

# 毒性関連ビッグデータを用いた人工知能による 化学物質安全性予測手法の開発について

経済産業省  
化学物質管理課

奥村 浩信

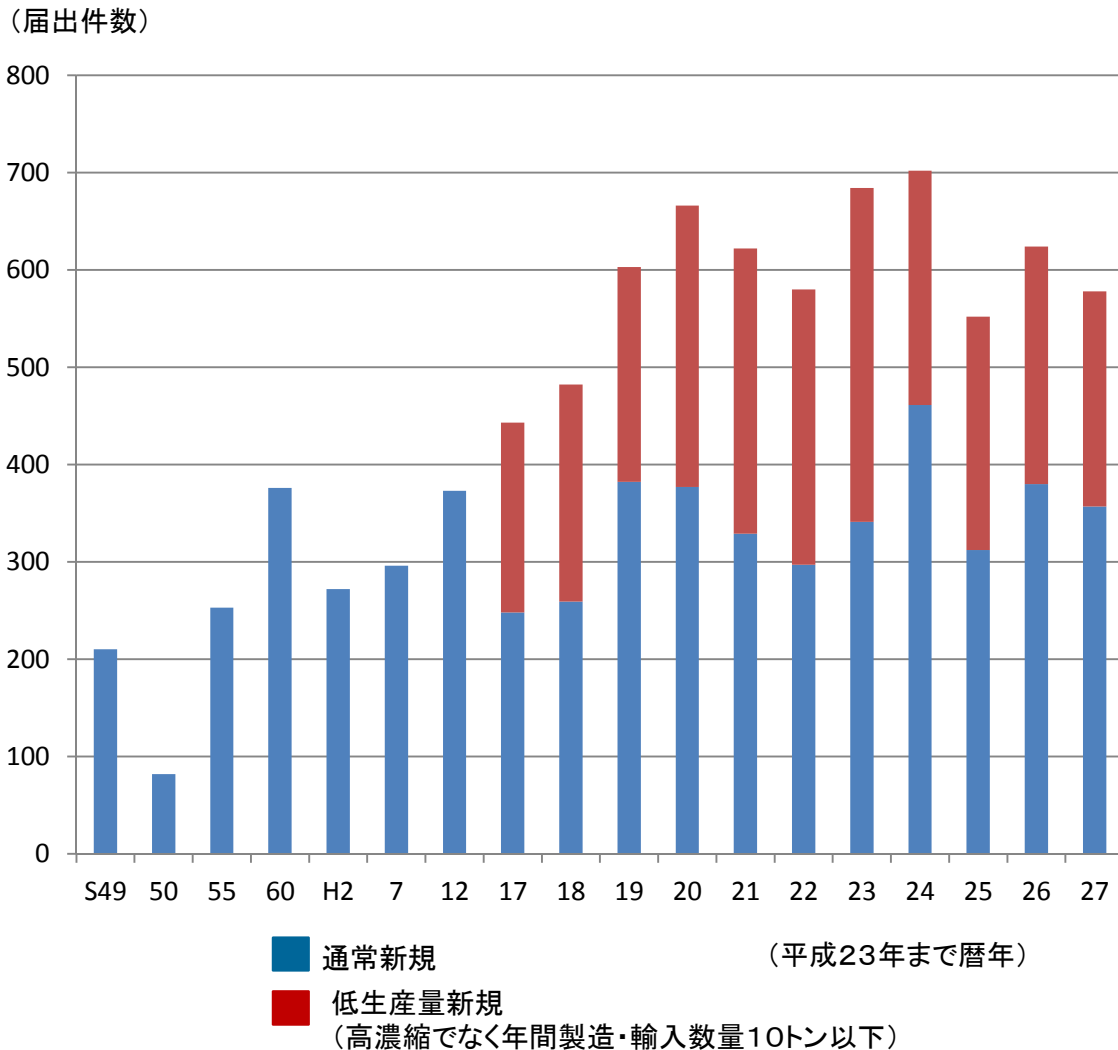
# 目次

1. 背景 日本<sup>の</sup>素材産業<sup>の</sup>競争力
2. 問題 競争環境<sup>の</sup>変化  
動物試験<sup>の</sup>禁止<sup>に</sup>向<sup>け</sup>た<sup>の</sup>流れ
3. 対策 欧米<sup>の</sup>取組  
日本<sup>の</sup>取組-新規研究<sup>の</sup>開発

