

化学物質の安全管理に関するシンポジウム (2019年11月28日)
－化学物質の評価・管理に関する手法やツール等の活用状況－
於：東京大学弥生講堂一条ホール

環境リスク評価管理に向けた化学物質データベースと生態毒性予測システムの開発と活用



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
環境リスク評価事業拠点長
大野 浩一

発表の概要

国立環境研究所 環境リスク・健康研究センターにおいて開発・改良を行っている2つのツールについて紹介し、環境リスク・管理における活用について説明します。

1. 生態毒性予測システム 「KATE」

2. 化学物質データベース 「Webkis-Plus」

(多媒体環境動態予測モデル「G-CIEMS」は昨年度に発表)

おことわり

本講演における意見等は発表者個人の見解であり、所属組織及び国の見解を示したものではありません。

生態毒性予測システム KATE

KATE 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・健康研究センターにおいて、研究・開発された生態毒性QSAR*システムです。

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

- KATEを構築している参照データは、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ル・データベースの魚類急性毒性試験結果です。

* 環境省試験は、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ます。

生態毒性に関する代表的なQSARの特徴

| 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・健康研究センター | logP (水-オクタノール分配係数) | 藻類・ミジンコ・魚類の急性毒性と慢性毒性 (2017) | ・適用範囲の判定：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ChV (NOECとLOECの幾何平均) | ・適用範囲の判定：記述子 |
| TIMES | ブルガリアブルガス大学 | logBCF _{tox} , LUMO等 | 魚類・甲殻類急性毒性等 | ・適用範囲の判定：構造 ・有償 |
| OECD QSAR Toolbox | OECD、EU | 任意 (ユーザーが選択) | 任意 | ・適用範囲：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開発の経緯と現状

- **Jan 31, 2008** 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
- **Mar 16, 2009** スタンドアロン版「**KATE on PAS**」を公開
(変更点) スタンドアロン版の追加、データ追加、計算アルゴリズムの変更等
- **Mar 31, 2011** 更新版**KATE2011**を公開
(変更点) データの追加、**QSAR**モデルの更新
- **Dec 25, 2015** **KATE2011**の更新
(変更点) - **QSAR**結果に予測区間 (信頼水準**95%**) の追加
- 式の詳細グラフの信頼区間、予測区間の修正実施
- **Mar 29, 2018** **KATE2017 on NET β**版を公開
(変更点) - 英語化
- 参照物質データの追加 (魚類：**289**物質、ミジンコ：**109**物質)
- 藻類毒性の追加 (藻類生長阻害試験における**EC50**及び**NOEC**)
- ミジンコ慢性毒性の追加 (ミジンコ繁殖試験における**NOEC**)
- 魚類慢性毒性の追加 (魚類初期生活段階毒性試験における**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)
- **Jan 30, 2019** **KATE2017 on NET**正式版 (**version1.0**)を公開
(変更点) - 複数物質の予測機能の追加 など



精度向上と操作性向上のために継続的改善を実施

2019年現在、 KATE 2011とKATE 2017の両方を公開しています⁶

KATE2017で予測可能な毒性の種類

| 生物群 急性/慢性 | 生物種 | 試験 | 試験期間 | 毒性のタイプ |
|--------------|---|---------------------------------|--------|--------|
| 魚類急性 | ヒメダカ (<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 | <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> | 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 | ヒメダカ (<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) | ~*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 | <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> | 藻類生長阻害試験 (OECDテストガイドライン201) | 72-hr | NOEC |

*1 魚類初期生活段階試験は魚種やふ化日数によって試験期間が異なります

KATEのホームページ (<https://kate.nies.go.jp>)

NIES > CHERR > KATE



KAshinhou Tool for Ecotoxicity Ecotoxicity prediction system

Japanese

Change Log

Site Policy

FAQ



January 30, 2019 **KATE2017 on NET**, which is an updated version of the internet version of KATE2011 (**KATE on NET**, this version is available only in Japanese), is now available. Please see [Change Log](#). KATE supports the browser Firefox.

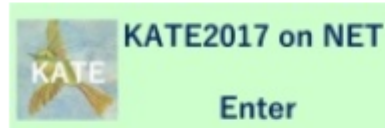
Your feedback on KATE2017 on NET is welcomed. Please e-mail us at kate@nies.go.jp

KATE: An ecotoxicity prediction system

KAshinhou¹ Tool for Ecotoxicity (**KATE**) is an ecotoxicity prediction system that consists of quantitative structure–activity relationship (QSAF) models and was researched and developed under contract with the Ministry of the Environment, Government of Japan from fiscal year 2004 to fiscal year 2018 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. In KATE2017, the predicted ecotoxicity values of the following endpoints are provided: EC₅₀ and no-observed-

KATE2017



KATE2017 on NET
operating manual

KAshinhou Tool for Ecotoxicity KATE2017

ユーザーログイン画面

初めての方は
“register”ページにて
ユーザー登録が必要です

米国環境保護庁の
KOWWINプログラムの
使用許諾条項に同意す
る必要があります

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

login name

password

KOWWIN v1.69 (April 2015)
© 2000-2015 U.S. Environmental Protection Agency
KOWWIN is owned by the U.S. Environmental Protection Agency and is protected by copyright throughout the world.
Permission is granted for individuals to download and use the software on their personal and business computers.
Users may not alter, modify, merge, adapt or prepare derivative works from the software. Users may not remove or obscure copyright, tradename, or proprietary notices on the program or related documentation.
KOWWIN contained therein is a tradename owned by the U.S. Environmental Protection Agency.

I agree to and accept the terms of the agreement above.

予測対象物質の入力画面

Input SMILES of your chemical

CAS to SMILES, IUPAC Name

Name to SMILES, CAS

SMILES to CAS, IUPAC Name

CAS

Name

- SMILES * Required

- log P Recommended

Prediction of Multiple Chemicals

- SMILES list

複数の化学物質
を同時に予測する
ことも可能
(現在は50物質まで)

Caution: KATE2017 can accept up to 50 chemicals at present.

化学物質（分子）の構造をSMILES* 記法で入力します。
CAS 登録番号や名前からSMILESに変換することも可能です。

*SMILES (Simplified Molecular Input Entry System)

予測対象物質の入力

※SMILES形式により予測対象化学物質の情報を入力します。

対象物質のSMILES入力にはKATE特有の制限があります。
特に[Na], [Na+]などの塩の形態は酸の形態で入力してください。

CAS登録番号からSMILESを表示させることも可能ですが、上記のようなKATEで予測可能な形式に変更させなければならない場合もあります。

その他の制限及び詳細はweb画面表示とKATEマニュアルをご参照ください。

The KATE system can predict ecotoxicity of organic chemicals only.

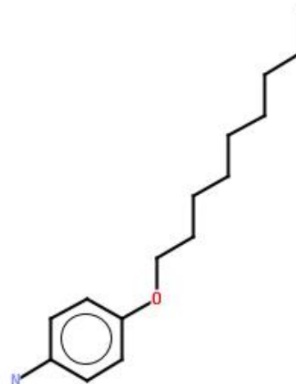
KATE2017 cannot predict ecotoxicity of chemicals represented as following types of SMILES:

- i. SMILES which includes elements other than H, C, N, O, F, Si, P, S, Cl, As, Br, Sn, and I.
- ii. SMILES which includes ions other than ammonium [N+] or pyridinium [n+].
- iii. SMILES which includes ".", i.e. SMILES which expresses a mixture.

