

分解性 AI-QSAR システムにかかる技術 動向及び産業界におけるニーズ調査 仕 様 書

※本仕様書は、予告なしに修正又は訂正する場合があります。
その際は、当機構ホームページ上にて仕様書の修正又は正誤表を公示いたします
ので、必ずご確認下さい。

(令和5年11月13日訂正)

独立行政法人製品評価技術基盤機構

1. 目的

独立行政法人製品評価技術基盤機構（以下「NITE」という。）化学物質管理センター安全審査課（以下「安全審査課」という。）では、「化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律」（以下「化審法」という。）において、国内で新たに製造又は輸入される化学物質（以下「新規化学物質」という。）に係る事業者から提出された法定試験法に基づく分解性、蓄積性及び毒性等の試験結果をもとに実施される、国による審査を支援している。

一方で、事業者における新規化学物質の製品開発にかかる時間及びコストの削減を目的とし、分解性、蓄積性及び毒性等が既知の化学物質の分子構造とこれらの活性との間の相関を解析した「定量的構造活性相関予測モデル（以下「QSAR モデル」という。）」の行政活用も検討されているところである。

本役務では、平成 30 年度（2018 年度）～令和 4 年度（2022 年度）に経済産業省の委託事業（※ 1）にて開発された「化学物質の分解性に係る人工知能を用いた定量的構造活性相関予測モデル（以下「分解性 AI-QSAR」という。）」について、「情報システムとして外部公開した場合の「特許侵害の予防」及び「今後の技術開発の方向性」にかかる情報の収集するために、次の 2 点に関する技術動向等の調査を実施し、報告書として取りまとめることを目的とする。

- ・ 分解性 AI-QSAR の予測モデルに関連する技術に関する特許の登録及び出願の状況
- ・ 分解性 AI-QSAR の利用ニーズ及び実装が求められる機能等に関する調査

※ 1 委託事業名：

- ① 平成 30 年度化学物質安全対策（新規化学物質の審査における定量的構造活性相関（QSAR）の活用のあり方に関する調査）
- ② 令和元年度～令和 4 年度化学物質安全対策（化学物質の分解性及び蓄積性に係る総合的評価の導入に関する調査）

公開先 URL：<https://www.meti.go.jp/topic/data/e90622aj.html>

2. 委託内容

2-1. 我が国における分解性 AI-QSAR の予測モデルに関連する技術に関する特許の登録及び出願の状況

- (1) 分解性 AI-QSAR の予測モデルで利用されている技術について、我が国での特許の登録及び出願の状況を調査し、次の情報を取りまとめること。
 - ・ 出願人及び権利者
 - ・ 出願日、公開日及び登録日
 - ・ 特許の内容
- (2) (1)の調査の結果を踏まえて、「特許侵害が懸念される技術」の特許が登録又は出願されている場合、NITE の HP 上から分解性 AI-QSAR の予測モデルを情報システムの形で一般に公開した場合のリスク及びそのリスクを低減させる方法等を考察し、その内容を取りまとめられることが望ましい（その場合、提案書の評価において加点する。）。)
- (3) 米国及び欧州での特許の登録及び出願の状況を調査し、(1)と同等の情報が取りまとめられていることが望ましい（その場合、提案書の評価において加点する。）。)

