

KATE2017 on NET β 版
(<https://kate2.nies.go.jp/nies/>)
簡易操作マニュアル 2018.03.29

NIES > CHERR > KATE > KATE2017 on NET
User Login > Input > Result > Verify QSAR

KAshinhou Tool for Ecotoxicity
KATE2017

User login New users please [register now](#)

login name
password
power user (check for advanced use)

Maintained by: Center for Health and Environmental Risk Research, National Institute for Environmental Studies, e-mail: kate@nies.go.jp
Copyright(C) 2018 Ministry of the Environment, Government of Japan, All Rights Reserved

※ KATE2017 on NET β 版は、化学物質の生態毒性

- ・ 魚類急性毒性試験における半数致死濃度 (LC₅₀)
- ・ ミジンコ遊泳阻害試験における半数影響濃度 (EC₅₀)
- ・ 藻類生長阻害試験における半数影響濃度 (EC₅₀)
- ・ 魚類初期生活段階毒性試験における無影響濃度 (NOEC)
- ・ ミジンコ繁殖試験における無影響濃度 (NOEC)
- ・ 藻類生長阻害試験における無影響濃度 (NOEC)

を予測するシステムです。

※ 化審法における今後の活用について

既に参考情報として一般化学物質のスクリーニング評価、優先評価化学物質のリスク評価に活用しているところですが、QSARによる予測値を事業者が提出するためのガイダンスや活用方法の検討も行っております。今後、環境省化学物質審査室のホームページなどで順次検討の結果はお知らせする予定です。

ご質問等がございましたら、下記までお問い合わせ下さい
国立研究開発法人 国立環境研究所 環境リスク・健康研究センター
kate@nies.go.jp

「KATE2011 on NET」からの主な変更点

- (1) 予測結果の改善
- (2) 藻類や慢性の毒性値予測の追加
KATE2017 では、魚類、甲殻類の慢性毒性値予測、藻類毒性値予測が可能
- (3) 部分構造検索方式の変更
FITS (<http://kate.nies.go.jp/onnet.html>) から SMARTS
(http://www.daylight.com/dayhtml_tutorials/languages/smarts/index.html
) に変更
- (4) 英語化
- (5) 表示・操作の改良
- (6) ログイン時の **Power User** チェックボックス追加
チェックした場合は **Power User** モード（詳細機能が利用可能なモード）、
チェックしない場合は一般ユーザモード（簡易モード）としてログイン
- (7) **Power User** のための各種ページの追加

1. 新規ユーザ登録 https://kate2.nies.go.jp/nies/user_regist_input.php

初めて使用する場合は、ユーザ名及びパスワードの登録を行ってください。また、既に登録されているユーザ名は登録することはできません。

なお、ユーザ名またはパスワードを忘れた場合も新規登録を行って下さい。長期間使用されていないユーザ名は定期的に削除されます。

NIES > CHERR > KATE > KATE2017 on NET
User Login > Registration

KAshinhou Tool for Ecotoxicity KATE2017

New User Registration

login name
(Input 5 or more characters.
If you cannot register, try another name.)

password
password (re-enter)

input registration key

registration key

2. ログイン <https://kate2.nies.go.jp/nies/index.php>

1. で登録したユーザ名及びパスワードを入力して、ログインしてください。

「power user」チェックボックスのクリック有り無しにより、Power Userモードと一般ユーザモードを選択できます。

- ・チェック有り ... Power Userモード：詳細機能が利用可能なモード
- ・チェック無し ... 一般ユーザモード：シンプルな機能の簡易モード

NIES > CHERR > KATE > KATE2017 on NET
User Login > Input > Result > Verify QSAR

KAshinhou Tool for Ecotoxicity KATE2017

User login New users please [register now](#)

login name
password
power user (check for advanced use)

*パスワードの変更も可能です。

NIES > CHERR > KATE > KATE2017 on NET
User Login > Input > Result

KAshinhou Tool for Ecotoxicity KATE2017

Password Change

Current Password
New Password
New Password (re-enter)

以降は、チェック無しの一般ユーザモードでログインした場合について説明します。

3. 化学物質の入力

NIES > CHERRI > KATE > KATE2017 on NET [Password](#) [Logout](#)
User Login > **Input** > Result

Input

Output from <https://cactus.nci.nih.gov> may be shown here. Thanks to Chemical Identifier Resolver service provided by NCI/CADD Group.
SMILES can be generated by using molecular editor **JSME Editor** (Java Runtime Plug-in is required).
Entered SMILES is classified by its substructure, and the ecotoxicity is predicted from prescribed QSAR. The glossary is [here](#).

