

グローバル COE 特別セミナー

生物化学専攻セミナー

日時：平成 22 年 5 月 14 日（金） 17:00～18:30

場所：理学部 3 号館 4 階 412 号室

講師：吉田 亮 博士 統計数理研究所

演題：Life Science Data Assimilation Systems:

生化学反応系の複雑性とその克服へ向けて

要旨：

生命現象を真に理解する上で、生化学反応系のネットワーク構造と系に内在する動的特性の解明は避けて通れない。現代システム生物学におけるシミュレーションの有用性については最早言うまでもない。その一方で、数理モデルの速度パラメータや初期条件の設定など、モデリングに付随する様々な不確実性因子が計算機実験の信頼性低下に繋がり、実データを再現できない「不完全・低予測性能モデル」の山が築かれつつある。細胞の環境依存性や生化学物質のバリエーション、個体間の遺伝的差異等がもたらす生化学反応メカニズムの多様性がボトルネックになっている。われわれは、システム生物学のこのような現状を踏まえ、LiSDAS (Life Science Data Assimilation Systems) という先端的データ同化技術にもとづくモデル構築理論を提唱している。LiSDAS は計算機内で仮想的な生化学反応系を大量に作り出し、パラメータとネットワーク構造のショットガンサーチによって、高品質のイン・シリコモデルを自動生成する。従来モデラーが手作業で行ってきたパラメータやモデル内生変数の初期条件の設定、生化学反応経路の構造決定に要する膨大な作業を、計算機上の統計的学習機能で代替する。シミュレーションの本質は、(1) 現象のシミュレート、(2) 実験データやアприオリな知識に対する再現性テストおよび検証実験 (3) モデルの再構築から成る帰納推論である。LiSDAS は不完全性に結びつくあらゆるシナリオを、モンテカルロサンプル(粒子)で表現した上で、大量のシミュレーションを同時に走らせる。その過程において、シミュレーションと実データの整合性を適切に評価しながら、現実を良く説明できるシナリオを選択的に選び出す。あるいは、合わないものを淘汰する。これを計算機上で組織的に実現するための統計計算である。