様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９、Ｚ－１９　（共通）

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

平成 ２８ 年　 ６ 月　 ７ 日現在

機関番号： １２４０１
研究種目： 若手研究(B)
研究期間： 2013～2015
課題番号： ２５８７０３３９
研究課題名（和文） 代数的確率論に基づく細胞内反応時系列データ解析手法の開発

研究課題名（英文） Time-series data analysis methods for small systems based on algebraic probability theory

研究代表者
大久保　潤（OHKUBO, Jun）

埼玉大学・理工学研究科・准教授

研究者番号：７０４５１８８８

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　3,100,000円

研究成果の概要（和文）：離散的な確率過程である出生死滅過程の解析に用いられてきたDoi-Peliti法の数理的な意味について深く研究を進めることで，離散的な変数を，連続的な変数とその微分に置き換えられることを見出した．これを利用して系統的な方法で双対過程を導出できるようになった．さらに，確率微分方程式に対する双対過程や，出生死滅過程に対する双対過程などを利用することで，もとの確率過程に対する高速なデータ解析手法を構築できるようになった．

研究成果の概要（英文）：Doi-Peliti formalism has been mainly used to analyze birth-death processes, which deals with discrete state variables. I investigated the mathematical meanings of the formalism, and it has been found that discrete variables can be connected to continuous variables and their differentials via the Doi-Peliti formalism. Using the findings, it is possible to derive dual processes from the original stochastic processes in systematic ways. Applying the duality concepts, dual processes for some stochastic differential equations and birth-death processes have been derived. In addition, using the dual processes, it is possible to construct rapid computational frameworks for time-series data analysis for the original stochastic processes.

研究分野： 数理工学，統計的機械学習，情報統計力学，確率過程の数理とその応用

キーワード： 確率過程　出生死滅過程　化学反応系　非可換代数　Doi-Peliti法　時系列データ解析

１．研究開始当初の背景

生命科学から工学，経済系などの社会科学も含めた様々な分野において，観測・入手されたデータから現象を解析することの重要性が増している．特に確率微分方程式は細胞内反応から金融工学にいたるまで用いられる数学的な道具であるが，その解析的および数値的な扱いには注意が必要である．さらに場合によってはデータ解析に大量の数値計算が必要とされる．

また，近年の生命科学における観測手法の発展により，指折り数えることができる程度の少数の分子が重要な役割を果たすことがあることも示されてきている．こういった少数性・離散性が顕著な時系列データに対する解析手法も求められていた．そもそも離散性を有する確率過程に対しては，マスター方程式などのいくつかの解析的な手法は知られているものの，少数性・離散性を扱うための数理的な「言語」に関する研究は不十分であった．

実験的に一分子計測データの蓄積も進むなか，揺らぎの大きな系を理解し，解析するための数理的手法およびデータ解析のための統計的手法を早急に確立することは，学術的観点からも，また応用的観点からも重要性が高くなっていた．

２．研究の目的

本研究の目的は，代数的確率論の枠組みに基づき，揺らぐ系を記述するための数理的な言語を整理・構築することである．さらにそのひとつの応用として，離散観測・観測ノイズを想定したデータ解析手法の枠組みを提案することも目的とする．

３．研究の方法

まず，量子力学における第二量子化法と類似した Doi-Peliti 法に関する数理的基盤に関する研究を実施した．少数性・離散性を扱うための手法として研究されてきていた Doi-Peliti 法は，確率モデルの振る舞いを調べるために用いられ，代数的確率論のひとつの例ともなっている．まずその数理的な基盤を明らかにし，データ解析という逆問題への適用可能性を探った．特に計数統計と呼ばれる，確率過程における特定の遷移の生じた回数の統計性を調べる数理的枠組みと Doi-Peliti 法との接点，および直交多項式系と Doi-Peliti 法との接点に関する理論的な研究を実施した．

続いて，確率過程における双対性のデータ解析への応用可能性を検討した．確率微分方程式系に対する検討の際は，比較としてアンサンブルカルマンフィルタを用いた数値実験もおこない，手法の有効性を調べることとした．特に，実際の実験データを想定し，不規則な時間間隔でしかデータを得ることができず，またデータには観測に起因する揺らぎを含むものとした．

４．研究成果

(1) 確率過程において特定の遷移に関する情報を引き出すための枠組みである計数統計について，幾何学的位相の観点，および Doi-Peliti 法の観点から数理的な研究を実施した．

