経済産業省　御中

令和２年度化学物質安全対策 (デジタル技術を応用した化学物質管理データの利活用の調査・検討)

最終報告書

2021/3

ABeam Consulting®

提案書目次

1. はじめに

1.1. 本事業の背景・目的 2

1.2. 社会の動向 6

2. 蓄積されている化学物質関連データの現状

2.1. 化審法で蓄積されているデータ 13

2.2. 化管法で蓄積されているデータ 16

2.3. その他蓄積されている化学物質関連データ 19

2.4. 蓄積されているデータの現状 24

2.5. 蓄積データに関する考察 28

3. 調査結果

3.1. 事例調査 31

3.2. ニーズ調査 39

3.3. 調査結果を踏まえたデータ利活用領域の特定 49

4. データ利活用の構想

4.1. データ連携基盤の全体像 54

4.2. データ利活用例 56

5. データ利活用に至るまでの実行計画

5.1. 今後の目指すべき姿 65

5.2. 実現に向けた課題/施策 67

Confidential

© 2021 ABeam Consulting Ltd.

1. はじめに

1.1. 本事業の背景･目的

1.2. 社会の動向

■ 経済産業省では、「化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律」（以降、「化審法」という）、「特定化学物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律」（以降、「化管法」という）等に基づき、化学物質管理に係る業務（審査や排出量管理等の業務）が行われている。

化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律※1

人の健康を損なうおそれ又は動植物の生息・生育に支障を及ぼすおそれがある化学物質による環境の汚染を防止することを目的とする法律

1. **新規化学物質の事前審査**
   新たに製造・輸入される化学物質に対する事前審査制度

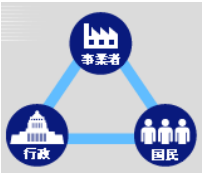
2. **上市後の化学物質の継続的な管理措置**
   製造・輸入数量の把握（事後届出）、有害性情報の報告等に基づくリスク評価

3. **化学物質の性状等（分解性、蓄積性、毒性、環境中での残留状況）に応じた規制及び措置**
   性状に応じて「第一種特定化学物質」等に指定
   製造・輸入数量の把握、有害性調査指示、製造・輸入許可、使用制限等

特定化学物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律※2

PRTR制度とSDS制度を柱として、事業者による化学物質の自主的な管理の改善を促進し、環境の保全上の支障を未然に防止することを目的とした法律

1. **PRTR制度**
   事業者が、対象化学物質を排出・移動した際には、その量を把握し、国に届け出る義務がある。国等は集計データを公表し、また国民は事業者が届け出た内容について開示を請求することができる。



2. **SDS制度**
   事業者が、対象化学物質等を他の事業者に譲渡・提供する際には、その情報(SDS)を提供する義務がある。

※1 経済産業省「化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律」 https://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/index.html
※2 経済産業省「化学物質排出把握管理促進法」 https://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/law/index.html

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

- 化審法に基づく業務では、分解性、蓄積性、人への毒性、生態（魚等）への毒性等に関する試験結果、製造事業者、化学物質の用途、製造・輸入量等のデータが蓄積されている。
- 化管法に基づく業務では、事業者が工場等から排出する化学物質の排出量を届け出ることとなっており、それらに係る事業者情報、化学物資の排出量、移動量等のデータが蓄積されている。

化審法に係る業務にて蓄積されるデータ（例）

試験結果（分解性、蓄積性、人への毒性、生体への毒性）、製造事業者、化学物質の用途、製造・輸入量などが事業者からの届出に基づき、蓄積され審査等の業務に活用されている。

新規化学物質カード（事業者が届出時に記入が必要）※1

化管法に係る業務にて蓄積されるデータ（例）

事業者の届出に基づき、化学物質の排出量・移動量やその事業者情報（事業者名、業種分類等）などが蓄積され集計されている。

届出排出量・移動量の対象化学物質別集計結果※2

対象物質物質番号	対象物質物質名称	報告事業所数（件）排出	報告事業所数（件）移動	報告事業所数（件）全体	排出件数（件）大気	排出件数（件）公水	排出件数（件）土壌	排出件数（件）埋立	排出件数（件）合計	移動件数（件）廃棄物	移動件数（件）下水道	移動件数（件）合計
1	亜鉛の水溶性化合物	2605	441	3910	82	2568	1	2	2653	394	111	505
2	アクリルアミド	23	38	90	22	7	0	0	29	34	5	39
3	アクリル酸エチル	87	64	125	85	8	0	0	93	63	7	70
4	アクリル酸及びその水溶性塩	110	119	230	106	10	0	0	116	115	14	129

対象物質物質番号	対象物質物質名称	排出量（kg/年；ダイオキシン類はmg-TEQ/年）大気	排出量（kg/年；ダイオキシン類はmg-TEQ/年）公共用水域	排出量（kg/年；ダイオキシン類はmg-TEQ/年）土壌	排出量（kg/年；ダイオキシン類はmg-TEQ/年）埋立	排出量（kg/年；ダイオキシン類はmg-TEQ/年）合計	移動量（kg/年；ダイオキシン類はmg-TEQ/年）廃棄物移動	移動量（kg/年；ダイオキシン類はmg-TEQ/年）下水道への移動	移動量（kg/年；ダイオキシン類はmg-TEQ/年）合計	排出・移動量合計	都道府県コード	業種コード	都道府県名	業種名
5	アクリル酸２－（ジミノ）エチル	10215	640771	0	2	650988	3040051	13970	3054021	3705008	99	9999	全国	全業種
6	アクリル酸２－ヒドチル	262	8	0	0	270	5183	17	5200	5470	99	9999	全国	全業種
7	アクリル酸ノルマル	16714	1868	0	0	18581	92169	145	92314	110895	99	9999	全国	全業種
8	アクリル酸メチル	44555	3629	0	0	48184	632346	4732	637078	685262	99	9999	全国	全業種
9	アクリロニトリル	4	0	0	0	4	0	0	0	4	99	9999	全国	全業種
10	アクロレイン	273	23	0	0	296	2401	0	2401	2697	99	9999	全国	全業種
		39900	1482	0	0	41382	170000	202	170202	211584	99	9999	全国	全業種
		31082	715	0	0	31798	57966	1	57967	89765	99	9999	全国	全業種
		114335	4872	0	0	119207	421289	16001	437290	556497	99	9999	全国	全業種
		10	1679	0	0	1689	1204	0	1204	2893	99	9999	全国	全業種

※1 経済産業省「化審法に基づく新規化学物質の届出等に係る資料の作成・提出等について」
https://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/files/information/shinki/todokedemanual.pdf
※2 経済産業省「平成30年度　集計結果(集計表)」 https://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/law/prtr/h30kohyo/shukeikekka.html

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

- 昨今では、デジタル技術の革新によりデータの様々な利活用が可能となり、様々な分野においてビックデータ解析やAIの導入などが進んでいる。
- こうした背景を踏まえ、本事業では、業務効率性向上・生産性向上や他業種との連携等を目指し、化審法及び化管法に基づき蓄積されたデータについて、更なる利活用方法を検討することとした。
- また、化学物質領域に閉ざした調査ではなく、材料や素材等のより幅広い領域や、新しい領域等でデータを利活用している事例を調査し、今後、データ利活用の方向性について検討していく上で試金石となる情報を整理することを本事業では目的とする。

本事業の目的

我が国では化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律、特定化学物質の環境への排出量の把握等及び管理の改善の促進に関する法律等に基づき、適切に化学物質管理が実施されてきた。

一方、近年、デジタル技術の革新によりデータの様々な利活用が可能となり、様々な分野においてビックデータ解析や AI の導入が進んでいる。化学物質管理法令に基づき、多くの情報が行き交う中で、こうした情報がデジタル技術を用いたデータの利活用ができないか、検討を行うものとする。

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

1. はじめに

1.1. 本事業の背景･目的

1.2. 社会の動向

- AI、ビッグデータ等の様々なデジタル技術が急速に進展・普及したことに伴い、官公庁や民間企業等において、これらの技術を活用したサービスの向上や事務の効率化・高度化が期待されており、既に多くの組織で様々な検討が進められている。
- 今後も、こうしたデジタル技術を活用し、社会（国や民間）が抱える課題の解決に向けた研究開発やサービス開発が進んでいくことが想定できる。

最新デジタル技術の活用動向

- ✓ モバイルコンピューティング
- ✓ BYOD（Bring your own device）
- ✓ ソーシャルアナリティクス
- ✓ ビッグデータ
- ✓ ウェアラブルデバイス
- ✓ クラウドソーシング
- ✓ オペレーショナル・インメモリ・データベース
- ✓ 利用者データ・サイエンス
- ✓ AIOPsプラットフォーム
- ✓ セキュリティ・インテリジェンス
- ✓ DevOps
- ✓ AI（人工知能）
- ✓ ブロックチェーン
- ✓ RPA（ロボットによる自動化）
- ✓ プレディクティブサポート
- ✓ IoTプラットフォーム
- ✓ OSコンテナ
- ✓ 仮想化技術・仮想基盤
- ✓ ヒューリスティックオートメーション
- ✓ インテリジェンオートメーション　　等

Smart Factory(Data Driven Manufacturing)

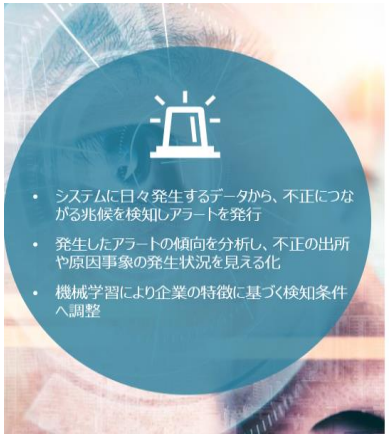
Target Industry：Manufacturing

Issues & Needs

- 慢性的な品質課題への新たな解決方法の模索
- 生産工程全体での要因系、結果系のデータをつなぎ見える化
  単品（個体）レベルでの品質トレース
- デジタルデータを活用したPDCA業務プロセスの再構築
- 匠の技のデジタル化とその伝承

Our Solutions

- 各種設備や検査データ収集とデータ活用のためのIoTプラットフォーム導入
- 設備や検査データの活用により、既存の改善プロセスでは実現出来なかった慢性不具合要因特定と不良率の低減を実現
- グローバルレベルで標準化すべき業務オペレーション及びデータの定義



Smart Fraud Detection

Target Industry： All Industries

Issues & Needs

- 内部統制としてプロセスの文書化やリスクの洗い出し、定期的な自己点検は行っているが、日々のオペレーションで発生しているデータに内在する不正の兆候を捉えられないでいる
- 実際に海外の拠点など目の届きにくいところで、収益にインパクトを及ぼすような不正行為が発生してしまった
- 不正につながるような行為がないかチェックしたいが、オペレーションを監視するにはボリュームが膨大で手に負えない

Our Solutions

- 不正徴候がないか、プリセットされた複合条件に基づいて、格納されているマスタデータ・トランザクションデータを常時モニタリング
- 検知対象のデータが発生した都度、アラートを管理者へ通知
- 発生したアラートについて傾向や発生元の分析行うレポート群を提供。機械学習により検知精度の向上を支援し、必要に応じて検知条件を調整可能

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

- 政府では、「世界最先端デジタル国家創造宣言」で示されているとおり、AI・RPA等の先進技術の活用を通じてコスト削減や質の向上を目指している。また、昨今の新型コロナウイルスの影響により、社会全体のデジタル化に向けて、行政のデジタル化を最優先課題として推進することが示されている。
- 経済産業省においても、「経済産業省デジタル・ガバメント中長期計画」や「データ利活用のポイント集」に示されているとおり、最新のデジタル技術の活用やデータ利活用に向けた検討を推進している状況である。

世界最先端デジタル国家創造宣言※1
経済産業省デジタル・ガバメント中長期計画※2

世界最先端デジタル国家創造宣言
→AI・RPA等の先進技術の更なる活用

行政サービスの質の向上や業務の効率化に向け、国の行政機関において、国民・企業等に大きな影響を持つ分野を中心に、BPRを実施した上で、**AI・RPA等の活用により効果が見込まれる審査、調査、問合せ対応等の業務から優先的にその導入を推進**する。

経済産業省デジタル・ガバメント中長期計画
→業務におけるデジタル技術の活用

省内における各種業務の業務改革（BPR）を徹底した上で、**審査や手続の件数が多い分野を中心に、AI・RPA 等のデジタル技術の活用により効率化等が見込まれる業務からその導入を推進**する。RPA の導入検討に当たっては、個別業務の分析や手順の整理と併せて、RPAが正常に動作する環境の設定が必要となることから、経済産業省では、使用するRPAソフト等に応じて必要な環境を設定・案内する等の支援体制を構築している。

経済産業省データ利活用のポイント集※3

※1 世界最先端デジタル国家創造宣言・官民データ活用推進基本計画（令和２年７月17日閣議決定）からの抜粋 https://cio.go.jp/data-basis
※2 経済産業省デジタル・ガバメント中長期計画（令和２年３月２７日最終改定）からの抜粋 http://www.moj.go.jp/hisho/jouhoukanri/hisho09_00067.html
※3 経済産業省「データ利活用のポイント集」（令和２年６月３日最終改定） https://www.meti.go.jp/policy/economy/chizai/chiteki/pdf/datapoint.pdf

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

- デジタル・ガバメント閣僚会議による「データ戦略タスクフォース 第一次とりまとめ（案）」で喫緊に取組むことの一つとして、オープンデータの推進が挙げられているように、政府ではデータ利活用の一つの手段として、官民を問わない様々なデータのオープン化が注目されている。
- 総務省でオープンデータ戦略が推進されているように、他省庁においてもデータのオープン化に向けた取組が実施されている。「データ戦略タスクフォース 第一次とりまとめ（案）」で示されている通り、総務省においても主な取組として、オープンデータに関わる環境整備が進められている。

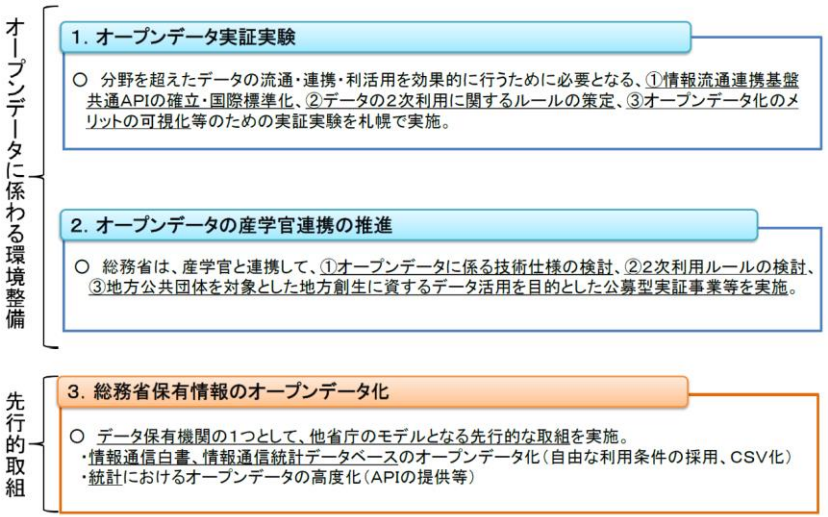
データ戦略タスクフォース 第一次とりまとめ（案）※1

III 喫緊に取組むこと
（5）オープンデータの推進

（オープンデータ原則）
基盤となるデータは企業や行政機関の組織内部に留めず広くオープン化することがその活用の始点であり、**官民問わず様々なデータがオープン化されることが望ましい。**特に基盤となるデータについてはそれを社会全体で活用することが社会全体の効率性向上、新たな社会価値の創出につながることから、**各種データは原則としてオープンにするための枠組みの構築、環境整備を図る**こととする。

その際、民間分野のデータの取扱いは企業戦略や営業秘密などの関係もありオープン化するための環境整備を丁寧に行っていく必要がある 。一方、行政の保有するデータについては、既にオープンデータ基本指針24があるが、今後、指針の趣旨・原則の徹底を図る。

