

IUCLID 4 ガイダンス文書の付録 1

化学物質カテゴリー

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)

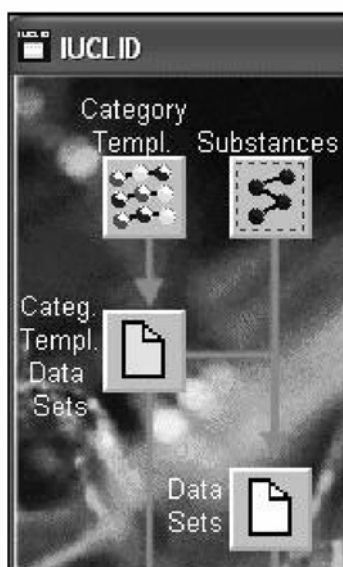
Environment, Health and Safety Division (環境・保健・安全性部門)
2 rue Andre Pascal
75775 Paris Cedex 16, France

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 1 : 化学物質カテゴリー
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 Department 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。

本マニュアルは、「IUCLID 4」ソフトウェアのユーザーによるカテゴリーデータセットと化学物質データセットの取り扱い、これらのデータセットへの情報や (Robust) Study Summary の組み込み、およびカテゴリーレポートやマトリックスレポートの作成を支援することを目的としたものである。大部分の説明は、ステップバイステップ・ガイドの形で提示してあり、『実際の』入力例が表示されたスクリーンショットや、数多くのヒントやコツも掲載した。

注：

IUCLID のカテゴリー機能の利用に関して本文書に記載した手引きは、指示を与えること (to be prescriptive) を意図したものではない点に十分留意すること。むしろ、本マニュアルは、推奨されているワークフローを提示することを目的としたものである。

考えられるいくつかの提出シナリオ (submission scenarios) について検討が行われているが、それら以外にも、本文書に概説したワークフローからの逸脱や変更が必要となるシナリオが存在する可能性がある。

目次

序文

1	基礎：化学物質カテゴリーおよび IUCLID	6
1.1	化学物質カテゴリーの定義	6
1.2	技術的な注意事項	6
1.2.1	化学物質カテゴリーに関するデータの IUCLID データセットへの入力	6
1.2.1.1	カテゴリーに関連するデータ入力用の IUCLID カテゴリー/テンプレートデータセット	7
1.2.1.2	個々のカテゴリー構成化学物質のデータ入力用の IUCLID 化学物質データセット	7
1.2.1.3	カテゴリー構成化学物質のカテゴリーへの割り当て	9
1.2.2	IUCLID のレポート	11
1.2.2.1	カテゴリーレポート (SIDS Dossier)	11
1.2.2.1.1	すべてのカテゴリー構成化学物質に対する個別レポート	11
1.2.2.1.2	全カテゴリーの統合レポート	11
1.2.2.2	マトリックスレポート	11
1.3	化学物質カテゴリーの設定に利用できる IUCLID の機能	13
2	提出シナリオ：基本的な『個別化学物質』カテゴリーの全構成化学物質についての個別レポート	14
2.1	データセットの作成	16
2.1.1	カテゴリーの識別情報作成 (Category/Template Administration [カテゴリー/テンプレート管理])	16
2.1.2	カテゴリーデータセットの作成 (Category/Template Data Set Administration [カテゴリー/テンプレートデータセット管理])	18
2.1.3	各カテゴリー構成化学物質の識別情報作成 (Substance Administration [物質管理])	21
2.1.4	各カテゴリー構成化学物質に関する化学物質データセットの作成 (Data Set Administration [データセット管理])	24
2.2	データの入力および編集	27
2.2.1	カテゴリー/テンプレートデータセットへのデータの入力	27
2.2.2	各カテゴリー構成化学物質データセットへのデータ入力	32
2.2.2.1	カテゴリー構成化学物質自体に関するデータの入力	32
2.2.2.2	構造的類似化学物質に由来する代替データの利用 (QSAR)	37
2.2.2.3	エンドポイントの充足を目的とした、別のカテゴリー構成化学物質に由来するデータの利用	38
2.2.2.3.1	オプション 1：他のデータソースの参照情報を収載	38
2.2.2.3.2	オプション 2：別のカテゴリー構成化学物質に由来するデータを収載	40
2.2.2.4	HPV に該当しない化学物質に由来するデータの利用	41
2.3	カテゴリーマトリックスレポートの作成	42
2.4	各カテゴリー構成化学物質データセットの個別レポートの作成	44
3	提出シナリオ：基本的な『個別化学物質』カテゴリーの統合カテゴリーレポート	47
3.1	データセットの作成	49
3.2	データの入力および編集	49
3.3	カテゴリーマトリックスレポートの作成	49
3.4	統合カテゴリーレポートの作成	49

4	提出シナリオ：一部のエンドポイントに関しては妥当性がないカテゴリー	52
5	提出シナリオ：漸増パターンが異なるサブカテゴリー	53
6	提出シナリオ：構造的特徴に基づくサブカテゴリー	53
7	別の目的のための構成化学物質データセットの使用	54
7.1	割り当てが解除されたデータセットの使用	54
7.2	データセットのコピーの使用	55
8	カテゴリー関連データセットのエクスポートとインポート	55
	付属文書 1 : カテゴリーに関する IUCLID 4 の制約	56

1 基礎：化学物質カテゴリーおよび IUCLID

1.1 化学物質カテゴリーの定義

OECD の高生産量 (HPV) 化学物質点検マニュアル (2002 年 7 月) では、化学物質カテゴリーは下記のように定義されている。

『化学物質カテゴリーとは、構造の類似性に起因して物理化学性状や毒性学的特性が類似または規則正しいパターンを示す可能性が高い一群の化学物質のことである。このような構造の類似性は、物理化学性状、環境中運命や環境への影響、および/またはヒトの健康への影響といったパラメーターの一部またはすべてに予測可能なパターンをもたらす可能性がある。類似性は下記に基づいているはずである。

- 共通の官能基 (アルデヒド、エポキシド、エステルなど) を有する。
- 共通の前駆物質および/または分解生成物を持つ (物理的または生物学的プロセスを介して構造的に類似の化学物質となる) 可能性がある。
- カテゴリー内全般にわたって段階的な一定の変化が見られる。同一カテゴリー内では、目的のエンドポイントのために異なる構成化学物質を選択することができる。すなわち、環境への影響に関するエンドポイントについて、カテゴリーアプローチ用に選択した化学物質は、ヒトの健康への影響に関するエンドポイントの評価には適さない可能性がある』

化学物質カテゴリーの中には、SIDS 項目またはエンドポイント 1 つの検討領域(one area of concern)についてのみカテゴリーの定義が受け入れられるがその他の領域については受け入れられないものもある。たとえば、ヒトの健康への影響については受け入れられるが、その他 (環境への影響や、挙動に関するエンドポイントなど) については受け入れられない場合などが該当する。このような場合には、特定のエンドポイントに関してサブカテゴリーが必要となることがある。

化学物質カテゴリーは、何らかの重要な特性が共通する多数の化学物質、化学反応生成物、または化学物質の混合物によって構成される場合もあり得る。このような場合にも、構造的特性、分子量、あるいはその他の基準に基づいて、サブカテゴリーを作成することがある。

1.2 技術的な注意事項

この項では、化学物質カテゴリーに関する SIDS Dossier を IUCLID を用いて作成する際に考慮を要する重要事項について説明する。序文でも強調したとおり、本ガイダンス文書に示した手引きは、指示を与えることを意図したものではない。

本ガイダンス文書は、「Getting Started (基本的な使用法)」マニュアル^{*}に取って代わるものではない点に留意する必要がある。IUCLIDのカテゴリー機能に関する技術的な問題点については「Getting Started」マニュアルを参照することが望ましい。

1.2.1 化学物質カテゴリーに関するデータの IUCLID データセットへの入力

化学物質カテゴリーに関する SIDS Dossier を IUCLID を用いて作成する場合、該当する提出シナリオによっては、(カテゴリー化されていない) 個別の化学物質に対して SIDS Dossier を作成する場合と比較して、下記に示すような追加情報や変更がいくつか必要となる場合がある。

- IUCLID の「category/template data set (カテゴリー/テンプレートデータセット)」における、カテゴリー内のすべての構成化学物質に適用されると考えられる情報の収集および評価
- IUCLID の「substance data sets (化学物質データセット)」における、カテゴリーの構成化学物質に関する情報の収集および評価
- それぞれのカテゴリー/テンプレートデータセットへのカテゴリー構成化学物質データセットの

^{*)} 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)

割り当て

IUCLID データセットの種類に関する詳細は、IUCLID のテクニカルマニュアルまたは IUCLID 4 ガイダンス文書の緒言を参照のこと。

1.2.1.1 カテゴリーに関連するデータ入力用の IUCLID カテゴリー/テンプレートデータセット

カテゴリー/テンプレートデータセットは、単一の化学物質に割り当てられるのではなく、カテゴリーの識別情報に割り当てられる。したがって、このタイプのデータセットは、そのカテゴリーの個別の構成化学物質に関連する情報ではなく、カテゴリーのすべてまたは一部の構成化学物質に適用されると考えられる情報の入力に用いられる。

カテゴリー/テンプレートデータセットを使用する際には、対応するカテゴリー構成化学物質データセットがカテゴリー/テンプレートデータセットに確実に割り当てられている必要がある。このような割り当ては、IUCLID の「Data Set Administration (データセット管理)」で行う必要がある。割り当てを行うと、カテゴリーデータセットに入力した情報は自動的に各カテゴリー構成化学物質データセットに表示される。この点に関しては、1.2.1.3 項でさらに詳しく説明する。

「Getting Started (基本的な使用法)」マニュアル^{*)}でも説明されているとおり、カテゴリー/テンプレートデータセットに入力する情報は、一部のカテゴリー構成化学物質で利用可能な情報に基づいて、そのカテゴリー内のすべての構成化学物質に該当する結果を提示することが可能な、範囲を持った値とすることができる。このような情報は、個別の試験に由来する情報を化学物質データセットに入力する場合とまったく同様にカテゴリーデータセットに入力する。結果が範囲として提示されているため、試験条件や信頼性などに関するすべての情報を記入することはできない場合や、その必要がない場合がある。一例を挙げると、カテゴリーを構成する物質の水への溶解度に関する全般的陳述 (generalizing statement) は、サブチャプター『2.6.1 Solubility in different media (異なる媒質における溶解度)』に記載することができる。このような情報は、カテゴリー構成化学物質データセットの各サブチャプターに繰り返し入力する必要はない。

カテゴリーの説明または識別情報を記載する必要や、特定の化学物質をそのカテゴリーに分類する根拠を説明する必要もある。カテゴリーベースの Dossier を提出するコンソーシアム、主導的役割を担う企業 (lead company)、協力企業に関する情報も、カテゴリーデータセットに入力することが望ましい。IUCLID のチャプター『1 一般的情報』には、このような情報の収載に関するサブチャプターが設けられている。

(Robust) Study Summary を含め、個々のカテゴリー構成化学物質に適用されるすべての関連重要情報は、次項で説明するとおり、それぞれの化学物質データセットに入力することが望ましい。

1.2.1.2 個々のカテゴリー構成化学物質のデータ入力用の IUCLID 化学物質データセット

OECD の高生産量 (HPV) 化学物質点検マニュアルでは、SIDS Dossier は、カテゴリー内の化学物質ごとに個別に作成することが推奨されている。IUCLID の観点では、各カテゴリー構成化学物質のデータセットの作成にあたっては、当該カテゴリー構成化学物質に適用可能なすべての関連重要データを収載することが望ましい。

化学物質データセットは、通常、単一の化学物質のみについて作成する。化学物質データセットは、カテゴリー構成化学物質ごとに定義することが望ましい。『物質/化学物質 (substance)』という用語は、特定の化学物質のみを指しているのではなく、規制上の理由から個別の物質として扱われる混合物も指していることを念頭におく必要がある。各物質は、固有の化学物質識別子 (物質の識別情報 [Substance ID]) で記載される。識別子には CAS 番号を用いることが望ましいが、必ずしも CAS 番号でなくてもよい。CAS 番号が利用できない場合や適用できない場合は、IUPAC 名、製品名、混合物の名称などの他の識別

^{*)} 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)

子を利用してもよい。

注：データセットにはどのような物質の識別情報でも適用できるため、カテゴリーの識別情報としてカテゴリー/テンプレートデータセットを定義する代わりに化学物質データセットを定義する方が原則として技術的には容易である。しかし、そのようなやり方は、カテゴリー機能を損なう可能性がある。

化学物質カテゴリーの利点の 1 つとして、個々のカテゴリー構成化学物質データセットにデータを入力する際に、エンドポイントの充足を目的としてデータの欠落部分にカテゴリー内の他の物質のデータを当てることができる点が挙げられる。化学物質カテゴリーに該当するか否かにかかわらず、『代替化学物質 (surrogates)』のデータを利用することが賢明な場合もある。代替化学物質とは、そのカテゴリー外の関連化学物質のことである。

OECD のマニュアルでは、他の物質に由来するデータ利用の取り扱い方法に関する手引きとして、下記の 2 つのオプションが示されている。

オプション 1 :

各 SIDS Dossier に、カテゴリーを構成する各化学物質に関して入手可能な情報および Robust Study Summary のみを収載する。カテゴリー内の他の化学物質のデータを用いることによりエンドポイントが充足されている場合は、データ未入力のエンドポイントがある SIDS Dossier のそれぞれに対し、データが入力されている SIDS Dossier の出典を示す。

カテゴリー外の別の関連化学物質に由来する情報（構造的類似化学物質に由来する代替データ）を用いることによりエンドポイントが充足されている場合には、当該化学物質に関する SIDS Dossier に関連化合物の試験結果を収載することが望ましい。その際、関連化合物（被験物質）の識別情報（化学名および CAS 番号）を明記すること。

オプション 2 :

各 SIDS Dossier に、SIDS で必要とされる全エンドポイントの完全なデータセットを収載する（エンドポイントの充足に他の被験物質が使用されている場合であっても）。カテゴリー内の他の化学物質の情報を用いることによりエンドポイントが充足されている場合は、その情報を上記の単一の SIDS Dossier に収載し、関連化合物（被験物質）の識別情報（化学名および CAS 番号）を明記する。カテゴリー外の他の関連化学物質に由来する情報を使用した場合も同様である。

HPVC プログラムではどちらのオプションも利用することができる。しかし、SIDS dossiers は、文書作成ソフトウェアを用いて編集されたのち IUCLID データセットに転送される場合があることを考慮に入れる必要がある。IUCLID は、特定の物質のデータをその物質について定義されたデータセットに入力できるようにデザインされたデータベースである。カテゴリーに関連する SIDS dossiers を IUCLID ソフトウェアを用いて作成する場合に、上記オプションのどちらを使用するのか慎重に考慮する必要があるのは、このような理由からである。

本ガイダンス文書には複数の提出シナリオの取り扱い方法に関して手引きが掲載されており、採用すべきワークフローについて考慮する際には、上記オプションの一方を使用すべきか特異的な要件に合わせて改変した方法を使用すべきかについて、判断の一助となるはずである。しかし、IUCLID のすべてのカテゴリー機能の利点が有効となるのは、上記のオプション #1 を実行した場合のみである点に注意が必要である。

1.2.1.3 カテゴリー構成化学物質のカテゴリーへの割り当て

IUCLID のすべてのカテゴリー機能を利用するには、個々のカテゴリー構成化学物質データセットが、対応するカテゴリーのカテゴリー/テンプレートデータセットに割り当てられている必要がある。この割り当ては、下記のスクリーンショット（図 1）に示すように「Data Set Administration（データセット管理）」で行う。これについては後述するステップバイステップ・ガイドの項でさらに詳しく説明する。

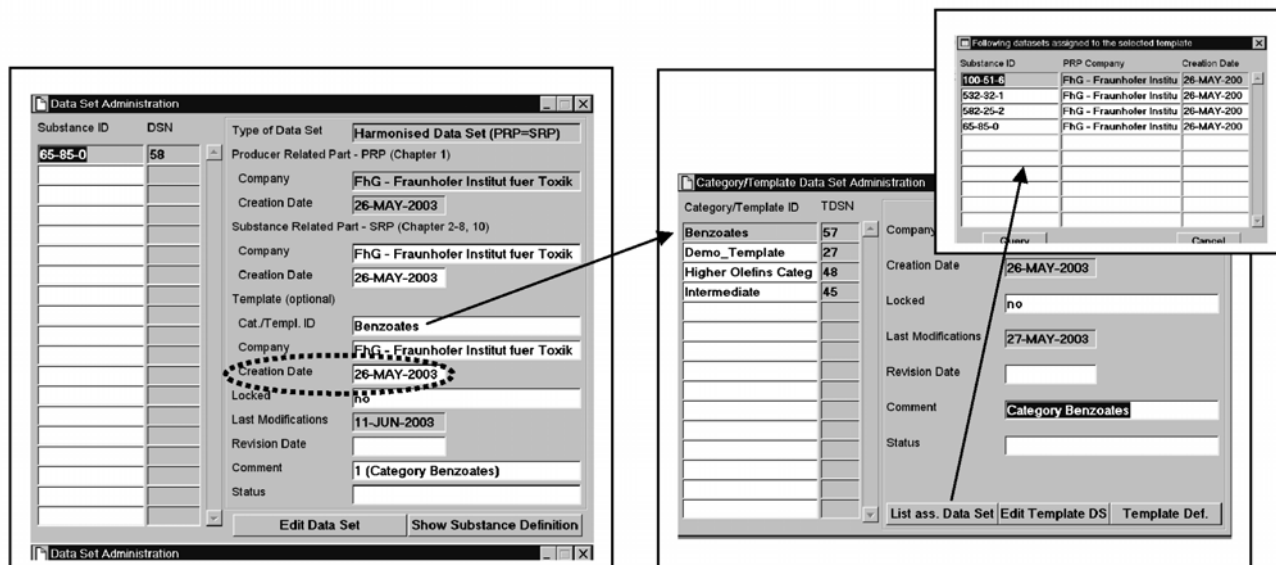


図 1. 「Data Set Administration（データセット管理）」における化学物質データセットの割り当て（左側）、および「Category Data Set Administration（カテゴリーデータセット管理）」における割り当て済みデータセットのリストの例（右側）

下記の機能を利用するには、カテゴリー構成化学物質データセットがカテゴリー/テンプレートデータセットに割り当てられていることが必要条件である。

- カテゴリー/テンプレートデータセットに入力された全情報が、そのカテゴリーデータセットに割り当てられた化学物質データセットに表示される。ただし、参照カテゴリー情報は書き込み禁止である。
- 図 2 は、カテゴリーデータセットに入力された記録の例を示しており、そのカテゴリーに割り当てられたすべてのカテゴリー構成化学物質データセットが表示されている。
- マトリックスレポートを作成することができる。このマトリックスレポートにより、選択したカテゴリー内のすべての構成化学物質のすべての SIDS エンドポイントを、迅速かつ容易に比較することができる（1.2.2.2 項および 2.3 項を参照）。

注: カテゴリーデータが編集できるのは、カテゴリー/テンプレートデータセットの中のみである。また、もっとも重要なのは、化学物質データセットにおいて真の意味で必要不可欠な部分ではないという点である。したがって、このカテゴリーデータは、データセットのエクスポート、マージ、印刷などのすべての化学物質データセット操作に関し、対応するカテゴリー/テンプレートデータセットをユーザーが使用している IUCLID インストール環境で利用できる場合にしか収載されない。データセットには正確な「Creation Date（作成日）」および「Category/Template ID（カテゴリー/テンプレートの識別情報）」（図 1 の円内）が記載されていなければならない。何らかの理由で化学物質データセットの割り当てが解除された場合、カテゴリーデータは表示されなくなる。