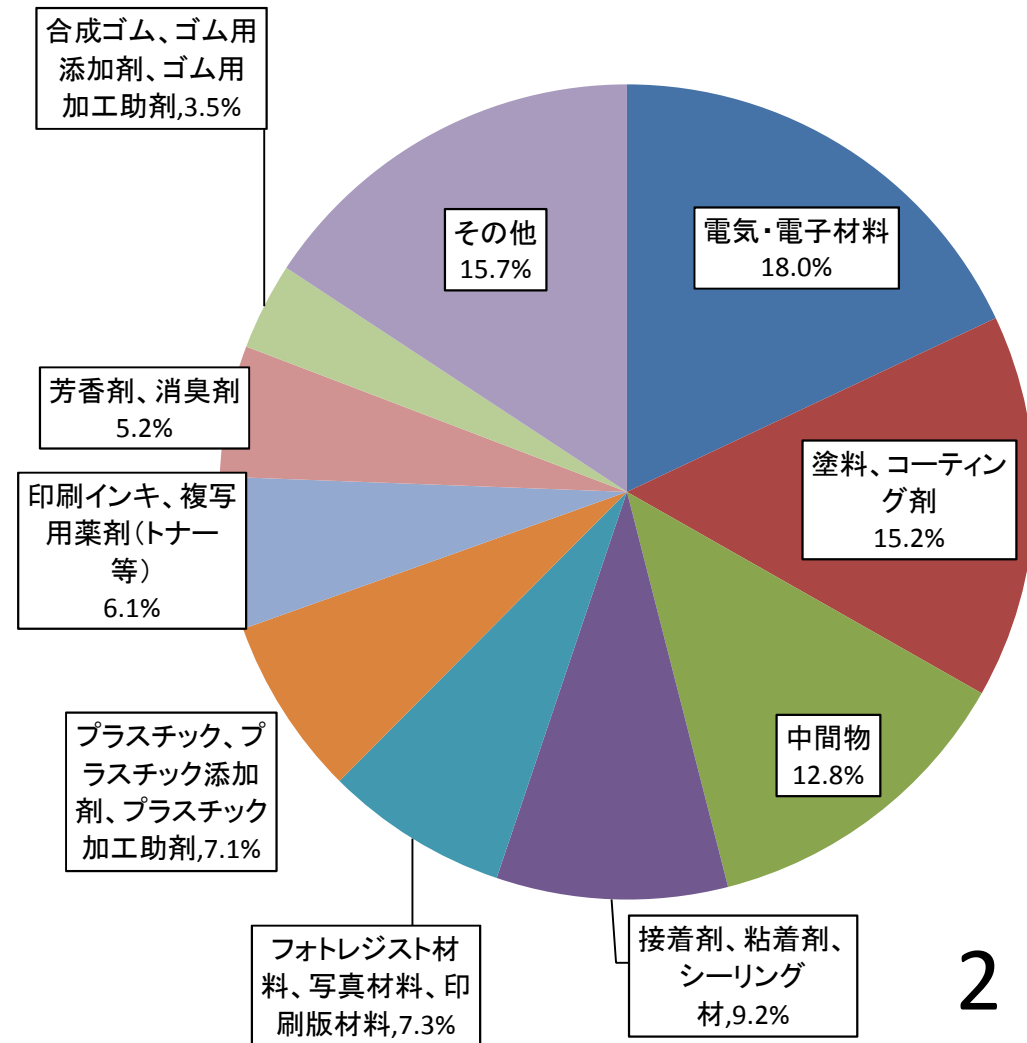
# 新規化学物質の届出件数の推移

- ◆新規化学物質の届出件数は、直近では600件前後で推移。
- ◆うち通常新規による届出件数は400件前後で推移、低生産量による届出件数は200件前後で推移。

＜新規化学物質届出件数の推移＞



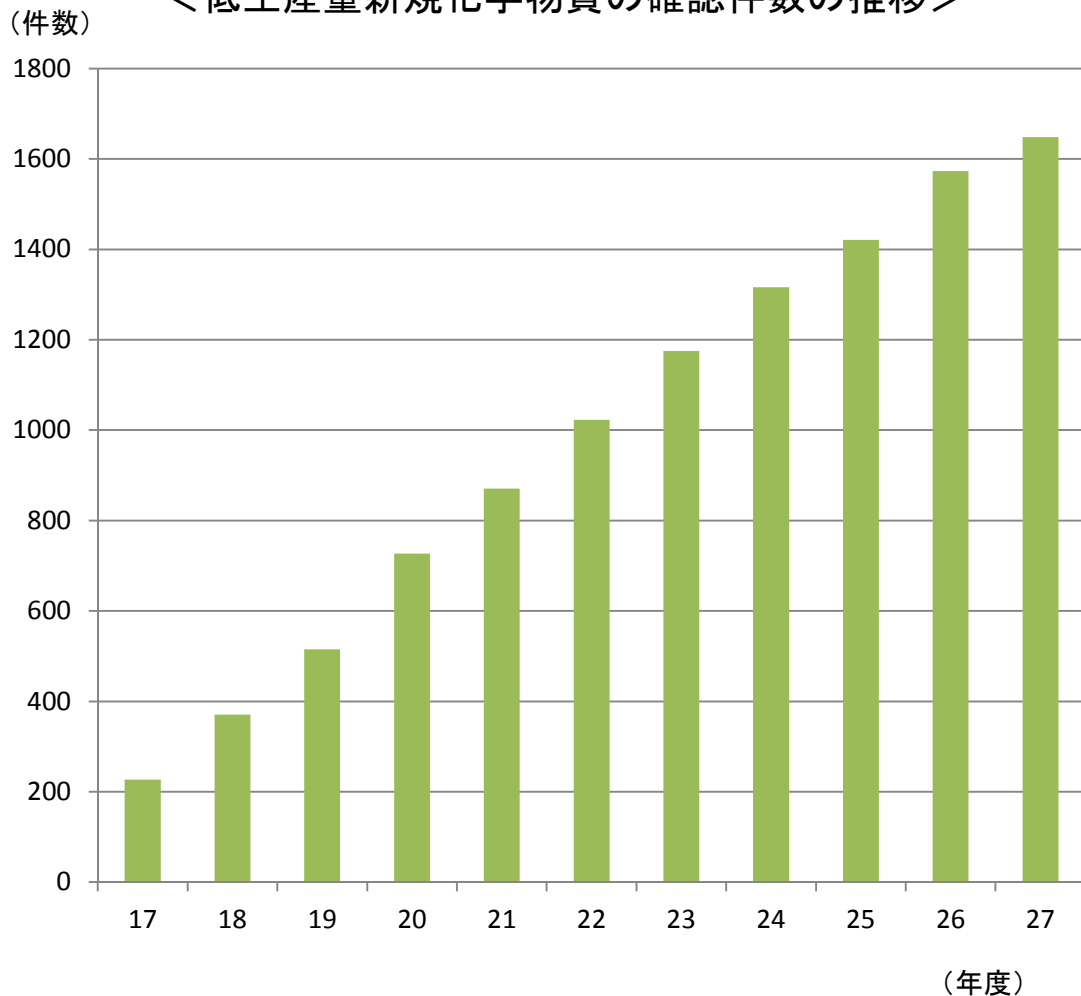
＜主な用途（平成27年度）＞



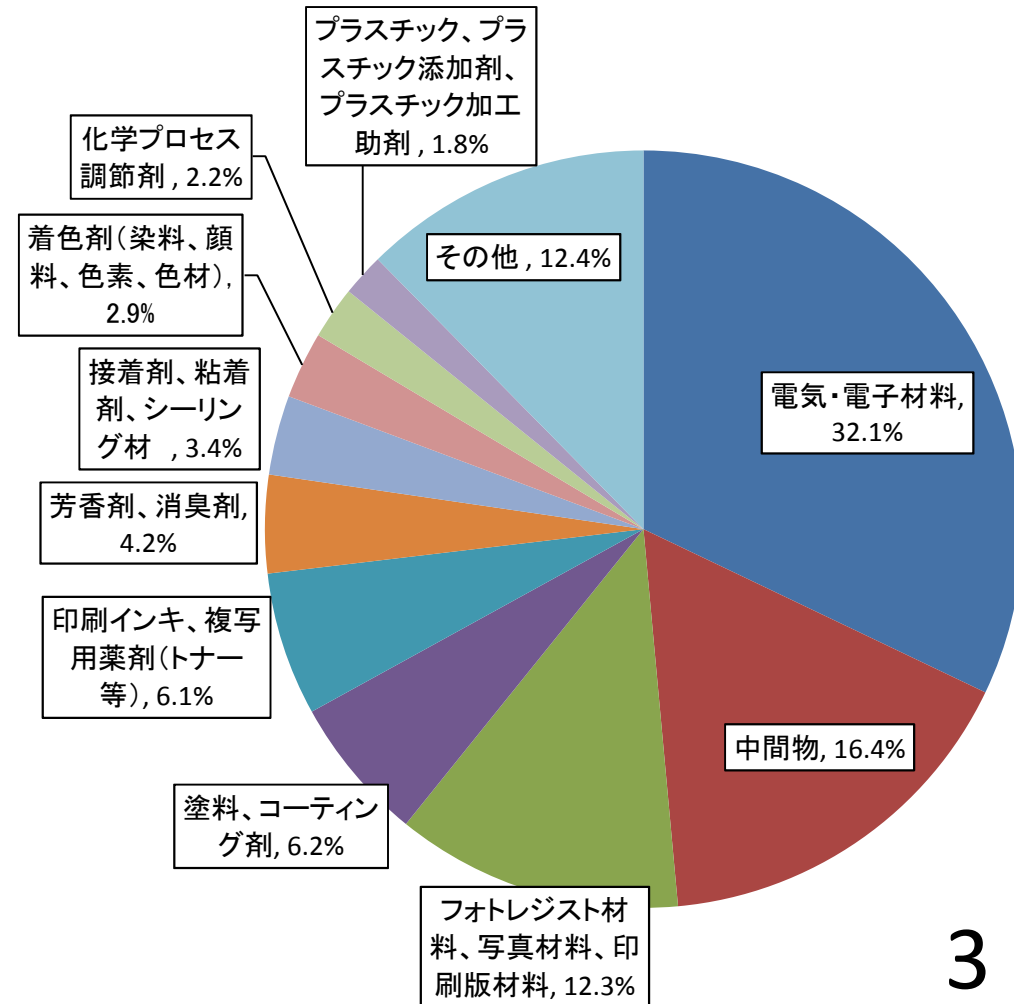
# 低生産量新規化学物質(全国10トン/年以下)の確認件数の推移

◆低生産量新規化学物質の確認件数は、年々増加しており、平成27年度では1,700件程度。

＜低生産量新規化学物質の確認件数の推移＞



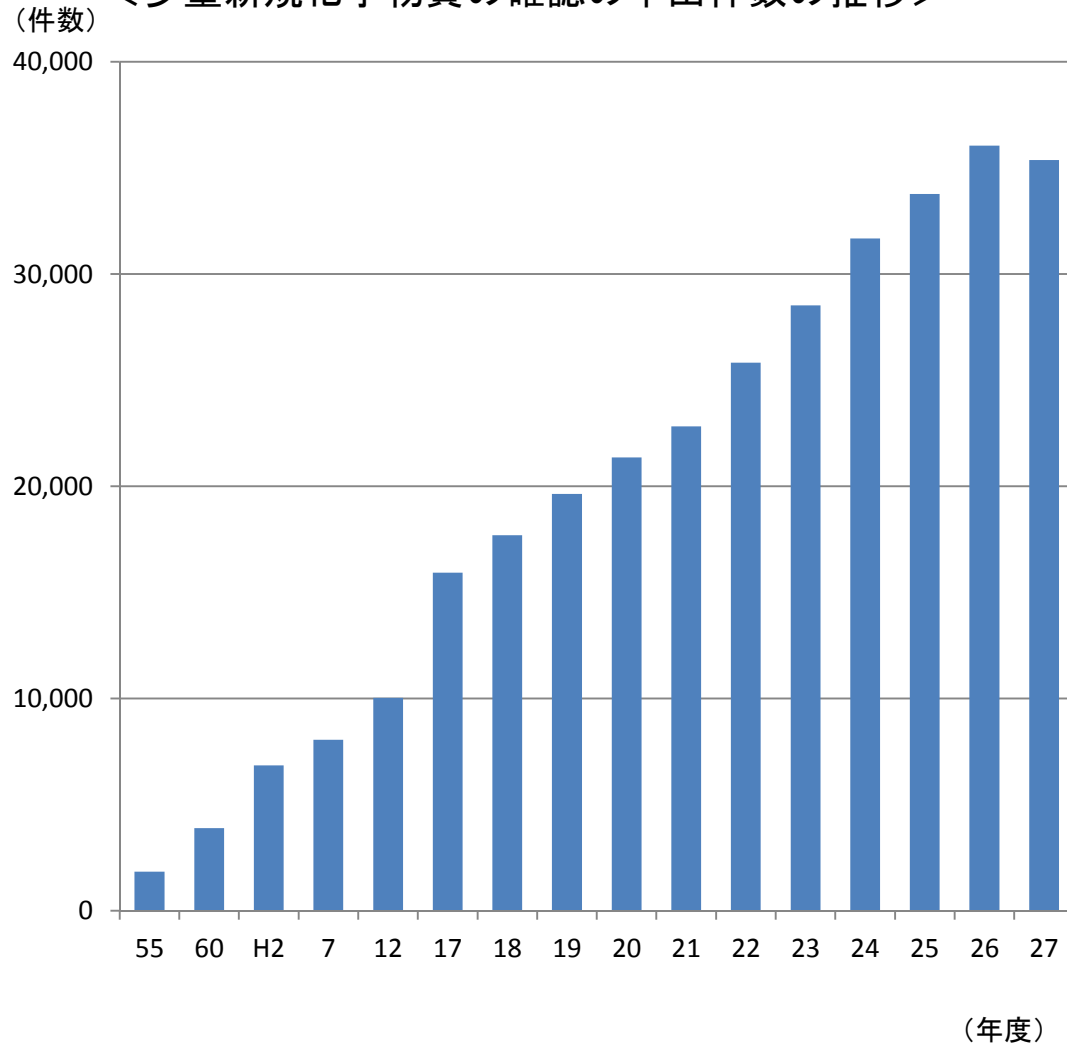
＜主な用途（平成27年度）＞



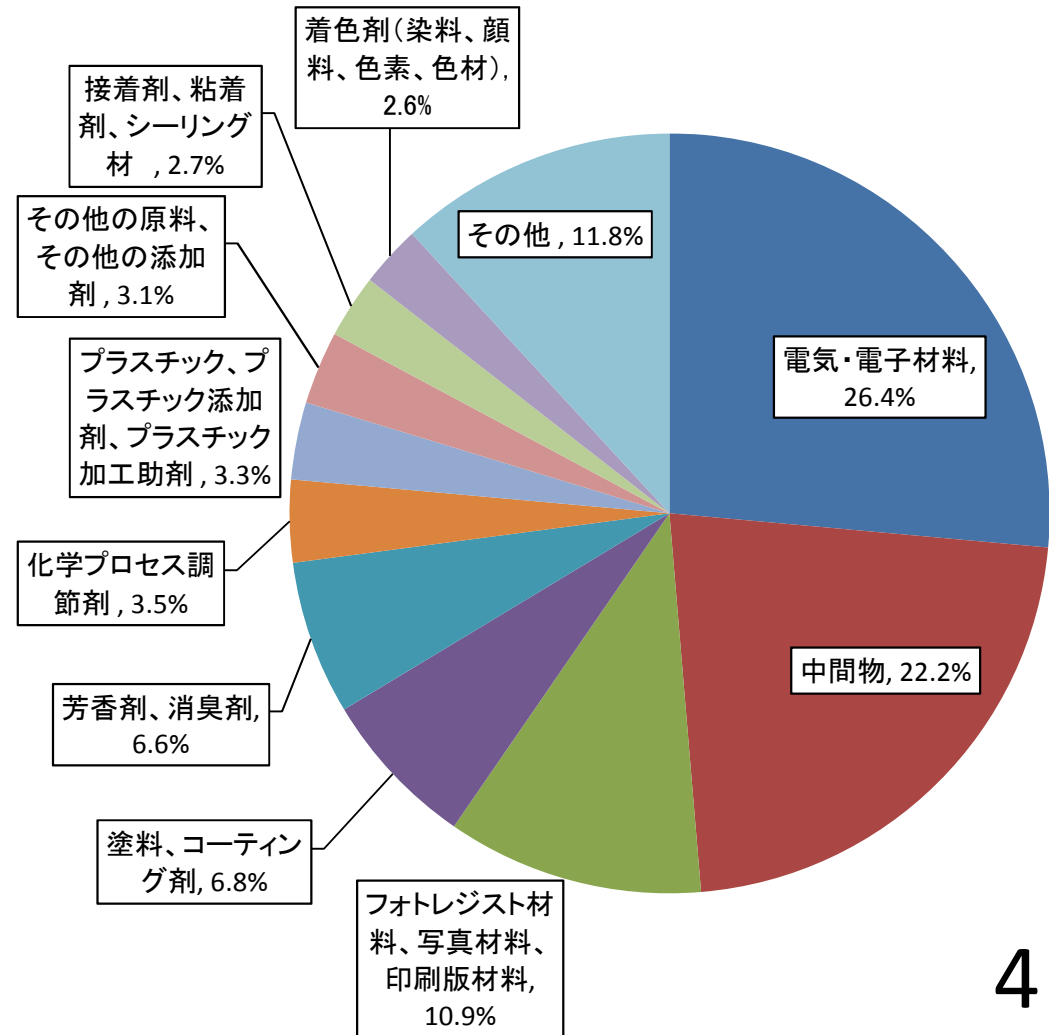
# 少量新規化学物質(全国1トン/年以下)の申出件数の推移

◆少量新規化学物質の申出件数は、年々増加しており、直近では36,000件程度。

＜少量新規化学物質の確認の申出件数の推移＞

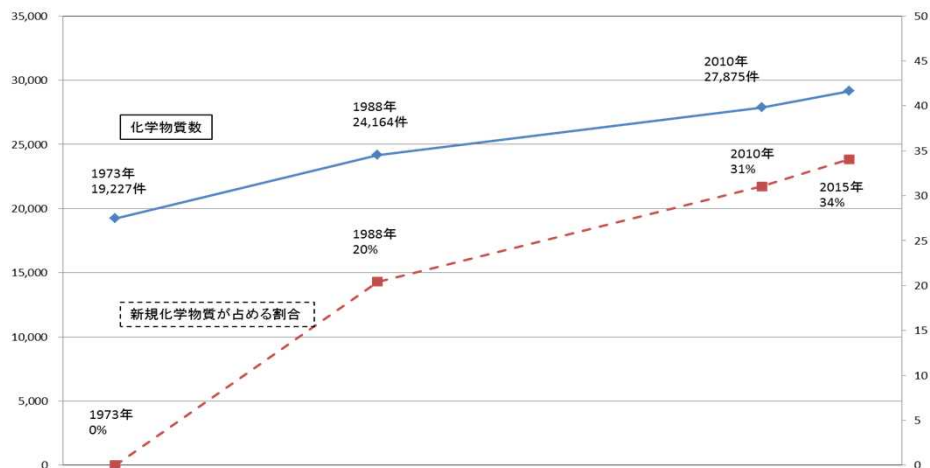


＜主な用途（平成27年度）＞

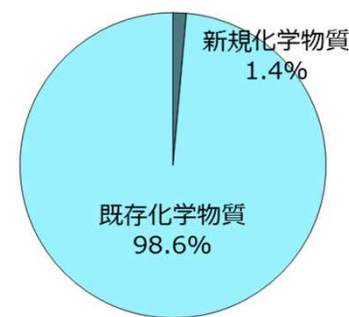