総務省 オープンデータ戦略の推進
総務省の取組 全体像※2



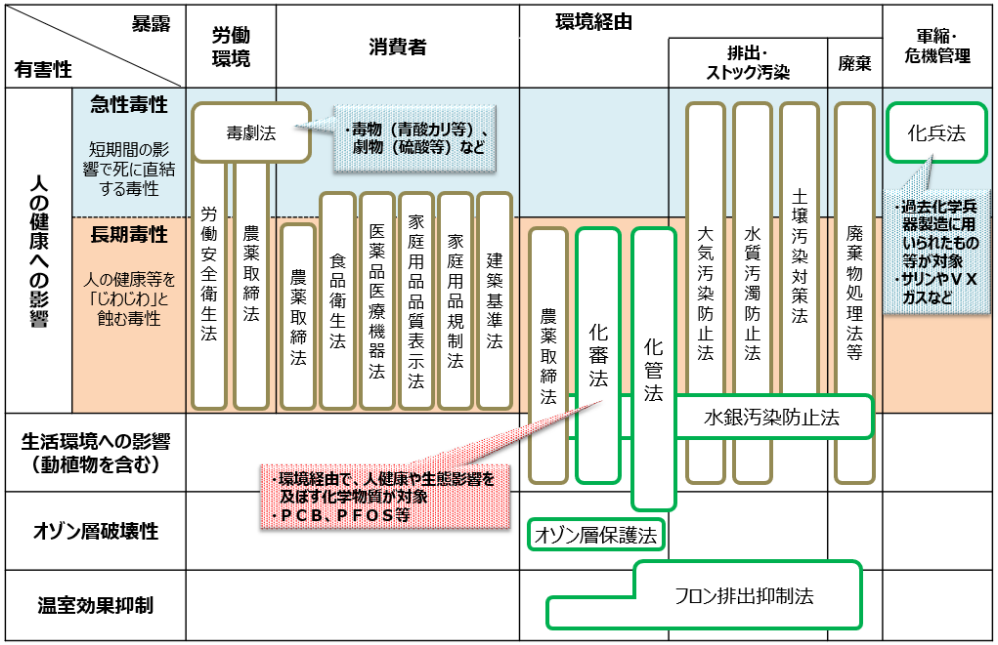
※1 データ戦略タスクフォース 第一次とりまとめ（案）（令和２年１２月８日発行）からの抜粋 https://www.kantei.go.jp/jp/singi/it2/dgov/data_strategy_tf/dai4/gijisidai.html
※2 総務省「オープンデータ戦略の推進」（令和３年３月５日時点）からの抜粋 https://www.soumu.go.jp/menu_seisaku/ictseisaku/ictriyou/opendata/opendata03.html

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

（3）化学物質関連業界の特性 1/3

- 化学物質管理に関する国内法は、下図に示されているように多種多様である。そのため、化学物質関連事業者は、業務に関連する法律はどれなのか、またどのような対応が求められているのか、といった関連法への理解が求められる。
- 欧州において2007年6月にREACH規制が施行され、化学物質に関するリスク評価の義務が政府の規制当局から事業者に移行しているように、国際的にも化学物質管理における事業者の責任は増している。

化学物質管理に関する国内法体系



REACH規制※1

人の健康と環境の保護、欧州化学産業の競争力の向上などを目的に2003年10月に欧州委員会により提案された化学物質管理に関する規制。**化学物質に関するリスク評価の義務を政府の規制当局から事業者に移行した。**2007年6月1日に施行されたのち、2008年6月1日より本格的に運用が開始され、特定化学物質の製造者・輸入者に登録・届出を義務付けた。

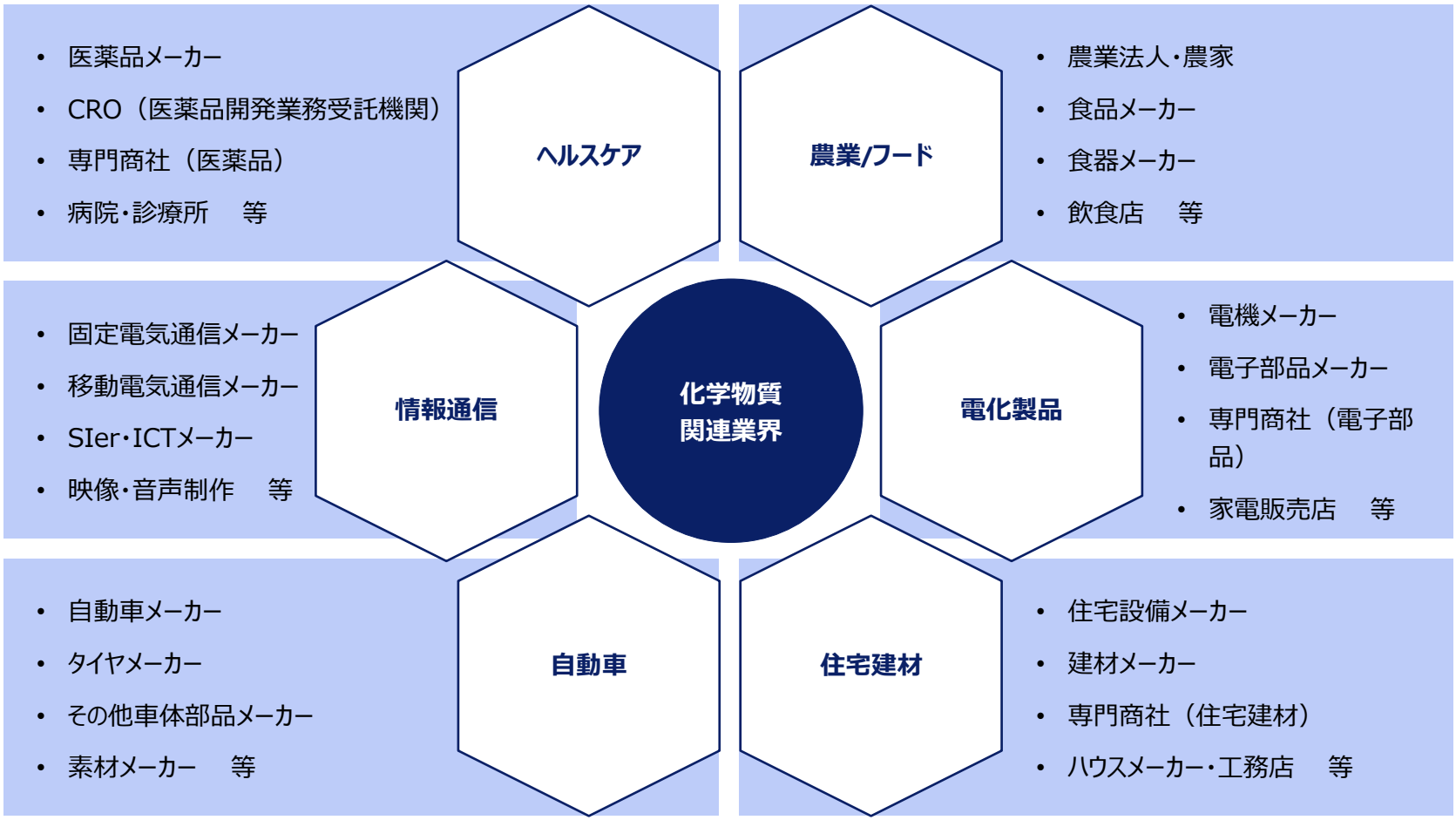
※1 REACHとは「Registration（登録）、Evaluation（評価）、Authorization（認可） and Restriction（制限） of Chemicals（化学品）」の略。

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

（3）化学物質関連業界の特性 2/3

- 化学物質はあらゆる業界で利用されており、化学物質関連事業者が製品供給に関わっていることも多い。下図で示すビジネス領域や職種は化学物質関連業界と親和性が高いと考えられる。
- こうした特性（親和性）を鑑み、事例調査及びデータ利活用案構想の着眼点とする必要がある。

化学物質を取り巻く注目したビジネス領域と職種※1



※1 化学物質関連事業者の内、主要企業数社のHP上の製品情報を参考に、弊社でビジネス領域と職種を整理した。

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

■ 既に多くの関連事業（J-CHECKやAI-SHIPSプロジェクト等）で、化学物質管理に係るデータの情報公開や利活用に向けた研究開発が進められている。

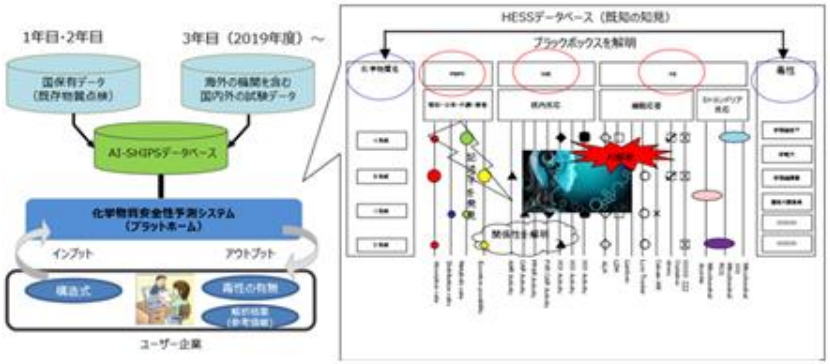
化審法データベース（J-CHECK）※1
厚生労働省・経済産業省・環境省の共同事業

化審法データベース（J-CHECK）
新規化学物質の判定に用いた知見を取りまとめた審査情報を、化審法データベース（J-CHECK）により一般公開している。

AI-SHIPSプロジェクト※2
経済産業省委託事業

エネ特事業
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予測システムの開発

- 日本は、他の先進国に先駆けて化審法を策定・運用。このため、**約45年間の化審法の運用によって多くの毒性等試験データ**が存在する。
- これらの**毒性情報をビッグデータ化し、AI技術を用いて**毒性情報と化学物質の構造情報、各種反応（核内反応、細胞反応塔）との関係性を解析することによって**最先端の有害性予測システムの開発**を目指す。



※1 厚生労働省・経済産業省・環境省「審査情報の公開について」（平成27年12月17日） https://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/kasinhou/information/151217sinsa.pdf
NITE「化審法データベース（J-CHECK）」（日本語版） https://www.nite.go.jp/chem/jcheck/top.action?request_locale=ja
※2 AI-SHIPSプロジェクト https://ai-ships.jp/project.html

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

2. 蓄積されている化学物質関連データの現状

2.1. 化審法で蓄積されているデータ

2.2. 化管法で蓄積されているデータ

2.3. その他蓄積されている化学物質関連データ

2.4. 蓄積されているデータの現状

2.5. 蓄積データに関する考察

■ 化審法に基づく事業者からの届出、国による審査（試験等）によって、化学物質情報（名称、構造式等）、物性情報、有害性情報、試験結果、輸入・製造量等のデータが蓄積されている。

化審法で蓄積されているデータ

No	蓄積データの種類	主なデータ項目	公開状況	管轄機関	更新頻度
1	化審法データベース J-CHECK※1	**化学物質情報** • CAS番号、MITI番号、化学物質名称、化学構造式 **化審法に関する情報** • 法規制分類、政令番号・通し番号、化学物質名称、日付 **スクリーニング評価情報** • 人健康影響/生態影響の暴露クラス・有害性クラス・優先度、専門家による詳細評価 **優先評価化学物質のリスク評価情報** • リスク評価結果、リスク評価書 **製造・輸入数量実績** • 年度、MITI番号、通し番号、化学物質名称、分類、製造・輸入数量実績 **試験データ** • 分解度試験、濃縮度試験 等	公開	独立行政法人製品評価技術基盤機構（NITE）	2か月に1回程度

※1 NITE「化審法データベース（J-CHECK）」（日本語版） https://www.nite.go.jp/chem/jcheck/top.action?request_locale=ja

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

■ 前頁の続き

化審法で蓄積されているデータ

No	蓄積データの種類	主なデータ項目	公開状況	管轄機関	更新頻度
2	新規化学物質審査シート	**化学物質情報** • 処理番号、区分、届出番号、CAS番号、届出会社、化学物質名称・略称、分子量、分子式、構造式、工業製品純度、概観 **物性・有害性情報** • 溶解度、分解性、蓄積性、人健康影響・生態影響の有害性クラス判定結果・判定証拠 **試験結果** • Ames（復帰突然変異）、染色体異常、28日間反復投与、藻類生長阻害、ミジンコ急性遊泳阻害、魚類急性毒性 **輸入・製造情報** • 用途、輸入・製造予定数量、暴露クラス（人健康影響・生態影響）、算出式 **審査に関する情報** • 優先判定結果、審議会でのコメント	非公開 ※1	経済産業省、厚生労働省、環境省	随時（事業者から届出があったとき）
3	有害性情報報告書	**有害性を示す資料（試験データ）** • 融点、沸点、蒸気圧、1オクタノールと水との分配係数、水に対する溶解度、解離定数、光分解性、加水分解性、大気、水域、底質又は土壌に係る分配係数（ヘンリー係数）、大気、水域、底質又は土壌に係る分配係数（有機炭素補正土壌吸着係数）生分解性、生物濃縮性、魚類に対する慢性毒性、水生の無脊椎動物に対する慢性毒性、鳥類の繁殖に及ぼす影響、底生生物に対する毒性、生体内運命、反復投与による毒性（吸入）、慢性毒性（経口）、慢性毒性（吸入）、変異原性（in vitro）、変異原性（in vivo）、がん原性、催奇形性、生殖能及び後世代に及ぼす影響	非公開	経済産業省、厚生労働省、環境省	随時（事業者から届出があったとき）

※1 新規化学物質審査シートの一部は、J-CHECKで平成21年10月時点で公示されている物質から順次PDFで公開されている。

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

2. 蓄積されている化学物質関連データの現状

2.1. 化審法で蓄積されているデータ

2.2. 化管法で蓄積されているデータ

2.3. その他蓄積されている化学物質関連データ

2.4. 蓄積されているデータの現状

2.5. 蓄積データに関する考察

■ 化管法のPRTR制度に基づく事業者からの届出及び国による推計によって、対象化学物質の排出量・移動量に係るデータが蓄積されている。

化管法で蓄積されているデータ

No	蓄積データの種類	主なデータ項目	公開状況	管轄機関	更新頻度
1	届出排出量・移動量（集計結果）※1	**PRTR対象物質** • 物質番号、物質名称 **排出・移動情報** • 報告事業所数（排出・移動）、排出件数・排出量（大気・公共用水域・土壌・埋立）、移動件数・移動量（廃棄物・下水道への移動） **集計カテゴリ** • 排出・移動先（都道府県）、（主たる）業種	公開	経済産業省、環境省	年1回
2	届出排出量・移動量（個別事業所データ）※2	**事業者情報** • 事業者名称、事業所名称、所在地、（主・従たる）業種、排出年度、届出先名称、届出先大臣、提出先名称、届出者名称、届出者／代表者氏名・連絡先等、従業員数 **化学物質情報** • 化学物質名称、政令番号、単位、第一種指定化学物質 **排出・移動情報** • 排出件数・排出量（大気・公共用水域・土壌・埋立）、排出先の河川・下水道終末処理施設等の名称、埋立処分量・場所の種類、廃棄物の処理方法、廃棄物の種類	公開	経済産業省、環境省	年1回
3	届出外排出量（集計結果）※1	**PRTR対象物質** • 物質番号、物質名称 **集計カテゴリ** • 算出事項（対象業種／非対象業種を営む事業者、家庭、移動体）、移動体の区分（自動車、二輪車・特殊自動車・船舶・鉄道車両・航空機） **届出外排出量の推計値、構成比**	公開	経済産業省、環境省	年1回

※1 経済産業省「平成30年度 集計結果(集計表)」 https://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/law/prtr/h30kohyo/shukeikekka.html
※2 経済産業省「PRTRけんさくん操作マニュアル」 https://www.meti.go.jp/policy/chemical_management/law/prtr/prtrdas/prtr_data_analysis_system_man.pdf

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

■ 前頁の続き

化管法で蓄積されているデータ

No	蓄積データの種類	主なデータ項目	公開状況	管轄機関	更新頻度
4	PRTRマップ※1	**排出量マップ** • PRTR届出データの排出量を、縮尺に応じて都道府県単位、市区町村単位（自治体単位）又は町名単位で色分け表示 **濃度マップ** • 日本全国の化学物質の年間日平均の大気中推定濃度を、5倍メッシュ（5km×5km）（縮尺1/20万以上では3次メッシュ（1km×1km））のメッシュごとに濃度に応じて色分け表示	公開	独立行政法人製品評価技術基盤機構（NITE）	年1回程度

