーを押すか、「Insert (挿入)」アイコンをクリックして、新規の記録を挿入する。

ポップアップダイアログボックスの指示にしたがって、下記の操作を行う。

**オプション 1 :** CAS 番号が存在する物質の場合、EINECS/TSCA インベントリーに関して『Yes』を選択する。

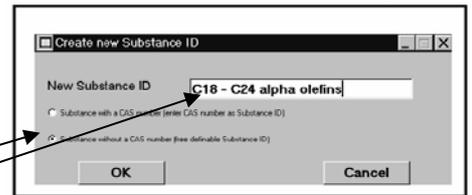
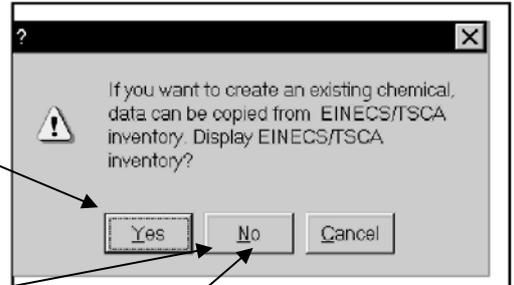
次に、目的とする物質についてクエリーを実行し、ピックリストからその物質を選択する。

**オプション 2 :** CAS 番号が存在するが、EINECS/TSCA インベントリーには登録されていない物質である場合は、下記を実施する。

- (i) ダイアログボックスで『No』を選択する
- (ii) 「Create new Substance ID (新規の物質の識別情報の作成)」ダイアログボックスがポップアップするので、CAS 番号を入力する

**オプション 3 :** CAS 番号が存在しない物質の場合は、下記を実施する。

- (i) ダイアログボックスで『No』を選択する
- (ii) 「Create new Substance ID (新規の物質の識別情報の作成)」ダイアログにおいて、『Substance without a CAS no. (CAS 番号がない物質)』にチェックを入れ、物質に関する適切な識別情報を入力する。



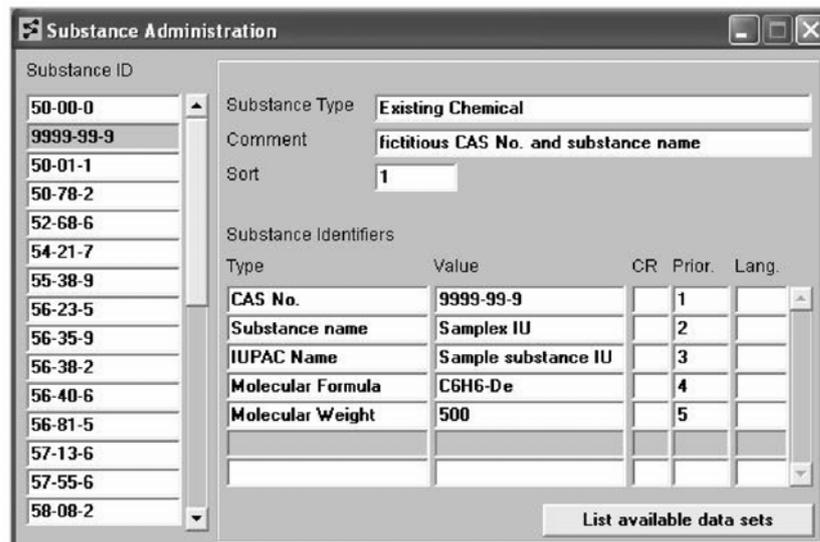
4. 物質情報を入力する

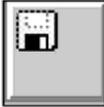
「Substance Type (物質の種類)」: ピックリストから選択する (例: 『Existing Chemicals (既存化学物質)』)

「Comment (コメント)」: 任意 (データセットのヘッダーに表示される)

「Sort (ソート)」: 任意 (たとえば、『1』と入力することにより、その物質の識別情報の入力内容を、識別情報の表の最初に表示させることができる)

「Substance Identifiers (物質の識別子)」: ステップ 5 を参照



5. 物質の識別子を入力する	<p>ステップ 3 において識別子が自動的に表示されなかった場合には、ステップ 4 のスクリーンショットのように、「Type (種類)」ピックリストから関連する物質の識別子をできるだけ多く選択し、それぞれのフィールドに識別子を入力する。</p> <p>ヒント: もっとも重要な 3 つの識別子がデータセットのヘッダーに確実に表示されるよう、優先順位の番号を「Prior. (優先順位)」の欄で設定/変更することができる (上記のスクリーンショットを参照)。しかし、エクスポートファイルを他の IUCLID インストール環境にインポートした場合には、当該物質の識別情報がインポート先ですでに作成済みであれば、エクスポート側で行った物質の識別子の設定は移行されない。</p> <p>ヒント: 「Substance Identifiers (物質の識別子)」の表がすべて埋まっている場合は、追加の入力欄を挿入することができる (&lt;F6&gt;キーまたは  )。</p> <p>注: 「CR (相互参照)」の欄と 「Lang. (言語)」の欄は通常必要ない。</p>
6. 	変更を保存する (新規の物質の記録が作成される)

## 1.2 化学物質データセットの作成 (Data Set Administration [データセット管理])

本項では、新規の化学物質データセットを作成する方法について説明する。

「Data Set Administration (データセット管理)」を立ち上げる前に、下記の点に留意することが望ましい。

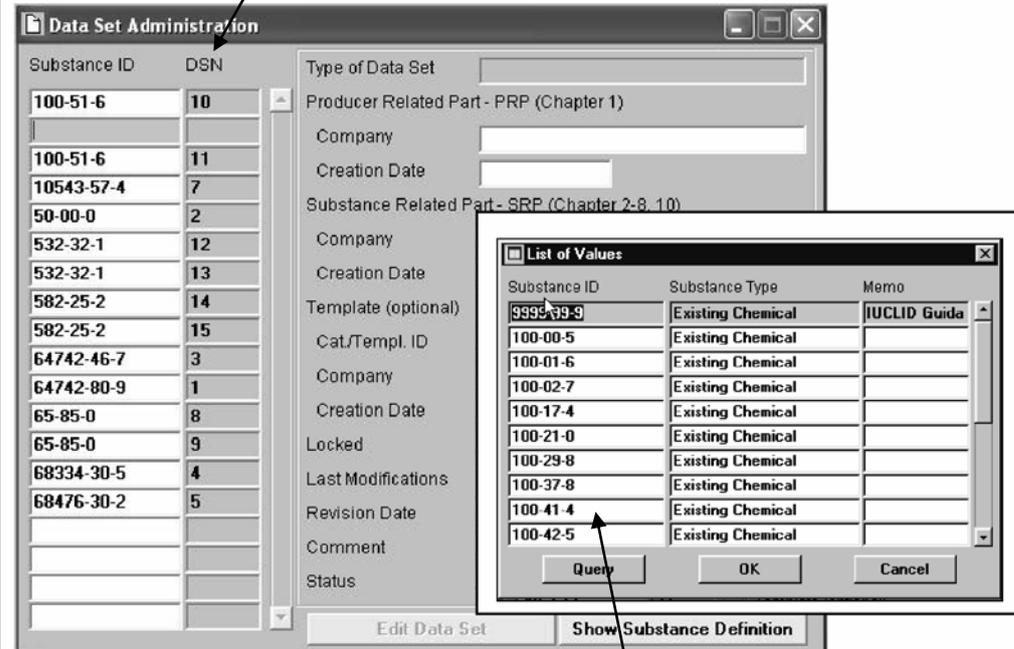
- 「Substance Administration (物質管理)」において該当する物質名が識別情報作成済みの場合に限り、化学物質データセットを作成することができる (1.1 項を参照)。
- 化学物質データセットは、下記によって一義的に定義される。
  - (i) 物質の識別情報 (ID)
  - (ii) 所有者(Owner) (企業/機関の名称) ; ソフトウェアの配布者から PIN (=個人識別番号) を取得していなければならない
  - (iii) 作成日
- IUCLID は、すべてのサブチャプターが編集可能ないわゆる「調和された (harmonized)」データセットと、他のデータセットのチャプター2~8 および 10 を参照する「参照された (referenced)」データセットを区別する点に注意を要する。IUCLID 4 ガイダンス文書も参照のこと。
- 異なる作成日を入力することにより、同一の物質識別情報および所有者に対して複数のデータセットを作成することが可能である。

### クイック・ステップ・ガイド

1.		「Data Set Administration (データセット管理)」を選択する
2.		「Substance ID (物質の識別情報)」の表に、新規データセットに関する新規の記録を挿入し、ピックリストから物質を選択する
3a. または 3b.		データセットの識別情報の領域で、データセットの識別子およびコメントを入力する オプション a) 「 <b>Harmonized Data Set (調和されたデータセット)</b> 」 オプション b) 「 <b>Referenced Data Set (参照されたデータセット)</b> 」
4.		変更を保存する (新規データセットの記録が作成される)

