

分析科学者に最適な電子実験ノートの実現

ケーススタディ

ファイザー社 医薬品科学部門 主任科学者 Stan Piper 氏



電子システムは、紙ベースのシステムに比べてはるかに合理的であり、時間や人材、費用といった膨大なリソースを確実に節約できることは明白です。

開発プロセスで ELN を展開することにより、科学者が企業内のナレッジを照合して業務のプロセスを向上するための好機を提供します。

- 毎月 2,000 ～ 3,000 件の実験を ELN に追加
- 新しいELNの記録のうち、70% 以上が既存の実験を複製して作成
- ELN に定期的に記録される情報を活用することで、実験記録の合理化、ボトルネックや負荷分散が必要な部分の特定、開発サイクルにかかる時間の短縮を実現

2006 年、ファイザーは、分析、プロセス、製剤開発を担当する科学者を対象とした電子実験ノート (ELN) の導入プロジェクトを立ち上げました。現在では、複数の拠点で活動する約 1,000 人の科学者が ELN を使用しており、検索によって容易に実験データを検出したり、以前別の担当者が行った作業をベースに実験を行えるようになりました。また、新しい実験のうち 70% 以上が既存の実験を複製して作成されています。この記事では、まず開発部門と研究部門における ELN の役割の違いについて説明し、その後ファイザーの開発部門の分析科学者に特化したニーズについて検討します。また、このシステムを使用して科学ワークフローを合理化する方法や、ファイザーの既存の知識管理イニシアチブのハブとして利用する方法についても紹介します。

開発と研究における ELN の役割の違い

科学者や組織の間では、ごく最近まで、ELN の有用性や適用性に対して疑問の声が上がっていました。初期の ELN の導入はその多くが研究部門で行われており、ELN に対する初期の懸念事項は、データセキュリティや、電子システムの導入による知的財産の形成と保護への影響という点に集中していました。研究部門における ELN の導入を広めるためには、安全で信頼性の高い電子署名を開発することが不可欠でした。現在ではほとんどの組織が化学分野で ELN を導入しており、その勢いは生物学分野にも広がりつつあります。

ELN は、研究部門だけでなく、開発部門においても主に実験データの記録に使用されています。ただし、ELN に記録されたデータの果たす役割は、研究部門と開発部門では大きく異なります。候補の選定を重視する研究部門では、ELN のデータは知的財産の形成と保護に使用されます。これに対し開発部門では、候補のその後の進展が重視されるため、開発を目的とした実験データは基本的に、製剤、プロセス、手法、薬剤を開発する一連の作業を効果的に構築するために使用されます。また、電子署名と監査証跡によって、作業の内容や日時、作業者、方法、目的が実証されます。電子システムのメリットは作業の大半を自動化できることであり、これによってサンプルの作成からテストの実施、結果の解釈や出願に至るあらゆる段階の情報を収集し、保存することができます。

ただし、21 CFR Part 11 といった規制要件に準拠するためには、組織のすべてのプロセスにおいて、ELN システムがデータを正確、確実、安全に記録し保存できることを検証するよう求められます。

開発部門の科学者向けの ELN では、この要件に対応することはきわめて困難です。検証のためには組織内のあらゆる一連の科学的活動のプロセスの背景にあるストーリーを再構築する必要があり、システムは様々な研究部門にまたがるデータと、データの前後関係を捕捉していなければなりません。そのためファイザーでは、ELN を次のようなサポート業務に利用することにしました。

- 原薬 および投薬形態開発
- パッケージ化と投薬形態のサポート
- 臨床用品の製造とテスト
- 審査用提出書類の生成
- 製造プロセスおよび技術の開発と移転
- 製品の改良

ELN を可能な限り有効活用できるよう、ファイザーは、中核となる科学面のサポート機能のみを提供するベンダーではなく、厳格で高度な監査証跡も行うベンダーを探しました。これでファイザーは、ベンダーのアプリケーションや設計プロセスの一次監査を行った後に、リスクベースのアプローチを使用してシステムを検証することができます。これを達成するには、ベンダーのプロセスに一定の信頼性が必要になります。つまりこのプロセスは、ベンダーの中核システムでサポートされていない要素や、ファイザーの科学者が独自に設定した要素に注目して、より厳格な検証を行えるものである必要があります。

