

令和元年6月4日現在

機関番号：12601

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2016～2018

課題番号：16K17780

研究課題名(和文) シグナル伝達系の情報熱力学

研究課題名(英文) Information thermodynamics for biochemical signal transduction

研究代表者

伊藤 創祐 (Ito, Sosuke)

東京大学・大学院理学系研究科(理学部)・講師

研究者番号：00771221

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,900,000円

研究成果の概要(和文)：本研究において、情報と熱力学の間の融合理論である情報熱力学を進展させ、シグナル伝達などの生体情報処理の基礎理論として発展させることができた。主に、情報処理を含んだ形での流れと力の関係であるオンサーガ相反関係の一般化や、因果推定の熱力学、また情報幾何と呼ばれる情報理論の微分幾何形式と熱力学の対応関係を構築することで、熱コストと速度の間のトレードオフ関係としての熱力学的な不確定性関係を導出することに成功した。これらの結果は、生体適応センサーや一般的な酵素反応に応用が可能であり、生体内のシグナル伝達系の定量的な理解に役立つと考えられる。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究成果は、情報理論と熱力学の融合理論である情報熱力学を進展させ、生体内のシグナル伝達の定量的な理解に役立てるための理論的な基盤を作ることである。この研究の発展によって、生体内で伝達される情報について熱力学的なコストとの関係から定量的に理解が可能となる。この研究の方向性は、低エネルギーコストで効率的な生体システムの理解に役立ち、工学的な実装の礎になると考えている。

研究成果の概要(英文)：In this study, we construct the unified theory of information and thermodynamics called information thermodynamics as a fundamental theory of biological information processing. We have derived the generalization of the Onsager reciprocal relation with information flow and the second law of thermodynamics in terms of the Granger causality. We have also derived a thermodynamic uncertainty relationship between thermodynamic cost and the speed from a view point of information geometry, that is a differential geometry of information theory. Our result is generally useful to understand the biological sensory adaptation and the enzyme reaction quantitatively.

研究分野：情報熱力学

キーワード：情報熱力学 シグナル伝達 情報幾何 不確定性関係 オンサーガ相反関係 移動エントロピー 熱力学第二法則 非平衡統計力学

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19、CK - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

研究開始当初、生体適応センサーの情報処理メカニズムにおける「熱」の役割が注目を集めていた。そして、この適応センサーの精度と熱の間にトレードオフの関係があることが、大腸菌の走化性のモデルで判明していた。このような状況で、報告者は熱力学第二法則を一般化することで、流れる情報と発生する熱の間のトレードオフの関係を導出した。この熱力学第二法則の一般化は、「情報熱力学」と呼ばれる分野の基礎になっている。

さらに報告者は大腸菌の走化性の適応センサーが「Maxwell のデーモン」と同様の情報処理する分子マシンであることに着目し、「情報熱力学」を大腸菌の走化性の適応センサーに応用する研究を行った。このような萌芽的な研究により、「情報熱力学」をシグナル伝達などの生体情報処理に応用する動きが世界的に広がりつつあった。

2. 研究の目的

当時の理論では「大腸菌の走化性の適応センサー」という一部のみしか生体情報処理の「情報熱力学」を用いた説明が進んでいなかったため、本研究「シグナル伝達系の情報熱力学」では「情報熱力学」の応用範囲をさらに広げてシグナル伝達系一般を取り扱えるようにするとともに、生体情報処理の普遍的な原理を探索することを目的とした。また物理的な制約のもとでの情報通信を議論する情報理論の枠組みを用いて、「情報熱力学」の新たな「効率」を開発することにより生体内情報処理に新たな知見を加えることも目的とした。

