令和８年度第７回薬事審議会化学物質安全対策部会化学物質調査会、令和８年度化学物質審議会第３回安全対策部会、第 269 回中央環境審議会環境保健部会化学物質審査小委員会	
令和８年１１月９日	資料２

スクリーニング評価における生態影響試験情報が得られない物質への生態毒性予測手法の活用について（案）

令和８年 11 月
環境省大臣官房環境保健部化学物質安全課化学物質審査室

【背景】

化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律（以下「化審法」という。）では、既存化学物質を含む一般化学物質等を対象にスクリーニング評価を行っており、化審法において着目している長期毒性に係る有害性情報について、「化審法における人健康影響に関する有害性データの信頼性評価等について【改訂第２版】[1]」、「化審法における生態影響に関する有害性データの信頼性評価等について[2]」に記載された情報源から有害性情報の収集及び信頼性の確認を行い、「化審法におけるスクリーニング評価手法について【改訂第３版】[3]」に基づき有害性クラスを付与しています。また、有害性に係る情報がない場合には、必要に応じて人健康、生態に対して一定の有害性があるものとみなして、デフォルトの有害性クラス（人健康影響：有害性クラス２、生態影響：有害性クラス１）を付与して評価を進めることとしています。なお、デフォルトの有害性クラスの採用によって優先度マトリックスで「高」となる物質については、事業者による有害性データ等の取得・提出を促すため、国への有害性データの提出について一定期間を付与することとしています。

一方、「化審法に基づくスクリーニング評価の基本的な考え方【改訂第２版】[4] 」において、QSAR、カテゴリーアプローチの活用検討として、QSAR に関しては、新規化学物質審査や既存化学物質安全性点検等の試験データ等を用いて導出した当該 QSAR の推計精度や評価対象物質に対する適用可能性等を加味して、利用可能性等を検討し、活用を図る、また、カテゴリーアプローチに関しては、有害性情報が得られなかった物質で適用可能な物質から実施し、その妥当性は個別に専門家判断を行うなどの試行を経て運用への組み込みを図ることとされています。

環境省では、有害性情報が不足している物質に対する有害性クラス付け方法として、米国や欧州において QSAR や類似物質データからの類推（リードアクロス又はカテゴリーアプローチ）といった新しい評価手法（New Approach Methodologies：NAMs）による毒性予測手法の有害性評価等への活用が進められていることを踏まえ、生態影響の観点から、生態毒性予測システム KATE（ケイト、KAshinhou Tool for Ecotoxicity）[5]の開発・充実等に係る取組を進めてきました。

今般、これまでの取組により得られた知見を踏まえ、スクリーニング評価におけるデフォルト適用の判断に際して、次頁以降の方法により、生態毒性予測手法による予測値を活用することにしました。なお、今後も化審法における NAMs の活用に関する全体的な方向性との整合を図りながら、予測手法の更なる活用可能性の検討を深め、必要に応じて本資料の見直しを行っていきます。

---

[1] 化審法における人健康影響に関する有害性データの信頼性評価等について【改訂第２版】
https://www.env.go.jp/content/000047827.pdf
[2] 化審法における生態影響に関する有害性データの信頼性評価等について
https://www.env.go.jp/content/000047828.pdf
[3] 化審法におけるスクリーニング評価手法について【改訂第３版】
https://www.env.go.jp/content/000067652.pdf
[4] 化審法に基づくスクリーニング評価の基本的な考え方【改訂第２版】
https://www.env.go.jp/content/000067651.pdf
[5] 生態毒性予測システム KATE（開発機関：国立研究開発法人国立環境研究所　環境リスク・健康領域）
https://kate.nies.go.jp/index.html

【生態毒性予測手法の活用方法（案)】

１．生態毒性予測手法の活用場面

スクリーニング評価におけるデフォルト適用の判断を行う際に、生態毒性予測手法を活用する。具体的には、以下①及び②の場面において活用する。

①一般化学物質のうち、暴露クラスが１～４かつ有害性情報が得られない物質について、国は必要に応じて生態毒性予測手法も活用しながら、デフォルト適用の候補物質として選定する。

②上記によりデフォルト適用の候補となった物質については、事業者に対して一定期間を付与し、有害性情報又は予測情報の取得・提出を促す。

２．活用可能な生態毒性予測手法

QSAR（定量的構造活性相関）及び類似物質データからの類推（リードアクロス又はカテゴリーアプローチ）を活用する。

当面は、QSAR については、推計精度や各 QSAR クラスの参照データを環境省で確認している KATE 最新版による毒性予測結果を使用する。ECOSAR 等の他の QSAR ツールを用いた毒性予測結果については、KATE 最新版による毒性予測結果と併せて収集し、個別に専門家判断を行うなどの試行を通じて知見の蓄積を図る。

