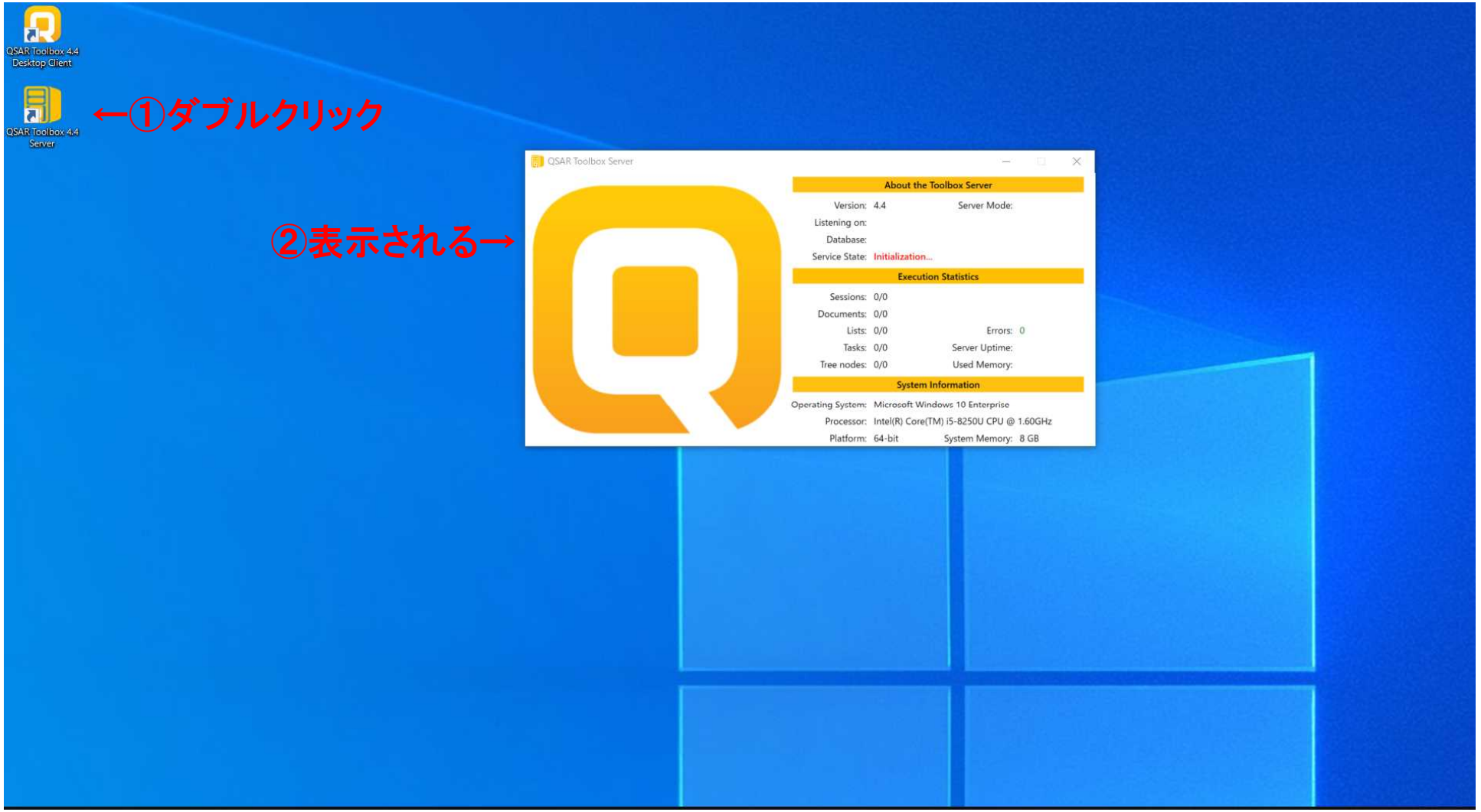
QSAR Toolboxの操作説明

（独）製品評価技術基盤機構（NITE）
化学物質管理センター

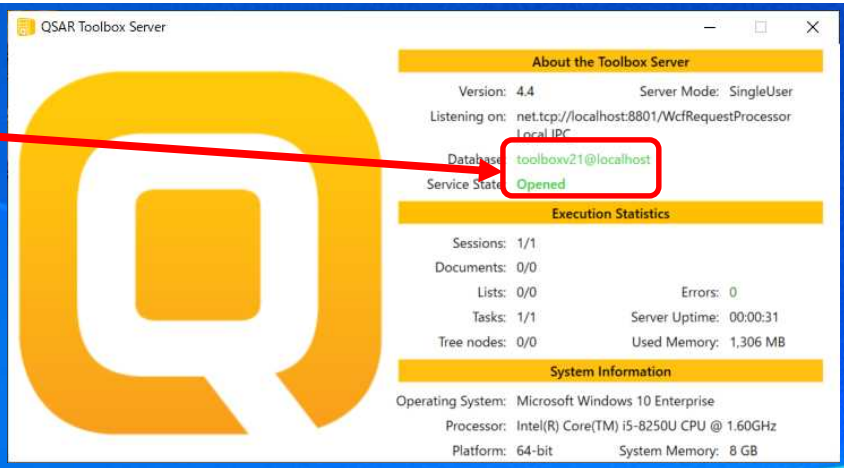
立ち上げ(1)


QSAR Toolbox 4.4
Desktop Client
QSAR Toolbox 4.4
Server
←①ダブルクリック
②表示される→
QSAR Toolbox Server
About the Toolbox Server
Version: 4.4
Server Mode:
Listening on:
Database:
Service State: Initialization...
Execution Statistics
Sessions: 0/0
Documents: 0/0
Lists: 0/0
Errors: 0
Tasks: 0/0
Server Uptime:
Tree nodes: 0/0
Used Memory:
System Information
Operating System: Microsoft Windows 10 Enterprise
Processor: Intel(R) Core(TM) i5-8250U CPU @ 1.60GHz
Platform: 64-bit
System Memory: 8 GB

立ち上げ(2)

