

# 上質な科学を身近なものに BIOVIA SCIENTIFIC NOTEBOOK データシート



電子実験ノート (ELN) の導入はどのラボにとっても大きなメリットとなりますが、どれでも同じというわけではありません。BIOVIA Scientific Notebook では新たなアプローチを採用し、研究者のニーズを優先させて、かつてないレベルでデータの活用を支援します。

BIOVIA Scientific Notebook は、ラボで研究に従事する研究者のニーズを中心に据えた、クラウド時代の ELN です。SaaS (Software-as-a-Service) として運用されているこの ELN は柔軟性に優れ、使いやすい、モバイルフレンドリーなデザインになっているため、日々の研究作業に迅速に導入することができます。

### ユーザーを中心に据えたデザイン

BIOVIA Scientific Notebook は作業や文書化がシンプルになるように設計されており、ラボで研究に従事する研究者は日々の実験やその結果の解釈に集中することができます。モバイルフレンドリーなデザインにより、BIOVIA Scientific Notebook はあらゆるモバイル機器（ノートパソコンやタブレット、スマートフォンなど）で使うことができ、ラボの内外でのさまざまな使い方に対応できます。柔軟性に優れたユーザーベースのテンプレートを利用でき、実験のセットアップも定義済みのパラメータを使用して迅速に行えます。データは構造化 / 非構造化を問わず、ドラッグ&ドロップ操作で迅速に記録・追加することができます。また、材料管理機能が統合されているため、さまざまな実験で使われる共通の試薬や製剤を一元化して追跡することができます。

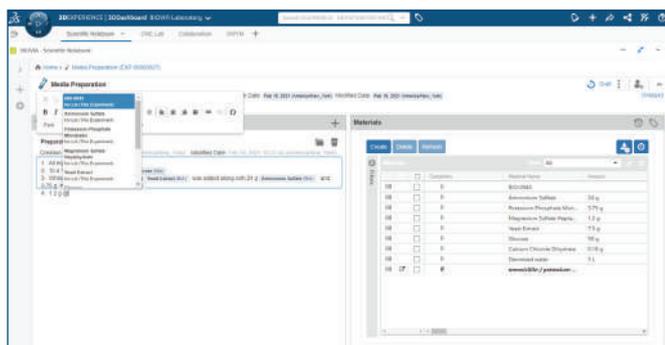


図 1: BIOVIA Scientific Notebook を使った培地調製

BIOVIA Scientific Notebook を使えば、組織内のあらゆる関連情報を簡単に探し出すことができます。既存の実験は、たとえば「実験の完了状態」などのさまざまなパラメータを使用して検索することができます。こうした検索機能では、6W (Who, What, When, Where, Why, how) によるタグ付けも活用されます。データに 6W でタグ付けしておけば、的を射た情報を迅速に絞り込むことができます。このような機能は、大規模なデータ・リポジトリを素早く検索するために必要不可欠です。

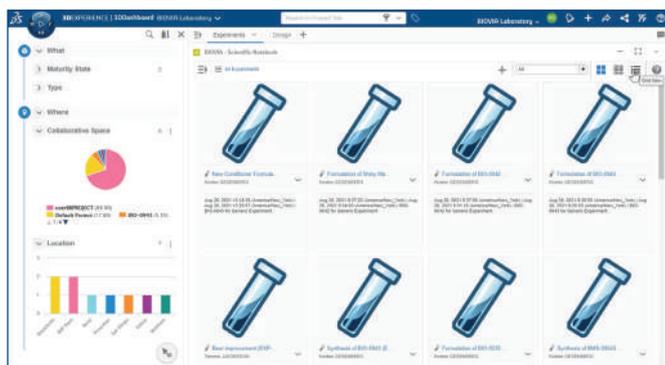


図 2: 「実験の完了状態」による検索

### 次世代のデータ

従来の ELN で主体となるのは文書（つまり、主に紙の資料を画面に表示する機器）ですが、BIOVIA Scientific Notebook はデータを中心に据えた手法を用いて開発されています。

