

参加者確認公募説明書

令和7年度カテゴリーアプローチを用いた新たな生態毒性予測システムの開発業務

令和7年9月

国立研究開発法人国立環境研究所

令和7年度カテゴリーアプローチを用いた新たな生態毒性予測システムの開発業務
に係る参加希望書類の募集要領

1. 総則

令和7年度カテゴリーアプローチを用いた新たな生態毒性予測システムの開発業務に係る参加者確認公募の実施については、この要領に定める。

2. 業務概要

(1) 業務名

令和7年度カテゴリーアプローチを用いた新たな生態毒性予測システムの開発業務

(2) 業務内容等

別添仕様書（案）のとおり。

(3) 予算額

非公表。ただし、企画競争手続に移行する場合にあっては、別途提示する。

(4) 履行期間

契約締結日～令和8年2月27日

3. 応募要件

(1) 基本的要件

- ① 国立研究開発法人国立環境研究所契約事務取扱細則第5条の規定に該当しない者であること。
なお、未成年者、被保佐人又は被補助人であって、契約締結のために必要な同意を得ている者は、同条中、特別の理由がある場合に該当する。
- ② 国立研究開発法人国立環境研究所契約事務取扱細則第6条の規定に該当しない者であること。
- ③ 契約者等から取引停止の措置を受けている期間中の者でないこと。
- ④ 参加者確認公募説明書別紙に定める暴力団排除等に関する誓約事項に誓約できる者であること。

(2) 技術力に関する要件

ケモインフォマティクス（化学情報学）やQSAR（定量的構造活性相関）に精通し、これらの分野において博士号を取得した従事者を複数名有すること。

(3) 設備・システムに関する要件

化学物質の各種物理化学的・量子化学的ならびに構造に関する記述子計算を行うソフトウェア・大型計算機等を有していること。

(4) 専門的な業務実績に関する要件

生態毒性に関するQSARプログラム、及びQSARモデルを組み込んだWebアプリケーションの開発に関する十分な業務実績、ならびに生態毒性QSARモデル開発に関連する査読付き学術論文発刊の経験を有すること。

- (5) (2) から (4) の要件を満たすことを証明する、資料及び証明書等を提出し、承認を得ること。

4. 参加希望書類の募集に関する質問の提出先及び回答

(1) 提出場所

茨城県つくば市小野川16-2

国立研究開発法人国立環境研究所総務部会計課契約第一係 担当：濱田

TEL：029-850-2775 FAX：029-850-2388

(2) 提出方法

持参又は郵送（書留郵便等の配達記録が残る方法に限り、受領期間必着とする）によって提出すること。メールによる電子データ（ワードもしくはエクセルで作成したもの）の送付も可とする。
（データの送付先：chotatsu@nies.go.jp）

(3) 提出期間

令和7年9月30日（火）までの10時～16時（持参の場合は、12時～13時を除く）

(4) 質問に対する回答書は、次のとおり閲覧に供する。

期 間：令和7年10月6日（月）午前10時から
令和7年10月14日（火）午後4時まで
茨城県つくば市小野川16-2
当研究所HP上

5. 提出書類、提出期限等

(1) 提出書類

- ① 令和7年度カテゴリーアプローチを用いた新たな生態毒性予測システムの開発業務に係る参加希望書類（別添様式参照）
- ② 提出者の概要（会社概要等）が分かる資料
- ③ 3（5）に示す書類

(2) 提出期限等

- ① 提出期限
令和7年10月14日（火）16時
- ② 参加希望書類の提出場所及び作成に関する問合せ先
4（1）に同じ。
- ③ 提出部数
2部
- ④ 提出方法
持参又は郵送（書留郵便等の配達記録が残るものに限る）すること。
なお、郵送する場合は、封筒に「令和7年度カテゴリーアプローチを用いた新たな生態毒性予測システムの開発業務に係る参加希望書類在中」と朱書きすること。
- ⑤ 提出に当たっての注意事項
 - ア 受付時間は、平日の10時から16時まで（持参の場合は、12時～13時を除く）とする。
 - イ 提出期限までに提出場所に現に到達しなかった参加希望書類は、無効とする。
 - ウ 提出された参加希望書類は、その事由の如何にかかわらず、提出期限以降は差替え又は再提出を行うことはできない。
 - エ 提出された参加希望書類は、返却しない。
 - オ 提出された参加希望書類は、提出者に無断で、参加希望書類の審査以外の目的には使用しない。

