

## これまでの公開状況と更新内容について

### 1, これまでの公開状況

現在もホームページ上で公開しているKATE2011版については、2008年1月に試用版、2009年3月にKATE2009をインターネットで公開しました。2011年3月には、更新版KATE2011を公開し、参照物質データの追加、部分構造の分類ルールの修正、構造判定の変更と皮膚感作性に関する部分構造の追加等を行いました。

その後、現在のKATE2020版と同じ系列の新しい生態毒性予測システムの開発を開始し、2018年3月にKATE2017 on NET $\beta$ 版、2019年1月にKATE2017 on NET 正式版 (version 1.0) を公開しました。KATE2011からKATE2017への変更では主に、部分構造検索方式のFITS (KATE2011で使用される部分構造表記法および検索プログラム) からSMARTS記法およびCDKを利用した検索プログラムへの変更、藻類や慢性の毒性値予測の追加、不等号付き毒性値データの追加、構造クラスの導入、部分構造・QSARクラスの大幅な変更、log P計算モジュールのClogPからKOWWIN™への変更、表示・操作の改良、英語化等を行いました。

### 2, KATE2020 の更新内容

令和2年2月3日 KATE2020 version 1.0 公開

KATE2017からの主な更新は以下の通りです。

#### ■主な更新内容

#### (1) QSARモデルの更新

- ・参照物質の記述子log Pの推定方法をClog PからKOWWIN™に変更。それに伴い一部のQSARモデルを変更。
- ・予測対象物質のlog P値として使用するための優先順位をユーザ入力値、KOWWIN™実測値、KOWWIN™推定値から、ユーザ入力値、KOWWIN™推定値に変更。
- ・Log P>6.0である物質は全てQSAR式計算から除外。
- ・参照物質とQSARクラスの追加・削除。
- ・QSAR式の計算には使われない物質 (Support Chemicals : log P>6.0のデータ、不等号付きデータ、外れ値) を参考情報として表示。

#### (2) 表示・操作方法の改良

- ・QSARクラスに含まれる参照物質およびSupport Chemicalsのデータ一覧を追加。
- ・QSARクラスに対応する構造クラスの定義一覧を追加。
- ・QSAR式詳細画面の物質一覧にソート機能を追加。
- ・グラフのポイント選択と予測区間・信頼区間を連動。
- ・KOWWIN™計算をスキップするチェックボックスを追加。

## 令和2年4月30日 KATE2020 version 1.1へアップデート

### ■主な更新内容

- ・予測毒性値 (>0) が $10^6$ 以上もしくは $10^{-5}$ [mg/L]未満の場合は指数表記 (例:  $2.3e-7$ ) で表示するように変更。
- ・予測毒性値を有効数字2桁で表示するように変更。
- ・化学物質入力の際に、正しい情報を入れたときにもエラーになる場合がある問題を修正。
- ・その他、表示に関する軽微な修正。

## 令和3年1月28日 KATE2020 version 2.0へアップデート

### ■主な更新内容

#### (1) QSARモデルの更新

- ・デフォルトで予測結果画面に表示するQSARクラスの基準のうち $Q^2 \geq 0.6$ を $Q^2 \geq 0.5$ に変更。
- ・毒性値を修正したことにより、藻類慢性のQSARクラスのQSAR式1つを変更。

#### (2) 表示・操作方法の改良

- ・部分構造に対する構造判定結果の表示機能を追加。
- ・印刷フォーマット表示を追加。
- ・複数化学物質予測でエラーがあった場合に途中で止まる問題を修正。
- ・その他、表示に関する修正。

#### (3) 構造クラス名の改良

- ・不適切なCN\_X等の接頭辞を削除もしくは追加。
- ・スペルミスを修正。
- ・不要な表記を削除。
- ・接頭辞の表記を統一。
- ・Reactive/Unreactiveの表記ミスを修正。
- ・予測毒性タイプを修正。