

測定機器データの長期保存ガイダンス

第 3.0 版

2025 年 3 月 31 日



公益社団法人日本文書情報マネジメント協会
R&D データ保存委員会

目次

1. 目的	3
2. 適用範囲	3
3. イントロダクション	3
3.1. 測定機器データの概要	3
3.2. 紙に印刷した測定機器データの問題点	4
3.3. 測定機器データの懸念点	5
3.3.1. 再解析	5
3.3.2. データ移行及び長期保存	5
3.3.3. データインテグリティ	7
3.3.4. 測定機器データのフォーマット	9
3.3.4.1. 測定機器データの相互利用可能性	11
3.3.5. クラウドサービスの利用	11
3.3.5.1. クラウド環境上での測定機器データの長期保存	12
4. 方針	12
4.1. 解析結果に関する考え方	13
4.2. 移行及び長期保存に関する考え方	13
4.3. データインテグリティに関する考え方	14
5. 推奨する測定機器データの移行及び長期保存方法	15
5.1. 測定機器データの長期保存方法	15
5.1.1. AIA フォーマットデータ (HPLC クロマトグラム) の移行と保存	15
5.1.2. 標準フォーマットのない測定機器データの移行と保存	16
5.1.3. 測定機器データパッケージ	16
5.2. 測定機器データの長期保存プロセスの信頼性確保	18
5.3. パッケージに格納すべき測定機器データの例	19
5.3.1. 適切な標準フォーマットがある場合	19
5.3.2. 適切なフォーマットがない場合	19
6. 施設間のデータ移行	20
7. 今後の課題	21
7.1. 各種測定機器データの標準化	21
7.2. データパッケージ技術の開発	21
8. 将来の展望	21
9. 用語集	23
10. 改訂履歴	25
付録 1 AIA フォーマットデータの例	26
付録 2 測定機器データの利用目的に関する解説	30

1. 目的

本ガイダンスの目的は、製薬業界の研究施設、試験検査施設等において、各種の測定機器から出力された電子データ（以下、「測定機器データ」という）を、そのデータが再解析される可能性があることを前提として、信頼性を保ったまま測定機器から保存場所に移行させ、長期間に渡り安心して保存管理する方法を提示することにある。

2. 適用範囲

本ガイダンスは、製薬業界において以下の目的で取り扱われる測定機器データを対象とする。

- a. 規制当局への申請及び報告に用いるデータ
- b. GxP 規制¹で保存が義務付けられているデータ
- c. 施設において保存の必要があると考えられているデータ

なお、測定機器データは、再解析される可能性があることを前提としている。もし天秤や pH 計などの測定機器から出力されたデータをそのままの状態に確定し、再解析を行わない場合は、本ガイダンスの対象には含まれない。

3. イントロダクション

IT 環境の急激な変化に伴い、保存しなければならない電子記録の量は急速に増加している。その一方で、紙に印刷した記録と異なり、電子記録は新しいシステムへの移行やソフトウェアのバージョンアップなどによって、将来的に読めなくなることが危惧されている。

また、試験を外部委託した場合、委受託試験における施設間の測定機器データの引き渡しに際して、紙に印刷した測定機器データであれば印刷物を施設間で容易に引き渡すことができる。しかし、測定機器データそのものの場合、真正性²を保った状態で、どのような方法で引き渡すのか、引き渡された測定機器データをどのように保存するのかなどについて明確な基準がなく、施設が各々最適と考える方法で対応せざるを得ない状況である。

製薬業界においては、測定機器データを信頼性が保たれ、再解析ができる状態で長期間保存しなければならないため、上記の課題はより重大である（3.3 項参照）。

本ガイダンスの策定に至った前提や背景を以下に示す。

3.1. 測定機器データの概要

測定機器、又は測定機器に接続されたコンピュータには、測定データや解析結果のほか、測定条件、解析条件、サンプルスケジュール、電子署名及び監査証跡、並びにシステムのログなどが保存

¹ 患者の安全性や試験の信頼性を確保することを目的に規制当局で定められた基準の総称。製薬業界の代表的な法令を以下に例示するが、これに限らない。

GLP (Good Laboratory Practice) : 「医薬品の安全性に関する非臨床試験の実施の基準」

GCP (Good Clinical Practice) : 「医薬品の臨床試験の実施の基準」

GMP (Good Manufacturing Practice) : 「医薬品の製造管理及び品質管理の基準」

GVP (Good Vigilance Practice) : 「医薬品の製造販売後安全管理の基準」

² 参照：薬食発 第 0401022 号平成 17 年 4 月 1 日 医薬品等の承認又は許可等に係る申請等における電磁的記録及び電子署名の利用について（ERES 指針）、3.1.1.電磁的記録の真正性の項

される。最近ではネットワークを介してデータ保存サーバー、データ管理システム等に保存されることも多い。

本ガイダンスでは、これら測定機器データについて以下の用語を用いる。

測定機器データの保存形式としては、下記 A.、B.の 2つがあり、測定機器データには、下記 a.、b.、c.の 3種類のデータが含まれる。

A. オリジナルデータ

測定機器から出力された電子データ。オリジナルレコードともよばれ、GxP 規制下では生データの一部とされる。機器固有のフォーマットで出力されることが多い。機器によって、測定データ以外に派生データとメタデータを含む場合と含まない場合がある。

B. 標準フォーマットデータ

AIA などの標準フォーマットに変換した測定データ及び一部の派生データとメタデータ。残りの派生データとメタデータが変換されずに欠落するが、欠落した分を補完する資料等と合わせて保存することによって、変換前のデータと同等と見なすことができる。

a. 測定データ

測定機器で得られたデータ。高速液体クロマトグラフィー (HPLC) などのクロマトグラムデータ、赤外分光光度計 (IR)、核磁気共鳴装置 (NMR)、質量分析装置 (MS) などのスペクトルデータ、天秤の秤量データなど。

b. 派生データ

オリジナルデータを使って解析された結果 (ピーク面積等) や計算結果 (濃度等) など。

c. メタデータ

データの意味を明確にするために補足される単位等の情報、データの取得された日時や測定機器等を特定する情報、測定条件、監査証跡など。FDA (Food and Drug Administration) はデータインテグリティのガイダンス³において、メタデータを具体的に説明している。本ガイダンスでは FDA の考え方を参考にしつつ、測定機器データに関連するデータと、監査証跡を分けて示す。即ち、測定条件、解析条件、サンプルスケジュールなどを分析メタデータと表記し、監査証跡を監査証跡メタデータと表記する。

3.2. 紙に印刷した測定機器データの問題点

従来、日本の製薬業界では、測定機器データや解析レポートを印刷して紙で保存することが一般的に行われてきた。しかし、次の問題点を解決し、データインテグリティを確保するために、最近では電子データを保存することが求められている。

- a. 印刷されたデータは再解析できない。
- b. 電子データの中にも含まれていても通常印刷されないデータ (解析条件や測定条件等)、印刷できないデータ (3次元データ等) は全て失われてしまう。
- c. 紙を保存する膨大なスペースが必要になる。

³ 出典 : Data Integrity and Compliance With Drug CGMP Questions and Answers Guidance for Industry (FDA, Dec. 2018)

3.3. 測定機器データの懸念点

3.3.1. 再解析

製薬業界では測定機器データを取得してから数年後に再解析しなければならないことがある。例えば類縁物質試験において、あるロットで問題となった類縁物質が、過去のロットにどの程度含まれていたかを調査する場合がある。その際、未報告の微小ピークを調査するために、過去の測定機器データの再解析が必要となることがある。

この際、測定機器データの保存期間と測定機器ソフトウェアのバージョンアップの頻度などに相違があるため、長期保存された測定機器データの再解析時に課題が生じることもある。また、様々な事情により他のメーカーの測定機器に切り替えられることもある（図1）。

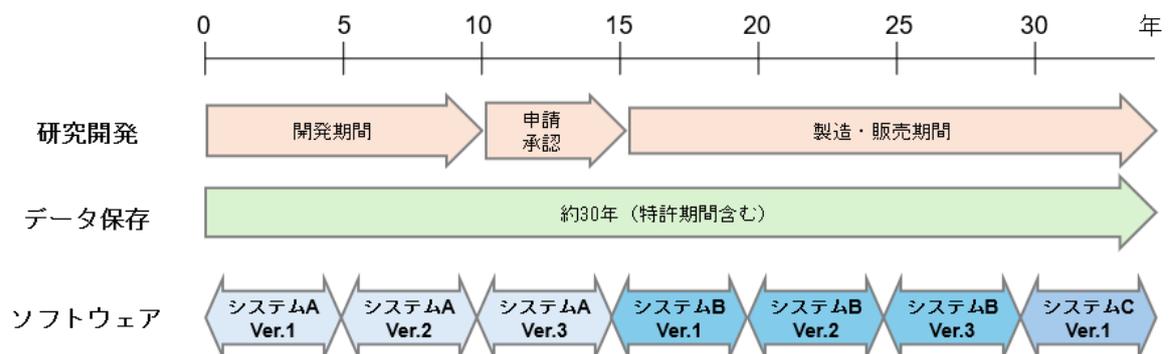


図1 データの保存期間とソフトウェアのバージョンアップの関係⁴

他のメーカーの測定機器のソフトウェアに測定機器データを移行した場合には、、、ソフトウェアのアルゴリズムの違いから、同一の結果が出ることは保証できない。また、同一メーカーのソフトウェアであっても、バージョンアップされている場合、元の解析結果と同一の結果が得られるとは限らない。