落とし穴 (Pitfall) : データの起源を示す識別情報のフィールドがない

IUCLID ソフトウェアが当初設計された際には、化学物質カテゴリーは重要ではなかったため、IUCLID のデータ入力フォームには特定の識別情報フィールド（記録がどのデータセットに由来するのかを自動

的に示すフィールド)が存在しない。代替として、下記のスクリーンショット (図 2 の点線で囲った円内) に示す例のように、ユーザー自身が忘れずにオリジナルのカテゴリーデータセットのフリーテキストタイプ「TS (被験物質)」に入力しておく必要がある。

実際のところ、書き込み禁止のシンボルは、その記録がカテゴリーデータセットに由来するものであることを示している。しかし、そのような表示はどのレポートにも印刷されないため、ユーザーがデータソースを明記しなかった場合には混乱をきたす恐れがある。

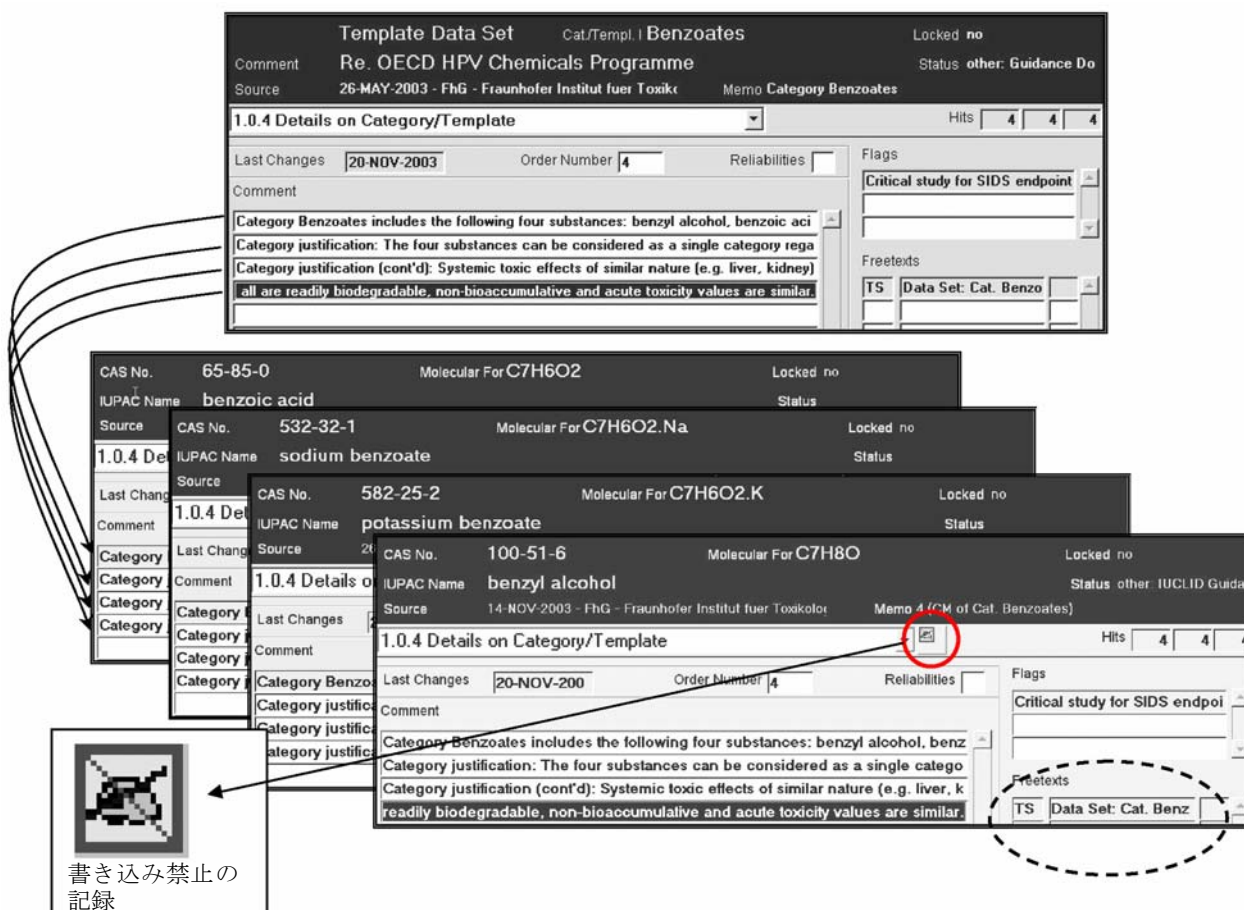


図 2. カテゴリー/テンプレートデータセットに由来するデータの例、およびそのカテゴリーに割り当てられたすべてのカテゴリー構成化学物質データセットの表示例 (注: フリーテキスト「TS」は、記録の起源が手入力されたことを示す)

原則として、データセットを作成した時点で同時に割り当てを行う必要はない。カテゴリーデータセットが後日作成される場合もあれば、データ入力済みの既存の化学物質データセットをカテゴリーに割り当てることが決定される場合もある。割り当てだけでなく、割り当ての解除もいつでも行うことができる。したがって、さまざまなオプションや必要性に応じた柔軟的な対応が可能である。

このデータセットを別の目的 (別の化学物質プログラムや別の化学物質カテゴリーなど) に使用する場合、カテゴリー構成化学物質データセットにおける割り当ての削除 (『de-assignment (割り当て解除)』) が必要となることがある (7 項を参照)。

1.2.2 IUCLID のレポート

化学物質カテゴリーで利用可能なレポートの種類には次の 2 つがある。

- 「カテゴリーレポート (Category report)」: SIDS dossier を作成するレポート
- 「マトリックスレポート (Matrix report)」: 選択したカテゴリー内のすべての構成化学物質に関する全 SIDS エンドポイントの、きわめて簡潔な概要レポート

1.2.2.1 カテゴリーレポート (SIDS Dossier)

原則として、カテゴリーレポートの作成に関しては下記に示す 2 つのオプションを選択することができる。

1.2.2.1.1 すべてのカテゴリー構成化学物質に対する個別レポート

これはおそらくもっとも簡単明瞭なオプションであり、別の操作を追加することなく IUCLID ソフトウェアの通常の印刷機能を利用することができる。

カテゴリー/テンプレートデータセットのレポートは通常必要ない。これは、データが各カテゴリー構成化学物質データセットのレポートに自動的に表示されるからである。しかし、入力したデータの確認に便利のようにカテゴリーデータセットのレポートを印刷することは賢明である。

何らかの理由で個々の化学物質データセットがカテゴリー/テンプレートデータセットに割り当てられていない場合、いずれにせよカテゴリーデータセット別のレポートの作成が必要となる。

1.2.2.1.2 全カテゴリーの統合レポート

統合レポートは、すべての内容を網羅した単一の文書である。特定のエンドポイントに関するすべての Study Summary が、単一のチャプター番号および見出しのもとに表示される。このような表示方法の方が、カテゴリー内の各構成化学物質の特定エンドポイントのデータ比較が容易となる場合がある。また、他のデータセットから利用したデータの (複数の) コピーを収載する必要もなくなる。もうひとつの利点として、扱う SIDS Dossier が 1 つのみの場合には、文書管理が容易となる点が挙げられる。

統合カテゴリーレポートの作成は、現行バージョンの IUCLID でも原則として可能であるが、利用できる機能には制限があり、若干の準備手順も必要である。したがって、このオプションは、統合レポートを作成する方が個別レポートよりも本当に適している場合にのみ選択することが望ましい。たとえば、多数のカテゴリー構成化学物質に対するデータセットに少数の Study Summary しか収載されていない場合などが該当する。そのカテゴリーで定義されている番号にしたがってソートしたすべてのデータを、単一のレポートとして統合することが読みやすさを向上させる場合もある。

カテゴリーアプローチに関する現行の IUCLID 機能の落とし穴については、付属文書 1 に説明した。一方、利用可能な IUCLID の機能は、このような落とし穴を避ける方法を見つけるうえでは十分強力である。

1.2.2.2 マトリックスレポート

IUCLID 4^{*)}では、専用のマトリックスレポート (Matrix Report) ツールが利用可能となった。このツールを用いることにより、選択したカテゴリーの全構成化学物質に関する全 SIDS エンドポイントについて、概要レポートを作成することができる。主たる目的は、データの入手可能性について概要を提供すること、およびカテゴリー内のすべての構成化学物質のすべての SIDS エンドポイントを迅速かつ容易に比較

^{*)} 「マトリックスレポート」ツールは下記のウェブサイトからダウンロードできる：
http://www.technidata.de/iuclid/fs_links_d.htm のリンク『The IUCLID Matrix Report』

できるようにすることである。

このようなマトリックスレポートには、「Critical study for SIDS endpoint (SIDS エンドポイントにとって重要な試験)」というフラグが設定された試験のみが収載される。また、もっとも重要なデータフィールドのみが印刷され、フラグ、参考文献リスト、フリーテキストは印刷されない。

マトリックスレポートの機能に関する詳細な手引きは 2.3 項に記載する。このツールは、カテゴリー/テンプレートデータセットの特殊なレポートを作成するもので、カテゴリー構成化学物質のデータセットのうち、選択した入力事項しか収載しない点に十分留意する必要がある。したがって、後者をカテゴリー/テンプレートデータセットに割り当てる必要がある。

1.3 化学物質カテゴリーの設定に利用できる IUCLID の機能

IUCLID 起動時のスプラッシュスクリーン (図 3) で表示されるとおり、カテゴリーに属するすべての化学物質 (=カテゴリー構成化学物質) やカテゴリー自体のデータセットの作成、これらのデータセットへのデータの入力、レポートの作成を行うには、下記の IUCLID の機能が必要である。

- カテゴリーの識別情報作成 (IUCLID の機能：Category/Template Administration [カテゴリー/テンプレート管理])
- カテゴリーデータセットの作成 (IUCLID の機能：Category/Template Data Set Administration [カテゴリー/テンプレートデータセット管理])
- 個々の物質の識別情報作成 (IUCLID の機能：Substance Administration [物質管理])
- 個々の物質すべてに対するデータセットの作成 (IUCLID の機能：Data Set Administration [データセット管理])
- カテゴリー自体の情報 (カテゴリーの説明とカテゴリー設定の根拠を含む) のカテゴリーデータセットへの入力 (IUCLID の機能：Select/Edit Data Set [データセットの選択/編集])
- 個々のカテゴリー構成化学物質の情報および (Robust) Study Summary (=データ) の、各化学物質データセットへの入力 (IUCLID の機能：Select/Edit Data Set [データセットの選択/編集])
- オプション：データセットのマージ (IUCLID の機能：Select/Edit Data Set - Merge [データセットの選択/編集 - マージ])
- レポートの作成 (IUCLID の機能：Select/Edit Data Set - Print [データセットの選択/編集 - 印刷])

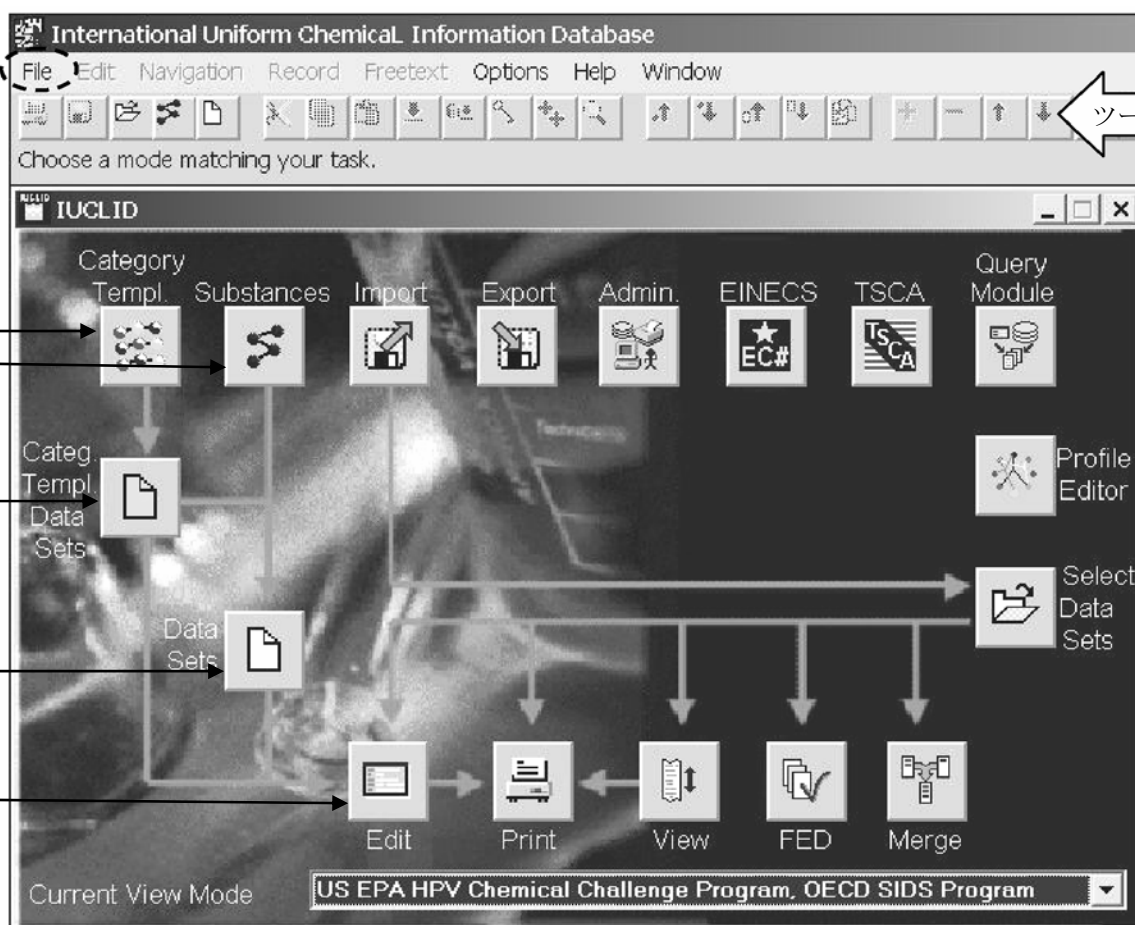


図 3. IUCLID 4 のスプラッシュスクリーン (起動画面)

上記のタスクの大部分は、スプラッシュスクリーンからだけでなく「File (ファイル)」メニュー (図 3 の点線で囲った円内を参照) やツールバーからも利用することができる。

2 提出シナリオ：基本的な『個別化学物質』カテゴリーの全構成化学物質についての個別レポート

この提出シナリオは、OECD 高生産量（HPV）化学物質点検マニュアル（2002 年 7 月）の第 3 章に概説されているとおり、基本的な『個別化学物質』カテゴリーの原則を反映したものである。IUCLID カテゴリー機能の原則を理解しやすくするため、すべてのエンドポイントを通じてカテゴリーアプローチが妥当であるという『理想的な』状況を想定するものとする。

図 4 に示した推奨ワークフローは、もっとも簡単明瞭な手順である。この手順により、カテゴリーの全構成化学物質のデータセットの個別レポート（それぞれにはカテゴリーデータセット自体に入力した情報も含まれる）で構成されるカテゴリー dossier が作成される。

個別のデータセットのそれぞれが『独立した（self-standing）』文書であると予想される場合には、カテゴリー構成化学物質ごとに個別のレポートを作成することが望ましい。このシナリオでは、『独立した』とは、それぞれのレポートがカテゴリー/テンプレートデータセット由来のすべての情報と、物質自体に関するすべてのデータを収載していることを意味する。また、代替化学物質由来のデータと、カテゴリー内の他の物質に対する参照情報も収載する場合や（オプション 1）、エンドポイントの充足のために用いた他の物質に由来する完全な Study Summary も収載する場合（オプション 2）がある。これら 2 つのオプションについては、2.2.2.3 項で詳しく説明する。

個別のレポートのかわりに統合カテゴリーレポートを作成した方が有用な場合がある。この場合、若干込み入った手順が必要となり、カテゴリー構成化学物質データセットのコピーをカテゴリーデータセットにマージする必要がある。3 項を参照。

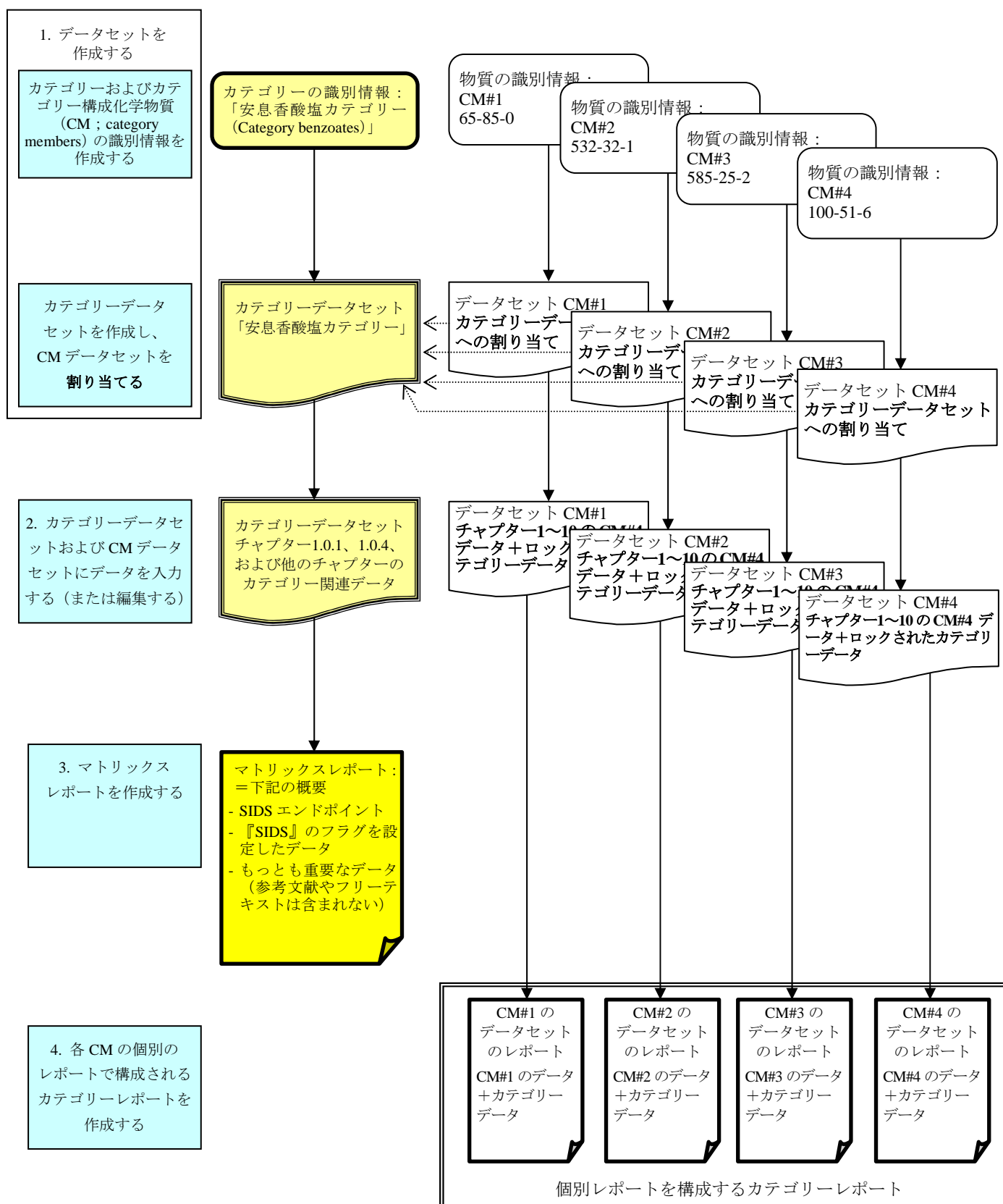


図 4. ワークフロー：化学物質カテゴリーのデータセットの定義とデータ入力、およびマトリックスレポートおよび個々のカテゴリー構成化学物質データセットに関する「個別レポート」の作成

