

## 「数学と諸分野の協働によるブレークスルーの探索」研究領域 領域活動・評価報告書

—平成23年度終了研究課題—

研究総括 西浦 廉政

## 1. 研究領域の概要

本研究領域は、数学研究者が社会的ニーズの高い課題の解決を目指して、諸分野の研究者と協働し、ブレークスルーの探索を行う研究を対象とする。謂わば21世紀におけるデカルト流の数学的真理とベーコン流の経験則の蓄積との統合を目指すものである。

諸分野の例として、材料・生命・環境・情報通信・金融などが想定されるが、社会的ニーズに対応した新しい研究課題の創出と解決を目指すものであればこの限りではない。

諸分野の研究対象である自然現象や社会現象に対し、数学的手法を応用するだけでなく、それらの数学的研究を通じて新しい数学的概念・方法論の提案を行うなど、数学と実験科学の融合を促進する双方向的研究を重視する。

## 2. 研究課題・研究者名

別紙一覧表参照

## 3. 選考方針

選考の基本的な考えは下記の通り。

- 1) 選考は「数学と諸分野の協働によるブレークスルーの探索」領域に設けた選考委員 13 名の協力を得て、研究総括が行なう。
- 2) 選考方法は、書類選考、面接選考及び総合選考とする。
  - ・書類選考において 1 提案につき 3 名の選考委員が査読評価を行なう。
  - ・選考委員の所属機関と応募者の所属機関が異なるよう配慮し、書類選考は利害関係者を査読対象とせず、面接選考において利害関係者は席を外して実施する。
  - ・面接選考では可能な限り多くの研究提案を直接聴取し、質疑応答する。
- 3) 選考に当たっては、研究構想、計画性、課題への取り組みなどの観点のほか、諸分野とのつながりを具体的にどのように実現させるのか、その姿勢や他の助成金等ではできない斬新な取り組みを重視した。

## 4. 選考の経緯

一応募課題につき領域アドバイザー・外部評価者 3 名が書類審査し、書類選考会議において面接選考の対象を選考した。続いて、面接選考および総合選考により、採択候補課題を選定した。

選考	書類選考	面接選考	採択数
対象数	66 件	23 件	8 件

## 5. 研究実施期間

平成 20 年 10 月～平成 24 年 3 月

## 6. 領域の活動状況

- 1) 領域会議: 7 回
- 2) 研究報告会(公開): 1 回
- 3) 研究総括(または技術参事)の研究実施場所訪問:

平成 20 年秋～平成 22 年にかけて研究者の研究拠点を訪問し、研究環境・設備等の確認および研究計画のヒアリング、学長、組織責任者などへさきがけ事業と当領域の意義を説明し、機関に対する協力依頼などを実施した。また、研究者の異動に対しては、適宜訪問して同様の取組みを行なうと同時に、研究継続に必要な支援等を検討した。

## 4) 領域独自活動の展開:

当領域では、諸分野をつなぐコーディネータの育成にも寄与することを強く期待しており、数学の重要性と諸分野とのつながりを一般に理解していただくためのアウトリーチ活動として、「さきがけ数学塾」および「さき

「さがけ数学キャラバン」を研究者主体により開催した。後者については、当領域がハイブリッド領域であることを活かし、CREST 研究代表者にも働きかけ、協力して実施した。そのため名称からさがけの名を外し「JST 数学キャラバン」と改めている。

さがけ数学塾: 4 回(主として大学生を対象に、JST 施設を使って実施)

H21.3.7-9 力学系・カオス理論

H22.3.8-10 応用数学と物理学の協働 ～作ってみよう数理モデル・動かしてみよう数理モデル～

H23.3.7-9 変分法入門 ～幾何学と解析学の橋渡し。そして応用へ～

H24.3.7-9 数学を使う ～生命現象への挑戦～

JST 数学キャラバン: 4 回(主として高校生を対象に、研究者の所属する大学と協力して各地で開催)

H23.2.20 山形大学理学部共催(JST 主催)

H23.5.14 神戸大学理学部共催(JST 主催)

H23.10.09 金沢大学理工学域数物科学類主催(JST 共催)

H23.10.23 岡山大学特別教育研究プロジェクト主催(JST 共催)

## 7. 評価の手続き

研究者の作成した研究報告書および自己評価を基に、年 2 回の領域会議における経過報告および討議内容、領域アドバイザーの意見、さらに成果報告会(公開)での評価を参考にして研究総括が総合評価を行なった。

(評価の流れ)

平成 23 年 6 月 第 8 回領域会議(総括・アドバイザーによる進捗評価とアドバイス)

平成 23 年 12 月 研究報告会開催(一般参加者および総括・アドバイザーによる評価)

平成 24 年 1 月 第 9 回領域会議(総括・アドバイザーによる進捗評価とアドバイス)

平成 24 年 3 月 研究期間終了(8 件)

平成 24 年 3 月 研究報告書提出

平成 24 年 3 月 研究総括による評価

## 8. 評価項目

- (1) 研究計画書の目標に対する研究課題の達成度
- (2) 得られた研究成果の科学技術への貢献、諸分野との協働実績
- (3) 外部発表(論文、口頭発表、特許など)研究成果の発信状況
- (4) 数学への理解増進のため一般や他の諸分野に対する働きかけ

## 9. 研究結果

当領域では、数学を深化させ、結果として他分野の伏流水となるもの、また材料・生命・医療・環境・情報・交通・金融を含む様々な分野とのつながりを意識し、新たな切り口を開拓しようとする意欲的な研究課題が採択されている。今回終了する 8 名の研究者は、戦略目標である諸分野との協働について強く意識を持ち、また研究者やアドバイザーとの活発な議論を通じて研究のレベルを高めるとともに、さらに諸分野へ拡大することができたと判断できる。同時にアウトリーチ活動についても積極的に参画し、研究者としての成長も著しいものがあったと評価できる。これらの経験を契機に、各研究者が一層大きく飛躍するとともに、基礎研究に留まることなく諸分野との協働を推し進めて、ブレークスルーへとつながっていくものと期待している。

○大下 承民 研究者

「ヤング測度による高分子共重合体の微細構造の解明及びヤング測度の展開」

時空スケールが多重に存在する系において、その時間的および空間的振る舞いの特徴付けは数理的アプローチが最も必要とされ、かつ有用な分野である。大下氏はブロック共重合体のマイクロ相分離における厳密な形状の特徴付けを 2 次元においてまず行い、それを 3 次元においても一方の相体積が小さい場合において拡張することを試みた。また希薄系における平均場モデルの定常解、安定性、初期値問題の漸近挙動においても厳密な結果が得られたことは大きく評価できる。

これらの結果は諸分野では実験系においてオストワルドライピングなどとして良く知られていたものではあるが、その数学的基礎付けは必ずしも明確ではなく、そこに一石を投じた成果は評価される。

今後は物理学の分野においても大きな影響を与える挑戦的問題に取り組むことが期待される。

○小磯 深幸 研究者

「幾何学的変分問題の解の大域解析とその応用」

シャボン玉、石けん膜にみられる曲面は面積最小にするものとして良く知られているが、小磯氏は液晶などのように非等方的表面エネルギーの場合も含めた非等方的平均曲率一定曲面(CAMC 曲面)の一意性、自由境界問題さらに CAMC 超曲面の分岐問題などについて厳密な結果を得たことは大いに評価できる。とりわけ超曲面の分岐問題においてエネルギー汎関数の第 2 変分を詳細に調べ、pitchfork 分岐の存在証明を得たことは興味深い。さらにより一般の分岐も含めた体系化が望まれる。物理学者であるさきがけ研究者との協働も進めており、今後その発展が大いに期待される。

○郡 宏 研究者

「振動子理論の生物・化学・工学・医療分野への応用」

生命系、医学系の協働研究者との分野横断的研究を振動子集団モデルを仲介として多彩な活動を展開したことは大いに評価できる。とくにノイズ低減の集団効果における数学的考察も興味深く、その双方向性への努力も評価したい。

一方で本人の自己評価にもあるように、数学、あるいは数理モデルが主導するところまでには到達していない。しかしその自覚の下で今後の発展の伸びしろは大きいであろう。また様々なアウトリーチ活動における積極的姿勢も評価したい。

○田中 冬彦 研究者

「統計モデル多様体の普遍的な性質のベイズ予測理論への応用」

時系列モデル、量子統計モデルにおいて従来の統計的推定を予測という観点から捉え直すと共に、より幾何学的性質にも着目して、優れた予測方法を与える手法をベイズ予測の最新の結果を用いて大きく進展させたことは評価できる。

とくに物理学者と継続して協働できる場 q-stats を作り、量子統計モデルの今後の基盤作りにも成功したことも高く評価できる。

本事業に参加することにより、その意識を変え、さきがけスピリットを最もよく体現した研究者の一人であると思う。垣根を越え、横断的な姿勢で研究することはたやすいことではなく、それを実施した田中氏の今後に大いに期待する。

○原田 昌晃 研究者

「代数的符号理論による組合せ構造の解析と量子符号への応用」

符号理論の数学的整備はデジタル通信の発展に不可欠のものである。とりわけ誤り訂正符号理論は重要である。原田氏は代数的見地から自己双対符号の研究を行い、4以上の全ての偶数を位数とする整数の剰余環上の長さ72の極値的な重偶自己双対符号の存在証明を初めて行うなどこの方面での顕著な成果を残したことは高く評価できる。

同時に計算機支援による自己双対符号の分類、とりわけ困難と思われた長さ40の分類を新たな方法の開発と共に成し遂げたことは、より一般的な状況への可能性を示唆するものである。さらに量子符号への応用を目指した組み合わせ構造からのアプローチは今後の発展が大いに期待される。

一方、企業での研究者を含む情報理論、符号理論の研究者との横断的交流会の組織やアウトリーチ活動も積極的に行い、本領域の認知度も高めることにも貢献したことも評価したい。