この理由には、次のものがある。

- 解析アルゴリズムを変更している。（計算精度の向上も含む）
- 計算機内部では10進数ではなく2進数の有限桁数で計算しているため、最小桁には誤差が含まれており、計算結果にも誤差を含む。
- コンピュータも現在は32ビットから64ビットに変化しつつあるので、これにより差が生じる可能性がある。

これらを避けるには、再解析が可能な環境として、解析ソフトウェアだけではなくOSまで含めたコンピューター式を保管することが必要となるが、現実的ではない。

3.3.2. データ移行及び長期保存

再解析の必要性を考慮した場合、製薬業界では測定機器データを30年位再解析できる状態で保

⁴ 出典：「電子データ保存用パッケージの作成と信頼性保証」、JIIMA デジタルドキュメント 2024 ウェビナー、2024年11月

存することが望まれる⁵。しかし、ハードウェアの更新やソフトウェアのバージョンアップが行われた場合、解析ソフトウェアが新しいOSに対応できず、長期間にわたって保存された測定機器データが利用できない恐れがある。また、利用しているデータベースソフトウェアがサポートを終了したとき、他メーカーのシステムに測定機器データを移行できない恐れもある。

一般的な測定機器データの長期保存方法には、図2の方法が想定される。

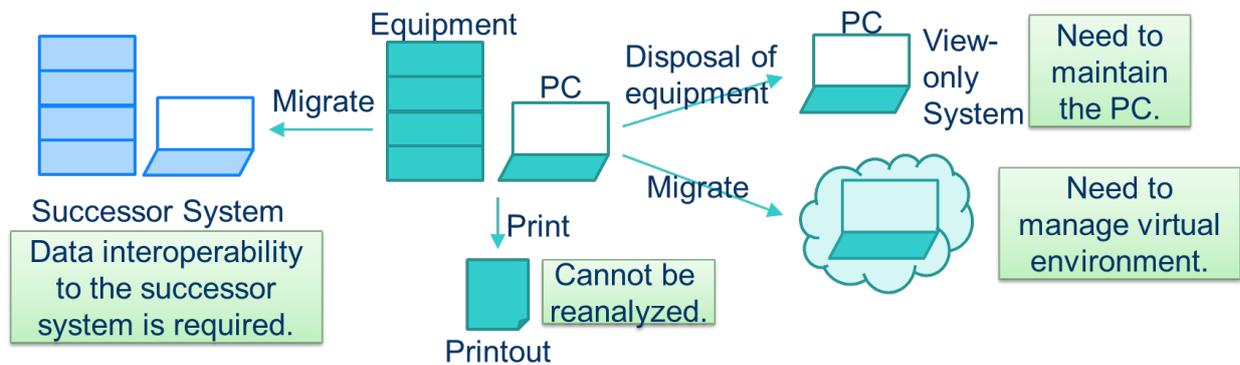


図2 測定機器データの長期保存方法⁶

なお、測定機器データの印刷物については再利用できないため（図2中央下）、本ガイダンスの対象外とし、それ以外の対応策に対する懸念点について記す。

A) 解析用コンピュータを物理的に保存（図2右上）

懸念点：

- a. 管理対象システムの増加
- b. 機械的寿命（コンピュータ本体、プリンター、外部ストレージ）
- c. 維持費（ライセンス費含む）
- d. 保存場所
- e. 定期点検
- f. 電子データのバックアップの維持
- g. 旧システムを操作できる作業者の確保

B) 解析用コンピュータを仮想化し保存（図2右下）

懸念点：

- a. 管理対象システムの増加
- b. 維持費（ライセンス維持費用が必要となるが、近年はサブスクリプション契約での販売も多いため、契約満了後のライセンス維持方法を考慮する必要がある）
- c. 定期点検
- d. 電子データのバックアップの維持

⁵ 例：医薬品及び医薬部外品の製造管理及び品質管理の基準に関する省令（平成十六年厚生労働省令第百七十九号）（GMP省令）第20条第3号、第30条など。

⁶ 出典：“Data Storage Methods and Examples under Japan’s GLP Regulations”, 2024 KSQA International Conference, 2024年10月24日 (<https://jsqa.com/kenkyu/society/2024ksqa/>)

- e. 旧システムを操作できる作業者の確保
 - f. ハードウェアキー⁷、インタフェースカード⁸等のハードウェアが必要な場合の追加措置
 - g. 仮想化の対象となるソフトウェアのライセンス形態⁹
 - h. 完全に互換性がとれているかの検証が必要
- C) 現行システムから後継システム（又は互換システム）への移行（図 2 左）

懸念点：

- a. 移行可能なシステムの制約
システム導入時にその制約を知ることは困難である。
- b. 移行可能な範囲の制約
例えば、監査証跡は移行不可である。

D) 標準フォーマットを介したデータ移行（図 2 左）

懸念点：

- a. 自動・手動を問わず、移行元のシステムにデータとメタデータをエクスポートできる機能が、移行先のシステムにそれらをインポートできる機能が必須である。
- b. メタデータとのリンクの喪失、又はリンクの移行が困難である。
- c. 移行元のシステムと移行先のシステムとのデータ管理水準の違いにより、データインテグリティの保持が困難である。例えば、そのシステムで生成したデータ以外には監査証跡が記録されない。

本ガイダンスでは、「D) 標準フォーマットを介したデータ移行」を推奨する。推奨する理由は 4 章で述べる。また、標準フォーマットがない測定データの移行方法についての見解も述べる。

3.3.3. データインテグリティ

再解析を行うことを前提に、測定機器データを保存したり、保存場所から移行させたりする際には、その信頼性が保たれていることが重要である。特に、規制当局への申請及び報告に用いる資料に使用する測定機器データについては、データインテグリティの確保を求められるようになってきている。このデータインテグリティ確保のためには、測定データだけでなく派生データ及びメタデータ（分析、監査証跡）も含めて、判読性を保った状態でセキュリティ管理のもと保存することが要求されているが、要求を満たすには、3.3.1 項、3.3.2 項の懸念点を含め、困難な点がある。

下記に規制当局の要求事項が書かれたガイダンス等の抜粋を示す。

電子データの保存に対する規制当局の要求

FDA は、“Questions and Answers on Current Good Manufacturing Practices、 Good

⁷ 不正アクセスや不正コピーを防止する目的で、ソフトウェアなどの利用制御に用いられる USB デバイスなどのハードウェア（ドングル）。

⁸ コンピュータに入出力インターフェースを追加する拡張カード。

⁹ ユーザーではなくハードウェアにライセンスが必要な場合がある（Microsoft Windows DSP 版、OEM 版など）。

Guidance Practices、 - Records and Reports” というガイダンス¹⁰の中で、次のような Q&A を掲載している。なお、回答については、関連する部分のみ抜粋し、理解しやすいように整理した。

Q) 医薬品の製造と試験で使用されるラボのコンピュータ化システムが生成する電子記録及び関連する印刷されたクロマトグラムに対して、Part 11 やプレディケートルール要件 (21 CFR Part 11) ほどの様に適用されるのか？

- A) 印刷されたクロマトグラムは、§ 211.68 で要求されているように、クロマトグラムを作成するために使用された電子データの正確かつ完全なコピーとは見なされない。クロマトグラムには、一般に、例えば注入シーケンス、装置メソッド、解析メソッド、監査証跡などは含まれていない。これらのすべてがクロマトグラムの作成に使用され、信頼性と関連付けられている。したがって、
- a. 医薬品の製造と試験で使用される印刷されたクロマトグラムは、Part 211 におけるプレディケートルール要件を満たしていない。
 - b. ラボのコンピュータ化システムによって生成された電子記録は、これらの要件に則って維持されなければならない。

FDA のガイダンス³は、データインテグリティのために ALCOA を要求しており、PIC/S のガイダンス¹¹は、それに加えて CCEA を要求している。日米欧の規制当局の期待に応じ、当局による査察（適合性書面調査など）に耐えうるものとするためには、これらをまとめた ALCOA+ の要求を満たす方法を確認する必要がある。

ALCOA

Attributable (帰属性) : 署名や捺印等により帰属や責任の所在が明らかである
Legible (判読性) : 誰もが読める字で簡潔かつ明瞭に記録されている
Contemporaneous (同時性) : 発生と同時にあるいは遅滞なく記録されている
Original (原本性) : 記録内容が原本として管理されている
Accurate (正確性) : 事実が正確かつ客観的に記録されている

CCEA

Complete (完全性) : 記録に欠損がなく完結している
Consistent (一貫性) : 記録 (データ) が理にかなない矛盾がない
Enduring (耐久性) : 記録の保存が永続的である
Available (利用可能性) : 記録を必要な時に取り出せる

また、MHRA のガイダンス¹²は、6.11.2 で真正なコピー (True copy) について以下のように定めている。

- a. 必要ならば、真正なコピーはオリジナルレコードとは異なる電子ファイル形式で保管してもよいが、データの全ての意味が保たれ、履歴が再構築できることを保証するためにメタデータと監査証跡を保持しなければならない。