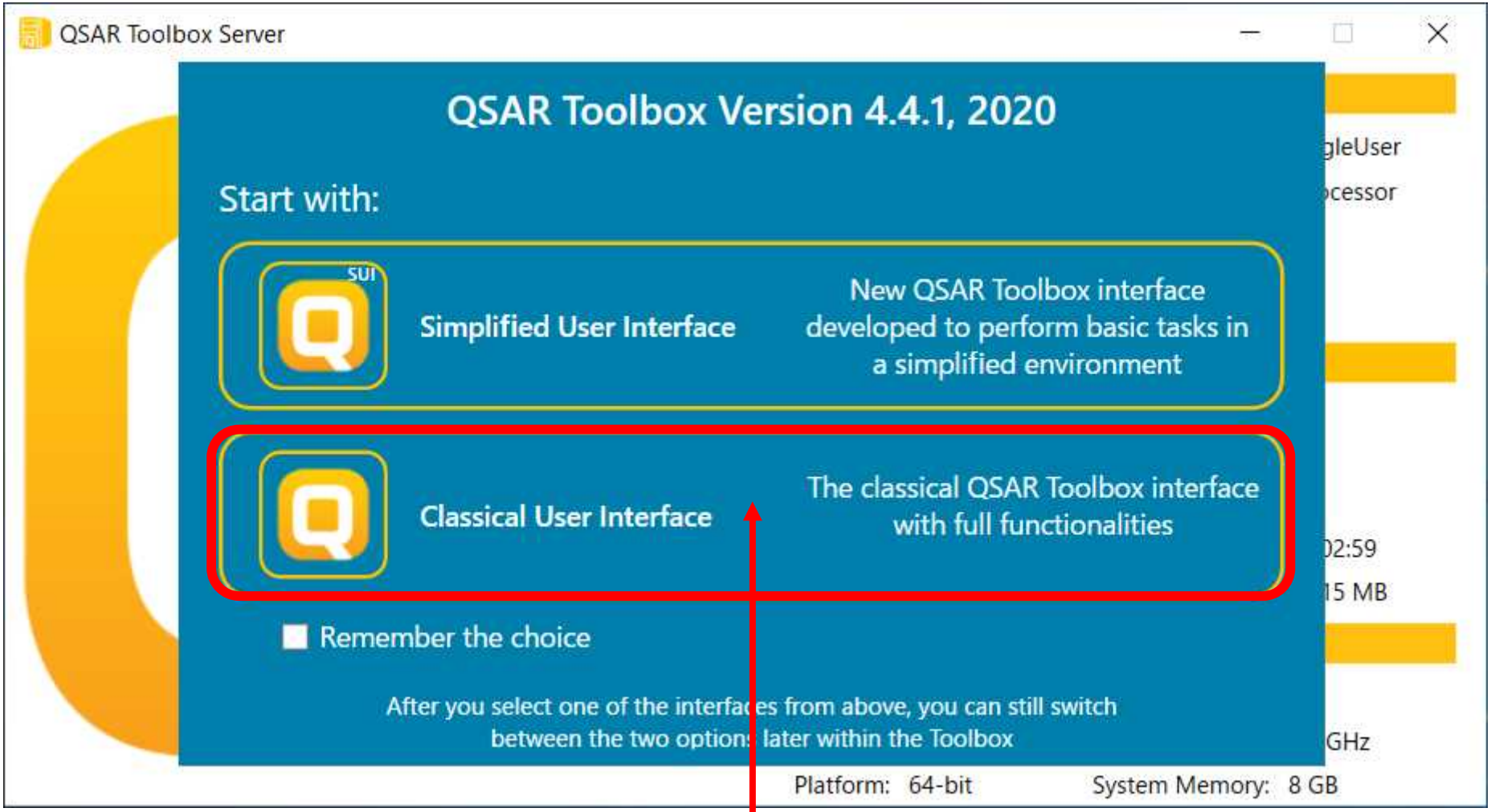
←②ダブルクリック

①緑色になったことを確認



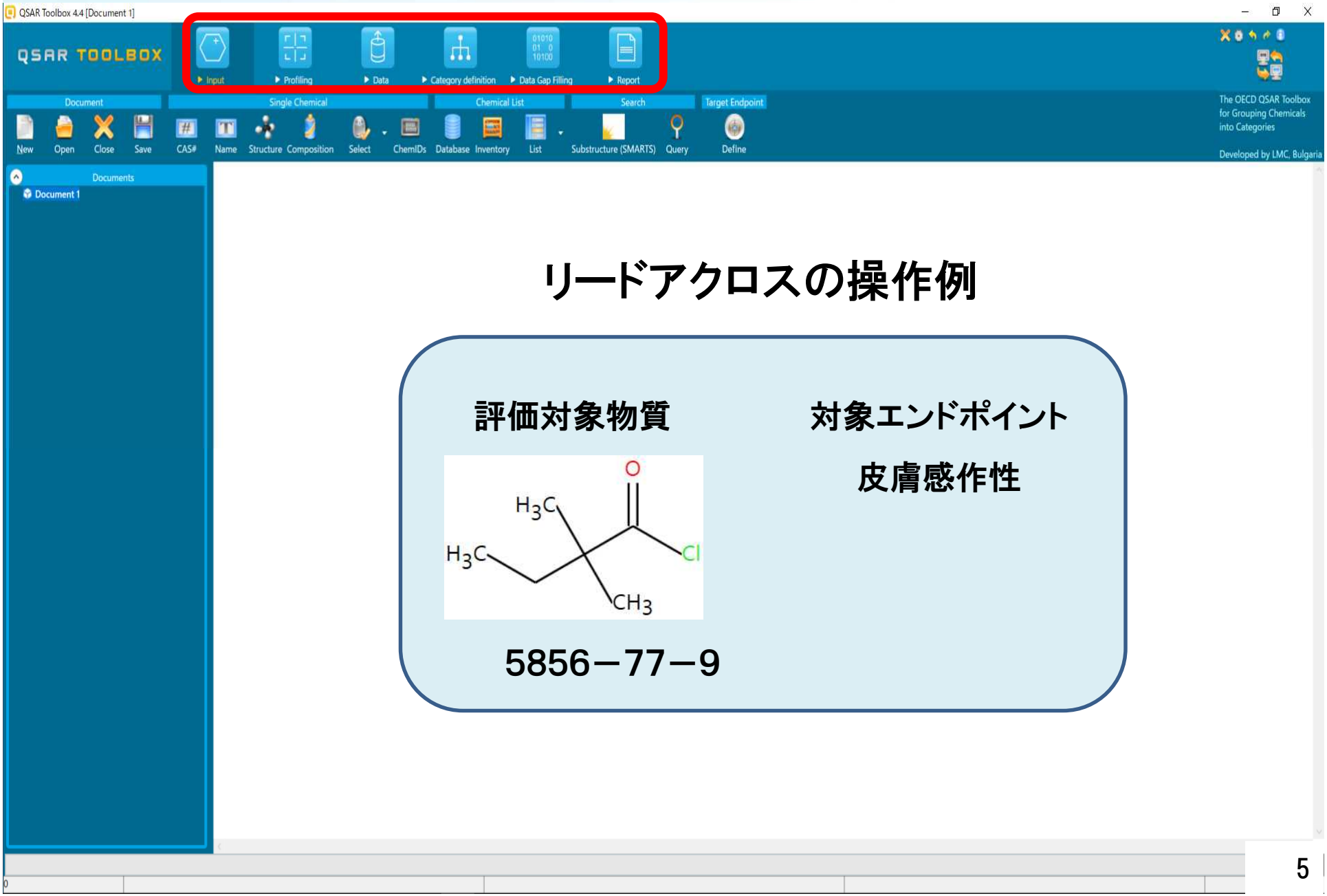
③表示される→
（数分待つ）

立ち上げ(3)


QSAR Toolbox Server
QSAR Toolbox Version 4.4.1, 2020
Start with:
SUI
Simplified User Interface
New QSAR Toolbox interface developed to perform basic tasks in a simplified environment
Classical User Interface
The classical QSAR Toolbox interface with full functionalities
Remember the choice
After you select one of the interfaces from above, you can still switch between the two options later within the Toolbox
Platform: 64-bit
System Memory: 8 GB