詳細なステップバイステップ・ガイド

1. [File: Create/Delete Data Sets: Data Sets (ファイル: データセットの作成/削除: データセット)] を選択するか、「Data Set Admin. (データセット管理)」アイコンをクリックする



結果: 「Data Set Administration (データセット管理)」ダイアログボックスが開き、利用可能な(すなわち、作成済みの)すべてのデータセットが表示される。この表に表示されるデータセット番号(DSN)は、自動的に作成される固有の番号である点に注意すること。

Substance ID	DSN
100-51-6	10
100-51-6	11
10543-57-4	7
50-00-0	2
532-32-1	12
532-32-1	13
582-25-2	14
582-25-2	15
64742-46-7	3
64742-80-9	1
65-85-0	8
65-85-0	9
68334-30-5	4
68476-30-2	5

Substance ID	Substance Type	Memo
9999-99-9	Existing Chemical	IUCLID Guida
100-00-5	Existing Chemical	
100-01-6	Existing Chemical	
100-02-7	Existing Chemical	
100-17-4	Existing Chemical	
100-21-0	Existing Chemical	
100-29-8	Existing Chemical	
100-37-8	Existing Chemical	
100 41 4	Existing Chemical	
100-42-5	Existing Chemical	

2. データセットに関する新規の記録を挿入する



左の列 (Substance ID [物質の識別情報]) に、新規の記録を挿入する (<F6>キーを押すか、「Insert (挿入)」アイコンをクリックする)

空白の記録フィールドをダブルクリックするか、<F7>キーを押すことにより、定義済みの(つまり、利用可能な)物質のピックリストを開き、ピックリストから該当する物質を選択する(ヒント1および2も参照)。

ヒント1: 上記の識別情報の表に膨大な数の入力がある場合は、クエリーを起動して(「Query (クエリー)」アイコンまたは<F4>キー)、物質の識別子を入力し、クエリーを実行する(「Query (クエリー)」アイコンまたは<F5>キー)。たとえば、<F4>2437<F5>と入力することにより、『2437』で始まるIDを検索することができる。このクエリーは大文字と小文字を区別するので注意が必要である。『C18%』と入力した場合と、『c18%』と入力した場合とでは、クエリー実行後の結果が異なる。

ヒント2: 物質の識別情報をピックリストから選択する代わりに、直接入力することもできる。この場合、ピックリスト内に保存されている識別情報と完全に一致させる必要がある。例: 『9999-99-9』という入力は受け付けられるが、『9999999』と入力した場合にはエラーメッセージが表示される。

3a. オプション : 「Harmonized Data Set (調和されたデータセット)」: データセットの識別子とコメントを入力する

「Harmonized Data Set (調和されたデータセット)」に関する、入力済みの「Data Set Administration (データセット管理)」ダイアログボックスの例 :

「Type of Data set (データセットの種類)」: 新規データセットの記録を保存した際に自動的に『Harmonized Data set (PRP=SRP) (調和されたデータセット [PRP=SRP])』と入力される。

「Company (企業) (Producer Related Part [作成者に関連する領域])」: ピックリストから『所属(your)』企業/機関の名称を選択する (ヒント 1 も参照)

「Creation Date (作成日) (Producer Related Part [作成者に関連する領域])」: 日付を dd-MON-yyyy の書式 (例: 26-MAY-2003) で入力する (注: 記録を保存する際には、現在の日付がデフォルトで入力される)

「Company (企業) (Substance Related Part [物質に関連する領域])」: ピックリストから『所属』企業/機関の名称を選択する (ヒント 2 も参照)

「Creation Date (作成日) (Substance Related Part [物質に関連する領域])」: 日付を dd-MON-yyyy の書式で入力する (注: 記録を保存する際には、現在の日付がデフォルトで入力される)

「Template (optional) (テンプレート [任意])」: この 3 つのフィールドは、化学物質カテゴリーに割り当てられている物質にのみ使用される (付録『化学物質カテゴリー』を参照)。

「Locked (ロック済み)」: 『no』以外の場合に限り、ピックリストから選択する (ヒント 3 を参照)

「Last Modifications (最終変更)」: 日付が自動的に入力される

「Revision Date (改訂日)」: 任意; 日付を入力する (書式: dd-MON-yyyy)

「Comment (コメント)」: 任意; 開いたデータセットのヘッダーに『Memo (メモ)』として表示させたいコメントを入力する

「Status (ステータス)」: 任意; 必要に応じ、ピックリストから『other (その他)』を選択し、コロンを挿入してテキストを入力する (たとえば『other: 1st draft (その他: 初回ドラフト)』、『other: Demo (その他: デモ)』など)

ヒント 1: 『所属』企業/機関とは、入力者が個人識別番号 (PIN) を有する所属またはその他の企業/機関を指す。



ヒント 2: PRP の「Company (企業)」フィールドから SRP の「Company (企業)」フィールドに [Ctrl]+[c] / [Ctrl]+[v] で企業名をコピーする方が迅速に入力できる。



ヒント 3: このフィールドが空欄の場合はデフォルトで『no』と入力される。『yes』と入力した場合には、物質を作成・削除する権限が付与されたユーザーしか当該データセットを編集できなくなる。『for all users (すべてのユーザー向け)』と入力すれば、当該データセットは一般大衆からロックされる。この入力とはあとで変更することができる。



- 3b. オプション :  
「Option  
Referenced  
Data Set (参照  
されたデータ  
セット)」:デー  
タセットの識  
別子とコメン  
トを入力する

「Referenced Data Set (参照されたデータセット)」に関する、入力済みの「Data Set Administration (データセット管理)」ダイアログボックスの例 :

Substance ID	DSN
100-51-6	10
100-51-6	11
10543-57-4	7
50-00-0	2
532-32-1	12
532-32-1	13
582-25-2	14
582-25-2	15
64742-46-7	3
64742-80-9	1
65-85-0	8
65-85-0	9
68334-30-5	4
68476-30-2	5
9999-99-9	20
9999-99-9	21

**Data Set Administration**

Type of Data Set: **Referenced Data Set (PRP<>SRP)**

Producer Related Part - PRP (Chapter 1)  
Company: **FhG - Fraunhofer Institut fuer Toxikolo**  
Creation Date: **01-AUG-2003**

Substance Related Part - SRP (Chapter 2-8, 10)  
Company: **Akzo Nobel, Amersfoort**  
Creation Date: **12-DEC-2002**

Template (optional)  
Cat/Temp. ID:   
Company:   
Creation Date:   
Locked: **no**  
Last Modifications: **05-AUG-2003**  
Revision Date:   
Comment: **Guidance Doc: Referenced data set e**  
Status:   
**Edit Data Set** **Show Substance Definition**

「Type of Data set (データセットの種類)」: 新規データセットの記録を保存した際に、自動的に『Referenced Data Set (PRP≠SRP) (参照されたデータセット [PRP と SRP は異なる])』と入力される。

「Company (企業)」 / 「Creation Date (作成日)」 (Producer Related Part [作成者に関連する領域]): 『所属』企業/機関の名称をピクリストから選択し (上記ステップ 3a のヒント 1 も参照)、日付を入力する

「Company (企業)」 (Substance Related Part [物質に関連する領域]): ユーザーが参照を希望するデータセットを作成した企業/機関の名称を選択する。ユーザー自身の『所属』企業/機関という場合もあり得る。

「Creation Date (作成日)」 (Substance Related Part [物質に関連する領域]): ユーザーが参照を希望するデータセットの正確な作成日を入力する。注: そのデータセットがユーザーの IUCLID システムで利用できる場合に限り、チャプター2~8 および 10 のデータが表示される。それ以外の場合は、下部の表示ラインに警告メッセージが表示される。

「Locked (ロック済み)」: 『no』以外の場合に限り、ピクリストから選択する。参照した「Substance Related Part (物質に関連する領域)」を編集できるのは、該当する企業/機関の PIN を有するユーザーだけであるの点に注意する (上記ステップ 3a のヒント 3 も参照)

「Comment (コメント)」: 任意; 開いたデータセットのヘッダーに『Memo (メモ)』として表示されるコメント。チャプター2~8 および 10 に関しては、ユーザーが参照するソースデータセットのヘッダーが自動的に表示される。

「Other フィールド (その他のフィールド)」: ステップ 3a を参照

4.