ある非平衡定常状態から別の非平衡定常状態に遷移する際の変化の特徴をどのような量で測るべきか，という問題については決定的な答えがない状態であり，様々な試みがなされていた．ここでは何かしらの数理構造を背景とした量を模索することを考え，非周期的・非断熱的という一般的な状況において幾何学的位相を定義でき，これが遷移を特徴付ける量の候補となりうることを示した．提案した量を簡単な確率モデルにおけるエントロピー生成の問題に適用したところ，提案した量はシャノン情報量の差と近い値を取ることが明らかとなった．さらに，このような計数統計の枠組みを代数的確率論のひとつの例である Doi-Peliti 法で記述可能であることも明らかとなった．

発見的にさまざまな特徴量が提案されているなかで，数理的な基盤をもつ特徴量を提案できたことは，今後の関連研究にけるひとつの足掛かりとなりうる．また計数統計に関する研究については招待論文の執筆もおこなった．

(2) Doi-Peliti 法を用いた双対性の導出の拡張をおこない，実際のフィルタリングに適用した．

これまでにも離散的な状態をもつ確率過程と連続的な状態をもつ確率過程の間に成立する双対性が知られていた．出生死滅過程から出発し，Doi-Peliti 法を利用して系統的に双対となる確率微分方程式を導出できることは以前の研究で明らかとされていたが，その逆方向の導出は不明であった．そこで，重み因子（Feyman-Kac term）と付加的な状態を利用することで，広いクラスの確率微分方程式系に対して双対性を拡張できることが明らかとなった．これにより，特に非線形な係数をもつ確率微分方程式の取り扱いが容易になった．

この拡張手法を用いて，具体的に観測データに基づいて状態を推定する手法を提案した．非線形な確率微分方程式系に対するフィルタリング手法として，例えばアンサンブル・カルマンフィルタが知られている．アンサンブル・カルマンフィルタにおける各粒子の時間発展にはモンテカルロ法を用いるため計算に時間を要するが，ここを双対性に基づいた時間発展に置き換えた（図１）．双対性を利用することにより，大規模な事前計算をしておけば実際のフィルタリングの際の

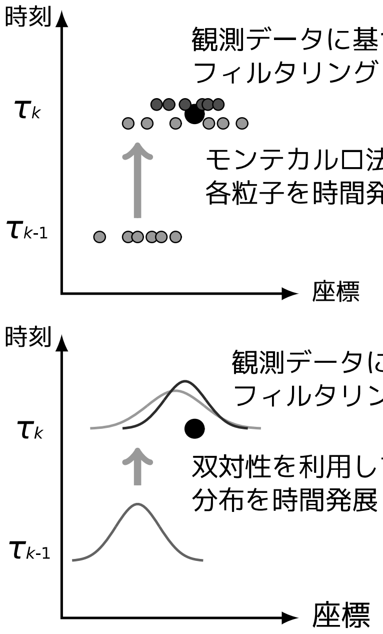

図 1: 双対性に基づくフィルタの枠組み．アンサンブルカルマンフィルタにおける各粒子の時間発展を，双対性による分布の時間発展に置き換えることで計算を高速化できる．その後，黒丸で表された観測データに基づいたフィルタリングを実施する．

計算負荷は軽く済む．Van der Pole 型の非線形系に対して数値実験を実施し，手法の有効性を確認した．

実際のフィルタリングが軽量な計算で済むというという特徴は，双対性を用いたからこそ得られた．長時間の時間発展のためには，双対過程に対する非常に高精度な解が必要になるなど，改良すべき点はまだ残されているが，確率過程の双対性を用いた新しいデータ解析の枠組みの提案は本研究で初めてなされたものである．

(3) 環境が変化する状況に対する出生死滅過程の解析的な枠組みについての研究を実施した．

時定数が変化せずに常に一定となる場合の出生死滅過程は，母関数法を始めとしてさまざまな解析方法がすでに知られている．特に直交多項式に基づいた Karlin-McGregor のスペクトル表現により，さまざまな出生死滅過程の時間依存解析解を直交多項式を用いて記述できることが知られていた．しかし時定数が時間に依存して変化する場合には，Karlin-McGregor のスペクトル表現のような直交多項式に基づく表現が得られるかどうかは自明ではなかった．そして実際の細胞内反応等においては環境の変化がシグナルとなってシステムの振る舞いの変化を引き起こすため，環境の変化を時定数の変化と捉えて出生死滅過程を記述し，それを理論的に扱えるようにすることが必要となる．そこで Doi-Peliti 法の枠組みを用いてある簡単な出生死滅過程に対しては時定数が時間依存する場合でも直交多項式に基づく表現を得られることがわかった．さらに，Doi-Peliti 法の枠組みを Lie 代数として捉えることで，時定数が変化する出生死滅過程に対して，求積法によって解が得られるかどうかを判断する方法について議論した．具体的には Lie 代数が閉じるかどうかがその判断基準となるが，Doi-Peliti 法を経由することでその判断がこれまでよりも容易になった．

