

# 環境中の化学物質のモニタリング情報を管理するプラットフォーム 「ChemTHEATRE」の構築と活用

<https://chem-theatre.com/>



愛媛大学 沿岸環境科学研究センター  
仲山 慶



Licensed under a Creative Commons表示4.0国際ライセンス  
(c) 2018 仲山 慶(愛媛大学・沿岸環境科学研究センター)

<http://www.team-fische.com/>

# ChemTHEATRE トップページ(<https://chem-theatre.com/>)



About

ChemTHEATRE Wiki

Project Search

Sample Search

Chemical Search

Register your data:

[register@chem-theatre.com](mailto:register@chem-theatre.com)

For inquiry:

[info@chem-theatre.com](mailto:info@chem-theatre.com)



## Welcome to ChemTHEATRE

ChemTHEATRE: Chemicals in the THEATRE (Extractable and Reusable E-Archive for Toxicology and Responsible-care Engagement) is the platform to deposit and visualize monitoring data of environmental contaminants more effectively than ever.

You can currently use so many monitoring data of environmental contaminants in scientific journals or reports by public organizations, but unfortunately in a variety of forms such as texts or excel files. That leads to poor use of such valuable data, which can be input data for the modeling and materials for validation.

To tackle this problem and make use of such data, we first put together such scattered data in one database: ChemTHEATRE, properly and well organized. It will ensure traceability of chemicals and help you simulate the environmental behavior and fate, or assess the risk. Moreover, ChemTHEATRE will make the prediction of global chemical pollution easier in cooperation with external database or other tools.

ChemTHEATRE was supported through a GrandData of Long-range Research Initiative (LRI) by Japan Chemical Industry Association (JCA).

## Released Entries

### Sample Top10

Sample	#Samples
Home samples	915
Water	477
Sediment	404
<i>Nephrocampa phocaenoides</i>	214
Soil	130
Air	130
<i>Mytilus galloprovincialis</i>	127
<i>Katsuwonus pelamis</i>	87
<i>Nyctembaux progamoides</i>	86
<i>Mytilus edulis</i>	75

### Chemical substance Top10

Chemical	#Data
Organochlorines PCBs	4847
Flame retardants PBDEs	4306
PCBs	3524
Organochlorines Co-PCBs	3082
Phenols	2408
Organochlorines PCDFs	2212
Metals/Elements	2130
Perfluoroalkyl and polyfluoroalkyl substances	2025
Organochlorines PCDDs	1739
Flame retardants	1411

### Contributor Top10

Submitted by	#Project
Chime University	36
National Institute for Environmental Studies	4
Kagoshima University	4
Fisheries Research and Education Agency	3
Niigata National University	1
National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)	1
Chinese Academy of Sciences	1
Health Research, Inc. (New York State Department of Health)	1
University of Shizuoka	1
Center for Environmental Science in Suitama	1



## 研究・開発体制

### 【ChemTHEATREの構築・運営】

- 国末達也(愛媛大学)
- 半藤逸樹(新潟大学)
- 宇野誠一(鹿児島大学)
- 磯部友彦(国立環境研究所)
- 大野暢亮(兵庫県立大学)

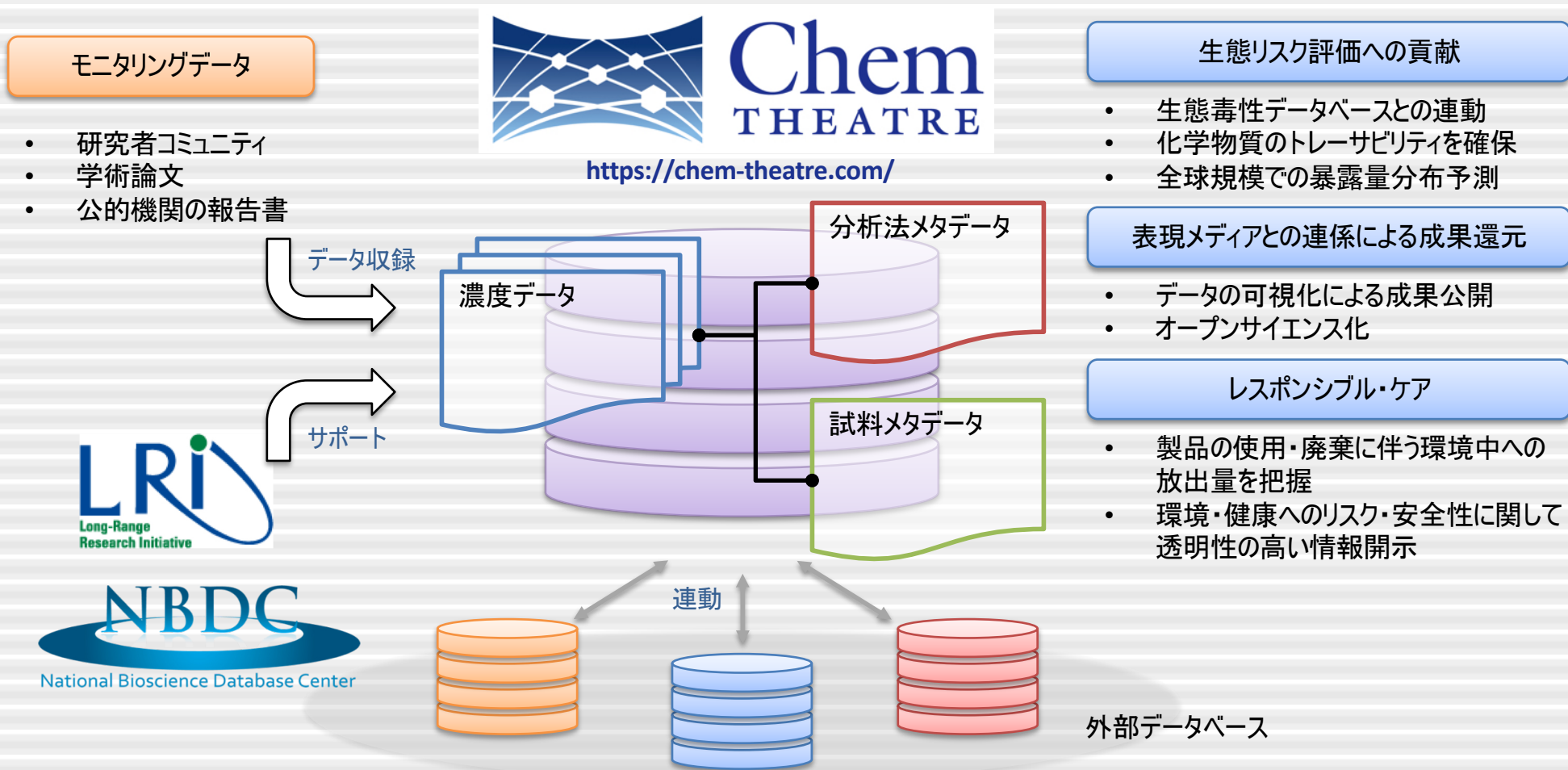
### 【登録データのリスク評価への活用】

- 林 彬勒(産業技術総合研究所)
- 赤堀有美(化学物質評価研究機構)