保存する

<F10> キーを押して変更を保存する (新規データセット)  
「Data Set Administration (データセット管理)」ダイアログを閉じる

## 2 データセットのインポートとエクスポート

本項では、データセットをインポート・エクスポートする方法や、異なる IUCLID インストール環境間でデータを交換する方法について説明する。また、IUCLID のエクスポートファイルの原則についても説明する。

新規データセットを作成する代わりに、別の企業/機関や、異なる IUCLID インストール環境で作業している同僚担当者から受け取ったデータセットをインポートすることが可能である。ユーザー自身のハードディスクにエクスポートファイルとして保存しておいたデータセットをインポートすることもできる。このような作業は、誤ってデータセットを変更してしまったためオリジナルの（保存してあった）データセットに戻る必要がある場合に重要になる。

IUCLID では、データの交換は IUCLID 特有のエクスポートファイルを介して行われる。エクスポートファイルでは、一部のデータ（具体的にはすべてのピクリストの入力内容とフィールド名）は「特殊なコード (specific codes)」で記載されるが、(フリー) テキストの入力内容はそのまま転載され、さらには転載の際に検索可能文字 240 字に字数が制限される (図 2 を参照)。下記的一般原則に留意することが望ましい。

■ IUCLID のデータベースにインポートできるのは IUCLID のエクスポートファイルだけであり、その他の文書形式 (rtf 形式、doc 形式、txt 形式、pdf 形式で作成されたレポートなど) はインポートできない。

■ インポート機能の目的 :

- 外部企業/機関や、ユーザーが所属する企業/機関の同僚担当者から受け取ったデータセットをインポートすること
- バックアップ機能 : 前のバージョンのデータセットをインポートすること

■ エクスポート機能の目的 :

- 外部企業/機関や、ユーザーが所属する企業/機関の同僚担当者に、エクスポートファイルを提供すること
- バックアップ機能 : 単一または複数のデータセットのエクスポートファイルを作成することにより、エクスポート機能をバックアップツールとして利用することができる。

■ データ交換形式 :

- エクスポートファイルは、『.exp』の拡張子を持つ一連の ASCII ファイルである。
- 各ラインは、下記に示すように固有のセクションに細分されている：
  - (i) 第 1~4 列 : ライン識別子
  - (ii) 第 5 列 : ブランク
  - (iii) 第 6~80 列 : データ
- 特殊な識別子がデータや追加情報の種類を表示する
- 典型的な IUCLID エクスポートファイルの一部を図 2 に示す。交換形式に関する詳細については、Technidata 社の Reference manual (参照マニュアル) を参照のこと (IUCLID の「Help (ヘルプ)」メニューから利用可能)。

■ エクスポートファイルの編集 :

エクスポートファイルの編集を可能とする『正規の』機能は存在しない。しかし、進んだユーザーは、MS WORD などの文書作成ソフトを使ってエクスポートファイルの操作を行うことができる。そのため、データセットのコピー作成を目的としたエクスポートファイルの編集方法について、注意事項を 3.3.2 項に掲載する。

■ データ交換は、オペレーティングシステムプラットフォームに依存しない

■ エクスポートファイルには複数のデータセットを収載することができる。1 つのデータセットをインポートするのか、すべてのデータセットをインポートするのかは、インポートの際に選択す

ることができる。

■他の IUCLID のバージョンとの互換性：

- 下位互換性がある。すなわち、古いバージョン (version 3.1.1 以前) の IUCLID 由来のエクスポートファイルを、IUCLID version 4 にインポートすることができる。
- 上位互換性は限られている

<pre> C***** C C Import/Export - File for the C C International Uniform Chemical Information Database C C Column 1- 4: Blocknumber / Fieldnumber C Column 6-80: Blockname / Fieldvalue C Date       : 30-JUL-2003 19:01:12 C Company    : FhG C***** C V      IUCLID-Export V4.00 C CS     ISO-Latin 1 C NL     GBR C B005  SUBST_MASTER_TAB F001  9999-99-9 F002  Y26-001 F003  IUCLID Guidance Document F004  1 EOB C B006  SUBST_IDENT_TAB F001  9999-99-9 F002  Y28-001 F003  Y27-001 F004  9999-99-9 F005  1 EOR F001  9999-99-9 F002  Y28-002 F003  Y27-031 F004  Samplex IU F005  2 EOR F001  9999-99-9 F002  Y28-002 F003  Y27-032 F004  Sample substance IU F005  3 EOB C B003  DS_ADMIN_TAB F002  76 F001  9999-99-9 F009  N F005  491000556 F006  24-07-2003 F007  491000556 F008  24-07-2003 F003  30-07-2003 F101  Guidance Doc. F102  A35-01 EOB </pre>	<pre> EOR... F002-76 F010-5.8.1 F004-13 F005-TS F006-The investigations were performed with calcium--EDTA F007-The investigations were performed with calcium--EDTA F008-HEdSET F009-28-11-1995 F012-1 F020-30596 EOR... F002-76 F010-5.8.2 F004-1 F005-CL F006-There is suggestive evidence that there was ***reproductive/developmental toxicity in rats that received ***1,000 mg/kg by oral gavage doses of diacetone alcohol. A ***clear NOEL was established at 300 mg/kg bw/day. F007-There is suggestive evidence that there was ***reproductive/developmental toxicity in rats that received ***1,000 mg/kg by oral gavage doses of diacetone alcohol. A ***clear NOEL was established at 300 mg/kg bw/day. F008-IUC300_COL F012-1 F020-30600 EOR... F002-76 F010-5.8.2 F004-1 F005-HE F006-METHOD FOLLOWED: OECD Combined Repeat Dose and ***Reproductive/Developmental Toxicity Screening Test ***DEVIATIONS FROM GUIDELINE: This study was conducted to ***examine both repeated dose toxicity and ***reproductive/developmental toxicity as an OECD F007-METHOD FOLLOWED: OECD Combined Repeat Dose and ***Reproductive/Developmental Toxicity Screening Test ***DEVIATIONS FROM GUIDELINE: This study was conducted to ***examine both repeated dose toxicity and ***reproductive/developmental toxicity as an OECD screening ***combined study. Estrous cycle length and pattern, and ***anogenital distances were not performed because the test wa ***conducted by the TG adopted in 1990. ***STATISTICAL METHODS: Dunnett's or Scheffe's test for ***continuous data and Chi square test for quantal data F008-IUC300_COL F012-1 F020-30601 EOR... F002-76 F010-5.8.2 F004-1 F005-RE F006-Ministry of Health and Welfare: Japan, Toxicity Testing ***Reports of Environmental Chemicals 5, 475-498 (1997) F007-Ministry of Health and Welfare: Japan, Toxicity Testing ***Reports of Environmental Chemicals 5, 475-498 (1997) F008-IUC300_COL F012-1 F020-30602 EOR... </pre>
---	--

図 2. IUCLID エクスポートファイル (一部) の例

インポート/エクスポート機能は、IUCLID ウィンドウの下記の場所から利用することができる。

- スプラッシュスクリーン：目的のアイコンをクリックする（図 3 の点線で囲った円内を参照）；
- メニューバー：「File (ファイル)」メニューで、「Import/Export (インポート/エクスポート)」をポイントし、「Data Set Import (データセットのインポート)」または「Data Set Export (データセットのエクスポート)」をクリックする。

