（実績）デジタル×化学物質

概要

化学物質は工業的に使用されているもので数十万物質あると言われており、さらに日々新たな化学物質が生み出されています。化学物質の反応や分解の機構は複雑であり、新たな機能の発掘や人や生態への悪影響の最小化といったニーズや課題への対応には、膨大な時間や人的資源、コストが必要でありましたが、昨今のデジタル技術の革新によって劇的な変革が期待されています。

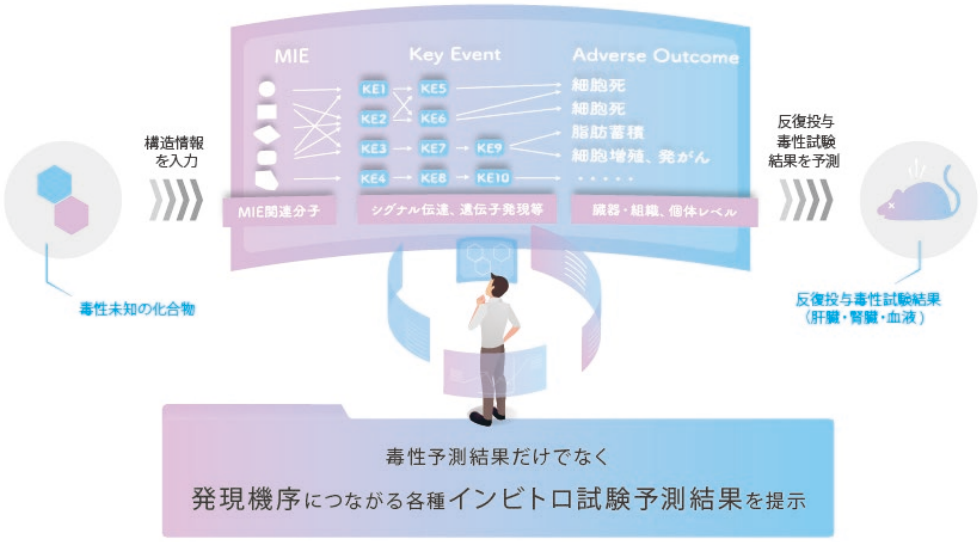
当社では、化学物質の専門知識とデジタル技術の専門知識を融合することで、お客さまや社会のニーズや課題の解決を支援しています。

・AI-SHIPS　統合的毒性予測システムの開発
・次世代製品含有化学物質情報・資源循環プラットフォーム(CMP)
・化審法における行政手続きの効率化支援
・構造同定コードを用いた化学物質管理の高度化支援
・JCIA BIGDr の開発・運用支援
・NITE-CHRIP のリニューアル支援　等

AI-SHIPS　統合的毒性予測システムの開発

化学物質の安全性の評価は、従来、反復投与毒性試験など動物実験により行われてきました。しかし、動物実験は高額の費用や時間がかかることや、動物福祉の観点で課題がありました。動物実験に代わる手法として、化学物質の構造から毒性を予測する QSAR（定量的構造活性相関）の開発が進められてきていますが、規制当局への受け入れは進んでいません。その大きな要因の 1 つとして、一般的な QSAR では、試験結果と作用機序との関連性が見えないことが挙げられます。

そのような背景から、毒性発現機序に基づく反復投与毒性試験の予測システム（通称 AI-SHIPS）の開発が、経済産業省の研究開発事業として実施されました(2017 年度～2021 年度)。当該プロジェクトには化学物質の毒性学、細胞等を用いた各種インビトロ試験、ケモインフォマティクス、AI 技術等に精通する複数の大学・研究機関や民間企業が参画しました。当社はプロジェクト全体のマネジメント支援ならびにインビトロ試験の予測モデル開発、毒性データの収集整理などを担当しました。



毒性発現機序に基づく反復投与毒性試験の予測システム（通称 AI-SHIPS）

（参考情報）

- 経済産業省事業「省エネ型電子デバイス材料の評価技術の開発事業（機能性材料の社会実装を支える高速・高効率な安全性評価技術の開発）」
- AI-SHIPS プロジェクトページ

