

# 仕 様 書

## 1. 件名

最適代謝経路計算用バイオ合成反応実現性シミュレーションツールの改良

## 2. 研究の概要

国立研究開発法人産業技術総合研究所（以下、「産総研」という。）生命工学領域生物プロセス研究部門では、日本学術振興会科学研究費助成事業（科研費）において学術変革領域研究 A 「生物を凌駕する無細胞分子システムのボトムアップ構築学」（以下、「本プロジェクト」という。）に関する研究を行っている。産総研では、無細胞分子システムにおける物質生産経路の最適化にむけ、代謝経路探索手法の開発を本プロジェクトの参画機関と連携して実施している。

## 3. 作業の概要

バイオ合成反応（生物が保有する代謝経路を活用した目的物質の合成およびそのための一連の化学反応）においては、目的物質の合成までの副産物の蓄積によって、目的物質の生産性に影響を及ぼす可能性がある。また、新たな代謝経路の発見・活用によって、より効率的な物質生産の可能性を提示することができる。産総研では、より効率的な物質生産を行うための経路探索用ツールとして、様々な化学反応パターンの類似度からバイオ合成反応の実現性を評価するための GUI シミュレーションツール（以下、「バイオ合成反応実現性シミュレーションツール」という。）を開発している。本作業ではより最適な代謝経路を提示する為、バイオ合成反応実現性シミュレーションツールの改良を行う。（GUI : Graphical User Interface）1つ目の作業では、1ステップの化学反応のみを対象として表示するだけでなく、複数のステップを経る化学反応を表示可能にする。2つ目の作業では、入力された化合物の組み合わせに対し、最も確からしいことを示すスコアを計算し、ランキング形式で結果を表示する。

## 4. 作業項目

- （1）複数ステップの化学反応の実装
- （2）ランキング計算方法の実装

## 5. 作業項目別仕様

- （1）複数ステップの化学反応の実装

入力された化合物の組合せをもとに、既に登録済みの化学反応のデータ群から複数ステップの化学反応を提示するアルゴリズムを実装すること。複数ステップの計算アルゴリズムは調達請求者と協議の上、決定すること。また、GUIにて提示された結果を表示可能とすること。表示は単一の反応、複数ステップの

反応どちらも対応可能とすること。表示方法については調達請求者と協議の上、決定すること。

## (2) ランキング計算方法の実装

(1)にて計算された結果の確からしさを計算するアルゴリズムを実装すること。確からしさの計算方法については調達請求者と協議の上、決定すること。また、計算された確からしさをを用いたランキングの結果を GUI にて表示すること。表示方法については調達請求者と協議の上、決定すること。

## 6. 特記事項

- (1) Linux 系 OS 環境上で動作するプログラムを実装する（現時点においてサポート中である Ubuntu のリリース版が望ましい）。使用言語は Python、Perl、R を基本とする（それ以外の言語を使用する場合は、調達請求者の了承を得る必要がある）。
- (2) 月に 1 回程度、調達請求者に対して作業の進捗報告を行うこと。報告時はメールや WEB 会議、または調達請求者指定の場所にて開催すること。ただし、対面報告の際、原則 1 名以上は調達請求者の指定場所にて対面での進捗報告を行うものとする。
- (3) 実装作業等については、調達請求者と事前協議の上、実施すること。
- (4) サプライチェーン・リスクに対応するため、「IT 調達に係る国等の物品等又は役務の調達方針及び調達手続きに関する申合せ」（平成 30 年 12 月 10 日関係省庁申合せ）に基づき対応を求められることがあるので応じること。

## 7. 受注者に必要な要件等

本作業の従事者は、次の各項について公表可能な実績を有していること。

- (1) スマートセル関連技術開発に関わる業務実績を有していること。
- (2) 代謝経路推定等、酵素反応に関する情報解析実績を有していること。
- (3) 化合物構造情報の解析実績を有していること。

## 8. 貸与品

既存の「バイオ合成反応実現性シミュレーションツール」

(これまでに開発されたもの)

貸与品は産総研から box 経由で貸与する。本作業終了後、貸与品は直ちに削除し、文面で削除した旨を報告すること。

## 9. 納入物品

以下に示す作業報告書やプログラムを個別のファイルとして電子媒体に記録し納入すること。

- (1) 複数ステップの化学反応提示アルゴリズムの実装プログラム 一式
- (2) 複数ステップの化学反応提示アルゴリズムの実装に関する報告書 一部

- (3) ランキング計算方法の実装プログラム 一式  
(4) ランキング計算方法の実装に関する報告書 一部  
※USBメモリ等の外部電磁的記録媒体は用いないこと。

#### 10. 納入期限及び納入場所

納入期限：2025年1月30日

納入場所：国立研究開発法人産業技術総合研究所

生命工学領域生物プロセス研究部門

北海道センターD1棟 325室

北海道札幌市豊平区月寒東2条17-2-1

#### 11. 納入の完了

作業完了の後、「9. 納入物品」に記載されている納入物品が過不足なく納入されていること、また、その内容・品質を確認し、本仕様書を満たしていることの確認を行い、納入の完了とする。

#### 12. 付帯事項

- (1) 本仕様書の技術的内容及び知り得た情報については、守秘義務を負うものとする。
- (2) 本仕様書の技術的内容に関する質問等については、調達請求者と協議すること。また、本仕様書に定めのない事項及び疑義が生じた場合は、調達担当者と協議のうえ決定する。
- (3) 本業務に起因する不具合等に関しては、原因究明に関し、納入の完了後1年間は追加請求無しで対応を行うこと。
- (4) 請負者の責において及ぼした損害は、請負者が賠償すること。
- (5) 請負者は、成果に係る著作物の著作権を産総研に代金支払の対価として譲渡するものとし、著作者人格権を行使しないものとする。
- (6) 請負者は、契約条項に定める検査に合格後、直ちに別紙様式による著作者財産権譲渡証書及び著作者人格権不行使証書を産総研に提出しなければならない。
- (7) 請負者は、産総研に対し、納品した成果品が第三者の知的財産権を侵害しないことを保証するものとする。なお、納品した成果品について、第三者の権利侵害の問題が生じ、その結果、産総研又は第三者に費用や損害が生じた場合は、請負者は、その責任と負担においてこれを処理するものとする。

別紙様式

年 月 日

## 著 作 者 財 産 権 譲 渡 証 書

国立研究開発法人産業技術総合研究所 殿

請 負 者  
住 所  
会 社 名  
代表者氏名

印

作業請負契約 ( 年 月 日 契約)  
件 名

上記契約により作成した成果物の所有権及び著作権（著作権法第 27 条及び第 28 条に規定する権利を含む）は、国立研究開発法人産業技術総合研究所に譲渡したことに相違ありません。ただし、自己所有していた権利は除くものとします。

別紙様式

年 月 日

## 著作者人格権不行使証書

国立研究開発法人産業技術総合研究所 殿

請負者  
住 所  
会 社 名  
代表者氏名

印

作業請負契約 ( 年 月 日 契約)  
件 名

上記契約により作成した成果物の著作権（著作権法第 27 条及び第 28 条に規定する権利を含む）に係わる著作者人格権を行使しないことを約束します。

なお、著作者人格権を行使しようとする場合は、国立研究開発法人産業技術総合研究所の承認を得るものとします。