※1 NITE「PRTRマップ」 https://www.prtrmap.nite.go.jp/prtr/top.do

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

2. 蓄積されている化学物質関連データの現状

2.1. 化審法で蓄積されているデータ

2.2. 化管法で蓄積されているデータ

2.3. その他蓄積されている化学物質関連データ

2.4. 蓄積されているデータの現状

2.5. 蓄積データに関する考察

■ NITE-CHRIPでは、様々な公表データのリンク先が化学物質ごとに掲載されており、国内・海外の法規制情報や有害性・リスク評価情報等を幅広く公開している。

その他蓄積されている化学物質関連データ

No	蓄積データの種類	主なデータ項目	公開状況	管轄機関	更新頻度
1	NITE-CHRIP（化学物質総合情報提供システム）※1	**一般情報** • CHRIP_ID、CAS登録番号、化学物質名称（日本語・英語名）、分子式、分子量、SMILES、構造式、別名、日化辞（日本化学物質辞書）、用途 **国内法規制情報** • 政令番号、分類、官報公示日・政令施行日、対象となる範囲等（化審法、化管法、労働安全衛生法、毒物及び劇物取締法、化学兵器禁止法、オゾン層保護法、大気汚染防止法、水質汚濁防止法、土壌汚染対策法、家庭用品規制法、食品衛生法） **外国法規制情報** • 番号、名称、分類、対象となる範囲等（ASEAN、EU、米国、中国、韓国、台湾、国際条約（ストックホルム条約（POPs条約）、ロッテルダム条約（PIC条約）等）） **有害性・リスク評価情報** • GHS分類結果（版、公表名称、分類結果（HTML、Excel））、GHS対応モデルラベル・モデルSDS情報（厚生労働省へのリンク）、リレーショナル化学災害データベース:RISCAD（物質ID、名称、物質情報、事故情報（産総研へのリンク））、危険物災害等情報支援システム（物質名、危険物分類、物性概略、物性詳細（消防庁へのリンク））、国外有害性評価書／リスク評価書等（国際化学物質簡潔評価文書:CICADs・環境保健クライテリア:EHCのタイトル、詳細情報、日本語訳（IPCS・国立医薬品食品衛生研究所のリンク）、統合リスク情報システム:IRISの公表物質名称、詳細情報、最終更新日（米国環境保護庁:EPAのリンク））、許容濃度等の勧告（日本産業衛生学会の許容濃度、生物学的許容値、発がん分類）、発がん性評価（国際がん研究機関:IARC、EPA、米国国歌毒性計画:NTPの発がん性評価（評価物質名称、評価ランク））等	公開	独立行政法人製品評価技術基盤機構（NITE）	2か月に1回程度

※1 NITE「NITE-CHRIP」 https://www.nite.go.jp/chem/chrip/chrip_search/systemTop

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

■ 化管法・安衛法等に基づき、事業者が作成・交付を義務付けられているSDSについて、厚生労働省がモデルSDS情報※1を公開している。

その他蓄積されている化学物質関連データ

No	蓄積データの種類	主なデータ項目	公開状況	管轄機関	更新頻度
2	モデルSDS情報※1	**化学物質等及び会社情報** • 化学物質等の名称、製品コード、会社名・連絡先等、推奨用途及び使用上の制限 **危険有害性の要約** • GHS分類（分類実施日、物理化学的危険性、健康に対する有害性）、ラベル要素（絵表示又はシンボル、注意喚起語、危険有害性情報、注意書き、国・地域情報） **組成及び成分情報** • 化学名又は一般名、別名、分子式（分子量）、化学特性（示性式又は構造式）、CAS番号、官報公示整理番号（化審法・安衛法）、分類に寄与する不純物及び安定化添加物、濃度又は濃度範囲 **応急措置** • 吸入した場合、皮膚に付着した場合、眼に入った場合、飲み込んだ場合、予想される急性症状及び遅発性症状、最も重要な兆候及び症状、応急措置をする者の保護、医師に対する特別注意事項 **火災時の措置** • 消火剤、使ってはならない消火剤、特有の危険有害性、特有の消火方法、消火を行う者の保護 **漏出時の措置** • 人体に対する注意事項、保護具および緊急措置、環境に対する注意事項、回収・中和、封じ込め及び浄化方法・機材、二次災害の防止策 **取扱い及び保管上の注意** • 取扱い（技術的対策、局所排気・全体換気、安全取扱い注意事項、接触回避）、保管（技術的対策、保管条件、容器包装材料）	公開	厚生労働省	年1回程度

※1 厚生労働省「GHS対応モデルラベル・モデルSDS情報 一覧表」 https://anzeninfo.mhlw.go.jp/anzen_pg/GHS_MSD_LST2.aspx

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

■ 前頁の続き

その他蓄積されている化学物質関連データ

No	蓄積データの種類	主なデータ項目	公開状況	管轄機関	更新頻度
2	モデルSDS情報※1	**暴露防止及び保護措置** • 管理濃度、日本産衛学会／ACGIHの許容濃度（暴露限界値、生物学的暴露指標）、設備対策、呼吸器／手／眼／皮膚及び身体の保護具、衛生対策 **物理的及び化学的性質** • 物理的状態（形状、色、臭い、pH）、融点、凝固点、沸点、初留点及び沸騰範囲、引火点、自然発火温度、燃焼性（固体、ガス）、爆発範囲、蒸気圧、蒸気密度、蒸発速度（酢酸ブチル＝１）、比重（密度）、溶解度、オクタノール・水分配係数、分解温度、粘度、粉じん爆発下限濃度、最小発火エネルギー、体積抵抗率（導電率） **安定性及び反応性** • 安定性、危険有害反応可能性、避けるべき条件、混触危険物質、危険有害な分解生成物 **有害性情報** • 急性毒性（経口、経皮、吸入）、皮膚腐食性・刺激性、眼に対する重篤な損傷・刺激性、呼吸器感作性又は皮膚感作性、生殖細胞変異原性、発がん性、生殖毒性、特定標的臓器・全身毒性（単回暴露）、特定標的臓器・全身毒性（反復暴露）、吸引性呼吸器有害性 **環境影響情報** • 生態毒性、水生環境有害性（急性有害性）、水生環境有害性（長期間有害性）、オゾン層への有害性 **廃棄上の注意** • 残余廃棄物、汚染容器及び包装 **輸送上の注意** • 国際規制（国連番号・海上規制情報・航空規制情報）、国内規制（国連番号・海上規制情報・航空規制情報）、特別安全対策、緊急時応急措置指針番号 **適用法令**	公開	厚生労働省	年1回程度

※1 厚生労働省「GHS対応モデルラベル・モデルSDS情報 一覧表」 https://anzeninfo.mhlw.go.jp/anzen_pg/GHS_MSD_LST2.aspx

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

- NITEは製品安全の取組の一環で、製品事故情報及びリコール情報を収集し、公開している。
- 環境省の化学物質ファクトシートでは、PRTR届出データ等の情報を化学物質の専門家以外の人々にも理解しやすい内容で公開している。

その他蓄積されている化学物質関連データ

No	蓄積データの種類	主なデータ項目	公開状況	管轄機関	更新頻度
3	製品事故情報・リコール情報の公開※1	**製品の事故情報** • 事故発生日、品目、品名、事故通知者、事故通知内容、被害状況（物的／人的被害）、事故発生場所、原産国、被害の種類、事故原因、原因区分 **リコール情報** • リコール実施日、事業者名、品名、内容（製品名、機種・型式、品番、JANコード、リコール内容）、製造期間、対応方法、問合せ先等	公開	独立行政法人製品評価技術基盤機構（NITE）	年に数回
4	化学物質ファクトシート※2	**化学物質情報** • 化学物質名称、別名、PRTR政令番号、CAS番号、構造式 **用途** • 性状、製品への主な用途、生産量 **排出・移動** • 環境排出量、届出排出・移動量、排出・移動源／排出・移動先の内訳（推計値）、業種別構成比（上位5業種）、環境データ（大気・室内空気・公共用水域・地下水・底質・生物（魚）中濃度） **環境中での動き** • 分解性、溶解性等 **健康影響・生態影響** • 毒性、体内への吸収と排出、影響（リスク評価情報等）、PRTR対象選定理由 **適用法令**	公開	環境省	2012年版が最新

※1 NITE「製品事故情報・リコール情報」 https://www.nite.go.jp/jiko/jikojohou/index.html
※2 環境省「化学物質ファクトシート」http://www.env.go.jp/chemi/communication/factsheet.html

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

2. 蓄積されている化学物質関連データの現状

2.1. 化審法で蓄積されているデータ
2.2. 化管法で蓄積されているデータ
2.3. その他蓄積されている化学物質関連データ
2.4. 蓄積されているデータの現状
2.5. 蓄積データに関する考察

■ 「利活用できる状態になっているのか（正確性）・（完全性）」「公開できるデータなのか（機密性）」等の以下の評価観点※1を基に、蓄積されているデータの現状（データ利活用の検討に関するデータ品質の現状）を確認した。

データ品質の評価観点※1

No	カテゴリ	説明
1	**正確性**	入力不備や変換ミスなどが含まれていないか（誤字・脱字、別項目・別レコードのデータが登録されていないか）
2	**完全性**	すべてのデータが欠落なく揃っているか
3	**一貫性**	データ間で矛盾が生じてしまっていないか
4	**最新性**	データが期限内の実体を示しているか
5	**精度**	データの詳細度（有効桁数など）が十分であるか
6	**機密性（プライバシー）**	再利用・公開して良いデータであるか 第三者の機密情報が含まれていないか
7	**妥当性**	対象の業務内容においてデータの整合性が取れているか（業務と整合したデータ）
8	**参照整合性**	参照元のデータが存在するか
9	**適時性**	必要な時に速やかにデータが利用できようになっているか
10	**一意性**	同じ実体を表すデータが1つだけとなっているか
11	**有効性**	データが定められた属性（型・形式・精度・文字コード等）が有効範囲に収まっているか

※1 DAMA（データ管理協会）「DMBOK Functional Framework」を基に弊社で作成

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

■ 前頁の評価観点を基に、化審法及び化管法に関して蓄積されているデータの現状を整理した結果を以下に示す。

化審法・化管法で現在蓄積されているデータの現状

No	カテゴリ	化審法による蓄積データの確認結果	化管法による蓄積データの確認結果
1	**正確性**	–	–
2	**完全性**	• 化学物質によっては、構造式や物理化学性状情報、試験データが含まれていない場合がある • 一つの化学物質名称に複数の化学物質が該当する場合、複数名称の情報が含まれていない場合がある	–
3	**一貫性**	• データ間での矛盾はなし ※ただし、同一化学物質でも各種一覧資料間で番号（省令番号、通し番号等）や名称（省令名称、官報公示名称等）が異なる場合がある	• データ間での矛盾はなし（化審法との関係では、対象業種が事業所ごとであり、事業者ごとでないため単純照会が難しい）
4	**最新性**	• 製造・輸入量はリアルタイムな情報ではなく、年度ごとの蓄積データである • 製造量や輸入量以外の情報は、時間によって変化する情報ではないため最新性はある • 試験データは20、30年前のデータである場合がある	• リアルタイムな排出量や移動量ではなく、年度ごとの蓄積データである
5	**精度**	• データの精度は問題なし	• データの精度は問題なし

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

■ 前頁の続き

化審法･化管法で現在蓄積されているデータの現状

No	カテゴリ	化審法による蓄積データの確認結果	化管法による蓄積データの確認結果
6	**機密性(プライバシー)**	• 試験データの所有権が事業者にあるため、試験データ全般的にCBIの考慮が必要（なお、新規物質については化学物質名称の公示の際に、新規審査データを公表する） • 法令において公表の規定が存在していないわけでは無いが、オープンデータ化するにあたっては新しい規定が必要になる	• 移動量や排出量情報を公開する際には、風評被害や盗難等のリスクに注意が必要である • 法令において公表の規定が存在していないわけでは無いが、オープンデータ化するにあたっては新しい規定が必要になる
7	**妥当性**	–	–
8	**参照整合性**	• 企業からの申請内容が保管されている（新規化学物質審査シートや有害性情報報告書）	• 企業からの届出内容が保管されている
9	**適時性**	• 届出データは、紙媒体やPDF、wordファイルの形式保管されている • 構造化された形でデータが蓄積されていない（※j-checkでは一部情報がすぐに利用･検索できるようにデータが保管されている） • 構造式情報がコンピュータで読み取れるような形で保管されていない（MOLファイルやSDFの形で保管されていない）	• 構造化された形でデータが保管されている（集計結果一覧）
10	**一意性**	• 化学物質の名称が統一されていないケースがある • 一意性のある情報	• 化学物質の名称が統一されていないケースがある
11	**有効性**	• 審査される情報のため、信頼性は高い	• 企業からの届出に基づいた情報であり、審査等が実施された情報ではない

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

2. 蓄積されている化学物質関連データの現状

2.1. 化審法で蓄積されているデータ
2.2. 化管法で蓄積されているデータ
2.3. その他蓄積されている化学物質関連データ
2.4. 蓄積されているデータの現状
2.5. 蓄積データに関する考察

■ 化審法及び化管法に関して蓄積されているデータの現状確認の結果を踏まえ、蓄積データに関する考察を以下に示す。

化審法・化管法で現在蓄積されているデータの考察

1. 構造式を主キーとしてデータベースを整備することで、その他のデータベースとの連携がしやすい
- 化学物質に関して、現段階では世界的に一意に統一された化学物質固有のIDや名称は存在していない。
- CAS番号は世界的に広く利用されているが、アメリカの民間事業者によって管理されているため、事業者が突発的に運営を中止する可能性もゼロではない。かつCAS番号においても一物質一番号として登録されているわけではない点やすべての化学物質が登録されている場合でもないことを考慮すると、一意のIDとして扱うことに懸念がある。
- 海外のデータベース、例えばPubchemなどではCAS番号ではなく、独自のCIDを設定し、一意の情報として利用している。
- 化学物質に一意の情報として有力なのは、化学物質の構造式情報である。

2. 化学物質関連のデータベースでは、複数名称に対応する形でデータを整備する方が利便性が高い
- 化学物質の名称について、現状IUPAC命名法をもとに名称を決定することになっているが、同じHCｌでも塩化水素（IUPAC名）と塩酸、CH3OHでもメタノール、メチルアルコール（IUPAC名）を使い分けるように、通常よくとおっている名称が存在していることがあり、結果複数の名称が併存している場合がある。
- アメリカのSubstance Registry Services（SRS）では、一つの物質に対して複数の名称がある場合、どのような名称で検索をしても同じ化学物質が検索されるようになっている。

3. これまでに届け出されたデータをデータベースとして整備する際、紙やPDFデータからの移行負担の軽減として、AI-OCR※1技術の活用が考えられる
- 化審法・化管法で届出されたデータは、紙やPDF、Wordファイルの形で保管されている。
- 上記状況のため、データベースを整備する際にはデータ移行に係る負担が大きい。

※1 AI-OCR（Artificial intelligence - Optical character recognition）とは、活字、手書きテキストの画像を文字コードの列に変換するソフトウェアで、通常のOCRとは異なりAI技術を組み込むことで、読み取り精度を大きく向上させ、文字認識率が向上する技術とされている。

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

■ 前頁の続き

化審法・化管法で現在蓄積されているデータの考察

4. CBI（営業機密情報）にあたる情報が含まれており、オープンデータ化するにあたって、考慮が必要である

- 化学物質の所有企業名や製造量・輸入量、化学物質の名称等の情報についても、企業のノウハウとなる可能性があり、CBIへの対応が必要である。
- CBIへの対応方針の例として、「データ提供者・利用者の認証」や「データの匿名化」が挙げられる。
- データの匿名化に関しては、化学物質の名称や所有企業等をマスキングをして公開するという方法が考えられる。例えば、REACHでは所有企業が3社以上の場合は、所有企業名を公表するがそうでない場合は公表していない。
- またデータ提供者・利用者の認証に関しては、データの閲覧をできる企業を絞り、認証を行うことで海外等へのノウハウの流出を防ぐことができる。またデータの種類によって、閲覧をできる対象を設定することも一つの方法である。例えばWAGRIではデータ連携基盤を利用できるのは会員のみにして、完全にオープンな形では公開していない。

5. 法令によって収集した情報をオープンデータ化するためには、収集する情報を「公表・閲覧」できるよう制度の見直しをする必要がある

- 政府のオープンデータ基本方針では、法令によって収集したデータを公開する場合、「公表・閲覧」等を実施する旨を法令に記載する必要がある。
- 化審法・化管法で法令において公表の規定が存在していないわけでは無いが、オープンデータ化するにあたっては「公表・閲覧」することを明記する等、新しい規定が必要になる。

