

Syngenta社における 既存ケムインフォマティクス 基盤の移行

Syngenta 社 R&D IS 化学システム部長、Graham Mullier 氏へのインタビュー

Syngenta 社 (www.syngenta.com) は、革新的な研究と技術を通して環境に優しい農業の実現に尽力する、農業関連産業分野で世界をリードする多国籍企業です。作物保護分野では世界トップ、高付加価値商用種子市場では世界第3位にランク付けされています。

アクセルリスは、Syngenta の化学システム部長である Graham Mullier 氏に、既存のケムインフォマティクスシステムを AIRIM に移行するに至った理由と、それによってもたらされた利点についてお話を伺いました。AIRIM とは、アクセルリスの Accord Enterprise Informatics (AEI) を中心に構築された新しいシステムのことで、

Graham 氏に、まずは現在 Syngenta で使用されているケムインフォマティクス ツールについて説明して頂きました。「弊社では現在、AEI、Accord Structure Checker、および Accord SDK を使用しています。SDK は、主に登録システムのコーディングで使用されています。これは AEI の最上層に位置します。また、化学データの検索クライアントとして Accord for Excel Enterprise を使用し、その他に Accord Chemistry Control と Chemicals Available for Purchase (CAP) を使用しています。」

そして Graham 氏は、Syngenta の既存のシステムを Accord ベースのシステムに切り替える決断をした、その理由の核心について説明して頂きました。「旧システムは単一のシステムではなかったのです。弊社は最近合併したばかりで、それぞれのシステムをうまく機能させ、データを 1 つにまとめ、システムにとって必要なあらゆることをしようと奮闘していました。」

「古いツールを使用して、前年までの考え方ややり方を続けるのではなく、全員が同じグループの一員であり、同じツールを使用する研究者なのだということを、社内の科学者たちに理解してもらう必要がありました。これは、会社を一貫性のある組織にまとめるための作業の一部でした。それにデータを一つにまとめる事はサイエンスの面でもアドバンテージを得る事が出来ます。そうする事で研究員は一カ所にアクセスしてデータを検索すれば良いだけです、全研究員が同じデータを得ることが出来ます。」



使用ソリューション

- ・ Accord Enterprise Informatics
- ・ Accord SDK, Accord Structure Checker
- ・ Accord Chemistry Control
- ・ Chemicals Available for Purchase (CAP) database
- ・ SPRESI database

産業分野

農芸化学

組織



「我々は、思い通りに AEI (Accord Enterprise Informatics) を拡張することができています。システムを拡張するために一度システムをバラバラにした後で、苦勞して組み立て直す必要が無いからです。」

「AEI、そして Accord Structure Checker のようなコンポーネントツールを手に入れたことにより、システムの構築が容易になりました。これが、単なる化学データカートリッジではなく、Accord ツールと、AEI を選択した理由の 1 つです。」

「3つの旧システムを AEI に移行しました。Zeneca 社の旧システムは、あるベンダーのプラットフォームに合わせたものでした。また、Novartis 社のシステムは、別のベンダーのツールキットにより構築されたものでした。さらに RS³ は、別のインフォマティクスプロジェクト内で使用されていました。この3つのすべてを AEI に移行したのです。」と、Graham 氏は説明しました。

Graham 氏は、3つのシステムを1つのシステムに移行したことによる利点についてもコメントしています。「システムの移行によって、ライセンス費用が減少しました。インターフェースも簡素化されました。支払いは1つのライセンスセットに対して行われるので、IT 側にとっても購買側にとっても作業が簡素化されました。また、3つではなく、1まとまりのコードと1つのシステムを管理すれば良いので、複数の異なるシステムをつなぐ必要もありませんし、人員を重複して確保する必要も、登録作業を平行して実行する必要もなくなりました。」

Graham 氏は、なぜ Syngenta が、数ある他のケムインフォマティクス ソリューションではなく、Accord を選択したのかについて説明してくれました。「2つの企業が合併した結果、それぞれの旧システムで機能に大きな違いがあることがわかりました。例えば分子モデリングツールやドラッグデザイン用の計算ツールなどのように、これらの違いを簡単にクリアする方法は見つかりませんでした。そこでアクセセルリスを検討したのです。アクセセルリスは複数のシステムやツールの統合作業を数多く手がけており、異なるシステムをうまくまとめていました。これが、AEI を選ぶという戦略決定を下した主な理由です。また、化学データの品質もよく、データの自然な表現も他のシステムより優れていました。」

アクセセルリスと Syngenta によって共同開発された Accord SDK や Accord Structure Checker などのコンポーネントを使用して AEI を拡張できた点も非常に重要でした。Graham 氏は次のように説明しています。「弊社には構造をチェックするツールが欲しいという明確なニーズがあり、偶然にもそれがアクセセルリスが開発しようとしていたものと一致したことは幸運でした。これにより、急速に開発が進み、求めていたものが非常に短期間のうちにもたらされました。求めていたものに近いものではなく、求めていたものそのものが得られました。アクセセルリスとの共同開発は、効率的なものであると同時に生産的なものでもありました。」

Graham 氏は続けます。「我々は、思い通りに AEI を拡張することができます。システムを拡張するために一度システムをバラバラにした後で、苦勞して組み立て直す必要が無いからです。これは、アップグレードを行う際に非常に重要です。我々は個別に新しいバージョンを反映させて1つにまとめ直すのではなく、アップグレード後に各コンポーネントが AEI のインターフェースに正確に適合することを確認するだけでよいのです。」