# ChemTHEATRE (ケムシアター) 運用の概要と意義

データマイニングが進まないのは、必要なデータが最適な形式で整理されていないから

散在するモニタリングデータを一元管理し、機械判読可能な形式で公開することで、データの二次的利用を促進する(学術的・行政的)。



## ChemTHEATREが推進するオープンデータ化

1. オープンデータの推進によるオープンサイエンス  
学術論文に対する生データの紐付け  
研究成果の還元・誰でもアクセス可能に  
国・地方自治体が実施したモニタリング情報の受け皿に
2. データリポジトリに留まらない  
機械判読可能な形でのデータ公開・二次利用の推進  
解析結果の可視化
3. データベースの統合利用による環境行政への貢献  
科学的根拠となるデータ収集のコストカット  
環境系DBの統合利用による新たなリスク評価・管理
4. 将来への投資  
新たな価値の創造



English →

- About
- ChemTHEATRE Wiki
- Project Search
- Sample Search
- Chemical Search

Register your data:  
[register@chem-theatre.com](mailto:register@chem-theatre.com)

For inquiry:  
[info@chem-theatre.com](mailto:info@chem-theatre.com)



Site Policy

Copyright (C) 2016  
 ChemTHEATRE



## Welcome to ChemTHEATRE

ChemTHEATRE: Chemicals in the THEATRE (T)raceable and (H)euristic (A)rchive for (T)raceability and (R)esponsible-care (E)ngagement is the platform to deposit and visualize monitoring data of environmental contaminants more effectively than ever.

You can currently see so many monitoring data of environmental contaminants in scientific journals or reports by public organizations, but unfortunately in a variety of forms such as texts or excel files. That leads to poor use of such valuable data, which can be input data for the modeling and materials for validation.

To tackle this problem and make use of such data, we first put together such scattered data in one database: ChemTHEATRE, properly and well organized. It will ensure traceability of chemicals and help you simulate the environmental behavior and fate, or assess the risk. Moreover, ChemTHEATRE will make the prediction of global chemical pollution easier in cooperation with external database or other tools.

ChemTHEATRE was supported through a GrantData of Long-range Research Initiative (LRI) by Japan Chemical Industry Association (JCIA).

## Released Entries

Sample Top10

Sample	#Samples
Water	2215
Homo sapiens	1585



ChemTHEATREとは

ChemTHEATREウィキ

プロジェクト検索

試料検索

化学物質検索

データの登録:  
[register@chem-theatre.com](mailto:register@chem-theatre.com)

お問い合わせ:  
[info@chem-theatre.com](mailto:info@chem-theatre.com)



サイトポリシー

Copyright (C) 2016  
 ChemTHEATRE



## ようこそ ChemTHEATREへ

ChemTHEATRE (ケムシアター)とは、Chemicals in the THEATRE (T)raceable and (H)euristic (A)rchive for (T)raceability and (R)esponsible-care (E)ngagementの造語で、より効率的に環境汚染物質のモニタリングデータを集積、可視化するためのプラットフォームです。

化学物質の環境中濃度に関する情報は、学術論文または公的機関の報告書として数多く存在しています。しかし、そのほとんどはテキストファイルやエクセルファイルなど様々な形態で電子化・保存されており、モデリングやリスク解析を行う上では極めて使いにくい状況に陥っています。

この状況を打開、貴重なデータを活用するため、我々はまず存在しているデータを1つのデータベース (ChemTHEATRE) にまとめ、統一した形式で収録しています。そうすることにより、個々の化学物質のトレーサビリティの確保、環境中での挙動・運命予測やリスク評価に資していたコストを大幅に削減できます。さらに、ChemTHEATREでは外部のデータベースとも連携しており、世界規模の化学物質汚染の予測を立てることも容易になることでしょう。

ChemTHEATREは、日本化学工業協会 (JCIA) の第4期~第6期LRI (長期自主研究) の委託研究としてスタートしました。

## 公開データ

試料トップ10

試料	試料数
Water	2215
Homo sapiens	1585

化学物質トップ10

化学物質	測定データ数
Flame retardants PBDEs	9652
Organochlorines PCBs	8951

データ提供機関トップ10

データ提供機関	プロジェクト数
Ehime University	42

93プロジェクト  
 6,797サンプル  
 81,577測定値

Japanese →







# Projects

ProjectID	<input type="text"/>	Chemical Groups	<input type="text"/>
Sample Type	<input type="text"/>	Chemical Name	<input type="text"/>
Scientific Name	<input type="text"/>	Collection Region	<input type="text"/>
Tissue / Organ	<input type="text"/>	Collection Country	<input type="text"/>
Keyword	<input type="text" value="Project title, Abstract"/>	Collection Year	<input type="text" value="XXXX"/> - <input type="text" value="XXXX"/>

Show  entries


Showing 1 to 50 of 93 entries

ProjectID 	Submitter 	Title 	Samples	doi 	MeasuredData	RegisterDate 
<a href="#">PRA000095</a>	Ruriko Tahara (Hokkaido Research Organization)	[LOC_JP] Survey on Perfluorinated chemicals in Aquatic Environment in Hokkaido ( Source: Report of Institute of Environmental Sciences No. 3 (No. 39) )	<a href="#">Samples</a>		<a href="#">MeasuredData</a>	2019/07/26
<a href="#">PRA000094</a>	Takeshi Hano (Fisheries Research and Education Agency)	Occurrence of neonicotinoids and fipronil in estuaries and their potential risks to aquatic invertebrates	<a href="#">Samples</a>		<a href="#">MeasuredData</a>	2019/06/24

## Project Details

Project ID	PRA000095
Submitter	Hokkaido Research Organization, Ruriko Tahara
Corresponding Author	Hokkaido Research Organization, Ruriko Tahara
Release Date	2019/07/26
Title	[LOC_JP] Survey on Perfluorinated chemicals in Aquatic Environment in Hokkaido ( Source: <a href="#">Report of Institute of Environmental Sciences No. 3 (No. 39)</a> )
doi	
Grant	
Register Date	2019/07/26
Update Date	2019/07/26

Chemical	Perfluoroalkyl and polyfluoroalkyl substances + <ul style="list-style-type: none"><li>• PFBS</li><li>• PFHxS</li><li>• PFHpS</li><li>• PFOS</li><li>• PFPA</li><li>• PFHxA</li><li>• PFHpA</li><li>• PFOA</li><li>• PFNA</li><li>• PFDA</li><li>• PFUA</li><li>• PFNS</li></ul>
Sample	All Samples Water +
Measured Data	



地図 航空写

# Sample

Show/Hide blank data

Sample ID	SAA005816
Sample Type	Surface water
Scientific Name	Water
Common Name	River water
Collection Year	2011
Collection Month	7
Collection Day	6

## Remarks

Upstream from the inflow of STP effluent; Chitose STP; Population served (x1000): 95; Sewage treatment volume (x1000 m<sup>3</sup>/day): 79; Treat the effluent from 7 industrial parks which have semiconductor facilities

## Maps



Collection Country	Collection Year	Chemicals	Measured Data
apan	2011	Perfluoroalkyl and polyfluoroalkyl substances	🌐
apan	2011	Perfluoroalkyl and polyfluoroalkyl substances	🌐
apan	2011	Perfluoroalkyl and polyfluoroalkyl substances	🌐
apan	2011	Perfluoroalkyl and polyfluoroalkyl substances	🌐

