

研究開発

資生堂、AI を活用した「化粧品原料の生分解性評価法」と
「安全性情報識別システム」の開発に成功

～新価値創出の源泉 研究開発における DX(デジタルトランスフォーメーション)を加速～

株式会社資生堂(以下、資生堂)は、新価値創出の源泉である研究開発において 100 年以上にわたり培ってきた研究知見に加え、DX を融合することで新たな価値創出に取り組んでいます。この度、特に膨大な情報の中から必要な情報を収集・解析することが重要な分野において、AI を活用した 2 つの革新的な技術開発に成功しました。

一つ目は、持続可能な社会の実現に向けて、化粧品業界全体が直面している環境に配慮した素材の活用促進という課題に対し、「化粧品原料の生分解性^{※1} 評価法」の開発です。二つ目は、生活者が安心して化粧品を使用できるように、高い安全性と品質基準を遵守するための評価精度の向上と効率化を目指した「安全性情報識別システム」の開発です。これらにより、研究開発における属人化を解消するとともに、効率的で効果的なプロセスを構築し、環境問題や人への安全性の対応を強化することで、化粧品業界全体の発展および持続可能な社会の実現に貢献します。

今後も、AI の活用や外部研究機関とのデータ連携などを通じて DX を推進し、経験値だけでは導き出せない、新たなイノベーションを創出し、研究開発のさらなる加速を目指します。

※1 素材や物質が自然に存在する微生物によって分解され、最終的に水や二酸化炭素、自然に存在する物質に変わる性質

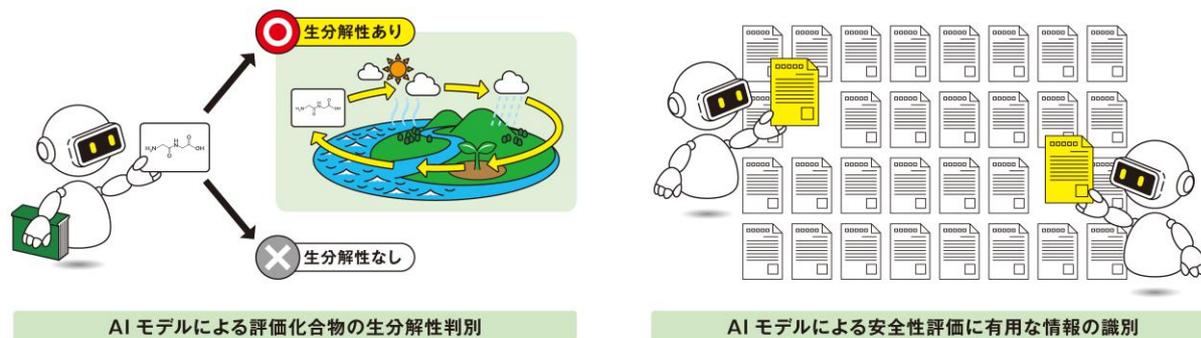


図 1 AI を活用し環境問題およびヒトへの安全性に対する対応強化

成果 1. 「AI-QSAR(AI キューサー)」を活用した化粧品原料の生分解性評価法を開発

資生堂は、研究アプローチの一つとして「Sustainability Innovation: 循環型の価値づくり」を掲げ、環境負荷を低減させる原料選定を重視しています。2020 年より化粧品原料の生分解性評価に着手し、国際基準に基づいた試験法をベースに評価研究を深化させてきました。しかし、従来の評価方法では、時間とコストがかかることや、結果が評価者の経験に左右されるといった課題があり、より簡便で高精度な評価法が求められていました。

今回、独立行政法人製品評価技術基盤機構(ナイト)の協力により、化粧品原料の生分解性を AI で予測する新しい評価法を開発しました。この方法は、化学構造をもとに成分の生分解性を AI で予測し、その結果を活用して原料の生分解性を評価するものです。経済産業省が令和 4 年度化学物質安全対策(化学物質の分解性及び蓄積性に係る総合的評価の導入に関する調査)の委託事業にて「化学物質の審査及び製造等の規制に関する法律(以下、化審法)」のために開発した「分解性 AI-QSAR(定量的構造活性相関)」をもとにしており、化審

法対象外である化粧品成分については、新たに生分解性試験を実施し、実測値を蓄積しました。この実測値と AI-QSAR モデルによる予測結果を比較し、AI モデルを段階的に最適化して使用することで、化粧品成分に対して高い予測精度で生分解性評価結果を得ることが可能となりました。

これにより、高度な専門知識や網羅的な試験を必要とせず、化粧品原料の生分解性を迅速に評価できるようになりました。従来はデータ取得に約 1~2 か月を要していましたが、AI-QSAR は即時に評価結果を得ることができます。今後は、この AI モデルを業界共通の基盤として展開することを目指し、業界における環境負荷を低減させる技術の発展に貢献していきます。