○春名 太一 研究者

「システム生物学に関わる情報と記述の諸問題」

圏論的手法というこれまでにはない新たな数理言語を用いて、自然科学とくにシステム生物学にアプローチしようという積極的姿勢は野心的であり、さきがけの趣旨にかなったもので大いに評価できる。生命科学にふさわしい言語は何なのかまだよくわかっていない状況において、生命系の複雑ネットワークに圏論的双対性を用いることにより、側方経路の存在や順列エントロピーに関わる興味深い発見は注目に値する。

また細胞等の小さな体積で起こる化学反応系では関与する分子数は少なくその離散性が本質的に問題となる。春名氏は、化学マスター方程式と化学フォッカー・プランク方程式の関連づけに成功し、その分岐構造が離散性パラメータの値によらず成立することを示した。化学マスター方程式を一般的に解くことは困難であることを考えるとこの関連づけの意義は大きい。

さらに生命の起源に関わる化学進化の実験も今後の発展が大いに期待できる興味深い結果が生み出され

つつある。全体として生命とは何かについて数理的視点から真摯に追求する姿勢が感じられ、高く評価できる。またさがけのアウトリーチ活動においても積極的に参加し、その認知度を一般の人にも高めたことも評価したい。

○平岡 裕章 研究者

「シャノン限界の実現と次世代情報通信理論の構築」

シャノン限界を実現する実用的誤り訂正符号の開発およびネットワーク符号における層コホモロジーを用いた解析手法の開発という共にこれまでにない視点と新たな手法を導入し、困難な問題への挑戦が感じられ頼もしい。実際、前者に対しては、最尤推定復号を有理写像として表現し、その力学系的性質から復号過程を調べるといふ全く新たな手法を編み出し、これにより符号復号双対定理を証明し、最尤推定復号の代数構造の解明に成功した。

これにより平岡氏の提案する復号方式は現実の設計にも応用可能となり、数値シミュレーションにおいても、BCH 符号の性能と同等以上であり、理論限界値に近い結果を出したことは大いに評価できる。

後者の課題についても層コホモロジーやホモロジー代数を実用的問題への応用も含め、ネットワーク符号の理論整備への今後の発展が期待されるものとなっている。

○三浦 佳二 研究者

「情報幾何学の計算論的神経科学への応用」

外界世界を脳がどう符号化しているかは極めて大きな問題である。三浦氏はハーバード大学において無限とも言える臭い物質を脳がどう表現しているのか、という問題に取り組んだ。その際に神経活動にノイズ相関があるかどうかは極めて重要となる。すなわちノイズが細胞毎に独立ならば、細胞毎の平均でそのようなゆらぎは取り去ることができるが、そうでなければ問題は一挙に複雑となる。しかしながらノイズ相関の有無の判定は単純ではない。それはトレンドとよばれる平均値などの変動が実際の時系列には一般に含まれるからである。

これを取り出す手法として情報幾何学的手法を開発し、それを神経活動の発火パターンを始め、いくつかの重要な応用例に適用し成功したことは大きく評価できる。

この方法は問題の詳細によらない普遍性をもち、従ってより広い時系列への適用可能性の拡大は今後大きなインパクトをもつと期待される。

10. 評価者

研究総括 西浦 廉政 東北大学 教授

領域アドバイザー氏名(五十音順)

赤平 昌文 筑波大学 理事／副学長  
 池田 勉 龍谷大学 副学長／理事  
 織田 孝幸 東京大学 教授  
 小田 忠雄 東北大学 名誉教授  
 小野 寛晰 北陸先端科学技術大学院大学 特別招聘教授  
 高橋 理一 (株)コンポン研究所 取締役  
 津田 一郎 北海道大学 教授  
 長井 英生 大阪大学 教授  
 宮岡 礼子 東北大学 教授  
 山口 智彦 (独)産業技術総合研究所 副部門長

(参考)

(1)外部発表件数

	国内	国際	計
論文	7	49	56
口頭	67	73	140
その他	1	6	7
合計	75	128	203

※平成 24 年 3 月現在

(2)特許出願件数

国内	国際	計
0	0	0

(3)受賞等

・郡 宏

日本物理学会 第 3 回(2009 年)日本物理学会若手奨励賞(H20.11)

・春名太一

Fourth International Conference on Rough Set and Knowledge Technology 2009 Best Paper Award (H21.7)

(4)招待講演

国際 28 件

国内 3 件

## 別紙

## 「数学と諸分野の協働によるブレークスルーの探索」領域 研究課題名および研究者氏名

研究者氏名 (参加形態)	研究課題名 (研究実施場所)	現職(平成24年3月末現在) (応募時所属)	研究費 (百万円)
大下 承民 (兼任)	ヤング測度による高分子共重合体の 微細構造の解明及びヤング測度の展 開 (岡山大学、オックスフォード大学)	岡山大学大学院自然科学研究科 准教授 (同上)	18
小磯 深幸 (兼任)	幾何学的変分問題の解の大域解析と その応用 (奈良女子大学、九州大学)	九州大学マス・フォア・インダストリ 研究所 教授 (奈良女子大学 教授)	29
郡 宏 (兼任)	振動子理論の生物・化学・工学・医療 分野への応用 (お茶の水女子大学)	お茶の水女子大学お茶大アカデミッ ク・プロダクション 特任助教 (同上)	45
田中 冬彦 (兼任)	統計モデル多様体の普遍的な性質の ベイズ予測理論への応用 (東京大学)	東京大学大学院情報理工学研究科 助教 (同上)	12
原田 昌晃 (兼任)	代数的符号理論による組合せ構造の 解析と量子符号への応用 (山形大学)	山形大学大学院理学部 准教授 (同上)	25
春名 太一 (兼任)	システム生物学に関わる情報と記述 の諸問題 (神戸大学)	神戸大学大学院理学研究科 助教 (同上)	16
平岡 裕章 (兼任)	シャノン限界の実現と次世代情報通信 理論の構築 (広島大学、ペンシルバニア大学、九 州大学)	九州大学マス・フォア・インダストリ 研究所 准教授 (広島大学 助教)	16
三浦 佳二 (兼任)	情報幾何学の計算論的神経科学への 応用 (ハーバード大学、東北大学)	東北大学情報科学研究科 助教 (東京大学 日本学術振興会特別 研究員)	8

※本領域では、研究場所について複数記載した。

# 研究報告書

## 「ヤング測度による高分子共重合体の微細構造の解明及びヤング測度の展開」

研究期間：平成20年10月～平成24年3月

研究者：大下 承民

### 1. 研究のねらい

本研究の目的は、高分子共重合体などに現れるマイクロ相分離現象における、多重スケールをもつ微細パターンの構造形成の機構を解明することである。異なるスケールが共存する微細構造の解明は、物理学や材料科学において極めて重要な問題である。変分法、勾配流、ヤング測度および測度値写像などの実解析的な手法を用いたアプローチでこの変分問題および対応する時間発展問題に取り組み、エネルギー駆動型の微細構造をもつパターンの形成機構を理論的に解明する。この研究は、物理、材料・生命科学における微細構造形成と関連し、材料科学技術の更なる発展の基礎になると大きく期待される。さまざまな物理系に適用可能な、エネルギーが駆動するパターン形成のひな型数理モデルの解析を通して、その他の材料科学や生命科学におけるパターン形成メカニズムへの応用を目指す。

### 2. 研究成果

研究期間中に得られた成果は、マイクロ相分離現象に対する空間非一様な平均場モデルの導出、希薄ケースの平均場モデルの定常問題、平衡状態の安定性、および時間発展問題の長時間挙動、粒子移動項をもつ拡張版平均場モデルの定常問題について、および材料科学における非線形弾性棒の音響共鳴の変分法による考察である。

[1] 空間3次元における、マイクロ相分離を説明する自由境界問題における空間非一様拡張版の導出。

マイクロ相分離を説明する自由境界問題を、片方の相領域の体積比率が小さく、マイクロ相分離が小さい球の集まりになるパラメータ領域で考察する。この小さな球面の集合の時間発展は、ある種の平均場モデルにより記述される。

球面の平均体積オーダーの時間スケールでは、粗大化と球面半径の安定化により時間発展が支配され、球面移動はさらに大きい時間スケールでのみ影響を及ぼすことがわかる。この初期の時間スケールにおける平均場方程式の厳密な導出に関する結果を得た。解析の手法は、勾配流の変分的特徴付けにおける均質化極限に基づくものである。

[2] 希薄バージョンの平均場モデルに対する定常問題の考察、平衡状態の安定性、および初期値問題の長時間挙動について。

ブロック共重合体などに現れるマイクロ相分離現象に対する平均場モデルの、空間3次元における希薄なケースにおいて、すべての平衡状態とその安定性を特定し、さらに、時間無限大での漸近挙動に関する考察を行った。

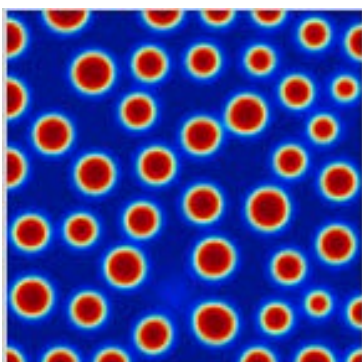


図 1. 粒子の集まりからなる相分離

態になる。

3次元の平均場モデルの長時間挙動を明らかにするため、初期の粗大化過程、およびその後の安定相に遷移する過程において、いかに特異性が現れるかを調べた。具体的には、エネルギーは時間について単調減少する絶対連続関数であること、ラグランジュ未定関数が粒子消滅時に非正則な振る舞いをするが有界な関数であることなどがわかり、時間無限大での解の収束結果を得ることができた。

