

教育訓練資料作成における生成系AIの活用

Use of Generative AI in Creating Staff Training Materials

日本新薬株式会社 研究開発本部 創薬研究所
薬物動態研究部 丹羽誠

Makoto Niwa, Nippon Shinyaku Co., Ltd.

おことわり

- 本発表は、生成系を含むAI利活用の議論に資するために一般的な内容をまとめたものであり、演者の勤務先である日本新薬株式会社、または、発表を企画したバイオアナリシスフォーラムの立場を述べるものではありません。
- 本発表は、演者が過去に探索的に検討した内容を含んで構成されており、演者の勤務先の現在のセキュリティポリシーとの関係性はありません。
- 生成系AIの利活用は、各組織のポリシーに従っての運用をお願いします。
- 利益相反について：演者は日本新薬株式会社の従業員です。

Disclaimer

This presentation is a summary of general contents related to the utilization of AI, including generative systems, and does not state the position of the speaker's employer, Nippon Shinyaku, nor the Bioanalysis Forum, which organized this session. This presentation consists of content that the speaker has explored in the past and has no relationship to the current security policy of the speaker's employer.

Conflict of Interest Statement

Presenter is an employee of Nippon Shinyaku Co., Ltd.

背景と本発表の狙い *Background*

- 2023年に入ってからChat GPTなど生成系AIの活用が拡大
- AIによる操作支援は広範に実装されている
 - 無視できない重要度を持った技術となっている

*Use of generative AI was expanded in 2023.
AI assistance is being implemented extensively.*



- バイオアナリシス分野における有効利用法の議論には価値があると考えた
- 2023年前半のJBF運営委員での議論内容も考慮、一般性高い「教育訓練資料作成」におけるAI活用について「できること」を投げかけ、議論の端緒とする

*Discussion of effective usage in bioanalysis seemed valuable.
Aim to start the discussion by providing "what we can do"
in "creation of staff training materials".*

はじめに：研究開発に活用しうるAIツール例 *Example of AI tools*

分類 <i>Classification</i>	事例 <i>Example</i>	機能 <i>Function</i>	業務活用例 <i>Potential Use</i>
文章生成 <i>Sentence</i>	Chat GPT	指示に沿った文章作成 <i>Generating Sentences</i>	手間のかかる文章作成：案内文、教育資料 <i>Generation of Introductory Materials</i>
画像生成 <i>Picture</i>	Stable Diffusion	指示に沿った画像作成 <i>Generating Pictures</i>	一般的な画像の生成が必要なとき <i>Generation of General Pictures</i>
文献検索 <i>Literature</i>	Elicit	リサーチクエスチョンに関する文献を検索・要約 <i>Search literatures Related to Research Question</i>	機密性がない技術的課題の解決策の整理 <i>Searching Resolution for Non-confidential Issues</i>
	Research Rabbit	文献ネットワーク自動生成 <i>Generating Literature Networks</i>	ある研究分野の背景の整理 <i>Examining Research Backgrounds</i>

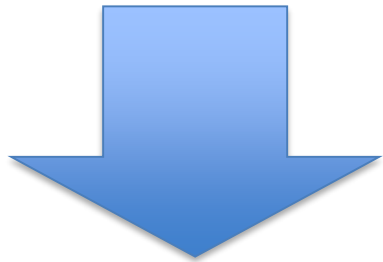
データから学習するというAIの性質から一般に機密保持が難しいが、最近ではデータの扱い方を見直して機密性に配慮したアプリケーションも提案されている。

教育訓練資料作成のニーズ

*Requirements for Staff
Training Materials*

- 一般的な内容はどうしても必要
(機密性がない内容のウエイトが高い)
- 簡潔に作りたい
- 労力をかけすぎず作りたい

*General content is necessary.
(non-confidential)
Creating concise material with
less effort is warranted.*



AI利用のハードルが低く、
利用して効果があるだろう

Use of AI will be Productive.



AI利用の一般的留意点

*General Points to Consider
in the Use of AI*

- 新しい話題の学習が不十分な場合がある⇒確立した分野で活用
 - 最新のガイドライン（Web上に情報がほとんどないため学習困難）を解説してもらうことは困難

Learning for new topics are insufficient. Use in established field is effective.

