

研究課題別中間評価結果

1. 研究課題名： システムバイオロジーのためのモデリング・シミュレーション環境の構築

2. 研究代表者名： 富田 勝（慶應義塾大学先端生命科学研究所 所長/環境情報学部 教授）

3. 研究概要

生物や細胞をシステムとしてとらえてその全体のしくみや振る舞いを理解する新しい学問分野は「システムバイオロジー」と呼ばれ、コンピュータシミュレーションが不可欠である。大規模化する細胞モデリングに対応した新しい統合環境ソフトウェアの開発を主目的として、細胞シミュレーション統合環境(E-Cell IDE)の開発、E-Cellシステムの改良、アルゴリズムモジュール群の開発、物理シミュレーションとの連成も視野に入れた計算アルゴリズムの研究を実施している。これまでにE-Cell IDEの基本的な機能の開発を完了し、実際にユーザが研究に使えるレベルであるベータバージョンをリリースする段階となった。

4. 中間評価結果

4-1. 研究の進捗状況と今後の見込み

本研究の実用的なモデリング環境とシミュレータを統合したソフトウェアプラットフォームは、システムバイオロジーのための汎用的なソフトウェアとしてユーザに提供するものであり、研究競争の激しい分野ではあるが世界の最先端をいく研究である。本研究では統合環境システムの開発、シミュレータの改良を進めており、使いやすく拡張のしやすいシステムにする努力が払われている。シミュレーションのエンジン部分についての主な開発としては、結合・乖離反応経路の組み合わせ論的な爆発を抑える手法を、米国のMSIの協力を得て進めており、E-Cell IDEソフトウェアの β バージョンのリリースなど計画通りに進捗している。

本ソフトウェアは多岐にわたる機能をもっているシステムであるが、研究体制は比較的少数精鋭であり、鶴岡と藤沢の2拠点の体制で効率的な開発を行っている。

研究予算は主にシステムソフトウェア開発の外注費の執行が多いが、システムの維持管理、整備と拡張、具体的な研究事例への適用などが計画されており妥当である。

4-2. 研究成果の現状と今後の見込み

このような統合シミュレーションシステムの構築という作業そのものも高く評価されるが、適用研究が進むにつれて本システムの信頼度の向上が図れる。本研究ではソフトウェアの無償公開を目指しており、その成果がシステムバイオロジー分野で利用できることはインパクトの高いものと判断できる。

4-3. 今後の研究に向けて

研究計画の後半に入るが、実際に細胞シミュレーションやシステムバイオロジー研究を行っているユーザを巻き込んだソフトウェアのブラッシュアップ、機能追加を進めてほしい。今年度リリースの β バージョンによりユーザからの様々なフィードバックがあることが想定されるが、それらを適切に整理し、より実用的なソフトウェアとしてブラッシュアップされることを期待する。本研究プロジェクトのシミュレータを使用することで、これまで実験生物学の研究において研究者個人の頭の中でイメージしていた仮説に対して、具体的な細胞モデルとしてモデリングしシミュレーションが可能となり仮説の確認・検討ができるであろう。

4-4. 戦略目標に向けての展望

これまでまったく異なるスケールで捉えられシミュレーション研究がなされていた物理シミュレーションと生化学

反応シミュレーションを組み合わせたシミュレーションコアエンジンの開発を目指している。このことは当領域の戦略達成目標であるマルチスケール・マルチフィジックスシミュレーション技術の確立という方針に沿うものであり更なる展開を期待する。

4-5. 総合的評価

ワークショップの開催、 α バージョンのリリースそして一般公開可能な状態である β バージョンのリリースなど着実に研究成果を出している。またシミュレーションエンジン、アルゴリズムの開発についても複合体形成経路の効率的なモデリングシミュレーション法の組み込みを行い、結合／乖離反応経路の組み合わせ論的な爆発により起こる問題を解決している。

これまでにモデルエディタ、シミュレータ、デバッガ(静的デバッグのみ)と統合環境アプリケーションの主要な機能とそれらを組み合わせるフレームワークを開発しているが、今後デバッガ(動的デバッグ)や現在の機能のブラッシュアップと付加価値となる拡充を着実に行ってほしい。特に統合環境ソフトウェア(E-Cell IDE)を使用して実際にシステムバイオロジー研究を行うユーザを巻き込んだ開発を行い、実際の研究に適用可能なレベルへソフトウェアの完成度を高めることが必要である。