

第1章 CellDesignerの概要

CellDesignerは、生物学的パスウェイモデルを作成し、シミュレーションを実行する機能を持つ総合的なツールです。

この章では、CellDesignerの概要について理解しましょう。

1.1 CellDesignerとは

CellDesignerは、SBML (Systems Biology Markup Language)をネイティブフォーマットとして使用し、厳密に定義されたグラフィカル表記の標準であるSBGN (Systems Biology Graphical Notation)に準拠して生化学および遺伝子調節ネットワークを表現するモデリングツールです。また、SBW (Systems Biology Workbench)にも対応しており、既存のリソースおよびソフトウェアツールとの連携を可能にして、多くの研究者に役立つツールです。

CellDesignerは200x年、xxxxxによって最初のバージョンが開発され、その後も機能拡張をともなうバージョンアップが続けられ、2012年5月末の時点で最新バージョンは4.2となっています。CellDesignerはJavaで開発され、Windows (XP以降)、Mac OS X (10.5以降)、Linux (Fedora Core 4.0以降)の各オペレーティングシステムに対応しています。ユーザーはライセンステキスト(<http://www.celldesigner.org/license.txt>)に従い、無料で使用することができます。CellDesignerに関する情報は、CellDesigner.org (<http://www.celldesigner.org/>)で管理されています。

1.2. CellDesignerの特徴

CellDesignerは基本的には生化学ネットワーク用のモデリングツールであり、次のような大きな特徴を持っています。

- ・ SBML準拠
- ・ SBGN準拠
- ・ ビルトインのシミュレーション機能
- ・ SBW対応

■SBML準拠

SBML (Systems Biology Markup Language)は、生物学的プロセスを表すコンピュータモデルのためのフリーかつオープンな交換フォーマットです。XMLをベースとし、コンピュータが読み書きできるフォーマットであり、SBMLをサポートするツール間での情報の交換を可能にします。

CellDesignerはSBMLフォーマットでの読み込みと書き出しをサポートしており、他のツールで作成されたモデルをインポートしたり、CellDesignerで作成したモデルをエクスポートしたりして活用することが可能です。いわば、CellDesignerはSBMLベースのモデルエディターともいえるでしょう。

SBMLはSBML.orgによって管理されています。SBMLの詳細については、SBML.orgのWebサイト(http://sbml.org/Main_Page)を参照してください。

■SBGN準拠

SBGN (Systems Biology Graphical Notation)は、生物学的ネットワークをグラフィカルに表現するための国際標準です。SBGNによって、研究者同士が複雑な情報を曖昧さなしに理解して伝達することが可能になります。

CellDesignerはSBGNに準拠しています。CellDesignerで構築したパスウェイマップについて、言語面でベースとなるのがSBMLであるのに対し、グラフィカル表現でのベースとなるのがSBGLです。CellDesignerはSBGNベースのモデリングツールといえます。

SBGNはSBGN.orgによって管理されています。SBGNの詳細については、SBGN.orgのWebサイト(http://www.sbgn.org/Main_Page)を参照してください。

■ビルトインのシミュレーション機能

これまで、パスウェイモデルの構築に用いられるツールはシミュレーション機能を持たないことが一般的でしたが、CellDesignerはシミュレーション機能を内蔵しています。このため、数理モデルの構築とシミュレーションの実行を1つのモデル内で連続して行うことができ、研究の効率が大幅に向上します。もちろん、外部のシミュレータを呼び出して、シミュレーションを実行することも可能です。

■SBW対応

SBW (Systems Biology Workbench)は、システムバイオロジーに関するさまざまなソフトウェアアプリケーションを結び付けるオープンソースのフレームワークです。SBWに対応することにより、異なる言語で書かれ、さまざまプラットフォームで動作するアプリケーション同士がコミュニケーションして、相互の機能を利用することが可能になります。

