

# 化學物質綠色替代診斷模組建置 及決策支援計畫(1/4) 成果報告

計畫編號：112DA023

受託單位：國立臺灣大學

計畫執行期間：112年07月12日起至112年11月20日

環境部

化學物質管理署編印

中華民國 **112** 年 **12** 月印製

# 化學物質綠色替代診斷模組建置 及決策支援計畫(1/4) 成果報告

計 畫 編 號：112DA023

受 託 單 位：國立臺灣大學

計 畫 主 持 人：

計畫執行期間：112 年 07 月 12 日起至 112 年 11 月 20 日

計 畫 經 費：新台幣參佰玖拾柒萬元整

環境部

化學物質管理署編印

中華民國 112 年 12 月印製

## 計畫成果報告基本資料表

「化學物質綠色替代診斷模組建置及決策支援計畫(1/4)」

## 成果報告基本資料表

|          |                                                                                                      |      |                     |
|----------|------------------------------------------------------------------------------------------------------|------|---------------------|
| 委辦單位     | 環境部化學物質管理署                                                                                           |      |                     |
| 執行單位     | 國立臺灣大學                                                                                               |      |                     |
| 參與計畫人員姓名 |                                                                                                      |      |                     |
| 年 度      | 112                                                                                                  | 計畫編號 | 112DA023            |
| 研究性質     | <input checked="" type="checkbox"/> 基礎研究 <input type="checkbox"/> 應用研究 <input type="checkbox"/> 技術發展 |      |                     |
| 研究領域     | 環境科學                                                                                                 |      |                     |
| 計畫屬性     | <input checked="" type="checkbox"/> 科技類 <input type="checkbox"/> 非科技類                                |      |                     |
| 全程期間     | 112年 07 月～ 112年 11 月                                                                                 |      |                     |
| 本期期間     | 112年 07 月～ 112年 11 月                                                                                 |      |                     |
| 本期經費     | 零 億 3,970 千 元                                                                                        |      |                     |
|          | 資本支出                                                                                                 |      | 經常支出                |
|          | 土地建築 ____0____ 千元                                                                                    |      | 人事費 <u>1,419</u> 千元 |
|          | 儀器設備 ____0____ 千元                                                                                    |      | 業務費 <u>683</u> 千元   |
|          | 其 他 <u>1,350</u> 千元                                                                                  |      | 材料費 <u>0</u> 千元     |
|          |                                                                                                      |      | 其 他 <u>518</u> 千元   |

摘要關鍵詞（中英文各三則）

綠色化學     Green chemistry

安全替代     Safer alternative

危害資料庫   Database for hazardous chemical



## 計畫成果中英文摘要（簡要版）

一、中文計畫名稱：

化學物質綠色替代診斷模組建置及決策支援計畫(1/4)

二、英文計畫名稱：

Development of a Green Chemical Substitution Diagnostic Module and Decision  
Support Plan (1/4)

三、計畫編號：

112DA023

四、執行單位：

國立臺灣大學

五、計畫主持人（包括共同主持人）：

六、執行開始時間：

2023/07/12

七、執行結束時間：

2023/11/20

八、期中報告完成日期：

2023/08/31

九、報告總頁數：

382

十、使用語文：

中文，英文

十一、報告電子檔名稱：

112DA023.docx

十二、報告電子檔格式：

Word 5.0

十三、中文摘要關鍵詞：

綠色化學，安全替代，危害資料庫

十四、英文摘要關鍵詞：

Green chemistry, Safer alternatives, Database for hazardous chemical

十五、中文摘要（約三百至五百字）：

本研究計畫建立「高風險化學物質之安全替代化學物質搜尋、評估及篩選(Searching, assessment, and screening system for safer alternative chemicals, SAS)診斷模組系統」，基於模組系統架構進行優化，功能包含診斷化學物質危害，建立安全替代建議清單，以利源頭管理化學物質。針對 110-111 年完成之 SAS 診斷模組系統，參考國際安全替代評估策略及運算邏輯、化學物質管理法規、危害物質或管制清單，將 SAS 診斷模組系統進行優化，包含新增模組功能及優化期程。進行 SAS 診斷模組系統優化作業：包含替代評估運算邏輯更新、擴充安全替代化學物質資料庫、關聯資料庫，以及強化毒理資料不足之補足，使 SAS 診斷模組系統更加完善。

計畫已完成(1)建立 SAS 診斷模組系統，並新增功能及優化期程：針對 110-111 年完成之 SAS 診斷模組系統，參考國際安全替代評估策略及運算邏輯、化學物質管理法規、危害物質或管制清單，提出 SAS 診斷模組系統優化建議，包含新增模組功能並進行優化。(2)進行 SAS 診斷模組系統優化作業：包含替代評估運算邏輯更新、擴充安全替代化學物質資料庫、關聯資料庫，以及強化毒理資料不足之補足，使 SAS 診斷模組系統更加完善。

(3) 由化學署測試並系統驗證後，由計畫執行團隊邀請產業及專家試操作蒐集回饋建議，辦理 2 場應用教育訓練，以及研析綠色替代診斷模組未來推廣及應用相關預備工作。

十六、英文摘要：

This research project focuses on establishing the “Searching, Assessment, and Screening system for Safer Alternative Chemicals (SAS)” diagnostic module system. The system is optimized based on a modular structure, encompassing functions such as diagnosing the hazards of chemical substances, creating a list of safe alternatives, and facilitating the management of chemicals at the source. Due to the international safety assessment strategies, computational logic, chemical regulations, and hazardous substance lists, the SAS diagnostic module system is undergoing optimization, including adding new module functions and improving the schedule.

The optimization operations for the SAS diagnostic module system include updating the computational logic for alternative assessment, expanding the database of safe alternative chemicals, associating databases, and reinforcing data on toxicology where information is insufficient, enhancing the overall completeness of the SAS diagnostic module system.

The project has already accomplished the planning phase, which involved proposing optimization suggestions for the SAS diagnostic module system, considering international safety assessment strategies, computational logic, chemical regulations, and lists of hazardous substances or controlled chemicals. The next phase involves the optimization operations, which include updating the computational logic for alternative assessment, expanding the database of safe alternative chemicals, associating databases, and reinforcing data on toxicology where information is insufficient, ensuring the SAS diagnostic module system becomes more comprehensive.

Finally, the Chemical Substance Bureau will test and systematically verify the optimized SAS diagnostic module system. An artificial intelligence (AI) chemical hazard classification SAS diagnostic module system will also be

developed. Feedback and suggestions will be collected through hands-on trials with industry professionals and experts, and continuous optimization of module functions will be pursued. The project will also analyze the future promotion and application of the green alternative diagnostic module, preparing for related activities such as education and training.

## 目錄

|                                        |           |
|----------------------------------------|-----------|
| 計畫成果報告基本資料表 .....                      | I         |
| 計畫成果中英文摘要（簡要版） .....                   | III       |
| 目錄 .....                               | 1         |
| 圖目錄 .....                              | 3         |
| 表目錄 .....                              | 4         |
| 報告大綱 .....                             | I         |
| 計畫成果報告摘要（詳細版） .....                    | III       |
| 附件一覽表 .....                            | XVII      |
| <b>第一章 前言</b> .....                    | <b>1</b>  |
| 1.1 計畫背景 .....                         | 1         |
| 1.2 計畫目標與工作內容 .....                    | 1         |
| 1.3 執行期程與查核點 .....                     | 4         |
| 1.4 相關人員學經歷 .....                      | 8         |
| <b>第二章 計畫工作項目</b> .....                | <b>11</b> |
| <b>第三章 計畫工作內容</b> .....                | <b>13</b> |
| 3.1 規劃 SAS 診斷模組系統新增功能及優化期程 .....       | 13        |
| 3.1.1 規劃 SAS 診斷模組系統新增功能 .....          | 13        |
| 3.1.2 擴增關聯資料庫 .....                    | 16        |
| 3.1.3 優化期程 .....                       | 22        |
| 3.2 進行 SAS 診斷模組系統優化作業 .....            | 22        |
| 3.2.1 擴增安全替代化學品 .....                  | 22        |
| 3.2.2 替代評估運算邏輯加入國際或國家管理機構研發工具邏輯 .....  | 25        |
| 3.2.3 毒理資料不足時以 QSAR 定量構效關係模型運算補足 ..... | 33        |
| 3.3 SAS 診斷模組系統功能驗證 .....               | 55        |
| <b>第四章 教育訓練與專家回饋建議</b> .....           | <b>59</b> |
| 4.1 辦理教育訓練與蒐集回饋建議 .....                | 59        |
| 4.2 研析綠色替代模組未來推廣及應用相關預備工作 .....        | 62        |
| 4.3 為推動安全替代，撰寫科普文章及相關資料蒐集 .....        | 65        |
| 4.4 現行（或開發）作業環境 .....                  | 67        |

|                    |    |
|--------------------|----|
| 第五章 結論 .....       | 71 |
| 第六章 未來或後續執行建議..... | 75 |
| 參考資料 .....         | 77 |
| 附件一覽表 .....        | 81 |

## 圖目錄

|                                                      |    |
|------------------------------------------------------|----|
| 圖 1 工作流程圖 .....                                      | 3  |
| 圖 2 搜尋危害性較小的替代溶劑化學品之方法.....                          | 23 |
| 圖 3 TEST 介面 .....                                    | 27 |
| 圖 4 所使用預測之 Endpoints 和 method 組合 .....               | 28 |
| 圖 5 預測結果示意圖 .....                                    | 28 |
| 圖 6 生成 SMILES 和 CAS No. 的 Dataset .....              | 29 |
| 圖 7 OECD QSAR Toolbox 網頁.....                        | 33 |
| 圖 8 OECD QSAR Toolbox 介面以二甲基甲醯胺為例.....               | 34 |
| 圖 9 OECD QSAR Toolbox 進行計算操作步驟.....                  | 35 |
| 圖 10 全球全氟/多氟烷基物質資料庫更新清單之篩選流程圖 .....                  | 41 |
| 圖 11 SAS 網站介面調整建議.....                               | 43 |
| 圖 12 Google Chart API 提供之統計分析與視覺化報表 .....            | 51 |
| 圖 13 使用 Javascript <script> 示範如何產生視覺化圖表.....         | 52 |
| 圖 14 使用 Javascript <script> 產生之圖.....                | 52 |
| 圖 15 D3 視覺化工具產生之圖.....                               | 53 |
| 圖 16 Crossfilter 視覺化工具產生之圖.....                      | 53 |
| 圖 17 不同化合物在危害終點中之評估分數.....                           | 54 |
| 圖 18 11 月 10 日第一次教育訓練 .....                          | 60 |
| 圖 19 11 月 10 日第一次教育訓練學員合照 .....                      | 61 |
| 圖 20 11 月 13 日第二次教育訓練 .....                          | 61 |
| 圖 21 11 月 13 日第二次教育訓練學員合照 .....                      | 61 |
| 圖 22 112 環境科技論壇暨成果發表會 .....                          | 67 |
| 圖 23 網路環境建置及規劃之網路環境.....                             | 68 |
| 圖 24 將 Airflow 加至 Docker compose 上以完成未來自動化更新作業 ..... | 70 |

## 表目錄

|                                                                  |    |
|------------------------------------------------------------------|----|
| 表 1 計畫工作項目與報告本文之章節對應表.....                                       | 11 |
| 表 2 PARIS III 資料庫評估安全替代化學品考慮之項目.....                             | 24 |
| 表 3 OECD Substitution and Alternatives Toolbox (SAAToolbox)..... | 32 |
| 表 4 OECD QSAR Toolbox 4.6 版內建資料庫四種主分類所含資料統計.....                 | 34 |
| 表 5 OECD QSAR Toolbox QSAR 模型選擇示範 .....                          | 35 |
| 表 6 管制或高關注物質清單屬性範例.....                                          | 39 |
| 表 7 蒐集之全氟/多氟烷基物質資料庫與清單.....                                      | 42 |
| 表 8 系統規格 .....                                                   | 67 |



## 報告大綱

綠色化學是一個在 1990 年代早期由美國環境保護署 (US EPA) 引入的概念，旨在促進化學產品的製造和使用過程中減少或消除使用有害物質的創新化學技術。在 2019 年，美國環保署 (US EPA) 署長安德魯·惠勒 (Andrew Wheeler) 宣布將在 2035 年終止動物試驗，這也是一個重要的發展。同時，近年來，聯合國推動永續發展目標，我國則推動 2050 淨零排放路徑政策和轉型政策。美國環保署明確表示，綠色化學的目標是消除化學過程中的有害物質，綠色化學的定義是不使用對環境有毒害的物質，並通過開發更安全無害的替代品實踐可持續發展。為了促進綠色化學的發展和推廣，國際上有許多國家與非政府組織建立綠色化學、綠色替代資料庫，化學品替代方案及技術可以替代傳統的有毒、危險或不環保的化學產品和製程，這些替代品比傳統產品更加環保、環境友善、安全和健康。

此計畫統整國際上常見的綠色替代資料庫，參考歐盟生態環保標章 (EU Ecolabel) 推薦的國際安全替代資料庫清單以及利用國際上已建立的化學品毒性資料庫來蒐集適用資料並利用資料探勘技術和人工智慧技術進行結構預測，可以節省研究時間和大量經費，同時綠色化學和綠色化學替代資料庫是推動可持續發展和保護環境的重要工具，在未來的化學領域中發揮越來越重要的作用。以下依章節次序簡述說明報告本文內容：

報告第一章為前言，主要描述計畫緣起與目的，簡述每項計畫工作項目與子項目，計畫執行流程圖，計畫期程與重要查核點。第二章說明計畫工作項目以及對照之章節及頁碼。第三章說明計畫執行之內容，分節概述如下：

- 一、建立 SAS 診斷模組系統，並新增功能及優化期程：針對 110-111 年完成之 SAS 診斷模組系統，參考國際安全替代評估策略及運算邏輯、化學物質管理法規、國際危害物質或管制清單，提出 SAS 模組系統優化建議，包含新增模組功能及優化期程。
- 二、進行 SAS 診斷模組系統優化作業：至少須包含替代評估運算邏輯更新、擴充安全替代化學物質資料庫、關聯資料庫，以及強化毒理資料不足之補足，使 SAS 診斷模組系統更加完善。
- 三、SAS 診斷模組系統功能驗證

報告第四章分節說明教育訓練之意見蒐集，內容以「辦理人工智能(AI)化學

物質危害分級 SAS 診斷模組系統優化意見蒐集及應用」舉行兩場教育訓練，邀請產業及專家試操作並蒐集回饋建議，持續優化模組功能。第五章為計畫之總結論，第六章為未來或後續執行建議分為短期與中長期建議。

## 計畫成果報告摘要（詳細版）

計畫名稱：化學物質綠色替代診斷模組建置及決策支援計畫  
(1/4)

計畫編號：112DA023

計畫執行單位：國立臺灣大學

計畫主持人（包括協同主持人）：

計畫期程：112 年 7 月 12 日起至 112 年 11 月 15 日止

計畫經費：3,970,000 元

### 摘要

本研究計畫以建立「高風險化學物質之安全替代化學物質搜尋、評估及篩選(Searching, assessment, and screening system for safer alternative chemicals, SAS)診斷模組系統」，基於模組系統架構進行優化，功能包含診斷化學物質危害，建立安全替代建議清單，以利源頭管理化學物質。針對 110-111 年完成之 SAS 診斷模組系統，參考國際安全替代評估策略及運算邏輯、化學物質管理法規、危害物質或管制

清單，將 SAS 診斷模組系統進行優化，包含新增模組功能及優化期程。

進行 SAS 診斷模組系統優化作業：包含替代評估運算邏輯更新、擴充安全替代化學物質資料庫、關聯資料庫，以及強化毒理資料不足之補足，使 SAS 診斷模組系統更加完善。

計畫已完成(1)建立 SAS 診斷模組系統，並新增功能及優化期程：

針對 110-111 年已完成之 SAS 診斷模組系統，參考國際安全替代評估策略及運算邏輯、化學物質管理法規、危害物質或管制清單，提出 SAS 診斷模組系統優化建議，包含新增模組功能及優化期程。(2)進行 SAS 診斷模組系統優化作業：至少須包含替代評估運算邏輯更新、擴充安全替代化學物質資料庫、關聯資料庫，以及強化毒理資料不足之補足，使 SAS 診斷模組系統更加完善。(3)化學署測試並系統驗證後，由計畫執行團隊邀請產業及專家試操作蒐集回饋建議，辦理人工智能(AI)化學物質危害分級 SAS 診斷模組系統優化意見蒐集及 2 場應用教育訓練，以及研析綠色替代診斷模組未來推廣及應用相關預備工作。

The research project aims to establish a "Searching, Assessment, and Screening system for Safer Alternative Chemicals (SAS)" diagnostic module

system for high-risk chemicals. The system will be optimized based on a modular framework and will include functions such as diagnosing chemical hazards, creating a list of recommended safer alternatives, and facilitating the management of chemicals at the source.

Building upon the SAS diagnostic module system developed in 2021 and 2022, the optimization process will involve referencing international strategies and computational logic for safety assessment, chemical substance management regulations, hazardous substance or control lists, and enhancing the module system by adding new functionalities and optimizing the timeline. The optimization process will include updating the computational logic for alternative assessment, expanding the database of safer alternative chemicals, establishing related databases, and supplementing insufficient toxicological data to improve the SAS diagnostic module system.

The project aims to achieve the following objectives. (1) Planning the addition of new functionalities and optimizing the timeline of the SAS diagnostic module system: This will involve referencing international safety assessment strategies and computational logic, chemical substance management regulations, and hazardous substance or control lists to propose optimization suggestions for the SAS diagnostic module system, including new functionalities and an optimized timeline. (2) Conducting the optimization process for the SAS diagnostic module system: This will involve updating the computational logic for alternative assessment, expanding the database of safer alternative chemicals, establishing related databases, and supplementing insufficient toxicological data to enhance the SAS diagnostic module system.

Finally, the Toxic and Chemical Substances Bureau will conduct testing and system validation of the optimized SAS diagnostic module system, collect feedback and suggestions through AI-enabled chemical hazard classification, and organize educational training. Industry professionals and experts will be invited to provide operational feedback, enabling continuous optimization of

the module system. Additionally, preparations will be made for the future promotion and application of the green alternative diagnostic module.

## 前 言

在化學產品的開發、製造和使用過程中，應用綠色化學原則可以減少對環境和人體的不良影響。為了促進綠色化學的發展和推廣，國際上有許多國家與非政府組織建立綠色化學、綠色替代資料庫，化學品替代方案及技術可以替代傳統的有毒、危險或不環保的化學產品和製程，這些替代品比傳統產品更加環保、環境友善、安全和健康。綠色化學替代資料庫可以幫助企業和研究人員在新產品開發和製造過程中，提供選擇更加環保、健康和安全的化學品和技術。這些資料庫也可以幫助政府制定環保政策和標準，促進綠色化學在社會上的應用和推廣。世界各地都建立了綠色化學和綠色化學替代資料庫，例如美國環保署的綠色化學替代資料庫、歐盟的綠色化學網絡和中國的綠色化學產品目錄。這些資料庫不斷更新和完善，以滿足不斷增長的綠色化學需求，綠色化學和綠色化學替代資料庫是推動可持續發展和保護環

境的重要工具，在未來的化學領域中發揮越來越重要的作用。

本計畫針對 110-111 年完成之 SAS 診斷模組系統，參考國際安全替代評估策略及運算邏輯、化學物質管理法規、危害物質或管制清單，將 SAS 診斷模組系統進行優化，包含新增模組功能及優化期程。進行 SAS 診斷模組系統優化作業：包含替代評估運算邏輯更新、擴充安全替代化學物質資料庫、關聯資料庫，以及強化毒理資料不足之補足，使 SAS 診斷模組系統更加完善。

## 執行方法

於 112 年 7 月 12 日舉行啟動會議，與署內確認計畫執行規劃與方向並瞭解執行範疇。

一、 建立 SAS 診斷模組系統，並新增功能及優化期程：針對 110-111 年已完成之 SAS 診斷模組系統，參考國際安全替代評估策略及運算邏輯、化學物質管理法規、危害物質或管制清單，提出 SAS 診斷模組系

統優化建議，包含新增模組功能及優化期程。

(一) 擴增關聯資料庫，優化診斷模組系統

1. 至少擴增 20 項危害化學物質清單
2. 包含國際組織危害物質清單、各國管制清單、或跨國公司限用物質清單
3. 以持續更新性與可信度做為優先選擇使用的資料來源
4. 為快速篩選所需使用之診斷模組，加入危害或管制清單之屬性，如地域性（歐洲、美國、歐盟）等

(二) 於所建置之我國化學物質危害分級及綠色替代資料庫系統中，

依據國際或國家管理機構，構築符合國際對於化學品危害評估預測模組

1. 提供美國環保署所提供工具評估結果
2. 提供經濟合作暨發展組織的定量構效關係工具箱評估結果

二、進行 SAS 診斷模組系統優化作業：至少須包含替代評估運算邏輯

更新、擴充安全替代化學物質資料庫、關聯資料庫，以及強化毒理資



料不足之補足，使 SAS 診斷模組系統更加完善。

(一)基於化學物結構，建立以下診斷模組

1. 增加子結構警示 (Substructural alert)
2. 增加相似性警示 (Similarity alert)
3. 增加交叉參照 (Read-across)
4. 增加分類模型 (Classification model)

(二)擴增安全替代化學品

1. 持續擴增安全替代物清單
2. 擴增可替代安全替代物適用功能

(三)提供統計分析與視覺化報表，利用自動化更新技術，使用者

可隨時取得決策相關資訊所需背景資料

1. 提供自動更新資料庫報表，以便瞭解資料更新
2. 提供多項化學物綜合評估比較表
3. 提供化學物搜尋結果匯出

三、SAS 診斷模組系統功能驗證

#### 四、辦理人工智能(AI)化學物質危害分級 SAS 診斷模組系統優化意見

蒐集及應用教育訓練，邀請產業及專家試操作蒐集回饋建議，持續優化模組功能。

#### 五、研析綠色替代診斷模組未來推廣及應用相關預備工作

### 結 果

團隊根據甘特圖順利進行工作項目。於 7 月 24 日辦理專家諮詢會議，邀請至少 5 位專家學者，領域包含毒理、化學、資訊、產業等，提出 SAS 診斷模組之新增功能及優化建議，並依建議規劃優化期程。團隊已擴增 20 項危害化學物質清單，包括國際組織危害物質清單、各國管制清單、或跨國公司限用物質清單，並結合了數個全氟及多氟烷基聚烯烴資料庫和清單，以持續更新性與可信度做為優先選擇使用的資料來源，為快速篩選所需使用之診斷模組，加入危害或管制清單之屬性，如地域性（歐洲、美國、歐盟）等通過化學結構比對，整合化學物資訊儲存於 SAS 資料庫中，以便快速獲取特定化學物之特性與毒

性評估資訊。

團隊根據規劃進程進行 SAS 診斷模組系統優化作業：包含替代評估運算邏輯更新、擴充安全替代化學物質資料庫、關聯資料庫，以及強化毒理資料不足之補足，使 SAS 診斷模組系統更加完善。

安全替代評估邏輯部分，團隊研讀 TURI P2OASys、US EPA PARIS III、國際間安全替代原則如 OECD 與 US EPA，加入 SAS 系統中，透過新增之安全替代評估邏輯增列可選用之安全替代品。擴充 20 項化學品清單部分，團隊已完成適用範圍、清單所屬產業別資訊、規範性質，進行資料爬蟲撰寫。強化毒理資料不足之處，團隊透過 ToxAlert 資料庫建構子結構警示模組、利用計算結構相似性以建構相似度警示模組、透過 OECD QSAR Toolbox 建構交叉參照模組、透過 US EPA TEST 與 US EPA CompTox 資料庫建構分類模型模組。視覺化與報告部分建構直方圖與旭日圖視覺呈現並提供使用者下載分析數據。相較於 110-111 之化學署計畫所建置之 SAS 系統，新增 15,991 化學物、2 危害項目以及 1,121,867 化學物危害評估數。

最後，團隊完成兩場 SAS 系統原理與操作教育訓練，共計 37 位參與者。這兩場訓練不僅為參與者提供了深入的學習機會，更強化了對 SAS 系統的瞭解與實際應用。同時，我們也撰寫了兩篇科普文章，以清晰而易懂的方式介紹 SAS 系統的原理、應用範疇和未來趨勢，致力於推動相關領域的普及和瞭解。

## 結 論

團隊積極擴展危害化學物質清單，透過彙整國際組織、各國管制以及跨國公司的相關清單，並結合全氟及多氟烷基聚烯烴資料庫，持續更新資料以確保其性和可信度。我們強調地域性屬性，如歐洲、美國、歐盟等，以及針對化學結構的比對，將危害或管制清單的屬性納入快速篩選所需的診斷模組中。

SAS 系統的特色在於將大量化學物質的相關資訊整合至 SAS 資料庫，實現了化學物的快速獲取，進而提供相應的特性與毒性評估資訊。這不僅提高了效率，也為安全替代物的篩選提供了更為全面和可靠的

基礎。

團隊擴充資料庫內容，以確保使用者始終能夠獲得最新、最具參考價值的資訊，有助於推動化學物質安全評估領域的發展，促進更加健康與安全的工作環境。

最後，透過兩場 SAS 系統原理與操作教育訓練，提供使用者與學、研、產業深入的學習體驗，也成功為使用者推廣對 SAS 系統應用的興趣與瞭解。同時，為普及相關知識，撰寫了兩篇科普文章，以清晰易懂的方式介紹 SAS 系統的原理、應用領域和未來發展趨勢。

此外，蒐集並分析參與者的回饋針對 SAS 系統的使用體驗以及改進建議。這些寶貴的意見將提供實際的改進方向，確保 SAS 系統能夠更好地滿足業界需求並保持技術領先。在未來，將持續舉辦類似的教育訓練活動，不斷提升專業水平，擴大技術影響力，並將先進的科技知識分享給更廣泛的學研業界與廠商。

## 建議事項

建置我國化學物質危害分級及綠色替代資料庫系統中，根據產業建議以及業界需求以及關注國際近年趨勢，建議未來可持續擴增關聯資料庫以及高關注清單以優化綠色替代診斷模組系統。蒐研與擴增國內廠商高度使用之化學物質至 SAS 資料庫，以及於系統中新增國內更新資料備註何時被列管為毒化物之資訊，增加綠色替代診斷模組產業應用發展規劃，包含確保綠色替代診斷模組應用性，納入產業應用發展需求參數。另外建議持續召開產業應用發展座談及專家諮詢會，作為系統優化參據以及蒐研並匯入國內外相關化學物質評估產業應用於化學物質綠色替代診斷模組建置及決策支援計畫之資訊，以持續優化診斷模組系統。最後目標為建立綠色化學安全替代流程建議範例、加強推廣及修正檢討，為推廣綠色化學安全替代篩選系統之業者應用，辦理操作示範活動、相關利害關係人溝通會議、專家諮詢會議及跨部會共識交流會議，以建置安全替代示範流程基礎。此外，透過參加國家及國際競賽可提升系統在學術研究界交流與曝光度的一個重要途徑以及吸引相關廠商的關注和興趣，有助於擴大系統的影響力，使其在

相關研究領域獲得更多的關注與討論。另外也可以使用 PDCA (Plan, Do, Check, Act)循環法則，納入人工智慧，滾動檢視及優化建立之綠色替代診斷模組，以及決策系統適用性。

## 一、 短期建議

- (一) 持續擴增 20 項高關注化學物質清單。
- (二) 蒐研與擴增國內廠商高度使用化學物至資料庫中，以及新增國內更新資料至資料庫時備註何時被列管為毒化物之資訊。
- (三) GHS 資料增加年份資訊識別。
- (四) 基於文獻與安全替代實例透過物性化性及其他化學物質特性，以搜尋具潛力安全替代物。
- (五) 辦理工作坊推廣 SAS 系統，蒐集學術界與產業界回饋問卷，涵蓋多項產業。
- (六) 參加國內及國際相關競賽，推廣 SAS 系統模組。

## 二、 中長期建議

- 。
- (一) 建置 SAS 系統雙語模式 ( 中文輸入、顯示 )
- (二) 設計以 AI 大型語言模型基於化學物質毒性資訊與安全替代物資訊，由使用者與 AI 系統對談取得所需資料，以提升使用者體驗。





## 附件一覽表

| 資料夾名稱   | 附件標號  | 附件名稱              | 頁碼      |
|---------|-------|-------------------|---------|
| 計畫基本摘要  | 附件一   | 期中報告基本摘要          | 附件 1-1  |
| 工作進度報告  | 附件二   | 第 1 次進度報告會議紀錄     | 附件 2-1  |
|         | 附件三   | 第 1 次進度報告會議回應對照表  | 附件 3-1  |
| 專家諮詢會議  | 附件四   | 第 1 次專家諮詢會會議紀錄    | 附件 4-1  |
|         | 附件五   | 第 1 次專家諮詢會會議回應對照表 | 附件 5-1  |
| 啟動及審查會議 | 附件六   | 啟動會議紀錄            | 附件 6-1  |
|         | 附件七   | 啟動會議回應對照表         | 附件 7-1  |
|         | 附件八   | 期中審查會議紀錄          | 附件 8-1  |
|         | 附件九   | 期中審查會議回應對照表       | 附件 9-1  |
|         | 附件十   | 驗收審查會議紀錄          | 附件 10-1 |
|         | 附件十一  | 驗收審查會議回應對照表       | 附件 11-1 |
| 教育訓練    | 附件十二  | 教育訓練規劃書           | 附件 12-1 |
|         | 附件十三  | 教育訓練回饋單           | 附件 13-1 |
|         | 附件十四  | 教育訓練講義            | 附件 14-1 |
|         | 附件十五  | 教育訓練簽到表           | 附件 15-1 |
| 科普文章    | 附件十六  | 科普文章一             | 附件 16-1 |
|         | 附件十七  | 科普文章二             | 附件 17-1 |
|         | 附件十八  | 科普文章審查意見          | 附件 18-1 |
| 資訊報告    | 附件十九  | 資訊報告              | 附件 19-1 |
| 資訊會議    | 附件二十  | 資訊工作會議紀錄          | 附件 20-1 |
|         | 附件二十一 | 資訊工作會議回覆          | 附件 21-1 |
| 驗收報告    | 附件二十二 | 驗收 20 項化學物結果報告    | 附件 22-1 |



## 第一章 前言

此章節主要描述計畫緣起與目的，簡述每項計畫工作項目與子項目，計畫執行流程圖，計畫期程與重要查核點。

### 1.1 計畫背景

綠色化學在化學產品的開發、製造和使用過程中，可以減少對環境和人體的不良影響。為了促進綠色化學的發展和推廣，國際上有許多國家與非政府組織建立綠色化學、綠色替代資料庫，化學品替代方案及技術可以替代傳統的有毒、危險或不環保的化學產品和製程，這些替代品比傳統產品更加環保、環境友善、安全和健康。綠色化學替代資料庫可以幫助企業和研究人員在新產品開發和製造過程中，提供選擇更加環保、健康和安全的化學品和技術。這些資料庫也可以幫助政府制定環保政策和標準，促進綠色化學在社會上的應用和推廣。世界各地都建立了綠色化學和綠色化學替代資料庫，例如美國環保署的綠色化學替代資料庫、歐盟的綠色化學網絡和中國的綠色化學產品目錄。這些資料庫不斷更新和完善，以滿足不斷增長的綠色化學需求，

### 1.2 計畫目標與工作內容

本計畫以建立「高風險化學物質之安全替代化學物質搜尋、評估及篩選 (Searching, assessment, and screening system for safer alternative chemicals, SAS) 診斷模組系統」，基於模組系統架構進行優化，功能包含診斷化學物質危害，建立安全替代建議清單，以利源頭管理化學物質。針對 110-111 年完成之 SAS 診斷模組系統，參考國際安全替代評估策略及運算邏輯、化學物質管理法規、危害物質或管制清單，將 SAS 診斷模組系統進行優化，包含新增模組功能及優化期程。進行 SAS 診斷模組系統優化作業：包含替代評估運算邏輯更新、擴充安全替代化學物質資料庫、關聯資料庫，以及強化毒理資料不足之補足，使 SAS 診斷模組系統更加完善。

一、建立 SAS 診斷模組系統，並新增功能及優化期程：針對 110-111 年已完成之 SAS 診斷模組系統，參考國際安全替代評估策略及運算邏輯、化學物質管理法規、危害物質或管制清單，提出 SAS 診斷模組系統優化建議，包含新增模組功能及優化期程。

(一) 擴增關聯資料庫，優化診斷模組系統

1. 至少擴增 20 項危害化學物質清單
2. 包含國際組織危害物質清單、各國管制清單、或跨國公司限用物質清單
3. 以持續更新性與可信度做為優先選擇使用的資料來源
4. 為快速篩選所需使用之診斷模組，加入危害或管制清單之屬性，如地域性（歐洲、美國、歐盟）等

(二) 於所建置之我國化學物質危害分級及綠色替代資料庫系統中，依據國際或國家管理機構，構築符合國際對於化學品危害評估預測模組

1. 提供美國環保署所提供工具評估結果
2. 提供經濟合作暨發展組織的定量構效關係工具箱評估結果

二、進行 SAS 診斷模組系統優化作業：至少須包含替代評估運算邏輯更新、擴充安全替代化學物質資料庫、關聯資料庫，以及強化毒理資料不足之補足，使 SAS 診斷模組系統更加完善。

