

2026/01/09 (F)

生態毒性に関連したQSARと生態毒性 予測システムKATEの概要・最新動向

国立研究開発法人国立環境研究所

環境リスク・健康領域

環境リスク科学研究推進室

室長 大野 浩一

准特別研究員 伊丹 悠人



免責事項



- 本発表内容は発表者の個人的な見解であり、国立環境研究所及び環境省などの諸機関の考えを示すものではありません。
- COI開示：本発表に関連して開示すべき利益相反関係に該当する項目はありません。

本日の内容

1. 化学物質規制の文脈で行われている生態リスク評価手法の要点
2. 生態毒性QSARと「KATE」について
3. KATEにおける予測手法
4. KATE2025の使用方法
5. KATE2025の予測性能について
6. 生態毒性QSAR予測の最新動向

1. 化学物質規制の文脈で行われている生態リスク評価手法の要点 (生態毒性QSARの説明の前に)

化審法を例として



National
Institute for
Environmental
Studies, Japan

規制の文脈で行われている生態リスク評価の例 (化審法の場合)

- 化審法のもとで行われる生態リスク評価の対象
 - 水生生物 (3生物種: 藻類、ミジンコ、魚類)
 - 底生生物
- 3生物種 (OECD推奨) の慢性毒性の最小値にて評価する
- 慢性毒性が得られない場合は"ACR: Acute-Chronic Ratio"を導入して急性毒性値を変換
- 生態リスクの判定方法
 - PNEC: Predicted No-Effect Concentration 予測無影響濃度 (有害性)
 - PEC: Predicted Environmental Concentration 予測環境中濃度 (曝露)

$$\text{リスク判定基準 } PEC / PNEC \geq 1$$

規制の文脈で行われる生態リスク評価の例 (化審法の場合)

$$PNEC = \text{Min} \{ \text{毒性値(急性、慢性)} \div \text{UFs} \}$$

※UFsは下表に従う

図表 III-7 有害性評価II以降における水生生物に対する
PNECの導出に用いる不確実係数

採用する毒性値	種間外挿のUF	急性から慢性へのUF(ACR)	室内試験から野外へのUF	不確実係数積UFs	
3つの栄養段階の慢性毒性試験結果がある場合の最小のNOEC	—	—	10	10	
2つの栄養段階の慢性毒性試験結果がある場合の小さいほうのNOEC	5	—	10	50	
1つの栄養段階の慢性毒性試験結果がある場合のNOEC	10	—	10	100	
3つの栄養段階の急性毒性L(E)C50がある場合の最小のL(E)C50	—	ACR	10	10×ACR	
慢性毒性試験結果が欠けている栄養段階の急性毒性値が揃わない場合の小さいほうのL(E)C50	10	ACR	10	100×ACR	
ACR	生産者		/	20	/
	一次消費者	アミン類	/	100	/
		アミン類以外	/	10	/
	二次消費者(捕食者)		/	100	/

化審法における優先評価化学物質に関するリスク評価の技術ガイダンス
(第III章 生態影響の有害性評価 Ver.1.0)

<https://www.env.go.jp/chemi/kagaku/h260626.html>



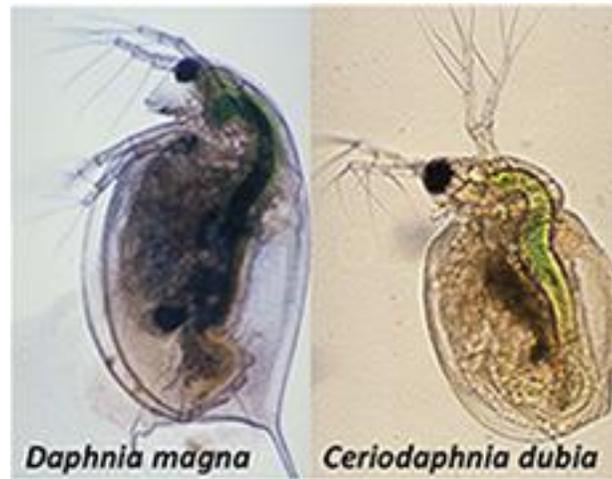
魚類



魚類急性毒性試験
(影響内容: 死亡, LC₅₀)
OECD TG203

魚類初期生活段階試験 (慢性試験) OECD TG210
(影響内容: ふ化、ふ化後生残、成長など, NOEC)

ミジンコ (甲殻類)



ミジンコ急性遊泳阻害試験
(EC₅₀)
OECD TG202

ミジンコ繁殖阻害試験
(慢性試験, NOEC)
OECD TG211

藻類

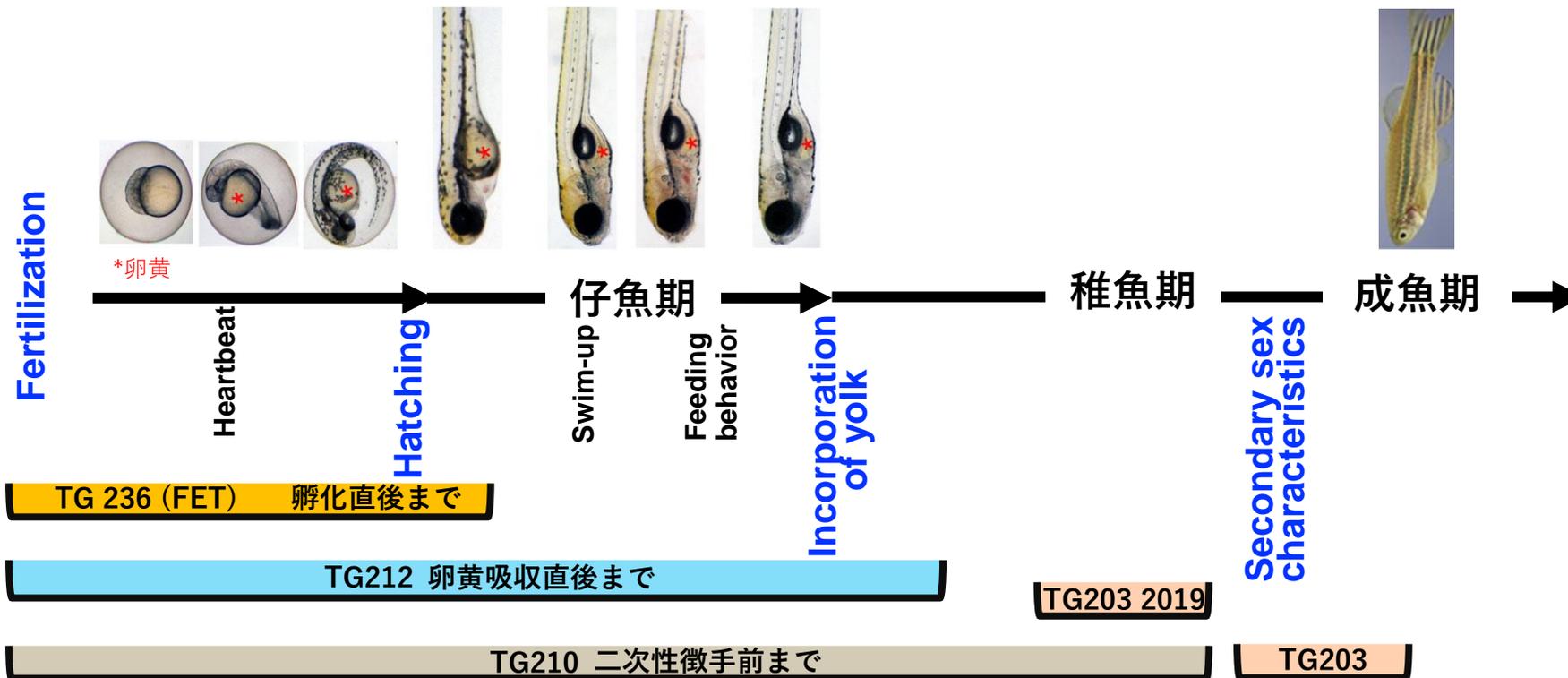


藻類生長阻害試験
(急性: EC₅₀
慢性: NOEC, EC₁₀)

OECD TG201

※TG201では、多くの場合
急性毒性値、慢性毒性値
の両方が得られる

※ OECD: 経済協力開発機構



	TG210	TG203	TG212	TG236(FET)
目的	致死影響（急性毒性）および亜致死影響（慢性毒性）	致死影響（急性毒性）	致死影響（急性毒性）および亜致死影響（亜慢性毒性）	致死影響（急性毒性）
ばく露ステージ	受精直後から二次性徴手前までの約40日間	稚魚期（1-2 cm）4日間	受精直後から孵化後の卵黄吸収直前	受精直後から孵化直後

生態リスク評価における有害性評価（を行う際）の課題

- 3生物群の慢性毒性評価が水生生物生態系の保全になるのか？
- 急性毒性から慢性毒性へのACRの適用は妥当か？ などなど

→これらは基礎科学（純粋科学）と規制科学（レギュラトリーサイエンス）の間のギャップであり、基礎科学研究の発展とともに規制におけるリスク評価手法も発展させていくことが重要

実務的な有害性評価の面における課題

- 3生物群の慢性毒性値が得られることは少ない
- 急性毒性値についても、生産量の多い新規物質については化審法審査時の義務になっているが、既存物質については3生物群のデータがそろわないことも多い。

→これらのデータギャップについて推定する手法 QSARや類推など

（注）現時点では行政上、実測値と同じ信頼性を持たせることはできない。

2. 生態毒性QSARと「KATE」について

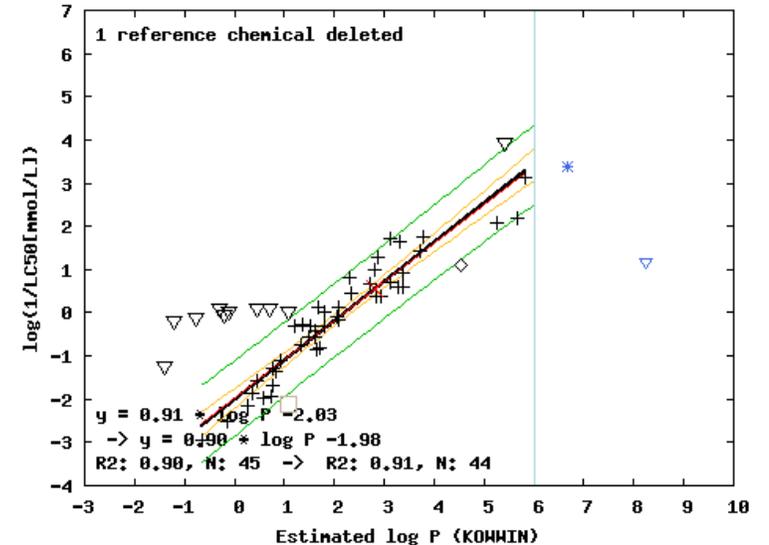


National
Institute for
Environmental
Studies, Japan

QSARとは

QSAR (定量的構造活性相関)
Quantitative Structure-Activity Relationship

- 化学物質の**構造上の特徴**（物理化学的なパラメータを含む）と**生物学的活性**（毒性や薬効など）との間に成り立つ関係のこと
- 定性的な関係の場合： SAR
定量的な関係の場合： QSAR
両者をあわせて(Q)SARと表記する場合があります



生態毒性予測システム「KATE」(ケイト)とは

- KATE (KAshinhou Tool for Ecotoxicology)

環境省の請負業務として、国立研究開発法人 国立環境研究所 環境リスク・健康研究領域において、研究・開発されている生態毒性QSARシステム

- 最新バージョンは KATE2025 version 1.1(2025年8月25日版)

<https://kate.nies.go.jp/>

- KATEを構築している参照物質データは、環境省が実施した生態影響試験*結果（魚類、ミジンコ、藻類）及び米国環境保護庁(USEPA)のファットヘッドミノー・データベースの魚類急性毒性試験結果

* 環境省による試験は、OECDの定めたテストガイドラインに準拠した方法により、環境省の優良試験所基準 (GLP: Good Laboratory Practice)に適合している試験施設において実施されている。

<https://www.env.go.jp/chemi/sesaku/seitai.html>

KATE2025で予測可能な生態毒性の種類

	生物群 急性/慢性	生物種	試験	試験期間	毒性指標
	魚類急性	メダカ (<i>Oryzias latipes</i>) およびファットヘッドミノー (<i>Pimephales promelas</i>)	魚類急性毒性試験 (OECDテストガイドライン203)	96-hr	LC50
	ミジンコ急性	オオミジンコ (<i>Daphnia magna</i>)	ミジンコ遊泳阻害試験 (OECDテストガイドライン202)	48-hr	EC50
	藻類急性	ムレミカヅキモ (<i>Raphidocelis subcapitata</i>)* ²	藻類生長阻害試験 (OECDテストガイドライン201)	72-hr	EC50
	魚類慢性	メダカ (<i>Oryzias latipes</i>)	魚類初期生活段階毒性試験 (OECDテストガイドライン210)	約 40-day* ¹	NOEC
	ミジンコ慢性	オオミジンコ (<i>Daphnia magna</i>)	ミジンコ繁殖試験 (OECDテストガイドライン211)	21-day	NOEC
	藻類慢性	ムレミカヅキモ (<i>Raphidocelis subcapitata</i>)* ²	藻類生長阻害試験 (OECDテストガイドライン201)	72-hr	NOEC

*¹ (魚種やふ化日数によって試験期間が異なります)
メダカの場合の曝露期間 (胚期 約10日 + ふ化後30日 = 約40日)

*² 旧名: *Pseudokirchneriella subcapitata*

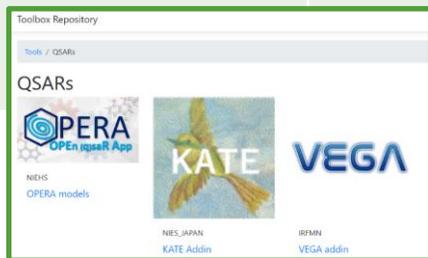
KATE2025ver1.1 で使用されている 生態影響試験結果数 (n) と QSARクラス

生物種 急性/慢性	使用している生態影 響試験結果数 (n)	3条件($R^2 \geq 0.7$, $Q^2 \geq 0.5$, $n \geq 5$)全てを 満たすQSARクラス	条件を満たさない QSARクラス*
魚類急性	1079	51	70
ミジンコ急性	486	28	77
藻類急性	554	11	69
魚類慢性	33	3	7
ミジンコ慢性	384	12	77
藻類慢性	534	16	83

* 条件を満たさないQSARクラスの結果も表示できます (後述)

