これからの治験薬データベースを考える—その2

—データベースの機能比較と利用状況調査—上

医薬情報ネット21 (PINET21)¹

著者抄録: 医薬品研究開発の重要な情報源である治験薬データベース(以下DB)に関して平成12年に実施した調査¹⁾以降の動向をフォローし、当該DBの最新動向と課題、およびユーザからの要望を明らかにした。本稿はその上編で、(1)薬業および薬業関連企業への利用状況アンケート調査、(2) IDdb, Integrity(以下INT), Pharmaprojects(以下PPJ), R&D Insight(以下RDI), R&D Focus(以下RDF), 明日の新薬(以下 明日新)の6種のDBについて、前回調査以降の改善および今後の計画に関する最新情報をDB製作ベンダー各社から入手し、その解析によるDB比較、(3)主要なWeb 版複合型DBであるIDdbおよびINTのユーザビリティの比較検証を実施した。その結果、大きな流れとしては大規模なWeb版複合型DBが利用を増やしている一方、従来型の単一型DBもCD-ROMや商用オンライン検索に加え、直近ではWeb版が登場したDBもあり根強く利用され続けていることがわかった。さらに各ベンダーは新しい機能の導入計画を公表・実施するなど、それぞれに改善努力を続けていることも判明した。しかし一方で各DBにおいて開発ステージ情報の更新など改善が見られないところもいくつかあり、それがユーザに複数DBの併用を余儀なくさせていると思われる。Web版複合型DBのIDdbとINTのユーザビリティを比較した結果、両DBとも多数の機能を具備していて総合的には優劣を付け難いことがわかった。しかし、個別に見るとIDdbには構造データのダウンロード機能の追加、INTには各種機能の改善など、両DBに対してさらなる改善が望まれることも判明した。

キーワード: 治験薬データベース, データベース比較, Web版複合型データベース, IDdb, Integrity, Pharmaprojects, 明日の新薬, R&D Focus, R&D Insight, ホームページ, ユーザビリティ

Future of investigational drugs databases—Part 2

—Comparison of the functionalities and survey of the trend of use—No.1

PINET 21¹

Author Abstract: This article traces the trends in the investigational drug databases (the DB), important information sources for R&D of medical drugs since 2000 when the first survey was conducted, and clarifies the recent trend of the DB, issues and demands from the users. As the first half part of the whole article, this deals with 1) questionnaires regarding usage condition forwarded to pharmaceutical or related firms, 2) the DB comparison covering IDdb, Integrity (INT), Pharmaprojects (PPJ), R&D Insight (RDI), R&D Focus (RDF) and Asuno Shinyaku, and 3) Comparison of usability for IDdb and INT (both are DBs on Web version). It is found that while large size DB on Web version is increasingly used, traditional DB is still used very often along with CD-ROM and commercial online searched DB. It is also found that each vendor continues to make every effort to improve DB usability by introducing and implementing new functions. It is, however, found that there are seen no improvements in each DB, for instance, lack of update information related to the development stage, which seems to drive users to use several DBs at the same search session. Comparison of usability between IDdb and INT showed that the both facilitate many functions so that one is not differentiated with other, but IDdb is still anticipated that it should add download function of structural data while INT needs to improve in its individual functions, so on.

Key words: investigational drug database, database comparison, database on Web version, IDdb, Integrity, Pharmaprojects, Asuno Shinyaku, R&D Focus, R&D Insight, homepage, usability

¹医薬情報ネット21

¹Pharmaceutical Information Network 21 (PINET21)

1. はじめに

治験薬とは臨床試験段階にある医薬品候補化合物である。ある治験薬がどのような特性をもち、定められた臨床試験のどのステップまで進んだかという情報を収集整理した治験薬DBは、薬業関連企業にとって科学技術系、ビジネス系のそれらとともに重要な情報源である。

我々医薬情報ネット21²⁾ (以下PINET21: 医薬品関連情報の高度利用についての有志の勉強会) は、治験薬DBの効率的発展的な利用を目指し、ベンダー各社ならびに科学技術振興機構西日本支所のご協力を得て平成10年以降種々の検討を進めてきた。平成12年には、その成果として治験薬DBの現状と望ましい将来像の展望につき本誌に発表した¹⁾。