類似物質データからの類推については、「類似物質の選定方法」（別紙３）に基づき、類似物質を選定する。

３．生態毒性予測情報の受付

スクリーニング評価において、事業者から有害性情報の提供又は試験実施の申出を受け付ける際に、「生態影響評価に係る有害性予測結果の提供又は有害性予測実施の申出要領」（別紙１）に基づき事業者が取りまとめた予測情報や予測実施の申出を受け付ける。

４．暫定有害性クラスの付与

３．で受け付けた情報は、「予測手法による毒性値の確認事項」（別紙２）に沿って環境省の指定する専門家による確認を行い、採用可能な予測値により暫定有害性クラスを付与する。

予測値を提供した事業者には暫定有害性クラス付与結果を事前に通知する。また、当該事業者に対して、一定期間を付与し、有害性試験又は有害性予測実施の申出を受け付ける。

予測に係る UF は最大 10 を適用するが、良好な精度で予測値を得られるケース等について、個別に専門家判断を行うなどの試行を経ながら知見を蓄積し、予測に係る UF の軽減を図っていく。

５．暫定有害性クラスを用いたスクリーニング評価の実施

有害性試験実施等の申出がない場合は、４．で付与した暫定有害性クラスを用いてデフォルト候補物質のスクリーニング評価を行う。

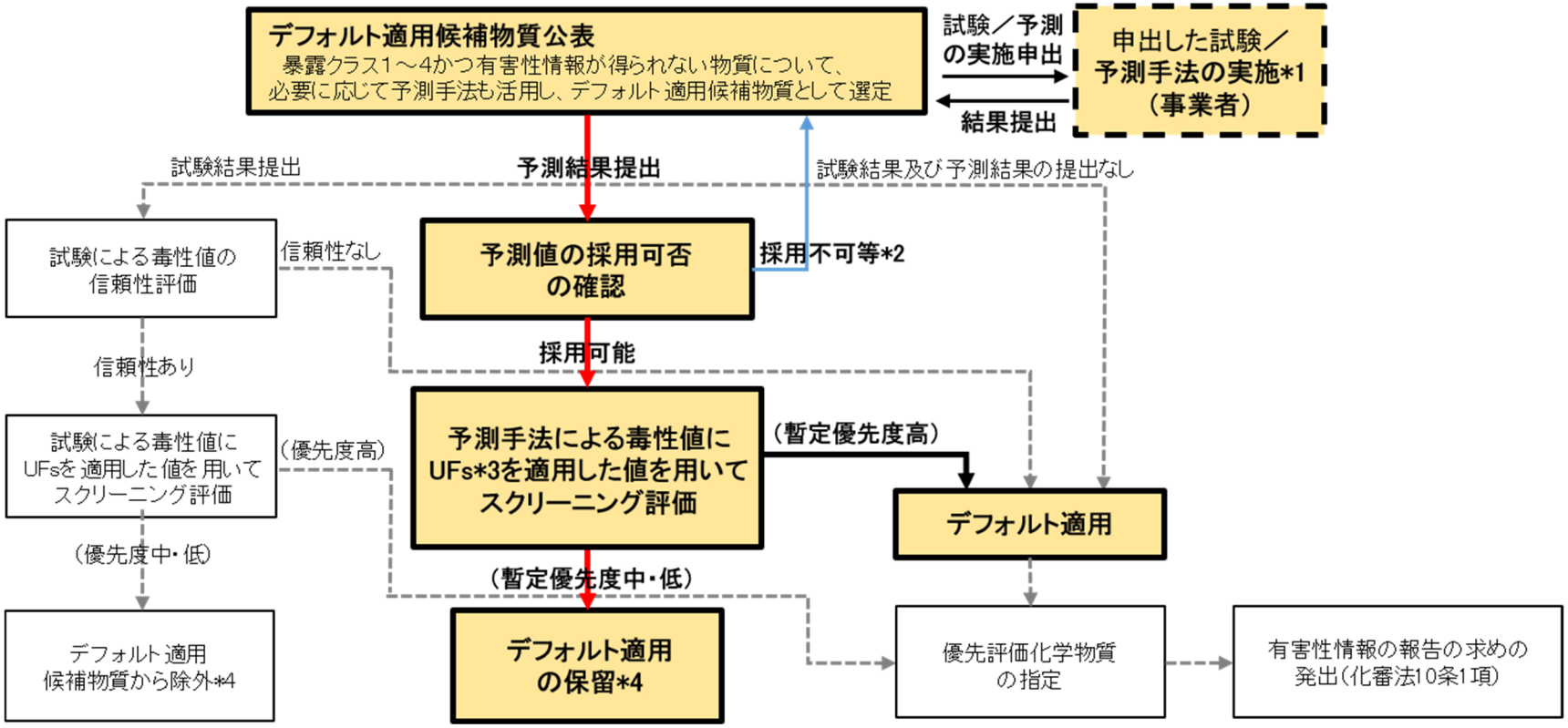
（当該年度の対応）

・優先度マトリックス上で暫定優先度「高」となった場合は、デフォルト適用を行い、優先評価化学物質への指定を行う。
・優先度マトリックス上で暫定優先度「中」「低」となった場合は、デフォルト適用を保留する。

（次年度以降の対応）

・新たな有害性情報が得られた場合は、当該有害性情報に基づき付与した有害性クラスを用いてスクリーニング評価を行う。
・新たな有害性情報が得られていない場合は、暫定有害性クラスを用いてスクリーニング評価を行い、暫定優先度「中」「低」であることを確認する。暫定優先度「高」となった場合は、再度デフォルト適用候補物質として公表し、事業者による有害性情報等の取得・提出を促すため、国への有害性情報及び予測情報の提出について一定期間を付与する。

（参考）スクリーニング評価における生態毒性予測手法を活用したデフォルト適用の進め方のイメージ



*1 有害性試験又は有害性予測の実施申出があった場合は、当該年度のデフォルト適用を保留し、次年度以降にスクリーニング評価を行う。

*2 予測値を提供した事業者には暫定有害性クラス付与結果を事前に通知する。また、当該事業者に対して、一定期間を付与し、有害性試験又は有害性予測の実施の申出を受け付ける。

