

ELN導入によるサイエンス・サポート およびナレッジ・マネジメントの促進

ケーススタディ



ファイザー社
医薬品科学部門
主任研究者、Stan Piper氏

研究部門のITチームが、研究ワークフローと組織の知識管理を支援するELN導入の際に活用できる4つのベストプラクティスは、以下のとおりです。

- 要望、製品定義、リリーススケジュールをスパイラルライフサイクルモデルで管理
- 研究者の作業方法に応じたオープンな構成理念を採用
- 機能を階層で提供
- データ構造の定義と再現性のあるオブジェクト管理の使用により、システムの構造と管理を最適化

ファイザーの医薬品科学部門では最近、研究開発分野の中でもより規制の厳しい3つの開発分野（分析科学、プロセス科学、製剤科学）に従事する研究者を支援するために、電子実験ノート(ELN)を導入しました。このELN導入は、中核的な機能のサポートに加え、各分野の特定の実験活動や実験計画を支援することを目的としています。この記事では、ELN導入におけるファイザーのアプローチ、および導入成功に不可欠な4つのベストプラクティスについて説明します。ELNはファイザーにドキュメント作成サイクルの短縮、実験の効率化とスループットの向上、ドキュメントの品質と一貫性の向上、コラボレーションとコミュニケーションの合理化など、幅広いメリットをもたらしています。

開発と研究におけるELNの役割の違い

ライフサイエンスを専門とする組織において、ELNは研究部門では比較的普及していますが、開発部門ではあまり一般的に使用されていません。いずれの場合でも、ELNは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

「12年という私のファイザーの在職期間において、このELNの導入作業ほどスムーズなものはありませんでした。これまで導入し中で、最も直観的で使いやすいシステムです。」

—ELN意識調査に対するファイザー従業員のコメント

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必要があります。

ソフトウェアの検証には時間とリソースがかかるものですがELNの場合は利用範囲が広範にわたるため、特に困難でした。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

科学ソフトウェアシステムは数多く出回っているため、組織が既製のアプリケーションを選び、ユーザーの要望にあわせてカスタマイズしようとするのは自然なことです。しかしファイザーでは、幅広い活用が期待できるELNシステムに対してこのようなアプローチを取ることはしませんでした。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、厳格かつ高度な監査証跡も行うベンダーを探しました。このような方法を取れば、既製のシステムをカスタマイズするのではなく、ベンダーの協力のもとで、ユーザーのニーズを満たす設定を施したシステムを提供できると考えました。ファイザーでは、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しました。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不可欠になります。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、ファイザーの研究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。

研究者がELNに求めるもの

ソフトウェア導入を成功させるには、ユーザーがシステムに何を求めているかをプロジェクトチームが十分に理解する必要があります。これは時に、要望と実際のニーズにずれが生じている場合があるためです。ユーザーの要望に完全に応えようとするあまり、ソフトウェアの定義と導入のプロセスに没頭しすぎて思わぬ落とし穴にはまってしまうことがあります。このことをブランコを使って描いた漫画があります¹。ユーザーは正常に機能するシンプルなツールを求めているにもかかわらず、さまざまな（時にはまったく役に立たない）機能を盛り込んだあげく、ユーザーの要望には何ひとつ応えられていない、ということを表したものです。

こうしたリスクを回避するために、ファイザーのチームはまずELN導入が及ぼす影響についてさまざまな分野の研究者と話し合い、システムに何が求められているかを探ることにしました。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、研究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、研究者は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、大半の研究者がELNをオフィスのデスクと研究室の実験デスクの2か所でしか使用していませんでした。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。一部の研究者は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：**研究者は、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研究者は、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の定義およびプロジェクトの目標と指標を定めました。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捉え、研究者たちが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支援し、ELNがもたらすスピードと効率性によって、次に挙げるファイザーの内部的および外部的な3つの課題を克服することを目指しました。

- 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：**研究者の要請と要件（前述）の達成
- 人的目標：**

- 1)研究者が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
- 2)ELNによって転記ミスや記録にかかる作業が削減され、研究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導入のベストプラクティス

組織規模の大きなファイザーでは、注意を払う必要のある4つの領域があります。これは、ほとんどの大規模組織に当てはまると考えられます。

1) 柔軟なライフサイクルモデルの採用

ソフトウェア開発のライフサイクルとして最も一般的なものに線形モデルとウォーターフォールモデルの2つがありますが、いずれも大規模で複雑なユーザーベースを持つELNには不向きです。ELNの機能は絶えず進化していくものであり、またベンダーのリリーススケジュール（ファイザーのELNベンダーは年間少なくとも2バージョンのソフトウェアをリリース）の変更に対応することも困難です。第三のライフサイクルモデルとして、スパイラルモデルと呼ばれるものがあり、このモデルでは作業を4つ（発案/契約、要件、設計/作成/テスト、サポート）に分割します。作業はこの4か所をらせん状（スパイラル）に通過しながら進め、初期のプロトタイプから開発版、そしてさまざまな製品版へと開発を行います(図1参照)。このスパイラルライフサイクルでは、要望、製品定義、リリーススケジュールを効率よく管理できます。