(一) 基於化學物結構，建立以下診斷模組

1. 增加子結構警示 (Substructural alert)
2. 增加相似性警示 (Similarity alert)
3. 增加交叉參照 (Read-across)
4. 增加分類模型 (Classification model)

(二) 擴增安全替代化學品

1. 持續擴增安全替代物清單
2. 擴增可替代安全替代物適用功能

(三) 提供統計分析與視覺化報表，利用自動化更新技術，使用者可隨時取得決策相關資訊所需背景資料

1. 提供自動更新資料庫報表，以便瞭解資料更新
2. 提供多項化學物綜合評估比較表
3. 提供化學物搜尋結果匯出

三、SAS 診斷模組系統功能驗證

四、辦理人工智能(AI)化學物質危害分級 SAS 診斷模組系統優化意見蒐集及應用教育訓練，邀請產業及專家試操作蒐集回饋建議，持續優化模組功能。

## 五、研析綠色替代診斷模組未來推廣及應用相關預備工作

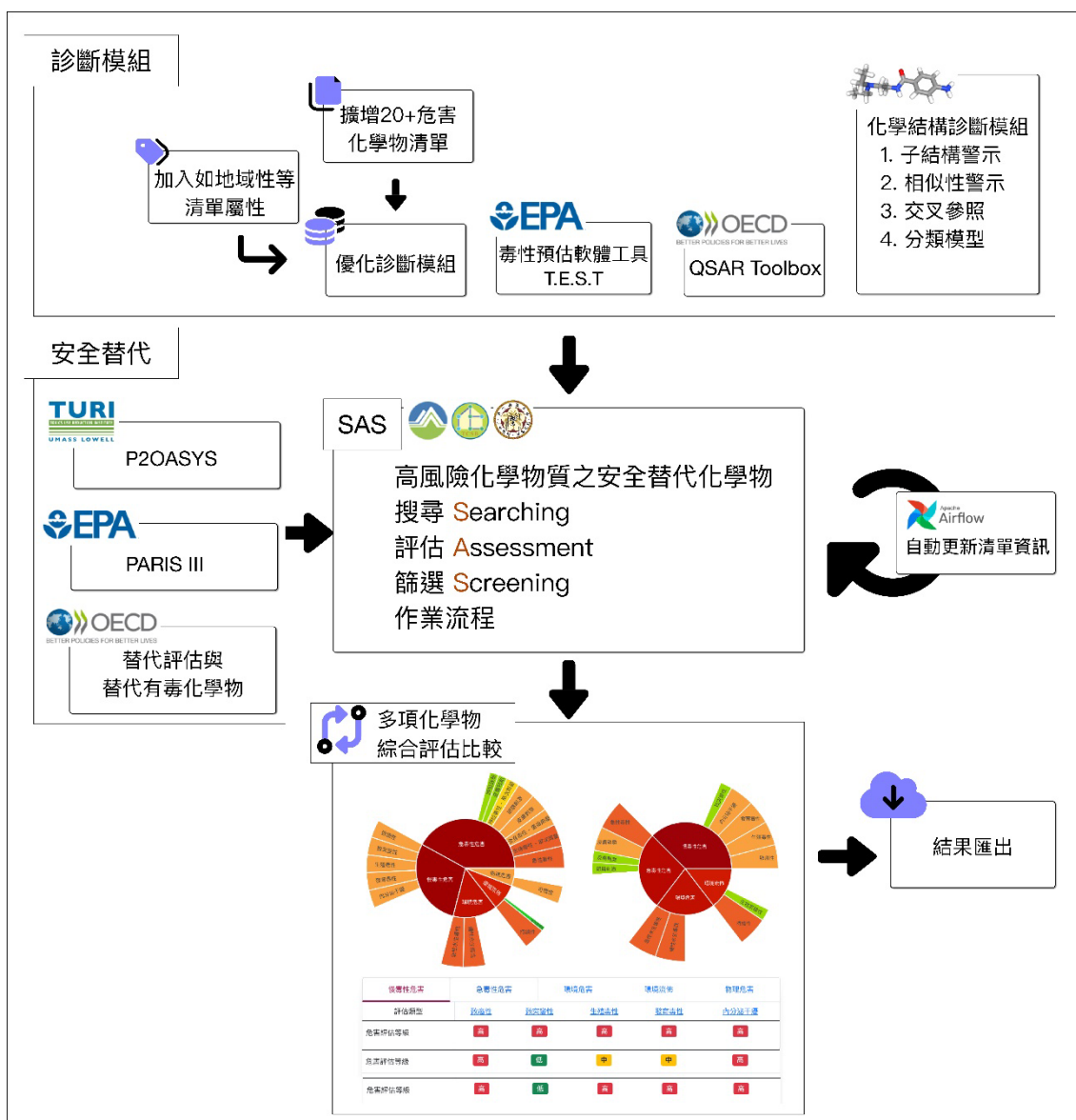


圖 1 工作流程圖

### 1.3 執行期程與查核點

| 查核點                                          | 預定完成時間    | 實際完成時間    | 查核點內容說明                                                                                                                                                                  |
|----------------------------------------------|-----------|-----------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| SAS 模組系統優化建議                                 | 112/07/31 | 112/07/31 | 提出 SAS 模組系統優化建議，包含新增模組功能及優化期程                                                                                                                                            |
| 專家諮詢會議                                       | 112/07/31 | 112/07/31 | 諮詢系統優化建議                                                                                                                                                                 |
| 第一次工作報告                                      | 112/07/31 | 112/07/31 | 交付第一次工作報告書                                                                                                                                                               |
| 進行 SAS 診斷模組系統優化作業                            | 112/09    | 112/09    | 進行 SAS 診斷模組系統優化作業，包含擴增關聯資料庫、強化替代評估邏輯、補足毒理資料、加入清單屬性參數、提供決策相關資訊、視覺化報表、多項化學物綜合評估比較表、結果匯出                                                                                    |
| 期中報告                                         | 112/09    | 112/08/31 | 交付期中報告書                                                                                                                                                                  |
| SAS 診斷模組系統功能驗證                               | 112/10    | 112/10    | 持續優化模組功能                                                                                                                                                                 |
| 辦理人工智能(AI)化學物質危害分級 SAS 診斷模組系統功能優化意見蒐集及應用教育訓練 | 112/11    | 112/11/13 | 1. 邀請產業及專家試操作蒐集至少 5 份回饋建議，專家領域至少包含毒理、資訊、化學等範疇，作為優化模組參考建議。<br>2. 提出教育訓練規劃書後，辦理 SAS 診斷模組系統功能應用教育訓練至少 2 場次，每場次至少 2 小時，邀請至少 1 位講師，並準備相關資料，總人次共 30 人次以上，並蒐集學員回饋意見，作為後續模組優化參考。 |
| 研析綠色替代模組未來推廣及應用相關預備工作                        | 112/11    | 112/11    | 協助化學署有關安全替代、模組推廣相關之提問、政策回應等資料蒐集                                                                                                                                          |
| 為推動安全替代，撰寫科普文章及相關資料蒐集。                       | 112/11    | 112/11    | 撰寫科普文章 2 篇，2,500 字含圖文，經 3 位相關領域專家委員審查                                                                                                                                    |
| 由化學署鍵入 20 項高風險化學物驗證                          | 112/11    | 112/11    | 由化學署鍵入 20 項高風險化學物，就系統產出之毒理、危害分級、安全替代及其可替代應用資料等進行                                                                                                                         |

| 查核點  | 預定完成時間 | 實際完成時間    | 查核點內容說明                         |
|------|--------|-----------|---------------------------------|
|      |        |           | 檢視，確認系統功能操作及危害分級產出資料至少達<br>12 項 |
| 成果報告 | 112/11 | 112/11/20 | 交付成果報告書                         |

實際進度及查核點

| 契約書之預定進度累積百分比(%)                             |        |        | 100% |    |    | 實際執行進度(%) | 100%        |              |
|----------------------------------------------|--------|--------|------|----|----|-----------|-------------|--------------|
| 工作內容項目                                       | 查核日期   | 實際執行情形 | 差異分析 |    |    | 落後原因      | 困難檢討及<br>對策 | 預計改善完成<br>日期 |
|                                              |        |        | 符合   | 落後 | 超前 |           |             |              |
| SAS 模組系統優化建議                                 | 112/07 | 已完成    | √    |    |    | 無         | 無           | 無            |
| 專家諮詢會議                                       | 112/07 | 已完成    | √    |    |    | 無         | 無           | 無            |
| 第一次工作報告                                      | 112/07 | 已完成    | √    |    |    | 無         | 無           | 無            |
| 進行 SAS 診斷模組系統優化作業                            | 112/09 | 已完成    | √    |    |    | 無         | 無           | 無            |
| 期中報告                                         | 112/09 | 已完成    | √    |    |    | 無         | 無           | 無            |
| SAS 診斷模組系統功能驗證                               | 112/10 | 已完成    | √    |    |    | 無         | 無           | 無            |
| 辦理人工智能(AI)化學物質危害分級 SAS 診斷模組系統功能優化意見蒐集及應用教育訓練 | 112/11 | 已完成    | √    |    |    | 無         | 無           | 無            |
| 研析綠色替代模組未來推廣及應用相關預備工作                        | 112/11 | 已完成    | √    |    |    | 無         | 無           | 無            |



|                           |        |     |   |  |  |   |   |   |
|---------------------------|--------|-----|---|--|--|---|---|---|
| 為推動安全替代，撰寫科普文章及<br>相關資料蒐集 | 112/11 | 已完成 | v |  |  | 無 | 無 | 無 |
| 由化學署鍵入 20 項高風險化學物驗<br>證   | 112/11 | 已完成 | v |  |  | 無 | 無 | 無 |
| 成果報告                      | 112/11 | 已完成 | v |  |  | 無 | 無 | 無 |

|                  |     |           |     |
|------------------|-----|-----------|-----|
| 契約書之預定進度累積百分比(%) | 100 | 實際執行進度(%) | 100 |
|------------------|-----|-----------|-----|

#### 1.4 相關人員學經歷

| 姓名    | 單位/職稱                     | 年資 | 最高學歷                       | 曾參與計畫名稱                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |
|-------|---------------------------|----|----------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 曾 * * | 臺灣大學/教授                   | 16 | 美國伊利諾大學芝加哥分校<br>藥物化學及生藥學博士 | <ul style="list-style-type: none"> <li>● 110-111 年綠色化學-安全替代整合性政策研究計畫(2021-2022)</li> <li>● 全自動化智能藥物開發系統 (2020-2021)</li> <li>● 以電腦模擬方式評估新興影響精神物質生理作用之研究 (2020)</li> <li>● 美國化學學會出版委員會委員、藥物開發研討會主席和學術議程委員 - 拓展國際新藥開發視野 (1/3) (2020-2021)</li> <li>● 積極參與美國化學學會學術議程委員及藥物開發研討會主席以拓展國際新藥開發視野 (3/3)(108-2911-I-002 -505 -) (2019)</li> <li>● 價創計畫：新型治療思覺失調症藥物 RS-D7 之臨床前安全試驗(107-2823-8-002-003-) (2018-2019)</li> <li>● 建構及發展藥物代謝動力學特徵及毒性人工智慧預測篩選平臺 (2018-2019)</li> </ul> |
| 蘇 * * | 英屬開曼群島商思捷優達股份有限公司臺灣分公司/顧問 | 3  | 臺灣大學電資學院博士                 | <ul style="list-style-type: none"> <li>● 110-111 年綠色化學-安全替代整合性政策研究計畫(2021-2022)</li> <li>● 基於深度學習可進行多項特性優化的新藥設計 (2022)</li> <li>● 最佳化技術於大量不平衡資料的深度學習新藥探勘預測模型上之研究 (2021-2022)</li> <li>● 全自動化智能藥物開發系統 (2020-2021)</li> <li>● 建構及發展藥物代謝動力學特徵及毒性人工智慧預測篩選平台(2018-2019)</li> </ul>                                                                                                                                                                                          |

| 姓名  | 單位/職稱      | 年資 | 最高學歷      | 曾參與計畫名稱                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
|-----|------------|----|-----------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 王** | 臺灣大學/博士候選人 | -  | 臺灣大學生醫電資所 | <ul style="list-style-type: none"> <li>● 110-111 年綠色化學-安全替代整合性政策研究計畫(2021-2022)</li> <li>● 再生醫學科技發展計畫--全身安全性異體移植策略之細胞治療產品開發:標靶醫療未滿足慢性發炎相關疾病-糖尿病/褥瘡/嚴重燒燙傷之傷口癒合與多發性硬化症 (2018-2021)</li> <li>● 高等教育深耕計畫－核心研究群計畫【神經退化疾患之腦腸軸表現型與特定 NMDA 受體調節藥物之藥物動力學分析】(2019)</li> <li>● RS-D7-用於治療思覺失調症負性症狀的新型 NMDA 受體調節劑 (2018)</li> </ul> |
| 黎** | 臺灣大學/博士候選人 | -  | 臺灣大學生醫電資所 | <ul style="list-style-type: none"> <li>● 再生醫學科技發展計畫--全身安全性異體移植策略之細胞治療產品開發:標靶醫療未滿足慢性發炎相關疾病-糖尿病/褥瘡/嚴重燒燙傷之傷口癒合與多發性硬化症 (2018-2021)</li> <li>● 高等教育深耕計畫－核心研究群計畫【神經退化疾患之腦腸軸表現型與特定 NMDA 受體調節藥物之藥物動力學分析】(2019)</li> <li>● RS-D7-用於治療思覺失調症負性症狀的新型 NMDA 受體調節劑 (2018)</li> </ul>                                                   |
| 杜** | 臺灣大學/博士生   | -  | 臺灣大學生醫電資所 |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |
| 許** | 臺灣大學/碩士生   | -  | 臺灣大學生醫電資所 |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |
| 王** | 臺灣大學/碩士生   | -  | 臺灣大學生醫電資所 |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |
| 高** | 臺灣大學/碩士生   | -  | 臺灣大學生醫電資所 |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |
| 陳** | 臺灣大學/碩士生   | -  | 臺灣大學生醫電資所 |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |

化學物質綠色替代診斷模組建置及決策支援計畫(1/4)

| 姓名   | 單位/職稱    | 年資 | 最高學歷      | 曾參與計畫名稱 |
|------|----------|----|-----------|---------|
| 吳* * | 臺灣大學/碩士生 | -  | 臺灣大學生醫電資所 |         |

## 第二章 計畫工作項目

表 1 計畫工作項目與報告本文之章節對應表

| 工作項目                                         | 章節對應 | 頁碼 |
|----------------------------------------------|------|----|
| 提出 SAS 模組系統優化建議，包含新增模組功能及優化期程。               | 3.1  | 13 |
| 進行 SAS 診斷模組系統優化作業                            | 3.2  | 22 |
| SAS 診斷模組系統功能驗證                               | 3.3  | 56 |
| 辦理人工智能(AI)化學物質危害分級 SAS 診斷模組系統功能優化意見蒐集及應用教育訓練 | 4.1  | 59 |
| 研析綠色替代模組未來推廣及應用相關預備工作                        | 4.2  | 62 |
| 為推動安全替代，撰寫科普文章及相關資料蒐集。                       | 4.3  | 65 |



### 第三章 計畫工作內容

說明計畫執行之工作內容，以及重要發現與成果，分節概述如下：

- 一、規劃 SAS 診斷模組系統新增功能及優化期程：針對 110-111 年完成之 SAS 診斷模組系統，參考國際安全替代評估策略及運算邏輯、化學物質管理法規、國際危害物質或管制清單，提出 SAS 模組系統優化建議，包含新增模組功能及優化期程。
- 二、進行 SAS 診斷模組系統優化作業：至少須包含替代評估運算邏輯更新、擴充安全替代化學物質資料庫、關聯資料庫，以及強化毒理資料不足之補足，使 SAS 診斷模組系統更加完善。
- 三、SAS 診斷模組系統功能驗證

#### 3.1 規劃 SAS 診斷模組系統新增功能及優化期程

##### 3.1.1 規劃 SAS 診斷模組系統新增功能

預定新增模組功能規劃，針對安全替代評估邏輯運算包含依據美國環保署(US EPA Suite)、經濟合作暨發展組織的定量構效關係工具箱(OECD QSAR Toolbox)等國際或國家管理機構研發工具邏輯，構築符合國際對於化學品危害分級計算模組。

隨著對化學產品內的化學物質之風險評估與安全性分析與時俱進，需要快速篩選與審慎品管的需求不斷增長，急需開發預測化學特性的新策略。定量結構活性關係(QSAR)模型是一個目前被廣泛使用的工具，其原理借助分子的理化與結構性質參數，以模擬與計算手段定量研究有機小分子與生物大分子的交互作用，這種方法在藥物、農藥或化學物品等被廣泛的應用。而目前此平台在跨模型預測和化學性讀取被認為是化學物風險評估的重要工具。

此外，綠色化學和綠色化學替代資料庫是推動可持續發展和保護環境的重要工具，在未來的化學領域中發揮越來越重要的作用。統整國際上常見的綠色替代資料庫，參考歐盟生態環保標章(EU Ecolabel)推薦的國際安全替代資料庫清單，以下為資料庫清單介紹：

##### 1. ChemSec Marketplace (<https://marketplace.chemsec.org/>)

國際化學秘書處(The International Chemical Secretariat, ChemSec)於 2002 年在

瑞典成立，由政府資助的國際組織，倡導對潛在危險的化學品實施更嚴格的監管，並與國際企業合作減少產品中有害物質的使用。由 ChemSec 建立的 ChemSec Marketplace 搜集來自不同企業、製造商、供應鏈對於產品中所使用化學品的技術報告。ChemSec Marketplace 將這些技術報告分成三類：Requests、Alternatives、Evaluated Alternatives。Requests 是來自企業、廠商向 ChemSec Marketplace 所提出對於潛在危害化學品尋找安全替代的需求，讓有興趣並且掌握安全替代技術的供應商可以回應需求，以便更有效地連結這些致力於綠色化學的企業並做到上下游的串接，使得最終的產品能夠真正符合綠色化學。Alternatives 是化學品供應商向 ChemSec Marketplace 提出可行的替代方案，並經過 ChemSec 初步認可，但尚未經過詳細產品評估的技術報告。Evaluated Alternatives 則是供應商進一步提供產品相關資訊，經過 ChemSec 嚴格審查後確定可行的替代方案。使用者進入頁面後，可以選擇上述三種類別查詢，另外，頁面上也提供「化學品用途」、「化學品質地」、「相關產業部門」、「核准之法規、標準及第三部門認證」等進階搜尋。

## 2. OECD Substitution and Alternatives Assessment Toolbox (<https://www.oecd.org/chemicalsafety/risk-management/substitution-of-hazardous-chemicals/>)

經濟合作暨發展組織（Organization for Economic Cooperation and Development, OECD）是由 38 個國家組成的國際間政府組織，總部設立於法國巴黎。OECD 在化學安全及生物安全主題下，設立化學品風險評估的相關工作，並且建立了 OECD Substitution and Alternatives Assessment Toolbox。其中的安全替代案例報告搜集來自不同製造商、學術單位、非政府組織、政府機關所執行的安全替代品研究，另外還包含了其他相關組織之案例報告，如：SUBSPORTPLUS web portal, The Interstate Chemical Clearinghouse 等。案例報告中的資訊包含執行單位、關注之化學品、可行之替代品、相關產業部門、化學品用途、危害暴露終點、方法學、目的、影響、總結。

## 3. My Chemical Monitoring (<https://chemycal.com/>)

Chemycal 是比利時布魯塞爾的化學資訊企業，主要業務在於追蹤來自世界各地對於化學品相關規範，並且隨時提供最新的化學品使用規範的整合資訊給用戶，幫助用戶企業與組織可以取得最新資訊，旨在幫助製造業維持供應鏈穩定及提升競爭力。My Chemical Monitoring 是需付費的訂閱制網頁服務，提供化學品相關的



最新規範及異動，讓使用者更易於篩選危害性化學品，並尋找替代品。

#### 4. Pharos (<https://pharosproject.net/>)

健康建築網路 (Healthy Building Network) 於 2000 年成立於美國華盛頓特區，為非政府組織，該組織關注建築材料存續性，提倡使用環保建築材料並持續倡議環保建築政策。Pharos 為健康建築網路發布的化學品危害暴露資料庫，該網頁服務為付費訂閱制，搜尋結果包括化學品危害等級、化學品特性、化學品用途、資料來源，並且提供用戶將有興趣的化學品加入比對項目，將相同用途之化學品做危害程度比對，方便用戶可以根據自己的需求來查詢潛在危害化學品之可行替代品。

#### 5. Substitution Support Portal (SUBSPORTplus)

([https://www.subsportplus.eu/subsportplus/EN/Home/Home\\_node.html](https://www.subsportplus.eu/subsportplus/EN/Home/Home_node.html))

安全替代品支援門戶網(Substitution Support Portal)源自 2010 年由瑞典 ChemSec、丹麥 Grontmij、西班牙 ISTAS 共同執行之 SUBSPORT 計畫。提供安全化學替代品的相關資訊，促使各產業能夠以系統化的方式替具有危害風險的化學品尋找較安全的替代品，並提供一套針對替代方案的評估方法，現由德國聯邦職業安全與健康研究所(German Federal Institute for Occupational Safety and Health, BAUA)持續維護。其中的案例報告資料庫，有經認可的安全替代案例報告，報告內容包含：潛在危害化學品、安全替代品、化學品用途、相關產業部門、危害評估、替代方案詳述、替代方案評估等。

#### 6. U.S. Environmental Protection Agency's Safer Chemical Ingredients List

(<https://www.epa.gov/saferchoice/safer-ingredients>)

由美國國家環保署(US EPA)所建立的 Safer Chemical Ingredients List 收錄了由 US EPA 底下的 Safer Choice Program 所評估，確認可以作為傳統潛在危害化學品的替代品，清單依照化學品功能分類，例如：螯合劑、溶劑、界面活性劑等等。供使用者根據個別需求，尋找相應之可行性安全替代品。

#### 7. The Toxics Use Reduction Institute (TURI) List

([https://www.turi.org/TURI\\_Publications](https://www.turi.org/TURI_Publications))

由美國麻省大學(The University of Massachusetts)所建立，TURI 幫助麻薩諸塞省當地商業、製造業及相關產業社群尋找危害化學品之安全替代方案。而 TURI list of technical research report 收錄相關安全替代研究的技術及報告以供查詢。

### 3.1.2 擴增關聯資料庫

- 一、至少擴增 20 項危害化學物質清單，團隊已蒐集完成 20 項危害化學物質清單
- 二、包含國際組織危害物質清單、各國管制清單、或跨國公司限用物質清單
- 三、以持續更新性與可信度做為優先選擇使用的資料來源
- 四、為快速篩選所需使用之診斷模組，加入危害或管制清單之屬性，如地域性（歐洲、美國、歐盟）等

| 編號 | 清單縮寫名                                        | 清單來源                  | 清單名稱                                                                                                                                   | 危害終點             | 適用地區 | 適用產業別                                         | 是否有<br>強制性 | 新增化學物<br>數量 |
|----|----------------------------------------------|-----------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------|------|-----------------------------------------------|------------|-------------|
| 01 | TRI Carcinogens                              | 美國勞工部                 | US OSHA - Carcinogens                                                                                                                  | 致癌性、持續性<br>生物累積性 | 美國   | 所有                                            | 強制         | 856         |
| 02 | AFIRM<br>Packaging RSL                       | 服飾與鞋類國際<br>限用物質清單管理團隊 | The Apparel and<br>Footwear<br>International RSL<br>Management<br>Group (AFIRM)<br>Packaging<br>Restricted<br>Substances List<br>(RSL) | -                | 全球   | C 大類「製造業」- 成衣及<br>服飾品製造業; 皮革、毛<br>皮及其製品製造業    | 全球         | 64          |
| 03 | Endocrine<br>Disruptor Lists<br>(Danish EPA) | 丹麥環保署                 | Endocrine<br>Disruptor Lists<br>(Danish EPA)                                                                                           | 內分泌干擾            | 歐盟   | C 大類「製造業」- 其他化<br>學製品製造業<br>- 清潔用品及<br>化粧品製造業 | 強制         | 185         |

|    |                                                                       |               |                                                                              |                 |    |                                     |     |       |
|----|-----------------------------------------------------------------------|---------------|------------------------------------------------------------------------------|-----------------|----|-------------------------------------|-----|-------|
| 04 | US EPA<br>CompTox PFAS<br>STRUCT                                      | 美國環保署         | a list of all PFAS structures containing a specific defined substructures.   | -               | 美國 | 所有                                  | 強制  | 14735 |
| 05 | CFP Solar<br>CoHCs Reference<br>List                                  | 化學品足跡計畫 (CFP) | CFP Solar Chemicals of High Concern Reference List                           | 人類健康危害、<br>環境危害 |    | 所有                                  | 非強制 | 225   |
| 06 | Cosmetic<br>Ingredient<br>Review (CIR)                                | 化妝品成分回顧       | Cosmetic<br>Ingredient<br>Review (CIR)                                       | 皮膚致敏、皮膚<br>刺激   | 美國 | C 大類「製造業」-其他化學製品製造業<br>-清潔用品及化粧品製造業 | 強制  | 5766  |
| 07 | Comprehensive<br>Global Database<br>of PFASs                          | 經濟合作暨發展組織     | Comprehensive<br>Global Database<br>of PFASs                                 | -               | 全球 | PFAS                                |     | 4730  |
| 08 | EU - SCCS<br>Fragrance<br>Allergens                                   | 歐盟            | EU Scientific<br>Committee on<br>Consumer Safety<br>- Fragrance<br>Allergens | 過敏原             | 歐盟 | 所有                                  | 強制  | 176   |
| 09 | US FDA -<br>Prohibited &<br>Restricted<br>Ingredients in<br>Cosmetics | 美國食藥署         | US FDA -<br>Prohibited &<br>Restricted<br>Ingredients in<br>Cosmetics        | 人類健康危害          | 美國 | C 大類「製造業」-其他化學製品製造業<br>-清潔用品及化粧品製造業 | 強制  | 11    |

|    |                                       |             |                                                         |                                              |    |                                                                                                       |     |      |
|----|---------------------------------------|-------------|---------------------------------------------------------|----------------------------------------------|----|-------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|------|
| 10 | ZZS totale lijst                      | 荷蘭公衛、衛生、運動部 | Netherland Substances of Very High Concern (RIVM ZZS)   | 致癌性、生殖毒性、生物累積性                               | 歐盟 | 所有                                                                                                    | 非強制 | 2045 |
| 11 | Perkins and Will - Precautionary List | 帕金斯威爾建築事務所  | Perkins and Will - Precautionary List                   | 內分泌干擾、發育毒性（含神經發育毒性）、生殖毒性、系統毒性、器官毒性、眼睛刺激、皮膚刺激 | 北美 | I 大類「工商服務業」-景觀、室內設計業; M 大類「專業、科學及技術服務業」-建築、工程服務及技術檢測、分析服務業-建築服務業; M 大類「專業、科學及技術服務業」-專門設計業-專門設計業-室內設計業 | 非強制 | 71   |
| 12 | CA SCP - Candidate Chemicals          | 美國加州政府      | State of California Safer Consumer Products Information | 內分泌干擾、發育毒性（含神經發育毒性）、生殖毒性、系統毒性、器官毒性、          | 美國 | 所有                                                                                                    | 強制  | 3302 |

|    |                                                                   |           |                                                                                                |                |      |                    |     |       |
|----|-------------------------------------------------------------------|-----------|------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------|------|--------------------|-----|-------|
|    |                                                                   |           | Management System (Cal SAFER) - Safer Consumer Product Candidate Chemicals                     | 眼睛刺激、皮膚刺激      |      |                    |     |       |
| 13 | FCCdb                                                             | 食品包裝論壇    | Food Packaging Forum - Food Contact Chemicals database. Version 5.0                            | 人類毒性、環境危害、物理危害 | 全球   | C 大類「製造業」-食品及飼品製造業 | 非強制 | 11618 |
| 14 | CHE - Toxicant Database                                           | 健康與環境協作組織 | Collaborative on Health and the Environment (CHE) - Toxicant and Disease Database              | 皮膚與呼吸敏感        | 全球   | 所有                 | 非強制 | 613   |
| 15 | MA TURA Chemical list                                             | 美國麻州政府    | US Massachusetts Toxics Use Reduction Act                                                      |                | 美國麻州 | 所有                 | 非強制 | 1725  |
| 16 | EDF - Chemical Detection Project: Full List of Chemicals Detected |           | Environmental Defense Fund (EDF) - Chemical Detection Project: Full List of Chemicals Detected | 人類健康毒性         | 全球   | 所有                 | 非強制 | 57    |

|    |                                                                     |                        |                                                                                                                         |      |    |           |     |       |
|----|---------------------------------------------------------------------|------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------|----|-----------|-----|-------|
| 17 | Silent Spring - Breast Cancer Chemicals                             | Silent Spring 研究機構     | Silent Spring - Breast Cancer Chemicals Mammary Carcinogens Review Database                                             | 致癌性  | 全球 | 所有        | 非強制 | 209   |
| 18 | SCJ - Potential Skin Allergens                                      | 美國莊臣集團                 | Scjohnson - Potential Skin Allergens in SC Johnson products                                                             | 皮膚致敏 | 全球 | C 大類「製造業」 | 非強制 | 353   |
| 19 | Suspect List of Possible Per- and Polyfluoroalkyl Substances (PFAS) | 美國國家標準暨技術研究院 (US NIST) | US National Institute of Standards and Technology - Suspect List of Possible Per- and Polyfluoroalkyl Substances (PFAS) | -    | 美國 | 所有        | 非強制 | 4969  |
| 20 | PFAS Master List                                                    | 美國環保署                  | US Environmental Protection Agency (EPA) - PFAS Master List of PFAS Substances                                          | -    | 美國 | 所有        | 強制  | 12034 |

SAS 系統之資料相關數值

| 計畫年份    | 化學物           | 危害項目     | 化學物危害評估數         |
|---------|---------------|----------|------------------|
| 110-111 | 184,525       | 121      | 194,380          |
| 112     | 200,516       | 123      | 1,316,247        |
| 增加      | <b>15,991</b> | <b>2</b> | <b>1,121,867</b> |

### 3.1.3 優化期程

針對建置之 SAS 診斷模組系統中之化學物質危害分級、模組運算邏輯、關聯資料庫及安全替代建議資料庫，於 7 月 24 日辦理專家諮詢會議，邀請至少 5 位專家學者，領域包含毒理、化學、資訊、產業等，名單經化學署同意，提出 SAS 診斷模組之新增功能及優化建議，並依建議規劃優化期程。

專家會議記錄與建議回覆於附件四、五。

#### 一、資訊規劃建議

(一) 可有 UI 實例與捷徑去減少點擊長度、壓力測試與等待時間等 UX 指標

(二) 對於 QSAR 或模式無法預測之毒理資料：如何訂定其適用基準及如何加強補足其可信度，建議於報表中強化說明

#### 二、安全替代物建議

(一) 安全替代的資料庫，UX 再加強會更實用。

(二) 安全替代物之味道（實際例子如紡織）、顏色、黏性與 boiling point 等等物化特性其實會影響到產業之應用面以及可行性，也是提供業者的重要考量，之後可以呈現提供參考。

#### 三、SAS 資料庫建議

(一) 進出口限用清單對業者很有幫助，可以依據不同國家分類提供業者選擇以及表單下載呈現。

(二) 辦理 workshop，希望有 feedback 可改進系統。

#### 四、視覺化建議

(一) 提供多種，讓使用者選擇下載，如果視覺化，sunburst 可以連結就更好

(二) 建議至少區分為簡要版及詳細版，符合相關經濟體之需求，並經業界及學者試用蒐集回饋意見後修正

## 3.2 進行 SAS 診斷模組系統優化作業

### 3.2.1 擴增安全替代化學品

以持續更新性與可信度做為優先選擇使用的資料來源，持續擴增關聯資料庫。團隊於安全替代物化學品內容，增加以下資料庫內容



## 一、PARIS III

PARIS III 由 EPA (U.S Environmental Protection Agency；美國環境保護署) 所開發，可從化學物質資料庫中搜尋對環境傷害較小的溶劑替代化學品，期望其替代化學品能在較為不傷害環境的情況下，具有和原本化學溶劑同等的物理以及化學性質。需要注意的是，PARIS III 缺少化學物質生命週期評估(LCA)，需另尋其他分析工具完成。以下是其 PARIS III 分析理論以及替代化學品評估項目

### (一) PARIS III Database (PARIS III 資料庫)

PARIS III 資料庫內包含業界常使用的化學溶劑之化學物質 以及 許許多多對環境危害較小的替代溶劑化學品，其各種指標與其相關實驗數據也都記錄在資料庫中，有的指標是透過實際實驗所得，有的指標是透過方程式計算得知，更有些是透過 UNIFAC 推導而來。

### (二) Theory (理論分析)

其尋找方法透過給予不同的軸不同的化學或物理評估屬性，進而使各替代化學品能在 18 個軸的 18 維屬性空間中搜尋及評估，如下圖 2，P1 和 P2 分別代表不同的評估項目，以此搜尋危害性較小的替代溶劑化學品