¹⁰ 出典 : Data Integrity and Compliance With Drug CGMP Questions and Answers Guidance for Industry December 2018 (<https://www.fda.gov/media/119267/download>)

¹¹ 出典 : PIC/S Guidance Good Practices for Data Management and Integrity in Regulated GMP/GDP Environments (PIC/S, PI 041-1 1 Jul. 2021) <https://picscheme.org/docview/4234>

¹² 出典 : ‘GXP’ Data Integrity Guidance and Definitions (MHRA, Revision1 March 2018)

- b. オリジナルレコードとその真正なコピーは、記録の完全性を保持しなければならない。当該コピーの完全性を検証して記録する文書化されたシステムが確立されているなら、オリジナルレコードの真正なコピー（例えば、紙記録のスキャンしたもの）を、オリジナルレコードの代わりに保存してもよい。組織は、オリジナルレコードの破棄に伴うあらゆるリスクについて考慮すること。
- c. レビュー、バックアップ、アーカイブなどの目的のために、関連するメタデータを含めた電子データの真正なコピーを作成できるようにすること。真正なコピーであることを保証するために、正確で完全なコピーは、データの意味（例えば、日付フォーマット、前後関係、レイアウト、電子署名及び承認）と完全な監査証跡を含むこと。保存期間を通じて、真正なコピーの動的な機能が維持されるよう考慮すること。

当局の要求事項への対応においては、リスクマネジメントが重要である。

日米 EU 医薬品規制調和国際会議（ICH）は品質、安全性及び有効性の3分野でハーモナイゼーションの促進を図るための活動を行っており、2006年に「品質リスクマネジメントに関するガイドライン」を作成し、2023年に改訂版を公開した¹³。リスクマネジメントは、リスクアセスメント（ハザードの特定、リスク分析、リスク評価）に基づいてリスクコントロールを行い、その結果をレビューするというプロセスで実施する。データインテグリティの確保においても、このリスクマネジメントは重要な要素となる。なお、第18改正日本薬局方参考情報の品質リスクマネジメントの基本的考え方〈G0-2-170〉¹⁴には、前述のガイドラインの概説もあるので、参考になる。

日本製薬工業協会 品質委員会 GMP 部会データインテグリティプロジェクトは、リスク分析に基づいたデータインテグリティ対応は、効果的且つ効率的な品質保証体制の構築のために極めて重要と考え、2018年にホームページ上でデータインテグリティコンプライアンスアセスメントツールを公開した¹⁵。

測定機器データの保存や移行を行う場合においても、リスクアセスメントを行い、当該データの重要性、プロセスにおける人の関与の度合いなどを考慮して対応することが必要である。

3.3.4. 測定機器データのフォーマット

測定機器は様々な種類のデータを発生させる。あるメーカーの測定機器のオリジナルフォーマット（機器固有フォーマット）で保存した電子データを、そのフォーマットのまま他のメーカーの測定機器に移行することは難しい。

そのため、団体等でメーカーに依らない標準フォーマットの検討もなされている場合もあるが、画像データや音楽データほど汎用性を求められていないため未検討のものも多い。汎用性が高いテキスト形式の数値データとして出力できるものもあるが、このような形式のファイルはデータの改

¹³ 出典：ICH Q9(a) 品質リスクマネジメントに関するガイドライン (<https://www.pmda.go.jp/int-activities/int-harmony/ich/0049.html>)

¹⁴ 出典：第18改正日本薬局方参考情報の、品質リスクマネジメントの基本的考え方〈G0-2-170〉
<https://www.mhlw.go.jp/content/11120000/000788362.pdf>

¹⁵ 出典：https://www.jpma.or.jp/information/quality/index_di.html

ざんも容易であるため、保存する場合には、5.1.3項にて説明するパッケージ化ツール等を用いることが望ましい。ここでは、分析においてよく使用されるクロマトグラフデータを例として取り上げる。クロマトグラフデータの標準フォーマットとしては、次に挙げるフォーマットが提唱されているが、それぞれに一長一短があり、統一できていないのが現状である。

a. AIA (Analytical Instrument Association)

米国の分析機器工業会(Analytical Instrument Association—AIA)が定めた、HPLC等のクロマトグラフデータの標準フォーマット。バージョンが違っていると読み出せない事がある。

b. NetCDF (Network Common Data Form)

大気研究大学連合(University Corporation for Atmospheric Research -UCAR) Community Programs (UCP)の一部である Unidata が開発した、科学的なデータを表現する為の機種に依存しないデータフォーマット。

c. JCAMP (Joint Committee on Atomic and Molecular Physical Data)

国際純正・応用化学連合 (International Union of Pure and Applied Chemistry—IUPAC) が引き継いだ NMR、IR、MS等のスペクトルデータの標準フォーマット。

d. AnIML (Analytical Information Markup Language)

アメリカ材料試験協会(American Society for Testing Materials)のXML標準フォーマット。まだ最終化されていないXML形式のフォーマットで、データ量が大きくなることと(オリジナルデータの10~20倍)、機器のデータの取り込み速度が速くなっているのにもかかわらず書き込み速度が追い付かない欠点があるため、標準化が進んでいない¹⁶。

なお、上記いずれのフォーマットも分析メタデータの全てを含んでいる訳ではない。

クロマトグラムデータは標準フォーマットに変換が可能であるが、測定条件、解析条件などの分析メタデータは測定機器メーカー各社で仕様が異なる。また、解析アルゴリズムは各メーカーで異なるため、解析パラメーターが移行されたとしても、他メーカーのデータを完全に再現することはできない。しかしながら、定量分析の場合は、標準品に対する相対値がほぼ同じであれば、他社の機器でも同等な定量値を求めることができる。このような定量分析の例として、標準品を用いて作成された検量線による濃度算出が挙げられる。

ただし、標準フォーマットの規格を使ったデータであっても、メーカー間でデータ内容に相違がある。AIAフォーマットでは生データと様々なメタデータを格納する形式が定められているが、メーカーによって格納されるメタデータに相違が発生する可能性がある場合や、格納されたデータやメタデータの単位が異なる場合がある。格納すべきデータの一部が空欄になっていたり、検出器や時間の単位が機種依存になっていたりする(「付録1 AIAフォーマットデータの例」参照)。

¹⁶ XML形式のフォーマットは、通信のアルゴリズムを改良することで、通信速度が向上する可能性があるが、基本は機械語で組み込んでいるため、通信アルゴリズムの修正は困難。

3.3.4.1. 測定機器データの相互利用可能性

標準フォーマットが整備されていても、そのフォーマットを用いたメーカー間のデータ移行が可能かであるか否かを確認する必要がある。そこで多くの研究施設や試験検査施設で用いられている高速液体クロマトグラフィー（HPLC）と質量分析装置（MS）を題材として、メーカーの協力を得てデータの相互利用可能性を検討した。

HPLC については「a. AIA (Analytical Instrument Association)」のデータであれば、別の機種 of データを移行して再解析可能であることが実証された。このため、AIA フォーマットの HPLC データについては各メーカーで相互利用できる可能性が示された（5 章参照）。

他方、MS データについては、主要なメーカーで利用可能な共通のフォーマットが見つからないことと、及び、異なるメーカーの MS から出力されたデータを用いて再解析できないことが明確になり、いずれのフォーマットも相互利用できないことが判明した¹⁷。

3.3.5. クラウドサービスの利用

従来は、電子データを各施設で確保したサーバーやデータセンターに搭載したファイルサーバーやアプリケーションソフトウェアに格納し、自施設で管理してきた。しかしながら、近年、様々な事業者がインターネットなどのコンピュータネットワークを介して自社のアプリケーションソフトウェア（文書管理システムなど）やインフラストラクチャ（AWS、Azure など）をサービスとして提供されるようになった。このようなサービスをクラウドサービスと言い、そのサービスが搭載された場所をクラウド環境と言い、そのサービスを支える技術をクラウド技術という。これに伴い電子データや電子文書を事業者から提供されたクラウド環境上のアプリケーションソフトウェアに保存する施設が増えてきた。また、施設間でのデータ移行に際して、クラウド環境上の共有サイトを利用することがある。そのため、本ガイダンスにて、クラウドサービスについても説明する。

一般的にクラウドサービスとは、インターネット経由で様々なサービスを提供する事業であり、クラウド事業者は特定のアプリケーションやストレージ以外にも、サーバーや大規模なシステムなど、幅広いサービスを提供している。クラウド事業者側が環境構築や保守／運用を行うため、利用者側はそれらに手間やコストを掛けずにサービスを利用できる。

クラウド事業者はハードウェア（基盤）、ミドルウェア、ソフトウェアの各サービスをインターネット経由で提供する。このサービスの提供範囲によりクラウドサービスは SaaS、PaaS、IaaS の 3 分類に大別される。

クラウドサービスの提供形態は、利用者毎に専用で構築されるプライベートクラウドと複数の利用者が同じ構成を共有するパブリッククラウドがあり、運用形態は単一運用・ハイブリッドクラウド・マルチクラウドなどがある。

ハイブリッドクラウドはパブリック・プライベート・自社内システムを連携させて 1 つの環境を構築することであり、マルチクラウドは各事業者のクラウドサービスを契約し、それらを併用する