それから数年を経た現在、医薬品開発事情はスクリーニングのロボット化、ゲノム解明、またM&A等々、科学的にも社会的にも大きく変貌(ぼう)しつつある。一方、治験薬DBにおいても新たに複数の関連あるコンテンツを統合したINTが登場し、同様の形態を有する先行DBであるIDdbもさらに多くのコンテンツを統合するThomson Pharmaへの移行を発表した。このような状況の変化の中、治験薬DBは進化を遂げたのか、データの網羅性・信頼性は増したといえるのかなどを検証するため再検討を行った。

5年前の調査から治験薬DBがどのように変化しているかを探るため、まず①PINET会員ほか、薬業および薬業関連企業(24社)にアンケートを実施し、ユーザの利用状況の変化を把握した。並行して②ベンダー各社にも前回の調査以降のDB改善および今後の計画についての最新情報を提示願った。また、③今後利用が最も進むと思われるWeb版複合型DBのIDdbとINTについて、検索機能・表示項目・所要時間など使い勝手(ユーザビリティ)を比較検討した。次に、アンケートの結果から利用頻度の高い上位6種のDBについて、④特定の会社名および⑤作用機作名の2種類の検索を実施し、その結果の比較から網羅性・信頼性・速報性を評価した。最後に考察として、これらの調査・比較検討を通して前回調査からの状況変化の実態と要因の分析を行い、今後の治験薬DBの動向予測とそれに則したユーザからの要望・提案をまとめた。

本稿はINFOPRO2004第1回情報プロフェッショナルシンポジウム(2004年10月21-22日)において発表した内容に、時間的制限のため盛り込めなかったデータを加え新たに編集したものである。紙面

の都合上、上記①~③を本稿(上)にて、④以降を次稿(下)³⁾にて述べることとする。

2. 治験薬DB利用状況アンケート調査

1998年11月にPINET会員15社に対して治験薬DB利用状況アンケート調査を実施した。それから5年後の現在、利用状況はどのように変化したかを探る目的で、2003年11月から2004年6月にかけてPINET会員ほか、薬業および薬業関連企業(24社)に同様のアンケートを実施し、1998年と2003/2004年の調査結果を比較した。なおアンケート記入にあたり、主に利用しているDB(主利用)と、それ以外に頻度を問わず利用しているDB(利用)を区別して記載してもらった。

アンケート結果を集計したものが表1であり、以後の図表は主にこの表を元に作成した。表から明らかのように1社の平均利用DB数は、1998年調査時と2003/2004年調査時とでそれほど大きく変わっていない(表1の下から2行目参照)。

主要な7種のDBについて、(主利用)と(利用)の和を全体利用数とし、それを会社数で割ったものを全体利用率として、1998年調査時と2003/2004年調査時で比較した結果が図1である。この図でINTは1998年調査時はまだ提供されておらず、その前身の一つであるEnsembleと比較している。全体利用率はPPJ, RDI, RDF, 明日新, New Currentでは大きな変化がなかったが、IDdbとINTでは増えていた。

DB間の全体利用数の比較をしてみるため、利用が多い順に順位を付け、上位5種のDBについて調べたものが図2である。図に示されるように若干順位が入れ代わったものがあるが、1998年と2003/2004年調査では大きな変化はなかった。

一方主に利用しているとの回答のあった主利用数についても比較するため、主利用が多い順に順位を付け、同じく上位5DBを比較したものが図3である。その結果、1位の明日新は変わらず、IDdbとINTが上位に上がり、PPJ, RDFは順位が落ちていることがわかり、上述の全体利用数の上位5DBの比較とは異なる結果となった。

次に現在の主要6DBについてユーザから見た利用形態別の推移を比較した結果が図4である。図4において中心から上・下・左・右へ離れるにつれそれぞれオンライン、印刷体、CD/DVD、Webの利用率が高いことを示し、また面積が大きいほど全体利用数が多いことを示している。1998年では、明

表1 治験薬DB利用状況比較 (1998年と2003/2004年)