6. SDSの活用による、専門家以外を対象としたデータの活用が考えられる

- 化学物質関連の情報は、専門家以外には難解な情報である場合が多い。
- 一方で、SDSは化学物質管理の知見を有していない者でもわかりやすい情報としてまとめられている。

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

3. 調査結果

3.1. 事例調査

3.2. ニーズ調査

3.3. 調査結果を踏まえたデータ利活用領域の特定

■ 事例調査の概要を以下に示す。

事例調査概要

調査の背景・目的	✓ 我が国では化審法、化管法等に基づき、適切に化学物質管理が実施されてきた。 ✓ 一方、近年、デジタル技術の革新によりデータの様々な利活用が可能となり、様々な分野においてビックデータ解析やAIの導入が進んでいる。**化学物質管理法令に基づき多くの情報が行き交う中で、こうしたデータの利活用ができないか**検討している。 ✓ データ利活用の方向性について検討していく上で、**これまでにない新たな利活用方法や社会的ニーズが大きい利活用の方向性を把握**するために、国内外での材料や素材が持つ機能や特性情報を用いたデータ利活用事例やその他新しい領域でデータを利活用している事例を調査する。
調査方針	✓ 材料や素材が持つ機能や特性情報を用いて、「データを利活用して生産性向上等の事業に応用している事例」、「業務効率化等の成果を上げた事例」、「他業種と連携している事例」等の調査を行う。 ✓ 化学物質領域だけでなく、他領域における生産性向上・業務効率化・他業種連携の事例も含めて調査を行う。 ✓ 対外的なデータ利活用を見据え、社会的ニーズが大きいデータもしくはデータの利活用の方向性を調査する。
調査対象	国内：政府・公的機関：•独立行政法人 製品評価技術基盤機構 •農林水産省 •環境省 •特許庁 •地方自治体 国内：民間企業：•化学業界 •IT業界 •医療業界（ヘルスケア領域） •食品業界 等 国外：政府・公的機関：•EPA（米国環境保護庁） •ECHA（欧州化学機関） •研究機関 国外：民間企業：•化学業界 •IT業界 •医療業界

調査手法の詳細

キーワードの設定	「物質、材料、データ活用」などの複数の検索キーワード・条件を設定
情報の検索	検索キーワード・条件を用いて、データベース（Factiva等）から情報を検索
スクリーニング	本調査の目的に沿った事例を絞りこむため、中間調査状況をもとに協議して、スクリーニングを実施
リストの作成	スクリーニングした事例等をリスト化
考察	事例に関する情報を体系的に整理し、化学物質に係るデータの利活用の方向性をまとめる

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

■ 本調査に当たっては、以下の国内外の専門データベースから文献情報（論文、新聞）を検索した。データを利活用している事例の多くは、世界最大の有料データベースであるFactivaやJ DreamⅢを活用し、また、有用な論文はGoogle Scholar等からも収集した。

調査に活用したデータベース

	データベース	特徴
国内・海外文献	**J DreamⅢ**	• 科学技術や医学・薬学関係の国内外文献情報を検索できる国内最大のデータベース。収録文献は5,800万件。そのうち最も収録件数が多いDB（JSTPlus）では、世界50数か国の情報を含む科学技術全分野に関する文献情報を検索可能。
	Google Scholar	• 全分野型の学術情報専用検索エンジンで、オンラインジャーナルや学術研究機関サイト、機関リポジトリ、e-プリントアーカイブなどで公開提供されている論文・テクニカルレポート・プレプリントなどが検索可能。
	Factiva.com	• 新聞・雑誌・業界紙・ニュースなど世界の最新情報を収録したオンラインデータベース。世界で提供されている10,000以上のニュースリソースをキーワードで横断検索し、全文の利用が可能。
国内文献	**J-STAGE**	• ジャーナル、予稿集、報告書等を検索・閲覧が可能。
	CINI	• 学術論文情報を検索の対象とする論文データベース。
海外文献	**Web of Science**	• クラリベイト アナリティクスが提供する、化学・学術研究をサポートする統合的Webプラットフォーム。自然科学、社会科学、人文科学の全分野における主要論文誌、総計約12,000誌の情報がカバーされている。
	その他（電子ジャーナル）	• 海外の出版社が運営する電子ジャーナルサイトを活用し、必要な文献を購入が可能。
その他	**WEB検索**	• 企業等が独自に作成・公表する製品・サービス等についてWEB検索を実施。

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

（2）事例調査による気づきの抽出 – 化学物質管理データ利活用への応用 1/5

■ 事例調査による気づきを抽出し、化学物質管理データ利活用へ適応できる観点を分析した。

事例調査による気づきの抽出と化学物質管理データ利活用への応用

I プラットフォーム化によるデータの利便性向上を図ることで、データ利活用の促進に繋がる

- ✓ 現在、公的機関によるオープンデータ化が推進されている。その中でも公的機関の取り組みとして注目されているのが、散在するデータを一つの基盤上に連携する、**データ連携基盤の構築**である。
- ✓ あるデータ連携基盤は、農業の担い手がデータを使って生産性向上や経営改善に挑戦できる環境を生み出すことを目的とした、データ連携・共有・提供機能を有するデータプラットフォームとして公開されている。民間企業や団体、官公庁が、気象や土地、地図情報に関する様々なデータを提供し、各ベンダーやメーカーがデータを取得することで、農業者への新たなサービス等に活用することが可能となっている。この取り組みの背景としてあるのは、農業従事者の高齢化が進む中で、個々の農業者がそれぞれの経験に基づいて農業を行っている状況を改善し、農業者の収益を安定的に上げていくために、農業分野でもこれまでの知見やデータの活用を実現する必要があったためである。データを活用するにあたって、農業のデータはメーカーやサービスごとにデータ形式が異なるため、なかなか連携できない点が大きな課題であった。そこで散財するデータを一つの基盤上に連携し、データの利便性を向上させた。
- ✓ 化学物質関連の世界では、農業と同様に関連データが散在しているケースがある。そこで化学物質関連のデータ利活用においても、**データ連携基盤を構築することで、各データの利便性を向上させ、民間企業や各団体でのデータ利活用を促進**できると考えられる。

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

■ 事例調査による気づきを抽出し、化学物質管理データ利活用へ適応できる観点を分析した。

事例調査による気づきの抽出と化学物質管理データ利活用への応用

Ⅱ 他分野のデータとの掛け合わせによって新たな価値が創出される

- ✓ データ利活用の一つの方針として、**様々な分野かつ大量のデータを掛け合わせることによって新たな価値を創出**することが考えられる。
- ✓ ある医療系企業が提供するサービスでは、気象データと企業内で保管する医療データを掛け合わせることで、ぜんそくの発症リスクを予測するサービスを提供している。ぜん息患者の受診状況と気象データを掛け合わせ、気象変動によるリスク度を５段階で分類するとともに、天気予報を活用し、10日後までのリスク度を表出する予測モデルを開発し、アプリケーションによって通知している。これによって、ぜんそくの重症化を防ぎ、国民の健康の促進や医療費の削減に貢献している。
- ✓ 化学物質の情報は、様々な製品やサービスと関連している裾野が広い情報である。そのため、本事例のような、**他分野のデータとの掛け合わせによる新たな価値の創出は、化学物質関連のデータ利活用**の方向性の一つとして有力であると考えられる。特に有力な分野としては、ヘルスケアが挙げられる。化学物質は、病気の原因となる場合がある。例えば、工場で事故が起こった際に化学物質が漏れ労働者の健康被害に繋がる、もしくは普段の生活の中でもなんらかの化学物質によって症状が出ることなどがある。化学物質データと医療データを掛け合わせることによって、医療従事者による診断の正確性向上、原因となる化学物質の早期特定、症状の予測に繋げることができると考えられる。

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

■ 前頁の続き

事例調査による気づきの抽出と化学物質管理データ利活用への応用

Ⅲ AI技術による高度なデータ分析によって価値が創出される

- ✓ データ利活用の一つの大きな方向性として、**AI技術を利用した高度なデータ分析**が考えられる。
- ✓ 今回の事例調査では、研究開発においてAI技術をデータ分析に活用している事例が複数見つかった。本事業で意見交換を実施したある企業では、独自のAIプログラムを活用し、無数に存在する化合物の中から新たな有望化合物候補を見つけ出すことで、材料開発をサポートする製品を開発していた。既知の化合物や特性、カスタムデザインした化合物を指定すると、目的とする特性をもつ可能性の高い化合物を見つけ出し、その特性予測を提示する。該当する化合物の特許、論文などの関連情報を併せて提示することで、R&Dプロセスの効率化に貢献する。
- ✓ また、品質予測における事例として、ある化学系企業が開発したガス製品の品質予測システムが挙げられる。原料や炉の状態などのプロセスデータと、ガス製品の品質を示すXガス濃度との関係を、AI技術の一種であるディープラーニング（深層学習）を用いてモデル化することにより、プロセスデータ収集時から20分後のガス製品の品質を高精度で予測する。
- ✓ いずれの事例もAI技術を用いて大量のデータを分析し、材料開発や品質管理の効率化・高度化を実現している。
- ✓ 化審法や化管法で蓄積している化学物質関連のデータの中には、化学物質の構造式や物化性状、特性(分解性や蓄積性など)の情報が含まれている。これらのデータは材料開発をする際に関わるデータであり、これらの**データを機械で判別可能な形で公開することで、AI技術を用いた製品・サービスの機能向上に寄与**すると考えられる。

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

（2）事例調査による気づきの抽出 – 化学物質管理データ利活用への応用 4/5

■ 前頁の続き

事例調査による気づきの抽出と化学物質管理データ利活用への応用

Ⅳ 化学物質関連企業では研究開発の高度化が求められており、研究開発の効率化に資するデータ利活用は社会的ニーズが大きい

- ✓ 今回の事例調査では、化学物質関連の研究開発の効率化を図る取組が複数見つかった。それらの事例に共通した背景としては、化学業界各社で**研究開発の効率化**が求められているということである。これまで研究開発は化学研究開発者の知識と直観等の経験則に基づいて実施されており、新製品の開発には莫大なコストと時間がかかっていた。しかし、現在の化学業界では、グローバル化の加速に伴う開発競争の激化やテクノロジーの進化の加速に伴い、高付加価値で差異化された製品のいち早い市場投入、およびその分野における高いシェアの獲得が企業に求められている。
- ✓ このように**各企業が研究開発の効率化・高度化を図っている背景を鑑みると、研究開発の効率化が達成できるようなデータ利活用は、社会からのニーズが大きい**と予想される。

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

■ 前頁の続き

事例調査による気づきの抽出と化学物質管理データ利活用への応用

V ESGへの対応が喫緊の課題になっており、ESGへの取組に寄与するようなデータ利活用は社会的意義が大きい

- ✓ 近年、**各企業はESGへの対応が喫緊の課題**になっている。特に化学物質に関連する業界は、比較的ESGへの関心が高く、考慮することは必要不可欠になっている。そのため各企業ではなるべく環境負荷の低い化学物質を利用できるように、もしくは排出しないように取り組んでいる。
- ✓ 今回の事例調査では、環境省による情報プラットフォームの活用によって資源循環を促進する事例が挙げられる。現在検討段階ではあるが、一定の共通項のある複数の工場からの排出物を対象として、共通の排出物分類等により情報プラットフォームに排出物管理データを一元化することで、排出事業者とリサイクラ等とのコミュニケーションを促進し資源循環を促進している取り組みである。
- ✓ このような**各企業のESGへの取組が促進されるようなデータ利活用は、社会的意義が大きい**と考えられる。具体的には、資源循環に貢献するようなデータ利活用、もしくは、企業による化学物質管理や自主的なリスク評価をサポートする取り組みなどが考えられる。

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

3. 調査結果

3.1. 事例調査

3.2. ニーズ調査

3.3. 調査結果を踏まえたデータ利活用領域の特定

- ニーズ調査では、化学物質に関するニーズや課題を把握し、データ利活用案の検討材料とすることを目的に、化学物資を業務で利用している、または化学物質関連企業をクライアントに持つ企業に対してヒアリングを実施し、ニーズ・課題等を収集した。
- 意見交換で収集したニーズ・課題等を整理・考察することで、「国や公共機関が蓄積する化学物質に関するデータをどのように利活用していくか」の検討につなげる。

ニーズ調査の対象

No.	意見交換先企業	企業選定の理由	事例調査による気づき※1との相関					意見交換のテーマ
			Ⅰ	Ⅱ	Ⅲ	Ⅳ	Ⅴ	
1	企業A	一般的な化学企業のニーズ・課題の深堀のため	○				○	・化学物質に関するニーズ・課題の収集 ・弊社構想案に対する所感の収集
2	企業B	研究開発事例の深堀のため			○	○		・化学物質に関するニーズ・課題の収集 ・弊社構想案に対する所感の収集
3	中央省庁A・ 独立行政法人A	データ連携基盤事例の深堀のため	○	○				・化学物質に関するニーズ・課題の収集 ・データ連携基盤に関するニーズ・課題の収集
4	企業C	ESG投資関連知見の深堀のため					○	・化学物質に関するニーズ・課題の収集 ・リスクマネジメント業務内容の収集
5	企業D	研究開発事例の深堀のため			○	○		・化学物質に関するニーズ・課題の収集 ・弊社構想案に対する所感の収集
6	企業E	一般的な化学企業のニーズ・課題の深堀のため	○				○	・化学物質に関するニーズ・課題の収集 ・弊社構想案に対する所感の収集

※1 前述「3.1. 事例調査（3）事例調査による気づきの抽出」に記載して下記の5項目を指す。
Ⅰ. プラットフォーム化によるデータの利便性向上を図ることで、データ利活用の促進に繋がる
Ⅱ. 他分野のデータとの掛け合わせによって新たな価値を創出する
Ⅲ. AI技術による高度なデータ分析によって価値を創出する
Ⅳ. 化学物質関連企業では研究開発の高度化が求められており、研究開発の効率化を達成するようなデータ利活用は社会的ニーズが大きい
Ⅴ. 化学物質関連企業では、ESGへの対応が喫緊の課題になっており、ESGへの取組に寄与するようなデータ利活用は社会的ニーズが大きい

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

（2）事業者との意見交換結果 - 意見交換の結果から導出されたニーズ・課題 1/2

■ ヒアリングで抽出された意見の内容と、導出されたニーズ・課題等を以下に示す。

意見交換の結果から導出されたニーズ・課題

	ニーズ・課題
1	副生成物の発生を抑制したい
2	副生成物や余剰原材料の情報を公開する場合、ノウハウの流出やデータの整理に留意する必要がある
3	産業全体でより自主的にリスク評価を行う機運が高めたい
4	自主的なリスク評価によって懸念される業務的な負荷やコスト増加に見合った便益を享受できる仕組みが必要である
5	リスク評価に利用できる評価根拠（化学的エビデンス等）の情報がほしい
6	過去の事故データや化学物質管理データが一元的に集約し、提供してほしい
7	化学物質の構造式等の構造情報を集約し、検索できるような仕組みがほしい
8	化学物質の製造者情報を基に、製造企業へアプローチできるようにしてほしい
9	化学物質に関わる学術的な情報（論文等）を集約し、検索できるような仕組みがほしい
10	構造式検索や物質の構造と活性の関係、骨格・側鎖のマトリクスによる構造式等の情報を集約し、検索できるようにしてほし
11	創薬以外の分野においても化学物質の構造式データ等の活用の機会はある
12	API等で情報の公開をしてほしい
13	機械学習やAIの学習用データとして活用できるような情報を提供してほしい
14	毒性情報を集約し、検索できるようにしてほしい
15	分解性情報を集約し、検索できるようにしてほしい
16	データを集約するだけでなく、適切な鮮度を保つ運用を行ってほしい
17	構造式検索機能を具備してほしい
18	労働安全衛生法のデータベースや労働安全衛生法の既存物質の情報も集約してほしい
19	事業者やサービスごとにデータ形式が異なるため、データの集約・連携が難しい
20	より有益な情報プラットフォームを構築するうえで民間事業者との協業は欠かせないところ、彼らにとってもメリットとなるような仕組みである必要がある