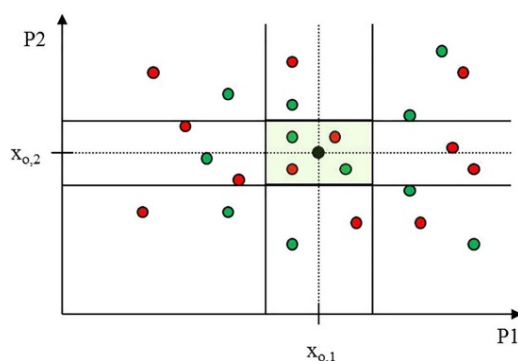


圖 2 搜尋危害性較小的替代溶劑化學品之方法

P1 和 P2 分別代表不同的評估項目，在給予數字條件後標出顏色，紅色代表危害性高，綠色代表危害性低，黑點代表符合替代條件

## 二、替代化學品評估項目

PARIS III 資料庫評估安全替代化學品考慮之項目如下，包含 8 項物理性質、10 項化學性質和 8 項潛在環境影響類別

**表 2 PARIS III 資料庫評估安全替代化學品考慮之項目**

|                |                                                                                 |
|----------------|---------------------------------------------------------------------------------|
| 物理性質 (8 項)     | a. 分子量 b. 液體密度 c. 沸點 d. 蒸汽壓 e. 表面張力 f. 黏度 g. 熱傳導係數 h. 閃燃點                       |
| 化學性質 (10 項)    | a. 醇類 b. 醚類 c. 酮類 d. 極性無機物 e. 芳香烴 f. 含氮有機物 g. 不飽和有機物 h. 鹵代有機物 i. 碳氫化合物 j. 含硫有機物 |
| 潛在環境影響類別 (8 項) | 分為四大類，a. 人類健康的、b. 生態的、c. 對區域產生影響的和 d. 對全球產生影響的，每一大類分別包含兩項評估項目                   |

### 三、Pollution Prevention Options Analysis System (P2OASys)

P2OASys 由 Toxics Use Reduction Institute (TURI) 所開發的一個決策工具，其目的是協助公司、企業或其他組織進行化學物質、產品調配以及生產過程中的環境、生物健康與安全(environmental, health and safety, EHS)等屬性的比較。P2OASys 可以整理從各種來源獲得的化學危險資訊、整理可能影響職業健康和安全的製造過程資訊（例如熱和噪音）、比較調配產品過程中的 EHS 屬性（使用安全資料表(Safety Data Sheet, SDS)）和化學成分資訊），並在採用替代性化學物質之前，幫助理解此化學物質相關的環境、職業或公共健康風險。在這個軟體的首頁中有五大功能選項：START ASSESSMENT（開始評估）、LOAD FROM DATABASE（從資料庫中載入）、IMPORT FROM FILE（從檔案中輸入）、COMPARE SUMMARY（比較）、VIEW RAW DATA（顯示原始資料）。

#### （一）START ASSESSMENT（開始評估）

網頁中可以新增欲評估的化學物質，其中的欄位有化學名稱、CAS 號碼、SDS 來源、SDS 來源網址、SDS 年份與評估資訊等。

加入化學物質後，進入資料表填寫數值資料，以評估此化學物質的風險程度。評估參數分成八大項：急性人類影響(Acute Human Effects)、慢性人類影響(Chronic Human Effects)、生態危害(Ecological Hazards)、環境歸宿及運輸(Environmental Fate & Transport)、大氣危害

(Atmospheric Hazard)、物理特性 (Physical Properties)、過程因素 (Process Factors)、週期因素 (Life Cycle Factors)等。再藉由危害分數矩陣(Hazard Score Matrix)將數值與危害程度進行轉換，可得出總分 2-10 的分數 (2-4：綠色、4-6：黃色、6-8：橘色、8-10：紅色)。

(二) LOAD FROM DATABASE (從資料庫中載入)

搜尋想瞭解或比較的化學物質，可以在資料庫中輸入化學名字、CAS 號碼、年份等等，也可以從危害分數區間進行篩選。

(三) 其他

IMPORT FROM FILE (從檔案中輸入)、COMPARE SUMMARY (比較) 與 VIEW RAW DATA (顯示原始資料) 可以調整各項危害程度的數值權重，將化學物質的資料進行客製化比對，用以瞭解各項化學物質的原始詳細資訊。

使用 P2OASys 之四大步驟 (1) 將現使用化學品數據輸入至工具 (2) 使用八個 EHS 類別之數據作比較 (3) 給予評級分數 (4)根據危害因子考量點，給予其權重並調整評級分數

### 3.2.2 替代評估運算邏輯加入國際或國家管理機構研發工具邏輯

一、替代評估運算邏輯加入美國環保署(US EPA Suite)、經濟合作暨發展組織的定量構效關係工具箱(OECD QSAR Toolbox)等國際或國家管理機構研發工具邏輯。

於所建置之我國化學物質危害分級及綠色替代資料庫系統中，依據國際或國家管理機構，構築符合國際對於化學品危害評估預測模組，隨著各界對於安全替代化學品的討論度上升，因此各大組織對於替代品評估、評估方法、評估工具也持續不斷的研擬與開發。

(一) Toxicity Estimation Software Tool (TEST) 是由美國環保署開發的一款 Java 應用程式，旨在從分子結構中估計化學品的毒性和物理性質。TEST 使用了多種預測模型，包括 QSAR (Quantitative Structure Activity Relationship) 模型、統計模型和神經網絡模型等，以提供更

準確和可靠的預測結果。TEST 可以對多種化學品屬性進行預測，包括急性毒性、慢性毒性、生物降解性、生物累積性等。使用者可以通過手動繪製分子結構或導入現有的分子文件來進行預測。TEST 還提供了詳細的數據庫和實驗數據，以幫助用戶更好地理解其預測結果。

使用方法：

1. 單一化學品模式 **Single Mode**

下載和安裝 TEST 軟件。TEST 可以在美國環保署的官方網站上免費下載。打開 TEST 軟件並選擇「**Single Mode**」，針對單一化學品進行預測。使用結構繪圖工具繪製分子結構或導入現有的分子文件（例如：SMILE, CAS）。選擇要預測的屬性（例如毒性、生物降解性等）。選擇所需的模型（例如 QSAR 模型）。開始預測並等待結果。當您完成上述步驟後，TEST 將開始進行預測。

2. 批量化學品模式 **Batch Mode**

打開 TEST 軟體並選擇「**Batch Mode**」，針對多個化學品進行預測。導入包含化學品資訊的文件。TEST 支持多種文件格式，例如 CSV、TXT 等。選擇要預測的屬性和模型。與單一化學品模式相同，您需要選擇所需的屬性和模型。開始批量預測並等待結果。當您完成上述步驟後，TEST 將開始進行批量預測。導出結果文件。當批量預測完成後，您可以導出包含預測結果的文件。TEST 支持多種文件格式，例如 CSV、TXT 等。需要注意的是，在批量模式下，TEST 會自動忽略任何無法識別或無法處理的化學品資訊。因此，在使用批量模式時，請確保您提供了正確且完整的化學品資訊以獲得準確和可靠的預測結果。

注意事項：

TEST 僅能提供預測值，而非實際測量值。因此其結果僅供參考，不得作為決策依據。TEST 僅能對已知化學品進行預測。對於未知化學品，需要進行實驗以確定其屬性。TEST 的預測結果受到多種因素的影響，包括模型選擇、分子結構、實驗數據等。因此需要對其結果進行詳細分析和解釋。

參考資料：U.S. Environmental Protection Agency. (2020). User's Guide for T.E.S.T. (Toxicity Estimation Software Tool) Version 5.1 [PDF file]. Retrieved from <https://www.epa.gov/chemical-research/toxicity-estimation-software-tool-test>

以上參考資料提供了關於化學品毒性預測方法的詳細資訊，包括 TEST 的使用指南、毒性預測方法的發展現狀和趨勢等。使用者可以參考這些資料來進一步瞭解 TEST 及其在化學品領域中的應用。

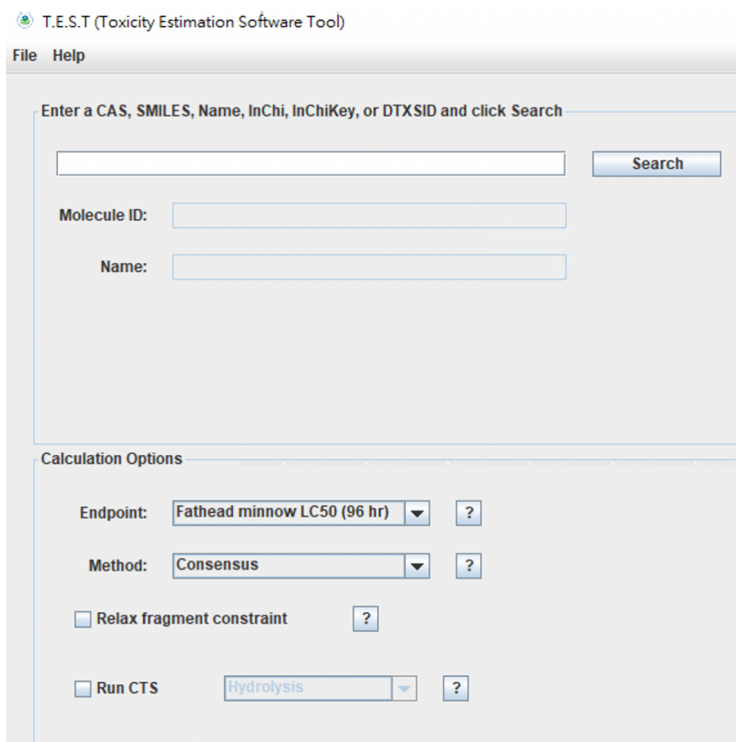


圖 3 TEST 介面

團隊也針對近 18 萬筆資料作毒性預測：輸入：CAS No. 或 SMILES 字串；輸出：預測值。此外，針對不同的 危害終點 和 預測方法 組合作預測：

| Endpoint                     | Abbreviation |
|------------------------------|--------------|
| Fathead minnow LC50 (96 hr)  | LC50         |
| Daphnia magna LC50 (48 hr)   | LC50DM       |
| T. pyriformis IGC50 (48 hr)  | IGC50        |
| Oral rat LD50                | LD50         |
| Bioconcentration factor      | BCF          |
| Developmental Toxicity       | DevTox       |
| Mutagenicity                 | Mutagenicity |
| Normal boiling point         | BP           |
| Vapor pressure at 25°C       | VP           |
| Melting point                | MP           |
| Flash point                  | FP           |
| Density                      | Density      |
| Surface tension at 25°C      | ST           |
| Thermal conductivity at 25°C | TC           |
| Viscosity at 25°C            | Viscosity    |
| Water solubility at 25°C     | WS           |
| Molecular descriptors        | Descriptors  |

| Method                  | Abbreviation |
|-------------------------|--------------|
| Hierarchical clustering | hc           |
| Single model            | sm           |
| Nearest neighbor        | nn           |
| Group contribution      | gc           |
| Consensus               | consensus    |

圖 4 所使用預測之 Endpoints 和 method 組合

| Index | ID        | Query                          | SmilesRan | Error | Exp_Value | Pred_Value | Exp_Value | Pred_Value: |
|-------|-----------|--------------------------------|-----------|-------|-----------|------------|-----------|-------------|
| 2     | 1 81-14-1 | CC1=C(C(=O)C=C1C(=C(C(=C(C(N/A |           |       |           | 2.21       | N/A       | 162.33      |
| 3     | 2 81-16-3 | C1=CC=C2O=S(=O)(O)C1=C(N)C     |           | 0.28  |           | 0.82       | 1.9       | 6.68        |
| 4     | 3 81-19-6 | C1=CC(=C(C1C1=CC=CC(C1)=C1     | N/A       |       |           | 2.98       | N/A       | 964         |
| 5     | 4 81-20-9 | CC1=C(C(=O)C=[N+](O-))C=C1C(=C | N/A       |       |           | 1.24       | N/A       | 17.53       |
| 6     | 5 81-21-0 | C1C2C3C(C1C2CC3C4CC(C5O(C      | N/A       |       | N/A       | N/A        | N/A       |             |
| 7     | 6 81-23-2 | C[C@H](C)O=C(O)CCC(C)C1CC(C    | N/A       |       |           | 0.22       | N/A       | 1.67        |
| 8     | 7 81-30-1 | C1=CC2=C(C(=O)C1OC(=O)C2=CC=   | N/A       |       |           | 1.4        | N/A       | 24.84       |
| 9     | 8 81-45-8 | C1=CC=C(C(=O)C(NC1=CC=C(C1)C   | N/A       |       |           | 1.68       | N/A       | 48.36       |
| 10    | 9 81-48-1 | CC1=CC=C(C(=O)C1C=C2C=CC(=C2   | N/A       |       |           | 1.58       | N/A       | 37.82       |

圖 5 預測結果示意圖

另外，針對 PFOA 和 PFOS 兩化學物使用 Toxicity Estimation Software Tool (TEST) 對 TEST 現有的 endpoints 和 method 生成 SMILES 和 CAS No.，並比對兩者是否相同，結果顯示為相同。



```

系統管理員: 命令提示字元
2023-08-16 18:02:52.429 main DEBUG Reconfiguration complete for context[name=70dea4e] at URI jar:file:/D:/EDA_TEST/WebTE
ST.jar!/log4j2.properties (org.apache.logging.log4j.core.LoggerContext@52102734) with optional ClassLoader: null
2023-08-16 18:02:52.429 main DEBUG Shutdown hook enabled. Registering a new one.
2023-08-16 18:02:52.430 main DEBUG LoggerContext[name=70dea4e, org.apache.logging.log4j.core.LoggerContext@52102734] sta
rted OK.
inputFilePath=D:\EDA_TEST\TEST\_cas.txt
outputFilePath=D:\EDA_TEST\TEST\_CasList\consensus_Descriptors_caslist.csv
endpointAbbrev=Descriptors
methodAbbrev=consensus
[INFO ] 2023-08-16 18:02:52.768 [main] ResolverDb - 335-67-1 CAS 335-67-1 DTXCID6011865 Perfluorooctanoic
acid
2023-08-16 18:02:52.770 main DEBUG AsyncLogger.ThreadNameStrategy=UNCACHED (user specified null, default is UNCACHED)
2023-08-16 18:02:52.772 main DEBUG org.apache.logging.log4j.core.util.SystemClock does not support precise timestamps.
[INFO ] 2023-08-16 18:02:52.922 [main] ResolverDb - 1763-23-1 CAS 1763-23-1 DTXCID1011864 Perfluorooctanes
ulfonic acid
[INFO ] 2023-08-16 18:02:52.930 [main] RunFromCommandLine - 2 molecules loaded from file
[DEBUG] 2023-08-16 18:02:56.831 [Thread-0] TaskCalculations2 - Loading training data in 0.0s
[DEBUG] 2023-08-16 18:02:57.940 [Thread-0] WebTEST4 - Calculated descriptors in 0.152s
[INFO ] 2023-08-16 18:02:57.941 [Thread-0] WebTEST4 - Calculating '[Descriptors]' using '[Consensus]' methods...
[DEBUG] 2023-08-16 18:02:57.951 [Thread-0] WebTEST4 - Time to generate output for [Descriptors] using [Consensus] method
: 0.01s including time to calculate descriptors 0.0s, predictions 0.0s, reports 0.0s
[DEBUG] 2023-08-16 18:02:58.082 [Thread-0] WebTEST4 - Calculated descriptors in 0.104s
[INFO ] 2023-08-16 18:02:58.083 [Thread-0] WebTEST4 - Calculating '[Descriptors]' using '[Consensus]' methods...
[DEBUG] 2023-08-16 18:02:58.084 [Thread-0] WebTEST4 - Time to generate output for [Descriptors] using [Consensus] method
: 0.0s including time to calculate descriptors 0.0s, predictions 0.0s, reports 0.0s

*** Completed saving to D:\EDA_TEST\TEST\_CasList\consensus_Descriptors_caslist.csv
請按任意鍵繼續 . . .
D:\EDA_TEST\TEST >

```

圖 6 生成 SMILES 和 CAS No. 的 Dataset

比對 PFOS、PFOA 化學物的 SMILES 和 CAS No. 所生成的結果是否相同

## FPOS

```
hc LC50 Equal!!
hc LC50DM Equal!!
hc IGC50 Equal!!
hc BCF Equal!!
hc DevTox Equal!!
hc Mutagenicity Equal!!
hc BP Equal!!
hc VP Equal!!
hc MP Equal!!
hc FP Equal!!
hc Density Equal!!
hc ST Equal!!
hc TC Equal!!
hc Viscosity Equal!!
hc WS Equal!!
hc Descriptors Equal!!
sm LC50 Equal!!
sm LC50DM Equal!!
sm IGC50 Equal!!
sm BCF Equal!!
sm DevTox Equal!!
sm Mutagenicity Equal!!
sm BP Equal!!
sm VP Equal!!
sm MP Equal!!
sm FP Equal!!
sm Density Equal!!
sm ST Equal!!
sm TC Equal!!
sm Viscosity Equal!!
sm WS Equal!!
sm Descriptors Equal!!
nn LC50 Equal!!
nn LC50DM Equal!!
nn IGC50 Equal!!
nn BCF Equal!!
nn DevTox Equal!!
nn Mutagenicity Equal!!
nn BP Equal!!
nn VP Equal!!
nn MP Equal!!
nn FP Equal!!
nn Density Equal!!
```

## FPOA

```
hc LC50 Equal!!
hc LC50DM Equal!!
hc IGC50 Equal!!
hc BCF Equal!!
hc DevTox Equal!!
hc Mutagenicity Equal!!
hc BP Equal!!
hc VP Equal!!
hc MP Equal!!
hc FP Equal!!
hc Density Equal!!
hc ST Equal!!
hc TC Equal!!
hc Viscosity Equal!!
hc WS Equal!!
hc Descriptors Equal!!
sm LC50 Equal!!
sm LC50DM Equal!!
sm IGC50 Equal!!
sm BCF Equal!!
sm DevTox Equal!!
sm Mutagenicity Equal!!
sm BP Equal!!
sm VP Equal!!
sm MP Equal!!
sm FP Equal!!
sm Density Equal!!
sm ST Equal!!
sm TC Equal!!
sm Viscosity Equal!!
sm WS Equal!!
sm Descriptors Equal!!
nn LC50 Equal!!
nn LC50DM Equal!!
nn IGC50 Equal!!
nn BCF Equal!!
nn DevTox Equal!!
nn Mutagenicity Equal!!
nn BP Equal!!
nn VP Equal!!
nn MP Equal!!
nn FP Equal!!
nn Density Equal!!
```



|                                |                                |
|--------------------------------|--------------------------------|
| nn ST Equal!!                  | nn ST Equal!!                  |
| nn TC Equal!!                  | nn TC Equal!!                  |
| nn Viscosity Equal!!           | nn Viscosity Equal!!           |
| nn WS Equal!!                  | nn WS Equal!!                  |
| nn Descriptors Equal!!         | nn Descriptors Equal!!         |
| gc LC50 Equal!!                | gc LC50 Equal!!                |
| gc LC50DM Equal!!              | gc LC50DM Equal!!              |
| gc IGC50 Equal!!               | gc IGC50 Equal!!               |
| gc BCF Equal!!                 | gc BCF Equal!!                 |
| gc DevTox Equal!!              | gc DevTox Equal!!              |
| gc Mutagenicity Equal!!        | gc Mutagenicity Equal!!        |
| gc BP Equal!!                  | gc BP Equal!!                  |
| gc VP Equal!!                  | gc VP Equal!!                  |
| gc MP Equal!!                  | gc MP Equal!!                  |
| gc FP Equal!!                  | gc FP Equal!!                  |
| gc Density Equal!!             | gc Density Equal!!             |
| gc ST Equal!!                  | gc ST Equal!!                  |
| gc TC Equal!!                  | gc TC Equal!!                  |
| gc Viscosity Equal!!           | gc Viscosity Equal!!           |
| gc WS Equal!!                  | gc WS Equal!!                  |
| gc Descriptors Equal!!         | gc Descriptors Equal!!         |
| consensus LC50 Equal!!         | consensus LC50 Equal!!         |
| consensus LC50DM Equal!!       | consensus LC50DM Equal!!       |
| consensus IGC50 Equal!!        | consensus IGC50 Equal!!        |
| consensus BCF Equal!!          | consensus BCF Equal!!          |
| consensus DevTox Equal!!       | consensus DevTox Equal!!       |
| consensus Mutagenicity Equal!! | consensus Mutagenicity Equal!! |
| consensus BP Equal!!           | consensus BP Equal!!           |
| consensus VP Equal!!           | consensus VP Equal!!           |
| consensus MP Equal!!           | consensus MP Equal!!           |
| consensus FP Equal!!           | consensus FP Equal!!           |
| consensus Density Equal!!      | consensus Density Equal!!      |
| consensus ST Equal!!           | consensus ST Equal!!           |
| consensus TC Equal!!           | consensus TC Equal!!           |
| consensus Viscosity Equal!!    | consensus Viscosity Equal!!    |

(二) OECD (Organisation for Economic Co-operation and Development; 經濟合作與發展組織) 根據其組織與實際需求，由 38 個國家組成的國際間政府組織，總部設立於法國巴黎。OECD 在化學安全及生物安全主題下，設立化學品風險評估的相關工作，並且建立了 OECD Substitution and Alternatives Assessment Toolbox。其中 OECD Substitution and Alternatives Toolbox (SAAToolbox) 包含四大部分：

#### 1. Tools and Data (分析工具和資料)

OECD 將可進行安全替代化學品評估之網站以及相關工具軟體彙集此部分，像是 Column Model、Green Chemistry Assistant，每一項工具之欄框同時也提供其應用範圍，以及安全替代化學品評估之危害終點(Hazard Endpoints)像是致癌性、急性毒性等等，也

就是說，列表之各項工具可能會基於上述之特性來對替代化學品作出完整的評估。

## 2. Frameworks and Guides（評估架構和指南）

第二部分，OECD 將各國政府單位、學術單位、產業界機構以及非營利機構整理之安全替代化學品評估架構與評估方法皆彙集在此頁面，以便於各界人士比較與搜尋，更推動安全替代化學品產業之發展。

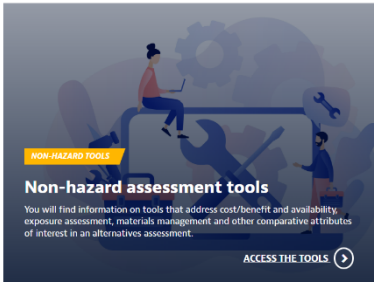
## 3. Non-Hazard Tools（替代化學品評估工具）

安全替代化學品評估工具像是 Finechem Tool、Material IQ，網站根據其分析類別整理，包含可分析生產成本、可利用性等等，總共整理出 24 項工具可供相關人士使用。

## 4. Case studies（替代化學品實際案例研究）

OECD case study 以統一的方式將安全替代化學品評估之實際案例研究來呈現，讓其分析方法與結果能完整並有效率的提供給使用者。

**表 3 OECD Substitution and Alternatives Toolbox (SAAToolbox)**

| Tools and Data（分析工具和資料）                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | Frameworks and Guides（評估架構和指南）                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|  <p><b>Tools and data sources</b></p> <p>The tools and data sources present online resources and software that can be used in conducting chemical substitutions or alternatives assessments. The information is divided into two categories: tools, which provide users with the ability to evaluate a chemical, material, process, product and/or technology for attribute analysis with an alternatives assessment, and data sources, which contain a repository of organized information but no mechanisms for data manipulation for outside users.</p> <p>ACCESS THE TOOLS AND DATA SOURCES</p> |  <p><b>Frameworks, guides, toolkits and product rating systems</b></p> <p>You will find a number of frameworks and guides developed by various organisations in response to regulations of chemical substances and stakeholder interest in having consistent approaches to evaluate alternatives.</p> <p>ACCESS THE FRAMEWORKS, GUIDES, TOOLKITS AND PRODUCT RATING SYSTEMS</p> |
| Non-Hazard Tools（安全替代化學品評估工具）                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          | Case studies（替代化學品實際案例研究）                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |
|  <p><b>Non-hazard assessment tools</b></p> <p>You will find information on tools that address cost/benefit and availability, exposure assessment, materials management and other comparative attributes of interest in an alternatives assessment.</p> <p>ACCESS THE TOOLS</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |  <p><b>Case studies of substitution</b></p> <p>Case studies are descriptions of alternatives assessments that have been conducted by manufacturers, academic institutions, NGOs or government bodies.</p> <p>ACCESS THE CASE STUDIES</p>                                                                                                                                        |

除此之外，從 2013 年到 2021 年，經濟合作與發展組織分別發表了 5 份關於安全替代化學品評估方法與架構之文章給予相關人士參考。

### 3.2.3 毒理資料不足時以 QSAR 定量構效關係模型運算補足

強化毒理資料不足之補足，以 QSAR (Quantitative Structure-activity Relationships) 定量構效關係模型運算方式獲取資料，使 SAS 系統更加完善。

OECD QSAR Toolbox 是經濟合作暨發展組織 (Organisation for Economic Cooperation and Development, OECD) 歐洲化學品管理局 (European Chemical Agency, ECHA) 兩個組織共同合作開發的免費軟體，希望可讓政府單位、化學產業、學術領域使用。最新版本為 2023 年 5 月發行 4.6 SP1 版內建資料庫包含 59 個子資料庫、超過 10 萬個化學物、300 萬筆實驗測量資料、254 個 QSAR 模型於四個主要領域，如表 4。各種新穎化學物出現在各種應用，而歐盟施行 REACH 法規要求化學品登錄資訊需包含毒理資訊，然而現有毒理資料不足使用，以及動物保護團體呼籲減少使用動物實驗，故希望透過利用電腦計算作為動物試驗的替代方法。目前 REACH 法規可透過替代測試方法提供毒理數據包含：

- 一、現有數據之使用 (Use of existing data)
- 二、證據權重法 (Weight of evidence)
- 三、QSAR
- 四、體外測試方法 (in vitro methods)
- 五、化學物質分組和交叉參照法 (Grouping of substances and read-across approach)

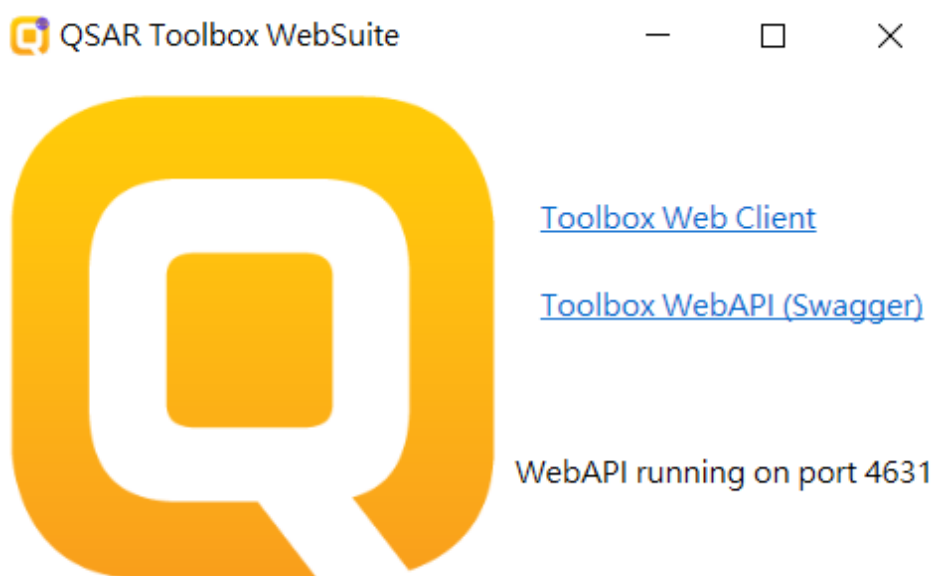


圖 7 OECD QSAR Toolbox 網頁

表 4 OECD QSAR Toolbox 4.6 版內建資料庫四種主分類所含資料統計

| 分類      | 化學物數   | 實驗測量資料數   | QSAR 模型數 |
|---------|--------|-----------|----------|
| 物理化學特性  | 50,771 | 251,311   | 28       |
| 環境宿命與傳輸 | 15,610 | 177,909   | 41       |
| 環境毒理資訊  | 23,678 | 1,423,889 | 39       |
| 人類健康危害  | 45,931 | 1,367,583 | 146      |

OECD QSAR Toolbox 可根據化學物之 CAS 編號，或名稱進行搜尋內建資料庫，如內建資料庫已有毒理資料且經過測試、結果可公開取得，則無須進行預測。OECD QSAR Toolbox 操作介面如圖 8，以二甲基甲醯胺 (Dimethylformamide, DMF; CAS 編號：68-12-2) 作為示範。

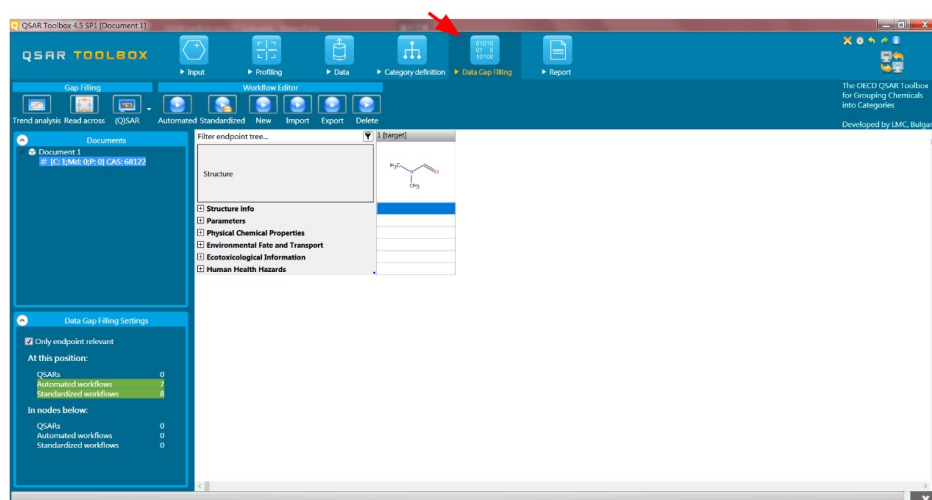


圖 8 OECD QSAR Toolbox 介面以二甲基甲醯胺為例

輸入 CAS 編號後，軟體即呈現結構式與資料庫內所儲存資訊，分類包含結構資訊、物理化學特性、環境宿命與傳輸、環境毒性、人類健康危害，點擊分類前符號可展開樹狀結構。若想要檢閱的危害終點資料不足時，需要進行計算作為替代方法，可點擊“Data Gap Filling”按鍵，選擇所需要的危害終點，例如想檢閱環境毒性底下的水生毒性危害終點，選取後，點擊紅色框 QSAR 按鈕即可開始進行，如圖 9。後續仍須選擇適用於所選擇危害終點之 QSAR 模型，並評估其適用物種、暴露途徑與可預測適用範圍(Applicability domain)，舉例如果想進行人類健康危害分類底下的急性毒性預測，啟動 QSAR 模型選擇，OECD QSAR Toolbox 會列出內建資料庫與目標化學品相關之模型，如表 5，若要尋找暴露途徑

為「口服」，且目標化學品符合適用範圍，則可選擇編號 3 或 6 號 QSAR 模型進行預測。

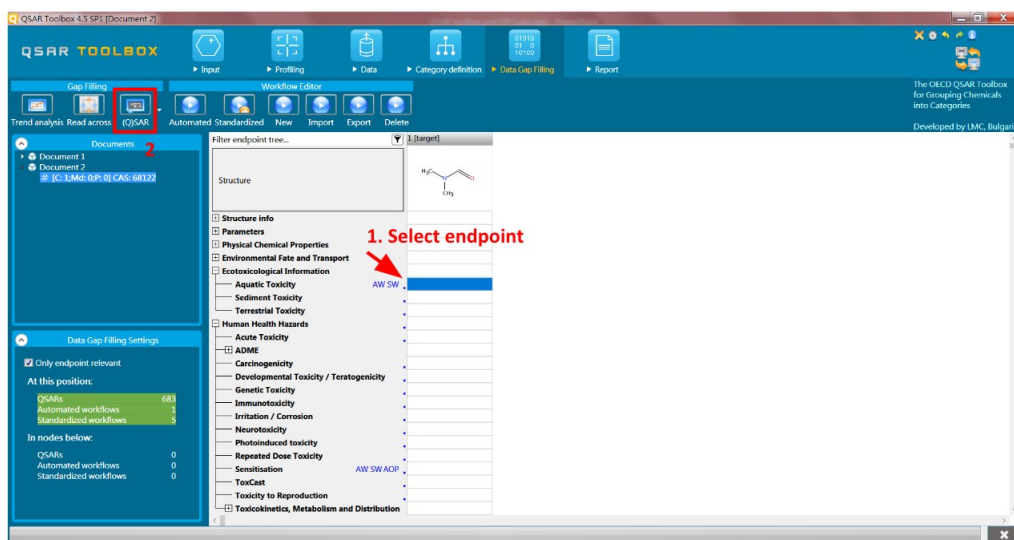


圖 9 OECD QSAR Toolbox 進行計算操作步驟

表 5 OECD QSAR Toolbox QSAR 模型選擇示範

| 編號 | 物種 | 預測值                | 適用範圍? | 終點               | 暴露途徑   |
|----|----|--------------------|-------|------------------|--------|
| 1  | 小鼠 | 500 mg/kg bdwt/d   | 是     | LD <sub>50</sub> | 腹腔注射   |
| 2  | 小鼠 | 無預測                | 否     | LD <sub>50</sub> | 靜脈注射   |
| 3  | 小鼠 | 2.2E3 mg/kg bdwt/d | 是     | LD <sub>50</sub> | 口服     |
| 4  | 小鼠 | 1.7E3 mg/kg bdwt/d | 是     | LD <sub>50</sub> | 皮下組織吸收 |
| 5  | 大鼠 | 690 mg/kg bdwt/d   | 是     | LD <sub>50</sub> | 腹腔注射   |
| 6  | 大鼠 | 2.2E3 mg/kg bdwt/d | 是     | LD <sub>50</sub> | 口服     |

