

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 5 年 6 月 21 日現在

機関番号：82626

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2019～2022

課題番号：19H04297

研究課題名(和文) 2次元GC計測とLFER理論を利用した混合物の物性・毒性推定手法開発

研究課題名(英文) Method development on physicochemical properties and toxicities of a mixture by two-dimensional GC combined with LFER theory

研究代表者

頭士 泰之 (Yasuyuki, Zushi)

国立研究開発法人産業技術総合研究所・エネルギー・環境領域・主任研究員

研究者番号：80611780

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 13,520,000円

研究成果の概要(和文)：製品開発や環境管理において、存在する全ての物質を考慮したリスク評価枠組みは未発達である。本研究では混合物中の化学組成を網羅的に検出できるGCxGCおよび環境動態に係る物性を推定できるpp-LFERを組み合わせ、物性推定において極性官能基を含むリン酸エステル類に適用した。このモデルは、log Pなどについて良好な予測能を示した。毒性値の推定においても、非極性物質について良好な予測能を示した。また予測できる物質群拡大のため、マススペクトル情報の利用を着想し、より広範なGC測定対象物に適用可能な予測モデルの構築に成功した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究の成果により、分析装置により検出された化学物質について、その構造が不明な場合であっても、性質や毒性を一定の精度で把握する事が可能となった。将来的には、我々の身の回りに存在する無数の種類の化学物質のリスクを把握する事まで可能となりうる。本成果は、我々が化学物質の便益を享受しながら安全に暮らす上で、また我々が持続的に暮らしていける地球環境を保全する上で、その評価を行うシステムの基礎を形成しうる重要な意義を持つ。

研究成果の概要(英文)：A framework of risk assessment for all substances present in the environment or product is underdeveloped. In this study, GCxGC, which can comprehensively detect chemicals in a mixture, and pp-LFER, which can estimate physicochemical properties related to environmental dynamics, were applied to phosphate esters which contain a polar functional group. It performed well in predicting log P and other properties. It also performed well for non-polar substances in predicting toxicity values. Furthermore, mass spectral data were added to a model input as chemical information to expand the predictable class of chemicals. As a result, a prediction model applicable to a wider range of GC-amenable compounds was successfully constructed.

研究分野：環境化学

キーワード：2次元GC 混合物 LFER GCxGC 物性 毒性 推定手法 化学計測

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

## 1. 研究開始当初の背景

産業の発展や生活レベルの向上に伴い、我々の身の回りにあふれる化学物質の種数が劇的に増加している事は、化学物質情報データベース CAS における登録種数が 2015 年に 1 億を超えた事<sup>1)</sup>を見ても明らかである。近年の製品開発においては、人健康及び生態系へのリスクを考慮して、毒性の低い成分を利用することあるいは暴露量を低くすることにより、リスクを低減しようとする取組みがみられ製品安全性は高まりつつあるが、製造過程における副反応や製品成形工程の複雑化などで最終製品に含まれる物質数が数百～数千と膨大な数となることが問題となっている。従来の化学物質のリスクは個別物質ごとに評価されているが、実際には存在する複数の物質が加算的に作用してリスクとして現れると考えられる。しかし製品開発や環境管理の場面においては、複数物質を考慮したリスク評価の枠組みは未だ取り入れられていない。それは膨大な種数の化学物質を含むことで「混合物」品やそれらが排出された環境に対して、従来のリスク評価で必要となる情報(個別の物質についての毒性情報や暴露量)が揃えられず、総合的な製品安全性や環境影響の評価方法が未構築だからである。しかしながら、混合物評価を可能とする事は実際には非常に難しい<sup>2)</sup>。それは混合物である化学製品や環境媒体(空気質・水質など)の化学組成を明確化することが難しい事、混合物を構成する化学物質の環境動態に係る性質や生物に対する毒性情報が欠損している事などが重要な理由として挙げられる。混合物のリスク評価には生物試験の利用が注目されることもあるが、そのアプローチのみでは混合物の化学組成や各組成の環境動態・毒性情報までは明らかにできず、詳細な評価に結びつかず有効な対策立案が難しい。このような点から、混合物の組成を網羅的に把握し、リスク評価に繋げられる化学分析的アプローチも必要であると考えられる。こうした状況に対し、GCxGC による網羅分析と polyparameter linear free energy relationship (pp-LFER) に基づく推定手法を融合させた化学分析的アプローチが混合物のリスク評価に有効ではないかと考えられる。