クリック

ワークフローに対応した6つのモジュール



リードアクロスの操作例

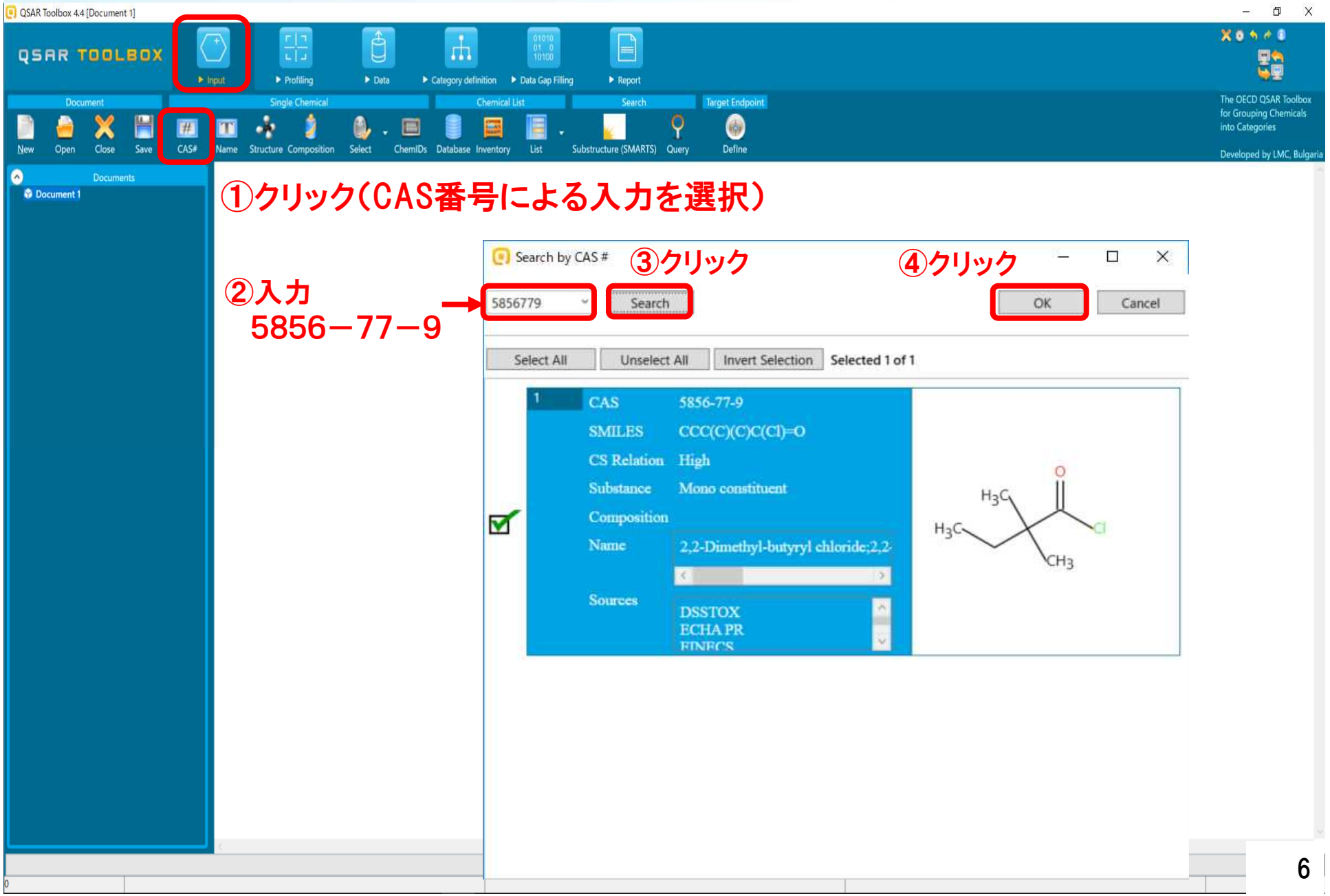
評価対象物質

5856−77−9

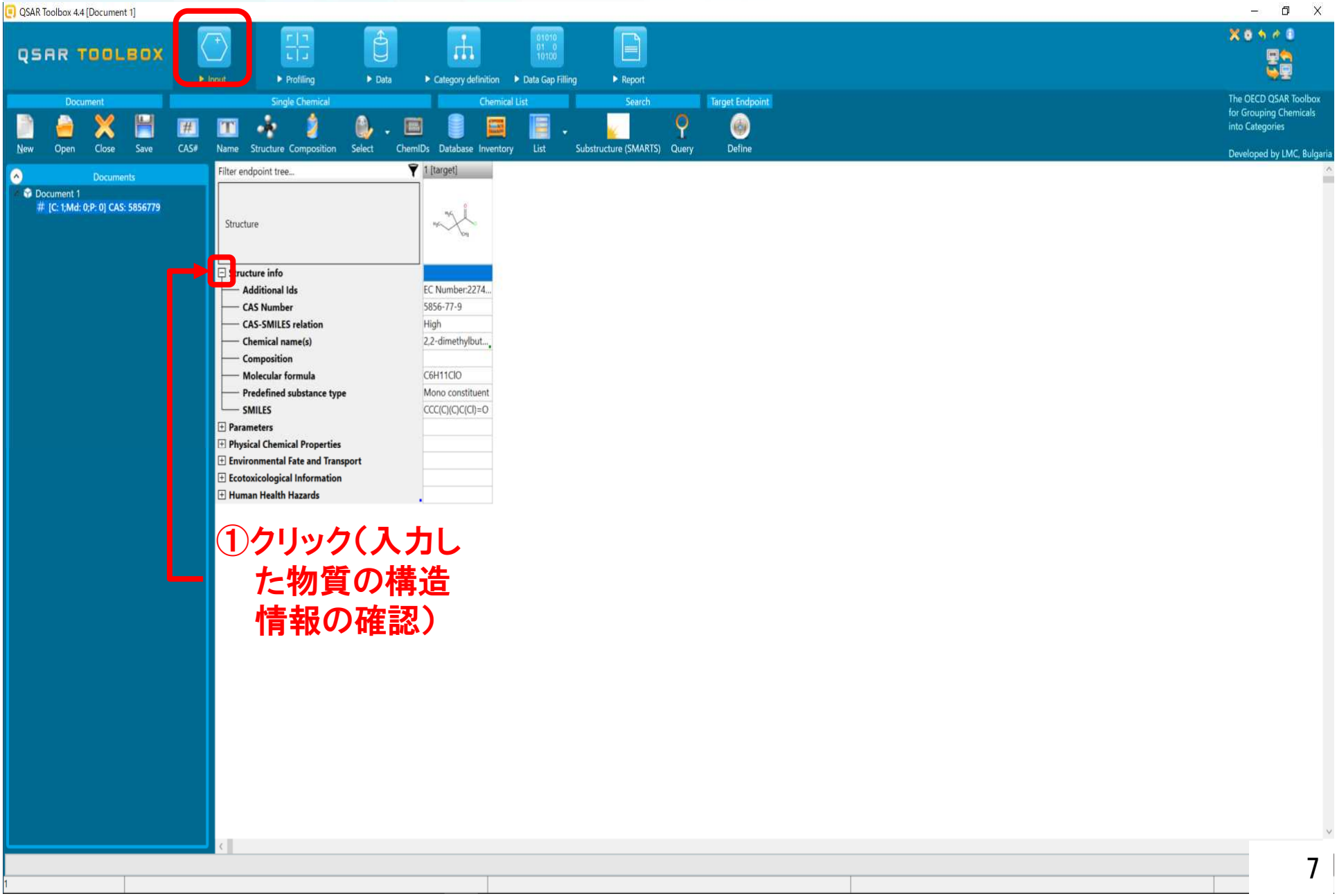
対象エンドポイント

皮膚感作性

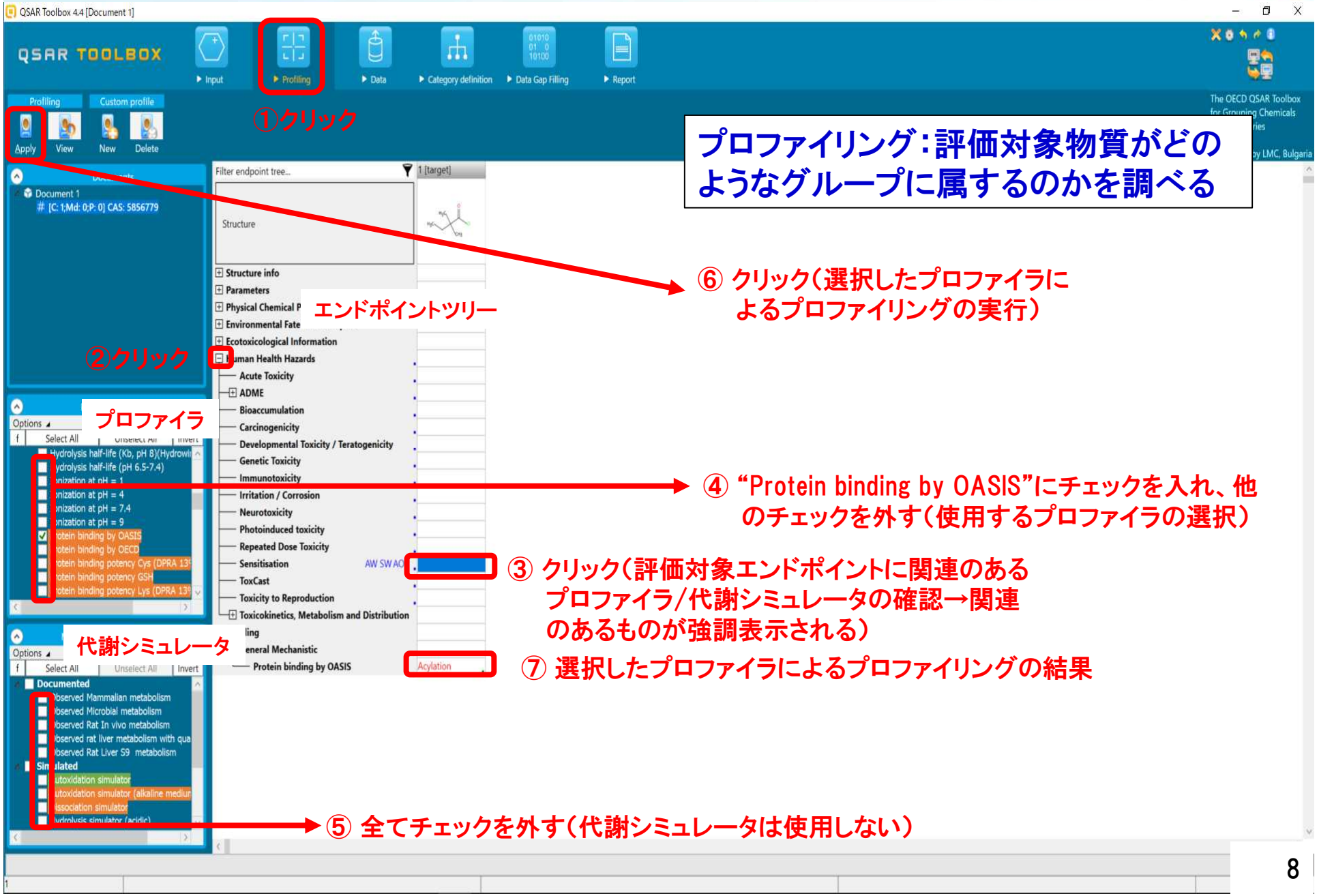
評価対象物質の入力


QSAR Toolbox 4.4 [Document 1]
QSAR TOOLBOX
Input
Profiling
Data
Category definition
Data Gap Filling
Report
Document
Single Chemical
Chemical List
Search
Target Endpoint
New
Open
Close
Save
CAS#
Name
Structure
Composition
Select
ChemIDs
Database
Inventory
List
Substructure (SMARTS)
Query
Define
The OECD QSAR Toolbox for Grouping Chemicals into Categories
Developed by LMC, Bulgaria
Documents
Document 1
①クリック(CAS番号による入力を選択)
②入力
5856−77−9
Search by CAS #
③クリック
④クリック
5856779
Search
OK
Cancel
Select All
Unselect All
Invert Selection
Selected 1 of 1
1
CAS 5856-77-9
SMILES CCC(C)(C)C(Cl)=O
CS Relation High
Substance Mono constituent
Composition
Name 2,2-Dimethyl-butyryl chloride;2,2-
Sources
DSSTOX
ECHA PR
FINECS

評価対象物質の入力(結果)



プロファイリング



プロファイリング：評価対象物質がどのようなグループに属するのかを調べる

⑥ クリック（選択したプロファイラによるプロファイリングの実行）

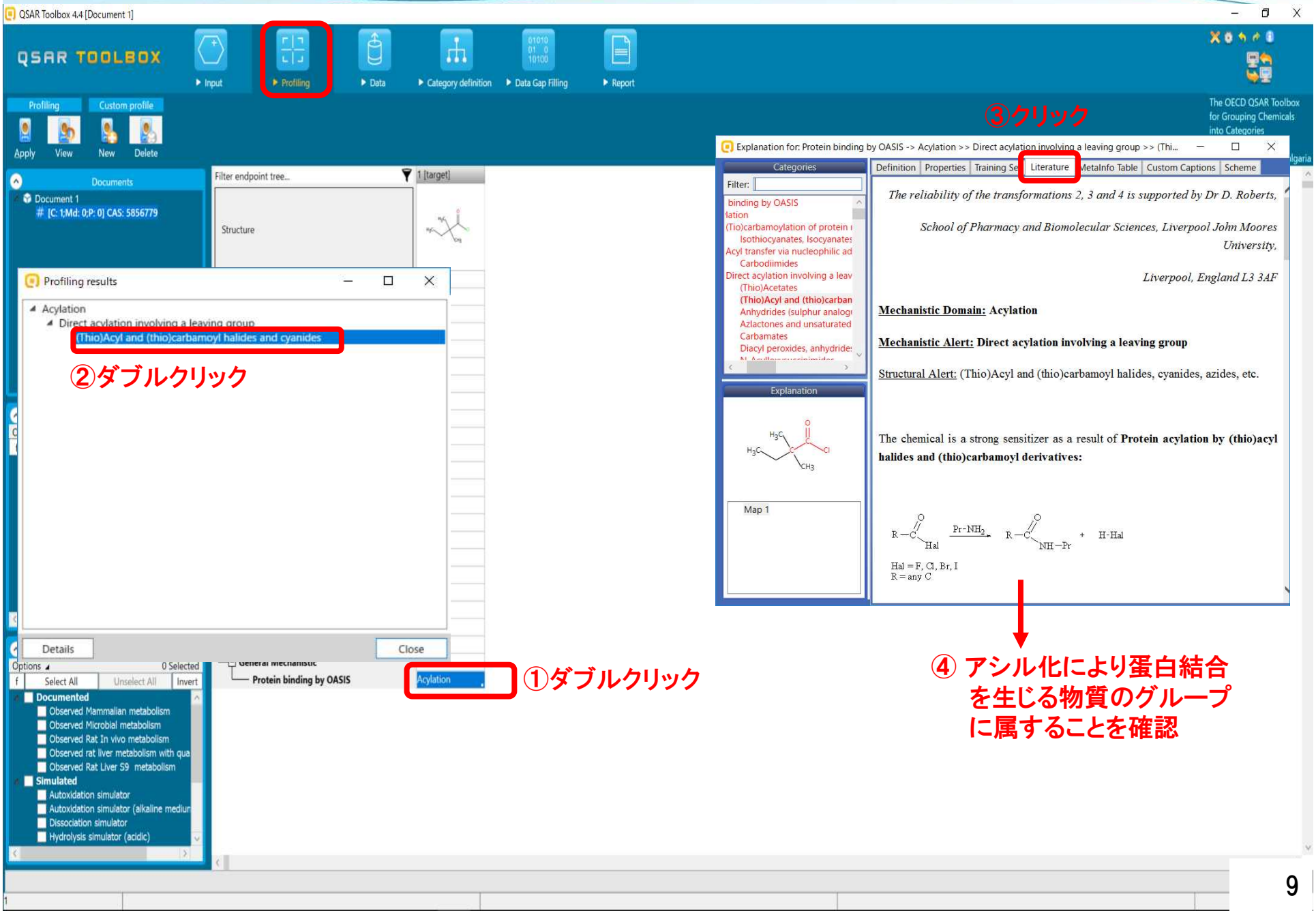
④ “Protein binding by OASIS”にチェックを入れ、他のチェックを外す（使用するプロファイラの選択）