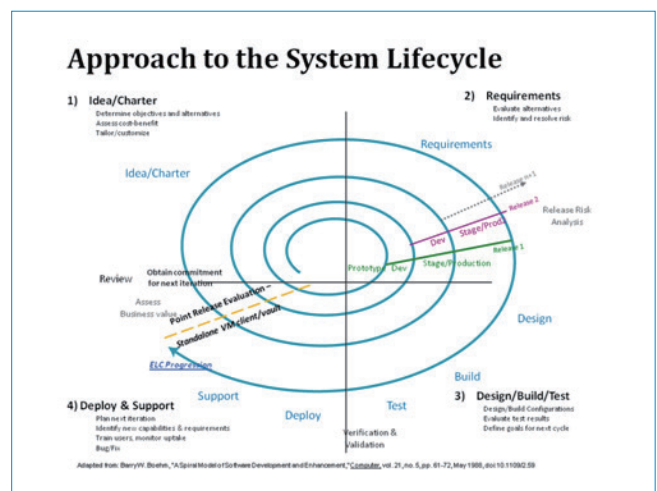


図1: ソフトウェア導入のスパイラルアプローチにより、組織は ELN のように複雑なシステムを柔軟に導入できる。

2) ユーザー主体のオープンな構成理念を採用

ファイザーの構成理念は3つの方針によって構成されています。1つ目の方針は、過剰な構成を避け、不要な経費や操作の複雑化を防ぐことです。これを実現する方法としてできたのが2つ目の方針であり、多くの建設業者が建築に採用するのと同じ方法でソフトウェアを開発することです。建設プロジェクトにおいて、景観設計は、人々がどのような経路を使うかが明らかになった後の最終段階で行われます。人々がよく使う経路に歩道を作る方が用途として適切であり、敷地も傷みにくくなると考えられるためです。組織は、パイロット

プロジェクトの早期利用者と緊密に連携を取ることで、ベストプラクティスを見極め、ELNに直接活かすことができます。このアプローチを使用すると、分野を超えてプロセスを標準化できます。研究者全員が特定のプロセスを管理するためのスプレッドシートを各自で作成するのではなく、全員がアクセスする1つのスプレッドシートを作成すれば、時間の節約になると同時に整合性や品質の向上も期待できます。

3つ目の方針は、ELN導入を1つの目的地として捉えることです。定義されたシステムオブジェクトの範囲に沿って、特定のバージョンの製品用の道筋を設定し、ファイザーが設定したELNの定義とチームが設定したビジネス、技術、人的な目標に合わせて方向性を決めました。このような方針を取ることにより、組織は初期バージョンや機能のサブセットを重要ポイント、あるいは最終目的地までの通過点として捉える柔軟性を得られます。

3) 機能を階層で提供

ファイザーはELNの機能について、基盤となるデータ構造要素を中央階層に、コンテナやデータを定義するその他の要素を中間階層に、ELNを別のシステムに統合する際に使用する拡張機能やアダプタを外部階層に配置しました。階層化の効果は、ELNの天秤インターフェースに見ることができます。研究者たちはELN内で、利用可能な天秤を閲覧することができます。使用する天秤を選択すると、ELNによって、物質の風袋重量の計測、実重量の記録、濃度の算出、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）の提供が自動的に行われ、一貫性のある正確な記録が可能になります(図2を参照)。天秤インターフェース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。

4) データ構造の定義と再現性のあるオブジェクト管理の使用

ELNで知識管理を効果的に行うには、適切な構造化と管理が行われている必要があります。つまり、どのデータセットを収集してどこに保存するかがわかるように、データの構造を明示的に定義しなければなりません。ファイザーが見出したベストプラクティスの1つは、データ構造を追加する際に必ずサインオフを行うデータキュレーションチームを編成することでした。このチームが管理することによって、信頼性が向上し、システムの拡張が慎重かつ体系的に行われるようになります。またデータ検索をサポートし、柔軟性を引き続き確保するために、組織には、ELNでさまざまなオブジェクト（テンプレート、フォーム、セクション、用語、リストなど）を管理するための再現性のあるプロセスが必要です。こうしたオブジェクトは、小規模な組織であっても急速に扱いはなくなるものであり、組織の規模が大きくなればなるほど状況は困難になります。ファイザーでは、このような要素のすべてをシステムで管理することにしました。これにより、変更管理や電子署名の変更はすべて1つの場所で定義されるので、別の場所に保存されたり、アーカイブされたり、管理されることはありません。組織がどのような戦略を取るとしても、データ構造とオブジェクト管理については事前に考慮し、後になってシステムに変更を加えなければならない状況になることは避けるべきです。