GCxGC の構成技術であるガスクロマトグラフィー(GC)において、測定物質の GC 保持時間は、気相-GC 固定相間の分配自由エネルギーと直接関係している。そのため各物質の GC 保持時間から気相-GC 固定相間の分配平衡定数を求める事が出来る。分配自由エネルギーは物質が持つ分子間相互作用特性と関係している。この関係はすなわち、分配自由エネルギー(つまり GC 保持時間や分配定数)は、モル屈折率、双極子・分極率、水素結合能(受容、供与)、モル体積などのパラメータ(分子記述子)により記述可能という事を示している<sup>3)</sup>。この関係を定量的に表したものが pp-LFER 式と呼ばれるものである。環境中における物質の分配・吸着挙動など環境挙動も同様なパラメータにより支配されているため、GC 保持時間から環境評価に重要な物性を得ることができると考えられる。つまり、LFER 理論を 2 次元ガスクロマトグラフィー(GCxGC)による網羅分析に取り入れることで、無数の物質を含む混合物について、リスク評価に必要な情報を網羅分析データからダイレクトに推定することが可能になると考えられる。最近では、GCxGC 計測において LFER 理論を取り入れ、物質の物性を推定しようとする取組みが芽吹きつつあるが<sup>4-5)</sup>、これら既往研究は混合物のリスク評価を指向したものとは言えず、またその物質適用範囲は炭化水素類や含ハロゲン物質類などと狭く、官能基を有する極性物質への展開が出来ていない。これらの点について研究による発展が求められている。

## 2. 研究の目的

上述の背景を踏まえ、本研究では混合物中の化学組成を網羅的に検出できる GCxGC を用い、検出された種々の物質についてそれらの保持時間に基づいて、化学物質の環境動態に係る物性を推定する手法を発展させる。これにより、多数の物質について煩雑な作業をしなければならない・そもそも組成が不明など、混合物リスク評価が抱える種々の課題の解決を目指す。また混合物のリスクを評価するためには、物性値だけでなく毒性値情報が必要なため、水生生物を対象とし、GCxGC データ中のピーク座標からダイレクトに毒性値の推定を可能とする手法開発にもチャレンジする。本研究の取組みは、先端計測技術と LFER 理論を結び付け、社会的に問題となり得る評価困難な混合物の評価手法を確立しようとするものである。背景で述べた通り、近年芽吹きつつある GCxGC と LFER 理論を利用したアプローチはリスク評価活用を指向しておらず、また適用可能な物質範囲も、炭化水素類および含ハロゲン物質などと狭い。例えばエステル、ケトンといった含酸素物質は既往手法でカバーできないが、それはこれらが水素結合受容体の役割を持つ一方、通常の GC 固定相は水素結合供与能を有しておらず、これら物質の水素結合能に応じた固定相保持がなされないからである。一方で、最近開発されたイオン液体カラムなど水素結合能を捉える事のできるカラムを用いれば、GC 計測においても pp-LFER 式から高精度にこれら物質の性質を推定できると言える。このように化学的理論に基づき物質群とカラムとの適切な組み合わせを見つけ、物性推定を適用できる物質範囲の拡大を目指す。また本推定手法について物質種の適用範囲拡大を狙いながら、物質の毒性値についても GCxGC を含む計測データに基づく推定を可能とすることを目指す。

### 3. 研究の方法

本研究においては、網羅分析装置を用いた混合物のリスク評価に資する推定手法を開発するため、1. GCxGC における推定可能物質種の範囲の拡大、2. 化学構造や物性と毒性の関係を考慮した GCxGC 含む計測データに基づく毒性値推定の開発に分けて研究を実施した。