*3 予測手法による毒性値には、「スクリーニング評価手法について」（https://www.env.go.jp/content/000067652.pdf ）に示されている UFs（不確実係数積）に加えて、予測に係る UF（不確実係数・最大 10）を適用した値を用いてスクリーニング評価を行う。

*4 次年度以降は、提出された試験毒性値又は予測手法による毒性値に UFs を適用した値を用いてスクリーニング評価を行う。なお、暴露クラスの変更等により、予測値を用いたスクリーニング評価の結果、暫定優先度「高」となった場合は、再度デフォルト適用候補物質として公表し、国への有害性情報及び予測情報の提出について一定期間を付与する。

（別紙１）

生態影響評価に係る有害性予測結果の提供
又は有害性予測実施の申出要領

不足している有害性情報項目に関する有害性予測結果を提供いただける場合には、提出期限までに以下に示す要領で御提供ください。

また、翌年中に有害性予測を実施し、その結果を提供いただける場合には、提出期限までに予測実施申出書（別添様式）にてお知らせください。なお、有害性予測を実施し、その結果を提供いただける場合には、結果が得られた後、遅滞なく以下に示す要領で御提供ください。

１．提出書類について

生態影響評価に係る有害性予測結果を提供いただける場合は、次の①～③を提出してください。

① 生態影響評価に係る有害性予測結果の報告書（様式〇）
② 予測結果を示す資料（様式〇）
③ その他、参考となる資料（必要に応じて任意様式で提出してください）

提出様式は、来年度の運用開始までに作成する予定

２．提出方法、提出先

（１）提出方法

電子メールにてご提出ください。

（２）提出先

環境省大臣官房環境保健部化学物質安全課化学物質審査室

（E メールアドレス）

３．留意事項

〇QSAR を利用する場合は、KATE 最新版による毒性予測結果を提出してください。

ECOSAR 等の QSAR ツールを用いた予測結果をお持ちの場合は、KATE 最新版による毒性予測結果（予測できない場合も含む）と併せて提出してください。

〇類似物質からの類推を利用する場合は、提出する類似物質の有害性データの信頼性を事前に確認してください（別紙２のⅡ③を参照）。

別添様式

生態影響評価に係る有害性予測の実施申出書

年　　月　　日

厚生労働省医薬局医薬品審査管理課化学物質安全対策室長
経済産業省産業保安・安全グループ化学物質管理課化学物質安全室長　　殿
環境省大臣官房環境保健部化学物質安全課化学物質審査室長