¹⁷ 日本 QA 研究会、日本 PDA 製薬学会の協力のもとに行ったユーザーアンケート調査を基に、netCDF を MS の標準フォーマット候補とした。4 社の機器メーカーの MS 装置とアプリケーションを用いて、データの出力/取り込みが実際に可能かどうかを確認したが、相互利用は困難であった。

形態である。

3.3.5.1. クラウド環境上での測定機器データの長期保存

ここではクラウド環境上での測定機器データの長期保存する際の規制要件や配慮事項について考察した。

日本では、長年 GLP 施設でのクラウド環境上での資料の保存は認められてこなかった。しかしながら、2023年6月に OECD 文書 No17 の補遺¹⁸が発行されたことに対応し、第 28 回 GLP 研修会にて医薬品医療機器総合機構 (PMDA) 職員から「PMDA として「GLP 資料の保存」へクラウド技術を利用することは否定しない」との見解が示された¹⁹。

本ガイダンスでは、測定機器データがクラウド環境上に長期保存されることを想定する。そのソフトウェアの維持管理（変更管理を含む）やそこに保存されたデータの管理（セキュリティ対策、バックアップ/リストアを含む）は該当するサービスを提供するプロバイダーが責任を持つ。そのため、該当するクラウドサービスを利用する前にサービスプロバイダーを品質マネジメントシステム、情報セキュリティ・事業継続性、提供されるサービスなどをリスクベースで評価し、利用目的に合ったサービスを選定することが推奨される。このようなサービスでは、オープン環境でのデータの機密性や真正性を確保するための技術的な管理（データの暗号化など）が必要とされるので、確認すべき要件がクローズ環境に比べて多くなることに留意する必要がある。詳細は技術ガイドブック等²⁰を参照すること。

4. 方針

本章では、5章で述べる、推奨する測定機器データの長期保存方法の背景となる考え方を示す。表 1 に、3.3 項で挙げた懸念点に対する対応方針のまとめを示す。

表 1 懸念点に対する対応方針（まとめ）

	懸念点	対応方針
1	再解析時に、解析アルゴリズムは各メーカーで異なるため、解析パラメーターが移行されたとしても、他メーカーのデータを完全に再現することはできない。(3.3.1 項)	4.1 項に示す
2	再解析時に、同一メーカーであっても、ソフトウェアのバージョンの違いにより、元の解析結果と同一の結果が得られるとは限らない。(3.3.1 項)	4.1 項に示す
3	長期保存のためにデータを移行する場合、オリジナルデータとメタデータとのリンクが喪失する。又は、リンクの移行が困難である。(3.3.2 項)	4.2 項に示す
4	長期保存のためにデータを移行する場合、移行先のシステムでのデータ管理水準には制限があり、データインテグリティの維持が困難である。例えば、移行先のシステムで生成したデータ以外には監査証跡が記録されない。(3.3.2 項)	4.3 項に示す

¹⁸ 出典：GLP 原則及び適合性モニタリングに関する OECD シリーズ No.17 Supplement 1 GLP 原則のコンピュータ化システムに対する適用 https://jsqa.com/seikabutsu/open/glp_bukai/oecd-glp17_supplement1/

¹⁹ 出典：第 28 回 GLP 研修会資料 (<https://www.pmda.go.jp/files/000264651.pdf>)

²⁰ 出典：測定機器データの長期保存ガイダンス 技術ガイドブック (JIIMA、2021) を参照

4.1. 解析結果に関する考え方

3.3.1 項で述べたように、測定機器データがあっても、元の解析結果と同一の結果が得られるとは限らない。オリジナルデータを完全に保存できても、解析する時に入手可能なコンピュータ、ソフトウェアにより、微妙な差が含まれることは許容せざるを得ない。しかし、差は小さいことが想定されるので、実質上、試験の目的に大きな影響を与えない場合が多いと考えられる。

従って、データ長期保存時に何をどこまで求めるのかを明確にすることにより、必要以上に要求水準を高めないことが必要である。想定される要求水準としては以下のようなものが考えられる。

- a. 再解析結果が元の解析結果と一致している必要がある。
- b. 再解析することができれば、アルゴリズム変更やその他の理由による解析結果の違いは許容される。
- c. 前回と別の観点から見直すことができれば良い。例えば類縁物質の存在が懸念される部分を拡大してピークを確認する必要があるなど。

4.2. 移行及び長期保存に関する考え方

本ガイダンスは、測定機器データを再解析可能な状態で保存することが期待される期間として、10年から30年を想定している。このため、本ガイダンスでは、以下に示すワークフローを提案する（図3、表2）。該当するワークフローについては技術ガイドブック²⁰及び運用ガイドブック²¹にて詳しく説明する。これにより、測定機器データの測定機器からの独立が図られ、流動化が促進されると共に、解析環境を提供する受託サービスが実現される可能性が生まれる（8章参照）。

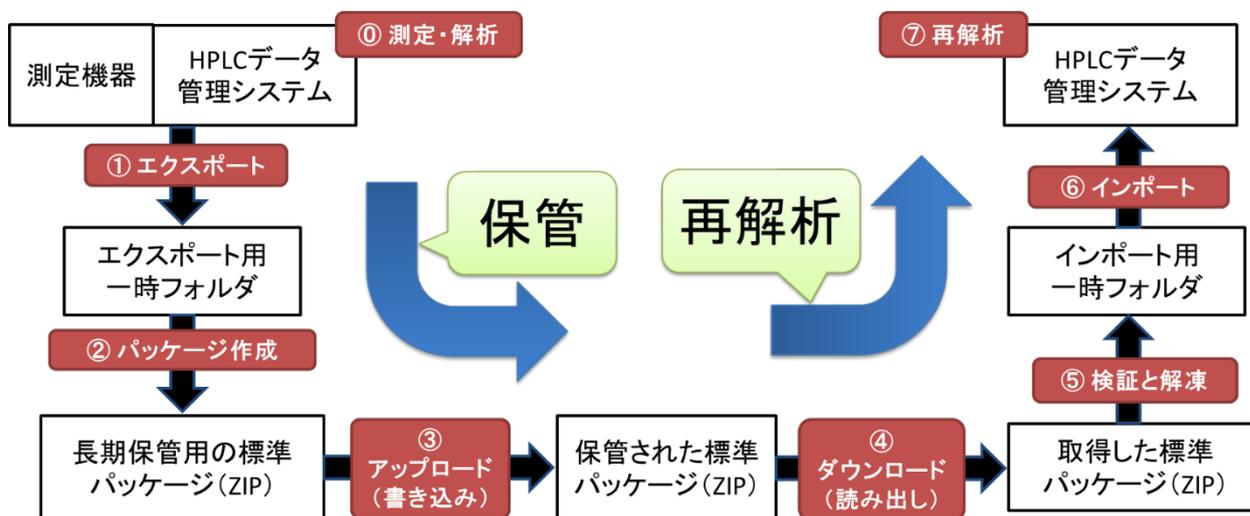


図3 測定機器データのワークフロー

表2 測定機器データの取得から再解析までのワークフロー

ステップ	利用	説明	目的
① 測定・解析	測定ソフト 解析ソフト	測定し、最初の解析を行う。	

²¹ 出典：測定機器データの長期保存ガイダンス 運用ガイドブック（JIIMA、2023）を参照

ステップ	利用	説明	目的
① エクスポート	HPLC データ管理システム	解析に必要なデータ群をエクスポート用フォルダに出力する。	保管
② パッケージ作成	パッケージツール	エクスポート用フォルダ中のファイルと必要に応じて外部から与えられた情報も使ってメタデータを作成し、ZIP で固めて標準パッケージファイルを作成し記録する。 エクスポートから標準パッケージ作成までデータが改ざんされないようにアクセス権の設定や運用を考える。 エクスポート用フォルダは一時領域でありパッケージ作成後に削除する。	
③ アップロード (書き込み)	データ保管サーバー (リライト不可媒体)	標準パッケージファイルをサーバー上にアップロードする。サーバー側では誰がいつアップロードしたか記録する。 アップロードされたファイルが改ざんされないようにアクセス権の設定や運用を考える。 リライト不可媒体に保存しても良い。	
④ ダウンロード (読み出し)	データ保管サーバー (リライト不可媒体)	再解析するデータの標準パッケージを検索してダウンロードする。サーバー側では誰がいつダウンロードしたか記録する。リライト不可媒体からの読み出しの場合もある。	再解析
⑤ 検証と解凍	パッケージツール	標準パッケージファイルの検証を行い、真正性（改ざん等）を確認して、インポート用フォルダに標準パッケージ内データを出力する。	
⑥ インポート	HPLC データ管理システム	インポート用フォルダからデータ群をインポートして記録する。 検証解凍からインポートまでデータが改ざんされないようにアクセス権の設定や運用を考える。 インポート用フォルダは一時領域でありインポート後に削除する。	
⑦ 再解析	解析ソフト	再解析を行う。	

4.3. データインテグリティに関する考え方

データインテグリティは、オリジナルデータ、派生データ、標準フォーマットデータ、分析メタデータ、監査証跡メタデータ、データ処理プロセス、OS/ハードウェアと密接に関係している（図4）。