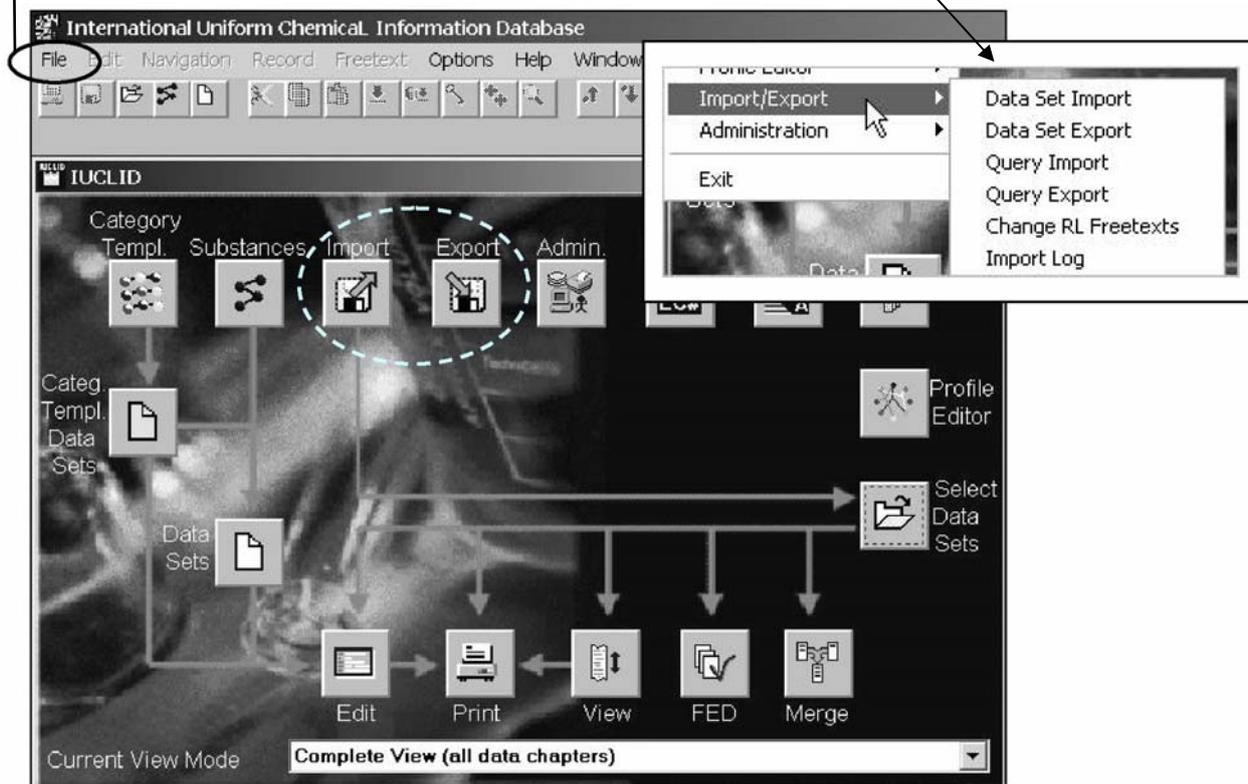


図 3. IUCLID 4 のスプラッシュスクリーンおよびメニューバー上でのデータセット「Import/Export (インポート/エクスポート)」機能

## 2.1 データセットのインポート

本項では、データセットのエクスポートファイルを、ユーザーが使用している IUCLID インストール環境にインポートする方法について説明する。

データセットのインポートを開始する前に、下記の点に留意する必要がある。

- 他の関係機関から受け取ったデータセットは、当該企業/機関の PIN を保有しない限り編集することはできない。ただし、表示させることはできる。インポートした『外来 (foreign)』データセットを、ユーザーが所属する企業/機関が作成した新規データセットにマージしたのちは、当然のことながら編集が可能となる。  
 注：通常、ユーザーは IUCLID installation CD ROM (IUCLID インストール用 CD-ROM) に添付された 1 つの PIN だけを受領する。しかし、複数の PIN が提供される特殊なケースもあり、さらにはすべての PIN が提供される例もある。たとえば、規制当局や、さまざまな提出者からのデータセットをマージする機関は、インポート後にこれらのデータセットを制限なく編集できる権限を有する必要がある。
- 警告：物質の識別情報、作成日、および企業/機関の名称に関する入力内容が同一の既存データセットは、インポートされたデータセットのデータによって上書きされる。このような事態は、作成日を変更し、3.3 項に記載したように既存データセットのコピーを作成することによって回避できる。
- IUCLID データセットをインポートする前に、第 1 項に記載した機能を使って物質の識別情報を作成したり、データセットを作成したりしておく必要はない。「Substance Administration (物質管理)」の「Substance ID (物質の識別情報)」の表において利用できる状態になっていなければ、IUCLID は該当する物質の識別情報を自動的に作成する。
- エクスポートファイルが「正しい拡張子『.exp』」を持っていることを確認する必要がある (例：『9999-99-9.exp』)。一部に、文書作成ソフトを使ってエクスポートファイルを表示あるいは編集するユーザーがいるが、ファイル名の拡張子『.txt』がエクスポートファイル名に自動的に付加される可能性があるという事実には注意を払わない場合がある。このような場合は、2 番目の拡張子を削除することによりファイル名を変更する必要がある。たとえば、『9999-99-9.exp.txt』は『9999-99-9.exp』に変更する。  
 注：使用している Windows のフォルダオプションの設定を、ウィンドウズエクスプローラや (Windows Explorer) や「Open (開く)」・「Save (保存)」ダイアログボックスでファイル名の拡張子が表示されるように変更する必要があるかもしれない。
- 対応するエクスポートファイルと一緒に「添付文書」が提供されていることや、その「添付文書」がローカルのハードディスクやネットワーク上のファイルサーバの同じ保存場所に保存されていることを確認する必要がある。

### クイック・ステップ・ガイド

1. 	[File: Import/Export: Data Set Import (ファイル: インポート/エクスポート: データセットのインポート)] を選択するか、スプラッシュスクリーン上の「Import (インポート)」アイコンをクリックする
2. 	エクスポートファイルを選択する
3. 	エクスポートファイルの内容を表示し、インポートするデータセットを選択して、インポートを開始する
4. ログファイル	ログファイルでエラーメッセージの有無を確認し、インポートを完了する

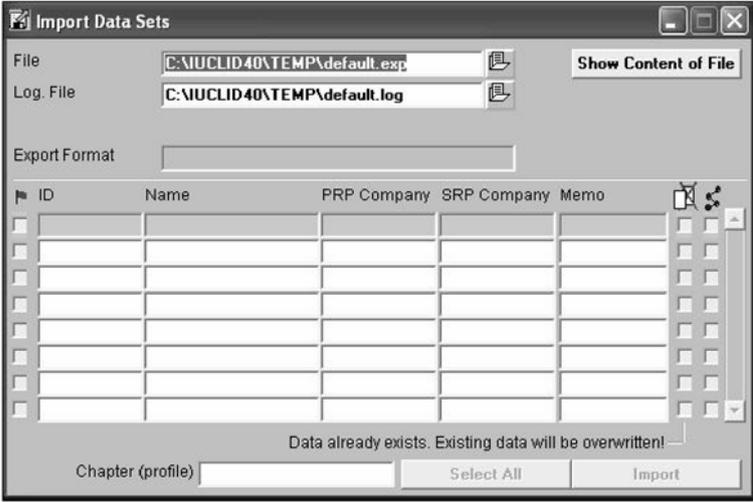
## 詳細なステップバイステップ・ガイド

1. [File: Import/Export: Data Set Import (ファイル:インポート/エクスポート:データセットのインポート)] を選択するか、スプラッシュスクリーン上の「Import (インポート)」アイコンをクリックする



結果: 「Import Data Sets (データセットのインポート)」ダイアログボックスが開き、デフォルトでのファイル名 (下記) が表示される (注: 表示されるデフォルトの保存場所やフォルダ名は、ユーザーが使用している IUCLID インストール環境によって異なる可能性がある):

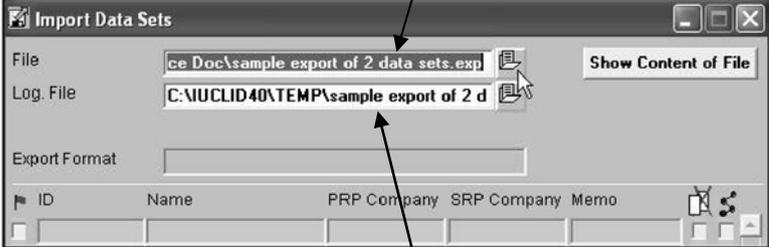
「File (ファイル)」フィールド: C:\IUCLID40\TEMP\default.exp  
「Log File (ログファイル)」フィールド: C:\IUCLID40\TEMP\default.log



2. エクスポートファイルを選択する



「File (ファイル)」フィールドの隣の「file finder (ファイルファインダー)」アイコンをクリックして「File Open (ファイルを開く)」ダイアログを開き、インポートするエクスポートファイル名を選択する。「File (ファイル)」フィールドにパスとファイル名を手入力することもできる。

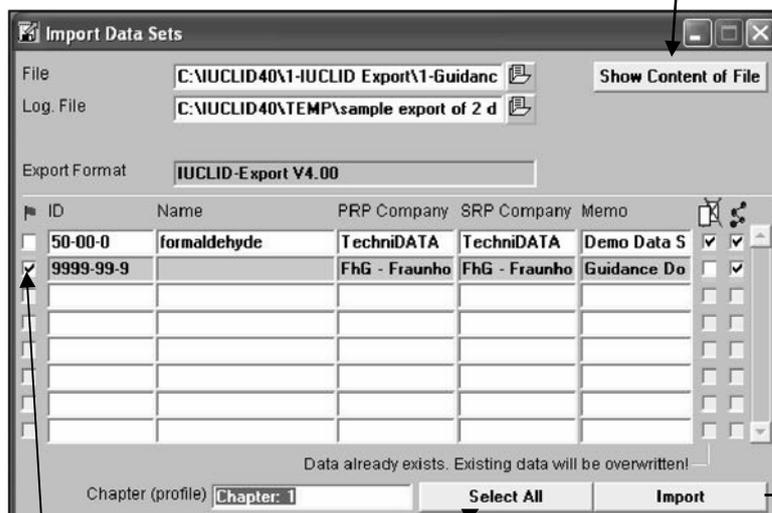


注: ログファイルをどのフォルダにどのようなファイル名で保存するか指定することができる (任意) (デフォルトの名称: エクスポートファイルの名称に拡張子『.log』が付属)。ログファイルには、エラーメッセージを含め、インポート操作の記録が書き込まれる。通常、ログファイルを保存する必要はないが、インポートを実行した際には目を通し、エラーが表示されていないことを確認しなければならない (ステップ 4 を参照)。