さらに、Syngenta のユーザーに提供されている機能とシステム構造について、お聞きしました。「創薬研究をサポートするために、システムを調整しようとしていました。ごく簡単に説明すると、合成者は化合物のサンプルを作り、生物研究員が生物学的スクリーニングを行い、その後データを格納します(このデータは後で分析します)。スクリーニングするためにサンプルを合成者から生物学者のところへ送付する必要があります。それに加え我々はデータベースに格納された結果をレポートしなければなりません。システム全体で化学データ、生物学実験データ、およびロジスティクス面までハンドリングします。そして、最終的な目標としてレポートングソリューションがあります。社内のデータモデルに合わせるために、それぞれシステムの独立性はありますが、各システムが完全に独立して存在するわけではありません。」

「AEI ベースのシステムへの移行により、投資に対する収益は十分に戻ってきたと感じています。……管理の簡素化とライセンス費用の削減という点で、弊社は確実に利益を得ています。」

「我々は、科学者たちが1カ所にアクセスすれば済むように、システムのかなりの部分を統合してきました。これにより、研究がしやすくなったはずですが、古いデータを見たり、必要な全データの半分にしかアクセス出来ずに時間を無駄にすることは、もはやありません。同一のデータに基づいて、共同で作業することができます。今後は、Syngenta の次の主要製品の創造に向けて活動していきます。」

「AEIは弊社の化学ソリューションの心臓部です。これにより、化学者は他の既知の物質を検索できるようになりました。その中には、Syngenta 内で作成または計画されたものも、少なくとも外部ではもともと使用可能だったものもあります。そこに CAP が加わりました。AEI は、構造やテキストフラグなど、我々が化学物質と呼んでいるものを管理する心臓部です。我々は、サンプルハンドリング機能、およびサンプルコンポジションと呼んでいる、サンプルとその含有物を結び付ける機能を追加しました。また登録機能はその中でも極めて重要です。」と Graham 氏は言います。

Syngenta が構築したシステムは、段階的に展開されました。Graham 氏は次のように説明しています。「現在、このシステムは Syngenta の作物保護研究全体で使用されています。最初のフェーズでは、2 ヶ所に導入しました。第 2 フェーズで残りの部門での対応を行いました。コアアプリケーションおよびその他のレポートツールを使用する研究者は、約 350 名います。レポートツールのユーザー数は、全世界で約 500 名です。また、システムには 350 万の化学構造データが格納されています。」

Syngenta の AIRIM システムの構築はどのくらい簡単だったか、また、新しいシステムに移行する際に苦労したのはどのような点かを、Graham 氏に尋ねました。「プロジェクトとしては、AIRIM は全体的に非常に難しいものでした。しかし AEI や Accord Structure Checker のようなコンポーネントツールを手に入れたことにより、システムの構築が容易になりました。これが、単なる化学データカートリッジではなく、Accord ツールと、特に AEI を選択した理由の 1 つです。」と、Graham 氏は説明しました。

アクセルリスとの共同開発についてもお聞きしました。Graham 氏は、次のように話しています。「全体として、実りの多い関係でした。それは今も続いています。個人的な意見ですが、一緒に作業をしたさまざまな人たちが、ごく短期間のことだけを考えるのではなく、この良い関係を維持しようとしているように感じられたことが重要だと思います。今月は何を買ってもらおう、というわけではありません。ただのクライアントと顧客という関係ではなく、これは戦略的な共同開発であり、パートナーシップであると感じました。」

その後、Graham 氏は、Syngenta による Chemicals Available for Purchase (CAP) および SPRESI データベースの使用について、簡単に説明してくれました。「これらのものは、十分に ACD を置き換えられるものとして考えています。弊社にとって、データコンテンツの供給は課題でした。AEI、Accord のツールおよびコンポーネントに基づいたコアの基盤は手に入れました。次に必要なのはデータの投入です。」

「SPRESI for Accord Database Explorer に移行することにより、他のベンダー製品の使用をやめ、総合的な化学反応データをユーザーに提供することができるでしょう。これにより、英国、スイス、そしてインドにいる化学研究者すべてが共通のツールセットを使用して作業することができます。」と、Graham 氏は言います。

それでは、ソフトウェアの投資収益率はどうでしょう？ Graham 氏はこう言っています。「これは、カスタマイズ可能で拡張可能なツールセットを組み合わせたものです。しかし、実際のところ、アクセルリスは、時折発生する不具合を単に修正するだけでなく、熱心に作業をし、機能拡張を行っています。Syngenta にとって、これは重要なことです。アクセルリスが次世代のシステムへの移行も視野に入れ、どうすればよいか考えてくれているという事実は、我々にとって非常に重要です。」

「AEI ベースのシステムへの移行により、投資に対する収益は十分に戻ってきたと感じています。ですが、旧システムの移行作業はまだ継続するつもりです。移行が完了したとき、投資収益はより大きなものになっているでしょう。管理の簡素化とライセンス費用の削減という点で、弊社は確実に利益を得ています。まだやらなくてはならない作業は残っています。我々は、科学者たちが研究を進めるのに、1 カ所にアクセスすれば済むように、システムのかなりの部分を統合してきました。これにより、研究がしやすくなったはずですが、古いデータを見たり、必要な全データの半分にしかアクセス出来ずに時間を無駄にすることは、もはやありません。同一のデータに基づいて、共同で作業することができます。今後は、Syngenta の次の主要製品の創造に向けて活動していきます。」 Graham 氏は、こう締めくくりました。