エクスポートしてパッケージ化した測定機器データには、エクスポート・パッケージ化作業を行う時点までの測定機器データのみが含まれる。

本ガイダンスでは、第三者が所定の条件下でデータインテグリティが確保されていることを確認することを条件に、測定機器データをエクスポートすることを推奨する。エクスポート・パッケージ化作業は、測定・解析終了直後、ソフトウェアバージョンアップ時など、複数のタイミングで実行される。

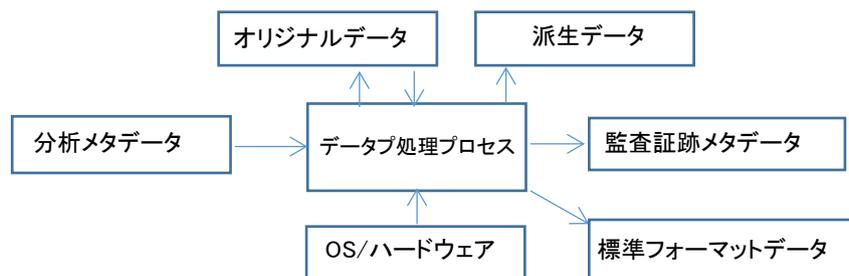


図 4 データインテグリティに係る要素

測定機器データをエクスポートした後は条件付きでデータインテグリティが確保されることになるが、データをエクスポートしてから新たなシステムにインポートするまでのプロセスの適切性を第三者（QA など）が保証すれば、たとえデータのエクスポートやインポートが自動化されていなかったとしてもデータの信頼性を確保できるものと考えられる。

5. 推奨する測定機器データの移行及び長期保存方法

本ガイダンスでは、3.1 項に示した測定機器の標準フォーマットデータを 4.2 項に示す方法でデータ管理システムに移行した後で、必要時に HPLC データ管理システムにて再解析するプロセスをより詳しく紹介している。この際、データを取得した測定機器から、再解析を行う HPLC データ管理システムに移行するまでの間にデータの改ざんを防止するための仕組みを構築することが重要である。そのための方策がデータのパッケージ化である。

5.1. 測定機器データの長期保存方法

測定機器データには様々な種類がある。本ガイダンスでは、測定機器データの代表例としてクロマトグラフデータを、その標準フォーマットの代表例として AIA フォーマットを取り上げて、測定機器データの移行及び長期保存の方法を検討した。また、標準フォーマットがない測定機器データの取り扱いについても検討を行った。

5.1.1. AIA フォーマットデータ（HPLC クロマトグラム）の移行と保存

AIA フォーマットデータはアプリケーション間での相互運用可能性があることが確認できているので²²、どのようなアプリケーションであっても、データの再解析は可能であると推察される。そこで、この項では AIA フォーマットデータを用いたデータの移行と保存について解説する。なお、3.1 項に示したように、測定機器データには測定データ、派生データ及びメタデータが含まれ、再現性の確保のためにはこれらすべてを移行し、保存する必要があることに留意すべきである。

HPLC から出力される AIA フォーマットの中に測定データだけでなく派生データやメタデータがすべて含まれていれば、AIA フォーマットデータのみ移行すれば良いが、実際にはそうではない

²² 日本ウォーターズ株式会社、株式会社島津製作所、株式会社日立ハイテクサイエンスの HPLC において、他社が作成した AIA フォーマットのデータを読み込むことで波形を再現し、自社の解析ソフトにて取り扱えることが確認されている。（株式会社日立ハイテクサイエンスの HPLC は AIA フォーマットの読み込み機能がないため、書き出しのみ確認された。）

(AIA フォーマットの実例を、「付録 1 AIA フォーマットデータの例」に示す)。メタデータの中でも特にサンプルスケジュールは測定対象と測定結果を紐づける重要な情報であるが、これは AIA フォーマットデータと関連付けられない。そこで AIA フォーマットと派生データやメタデータをひとかたまりにしてデータの改ざんができない状態で保存することが重要である。

なお、HPLC 測定の場合には、他の目的のために準備された試料を主目的のために準備された試料と一緒に分析する場合もある。このような状況で一連のデータを保存するときに必要なデータのみ抽出すれば、恣意的な抽出であると疑われるため、測定バッチ単位で保存すべきである。

5.1.2. 標準フォーマットのない測定機器データの移行と保存

適切な標準フォーマットのない測定機器の場合には、標準フォーマットデータの代わりにオリジナルフォーマットのデータを保存する必要がある。オリジナルフォーマットのデータは書き換えが困難であり、作成日時などのメタデータが含まれており、データインテグリティの確保に有用である。したがって、オリジナルデータをそのままパッケージ化して保存することを推奨する。なお、オリジナルフォーマットのデータだけでなく、測定値を利用できるようにするためにテキスト形式の数値として出力したファイルや、見読性の確保のために PDF フォーマットに書き出したファイルを、一緒に保存しておくことによって、有用性を高めることができる。

オリジナルフォーマットのデータは標準フォーマットデータと異なり、解析可能なアプリケーションが限定される。しかしながら、当該フォーマットを解析可能なアプリケーションがあれば、長期保存後にオリジナルデータを再解析に利用できる。

また測定時に用いたソフトウェアを廃棄しても、オリジナルデータが保存されていれば、再解析が必要になった場合に、メーカーにサポートを依頼することができる。なお、今日ではメーカーの合併なども活発なので、サポートを受けられるかどうかには課題がある。

5.1.3. 測定機器データパッケージ

測定機器データパッケージのイメージを図 5、図 6 に示す。

測定機器データパッケージには、オリジナルデータと、測定データの動的な状態を維持して長期間保存できる標準フォーマット (AIA) データが含まれる。そのパッケージに派生データ (解析結果、濃度計算結果、オリジナルデータを人が読める形式で出力したファイル、解析レポート等)、分析メタデータ、監査証跡メタデータなどを加えることによって、測定機器データの真正性を確保する。

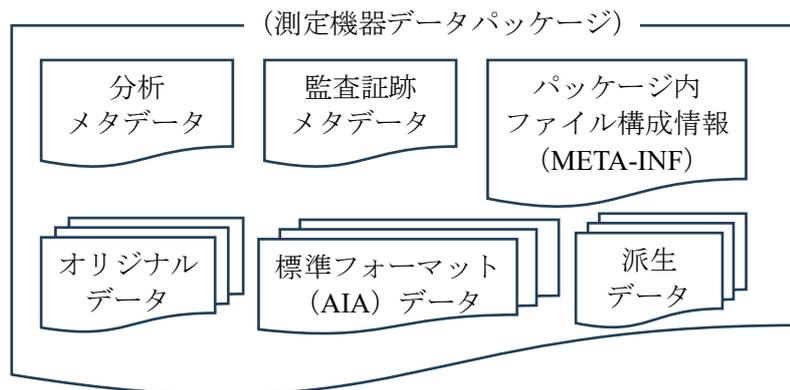


図5 測定機器データのパッケージ化

これら複数のファイルの入れ物（パッケージ）として、ZIP パッケージを利用することが推奨される²³。ZIP パッケージには、オリジナルデータ、AIA データ、派生データ、メタデータに加えて、パッケージ内のファイル構成情報を記述した特別なディレクトリ（META-INF）を格納する。この META-INF は、ディレクトリ名により識別することになる。ZEP パッケージの仕様を定め、技術ガイドブックに示した²⁰。

なお、META-INF は、パッケージの外側で管理することも可能である。この場合は、パッケージのハッシュ値でリンク付けを行う。ハッシュ値の生成には、例えばタイムスタンプあるいは電子署名といった適切な技術を用いる。これらは技術ガイドブック²⁰で解説する。

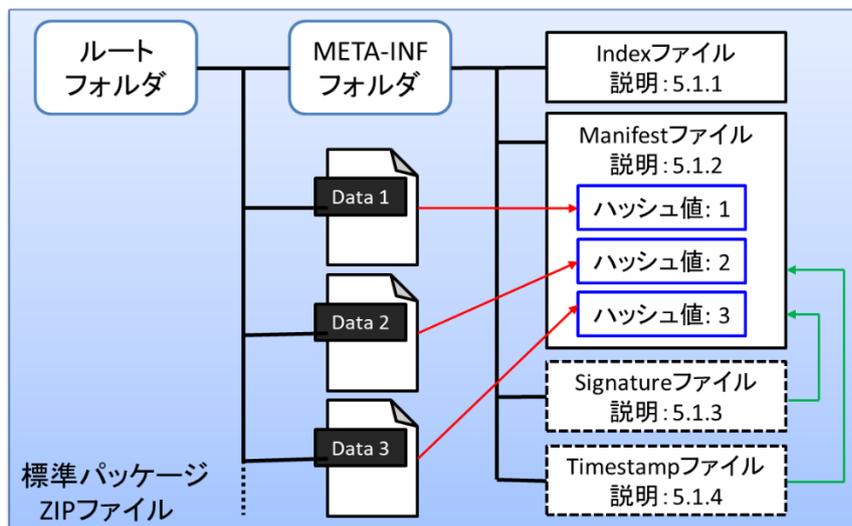


図6 測定機器データパッケージの構造例（技術ガイドブック²⁰参照）

²³ そのほかのパッケージ候補として、ZIP ベースの目的別パッケージ、PDF、XML 構造体が挙げられる。ZIP ベースの目的別パッケージは、既に様々な形式が存在する（例えば、office 文書の OPC、電子図書の EPUB、欧州で標準化が進められている ASiC（Associated Signature Container, ETSI TS 102 918）など）。これらは、パッケージ内の META-INF の定義が違うだけとみなすこともできる。将来的には、測定機器データ専用の META-INF を定義することも候補となる（この場合はそれに対応する新たな拡張子を登録することになる）。

