
Algorithm 1 TSM-ROM-Based Transitional MCMC for 5-Species Biofilm Model

Inputs:

Experimental data y at observation times $\{t_i\}_{i=1}^{N_t}$ for 5 species
 Prior distribution $p(\theta)$ on 20-dimensional parameter vector θ
 Observation noise variance σ_{obs}^2
 TSM-ROM likelihood evaluator $\mathcal{L}_{\text{TSM}}(\theta) = \log p(y | \theta)$
 Number of particles N , number of stages S , number of chains C
 Target ESS ratio ρ_{ESS} , mutation settings (proposal covariance, steps per stage)

Initialization:

```

for  $c = 1, \dots, C$  do
    for  $i = 1, \dots, N$  do
        Draw initial particle  $\theta_i^{(0,c)} \sim p(\theta)$ 
        Compute log-likelihood  $\ell_i^{(0,c)} \leftarrow \mathcal{L}_{\text{TSM}}(\theta_i^{(0,c)})$ 
    end for
end for
```

Set initial inverse temperature $\beta_0 \leftarrow 0$

For stages $s = 1, \dots, S$:

Determine next inverse temperature $\beta_s > \beta_{s-1}$ by solving for

$$\text{ESS}(\beta_s) = \frac{\left(\sum_{i,c} w_i^{(s,c)}\right)^2}{\sum_{i,c} (w_i^{(s,c)})^2} \approx \rho_{\text{ESS}} CN,$$

where $w_i^{(s,c)} \propto \exp((\beta_s - \beta_{s-1}) \ell_i^{(s-1,c)})$.

for $c = 1, \dots, C$ **do**

(1) Re-weighting:

```

for  $i = 1, \dots, N$  do
    Compute incremental weight
```

$$\tilde{w}_i^{(s,c)} \leftarrow \exp((\beta_s - \beta_{s-1}) \ell_i^{(s-1,c)})$$

end for

Normalize weights $w_i^{(s,c)} \leftarrow \tilde{w}_i^{(s,c)} / \sum_j \tilde{w}_j^{(s,c)}$

(2) Resampling:

Resample $\{\theta_i^{(s-1,c)}\}_{i=1}^N$ according to $\{w_i^{(s,c)}\}$ to obtain equally weighted particles $\{\theta_i^{(s,c)}\}_{i=1}^N$

Set $\ell_i^{(s,c)} \leftarrow \ell_k^{(s-1,c)}$ for the corresponding resampled index k

(3) Mutation (MCMC moves at fixed β_s):

for $i = 1, \dots, N$ **do**

for mutation step $m = 1, \dots, M_s$ **do**

Propose $\theta^* \sim q_s(\cdot | \theta_i^{(s,c)})$ (e.g., Gaussian random walk)

Evaluate TSM-ROM log-likelihood

$$\ell^* \leftarrow \mathcal{L}_{\text{TSM}}(\theta^*)$$

Compute Metropolis–Hastings acceptance probability

$$\alpha = \min \left\{ 1, \exp \left(\beta_s (\ell^* - \ell_i^{(s,c)}) + \log p(\theta^*) - \log p(\theta_i^{(s,c)}) \right) \right\}$$

With probability α , set $\theta_i^{(s,c)} \leftarrow \theta^*$, $\ell_i^{(s,c)} \leftarrow \ell^*$

end for

end for

Optionally update TSM linearization point and ROM settings based on ROM error and current β_s

end for

Outputs:

Collection of posterior samples $\{\theta_i^{(S,c)}\}_{i=1,\dots,N}^{c=1,\dots,C}$ approximating $p(\theta | y)$

Posterior summaries (MAP, mean, credible intervals) and diagnostics (ESS, \hat{R} , ROM error)

Algorithm 2 5-Species Biofilm Forward Simulation

Inputs:

Parameter vector θ for the 5-species biofilm model
Initial state $x(0) \in \mathbb{R}_{\geq 0}^5$ (biofilm volumes of 5 species)
Final time T , time step Δt , observation times $\{t_i\}_{i=1}^{N_t}$
Experimental condition flags (Static/HOBIC, Commensal/Dysbiotic, etc.)

