

(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12月5日(05.12.2024)

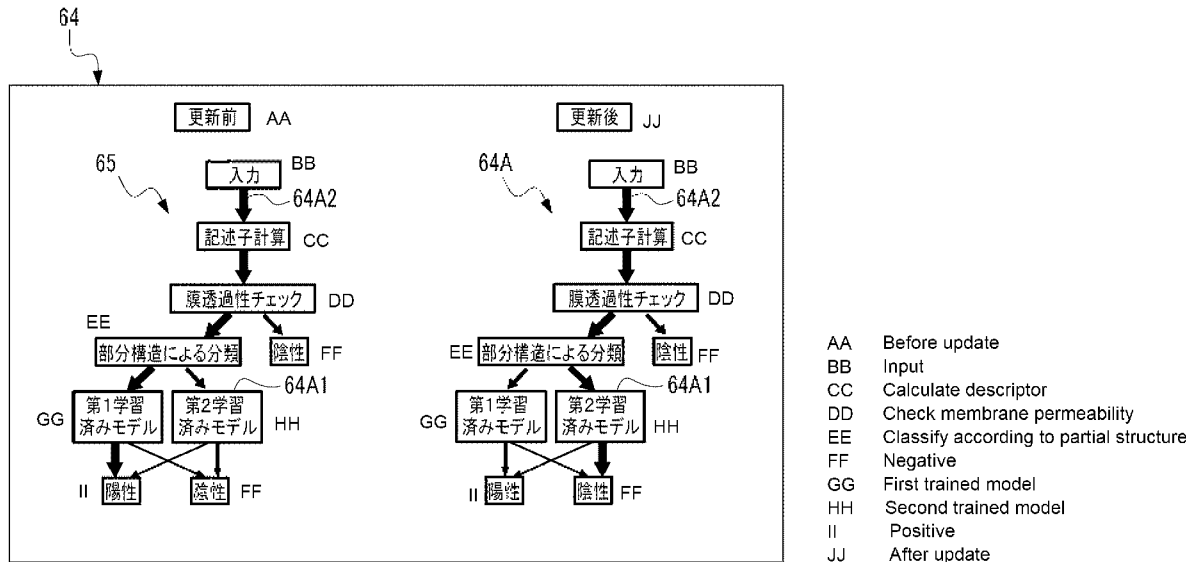


(10) 国際公開番号  
**WO 2024/248145 A1**

- (51) 国際特許分類:  
*G16C 20/30* (2019.01)
- (21) 国際出願番号: PCT/JP2024/020081
- (22) 国際出願日: 2024年5月31日(31.05.2024)
- (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 2023-091157 2023年6月1日(01.06.2023) 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2番30号 Tokyo (JP).
- (72) 発明者: 館下 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).
- (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, 7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



(57) Abstract: This information processing device comprises a processor, the processor executing a control for outputting a flowchart showing a procedure for obtaining toxicity evaluation results for a plurality of compounds of interest. The flowchart has a plurality of preset processing steps arranged in a time series, and includes a determination process step in which a determination condition can be changed and from which subsequent paths branch according to a determination result. In a case where, after a toxicity evaluation result is obtained in accordance with the procedure with respect to at least one compound of interest, the determination condition in the determination process step has been changed and a toxicity evaluation result has been obtained under the determination condition after the change, if a change has occurred

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))

between a pre-change path that has been followed before arriving at the toxicity evaluation result before the change of the determination condition and a post-change path that has been followed before arriving at the toxicity evaluation result after the change of the determination condition, the processor causes the path in which the change has occurred to be displayed in an identifiable manner during the control for outputting the flowchart.

(57) 要約 : プロセッサを備え、プロセッサは、複数の対象化合物の毒性評価結果を得るための手順を示すフローチャートであって、予め設定された複数の処理ステップが時系列に配列され、かつ判定条件の変更が可能であり、判定結果に応じてその後の経路が分岐する判定処理ステップが含まれるフローチャートを出力する制御を実行し、少なくとも1つの対象化合物について手順に従って毒性評価結果が得られた後に、判定処理ステップにおける判定条件が変更され、かつ変更後の判定条件で毒性評価結果が得られた場合において、プロセッサは、フローチャートを出力する制御において、判定条件の変更前の毒性評価結果に至るまでに通過した変更前の経路と、判定条件の変更後の毒性評価結果に至るまでに通過した変更後の経路との間に変化が生じた場合は、変化が生じた経路を識別可能に表示する情報処理装置。

## 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では、単に毒性評価を得るだけでなく、毒性評価の結果に対して、毒性が発現する原因又は毒性が発現しやすい化合物の傾向等の観点から様々な考察を加えることが求められる。

[0003] 特表2013-522649号公報には、試験化合物の催奇性の予測方法であって、(a) (i) 第一の既知の催奇性化合物の存在下；及び(ii) 第一の既知の催奇性化合物の不存在下で、hSLCsを培養する工程、(b) 第一の既知の催奇性化合物に曝露されていないhSLCsと比較して、第一の既知の催奇性化合物に曝露されたhSLCsに関連する約3000ダルトン未満の分子量を有する複数の代謝物を検出し、第一の既知の催奇性化合物に曝露されていないhSLCsと比較した、第一の既知の催奇性化合物に曝露されたhSLCsの代謝応答における違いを同定する工程；(c) 代謝応答における違いを分析し、第一の催奇性化合物へのhSLCsの曝露に関連する質量特性のセットを生じる工程；(d) 毎回異なる既知の催奇性化合物で、工程a)～c)を複数回繰り返す工程；(e) 催奇性化合物への各曝露から生じる質量特性を分類し、質量特性の第一の参照プロファイルを得る工程；(f) 試験化合物へのhSLCsの曝露で生じる質量特性のプロファイルを、第一の参照プロファイルと比較し、試験化合物の催奇性を予測する工程；(g) 試験化合物が催奇性物質であると予測される場合に、質量特性のプロファイルを第一の参照プロファイルへ追加し、第二の参照プロファイ

ルを得る工程であって、第二の参照プロファイルの予測正確性が第一の参照プロファイルの予測正確性より高い工程； 及び（h）工程 f）と g）とを、毎回異なる試験化合物で複数回繰り返し、最終参照プロファイルを得る工程、を含む、予測方法が記載されている。

[0004] 国際公開WO2011/055820号には、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、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支援装置が記載されている。

[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] 上記の特表2013-522649号公報、国際公開WO2011/055820号、及び特開2004-93234号公報に記載の技術では、毒性評価の手法について考慮されているものの、毒性評価に用いられる毒性判定用フローチャート（以下単に「毒性判定フロー」とも称する）を用いた評価については考慮されていない。毒性判定フローは、複数の判定ステップを有し、各判定ステップでの判定結果に応じて、その後の毒性評価の経路が分岐する。

[0007] 毒性評価の精度を向上させるために、毒性判定フローに対して、ユーザにより判定ステップの判定条件の変更が加えられる場合がある。しかし、例えば、毒性判定フローが複雑である場合には、毒性判定フローの判定条件を変更した場合の評価結果への影響を把握することは困難であった。

[0008] 本開示の技術に係る一つの実施形態は、毒性評価における判定条件が変更された場合に、変更後の評価経路において変化があった化合物について、毒性評価に用いられた毒性判定フローにおいてどのような経路を辿ったかを把握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

[0009] 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、毒性評価の対象となる複数の対象化合物の毒性評価結果を得るための手順を示すフローチャートであって、予め設定された複数の処理ステップが時系列に配列され、かつ処理ステップには、判定条件の変更が可能であり、判定結果に応じてその後の経路が分岐する判定処理ステップが含まれるフローチャートを出力する制御を実行し、複数の対象化合物のうち、少なくとも1つの対象化合物について手順に従って毒性評価結果が得られた後に、判定処理ステップにおける判定条件が変更され、かつ変更後の判定条件で手順に従って毒

性評価結果が得られた場合において、プロセッサは、フローチャートを出力する制御において、判定条件の変更前の毒性評価結果に至るまでに通過した変更前の経路と、判定条件の変更後の毒性評価結果に至るまでに通過した変更後の経路との間に変化が生じた場合は、変化が生じた経路を識別可能に表示する情報処理装置である。

[0010] 本開示の技術に係る第2の態様は、判定条件の変更の前後において、複数の対象化合物について毒性評価結果が得られている場合において、フローチャートにおいて、変化が生じた経路の表示態様が、毒性評価において、変化が生じた経路を通過した対象化合物の数に応じて変更される第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3の態様は、フローチャートは、複数の処理ステップと、時系列で前後に配置された処理ステップ同士を繋ぐ結合線とを示し、かつ結合線によって経路が示されるものであり、表示態様は、結合線の太さである第2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4の態様は、結合線の太さは、変化が生じた経路を通過した対象化合物の数が多いほど太くなる第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5の態様は、フローチャートは、複数の処理ステップと、時系列で前後に配置された処理ステップ同士を繋ぐ結合線とを示し、かつ結合線によって経路が示されるものであり、フローチャートにおいて示される処理ステップ又は結合線が選択された場合に、毒性評価において、処理ステップ又は結合線で示される経路を通過した対象化合物を示す画像が表示される第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6の態様は、画像には、対象化合物の分子構造を示す構造データが含まれる第5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7の態様は、画像には、対象化合物が一部として含む部分構造であって、選択された処理ステップ又は結合線を通過した複数の対象化合物の間で共通する構造である共通構造を示す構造データが含まれる

第6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8の態様は、毒性評価の対象となる複数の対象化合物の毒性評価結果を得るための手順を示すフローチャートであって、予め設定された複数の処理ステップが時系列に配列され、かつ処理ステップには、判定条件の変更が可能であり、判定結果に応じてその後の経路が分岐する判定処理ステップが含まれるフローチャートを出力する制御を実行することを含み、複数の対象化合物のうち、少なくとも1つの対象化合物について手順に従って毒性評価結果が得られた後に、判定処理ステップにおける判定条件が変更され、かつ変更後の判定条件で手順に従って毒性評価結果が得られた場合において、フローチャートを出力する制御において、判定条件の変更前の毒性評価結果に至るまでに通過した変更前の経路と、判定条件の変更後の毒性評価結果に至るまでに通過した変更後の経路との間に変化が生じた場合は、変化が生じた経路が識別可能に表示される情報処理方法である。

[0017] 本開示の技術に係る第9の態様は、コンピュータに、毒性評価の対象となる複数の対象化合物の毒性評価結果を得るための手順を示すフローチャートであって、予め設定された複数の処理ステップが時系列に配列され、かつ処理ステップには、判定条件の変更が可能であり、判定結果に応じてその後の経路が分岐する判定処理ステップが含まれるフローチャートを出力する制御を実行すること、を含む処理であって、複数の対象化合物のうち、少なくとも1つの対象化合物について手順に従って毒性評価結果が得られた後に、判定処理ステップにおける判定条件が変更され、かつ変更後の判定条件で手順に従って毒性評価結果が得られた場合において、フローチャートを出力する制御において、判定条件の変更前の毒性評価結果に至るまでに通過した変更前の経路と、判定条件の変更後の毒性評価結果に至るまでに通過した変更後の経路との間に変化が生じた場合は、変化が生じた経路が識別可能に表示さ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、毒性評価における判定条件が変更された場合に、変更後

の評価経路において変化があった化合物について、毒性評価に用いられたフローチャートにおいてどのような経路を辿ったかを把握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]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7]条件設定部及び毒性評価部の処理内容の一例を示す概念図である。
- [図8]差分導出部の処理内容の一例を示す概念図である。
- [図9]画像生成部の処理内容の一例を示す概念図である。
- [図10]表示画像64の表示内容の一例を示す概念図である。
- [図11]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12]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13]画像生成部の処理内容の一例を示す概念図である。
- [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]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16]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17]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。本実施形態において、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、評価処理プログラム32Aが記憶されている。評価処理プログラム32A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32Aを読み出し、読み出した評価処理プログラム32AをRAM34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1取得部30A、毒性評価部30B、及び条件設定部30C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、導出処理プログラム32Bが記載されている。導出処理プログラム32Bは、毒性判定フローの更新前後の毒性評価における経路の変化を導出するためのプログラムである。プロセッサ30は、ストレージ32から導出処理プログラム32Bを読み出し、読み出した導出処理プログラム32BをRAM34上で実行することにより差分導出処理を行う。差分導出処理は、プロセッサ30が、第2取得部30D、及び差分導出部30E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32Cが記憶されている。生成処理プログラム32Cは、クライアント端末12に対して出力される表示画像64（図10等参照）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32Cを読み出し、読み出した生成処理プログラム32CをRAM34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30F、画像生成部30G、及び出力部30Hとして動作することによって実現される。本実施形態において、生成処理プログラム32C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、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、化合物リスト58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。化合物リスト58は、毒性評価の対象となる化学物質のリストである。一例として、一回の毒性評価において、毒性評価の対象となる化合物の数は、数千〜数万個である。化学物質は、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。化合物リスト58は、複数の化合物情報58Aを含んでいる。化合物情報58Aは、化合物の化学構造を特定可能な情報である。化合物情報58A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、化合物リスト58は、CAS (Chemical Abstract Service) 番号、又は化学物質の名称を示す情報のリストであってもよい。この場合において、クライアント端末12又はサーバ14は、CAS番号または化学物質の名称と化学構造との対応関係を記録したテーブルデータ等を参照して、入力された化学物質に対応する化合物情報58Aを読み出す。

[0039] また、化合物リスト58は、化合物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)として示す画像データのリストであってもよい。この場合において、クライアント端末12又はサーバ14は、化合物グラフと化合物情報58Aとの対応関係を記録したテーブルデータ等を参照して、選択された化合物グラフに対応する化合物情報58Aを読み出す。

[0040] 図3に示す例では、表示装置24の画面に化合物リスト58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、化合物リスト58が選択される。選択画面において、例えば

、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、化合物リスト58が送信されると共に、化合物についての毒性評価に関する処理要求が行われる。

[0041] なお、ここでは、複数の化合物情報58Aがリスト化されて、一度に入力される形態例を挙げて説明したが、複数の化合物情報58Aの各々が個別に入力されたり、複数のリストに分けて入力されたりしてもよいことはもちろんである。また、一つの化合物情報58Aが入力されて、一つの化合物及び代謝産物の毒性が評価されてもよい。

[0042] 一例として図4に示すように、クライアント端末12から化合物リスト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、毒性評価処理が実行される。毒性評価処理は、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1取得部30Aは、取得した化合物リスト58を毒性評価部30Bに出力する。毒性評価部30Bは、化合物リスト58の化合物情報58Aにより示される複数の化合物（すなわち、化合物群）に対して毒性の評価を行う。

[0043] 具体的には、毒性評価部30Bは、毒性判定フロー33に従って毒性評価処理を実行する。毒性判定フロー33は、評価処理プログラム32A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33は、毒性を評価するために用いられる判定フローである。

[0044] 毒性判定フロー33は、複数の処理ステップを含んでいる。複数の処理ステップは、予め設定されており、毒性評価の手順に沿って時系列に配列されている。また、処理ステップは、判定処理ステップを含んでおり、判定処理ステップにおける判定結果に応じてその後の経路が分岐する。各判定処理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、化合物が細胞膜を透過するか否か、又は、化合物が部分構造ルールに該当するか否か等が挙げられる。部分構造ルールは、化学構造に関する規定で

あって、予め定められた部分構造（例えば、ユーザ18が関心のある部分構造）を特定するルールである。部分構造ルールとしては、例えば、化学構造におけるベンゼン環の有無、及びその数である。また、判定処理ステップにおける判定条件は、変更可能とされている。