2-2. 分解性 AI-QSAR の利用ニーズ及び実装が求められる機能等に関する調査

- (1) 化学品、化粧品、農薬及び医薬品を取り扱う日本国内の様々な立場の事業者及び事業者団体等（以下「事業者等」という。）に対して、次の4点のことを含めた調査を実施すること。また、行政や事業者等が分解性 AI-QSAR を利用する際の課題とその対応策なども収集可能なように、調査方法に留意すること。
- ・ どのような場面で分解性 AI-QSAR を利用したいのか（例えば、化学物質管理規制における評価手法及び製品開発時の物質のスクリーニング手法等）
 - ・ NITE の HP 上から分解性 AI-QSAR の予測モデルを情報システムの形で一般に公開する場合の公開方式
 - ・ 分解性 AI-QSAR の予測モデルを情報システムの形で一般に公開する場合に、求める機能
 - ・ 分解性 AI-QSAR の機能等の要件定義に必要と考えられる情報の収集
- (2) (1)の調査において、事業者等のそれぞれの立場に適する調査方法を提案し、その提案に基づいた調査を実施して要望をまとめること。
- なお、調査対象とした事業者等において、多角的な視点での要望も把握できるような調査方法であることが望ましい（その場合、提案書の評価において加点する。）。

3. 経済産業省の委託事業の業務成果物の閲覧等

- (ア) 経済産業省の委託事業にて開発した「分解性 AI-QSAR」に係るドキュメントの閲覧又は貸与は、契約締結後に実施する（ただし、経済産業省の HP より公開されている委託事業の調査報告書は除く。）。
- (イ) ドキュメントの貸与は、担当職員より受託者へメール又は NITE ファイル交換システムより電子ファイルを送付する。
- (ウ) ドキュメントの NITE 内での閲覧を希望する場合には、受託者と担当職員との間で協議の上、日時を決定する。また、NITE 本所内の担当職員の指定した場所にて実施するものとする。
- (エ) 「分解性 AI-QSAR」の予測モデルで利用されている技術について、ドキュメント上の情報からは特許に関連する技術が特定できない場合には、担当職員と協議の上で、当該モデルの開発者である静岡大学の関係者へのヒアリング等を実施すること。

4. 実施体制

4. 1 受託者の体制

受託者は、本委託事業を履行できる体制を設けるとともに、実施計画書に以下の事項を含めるとともに、初回打合せ時にその内容について説明すること。

なお、原則として体制の変更は認めない。やむを得ず変更する場合は、事前に担当職員にその理由及び事業を継続するための対策を説明し、承認を得ること。

- ① 受託者側の体制（指揮命令系統、役割分担、人員配置、等）
- ② 受託者側の本役務に係る責任者（氏名及び所属）
- ③ 受託者側の本役務に係る作業員（氏名及び所属）

- ④ 連絡体制（受託者側の対応窓口）
- ⑤ 受託者側の情報管理規則制定の有無（制定されている場合は、その内容）

4. 2. 受託者に求める資格等の要件

(ア)実施責任者

- ・ 官公庁又は独立行政法人等の行政機関、大学及び外郭団体等における技術動向調査にかかる役務の実施責任者としての経験を5件以上有すること。

(イ)作業員

- ・ 官公庁又は独立行政法人等の行政機関、大学及び外郭団体等における技術動向調査にかかる役務の作業員としての経験を5件以上有すること。
- ・ 機械学習又はディープラーニング等の人工知能を利用した情報システムの「特許侵害の予防」を目的とした技術動向調査の役務の作業員としての経験を2件以上有すること。
- ・ 2-1.及び2-2.の実施体制において、「特許庁の特許情報提供事業者リスト集2.調査・検索サービス」に掲載されている事業者が含まれていることが望ましい（その場合、提案書の評価において加点する。）。

5. 実施計画書の作成

(ア)受託者は、担当職員の指示に基づき、本事業の実実施計画書を検討の上、契約締結後10営業日以内に作成・提出し、担当職員の承認を受けること。

(イ)本事業の実実施計画書には、表1の内容を含むこと。

表1 実施計画書の記載事項

記載事項	記載内容
① 作業概要	<ul style="list-style-type: none"> ・ 本事業にて実施予定の作業の概要 ・ 本事業における進捗管理、コミュニケーション管理及び課題管理の方法及び進捗報告における報告内容等
② 実施体制	<ul style="list-style-type: none"> ・ 発注者であるNITE側の実施体制（責任者及び関連する者の役割等） ・ 受託者の実施体制（責任者、各作業における主担当者及びその役割等）
③ 作業スケジュール	<ul style="list-style-type: none"> ・ 作業項目 ・ スケジュール ・ マイルストーン