科学者が ELN に求めるもの

科学的なソフトウェアも、科学者に使用されなければ意味がありません。科学者が使用するものは、仕事をより効率化してくれるソフトウェアだけです。ファイザー研究部門の IT チームは、ELN の導入を検討しているさまざまな分野の科学者に対し、システムに何を求めているのかについて聞き取り調査を行うことにしました。その結果、次の 6 つのテーマが浮上りました。

- **操作性:** ELN は、紙ベースのノートのように簡単に扱えるものでなければなりません。データの入力方法がシンプルで、科学者が戸惑うような複雑なインターフェースや非合理的なインターフェースが採用されていないことが重要です。また、電子的な性質を活かして、紙ベースのノートを凌ぐ効率性を実現する必要もあります。これにはたとえば、自動計算機能やデータの欠落を通知する機能が挙げられます。
- **携帯性:** 携帯性については、ユーザーの要望と実際のニーズにずれがありました。当初、科学者は ELN を持ち歩きできる「魔法のタブレット」のように使用することを想定していました。しかし実際には、大半の科学者が ELN をオフィスのデスクと研究室の実験デスクの 2 か所だけで使用しませんでした。最終的に ELN は、研究室の特定のニーズに合ったさまざまな方法で導入されました。一部の科学者は ELN を共用のラップトップで使用しており、小さな研究室では 1 台のラップトップを共用し、無菌実験室にも専用のラップトップがあります。また、天秤インターフェースとして使用されているラップトップも存在します。
- **アクセス性:** 科学者は、オフィスや実験室、自宅、外出先から、システムに安全にアクセスできる必要があります。
- **検索機能:** 必要な情報をすぐに得られる Google の強力な検索機能に慣れている科学者は、索引を参照し、ページをめくる必要がある紙ベースのノートよりも、キーワードや数字、構造を検索し、実験データを特定できる ELN に価値を見出しました。この機能は、導入した ELN システムに実際に組み込まれています。実験の検索と複製が可能なのは、この機能は、ファイザーの ELN がもたらした効率化の大きなポイントの 1 つです。
- **コラボレーション:** 紙ベースのノートの問題点の 1 つに、その物理的な側面が挙げられます。特定のオフィスや地域、国が所有する紙ベースのノートを世界中の仲間と共有することは難しく、またデータの破損や喪失のリスクもあります。適切なセキュリティ設定を施した電子システムを使用すれば、データを必要な場所ですぐに利用できます。
- **統合性:** 電子システムは製薬研究開発のさまざまな分野で普及しつつあり、これらのシステムを相互に連携させ、機能させることが重要になっています。データや情報の収集を担う ELN には、特にこの点が求められます。また ELN は、研究室で使用されている既存のツールや今後導入される新しいツールと連携して機能する必要もあります。

これらのテーマを基に、ファイザーの医薬品科学部門では ELN を紙ベースの実験ノートに替わる柔軟性に富んだ電子的な手段として定義しました。これによって科学者は、自ら実験データにアクセスし、実験室での作業を把握し、実験を計画して実行できるようになりました。ELN がもたらすスピードと効率性によって、ファイザーの内部的および外部的な課題の克服と、重要な戦略的目標、とりわけ知識管理に関連する目標の達成にさらに近づくことができました。ELN プロジェクトの目標とその指標は、以下の 3 つの領域に分けられます。

- **ビジネス目標:** ドキュメント作成効率の向上、サイクルの短縮、グローバルな作業負荷の分散
- **技術目標:** 科学者の要請と要件（前述）の達成
- **人的目標:**
 - 科学者が ELN を使用して実験を記録しているか、新しい実験を開始する前に ELN のリポジトリを検索しているか、ELN を協調的に使用しているかを観察
 - ELN によって転記ミスや記録にかかる作業が削減され、科学者の作業効率の向上や候補の進展の妨げとなる問題の回避ができていないかを判断