タイムスタンプを用いる場合は、タイムスタンプ局の証明書の有効期間満了後の有効性保証の方法を確立する必要がある。その方法の一つとして、新聞や雑誌等に公告し、見読性確保のために国立国会図書館を利用することが考えられる。

再解析を行う場合は、パッケージ化されたデータを直接操作するのではなく、データをコピーし、このコピーを使って再解析を行うことで、オリジナルデータの誤消去や、誤って上書きしてしまう危険性を排除することができる。

5.2. 測定機器データの長期保存プロセスの信頼性確保

測定データの長期保存プロセスでは、システム（測定機器、ツール、電子文書管理システムなど）により実行される部分と作業員により実行される部分が混在する。例えば、①エクスポートにおいて、データのエクスポート自体はシステムが実行するが、データの選択は作業員が行う。また、②パッケージ化において、標準パッケージの作成自体パッケージ化ツールにより行われるが、データの集積及び階層構造作成は、作業員が行う。

システムにより実行されるプロセスは、コンピュータ化システムバリデーション等によって保証される。これに対し、人の手が介在するプロセスにおいては、データの選択ミス、システムの操作ミスや測定機器データの改ざんが発生しうる。このミス又は改ざんのリスクを下げるために、作業記録の作成と第三者によるチェックで保証することが必要である。さらに、実施すべき記録、記録すべき事項やチェック項目などを明確にするために、事前に保存対象のデータ・保存期間等を指定した計画書やテンプレートなどを作成することが望ましい。

データを長期保存するにあたっては、各組織内での運用を踏まえて、標準操作手順書（SOP）、保存操作の記録書、第三者（QA など）の確認記録などを作成することが望ましい。加えて、データを保存する媒体（メディア、サーバーなど）の適格性確認も必要である。詳細は、運用ガイドブックを参照のこと²¹。

表 3 各プロセスの信頼性保証の方法

ステップ	システムの性能保証	作業員によって実行される作業例
① 測定・解析		
① エクスポート	測定機器のバリデーション エクスポート可能データの確認	エクスポートされる情報の確認 エクスポートするデータの選択 エクスポートの実行
② パッケージ作成	ツールのバリデーション	エクスポートするデータの選択 エクスポートの実行
③ アップロード (書き込み)	アップロードのバリデーション アップロード場所の適格性確認	標準パッケージの選択 アップロード場所の選択 アップロードの実行
④ ダウンロード (読み出し)	ダウンロードのバリデーション	標準パッケージの選択 ダウンロード場所の選択 ダウンロードの実行
⑤ 検証と解凍	検証と解凍のバリデーション	解凍の実行 データの検証、改ざん確認

ステップ	システムの性能保証	作業者によって実行される作業例
⑥ インポート	測定機器のバリデーション	インポートする機器の選択 インポートするデータの選択 インポートの実行
⑦ 再解析		

5.3. パッケージに格納すべき測定機器データの例

データ保存に対する要件は、利用目的や利用状況、及び要求される信頼性のレベルや保存期間によって異なる。利用目的には、再解析のみできる、適合性書面調査で調査の対象となる、GxP 規制への準拠が求められるなどが含まれる。目的に応じてパッケージに格納すべき測定機器データの例を、適切な標準フォーマットがある場合（5.3.1 項、表 4）と、標準フォーマットが無い場合（5.3.2 項、表 5）に分けて示す。（目的についての詳細説明は「付録 2 測定機器データの利用目的に関する解説」を参照）

5.3.1. 適切な標準フォーマットがある場合

AIA フォーマットのような相互運用可能な適切な標準フォーマットがある場合のパッケージに格納すべき測定機器データの一例を表 4 に示す。（詳細説明は「付録 2 測定機器データの利用目的に関する解説」を参照）

表 4 利用目的ごとの測定機器データの選択の例（標準フォーマットがある場合）

測定機器データ		再解析のみ	適合性書面調査	GxP 規制準拠
オリジナルデータ（機器固有フォーマットのデータ）		○	○	○
標準フォーマット（AIA）データ		○	○	○
派生データ	オリジナルデータを使って解析された結果（ピーク面積等）など	—	○	○
	計算結果（濃度等）など	—	○	○
	解析条件を含むレポート	○	○	○
分析メタデータ	サンプルスケジュール	○	○	○
	装置パラメーター	○	○	○
	解析パラメーター	○	○	○
監査証跡メタデータ	オリジナルデータに関連するもの	—	○	○
	解析結果関連	—	—	○
	システム関連	—	—	—

○：格納する —：格納不要

5.3.2. 適切なフォーマットがない場合

適切な標準フォーマットがない場合に、パッケージに格納すべき測定機器データの一例を表 5 に示す。なお、測定時点での測定結果を再利用したり、閲覧したりするために、AIA フォーマットデータの代わりにテキスト形式の数値データとして出力したファイルや、PDF などの汎用フォーマットに書き出したファイルを一緒に保存しておくことで有用性を高めることができる。

表 5 利用目的ごとの測定機器データの選択の例(適切なフォーマットがない場合)

測定機器データ		再解析のみ	適合性 書面調査	GxP 規制 準拠
オリジナルデータ (機器固有フォーマットのデータ)		○	○	○
テキスト形式の数値 / PDF などの汎用フォーマットにエクスポートしたデータ		○	○	○
派生データ	オリジナルデータを使って解析された結果 (ピーク面積等) など	—	○	○
	計算結果 (濃度等) など	—	○	○
	解析条件を含むレポート	○	○	○
分析メタデータ	サンプルスケジュール	○	○	○
	装置パラメーター	○	○	○
	解析パラメーター	○	○	○
監査証跡メタデータ	オリジナルデータに関連するもの	—	○	○
	解析結果関連	—	—	○
	システム関連	—	—	—

6. 施設間のデータ移行

試験を外部委託した際、試験終了後試験関係資料の取り扱いが問題になる。紙資料の場合には受託試験施設 (CRO) からスポンサーに移管することは容易であるが、測定機器データのような電子記録の場合には試験終了後の長期保存に際し様々な課題が存在する。CRO における測定機器データの長期保存方法を図 7 にまとめた。

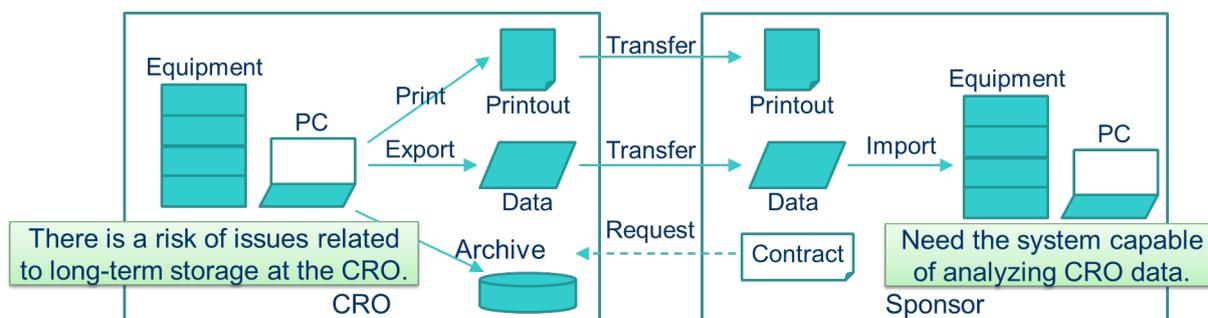


図 7 CRO における測定機器データの長期保存⁶

その方法の一つは、測定機器データを印刷して、印刷物のみ移管することである (図 7 の上のフロー)。この方法であれば、測定結果の返却は容易であるが、データインテグリティが確保されず、再解析に利用できないという課題がある。

そのため、測定機器データのデータインテグリティを確保し、再解析を可能にするために CRO に継続して保存するように契約している施設が多い (図 7 の下のフロー)。この方法であればデータインテグリティが確保され、再解析は可能であるが、以下のような課題が想定される。

- 時間経過と共に、契約時点での職員が退職して、問い合わせ先が不明確になる。
- CRO の統合や解散などにより、CRO に保存された資料 (測定機器データを含む) が適切に

維持されない危険性がある。

- CROも長期保存の課題（3.3.1項と3.3.2項参照）に直面する。

上記の課題を解決するために、測定機器データをCROからスポンサーに移管することも考慮する必要がある（図7の真ん中のフロー）。5章に示した方法を転用することにより、この移管プロセスの信頼性の信頼性を確保することが可能である。少なくとも、HPLCデータについてはこの手法で返却された測定結果を再解析などに利用可能になる。その他の測定機器データについてもスポンサーが適切な解析アプリケーションを持っていれば、再解析などに利用可能である。