3. 研究の方法

報告者は、実際の研究において Schnakenberg のネットワーク理論、確率的な熱力学、Granger 因果の理論、および情報幾何の手法を用いながら、「情報熱力学」の理論を開拓した。その上で、適応センサーや酵素反応系などのシグナル伝達系のモデルにおいて、定量的な法則の模索を行った。研究当初は適応センサー系におけるシグナル伝達系で、通信と熱の効率や法則性についてより詳細な議論を行った。また、後半は情報幾何という手法を使って、「情報熱力学」の新しい展開を模索することで、今までにない新たな「効率」を議論するフレームワークの構築に取り組み、酵素反応などのより普遍的なシグナル伝達モデルで定量的な議論を行った。

4. 研究成果

主要な結果として、次の三つが挙げられる。

(1) 情報の流れを用いたオンサーガ相反関係の確立

従来の「情報熱力学」では、熱と情報の間の関係性としていわゆる熱力学第二法則の関係を一般化することしかできていなかった。線形不可逆熱力学の文脈では第二法則と関係が深いオンサーガ相反関係と呼ばれる力と流れの間関係式が存在するが、このオンサーガ相反関係まで情報を含んだ形で一般化できるかは自明ではなかった。本研究により、マルコフネットワークにおける熱力学理論(Schnakenberg ネットワーク理論)を拡張することで、オンサーガ相反関係を情報の流れと力を含んだ形まで一般化することに成功した(論文[6])。この一般化されたオンサーガ相反関係は、シグナル伝達系の適応センサーのモデルである4状態モデルにおいて成立するため、シグナル伝達中の情報と熱の間関係性を新たに見出したと言える。

(2) 因果推定の熱力学と適応センサーの効率

今までの「情報熱力学」では移動エントロピーという情報の流れの指標が、一般化された熱力学第二法則に出てくることが、報告者によって見出されていた。この移動エントロピーは Granger 因果と呼ばれる推論手法との等価性が知られているため、本研究では因果推定の文脈で「情報熱力学」を考察し直すことにした(論文[5])。その結果、通常の移動エントロピーだけでなく、時間を逆向きして定義した移動エントロピーも同様に熱力学第二法則の一般化に現れることを示すことができた。この量は隠れマルコフであるか否かを表現する情報量になっており、さらにこの量と通常の移動エントロピーとの比は、シグナル伝達における適応センサーの効率として提案されていた Sensory capacity と呼ばれる量で表されることがわかった。

(3) 情報幾何の熱力学的解釈と熱力学的不確定性関係

従来の「情報熱力学」を超えて新規な法則性を発見するため、情報幾何とよばれる微分幾何をベースにした情報理論を用いて、熱力学と幾何学の関係を見出した(論文[1], プレプリント[2], [3])。オンサーガ相反関係の研究と同様に Schnakenberg ネットワーク理論をベースにして議論することにより、情報幾何の幾何学量はマルコフ過程において熱力学量と結びつくことを明らかにし、さらにこの幾何学と熱力学の対応関係から、時間と熱コストの間のトレードオフ関係として「熱力学的な不確定性関係」を導出することに成功した。これにより従来の「情報熱力学」にはなかった新たな「効率」を見出し、さらに酵素反応などのダイナミックなシグナル伝達過程における「効率的な経路」を定義することに成功した。またレート方程式で記述される酵素反応のモデルで、この「効率」が有効であることを示した。この研究は次世代の「情報熱力学」として極めて有望であると考えている。

5 . 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計 7 件)