The strings such as [Na], [K], [Li], [Na+], [K+] and [Li+] in SMILES should be replaced by the protonated forms. For example, "c1ccccc1O[Na]" needs to be replaced by "c1ccccc1O".

結果画面 (KATE2017)

| | | | |
|------------------|-----------------------------------|----------------------|---------------------------------------|
| CAS RN* | 50262-67-4 | | |
| Chemical Name | 4-nonoxyaniline | | |
| SMILES | CCCCCCCCOc1ccc(N)cc1 | | |
| Molecular Weight | 235.37 | | |
| log P | Measured Value in KOWWIN Database | | |
| | Calculated Value by KOWWIN | 5.0857 | |
| | User Input Value | <input type="text"/> | <input type="button" value="update"/> |



QSAR Results

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

Exclude: R² < 0.7 Q² < 0.6 n < 5

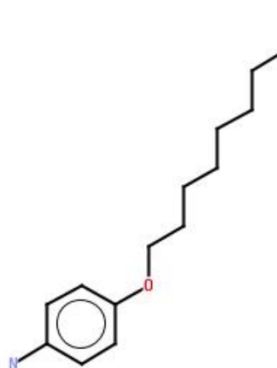
| QSAR Class Name* ¹ | Type of Predicted Toxicity | | | log P | | Predicted Toxicity [mg/L] | 95% Prediction Interval | Applicability Domains | | Statistics of QSAR Class | | | |
|---|----------------------------|----------|------------------|--------------------------|------------|---------------------------|-------------------------|-------------------------|---------------------|--------------------------|----------------|--------|-----------------|
| | Species (acute/chronic) | Duration | Type of Toxicity | Type used for Prediction | Used Value | | | Structure* ² | log P* ³ | R ² | Q ² | RMSE | n* ⁴ |
| amine unreactive aromatic w/ NO2, SO2 w/o o-C | Fish (acute) | 96-hr | LC50 | Calculated | 5.0857 | 0.22 | [0.036, 1.3] | in | in | 0.8943 | 0.8697 | 0.3204 | 24(3) |
| CNOS_X amine aromatic lesstoxic | Fish (acute) | 96-hr | LC50 | Calculated | 5.0857 | 0.33 | [0.072, 1.5] | in | in | 0.9226 | 0.9035 | 0.2651 | 20(6) |
| amine unreactive aromatic w/ NO2, SO2 w/o o-C | Daphnia (acute) | 48-hr | EC50 | Calculated | 5.0857 | 0.087 | [0.01, 0.76] | in | in | 0.8087 | 0.6291 | 0.3115 | 12(0) |

* 1 The query chemical may be classified into multiple QSAR classes. Click to see the details of the QSAR model.

「R²<0.7, Q²<0.6, n<5」という条件により、統計値が良くないQSARクラスは表示されません。これら統計値の条件はKATE2017における目安です。

結果画面 (KATE2017)

| | | |
|------------------|-----------------------------------|--|
| CAS RN® | 50262-67-4 | |
| Chemical Name | 4-nonylaniline | |
| SMILES | CCCCCCCCOc1ccc(N)cc1 | |
| Molecular Weight | 235.37 | |
| log P | Measured Value in KOWWIN Database | |
| | Calculated Value by KOWWIN | 5.0857 |
| | User Input Value | <input type="text"/> <input type="button" value="update"/> |