カ 虚偽の記載をした参加希望書類は、無効とする。また、虚偽の記載をした者に対して指名停止を行う。

キ 参加希望書類の作成及び提出に係る費用は、提出者の負担とする。

6. 参加希望書類の審査

- (1) 国立環境研究所において、提出された参加希望書類に基づき、当該参加希望書類の提出者が3に定める応募要件を満たしているか否かについて審査し、その結果を参加希望書類の提出者に対して令和7年10月16日（木）までに通知する。
- (2) 審査に当たっては、参加希望書類の記載内容について提出者に問い合わせることがあるので、参加希望書類提出後、(1)の通知期限までは、問い合わせに適切に対応できるようにすること。提出者が問い合わせに応じないとき、又は提出者と連絡が取れないときは、応募要件の確認ができないため、応募要件を満たしていない者と認めることとする。
- (3) 審査の結果、応募要件を満たすと認められる者がいない場合にあっては、特定事業者との随意契約手続に移行し、応募要件を満たすと認められる者が複数いる場合にあっては、一般競争入札又は企画競争手続（以下「一般競争入札等手続」という。）に移行する。
- (4) 応募要件を満たしていないと認める旨の通知を受けた者は、通知をした日の翌日から起算して7日（行政機関の休日に関する法律(昭和63年法律第91号)第1条に規定する行政機関の休日を除く。）以内に、書面により、応募要件を満たさないとされた理由についての説明を求めることができる。

7. 一般競争入札等手続に移行した場合

- (1) 一般競争入札等手続に移行した場合にあっては、応募要件を満たす応募者に対して、入札説明書等を交付し、入札書等の提出を要請する。
- (2) 入札書等提出予定期限
令和7年11月12日（水）

8. その他

- (1) 手続において使用する言語及び通貨
日本語及び日本国通貨に限る。
- (2) 関連情報を入手するための照会窓口
4（1）に同じ。
- (3) 令和7・8・9年度環境省競争参加資格（全省庁統一資格）の「役務の提供等」の「調査・研究」の認定を受けていない者であっても、参加希望書類を提出することができるが、その者が3に定める応募要件を満たすと認められ、一般競争入札又は企画競争手続に移行した場合に入札書等を提出するためには、入札書等の提出時まで、当該資格の認定を受ける必要がある。

令和 年 月 日

国立研究開発法人国立環境研究所
理事長 木本 昌秀 殿

所在地
商号又は名称
代表者氏名

令和7年度カテゴリーアプローチを用いた新たな生態毒性予測システムの開発業務
に係る参加希望書類の提出について

標記の業務について、当社において実施することを希望します。
応募要件を満たしていることを、添付資料のとおりお示しします。
なお、参加者確認公募説明書別紙の暴力団排除等に関する誓約事項に誓約します。

- (1) 会社概要等
- (2) 参加者確認公募説明書3 (5) に示す書類

担当者等連絡先

所属部署：
担当者名：
責任者名：
TEL：
E-mail：

暴力団排除等に関する誓約事項

当社（個人である場合は私、団体である場合は当団体）は、下記事項について、入札書（見積書）の提出をもって誓約いたします。

この誓約が虚偽であり、又はこの誓約に反したことにより、当方が不利益を被ることとなっても、異議は一切申し立てません。

また、国立研究開発法人国立環境研究所（以下「貴所」という。）の求めに応じ、当方の役員名簿（有価証券報告書に記載のもの（生年月日を含む。）。ただし、有価証券報告書を作成していない場合は、役職名、氏名及び生年月日の一覧表）及び登記簿謄本の写しを提出すること並びにこれらの提出書類から確認できる範囲での個人情報警察に提供することについて同意します。