(4) 出生死滅過程同士の双対性について，データ解析を念頭においた新しい利用方法を考案した．

確率微分方程式に対しては，その双対過程として出生死滅過程を導出することで，平均や分散といったモーメントを計算できることがわかっていた．しかし，出生死滅過程同士の双対性を単純に利用する場合には，双対過程を解くことがもとの出生死滅過程のひとつの遷移確率を計算できることに対応するだけであり，双対性の利用の利点があまりない．しかし，出生死滅過程の反応速度定数について双対変数を導入することで，双対性を利用する大きな利点が出現することを見出した．具体的には，双対過程のひとつの解が，元の過程におけるさまざまな反応速度定数における遷移確率に対応する．

この手法を利用することで，時系列データからの反応速度定数の推定を高速におこなう手法の基盤を整えることができた．

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７件）

① Jun Ohkubo, Nonlinear Kalman filter based on duality relations between continuous and discrete-state stochastic processes, Phys. Rev. E. Vol. 92, 2015, 043302-1--9（査読有）
DOI: 10.1103/PhysRevE.92.043302

② Jun Ohkubo, Karlin-McGregor-like formula in a simple time-inhomogeneous birth-death process, J. Phys. A: Math. Theor. Vol. 47, 2014, 405001-1--11（査読有）
DOI: 10.1088/1751-8113/47/40/405001

③ Jun Ohkubo, Lie algebraic discussions for time-inhomogeneous linear birth-death processes with immigration, J. Stat. Phys. Vol. 157, 2014, 380--391（査読有）
DOI: 10.1007/s10955-014-1068-x

④ Jun Ohkubo, Basics of counting statistics, IEICE Transactions on

Communications E96-B, 2013, 2733--2740（査読有・招待論文）
DOI: 10.1587/transcom.E96.B.2733
⑤ Jun Ohkubo, Extended duality relations between birth-death processes and partial differential equations, Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical Vol. 46, 2013, 375004-1--11（査読有）
DOI: 10.1088/1751-8113/46/37/375004
⑥ Jun Ohkubo, Algebraic probability, classical stochastic processes, and counting statistics, Journal of the Physical Society of Japan. Vol. 82, 2013, 084001-1--7（査読有）
DOI:10.7566/JPSJ.82.084001
⑦ Jun Ohkubo, Noncyclic geometric phase in counting statistics and its role as an excess contribution, Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical. Vol. 46 2013, 285001-1--12 （査読有）
DOI:10.1088/1751-8113/46/28/285001

〔学会発表〕（計７件）
① 大久保 潤，双対性を利用した出生死滅過程の遷移確率の計算,日本物理学会 第 71 回年次大会，2016 年 3 月 21 日，東北学院大学泉キャンパス（宮城県・仙台市）
② 大久保 潤，非可換代数と双対確率過程 -- 量子系の手法で古典確率過程を扱う，第 59 回システム制御情報学会研究発表講演会(SCI'15)，オーガナイズドセッション「量子系とその応用の新展開」,2015 年 5 月 20 日，中央電気倶楽部（大阪府・大阪市）
③ Jun Ohkubo, Algebraic approach to time-inhomogeneous birth-death processes, 日本生物物理学会 第 52 回年会，2014 年 09 月 26 日,札幌コンベンションセンター（北海道・札幌市）
④ Jun Ohkubo, Toward useful and concise descriptions for dynamics in small systems, JSMB/SMB OSAKA 2014, 2014 年 7 月 30 日，Osaka international convention center, Japan.
⑤ 大久保 潤，非平衡定常状態間遷移における幾何学的位相，日本物理学会 第 69 回年次大会，2014 年 3 月 27 日，東海大学湘南キャンパス（神奈川県・平塚市）
⑥ 大久保 潤， 確率過程における双対性の拡張，日本物理学会 2013 年秋季大会，2013 年 09 月 25 日，徳島大学常三島キャンパス（徳島県徳島市）
⑦ Jun Ohkubo, Geometric phase discussions for counting statistics, 2013 Taiwan International Workshop on Biological Physics and Complex Systems (BioComplex-Taiwan-2013)(招待講演)，2013 年 7 月 17 日，National Taiwan University, Taiwan.

〔その他〕
ホームページ等
研究者自身のホームページ
http://www.sp.ics.saitama-u.ac.jp/ohkubo/index_j.html

６．研究組織
(1)研究代表者
大久保 潤(OHKUBO, Jun)
埼玉大学・大学院理工学研究科・准教授
研究者番号：７０４５１８８８