

# 「電子ラボ」の統合による コラボレーションの育成-ELAN社

ケーススタディ



Elan Corporation

Elan Corporationは、化学分野における研究ライフサイクル全体をサポートするシステムとして、BIOVIAのソリューションを導入しました。同社が得た主なメリットは次のとおりです。

- 化学および生物学の複合データの一元管理をわずか6週間で実現。
- 分野ごとに専用のテンプレートを使用し、医薬品化学、分析化学、プロセス化学の各分野の研究活動を合理化および自動化。
- 外部パートナーの科学者が研究結果を安全にELNに保存できるようにすることで、コラボレーションを強化。
- 研究活動に活用できるよう、研究者による既存の知識や重要な知的財産へのアクセスを迅速化

BIOVIAとシミックスが合併を進めていた2010年7月、Elan Corporationでは既に独自に両社のソフトウェアの統合を進めていました。同社は現在、化合物構造の構想や設計に始まり、合成実験と特性分析を経て実験を終了し、知的財産として承認するといった実験ライフサイクル全体をサポートする統合化学情報技術ワークフローを実装しています。Elan社の医薬品化学、分析化学、プロセス化学分野の研究者および外部パートナーの研究者は、コミュニケーションと研究における意思決定を強化する支援ツールを使用しながら、電子的な環境上で共同作業を行っています。これは、BIOVIAの代表的な製品であるIsentris、Pipeline Pilot、BIOVIA Notebook by BIOVIA、およびDirectデータカートリッジの緊密な連携によって実現されています。

Elan社のリサーチ・インフォマティクス担当ディレクターであるAjay Shah氏は次のように語ります。「近年ではあらゆる規模の企業に当てはまると思いますが、特に当社のような中規模企業では、常に少ない投資で大きな成果を挙げることが求められます。そのため、当社が研究情報科学アーキテクチャを導入するにあたっては、アプリケーションを迅速に提供し、科学者の作業に最高のテクノロジーを実装することができるツールを探し求めました。BIOVIAが提供するこれらの製品の組み合わせにより、特定のユーザーの日々の作業をサポートする一方で、他分野の同僚とのコミュニケーションやデータ共有の方法を合理化するエンドツーエンドのワークフローを開発することができました」。

**「BIOVIAの製品群の組み合わせにより、特定のユーザーの日々の作業をサポートする一方で、他分野とのコミュニケーションやデータ共有の方法を合理化するエンドツーエンドのワークフローを開発することができました」**

—Ajay Shah 氏  
ディレクター、リサーチ・インフォマティクス  
Elan Corporation

**「BIOVIAとシミックスが合併した今、Pipeline Pilotの持つ可能性はさらに大きく広がりました」**

—Ajay Shah 氏  
ディレクター、リサーチ・インフォマティクス  
Elan Corporation

## RISeの導入

昨春、Shah氏とそのチームメンバーであるAli Ozkabak氏、John Meng氏、SrinivasBolisetty氏はElan社の研究情報科学インフラ開発の第一段階に関するレポートを発表しました<sup>1</sup>。RISe(Research Informatics Systems at Elan)と呼ばれるこのインフラストラクチャは、Elan社が創業時から約10年間にわたって使用してきた自社開発の商用システム群に替わるものです。

RISeは次の理念に基づいて作成されました。

- 実績あるクラス最高のアプリケーションに可能な限り投資し、研究者の作業に最適なツールを提供する
- 新機能や異なる機能を容易に導入できる、オープンで柔軟性の高いベンダー中立型のアーキテクチャを基本とする
- 特定のタスクを行うアプリケーションとワークフローを導入し、サービスまたはパイプラインを通じて目的のデータをオンデマンドベースでさまざまな分野の科学者に提供する
- 研究者が生産性の高い仕事をするために必要なあらゆるデータを提供する、自己集成的なダッシュボードインターフェースを作成する
- Elan社のリサーチ・インフォマティクス・スタッフがサポートするアジャイル開発を使用する

化学分野を重視したRISeの第一段階を設計するにあたり、Elan社には3つの大きな目標がありました。1つ目は、科学および生物学の（分析）データの管理を一元化し、構造活性相関（SAR）分析を迅速かつ効率的に実現することです。2つ目は、物性計算を自動化し、統一したResearch Workbenchで登録処理を実行して研究情報科学の幅広い活動を取り入れることにより、登録処理を合理化することです。そして3つ目は分析能力の向上であり、とりわけ作業の流れの中で分析を行えるように、研究者がマウスをクリックするだけで目的のデータの分析を開始できるようにすることです。