生態毒性予測に関するQSARソフトの例

名称	開発元	記述子	予測する毒性の種類	その他
KATE	環境省、国立環境研究所環境リスク・健康領域	logP (オクタノール/水分分配係数)	藻類・ミジンコ・魚類の急性毒性と慢性毒性 (2025 ver1.1)	・適用領域の判定：構造、logP(記述子)
ECOSAR	米国環境保護庁 (USEPA)	主にlogP	魚類・甲殻類・藻類 急性毒性 魚類・甲殻類・藻類 慢性毒性(NOECとLOECの幾何平均(ChV))	・適用領域の判定：log P (記述子)
TIMES	ブルガリアブルガス大学	logBCFtox, LUMO等	魚類・甲殻類急性毒性等	・適用領域の判定：構造、記述子 ・有償
(参考) OECD QSAR Toolbox	OECD、EU	任意 (ユーザーが選択)	任意	・適用領域：ユーザーが判断 ・ユーザーがQSAR式を構築することも可能



←KATEをAddinとしてOECD QSAR Toolboxに組み込むこともできます。(後述)

KATE開発の歴史 (KATE2011系列)

1) KATE2011系列 (開発終了)

2008.01 生態毒性予測システム (KATE ver0.1) 試用版利用開始

化学物質の部分構造から 魚類、ミジンコの急性毒性試験における生態毒性を予測

2009.03 スタンドアロン版 KATE on PAS
インターネット版 KATE on NET 公開

2011.03 KATE2011として公開

2016.02 KATE2011 最終更新、開発終了

2024.03 KATE2011 on NET 公開終了
(KATE on PAS は 限定的に配布継続

<https://kate.nies.go.jp/onpas-ja.html>)

KATE開発の歴史 (KATE2017系列)

- **Mar 29, 2018** **KATE2017 on NET β版を公開**
(KATE2011からの大きな変更点)
 - 参照物質データの追加
 - **QSARモデルの大幅な変更**
 - 部分構造検索方式をFITSからSMARTSへの変更
 - **藻類急性・慢性毒性の追加** (藻類生長阻害試験 EC₅₀及びNOEC)
 - **ミジンコ慢性毒性の追加** (ミジンコ繁殖試験 NOEC)
 - **魚類慢性毒性の追加** (魚類初期生活段階毒性試験 NOEC)
 - 限度試験データの導入 (表やグラフに出力され構造判定にも使用)
 - 英語化
- **Jan 30, 2019** **KATE2017 on NET (version1.0)を公開**
(主な変更点) - 複数物質の予測機能追加
- **Feb 3, 2020** **KATE2020 version 1.0を公開**
(主な変更点) - 参照物質の記述子 log P の推定方法をClog P からKOWWIN™に変更
(米国環境保護庁承諾済)
 - **Log P > 6.0** である参照物質は**QSARモデルから除外**
 - QSARモデルに使用されていない物質 (Support Chemicals: log P>6.0の物質データ、不等号付きデータ、外れ値) を参考情報として表示

KATE開発の歴史 (KATE2017系列、つづき)

- Mar 27, 2025 KATE2025 version 1.0を公開

(主な変更点) - **全ての生態影響試験結果を最新のテストガイドラインに基づいて見直し**

- 毒性値の再計算が必要なものは最新のテストガイドラインに基づいて再計算を実施
- 異性体混合物等、一部の参照物質をサポートケミカル (回帰式の構築に使用されない物質) に変更

- トレーニングセットデータの追加
- QSAR モデルの更新
- ユーザーインターフェースの改良

- Aug 25, 2025 KATE2025 version 1.1 (現行版) を公開

(主な変更点) - 軽微な修正など

- March, 2026 KATE2025 version 2.0 を公開予定

詳細は <https://kate.nies.go.jp/> の更新履歴参照

3. KATEにおける予測手法

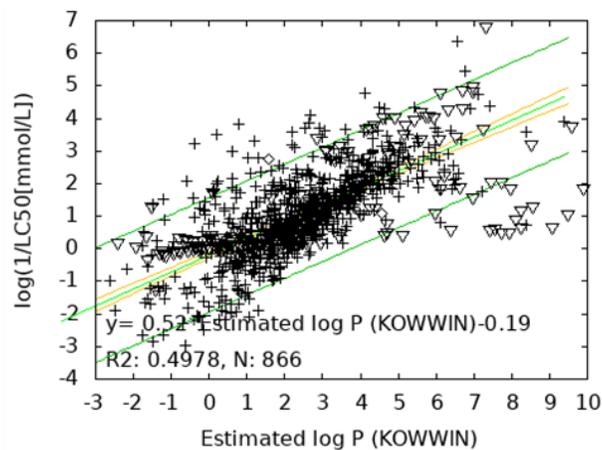
- 構造クラス分類
- log-log 回帰



KATEにおける構造クラス分類のイメージ

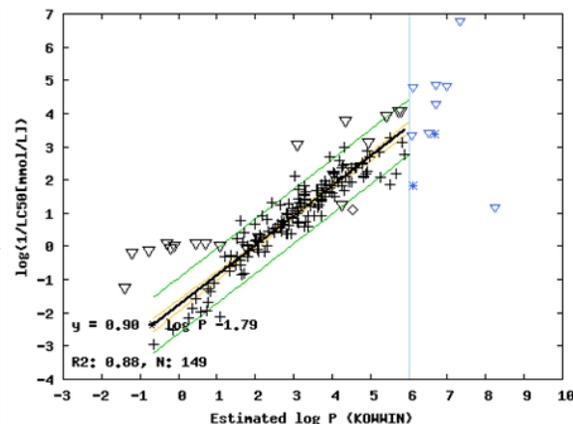
Y軸は $\log(1/\text{毒性}[\text{mmol/L}])$
なので、上に行くほど
毒性が強い (毒性値が小さい)

全物質データ
(魚類急性)



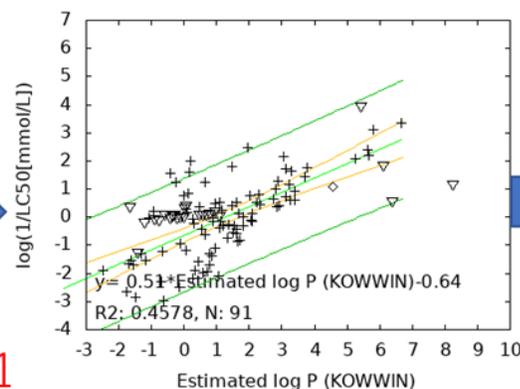
条件X

Narcotic クラス (魚類急性)

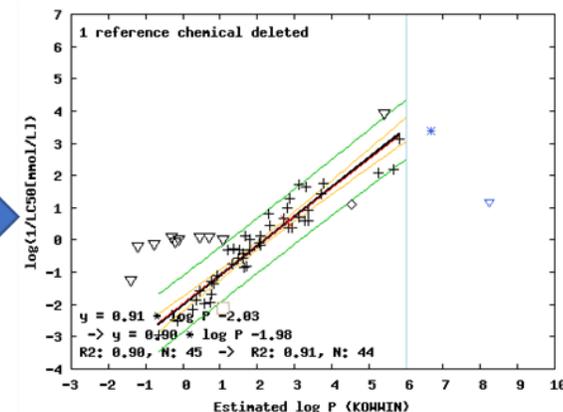


CO_X alcohol
unreactive Fish
クラス (魚類急性)

条件Y1
(ex. アルコール)

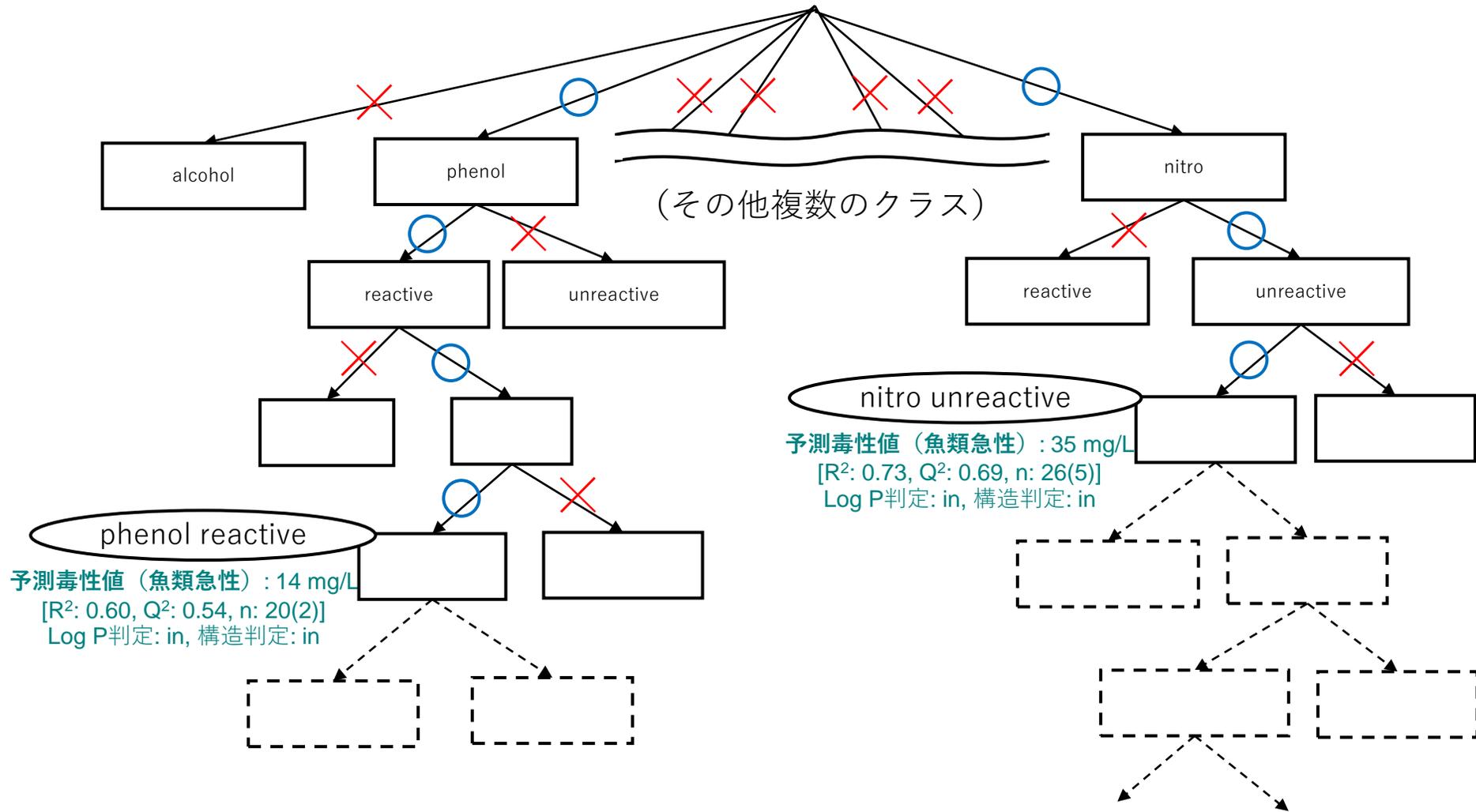
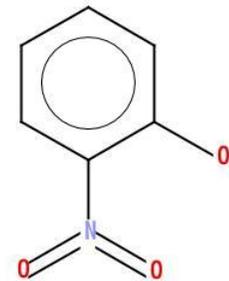


条件Y2 & Y3
(さらに絞る)



※ KATEやECOSARは化学物質の構造クラス (≒ QSARクラス) によって、
別々のQSAR回帰式を作成し、毒性を予測しています。

KATE による構造クラス・ QSARクラス分類(概念図)



KATEの化学物質クラスの大分類

	大分類	キーとなる部分構造ID	部分構造名	SMARTS
1	acid	3034	carboxylic acid C(=O)O	[#6;\$(=[#6])(=[#8])([#6])[#8H1]]
		4760	-SO3H, Sulfonic Acid, sulfo-, -sulfonic acid	[C,c,o]S(=O)(=O)[O;\$(OH1),\$(O[Na,Li,K])]
2	alcohol	3046	alcohol COH	[#6;\$(=[#6])([#8;H]);!X3;v4]
3	aldehyde, ketone	3031	ketone CC(=O)C	[#6;\$(=[#6])(=[#8])([#6])[#6]]
		3036	aldehyde	[#6H1;\$(=[#6])(=[#8])[#6]]
4	ester	3032	ester CC(=O)OC	[#6;\$(=[#6])(=[#8])([#6])[#6];!\$(=[#6])(=[#8])([#6])[#6]=[O,S,N]]
		3145	acetal	[#6X4;\$(=[#6])([#8])[#8]]
5	ether	3044	ether general	[#8H0;!\$(=[#8]C=[O,N,S]);!\$(=[#8]C[#8]);\$(=[#8])([#6])[#6]]
6	phenol	3047	phenol cOH	[OX2H][cX3;\$(c1ccccc1)]
7	amine primary	3100	amine CNH2	[#7X3H2;!\$(=[#7][*v6]);!\$(N[#6])(~[#7,#8,#16])]
8	amine sec, tert	3110	amine CNH1	[#7v3X3H1;!\$(=[#7][*v6]);!\$(N[#6])(~[#7,#8,#16]);!\$(=[#7v5H1](a))]
		3120	amine CNH0	
9	aromatic n	4911	aromatic n	
10	hydrazine	3210	NN, hydrazine g	
11	nitrile	3104	nitril C#N	
12	amide	3123	amide	
13	carbamate	3041	carbamate gene	
14	nitro	3130	nitro N(=O)=O	
15	phosphorus	5018	Phosphorus [P]	
16	sulfur	3234	SH thiophenol	
		3235	SH mercaptan, n	
		3535	disulfide excepti	
		3536	disulfide general	
		3537	2-mercapto-thia	
17	halogen	4507	halogen	[F,C,I,Br,]
18	heteroatomic	4911	aromatic n	[n]
		4912	aromatic o	[o]
		4913	aromatic s	[s]
Others		3106	azo N=N	[NX2;\$(N=N)]
		4541	epoxide monocyclic	[#8r3;\$(=[#8]1[#6R1][#6R1])]
		3108	imino C=N-, guanidine	[#7v3X2;\$(N=[Cv4X3]);!\$(N[N,O,S])]
			etc	