③ クリック（評価対象エンドポイントに関連のあるプロファイラ/代謝シミュレータの確認→関連のあるものが強調表示される）

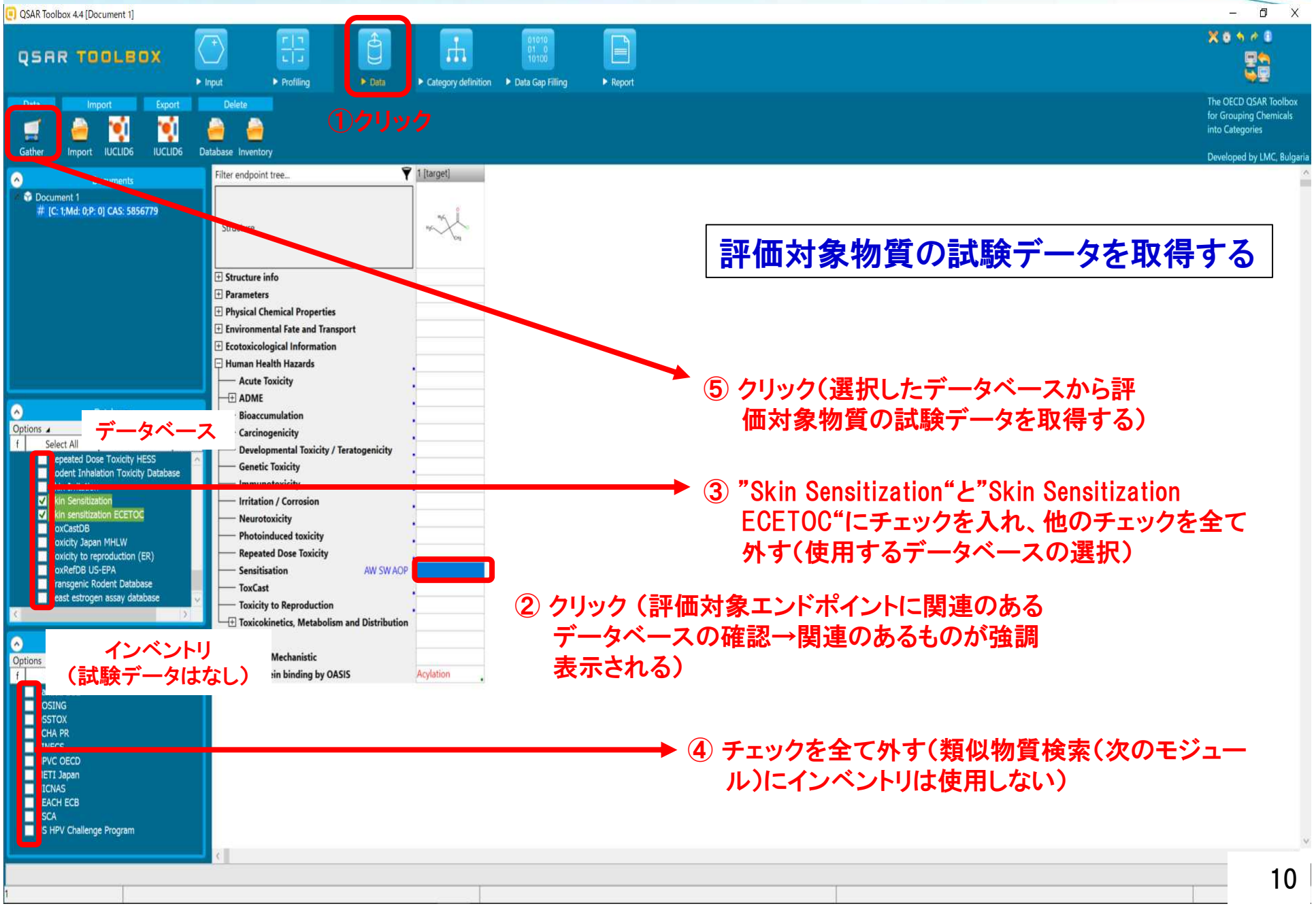
⑦ 選択したプロファイラによるプロファイリングの結果

⑤ 全てチェックを外す（代謝シミュレータは使用しない）

プロファイリング結果の詳細の確認



試験データの取得



評価対象物質の試験データを取得する

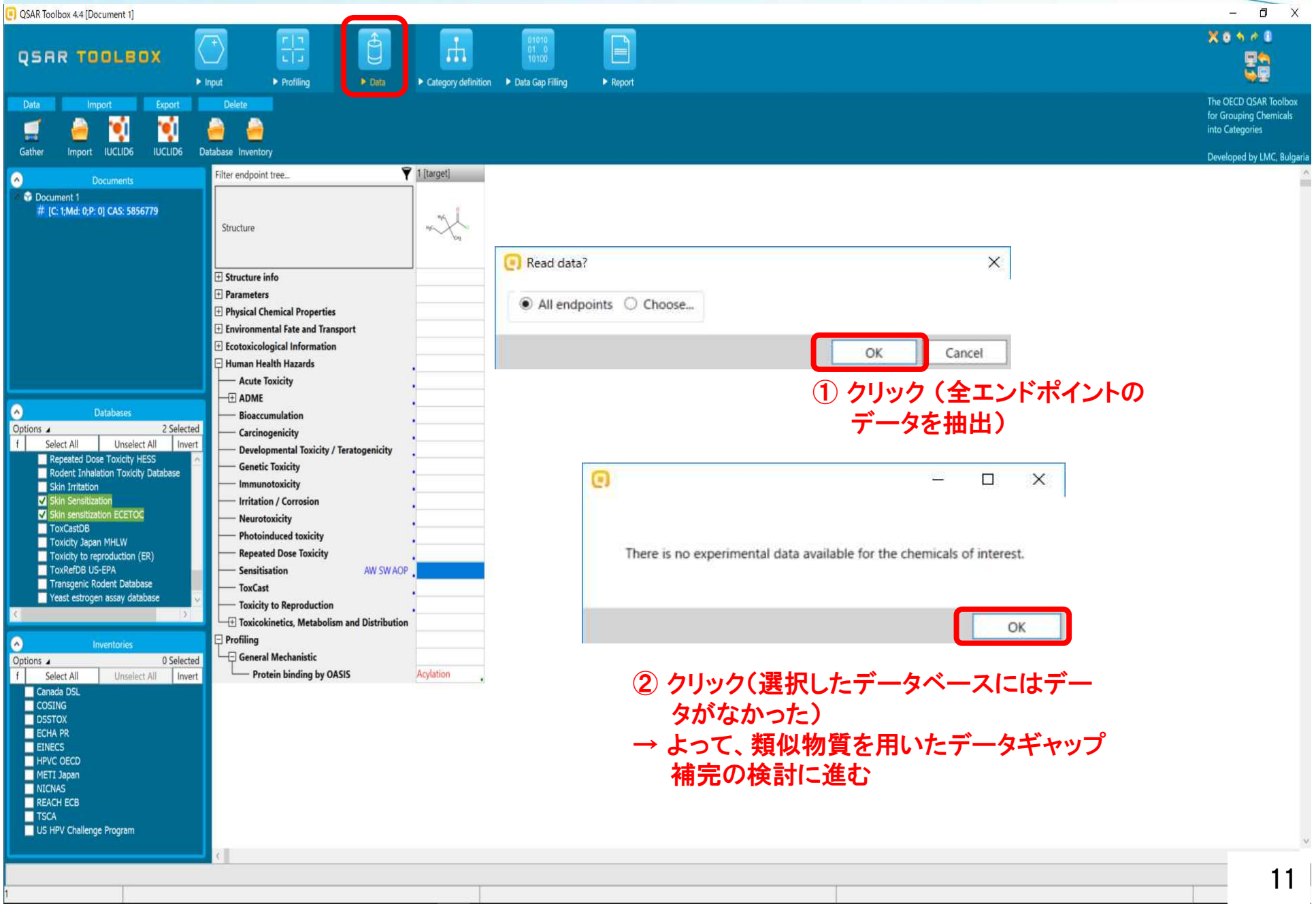
⑤ クリック（選択したデータベースから評価対象物質の試験データを取得する）

③ ”Skin Sensitization“と”Skin Sensitization ECETOC“にチェックを入れ、他のチェックを全て外す（使用するデータベースの選択）

