

令和 2 年 6 月 15 日現在

機関番号：34316

研究種目：基盤研究(C) (特設分野研究)

研究期間：2016～2019

課題番号：16KT0138

研究課題名(和文) 生命科学におけるネットワーク結合力学系の大域的構造解明のための位相的計算理論

研究課題名(英文) Topological and computational method for dynamical systems for the global structure of biological sciences

研究代表者

岡 宏枝(國府宏枝)(Oka, Hiroe)

龍谷大学・理工学部・教授

研究者番号：20215221

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,600,000円

研究成果の概要(和文)：(A) 位相的計算理論による制御ネットワーク系のモース分解については、力学系の不安定ダイナミクスの情報を含む有限軌道の集合から得られる時系列データから、背後にある力学系の不安定不変集合の存在を証明する数学的な構造との関連性について調べた。  
 (B) 位相計算的方法により、生命科学でよく扱われる生体分子の制御ネットワーク結合系の一つである switching network とその特異摂動ネットワーク力学系のモース分解の研究を遂行した。  
 (C) 一般のネットワーク結合力学系のモース分解とその応用の研究について、遺伝子ネットワークの結合力学系の同期について考察し、またいくつかの関連する問題を扱った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

研究代表者はこれまで、分岐理論を用いた解析的アプローチやConley 指数などの力学系の位相不変量を用いたトポロジック的アプローチによる研究を行い、ホモロジー計算などの位相的方法に精度保証付き数値計算を組み合わせ、数学的に厳密で汎用性のあるアルゴリズムの構築を試みてきた。この方法をswitching systemsと言われる生体分子の制御ネットワーク結合系に適用し、遺伝子ネットワークなどの生物学的研究に新しい方法を与えることができる。また、この手法は、力学系の枠組みの新しい視点を構築し、数学的な新規性についても寄与している。

研究成果の概要(英文)：(A) Topological and computational method for dynamical systems is a computer-assisted method developed by the people including the author, in order to analyze the global structures of the dynamical systems and its bifurcations. From time series data obtained by complex network systems like gene regulatory networks, the author formulate the theory for reconstructing the global structure of the systems like Morse decomposition and also did some computation for Mirsky's model for circadian rhythms.

(B) In this project we apply this method to the switching systems which is one of the coupled neural regulatory networks of biomolecules, and give the mathematical formulation.

(C) We compute the persistence diagram from the time series data of the vector field of 3-dimensional turbulence, and obtain some characteristic structure.

研究分野：力学系理論

キーワード：力学系 制御ネットワーク 大域的構造 モース分解 Conley index

様式 C - 19 , F - 19 - 1 , Z - 19 ( 共通 )

### 1 . 研究開始当初の背景

力学系は決定論的な法則に従って時間発展するシステムを数学的に定式化したものであり、その対象は数学だけでなく自然科学、工学、社会科学などに現れる多くの興味深い非線形現象を含んでいる。その現象を理解するために考案された数理的モデルは、微分方程式、差分方程式、離散モデルなど多岐にわたり、解析のために様々な数学理論が展開されているが、一方、その非線形性の多様性から計算機による数値シミュレーションが不可欠である。しかし数値シミュレーションはあくまで近似計算であり、その結果の数学的解析による証明には限界があり注意深い評価と吟味が必要になる。これに対して、研究代表者はこれまで、分岐理論を用いた解析的アプローチや Conley 指数などの力学系の位相不変量を用いたトポロジックなアプローチによる研究を行い、ホモロジー計算などの位相的方法に精度保証付き数値計算を組み合わせ、数学的に厳密で汎用性のあるアルゴリズムの構築を試みてきた。

### 2 . 研究の目的

本研究「生命科学におけるネットワーク結合力学系の大域的構造解明のための位相的計算理論」の目的は、生命科学に由来するネットワーク結合力学系に対して、そのモース分解を初めとする大域的ダイナミクスの理解のための位相的計算理論を発展させること、および、それをいくつかの具体的な遺伝子制御ネットワーク系などに適用して、その有用性を検証することである。