計算毒理學是 21 世紀新興的研究領域之一，用於研究化學物質的毒性。即使是現在，也仍有許多化學品沒有完整的毒理學數據。計算毒理學可以應用於初步篩選化學物和危害排序，以規劃進一步的毒理實驗測試，並瞭解化學物質的毒性機制。

一、為快速篩選安全替代化學物質，於診斷模組加入危害或管制清單之屬性參數，如地域性（歐洲、美國、歐盟）等。

擴增關聯資料庫，優化診斷模組系統，為增加使用者的便捷性，在 SAS 作業流程上增加「屬性」選項來篩選適當的規範與限制。基於常見需求

建議增加下列三種屬性，適用地區：特定地區會受到的規範與限制；規範性質：是否為法律上強制或者為某種認證的規範；產業類別：特定產業受到的規範與限制。團隊使用 NCBI PubChem 聯合國 GHS 資料庫資料，使用 Python 程式語言搭配 BeautifulSoup 套件，與 Ruby 程式語言搭配 Wombat 套件，儲存至工作資料庫內，以獲得最新 GHS 項目列表。除 PubChem 聯合國 GHS 資料庫外，預計分析下列國際化學品資料庫以獲得化學物質之資訊與毒性資料，以利與國際接軌。

以目前 SAS 作業流程中收錄的規範與限制為範例，分別可增加的清單屬性如下：

(一) 歐洲委員會優先清單(European Commission Priority List)

為了確立將化學品列入「疑似內分泌干擾物」清單的標準與優先性，歐洲執委會從西元 2000 年開始進行了一系列研究，透過制定一個連貫的方法來建立優先物質清單，以進一步評估它們在內分泌干擾中的作用。優先物質清單分兩個階段建立，首先是對內分泌干擾作用和人類/動物接觸的證據進行獨立審查，其次是諮詢利益相關者和委員會科學委員以確定執行事項的優先順序，其過程如下：

1. 從各組織公佈的「疑似內分泌干擾物」清單中彙整出一份化學品工作清單，並輔以科學文獻的搜索，找出提及特定化學品內分泌干擾作用的報告和論文。為了盡可能確保清單的全面性，清單草案會與主要利益相關者（包括來自政府、行業和非政府組織的代表）開會討論。有關化學品對人類、其他脊椎動物和無脊椎動物內分泌影響之資料都會被蒐集納入資料庫中，另外，若還有每種化學品在環境中的持久性和在暴露於該環境下之生物體中積累的可能性（即生物積累）也會一併蒐集。
2. 對現有的資訊進行審查，找出可能在環境中具有高度持久性（即抗分解性）或由工業界大量生產的化學品（即每年超過 1000 噸）。採用這兩個標準是因為在這兩種條件下，人類和動物有更高的機率接觸到這些化學品，因此潛在有害的風險更大。
3. 根據專家建議，對步驟二確定的高持久性或大量生產之化學品的資訊進行審查，以確定對內分泌干擾的證據強度，並將化學

品歸為以下三個類別之一。

第 1 類：具有對至少一個完整的動物物種造成內分泌干擾活動的證據

第 2 類：具有至少一些與體外內分泌干擾有關的生物活動證據

第 3a 類：沒有內分泌干擾活動的證據

第 3b 類：資料不足

4. 對於在步驟三中歸於第一類的化學品審查現有的資訊，判斷人類或野生動物實際接觸到的可能性。對人類或野生動物預計會暴露的化學品給予最高關注；對人類預計不會暴露但野生動物可能暴露的化學品給予中等關注；對人類或野生動物都不會暴露的化學品給予最低關注。

歐洲執委會分析了由各組織公佈的 564 個疑似內分泌干擾物，最終歸類有 194 個第一類化學品與 126 個第二類化學品，並彙整成一個資料庫檔案。

(二) Perkins and Will 預防性清單(Perkins and Will Precautionary List)是由建築設計公司 Perkins and Will 所制定的一份清單，旨在協助建築師、設計師和業主選擇更環保和健康的建材和產品。這份清單列出了一系列被認為可能對人體健康或環境造成潛在風險的化學品物質，並提供了可替代的更環保和健康的選擇。Perkins and Will 預防性清單的目的是鼓勵建築業者使用更健康 and 環保的建材和產品，並進一步推動建築行業的可持續發展。該清單被廣泛應用於建築、設計和裝修等相關領域，成為了一個推動可持續建築發展的重要工具之一。

(1) 適用地區：美國

(2) 規範性質：建議性

(3) 產業別：建築、室內裝潢

(三) International Electrotechnical Commission : Material Declaration for Products of and for the Electrotechnical Industry (IEC 62474)，國際電工



委員會(International Electrotechnical Commission, IEC)制定的 IEC 62474 是一份產品材料聲明標準，旨在為電氣技術產品提供可持續發展和環境保護的解決方案。該標準要求電氣技術產品的生產廠商提供產品材料聲明，即清單和描述產品中包含的化學品物質和材料，以便消費者和相關利益攸關方能夠評估產品的環境影響和安全性能。IEC 62474 要求產品材料聲明的內容包括產品中的所有化學品物質和材料，以及它們的用途和比例。該標準還提供了一套基於化學品物質危害性和限制使用的篩選機制，幫助生產廠商評估產品中的化學品物質和材料是否安全、可持續和符合法規要求。IEC 62474 標準的制定旨在推動電氣技術產品的可持續發展，促進環境保護和健康安全，並提高消費者和利益攸關方對產品的信任度和透明度。

(1) 適用地區：歐盟

(2) 規範性質：強制性

(3) 產業別：電子

(四) 加州環境保護局(OEHHA)提出的加州 65 號提案，也稱為《安全飲用水和有毒物質執行法案》(Safe Drinking Water and Toxic Enforcement Act of 1986)，是加州議會於 1986 年通過的一項法律，旨在保護加州居民免受對健康有害的化學品侵害。根據這項法案，加州政府要求業者在其產品上標明可能導致癌症、生殖毒性或其它有害健康影響的化學品，這些化學品被稱為加州認定的致癌物質或生殖毒性物質。CA EPA - Prop 65 涵蓋了眾多常見的化學品，包括許多常見的工業和消費品。這些物質通常進入人體的途徑有吸入、攝入和皮膚接觸。符合 CA EPA - Prop 65 標準的化學品在加州銷售或分發時需要標明相關警示，以提醒消費者可能的健康風險。CA EPA - Prop 65 的實施對業界產生了重要影響，需要生產商、進口商、分銷商等在產品上進



行必要的警示標記，同時需要進行風險評估和測試，以確保其產品符合相關標準，保障消費者的健康安全。

(1) 適用地區：美國

(2) 規範性質：強制性

(3) 產業別：全部產業

(五) 工作場所危險物質資訊系統(WHMIS)，是一種在加拿大使用的制度，目的是保護工人免受有害化學品的傷害。魁北克職業健康和安全委員會(CSST)負責管理和實施 WHMIS 1988，該制度要求業主標識和提供有關使用、存儲和處理化學品的資訊。WHMIS 1988 制度中規定，受控產品是指符合《受控產品法規》第四部分規定的產品，即在處理和使用過程中可能對健康造成危害的物質。這些受控產品在魁北克的使用和分銷必須符合 WHMIS 1988 制度的要求，包括標記、貯存、處理和運輸，以確保工人和公眾的安全。WHMIS 1988 制度的實施對於工業、化學、醫療保健等行業都非常重要，需要相關業者瞭解並遵守相關規定，確保化學品的安全使用和處理。

(1) 適用地區：加拿大

(2) 規範性質：強制性

(3) 產業別：全部產業

表 6 管制或高關注物質清單屬性範例

| 名稱/簡稱                               | 發行單位    | 適用地區 | 產業別    | 規範性質 |
|-------------------------------------|---------|------|--------|------|
| European Commission Priority List   | 歐洲執委會   | 歐盟   | 化工     | 強制性  |
| Perkins and Will Precautionary List | 帕金斯威爾公司 | 北美   | 建築室內裝潢 | 建議性  |

| 名稱/簡稱                    | 發行單位          | 適用地區 | 產業別  | 規範性質 |
|--------------------------|---------------|------|------|------|
| IEC 62474                | 國際電工委員會       | 歐盟   | 電子科技 | 強制性  |
| CA EPA - Prop 65         | 加州環境健康危害評估辦公室 | 美國加州 | 全部產業 | 強制性  |
| Québec CSST - WHMIS 1988 | 加拿大衛生部        | 加拿大  | 全部產業 | 強制性  |
| GHS - Australia          | 澳大利亞聯邦        | 澳大利亞 | 全部產業 | 強制性  |

#### (六) 全氟及多氟烷基物質資料庫與清單

全球全氟及多氟烷基物質資料庫 (Comprehensive Global Database of PFASs) 是由經濟合作暨發展組織(OECD) 和聯合國環境規劃署 (UNEP) 中的全球氟烷化學品小組(PFC group) 所維護，於 2012 年成立。全氟及多氟烷基物質是一類化學物質，包括含氟的烷基聚烯烴 (PFCs) 和全氟脂肪酸鹽 (PFAAs)，於 1940 年代開始被廣泛運用。由於其防水、防油且低摩擦力等特性，多作為如食品包裝、容器等的表面塗料。但因其穩定性高、不易於環境中分解，因此在近年來被如美國、歐盟等國家監控使用。

此資料庫功能為整合包括美國、歐盟等 15 個國家或地域對於全氟及多氟烷基物質的管控資訊，如物理和化學性質、用途、暴露方式、潛在的健康和環境影響等，以此提供 較完整的資料，供政策制定和管理使用。另外，資料庫中也收錄相關的研究成果和建議，包

括各國的管理政策和法規、清除方法和可使用替代物等，以協助政策制定者決策。

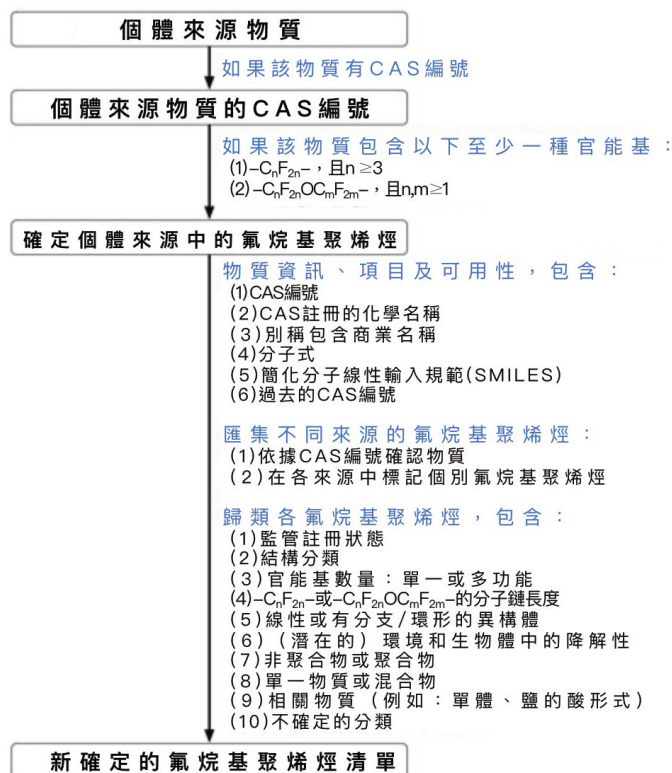


圖 10 全球全氟及多氟烷基物質資料庫更新清單之篩選流程圖

(圖片來源：全球全氟/多氟烷基物質資料庫網站)

另外較高可信度之全氟及多氟烷基物質亦有美國國家環保署(US EPA)的全氟/多氟烷基物質總清單(PFAS Master List of PFAS Substances)，以及美國國家標準暨技術研究院(US NIST)所提供的可能含有全氟及多氟烷基物質的可疑清單(Suspect List of Possible Per- and Polyfluoroalkyl Substances (PFAS))等。團隊已從三個資料來源蒐集約 15,000 個全氟及多氟烷基物質，已搜集、整理和加入除了 CAS 編號以外的其他資料庫系統中的編號，例如 PubChem 資料庫系統中的化學品識別編號(Compound Identifier, CID)，同時亦補充資料來源中缺少的簡化分子線性輸入規範(Simplified Molecular Input Line Entry Specification; SMILES)。

SMILES 是一種用於描述化學品結構的字串編碼系統，它可以轉

換成化學品的立體結構，並在計算化學領域中被廣泛使用。因此，團隊蒐集和整理包括 CAS 編號在內的其他資料庫系統中的編號，如 PubChem 資料庫系統中的化合物識別編號(CID)，同時補充部分來源資料中缺少的簡化分子線性輸入規範(SMILES)，以提供更全面的化學資訊。團隊將全氟及多氟烷基物(PFAS)的簡化分子線性輸入規範(SMILES)和分子指紋匯入資料庫，同時新增致突變性(Mutagenicity)的預測，確認適用域(Adaptive Domain)相符後，取得 3053 筆全氟及多氟烷基物質的危害資訊，最終輸出為 CSV 檔案，以利查看。

表 7 蒐集之全氟及多氟烷基物質資料庫與清單

| 資料庫名稱                                                                                       | 維護機構                      | 數量    |
|---------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------|-------|
| 全球全氟及多氟烷基物質資料庫<br>(Comprehensive Global Database of PFASs)                                  | 經濟合作暨發展組織(OECD)           | 4730  |
| 全氟及多氟烷基物質總清單<br>(PFAS Master List of PFAS Substances)                                       | 美國國家環保署(US EPA)           | 12034 |
| 可能含有全氟及多氟烷基物質的可疑清單<br>(Suspect List of Possible Per- and Polyfluoroalkyl Substances (PFAS)) | 美國國家標準暨技術研究院<br>(US NIST) | 4969  |

(七) SAS 網站之介面建議可以進下行列調整：

加入篩選器，包含「法規適用地區」、「是否具強制性」、「適用產業別」等三個篩選器。「法規適用地區」有全球、聯合國、歐盟、OECD、OSPAR、美國、加拿大、德國、澳洲、南韓、馬來西亞、日本、紐西蘭、其他等選項。「是否具強制性」有是、否、未知等選項。「適用產業別」有所有、C 大類製造業、G 大類批發及零售業、F 大類營建及工程業。

|                                                                                                                                                                                                                                                                                      |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <p>危害評估整理表</p> <p>篩選器: 請選擇篩選項目 提交</p> <p>法規適用地區<br/>是否具強制性<br/>適用產業別</p> <p>慢毒性危害 急性危害 環境危害 環境流佈 物理危害</p> <p>評估類型 致毒性 致突變性 生殖毒性 發育毒性 內分泌干擾</p> <p>危害評估等級 高 中 中 高 高</p> <p>危害名稱 危害評估</p> <p>致毒性</p> <p>資料來源: <a href="#">國際癌症研究機構清單</a><br/>可信度 相對高<br/>危害等級分類清楚。<br/>清單轉譯等級: 11B</p> | <p>危害評估整理表</p> <p>篩選器: 法規適用地區 全球 提交</p> <p>聯合國<br/>歐盟<br/>OECD<br/>OSPAR<br/>美國<br/>加拿大<br/>德國<br/>澳洲<br/>南韓<br/>馬來西亞</p> <p>慢毒性危害 急性危害 環境危害 環境流佈 物理危害</p> <p>評估類型 致毒性 生殖毒性 發育毒性 內分泌干擾</p> <p>危害評估等級 高 中 高 高</p> <p>危害名稱 危害評估</p> <p>致毒性</p> <p>資料來源: <a href="#">國際癌症研究機構清單</a><br/>可信度 相對高<br/>危害等級分類清楚。<br/>清單轉譯等級: 11B</p> |
| <p>危害評估整理表</p> <p>篩選器: 是否具強制性 是 否 未知 提交</p> <p>慢毒性危害 急性危害 環境危害 環境流佈 物理危害</p> <p>評估類型 致毒性 致突變性 生殖毒性 發育毒性 內分泌干擾</p> <p>危害評估等級 高 中 中 高 高</p> <p>危害名稱 危害評估</p> <p>致毒性</p> <p>資料來源: <a href="#">國際癌症研究機構清單</a><br/>可信度 相對高<br/>危害等級分類清楚。<br/>清單轉譯等級: 11B</p>                              | <p>危害評估整理表</p> <p>篩選器: 適用產業別 所有 提交</p> <p>C大類「製造業」<br/>G大類「批發及零售業」<br/>F大類「營建工程業」</p> <p>慢毒性危害 急性危害 環境危害 環境流佈 物理危害</p> <p>評估類型 致毒性 致突變性 生殖毒性 發育毒性 內分泌干擾</p> <p>危害評估等級 高 中 中 高 高</p> <p>危害名稱 危害評估</p> <p>致毒性</p> <p>資料來源: <a href="#">國際癌症研究機構清單</a><br/>可信度 相對高<br/>危害等級分類清楚。<br/>清單轉譯等級: 11B</p>                              |

圖 11 SAS 網站介面調整建議

按下提交篩選後，會依照篩選結果更新旭日圖、風險等級、危害評估等級及詳細資料來源之顯示。

篩選前：



篩選後（適用產業類別 C 大類製造業）：



二、於安全替代運算中基於化學物結構，建立結構警示診斷模組 (Structural alert)，包含子結構警示(Substructural alert)、相似性警示(Similarity alert)、交叉參照(Read-across)、分類模型 (Classification model)。

基於化學物結構，建立以下診斷模組：

#### (一) 子結構警示(Substructural alert)

子結構警示 (substructural alerts) 是與特定生物或毒理學活動有關的分子片段，或子結構。這些子結構可以作為標記，用以辨識具有類似活性或風險特徵的分子。透過檢測給定分子中子結構的存在，研究人員可以深入瞭解該分子的潛在生物活性和毒理學風險，因此可用於辨識潛在的候選藥物，預測毒性，協助藥物開發，也可用於環境和監管毒理學，以辨識具有危險特性的化學品。有幾種方法可以辨識一個特定分子中的子結構警示。一些常見的方法包括：

1. SMILES arbitrary target specification (SMARTS)字串：SMARTS 字串是用來描述分子結構的一種表達方式，為 SMILES 字串的改進版，具有描述複雜分子子結構的能力，可以描述分子的結構、化學性質和生物活性等。常用於搜索化學結構資料庫，以確定含有特定

子結構的分子。例如 ToxAlerts 是一個化學物質風險評估工具，旨在評估化學物質的毒性和風險，使用 SMARTS 方法去描述警示的化學結構，並使用 ChemAxon 的 MolSearch 進行搜尋比對是否有警示結構。SMARTS 與 SMILES 一樣由 Daylight Chemical Information Systems 的 David Weininger 等人所開發，用於指定分子結構的語言。ChemAxon 是一間 1998 年成立的 cheminformatics 與 bioinformatics 軟體開發公司，MolSearch 為該公司開發搜尋化學物上是否有指定結構的軟體。在 ToxAlerts 的資料庫中蒐集 3246 種危害終點 (endpoint) 資料及對應的化學結構，取自 30 篇期刊論文、2 個官方機構、10 個私人機構或企業。團隊使用 RDKit 進行化合物子結構搜尋，RDKit 是一個開源的化學資訊軟體，其函式庫中的「HasSubstructMatch」功能為搜尋輸入化合物中是否具有指定的子結構。使用 Benzene 與 Chloramphenicol 兩種經典具有致突變性的化學物進行初步測試，ToxAlerts 蒐集到的危害化學結構與團隊建立之系統一致。

2. 分子指紋 (molecular fingerprints)：分子指紋是一種將分子的結構資訊編碼為數位向量的方法，可用於化學資訊學中的相似性搜索和子結構搜索。常見的一種指紋是由一連串的二進位數字組成，每個數字代表特定子結構是否存在於該分子。若要辨識子結構警示，可以將所需的子結構編碼成一個指紋，然後將這個指紋與其他分子的指紋進行比較，以辨識含有特定子結構的分子。
3. 專家決策 (expert decision making)：專家決策透過人工審查化學結構，並根據已知的生物或毒理學活動，辨識子結構。專家決策費時費力，但其優點是能夠辨識新的子結構以及子結構和活性之間的關係，補足自動化方法可能無法辨識新的子結構之問題。然而，專家決策可能是主觀的，且受到專家所具備的知識影響。

## (二) 相似性警示(Similarity alert)

相似性警示可用於識別具潛在危害性的化學物質或分子。警示由化學資訊學軟體或工具生成，通常基於與潛在有害或是有毒化合物相關的一組結構標準或特徵，並透過識別及標示共享這些特徵的化合



物，以表明它們可能具有相似的性質或風險。在化學資訊學中生成相似性警示，首先要識別與有害化合物相關的一組結構或亞結構特徵。這些特徵可能包括與毒性或其他不良影響相關的特定功能基團、環狀結構或其他結構體，一旦這些特徵被確認，它們可以用於搜索大型的化學化合物或分子數據庫，尋找其他共享相同結構特徵的化合物。現今有各種工具和軟體程式可用於在化學資訊學中生成相似性警報，包括商業軟體和開源工具，這些程式通常使用各種演算法和技術來識別結構特徵和比較分子結構，如分子指紋、2D 或 3D 結構相似性等方式辨認及標記特徵，進而使用機器學習演算法等進行搜尋比對。輸出的結果通常是一個化合物列表，這些化合物已被標識為可能與有害化合物相似或相關，並根據各種度量標準如雅卡爾指數或歐幾里德距離等，來衡量其相似程度。相似性警報在化學品的安全性評估、藥物開發、環境毒理學等領域中皆被廣泛的運用。例如在藥物開發中，相似性警報可以用來評估及篩選，透過比對候選藥物與已知有害物質之間的相似性，以避免後續藥物的使用上出現不良反應或是副作用。在環境毒理學中，相似性警示可以用來識別具有和已知有害物質類似毒性的化學物質，以評估該物質對環境和生態系統的影響。

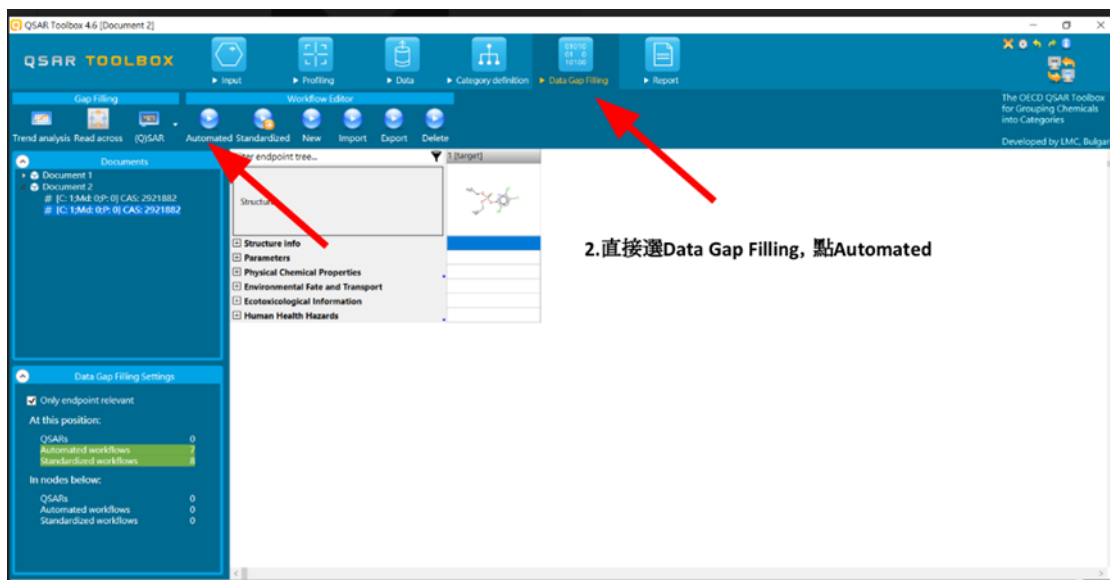
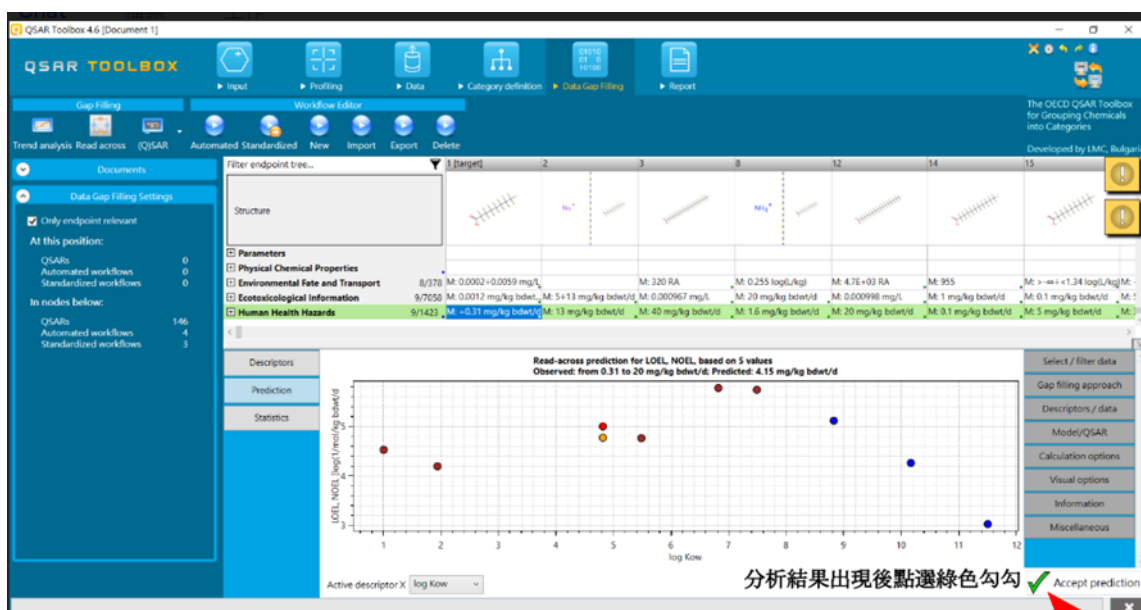
### (三) 交叉參照(Read-across)

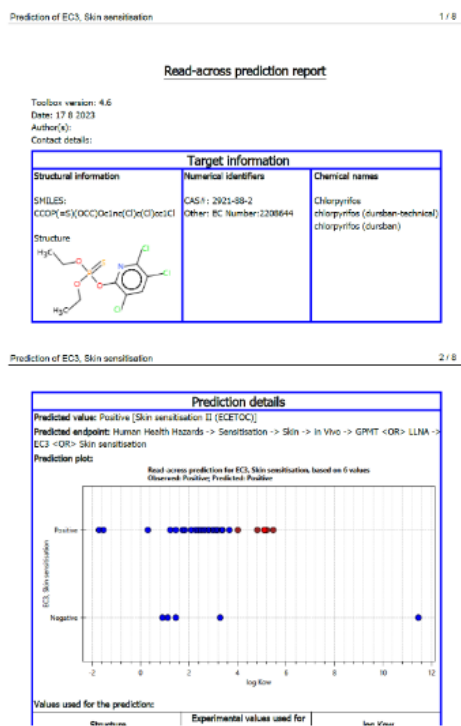
交叉參照的過程通常涉及將參考物質的已知數據與目標物質的已知數據要求進行比較。如果參考物質的可用數據表明它具有某些特性或表現出特定的作用，則假定目標物質可能在某種程度上具有這些特性或作用。然而，謹慎並考慮交叉參照的局限性至關重要。預測的可靠性取決於參考物質可用數據和相關性。此外參考物質和目標物質之間的相似程度在交叉參照預測的準確性中起重要作用，具有顯著結構差異的物質可能不適合這種方法。為了支持交叉參照過程，可以利用各項資訊，例如化學結構、物化特性、毒理數據以及來自類似物質或類別的數據，此外可採用專家判斷和專家系統來幫助解釋數據和評估交叉參照預測的可靠性。交叉參照根據結構或功能相似參考物質的可用數據評估物質的特性或潛在危險，對物質進行有



效評估，同時最大限度地減少廣泛測試的需要。通過採用交叉參照，對於化學品安全評估發揮多項優勢。首先，最大限度地減少大量實驗測試的需要來節省時間和資源，特別是處理大量化學品，因為它可以實現高效篩選和優先排序。此外，交叉參照有助於識別早期開發階段的潛在危害，使研究人員能夠修改化合物或探索可將風險降至最低的替代解決方案。

團隊下載後使用 QSAR Toolbox 4.6 Desktop Client，執行透過 read-across 分析 PFOA、PFOS，也可以透過 Automated 方式進行 read-across 分析輸出報告結果。





#### (四) 分類模型 (Classification model)

分類模型是一種機器學習模型，它被用來將數據分類到預定的類別或標籤中。在化學資訊學中，分類模型可以應用於分子分類、化合物活性預測、藥物相互作用預測等問題。在化學資訊學中使用分類模型的一般步驟如下：

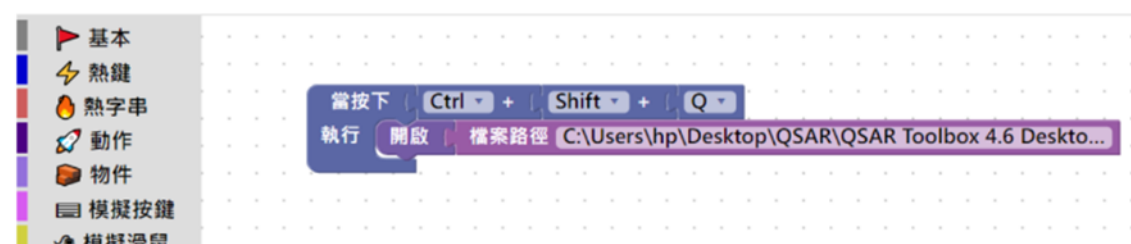
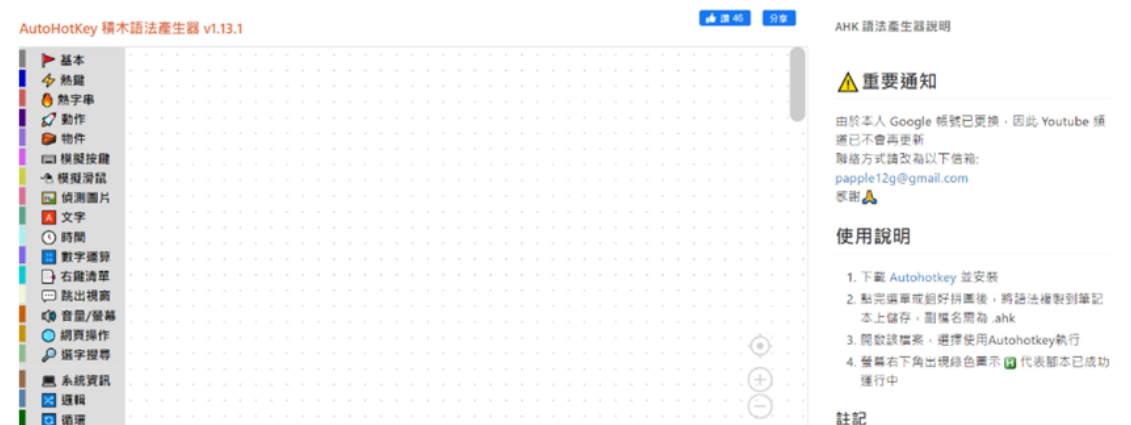
1. 數據準備：首先，需要準備用於訓練和測試的數據。這些數據應該包含分子的描述符（例如結構、物理化學性質等）以及與每個分子相關聯的目標類別或標籤。
2. 特徵提取：接下來，從分子描述符中提取特徵。這些特徵可以是分子的結構特徵（例如原子數量、鍵的數量、官能團等）或數值特徵（例如分子的物理化學性質）。常用的特徵提取方法包括分子指紋（如 MACCS 指紋、ECFP 指紋）和數據標準化（如歸一化）。
3. 數據切分：將數據集劃分為訓練集和測試集。訓練集用於訓練分類模型，而測試集用於評估模型的性能。
4. 模型選擇：根據問題的特點和數據集的大小，選擇合適的分類模型。常用的分類模型包括決策樹、支持向量機、隨機森林、

邏輯回歸和深度學習模型等。

5. 模型訓練：使用訓練集對所選的模型進行訓練。訓練過程通常涉及模型的參數調整，以最大程度地提高模型對訓練數據的擬合能力。
6. 模型評估：使用測試集對訓練好的模型進行性能評估。常用的評估指標包括準確率、精確率、召回率、F1 分數等。
7. 模型應用：一旦模型經過充分的訓練和評估，就可以應用於新的未知數據。這可以是單個分子或一組分子，需要進行分類或預測。將這些數據輸入到已訓練好的模型中，模型將根據先前的學習對其進行預測或分類。
8. 結果解釋和詮釋：根據模型的預測結果，進行結果的解釋和詮釋。這可能涉及分析模型所使用的特徵的重要性，解釋模型對於不同類別的決策依據，或對模型預測結果進行可視化和解釋。
9. 模型優化和改進：根據應用中的實際需求和反饋，可以進一步優化和改進模型。這可能包括調整模型參數、增加更多的訓練數據、改進特徵提取方法或探索其他更有效的分類模型。
10. 持續監測和更新：分類模型的性能和準確性可能隨著時間和數據的變化而發生變化。因此，持續監測模型的性能並進行定期更新是重要的。這可能包括使用新數據重新訓練模型，檢查模型的穩定性和可靠性，以確保模型在實際應用中保持準確和有效。