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

■ 前頁の続き

意見交換の結果から導出されたニーズ・課題

	ニーズ・課題
21	化学物質を扱う企業において、法規制対象物質が何か分かっていない/どうやって調べればよいか分からない
22	環境配慮に係る化学物質の情報（代替となる化学物質の情報等）を提供してほしい
23	PRTRの情報や化学物質の内容を分かりやすく示している資料を提供してほしい
24	化学物質の保管場所、扱う事業者、管理方法等の情報を地図情報と合わせて提供してほしい
25	情報を提供する方法（検索項目や表示内容等）を利用者視点で検討し、ユーザビリティの高い機能としてほしい
26	マテリアルズ・インフォマティクス推進のため、公開データを幅広く活用したい
27	商業的に生産していく際の各企業が有するデータを活用したい
28	医薬・農薬・食品の分野では細胞毒性、毒性の情報が必要とされている
29	化学物質の選定には時間が要し、また研究開発が成功裏に終わるのか否かは研究者のノウハウに左右される場合が多い
30	生成方法と物性の関係等のデータを提供してほしい
31	製法と物理化学性状の関連データ（プロセスデータ）を提供してほしい
32	当社が求める一次情報を利用するためには、国が提供する各個別サイトをそれぞれ確認する必要がある
33	各企業から集約した情報について、機微な情報やノウハウが流出しないよう留意する必要がある
34	SDSを明瞭なものにしてほしい
35	SDSシステムでどの情報がどういう分類で使われているかを可視化してほしい
36	密度の濃い（専門的な）情報を提供してほしい
37	国や公共機関が保有する各化学物質関連サイトの情報を1つのプラットフォームに集約してほしい
38	社会一般的にネガティブな印象を持たれるおそれがある化学産業のイメージを払拭したい
39	各国の規制情報を集約し、提供してほしい
40	化審法の該否判断をサポートする機能がほしい
41	化学物質の構造式をもって検索できるようにしてほしい

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

■ ヒアリングで得られた助言を以下に示す。データ利活用案の実現可能性等の検討の際に教訓として活用する。

意見交換で得られた助言

	助言
a	副生成物に関しては、様々な物質が混ざっているため、綺麗にデータを分類することは難しい
b	化学反応の残渣の再利用は難しい
c	余剰原材料や副生成物の再利用は、ある程度量がまとまっている余剰原材料や副生成物であれば実現できるが、量が少ない余剰原材料や副生成物では実現性は低い
d	リスク評価については、日本化学工業協会から公表されているデータも活用できるのではないか
e	化学物質がリスク評価されて安全に運用されていることを示すために、リスク評価を一般国民向けにデータを取り纏めるのも一案
f	事故があった際に、消防に事故の報告書を提出している。消防の情報を利用できる可能性がある
g	ヨーロッパのREACHでは、3社以上であれば会社名を公開している
h	医薬品分野では、他社へ化合物のデータを提供することのハードルが高い
i	化学物質の所有企業とのマッチングという従来なかった仕組みができることで、新たな市場が生まれる可能性はある
j	国の事業として、新規審査データ等を提供する代わりに利活用のアイデアを提案してもらう企画を開催する場合、関心はある（自社の大学院生アルバイトの従業員にチャレンジさせることも一案）
k	医薬品開発で重要なデータであるADMETを国等に公開してほしい
l	データ形式・フォーマットは一般的なものであれば問題ない（SQL検索、SMILS記法等）
m	農業分野でのデータ共通基盤を作った背景として以下のようなニーズ・課題があった 高齢化などによる人手不足 /熟練者の経験・知見のデータ化/天候や市況データ活用による収益安定化
n	国の事業で研究開発段階から事業者に参画してもらい、ニーズの高いデータを中心に実装している
o	データ提供側が無償・有償を決定できる（自社サービス等で解析されたデータの場合、有償が多い）
p	事業者が自社データを外部へ公開することへのハードルは高い印象
q	基本的には会員費で運用するため、サービスの周知やデータの拡充が重要である
r	データの拡充によって、想定外のサービスの創出や既存サービスのレベルアップを期待している

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

（3）意見交換を踏まえたデータ利活用の方向性の考察（活用ニーズの整理） 1/3

■ ヒアリングで得られた意見から、化学物質関連データのニーズ・課題が導出された。それらの解決の方向性として特に意見が多かったのは、研究開発の高度化（材料設計や化合物探索やの効率化、AIを活用した研究開発サービスの精度向上）である。

意見交換を踏まえたデータ利活用の方向性

意見交換から導出されたニーズ・課題		解決の方向性	課題解決に役立つデータ
7	化学物質の構造式等の構造情報を集約し、検索できるような仕組みがほしい	**【①研究開発の高度化】** ✓ 化学業界の高付加価値かつ差異化された製品の研究開発に資する化学物質データの提供。 ✓ 研究者の経験（材料の設計、デザイン）に基づく研究開発データの蓄積。 ✓ 幅広い構造式のデータの提供及び構造式によるスクリーニング機能の提供。 ✓ 製法と物化性状の紐づきのデータ（プロセスデータ）の提供。 ✓ 化学物質を保有している企業、製造元企業の情報提供。	**【化審法による蓄積データ】** 化学物質の構造式、化学物質の物化性状（毒性、分解性、蓄積性、融点、沸点等）、製造元企業 等 **【その他データ】** 公示前の新規物質情報、生成・反応プロセス 等
10	構造式検索や物質の構造と活性の関係、骨格・側鎖のマトリクスによる構造式等の情報を集約し、検索できるようにしてほしい		
11	創薬以外の分野においても化学物質の構造式データ等の活用の機会はある		
13	機械学習やAIの学習用データとして活用できるような情報を提供してほしい		
29	化学物質の選定には時間が要し、また研究開発が成功裏に終わるのか否かは研究者のノウハウに左右される場合が多い		
31	製法と物理化学性状の関連データ（プロセスデータ）を提供してほしい		
その他下記のニーズ・課題を含む※1 8、9、14、28、30、36、41			

※1 本書「3.2. ニーズ調査（2）事業者との意見交換結果 - 意見交換の結果から導出されたニーズ・課題」の「ニーズ・課題等」の番号を記載している。以下のページも同様。

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

（3）意見交換を踏まえたデータ利活用の方向性の考察（活用ニーズの整理） 2/3

■ 前述の研究開発以外の観点からもニーズ・課題が導出されており、化学関連企業のリスク評価の推進、 ESG投資に資する調達の改善、化学物質関連の法規制・安全対策に資する情報の提供が解決の方向性として求められている。

意見交換を踏まえたデータ利活用の方向性

意見交換から導出されたニーズ・課題		解決の方向性	課題解決に役立つデータ
3	産業全体でより自主的にリスク評価を行う機運が高めたい	**【②リスク評価の促進】** ✓ 企業の自主的なリスク評価の促進、リスク評価業務の負荷・コスト軽減に資するリスク評価に関連する情報の提供	**【化審法による蓄積データ】** 化学物質名、製造・輸入量、リスク評価結果、物理化学性状情報、有害性情報 等 **【化管法による蓄積データ】** 排出・移動量 等
5	リスク評価に利用できる評価根拠（化学的エビデンス等）の情報がほしい		
その他下記のニーズ・課題を含む 4			
22	環境配慮に係る化学物質の情報（代替となる化学物質の情報等）を提供してほしい	**【③CSR調達の推進】** ✓ 環境負荷の低い代替材及びその候補となる化学物質情報の提供	化学物質の代替材及びその候補を探すための情報一覧（化学物質名、代替できる化学物質名、製造元企業、物性等） 等
その他下記のニーズ・課題を含む 1、15、38			
21	化学物質を扱う企業において、法規制対象物質が何か分かっていない/どうやって調べればよいか分からない	**【④化学物質の法規制】** ✓ 化学関連企業が留意すべき法規制、法規制対象化学物質の情報を提供	**【NITE-CHRIPによるデータ】** 化学物質名、構造式、法規制対象物質 等
その他下記のニーズ・課題を含む 17、18、34、35、39、40			
6	過去の事故データや化学物質管理データが一元的に集約し、提供してほしい	**【⑤化学物質の安全対策】** ✓ 化学関連企業において発生しうる事故の原因（物質環境や装置設備、組織等）と予防策に係る情報を提供 ✓ 化学物質関連の事故の経験やノウハウを事例として提供	**【RISCADに蓄積されたデータ】** 事故原因、事故進展フロー、対応策、改善策 等 **【NITE（製品安全）】** 製品事故情報 等 **【事故報告書によるデータ】** 事故原因、その対応、改善策 等
23	PRTRの情報や化学物質の内容を分かりやすく示している資料を提供してほしい		

（3）意見交換を踏まえたデータ利活用の方向性の考察（活用ニーズの整理） 3/3

■ 前頁の続き

意見交換を踏まえたデータ利活用の方向性

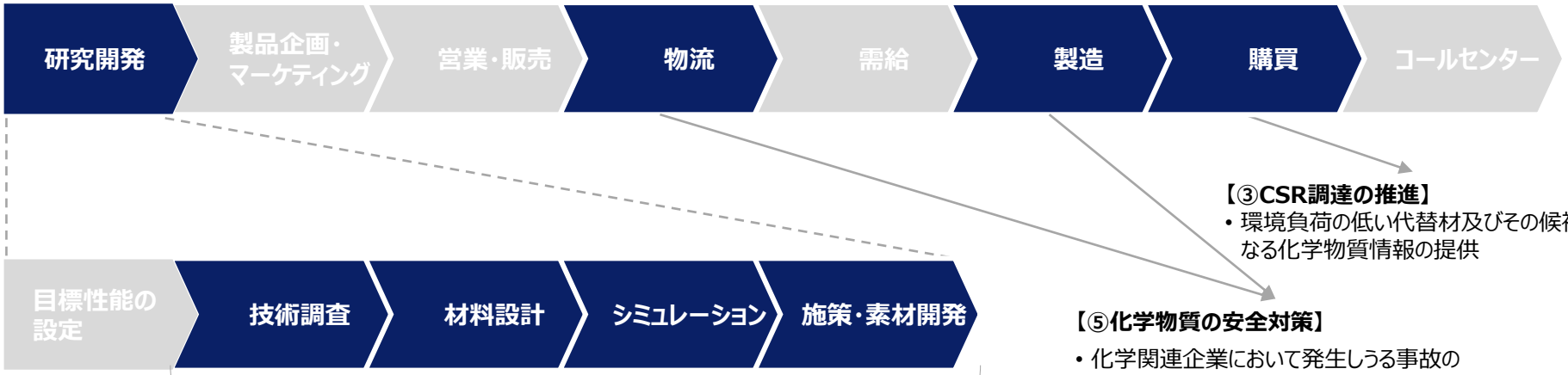
意見交換から導出されたニーズ・課題		解決の方向性
12	API等で情報の公開をしてほしい	**【⑥多様なデータ利活用に資するプラットフォーム基盤の構築】** ✓ 継続して利用されるプラットフォームを目指し、ニーズに合ったデータ及びAPIの充足化を図る ✓ データ提供者に対するインセンティブを設ける（事業者のデータ販売チャネルを増やす／サービスを広報する場としての活用を推進するなど）ことで民間事業者の情報公開を促進 ✓ 他のデータベースとのデータ形式差異を埋めるため、データの標準化を図る（必要に応じてデータ変換機能の実装も視野に入れる） ✓ 定期的に更新・メンテナンスされているデータベースとのオンライン連携を図る ✓ 定期的に最新情報を更新する運用体制・仕組みを具備する
16	データを集約するだけでなく、適切な鮮度を保つ運用を行ってほしい	
19	事業者やサービスごとにデータ形式が異なるため、データの集約・連携が難しい	
20	より有益な情報プラットフォームを構築するうえで民間事業者との協業は欠かせないところ、彼らにとってもメリットとなるような仕組みである必要がある	
24	化学物質の保管場所、扱う事業者、管理方法等の情報を地図情報と合わせて提供してほしい	
25	情報を提供する方法（検索項目や表示内容等）を利用者視点で検討し、ユーザビリティの高い機能としてほしい	
32	当社が求める一次情報を利用するためには、国が提供する各個別サイトをそれぞれ確認する必要がある	
その他下記のニーズ・課題を含む 2、26、27、33、37		

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

（3）意見交換を踏まえたデータ利活用の方向性の考察（ビジネスフローとの関係性） 1/2

■ 前頁までで整理したニーズ課題に対する解決の方向性について、化学物質を扱う業界の標準的なビジネスフローとの関係性を以下に示す。

化学業界のビジネスフローとその事業プロセス毎のデータ利活用ニーズ



【①研究開発の高度化】
- 化学業界の高付加価値かつ差異化された製品の研究開発に資する化学物質データの提供。
- 研究者の経験（材料の設計、デザイン）に基づく研究開発データの蓄積
- 幅広い構造式のデータの提供及び構造式によるスクリーニング機能の提供
- 製法と物理化学性状の紐づきのデータ（プロセスデータ）の提供
- 化学物質を保有している企業、製造元企業の情報提供

【③CSR調達の推進】
- 環境負荷の低い代替材及びその候補となる化学物質情報の提供

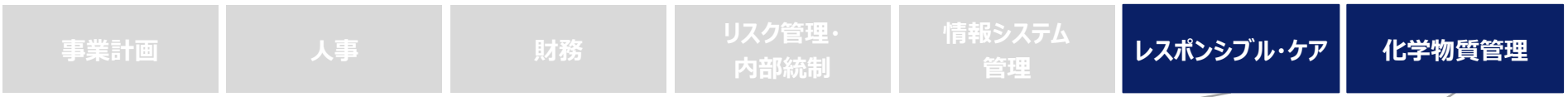
【⑤化学物質の安全対策】
- 化学関連企業において発生しうる事故の原因（物質環境や装置設備、組織等）と予防策に係る情報を提供
- 化学物質関連の事故の経験やノウハウを事例として提供

【⑥多様なデータ利活用に資するプラットフォーム基盤の構築】
- 継続して利用されるプラットフォームを目指し、ニーズに合ったデータ及びAPIの充足化を図る
- データ提供者に対するインセンティブを設ける（事業者のデータ販売チャネルを増やす／サービスを広報する場としての活用を推進するなど）ことで民間事業者の情報公開を促進
- 他のデータベースとのデータ形式差異を埋めるため、データの標準化を図る（必要に応じてデータ変換機能の実装も視野に入れる）
- 定期的に更新・メンテナンスされているデータベースとのオンライン連携を図る
- 定期的に最新情報を更新する運用体制・仕組みを具備する

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

■ 前頁の続き

化学業界のビジネスフローとその事業プロセス毎のデータ利活用ニーズ



【②リスク評価の促進】
- 企業の自主的なリスク評価の促進、リスク評価業務の負荷・コスト軽減に資するリスク評価に関連する情報の提供

【④化学物質の法規制】
- 化学関連企業が留意すべき法規制、法規制対象化学物質の情報を提供

【⑥多様なデータ利活用に資するプラットフォーム基盤の構築】
- 継続して利用されるプラットフォームを目指し、ニーズに合ったデータ及びAPIの充足化を図る
- データ提供者に対するインセンティブを設ける（事業者のデータ販売チャネルを増やす／サービスを広報する場としての活用を推進するなど）ことで民間事業者の情報公開を促進
- 他のデータベースとのデータ形式差異を埋めるため、データの標準化を図る（必要に応じてデータ変換機能の実装も視野に入れる）
- 定期的に更新・メンテナンスされているデータベースとのオンライン連携を図る
- 定期的に最新情報を更新する運用体制・仕組みを具備する

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

3. 調査結果

3.1. 事例調査

3.2. ニーズ調査

3.3. 調査結果を踏まえたデータ利活用領域の特定

■ 事例調査及びニーズ調査の結果から、化学物質データの利活用が考えられる8つの領域を導出した。

調査結果の気づき

事例調査での気づき

Ⅰ プラットフォーム化によるデータの利便性向上を図ることで、データ利活用の促進に繋がる

Ⅱ 他分野のデータとの掛け合わせによって新たな価値が創出される

Ⅲ AI技術による高度なデータ分析によって価値が創出される

Ⅳ 化学物質関連企業では研究開発の高度化が求められており、研究開発の効率化に資するデータ利活用は社会的ニーズが大きい

Ⅴ ESGへの対応が喫緊の課題になっており、ESGへの取組に寄与するようなデータ利活用は社会的意義が大きい

ニーズ事例調査での気づき

1 研究開発の高度化

2 リスク評価の促進

3 CSR調達の推進

4 化学物質の法規制

5 化学物質の安全対策

6 多様なデータ利活用に資するプラットフォーム基盤の構築

データ利活用領域

- 研究開発部門での材料開発の効率化に向けた情報プラットフォームの活用（AIを活用した材料探索、構造式ベースでの特性予測、法規制予測）
- 情報プラットフォームを活用した化学物質の所有企業とのマッチング促進による材料開発・試作期間の短縮化
- 情報プラットフォームを活用した化学物質の代替材の利用促進によるCSR調達の推進
- 各種データを用いた化学物質を扱う企業の自主取組評価の実施（ESG活動の推進）
- 情報プラットフォームを活用したリユース・リサイクルの促進
- 情報プラットフォームを活用した安全管理・事故時の対応の効率化（事故情報や安全に関する情報の利便性・検索性向上）
- リスク評価データの活用による、化学物質管理・リスク評価の効率化（リスク評価情報や法規制関連情報の利便性・検索性向上、AIを活用した法規制予測）
- 医療データとの掛け合わせによる医療診断の効率化