3. エクスポートファイルの内容を表示し、インポートを開始する

Show Content of File

- 「Show Content of File (ファイルの内容の表示)」ボタンをクリックする  
結果：エクスポートファイルと一緒に提供されたすべてのデータセットが表示される (スクリーンショットを参照)。



- 特定のデータセットにチェックを入れるか、すべてのデータセットをインポートしたい場合には「Select All (すべて選択)」ボタンをクリックする (右側のチェックボックスの説明についてはヒントを参照)。
- チャプタープロファイルを選択すれば、選択したチャプターのみをインポートすることができる (任意) (注：Profile Editor [プロファイルエディタ] を使えばユーザー自身のチャプタープロファイルのカスタマイズすることができる。プロファイルエディタは、ファイルメニュー [File: Profile Editor: Chapter (ファイル: プロファイルエディタ: チャプター)] から利用できる)。
- 「Import (インポート)」ボタンをクリックしてインポートを実行する。

ヒント：右側の2つのチェックボックスは、下記を意味する。



- 1つ目のボックスにチェックが付いている場合、同一の識別子、企業名、および作成日のデータセットがすでに存在することを意味する。データは上書きされる。
- 2つ目のボックスにチェックが付いている場合、化学物質データセットであることを意味する。ボックスにチェックが付いていない場合は、カテゴリ/テンプレートデータセットであることを意味する。

4. ログファイルを確認し、インポートを完了する

インポートが終了したら、ログファイルが表示される。

- ログファイルの末尾にエラーメッセージが表示されていないことを確認する(ヒントを参照)。
- 『Do you want to delete the log file (ログファイルを削除しますか)』というポップアップウィンドウが表示されるので、『yes』または『no』で答え、ログファイルの「Editor (エディタ)」ウィンドウを閉じる。
- 「Import Data Sets (データセットのインポート)」ダイアログボックスを閉じる

```

sample export of 2 data sets.log - Editor
Datei Bearbeiten Format Ansicht ?
MSG-3000: Import started at 05-AUG-2003 11:27:46.
MSG-3003: - Parameters User = IUC4
MSG-3006: Source = FHG - Fraunhofer Institut fuer Toxi
MSG-3004: Substance-ID = %
MSG-3005: Chapter = 0100
MSG-3006: Company = selected companies
MSG-3018: Mode = dialog
MSG-3007: Importfile = C:\IUCLID40\1-IUCLID Export\1-Guida
MSG-3023: Version = IUCLID-Export v4.00
MSG-3048: Character-set = ISO-Latin 1
MSG-3050: National-Language = GBR
MSG-3016: Importing elementary informations.
MSG-3014: Table SUBST_MASTER_TAB with ...
MSG-3015: 2 rows imported.
MSG-3014: Table SUBST_IDENT_TAB with ...
MSG-3015: 10 rows imported.
MSG-3014: Table DS_ADMIN_TAB with ...
MSG-3015: 2 rows imported.
MSG-3014: Table COMPANY_TAB with ...
MSG-3015: 2 rows imported.
MSG-3013: Importing data for 9999-99-9 (20 -> 23).
MSG-3053: Company-Name = FHG - Fraunhofer Institut fuer
MSG-3054: Creation-Date = 24-JUL-2003
MSG-3014: Table DS_COMPONENT_TAB with ...
MSG-3015: 1 rows imported.
MSG-3001: Import finished (see Log-File C:\IUCLID40\TEMP\sample export of 2 da).
  
```

ヒント: エラーメッセージは、インポートの失敗原因が下記のいずれかであることを示している。



- エクスポートファイルが破損している
- エクスポートファイルが保存されているフォルダに添付文書が存在しないか、添付文書のファイル名が変更されている
- その他

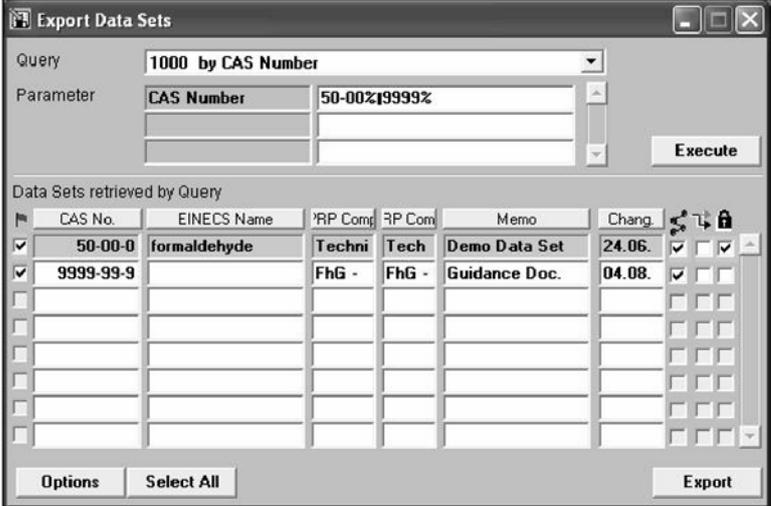
## 2.2 データセットのエクスポート

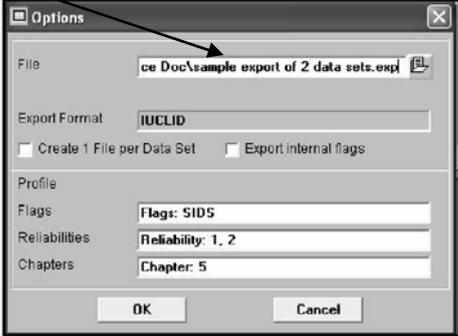
本項では、データセットをエクスポートする方法について説明する。エクスポートの方法は、インポートの方法と類似している。

### クイック・ステップ・ガイド

1. 	[File: Import/Export: Data Set Export (ファイル: インポート/エクスポート: データセットのエクスポート)] を選択するか、スプラッシュスクリーン上の「Export (エクスポート)」アイコンをクリックしてデータセットを選択する
2. 	「Options (オプション)」ダイアログボックスで、エクスポートファイル名と、保存場所のパスを入力する。その他のオプションを設定し、エクスポートを開始する
3. ログファイルを確認する	ログファイルでエラーメッセージの有無をチェックして、エクスポートがエラーなく完了したことを確認する

### 詳細なステップバイステップ・ガイド

<p>1. [File: Import/Export: Data Set Export (ファイル: インポート/エクスポート: データセットのエクスポート)] を選択するか、スプラッシュスクリーン上の「Export (エクスポート)」アイコンをクリックする</p> 	<p>結果: 「Export Data Sets (データセットのエクスポート)」ダイアログボックスが開く:</p>  <table border="1" data-bbox="448 1272 1219 1518"> <thead> <tr> <th>CAS No.</th> <th>EINECS Name</th> <th>'RP Com</th> <th>RP Com</th> <th>Memo</th> <th>Chang.</th> <th></th> <th></th> <th></th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>50-00-0</td> <td>formaldehyde</td> <td>Techni</td> <td>Tech</td> <td>Demo Data Set</td> <td>24.06.</td> <td><input checked="" type="checkbox"/></td> <td><input checked="" type="checkbox"/></td> <td><input checked="" type="checkbox"/></td> </tr> <tr> <td>9999-99-9</td> <td></td> <td>FhG -</td> <td>FhG -</td> <td>Guidance Doc.</td> <td>04.08.</td> <td><input checked="" type="checkbox"/></td> <td><input type="checkbox"/></td> <td><input type="checkbox"/></td> </tr> </tbody> </table> <ul style="list-style-type: none"> <li>適切なクエリー (CAS 番号など) を使用して、エクスポートするデータセット (= 3.1 項の冒頭で説明するシナリオのデータセット A) を取得する。</li> <li>クエリーによって取得されたデータセットの左側のチェックボックスにチェックを入れる。</li> </ul>	CAS No.	EINECS Name	'RP Com	RP Com	Memo	Chang.				50-00-0	formaldehyde	Techni	Tech	Demo Data Set	24.06.	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	9999-99-9		FhG -	FhG -	Guidance Doc.	04.08.	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
CAS No.	EINECS Name	'RP Com	RP Com	Memo	Chang.																							
50-00-0	formaldehyde	Techni	Tech	Demo Data Set	24.06.	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>																				
9999-99-9		FhG -	FhG -	Guidance Doc.	04.08.	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>																				