[0045] 毒性評価部30Bは、化合物リスト58を毒性判定フロー33に入力する。毒性評価部30Bは、毒性判定フロー33において、化合物情報58Aに対して、判定ステップ毎に毒性評価に関する判定を実行する。毒性評価部30Bは、実行するそれぞれの毒性判定フロー33に応じて、毒性評価結果として、それぞれ更新前評価情報62Aを出力する。以下に説明するステップST1～ST5は、本開示の技術に係る「処理ステップ」の一例であり、ステップST2～ST5は、本開示の技術に係る「判定処理ステップ」の一例である。

[0046] 一例として図5に示すように、化合物情報58Aが、毒性判定フロー33に入力される。毒性判定フロー33において、ステップST1で、化合物情報58Aに対して記述子計算が実行される。記述子としては、化合物のモル質量又はLogP（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。

[0047] ステップST2で、ステップST1で実行された化合物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ST2における判定が肯定されると、毒性評価は、ステップST3へ移行する。ステップST2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。

[0048] ステップST3で、ステップST3の化合物の部分構造による化合物の分類が行われる。具体的には、化合物情報58Aに対して部分構造ルールの適

用が実行される。これにより、化合物が部分構造を有するか否かが判定される。そして、各化合物の分子構造において、部分構造が含まれる否かの判定結果に基づいて、化合物の分類が行われる。すなわち、化合物の有する部分構造の組み合わせに応じて、化合物が予め定められた区分に選別される。なお、部分構造ルールは、複数あってもよく、複数の部分構造ルールの各々について、毒性評価の対象となる化合物が部分構造を有するか否かが判定される。ステップS T 3の処理が実行された後、毒性評価は、ステップS T 4へ移行する。

[0049] ステップS T 3における分類結果に応じて、毒性評価は、ステップS T 4に移行する。ステップS T 4において、第1学習済みモデルを用いた判定が実行される。第1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毒性の判定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、分類された被験物質を特定可能な情報を例題データとし、毒性の判定結果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。

[0050] また、ステップS T 3における分類結果に応じて、毒性評価は、ステップS T 5に移行する。ステップS T 5において、第2学習済みモデルを用いた判定が実行される。第2学習済みモデルは、第1学習済みモデルとは異なる学習済みモデルである。第2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毒性の判定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、分類された被験物質を特定可能な情報を例題データとし、毒性の判定結果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。

[0051] ステップS T 4及びステップS T 5の判定を経て、最終的な毒性評価結果が出力される。毒性評価結果としては、陽性（すなわち、毒性あり）又は陰性（すなわち、毒性なし）の評価結果が出力される。

- [0052] なお、ここでは、毒性評価結果として陽性又は陰性（例えば、陽性を1とし、陰性を0とする値）が出力される例を挙げたがこれはあくまでも一例に過ぎない。毒性評価結果として、陽性又は陰性である確率を示す値（例えば、0～1の間のスコア）が出力されてもよい。
- [0053] 図5に示す例では、化合物Aに対する毒性評価が、毒性判定フロー33で辿った経路及び処理ステップが示され、最終的に化合物Aが陽性と評価された例が示されている。また、更新前評価情報62Aには、毒性評価結果を示す情報と共に、毒性判定フロー33において毒性評価結果に至る経路（以下、単に「評価経路」とも称する）を示す情報、判定項目の説明を示す情報、及び、処理ステップ毎の判定結果の詳細を示す情報も含まれている。
- [0054] このように、毒性判定フロー33は、入力された化合物情報58Aに応じて、更新前評価情報62Aを出力する。更新前評価情報62Aにおいて、化合物毎に評価結果及び経路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。毒性評価部30Bは、更新前評価情報62Aを第2取得部30Dに出力する。
- [0055] ところで、毒性判定フロー33を用いて化合物の毒性評価を行う場合に、ユーザが判定処理ステップにおける判定条件を変更することがある。判定条件を変更する目的としては、例えば、毒性評価の精度の向上が挙げられる。例えば、ユーザが、ある毒性判定フロー33を用いた評価結果を考察し、判定条件に対して有機化学の理論に基づいた調整（例えば、部分構造ルールを追加したり、膜透過性に関する閾値を変更したりする等）を加える。これにより、更新後の毒性判定フロー33による毒性評価の精度が向上する場合がある。
- [0056] しかしながら、毒性判定フロー33が更新された場合、更新による毒性判定フロー33による毒性評価へどのような影響があったかを把握することは困難であった。例えば、毒性判定フロー33が複雑である場合（例えば、判定処理ステップが大量にある場合）に、判定処理ステップに加えた変更が、どのように評価結果の変化に影響しているかを把握することは困難であった

。

[0057] そこで、本実施形態では、プロセッサ30において差分導出処理が実行される。差分導出処理は、毒性判定フロー33の更新前後で、毒性評価に生じた変化を導出する処理である。一例として図6に示すように、ユーザ18は、記述子リスト60及び構造ルールリスト61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。記述子リスト60は、更新後の毒性判定フロー33の判定処理ステップにおいて判定に用いられる記述子のリストである。記述子リスト60は、複数の記述子情報60Aを含んでいる。記述子情報60Aには、記述子計算を行う処理ステップ（例えば、図5に示すステップST1）で用いられる記述子であって、変更後の記述子を特定可能な情報を含んでいる。また、記述子情報60Aには、記述子計算結果と閾値との比較を行う判定処理ステップ（例えば、図5に示すステップST2）で用いられる閾値であって、変更後の閾値を特定可能な情報も含んでいる。

[0058] 構造ルールリスト61は、部分構造ルールのリストである。構造ルールリスト61は、複数の構造ルール情報61Aを含んでいる。構造ルール情報61Aは、部分構造を特定可能な情報である。より具体的には、構造ルール情報61Aは、部分構造の構造式、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、構造ルールリスト61は、化学構造の名称を示す情報のリストであってもよい。この場合において、クライアント端末12又はサーバ14は、化学構造の名称と化学構造との対応関係を記録したテーブルデータ等を参照して、入力された部分構造に対応する構造ルール情報61Aを読み出す。

[0059] また、構造ルールリスト61は、部分構造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）として示す画像データのリストであってもよい。この場合において、クライアント端末12又はサーバ14は、化合物グラフと構造ルール情報61Aとの対応関係を記録したテーブルデータ等を参照して、選択された化合物グラフに対応する

構造ルール情報 6 1 A を読み出す。

[0060] 図 6 に示す例では、表示装置 2 4 の画面に記述子リスト 6 0 及び構造ルールリスト 6 1 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 1 8 が選択操作を行うことにより、例えば、記述子リスト 6 0 及び構造ルールリスト 6 1 が選択される。選択画面には、例えば、ユーザ 1 8 は、マウス 2 2 を介して表示装置 2 4 の画面に表示されたポインタ 5 4 を操作することで、入力ソフトキー 5 6 をクリックする。これにより、クライアント端末 1 2 からサーバ 1 4 に対して、記述子リスト 6 0 及び構造ルールリスト 6 1 が送信されると共に、毒性判定フロー 3 3 の更新に関する処理要求が行われる。

[0061] 一例として図 7 に示すように、第 1 取得部 3 0 A は、取得した記述子リスト 6 0 及び構造ルールリスト 6 1 を条件設定部 3 0 C に出力する。条件設定部 3 0 C は、記述子リスト 6 0 及び構造ルールリスト 6 1 に基づいて、毒性判定フロー 3 3 の判定処理ステップの判定条件を変更する。具体的には、条件設定部 3 0 C は、記述子リスト 6 0 により示される記述子情報 6 0 A に応じて、記述子計算を実行する処理ステップにおいて用いられる記述子を変更する。また、条件設定部 3 0 C は、記述子情報 6 0 A に応じて、記述子計算結果と閾値との比較が行われる判定処理ステップにおいて用いられる閾値を変更する。図 7 に示す例では、記述子リスト 6 0 に基づいて、ステップ S T 1 における記述子を変更され、さらに、ステップ S T 2 の膜透過性チェックにおける閾値が変更される例が示されている。

[0062] 条件設定部 3 0 C は、構造ルールリスト 6 1 により示される構造ルール情報 6 1 A に応じて、部分構造ルールが適用される判定処理ステップにおいて用いられる部分構造ルールを変更する。図 7 に示す例では、構造ルールリスト 6 1 に基づいて、ステップ S T 3 において適用される部分構造ルールが変更される。例えば、部分構造としてベンゼン環が挙げられる場合、構造ルールリスト 6 1 によりベンゼン環として判定される構造式の変更がされる。そして、条件設定部 3 0 C は、更新後の毒性判定フロー 3 3 を毒性評価部 3 0 B に対して出力する。

[0063] 毒性評価部 30B は、更新後の毒性判定フロー 33 を用いて、化合物リスト 58 の化合物情報 58A により示される複数の化合物（すなわち、化合物群）に対して毒性の評価を行う。ここで評価の対象となる化合物群は、更新前の毒性判定フロー 33 による毒性評価の行われた化合物群と同じである。毒性評価部 30B は、更新後の毒性判定フロー 33 を用いて毒性評価を行った結果を、更新後評価情報 62B として第 2 取得部 30D に出力する。更新後評価情報 62B には、更新前評価情報 62A と同様に、毒性評価を行った結果を示す情報に加えて、評価経路を示す情報、判定項目の説明を示す情報、及び、処理ステップ毎の判定結果の詳細を示す情報も含まれている。

[0064] 図 7 に示す例では、化合物 A に対する毒性評価が、更新後の毒性判定フロー 33 で辿った経路及び判定ステップが示され、最終的に化合物 A が陰性と評価された例が示されている。ここで、図 7 に示す化合物 A に対する毒性評価における評価経路は、図 5 に示す化合物 A に対する毒性評価における評価経路と異なっている。具体的には、ステップ ST3 の判定条件の変更に伴って、化合物 A についてのステップ ST3 の判定結果が異なっており、その後の評価経路に変化が生じている。さらに、判定条件の変更前においては、化合物 A の毒性評価結果は陽性であったのに対して、判定条件の更新後は陰性に変化しているというように毒性評価結果の結論も異なっている。このように、毒性判定フロー 33 において、判定処理ステップの判定条件を変更することで、化合物の毒性評価における経路に変化が生じる場合がある。なお、ここでは、化合物 A において、毒性判定フロー 33 における評価経路に変化が生じた場合を示しているが、その他の化合物についても評価経路変化が生じ得ることはもちろんである。

[0065] この場合において、一例として図 8 に示すように、第 2 取得部 30D は、更新前評価情報 62A 及び更新後評価情報 62B を差分導出部 30E に対して出力する。差分導出部 30E は、差分導出処理を実行する。具体的には、差分導出部 30E は、更新前評価情報 62A により示される評価経路と更新後評価情報 62B により示される評価経路とを化合物毎に比較する。そして

、差分導出部30Eは、更新後評価情報62Bにおいて、更新前評価情報62Aから評価経路に変化のあった化合物を抽出し、差分評価情報62Cを生成する。差分評価情報62Cは、判定条件を変更した場合に、評価経路に変化のあった化合物及び変化後の評価経路を特定可能な情報である。

[0066] 図8に示す例では、更新前評価情報62Aと更新後評価情報62Bとの比較が行われた結果、評価経路に変化のあった化合物A及びCが抽出され、差分評価情報62Cとして、それらの化合物及び評価経路を示す情報が生成されている例が示されている。そして、差分導出部30Eは、差分評価情報62Cを第3取得部30Fに対して出力する。

[0067] 一例として図9に示すように、第3取得部30Fは、差分評価情報62C及び毒性判定フロー33を画像生成部30Gに対して出力する。画像生成部30Gは、差分評価情報62C及び毒性判定フロー33に基づいて表示画像64を生成する。表示画像64は、フロー画像64Aを含んでいる。フロー画像64Aは、本開示の技術に係る「フローチャート」の一例である。

[0068] フロー画像64Aは、毒性判定フロー33による化合物群の毒性評価の結果を得るための手順を示す画像である。フロー画像64Aは、複数のステップ記号64A1と結合線64A2とを含んでいる。結合線64A2により、毒性判定フロー33における毒性評価の経路が示される。ステップ記号64A1は、毒性判定フロー33における各処理ステップの内容を示す記号である。ここでは、一例として、矩形の枠線の中に処理ステップの内容を説明するテキストが示されている。

[0069] 結合線64A2は、時系列で前後に配置されたステップ記号64A1同士を繋ぐ線であり、ここでは、一例として矢印で示されている。フロー画像64Aにおいて、差分評価情報62Cにより示される評価経路に変化のあった化合物について、変化後の評価経路が識別可能に表示される。結合線64A2は、本開示の技術に係る「結合線」の一例である。

[0070] また、変化後の評価経路の表示態様は、変化後の評価経路を通過した化合物の数に応じて変更される。図9に示す例では、フロー画像64Aにおいて

、評価経路に変化のあった化合物の変化後の評価経路を示す結合線64A2の太さが、結合線64A2を通過した化合物の数に応じて変更される。これにより、評価経路に変化のあった化合物の変化後の評価経路が示される。図9に示す例では、結合線64A2の太さが、結合線64A2を通過した化合物の数が多いほど太く表示される。

[0071] すなわち、図9に示したように、差分評価情報62Cには、化合物Aおよび化合物C等、評価経路が変化した化合物について、化合物毎に評価結果と評価経路とが含まれている。フロー画像64Aを生成する場合において、画像生成部30Gは、一例として、差分評価情報62Cから抽出した化合物毎の評価経路に基づいて、毒性判定フロー33の各処理ステップ間の経路を通過する化合物の数をカウントし、数が多い経路ほどそれに対応する結合線64A2の太さを太くする。

[0072] 図9に示す例では、まず、評価経路が変化した化合物においては、「膜透過性チェック」の処理ステップから陰性に至る経路よりも、「部分構造による分類」に至る経路に対応する結合線64A2の方が太い。このことから、評価経路が変化した化合物においては、「膜透過性チェック」の処理ステップから「部分構造による分類」に至る経路を通過する化合物の数が多いことがわかる。また、「部分構造による分類」の処理ステップから分岐する2つの結合線64A2の太さから、「第1学習済みモデル」に至る経路よりも、「第2学習済みモデル」に至る経路を通過する化合物が多いことがわかる。そして、評価経路が変化した化合物においては、「第2学習済みモデル」から「陽性」と「陰性」に至る2つの結合線64A2の太さから、「第2学習済みモデル」において「陰性」と判定された化合物が多いことがわかる。

[0073] 上述したとおり、差分評価情報62Cには、判定条件の変更の前後において評価経路が変化した化合物のみが記載されている。図9に示す例のフロー画像64Aのように、結合線64A2の太さを変化させることによって、差分評価情報62Cに記載の評価経路が変化した化合物が、どのような評価経路を辿った化合物が多いかといったことを把握することができる。