# 付加価値の高い機能性化学物質

◆日本の化学産業は、主に電気電子材料分野で不可価値が高い機能性化学物質を、少量多品種生産することで競争力を発揮してきた。

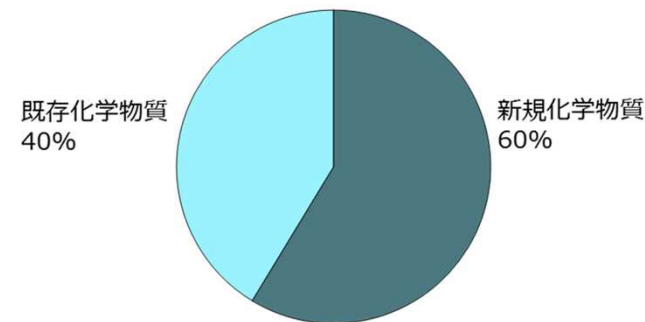


我が国で製造・輸入される化学物質数の推移と新規化学物質の割合  
※平成26年度化審法届出実績より作成



全化学物質の製造輸入数量に占める  
新規化学物質の製造輸入数量の割合

※新規化学物質とは、昭和48年以降に製造輸入された化学物質



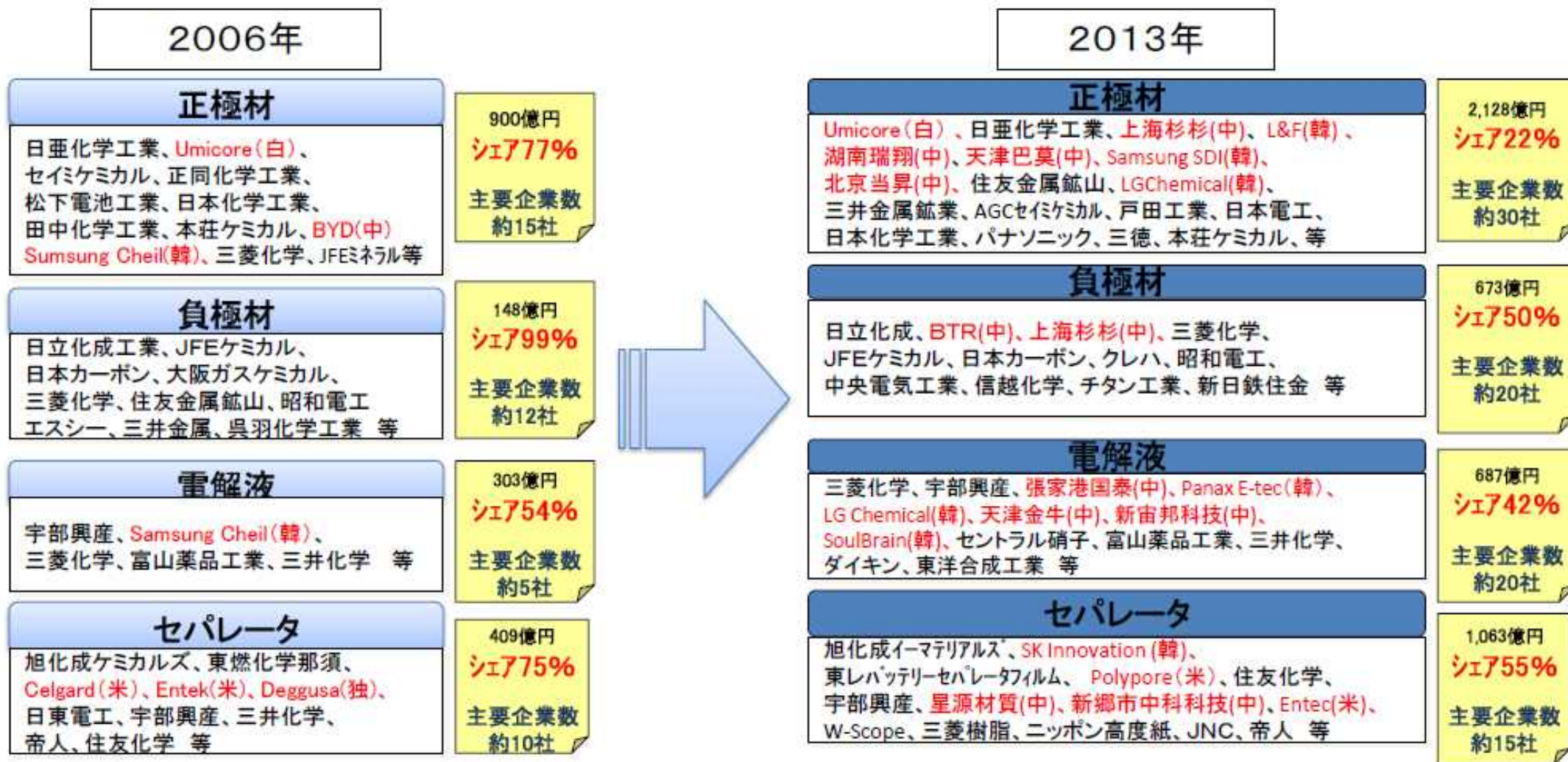
全化学物質の売上額に占める  
新規化学物質の売上額の割合

我が国の新規化学物質の製造輸入量と売上額

※平成25年度化審法届出実績と「平成26年度製造基盤技術実態等調査(機能性素材動向調査)報告書」(みずほ情報総研)によるポリエチレン価格250円/kg、機能性化学品単価数万円～数十万円/kgに基づいて算出

# 市場の変化 ①リチウムイオン電池材料

◆市場の拡大とともに、狭い市場に他業種を含む多くの企業が参入、鎬を削る状態。



[出典]経済産業省「2015機能性素材」産業政策の方向性」

# 市場の変化 ②液晶ディスプレイ材料

◆韓国、中国等の追い上げにより、日本が徐々にシェアを失いつつある。

2005年

## カラーレジスト

JSR、東洋インキ、富士フィルム、住友化学、ザ・インクテック、東レ 等