ELN を使用した分析科学

分析研究の効率化や整合性を促進する要素の 1 つに、分析科学者が日常的に使用しているツールと ELN とを接続する機能があります。この接続機能を説明するために、ファイザーの ELN に備わっている天秤インターフェースを取り上げます。このインターフェースでは、ELN 内でのみ作業する科学者が、利用可能な天秤を閲覧できるようになっています。天秤に接続した時点で物質の風袋重量と実重量が ELN に自動的に記録されるため、科学者は起こりがちな転記ミスを防ぐことができます。さらに ELN では、濃度を自動的に計測し、天秤に関連付けられている情報（技術者名、使用した手法、計量日時など）を提供して、一貫性のある正確な記録を行うことができます（図 1 を参照）。ELN と天秤の接続はファイザーの医薬品科学部門の要請により開発された主要機能の 1 つですが、この機能は中核的な ELN 製品の標準機能としてベンダーに採用され、結果として幅広く利用されるものになりました。

科学者は、ファイザーの ELN の機能である材料インポートウィザードを利用することで、その他の重要なデータに接続することもできます。任意の数の同義語（化合物名、汎用名、商品名を検索用語として使用可能）を使用して、リモートシステム上にあるサンプル情報を検索できます。対象のロットが見つかったら、そのロットに関連するサンプルのメタデータ情報が、ノートに記録された実験の分析材料テーブルに自動的にインポートされます。これにより、科学者は迅速に作業と連携させたり、関連付けたり、記録を取ることができます。

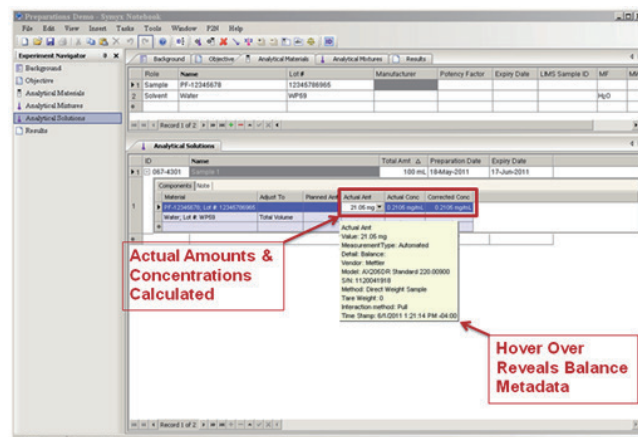


図 1: ファイザーの ELN が備える天秤インターフェースでは、取得した情報が合理化され、転記ミスも防止できる

Analytical Preparations

Sections for Managing Different Types of Preparations

Analytical Mixtures

> Fields appropriate for mixtures shown as default

> Concentration calculated in mol/L

> Utilizes planning functionality

Analytical Solutions

> Fields appropriate for solutions shown as default

> Concentration calculated in mg/mL

> Planning functionality hidden as default to minimise unnecessary fields for users.

図 2: ファイザーの ELN には、科学者が分析準備を管理しやすいようさまざまな項目が用意されている

またこの ELN には、分析準備を管理しやすいようさまざまな項目が用意されています (図 2 を参照)。このインターフェースには、分析用の混合物や溶液を作成する実験の計画に必要な項目が既定で表示され、インターフェースに組み込まれた計算やコマンドスクリプトによって、実験の進行に伴い多くの列が自動的に入力されるようになっています。

目標は、すべての ELN インターフェースにおいて、科学者によるデータ入力を最小限にとどめ、システムの操作方法を合理化することです。さらに重要な点として、このシステムでは、実験の開始から終了までの記録が完全自動化されており、組織の定めた手順や規制要件の準拠に必要な承認がすべて盛り込まれます。