2. ファイル名、パス、オプションを選択し、エクスポートを開始する	<ul style="list-style-type: none"><li>• 「Options (オプション)」ボタンをクリックし、エクスポートファイルのパスとファイル名を入力する。 (注: データセット全体をエクスポートする場合、通常はその他のオプションを設定する必要はない)</li><li>• 「Options (オプション)」ダイアログボックスで「OK」をクリックする。</li><li>• 「Export Data Sets (データセットのエクスポート)」ダイアログボックスの「Export (エクスポート)」ボタンをクリックする。</li></ul>	
3. ログファイルを確認する	<p>エクスポートが完了したら、ログファイルが表示される。</p> <ul style="list-style-type: none"><li>• このファイルの末尾に『Export finished (エクスポート完了)』というメッセージが表示されていることを確認する。</li><li>• 「Export Data Sets (データセットのエクスポート)」ダイアログボックスを閉じる。</li></ul>	

### 3 データセットのマージ

本項では、1 つまたは複数のデータセットを別のデータセットにマージする方法について説明する。化学物質カテゴリーに割り当てられているデータセットのマージ方法については、IUCLID 4 ガイダンス文書の付録 1『化学物質カテゴリー』を参照のこと。

マージを行うことにより、1 つのデータセットに由来するデータを別のデータセットに転送（併合）することができる。したがって、この機能は、作業のやり直しを最小限にするコピー機能と捉えることができる。マージは、別の企業/機関が作成した化学物質データセットで書き込み禁止の設定が行われている場合でも書き込みを可能にする唯一の方法である。

データセットが共同作業により作成されており、チャプターごとに作成担当者が異なるような場合は、別の担当者から受け取ったデータセットをマスターデータセットにマージする必要が生じる。このような場合、各ユーザーの権限付与について十分な注意を払っておかないと、問題が生じる恐れがある（たとえば、同僚の担当者 B にはチャプター 5 の編集とデータ入力のみを許可するが、それ以外のチャプターについては許可しないなど）。ユーザー管理モジュールに関する手引きについては、Technidata 社の Reference manual (参照マニュアル) を参照のこと (IUCLID の「Help (ヘルプ)」メニューから利用可能)。

3.1.1 項に詳述した標準的マージ手順は、同一物質に関するデータセットをマージする場合にのみ有効である。したがって、図 4 に示すとおり、物質の第 1 識別子（たとえば CAS 番号）は同一でなければならないが、企業/機関の名称は異なっても差し支えない。

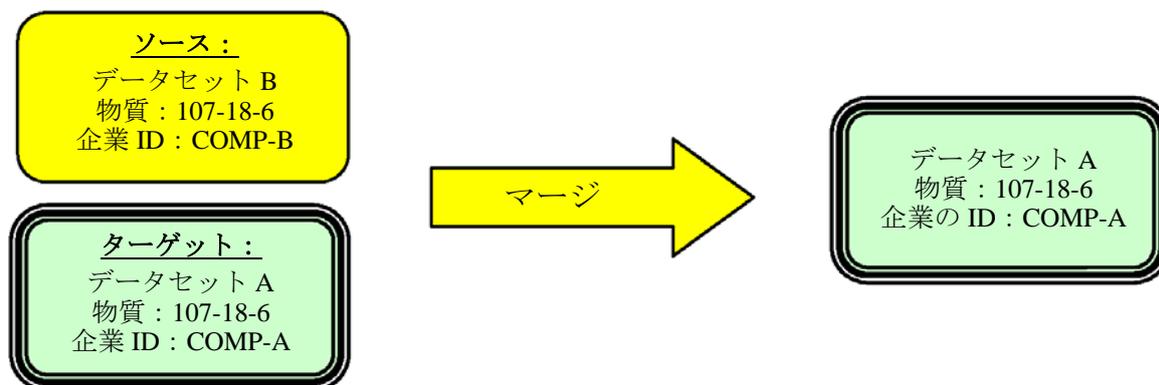


図 4. 同一の物質に関するデータセットのマージ

「異なる物質に関する」データセットのマージが必要となる場合もある。たとえば、わずかな変更のみで複数の物質に転用できる Study Summary の記録が存在するため、その記録をコピーする場合などがこれに該当する。これは、図 5 に示すとおり、「カテゴリー/テンプレートデータセットを中間データとして利用する」という単純な手段を取ることで実施することができる。詳細は 3.4 項に記載する。

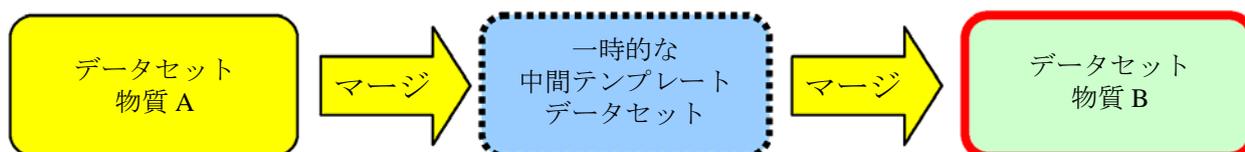


図 5. 異なる物質に関するデータセットのマージ

マージ機能の使用方法や、インポート機能とマージ機能の基本的な相違点については、下記のシナリオで説明し、ステップバイステップ・ガイドについては続くサブセクションに記載する。

- シナリオ 1： 2つのデータセット、異なる企業/機関の名称、同一の物質
- シナリオ 2： 2つのデータセット、異なる作成日、同一の企業/機関、同一の物質
- シナリオ 3： 2つのデータセット、同一の企業/機関、同一の作成日、同一の物質
- シナリオ 4： 2つのデータセット、異なる物質

マージ機能は、「Select Data Set (データセットの選択)」ダイアログボックス (図 6 の右のスクリーンショット) から利用することができる。このダイアログボックスは、IUCLID ウィンドウの下記のいずれかの場所から開くことができる。

- スプラッシュスクリーン：「Merge (マージ)」アイコン、「Edit (編集)」アイコン、または「Select Data Set (データセットの選択)」アイコンをクリックする
- メニューバー：「File (ファイル)」メニューで、「Open データセット (データセットを開く)」をポイントする

ソースデータセットとターゲット (=マージ先) データセットの両方を選択するには、先に「Select Data Set (データセットの選択)」ダイアログを開く必要がある点に注意すること。次にこのダイアログボックスの「Merge (マージ)」ボタンをクリックすることにより、「Merge Data Sets (データセットのマージ)」ダイアログに進む。

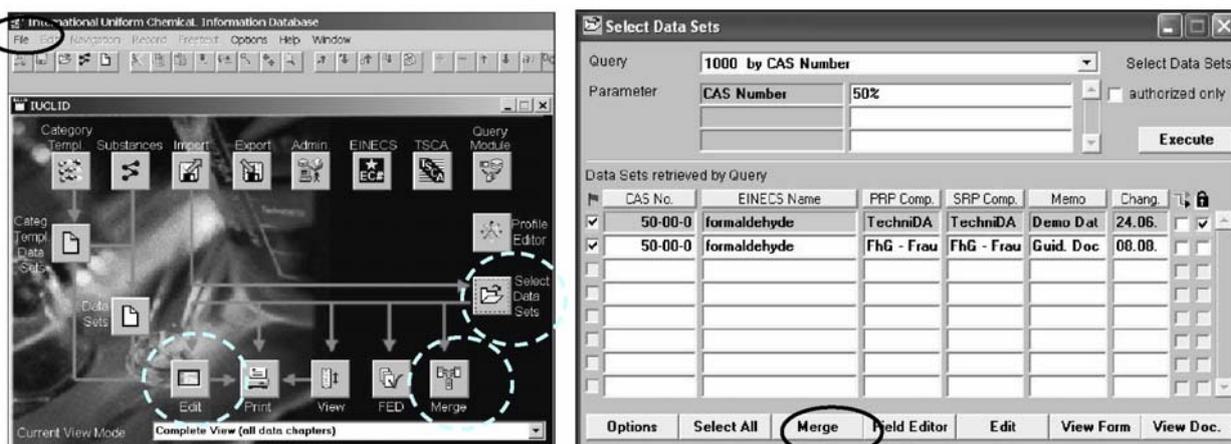


図 6. IUCLID ウィンドウ上の「Task (タスク)」ボタン (左) と、そこから開いた「Select Data Set (データセットの選択)」ダイアログ (右)。「Select Data Set」ダイアログには「Merge (マージ)」ボタン (円で囲った部分) がある。

#### 注：

マージを開始する前には、マージに関連するデータセットのエクスポートファイルを念のため必ず保存すること！ エクスポートファイルの作成方法に関する詳細なステップバイステップ・ガイドは、2.2 項に記載してある。

## 3.1 シナリオ 1: 2つのデータセット、異なる企業/機関の名称、同一の物質

## シナリオ :

2つの企業が協力して IUCLID データセットを作成している。企業 B が企業 A にエクスポートファイルを送付し、企業 A がマスターデータセットの作成と、企業 B が送付したデータの修正を行う。

## 実行可能な唯一の解決策 :

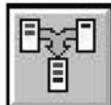
企業 A は、まずデータセット B をインポートしたのち、ソースデータセットをデータセット A にマージする。結果：ソースデータセットのデータが、ターゲットデータセット A に追加される。ターゲットデータセット A のその他のデータは、すべてそのまま残る。企業 B から追加した記録には、ソース企業の名称が記載されたフリーテキストタイプ「SO (情報源)」のタグが自動的に付けられる。