#### 3-(1). GCxGC における推定可能物質種の範囲の拡大

既存の物性推定の適用範囲の拡大を目指し、各物質固有の 5 つから成る pp-LFER の分子記述子に基づき物質をグルーピングし、物性推定において適切な対象物質範囲を探索した。物質のグルーピングについては、データベースに収められた約 8000 物質の pp-LFER 用分子記述子を利用し、主成分分析などにより性質の類似する物質を探索した。pp-LFER 用分子記述子の計測値が無い物質については、ソフトウェア Absolv により化学構造計算から推定値を得ることで、解析範囲の物質数を補足した。これにより、性質に応じた物質グループを整理し、物質グループごとに物性推定に適したカラム組み合わせを探索した。具体的な取り組みの 1 つとして、前述の通り現状では物性推定が可能な物質グループは炭化水素類や含ハロゲン物質など限定的であるが、推定できる物質種を拡大するため、GC カラムとしてイオン液体カラムを導入し、エステルやケトンといった物質群へ適用できるよう検討した。評価対象の物質グループと計測に利用する GC カラムの特性の相互関係性を明らかにし、状況に応じた適切な GCxGC 用 LFER 物性推定式を選択する仕組みとする事で、GCxGC による物性推定の物質適用範囲の拡大化を図り、多様な物質の物性や環境動態などの評価可能性を探った。

#### 3-(2). 化学構造や物性と毒性の関係を考慮した GCxGC 含む計測データに基づく毒性値推定の開発

基礎的な毒性値(いわゆるベースライン毒性値)は生物膜への分配性から推定可能であるとする Target Lipid Model (TLM)の考え方<sup>6)</sup>に基づけば、毒性値も LFER モデルについてはそれに基づく GCxGC モデルにより推定可能であると考えられる。そこで各種水生生物について毒性値情報を保有する AIST-MeRAM データベース<sup>7)</sup>の情報を活用し、化学構造や物性と毒性の関連性を調べた。これにより化学構造や物性と毒性の関連性を明らかにし、毒性と物性の関係性について整理した。

さらに、得られた水生生物についての物性と毒性の関連性に基づく形で、毒性推定式を立式し、GCxGC 計測データ中のピーク座標から毒性値を推定する方法の確立に取り組んだ。毒性推定式のパラメータキャリブレーションに必要な物質を AIST-MeRAM データベースから検索し、これら物質と GCxGC ピーク座標とのデータセットを作成した。これらデータに基づくパラメータキャリブレーションを実施し、精度の高い毒性推定式の検討を行った。また化学構造や物性と毒性の関連性に基づく形で GC-MS の計測データから物性や毒性を推定する手法について開発に取り組んだ。

これらにより、計測により検出された多数の物質について、ダイレクトにリスク評価に必要となる物性、環境動態、水生生物への毒性を推定できる手法の創出に取り組んだ。

### 4. 研究成果

#### 4-(1). GCxGC における推定可能物質種の範囲の拡大に関する成果

8000 物質に関する LFER 分子記述子の内、O, N, P, S, ハロゲンから成る 984 物質を抽出し、主成分分析を行い、主成分スコア 3 次元プロットを得た。結果として、ケトン、エステル、エーテル、アルデヒドのグループ、カルボン酸、アルコールのグループが平面上に集約される結果となり、2 つの合成変数で捉えられる事を示唆する結果を得た。この結果を踏まえ、GCxGC による物性推定手法について非極性物質から極性物質への物質種の拡張のため、事例としてエステル類を選定した。脂肪酸メチルエステル(FAME)および脂肪酸エチルエステル(FAEE)を対象としたが、GCxGC による 2 次元展開において、これら同族体は保持時間に差が生じなかった。そのため選定をリン酸エステル類に変更し、1 次元目のカラムを非極性 GC カラムである DB1, 2 次元目のカラムを極性あるいはイオン性カラムである BPX50, WAX, IL60, IL111 として測定を行い、GCxGC による物性推定能の検討を行った。対象とする物性項目としては、物質の蒸気圧を示す log VP に加え二相間の分配係数を示す log Koa, log Kaw, log Kow とした。リン酸エステルについてはこれらの実験値が得られないものが多かったため、量子計算に基づく高精度な推定手法である COSMOtherm により得られた計算値との比較を行った。その結果、log VP ではいずれのカラム組み合わせにおいても RMSE (Leave-one-out 値) が 0.60-0.70 (n=19), log Koa では 0.50-0.59 (n=19) と良好な予測能が得られた。一方で log Kaw は 1.54-1.82 (n=19), log Kow は 1.31-1.75 (n=19) と低く、相互作用として水素結合が重要となる媒体を対象に含む際の推定については、これらのカラムでその相互作用が上手く捉えられない事が示された。2 次元目のカラム種による推定能の違いに関する傾向は見られなかった。GCxGC によりリン酸エステル類の log P および log Koa を推定する事が可能である事が明らかとなった。その一方で、これらの媒体以外との相互作用があるようなケースでは異なるアプローチが必要であることを示唆する結果が得られた。