2.1 データセットの作成

化学物質データセットの設定方法に関する詳細な手引きは 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) に提示してある。同じ原則がカテゴリー/テンプレートデータセットの定義と識別情報作成にも適用される (ただし若干の修正が必要)。利用しやすくするため、カテゴリー関連データセットのみに関連するすべてのステップを本項に概説する。

IUCLID を用いて化学物質カテゴリーを取り扱うには、下記の 2 種類のデータセットを両方とも使用する必要がある。

- 「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」

データセットを設定するには、カテゴリー構成化学物質およびカテゴリー自体について識別情報を作成しておく必要がある。IUCLID は下記の 2 つの種類を区別することを念頭におく必要がある。





- 「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 (=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。この操作に該当する IUCLID の用語は、「Substance Administration (物質管理)」または「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)」または「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、図 1 に示したとおり、IUCLID のスプラッシュスクリーン、メニューバー、またはツールバーから利用することができる。


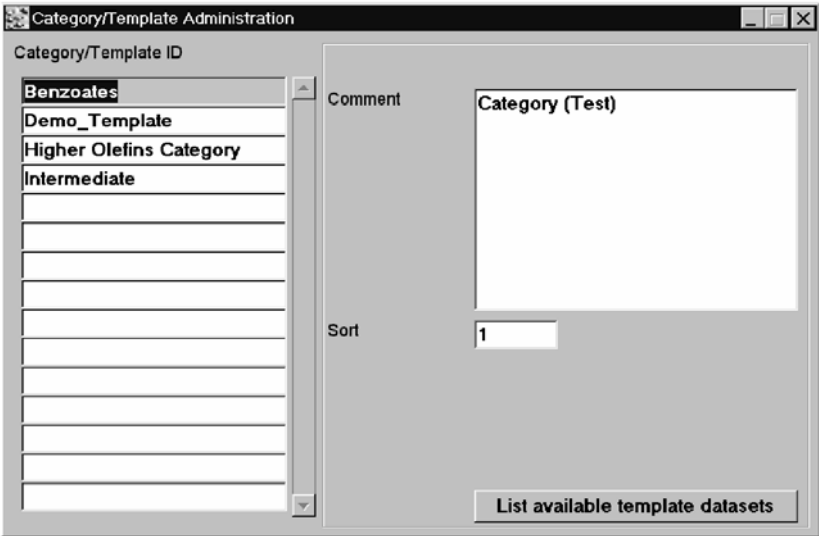



2.1.1 カテゴリーの識別情報作成 (Category/Template Administration [カテゴリー/テンプレート管理])

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カテゴリーの識別情報を作成する方法について説明する。化学物質カテゴリーの識別情報作成は、カテゴリー/テンプレート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。この作業がすでに実施済みである場合は、本項を飛ばして 2.1.2 項に進んでよい。実施済みか否かが不明な場合は、識別情報作成済みカテゴリーのリストをチェックすること (詳細はステップバイステップ・ガイドのステップ 2 を参照)。

クイック・ステップ・ガイド

1.		[File: Create/Delete Data Sets: Category/ Templates (ファイル : データセットの作成/削除 : カテゴリー/テンプレート)] を選択するか、スプラッシュスクリーン上の該当するアイコンをクリックする
2.		「Category/Templ. ID (カテゴリー/テンプレートの識別情報)」の表を表示させて、目的のカテゴリーが識別情報作成済みかどうかを確認する (識別情報作成済みの場合は、2.1.2 項に進む)
3.		カテゴリーに関する新規の記録を挿入し、カテゴリーの名称を入力する。また、任意でソート番号、コメント、ステータスを入力することもできる。
4.		変更を保存する (新規のカテゴリー識別情報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

<p>1. [File: Create/Delete Data Sets: Category/Templates (ファイル: データセットの作成/削除: カテゴリー/テンプレート)] を選択するか、スプラッシュスクリーン上の該当するアイコンをクリックする</p> 	<p>結果: 「Category/Template Administration (カテゴリー/テンプレート管理)」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) すべてのカテゴリーまたはテンプレートが一覧表示される</p> 
<p>2. 「Category/Templ. ID (カテゴリー/テンプレートの識別情報)」の表を確認する</p> 	<p>識別情報の表において、目的のカテゴリーの識別情報がすでに作成済みである場合には (例: 『Benzoates (安息香酸塩)』)、2.1.2 項に進む。</p> <p>ヒント: 上記の識別情報の表に多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)、カテゴリー名を検索する (「Query (クエリー)」アイコンまたは<F5>キー)。IUCLID での検索は大文字と小文字を区別するので注意すること!</p> <p>大文字使用の有無を含めて正確なスペルがわからない場合は、IUCLID のワイルドカード『%』を使用すること。たとえば、『Benzoates (安息香酸塩)』を検索するには「%enzo%」と入力する。</p>
<p>3.  カテゴリーに関する新規記録を挿入する</p>	<p>「Category/Templ. ID (カテゴリー/テンプレートの識別情報)」の表に、目的とするカテゴリーが存在しない場合は、下記を実施する。</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ <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 ■ カテゴリーの名称を入力する ■ コメントを入力する (任意; データセットのヘッダーには表示されない) ■ 「Sort (ソート)」フィールドにソート番号を入力する (任意; たとえば、ソート番号に『1』と入力することにより、そのカテゴリー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)
<p>4. </p>	<p><F10>キーを押すか、「Save (保存)」ボタンをクリックして、変更を保存する (カテゴリーの識別情報に関する新規の記録が作成される)</p> <p>注: 安全策として、保存せずに「Close (閉じる)」ボタンをクリックした場合には、保存するかどうか尋ねられる。</p>





2.1.2 カテゴリーデータセットの作成 (Category/Template Data Set Administration [カテゴリー/テンプレートデータセット管理])

本項では、新規のカテゴリーデータセットの作成方法について説明する。

「Category/Template Data Set Administration (カテゴリー/テンプレートデータセット管理)」を立ち上げる前に、下記の点に留意することが望ましい。


- 前項で説明したとおり、「Category/Template Administration (カテゴリー/テンプレート管理)」において、あらかじめ該当するカテゴリーの識別情報が作成されていないと、カテゴリーデータセットを作成することはできない。
- カテゴリーデータセットは、下記によって一義的に定義される。
 - (i) カテゴリーの識別情報 (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 には「Copy Data Set (データセットのコピー)」機能はない。しかし、異なる作成日を入力することにより、同一のカテゴリー識別情報および所有者に対して複数のカテゴリーデータセットを作成することは可能である。オリジナルのデータセットの入力内容を別のデータセットにマージした場合には、データセットのコピーが提供される。詳細は、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) を参照のこと。

クイック・ステップ・ガイド

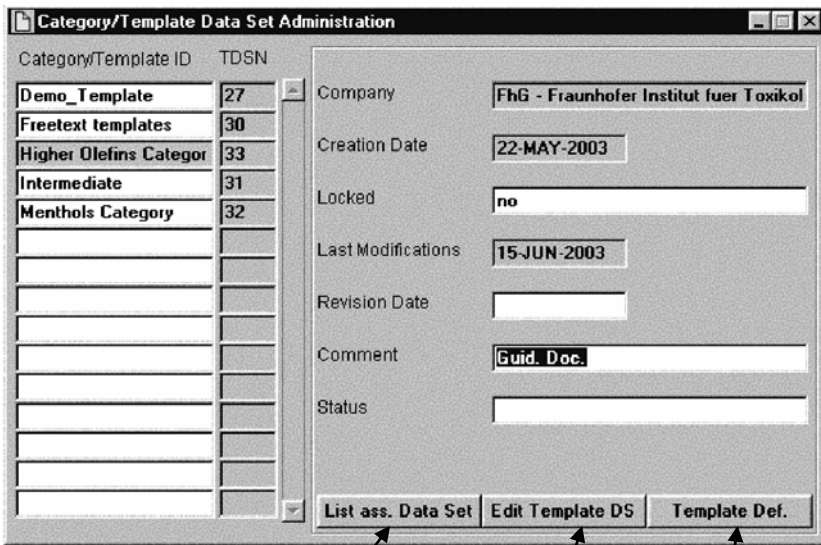
1.		[File: Create/Delete Data Sets: Category/ Template Data Sets (ファイル: データセットの作成/削除: カテゴリー/テンプレートデータセット)] を選択するか、スプラッシュスクリーン上の該当するアイコンをクリックする
2.		左の列 (Category/Template ID [カテゴリー/テンプレートの識別情報]) に、新規のカテゴリーデータセットに関する新規の記録を挿入し、ピックリストからカテゴリーを選択する
3.		データセットの識別情報の領域 (part) において下記を入力する <ul style="list-style-type: none"> 「Company (企業)」: ピックリスト 「Creation Date (作成日)」: 書式: dd-MON-yyyy 「Locked (ロック済み)」: 『no』 以外の場合 「Comment (コメント)」: データセットのヘッダーに表示させるカテゴリー名 「Status (ステータス)」: 任意; たとえば 『other: 1st draft (その他: 初回ドラフト)』
4.		変更を保存する (新規のカテゴリー/テンプレートデータセットが作成される)

詳細なステップバイステップ・ガイド

1. [File: Create/Delete Data Sets: Category/Template Data Sets (ファイル: データセットの作成/削除: カテゴリー/テンプレートデータセット)] を選択するか、スプラッシュスクリーン上の該当するアイコンをクリックする




結果: 「Category/Template Data Set (カテゴリー/テンプレートデータセット)」ダイアログボックスが開き、ユーザーが使用している IUCLID インストール環境で利用可能なすべてのデータセットが表示される:



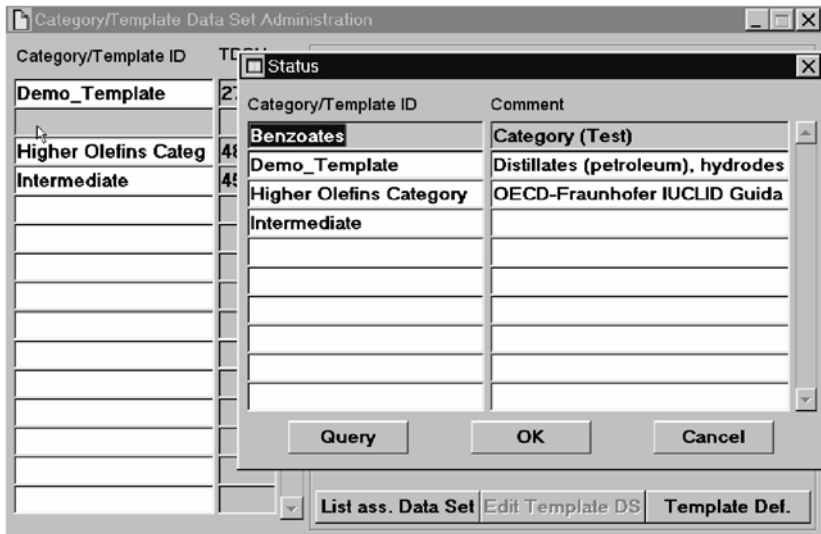
「List ass. Data Sets (割り当て済みデータセットの一覧表示)」ボタンをクリックすると、各カテゴリーデータセットに割り当てられている化学物質データセットの一覧が表示される。

「Edit Template DS (テンプレートデータセットの編集)」ボタンをクリックすると、識別情報のリストでマークしたデータセットが開く。

「Template Def. (テンプレートの定義)」ボタンをクリックすると、カテゴリー管理で入力した定義 (コメントおよびソート番号) が表示される。

2.  新規のカテゴリーに関する新規の記録を挿入する

<F6> キーを押して、左の列 (Category/Template ID [カテゴリー/テンプレートの識別情報]) に新規の記録を挿入する



ブランク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) カテゴリーのピックリストを開き、ピックリストから該当するカテゴリーを選択する

3. データセットの識別子を入力する

下記のフィールドに入力する。

- 「Company (企業)」: ピックリストから企業/機関の名称を選択する
- 「Creation Date (作成日)」を入力する (書式: dd-MON-yyyy、たとえば 26-MAY-2003)
- 「Locked (ロック済み)」: デフォルトは『no』である (ピックリストから『yes』または『for all users (すべてのユーザー向け)』を選択することにより、そのデータセットに変更が加えられるのを防ぐことができる)
- 「Comment (コメント)」: カテゴリー<名称> (ヒントを参照)
- 「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)』))

ヒント: 「Comment (コメント)」フィールドへの入力任意であるが、下記のような場合にはこのフィールドの利用が便利である。



- データセットのヘッダーにコメントが表示され、そのコメントは『Memo (メモ)』と表示される (2.2 項、ステップ 3 を参照);
- この「Memo (メモ)」フィールドに基づいてデータセットを検索するほうが容易である。たとえば、「Comment (コメント)」フィールドに「Category Benzoates (安息香酸塩カテゴリー)」と入力しておけば、『%Benz%』を検索することにより、「Benzoates (安息香酸塩)」のカテゴリーとそのすべてのカテゴリー構成化学物質データセットを検出することができる。

- 4.



<F10>キーを押すか、「Save (保存)」ボタンをクリックして、変更を保存する (新規のカテゴリー/テンプレートデータセットが作成される)

注: 安全策として、保存せずに「Close (閉じる)」ボタンをクリックした場合には、保存するかどうか尋ねられる。





2.1.3 各カテゴリー構成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。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。この作業がすでに実施済みである場合は、本項をスキップして 5 項に進んで構わない。実施済みか否かが不明な場合は、識別情報作成済みの物質のリストをチェックすること（詳細はステップバイステップ・ガイドのステップ 2 を参照）。


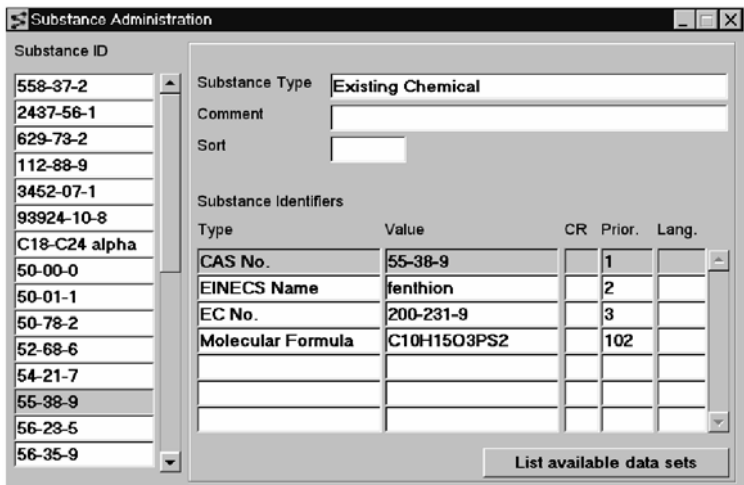


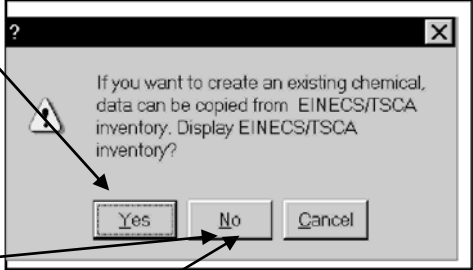
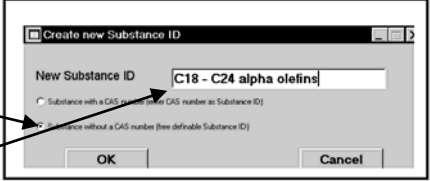
カテゴリー構成化学物質に関する物質管理に際しては、下記の点に留意する必要がある。

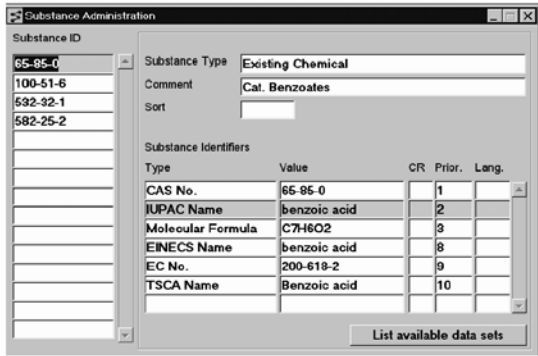


- 各カテゴリー構成化学物質の識別情報を作成しなければならない。
- 識別情報を作成する物質は、物質の定義に準じて、特定の化学物質でも規制上の理由から個別の物質として扱われる混合物でも構わない。
- 識別子には CAS 番号を用いることが望ましい (CAS 番号が使用できる場合)。
- CAS 番号が利用できない場合は、物質の名称を第 1 識別子 (primary identifier) として入力することが望ましい。たとえば、『C18 - C24 alpha olefins (C18~C24 アルファオレフィン)』など。(注：データセットのヘッダーには、第 1 から第 3 までの識別子しか表示されない)
- IUCLID のマトリックスレポートツールでは、IUPAC 名が「Chemical Name (化学名)」として使用されるため (2.3 項を参照)、IUPAC 名も識別子として追加入力することが望ましい。
- 分子構造が化学物質カテゴリーの重要な判断基準となっている場合には、分子構造も識別子として追加入力することが望ましい。
- 本プログラムの基礎となっている (underlying) EINECS または TSCA のリストから選択した物質の場合には、対応する EINECS での名称、EC 番号、TSCA での名称が、それぞれ優先順位 2~4 にデフォルトで割り当てられる。この優先順位の番号は、変更することができる。

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。 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確認する。
3.~5.		新規の記録を挿入し、物質を選択して、物質に関する情報と識別子を入力する
6.	ステップ 2~5 を繰り返す	各カテゴリー構成化学物質に対してステップ 2~5 を繰り返す
7.		変更を保存する (物質の識別情報に関する新規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

<p>1. [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、「Substance Administration (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、識別情報作成済みの全物質が、対応する識別子とともに一覧表示される:</p> 
<p>2. 「Substance ID (物質の識別情報)」の表を確認する</p> 	<p>識別情報の表で当該物質が識別情報作成済みである場合には、ステップ 5 に進み、物質の識別子が適切に設定されているかどうか確認する。</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』で始まる識別情報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>
<p>3. 新規の記録を挿入する</p>  <p>物質を選択または入力する</p>	<p>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。</p> <ul style="list-style-type: none"> マウスポインターが「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 <p>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。</p> <p>オプション 1: CAS 番号が存在する物質の場合、EINECS/TSCA インベントリに関して『Yes』を選択する。次に、目的とする物質に対してクエリーを実行し、ピクリストからその物質を選択する。</p> <p>オプション 2: CAS 番号は存在するが、EINECS/TSCA インベントリには登録されていない物質の場合は、下記を実施する。</p> <ol style="list-style-type: none"> ダイアログボックスで『No』を選択する 「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 <p>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。</p> <ol style="list-style-type: none"> ダイアログボックスで『No』を選択する 「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。  





<p>4. 物質情報を入力する</p>	<div data-bbox="451 208 991 562">  </div> <ul style="list-style-type: none"> 「Substance Type (物質の種類)」: ピックリストから選択する 「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
<p>5. 物質の識別子を入力する</p>	<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」ピックリストから関連する物質の識別子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>カテゴリー構成化学物質の場合、CAS 番号、EINECS Name (EINECS での名称)、TSCA Name (TSCA での名称) などの識別子のほかに、下記の識別子も入力することが望ましい。</p> <ul style="list-style-type: none"> IUPAC 名 (マトリックスレポートツールで必要となる) 分子式 (カテゴリー設定の根拠において、カテゴリー構成化学物質の整理番号の決定基準として用いた場合) <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有効とならない。</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 (<F6>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>
<p>6. ステップ 2~5 を繰り返す</p>	<p>各カテゴリー構成化学物質に対してステップ 2~5 を繰り返す</p>
<p>7. </p>	<p><F10>キーを押すか、「Save (保存)」ボタンをクリックして、変更を保存する (物質の識別情報に関する新規の記録が作成される)</p> <p>注: 安全策として、保存せずに「Close (閉じる)」ボタンをクリックした場合には、保存するかどうか尋ねられる。</p>

