

科学研究費補助金研究成果報告書

平成24年 5月21日現在

機関番号：14301

研究種目：若手研究（B）

研究期間：2009～2011

課題番号：21740283

研究課題名（和文） 物性理論的方法による古典確率過程の解析手法の開発と応用

研究課題名（英文） Development and applications of analytical methods for classical stochastic processes based on condensed matter physics

研究代表者

大久保 潤 (OHKUBO JUN)

京都大学・大学院情報学研究科・講師

研究者番号：70451888

研究成果の概要（和文）：

生命科学などとも関係する確率的な現象を研究するための数的手法について研究を実施した。確率過程と、物性理論において用いられている数的手法との形式的類似性に着目したことが本研究の特徴である。(1) 化学反応系や生態系を記述するために使われる確率過程と量子力学的定式化との関係性の研究、(2) 確率過程の動的振る舞いを記述するための計数統計に関する研究（幾何学的位相との関連、計数統計のための数値計算手法の提案）、といった基礎的な研究ほか、応用として遺伝子発現系に対する近似手法の提案をおこなった。

研究成果の概要（英文）：

In this study, analytical methods for classical stochastic processes were studied. Based on formal analogies with methods in condensed matter physics, the following two points were mainly investigated, i. e., (1) a relationship between quantum mechanical formalism and stochastic processes for chemical reactions and ecosystems, and (2) basics for counting statistics (its relation to geometric phases, and proposal of a numerical method). In addition, a new approximation scheme for gene regulatory systems was proposed. These studies are expected to be useful not only for physics, but also for life sciences.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2009年度	1,100,000	330,000	1,430,000
2010年度	800,000	240,000	1,040,000
2011年度	700,000	210,000	910,000
年度			
年度			
総計	2,600,000	780,000	3,380,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・数理物理・物性基礎

キーワード：揺らぎ、非平衡系、化学反応系、遺伝子発現系

1. 研究開始当初の背景

生物系、経済系、社会系などのさまざまな分野において、確率過程によるモデル化の重

要性は増している。例えば、車や人の渋滞、生物内における物質の輸送などを研究する「渋滞学」は、非対称単純排他過程と深い関

係をもつ。また、出生・死滅過程は、化学反応系や生態系における個体数の変動の研究など、広範囲に用いられている。

古典的な確率過程を研究する際に、量子系との類似性が有効になる場合がある。例えば非対称単純排他過程における量子スピン系との対応やペーテ仮説法の適用が挙げられる。量子力学的な効果を考えているわけではないが、数理的に似た構造が存在するために量子系で用いられている手法が有効に働くのである。化学反応系や生態系を記述するために用いられる出生・死滅過程は、量子力学におけるボソン系で用いられる生成・消滅演算子で記述できることが知られている。特に、反応拡散系に対する繰り込み群を援用した研究は広く行われている。

さらに、近年の実験技術の進展によって生命科学において「揺らぎ」の重要性が指摘されている。特に遺伝子発現ダイナミクスを確率過程と見なして研究することが、国内外を通じて盛んになってきた。遺伝子系は単純な出生・死滅過程ではなく、遺伝子の活性・不活性の状態に応じた内部状態をもつ複雑な確率過程である。現状では、多遺伝子が関与する複雑な場合の研究は、モンテカルロ法に頼らざるを得ない。これまでに2遺伝子系を題材として、コヒーレント状態を用いた近似的数値計算手法による研究を実施したが、さらに複雑な場合にも適用するためには、別の観点から研究を進める必要がある。複雑な確率過程はネットワーク上でのゲーム理論や生態系・社会系の研究においても需要がある。内部状態などを有する複雑な確率過程に対する解析的手法を開発することで、モンテカルロ法だけに頼らない研究が可能になることが期待される。

2. 研究の目的

本研究の目的は、主に物性理論で研究されてきた数理的手法との形式的類似性に着目し、確率過程に対する解析手法を研究することである。特に、量子力学における第2量子化法と類似した Doi-Peliti 法と呼ばれる数理的手法は、化学反応系を扱う際に有用であることが示されているが、数理的に不明である点も多い。また、確率過程において特定の遷移の回数を数える計数統計と呼ばれる枠組みについても、幾何学的位相という数理的手法との類似性が知られているが、具体的な計算を実施するのが難しい場合も知られている。これらの手法の数理的な基礎について研究を進めることで、新たな近似法や高速な数値計算手法の開発へとつなげることを目指す。

また、これらの研究を通して得られた知見を活かした応用研究まで視野に入れる。具体

的には、遺伝子発現系の確率モデルに対する近似手法の開発を実施する。

3. 研究の方法

適宜、数値実験による確認も実施しながら、数理的な基礎について検討を進める。特に Doi-Peliti 法と計数統計の二つを対象を絞り、数理的構造について調べるとともに、新しい応用を探る。さらに、高速な数値計算手法の提案については、モンテカルロ法によるシミュレーションもあわせて実施することにより、提案手法の有効性を示す。