[Export samples \(TSV\)](#)[Export measured data \(TSV\)](#)Show  entries

Showing 1 to 12 of 12 entries

ProjectID	SampleID	Sample	Chemical	ExperimentID	MeasuredValue	Unit	Remarks	RegisterDate
PRA000095	SAA005816	Water	PFNS	EXA000001	<1.00E-3	µg/L		2019/7/26
PRA000095	SAA005816	Water	PFOS	EXA000001	<1.00E-3	µg/L		2019/7/26
PRA000095	SAA005816	Water	PFHpS	EXA000001	<1.00E-3	µg/L		2019/7/26
PRA000095	SAA005816	Water	PFHxS	EXA000001	<1.00E-3	µg/L		2019/7/26
PRA000095	SAA005816	Water	PFBS	EXA000001	<1.00E-3	µg/L		2019/7/26
PRA000095	SAA005816	Water	PFLUA	EXA000001	1.40E+0	µg/L		2019/7/26
PRA000095	SAA005816	Water	PFDA	EXA000001	<1.00E-3	µg/L		2019/7/26
PRA000095	SAA005816	Water	PFNA	EXA000001	8.50E-3	µg/L		2019/7/26
PRA000095	SAA005816	Water	PFOA	EXA000001	2.40E-3	µg/L		2019/7/26
PRA000095	SAA005816	Water	PFHpA	EXA000001	<1.00E-3	µg/L		2019/7/26
PRA000095	SAA005816	Water	PFHxA	EXA000001	<1.00E-3	µg/L		2019/7/26
PRA000095	SAA005816	Water	PFPA	EXA000001	<1.00E-3	µg/L		2019/7/26

measureddata\_20190824053734

ホーム 挿入 ページレイアウト 数式 データ 検閲 表示

ゴシック (本文) 12 A A 文字列の並び直し 標準

B I U 条件付き書式 テーブルとして書式設定

A1 MeasuredID

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M
1	MeasuredID	ProjectID	SampleID	ScientificName	ChemicalID	ChemicalName	ExperimentID	MeasuredVal	AlternativeUnit	Unit	Remarks	RegisterDate	UpdateDate
2	81245	PRA000095	SAA005816	Water	CH0000362	PFBS	EXA000001	0.001	<1.00E-3	μg/L		2019/7/26	2019/7/26
3	81280	PRA000095	SAA005816	Water	CH0000363	PFHxS	EXA000001	0.001	<1.00E-3	μg/L		2019/7/26	2019/7/26
4	81315	PRA000095	SAA005816	Water	CH0000364	PFHpS	EXA000001	0.001	<1.00E-3	μg/L		2019/7/26	2019/7/26
5	81350	PRA000095	SAA005816	Water	CH0000365	PFOS	EXA000001	0.001	<1.00E-3	μg/L		2019/7/26	2019/7/26
6	81000	PRA000095	SAA005816	Water	CH0000369	PFFPA	EXA000001	0.001	<1.00E-3	μg/L		2019/7/26	2019/7/26
7	81035	PRA000095	SAA005816	Water	CH0000370	PFHxA	EXA000001	0.001	<1.00E-3	μg/L		2019/7/26	2019/7/26
8	81070	PRA000095	SAA005816	Water	CH0000371	PFHpA	EXA000001	0.001	<1.00E-3	μg/L		2019/7/26	2019/7/26
9	81105	PRA000095	SAA005816	Water	CH0000372	PFOA	EXA000001	0.0024		μg/L		2019/7/26	2019/7/26
10	81140	PRA000095	SAA005816	Water	CH0000373	PFNA	EXA000001	0.0085		μg/L		2019/7/26	2019/7/26
11	81175	PRA000095	SAA005816	Water	CH0000374	PFDA	EXA000001	0.001	<1.00E-3	μg/L		2019/7/26	2019/7/26
12	81210	PRA000095	SAA005816	Water	CH0000375	PFLUA	EXA000001	1.4		μg/L		2019/7/26	2019/7/26
13	81385	PRA000095	SAA005816	Water	CH0000774	PFNS	EXA000001	0.001	<1.00E-3	μg/L		2019/7/26	2019/7/26

samples\_20190824053733

ホーム 挿入 ページレイアウト 数式 データ 検閲 表示

ゴシック (本文) 12 A A 文字列の並び直し 標準

B I U 条件付き書式 テーブルとして書式設定 挿入 削除 書式 設定

A1 ProjectID

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q	R	S
1	ProjectID	SampleID	SampleType	TaxonomyID	UnioCodeType	UnioCode	SampleName	ScientificName	CommonName	CollectionYear	CollectionMonth	CollectionDate	SamplingTime	SamplingTime	SamplingDuration	WeatherStart	CollectionRegion	CollectionCountry	CollectionSite
2	PRA000095	SAA005816	S7015				W_1exy01_2l Water	River water	River water	2011	7	6					Asia	Japan	Salmo
3	PRA000095	SAA005817	S7015				W_1exy02_2l Water	River water	River water	2011	7	6					Asia	Japan	Neshi
4	PRA000095	SAA005818	S7015				W_1exy03_2l Water	River water	River water	2011	7	6					Asia	Japan	Chitose
5	PRA000095	SAA005819	S7015				W_1exy04_2l Water	River water	River water	2011	7	6					Asia	Japan	De125
6	PRA000095	SAA005820	S7015				W_1exy05_2l Water	River water	River water	2011	7	6					Asia	Japan	De125
7	PRA000095	SAA005821	S7015				W_1exy06_2l Water	River water	River water	2011	7	6					Asia	Japan	Minami
8	PRA000095	SAA005822	S7015				W_1exy07_2l Water	River water	River water	2011	7	6					Asia	Japan	Utsunomiya
9	PRA000095	SAA005823	S7015				W_1exy08_2l Water	River water	River water	2011	8	30					Asia	Japan	Kiyomizu
10	PRA000095	SAA005824	S7015				W_1exy09_2l Water	River water	River water	2011	8	30					Asia	Japan	Chubu
11	PRA000095	SAA005825	S7015				W_1exy10_2l Water	River water	River water	2011	9	15					Asia	Japan	Near E
12	PRA000095	SAA005826	S7015		ZETTAICODE	112690	W_112690_2 Water	River water	River water	2011	10	17					Asia	Japan	Yufutsu
13	PRA000095	SAA005827	S7015		ZETTAICODE	113080	W_113080_2 Water	River water	River water	2011	10	17					Asia	Japan	Rinko
14	PRA000095	SAA005828	S7015				W_1exy11_2l Water	River water	River water	2011	8	30					Asia	Japan	Munakata
15	PRA000095	SAA005829	S7015				W_1exy12_2l Water	River water	River water	2011	8	30					Asia	Japan	Miyama
16	PRA000095	SAA005830	S7015		ZETTAICODE	113060	W_113060_2 Water	River water	River water	2011	8	30					Asia	Japan	Ishikawa
17	PRA000095	SAA005831	S7015				W_1exy13_2l Water	River water	River water	2011	8	30					Asia	Japan	Saegusa