氏名又は名称及び法人にあっては、
その代表者氏名
住所

デフォルト適用候補物質「　　」の有害性情報についての知見を得るため、生態影響評価に係る有害性予測を実施し、翌年中にその結果を提供いたします。

記

1. 報告物質[1]の名称、MITI 番号（官報公示整理番号）、及び構造式
（CAS 登録番号（CAS RN®）が付与されている場合は記載すること。）

2. 有害性を予測する物質[2]の名称、MITI 番号、及び構造式
（CAS 登録番号が付与されている場合は記載すること。）

3. 予測する生物種名と毒性分類（急性／慢性）（複数可）

4. 予測に用いる手法（該当する手法を〇で囲む）（複数可）
QSAR（定量的構造活性相関）／類似物質からの類推

[1] デフォルト適用候補物質に該当する物質を記載すること。

[2] 報告物質が混合物であり、その主成分の毒性を予測した場合など、報告物質と予測した物質が異なる場合は予測した物質を本項目で明記すること。同一の場合は「報告物質と同一」と記載すること。

（別紙２）

予測手法による毒性値の確認事項

予測手法による毒性値をスクリーニング評価におけるデフォルト適用の判断に活用するに当たっては、原則として以下のⅠ又はⅡの全ての項目を満たすこととし、予測値の採用可否について専門家による確認を受けるものとする。

I. QSAR（定量的構造活性相関）

予測結果について、以下の各項目を満たすかどうか。

① 評価対象物質と QSAR ツールの予測対象物質が同一とみなせるか。
② OECD の「QSAR モデルバリデーション原則[1]」の４．に基づくバリデーションが行われており、一定の統計指標を概ね満たした QSAR クラスが使用されているか。
③ 予測対象物質が各 QSAR ツールの規定する適用領域内（内挿）にあるか。

II. 類似物質データからの類推

予測結果について、以下の各項目を満たすかどうか。

① 類推に用いる類似物質が「類似物質の選定方法」（別紙３）に適合するか。
② 予測対象物質の logP 値が、類似物質の logP 値と同程度かそれ以下であるか、又は複数の類似物質の logP 値に対して内挿であるか。
③ 類似物質の有害性情報が「化審法における生態影響に関する有害性データの信頼性評価等について（平成 23 年 9 月 15 日）」（https://www.env.go.jp/content/000047828.pdf）における信頼性ランク「１」又は「２」に相当するものであるか。

[1] https://www.oecd.org/content/dam/oecd/en/topics/policy-sub-issues/assessment-of-chemicals/oecd-principles-for-the-validation-for-regulatory-purposes-of-quantitative-structure-activity-relationship-models.pdf

類似物質の選定方法

類似物質データからの類推（リードアクロス又はカテゴリーアプローチ）による予測値をスクリーニング評価におけるデフォルト適用の判断に活用するに当たっては、以下により類似物質を選定することができる。

化学物質のグループ化に関する OECD ガイダンス文書[1]及び ECHA ガイダンス（附属書 XI セクション 1.5）[2]を参考に、以下の１～３のいずれかに該当する場合に、類似物質として選定することができる。

1. 評価対象物質が、酸とその塩の関係性にある物質（ただし、生態影響を有しない金属塩である場合に限る）。
2. 化学構造（基本骨格、官能基等）が類似しており、かつ、物理化学的性状（例：水に対する溶解度、logKow、ヘンリー定数）が類似している物質。
3. 化学構造と物理化学的性状／毒性との間に関連性が認められる１つの物質群に含まれる物質。

上記以外にも、以下の４～６のいずれかに該当する場合には、類似物質として選定することが考えられる。これらの場合には、個別の事例に応じて十分な科学的考察を行い、専門家の確認を受けた上で、類似物質として選定できる場合がある。

4. 毒性発現機構（Mode of Action、Mechanism of Action）又は有害性発現経路（Adverse Outcome Pathway）が、上記２又は３に基づき共通と考えられる物質、又は共通であることに関して十分な知見がある物質。
5. 共通の前駆体を有する物質、又は物理的及び生物学的プロセスを通じて構造的に類似した変化物を生成する可能性のある物質。
6. 共通の構成成分、類似の炭素数範囲を持つ物質（混合物に関連する項目）。