マージを開始する前に、下記の点に留意する必要がある。

- 警告 : 「Select Data Set (データセットの選択)」ダイアログボックスでは、「Options (オプション)」ダイアログを開くことができ、そこでフィルターを設定することができる(変更日の範囲、フラグ、信頼性スコア)。これらのオプションが有効なのは「Edit (編集)」、「View Document (文書の表示)」、「View Form (表示形式)」モードだけである点に注意すること。Getting Started (基本的な使用法) マニュアルではマージ操作の際にも有効であるかのように記載されているが、実際には有効ではない。
- ターゲットデータセットと全く同じデータを含むソースデータセットの記録は、マージ後に重複記録として表示される点に注意すること。これは、データセットをインポートする際の規則(既存データが上書きされる)とは異なる点である。残念ながら、IUCLID では選択した記録(選択したチャプターだけ!)をマージすることができない。唯一の解決策は、エクスポートと再インポートを行うという迂回策を取ることである。これについては 3.1.2 項に概説する。

## 3.1.1 別の化学物質データセットへの化学物質データセットのマージ

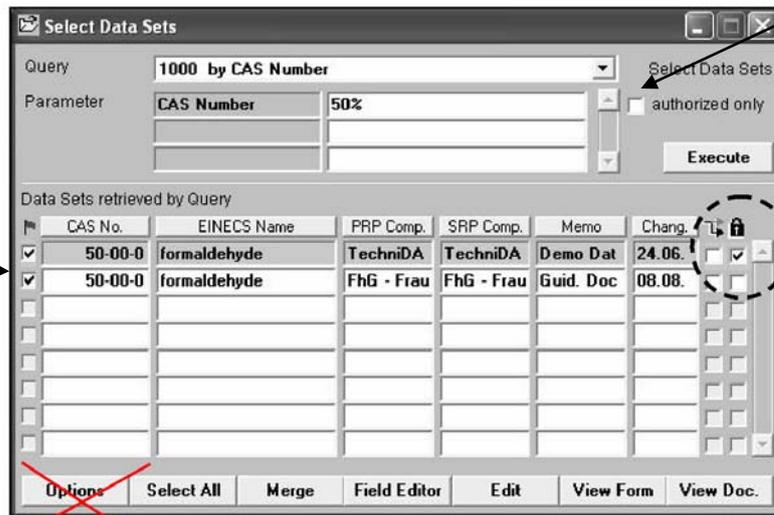
## 詳細なステップバイステップ・ガイド

<p>1. データセット B をインポートする</p> 	<p>2.1 項の説明にしたがって作業する。</p>
<p>2. [File: Open Data Set (ファイル:データセットを開く)] を選択するか、「Merge (マージ)」、「Edit (編集)」、または「Select Data Set (データセットの選択)」アイコンをクリックする</p> 	<p>結果 : 「Select Data Set (データセットの選択)」ダイアログボックスが開く :</p> 

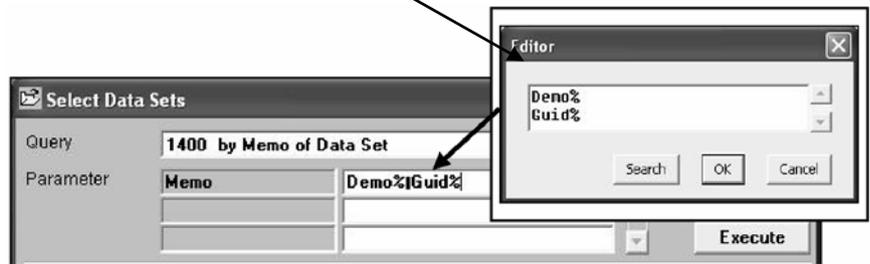
3. ソースファイルとターゲットファイルを選択し、「Merge (マージ)」ダイアログを開く



- **重要**：ソースデータセットが、ユーザーの所属企業/機関以外の企業/機関に由来するものである場合は、「authorized only (権限が付与されたユーザーのみ)」チェックボックスのチェックを外すこと。
- 適切なクエリーを選択する。たとえば、「Query (クエリー)」フィールドで『1000 by CAS Number』を選択し、各物質についてクエリーを実行する (ヒント 1)。
- クエリーの実行結果の最後の 2 列には、データセットが『referenced data set (参照されたデータセット)』であるのか、他の企業に由来するロックされたデータセットであるのかが表示される (点線で囲った円内)。
- ソースおよびターゲットデータセットのチェックボックスにチェックを入れる。
- 「Options (オプション)」ダイアログは使用しないこと (本項冒頭のヒントを参照)。
- 「Merge (マージ)」ボタンをクリックして「Merge (マージ)」ダイアログボックスを開く。



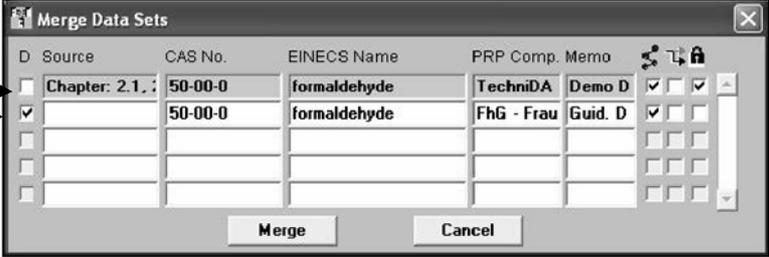
ヒント 1：一部のタイプのクエリーでは、複数の検索キーを入力することが可能である。たとえば、「Query (クエリー)」フィールドで『1400 by Memo of Data Set』を選択し、フィールド内をダブルクリックすると、エディタが開いて2つの (トランケートされた) メモをそれぞれ独立したラインに入力することができる。



4. 「Merge Data Sets (データセットのマージ)」ダイアログでソースデータセットとターゲットデータセットを選択し、「Merge (マージ)」ボタンをクリックする

**Merge**

- 「Source (ソース)」フィールドをダブルクリックしてチャプタープロファイルリストから目的のチャプター(choice)を選択することにより、ソースデータセットとチャプターを選択する。
- ターゲットデータセットを選択する：左端のチェックボックス「D」(=マージ先 [destination]) にチェックを入れる。
- 「Merge (マージ)」ボタンをクリックしてマージを開始する。



D	Source	CAS No.	EINECS Name	PRP Comp.	Memo
<input type="checkbox"/>	Chapter: 2.1. :	50-00-0	formaldehyde	TechniDA	Demo D
<input checked="" type="checkbox"/>		50-00-0	formaldehyde	FhG - Frau	Guid. D
<input type="checkbox"/>					
<input type="checkbox"/>					

- マージが完了したら (砂時計アイコンが消えることでしか判別できない！)、「Cancel (キャンセル)」ボタンをクリックして、「Select Data Set (データセットの選択)」ダイアログボックスに戻る。
- これでターゲットデータセットを開いて編集できる状態となったが、データセットを開く際には正しいデータセットが選択されていることを確認すること (他のチェックボックスのチェックを外す；ステップ 2 のスクリーンショットを参照)。

## 3.1.2 選択した記録（データ）のみのマージ

IUCLID では、選択した記録（選択したチャプターだけ！）をマージすることができないため、選択したデータだけをターゲットデータセットに転送するには、下記に示すとおり、若干込み入った手順を踏む必要がある。

## 詳細なステップバイステップ・ガイド

<p>1. 選択した記録の識別情報の作成</p>	<p>あらかじめ設定したオプション（たとえば固有のフラグや信頼性の指標）を利用したい場合は、ステップ 2 に進むこと。そのようなオプションとは無関係に特定の記録を転送したい場合には、下記の手順により転送する記録を指定する：</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• [File: Open Data Set（ファイル：データセットを開く）] を選択するか、「Edit（編集）」または「Select Data Set（データセットの選択）」アイコンをクリックしてソースデータセットを開く。</li> <li>• 目的の記録に移動し、フラグ『temporary flag（一時的なフラグ）』を設定する。</li> </ul>
<p>2. 選択した記録でエクスポートファイルを作成する</p> 	<p>[File: Import/Export: Data Set Export（ファイル：インポート/エクスポート：データセットのエクスポート）] を選択するか、スプラッシュスクリーン上の「Export（エクスポート）」アイコン をクリックする。結果：2.2 項で概説したように、「Export Data Sets（データセットのエクスポート）」ダイアログボックスが開く。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• クエリーを実行して、エクスポートするデータセットを取り出し、マークを付ける。</li> <li>• 「Options（オプション）」ボタンをクリックし、エクスポートファイルのパスとファイル名を入力する。</li> <li>• 「Options（オプション）」ダイアログボックスの「Flags（フラグ）」フィールドで、適切なオプションを選択する。たとえば、『Flag: SIDS（フラグ：SIDS）』や『Flags: temporary flag（フラグ：一時的なフラグ）』など。また、『Reliabilities（信頼性）』や『Chapters（チャプター）』についてのフィルターを設定することもできる。</li> <li>• 「Export（エクスポート）」ボタンをクリックする。</li> <li>• エクスポートが完了したら、ログファイルを確認する。</li> <li>• 「Export Data Sets（データセットのエクスポート）」ダイアログボックスを閉じる。</li> </ul>
<p>3. データセットの作成日を変更する</p>	<p>このデータセットを不注意により再インポートしないため、作成日を変更する。再インポートするとデータセットが上書きされ、オリジナルのデータセットのデータが失われてしまう。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• 「Data Set Administration（データセット管理）」を開き、当該物質のすべてのデータセットについて作成日を確認する。</li> <li>• 慎重にエクスポートファイルを編集し、作成日を、当該物質に関してまだ使用されていないことが明確な作成日に置き換える。3.3.2 項に記載した手引きにしたがうこと。</li> </ul>
<p>4. 『新規の』データセットをインポートし、ターゲットデータセットにマージする</p>	<p>3.1.1 項の説明にしたがって作業する。</p>