分類模型的應用後續步驟包括模型的實際應用、結果的解釋和詮釋、模型的優化和改進，以及持續監測和更新模型。這些步驟有助於確保模型在化學資訊學領域中的準確性和可靠性。另外現行也有公開的資源可供使用自動化操作 QSAR 分析，例如 AutoHotkey (<https://www.autohotkey.com/>)，依照需求讓 AutoHotkey 進行自動化 QSAR 分析，最後結果儲存為.ahk 檔進行後續作業。

## AHK 語法產生器 2.到語法產生器網站



### 3.透過各種功能積木元素可以進行拼裝，這邊示範用快捷鍵自動打開QSAR



4.1或是直接下載.ahk檔就可以

三、提供統計分析與視覺化報表，利用自動化更新技術，使用者可隨時取得決策相關資訊所需背景資料，包含提供自動更新資料庫報表，以便管理者瞭解資料更新情形。

統計分析與視覺化報表可以使用以下工具完成：

1. Google Chart API

資料通常是以逗號分隔值(csv), Javascript 物件標示(json)等格式進行儲存，以便在諸如 Python, Javascript 程式語言，或者統計分析系統（SAS）、統計產品與服務解決方案（SPSS）、R 語言等常用之統計軟體之間得以有效且通用地進行溝通。Google Chart API 能夠讀取逗號分隔值(csv)以及 json 等資料儲存格式，並且支援任何可使用可縮放向量圖形（SVG）及向量標記式語言（VML）之瀏覽器。提供常使用或是圖表功能，如以下之範例（圓餅圖（左上之 Pie Chart）、散佈圖（上中之 Scatter Chart）、量表圖（右上之 Gauge）、地理圖（左中之 Geo Chart）、表格（正中央之 Table）、樹狀結構矩形圖（右中之 Tree Map）、雙重圖表（左下之 Combo Chart）、折線圖（下中之 Line Chart）、長條圖（右下之 Bar Chart））：

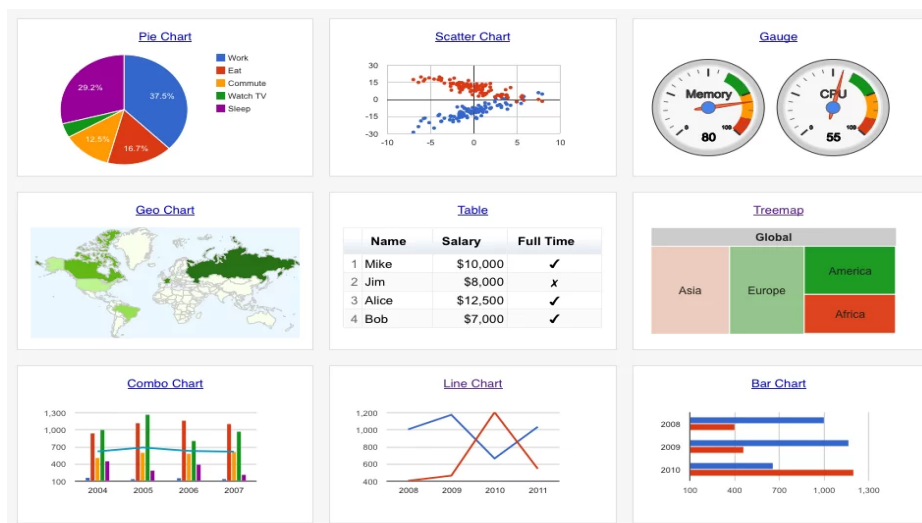


圖 12 Google Chart API 提供之統計分析與視覺化報表

以 Javascript 的<script>標籤引入統計資料，編寫程式碼，以下為範例：

輸入：

```
function drawChart() {  
  // Set Data  
  var data = google.visualization.arrayToDataTable([  
    ['Price', 'Size'],  
    [50,7],[60,8],[70,8],[80,9],[90,9],[100,9],  
    [110,10],[120,11],[130,14],[140,14],[150,15]  
  ]);  
  // Set Options  
  var options = {  
    title: 'House Prices vs Size',  
    hAxis: {title: 'Square Meters'},  
    vAxis: {title: 'Price in Millions'},  
    legend: 'none'  
  };  
  // Draw Chart  
  var chart = new google.visualization.LineChart(document.getElementById('myChart'));  
  chart.draw(data, options);  
}
```

圖 13 使用 Javascript <script> 示範如何產生視覺化圖表

(資料來源：W3C School 網站)

即可得到

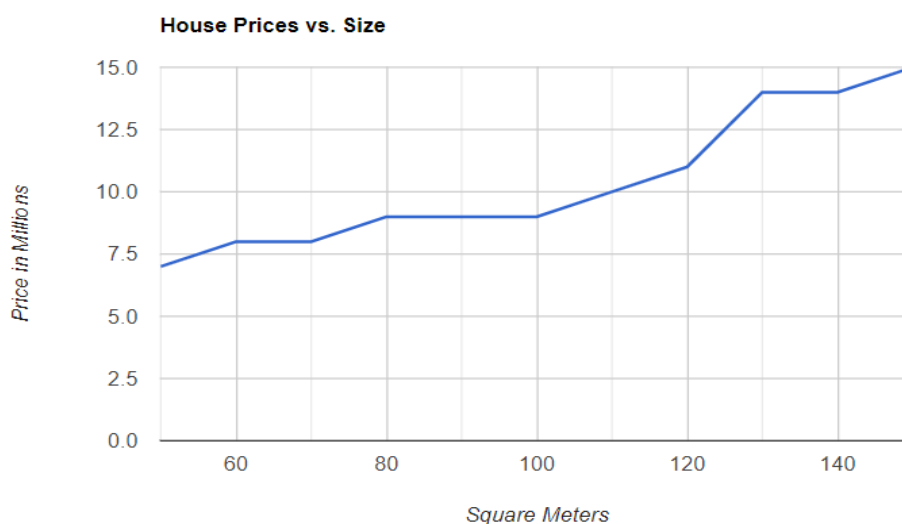


圖 14 使用 Javascript <script> 產生之圖

## 2. D3 與 Plot.ly 套件

D3 (Data-Driven Documents) 也是以 Javascript 為基礎之資料視覺化工具，它能夠提供大量線性圖和條形圖之外的複雜圖表樣式，例如 Voronoi 圖、樹形圖、圓形叢集和單詞雲等，如下圖所示：



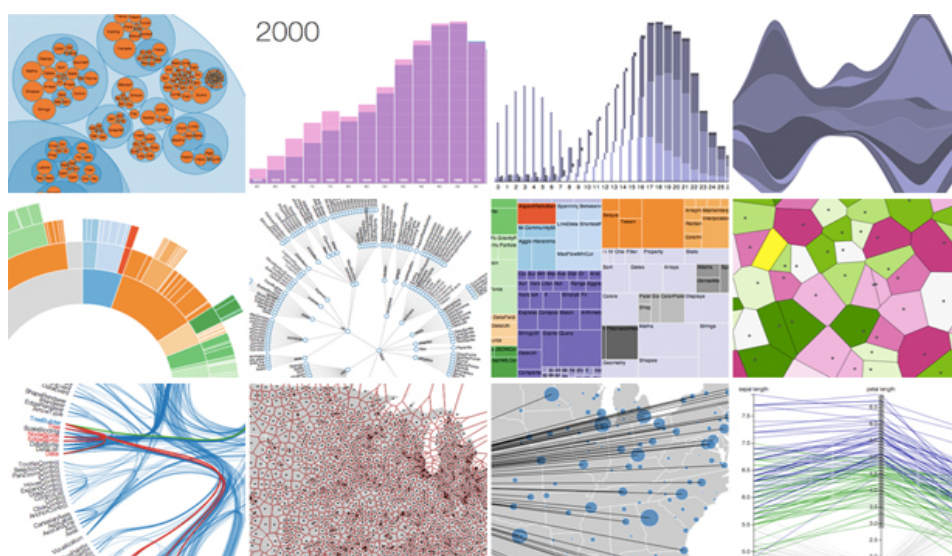


圖 15 D3 視覺化工具產生之圖

而使用方法也是以 Javascript 的<script>標籤引入統計資料，藉由包裝好的物件(object)為主進行程式語言的編寫，團隊採用以 D3 為基底之 Plot.ly 套件繪製旭日圖與直方圖。

### 3. Crossfilter

以上之舉例主要是固定範圍或者說預先設定好之資料的呈現，而 Crossfilter 能夠讓使用者與資料視覺化的介面進行互動，如下圖所示：

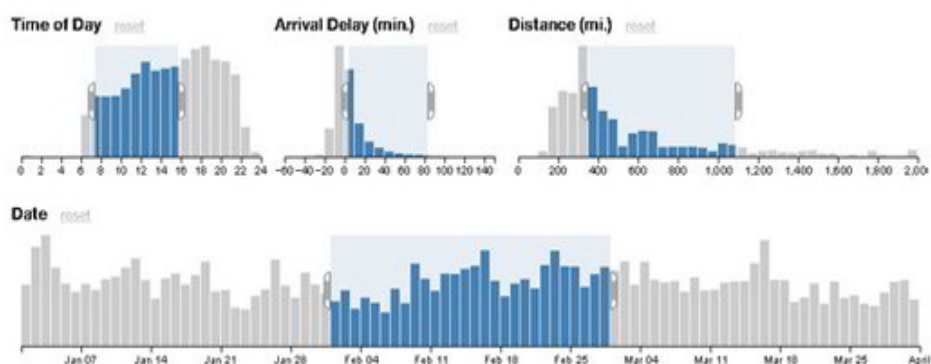


圖 16 Crossfilter 視覺化工具產生之圖

可以在它呈現的資料中自行選定範圍，再抓出需要的範圍的資料進行分析。而這種工具同樣是基於 Javascript 所設計，因此在資料的引入與分析上也是相當容易入手的工具。

四、模組新增功能包含提供多項化學物綜合評估比較表，搜尋結果匯出報表。擴增安全替代化學物清單，擴增產出報告包含可替代安全替代物適用功能。

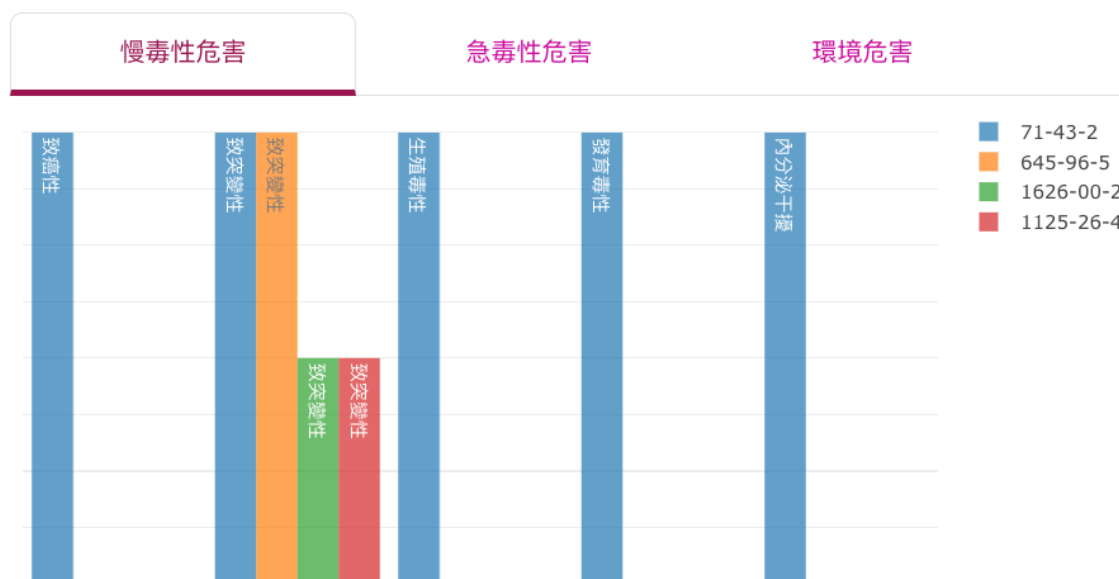


圖 17 不同化合物在危害終點中之評估分數

當需要同時比較多組數據的分布情況時，分組直方圖(grouped histogram)是一種非常有用的視覺化工具。它將數據分成多個區間(bin)，然後將每個區間中的數據繪製成一個矩形條形圖（即直方圖）。分組直方圖可以用於比較多個數據集的分布情況，也可以用於觀察單個數據集在不同區間的分布情況。例如，當今天有五種化合物的數據集，數據集中有這五種化合物的致癌性(Carcinogenicity)、生殖毒性(Reproductive Toxicity)、致突變性與遺傳毒性(Mutagenicity and Genotoxicity)、易燃性(Flammability)與內分泌活性(Endocrine Activity)等危害終點的數據。若要知道這些危害終點在這五種化合物中的評估分數(非常高危害、高危害、中危害、低危害、非常低危害)的話，就能以各組危害終點為一個區間，而不同化合物在該危害終點中的評估分數分別繪製成直方圖，以便比較這些化合物在同一種危害終點中的評估分數，如圖 17 所示，內容說明後述。

在計畫中，系統也增建直方圖形式，為了讓使用者更直觀地理解和分析數據。此視覺化呈現方式不僅提供了更豐富的資訊層面，也有助於



使用者更迅速地捕捉數據趨勢和模式。使用者可透過直方圖快速掌握化學物質的危害評估分佈狀況，並進一步評估其相關風險，如圖 17，以苯（CAS No.: 71-43-2，藍色呈現）與三種與苯結構相似之化學品（CAS No.: 645-96-5 橘黃色；CAS No.: 1626-00-2 綠色；CAS No.: 1125-26-4 紅色）進行比較，可見到苯在慢毒性危害組別五種危害終點評估皆為高危害，而於致突變性評估，可比較苯與其他三種化學物危害評估高低，若沒有評估資訊，則沒有顯示於直方圖中。

為了提升使用者的便利性，直方圖也提供下載之功能，讓使用者能夠方便地保存和分享他們的分析結果。這不僅有助於團隊合作和內外部溝通，還能支持使用者進行更深入的數據研究。未來，我們將持續關注使用者的實際需求，不斷優化系統，包括增加更多圖像化的呈現方式，以進一步提升使用者體驗和分析效能。

這項系統改進的最終目標是使系統更具彈性，能夠更靈活地滿足不同使用者的需求。我們相信這樣的改進將推動系統的應用範疇擴大，促進更廣泛的數據理解和應用，為使用者提供更全面的資源支持。

### 3.3 SAS 診斷模組系統功能驗證

- 一、至少以 8 項高風險化學物質由 SAS 模組系統鍵入，進行安全替代診斷模組系統功能驗證。就系統產出之毒理、危害分級及安全替代等資料與蒐集之資料進行比對，包含化學物質之毒性資料、危害風險資料、替代化學物質資料及其可替代應用資料（至少包含可應用產業類別及製程），驗證系統功能，並提供資料比對報告，及說明系統，再行優化內容（如有進行優化作業之需求）。此驗證作業，由團隊自行進行測試，直至滿意為止。驗證系統測試作業可參考附件十九之資訊報告。
- 二、安全替代診斷分析報告，以圖像化呈現為主，並依優化建議邏輯排序說明，至少應包含毒性危害風險資料、應用資料等資訊。
  - （一）危害評估整理表包含多種來源的危害資訊與規範，可適用篩選器選擇規範適用地區、產業別以及是否有強制性。同時 SAS 系統可選擇要查詢慢性毒性、急性毒性或環境危害等不同危害種類。

危害評估整理表

篩選地區

請選擇篩選地區

篩選產業

請選擇篩選產業

具有強制性

是否具有強制性

送出

重置

慢性危害

急性危害

環境危害

環境流佈

物理危害

評估類型

致毒性

致突變性

生殖毒性

發育毒性

內分泌干擾

危害評估等級

高

中

資料不足  
無法分類

資料不足  
無法分類

資料不足  
無法分類

危害名稱

危害評估

致毒性

資料來源：QSAR模型 決策樹 C5.0

可信度 相對低

危害等級分類清楚。

危害評估等級：高

預測值：高度/中度毒性

致毒性

資料來源：QSAR模型 隨機森林

可信度 相對低

內容選單

1. 風險評估

2. 化學物質資訊

3. 危害評估總覽

4. 危害評估整理表

5. 危害診斷模組

6. 安全替代物

（二）危害診斷模組提供四種計算化學方式所預測的毒性做為參考

危害診斷模組

危害診斷模組是由以下四種計算化學方法構成，所預測之毒性警示提供參考，仍須與其他資料綜合評估：

1. 子結構警示

2. 相似性警示

3. 交叉參照

4. 分類模型

子結構警示

相似性警示

交叉參照

分類模型

危害名稱

危害評估

致毒性

資料來源：Classification Model: Tox Tree

可信度 相對低

包含多種危害終點，危害等級分類模糊。

額外註解：Negative for genotoxic carcinogenicity:NO; Negative for nongenotoxic carcinogenicity:YES;

預測值：高度/中度毒性

致毒性

資料來源：Classification Model: Tox Tree

可信度 相對低

包含多種危害終點，危害等級分類模糊。

額外註解：Negative for genotoxic carcinogenicity:NO; Negative for nongenotoxic carcinogenicity:YES;

預測值：高度/中度毒性

內容選單

1. 風險評估

2. 化學物質資訊

3. 危害評估總覽

4. 危害評估整理表

5. 危害診斷模組

6. 安全替代物

（三）安全替代物是依結構相似性、工業用途以及實際案例探討三種情況下提供可能的安全替代物資訊

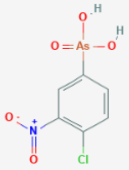
56

## 安全替代物

安全替代物參考目前安全替代資料庫與軟體運作邏輯，分為以下三類：

1. 依照結構相似性分類，需具備
  1. 由結構相似性尋找具有相似官能基之化學物質，相近於具有類似功能之化學物，篩選條件為谷本相關係數 0.8 以上。
  2. 由風險評估判斷為較低風險之化學物質，如風險評估等級為三級、四級、資料不足。實務上是否能替代仍須參照該領域知識，並參考其物理化學特性作為選擇參考，若為資料不足（U），則代表目前對於該化學品危害與風險評估較少，故選擇上需多謹慎，並多留意該化學物之相關毒理研究。
2. 依照工業用途區分，此清單為整理工業用途較安全化學物，而非可替代此頁面之化學物質，建議可由此頁籤右上方搜尋欄過濾工業用途再行篩選，例如可篩選「抗氧化劑」。資料來源：美國環保署更安全化學物質成分清單 Safer Chemical Ingredients List。
3. 依照實際案例探討，資料來源：OECD SAAT

系統依照結構，列出風險等級為三級（可用、但可尋求更安全替代物）、四級（安全化學物質）、與資料不足（U、無足夠資料可供判別風險等級）<sup>?</sup>

| 依結構相似性                                                                             | 依工業用途                                             | 依案例探討                 |
|------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------|-----------------------|
| 化學物結構                                                                              | 名稱與CAS                                            | 風險等級相似度 (介於0-1，越高越相似) |
|  | (4-chloro-3-nitrophenyl)arsonic acid<br>5430-08-0 | U<br>0.86             |

## 內容選單

1. 風險評估
2. 化學物資訊
3. 危害評估總覽
4. 危害評估整理表
5. 危害診斷模組
6. 安全替代物

三、模組建置完成後，由化學署於 SAS 模組系統鍵入 20 項高風險化學物質，並就系統產出之毒理、危害分級、安全替代及其可替代應用資料等進行檢視，確認系統功能操作及危害分級產出資料至少達 12 項。

驗收鍵入二甲基甲醯胺、苯、鄰苯二甲酸酯系列（擇 3）、1,3-丁二烯、乙腈、壬基酚、全氟辛烷磺酸、甲醛、三氯乙烯、1,2-二氯乙烷、四氯乙烯、硫鎢酸鉛、全氟辛酸、六溴環十二烷、雙酚 A、氯乙烯、二氯甲烷、三氯乙烯，20 項高風險化學物質，結果請詳見附件二十二。



## 第四章 教育訓練與專家回饋建議

本章旨在就人工智能(AI)化學物質危害分級 SAS 診斷模組系統進行功能優化，透過廣泛的意見蒐集，探討改進之方向。邀請使用廠商、專業從業人員及相關領域專家參與，分享寶貴的建議與經驗，以推動 SAS 診斷模組系統在化學物質危害評估方面的不斷優化與提升。

### 4.1 辦理教育訓練與蒐集回饋建議

辦理人工智能(AI)化學物質危害分級 SAS 診斷模組系統功能優化意見蒐集及應用教育訓練，邀請產業及專家試操作蒐集回饋建議，持續優化模組功能。

一、針對模組未來適用需求設計回饋意見調查內容及範疇文件，調查內容及範疇經化學署同意，邀請專家學者試操作診斷模組系統，蒐集回饋意見 5 份，專家領域包含毒理、資訊、化學等範疇，作為優化模組參考建議。以下為回饋意見參考建議（相關文件於附件十三）：

1. 建議增加法規相關之資訊
2. 建議在南部開訓練班，南部亦有許多化學公司。
3. 搜尋結果的資料呈現、說明排序的原則或設置排序的選擇功能由使用者決定。
4. 旭日圖和直方圖的評分數字越大危險越大，左側風險等級卻是數字越小越危險，容易讓使用者感到困惑，建議可以加以優化。

二、針對模組未來適用需求設計回饋意見調查內容及範疇文件，調查內容及範疇需經化學署同意，邀請相關產業試操作模組系統，蒐集回饋意見至少 3 份，產業類別至少 3 類，並與化學署確認，做為模組優化參考建議。以下為回饋意見參考建議（相關文件於附件十三）：

1. 期待可以輸入中文以及全中文顯示/或中英文雙語。
2. 首頁下面列了「12 項測試化學物質」，建議可說明列 12 項的意義。
3. 建議可新增國內更新資料致資料庫，例如：何時列為毒化物。
4. 建議新增替代物質的辨別篩選能力。
5. 可增加 GHS 年份識別。

三、模組系統初步建置完成後，提出教育訓練計畫內容需經化學署同意後，

辦理 SAS 診斷模組系統功能應用教育訓練 2 場，每場次 2 小時，邀請 1 位講師，並準備相關資料，總人次共 30 人次以上，並蒐集學員回饋意見，作為後續模組優化參考。

「化學物質綠色替代診斷模組」教育訓練透過實機操作之教育訓練課程，俾利各單位使用者能瞭解本系統之功能及操作，確保系統順利正式上線。

1. 於 11 月 10 日與 11 月 13 日舉行說明 SAS 系統操作與實作，包括設計原理使用國際物質評估標準，包括綠色篩選安全化學平台 (GreenScreen® for Safer Chemicals)與全球化學品統一分類和標籤制度來評估化學品的危害性(GHS, the Globally Harmonized System of Classification and Labeling of Chemicals)，建立安全替代化學物質的搜索、評估和篩選系統，以實現更有效的管理和健康永續環境，包括建立相關資料庫。
2. 完成兩場次教育訓練共計 37 人，學員包括化學署、業界廠商與資訊學生。

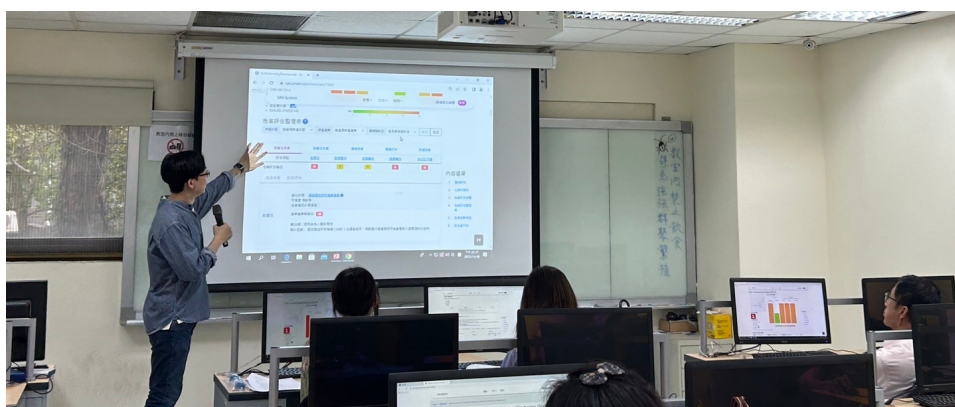


圖 18 11 月 10 日第一次教育訓練





圖 19 11 月 10 日第一次教育訓練學員合照

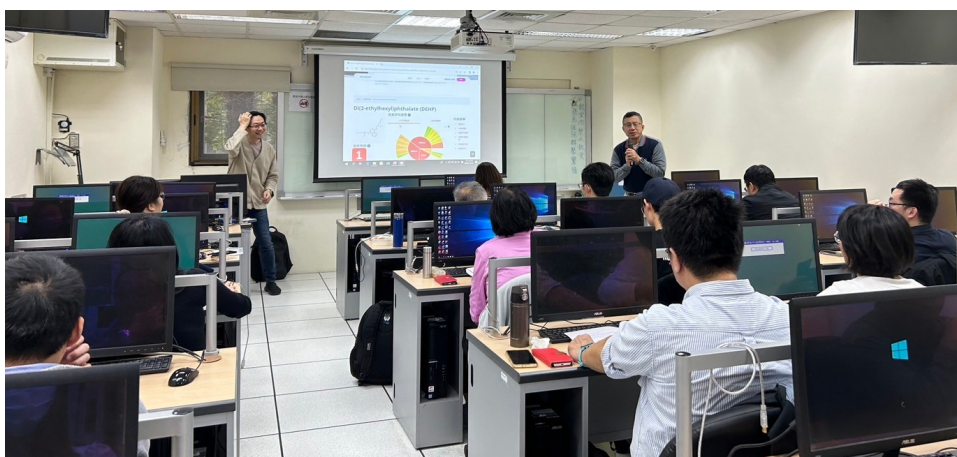


圖 20 11 月 13 日第二次教育訓練



圖 21 11 月 13 日第二次教育訓練學員合照

### 3. 回饋意見蒐集

- (1) 對於業界認知與所使用之資料庫：美日 EPA 之 safer chemical ingredients lists、PubChem、Hazardous Substances Data Bank

(HSDB)、CompTox、ChemView、EU Risk Assessment Report、ChemIDplus、NITE-CHRIP (NITE Chemical Risk Information Platform)、SciFinder-n、Registry of Toxic Effects of Chemical Substances (RTECS)、ECHA database。

(2) 希望新增之額外功能或改進之建議：

- 關鍵字檢索欄位可以做模糊查詢或列表清單方式不要把 (CAS No.、化學物) 放在同一個檢索欄位，否則還要先確認是否選到相應的條件才能進行搜尋。
- 參考資料庫希望有權重，量化出處權威性。
- 建議可加上可信度篩選器。

#### 4.2 研析綠色替代模組未來推廣及應用相關預備工作

一、盤點國際及國內與建置系統相關之競賽或獎勵制度，並分析可能參與之競賽或獎勵制度所需資料及可行性。

參加競賽如：國家政府服務獎、113 綠色化學應用及創新獎。

| 競賽項目    | 過去申請時間                           | 競賽內容                                                                                                                                                             | 評審標準                | 過去獲選團隊                                                                                                                                       |
|---------|----------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 國家政府服務獎 | 112/5/1-5/11<br>由中央與地方政府主管機關推薦參獎 | 數位創新加值：鼓勵各機關（構）運用數位創新策略及措施，有效增進經濟發展及就業機會，促進資源有效利用。<br>1. 連結政府及民間巨量資料，公私協力解決民眾關切問題。<br>2. 運用人工智慧、物聯網、區塊鏈等數位科技，創新為民服務模式。<br>3. 民生攸關之政府申辦業務，推動整合跨機關業務流程，提供民眾線上便捷服務。 | 創新性、效益及影響、可持續性、擴展應用 | 1. 財政部財政資訊中心（手機報稅 e 指輕鬆會）<br>2. 國立臺灣大學醫學院附設醫院雲林分院（安心雲林 e 院聯防）<br>3. 台灣電力股份有限公司電力調度處（數位精靈召喚民間神隊友-電力交易平台）<br>4. 桃園國際機場股份有限公司（機場大聯盟數位平台，打造全方位旅客 |



|            |                                         |                                                                                                                                                                                              |                                                                                                                                           |                                                                                                                                                                                                                                                        |
|------------|-----------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|            |                                         |                                                                                                                                                                                              |                                                                                                                                           | <p>服務)</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>數位發展部數位產業署(臺灣雲市集:帶各行各業上雲的數位轉型魔豆)</li> <li>臺北市政府消防局(119 高效派遣精準服務)</li> <li>臺南市政府水利局(即時水情一「點」通—智慧防災推動計畫)</li> <li>高雄市政府毒品防制局(ICARES·AI 科技輔導~走出藥癮迷途)</li> <li>南投縣埔里地政事務所(智慧服務更貼心-資訊便民服務系統建置)</li> </ol> |
| 綠色化學應用及創新獎 | 111/8/11-10/14<br>8/30 起於全臺舉辦 6 場次參選說明會 | <p>化學物質管理類:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>針對化學物質進行貯存分區、標示明確、用途告知及流向紀錄,有效的進行化學物質管理。</li> <li>建立化學物質管理資訊整合平臺,有效整合化學物質相關資訊。</li> <li>建置運作管理文件及風險管理,並且可提出應用運作管理之具體作法與績效。</li> </ol> | <ol style="list-style-type: none"> <li>參選單位之綠色化學相關成果是否具有示範性。</li> <li>所提交之單位相關事蹟是否具有推展性,且足資推廣宣傳。</li> <li>針對綠色化學推廣、替代、管理或災害防救之</li> </ol> | <ol style="list-style-type: none"> <li>力晶積成電子製造股份有限公司P1/2</li> <li>友達光電股份有限公司台中廠 災害防救類/化學物質管理類</li> <li>日月光半導體製造股份有限公司</li> <li>台灣中油股份有限公司綠能科技研</li> </ol>                                                                                             |

|  |  |  |                                                                                                                                  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |
|--|--|--|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|  |  |  | <p>應用，具有優化價值。</p> <p>4. 針對綠色化學之推廣、替代、管理、災害防救之應用，單位具有發展創新之作為。</p> <p>5. 針對企業永續發展(ESG)，說明與綠色化學之有關作為的具體推動計畫與實施成效，及企業反貪腐、企業誠信做法。</p> | <p>研究所</p> <p>5. 台灣化學纖維股份有限公司麥寮分公司</p> <p>6. 台灣積體電路製造股份有限公司十八廠一期</p> <p>7. 台灣積體電路製造股份有限公司十四B廠</p> <p>8. 台灣積體電路製造股份有限公司先進封測三廠</p> <p>9. 行政院農業委員會花蓮區農業改良場</p> <p>10. 奇美醫療財團法人奇美醫院</p> <p>11. 長興材料工業股份有限公司路竹廠</p> <p>12. 國立高雄科技大學南區毒災應變諮詢中心</p> <p>13. 國家中山科學研究院電子系統研究所</p> <p>14. 鋒霈環境科技股份有限公司</p> |
|--|--|--|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

二、預作系統可參與競賽或獎勵制度前置準備工作，國內至少包含國家政府服務獎。

國家新創獎參賽內容為數位創新加值：鼓勵各機關（構）運用數位創新策略及措施，有效增進經濟發展及就業機會，促進資源有效利用。內容包含 1. 連結政府及民間巨量資料，公私協力解決民眾關切問題；2. 運用人工智慧、物聯網、區塊鏈等數位科技，創新為民服務模式；3. 民生攸關之政府申辦業務，推動整合跨機關業務流程，提供民眾線上便捷服務。

此計畫所建置之系統已符合前兩項要求，未來可將系統設計為中英雙語介面以及更加便民化之系統。

#### 4.3 為推動安全替代，撰寫科普文章及相關資料蒐集

一、配合化學署推動安全替代業務，蒐研及協助撰寫應用安全替代於毒性及關注化學物質相關的化學知識科普文章，文章受眾以產業為主，共計產出 2 篇，主題需經化學署同意，每篇至少 2,500 字含圖文，經 3 位相關領域專家委員審查。

（一）科普文章以「利用化學結構-子結構警示、相似性警示、交叉參照以及分類模型模組預測毒性並提供安全替代物的選擇建議」、「建立化學安全替代的快速篩選系統—SAS 系統搭建背後的動機與過程」標題撰寫，兩篇科普文章於附件十六、十七。

（二）3 位相關領域專家委員審查如附件十八，以下為意見整合。

1. 若為科普文，建議先行界定閱讀對象，此內容較偏專業及學術。
2. 交叉參照（Read-Across, RAx）、證據權重法（Weight of Evidence, WoE）及化學物質分組（Chemical Categories）為現今國際間發展鑑別目標化學物質及混和物質（多重成分化學品、未知成分或不確定 UVCBs 物質）之毒性推估預測分析技術，藉由比對現有化學物質資料庫中特性及毒理資訊，建議參考經濟合作暨發展組織、歐洲化學總署及美國環保署皆已核准並推行 RAx 方法指引（如 OECD 公布之 Guidance on Grouping of Chemicals、ECHA 公布之 The Read-Across Assessment Framework, RAAF 及美國環保署公布之 Generalized Read-Across,