#### 4-(2). 化学構造や物性と毒性の関係を考慮した GCxGC 含む計測データに基づく毒性値推定の開発に関する成果

AIST-MeRAM に毒性値が登録されている物質の内、ファットヘッドミノール(Pimephales promelas)、ミジンコ(Daphnia magna)、藻類(Pseudokirchneriella)の3生物種に絞り、標準物質から GCxGC の測定値が得られた物質種数はそれぞれ、52、56、55 種であった。また AIST-MeRAM で算出される SSD5 (種の感受性分布の5%tile) 値に関しては、50 種のデータが得られた。化学構造の特徴を示す LFER 記述子による重回帰モデルから化学物質の物性により求められるベースライン毒性が推定可能であると考えられ、結果として LFER モデルの RMSE はそれぞれ 0.71, 0.65, 0.92, 1.2 であり、SSD5 は若干低いもののその他は良好な毒性の予測能を示し、LFER 記述子で表現される構造情報から一定の精度で水生生物のベースライン毒性を推定する事が可能であると考えられた。またこれらの内、GCxGC の物性推定の適用範囲内となる非極性物質のみに絞り、LFER の記述子から GCxGC ピーク座標を用いたモデルとした場合、それぞれの RMSE は、1.1 (n=22), 0.82 (n=28), 0.82 (n=16), 0.85 (n=20) であり、藻類の推定精度が若干低かったものの、良好な値を維持する事が明らかとなった。これにより GCxGC 計測で検出される物質の内、水生生物の毒性値が高く、水溶解度が高いために曝露量が多くなりうる物質を簡易にスクリーニングするアプローチが採れる。道路塵埃中に含まれる水生生物へのリスクが相対的に高くなる物質群は図1に示した形で示すことができ、この領域内のピークは数百以上に上る。課題としては、各ピークの高精度な濃度定量、バイオアクセシビリティを考慮した曝露量の見積もり、リスクを見積