QSAR Results

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

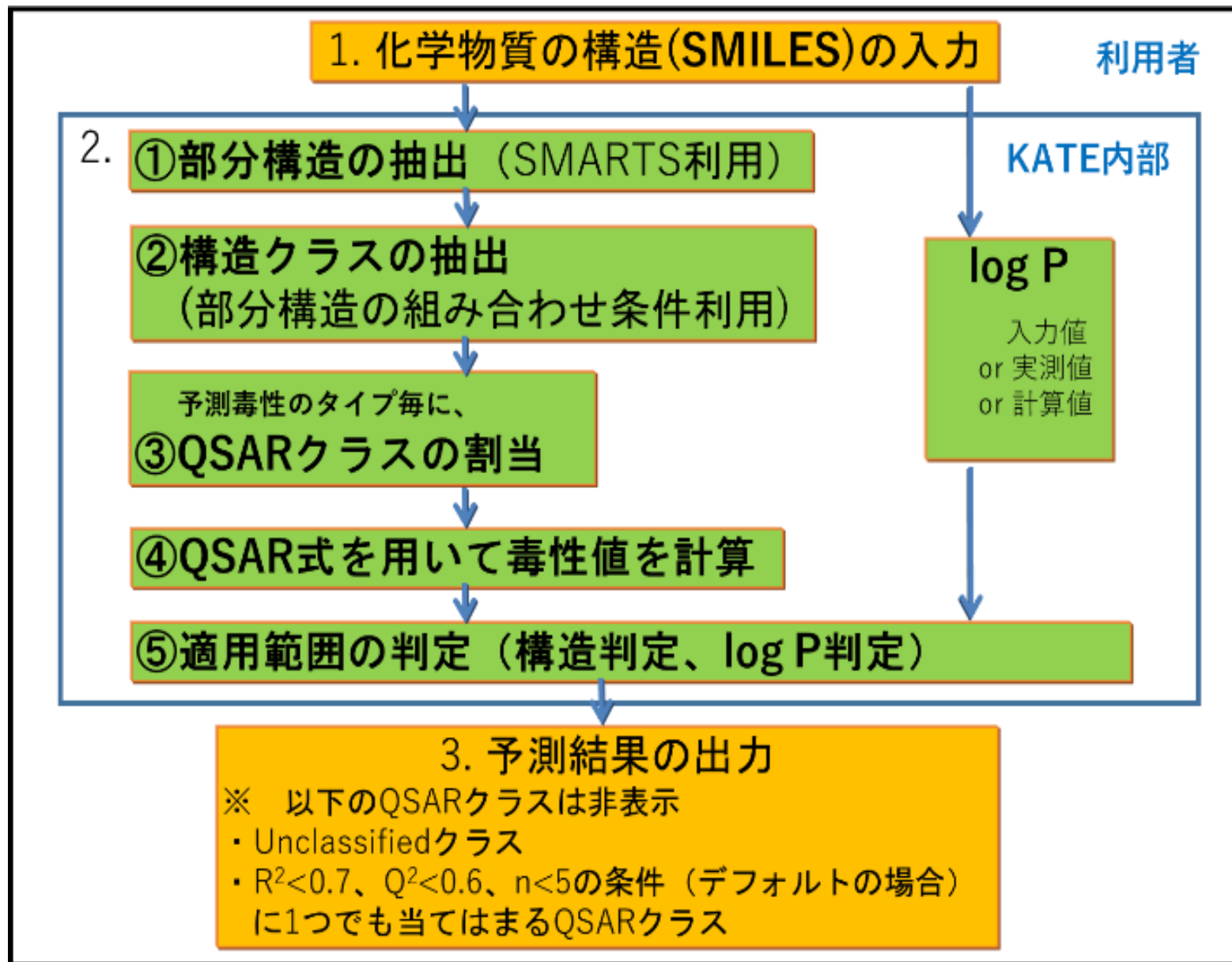
Exclude: R² < 0.7 Q² < 0.6 n < 5

go

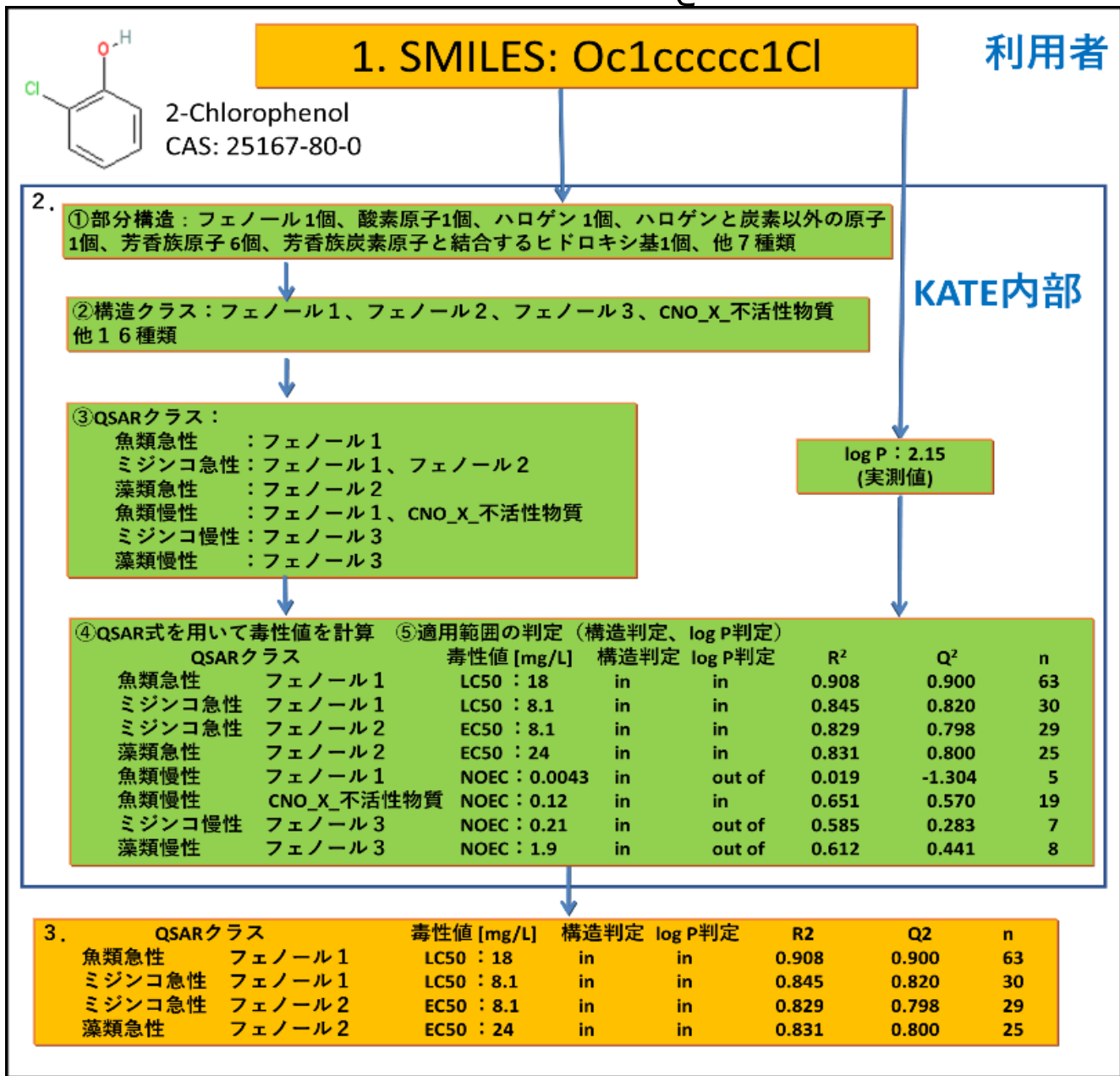
| QSAR Class Name* ¹ | Type of Predicted Toxicity | | | log P | | Predicted Toxicity [mg/L] | 95% Prediction Interval | Applicability Domains | | Statistics of QSAR Class | | | |
|---|----------------------------|----------|------------------|--------------------------|------------|---------------------------|-------------------------|-------------------------|---------------------|--------------------------|----------------|--------|-----------------|
| | Species (acute/chronic) | Duration | Type of Toxicity | Type used for Prediction | Used Value | | | Structure* ² | log P* ³ | R ² | Q ² | RMSE | n* ⁴ |
| amine unreactive aromatic w/ NO2, SO2 w/o o-C | Fish (acute) | 96-hr | LC50 | Calculated | 5.0857 | 0.22 | [0.036, 1.3] | in | in | 0.8943 | 0.8697 | 0.3204 | 24(3) |
| CNOS_X amine aromatic lesstoxic | Fish (acute) | 96-hr | LC50 | Calculated | 5.0857 | 0.33 | [0.072, 1.5] | in | in | 0.9226 | 0.9035 | 0.2651 | 20(6) |
| amine unreactive aromatic w/ NO2, SO2 w/o o-C | Daphnia (acute) | 48-hr | EC50 | Calculated | 5.0857 | 0.087 | [0.01, 0.76] | in | in | 0.8087 | 0.6291 | 0.3115 | 12(0) |
| CNOS_X amine aromatic lesstoxic | Daphnia (acute) | 48-hr | EC50 | Calculated | 5.0857 | 0.065 | [0.0025, 1.7] | in | in | 0.6484 | 0.3280 | 0.4505 | 15(1) |
| amine unreactive aromatic w/ NO2, SO2 w/o o-C | Algae (acute) | 72-hr | EC50 | Calculated | 5.0857 | 3.8 | [0.33, 43] | in | out of | 0.381 | -0.4309 | 0.2924 | 11(0) |
| CNO_X unreactive (Fish chronic), excl. (CnosX w/o n+) | Fish (chronic) | - | NOEC | Calculated | 5.0857 | 0.02 | [0.0011, 0.38] | in | in | 0.6509 | 0.5698 | 0.5507 | 19(0) |
| amine unreactive aromatic w/ NO2, SO2 w/o o-C | Daphnia (chronic) | 21-day | NOEC | Calculated | 5.0857 | 0.00027 | [0.000006, 0.013] | in | out of | 0.6894 | 0.3027 | 0.3198 | 8(0) |

「R²<0.7, Q²<0.6, n<5 を除外する」のチェックをはずすと、統計値が良くない QSARクラスも表示されます。これら統計値の値も変更可能です。

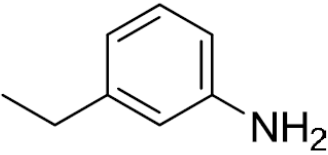
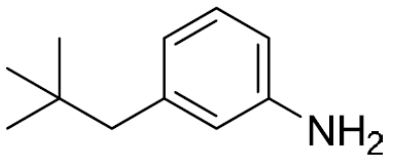
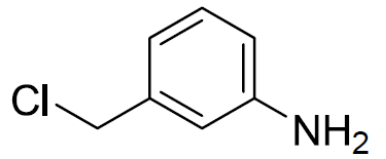
KATE2017におけるQSAR予測のフロー