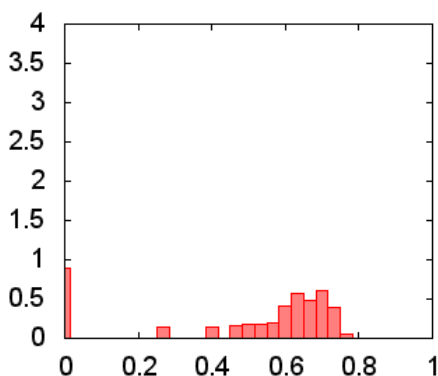


図 3. 一部の粒子は消滅し粗大化が進行中。横軸は粒子半径、縦軸は正規化された粒子数

適当な距離を定義することで、勾配流とみなせることを示した。

希薄バージョンの平均場モデルにおいては、平衡状態の粒子は、高々二つの大きさしかもたず、大きいものが安定、小さいものが不安定であることがわかった。希薄バージョンの平均場モデルの時間発展は、粗大化と安定化により支配される。粗大化とは、小さい粒子は消滅し平均半径が増大することである。しかしながら、長距離相互作用があるため、無制限の粗大化は阻害され、生き残った粒子は安定な半径のまわりで安定化する。これが粒子半径の安定化である。大域相互作用がなければ安定な平衡状態は存在せず、つながっているからこそ安定化することがわかった。Generic には、すべての粒子は、同じ大きさになり、その後、さらに微速で動き回った後、平衡状態になる。

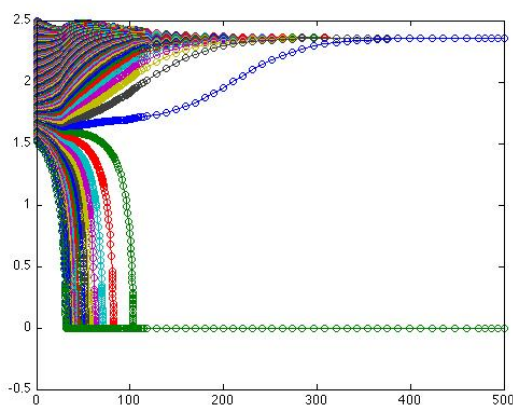


図 2. 粗大化と安定化過程。横軸は時間、縦軸は粒子体積

[3] 平均場モデル(希薄バージョン, 空間非一様拡張版, 粒子移動項を含む拡張版)の勾配流によるアプローチ, および空間非一様拡張バージョンの平均場モデルに対する定常問題, 安定性.

体積分率が小さく, 片方の相領域が小さい球面あるいは円柱の集まりになる場合の時間発展を支配する, 粗大化と粒子半径の安定化を記述する三つの平均場モデル, すなわち, 希薄バージョン, その空間非一様拡張バージョン, および形式的ではあるが中心移動まで含む拡張バージョンが, 確率測度の空間において,



マイクロ相分離における希薄バージョンのモデルにおいては、平衡状態は高々二つの大きさの粒子からなり、大きい方が安定で小さい方は不安定である。さらに、安定なものに限れば大きさはすべて同じである。しかしながら、粒子移動のない空間非一様拡張モデルでは、安定なものに限っても粒子体積・局所体積分率は、空間的に一定とは限らないことがわかった。すなわち、粒子体積が空間的に非一様な平衡解が存在する。しかしながら、粒子移動がある場合の平衡状態は、局所体積分率は一定で、粒子体積は場所によらず高々二つの値をとる。また、安定なものは、粒子数密度も大きさも空間的に一定である。

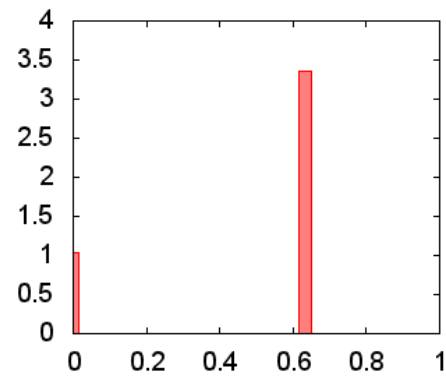


図 4. 平衡状態の分布. 生き残った粒子はすべて同じ大きさである.

#### [4] 空間2次元の平均場モデルの非一様拡張版について.

薄膜あるいは2次元空間におけるマイクロ相分離を記述する自由境界問題は、1成分の体積分率が非常に小さく、マイクロ相分離がたくさん小さな円板粒子の集まりになる、すなわち、3次元空間における円柱相の時間発展を記述するパラメーター範囲では、面積保存のためのある未知関数を含むような2次元版の空間非一様な平均場モデルで記述されることを示し、その未知関数が満たす方程式を導出した。

[5]球面制約した平均場モデルの妥当性を明らかにするため、形状を円板に制約しない2次元の自由境界問題のダイナミクスを考察した。片方の相領域が小さい体積分率をもつゆがんだ円領域の場合に、ほぼ円状の界面が、領域のグリーン関数により決まる曲線に沿って動くような解の存在を示した。

### 3. 今後の展開

マイクロ相分離現象を記述する全空間における幾何学的変分問題のエネルギー最小解や高エネルギー解の構造、1個の球面からなる平衡解の安定性、球面解からの分岐現象、および対応する拡散界面の問題を解明していきたい。

また、粒子移動項を含む拡張モデルでは、空間的に一様ではない平衡状態が多く存在し、長時間挙動は非常に複雑になる。この移動項を含むモデルを解析することにより、空間的に一様できれいな周期構造を実現させるためには何が必要かを解明していきたい。

### 4. 自己評価

エネルギー駆動型のパターン形成のひな形モデルに対する変分問題の解析が、本研究の当初の目的であった。相領域が多数の球面の集まりからなる場合に、対応する時間発展問題

を考察し、そのダイナミクスを捉えることに成功した。一方、変分問題そのものの定常エネルギー最小解の構造、特に異なる形態のパターンに関する研究、また、新しい数学的概念による材料や生物科学における応用については今後の課題として残っている。しかしながら、さきがかけて研究終了後もこの問題に挑戦し取り組み続けていく予定である。

## 5. 研究総括の見解

時空スケールが多重に存在する系において、その時間的および空間的振る舞いの特徴付けは数理的アプローチが最も必要とされ、かつ有用な分野である。大下氏はブロック共重合体のマイクロ相分離における厳密な形状の特徴付けを2次元においてまず行い、それを3次元においても一方の相体積が小さい場合において拡張することを試みた。また希薄系における平均場モデルの定常解、安定性、初期値問題の漸近挙動においても厳密な結果が得られたことは大きく評価できる。

これらの結果は諸分野では実験系においてオストワルドライピングなどとして良く知られていたものではあるが、その数学的基礎付けは必ずしも明確ではなく、そこに一石を投じた成果は評価される。

今後は物理学の分野においても大きな影響を与える挑戦的問題に取り組むことが期待される。

## 6. 主な研究成果リスト

### (1) 論文(原著論文)発表

- |   |
|---|
| 1. A rigorous derivation of mean-field models for diblock copolymer melts, Calc. Var. Partial Differential Equations, 39 (2010), 273–305.   |
| 2. Yoshihito Oshita, Gradient flow structure of mean-field models for micro phase separation, RIMS Kokyuroku Bessatsu.  |
| 3. Ruichi Tarumi & Yoshihito oshita, Free vibration acoustic resonance of one dimensional nonlinear elastic string, Philosophical Magazine Vol. 91, No. 5, 11 February 2011, 772–786. |

### (2) 特許出願

なし

### (3) その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物等)

#### 口頭発表

1. A rigorous derivation of mean-field models for diblock copolymer melts, Self-Assembly of Block Copolymers: Theoretical Models and Mathematical Challenges, BIRS, Banff, May 23–May 28. 2010/5/25.
2. Coarsening and stabilization in micro phase separation, International workshop on Far-From-Equilibrium Dynamics, Kyoto, 2011/1/4.
3. Coarsening, stabilization and migration in micro phase separation, The 4th MSJ-SI 2011, Nonlinear Dynamics in PDE, 九州大学, 2011/9/13.
4. Stability of Steady States and Asymptotic Behavior of Mean-field Models for Micro Phase Separation, SIAM PD11, San Diego, USA, 2011/11/15.

5. Coarsening, stabilization and migration in micro phase separation, Sino-Japan Conference of Young Mathematicians, Chern Institute of Mathematics, Tianjin, China, 2011/12/5.

# 研究報告書

## 「幾何学的変分問題の解の大域解析とその応用」

研究期間：平成 20 年 10 月～平成 24 年 3 月

研究者：小磯 深幸

### 1. 研究のねらい

幾何学的変分問題の解(極小曲面、平均曲率一定曲面やその一般化)の存在と一意性、大域的性質及び安定性についての研究を行い、一般の変分問題に応用可能な一般的・普遍的な理論を構築する。さらに、この研究を生かして、等方的あるいは非等方的表面エネルギーを持つ物質の幾何学的性質について、物理化学、工学その他、数学以外の分野との協働を行う。これらにより、数学以外の分野の研究については、その数学的な基礎付けを与えると共に、数学的に厳密な視点を加えることにより、また、数学の一般理論を応用することにより、それらの分野の発展を図る。また、数学の研究においては、実際の「物」を見ることにより未解決問題解決のためのヒントを得ると共に、応用的な視点を加えることにより新たな課題を発見し、それを一般的・普遍的な理論に発展させることを目指す。