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

- 調査を踏まえ、化学物質データの利活用が考えられる8つのデータ利活用領域の実現難易度と社会的意義を評価した。
- 想定されるデータ利活用領域は、全ての実現難易度は高いものの、いずれも社会的意義はあると評価できる。
- 現時点で、8つのデータ利活用領域について優先順位をつけることは困難だが全て社会的意義が高いため、実現可能性を見極めることを目的に、後述「5.2. 実現に向けた課題/施策」で課題の整理と分析を行う。

想定されるデータ利活用領域とその評価結果

想定されるデータ利活用領域	ターゲット・利用者像	実現難易度	社会的意義
1. 研究開発部門での**材料開発の効率化**に向けた情報プラットフォームの活用 （AIを活用した材料探索、構造式ベースでの特性予測、法規制予測）	民間企業（特に研究部門） 研究機関	AIを活用した同様のサービスは複数展開されており、民間企業と連携することでサービス開発に繋がる可能性が高い。一方で構造式での検索に対するニーズがあるため、構造式と紐づける形でデータベースを整備する必要がある。	現在の化学業界では、グローバル化の加速に伴う開発競争の激化やテクノロジーの進化の加速に伴い、高付加価値で差異化された製品のいち早い市場投入、およびその分野における高いシェアの獲得が企業に求められており、研究開発の効率化は喫緊の課題である
2. 情報プラットフォームを活用した**化学物質の所有企業とのマッチング促進**による材料開発・試作期間の短縮化	民間企業（特に研究部門） 研究機関	現在届出されている情報を利用できるが、情報が整備されていないため整備する必要がある また企業が化学物質を所有していることを担保するため、一定程度の情報の最新性を保つ必要がある 所有企業名を公開することはCBIに抵触する可能性がある	特に中小企業にとって、化学物質の現物を準備することは負担になっており、そのような負担の軽減に繋がる取組は社会的意義は大きいと考えられる

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

■ 前頁の続き

想定されるデータ利活用領域とその評価結果

想定されるデータ利活用領域	ターゲット・利用者像	実現難易度	社会的意義
3. 情報プラットフォームを活用した化学物質の代替材の利用促進による**CSR調達の推進**	民間企業（特にESG部門や調達部門）	環境負荷の低い化学物質（代替材）及びその候補を探すための情報を新たに収集する必要がある	化学物質に関連する業界は、ESGに関する問題を考慮することは必要不可欠でニーズが高まっている。そのため各企業ではなるべく環境負荷の低い化学物質を利用できるように取り組んでいる。代替材の利用促進に繋がる取組は社会的意義が大きいと考えられる
4. 各種データを用いた化学物質を扱う企業の**自主取組評価**の実施（ESG活動の推進）	民間企業（特にESG部門）	対象とするESG活動の選定等、点数化の仕組みを構築し、かつ民間企業等から新たに情報を収集する必要がある	化学物質に関連する業界は、比較的ESGへの関心が高く、考慮することは必要不可欠になっている。そのため各企業ではなるべく環境負荷の低い化学物質を利用できるように、もしくは排出しないように取り組んでいる。代替材の利用促進に繋がる取組は社会的意義が大きい
5. 情報プラットフォームを活用した**リユース・リサイクルの促進**	民間企業（特に研究部門） 研究機関	廃棄物情報や副生成物情報から民間企業のノウハウが分かってしまうため、民間企業から情報の収集や公開できる可能性は低い	化学物質に関連する業界は、なるべく環境負荷の低い化学物質を利用できるように、もしくは排出しないように取り組んでいる。リユース・リサイクルの促進が図られることで、環境問題への対応に寄与する

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

■ 前頁の続き

想定されるデータ利活用領域とその評価結果

想定されるデータ利活用領域	ターゲット・利用者像	実現難易度	社会的意義
6. 情報プラットフォームを活用した**安全管理・事故時の対応の効率化**（事故情報や安全に関する情報の利便性・検索性向上）	民間企業 周辺住民	各省庁や公共機関に散在する情報を集約し整備する必要がある	化学物質産業において、物質環境や装置設備、組織など様々な要因から事故が発生する可能性があり、重大事故に繋がる場合もある。過去の事故事例を生かせる仕組みがあることで、事故時の適切な初動対応に繋げたり、原因究明に役立てたりすることで、周辺環境のリスク低下や労働者の安全確保に繋がる
7. リスク評価データの活用による、**化学物質管理・リスク評価の効率化**（リスク評価情報や法規制関連情報の利便性・検索性向上、AIを活用した法規制予測）	民間企業（特に化学物質管理部門）	現在、民間企業でもAI活用による化学物質管理の効率化を図るサービスを開発しようという動きがあり、連携することで実現できる可能性がある。一方で機械判別可能な形でデータベースを整備する必要がある	化学物質は様々な規制があり、社会動向として、化学物質管理の重要性が増している。特に中小企業では化学物質管理の負担が大きく、それらの負担を軽減するような取組は社会的意義が大きいと考えられる
8. 医療データとの掛け合わせによる**医療診断の効率化**	医療機関 民間企業（特に工場）	医療情報を持つ企業・団体と連携することでサービス化に繋がる可能性がある。一方で医療データと掛け合わせて分析できるよう、データベース整備する必要がある	普段の生活の中や工場での労働など、化学物質は、病気の原因となる場合がある。そのような化学物質に関連する病気の診断の正確性向上や症状の予測に繋がる取組は、工場労働者の安全や周辺住民の安全の観点から社会的意義がある

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

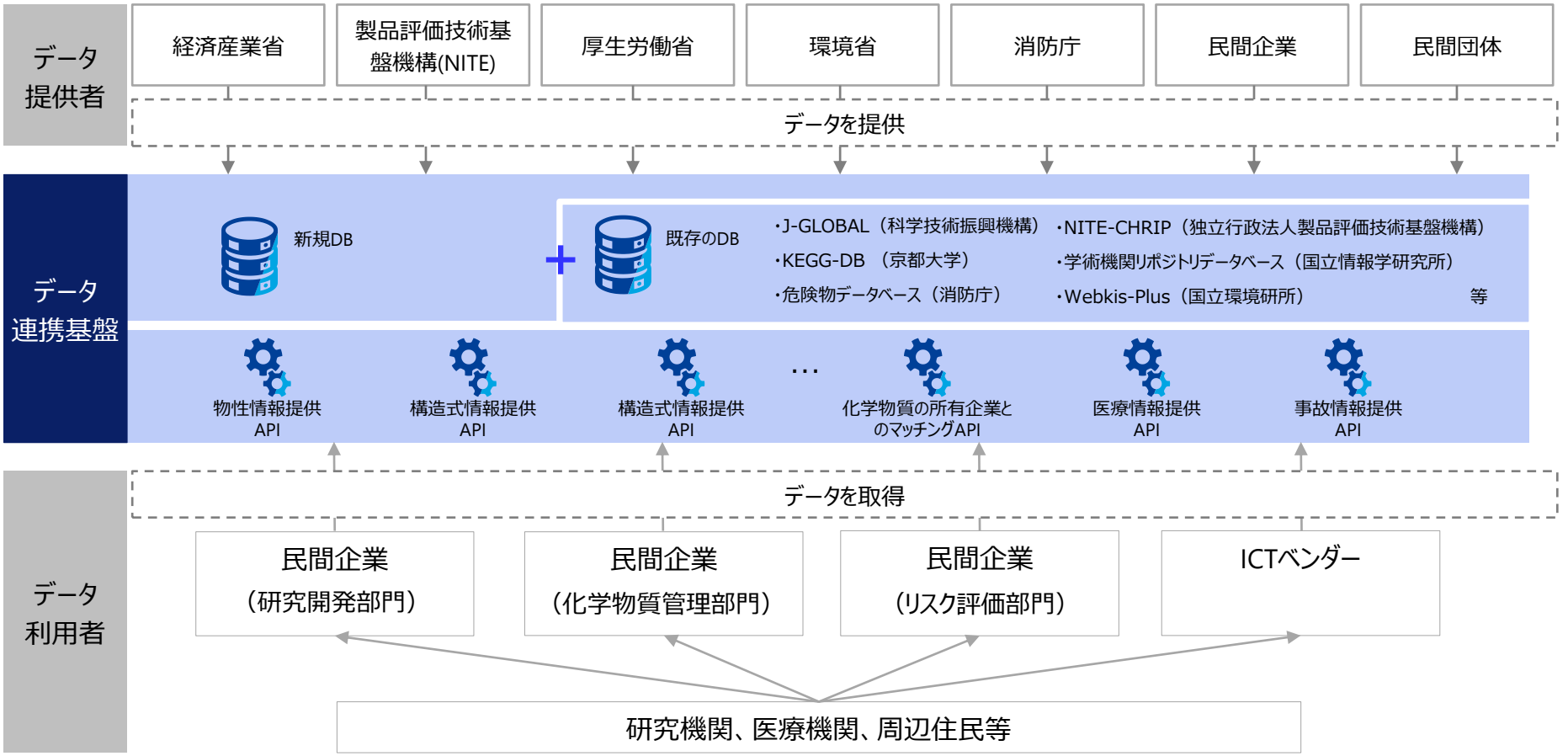
4. データ利活用の構想

4.1. データ連携基盤の全体像

4.2. データ利活用の構想

- データ利活用に向けた全体像を以下に示す。化学物質関連データを活用して生産性の向上や経営の改善に挑戦できる環境を作るために、データ取集や提供機能を持つデータ連携基盤を構築する想定である。
- これまでは管轄する各組織等により個別に管理、提供されてきたデータをデータ連携基盤として集約し、加えて各データの繋がりや形式、提供方式の違いを吸収することで、利用者は化学物質関連データをより容易に、より有益な情報として活用できる。それにより、新たなサービスの開発や既存サービスの改良をより迅速に、簡潔に行うことが期待できる。

データ連携基盤のイメージ図



Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

4. データ利活用の構想

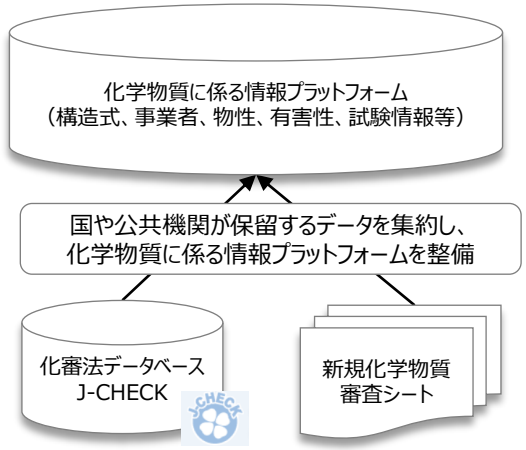
4.1. データ連携基盤の全体像

4.2. データ利活用例

データ利活用の具体例	1）研究開発部門での材料開発の効率化に向けた情報プラットフォームの活用

プラットフォームの構築

情報プラットフォームへの集約



データの利活用

APIでのデータ提供

各種API

- 化学物質の所有企業とのマッチング情報
- 化学物質の構造式情報
- 化学物質の事件結果等の情報
- 化学物質の物性情報

リスト一覧
- ・化学物質名
- ・構造式
- ・所有企業

機械学習が可能な形でのデータ提供
- ・化学物質名
- ・構造式
- ・物性
- ・試験情報

利活用による成果

化学物質の所有企業とのマッチング

化学物質を所有する企業の検索が可能になることで、研究開発等に使用したい企業はコンタクトを取ることができる。

ケモインフォマティクスへの活用

IT企業によるケモインフォマティクス関連のサービスや各企業のケモインフォマティクスを活用した研究開発で情報を活用することができる。

当施策の背景

- ✓ これまで研究開発は化学研究開発者の知識と直観等の経験則に基づいて実施されており、新製品の開発には莫大なコストと時間がかかっていた。
- ✓ しかし、現在の化学業界では、グローバル化の加速に伴う開発競争の激化やテクノロジーの進化の加速に伴い、高付加価値で差異化された製品のいち早い市場投入、及びその分野における高いシェアの獲得が求められている。すなわち、化学業界各社で研究開発の効率化が求められている。

当施策による想定効果

機械学習やAIを活用した材料開発をサポートする製品・サービスの開発促進

- ✓ 既知の化合物や特性、カスタムデザインした化合物を指定すると、目的とする特性をもつ可能性の高い化合物を見つけ出し、その特性予測を提示するような製品・サービスの開発に寄与する。国や公共機関が保有する有害性情報等を掛け合わせることによって、データ項目の幅が広がると考えられる。具体的には以下3つの効果を想定している。

①材料探索の効率化

✓研究開発部門が材料設計をする際に、目的の特性を持つ可能性の高い化学物質を迅速に見つけることができる。

②材料開発の幅が広がる

✓これまでの発想や経験にとらわれない新たな領域の有望化合物の探索を可能にすることで、材料開発の幅が広がる。

③環境負荷の低い製品開発の促進

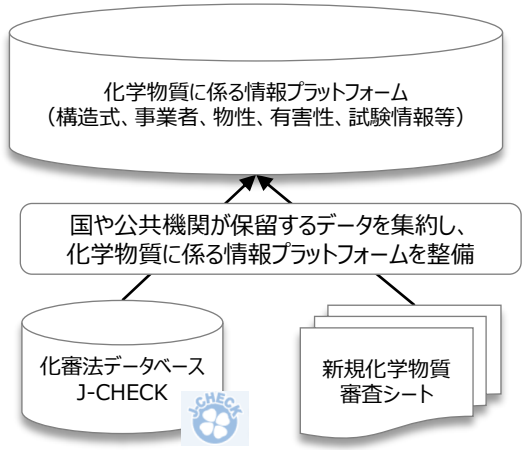
✓環境負荷の低い化学物質を発見しやすくすることで、環境負荷の低い製品の開発を促進する。

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

データ利活用の具体例	2）情報プラットフォームを活用した化学物質の所有企業とのマッチング促進による材料開発・試作期間の短縮化

プラットフォームの構築

情報プラットフォームへの集約



データの利活用

APIでのデータ提供

各種API

- 化学物質の所有企業とのマッチング情報
- 化学物質の構造式情報
- 化学物質の事件結果等の情報
- 化学物質の物性情報

リスト一覧
- ・化学物質名
- ・構造式
- ・所有企業

機械学習が可能な形でのデータ提供
- ・化学物質名
- ・構造式
- ・物性
- ・試験情報

利活用による成果

化学物質の所有企業とのマッチング

化学物質を所有する企業の検索が可能になることで、研究開発等に使用したい企業はコンタクトを取ることができる。

化学物質の入手方法の検索

必要とする化学物質を構造式を使って簡易的に検索でき、上記所有企業の情報と合わせて入手方法が可視化される。

当施策の背景

- ✓ 研究開発において、材料設計・シュミレーション後に実際に候補素材を試作をし、性能を評価している。候補材の試作のために、使用する化学物質を準備する必要がある。
- ✓ 材料設計・シミュレーション後に、どのような構造式の化学物質を利用したいかが分かっていても、その化学物質をどの企業が所有しているのか、どのように手に入れるかを調査することに時間を要する。
- ✓ AIによって出力される構造式のデザインはあくまでも机上の見解であり、実際にその化学物質を調達、または自社で製造する必要がある点（自社で製造する場合、その化学物質の製造プロセスを開発する必要がある）に留意する必要がある。

当施策による想定効果

化学物質の所有企業とのマッチング事業・サービスの促進

✓ 研究開発に使用したい化学物質を所有する企業を簡単に検索することができ、コンタクトを取ることができるようなサービス・事業を促進する。国や公共機関が保有する有害性情報等を掛け合わせることによって、データ項目の幅が広がると考えられる。具体的には以下の効果を想定している。

