

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関  
国際事務局

(43) 国際公開日  
2024年10月3日(03.10.2024)



(10) 国際公開番号

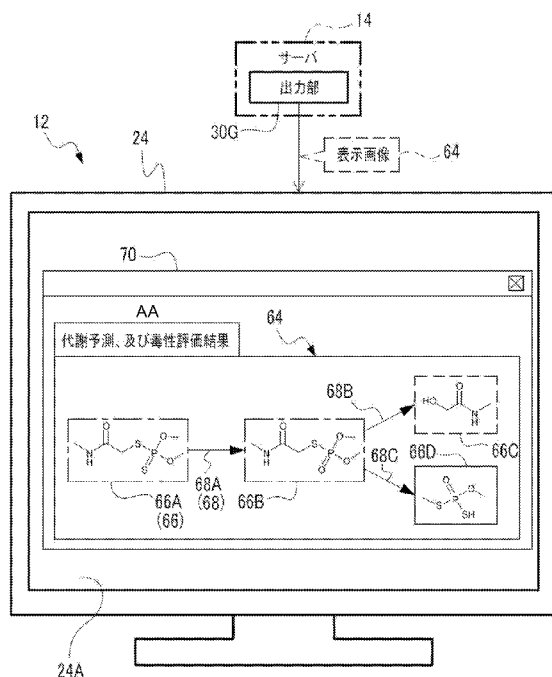
WO 2024/202431 A1

- (51) 国際特許分類:  
*G16C 20/30* (2019.01) *G06F 16/9038* (2019.01)
- (21) 国際出願番号: PCT/JP2024/001436
- (22) 国際出願日: 2024年1月19日(19.01.2024)
- (25) 国際出願の言語: 日本語
- (26) 国際公開の言語: 日本語
- (30) 優先権データ:  
特願 2023-059422 2023年3月31日(31.03.2023) JP
- (71) 出願人: 富士フイルム株式会社 (FUJIFILM CORPORATION) [JP/JP]; 〒1068620 東京都港区西麻布2丁目26番30号 Tokyo (JP).
- (72) 発明者: 舘下 正和 (TATESHITA, Masakazu); 〒2588577 神奈川県足柄上郡開成町牛島577番地 富士フイルム株式会社内 Kanagawa (JP). 足田 泰士 (HIKIDA, Yasushi); 〒2588577 神奈川県足柄上郡開成町牛島577番地 富士フイルム株式会社内 Kanagawa (JP). 村上 諒一 (MURAKAMI, Ryoichi); 〒2588577 神奈川県足柄上郡開成町牛島577番地 富士フイルム株式会社内 Kanagawa (JP). 杉山 聡 (SUGIYAMA, Satoshi); 〒2588577 神奈川県足柄上郡開成町牛島577番地 富士フイルム株式会社内 Kanagawa (JP).

(54) Title: INFORMATION PROCESSING DEVICE, INFORMATION PROCESSING METHOD, AND PROGRAM

(54) 発明の名称: 情報処理装置、情報処理方法、及びプログラム

[図7]



14... SERVER  
30G... OUTPUT UNIT  
64... DISPLAY IMAGE  
AA... METABOLISM PREDICTION, AND TOXICITY EVALUATION RESULT

(57) Abstract: Provided is an information processing device comprising a processor. The processor executes control for generating a display image and outputting the generated display image, said display image showing the results of predicting a metabolic reaction in the body of a test substance and a metabolic product generated by the metabolic reaction, and also showing the results of evaluating the toxicity of at least one compound in a group of compounds comprising the test substance and the metabolic product. The display image shows the results of evaluating a compound in a manner



WO 2024/202431 A1

(74) 代理人: 弁理士法人太陽国際特許事務所(TAIYO, NAKAJIMA & KATO); 〒1600022 東京都新宿区新宿4丁目3番17号 Tokyo (JP).

(81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CV, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IQ, IR, IS, IT, JM, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, MG, MK, MN, MU, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.

(84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, CV, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SC, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, ME, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

一 国際調査報告 (条約第21条(3))

identifiable in a metabolic reaction process in which metabolic reactions and metabolic products occurring in a cascade with the test substance as a starting point are systematically represented. The metabolic products systematically represented in the display image include an eliminated compound that is eliminated during the metabolic reaction process.

(57) 要約: プロセッサを備え、プロセッサは、被験物質の体内における代謝反応と代謝反応で生成される代謝産物との予測結果、及び被験物質と代謝産物とで構成される化合物群のうちの少なくとも1つの化合物の毒性の評価結果を示す表示画像であって、被験物質を起点として連鎖的に生じる代謝反応と代謝産物とを系統的に示した代謝反応過程において、化合物の評価結果を識別可能に示す表示画像を生成し、生成された表示画像を出力する制御を実行し、表示画像において系統的に示される代謝産物には、代謝反応過程において消失する消失化合物が含まれる情報処理装置。

## 明 細 書

発明の名称： 情報処理装置、情報処理方法、及びプログラム

### 技術分野

[0001] 本開示の技術は、情報処理装置、情報処理方法、及びプログラムに関する。

### 背景技術

[0002] 近年、化学物質を扱う分野ではコンピュータによるインシリコ手法を用いた毒性評価が行われるようになってきている。化学物質の毒性評価は、試験対象となる被験物質だけでなく、生体に対する毒性を評価するために、代謝産物の毒性も評価することが求められる。

[0003] 国際公開WO2021/145434には、目的とする薬剤又はその等価物質の適応症の予測方法であって、目的とする薬剤又はその等価物質を被験物質として投与した非ヒト動物から採取された、1又は複数の器官におけるバイオマーカーの挙動を示すデータの群から推定された推定有害事象関連情報を被験データとして予測用人工知能モデルに入力し、目的とする薬剤又はその等価物質の適応症を予測すること、を含む、予測方法が記載されている。

[0004] 国際公開WO2011/055820には、複数種類の代謝物及び／又は代謝酵素の各々について、異なる条件で得られた複数の測定値データを取得する測定値データ取得手段と、生体内の代謝パスウェイマップを表すデータを取得するパスウェイマップデータ取得手段と、測定値データ取得手段が取得した測定値データに基づいて、代謝物及び／又は代謝酵素と、代謝パスウェイ各々との関連性の強度を算出する関連性強度算出手段と、表示手段と、表示手段への表示内容を決定する表示内容決定手段とを備える支援装置が記載されている。支援装置において、表示内容決定手段は、表示手段に、関連性の強度が識別可能であるように、二種以上の代謝パスウェイを表す内容を表示させることが可能であり、さらに、表示手段に二種以上の代謝パスウェイ

イを表す内容が表示された場合に、ユーザからの、いずれかの代謝パスウェイの選択入力を受け付けるパスウェイ選択入力受付手段を備え、表示内容決定手段は、パスウェイ選択入力受付手段が受け付けた選択入力により選択された代謝パスウェイについて、表示手段に代謝パスウェイマップを表示させるとともに、当該代謝パスウェイマップ上に存在する代謝物及び／又は代謝酵素について、測定値データが示す測定値の増減が識別可能であるように、表示手段への表示内容を決定することを特徴とする。

[0005] 特開2004-93234号公報には、毒薬物の代謝又は配列に関連する遺伝子パスウェイ情報に基づいた連立微分方程式と、連立微分方程式の反応速度係数と、反応速度係数に応じた線形安定性及びヤコビ安定性の関係と、反応速度係数の値における毒薬物の毒性有無の判定を記憶する記憶手段と、連立微分方程式に、遺伝子発現分布データを入力する入力手段と、遺伝子発現分布データを連立微分方程式に入力することにより、反応速度係数を求め、毒薬物の毒性有無の判定を表示する表示手段とを有することを特徴とする毒性有無判定システムが記載されている。

## 発明の概要

### 発明が解決しようとする課題

[0006] しかしながら、国際公開WO2021/145434、国際公開WO2021/055820、及び特開2004-93234号公報に記載の技術では、代謝反応の予測結果及び毒性の評価結果の表示の仕方について考慮されておらず、ユーザに予測結果及び評価結果を効率的に把握させ、ユーザによる化合物の毒性評価を支援することについて改善の余地があった。

[0007] 本開示の技術に係る一つの実施形態は、代謝反応の予測結果及び代謝反応に関与する化合物の毒性の評価結果を効率的に把握させ、ユーザによる化合物の毒性評価を支援することが可能な情報処理装置、情報処理方法、及びプログラムを提供する。

### 課題を解決するための手段

[0008] 本開示の技術に係る第1の態様は、プロセッサを備え、プロセッサは、被

験物質の体内における代謝反応と代謝反応で生成される代謝産物との予測結果、及び被験物質と代謝産物とで構成される化合物群のうちの少なくとも1つの化合物の毒性の評価結果を示す表示画像であって、被験物質を起点として連鎖的に生じる代謝反応と代謝産物とを系統的に示した代謝反応過程において、化合物の評価結果を識別可能に示す表示画像を生成し、生成された表示画像を出力する制御を実行し、表示画像において系統的に示される代謝産物には、代謝反応過程において消失する消失化合物が含まれる情報処理装置である。

[0009] 本開示の技術に係る第2の態様は、表示画像において、消失化合物の評価結果が他の代謝産物とは識別可能に表示される第1の態様に係る情報処理装置である。

[0010] 本開示の技術に係る第3の態様は、表示画像において示される代謝反応過程は、被験物質及び代謝産物のそれぞれの化合物を表す化合物データと、代謝反応の前後の化合物データをつなぐ結合線とで示される樹形図である第1の態様に係る情報処理装置である。

[0011] 本開示の技術に係る第4の態様は、結合線には、代謝反応の名称が対応付けて表示される第3の態様に係る情報処理装置である。

[0012] 本開示の技術に係る第5の態様は、結合線が選択された場合に、代謝反応の原因となった化学構造であって反応前の化合物に含まれる部分構造が表示される第3の態様に係る情報処理装置である。

[0013] 本開示の技術に係る第6の態様は、代謝反応過程において、異なる複数の代謝産物を起点にした部分的な代謝反応過程が共通している場合は、部分的な代謝反応過程が1つにまとめて表示される第1の態様に係る情報処理装置である。

[0014] 本開示の技術に係る第7の態様は、毒性の評価の対象となり、かつ評価結果を有する化合物が、表示画像の代謝反応過程内において選択された場合に、毒性の評価に用いられ、少なくとも1つの判定ステップを有し、かつ判定ステップの判定結果に応じて経路が分岐する毒性判定手順を示す判定フロー

であって、複数の経路のうち、化合物の評価結果に至る経路が、他の経路とは識別可能な態様で示された判定フローが表示される第1の態様に係る情報処理装置である。

[0015] 本開示の技術に係る第8の態様は、表示画像において、代謝反応過程の表示範囲が調整可能とされている第1の態様に係る情報処理装置である。

[0016] 本開示の技術に係る第9の態様は、被験物質の体内における代謝反応と代謝反応で生成される代謝産物との予測結果、及び被験物質と代謝産物とで構成される化合物群のうちの少なくとも1つの化合物の毒性の評価結果を示す表示画像であって、被験物質を起点として連鎖的に生じる代謝反応と代謝産物とを系統的に示した代謝反応過程において、化合物の評価結果を識別可能に示す表示画像を生成すること、及び、生成された表示画像を出力する制御を実行すること、を含み、表示画像において系統的に示される代謝産物には、代謝反応過程において消失する消失化合物が含まれる情報処理方法である。

[0017] 本開示の技術に係る第10の態様は、コンピュータに、被験物質の体内における代謝反応と代謝反応で生成される代謝産物との予測結果、及び被験物質と代謝産物とで構成される化合物群のうちの少なくとも1つの化合物の毒性の評価結果を示す表示画像であって、被験物質を起点として連鎖的に生じる代謝反応と代謝産物とを系統的に示した代謝反応過程において、化合物の評価結果を識別可能に示す表示画像を生成すること、及び、生成された表示画像を出力する制御を実行すること、を含む処理であって、表示画像において系統的に示される代謝産物には、代謝反応過程において消失する消失化合物が含まれる処理を実行させるプログラムである。

## 発明の効果

[0018] 本開示の技術は、代謝反応の予測結果及び代謝反応に関与する化合物の毒性の評価結果を効率的に把握させ、ユーザによる化合物の毒性評価を支援することが可能な情報処理装置、情報処理方法、及びプログラムを提供する。

## 図面の簡単な説明

- [0019] [図1]情報処理システムの概略構成例を示す概念図である。
- [図2]サーバの電気系のハードウェア構成の一例を示すブロック図である。
- [図3]情報処理システムの使用態様の一例を示す概念図である。
- [図4]サーバのプロセッサの要部機能の一例を示す機能ブロック図である。
- [図5]毒性評価部の処理内容の一例を示す概念図である。
- [図6]サーバのプロセッサの要部機能の一例を示す機能ブロック図である。
- [図7]表示画像が表示装置に表示される態様の一例を示す概念図である。
- [図8]サーバ制御処理の流れの一例を示すフローチャートである。
- [図9]サーバのプロセッサの要部機能の一例を示す機能ブロック図である。
- [図10]表示画像が表示装置に表示される態様の一例を示す概念図である。
- [図11]サーバのプロセッサの要部機能の一例を示す機能ブロック図である。
- [図12]表示画像が表示装置に表示される態様の一例を示す概念図である。
- [図13]サーバのプロセッサの要部機能の一例を示す機能ブロック図である。
- [図14]表示画像が表示装置に表示される態様の一例を示す概念図である。
- [図15]サーバのプロセッサの要部機能の一例を示す機能ブロック図である。
- [図16]表示画像が表示装置に表示される態様の一例を示す概念図である。
- [図17]表示画像が表示装置に表示される態様の一例を示す概念図である。
- [図18]クライアント端末の電気系のハードウェア構成の一例を示すブロック図である。
- [図19]クライアント端末のプロセッサの要部機能の一例を示す機能ブロック図である。
- [図20]クライアント端末のプロセッサの要部機能の一例を示す機能ブロック図である。

### 発明を実施するための形態

- [0020] 添付図面に従って本開示の技術に係る情報処理装置、情報処理方法、及びプログラムの実施形態の一例について説明する。
- [0021] [第1実施形態]
- 一例として図1に示すように、情報処理システム10は、クライアント端

末12と、サーバ14とを備えている。情報処理システム10において、クライアント端末12とサーバ14とは、ネットワーク16を介して通信可能に接続されている。

[0022] 情報処理システム10は、例えば、化学物質に関する反応（例えば、体内における代謝反応）の予測及び／又は化学物質の特性の評価（例えば、人体に対する毒性の有無の評価）に用いられる。ユーザ18（例えば、研究者）は、情報処理システム10を用いることにより、コンピュータによるシミュレーションで実験結果の予測及び評価（すなわち、インシリコ手法による評価）を行うことができる。例えば、新規に開発された又は開発中の化学物質について、実際の化学物質を用いた毒性評価試験（すなわち、インビトロ又はインビボ毒性評価試験）を行うことなく、毒性の評価結果を得ることが実現される。

[0023] クライアント端末12は、ユーザ18によって使用される端末である。サーバ14は、ネットワーク16を介してクライアント端末12からの処理要求を受け、要求に応じたサービスを、ネットワーク16を介して、要求元のクライアント端末12に提供する。例えば、サーバ14は、処理要求として、化学物質の反応予測及び特性評価に関する処理の実行を受け付けた場合に、クライアント端末12に対して予測結果及び評価結果を送信する。本実施形態において、サーバ14は、本開示の技術に係る「情報処理装置」の一例である。

[0024] 例えば、サーバ14は、メインフレームによって実現されるが、これは、あくまでも一例に過ぎず、例えば、サーバは、クラウドコンピューティングによって実現されてもよいし、フォグコンピューティング、エッジコンピューティング、又はグリッドコンピューティング等のネットワークコンピューティングによって実現されてもよい。ここでは、クライアント端末12の外部に設けられるデバイスの一例として、サーバ14を挙げているが、これは、あくまでも一例に過ぎず、サーバ14に代えて、少なくとも1台のパーソナル・コンピュータ等であってもよい。

- [0025] ネットワーク 16 は、例えば、WAN (Wide Area Network) または LAN (Local Area Network) の少なくとも一方で構成されている。さらに、クライアント端末 12 とネットワーク 16 との接続方式、及び、サーバ 14 とネットワーク 16 との接続方式は、それぞれ無線通信方式でも有線通信方式でもよい。ネットワーク 16 は、クライアント端末 12 とサーバ 14 との間で通信を確立し、クライアント端末 12 とサーバ 14 との間の各種の情報の送受信を行う。
- [0026] クライアント端末 12 には、受付装置 20 が接続されている。受付装置 20 は、ユーザ 18 からの指示を受け付ける。受付装置 20 は、キーボード 21 及びマウス 22 等を有している。図 1 に示すキーボード 21 及びマウス 22 は、あくまでも一例に過ぎない。受付装置 20 として、キーボード 21 又はマウス 22 のいずれか一方のみを備えても良い。また、受付装置 20 として、例えば、キーボード 21 及び／又はマウス 22 に代えて、近接入力を受け付ける近接入力装置、音声入力を受け付ける音声入力装置、及び、ジェスチャー入力を受け付けるジェスチャー入力装置のうちの少なくとも 1 つを適用してもよい。近接入力装置は、例えば、タッチパネル又はタブレット等である。
- [0027] クライアント端末 12 には、表示装置 24 が接続されている。表示装置 24 としては、例えば、EL (Electro-Luminescence) ディスプレイ又は液晶ディスプレイ等が挙げられる。表示装置 24 は、クライアント端末 12 の制御下で、各種情報 (例えば、画像及び文字等) を表示する。
- [0028] なお、ここでは、クライアント端末 12 として、パーソナル・コンピュータの例を示しているが、これはあくまでも一例にすぎない。クライアント端末 12 として、スマートフォン及びタブレット端末等のモバイル端末が用いられてもよい。また、ここでは、一台のクライアント端末 12 がネットワーク 16 を介して一台のサーバ 14 に接続されている例を挙げているが、これはあくまでも一例にすぎない。情報処理システム 10 は、複数台のクライアント端末 12 及び複数台のサーバ 14 を含んでもよいことは、もちろんであ

る。

- [0029] 一例として図2に示すように、サーバ14は、コンピュータ26、通信I/F (Interface) 28、及びバス36を備えている。コンピュータ26は、プロセッサ30、ストレージ32、及びRAM (Random Access Memory) 34を備えている。プロセッサ30、ストレージ32、RAM34、及び通信I/F 28は、バス36に接続されている。コンピュータ26は、本開示の技術に係る「コンピュータ」の一例であり、プロセッサ30は、本開示の技術に係る「プロセッサ」の一例である。
- [0030] プロセッサ30には、メモリが接続されている。メモリは、ストレージ32及びRAM34を含む。プロセッサ30は、例えば、CPU (Central Processing Unit) 及びGPU (Graphics Processing Unit) を有する。GPUは、CPUの制御下で動作し、画像に関する処理の実行を担う。
- [0031] ストレージ32は、各種プログラム及び各種パラメータ等を記憶する不揮発性の記憶装置である。ストレージ32としては、例えば、フラッシュメモリ (例えば、EEPROM (Electrically Erasable and Programmable Read Only Memory) 及びSSD (Solid State Drive) 等) 及び/又はHDD (Hard Disk Drive) が挙げられる。なお、フラッシュメモリ及びHDDは、あくまでも一例に過ぎず、フラッシュメモリ、HDD、磁気抵抗メモリ、及び強誘電体メモリのうちの少なくとも1つをストレージ32として用いてもよい。
- [0032] RAM34は、一時的に情報が記憶されるメモリであり、プロセッサ30によってワークメモリとして用いられる。RAM34としては、例えば、DRAM (Dynamic Random Access Memory) 又はSRAM (Static Random Access Memory) 等が挙げられる。
- [0033] 通信I/F 28は、ネットワーク16に接続されている。通信I/F 28は、ネットワーク16を介して外部通信装置 (例えば、クライアント端末12) との間の情報の授受を司る。例えば、通信I/F 28は、プロセッサ30からの要求に応じた情報を、ネットワーク16を介して外部通信装置に送