7. 今後の課題

5章で推奨する方法を実現するためには、以下のような技術の開発が期待される。

7.1. 各種測定機器データの標準化

5.1項にて示した、推奨する測定機器データの長期保存方法は、他のメーカーの測定機器のデータをインポートし、活用するのに適用できることが望ましい。このためにメーカーが互換性のあるデータフォーマットを提供する必要がある。現状では、3.3.4項で示されたものを含む標準データフォーマットがない測定機器が多い。

新しい技術と共に、新しいデータフォーマットが開発される。これらのデータフォーマットについては、機種に依存しないソフトウェアの提供、既存機器と互換のある形での出力、フォーマット定義の開示などが期待される。

7.2. データパッケージ技術の開発

5章にて示した、推奨する測定機器データの長期保存方法を確実なものにするためには、以下の技術の開発が期待される。本委員会の技術ガイドブック²⁰の仕様に基づいた、パッケージ化ツールが既にオープンソースで提供されているので、これを活かした製品開発も可能である。

- a. 測定機器データを自動的にパッケージ化する技術
- b. パッケージ化されたデータを取り込み利用するための技術

8. 将来の展望

測定機器の高精度化と、1回の測定で取得する電子データの容量の増大が電子データの保存容量の増加をもたらしている。また、保存しているがほとんど活用されない電子データで、ストレージ（データ保存サーバー、データ管理システム等）の記録容量が占領されている事態が生じている。これらの結果、製薬業界では、電子データの保存に関するコストの増大が問題となりつつある。

製薬業界では、どの企業でも電子データの保存と管理について頭を悩ませており、電子データの保存と管理を受託するサービスのニーズがある（4.2項参照）。更に、全てのメーカーの解析ソフトウェアの保存と管理を行い、どのメーカーの測定機器データも解析可能な環境を提供するサービスがあれば、製薬業界の多くの企業にとって有用であろう。

また、企業買収や関連する組織の提携などで、測定機器データの授受や、システム間でのデータ移行を行う必要も出てきている。古いバージョンのOSや解析ソフトウェアを仮想環境上で保持す

るサービスが可能であれば、企業が過去の測定機器データを新しいシステムに移行するなどの問題に頭を悩ませる必要もなくなる。

上記の対応は技術上可能と思われるが、そのようなサービスがビジネスとして提供されるためには、それを必要とする企業の数やその企業が支払うサービス対価がビジネスとして十分成り立つ規模である必要がある。ニーズの調査などを通じた実現可能性の調査を含めて今後の課題である。

また、規制当局に対しても業界の現状を伝え、技術としての限界や運用面での限界を議論していく必要があるだろう。その限界に応じ、市場での商品サイクル（一般に医薬品と医療機器では大きく異なる）や保存データの重要度（医薬品や医療機器の機能や安全性に直接関係づけられるデータか否か）によって、求めるべきデータの保存期間を柔軟に見直すことも考えるべきであろう。

メーカーに対しては、ユーザー側から業界の現状を伝え、データフォーマットの必要性を議論していく必要がある。この点においても、規制側からの支援も必要と思われる。

また、イノベーションのためのデータマイニングには、データ共通基盤が必須であるが、そこに用いられるデータは信頼できる数値でなければならない。誤りを含むデータを解析に用いれば、誤った結論を導き出してしまう。この問題を防ぐためにも、標準フォーマットの有無にかかわらず、後日の検証にも耐えられるように、オリジナルデータと、そこから出力された数値データを、信頼性を予め確保した状態でパッケージ化しておくことは有用である。

9. 用語集

表 6 に、本ガイドンスで使用している用語の説明を示す。

表 6 用語の説明

用語	説明
アルゴリズム	明確に定義された有限個の規則の集まりであって有限回適用することにより問題を解くもの
解析パラメーター	ピーク波形の処理方法などの解析条件を設定した値であり、分析メタデータの一部である。HPLC の場合、ベースラインの設定方法、ノイズ除去方法が含まれる。
監査証跡	電子記録の作成、変更又は削除に関連する事象の過程の再構築を可能にする、安全でコンピュータで生成された、タイムスタンプ付き電子記録。 オリジナルデータ生成のログ、解析の監査証跡、システムに関する監査証跡などがある。
QA	Quality Assurance、品質を保証するための確認作業
高速液体クロマトグラフィー (HPLC)	液体を加圧しカラムを通過させ、固定相・移動相との相互作用を利用して液体の混合物から成分（分析種）を分離・検出する分析方法
コンピュータ化システムバリデーション	電子データ処理システムが要求される仕様について、システムの設計から廃棄まで又は新システムへの移行まで常に満たすことを検証し、文書化（記録化）する過程。(ICH E6) 000230974.pdf
サンプルスケジュール	サンプルの注入の順番や注入量などを定義するインジェクションのスケジュールであり、分析メタデータの一部である。
質量分析装置 (MS)	分子や原子をイオン化してその質量（実際に測定するのは m/z ）やイオン量（イオンを検出する時の電流量）を解析することで、試料に含まれている物質の定性・定量を行う装置全般
ZIP	複数のファイルを一つのファイルとしてまとめて取り扱うアーカイブ用ファイル形式の一つ。基本的に zip を拡張子とするが、docx など拡張子が zip ではないファイルもある。
装置パラメーター	測定機器の動作条件などの測定条件を設定する値であり、分析メタデータの一部である。HPLC の場合には、検出波長、流速などが含まれる。、、
タイムスタンプ	<ul style="list-style-type: none"> ・コンピュータが自動的に刻印する日時 (ERES 指針 24) ・変更を検知できる情報を付与しその時刻以降に変更があったかどうかを証明する技術 25
データインテグリティ	データの完全性 (completeness)、整合性 (consistency) 及び正確さ (accuracy)
電子署名	電磁的記録に対し、手書き署名又は捺印と同等のものとして行われる署名で、個人又は法人が作成、採用、確認、承認する一連の記号を電子化して構成したデータ (ERES 指針 15)
パッケージ内ファイル構成情報	パッケージ内のファイル構成情報を記述した特別なファイル
ハッシュ値	ハッシュ関数により生成されたメッセージダイジェスト

24 出典：薬食発 第 0401022 号平成 17 年 4 月 1 日 医薬品等の承認又は許可等に係る申請等における電磁的記録及び電子署名の利用について (ERES 指針)

25 タイムビジネス協議会 (<https://www.dekyo.or.jp/tbf/index.html>) タイムビジネス用語集

用語	説明
バリデーション	特定の工程、方法又はシステムが、一貫して、予め設定した判定基準に適合する結果を与えるという高度の保証を提供する文書によるプログラム。(ICH Q7) 000156438.pdf
PDF	Portable Document Format、ISO 32000として規定された、文字、イメージ、グラフィックを含む文書の交換用ファイル形式
ビット	コンピュータが扱うデータの最小単位

10. 改訂履歴

日付	版番号	改訂内容
2025.03.31	3.0	適切な標準フォーマットのない測定機器（MSを含む）のデータの長期保存方法について考察するとともに、技術ガイドブックや運用ガイドブックの発行に伴う変更やクラウドサービスの利用などに関する動向を反映した。
2020.01.31	2.1	英訳作成に伴い、内容を見直し
2019.04.18	2.0	タイトルをガイドライン（案）からガイダンスに変更 募集したコメントの内容を反映
2018.11.28	1.0	

付録 1 AIA フォーマットデータの例

```
netcdf demodata {
dimensions:
    _2_byte_string = 2 ;
    _4_byte_string = 4 ;
    _8_byte_string = 8 ;
    _12_byte_string = 12 ;
    _16_byte_string = 16 ;
    _32_byte_string = 32 ;
    _64_byte_string = 64 ;
    _128_byte_string = 128 ;
    _255_byte_string = 255 ;
    point_number = 1201 ;
    peak_number = 4 ;
    error_number = 1 ;
variables:
    float detector_maximum_value ;
    float detector_minimum_value ;
    float actual_run_time_length ;
    float actual_sampling_interval ;
    float actual_delay_time ;
    float ordinate_values(point_number) ;
    ordinate_values:uniform_sampling_flag = "Y" ;
    ordinate_values:autosampler_position = "" ;
    float peak_retention_time(peak_number) ;
    float peak_amount(peak_number) ;
    float peak_start_time(peak_number) ;
    float peak_end_time(peak_number) ;
    float peak_width(peak_number) ;
    float peak_area(peak_number) ;
    float peak_area_percent(peak_number) ;
    float peak_height(peak_number) ;
    float peak_height_percent(peak_number) ;
    float baseline_start_time(peak_number) ;
    float baseline_start_value(peak_number) ;
    float baseline_stop_time(peak_number) ;
    float baseline_stop_value(peak_number) ;
```

```

float retention_index(peak_number);
float migration_time(peak_number);
float peak_asymmetry(peak_number);
float peak_efficiency(peak_number);
float mass_on_column(peak_number);
char peak_name(peak_number, _128_byte_string);
char peak_amount_unit(peak_number, _128_byte_string);
char peak_start_detection_code(peak_number, _128_byte_string);
char peak_stop_detection_code(peak_number, _128_byte_string);
char manually_reintegrated_peaks(peak_number, _128_byte_string);

// global attributes:
:dataset_completeness = "C1+C2";
:aia_template_revision = "1.0.1";
:netcdf_revision = "VERSION of Aug 26 2015 17:18:35 $";
:languages = "English";
:administrative_comments = "";
:dataset_origin = "Supplier";
:dataset_owner = "";
:dataset_date_time_stamp = "20030116164231+0900";
:injection_date_time_stamp = "20030116164231+0900";
:experiment_title = "";
:operator_name = "Operator";
:separation_experiment_type = "";
:company_method_name = "";
:company_method_id = "";
:pre_experiment_program_name = "";
:post_experiment_program_name = "";
:source_file_reference =
"C:¥¥Data¥¥Project1¥¥Demo_Data-001.dat";
:sample_id_comments = "This is comment." ;// データファイルコメント
:sample_id = "1" ;// サンプル ID
:sample_name = "STD" ;// サンプル名
:sample_type = "Standard" ;// サンプルタイプ
:sample_injection_volume = 10.f;
:sample_amount = 1.f;
:detection_method_table_name = "";
:detection_method_comments = "This is comment." ;// データファイルコメント

