

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\*\*\*  
理研での所属研究室名 :

\*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」に参加し、生命体データ同化ソフトウェア「LiSDAS」(Life Science Data Assimilation System) の開発を実施している。「京」での大規模ノード利用開始に先立って、所内計算機では不可能な数千並列での並列化性能を測定するために RICC を利用した。

2. 具体的な利用内容、計算方法

LiSDAS は細胞内の信号伝達モデルのシミュレーション、および実験データからベイズ推定によりモデル・パラメータを決定するアプリケーションである。

昨年度までに哺乳類概日周期変動モデルをテストベッドとして 8192 並列まで線形に近い台数効果が出ていることを確認しているが、「京」で推奨されているプロセス並列とスレッド並列とのハイブリッド並列には対応していない。また、事前分布の設計が適切ではないために実験を再現するパラメータが推定できない問題があった。今年度はこの 2 点に対する改良を行った。

3. 結果

MPI と OpenMP とを用いたハイブリッド並列を用いた実装でも 8192 並列(8 スレッド×1024 並列)まで線形に近い並列化性能が得られた。また、昨年度と同じテストベッドを用いた推定実験では、図に示すようにサンプリングを反復することで実験を再現する解を与えるパラメータに到達できることを確認した。

4. まとめ

哺乳類概日周期変動モデルを対象として、パラメータの推定を可能にする事前分布を設計した。さらに、

「京」で求められるハイブリッド並列のもとで並列化性能が得られることを確認した。

5. 今後の計画・展望

設計した事前分布の構成手続きは、テストベッドに特化した部分が残されている。他のパスウェイ・モデルに適用できるような一般化を図りたい。

6. RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用した状況(どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか)や、継続して利用する際に行う具体的な内容

大規模並列ジョブ実行のための週末運用を利用して、大規模並列化へのコードの対応を進めることができた。

我々は、これまでに開発したデータ同化アルゴリズムを汎用ライブラリとして公開することを計画している。平成 24 年度は、このライブラリの動作試験・性能測定を行うために RICC を利用したい。

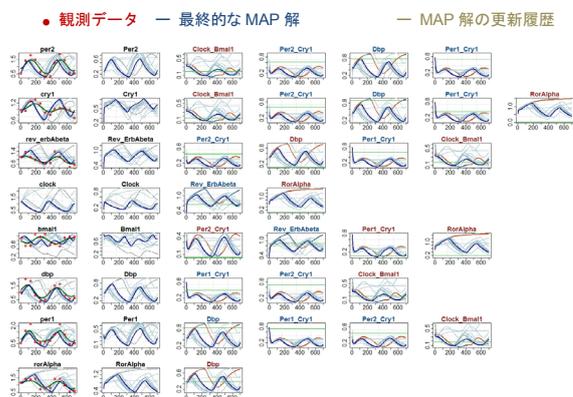


図 推定結果

平成 23 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】

- R. Yoshida, H. Nagao, M. M. Saito, T. Higuchi, "Dynamic Bayesian modelling of biological pathways and decoupling of hidden regulatory signals using nonlinear state space models", Yeditepe International Research Conference on Bayesian Learning, Istanbul, 15 – 17 June, 2011
- H. Nagao, R. Yoshida, T. Higuchi, "Hybrid Bayesian filter algorithm for multivariate time-series modellings on cloud computing systems", Yeditepe International Research Conference on Bayesian Learning, Istanbul, 15 – 17 June, 2011
- S. Nakano, T. Higuchi, "Massively parallel particle filter and a grouping strategy", XXVth IUGG General Assembly, Melbourne, 28 June – 7 July, 2011

【国際会議、学会などでの口頭発表】

- R. Yoshida, M. M. Saito, H. Nagao, S. Nakano, M. Nagasaki, R. Yamaguchi, S. Imoto, M. Yamauchi, N. Gotoh, S. Miyano, T. Higuchi, "LiSDAS: Life Science Data Assimilation Systems", 次世代スーパーコンピューティング・シンポジウム 2010 および第 1 回戦略プログラム 5 分野合同ワークショップ, 神戸 (ニチイ学館), 2011 年 1 月 17 日
- 中野慎也, 樋口知之, "Alternatively lattice-pattern switching strategy for the particle filter on a massively parallel computer", 第 3 回バイオスーパーコンピューティングシンポジウム, 神戸 (理化学研究所計算科学研究機構), 2011 年 2 月 21~22 日
- 吉田亮, 長尾大道, 斎藤正也, 樋口知之, "LiSDAS: Making whole gene simulators for transcriptional dynamics with fully automatic modelling", 第 3 回バイオスーパーコンピューティングシンポジウム, 神戸 (理化学研究所計算科学研究機構), 2011 年 2 月 21~22 日
- 長尾大道\*, 吉田亮, 斎藤正也, 樋口知之, "Estimation performance of LiSDAS by means of massive parallel computers", 第 3 回バイオスーパーコンピューティングシンポジウム, 神戸 (理化学研究所計算科学研究機構), 2011 年 2 月 21~22 日
- 中野慎也, 樋口知之, "Alternatively lattice-pattern switching strategy ~大規模並列計算による粒子フィルタのための~", 第 60 回理論応用力学講演会, 東京 (東京工業大学大岡山キャンパス), 2011 年 3 月 8~10 日
- 長尾大道, 樋口知之, "クラウドコンピューティングを利用したデータ同化システムの開発 (序)", 統計関連学会連合大会, 福岡 (九州大学伊都キャンパス), 2011 年 9 月 4 日-7 日
- 斎藤正也, 吉田亮, 長尾大道, 樋口知之, "生命体データ同化システム LiSDAS~生命を支えるメカニズムをいかに探るか~, バイオスーパーコンピューティングサマースクール 2011, 2011 年 9 月 26~27 日, 淡路 (淡路夢舞台国際会議場)
- 樋口知之, 斎藤正也, 吉田亮, 中野慎也, 長尾大道, "LiSDAS:データ同化計算技術に基づく生体情報シミュレーション", ISLiM 成果報告会 2011, 東京 (東京大学武田ホール), 2011 年 12 月 21~22 日