### 2. 研究成果

まず、研究対象について簡単に説明する。曲面に対する変分問題の解として古くから研究されているものの中に、極小曲面と平均曲率一定曲面(constant mean curvature surface。以下、CMC 曲面と略記する)がある。極小曲面は平均曲率が至る所0である曲面であり、CMC 曲面は平均曲率が至る所(0とは限らない)定数の曲面である。前者は面積の臨界点、後者は「囲む体積が一定」なる付加的条件のもとでの面積の臨界点である。そのため、これらはそれぞれ、石鹸膜、シャボン玉の数学的抽象化と言われることがある。一方、たとえば結晶やある種の液晶のように異方性を持つ物質の形状については、エネルギーとして面積汎関数を考えるだけでは十分でなく、より一般の、たとえば、エネルギー密度が表面の法線方向に依存するような表面エネルギーを考えることが有効であると考えられる。曲面上の各点におけるこのようなエネルギーの曲面全体での和(積分)を非等方的表面エネルギーと呼ぶ。物理的にも自然な変分問題は、曲面についての、「囲む体積を変えない」変分に対する非等方的表面エネルギーの臨界点を研究することである。その解は非等方的平均曲率一定(constant anisotropic mean curvature。以下、CAMC と略記する)曲面と呼ばれるものになる。面積は非等方的表面エネルギーの特別な場合とみなせるため、CAMC 曲面は CMC 曲面の一般化となっている。一般に、変分問題の解は、対応するエネルギー汎関数の第2変分が非負である時に安定であるといわれる。特に、エネルギー極小解は安定である。物理的に実現されるのは安定な解だけであり、安定解について研究することは極めて重要である。さて、同じ体積を囲む閉曲面の中での非等方的表面エネルギーの最小解は Wulff 図形と呼ばれる凸曲面(または、その相似)となることが知られている。以下では、Wulff 図形が滑らかな狭義凸閉曲面であることを仮定する。この時、非等方的表面エネルギー密度関数を与えることと、Wulff 図形を与えることは、(Wulff 図形の平行移動を除き)同値である。

以下、得られた研究結果をいくつかの課題に分けて述べる。

### (1) CAMC 閉曲面に対する一意性

CAMC 閉曲面に対する一意性の問題は、CAMC 曲面に関する基本課題であるだけでなく、近年学際的に取り上げられている非等方的平均曲率流方程式の解の極限を与える候補となるという意味でも重要である。本研究において、3次元ユークリッド空間内の種数0の CAMC 閉曲面は Wulff 図形またはその相似に限ることを証明した。なお、1以上の任意の整数  $n$  に対して、種数  $n$  の CMC 閉曲面の存在が知られているが、どのような非等方的表面エネルギー汎関数に対しても種数  $n$  の CAMC 閉曲面が存在するか否かは未解決である。

### (2) CAMC 曲面に対する自由境界問題

「与えられた曲面上に境界を持つ」という束縛条件のもとでの変分問題を、自由境界問題と呼ぶ。自由境界問題は、理論・応用の両観点から興味を持たれている。本研究では、平行な二平面（以下では支持平面と呼ぶ）上に自由境界をもち、これらの平面で囲まれる領域に埋め込まれた曲面に対する「非等方的表面エネルギー＋自由境界での濡れエネルギー＋曲面の境界の line tension」の臨界点について研究し、臨界点の幾何学的性質、安定性の判定法、安定解の存在と非存在、他の結果を得た。主な結果は次のものである。Wulff 図形が支持平面に垂直な直線を回転軸とする回転面であり、line tension が非負の場合には、最大値原理の応用により、自己交差をもたない臨界点は Wulff 図形と同じ軸を持つ回転面となることを証明した。さらに、より一般に、Wulff 図形が支持平面に平行で互いに相似な閉曲線族より成るといふ仮定のもとで、line tension が正の場合にはシュワルツ対称化が適用できることを証明し、このことを用いて、臨界点の安定性を判定する方法を得た。

### (3) CAMC 超曲面に対する分岐理論

上述の変分問題は、ユークリッド空間内の超曲面に対して一般化される。本研究では、ユークリッド空間内の境界を持つコンパクト CAMC 超曲面の分岐、及び、分岐後の超曲面の安定性の判定についての研究、分岐による解の対称性の崩壊についての研究を行った。

まず、与えられた境界条件を満たすコンパクトな CAMC 超曲面全体を考えた時、非等方的平均曲率または囲む体積をパラメータとして、解の分岐が起こるための十分条件を得た。これは、非等方的表面エネルギー汎関数の第2変分に付随する2階楕円型線形作用素に対する固有値問題の固有値の性質、及び、零固有値に属する固有関数の性質により判定される。本研究では、分岐点における零固有値の重複度が1という仮定の下で研究成果を得た。

解の分岐が起こるとき、分岐した解の安定性（境界条件と体積を保つ変分に対する、非等方的表面エネルギーの第2変分が非負であるか否か）の判定が問題となるのは、エネルギー汎関数の第2変分に付随する固有値問題の第2固有値が零の時である。この零固有値の重複度が1である場合について、分岐解の安定性の判定条件を得た。すなわち、いわゆる「pitchfork 分岐」が起こることを証明した。さらに、もとの解族に属する各解が対称性を持つ場合に、分岐族に属する解の対称性が崩壊する可能性についても結果を得た。

例として、3次元ユークリッド空間内の CMC 回転面であって、回転軸に垂直な平面に対して対称であり、面積の第2変分に付随する固有値問題が零固有値をもつものからの、解の分岐について研究した。とりわけ重要な場合である、第2固有値が0であり、かつ安定なものからの解の分岐を重点的に調べ、pitchfork 分岐及び対称性の崩壊が起こることを示した。このような

pitchfork 分岐の存在についてはこれまでも数学や数学以外の研究者による類似の結果が知られていたが、その方法は、既存の分岐理論を応用した複雑な計算を要するものであるか、または、厳密でないかのいずれかであった。本研究では、無限次元空間上の陰関数定理及び問題の幾何的性質を巧みに応用することにより、幾何学的にも明快な証明を得た。

また、支持曲面上に自由境界を持つ CAMC 超曲面に対する分岐の存在と安定性についても同様の結果を得た。その応用として、「平行な二平面上に自由境界を持つ自己交差を持たない CMC 曲面であって安定なものは、半球面と短い円柱に限る」(M. Athanassenas, T. I. Vogel, 1987)という既知の結果の簡明な別証明を得た。さらに、数値計算を援用することにより、エネルギーが非等方的な場合には unduloid 型の安定解が現れる可能性があることを示した。

#### (4) 円を張る種数0の安定な CAMC 曲面の決定

Wulff 図形が回転面である場合について、3次元ユークリッド空間内の Wulff 図形の回転軸に垂直な平面内の円周を境界とする種数0の CAMC 曲面で安定なものは、Wulff 図形または平面の一部のみであることを証明した。

### 3. 今後の展開

#### (1) CAMC 超曲面に対する分岐理論の応用

上述の分岐についての結果を、さまざまな、主としてマイクロ・マクロスケールの物理現象に応用し、それらについての物理的な説明に対する数学的な基礎付けを与える。そこでは、上述の一般論を具体例に応用して安定解の形状を決定することになるが、応用に際しては計算機援用が有用となる可能性がある。

#### (2) CAMC 超曲面に対する分岐理論の発展

上述の分岐についての研究では、分岐点において、エネルギー汎関数の第2変分に付随する固有値問題の第2固有値が重複度 1 の零固有値を持つということを仮定した。零固有値の重複度が2以上の場合について、解の分岐の幾何学的な構造及び安定性を決定することは、今後の課題である。

#### (3) 物理現象を記述する新しい発展方程式の導出と解析

たとえば微小な液体が徐々に蒸発していく時の液体の形状は、時として不連続に変化するように見える。このような、パラメータ(例えば体積や濡れエネルギー係数)の連続的な変化に対して不連続に変化する安定解を記述する発展方程式を導出し、適切な境界条件のもとで安定性や幾何学的性質を解析することは、理論・応用の両観点から重要であると思われる。純粋数学としては、従来以上に幾何学と解析学の境界分野としての発展性があり、また、さまざまな物理現象への応用という観点からも有望であると期待している。

### 4. 自己評価

「研究成果」で述べたように、極小曲面や平均曲率一定(CMC)曲面の一般化である非等方的平均曲率一定(CAMC)曲面についての研究を行い、円を張る種数0の安定な CAMC 曲面の一意性を証明し、CAMC 曲面に対する「非等方的表面エネルギー+自由境界での濡れエネルギー

「+曲面の境界の line tension」の臨界点の幾何学的性質・安定性の判定法・安定解の存在と非存在についての結果を得た。ここでは、エネルギー汎関数や境界条件について、物理学や工学等の研究に鑑みて自然な条件設定を行うことにより、さまざまな数学的研究成果を得ることができた。また、種数0の CAMC 閉曲面を決定し、学際的に重要な非等方的平均曲率流方程式の研究にも貢献することができた。さらに、CAMC 超曲面に対する分岐理論を構築し安定性の判定条件を得たが、その方法は、CAMC 超曲面に限らず、解が、局所的に(線形とは限らない)楕円型方程式の解となるような変分問題に対して一般化できる結果であり、さまざまな物理現象への応用が可能である。また、まだ公開できるだけの成果を得るには至っていないが、「今後の展開」で述べたように、物理現象を記述する新しい発展方程式の導出と解析についての研究を、物理学及び工学分野の研究者との協働により開始した。さらに、物理学者との協働により新しい数学的方法を提案し、応用数学者との協働により従来知られていなかった研究成果をもたらしたということも追記しておきたい。以上により、本研究の当初の目標は十分に達せられたと自己評価する。

## 5. 研究総括の見解

シャボン玉、石けん膜にみられる曲面は面積最小にするものとして良く知られているが、小磯氏は液晶などのように非等方的表面エネルギーの場合も含めた非等方的平均曲率一定曲面(CAMC曲面)の一意性、自由境界問題さらにCAMC超曲面の分岐問題などについて厳密な結果を得たことは大いに評価できる。とりわけ超曲面の分岐問題においてエネルギー汎関数の第2変分を詳細に調べ、pitchfork 分岐の存在証明を得たことは興味深い。さらにより一般の分岐も含めた体系化が望まれる。物理学者であるさきがけ研究者との協働も進めており、今後その発展が大いに期待される。

