

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 6 月 21 日現在

機関番号：12601

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2013～2015

課題番号：25800217

研究課題名(和文) 自律的情報処理を行う分子機械の非平衡統計力学に基づく研究

研究課題名(英文) Nonequilibrium statistical-mechanical study of molecular machines with autonomous information processing

研究代表者

沙川 貴大 (Sagawa, Takahiro)

東京大学・工学(系)研究科(研究院)・准教授

研究者番号：60610805

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,200,000円

研究成果の概要(和文)：自律的に動作する分子マシンの研究は、非平衡統計力学の重要な研究テーマであるばかりでなく、生体分子の動作原理を解明するうえでも重要な役割を果たす。本研究ではとくに情報処理に焦点をあて、自律的な情報処理を行う分子マシンの一般論の構築と、実際の生体情報処理への応用の研究を行った。その結果として、「ゆらぎの定理」と呼ばれる非平衡統計力学の関係式に情報流を取り入れた、新しい一般理論の構築に成功した。これは情報と熱力学を融合させる非平衡統計力学の基本原則の観点から興味深い。さらに、それを生体内のシグナル伝達に応用し、大腸菌の走化性において情報流の果たす役割を解明することに成功した。

研究成果の概要(英文)：The investigation of autonomous molecular machines attracts much interest not only in terms of nonequilibrium statistical mechanics but also quantitative biology. In this study, I focus on the role of autonomous information processing in molecular machines, and constructed a general thermodynamic theory of autonomous information processing. I have derived a generalized fluctuation theorem including information flow, which leads to the second law of thermodynamics with autonomous information processing. This has revealed the fundamental role of information flow in nonequilibrium statistical mechanics. Furthermore, I have applied the general theory to biochemical signal transduction, and found the relationship between information flow and robustness of adaptation of bacterial chemotaxis.

研究分野：統計力学

キーワード：ゆらぎの定理 情報熱力学 シグナル伝達

1. 研究開始当初の背景

(1) 熱ゆらぎの大きな環境下において、分子モーターなどの生体分子機械は、高いエネルギー効率で所望の動作を確率的に実現していると考えられている。そのメカニズムの解明は、生物物理学のみならず、非平衡統計力学の基本原則の観点からも重要な問題である。しかしこのような系について、「情報」の役割を十分に取り入れた理論的な研究は、まだほとんどなされていなかった。

(2) 一方、私は本課題の研究開始時点までに、二つの系の間の相関を表す「相互情報量」によって情報を定量化し、非平衡関係式などを一般化した。その結果として、測定とフィードバックなどの情報処理を行う熱機関（いわばマクスウェルのデーモン）についての非平衡統計力学の一般論（いわば情報熱力学）を構築することに成功した。しかしこれまでの研究では、たとえばデーモンはコンピュータで熱機関はコロイド粒子というように、両者は完全に分離されており、コンピュータが外部から駆動されるなど非自律的な状況を想定していた。一方、ゆらぎの大きな環境下でデーモンと熱期間があわせて自律的に動作する情報処理システムの非平衡統計力学的研究は、まだほとんどなされていなかった。

2. 研究の目的

以上のような背景に基づいて、本研究の目的は、熱ゆらぎにさらされた環境下で、シグナル伝達のような自律的な情報処理を行う分子機械について、理論的研究を行うことである。「ゆらぎの定理」などの非平衡関係式を自律的な情報処理へと一般化し、さらに生体分子機械などの具体的なモデルについての研究も並行して行う。それらに基づいて、どのようなメカニズムで自律的な情報処理が可能になるのか、情報処理の速度やエネルギー効率などの間にどのような関係があるのか、などを明らかにすることを目的とする。

3. 研究の方法

一般論の構築と具体的なモデルの研究を並行して行う。一般論については、まず「ゆらぎの定理」などの非平衡関係式を、自立的な情報処理に一般化する。その際、情報の流れ（情報流）や多体相関をどう特徴づけるかについて、情報理論の知見を活用する。一方、より具体的な分子機械について、内部自由度をもつランジュバン系などによってモデル化して研究する。生体分子機械は、複雑なためモデル化が必ずしも容易ではないが、単分子測定などの実験によって知られている知見を活用する。これらの一般論と具体的なモデルの研究の結果を総合することで、自律的な情報処理の一般的なメカニズムを明らかにする。