「現在はBIOVIA製品となったこれらのツールを使用することで、この3つの目標すべてを実現することができました。この登録システムを使用する以前は、化合物の登録は手作業中心の手間のかかる仕事でした。登録処理の自動化により、研究者が新しい化合物や関連する化合物をほぼリアルタイムに追加できるようになりました」(Shah氏)。

Isentrisはシステムのハブであり、BIOVIA Direct6データカートリッジの強化、Elan社の登録システムやAvailable Chemicals Directoryといったデータベースコンテンツへのアクセス、高度な検索機能の提供を実現し、Elan社のResearch Workbenchを通じて研究者がダッシュボードで化学や生物学のデータを得られるようにしています。その背景ではPipeline Pilotプロトコルが稼働し、システムに物性計算を提

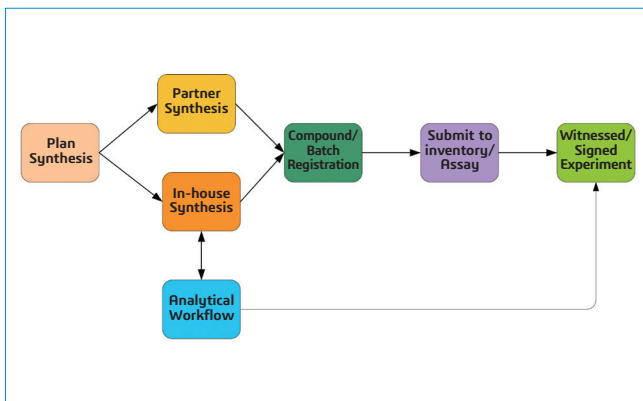


図1: RISEにELNを導入することで、Elan社は、化学分野向けの統合情報科学ワークフローを作成するクラス最高のソフトウェアの実装を目指しました。

供しています。Elan社は主要な分析ツールとしてSpotfireを使用していますが、Shah氏はRISeでもPipeline Pilotプロトコルを使用してさまざまな分析作業を簡単にこなすことにすぐに気が付きました。

「RISeの素晴らしい点は、その柔軟性とオープンであることです。好みのツールを自由に選べますし、不都合があればすぐに別のものと交換できます」。

Elan社は、もし選択したベンダーがすぐに合併するという事実を事前に知っていたら、別の方法を選んでいただいでしょうか。たとえば、BIOVIAの“Headquarters”フォーラムにおける公開コメントで、あるユーザーはElan社がデータウェアハウスを使用しなかったことに疑問を抱いていました。Shah氏は、Oracleのマテリアライズドビューを使用して、Elan社の化学および生物学のデータベースをIsentris内で結合することにしたチームの選択を支持しています。

「データウェアハウスは当社に向いていませんでした。ウェアハウスの構築やサポートに実用な設計を行うことを正当化するほどデータ量もなく、また十分な時間もありませんでした。ウェアハウスの場合、計画からツールの選定、導入、ETL(抽出/変換/ローディング)まで考慮すると、少なくとも1年は必要になります」(Shah氏)。

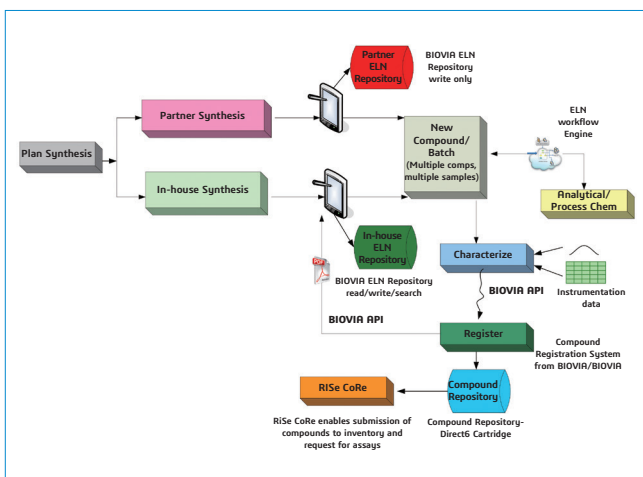


図2: Elan社のELNは、社内のメディカルケミスト、外部パートナーのメディカルケミスト、社内の分析およびプロセス化学者という3種類のユーザー間でのコミュニケーションとワークフローの受け渡しを促進します。

「これまで既存の知識は紙ベースのノートに埋もれてしまっていたのですが、今では社内か社外かにかかわらず、研究者が得た知識はすべて把握できるようになりました。過去の実績やその手法を知ることは、実験を計画し実行する際、研究者がよりの確な意思決定を行ううえでとても重要です」