- [0074] なお、ここでは、変化が生じた経路を通過した化合物の数に応じて結合線 6 4 A 2 の太さが変更される形態例を挙げたが、これはあくまでも一例にすぎない。例えば、結合線 6 4 A 2 の太さに代えて、又は太さと共に、化合物の数に応じて結合線 6 4 A 2 の色（例えば、化合物の数が多いほど赤くなり、少ないほど青くなる）、及び／又は線種（例えば、化合物の数が多いほど実線になり、少ないほど点線になる）が変更される態様であってもよい。
- [0075] また、フロー画像 6 4 A において、各ステップ記号 6 4 A 1 には、差分評価情報 6 2 C に基づいて、処理ステップを通過した化合物を示す情報が紐づけられている。また、各結合線 6 4 A 2 にも、差分評価情報 6 2 C に基づいて、結合線 6 4 A 2 を通過した化合物を示す情報が紐づけられている。具体的には、フロー画像 6 4 A において、差分評価情報 6 2 C により示される評価経路に対応したステップ記号 6 4 A 1 及び結合線 6 4 A 2 に対して、差分評価情報 6 2 C により示される化合物が対応付けられている。
- [0076] また、一例として図 1 0 に示すように、表示画像 6 4 において、フロー画像 6 4 A とともに、更新前フロー画像 6 5 が表示されてもよい。更新前フロー画像 6 5 は、更新される前の毒性判定フロー 3 3（図 5 参照）において、差分評価情報 6 2 C により示される化合物が辿った評価経路を示す画像である。画像生成部 3 0 G は、フロー画像 6 4 A と同様に、更新前の毒性判定フロー 3 3、及び差分評価情報 6 2 C に基づいて更新前フロー画像 6 5 を生成する。そして、画像生成部 3 0 G は、表示画像 6 4 において、更新前フロー画像 6 5 とフロー画像 6 4 A とを並べて配置する。
- [0077] 更新前フロー画像 6 5 においても、評価経路の表示態様は、評価経路を通過した化合物の数に応じて変更される。図 1 0 に示す例では、評価経路に変化のあった化合物について、変化前の評価経路を示す結合線 6 4 A 2 の太さが、結合線 6 4 A 2 を通過した化合物の数に応じて変更される。これにより、評価経路に変化のあった化合物の変化前の評価経路が示される。図 1 0 に示す例では、結合線 6 4 A 2 の太さが、結合線 6 4 A 2 を通過した化合物の数が多いほど太く表示される。図 1 0 に示す例では、更新前フロー画像 6 5

では、「部分構造による分類」から「第1学習済みモデル」を通り、「陰性」に至る評価経路が相対的に多い。対して、フロー画像64Aでは、「部分構造による分類」から「第2学習済みモデル」を通り、「陽性」に至る評価経路が相対的に多い。

[0078] このように、評価経路に変化が生じた場合に、更新前フロー画像65とフロー画像64Aとを比較することで、変化が生じた経路を識別することが容易となる。また、更新前フロー画像65及びフロー画像64Aの各々において、評価経路を通過した化合物の数に応じて、評価経路の表示態様が変更される。これにより、評価経路に変化のあった化合物について、変化前後の評価経路を比較することが容易になる。

[0079] 画像生成部30Gは、生成した表示画像64を出力部30Hに対して出力する。一例として図11に示すように、サーバ14の出力部30H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。

[0080] 上述したように、表示画像64は、フロー画像64Aを含んでいる。毒性判定フロー33を用いた毒性評価において、化合物群の中のいくつかの化合物（例えば、上述した化合物A）には、判定条件の変更前の評価経路と変更後の評価経路との間に変化が生じている。そして、フロー画像64Aには、変化が生じた経路が識別可能に表示されている。図11に示す例では、評価経路に変化のあった化合物が更新後の毒性判定フロー33において通過した評価経路が、更新後の毒性判定フロー33を示すフロー画像64Aに示されている。

[0081] 図11に示す例では、フロー画像64Aにおいて、ステップ記号64A1がポインタ54を介して選択されている。この場合に、詳細画像64Bが表示される。詳細画像64Bには、毒性評価において、選択された処理ステップを通過した化合物を示す化合物画像64B1が含まれる。ここでは、第2

学習済みモデルを用いた毒性評価の処理ステップに対応したステップ記号 6 4 A 1 が選択され、化合物画像 6 4 B 1 において第 2 学習済みモデルを用いた毒性評価の対象となった 3 つの化合物の分子構造を示す構造式が示されている。構造式以外の構造データとしては、例えば、化合物グラフ、又は分子構造を記述するテキスト等が表示されてもよい。化合物画像 6 4 B 1 は、本開示の技術に係る「対象化合物の分子構造を示す構造データ」の一例である。

[0082] なお、ここでは、化合物画像 6 4 B 1 において構造データが示されてい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。例えば、構造データに代えて、又は構造データとともに化合物の名称、CAS 番号、及び／又は分子式が示されてもよい。

[0083] また、ここでは、ステップ記号 6 4 A 1 が選択された場合に、ステップ記号 6 4 A 1 に対応した処理ステップを通過した化合物の詳細画像 6 4 B が表示される形態例を挙げたが、これはあくまでも一例にすぎない。ステップ記号 6 4 A 1 が選択された場合に、ステップ記号 6 4 A 1 に対応した処理ステップに入力された化合物又は処理ステップから出力された化合物が詳細画像 6 4 B に表示されてもよい。この場合において、処理ステップに入力された化合物又は出力された化合物が、切り替え可能な態様で詳細画像 6 4 B に表示されてもよい。

[0084] また、ここでは、ステップ記号 6 4 A 1 が選択される形態例を挙げたが、結合線 6 4 A 2 が選択されてもよく、この場合に、毒性評価において結合線 6 4 A 2 を通過した化合物に対応した化合物画像 6 4 B 1 が表示される。

[0085] 次に、本実施形態に係るサーバ 1 4 における制御処理について、図 1 2 を参照しながら説明する。サーバ制御処理は、サーバ 1 4 で実行される処理であって、上述した毒性評価処理、差分導出処理、及び画像生成処理を含む処理である。図 1 2 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 1 2 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。

- [0086] 一例として図12に示すサーバ制御処理では、先ず、ステップST10で、第1取得部30Aは、化合物リスト58及び処理要求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、化合物リスト58及び処理要求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、化合物リスト58及び処理要求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。
- [0087] ステップST12で、毒性評価部30Bは、ステップST10で取得された化合物リスト58により示される化合物に対して、毒性判定フロー33を用いて毒性評価を行う。これにより、更新前評価情報62Aが得られる。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。
- [0088] ステップST14で、第1取得部30Aは、記述子リスト60及び構造ルールリスト61を取得したか否かを判定する。ステップST14の判定において、記述子リスト60及び構造ルールリスト61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ST16へ移行する。ステップST14の判定において、記述子リスト60及び構造ルールリスト61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ST14へ戻る。
- [0089] ステップST16で、条件設定部30Cは、ステップST14で取得された記述子リスト60及び構造ルールリスト61に基づいて、毒性判定フロー33を更新する。具体的には、記述子リスト60及び構造ルールリスト61に応じて、毒性判定フロー33の判定ステップにおける判定条件を変更する。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。
- [0090] ステップST18で、毒性評価部30Bは、更新後の毒性判定フロー33を用いて、ステップST10で取得された化合物リスト58により示される化合物について、毒性評価を行う。これにより、更新後評価情報62Bが得

られる。ステップS T 1 8の処理が実行された後、サーバ制御処理は、ステップS T 2 0へ移行する。

[0091] ステップS T 2 0で、差分導出部3 0 Eは、ステップS T 1 2で得られた更新前評価情報6 2 Aと、ステップS T 1 8で得られた更新後評価情報6 2 Bとを比較する。これにより、更新前後で毒性評価の経路が変化した化合物を示す差分評価情報6 2 Cが得られる。ステップS T 2 0の処理が実行された後、サーバ制御処理は、ステップS T 2 2へ移行する。

[0092] ステップS T 2 2で、画像生成部3 0 Gは、差分評価情報6 2 Cに基づいて、表示画像6 4を生成する。表示画像6 4には、フロー画像6 4 Aが含まれる。フロー画像6 4 Aにおいて、差分評価情報6 2 Cにより示される評価経路に変化のあった化合物について、変化後の評価経路が示される。ステップS T 2 2の処理が実行された後、サーバ制御処理は、ステップS T 2 4へ移行する。

[0093] ステップS T 2 4で、出力部3 0 Hは、ステップS T 2 2で画像生成部3 0 Gにより生成された表示画像6 4をクライアント端末1 2に対して出力する制御を実行する。具体的には、出力部3 0 Hは、クライアント端末1 2に表示画像6 4を送信する。ステップS T 2 4の処理が実行された後、サーバ制御処理は、ステップS T 2 6へ移行する。

[0094] ステップS T 2 6で、出力部3 0 H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、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S T 2 6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S T 1 0へ移行する。ステップS T 2 6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。

[0095] 以上説明したように、本第1実施形態に係る情報処理システム1 0では、サーバ1 4のプロセッサ3 0において、毒性評価部3 0 Bによって化合物の毒性評価が行われる。また、条件設定部3 0 Cは、記述子リスト6 0及び構

造ルールリスト 61 に基づいて、毒性判定フロー 33 の更新を行う。そして、毒性評価部 30B は、更新後の毒性判定フロー 33 を用いて、化合物の毒性評価を行う。差分導出部 30E は、更新前評価情報 62A と更新後評価情報 62B と比較することにより、差分評価情報 62C を生成する。画像生成部 30G は、差分評価情報 62C に基づいてフロー画像 64A を生成する。フロー画像 64A には、判定条件の変更前の経路と変更後の経路との間に変化が生じた経路が識別可能に表示されている。そして、出力部 30H は、フロー画像 64A を含む表示画像 64 を出力する制御を実行する。これにより、毒性評価における判定条件が変更された場合に、変更後の評価経路において変化があった化合物について、フロー画像 64A 上で、どのような経路を辿ったかが視覚的に把握しやすくなる。この結果、判定条件の変更による評価結果への影響をユーザが把握しやすくなる。

[0096] 例えば、従来既知のソフトウェアにおいては、時系列で前後に存在する処理ステップの間で、出力結果の比較を行うことで、フロー全体に与える影響をユーザが推定していたが、一見して判定条件の変更による評価結果への影響が分かりにくかった。本構成では、評価経路に変化のあった化合物が、毒性判定フロー 33 上でどのような経路を辿ったかが視覚的に把握される。これにより、判定条件の変更による評価結果への影響をユーザが把握しやすくなる。

[0097] また、本第 1 実施形態に係る情報処理システム 10 では、フロー画像 64A において、変化が生じた経路の表示態様が、毒性評価において、変化が生じた経路を通過した化合物の数に応じて変更されている。これにより、判定条件の変更後の評価結果において変化があった化合物について、毒性判定フロー 33 上で、どのような経路を辿ったかが把握しやすくなる。

[0098] また、本第 1 実施形態に係る情報処理システム 10 では、フロー画像 64A は、複数のステップ記号 64A1 と、時系列で前後に配列されたステップ記号 64A1 同士を繋ぐ結合線 64A2 とを含んでいる。また、フロー画像 64A において、結合線 64A2 によって経路が示される。そして、結合線

64A2の太さが、変化が生じた経路を通過した化合物の数に応じて変更されている。これにより、変化のあった経路を通過した化合物の数を視覚的に把握しやすくなる。

[0099] また、本第1実施形態に係る情報処理システム10では、フロー画像64Aにおいて、結合線64A2の太さは、変化が生じた経路を通過した化合物の数が多いほど太くなる。変化の生じた経路を通過した化合物の数が多いということは、判定条件の変更による影響が大きいことを意味する。これにより、結合線が太くなっている経路を視認することで、判定条件の変更による影響が大きい経路を把握することができる。すなわち、判定条件の変更による影響の大きい経路を視覚的に把握しやすくなる。

[0100] また、本第1実施形態に係る情報処理システム10では、フロー画像64Aにおいてステップ記号64A1が選択された場合に、毒性評価において、ステップ記号64A1を通過した化合物を示す化合物画像64B1が表示される。これにより、フロー画像64Aの処理ステップ毎に、判定条件の変更後の評価経路に変化があった化合物を把握することができる。

[0101] また、本第1実施形態に係る情報処理システム10では、化合物画像64B1には、化合物の分子構造を示す構造データが含まれる。これにより、判定条件の変更後の評価経路に変化があった化合物について、どのような分子構造を有するかを把握することができる。

[0102] なお、本第1実施形態において示した毒性判定フロー33における毒性評価の流れは、あくまでも一例にすぎない。毒性判定フロー33における毒性評価の流れは、ユーザによって適宜選択、又は変更され得る。また、フロー画像64Aにおいて示される処理ステップは、毒性判定フロー33に含まれる全ての処理ステップである必要はなく、一部の処理ステップが表示される態様であってもよい。例えば、ユーザ18の関心のある処理ステップがフロー画像64Aとして表示される態様であってもよい。

[0103] (第1変形例)

上記第1実施形態では、詳細画像64Bにおいて、ステップ記号64A1

を通過した化合物の分子構造を示す構造データが含ま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、詳細画像64Bに、化合物画像64B1とともに、処理ステップを通過した化合物の間で共通する共通構造を示す構造データが含まれる。

[0104] 一例として図13に示すように、第3取得部30Fは、差分評価情報62C及び毒性判定フロー33を画像生成部30Gに対して出力する。画像生成部30Gは、差分評価情報62C及び毒性判定フロー33に基づいて表示画像64を生成する。表示画像64は、毒性判定フロー33を示す画像であるフロー画像64Aを含んでいる。

[0105] フロー画像64Aにおいて、ステップ記号64A1には、差分評価情報62Cに基づいて、ステップ記号64A1に対応した処理ステップを通過した化合物を示す情報が紐づけられている。また、各結合線64A2にも、差分評価情報62Cに基づいて、結合線64A2を通過した化合物を示す情報が紐づけられている。また、差分評価情報62Cには、複数の化合物（ここでは、化合物A及びC）に共通する構造である共通構造が、化合物に対して紐づけられている。これにより、ステップ記号64A1及び結合線64A2には、化合物を示す情報だけでなく、化合物の共通構造を示す情報も紐づけられている。

[0106] 画像生成部30Gは、生成した表示画像64を出力部30Hに対して出力する。一例として図14に示すように、サーバ14の出力部30H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。図14に示す例では、フロー画像64Aにおいて、ステップ記号64A1がポインタ54を介して選択されている。この場合に、詳細画像64Bが表示される。

[0107] 詳細画像64Bは、化合物画像64B1と共通構造画像64B2とを含んでいる。共通構造画像64B2は、処理ステップを通過した複数の化合物の共通構造を示す画像である。共通構造とは、処理ステップを通過した化合物が一部として含む部分構造であって、複数の化合物に共通する構造である。

[0108] ここでは、第2学習済みモデルを用いた毒性評価の処理ステップに対応したステップ記号64A1が選択され、共通構造画像64B2において第2学習済みモデルを用いた毒性評価の対象となった化合物の共通構造を示す構造式が示されている。共通構造画像64B2は、本開示の技術に係る「共通構造を示す構造データ」の一例である。

[0109] 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、詳細画像64Bには、処理ステップを通過した化合物の共通構造を示す構造データを示す共通構造画像64B2が含まれている。これにより、判定条件の変更後の評価経路において変化があった複数の化合物について、どのような共通構造を有するかを把握することができる。また、例えば、判定条件の変更による評価経路の変化への影響について、共通する分子構造を把握することで、どのような共通構造が原因となったのか考察を加えることが容易となる。

[0110] ここでは、ステップ記号64A1が選択される形態例を挙げたが、結合線64A2が選択されてもよく、この場合に、毒性評価において結合線64A2を通過した化合物に対応した共通構造画像64B2が表示される。

[0111] [第2実施形態]

上記第1実施形態では、サーバ14において、毒性評価処理、差分導出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、毒性評価処理及び差分導出処理が実行され、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、「情報処理装置」の一例である。

[0112] 一例として図15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/F40、外部I/F42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RAM48を備えている。プロセッサ44、ストレージ46、RAM48、受付装置20、表示装置24、通信I/F40、及び外部I/F