プロデューサー	データベース	1998年(15社)				2003/2004年(24社)			
		計 (全体)	計 (主)	主/全 体%	DB全体 利用率 (%)	計 (全体)	計 (主)	主/全 体%	DB全体 利用率 (%)
Prous Science	CIPSLINE	2	1	50	13	2	1	50	8
	Trilogy	0	0	--	0				
	DDR/MDDR	10	2	20	67	11	3	27	46
	Drugs of the Future	9	2	22	60	16	2	13	67
	Daily(Weekly) Essentials	5	2	40	33	13	2	15	54
	NME Express	5	0	0	33	4	0	0	17
	Drug News & Perspective	6	0	0	40	7	0	0	29
	Ensemble	4	0	0	27	2	0	0	8
	Integrity					12	8	67	50
I M S	R&D Focus	11	8	73	73	14	4	29	58
	PIONEER	1	1	100	7	3	1	33	13
	Patents International	5	0	0	33	6	0	0	25
	Drug Launches	6	1	17	40	8	1	13	33
	LifeCycle	1	0	0	7	1	0	0	4
P J B	Pharmaprojects	14	11	79	93	20	7	35	83
	Pharmastructures	4	2	50	27	2	1	50	8
Thomson	I D d b	4	4	100	27	16	11	69	67
	I D Daily Hightlightes	0	0	--	0				
	Conference Fast Track	6	2	33	40	4	2	50	17
	World Drug Index	5	2	40	33	6	0	0	25
	World Drug Alert	6	2	33	40	9	3	33	38
	Patent Preview	5	5	100	33	4	2	50	17
テクノミック	明日の新薬	14	11	79	93	24	13	54	100
	明日の新薬 構造式データ	2	1	50	13	5	1	20	21
A D I S	R & D Insight	8	5	63	53	14	4	29	58
シーマ・サイエンス・ ジャーナル	New Current	13	7	54	87	22	6	27	92
Paregian Associate	New Drug Commentary	2	0	0	13	0	0	--	0
	International Drug Review	0	0	--	0				
Pharmaco Medical Documentation	Unlisted Drugs	4	0	0	27	1	0	0	4
Paul de Haen Internationalde	de Haen	2	0	0	13				
メディカル・リサーチ	学会新薬ニュース	6	2	33	40	6	1	17	25
	学会新薬ニュース 450	3	1	33	20	2	1	50	8
	学会化学式データ	2	1	50	13	2	1	50	8
ミクス	トライアル ドラッグズ	1	0	0	7	3	0	0	13
Pharma Forum Institute	New Drug Candidates	5	1	20	33	2	0	0	8
計(全体)		171				241			
計(主)			74				75		
1社の平均利用DB(全体)		11.4				10.0			
1社の平均利用DB(主)		4.9				3.1			

日新, PPJ, RDIはCD-ROM (以下CD), 印刷体および商用オンライン検索 (以下オンライン) の提供があり, RDFはCDとオンラインであった。2003/2004年では利用形態がRDFとRDIでは若干オンラインとWebへ移行し, 明日新薬もWeb利用が増えた。PPJの利用形態は大きくは変わらなかったが, 若干オンラインに移行した。2004年にPPJとNew Currentが

Web版を提供しはじめたが, 今回のアンケート時点では採用していた会社はなかった。なおIDdbは前回調査時からWeb版の提供があり, また前述のようにINTは前回調査時にはまだ提供されていなかった。

以上のように個々の主要DBのこの5年間の利用推移として, DB利用は全体として印刷体・CD/DVD

図1 主要治験薬DB利用状況

版からWeb版に移行している。特に主利用数で見ると、IDdbやINTなどWeb版で提供されるDBの利用が高くなっている一方、前回調査時に主利用数を同一DB中の全体利用数で割った%である主利用数が高かったPPJ, RDF, RDI, New Currentは半減した。ただしIDdbは母集団が少なかったため除外した。しかし全体利用率を見るとWeb版の躍進が目立つものの、前回率が高かったDBは今回の調査でも高かった。

この現象は、IDdbやINT等のWeb版DBが主利用されるにつれて、CD/DVD版の利用が主体であるDBの一部では主利用が減少しているものの、利用

中止になるのではなく補足的な利用へと移り、それに適した従量課金制の商用オンライン検索に移行するなど継続して利用されており、利用数自体は減少しなかったことを示している。このように継続利用される理由としては、個々のDBの網羅性・信頼性の欠如から依然として複数DBを併用せざるを得ない状況にあることが大きいと推測される(詳細は次稿³⁾)。

なお、今後の傾向として昨年Web版を提供しはじめたDBも複数あり、治験薬DBはさらにWeb版へと移行すると思われる。

3. 治験薬DB比較

主要な6DBについて、1998年の前回調査時点からどのような機能強化や情報源の拡大等の改善がなされているのか、さらに今後の改善計画があるのかを確認するために、各ベンダーから最新情報を入手して一覧表(表2, 3)にまとめた後各DBの比較検討を実施した。