4. 研究成果

上記の研究手法に基づき、研究はほぼ当初の期待通りに進行し、目標は十分に達成されたと考えられる。具体的な研究成果は以下の通りである。(1) から (4) で自律的な情報処理の非平衡統計力学の一般論を構築し、(5) と (6) で具体的な生体分子機械への応用を議論した。

(1) 複数の自由度が複雑に相互作用して情報交換を行っている状況について、ゆらぎの定理と熱力学第二法則を拡張した。その際、複数の系の複雑な相互作用を特徴づけるために、ベイジアンネットワークと呼ばれる数学的手法を用いた。多体相関を含む情報の流れは、transfer entropy と呼ばれる概念によって定量化した。その結果、自律的な情報処理のように、従来の情報熱力学を適用できなかった状況にも、ゆらぎの定理と熱力学第二法則を一般化することに成功した。

(2) さらに、自律的な情報処理を行う熱機関（いわば自律的なマクスウェルのデーモン）について、上記 (1) とは異なるタイプのゆらぎの定理を導出した。その際、transfer entropy ではなく、dynamic information flow と呼ばれる特別なタイプの相互情報量を用いて、情報流を定量化した。その結果として得られた熱力学第二法則の一般化は、(1) で得られたものよりも不等式として強いものになった。

(3) 以上で構築した自律的な情報処理の熱力学と、従来よく研究されていた非自律的な情報処理の熱力学の関係を明らかにした。具体的には、両者の間をつなぐようなモデルを導入し、自律的な情報処理のゆらぎの定理と第二法則を、非自律的な場合のある種の極限として理解できることを示した。

(4) 以上で研究した情報処理の熱力学は、自律的な場合も非自律的な場合も、「測定とフィードバック」のフォーマリズムに基づいていた。一方、「情報浴」と呼ばれる概念に基づいた、情報熱力学の別の定式化も提案されていた。そこで本研究では、両者がある意味で等価であることを示した。さらに、「測定とフィードバック」のフォーマリズムを用いたほうが、「情報浴」を用いるよりも、不等式として強い第二法則が導けることを示した。

(5) F1-TAPase と呼ばれる自律的な生体分子機械についての研究を行った。この分子機械は熱力学効率が高く、さらに内部散逸がほぼゼロであることが実験的に知られていた。我々は、この実験事実を定量的に説明するモデルを提案し、さらに別の実験状況についての予言も行った。我々のモデルは、従来あまり理論的には研究されてこなかった分子機械の内部自由度を明示的に取り入れたもの

になっている。F1-ATPaseは情報処理を行っているわけではないが、複雑な自由度を持つ自律的な熱機関である。そのためこの研究結果は、自律的な情報処理を行う生体分子機械の研究の基礎となると考えられる。

(6) 大腸菌などの細胞内のシグナル伝達においては、しばしばフィードバックループがあることが知られている。我々は、大腸菌の走化性におけるシグナル伝達をランジュバン系でモデル化し、そこに(1)で得られた一般化された第二法則を適用した。その結果、環境のノイズに対するシグナル伝達の頑健性が、フィードバックループ内を流れる情報流 (transfer entropy) で特徴付けられることを明らかにした。さらに、現実的なパラメータの値でシミュレーションを行ったところ、走化性のシグナル伝達は通常熱力学効率は高くないが、情報熱力学的な効率が高いことが明らかになった。

以上のように本研究では、自律的な情報処理の熱力学の一般論を構築し、それが生体情報処理の理解に実際に有用であることを示した。これは情報処理を伴う系の非平衡統計力学の基礎原理の観点から興味深いのみならず、シグナル伝達の効率などを定量的に研究する生物物理学においても広く応用されていくことが期待される。

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 22 件)

① Aki Kutvonen, Takahiro Sagawa, and Tapio Ala-Nissila, "Thermodynamics of information exchange between two coupled quantum dots", *Physical Review E*, 査読有, 93, 2016, 032147/1-7, DOI:http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.93.032147

② Naoto Shiraishi, Takumi Matsumoto, and Takahiro Sagawa, "Measurement-feedback formalism meets information reservoirs", *New Journal of Physics*, 査読有, 18, 2016, 013044/1-8, DOI:10.1088/1367-2630/18/1/013044