GenRA) 進行預測模組資訊及專有名詞描述。

3. 內容僅包含至預測毒性描述，尚無包含題目所列之提供安全替代物選擇。
4. 四個模組建立能廣泛提供化合物危害性預測，建議將其流程圖繪製成示意圖，可加速讀者理解。
5. 項危害終點名詞建議參考化學署毒性及關注化學物質管理法及毒理資料庫進行修正。
6. SAS System 為呈現方式及資訊非常豐富且有幫助，未來若普及到業者使用時，建議考量提高介面友善性及資訊易讀性，危害評估是否安全可使用，建議仍與目前毒管法中所列許可用途連結，另原始毒理資料亦建議與化學署內毒理資料庫進行調和。
7. 科普文章 2 動機清晰，但標題中的系統搭建過程篇幅較少，若能列出採用 GreenScreen 標準的原因會更好。

## 二、協助化學署有關安全替代、模組推廣相關之提問、政策回應等資料蒐集。

### 1. 參與 112 環境科技論壇暨成果發表會



圖 22 112 環境科技論壇暨成果發表會

2. 參與 11 月 21 日「綠色化學源頭管理及創新應用工作坊」演講。

#### 4.4 現行（或開發）作業環境

##### 一、硬體架構

化學物質綠色替代診斷模組建置及決策支援計畫採用三層式架構，包含網頁伺服器、Docker Swarm 叢集、資料庫伺服器，讓使用者/使用單位透過網路，存取網頁伺服器之人機介面，進而存取化學物質綠色替代診斷模組（Docker Swarm 叢集），透過 Docker Swarm 叢集達成自動擴展、負載平衡等優點。使用規格如下表所示。

表 8 系統規格

| 主 機                                      | 系 統                    | 其 他                                                             | 規 格                                                |
|------------------------------------------|------------------------|-----------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------|
| Web 主機<br>(h0-sas-web)                   | Ubuntu Linux 22.04 LTS | Nginx 提供 Reverse Proxy                                          | 4 vCPU<br>32G RAM<br>VDS：100G SSD                  |
| Docker Swarm 管理主機<br>(h0-sas-manager1~2) | Ubuntu Linux 22.04 LTS | Docker Swarm Manager                                            | 4 vCPU<br>32G RAM<br>VDS：100G SSD                  |
| Docker Swarm 工作主機<br>(h0-sas-node1 ~ 3)  | Ubuntu Linux 22.04 LTS | Docker Swarm 工作節點，執行 Redis 快取、資料庫、診斷模組、Airflow 自動更新四種 Docker 容器 | 8 vCPU<br>64G RAM<br>VDS:100G SSD<br>COS: 500G HDD |

##### 二、軟體環境

本計畫採用之伺服器、網站、資料庫等作業環境如下：

1. 網頁平台：Ubuntu Linux 22.04 LTS。
2. 網站平台：Nginx。
3. 資料庫平台：Maria DB 架構於 Docker Swarm。
4. 資料庫備援機制：配合國網中心定期備份雲端物件儲存。
5. 開發作業環境：HTML、CSS、JavaScript、Python、Ruby、Docker 等。
6. 網路環境建置及規劃之網路環境如下圖所示：



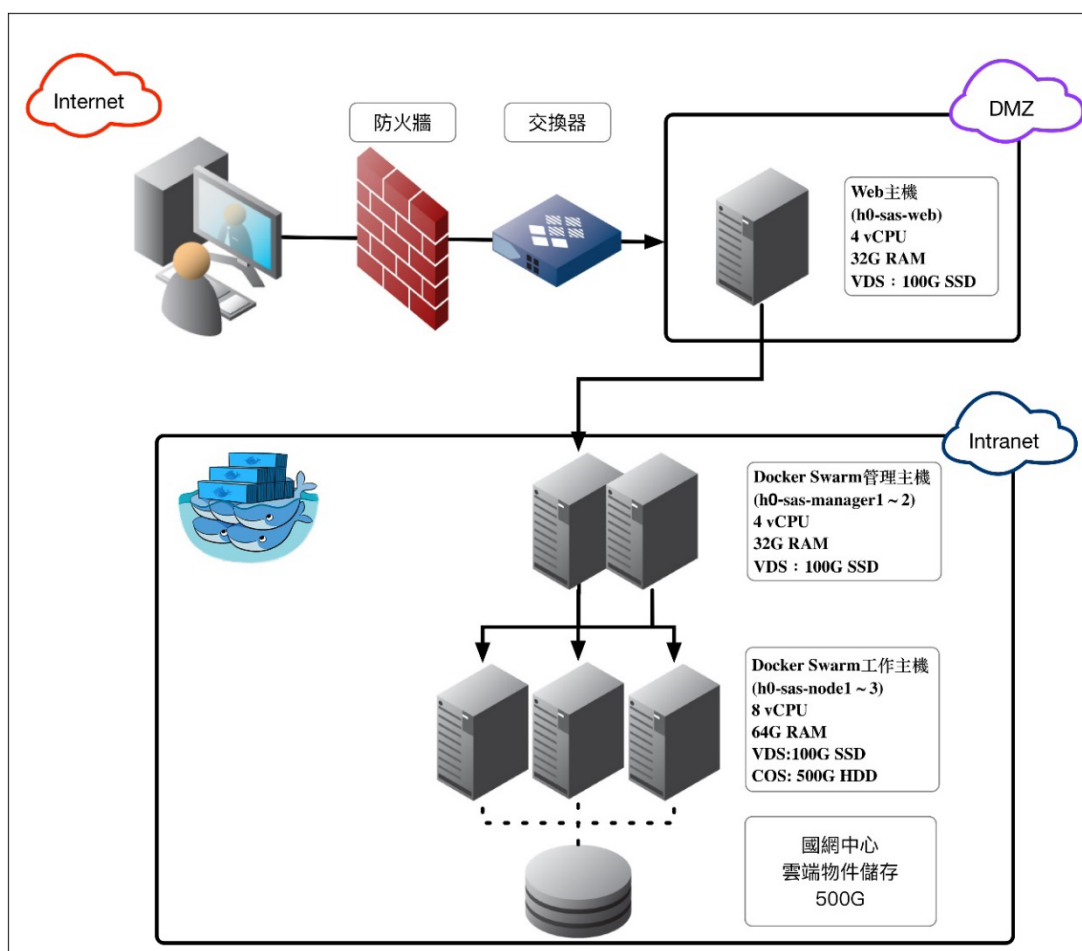


圖 23 網路環境建置及規劃之網路環境

此架構特性：

- (1) Web Server 放置於 DMZ 區，Web Server 需安裝 Nginx，對外以防火牆區隔，各層級間防火牆依國網中心規：ISO 27017 雲端服務資訊安全及 ISO 27018 個人隱私資料保護兩項認證。
- (2) Docker Swarm 管理與工作節點主機放置於 Intranet，資料庫使用 Maria DB 架構於 Docker Swarm，包括三個資料庫，暫存資料庫、正規化資料庫以及大數據資料庫。管理主機為 2 台、工作節點主機為 3 台作為分散負載使用。
- (3) 國網中心儲存設施包含新竹本部、台中分部、台南分部，三地互為備援，以國網中心自有技術建置負載平衡、異地援備。
- (4) 儲存裝置使用國網中心之雲端物件儲存 COS 掛載至 Docker Swarm 工作節點主機，對應至 COS 碟。

### 三、Airflow

Apache Airflow 是一個開源的工作流程自動化和排程平台，主要用於管理和調度數據流程、ETL（提取、轉換、加載）任務、數據處理任務、批處理作業等。它的主要目的是讓用戶能夠以程式化和可靠的方式定義、安排和監控複雜的工作流程。以下是一些 Apache Airflow 的關鍵特點和概念：

1. **DAGs (Directed Acyclic Graphs)** : Airflow 使用有向無環圖 (DAG) 的概念來表示工作流程。每個 DAG 都是由一系列的任務 (Tasks) 組成，這些任務以特定的順序執行，並可以根據前一個任務的成功或失敗來觸發。
2. **任務 (Tasks)** : 一個 DAG 由多個任務組成，每個任務代表一個單一的工作或操作，例如執行一個程式、運行一個 SQL 查詢、複製檔案等。每個任務都定義了它自己的邏輯和執行需求。
3. **調度器**: Airflow 的調度器負責根據任務的依賴關係和排程設定來確定任務的執行順序。它確保任務在它們的依賴關係滿足的情況下按照正確的順序執行。
4. **操作符 (Operators)** : 操作符定義了單個任務執行的操作。Airflow 提供了多種內置的操作符，例如 **BashOperator** (執行 Shell 命令)、**PythonOperator** (執行 Python 函數)、**SQLAlchemyOperator** (執行 SQL 查詢) 等。用戶也可以自定義自己的操作符。
5. **監控和日誌**: Airflow 提供了一個用戶界面，用戶可以在其中監控任務的運行狀態、查看任務的日誌，以及檢查任務的歷史運行情況。
6. **可靠性和重試**: 如果任務因為某些原因失敗，Airflow 具有內置的重試機制，可以自動重新執行失敗的任務，從而確保數據流程的可靠性。
7. **動態生成**: 使用 Airflow 的模板功能，您可以在任務中動態生成數據，例如根據前一個任務的輸出生成參數。
8. **可擴展性**: Airflow 的架構允許用戶通過添加插件和自定義操作符來擴展其功能。

由於未來計畫進行自動化做更新，需結合 airflow，但若每次啟動 docker

之後都一步一步手動安裝將造成許多麻煩，也可能因為操作不慎與版本問題出錯，因而要將安裝 airflow 的過程加進 docker compose 中。另外要建立 airflow 的網頁伺服器(webserver)以方便各種工作流程自動化之間的指派與先後設定，如下圖所示：

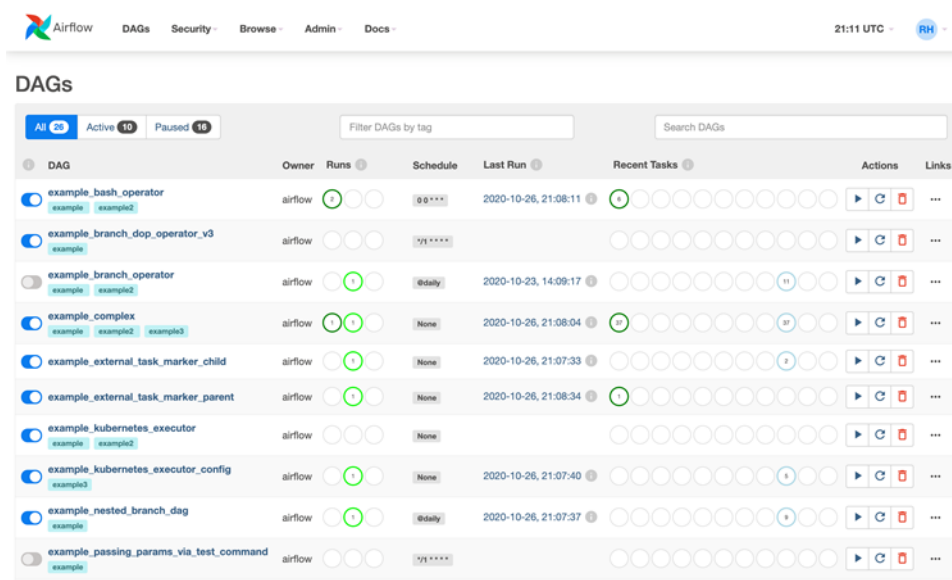


圖 24 將 Airflow 加至 Docker compose 上以完成未來自動化更新作業



## 第五章 結論

綠色化學在化學產品的開發、製造和使用過程中，可以減少對環境和人體的不良影響。為了促進綠色化學的發展和推廣，國際上有許多國家與非政府組織建立綠色化學、綠色替代資料庫，化學品替代方案及技術可以替代傳統的有毒、危險或不環保的化學產品和製程，這些替代品比傳統產品更加環保、環境友善、安全 and 健康。世界各地都建立了綠色化學和綠色化學替代資料庫，例如美國環保署的綠色化學替代資料庫、歐盟的綠色化學網絡和中國的綠色化學產品目錄。本計畫以優化「高風險化學物質之安全替代化學物質搜尋、評估及篩選(Searching, assessment, and screening system for safer alternative chemicals, SAS)診斷模組系統」，診斷化學物質危害，建立安全替代建議清單，由源頭管理化學物質。

針對 110-111 年完成之 SAS 診斷模組系統，參考國際安全替代評估策略及運算邏輯、化學物質管理法規、危害物質或管制清單，將 SAS 診斷模組系統進行優化，包含新增模組功能及優化期程。進行 SAS 診斷模組系統優化作業：包含替代評估運算邏輯更新、擴充安全替代化學物質資料庫、關聯資料庫，以及強化毒理資料不足之補足，使 SAS 診斷模組系統更加完善。

安全替代評估邏輯部分，團隊研讀 TURI P2OASys、US EPA PARIS III、國際間安全替代原則如 OECD 與 US EPA，撰寫程式加入 SAS 系統中，透過新增之安全替代評估邏輯增列可選用之安全替代品。擴充 20 項化學品清單部分，團隊已完成適用範圍、清單所屬產業別資訊、規範性質，根據資料爬蟲撰寫。強化毒理資料不足之處，團隊透過 ToxAlert 資料庫建構子結構警示模組、利用計算結構相似性以建構相似度警示模組、透過 OECD QSAR Toolbox 建構交叉參照模組、透過 US EPA TEST 與 US EPA CompTox 資料庫建構分類模型模組。視覺化與報告部分建構直方圖與旭日圖視覺呈現並提供使用者下載分析數據。相較於 110-111 之化學署計畫所建置之 SAS 系統，新增 15,991 化學物、2 危害項目以及 1,121,867 化學物危害評估數。

最後，教育訓練活動的成功舉辦得益於團隊全體成員的辛勤努力與卓越專業知識。透過兩場 SAS 系統原理與操作教育訓練，不僅提供了使用者與學研廠商深入的學習體驗，也成功激發了對 SAS 系統應用的興趣與瞭解。同時，為了普及相關知識，撰寫了兩篇科普文章，以清晰易懂的方式介紹 SAS 系統的原理、應用領域和未來發展趨勢。這不僅有助於加深公眾對於相關領域的認識，也提升了團隊

在專業領域的影響力。

此外，蒐集並分析參與者的回饋針對 SAS 系統的使用體驗以及改進建議。這些寶貴的意見將提供實際的改進方向，確保 SAS 系統能夠更好地滿足業界需求並保持技術領先。在未來，將持續舉辦類似的教育訓練活動，不斷提升專業水平，擴大技術影響力，並將先進的科技知識分享給更廣泛的學研業界與廠商。

本計畫完成，已達成下列之預期效益：

一、建立 SAS 診斷模組系統，並新增功能及優化期程：針對 110-111 年完成之 SAS 診斷模組系統，參考國際安全替代評估策略及運算邏輯、化學物質管理法規、危害物質或管制清單，提出 SAS 診斷模組系統優化建議，包含新增模組功能及優化期程。

(一) 擴增關聯資料庫，優化診斷模組系統

1. 至少擴增 20 項危害化學物質清單
2. 包含國際組織危害物質清單、各國管制清單、或跨國公司限用物質清單
3. 以持續更新性與可信度做為優先選擇使用的資料來源
4. 為快速篩選所需使用之診斷模組，加入危害或管制清單之屬性，如地域性（歐洲、美國、歐盟）等

(二) 於所建置之我國化學物質危害分級及綠色替代資料庫系統中，依據國際或國家管理機構，構築符合國際對於化學品危害評估預測模組

1. 提供美國環保署所提供工具評估結果
2. 提供經濟合作暨發展組織的定量構效關係工具箱評估結果

二、進行 SAS 診斷模組系統優化作業：至少須包含替代評估運算邏輯更新、擴充安全替代化學物質資料庫、關聯資料庫，以及強化毒理資料不足之補足，使 SAS 診斷模組系統更加完善。

(一) 基於化學物結構，建立以下診斷模組

1. 增加子結構警示 (Substructural alert)
2. 增加相似性警示 (Similarity alert)
3. 增加交叉參照 (Read-across)
4. 增加分類模型 (Classification model)

(二) 擴增安全替代化學品

1. 持續擴增安全替代物清單

2. 擴增可替代安全替代物適用功能

(三) 提供統計分析與視覺化報表，利用自動化更新技術，使用者可隨時取得決策相關資訊所需背景資料

1. 提供自動更新資料庫報表，以便瞭解資料更新

2. 提供多項化學物綜合評估比較表

3. 提供化學物搜尋結果匯出

三、SAS 診斷模組系統功能驗證

四、辦理人工智能(AI)化學物質危害分級 SAS 診斷模組系統應用教育訓練，邀請產業及專家試操作蒐集回饋建議，持續優化模組功能

五、研析綠色替代診斷模組未來推廣及應用相關預備工作



## 第六章 未來或後續執行建議

建置我國化學物質危害分級及綠色替代資料庫系統中，根據產業建議以及業界需求以及關注國際近年趨勢，可持續擴增關聯資料庫以及高關注清單以優化綠色替代診斷模組系統。蒐研與擴增國內產業高度使用之化學物質至 SAS 資料庫，以及於系統中新增國內更新資料備註何時被列管為毒化物之資訊，增加綠色替代診斷模組產業應用發展規劃，包含確保綠色替代診斷模組應用性，納入產業應用發展需求參數。另外召開產業應用發展座談及專家諮詢會，作為系統優化參據以及蒐研並匯入國內外相關化學物質評估產業應用於化學物質綠色替代診斷模組建置及決策支援計畫之資訊，以持續優化診斷模組系統。最後可以建立綠色化學安全替代示範、加強推廣及修正檢討，為推廣綠色化學安全替代篩選系統業者應用示範，辦理示範活動、相關利害關係人溝通會議、專家諮詢會議及跨部會共識交流會議，以建置安全替代示範基礎。此外，透過參加國家競賽可提升系統在學術研究界交流與曝光度的一個重要途徑以及吸引相關產業的關注和興趣，有助於擴大系統的影響力，使其在相關研究領域獲得更多的關注與討論。另外也可以使用 PDCA (Plan, Do, Check, Act) 循環法則，納入人工智慧，滾動檢視及優化建立之綠色替代診斷模組，以及決策系統適用性。

### 一、短期建議

1. 蒐研與擴增國內產業高度使用之化學物質至 SAS 資料庫，以及新增國內更新資料至資料庫時備註何時被列管為毒化物之資訊。
2. SAS 系統內之 GHS 相關資料增加年份資訊以利使用者識別。
3. 基於文獻與安全替代實例透過物化性及其他化學物質特性，以搜尋具潛力安全替代物。
4. 將今年之專家企業意見精進 SAS 系統後，持續辦理工作坊推廣 SAS 系統，蒐集學術界與產業界回饋問卷，涵蓋多項產業。
5. 明年可規劃參加競賽如：國家政府服務獎、113 綠色化學應用及創新獎。

### 二、中長期建議

1. 期望未來 SAS 系統介面可輸入中文以及全中文顯示或中英文雙語。
2. 教育訓練可規劃舉辦中南部地區教育訓練，中南部之相關產業眾多。

3. 設計以 AI 大型語言模型基於化學品毒性資訊與安全替代物資訊，由使用者與 AI 系統對談取得所需資料，以提升使用者體驗。
4. 安全替代物之篩選類別可增加碳足跡之選項，更符合業界之需求。

### 參考資料

1. OECD PRINCIPLES FOR THE VALIDATION, FOR REGULATORY PURPOSES, OF (QUANTITATIVE) STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIP MODELS. [URL:https://www.oecd.org/chemicalsafety/risk-assessment/37849783.pdf](https://www.oecd.org/chemicalsafety/risk-assessment/37849783.pdf)
2. GUIDANCE DOCUMENT ON THE VALIDATION OF (QUANTITATIVE)STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIPS [(Q)SAR] MODELS  
[URL:https://www.oecd.org/officialdocuments/publicdisplaydocumentpdf/?doclanguage=en&cote=env/jm/mono\(2007\)2](https://www.oecd.org/officialdocuments/publicdisplaydocumentpdf/?doclanguage=en&cote=env/jm/mono(2007)2)
3. <https://www.oecd.org/chemicalsafety/risk-management/substitution-of-hazardous-chemicals/>
4. <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC7433800/>
5. <https://p2oasys.turi.org/About#EHS>
6. 跨部會化學物質資訊平台  
<https://chemicloud.epa.gov.tw/chemicloud/index.html>, 2015.
7. Apache airflow <https://airflow.apache.org/>, 2018. Publication Title: Apache Airflow.
8. Google Cloud Composer <https://cloud.google.com/composer?hl=zh-tw>, 2018. Publication Title: Google Cloud.
9. GreenScreen® Method - GreenScreen® For Safer Chemicals  
<https://www.greenscreenchemicals.org/learn/full-greenscreen-method>, 2018.
10. Introducing Amazon Managed Workflows for Apache Airflow (MWAA) - AWS News Blog <https://aws.amazon.com/blogs/aws/introducing-amazon-managed-workflows-for-apache-airflow-mwaa/>, November 2020.
11. Artem Cherkasov, Eugene N. Muratov, Denis Fourches, Alexandre Varnek, Igor I. Baskin, Mark Cronin, John Dearden, Paola Gramatica, Yvonne C. Martin, Roberto Todeschini, Viviana Consonni, Victor E. Kuz'min, Richard Cramer,

- Romualdo Benigni, Chihae Yang, James Rathman, Lothar Terfloth, Johann Gasteiger, Ann Richard, and Alexander Tropsha. QSAR Modeling: Where Have You Been? Where Are You Going To? *Journal of Medicinal Chemistry*, 57(12):4977–5010, June 2014. Publisher: American Chemical Society.
12. James H Clark. Introduction. In *Handbook of Green Chemistry and Technology*, pages 1–9. John Wiley & Sons, Ltd, 2002. Section: 1 \_eprint: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/9780470988305.ch1>.
13. David J. Dix, Keith A. Houck, Matthew T. Martin, Ann M. Richard, R. Woodrow Setzer, and Robert J. Kavlock. The ToxCast Program for Prioritizing Toxicity Testing of Environmental Chemicals. *Toxicological Sciences*, 95(1):5–12, January 2007.
14. Matthew T. Martin, Richard S. Judson, David M. Reif, Robert J. Kavlock, and David J. Dix. Profiling Chemicals Based on Chronic Toxicity Results from the U.S. EPA ToxRef Database. *Environmental Health Perspectives*, 117(3):392–399, March 2009. Publisher: Environmental Health Perspectives.
15. Ann M. Richard, Richard S. Judson, Keith A. Houck, Christopher M. Grulke, Pa- tra Volarath, Inthirany Thillainadarajah, Chihae Yang, James Rathman, Matthew T. Martin, John F. Wambaugh, Thomas B. Knudsen, Jayaram Kancherla, Kamel Man- souri, Grace Patlewicz, Antony J. Williams, Stephen B. Little, Kevin M. Crofton, and Russell S. Thomas. ToxCast Chemical Landscape: Paving the Road to 21st Cen- tury Toxicology. *Chemical Research in Toxicology*, 29(8):1225–1251, 2016. \_eprint: <https://doi.org/10.1021/acs.chemrestox.6b00135>.
16. Colin A. Smith, Elizabeth J. Want, Grace O’Maille, Ruben Abagyan, and Gary Siuzdak. XCMS: Processing Mass Spectrometry Data for Metabolite Profiling Using Nonlinear Peak Alignment, Matching, and Identification. *Analytical Chemistry*, 78(3):779–787, February 2006.



17. Ralf Tautenhahn, Christoph Böttcher, and Steffen Neumann. Highly sensitive feature detection for high resolution LC/MS. BMC Bioinformatics, 9(1):504, November 2008.
18. Sean Watford, Ly Ly Pham, Jessica Wignall, Robert Shin, Matthew T. Martin, and Katie Paul Friedman. ToxRefDB version 2.0: Improved utility for predictive and retrospective toxicology analyses. Reproductive Toxicology, 89:145–158, October 2019.
19. ChemSec Marketplace (<https://marketplace.chemsec.org/>)
20. OECD Substitution and Alternatives Assessment Toolbox  
(<https://www.oecd.org/chemicalsafety/risk-management/substitution-of-hazardous-chemicals/>)
21. My Chemical Monitoring (<https://chemycal.com/>)
22. Pharos (<https://pharosproject.net/>)
23. Substitution Support Portal (SUBSPORTplus)  
([https://www.subsportplus.eu/subsportplus/EN/Home/Home\\_node.html](https://www.subsportplus.eu/subsportplus/EN/Home/Home_node.html))
24. The Toxics Use Reduction Institute (TURI) List  
([https://www.turi.org/TURI\\_Publications](https://www.turi.org/TURI_Publications))
25. U.S. Environmental Protection Agency. (2020). User’s Guide for T.E.S.T. (Toxicity Estimation Software Tool) Version 5.1. Retrieved from  
<https://www.epa.gov/chemical-research/toxicity-estimation-software-tool-test>



## 附件一覽表

| 資料夾名稱   | 附件標號  | 附件名稱              | 頁碼      |
|---------|-------|-------------------|---------|
| 計畫基本摘要  | 附件一   | 期中報告基本摘要          | 附件 1-1  |
| 工作進度報告  | 附件二   | 第 1 次進度報告會議紀錄     | 附件 2-1  |
|         | 附件三   | 第 1 次進度報告會議回應對照表  | 附件 3-1  |
| 專家諮詢會議  | 附件四   | 第 1 次專家諮詢會會議紀錄    | 附件 4-1  |
|         | 附件五   | 第 1 次專家諮詢會會議回應對照表 | 附件 5-1  |
| 啟動及審查會議 | 附件六   | 啟動會議紀錄            | 附件 6-1  |
|         | 附件七   | 啟動會議回應對照表         | 附件 7-1  |
|         | 附件八   | 期中審查會議紀錄          | 附件 8-1  |
|         | 附件九   | 期中審查會議回應對照表       | 附件 9-1  |
|         | 附件十   | 成果報告審查驗收會議紀錄      | 附件 10-1 |
|         | 附件十一  | 成果報告審查驗收回應對照表     | 附件 11-1 |
| 教育訓練    | 附件十二  | 教育訓練規劃書           | 附件 12-1 |
|         | 附件十三  | 教育訓練回饋單           | 附件 13-1 |
|         | 附件十四  | 教育訓練講義            | 附件 14-1 |
|         | 附件十五  | 教育訓練簽到表           | 附件 15-1 |
| 科普文章    | 附件十六  | 科普文章一             | 附件 16-1 |
|         | 附件十七  | 科普文章二             | 附件 17-1 |
|         | 附件十八  | 科普文章審查意見          | 附件 18-1 |
| 資訊報告    | 附件十九  | 資訊報告              | 附件 19-1 |
| 資訊會議    | 附件二十  | 資訊工作會議紀錄          | 附件 20-1 |
|         | 附件二十一 | 資訊工作會議回覆          | 附件 21-1 |
| 驗收報告    | 附件二十二 | 驗收 20 項化學物結果報告    | 附件 22-1 |



## 附件一期中報告基本摘要

## 期中報告

## 一、基本摘要內容：

計畫名稱：化學物質綠色替代診斷模組建置及決策支援計畫(1/4)

案 號：112DA023

主管機關：環境部化學物質管理署 執行單位：國立臺灣大學

計畫主持人：曾\* \* 聯絡人：郭\* \*

聯絡電話：02-33664\*\*\* #4\*\* 傳真號碼：

期 程：112 年 7 月 12 日起至 112 年 11 月 20 日止

經 費：(全程)： 3,970 千元 (年度)： 3,970 千元

執行情形：半年報

1.執行進度:預定(%) 實際(%) 比較(%)

年度 50 50 100

總進度 50 50 100

2.經費支用:預定(千元) 實際(千元) 支用比率(%)

年度經費 3,970 442 11

總經費 3,970 442 11

3.主要執行內容:(每行 28 字，2000 字以內)

建立 SAS 作業流程建立安全替代化學物質資料庫，蒐集整合我國列管化學物質進行安全替代定位及建立資料庫並優化資料庫。基於模組系統架構進行優化，功能包含診斷化學物質危害，建立安全替代建議清單，以利源頭管理化學物質。彙整國際化學品資料庫與整合化學物資訊，取得化學結構與特性資訊，團隊透過程式語言蒐集國際化學品資料庫或高關注監管化學物質清單，包含美國 NIH PubChem，美國 EPA CompTox，歐盟化學總署 ECHA，全氟/多氟烷基聚烯烴資料庫與清單，將資訊整合至工作資料庫共約 18 萬個化學物質。此外，計畫也將關注全氟及多氟烷基物質(PFAS)資料庫納入，包含三個資料庫或清單，如下表所示：

表.全氟/多氟烷基物質

| 資料庫名稱                                                                                       | 維護機構                      | 數量    |
|---------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------|-------|
| 綜合性全球全氟及多氟烷基物質資料庫<br>(Comprehensive Global Database of PFASs)                               | 經濟合作暨發展組織<br>(OECD)       | 4730  |
| 全氟及多氟烷基物質總清單<br>(PFAS Master List of PFAS Substances)                                       | 美國國家環保署<br>(US EPA)       | 12034 |
| 可能含有全氟及多氟烷基物質的可疑清單<br>(Suspect List of Possible Per- and Polyfluoroalkyl Substances (PFAS)) | 美國國家標準暨技術研究院<br>(US NIST) | 4969  |

團隊計畫根據規劃進程進行 SAS 診斷模組系統優化作業：包含替代評估運算邏輯更新、擴充安全替代化學物質資料庫、關聯資料庫，以及強化毒理資料不足之補足，使 SAS 診斷模組系統更加完善。

安全替代評估邏輯部分，團隊已研讀 TURI P2OASys、US EPA PARIS III、國際間安全替代原則如 OECD 與 US EPA，目前著手撰寫程式加入 SAS 系統中，後續可透過新增之安全替代評估邏輯增列可選用之安全替代品。擴充 20 項化學品清單部分，團隊已完成適用範圍、清單所屬產業別資訊、規範性質，目前進行資料爬蟲撰寫。強化毒理資料不足之處，團隊開始進行透過 ToxAlert 資料庫建構子結構警示模組、利用計算結構相似性以建構相似度警示模組、透過 OECD QSAR Toolbox 建構交叉參照模組、透過 US EPA TEST 與 US EPA CompTox 資料庫建構分類模型模組。視覺化與報告部分目前著手建構多種視覺化呈現。

- 4.計畫變更說明: 目前計畫並無變更。
- 5.落後原因分析: 目前進度順利。
- 6.解決辦法:(若無法自行解決，請求協助事項)
- 7.主管機關管考建議:

## 二、主管機關要求之內容

註：一千萬元以下計畫期中僅需繳交「基本摘要」

## 化學物質綠色替代診斷模組建置及決策支援計畫(1/4)

### 第 1 次進度報告會議紀錄

壹、時間：112 年 7 月 20 日（星期四）上午 9 時 50 分

貳、地點：視訊會議（meet.google.com/rhv-ypxa-vvw）

參、主席：劉＊＊組長 記錄：蕭＊＊

肆、出席（列）單位及人員：如附件（簽到表）

伍、主席致詞：（略）

陸、計畫執行單位簡報：（略）

柒、綜合討論及審查意見：

#### 一、評估管理組

建議於專家諮詢會議中討論目前高風險化學物質之安全替代化學物質搜尋、評估及篩選(Searching, assessment, and screening system for safer alternative chemicals, SAS)診斷模組功能項目是否充足，以及建議優化之工項順序。

#### 二、蕭＊＊高級環境技術師

1. 專家諮詢會議中請納入和業界討論 SAS 診斷模組後續視覺化分析、報表類型、呈現及閱讀方式之相關議題。
2. 請持續依進度辦理相關工作。

#### 三、劉＊＊組長

1. 有關邀請產業及專家試操作蒐集回饋意見部分，請納入邀請化學相關學會與學界試用操作系統，作為系統優化參考。邀請學界試用及蒐集回饋意見部分可由學校系所發送，如有其他單位邀請需求也可由本局協助。
2. 針對模組未來適用需求設計回饋意見調查內容及範疇文件，請先提供本局確認，以確實瞭解業界與學界需求及想法。

捌、臨時動議：無

玖、結論：

- 一、計畫已依按照甘特圖及契約執行，本計畫第 1 次工作進度報告符合計畫契約要求進度，原則通過。

二、專家諮詢會議請納入討論預計擴充功能、執行優先順序、視覺化呈現議題。蒐集回饋意見請考慮以雲端問卷方式進行，內容及範疇請先提供本局確認同意，回饋意見對於系統改良與參加相關競賽會是重點參考項目。

三、請參照綜合討論及結論辦理後續相關工作。

壹拾、散會：上午 10 時 35 分。

簽到表

| 單位            | 職稱      | 姓名  |
|---------------|---------|-----|
| 執行團隊－曾**教授實驗室 | 教授      | 曾** |
|               | 博士後研究員  | 郭** |
|               | 博士候選人   | 王** |
| 環境部化學物質管理署    | 高級環境技術師 | 蕭** |
|               | 高級環境技術師 | 陳** |
|               | 組長      | 劉** |