遺伝子発現系に関する研究については、これまでも他の研究者によって用いられている確率モデルを使用して、モンテカルロ法に頼らずに済むような近似手法を提案する。そしてモンテカルロ法によるシミュレーションとの比較を通して、提案手法の有効性や適用可能範囲等について検討する。

4. 研究成果

Doi-Peliti 法と母関数法との対応関係を用いることによって、双対確率過程が自然に導出できることを示した。さらに、遺伝学などで用いられる確率過程や、熱伝導のモデルとして用いられる確率過程に対して、従来から知られていた双対確率過程及び双対関数を導出できることを確認した。双対確率過程を利用することで、一方の確率過程を解くことができれば、もう一方の確率過程に関する情報を得ることができる。したがって、解くのが困難な確率過程に関する研究に双対確率過程を利用することができる。今後、双対確率過程を導出する際に、Doi-Peliti 法を用いた方法が広く利用されることが期待される。

また、計数統計に関して非周期的な幾何学的位相との関係を明らかにしたほか、解析解を計算するのが困難な場合を想定し、数値計算手法を提案した。これにより、モンテカルロ法によるシミュレーションを実施することなく、連立常微分方程式を解くだけで、特定の遷移が生じる回数や高次モーメントを計算することができる。実際にポンプレントと呼ばれる現象を題材としてモンテカルロ法によるシミュレーションも実施し、提案手法の正当性を確認した(図1)。

また、遺伝子発現系に対する新しい近似手法を提案した。具体的には、遺伝子制御に関わる関数を適切な定数に置き換えるという近似を用いる。この方法により、例えば2つのタンパク質が結合して遺伝子の活性を制御する場合や、排他的な制御が行われる場合など、厳密解を導出できない場合においても近似的な解析解が得られるようになった。導

出された近似的な解析解とモンテカルロ法によるシミュレーションの結果を比較することで、定性的な振舞いがよく再現されることを確認した。さらに、計数統計の枠組みとこの近似手法を組み合わせることで、動的な情報に関する扱うことが可能となり、遺伝子の活性・非活性状態の遷移を議論するための近似的なモデルを導出することに成功した。

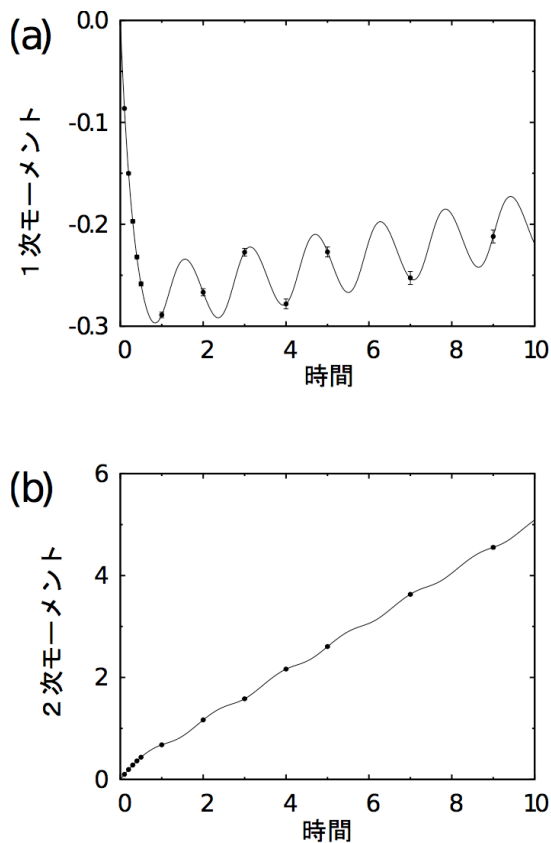


図 1：計数統計の枠組みを利用したポンパレントの計算。(a) 1次モーメント。(b) 2次モーメント。どちらも実線が連立常微分方程式により計算したものであり、誤差付きの点がモンテカルロ法によるシミュレーションから計算したもの。モンテカルロ法と比べて、連立常微分方程式による方法は高速な計算が可能である。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 8 件)

- ① Jun Ohkubo, Nonparametric model

reconstruction for stochastic differential equations from discretely observed time-series data, Phys. Rev. E, 査読有, Vol. 84, 2011, 066702

DOI: 10.1103/PhysRevE.84.066702

- ② Jun Ohkubo, Approximation scheme based on effective interactions for stochastic gene regulation, Phys. Rev. E., 査読有, Vol. 83, 2011, 041915