## 6. 主な研究成果リスト

### (1)論文(原著論文)発表

- |   |
|---|
| 1. Miyuki Koiso and Bennett Palmer, Anisotropic Surface Energy, Proceedings of the 16th OCU International Academic Symposium 2008 "Riemann Surfaces, Harmonic Maps and Visualization", OCAMI Studies Volume 3, Osaka Municipal University Press (2010), pp.105-117. |
| 2. Miyuki Koiso and Bennett Palmer, Anisotropic umbilic points and Hopf's Theorem for surfaces with constant anisotropic mean curvature, Indiana University Mathematics Journal 59-1 (2010), pp.79-90.  |
| 3. Miyuki Koiso and Bennett Palmer, Equilibria for anisotropic surface energies with wetting and line tension, Calculus of Variations and PDE's 43-3 (2012), pp.555-587.  |
|   |
|   |

### (2)特許出願

なし

### (3)その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物等)

### 学会招待講演

- [1] Miyuki Koiso, Pitchfork bifurcation for hypersurfaces with constant mean curvature, The 10th Pacific Rim Geometry Conference 2011 Osaka–Fukuoka, (December 1–5, 2011, Osaka City University, December 7–9, 2011, Kyushu University), December 7, 2011.
- [2] Miyuki Koiso, Stability of surfaces with constant anisotropic mean curvature and applications to physical phenomena, III Encontro Paulista de Geometria (San Paulo, Brazil, August 8–12, 2011), August 9, 2011.
- [3] Miyuki Koiso, Stability of hypersurfaces with constant anisotropic mean curvature and its applications, Spanish–Japanese Workshop on Differential Geometry (グラナダ大学, スペイン, February 14–18, 2011), February 14, 2011.
- [4] Miyuki Koiso, Stability and bifurcation for surfaces with constant mean curvature and their generalizations, 16th School of Differential Geometry (San Paulo, Brazil, June 12–16, 2010), June 13, 2010.
- [5] Miyuki Koiso, Stability and bifurcation for surfaces with constant mean curvature and their generalizations, Oberwolfach workshop “Progress in Surface Theory”, (Oberwolfach, Germany, May 2–8, 2010), May 6, 2010.
- [6] Miyuki Koiso, Bifurcation and stability for solutions of isoperimetric problems, Isoperimetric problems, space-filling, and soap bubble geometry (March 19, 2012 – March 23, 2012, ICMS (International Center for Mathematical Sciences, Edinburgh, UK), March 19, 2012.
- [7] 小磯深幸, 等周問題型変分問題の幾何解析, 2012(平成 24)年 3 月 26 日, 日本数学会 2012 年度年会(東京理科大学), 企画特別講演.



# 研究報告書

## 「振動子理論の生物・化学・工学・医療分野への応用」

研究期間：平成20年10月～平成24年3月

研究者：郡宏

### 1. 研究のねらい

諸分野に現れる振動子集団ダイナミクスの諸問題に、位相モデルと呼ばれる数理モデルの理論研究を軸として取り組む。振動子集団ダイナミクスは、分野横断的に現れる研究テーマである。生物では、概日リズム、ロコモーション、脳、心臓、発生、粘菌の集団運動などで複雑な振動子集団ダイナミクスが現れ、その動的性質が生存に不可欠な機能や致命的異常(病気)に関連する。また化学においても様々な振動性化学反応系があり、燃料電池で重要な役割を担うプラチナ金属表面での触媒反応もその一例である。工学では、ロボットのロコモーションなどリズムカルな運動システムや、モバイル通信系、都市の信号集団を結合振動子とした系などの大自由度振動子系の統合・制御・最適化問題にブレークスルーが要求されている。これらの例からも明らかとなっており、振動子集団ダイナミクスの関わる諸問題には、社会的ニーズの高いものが多い。

振動子集団のダイナミクスの理論研究は、60年代後半から結果が蓄積されてきており、数学や物理学の非線形分野で成熟した研究テーマとなっている。特に日本の研究者は重要な貢献をしてきた。しかしながら、ほとんどの研究者は一般的・抽象的な、あるいは化学反応系のモデル実験系に関する研究にとどまり、社会的ニーズの高い応用研究に目を向けてこなかった。

近年、生物学では定量的な時系列をリアルタイムで得る技術が急速に発展しており、そのデータは、背後に潜む美しい秩序の存在を確信させる。ロボットや通信技術などの工学分野もめざましい発展を見せており、どのような奇抜なアイデアも具現化される期待を我々に抱かせる。化学分野での新発見は環境問題の救世主になり得る。これらの分野に数学の力が加わるとき、飛躍的な発展、ブレークスルーが望めることを、我々、数学的研究に携わるものは確信している。

世界的にみて、化学や工学分野では数学との連携がかなりとれている領域がある。しかし、生物・医学(wet)に関してはまだ手探りの状況であり、もっとも挑戦しがいのある分野である。本研究課題ではこれを達成することに重点を置く。

### 2. 研究成果

#### (2-1)体内時計の数理モデル化と数値解析(Nature Communications, 2011)

生物の概日リズム(約24時間の体内時計)は遺伝子の制御ネットワークによって作られているが、その全貌はまだ明らかになっておらず、分子生物学的な研究が現在も精力的に行われている。そのような中、京都大学薬学部のグループが、マウスを用いた研究で、概日リズムの周期を決める新たな制御因子を発見し、これが、特定の細胞にのみ存在し、その結果その細胞も振動周期を24時間よりも短くすることを突き止めた。またこの制御因子が、体内時計の中核である視交叉上核の特定部分に局在することによって、空間的位相勾配(波)を作ることも見いだした。私はこの制御因子に、実際に周期を短くする作用があることと、制御因子のない細胞との結合系に位相勾配が現れることを、数理モデルを構築することによって確認し(図1)、共同研究として発表した。

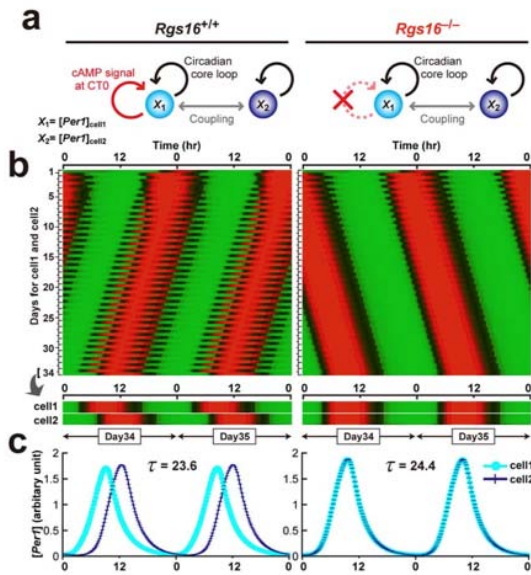


図1: 構築した数理モデルの数値シミュレーション結果. 体内時計を生成する遺伝子制御ネットワークを数理モデル化した. 実験的に観測された現象が再現されることを確認した.

(2-2) 化学反応系に現れる特異な現象の数学的説明 (Physica D, 2010)

生命現象には体内時計や拍動といった様々な種類の生物リズムが現れるが、それは細胞内における化学反応によって作られている。また、燃料電池など、現代の科学技術で不可欠な役割を果たす触媒反応においても、触媒表面では複雑な振動現象が現れることがあり、その理解や制御は実用上極めて重要である。実験室で行える化学反応系にも振動性の反応は多数存在し、生命現象のモデルとして、あるいは、工業的な応用という観点から研究されている。

共同研究を行っているバージニア大学の化学工学分野のグループが、振動性化学反応素子の集団で特異な集団挙動を発見した。これは、同期して振動している素子に、電気的な刺激を与えることによって同期を一時的に破壊する実験であるが、非同期状態から同期状態への遷移過程でクラスタ化と呼ばれる特殊な集団状態を経由することを観察した(図2)。そのような遷移がなぜ可能であるかを説明するために、化学反応の振動現象を記述する抽象的な数理モデルを提案し、数学的な構造について議論した(図3)。

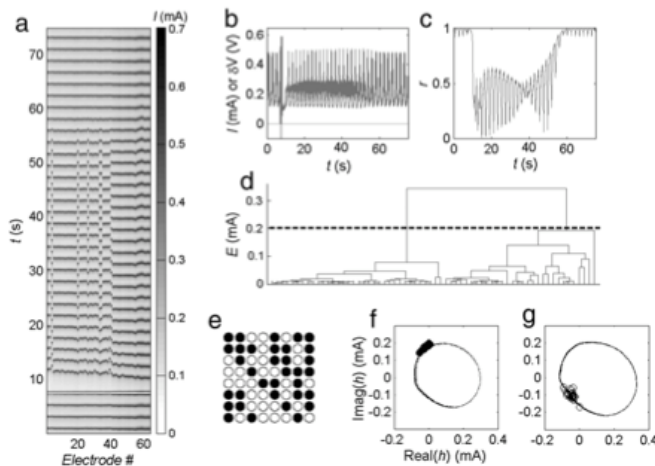


図2: 実験結果. a: 非同期状態からクラスタ状態を得て同期状態に変化する様子がみられる. f, g: クラスタ化しているときの、それぞれのクラスタの状態のスナップショット.

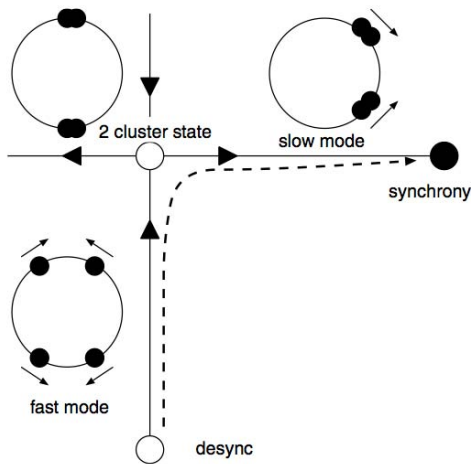


図3: 提案したモデルにおけるクラスタ機構の構造. タイムスケールの違うマニフォールドに沿った運動によって, クラスタ化する.