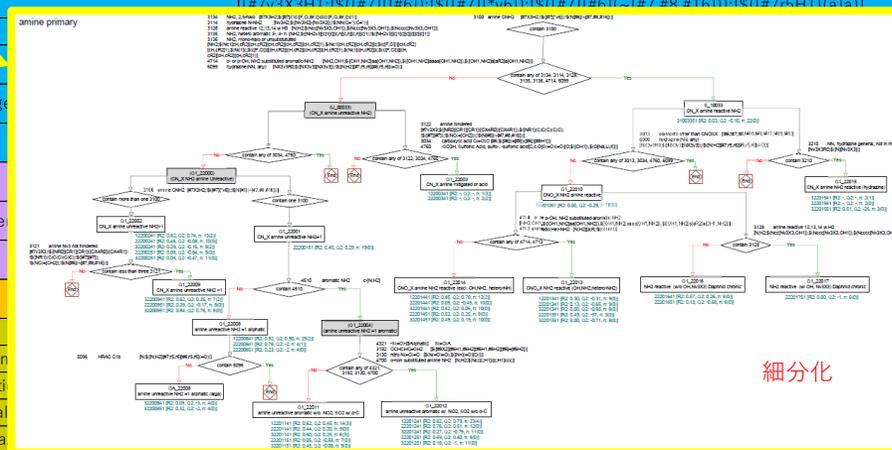
酸素を含む

窒素を含む

酸素と窒素を含むリンを含む

硫黄を含む

その他



その他 催眠作用 (Narcotic*)という大分類があります。

*ECOSARでは、Neutral Organics class (baseline toxicity)と呼ばれます。

分類されないものは "Unclassified" のクラスに割り当てられ、デフォルトでは表示されません。

4. KATE2025の使用方法



National
Institute for
Environmental
Studies, Japan

KATEのホームページ

- 「kate qsar」「kate2025」等で検索してください

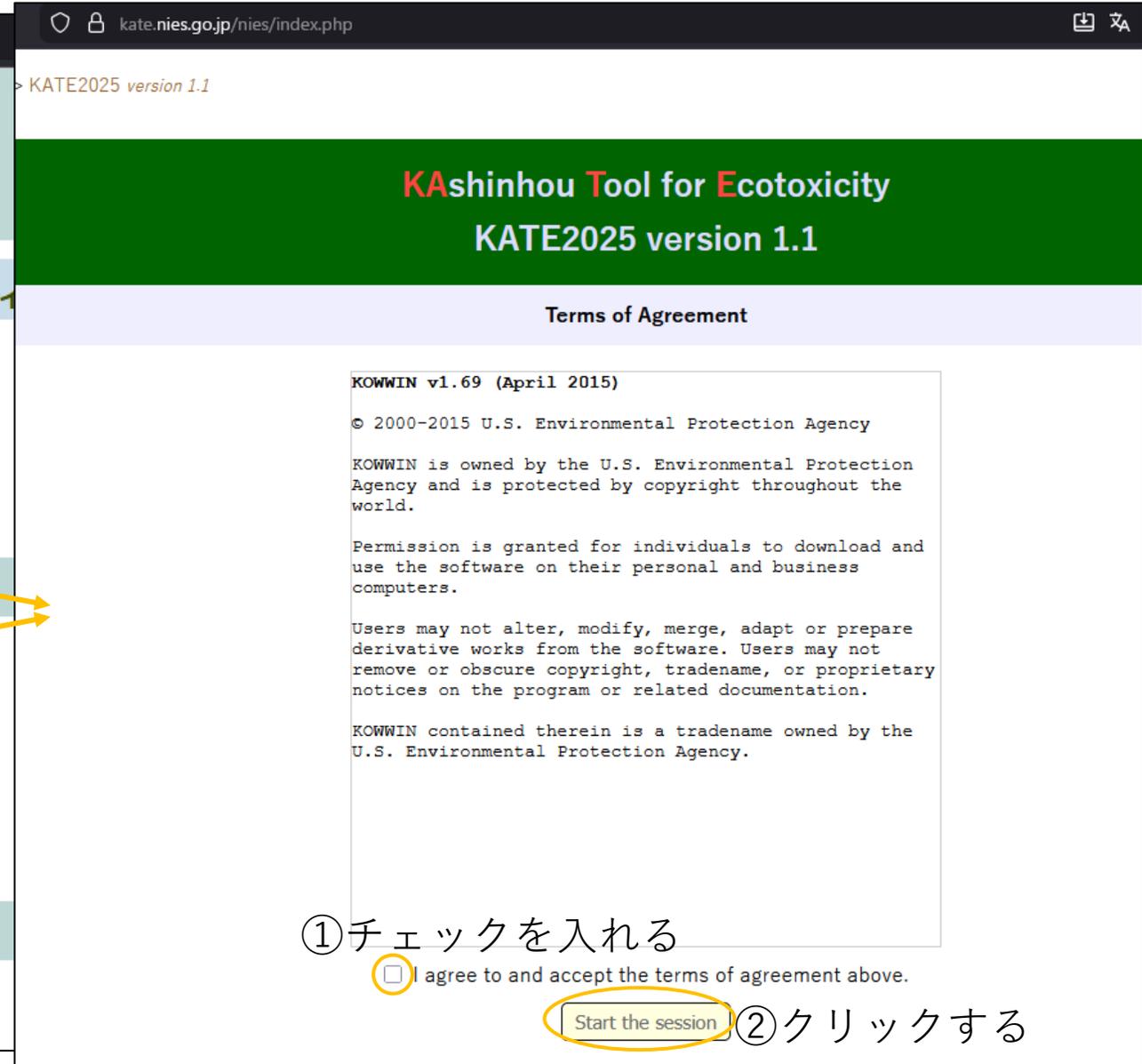
Google search results for "kate qsar". The top result is from the National Institute for Environmental Studies (NIES), titled "KAshinhou Tool for Ecotoxicity, 生態毒性予測システム". The snippet describes it as a QSAR system developed by NIES for environmental risk and health assessment. Below the main result, there are sections for "Disclaimer" and "KATE2025". A yellow arrow points from the "KATE2025" link in the search results to the "KATE2025" button on the website screenshot.

Screenshot of the KATE website homepage (kate.nies.go.jp). The page features a navigation bar with "KATE2025" highlighted in a yellow circle. Below the navigation bar, there is a "HOME" section and a "News" section. The "News" section contains a list of updates, with the most recent one dated 2025-08-25: "KATE2025 を version 1.1 へアップデートしました。更新履歴もご参照ください。". Below the news, there is a section titled "KATE2025 version 1.1" which states: "KATE2025 の最新版は「[KATE2025 version 1.1](#)」(2025年8月25日版)です。". A yellow circle highlights this section. At the bottom of the page, there is a section titled "生態毒性予測システム「KATE (ケイト)」について" and the Ministry of the Environment logo.

KATE2025の入口



The screenshot shows the Japanese homepage for KATE2025. At the top, there is a header with the KATE logo and the title "KAshinhou Tool for Ecotoxicity 生態毒性予測システム". Below this, there are navigation tabs for "KATE2025", "KATE on PAS 2011", "更新履歴", and "サイ". The main content area includes a breadcrumb "HOME > KATE2025" and a section for "KATE2025" with a "KATE2025 login" button circled in yellow. Below this is a "◆ 利用方法" section with instructions and a list of links, including "KATE2025 login (version 1.1, 2025年8月25日版)" which is also circled in yellow. A "◆ KATE2025 について" section follows, providing additional information about the software version.



The screenshot shows the English Terms of Agreement page for KATE2025 version 1.1. The page title is "KAshinhou Tool for Ecotoxicity KATE2025 version 1.1". Below the title is a "Terms of Agreement" section. The text includes copyright information for KOWWIN v1.69 (April 2015) and the U.S. Environmental Protection Agency, along with usage permissions and a disclaimer. At the bottom, there is a checkbox labeled "I agree to and accept the terms of agreement above." which is circled in yellow, and a "Start the session" button also circled in yellow. Handwritten annotations in Japanese indicate "①チェックを入れる" (check the box) and "②クリックする" (click the button).

入力画面

- アップデートにより画面は変わる可能性があります
- データはサーバーに送信されますが、予測後に削除され、サーバーには残りません

NIES > HERD > KATE > KATE2025 version 1.1
Index > Front Page

Front Page

Input SMILES of Your Chemical **一物質予測**

[READ ME FIRST](#) [Get information using Chemical Identifier Resolver](#) or [Generate SMILES using JSME Editor](#)

SMILES (Required): [Predict](#)

CAS RN[®]:

Chemical Name: [Clear](#)

log P:

Skip KOWWIN[™]: * When any error occurs in log P estimation by KOWWIN[™], you can skip it.

Output from
<https://cactus.nci.nih.gov>
may be shown here.

[▶ about SMILES notation in KATE2025](#)
[▶ about log P](#)

Prediction of Multiple Chemicals **複数物質予測 (バッチモード)**

SMILES List: [Select](#)

Notice: KATE2025 can currently make predictions for up to 2000 chemicals.
Predicting 100 chemicals will take about 80 seconds or less, depending on server load and other factors.
If the number of chemicals is over 300, only errors are shown in the result table.
To see all results, please download the result file from the prediction results page.

入力画面（下部）

- クラス分類の定義等を閲覧可能

to see all results, please download the result file from the p
If your PC goes into sleep mode, the predictions may stop.
No further operations on this screen will be accepted until th
complete.

► *about the SMILES List format*

List of Data Used

- Structure Classes
- Substructures
- QSAR Classes

Maintained by: Health and Environmental Risk Division,
Copyright(C) 2019-2025 Ministry of the Environment, Gove

Structure Classes

Group: Acid

Structure ID	Description	Decision tree
-	oxoacid [C,c]CO2-, [C,c,O]SO3-	ID:3034 > 0 or ID:4760 > 0
-	acid reactive	!R_00051 = true
G1_25012	CNOS_X acid reactive w/o N+	!ID:3102 = 0 and ID:3013 = 0
G1_25010	CNOS_X acid unreactive	!R_00051 = false and ID:3013 = 0
G1_25011	CNOS_X oxoacid unreactive carboxylic unhindered	!ID:3034 > 0 and ID:4034 = 0
G1_25014	CNOS_X acid unreactive sulfonic	!ID:3034 = 0

Group: Sulfonic acid

Structure ID	Description	Decision tree
-	-SO3H, Sulfonic Acid, sulfo-, -sulfonic acid	ID:4760 > 0
G1_21160	COS-X sulfonic acid	!ID:3009 = 0

Group: Alcohol

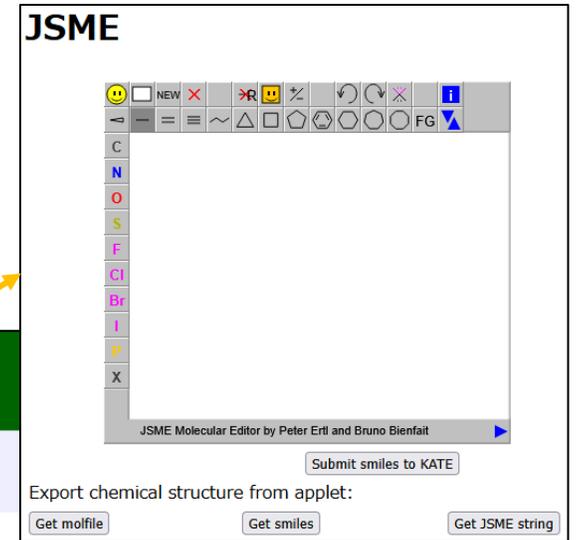
Structure ID	Description	Decision tree
-	alcohol COH	ID:3046 > 0
-	alcohol reactive	!ID:3030 = 0 and RF_00021 = true and G1_00010 = false
-	alcohol reactive C-OH w/ proMichael	!ID:5059 > 0
G1_21021	CO_X alcohol reactive w/ proMichael 8	!ID:3003 = 0
-	alcohol reactive C-OH w/o proMichael	!ID:5059 = 0

物質データの入力

- SMILESの入力には3つの方法がある

②CASまたは物質名を入力後にクリックしてSMILESを取得（外部のサービスを利用）

③エディタを起動して構造式からSMILESを取得



Front Page

Input SMILES of Your Chemical

READ ME FIRST | Get information using Chemical Identifier Resolver | Generate SMILES using JSME Editor

SMILES(Required): ①手動でSMILESを入力

CAS RN[®]:

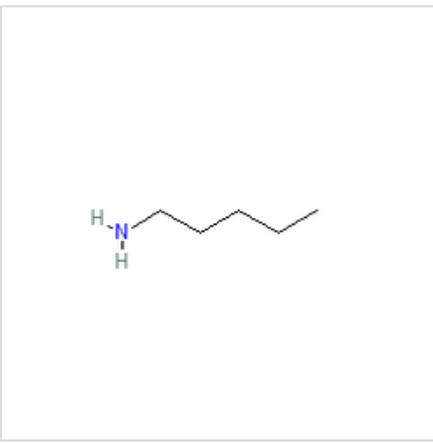
Chemical Name:

log P:

Skip KOWWIN™: * When any error occurs in log P estimation by KOWWIN™, you can skip it.

Predict

Clear



Information obtained from SMILES.