第一次進度報告會議回應對照表

| 化學署                                                                                                                                                                                                                |                                                                                                                                                                        |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 意見                                                                                                                                                                                                                 | 回覆                                                                                                                                                                     |
| 建議於專家諮詢會議中討論目前高風險化學物質之安全替代化學物質搜尋、評估及篩選(Searching, assessment, and screening system for safer alternative chemicals, SAS) 診斷模組功能項目是否充足，以及建議優化之工項順序。                                                                 | 專家諮詢會議會跟專家討論目前功能是否充足，以及工項優先順序。                                                                                                                                         |
| <ol style="list-style-type: none"> <li>1. 專家諮詢會議中請納入和業界討論 SAS 診斷模組後續視覺化分析、報表類型、呈現及閱讀方式之相關議題。</li> <li>2. 請持續依進度辦理相關工作。</li> </ol>                                                                                  | 專家諮詢會議會跟專家討論報表呈現方式以及優化作業之優先順序。                                                                                                                                         |
| <ol style="list-style-type: none"> <li>1. 有關邀請產業及專家試操作蒐集回饋意見部分，請納入邀請化學相關學會與學界試用操作系統，作為系統優化參考。邀請學界試用及蒐集回饋意見部分可由學校系所發送，如有其他單位邀請需求也可由本局協助。</li> <li>2. 針對模組未來適用需求設計回饋意見調查內容及範疇文件，請先提供本局確認，以確實瞭解業界與學界需求及想法。</li> </ol> | <ol style="list-style-type: none"> <li>1. 學界方面，會先以台大聯盟的學校例如師大以及台科大進行詢問以及推廣。問卷方面則由我們設計表單請他們進入系統填寫回饋意見。</li> <li>2. 可以透過教育訓練以及計畫期間會議討論瞭解化學署之需求，紀錄為下一期之計畫規劃重點。</li> </ol> |



## 化學物質綠色替代診斷模組建置及決策支援計畫(1/4)

### 第一次專家諮詢會議會議紀錄

- 一、時間：112 年 7 月 24 日 ( 星期一 ) 上午 10 時 00 分
- 二、地點：視訊會議 ( [meet.google.com/efn-dwkg-yim](https://meet.google.com/efn-dwkg-yim) )
- 三、主席：曾\*\*教授 記錄：郭\*\*
- 四、出席 ( 列 ) 單位及人員：如附件 ( 簽到表 )  
專家：張\*\*教授、華\*\*教授、陳\*\*經理、吳\*\*教授、林\*\*分析師、朱\*\*毒理專家、吳\*\*科長  
化學署：劉\*\*組長、董\*\*簡任技正、林\*\*科長、蕭\*\*高級環境技術師  
國立臺灣大學：曾\*\*、郭\*\*、王\*\*
- 五、主席致詞：( 略 )
- 六、計畫執行單位簡報：( 略 )
- 七、綜合討論及審查意見：

#### (一) 劉\*\*組長

- 1. 提供業界資訊，讓業者使用查詢資料。
- 2. 會不會有業者說我們是依據化學署/化學署資料，可能後續要考量這樣的情形發生，這是個反向的例子。
- 3. 此系統為沒有法規上的強制性，我們免費提供最好的材料，讓業者使用。
- 4. 有一個綠色化學創新獎，鼓勵業者使用系統並申請。
- 5. 業務結合的部分可以再研議討論。

#### (二) 張\*\*教授

本人的專長在資料庫與人工智慧等資訊技術方面，故就這一部份提供意見。

- 1. 資訊系統的開發，以達成客戶需求為目標，所以在確認客戶端真正需求之後，才能去討論資訊技術的問題。針對資訊專案的規劃，可有 UI 實例與捷徑去減少點擊長度，思考壓力測試與等待時間等 UX 指標。

2. 資料庫方面，前期已在需求上的資料結構、查詢效能與資安問題提供意見，可延續參考。本期主要工作有『擴充安全替代化學物質資料庫、關聯資料庫』。『關聯資料庫』一詞在資訊技術上是專有名詞，僅提供思考。要『擴充』資料庫，要處理資料 missing，就會有些技術問題要小心，可先小心掌握清楚。

(三) 華\*\*教授

1. 目前使用人次使用程度
2. 辦理 workshop，希望有多少 feedback。目前是五份
3. 綠色化學對業者吸引力有多大，是否在登錄化學物質時
4. 國內化學署內替代測試也不是所有 OECD assay 都能使用
5. 視覺化的部分：可以提供多種，讓使用者選，如果視覺化，sunburst 可以連結就更好

(四) 陳\*\*經理

1. 系統架構清楚，目前看安全替代品資料不充足，挑選上有困難。若要選擇安全替代物首要選擇需符合綠色 12 道原則，假設 80%物性化性類似，但可能特定幾項特性不一樣就不能用，根據不同應用面，會影響可行性與不可行性，能夠持續更新是好事。安全替代的資料庫，UX 再加強會更實用。
2. 安全替代物之味道（實際例子如紡織）、顏色、黏性與 boiling point 等等物化特性其實會影響到產業之應用面以及可行性，也是提供業者的重要考量，之後可以呈現提供參考。

(五) 吳\*\*教授

1. 想法作法非常好，這樣幫助業者很棒，持續擴充。
2. 廠商自行整理報告比較好
3. 先進國家使用的方法，對於使用系統上是比較沒有問題的。
4. 註明不確定性
5. 風險等級：廠商還是要自己衡量，如果使用量高有可能危害會更高（我們可以加註警語）

(六) 林\*\*分析師

1. 杜邦有詳細系統與一個 CAtool (基礎版本)，PSRtool。

2. 目前是健康與物理危害，清單的參考依據，output 一頁的 excel。
3. 業者會把資料當參考，會當成政府提供資訊或判斷標準，會不會跟其他的法規做連結。
4. 進出口限用清單對業者很有幫助，可以依據不同國家分類提供業者選擇以及表單下載呈現。

(七) 朱\*\*毒理專家

1. 關於預測模型的選擇，是否基於特定的模型，能否公開這部分資訊方便行業進行評估？
2. 模型預測的結果是否可以下載詳細的預測報告以使用人評估或其他用途。

(八) 吳\*\*科長

1. 系統適用性：目前系統資料庫已有 18 萬筆資料，請確認是否均已涵蓋目前國內使用之既有化學物質(約 11 萬種)及新化學物質(三千多種)。如未涵蓋請補足，使系統可先完全試用於我國產業。
2. 系統擴充性：目前化學物質登錄已有許多毒理資料並經專家審查確認，建議納入系統使用，對系統優化應有助益。
3. 優化進程規劃：目前準備新增 21 個資料庫清單相當可取；為使系統更優化，建議先盤整目前使用之關聯資料庫，考量其廣度及豐富度，並規劃未來系統可更優化須擴增使用之資料庫，甚至包括須付費之資料庫，規劃其期程及每年維護資料庫使用所需之費用。
4. 評估報表可讀性：
  - (1) 評估內容：建議包括結果產出之相關評估過程，讓使用者瞭解，例如危害評估之資料來源、是否使用 QSAR 或其他模式或工具(TEST)模擬、相關之判斷基準(criteria)等；安全替代物如何評估、評估邏輯、功能適用性及資料來源等；以及該結果應用之可靠性及可能之風險警告等。
  - (2) 匯出格式：建議至少區分為簡要版及詳細版，符合相關經濟體之需求，並經業界及學者試用蒐集回饋意見後修正。
  - (3) 對於 QSAR 或模式無法預測之毒理資料：如何訂定其適用基準及如何加強補足其可信度，建議於報表中強化說明。

八、 決議事項：

1. SAS 系統整合許多系統，於業界與綠色化學推廣面上有許多正向意見，期望執行計畫持續優化系統。
2. 期望未來 SAS 系統優化可做為決策系統提供監管化學物質使用。
3. 需留意不同資料來源與 QSAR 資料整合與視覺化呈現

九、 主席結論：

1. 此計畫將考量眾多專家學者建議進行優化系統。
2. 期望此系統能提供整合性資訊，以供署內監管化學品與業界學界使用，以推廣綠色化學。

十、 散會：上午 11 時 45 分。

十一、附件、簽到表

| 單 位                | 職 稱      | 姓 名   |
|--------------------|----------|-------|
| 國立臺灣大學工程科學與海洋工程研究所 | 教授       | 張 * * |
| 國立臺灣大學醫學院毒理學研究所    | 教授       | 華 * * |
| 默克                 | 產品經理     | 陳 * * |
| 國立臺灣大學食安所          | 教授       | 吳 * * |
| 臺灣杜邦股份有限公司         | 分析師      | 林 * * |
|                    | 亞太分區毒理專家 | 朱 * * |
| 環境部化學署（退休）         | 科長（退休）   | 吳 * * |
| 環境部化學署             | 組長       | 劉 * * |
|                    | 簡任技正     | 董 * * |

| 單 位    | 職 稱       | 姓 名   |
|--------|-----------|-------|
|        | 科長        | 林 * * |
|        | 特約高級環境技術師 | 蕭 * * |
| 國立臺灣大學 | 教授        | 曾 * * |
|        | 博士後研究員    | 郭 * * |
|        | 博士候選人     | 王 * * |





第一次專家會議回應對照表

| 意見                                                                                                                                                                                                                                                                                               | 回覆                                                                 |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------|
| <p>劉**組長</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. 提供業界資訊，讓業者使用查詢資料。</li> <li>2. 會不會有業者說我們是依據化學署/化學署資料，可能後續要考量這樣的情形發生，這是個反向的例子。</li> <li>3. 此系統為沒有法規上的強制性，我們免費提供最好的材料，讓業者使用。</li> <li>4. 有一個綠色化學創新獎，鼓勵業者使用系統並申請。</li> <li>5. 業務結合的部分可以再研議討論。</li> </ol>                                      | <p>團隊會遵照署內建議執行計畫</p>                                               |
| <p>張**教授</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. 資訊系統的開發，以達成客戶需求為目標，所以在確認客戶端真正需求之後，才能去討論資訊技術的問題。客戶與剛需都已在討論議題，很好！針對資訊專案的規劃，可有 UI 實例與捷徑去減少點擊長度，思考壓力測試與等待時間等 UX 指標。</li> <li>2. 資料庫方面，前期已在需求上的資料結構、查詢效能與資安問題提供意見，可延續參考。本期主要工作有『擴充安全替代化學物質資料庫、關聯資料庫』。『關聯資料庫』一詞在資訊技術上是專有名詞，僅提供思考。要『擴</li> </ol> | <p>謝謝委員建議，團隊會思考 UI/UX 改良之處提升使用體驗，資料庫方面，團隊會留意 missing value 問題。</p> |

| 意見                                                                                                                                                                                                                                                                                                           | 回覆                                                                                                    |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 充』資料庫，要處理資料 missing，就會有些技術問題要小心，可先小心掌握清楚。                                                                                                                                                                                                                                                                    |                                                                                                       |
| <p>華＊＊教授</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. 目前使用人次使用程度</li> <li>2. 辦理 workshop，希望有多少 feedback。目前是五份</li> <li>3. 綠色化學 對業者吸引力有多大，是否在登錄化學物質時</li> <li>4. 國內化學署內替代測試也不是所有 OECD assay 都能使用</li> <li>5. 視覺化的部分：可以提供多種，讓使用者選，如果視覺化，sunburst 可以連結就更好</li> </ol>                                           | <p>謝謝建議，現階段會按照計畫騎乘先以五份回饋問卷，未來再行擴大調查，團隊會配合業務執行。</p> <p>視覺化部分會依照委員意見提供多種，sunburst chart 部分會盡可能提供連結。</p> |
| <p>陳＊＊經理</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. 系統架構清楚，目前看安全替代物資料不充足，挑選上有困難。若要選擇安全替代物首要選擇需符合綠色 12 道原則，假設 80% 物性化性類似，但可能特定幾項特性不一樣就不能用，根據不同應用面，會影響可行性與不可行性，能夠持續更新是好事。安全替代的資料庫，UX 再加強會更實用。</li> <li>2. 安全替代物之味道（實際例子如紡織）、顏色、黏性與 boiling point 等等物化特性其實會影響到產業之應用面以及可行性，也是提供業者的重要考量，之後可以呈現提供參考。</li> </ol> | <p>謝謝委員建議，後續團隊會持續增加安全替代物原則，可研擬多加入數種特性作為安全替代物參考使用。UIUX 部分團隊會持續加強</p>                                   |

| 意見                                                                                                                                                                                                                                                                    | 回覆                                                                       |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------|
| <p>吳**教授</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. 想法作法非常好，這樣幫助業者很棒，持續擴充。</li> <li>2. 廠商自行整理報告比較好</li> <li>3. 先進國家使用的方法，對於使用系統上是比較沒有問題的。</li> <li>4. 註明不確定性</li> <li>5. 風險等級：廠商還是要自己衡量，如果使用量高有可能危害會更高 (我們可以加註警語)</li> </ol>                                       | <p>謝謝委員建議，團隊會按照建議加註不確定性與警語，讓使用者能瞭解還是需要自行衡量。</p>                          |
| <p>林**分析師</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. 杜邦有詳細系統與一個 CA<sub>t</sub> (基礎版本)，PSRtool。</li> <li>2. 目前是健康與物理危害，清單的參考依據，output 一頁的 excel。</li> <li>3. 業者會把資料當參考，會當成政府提供資訊或判斷標準，會不會跟其他的法規做連結。</li> <li>4. 進出口限用清單對業者很有幫助，可以依據不同國家分類提供業者選擇以及表單下載呈現。</li> </ol> | <p>謝謝委員提供 CA<sub>t</sub> 與 PSRtool 作為參考資料，我們會參考開發系統。</p>                 |
| <p>朱**毒理專家</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. 關於預測模型的選擇，是否基於特定的模型，能否公開這部分資訊方便行業進行評估？</li> <li>2. 模型預測的結果是否可以下載詳細的預測報告以使用人評估或其</li> </ol>                                                                                                                   | <p>謝謝委員建議，預測模型部分會依照 OECD 原則公開訓練資料夾、危害終點、演算法等資訊提供評估使用。亦於其他診斷模組提供詳細資訊。</p> |

| 意見                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     | 回覆                                                                                                        |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 他用途。                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |                                                                                                           |
| <p>吳**科長</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. 系統適用性：目前系統資料庫已有 18 萬筆資料，請確認是否均已涵蓋目前國內使用之既有化學物質(約 11 萬種)及新化學物質(三千多種)。如未涵蓋請補足，使系統可先完全適用於我國產業。</li> <li>2. 系統擴充性：目前化學物質登錄已有許多毒理資料並經專家審查確認，建議納入系統使用，對系統優化應有助益。</li> <li>3. 優化進程規劃：目前準備新增 21 個資料庫清單相當可取；為使系統更優化，建議先盤整目前使用之關聯資料庫，考量其廣度及豐富度，並規劃未來系統可更優化須擴增使用之資料庫，甚至包括須付費之資料庫，規劃其期程及每年維護資料庫使用所需之費用。</li> <li>4. 評估報表可讀性： <ol style="list-style-type: none"> <li>(1) 評估內容：建議包括結果產出之相關評估過程，讓使用者瞭解，例如危害評估之資料來源、是否使用 QSAR 或其他模式或工具 (TEST)模擬、相關之判斷基準 (criteria)等；安全替代物如何評估、評估邏輯、功能適用性及資料來源等；以及該結果應用之可</li> </ol> </li> </ol> | <p>謝謝委員建議，團隊會針對委員意見確認資料涵蓋範圍深度與廣度。報表部分會提供簡要版與詳細資訊版本。預測資料部分，會提供 QSAR 模型建構時訓練資料集屬性，包含適用分子量，與其他條件提供使用者參考。</p> |

| 意見                                                                                                                                                 | 回覆 |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| <p>靠性及可能之風險警告等。</p> <p>(2) 匯出格式：建議至少區分為簡要版及詳細版，符合相關經濟體之需求，並經業界及學者試用蒐集回饋意見後修正。</p> <p>(3) 對於 QSAR 或模式無法預測之毒理資料：如何訂定其適用基準及如何加強補足其可信度，建議於報表中強化說明。</p> |    |



化學物質綠色替代診斷模組建置及決策支援計畫(1/4)

啟動會議會議紀錄

壹、時間：112 年 7 月 12 日（星期三）下午 2 時 00 分

貳、地點：視訊會議（[meet.google.com/xiv-dcaq-etz](https://meet.google.com/xiv-dcaq-etz)）

參、主席：陳\*\*副署長      記錄：蕭\*\*

肆、出席（列）單位及人員：詳如會議簽名單（簽到表）

伍、主席致詞：（略）

陸、計畫執行單位簡報：（略）

柒、決議：

- 一、高風險化學物質之安全替代化學物質搜尋、評估及篩選(Searching, assessment, and screening system for safer alternative chemicals, SAS)診斷模組（下稱 SAS 診斷模組）系統目前已有良好之基礎，應適時規劃公開時間及方式，初步可規劃以科普知識形式或模組系統中之簡易資料或公開，以階段性方式逐步使各界瞭解系統功能。
- 二、於業界而言，應用或研發化學物質替代考量之層面甚廣，因此本計畫之 SAS 診斷模組推廣對象除原先預定之業界外，可考量增加新創產業、學校化學、化工等相關科系，透過其小規模試驗需求由模組獲取相關資料，進而蒐集其使用經驗回饋，進行模組優化。
- 三、SAS 診斷模組未來可提供為支援決策系統使用，故蒐集資料時如有國際上決策系統相關資訊應列於報告，供未來相關計畫推行參考。
- 四、化學署自成立以來，在綠色化學推廣於業界反應均相當正向，建議可以 SAS 診斷模組之相關教育訓練建立與產業間互動及交流。化學相關教育推廣部分可考慮請益相關協/學會或邀請教育部共同推廣。
- 五、意見蒐集以及辦理教育訓練建議增加執行本局相關化學物質危害評估等顧問公司，並詢問是否有預期需求的系統資料意見，作為優化模組的參考。
- 六、後續系統可考量擴充相關功能，如有化學緊急事故發生時快速查詢瞭解化學物危害特性等。

七、 本(112)年8月22日環境部及化學物質管理署正式成立，新的組織形象將考量更多執行工作及面向以及跨部會合作，在各業務推動部分均需強大的資訊支持，期望此系統能提供整合性資訊，以供局內監管化學品與業界、學界使用，以推廣綠色化學。

捌、 散會：下午 3 時 30 分。

玖、 附件、簽到表

| 單位            | 職稱      | 姓名  |
|---------------|---------|-----|
| 執行團隊－曾＊＊教授實驗室 | 教授      | 曾＊＊ |
|               | 博士後研究員  | 郭＊＊ |
|               | 博士候選人   | 王＊＊ |
| 環境部化學物質管理署    | 副署長     | 陳＊＊ |
|               | 危害控制組科長 | 林＊＊ |
|               | 科長      | 吳＊＊ |
|               | 高級環境技術師 | 蕭＊＊ |
|               | 高級環境技術師 | 陳＊＊ |
|               | 組長      | 劉＊＊ |



啟動會議回應對照表

| 化學署                                                                                                                                                                                               |                        |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------|
| 意見                                                                                                                                                                                                | 回覆                     |
| 高風險化學物質之安全替代化學物質搜尋、評估及篩選(Searching, assessment, and screening system for safer alternative chemicals, SAS) 診斷模組（下稱 SAS 診斷模組）系統目前已有良好之基礎，應適時規劃公開時間及方式，初步可規劃以科普知識形式或模組系統中之簡易資料或公開，以階段性方式逐步使各界瞭解系統功能 | 團隊全力配合化學署評估後公開平臺方式與時程。 |
| 於業界而言，應用或研發化學物質替代考量之層面甚廣，因此本計畫之 SAS 診斷模組推廣對象除原先預定之業界外，可考量增加新創產業、學校化學、化工等相關科系，透過其小規模試驗需求由模組獲取相關資料，進而蒐集其使用經驗回饋，進行模組優化。                                                                              | 可納入之後延續計畫之工作項目以及目標。    |
| SAS 診斷模組未來可提供為支援決策系統使用，故蒐集資料時如有國際上決策系統相關資訊應列於報告，供未來相關計畫推行參考。                                                                                                                                      | 瞭解驗收條件以及謝謝建議。          |
| 化學署自成立以來，在綠色化學推廣於業界反應均相當正向，建議可以 SAS 診斷模組之相關教育訓練建立與產業間互動及交流。化學相關教育推廣部分可考慮請益相關協/學會或邀請教育部共同推廣                                                                                                        | 團隊會配合執行。               |

| 化學署                                                                                                                  |               |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------|
| 意見                                                                                                                   | 回覆            |
| 意見蒐集以及辦理教育訓練建議增加執行本局相關化學物質危害評估等顧問公司，並詢問是否有預期需求的系統資料意見，作為優化模組的參考。                                                     | 團隊會配合執行。      |
| 後續系統可考量擴充相關功能，如有化學緊急事故發生時快速查詢瞭解化學物危害特性等。                                                                             | 謝謝建議，團隊會配合執行。 |
| 本(112)年 8 月 22 日環境部及化學物質管理署正式成立，新的組織形象將考量更多執行工作及面向以及跨部會合作，在各業務推動部分均需強大的資訊支持，期望此系統能提供整合性資訊，以供局內監管化學品與業界、學界使用，以推廣綠色化學。 | 團隊會配合執行。      |

## 化學物質綠色替代診斷模組建置及決策支援計畫(1/4)

### 期中審查會議紀錄

- 壹、 時間：112 年 9 月 14 日 ( 星期一 ) 上午 10 時 00 分
- 貳、 地點：視訊會議 ( [meet.google.com/vfk-weyd-zca](https://meet.google.com/vfk-weyd-zca) )
- 參、 主席：謝 \* \* 署長 記錄：蕭 \* \*
- 肆、 出席 ( 列 ) 單位及人員：如附件 ( 簽到表 )
- 伍、 主席致詞：( 略 )
- 陸、 計畫執行單位簡報：( 略 )
- 柒、 綜合討論及審查意見：

#### 一、林委員 \* \*

期中報告的紙本內容著重於計畫內容的描述，主持人口頭報告的進度應更詳細地納入期中報告，例如優化作業的擴增 20 件清單已完成多少 %，目前只是在第四章結論以一個段落簡單敘述目前的進度，顯得不足，或許另增一個章節描述進度，在摘要也可敘述目前進度。

#### 二、張委員 \* \*

(一) 第 5、7 頁進行高風險化學物質之安全替代化學物質搜尋、評估及篩選(Searching, assessment, and screening system for safer alternative chemicals, SAS)診斷模組系統優化作業預 112 年 9 月之進度補充說明。

(二) 附件 1-1 經費支用比率(%)為 11%?請補充說明。

(三) 排版左右對稱，如第 50、44 頁，第 52 頁缺項(4)。

- (四) 計畫各項目標皆有描述達成，前次在系統 UI/UX，資安... 開發注意事項亦有考量，惟建議持續系統紀錄分析，因應系統使用上的行為變化。
- (五) 視覺化(Visualization)與積木式設計(RPA)可以再多瞭解在 領域應用上（一般工具是否適用）要注意事項。
- (六) 「相似」與「分類」的準確性與可用性須小心，但這是 領域知識為重，光是資訊無法建言，只是提醒。

### 三、曾委員\*\*

- (一) 本計畫期中報告進度查核點都符合進度，台大團隊的專業對計畫很有助益。
- (二) 本計畫模組(SAS)已具初稿，建議注意
1. 資訊的正確性
  2. 業界、學界實用性
  3. 操作的方便性
- (三) 建議台大團隊對本計畫的構思是建立一個臺灣化學可以長久運作的資料庫，以此擴充修正與維護
- (四) 補充說明第 5 頁人工智能 AI 化學物質危害分 ( AI 的用途 )。
- (五) 建議可以加入臺灣比較常用的化學品，臺灣廠商在化學品的毒理資料、生態毒理資料欠缺 ( 第 24、25 頁 QSAR OECD )，新化學

品的定性、物化性是比較欠缺實例的（這點在 SAS 資料庫有可幫忙的嗎？）。

(六) 第 26-32 頁的關聯資料庫的名單是很好的整理，可應用到本資料庫嗎？

(七) 建立臺灣化學資料庫，「先求有，再求好」。

#### 四、張委員\*\*（書面意見）

(一) 期中各項進度已適切掌握

(二) 針對期中報告書之內容，以下建議請於後續執行時予以精進

1. 請加強圖、表與正文中敘述之編示是連結，在目前版本中仍有不少疏漏。
2. 2.4 節「國際化學品資料庫介紹」之內文，敘述稍嫌零亂，建議可在適度分段與編修
3. 第 41 頁，標題「3.2.2 毒理資料不足以...」應訂正為「3.2.3...」並請於目錄同步更新。
4. 承上，第 3.2.3 節為本報告的重要產出，再請加強段落間之連貫性與可讀性。
5. 第三章可更明確說明後續須完成之工作項目與預計做法。

#### 五、吳委員\*\*（請假）

#### 六、李委員\*\*

- (一) 報告之「編印」，請留意委託機關之全稱，並建議避免將報告定位為由委託單位「編印」。另外，期中報告似可省略「相關人員學經歷」，計畫經費若欲提列，亦請留意數值之正確。
- (二) 請區隔比較「安全替代」、「綠色替代」及「綠色化學替代」之異同，英文用詞亦請一併檢核修正。
- (三) 建議比較說明 SAS System 及診斷模組系統之異同，是否 SAS 為操作程序？而診斷模組系統是計畫預期之產出？
- (四) 報告之參考文獻、圖表來源建議均再行檢核標註之完整性，以利閱讀者進一步之參照檢索，例如第 20 頁所列之 (Green Screen, 2013)及(Clean Production Action, 2021)便不易查詢。
- (五) 建議於期中報告之進度檢核表 (第 5-6 頁) 增列報告對應章節，並於報告最後說明後續計畫執行重點。
- (六) 請補充說明「110-111 年已完成之 SAS 診斷模組」之建置情形。

## 七、吳委員\*\*

本計畫雖是 4 年期計畫的第 1 年(1/4)，但實際上已進行 3 第 3 年，臺大團隊已建立堅實基礎，在此表示肯定；但由於今年計畫 7 月才啟動，百尺竿頭，團隊亦積極進行系統優化中。參考意見如下：

- (一) 擴增關聯資料庫：目前系統資料庫已有 18 萬筆資料，今年再新增 20 項危害化學物質清單資料庫，包含目前受國際關注之 PFAS 資

料庫，惟建議敘明擴增前後涵蓋之化學物質屬性、數目範圍變化，例如幾筆 EDCs、POPs 及 PFAS 或總共幾筆。為使關聯資料庫更為完整，請團隊於 期末報告補充說明未來是否需再擴增其他關聯資料庫？甚至包括部分須付費之資料庫？

## (二) SAS 診斷模組系統優化

1. 強化毒理資料不足之補足：依第 4 頁工作流程圖，團隊已將 SAS 系統結合 QSAR、TEST ( 毒性預估軟體 工具 ) 及化學結構診斷模組 ( 子結構警示、相似性警 示、交叉參照及分類模型等 ) 等進行毒理預測，值得肯定，惟建議團隊說明在何條件下須進行預測及目前之工作成果，包括模組預測之準確性、相關驗證情形，以及目前資料庫中需進行預測者有幾筆及其預定完成 之進度。
2. 安全替代：當危害評估達某一等級時，SAS 系統將建議安全替代；國際上也有許多安全替代之網站或資料庫清單可供參考。安全替代是 SAS 系統中重要一環，也是比較複雜的部分，目前團隊正積極新增安全替代 評估邏輯納入 SAS 系統中，因此建議：
  - (i.1) 建立安全替代評估邏輯納入 SAS 系統後，進行國際資料庫擷取並加以排序，以供業者選擇；惟其排序之評估參

數除危害因子外，建議依 4 OECD 之 SAAToolbox (P39~P40)納入成本及生命週期因子，將更為完備，惟如何納入相關評估參數進行安全替代之排序，請團隊說明。

(i.2) 第 23-24 頁國際化學秘書處 ChemSec Marketplace 蒐集業界化學品報告，並區分為 Request、Alternatives 及 Evaluated Alternatives，這是從業界需求、提供安替方案、至嚴格審查後確定可行之安全替代方案，值得學習，建議可酌予納入系統中。

### (三) 報告可讀性

1. 第 IV 頁摘要：因是期中報告摘要，建議敘明報告進度、已進行之重要工作內容、是否符合合約規定及未來工作重點等。
2. 因本計畫係屬延續性計畫，期末報告建議描述系統過去成果，包括關聯資料庫、化學品資料（具毒理資料、未具毒理資料及安全替代資料）之筆數、屬性及模式模擬之準確性等，尤其需與相關系統之準確性驗證，並區隔出今年支持續優化之進展成果，說明今年計畫之貢獻。

## 八、化學物質管理署



(一) 評估管理組

目前化學物質登錄系統所使用資料有些可直接引用，有些屬於有智慧財產權需要付費才能使用，相關資料庫介接與工具提供可與執行本署計畫之顧問公司互相交流，瞭解哪些資料庫與工具是可用或是有疑慮。

(二) 綜合規劃組

1. 業務承辦會與執行團隊再精進報告書撰寫文字邏輯及報告編排，使報告閱覽更加順暢。
2. 本年度計畫執行重點為診斷模組系統建置，相關修訂與敘述說明會再協助審視。
3. 資料取得來源與預測模型需備註資料來源與正確性，尤其針對資料補強之說明。
4. 未來診斷模組應規劃能以套裝方式使用，以便各種不同產業類別使用。
5. 未來收集業者回饋問卷優化 SAS 系統，並可規劃明年以系統參加政府服務獎及明年於亞太經濟合作會議 (APEC) 化學對話會議展示此系統，研提概念文件提案。