712億円  
シェア91%  
主要企業数  
約10社

## ブラックレジスト

東京応化工業、富士フィルム、JSR、新日鐵化学、ADEKA 等

57億円  
シェア94%  
主要企業数  
約7社

## 偏光板

大日本印刷、日東電工、凸版印刷、日本製紙ケミカル、富士フィルム、サンリツ、ポラテクノ 等

1,028億円  
シェア68%  
主要企業数  
約8社

## カラーフィルタ

凸版印刷、大日本印刷、住友化学、東レ、アンデス電気、マイクロ技術研究所、光村印刷、AUO(台)、AMTC(台)等

4,020億円  
シェア95%  
主要企業数  
約9社

2012年

## カラーレジスト

JSR、LG Chemical(韓)、住友化学、トーヨーカラー、Cheil Industries(韓)、三菱化学、DNPファインケミカル、富士フィルム 等

814億円  
シェア63%  
主要企業数  
約10社

## ブラックレジスト

東京応化工業、Cheil Industries(韓)、三菱化学、CMC(台)、新日鐵住金化学、ADEKA、Daxin(台)、等

156億円  
シェア61%  
主要企業数  
約7社

## 偏光板

日東電工、LG Chemical(韓)、住友化学、CMMT(台)、BMC(台)、サンリツ、Cheil Industries(韓)、ポラテクノ、OPTIMAX(台)、SAPO(中)、SunnyPOL(中)、WINDA(中)、QIAOYE(中) 等

