

2024 年度年次報告書

未来を予測し制御するための数理を活用した新しい科学の探索

2024 年度採択研究代表者

谷地村 敏明

東北大学 数理科学共創社会センター

助教

最適輸送理論による細胞分化ダイナミクスの推定・制御基盤の構築

研究成果の概要

本研究の目的は、最適輸送理論に基づいて細胞分化ダイナミクスを定量的に推定・制御する数理基盤を構築し、その理論に基づいて時系列 scRNA-seq データから細胞分化のダイナミクスを推定するソフトウェアを開発することである。特に iPS 細胞から始原生殖細胞への誘導系や、ヒト体節形成過程を模したモデル系等に適用することで、これらの分化過程を制御する重要遺伝子や遺伝子間の制御ネットワークの解明を目指している。2024 年度(研究一年次)は主に理論面の整備に注力し、以下のような最適輸送理論の拡張と、それに基づく新しいダイナミクスモデルの理論的進展やアルゴリズム開発を実施した。

ある特定の条件下において、静的ベクトル値最適輸送と混合最適輸送が同値であることを証明した。この結果を出発点として、この対応関係と、ごく最近示された静的ベクトル値最適輸送と同値な動的最適輸送との関係を用いて、混合最適輸送の動的定式化を考察した。

また、Wasserstein 空間におけるスプライン補間に関する理論を参考にして、エントロピー正則化混合ガウス最適輸送 (Entropic Gaussian mixture Optimal Transport, EGOT) に基づく mixture Wasserstein スプライン補間を導出し、それらの理論に基づいて軌道全体を一貫して推定するための理論的基盤について考察した。その理論の応用として、細胞分化の大域的軌跡推定(時系列単一細胞データの情報の全てを同時活用した軌跡推定)や分化ダイナミクスの未来予測への展開について検討した。

これらの理論は、scRNA-seq 等の単一細胞データで表される非線形かつ連続的な分化過程を、幾何学的構造を保ったまま補間・予測する上で重要な基盤となる。現在はアルゴリズムの実装と動作検証のために、まずは二次元の人工データに対する数値実験を行い、ソフトウェア開発に向けた準備を進めている。来年度以降は得られた理論と手法を用いて実データへの応用を進める予定である。