

課題名 (タイトル) :

生命体シミュレーションのためのデータ同化研究

利用者氏名 : ○宮野 悟*, 吉田 亮**,***, 中野 慎也**,***, 長尾 大道***, 斎藤 正也***

所属 : *社会知創成事業 次世代計算科学研究開発プログラム

次世代生命体統合シミュレーション研究推進グループ データ解析融合研究開発チーム

**統計数理研究所 モデリング研究系

***統計数理研究所 データ同化研究開発センター

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

我々は、京コンピュータ上で動作するソフトウェア開発プロジェクト「グランドチャレンジアプリケーション」のもとで、生命体データ同化ソフトウェア「LiSDAS」(Life Science Data Assimilation System)の開発を実施してきた。このソフトウェアは、細胞内の信号伝達や物質生成にかかわる生物学的回路をある確率論的に従う誤差項を含む常微分方程式として記述し、そこに付随するパラメータをベイズ推定によって観測時系列から推定するものである。モデルに確率論的自由度を導入するのは、もともになっている実験的事実の不完全性による。その主要なものとして、細胞内に含まれる膨大な反応過程が平等に実験による検証の対象にはなっていないこと、実験の対象になったとしても細胞間の個体差のために、測定値に不確実性が大きいことがある。方程式系の非線形性のために、誤差項が従う確率分布は一般に非ガウスになる。非ガウス性に対応するために LiSDAS はモンテカルロ的アプローチを取っている。

プロジェクト最終年度にあたる今年度では、ソフトウェアの配布パッケージの検証のために RICC を利用した。

2. 具体的な利用内容、計算方法

「京」のプロジェクトで開発されたソフトウェアは ISLiM のサイトから公開される予定である (URL: http://www.islim.org/islim-dl_j.html)。昨年度までに開発はほぼ終わっていて、パラメータ推定性能や並列化性能の測定も終了している。今年度は、公開するパッケージの検証をおもに行った。GC プロジェクトでは「京」用に最適化したバージョンに加えて、PC クラスタ等の一般の並列計算環境で動作するバージョンも公

開することが推奨されている。後者のテストのために RICC の環境を利用した。また、4月の時点ではステージング運用が開始されておらず、運用開始後の条件にあわせた動作確認ができなかった。そこで、「京」に導入予定のものと類似のステージング・システムを持つ RICC での動作確認を行った。

3. 結果

公開用パッケージにおいて適切な動作(推定性能および並列化性能)がなされることを確認した。5月7日にパッケージの最初のバージョンを GPL/BSD のデュアルライセンスで公開した。

4. 今後の計画・展望

ソフトウェアの性能はプロジェクトを通して検証してきたが、開発チーム内での運用に限られている。今後は研究会・シンポジウムを通して開発したソフトウェアの広報普及をはかり、利用者の獲得や共同研究につなげていきたい。これに応じて、随時改良を行い ISLiM ダウンロードサイトで公開していきたい。また、LiSDAS は細胞内ネットワークを対象として開発を進めてきたが、拡張を行うことで幅広い常微分方程式系に適用できると考えられる。その一例として、感染症ネットワークや神経回路ネットワークへの適用を検討している。

平成 24 年度 RICC 利用研究成果リスト

【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】

なし

【国際会議などの予稿集、proceeding】

M.M. Saito, S. Imoto, R. Yamaguchi, S. Miyano, T. Higuchi, “Identifiability of Local Transmissibility Parameters in Agent-based Pandemic Simulation”, 15th International Conference on Information Fusion, Singapore, 9 – 12, 2012

S. Nakano, T. Higuchi, “Weight Adjustment of the Particle Filter on Distributed Computing Systems”, 15th International Conference on Information Fusion, Singapore, 9 – 12, 2012

【国際会議、学会などでの口頭発表】

斎藤 正也, 吉田亮, 長尾大道, 中野慎也, 樋口知之, 高速な生命体データ同化システムの開発とパスウェイ・モデル探索への応用, 京コンピュータ・シンポジウム 2012, 神戸 (神戸大学統合研究拠点コンベンションホール), 2012 年 6 月 14～15 日

斎藤 正也, 井元 清哉, 山口 類, 佐藤 弘樹, 中田 はる佳, 上 昌広, 坪倉正治, 宮野 悟, 樋口知之, 「インフルエンザ介入政策における集団免疫を高めるワクチン接種対象群の選択」, 札幌 (北海道大学), 2012 年 9 月 10～12 日

M. M. Saito, R. Yoshida, H. Nagao, S. Nakano, “Data assimilation in life-science—Towards efficient improvement of transcriptional circuit models by Life Science Data Assimilation System (LiSDAS)”, 4th Biosupercomputing Symposium, Tokyo (Tokyo International Forum), 3—5 December, 2012

樋口知之, 斎藤正也, 吉田亮, 中野慎也, 長尾大道, 「生命体シミュレーションのためのデータ同化技術の開発」, ISLiM ソフトウェア研究開発報告会, 東京 (東京大学武田ホール), 2013 年 1 月 10 日

M. M. Saito, R. Yoshida, H. Nagao, S. Nakano, “LiSDAS: Life Science Data Assimilation System”, AICS International Workshop on Data Assimilation, Kobe (RIKEN Advanced Institute for Computational Science), 26—27 February, 2013