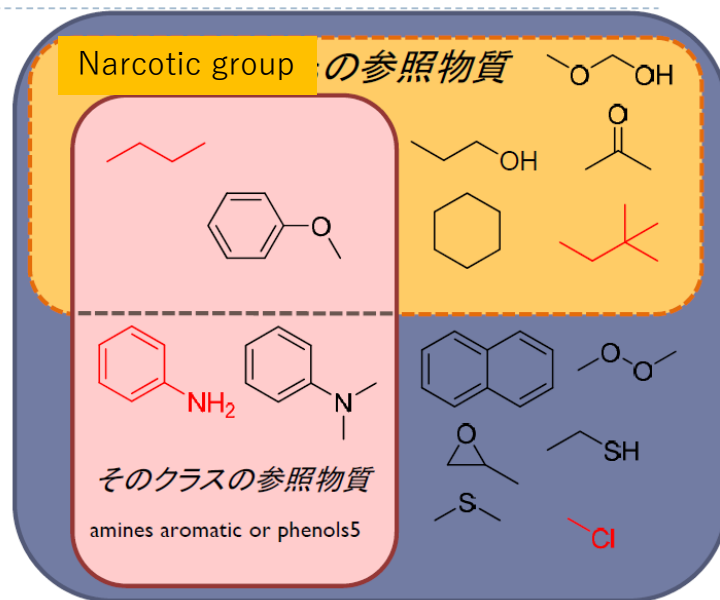


KATE2017におけるQSAR予測のフロー (例)



構造判定とlog P 判定

| | C(1) | C(2) |
|---|---------------|------|
|  | YES 構造判定：○ | — |
|  | NO 構造判定：△ | YES |
|  | NO 構造判定：× | NO |



構造判定

参照物質の部分構造のリスト

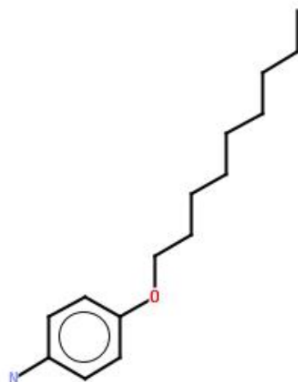
C(1): 予測した化学物質の**全ての部分構造**が、「そのクラス」の参照物質の部分構造リストに含まれるか。

C(2): 予測した化学物質の**全ての部分構造**が、「そのクラス」又は Narcotic group の参照物質の部分構造リストに含まれるか。

log P 判定：参照物質（QSARモデルを構成しているデータ）の log P の範囲内であれば内挿で OK、なければ外挿になるので NG

KATE2017では同じ毒性の種類に対して複数のQSARクラスが存在することがあります

| | | |
|------------------|-----------------------------------|--|
| CAS RN® | 50262-67-4 | |
| Chemical Name | 4-nonoxylaniline | |
| SMILES | CCCCCCCCOc1ccc(N)cc1 | |
| Molecular Weight | 235.37 | |
| log P | Measured Value in KOWWIN Database | |
| | Calculated Value by KOWWIN | 5.0857 |
| | User Input Value | <input type="text"/> <input type="button" value="update"/> |



QSAR Results

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

Exclude: R² < 0.7 Q² < 0.6 n < 5

go

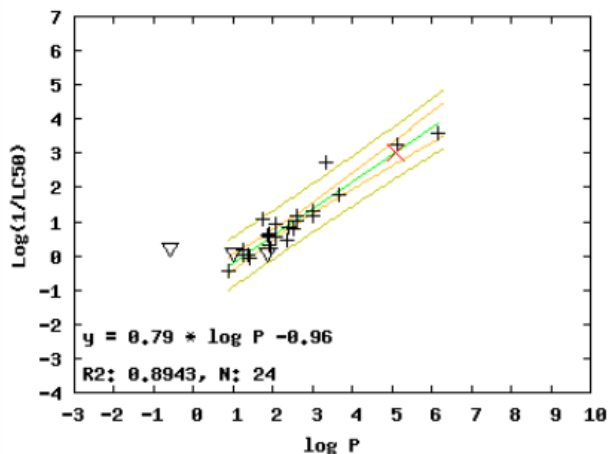
| QSAR Class Name* ¹ | Type of Predicted Toxicity | | | log P | | Predicted Toxicity [mg/L] | 95% Prediction Interval | Applicability Domains | | Statistics of QSAR Class | | | |
|---|----------------------------|----------|------------------|--------------------------|------------|---------------------------|-------------------------|-------------------------|---------------------|--------------------------|----------------|--------|-----------------|
| | Species (acute/chronic) | Duration | Type of Toxicity | Type used for Prediction | Used Value | | | Structure* ² | log P* ³ | R ² | Q ² | RMSE | n* ⁴ |
| amine unreactive aromatic w/ NO2, SO2 w/o o-C | Fish (acute) | 96-hr | LC50 | calculated | 5.0857 | 0.22 | [0.036, 1.3] | in | in | 0.8943 | 0.8697 | 0.3204 | 24(3) |
| CNOS_X amine aromatic lesstoxic | Fish (acute) | 96-hr | LC50 | calculated | 5.0857 | 0.33 | [0.072, 1.5] | in | in | 0.9226 | 0.9035 | 0.2651 | 20(6) |
| amine unreactive aromatic w/ NO2, SO2 w/o o-C | Daphnia (acute) | 48-hr | EC50 | Calculated | 5.0857 | 0.087 | [0.01, 0.76] | in | in | 0.8087 | 0.6291 | 0.3115 | 12(0) |

* 1 The query chemical may be classified into multiple QSAR classes. Click to see the details of the QSAR model.

QSARクラスのモデル式と参照物質データを確認しながら、よりよい予測値を採用します
(検討・考察が必要な部分)

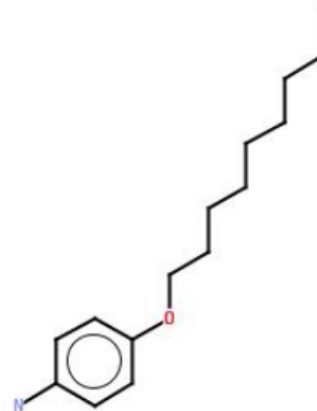
Verify QSAR Species: Fish (acute) ID: 12201241 Name: amine unreactive aromatic w/ NO2, SO2 w/o o-C

Horizontal Axis:



Shift:

Zoom: X: Y:



| Equation | Number of Data Points used for Regression | Total Number of Chemicals | log P Range |
|----------------------------|---|---------------------------|----------------|
| $y = 0.79 * \log P - 0.96$ | 24 | 27 | [0.864, 6.175] |

*1 +: data, v: limit test data (no effect at the highest concentration)