3.1. 情報の入手方法について

これらDBは1998年調査当時各ベンダーにより商品説明を受けたものである。今回の検討に際し、前回の一覧表の全調査項目についてベンダーに確認をとり最新情報に改訂していただき、加えて今後の計画などもお尋ねした。なお、Ensembleにつ

図2 DB全体利用数比較上位5DBの推移

図3 DB主利用数比較上位5DBの推移

図4 利用者から見た提供形態の推移

いては後継DBであるINTの情報を収集している。

3.2. DBの比較

これらのDBについて、ユーザの視点から複合型と単一型に分けた。複合型とは医薬開発情報全体をカバーする特許から文献に至る広範囲の情報が収録あるいはリンクされている大規模DBのことを指し、ID、IP数に基づく法人契約利用を主としている。IDdbとINTが複合型に該当する。その他はどれも単一型DBであり、治験薬に関する最低限の情報を提供するいわゆる従来からの治験薬DBである。1998年調査時との大きな変更点は、Prous Scienceが従来品Ensembleをはじめ多くの独自製品を包括するシステムとしてINTを2000年にリリースしたことである。IDdbとINTは独自の特長を有しニーズに応じた住み分けが適しているものの、現在ユーザの間では最も競合しているシステムと言える。

6DBを比較すると、情報源として特許も対象とするものは、IDdb、INT、RDFである。またRDIは構造検索機能がなく、明日新では構造検索機能はoptionで提供されている。最近の傾向として提供形態のWeb化が進む一方で、CD-ROMなどの形態も相変わらず存続しており、前回調査結果と全般的には大きな変化はない。最近の改良点等については、明日新ではWeb版の提供、RDFではアナリストによる市場予測の強化、RDIはプレスリリースの全文閲覧、PPJでは構造情報のexport機能などについて新たに各提供機関より発表があった。

次に6DB間における収録状況の違いの根本的要因となる情報の入手の仕方に関するヒヤリング結

果に着目した。特に企業からの明確な情報がない場合、DB作成部署においてDBに記載する治験薬の開発ステージをどのように決定しているかは大変興味深いところであった。しかし結果は、前回調査と同様に明快な基準を公表する機関はなかった。いずれも機関内での裁量のもとに置かれており、ユーザから見ると不透明な部分が多いと言える。つまり各ベンダーは今なお「手の内を明かさない」わけであり、このことはDBを特徴付けるといえる意味はあるものの、正確かつタイムリーな情報提供が要求される開発ステージ情報の信頼性低下に結び付く可能性がある。そこで我々は実際に開発ステージ情報の信頼性を検証した。その結果、同一化合物の開発ステージがDBによって異なることが多々あり、前回調査以降も改善されていないことがわかった（次稿³⁾。

4. ユーザビリティの検証

前述のユーザアンケート結果で明らかになったように、最近ではWeb版複合型治験薬DBが広く使われるようになってきた。これは調査を専門とする情報担当者だけでなく、研究者などいわゆるエンドユーザがこれらのDBを多用するようになったことも一因で、これからはインターネット接続の高速化と相まってユーザフレンドリーな使いやすさが求められている。

我々は2004年9月から10月にかけて、Web版複合型DBであるIDdbとINTのユーザビリティの比較検証を実施した。検索、表示などの各種機能の特徴

表2 DB比較表(1)