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人の研究者がELNを使用しています。このうちの90%の研

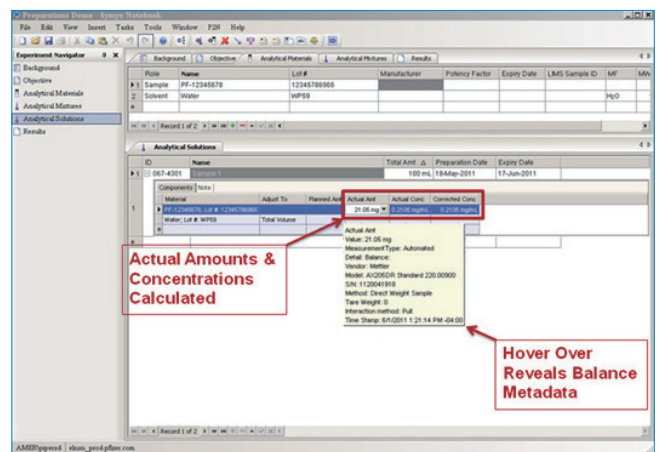


図2:ファイザーのELNが備える天秤インターフェースでは、取得したデータが合理化され、転記ミスも防止できる

究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、研究者はシステムを利用して容易に実験記録を検索したり、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。

ファイザーの研究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。

「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」

「12年という私のファイザーの在職期間において、このELNの導入作業ほどスムーズなものはありませんでした。これまで導入した中で、最も直感的で使いやすいシステムです」

「IT部門のスタッフは通常、新しい電子システムを研究者に公開する際にこうした手放しの評価を受けることなど期待していません。こうした評価がされたのは、もちろん、ファイザーチームの導入作業が見事だったこともその理由ですが、製品そのものが優れていることも大きな要因です」

データの利用、情報の作成、知識の促進

ELNでは、研究者の作業方法に合った視野の提供、組織におけるプロセスの理解の向上、そして業務の効率化を促す形で、データを収集します。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、組織はボト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。

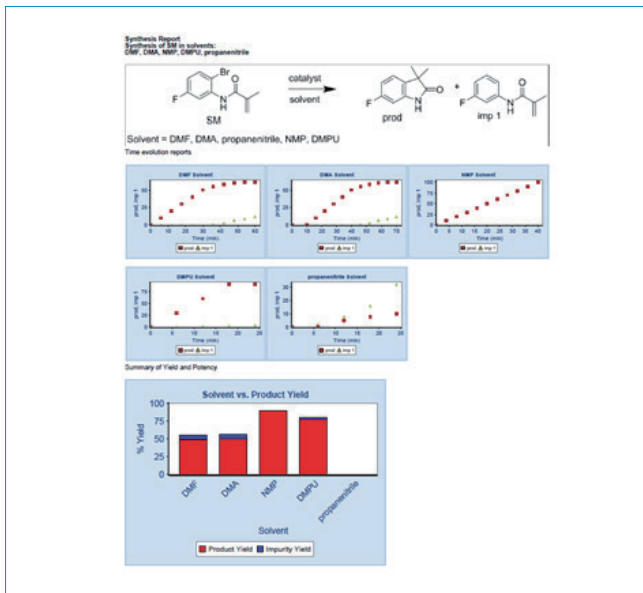


図3:このレポートには、パイプラインツールとELNを組み合わせて使用し、医薬品開発における意思決定に役立つ知識を作成する方法が示されている

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、研究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(図3を参照)。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。

「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」

「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」

—ELN意識調査に対するファイザー従業員のコメント

まとめ

研究者がELNをどのように使用するかを注意深く考慮し、オープンかつ再現可能な方法でデータ構成とオブジェクト管理を行えるようにすることで、ITグループは単に紙ベースのワークフローを電子的なものに変える以上のことを実現しました。組織が単なる「ドキュメントの電子化」を超えて、電子的なデータを可能な限り連携、共有、再利用することで、より高品質のデータや細かい調整、正確な基準を活用できるようにしました。ELNはこのような作業のハブとして、データ、経験、状況を収集し、組織が本格的な知識管理を行えるように支援します。

著者について

StanPiper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研究者です。同氏は1998年に、分析実験室の研究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年にステューブン工科大学(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。

ダッソー・システムズの3DEXPERIENCE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 Systemes. All rights reserved. 3DEXPERIENCE, CATIA, SOLIDWORKS, ENOVIA, DELMIA, SIMULIA, SIMULIA, GEVIA, EXALTERD, 3D VIRA, 3DSWIM, BIOVIA, 3D INETVIBES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商標または登録商標です。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、事前にその承認が必要となります。