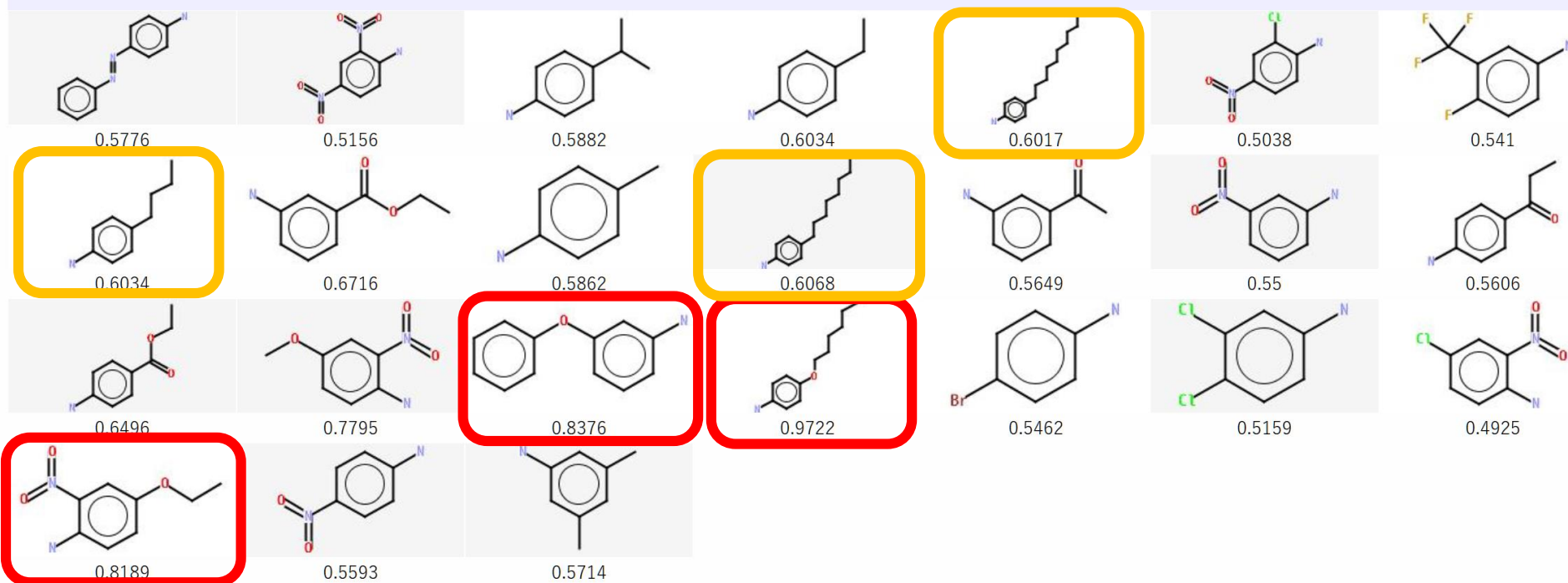
*2 only + are used for regression

QSAR式構築に使用した 参照物質一覧

- Chemicals list

Value under each structural formula represents the similarity (Tanimoto coefficient with Pubchem Fingerprints) to the target chemical.

- Reference Chemicals



+ Limit test

KATEの活用について

- 予測可能な化学物質の適切なSMILESを入力することにより、生態毒性影響の「程度」について予測することができます。
ただし、結果の毒性値は参考としての値であり、「そのまま」信頼できる毒性値として利用できるわけではありません。
- それぞれのQSARクラスによって、使用されているデータの数や回帰直線への当てはまり、ばらつきなどが異なります。
また、参照物質群が予測をしようとしている物質とどの程度類似しているか（特に部分構造について）を検証することが重要です。
- 魚類慢性毒性に対する予測は試験データ数が少ないため、他の種類の毒性予測に比べると精度が低いと考えられます。
- QSAR自体としての活用の他に、参照物質を検討することにより、カテゴリー・アプローチへの活用も考えられるかもしれません。
(OECD QSAR toolboxと併用するなど)

生態毒性QSARに関する考察

- 過去に実施された生態毒性試験の結果（参照物質）を利用することから、参照物質に部分構造が同一で構造が似ている物質の予測は精度が比較的良いと考えられます。
- 一方で、新規の構造や特別な生理活性があるような化学物質の予測には向いていません。
- QSAR予測の適用範囲を広くするためには、新しいデータ（＝生態毒性試験）を追加していく必要があります。
- 水生生物毒性に対するQSARの多くは、毒性の作用機序の詳細までは考慮していないと考えられます。将来的には、作用機序を考慮したモデルや試験体系を開発していくことが望まれます。

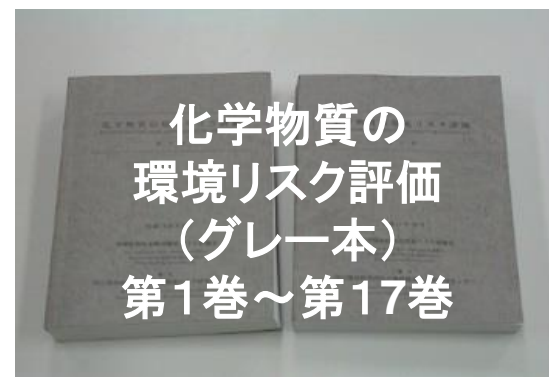
環境リスク初期評価における活用

「化学物質の環境リスク初期評価」

<http://www.env.go.jp/chemi/risk/index.html>

ガイドライン：[3]生態リスク初期評価において、

「定量的構造活性相関(QSAR)による予測値の活用については、当面、専門家判断の根拠の一つとし、評価事例を積み重ねた後にQSAR予測値の評価への扱いを再度検討する。」
としている。