## Experimentテーブル: 収録データのQC/QAに利用可能(信頼性・精度格付け)

Field	説明	入力項目	実例
ProjectID	該当するプロジェクトのID	運営側で入力	PRA000020
ChemicalID	分析対象化合物種のID	運営側で入力	CH0000277
ChemicalName	分析対象化合物名	運営側で入力	Diclofenac
OfficialMethod	公定法	公定法がある場合は, その名称とID	No
Extraction	抽出法	Solvent, LLE, SPE/SPME, Soxhlet, PSE/ASE	SPE
Extraction_details	抽出法の詳細	Solvent, Cartridge, Gel, Shaking, Homogenization, Sonication, etc.	Cartridge
Cleanup	クリーンアップ法	LLE, Deproteinization, Alkali saponific, Filtration/ultrafiltration, Chromatography	Filtration
Cleanup_details	クリーンアップ法の詳細	Solvent, Acid, Alkali, Filter, Cartridge, Gel, etc.	Filter
Derivatization	誘導体化	誘導体化試薬, 使用しない場合はNone	None
Chromatography	クロマトグラフィー	GC, LC, IC, TLC, Other, or None	LC
Detector	検出器	HRMS, Q-MS, MS-MS, IT-MS, Tof-MS, Tof/tof, Q-tof, FID, ECD, or Other	MS-MS
Ionization	イオン化	EI, NCI, PCI, FI, ESI, APCI, APPI, MALDI, or Other	ESI
Standard	標準品	試薬名称	Diclofenac sodium
Recovery_correction	回収率補正	回収率補正の有無Yes or No	Yes
Calibration	キャリブレーション	1. External calibration, 2. Internal calibration (isotope dilution method), 3. Matrix-matched external calibration, 4. Standard additions	2
LOD/MDL	検出下限値	数値	0.65 ng/L
LOQ/MQL	定量下限値	数値	
Intra-day precision	日内変動	数値	0.83%
Inter-day precision	日間変動	数値	
Recovery_CRM	標準試料の認証値との差	数値	
Recovery_spike_relative	内部標準で補正した後の標的物質の回収率	数値	90 ± 0.81%
Recovery_spike_absolute	内部標準で補正する前の標的物質の回収率	数値	
Recovery_IS	内部標準の絶対回収率	数値	80 ± 6.8%

# バイオサイエンスデータベースセンターからのサポート

NBDCトップ > サービス

## サービス

NBDCでは、共同研究開発、委託研究開発などを通じ、次のようなデータベース、ツールなどを提供あるいは開発・運用を支援しています。


絞り込み



提供・支援中



過去の提供・支援

 Integbio データベースカタログ

Integbioデータベースカタログ

[オリジナルサイト](#)

[概要](#)

LIFE SCIENCE DATABASE  
CROSS SEARCH

生命科学データベース横断検索

[オリジナルサイト](#)

[概要](#)

LIFE SCIENCE DATABASE  
LSDA  
Archive

生命科学系データベース アーカイブ

[オリジナルサイト](#)

[概要](#)

- データベースカタログへの登録
- 横断検索対象への追加
- データベースのアーカイブ化

## ChemTHEATREに対する感想と行動とのギャップ



データを生み出す側

担当者が不在(異動・卒業)になってもデータが容易に取り出せて助かる。



データを活用する側

解析に用いるデータの収集にかかるコストがカットできて助かる。



面倒くさい……。

ほしいデータが無い……。

© 2016 DBCLS Togo TV / CC-BY-4.0

**関係する研究者らの意識変革が必須。**

シーケンスしたら塩基配列を登録するような感覚が理想的

**活用事例を明示することが重要。**

## ケーススタディの目的



Chem  
THEATRE

と



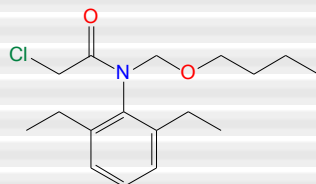
AIST-MeRAM  
Multi-purpose Ecological Risk Assessment  
and Management Tool

で何ができる？

**迅速かつ精緻で合理性のある評価フロー提案**

**健康・安全・環境に配慮した社会へ  
(ユーザーの増加を期待)**

# Butachlor



物質名	Butachlor
CAS No.	23184-66-9
分子量	311.85
用途	<b>酸アミド系除草剤 (適用作物：稲)</b>
作用機序	超長鎖脂肪酸の合成阻害
化審法	既存化学物質
PRTR法	<b>第一種指定化学物質 No.376</b>
環境基本法	環境基準 要調査項目 (水質) No. 155 要調査項目リスト(改定)
農薬取締法	水質汚濁に係る登録保留基準 (案) (公共用水域の水中における予測濃度 に対する基準値) 26 µg/L (平成25年3月18日)
農薬取締法	水産動植物の被害防止に係る登録保留基準値 <b>3.1 µg/L</b> (平成24年10月10日)
蒸気圧 <sup>1)</sup>	$3.86 \times 10^{-4}$ Pa @25°C
logPow <sup>1)</sup>	4.50
対水溶解度 <sup>1)</sup>	23 mg/L @24°C
加水分解性 <sup>1)</sup>	加水分解なし (pH=3,6,9 @25°C)
土壌中半減期 <sup>1)</sup>	好氣的分解：42-70日
土壌吸着性 <sup>1)</sup>	Koc (土壌吸着係数) =708
濃縮性 <sup>1)</sup>	BCF (生物濃縮係数) =219

1) 環境省\_化学物質の環境リスク評価 第8巻



# ブタクロールの暴露情報

## ■ 環境中濃度

年度	魚類	水質	水質 (河川)	水質 (海水)	水質 (湖沼)	地下水	底質	底質 (河川)	底質 (海水)	底質 (湖沼)	
1994	0/13	0/13					0/13				化学物質と環境 (環境省)
2001	0/16	0/17					0/17				化学物質と環境 (環境省)
2003 (10-11月)			0/25	0/10	0/5	0/10		0/10	0/10	0/4	要調査項目モニタ リング (環境省)
2005 (8月)			0/75		0/5						要調査項目モニタ リング (環境省)