② クリック（評価対象エンドポイントに関連のあるデータベースの確認→関連のあるものが強調表示される）

④ チェックを全て外す（類似物質検索（次のモジュール）にインベントリは使用しない）

試験データの取得

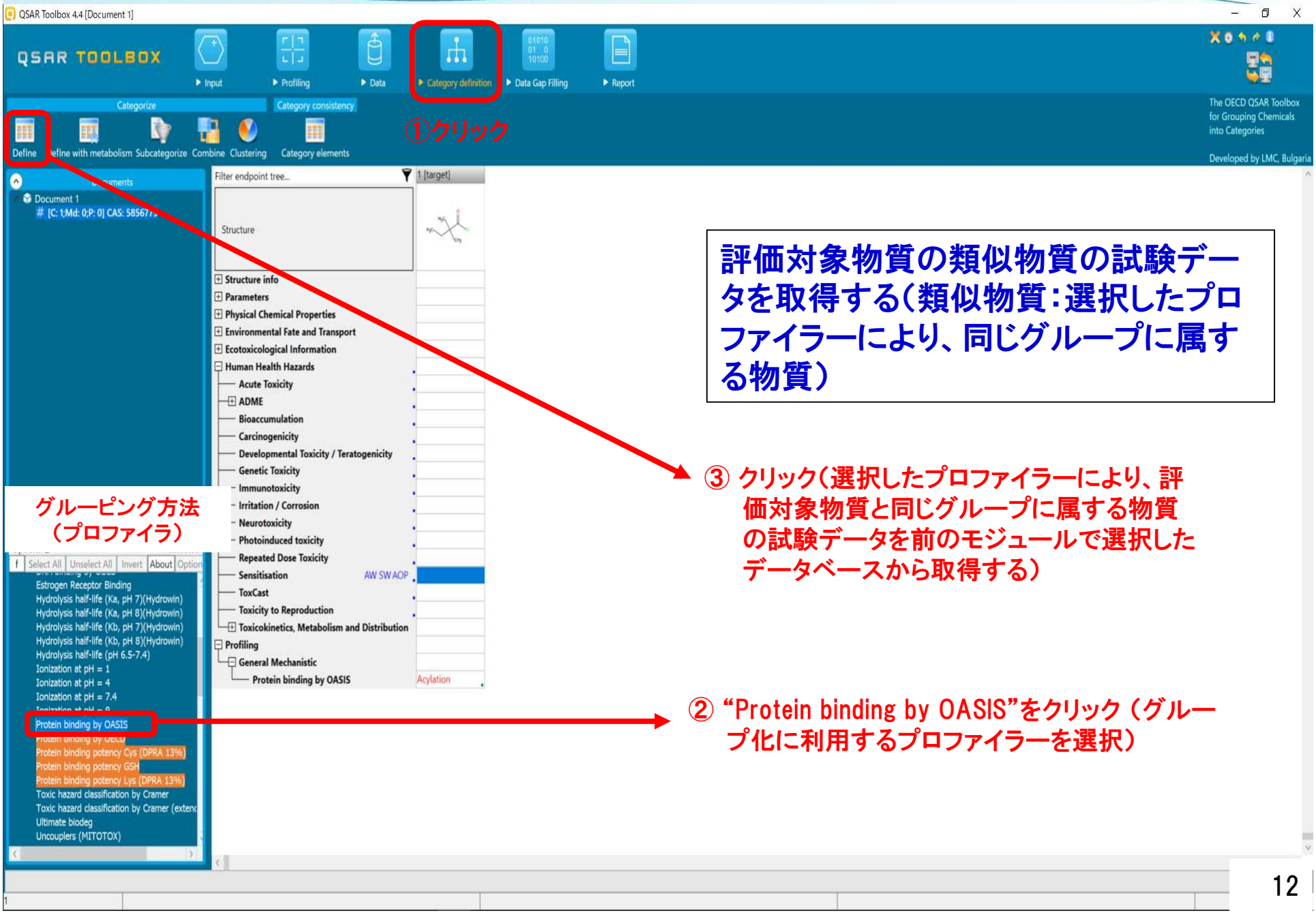


① クリック（全エンドポイントのデータを抽出）

② クリック（選択したデータベースにはデータがなかった）

→ よって、類似物質を用いたデータギャップ補完の検討に進む

カテゴリー定義

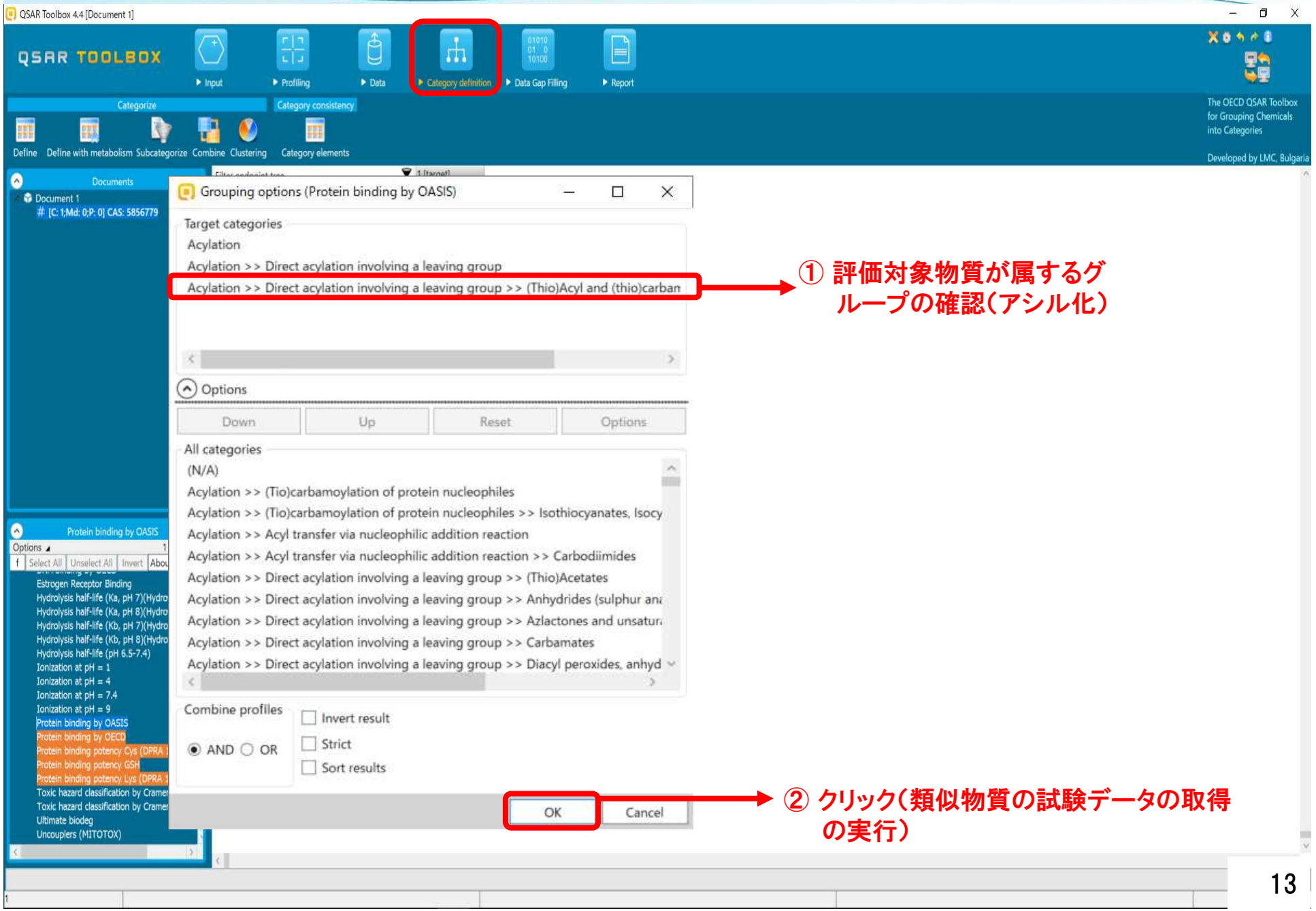


評価対象物質の類似物質の試験データを取得する（類似物質：選択したプロファイラーにより、同じグループに属する物質）

③ クリック（選択したプロファイラーにより、評価対象物質と同じグループに属する物質の試験データを前のモジュールで選択したデータベースから取得する）

② “Protein binding by OASIS”をクリック（グループ化に利用するプロファイラーを選択）

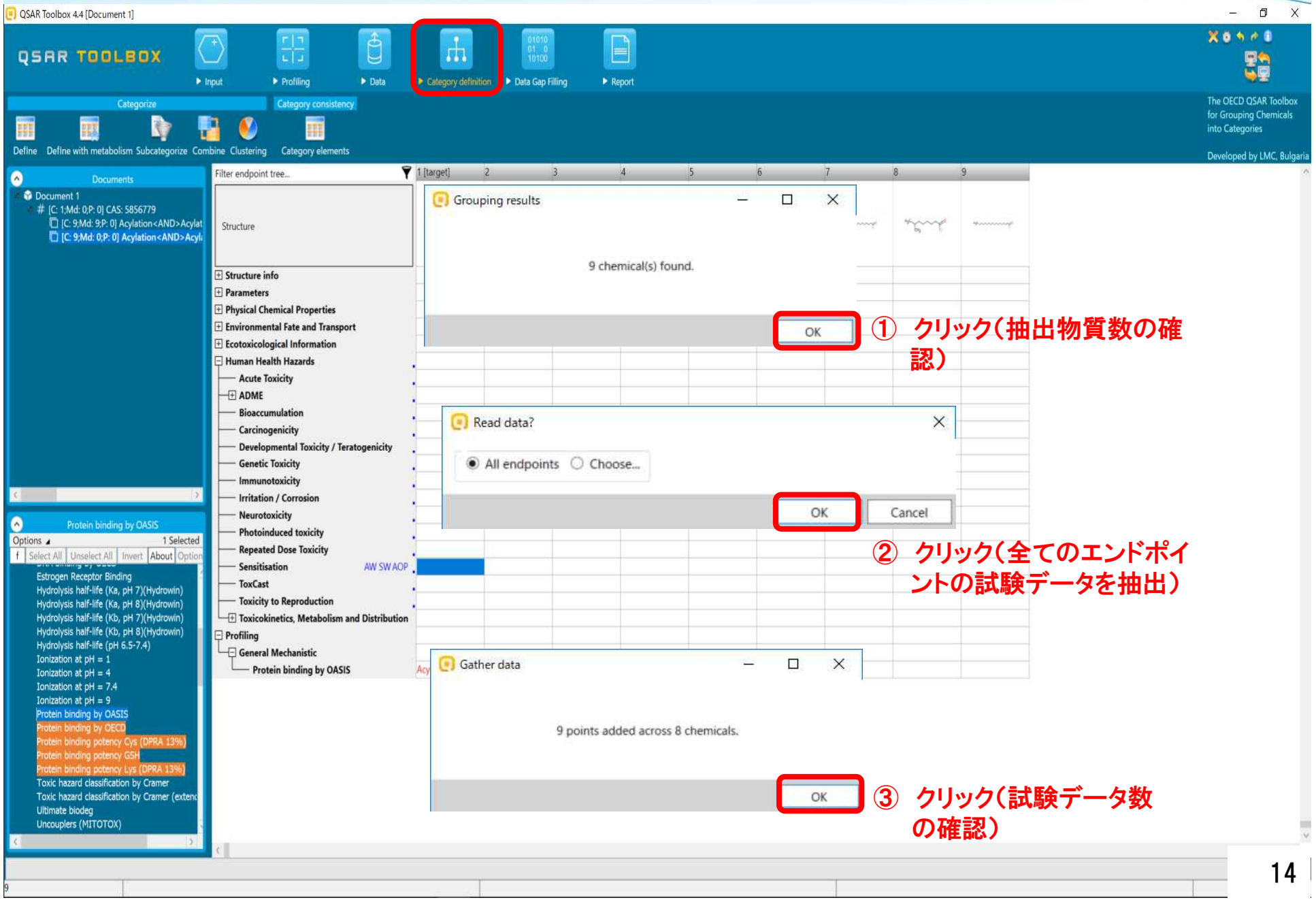
カテゴリー定義



① 評価対象物質が属するグループの確認（アシル化）

② クリック（類似物質の試験データの取得の実行）

カテゴリー定義

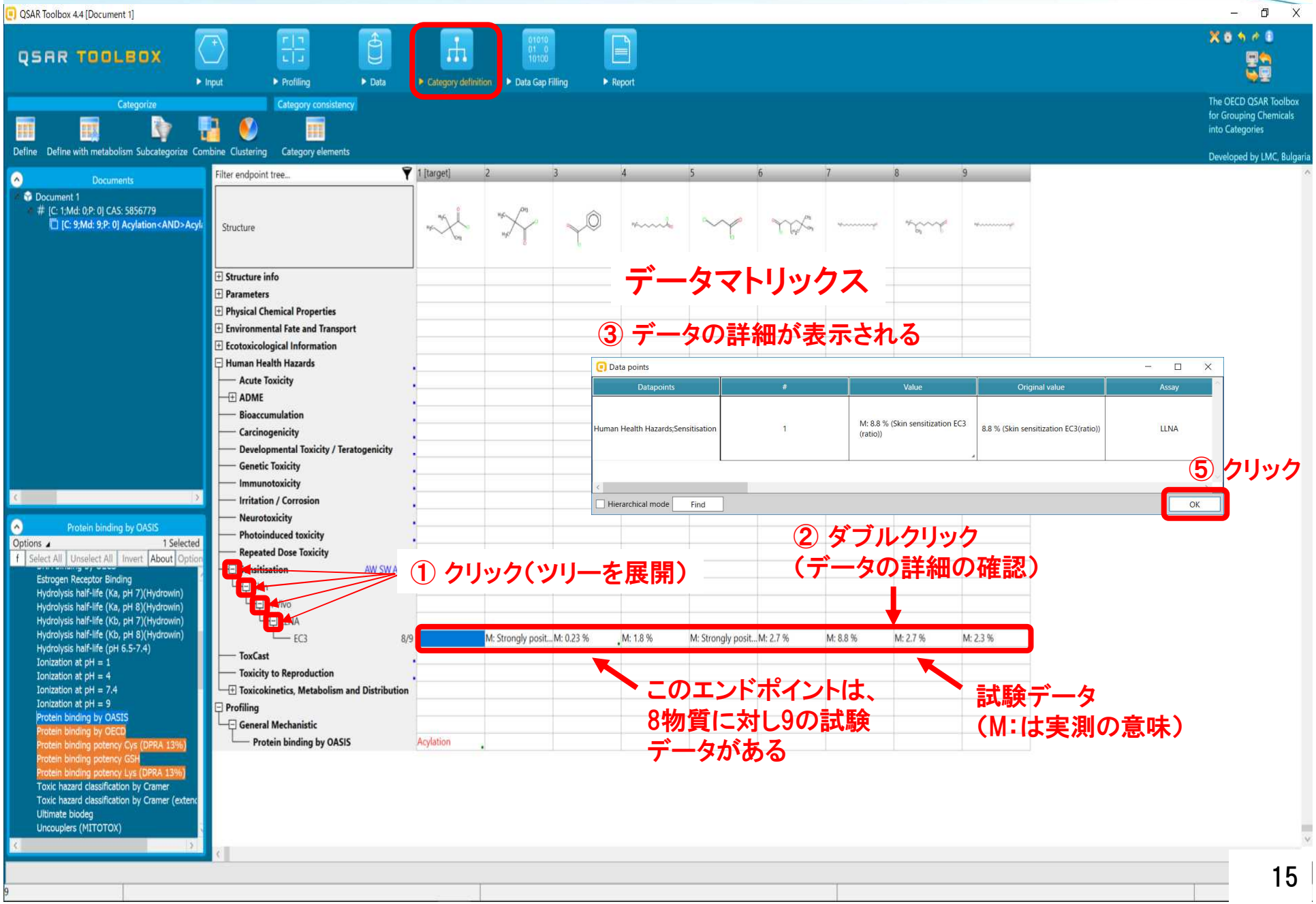


① クリック（抽出物質数の確認）

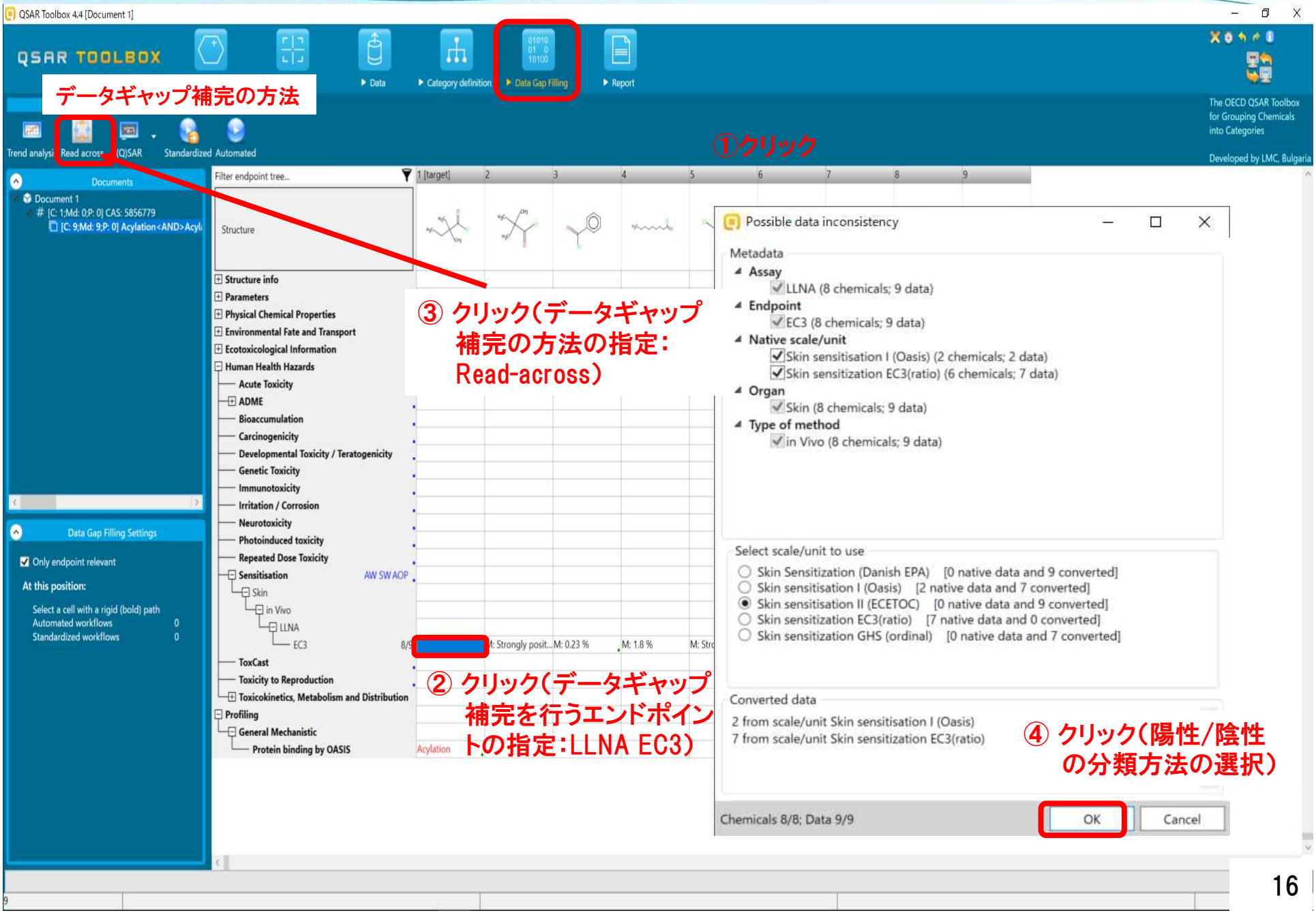
② クリック（全てのエンドポイントの試験データを抽出）

③ クリック（試験データ数の確認）

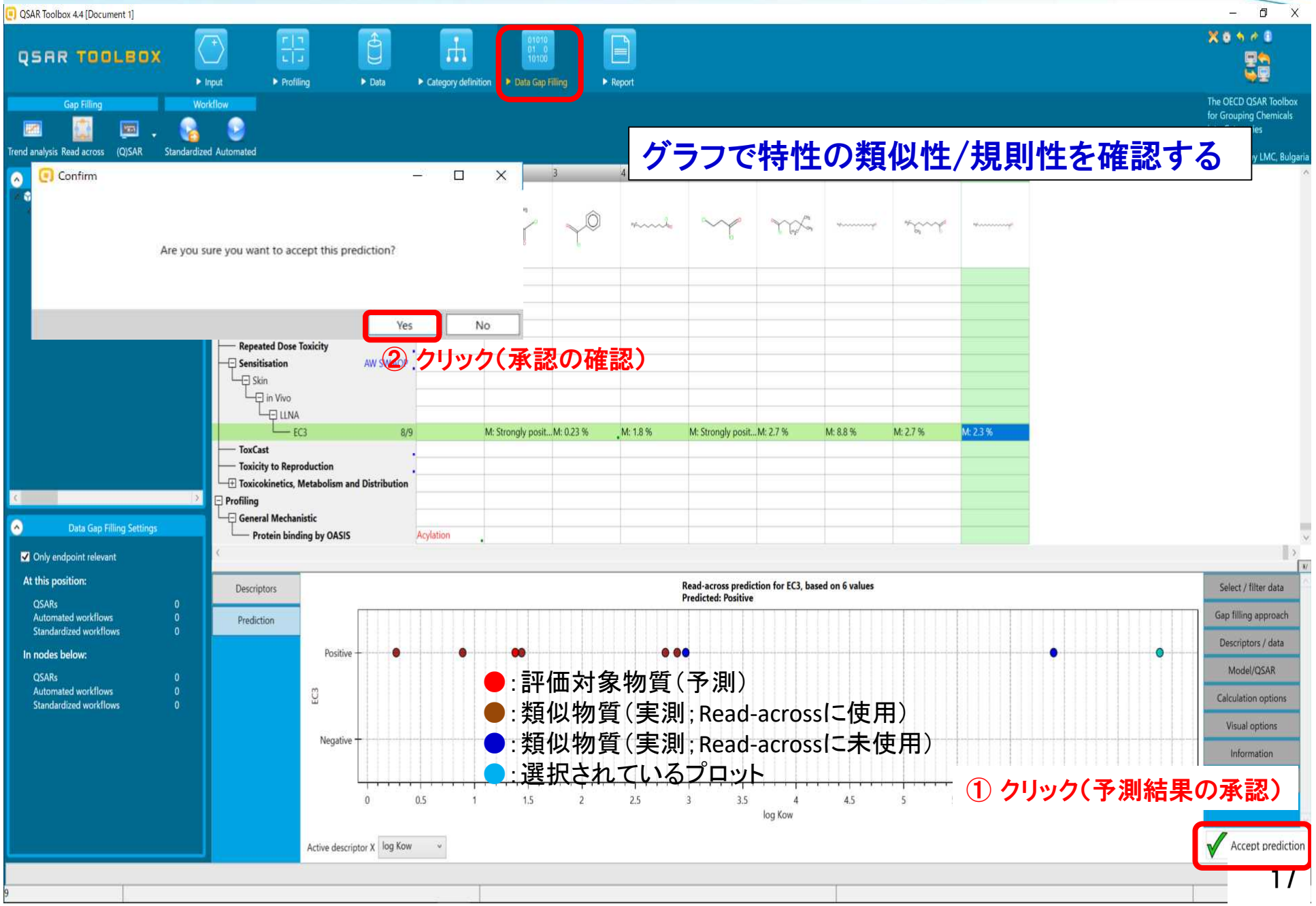
類似物質の試験データの確認



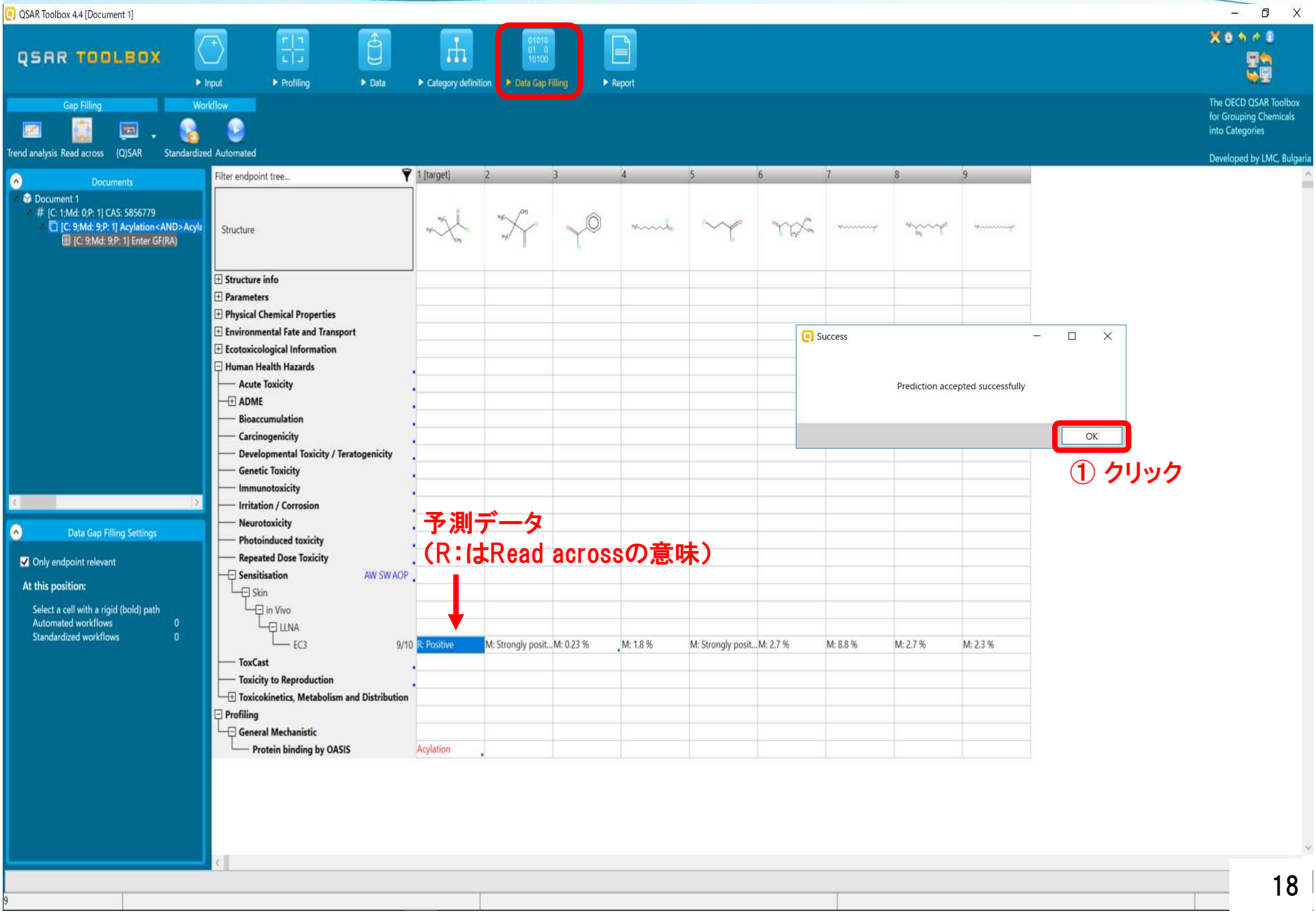
データギャップ補完


QSAR Toolbox 4.4 [Document 1]
QSAR TOOLBOX
Data
Category definition
Data Gap Filling
Report
The OECD QSAR Toolbox for Grouping Chemicals into Categories
Developed by LMC, Bulgaria
データギャップ補完の方法
Trend analysis
Read across
(Q)SAR
Standardized
Automated
①クリック
Documents
Document 1
[C: 1;Md: 0;P: 0] CAS: 5856779
[C: 9;Md: 9;P: 0] Acylation<AND>Acyl
Filter endpoint tree...
1 [target]
Structure
Structure info
Parameters
Physical Chemical Properties
Environmental Fate and Transport
Ecotoxicological Information