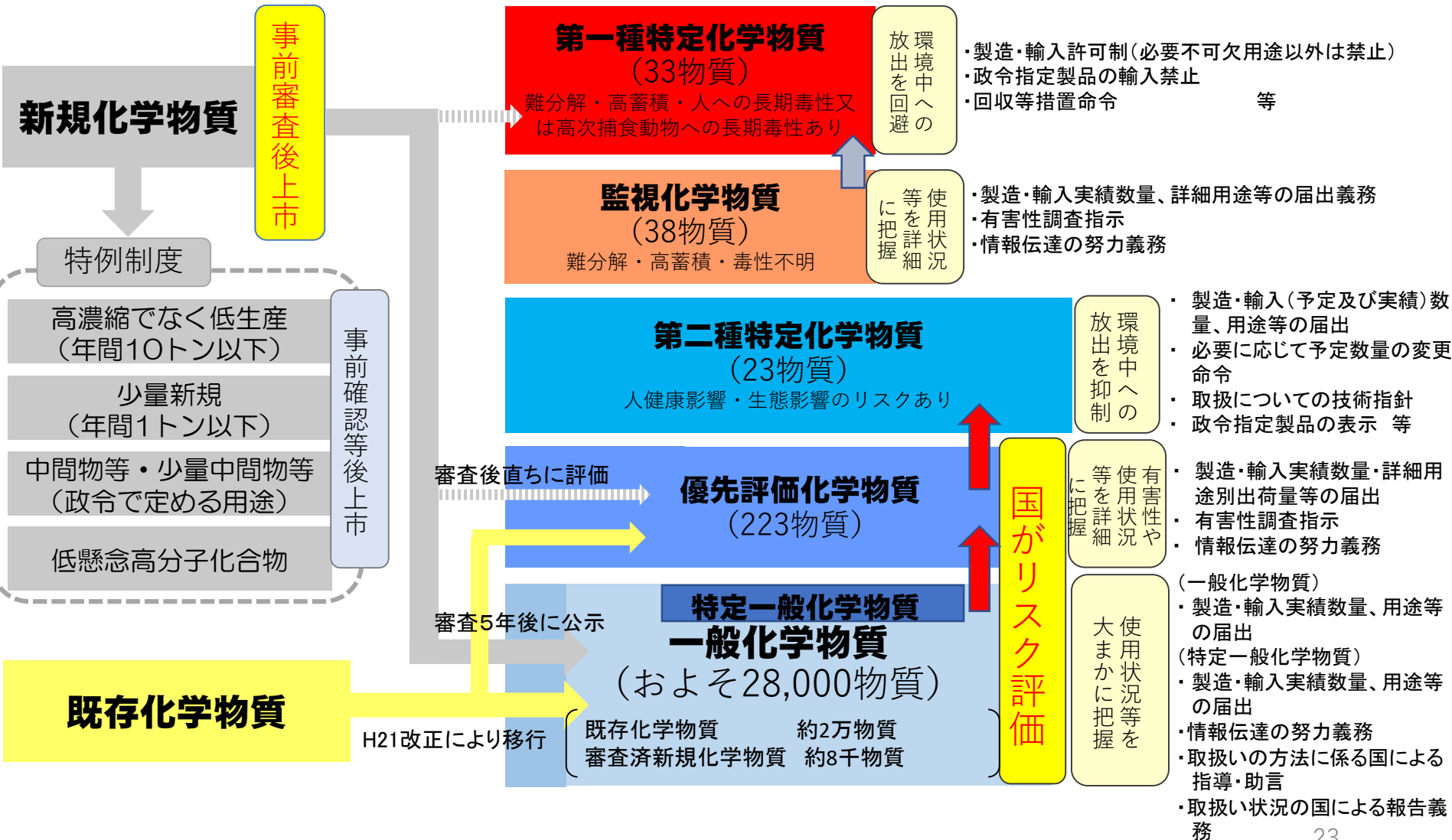


**2019年度は第18巻が
公開予定**

化審法の体系

○上市前の事前審査及び上市後の継続的な管理により、化学物質による環境汚染を防止。

物質数は令和元年9月時点



化審法における活用

- 化審法に基づくスクリーニング評価の基本的な考え方【改訂第1版】（2019年9月11日改訂）では以下の記載があります。
「QSARに関しては、新規化学物質審査や既存化学物質安全性点検等の試験データ等を用いて導出した当該QSARの推計精度（正解率、統計データ）や評価対象物質に対する適用可能性等を加味して、利用可能性等を検討し、活用を図る。」
- このため、一般化学物質のスクリーニング評価を中心に、QSARやカテゴリーアプローチの活用方法について、検討を行っています。
- なお、QSARで得られた予測結果は、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。
ご留意願います。

化学物質データベース Webkis-Plus

謝辞：

Webkis-Plusの資料については、国立環境研究所 環境リスク・健康研究センター 今泉圭隆 主任研究員のご協力をいただきました。

Webkis-Plusとは

<https://www.nies.go.jp/kisplus/>



- 化学物質のリスク関連情報を提供することを目的に環境リスク・健康研究センターで管理・運用しているWebサイト。
- 「化学物質データベース」でgoogle検索すると、トップに表示（2019年10月15日時点）
- 約70の出典からの10,000物質以上の情報を掲載している。
- 収集した化学物質情報をカテゴリ別に掲載している。
- カテゴリは、法規制等、曝露関連、健康影響、生態影響試験、リスク評価・有害性、分析法の6つに大別されており、さらに詳細なカテゴリに階層的に分けられている。
- カテゴリを利用した検索など、様々な切り口による検索が可能。
- 特に農薬、環境分析法、曝露に関する情報が充実している。

歴史的経緯

化学物質安全情報提供システム (KIS-NET)

- ・ 神奈川県環境科学センター
- ・ 1991年から情報提供開始
- ・ 1999年からインターネット版公開

↓ 物性値等基盤的情報を提供いただく

旧WebKis-Plus

- 【バージョン1】
- ・ ASP + MS Access、1997年から公開
- 【バージョン2】
- ・ PHP + Oracle、2007年に移行

旧EnvMethod

- ・ PHP + PostgreSQL
- ・ 2003年から公開

↓ 2つのサイトを統合 ↓

Webkis-Plus (現行)

- ・ PHPフレームワーク + jQuery等 + PostgreSQL
- ・ 2019年から公開

白石ら、日本化学会情報化学部会誌 (2003)
岡、日本化学会情報化学部会誌 (2007)

歴史的経緯

化学物質安全情報提供システム (KIS-NET)

- ・ 神奈川県環境科学センター
- ・ 1991年から情報提供開始
- ・ 1999年からインターネット版公開

《化学物質情報データベース》

- 物性値、毒性情報、法規制情報、管理方法対象物質

- 1) 環境関連法令の対象となっている物質
- 2) 危険性(爆発性、可燃性等)を有する物質
- 3) 毒性(急性・慢性毒性、発がん性等)を有する物質
- 4) 難分解性または蓄積性を有する物質
- 5) 全国的に使用量、生産量、輸入量が多い物質



物性値等基盤的情報を提供いただく

旧WebKis-Plus

【バージョン1】

- ・ ASP + MS Access
- 1997年から公開

【バージョン2】

- ・ PHP + Oracle
- 2007年に移行

《化学物質情報データベース》

- 法規制等情報
- 曝露関連情報
- 健康影響情報
- 生態影響試験情報
- リスク評価・有害性情報

旧EnvMethod

- ・ PHP + PostgreSQL
- ・ 2003年から公開

《環境分析法データベース》

- 環境分析法情報
- ・ 化学物質分析法開発調査報告書
- ・ 有害大気汚染物質測定方法マニュアル
- ・ 排出ガス中の指定物質の測定方法マニュアル
- ・ 排ガス中の多環芳香族炭化水素 (PAHs) の測定方法マニュアル
- ・ 排ガス中のPOPs (ポリ塩素化ビフェニル、ヘキサクロロベンゼン、ペンタクロロベンゼン) 測定方法マニュアルなど

旧WebKis-Plus

旧EnvMethod



2つのサイトを統合



Webkis-Plus (現行)

- PHPフレームワーク + jQuery等 + PostgreSQL
- 2019年から公開

《化学物質情報 + 環境分析法DB》

- 法規制等情報
 - 曝露関連情報
 - 健康影響情報
 - 生態影響試験情報
 - リスク評価・有害性情報
 - 環境分析法情報
- 旧WebKis-Plusより
- 旧EnvMethodより

※ 「化学物質名 (別名) 情報」や「外部サイト内個別ページへのリンク」等、新たな情報・機能も追加

基本的な利用の流れ

検索

- ✓ 化学物質の検索（カテゴリ指定、名称など）
- ✓ 農薬の検索
- ✓ 分析法の検索 など

詳細情報

- ✓ 物性・基準値などの一般情報
- ✓ 出荷量・排出量などの曝露情報
- ✓ 健康・生態・リスクに関する情報
- ✓ 分析法 など

関連情報

- ✓ 関連する物質リスト

検索画面

カテゴリを利用した化学物質の検索例

1. 検索の種類を選択

「カテゴリ×名称等」

2. カテゴリの選択

(例) 法規制等情報

－ 環境基準

－ 環境基準法

3. 検索文字の入力

4. 検索結果リスト

化学物質データベース
Webkis-Plus 環境リスクに着目した様々な化学物質関連情報を集約し、化学物質データベースとして提供しています。

Home 化学物質検索 農業薬品検索 環境分析法検索 出典検索 その他 更新履歴

名称等
カテゴリ×名称等
カテゴリ×別名 カテゴリ×化学物質名称等から化学物質を検索します
複数カテゴリ
農業情報

1

カテゴリ

●カテゴリを指定する場合は、下のメニューで該当するカテゴリをダブルクリックしてください。カテゴリをクリックすることでメニューの開閉を行うことができます。

法規制等情報
－ 環境基準
+ 環境基本法
+ 法規制
+ 対策等
+ 曝露関連情報
+ 健康影響情報
+ 生態影響試験情報
+ リスク評価・有害性情報
環境分析法情報
法規制等情報 > 環境基準 > 環境基本法 環境基準 (大気)

