超並列シミュレーションと対話的可視化を 組み合わせたパラメータ感受性解析手法の開発

東京大学医科学研究所ヒトゲノム解析センター 新井田 厚司

エージェントベースシミュレーションを用いた研究における重要なステップの一つはパラメータ感受性解析、なわちシミュレーション結果に対するパラメータ値の依存性を調べることである。演者は、エージェントベースシミュレーションのパラメータ感受性解析のための新しい方法論であるMASSIVE (Massively parallel Agent-based Simulations and Subsequent Interactive Visualization-based Exploration)を開発した

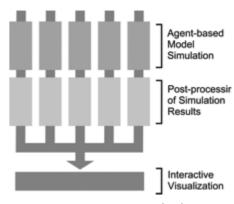


図 1 MASSIVE の概略

(図 1) [1]。MASSIVE はまず初めにエージェントベースドモデルを用いたシミュレーションを様々なパラメータで超並列にスーパーコンピュータ上で試行する。さらに Post-processing ステップとして各パラメータセットから産出されたシミュレーション結果は複数種の要約統計量を用いて評価し、各シミュレーション結果を可視化(例えばがんの進化シミュレーションの場合は変異プロファイル)、画像データとして保存しておく。MASSIVE ではこれらのステップで産出された膨大なシミュレーション結果を新規に開発した対話的可視化ツール MASSIVE viewer により可視化する。MASSIVE viewer は最大四次元パラメータ空間をインタラクティブに表示することで直感的にシミュレーション結果を解釈することを可能とし、viewer 一つの統計量に付いてパラメータ空間全体での傾向を精査するための focused モードと、3 種類の要約統計量を比較するための comparative モードの二種類のモードを用意している。またMASSIVE の適用例としてがんの進化シミュレーションの解析も本講演では紹介する。

参考文献

[1] Niida, Atsushi, Takanori Hasegawa, and Satoru Miyano. "Sensitivity analysis of agent-based simulation utilizing massively parallel computation and interactive data visualization." *PloS one* 14.3 (2019): e0210678.