BIOVIA Scientific Notebook では、リソース・ディスクリプション・フレームワーク (RDF) データモデルを活用し、実験室のデータを知識として図式化して表示します。具体的には、ラボの一つひとつのデータにはさまざまなメタデータが関連付けられており、他の関連するデータとつながっています。つまり、ラボのデータが互いにより深いレベルでつながっているため、より多くの科学的知見が得られ、知識もより適切に管理できるようになります。

「もはやフリーテキストによる検索機能だけでは十分ではありません。次世代の ELN では、パラメータ化されたデータが必須になります」

— Global BioPharma 社、作業手順開発部門責任者

RDF データモデルを利用すれば、ELN 内部の実行可能なオブジェクトに加えて、実験や研究、材料、手法、機器類等から双方向性を有する関連付けが可能になります。これにより、データに新たな次元やより深い意味合いが加わり、価値や有用性がさらに高まります。

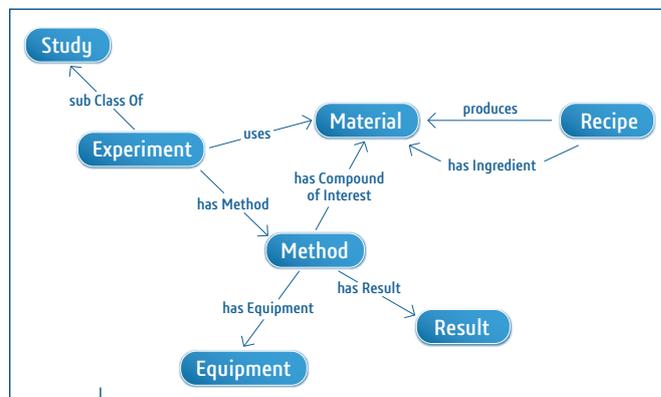


図 3: BIOVIA Scientific Notebook でデータを知識として図式化した例。

### クラウド版 3DEXPERIENCE® プラットフォームを活用

BIOVIA Scientific Notebook は、新たな業務変革を後押しするクラウドベースのコラボレーション環境、すなわちダットソー・システムズの 3DEXPERIENCE® プラットフォーム上で利用できるネイティブ・ソリューションです。3DEXPERIENCE® プラットフォームを活用すれば、BIOVIA Scientific Notebook が一元管理する実験データに常時アクセスできるようになり、研究者はプラットフォーム上のソリューション・エコシステム全体を対象にして奥行きのある科学力を有効に利用できます。オープンな 3DEXPERIENCE® プラットフォームがあれば、外部のマーケットプレイスやサードパーティ・プロバイダーのサービスも利用できます。

## 完璧なコラボレーション

BIOVIA Scientific Notebook は、世界中のさまざまな地域の研究機関をまたいでチームを連携させるのに理想的なソリューションです。いつでもどこでも、デバイスを問わず科学情報に瞬時にアクセスすることができます。**3DEXPERIENCE®** プラットフォーム上に BIOVIA Scientific Notebook を導入すると、たとえば豊かなアイデアの創出、プロジェクトの追跡、完了状態、設定が可能なコミュニティや通信、通知など、さまざまな専用コラボレーション・ツールを利用できます。研究者はまた、**3DEXPERIENCE®** プラットフォーム上のさまざまなソリューションを対象にして、一つの検索バーから検索を実行することができます。アプリケーションどうしが直接連携して動作し、実験データや実験結果にも直接アクセスするため、BIOVIA Scientific Notebook は市販されている他のソリューションには真似のできない、優れたコラボレーションを実現します。