DB 略称	IDdb	INT	PPJ
データベース名	IDdb (Investigational Drugs database)	Integrity	Pharmaprojects
製作元	Thomson	Prous Science	PJB
概要	医薬品研究開発データベースシステム 開発薬剤および特許・学会・文献情報を統合したデータベースシステム	医薬品研究開発データベースシステム 開発薬剤および特許・学会・文献情報を統合したデータベースシステム	開発薬剤を中心とする、開発情報のデータベースシステム
利用形態	Internet/Intranet	Internet	CD/Web/Online/Intranet/Print/ISIS
構造情報の有無	○	○	○
構造検索機能	○	○	○
1. 情報源			
①特許	○	○	×
②文献・新聞	○ 約500誌以上	○ 1500誌以上	○ ・約50誌 ・500誌以上をスキャン(図書館等で)
③学会発表	○ 400学会(2003)	○ 世界300以上の学会に出席	○ 約50学会に出席。会議録収集のみは約100学会
④企業からの情報入手(インタビューなど)	○	○	○
⑤ 構造情報	3Dで表示可能Validationレベル:(CASIに確認) レベル1: CASまたは直接企業からの情報 レベル2: 複数雑誌に公開, レベル3: 1つの雑誌に公開 レベル4: 2.3以外の情報源, レベル5: 手書き構造式	特許・学会・ジャーナルの執筆者から原則的にすべての化合物構造情報掲載	速報性重視。CASと連携。 14200件/32000件中に構造式情報
2. 開発ステージ決定(企業からの情報がない場合)	企業直接問い合わせ、文献検索	掲載基準:ProusのScientific Committeeによるレベル :薬理と治療と同等レベル; Quality Control Committeeがある	SCRIP等などのofficialな情報から
①Clinical・PreClinical	DR(Discovery research)として収録 薬効かメカニズムによる検索で得られる。	特になし	PreClinicalのまま。不明な場合は、[Clinical Trial]として登録
②Discontinued	開発企業からの情報待ち	独自のStar Compound SystemによりDrop outとする *マーク:過去2年間に3回以上学会発表のあったものに付与	企業からの情報あるいは、信頼できる出版物で確証をとる
③No Development Reported	少なくとも2年間、全く何も情報が出てこない物	特になし	前回更新時以降14~18ヶ月間何ら情報が得られない場合
④Suspended	一時的に何かしらの要因で開発を中止している物(再度開発をする可能性がある)	開発企業からの情報待ち	特になし
⑤Withdrawn	上市后、何かしらの原因で発売を中止した物	開発企業からの情報待ち	特になし
3. 情報の精度向上のための特殊な戦略の有無	PDR会長 Dr.A Mullen(Bayer AG)による独立したComparisonの活用		
4. 新規データの搭載までのタイムラグ	平均2~3週間	平均1.5ヶ月(1~3ヶ月)	約2週間(Weekly Update) CD-ROM版/冊子体:更に約2週間~6週間後
5. 優位性セールスポイント	●医薬品開発における全情報を統合した大きなデータベース ●企業内での多ユーザー利用:個人ID登録制 ●ハイパーリンクでの情報利用 ●Personal機能:個人あてSDI、Alert機能 ●Intranetでは独自データともリンク可能 ●治験薬情報に関する高精度かつ詳細情報:開発段階は各国、疾病別に個別に情報あり、情報源も明らかでリンクされている	●開発の流れにおける全段階をカバーしている ●Drug Data Report /Drug News & Perspectives /Drugs of The Future /Methods and Findings /Drugs of Todayの5種類を網羅している(Ensembleに相当) ●products検索詳細:以下の3種類に分けて検索可能 ①lead コアな化合物だけに限定 ②Under active Prous独自のタグ付け、1.5年以内にレポートのあるものは開発企業が開発中であると判断してそれらだけを対象に検索可能 ③限定なし:全化合物対象:上記両者ともにチェックしない	●約1,700社の企業便覧を収録(企業HPへリンク) ●トレンド機能(化合物・企業・薬効・薬理等最大過去9年間のデータ推移)およびグラフ機能(CD/Web版) ●情報源:Scrip 精度迅速性に優れる ●scrip誌の記事情報(2001年1月以降)にアクセス可(CD/Web版) ●薬効カテゴリー約220、と薬理カテゴリー約1,600が相互にリンク ●薬物動態(Pharmacokinetics)フィールドを追加 ●[Latest Change]欄を追加。当該化合物の最新更新情報(Major/Minorに係わらず)を記載(CD/Web版)
6. 最近の改良点、将来計画等			★構造式データのExcelへのExport機能 ★構造データのSDF保存 ★Document情報へのリンク ★情報の信頼性を判断したカテゴリー ★update Conference新設

表3 DB比較表(2)