1 Guidance on Grouping of Chemicals, Third Edition, OECD Series on Testing & Assessment No. 418, 2025.
https://www.oecd.org/en/publications/guidance-on-grouping-of-chemicals-third-edition_b254a158-en.html

2 REACH Annex XI 1.5.: Grouping of substances and read-across approach
https://reachonline.eu/reach/en/annex-xi-1-1.5.html

（別紙４）

生態毒性予測手法の活用に係る解説

本資料は、スクリーニング評価におけるデフォルト適用の判断に生態毒性予測手法を活用する場合の考え方を解説したものである。本資料は、今後蓄積される知見を踏まえ、適宜内容の拡充を図っていく。

１．予測手法全般について

項目	解説
予測手法による毒性値に UFs を適用した値を用いてスクリーニング評価を行うとはどのような意味ですか。	・化審法の生態影響に係るスクリーニング評価では、3 つの栄養段階（魚類、ミジンコ、藻類）に対する急性毒性試験結果又は慢性毒性試験結果の毒性値を、種間外挿や ACR（急性慢性毒性比）等から算出される UFs（不確実係数積、10～10,000）で除した値（PNEC）を用いて、化学物質に有害性クラスを付与しています。 ・予測手法による毒性値については、上記に加えて、予測に係る UF（不確実係数、最大 10）を適用し、スクリーニング評価におけるデフォルト適用の判断に活用することとしています。 ・例えば、予測手法により 3 つの栄養段階（魚類、ミジンコ、藻類）の慢性毒性値が得られた場合は、予測に係る UF（最大 10）及びスクリーニング評価における UFs（10）で除した値により、暫定有害性クラスを付与します。 ・詳細は「スクリーニング評価手法について」（https://www.env.go.jp/content/000067652.pdf）を確認してください。
一つのデフォルト適用候補物質に、有害性情報と予測情報の両方が提出された場合は、どのように取り扱われますか。	・有害性情報の信頼性評価の結果、信頼性ありとなった場合は、当該有害性情報を用いて有害性クラスを付与し、スクリーニング評価を行います。 ・信頼性なしの場合は、採用可能な予測情報を用いて暫定有害性クラスを付与し、スクリーニング評価を行います。

２．QSAR（定量的構造活性相関）について

項目	解説
評価対象物質と QSAR ツールの予測対象物質が同一とみなされるためには、構造が完全に一致している必要がありますか。	必ずしも構造が完全に一致している必要はありません。 （例　評価対象物質がナトリウム塩であり、予測対象物質がナトリウムを水素に置き換えた物質であって、両者を同一とみなせる場合等）
一定の統計指標を概ね満たしたQSARクラスであることは、どのように確認できますか。	当面活用することとしているKATEにおいては、統計指標（$R^2 \geqq 0.7$、$Q^2 \geqq 0.5$、$n \geqq 5$）を概ね満たしたQSARクラスであることを確認してください。
予測対象物質が各 QSAR ツールの規定する適用領域内（内挿）にあるかは、どのように確認できますか。	当面活用することとしているKATEにおいては、予測対象物質の logP 値及び部分構造が適用領域内（内挿）であることを確認してください。

３．類似物質データからの類推について

項目	解説
・生態影響を有しない金属塩とはどのようなものですか。 ・また、生態影響を有しないとは認められない金属塩にはどのようなものがありますか。	・生態影響を有しない金属には、ナトリウム、カリウムがあります。その他の金属については、生態毒性が弱いと考えられる理由等について考察を行い、専門家による確認を受けてください。 ・強い生態毒性を有することが知られている金属には、ニッケル、銅、亜鉛があります。
化学構造（基本骨格、官能基等）が類似している場合とはどのような場合ですか。	化学構造の類似性については、KATE の QSAR クラスを参考にすることが考えられます。
化学構造と物理化学的性状／毒性との間に関連性が認められるかは、どのように判定することができますか。	・選定した物質と物理化学的性状や毒性に関するパラメーターのマトリックスを作成し、傾向を検討する等の方法が考えられます。
毒性発現機構や有害性発現経路（adverse outcome pathway）に関する知見はどのように入手することができますか。	・例えば、化審法用途として使用される農薬・殺生物剤については、関連情報が整理されている場合があります。 ・また、人健康影響における情報を参考にできる場合があります。
共通の構成成分、類似の炭素数範囲を持つ物質（混合物に関連する項目）とはどのようなものですか。	例えば、組成が不明な物質、複雑な反応生成物や生物由来物質を含む物質など、UVCB 物質として知られる物質が含まれます。