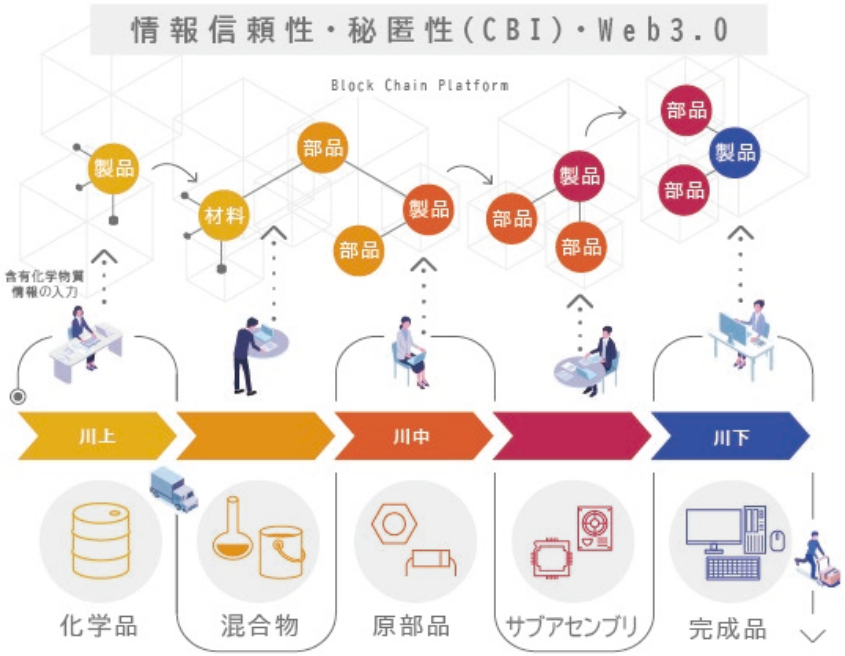
次世代製品含有化学物質情報・資源循環プラットフォーム(CMP)

欧米を中心として、製品(成形品)に含有する化学物質の規制が強化されています。自動車、電機・電子機器などの組立製品は、長く複雑なサプライチェーンにおける分業で製造されており、製品中の化学物質の含有状況を把握するためには、サプライチェーンに関わる川上～川下の各企業が製品の含有化学物質情報を伝達していくことが必要です。

製品含有化学物質の情報伝達スキーム chemSHERPA など、製品含有化学物質の情報伝達・管理に係る企業の負担軽減や効率化が進められてきましたが、迅速性や企業機密の確保、トレーサビリティ等の点で課題がありました。また、昨今は EV の普及など、業界をまたいだ製品の流通が進んでいます。

さらに、サーキュラーエコノミーへの移行が求められている中、欧州では、製品の持続可能性に関する情報を記録、提供するデジタルプロダクトパスポート（DPP）が制度化される等の動きもあり、資源循環に係る情報の伝達も必要になってきています。

以上の背景から、業種横断で利用可能なサプライチェーンの情報流通基盤の必要性が高まり、2023 年に Chemical and Circular Management Platform (CMP)の構築を目指した活動が開始されました。当社もこの活動に参画し、約 50 の企業・団体とともに、検討を進めています。



Chemical and Circular Management Platform (CMP)のイメージ

（参考情報）

・ Trusted Web の実現に向けたユースケース実証事業：Chemical Management Platform(CMP)

化審法における行政手続きの効率化支援

化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律(化審法)の下、一般化学物質等の製造・輸入事業者は、毎年の製造・輸入数量や用途等を国へ届出し、国は、これらの情報を集計及び分析しリスク評価に用いています。届出件数は年間３万件程度あり、複数の機関で届出受付、疑義照会、整理分析等を行っているため、コストや正確性の担保の上で課題がありました。そのような背景から、行政手続きの効率化支援を実施しました。

