

研究開発DX

電子実験ノートを基盤とした カネカの研究開発DX 生成AIやMIで素材開発を加速

紙の実験ノートや Excel を使い続けているために DX が進まないという国内企業の医薬品や素材の研究開発部門は多いといわれる。カネカは組織全体で研究開発データを集約できる基盤を構築し、DX で大きな成果を挙げている。

事業を取り巻く環境の予測不能な変化に対応して持続的に成長するため、DX（デジタルトランスフォーメーション）はあらゆる企業にとって必要になりつつある。医薬品や素材のメーカーも例外ではない。工場などにおける製造工程、品質管理、設備保全の効率化を推進し、そこから新たな価値やビジネスモデルを生み出すべく多様な DX を推進している。

ただ、医薬品や素材の研究開発部門はデジタルの恩恵を生かし切れていない。実験の進捗（しんちょく）状況やその過程で生まれたアイデアなどを紙のノートに記録する他、実験データも個人の Excel で管理しているなど、研究チームや部門での情報共有に課題がある企業が散見される。

そうした中で、電子実験ノートを活用した DX を推進しているのが大手総合化学メーカーのカネカだ。

研究開発活動に積極的に先端技術を取り入れ続けているカネカは、事業をより加速させる戦略を R2B（リサーチ to ビジネス）と定義。マーケットと顧客の視点に立った価値を追求し、独創的な技術開発によってオンリーワンで優れた素材を提供しようとしている。

その取り組みの一つがダッソー・システムズの「BIOVIA Notebook」の導入だ。

研究開発 DX の第 1 ステップとして実験ノートをデジタル化した要因には、前述した課題の解消に加えてカネカが DX によるビジネスの競争優位性の確立を目標に掲げている点がある。

カネカ R2B 本部 R2B 戦略室の神田彰久氏は、「医薬品は、コンプライアンスの観点からしっかりエビデンスを残すことが電子実験ノート導入の一義的な目的です。また、素材分野においてホットなテーマとなっているのがマテリアルズインフォマティクス(MI)です。グローバルの競合他社としてのぎを削る素材開発のスピードアップを図る上で、MI は必要不可欠な取り組みです。電子実験ノートを基盤に研究開発の多様なデータを蓄積し、組織全体で集約して解析するフローを確立したいと考えました」と話す。

こうした背景から、研究情報管理の経験が豊富な同部の宮田きよみ氏と、研究所出身の神田氏が中心となりプロジェクトをスタート。

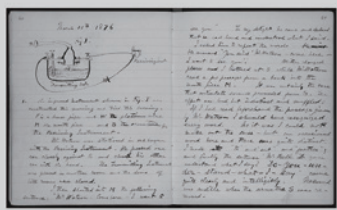


カネカ R2B 本部 R2B 戦略室 神田彰久氏

DXへの1st step 実験ノートのデジタル化

紙のノート

紛失・消失リスク
過去の知見の未活用



グラハム・ベル（1876年）電話の発明を記した実験ノート

電子実験ノート

研究者の知的資産の適切な管理
データ活用のインフラ



DX への第 1 ステップとして、BIOVIA Notebook によって実験ノートのデジタル化を実施 提供：カネカ

2019 年度に BIOVIA Notebook のクラウド版で機能検証を行い、利用に問題がないことを確認し、2020 年度に医薬／バイオ分野を中心に先行導入した後、2021 年度に本格導入を開始し、現在の導入数は日本の化学業界ではトップレベルである。

BIOVIA Notebookを 選定した3つのポイント

電子実験ノートは各ベンダーがさまざまなソリューションを提供している。カネカが BIOVIA Notebook を選定したポイントは3点だという。

1 つ目は、ノート作成の自由度の高さだ。電子実験ノートの中には目的や分野ごとにフォーマットの作り込みが必要なものがあるが、BIOVIA Notebook はそういった手間が不要だ。「パイオ、高分子、生産技術等、多岐にわたる研究分野を持つ当社において、全社展開に時間やコストがかからず、全研究者がすぐに活用できるというメリットを重視しました」

2 つ目は、化学式検索に標準対応していることだ。BIOVIA Notebook は化学構造式や反応式を記載でき、それらの要素をそのまま使った検索も可能だ。「既に登録されている化学構造式をコピーしてペーストしたり修正したりできるなど、研究者の手作業を大幅に減らせます。抽出した化学構造式や反応式をデータとして MI に持ち込んで直接解析することもできます」

3 つ目は、ダッソー・システムズが別途提供している、研究開発領域に特化したデータサイエンスプラットフォーム「Pipeline Pilot」による拡張性の高さだ。「部門のニーズに合わせてアプリケーションを個別に開発するのではなく、BIOVIA Notebook にさまざまな機能やツールを連携させてシームレスに利用できるようにすることで利便性を高められます」