SMILES:	CCCCCN
CAS RN [®] :	110-58-7
IUPAC NAME:	pentan-1-amine

SMILES入力後にクリックして予測開始

②で取得した情報

一物質の予測結果

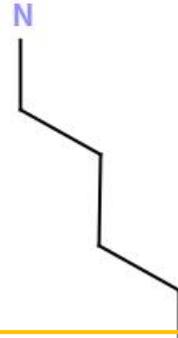
Results

Summary of the Query Chemical

予測対象物質の情報

Query Chemical

SMILES	CCCCCN	
CAS RN*	110-58-7	
Chemical Name	pentan-1-amine	
log P	User Input Value	<input type="text"/> Re-calculate
	Estimated Value by KOWWIN™	1.33
	Measured Value in KOWWIN™ Database	1.49
Molecular Weight	87.16	



手動で入力したLogPの値を用いて予測値を計算することも可能

QSAR Prediction Result

予測結果

チェックを外すと全てのQSARクラスの情報が表示される
(デフォルトでは $R^2 \geq 0.7$ 、 $Q^2 \geq 0.5$ 、 $n \geq 5$ を満たすもののみが表示される)

Toxicity filter:

	all	Fish	Daphnid	Alga
Acute	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Chronic	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>

Statistical filter:

Apply the following statistical criteria (uncheck this box to see all QSAR results):
 $R^2 \geq 0.7$ $Q^2 \geq 0.5$ $n \geq 5$

予測毒性値

適用領域の判定結果

回帰式の統計指標

Print Detail	QSAR Class Name*1 <small>Click the class name to see the QSAR details</small>	Type of Predicted Toxicity*2		Predicted Toxicity [mg/L]	95% Prediction Interval	log P (Estimated)	Applicability Domain		Statistics of QSAR Class					
		Organism	Acute or Chronic				LogP Judgement	Structure*5	R^2	Q^2 *6	RMSE	n *7	criteria*8	
<input checked="" type="checkbox"/>	amine primary unreactive NH2=1 aliphatic	Fish	Acute	47	[3.4, 640]	1.33	in	[-1.61, 5.25]	in	0.84	0.81	0.54	26(2)	✓

Create Print Format

括弧外：回帰式の構築に使用される物質数
括弧内：回帰式の構築に使用されない物質数

一物質の予測結果

- 全てのQSARクラスを表示した状態

QSAR Prediction Result

Toxicity filter:

	all	Fish	Daphnid	Alga
Acute	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Chronic	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>

Statistical filter:

Apply the following statistical criteria (uncheck this box to see all QSAR results):

$R^2 \geq 0.7$ $Q^2 \geq 0.5$ $n \geq 5$

Print Detail <input type="checkbox"/>	QSAR Class Name*1 <small>Click the class name to see the QSAR details</small>	Type of Predicted Toxicity*2		Predicted Toxicity [mg/L]	95% Prediction Interval	log P (Estimated)	Applicability Domain Judgement			Statistics of QSAR Class				
		Organism	Acute or Chronic				log P*4 [Range]	Structure*5	R ²	Q ² *6	RMSE	n*7	criteria*8	
<input checked="" type="checkbox"/>	amine primary unreactive NH2=1 aliphatic	Fish	Acute	47	[3.4, 640]	1.33	in	[-1.61, 5.25]	in	0.84	0.81	0.54	26(2)	✓
<input type="checkbox"/>	amine primary unreactive NH2=1 aliphatic	Daphnid	Acute	11	[0.32, 350]	1.33	in	[-1.61, 4.76]	in	0.78	0.38	0.55	7(1)	
<input type="checkbox"/>	amine primary unreactive NH2=1 aliphatic alga	Alga	Acute	2.6	[0.0040, 1700]	1.33	in	[-1.61, 4.76]	in	0.43	-0.61	1.02	7(0)	
<input type="checkbox"/>	CNO_X unreactive Fish Chronic, w/ N,O	Fish	Chronic	0.14	[0.0076, 2.7]	1.33	in	[-1.61, 5.99]	in	0.62	0.54	0.57	19(2)	
<input type="checkbox"/>	amine primary unreactive NH2=1 aliphatic	Daphnid	Chronic	0.95	[0.046, 19]	1.33	in	[-1.61, 1.63]	in	0.23	-2.22	0.26	4(0)	
<input type="checkbox"/>	amine primary unreactive NH2=1 aliphatic alga	Alga	Chronic	0.33	[0.0016, 65]	1.33	in	[-1.61, 4.76]	in	0.60	-0.08	0.84	7(0)	

クリックするとQSARクラスの詳細画面 (Verify QSAR画面) へ移動

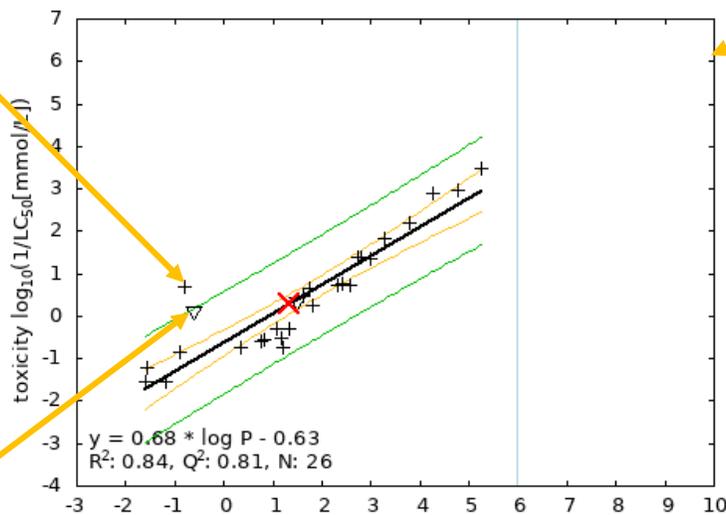
Verify QSAR画面 (上段)

Verify QSAR

Type: Fish (Acute) Structure Class ID: G1_22008 QSAR Class Name: amine primary unreactive NH2=1 aliphatic

Regression Equation

Horizontal Axis



LogP対毒性値のグラフ

Query Chemical

SMILES	CCCCCN
CAS RN®	110-58-7
Chemical Name	pentan-1-amine
log P (Estimated)	1.33
Molecular Weight	87.16



確定値の毒性値データ
回帰式に使用される

不等号付き毒性値データ
(>100 mg/L等)
回帰式に使用されない

Query Chemical		Regression line	
X :	User Input	— (black)	(default)
+ :	Used in regression	— (red)	New regression line (when datapoint was clicked)
□ :	Excluded from regression (when datapoint was clicked)	— (yellow)	95% confidence interval
▽△ :	Data with "<" or ">"	— (green)	95% prediction interval
◇ :	Data on mixture, etc.	— (blue)	Vertical line log P = 6.0 (Data with log P > 6 is not used in the regression line.)
* :	Data with log P > 6.0		
▽△ :	Data with log P > 6.0 and "<" or ">"		
▽△◇*▽△ :	Clicked datapoint		

Predicted Toxicity [mg/L]: 47
 95% Prediction Interval [mg/L]: [3.4, 640]
 log P Judgement: in, Structure Judgement: in
 Shift:
 Zoom: X: Y:

Equation	Number of Chemicals used in Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R ²	Q ²	RMSE
$y = 0.68 * \log P - 0.63$	26	2	[-1.61, 5.25]	0.84	0.81	0.54

Verify QSAR画面 (上段)

1 reference chemical deleted

toxicity $\log_{10}(1/LC_{50}[\text{mmol/L}])$

Estimated log P (KOWWIN)

Predicted Toxicity [mg/L]: 47
95% Prediction Interval [mg/L]: [3.4, 640]
log P Judgement: in, Structure Judgement: in

Shift:

Zoom: X: Y:

Query Chemical

SMILES	CCCCCN
CAS RN*	110-58-7
Chemical Name	pentan-1-amine
log P (Estimated)	1.33
Molecular Weight	87.16

CCCCCN

Query Chemical **Regression line**

x: User Input —: (default)

Reference Chemicals

+ : Used in regression —: New regression line (when datapoint was clicked)

□: Excluded from regression (when datapoint was clicked)

—: 95% confidence interval

—: 95% prediction interval

Support Chemical

▽△: *▽△: Clicked datapoint

クリックした物質のデータポイントの形が変わる

Equation	Number of Chemicals used in Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R ²	Q ²	RMSE
$y = 0.68 * \log P - 0.63$	26	2	[-1.61, 5.25]	0.84	0.81	0.54

グラフ上で最後にクリックした物質の情報

Most Recently Clicked Chemical

SMILES: CC(C)(C)CN
CAS RN*: 5813-64-9
Chemical Name: 2,2-Dimethyl-1-propylamine
Molecular Weight: 87.16
(X, Y): (1.21, -0.74)
Square of Residual: 0.87
Measured Toxicity Value Data:
LC₅₀ [mg/L]: 475.0, Species: *Pimephales promelas*, Reference: USEPA

Note:

CC(C)(C)CN

Verify QSAR画面 (中段)

- QSARクラスに含まれる物質の情報 (LogPが小さい順に物質が並んでいる)

予測対象物質との類似度
LogP(X軸の値)、実測毒性値(Y軸の値)

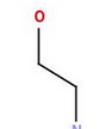
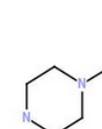
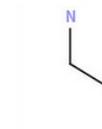
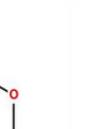
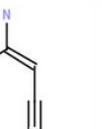
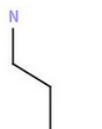
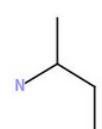
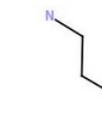
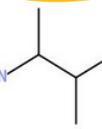
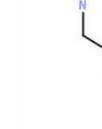
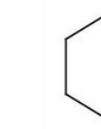
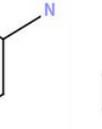
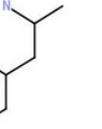
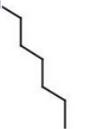
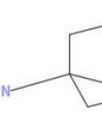
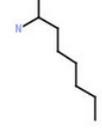
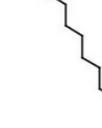
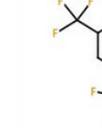
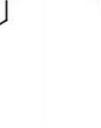
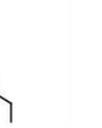
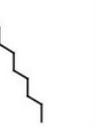
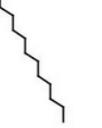
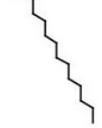
structure view | table view

List of Chemicals

sort by X-axis(log P) in ascending order Update

Notice: • The value below chemical structure represents the similarity (Tanimoto coefficient with PubChem Fingerprints) to the query chemical.
• The figures in parentheses indicate the coordinate values (x, y) of the chemical in the log P vs. $\log_{10}(1/LC_{50}, EC_{50}, \text{ or } NOEC)$ graph.

- Reference chemicals (used in regression)

 0.467 (-1.61, -1.53)	 0.500 (-1.57, -1.23)	 0.531 (-1.19, -1.53)	 0.552 (-0.91, -0.84)	 0.400 (-0.79, 0.68)	 0.810 (0.34, -0.72)	 0.783 (0.76, -0.58)	 0.905 (0.83, -0.56)	 0.284 (1.07, -0.29)
 0.692 (1.18, -0.51)	 0.739 (1.21, -0.74)	 1.000 (1.33, -0.31)	 0.769 (1.63, 0.48)	 0.309 (1.76, 0.67)	 0.955 (1.82, 0.25)	 0.875 (2.31, 0.72)	 0.405 (2.43, 0.78)	 0.567 (2.58, 0.72)
 0.750 (2.73, 1.40)	 0.808 (2.80, 1.40)	 0.240 (3.00, 1.34)	 0.808 (3.29, 1.82)	 0.808 (3.78, 2.18)	 0.808 (4.27, 2.91)	 0.808 (4.76, 2.98)	 0.808 (5.25, 3.49)	

+ Support Chemicals (not used in regression)

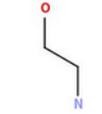
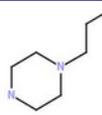
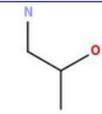
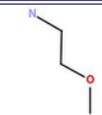
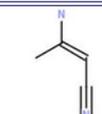
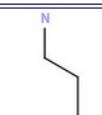
+ Definition of Structure Class

+ Substructures of the Query Chemical

Verify QSAR画面 (中段)

- 物質情報の表示方法を変更することが可能

ここをクリックした場合

structure view		table view								
Details of Chemicals										
Reference chemicals (used in regression)										
CAS RN [†]	Chemical Name	SMILES	Structural Formula	Similarity	Molecular Weight	Estimated log P	Measured Toxicity Data			
							LC ₅₀ [mg/L]	log ₁₀ (1/LC ₅₀) [mmol/L]	Reference	Note
141-43-5	Monoethanolamine	NCCO		0.467	61.08	-1.61	2070.0	-1.53	USEPA	
140-31-8	1-(2-Aminoethyl) piperazine	NCCN1CCNCC1		0.500	129.2	-1.57	2190.0	-1.23	USEPA	
78-96-6	1-Amino-2-propanol	CC(O)CN		0.531	75.11	-1.19	2520.0	-1.53	USEPA	
109-85-3	2-Methoxyethyl amine	COCCN		0.552	75.11	-0.91	524.0	-0.84	USEPA	
1118-61-2	2-Butenenitrile, 3-amino-	N#CC=C(N)C		0.400	82.1	-0.79	17.0	0.68	MOE 2010	
107-10-8	Propylamine	CCCN		0.810	59.11	0.34	308.0	-0.72	USEPA	

Verify QSAR画面 (下段)

- Definition of Structure Class **クラス分類の定義**

Group: Amine primary Show all structures

Structure ID	Description	Decision tree
-	amine CNH2	ID:3100 > 0
-	amine primary unreactive	↳R_00033 = false
-	NH2 amine unreactive	↳G1_00010 = false
-	amine primary unreactive NH2=1	↳ID:3100 = 1
G1_22008	amine primary unreactive NH2=1 aliphatic	↳ID:4510 = 0
GA_22008	amine primary unreactive NH2=1 aliphatic alga	↳RA_00033 = false

▶ detailed information about font decoration and color

- Substructures of the Query Chemical **予測対象物質に含まれる部分構造の種類とその定義**

+ Substructures used only for Structural Classification

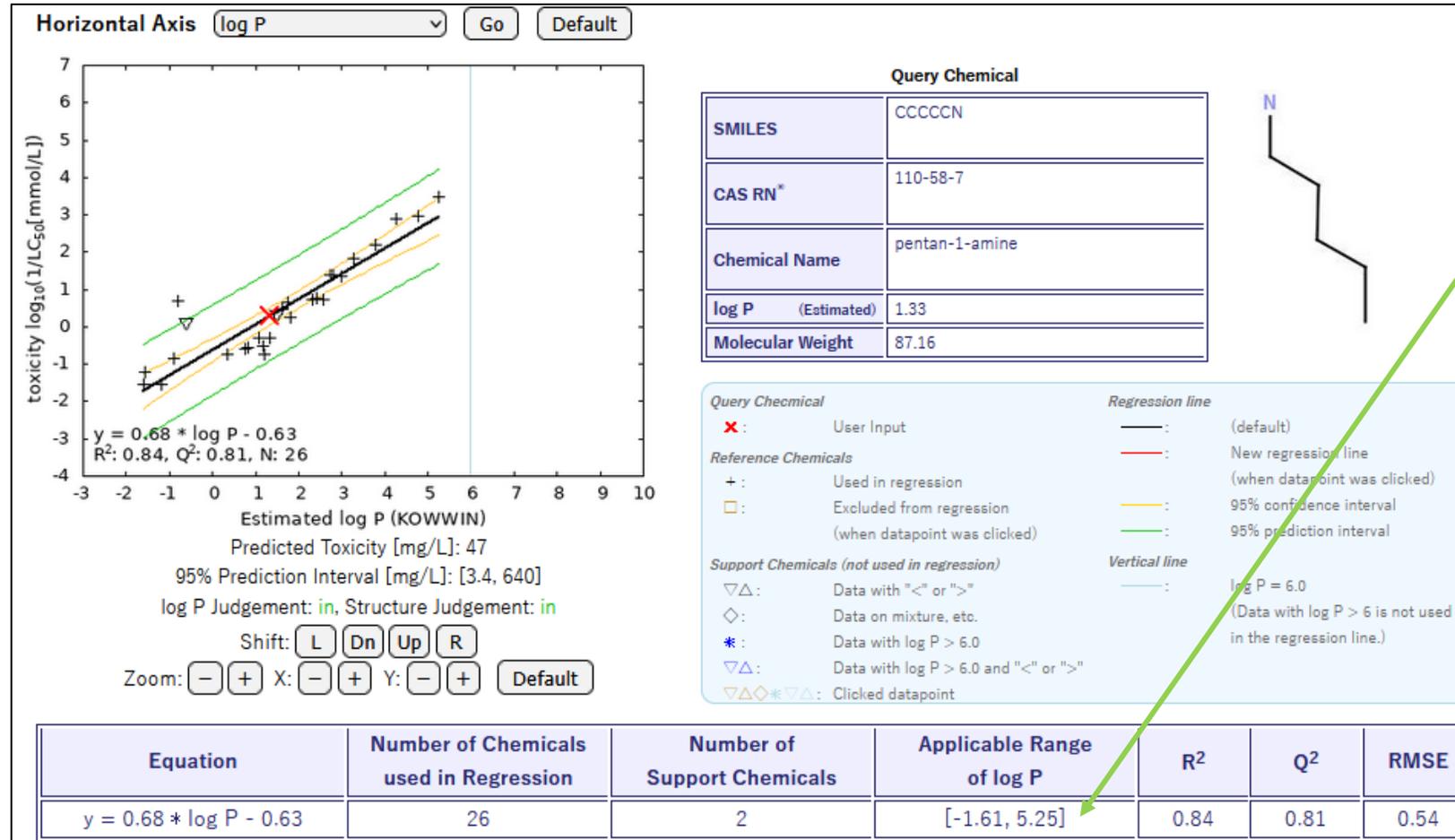
- Substructures used for the Judgement and the Classification