Human Health Hazards
Acute Toxicity
ADME
Bioaccumulation
Carcinogenicity
Developmental Toxicity / Teratogenicity
Genetic Toxicity
Immunotoxicity
Irritation / Corrosion
Neurotoxicity
Photoinduced toxicity
Repeated Dose Toxicity
Sensitisation
AW SW AOP
Skin
in Vivo
LLNA
EC3
ToxCast
Toxicity to Reproduction
Toxicokinetics, Metabolism and Distribution
Profiling
General Mechanistic
Protein binding by OASIS
Acylation
③ クリック（データギャップ補完の方法の指定：Read-across）
② クリック（データギャップ補完を行うエンドポイントの指定：LLNA EC3）
Data Gap Filling Settings
Only endpoint relevant
At this position:
Select a cell with a rigid (bold) path
Automated workflows 0
Standardized workflows 0
Possible data inconsistency
Metadata
Assay
LLNA (8 chemicals; 9 data)
Endpoint
EC3 (8 chemicals; 9 data)
Native scale/unit
Skin sensitisation I (Oasis) (2 chemicals; 2 data)
Skin sensitization EC3(ratio) (6 chemicals; 7 data)
Organ
Skin (8 chemicals; 9 data)
Type of method
in Vivo (8 chemicals; 9 data)
Select scale/unit to use
Skin Sensitization (Danish EPA) [0 native data and 9 converted]
Skin sensitisation I (Oasis) [2 native data and 7 converted]
Skin sensitisation II (ECETOC) [0 native data and 9 converted]
Skin sensitization EC3(ratio) [7 native data and 0 converted]
Skin sensitization GHS (ordinal) [0 native data and 7 converted]
Converted data
2 from scale/unit Skin sensitisation I (Oasis)
7 from scale/unit Skin sensitization EC3(ratio)