- 不正確な場合がある、誤学習してしまっている場合がある⇒レビューは必須
 - 専門的な分野では背景データが少ないため誤学習となりやすい

*Potentially inaccurate, thus review is essential.
Mis-learning is common in specialized field
because of scarcity of the information.*

事例1（生成） 「液体クロマトグラフィー質量分析法（LC-MS）をバイオアナリシスに用いる意義」の生成例（Chat GPT使用）

Example 1

- 命令文：あなたはバイオアナリシスを行う部署の新規配属者研修の講師です。液体クロマトグラフィー質量分析法をバイオアナリシスに用いる意義を3点の箇条書きで記載ください。
- **高い感度と選択性**: LC-MSは非常に高い感度を持ち、微量の化合物や生体分子を検出することができます。また、質量分析機能により、物質の分子量や化学的な構造を詳細に解析することができます。これにより、バイオアナリシスにおいて微量の薬物、代謝物、タンパク質、ペプチドなどの測定や同定が可能となります。
- **複雑なサンプル行列の分析**: バイオアナリシスでは、血液、尿、細胞培養液などのような複雑なサンプル行列を扱うことがあります。LC-MSは、これらの複雑な行列中の分析対象物を選択的に分離し、高い感度で検出することができます。さらに、サンプル前処理や分離カラムの選択により、バックグラウンドの干渉を低減することが可能です。
- **多様な化合物クラスの解析**: LC-MSは、さまざまな化合物クラスの解析に適しています。薬物、天然物、代謝物、タンパク質、糖鎖など、様々な生体分子を検出および同定することができます。また、定量分析においても**高い精度と再現性**を持ちます。これにより、バイオアナリシスの幅広い応用領域において、包括的な分析が可能となります。

①定量観点が化合物クラスの項目に入るなど重要ポイントの相互関係が悪い ②用語の整備 について対応必要

*Example of "Significance of liquid chromatography-mass spectrometry for bioanalysis":
(1) Context should be optimized, (2) Terminology should be Controlled.*

「液体クロマトグラフィー質量分析法（LC-MS/MS）をバイオアナリシスに用いる意義」の整理例

Example 1

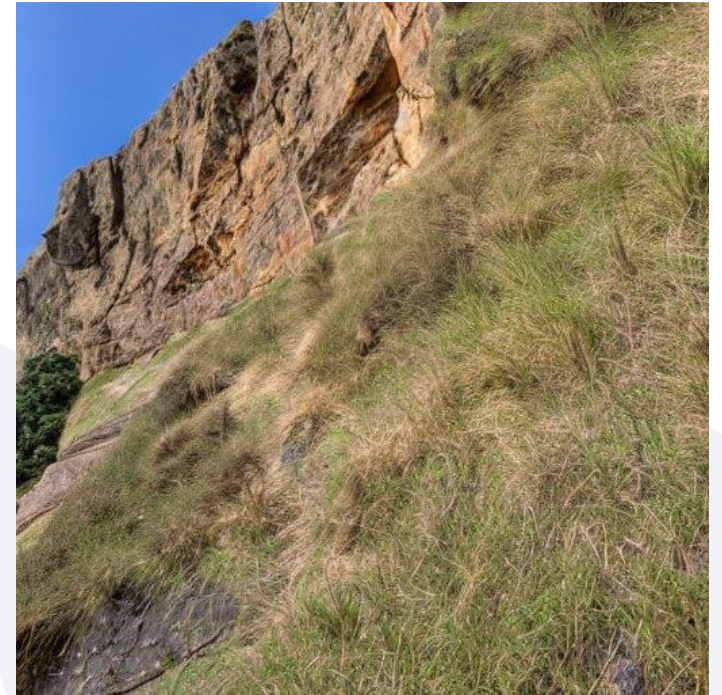
- 感度・選択性・定量性
 - 感度：LC-MS/MSは非常に高い感度を持ち、微量の化合物や生体分子を検出することができる
 - 選択性：質量分析 = 物質の化学構造・元素組成に基づく検出
 - 定量性：高い精度と再現性を持つためバイオアナリシスの幅広い応用領域で対応が可能
 - 複雑なマトリックスの分析
 - 血液、尿、細胞培養液などのような複雑なマトリックスにおいても、バックグラウンドから分析対象物を選択的に分離・検出・定量することが期待される
 - サンプル前処理との組合せや分離カラムの選択により、バックグラウンドの影響を低減できる
 - 多様な化合物クラスへの対応
 - 薬物、天然物、代謝物、タンパク質、糖鎖など、様々な生体分子を検出できる
- ⇒微量の薬物、代謝物、タンパク質、ペプチドなどの選択的な定量が可能

Improvement of "Significance of liquid chromatography-mass spectrometry for bioanalysis": (1) Context arranged, (2) Terminology controlled.