Hide SMARTS

Judgement*1	FragID	Substructure Name	Count	SMARTS
in	5007	Nitrogen [N,n]	1	[#7]
in	5037	pro-SB 1	1	[CH2][NH2]
in	5500	amin (daphnid ACR100)	1	[#7;v3;X3;!\$([#7][!#6]);!\$([#7][#6;X3]([#7])[#7]);!\$([#7][#6]=,#[!#6]);!\$([#7][!#6;R][!#6;!#7;!#8;!#16;R][!#6;!#7;!#8;!#16;R][!#6;!#7;!#8;!#16;R])]

適用領域の判定について (LogP)

- 予測対象物質のLogPの値が、**回帰式の構築に使用される物質の最小LogPと最大LogPの範囲**内であれば"in"(適用領域内)、そうでなければ"out"(適用領域外)



適用領域の判定について（構造）

- QSARクラスの回帰式の構築に使用される物質に、予測対象物質に含まれる構造判定用部分構造（酸素・窒素等のヘテロ原子、皮膚感作性・農薬に関する部分構造等）を持つものがある場合”in”、そうでない場合”out”
- “out”について別の言い方とすると、「予測対象物質に含まれる構造判定用部分構造を持つような物質は、回帰式に含まれない」

Substructures of the Query Chemical

Substructures used only for Structural Classification

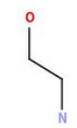
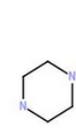
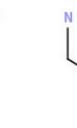
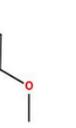
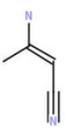
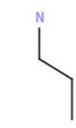
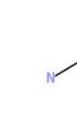
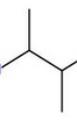
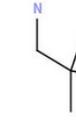
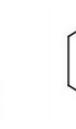
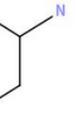
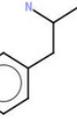
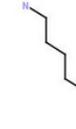
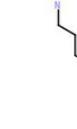
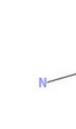
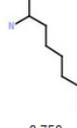
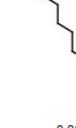
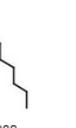
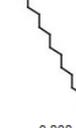
Substructures used for the Judgement and the Classification

Hide SMARTS 予測対象物質に含まれる構造判定用部分構造

Judgement*1	FragID	Substructure Name	Count	SMARTS
in	5007	Nitrogen [N,n]	1	[*7]
in	5037	pro-SB 1	1	[CH2][NH2]
in	5500	amin (daphnid ACR100)	1	[*7;v3;X3;![*7][*6];![*7][*6;X3][*7];[*7][*6;R][*6;!*7;!*8;!*16;R][*6;!*7;!*1]]

QSARクラスの構築に使用される物質

Reference chemicals (used in regression)

 0.467 (-1.61, -1.53)	 0.500 (-1.57, -1.23)	 0.531 (-1.19, -1.53)	 0.552 (-0.91, -0.84)	 0.400 (-0.79, 0.68)	 0.810 (0.34, -0.72)	 0.783 (0.76, -0.58)	 0.905 (0.83, -0.56)	 0.284 (1.07, -0.29)
 0.692 (1.18, -0.51)	 0.739 (1.21, -0.74)	 1.000 (1.33, -0.31)	 0.769 (1.63, 0.48)	 0.309 (1.76, 0.67)	 0.955 (1.82, 0.25)	 0.875 (2.31, 0.72)	 0.405 (2.43, 0.78)	 0.567 (2.58, 0.72)
 0.750 (2.73, 1.40)	 0.808 (2.80, 1.40)	 0.240 (3.00, 1.34)	 0.808 (3.29, 1.82)	 0.808 (3.78, 2.18)	 0.808 (4.27, 2.91)	 0.808 (4.76, 2.98)	 0.808 (5.25, 3.49)	

KATE2025で定義されている部分構造

- 入力画面下部に部分構造一覧へのリンクがある

to see all results, please download the result file from the prediction result page.
If your PC goes into sleep mode, the predictions may stop.
No further operations on this screen will be accepted until the predictions complete.

▶ [about the SMILES List format](#)

List of Data Used

- Structure Classes
- Substructures
- QSAR Classes

Maintained by: Health and Environmental Risk Division, National Institute of Environmental Health Sciences
Copyright(C) 2019-2025 Ministry of the Environment, Government of Japan

Substructures

Filter(ID.Name): Filter SMARTS:

Substructures used for the Judgement and the Classification

FragID	Substructure Name	SMARTS
5001	Lithium [Li]	[#3]
5002	Sodium [Na]	[#11]
5003	Boron [B]	[#5]
5004	NH 5 membered aromatic	[#7x5H1;\$(#7)(a)(a)]
5006	Silicon [Si]	[#14]
5007	Nitrogen [N.n]	[#7]
5008	Oxygen [O.o]	[#8]
5012	Arsenic [As]	[#33]
5013	Selenium [Se]	[#34]
5014	Potassium [K]	[#19]
5016	Sulfur [S]	[#16]
5017	Tin [Sn]	[#50]
5018	Phosphorus [P]	[#15]
5020	SNAr 1	<chem>c1([F,Cl,Br,I,\$(N(=O)~O)])c([F,Cl,Br,I,\$(N(=O)~O),\$ (C#N),\$ (C=O),\$ (C(F)(F)F),\$ (S=O)])cc([F,Cl,Br,I,\$(N(=O)~O),\$ (C#N),\$ (C=O),\$ (C(F)(F)F),\$ (S=O)])cc1</chem>
5021	SNAr 2	<chem>c1([F,Cl,Br,I,\$(N(=O)~O)])c([F,Cl,Br,I,\$(N(=O)~O),\$ (C#N),\$ (C=O),\$ (C(F)(F)F),\$ (S=O)])cccc1([F,Cl,Br,I,\$(N(=O)~O),\$ (C#N),\$ (C=O),\$ (C(F)(F)F),\$ (S=O)])</chem>
5022	SNAr 3	<chem>c1([F,Cl,Br,I,\$(N(=O)~O)])ncc([F,Cl,Br,I,\$(N(=O)~O),\$ (C#N),\$ (C=O),\$ (C(F)(F)F),\$ (S=O)])cc1</chem>
5023	SNAr 4	<chem>c1([F,Cl,Br,I,\$(N(=O)=O)])ncccc1([F,Cl,Br,I,\$(N(=O)=O),\$ (C#N),\$ (C=O),\$ (C(F)(F)F),\$ (S=O)])</chem>
5024	SNAr 5	<chem>c1([F,Cl,Br,I,\$(N(=O)=O)])ncccn1</chem>
5025	SNAr 6	<chem>c1([F,Cl,Br,I,\$(N(=O)=O)])ncncc1</chem>
5026	SNAr 7	<chem>c1([F,Cl,Br,I,\$(N(=O)=O)])ncc([F,Cl,Br,I,\$(N(=O)=O),\$ (C#N),\$ (C=O),\$ (C(F)(F)F),\$ (S=O)])nc1</chem>

予測結果の印刷機能

QSAR Prediction Result

Toxicity filter:

	all	Fish	Daphnid	Alga
Acute	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Chronic	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>

Statistical filter:

Apply the following statistical criteria (uncheck this box to see all QSAR results):

$R^2 \geq 0.7$ $Q^2 \geq 0.5$ $n \geq 5$

Print Detail	QSAR Class Name* ¹ Click the class name to see the QSAR details	Type of Predicted Toxicity* ²		Predicted Toxicity [mg/L]	95% Prediction Interval	log P (Estimated)	Applicability Domain Judgement	
		Organism	Acute or Chronic				log P* ⁴ [Range]	
<input checked="" type="checkbox"/>	amine primary unreactive NH2=1 aliphatic	Fish	Acute	47	[3.4, 640]	1.33	in	[-1.61, 5.25]
<input type="checkbox"/>	amine primary unreactive NH2=1 aliphatic	Daphnid	Acute	11	[0.32, 350]	1.33	in	[-1.61, 4.76]
<input type="checkbox"/>	amine primary unreactive NH2=1 aliphatic alga	Alga	Acute	2.6	[0.0040, 1700]	1.33	in	[-1.61, 4.76]
<input type="checkbox"/>	CNO_X unreactive Fish Chronic, w/ N,O	Fish	Chronic	0.14	[0.0076, 2.7]	1.33	in	[-1.61, 5.99]
<input type="checkbox"/>	amine primary unreactive NH2=1 aliphatic	Daphnid	Chronic	0.95	[0.046, 19]	1.33	in	[-1.61, 1.63]
<input type="checkbox"/>	amine primary unreactive NH2=1 aliphatic alga	Alga	Chronic	0.33	[0.0016, 65]	1.33	in	[-1.61, 4.76]

Create Print Format

クリックすると予測結果の印刷画面へ移動

Ecotoxicity Prediction by KATE2025 version 1.1
December 25, 2025 at 18:11 (JST) <https://kate.nies.go.jp/>

Results

Summary of the Query Chemical

Query Chemical	
SMILES	CCCCCN
CAS RN*	110-58-7
Chemical Name	pentan-1-amine
log P	Estimated Value by KOWWIN* 1.33 Measured Value in KOWWIN* Database 1.49
Molecular Weight	87.16

Chemical Structure: CCCCCN

QSAR Prediction Result

Toxicity filter: all, Fish, Daphnid, Alga

Statistical filter: Apply the following statistical criteria: $R^2 \geq 0.7$, $Q^2 \geq 0.5$, $n \geq 5$

Print Detail	QSAR Class Name	Type of Predicted Toxicity		Predicted Toxicity [mg/L]	95% Prediction Interval	log P (Estimated)	Applicability Domain Judgement		Statistics of QSAR Class					
		Organism	Acute or Chronic				log P [Range]	Structure	R ²	Q ²	RMSE	n	criteria	
<input checked="" type="checkbox"/>	amine primary unreactive NH2=1 aliphatic	Fish	Acute	47	[3.4, 640]	1.33	in	[-1.61, 5.25]	in	0.84	0.81	0.54	26(2)	✓
<input type="checkbox"/>	amine primary unreactive NH2=1 aliphatic	Daphnid	Acute	11	[0.32, 350]	1.33	in	[-1.61, 4.76]	in	0.78	0.38	0.95	7(1)	
<input type="checkbox"/>	amine primary unreactive NH2=1 aliphatic alga	Alga	Acute	2.6	[0.0040, 1700]	1.33	in	[-1.61, 4.76]	in	0.43	-0.61	1.02	7(0)	
<input type="checkbox"/>	CNO_X unreactive Fish Chronic, w/ N,O	Fish	Chronic	0.14	[0.0076, 2.7]	1.33	in	[-1.61, 5.99]	in	0.62	0.54	0.57	19(2)	
<input type="checkbox"/>	amine primary unreactive NH2=1 aliphatic	Daphnid	Chronic	0.95	[0.046, 19]	1.33	in	[-1.61, 1.63]	in	0.23	-2.22	0.26	4(0)	
<input type="checkbox"/>	amine primary unreactive NH2=1 aliphatic alga	Alga	Chronic	0.33	[0.0016, 65]	1.33	in	[-1.61, 4.76]	in	0.60	-0.08	0.84	7(0)	

Type: Fish (Acute) Structure Class ID: G1_22008 QSAR Class Name: amine primary unreactive NH2=1 aliphatic

Equation: $y = 0.68 * \log P - 0.63$
 $R^2 = 0.84$, $Q^2 = 0.81$, $N = 26$

Equation	Number of Chemicals used in Regression	Number of Support Chemicals	Applicable Range of log P	R ²	Q ²	RMSE
$y = 0.68 * \log P - 0.63$	26	2	[-1.61, 5.25]	0.84	0.81	0.54

Reference Chemicals (used in regression):

CAS RN*	Chemical Name	SMILES	Structural Formula	Similarity	Molecular Weight	Estimated log P	Measured Toxicity Data			
							LC ₅₀ [mg/L]	log ₁₀ (1/LC ₅₀) [mmol/L]	Reference	Note
141-43-5	Monethanolamine	NCCO	<chem>NCCO</chem>	0.467	61.08	-1.61	2070.0	-1.53	USEPA	
140-31-8	1-(2-Aminoethyl) piperazine	NCCN1CCNCC1	<chem>NCCN1CCNCC1</chem>	0.500	129.2	-1.57	2190.0	-1.23	USEPA	
78-96-6	1-Amino-2-propanol	CC(O)CN	<chem>CC(O)CN</chem>	0.531	75.11	-1.19	2520.0	-1.53	USEPA	

複数物質予測の入力形式

クリックして入力するテキストファイルを選択

Prediction of Multiple Chemicals

SMILES List: No file selected.

一度に1,000物質同時に予測可能

Notice: KATE2025 can currently make predictions for up to 2000 chemicals. Predicting 100 chemicals will take about 80 seconds or less, depending on server load and other factors. If the number of chemicals is over 300, only errors are shown in the result table. To see all results, please download the result file from the prediction results page. If your PC goes into sleep mode, the predictions may stop. No further operations on this screen will be accepted until the predictions are complete.