Input SMILES of your chemical

CAS to SMILES, IUPAC Name **Name to SMILES, CAS** **SMILES to CAS, IUPAC Name**

CAS Name

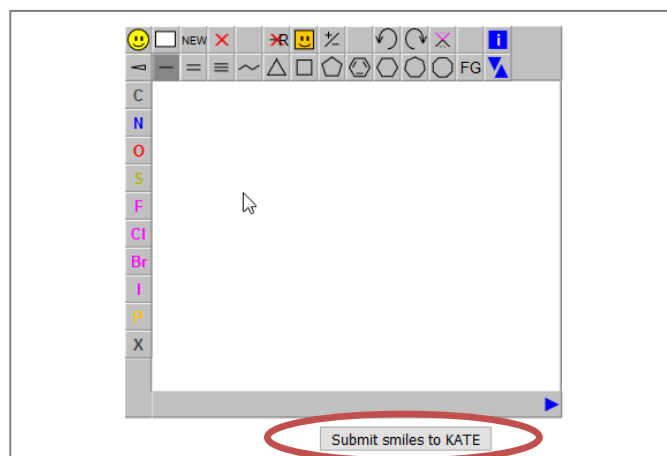
• **SMILES** * Required

化学物質は、SMILES で入力してください。

① JSME Editor（構造式エディタ）を用いて構造式を描くと SMILES に変換が出来ます。また、②「CAS to SMILES, IUPAC Name」、「Name to SMILES, CAS」を使用して名称、CAS 番号の入力から、SMILES への変換をすることが出来ます。

log *P*などの補足情報は入力すると予測結果のページに反映されます。必須項目ではありません。

- ① JSME Editor (構造式エディタ) ※Java Runtime Plug-in が必要です。
構造式を描き、「Submit smiles to KATE」をクリックします。



- ② 「CAS to SMILES, IUPAC Name」、 「Name to SMILES, CAS」

「CAS」の右のテキストボックスにCAS番号 (CAS番号はXXXXXXXX-XX-Xの形式で入力してください。例: 27271-55-2)、「CAS to SMILES, IUPAC Name」をクリックして下さい。構造図、Name, SMILESが表示されます。

同様に「Name」の右のテキストボックスに化学物質名を入力して、「Name to SMILES, CAS」をクリックした場合は、化学物質名から構造図、CAS、SMILESが表示されます。

SMILSEが入力されたら、Predictボタンをクリックします。

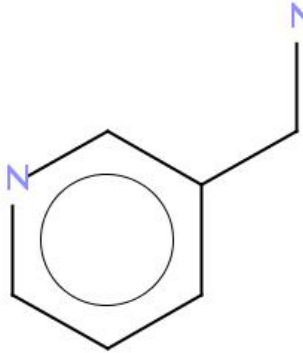
4. 結果の表示

ページの上部には入力した SMILES と補足情報が表示されます。分子量は入力した情報から計算した値が表示されます。SMILES は内部で変換されるため入力と異なる場合があります。なお、ClogP による計算値はライセンスの契約上、提供できません。

NIES > CHERR > KATE > KATE2017 on NET
 User Login > Input > Result > Verify QSAR

Result

CAS	3731-52-0		
Chemical Name	pyridin-3-ylmethanamine		
SMILES	NCc1ccncc1		
Molecular weight	108.14		
Water solubility[mg/L]	user input	<input type="text"/>	update
LogP	DB (measured)	-0.32	
	user input	<input type="text"/>	update




中段には、化学物質のクラス分類、Fish（魚類）、Daphnia（ミジンコ類）、Algae（藻類）の予測結果（緑字）等が表示されます。

QSAR Results

Include: Fish (chronic) Fish (acute) Daphnia (chronic) Daphnia (acute) Algae (chronic) Algae (acute)

Exclude: R² < 0.7 Q² < 0.6

QSAR Class Name*1	Type of Predicted Toxicity			Predicted Value [mg/L]	95% Prediction Interval	Descriptor(s)	Domain		Water Solubility*4	R ²	Q ²	RMSE	n (limit test)*5
	Species (acute/chronic)	Duration	Type of toxicity				Structure*2	Descriptor(s)*3					
amine unreactive NH2 =1 aliphatic	Fish (acute)	96-hr	LC50	1800	[350, 9000]	ClogP	×	○	unentered	0.9512	0.9437	0.3118	25(2)
CNOS_X basic aromatic n unreactive	Algae (acute)	72-hr	EC50	130	[3.3, 5100]	ClogP	×	×	unentered	0.8536	0.7672	0.4912	9(5)
CNOS_X basic aromatic n unreactive	Algae (chronic)	72-hr	NOEC	62	[1.9, 2000]	ClogP	×	○	unentered	0.9131	0.8718	0.5532	11(3)