2.1.4 各カテゴリー構成化学物質に関する化学物質データセットの作成 (Data Set Administration [データセット管理])


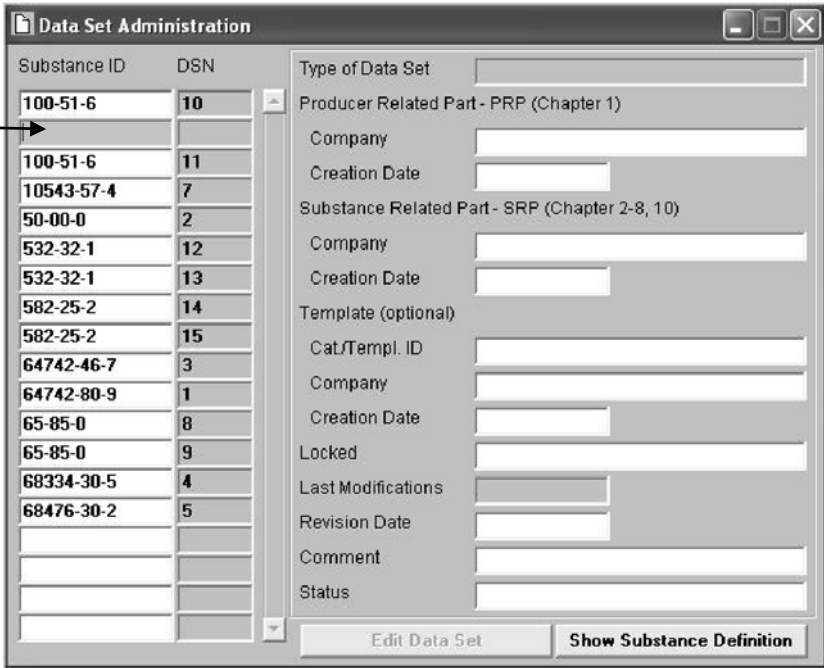



本項では、新規の化学物質データセットの作成方法について説明する。「Data Set Administration (データセット管理)」を立ち上げる前に、下記の点に留意することが望ましい。

- 「Substance Administration (物質管理)」において、あらかじめ該当する物質名の識別情報が作成されていないと、化学物質データセットを作成することはできない (2.1.3 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。
 - 物質の識別情報 (ID)
 - 企業/機関の名称
 - 作成日
- IUCLID は、作成者 (producer) および物質に関連する領域の両方で企業/機関の名称および作成日が同一であるいわゆる「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)」データセットとを区別する。原則として参照されたカテゴリー構成化学物質のデータセットを利用することは可能であるが、HPVC プログラムにおいてはおそらく重要ではないため、ここでは詳細な説明は割愛する。このデータセットのタイプに関する詳細な手引きについては、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) を参照のこと。
- 異なる作成日を入力することにより、1 つの物質および企業/機関に対して複数のデータセットを作成することができる。また、データセットのコピー (異なるバージョンなど) を作成することも可能である。たとえば、一部の情報のみを収載したコピーを作成することができる (例: 機密データ以外のデータ、「Critical study for SIDS endpoint (SIDS エンドポイントにとって重要な試験)」のフラグを設定した情報のみなど)。データセットのコピーの方法に関する手引きについては、付録 3 を参照のこと。
- マトリックスレポートツールでは、カテゴリー構成化学物質の情報のソート方法に関する情報が必要とされる。ソートは、論理的な順序設定にしたがって行うことが望ましい (たとえば、分子量の増加や、その他の重要な特性のカテゴリー全般にわたる段階的変化や一定の変化など)。利用可能な独立したフィールドは存在しないため、Technidata 社のマニュアルで規定されているとおり (2.3 項)、カテゴリー構成化学物質のソートには慣例により「Comment (コメント)」フィールドを使用しなければならない。

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.		左の列 (Substance ID [物質の識別情報]) に、新規の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 各カテゴリー構成化学物質に対してこのステップを繰り返す
3.		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し、データセットをカテゴリーに割り当てる 各カテゴリー構成化学物質に対してこのステップを繰り返す
4.		変更を保存する (新規の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

<p>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、該当するアイコンをクリックする</p> 	<p>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、利用可能なすべてのデータセットが表示される (注: 「Substance ID (物質の識別情報)」の表に識別子が表示されるということは、当該ユーザーが使用している IUCLID データベースにおいてその化学物質データセットがすでに利用可能な状態にあることを示している):</p> 
<p>2.  化学物質データセットに関する新規の記録を挿入する</p>	<p>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)</p> <p>ブランク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)。「Substance ID (物質の識別情報)」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。</p> <p>各カテゴリー構成化学物質に対してこのステップを繰り返す</p> <p>1:  上記の識別情報の表に膨大な数の入力がある場合は、クエリを起動して (「Query (クエリ)」アイコンまたは<F4>キー)、物質の識別子を入力し、クエリを実行する (「Query (クエリ)」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%』と入力した場合とは、クエリ実行後の結果が異なる。</p> <p>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こと。例: 『65-85-0』という入力は受け付けられるが、『65850』と入力した場合にはエラーメッセージが表示される。</p>

3. データセットの識別子とコメントを入力し、データセットをカテゴリーに割り当てる

各カテゴリー構成化学物質に対してこのステップを繰り返す

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 :

作成者に関する領域 (Producer Related Part) および物質に関連する領域 (Substance Related Part) :

- 「Company (企業)」: ピックリストから企業/機関の名称を選択する
- 「Creation Date (作成日)」: 日付を入力する (書式: dd-MON-yyyy)

テンプレート (任意) :

- 「Category/Template ID (カテゴリー/テンプレートの識別情報)」: 割り当てたいカテゴリーデータセットをピックリストから選択する (ヒント 1 を参照)。「Company (企業/機関)」および「Creation Date (作成日)」は自動的に入力される。
- 「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 2 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)」: 整理番号 (=カテゴリーの定義で使用了カテゴリー構成化学物質の番号) を入力する (ヒント 3 を参照)
- 「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)』)

ヒント 1: カテゴリーデータセットへの割り当ての設定は、あとで行うこともできる。データセットを他の目的に使用する場合は、データセットの割り当てを解除することもできる (7 項を参照)。

ヒント 2: ピックリストから他の選択肢 (『yes』または『for all users [すべてのユーザー向け]』) を選択しない限り、デフォルトでは『no』が入力される。この入力はあとで変更することができる。

ヒント 3: マトリックスレポートツールでは、該当するカテゴリーの定義に、物質に割り当てられた番号が入力されていることが必須である。必要に応じて、括弧内にコメントやカテゴリー名を併記することもできる (例: 『1 (CM of Cat. Benzoates) (安息香酸塩カテゴリーの構成化学物質)』)。当該カテゴリーにあとから追加の物質を挿入する余地を残しておきたい場合には、番号を 10 番おきに割り当てておくとい (10、20、30、など)。

- 4.



保存する

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

2.2 データの入力および編集

2.2.1 カテゴリー/テンプレートデータセットへのデータの入力

本項では、カテゴリー/テンプレートデータセットへのデータの入力方法について説明する。

下記の点に留意することが望ましい。

- その化学物質カテゴリーに共通する情報はすべて、対応するカテゴリーデータセットに入力する。入力された情報は、そのカテゴリーに割り当てられている各化学物質データセットに表示される。これに該当する情報の種類としては、下記のようなものが挙げられる。
- IUCLID チャプター『1 General Information (一般的情報)』**：カテゴリーベースの Dossier を提出するコンソーシアム、主導的役割を担う企業、協力企業に関する情報を、該当するサブチャプターに入力する。
- IUCLID サブチャプター『1.0.4 Details on Category/Template (カテゴリー/テンプレートに関する詳細)』**：カテゴリーの説明または識別情報（カテゴリー内における各構成化学物質の割当番号を含む）や、カテゴリー提案の根拠などを入力する。
- IUCLID のチャプター2～10**：カテゴリー内のすべての構成化学物質に適用されると考えられる情報はすべて入力する。一例を挙げると、カテゴリーを構成する物質の水への溶解度に関する情報が利用可能な場合には、カテゴリー/テンプレートデータセットのサブチャプター『2.6.1 Solubility in different media (異なる媒質における溶解度)』に全般的陳述を記載しておくことができる。こうすることにより、当該情報は各化学物質データセットに自動的に表示されることになる。

各記録の起源（データセットの情報源）に関する推奨規則 (Recommended convention) :

- IUCLID の記録（サブチャプターの入力として記録されたデータ）には、その記録の所属データセットを示す独立した識別情報フィールドが存在しない（付属文書 1 を参照）。データセットの識別情報は、各記録のヘッダー（編集または表示モードの場合）またはレポートのヘッダーに表示されるため、通常この点が問題になることはない。しかし、カテゴリー/テンプレートデータセットに由来する情報を、割り当てられているカテゴリー構成化学物質データセットのデータと一緒に印刷する場合は、データセットの情報源がわからなくなる。
IUCLID チャプター1.0.4 の特定のサブチャプターにおいて、カテゴリーデータのみが利用可能な場合は、当然のことながらこの点は問題とならない。しかし、チャプター内において、カテゴリー構成化学物質のデータと一緒にカテゴリーデータを表示させる場合には、カテゴリーデータセットに入力されている各記録にタグを付ける必要がある。タグ付けは、独立したフリーテキストタイプ「TS（被験物質）」を挿入し、そのフリーテキストにデータセットの識別情報を明記することにより行う。IUCLID のチャプター2～6 では、大部分のサブチャプターで「Test substance（被験物質）」フィールドを利用することができるが、この「Test substance（被験物質）」フィールドに入力されている被験物質の具体的な説明はタグ付けとは無関係である。
- 独立した「TS」フリーテキストの入力例：『Data set: Category Benzoates（データセット：安息香酸塩カテゴリー）』（例：カテゴリー構成化学物質データセットでは、このような「TS」フリーテキストの入力は『Data set: benzoic acid（データセット：安息香酸）』などと表示される；下記のサブセクションを参照）。
- このようなフリーテキストの入力は、IUCLID の「フィールドエディタ (Field editor)」機能を用いることにより、あとから容易に編集することができる。このフィールドエディタ機能を用いれば、データセット全体にわたってフリーテキストの入力内容の修正や調和を行うことができる。また、のちに何らかの理由によりそのようなフリーテキストの削除が必要となった場合には、この機能を用いて削除することもできる。詳細はTechnidata社の「Reference（参照）」マニュアル^{*)}を参照のこと。


^{*)} Technidata : IUCLID 4.0 - Reference manual（参照マニュアル；IUCLIDソフトウェアの「Help（ヘルプ）」メニューから利用可能）

- タグの入力先として、専用のフリーテキストタイプ「SO (情報源)」を使用しないことが望ましい。一見すると、フリーテキストタイプ「SO」はこのようなタグの入力先として好ましいように見えるが、このフリーテキストタイプは、EU 既存化学物質の規制要件を満たすことを目的として専用に設計されたものである。データセットを別のデータセットにマージした場合、IUCLID ではフリーテキスト「SO」が自動的に挿入され、ソースデータセットの企業/機関の名称が入力される。

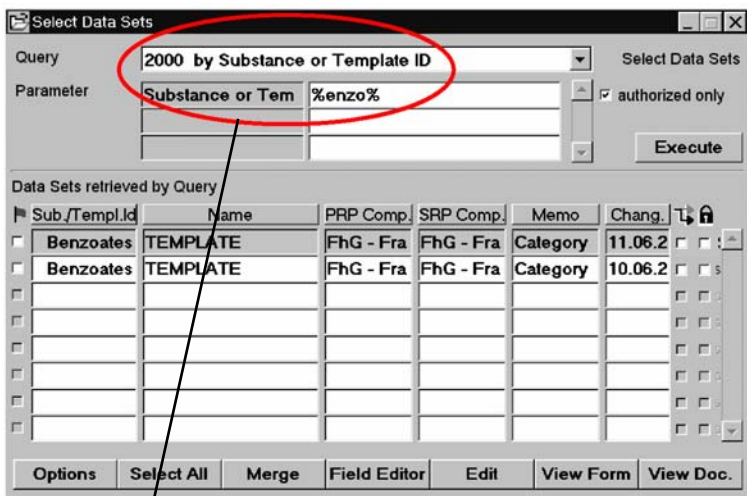
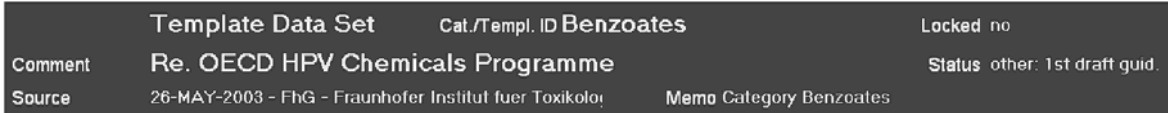
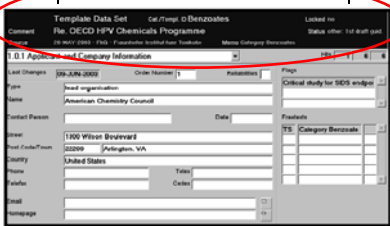
各記録の整理番号に関する推奨規則：

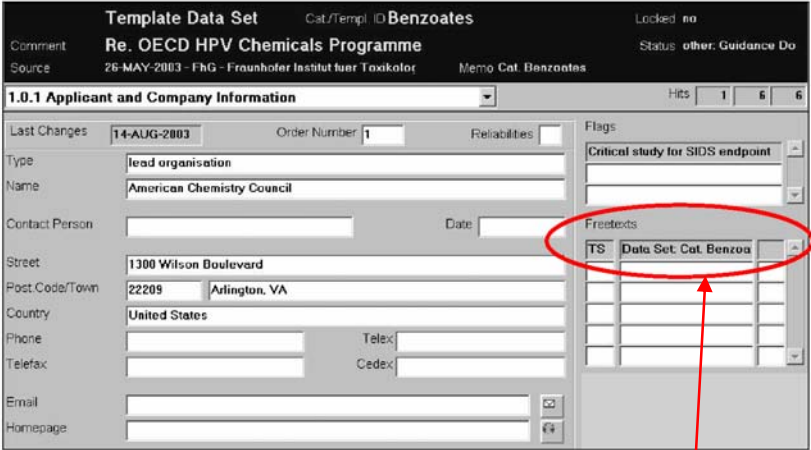

- あるデータセットから別のデータセットに転送された記録の場合、自動制御されたソートは行われない。この場合において、転送とは、データセットをカテゴリーに割り当てることによるバーチャルな転送と、マージによる現実の物理的転送のいずれかを指す。いずれの場合も、記録のソートは、オリジナルのデータセットの情報源に入力された整理番号にしたがって行われる。したがって、データセットに整理番号が入力されていないか、さまざまなデータセットに同一の整理番号が入力されていたりすると、記録が混ざり合っソートされてしまい、付属文書 1 の図 11 に示したような結果をまねく。
- したがって、レポートで論理的な記録の配列順が得られるよう、それぞれの記録には必ず整理番号を入力しておく必要がある。IUCLID の各サブチャプターに対しては、1～99 の整理番号を使用する。カテゴリー構成化学物質データセットにおいて準拠することが望ましい規則については、2.2.2 項に説明する。

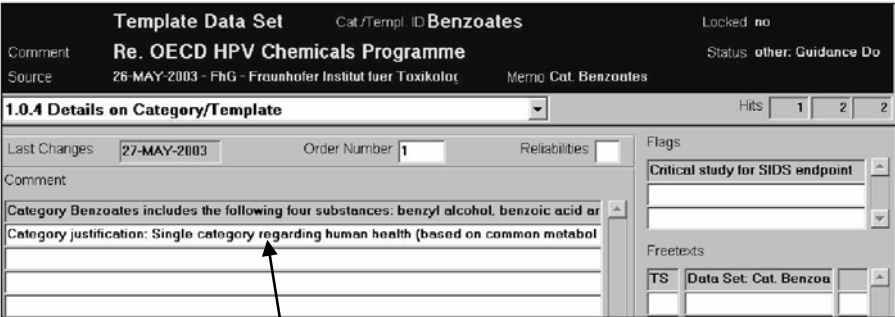
クイック・ステップ・ガイド

1.		[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)」アイコンまたは「Select Data Sets (データセットを選択)」アイコンをクリックする
2.	カテゴリーデータセットを選択する	クエリーを実行して目的のカテゴリーデータセットを検索し、編集のため開く
3.~5.	サブチャプター 1.0.1 に入力する	サブチャプター『1.0.1 Applicant and Company Information (申請者および企業に関する情報)』： 企業/機関に関する情報を入力する（主導的役割を担う機関に対して順位『1』を割り当てる）；「Critical study for SIDS endpoint (SIDS エンドポイントにとって重要な試験)」のフラグを設定する 別の企業/機関の種類について追加の記録を挿入する（適宜）
6.	サブチャプター 1.0.4 に記録を入力/編集する	サブチャプター『1.0.4 Details on Category/Template (カテゴリー/テンプレートに関する詳細)』： 最低限、次の情報を入力する：(i) カテゴリーを構成する物質について説明したコメント、(ii) カテゴリー設定の根拠
7.	その他のサブチャプターにデータを入力する	IUCLID の適切なサブチャプターに、特定の 1 つのカテゴリー構成化学物質だけに該当するのではなく、カテゴリー内のすべての構成化学物質に該当すると考えられる情報を入力する。

詳細なステップバイステップ・ガイド

1. [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)」アイコンまたは「Select Data Sets (データセットの選択)」アイコンをクリックする
- 結果: 「Select Data Sets (データセットの選択)」ダイアログボックスが開く:
- 
2. クエリーを実行して目的のカテゴリーデータセットを検索する
- 下記のいずれかのクエリーにより、カテゴリーデータセットを検索する。
- 「Query (クエリー)」フィールド: 『2000 by Substance or Template ID』
 - 「Query (クエリー)」フィールド: 『1400 by Memo of Data Set』
 - その他のクエリー
- 「Parameter (パラメーター)」フィールドに適切な検索キーを入力する (ヒント 1 を参照)
- 編集するデータセットを選択する (複数のデータセットの場合はヒント 2 を参照)
- 「Edit (編集)」ボタンをクリックしてデータセットを開く
- ヒント 1: トランケーションにはワイルドカード『%』を、任意の 1 文字にはワイルドカード『_』を使用する。例: 『_enzo%』で検索した場合、クエリー『2000』では『Benzoates (安息香酸塩)』が検索されるが、クエリー『1400』ではこのデータセットを検索することができない。これは、コメント (メモ) には『Category Benzoates (安息香酸塩カテゴリー)』と入力されているためである。検索キーを『%enzo%』とすれば、どちらのクエリーでもこのデータセットを取得することができる。
- ヒント 2: 複数のクエリー結果が得られた場合は、「Memo (メモ)」フィールドまたはその他の任意のフィールドをダブルクリックすることにより、完全な情報を表示させることができる。
3. サブチャプター 1.0.1 が開く
- IUCLID のサブチャプター『1.0.1 Applicant and Company Information (申請者および企業に関する情報)』が表示される
- ヘッダーの情報に注目すること。
- 
- データセットの種類 (デフォルトでは『Template Data Set (テンプレートデータセット)』と表示される)
 - Cat./Templ. ID (カテゴリー/テンプレートの識別情報): 「Category Administration (カテゴリー管理)」で定義した情報
 - 「Comment (コメント)」: 「Category Admin. (カテゴリー管理)」の「Comment (コメント)」フィールドに入力したテキスト
 - 「Memo (メモ)」: 「Categ. Data Set Admin. (カテゴリーデータセット管理)」の「Comment (コメント)」フィールドに入力したテキスト
 - 「Status (ステータス)」: 「Categ. Data Set Admin. (カテゴリーデータセット管理)」の対応するフィールドに入力したテキスト
- 