③ Sosuke Ito and Takahiro Sagawa, "Maxwell's demon in biochemical signal transduction with feedback loop", *Nature Communications*, 査読有, 6, 2015, 7498/1-6, DOI:10.1038/ncomms8498

④ Kiyoshi Kanazawa, Tomohiko G. Sano, Takahiro Sagawa, and Hisao Hayakawa,

"Asymptotic Derivation of Langevin-like Equation with Non-Gaussian Noise and Its Analytical Solution" *Journal of Statistical Physics*, 査読有, 160, 2015, 1294-1335, DOI:10.1007/s10955-015-1286-x

⑤ Naoto Shiraishi, Sosuke Ito, Kyogo Kawaguchi, and Takahiro Sagawa, "Role of measurement-feedback separation in autonomous Maxwell's demons", *New Journal of Physics*, 査読有, 17, 2015, 045012/1-11 DOI: 10.1088/1367-2630/17/4/045012

⑥ Kiyoshi Kanazawa, Tomohiko G. Sano, Takahiro Sagawa, and Hisao Hayakawa, "Minimal Model of Stochastic Athermal Systems: Origin of Non-Gaussian Noise", *Physical Review Letters*, 査読有, 114, 2015, 090601/1-6, DOI: 10.1103/PhysRevLett.114.090601

⑦ Juan M. R. Parrondo, Jordan M. Horowitz, and Takahiro Sagawa, "Thermodynamics of information", *Nature Physics*, 査読有, 11, 2015, 131-139, DOI:10.1038/nphys3230

⑧ Naoto Shiraishi and Takahiro Sagawa, "Fluctuation theorem for partially masked nonequilibrium dynamics", *Physical Review E*, 査読有, 91, 2015, 012130/1-7, DOI: 10.1103/PhysRevE.91.012130

⑨ Kiyoshi Kanazawa, Takahiro Sagawa, and Hisao Hayakawa, "Energy pumping in electrical circuits under avalanche noise", *Physical Review E*, 査読有, 90, 2014, 012115/1-8, DOI:10.1103/PhysRevE.90.012115

⑩ J. V. Koski, V. F. Maisi, T. Sagawa, and J. P. Pekola, "Experimental Observation of the Role of Mutual Information in the Nonequilibrium Dynamics of a Maxwell Demon" *Physical Review Letters*, 査読有, 113, 2014, 030601/1-5, DOI:10.1103/PhysRevLett.113.030601

⑪ Kyogo Kawaguchi, Shin-ichi Sasa, and Takahiro Sagawa, "Nonequilibrium Dissipation-free Transport in F1-ATPase and the Thermodynamic Role of Asymmetric Allostereism", *Biophysical Journal*, 査読有, 106, 2014, 2450-2457, DOI:10.1016/j.bpj.2014.04.034

⑫ Jordan M. Horowitz and Takahiro Sagawa, "Equivalent Definitions of the Quantum

Nonadiabatic Entropy Production”, Journal of Statistical Physics, 査読有, 156, 2014, 55-65,
DOI:10.1007/s10955-014-0991-1

⑬ Takahiro Sagawa, “Thermodynamic and Logical Reversibilities Revisited” Journal of Statistical Mechanics, 査読有, P03025, 2014, 1-33,
DOI:10.1088/1742-5468/2014/03/P03025

⑭ Takahiro Sagawa and Masahito Ueda, “Role of mutual information in entropy production under information exchanges”, New Journal of Physics, 査読有, 15, 2013, 125012/1-23
doi:10.1088/1367-2630/15/12/125012

⑮ Jung Jun Park, Kang-Hwan Kim, Takahiro Sagawa, and Sang Wook Kim, “Heat Engine Driven by Purely Quantum Information” Physical Review Letters, 査読有, 111, 2013, 230402/1-5,
DOI:10.1103/PhysRevLett.111.230402

⑯ Sosuke Ito and Takahiro Sagawa, “Information Thermodynamics on Causal Networks”, Physical Review Letters, 査読有, 111, 2013, 180603/1-6,
DOI: 10.1103/PhysRevLett.111.180603

⑰ Sang Wook Kim, Kang-Hwan Kim, Takahiro Sagawa, Simone De Liberato, and Masahito Ueda, “Kim et al. Reply:”, Physical Review Letters, 査読有, 111, 2013, 188902-1,
DOI:10.1103/PhysRevLett.111.188902