▶ about the SMILES List format

クリックして入力するテキストファイルの中身の説明を表示

▼ about the SMILES List format

In KATE2025, to process multiple SMILES strings consecutively, we use a custom file format called "SMILES List".

The SMILES List has the following features:

1. It is a tab-delimited text file.
2. Column names are limited to **SMILES**, **CAS**, **NAME**, **LOGP**, and **ID**, representing SMILES, CAS RN[®], chemical name, log P, and ID, respectively. Column names are case-insensitive.
3. Each line must include a SMILES string. Columns other than **SMILES** are optional.
4. The **ID** column can only contain alphanumeric characters, '-' and '_'.
5. The number of tabs must be the same in all lines.
6. The column order can be customized according to your preferences.

Two examples are provided below.

Example 1: Single column SMILESのみ含める場合

```
SMILES
CCCCOC (=O) CS
CC (=C) CS
CC1 (CC2 (C) CC3 (Br) C1) CC (Br)
(C2) C3
CCCCCCCCBr
CCCCCCCC (Br) CBr
CCCCCCCCBr
```

Example 2: Multiple columns SMILES以外(CAS、LogP等) も含める場合

ID	NAME	LOGP	SMILES	CAS
A01	name1	-0.8	CCCCOC (=O)	
A20	name2		CC (=C) CS	
B06	name3	1.3	NCc1cccnc1	3731-52-0

" " and " " denote tab characters.

For ID: A01, CAS RN[®] is empty. For ID: A20, both log P and CAS RN[®] are empty.

複数物質予測中の画面

予測完了に必要なおおよその時間
(カウントダウンしない)

Prediction of Multiple Chemicals

SMILES List: smiles.txt (24 chemicals)

Notice: KATE2025 can currently make predictions for up to 2000 chemicals.
Predicting 100 chemicals will take about 80 seconds or less, depending on server load and other factors.
If the number of chemicals is over 300, only errors are shown in the result table.
To see all results, please download the result file from the prediction results page.
If your PC goes into sleep mode, the predictions may stop.
No further operations on this screen will be accepted until the predictions are complete.

Predicting.
Total time: less than 1 min.

27.8%

おおよその進行状況
(プログレスバーが毎秒進む)

複数物質の予測結果画面

Results (batch mode)

▶ about the result file associated with the button in the right.

エラーのあった物質数/全物質数

Download results as text file

QSAR Prediction Results: **4 errors / 24 chemicals**

Toxicity filter: all Fish Daphnid Alga
 Acute
 Chronic

Statistical filter: Apply the following statistical criteria (uncheck this box to see all QSAR results):
 R² ≥ 0.7 Q² ≥ 0.5 n ≥ 5

クリックして予測結果をテキストファイルとしてダウンロード

No	ID	CAS RN*	Chemical Name	SMILES	Molecular Weight	Structural Formula	QSAR Class Name*1 <small>Click the class name to see the QSAR details</small>	Type of Predicted Toxicity*2		Predicted Toxicity [mg/L]	95% Prediction Interval	log P (Estimated)	Applicability Domain Judgement		Statistics of QSAR Class					
								Organism	Acute or Chronic				log p*4 [Range]	Structure*5	R ²	Q ² *6	RMSE	n*7	criteria*8	
1				C	16.04	C	C_X hydrocarbon unreactive aliphatic w/o X	Fish	Acute	93	[8.8, 990]	0.78	out	[2.58, 4.98]	in	0.73	0.68	0.36	21(4)	✓
							narcotic group Fish Acute	Fish	Acute	200	[27, 1400]	0.78	in	[-0.63, 5.88]	in	0.87	0.87	0.43	152(33)	✓
							narcotic group Daphnid Acute	Daphnid	Acute	21	[2.6, 160]	0.78	out(p)	[1.08, 5.88]	in	0.71	0.70	0.43	82(23)	✓
							narcotic group Alga Acute	Alga	Acute	220	[24, 2100]	0.78	out(p)	[1.08, 5.26]	in	0.76	0.73	0.43	51(46)	✓
							Cnos_X unreactive Fish Chronic	Fish	Chronic	1.9	[0.10, 36]	0.78	out	[1.52, 5.52]	in	0.76	0.68	0.43	12(0)	✓
							C_X hydrocarbon unreactive	Fish	Chronic	2.0	[0.10, 38]	0.78	out	[1.52, 5.52]	in	0.78	0.68	0.43	11(0)	✓
							narcotic group Fish Chronic	Fish	Chronic	2.3	[0.14, 36]	0.78	out	[1.52, 5.81]	in	0.82	0.75	0.41	12(0)	✓
2				CC	30.07		C_X hydrocarbon unreactive aliphatic w/o X	Fish	Acute	62	[7.0, 550]	1.32	out	[2.58, 4.98]	in	0.73	0.68	0.36	21(4)	✓
							narcotic group Fish Acute	Fish	Acute	120	[17, 880]	1.32	in	[-0.63, 5.88]	in	0.87	0.87	0.43	152(33)	✓
							narcotic group Daphnid Acute	Daphnid	Acute	17	[2.2, 130]	1.32	in	[1.08, 5.88]	in	0.71	0.70	0.43	82(23)	✓
							narcotic group Alga Acute	Alga	Acute	130	[14, 1100]	1.32	in	[1.08, 5.26]	in	0.76	0.73	0.43	51(46)	✓
							Cnos_X unreactive Fish Chronic	Fish	Chronic	1.5	[0.094, 23]	1.32	out	[1.52, 5.52]	in	0.76	0.68	0.43	12(0)	✓
							C_X hydrocarbon unreactive	Fish	Chronic	1.6	[0.099, 25]	1.32	out	[1.52, 5.52]	in	0.78	0.68	0.43	11(0)	✓
							narcotic group Fish Chronic	Fish	Chronic	1.7	[0.13, 23]	1.32	out	[1.52, 5.81]	in	0.82	0.75	0.41	12(0)	✓

複数物質予測結果画面

- エラーのあった（予測できなかった）物質の情報のみが表示が可能

Results (batch mode)

▶ about the result file associated with the button in the right. Download results as text file

QSAR Prediction Results: 4 errors / 24 chemicals

Toxicity filter: all | Fish | Daphnid | Alga
Acute | | | |
Chronic | | | |

Statistical filter: Apply the following statistical criteria (uncheck this box to see all QSAR results):
 R² ≥ 0.7 | Q² ≥ 0.5 | n ≥ 5

all chemicals | **chemicals with errors only** ← クリックしてエラーのあった物質のみを表示

No	ID	CAS RN [*]	Chemical Name	SMILES	Molecular Weight	Structural Formula	QSAR Class Name ^{*1} <small>Click the class name to see the QSAR details</small>	Type of Predicted Toxicity ^{*2}		Predicted Toxicity [mg/L]	95% Prediction Interval	log P (Estimated)	Applicability Domain Judgement		Statistics of QSAR Class							
								Organism	Acute or Chronic				log P ^{*4} [Range]	Structure ^{*5}	R ²	Q ² ^{*6}	RMSE	n ^{*7}	criteria ^{*8}			
5				c1ccccc1		Image Not Available	[A SMILES Error Has Occurred!] *** WARNING: UNCLOSED RING-STRUCTURE *** Each ring designation number MUST be used twice and ONLY twice! SMILES: c1ccccc1															
11				c1ccccc12		Image Not Available	[A SMILES Error Has Occurred!] *** WARNING: UNCLOSED RING-STRUCTURE *** Each ring designation number MUST be used twice and ONLY twice! SMILES: c1ccccc12															
17				c1ccccc1		Image Not Available	[A SMILES Error Has Occurred!] *** WARNING: UNCLOSED RING-STRUCTURE *** Each ring designation number MUST be used twice and ONLY twice! SMILES: c1ccccc1															
23				c1cccccA		Image Not Available	[A SMILES Error Has Occurred!] *** WARNING: UNCLOSED RING-STRUCTURE *** Each ring designation number MUST be used twice and ONLY twice! SMILES: c1cccccA															

複数物質予測結果ファイルの中身

- エラー内容はテキストファイルに記載されません

ID	CAS RN	Chemical Name	SMILES	Molecular Weight	QSAR ID	QSAR Class Name	Organism	Acute or Chronic	Predicted Toxicity	95% Prediction Interval	log P Value	log P Type	log P Judgement	log P Range	Structure Judgement	R2	Q2	RMSE	n	criteria
			C	16.04	12120341	C_X hydrocarbon unreactive ali	Fish	Acute	93 [8.8, 990]	0.78	Estimated	out	[2.58, 4.98]	in	0.73	0.68	0.36	21(4)	yes	
			C	16.04	12899941	narcotic group Fish Acute	Fish	Acute	200 [27, 1400]	0.78	Estimated	in	[-0.63, 5.88]	in	0.87	0.87	0.43	152(33)	yes	
			C	16.04	22120341	C_X hydrocarbon unreactive ali	Daphnid	Acute	19 [0.89, 420]	0.78	Estimated	out	[2.58, 5.74]	in	0.66	0.51	0.42	15(3)	no	
			C	16.04	22899941	narcotic group Daphnid Acute	Daphnid	Acute	21 [2.6, 160]	0.78	Estimated	out(p)	[1.08, 5.88]	in	0.71	0.7	0.43	82(23)	yes	
			C	16.04	32120341	C_X hydrocarbon unreactive ali	Alga	Acute	3800 [1.5, 9.2e+6]	0.78	Estimated	out	[2.58, 4.08]	in	0.66	0.38	0.47	6(10)	no	
			C	16.04	32899941	narcotic group Alga Acute	Alga	Acute	220 [24, 2100]	0.78	Estimated	out(p)	[1.08, 5.26]	in	0.76	0.73	0.43	51(46)	yes	
			C	16.04	12100151	C_X hydrocarbon unreactive	Fish	Chronic	2 [0.10, 38]	0.78	Estimated	out	[1.52, 5.52]	in	0.78	0.68	0.43	11(0)	yes	
			C	16.04	12500151	Cnos_X unreactive Fish Chronic	Fish	Chronic	1.9 [0.10, 36]	0.78	Estimated	out	[1.52, 5.52]	in	0.76	0.68	0.43	12(0)	yes	
			C	16.04	12899851	narcotic group Fish Chronic	Fish	Chronic	2.3 [0.14, 36]	0.78	Estimated	out	[1.52, 5.81]	in	0.82	0.75	0.41	12(0)	yes	
			C	16.04	22120351	C_X hydrocarbon unreactive ali	Daphnid	Chronic	1.7 [0.055, 55]	0.78	Estimated	out	[2.58, 5.74]	in	0.58	0.32	0.44	11(2)	no	
			C	16.04	22899851	narcotic group Daphnid Chronic	Daphnid	Chronic	2.1 [0.23, 19]	0.78	Estimated	in	[-1.20, 5.88]	in	0.78	0.76	0.46	70(12)	yes	
			C	16.04	32100151	C_X hydrocarbon Alga Chronic	Alga	Chronic	3.9 [0.18, 86]	0.78	Estimated	out	[1.61, 5.52]	in	0.38	0.32	0.61	56(24)	no	
			C	16.04	32120351	C_X hydrocarbon unreactive ali	Alga	Chronic	850 [0.30, 2.4e+6]	0.78	Estimated	out	[2.58, 4.20]	in	0.51	0.24	0.62	9(9)	no	
			C	16.04	32899851	narcotic group Alga Chronic	Alga	Chronic	13 [0.45, 370]	0.78	Estimated	in	[0.69, 5.81]	in	0.57	0.53	0.69	58(26)	no	
			CC	30.07	12120341	C_X hydrocarbon unreactive ali	Fish	Acute	62 [7.0, 550]	1.32	Estimated	out	[2.58, 4.98]	in	0.73	0.68	0.36	21(4)	yes	
			CC	30.07	12899941	narcotic group Fish Acute	Fish	Acute	120 [17, 880]	1.32	Estimated	in	[-0.63, 5.88]	in	0.87	0.87	0.43	152(33)	yes	
			CC	30.07	22120341	C_X hydrocarbon unreactive ali	Daphnid	Acute	15 [0.86, 250]	1.32	Estimated	out	[2.58, 5.74]	in	0.66	0.51	0.42	15(3)	no	
			CC	30.07	22899941	narcotic group Daphnid Acute	Daphnid	Acute	17 [2.2, 130]	1.32	Estimated	in	[1.08, 5.88]	in	0.71	0.7	0.43	82(23)	yes	
			CC	30.07	32120341	C_X hydrocarbon unreactive ali	Alga	Acute	1200 [1.8, 840000]	1.32	Estimated	out	[2.58, 4.08]	in	0.66	0.38	0.47	6(10)	no	
			CC	30.07	32899941	narcotic group Alga Acute	Alga	Acute	130 [14, 1100]	1.32	Estimated	in	[1.08, 5.26]	in	0.76	0.73	0.43	51(46)	yes	
			CC	30.07	12100151	C_X hydrocarbon unreactive	Fish	Chronic	1.6 [0.099, 25]	1.32	Estimated	out	[1.52, 5.52]	in	0.78	0.68	0.43	11(0)	yes	
			CC	30.07	12500151	Cnos_X unreactive Fish Chronic	Fish	Chronic	1.5 [0.094, 23]	1.32	Estimated	out	[1.52, 5.52]	in	0.76	0.68	0.43	12(0)	yes	
			CC	30.07	12899851	narcotic group Fish Chronic	Fish	Chronic	1.7 [0.13, 23]	1.32	Estimated	out	[1.52, 5.81]	in	0.82	0.75	0.41	12(0)	yes	
			CC	30.07	22120351	C_X hydrocarbon unreactive ali	Daphnid	Chronic	1.6 [0.068, 38]	1.32	Estimated	out	[2.58, 5.74]	in	0.58	0.32	0.44	11(2)	no	
			CC	30.07	22899851	narcotic group Daphnid Chronic	Daphnid	Chronic	1.7 [0.20, 15]	1.32	Estimated	in	[-1.20, 5.88]	in	0.78	0.76	0.46	70(12)	yes	
			CC	30.07	32100151	C_X hydrocarbon Alga Chronic	Alga	Chronic	3.6 [0.18, 72]	1.32	Estimated	out	[1.61, 5.52]	in	0.38	0.32	0.61	56(24)	no	
			CC	30.07	32120351	C_X hydrocarbon unreactive ali	Alga	Chronic	270 [0.32, 230000]	1.32	Estimated	out	[2.58, 4.20]	in	0.51	0.24	0.62	9(9)	no	
			CC	30.07	32899851	narcotic group Alga Chronic	Alga	Chronic	9.6 [0.36, 260]	1.32	Estimated	in	[0.69, 5.81]	in	0.57	0.53	0.69	58(26)	no	
			CCC	44.1	12120341	C_X hydrocarbon unreactive ali	Fish	Acute	36 [4.7, 280]	1.81	Estimated	out	[2.58, 4.98]	in	0.73	0.68	0.36	21(4)	yes	

QSAR Toolbox KATE Addinのダウンロード

<https://qsartoolbox.org>

QSAR TOOLBOX

About Features Resources Support Developers **Repository** Download

<https://repository.qsartoolbox.org>

Toolbox Repository Login

The Toolbox Repository uses cookies to provide personalized content.