つまり、データは自動的に集積、算出されるため、科学者は導入に際してデータを改めて入力する必要がなくなります。電子システムによって必須情報の入力の有無が確認され、必須項目が空白の場合には科学者に通知されます。また、作成者や評価者に作業の承認や評価の作成の期限を通知する機能も含まれています。さらに、コラボレーションを促進する機能として、システムへのチェックイン/チェックアウト機能も備えられており、共同作業を行うメンバーが実験を最新の結果や成果に更新する際に役立てることが出来ます。

ELN 導入の結果と影響

現在、ファイザーの医薬品科学部門においては、約 1,000 人の科学者が ELN を使用しています。このうちの 90% の科学者がこのシステムを使ってデータを作成しており、残りの 10% は、品質管理担当者やマネージャなどが主に入力済みのデータの確認を行っています。データの作成者は、毎月 2,000 ~ 3,000 もの実験データをシステムに追加しています。注目すべきなのは、こうした新しい実験の 70% 以上が既存の実験を複製して作られたものである点です。これは複数の指標を裏付けるものであり、科学者はシステムを利用して容易に実験記録を検索し、以前別の担当者が行った作業記録をベースに実験を行えるようになりました。また、ノートを探して、索引を参照し、ページをめくるといった一連の動作に費やす時間を考えただけでも、電子システムを使用する方がはるかに合理的であり、時間や人材、費用といった膨大なリソースを確実に節約できることがわかります。

この ELN (電子実験ノート) のワークフローは、一連のステージで構成されています。実験の開始から終了までのプロセスをまとめた電子的記録 (ドキュメントと呼ばれる場合もあるが、GDMS のドキュメントとは異なる) が作成され、ファイザーの定めた手順や規制要件の準拠に必要な署名もすべて盛り込まれます。このワークフローは、医薬品科学部門で使用される ELN の分析リポジトリのすべての実験に適用できます。

ファイザーの科学者がこのシステムに満足していることは、ELN 導入後に行われた意識調査へのコメントからも伺えます。

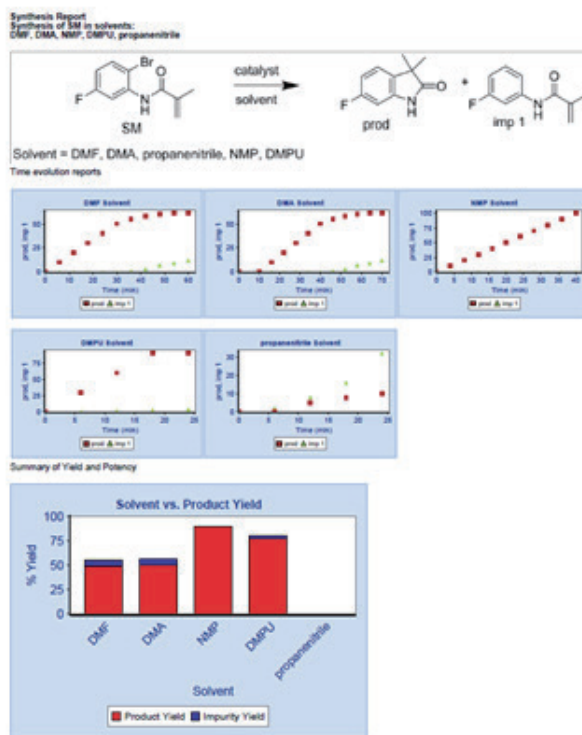


図 3: このレポートには、パイプラインツールと ELN を組み合わせて使用し、医薬品開発における意思決定に役立つ知識を作成する方法が示されている

「ELN の導入後、紙ベースのノートはすべて処分してしまいました。もう紙ベースの作業には戻りたくありません」

「これほど役に立つシステムが手に入るとは夢にも思いませんでした。日常業務が本当に楽になります」

「私のグループでは ELN の評判は非常に高く、実際によく使用されています。実験の記録にかかる時間を減らせるだけでなく、記録にも簡単にアクセスできるようになりました」

ワークフローの合理化の実現に加え、ELN がデータを集約できたことで、科学者が既存のプロセスをよく理解し、さらにプロセスの効率を改善する機会を提供できました。ELN に定期的に記録される情報やプロセスを利用することで、組織はポルネックとなっている部分や、変更や負荷の分散が必要な部分を特定し、プロセスをより合理的かつ効率的なものにすることができます。