7,822億円  
シェア60%  
主要企業数  
約13社

## カラーフィルタ

LG Display(韓)、Samsung Display(韓)、Innolux(台)、AUO(台)、大日本印刷、凸版印刷、住友化学、東レ、アンデス電気、BOE(中)、SVA-FF(中) 等

1兆4595億円  
シェア11%  
主要企業数  
約40社  
(うち、内製化企業  
約30社)

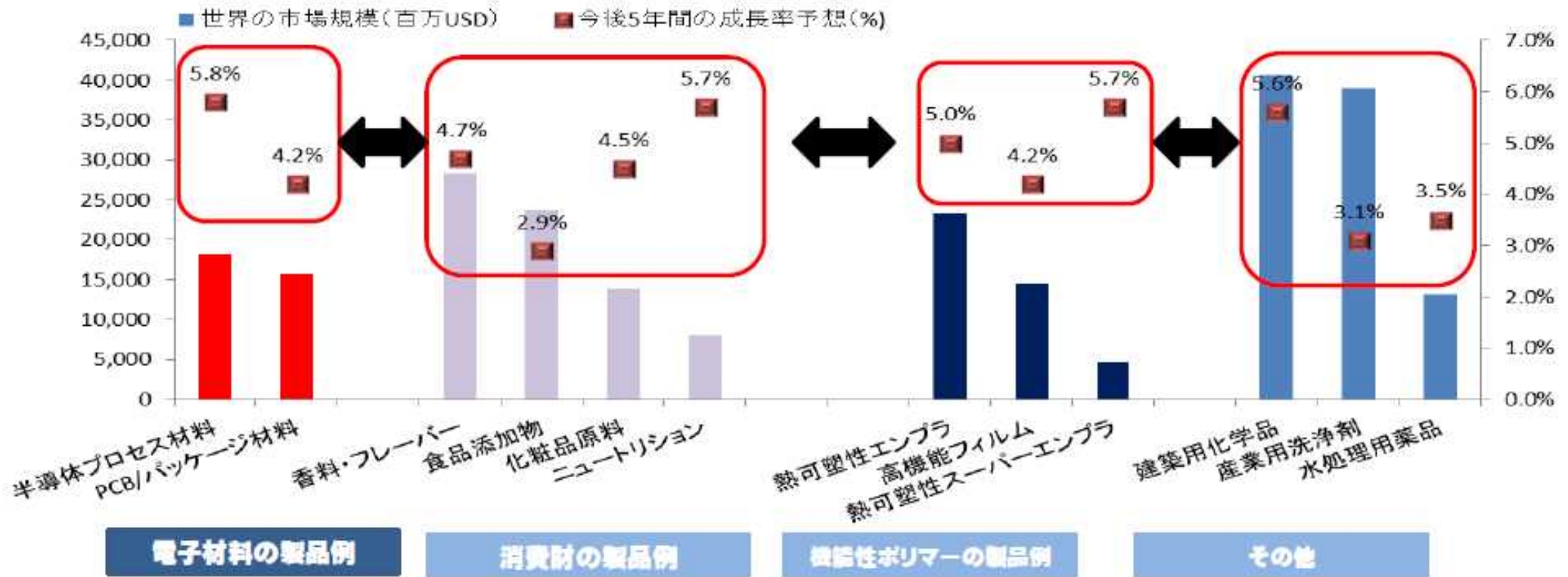
[出典]経済産業省「2015機能性素材」産業政策の方向性



# 高い成長が見込まれる機能性素材市場

- ◆我が国素材企業が国際競争力を持つ電子材料分野の市場規模は約30,000百万USD(3兆円)あまりであり、全世界の機能性素材市場の1割にも満たない。
- ◆残り9割以上は、電子材料分野に劣らない規模で高い成長潜在性を持つ、ニュートリションや化粧品原料等の消費財など。

