

質問回答書

国立研究開発法人理化学研究所 神戸事業所
 契約担当役 研究支援部長
 (公印省略)

件名 : ヒト薬物動態モデル(PBPKシミュレータ)の改良

番号	質問事項	回答
1	昨年度実施された「ヒト薬物動態モデル(PBPKシミュレータ)の構築」についてお聞きます。	
1-1	昨年度中に設計、実装されたのでしょうか？	はい、昨年度に設計、実装されたものになります。
1-2	言語はC/C++でしょうか。	はい、言語はC/C++です。
1-3	ソースコードのおおよその行数をお教えてください。	2,000行程度です(サンプルの入力ファイルを含む)。
1-4	事前に入手することは可能でしょうか？	ソースコードのお渡しはできませんが、弊所にて閲覧いただくことは可能です。閲覧が必要な場合には、別途申請をお願いいたします。
1-5	ソースコード以外に存在する文書には何がありますでしょうか？例えば、理論説明書、プログラム説明書、使用説明書などはありますか？	ソースコード以外には、環境構築手引、システムテスト結果報告書、操作マニュアル、調査報告書、ベンチマーク報告書がございます。
1-6	グラフィカルなユーザーインターフェイス(GUI)はあるのでしょうか？それともコマンドラインのみで実行するのでしょうか。	コマンドラインのみで実行します。
2	仕様書7.1:調査についてお聞きます。	
2-1	「時間刻み幅を自動制御するための調査」というのは、以下のどちらの意味に近いでしょうか。 ・現在のプログラムの動作をさまざまにテストして調査する。つまり、「設計」に近い意味でしょうか。 ・それとも、本手法に特有な自動制御法などがあり、それらのアルゴリズムや使用例を文献なので調査するという意味でしょうか？	まず、適切な自動制御法を文献などから調査(列挙)いただき、それらの独自の実装、または既存のソフトウェアでテストを行い、その結果を、それぞれの手法の特徴がわかるように報告していただくことを想定しています。そのため、回答としては、「両方」となります。最終的な実装に既存のソフトウェアを組み込む場合は、発注者が継続して使用し、また改良することが可能なライセンスを想定しています。

2-2	「個人の薬物濃度の時系列推移データより、薬物動態パラメータをあてはめ計算するアルゴリズム」というのは、別の表現でいうと、「個人の薬物濃度の時系列推移データから、薬物動態パラメータを推論するアルゴリズム」のことでしょうか？	はい、その通りです。
2-3	「個人の薬物濃度の時系列推移データより、薬物動態パラメータをあてはめ計算するアルゴリズムの調査」というのは、以下のどちらの意味に近いでしょうか？ <ul style="list-style-type: none"> ・既存のプログラムの動作や実装内容を確認し、かつ適切なアルゴリズムを調査し、実際に実装できるように設計するという意味でしょうか？ ・それとも、本アルゴリズムそのものやその使用例などを文献などで調査するという意味でしょうか？ 	まず、アルゴリズムを文献などで調査(列挙)いただき、それらを独自の実装、または既存のソフトウェアでテストし、その結果をそれぞれの特徴がわかるように報告していただくことを想定しています。回答としては、「両方」となります。
2-4	「個人の薬物濃度の時系列推移データ」は、貸与いただけるのでしょうか？ そうではなくて、データの収集についても作業に含まれるのでしょうか？ 後者の場合には何らかの参考となる情報などはいただけるのでしょうか？	手法の検証用のデータについては、データの収集も作業に含まれます。参考となる情報は可能な限り提供できますが、発注者以外の専門家によるアドバイスを受けることも必要になる可能性があります。
2-5	「マルコフ連鎖モンテカルロシミュレーションソフトの調査および、薬物動態モデル(PBPKシミュレータ)との連携方法の調査」とありますが、以下のどちらの意味に近いのでしょうか？ <ul style="list-style-type: none"> ・マルコフ連鎖モンテカルロシミュレーションソフトとして既存のソフトをどのように連携させるかを調査するという意味でしょうか？ ・それとも、今回の目的のためのマルコフ連鎖モンテカルロシミュレーションを設計して、既存のソフトに組み込むという意味でしょうか？ 	いずれでも構いません。まず、アルゴリズムを文献などで調査(列挙)いただき、それらを独自の実装、または既存のソフトウェアでテストし、その結果をそれぞれの特徴がわかるように報告していただくことを想定しています。最終的な実装に既存のソフトウェアを組み込む場合は、発注者が継続して使用し、また改良することが可能なライセンスを想定しています。
3	仕様書7.2:薬物動態モデル(PBPKシミュレータ)プロトタイプ改良および計算精度の比較、についてお聞きします。	
3-1	「統計モデル等との連携のため、…」の作業については、入力用APIと出力用APIについてご希望の仕様をお聞きしてから作業を進めるという理解です。この仕様が明確であれば実際に連携させる統計モデルについての詳細な知識が無くても作業は可能だと思いますが、この理解は正しいのでしょうか？	はい、その通りです。
3-2	DDI Simulatorは受注者にて準備する必要があるのでしょうか？	受注者にて準備する必要がございます。
3-3	精度比較で実施するテスト内容については具体的に指示をいただけるという理解でいいでしょうか？	テスト内容については、受注者にてご検討いただく必要がございます。

4	仕様書7.3:その他、についてお聞きします。	
4-1	プログラムのソースコード内や実際のコマンドラインの入力や出力されるデータについては英語にて実装します。一方、納品物として作成する文書については日本語でいいでしょうか？	はい、文書については、日本語で問題ございません。
5	本案件全体についてお聞きします。	
5-1	本案件の作業者に期待される能力として以下のどちらかを選ぶとすればどちらでしょうか？ <ul style="list-style-type: none"> ・生理学や薬学や創薬に対する深い知識や経験(プログラム開発についてはあまり経験がない) ・数理計算プログラムの豊富な開発経験(生理学や薬学や創薬について専門知識は無い) 	前者になります。