2

検索対象項目と検索文字

化学物質和名
検索 検索条件クリア

3

1 to 11 of 11 rows 20

| chem_id | カテゴリ名 | 化学物質和名 | CASRN |
|---------|----------------|---------------|-----------|
| KKT0001 | 環境基準：環境基準 (大気) | 二酸化いおう(SO2) | |
| KKT0002 | 環境基準：環境基準 (大気) | 一酸化炭素(CO) | |
| KKT0003 | 環境基準：環境基準 (大気) | 浮遊粒子状物質 (SPM) | |
| KKT0004 | 環境基準：環境基準 (大気) | 二酸化窒素(NO2) | 10102-440 |
| KKT0005 | 環境基準：環境基準 (大気) | 光化学オキシダント(OX) | |
| KKT0006 | 環境基準：環境基準 (大気) | ベンゼン | 71183-2 |
| KKT0007 | 環境基準：環境基準 (大気) | トリクロロエチレン | 77001-6 |
| KKT0008 | 環境基準：環境基準 (大気) | テトラクロロエチレン | 12718-4 |
| KKT0009 | 環境基準：環境基準 (大気) | ジクロロメタン | 7509-2 |
| KKT0010 | 環境基準：環境基準 (大気) | 微小粒子状物質 | |
| KKT0011 | 環境基準：環境基準 (大気) | ダイオキシン類 | |

4

化学物質のカテゴリ

化学物質を階層的なカテゴリに分類し、利便性の高い検索を実現した。カテゴリは、検索の利便性を考慮し多角的に設定した。最大4階層まで計195分類ある。以下、カテゴリの一部抜粋

□法規制等情報

- 環境基準
- 法規制

□曝露関連情報

- PRTR制度
- 環境中濃度測定値
- 農薬出荷量
- 製造輸入量

□リスク評価・有害性情報

- リスク評価関連文書の情報源

□環境分析法情報

カテゴリ

●カテゴリを指定する場合は、下のメニューで該当するカテゴリをダブルクリックしてください。カテゴリをクリックすることでメニューの開閉を行うことができます。

| |
|-------------------------|
| - 法規制等情報 |
| + 環境基準 |
| + 法規制 |
| + 対策等 |
| - 曝露関連情報 |
| - PRTR制度 |
| • PRTR排出・移動量（平成20年改正以前） |
| • PRTR排出・移動量（平成20年改正後） |
| + 環境中濃度測定値 |
| + 農薬出荷量 |
| + 製造輸入量 |
| - 健康影響情報 |
| + 発がん性評価 |
| - 生態影響試験情報 |
| + 生態毒性 |
| - リスク評価・有害性情報 |
| + リスク評価関連文書の情報源 |
| + 分類と表示 |
| + 基準値等 |
| + 許容濃度等 |
| + PRTR対象物質選定基準 |
| - 環境分析法情報 |
| + 環境分析法 |

個別物質の詳細情報

検索した化学物質の個別情報の表示

1. 検索物質の基礎情報
和名、英名、分子式など
2. 詳細情報の分類
 - ・タブで切り替え
 - ・一般、曝露、健康、生態、リスク、事故、関連、分析
3. 情報源・情報種類ごとに表に整理

化学物質データベース
Webkis-Plus 環境リスクに着眼した様々な化学物質関連情報を集約し、化学物質データベースとして提供しています。

Home 化学物質検索 農薬製剤検索 環境分析手法検索 出典検索 その他 更新履歴

化学物質詳細情報

アクリロニトリル
chem_id: YDT00009
CAS RN#: 107-13-1
化学物質名 (和名): アクリロニトリル
化学物質名 (英名): ACRYLONITRILE
分子式: C₃H_{3.5}N
示色式: CH₂=CHCN
SMILES: N#CC=C
RTECS: ATS250000

一般 曝露 健康 生態 リスク 事故 関連 分析 一覧一括表示

化学物質名 (別名)

| 物質名 | 出典 |
|-------------------------------|-------------------------------|
| アクリロニトリル | 環境基本法 管理在留物 他 |
| Acrylonitrile | JapanChallenge 優先評価の化学物質リスト 他 |
| アクリルニトリル | 毒物及び劇物取締法 (毒劇法) |
| 2-プロペニトリル | 環境省-化学物質の生態影響試験 |
| アクリルモノトリル | KIS-NET |
| Acrylonitrile(2-Propenitrile) | ドイツの固有化学物質に関する有害性評価文書(報告書) |

物性情報

| 物性種別 | 最小値 | 最大値 | 単位 | 物性 | 出典 |
|---------|-------|-------|-------|-----------|---------|
| 外観 | | | | 無色、流動性の液体 | KIS-NET |
| 臭気 | | | | 鋭い臭気、甘く臭気 | KIS-NET |
| その他特徴 | | | | 水に可溶 | KIS-NET |
| 分子量 | 53.06 | 53.07 | | | KIS-NET |
| 比重 | 0.8 | 0.8 | | | KIS-NET |
| 沸点測定温度 | 20 | 25 | deg C | | KIS-NET |
| 蒸気密度 | 1.83 | 1.83 | | | KIS-NET |
| 水溶性 | 73500 | 75000 | | | KIS-NET |
| 水溶性測定温度 | 20 | 25 | deg C | | KIS-NET |
| 高圧 | | | | | KIS-NET |
| 溶解度記号 | | | | 可溶 | KIS-NET |
| 蒸気圧 | 100 | 100 | hPa | | KIS-NET |

曝露情報の可視化

一部の曝露情報は表やグラフで表示が可能

【対象データ】

PRTR排出量、環境測定濃度、農薬出荷量

【機能】

- ✓表・グラフの表示形式の変更
- ✓表示データの取捨選択
- ✓軸の入れ替え など

The screenshot displays the Webkis-Plus website interface. At the top, there is a navigation bar with options like 'Home', 'Chemical Search', 'Agricultural Production Search', 'Environmental Analysis Search', 'Publication Search', 'Others', and 'Update History'. Below this, the 'Chemical Detailed Information' section is visible, showing details for 'Acrylonitrile' (アクリル酸ニトリル) with its chemical ID and CAS RN.

The main content area is titled 'PRTR制度' (PRTR System) and includes a table of data. A blue callout box highlights the table's structure and the 'PRTR制度' section. Below the table, there is a section for '環境中濃度測定値' (Environmental Concentration Measurement Values) with a table of data.

At the bottom, a line graph titled '合計(調査経路経緯) vs 年度 調査経路経緯名 by 都道府県コード-都道府県 12-千葉県-大気 2' is shown. The graph plots '合計(調査経路経緯)' (Total Investigation Route/History) on the y-axis (ranging from 0.0 to 2.0) against '年度' (Year) on the x-axis (2003, 2004, 2005, 2006). The legend lists 34 different investigation routes/paths, each represented by a different colored line.

| 年度 | 都道府県 | 届出排出量(大気) | 届出排出量(水域) | 届出排出量(土壌) | 届出排出量(埋立) | 届出移動量(事業所外) | 届出外排出量(対象業種) | 届出外排出量(対象業種) | 届出外排出量(高威) | 届出外排出量(移動体) | 排出量総計 | 単位 |
|------|------|-----------|-----------|-----------|-----------|-------------|--------------|--------------|------------|-------------|---------|------|
| 2001 | 全国 | 879603 | 66018 | 0 | 0 | 62273 | 955564 | 0 | 0 | 0 | 1901184 | kg/年 |
| 2002 | 全国 | 696966 | 65204 | 0 | 0 | 74 | 13653 | | | 30108 | 80593 | kg/年 |

| 年 | 都道府県 | 調査名 | 媒体 | 検出濃度 | 単位 | 備考 |
|------|------|----------|----|------|----|----|
| 1977 | 全国 | 化学物質(環境) | 媒体 | 検出 | | |
| 1977 | 全国 | 化学物質(環境) | 媒体 | 検出 | | |
| 1987 | 全国 | 化学物質(環境) | 媒体 | 検出 | | |
| 1987 | 全国 | 化学物質(環境) | 媒体 | 検出 | | |