九、簡\*\*副署長

- (一) 診斷模組所使用資料之連結需確認是否充足，並請確認導入業者

系統之可能性及對應作法。

(二) 需留意綠色化學與安全替代之診斷模組方法學的部分。

十、謝\*\* 署長

(一) 逐步推廣與加入業界意見與回饋。

(二) SAS 系統整合許多系統，綠色化學執行上有許多正向意見，期望

執行團隊依據未來業者回饋問卷持續優化系統，亦可考慮加入化

學物質登錄業者使用收集回饋。

捌、 主席結論：

1. 本計畫期中審查原則通過。

2. 請執行團隊依據審查委員及業務單位意見進行報告修訂與系統優

化，補充及修正資料請於成果報告說明。

玖、 散會：上午 11 時 45 分。

期中審查會議回應與對照表

| 委員姓名 | 審查意見                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         | 回應說明                                                                                                                                                                                                                                                       |
|------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 林**  | <p>期中報告的紙本內容著重於計畫內容的描述，主持人口頭報告的進度應更詳細地納入期中報告，例如優化作業的擴增 20 件清單已完成多少%，目前只是在第四章結論以一個段落簡單敘述目前的進度，顯得不足，或許另增一個章節描述進度，在摘要也可敘述目前進度。</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              | <p>謝謝委員建議，團隊會再補充報告內文進行修正。</p>                                                                                                                                                                                                                              |
| 張**  | <ol style="list-style-type: none"> <li>1. 第 5、7 頁進行高風險化學物質之安全替代化學物質搜尋、評估及篩選 (Searching, assessment, and screening system for safer alternative chemicals, SAS)診斷模組系統優化作業預 112 年 9 月之進度補充說明。</li> <li>2. 附件 1-1 經費支用比率(%)為 11%?請補充說明</li> <li>3. 排版左右對稱，如第 50、44 頁，第 52 頁缺項(4)。</li> <li>4. 計畫各項目標皆有描述達成，前次在系統 UI/UX，資安... 開發注意事項亦有考量，惟建議持續系統紀錄分析，因應系統使用上的行為變化。</li> <li>5. 視覺化(Visualization)與積木式設計 (RPA)可以再多瞭解在領域應用上 (一般工具是否適用) 要注意事項。</li> <li>6. 「相似」與「分類」的準確性與可用性須小心，但這是領域知識為重，光是資訊無法建言，只是提醒。</li> </ol> | <ol style="list-style-type: none"> <li>1. 書面報告部份會再詳細補充說明，謝謝委員建議。</li> <li>2. 期中審查會議通過後才會再次撥款經費，故目前只支用 11%。</li> <li>3. 謝謝委員提醒。</li> <li>4. 謝謝委員建議，團隊會再持續記錄系統分析。</li> <li>5. 謝謝委員建議 RPA 工具，團隊會再考量業界需求做綜合考量資料輸出呈現結果。</li> <li>6. 謝謝委員提醒，團隊會再多加注意。</li> </ol> |

| 委員姓名 | 審查意見                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          | 回應說明                                                            |
|------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------|
| 曾 ** | <ol style="list-style-type: none"> <li>1. 本計畫期中報告進度查核點都符合進度，臺大團隊的專業對計畫很有助益。</li> <li>2. 本計畫模組(SAS)已具初稿，建議注意 <ol style="list-style-type: none"> <li>(1) 資訊的正確性</li> <li>(2) 業界、學界實用性</li> <li>(3) 操作的方便性</li> </ol> </li> <li>3. 建議臺大團隊對本計畫的構思是建立一個臺灣化學可以長久運作的資料庫，以此擴充修正與維護</li> <li>4. 補充說明第 5 頁人工智能 AI 化學物質危害分 ( AI 的用途 )</li> <li>5. 建議可以加入臺灣比較常用的化學品，臺灣廠商在化學品的毒理資料、生態毒理資料欠缺 ( 第 24、25 頁 QSAR OECD )，新化學品的定性、物化性是比較欠缺實例的 ( 這點在 SAS 資料庫有可幫忙的嗎？ )。</li> <li>6. 第 26-32 頁的關聯資料庫的名單是很好整理，可應用到本資料庫嗎？</li> <li>7. 建立臺灣化學資料庫，「先求有，再求好」。</li> </ol> | <p>謝謝委員的建議與肯定，團隊會再增加書面報告的內容，包括 AI 化學物質危害分級以及加入臺灣比較常用的化學品資料。</p> |
| 張 ** | <ol style="list-style-type: none"> <li>1. 期中各項進度已適切掌握</li> <li>2. 針對期中報告書之內容，以下建議請於後續執行時予以精進 <ol style="list-style-type: none"> <li>(1) 請加強圖、表與正文中敘述之編示連結，在目前版本中仍有不少疏漏。</li> <li>(2) 第 2.4 節「國際化學品資料庫介紹」之內文，敘述稍嫌零亂，建議可在適度分段與編修。</li> </ol> </li> </ol>                                                                                                                                                                                                                                                                                        | <p>謝謝委員建議，將會補充報告內文進行修正。</p>                                     |

| 委員姓名 | 審查意見                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           | 回應說明                          |
|------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------|
|      | <p>(3) 第 41 頁，標題「3.2.2 毒理資料不足以…」應訂正為「3.2.3…」並請於目錄同步更新。(4) 承上，第 3.2.3 節為本報告的重要產出，再請加強段落間之連貫性與可讀性</p> <p>(5)第三章可更明確說明後續須完成之工作項目與預計做法</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |                               |
| 李**  | <ol style="list-style-type: none"> <li>1. 報告之「編印」，請留意委託機關之全稱，並建議避免將報告定位為由委託單位「編印」。另外，期中報告似可省略「相關人員學經歷」，計畫經費若欲提列，亦請留意數值之正確</li> <li>2. 請區隔比較「安全替代」、「綠色替代」及「綠色化學替代」之異同，英文用詞亦請一併檢核修正。</li> <li>3. 建議比較說明 SAS System 及診斷模組系統之異同，是否 SAS 為操作程序？而診斷模組系統是計畫預期之產出？。</li> <li>4. 報告之參考文獻、圖表來源建議均再行檢核標註之完整性，以利閱讀者進一步之參照檢索，例如第 20 頁所列之 (Green Screen, 2013)及(Clean Production Action, 2021)便不易查詢</li> <li>5. 建議於期中報告之進度檢核表 (第 5-6 頁) 增列報告對應章節，並於報告最後說明後續計畫執行重點。</li> <li>6. 請補充說明「110-111 年已完成之 SAS 診斷模組」之建置情形。</li> </ol> | <p>謝謝委員建議，團隊會再補充報告內文進行修正。</p> |

| 委員姓名 | 審查意見                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              | 回應說明                                                                                                                                                                                                                                                      |
|------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 吳**  | <ol style="list-style-type: none"> <li>擴增關聯資料庫：目前系統資料庫已有 18 萬筆資料，今年再新增 20 項危害化學物質清單資料庫，包含目前受國際關注之 PFAS 資料庫，惟建議敘明擴增前後涵蓋之化學物質屬性、數目範圍變化，例如幾筆 EDCs、POPs 及 PFAS 或總共幾筆。為使關聯資料庫更為完整，請團隊於期末報告補充說明未來是否需再擴增其他關聯資料庫？甚至包括部分須付費之資料庫？</li> <li>強化毒理資料不足之補足：依第 4 頁工作流程圖，團隊已將 SAS 系統結合 QSAR、TEST（毒性預估軟體工具）及化學結構診斷模組（子結構警示、相似性警示、交叉參照及分類模型等）等進行毒理預測，值得肯定，惟建議團隊說明在何條件下須進行預測及目前之工作成果，包括模組預測之準確性、相關驗證情形，以及目前資料庫中需進行預測者有幾筆及其預定完成之進度。</li> <li>建立安全替代評估邏輯納入 SAS 系統後，進行國際資料庫擷取並加以排序，以供業者選擇；惟其排序之評估參數除危害因子外，建議依 4 OECD 之 SAAToolbox (P39~P40)納入成本及生命週期因子，將更為完備，惟如何納入相關評估參數進行安全替代之排序，請團隊說明。</li> <li>第 23-24 頁國際化學秘書處 ChemSec Marketplace 蒐集業界化</li> </ol> | <ol style="list-style-type: none"> <li>系統建置後會再補上數值於書面報告中，謝謝委員建議。</li> <li>謝謝委員建議，期末報告會再增列未來預計工作項目。</li> <li>系統建置後會再補上數值於書面報告中，謝謝委員建議。</li> <li>團隊會再詳細說明 EPA PARIS III 所涵蓋內容如生命週期加入系統於書面報告中，謝謝委員建議。</li> <li>團隊會再詳細說明安全替代資料與資料準確度於書面報告中，謝謝委員建議。</li> </ol> |

| 委員姓名  | 審查意見                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         | 回應說明                       |
|-------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------|
|       | <p>學品報告，並區分為 Request、Alternatives 及 Evaluated Alternatives，這是從業界需求、提供安替方案、至嚴格審查後 確定可行之安全替代方案，值得學習，建議可酌 予納入系統中。</p> <p>5. 第 IV 頁摘要：因是期中報告摘要，建議敘明報告進 度、已進行之重要工作內容、是否符合合約規定及未 來工作重點等。</p> <p>6. 因本計畫係屬延續性計畫，期末報告建議描述系統過 去成果，包括關聯資料庫、化學品資料（具毒理資料、未具毒理資料及安全替代資料）之筆數、屬性及模式 模擬之準確性等，尤其需與相關系統之準確性驗證，並區隔出今年支持續優化之進展成果，說明今年計畫 之貢獻。</p> |                            |
| 評估管理組 | <p>目前化學物質登錄系統所使用資料有些可直接引用，有些屬於有智慧財產權需要付費才能使用，相關資料庫介接與工具提供可與執行本署計畫之顧問公司互相交流，瞭解哪些資料庫與工具是可用或是有疑慮。</p>                                                                                                                                                                                                                           | <p>謝謝委員建議，團隊會再與署內討論交流。</p> |

| 委員姓名       | 審查意見                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            | 回應說明                                                   |
|------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------|
| 綜合規劃組      | <ol style="list-style-type: none"> <li>1. 業務承辦會與執行團隊再精進報告書撰寫文字邏輯及報告編排，使報告閱覽更加順暢。</li> <li>2. 本年度計畫執行重點為診斷模組系統建置，相關修訂與敘述說明會再協助審視。</li> <li>3. 資料取得來源與預測模型需備註資料來源與正確性，尤其針對資料補強之說明。</li> <li>4. 未來診斷模組應規劃能以套裝方式使用，以便各種不同產業類別使用。</li> <li>5. 未來收集業者回饋問卷優化 SAS 系統，並可規劃明年以系統參加政府服務獎及明年於亞太經濟合作會議(APEC)化學對話會議展示此系統，研提概念文件提案。</li> </ol> | <p>謝謝委員建議與提醒，團隊會再補充報告內文進行修正。</p>                       |
| 簡副署長<br>** | <ol style="list-style-type: none"> <li>1. 診斷模組所使用資料之連結需確認是否充足，並請確認導入業者系統之可能性及對應作法。</li> <li>2. 需留意綠色化學與安全替代之診斷模組方法學的部分。</li> </ol>                                                                                                                                                                                              | <p>謝謝委員建議，目前規劃系統完成後將與業界進行測試並回收回饋表單，希望能更符合業界需求精進系統。</p> |



| 委員姓名         | 審查意見                                                                                                                                                   | 回應說明                                            |
|--------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------|
| 謝 * * 署<br>長 | <ol style="list-style-type: none"><li>1. 逐步推廣與加入業界意見與回饋。</li><li>2. SAS 系統整合許多系統，綠色化學執行上有許多正向意見，期望執行團隊依據未來業者回饋問卷持續優化系統，亦可考慮加入化學物質登錄業者使用收集回饋。</li></ol> | 謝謝委員建議，目前規劃系統完成後將與業界進行測試並回收回饋表單，希望能更符合業界需求精進系統。 |



成果報告審查驗收會議紀錄

一、時間：112 年 11 月 30 日 ( 星期四 ) 上午 9 時 30 分

二、地點：線上會議 (<https://meet.google.com/yko-wurg-zyy>)

三、主席：陳\*\*副署長 紀錄：蕭\*\*

四、出 ( 列 ) 席單位及人員：( 如簽到單 )

五、主席致詞：( 略 )。

六、承辦單位報告：( 略 )。

七、廠商說明：( 略 )。

八、委員意見：

( 一 ) 林\*\*委員

1. 未來如何更新關聯資料庫內容強化毒理資料不足的功能及有所規劃及說明。
2. 危害終點除 3CMR ( 致癌性 Carcinogenic , 致突變性 mutagenic , 生殖毒性 reprotoxic ) and 6 packs ( 急性毒性測試 , 分別是 3 種暴露途徑：口服毒性 oral toxicity , 吸入毒性 inhalation toxicity , 及皮膚毒性 Dermal toxicity ; 3 種危害：皮膚刺激 skin irritation , 眼睛刺激 eye irritations , 及皮膚敏感 skin sensitization ) 之外 , 還包括呼吸致敏及 2 單次劑量神經毒性 , 其參考的資料筆數是否預測準確性高 , 請再確認。
3. 如何訂出各化學物質的綜合危害終點分數及分級 , 應有更透明化的計算過程及配分 , 讓使用者能判斷資料準確性。

( 二 ) 張\*\*委員

1. 第一個重點在附件 11 之教育訓練回饋。除了一些化學與產業的專業意見 , 各多在資訊系統的使用上 , 正對應專家會議中所提及之 UI/UX ( 使用者介面 User Interface 與使用者體驗 User eXperience ) 問題。在了解使用者之意見須求 ( 如附件 11-5 頁之視覺習慣須求與連結出錯問題 , 附件第 11-10 頁之微軟瀏覽器無法使用 , 附件第

- 11- 15 頁之頁面連續資料頁面不正確，有內部連接網址呈現，附件第 11-25 頁 CAS 80-90-1 與 Bisphenol S 找到的風險分類不一致)，可提供改善之工作追蹤列表，回應逐項之改善。
2. 在移轉與維運之相關手冊內容是否足夠，可再細細討論，問題比較直接的是：缺少系統「安裝」手冊。在使用手冊只有粗略內容，例如相關套件是哪些？
3. 其他建議（口頭表示）。

（三）曾\*\*委員

1. 本計畫為我國建立一個化學物質綠色替代診斷模組，是一個具有創見的資料庫，很值得支持和肯定。受委託單位臺大資工所曾教授團隊曾經協助建立美國環保署化學物質資料庫，又是資訊專長的團隊，執行本計畫是很適當的執行團隊。
2. 本計畫的時間 4 個月相當短，計畫查核點都已經完成，唯一尚未很確定的是：鍵入 12 項化學品測試項目，沒看到，希望鍵入 1、2 項全氟及多氟烷基物質 (Per- and polyfluoroalkyl substances, PFAS) 看看成果如何？查核點科普文章，希望能更簡明易懂的內容。
3. 由於化學產業、研發單位是本計畫成果的應用主要對象，因此本人也於 11 月 13 日教育訓練邀請長春、福盈、中華化學、奇鈦等公司研發主管一起參加試用系統訓練，
- (1) 系統介面的操作方便、搜尋設計很直觀，確實是很優的設計，完成一個臺灣版化學資料庫，成果相當紮實。
- (2) 查詢資料的內容、危害評估的旭日圖表達方式很清楚明白
- (3) 毒性資料等內容由於範圍很廣，我國產業界也都只是參考看到的 SDS 安全資料表(Safety Data Sheet, SDS)資料；部分參考過國外資料庫，很不容易判斷資訊是否充分。
- (4) 國內業者普遍需要製作、修正所用的 SDS 都是參考現有資料做的在生物毒理毒性、環境危害、環境流布等項目較為欠缺，需

要這些資料庫的內容可以參考

- (5) 真正要做到綠色化學品的替代可能也需考慮相當多的因素，例如碳足跡、原料來源
- (6) 建議到南部做廠商訓練
- (7) 第 63 頁建議取代物是 As ( 砷 ) 化合物取代，是否正確？

( 四 ) 張委員 \*\* ( 書面審查意見 )

- 1. 本計畫成果豐碩，值得肯定。
- 2. 目前的期末報告紙本正文，建議可參考附件十七「資訊報告」的內容予以優化，以提升正文的可讀性；並請修 5 正以下疏漏之處：
  - (1) 以下的表、圖，請適切引用於正文內容中，以利讀者理解：表 1、圖 3、圖 7、圖 8、圖 9、圖 11-圖 15，表 6、表 10、圖 20-圖 24。
  - (2) 第 23 頁，倒數第二段「由美國國家環境保護局(US EPA)...」，請將「局」更正為「署」。
  - (3) 第 41 頁，第 10 行，「如表 3」，應更正為「如表 7」。
  - (4) 第 42 頁，最後一行，「如表 7」應更正為「如表 8」。
  - (5) 第 52-53 頁，「(3)SMILES...」、「(4)分子指紋...」及「(5) 專家決策...」應將其項目標號更正為(1)、(2)、(3)。
  - (6) 第 85 頁，參考文獻 26 是否有遺漏或是要刪除。

( 五 ) 吳 \*\* 委員

- 1. 首先肯定化學署執行這個計劃，也肯定執行單位有足夠能力執行這個計劃。
- 2. 因化學品使用範圍和目的很廣，化學物質的本身建立替代，對於不同業者使用不同之化學品有不同之影響，例如苯可當作溶劑也可當作製程之原料，亦可當作食品加工助劑，用溶劑替代的可行性較高，但若應用在其他製程則困難度較高，可能有特殊條件催化劑或專利保護，建議先定義系統之使用範圍。建議取代之化學物限縮在

特定範圍，可以往後再逐漸精進。

3. 未來可規劃優化系統之搜尋功能，提供國際之化學品被取代應用之案例與用途之依據，增加業者使用這個系統的信心。

#### (六) 吳\*\*委員

本年度在有限時間內新增 20 個化學物質清單，化學物質從過去 18 萬種，增至 20 萬種，且已進行 SAS 系統之教育訓練及回饋意見之蒐集，值得肯定。茲提供下列意見供參。

##### 1. SAS 系統

###### (1) 危害評估

- I. 系統顯示，目前之危害項目已高達 123 項，但 GreenScreen 危害評估項目僅 18 項，123 項是如何納入危害評估？請說明。
- II. 目前化學物質危害評估數約 131 萬 6,000，是否為經 SAS 系統評估後資料庫之資料筆數？若依 GreenScreen 評估而言，該數字是否有一趨於完整/飽和之數字？若有，與目前之差距約多少？如何規劃補足？約需多久作業時間？請說明，以供瞭解後需相關時程。
- III. 在補足資料庫毒理/危害評估項目資料方面，目前系統有些還是呈現資料不足現象；SAS 系統設計係應以 QSAR 等模擬資料補足，如何快速補足攸關系統成效，是否可爬取國內外 QSAR 相關資料？或以其他方式克服？請說明。

###### (2) 安全替代

- I. 「依結構相似性」提出之安全替代化學品成果，建議與其他網站系統資訊交叉驗證，並逐步優化，以提升其應用性。
- II. 「依工業用途」：目前似僅將 USEPA Safer Choice 內容納入，後續如何持續建構及優化，請補充說明。

###### (3) 整體系統功能

- I. 增加使用者回饋意見，以利系統改進。
- II. 增加評估報表產製功能，並酌予加入視覺化圖表。
- III. 持續改善介面使用者親和性、頁面清晰度及美化。

(七) 高\*\*委員

1. 各項主要目標均依規定完成，並且達到預期目標，計畫成果豐碩。
2. 本計畫具持續執行之必要性，所建議之短、中、長期工作是否需有具體之期程，此期程是否可有效和國際接軌。
3. 後續可強化 SAS 系統之應用性操作及驗證，並評估如何擴大其在不同產業之應用可行性，例如如何將高碳足跡原料或化學品替代為較綠色之化學品。
4. 由於各項化學物質之清單均來自國外，請說明是否具有自動更新及通知功能，並說明如何進行系統之管理維護。
5. 請說明如何確認資料庫及診斷模組結果之完整性及正確性，功能驗證之代表性亦請說明。

(八) 評估管理組

該系統危害資料的展現方式具直觀性，容易閱讀；但安全替代物質的篩選條件，包括結構式的類似度、用途及國外建議清單等是獨立項目，篩出來物質項目很多，不夠聚焦。建議增加篩選條件有交互關連性。

(九) 綜合規劃組

1. 應考慮生命週期加入安全替代邏輯。
2. 除了結構相似性之外，仍須考量功能用途，目前計畫已經加入用途與案例，後續可以考慮規劃加強化學品用途與案例用以篩選安全替代物。以 PFAS 為例，以短鏈 PFAS 替代依然會有一樣的風險及健康危害，應該考慮由診斷模組提供相同用途，但非同一個化學物家族的安全替代物建議清單。
3. 彙整教育訓練收集業界意見，確認系統是否契合業界需求，以規劃未來模組應用。

九、會議結論：

本案成果報告驗收合格，請國立臺灣大學將審查委員意見建議事項納入成果報告，並於會議紀錄之發文日起 7 日內，檢送驗收合格成果報告函報本署辦理結案事宜。

十、散會：上午 11 時 30 分。



成果報告審查驗收回覆對應表

| 委員姓名  | 審查意見                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | 回應說明                                                                                                                                                                             |
|-------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 林**委員 | <ol style="list-style-type: none"> <li>未來如何更新關聯資料庫內容強化毒理資料不足的功能及有所規劃及說明。</li> <li>危害終點除 3CMR ( 致癌性 Carcinogenic, 致突變性 mutagenic, 生殖毒性 reprotoxic ) and 6 packs ( 急性毒性 測試, 分別是 3 種暴露途徑: 口服毒性 oral toxicity, 吸入毒性 inhalation toxicity, 及皮膚毒性 Dermal toxicity; 3 種危害: 皮膚刺激 skin irritation, 眼睛刺激 eye irritations, 及皮膚敏感 skin sensitization ) 之外, 還包括呼吸致敏及 2 單次劑量神經毒性, 其參考的資料筆數是否預測準確性高, 請再確認。</li> <li>如何訂出各化學物質的綜合危害終點分數及分級, 應有更透明化的計算過程及配分, 讓使用者能判斷資料準確性。</li> </ol> | <ol style="list-style-type: none"> <li>根據國際趨勢與業界廠商需求增加相關之關聯資料庫。</li> <li>謝謝委員的建議, 團隊會再根據單次劑量神經毒性確認預測之準確性。</li> <li>團隊根據 GreenScreen 之計算評分方式給予, 系統上之預測模型計算方式會再加以說明與註記。</li> </ol> |
| 張**委員 | <ol style="list-style-type: none"> <li>第一個重點在附件 11 之教育訓練回饋。除了一些化學與產業的專業意見, 各多在資訊系統的使用上, 正對應專家會議中所提及之 UI/UX ( 使用者介面 User Interface 與使用者體驗 User eXperience ) 問題。在了解使用者之意見須求 ( 如附件</li> </ol>                                                                                                                                                                                                                                                                          | <ol style="list-style-type: none"> <li>謝謝委員建議, 團隊會再根據專家提供之建議建立工作追蹤以利系統之改善。</li> <li>團隊會再補充系統安裝手冊以及相關套件資訊。</li> </ol>                                                             |

| 委員姓名  | 審查意見                                                                                                                                                                                                                                                         | 回應說明                                                                                                                                                                |
|-------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|       | <p>11-5 頁之視覺習慣須求與連結出錯問題，附件第 11-10 頁之微軟瀏覽器無法使用，附件第 11- 15 頁之頁面連續資料頁面不正確，有內部連接網址呈現，附件第 11-25 頁 CAS 80-90-1 與 Bisphenol S 找到的風險分類不一致)，可提供改善之工作追蹤列表，回應逐項之改善。</p> <p>2. 在移轉與維運之相關手冊內容是否足夠，可再細細討論，問題比較直接的是：缺少系統「安裝」手冊。在使用手冊只有粗略內容，例如相關套件是哪些？</p>                   |                                                                                                                                                                     |
| 曾**委員 | <p>1. 本計畫為我國建立一個化學物質綠色替代診斷模組，是一個具有創見的資料庫，很值得支持和肯定。受委託單位臺大資工所曾教授團隊曾經協助建立美國環保署化學物質資料庫，又是資訊專長的團隊，執行本計畫是很適當的執行團隊。</p> <p>2. 本計畫的時間 4 個月相當短，計畫查核點都已經完成，唯一尚未很確定的是：鍵入 12 項化學品測試項目，沒看到，希望鍵入 1、2 項全氟及多氟烷基物質 (Per- and polyfluoroalkyl substances, PFAS)看看成果如何？查核點</p> | <p>1. 12 項評估為上一期計畫之結果，可於系統首頁點選進入搜尋。</p> <p>2. 團隊會再蒐研 MSDS 資料，補充生物毒理毒性、環境危害、環境流布等項目於未來系統中。</p> <p>3. 系統未來可規劃化學品法規增進於系統內。</p> <p>4. 謝謝委員建議，團隊會再根據化學署之規畫進行開放系統之要求。</p> |

| 委員姓名 | 審查意見                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      | 回應說明                                                         |
|------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------|
|      | <p>科普文章，希望能更簡明易懂的內容。</p> <p>3. 由於化學產業、研發單位是本計畫成果的應用主要對象，因此本人也於 11 月 13 日教育訓練邀請長春、福盈、中華化學、奇鈦等公司研發主管一起參加試用系統訓練，</p> <p>(1) 系統介面的操作方便、搜尋設計很直觀，確實是很優的設計，完成一個臺灣版化學資料庫，成果相當紮實。</p> <p>(2) 查詢資料的內容、危害評估的旭日圖表達方式很清楚明白</p> <p>(3) 毒性資料等內容由於範圍很廣，我國產業界也都只是參考看到的 SDS 安全資料表(Safety Data Sheet, SDS)資料；部分參考過國外資料庫，很不容易判斷資訊是否充分。</p> <p>(4) 國內業者普遍需要製作、修正所用的 SDS 都是參考現有資料做的，在生物毒理毒性、環境危害、環境流布等項目較為欠缺，需要這些資料庫的內容可以參考</p> | <p>5. 碳足跡、原料來源將會納為未來計畫之重要替代依據。</p> <p>6. 教育訓練會再與化學署進行規劃。</p> |

| 委員姓名  | 審查意見                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | 回應說明                              |
|-------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------|
|       | <p>(5) 真正要做到綠色化學品的替代可能也需考慮相當多的因素，例如碳足跡、原料來源</p> <p>(6) 建議到南部做廠商訓練</p> <p>(7) 第 63 頁建議取代物是 As (砷) 化合物取代，是否正確？</p>                                                                                                                                                                                                                    |                                   |
| 吳**委員 | <ol style="list-style-type: none"> <li>1. 首先肯定化學署執行這個計劃，也肯定執行單位有足夠能力執行這個計劃。</li> <li>2. 因化學品使用範圍和目的很廣，化學物質的本身建立替代，對於不同業者使用不同之化學品有不同之影響，例如苯可當作溶劑也可當作製程之原料，亦可當作食品加工助劑，用溶劑替代的可行性較高，但若應用在其他製程則困難度較高，可能有特殊條件催化劑或專利保護，建議先定義系統之使用範圍。建議取代之化學物限縮在特定範圍，可以往後再逐漸精進。</li> <li>3. 未來可規劃優化系統之搜尋功能，提供國際之化學品被取代應用之案例與用途之依據，增加業者使用這個系統的信心。</li> </ol> | 未來系統優化可再增加已取代之化學品案例及用途增加業者之信心與使用。 |

| 委員姓名  | 審查意見                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       | 回應說明                                                                                                                                                                                                                                                                                |
|-------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 吳**委員 | <p>本年度在有限時間內新增 20 個化學物質清單，化學物質從過去 18 萬種，增至 20 萬種，且已進行 SAS 系統之教育訓練及回饋意見之蒐集，值得肯定。茲提供下列意見供參。</p> <p>1. SAS 系統</p> <p>(1) 危害評估</p> <p>I. 系統顯示，目前之危害項目已高達 123 項，但 GreenScreen 危害評估項目僅 18 項，123 項是如何納入危害評估？請說明。</p> <p>II. 目前化學物質危害評估數約 131 萬 6,000，是否為經 SAS 系統評估後資料庫之資料筆數？若依 GreenScreen 評估而言，該數字是否有一趨於完整/飽和之數字？若有，與目前之差距約多少？如何規劃補足？約需多久作業時間？請說明，以供瞭解後需相關時程。</p> <p>III. 在補足資料庫毒理/危害評估項目資料方面，目前系統有些還是呈現資料不足現象；SAS 系統設計係應以 QSAR 等模擬資料補足，如何快速補足攸關系統成效，是否可爬取國內</p> | <p>1. 主要是跨多種危害，所以數量很多，有一些清單只寫「水生毒性」，就會對應到急性水生毒性或慢性水生毒性。</p> <p>2. 目前團隊已將 GreenScreen 評估之資料與納入之清單化學物皆彙整於系統中，後續團隊會再增加國際趨勢與更符合夜街需求之資料庫於系統中。</p> <p>3. QSAR 相關計算與補足資訊可以參靠本文 3.2.3 之內容。</p> <p>4. 謝謝委員建議，系統優化部分則會持續增加使用者回饋意見，以利系統改進；持續增加評估報表產製功能，並酌予加入視覺化圖表，另外持續改善介面使用者親和性、頁面清晰度及美化。</p> |

| 委員姓名  | 審查意見                                                                                                                                                                                                                                                                                                  | 回應說明                   |
|-------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------|
|       | <p>外 QSAR 相關資料?或以其他方式克服?請說明。</p> <p>(2) 安全替代</p> <p>I. 「依結構相似性」提出之安全替代化學品成果，建議與其他網站系統資訊交叉驗證，並逐步優化，以提升其應用性。</p> <p>II. 「依工業用途」：目前似僅將 USEPA Safer Choice 內容納入，後續如何持續建構及優化，請補充說明。</p> <p>(3) 整體系統功能</p> <p>I. 增加使用者回饋意見，以利系統改進。</p> <p>II. 增加評估報表產製功能，並酌予加入視覺化圖表。</p> <p>III. 持續改善介面使用者親和性、頁面清晰度及美化。</p> |                        |
| 張**委員 | <p>1. 本計畫成果豐碩，值得肯定。</p> <p>2. 目前的期末報告紙本正文，建議可參考附件十七「資訊報告」的內容予以優化，以提升正文的可讀性；並修正以下疏漏之處</p> <p>(1) 以下的表、圖，請適切引用於正文內容中，以利讀者理解：表 1、圖 3、圖 7、圖 8、圖 9、圖 11-圖 15，表 6、表 10、圖 20-圖 24。</p>                                                                                                                       | <p>謝謝委員建議，報告內文已更正。</p> |

| 委員姓名  | 審查意見                                                                                                                                                                                                                                                                             | 回應說明                                                                                      |
|-------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------|
|       | <p>(2) 第 23 頁，倒數第二段「由美國國家環境保護局(US EPA)...」，請將「局」更正為「署」。</p> <p>(3) 第 41 頁，第 10 行，「如表 3」，應更正為「如表 7」。</p> <p>(4) 第 42 頁，最後一行，「如表 7」應更正為「如表 8」。</p> <p>(5) 第 52-53 頁，<br/>「(3)SMILES...」、「(4)分子指紋...」及「(5) 專家決策...」應將其項目標號更正為(1)、(2)、(3)。</p> <p>(6) 第 85 頁，參考文獻 26 是否有遺漏或是要刪除。</p> |                                                                                           |
| 評估管理組 | 該系統危害資料的展現方式具直觀性，容易閱讀；但安全替代物質的篩選條件，包括結構式的類似度、用途及國外建議清單等是獨立項目，篩出來物質項目很多，不夠聚焦。建議增加篩選條件有交互關連性。                                                                                                                                                                                      | 謝謝建議，團隊會再增加篩選條件之交互關連性。                                                                    |
| 綜合規劃組 | <p>1. 應考慮生命週期加入安全替代邏輯。</p> <p>2. 除了結構相似性之外，仍須考量功能用途，目前計畫已經加入用途與案例，後續可以考慮規劃加強化學品用途與案例用以篩選安全替代物。以 PFAS 為例，以短鏈 PFAS 替代依然會有一樣的風險及健康危害，</p>                                                                                                                                           | <p>1. 謝謝建議，團隊會再考慮生命週期加入安全替代邏輯以及增加強化學品用途與案例用以篩選安全替代物。</p> <p>2. 團隊會再收集業界意見，確認系統契合業界需求。</p> |

| 委員姓名 | 審查意見                                                                                        | 回應說明 |
|------|---------------------------------------------------------------------------------------------|------|
|      | <p>應該考慮由診斷模組提供相同用途，但非同一個化學物家族的安全替代物建議清單。</p> <p>3. 彙整教育訓練收集業界意見，確認系統是否契合業界需求，以規劃未來模組應用。</p> |      |



**國立臺灣大學**  
**「化學物質綠色替代診斷模  
組建置  
及決策支援計畫(1/4)」**  
**「人工智能(AI)化學物質危  
害分級 SAS 診斷模組系  
統」**  
**教育訓練規劃書**

| 文件版本 | 制/修訂日期    | 內容說明 | 製作者 | 審稿人 |
|------|-----------|------|-----|-----|
| 1.0  | 112/10/30 | 初稿   | 王** | 蕭** |

|               |   |
|---------------|---|
| 一、目的 .....    | 1 |
| 二、辦理單位 .....  | 1 |
| 三、辦理時間 .....  | 1 |
| 四、參加對象 .....  | 1 |
| 五、辦理流程 .....  | 2 |
| 六、講師介紹 .....  | 4 |
| 七、聯絡人資訊 ..... | 4 |



## 一、目的

透過實機操作之教育訓練課程，俾利各單位使用者能瞭解本系統之功能及操作，確保系統順利正式上線。

## 二、辦理單位

- (一) 主辦及指導單位：化學物質管理署
- (二) 執行單位：國立臺灣大學

## 三、辦理時間

教育訓練：112 年 11 月 10 日（星期五）與 112 年 11 月 13 日（星期一）

## 四、參加對象

- (一) 毒化物專家學者
- (二) 化學產業之企業廠商
- (三) 化學與資訊相關科系學生

## 五、 辦理流程

### (一) 報名方式

1. 課程通知：發函或電郵通知。
2. 報名方式：採網路線上報名方式。

第一場(11/10): <https://www.cha.gov.tw/sp-event-form-238-707fa-1.html>。

第二場(11/13): <https://www.cha.gov.tw/sp-event-form-239-32c69-1.html>。

3. 報名截止日期：詳教育訓練報名網址。

### (二) 教材準備

1. 依每班報名人數準備所需之實體教材
2. 電子教材：以電子檔型式附在投影片中，使用者可自行下載。

### (三) 課程實施內容

1. 講師以廣播教學系統或單槍投影實例操作示範各項功能。
2. 講師示範講解完畢，協助學員排解操作、系統問題。
3. 每一課程皆提供簽到表。

## (四) 課程安排

## 1. 區域安排

| 區域 | 辦理縣市 | 容納人數 | 辦理場次 |
|----|------|------|------|
| 北區 | 臺北市  | 30 人 | 2 場  |

## 2. 場地位置

| 區域 | 場地名稱   | 教室名稱             | 地址                |
|----|--------|------------------|-------------------|
| 北區 | 國立臺灣大學 | 資訊館(德田館)<br>223A | 臺北市大安區羅 * * 路四段1號 |

## 3. 場次規劃

| 場次   | 時間          | 日期        | 建議參加對象                        | 總時數 | 預估人數 |
|------|-------------|-----------|-------------------------------|-----|------|
| 場次 1 | 14:00-16:00 | 112/11/10 | 毒化物專家學者、<br>廠商與化學資訊相<br>關科系學生 | 2小時 | 30 人 |
| 場次 2 | 14:00-16:00 | 112/11/13 | 毒化物專家學者、<br>廠商與化學資訊相<br>關科系學生 | 2小時 | 30 人 |

## 六、 講師介紹

郭\*\*

| 人員                   |                                                               |        |        |
|----------------------|---------------------------------------------------------------|--------|--------|
| 姓 名                  | 郭**                                                           | 專案職稱   | 博士後研究員 |
| 學 歷                  | 國立臺灣大學/生醫電子與資訊所                                               | 相關年資   | 8年     |
| 個人專長                 |                                                               |        |        |
| 程式語言                 | Perl, PHP, Python, R, Ruby, HTML, JavaScript                  |        |        |
| 作業系統                 | Windows、Linux, Mac                                            |        |        |
| 資料庫                  | MySQL, MariaDB                                                |        |        |
| 硬體平台                 | X86、Linux                                                     |        |        |
| 專業領域                 |                                                               |        |        |
| 機關                   | 專案名稱                                                          | 擔任職務   |        |
| 台大<br>化學署<br>國家環境研究院 | 基因體暨精準醫學研究中心代謝體核心實驗室<br>綠色化學-安全替代整合性政策研究計畫<br>綠色消費化學品毒性預測技術建立 | 博士後研究員 |        |

## 七、 聯絡人資訊

國立臺灣大學 生醫電資所 王\*\*

電話 02-3366\*\*\*\*#4\*\*

cra\*\*\*\*\*@cmdm.csie.ntu.edu.tw