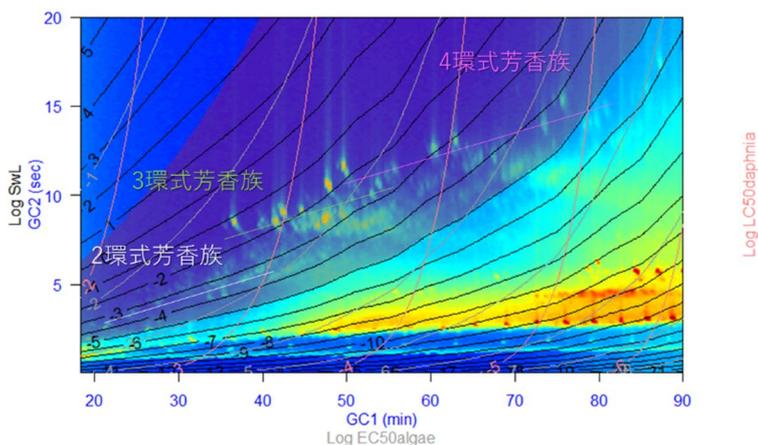


図1 GCxGC で検出される道路塵埃中の物質群

囲まれた領域は水生生物へのリスクが懸念される物質群を示す

Log SSD5 が-3 以下、log WS が-5 以上の領域を囲んでいる

れたモデルを構築することができた。この推定モデルによる log VP は RMSE が 0.74、げっ歯類の毒性も 0.6-0.74 であった。水生生物の毒性に関しては、情報の蓄積が浅い事から、このアプローチによるモデル構築は現段階では困難であった。但し、従来の構造活性相関モデルにより計算された水生生物毒性値を用いる事で、これらの値を本開発モデルで再現する事は可能であった。これらについて成果リストにも示した通り、論文発表を行った。今後、データ拡充による精度向上と共に予測項目についても拡充を検討していく必要がある。本研究で開発した GCxGC と LFER を組み合わせた物性および毒性推定手法、マススペクトルを組み合わせた手法をさらに発展させていく事で、従来では困難であった環境中はじめ様々な試料中の未知物質を含めた含有物質の全体のリスクを推し量る取り組みを本格化させる事に繋げられるものと期待する。

#### 引用文献

- 1) CAS, プレスリリース June 29th, 2015.
- 2) 頭土泰之, 技術情報協会編 製品含有化学物質のリスク管理、情報伝達の効率化, 600pp, 2017.
- 3) Endo, S., Goss, K.-U., Environmental Science & Technology 48, 12477-12491, 2014.
- 4) Arey, J. S., Nelson, R. K., Xu, L., Reddy, C. M. Anal. Chem. 2005, 77, 7172-7182.
- 5) Nabi, D., Gros, J., Dimitriou-Christidis, P., Arey, J.S., Environ. Sci. Technol. 2014, 48, 6814-6826.
- 6) McCarty, L.S. and Mackay D., Environ. Sci. Technol. 1993, 27, 1718-1728.
- 7) 林彬勅, 孟耀斌, 内藤航, 加茂将史, 2016 著作権登録 H28PRO-2006(日本語版) H28PRO-2007(英語版)

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計9件（うち査読付論文 8件/うち国際共著 3件/うちオープンアクセス 7件）

1. 著者名 Zushi Yasuyuki	4. 巻 94
2. 論文標題 Direct Prediction of Physicochemical Properties and Toxicities of Chemicals from Analytical Descriptors by GC-MS	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Analytical Chemistry	6. 最初と最後の頁 9149 ~ 9157
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.analchem.2c01667	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Endo Satoshi	4. 巻 56
2. 論文標題 Applicability Domain of Polyparameter Linear Free Energy Relationship Models Evaluated by Leverage and Prediction Interval Calculation	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Environmental Science and Technology	6. 最初と最後の頁 5572 ~ 5579
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.est.2c00865	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 頭士 泰之	4. 巻 45
2. 論文標題 環境ノインターゲット分析における分離技術	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 水環境学会誌	6. 最初と最後の頁 408-410
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Endo Satoshi	4. 巻 23
2. 論文標題 Refinement and extension of COSMO-RS-trained fragment contribution models for predicting the partition properties of C10-20 chlorinated paraffin congeners	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Environmental Science: Processes & Impacts	6. 最初と最後の頁 831 ~ 843
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D1EM00123J	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Zushi Yasuyuki	4. 巻 6
2. 論文標題 NMF-Based Spectral Deconvolution with a Web Platform GC Mixture Touch	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 2742 ~ 2748
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.0c04982	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Naseem Sana, Zushi Yasuyuki, Nabi Deedar	4. 巻 13
2. 論文標題 Development and evaluation of two-parameter linear free energy models for the prediction of human skin permeability coefficient of neutral organic chemicals	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Cheminformatics	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1186/s13321-021-00503-5	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Hammer Jort, Matsukami Hidenori, Endo Satoshi	4. 巻 11
2. 論文標題 Congener-specific partition properties of chlorinated paraffins evaluated with COSMOtherm and gas chromatographic retention indices	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-021-84040-z	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Lin Bin-Le, Meng Yaobin, Kamo Masashi, Naito Wataru	4. 巻 268
2. 論文標題 An all-in-one tool for multipurpose ecological risk assessment and management (MeRAM) of chemical substances in aquatic environment	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemosphere	6. 最初と最後の頁 128826 ~ 128826
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.chemosphere.2020.128826	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Zushi Yasuyuki, Hanari Nobuyasu, Nabi Deedar, Lin Bin-Le	4. 巻 5
2. 論文標題 Mixture Touch: A Web Platform for the Evaluation of Complex Chemical Mixtures	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 8121 ~ 8126
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.0c00340	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 該当する