信する。また、通信 I / F 28 は、外部通信装置から送信された情報を受信し、受信した情報を、バス 36 を介してプロセッサ 30 に出力する。

[0034] ストレージ 32 には、予測処理プログラム 32 A が記憶されている。予測処理プログラム 32 A は、化学物質の代謝に関する予測シミュレーションを提供するプログラムである。プロセッサ 30 は、ストレージ 32 から予測処理プログラム 32 A を読み出し、読み出した予測処理プログラム 32 A を RAM 34 上で実行することにより代謝予測処理を行う。代謝予測処理は、プロセッサ 30 が、第 1 取得部 30 A、及び代謝予測部 30 B として動作することによって実現される。

[0035] また、ストレージ 32 には、評価処理プログラム 32 B が記憶されている。評価処理プログラム 32 B は、化学物質の毒性の評価シミュレーションを提供するプログラムである。プロセッサ 30 は、ストレージ 32 から評価処理プログラム 32 B を読み出し、読み出した評価処理プログラム 32 B を RAM 34 上で実行することにより毒性評価処理を行う。毒性評価処理は、プロセッサ 30 が、第 2 取得部 30 C、及び毒性評価部 30 D として動作することによって実現される。

[0036] また、ストレージ 32 には、生成処理プログラム 32 C が記憶されている。生成処理プログラム 32 C は、クライアント端末 12 に対して出力される表示画像（図 6 参照）を生成するプログラムである。プロセッサ 30 は、ストレージ 32 から生成処理プログラム 32 C を読み出し、読み出した生成処理プログラム 32 C を RAM 34 上で実行することにより画像生成処理を行う。画像生成処理は、プロセッサ 30 が、第 3 取得部 30 E、画像生成部 30 F、及び出力部 30 G として動作することによって実現される。生成処理プログラム 32 C は、本開示の技術に係る「プログラム」の一例である。

[0037] ここで、ユーザ 18 が、情報処理システム 10 を用いて、新規に開発された化学物質 A に対して、体内における代謝に関する予測（以下単に「代謝予測」とも称する）、及び人体への毒性の評価（以下単に「毒性評価」とも称する）を行う場合を考える。なお、ここで、毒性とは、ユーザ 18 が評価項

目として関心のある毒性を指し、例えば、変異原性、感作性、及び刺激性等が挙げられる。変異原性は、生物の遺伝情報（DNA（Deoxyribonucleic acid）の塩基配列又は染色体の構造もしくは数）に不可逆的な変化を引き起こす性質をいう。感作性は、化学物質に暴露することで、アレルギー性反応を引き起こす性質をいう。刺激性は、化学物質などが触覚などに刺激（例えば、痛み、又は灼熱感）を与える性質をいう。

[0038] 毒性の評価を行う場合、一例として図3に示すように、ユーザ18は、代謝予測及び毒性評価の対象となる化学物質A（以下、単に「被験物質A」とも称する）について、被験物質Aを示すデータをクライアント端末12に対して受付装置20を介して入力する。被験物質は、例えば、低分子化合物（例えば、分子量1000未満）、糖類、ペプチド、タンパク質、又は核酸等が挙げられる。被験物質Aは、本開示の技術に係る「被験物質」の一例である。

[0039] 図3に示す例では、表示装置24の画面に被験物質を選択する画面が表示されており、選択画面においてユーザ18が選択操作を行うことにより、例えば、被験物質Aが選択される。選択画面には、例えば、被験物質Aの化学構造を化合物グラフ（すなわち、原子をノードとし、結合をエッジとしたデータ構造）として示す被験物質グラフ52が表示されている。ユーザ18は、マウス22を介して表示装置24の画面に表示されたポインタ54を操作することで、入力ソフトキー56をクリックする。これにより、クライアント端末12からサーバ14に対して、被験物質情報58が送信されると共に、被験物質Aについての代謝予測及び毒性評価に関する処理要求が行われる。

[0040] ここで、被験物質情報58は、被験物質Aの化学構造を特定可能な情報である。被験物質グラフ52は、一例として画像データであり、被験物質情報58は、被験物質の化学構造を表すテキスト情報又は数値情報で構成される情報である。表示装置24は、被験物質グラフ52と被験物質情報58との対応関係を記録したテーブルデータ等を参照して、選択された被験物質グラ

フ52に対応する被験物質情報58を読み出す。

[0041] なお、ここでは、被験物質Aを示すデータとして、化合物グラフが入力される例を挙げたがこれはあくまでも一例にすぎない。クライアント端末12に入力されるデータは、被験物質Aを特定可能なデータであればよく、被験物質情報58でもよい。被験物質情報58は、より具体的には、構造式、組成式、及びアミノ酸配列等の化学構造を記述するテキスト情報、あるいはこうしたテキスト情報を数値に変換した数値情報である。また、被験物質Aを示すデータは、CAS (Chemical Abstract Service) 番号、又は化学物質の名称であってもよい。

[0042] また、被験物質Aは、複数あってもよい。この場合において、例えば、ユーザ18は、複数の被験物質Aをリスト化したデータを入力するようにしてもよい。

[0043] 一例として図4に示すように、クライアント端末12から被験物質情報58がサーバ14に対して出力される。サーバ14のプロセッサ30において、代謝予測処理が実行される。代謝予測処理は、被験物質が毒性評価試験に供された場合に生じる被験物質の代謝反応過程と代謝反応過程において生成される代謝産物とを予測し、予測結果として、代謝反応過程と代謝産物とを出力する処理である。以下、被験物質と代謝産物とを総称して、単に「化合物」と称する場合がある。

[0044] 代謝予測処理において、まず、第1取得部30Aは、被験物質情報58を取得する。第1取得部30Aは、代謝予測部30Bに被験物質情報58を出力する。代謝予測部30Bは、被験物質情報58により示される被験物質Aについて体内における代謝に関する予測を行う。ここで、代謝に関する予測には、被験物質Aを起点として連鎖的に生じる代謝反応の予測と、代謝反応で生成される化合物である代謝産物の予測とが含まれる。

[0045] 具体的には、代謝予測部30Bは、ストレージ32から代謝予測モデル32Dを取得する。代謝予測モデル32Dは、代謝反応過程及び代謝産物を予測するルールデータを含むモデルである。プロセッサ30は、被験物質情報

58及びルールデータに基づいて、代謝予測処理を実行する。ルールデータは、代謝反応が進行するルールを表すデータである。ルールデータには、例えば、化合物の代謝反応に関する情報、すなわち、どのような構造を有する化合物がどのような代謝反応を生じ、どのような代謝産物を生成するかといった情報が記載されている。プロセッサ30は、被験物質情報58とルールデータとを照合しながら、代謝反応及び代謝産物を予測する。代謝反応は、被験物質に加えて、代謝産物でも生じる。このため、代謝反応は、被験物質を起点として連鎖的に生じる。プロセッサ30は、被験物質に生じる代謝反応によって代謝産物が予測される場合には、予測された代謝産物に生じる代謝反応も予測する。プロセッサ30は、このように、被験物質及び代謝産物のそれぞれの化合物に連鎖的に生じる代謝反応を予測し、それらを代謝反応過程として記録する。

[0046] なお、ここでは、ルールデータを用いたルールベースの代謝予測モデル32Dを用いて、代謝反応及び代謝産物の予測が行われる形態例を挙げて説明したが、これはあくまでも一例にすぎない。代謝予測モデル32Dとしては、例えば、AI (Artificial Intelligence) 方式による代謝反応予測用の学習済みモデルでもよい。このような学習済みモデルは、例えば、ニューラルネットワークに対して教師データを用いた機械学習が行われることによって代謝反応の予測機能を実現している。教師データとしては、例えば、過去の実験結果により得られたデータセットであって、被験物質を特定可能な情報を例題データとし、代謝産物を特定可能な情報及び代謝反応を特定可能な情報を正解データとした教師データが挙げられる。

[0047] そして、代謝予測部30Bは、代謝予測モデル32Dに対して、被験物質情報58を入力する。代謝予測モデル32Dは、入力された被験物質情報58に応じた代謝予測情報60を出力する。代謝予測部30Bは、代謝予測モデル32Dから出力された代謝予測情報60を取得する。代謝予測情報60には、予測される代謝反応を特定可能な情報である代謝反応情報60Bと、代謝反応によって生成される代謝産物を特定可能な情報である代謝産物情報

60Aとが含まれる。代謝産物情報60Aは、被験物質情報58と同様に、化合物である代謝産物の化学構造を特定可能な情報である。

[0048] 第1取得部30Aは、被験物質情報58を第2取得部30Cに出力し、代謝予測部30Bは、代謝予測情報60を第2取得部30Cに出力する。プロセッサ30において代謝予測処理が実行された後、プロセッサ30における処理は、毒性評価処理に移行する。

[0049] 毒性評価処理は、被験物質及び代謝産物からなる群より選択される少なくとも1つの化合物の毒性を評価する処理である。毒性評価処理において、第2取得部30Cは、被験物質情報58及び代謝予測情報60を毒性評価部30Dに出力する。毒性評価部30Dは、被験物質情報58により示される被験物質A、及び代謝産物情報60Aにより示される代謝産物に対して毒性の評価を行う。

[0050] 具体的には、毒性評価部30Dは、ストレージ32から毒性判定フロー32Eを取得する。毒性判定フロー32Eは、評価処理プログラム32Bにおいて記述されており、図4においてストレージ32に格納されている形態で模式的に示している。毒性判定フロー32Eは、毒性を評価するために用いられる判定フローである。毒性判定フロー32Eは、少なくとも一つの判定ステップを有し、判定ステップにおける判定結果に応じて経路が分岐する。各判定ステップにおける判定項目は、予め定められている。判定項目としては、例えば、化合物が代謝により消失するか否か、化合物が細胞膜を透過するか否か、又は、化合物が懸念構造ルールに該当するか否か等が挙げられる。懸念構造ルールは、化学構造に関する規定であって、ユーザが関心のある毒性を有する可能性のある部分構造を特定するルールである。

[0051] 毒性評価部30Dは、被験物質情報58及び代謝産物情報60Aを毒性判定フロー32Eに入力する。毒性判定フロー32Eにおいて、被験物質又は代謝産物のいずれかの化合物に対して、判定ステップ毎に毒性評価に関する判定が実行される。毒性判定フロー32Eは、本開示の技術に係る「判定フロー」の一例である。以下において、被験物質情報58及び代謝産物情報6

OAを総称して化合物情報と呼ぶ。

[0052] 以下の毒性判定フロー32Eに関する説明において、代謝産物Dを例に挙げて説明する。一例として図5に示すように、代謝産物Dを示す化合物グラフD1に対応する化合物情報が、毒性判定フロー32Eに入力される。毒性判定フロー32Eにおいて、ステップST1で、化合物グラフD1により示される代謝産物Dが体内で代謝により分解されず、残存する化合物であるか否かが判定される。ステップST1における判定が肯定されると、代謝産物Dに対する毒性評価は、ステップST2へ移行する。ステップST1における判定が否定されると、代謝産物Dに対する毒性評価の結果として、代謝産物Dが、体内で分解されて消失する化合物（以下単に「消失化合物」とも称する）であるとの評価結果が出力される。

[0053] ここで、代謝反応において、代謝酵素は、代謝酵素の活性部位に適合する化合物と複合体を形成する。そして、代謝酵素は、その化合物が化学反応を起こすために必要なエネルギー（すなわち、活性化エネルギー）を下げることで、代謝反応を促進する働きがある。「消失化合物」とは、代謝酵素と複合体を形成した際の活性化エネルギーが、他の代謝産物より低く、他の代謝産物と比較して速やかに化学反応が起こり、短時間で次の代謝産物へと変化する化合物である。そのため、消失化合物は、細胞内のDNAとの反応が起きにくく、毒性の評価（すなわち、陽性、又は陰性の評価）を行う必要性が低い。

[0054] ステップST2で、化合物グラフD1に対応する化合物情報に対して記述子計算が実行される。記述子としては、代謝産物Dのモル質量又は $\log P$ （オクタノール/水 分配係数の常用対数をとった値）が挙げられる。ステップST2の処理が実行された後、毒性評価は、ステップST3へ移行する。

[0055] ステップST3で、ステップST2で実行された代謝産物Dの記述子計算の結果に基づいて、細胞膜を透過するか否かの判定が行われる。記述子の示す数値と閾値とが比較され、比較結果に基づいて細胞膜を透過するか否かの

判定が行われる。ステップS T 3における判定が肯定されると、毒性評価は、ステップS T 4へ移行する。ステップS T 3における判定が否定されると、毒性評価の結果として、陰性（すなわち、毒性なし）の評価結果が出力される。これは、化合物が細胞膜を透過しないことから体内に及ぼす影響が低いと考えられるためである。

[0056] ステップS T 4で、化合物グラフD 1に対応する化合物情報に対して懸念構造ルールの適用が実行される。ステップS T 4の処理が実行された後、毒性評価は、ステップS T 5へ移行する。

[0057] ステップS T 5で、化合物グラフD 1に対応する化合物情報により示される分子構造に、懸念構造が含まれる否かが判定される。ステップS T 5における判定が否定されると、毒性評価結果として、毒性評価の結果として、陰性（すなわち、毒性なし）の評価結果が出力される。これは、代謝産物Dが懸念構造を有さないため、毒性を示す可能性が低いと考えられるためである。

[0058] ステップS T 5における判定が肯定されると、毒性評価結果として、陽性（すなわち、毒性あり）の評価結果が出力される。図5に示す例では、代謝産物Dに対する毒性評価として、毒性判定フロー3 2 Eで辿った経路及び判定ステップが示され、最終的に代謝産物Dが陽性と評価された例が示されている。このように、毒性判定フロー3 2 Eは、入力された被験物質情報5 8及び代謝産物情報6 0 Aに応じて、毒性評価情報6 2を出力する。毒性評価情報6 2において、被験物質A及び代謝産物毎に評価結果が紐づけられている（図4参照）。このように、毒性評価処理が実行される。

[0059] なお、ここでは、代謝予測処理が実行された後、毒性評価処理が実行される形態例を挙げて説明したが、本開示の技術はこれに限定されない。代謝予測処理及び毒性評価処理は、並行して実行されてもよい。例えば、代謝予測処理において、生成が予測された代謝産物に対して、逐次、毒性評価処理における毒性評価が行われてもよい。

[0060] 一例として図6に示すように、代謝予測部3 0 Bは、代謝予測情報6 0を

第3取得部30Eに対して出力する。また、毒性評価部30Dは、被験物質情報58及び毒性評価情報62を第3取得部30Eに対して出力する。第3取得部30Eは、画像生成部30Fに対して、取得した被験物質情報58、代謝予測情報60、及び毒性評価情報62を出力する。画像生成部30Fは、被験物質情報58、代謝予測情報60、及び毒性評価情報62に基づいて、表示画像64を生成する。表示画像64は、代謝に関する予測の結果と、化合物に対する毒性評価の結果とを示す画像である。また、表示画像64は、被験物質を起点として連鎖的に生じる代謝反応と代謝産物とを系統的に示した代謝反応過程において、化合物の毒性の評価結果を識別可能に示す画像である。表示画像64は、本開示の技術に係る「表示画像」の一例である。

[0061] 図6に示す例では、表示画像64には、被験物質A及び代謝産物B～Dの各々の化合物グラフを示す化合物画像66が含まれている。また、表示画像64には、代謝反応の前後の化合物画像66を繋ぐ結合線68が含まれている。代謝産物B～Dは、本開示の技術に係る「代謝産物」の一例であり、化合物画像66は、本開示の技術に係る「化合物データ」の一例であり、結合線68は、本開示の技術に係る「結合線」の一例である。

[0062] 具体的には、表示画像64の左部分には、被験物質Aの化合物グラフを示す化合物画像66Aが示されている。また、表示画像64の中央部分には、代謝産物Bの化合物グラフを示す化合物画像66Bが示されている。そして、化合物画像66Aと化合物画像66Bとの間には結合線68Aが示されている。

[0063] また、表示画像64の右上部分には、代謝産物Cの化合物グラフを示す化合物画像66Cが示されている。そして、化合物画像66Bと化合物画像66Cとの間には結合線68Bが示されている。表示画像64の右下部分には、代謝産物Dの化合物グラフを示す化合物画像66Dが示されている。そして、化合物画像66Bと化合物画像66Dとの間には結合線68Cが示されている。このように、表示画像64において、被験物質Aを起点として連鎖的に生じる代謝反応と代謝産物B～Dとを系統的に示した代謝反応過程が樹

形図として示されている。

[0064] 表示画像64において、被験物質Aを示す化合物画像66A及び代謝産物Bを示す化合物画像66Bの枠線は、一点鎖線となっている。これにより、被験物質A及び代謝産物Bが消失化合物であることを示している。また、表示画像64において、代謝産物Cを示す化合物画像66Cの枠線は、点線となっている。これにより、代謝産物Cの毒性の評価結果が、「毒性なし」であることを示している。さらに、表示画像64において、代謝産物Dを示す化合物画像66Dの枠線は、実線となっている。これにより、代謝産物Dの毒性の評価結果が、「毒性あり」であることを示している。

[0065] このように、表示画像64において、化合物の毒性の評価結果が識別可能に示されている。また、表示画像64には、消失化合物である代謝産物Bを示す化合物画像66Bが示されており、代謝産物Bが消失化合物であることが識別可能に示されている。画像生成部30Fは、生成した表示画像64を出力部30Gに対して出力する。

[0066] 一例として図7に示すように、サーバ14の出力部30Gは、クライアント端末12に対して表示画像64を出力する制御を実行する。換言すれば、サーバ14は、クライアント端末12に対して表示画像64を示す情報を送信する。クライアント端末12の表示装置24において、表示画像64を含む画面24Aが表示される。

[0067] 図7に示す例では、ウィンドウ70において、表示画像64が表示されている。表示画像64には、上述したように、被験物質Aを起点として連鎖的に生じる代謝反応と代謝産物B～Dとを系統的に示した代謝反応過程が樹形図として示されている。また、表示画像64には、化合物の毒性の評価結果が識別可能に示されている。ユーザ18は、表示画像64を視認することにより、被験物質Aに対する代謝予測の結果、及び被験物質A及び代謝産物B～Dの毒性評価の結果を把握することができる。

[0068] 次に、本実施形態に係るサーバ14における制御処理について、図8を参照しながら説明する。サーバ制御処理は、サーバ14で実行される処理であ

って、上述した代謝予測処理、毒性評価処理、及び画像生成処理を含む処理である。図8は、サーバ制御処理の一例を示すフローチャートである。図8に示す処理の流れは、本開示の技術に係る「情報処理方法」の一例である。

[0069] 一例として図8に示す制御処理では、まず、ステップST10で、第1取得部30Aは、被験物質情報58を取得したか否かを判定する。ステップST10の判定において、被験物質情報58を取得したと判定された場合、判定が肯定されて、サーバ制御処理は、ステップST12へ移行する。ステップST10の判定において、被験物質情報58を取得したと判定されない場合は、判定が否定されて、サーバ制御処理は、ステップST10へ戻る。