<p>4. サブチャプター1.0.1 の最初の記録を編集する</p>	<p>1.0.1 Applicant and Company Information (申請者および企業に関する情報)</p>  <p><u>定義済みフィールド:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> 「Order Number (整理番号)」: 入力を強く推奨。1~99 の数字を入力すること (たとえば、主導的役割を担う機関には番号『1』を割り当てる) 「Reliabilities (信頼性)」: IUCLID のチャプター1 には該当なし 「Type (種類)」(企業/機関の): ピックリストから種類を選択する 適宜、その他のフィールドに入力する <p><u>フリーテキスト:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> フリーテキストタイプ「TS (被験物質)」: 『Data Set: <category name> (データセット: <カテゴリー名>)』を入力する (たとえば『Data Set: Cat. Benzoates (データセット: 安息香酸塩カテゴリー)』) <p><u>注:</u> 適切な識別情報が提示されていないと、化学物質データセットのレポートに印刷されたデータのうち、カテゴリー/テンプレートデータセットに由来するのはどのデータであるのかが不明瞭になるため、このような入力が強く推奨される。</p> <p><u>フラグ:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> ピックリストから「Critical study for SIDS endpoint (SIDS エンドポイントにとって重要な試験)」のフラグを選択する (マトリックスレポートツールにとって重要)
<p>5. サブチャプター1.0.1 に追加の記録を挿入する</p> 	<p>追加の記録を挿入し、別の企業/機関の種類 (協力企業など) や名称を入力する (適宜)</p>

<p>6. サブチャプター1.0.4 の記録を入力/編集する</p>	<p>1.0.4 Details on Category/Template (カテゴリー/テンプレートに関する詳細)</p>  <p>注：このサブチャプター様式の「Comment (コメント)」フィールドは、IUCLID では『フィールド』としてではなく『記録』として扱われる。したがって、それぞれのコメントには、専用のフリーテキストとフラグボックスが付属する。</p> <p>最初の「Comment (コメント)」記録：</p> <ul style="list-style-type: none"> 「Order Number (整理番号)」：入力を強く推奨。1～99 の数字を入力すること（整理番号『1』は、そのコメントがレポートの最初に表示されることを意味する）。 「Comment (コメント)」フィールド：最低限、カテゴリーを構成する物質に関する説明を入力する（スクリーンショットを参照）。ヒント 1 および 2 を参照のこと！ フリーテキストタイプ「TS (被験物質)」：『Data Set: <category name> (データセット: <カテゴリー名>)』を入力する（たとえば、『Data Set: Cat. Benzoates (データセット: 安息香酸塩カテゴリー)』；ステップ 4 の説明を参照）。 注：いつも同じテキストをコピー＆ペーストする場合は、IUCLID の「List freetext of same type (同じタイプのフリーテキストの一覧表示)」機能を利用することが推奨される（カテゴリーデータセットに対してこの機能が働かない場合は、Technidata 社のウェブサイトからパッチをダウンロードしてインストールすること）。 「Critical study for SIDS endpoint (SIDS エンドポイントにとって重要な試験)」のフラグを設定する。 <p>追加の「Comment (コメント)」記録：</p> <ul style="list-style-type: none"> 2 番目の「Comment (コメント)」としては、『category justification (カテゴリー設定の根拠)』を入力することが望ましい。ヒント 2 を参照のこと。 <p>ヒント 1：物質が多数にのぼる場合は、一覧表をフリーテキスト「RM (特記事項)」として挿入することも可能である。フリーテキストタイプ「AD (添付文書)」を使って WORD または EXCEL の表を添付してもよい。</p> <p>ヒント 2：「Comment (コメント)」記録の入力文字数は、1 コメントあたり上限 240 字に制限されている。したがって、ここに入力できるのはキーワードや短いテキストだけである。詳しい説明はフリーテキスト「RM (特記事項)」として入力することが望ましい。</p> <p>マトリックスレポートツールは「Comment (コメント)」フィールドしか印刷しない。フリーテキストは一切印刷しないので注意！</p>
<p>7. その他のサブチャプターへのデータ入力</p>	<p>IUCLID の適切なサブチャプターに、カテゴリー内のすべての構成化学物質に適用されると考えられる情報を入力する（特定のカテゴリー構成化学物質だけに適用される情報は入力しない）。</p>

2.2.2 各カテゴリー構成化学物質データセットへのデータ入力

本項では、個々のカテゴリー構成化学物質データセットへのデータの入力方法について説明する。科学的妥当性があれば、データの欠落部分も他の物質のデータで充足できる可能性があるという点を考慮に入れると、本項の手引きは下記のサブセクションに分割することができる。

- カテゴリー構成化学物質自体に関するデータの入力
- 構造的類似化学物質に由来する代替データの利用
- 構造活性相関データの利用
- エンドポイントの完成を目的とした、別のカテゴリー構成化学物質に由来するデータの利用
 - オプション 1 : 他のデータソースの参照情報を収載
 - オプション 2 : 別のカテゴリー構成化学物質に由来するデータを収載
- HPV に該当しない化学物質に由来するデータの利用

2.2.2.1 カテゴリー構成化学物質自体に関するデータの入力

本項では、カテゴリー構成化学物質に関するデータの入力方法について説明する。

下記の点を考慮する必要がある。

- 各化学物質について利用可能な関連重要情報および **Robust Study Summary** は、そのカテゴリー構成化学物質に対応する化学物質データセットに入力することが望ましい。
- カテゴリーの一般的情報に含めることができない特定の情報が存在する場合を除き、通常はカテゴリー/テンプレートデータセットに入力済みの情報のほかにサブチャプター『1.0.4 Details on Category/Template (カテゴリー/テンプレートに関する詳細)』に情報を入力する必要はない。

下記の 2 つの規則は若干煩雑なものに思えるが、現時点では、限られた IUCLID の機能にうまく対処する唯一の解決策である。

各記録の起源（データセットの情報源）に関する推奨規則：

- 次の点を念頭におくこと：IUCLID の記録（サブチャプターの入力として記録されたデータ）には、その記録の所属データセットを示す独立した識別情報フィールドが存在しない（付属文書 1 を参照）。しかし、データセットの識別情報は、各記録のヘッダー（編集または表示モードの場合）またはレポートのヘッダーに表示されるため、通常この点が問題になることはない。
- したがって、各カテゴリー構成化学物質データセットに対してもっぱら個別のレポートのみを作成するのであれば、それぞれの記録にデータセットの識別情報を表示させる必要はない。2.2.1 項に概説したように、カテゴリー/テンプレートデータセットの記録をタグ付けるだけで十分である。
- しかし、入力者本人または他の者がそのような表示を必要とする場合は、各カテゴリー構成化学物質のデータセットに入力されている各記録にタグを付ける必要がある。タグ付けは、独立したフリーテキストタイプ「TS（被験物質）」を挿入し、そのフリーテキストにデータセットの識別情報を明記することにより行う。IUCLID のチャプター 2～6 では、大部分のサブチャプターで「Test substance（被験物質）」フィールドを利用することができるが、この「Test substance（被験物質）」フィールドに入力されている被験物質の具体的な説明はタグ付けとは無関係である。また、フリーテキストタイプ「TS」に入力された被験物質に関する注釈もタグ付けとは無関係である点に注意すること。
- 少なくとも下記のような場合には、そのようなフリーテキストの『タグ』を入力することが望ましい。
 - データセットから選択した一部のデータを、他の物質のデータセットにマージしようとする場合や、そのようなオプションを留保したい場合。

- 統合カテゴリーレポートを作成しようとする場合や、そのようなオプションを留保したい場合。

- 『データセット識別情報タグ』として使用される独立したフリーテキスト「TS」の入力例：

『Data set: CM#1 benzoic acid (データセット：安息香酸)』

『Data set: CM#2 sodium benzoate (データセット：安息香酸ナトリウム)』

(注：カテゴリーの説明において、カテゴリー構成化学物質 [CM] に付与された整理番号を併記することにより、さらに明確性を高めることができる)。


- このようなフリーテキストの入力は、IUCLIDの「フィールドエディタ」機能を用いることにより、あとから容易に編集することができる。このフィールドエディタ機能を用いれば、データセット全体にわたってフリーテキストの入力内容の修正や調和を行うことができる。また、のちに何らかの理由によりそのようなフリーテキストの削除が必要となった場合には、この機能を用いて削除することもできる。フィールドエディタに関する詳細は、Technidata社の「Reference (参照)」マニュアル^{*)}を参照のこと。

各記録の整理番号に関する推奨規則：


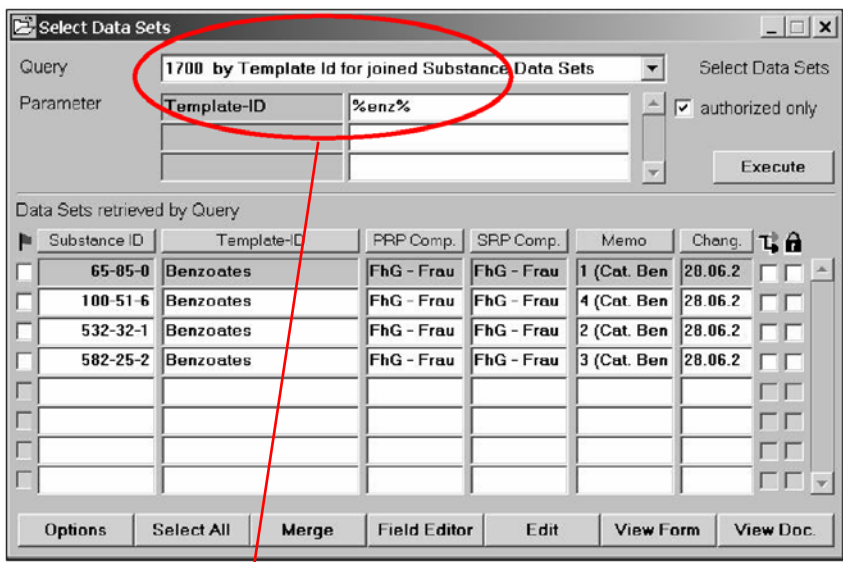
- あるデータセットから別のデータセットに転送された記録の場合、自動制御されたソートは行われない。この場合において、転送とは、データセットをカテゴリーに割り当てることによるバーチャルな転送と、マージによる現実の物理的転送のいずれかを指す。
いずれの場合も、記録のソートは、オリジナルのデータセットの情報源に入力された整理番号にしたがって行われる。したがって、データセットに整理番号が入力されていなかったり、さまざまなデータセットに同一の整理番号が入力されていたりすると、記録が混ざり合っソートされてしまい、付属文書 1 の図 11 に示したような結果をまねく。
- したがって、レポートで論理的な記録の配列順が得られるよう、それぞれの記録には必ず整理番号を入力しておく必要がある。統合カテゴリーレポートを作成しようとする場合や、そのようなオプションを留保したい場合には、このことは特に重要である。個別のレポートのみを印刷する場合には、整理番号を入力しておくことにより記録の印刷順序を規定することもできる。たとえば、カテゴリー/テンプレートデータセットに由来する任意のデータを、IUCLIDの各サブチャプターにおいて必ず最初に印刷させることができる。したがって、他のデータとデータの間のどこかに偶然印刷されるようなことにはならない。
- 個別のレポートのみを作成する場合には、2.2.1 項に概説したようにカテゴリー/テンプレートデータセットに対して 1～99 の整理番号が使用済みであると仮定して、各カテゴリー構成化学物質データの各サブチャプターに 100～199 の整理番号を入力すれば十分である。
- 統合カテゴリーレポートを作成しようとする場合や、そのようなオプションを留保したい場合には、下記の規則を適用することが推奨される (データセットのいずれのサブチャプターにも 100 以上の記録は入力されていないと仮定)：
カテゴリーデータセット：1～99；CM#1：100～199；CM#2：200～299；CM#3：300～399；etc。

^{*)} Technidata：IUCLID 4.0 - Reference manual (参照マニュアル；IUCLIDソフトウェアの「Help (ヘルプ)」メニューから利用可能)

クイック・ステップ・ガイド

1.		[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)」アイコンまたは「Select Data Sets (データセットの選択)」アイコンをクリックする
2.	化学物質データセットを選択して開く	化学物質データセット (カテゴリー構成化学物質 #1-n) に対してクエリーを実行し、編集のため開く
3.~4.	IUCLID のサブチャプターに記録を入力する (エンドポイント)	IUCLID の各サブチャプターに、そのカテゴリー構成化学物質に関する任意のエンドポイント関連情報を入力する
5.	ステップ 2~4 を繰り返す	各カテゴリー構成化学物質データセットに対してステップ 2~4 を繰り返す

詳細なステップバイステップ・ガイド

1.	<p>[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)」アイコンまたは「Select Data Sets (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 Sets (データセットの選択)」ダイアログボックスが開く:</p> 
2.	化学物質データセット (カテゴリー構成化学物質 #1-n) に対してクエリーを実行する	<p>下記のいずれかのクエリーにより、データセットを検索する。</p> <ul style="list-style-type: none"> - 「Query (クエリー)」フィールド: 『1000 by CAS Number』 - 「Query (クエリー)」フィールド: 『1700 by Template ID for joined Substance Data Sets』 - その他の適切なクエリーの種類 <p>「Parameter (パラメーター)」フィールドに適切な検索キーを入力し、編集するデータセットを選択する</p> <p>「Edit (編集)」ボタンをクリックしてデータセットを開く</p>

3. サブチャプター1.0.1 においてカテゴリーデータセットに由来する記録を表示する
- 「benzoic acid (安息香酸)」(＝例として挙げた安息香酸塩カテゴリーにおいて、整理番号『1』が付与された化学物質) のデータセットで表示されるサブチャプター『1.0.1 Applicant and Company Information (申請者および企業に関する情報)』のスクリーンショット例 (最初の記録) :

CAS No. 65-85-0 EC No. 200-618-2 Locked no

EINECS Name benzoic acid Status other: Guidance Do

Source 01-AUG-2003 - FhG - Fraunhofer Institut fuer Toxikolog Memo 1 (Cat. Benzoates)

1.0.1 Applicant and Company Information Hits 1 6 8

Last Changes 14-AUG-2003 Order Number 1 Reliabilities

Type lead organisation

Name American Chemistry Council

Contact Person Date

Street 1300 Wilson Boulevard

Post Code/Town 22209 Arlington, VA

Country United States

Phone Telex

Telefax Cedex

Email

Homepage

Flags Critical study for SIDS endpoint

Free texts

TS	Data Set: Cat. Benzoa

上図の記録は、『benzoic acid (安息香酸)』のヘッダーのもとに表示されているように見えるが、実際は、対応するカテゴリーデータ『Category Benzoates (安息香酸塩カテゴリー)』に由来する記録である点に注意すること。

この記録の識別情報は、下記によって示されている。

- (i) 書き込み禁止のシンボル (間接的)
- (ii) この記録がカテゴリーデータセットに属するものである場合に明示的に入力されるフリーテキスト「TS」(2.2.1 項のステップ 4 を参照)。

追加の記録を、このサブチャプターのみ挿入する (追加する情報の種類が、このカテゴリー構成化学物質だけに関係するものである場合)。次のステップの説明を参照。

4. IUCLID のサブチャプターに記録を入力する (エンドポイント)



IUCLID の各サブチャプターに、そのカテゴリー構成化学物質に関する任意のエンドポイント関連情報を入力する。下記に例を示す。

フラグ :

「Critical study for SIDS endpoint (SIDS エンドポイントにとって重要な試験)」のフラグを設定する (キースタディやその他の重要な試験 [マトリックスレポートに表示される試験など] の場合)

カテゴリー構成化学物質データセットの個別のレポートのみを作成する場合は、下記の推奨規則は無視しても差し支えないと思われる。

整理番号 :

- 入力事項 (記録) が複数ある場合は、入力事項のソート順を指定する整理番号を入力する必要がある。
カテゴリー/テンプレートデータセットに整理番号を入力してある場合は (2.2.1 項のステップを参照)、カテゴリー/テンプレートデータセットに割り当てられているデータセットにおいて、重複した整理番号を持つ記録が表示される場合がある。
このような事態を避けるには、本項の冒頭に記載した規則に則って整理番号を付与する必要がある。一例を挙げると、整理番号 1 のカテゴリー構成化学物質に対して 100~199 の番号を使用する (点線で囲った円内を参照)。
- 適宜、その他のフィールドに入力する (IUCLID 4 ガイダンス文書のデータ入力に関する手引きを参照)。

フリーテキストタイプ「TS (被験物質)」:

- 本項の冒頭に記載した規則に則り、独立したフリーテキスト「TS」に入力する。
具体的には、『Data Set: <cat. member no. and name> (データセット : <カテゴリー構成化学物質の番号および名称>)』を入力する (たとえば、『Data Set: CM#1 benzoic acid (データセット : CM#1 安息香酸)』)。
ヒント :「List freetext of same type (同じタイプのフリーテキストの一覧表示)」という IUCLID の機能を用いることにより、1 度入力した『タグ』はコピーして繰り返し利用することができる。
ヒント :1 つの記録内に 2 つ以上のフリーテキストタイプ「TS」を入力する場合は、フリーテキストボックスの 3 番目の列にフリーテキストの整理番号『1』を入力すること。

5. ステップ 2~4 を繰り返す

各カテゴリー構成化学物質データセットに対してステップ 2~4 を繰り返す

2.2.2.2 構造的類似化学物質に由来する代替データの利用 (QSAR)

カテゴリー外の物質（たとえば異性体、関連性の高い同族体など）に関する情報のみなし代用の場合、特定のエンドポイントを選択的に充足させるため、カテゴリー構成化学物質データセットに関連化合物のデータを入力することが望ましい。

代替データが他の化学物質データセットに由来するものである場合、このデータを編集する際には、オリジナルのデータセットにおけるデータと、カテゴリー構成化学物質データセットに組み込まれたデータが矛盾しないように編集を行うよう注意を払う必要がある。

代替データは、原則としてカテゴリー構成化学物質自体に関するデータと同様に入力することができる。したがって、2.2.2.1 項のステップ 4 の手引きを適用できる。追加の要件は、関連化合物の識別情報を定義済みフィールド「Test substance (被験物質)」およびフリーテキストタイプ「TS (被験物質)」の両方または一方に明記しなければならないという点のみである。下記のスクリーンショットの例を参照のこと (図 5)。

図 5. カテゴリー構成化学物質データセットの記録に入力された代替データの例。

注：(1) 類似化学物質の識別情報の記載に用いられる「Test substance (被験物質)」フィールド；
(2) データセット識別情報タグが記載されたフリーテキスト「TS」(該当する場合)

定量的構造活性相関 (QSAR) データは、下記の 2 つの方法により収載することができる。

- QSAR に関するデータが、すべてのカテゴリー構成化学物質に該当する範囲データである場合は、カテゴリー/テンプレートデータセットに入力する
- QSAR に関するデータが、特定物質のエンドポイント充足のために使用されるデータであり、カテゴリー全体に適用されるものではない場合は、該当する化学物質のデータセットに入力する。

定義済みフィールド「Test substance (被験物質)」において、『QSAR data (QSAR に関するデータ)』を『test substance (被験物質)』と表示する。詳細をフリーテキストタイプ「RM (特記事項)」に記載する。

2.2.2.3 エンドポイントの充足を目的とした、別のカテゴリー構成化学物質に由来するデータの利用

1.2.1.2 項において概説したとおり、OECD のマニュアルには、エンドポイント充足を目的としてデータの欠落部分に他の物質のデータを利用する方法に関し、2 つのオプションが提示されている。オプション 1 は、他の物質のデータの参照情報を挿入するだけであるが、オプション 2 では、そのようなデータ自体を該当するデータセットに完全に挿入する。