研究代表者はこれまで、特異摂動的ベクトル場について、分岐理論を用いた解析的アプローチと Conley 指数などの力学系の位相不変量を用いた位相的アプローチによる研究を行ってきた。また、位相的方法に精度保証付き数値計算を融合させて力学系の大域的構造を、計算機を援用して解析する位相的計算理論の研究を行い、力学系の大域的構造の最も基本的な情報を Conley-Morse graph と呼ばれる有限有向グラフとそれに付随するデータの形で表現し力学系の大域的構造と分岐を捉える方法の研究に携ってきた。これにより、モース分解と呼ばれる、力学系の相空間の勾配的部分と回帰的部分への分解という形で、力学系の大域的構造の最も基本的な骨格の情報を抽出することが原理的に可能となった。また、この CM graph が力学系のパラメータの変動に伴って変化するときのダイナミクスの変化をある種の「分岐」と捉え、そこから得られる数学的な帰結についても結果を得た。

### 3 . 研究の方法

生命科学に現れるネットワーク結合力学系は多くのノードからなる大自由度力学系であり、そのダイナミクスを詳細に理解することは大変難しいと思われる。そのような系のモース分解は、そのもっとも大づかみな大域的ダイナミクスの情報を与えている。本研究では、以上のような予備の結果に基づき、生命科学に由来する広汎なネットワーク結合力学系に対して、そのモース分解を初めとする大域的ダイナミクスの理解のための位相的計算理論を発展させると共に、それをいくつかの具体的な遺伝子制御ネットワーク系などに適用して、その有用性を検証する。より具体的には、次の3つの課題を設定して研究を進める。

- (A) 位相的計算理論による制御ネットワーク系のモース分解の研究
- (B) switching network とその特異摂動ネットワーク力学系のモース分解の研究
- (C) より一般のネットワーク結合力学系のモース分解とその応用の研究

課題(A) では, Fiedler・望月らによる制御ネットワークのモース分解に対する位相的計算理論の整備・改良を進める. 特に実際の計算におけるパラメータの選択方法についての指針を明確にし, 具体的な生命科学のネットワーク結合力学系に適用する際の計算手法の有効性を高めるための研究を行う. 課題(B) では, 現在, 2要素に留まっている switching system のモース分解の持続性についての結果をより多くの要素の系に対して拡張することを目指すと共に, 特異摂動パラメータをどれくらいまで延長できるかを検討する. また逆に, より一般のなめらかな非線型性を持つネットワーク結合系を switching system で近似することによりモース分解を得る方法を開発することにも取り組む. 課題(C)では, 課題(A) と(B) で得られた知見を基にして, 生命科学に由来する広汎なネットワーク結合力学系に対して位相的計算理論に基づくモース分解の計算方法を拡張することを目指す. これについては極大コンパクト不変集合を力学系の解の関数空間の適当な射影の中に埋め込むというアイデアを持っており, その観点から課題(A)と(B)の結果を融合することがアイデアである. これを生命科学における具体的なネットワーク結合系に対して応用し, その有効性や改良すべき点を検証して理論の整備を図る.

#### 4. 研究成果

上述の課題(A)(B)(C)は相補的に研究を行った. 結果的には, (B)が一番進んだと言えるが, これは, (A)(C)とも密接に関係している.

##### (A) 位相的計算理論による制御ネットワーク系のモース分解の研究

力学系の不安定ダイナミクスの情報を含む有限軌道の集合から得られる時系列データから, 背後にある力学系の不安定不変集合の存在を証明する数学的な構造との関連性について調べる課題である. gene regulatory networkなどの複雑なネットワーク・ダイナミクスの時系列データから, 大域的構造を復元するための理論の構築と計算を行った. これは, Fiedler, Mochidukiらの研究における regulatory network の Feedback vertex set の考え方を時系列データに対して成り立つように拡張したものであり, この考えかたはアトラクタのみでなく力学系の大域的構造を再現するもので, Takens の力学系の時系列解析を発展させた新しいものである. この結果については, University of Auckland, AMS conference, MCA2017 他で講演した. 論文は執筆中である.