また、ELN に記録した重要データの関連付けや実験の検索を行うことで、組織は本格的な知識管理を実施できるようになります。十分に構造化されている ELN は、検索に必要な重要項目が整備された、分析ツールやレポートツールでの検索対象として申し分のないソースです。開発に使用する場合、たとえば材料 (反応物質、製品、不純物、溶媒など) を説明したデータやこれらの材料の特性 (名前、構造、サンプル/ロット ID、プロトコルなど) を収集することができます。多くの実験には、開発における意思決定や、レポートや関係書類の作成を進めるうえで必要な情報が含まれており、パイプラインツールですぐに使用できる詳細なレポートを作成するために利用できます。

このレポートからは、さまざまな分野にまたがる複数のソースのデータを照合できます。以前は手作業で行っていたためにミスが起きやすく面倒だった紙ベースの作業は、電子的なワークフローやプロセスに置き換えることによって合理化できます。たとえば、科学者が構造や製品名を入力するだけで、複数の実験で分析された幅広い反応溶媒の中から、生成される製品やその化合物に関連する不純物の概要が返されます。このようなタイプのレポートは、さらなる実験の必要性を把握、証明するための知識を提供したり、プレゼンやチームミーティングで発表できるようプロジェクトの進捗状況をまとめるために使用することができます。

まとめ

ファイザーの ELN は、単にワークフローを合理化すること以上の効果をもたらしています。

データ作成と情報利用の 2 つの役割を果たすこの ELN は、データ集計と知識管理のハブとして利用されることで、分析科学者による情報処理と意思決定の迅速化を実現しています。

筆者について

Stan Piper 氏は、情報科学プロジェクトを専門とするファイザー社医薬品科学部門の主任科学者です。同氏は 1998 年に、分析実験室の科学者としてファイザー社に入社しました。この 10 年間においては、ビジネスシステムおよび統合を担当する複数のチームのメンバーとして、LIMS、CDS、ELN、Lab Data Archive アプリケーションなどの実験室ソリューションの評価と導入を担当しており、現在は、複数のグローバル情報科学イニシアチブにおいてビジネスリーダーを務めています。同氏は、1998 年にスティーブンス工科大学 (Stevens Institute of Technology) で化学生物学の理学士号を取得し、2006 年にはレンセラー工科大学 (Rensselaer Polytechnic Institute) で MBA を取得しました。

電子実験ノートのメリットの詳細については、<http://accelrys.co.jp/products/process-management-and-compliance/electronic-lab-notebook.html> を参照してください。

ダッソー・システムズの**3D**エクスペリエンス・プラットフォームでは、**12**の業界を対象に各ブランド製品を強力に統合し、各業界で必要とされるさまざまなインダストリー・ソリューション・エクスペリエンスを提供しています。

ダッソー・システムズは、**3D**エクスペリエンス企業として、企業や個人にバーチャル・ユニバースを提供することで、持続可能なイノベーションを提唱します。世界をリードするダッソー・システムズのソリューション群は製品設計、生産、保守に変革をもたらしています。ダッソー・システムズのコラボレーティブ・ソリューションはソーシャル・イノベーションを促進し、現実世界をより良いものとするためにバーチャル世界の可能性を押し広げています。ダッソー・システムズ・グループは140カ国以上、あらゆる規模、業種の約19万社のお客様に価値を提供しています。より詳細な情報は、www.3ds.com (英語)、www.3ds.com/ja (日本語) をご参照ください。



©2014 Dassault Systèmes. All rights reserved. 3DEXPERIENCE, CATIA, SOLIDWORKS, ENOVIA, DELMIA, SIMULIA, GEOVIA, EXALTED, 3D VIA, 3DSWIM, BIOVIA, および NETVIBES はアメリカ合衆国、またはその他の国における、ダッソー・システムズまたはその子会社の登録商標または商標です。ダッソー・システムズまたはその子会社の商標を使用する際には、書面による許可の承認が必要です。