研究チームメンバー間の 情報共有と コミュニケーション活性化に貢献

全研究開発部門に導入された BIOVIA Notebook は、研究者に多くのメリットをもたらしている。

カネカでバイオ系の研究を行う同社 バイオ

ファルマ研究所の平野優氏は、「紙のノートに実験内容を記録していた頃は管理が難しく、過去の実験結果がどのノートのどの辺りに記されているのか、自分でも分からなくなることがありました。紙のノートは、紛失したり水にぬらして読めなくなったりするという懸念もあります。BIOVIA Notebook が導入されたことで、こうした課題はすっかり解消されています」と語る。

さらに平野氏が言及するのが、「研究チーム内での情報共有やコミュニケーションの活性化」だ。「以前は席が近くても他のメンバーの活動内容はよく分かりませんでした。BIOVIA Notebook では、誰がどんな実験を手掛けているのか、進捗状況まで把握できます」。研究者が互いに良い刺激を与えるとともに、実験が行き詰まった際に助言し合うなど、チームワークの向上に貢献している。

もちろん、情報共有が全く行われていなかったわけではない。オンプレミスのファイルサーバ（NAS）やクラウドストレージに共有フォルダを作成し、権限に応じてアクセスできる仕組みが用意されていた。しかし、実験の概要や分析結果などのデータをその都度整理し直し、決められたフォーマットに取りまとめる登録するといった煩雑な手間が発生するため MI に用いるのは難しかった。

BIOVIA Notebook であればより自由で柔軟なデータ活用が可能だ。カネカの生産技術研究に携わる同社 生産技術研究所の安成竜輝氏は、「実験途中の生データであれ最終的



カネカ 生産技術研究所 安成竜輝氏 提供：カネカ

な分析結果であれ、どんなデータも Excel や CSV 形式のファイルにまとめておけば実験ノートに簡単に添付できます。参照するときも、BIOVIA Notebook で検索すれば添付ファイルの中身までサーチして実験ノートやデータを抽出可能です」とコメントする。

「実験ノートを作成した研究者のデータ管理効率が向上するのは言うまでもありません。『ダウンロードした添付ファイルを○○アプリに読み込んでください』というメッセージを一言添えておくだけで誰でもそのデータを活用できて、部門内の情報共有が促進します」と強調する。

OCR機能で紙ベースの 実験ノートも 容易に取り込み可能

多くの研究者から高い評価が寄せられているのが、Pipeline Pilot によってシームレスに BIOVIA Notebook に組み込まれた拡張機能の数々だ。

カネカの新しい素材開発を手掛ける同社 Material Solutions New Research Engine の長野卓人氏が高く評価しているのは光学文字認識（OCR）機能だ。「紙のまま保管している実験ノートや、実験の参考にした関連資料や技術情報などのデータを OCR 機能のおかげで BIOVIA Notebook に簡単に取り込みます。昔の手書きの報告書やアイデアのメモ書きなども、スキャンしたり、スマホのカメラで撮影してメールで送ったりす



カネカ バイオファルマ研究所 平野優氏 提供：カネカ



カネカ Material Solutions New Research Engine
長野卓人氏 提供：カネカ

れば、OCR 機能でデータ化して実験ノートに登録できます。このように、日常全般を通じて OCR 機能を便利に活用しています。当社に長年の蓄積がある樹脂開発においては、過去の報告書もデジタル化することで、先人の発想を現在の素材開発に生かせると期待しています」

長野氏は当初、OCR 機能は BIOVIA Notebook の標準機能なのか Pipeline Pilot によって組み込まれた外部ツールなのか、「違いを分かちあわず、全く意識もしていませんでした」と言う。それほどまでに、Pipeline Pilot は BIOVIA Notebook とシームレスに連携できる。

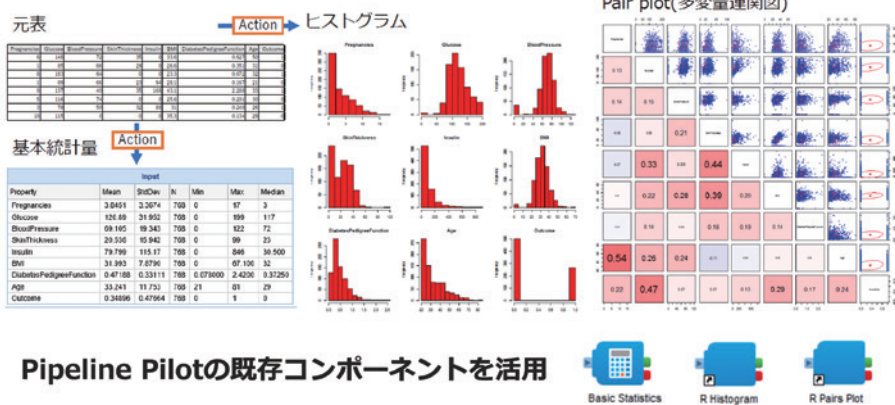
安成氏は便利な機能としてデータの可視化機能を挙げた。「製造工程から上がってくる大量のデータを Excel 形式で BIOVIA Notebook に保存し、この機能に読み込めると、自動的に基本統計量を解析して Pairs Plot（多変量連関図）やヒストグラムを表示します。これは常に多くのパラメータを扱う生産技術研究者にとってはとても画期的なことで、大量のデータのどこに相関があるのか、簡単に発見できるようになりました。これまでハードルが高かったこの解析を、BIOVIA Notebook では気軽に、何度でも実行できて本当に助かっています」

