

# 完全なペーパーレス化: KALEXSYN社、 ELN導入による共同研究の促進

ケーススタディ



- 臨床試験受託機関であるKalexsyn社は、ELNを導入したことで、顧客にサービスをよりの確かつ迅速に提供できるようになりました。
- ELNをすべての研究活動の中心に置くことで、研究者が実験のコラボレーション、設計、記録を容易に行い、顧客に週間レポートを発行できるようになりました。
- Kalexsyn社の研究者たちがデータ入力に費やしていた時間を25%削減できたことにより、ワークフローを効率化するとともに、企業における年間経費を数千ドルも節約することができました。

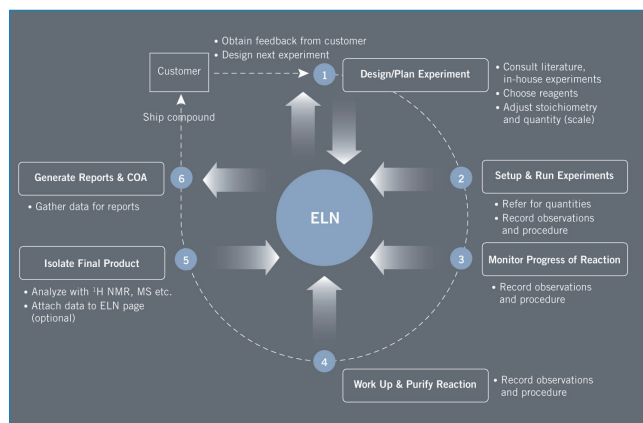


図1: Kalexsyn社では、ELNがすべての研究活動をつなぐ中心(ハブ)的な役割を果たしています。

組織が電子実験ノート (ELN) を導入するにあたって必ず直面する問題は、紙ベースの作業を廃止することをいかに研究者たちに納得させるかという点です。ミズーリ州カラズーにある臨床試験受託機関 (CRO) Kalexsyn社は、研究者による紙ベースでの作業を最初から禁止することで、この問題を回避しました。

創業時からELNを導入しているKalexsyn社のリーダーたちは、顧客にとってより生産性の高い優れたパートナーとなるために、このシステムが役立っていることを実感しています。

Kalexsyn社のCEOであるDavid Zimmermann氏は次のように語ります。「当社の研究者たちは、レポート作成や特許関連の書類作成に費やしていた時間を少なくとも25%削減することができました。そしてその分の時間を化学研究に費やすことで、お客様の満足度も大幅に向上しています。」

### 製品およびパートナーとの出会い

Zimmermann氏とPharmacia社時代の同僚であり、Kalexsyn社の社長兼CSOを務めるRobert Gadwood博士は、2003年にKalexsyn社を創業した際、Pharmacia社でのCROとの仕事の経験から、これまでの手法からは一線を引き、メディシナルケミストリーを専門とする研究者を採用することにしました。「競合他社の多くは、過去に生物活性分子を作った経験を持つ合成化学者を主に採用しています。しかし私たちは、メディシナルケミストこそが、合成方法論、毒物

学、ADME、薬理学、物理化学的特性に関する総合的な情報を基に新しい化学実体を生成できる研究者であるとの考え方から、これを実現する機関としてKalexsynを設立しました。」(Zimmermann氏)

またZimmermann氏とGadwood博士は、Kalexsyn社のビジネスに不可欠となる、医薬品企業パートナーとの効果的なコミュニケーションとコラボレーションを実現するための方法を心得ていました。「私たちは共に、Pharmacia社で10年以上にわたってCROと仕事をしてきた経験から、多くの企業がこの部分をうまく実現できていないことを、身をもって知っていました。」(Zimmermann氏)

Pharmacia社での試験的な電子ノート導入プロジェクトの経験は、後にKalexsyn社を創始した両者にとって、紙をベースとして手法はいずれ衰退するという点を強く印象付けるものでした。「研究所における技術はこの20年で大きく進歩したにもかかわらず、研究者たちはまだレオナルド・ダ・ビンチと同じやり方で記録をとっているのです。私たちはELNの将来性を強く感じています。」(Zimmermann氏)

Zimmermann氏とGadwood博士にとって課題となったのは、Kalexsyn社にELNを導入するか否かではなく、どのELNを採用するかという点でした。Zimmermann氏によると、Kalexsyn社がELNを選択するうえで最も重視したのは「機能性」でしたが、書式や構成が研究者の要望とは必ずしも一致しませんでした。最初のシステムに満足できなかった同社は、2004年に初期バージョンのBIOVIA Notebook by BIOVIAを導入しました。

「完璧なソフトウェアパッケージなどないことには当初から気付いていましたが、最初のELNよりもさらに効果的なELNにめぐり合うことができました。私たちにとって重要だったのは、私たちの持つ長い製薬経験を活かすことができ、私たちのアイデアに耳を傾け、必要に応じてそのアイデアを採用してくれるパートナーを持つことでした。BIOVIAこそが、私たちが求めていたパートナーです。的確なカスタマーサポートやサービスを受けられるだけでなく、ELNに対するビジョンを共有できるベンダーに出会うことができました。」(Zimmermann氏)

「当社の研究者たちは、レポート作成や特許関連の書類作成に費やしていた時間を少なくとも 25% 節約することができました。そしてその分の時間を化学研究に費やすことで、お客様の満足度も大幅に向上しています」