[0070] ステップST12で、代謝予測部30Bは、ステップST10で取得した被験物質情報58に基づいて代謝反応を予測する。具体的には、代謝予測部30Bは、代謝予測モデル32Dに被験物質情報58を入力する。代謝予測モデル32Dは、被験物質Aに応じた代謝産物を示す代謝予測情報60を出力する。代謝予測部30Bは、代謝予測情報60を取得する。ステップST12の処理が実行された後、サーバ制御処理は、ステップST14へ移行する。

[0071] ステップST14で、第2取得部30Cは、被験物質情報58及び代謝産物情報60Aを取得する。ステップST14の処理が実行された後、サーバ制御処理は、ステップST16へ移行する。

[0072] ステップST16で、毒性評価部30Dは、ステップST14で取得された被験物質情報58により示される被験物質、及び代謝産物情報60Aにより示される代謝産物の毒性を評価する。具体的には、毒性評価部30Dは、毒性判定フロー32Eを用いて被験物質及び代謝産物の毒性評価を実行する。毒性評価部30Dは、被験物質及び代謝産物の毒性評価の結果を示す情報である毒性評価情報62を取得する。ステップST16の処理が実行された後、サーバ制御処理は、ステップST18へ移行する。

[0073] ステップST18で、第3取得部30Eは、被験物質情報58、代謝予測情報60、及び、毒性評価情報62を取得する。ステップST18の処理が

実行された後、サーバ制御処理は、ステップST20へ移行する。

[0074] ステップST20で、画像生成部30Fは、ステップST18で取得された被験物質情報58、代謝予測情報60、及び、毒性評価情報62に基づいて、表示画像64を生成する。表示画像64は、被験物質を起点として連鎖的に生じる代謝反応と代謝産物とを系統的に示した代謝反応過程において、化合物の毒性の評価結果を識別可能に示す画像である。また、表示画像64には、消失化合物を示す画像が含まれており、代謝産物が消失化合物であることが識別可能に示されている。ステップST20の処理が実行された後、サーバ制御処理は、ステップST22へ移行する。

[0075] ステップST22で、出力部30Gは、ステップST20で画像生成部30Fにより生成された表示画像64をクライアント端末12に対して出力する制御を実行する。具体的には、出力部30Gは、クライアント端末12に表示画像64を送信する。ステップST22の処理が実行された後、サーバ制御処理は、ステップST24へ移行する。

[0076] ステップST24で、出力部30Gは、サーバ制御処理が終了する条件（以下、「終了条件」と称する）を満足したか否かを判定する。終了条件の一例としては、表示画像64がクライアント端末12に対して送信されたという条件が挙げられる。また、その他の終了条件としては、サーバ制御処理を終了させる指示が受け付けられた、という条件が挙げられる。ステップST24において、終了条件を満足していない場合は、判定が否定されて、サーバ制御処理はステップST10へ移行する。ステップST24において、終了条件を満足した場合は、判定が肯定されて、サーバ制御処理が終了する。

[0077] 以上説明したように、本実施形態に係る情報処理システム10では、サーバ14のプロセッサ30において、表示画像64が生成される。表示画像64には、被験物質Aの体内における代謝反応と代謝反応で生成される代謝産物B～Dとの予測結果、及び被験物質Aと代謝産物B～Dとで構成される化合物群のうちの少なくとも1つの化合物の毒性の評価結果が示される。また、表示画像64には、被験物質Aを起点として連鎖的に生じる代謝反応と代

代謝産物 B～D とを系統的に示した代謝反応過程において、化合物の毒性の評価結果が識別可能に示される。被験物質 A を起点として系統的に代謝産物 B～D を表示し、かつ毒性評価を合わせて表示することで、代謝反応の予測結果と、代謝反応に関与する化合物の毒性の評価結果とを効率的に把握することができる。さらに、反応過程において消失する代謝産物 B も表示することで代謝反応過程をより把握しやすくなる。これにより、本構成によれば、ユーザによる化合物の毒性評価を支援することが可能になる。

[0078] 例えば、化合物が反応過程に関係なく、一覧表示される場合と比較して、代謝反応過程において、どの化合物が毒性を有しているかを把握しやすくなる。また、消失する代謝産物も表示する場合、一覧表示では、表示する代謝産物の数が増えて見にくくなるが、本構成では代謝産物を系統的に表示するので、消失する化合物があっても代謝予測及び毒性評価の結果を把握しやすくなる。

[0079] また、本実施形態に係る情報処理システム 10 では、表示画像 64 において、代謝反応過程において消失する代謝産物 B の評価結果が他の代謝産物 C 及び D とは識別可能に表示される。代謝反応過程において消失する代謝産物 B については、反応後も残存する代謝産物 C 及び D と比較して、毒性評価において考慮する必要性が低い。そこで、消失する代謝産物 B を代謝反応過程において識別可能に表示することにより、ユーザが消失化合物以外の代謝産物に注目しやすくなり、代謝反応過程を把握しやすくなる。ことができる。

[0080] また、本実施形態に係る情報処理システム 10 では、表示画像 64 において示される代謝反応過程は、被験物質 A 及び代謝産物 B～D のそれぞれの化合物を表す化合物画像 66 と、代謝反応の前後の化合物画像 66 をつなぐ結合線 68 とで示される樹形図である。代謝反応過程が樹形図であることで、代謝反応過程において、どのように化合物が変化したかが把握しやすくなる。この結果、代謝反応過程が把握しやすくなる。

[0081] なお、本実施形態において、表示画像 64 に示される毒性評価の結果が、化合物を示す化合物画像 66 の枠線の種類により識別可能とされる形態例を

挙げて説明したが、本開示の技術はこれに限定されない。毒性評価の結果の表示態様は、ユーザ 18 により毒性評価の結果が識別可能な態様であればよく、例えば、化合物を示す化合物画像 66 の枠線の色（例えば、陽性が赤、陰性が緑、消失化合物が灰色）、形状（例えば、円形、三角形、又は四角形）、及び／又は太さが変更される態様であってもよい。また、化合物画像 66 内に毒性評価を示す文字、及び／又はマークが付与される態様であってもよい。

[0082] また、本実施形態において、表示画像 64 に示される毒性評価の結果が、すべての化合物について表示される形態例を挙げて説明したが、本開示の技術はこれに限定されない。例えば、一部の化合物（例えば、被験物質 A）について毒性評価の結果は、表示されなくてもよい。

[0083] また、本実施形態では、表示画像 64 において、化合物が左から右に配置されることで、系統的に表示される形態例を挙げて説明したが、本開示の技術はこれに限定されない。表示画像 64 において、化合物が右から左に系統的に表示されてもよいし、上から下に系統的に表示されてもよい。

[0084] また、本実施形態では、表示画像 64 において、結合線 68 が矢印である形態例を挙げて説明したが、本開示の技術はこれに限定されない。結合線 68 は、反応前後の化合物を示す化合物画像 66 を繋ぐ線であればよく、結合線 68 は、直線であってもよいし、曲線であってもよい。

[0085] また、本実施形態では、表示画像 64 において、代謝反応過程が樹形図により示される形態例を示したが、本開示の技術はこれに限定されない。表示画像 64 において、被験物質 A を起点として代謝産物が系統的に示されればよく、化合物を示す化合物画像 66 が結合線 68 を介さずに系統的に並んだ態様であってもよい。

[0086] また、本実施形態では、表示画像 64 において、被験物質 A 及び代謝産物 B～D が化合物グラフを示す化合物画像 66 により示される形態例を挙げて説明したが、本開示の技術はこれに限定されない。表示画像 64 において、被験物質 A 及び代謝産物 B～D をユーザ 18 が認識できればよく、化合物画

像 6 6 に代えて、又は化合物画像 6 6 と共に、CAS 番号、物質名称、又は構造式を示す画像が表示されてもよい。

[0087] (第 1 変形例)

上記第 1 実施形態では、表示画像 6 4 において、結合線 6 8 が表示される形態例を挙げて説明したが、本開示の技術はこれに限定されない。本第 1 変形例では、表示画像 6 4 において、結合線 6 8 に代謝反応の名称が対応付けて表示される。

[0088] 一例として図 9 に示すように、サーバ 1 4 のプロセッサ 3 0 において、第 3 取得部 3 0 E は、被験物質情報 5 8、代謝予測情報 6 0、及び毒性評価情報 6 2 を取得する。ここで、代謝予測情報 6 0 には、代謝産物情報 6 0 A 及び反応名称情報 6 0 C が含まれている。ここで、反応名称情報 6 0 C は、代謝反応の名称を特定可能な情報である。反応名称情報 6 0 C は、代謝予測処理において、代謝反応情報 6 0 B と共に生成される。そして、画像生成部 3 0 F は、被験物質情報 5 8、代謝予測情報 6 0、及び毒性評価情報 6 2 に基づいて、表示画像 6 4 を生成する。

[0089] 図 9 に示す例では、表示画像 6 4 には、被験物質 A 及び代謝産物 B ~ D の各々の化合物グラフを示す化合物画像 6 6 が含まれている。また、表示画像 6 4 には、代謝反応の前後の化合物画像 6 6 を繋ぐ結合線 6 8 が含まれている。そして、結合線 6 8 には、反応名称情報 6 0 C に基づいて代謝反応の反応名称が対応付けられている。

[0090] 一例として図 1 0 に示すように、サーバ 1 4 の出力部 3 0 G は、クライアント端末 1 2 に対して表示画像 6 4 を出力する制御を実行する。クライアント端末 1 2 の表示装置 2 4 において、表示画像 6 4 を含む画面 2 4 A が表示される。

[0091] 図 1 0 に示す例では、ウィンドウ 7 0 において、表示画像 6 4 が表示されている。表示画像 6 4 には、被験物質 A を起点として連鎖的に生じる代謝反応と代謝産物 B ~ D とを系統的に示した代謝反応過程が樹形図として示され、かつ化合物の毒性の評価結果が識別可能に示されている。また、表示画像

64において、結合線68に対応する反応名称を示す文字が表示されている。

[0092] 図10に示す例では、表示画像64において、結合線68Aの上側に「酸化的脱硫」とのテキストが表示されている。これにより、被験物質Aが、酸化的脱硫により代謝産物Bに変化することが示される。また、表示画像64において、結合線68Bの上側に「リン酸エステルの加水分解」のテキストが表示されている。これにより、代謝産物Bが、リン酸エステルの加水分解により、代謝産物Cに変化することが示される。また、表示画像64において、結合線68Cの下側に「リン酸エステルの加水分解」のテキストが表示されている。これにより、代謝産物Bが、リン酸エステルの加水分解により、代謝産物Dに変化することが示される。このように、表示画像64において、結合線68と反応名称とが対応付けられて表示されている。

[0093] ユーザ18は、表示画像64を視認することにより、代謝予測の結果及び毒性評価の結果を把握することができる。また、ユーザ18は、表示画像64を視認することにより、代謝反応の名称を認識することができる。

[0094] 以上説明したように、本第1変形例に係る情報処理システム10では、サーバ14のプロセッサ30において、画像生成部30Fは、表示画像64を生成する。表示画像64には、代謝反応の前後の化合物画像66を繋ぐ結合線68が含まれている。そして、結合線68には、代謝反応の名称が対応付けて表示される。これにより、代謝反応過程において、どのような反応によって化合物が変化したかが把握しやすくなる。この結果、反応名称が表示されない場合と比較して、代謝反応過程が把握しやすくなる。

[0095] なお、上記第1変形例では、表示画像64において、反応名称がテキストで表示される形態例を挙げて説明したが、本開示の技術はこれに限定されない。ユーザ18が表示画像64を視認することにより、代謝反応を特定できればよく、表示画像64において、反応名称を示すテキストに代えて、又は、テキストと共に、反応名称を示すマークが表示される態様であってもよい。

## [0096] (第2変形例)

上記第1実施形態では、表示画像64において、結合線68が表示される形態例を挙げて説明したが、本開示の技術はこれに限定されない。本第2変形例では、表示画像64において、結合線68がユーザ18により選択された場合に、代謝反応の原因となった化学構造が表示される。

[0097] 一例として図11に示すように、サーバ14のプロセッサ30において、第3取得部30Eは、被験物質情報58、代謝予測情報60、及び毒性評価情報62を取得する。ここで、代謝予測情報60には、代謝産物情報60A及び原因構造情報60Dが含まれている。ここで、原因構造情報60Dは、代謝反応の原因となった化学構造であって、反応前の化合物に含まれる部分構造（以下単に「原因構造」とも称する）を特定可能な情報である。原因構造情報60Dは、代謝予測処理において、代謝反応情報60Bと共に生成される。そして、画像生成部30Fは、被験物質情報58、代謝予測情報60、及び毒性評価情報62に基づいて、表示画像64を生成する。

[0098] 図11に示す例では、表示画像64には、被験物質A及び代謝産物B～Dの各々の化合物グラフを示す化合物画像66が含まれている。また、表示画像64には、代謝反応の前後の化合物画像66を繋ぐ結合線68が含まれている。そして、結合線68には、原因構造情報60Dに基づいて原因構造が対応付けられている。

[0099] 一例として図12に示すように、サーバ14の出力部30Gは、クライアント端末12に対して表示画像64を出力する制御を実行する。クライアント端末12の表示装置24において、表示画像64を含む画面24Aが表示される。

[0100] 図12に示す例では、ウィンドウ70において、表示画像64が表示されている。表示画像64には、被験物質Aを起点として連鎖的に生じる代謝反応と代謝産物B～Dとを系統的に示した代謝反応過程が樹形図として示され、かつ化合物の毒性の評価結果が識別可能に示されている。また、表示画像64において、結合線68が選択されると、原因構造が表示される。図12

に示す例では、ユーザ 18 によりポインタ 54 を介して結合線 68 B が選択された場合に、表示画像 64 において、代謝産物 B が代謝産物 C に変化する反応における原因構造を示す原因構造画像 64 A がポップアップ表示されている。

[0101] ユーザ 18 は、表示画像 64 を視認することにより、代謝予測の結果及び毒性評価の結果を把握することができる。また、ユーザ 18 は、原因構造画像 64 A を視認することにより、原因構造を認識することができる。

[0102] 以上説明したように、本第 2 変形例に係る情報処理システム 10 では、サーバ 14 のプロセッサ 30 において、画像生成部 30 F は、表示画像 64 を生成する。表示画像 64 には、代謝反応の前後の化合物画像 66 を繋ぐ結合線 68 が含まれている。そして、結合線 68 が選択された場合に、原因構造画像 64 A が表示される。これにより、代謝反応過程において、どのような化学構造が原因となって化合物がどのように変化したかが把握しやすくなる。この結果、代謝反応過程が把握しやすくなる。

[0103] (第 3 変形例)

上記第 1 実施形態では、表示画像 64 において、代謝反応過程がそのまま表示される形態例を挙げて説明したが、本開示の技術はこれに限定されない。本第 3 変形例では、表示画像 64 において、代謝反応過程の一部がまとめて表示される。

[0104] 一例として図 13 に示すように、プロセッサ 30 において、画像生成部 30 F は、被験物質情報 58、代謝予測情報 60、及び毒性評価情報 62 に基づいて、表示画像 64 を生成する。図 13 に示す例では、表示画像 64 には、化合物を示す化合物画像 66 E ~ 66 J が含まれている。また、表示画像 64 には、代謝反応の前後の化合物画像 66 を繋ぐ結合線 68 が含まれている。表示画像 64 において、被験物質を示す化合物画像 66 E を起点として、化合物画像 66 F ~ 66 J により系統的に示される代謝反応過程が示されている。

[0105] そして、図 13 の表示画像 64 において示された代謝反応過程には、異な

る代謝産物を起点にした部分的な代謝反応過程が共通している。この場合に、部分的な代謝反応過程がまとめて表示される。図13に示す例では、化合物画像66Fにより示される代謝産物を起点として、化合物画像66I及び化合物画像66Jの順に変化する部分的な代謝反応過程を示す部分過程画像64Bが示されている。また、化合物画像66Gにより示される代謝産物を起点として、化合物画像66I及び化合物画像66Jの順に変化する部分的な代謝反応過程を示す部分過程画像64Cが示されている。部分過程画像64B及び64Cは、反応過程が共通しているので、1つにまとめて表示される。

[0106] 一例として図14に示すように、サーバ14の出力部30Gは、クライアント端末12に対して表示画像64を出力する制御を実行する。クライアント端末12の表示装置24において、表示画像64を含む画面24Aが表示される。

[0107] 図14に示す例では、ウィンドウ70において、表示画像64が表示されている。表示画像64には、代謝反応過程が樹形図として示され、かつ化合物の毒性の評価結果が識別可能に示されている。また、表示画像64において、共通している部分的な代謝反応過程（ここでは、化合物画像66Iにより示される代謝産物が化合物画像66Jにより示される代謝産物に変化する反応過程）がまとめて表示される。ユーザ18は、表示画像64を視認することにより、代謝予測の結果及び毒性評価の結果を把握することができる。

[0108] 以上説明したように、本第3変形例に係る情報処理システム10では、代謝反応過程において、異なる複数の代謝産物を起点にした部分的な代謝反応過程が共通している場合は、部分的な代謝反応過程が1つにまとめて表示される。これにより、部分的な代謝反応過程が共通している部分がまとめて表示されるので、表示画像64の全体を見やすくでき、さらに表示画像64の表示範囲を小さくすることができる。

[0109] (第4変形例)

上記第1実施形態では、表示画像64において、代謝反応過程が示されて

いる形態例を挙げて説明したが、本開示の技術はこれに限定されない。本第4変形例では、表示画像64において、代謝反応過程と共に、毒性評価に用いられる毒性判定フロー32Eが表示される。

[0110] 一例として図15に示すように、プロセッサ30において、画像生成部30Fは、被験物質情報58、代謝予測情報60、毒性評価情報62、及び毒性判定フロー32Eに基づいて、表示画像64を生成する。

[0111] 図15に示す例では、表示画像64には、被験物質A及び代謝産物B～Dの各々の化合物グラフを示す化合物画像66が含まれている。また、表示画像64には、代謝反応の前後の化合物画像66を繋ぐ結合線68が含まれている。さらに、表示画像64には、毒性判定フロー32Eを示すフロー画像64Dが含まれている。本変形例において、毒性評価情報62には、毒性評価の結果を示す情報と共に、毒性判定フロー32Eにおいて毒性評価の結果に至る経路（以下、単に「評価経路」とも称する）を示す情報が含まれている。

表示画像64において、化合物画像66により示される化合物と、毒性判定フロー32Eの評価経路とが対応付けられている。

[0112] 一例として図16に示すように、サーバ14は、クライアント端末12に対して表示画像64を出力する制御を実行する。クライアント端末12の表示装置24において、表示画像64を含む画面24Aが表示される。表示画像64には、被験物質Aを起点として連鎖的に生じる代謝反応と代謝産物B～Dとを系統的に示した代謝反応過程が樹形図として示され、かつ化合物の毒性の評価結果が識別可能に示されている。

[0113] また、表示画像64において、化合物を示す化合物画像66が選択されると、フロー画像64Dにおいて評価経路が表示される。図16に示す例では、ユーザ18によりポインタ54を介して化合物画像66Dが選択された場合に、フロー画像64Dにおいて、化合物画像66Dにより示される代謝産物Dの評価経路（ここでは、「陽性」に至る経路）が表示されている。また、フロー画像64Dにおいて、評価経路は、毒性判定フロー32Eにおける