作成してみたの感触

Impression: Example 1

- 人によるレビューが重要
 - 「ふわっと」作られがち⇒オーディエンスに伝わる（刺さる）ように吟味が必要
 - 説明順序・構造の再構築、用語の整理、文章自体の構造の再構築
- それでもGenerateしてくれる意義は大きい（気力の節約）
 - どうしても最初の1歩が心理的に重い



Human review is important so that the content can be conveyed to the audience accurately.

Restructuring the structure of statement is important.

Significance of the use of generative AI is to save the mental energy.

"looking up the cliff from lower ground"

by Stable Diffusion 23 Jun 2023

事例2 (探索) Web横断情報検索 Microsoft Copilot *Example 2*

- “Polyethylene glycol ion suppression”をBing検索すると質問“Is ion suppression a problem in pre-clinical dosing of polyethylene glycol (peg 400)?”が生成される
- 文献に限定せずWebリソース横断的に検索される
 - 教育訓練資料作成の目的では好ましいことが多い
- 回答自体はそのまま使える精密さはない（「何故か」の言及乏しい）

はい、イオン抑制は、ポリエチレングリコール（PEG400）を含む前臨床投与車両のLC-MS/MS分析において、問題となる可能性があります。PEG400は、投与媒体に溶解しやすくするために添加されることが多いのですが、これによりイオン化効率が低下したり、ピーク形状が悪化したりすることが報告されています[1][2]。イオン化抑制を減らすためには、PEG400の除去[2]や、内標準物質の使用[1]などの方法があります。

[1] Identification and reduction of ion suppression effects on quantitative bioanalysis using LC-MS/MS (analyticalsciencejournals.onlinelibrary.com)

[2] Removal of polyethylene glycol 400 (PEG400) from biological samples using Oasis PRiME HLB cartridges (waters.com)

Web search by Microsoft copilot. It enables searching from a few words' input but lacks in precision.

事例3（探索）文献ベースの情報検索 Elicit使用

Example 3

- Research Question: How can matrix effects in LC-MS/MS be avoided?
- Summary of top 3 papers:
 - Steene 2008 compares matrix effects in HPLC-MS/MS and UPLC-MS/MS and suggests that UPLC may eliminate or reduce matrix effects due to **better resolution** and **narrower peaks**.
 - Côté 2009 discusses the matrix effect in bioanalytical assays and suggests various approaches to eliminate or reduce the matrix effect, such as **cleaner sample preparations** and **sensitive instruments**.
 - Krueve 2009 proposes the **extrapolative dilution approach** to combat matrix effects, which involves consecutive dilutions of the sample and extrapolation of analyte content to a matrix-free solution.
- 検索キーワードを選択する知識を要せず、「自然な質問」からAIで検索できる
- 期待した内容に沿ってはいる（**それまで重視していなかったことの発見**もある）
- 教育用には要約のままでは情報が不足（ex. UHPLCが万能ととられかねない）、人によるレビューが必要
 - Literature search by Elicit. It enables discovery of literature which attention was not paid. Human review of context is important.*