—David Zimmermann 氏  
Kalexsyn 社、CEO



図2: Kalexsyn社の研究者 Jill NorthuisとTom Belliottiが実験について相談している様子。

## ELNによる研究ワークフローデータの集中管理

Kalexsyn社のELNは、同社のあらゆる研究活動におけるケムインフォマティクスの中心的な役割を果たしています。研究者たちはELNを使って個々の研究内容を記録し、メンバーと共同でプロジェクトを遂行し、重要な報告や実験結果を顧客に週単位で報告しています（図1を参照）。プロジェクトの範囲や難易度はさまざまであり、1~2ヶ月で終了するカスタム合成プロジェクトもあれば、数年間かかる包括的な構造活性相関研究もあります。Kalexsyn社の運用管理者であるBecky Gross氏は次のように説明します。「ELNの素晴らしい点は、研究計画を制限する必要がないところにあります。ソフトウェアの制約に合わせて作業をするのではなく、プロジェクトに最も適したプロトコルを選択し、そのワークフローをELNでそのまま使用できるのです。」

Gross氏は、ELNがプロジェクトのあらゆる段階で役立つと言います。プロジェクトの開始時には、研究者はELNを使って外部の化学資料と社内の記録を検索し、ターゲットに対する適切な合成経路を設計します。ELNでは、構造やキーワードなどを使って検索を実行することができます。Zimmermann氏はこの検索機能を使用して、特定の素材や手法、相談すべき専門家を探すこともできると指摘します。「ELNを使うと、たとえば、ある化合物の化学反応に最も詳しい人物を特定することができます。つまり研究者たちは、特定の化合物や技術について相談すべき人物をELNによって確実に知ることができるのです。」（図2を参照）。

実験準備の負担も電子的に軽減されます。ELNには物理的なデータと共に試薬と溶剤に関する巨大なデータベースがあり、研究者が合成の計画を立てる際にこれを参照することができる、とGross氏は言います。紙ベースのノートとは

「電子的に作業することでワークフローの効率が向上し、年間にして数千ドルもの経費節約に値する時間を節約できます」

—David Zimmermann  
Kalexsyn社、CEO

異なり、ELNでは研究者が実験を複製することができます。これは、反応の変更や最適化を行ったり、合成をスケールアップしたりする際に特に便利です。「研究者はELNにある要素を切り取って自分の計画に貼り付けるだけで済むため、作業はとても簡単です。また、化学量論やその他の標準的な計算が自動的に処理されるので、研究者の時間を節約できるだけでなく、実験におけるミスも減らすことができます。」（Gross氏）

最も重要と思われるのは、ELNがKalexsyn社の顧客に対する実験の進捗報告に役立つ点です。透明性の高いコミュニケーションを実現するという同社の方針の一環として、プロジェクトチームは顧客に対して毎週状況報告を行っています。ELNはレポートを自動生成するように設定されており、ほとんどの研究者は単に電子データを切り取り別のドキュメントに貼り付けるだけでレポートを作成している、とGross氏は言います。また、切り取りと貼り付けの機能によってレポート作成作業が飛躍的に合理化され、それもこの電子システムの構成のおかげであると語っています。紙ベースのシステムでは（おそらく他のELNでも）、実験計画を記載したページとは別に、各分析テストのデータを保存したページが多数作成されることとなります。Kalexsyn社のELNでは、研究者が分析データを生成元の実験に直接関連付けることができるため、結果の追跡に費やす時間を節約することができます。

## 生産性と効率性の向上でROIを評価

Zimmermann氏は、ELN導入について話すと、導入関連の初期コストに多くの人が圧倒されると言います。しかしZimmermann氏は、効率性と時間の節約を分析することで、初期投資の価値を実証できると主張します。

たとえば、ELNによってデータ入力全般を高速化できるとGross氏は指摘します。「当社の研究者のほぼ全員が、手書きよりも速く入力することができます。また切り取りと貼り付けの機能によって、テキストの複製や変更も瞬時に行えます。」（Gross氏）データ入力の迅速化によって、研究者がより詳細な情報を入力する時間が得られる、という付加的なメリットも生み出されています。

Zimmermann氏は、Kalexsyn社が顧客とのコミュニケーションの一貫性を保つためにELNが役立っていることを実感しています。「研究ノート作りについては、研究者によって得手不得手があることはよく知られています。ELNを使えば作業が標準化されるので、完全かつ一定の品質を維持したドキュメントをすべてのプロジェクトで作成することができます。」

Zimmermann氏の試算によると、ELNを導入したことで、Kalexsyn社の研究者がデータ入力に費やす時間は25%削減され、これまで以上に多くの時間を研究に割られるようになりました。また、研究者の効率性や生産性が上がったこ

とで、同社はより多くの利益を顧客に還元できるようになりました。「電子的に作業することでワークフローの効率が向上し、年間にして数千ドルもの経費節約に値する時間を節約できます。」(Zimmermann氏)

医薬品企業やバイオテクノロジー企業の大半がELNを導入するのは時間の問題であり、さらに多くの企業がELNを活用する日が来るのを心待ちにしている、とZimmermann氏は語ります。同氏はELNの使用が普及すれば、Kalexsyn社を始めとするCROが顧客とより緊密なコラボレーションを実現することができるかと確信しています。

「システム間における完全なポータビリティが実現すれば、お客様は私たちが行っている作業の状況をリアルタイムに確認でき、自社に居ながら直接その成果を利用することが可能になります。これが実現すれば、ELNは組織がCROにおける作業進捗を確認するための有効なメカニズムとなるでしょう。」(Zimmermann氏)

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 Systèmes. All rights reserved. 3DEXPERIENCE, CATIA, SOLIDWORKS, ENOVIA, DELMIA, SIMULIA, SIMULIA, GEOVIA, EXALTED, 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。