(2-3) 振動の規則性への独立ノイズの影響とネットワークの効果 (New J. Physics, 2010; J. Theoretical Biology, 2012)

(背景) 生物には様々なペースメーカー組織があり、これらは振動性のダイナミクスを持つ細胞の集団が構成している。たとえば、心臓の拍動を作り出す心房結節、ほ乳類概日リズムの主時計である視交叉上核、電気魚のペースメーカー神経核などが挙げられる。これらの組織は、活動のタイミングの決定やセンサーなど、生物機能において中心的な役割を果たしている。

一般に、細胞ダイナミクスは、細胞内の化学反応過程に起因する揺らぎを伴う。細胞における振動も揺らぎ、その結果、振動の精確性が低下する。そのような中で、種々のペースメーカー組織がきわめて正確なリズムを刻むことが観測されている。正確なリズムは生物時計の機能として不可欠であり、ゆらぎを抑える機構が生物リズムに備わっていると考えられる。

振動の精確性は、振動と振動の間の時間分布の広がり(標準偏差)で定義することができる。例えば、心筋細胞の場合では、拍動間隔の分布である。振動の精確性についての、Clay と DeHaan による重要な実験研究について簡単に紹介する(1979, Biophys. J.)。Clay らは、心筋細胞の分離培養系を用い、1 細胞から 100 細胞程度までのクラスタを作った。そして、拍動間隔の精確性が、クラスタを構成する細胞数にどのように依存するかを調べ、細胞数とともに振動がより精確になり、標準偏差がだいたい  $1/\sqrt{N}$  に従って減少していくことを発見した。 $1/\sqrt{N}$  則は独立な乱数を平均化したときに現れる基本法則(中心極限定理)としてよく知られる。この法則は、結合する振動子集団には当然適用できないのだが、心筋細胞の実験結果は、類似の法則が振動子集団の精確性にも存在することを示唆する。そうだとすれば  $1/\sqrt{N}$  的振る舞いは、数学的にはどのような機構で現れ、また、どの程度一般的に成立するかを明らかにすべきである。

(研究方法と結果) 任意のネットワークで結合する位相振動子集団を考え、振動のゆらぎとネットワークの関係を明らかにした。使用したモデルは次式である。

$$\dot{\phi}_i = \omega + \frac{\kappa}{N} \sum_{j=1}^N A_{ij} f(\phi_j - \phi_i) + \sqrt{D} \xi_i(t) \quad (1.1)$$

ここで  $\phi_i(t)$  は振動子  $i$  ( $1 \leq i \leq N$ ) の位相,  $\omega$  は固有振動数,  $A = \{A_{ij}\}$  は隣接行列(定数)、そして  $\xi_i(t)$  は独立な白色ガウスノイズ,  $D$  はノイズ強度である。この微分方程式を以下の状況に限定することにより解析する。まず, ノイズがないときにはすべての振動子の位相がそろった同期状態が得られることを仮定する。次にノイズが十分弱いとし, 方程式を位相同期状態の周りで線形化する。線形化された方程式から平均的な振動周期  $\tau = 2\pi / \omega$  にわたる位相拡散  $\text{var}[\phi_i(t + \tau) - \phi_i(t)] = \mu_i D \tau$  を算出した。ここで  $\mu_i$  はノイズの減衰程度を表す指数で次のように表される。

$$\mu_i = \frac{(\mathbf{v}^{(1)} \cdot \mathbf{v}^{(1)})}{N} + \sum_{m,n}^N \frac{2 - e^{-\kappa \lambda_m \tau} - e^{-\kappa \lambda_n \tau}}{\kappa(\lambda_m + \lambda_n) \tau} (\mathbf{v}^{(m)} \cdot \mathbf{v}^{(n)}) u_i^{(m)} u_i^{(n)} \quad (1.2)$$

ここで  $\lambda_m, \mathbf{u}^{(m)} = \{u_i^{(m)}\}, \mathbf{v}^{(m)}$  はそれぞれ線形化行列(ヤコビアン)の固有値, 右固有ベクトル, 左固有ベクトルである。固有値は, 我々のモデルの回転対称性と, 同期状態の安定性の仮定とから  $0 = \lambda_1 \leq \text{Re} \lambda_2 \leq \dots \leq \text{Re} \lambda_N$  を満たす。ゼロ固有値に対応する右ベクトルは  $\mathbf{u}^{(1)} = (1, \dots, 1) / \sqrt{N}$  としている。

ノイズが弱いときには, 振動周期の標準偏差SDが  $\sqrt{\mu_i}$  に比例することが, 現在考えているモデルの特殊なケースについて示せる。数値シミュレーションによって, この比例関係がよい近似になっていることを様々なケースについて確かめた。したがって(1.2)によって振動の正確性が特徴付けられる。

まずヤコビアンが対称行列である場合を考える。これは隣接行列  $A$  が対称行列であるときに得られる。このとき(1.2)は

$$\mu_i = \frac{1}{N} + \sum_{m=2}^N \frac{1 - e^{-\kappa \lambda_m \tau}}{\kappa \lambda_m \tau} \left\{ u_i^{(m)} \right\}^2 \quad (1.3)$$

に簡略化され, さらに  $\mu_i$  のネットワーク全体に対する平均値は

$$\langle \mu_i \rangle = \frac{1}{N} + \sum_{m=2}^N \frac{1 - e^{-\kappa \lambda_m \tau}}{\kappa \lambda_m \tau} \quad (1.4)$$

であることが示せる。例としてサイズ  $N$  のリング状のネットワークに対して(1.4)を図4にプロットした。SDは, 小さな  $N$  に対しては  $1/\sqrt{N}$  に比例して減衰することと,  $N \rightarrow \infty$  ではある値に収束する様子が確認できる。つまり, クロスオーバーが存在する。また, 収束値は結合強度  $\kappa$  とともに減衰しており,  $1/\sqrt{N}$  で減衰する領域は, より大きな結合強度でより広がる。

より一般的な考察をする。(1.4)を見ると, 小さな  $N$  に対しては右辺第1項が支配的で, SDの  $N$

依存性は  $1/\sqrt{N}$  である。しかし、大きな  $N$  では右辺第2項が支配的になる。リングネットワークの場合には第2項が  $N \rightarrow \infty$  で収束すること、この収束値 ( $\mu_\infty$  とする) が結合強度  $\kappa$  とともに減少することが示せる。これらの性質は、完全グラフや各種のランダムグラフでも共有されていることがさらに示せる。

次にヤコビアンが非対称行列な場合を考える。この場合は(1.2)を考える必要があり複雑である。ここでは、 $N \rightarrow \infty$  でスペクトルギャップが存在する(つまり  $\text{Re } \lambda_2 > 0$ ) 場合に限定し、さらに大きな結合強度を考える。すると、右辺第2項は無視できるので、ゆらぎの減衰は左ゼロ固有ベクトルのノルム  $\sigma \equiv \sqrt{\mathbf{v}^{(1)} \cdot \mathbf{v}^{(1)}}$  によって特徴づけられる。対称行列では  $\sigma = 1$  であり、このため

$1/\sqrt{N}$  の減衰が得られたが、一般の非対称行列に対しては  $\sigma \geq 1/\sqrt{N}$  を証明できた。つまり、非対称行列の場合は対称行列のときに比べ、ノイズの減衰が一般に弱い。これは、対称行列では民主的にダイナミクスが平均化されるのに対し、非対称行列では一部の振動子が強い影響も持つことがあり、それらのもつゆらぎに支配されるためである。

興味深い例として、各ノードの出次数  $k$  の分布が  $P(k) \propto k^{-\gamma}$  にしたがう、有向スケールフリーネットワークを考える。このとき、いくつかの近似を用いることにより、 $\sigma = 1$  ( $\gamma < 2$ ),  $N^{-1+(\gamma-1)^{-1}}$  ( $2 \leq \gamma < 3$ ),  $N^{-1/2}$  ( $\gamma > 3$ ) を得る(図5の実線)。図5の記号は数値的に左固有ベクトルを計算することによって  $\sigma$  の  $N$  依存性を計算したものであり、計算結果が正しいことが確認できた。

以上の結果をまとめると、SD は必ずしも  $1/\sqrt{N}$  のように減衰するわけではなく、クロスオーバーが一般的に存在し、また  $1/N^\beta$  ( $0 \leq \beta \leq 1/2$ ) のように減衰することもあることが示された。

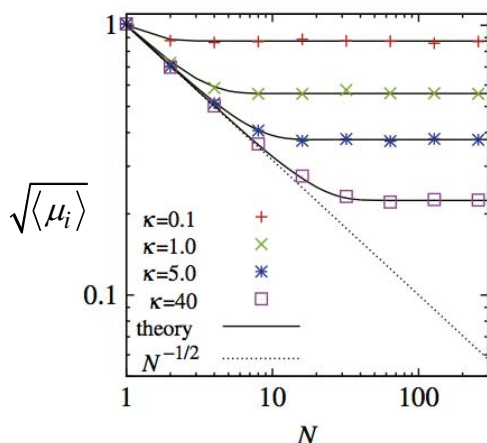


図4: 振動周期ゆらぎの大きさのネットワークサイズ依存性。リングネットワーク。実線:理論。記号:数値シミュレーション。

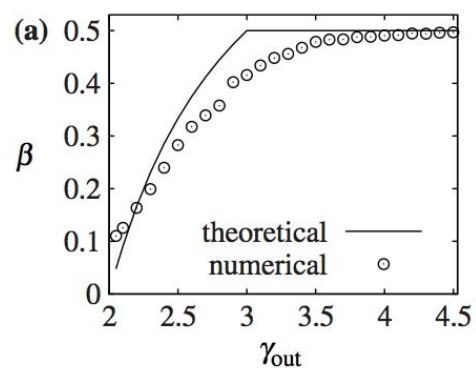


図5: ゆらぎの減衰のべきと、スケールフリーネットワークの度数分布のべきの関係。

(2-4)共通ノイズの同期に対する影響 (Physical Review E (Rapid Communications), 2010)