民間企業・研究機関による候補素材の試作の効率化

✓候補素材を試作する際に、必要とする化学物質を準備するための負担が軽減し、研究開発の期間の短縮化やコストの削減に繋がる。

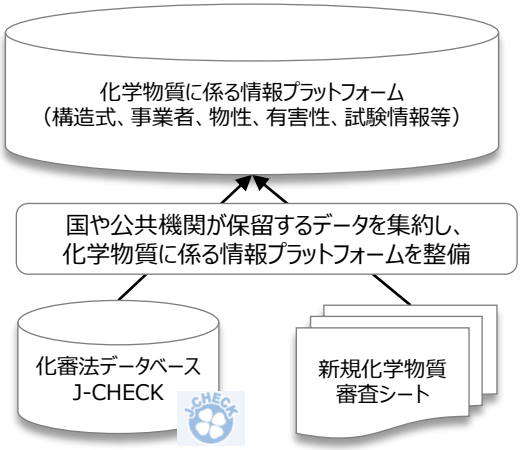
Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

データ利活用の具体例

3）情報プラットフォームを活用した化学物質の代替材の利用促進によるCSR調達の推進

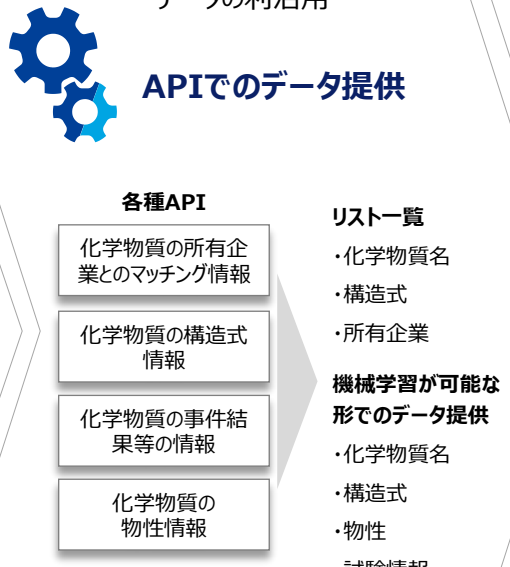
プラットフォームの構築

情報プラットフォームへの集約



データの利活用

APIでのデータ提供



利活用による成果

環境負荷の低い化学物質（代替材）の検索

化学物質の代替材及びその候補が検索でき、情報（化学物質名、代替できる化学物質名、製造元企業、物性等）が可視化される。

CSR調達の促進

環境負荷の低い化学物質（代替材）を簡単に検索することができるため、各民間企業での環境に配慮した調達に係る手間が削減でき、CSR調達の促進に繋がる。

当施策の背景

- ✓ 特に中小企業では環境に配慮したCSR調達をする際に、どの化学物質が代替材となるのかが分からず、環境負荷の低い化学物質の調達が進んでいない。
- ✓ 化学物質に関連する業界は、比較的ESGへの関心が高く、考慮することは必要不可欠になっている。そのため、各企業では環境に配慮したCSR調達を進めており、なるべく環境負荷の低い化学物質（代替材）を利用しようと試みている。
- ✓ 環境負荷の低い化学物質は、用途等によって判断基準が変わる可能性があり、総合的に判断する必要があるため定義・特定が難しい（そのため、関連する情報を整備することにとどまる可能性がある。）。

当施策による想定効果

環境負荷の低い化学物質（代替材）に関する情報の検索性・利便性向上

- ✓ 環境負荷の低い化学物質（代替材）に関する情報を簡単に調べることを可能にする。国や公共機関が保有する有害性情報等を掛け合わせることによって、データ項目の幅が広がると考えられる。具体的には以下の効果を想定している。

民間企業のCSR調達の促進

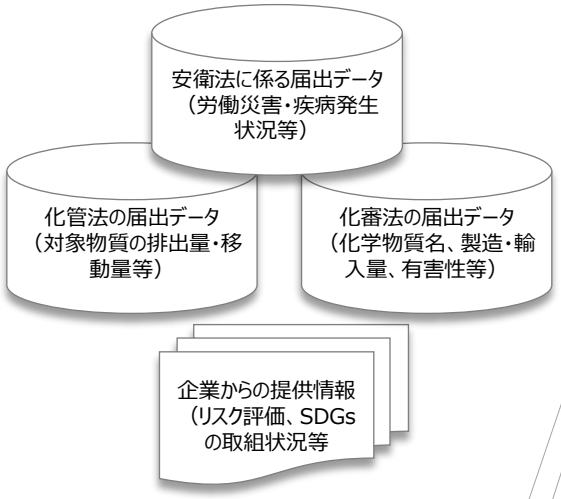
✓環境負荷の低い化学物質（代替材）を簡単に検索することができるため、各民間企業での環境に配慮した調達に係る手間が削減でき、CSR調達の促進に繋がる。

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

データ利活用の具体例	4）各種データを用いた化学物質を扱う企業の自主取組評価の実施

プラットフォームの構築

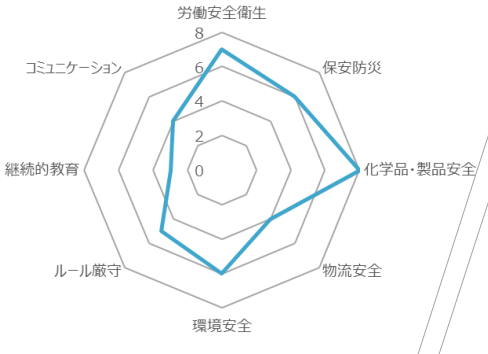
各種データの収集・整備



データの利活用

取組状況のスコアリング

企業の自主取組スコアリング → 企業の自主取組結果の公表



利活用による成果

ESG投資の指標化

環境・社会・企業統治に配慮している企業を重視・選別して行う投資の際に、自主取組のスコアリング結果を指標として活用する。

企業価値（ブランド）の向上

自主取組スコアリング結果を踏まえ、化学物質を扱う企業として一定以上の環境等への配慮が認められる場合には国が認定し、企業価値向上に繋がる。

当施策の背景

- ✓ 化学物質のベネフィット（有用性・利便性）を持続的に享受できるよう、企業が自主取組（レスポンシブルケア活動、リスク評価、ライフサイクル全体での情報提供等）を通じて化学物質のリスクを管理することが社会的に求められている。
- ✓ 上記のような自主取組を行うにはコストが掛かるため、企業にとってメリットがなければ実践が難しい。

当施策による想定効果

化学物質管理の自主取組の促進

- ✓ 企業の化学物質管理の自主取組を第三者視点で評価（可視化）・認定することで、他社と比較できる共通の指標となり、化学物質管理の自主取組の拡大・促進につながる。具体的には以下2つの効果を想定している。

①企業がESG投資の指標として活用

✓自主取組を分類ごとにスコアリング・評価するため、ESG投資の指標として活用される。

②国の認定による企業イメージ（ブランド）向上

✓自主取組が適正に評価（点数化）・認定されるため、その評価が高いものであれば企業イメージ向上に繋がる。

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

データ利活用の具体例

5）情報プラットフォームを活用したリユース・リサイクルの促進

プラットフォームの構築

情報プラットフォームへの集約

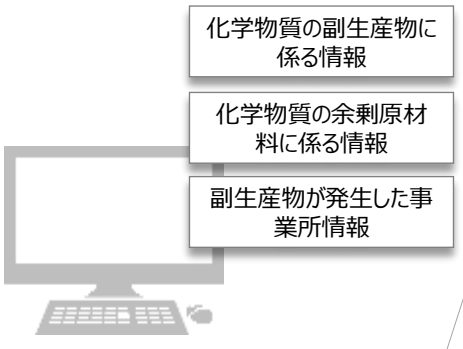
化学物質に係る情報プラットフォーム
（副生成物、余剰原材料、事業所）

製造過程で発生する副生成物や余剰原材料のデータを集約し、化学物質に係る情報プラットフォームを整備

調達 → 開発 → 製造 → 輸送 → 販売 → 廃棄

データの利活用

GUIでのデータ提供



利活用による成果

原材料の無駄とコストロスの低減

情報提供する企業は、原材料のムダとコストロスの低減につながり、提供される企業は、原材料調達時に再利用できそうな物資があれば新規で用意する場合よりもコスト削減に繋がる。

企業価値（ブランド）の向上

副生成物を利用した製造等、ESG投資や環境配慮への取り組みとして対外的なアピールになる。

当施策の背景

- ✓ 化学物質の再利用を行うためには、他の企業がどんな副生成物/余剰材料を持っていて、どのような物質を必要としているかが分からないといけないが、それらがリアルタイムなデータとしてまとまっていない。
- ✓ 余剰原材料や副生成物を提供することにより、社内のノウハウが他社に分かってしまう可能性がある。
- ✓ 化学産業において副生成物や余剰材料の廃棄に苦心している。SDGsなど社会的な動きもあり、無条件に廃棄・排出することができない。

当施策による想定効果

副生成物の再利用の促進

- ✓ 副生成物に関してよりリアルタイムな情報が各企業間で共有され、各企業間のコミュニケーションが促進され、副生成物の再利用が促進される。具体的には以下2つの効果を想定している。

①原材料のムダとコストロスの低減

✓情報提供する企業は、原材料のムダとコストロスの低減につながり、提供される企業は、原材料調達時に再利用できそうな物資があれば新規で用意する場合よりもコスト削減に繋がる。

②ESG投資、企業イメージ（ブランド）の向上

✓副生成物を利用した製造等、ESG投資や環境配慮への取り組みとして対外的なアピールを促進する。

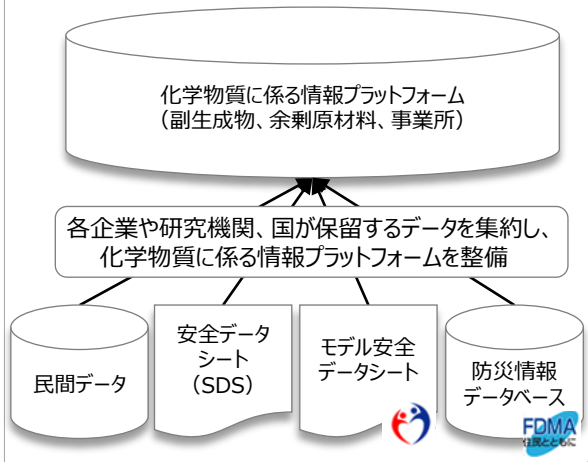
Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

データ利活用の具体例

6）情報プラットフォームを活用した安全管理・事故時の対応の効率化

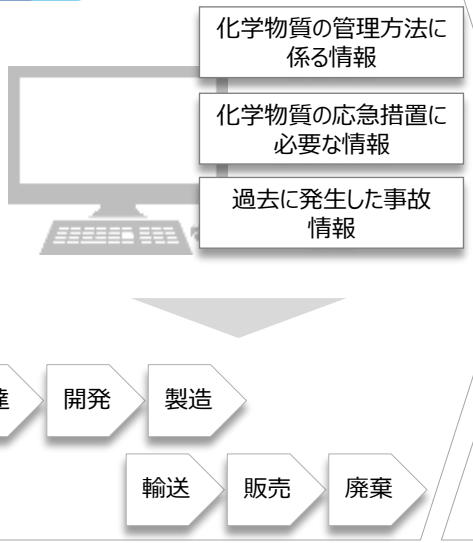
プラットフォームの構築

情報プラットフォームへの集約



データの利活用

GUIでのデータ提供



利活用による成果

管理方法や応急措置の知見を利活用

製造過程や輸送過程での、化学物質の適切な管理方法や応急措置などを簡単に検索することができ、管理体制の整備などに役立てる。

事故等発生時の過去知見活用

工場等で事故が起こった際に、過去の類似事例を調べることが可能とし、適切な初動対応や原因究明に繋げる。

当施策の背景

- ✓ 過去の事故データが一か所に分かりやすくまとめられている情報プラットフォームは存在しておらず、過去の事故事例を生かしきれていない。
- ✓ 化学産業において、物質環境や装置設備、組織など様々な要因から事故が発生する可能性がある。
- ✓ 工場での事故においては、初期の対応が重要でありそれを誤ると、重大事故に繋がる。

当施策による想定効果

労働者の安全確保

- ✓ 適切な管理方法や応急措置を簡単に調べることができ、労働者の安全確保に繋がる。

事故発生時の初動対応及び原因究明の効率化

- ✓ 過去の類似事故事例を生かして、事故発生時の適切な初動対応に繋げたり、原因究明に役立てたりすることができる。

企業における安全管理体制の強化

- ✓ 製造過程や輸送過程での、化学物質の適切な管理方法や応急措置などを簡単に検索することができ、管理体制の整備などに役立てることができる。
- ✓ また、過去の経験者が不足している場合でも、過去の事故データや化学物質管理データが参照できることで、知見の充足に繋がる。

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

データ利活用の具体例	7）リスク評価データの活用による、化学物質管理・リスク評価の効率化

プラットフォームの構築

情報プラットフォームへの集約

化学物質に係る情報プラットフォーム
（リスク評価結果、各国規制情報）

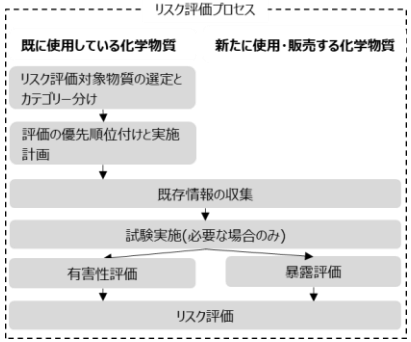
各企業や研究機関、公的機関が持っているリスク評価に関連する情報（化学物質の安全性や有害性情報、各国の規制情報等）を集約し、情報プラットフォームを整備

- 安全性や有害性情報
- 各国の規制情報
- NITE-CHRIP

データの利活用

GUIでのデータ提供

- リスク評価結果に係る情報
- 各国規制に係る情報



利活用による成果

安全性や有害性に係る情報を検索し、リスク評価プロセスで活用

化学物質の安全性や有害性などを一つの情報プラットフォーム上で調査できるようにし、リスク評価プロセスにおいて効率的な既存情報の収集を実現する。

その結果、リスク評価プロセスで活用する情報の信頼性が上がり、また企業によるばらつきが少ない一元的なリスク評価が可能となる。

当施策の背景

- ✓ 近年、化学物質管理の重要性が増し、各国によって様々な化学物質に関する法規則があり、各企業はそれらの規則に準拠し化学物質管理や調達・製造をしている。
- ✓ 民間企業では、自主的に化学物質のリスク評価を実施している場合がある。リスク評価の際には、製造量や排出量、各国の規制動向などにより、化学物質のリスク評価の優先順位付けを実施している。
- ✓ 情報が点在しているため、リスク評価では情報の収集・精査に時間がかかる。また化学物質規制は各国によって異なり定期的に更新されるため、随時調査が必要となる。特に中小企業にとっては、法律に申請する必要があるかどうか判断することが難しい。

当施策による想定効果

化学物質管理に関する情報の検索性・利便性向上

- ✓ 化学物質の安全性や有害性情報、各国の規制情報等を簡単に調べることができるようになる。

AIを活用して化学物質管理をサポートする製品・サービスの開発促進

- ✓ 新しい化学物質を開発する際に、国内外の法律に照らして申請の要否を判定する製品やサービスや化学物質のリスク評価の優先順位を判断する製品やサービスの開発に寄与する。

①化学物質管理の効率化

✓情報の利便性向上とAIを活用した製品・サービスにより、法規制への対応などの各企業における化学物質管理業務の効率化に繋げる。

②自主的なリスク評価の促進

✓リスク評価にかかる負担の軽減により、各企業の自主的なリスク評価の促進を図る。

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

データ利活用の具体例	8）医療データとの掛け合わせによる医療診断の効率化

プラットフォームの構築

情報プラットフォームへの集約

化学物質に係る情報プラットフォーム（試験・分析結果、構造式、質量分析などの測定結果、有害性等）

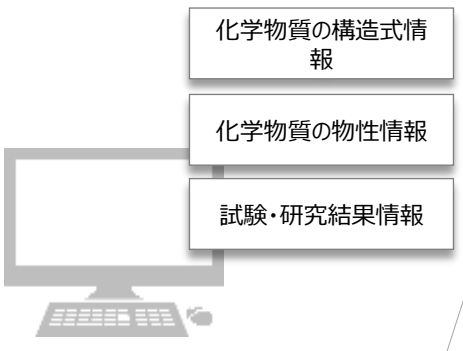
各企業や研究機関が保有する化学物質の試験・分析データを集約し、化学物質に係る情報プラットフォームを整備