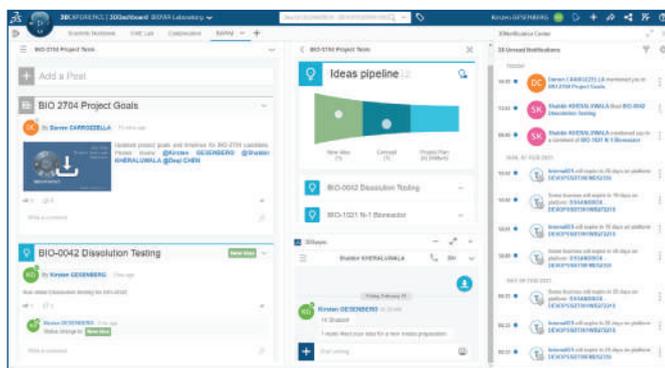


図 4: BIOVIA Scientific Notebook が実現するコラボレーション

## 合成化学

BIOVIA Scientific Notebook には合成化学サポート機能も組み込まれており、研究者は ELN で直接、反応合成や化学量論の計算を設計・調整することができます。構造はドラッグ&ドロップ操作で追加ことができ、備え付けのエディターを使用して作成することも、また、ELN ライブラリから既存の構造を取り込むこともできます。化学量論の表は設定が可能で、列をソートして独自のビューを作成することができ、内蔵されている化学量論計算を組み入れることができます。材料は ELN ライブラリから追加することができ、化学量論の表で直接作成することもできます。

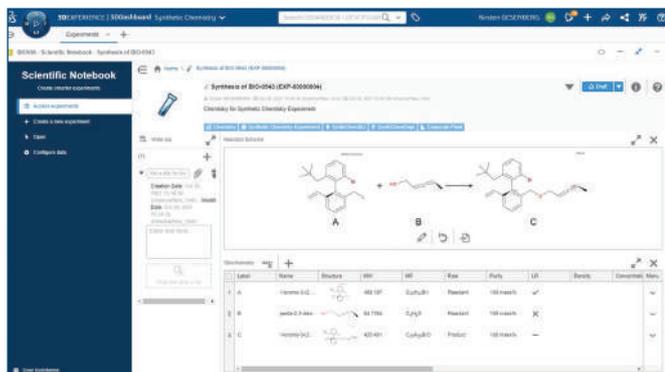
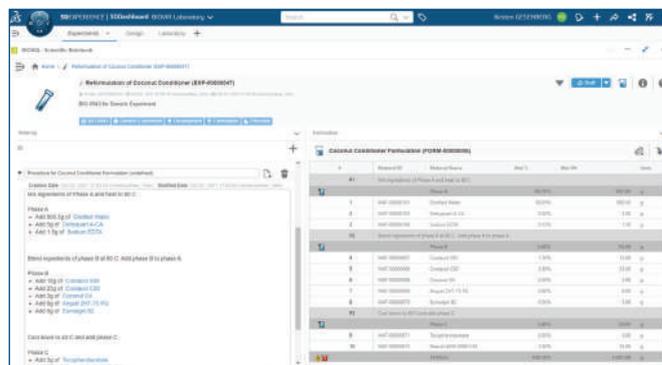


図 5: 合成化学反応の構築

## 配合設計

BIOVIA Scientific Notebook は BIOVIA Formulation Design と緊密に統合されており、製剤開発や実験の流れをシンプルにすることができます。BIOVIA Formulation Design で配合を定義したら、研究者がその製剤オブジェクトを BIOVIA Scientific Notebook にドラッグ&ドロップすれば自動的に製剤として認識されます。あらかじめ作成されている実験手法が BIOVIA Scientific Notebook の実験として自動生成され、関連する製剤の材料が実行可能なリンクとともに取り込まれます。BIOVIA Scientific Notebook と BIOVIA Formulation Design を組み合わせることで、製剤組成変更や新規製剤の試験が劇的に変化し、従来よりも簡素化されるだけでなく、ELN で作業を複製すれば時間の無駄もなくなります。



Component	Material	Quantity	Unit	Notes
1	API	100.00	mg	
2	Excipient A	100.00	mg	
3	Excipient B	100.00	mg	
4	Excipient C	100.00	mg	
5	Excipient D	100.00	mg	
6	Excipient E	100.00	mg	
7	Excipient F	100.00	mg	
8	Excipient G	100.00	mg	
9	Excipient H	100.00	mg	
10	Excipient I	100.00	mg	
11	Excipient J	100.00	mg	

図 6: 製剤の実験

## ELN の整理統合

Scientific Notebook では、現在利用している BIOVIA Workbook や BIOVIA Notebook の実験の記録や結果に索引を付けて表示することができますので、研究者は以前のすべての実験データに確実にアクセスすることができます。この機能は他社製 ELN も対象になります。つまり、どの ELN からでもデータを **3DEXPERIENCE®** プラットフォームに取り込むための移行経路が組み込まれているため、科学的なデータがレガシー・アプリケーションで孤立する心配はありません。