[学会発表] 計15件(うち招待講演 2件/うち国際学会 4件)

1. 発表者名 頭士 泰之, 関口 桂, 野原 健太
2. 発表標題 SCCP全異性体の分離と識別に関する検討
3. 学会等名 第30回環境化学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 羽成 修康, 頭士 泰之, 小坂 明正
2. 発表標題 ポストカラム反応装置を備えた2次元GC-MSによるPCBの簡易定量
3. 学会等名 第30回環境化学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 頭士 泰之
2. 発表標題 Detective-QSAR: GC-MSデータのみから物性・毒性値を推定する手法
3. 学会等名 第25回日本水環境学会シンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 頭土 泰之
2. 発表標題 MSスペクトルとfingerprintと化学物質評価の関係性に関する考察
3. 学会等名 情報科学による環境化学分野の問題解決と新展開に関する研究集会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 頭土 泰之
2. 発表標題 情報学的アプローチによるEIマススペクトルと化学構造の関連性に関する解析
3. 学会等名 第57回日本水環境学会年会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 遠藤 智司
2. 発表標題 てこ比と予測区間を用いた物性予測線形重回帰モデルの適用範囲の評価
3. 学会等名 第30回環境化学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Endo Satoshi
2. 発表標題 Interpolation and Extrapolation of Polyparameter Linear Free Energy Relationships (PP-LFERs) to Predict Partition Coefficients
3. 学会等名 SETAC Europe 32nd Annual Meeting (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 頭土泰之
2. 発表標題 ノンターゲット分析とChemical space plotに関する考察
3. 学会等名 情報科学による環境化学分野の問題解決と新展開に関する研究集会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Zushi Yasuyuki
2. 発表標題 Source identification of PFAS in the water environment using chemical markers and spatial analysis
3. 学会等名 PFAS workshop of Japan Society of Environmental Chemistry (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 頭土泰之, 林彬勸
2. 発表標題 非極性物質の水生生物毒性に関する2次元GC分析による推定方法の検討
3. 学会等名 第55回日本水環境学会年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Hammer J., Endo S.
2. 発表標題 Congener-specific partition properties of chlorinated paraffins evaluated with COSMOtherm and GC-retention indices.
3. 学会等名 SETAC SciCon, SETAC Europe 30th Annual Meeting (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Yasuyuki Zushi
2. 発表標題 Mixture Touch: A Web Platform for Assessments of Complex Mixtures Using Comprehensive Two-Dimensional Gas Chromatography Coupled with Mass Spectrometry (GC×GC-MS)
3. 学会等名 ICCA- LRI Workshop (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 頭土泰之
2. 発表標題 ウェブプラットフォーム(Mixture Touch)におけるデータ解析手法実装の試み
3. 学会等名 統計学的アプローチによる問題解決のための環境化学分析の最適化・高度化に関する研究集会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 頭土泰之, 羽成修康, 林彬勲
2. 発表標題 混合物ウェブプラットフォーム(Mixture Touch)を利用した塩素化パラフィンリスク評価手法の検討
3. 学会等名 日本環境化学会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 頭土泰之, 羽成修康, 林彬勲
2. 発表標題 Mixture Touch: 環境混合物を診るためのウェブプラットフォーム
3. 学会等名 日本水環境学会
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

AIIST-MeRAM (Web Version in English)  
[https://riss.aist.go.jp/en-meram/download/Mixture Touch](https://riss.aist.go.jp/en-meram/download/Mixture_Touch)  
[http://www.mixture-platform.net/Mixture\\_Touch\\_open/](http://www.mixture-platform.net/Mixture_Touch_open/)

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	林 彬勒  (Lin Bin-Le)  (20358360)	国立研究開発法人産業技術総合研究所・エネルギー・環境領域・上級主任研究員   (82626)	
研究分担者	遠藤 智司  (Endo Satoshi)  (30748934)	国立研究開発法人国立環境研究所・環境リスク・健康領域・主任研究員   (82101)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------