Categories

- Calculators
- Profilers
- Metabolism Simulators
- QSARs
- System Extensions
- Databases

Tools

Tool name, description, developer

ECHA ECHA ECHA ECHA

ECHA REACH Unlock Plugin ECHA P screening (BETA) ECHA B screening (BETA) ECHA T screening (BETA)

System Extensions Profilers Profilers Profilers

EcoTox Pharmaceutical DB HC-BioSIM Water v1.0 KATE VE

NIES & NIHS ExxonMobil Biomedical Sciences, Inc. NIES_JAPAN IRFMN

Ecotox pharmaceutical HC-BioSIM KATE Addin VEGA m

<https://repository.qsartoolbox.org/Tools/Details/35fec3b5-a379-40e9-bc9c-4c03db78a79a>

Toolbox Repository Login

The Toolbox Repository uses cookies to provide personalized content. Accept

Tools / QSARs / KATE Addin

KATE Addin

Current version: 1.5
Supported Toolbox versions: 4.4, 4.5, 4.6, 4.7, 4.8
Developer: NIES_JAPAN
Category: QSARs
Downloads: 347
Rating: ☆☆☆☆☆ 0

Description:
KAshinhou Tool for Ecotoxicity (KATE) is an ecotoxicity prediction system that consists of quantitative structure-activity relationship (QSAR) models and was researched and developed under contract with the Ministry of the Environment, Government of Japan from fiscal year 2004 to 2019 by the Center for Health and Environmental Risk Research (CHERR) of the National Institute for Environmental Studies (NIES). KATE was originally developed to provide predicted ecotoxicity values—specifically, 50% effective concentration (EC50) values in the Daphnia acute immobilization test and 50% lethal concentration (LC50) values in the fish acute toxicity test—for chemical substances on the basis of their substructures. Since KATE2017, the predicted ecotoxicity values of the following endpoints are provided: EC50 and no-observed-effect concentration (NOEC) values in the algal growth inhibition test (72 h); NOEC values in the Daphnia magna reproduction test (21 d); and NOEC values in the fish early-life-stage toxicity test.

The plug-in developer is responsible for the correct functioning of the plug-in and its results. Before being made available via the repository, the plug-ins are checked for viruses, impact on stability of the QSAR Toolbox and documentation. For suggestions on improvement or bug fixing of the plug-in, please contact its developer directly.

To download and install this plugin, please use the Repository Client* that comes with the QSAR Toolbox.
*The Repository Client is part of QSAR Toolbox 4.4

You don't need to manually download this plugin unless you need to use it on an offline computer.

Download

Addinのインストール

The image shows a Windows File Explorer window on the left with the search results for 'Toolbox repository client'. The 'Toolbox repository client' application is open in the foreground, displaying the 'Available' tab. The application window has a table with columns 'Name', 'Version', and 'Uninstall'. The 'KATE Addin' entry is circled in yellow. Below the table, the 'Load from file' button is also circled in yellow. An arrow points from the 'Load from file' button to the 'KATE Addin' entry in the table.

Name	Version	Uninstall
QSAR Toolbox Calculator	4.8	Uninstall
QSAR Toolbox Profiler	4.8	Uninstall
KATE Addin	1.55	Uninstall
iSafeRat Mechanisms of toxic action profiler	1.1.2	Uninstall
Ecotox pharmaceuticals	1.0.0.0	Uninstall

QSAR ToolboxでのQSAR予測の手順

① Data Gap Filing

② (Q)SAR

③ Aquatic Toxicity

④ Details for 44 (QSAR models (6 selected))

⑤ Predict selected chemical

⑥ 統計指標の基準を満たすQSARクラス且つLogPと構造の両方が適用領域内の予測結果のみが取り込まれる

Checked	#	QSAR name	Endpoint	Effect	Duration
<input type="checkbox"/>	20	ECOSAR: LEMNA GIBBA 96 h EC50	EC50		96 h
<input type="checkbox"/>	21	ECOSAR: MYSID (SW) 96 h LC50 Mortality	LC50	Mortality	96 h
<input type="checkbox"/>	22	ECOSAR: MYSID (SW) ChV	ChV		
<input type="checkbox"/>	23	ECOSAR: MYSID 96 h LC50 Mortality	LC50	Mortality	96 h
<input type="checkbox"/>	24	ECOSAR: MYSID ChV	ChV		
<input type="checkbox"/>	25	ECOSAR: MYSID SHRIMP (SW) 96 h LC50 Mortality	LC50	Mortality	96 h
<input type="checkbox"/>	26	ECOSAR: MYSID SHRIMP (SW) ChV	ChV		
<input type="checkbox"/>	27	ECOSAR: MYSID SHRIMP 96 h LC50 Mortality	LC50	Mortality	96 h
<input type="checkbox"/>	28	Fathead minnow 96h LC50 - Danish QSAR DB battery model	LC50	Mortality	96 h
<input type="checkbox"/>	29	Fathead minnow 96h LC50 - Danish QSAR DB Leadscope model	LC50	Mortality	96 h
<input type="checkbox"/>	30	Fathead minnow 96h LC50 - Danish QSAR DB SciQSAR model	LC50	Mortality	96 h
<input checked="" type="checkbox"/>	31	KATE2025 - Algae 72h EC50	EC50	Growth Inhibition	72 h
<input checked="" type="checkbox"/>	32	KATE2025 - Algae 72h NOEC	NOEC	Growth Inhibition	72 h
<input checked="" type="checkbox"/>	33	KATE2025 - Daphnid 21d NOEC	NOEC	Reproduction	21 d
<input checked="" type="checkbox"/>	34	KATE2025 - Daphnid 48h EC50	EC50	Immobilisation	48 h
<input checked="" type="checkbox"/>	35	KATE2025 - Fish 96h LC50	LC50	Mortality	96 h
<input checked="" type="checkbox"/>	36	KATE2025 - Fish ELS NOEC	NOEC	-	-
<input type="checkbox"/>	37	M1 - LC50 - Pimephales promelas (fathead minnow)	LC50	Mortality	96 h
<input type="checkbox"/>	38	M2 - LC50 - Pimephales promelas (fathead minnow)	LC50	Mortality	96 h
<input type="checkbox"/>	39	M3 - LC50 - Pimephales promelas (fathead minnow)	LC50	Mortality	96 h
<input type="checkbox"/>	40	M4 - LC50 - Pimephales promelas (fathead minnow)	LC50	Mortality	96 h
<input type="checkbox"/>	41	Photoinduced toxicity of PAHs	Toxicity on Daphnia magna	Photoinduced Toxicity	
<input type="checkbox"/>	42	Pseudokirchneriella subcapitata 72h EC50 - Danish QSAR DB battery model	EC50	Growth Inhibition	72 h
<input type="checkbox"/>	43	Pseudokirchneriella subcapitata 72h EC50 - Danish QSAR DB Leadscope model	EC50	Growth Inhibition	72 h
<input type="checkbox"/>	44	Pseudokirchneriella subcapitata 72h EC50 - Danish QSAR DB SciQSAR model	EC50	Growth Inhibition	72 h

5. KATE2025の予測性能について



National
Institute for
Environmental
Studies, Japan

KATE2025の予測性能

- J-CHECK(https://www.nite.go.jp/chem/jcheck/list7.action?category=240&request_locale=ja)から化審法の新規公示化学物質の実測毒性値を収集

独立行政法人 製品評価技術基盤機構

化審法データベース
Japan CHEmicals Collaborative Knowledge database

用語

リストについて

新規公示化学物質 (2011年4月1日以降届出)

新規公示化学物質 (2011年4月1日以降届出)は、我が国で新たに製造又は輸入される化学物質として、化審法に基づき2011 (平成23) 年4月1日以降に届け出られたもののうち、第一種特定化学物質、優先評価化学物質のいずれにも該当しないものと判定され、公示された物質です。
化審法においては、第二条第七項の規定に基づき一般化学物質とされています (優先評価化学物質、監視化学物質、第一種特定化学物質及び第二種特定化学物質を除く)。

1 - 100 件目表示 / 1821 件中 > >| 1 表示 / 19 1ページに 100 表示

通し番号*	官報公示整理番号	官報公示名称	官報公示日	備考
1	4-1970	オクタヒドロインデン	2017/07/31	
2	7-3448	[2-(クロロメチル)オキシラン・4, 4'- (プロパン-2, 2-ジイル)ジフェノール重縮合物]・4-tert-ブチルフェノール・4, 4'- (プロパン-2, 2-ジイル)ジフェノール重付加物	2017/07/31	
3	3-4658	4- (ヘキシルスルファニル) アニリン	2017/07/31	
4	5-7009	1, 3-ジヨード-5, 5-ジメチルイミダゾリジン-2, 4-ジオン	2017/07/31	
5	3-4659	3, 4, 5-トリメトキシトルエン	2017/07/31	
6	3-4660	アルキル (C=8を主成分(90%以上)とする、C=7~9、直鎖型及び分枝型) =3- (3, 5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシフェニル) プロパノアート	2017/07/31	
7	6-3519	[[エテン・プロペン共重合物]と無水マレイン酸の反応生成物]と1-ビニル-1H-イミダゾールの反応生成物]とN-フェニルベンゼン-1, 4-ジアミンの反応生成物 (水、酸及びアルカリに不溶であり、分子量1, 000未満の成分の含有率が1%以下であるものに限る。)	2017/07/31	
8	7-3449	テレフタル酸・ビス (4-ヒドロキシフェニル) メタン-4-ヒドロキシ安息香酸重縮合物 (数平均分子量が1, 000以上であり、水、脂溶性溶媒、汎用溶媒、酸及びアルカリに不溶であるものに限る。)	2017/07/31	
9	7-3450	o- [ジメチル (ビニル) シリル] -ω- [[ジメチル (ビニル) シリル] オキシ] -ポリ [オキシ (ジメチルシランジイル) / オキシ [メチル (3, 3, 4, 4, 5, 5, 6, 6, 6-ノナフルオロヘキシル) シランジイル] / オキシ [メチル (3, 3, 3-トリフルオロプロピル) シランジイル]] (水、酸及びアルカリに不溶であり、分子量1, 000未満の成分の含有率が1%以下であるものに限る。)	2017/07/31	

KATE2025の予測性能

- 収集したデータ数：魚類急性：96、甲殻類急性：121、藻類急性：102
- KATE2025に加えてUS EPAのECOSAR2.2を使用

	魚類急性		甲殻類急性		藻類急性	
	KATE	ECOSAR	KATE	ECOSAR	KATE	ECOSAR
①適用領域内の予測値が得られた物質の割合	60%	78%	55%	79%	45%	85%
②(適用領域内の物質について) 予測値と実測値の比が1オーダーの範囲に入った割合	91%	77%	91%	78%	80%	69%

- KATE2025はECOSARと比較して、①適用領域内に入る物質の割合は低いが、②適用領域内の予測値は当たりやすい（実測毒性値との比が1オーダーの範囲に入る割合が高い）
- 予測性能や適用領域はQSARモデルによって異なるため、各モデルの特徴を理解して使用することが重要

6. 生態毒性QSAR予測の 最新動向



OECD QAF 2nd Edition (2024)

- QSAR等の予測及び複数の予測に基づく結果を評価するための枠組み
- ガイダンスの主な対象者は規制当局
- QAFを補完するためQMRF(QSAR Model Reporting Format)及びQPRF(QSAR Prediction Reporting Format)を更新

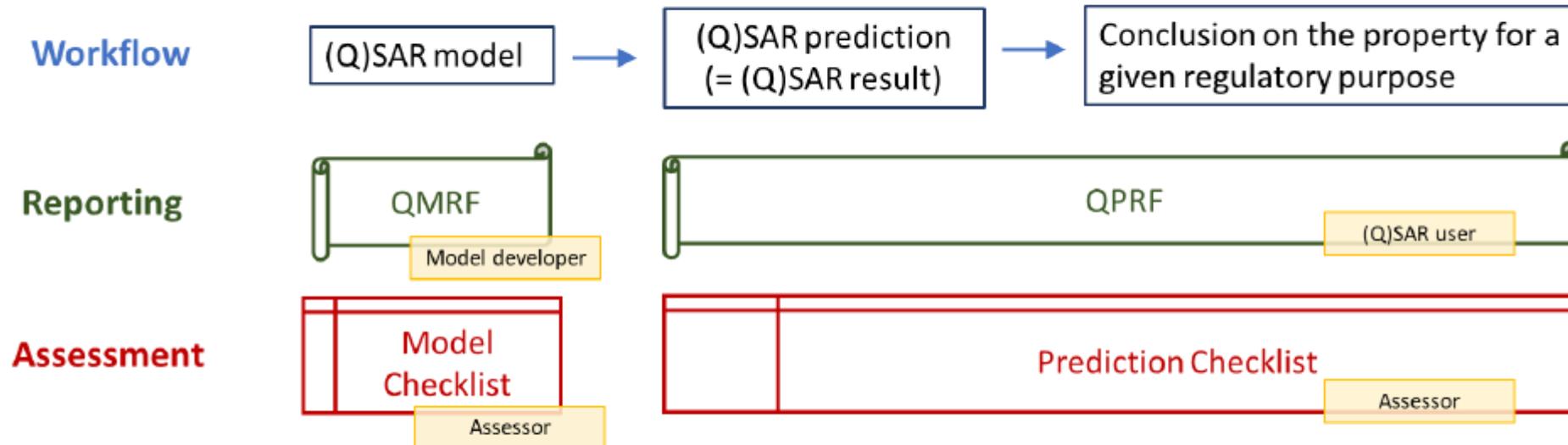
(Q)SAR Assessment Framework:
Guidance for the regulatory assessment
of (Quantitative) Structure Activity
Relationship models and predictions,
Second Edition



個別の予測に対するQAF

- これまではモデルに対する評価枠組みはあったが、個別の予測結果自体に対する国際的な（信頼性）評価枠組みは存在しなかった。

Figure 1. (Q)SAR Assessment Framework (QAF) Result based on an individual prediction