他の経路とは識別可能に示される。図16に示す例では、評価経路が太線で示され、その他の経路が破線で示されている。

[0114] なお、ここでは、評価経路を示す線種を変えることにより、評価経路が他の経路とは識別可能に表示されているが、これはあくまでも一例にすぎない。評価経路の色を変えることで他の経路と識別可能とされてもよいし、評価経路を枠線で囲うことで他の経路と識別可能とされてもよい。

[0115] ユーザ18は、表示画像64を視認することにより、代謝予測の結果及び毒性評価の結果を把握することができる。また、ユーザ18は、フロー画像64Dを視認することにより、評価経路を認識することができる。

[0116] 以上説明したように、本第4変形例に係る情報処理システム10では、化合物を示す化合物画像66が、表示画像64において選択された場合に、毒性判定フロー32Eにおける複数の経路のうち、選択された化合物の評価経路が、他の経路とは識別可能な態様で示されたフロー画像64Dが表示される。これにより、どのような評価経路を辿って毒性評価がされたのかが、把握しやすくなる。

[0117] (第5変形例)

上記第1実施形態では、表示画像64において、代謝反応過程がそのまま表示される形態例を挙げて説明したが、本開示の技術はこれに限定されない。本第5変形例では、表示画像64において、代謝反応過程の表示範囲が調整可能とされている。

[0118] 一例として図17に示すように、サーバ14は、クライアント端末12に対して表示画像64を出力する制御を実行する。これにより、表示装置24の画面24Aにおいて、表示画像64が表示される。表示画像64の下部には、拡大ソフトキー64E、縮小ソフトキー64F、及びアジャストソフトキー64Gが表示されている。

[0119] 拡大ソフトキー64Eは、代謝反応過程の表示倍率を拡大するためのソフトキーであり、縮小ソフトキー64Fは、代謝反応過程の表示倍率を縮小するためのソフトキーである。ユーザ18は、ポインタ54を介して拡大ソフ

トキー 64E 又は縮小ソフトキー 64F を押下することで、代謝反応過程の表示倍率を大きくしたり、小さくしたりする。また、アジャストソフトキー 64G は、代謝反応過程の表示範囲を元に戻すためのソフトキーである。ユーザ 18 は、ポインタ 54 を介してアジャストソフトキー 64G を押下することで、代謝反応過程の表示範囲を、表示範囲の変更前の状態に戻す。このように、表示画像 64 において、代謝反応過程の表示範囲が調整可能とされる。

[0120] 以上説明したように、本第 5 変形例に係る情報処理システム 10 では、表示画像 64 において、代謝反応過程の表示範囲が調整可能とされている。代謝反応過程の表示範囲が調整されることで、代謝反応過程が複雑な場合（例えば、代謝反応過程が複数回分岐しており、多くの代謝産物が生成される場合）などに代謝反応過程を把握しやすくなる。

[0121] なお、上記第 5 変形例では、拡大ソフトキー 64E 又は縮小ソフトキー 64F により表示範囲の拡大又は縮小が行われる形態例を挙げて説明したが、本開示の技術はこれに限定されない。例えば、受付装置 20 としてのマウス 22 がホイールを備える場合に、ホイールを操作することで、表示画像 64 の拡大又は縮小が行われる態様であってもよい。

[0122] [第 2 実施形態]

上記第 1 実施形態では、サーバ 14 において、代謝予測処理、毒性評価処理、及び画像生成処理が行われる形態例を挙げて説明したが、本開示の技術はこれに限定されない。本第 2 実施形態では、サーバ 14 において、代謝予測処理及び毒性評価処理が実行され、クライアント端末 12 において、画像生成処理が実行される。本実施形態において、クライアント端末 12 は、本開示の技術に係る「情報処理装置」の一例である。

[0123] 一例として図 18 に示すように、クライアント端末 12 は、コンピュータ 38、受付装置 20、表示装置 24、通信 I/F 40、外部 I/F 42 及びバス 50 を備えている。コンピュータ 38 は、プロセッサ 44、ストレージ 46、及び RAM 48 を備えている。プロセッサ 44、ストレージ 46、R

AM 4 8、受付装置 2 0、表示装置 2 4、通信 I / F 4 0、及び外部 I / F 4 2 は、バス 5 0 に接続されている。

[0124] なお、コンピュータ 3 8 のハードウェア構成（すなわち、プロセッサ 4 4、ストレージ 4 6、及び RAM 4 8）は、コンピュータ 2 6 のハードウェア構成と基本的に同じなので、ここでは、コンピュータ 3 8 のハードウェア構成に関する説明は省略する。

[0125] 通信 I / F 4 0 は、ネットワーク 1 6 に接続されている。通信 I / F 4 0 は、ネットワーク 1 6 を介して外部通信装置（例えば、サーバ 1 4）との間の情報の授受を司る。例えば、通信 I / F 4 0 は、プロセッサ 4 4 からの要求に応じた情報を、ネットワーク 1 6 を介して外部通信装置に送信する。また、通信 I / F 4 0 は、外部通信装置から送信された情報を受信し、受信した情報を、バス 5 0 を介してプロセッサ 4 4 に出力する。

[0126] 外部 I / F 4 2 は、クライアント端末 1 2 の外部に存在する外部装置（図示省略）との間の各種情報の授受を司る。外部装置は、例えば、スマートデバイス、パーソナル・コンピュータ、サーバ、USB (Universal Serial Bus) メモリ、メモ리카ード、及びプリンタ等のうちの少なくとも 1 つであってもよい。外部 I / F 4 2 の一例としては、USB インタフェースが挙げられる。USB インタフェースには、外部装置が直接的又は間接的に接続される。

[0127] ストレージ 4 6 には、制御処理プログラム 4 6 A が記憶されている。制御処理プログラム 4 6 A は、画像の表示制御を実行するためのプログラムである。プロセッサ 3 0 は、ストレージ 4 6 から制御処理プログラム 4 6 A を読み出し、読み出した制御処理プログラム 4 6 A を RAM 4 8 上で実行することにより表示制御処理を行う。表示制御処理は、プロセッサ 4 4 が、取得部 4 4 A、画像生成部 4 4 B、及び表示制御部 4 4 C として動作することによって実現される。コンピュータ 3 8 は、本開示の技術に係る「コンピュータ」の一例であり、制御処理プログラム 4 6 A は、本開示の技術に係る「プログラム」の一例である。

[0128] 一例として図19に示すように、サーバ14のプロセッサ30において、代謝予測部30Bは、代謝予測処理により得られた代謝予測情報60を出力部30Gに出力する。また、毒性評価部30Dは、毒性評価処理に得られた毒性評価情報62を出力部30Gに出力する。出力部30Gは、ネットワーク16を介してクライアント端末12に対して代謝予測情報60及び毒性評価情報62を出力する。

[0129] クライアント端末12のプロセッサ44において、取得部44Aは、ネットワーク16を介して代謝予測情報60及び毒性評価情報62を取得する。そして、取得部44Aは、代謝予測情報60及び毒性評価情報62を、画像生成部44Bに対して出力する。画像生成部44Bは、代謝予測情報60及び毒性評価情報62に基づいて表示画像64を生成する。そして、画像生成部44Bは、生成した表示画像64を表示制御部44Cに対して出力する。表示制御部44Cは、表示画像64を表示するためのGUI (Graphical User Interface) 制御を行うことで、表示装置24に対して表示画像64を表示させる。ユーザ18は、表示画像64を視認することにより、被験物質Aに対する代謝予測の結果、及び被験物質A及び代謝産物B～Dの毒性評価の結果を把握することができる。

[0130] [第3実施形態]

上記第1実施形態では、サーバ14において、代謝予測処理、毒性評価処理、及び画像生成処理が行われる形態例を挙げて説明したが、本開示の技術はこれに限定されない。本第3実施形態では、クライアント端末12において、代謝予測処理、毒性評価処理、及び画像生成処理が行われる。本実施形態において、クライアント端末12は、本開示の技術に係る「情報処理装置」の一例である。

[0131] 一例として図20に示すように、クライアント端末12において、受付装置20を介して被験物質情報58が受け付けられる。クライアント端末12のプロセッサ44において、代謝予測部44Dは、被験物質情報58に基づいて、被験物質Aの代謝予測を行う。また、毒性評価部44Eは、被験物質

A及び代謝産物B～Dに対して毒性評価を行う。そして、画像生成部44Bは、代謝予測情報60及び毒性評価情報62に基づいて表示画像64を生成する。表示制御部44Cは、表示装置24に対して表示画像64を表示させる。ユーザ18は、表示画像64を視認することにより、被験物質Aに対する代謝予測の結果、及び被験物質A及び代謝産物B～Dの毒性評価の結果を把握することができる。

[0132] また、上記各実施形態では、代謝予測処理及び毒性評価処理が実行されることで、代謝予測情報60及び毒性評価情報62が得られる形態例を示したが、本開示の技術はこれに限定されない。例えば、サーバ14又はクライアント端末12において、既に得られた代謝予測情報60及び毒性評価情報62（例えば、外部装置による処理の結果得られた代謝予測情報60及び毒性評価情報62、又は、過去に得られた代謝予測情報60及び毒性評価情報62）が受け付けられて、画像生成処理が実行される態様であってもよい。

[0133] また、上記各実施形態では、ストレージ32に予測処理プログラム32A、評価処理プログラム32B、及び生成処理プログラム32Cが記憶されている形態例を挙げて説明したが、本開示の技術はこれに限定されない。例えば、予測処理プログラム32A、評価処理プログラム32B、及び生成処理プログラム32CがSSD又はUSBメモリなどの可搬型の記憶媒体に記憶されていてもよい。記憶媒体は、非一時的なコンピュータ読取可能な記憶媒体である。記憶媒体に記憶されている予測処理プログラム32A、評価処理プログラム32B、及び生成処理プログラム32Cは、コンピュータ26にインストールされる。プロセッサ30は、予測処理プログラム32A、評価処理プログラム32B、及び生成処理プログラム32Cに従ってサーバ14の制御処理を実行する。また、制御処理プログラム46Aについても同様に、ストレージ46ではなく、記憶媒体に記憶されていてもよい。

[0134] 上記各実施形態では、コンピュータ26及び38が例示されているが、本開示の技術はこれに限定されず、コンピュータ26及び38に代えて、ASIC (Application Specific Integrated Circuit)、FPGA (Field Prog

rammable Gate Array)、及び／又はP L D (Programmable Logic Device)を含むデバイスを適用してもよい。また、コンピュータ26及び38に代えて、ハードウェア構成及びソフトウェア構成の組み合わせを用いてもよい。

[0135] 上記各実施形態で説明した各種処理を実行するハードウェア資源としては、次に示す各種のプロセッサを用いることができる。プロセッサとしては、例えば、ソフトウェア、すなわち、プログラムを実行することで、代謝予測処理、毒性評価処理、及び／又は画像生成処理（以下単に「各種処理」とも称する）を実行するハードウェア資源として機能する汎用的なプロセッサであるCPUが挙げられる。また、プロセッサとしては、例えば、FPGA、PLD、又はASICなどの特定の処理を実行させるために専用に設計された回路構成を有するプロセッサである専用電子回路が挙げられる。何れのプロセッサにもメモリが内蔵又は接続されており、何れのプロセッサもメモリを使用することで各種処理を実行する。

[0136] 各種処理を実行するハードウェア資源は、これらの各種のプロセッサのうちの1つで構成されてもよいし、同種または異種の2つ以上のプロセッサの組み合わせ（例えば、複数のFPGAの組み合わせ、又はプロセッサとFPGAとの組み合わせ）で構成されてもよい。また、各種処理を実行するハードウェア資源は1つのプロセッサであってもよい。

[0137] 1つのプロセッサで構成する例としては、第1に、1つ以上のプロセッサとソフトウェアの組み合わせで1つのプロセッサを構成し、このプロセッサが、各種処理を実行するハードウェア資源として機能する形態がある。第2に、SoC (System-on-a-chip) などに代表されるように、各種処理を実行する複数のハードウェア資源を含むシステム全体の機能を1つのIC (Integrated Circuit) チップで実現するプロセッサを使用する形態がある。このように各種処理は、ハードウェア資源として、上記各種のプロセッサの1つ以上を用いて実現される。

[0138] 更に、これらの各種のプロセッサのハードウェア的な構造としては、より具体的には、半導体素子などの回路素子を組み合わせた電子回路を用いるこ

とができる。また、上記の各種処理はあくまでも一例である。従って、主旨を逸脱しない範囲内において不要なステップを削除したり、新たなステップを追加したり、処理順序を入れ替えたりしてもよいことは言うまでもない。

[0139] 以上に示した記載内容及び図示内容は、本開示の技術に係る部分についての詳細な説明であり、本開示の技術の一例に過ぎない。例えば、上記の構成、機能、作用、及び効果に関する説明は、本開示の技術に係る部分の構成、機能、作用、及び効果の一例に関する説明である。よって、本開示の技術の主旨を逸脱しない範囲内において、以上に示した記載内容及び図示内容に対して、不要な部分を削除したり、新たな要素を追加したり、置き換えたりしてもよいことは言うまでもない。また、錯綜を回避し、本開示の技術に係る部分の理解を容易にするために、以上に示した記載内容及び図示内容では、本開示の技術の実施を可能にする上で特に説明を要しない技術常識等に関する説明は省略されている。

[0140] 本明細書において、「A及び／又はB」は、「A及びBのうちの少なくとも1つ」と同義である。つまり、「A及び／又はB」は、Aだけであってもよいし、Bだけであってもよいし、A及びBの組み合わせであってもよい、という意味である。また、本明細書において、3つ以上の事柄を「及び／又は」で結び付けて表現する場合も、「A及び／又はB」と同様の考え方が適用される。

[0141] 本明細書に記載された全ての文献、特許出願及び技術規格は、個々の文献、特許出願及び技術規格が参照により取り込まれることが具体的かつ個々に記された場合と同程度に、本明細書中に参照により取り込まれる。

[0142] 2023年3月31日に出願された日本国特許出願2023-059422号の開示は、その全体が参照により本明細書に取り込まれる。

[0143] 上記実施形態に関し、さらに以下を開示する。

<付記1>

プロセッサを備え、

上記プロセッサは、

被験物質の体内における代謝反応と上記代謝反応で生成される代謝産物との予測結果、及び上記被験物質と上記代謝産物とで構成される化合物群のうちの少なくとも1つの化合物の毒性の評価結果を示す表示画像であって、上記被験物質を起点として連鎖的に生じる上記代謝反応と上記代謝産物とを系統的に示した代謝反応過程において、上記化合物の上記評価結果を識別可能に示す表示画像を生成し、

生成された上記表示画像を出力する制御を実行し、

上記表示画像において系統的に示される上記代謝産物には、上記代謝反応過程において消失する消失化合物が含まれる

情報処理装置。

#### <付記2>

上記表示画像において、上記消失化合物の上記評価結果が他の上記代謝産物とは識別可能に表示される

付記1に記載の情報処理装置。

#### <付記3>

上記表示画像において示される上記代謝反応過程は、上記被験物質及び上記代謝産物のそれぞれの化合物を表す化合物データと、上記代謝反応の前後の上記化合物データをつなぐ結合線とで示される樹形図である

付記1又は付記2に記載の情報処理装置。

#### <付記4>

上記結合線には、上記代謝反応の名称が対応付けて表示される

付記3に記載の情報処理装置。

#### <付記5>

上記結合線が選択された場合に、上記代謝反応の原因となった化学構造であって反応前の上記化合物に含まれる部分構造が表示される

付記3又は付記4に記載の情報処理装置。

#### <付記6>

上記代謝反応過程において、異なる複数の上記代謝産物を起点にした部分

的な代謝反応過程が共通している場合は、上記部分的な代謝反応過程が1つにまとめて表示される

付記1から付記5の何れか一つに記載の情報処理装置。

<付記7>

上記毒性の評価の対象となり、かつ上記評価結果を有する上記化合物が、上記表示画像の上記代謝反応過程内において選択された場合に、上記毒性の評価に用いられ、少なくとも1つの判定ステップを有し、かつ上記判定ステップの判定結果に応じて経路が分岐する毒性判定手順を示す判定フローであって、複数の経路のうち、上記化合物の上記評価結果に至る経路が、他の経路とは識別可能な態様で示された上記判定フローが表示される

付記1から付記6の何れか一つに記載の情報処理装置。

<付記8>

上記表示画像において、上記代謝反応過程の表示範囲が調整可能とされている

付記1から付記7からの何れか一つに記載の情報処理装置。

## 請求の範囲

- [請求項1]            プロセッサを備え、  
                         前記プロセッサは、  
                         被験物質の体内における代謝反応と前記代謝反応で生成される代謝  
                         産物との予測結果、及び前記被験物質と前記代謝産物とで構成される  
                         化合物群のうちの少なくとも1つの化合物の毒性の評価結果を示す表  
                         示画像であって、前記被験物質を起点として連鎖的に生じる前記代謝  
                         反応と前記代謝産物とを系統的に示した代謝反応過程において、前記  
                         化合物の前記評価結果を識別可能に示す表示画像を生成し、  
                         生成された前記表示画像を出力する制御を実行し、  
                         前記表示画像において系統的に示される前記代謝産物には、前記代  
                         謝反応過程において消失する消失化合物が含まれる  
                         情報処理装置。
- [請求項2]            前記表示画像において、前記消失化合物の前記評価結果が他の前記  
                         代謝産物とは識別可能に表示される  
                         請求項1に記載の情報処理装置。
- [請求項3]            前記表示画像において示される前記代謝反応過程は、前記被験物質  
                         及び前記代謝産物のそれぞれの化合物を表す化合物データと、前記代  
                         謝反応の前後の前記化合物データをつなぐ結合線とで示される樹形図  
                         である  
                         請求項1に記載の情報処理装置。
- [請求項4]            前記結合線には、前記代謝反応の名称が対応付けて表示される  
                         請求項3に記載の情報処理装置。
- [請求項5]            前記結合線が選択された場合に、前記代謝反応の原因となった化学  
                         構造であって反応前の前記化合物に含まれる部分構造が表示される  
                         請求項3に記載の情報処理装置。
- [請求項6]            前記代謝反応過程において、異なる複数の前記代謝産物を起点にし  
                         た部分的な代謝反応過程が共通している場合は、前記部分的な代謝反

応過程が1つにまとめて表示される

請求項1に記載の情報処理装置。

[請求項7]

前記毒性の評価の対象となり、かつ前記評価結果を有する前記化合物が、前記表示画像の前記代謝反応過程内において選択された場合に、前記毒性の評価に用いられ、少なくとも1つの判定ステップを有し、かつ前記判定ステップの判定結果に応じて経路が分岐する毒性判定手順を示す判定フローであって、複数の経路のうち、前記化合物の前記評価結果に至る経路が、他の経路とは識別可能な態様で示された前記判定フローが表示される

請求項1に記載の情報処理装置。

[請求項8]

前記表示画像において、前記代謝反応過程の表示範囲が調整可能とされている

請求項1に記載の情報処理装置。

[請求項9]

被験物質の体内における代謝反応と前記代謝反応で生成される代謝産物との予測結果、及び前記被験物質と前記代謝産物とで構成される化合物群のうちの少なくとも1つの化合物の毒性の評価結果を示す表示画像であって、前記被験物質を起点として連鎖的に生じる前記代謝反応と前記代謝産物とを系統的に示した代謝反応過程において、前記化合物の前記評価結果を識別可能に示す表示画像を生成すること、及び、