—Ajay Shah氏  
ディレクター、リサーチ・インフォマティクス  
Elan Corporation

Shah氏は次のように語ります。「マテリアライズドビューは、まさに“低予算”データウェアハウスです。このアプローチにより、希望通りのシステムをわずか6週間で導入し、リサーチ・インフォマティクスのスタッフをすぐに別の開発作業に配属することができました。また、研究者はデータの管理に費やしていた時間や労力も大幅に削減し、研究プロジェクトにより多くの時間を割けるようになりました。これは、少ない投資で多くの成果を挙げた代表的な例です」。

「しかし、BIOVIAとシミックスが合併した今、Pipeline Pilotの持つ可能性はさらに大きく広がりました。Pipeline PilotをIsentrisのバックエンドとして使用することで、計算特性、分析、機器からのデータ収集、計算化学のシステムへの組み込みなど、ワークフロー全体の統合や合理化が一段と進む可能性が高まりました」(Shah氏)。

## ELNによるRISEの進化

RISeの初期導入により、非効率的な紙ベースのワークフローの一部が廃止されました。たとえばデータの登録時にデータをUSBメモリ等で持ってくる必要があり、担当者が紙の印刷物で確認しなければならなかった点などです。RISeの第二段階においても、不都合なワークフローである紙ベースの研究ノートへの研究データ記録が廃止されました。IsentrisとPipeline Pilotの導入により登録済みの社内データへの接続が合理化された一方、作業依頼や、メディカルケミスト、分析/プロセス化学者とのコミュニケーションなど、登録に先立つ作業の多くが依然として紙ベース、あるいは電子メールやExcelスプレッドシートといったさまざまなシステムを使用していた(図1を参照)。

「ELNを導入した目的は、研究者が簡単に日々の作業を記録したり、ワークフローの要所所で成果を同僚と共有できるようにすることでした」とShah氏は述べています。

ELNの選択にあたっては、3種類の研究者に対し、それぞれの分野専用のワークフローを提供できるシステムを模索しました(図2を参照)。メディカルケミストは、反応を予測し設計するためにシステムを利用することから、構造描画プログラム、社内の反応データベースおよび在庫管理システム、外部の合成方法論および市販化合物のデータベースのインターフェースとして使用できることが必要でした。またプロセス化学者と分析化学者は、医薬品化学を使った合成にシステムを使用することから、機器と完全に統合でき、特性分析、

精製、実行したステップのスケールアップを完全に詳述する方法を備えたものである必要がありました。

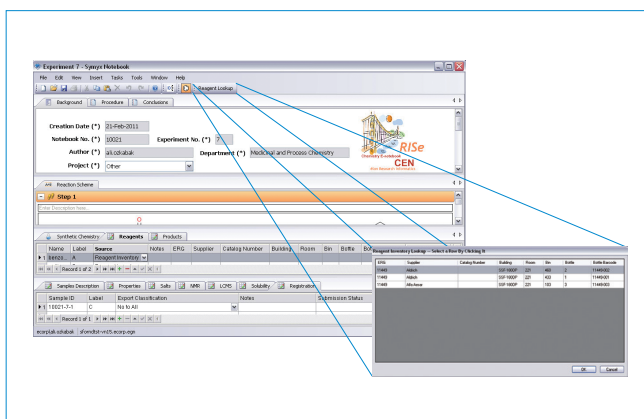


図3: Elan社はBIOVIA Notebook by BIOVIA テンプレートを  
使用し、ELNを介して重要な情報を統合しました。たと  
えば、研究者が実験で使用する試薬を入力すると、その試薬  
が利用できるかどうかをELNで即座に確認できます。

また同社は、海外にある外部パートナーとのコラボレーションを促進するために、パートナー先のデータも社内内で生成したデータと同じ方法で扱うことができるシステムを導入したいと考えていました。「メディシナルケミストにとって、合成や特性の研究が行われているのが社内か社外かということは重要ではありません。重要なのはデータであり、それがすぐに使える状態でシステム内に揃っているかどうかの問題なのです」(Shah氏)。

BIOVIA Notebook by BIOVIAの導入により、Elan社の化学ワークフロー全体が拡大されました。カスタマイズしたワークフローでは、特定ユーザーのニーズを満たすと同時に、データを受け渡し、別の分野の作業を開始できます(図3を参照)。たとえば、メディシナルケミストが合成計画を完成したら、分析化学者やプロセス化学者に作業依頼を送信します。依頼を受けた研究者は、分析やプロセスのノートで新しい実験を準備します。各ワークフローはユーザーの種類によって異なりますが、データはより大きな範囲のノートで検索できるため、研究者は自分が引き渡した研究の進捗を確認することができます。結果は適切な研究者に渡され、データの準備が整い次第作業を開始できます。ワークフローは外部の研究者も同様ですが、Elan社の知的財産を保護するために、データをELNへ保存することは可能ですが、担当する実験以外の情報の検索はできません。