IUCLID を使って Dossier を作成した場合には、原則としてどちらのオプションも利用できる。下記に双方の方法について手引きを掲載する。しかし、IUCLID のすべてのカテゴリー機能の利点が有効となるのは、オプション 1 を実行した場合のみである点に注意が必要である。オプション 2 には重大な欠点や落とし穴がある場合がある。下記のサブセクションでは、ユーザーが採るべきオプションを決定する際の判断材料となるよう、それぞれのオプションについて長所と短所を述べる。

さらに、サブカテゴリーテンプレートを設定するという第 3 の選択肢を検討する必要がある場合もある。共通の影響データ (『 $X < LC50 < Y$ 』のような範囲データ) を持つカテゴリーの構成化学物質がサブカテゴリーに割り当てられ、このデータはそれぞれのサブカテゴリーデータセットだけに収められる。この方法は一部のケースでは有用であるが、データ欠落やデータ共有のパターンがカテゴリー内で異なっている場合にはむしろ複雑化する場合もある。

2.2.2.3.1 オプション 1 : 他のデータソースの参照情報を収載

IUCLID の各サブチャプターの入力フォームに下記のように入力することにより、他のカテゴリー構成化学物質に由来するデータの参照情報を収載することができる。

■入力可能な未使用の入力フォームがない場合は、新規の記録を挿入する。

- ① ■「Test Substance (被験物質)」フィールドにおいて、ピックリストの選択肢から『other TS (その他の TS)』を選択し、参照する物質の識別情報を具体的に記載する。たとえば、『other TS: benzyl alcohol (CAS No.100-51-6) (その他の TS : ベンジルアルコール [CAS 番号 100-51-6])』。
- ② ■フリーテキストタイプ「RM (特記事項)」を挿入し、どのデータをどのような理由で参照するのか説明する。下記のスクリーンショットの例を参照のこと。
この説明は、他の物質に由来するデータを利用することの妥当性を示す必要がある SIAR でも使用することができる。
- ③ ■「Critical study for SIDS endpoint (SIDS エンドポイントにとって重要な試験)」のフラグを設定する

注 : 未入力記録にはフリーテキストを挿入することができない。「Test substance (被験物質)」フィールドなど、少なくとも 1 つの定義済みフィールドにまず入力する必要がある。

データセットをマージしようとする場合は (統合レポート作成のため ; 3.4 項を参照)、上記のデータに加えて下記の情報も記載する必要がある。

- ④ ■「Order number (整理番号)」フィールドに適切な数字を入力する (2.2.2.1 項、ステップ #4 の説明を参照)
- ⑤ ■フリーテキストタイプ「TS (被験物質)」を挿入し、データセットの識別情報を提示する。たとえば、『データセット: CM#4』 (2.2.2.1 項、ステップ #4 を参照)。

参照しようとしているデータが、他の物質 (その化学物質カテゴリーの構成化学物質でなければならない) のデータセットにすでに収められているものであることを確認する必要がある。

この方法には、下記のような利点がある。

- データの重複が限定的 (複数のデータセットにわたってデータのコピーが 1 つまたは複数存在するようなことはない)。
- したがって、データを編集するにはソースデータセットのデータを 1 回編集するだけで済むため、

編集によるエラーが生じにくい。記載されている理論的根拠に変更がない限り、別のデータセットの参照情報セットには手を加える必要がない。

- その物質の識別情報に基づき、当該物質専用に作成した化学物質データセットに明確にデータを割り当てることができる。
- マトリックスレポートを簡単明瞭に作成することができる。具体的には、**Study Summary** として入力されているエンドポイントデータのみがマトリックスレポートに表示され、参照したデータに関するフリーテキストの説明は印刷されない。したがって、データの欠落部分を確実に把握することができる。
- 統合カテゴリーレポートを作成する際に (3.4 項を参照)、エンドポイントに入力されているすべてのカテゴリー構成化学物質に由来するすべてのデータを、1 つの項目の見出しのもとに印刷することができる。各記録に適切な整理番号が記入されていれば、データが論理的にソートされ、見やすく表示される。

この方法には、下記のような欠点がある。

- 複数のデータセットレポートを取得する必要があるため、個別のレポートを作成する場合には、読者は余計な作業を強いられる。
- 統合カテゴリーレポートを作成する場合、データセットの識別情報を提示するフリーテキスト「TS」の入力および整理番号の入力に関して推奨されている規則に準拠するよう注意する必要がある。これらの規則はあまりユーザーフレンドリーとは言えないが、現行の IUCLID ソフトウェアの不備により準拠する必要がある。これら 2 つの『タグ』の入力は、作業量としては決して多くはないが、厳密に行われなくてはならず、また入力し忘れがちである。

何らかの理由により参照する物質に関するデータセットが作成されていない場合や作成される予定がない場合、もしくは提出物に既存データセットが含まれていない場合は、上記の方法から逸脱することが妥当な場合がある。このような場合は、参照されるデータを、代替化学物質に由来するデータであるかのように完全に収載することができる (2.2.2.2 項を参照)。

The screenshot shows the IUCLID 4 software interface. At the top, the CAS No. is 100-51-6, IUPAC Name is benzyl alcohol, and Molecular Formula is C7H8O. The '5.8.1 Toxicity to Fertility' section is active. A pop-up window displays a text entry for benzyl alcohol, stating that data from benzoic acid can be used for toxicity assessment. Numbered callouts (1-5) highlight specific features: (1) Test Substance field, (2) Free Texts section, (3) Flags section, (4) Hits section, and (5) Data Set field.

図 6. 他のカテゴリー構成化学物質に由来するデータの参照情報: 「benzyl alcohol (ベンジルアルコール)」に関するデータセットの記録の例 (ヘッダーの点線で囲った円内を参照): (1) 参照したデータの被験物質識別情報、(2) フリーテキスト「RM」における理論的根拠の短い説明、(3) 設定したフラグ、(4) ~ (5) 統合カテゴリーレポートにとって重要な場合に入力

2.2.2.3.2 オプション 2 : 別のカテゴリー構成化学物質に由来するデータを収載

この方法を用いる場合は、別のデータセットから目的のデータセットに完全な (Robust) Study Summary を入力する必要がある。下記の手順にしたがって実施する。

- 入力可能な未使用の入力フォームがない場合は、新規の記録を挿入する。
- データセットの情報源から、(Robust) Study Summary を構成する完全な情報 (関連するすべてのフィールドとフリーテキスト) をコピーする。データを再度タイプするか、フィールドごとにコピー & ペーストすることによりコピーする。
- 「Test Substance (被験物質)」フィールドにおいて、ピックリストの選択肢から『other TS (その他の TS)』を選択し、その (Robust) Study Summary で使用された物質の識別情報を具体的に記載する。これは、上記のステップ 1 に対応する作業である。
- さらに、フリーテキストタイプ「RM (特記事項)」を挿入して、そのデータを利用する理論的根拠を説明することが望ましい。
この説明は、他の物質に由来するデータを利用することの妥当性を示す必要がある SIAR でも使用することができる。
- 「Critical study for SIDS endpoint (SIDS エンドポイントにとって重要な試験)」のフラグを設定する。

データセットをマージしようとする場合は (統合レポート作成のため ; 3.4 項を参照)、前項で説明したとおり、追加情報を記載する必要がある。しかし、複数の重複データを持つデータセットのマージは、下記の『欠点』で説明するとおり、いずれにしても賢明ではないと思われる。

この方法には、下記のような利点がある。

- 各カテゴリー構成化学物質のデータセットは、本当の意味で『独立している』。複数のデータセットレポートでデータを探す際に、オプション 1 の個別レポートの場合に必要なような余計な作業は生じない。

この方法には、下記のような欠点がある。

- データの重複性が高い (複数のデータセットにわたってデータのコピーが 1 つまたは複数存在する)。
- IUCLID には記録をコピーする機能がないため、同じデータを別の 1 つまたは複数のデータセットに入力する作業が煩雑である。この作業は誤記 (誤った番号の入力) をまねく可能性が高いだけでなく、同じ情報を別の方法で記載する可能性も高まる。
- 特に、データの編集が必要な場合に誤記が生じる可能性が高まる。データの編集はおそらく複数のデータセットで実施する必要があるため、煩雑である。
- データの割り当てが不明確。他の物質に由来するデータが、別の物質の識別情報として作成されたデータセットに収載される。
- 次のような理由から、マトリックスレポートの作成に不都合がある。
2.3 項のスクリーンショット例で示したとおり、カテゴリーマトリックスはデータの利用可能性の概要を示すことを目的としたものである。データの欠落がある箇所にデータのコピーが収載されると、マトリックスの作成は陳腐化してしまう。
マトリックスレポートの書式は、「Test Substance (被験物質)」フィールドやフリーテキストに入力された情報を一切収載しないように設計されている点に注意すること。このことは、特定のカテゴリー構成化学物質の行に表示されたデータが、その物質に由来するものであるのか、それとも他のカテゴリー構成化学物質に由来する代替データとして使用されたものであるのかを、読者が判断できないことを意味する。
- 同一レポート内で同一データが複数重複して印刷される可能性があるため、統合カテゴリーレポートの作成に差し障りがある。もっとも、オプション 2 を選択した場合には統合レポートは必要ないと思われる。

2.2.2.4 HPV に該当しない化学物質に由来するデータの利用

HPV に該当しない化学物質に由来するデータ（当該カテゴリーに適合するもの）を使用する場合、その物質に対する独立したデータセットを作成し、そのデータセットを HPV 化学物質の場合と同様に当該カテゴリーに割り当てる必要がある。

2.3 カテゴリーマトリックスレポートの作成

上記 (1.2.2.2 項) で概説したとおり、専用のマトリックスレポートツールを用いることができる。このツールを用いることにより、選択したカテゴリーの全構成化学物質に関するすべての SIDS エンドポイントについて、概要レポートを作成して迅速かつ容易に比較することができる。

マトリックスレポートの印刷方法に関する手引きは、ソフトウェア企業 TECHNIDATA が提供している詳細なマニュアルに記載されている。このマニュアルと、マトリックスレポートツールは、下記のウェブサイトからダウンロードすることができる：

http://www.technidata.de/iuclid/fs_links_d.htm (このサイトからリンク『The IUCLID Matrix Report』にアクセスする)

このマニュアルでは、レポート書式の基盤となるデータ構造について説明が行われている。レポートの書式には下記の基準が適用されている。

- SIDS エンドポイントのみ表の形にまとめる。
- 「Critical study for SIDS endpoint (SIDS エンドポイントにとって重要な試験)」のフラグが設定されている試験のみ印刷する。
- もっとも重要な情報のみ印刷する (「Test type (試験の種類)」、「Species (種)」、「LC50」などの選択されたフィールド)。
- 「Test Substance (被験物質)」フィールド内の情報は収載しない。
- 参考文献やフリーテキストは収載しない

マトリックスレポートツールの使用法に関して詳細なステップバイステップ・ガイドは必要ない。マトリックスレポートの印刷は、きわめて簡単である。2.3 項の説明にしたがって実施するだけで印刷できる。ただし、ステップ 4 では、レポートの種類 (印刷レイアウト) として「Category Matrix WinWord Report (カテゴリーマトリックス WinWord レポート)」を選択すること。

マトリックスレポートを適切に印刷するうえで必要なすべての要件は、前項に記載してある。具体的には、下記が該当する。

- すべてのカテゴリー構成化学物質データセットを、対応するカテゴリーデータセットに割り当てる
- 「Substance Administration (物質管理)」において、各カテゴリー構成化学物質の IUPAC 名を物質の識別子として追加入力する
- 各カテゴリー構成化学物質の「Data Set Administration (データセット管理)」の「Comment (コメント)」フィールドに、カテゴリーの定義で指定されているカテゴリー構成化学物質の番号を入力する (たとえば「1 (CM of Cat. Benzoates) (安息香酸塩カテゴリーの構成化学物質)」は、「Benzoates (安息香酸塩)」カテゴリーにおいて番号『1』が付与された構成化学物質であることを意味する)
- カテゴリーデータセットの場合に限り、カテゴリーデータセットのチャプター『1.0.4 Details on Category/Template (カテゴリー/テンプレートに関する詳細)』に、そのカテゴリーに関する情報 (カテゴリーの定義など) を入力する
- カテゴリーデータセットの場合に限り、カテゴリーデータセットのサブチャプター『10.1 End Point Summary (エンドポイントの要約)』に、特定のエンドポイントに関する要約または結論を入力する
- 「Critical study for SIDS endpoint (SIDS エンドポイントにとって重要な試験)」のフラグが設定されている関連重要記録にフラグを付ける

下記のスクリーンショットは、「Benzoates (安息香酸塩)」カテゴリーから作成したマトリックスレポート例の抜粋 (IUCLID のチャプター 1、2.1、4.1 のみ) である。

注：マトリックスレポートツールでは、自動的に『IUCLID Category Report (IUCLID のカテゴリーレポート)』という表題が印刷される。カテゴリーレポートは、全データを収載する完全なレポートとみなされるため、この表題は混乱をまねく可能性がある。したがって、この表題は『IUCLID Matrix Report (IUCLID のマトリックスレポート)』と読み替える必要がある。表題は下記の手順により修正することができる。

- メニューバーから、IUCLID のコマンド [File: Administration: Layout (ファイル：管理：レイアウト)] を選択する。
- 「Print Layout Administration (レイアウト管理の印刷)」ダイアログで、「IUCLID Matrix Report」をマ

ークする（反転表示する）。

- 「Edit Layout File（レイアウトファイルの編集）」ボタンをクリックしてレイアウトファイル「matrix.rtf」を開き、表題を変更したのち、ファイルを保存して閉じる。
- 「Register Layout（レイアウトの登録）」ボタンをクリックし、砂時計アイコンが消えるまで待つ（数分かかる場合がある）。
- 「Print Layout Administration（レイアウト管理の印刷）」ダイアログを閉じる。
- 表題変更完了。

~~Matrix~~
IUCLID Category Report

This report is designed to provide a rapid and easy comparison for all SIDS endpoints. As such, not all details of each study are displayed. For a complete description of the studies cited here refer to the dossier on the specific substance or category.

Only those studies flagged as "Critical study for SIDS endpoint" are reported.

Memo : Re. OECD HPV Chemicals Programme
Template : Category/Template ID: Benzoates

Data owner : FhG - Fraunhofer Institut fuer Toxikologie und Aerosolforschung
Creation date : 10.06.2003

Memo : Category benzoates incl. all category members

Category members		Record definition			
Subst. ID	Chemical name (IUPAC)	PRP	Date	SRP	Date
Rationale for category : Category justification: The four substances can be considered as a single category regarding human health, as they are all rapidly metabolised and excreted via a common pathway within 24hrs. Category Benzoates includes the following four substances: benzyl alcohol, benzoic acid and its sodium and potassium salt Category justification (conf'd): Systemic toxic effects of similar nature (e.g. liver, kidney) were observed. However with benzoic acid and its salts at higher doses than with benzyl alcohol. Category justification (conf'd): For environmental effects the category is less clear, however all are readily biodegradable, non-bioaccumulative and acute toxicity values are similar.					

Printing date : 15.06.2003
Number of pages : 2

IUCLID CATEGORY REPORT Id Benzoates
Date 15.06.2003

CATEGORY MATRIX: PHYSICOCHEMICAL PROPERTIES

Category Members

Subst. ID	Chemical Name (IUPAC)	Melting Point	Boiling Point	Vapour Pressure
Benzoates		= 122.4 °C ----- > 300 °C ----- = 330.6 °C ----- = -15.2 °C		

Category Members

Subst. ID	Chemical Name (IUPAC)	Water Solubility	Octanol/Water Partition Coeff. (Log P) ²
Benzoates			

CATEGORY MATRIX: ECOTOXICITY

Category Members




Subst. ID	Chemical Name (IUPAC)	Acute Toxicity to Fish	Acute Toxicity to Aquatic Invertebrates	Acute Toxicity to Aquatic Plants
65-85-0	benzoic acid	Lepomis macrochirus 44.6 mg/l ----- Salmo gairdneri 47.3 mg/l		
532-32-1	sodium benzoate			
582-25-2	potassium benzoate			
100-51-6	benzyl alcohol	Pimephales promelas 460 mg/l ----- Leuciscus idus 646 mg/l		
Benzoates				

2/2

2.4 各カテゴリー構成化学物質データセットの個別レポートの作成

本項では、すべてのカテゴリー構成化学物質データセットに対して個別のレポート（プリントアウト）を作成する方法について説明する。カテゴリーレポートに対しては、カテゴリーデータセットを印刷する必要はないので注意すること。そのようなデータは、そのカテゴリーに割り当てられている構成化学物質のデータセットに自動的に収載されるからである。しかし、管理上の目的のためカテゴリーデータセットのプリントアウトを作成してもよい。

クイック・ステップ・ガイド

1.		印刷するデータセットを選択する
2.		「Print (印刷)」ダイアログボックスを開く（必要に応じ、「All options (すべてのオプション)」チェックボックスにチェックを入れて「Flags Profile (フラグプロファイル)」、「Reliability Profile (信頼性プロファイル)」、「Date filter (日付フィルター)」を表示させる)
3.	印刷オプションを設定する	<p>下記の印刷オプションを設定する（適宜）。</p> <ul style="list-style-type: none"> • Type of report (レポートの種類；印刷レイアウト) • Output (出力) • Chapter Profile (チャプタープロファイル) • Flags Profile (フラグプロファイル；任意) • Reliability Profile (信頼性プロファイル；任意) • Date filter (日付フィルター；任意) • Delete temporary flags (一時的なフラグを削除；任意) • Sort references by text (テキストによる参考文献のソート；任意)
4.		印刷を開始する
5.	ステップ 1～4 を繰り返す	各カテゴリー構成化学物質に対してステップ 1～4 を繰り返す

詳細なステップバイステップ・ガイド

1. データセットを選択する



結果: 「Select Data Sets (データセットの選択)」 ダイアログボックスが開く:

Select Data Sets

Query: 1700 by Template Id for joined Substance Data Sets

Parameter: Template-ID %enz%

☒ authorized only

Execute

Data Sets retrieved by Query

Substance ID	Template-ID	PRP Comp.	SRP Comp.	Memo	Chang.		
65-85-0	Benzoates	FhG - Frau	FhG - Frau	1 (Cat. Ben	28.06.2	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
100-51-6	Benzoates	FhG - Frau	FhG - Frau	4 (Cat. Ben	28.06.2	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
532-32-1	Benzoates	FhG - Frau	FhG - Frau	2 (Cat. Ben	28.06.2	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
582-25-2	Benzoates	FhG - Frau	FhG - Frau	3 (Cat. Ben	28.06.2	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
						<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
						<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
						<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
						<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

Options Select All Merge Field Editor Edit View Form View Doc.