(背景)

現実の系では、振動子には様々なノイズが作用する。ノイズは独立ノイズと共通ノイズに大別される。独立ノイズは、熱揺らぎや分子数の揺らぎなどの各振動子が内包するノイズである(2-1)で考えたものがこれにあたる。共通ノイズは環境の温度変化など、系全体に共通に作用するノイズである。共通ノイズは様々な系に存在する基本的なノイズであり、その効果を調べることは重要である。先行研究として、2つの結合していない位相振動子に対する共通ノイズの効果が調べられており、2つの振動子が必ず同期することが解析的に示されている。結合する振動子集団に対する共通ノイズの効果については解析的な研究がない。そこで、結合振動子において共通ノイズが同期に与える影響を研究した。

(研究方法と結果)

異なる固有振動数を持つ振動子集団が大域的に相互作用し、またすべての振動子が共通のノイズを受けている次の系を考えた。

$$\dot{\phi}_i = \omega_i + \frac{K}{N} \sum_{j=1}^N \sin(\phi_j - \phi_i) + \sqrt{D} \xi(t) \quad (1.5)$$

ここで  $\omega_i$  は各振動子の固有振動数で、ローレンチアン分布にしたがうとする。また  $\xi(t)$  は白色ガウスノイズで、(2-2)の研究と異なり、すべての振動子に共通に作用することに注意する。このモデルを以下の手順で解析した。(i)  $N \rightarrow \infty$  とし Ott-Antonsen ansatz を適用する。(ii) 対応する Fokker-Planck 方程式を導出する。(iii) 弱結合を仮定し平均化近似を行う。(iv) 同期度を表すオーダーパラメタの最頻値  $A_{\max}$  を求める。これにより

$$A_{\max} = \begin{cases} 0 & (K + D < 2) \\ (K + D - 2) / K + D & (K + D \geq 2) \end{cases} \quad (1.6)$$

を得た(図6の線)。ノイズによって、同期のオンセットがより小さな結合強度で起こることが示された。つまり、共通ノイズは同期を促進する。図6にはモデルを直接数値シミュレーションした結果もプロットしているが、解析的な計算結果が正しいことが確認できる。

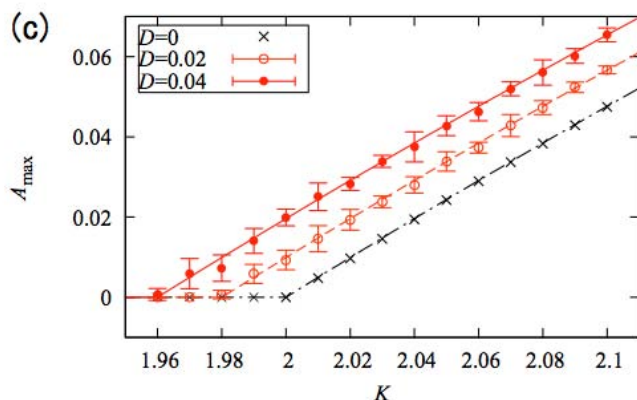


図6: 秩序度の最頻値と結合強度の関係。共通ノイズの強度  $D$  が大きいほど、小さな結合強度で秩序化する。線: 理論。記号: 数値シミュレーション。

(2-5)スモールワールドネットワークにおける同期・非同期転移とカオス (New J. Physics, 2010)

(背景)ネットワーク上のダイナミクスはネットワーク構造に強く影響を受ける。研究(2-1)では、振動の揺らぎの大きさという量的な変化とネットワーク構造の関係を取り扱ったが、秩序状態が転移するような質的な変化もありえる。この研究では、できる限り簡単な設定のもと、ネットワーク構造を特徴づけるパラメタとともに、秩序状態がどのように転移するか、その分岐構造を調べた。本研究は諸分野との連携研究を強く意識したのではなく、ネットワーク構造の効果に対する数学的興味に基づく研究である。

(方法と結果)

次のモデルを考えた。

$$\dot{\phi}_i = \omega + \sum_{j=1}^N A_{ij} (\sin(\phi_j - \phi_i + \alpha) - \sin \alpha)$$

ここで隣接行列  $A = \{A_{ij}\}$  としてノード数  $N$  のリングにランダムショートカットを  $\sigma N$  本加えた、

Watts-Strogatz ネットワークを考える。  $\sigma$  はショートカット密度で、これが 1 程度のとき、スモールワールドネットワークと呼ばれる。図4は  $N = 400$  としたときの数値シミュレーション結果から得られた相図である。ここで  $R$  は蔵本秩序パラメタで、  $R = 1$  は全振動子が位相同期した状態を、  $R = 0$  は位相がばらばらになっている非同期状態を表す。図7から、同期状態と非同期状態の間をシャープに転移することが確認できる。この転移がショートカット密度を変化させることによって得られることに注意する。つまり、ネットワーク構造によって、ダイナミクスの質的狀態が変化する。次にこの転移についてより詳しく調べるために、制御の手法を用いて秩序パラメタの分岐図を作成した(図8)。同期・非同期転移が集団状態の分岐によって理解されることが明確に示された。

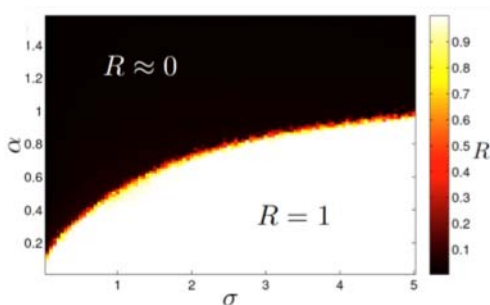


図7:スモールワールドネットワークにおける相図。同期状態 ( $R = 1$ ) から非同期状態 ( $R \approx 0$ ) にシャープに転移する。

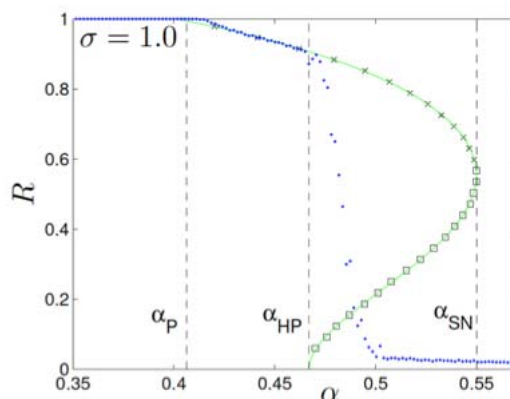


図8:秩序パラメタの分岐図。同期・非同期転移は複雑な分岐によって引き起こされている。

### 3. 今後の展開

#### ・ 振動ゆらぎの理論の実験検証

研究(2-3)の理論を実験的に検証するため、心筋細胞をつかった実験を共同研究者と進めている。特にクロスオーバーの存在が理論的に予言できたので、これを実験的に示す。これが完成すれば、理論の妥当性を示すのみでなく、ペースメーカー組織の設計原理にも踏み込んだ研究とすることができ、生物学的にも重要な貢献となると期待している。

#### ・ 振動ゆらぎの理論のナノサイエンスへの応用

ナノサイエンスは現在の科学の大きなテーマである。現在様々なナノ・デバイスやナノ・ロボットの作成が試みられているが、ナノ・クロック、つまりナノスケールの時計の需要が必ずあると考えている。クロックは、複数のデバイスやロボットの情報を統合するために必要であろう。また、時計自体も時間医療などで活用できるかもしれない。ナノスケールの子針を作るにあたり、大きな障害になると予想されるのが、熱ゆらぎや量子ゆらぎといった各種のノイズである。このノイズを抑えるために、研究(2-3)で取り扱った集団の効果を使うことが考えられる。今後の展開として期待できる。

#### ・ 体内時計の研究者との共同研究の発展

体内時計は、生物学の中でも理論的研究の活躍が特に期待できる研究テーマである。さきがけ研究期間に体内時計の研究を行ういくつかのグループと交流し、共同研究の立ち上げを模索した。その1つの成果が(2-1)であった。他にも現在進行中の研究があり、これを積極的に推進していきたい。

### 4. 自己評価

まず、重要な目標であった諸分野との協働に全力で取り組んだ。特に、生物実験に関する共同研究をハイインパクト・ジャーナル(Nature Communications)から出版できたことが評価できる。この共同研究における私の役割は分子生物学的発見のサポートであり、数学を用いてブレークスルーを探索するという本領域の目標に照らし合わせるとまだまだ物足りない。しかし、生物実験の研究者達の信頼を得ることができ、また、頻りに議論を行ったため、共同研究者達の数学的アプローチに対する理解が深まっている。今後の協働はかなりスムーズになるであろう。これを土台に、今後は数学的研究が主導する協働を目指していきたい。

また応用研究をにらんだ数学的研究としては上述の(2-3)を評価したい。この研究は、ノイズの低減に対する集団効果という生物学で古くから知られていた問題に取り組んだ。クロスオーバーと $1/\sqrt{N}$ 則の現れる条件を初めて明らかにできた。この理論は弱結合弱ノイズを仮定することにより解析的な結果を得られた。その適用範囲が広いことは数値的に確かめた。また、任意のネットワークを取り扱える点において、先行研究から大きく発展している。今後、ノイズに対する集団の影響を考える上で、重要な基礎理論として活用されると期待している。

これらの成果を得るに当たり、博士号を持つ研究補助者を雇用できたことが大変に役立った。十分な能力をもつ補助者のおかげで、私一人ではとうていできない質と量の研究が行えた。さきがけの制度に心より感謝している。

また、諸分野に数学研究の重要性を伝えることを、このさきがけ研究の中で取り組んだ。生物



分野の学生や研究者に対するチュートリアルを行った(定量生物学会で2回, 生物の夏の学校で1回, そのほかグループセミナーなど). 生物学の国際会議における研究発表においてもチュートリアル的な要素を取り入れるなどの工夫を行ってきた. またアウトリーチ活動にも多数取り組んだ(「さきがけキャラバン」での講演, サイエンス・イベント「にんげんセルオートマトン」の企画など). 今後も地道に取り組んでいきたい.