④ クリック（陽性/陰性の分類方法の選択）
Chemicals 8/8; Data 9/9
OK
Cancel

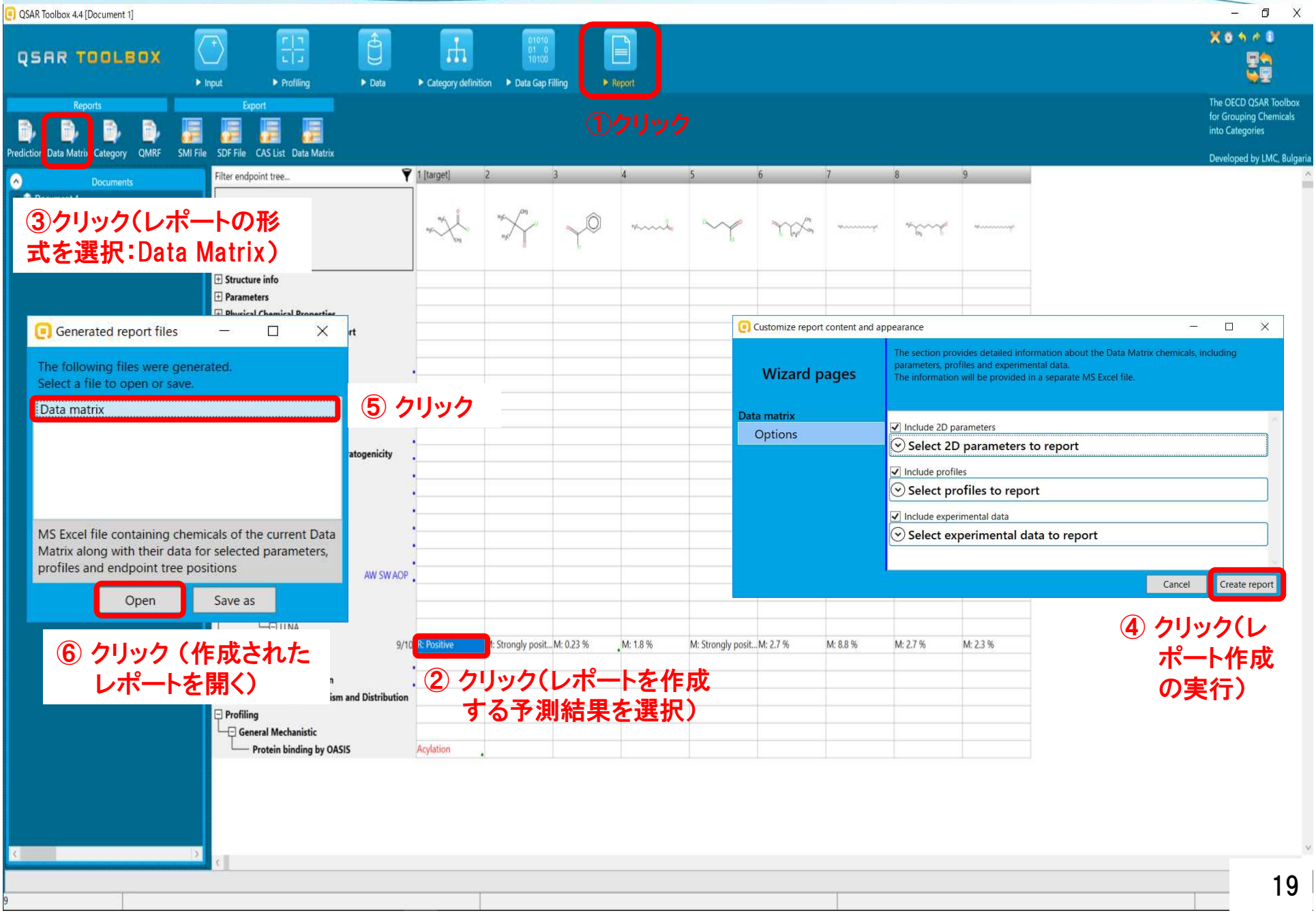
データギャップ補完


QSAR Toolbox 4.4 [Document 1]
QSAR TOOLBOX
Input
Profiling
Data
Category definition
Data Gap Filling
Report
Gap Filling
Workflow
Trend analysis
Read across
(Q)SAR
Standardized
Automated
The OECD QSAR Toolbox for Grouping Chemicals
グラフで特性の類似性/規則性を確認する
Confirm
Are you sure you want to accept this prediction?
Yes
No
② クリック（承認の確認）
Repeated Dose Toxicity
Sensitisation
Skin
in Vivo
LLNA
EC3
8/9
M: Strongly posit...M: 0.23 %
M: 1.8 %
M: Strongly posit...M: 2.7 %
M: 8.8 %
M: 2.7 %
M: 2.3 %
ToxCast
Toxicity to Reproduction
Toxicokinetics, Metabolism and Distribution
Profiling
General Mechanistic
Protein binding by OASIS
Acylation
Data Gap Filling Settings
Only endpoint relevant
At this position:
QSARs 0
Automated workflows 0
Standardized workflows 0
In nodes below:
QSARs 0
Automated workflows 0
Standardized workflows 0
Descriptors
Prediction
Read-across prediction for EC3, based on 6 values
Predicted: Positive
Positive
Negative
EC3
0
0.5
1
1.5
2
2.5
3
3.5
4
4.5
5
log Kow
●：評価対象物質（予測）
●：類似物質（実測；Read-acrossに使用）
●：類似物質（実測；Read-acrossに未使用）
●：選択されているプロット
① クリック（予測結果の承認）
Active descriptor X
log Kow
Select / filter data
Gap filling approach
Descriptors / data
Model/QSAR
Calculation options
Visual options
Information
Accept prediction

