

脳神経シミュレーション・データの新しい表現法

大石 智彦[†] 知原 守孝 高丸 尚 教

宮崎 大輝 富田 元基

稲垣 圭一郎 平田 豊

1. はじめに

脳科学における Neural Network Simulation(以下 NNS と略す)では,各細胞から出された信号(入力電位)が,最終的にある1種類の神経細胞に集約され,そこで閾値を超えるまで累積し,発火する。重要な点は,一つ前の時刻での相関係数に対して次の時刻での相関係数が増えるのか否かが,全体の挙動に大きく影響する事である。

NNSでは,simulation細胞の内いくつかを knock-out するなどして,全体の挙動に関する知見を得ることが多い。ただし,knock-out細胞をどのように選別するかは,研究者の恣意性にに基づく。また,中心となる細胞が発火する直前の細胞群の動きを一括で把握しつつ,注目している細胞群の挙動を解析することは困難である。

そこで我々は,高分子科学分野で用いられている分子動力学手法を visualization 手法として導入し,ノード間相関関係を分子間の力に対応させることにより,実際には動かない細胞を3次元空間で動かすことにより,全ノードの動きを一括して把握する事を可能とする手法「Quasi-MD法」を提案する。

これに加えて,本手法を3次元のインタラクティブな空間で表現し解析したいので,本格的な Virtual Reality(以下 VR と略す)装置から一般のコンピュータまで同じ操作方法で対象物体に対し柔軟なアクセスの出来る新しい VR 操作環境の開発も行っている。

2. 方 法

2.1 疑似分子動力学手法

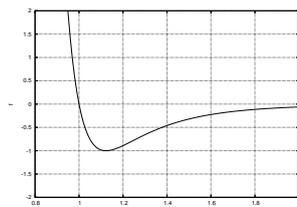


図1 レナード-ジョーンズ・ポテンシャル
Fig. 1 Lennard-Jones potential

Quasi-MD法は,式1で表される Lennard-Jones potential

$$\phi = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (1)$$

を用いる。式1は図1のようなグラフで示される。ここで, $\frac{r}{\sigma}$, σ , ϵ は,それぞれ距離,定数,エネルギー(温度)に対応している。 $\frac{r}{\sigma}$ が $\sqrt[6]{2}$ の所でポテンシャルの勾配が0となる。 $\sqrt[6]{2}$ より大きい場所では引力が働き,小さい場所では斥力が働く。

この式の ϵ とシミュレーションで得られる相関係数 w を

$$\epsilon = w\epsilon_0 \quad (2)$$

と置き,相関係数が大きくなったら,エネルギーが大きくなったことに対応させ,力 \vec{F} を $\vec{F} = -\nabla\phi$ として求める。小脳学習 NNS で得られた相関係数を固定し,シミュレーテッド・アニーリングを用いることを繰り返しながら,全学習段階を経た後,各細胞の空間配置を得る。この作業を繰り返すことで全細胞の位置を決定する,ここで,各細胞の仮想質量を m とすると,

$$\tau = \sqrt{\frac{\epsilon}{m\sigma^2}} \quad (3)$$

は時間の次元を持つ。これを基準として 10τ 程度アニーリングを行う。つまり,相関係数 w に従って,学習が強い場合には細胞は激しく動き,弱い場合には動かないように表現することができる。

2.2 VR 操作環境

Quasi-MD法で新しい表現を提案しても,解析する環境がなければ研究を進めて行く上で困難が多くなる。そこで,Quasi-MD法で表現された3次元空間内をインタラクティブにアクセスできる環境が必要がある。それには,自分の注目したい細胞群を指定し観察する事や自分の行動履歴を残せる事が必要だと考える。

また,この環境を一般的なコンピュータのディスプレイ上だけでなく,立体視スクリーンや本格的な VR の上で提供することで,多方面での解析を可能とする。このような高いポータビリティを提供するために,基本ライブラリに OpenGL を用い,環境の変更は設定ファイルで対応するなど,ユーザーの利便性を確保する。