*1 The target chemical may be classified in to multiple QSAR classes. The QSAR class with the judgement of "○" should be used. Press  to move to the Verify QSAR page helping your decision, and display the statistical information of the QSAR equation related to the prediction accuracy, predictivity, robustness, similarity to the reference chemicals and so on.
 *2 KATE judges the applicability domain of the QSAR class as "Structure G judgement" with the predefined substructure. Usually, the target chemical belongs to several QSAR classes, which are identified by ClassID started with G letter (see table Structure Class if you login through the power user mode).
 ○: All of the substructures of the target chemical are included in the substructure list made from reference chemicals in the class.
 △: Included in the substructure list made from reference substances of this QSAR class or the QSAR class called "narcotic class".
 X: Included in the substructure list made from reference substances of neither this QSAR class or the QSAR class "narcotic class". In the case of "○" or "△", it is within the applicability domain.
 *3 If all the descriptor(s) are interpolating, it is judged as within the domain, indicated by "○" while any extrapolating values are found, "X" is displayed.
 *4 If the aqueous solubility of this chemical is higher than the toxicity value, "○" is displayed while it is not, "X" is displayed.
 *5 The number within the parenthesis is the one with limit test.

下段には、化学物質に含まれる部分構造の一覧が表示されます。

Substructure			
FragID	Substructure Class Name	Count	SMARTS
3001	elements other than CX	2	[!#6;#9;!#17;#35;#53]
3003	elements other than COX	2	[!#6;#8;#9;!#17;#35;#53]
3004	elements other than CSX	2	[!#6;#16;#9;!#17;#35;#53]
3009	elements other than COSX	2	[!#6;#8;#16;#9;!#17;#35;#53]
3011	elements other than COns	1	[!#6;F;Cl;Br;I;n;s;o;o]
3014	elements other than CnosX	1	[\$(!#6;F;Cl;Br;I;n;s;o)]\$(n+)
3100	amine CNH2	1	[#7x3H2;\$(#7[+v6]);\$(N[#6]([#7,#8,#16]))]
3121	amine Nv3 not hindered	1	[#7v3x3;\$(NR0[CR1][CR1][CX4R0][CX4R1]);\$(NR1)(C)(C)(C);\$(#7[#7]);\$(NC(=CH2));\$(N[#6]([#7,#8,#16]))]
4543	MF: not C,c,O,F	2	[!C;!c;!O;!F]
4711	aliphatic-NH2	1	[NH2.v3.x3;\$(NC=[S.N.O]);\$(NCC(=O)O)[C]
4892	MF: not CHO (wPilotO)	2	[!C;!c;!O]
4893	MF: not CHOP	2	[!C;!c;!O;!P]
4910	aromatic	6	[a]
4911	aromatic n	1	[n]
5007	Nitrogen [Nn]	2	[#7]
5037	Mechanism=pro-SB 1	1	[CH2][NH2]
5136	IRAC 4 nicotinic AChR agonist	1	nccC[S8;\$(S=[N](=O)C)N8x38;\$(NC=[S.O])]
5500	amin (daphnia 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])]

5. 参照物質の閲覧と比較

予測結果画面で、分類されたクラスをクリックすると、そのクラスの回帰直線、及び参照物質一覧が表示されます。詳しくはKATE2011のKATE on NETマニュアル http://kate.nies.go.jp/nies/doc/KATEmanual_net2011.pdf を参照ください。

6. ログアウト

作業が終了したら、ログアウトをしてください。ログアウトをせずに終了すると、作業されていた最後の物質の予測結果がサーバーに残りますので、ご注意ください。なお、ログアウトを忘れた場合でも、同じユーザ名で再度ログイン、ログアウトをすれば情報は削除されます。



NIES > CHERR > KATE > KATE2017 on NET
 User Login > Input > Result > Verify QSAR

KAshinhou Tool for Ecotoxicity
KATE2017

User login New users please [register](#) now

login name
 password
 power user (check for advanced use)

Logged out .