生成された前記表示画像を出力する制御を実行すること、を含み、前記表示画像において系統的に示される前記代謝産物には、前記代謝反応過程において消失する消失化合物が含まれる

情報処理方法。

[請求項10]

コンピュータに、

被験物質の体内における代謝反応と前記代謝反応で生成される代謝産物との予測結果、及び前記被験物質と前記代謝産物とで構成される化合物群のうちの少なくとも1つの化合物の毒性の評価結果を示す表

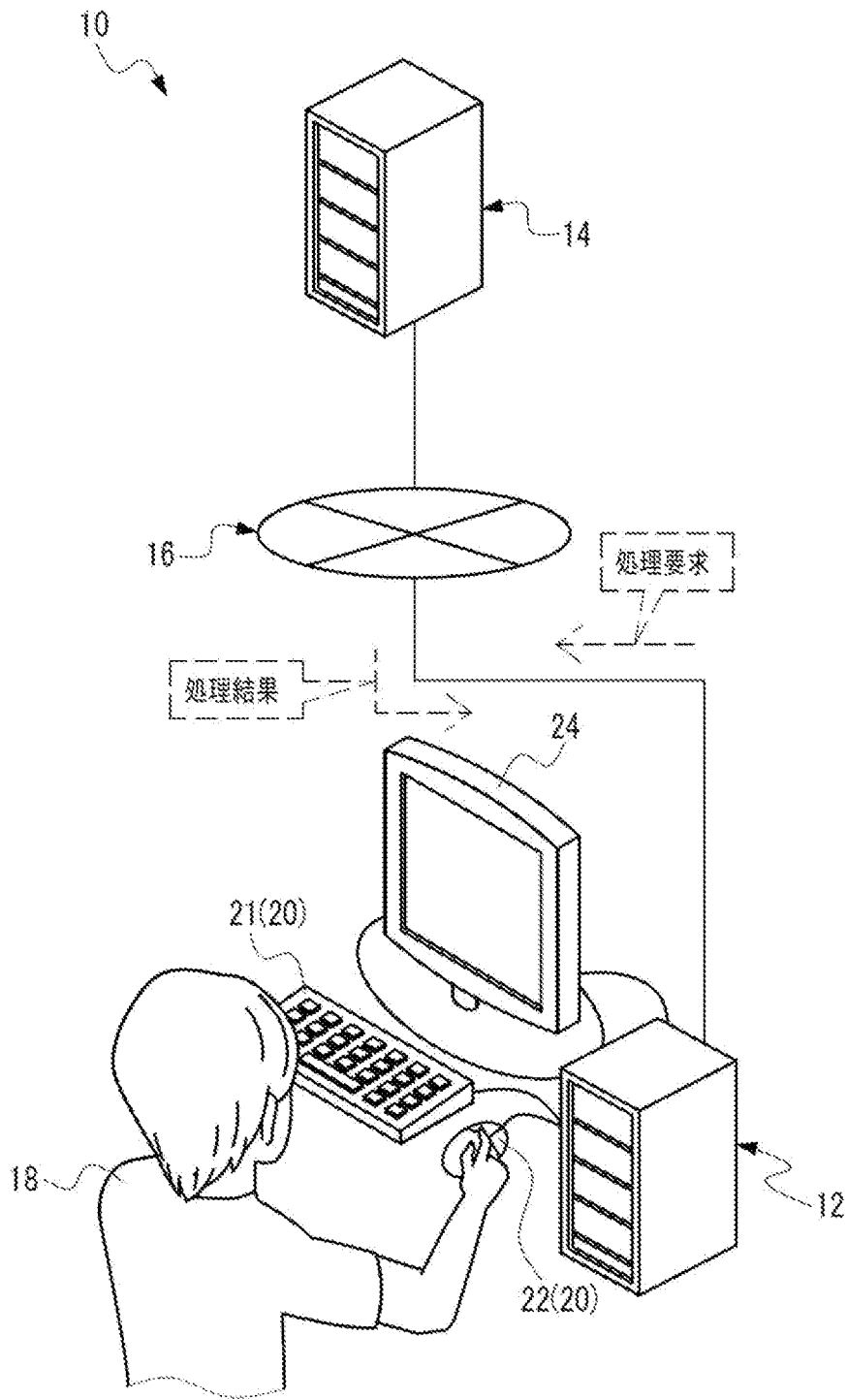
示画像であって、前記被験物質を起点として連鎖的に生じる前記代謝反応と前記代謝産物とを系統的に示した代謝反応過程において、前記化合物の前記評価結果を識別可能に示す表示画像を生成すること、及び、

生成された前記表示画像を出力する制御を実行すること、を含む処理であって、

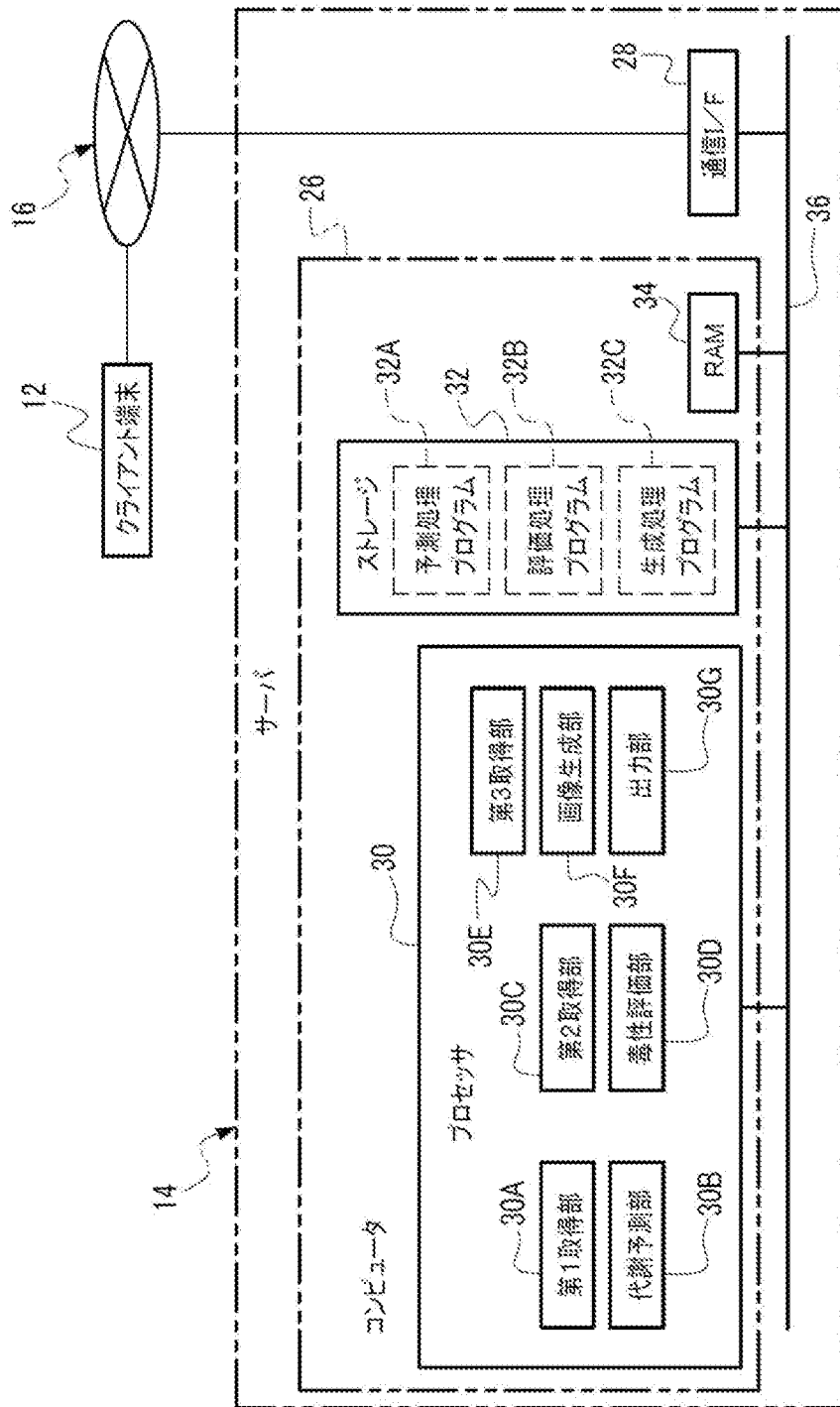
前記表示画像において系統的に示される前記代謝産物には、前記代謝反応過程において消失する消失化合物が含まれる

処理を実行させるプログラム。

[図1]



[図2]



[図3]

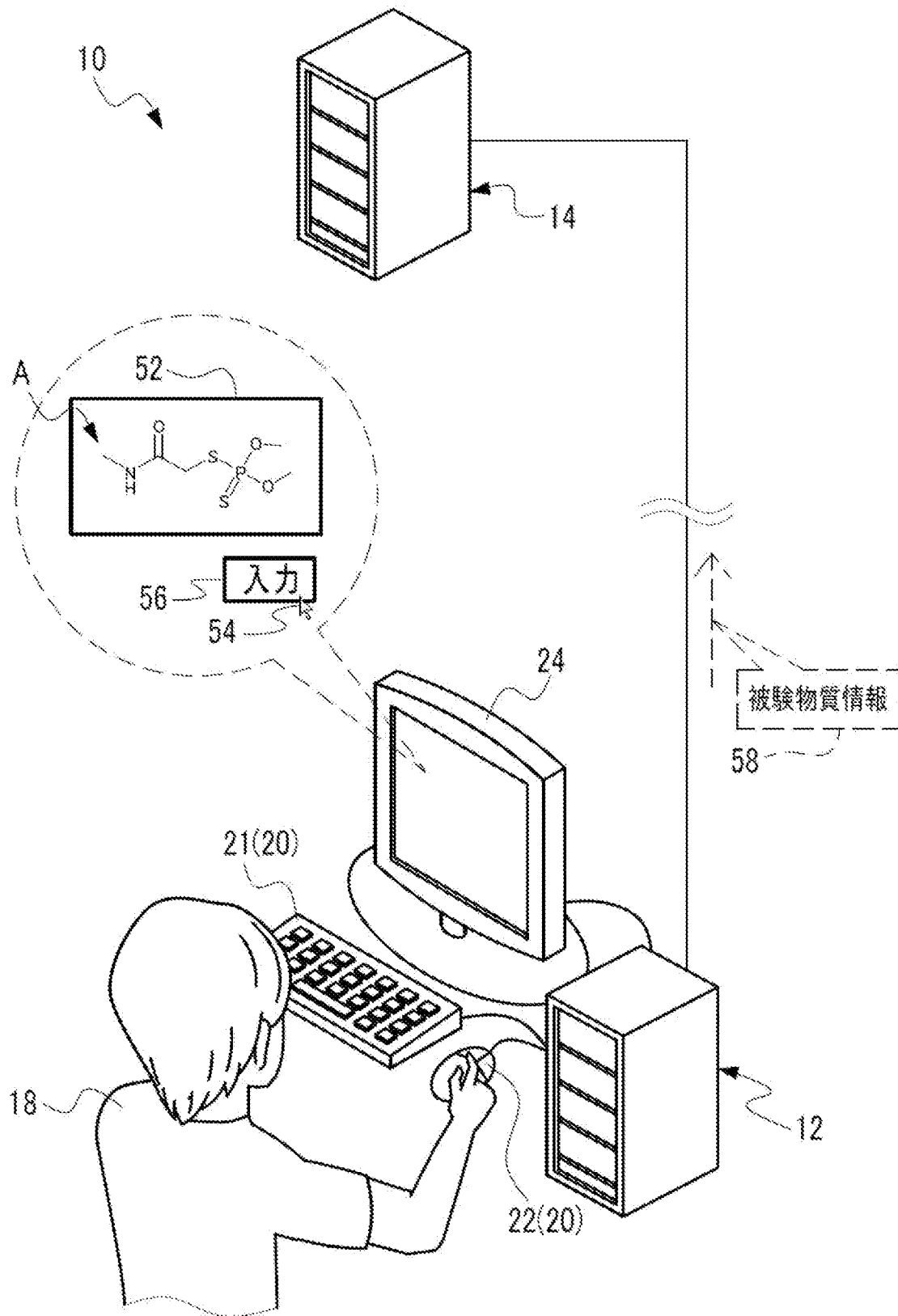
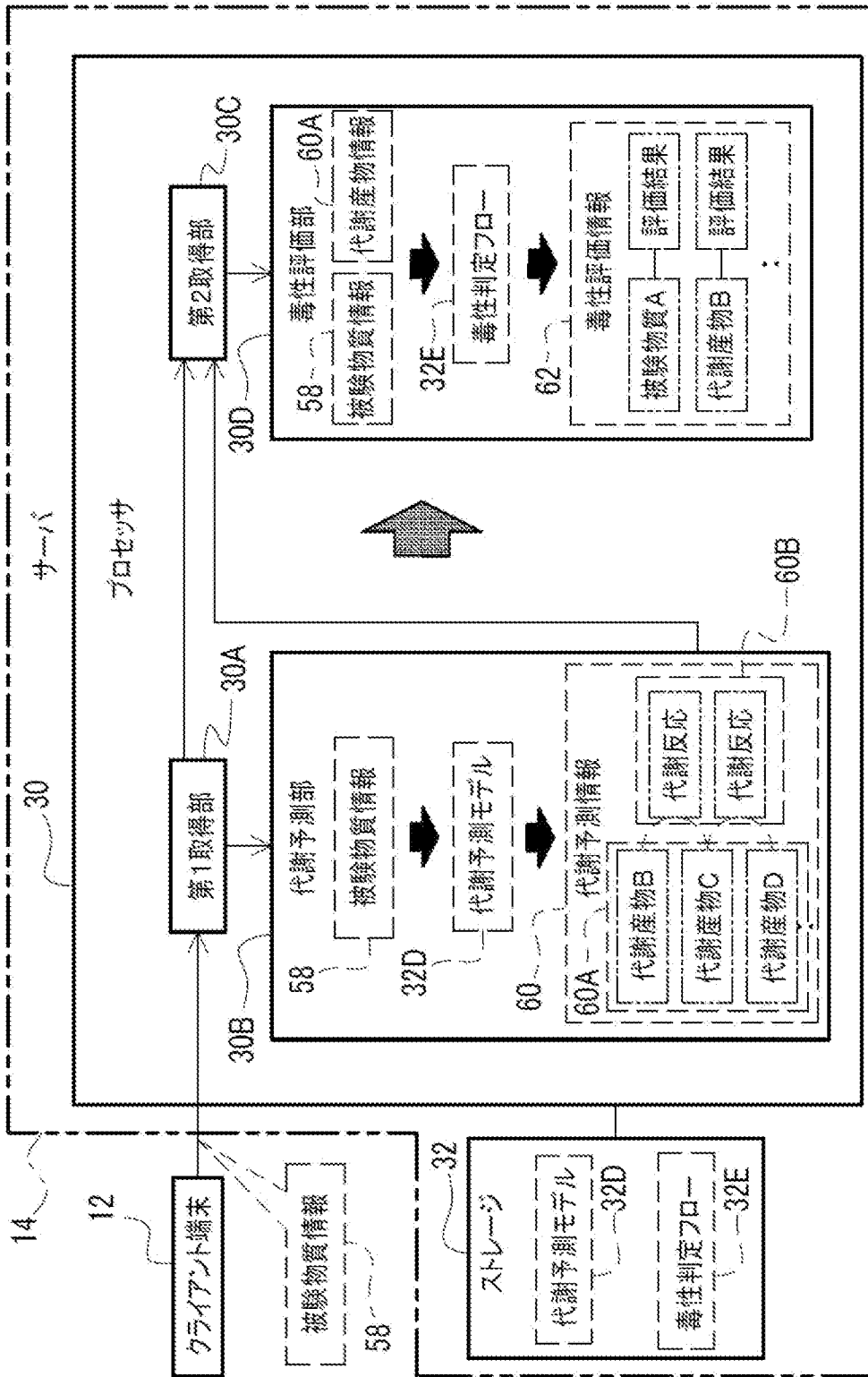
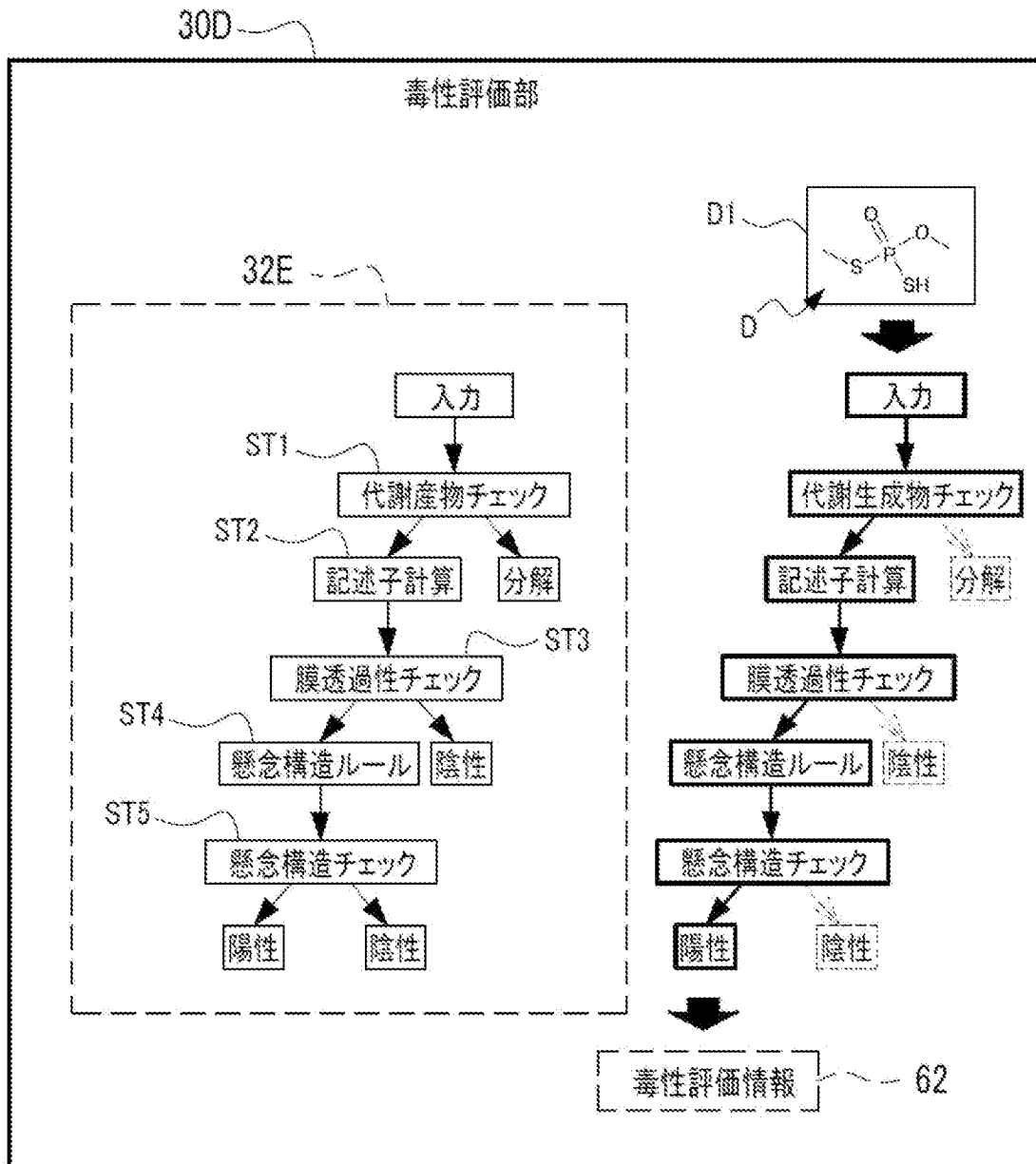