6. 進捗報告及び管理

6. 1 進捗報告

原則として、1か月に1回程度の頻度でNITE担当職員に進捗報告を行うこと。報告内容については、担当職員と協議の上決定すること。実施計画書に提出した作業スケジュールのマイルストーンに対して、1週間以上の遅れが見込まれる場合又は確認された場合には、その対応策を検討して担当職員に報告し、その対処を実施すること。

なお、担当職員から求めがあった場合は、面会/web 会議にて進捗報告を行うとともに、打合せ議事録を作成すること。

7. 事業実施期間

委託契約締結日から令和6年3月25日（月）まで

8. 納入成果物

8. 1 数量及び期日等

本業務における納入成果物の数量及び期日等を表 2 に示す。

表 2 納入成果物の数量及び期日等

No.	成果物名	内容及び納品数量	納品期日
1	実施計画書	電磁的記録 媒体：1式	契約締結後 10営業日以内
2	2-1. 我が国における分解性AI-QSARの予測モデルに関連する特許の登録及び出願の状況にかかる調査報告書		令和6年3月 25日（月）
3	2-2. 分解性AI-QSARの利用ニーズ及び実装が求められる機能等に関する調査報告書		
4	打合せ議事録		打合せ終了後 10営業日以内

8. 2 納品方法

- ・ 成果物は、全て日本語で作成すること。ただし、日本国内においても英字で表記されることが一般的な文言については、そのまま記載しても構わないものとする。
- ・ 用字・用語・記述符号の表記については、「公用文作成の考え方（令和4年1月7日文化審議会建議）」を参考にすること。
- ・ 情報処理に関する用語の表記については、日本産業規格（JIS）の規定を参考にすること。
- ・ 電磁的記録媒体については、Microsoft 365 又は Adobe Acrobat Reader DC を使用して内容が確認できる形式で納品すること。ただし、左記ファイル形式で納品が困難な場合は、担当職員と事前に協議の上、納品するファイル形式を決定すること。
- ・ 納品後、NITE において改変が可能となるよう、図表等の元データも併せて納品すること。
- ・ 成果物の作成に当たって、図表等の元データの作成に Microsoft 365 及び Windows10 の標準機能で読み込み及び改変できないような特別なツールを使用する必要がある場合は、事前に担当部署の承認を得ること。
- ・ 成果物が外部に不正に使用されたり、納品過程において改ざんされたりすることのないよう、安全な納品方法を提案し、成果物の情報セキュリティの確保に留意すること。
- ・ 成果物は電磁的記録媒体1部を納品すること。電磁的記録媒体での納品は、電子ファイルの納品期日が同一の場合には、事前に担当職員の承諾を得た上で CD-R、DVD-R 又は BD-R を1つにまとめてもよい。納品する電子記録媒体には、件名、受託者名、納品期日を本体に印字して提出すること。

- ・ 電磁的記録媒体は、必ずマルウェアに対するセキュリティチェックを行った上で納品すること。セキュリティチェックに使用する不正プログラム対策ソフトウェアのウイルス定義ファイルは、チェック日における最新バージョンを使用して実施すること。
- ・ 成果物のうち、国等による環境物品等の調達の推進等に関する法律（平成12年法律第100号）第6条による「環境物品等の調達の推進に関する基本方針」に定められている品目については、独立行政法人製品評価技術基盤機構が定めた令和5年度環境物品等の調達の推進を図るための方針（<https://www.nite.go.jp/data/000146074.pdf>）を満たすこと。

