

クラウド型電子実験ノートによる 研究データの統合的管理

—CDD Vault ELNの紹介—

篠崎 康裕

1 はじめに

実験においては、参考文献、標準手順書、使用する試薬や機材の情報、実際に行った作業内容やその際の観察結果、分析機器からの出力など、多種多様な情報を取り扱う必要がある。これらの情報はその形態もさまざまであり、出版物のコピー、手書きのノートやメモ、プロッターなどでの出力といった物理的なものと、テキスト・画像・PDFなどの電子ファイルとがある。これらは、必要に応じて参照できるように適切に管理する必要がある。しかし、物理的な記録は所持者しか閲覧できず、検索性にも劣るため、後日、改めて参照するのに手間がかかることがある。また、電子ファイルには「各研究者のPC・分析機器などの機器類・ファイルサーバーなどに散在して所在が不明確になりやすい」「研究チーム内外への公開可否の制御などのセキュリティの確保が必要となる」といった課題がある。

本稿では、電子実験ノート（electric lab notebook, ELN）によりこれらの課題が解決できることと、電子実験ノート製品の一つであるCDD Vault ELNについて紹介する。

2 電子実験ノートについて

従来の（手書きの）実験ノートで実験を記録する場合、理想的には以下になるよう。

- 使用するサンプル・試薬などを台帳で確認し、ロットの情報などを実験ノートに正しく転記。
- 雑誌からコピーまたはウェブから印刷した参考文献や、標準手順書などをファイリング。実験ノートにはそれらをどこにファイリングしたかを記入。
- 行った操作とその結果生じた変化の観察などを実験ノートに記入。写真を撮った場合は現像・印刷して実験ノートに貼り付け。
- 各種の機器分析の結果を印刷して実験ノートに貼り付け、または別途ファイリングしてその旨を記入。
- 実験ノートの記載内容のレビューを受け、同僚や上長がサイン。この際、別途ファイリングした資料なども同時に確認が必要。
- サインを受けた内容の書き換えや汚損が起きないよう

うに注意して管理。

電子実験ノートは、このような実験の記録と関連データの管理を電子的に行うためのシステムである。製品により違いはあるが、多くの場合以下のような機能を備えている。

- 手書きの実験ノートを模した「ページ」単位での非定型的なデータの記録。
- 電子ファイルを、電子実験ノートのシステム内でページに関連づけて管理。
- 同僚や上長などによるページ内容の承認と、承認後のページの変更禁止の制御。
- 所属やプロジェクトなどに基づいたアクセス制御。
- 変更日時、変更者、変更内容などの証跡の記録。
- 既存のページの複製。
- 記入内容やメタデータ（記入日、記入者など）による検索。
- サンプル管理システムなどとの連携。

電子実験ノートでは手書きのノートに比べ多くの手間を省ける。例えば台帳からの転記はコピー＆ペーストで済み、写真や機器分析結果は電子ファイルのまま扱え、条件を振って繰り返す実験ではページを複製して共通部分をそのまま利用できる。さらに、先に挙げた課題の多くも解決できる。すなわち、電子ファイルを電子実験ノート内で管理することでデータの散逸を防ぎ、検索機能によって他の研究者の実験データや過去の実験データの参照や活用が容易になる。一方でアクセス制御機能によってデータの閲覧や変更を特定の者だけに限定し、セキュリティも確保することができる（図1）。

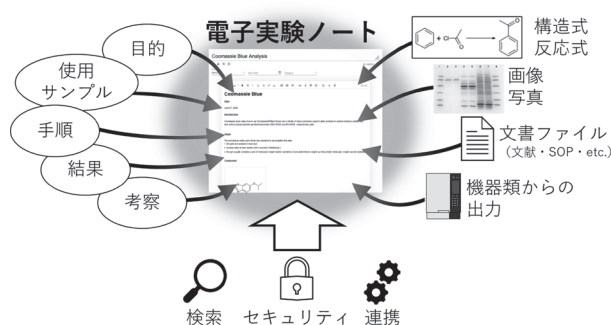


図1 電子実験ノートの概念

3 CDD Vault ELN の紹介

CDD Vault は Collaborative Drug Discovery 社 (CDD 社) が提供するクラウド型の研究情報管理・共有システムであり、サンプル情報とその在庫、アッセイの実験内容の定義と得られた結果データなどを管理できる。CDD Vault ELN は、この CDD Vault のオプションモジュールとして提供されているクラウド型電子実験ノートである。

3.1 CDD Vault について

上述の通り CDD Vault はクラウド型のシステムである。すなわち、CDD 社が管理するサーバーで運用されており、サーバーなどのハードウェアの導入と管理の負担なく、利便性の高い研究情報管理システムを利用できる。ブラウザを使ってインターネット経由でどこからでも利用できるため、複数の事業所を持つ企業や、複数の組織にまたがる共同研究における情報共有のプラットフォームとしても活用されている。

CDD Vault に登録されるデータは定義されたプロジェクトに属し、そのプロジェクトのメンバーに公開される一方、メンバー以外には公開されない。これにより、秘密データを含む研究情報をプロジェクト内で安全に共有し活用できる。