CellDesignerもSBWに対応しているため、SBW対応のシミュレーション/分析ソフトウェアと連携することができます。

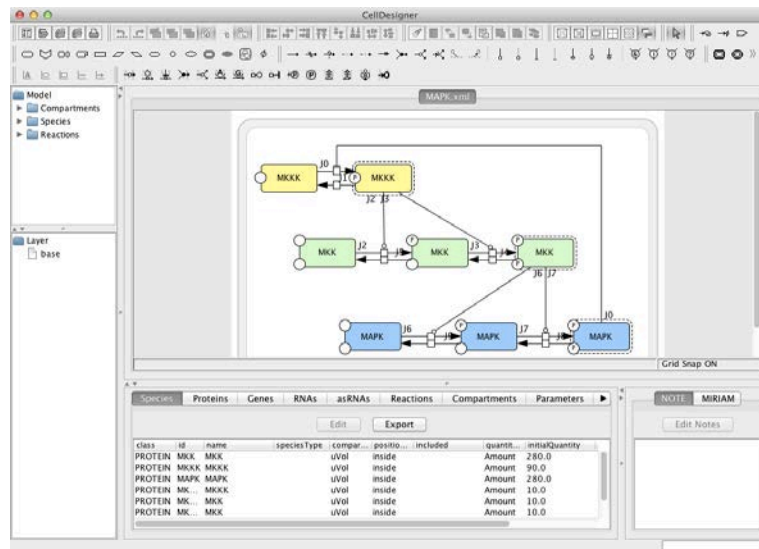
1.3 CellDesignerの主な機能

CellDesignerには、次のような機能があります。

- ・パスウェイマップの構築
- ・シミュレーションの実行
- ・アノテーションの追加
- ・外部データベースへの接続
- ・プラグインによる機能拡張
- ・モデルのインポートとエクスポート(SBMLフォーマット)

■パスウェイマップの構築

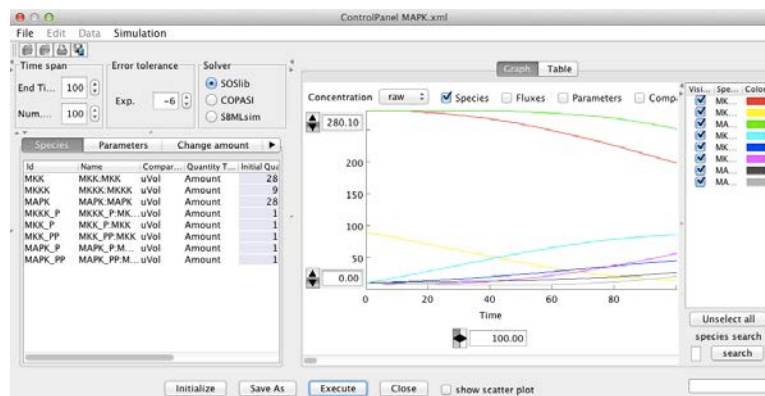
CellDesignerの中心となる機能の1つが、パスウェイマップの構築です。直感的でわかりやすいインターフェースを使用して、ドロワーソフトを操作するような感覚でパスウェイマップを作成できます。また、タンパク質の状態遷移、触媒と抑制、結合と分離などの基本的な反応をあらかじめ定義した要素(マクロと呼びます)が用意されていて、効率よくモデルの作成を進められます。



<Fig. 1-1 パスウェイマップの構築>

■シミュレーションの実行

もう1つの中心的な機能がシミュレーションです。CellDesignerにはシミュレータが内蔵されていて、数理モデルに対しシミュレーションを実行できます。構築したモデルに数値データや数式を入力するのも容易で、モデル作成からシミュレーション実行までをCellDesignerだけで切れ目なくこなすことができます。



<Fig. 1-2 シミュレーションの実行>

■アノテーションの追加

アノテーションは、パスウェイマップに注釈や覚え書きを追加する機能です。CellDesignerはアノテーション機能が充実していて、タンパク質やゲノムなどのコンポーネントごとにノーツと呼ばれる注釈を追加できるだけでなく、MIRIAMアノテーションも使用できます。また、アノテーションを利用して、外部データベースに存在する情報をCellDesigner内から直接呼び出すことが可能で、パスウェイマップにさまざまな情報を組み込むことができます。

■外部データベースへの接続

CellDesignerの内部から、外部サイトに保管されているデータベースにアクセスする機能です。コンポーネントの名前、またはノーツやMIRIAMアノテーションに入力したIDに基づいて外部データベースを検索し、該当する情報をWebブラウザに表示します。また、外部データベースに保管されているReaction情報をCellDesignerにインポートして(読み込んで)使用することもできます。

■プラグインによる機能拡張

プラグインと呼ばれるJavaプログラムを書くことにより、CellDesignerの機能を拡張できます。ユーザー自身がプラグインを作成することも、他のユーザーが作成したプラグインを利用することもできます。

■モデルのインポートとエクスポート(SBMLフォーマット)

CellDesignerで構築したモデルをSBMLフォーマットでエクスポートする(書き出す)ことができます。また、他のツールで作成され、SBMLフォーマットで保存されているモデルをインポートする(読み込む)ことができます。このように、エクスポート/インポート機能を使用すれば、SBML準拠のツール間でモデルを共有でき、研究成果の活用が容易になります。