機能性素材の市場規模と成長率予測の比較（製品別）

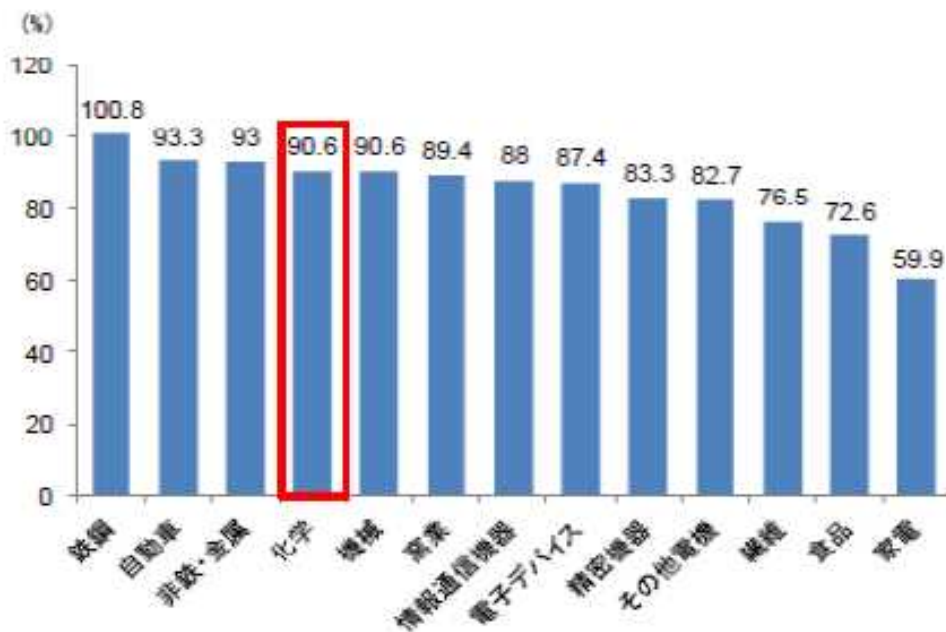


[出典]経済産業省「2015機能性素材」産業政策の方向性」

# 製品ライフサイクル・研究開発投資の短期化

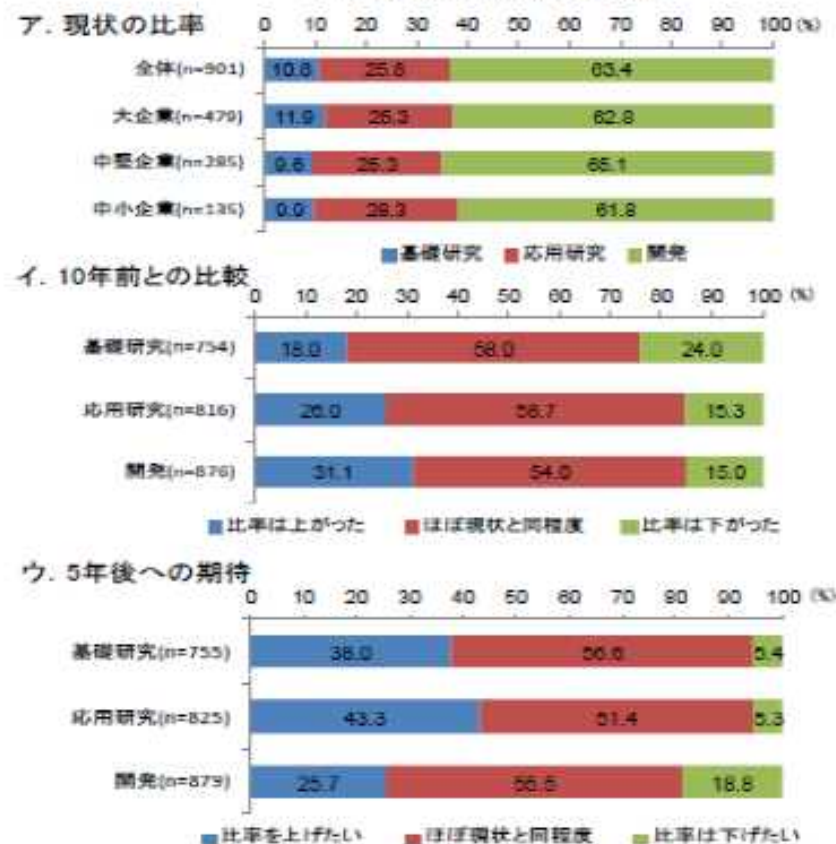
- ◆業界別に製品ライフサイクル年数の短縮率(5年前)をみると、化学業界は9割に短縮。また、ユーザー業界でも短期化傾向にある。
- ◆国際競争の激化が進み、企業は短期の研究開発投資の比率を高める傾向にある。

製品サイクルの短縮率



出所:経済産業省「2007年ものづくり白書」  
 ※主力製品の現在のライフサイクル年数(産業別平均値)／主力製品の5年前のライフサイクル年数(産業別平均値)

研究開発投資の配分比率

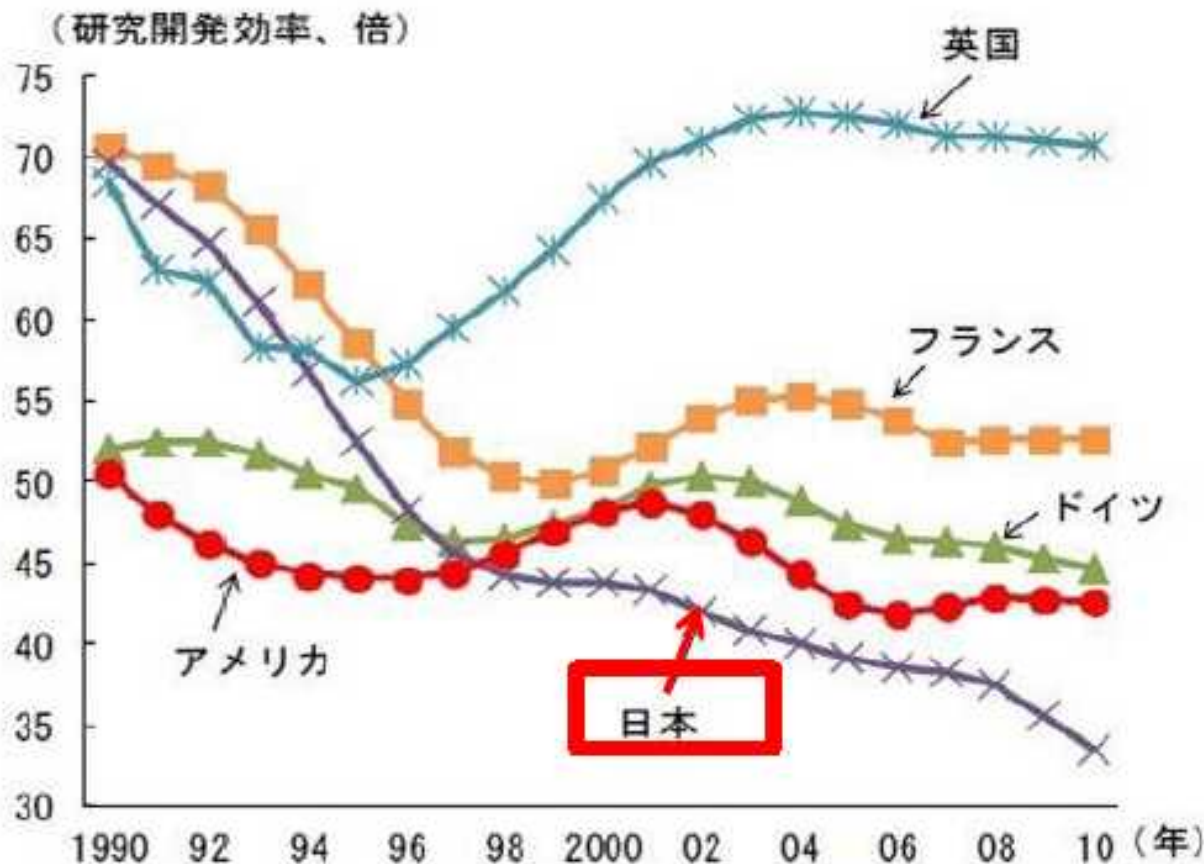


[出典]経済産業省「2015機能性素材」産業政策の方向性

# 低下する我が国企業の研究開発効率

- ◆企業の研究開発費とその後生み出した付加価値の割合（後方5年移動平均との比較）を見ると、日本は90年代以降大きく減少。
- ◆主要先進国と比較しても、企業の研究開発が付加価値創造にうまく活かされていないと考えられる。