9. 納入場所

独立行政法人製品評価技術基盤機構 化学物質管理センター安全審査課（本所本館3階南7 対話型執務室）

10. 委託予算額

委託における予算額は850万円(税込み)である。

11. 応募者資格と受託者の選定方法

11.1 応募者資格

提案書作成要領の記載に準じる。

11.2 受託者の選定方法

提出された提案書(企画書等)に基づき、企画競争により受託者を選定する。

12. 成果物の取扱いに関する事項

12.1 知的財産権の帰属

- (ア) 本業務における成果物の著作権及び二次的著作物の著作権（著作権法第21条から第28条に定める全ての権利を含む。）は、受託者が本調達の実施の従前から権利を保有していた等の明確な理由によりあらかじめ提案書にて権利譲渡不可能と示されたもの以外は、全てNITEに帰属するものとする。
- (イ) NITEは、成果物について、第三者に権利が帰属する場合を除き、自由に複製し、改変等し、及びそれらの利用を第三者に許諾すること（以下「複製等」という。）ができるとともに、任意に開示できるものとする。ただし、成果物に第三者の権利が帰属するものが含まれる場合には、複製等ができる範囲やその方法等について協議するものとする。
- (ウ) 納品される成果物に第三者が権利を有する著作物（以下「既存著作物等」という。）が含まれる場合には、受託者は、当該既存著作物等の使用に必要な費用の負担及び使用許諾契約等に関わる一切の手続を行うこと。この場合、本業務の受託者は当該既存著作物の内容について事前にNITEの承認を得ることとし、NITEは既存著作物等を当該許諾条件の範囲で使用するものとする。

なお、本仕様に基づく作業に関し、第三者との間に著作権に係る権利侵害の紛争の原

因が専ら NITE の責めに帰す場合を除き、受託者の責任及び負担において一切を処理すること。この場合、NITE は係る紛争等の事実を知ったときは、受託者に通知し、必要な範囲で訴訟上の防衛を受託者に委ねる等の協力措置を講じるものとする。

- (エ) 受託者は NITE に対し、一切の著作権人格権を行使しないものとし、また、第三者をして行使させないものとする。
- (オ) 受託者は使用する画像、デザイン、表現等に関して他者の著作権を侵害する行為に十分配慮し、これを行わないこと。

12.2 契約不適合責任

- (ア) 本業務における成果物等について、種類、品質又は数量が契約書、本調達仕様書その他合意された要件（以下「契約書等」という。）の内容に適合しないもの（以下「不適合」という。）であることが認められ、かつ NITE がその修補、代替物の引渡し又は不足分の引渡しによる履行の追完（以下、手段を問わず総称して「履行の追完」という。）を受託者に請求する場合には、NITE は不適合を知った時から 1 年以内に受託者にその旨を通知するものとする。その不適合が NITE の責に帰すべき事由による場合を除き、受託者は自己の費用で、NITE の選択に従い、履行の追完をすること。なお、受託者は如何なる場合であっても、NITE の選択と異なる方法で履行の追完をする場合は、NITE の事前の承認を得ること。
- (イ) 受託者は、その具体的な履行の追完の実施方法、完了時期、実施により発生する諸制限事項について、NITE と協議し、承認を得てから履行の追完を実施するものとし、完了時には、その結果について NITE の承認を得ること。
- (ウ) 受託者が NITE から相当の期間を定めた履行の追完の催告を受けたにもかかわらず、その期限内に履行の追完を実施しない場合、NITE は、その不適合の程度に応じて代金の減額を請求することができる。ただし、次に掲げる場合、受託者に対して履行の追完の催告なく、直ちに代金の減額を請求することができる。
 - (1) 履行の追完が不能であるとき。
 - (2) 受託者が履行の追完を拒絶する意思を明確に表示したとき。
 - (3) 本業務の性質又は契約書等の内容により、特定の日時又は一定の期間内に履行をしなければ契約をした目的を達することができない場合において、受託者が履行の追完をしないでその時期を経過したとき。
 - (4) 前 3 号に掲げる場合のほか、前項の催告をしても履行の追完を受ける見込みがないことが明らかであるとき。