DB 略称	RDI	RDF	明日新
データベース名	Adis R&D Insight	R&D Focus	明日の新薬
製作元	Adis International Ltd	IMS HEALTH	(株)テクノミック
概要	開発薬剤を中心とする、開発情報のデータベースシステム	開発薬剤を中心とする、開発情報のデータベースシステム	開発薬剤を中心とする、開発情報のデータベースシステム 日本語のデータベース
利用形態	CD/Online/Intranet/Internet	CD/Online/Intranet	CD/web/Print/MT
構造情報の有無	○	○	○
構造検索機能	×	○	× Optionがあり
1. 情報源			
①特許	×	○	×
②文献・新聞	○ 薬・薬物療法の領域における専門誌2300誌	○ ジャーナル誌・新聞 Wall Street J, Financial Times, Nikkei, Pharma Japan, Pink sheet, National Press, etc.	○ 日刊薬業・日経バイオテック・Scrip・Market Letter等 10紙 ; クリッピングサービス(21紙); Internet検索;
③学会発表	○ 50学会に出席、200学会をカバー	○ 30学会以上に出席	○ 取材:薬学会・薬理学会・癌学会等6学会 抄録利用:国内約40学会、海外数学会
④企業からの情報入手 (インタビューなど)	○	○	○ 日本企業対象:ヒヤリングノ校間(回答率90%以上) 企業Web
⑤ 構造情報	文献:スタッフが化学名から構造式を展開 学会:抄録に化学名記載あるいはポスター発表で構造式が表記されたもののみ、構造式を展開		60%に構造式情報あり 会社聞き取り、化学名、学会・化学式・文献・特許から ISISによる管理と構造式情報の提供
2. 開発ステージ決定(企業からの情報がない場合)	積極的にメディアリリースを活用	開発企業に直接問い合わせ	開発企業に直接問い合わせ
①Clinical・PreClinical	臨床試験前の“Research Programmed”付与	確認するまで preclinicalのまま	開発企業からの情報待ち
②Discontinued	メディアリリース:積極的に主として公報からの情報による(業界紙)	企業・行政からの正式コメント待ち 3年間情報なしのものは企業に確認	3年間情報なしのものは企業に確認。
③No Development Reported	18ヶ月～2年間動きが無い場合に付与	企業・行政からの正式コメントを待つ。または4年以上新規情報が無い場合、企業に確認する	
④Suspended	メディアリリース:積極的に主として公報からの情報による(業界紙)		
⑤Withdrawn	メディアリリース:積極的に主として公報からの情報による(業界紙)	企業・行政からの正式コメントを待つ。または4年以上新規情報が無い場合、企業に確認する	国内は経過措置品目の情報等、海外は企業発表等
3. 情報の精度向上のための特殊な戦略の有無	Adis Knowledge Bases Publisherの訪問。書面調査 Adis JのDrug Evaluationの出版・企画等を目的にAdis Sales Executiveの企業訪問		
4. 新規データの搭載までのタイムラグ	1ヶ月以内	2～3週間	インターネット:約2週間 冊子・CD:約6週間
5. 優位性セールスポイント	●市場での成功可能性予測 (Lehman Market Analysis) ●文献サマリーデータベースClinical Trials Insight のレコードによる補完	●ATCプロフィール:最新1年間データ ●IMSデータ:薬効別市場分析データ(売上情報)・全世界・各地域別・上位製品・上位企業・使用上位疾患市場分析等 ●欧米における早期段階の情報に強い ●CD-ROM上での各種機能:レポート作成・構造および項目検索の複合検索・ハイパーリンクなど	●総合的な情報のチェック体制によるノイズの削除 ●詳細な国内開発情報 ●冊子、インターネット、CD、生データまでの柔軟な利用形態 ●サブファイル(例:時系列)の充実
6. 最近の改良点、将来計画等	★更新頻度の向上(毎日) ★プレスリリース全文閲覧可能	★ライセンシング情報の充実、 ★アナリストの市場予測を別項目化、★開発フェーズ情報の充実、 ★剤形の追加など	★更新頻度の向上を計画中。一部メールによる速報サービス開始 ★各企業サイト巡回による情報の早期収集に務めている ★Webによる検索機能の向上を計画 ★ゲノム情報取り扱い検討中 ★M&A対応としては、親子の一括検索などの対応

を把握するとともに、結果を得るまでの作業ステップ数・時間など、実際に検索を行い調査した。

まず、各種機能の特徴についてまとめた結果を表4に示す。文字検索機能については、両DBともに作用機作や適応症などの主要項目に階層型のキーワードが存在し、閲覧および検索式への入力も1クリックで可能なことから、研究者などのエンドユー

ザにとって非常に使い勝手がよい。一方、調査担当者にとっては、IDdbに詳細な検索式を入力できる機能はあるものの、近接演算や集合演算の機能はなく、物足りなさを感じる。さらにINTには全文検索機能が簡易検索のQuick Searchにしかなく、詳細な検索画面での利用ができない。キーワードだけの検索では必要な情報を漏らしてしまうこと