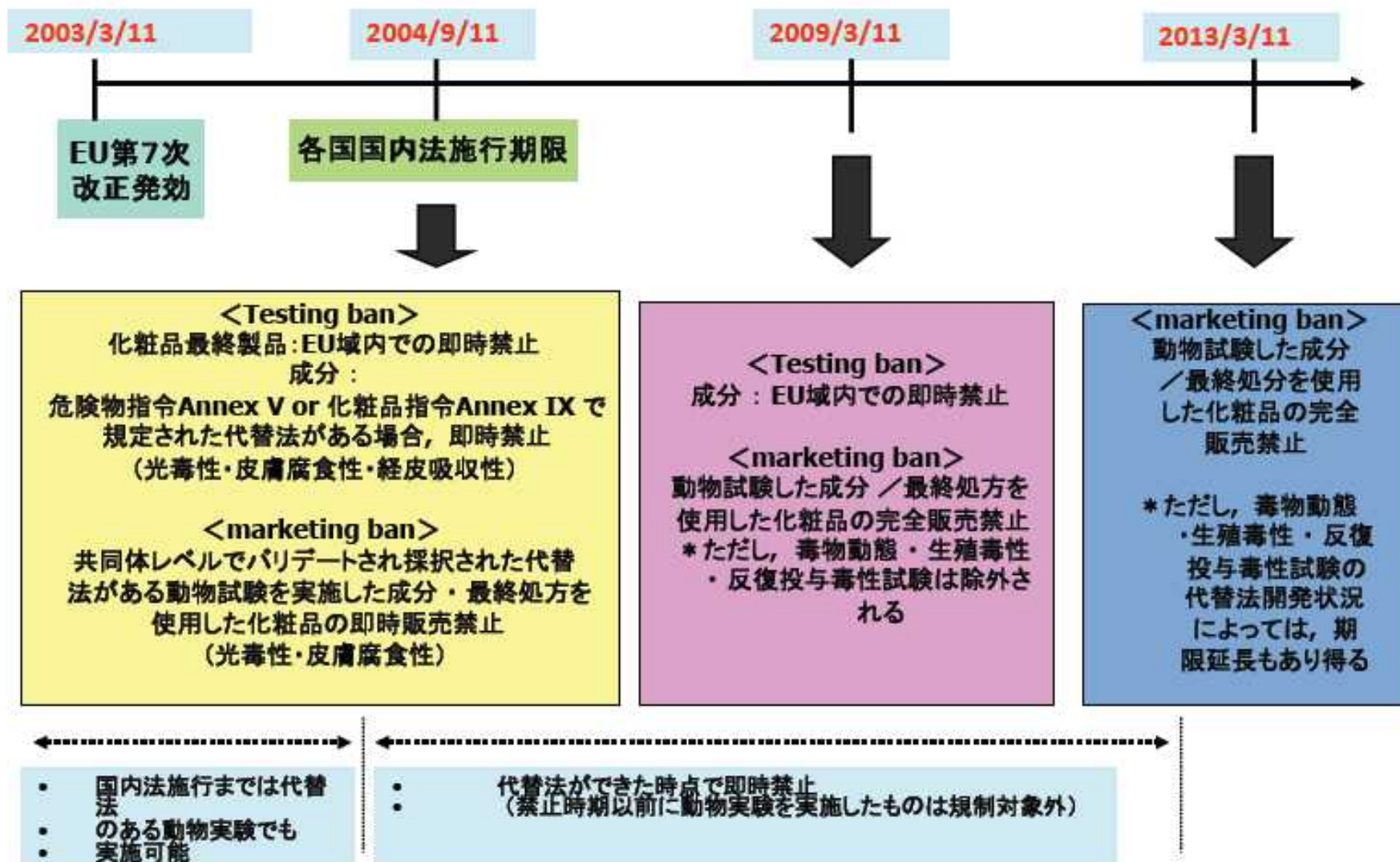
先進主要国での研究開発効率の推移



[出典]経済産業省「2015機能性素材」産業政策の方向性」

# EU化粧品に対する動物実験規制

## ◆動物試験した成分／最終処分をした化粧品の完全販売禁止



# REACHの動向

◆EUでは政策的に動物実験の代替と削減が進められている。

## 2016年6月6日 REACH付属書の改正 — 登録者には代替試験法の使用を要求

「皮膚腐食性／刺激性、重篤な眼の損傷／眼刺激、急性経皮毒性および皮膚感作性に対するREACHの要件が変更されました。登録者は代替試験法の使用を考慮してください。」

[http://echa.europa.eu/view-article/-/journal\\_content/title/reach-annexes-amended-registrants-to-use-alternative-test-methods](http://echa.europa.eu/view-article/-/journal_content/title/reach-annexes-amended-registrants-to-use-alternative-test-methods)

<http://eur-lex.europa.eu/legal-content/EN/TXT/PDF/?uri=CELEX:32016R0863&qid=1465260605785&from=en>

## 2016年6月15日 試験提案をするときは(動物試験)代替法を考慮を要求

「REACH登録における情報要件で動物試験を提案するときは、まず代替試験法を考慮していることを示してください。」

[http://echa.europa.eu/view-article/-/journal\\_content/title/considerations-for-alternative-methods-need-to-be-included-in-your-testing-proposal](http://echa.europa.eu/view-article/-/journal_content/title/considerations-for-alternative-methods-need-to-be-included-in-your-testing-proposal)

# 欧米の取組

## ◆欧米の動向

- ・動物試験を代替する細胞試験の開発に着手

欧州のSEURATプロジェクト(欧州委員会等 2011年～)

米国のToxCast・Tox21プロジェクト(環境保護庁等 2007年～)

## ◆欧米の戦略

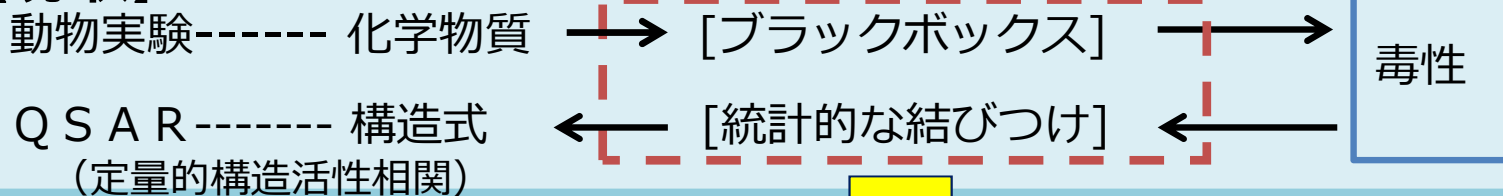
- ・細胞試験の標準化(OECDテストガイドライン化及びデータの相互受入化)
- ・知財を活用し、試験機器・細胞等の販売
- ・更に、欧米での動物実験禁止、動物実験データの受入れ禁止

## ◆本研究開発を行わなければ、

- 我が国企業は、欧米の細胞試験を行わざるを得なくなる。これを国内で行う場合は欧米企業が特許を持つ試験機器等を使用しなければならず、また、試験機器等の納期遅れ等のリスクも発生。
- 海外で安価に安全性試験を行うことが可能であれば、海外の研究所に開発拠点を移すという選択もあり得る。

# 毒性関連ビッグデータを用いた人工知能による次世代型安全性予測手法の開発の概要

## 【現状】



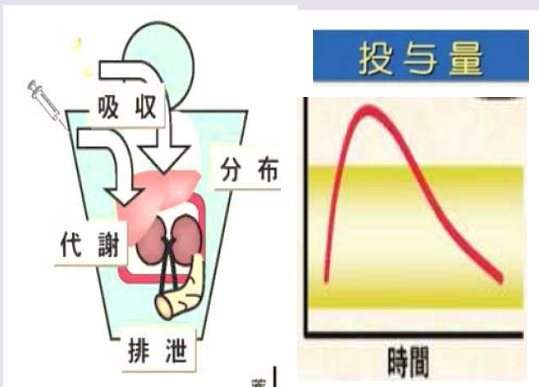
動物実験データ  
数万物質  
(国・企業が保有)

## 研究課題 毒性発現メカニズムの解明

## ディープラーニング

### 吸収・代謝・排泄・分布

【生理学的薬物動態モデル】



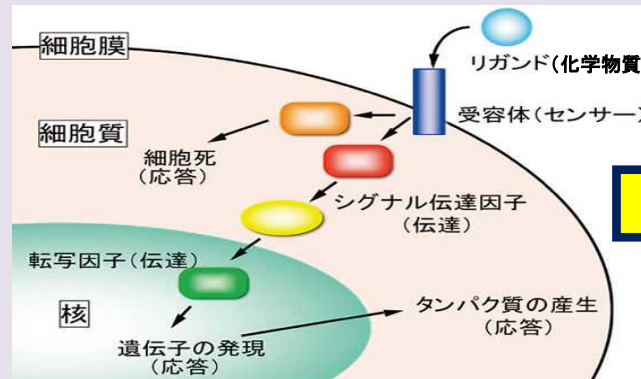
代謝物構造

体内濃度

### 細胞実験と解析

【遺伝子、細胞内タンパク質の変動】

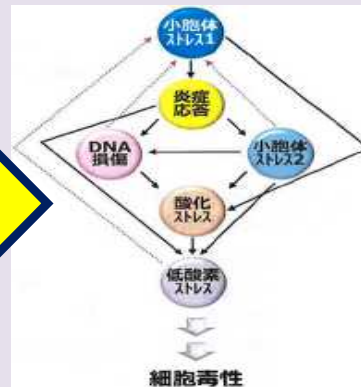
【ネットワーク構造解析】



遺伝子発現

タンパク質活性

遺伝子等ネットワーク構造



細胞毒性メカニズム  
数千物質  
(これから取得)