## 研究開発から品質管理、製造までをカバー

製品開発ライフサイクルの個々のステージでは、それぞれに固有の試験施設が必要になります。そしてこうした試験施設には、それぞれに固有のニーズやワークフローがあります。柔軟性に優れた BIOVIA Scientific Notebook を、**3DEXPERIENCE®** プラットフォーム上で他の BIOVIA ラボ・インフォマティクス・アプリケーションと統合すれば、開発ライフサイクル全体にわたって展開するのに最適な ELN を実現することができます。実験の柔軟性、そして非構造化データの取り込みが研究の早い段階でサポートされており、後々の開発や品質管理のワークフローでは、より構造化されたデータの取り込みや管理されたワークフロー、監査証跡などが優先されます。BIOVIA Scientific Notebook は、作業の文書化に加え、製造する際の監査証跡の確保にも利用できます。

分野を問わず真に劇的な変化をもたらすコラボレーションを実現するには、研究者はデータを簡単に共有することができ、部門を問わず同僚たちと連携できなければいけません。BIOVIA の統合ラボ・インフォマティクス・ソリューションの一翼を担う BIOVIA Scientific Notebook を利用する組織は、一つの ELN に一本化することで、全社的な一貫性やコラボレーションを実現することができます。

## 製品の機能

BIOVIA Scientific Notebook は、組織が実験情報を効率的に取り込んで管理し、知見を捉え、コラボレーションを促進し、ラボの科学的な生産性を高められるようにするあらゆる機能を備えています。

### 主な機能

- ・ 構造化 / 非構造化データの取り込み
- ・ RDF データモデルを利用した双方向性を有する関連付けと実行可能なデータオブジェクト
- ・ 柔軟性に優れたユーザーベースのテンプレートにより、一貫性を確保しながら柔軟性を実現
- ・ 全文検索に加え、化学構造や部分構造による検索が可能
- ・ 合成化学サポート機能を内蔵
- ・ 製剤の試験と実験を一体化
- ・ BIOVIA Workbook や BIOVIA Notebook、他社製 ELN から実験データを統合

## 効果

- ・ 使いやすさと導入しやすさを兼ね備えた ELN を活用してペーパーレス・ラボへの移行を実現
- ・ 製品ライフサイクル全体を対象にして、バラバラなソリューションの寄せ集めを一つの ELN に統合
- ・ 付加価値を生むことのない作業を減らして研究に集中
- ・ すべてのラボを対象にしてデータの一貫性を強化
- ・ 製剤とラボの試験との間で統合性を確保
- ・ 科学的に関連付けられた実験データを通して実用的な知識を生み出す
- ・ 即座にコラボレーションを実現し、場所を問わずすべてのノートの入力内容や実験内容を簡単に保存・検索・共有
- ・ 電子署名や実験用テンプレート、ワークフロー・アラート機能により知的財産を保護
- ・ 3DEXPERIENCE® プラットフォーム上で一つに統合されたラボ・インフォマティクス・エクスペリエンスにより、シンプルなデジタル化の作業の流れを実現

ラボのデジタル化の道のりを、さらに一つ上の段階へと進めましょう。BIOVIA Scientific Notebook があれば、より少ない労力でデータを最大限に活用し、上質な科学をより身近なものにすることができます。

## 詳細情報

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 3DEXPERIENCEカンパニーとして、人々の進歩を促す役割を担います。当社は持続可能なイノベーションの実現に向けて、企業や人々が利用する3Dのバーチャルコラボレーション環境を提供しています。当社のお客様は、3DEXPERIENCEプラットフォームとアプリケーションを使って現実世界のバーチャルツイン・エクスペリエンスを生み出し、さらなるイノベーション、学び、生産活動を追求しています。

ダッソー・システムズ・グループの20,000名に及ぶ社員が、140カ国以上、あらゆる規模、業種の30万社以上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。



3DEXPERIENCE®