また、ウェブ API を備えており、サードパーティー製品から呼び出して CDD Vault のデータをアクセスできる。例えば、分析機器の出力データをツールで整形してそのツールから直接 CDD Vault に登録する、データ解析ツールの入力データとして CDD Vault のデータを利用する、といったことができる。

3.2 CDD Vault ELN について

3.2.1 CDD Vault ELN の特長

CDD Vault ELN は記入の自由度が高く研究分野を問わず利用できる電子実験ノートである。本製品では、以

下のように実験を記録できる (図 2)。

- 1 回の実験を「エントリー」として非定型的に (つまり、あらかじめ決められたデータ項目に整理せずに) 文章・箇条書き・表などを使って記録。
- 文章には大見出し・小見出し・本文の分けや、色・太字・斜体・上付き・下付きなどの修飾が可能。
- 関連実験のエントリーや、参考情報となる外部ウェブサイトなどへのリンクの作成が可能。
- 画像や各種電子ファイルの貼り付けが可能。画像や PDF ファイルなどは内容のサムネイル表示が、MOL2 ファイル、PDB ファイルは拡大縮小・回転が可能な三次元構造のサムネイル表示が可能。

また、CDD Vault ELN は、ユーザーの入力を効率化する以下のような補助機能を備えている。

- 構造式や化学反応式の描画
ブラウザ内で動作するツールが搭載されており、アプリケーションのインストールは不要。
- 化学量論表の自動生成 (化学合成実験向け)
記入された反応式から出発物質・生成物などを認識し、使用量・収量などが入力されれば当量比や収率を自動計算。
- アノテーションの自動生成 (アッセイ実験向け)
ターゲットや手法などを用語リストから選択することで、アッセイアノテーションの文章を生成。用語リストは BioAssay Ontology, Drug Target Ontology, Cell Line Ontology などの定評のあるオントロジーから構成。

記入した内容や、エントリー内に貼り付けたファイルの内容は、キーワードで検索が可能である。また、構造式・化学反応式については部分構造検索が可能である。これらの検索機能によって、過去の実験記録の参照と活用が容易になる。また、プロジェクトに基づくアクセス制御は本体と同様に CDD Vault ELN でも行われ、実験記録をプロジェクト内で安全に共有できる。

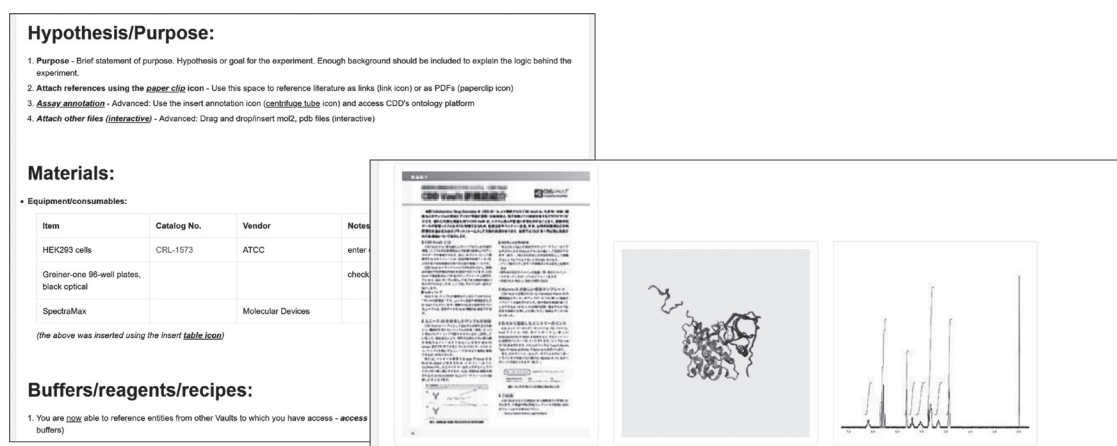


図 2 CDD Vault ELN のエントリー記入例

左：見出し，文章，箇条書きと表。右：ファイルの貼り付けとサムネイル表示（左から PDF，PDB，画像ファイル）

このように、CDD Vault ELN を利用することで、実験記録と関連情報の管理や有効活用にかかる労力を軽減できる。

3・2・2 CDD Vault 本体と CDD Vault ELN の連携

CDD Vault ELN は CDD Vault (以下、CDD Vault ELN との対比で「本体」) と密接に連携しており、本体のデータと以下のような関連付けができる (図 3)。

- 実験で用いるサンプルとして、本体に登録済みのサンプルや在庫を参照して、ID や構造式などとして記載。
- 化学合成実験で得られた生成物や、細胞サンプルから分離・精製して得られたタンパク質などを、サンプルや在庫として本体に新規登録。
- バイオアッセイ実験を記録したエントリーに貼り付けた表形式ファイルを入力データとして利用して、アッセイの結果データを本体に登録。