42は、バス50に接続されている。本実施形態において、プロセッサ44は、本開示の技術に係る「プロセッサ」の一例である。

[0113] なお、コンピュータ38のハードウェア構成（すなわち、プロセッサ44、ストレージ46、及びRAM48）は、コンピュータ26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38のハードウェア構成に関する説明は省略する。

[0114] 通信I/F40は、ネットワーク16に接続されている。通信I/F40は、ネットワーク16を介して外部通信装置（例えば、サーバ14）との間の情報の授受を司る。例えば、通信I/F40は、プロセッサ44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/F40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50を介してプロセッサ44に出力する。

[0115] 外部I/F42は、クライアント端末12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/F42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。

[0116] ストレージ46には、制御処理プログラム46Aが記憶されている。制御処理プログラム46Aは、画像生成及び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30は、ストレージ46から制御処理プログラム46Aを読み出し、読み出した制御処理プログラム46AをRAM48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44が、取得部44A、画像生成部44B、及び表示制御部44Cとして動作することによって実現される。本実施形態において、コンピュータ38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46Aは、本開示の技術に係る「プログラム」の一例である。

[0117] 一例として図16に示すように、サーバ14のプロセッサ30において、毒性評価部30Bは、毒性評価処理により得られた更新前評価情報62A及び更新後評価情報62Bを出力部30Hに出力する。また、差分導出部30Eは、差分導出処理を実行し、更新前評価情報62A及び更新後評価情報62Bに基づいて得られた差分評価情報62Cを出力部30Hに出力する。出力部30Hは、ネットワーク16を介してクライアント端末12に対して差分評価情報62Cを出力する。

[0118] 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を介して差分評価情報62Cを取得する。また、取得部44Aは、毒性判定フロー33を取得する。そして、取得部44Aは、差分評価情報62C及び毒性判定フロー33を、画像生成部44Bに対して出力する。画像生成部44Bは、差分評価情報62C及び毒性判定フロー33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、フロー画像64Aを含む表示画像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に対してフロー画像64Aを含む表示画像64表示させる。

[0119] [第3実施形態]

上記第1実施形態では、サーバ14において、毒性評価処理、差分導出処理、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において毒性評価処理、差分導出処理、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、「情報処理装置」の一例である。

[0120] 一例として図17に示すように、クライアント端末12において、受付装置20を介して化合物リスト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、毒性評価部44Eは、化合物リスト58により示される化合物群に対して、毒性判定フロー33を用いて毒性評価を行う。また、クライアント端末12において、受付装置20を介して記述子リスト

60及び構造ルールリスト61が受け付けられる。記述子リスト60及び構造ルールリスト61に基づいて、毒性判定フロー33が更新される。毒性評価部44Eは、更新後の毒性判定フロー33を用いて、化合物リスト58により示される化合物に対して毒性評価を行う。

[0121] また、差分導出部44Dは、更新前評価情報62Aと更新後評価情報62Bとに基づいて差分評価情報62Cを生成する。そして、画像生成部44Bは、差分評価情報62C及び毒性判定フロー33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に対してフロー画像64Aを含む表示画像64を表示させる。

[0122] なお、上記各実施形態では、記述子リスト60、及び構造ルールリスト61が入力されることで、毒性判定フロー33の判定ステップの判定条件が変更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、毒性判定フロー33における判定条件がユーザにより直接入力されることで、判定条件が変更される態様であってもよい。

[0123] また、上記実施形態では、毒性評価処理が実行されることで、更新前評価情報62A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、既に得られた更新前評価情報62A（例えば、外部装置による処理の結果得られた更新前評価情報62A、又は、過去に得られた更新前評価情報62A）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。

[0124] また、上記実施形態では、ストレージ32に、評価処理プログラム32A、導出処理プログラム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、評価処理プログラム32A、導出処理プログラム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評価処理プログラム32A、導出処理プログラム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、評価処理プログラム32A、導出処理プログラム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。

[0125] 上記実施形態では、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 Programmable Gate Array)、及び/又はPLD (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。

[0126] 上記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、毒性評価処理、差分導出処理、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。

[0127] 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。

[0128] 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。

[0129] 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。

[0130] 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。

[0131] 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。

[0132] 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。

[0133] 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、

毒性評価の対象となる複数の対象化合物の毒性評価結果を得るための手順を示すフローチャートであって、予め設定された複数の処理ステップが時系列に配列され、かつ上記処理ステップには、判定条件の変更が可能であり、判定結果に応じてその後の経路が分岐する判定処理ステップが含まれるフローチャートを出力する制御を実行し、

複数の上記対象化合物のうち、少なくとも1つの上記対象化合物について上記手順に従って上記毒性評価結果が得られた後に、上記判定処理ステップにおける上記判定条件が変更され、かつ変更後の上記判定条件で上記手順に従って上記毒性評価結果が得られた場合において、

上記プロセッサは、上記フローチャートを出力する制御において、上記判定条件の変更前の上記毒性評価結果に至るまでに通過した変更前の経路と、上記判定条件の変更後の上記毒性評価結果に至るまでに通過した変更後の経路との間に変化が生じた場合は、変化が生じた経路を識別可能に表示する情報処理装置。

<付記 2>

上記判定条件の変更の前後において、複数の上記対象化合物について上記毒性評価結果が得られている場合において、

上記フローチャートにおいて、上記変化が生じた経路の表示態様が、上記毒性評価において、上記変化が生じた経路を通過した上記対象化合物の数に応じて変更される

付記 1 に記載の情報処理装置。

<付記 3>

上記フローチャートは、複数の上記処理ステップと、時系列で前後に配置

された上記処理ステップ同士を繋ぐ結合線とを示し、かつ上記結合線によって上記経路が示されるものであり、

上記表示態様は、上記結合線の太さである

付記 2 に記載の情報処理装置。

<付記 4 >

上記結合線の太さは、上記変化が生じた経路を通過した上記対象化合物の数が多いほど太くなる

付記 3 に記載の情報処理装置。

<付記 5 >

上記フローチャートは、複数の上記処理ステップと、時系列で前後に配置された上記処理ステップ同士を繋ぐ結合線とを示し、かつ上記結合線によって上記経路が示されるものであり、

上記フローチャートにおいて示される上記処理ステップ又は上記結合線が選択された場合に、上記毒性評価において、上記処理ステップ又は上記結合線で示される上記経路を通過した上記対象化合物を示す画像が表示される

付記 1 から付記 4 の何れか一つに記載の情報処理装置。

<付記 6 >

上記画像には、上記対象化合物の分子構造を示す構造データが含まれる

付記 5 に記載の情報処理装置。

<付記 7 >

上記画像には、上記対象化合物が一部として含む部分構造であって、選択された上記処理ステップ又は上記結合線を通過した複数の上記対象化合物の間で共通する構造である共通構造を示す構造データが含まれる

付記 6 に記載の情報処理装置。

[0134] 2023年6月1日に出願された日本国特許出願2023-091157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。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。

## 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、

毒性評価の対象となる複数の対象化合物の毒性評価結果を得るための手順を示すフローチャートであって、予め設定された複数の処理ステップが時系列に配列され、かつ前記処理ステップには、判定条件の変更が可能であり、判定結果に応じてその後の経路が分岐する判定処理ステップが含まれるフローチャートを出力する制御を実行し、

複数の前記対象化合物のうち、少なくとも1つの前記対象化合物について前記手順に従って前記毒性評価結果が得られた後に、前記判定処理ステップにおける前記判定条件が変更され、かつ変更後の前記判定条件で前記手順に従って前記毒性評価結果が得られた場合において、

前記プロセッサは、前記フローチャートを出力する制御において、前記判定条件の変更前の前記毒性評価結果に至るまでに通過した変更前の経路と、前記判定条件の変更後の前記毒性評価結果に至るまでに通過した変更後の経路との間に変化が生じた場合は、変化が生じた経路を識別可能に表示する

情報処理装置。

[請求項2]

前記判定条件の変更の前後において、複数の前記対象化合物について前記毒性評価結果が得られている場合において、

前記フローチャートにおいて、前記変化が生じた経路の表示態様が、前記毒性評価において、前記変化が生じた経路を通過した前記対象化合物の数に応じて変更される

請求項1に記載の情報処理装置。

[請求項3]

前記フローチャートは、複数の前記処理ステップと、時系列で前後に配置された前記処理ステップ同士を繋ぐ結合線とを示し、かつ前記結合線によって前記経路が示されるものであり、

前記表示態様は、前記結合線の太さである

請求項 2 に記載の情報処理装置。

[請求項4] 前記結合線の太さは、前記変化が生じた経路を通過した前記対象化合物の数が多いほど太くなる

請求項 3 に記載の情報処理装置。

[請求項5] 前記フローチャートは、複数の前記処理ステップと、時系列で前後に配置された前記処理ステップ同士を繋ぐ結合線とを示し、かつ前記結合線によって前記経路が示されるものであり、

前記フローチャートにおいて示される前記処理ステップ又は前記結合線が選択された場合に、前記毒性評価において、前記処理ステップ又は前記結合線で示される前記経路を通過した前記対象化合物を示す画像が表示される

請求項 1 に記載の情報処理装置。

[請求項6] 前記画像には、前記対象化合物の分子構造を示す構造データが含まれる

請求項 5 に記載の情報処理装置。

[請求項7] 前記画像には、前記対象化合物が一部として含む部分構造であって、選択された前記処理ステップ又は前記結合線を通過した複数の前記対象化合物の間で共通する構造である共通構造を示す構造データが含まれる

請求項 6 に記載の情報処理装置。

[請求項8] 毒性評価の対象となる複数の対象化合物の毒性評価結果を得るための手順を示すフローチャートであって、予め設定された複数の処理ステップが時系列に配列され、かつ前記処理ステップには、判定条件の変更が可能であり、判定結果に応じてその後の経路が分岐する判定処理ステップが含まれるフローチャートを出力する制御を実行することを含み、

複数の前記対象化合物のうち、少なくとも 1 つの前記対象化合物に

ついて前記手順に従って前記毒性評価結果が得られた後に、前記判定処理ステップにおける前記判定条件が変更され、かつ変更後の前記判定条件で前記手順に従って前記毒性評価結果が得られた場合において、

前記フローチャートを出力する制御において、前記判定条件の変更前の前記毒性評価結果に至るまでに通過した変更前の経路と、前記判定条件の変更後の前記毒性評価結果に至るまでに通過した変更後の経路との間に変化が生じた場合は、変化が生じた経路が識別可能に表示される

情報処理方法。

[請求項9]

コンピュータに、

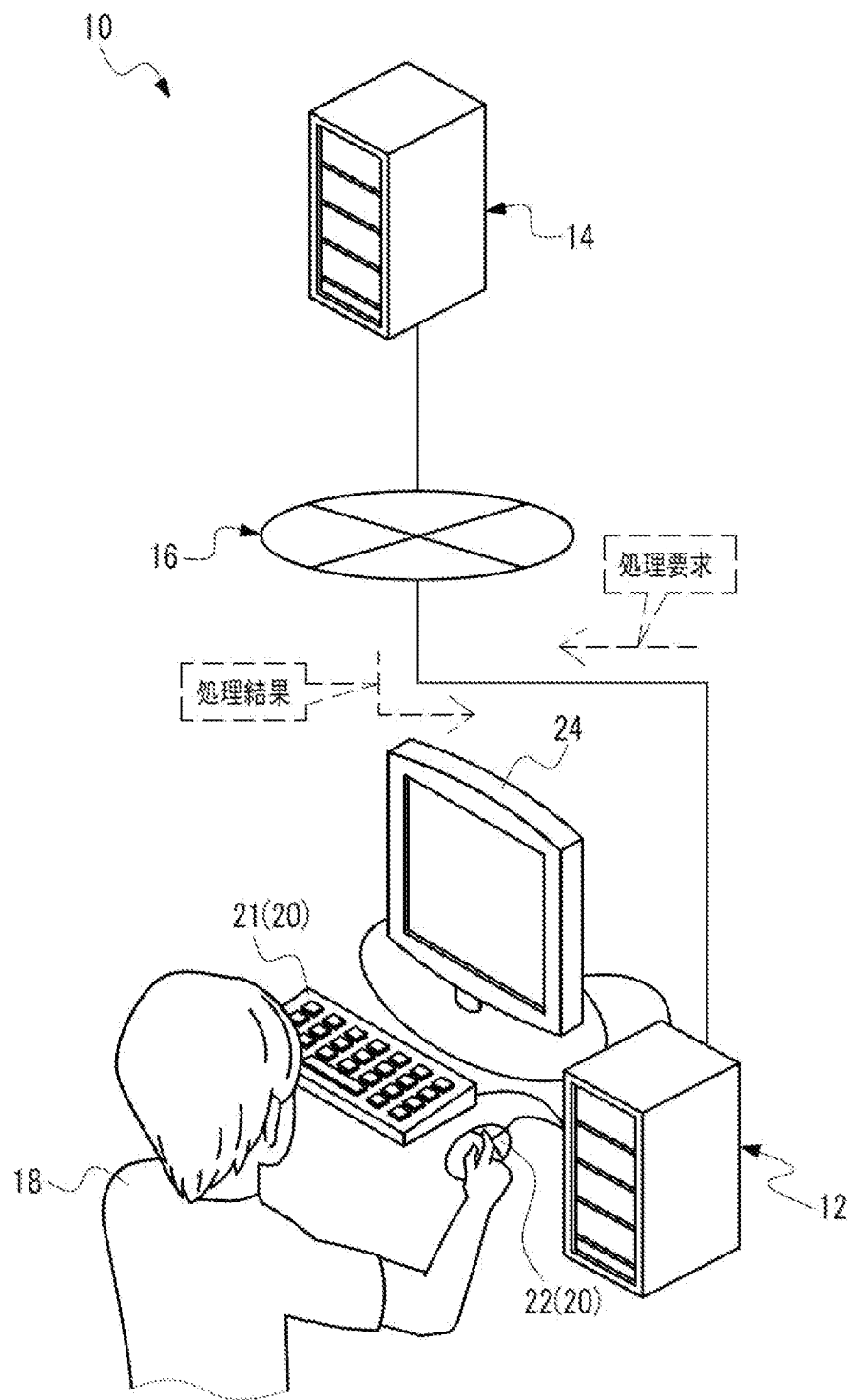
毒性評価の対象となる複数の対象化合物の毒性評価結果を得るための手順を示すフローチャートであって、予め設定された複数の処理ステップが時系列に配列され、かつ前記処理ステップには、判定条件の変更が可能であり、判定結果に応じてその後の経路が分岐する判定処理ステップが含まれるフローチャートを出力する制御を実行すること、を含む処理であって、

複数の前記対象化合物のうち、少なくとも1つの前記対象化合物について前記手順に従って前記毒性評価結果が得られた後に、前記判定処理ステップにおける前記判定条件が変更され、かつ変更後の前記判定条件で前記手順に従って前記毒性評価結果が得られた場合において、