13. 情報セキュリティ

- (ア) 情報セキュリティポリシーの遵守

受託者は、NITE の情報セキュリティポリシー (<https://www.nite.go.jp/nite/jyohokoukai/sonotahojin/security/security.html>) に従って受託者組織全体のセキュリティを確保すること。

- (イ) 情報セキュリティを確保するための体制の整備

受託者は、NITEの情報セキュリティポリシーに従い、受託者組織全体のセキュリティを確保すると共に、発注者から求められた当該業務の実施において情報セキュリティを確保するための体制を整備すること。

(ウ) 情報セキュリティが侵害された場合の対処

本委託に係る業務の遂行において、担当職員が求めた場合には、情報セキュリティ対策の履行状況を報告すると共に情報セキュリティが侵害され又はその恐れがある場合には、直ちに担当職員に報告すること。これに該当する場合には、以下の事象を含む。

(1)機構が受託者に提供した又は受託者によるアクセスを認めた機構の情報の外部への漏えい及び目的外利用

(2)受託者による機構のその他の情報へのアクセス

(3)被害の程度を把握するため、受託者は必要な記録類を契約終了時まで保存し、機構が求めた場合には、納入物と共に機構に引き渡すこと。

(4)情報セキュリティが侵害された又はその恐れがある事象が本調達に係る作業中及び契約に定める瑕疵担保責任の期間中に発生した場合には遅滞なく担当職員に報告すること。また、その事象が受託者における情報セキュリティ上の問題に起因する場合は、受託者の責任及び負担において次の各事項を速やかに実施すること。

- ・情報セキュリティ侵害の内容及び影響範囲を調査の上、当該情報セキュリティ侵害への対応策を立案し、担当職員の承認を得た上で実施すること。
- ・発生した事態の具体的内容、原因及び実施した対応策などについて報告書を作成し、担当職員へ提出して承認を得ること。
- ・再発防止対策を立案し、担当職員の承認を得た上で実施すること。
- ・上記のほか、発生した情報セキュリティ侵害について、担当職員の指示に基づく措置を実施すること。

(エ) 情報セキュリティ監査の実施

本委託に係る業務の遂行における情報セキュリティ対策の履行状況を確認するために、担当職員が情報セキュリティ監査の実施を必要と判断した場合は、担当職員がその実施内容（監査内容、対象範囲、実施など）を定めて、情報セキュリティ監査を行う（NITEが選定した事業者による監査を含む。）。また、NITEが求めた場合、受託者は自ら実施した外部監査についても機構へ報告すること。

情報セキュリティ監査の実施については、これらに記載した内容を上回る措置を講ずることを妨げるものではない。

(オ) 情報セキュリティ対策の改善

受託者は、本委託における情報セキュリティ対策の履行状況について担当職員が改善を求めた場合には、担当職員と協議の上、必要な改善策を立案して速やかに実施するものとする。

(カ) 私物の使用禁止

受託者は、本委託に係る作業を実施する全ての関係者に対し、私物（関係者個人の所有物など、受託者管理外のものを指す。以下、同じ。）コンピュータ及び私物記録媒体（USBメモリなど）にNITEに関連する情報を保存すること及び本委託に係る作業を私物コンピュータ