⑱ Tatsuro Yuge, Takahiro Sagawa, Ayumu Sugita, and Hisao Hayakawa, “Geometrical Excess Entropy Production in Nonequilibrium Quantum Systems”, Journal of Statistical Physics, 査読有, 153, 2013, 412-441,
DOI:10.1007/s10955-013-0829-2

⑲ J. V. Koski, T. Sagawa, O-P. Saira, Y. Yoon, A. Kutvonen, P. Solinas, M. Möttönen, T. Ala-Nissila, and J. P. Pekola, “Distribution of entropy production in a single-electron box” Nature Physics, 査読有, 9, 2013, 644-648,
doi:10.1038/nphys2711

⑳ Jordan M. Horowitz, Takahiro Sagawa, and Juan M. R. Parrondo, “Imitating Chemical Motors with Optimal Information Motors” Physical Review Letters, 査読有, 111, 2013, 010602/1-5,
DOI:10.1103/PhysRevLett.111.010602

㉑ Kiyoshi Kanazawa, Takahiro Sagawa, and Hisao Hayakawa, “Heat conduction induced by non-Gaussian athermal fluctuations” Physical Review E, 査読有, 87, 2013, 052124/1-10,
DOI: 10.1103/PhysRevE.87.052124

㉒ Ryotaro Inoue, Shin-Ichi-Ro Tanaka, Ryo Namiki, Takahiro Sagawa, and Yoshiro Takahashi, “Unconditional Quantum-Noise Suppression via Measurement-Based Quantum Feedback” Physical Review Letters, 査読有, 110, 2013,
DOI: 10.1103/PhysRevLett.110.163602

[学会発表] (計 25 件)

① T. Sagawa, “Nonequilibrium thermodynamics of quantum information”, UTokyo-ANU Workshop on Quantum Information and Control, 2016年3月9日, 東京大学本郷キャンパス(東京都文京区).

② 沙川貴大, 熱的な量子純粋状態におけるゆらぎの定理, 第4回統計物理学懇談会, 2016年3月7日~8日, 学習院大学(東京都豊島区).

③ 沙川貴大, 熱的な量子純粋状態におけるゆらぎの定理, 量子論の諸問題と今後の発展(QMKEK6), 2016年2月17日~2016年2月18日(18日発表), 高エネルギー加速器研究機構(KEK)(茨城県つくば市).

④ T. Sagawa, “Thermodynamics of information and its application to biological signal transduction”, Toyota Physical & Chemical Research Institute Workshop “Entropy, Information and Control”, 2016年1月8日~2016年1月13日(8日発表), 東京大学生産技術研究所(東京都目黒区).

⑤ T. Sagawa, “Thermodynamics of Autonomous Information Processing”, KIAS Workshop on Quantum Information and Thermodynamics, 2015年11月25日~2015年11月28日(27日発表), Busan(Korea).

⑥ 沙川貴大, 情報熱力学の細胞内シグナル伝達への応用, 山田研究会「生物と非生物をつなぐ」, 2015年11月16日~18日(16日発表), ラフォーレ修善寺(静岡県伊豆市).

⑦ T. Sagawa, “Thermodynamics of Autonomous Information Processing and its Application to Biological Signal Transduction”, International Symposium on Fluctuation and Structure out of Equilibrium 2015 (SFS2015), 2015年8月20日~2015年8月23日(21日発表), 京都大

学芝蘭会館稲盛ホール(京都府京都市).

⑧ T. Sagawa, "Maxwell's Demon in Biochemical Signal Transduction", New Frontiers in Non-equilibrium Physics 2015, 2015年7月21日~2015年8月23日(7月28日発表), 京都大学基礎物理学研究所(京都府京都市).

⑨ T. Sagawa, "Nonequilibrium Thermodynamics of Quantum Information Processing", The 10th Principles and Applications of Control in Quantum Systems Workshop 2015 (PRACQSYS 2015), 2015年7月20日~2015年7月24日, Sydney(Australia).

⑩ 沙川貴大, 情報熱力学とその細胞内シグナル伝達への応用, 新学術領域研究「ゆらぎと構造」第2回公開シンポジウム, 2015年5月1日, 東京大学本郷キャンパス小柴ホール(東京都文京区).