一般的に実施されるモニタリングでは検出されていない。

環境中にはほとんど存在していないのか？



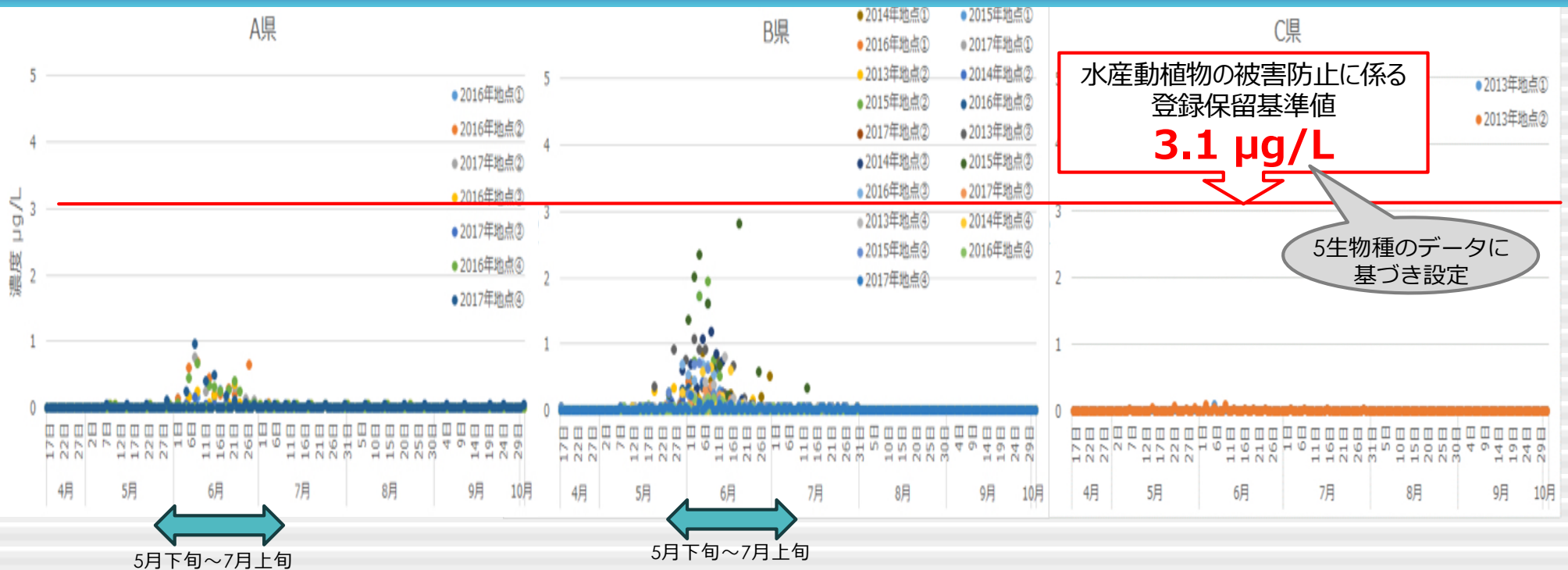
「**農薬残留対策総合調査結果 (環境省)**」にブタクロールのデータあり

〔一定期間経時的に実施しているモニタリング調査〕

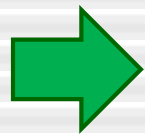


ChemTHEATREからデータをエクスポート！

# ブタクロールの暴露情報：ChemTHEATREからエクスポートしたデータ



## 限定的な時期にのみ暴露があるエビデンス



登録保留基準値3.1  $\mu\text{g/L}$ を下回っているが…  
登録保留基準値の近傍濃度になることもあり、



AIST-MeRAMを用いて詳細な評価を試行！

# 有害性評価

## ▶ データ収集：AIST-MeRAM搭載データから収集

- ▶ 日本環境省の生態影響試験データベース
- ▶ 日本環境省の環境リスク初期評価
- ▶ 日本環境省の農薬登録保留基準
- ▶ 日本経済産業省製品評価技術基盤機構の初期リスク評価書
- ▶ 欧州化学物質生態毒性および毒性センターの生態毒性データベース（ECETOC）
- ▶ 米国環境省の生態毒性データベース（ECOTOX）
- ▶ 米国環境省の魚類急性毒性データベース（EPAFHM）

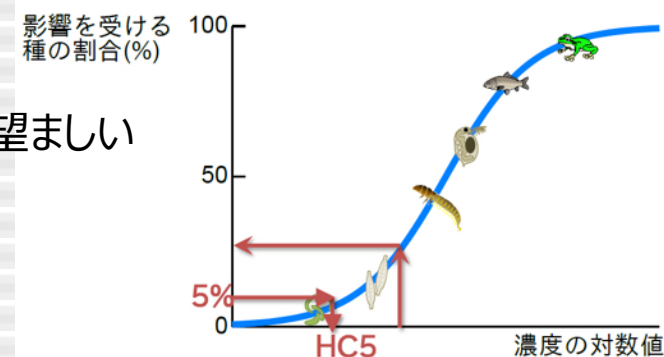


## 急性毒性について37生物種のデータあり

## ▶ 有害性評価の方法

- ▶ Butachlorは除草剤→種間の感受性の差を考慮することが望ましい  
→種感受性分布（SSD）評価法  
→急性毒性データに基づき

## AIST-MeRAM搭載のSSD評価を試行



国立研究開発法人農業環境技術研究所 【技術マニュアル】農薬の生態リスク評価のための種の感受性分布解析 Ver. 1.0. 2016年3月より

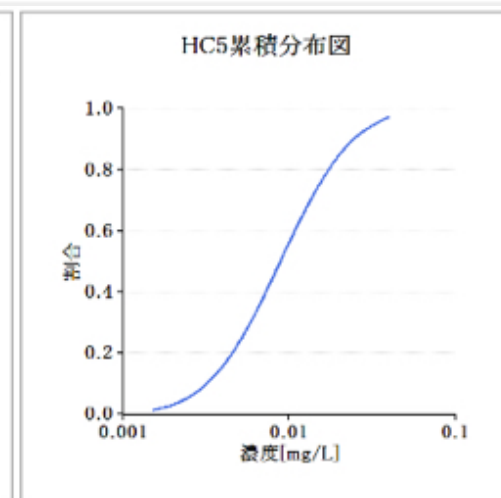
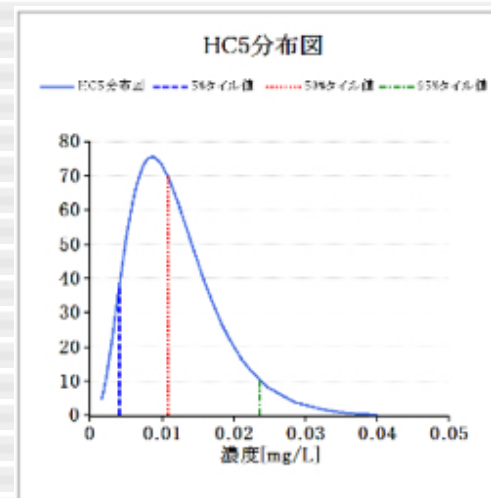
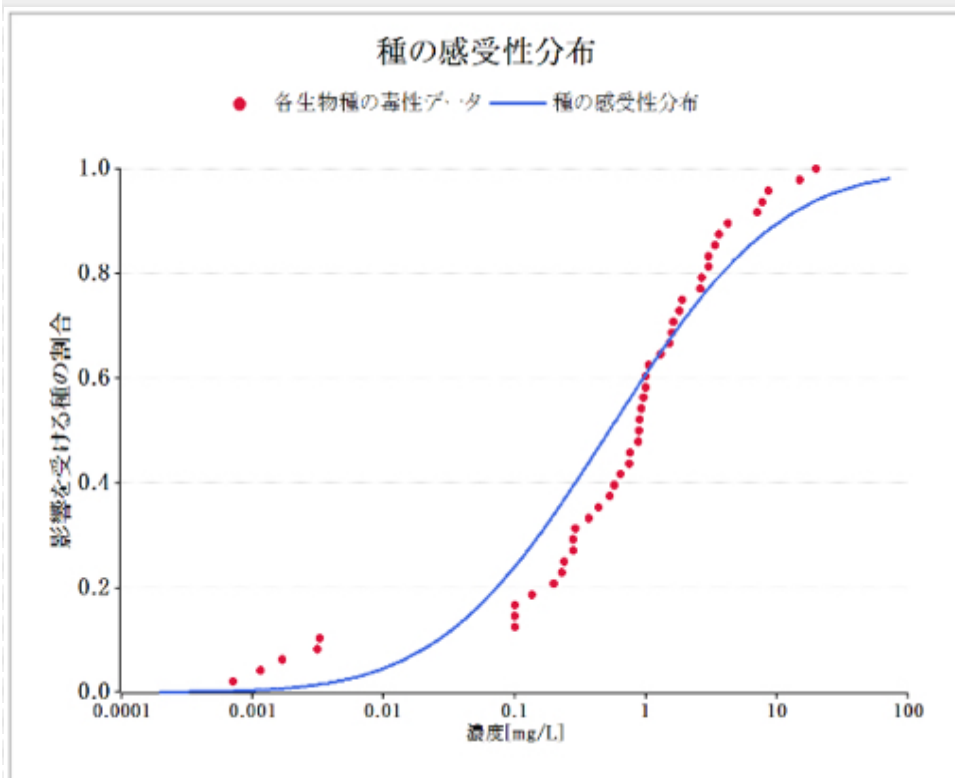
# ブタクロールに対する種の感受性分布