支援においては、手続きのフローと情報の流れをヒアリングの上分析し、IT の活用により効率化が可能な部分を抽出、新たなフローの整理等による効果測定を実施しました。それらを踏まえて、情報のステータス管理や効率的な情報授受を行うための届出管理システムの設計ならびにシステム構築の PMO（Project Management Office）などを実施しました。

行政手続きの効率化支援フロー（イメージ）

構造同定コードを用いた化学物質管理の高度化支援

化学物質は物質名称や CAS RN®等の番号によって管理されていますが、名称には多数の別称があり、CAS RN®についてもその番号だけでは化学物質の構造を同定することができない場合があります。そこで、近年様々な構造同定コードが開発されています。当該コードには、SMILES や InChI/InChIKey 等の文字列形式、MDL MOLfile 等のファイル形式が存在しています。それぞれの構造同定コードにはメリット／デメリットがあり、当該コードを使う目的に応じて適切なコードの選択が必要となります。また、構造同定コード間には互換性があり、様々なソフトウェアで処理することができます。

また、構造同定コードから各化学物質の特徴量を抽出して記述子化すれば、機械学習等に利用可能な基礎データとすることができます。記述子化とは、例えば、「ベンゼン環を有している」、「フルオロ化合物である」といった情報を明示的に扱うことができ、これにより、化学物質の構造と物理化学的性状／毒性／機能用途との関係性を抽出しやすくなります。

当社では、化学物質の構造同定コードの作成から、それを利活用した解析やモデル構築まで、化学物質に関わるデジタル活用について支援を行っています。

（近年の実績）

- 新規化学物質申出における構造を表すコードの記載のあり方に関する調査（経済産業省 2017）
- 化学物質のフロー及びストックに関する情報収集・検討業務（環境省 2018~2020）
- 食品用器具・容器包装ポジティブリスト収載物質の QSAR 解析に係る SMILES 等作成業務（国立医薬品食品衛生研究所 2021~2023）

JCIA BIGDr の開発・運用支援

JCIA BIGDr(ビッグドクター)は一般社団法人日本化学工業協会が提供する「化学物質リスク評価支援ポータルサイト」です。GPS/JIPS 活動の支援に加え、より広く化学物質のリスクアセスメント全般をカバーしています。

当社では、JCIA BIGDr の開発（データベースの作成、リスクアセスメントツールの開発、各種解説資料の作成）及び運営（コンテンツの定期更新やシステムの保守）などを行っています。

（近年の実績）

- BIGDr の開発・メンテナンス・管理（日本化学工業協会 2012～2023）

NITE-CHRIP のリニューアル支援

独立行政法人製品評価技術基盤機構（NITE）では、化学物質の物理化学的性状、ハザード情報、暴露情報、国内外におけるリスク評価結果などの情報を収集・整理し、化学物質総合情報提供システム（NITE-CHRIP）等を通じて国民、事業者、行政機関等に提供しています。

NITE-CHRIP は 2016 年 4 月に、検索機能の拡張や、検索結果のダウンロード機能実装など利便性の向上に資する大幅なリニューアルを行っています。

当社では、当時の NITE-CHRIP 刷新に際し、「利用ユーザからの要望（国内外の規制情報の充実、データ二次利用の促進、一部のサイトとの連携強化など）」や「機能ごとの利用状況」、NITE 内で管理するデータベースである NITE-CHRIP/J-CHECK/政府 GHS 分類結果の「維持管理に関する課題（データ更新の抜本的な効率化、運用コストの低減など）」を踏まえ、NITE-CHRIP 更新業務・システムの現状分析を実施しました。さらに実装済み機能や要望・課題を重要性と緊急性の観点で評価し、次期業務・システムに期待される機能と要件等の絞り込みを実施しました。整理結果は、「情報システムに係る政府調達の基本指針」に則り次期 NITE-CHRIP 開発仕様書原案（要件定義書案）として取りまとめ、調達審査まで支援を行っています。

（近年の実績）

- 次期 CHRIP の業務・システム再構築のための調査・整理等支援業務（製品評価技術基盤機構 2013）