### 3.2 シナリオ 2 : 2つのデータセット、異なる作成日、同一の企業/機関、同一の物質

#### シナリオ :

チームで作業している担当者 A がデータセット A を作成日 1 で作成し、その同僚担当者 B が同じ物質に関するデータセット B を作成日 2 で作成する。両担当者とも、さまざまなチャプターにデータを入力する。担当者 B が担当者 A にエクスポートファイルを送り、担当者 A がマスターデータセットを作成する。

#### 実行可能な唯一の解決策 :

担当者 A は、まずデータセット B をインポートしたのち、そのデータセットを自身のデータセット A にマージする。結果 : ソースデータセットのデータが、ターゲットデータセット A に追加される。ターゲットデータセット A のその他のデータは、すべてそのまま残る。選択した記録だけをマージする必要がある場合は、3.1.2 項を参照のこと。

### 3.3 シナリオ 3 : 2つのデータセット、同一の企業/機関、同一の作成日、同一の物質

#### シナリオ :

チームで作業している担当者 A がマスターデータセットを作成し、チャプター1~4 にデータを入力して、チーム内の別の担当者 B にエクスポートファイルを配布する。担当者 B はチャプター5 を作成し、チャプター1 にも記録を追加したうえで、担当者 A にエクスポートファイルを送り返す。

どちらのデータセットも作成日が同一である点に注目する。作成日が同一であるため、既存のチャプターは、インポートされたチャプターによって完全に上書きされることになる。したがって、このような場合には、直接インポートできるのはチャプター5 だけである。チャプター1 はインポートすることができない。同様にマージも実施することができない。マージするには、まずチャプター1 をインポートする必要があるが、インポートと同時にデータセット A のチャプター1 が上書きされてしまうからである。したがって、実行可能な選択肢は下記のみである。

#### 実行可能な解決策 :

- **オプション 1 :** 3.3.1 項に記載した手順にしたがって、オリジナルのデータセットのコピー (=データセット C) を別の作成日で作成するよう、担当者 B に依頼する。このようにして作成したデータセット C は、シナリオ 1 に記載した手順にしたがってデータセット A にマージすることができる。

- **オプション 2 :** 担当者 A (または B) が文書作成ソフトを使ってデータセット B のエクスポートファイルを編集し、作成日を変更する。これにより、オリジナルのデータセットのコピーを作成する。

**警告 :** 3.3.2 項に記載した操作は、エクスポートファイルの破損をまねく恐れがあるので (たとえば、特殊なコードが偶然削除されたり変更されたりした場合)、十分に注意して行う必要がある。しかし、数多くの IUCLID のユーザーがこのような操作を行っているため、そのコツについて下記に概説する。

#### 3.3.1 IUCLID の機能を利用した、データセットのコピーの作成

IUCLID の機能を使ってデータセット B のコピーを作成するのは煩雑であると考えるユーザーもいるであろう。しかし、この作業は、実際には次の 2 つのステップを行うだけである。

- 別のデータセット C を作成する (異なる作成日にする事！)。

- データセット B をデータセット C にマージする。

この手順は、ユーザーが使用している IUCLID インストール環境においてデータセット B が使用できる場合にしか有効でない点に留意すること。上記のシナリオでは、データセット B が利用できるのは担当者 B だけであり、担当者 A はデータセット B のエクスポートファイルを受け取るしかない。しかし、担当者 A がそのエクスポートファイルをインポートすると、担当者 A のデータセット A は即座に完全に上書きされてしまう！したがって、担当者 A としては、下記の手段 (3.3.2 項) 以外には取り得る選択肢がない。

### 3.3.2 エクスポートファイルの編集によるデータセットのコピーの作成

進んだユーザーは、MS WORD などの文書作成ソフトを使ってエクスポートファイルの操作を行うことがよくある。そのような操作を行う場合には、エクスポートファイルの書式を変更しないように十分注意する必要がある。書式が変更されると、エクスポートファイルは『破損』する恐れがあり、以降のエクスポート作業が行えなくなる！

文書作成ソフトを用いたエクスポートファイルの編集は、下記の手順により行う：

- WORD またはテキストエディタでエクスポートファイルを開く。
- コード『B003 DS\_ADMIN\_TAB』から始まるブロックに進む。
- コード『F006』および『F008』の隣に記載されている日付を、まったく同じ書式を使って別の日付に書き換える。たとえば、『24-07-2003』を『26-07-2003』に書き換える。
- ファイルを別の文書として保存する。ただし、次の点を確認すること。
  - ファイル形式は、(書式のない)『text only (テキストのみ)』とする
  - ファイルの拡張子は『.exp』であり、『.exp.txt』ではない
- ウィンドウズエクスプローラや (Windows Explorer) を使って、WORD が拡張子『.txt』(デフォルト)を付加していないかどうか確認し、付加されている場合は削除する。

```

C
B003 DS_ADMIN_TAB
F002 76
F001 9999-99-9
F009 N
F005 491000556
F006 24-07-2003
F007 491000556
F008 24-07-2003
F003 30-07-2003
F101 Guidance Doc.
F102 A35-01
EOB
    
```

(注：WORD のファイルのオプション設定によっては、ファイル保存時に拡張子『.txt』を削除しても『.txt』が付加される場合がある)

### 3.4 シナリオ 4 : 2つのデータセット、異なる物質

#### シナリオ :

2つのデータセットを作成した。一方は物質 A に関するデータセットであり、もう一方は物質 B に関するデータセットである。データセット B に入力した **Robust Study Summary** の一部は、物質 A でも実施された試験について言及している。方法および結果のデータは、影響量 (LD50 など) 以外はほぼ同等である。これらの記録をデータセット A にコピーしたうえで編集できれば、時間の削減につながる。

#### 実行可能な唯一の解決策 :

データセットが他のデータセットにマージできるのは、両者が同一の物質を扱っている場合だけであるため、下記の手段を取る必要がある。

1. オリジナルのデータを後で再インポートできるように保存しておくため、データセット B をエクスポートし、エクスポートファイルを <original>.exp (または他の適切なファイル名) で保存する。
2. データセット B において、コピー対象とする各記録に『temporary flag (一時的なフラグ)』を設定する。
3. 『only records with temporary flag (一時的なフラグが設定された記録のみ)』というオプションでデータセット B をエクスポートし、エクスポートファイルを <flagged.exp> または他の適切なファイル名で保存する (ステップ 1 で選択したファイル名とは別の名称にすること！)
4. フィルタリングした(filtered)データセット B サブセット (選択した記録だけが収載されている) が含まれるようデータセット <flagged.exp> を再インポートする (その他のデータはすべて自動的に削除される ; つまり、インポートされたデータによって上書きされる)。
5. 中間データセットとして使用するカテゴリー/テンプレートデータセットを作成する (このタイプのデータセットは、どの物質に関するものであるのかにかかわらず、任意のデータセットにマージすることができる点に注意)。
6. データセット B サブセットをカテゴリー/テンプレートデータセットにマージする
7. B サブセットが収載されたカテゴリー/テンプレートデータセットを、データセット A にマージする
8. エクスポートファイル <original>.exp を再インポートしてオリジナルのデータセット B をリセットする

注 : 原則として、3.3.2 項に記載したのと同様の手順により、エクスポートファイルを編集して、データセット全体で第 1 識別子として使用されている CAS 番号などの物質の識別子を他の識別情報に書き換えることも可能ではある。しかし、マージ後に削除し忘れると、誤った物質の識別子を有するデータセットを、ユーザー自身の IUCLID データベースにインストールしてしまう危険性がある！