## 有害性評価条件

手法	種の感受性分布(HC5)
化学物質	2-クロロ-2',6'-ジエチル-N-(ブトキシメチル)アセトアニリド<ブタクロール>
CAS番号	23184-66-9
データの充足度:急性	魚類,藻類,ミジンコ類,その他
データの充足度:慢性	-
生物種	魚類,藻類,ミジンコ類
推定方法	対数正規分布推定法
UF選定根拠	自動設定
データ編集	あり

## 参考結果[mg/L](5%の種が影響を受ける場合の濃度:HC5)

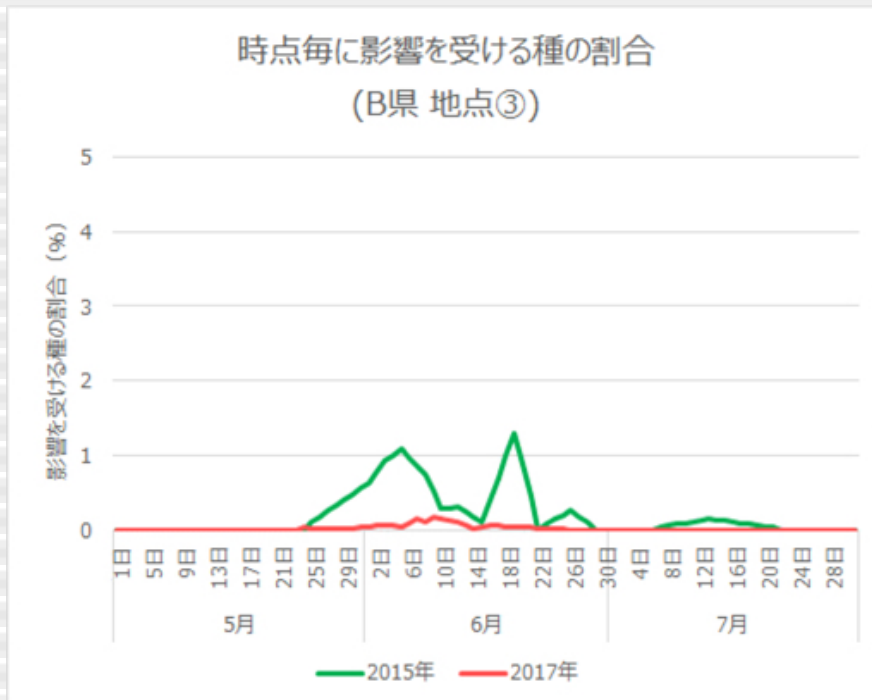
PNEC [mg/L]	ユーザー指定の不確実性係数 (UF)	50%タイル値(PNEC導出用毒性値)	5%タイル値	95%タイル値
2.165E-03	5	1.082E-02	4.039E-03	2.359E-02



**AIST-MeRAMを使用することで  
種の感受性分布解析を  
簡便に実施**

# リスク評価

- ✓ 限定的な時期のみの暴露
- ✓ 時系列データが利用できる
- ✓ 種の感受性分布（SSD）解析により、濃度毎に影響を受ける生物の割合が分かる



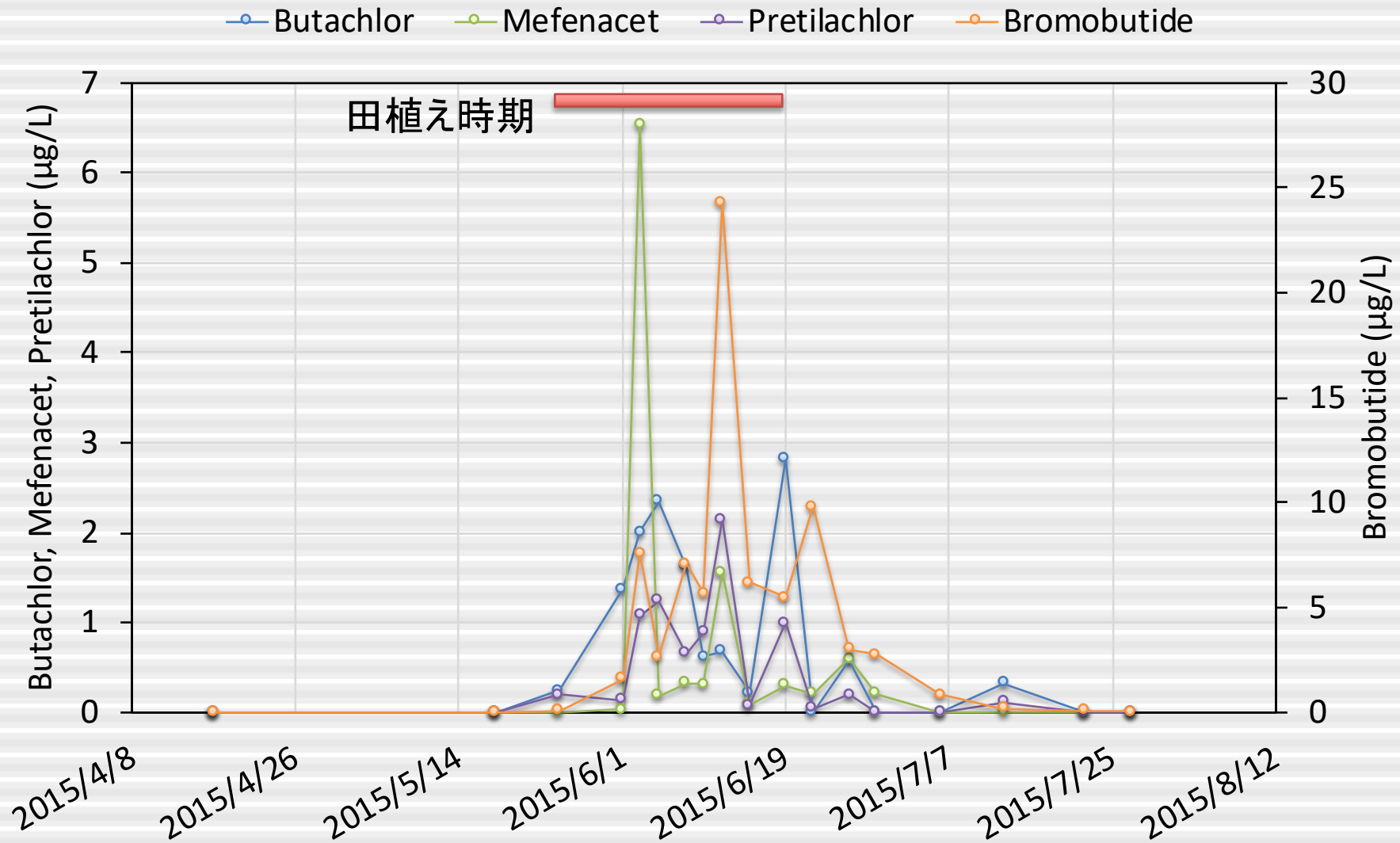
「【技術マニュアル】農薬の生態リスク評価のための種の感受性分布解析（農業環境技術研究所,2016）」を参考に  
時点毎に影響を受ける割合を算出