- [1] Sosuke Ito “ Stochastic thermodynamic interpretation of information geometry ”
Physical Review Letters 121, 030605 (2018). 査読あり
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.121.030605>
- [2] 伊藤 創祐 “ 講義ノート - ネットワーク上の情報熱力学とその生体情報処理への応用 ” 物
性研究・電子版, 6(4), 064232 (2017). 査読なし
DOI: 10.14989/229054
- [3] 伊藤 創祐, 沙川 貴大 “ 最近の研究から - ネットワーク上の情報熱力学とその生体情報
処理への応用 ” 日本物理学会誌, 72, 9 (2017). 査読なし
https://doi.org/10.11316/butsuri.72.9_658
- [4] 伊藤 創祐 “ トピックス(新進気鋭シリーズ)- 適応センサー中のマクスウェルのデーモ
ン ” 生物物理, 56, 232 (2016). 査読なし
<https://doi.org/10.2142/biophys.56.232>
- [5] Sosuke Ito “ Backward transfer entropy: Informational measure for detecting hidden
Markov models and its interpretations in thermodynamics, gambling and causality ”
Scientific Reports 6, 36831 (2016). 査読あり
<https://doi.org/10.1038/srep36831>
- [6] Shumpei Yamamoto, Sosuke Ito, Naoto Shiraishi and Takahiro Sagawa “ Linear
Irreversible Thermodynamics and Onsager Reciprocity for Information-driven
Engines ” Physical Review E 94, 052121 (2016). 査読あり
<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.94.052121>
- [7] Nobuyuki Matsumoto, Kentaro Komori, Sosuke Ito, Yuta Michimura and Yoichi
Aso, “ Directed measurement of optical trap-induced decoherence ” Physical Review A 94,
033822 (2016). 査読あり
<https://doi.org/10.1103/PhysRevA.94.033822>

〔学会発表〕(計 23 件)

- [1] 伊藤 創祐 “ 情報幾何とマルコフ過程の熱力学 ”, 2019 年電子情報通信学会総合大会, 早
稲田大学, 2019 年 3 月 19-22 日.
- [2] 伊藤 創祐 “ 熱力学第二法則と情報熱力学第二法則の情報幾何による統一的フレームワー
ク ”, 日本物理学会 第 74 回年次大会, 九州大学, 2019 年 3 月 14-17 日.
- [3] Sosuke Ito, “ Thermodynamic speed limits for biochemical reaction and its information
geometric interpretation ”, Winter Q-bio, Oahu, USA, Feb. 18-Feb. 22, 2019.
- [4] Sosuke Ito, “ Stochastic thermodynamics and information geometry ”, APEF 2018, Tokyo,
Japan, Nov. 12-Nov. 15, 2018.
- [5] Sosuke Ito, “ Information geometry and thermodynamic uncertainty for biochemical
process ”, The 56th Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, Okayama, Japan,
Sep. 15-Sep. 17, 2018.
- [6] 伊藤 創祐 “ 情報幾何の確率的熱力学による解釈と熱力学不確定性関係 ”, 日本物理学会
2018 年 秋季大会, 同志社大学, 2018 年 9 月 9-12 日.
- [7] Sosuke Ito, “ Stochastic thermodynamic interpretation of information geometry ”, Big
data analysis from a dynamical systems point of view, Hokkaido, Japan, May. 10, 2018.
- [8] 伊藤 創祐 “ Stochastic thermodynamic interpretation of information geometry ”, 若
手研究会「統計物理学とその周辺」, 東京大学, 2018 年 3 月 1-2 日.
- [9] 伊藤 創祐 “ 情報熱力学の進展: 細胞内ネットワーク及び情報幾何への拡張 ”, 細胞内ネ
ットワークのダイナミクス~生物学と数理科学の協働~, 東北大学, 2018 年 1 月 31 日-2 月 1 日.
- [10] Sosuke Ito, “ Stochastic thermodynamics of information ”, Frontiers of complex

systems science: soft matters, statistical physics, and big data, Taipei, Taiwan, Jan. 22-23, 2018.

[11] Sosuke Ito, "Thermodynamics and information geometry", The 18th RIES-Hokudai Symposium, Sapporo, Nov. 30-Dec. 1, 2017.

[12] 伊藤 創祐 "生化学系の情報熱力学", 第60回 自動制御連合講演会, 電気通信大学, 2017年11月10-12日.

[13] 伊藤 創祐 "生化学時計の情報熱力学", 「理論と実験」2017, 広島大学, 2017年10月6-7日.

