

2016年度 学術交流支援資金 報告書

外国語電子教材作成支援「バイオシミュレーション」

環境情報学部 内藤泰宏

概要

隔年でGIGA科目として開講している「バイオシミュレーション1・2」で用いる英語教材を開発した。細胞シミュレーション環境E-Cell4およびE-Cell3をシミュレーションエンジンとして用い、ウェブブラウザ上ですべての作業を実行可能な Jupyter notebook 上に構築した。

背景と目的

「バイオシミュレーション1・2」は隔年でGIGA科目として開講している。「バイオシミュレーション1」は従来より特別教室で開講しており、概ね以下の内容で構成している。

- ・ 微分方程式の基礎、力学系の基礎
- ・ プログラミングの基礎（授業内容に必要な技法に絞りこむ）
- ・ 細胞シミュレーション環境E-Cellを用いたモデル作成とシミュレーションの実行

私たちの研究グループは、理化学研究所と共同で細胞シミュレーション環境E-Cellを開発しており、従来よりこれを「バイオシミュレーション1」などの授業科目の教材として用いてきた。2016年2月5日に、最新バージョンであるE-Cell4の最初のメジャーバージョンを公開した。

E-Cell4は、空間内での粒子レベルのシミュレーションを実行可能な最先端の機能を持つシミュレーション環境である（図1）。研究目的では、理化学研究所のスーパーコンピュータ「京」での大規模並列計算にも用いられている一方で、初学者あるいはライトユーザにも容易にインストールして利用できるよう Homebrew、Docker など、さまざまなインストール手法を用意している。S F C 特別教室のiMacにもE-Cell3、E-Cell4がインストールされている。

作成した教材の内容

本研究では、(1) E-Cell4 のチュートリアル、(2) 生命システムを力学系として捉えるモデリングへの導入、(3) 生命システム内での物質の移動と反応 を内容とする教材を Jupyter notebook 形式で作成した。

教材そのものが Python を用いたデータ分析のサンプルとなるように、比較的単純な解析にも、NumPy の Array オブジェクトや、pandas の DataFrame オブジェクトを用い、それらの利点を利用したシンプルな記述としている。

数式は画像ファイルなどとはせず、Jupyter の markdown セルや matplotlib のテキストオブジェクト内で利用可能で可搬性の高い MathJaxを用いて記述し、可読性を高めた。

微分方程式（系）の数値計算（シミュレーション）は E-Cell あるいは scipy のモジュールを用いて notebook 内で実行している。実行結果は DataFrame オブジェクト等に格納し、

matplotlib 等を用いて可視化している。そのため、Jupyter notebook の利点を活用し、パラメータの数値を変えての再計算などの試行錯誤を手軽に行える。

(1) は、GitHubのレポジトリ [ecell/ecell4-notebooks](https://github.com/ecell/ecell4-notebooks) の一部としても公開されている。

(2), (3) は“Biosimulation” D. A. Beard (2012) をベースに、数理モデルのプログラミング、数値計算、可視化をすべて Python で新たに実装している。

以下に、別途電子ファイルで提供する教材の目次を示す。

Chapter 1 E-Cell4 Tutorial

1. Brief tour of E-Cell4 simulations
2. How to build a model
3. How to setup the initial condition
4. How to run a simulation
5. How to solve odes with rate law functions
6. Introduction of rule-based modeling
7. More about 1. brief tour of E-Cell4 simulations
8. Spatial Gillespie method
9. Spatiocyte simulations at single-molecule resolution

Chapter 2 Introduction to simulation of biological systems

1. Modeling approaches
2. An introductory example
3. Recapitulation and lessons learned

Chapter 3 Transport and reaction of solutes in biological systems

1. Compartmental modeling
2. Passive flow of water, solutes, and electrical current across membranes
3. Simulating chemical reactions
4. Distributed transport modeling

展望

Jupyter notebook は可読性の高いテキストとプログラム実行環境を単一のファイルにまとめて提供でき、可搬性も高い。履修者が行う演習も notebook に追記し、これをそのまま提出することで、授業担当者が容易に提出物を実行し、確認することもできる。現象の数理モデル化とそのプログラミング、数値計算を扱う本科目の教材形態として適している。

今後も、今回開発した教材を拡充していきたい。