分析手法の詳細情報

1. 元資料のpdf表示

- 分析法の詳細情報を表示

2. 測定対象物質の一覧

- クリックで各物質の個別詳細情報を表示

3. 元資料における分析手法の適用可否判断

- 物質・媒体別に環境省検討会で判断された結果

化学物質データベース
Webkis-Plus

環境リスクに着目した様々な化学物質関連情報を集約し、化学物質データベースとして提供しています。

Home 化学物質検索 農業製剤検索 環境分析法検索 出典検索 その他 更新履歴

環境分析法詳細情報

●o-ニトロフェノール;m-ニトロフェノール;p-ニトロフェノールの分析法

分析法id:448
公表年月日:1978-03-01
媒体等:水
出典名称:化学物質環境調査報告書

分析法(448)PDF表示

一覧一括表示

分析法

対象化学物質

| chem_id | CAS RN | 化学物質和名 | 化学物質英名 | 分子式 | YID | 原液ID | TYPE |
|----------|----------|------------|---------------|---------|-----|------|------|
| BNT00481 | 554-84-7 | m-ニトロフェノール | m-nitrophenol | C6H5NO3 | | | |
| KN201187 | 100-02-7 | p-ニトロフェノール | p-nitrophenol | C6H5NO3 | | | |
| SEJ00087 | 88-75-5 | o-ニトロフェノール | o-nitrophenol | C6H5NO3 | | | |

化学物質分析法開発調査報告書における適用可否

| chem_id | 化学物質和名 | CAS RN | 開発担当 | 大気 | 水質 | 底質 | 生物 |
|----------|------------|----------|------|----|----|----|----|
| BNT00481 | m-ニトロフェノール | 554-84-7 | 神奈川県 | | ○ | △ | |
| KN201187 | p-ニトロフェノール | 100-02-7 | 神奈川県 | | ○ | △ | |
| SEJ00087 | o-ニトロフェノール | 88-75-5 | 神奈川県 | | ○ | △ | |

注釈

関連物質の情報

一部の物質は関連物質リストを収載している

- 関連物質リストをクリックすることで当該物質の個別情報ページが開く
- 様々な“関連性”を有する物質をまとめて表示

【今後の課題】

- 関連情報の充実
- 関連性の種類ごとに情報を整理

化学物質データベース
Webkis-Plus 環境リスクに着目した様々な化学物質関連情報を集約し、化学物質データベースとして提供しています。

Home 化学物質検索 農薬製剤検索 環境分析法検索 出典検索 その他 更新履歴

化学物質詳細情報

ノニルフェノール
chem_id:KN201209
CAS RN@:104-40-5他
化学物質名(和名):ノニルフェノール
化学物質名(英名):
分子式:
示性式:
SMILES:
RTECS:

一覧一括表示

一般 曝露 健康 生態 リスク 事故 **関連** 分析

関連化学物質

| 関連物質chem_id | CAS RN® | 物質名称 |
|-------------|------------|----------------------------|
| KKS00007 | 25154-52-3 | ノニルフェノール |
| KN201210 | 104-40-5 | 4-ノニルフェノール |
| KN201211 | 136-83-4 | o-ノニルフェノール |
| KN201212 | 139-84-4 | m-ノニルフェノール |
| KN201213 | 11066-49-2 | イソノニルフェノール |
| KN201214 | 17404-45-4 | Phenol, 2-(1-methyloctyl)- |
| KN201215 | 17404-66-9 | p-s-e-c-ノニルフェノール |
| KN201217 | 26543-97-5 | p-イソノニルフェノール |
| KN201218 | 27938-31-4 | o-イソノニルフェノール |
| KN201219 | 30784-30-6 | p-(1,1-ジメチルヘプチル)フェノール |
| KN201220 | 52427-13-1 | p-(1-エチル-1-メチルヘキシル)フェノール |
| KN201221 | 58865-77-3 | 4-tert-Nonylphenol |
| KN201222 | 87247-00-5 | p-トリ(プロピレン)フェノール |

外部連携

ポータルサイトとのリンク

環境省 ケミココ

(<http://www.chemicoco.go.jp/>)

- 関連法律や用途情報が充実
- 物質単位の相互リンク（ケミココ側はデータ修正中）

日本化学工業協会 BIGDr

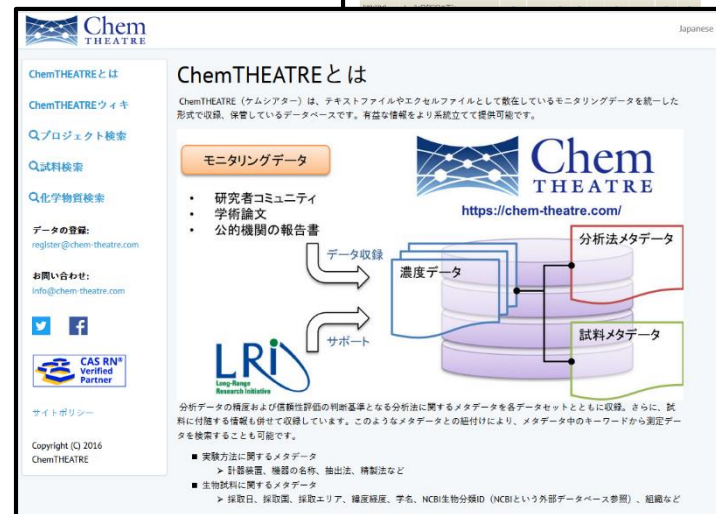
(<https://www.jcia-bigdr.jp/jcia-bigdr/top>)

- 化学物質リスク評価支援ポータルサイト

ChemTHEATRE

(<https://chem-theatre.com/>)

- 学術論文や公的機関の報告書から環境分析の結果を収録したサイト
- 物質単位の相互リンク



Webkis-Plusの強み

Q. 他の化学物質情報ページとの違いは？

A 1. Webkis-Plusだけに存在する情報

- 環境省の環境分析法は冊子でのみ公表されており、農薬出荷量は冊子から独自に計算した結果である

A 2. 多岐にわたる情報を掲載

- 物性値、曝露、毒性、分析法まで多岐にわたる情報を掲載している。また、新規情報を追加することも容易な仕様になっている

A 3. 大容量データへも対応

- PRTRや環境省「化学物質と環境」（いわゆる黒本）は、地点（都道府県）別、年度別など多様な切り口をもちデータ量も多い。そういったデータを表示できる仕組みを持っている。

Q. どのような情報が活用されているか？

A. 環境分析法と農薬出荷量

- 環境分析法・農薬出荷量はWebkis-Plusが“唯一”の情報源であり、アクセスや問い合わせが多い

今後の課題・予定

□関連物質情報の精査、充実

- 専門的な判断が必要な関連情報は、一部の物質のみ掲載している状況
- 今後は、関連性の種類を分類し、ルール化を進め、情報の充実を図りたい。

□外部連携の強化

- 様々な情報源があり、全てを集約することは不可能。
- 信頼性の高い情報源と蜜に連携することで相互に利便性が上がる。

□掲載情報・カテゴリの整理・精査

- 限られた資源を有効活用するためにも、掲載情報の選択と集中が必要になる。カテゴリ構成も掲載情報に合わせて修正していきたい。

おわりに

- 国立環境研究所 環境リスク・健康研究センターにおいて開発・改良を行っている
 - ・生態毒性予測システム「KATE」
 - ・化学物質データベース「Webkis-Plus」について紹介しました。
- どちらも環境リスク評価管理に有効なツールとしての活用が期待されています。
- ただし、得られる結果やデータについては、検証や考察を加えた上で活用することが重要です。