⑪ T. Sagawa, "Thermodynamics of Nonequilibrium Systems with Feedback Control", March Meeting 2015 of the American Physical Society (an invited session on "Thermodynamics of Information Processing"), 2015年3月2日~2015年3月6日(6日発表), San Antonio, Texas(US).

⑫ T. Sagawa, "Fluctuation Theorem for Information Processing", 2015 Berkeley Mini Statistical Mechanics Meeting, 2015年1月9日~2015年1月11日(10日発表), Berkeley, California(US).

⑬ T. Sagawa, "Nonequilibrium Thermodynamics of Quantum Information Processing", Yukawa International Seminar 2014 (YKIS2014): Nonequilibrium Phenomena in Novel Quantum States, 2014年12月3日~2015年12月5日(4日発表), 京都大学基礎物理学研究所(京都府京都市).

⑭ T. Sagawa, "Information Thermodynamics on Causal Networks", Thermodynamics, Large deviation, and Transportation, 2014年9月17日~2014年9月18日(18日発表), 京都大学基礎物理学研究所(京都府京都市).

⑮ 沙川貴大, 量子情報理論と熱力学, 基礎研究会「若手のための量子情報基礎セミナー」, 2014年8月8日~10日(9日発表), 京都大学(京都府京都市).

⑯ T. Sagawa, "Quantum-information thermodynamics", YITP Workshop on Quantum Information Physics (YQIP2014), 2014年8月4日~2014年8月7日(4日発表), 京都大学基礎物理学研究所(京都府京都市).

⑰ T. Sagawa, "Information Thermodynamics on Causal Networks", The 6th KIAS Conference on Statistical Physics "Nonequilibrium Statistical Physics of Complex Systems (NSPCS14)", 2014年7月8日~2014年7月11日(10日発表), Seoul(Korea).

⑱ 沙川貴大, 「情報交換プロセスにおけるゆらぎの定理」, @領域11・領域12合同シンポジウム「量子・生命・ソフトマターにおける動的揺らぎの普遍法則の現在と未来」日本物理学会第69回年次大会, 28pBD-3(領域11・12合同), 2014年3月27日~2014年3月30日(28日発表), 東海大学(神奈川県平塚市).

⑲ 沙川貴大, 情報処理過程における熱力学第二法則, 計測自動制御学会第一回制御部門マルチシンポジウム(MSCS2014), 2014年3月4日~7日(7日発表), 電気通信大学(東京都調布市).

⑳ T. Sagawa, "Fluctuation Theorem with Information Exchange", Solvay Workshop on "Thermodynamics of Small Systems", 2013年12月2日~2013年12月4日(4日発表), Brussels(Belgium).

㉑ T. Sagawa, "Role of Mutual Information in Entropy Production under Information Exchanges", East Asia Joint Seminars on Statistical Physics (EAJS-SP2013), 2013年10月21日~2013年10月24日(23日発表), 京都大学基礎物理学研究所(京都府京都市).

㉒ T. Sagawa, "Second law of thermodynamics with the QC-mutual information", Summer Workshop on "Physics, Mathematics, And All That Quantum Jazz", 2013年8月7日~2013年8月9日(9日発表), 近畿大学(大阪府東大阪市).

㉓ T. Sagawa, "Fluctuation theorem for information exchanges", Statphys 25, 2013年7月22日~2013年7月26日(22日発表), Seoul(Korea).

㉔ T. Sagawa, "Imitating Chemical Motors with Information Motors", 2013 Taiwan International Workshop on Biophysics and Complex Systems, 2013年7月17日~2013年7月20日(17日発表), Taipei(Taiwan).

㉕ T. Sagawa, "Nonequilibrium Thermodynamics of Quantum Information Processing", The 11th US-Japan Joint Seminar on Quantum Electronics and Laser Spectroscopy, 2013年4月9日~2013年4

月12日(11日発表), 奈良県新公会堂(奈良県奈良市).

[図書] (計1件)

① 沙川貴大・上田正仁, サイエンス社,
『量子測定と量子制御』臨時別冊・数理科学,
2016, 224

[産業財産権]

○出願状況 (計 0件)

○取得状況 (計 0件)

[その他]

ホームページ等

<http://www.taksagawa.com/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

沙川 貴大 (SAGAWA, Takahiro)

東京大学・大学院工学系研究科・准教授

研究者番号: 60610805