[14] 伊藤 創祐 "Langevin系の熱力学, 情報熱力学", Perspectives of Nonlinear Phenomena in Random and Non-autonomous Dynamics, 京都大学, 2017年9月28-29日.

[15] 伊藤 創祐 "生化学時計の情報熱力学", 日本物理学会 2017年 秋季大会, 岩手大学, 2017年9月12-24日.

[16] Sosuke Ito, "Information thermodynamic study of a biochemical clock", The 55th Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, Kumamoto, Japan, Sep. 19-Sep. 21, 2017.

[17] 伊藤 創祐 "生体適応センサーの情報熱力学", 日本神経回路学会 時限研究会 2017, 京都大学, 2017年8月25日.

[18] 伊藤 創祐 "ネットワーク上の情報熱力学と生体シグナル伝達への応用", 第62回物性若手夏の学校 集中ゼミ, 岐阜, 2017年7月25-29日.

[19] Sosuke Ito, "Thermodynamics of information on biochemical signaling networks", Deciphering complex energy landscape and kinetic network from single molecules to cells: a new challenge to make theories meet experiments, Dijon, France, Sep. 3-8, 2017.

[20] 伊藤 創祐 "情報熱力学とギャンブルの情報理論のアナロジー", 日本物理学会 2017年 春季大会, 大阪大学, 2017年3月17-20日.

[21] 伊藤 創祐 "情報熱力学の展開と生体系への応用", 日本物理学会 2017年 春季大会 若手奨励賞受賞記念講演, 大阪大学, 2017年3月17-20日.

[22] Sosuke Ito, "Maxwell's demon in biochemical signal transduction with feedback loop", DutchBiophysics 2016, Veldhoven, Netherlands, Oct. 3-Oct. 4, 2016.

[23] Sosuke Ito, "Backward transfer entropy: Informational measure of non hidden-Markov property", Statphys26, Lyon, France, Jul. 18-Jul. 22, 2016.

〔図書〕(計 2件)

[1] Sosuke Ito and Takahiro Sagawa "Information flow and entropy production on Bayesian networks", "Mathematical Foundations and Applications of Graph Entropy", Wiley, 2016. (ISBN: 978-3-527-33909-9) 63-100.

[2] Sosuke Ito "Information Thermodynamics on Causal Networks and its Application to Biochemical Signal Transduction", Springer, 2016. (ISBN: 978-981-10-1664-6).133pages

〔産業財産権〕

出願状況(計 0件)

名称:
発明者:
権利者:
種類:
番号:
出願年:
国内外の別:

取得状況(計 0件)

名称:
発明者:
権利者:
種類:
番号:
取得年:
国内外の別:

〔その他〕

プレプリント

- [1] Matthijs Meijers, Sosuke Ito, and Pieter Rein ten Wolde “ Behavior of information flow near criticality ” arXiv:1906.00787 (2019).
- [2] Sosuke Ito “ Unified framework for the second law of thermodynamics and information thermodynamics based on information geometry ” arXiv:1810.09545 (2018).
- [3] Sosuke Ito and Andreas Dechant “ Stochastic time-evolution, information geometry and the Cramer-Rao Bound ” arXiv:1810.06832 (2018).

プレスリリース

- [4] 情報の幾何学から熱力学的な不確定性原理を発見~生体内の“ ゆらく”化学反応”による情報伝達の普遍的な理解へ~ 北海道大学, https://www.hokudai.ac.jp/news/180719_pr.pdf (2018).

招待セミナー

- [5] 伊藤創祐 “ Stochastic thermodynamics of information ”, ARAYA Seminar, ARAYA Inc., 2018年3月2日.

集中講義

- [6] 伊藤創祐 “ 確率過程における熱力学と情報理論の関わり ”, 京都大学, 2019年1月29-30日.

6 . 研究組織

該当なし

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。