ゲノム解析

量子アニーリング方式によるアセンブリング

IBM Community Japan　ナレッジモール研究
量子コンピューターの活用研究 －機械学習・量子化学計算・組み合わせ最適化への応用－

```
# GoogleDrive上のモジュール配置パス（DeBruijnDNA.py、phi-x.600l.gfa などがあるフォルダまでのパス）
FILE_PATH = '/gdrive/My Drive/Genom/'
```

```
# Google Drive のマウント
from google.colab import drive
drive.mount('/gdrive')
```

```
# GoogleDrive上にあるモジュールのパスを通す
import sys
sys.path.append(FILE_PATH)
```

```
# D-WaveのSDKをインストール
!pip install dwave-ocean-sdk
```

＋ コード　＋ テキスト

```
# グラフ分割ソフト：https://github.com/inducer/pymetis
!pip install PyMetis
```

```
import re
import itertools

import matplotlib.pyplot as plt

# Numpy
import numpy as np

# グラフ可視化ライブラリ：https://graphviz.org/
from graphviz import Digraph

# ネットワーク構造解析のライブラリ：https://networkx.org/
import networkx as nx
import networkx.algorithms as nxa

# グラフ分割
import pymetis

# D-Wave
from dwave.system.samplers import DWaveSampler
from dwave.system.composites import EmbeddingComposite
from dwave.system import LeapHybridSampler

import DeBruijnDNA
import AcyclicGraphDNA

import matplotlib.pyplot as plt

# API_KEY = "D-WAVE_OCEAN_SDK_API_KEY" #API_KEY, register on https://www.dwavesys.com/take-leap # シュミレータを使用するため、
```

```
#def solve_dwave(Q, API_KEY):          # APIキーを利用しないシュミレータで実装するため、記載を削除しています。
def solve_dwave(Q):
    """
    Q = np.array([[-1, 1, 0], [1, -1, -2], [0, -2, -1]])
    solve_dwave(Q)
    """
```

```
    q = {}
    size = len(Q)
    for i in range(size):
        for j in range(size):
            q[(i,j)] = Q[i][j]

    # シミュレータでの実装に書き換えています
    #sampler = LeapHybridSampler(token=API_KEY)
    #response = sampler.sample_qubo(q, num_reads=30, anneal_time=20)
    solver = dimod.IdentitySampler()
    response = solver.sample_qubo(q, num_reads=30, anneal_time=20)

    result = []
    for sample, energy in response.data(['sample', 'energy']):
        result.append(sample)
        result.append(energy)

    result.append(response.info) # view timings

    return result
```

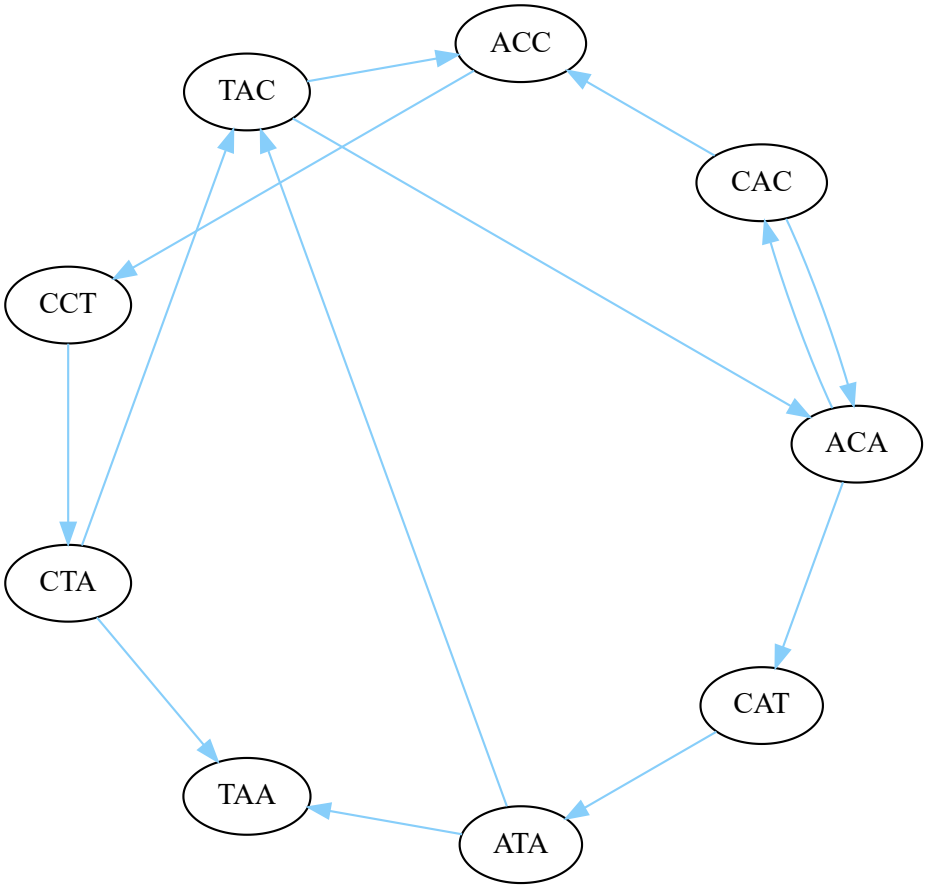
1. Hamiltonian path De Bruijn graph

```
#ツール読み込み
import dimod

seq = 'CATACACCTAA'                                                    # シーケンスの定義
kmer_len, suffix_len = 3, 2                                            # 塩基の長さと、結合する際の共通
adj, node_labels = DeBruijnDNA.make_debr(seq, kmer_len=kmer_len, suffix_len=suffix_len)   # De Brujin graphの作成

g, nodes = DeBruijnDNA.draw_graph(adj, node_labels, [], kmer_len = kmer_len)   # グラフ描画のためのデータ準備
g.engine = 'circo'                                                     # Graphvizの円形グラフで描画。Gra
Q = DeBruijnDNA.to_qubo(adj)                                           # 隣接行列をQUBOに変換

g                                                                      # グラフ描画
```



```
target_energy = -np.sqrt(len(Q))                                                    # QUBOの長さをもとにnumpy配列の平
# solution = solve_dwave(Q, API_KEY=API_KEY)
solution = solve_dwave(Q)                                                           # D-Waveによる処理
spins, energy = [solution[0][i] for i in solution[0].keys()], solution[1]           # グラフ描画のためのデータ準備

g, nodes = DeBruijnDNA.draw_graph(adj, node_labels, path_spins=spins, kmer_len=kmer_len)    # グラフの描画
g.engine = 'circo'
g
```

```
/usr/local/lib/python3.7/dist-packages/dimod/core/sampler.py:291: SamplerUnknownArgWarning: Ignoring unknown kwarg: 'ar
  return self.sample(bqm, **parameters)
```