1.4 CellDesignerのインストール

それでは、実際にCellDesignerをダウンロードして、お手元のコンピュータにインストールしてみましょう。

注意 最新情報の確認

以下で説明する内容は、CellDesigner Ver.4.2に基づいて書かれています。バージョンによっては、要件やインストール方法などが異なる可能性があります。

実際にCellDesignerをインストールする場合は、CellDesignerのWebサイト(CellDesigner.org: <http://www.celldesigner.org/>)にアクセスして、最新情報を確認してください。

1.3.1 要件

■オペレーティングシステム

CellDesignerは、次のオペレーティングシステムで動作します。

- ・ Windows (XP以降)、32ビットのみ *1
- ・ Mac OS X (10.5以降) 32ビット、64ビット
- ・ X Window Systemが組み込まれているLinux (Fedora Core 4以降を推奨) *2

注意 CellDesignerバージョン4.2での注意事項

*1 Windowsでは、32ビットモードのみサポートされています。64ビットのWindowsにはインストールしないでください。

*2 Linuxプラットフォームでは、ネイティブライブラリーのバージョン違いから、Fedora Core 4以降が推奨されています。これ以外のバージョンやディストリビューションでCellDesignerを動作させると問題が生じるおそれがあります。

最新の情報については、CellDesignerのWebサイト(CellDesigner.org: <http://www.celldesigner.org/>)で確認してください。

■JRE (Java Runtime Environment: Java実行環境)

CellDesignerを実行するには、JRE 1.5.0以降が必要です。ただし、CellDesignerのインストーラーパッケージにはJREが含まれているので、事前に単独でJREをインストールする必要はありません。

また、Mac用のインストーラーパッケージは、OS X 10.5 (JRE 1.5)用と OS X 10.6 (JRE 1.6)用とで別のファイルが用意されています。

■SBWおよびSBW対応モジュール

SBW (Systems Biology Workbench)およびSBW対応モジュールを使用する場合は、CellDesignerをインストールする前に、SBWと対応モジュールをインストールしておく必要があります。

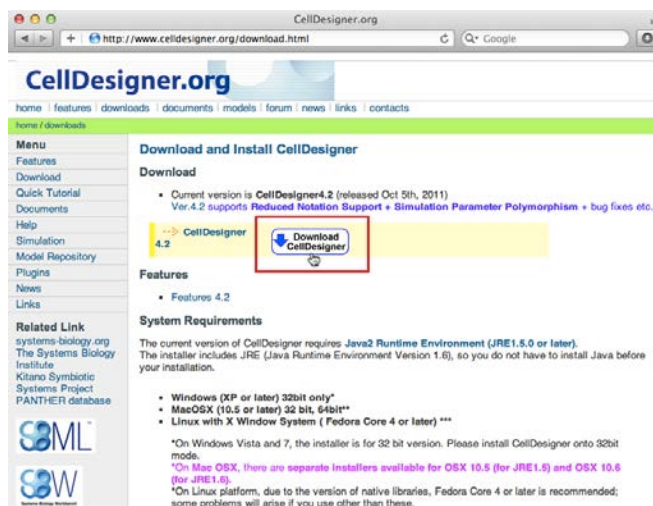
SBWおよび対応モジュールのインストールについては、SBW Systems Biology Workbench)のWebサイト(<http://sbw.sourceforge.net/index.html>)を参照してください。

SBWを使用しない場合、インストールの必要はありません。

1.3.2 インストーラーパッケージの入手

最新版のインストーラーパッケージは、CellDesigner.orgの「Download」ページから入手できます。

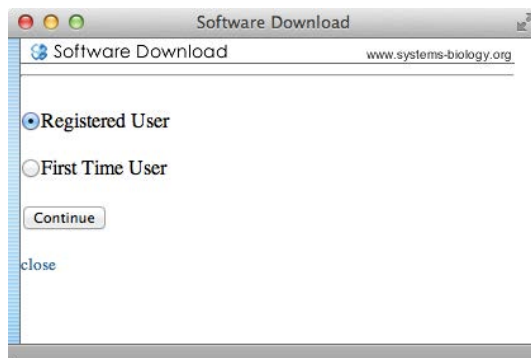
- (1) CellDesigner.orgの「Download」ページ(<http://www.celldesigner.org/download.html>)にアクセスします。
- (2) 「Download CellDesigner」 ボタンをクリックします。