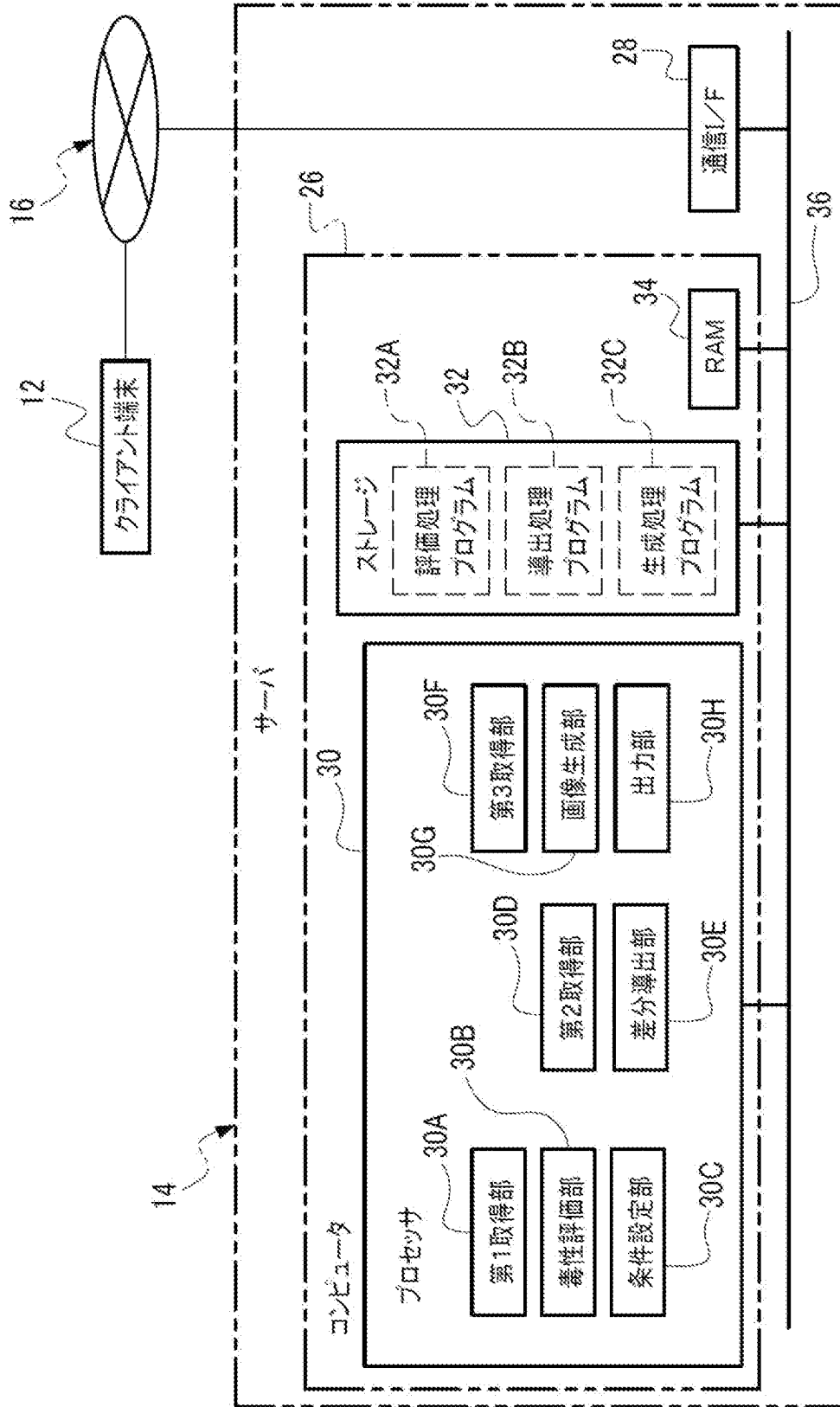
前記フローチャートを出力する制御において、前記判定条件の変更前の前記毒性評価結果に至るまでに通過した変更前の経路と、前記判定条件の変更後の前記毒性評価結果に至るまでに通過した変更後の経路との間に変化が生じた場合は、変化が生じた経路が識別可能に表示される

処理を実行させるプログラム。

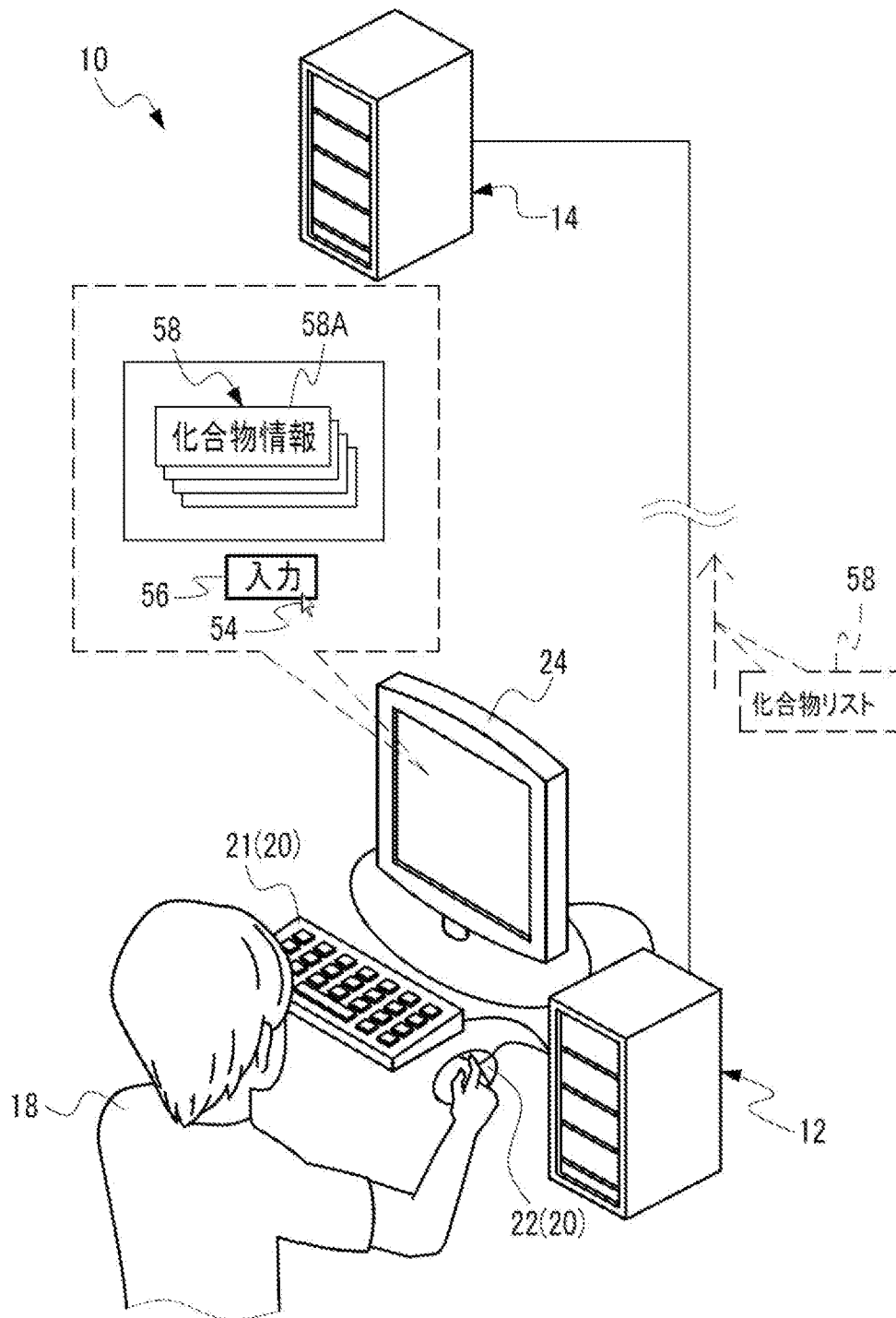
[図1]



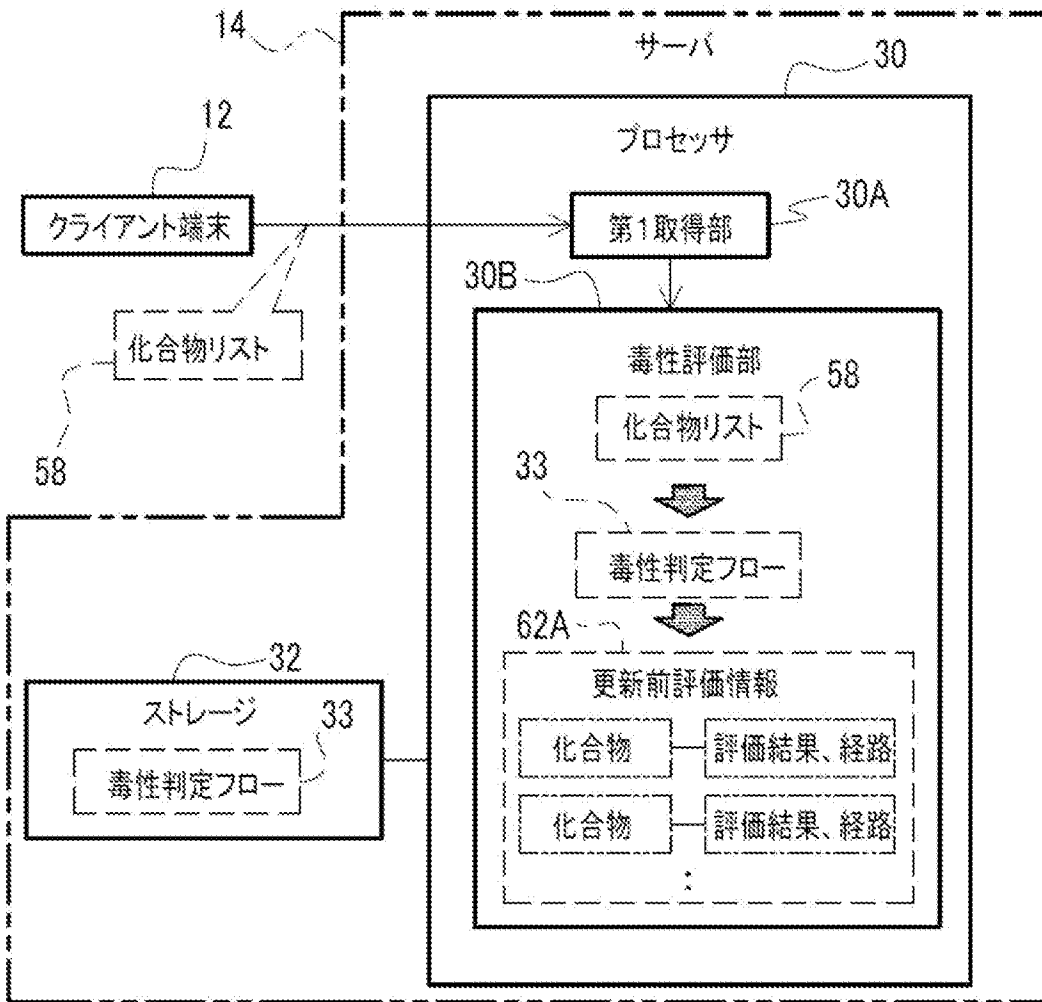
[図2]



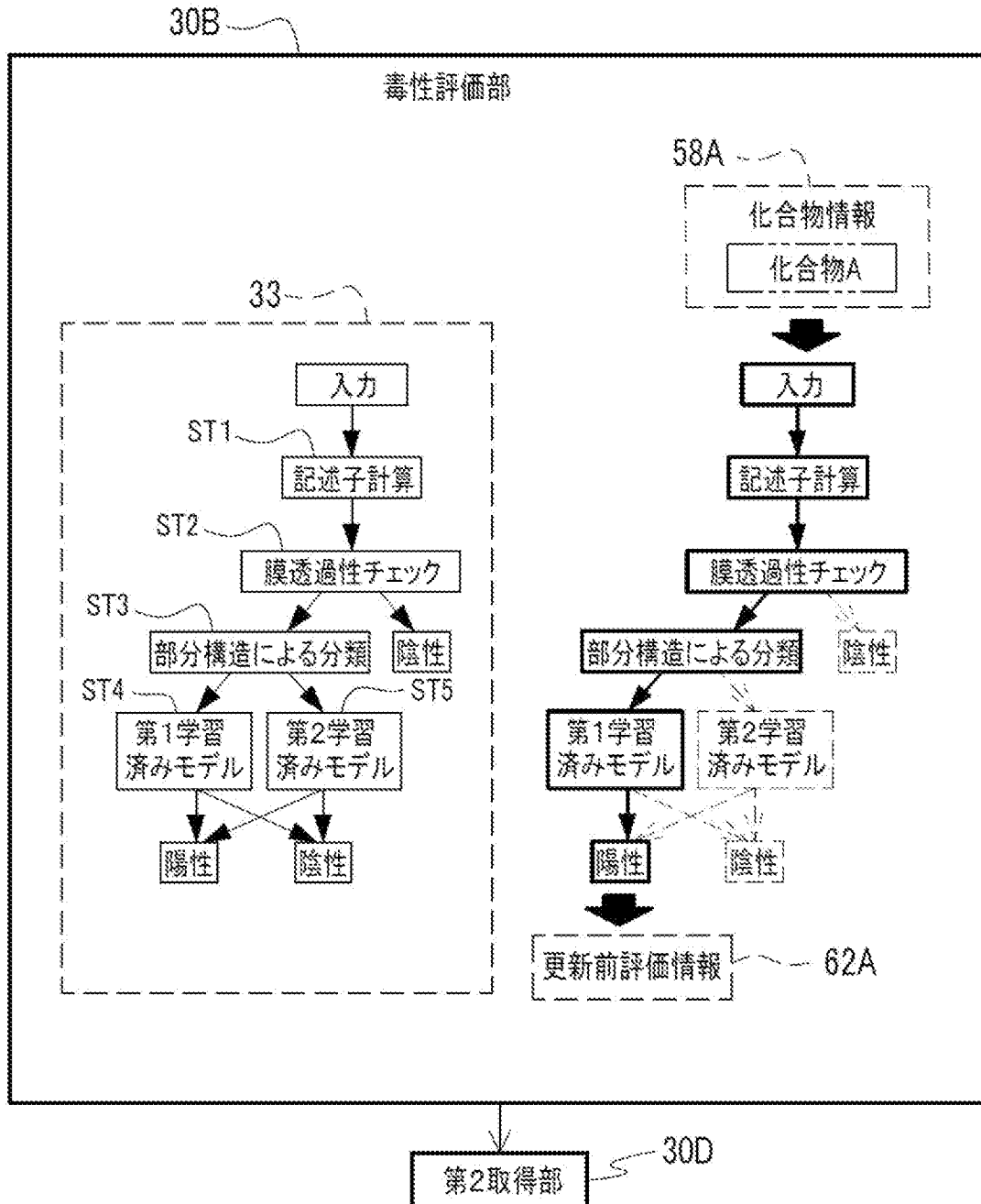
[図3]