##### (B) switching network とその特異摂動ネットワーク力学系のモース分解の研究

位相計算的方法は, ダイナミクスの大域的構造とそのパラメータ変化を大づかみに捉える計算機援用解析の方法であり研究代表者らによって初めて得られたものである. この方法を switching system に適用した. switching system とは生命科学でよく扱われる生体分子の制御ネットワーク結合系を区分線形な常微分方程式系とそれの連続系への摂動系として捉えその性質を抽出したものであり, この分野における新しい視点を与えるものとして発展が期待される. 次元を2次元に制限した場合は, 論文[1]にまとめた. さらに, 高次元の場合に適用できるように条件を緩め, L. Ironi et al. の "Dynamics of activity regulated gene networks" の内容を数学的に定式化し, より強い結果をえた. この成果は, iciam の mini symposium で発表した. この mini symposium では, 共同研究者3名で, 式で与えられた制御ネットワーク結合系のみでなく, 実際のデータを扱うことも可能な一般的な枠組みを提案するもので, より広い regulatory network に対して, 新しい視点を与えたものである.

(C) より一般のネットワーク結合力学系のモース分解とその応用の研究

Chih-Wen Shih, Tseng, Jui-pinらと遺伝子ネットワークの結合力学系の同期について、プロジェクトを始めた。これは、Mochizuki, Fiedler たちのアイデアをいくつかの同じネットワーク系が結合した場合により精密な結果が得られないかを探るもので、switching system とも関係する。

以上の3つの目的を遂行する過程で、いくつかの関連した数学的な問題に取り組んだ。

一つ目は、circular persistence について研究した。これは、J. Bauer, M. Lesnick の “Induced Matchings of Barcodes and Algebraic Stability of Persistence” の内容が、中山の定理を用いて、quiver が circular な場合にも、いくつかの変更点とともに成り立つことを示したもので、力学系の冬の研究集会において発表した。

二つ目は、位相計算的方法に用いる位相不変量の Conley index に関してである。離散力学系とそのサスペンションとして得られる連続力学系の Conley index の関係を Mrozek の Conley index over the circle という観点から考察した。この結果は、2018 日本数学会年会で講演した。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計1件（うち査読付論文 1件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 TOMAS GEDEON, SHAUN HARKER, HIROSHI KOKUBU, KONSTANTIN MISCHAIKOW, HIROE OKA	4. 巻 339
2. 論文標題 GLOBAL DYNAMICS FOR STEEP SIGMOIDAL NONLINEARITIES IN TWO DIMENSIONS	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Physica D	6. 最初と最後の頁 18-38
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.physd.2016.08.006	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計8件（うち招待講演 5件/うち国際学会 5件）

1. 発表者名 Hiroe Oka
2. 発表標題 A remark on Conley indices over base
3. 学会等名 Algebraic Topology in Dynamics and Data 2018（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Hiroe Oka
2. 発表標題 Morse decompositions of the switching system and its smooth perturbation
3. 学会等名 武蔵野大学連携シンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hiroe Oka
2. 発表標題 Morse decomposition of regulatory networks via determining nodes
3. 学会等名 University of Aukland
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Hiroe Oka
2. 発表標題 Morse decomposition of regulatory networks via determining nodes
3. 学会等名 MCA2017 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Hiroe Oka
2. 発表標題 Conley Indices for continuous and discrete time dynamical systems
3. 学会等名 2018日本数学会年会、応用数学科分会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Hiroshi Kokubu (連携研究者)
2. 発表標題 Computer assisted methods for detecting global structure of dynamics
3. 学会等名 SCAN2016 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Hiroshi Kokubu
2. 発表標題 Morse decomposition of dynamical systems from time-series data
3. 学会等名 International Conference "Mathematical Analysis on Nonlinear PDEs" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Hiroe Oka
2. 発表標題 Morse decomposition of switching systems
3. 学会等名 9th International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM 2019) (招待講演) (国際学会) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

<a href="https://www.math.ryukoku.ac.jp/~oka/">https://www.math.ryukoku.ac.jp/~oka/</a> Welcome to Hiroe's Home Page! <a href="https://www.math.ryukoku.ac.jp/~oka/">https://www.math.ryukoku.ac.jp/~oka/</a>
---

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	国府 寛司  (Kokubu Hiroshi)		