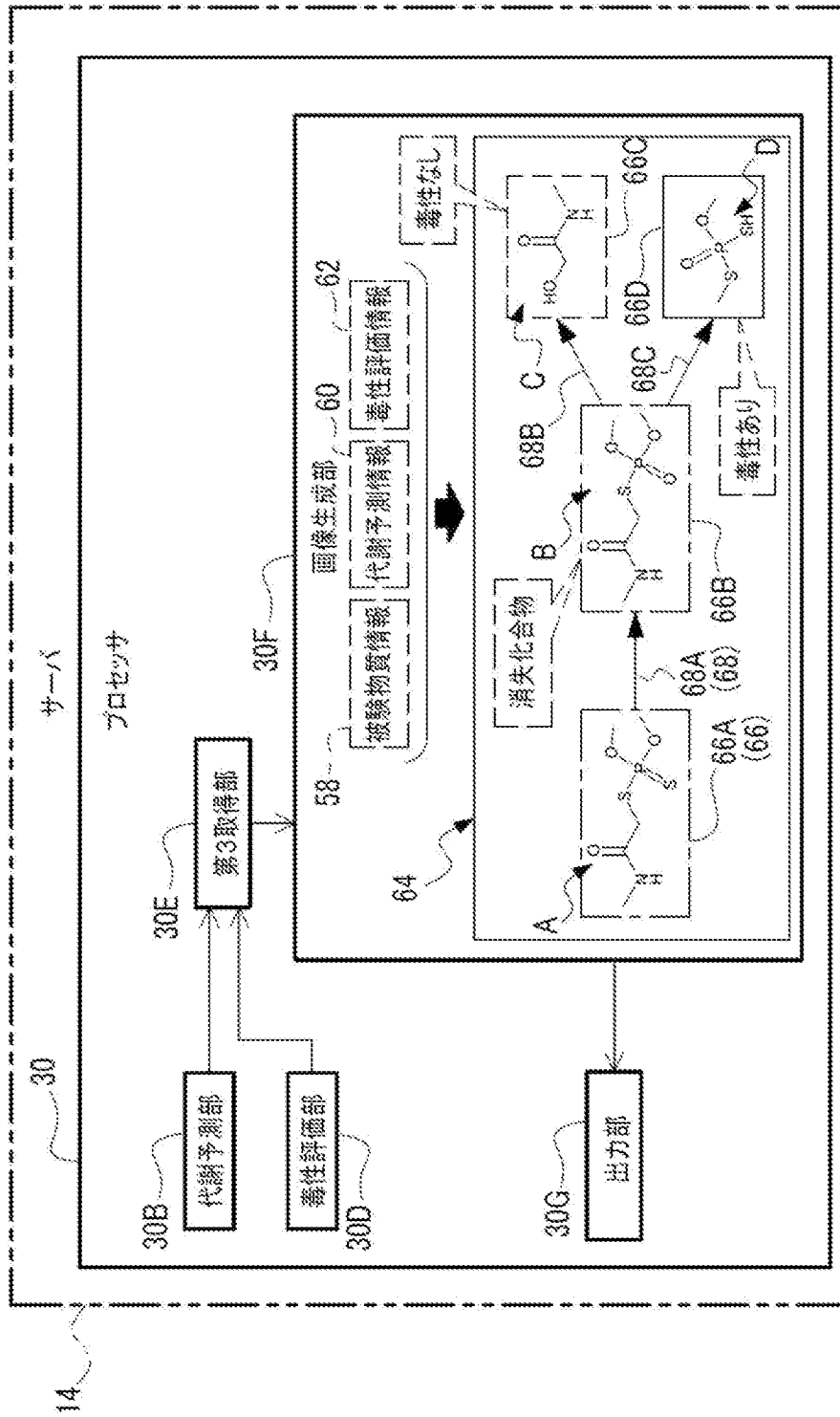
図4



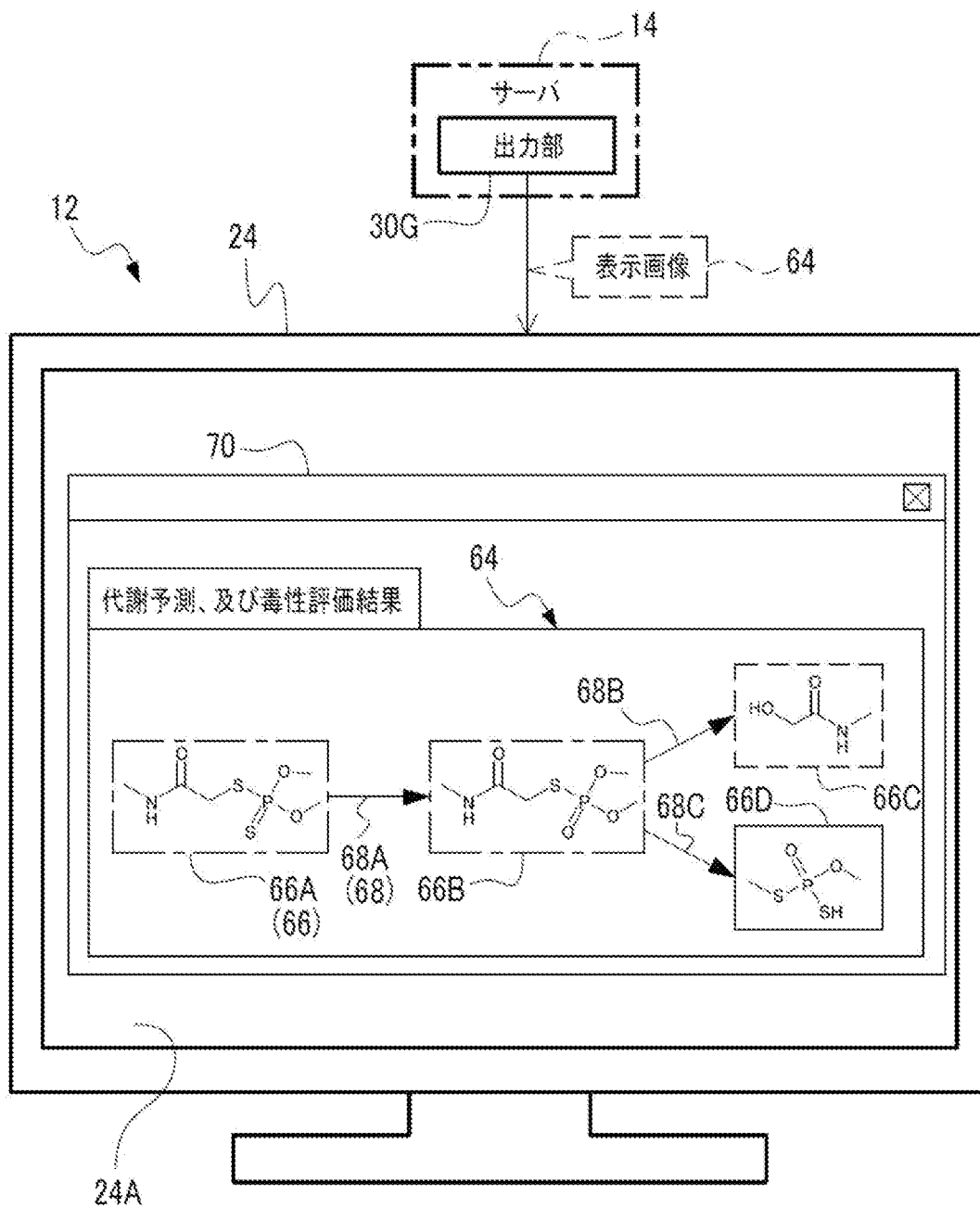
[図5]



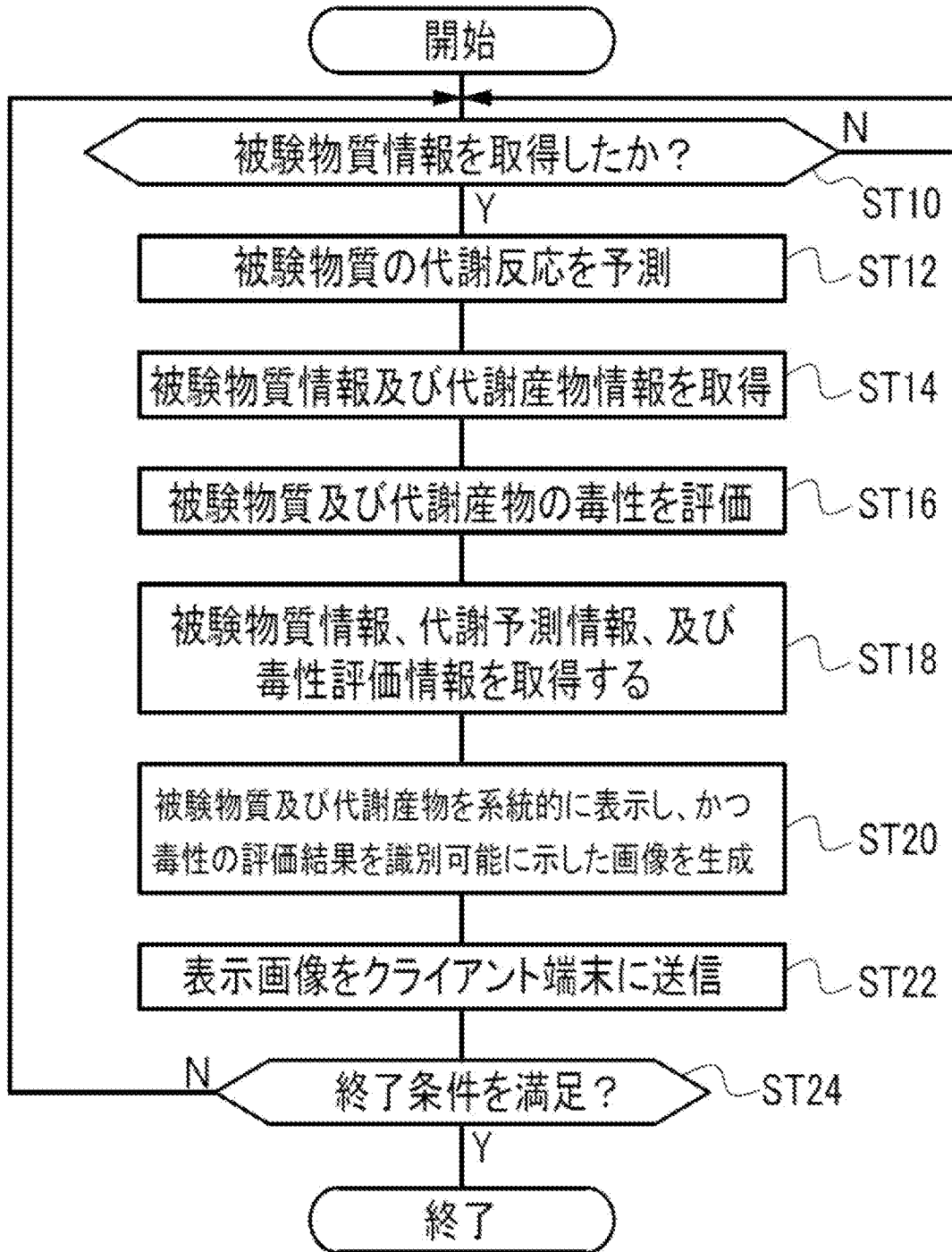
[図6]



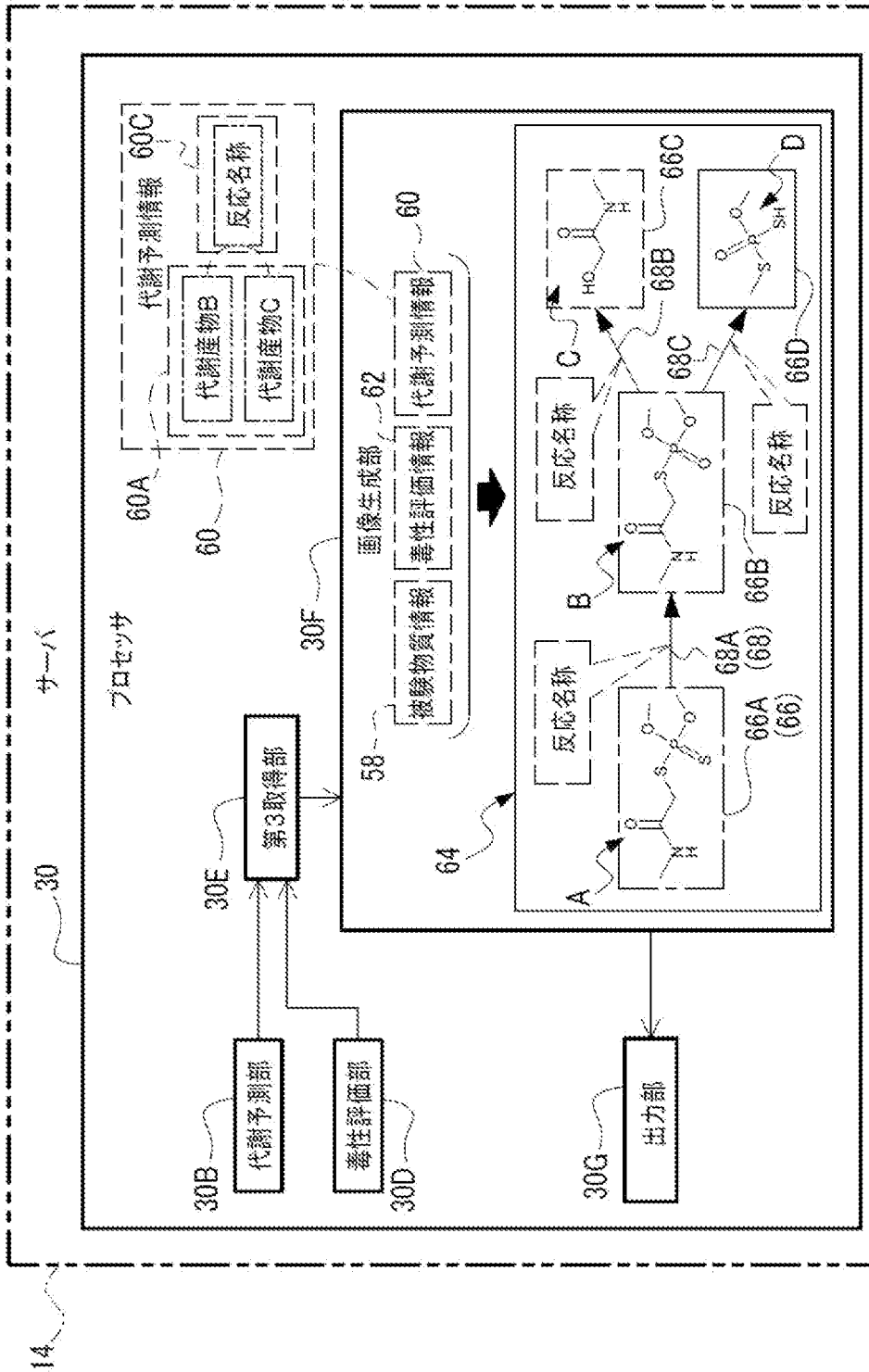
[図7]



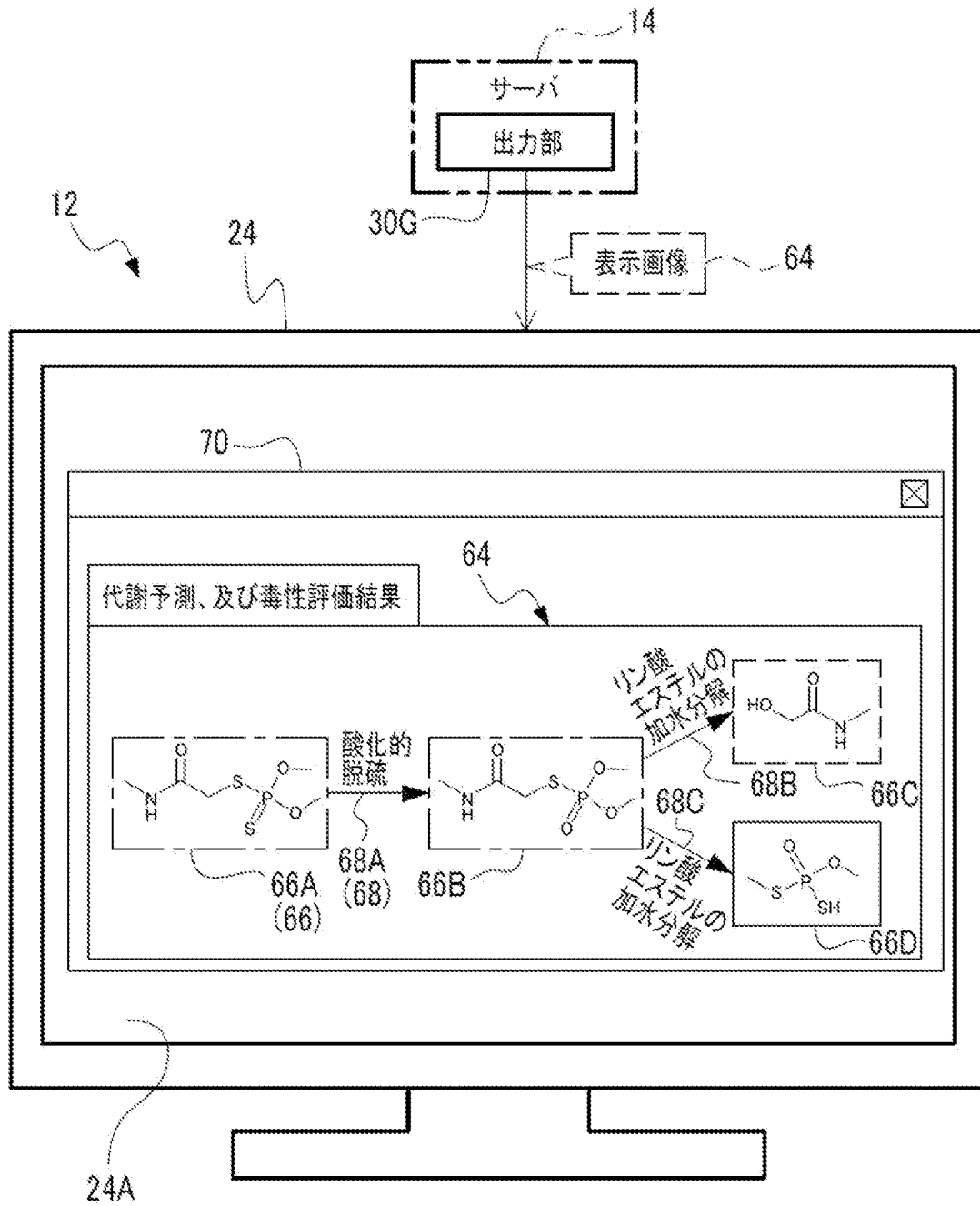
[図8]



[図9]