Step 1: Set up time grid and storage

Construct time grid $t_k = k \Delta t$ for $k = 0, \dots, K$ where $K = \lceil T/\Delta t \rceil$
Initialize state $x^{(0)} \leftarrow x(0)$
Initialize arrays to store $x^{(k)}$ and derived quantities (total biofilm volume, species of interest)

Step 2: Time stepping

for $k = 0, \dots, K - 1$ **do**

 Evaluate model right-hand side $f(x^{(k)}, \theta, t_k)$
 Update state by a time integration scheme (e.g. implicit Euler in implementation)

$$x^{(k+1)} \leftarrow x^{(k)} + \Delta t f(x^{(k+1)}, \theta, t_{k+1})$$

 Enforce physical constraints (e.g. clip negative components of $x^{(k+1)}$ to 0)

 Store $x^{(k+1)}$ and, if needed, total biofilm volume $\sum_{i=1}^5 x_i^{(k+1)}$

end for

Step 3: Extract outputs at observation times

for $i = 1, \dots, N_t$ **do**

 Locate time index k_i such that t_{k_i} is closest to t_i

 Define simulated observation $y^{\text{sim}}(t_i)$ from $x^{(k_i)}$ (e.g. selected species or total volume)

end for

Outputs:

Time series $\{x^{(k)}\}_{k=0}^K$ for all 5 species

Simulated observations $\{y^{\text{sim}}(t_i)\}_{i=1}^{N_t}$ for comparison with data

Algorithm 3 5種バイオフィルムモデルの前向きシミュレーション

入力:

5種バイオフィルムモデルのパラメータベクトル θ
初期状態 $x(0) \in \mathbb{R}_{\geq 0}^5$ (5種それぞれの初期バイオフィルム量)
終了時刻 T , 時間刻み Δt , 観測時刻列 $\{t_i\}_{i=1}^{N_t}$
実験条件フラグ (Static/HOBIC, Commensal/Dysbiotic など)

ステップ1: 時間グリッドと記録用配列の準備

時間グリッド $t_k = k \Delta t$ ($k = 0, \dots, K$, $K = \lfloor T/\Delta t \rfloor$) を構成する

状態を $x^{(0)} \leftarrow x(0)$ に初期化する

各時刻の $x^{(k)}$ および全体ボリューム $\sum_{i=1}^5 x_i^{(k)}$ などを保存する配列を用意する

ステップ2: 時間発展

for $k = 0, \dots, K - 1$ do

 モデル右辺 $f(x^{(k)}, \theta, t_k)$ を計算する

 実装では陰的オイラー法などの時間積分スキームにより次の状態を更新する:

$$x^{(k+1)} \leftarrow x^{(k)} + \Delta t f(x^{(k+1)}, \theta, t_{k+1})$$

 負の値を 0 にクリップするなど物理的制約を適用する

$x^{(k+1)}$ と必要であれば全体バイオフィルム量 $\sum_{i=1}^5 x_i^{(k+1)}$ を記録する

end for

ステップ3: 観測時刻での出力の抽出

for $i = 1, \dots, N_t$ do

 観測時刻 t_i に最も近い時間インデックス k_i を求める

 種ごとの値や総量からシミュレーション結果 $y^{\text{sim}}(t_i)$ を定義する

end for

出力:

5種それぞれの時系列 $\{x^{(k)}\}_{k=0}^K$

観測時刻におけるシミュレーション値 $\{y^{\text{sim}}(t_i)\}_{i=1}^{N_t}$

Algorithm 4 5種バイオフィルムモデルに対する TSM-ROM 付き Transitional MCMC

入力:

観測データ y (観測時刻 $\{t_i\}_{i=1}^{N_t}$ における5種の計測値)
 20次元パラメータベクトル θ に対する事前分布 $p(\theta)$
 観測ノイズ分散 σ_{obs}^2
 TSM-ROM 尤度評価器 $\mathcal{L}_{\text{TSM}}(\theta) = \log p(y | \theta)$
 粒子数 N , ステージ数 S , チェーン数 C
 目標 ESS 比 ρ_{ESS} , 突然変異ステップ数や提案共分散などの設定

初期化:

```
for  $c = 1, \dots, C$  do
    for  $i = 1, \dots, N$  do
        粒子を事前分布からサンプリング:  $\theta_i^{(0,c)} \sim p(\theta)$ 
        TSM-ROM により対数尤度を計算:  $\ell_i^{(0,c)} \leftarrow \mathcal{L}_{\text{TSM}}(\theta_i^{(0,c)})$ 
    end for
end for
```

逆温度の初期値を $\beta_0 \leftarrow 0$ とする

ステージ $s = 1, \dots, S$ に対して:

次の逆温度 $\beta_s > \beta_{s-1}$ を選ぶ.

その際, 増分 $\Delta\beta_s = \beta_s - \beta_{s-1}$ を調整し,

$$\text{ESS}(\beta_s) = \frac{\left(\sum_{i,c} w_i^{(s,c)}\right)^2}{\sum_{i,c} (w_i^{(s,c)})^2} \approx \rho_{\text{ESS}} CN$$

を満たすようにする. ここで $w_i^{(s,c)} \propto \exp(\Delta\beta_s \ell_i^{(s-1,c)})$ である.

```
for  $c = 1, \dots, C$  do
```

(1) 重み付け:

```
for  $i = 1, \dots, N$  do
```

増分重みを計算:

$$\tilde{w}_i^{(s,c)} \leftarrow \exp((\beta_s - \beta_{s-1}) \ell_i^{(s-1,c)})$$

end for

正規化して重みを得る: $w_i^{(s,c)} \leftarrow \tilde{w}_i^{(s,c)} / \sum_j \tilde{w}_j^{(s,c)}$

(2) リサンプリング:

重み $w_i^{(s,c)}$ に従って $\{\theta_i^{(s-1,c)}\}_{i=1}^N$ をリサンプリングし, 一様重みの新しい粒子集合 $\{\theta_i^{(s,c)}\}_{i=1}^N$ を得る
対応するインデックス k に対して $\ell_i^{(s,c)} \leftarrow \ell_k^{(s-1,c)}$ とする

(3) 突然変異 (固定 β_s での MCMC ステップ) :

```
for  $i = 1, \dots, N$  do
```

for mutation step $m = 1, \dots, M_s$ do

提案分布 (例: ガウスランダムウォーク) から $\theta^* \sim q_s(\cdot | \theta_i^{(s,c)})$ を生成

TSM-ROM 尤度を評価:

$$\ell^* \leftarrow \mathcal{L}_{\text{TSM}}(\theta^*)$$

メトロポリス-ヘイスティングの受理確率を計算:

$$\alpha = \min \left\{ 1, \exp(\beta_s (\ell^* - \ell_i^{(s,c)}) + \log p(\theta^*) - \log p(\theta_i^{(s,c)})) \right\}$$

確率 α で提案を受理し, 受理された場合は $\theta_i^{(s,c)} \leftarrow \theta^*$, $\ell_i^{(s,c)} \leftarrow \ell^*$ と更新

end for

end for

ROM 誤差および現在の β_s に基づき, 必要に応じて TSM の線形化中心や設定を更新する
end for

出力:

事後分布 $p(\theta | y)$ を近似するサンプル集合 $\{\theta_i^{(S,c)}\}_{i=1,\dots,N}^{c=1,\dots,C}$
 MAP・事後平均・信用区間などの要約統計と,
 ESS, \hat{R} , ROM 誤差などの診断指標
