令和８年度第７回薬事審議会化学物質安全対策部会化学物質調査会、令和８年度化学物質審議会第３回安全対策部会、第269回中央環境審議会環境保健部会化学物質審査小委員会	
令和８年１１月９日	資料２補足資料

環境省
Ministry of the Environment

KATEの概要及び推計精度の検証結果等について

2026年11月９日

環境省 環境保健部 化学物質安全課

化学物質審査室

SUSTAINABLE DEVELOPMENT GOALS　Re-Style　デコ活 くらしの中のエコろがけ　つなげよう、支えよう 森里川海　Plastics Smart

生態毒性予測システムKATEについて

KATE（KAshinhou Tool for Ecotoxicity）は、環境省の請負業務として、国立環境研究所環境リスク・健康領域が研究・開発している生態毒性QSAR※1システムです。

有機化学物質の構造的特徴（アルデヒド、フェノール等）を基にクラスの分類を行い、各クラス毎にLogP ※2を記述子とした線形回帰式により魚類、甲殻類（ミジンコ）、藻類の急性及び慢性毒性を予測します。

KATEは無料のウェブアプリとして公開されており、化学物質の構造情報（SMILES ※3 ）を入力することで予測結果を出力します。

※1　Quantitative Structure-Activity Relationship：定量的構造活性相関
※2　オクタノール-水分配係数（化学物質の生物への取り込みの指標）
※3　化合物の分子構造等を印刷可能な文字で線形表記した識別子

（KATEの特徴）

〇参照データには、環境省が実施した生態毒性試験結果※4・米国環境保護庁（US EPA）のファットヘッドミノー急性毒性試験結果を用いており、その詳細を確認することが可能。

〇OECDの「QSARモデルバリデーション原則」等に基づき、回帰式の統計値の基準（ $R^2 \geqq 0.7$、$Q^2 \geqq 0.5$、$n \geqq 5$）を設定。

〇Log Pと化学構造についてそれぞれ適用領域（信頼できる予測が行える可能性が高い領域）を自動で判定。

※4　https://www.env.go.jp/chemi/sesaku/seitai.html

（参考）KATEの参照データ等について

○KATE2025の参照データには、以下に示す数の環境省が実施した生態毒性試験結果及び米国環境保護庁のファットヘッドミノー急性毒性試験結果が用いられています。

魚類急性	ミジンコ急性	藻類急性	魚類慢性	ミジンコ慢性	藻類慢性
1079	486	554	33	384	534

○KATE2025では、上記参照データを有機化学物質の構造的特徴を元にクラス分類し、線形回帰式を構築しています。
また、線形回帰式の統計値の基準（ $R^2 \geqq 0.7$、$Q^2 \geqq 0.5$、$n \geqq 5$）を設定しており、これらを満たす線形回帰式数は以下のとおりです。

魚類急性	ミジンコ急性	藻類急性	魚類慢性	ミジンコ慢性	藻類慢性
51 (121※)	28 (105)	11 (80)	3 (10)	12 (89)	16 (99)

※括弧内は統計値の基準を満たさないものを含めた全ての線形回帰式数を示す。

KATE・ECOSARの推計精度の検証について①

環境省

環境省では、スクリーニング評価におけるKATE等の活用可能性を検討するため、OECD高生産量化学物質を用いてKATE2025及びECOSAR ※ 2.2の推計精度の検証を行いました。

具体的には、各物質の魚類急性、甲殻類急性、藻類急性・慢性の毒性を予測し、推計精度の評価指標として以下を集計しました。

①適用領域内の予測値が得られた物質数

②（適用領域内の）予測値と実測値との比が１オーダー（1/10から10倍）の範囲にある物質数

※ECOSAR（Ecological Structure Activity Relationships）：米国EPAの水生生物に対する生態毒性を予測するQSARシステム

		魚類急性（178物質）	甲殻類急性（196物質）	藻類急性（141物質）	藻類慢性（100物質）
KATE 2025	①適用領域内の予測値の数	114	122	68	46
	②実測値との比が1オーダー以内の予測値数* （下段：適用領域内予測値に占める割合）	102 （89%）	100 （82%）	56 （82%）	34 （74%）
ECOSAR 2.2	①適用領域内の予測値の数	167	182	131	92
	②実測値との比が1オーダー以内の予測値数* （下段：適用領域内予測値に占める割合）	127 （76%）	122 （67%）	88 （67%）	58 （63%）

＊ 一物質に対して適用領域内の予測値が複数得られた場合は、実測値に最も近い予測値のみを集計。
物質及び実測毒性値は、OECD Screening Information Data Set, SIDSより抜粋。

KATE2025

・適用領域内の予測値が得られた物質は、ECOSAR2.2より少ない。
・7～8割を超える予測値が実測値の１オーダー以内に収まる。
⇒予測に係るUF（不確実係数）を最大10と設定。