記

1. 次のいずれにも該当しません。また、将来においても該当することはありません。
 - (1) 契約の相手方として不適当な者
 - ア 法人等（個人、法人又は団体をいう。）の役員等（個人である場合はその者、法人である場合は役員又は支店若しくは営業所（常時契約を締結する事務所をいう。）の代表者、団体である場合は代表者、理事等、その他経営に実質的に関与している者をいう。）が、暴力団（暴力団員による不当な行為の防止等に関する法律（平成3年法律第77号）第2条第2号に規定する暴力団をいう。以下同じ）又は暴力団員（同法第2条第6号に規定する暴力団員をいう。以下同じ。）であるとき
 - イ 役員等が、自己、自社若しくは第三者の不正の利益を図る目的又は第三者に損害を加える目的をもって、暴力団又は暴力団員を利用するなどしているとき
 - ウ 役員等が、暴力団又は暴力団員に対して、資金等を供給し、又は便宜を供与するなど直接的あるいは積極的に暴力団の維持、運営に協力し、若しくは関与しているとき
 - エ 役員等が、暴力団又は暴力団員と社会的に非難されるべき関係を有しているとき
 - (2) 契約の相手方として不適当な行為をする者
 - ア 暴力的な要求行為を行う者
 - イ 法的な責任を超えた不当な要求行為を行う者
 - ウ 取引に関して脅迫的な言動をし、又は暴力を用いる行為を行う者
 - エ 偽計又は威力を用いて国立研究開発法人国立環境研究所の業務を妨害する行為を行う者
 - オ その他前各号に準ずる行為を行う者
2. 暴力団関係業者を再委託又は当該業務に関して締結する全ての契約の相手方としません。
3. 再受任者等（再受任者、共同事業実施協力者及び自己、再受任者又は共同事業実施協力者が当該契約に関して締結する全ての契約の相手方をいう。）が暴力団関係業者であることが判明したときは、当該契約を解除するため必要な措置を講じます。
4. 暴力団員等による不当介入を受けた場合、又は再受任者等が暴力団員等による不当介入を受けたことを知った場合は、警察への通報及び捜査上必要な協力を行うとともに、発注元の貴所へ報告を行います。
5. 貴所の規程類及び法令を遵守して不正、不適切な行為に関与せず、また、貴所の職員等から不正行為の依頼等があった場合には拒絶するとともに、その内容を貴所に通報し、さらに内部監査、その他調査等において、取引帳簿の閲覧・提出等の要請に協力します。

(参考) 国立研究開発法人国立環境研究所 規程・規則等
<https://www.nies.go.jp/kihon/kitei/>

国立研究開発法人国立環境研究所契約事務取扱細則（抄）

第2章 一般競争契約

（一般競争に参加させることができない者）

第5条 契約責任者は、特別の事由がある場合を除くほか、当該契約を締結する能力を有しない者及び破産者で復権を得ない者を会計規程第34条第1項の規程による一般競争に参加させることができない。

（一般競争に参加させないことができる者）

第6条 契約責任者は、次の各号の一に該当すると認められる者を、その事実があった後2年間一般競争に参加させないことができる。これを代理人、支配人その他の使用人として使用する者についても、また同様とする。

- （1）契約の履行にあたり、故意に工事若しくは製造を粗雑にし、又は物件の品質若しくは数量に関して不正の行為をした者
- （2）公正な競争の執行を妨げた者又は公正な価格を害し若しくは不正な利益を得るために連合した者
- （3）落札者が契約を結ぶこと又は契約者が契約を履行することを妨げた者
- （4）監督又は検査の実施に当たり職員の職務の執行を妨げた者
- （5）正当な理由がなくて契約を履行しなかった者
- （6）前各号の一に該当する事実があった後2年を経過しない者を、契約の履行に当たり、代理人、支配人その他使用人として使用した者

2 契約責任者は、前項の規定に該当する者を入札代理人として使用する者を一般競争に参加させないことができる。

（予定価格の作成）

第13条 契約責任者は、その競争入札に付する事項の価格を当該事項に関する仕様書、設計書等によって予定し、その予定価格を記載した書面を封書にし、開札の際これを開札場所に置かなければならない。

仕 様 書 (案)