DOI: 10.1103/PhysRevE.83.041915

- ③ Jun Ohkubo and Thomas Eggel, Noncyclic and nonadiabatic geometric phase for counting statistics, J. Phys. A: Math. Theor., 査読有, Vol. 43, 2010, 425001

DOI:10.1088/1751-8113/43/42/425001

- ④ Jun Ohkubo and Thomas Eggel, Direct numerical method for counting statistics in stochastic processes, J. Stat. Mech., 査読有, (巻なし), 2010, P06013

DOI:10.1088/1742-5468/2010/06/P06013

- ⑤ Jun Ohkubo, Duality in interacting particle systems and boson representation, J. Stat. Phys., 査読有, Vol. 139, 2010, 454-465

DOI: 10.1007/s10955-009-9910-2

- ⑥ Kazunori Itakura, Jun Ohkubo, and Shin-ichi Sasa, Two Langevin equations in the Doi-Peliti formalism, J. Phys. A: Math. Theor., 査読有, Vol. 43, 2010, 125001

DOI: 10.1088/1751-8113/43/12/125001

- ⑦ Jun Ohkubo, Posterior Probability and Fluctuation Theorem in Stochastic Processes, J. Phys. Soc. Jpn., 査読有, Vol. 78, 2009, 123001

DOI: 10.1143/JPSJ.78.123001

- ⑧ Jun Ohkubo, Variational principle of counting statistics in master equations, Phys. Rev. E, 査読有, Vol. 80, 2009, 012101

DOI: 10.1103/PhysRevE.80.012101

[学会発表] (計 14 件)

- ① 大久保潤, Doi-Peliti 法と直交多項式について, 日本物理学会第 67 回年次大会, 2012 年 3 月 25 日, 関西学院大学西宮上ヶ原キャンパス
- ② 大久保潤, 非平衡, 生命, 情報の関係: 計数統計の視点から, 京都大学基礎物理学研究所研究会 情報統計力学の最前線, 2012 年 3 月 22 日, 京都大学

- ③ 大久保潤, 計数統計とその周辺, 第21回日本数理生物学会年会 企画シンポジウム「New theoretical approaches for stochastic phenomena in biology」, 2011年9月14日, 明治大学駿河台キャンパス
- ④ 大久保潤, 非平衡統計力学から見たナノデバイスの情報処理機能, 2011年春期第58回応用物理学関係連合講演会シンポジウム「ナノ光電子系と情報の融合が拓くシステムの質的変革」, 2011年3月26日, 神奈川工科大学 (震災のため中止となり, 講演予稿集の発行をもって発表成立となった)
- ⑤ 大久保潤, 遺伝子制御系の確率モデルにおける近似手法, 定量生物学の会 第三回年会, 2010年11月27-28日, 東京大学生産技術研究所
- ⑥ 大久保潤, Thomas Eggel, 計数統計における非周期的幾何学的位相について, 非平衡系の物理-非平衡ゆらぎと集団挙動-, 2010年11月19日, 京都大学基礎物理学研究所
- ⑦ 大久保潤, Thomas Eggel, 計数統計における非周期的幾何学的位相, 日本物理学会 2010年秋季大会, 2010年9月24日, 大阪府立大学中百舌鳥キャンパス
- ⑧ 大久保潤, 揺らぐ系における外場応答動力学への理論的アプローチ, 第7回AMO討論会, 2010年6月12日, つくば国際会議場
- ⑨ 大久保潤, Doi-Peliti 法による双対確率過程および双対関数の導出, 日本物理学会第65回年次大会, 2010年3月20日, 岡山大学
- ⑩ 大久保潤, Doi-Peliti 法と双対確率過程, 古典および量子ダイナミックス・非平衡統計力学に関するワークショップ, 2010年2月13日, 東京大学
- ⑪ 大久保潤, 量子力学における数理的手法の古典確率過程への応用, 第15回交流シミュレーションシンポジウム, 2009年12月3日, 名古屋大学
- ⑫ Jun Ohkubo, Pump Current as a Signal Transformation, 4th International workshop on Natural Computing, 2009年9月25日, 姫路市国際交流センター
- ⑬ Jun Ohkubo, Counting statistics for pump current induced by periodic perturbation, Symposium in “Frontiers in Nonequilibrium Physics”, 2009年7月31および8月1日, 京都大学
- ⑭ 大久保潤, ポンプカレントの計数統計と「コト」の物理学, 科研費特定領域研究「情報統計力学の深化と展開」研究会, 2009年7月6日, 北海道大学

6. 研究組織

(1) 研究代表者

大久保 潤 (OHKUBO JUN)

京都大学・大学院情報学研究所・講師

研究者番号：70451888