

【概説】OECD QAF ガイダンス文書について

◆ここがポイント◆

- ✓ 2023年に第1版が、2024年に第2版が公表されたOECDのQAFガイダンス文書は、規制当局が(Q)SARを評価する際に参考となる体系的で調和のとれたフレームワークを提供することを目的に作成された。
- ✓ QAFガイダンス文書の別添QAFチェックリストは、化審法での適用が2024年度に承認された。
- ✓ QAFガイダンス文書へのNITEの貢献は、OECD HPより紹介されている。

【背景】

近年、動物実験代替法による有害性評価手法の推進が国際的に進められている。OECD(経済協力開発機構)は2004年に、(Q)SAR((Quantitative) Structure-Activity Relationship:(定量的)構造活性相関)モデル¹の検証に関する5つの原則(OECD, 2004)を公表し、その後も、(Q)SAR関連文書及びOECD [QSAR Toolbox](#)の公開を通じて、(Q)SARの行政利用推進に貢献している。

【QAFガイダンス文書の詳細】

2023年にOECDより(Q)SAR Assessment Framework(QAF)第1版が公表された。これは、規制当局が(Q)SARモデル、予測、および複数の予測に基づく結果を評価する際に、体系的で調和のとれたフレームワークを提供することを目的に作成された文書である。2024年に公表された第2版(OECD, 2024)では、「複数予測からの結果」に対する報告様式である(Q)SAR Result Reporting Format(QRRF)が追加された。本ガイダンス文書は、40名以上の専門家がプロジェクトチームに参加し約2年間の作成期間を経て公表された。QAFガイダンス文書は規制当局向けの文書であるが、評価される項目が明確化されることで評価の透明性につながり、(Q)SARモデル開発者や(Q)SAR結果を規制当局に提出する届出者にとっても、参考となる文書である。

QAFガイダンス文書では、(Q)SARモデルの検証に関する5つの原則(OECD(2004))に加えて、新たに以下の内容を文書内で示した。「(Q)SARモデル」、「(Q)SAR予測」及び「複数予測からの結果」の評価基準については図を参照。

- 「(Q)SARモデル」:5つの原則を評価する際に確認すべき評価要素(AE)
- 「(Q)SAR予測」及び「複数予測からの結果」:評価基準、各評価基準に対する評価要素(AE)及び不確実性要素(UF)

¹ 数理モデルを用いて化学構造を基に化学物質の有害性を推計する手法。

QAFで初導入

<ol style="list-style-type: none">1. QSAR モデルの評価 (バリデーション5 原則)<ol style="list-style-type: none">1) エンドポイントの定義2) 曖昧さのないアルゴリズム3) 適用範囲の定義4) 適合度、頑健性、予測性の適切な評価5) メカニズムに関する解釈 (可能ならば)	<ol style="list-style-type: none">2. QSAR 予測の評価<ol style="list-style-type: none">1) モデルへの入力正しい2) 評価対象の物質がモデルの適用範囲内にある3) 信頼できる予測結果4) 出力内容が行政目的に適合している3. 複数予測からの結果の評価<ol style="list-style-type: none">1) 結果チェックリストを使用する場合2) QSAR 結果の不確実性と結果
--	---

※それぞれの項目に評価要素 (Assessment Element: AE) として評価するポイントを明記

※予測については不確実性の評価ポイントを明記

図: QAF ガイダンス文書における「(Q) SAR モデル」、「(Q) SAR 予測」及び「複数予測からの結果」の評価基準

また、規制当局が使いやすいよう、OECD は QAF チェックリストを Microsoft Excel 形式で公開している。QAF チェックリストには、規制当局が参考としやすいよう各評価要素について、チェックするポイント及び実践的なアドバイスが記載されている。さらに、QAF チェックリストを使った評価事例及びその説明動画は [OECD の HP](#) より公表されている。当機構は当該ガイダンス作成プロジェクトへの参加に加え、QAF 使用例及び説明動画の作成に協力した。

日本では、「化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律」(化審法) のリスク評価において 2025 年 1 月に承認された「[化審法リスク評価における生分解性評価のための Weight of Evidence の実施マニュアル](#)」の中で、OECD QAF チェックリストが活用されている。この QAF 活用の提案は、OECD QAF 文書作成プロジェクトやその他 OECD の活動に参画している知見を生かし、当機構が行ったものである。

当機構が参画している OECD を中心とした (Q) SAR プロジェクトについては、[当機構の HP](#) にまとめている。

【編集者所感】

OECD QAF ガイダンス文書は、「(Q) SAR モデル」、「(Q) SAR 予測」及び「複数予測からの結果」に関して規制当局が評価基準、評価要素等を指標として公表したことで、(Q) SAR の規制利用の推進に貢献すると考えられる。OECD QAF ガイダンス文書作成プロジェクトでは、ECHA (欧州化学品庁) とイタリアの ISS (Istituto Superiore di Sanità) がリードを務めたことを考慮すると、欧州の規制に活用されることが予想される。ECHA 主催の REACH ドシエ評価における QAF に関する [ウェビナー](#) が 2024 年 3 月に開催されており、[録画](#) を閲覧することが可能である。

【参考文献】

- OECD (2004), *The report from the expert group on (Quantitative) Structure-Activity Relationships [(Q)SARs] on the principles for the validation of (Q)SARs*, OECD Series on Testing and Assessment, No. 49,

- OECD (2024), *(Q)SAR Assessment Framework: Guidance for the regulatory assessment of (Quantitative) Structure Activity Relationship models and predictions, Second Edition*, OECD Series on Testing and Assessment, No. 405,
 - 経済産業省 (2024), スクリーニング評価・リスク評価における生分解性評価のための Weight of Evidence の実施について.
https://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/information/woe_biodegradation.html
 - ECHA HP: <https://echa.europa.eu/-/oeqd-qsar-assessment-framework-in-reach-dossier-evaluation-what-you-need-to-know>
 - OECD HP: <https://www.oecd.org/en/events/2023/11/qsar-assessment-framework-guidance-for-assessing-qsar-models-and-predictions.html>
-

本コラムでは、国際的に注目されているトピックを取り上げ、概要を紹介しています。
本概要は、公開されている情報を基に編集者がまとめたものであり、最終的なご判断は読者の皆さまにお任せいたします。詳細については必ず情報源をご確認ください。