[†] 中部大学
Chubu University

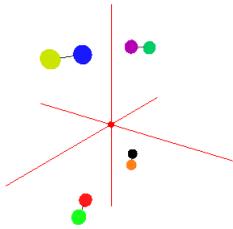


図 2 8 個の神経細胞での挙動
第一主成分の大きな対分離して存在する

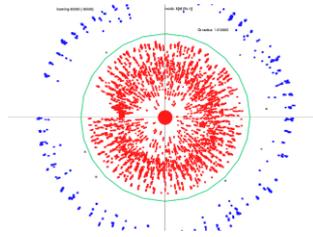


図 3 1 万個の神経細胞での挙動
学習過程の差が層状になって表れている

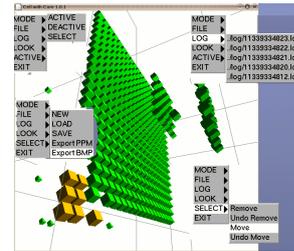


図 4 VR 操作環境プログラムでの表示

3. 結 果

3.1 疑似分子動力学手法

小脳学習シミュレーション自体は、稲垣、平田が別途行い、結果を Quasi-MD 法で表現する。

まず最初に、基本動作を理解するために 8 個の神経細胞での NNS の結果を図 2 に示す。初期配置は、3 次元多重極展開の最低次元配置として立方体の頂点に各細胞を配置した。この場合では、相関の強い細胞はまとまりグループを形成した。

次により実際のモデルに近づけるため、最終発火細胞を 1 個に対して、付帯細胞 1 万個で表現した結果を図 3 に示す。条件として付帯細胞間には相関はない。初期配置は、球殻状と円環状が考えられるが、ここでは円環状に配置した場合を示す。このときの半径は、 $\sqrt{2}$ である。図 3 から分かるように円環の形は変化しないが、相関係数の変化によって揺らぐ。

3.2 VR 操作環境

図 4 は、Quasi-MD 法と違う場合の小脳学習シミュレーション結果を本研究で開発した VR 操作環境ソフトで表示した。本ソフトでは、解析メニューを表示し解析に必要な機能を提供する。

本ソフトで重要な機能は、(1) オブジェクト選択機能、(2) 履歴機能、(3) 設定ファイルによる柔軟な環境移行 である。

第一に各細胞を 3 次元空間で指定できる機能である。これにより、研究者が注目している細胞群を視覚的に追うことができ、必要に応じて knock-out 可能である。よって、研究者はデータに対して積極的にアクセスが出来き、細胞群を大域的または局所的に観察することが可能である。

第二に knock-out シミュレーションは、試行錯誤的に解析される場合が多い、そのため、研究者の行った細胞へのアクセス記録を随時保持、研究者が必要と感じたら、即座にある状態へと戻れる機能を実装した。これにより、研究者は自分の直感を試すような解析を

積極的に行うことが出来る。そして、重要と感じた情報は、画像ファイルとして保存できるだけでなく、その状態を記録することが出来る。

最後に設定ファイルである。この設定ファイルに記載されている項目を有効にするか否かで、本ソフトを VR 装置上で立体的に表示させることが出来る。もちろん、設定ファイルを書き換えてもコンパイルする必要は全くないので、簡単に他の環境に移ることが可能である。

4. ま と め

本研究は、新しい表現法と操作環境ソフトウェアの 2 つで構成されている。

Quasi-MD 法による新しい表現法は、どの細胞が学習に関与しているかを知るだけでなく、knock-out や細胞のクラスタリングのルールを自動生成できる可能性がある。今後、ルール作りをしていくために脳科学の専門家と検討し、本手法の実用性と可能性を評価することが今後の課題である。

次に VR 操作環境は小脳学習シミュレーションを表示するだけに留まらず、力学、プラズマなど様々なシミュレーション・データを汎用的に扱い、解析しやすい環境の提供を目指して開発を行っている。しかし、必要な機能は分野によって異なるため、機能の分類や研究者が良く使う機能を抽出するような機能を開発することが今後の課題である。また、数万個の細胞のような大量の粒子データを高速に描画できる環境の提供も行い、リアル・タイムに描画できるようにすることも今後の課題である。

参 考 文 献

- 1) 分子動力学手法とモンテカルロ法:片岡 洋右, 講談社 (1995 年)