**影響を受ける種の割合が  
5%を超える時点はない！**

引き継ぎ検討

累積の影響をどう考えるか？

# 2015年の農薬モニタリングデータ: 同一地点で検出された4種の農薬の消長



複合影響に関する評価が必要。

# データ利用例：AIST-MeRAM (産総研)との連携による生態リスク評価



実測値  
( $\mu\text{g/L}$ )

化学物質を選択



試料:「水」で絞り込み



時空間情報でさらに絞り込み



濃度情報および試料情報を  
エクスポート

濃度データをインポート



曝露評価



有害性評価

- ・ハザード比
- ・種の感受性分布
- ・個体群存続影響



リスク評価

地図データを読み込み



位置情報を付した  
濃度情報, 試料情報,  
リスク評価結果から  
レイヤを生成

# 福岡県のモニタリング地点, 2016年度

About

ChemTHEATRE Wiki

Project Search

Sample Search

Chemical Search

Register your data:  
register@chem-theatre.com

For inquiry:  
info@chem-theatre.com



Site Policy

Copyright (C) 2016  
ChemTHEATRE

## Samples Map

ProjectID: PRA000083

Sample Type: Abiotic - Water

Scientific Name: -

Tissue / Organ: -

Keyword: Project title, Abstract

Chemical Groups: Phenols - Alkylphenols

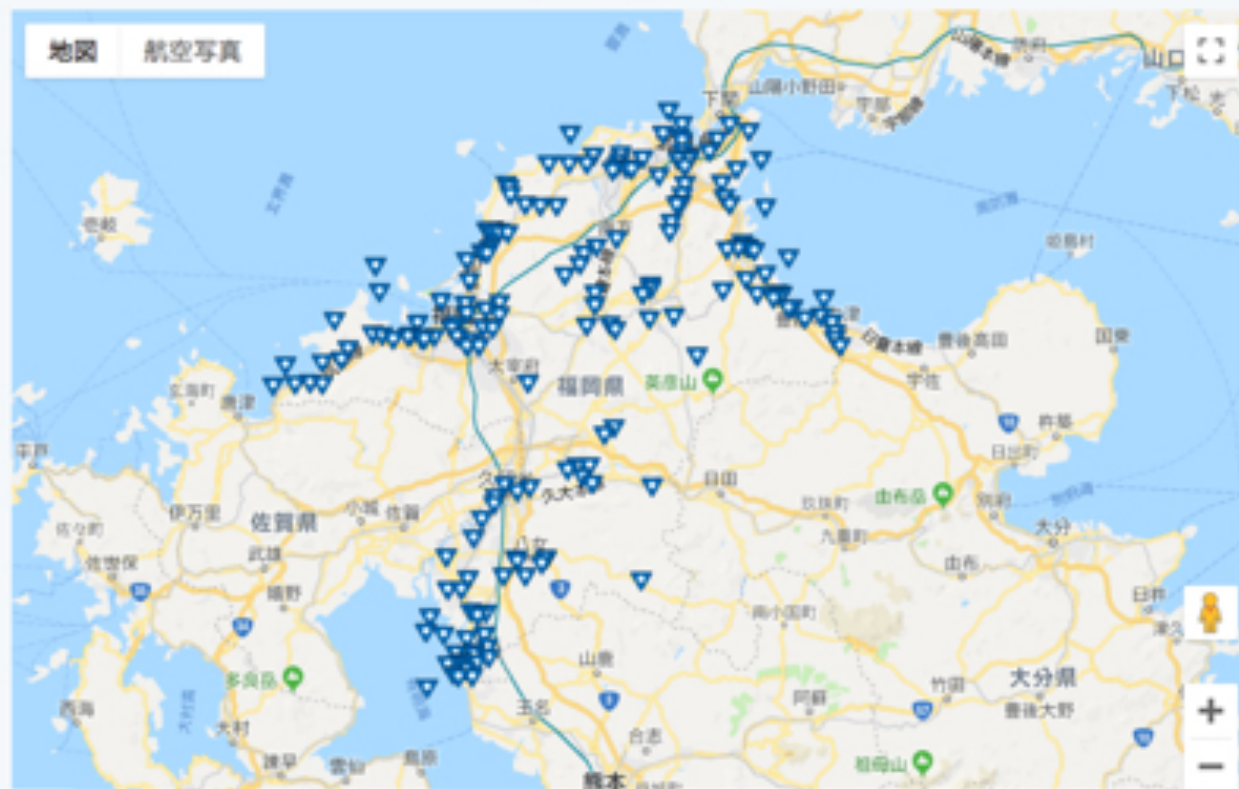
Chemical Name: NP

Collection Region: -

Collection Country: -

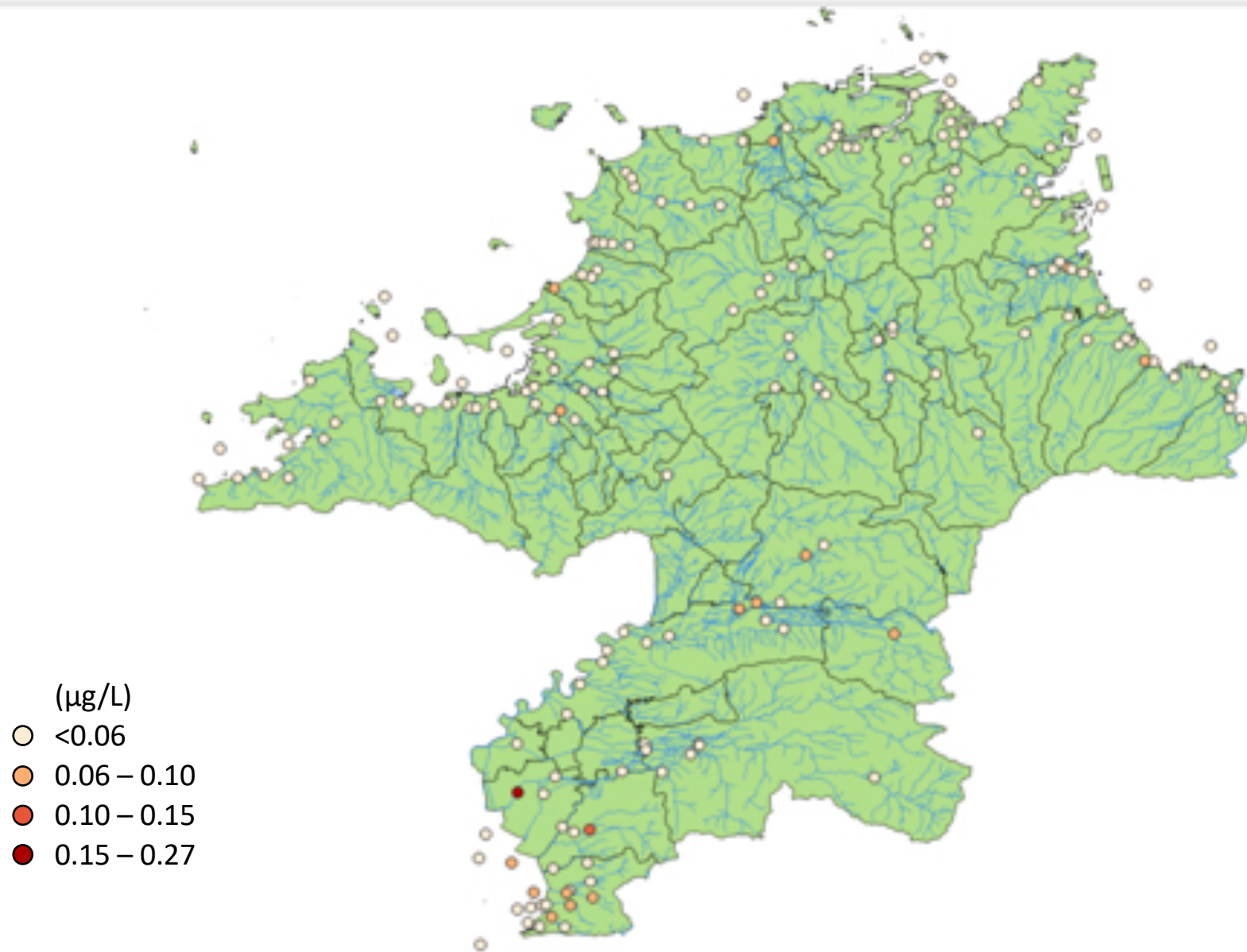
Collection Year: XXXX - XXXX

Search Reset





# ノニルフェノールのモニタリング結果(福岡県, 2016年度, 最大濃度)



# データサイエンス教育への活用

jupyter notebook Last Checkpoint: 5分前 (autosaved)

File Edit View Insert Cell Kernel Widgets Help

Code

## 2.データの読み込み

今回はスナメリ (学名: Neophocaena phocaenoides) のデータを取り扱う。ChemTHEATREのSample Searchからスナメリに関するデータをTSV形式でダウンロードする。ChemTHEATREのSample Searchのデータは、測定結果 (measureddata) と採集標本 (samples) の2種類あるが、今回はその両方を使用する。

```
in [2]: data_file = "measureddata"
chem = pd.read_csv(data_file)
chem = chem.drop(["Proje
```

```
in [3]: sample_file = "samples_20"
sample = pd.read_csv(sample
```

ダウンロードしたTSVファイルの環境に合わせる必要が

## 3.データの下処理

今回扱うデータは、様々な(までは扱いづらいので、扱

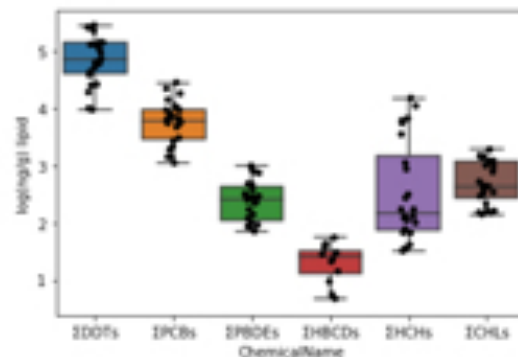