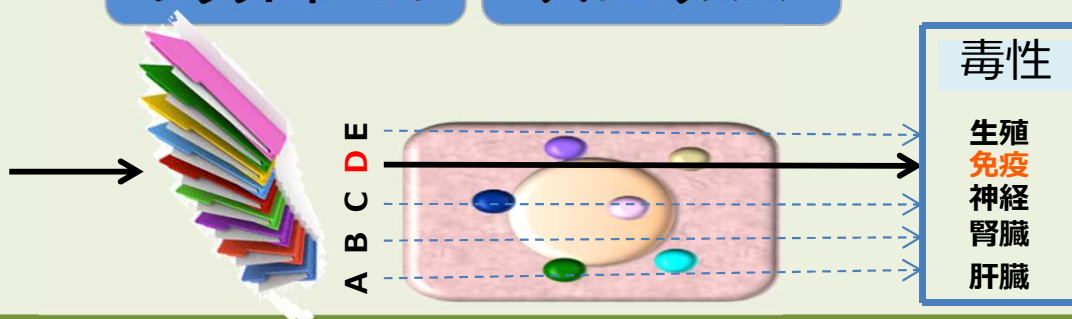
## 予測モデルの精度向上

## 【将来】

プラットフォーム

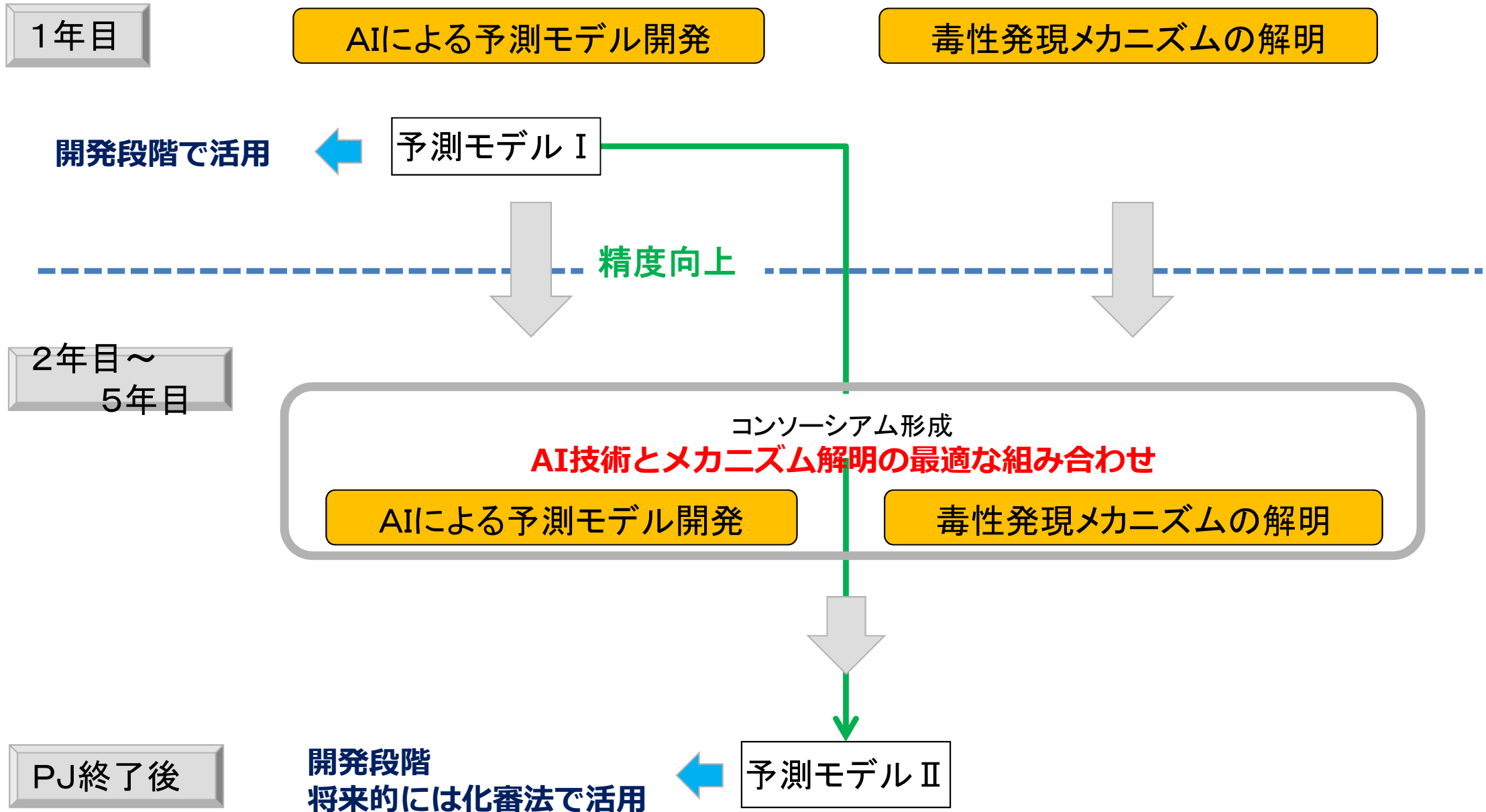
アルゴリズム

未知物質  
構造式  
ばく露量



未知物質の毒性

# 研究開発の進め方





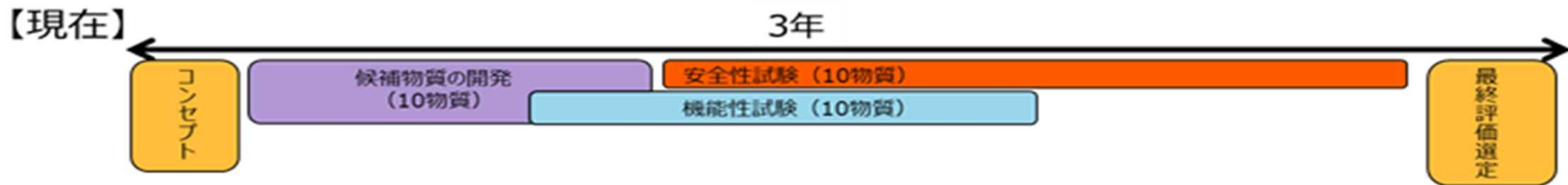
# 将来の姿

- ◆化学物質の研究開発費の20%を占めるとされる安全性評価に係るコストを大幅に削減。
- ◆また、毒性試験に要する期間を実質的にゼロとし、開発期間の大幅な短縮を可能とする。
- ◆このように安全性評価の効率化を図ることにより、機能性化学物質の開発を促進し、我が国の機能性材料やこれらを使った製品の開発力、提案力の向上を図る。

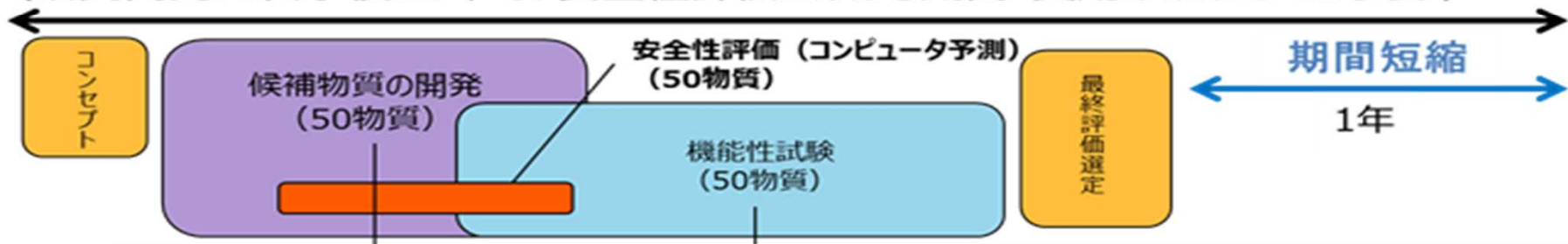
## 新規化学物質の開発の流れ

### ■電気・電子材料用機能性物質の開発例

- ・ 開発期間：3年
- ・ 開発費：数10億円
- ・ 候補物質数：数10物質の候補の中から、最終的に1物質を上市
- ・ 試験数：10件程度の安全性試験を実施



【将来 (研究開発PJ終了後20年で、安全性評価にかかる期間・費用はほぼゼロになる。)



安全性試験費用の削減分で、候補物質開発数と機能性試験数を5倍に増やすことができる。