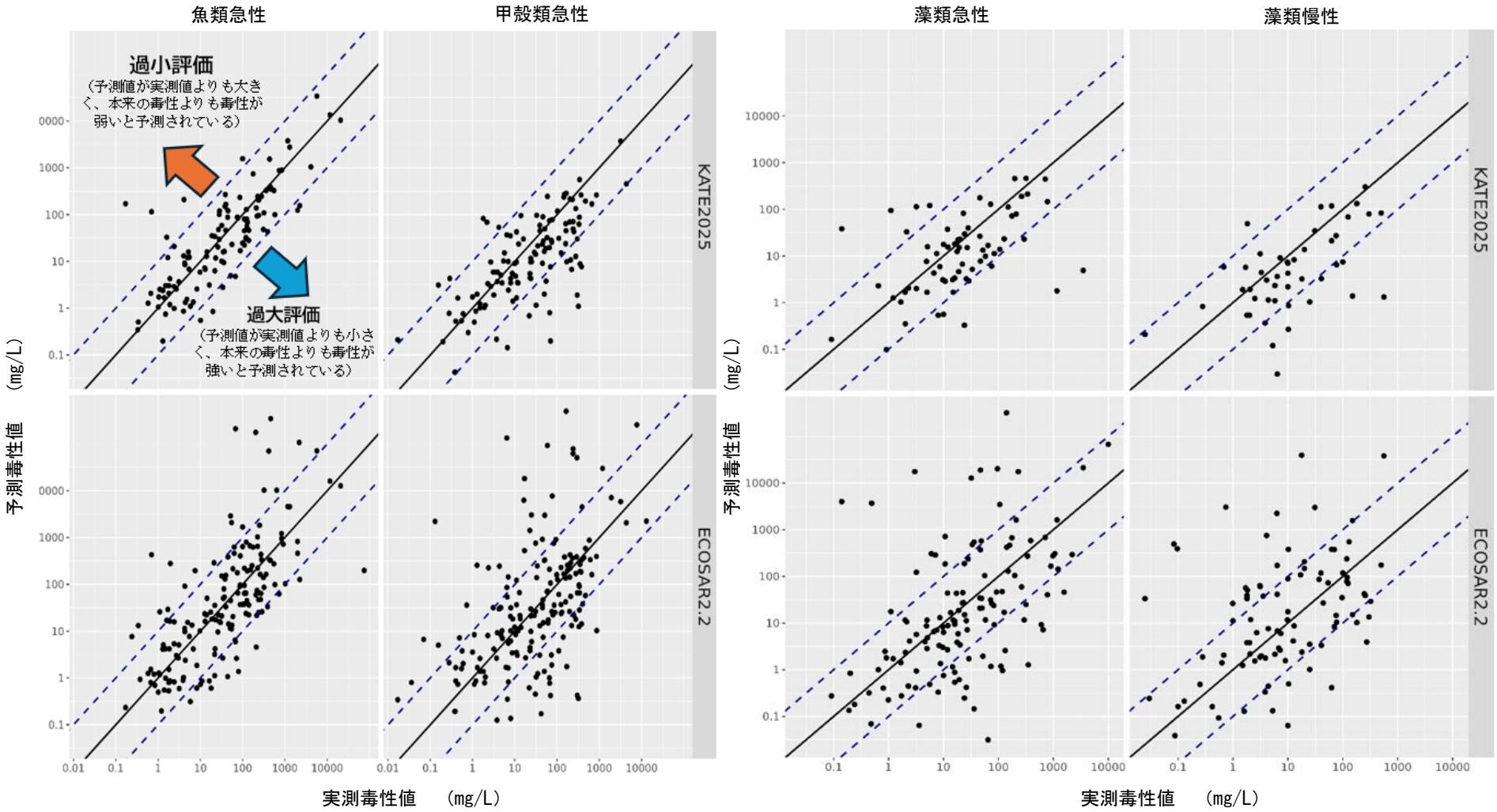
ECOSAR2.2

・適用領域内の予測値が得られた物質は、KATE2025より多い。
・予測値が実測値の１オーダー以内に収まる物質は6～7割程度。
⇒予測に係るUFを最大10としても非安全側になる可能性。
・ECOSARの参照データは、その詳細を確認できないものが含まれる。

表出典：令和7年度生態毒性予測手法等に関する調査検討業務報告書表Ⅱ-3-3-1・3-3-2を元に作成

KATE・ECOSARの推計精度の検証について②

KATEは、Log Pと化学構造を用いて適用領域を判定しており、過小評価となる物質が比較的少ない結果が得られた。



出典：令和7年度生態毒性予測手法等に関する調査検討業務報告書図Ⅱ-3-3-1・3-3-2を元に作成

スクリーニング評価における予測手法の活用について

- 予測手法の活用に当たっては、まずは推計精度が比較的高く、参照データの詳細を確認できるKATEを、スクリーニング評価におけるデフォルト適用の要否の判断に活用していく。

- 予測に係るUFは、最大10を適用するが、良好な精度で予測値を得られるケース等について、個別に専門家判断を行うなどの試行を経ながら知見を蓄積し、UFの軽減を図っていく。

- ECOSARについては、環境省の検証において、毒性値を過小評価する物質がKATEと比べて多いことや、参照データを確認できない場合があることが確認された。このため、ECOSAR等の他のQSARツールを用いた毒性予測結果については、KATEによる毒性予測結果と併せて収集し、個別に専門家判断を行うなどの試行を通じて知見の蓄積を図る。

- 今後、事業者へ予測手法を活用した有害性情報の提供を促し、予測手法に関する知見を充実させていく。また、得られた知見を踏まえ、化審法におけるNAMsの活用に関する全体的な方向性との整合を図りながら、予測手法の更なる活用可能性について検討を深めていく。