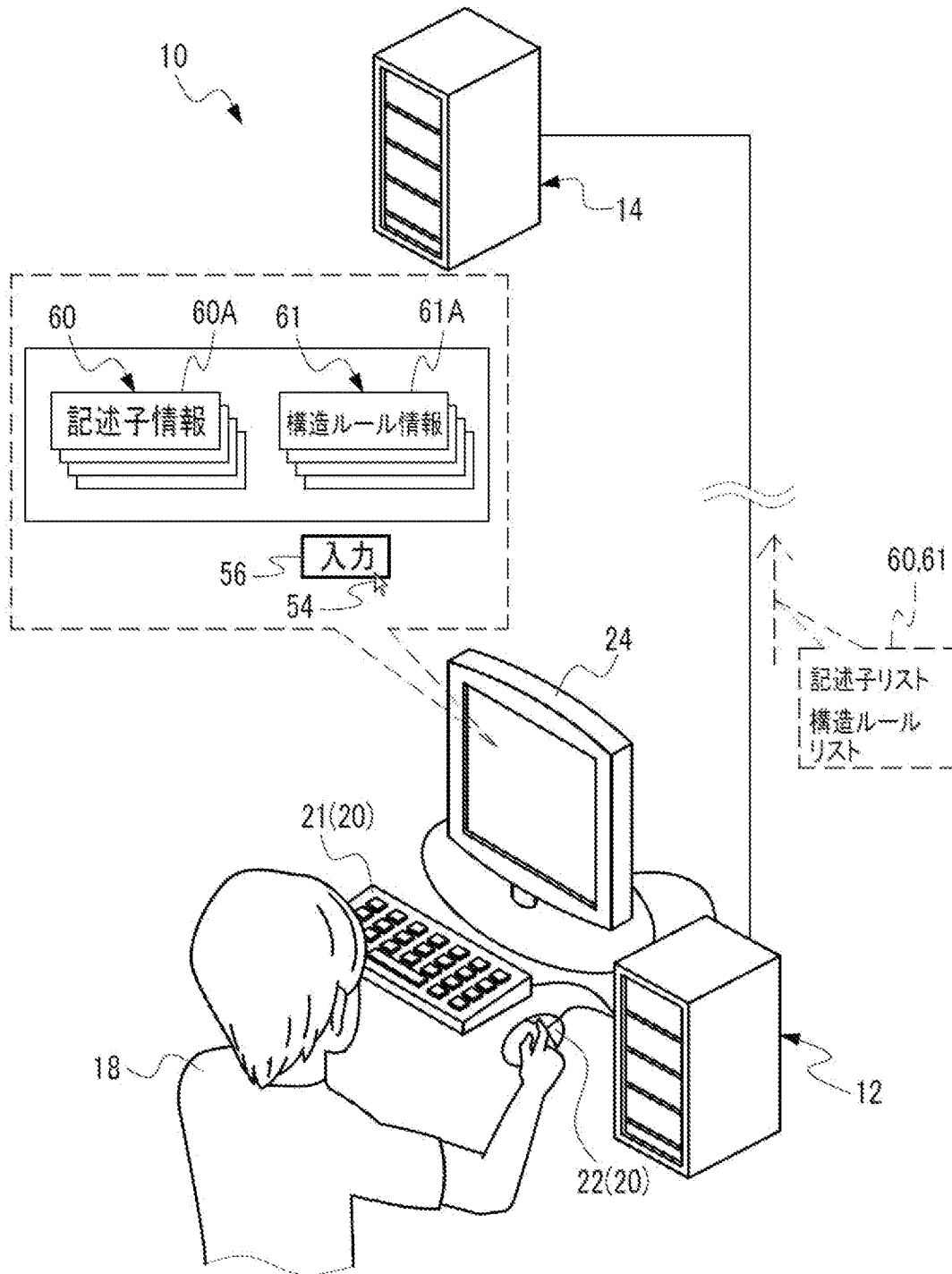
[図4]



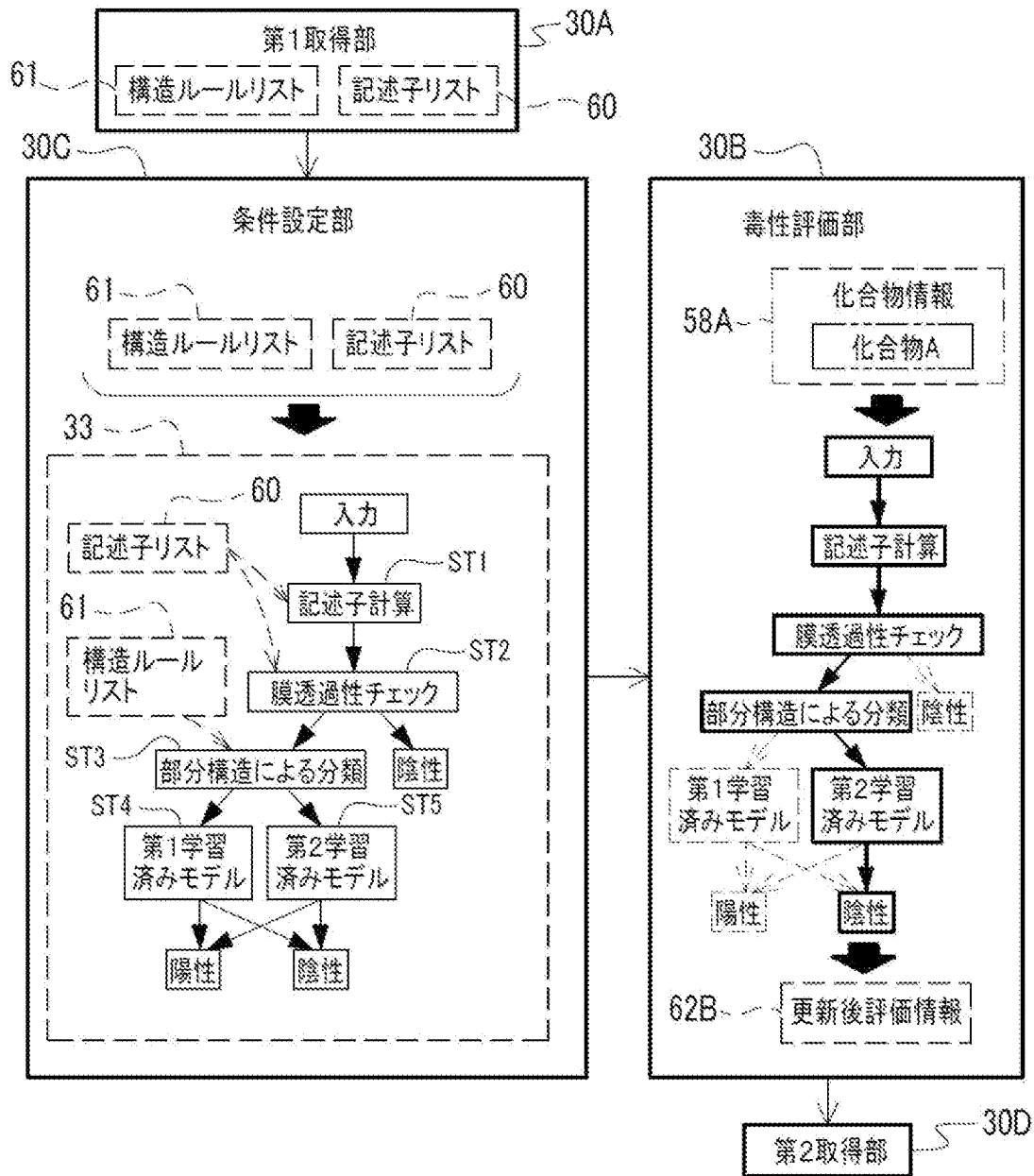
[図5]



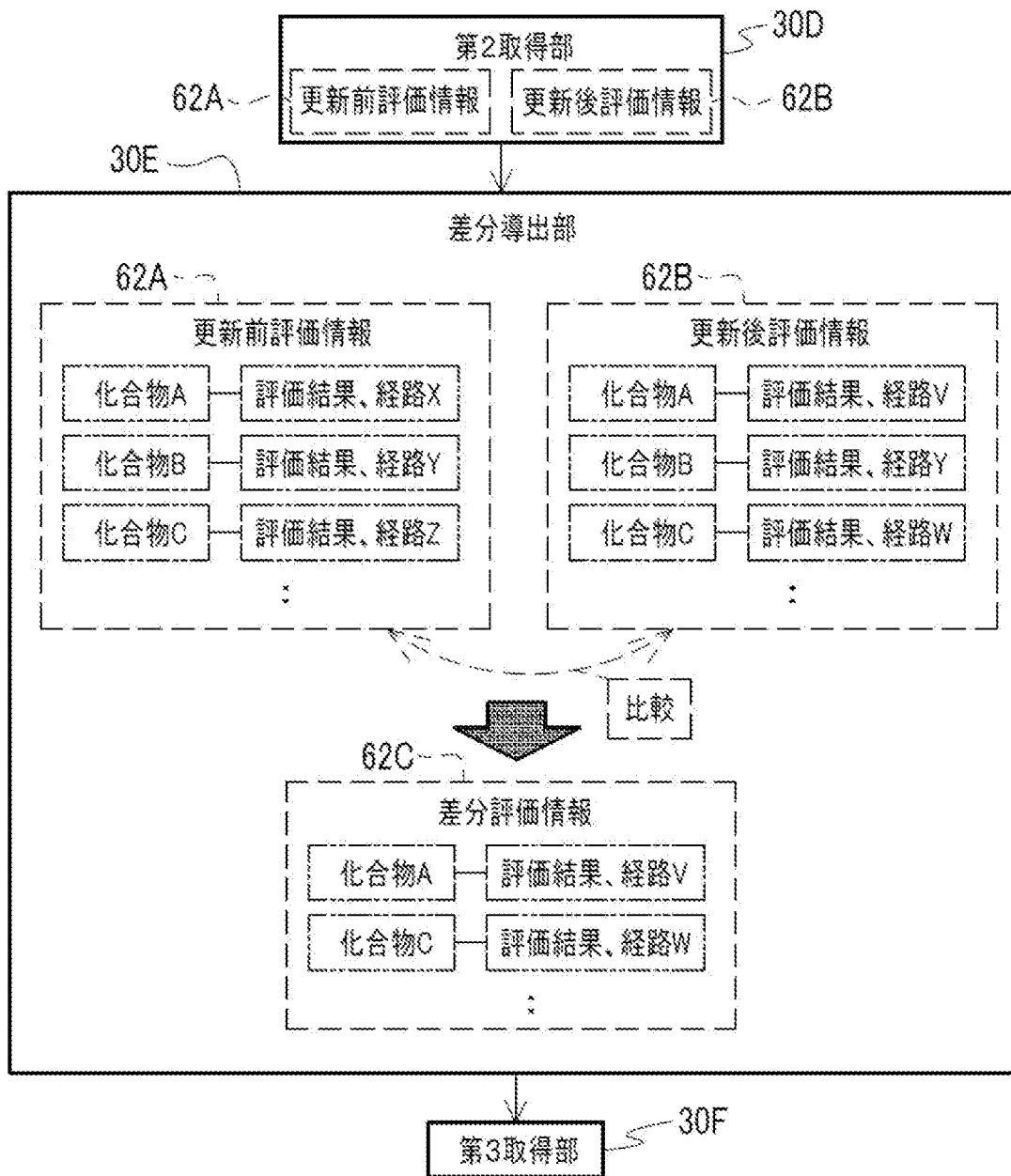
[図6]



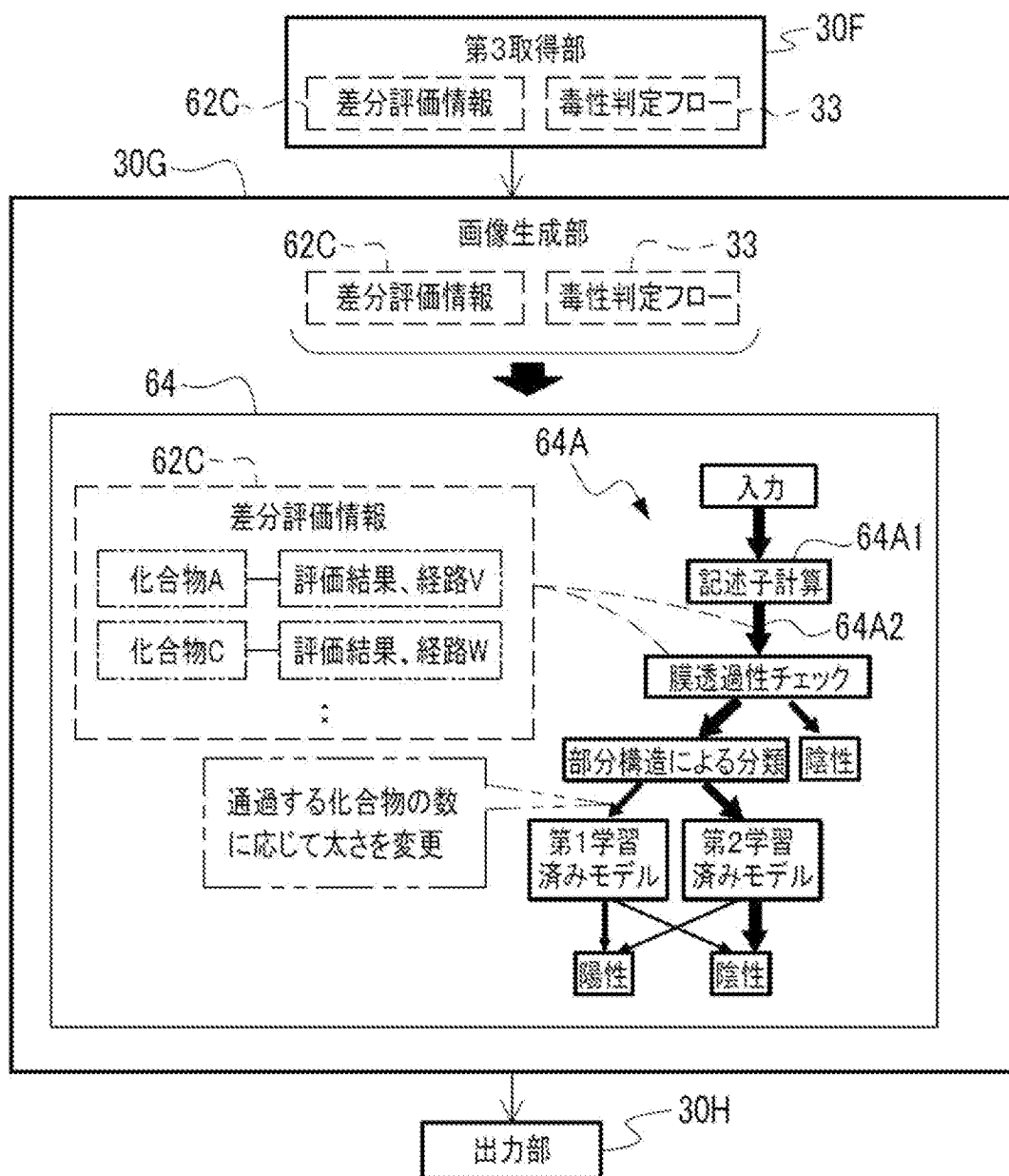
[図7]



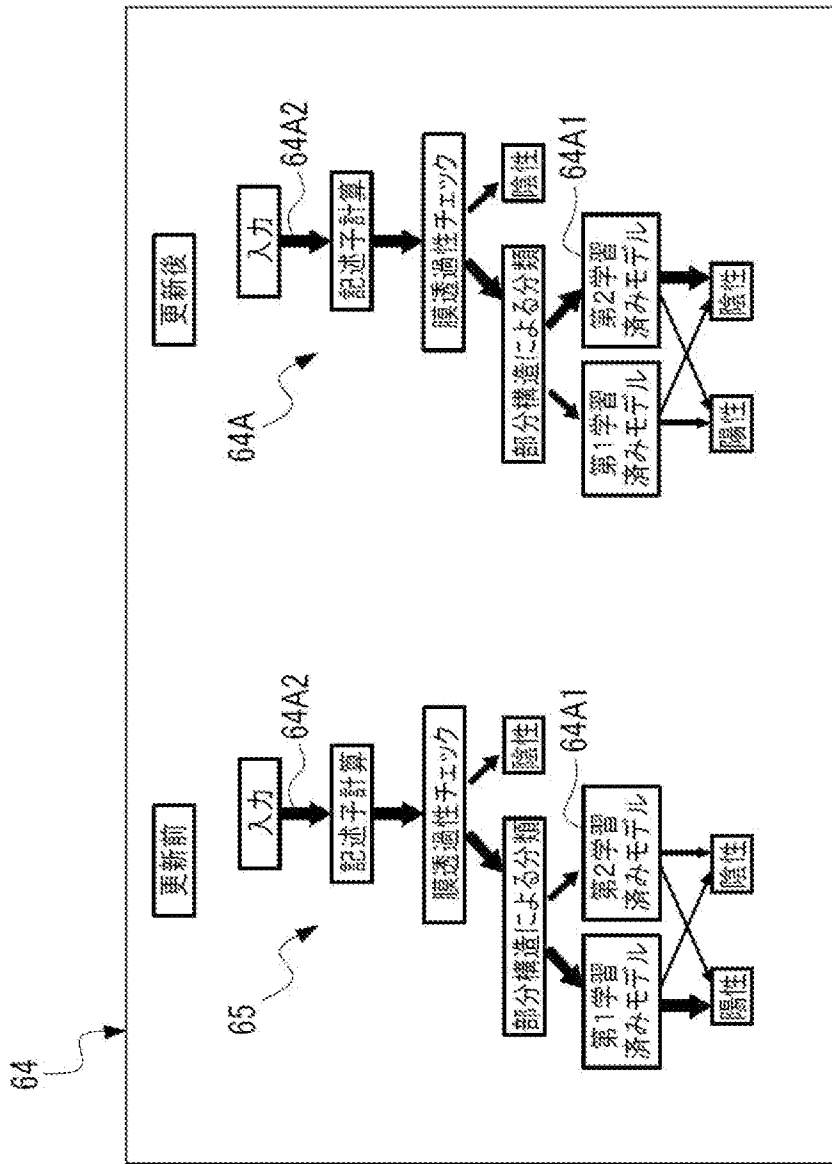
[図8]