```

```

:detection_method_name =
"C:¥¥Sample¥¥LC¥¥Demo_Method.met";
:detector_name = "検出器 A";
:detector_unit = "Volts"; // 検出器の単位
:raw_data_table_name =
"C:¥¥Data¥¥Project1¥¥Demo_Data-001.dat";
:retention_unit = "Seconds"; // 時間の単位
:peak_processing_results_table_name = "";
:peak_processing_results_comments = "This is comment." ;// データファイルコメント
:peak_processing_method_name =
"C:¥¥Sample¥¥LC¥¥Demo_Method.met";
:peak_processing_date_time_stamp = "";
data:
detector_maximum_value = 0.01606795 ;
detector_minimum_value = -0.002146373 ;
actual_run_time_length = 600 ;
actual_sampling_interval = 0.5 ;
actual_delay_time = 0 ;
ordinate_values = -3.786087e-006 , -3.786087e-006 , 6.341934e-007 ,
2.627373e-006 , 4.763603e-006 , 6.165505e-006 , 7.691383e-006 ,
.....
5.438328e-005 , 5.547047e-005 , 5.688667e-005 , 5.883217e-005 ,
6.048202e-005 , 6.172657e-005 , 6.249905e-005 , 6.396294e-005 ,
6.585121e-005 , 6.725788e-005 , 6.734371e-005 , 6.756782e-005 ,
6.769657e-005 , 6.738186e-005 , 6.752014e-005 , 6.912708e-005 ,
7.059574e-005 ;
peak_retention_time = 159.271 , 194.451 , 237.258 , 278.901 ;
peak_amount = 1 , 1 , 1 , 1 ;
peak_start_time = 151.5 , 180.5 , 229.5 , 271.5 ;
peak_end_time = 169.5 , 204 , 246 , 287.5 ;
peak_width = 18 , 23.5 , 16.5 , 16 ;
peak_area = 73509.84 , 83363.7 , 53565.35 , 57335.54 ;
peak_area_percent = 27.45215 , 31.13206 , 20.00391 , 21.41188 ;
peak_height = 13039.91 , 15250.72 , 11457.2 , 13248.39 ;
peak_height_percent = 24.60536 , 28.77699 , 21.6189 , 24.99875 ;
baseline_start_time = 151.5 , 180.5 , 229.5 , 271.5 ;
baseline_start_value = 4.217148e-005 , 0.0005049753 , 0.00154314 , 0.002390246 ;
baseline_stop_time = 169.5 , 204 , 246 , 287.5 ;

```

```
baseline_stop_value = 0.0003286457 , 0.001030946 , 0.00189703 , 0.0025459 ;
retention_index = 0 , 0 , 0 , 0 ;
migration_time = 0 , 0 , 0 , 0 ;
peak_asymmetry = 1.193704 , 1.139562 , 1.168244 , 1.165645 ;
peak_efficiency = 4246.021 , 6958.823 , 12828.54 , 20710.6 ;
mass_on_column = 0 , 0 , 0 , 0 ;
peak_name =
"Methyl paraben", "Ethyl paraben", "Propyl paraben", "Butyl paraben" ;
peak_amount_unit = "", "", "", "" ;
peak_start_detection_code = " ", " ", " ", " " ;
peak_stop_detection_code = " ", " ", " ", " " ;
manually_reintegrated_peaks = "", "", "", "" ;
}
```

付録2 測定機器データの利用目的に関する解説

本ガイダンスの表4と表5に利用目的ごとの測定機器データの選択例を提供しているが、実際の運用においては各企業が状況に応じて判断していただきたい。

ここでは参考のため表4の区分の根拠を述べる。

表4 (再掲) 利用目的ごとの測定機器データの選択の例(標準フォーマットがある場合)

測定機器データ		再解析のみ	適合性 書面調査	GxP 規制 準拠
オリジナルデータ (機器固有フォーマットのデータ)		○	○	○
標準フォーマット (AIA) データ		○	○	○
派生データ	オリジナルデータを使って解析された結果 (ピーク面積等) など	—	○	○
	計算結果 (濃度等) など	—	○	○
分析メタデータ	サンプルスケジュール	○	○	○
	装置パラメーター	○	○	○
	解析パラメーター	○	○	○
監査証跡メタデータ	オリジナルデータに関連するもの	—	○	○
	解析結果関連	—	—	○
	システム関連	—	—	—

○：格納する —：格納不要

再解析のみ

企業が測定機器データを長期間保存する目的の一つは、後日必要に応じて、再解析を行えるようにしておくためである。再解析に必要な要件を以下のように設定し、表4に反映した。

- ・ 再解析に使うソフトウェアに電子データが取り込めることが必須である。オリジナルデータが取り込めない可能性があるため、標準フォーマットデータも併せて保存しておく。
- ・ サンプルの特定や測定条件の情報源として分析メタデータを保存しておく。
- ・ パッケージにタイムスタンプを付与し、再解析をするまでに変更されていないことの証明とする。

適合性書面調査

新薬承認申請時に薬理試験、薬物動態試験・臨床薬物動態試験、品質試験などは、適合性書面調査において「申請資料の信頼性の基準 (医薬品医療機器法施行規則第43条、第61条、第114条の22、第114条の42、第137条の25又は第137条の42)」に従って収集され、かつ作成されているものであるかどうかを調査される。上記基準に則って行われた試験の資料を保存することは当然のことであるが、長期保存方法や考え方には施設によって違いがある。ここでは以下の考えをもとに表2の要件を設定した。

- ・ QA/QCなどの社内監査部門の確認が終了したあと、オリジナルデータ、派生データ、分析

メタデータ、オリジナルデータに関する監査証跡メタデータは、そのままの状態パッケージに格納する。

- これに加えて長期保存後でも波形などの動的データの再現が可能となるよう、標準フォーマットデータもパッケージに格納する。
- パッケージにタイムスタンプを付与し、社内監査後の変更がないことの証明とする。

GxP 規制準拠

GxP 規制に則って試験資料を保存することは当然のことであるが、長期保存方法や考え方には施設によって違いがある。ここでは以下の考えをもとに表 4 の要件を設定した。

- QA/QC などの社内監査部門の確認が終了したあと、オリジナルデータ、派生データ、分析メタデータ、オリジナルデータと解析結果に関する監査証跡メタデータは、そのままの状態パッケージに格納する。
- これに加えて長期保存後でも波形などの動的データの再現が可能となるよう、標準フォーマットデータもパッケージに格納する。
- パッケージにタイムスタンプを付与し、社内監査後の変更がないことの証明とする。

また、以下の理由により、ログインやログアウトなどのシステムの監査証跡はパッケージに含めないこととした。

- 本ガイダンスで提案しているパッケージは測定バッチ単位に作成するものであるが、システムの監査証跡は測定バッチ単位ではなくシステムの使用期間全体で管理するものであるため。
- システムの監査証跡はパッケージ化されたデータ以外に関する不適切な活動の検知に用いるものであるため。

(GxP 施設では、データ以外に関する不適切な活動は、QA/QC などの社内監査部門による定期的な監査等で確認している。)

以上

R & Dデータ保存委員会 ガイダンス作成メンバー（敬称略）

委員会メンバー	
上原 小百合	アステラス製薬（株）
岡田 泰	リコージャパン（株）
荻本 浩三	（個人）
木村 道弘	（公社）日本文書情報マネジメント協会
春山 義公	ビジネスエンジニアリング（株）
平石 嘉昭	テルモ（株）
三浦 淳平	ビジネスエンジニアリング（株）
宮地 直人	（有）ラング・エッジ
守野 智	エーザイ（株）
山崎 晃	協和キリン（株）
山田 宜昭	（株）日立ハイテクサイエンス
協力メンバー（一般社団法人日本QA研究会所属）	
石黒 尋保	リードケミカル（株）
大竹 昭良	アステラス製薬（株）
正木 良和	（株）大塚製薬工場

公益社団法人 日本文書情報マネジメント協会

〒101-0041 東京都千代田区神田須田町 2-19 ライダースビル 7 階

TEL 03-5244-4781 FAX 03-5244-4782

<http://www.jiima.or.jp>

法人番号 6010005003693