このような連携が行われた箇所は本体のサンプルやアッセイ結果へのハイパーリンクとなるので、本体に登録されている詳細な情報に簡単にアクセスできる。また、参照される本体のデータには CDD Vault ELN のエントリーへの逆参照のリンクが生成されるので、サンプルを使用した実験、サンプルを合成した実験、アッセイ結果を得た実験などの内容を簡単に確認できる。

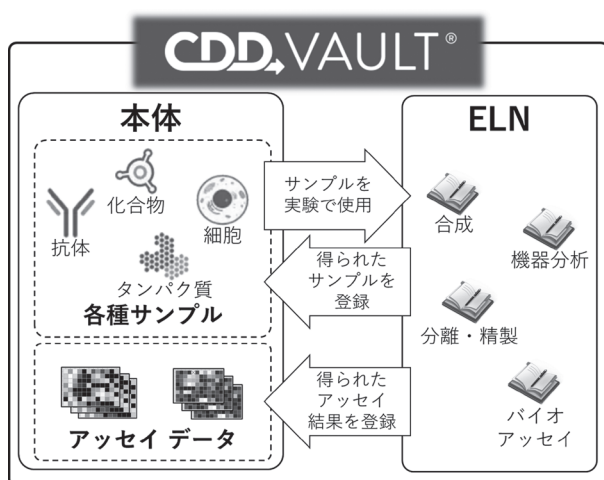


図 3 CDD Vault と CDD Vault ELN

3・3 分析研究者と CDD Vault ELN

分析研究者も上記の CDD Vault ELN のメリットの多くを享受できる。すなわち、実験の手法、使用する機材や試薬、結果と考察などを文章・表・箇条書きを使って自由に記述し、参考文献や分析機器から出力された生データなどの電子ファイルをエントリー内で統合的に管理し、検索機能により過去のデータに容易にアクセスして活用できる。

また、分析研究者が他の分野の研究者と共同作業を行う場合にも、情報共有の基盤として CDD Vault ELN は力を発揮する。例えば、研究チーム内で合成実験で得られた化合物や培養細胞・培養菌株から分離されたタンパク質・酵素の分析を担当するケースでは、以下のような利用シーンが考えられる。

- 分析研究者は、分析するサンプルの来歴を、そのサンプルを得た合成実験や分離実験のエントリーを直接閲覧して確認できる。
- 分析実験のエントリーには、分析機器から出力された生データも電子ファイルとして貼り付けて一括管理できる。
- 分析結果を受け取って利用する研究者は、分析実験のエントリーを直接閲覧して詳細を確認でき、生データも簡単に確認できる。

このように、従来は分析依頼票・分析報告書といった書面を作成して伝達していた情報を、CDD Vault ELN ではリアルタイムに、かつ従来以上に詳細に共有できるようになる。

受託分析企業で顧客からサンプルの分析を委託されるケースでも同様に、CDD Vault ELN を顧客との間の情報共有に利用できる。顧客にアカウントを割り当て、その顧客用のプロジェクトを作成し、受託分析実験の記録を ELN のエントリーとしてプロジェクト内に作成することで、その顧客のデータだけを速やかに、詳細に、そして安全に共有することが可能となる。

4 ま と め

CDD Vault ELN はさまざまな分野・種類の実験を柔軟に記録できる電子実験ノートである。実験の記録と関連する電子ファイルを統合的に管理することでデータの散逸を防ぎ、各種の補助機能で記録の入力の負荷を軽減し、キーワード検索や部分構造検索によって必要なデータを簡単に参照・活用できる環境を提供する。また、プロジェクト内で実験記録を共有することで、専門分野や組織などの壁を越えて研究者間のコラボレーションを促進できる。このようにして、CDD Vault ELN は研究の効率化や質の向上に寄与する。



篠崎康裕 (Yasuhiro SHINOZAKI)

株式会社モルシス (〒104-0032 東京都中央区八丁堀 3-19-9)。《趣味》読書。
E-mail : shinozaki.yasuhiro@molsis.co.jp

会社ホームページ URL :

<https://www.molsis.co.jp/>

関連製品ページ URL :

<https://www.molsis.co.jp/datamanagement/cdd-vault/>

<https://www.collaborativedrug.com/>

原 稿 募 集

「技術紹介」の原稿を募集しています

対象：以下のような分析機器，分析手法に関する紹介・解説記事

- 1) 分析機器の特徴や性能および機器開発に関わる技術，
- 2) 分析手法の特徴および手法開発に関わる技術，
- 3) 分析機器および分析手法の応用例，
- 4) 分析に必要な試薬や水および雰囲気などに関する情報・解説，
- 5) 前処理や試料の取扱い等に関する情報・解説・注意事項，
- 6) その他，分析機器の性能を十分に引き出すために有用な情報など

報など

新規性：本記事の内容に関しては，新規性は一切問いません。新規の装置や技術である必要はなく，既存の装置や技術に関わるもので構いません。また，社会的要求が高いテーマや関連技術については，データや知見の追加などにより繰り返し紹介していただいても構いません。

お問い合わせ先：

日本分析化学会『ぶんせき』編集委員会

[E-mail : bunseki@jsac.or.jp]