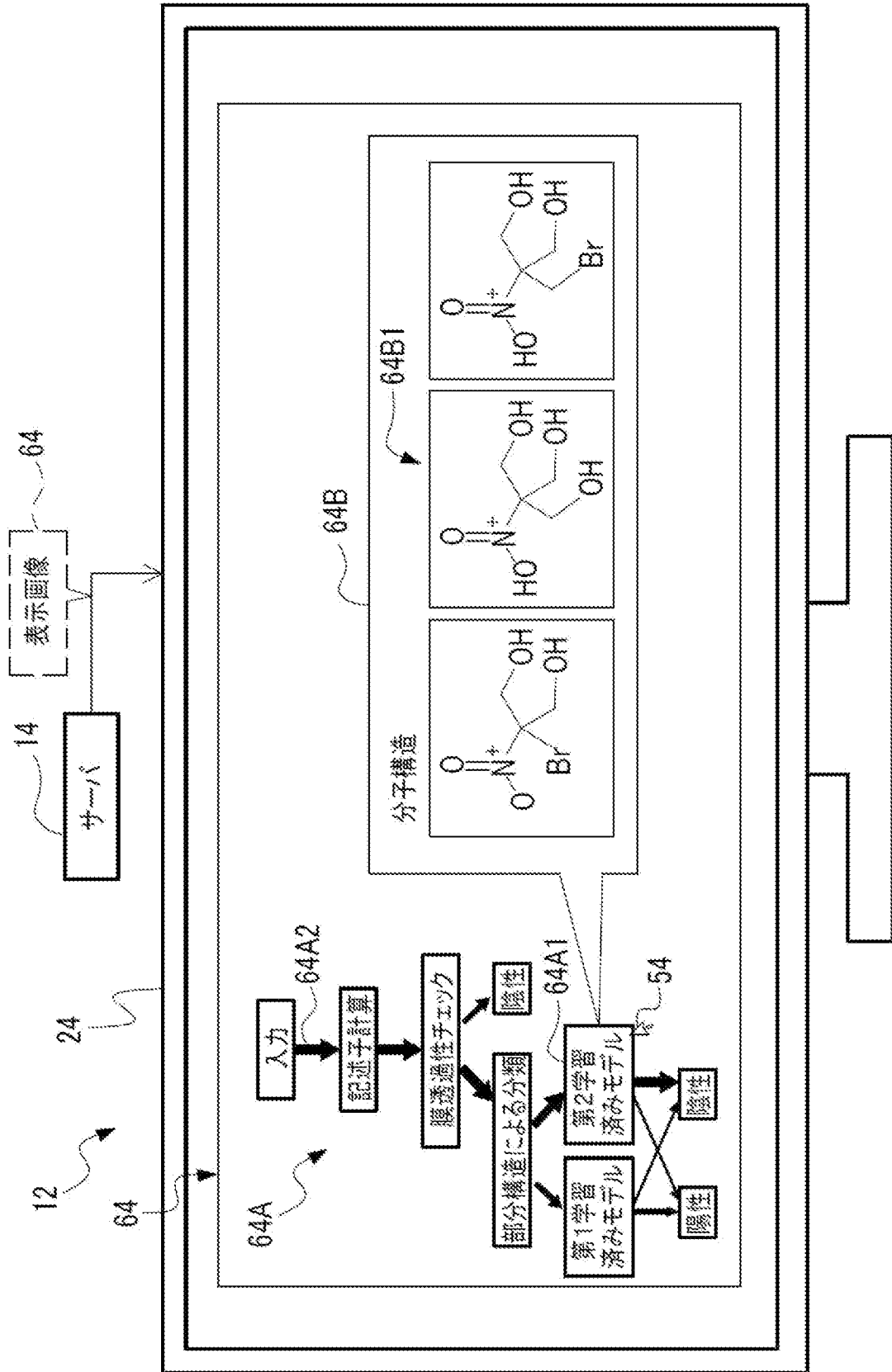
[図9]



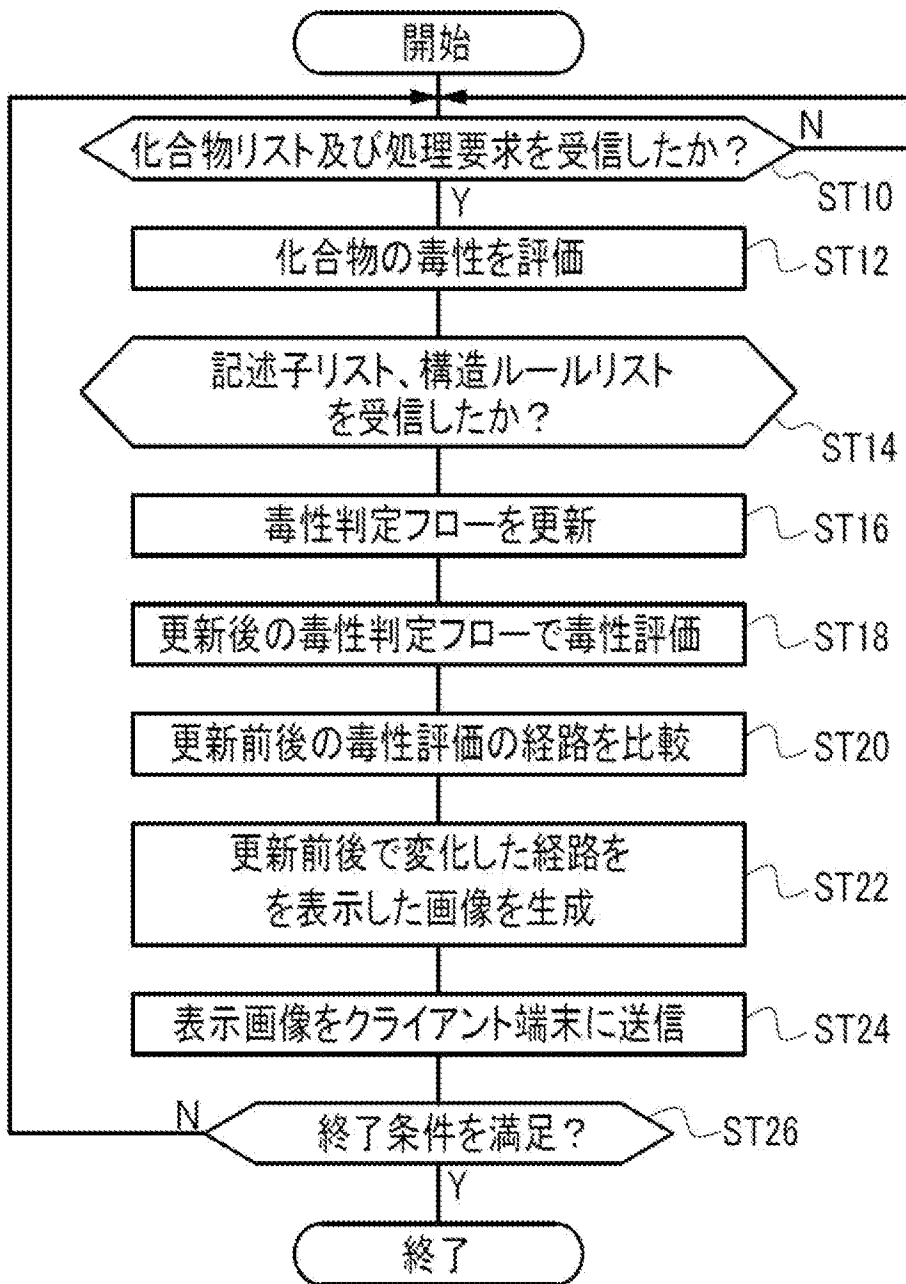
[図10]



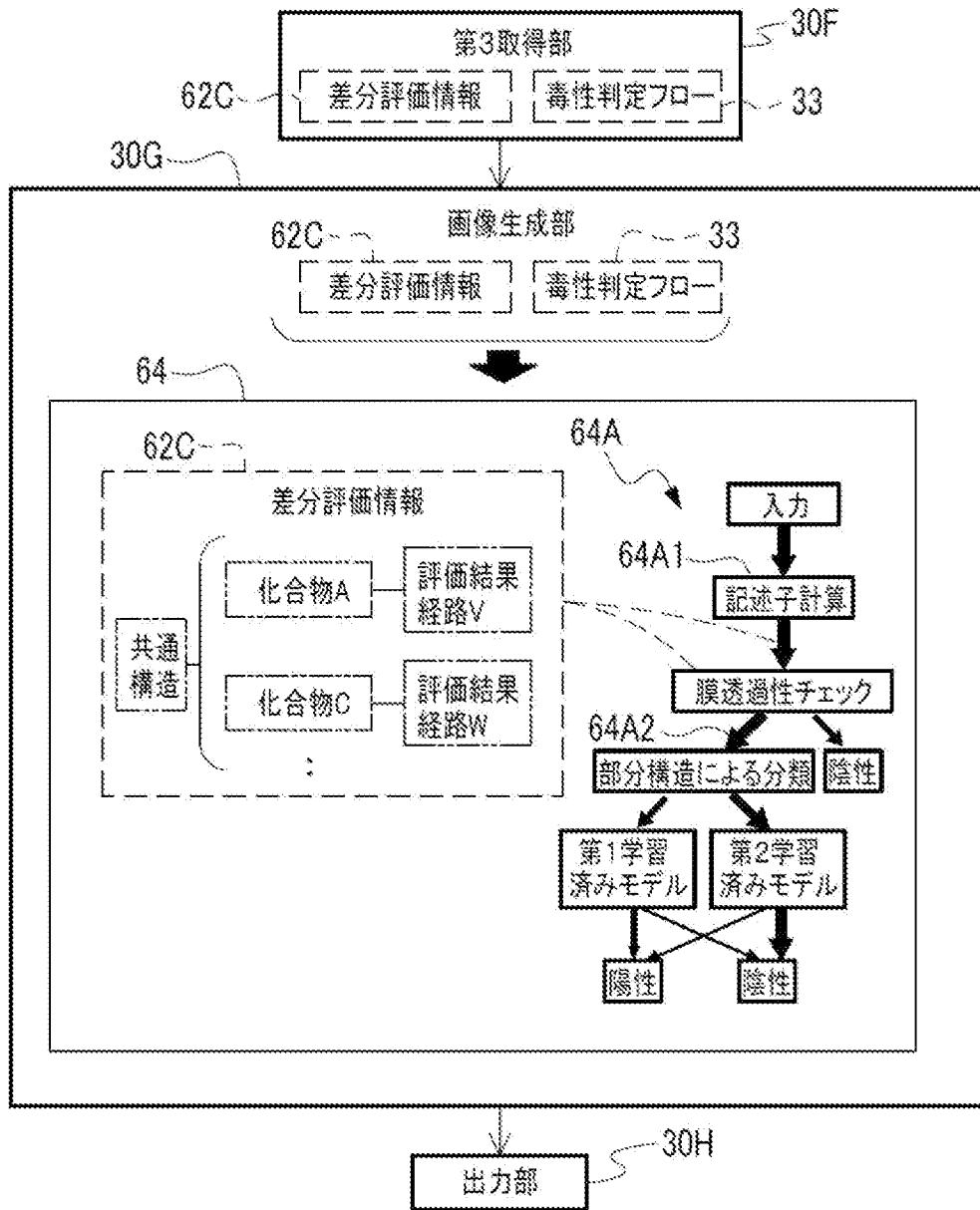
[図11]



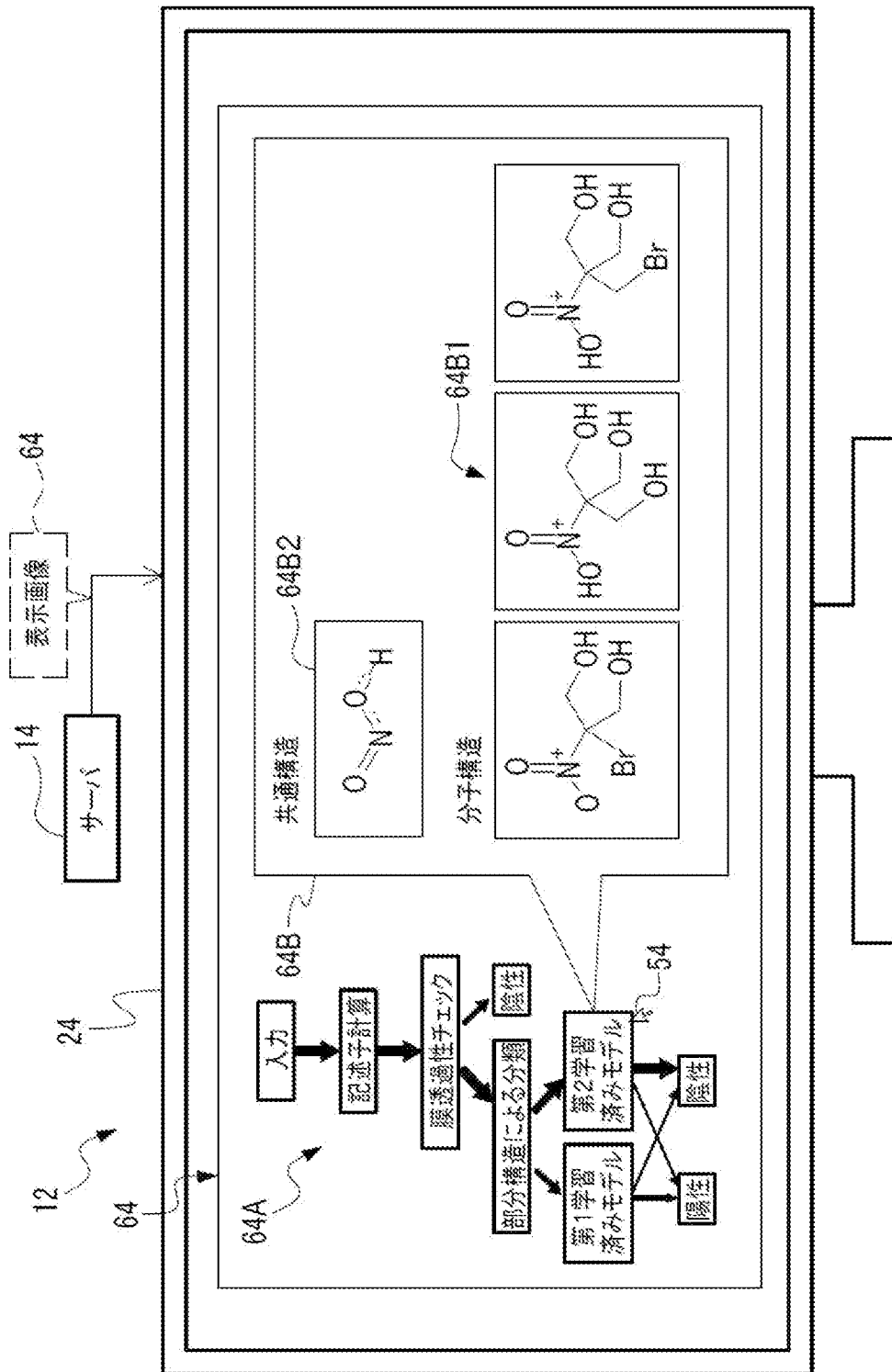
[図12]



