

仕 様 書

A I を利用した未知化合物の毒性予測 モデル構築の役務	仕 様 書 番 号	第 6 2 号
	作 成 年 月 日	令 和 7 年 9 月 2 4 日
	作成部隊等名	化 学 学 校

1 総則

1.1 適用範囲

この仕様書は、陸上自衛隊化学学校において実施するA I を利用した未知化合物の毒性予測モデル構築の役務について規定する。

1.2 用語及び定義

この仕様書で用いる用語及び定義は、次によるほか、G L T - C G - Z 0 0 0 0 0 1 による。

1.2.1

C h E M B L

生物学的に活性な化合物に関する包括的なデータベースのことをいう。

1.2.2

A C h E 阻害

アセチルコリンエステラーゼ (A C h E) の働きを阻害することをいう。

1.2.3

K i 値

阻害定数をいう。

1.3 引用文書

この仕様書に引用する次の文書は、この仕様書に規定する範囲内において、この仕様書の一部を成すものであり、入札書又は見積書の提出時における最新版とする。

G L T - C G - Z 0 0 0 0 0 1 陸上自衛隊装備品等一般共通仕様書

2 役務に関する要求

2.1 一般的要求事項

契約の相手方は、官側が実施するA C h E 阻害評価において、C h E M B L データベースからA C h E 阻害のK i 値を使用して、薬物動態・毒性予測の候補となる予測モデルを複数個作成する。また、その予測モデルの精度を取りまとめ、未知化合物の毒性予測モデルの構築を行い、官側に報告しなければならない。

2.2 役務の内容

役務の内容は、表1による。

表1-役務の内容

番号	項目	内容
1	データ調査、収集、 整理	C h E M B L データベースからA C h E 阻害のK i 値を学習データとして調査収集を行い、整理する。
2	薬物動態・毒性予測 の候補となる予測モデル の作成、精度検証	番号1から、薬物動態・毒性予測の候補となる予測モデルを複数個作成する。また、予測精度の検証を行い、未知化合物の毒性予測モデルを構築する。

表1－役務の内容（続き）

番号	項目	内容
3	報告書の作成	番号2によって作成された出された未知化合物の毒性予測モデルについて、報告書を作成する。 なお、番号2の予測モデルの作成手順及び予測精度を記載する。

3 品質保証

監督及び検査は、契約担当官等が定める監督・検査実施要領による。

4 その他の指示

4.1 提出書類

提出書類は、表2による。

表2－提出書類

名称	数量	提出先	提出時期	注記
毒性予測モデル構築 報告書	2部 ^{a)}	検査官	納期までに	様式は、随意とする。
注 ^{a)} 2部のうち、1部は写し（コピー）でもよい。				

4.2 保全

保全は、次による。

- a) 契約の相手方は、この契約の履行に当たり、直接または間接的にかかわらず知り得た事項の管理に万全を期すとともに、別途利用その他への公表などは、官側の許可なく行ってはならない。また、この契約終了後も同様とする。
- b) 駐屯地への立入りに際しては、当該駐屯地所定の立入手続きを行う。

4.3 仕様書に関する疑義

この仕様書に関する疑義は、GLT-CG-Z000001の8.3による。