1. chemにsampleを結合さ
2. 今回扱う化学物質の測
3. 可視化に不要な列を削

jupyter notebook Last Checkpoint: 6分前 (autosaved)

File Edit View Insert Cell Kernel Widgets Help

Code

```
in [17]: fig = plt.figure()
ax = fig.add_subplot(1,1,1)
sns.stripplot(x="ChemicalName", y="MeasuredValue", data=data_lipid, color="black", ax=ax)
sns.boxplot(x="ChemicalName", y="MeasuredValue", data=data_lipid, ax=ax)
ax.set_ylabel("log(ng/g) lipid")
plt.show()
```

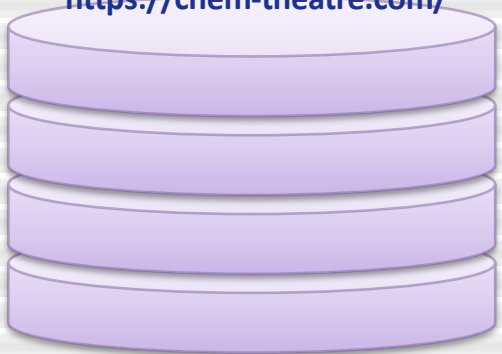


data\_wetについても同様に、可視化する。まず、データセットに0が含まれる場合、最小値の1/2を代わりに代入する。その後、対数を取り、可視化する。

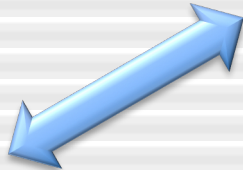
```
in [18]: if 0 in data_wet.loc[:, "MeasuredValue"].values:
data_wet["MeasuredValue"].replace(0, data_wet[data_wet["MeasuredValue"] != 0].loc[:, "MeasuredValue"].values.min() / 2)
else:
```



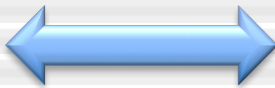
<https://chem-theatre.com/>



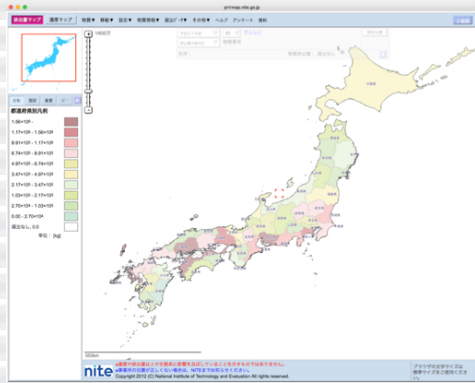
CAS RN



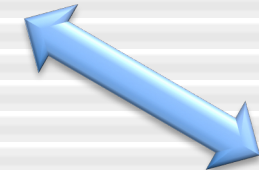
有害性(予測・実測)  
物性



位置情報



PRTRデータ  
その他環境情報



Taxonomy ID



共通の識別子で繋いで活用する



生物試料  
多様性情報

# ChemTHEATREの運営目的・方針

## ChemTHEATREの 利用価値向上

- 産官学からのモニタリング情報の収集・一元化
- 外部データベースとの連携による多目的な利用への対応
- リスク評価ツール等の開発
- 環境教育やSDGs啓発などの教育的な利用

## 化学物質のリスク評価への ChemTHEATREの活用

- データへのアクセス向上によるリスク評価の迅速化
- 時空間情報を利用したGIS解析
- ハザード探索:ヒト健康および生態系へのインパクトの解析
- データ空白地域に対する予測および予測値とのギャップ補完

## 継続的な運営体制の確立

- 環境研究関連学会へのデータベース運営への参画の要求
- 行政および関連研究所との連携を模索
- データ解析・リスク評価セミナー等での活用
- SNS等を活用した国民への周知・市民の意思決定への参画

## 連絡先等



<https://chem-theatre.com/>

データ登録: [register@chem-theatre.com](mailto:register@chem-theatre.com)  
問い合わせ: [info@chem-theatre.com](mailto:info@chem-theatre.com)

 @ChemTHEATRE

 @Chem\_THEATRE