- 1 件 名 令和7年度カテゴリーアプローチを用いた新たな生態毒性予測システムの開発業務
- 2 業務契約期間 契約締結日～令和8年2月27日
- 3 業務実施場所 請負者及び国立研究開発法人国立環境研究所において行うものとする。

4 目 的

国立研究開発法人国立環境研究所（以下「NIES」という。）では、「令和7年度生態毒性予測手法等に関する調査検討業務」（以下「環境省請負業務」という。）及び過年度の環境省請負業務において、定量的生態毒性評価・予測システムとして、定量的構造活性相関（以下「QSAR」という）を利用した生態毒性予測システム（以下「KATE」という）を開発・改良してきている。その一方で、近年の工業用化学物質の多様化・多機能化が進む中で、QSARをベースとしたKATEの適用領域は十分とはいえず、予測結果の適用領域が限定的であり予測が難しい物質も多く存在している。このことから、KATEにおいて活用が十分に進んでいないオクタノール・水分配係数以外の各種物理化学的・量子化学的な記述子と物質構造の類似性に着目したカテゴリーアプローチをベースにした生態毒性予測手法の開発と既存のKATEとの融合が求められる。

これまでNIESが開発を進めてきたカテゴリーアプローチとして、k-近傍法やカーネル重み付き局所多項式回帰法について検討を行い、後者について比較的高い精度での予測が可能であることがわかってきた。本業務では、カーネル重み付き局所多項回帰法に基づくアルゴリズム及び予測システムの開発を行うとともに、将来的なKATEとの融合に向けて、その検証を行うことを目的とする。

5 業 務 内 容

カテゴリーアプローチを用いた新たな予測アルゴリズム及び予測システム開発のため、NIESが提供する魚類・甲殻類・藻類の毒性データを活用して、請負者は以下の業務を実施する。なお、本業務の遂行に当たり、NIES担当者と十分な打ち合わせを行うこととする。

(1) 事前打合せ

請負者は、NIESと生態毒性予測システムの開発に関わる日程について事前打合せを行うこととする。

(2) 記述子計算

請負者は、記述子計算手法やソフトウェアについてNIESと協議を行いながら、NIESが提供する化学物質データについて、予測アルゴリズムの開発に必要な各種物理化学的・量子化学的、ならびに化学構造記述子を計算する。記述子計算のためのソフトウェアについては、(5)のWebアプリケーションに組み込んで使用できるものを選定する。

(3) 予測アルゴリズムの開発

請負者は、上記の記述子を適切に選定して、カテゴリーアプローチを用いた魚類・甲殻類の急性毒性予測、及び藻類の急性と慢性毒性予測を行うアルゴリズムの開発を行う。具体的には、NIESが新たに提供する追加データを用いて、昨年度までに開発されたカーネル重み付き局所多項式回帰法に基づくアルゴリズムによる予測性能の評価を行う。その後、追加データを既存のトレーニングセットに加えて新たなトレーニングセットを作成し、作成したデータに基づいてアルゴリズムの改良を行う。

(4) 予測アルゴリズムの検証

請負者は、上記(3)で改良した予測アルゴリズムの検証を実施し、性能評価結果を作成する。また、昨年度開発された予測アルゴリズムを用いた性能評価結果との比較及び考察を行う。

(5) Webアプリケーションの開発

請負者は、今年度開発する予測アルゴリズムによる毒性の予測及び予測結果の出力が可能なWebアプリケーションを開発する。そして試作版として一般公開できるように、KATEサーバーに移植するためのマニュアルを作成する。

6 業務実施体制及び資格

請負者は、本業務履行可能な体制として、ケモインフォマティクス（化学情報学）や QSAR に精通し、これらの分野において博士号取得し、十分な経験と学術論文を発刊している複数の実施者を有すること。

また、請負者は化学物質の各種物理化学的・量子化学的ならびに構造に関する記述子計算を行う能力を有すること。さらに、請負者は生態毒性予測を実行可能なアルゴリズムを作成・検証する能力を有するとともに、類似の業務を実施した経験を有すること。