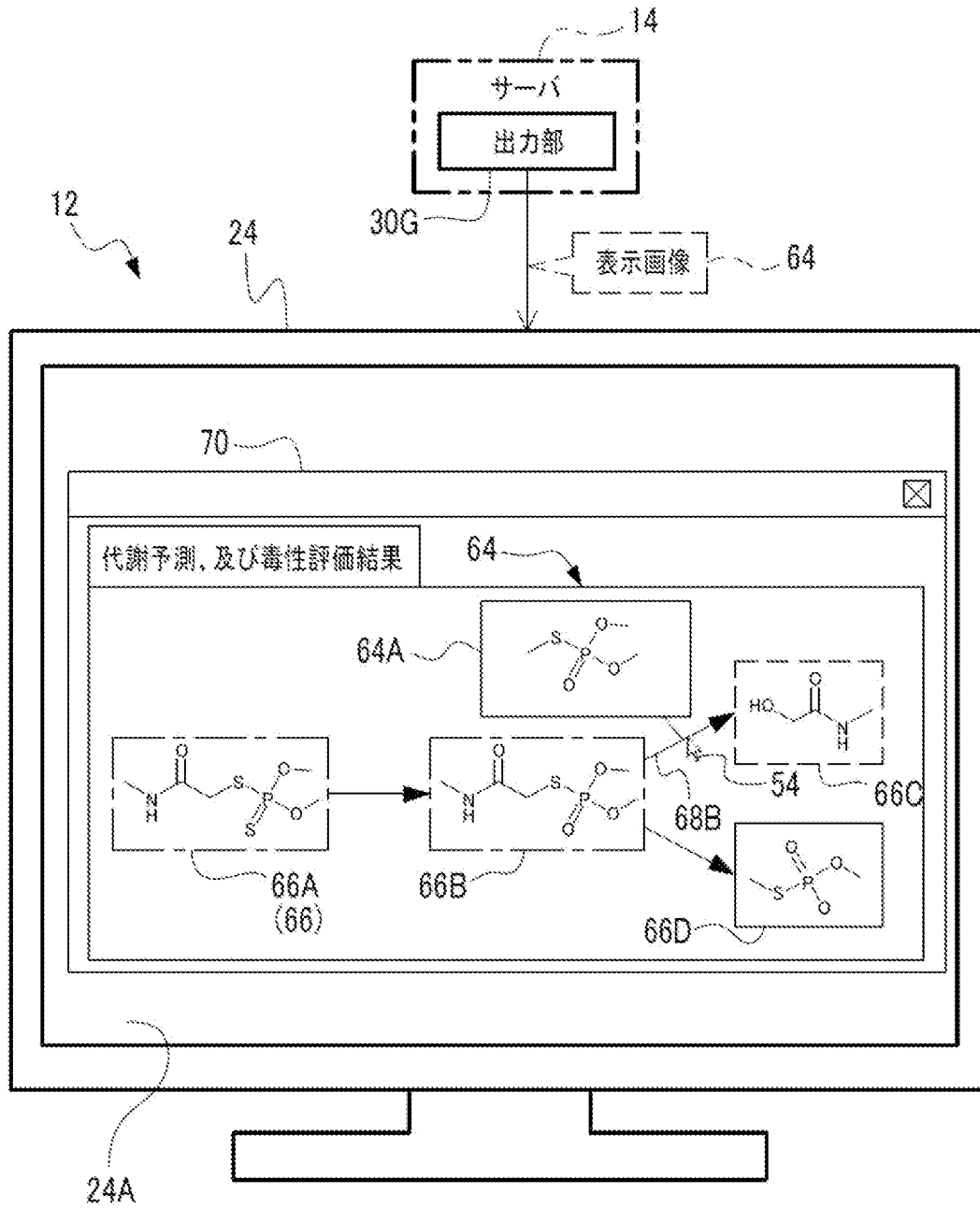


[図10]

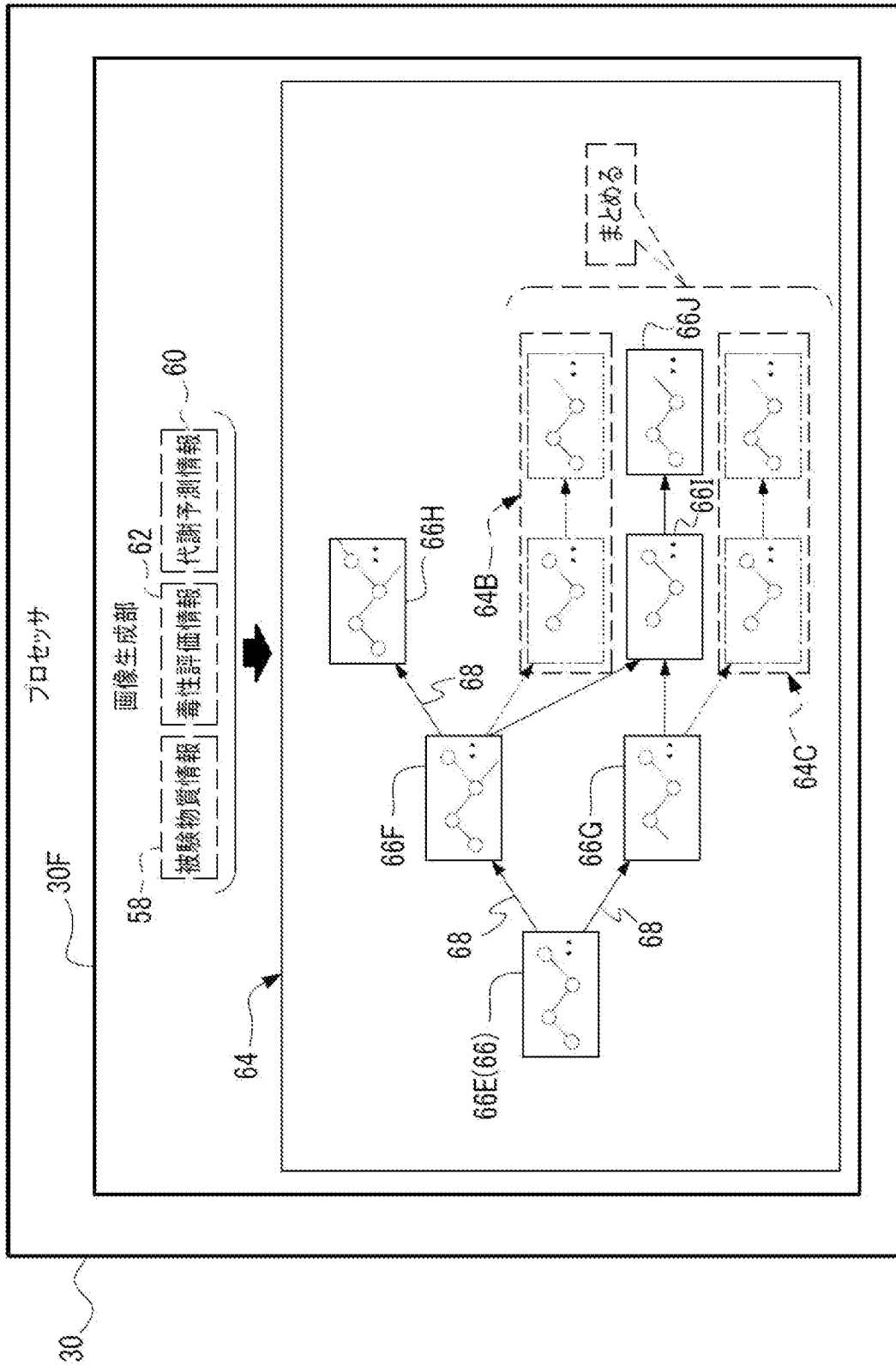




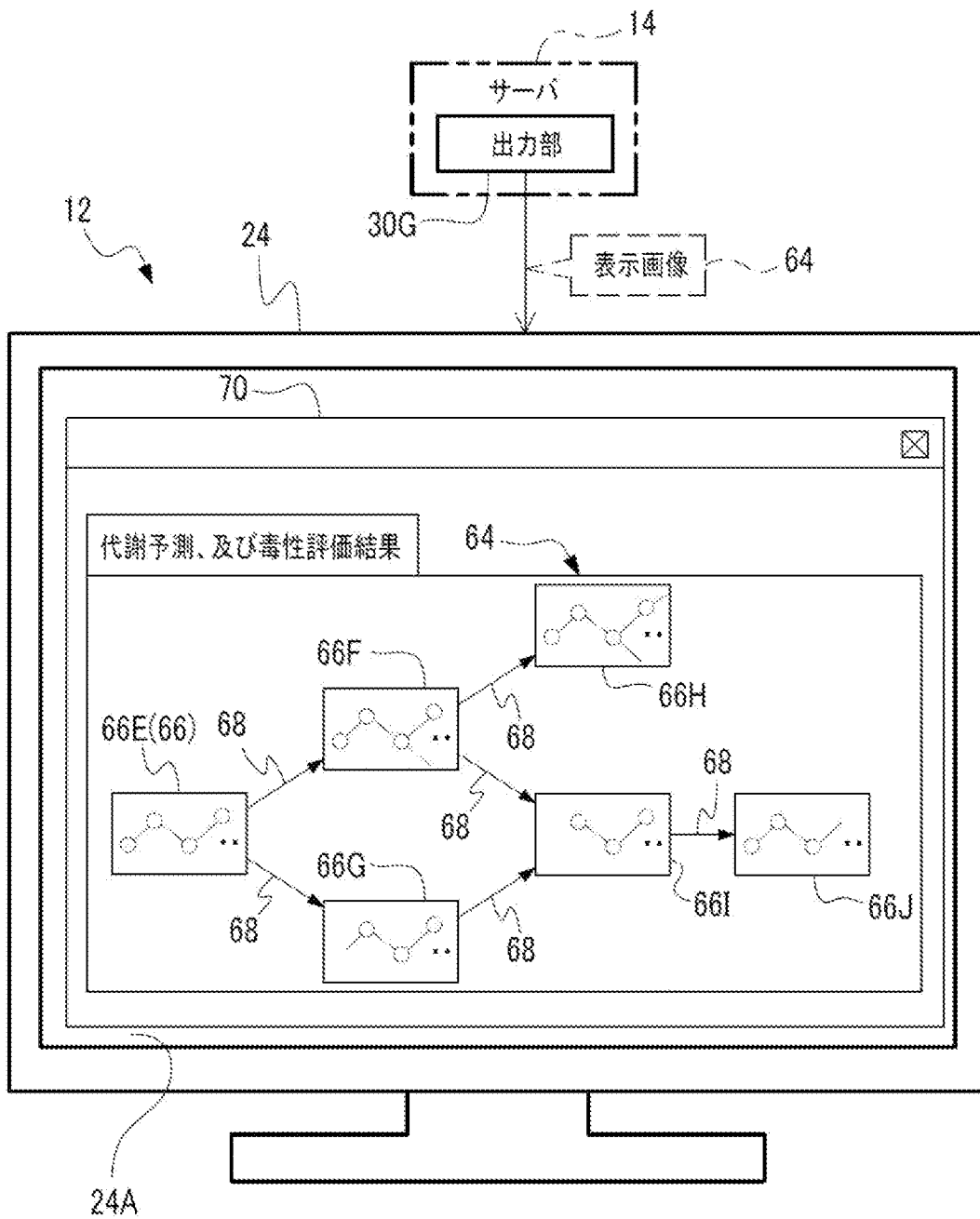
[図12]



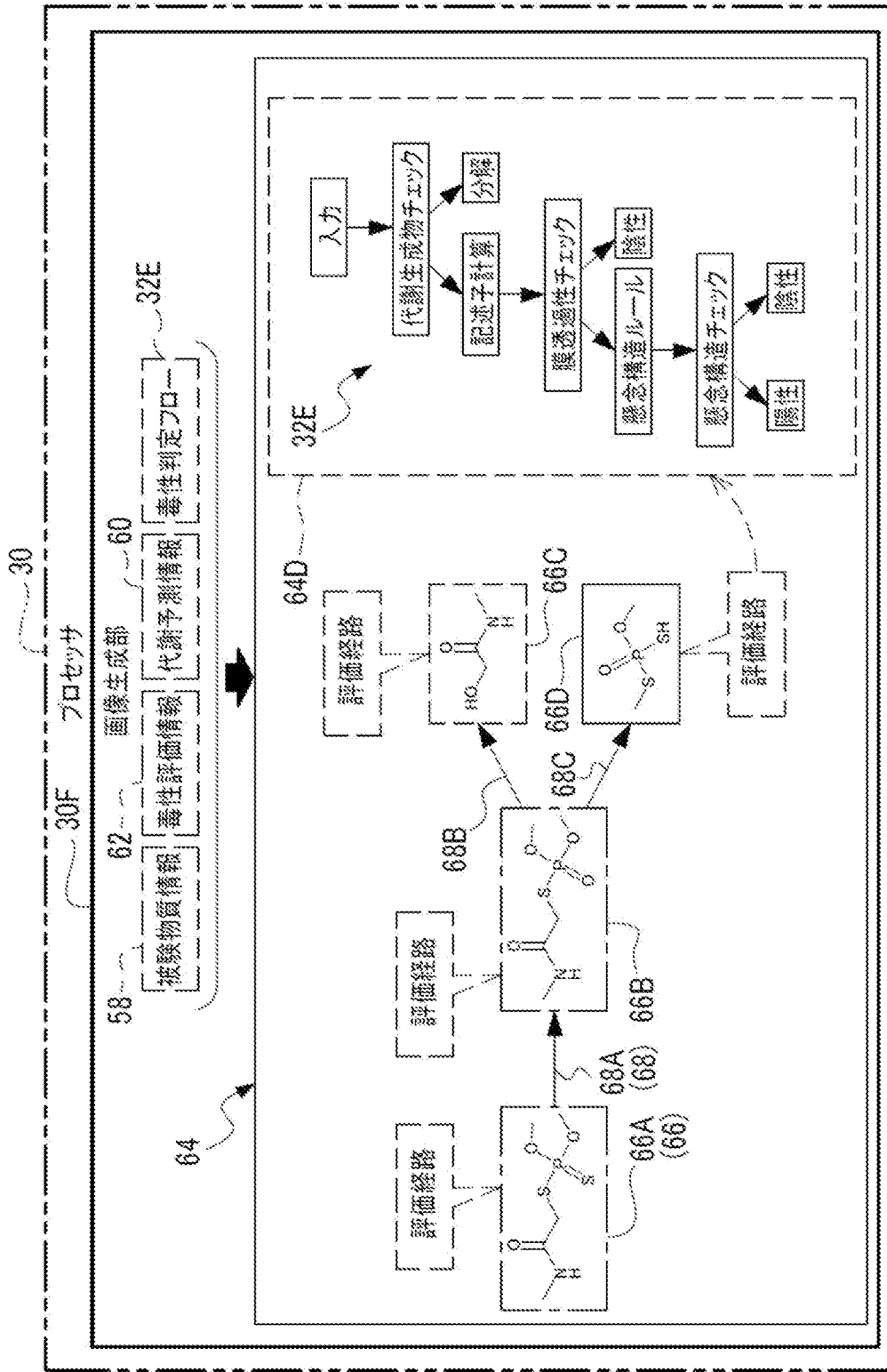
[図13]



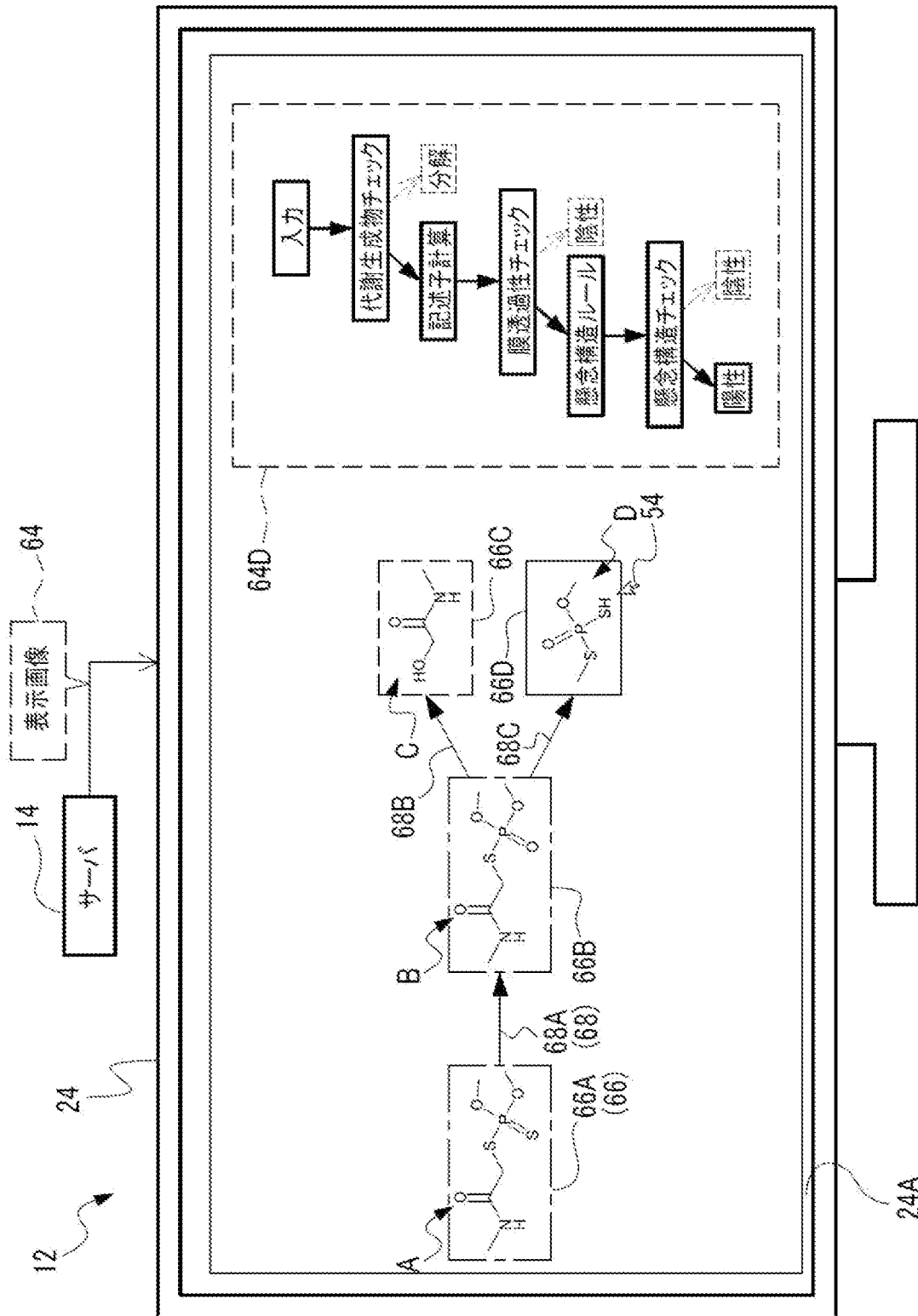
[図14]



