

## 質問書回答

2021年11月25日

国立研究開発法人理化学研究所

横浜事業所 契約担当役

研究支援部長 富田 久行

(公印省略)

件名：「モデル錠剤の溶出プロファイラのキャリブレーション高度化」

項番	該当箇所	質問	回答
1	2.仕様（1）	実装は <b>python</b> で行うのでしょうか？ その場合、ベイズ探索で利用するライブラリで想定しているものはありますか？	実装は <b>python</b> で実施する。ベイズ探索のためのライブラリとして、 <b>COMBO</b> または <b>PHYSBO</b> などを想定している。
2	2.仕様（1）	ベイズ探索に用いるプログラムライブラリについて、貴研究所より種類やバージョンの指定はございますでしょうか。	ベイズ探索のためのライブラリとして、 <b>COMBO</b> または <b>PHYSBO</b> などを想定している。
3	2.仕様（2）	「グリッドサーチについては（1）で決定したパラメータを再利用してよい」、というのは、決定したパラメータをベースにしてグリッドサーチする、という理解で正しいでしょうか？	「グリッドサーチについては（1）で決定したパラメータを再利用してよい」、というのは、決定したパラメータをベースにしてグリッドサーチを行うことが可能であることを意味する。
4	2.仕様（2）	「～実用性を～確認すること。」という記述について、実用性の確認方法はすでに定められており、作業の際にご教示いただける認識でよろしいでしょうか。	実用性を確認するための定量的な値がある。その数値を算出する数式を指定するので、数式に基づいて計算し結果を提示すること。監督員がその値に基づいて実用性を判定する。

5	2.仕様（2）	<p>今回使用する実験データ、検収マシンにおいて、既存のグリッドサーチによるキャリブレーションはどのくらい時間がかかるでしょうか。もし分かるようでしたら、ご教示ください。</p>	<p>いままで実施したグリッドサーチを例示する：12 個の錠剤の実験の溶出プロファイルを同時に満たすパラメータセットを探索するため、各錠剤について5625 通りのパラメータセットのシミュレーションを実施した。このために、検収マシン（3 GPU）のみを利用すると5～6 日程度を要する。</p> <p>本案件では計算量が膨大であるため、実施期間中に検収マシンに加えて、8 GPU×30 日程度を利用できる環境を本案件のために提供予定である。この資源も併せることで、本案件に必要な計算資源を満たすことができる。</p>
6	2.仕様（2－1）	<p>錠剤モデルの作成は、ご提供いただく実験データを入力として、タブレットモデラーのプログラムを実行するのみの作業という認識でよろしいでしょうか。</p>	<p>予備計算では、仕様（2－1）に記載のある「28 錠剤×3」のうち、「6 錠剤×3」で、構築がうまくいく <b>Hardness</b> の値がわかっており、「錠剤モデルの作成は、提供する実験データを入力として、タブレットモデラーのプログラムを実行するのみの作業」と想定している。しかし、構築がうまくいかない場合は、必要に応じてマニュアルに記載のあるパラメータ（<b>Hardness</b>）を変更して構築すること。</p>

7	2.仕様（3）	タブレットモデラーと溶出プロファイラーの両方が作業対象となるのでしょうか？	タブレットモデラーと溶出プロファイラーの両方が作業対象となる。
8	2.仕様（3）	「～徐放性基剤を表現することが難しいことが分かった場合は～」という記述について、受注者がシミュレーションモジュールの出力結果をご提示し、難しいかどうかは貴研究所でご判断いただく認識でよろしいでしょうか。	「～徐放性基剤を表現することが難しいことが分かった場合は～」という記述について、受注者がシミュレーションモジュールとキャリブレーションの出力結果を提示し、難しいかどうかを、監督員が判断する。
9	2.仕様（3）	使用するキャリブレーションシステムは仕様（1）で構築したものをほぼそのまま利用できる、という理解で正しいのでしょうか？	使用するキャリブレーションシステムは仕様（1）で構築したものをほぼそのまま利用できる想定される。
10	10.その他	打合せは、全て Web 会議でお願いすることは可能でしょうか。	打合せをすべて web 会議で行うことが可能である。