印刷するデータセットに対してクエリーを実行する

下記のいずれかのクエリーにより、化学物質データセットを検索する。

- 「Query (クエリー)」 フィールド: 『1000 by CAS Number』
- 「Query (クエリー)」 フィールド: 『1400 by Memo of Data Set』
- 「Query (クエリー)」 フィールド: 『1700 by Template ID for joined Substance Data Sets』
- その他の適切なクエリー

「Parameter (パラメーター)」 フィールドに検索文字列を入力する

印刷するデータセットを選択する

2. 「Print (印刷)」 アイコンをクリックする



結果: 「Print (印刷)」 ダイアログボックスが開く:

Print

Type of report (select a layout, see list of values - key F7)

IUCLID WinWord Report

Output

☒ Preview report in Winword

☐ Printer

☐ File

Language

ENG

Chapter Profile

Chapter: 1, 2.1, 4.1

Flag Profile

Flags: without flag, confidential, non confidential, W

Reliability Profile

Reliability: without reliability, 1, 2, 3, 4

Date Filter



from to

☐ Delete temporary flags ☒ Sort references by text

☒ All options

Print Save Changes Cancel

「All options (すべてのオプション)」 チェックボックスにチェックを入れ、「Flags Profile (フラグプロファイル)」、「Reliability Profile (信頼性プロファイル)」、「Date filter (日付フィルター)」を表示させる

<p>3. 印刷オプションを設定する</p>	<p>下記の印刷オプションを設定する (適宜)。</p> <ul style="list-style-type: none"> • Type of report (レポートの種類 ; 印刷レイアウト) : ピックリストから書式を選択する (『WinWord Report』 書式を推奨)。 • Output (出力) : 希望する出力モードを選択する。プレビューが可能なのは WinWord 形式のみである (レポートをプレビューしたあと保存することができる)。異なるレポート同士を区別するため、適切なファイル名を入力すること。 • Language (言語) : デフォルトで『ENG』と入力されている • Chapter Profile (チャプタープロファイル) : ピックリストから選択する (ヒントを参照) • Flags Profile (フラグプロファイル ; 任意) : ピックリストから選択する (ヒントを参照) • Reliability Profile (信頼性プロファイル ; 任意) : ピックリストから選択する (ヒントを参照) • Date filter (日付フィルター ; 任意) : 特定の期間内に変更または挿入された記録のみを出力する際に、日付を範囲指定する • Delete temporary flags (一時的なフラグを削除 ; 任意) : 選択した記録だけが印刷されるようにデータセットに一時的なフラグが設定されている場合、そのようなフラグを印刷後に自動的に削除することができる。 • Sort references by text (テキストによる参考文献のソート ; 任意) : 参考文献のリスト内において、各参考文献をアルファベット順に並べ替えたい場合に選択する。 <p>ヒント : その他のプロファイルは、IUCLID のプロファイルエディタを使って定義することができる。プロファイルエディタは「File (ファイル)」メニューから利用できる。</p> 
<p>4. 「Print (印刷)」ボタンをクリックする</p> 	<p>印刷を開始する</p> <p>ヒント : 「Print (印刷)」ボタンの隣の「Save Changes (変更を保存)」ボタンをクリックすると、IUCLID を終了して再起動してもすべての設定が保存される。したがって、この機能を利用する場合は十分注意すること。</p>
<p>5. ステップ 1~4 を繰り返す</p>	<p>各カテゴリー構成化学物質に対してステップ 1~4 を繰り返す</p>

3 提出シナリオ：基本的な『個別化学物質』カテゴリーの統合カテゴリーレポート

この提出シナリオは、2 項で説明したシナリオと、ステップ 4 を除いては同じである。ステップ 4 の『レポートの作成』では、カテゴリー構成化学物質データセットのコピーをカテゴリーデータセットにマージして統合カテゴリーレポートを作成する。

個別レポートとの比較による統合レポートの長所と短所は、1.2.2.1.2 項に概説してある。IUCLID ソフトウェアは本来、化学物質カテゴリーを扱うようには設計されていないため、統合カテゴリーレポートを作成したり、各データセットのデータに識別情報を使って自動的にタグ付けしたり、それらを論理的にソートしたりする際に利用できる自動機能は搭載されていない。そのような『インテリジェント』ツールが開発されれば、作業の負担が減り、現時点での欠点（本稿の付属文書 1 に概説）にうまく対処することができるものと思われる。

しかしながら、現バージョンの IUCLID ソフトウェアでも、統合カテゴリーレポートを作成することは可能である。図 7 に概説したワークフローは、おそらく実際よりも複雑に見えると思われる。背景については付属文書 1 に詳述してある。

利用できる自動的なカテゴリーレポートツールが存在しない限り、下記の手順を使用することができる。その際には次の点を考慮に入れること。

- 『データセットのタグ』が、関係するすべてのデータセットの各記録において、独立したフリーテキスト「TS（被験物質）」として挿入されていることを確認する（2.2.1 項および 2.2.2 項の冒頭部分に記載されている手引きを参照）。
個別のレポートのみを作成する場合は、実際のところこのような『タグ』は必要ないが（2.4 項を参照）、統合レポートを作成する場合はタグはもっとも重要である。タグが付いていないと、データが『ごちゃごちゃに』混ざってしまい、どのデータセットに由来するデータであるのか判別できなくなる。
- 各カテゴリー構成化学物質データセットの記録や、各カテゴリーデータセットの記録に、下記の規則にしたがって整理番号が入力されていることを確認する：カテゴリー：1～99；CM#1：100～199；CM#2：200～299；など（2.2.2 項の冒頭部分に記載されている手引きを参照）。
- 付属文書 1 に説明したとおり、『複数重複』という問題点があるため、マージ作業はオリジナルのデータセットを使用して行ってはならない。オリジナルのデータセットの代わりに、全データセットの一時的コピーを使用する必要がある。この一時的コピーは、マージ作業終了後に破棄することができる。これにより、オリジナルのデータセットは変更されず、以降に編集することができる。



3.1 データセットの作成

2.1 項の手引きを参照。

3.2 データの入力および編集

2.2 項の手引きを参照。



3.3 カテゴリーマトリックスレポートの作成



2.3 項の手引きを参照。


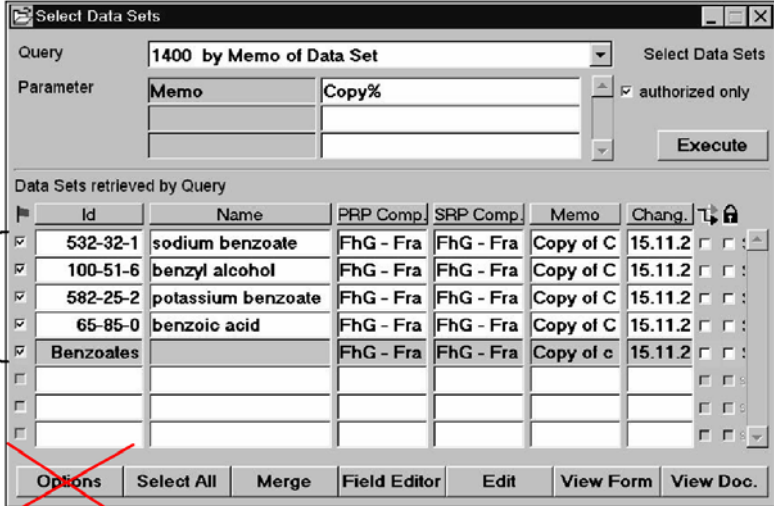
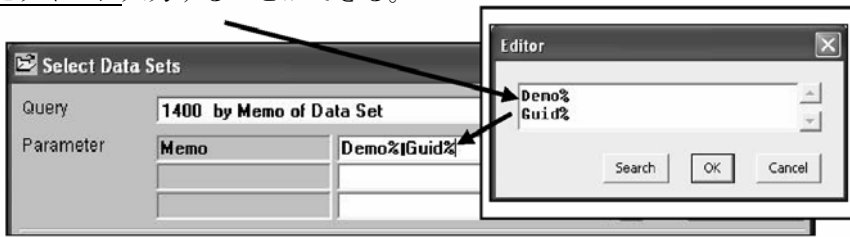
3.4 統合カテゴリーレポートの作成


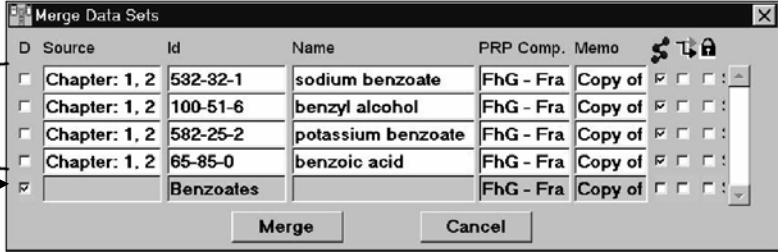



本項では、カテゴリー全体を網羅した統合レポート（プリントアウト）の作成方法について説明する。

詳細なステップバイステップ・ガイド

<p>1. カテゴリー/テンプレートデータセットのコピーを作成する</p> 	<ul style="list-style-type: none"> 2.1.2 項のステップバイステップ・ガイドに記載した手順にしたがい、新規のカテゴリー/テンプレートデータセットを作成する 「Category/Template Data Set Administration (カテゴリー/テンプレートデータセット管理)」ダイアログボックス (2.1.2 項のステップ 3) において、新規データセット用として、オリジナルのカテゴリー/テンプレートデータセットとは異なる「Creation Date (作成日)」を入力する。 「Comment (コメント)」フィールドに、適切なメモを入力する。たとえば、『Copy of cat. DS of 26 May 2003 (2003 年 5 月 26 日付けのカテゴリーデータセットのコピー)』などを入力する。このメモは、後日オリジナルとコピーのカテゴリー/テンプレートデータセットを識別する際に役立つ。 次いで、オリジナルのカテゴリー/テンプレートデータセットを新規（すなわち、コピー）のデータセットにマージする (IUCLID 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』に記載されているマージに関する手引きを参照)。
<p>2. 各カテゴリー構成化学物質データセットのコピーを作成する</p> 	<ul style="list-style-type: none"> 2.1.4 項のステップバイステップ・ガイドの記載にしたがって、それぞれの物質について新規のデータセットを作成する。 「Data Set Administration (データセット管理)」ダイアログボックス (2.1.4 のステップ 3) において、オリジナルの化学物質データセットとは異なる「Creation Date (作成日)」を入力する。 警告：コピーのデータセットをカテゴリー/テンプレートデータセットに割り当ててはならない。これは 2.1.4 項のステップ 3 の説明とは異なる点である。 「Comment (コメント)」フィールドに、適切なメモを入力する。たとえば、『Copy of CM#1 of 26 May 2003 (2003 年 5 月 26 日付けの CM#1 のコピー)』などを入力する (下記のスクリーンショットを参照)。このメモは、後日オリジナルのデータセットとコピーのデータセットを識別する際に役立つ。 次いで、オリジナルの各データセットを新規（すなわち、コピー）のデータセットにマージする (IUCLID 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』に記載されているマージに関する手引きを参照)。

<p>3. マージ</p> <p>3a. 「Select Data Set (データセットの選択)」ダイアログを開く</p> 	<p>3a. 「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か、メニューバーから [File: Open Data Set (ファイル: データセットを開く)] を選択する</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> 
--	--	--

<p>3b. 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</p> 	<ul style="list-style-type: none"> 「Query (クエリー)」フィールドで『1400 by Memo of Data Set』を選択し、適切な検索キーを入力する。例: 『Copy%』(その他の化学物質カテゴリーに関して複数のコピーデータセットが存在する場合は、ヒント 1 を参照のこと)。 「Option (オプション)」ダイアログは使用しないこと。「Merge (マージ)」機能においては、「Option (オプション)」ダイアログへの入力は無効である(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』を参照)。 ソースデータセットと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(それ以外のデータセットが表示されていない場合は、「Select All (すべて選択)」ボタンをクリックする)。 「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。  <p>ヒント 1: 『1400 by Memo of Data Set』が選択されている「Query (クエリー)」フィールドをダブルクリックすることにより、複数の検索キーを入力することができる。エディタが開き、2つの(トランケートされた)メモを<u>それぞれ独立したライン</u>に入力することができる。</p> 
--	--

<p>3c. 「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</p> <p></p>	<ul style="list-style-type: none"> 「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を選択することにより、すべてのソースデータセットを選択する。注：すべてのチャプターをマージすることも、選択したチャプターだけをマージすることもできる。 左端のチェックボックス D (=destination [マージ先]) にチェックを入れることにより、ターゲットデータセットを選択する。 「Merge (マージ)」ボタンをクリックしてマージ作業を開始する。  <ul style="list-style-type: none"> 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。
<p>4. 「Print (印刷)」ボタンをクリックする</p> <p></p>	<ul style="list-style-type: none"> 印刷するカテゴリー/テンプレートデータセットを選択する前に、「Select Data Set (データセットの選択)」ダイアログボックスでマークを付けたデータセットのチェックをすべて外しておくこと。 次に、コピーのカテゴリー/テンプレートデータセットにマークを付ける（選択する）。 最後に、「Print (印刷)」ボタンをクリックする。
<p>5. コピーのデータセットを削除する</p> 	<ul style="list-style-type: none"> 以後はそのコピーデータセットが必要ないのであれば、下記に示す簡単な操作で削除することができる。 ステップ 3b (箇条書きの最初の項目) に概説したように『1400 by Memo of Data Set』クエリーを使用してデータセットを選択する。 削除するデータセットのチェックボックスにチェックを入れる（それ以外のデータセットが表示されていない場合は、「Select All (すべて選択)」ボタンをクリックする）。警告：いったんデータセットを削除すると、もとに戻すことはできない！ヒントを参照！ ツールバー上の「Delete record (記録を削除)」ボタンをクリックするか、メニューバーから [Record: Delete (記録：削除)] を選択する。ダイアログボックスがポップアップ表示されるので、『Delete all (すべて削除)』ボタンをクリックする。 削除完了。 <p>ヒント 1：念のため、データセットを削除する前に、すべてのデータセットのエクスポートファイルを保存しておくことが推奨される！</p> 

4 提出シナリオ：一部のエンドポイントに関しては妥当性がないカテゴリー

カテゴリー設定の根拠が当てはまるのは特定のエンドポイント（たとえば、ヒトの健康への影響に関するエンドポイント）だけであり（＝パート A）、その他のエンドポイントは一定のパターンをとらない（＝パート B）という化学物質カテゴリーがある。

このような場合でも、データセットの設定やデータの入力に関する通常の手順を変更する必要はない。IUCLID のチャプター『1.0.4 Details on Category/Template（カテゴリー/テンプレートに関する詳細）』にカテゴリーの定義が記載されており、定義が当てはまるのはパート A だけであることが説明されているはずである。

レポートを作成する際には、下記に示す若干の変更が必要な場合がある。

■ 「カテゴリーレポート」:

個々のデータセットのすべてに対して個別レポートを作成する場合は、変更の必要はない。統合カテゴリーレポートの作成を望む場合は、下記に示すようないくつかのオプションがある。

- オプション 1 : すべての IUCLID サブチャプターを含む統合レポートを作成する
- オプション 2 : カテゴリー設定の根拠が当てはまるサブチャプター/エンドポイントだけについて統合レポートを作成する。3.4 項に記載されている手順のうち、変更が必要となるのはマージを行う際のチャプタープロファイルの選択だけである（3.4 項のステップ 3c を参照）。カテゴリー設定の根拠が当てはまらないパートについては、個別レポートの形式で印刷する必要がある。この場合も、適切なチャプタープロファイルを「Print（印刷）」ダイアログにおいてフィルターとして使用する。
- オプション 3 : 2.4 項に概説したように、化学物質データセットごとに個別のレポートを作成する。

■ 「マトリックスレポート」:

マトリックスレポートを作成する必要があるのは、カテゴリーに関連する IUCLID のチャプターのみである。これは、「Print（印刷）」ダイアログでチャプタープロファイルオプションを設定することで指定できる。

注：上記のレポート機能の一方または両方を使用するには、個々の化学物質データセットがカテゴリー/テンプレートデータセットに割り当てられている必要がある。選択したチャプターだけを割り当てることはできない。一方、単に割り当てられていることが、データセット全体がカテゴリーの説明に当てはまることを演繹的に意味するわけでもない。むしろ決め手となるのは、カテゴリー/テンプレートデータセットのサブチャプター 1.0.4 に入力されているカテゴリーに関する情報である。

いずれの場合も、必要に応じ、2 つのパートを 2 つの化学物質データセットに分割するという方法をとることもできる。これは、それぞれの物質に対して異なる 2 つのデータセットを作成するだけで実施できる。2 つのデータセットの一方をカテゴリー/テンプレートデータセットに割り当て、カテゴリー設定根拠が当てはまるチャプター/エンドポイントにだけデータを入力する。もう一方のデータセットは割り当てを行わず、カテゴリー設定根拠が当てはまらないチャプターにデータを入力する。

5 提出シナリオ：漸増パターンが異なるサブカテゴリー

パート A とパート B はどちらも化学物質カテゴリーの基準を満たしている場合があるが、それらのカテゴリー構成化学物質は、カテゴリー全体にわたって異なっているか、異なる漸増パターンにしたがっている。このような場合は、下記のような変更を行うことを検討する必要がある。

- 異なる 2 つのカテゴリーデータセットを作成してデータを入力する（一方はパート A 用、もう一方はパート B 用）。
- 各カテゴリー構成化学物質に対し、独立したデータセットを作成する（1 つはパート A 用、1 つはパート B 用）。パート A およびパート B のカテゴリー定義にしたがったナンバリングシステムを使用すること。該当するエンドポイントに関連するデータのみをデータセットに入力する。
- 「カテゴリーレポート」：
個々のデータセットのすべてに対して個別レポートを作成する場合は、変更の必要はない。結果的に、各カテゴリー構成化学物質データセットに対してパート A とパート B のレポートが得られることになる（両パートをマージすれば、1 つの物質に対して 1 つのレポートだけを得ることができ、これを行うには、ソースデータセットをオリジナルの段階のまま保つために、ターゲット（マージ先）データセットとして第 3 のデータセットを使用する以外に手段がない）。
2 つのカテゴリーパートに対して統合レポートを作成したい場合は、必要なマージ作業と印刷作業を、(i) カテゴリーのパート A と (ii) カテゴリーのパート B に対して個別に行う必要がある。
- 「マトリックスレポート」：
2 つのマトリックスレポートを作成しなければならない。つまり、(i) カテゴリーのパート A に対するレポートと、(ii) カテゴリーのパート B に対するレポートを作成する。

6 提出シナリオ：構造的特徴に基づくサブカテゴリー

化学物質カテゴリーは、膨大な数の化学物質、化学反応生成物、混合物で構成されている場合があるが、カテゴリー内のすべての物質は必ず何らかの重要な特徴を共有している。それでも、構造的特徴、分子量、あるいはその他の基準に基づいて、カテゴリー構成化学物質をサブカテゴリーに分類する必要があることがある。

現行の IUCLID ソフトウェアでは、複数の割り当てを設定することができない。このことは、サブカテゴリーの構成化学物質のデータセットを、サブカテゴリーを反映する 1 つのカテゴリー/テンプレートデータセットに割り当てることしかできず、後者のデータセットをメインカテゴリーには割り当てられなくなることを意味する。

したがって、サブカテゴリーは、それぞれ独立したカテゴリーのように扱う必要があり、サブカテゴリーごとに本ガイダンス文書に記載されているワークフローや手順にしたがう必要がある。

また、メインカテゴリーに対するカテゴリーデータセットを作成し、カテゴリー全体に共通するデータを入力することもできる。特に、カテゴリーの定義を、サブカテゴリー作成の理論的根拠とともに、IUCLID のチャプター『1.0.4 Details on Category/Template（カテゴリー/テンプレートに関する詳細）』に収載することが望ましい。また、「Applicant and Company Information（申請者および企業に関する情報）」（サブチャプター 1.0.1）、「Use Pattern（用途）」（サブチャプター 1.7）、または「Source of Exposure（暴露源）」（サブチャプター 1.10）がすべてのサブカテゴリーにおいて共通する場合は、それらの情報もメインカテゴリーのデータセットに挿入することが望ましい。このデータセットのレポート（プリントアウト）は、全サブカテゴリーのレポートの前に出力することが望ましい。

7 別の目的のための構成化学物質データセットの使用

時として、特定の化学物質カテゴリーにおいて作成した化学物質データセットを、他の目的に使用する必要が生じることがある。たとえば、別の化学物質プログラムでの使用がこれに該当する。さらには、別の化学物質カテゴリーの構成物質として使用されることもある。