<Fig. 1-3 「Download CellDesigner」 ボタン>

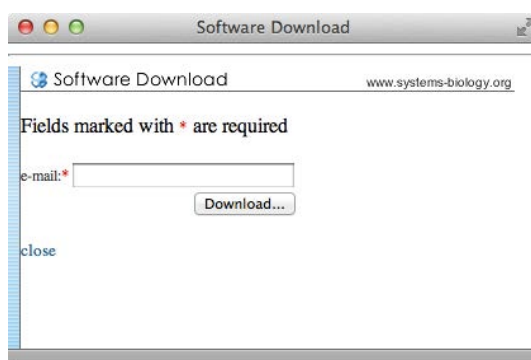
- (3) systems-biology.orgのポータルサイトにあるCellDesignerのダウンロードページが表示されるので、オペレーティングシステムに応じたリンクをクリックします。

ユーザー登録確認用のダイアログボックスが表示されます。



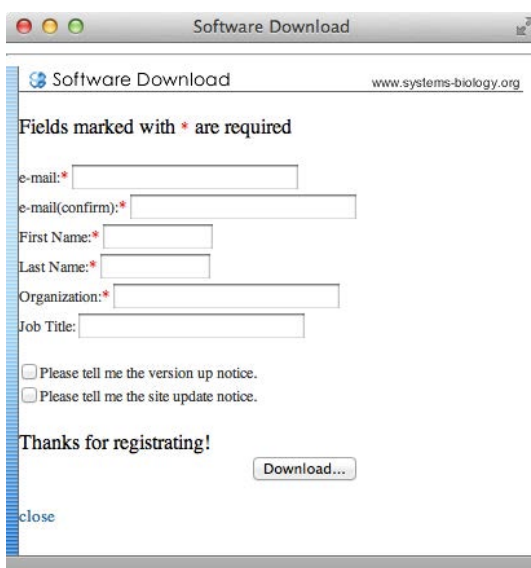
<Fig.1-4 ユーザー登録確認のダイアログボックス>

- (4) systems-biology.orgに登録済みのユーザーは「Registered User」を選択して「continue」をクリックします。次のダイアログで電子メールアドレスを入力し、「Download」をクリックしてください。



<Fig. 1-5 登録済ユーザーの場合>

まだ登録していないユーザーは、「First Time User」を選択して「continue」をクリックします。次のダイアログで必要な項目に入力し、「Download」をクリックしてください。



<Fig.1-6 未登録ユーザーの場合>

ヒント

インストーラーパッケージのファイル名

ダウンロードするインストーラーパッケージのファイル名は、オペレーティングシステムごとに次のようになります(CellDesignerバージョン4.2の場合)。

- ・ Windows: CellDesigner-4.2-windows-installer.exe
- ・ MacOSX (10.5): CellDesigner-4.2-osx-10.5-installer.dmg
- ・ MacOSX (10.6): CellDesigner-4.2-osx-10.6-installer.dmg
- ・ Linux: CellDesigner-4.2-linux-installer.bin

1.3.3 インストールの実行

次の方法でインストールします。

■Windowsの場合

- (1) ダウンロードしたインストーラーパッケージ(CellDesigner-4.2-windows-installer.exe)をダブルクリックします。
- (2) インストールウィンドウが表示されるので、説明に従ってインストールを進めます。

■Mac OS Xの場合

- (1) ダウンロードしたインストーラーパッケージ(CellDesigner-4.2-osx-10.5-installer.dmgまたはCellDesigner-4.2-osx-10.6-installer.dmg)をダブルクリックします。
- (2) インストーラーパッケージが自動的にマウントされ、インストーラーアプリのあるフォルダが表示されます。
- (3) インストーラーアプリ(CellDesigner-4.2-osx-10.5-installer.appまたはCellDesigner-4.2-osx-10.6-installer.app)をダブルクリックします。
- (4) インストールウィンドウが表示されるので、説明に従ってインストールを進めます。

■Linuxの場合

- (1) シェルを開き、「LSB (Linux Standard Bas)」がインストールされていない場合は、これをインストールします。
- (2) 「ia32-libs」がインストールされていない場合は、これをインストールします。
- (3) インストールパッケージをダウンロードしたディレクトリに移動し、次のコマンドを入力してインストーラーを起動します。

```
% chmod u+x CellDesigner-4.2-linux-installer.bin  
% ./CellDesigner-4.2-linux-installer.bin
```

- (4) インストールウィンドウが表示されるので、説明に従ってインストールを進めます。

以上で、CellDesignerがインストールされます。さっそく第2章を参考にして、CellDesignerを起動してみましょう。