表4 IDdbとINTの機能比較表

分類	項目	IDdb	INT
文字検索	全項目	○	×
	フィールド指定検索のフィールド数	15	25
	分子量の検索	○	○
	前方一致	○	○
	中間一致	×	○
	後方一致	×	○
	AND 演算	○	○
	OR 演算	○	○
	NOT 演算	×	×
	構造との演算	AND, OR, NOT	AND
	近接演算	×	×
	絞り込み	×	×
	集合演算	×	×
構造検索	Exact match	○	×
	Atom Selection	○	×
	可変原子選択	○	○
	ノードの属性	○	○
	結合次数	○	○
	結合の種類（環／鎖結合）	○	○
	ショートカット（官能基）	○	×
	G グループ（構造フラグメント作図）	○	×
	繰り返しグループ	×	×
	可変置換位置	×	×
	環の孤立化	○	○
表示機能	リスト表示	○	○
	構造付き簡易表示	○	○
	フルテキスト表示	○	○
	プリンター対応表示	○	○
	ソート可能項目数	4	2
	1画面の表示可能最大件数	100	10
	レコードの絞り込み	○	○
出力機能	1レコード1件の印刷	○	×
	Excel への EXPORT	○	○
	構造式の Excel への EXPORT	△（ソフト必要）	○
	Excel への EXPORT できる項目数	8	13
	Word への EXPORT	×	○
	SDFFile への EXPORT	×	○
	EXPORT の制限件数	なし	100
SDI	SDI 機能	○	△（構造不可）
	頻度	毎日、毎週、毎月	毎日、毎週、毎月
	管理ページ	あり	あり
	メール配信機能	○	○
	メールの内容	件数、ヘッダライン	件数のみ
	メールからの結果情報へのアクセス	○	×

から、全文検索機能の充実は必須である。構造式検索についてはIDdbではISIS系,INTではChemDraw系が使われており、それぞれ無料のプラグインをインストールして利用できる。

検索機能面では若干IDdbが勝るが、エンドユーザの利用においては、両DBとも十分な使い勝手である。

表示機能については両DBとも満足できたが、出力機能についてはIDdbでは構造式をダウンロードするには別途有償のソフトウェアが必要、INTも一度に100件までしかダウンロードできないなど両DBともに満足できるものではなかった。

SDI・Alert機能においては、IDdbの完成度が高く、特にSDI登録した検索結果メールから直接検索結果の内容にアクセスできることはユーザにとって非常に有用である。一方、INTは構造式のSDI登録ができず、メールでの検索結果の内容も件数のみであった。

次に実際に文字検索として、糖尿病治療薬であるDPP-IV inhibitorを検索し、結果が表示またはダウンロードされるまでの作業に要するクリック数と時間を測定した。使用PCはOS WinXP, PentiumIII 1GHz, メインメモリ448M, インターネット接続速度約20M bpsであった。表示はIDdbではSmart View, INTではデフォルト形式を用いた。ダウンロードはIDdbではSmartsheet export viewのExport to Excelで、INTではExcel用で構造式なしの形式を用いた。

その結果を表5に示す。INTでは治験薬の化合物に加えて特許由来の化合物も検索結果として表示されて件数が大幅に増加してしまうため、特許由来の化合物を除く操作も加えた結果もあわせて比較した。特許由来の化合物を除く操作を加えたINT(BT除く)では表示クリック数およびダウンロードクリック数が多かったが、表示時間およびダウンロード時間についてはほとんど差はなかった。

さらに実際の構造検索について比較した結果を表6に示す。3種類の構造式を描画後(1,2は件数の少ない詳細な構造式,3はヒット件数の多くなるフェニル基)、部分構造検索を実施し、最初の結果表示までの時間を同様の環境で測定した。その結果、INTではヒット件数が多いためやや時間がかかったが、特に問題となる時間ではなかった。またINTではヒット件数の多い構造検索3の場合は60秒を超えてエラーとなってしまったが、これは検索に用いる部分構造式を工夫することでクリアできると考えられる。

これらの結果より、両DBともにWeb版治験薬DB

表5 文字検索におけるユーザビリティ

	IDdb	INT	INT (BT 除く)
ヒット件数	25	548	47
表示クリック数	8	9	14
表示時間(秒)	43	40	44
1ページ表示件数	20	10	10
ダウンロードクリック数	10	11	16
ダウンロード時間(秒)	67	66	69
ダウンロード件数	25	100	47

表6 構造検索におけるユーザビリティ

DB	構造式	1	2	3 (フェニル基)
IDdb	ヒット件数	899	1261	10456
	表示件数	20	20	20
	検索時間(秒)	12	10	37
INT	件数	4502	3257	--
	表示件数	10	10	--
	検索時間(秒)	19	20	60 超エラー