警告：データセットに変更を加えたり、他の目的に使用したりする際には、後日、元のデータセットが必要となる場合に備え、必ずあらかじめエクスポートファイルを作成して保存しておく必要がある。作成日と企業/機関の名称が同一のデータセットをインポートすると、現在のデータセットが上書きされてしまうことを念頭においておくこと！

7.1 割り当てが解除されたデータセットの使用

カテゴリー構成化学物質データセットは、他の目的や提出に使用することが可能である。カテゴリー/テンプレートデータセットに由来するデータを他の目的に使用することは望ましくないと仮定した場合、必要となるのはデータセットの割り当て解除だけである。これにより、カテゴリーデータは自動的に削除される。また、「Comment (コメント)」フィールドと「Status (ステータス)」フィールドに入力されている情報を修正することが望ましい。手順は下記のステップバイステップ・ガイドにおいて説明する。

さらに別の修正が必要となる場合もある。たとえば、異なるフラグ設定が必要となることがある。オリジナルのカテゴリー構成化学物質データセットに変更を加えていることをしっかり認識すること。保存されているエクスポートファイルをインポートすることにより、オリジナルのカテゴリー構成化学物質データセットを復活させることができる。

[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、
該当する
アイコンをクリックする



結果: 「Data Set Administration (データセット管理)」ダイアログが開く。

- 左の列 (Substance ID [物質の識別情報]) において、クエリーを起動し (<F4>キー)、目的の物質 (たとえば『65-85-0』) を検索する (<F5>キー)。
- 関連するデータセットを選択し、「Template (optional) (テンプレート [任意])」見出し下の3つのフィールドの入力内容を削除する(スクリーンショットの点線で囲った円内を参照)
警告: 「DELETE」キーもしくは「BACK SPACE」キーを使用すること。IUCLIDの「Delete record (記録を削除)」コマンドを使用してはならない! このコマンドを使用すると、データセット自体が削除されてしまう!
- 「Comment (コメント)」フィールドと「Status (ステータス)」フィールドを適宜修正する

Substance ID	DSN
65-85-0	13
65-85-0	14

Type of Data Set	Harmonised Data Set (PRP-SRP)
Producer Related Part - PRP (Chapter 1)	
Company	FhG - Fraunhofer Institut fuer Toxikologi
Creation Date	01-JUN-2003
Substance Related Part - SRP (Chapter 2-8, 10)	
Company	FhG - Fraunhofer Institut fuer Toxikologi
Creation Date	01-JUN-2003
Template (optional)	
Cat./Templ. ID	Benzotates
Company	FhG - Fraunhofer Institut fuer Toxikologi
Creation Date	01-JUN-2003
Locked	no
Last Modifications	28-JUN-2003
Revision Date	
Comment	1 (Cat. Benzotates)
Status	other: Demo

7.2 データセットのコピーの使用

カテゴリーの設定を維持したいという理由から、データの割り当てを解除できない場合は、データセットのコピーを作成して他の目的に使用する方法が適している。

また、改変したデータや、データのサブセットのみを、他の目的で提出したい場合も考えられる。たとえば、チャプター1 の情報を変更する場合や、追加情報の入力が必要な場合がこれに該当する。現行の IUCLID ソフトウェアでは、データセットのエクスポートや印刷の際にフィルターとして利用できる『目的またはプログラム別』のフラグ（EPA-HPVC、SIDS、EU BPD、EU のリスク評価など）を設定する手段がないため、データセットのコピーを経由する『迂回』が現時点では唯一の方法である。

下記のワークフローにしたがってオリジナルのデータセットのコピーを作成する。

- 目的の物質に対して別のデータセットを作成する。その際、カテゴリーデータセットへの割り当ては行わないこと。
- 既存データセットのすべてのチャプターを新規データセットにマージする。
- 新規データセットを編集して、チャプター1 で必要な変更をすべて行う。
- データセットを提出する。

オリジナルのデータセットにおいてチャプター2～8 および 10 が編集されており、それらの変更を新規のデータセットに取り込む必要がある場合は、単にこれらのチャプターを新規データセットに再度マージするだけでよい（チャプター1 は除外すること！）。変更された記録（入力内容）は、このマージ作業により新規の記録として挿入される点に注意すること。したがって、既存の重複記録を削除する必要がある。変更されていない記録は、同一の入力内容で上書きされるため、変更されずに残る。

データセットの編集に際して厳正に規則が適用されていないと、このオプションでは同じ物質に対して矛盾するデータセットが作成される危険性が多少なりとも存在する点に注意すること。

8 カテゴリー関連データセットのエクスポートとインポート

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）に記載されているデータ交換の原則は、カテゴリー関連データセットにも当てはまる。したがって、下記の手引きには、カテゴリーの場合だけに有用と思われるヒントに限って提示する。

下記の点に留意すること。

- カテゴリー構成化学物質データセットをエクスポートすると、対応するカテゴリーデータセットが自動的にエクスポートファイルに収載される。
- 個々のデータセットに対して個別にエクスポートファイルを作成することも、カテゴリーを構成するすべてのデータセットに対して 1 つのエクスポートファイルを作成することもできる。
- 3 項のワークフローオプションにしたがって統合レポートを作成した場合、マージ後のカテゴリーデータセットのエクスポートファイルを提出することは望ましくない。受領した機関や企業が、マージ後のデータセットに編集を加えてしまう恐れがある。必ず統合レポートを、すべてのカテゴリー構成化学物質データセットのエクスポートファイルとともに提出すること。
- カテゴリー構成化学物質データセットのエクスポートファイルをインポートする際、対応するカテゴリーデータセットが「Import Data Sets（データセットのインポート）」ダイアログボックスに表示される。カテゴリー全体を確実にインポートするため、このデータセットもインポート対象に含めることが望ましい。

付属文書 1 : カテゴリーに関する IUCLID 4 の制約

この付属文書では、現行の IUCLID ソフトウェアが抱える制約の中でもっとも重要なものについて詳しく説明する。主にマージ作業と統合レポートの作成について説明するが、IUCLID を用いた化学物質カテゴリーの取り扱いでは、識別情報や記録の整理番号に関する短所も付随することがよくある。

背景を理解することにより、本ガイダンス文書で推奨されている一部の手順が若干複雑である理由や、「Getting Started (基本的な使用法)」マニュアル^{*)}に記載されている手順の使用が推奨されない理由をより十分に理解することができると思われる。「Getting Started (基本的な使用法)」マニュアルでは、下記のワークフローが提唱されている。

- すべてのカテゴリー構成化学物質データセットを、対応するカテゴリーデータセットに割り当てる。
- すべてのカテゴリー構成化学物質のデータを、マージによりカテゴリーデータセットに組み込む。
- すべてのカテゴリー構成化学物質のデータが収載されたカテゴリーデータセットのレポートを作成する。
- マージ作業後に、カテゴリーデータセットに修正/編集を行う。

この方法には次のような落とし穴が存在する。

重複 :

カテゴリー構成化学物質データセットのデータをカテゴリーデータセットにマージすれば、目的とする結果を得ることはできる。つまり、カテゴリー構成化学物質データセットに由来するすべての入力内容をカテゴリーデータセットに収載することができる。しかし、このようなマージ作業は、下記のような望ましくない重複をまねく。

- 各カテゴリー構成化学物質データセットにおいて、それぞれの入力内容（記録）が重複して収載される。重複する 2 つの記録のうち、一方は書き込み禁止である（図 8 を参照）。
- 書き込み禁止であるにもかかわらず、各カテゴリー構成化学物質データセットに、他のカテゴリー構成化学物質データセットに由来するすべての入力内容も収載される。

注：従来のマージ作業によって生じる複数重複を図 9 に図解した。3 項で提唱されているワークフローでは、上記の欠点を回避する技として、データセットの一時的コピーを利用する手順が導入されている。

重複が個々のデータセットのレポート作成に及ぼす影響

上記のような重複が生じている場合、マージ作業後のカテゴリー構成化学物質データセットに対して個別レポートを作成することは賢明ではない。すべてのデータと Study Summary が繰り返し印刷されてしまうためである。

重複がデータセットの修正/編集に及ぼす影響

カテゴリーデータセットが混乱した状態となっているため、「Getting Started (基本的な使用法)」マニュアルで推奨されているとおり、編集はすべて中央データセット（すなわち、マージ後のカテゴリーデータセット）に行う必要がある。しかし、これは好ましくない。編集は、中央データセットではなく、すべて個々のカテゴリー構成化学物質データセットに行うことが望ましい。そうしないと、カテゴリーデータセットに割り当てられた個々のデータセットの設定を作成する意味がなくなる。

^{*)} 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)

Original Record (Left):

- CAS No. 65-85-0
- Molecular For C7H6O2
- IUPAC Name benzoic acid
- Source 26-MAY-2003 - FhG - Fraunhofer Institut fuer Toxikolo
- Memo 1 (Category Benzoates)
- 4.1 Acute/Prolonged Toxicity to Fish
- Last Changes 08-JUN-2003
- Order Number 100
- Type static
- Species Lepomis macrochirus
- Unit mg/l
- Exposure Period
- NOEC 10
- LC0
- LC50 44.6

Merged Record (Right):

- CAS No. 65-85-0
- Molecular For C7H6O2
- IUPAC Name benzoic acid
- Source 26-MAY-2003 - FhG - Fraunhofer Institut fuer Toxikolo
- Memo 1 (Category Benzoates)
- 4.1 Acute/Prolonged Toxicity to Fish
- Last Changes 08-JUN-2003
- Order Number 100
- Reliability 2
- Flags
- Type static
- Species Lepomis macrochirus
- Unit mg/l
- Exposure Period 96 (hours)
- NOEC 10
- LC0
- LC50 44.6

Labels:

- オリジナルの記録 (Original Record)
- 重複した記録、書き込み禁止 (Duplicate record, no entry allowed)

図 8. カテゴリー構成化学物質データセットを対応するカテゴリーデータセットにマージした場合に重複表示される記録の例

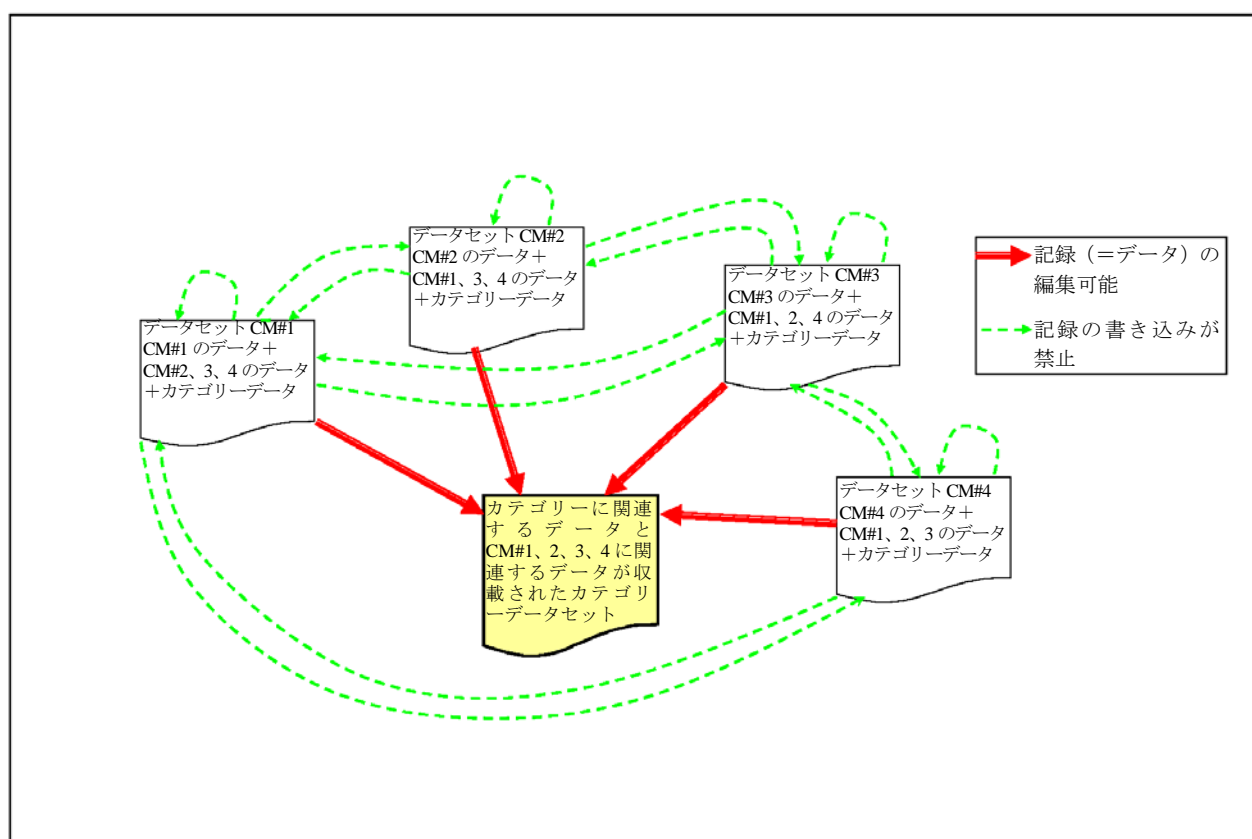


図 9. 落とし穴 : マージ後の複数重複

物質の識別情報が不明瞭となるリスク :

IUCLID の入力フォームには、その記録の所属データセットを示す独立した識別情報フィールドが存在しない。そのため、『手入力による修正』を行わないと、マージ後のカテゴリーデータセットのレポート（統合カテゴリーレポート）は非常に読みにくいものとなり、役に立たない場合さえある。

マージを行わない場合でも、物質やデータセットの識別情報が不明瞭となるリスクは残る。なぜなら、カテゴリー構成化学物質データセットのレポートには、割り当てられたカテゴリーデータセットに入力されているデータも収載されるからである。

このような理由から、図 10 に示す例で実施しているように、データセットに新規の記録を入力する際には必ずタグとしてフリーテキストタイプ「TS（被験物質）」に入力するよう本ガイダンス文書で強く推奨している。

The screenshot shows the IUCLID 4 data entry interface for 'benzoic acid'. Key fields include CAS No. 65-85-0, EINECS Name benzoic acid, and Source 01-AUG-2003 - FHG - Fraunhofer Institut fuer Toxikologie. The '4.1 Acute/Prolonged Toxicity to Fish' section is active, showing test results for Lepomis macrochirus. Two areas are highlighted with red dashed circles: the 'Order Number' field (value 100) and the 'TS' tag in the 'Freetexts' list (value 'Data Set: CM#1: benz').

図 10. 明確に入力された整理番号とデータセット識別情報タグの例（点線で囲った円内）

記録のソートを制御できない :

データセットのカテゴリーへの割り当てまたはマージによってあるデータセットから別のデータセットに転送された記録の場合、自動制御されたソートが行われない。どちらの場合も、記録はオリジナルのデータセットの情報源に入力された整理番号にしたがってソートされる。IUCLID では、記録の整理番号入力が義務付けられてさえいない。したがって、データセットに整理番号が入力されていなかったり、さまざまなデータセットに同一の整理番号が入力されていたりすると、記録が混ざり合ってソートされてしまい、図 11 に示したような結果をまねく。

このような理由から、本ガイダンス文書では、レポート内において記録が論理的な順序で配列されるように（図 11 の右端の列を参照）、各記録に整理番号を入力するよう推奨している（図 10 の点線で囲った円内を参照）。提唱されている規則を遵守するには、ある程度の時間がかかるが（2.2.2 項を参照）、カテゴリーレポートを読む際にはその苦勞が報われる。

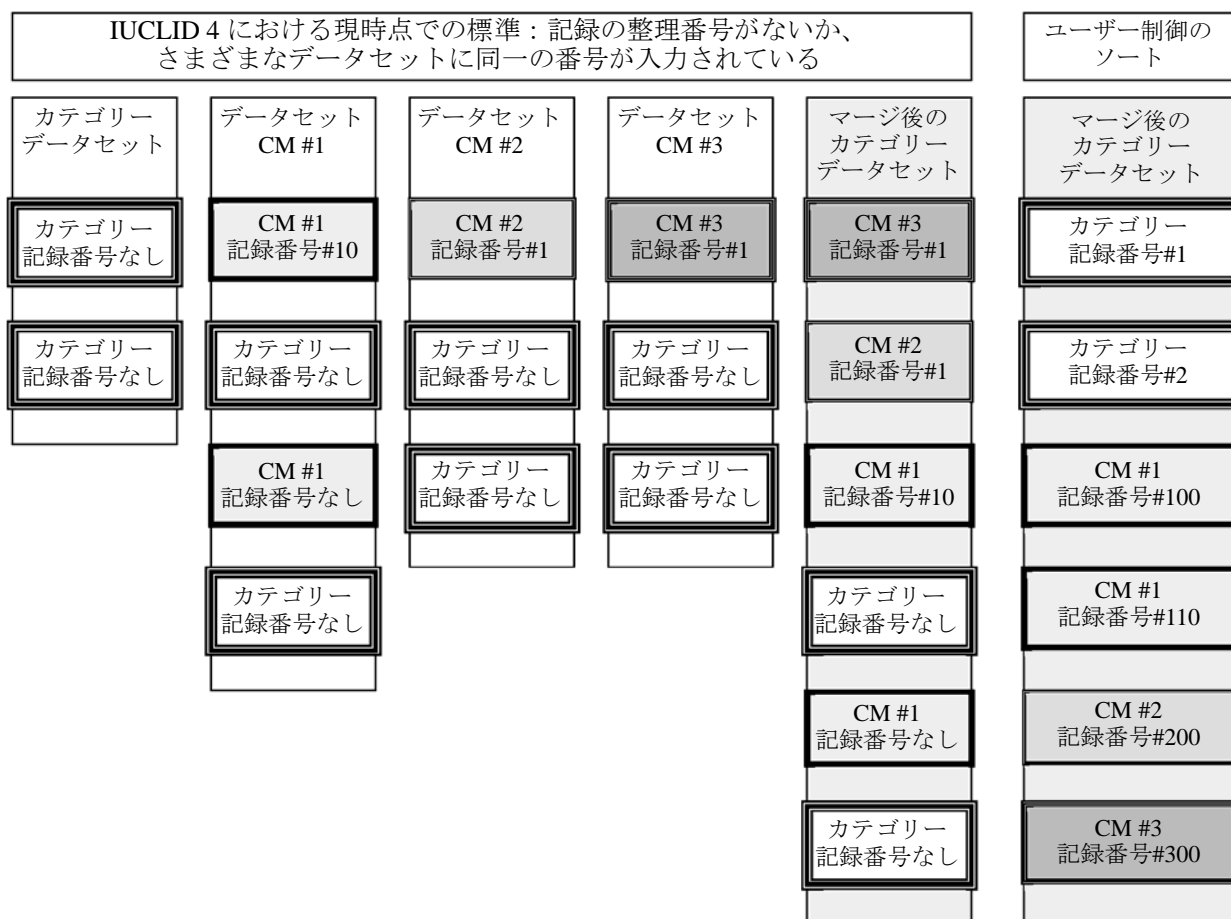


図 11. 制御されていないソート（現行の IUCLID 4）と、
所定の規則に則ったユーザー制御のソート
（カテゴリー：#1～99；CM#1：100～199；CM#2：200～299；など）の比較

注：統合カテゴリーレポートを作成することができる『インテリジェントな』カテゴリーレポートツールの開発が提唱されている。実現すれば、このツールにより、各データセットの各記録に (i) データセット識別情報タグを有する特別なフリーテキストタイプや、(ii) 補正された整理番号が自動的に挿入され、すべてのデータセットがマージされたのち、改良されたレイアウトを用いてマージ後のデータセットのレポートが作成されることになる。このツールによって、レポート作成後にすべてのデータセットがリセットされるため、以降の改訂作業はすべてオリジナルのデータセットに対して実施することができる。このようなツールが利用可能となれば、本ガイダンス文書に付属文書を追加する予定である。