において実施することを禁止する。

(キ) 機密保持、個人情報及び資料の取扱い

- ・ 受託者は、契約期間中及び契約終了後において、本作業に関して知り得た機構の業務上の内容について、他に漏らし又は他の目的に利用してはならない。ただし、担当職員が認める場合はこの限りではない。
- ・ 受託者は、本調達のために担当職員から貸与された紙媒体や電子媒体を、担当職員の許可なく複製してはならない。許可を得て複製する場合は、複写先及び複写数等の記録を取る。
- ・ 受託者が本調達を終了又は契約解除する場合は、担当職員から貸与された紙媒体、電子媒体（その複製を含む。）を速やかに担当職員に返却すること。その際、担当職員の確認を必ず受けること。
- ・ 受託者は、本調達において、機構の情報セキュリティが侵害された又はその恐れを発見した場合は、速やかに担当職員に報告を行い、原因究明及びその対処方法等について担当職員の指示に従い実施すること。
- ・ 受託者は、本調達の実施において、情報セキュリティ(NITE の提供した情報の保護)を確保するための体制を整備し、明示すること。
- ・ 情報セキュリティインシデント及び事故が発生した場合又はその可能性がある場合の緊急連絡体制及び手順を記載すること。その際、機構職員への連絡は、対面、電話連絡、電子メール等複数の手段で、複数の機構職員に対して遅滞なく確実に連絡及び情報共有できるようにすること。
- ・ 緊急連絡体制及び手順に変更があった場合は、速やかに再提出すること。
- ・ 受託者の実施責任者及び作業者の情報として、氏名、所属、連絡先、役割と責任、国籍、セキュリティ関連研修の受講実績を記載すること。

1.4. 再委託に関する事項

1.4.1 委託の制限及び再委託を認める場合の条件

- (ア) 受託者は、機構の許可無く作業の一部を第三者に委託し、又は請け負わせてはならない。このときの第三者には、関連事業者（「財務諸表等の用語、形式及び作成方法に関する規則」（昭和 38 年大蔵省令第 59 号）第 8 条に規定する親会社及び子会社、同一の親会社を持つ会社並びに委託先事業者等の緊密な利害関係を有する事業者をいう。）も含むものとする。
- (イ) 一部の業務を再委託する場合、再委託先にも本仕様書で定める受託者の責務を負わせる契約を締結すること。
- (ウ) 再委託先に業務を請け負わせる場合、当該業者の全ての行為及びその結果についての責任を受託者が負うこと。
- (エ) 業務の一部を再委託する場合であっても再委託金額及び外注金額の合計は、契約金額の半分を超えないこと。
- (オ) 受託者における遂行責任者を再委託先事業者の社員や契約社員とすることはできない。
- (カ) 再委託先における情報セキュリティの確保については受託者の責任とする。

(キ)再委託先との契約は、日本法を準拠法とし海外の法律の適用が行われないこと。

14.2 承認手続き

(ア)本業務の実施の一部を合理的な理由及び必要性により再委託する場合には、あらかじめ再委託の相手方の商号又は名称及び住所並びに再委託を行う業務の範囲、再委託の必要性及び契約金額等について機構に報告し、あらかじめ承認を得ること。

(イ)前項による再委託の相手方の変更等を行う必要が生じた場合も、前項と同様に再委託に関する書面を機構に提出し、承認を得ること。

(ウ)再委託の相手方が更に委託を行うなど複数の段階で再委託が行われる場合（以下「再々委託」という。）には、当該再々委託の相手方の商号又は名称及び住所並びに再々委託を行う業務の範囲を書面で報告すること。

14.3 再委託先の契約違反等

(ア)再委託先において、本調達仕様書の遵守事項に定める事項に関する義務違反又は義務を怠った場合には、受託者が一切の責任を負うとともに、機構は、当該再委託先への再委託の中止を請求することができる。

15. その他

(ア)契約金額に含まれる一般管理費の割合について、原則 10%を超えないこと。ただし、一般管理費の割合が 10%を超える場合には、提案書にその理由及び契約実績を添えて提出し、NITE が認めた場合はその率を採用することができるものとする。

(イ)ワーク・ライフ・バランス等の推進に関する指標に基づく取り組みに係る以下の認定を取得している場合には、提案書の評価に必要なエビデンスとして、その認定証のコピーの提出すること。

- ・ 女性の職業生活における活躍の推進に関する法律（女性活躍推進法）に基づく認定（えるぼし認定企業）
- ・ 次世代育成支援対策推進法（次世代法）に基づく認定（くるみん認定企業・プラチナ認定企業）
- ・ 青少年の雇用の促進に関する法律（若者雇用促進法）に基づく認定（ユースエール認定）