として完成した形であり、ユーザビリティも優れていると思われる。また両DBを比較すると構造式のダウンロード以外の機能全般ではIDdbの方が完成度が高くINTはまだ改善の余地がある。一方、薬業関連企業にとって非常に重要な機能である構造式のダウンロードにおいてはIDdbにはデフォルトでのダウンロード機能がなく、エクセルやSDFFileにエクスポートできるINTが優れていた。ただ、INTにおいても100件という件数制限や安定性などに問題があり、両DBともにさらなる改善を強く要望する。

5. まとめ

本稿は前回の治験薬DBの動向調査¹⁾のフォロー調査の上編であり、①ユーザへの利用状況のアンケート調査、②DB改善および今後の計画についてのベンダーからの情報収集とその解析によるDB比較、③IDdbとIntegrityのユーザビリティの比較検証について述べた。

以下調査結果を簡単にまとめると、まずアンケート調査で前回調査でその兆しが見えていたWeb版複合型治験薬DBの台頭が顕著に現れ、その利用が急増していることがわかった。そしてその理由としては、情報量の飛躍的な増加に加えてWeb版DB

特有のユーザフレンドリーな使いやすさによるところが大きいことがIDdbとINTのユーザビリティの比較検証から推測された（ただしこれらのDBも個別には機能改善を要望する必要がある）。

一方ベンダーからの情報収集によってそれぞれのDBにおいて前回調査後も改善努力が続けられていることがわかったが、収録データの網羅性・信頼性といった基本的な問題点が前回調査以降も改善されていないこともうかがえ、それが次稿²⁾で述べる収録状況調査で具現した。そしてこの網羅性・信頼性の脆（ぜい）弱さを補うため、Web版複合型DBというオールインワン型DBが出現したにもか

かわらず、ユーザはその出現の前から使っていた単一型DBも依然として併用していることがユーザアンケート調査結果に如実に現れた。

なお次稿³⁾では収録状況調査の結果を報告し、さらに全調査結果を踏まえた考察と、今後の治験薬DBの動向予測やユーザからの要望・提案について述べる。

最後に、本稿作成にあたり多面的にご協力いただいた科学技術振興機構西日本支所、ユーザアンケートにご協力いただいた薬業ならびに薬業関連企業各社、およびDB比較検討に応じて下さったベンダー各社に深謝したい。

医療情報ネット21(PINET21)メンバー

(ホームページ <http://med.honnet.co.jp/PINET/>)

安藤 聡子：協和メディアサービス（株）統計解析室
伊藤 幸紀：住友製薬（株）知的財産部
今井 奈月：味の素（株）医薬カンパニー 医薬研究所 研究企画部
上野 祐子：エーザイ（株）研開人事部情報室
岡 紀子：（株）住化技術情報センター 情報技術グループ
鍛冶 恭子：ファイザー（株）知的財産部
勝山 麗：塩野義製薬（株）安全管理部
小島 史照：田辺製薬（株）研究本部 研究企画部
酒井 満：武田薬品工業（株）医薬研究本部 研究推進部
清水 巖：（独）科学技術振興機構 さきがけ研究21「秩序と物性」領域事務所
須藤 公夫：大塚製薬（株）情報室
仲 美津子：アイ・エー・シー（株）

中井 芳治
夏原やよい：バイエル薬品（株）マーケティング 学術情報
浜崎 泰嗣：ゼリア新薬（株）法務部 知的財産グループ
原田 房江：ライオン（株）研究技術本部 企画管理部
平野 弘之：（株）ジーエスプラッツ
松浦智佳子：協和醗酵（株）医薬研究センター 技術情報部
松岡 靖史：三菱ウェルファーマ（株）創薬本部創薬企画部
本木 宏昭：システム・インスツルメンツ（株）開発研究部
安田 一代：（株）ホンネット
吉野 敬子：三菱ウェルファーマ（株）製品情報部 情報開発グループ

参考文献

- 1) 医療情報ネット 21. これからの治験薬データベースを考える. 情報管理. Vol. 43, No.1, 2000, p.12-29.
- 2) PINET21ホームページ. (オンライン), 入手先<<http://med.honnet.co.jp/PINET/>> (参照 2005-01-12).
- 3) 医療情報ネット 21. これからの治験薬データベースを考える (その2)：－データベースの機能比較と利用状況調査－ (下). 情報管理. Vol.48, No.1, 2005. (印刷中).