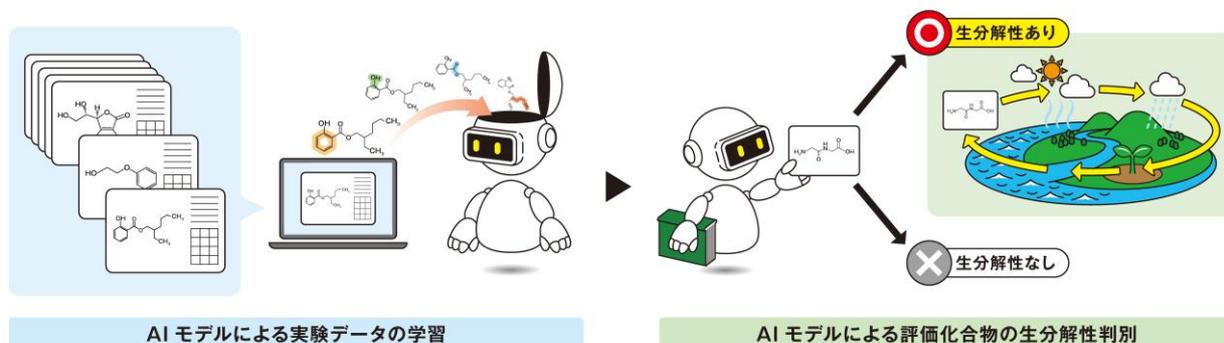


図 2 生分解性評価を行う AI-QSAR の予測イメージ図^{※2}

※2 生分解性する成分の化学構造とその組み合わせによる生分解性のし易さを学習した AI モデルが、評価したい成分の化学構造から自然界に於いて水と二酸化炭素など自然界に存在する物質になり得るかを評価

成果 2. 化粧品原料の安全性情報を迅速に識別するシステムの開発

資生堂は、1963 年に安全性の研究部門を設立して以来、60 年以上にわたり安全性評価法の研究を続けてきました。2003 年からは AI を活用した研究にも取り組み、最先端技術による安全性の評価方法の開発を進めています。安全性評価は、①社内外の文献など、膨大な既存情報の調査と検証、②刺激性やアレルギー性・遺伝毒性など、毒性を予測する試験による評価、③ヒト試験による最終確認というステップをたどります。特に重要な情報調査には高度な専門知識と多大な時間が必要となり、情報不足により安全性評価が難しい場合には原料の活用ができないという課題がありました。

今回、資生堂は化粧品原料の安全性情報を調査し、安全性評価の上で重要な情報である可能性を高精度で判定できるシステムを開発しました。このシステムは、反復投与毒性や皮膚感作性などの評価項目に関する重要な情報の抽出を迅速化し、文書の関連度を識別することが可能です。これにより、属人的なばらつきや見落としのリスクを低減し、高度な専門知識を有する人材が安全性の最終判断に集中できるようになりました。

本研究により、安全性保証の精度と信頼性が向上し、専門人材のリソースを新たな研究や人材育成に効果的に配分できるようになりました。また、これまで情報不足により使用を控えていた原料の活用が可能となり、化粧品の新たなイノベーション創出が期待できます。

本研究成果は 2024 年日本動物実験代替法学会第 37 回大会にて発表し、大会長特別賞を受賞しました。

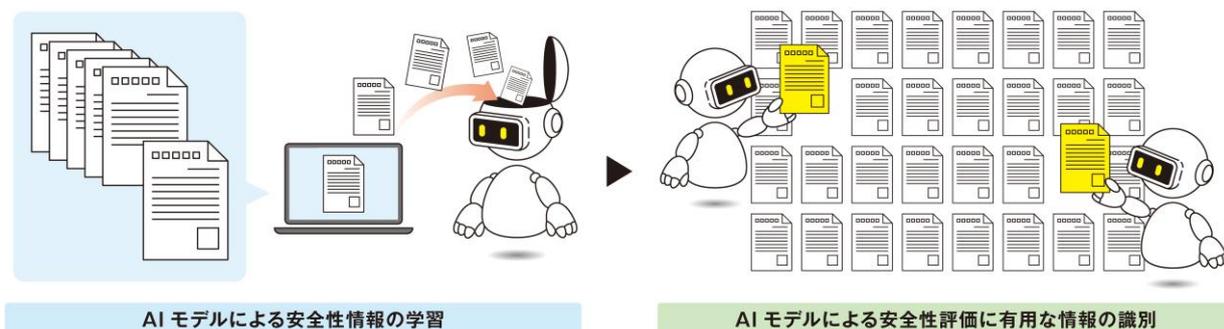


図 3 安全性評価に役立つ AI モデルの概念図^{※3}

※3 AI モデルが、未知の文章に対して、安全性評価の上で重要な情報である可能性をスコアとして正確に算出

今後の展望

資生堂は、品質と安全性を最優先に掲げ、法令遵守はもとより高いレベルの自主基準を設定し、品質の維持・管理に努めてきました。今回開発した2つのAIモデルも、人だけでなく環境への安全性保証の精度向上を目指した画期的な発想に基づいています。人の力だけでは見つけることが難しかった既存情報を最大限に活用し、最先端の技術を駆使した評価体系の進化を続けることで、化粧品技術のイノベーションを支え、新たな可能性を切り拓いていきます。

R&D 戦略について

資生堂は、イノベーションを加速させるためのアプローチとして R&D 理念「DYNAMIC HARMONY」のもと、「Skin Beauty Innovation: ブランドの価値向上」「Sustainability Innovation: 循環型の価値づくり」「Future Beauty Innovation: 新領域への挑戦」の3つの柱を立てています。また、オープンイノベーションを推進し、さまざまな外部機関との研究アライアンスを通じて、新しい価値創造を進めています。資生堂の先進サイエンスと世界トップレベルの研究機関の知と技術の融合から創出された革新的な研究成果は、化粧品技術に関する世界最大の権威ある研究発表会 IFSCG などグローバルにおいて学術的にも高く評価されています。

R&D 理念「DYNAMIC HARMONY」とは

<https://corp.shiseido.com/jp/rd/dynamicharmony>

参考情報

資生堂の安全性の保証

<https://corp.shiseido.com/jp/rd/safety/>

動物実験代替法や安全性評価に関する専門学会での受賞実績

<https://corp.shiseido.com/jp/rd/safety/open/experiment/awards/>