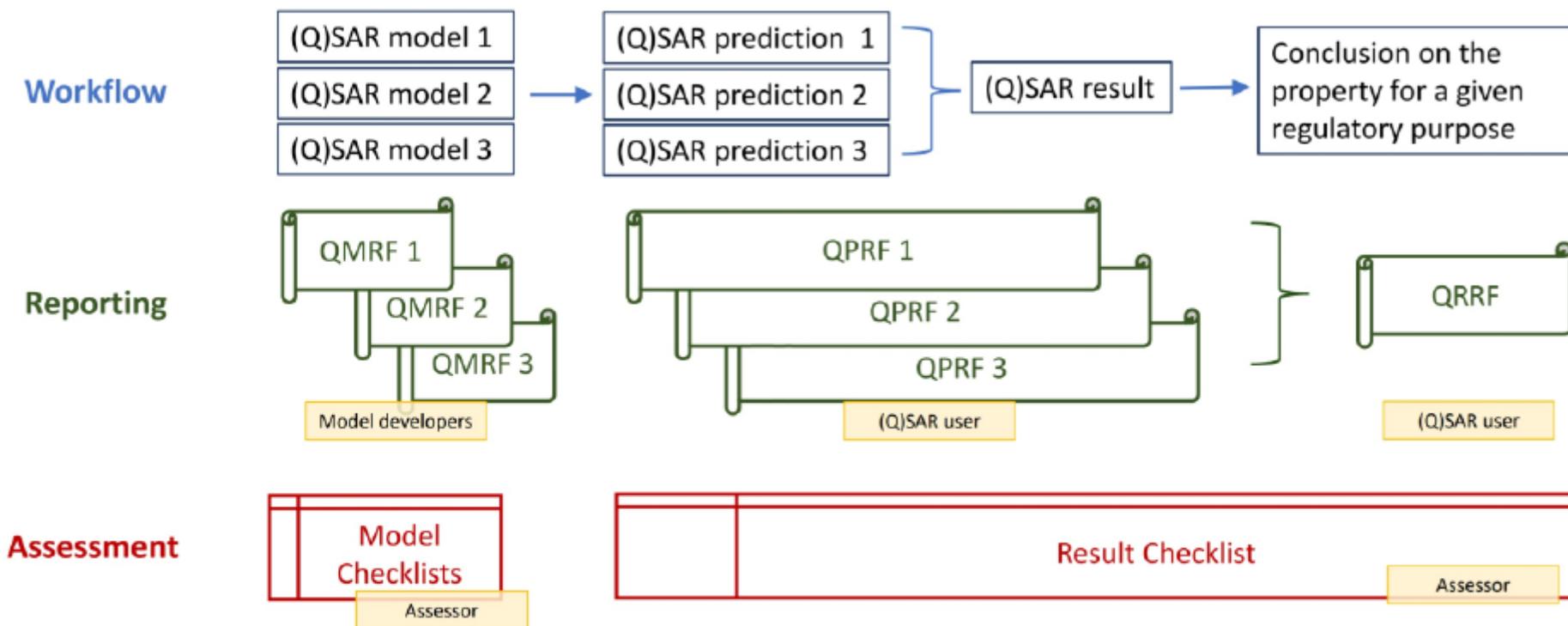
Note: Workflow of (Q)SAR information for a result based on an individual prediction according to the OECD (Q)SAR assessment framework (QAF). The information about the model is reported in the (Q)SAR Model Reporting Format (QMRF) document prepared by the model developer and assessed by regulators using the QAF Model Checklist. The information about the (Q)SAR prediction is reported in the (Q)SAR Prediction Reporting Format (QPRF) document by the (Q)SAR user and assessed by regulators using the QAF Prediction Checklist. Checklists could also be pre-compiled by the (Q)SAR user to facilitate the work of the assessor.

評価の観点

- QSAR予測結果が利用に適していることを確認するため、モデル製作者や使用者はQMRFとQPRFによってQSARバリデーション原則に基づくことを示す
- OECD QSARバリデーション原則(OECD, 2007)
 - 1) a defined endpoint
 - 2) an unambiguous algorithm
 - 3) a defined domain of applicability
 - 4) appropriate measures of goodness-of-fit, robustness and predictivity
 - 5) a mechanistic interpretation, if possible
- QAFにおける評価ではQSARバリデーション原則に基づき、評価のための4つの原則 (OECD (Q)SAR Prediction Principles) を定義
 - 1) the model input(s) should be correct;
 - 2) the substance should be within the applicability domain of the model;
 - 3) the prediction(s) should be reliable;
 - 4) the outcome should be fit for the regulatory purpose.

複数の(Q)SAR予測を用いて、最終的な予測結果を得る場合のQAF

Figure 2. (Q)SAR Assessment Framework (QAF) Result based on multiple predictions



Note: Workflow of (Q)SAR information for a result based on multiple predictions according to the OECD (Q)SAR assessment framework (QAF). The information about the models is reported in the (Q)SAR Model Reporting Format (QMRF) documents prepared by the model developers and assessed by regulators using the QAF Model Checklist. The information about the (Q)SAR predictions and result are reported in the (Q)SAR Prediction Reporting Format (QPRF) and (Q)SAR Results Reporting Format (QRRF) document by the (Q)SAR user, and assessed by regulators using the QAF Result Checklist.

評価のためのチェックリスト群 (Excel形式)

Model 1			
<i>when more than one model is considered, add a comment here to identify to which model the checklist refers to (e.g. model name)</i>			
Principle	Assessment element	Outcome	Comments
Defined endpoint			
1.1	Clear scientific and regulatory purpose		
1.2	Transparency of the underlying experimental data	Fulfilled	
1.3	Quality of the underlying experimental data	Not fulfilled	
Unambiguous algorithm			
2.1	Description of the algorithm and/or software		
2.2	Inputs and other options		
2.3	Model accessibility		

Model Checklist
(一部)

Prediction 1			Prediction 2 (compile in case of multiple predictions, add additional copies when more than two predictions are considered)					
<i>when more than one prediction is considered, add a comment here to identify to which prediction the checklist refers to (e.g. model name and/or predicted structure)</i>			<i>when more than one prediction is considered, add a comment here to identify to which prediction the checklist refers to (e.g. model name and/or predicted structure)</i>					
Principle	Assessment element	Weight	Principle	Assessment element	Weight	Outcome	Uncertainty	Comments
Correct input(s) to the model			Correct input(s) to the model					
1.1	Clear and complete description of the input and model settings	High	1.1	Clear and complete description of the input and model settings	High			
1.2	Input representative of the substance under analysis	High	1.2*	Input representative of the substance under analysis	High			
1.3	Reliable input (parameters)	Medium	1.3	Reliable input (parameters)	Medium			
Substance within the applicability domain of a valid model			Substance within the applicability domain of a valid model					
2.1	Substance within the applicability domain	High	2.1	Substance within the applicability domain	High			
2.2	Any other limitation of the model is considered	High	2.2	Any other limitation of the model is considered	High			

Predictions Checklist
(一部)

Conclusion on the final result						
Compile only when multiple predictions are considered						
Principle	Assessment element	Weight	Outcome	Uncertainty	Comments	
5.1	Correct determination of the final result from individual predictions	High				
Uncertainty (final result)						
Outcome of the assessment (final result)						
Comments						

Result Checklist
(一部)

環境省 化学物質環境リスク初期評価等への活用

- 生態リスクの「総合的な判定」の評価の材料としてQSAR+類推の活用
化学物質の環境リスク初期評価ガイドライン（令和6年11月版）に別添4追加

- 実施対象物質を限定
（年間数物質のみ）

初期評価における判定の流れ

- 1) PEC / PNEC 比による生態リスクの判定
- 2) 総合的な判定

[環境省website](#)

[化学物質の環境リスク初期評価関連](#)

<https://www.env.go.jp/chemi/risk/>

別添4

定量的構造活性相関（QSAR：Quantitative Structure-Activity Relationship）
及び類似物質等に基づく類推による生態毒性推定の実施手順

この実施手順は、本生態リスク初期評価での利用に限定したものである。

I. 生態毒性推定の実施対象

生態毒性試験結果に基づく評価の不確実性が減少する可能性がある場合に、QSAR 等による生態毒性推定の実施を検討する。

II. QSAR 予測の実施

上記 I. において実施対象とされた物質について、QSAR 予測による生態毒性の推定を行う。

(1) 使用するソフトウェア

- KAshinhou Tool for Ecotoxicity（以下、KATE⁸）
- Ecological Structure Activity Relationships（以下、ECOSAR⁹）

初期評価における類推の特徴（簡便化）

- QSARで推定出来なかった場合に「QSAR式構築に使用された毒性値」等のみで検討する
（毒性値の信頼性評価が終わっているデータのみ活用）
- 定量的類推だけでなく、定性的な毒性傾向の推定を検討する

III. 類似物質等に基づく類推の実施

上記 II. において予測結果の妥当性が十分ではないと判断された場合、類似物質等に基づく類推による生態毒性の推定を行う。

(1) 類似物質（群）等

上記 II. (4) ①において妥当性を検討した QSAR 式を構成する物質群から、上記 II. (4) ②における手法により抽出したものを類似物質（群）とする。必要に応じて、部分構造及びそれに基づく類縁物質も考慮する。

(2) 用いる類似物質（群）等の生態毒性値

- 過去に環境省で実施された生態影響試験結果
- 過去に生態リスク初期評価において信頼性が確認された毒性値
- （上記が得られない場合）QSAR 式構築に使用された毒性値

(3) 類推

類似物質の総数や毒性傾向等により適した手法が変わるため、用いる手法を一律には規定しない。以下に例を示す。

- Trend Analysis
- Read Across

定量的な生態毒性値が得られないと判断される場合には、定性的な毒性傾向の推定を検討する。

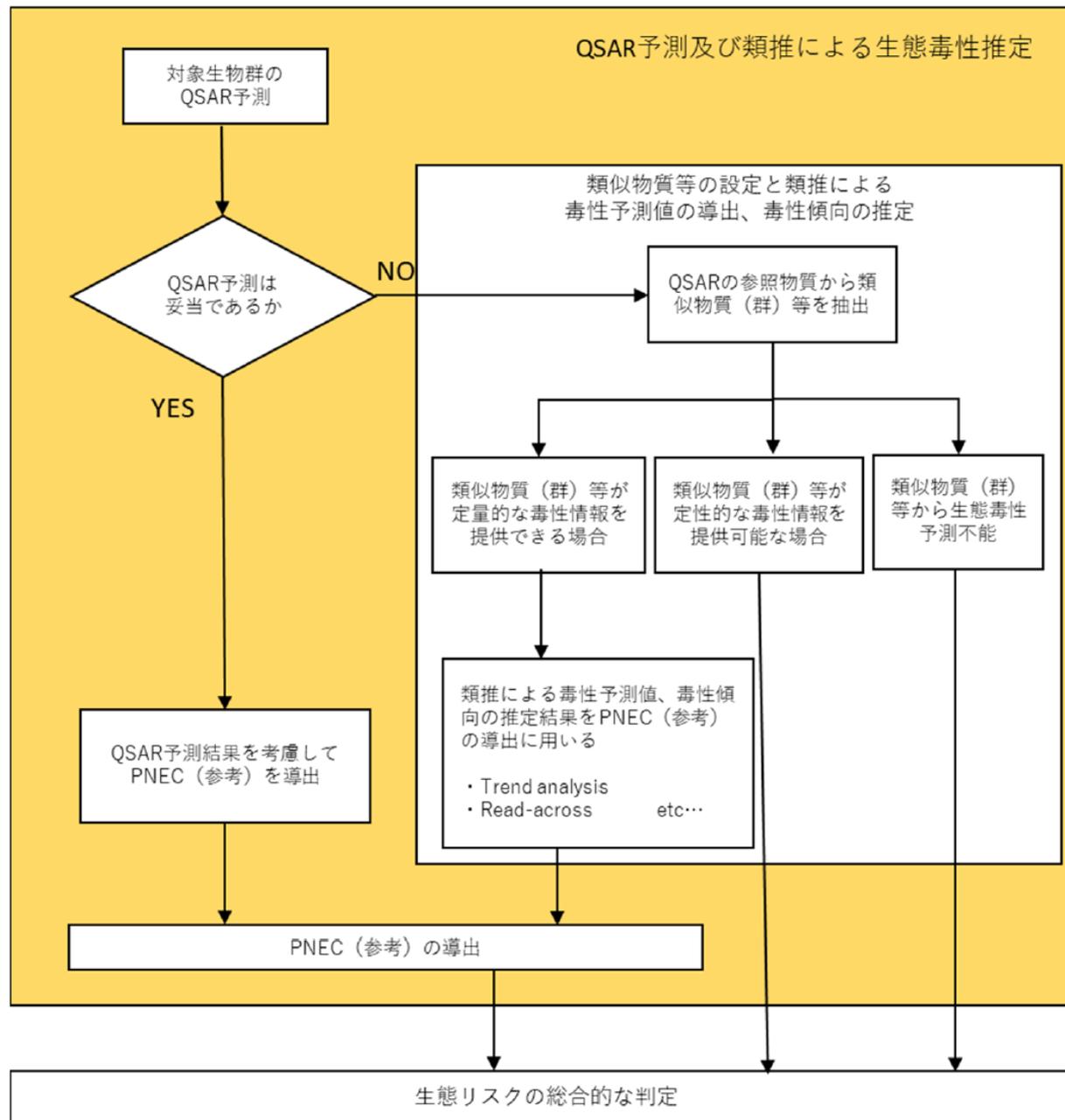


図2 QSAR 予測及び類推による生態毒性推定の手順

生態毒性予測に関する今後の展開

1) KATEについて

- ・ 化審法の新規公示物質を参照物質として追加したモデルの作成
- ・ (構造クラス分類) + (Log P と毒性とのlog-log回帰)
 以外のアルゴリズムを用いたモデルの作成

2) 生態毒性予測手法の活用について

- ・ 環境リスク初期評価におけるQAFを用いた生態毒性予測結果の
 (信頼性) 評価手法の一般化 (現在は、専門家判断に頼っているため)
- ・ Weight of Evidence (証拠の重み付け) への生態毒性QSARや類推手法の適用

KATE2025の活用における免責事項

本システムで得られた予測結果は、十分な予測精度を保証するものではありません。化学物質の生態毒性影響の程度について、参考値を得るためのツールの一つとしてご利用ください。

「化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律（化審法）」に基づく届出に必要な生態毒性試験結果として利用することはできません。

ご静聴ありがとうございました