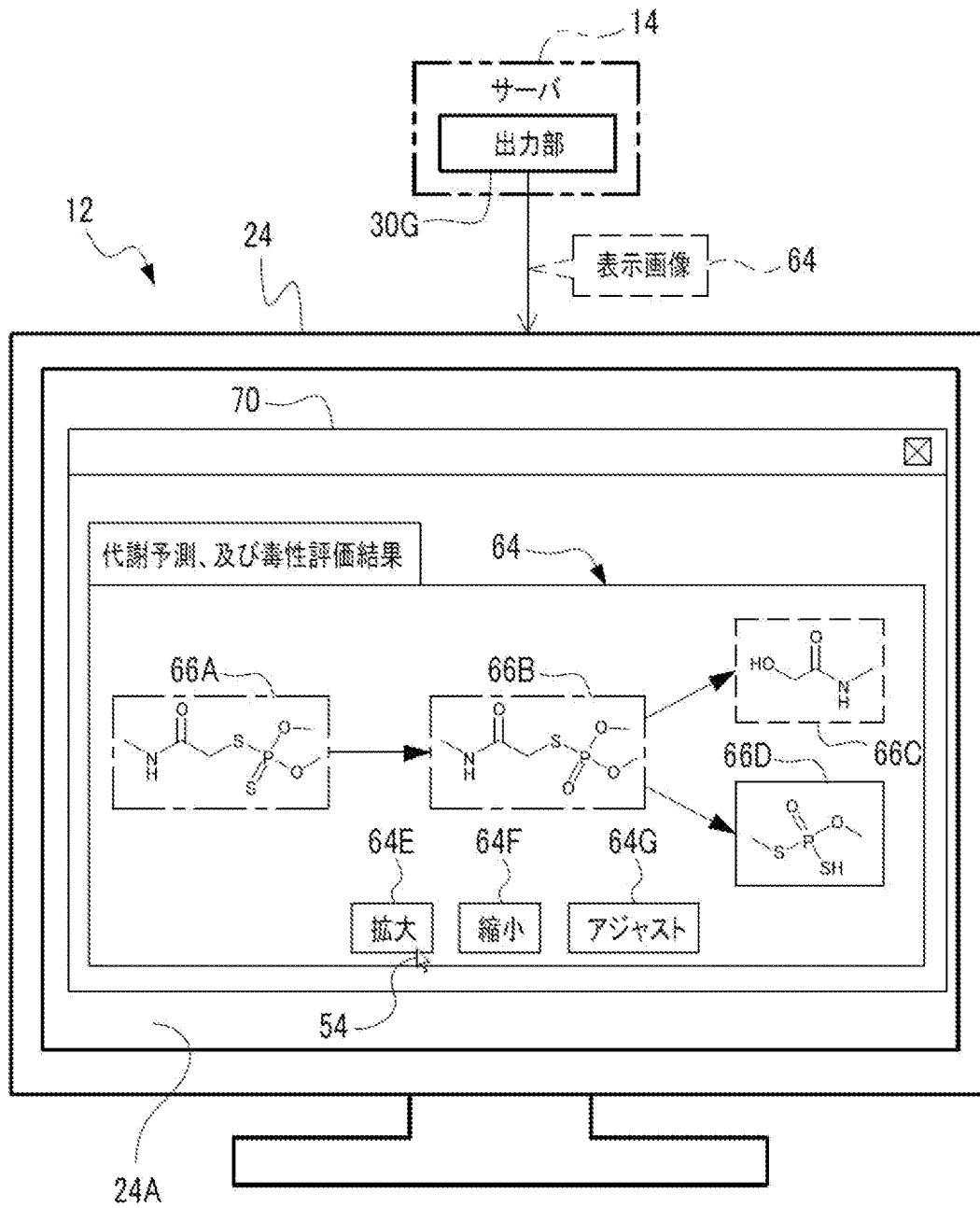
[図15]



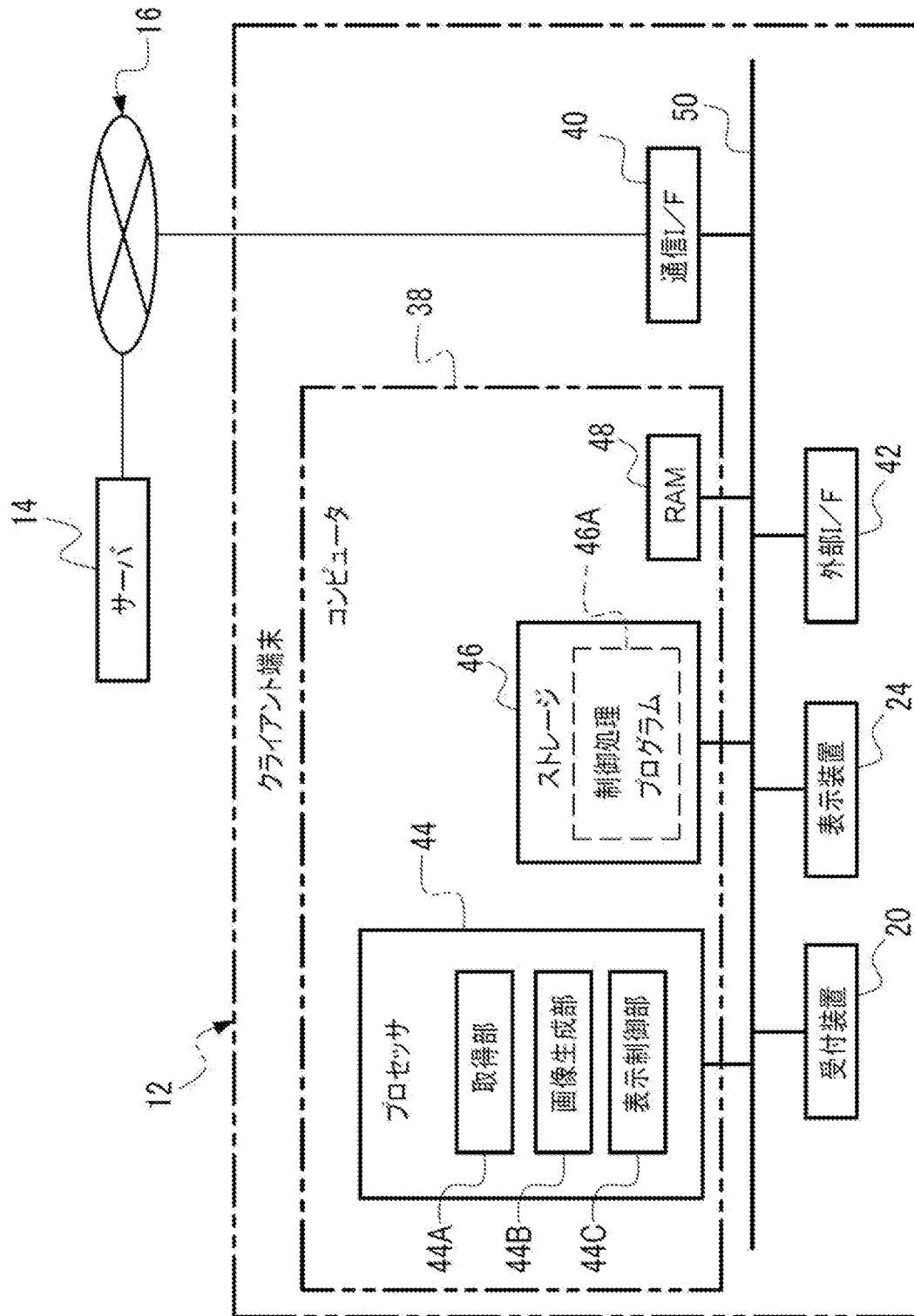
[図16]



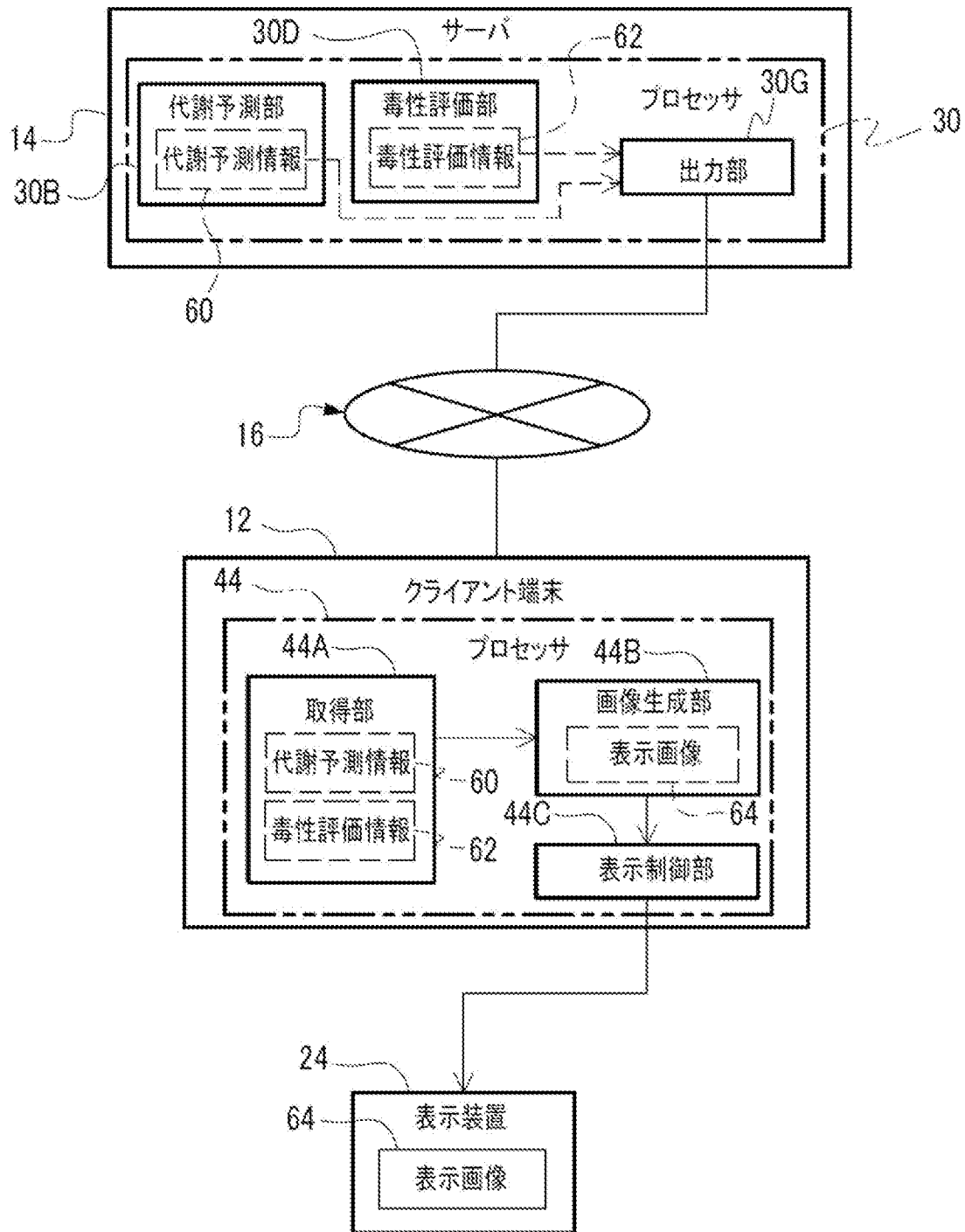
[図17]



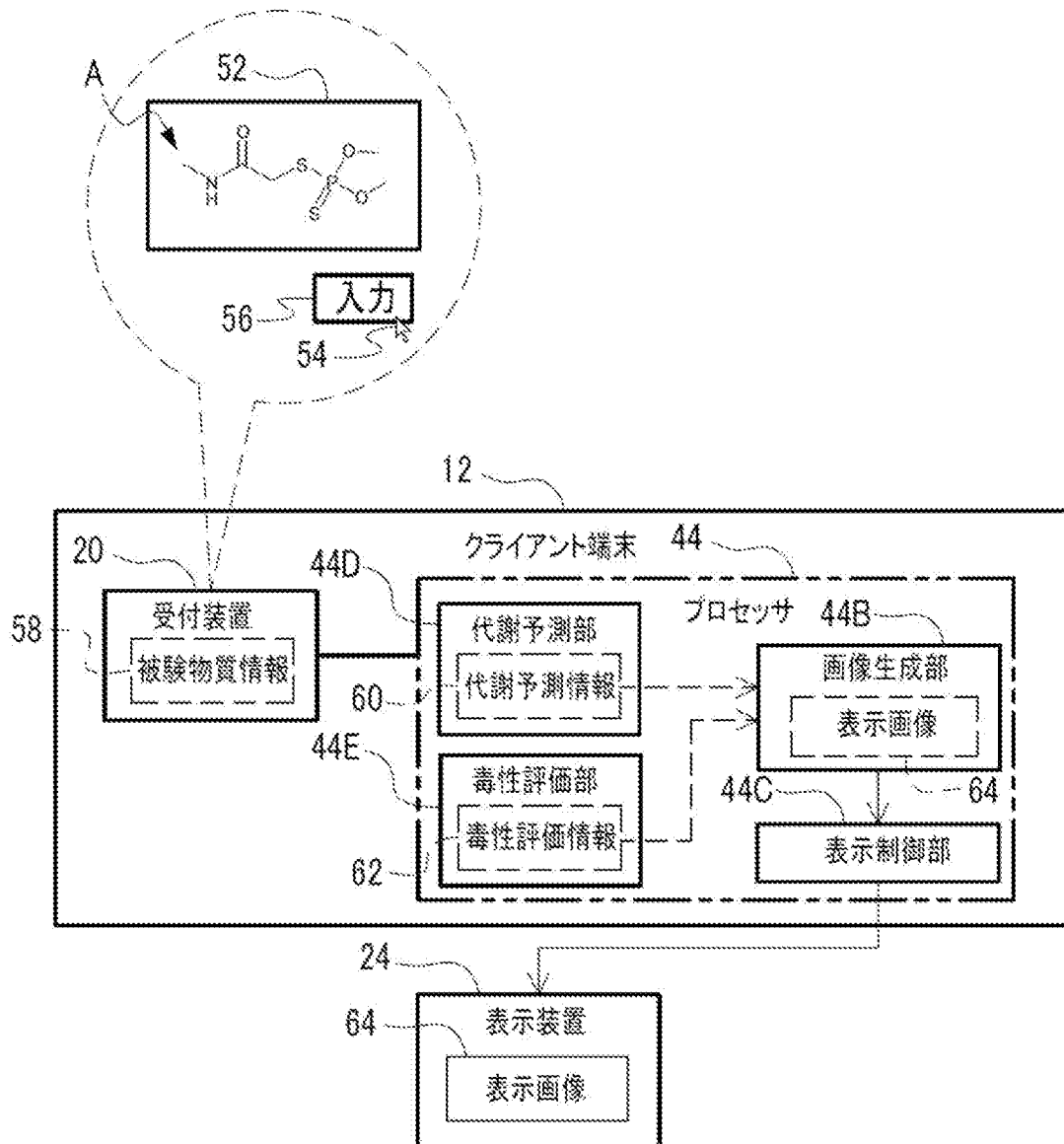
[図18]



[図19]



[図20]



## INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2024/001436

<b>A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER</b> <i>G16C 20/30</i> (2019.01); <i>G06F 16/9038</i> (2019.01); FI: G16C20/30; G06F16/9038  According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC		
<b>B. FIELDS SEARCHED</b>		
Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) G16C10/00-99/00; G06F16/9038		
Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched Published examined utility model applications of Japan 1922-1996 Published unexamined utility model applications of Japan 1971-2024 Registered utility model specifications of Japan 1996-2024 Published registered utility model applications of Japan 1994-2024		
Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)		
<b>C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT</b>		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	RUDIK, Anastasia et al., MetaTox: Web Application for Predicting Structure and Toxicity of Xenobiotics' Metabolites, Journal of Chemical Information and Modeling [online], 27 March 2017, vol. 57, no. 4, pages 638-642, [retrieved on 01 February 2024], Retrieved from the Internet: <URL: <a href="http://dx.doi.org/10.1021/acs.jcim.6b00662">http://dx.doi.org/10.1021/acs.jcim.6b00662</a> > pages 638-640	1, 3-4, 8-10
A	entire text, all drawings	2, 5-7
A	AGAH, Fojan et al., In silico methods for metabolomic and toxicity prediction of zearalenone, $\alpha$ -zearalenone and $\beta$ -zearalenone, Food and Chemical Toxicology [online], 21 October 2020, vol. 146, pages 1-10, [retrieved on 01 February 2024], Retrieved from the Internet: <URL: <a href="https://doi.org/10.1016/j.fct.2020.111818">https://doi.org/10.1016/j.fct.2020.111818</a> > entire text, all drawings	1-10
A	JP 2004-93234 A (HITACHI, LTD.) 25 March 2004 (2004-03-25) entire text, all drawings	1-10
<input type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C. <input checked="" type="checkbox"/> See patent family annex.		
* Special categories of cited documents: "A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance "D" document cited by the applicant in the international application "E" earlier application or patent but published on or after the international filing date "L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means "P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed "T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention "X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone "Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art "&" document member of the same patent family		
Date of the actual completion of the international search <b>06 February 2024</b>		Date of mailing of the international search report <b>20 February 2024</b>
Name and mailing address of the ISA/JP <b>Japan Patent Office (ISA/JP) 3-4-3 Kasumigaseki, Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915 Japan</b>		Authorized officer  Telephone No.

**INTERNATIONAL SEARCH REPORT**  
**Information on patent family members**

International application No.

**PCT/JP2024/001436**

Patent document cited in search report	Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)	Publication date (day/month/year)
JP 2004-93234 A	25 March 2004	(Family: none)	

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC）） G16C 20/30(2019.01)i; G06F 16/9038(2019.01)i FI: G16C20/30; G06F16/9038		
B. 調査を行った分野 調査を行った最小限資料（国際特許分類（IPC）） G16C10/00-99/00; G06F16/9038 最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの 日本国実用新案公報 1922 - 1996年 日本国公開実用新案公報 1971 - 2024年 日本国実用新案登録公報 1996 - 2024年 日本国登録実用新案公報 1994 - 2024年		
国際調査で使用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語）		
C. 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
X	RUDIK, Anastasia et al., Meta Tox: Web Application for Predicting Structure and Toxicity of Xenobiotics' Metabolites, Journal of Chemical Information and Modeling [online], 2017.03.27, Vol.57, No.4, Pages 638-642, [検索日:2024年2月1日], Retrieved from the Internet: <URL: http://dx.doi.org/10.1021/acs.jcim.6b00662 638-640ページ	1,3-4,8-10
A	全文、全図	2,5-7
A	AGAHI, Fojan et al., In silico methods for metabolomic and toxicity prediction of zearalenone, $\alpha$ -zearalenone and $\beta$ -zearalenone, Food and Chemical Toxicology [online], 2020.10.21, Vol.146, Pages 1-10, [検索日:2024年2月1日], Retrieved from the Internet: <URL:https://doi.org/10.1016/j.fct.2020.111818> 全文、全図	1-10
A	JP 2004-93234 A (株式会社日立製作所) 25.03.2004 (2004 - 03 - 25) 全文、全図	1-10
<input type="checkbox"/> C欄の続きにも文献が列挙されている。 <input checked="" type="checkbox"/> パテントファミリーに関する別紙を参照。		
* 引用文献のカテゴリー “A” 特に関連のある文献ではなく、一般的技术水準を示すもの “D” 国際出願で出願人が先行技術文献として記載した文献 “E” 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの “L” 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す） “O” 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献 “P” 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献 “T” 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの “X” 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの “Y” 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの “&” 同一パテントファミリー文献		
国際調査を完了した日	06.02.2024	国際調査報告の発送日 20.02.2024
名称及びあて先 日本国特許庁(ISA/JP) 〒100-8915 日本国 東京都千代田区霞が関三丁目4番3号	権限のある職員（特許庁審査官）  岡北 有平 5R 4677  電話番号 03-3581-1101 内線 3502	

国際調査報告  
パテントファミリーに関する情報

国際出願番号

PCT/JP2024/001436

引用文献	公表日	パテントファミリー文献	公表日
JP 2004-93234 A	25.03.2004	(ファミリーなし)	