生成AI活用でさらに利便性を高め、全社的なDXを加速

研究者たちの声を踏まえつつ、神田氏は今後も Pipeline Pilot プロトコルを拡充して

ユーザー向け解析プロトコルの例

ノートに保管したエクセルセクションを選択し、Actionボタンからワンクリックで基本統計量とPair Plot(多変量連関図)、ヒストグラムを表示



データの可視化機能に対象のデータを読み込ませるだけで基本統計量解析が可能に 提供：カネカ

BIOVIA Notebook の利便性をさらに強化する考えだ。

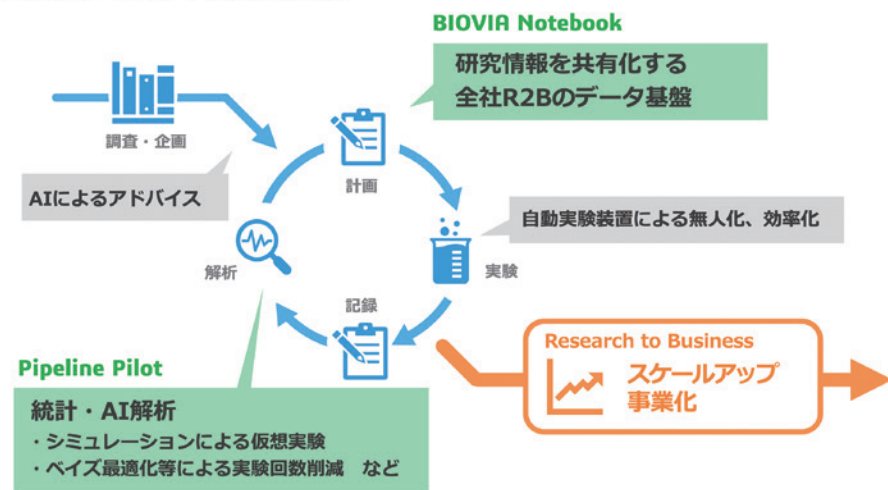
早期実現を目指すテーマの一つとして位置付けているのが、生成 AI（人工知能）と Pipeline Pilot の連携だ。

「電子実験ノートは基本的に 1 回の実験ごとに独立して作成されるため、一覧性が不足しているという側面もあります。もちろん検索機能を使えば実験ノートを横断したページやデータの抽出は可能ですが、まだまだ十分に

はない。そこで目を付けたのが生成 AI です。蓄積された膨大な実験ノートの要約を一覧表示する機能を BIOVIA Notebook で提供しています。今後は、セキュリティが確保された大規模言語モデル（LLM）に投入して学習させることで、自然言語による問い合わせ（プロンプト）に基づいて目的の実験ノートを抽出できたり、関連性が高い実験の内容から知財のアイデアを創出したりする機能なども開発したいと考えています」と神田氏は展望を明かす。

DXの加速

事業化へのサイクルを加速



BIOVIA Notebook や Pipeline Pilot で研究開発の DX を推進。今後は生成 AI を活用して研究開発の DX をさらに加速 提供：カネカ

単なる構想ではなく、近日中のリリースに向けて取り組んでいるという。

BIOVIA NotebookとPipeline Pilotを基盤としたMIの強化により、カネカはR2B戦略に基づく全社的なDXをさらに加速する。神田氏は「カネカは、BIOVIA Notebookの導入によって研究者の作業時間を6%削減できることを既に確認しています。将来的には、BIOVIA Notebookによって作業時間を10%減らすことを目指しています。また、MIやAIの活用により、新たな価値を創造するための基盤として活用を進めていきます」と意気込んでいる。



神田彰久氏。今後も高い目標を掲げてカネカの研究開発 DX を推進

●お問い合わせ

ダッソー・システムズ株式会社 BIOVIA マーケティング

E-mail : BIOVIA.JP.Post@3ds.com

Tel : 03-4321-3500

※この冊子は、MONOist (<https://monoist.itmedia.co.jp/>) に 2024 年 10 月に掲載されたコンテンツを再構成したものです。
<https://monoist.itmedia.co.jp/mn/articles/2410/29/news008.html>

copyright © ITmedia, Inc. All Rights Reserved.