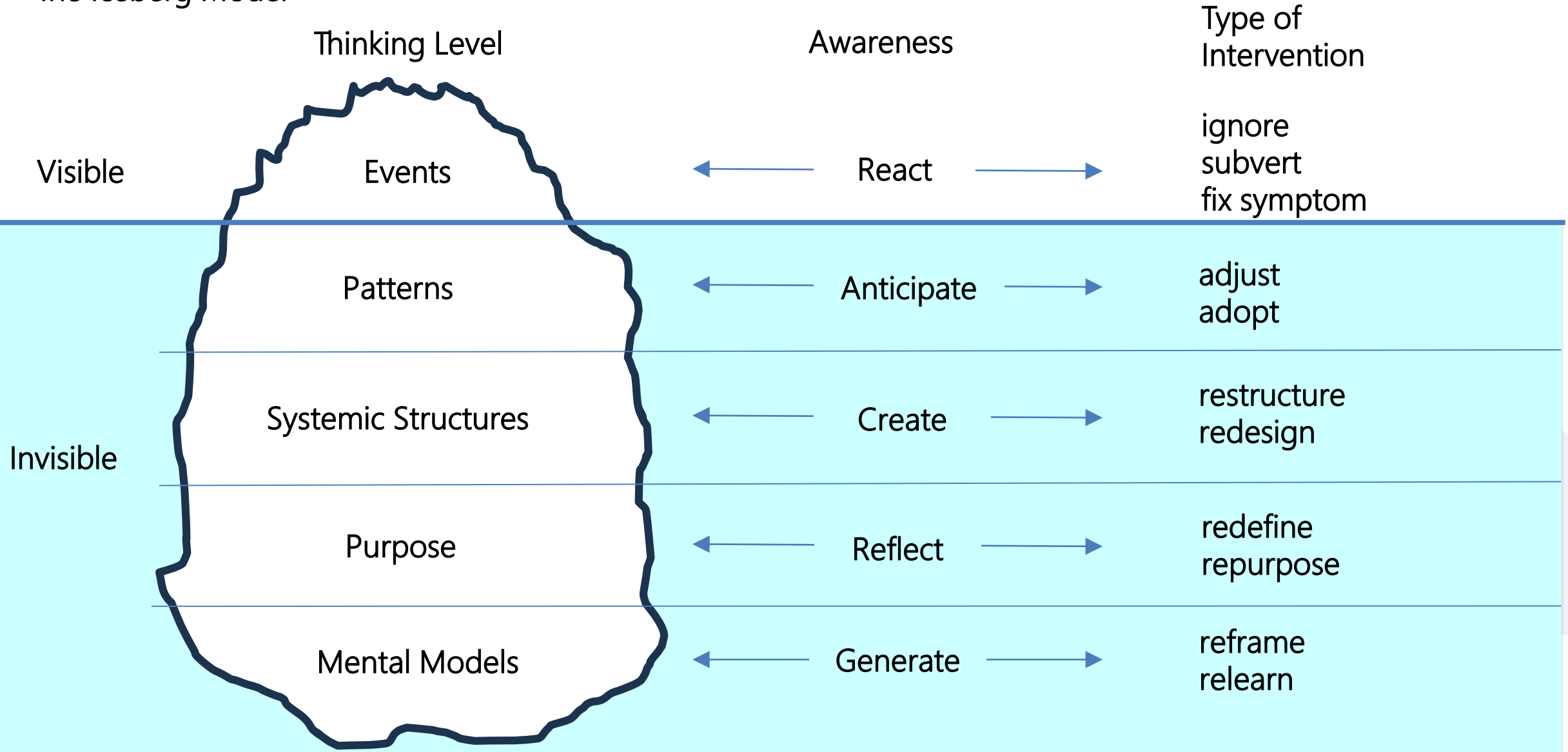
AI活用の潜在的利点

Potential Benefits of AI Application

- 事業環境の変化や技術の進歩により、物事の重要度バランスが変わっていく。
- 敢えてAIに生成してもらった方が、先入観にとらわれず良いものができる可能性があるのではないか？（今まで重視していなかったことの発見もあるのでは？）
- 良いものをつくるにあたり・・・
- アップデートされていない自分自身が障害になりうる。
- 情報を揃えても、自身の頭が必ずしもついていけない。→成果物に反映できない。
- 自分の思考パターン、構造化のしかた、目的の認識、メンタルモデルが縛りになっているのではないか？（次ページ、Iceberg Model）
- 敢えてGenerateしてもらおうことで、自分にはないメンタルモデルを活用できる可能性がある。

*Our own thinking patterns, structuring, perceptions, and mental models may be putting biases.
Generating AI can act as an external intelligence.*

The Iceberg Model



評価「液体クロマトグラフィー質量分析法（LC-MS）を バイオアナリシスに用いる意義」

Considerations

Char GPT (2023) / GPT-3

- 感度・選択性・定量性
- 複雑なマトリックスの分析
- 多様な化合物クラスへの対応

広く捉えることができている

*Material generated by AI has broader scope
(sensitivity, selectivity, quantitation, modality)*


丹羽誠 (2022)

第13回JBFシンポジウム基礎講座

- 特長の異なる方法の組み合わせ
→選択性→信頼されている

論理的・精密だが狭くなっている
(他の要素は頭になかった)

*Material generated by human is precise
but has narrower scope (orthogonal
hyphenation results in reliability)*



生成系AIと資料作成者の協働により、
単独作成よりも良いものができるだろう

Collaboration between the generative AI and the document creator will produce better materials

結語

Conclusion

- 負荷の軽減により、他の大事なこと、深い検討ができることは重要

Reduction of workload by AI allows other important things to be done.

- 一方で、生成させることは見えないものを活用する手段の一つ
- 生成系AIと資料作成者の協働により、単独作成よりも良いものができるだろう

Generating by AI is one way to discover information, which was overlooked by humans. Collaboration between a generative AI and a document creator will produce better materials.