Elan社では、ワークフローの2か所でELNから情報を発行しており、知的財産保護の観点からPDF形式を採用していま

「当社は、化学物質の登録、SAR分析、研究ノートへの記録という、研究者がこれまで最も多く時間を費やしていた作業をサポートできるツールを手に入れたのです」

—Ajay Shah 氏 ディレクター、リサーチ・インフォマティクス  
Elan Corporation

「当社はシミックストとBIOVIAの合併前から、両社の製品を併用するメリットに気づいていました。そして、Pipeline Pilot、BIOVIA Notebook by BIOVIA、Isentris、Directカートリッジを社内のアーキテクチャでシームレスに活用することで、それを証明しました」

—Ajay Shah 氏  
ディレクター、リサーチ・インフォマティクス  
Elan Corporation

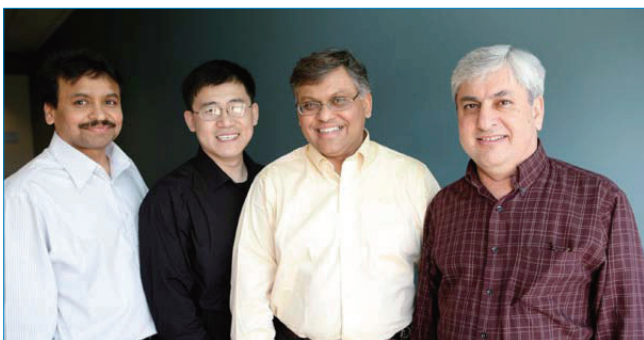
す。新しい化合物を登録するとPDFファイルが生成され、参照用にELNに保存されます。PDFファイルは研究者が実験を完了したときにも生成されます。このドキュメントは変更できない記録としてMicrosoft SharePointに保存され、Elan社の法務部や、ELNを使用せずに研究記録を参照することが必要な各部署で使用されます。ノートの実験記録は同社の研究者が検索できるように残され、将来の研究活動において情報を得るナレッジベースとして活用されます。

「これまでは、既存の知識が紙ベースのノートに埋もれてしまっていました。今では社内かパートナー先かにかかわらず、研究者が得た知識はすべて把握できるようになりました。過去の実績やその手法を知ることは、実験を計画し実行する際、研究者がよりの確な意思決定を行ううえでとても重要です」(Shah氏)。

### 成長を支援する強固な基盤

Elan社は2011年1月にELNを全社規模で展開し、現在は第三段階の導入を行う計画を立てています。「化学物質の登録、SAR分析、研究ノートへの記録という、研究者がこれまで最も多く時間を費やしていた作業をサポートできるツールを手に入れたのです」とShah氏。現在の目標は、統合を進めることです。最終的には、タンパク質情報の登録、追跡、管理を行うコンポーネント (RISe Protein) や化合物の提供や要求を行うコンポーネント (RISe CoRe) といった別のコンポーネントに、RISeの化学コンポーネントを接続したいと考えています。この2つのシステムにもBIOVIA製品が統合されています。RISe Proteinの小分子登録とRISe CoReの化合物データベースには、BIOVIADirect 6データカートリッジが使用されています。またCoRelにおけるフルフィルメントはPipeline Pilot上に構築されています。

「BIOVIAは今後も、RISeの発展を支える重要なパートナーであると考えています。当社はシミックストとBIOVIAの統合前から、両社の製品を併用するメリットに気づいていました。そして、Pipeline Pilot、BIOVIA Notebook by BIOVIA、Isentris、Directカートリッジを社内のアーキテクチャでシームレスに活用することで、それを証明しました」(Shah氏)。



Elan社のリサーチ・インフォマティクス・チーム(左から): Srinivas Bolisetty氏、John Meng氏、Ajay Shah氏、Ali Ozkabak氏

### 著者について

Deborah Ausman は科学系ライターであり、Principia Communicationsの社長を務めています。同氏の問い合わせ先はauswoman@princomm.comです。

<sup>1</sup> Molecular Connection. Published by BIOVIA Technologies, Inc. Spring 2010, p. 12-16.

## ELAN PHARMACEUTICALS社について

Elan Corporation, plcは神経科学ベースのバイオテクノロジー企業であり、科学に革新をもたらす未対応の医療ニーズを満たすことにより、患者とその家族の生活の向上に力を注いでいます。同社の株式は、ニューヨーク証券取引所およびアイルランド証券取引所に公開されています。同社の詳細情報については、[www.elan.com](http://www.elan.com) 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](http://www.3ds.com) (英語)、[www.3ds.com/ja](http://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, GEOVIA, EXALAND, 3D VIA, 3DSWIM, BIOVIA, および 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、書面による所定の承認が必要です。