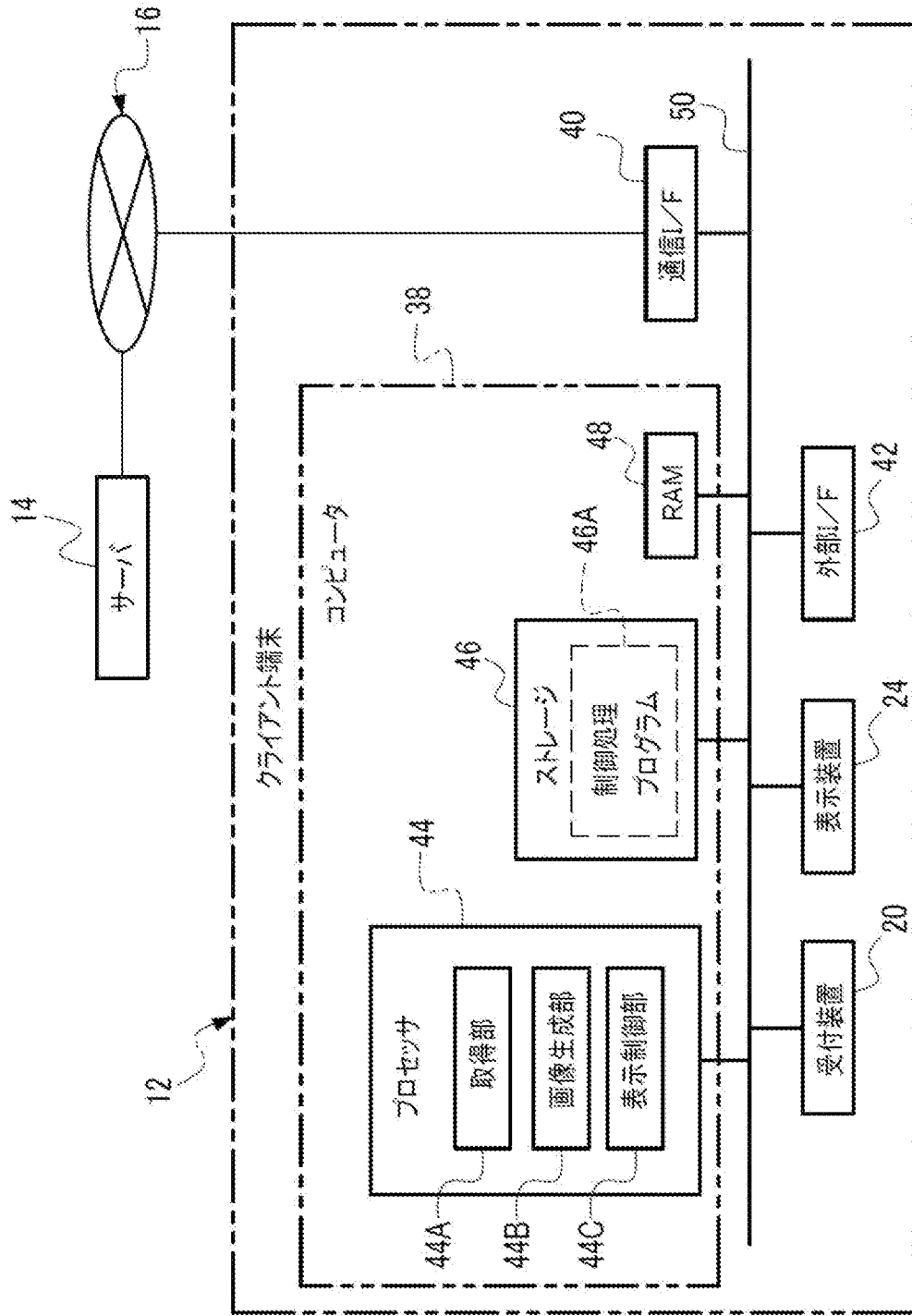
[図13]



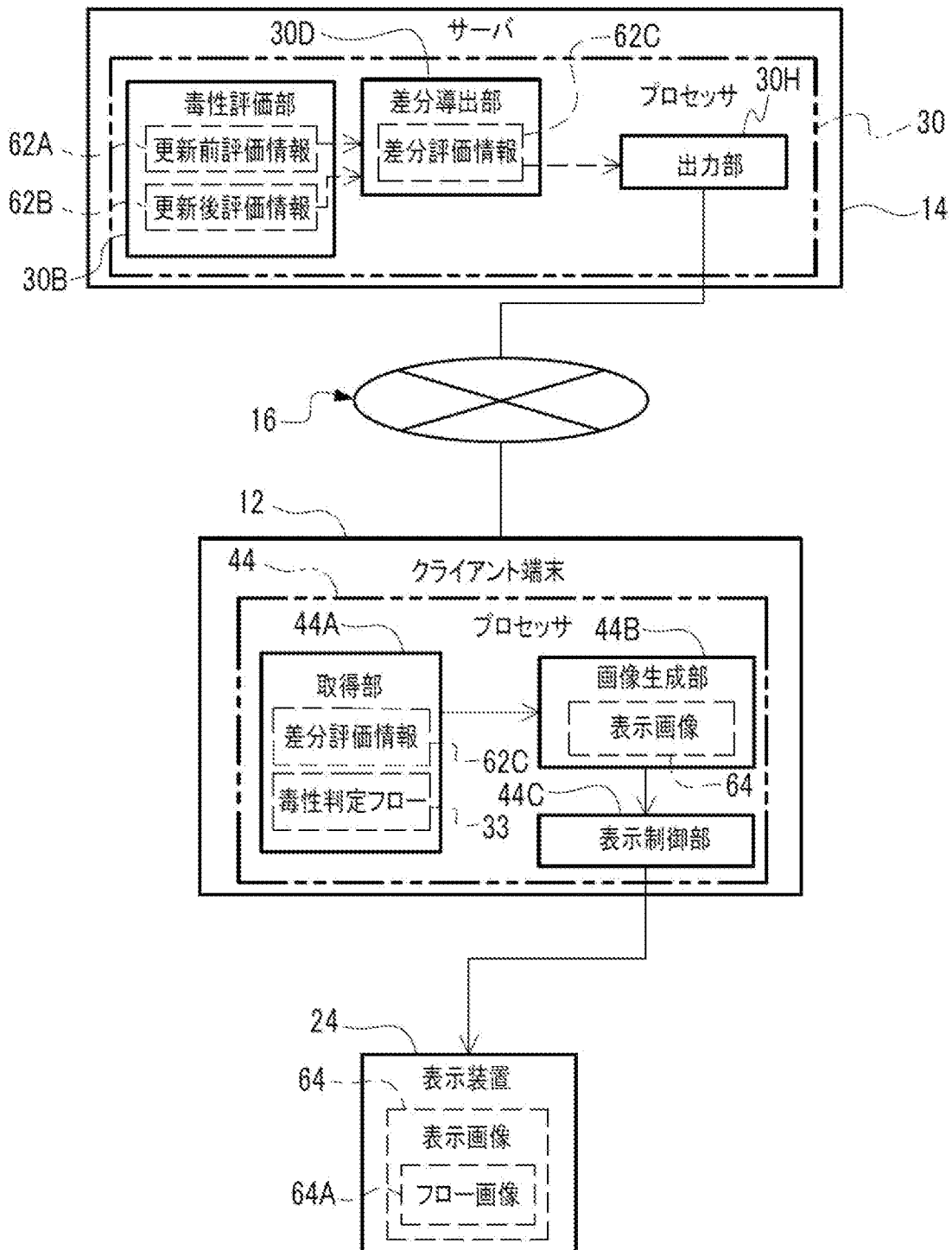
[図14]



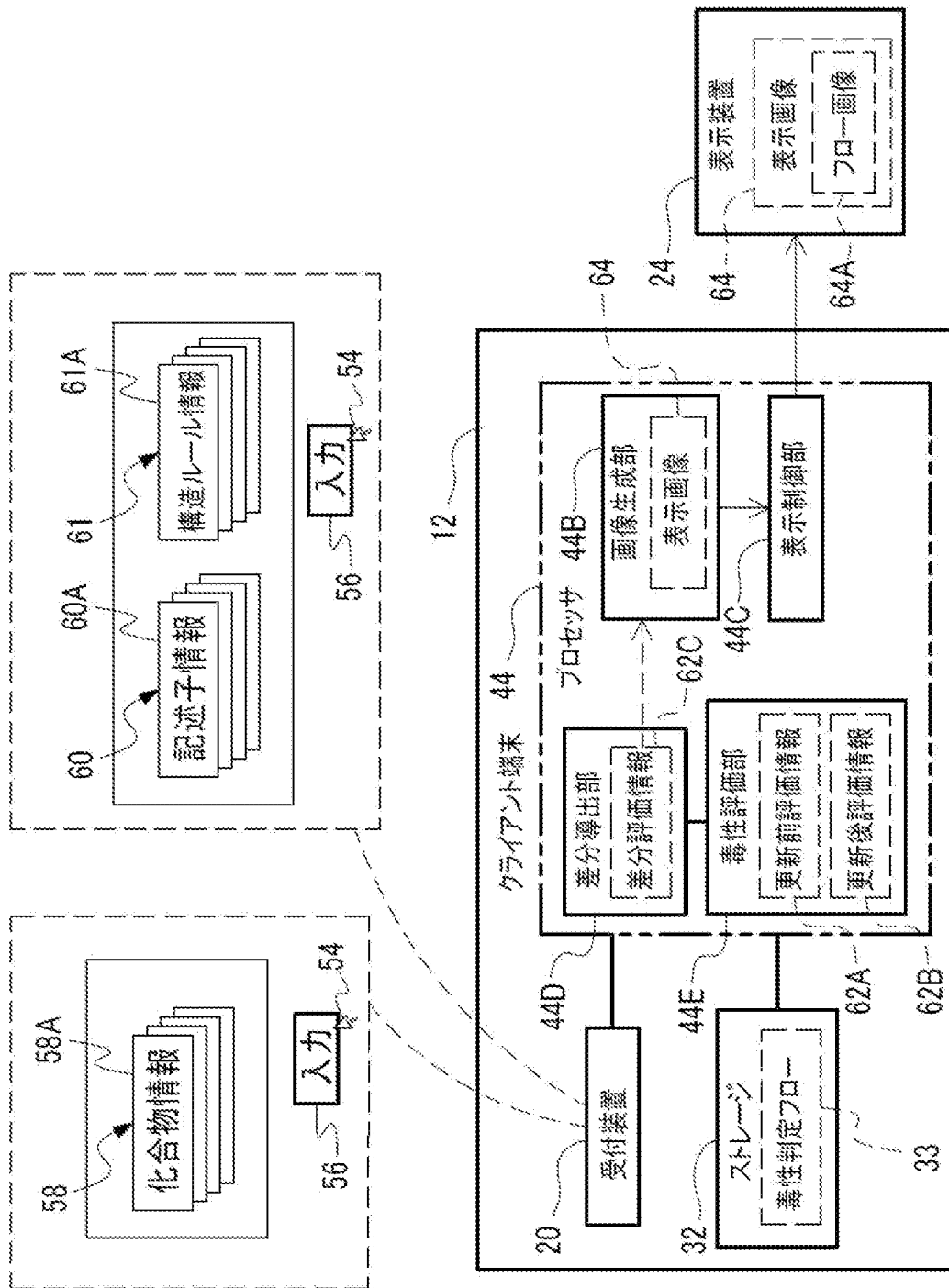
[図15]



[図16]



[図17]



## INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2024/020081

<b>A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER</b>		
G16C 20/30(2019.01) FI: G16C20/30		
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		
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.
A	IDEACONSULT LTD. Toxtree User Manual. [online]. 05 August 2011, [retrieved on 06 August 2024], Internet<URL:https://sourceforge.net/projects/toxtree/files/toxtree/Toxtree-v.2.5.0/Toxtree_user_manual.pdf/download> pp. 15-24	1-9
A	インビボ毒性試験成績のデータベース化とそのインシリコ解析・評価への応用に関する研究, [online]. 02 September 2022, [retrieved on 26 March 2024], Internet<URL: https://web.archive.org/web/20220120041802/https://kate2.nies.go.jp/nies/doc/KAT Emanual_2020.pdf>, (Research on the construction of database for the in vivo toxicity studies and on application of the database for the in silico analysis and assessment) pp. 29-32	1-9
A	JP 2013-522649 A (STEMINA BIOMARKER DISCOVERY, INC.) 13 June 2013 (2013-06-13) paragraphs [0107]-[0108]	1-9
<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 August 2024</b>		Date of mailing of the international search report <b>13 August 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/JP2024/020081**

Patent document cited in search report	Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)	Publication date (day/month/year)
JP 2013-522649 A	13 June 2013	US 2011/0312019 A1 paragraphs [0144]-[0145] WO 2011/119637 A1 CA 2793216 A1	
-----			

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 FI: G16C20/30		
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		
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
A	IDEACONSULT LTD., "Toxtree User Manual", [online], 2011.08.05, [検索日 2024.08.06], インターネット<URL : <a href="https://sourceforge.net/projects/toxtree/files/toxtree/Toxtree-v.2.5.0/Toxtree_user_manual.pdf/download">https://sourceforge.net/projects/toxtree/files/toxtree/Toxtree-v.2.5.0/Toxtree_user_manual.pdf/download</a> > 第15-24頁	1-9
A	インビボ毒性試験成績のデータベース化とそのインシリコ解析・評価への応用に関する研究, [online], 2022.09.02, [検索日 2024.03.26], インターネット<URL : <a href="https://web.archive.org/web/20220120041802/https://kate2.nies.go.jp/nies/doc/KATEmanual_2020.pdf">https://web.archive.org/web/20220120041802/https://kate2.nies.go.jp/nies/doc/KATEmanual_2020.pdf</a> > 第29-32頁	1-9
A	JP 2013-522649 A (ステミナ バイオマーカー ディスカバリー, インコーポレイテッド) 13.06.2013 (2013-06-13) 段落[0107]-[0108]	1-9
<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 06.08.2024	国際調査報告の発送日 13.08.2024	
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） 松田 岳士 5R 3137 電話番号 03-3581-1101 内線 3560	

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/JP2024/020081

引用文献	公表日	パテントファミリー文献	公表日
JP 2013-522649 A	13.06.2013	US 2011/0312019 A1 段落[0144]-[0145]	
		WO 2011/119637 A1	
		CA 2793216 A1	
-----			