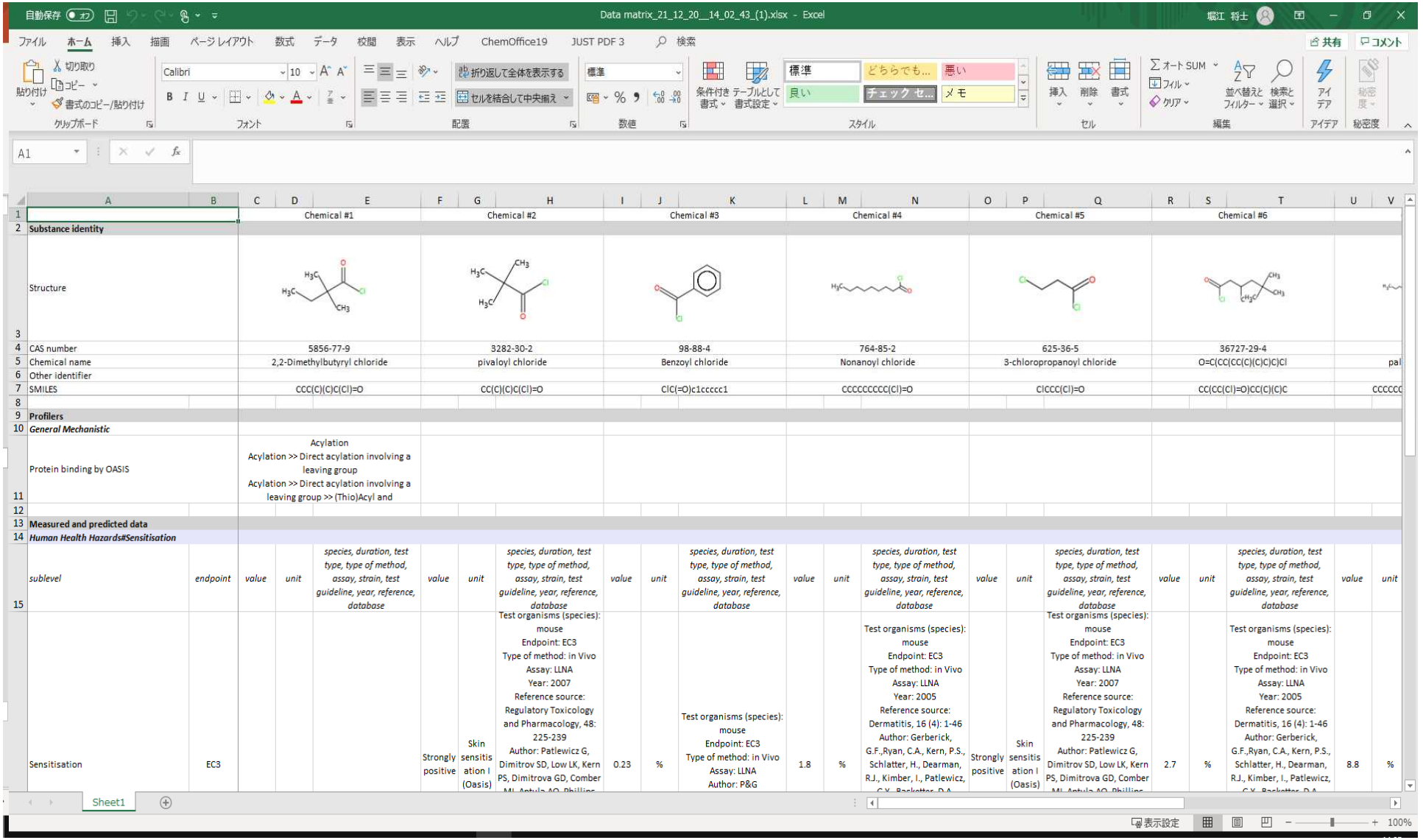
データギャップ補完（結果）



レポート作成


QSAR Toolbox 4.4 [Document 1]
QSAR TOOLBOX
Input
Profiling
Data
Category definition
Data Gap Filling
Report
①クリック
Reports
Export
Prediction
Data Matrix
Category
QMRF
SMI File
SDF File
CAS List
Data Matrix
The OECD QSAR Toolbox for Grouping Chemicals into Categories
Developed by LMC, Bulgaria
Documents
Filter endpoint tree...
1 [target]
③クリック(レポートの形式を選択:Data Matrix)
Structure info
Parameters
Generated report files
The following files were generated.
Select a file to open or save.
Data matrix
⑤ クリック
MS Excel file containing chemicals of the current Data Matrix along with their data for selected parameters, profiles and endpoint tree positions
Open
Save as
⑥ クリック(作成されたレポートを開く)
Customize report content and appearance
Wizard pages
Data matrix
Options
The section provides detailed information about the Data Matrix chemicals, including parameters, profiles and experimental data.
The information will be provided in a separate MS Excel file.
Include 2D parameters
Select 2D parameters to report
Include profiles
Select profiles to report
Include experimental data
Select experimental data to report
Cancel
Create report
④ クリック(レポート作成の実行)
AW SW AOP
9/10
R: Positive
② クリック(レポートを作成する予測結果を選択)
Profiling
General Mechanistic
Protein binding by OASIS
Acylation

レポート作成（結果）



	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q	R	S	T	U	V
1			Chemical #1			Chemical #2			Chemical #3			Chemical #4			Chemical #5			Chemical #6				
2	**Substance identity**																					
3	Structure																						
4	CAS number		5856-77-9			3282-30-2			98-88-4			764-85-2			625-36-5			36727-29-4				
5	Chemical name		2,2-Dimethylbutyryl chloride			pivaloyl chloride			Benzoyl chloride			Nonanoyl chloride			3-chloropropanoyl chloride			O=C(CC(CC(C)(C)C)C)Cl			pal	
6	Other identifier																					
7	SMILES		CCC(C)(C)C(Cl)=O			CC(C)(C)C(Cl)=O			ClC(=O)c1ccccc1			CCCCCCCCC(Cl)=O			ClCCC(Cl)=O			CC(CC(Cl)=O)CC(C)(C)C			CCCCCC	
8																						
9	**Profilers**																					
10	***General Mechanistic***																					
11	Protein binding by OASIS		Acylation Acylation >> Direct acylation involving a leaving group Acylation >> Direct acylation involving a leaving group >> (Thio)Acyl and																			
12																						
13	**Measured and predicted data**																					
14	***Human Health Hazards#Sensitisation***																					
15	*sublevel*	*endpoint*	*value*	*unit*	*species, duration, test type, type of method, assay, strain, test guideline, year, reference, database*	*value*	*unit*	*species, duration, test type, type of method, assay, strain, test guideline, year, reference, database*	*value*	*unit*	*species, duration, test type, type of method, assay, strain, test guideline, year, reference, database*	*value*	*unit*	*species, duration, test type, type of method, assay, strain, test guideline, year, reference, database*	*value*	*unit*	*species, duration, test type, type of method, assay, strain, test guideline, year, reference, database*	*value*	*unit*	*species, duration, test type, type of method, assay, strain, test guideline, year, reference, database*	*value*	*unit*
	Sensitisation	EC3				Strongly positive	Skin sensitisation I (Oasis)	Test organisms (species): mouse Endpoint: EC3 Type of method: in Vivo Assay: LLNA Year: 2007 Reference source: Regulatory Toxicology and Pharmacology, 48: 225-239 Author: Patlewicz G, Dimitrov SD, Low LK, Kern PS, Dimitrova GD, Comber	0.23	%	Test organisms (species): mouse Endpoint: EC3 Type of method: in Vivo Assay: LLNA Author: P&G	1.8	%	Test organisms (species): mouse Endpoint: EC3 Type of method: in Vivo Assay: LLNA Year: 2005 Reference source: Dermatitis, 16 (4): 1-46 Author: Gerberick, G.F.,Ryan, C.A., Kern, P.S., Schlatter, H., Dearman, R.J., Kimber, I., Patlewicz,	Strongly positive	Skin sensitisation I (Oasis)	Test organisms (species): mouse Endpoint: EC3 Type of method: in Vivo Assay: LLNA Year: 2007 Reference source: Regulatory Toxicology and Pharmacology, 48: 225-239 Author: Patlewicz G, Dimitrov SD, Low LK, Kern PS, Dimitrova GD, Comber	2.7	%	Test organisms (species): mouse Endpoint: EC3 Type of method: in Vivo Assay: LLNA Year: 2005 Reference source: Dermatitis, 16 (4): 1-46 Author: Gerberick, G.F.,Ryan, C.A., Kern, P.S., Schlatter, H., Dearman, R.J., Kimber, I., Patlewicz,	8.8	%

ユーザーマニュアル(和訳)

https://www.nite.go.jp/chem/qsar/toolbox.html#section2

QSAR Toolboxマニュアル類

<NITEの仮訳>

OECDのQSAR Toolboxページに公開されている一部のマニュアルをNITEで仮訳いたしました。ぜひご活用ください。

- OECD QSAR Toolbox v.4の操作マニュアル

(QSAR Toolbox v4.1に基づいたマニュアル)

原文 Application manual of OECD QSAR Toolbox v.4【PDF:外部サイト】

- OECD QSAR Toolboxユーザーマニュアルスタートガイド

(QSAR Toolbox v3.0に基づいた使い方マニュアル)

原文 QSAR Toolbox Manual for getting started【PDF:外部サイト】

- OECD QSAR Toolbox4.4のインストールマニュアル (現在準備中)

原文 Toolbox 4.4 Installation Manual【PDF:外部サイト】

<NITEのマニュアル>

QSAR Toolboxの使用方法について、NITE独自でマニュアルを作成しております。こちらもご覧ください。

- OECD QSAR Toolbox version 3.2を用いた公開データの活用方法に関するマニュアル