7 成果物の提出

請負者は、業務結果報告書の草案を作成し、NIES 担当者と協議の上、業務契約期間終了時まで以下に以下の成果物を NIES 担当者へ提出するものとする。

- (1) 業務結果報告書 1 部
- (2) 報告書の電子データ 一式

報告書の仕様は、契約締結時における国等による環境物品等の調達に関する法律（平成 12 年法律第 100 号）第 6 条第 1 項の規定に基づき定められた環境物品等の調達の推進に関する基本方針（以下「基本方針」という。）の「印刷」の判断の基準を満たすこと。

ただし、当該「判断の基準」を満たすことが困難な場合には、NIES 担当官の了解を得た場合に限り、代替品による納品を認める。

なお、印刷物にリサイクル適性を表示する必要がある場合は、以下の表示例を参考に、裏表紙等に表示すること。

リサイクル適性の表示：印刷用の紙にリサイクルできます
この印刷物は、グリーン購入法に基づく基本方針における「印刷」に係る判断の基準にしたがい、印刷用の紙へのリサイクルに適した材料〔A ランク〕のみを用いて作製しています。

なお、リサイクル適性が上記と異なる場合は NIES 担当者と協議の上、基本方針（<https://www.env.go.jp/policy/hozen/green/g-law/net/kihonhoushin.html>）を参考に適切な表示を行うこと。

8 著作権等の扱い

- (1) 請負者は、本業務の目的として作成される成果物に関し著作権法第 27 条及び第 28 条を含む著作権の全てを NIES に無償で譲渡するものとする。
- (2) 請負者は、成果物に関する著作者人格権（著作権法第 18 条から第 20 条までに規定された権利をいう。）を行使しないものとする。ただし、NIES が承認した場合は、この限りではない。
- (3) 上記 (1) 及び (2) にかかわらず、成果物に請負者が既に著作権を保有しているもの（以下「既存著作物」という。）が組み込まれている場合は、当該既存著作物の著作権についてのみ、請負者に帰属する。提出される成果物に第三者が権利を有する著作物が含まれる場合には、請負者が当該著作物の使用に必要な費用の負担及び使用許諾契約等に係る一切の手続を行うものとする。

9 情報セキュリティの確保

請負者は、国立研究開発法人国立環境研究所情報セキュリティポリシーを遵守し、情報セキュリティを確保するものとする。特に下記の点に留意すること。なお、国立研究開発法人国立環境研究所情報セキュリティポリシーは以下 URL において公開している。
(https://www.nies.go.jp/security/sec_policy.pdf)

- ① 請負者は、請負業務の開始時に、請負業務に係る情報セキュリティ対策の遵守方法及び管理体制、事故時における緊急時の連絡体制について、NIES 担当者に書面で提出すること。
- ② 請負者は、NIES から要機密情報を提供された場合には、当該情報の機密性の格付けに応じて適切に取り扱われるための措置を講ずること。
- ③ 請負者は、国立研究開発法人国立環境研究所セキュリティポリシーの履行が不十分と見なされるとき又は請負者において請負業務に係る情報セキュリティ事故が発生したときは、必要に応じて NIES の行う情報セキュリティ監査を受け入れること。
- ④ 請負者は、NIES から提供された要機密情報が業務終了等により不要になった場合には、確実に返却し又は廃棄し、文書にて報告すること。
- ⑤ 業務に用いる電算機（パソコン等）は、使用者の履歴が残るものを用いてこれを保存するとともに、施錠など適切な盗難防止の措置を講ずること。また、Winny 等の P2P ソフトをインストールしていないことが確認できたもののみを使用すること。
- ⑥ 再委任することとなる場合は、事前の承諾を得て再任先のも以上と同様の制限を課して契約すること。

10 検 査

本業務終了後、NIES 担当者立会いによる本仕様書に基づく検査に合格しなければならない。

11 協 議 事 項

本業務に関し疑義等を生じたときは、速やかに NIES 担当者と協議の上、その指示に従うものとする。

12 そ の 他

請負者は、本業務実施に係る活動において、国等による環境物品等の調達に関する法律（グリーン購入法）を推進するよう努めるとともに、物品の納入等に際しては、基本方針で定められた自動車を利用するよう努めるものとする。