化学物質の試験データ

化学物質の分析データ

データの利活用

GUIでのデータ提供



利活用による成果

医療機関でのデータ活用

医療機関で血液の質量分析をした際に測定値と情報プラットフォームのデータを掛け合わせることで、症状の原因特定や対応の迅速化に繋げる。

研究開発でのデータ活用

新規物質開発において、例えば質量分析から得られた測定結果を簡単に参照できることで、実験の考察や分析、ひいては研究期間の短縮に繋げる。

当施策の背景

- ✓ 各企業で化学物質の試験データを蓄積している。
- ✓ 化学物質は人の健康に影響を与える場合があり、医療機関において患者からどのような物質が検出されたか等をすぐに把握し、診断に役立てる必要がある。
- ✓ 化学産業において、研究開発の際に様々な分析を行うが、測定結果の考察などは属人的になっている。

当施策による想定効果

国民の安全に資する化学物質の試験・分析データのオープン化

- ✓ 医療機関での検査結果と化学物質の分析データを掛け合わせて蓄積・公開することで、化学物質の検出や症状の原因特定に役立て、国民の安全確保に寄与する。具体的には以下2つの効果を想定している。

①症状の原因特定や処置の効率化

✓医療機関で血液の質量分析をした際に測定値と情報プラットフォームのデータを参照できることで、症状の原因特定や対応の迅速化に繋がる。

②研究開発の効率化

✓新規物質開発において、例えば質量分析から得られた測定結果を、情報プラットフォーム上のデータと簡単に参照できることで、実験の考察や分析の時間を短縮することができ、研究期間の短縮に繋がる。

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

5. データ利活用に至るまでの実行計画

5.1. 今後の目指すべき姿

5.2. 実現に向けた課題/施策

■ 国や公共機関、民間が保有するデータ、非定型情報等を集約・整備し、またそれら情報を有効な形式での提供を実現する情報プラットフォームを構築を目指す。

❶既存データの特定・選定

国や公共機関が蓄積するデータ
- 化審法データベース（J-CHECK）
- NITE-CHRIP
- 安衛法に係る届出データ
- 化審法の届出データ

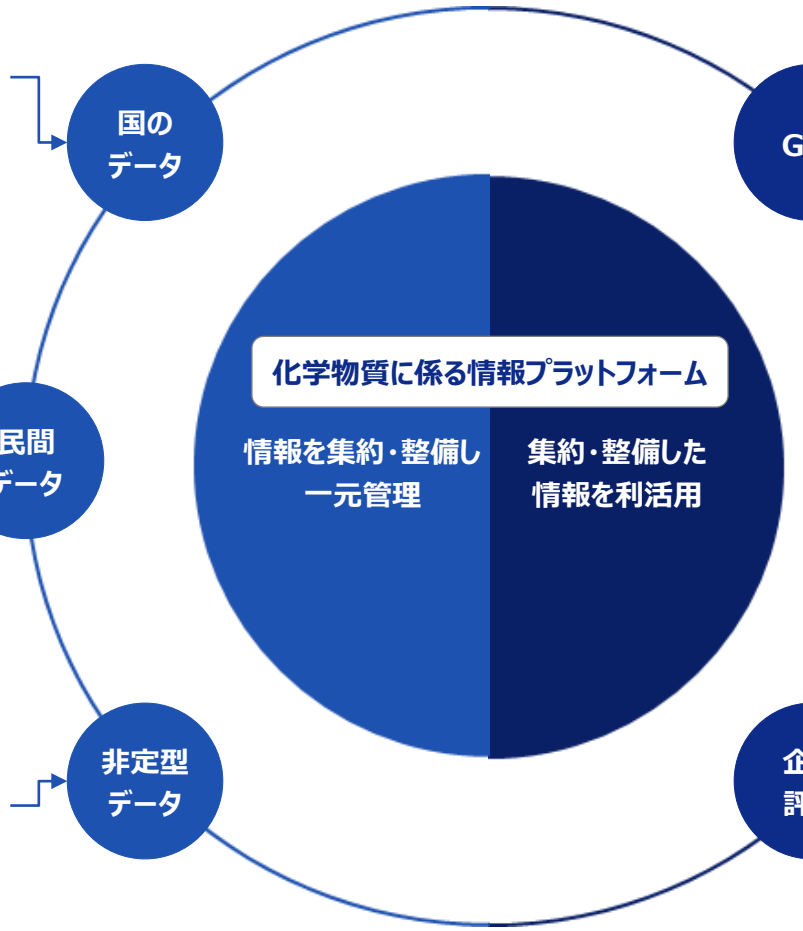
❷民間データの取得・保有

民間が蓄積するデータ
- 副生産物や余剰原材料
- 試験・分析結果

化学物質以外の蓄積データ
- 医療データ
- 安全管理・事故情報
- 企業情報

❸非定型データの定型化

国や民間が保有する非定型データ
- 新規化学物質審査シート
- 安全データシート(SDS)
- 厚生労働省のモデル安全データシート
- リスク評価結果
- SDGsの取組状況



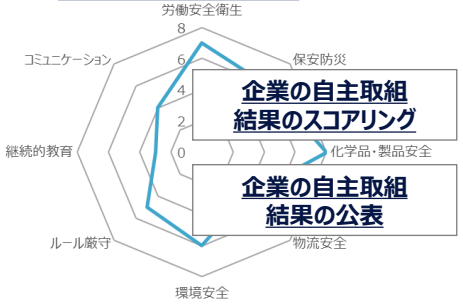
❹データのオンライン提供

- 化学物質情報の検索・閲覧
- 化学物質管理情報の検索・閲覧
- 統計情報等のダウンロード

❺データの二次利用促進

- 化学物質の物性情報・構造式情報
- 化学物質の安全管理・事故情報
- 化学物質の所有企業とのマッチング

❻企業評価・認定



- 企業の自主取組結果のスコアリング
- 企業の自主取組結果の公表

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

5. データ利活用に至るまでの実行計画

5.1. 今後の目指すべき姿

5.2. 実現に向けた課題/施策

■ 前述の今後の目指すべき姿の実現に向け、解決すべき課題とその施策を以下に示す。

目指すべき姿の実現に向けた課題・施策

No	分類	課題	施策
1	①既存データの特定・選定	化学物質の整理方法が法律によって異なっているため、一意の情報が存在していない。 （特に日本では英語表記と日本語表記が混在しているため、データベース化した際の同定が難しい）	構造式を一意の情報（主キー）としてデータベースを整備をすることで、その他のデータベースとの連携を容易にする
2		化学物質管理データベースを構築するうえで、データを標準化（用語の統一）・複数名称の存在を考慮する必要がある。 化審法で蓄積しているデータのなかには複数名称の情報が含まれていないものがある。	化学物質関連のデータベースを整備する際は、複数名称に対応する形でデータを整備する
3		化審法で蓄積されているデータにおいて、化学物質によっては、構造式や物化性情報が含まれていない場合がある（特に化審法制定時における既存物質）。	情報プラットフォームに集約する際、データの欠損や欠落を保管する仕組みを構築する
4		化審法で蓄積されているデータにおいて、製造・輸入量はリアルタイムな情報ではなく、年度ごとの蓄積データである。（製造量や輸入量以外の情報は、時間によって変化する情報ではないため最新性はある。） 試験データによっては20、30年前のデータである場合がある。	情報プラットフォームを構築する際、データ移行対象とする範囲を検討する
5		化管法で蓄積されているデータにおいて、企業からの届出に基づいた情報であり、審査等が実施された情報ではない。	• 情報プラットフォームに集約する際、データの欠損や欠落を保管する仕組みを構築する • 情報プラットフォームを構築する際、データ移行対象とする範囲を検討する

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

■ 前頁の続き

目指すべき姿の実現に向けた課題・施策

No	分類	課題	施策
6	①既存データの特定・選定	毒性情報の検索利便性を向上するため、毒性情報を集約する必要がある	毒性情報を情報プラットフォームに集約する
7		データを集約するだけでなく、適切な鮮度を保つ運用が必要である	定期的に集約しているデータの更新を行う仕組みを構築する
8		事業者が求める一次情報を利用するためには、国が提供する各個別サイトをそれぞれ確認する必要がある	申し送り事項とする 左記各個別サイトの集約方法の調査や他府省間との検討会等のプロセスを経る必要があるため、引き続き検討する
9		国や公共機関が保有する各化学物質関連サイトの情報を1つのプラットフォームに集約する必要がある	申し送り事項とする 左記プラットフォーム1つに集約するか否かは、データ利活用に関する更なるニーズ調査や他府省間との検討会等のプロセスを経る必要があるため、引き続き検討する
10		現状の化学物質管理法令のうち、化学物質に係る情報伝達を求める法令・制度、ビジネス慣習上で求められている情報を調査し、求められている情報、伝達手段及び情報伝達における事業者の課題を整理・分析する必要がある （特にSDSは化学物質管理の知見を有していない者でもわかりやすい情報としてまとめられているため、化学物質管理における自主管理の向上により役立てられる可能性がある）	データ利活用に関する更なるニーズ調査や化学物質に係る情報伝達を求める法令・制度等に係る調査を実施する

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

■ 前頁の続き

目指すべき姿の実現に向けた課題・施策

No	分類	課題	施策
11	②民間データの取得・保有	マテリアルズ・インフォマティクスによって候補物質を特定したとしても、実際にその化学物質を生産していくことが難しい。生産についての情報は、各企業で個別に保持しているケースが多く企業間でデータが共有されないため、なかなか情報が入手できずに先に進まない。（試作段階・商業的に長期的な商品化のラインを作る段階の両方で課題となっている。）	何と何を反応させるとどのような性質を持つか、といった製法と物理化学性状データの紐づけを行うPI（プロセスインフォマティクス）を実現する
12		現状のデータベース（PubChem等）では構造式と物理化学性状の紐づきにとどまっている	何と何を反応させるとどのような性質を持つか、といった製法と物価性状データの紐づけを行うPI（プロセスインフォマティクス）を実現する
13		論文・特許によって単位の記載が異なるため、利用する技術者側で単位を統一する必要がある	情報プラットフォームにデータを集約する際に、単位の統一を行、また情報を提供する際には単位を選択できるようにする
14		過去の事故データや化学物質管理データが一元的に集約する必要がある	過去の事故データや化学物質管理データを情報プラットフォームに集約する
15		労働安全衛生法のデータベースや労働安全衛生法の既存物質の情報も集約する必要がある	労働安全衛生法のデータベースや労働安全衛生法の既存物質の情報を集約する
16		事業者やサービスごとにデータ形式が異なるため、データの集約・連携が難しい	ETLツールを活用し、効率的に多様な形式のデータを情報プラットフォームに集約する

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

■ 前頁の続き

目指すべき姿の実現に向けた課題・施策

No	分類	課題	施策
17	②民間データの取得・保有	商業的に生産していく際の各企業が有するデータを活用したい	各企業が保有する生産に係るデータを情報プラットフォームに集約する
18		各国の規制情報を集約し、提供する必要がある	申し送り事項とする 規制情報の各国サイトからの集約方法だけではなく、データ変換、翻訳等について検討する必要があるため、必要な検討項目の抽出から開始する
19		化学物質の構造式等の構造情報を集約し、検索できるような仕組みがほしい	化学物質の構造情報も情報プラットフォームに集約する
20		構造式検索や物質の構造と活性の関係、骨格・側鎖のマトリクスによる構造式等の情報を集約し、検索できるようにする必要がある	構造式検索や物質の構造と活性の関係、骨格・側鎖のマトリクスによる構造式等の情報を情報プラットフォームに集約する
21		民間のデータ提供だけではなく、サービスを提供者がICTベンダー等の民間事業者であることを鑑み、その民間事業者の巻き込み方法を考慮する必要がある	データ提供者のインセンティブ等の策定・整備を目的に、検討する 検討に際しては、アンケートやヒアリングだけではなく、アイデアソン、ワークショップ等の開催も検討する
22		試験データの所有権が事業者にあるため、試験データ全般的にCBIの考慮が必要（なお、新規物質については化学物質名称の公示の際に、新規審査データを公表する）である	化学物質の名称や所有企業等をマスキングをして公開するという「データの匿名化」の実施と、データの閲覧をできる企業を絞り、認証を行うことで海外等へのノウハウの流出を防ぐデータ提供者・利用者の認証の実施を検討する

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

■ 前頁の続き

目指すべき姿の実現に向けた課題・施策

No	分類	課題	施策
23	③非定型データの定型化	データは紙媒体、PDF（紙媒体をスキャンしたもの）のほか、一部は電子届出システムで受付されている。電子状態についてもxmlファイルの他にwordファイルも存在しているため、データ移行の際にデータの入力作業は発生する。構造式情報がコンピュータで読み取れるような形で蓄積されていない（MOLファイルやSDFの形で蓄積されていない）	AI-OCR技術等を用いて、アナログなデータを情報プラットフォームに集約する
24		OCRでデータ抽出を実施する場合、文章・表を抽出することは可能だが、図の抽出は難しい	IT技術等で自動的にデータを集約できない場合は、アウトソーシングを行うなど、人間によるデータ入力を行う
25		化審法で蓄積されているデータにおいて、構造化された形でデータが蓄積されていない（※J-CHECKでは一部情報がすぐに利用・検索できるようにデータが蓄積されている）	情報プラットフォームに集約する際、データの構造化を行ったうえで保管する仕組みを構築する
26		新規化合物生成の実現可能性に関する情報があると良いが、実現は非常に難しい	生成の実現可能性に関する情報を集約するうえで障害となっている事項の特定等の改善策を検討する
27		化学物質に関わる学術的な情報（論文等）を集約し、検索できるような仕組みが必要である	• 学術的な情報を情報プラットフォームに集約する（学術的な情報だけではなく、より簡便に収集できる申請情報等も含めて全体的にデータベースに登録する） • 論文データについては、タイトル、作者等だけではなく、文章の内容（最小単位は単語）でも検索できるように構造化データとして登録する ※論文データを構造化データとして登録するためにはAIの活用が必要なため、ソリューション選定やPoC等の検証が必要で、対応までに時間がかかる可能性が高い

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

■ 前頁の続き

目指すべき姿の実現に向けた課題・施策

No	分類	課題	施策
28	④データのオンライン提供	化審法・化管法によって蓄積されたデータをオープン化するにあたっては新しい規定が必要になる	オープンデータ化にあたって必要な制度の見直し、規定の策定を行う
29		民間企業の持つ廃棄物情報や研究開発系の情報の収集については、それらの情報から製造単価やノウハウが推測可能となってしまう点等企業秘密との兼ね合いが難しい	情報プラットフォームにデータを集約する際に、単に収集するだけでなく、データの匿名化等の加工を施す
30		構築した情報プラットフォームに誰でもアクセス可能である場合、海外への技術流出の危険性が考えられる	機密性の高い情報を提供いただいた場合には、適切なアクセス権を設定し、オープンというよりはプライベートに利用する環境を構築する必要
31	⑤データの二次利用促進	中小企業等にも幅広く活用してもらうことを念頭に、API提供の意義・方策についても検討する必要がある	既存の化学物質データベースに対するニーズや連携可能性について調査し、更なるニーズ・課題収集を実施する
32	⑥企業評価・認定	自主的なリスク評価によって懸念される業務的な負荷やコスト増加に見合った便益の享受ができて、企業にとってメリットとなるような仕組みが必要である（評価に必要な情報の公表を簡便にできることにも配慮が必要）	申し送り事項とする 左記の企業に自主的なリスク評価を促す手法等の検討は、No.33の施策で実施するデータ利活用のニーズの深耕の結果を踏まえて検討する
33	その他	本事業で見えてきた利活用案（化学物質管理、研究開発、資源循環、ヘルスケア）において、化学物質管理法令のデータを利活用できないか、更なる検討が必要である	データ利活用のニーズの深耕を目的に検討・調査を行う。検討に際しては、ハッカソンやブレーンストーミング等の形式を用いて、アイデアを幅広く募る
34		プラットフォーム事業のマネタイズ、運用体制、法対応、周知広報等の実行計画が必要である	申し送り事項とする 左記のプラットフォーム事業のマネタイズ等の検討は、No.33の施策で実施するデータ利活用のニーズの深耕の結果を踏まえて検討する

Confidential
© 2021 ABeam Consulting Ltd.

Real Partner®
ABeam Consulting®