## 5. 研究総括の見解

生命系、医学系の協働研究者との分野横断的研究を振動子集団モデルを仲介として多彩な活動を展開したことは大いに評価できる。とくにノイズ低減の集団効果における数学的考察も興味深く、その双方向性への努力も評価したい。

一方で本人の自己評価にもあるように、数学、あるいは数理モデルが主導するところまでには到達していない。しかしその自覚の下で今後の発展の伸びしろは大きいであろう。また様々なアウトリーチ活動における積極的姿勢も評価したい。

## 6. 主な研究成果リスト

### (1) 論文(原著論文)発表

- |   |
|---|
| 1. H. Kori, Y. Kawamura, N. Masuda: "Structure of Cell Networks Critically Determines Oscillation Regularity", J. Theoretical Biology (2011) (in press)   |
| 2. Doi M, et al.: "Circadian regulation of intracellular G-protein signalling mediates intercellular synchrony and rhythmicity in the suprachiasmatic nucleus", Nature Communications 2, 327 (2011) |
| 3. N. Masuda, Y. Kawamura, H. Kori: "Collective fluctuations in networks of noisy components", New Journal of Physics 12, 093007 (2010)   |
| 4. R. Tonjes, N. Masuda, H. Kori: "Synchronization transition of identical phase oscillators in a directed small-world network", Chaos 20, 033108 (2010)  |
| 5. K.H. Nagai, H. Kori: "Noise-induced synchronization of a large population of globally coupled nonidentical oscillators", Physical Review E 81, 065202(R) (2010)                                  |
| 6. Y. Zhai, I. Z. Kiss, H. Kori, J. L. Hudson: "Desynchronization and clustering with pulse stimulations of coupled electrochemical relaxation oscillators", Physica D 239, pp. 848-856 (2010)      |

### (2) 特許出願

該当なし.

### (3) その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物等)

#### [主要な学会発表]

- 2011 SIAM Conference on Dynamical Systems, Snowbird, USA, May 21-26 (2011), "Collective Enhancement of Temporal Precision in Networks of Noisy Oscillators" (招待講演)
- XXX Dynamics Days Europe 2010, Bristol, United of Kingdom, September 6-10 (2010), "Collective phase diffusion and temporal precision in networks of noisy oscillators"

- XI. Congress of the European Biological Rhythms Society, Strasbourg, France, August 22-28 (2009), "Effects of intercellular communication on the entrainment to time cues" (招待講演)

[受賞] 第3回(2009年)日本物理学会若手奨励賞受賞

[著作] 郡宏、森田喜久:「生物リズムと力学系」共立出版(2011)

# 研究報告書

## 「統計モデル多様体の普遍的な性質のベイズ予測理論への応用」

研究期間：平成20年10月～平成24年3月

研究者：田中 冬彦

### 1. 研究のねらい

ある未知のパラメータをもつ統計モデルに従って、確率的に次々と発生する一連のデータから、次に出てくる値を推定する場合、従来の方法では一連のデータからパラメータを推定したり予測値と信頼区間を与える事が多い。また、より複雑なモデルの場合には未知パラメータに確率分布(事前分布)を導入して解析するが、事前分布の選択についての理論研究は非独立なモデルでは極めて少ない。

そこで、本研究では、従来の統計的推定を予測という視点から捉え直して、統計モデルの幾何学的な性質に注目して、よりよい予測方法を与える普遍的な理論の構築を目指す。特に、独立同一分布の仮定の下でのベイズ予測に関する最近の理論的な結果を踏まえて、これらを時系列モデルや量子統計モデルに拡張することを中心に据える。

### 2. 研究成果

#### A. 時系列モデルの研究

私は駒木氏との共同研究で、駒木氏による独立同一分布での優調和事前分布の議論を、スペクトル密度のベイズ推定問題におきかえて、時系列モデルにおける優調和事前分布の理論として展開している。それまでは、 $p$  個のパラメータをもつ AR( $p$ )モデルについて、1つ優調和事前分布が構成できていたが、さきがけ研究をすすめることで、さらに以下の成果が得られた。

- 1) 直観的に理解しやすいパラメータ表示(偏自己相関係数(PAC)に基く表示)の発見
- 2) Jeffreys 事前分布がパラメータ領域で積分すると発散するのに対して、優調和事前分布が積分有限、つまり、確率分布として解釈できること
- 3) 2)の帰結として、優調和事前分布に基いたベイズ推定量の許容性の証明
- 4) 1)を用いて、2次の AR モデルの今まで見つかっていなかった優調和事前分布の発見

優調和事前分布の存在はリーマン多様体上の正の優調和関数(定数を除く)の存在と同等である。その定義は、一般のラプラス作用素を用いた微分不等式の形で表現されるため、個別の統計モデルに対しては解の存在判定も難しい。また、一意ではなく無数に存在しうる。例えば、AR モデルの場合、根座標系を用いると以下のような微分不等式の解  $h(z)$  を求めることに帰着する。

$$\Delta h = \frac{\partial}{\partial z_i} \left( g^{ij} \frac{\partial h}{\partial z_j} \right) + \frac{1}{2g} \frac{\partial g}{\partial z_i} \left( g^{ij} \frac{\partial h}{\partial z_j} \right) \leq 0$$
$$g^{mh} = \frac{(1-z_m z_h) \prod_{l \neq h} (1-z_l z_m) \prod_{l \neq m} (1-z_l z_h)}{\prod_{l \neq h} (z_h - z_l) \prod_{l \neq m} (z_m - z_l)}$$

また、上の表示は根座標系を用いており  $p$  次多項式の根として定義されているため、計算上は便利であるが優調和事前分布の直観的な意味がつかみづらい。たとえば3次の AR モデルであれば AR 座標系では図1のように平面と2次曲面ではさまれた形をしている。高次の AR モデルでは高次の曲面ではさまれる形になるため、やはり直観的な意味がつかみづらい。これに比べて、PAC 座標系を用いるとパラメータの動く範囲は実数の  $(-1,1)$  の  $p$  次元超立方体の内部になり、積分の発散収束の判定も平易になる。また実用上も、事前分布を数値計算する上で超立方体の方が扱いやすい。

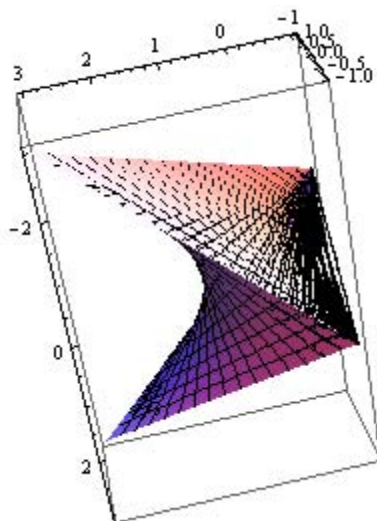


図1: AR(3)モデルの AR 座標系での定常領域(各点が1つの統計モデルに対応)

上述のスペクトル密度のベイズ推定問題を考えることで、独立同一分布の事前分布に関する他の理論的な結果も拡張できる。本研究の成果としては、

#### 5) ARMA モデルの $\alpha$ 曲率形式及び $\alpha$ 平行事前分布が存在しないことの証明

が挙げられる。 $\alpha$  平行事前分布とは、Hartigan (1998)、Takeuchi and Amari (2005) らによって提唱されたものであり、Jeffreys 事前分布が Levi-Civita 接続について平行であるように、 $\alpha$  接続で平行な事前分布として定義される。 $\alpha$  平行事前分布の存在は統計モデル多様体としての性質に依存して決まる。つまり、リーマン計量だけでなく接続に関する情報も必要である。

本研究では、まず、 $\alpha$  平行事前分布の存在条件を  $\alpha$  曲率形式の言葉で書きなおした。また、ARMA モデルについて  $\alpha$  曲率形式を計算した。 $\alpha$  曲率形式の計算では、根座標系を用いた Tanaka and Komaki (2003)にある一連の計算手法がキーになる。その結果、サブモデルである AR モデルや MA モデルは  $\alpha$  平行事前分布が存在するが、ARMA モデルでは存在しないことが示された。

## B. 量子統計モデルの研究

物理では統計理論というと Fisher 流のパラメータ推定や検定理論が主流で、近年の実験技術の進歩と、小標本での測定精度の向上のために、理論物理、統計理論の両サイドから興味深い

結果が徐々に得られている。しかし、予測分布の理論は理論物理のサイドに浸透しておらず、量子ベイズ予測として扱える問題が理論物理の中で個別に扱われている。本研究では、物理学者が気付きにくいベイズ予測的なアイデアの応用として以下のような新しい成果を得た。

1) 波動関数のパラメータ族に対するベイズ予測密度を経由した推定量の構成と積分核を用いた計算公式の導出

2) 離散純粋状態族についてのもっとも不利な事前分布の提案

が挙げられる。1)については、有限個の正規直交基底関数を用いて有限次元のヒルベルト空間におとせる場合には、すでに結果が知られているが、ロケーションモデルのような波動関数の中心を平行移動したようなモデルの場合には使えない。多体系の波動関数の場合にはさらに複雑な形になるため、上の手法を用いて実験で得られた測定データから推定する方法が有効である。特に実際の計算においては線型作用素の固有関数を求める必要があるが、解析的には非常に平易な公式も与えた。ここでは、第二種 Fredholm 積分方程式の一般論を用いた。

2)については、統計学特有の問題設定である。量子通信の際に、非直交な純粋状態(例えば波動関数)が複数種類用意されている場合を考える。複数種類のどれが送信されるか不明な状態では、事前分布をどのようにとるべきか。古典のベイズ統計にしたがって、もっとも不利な事前分布(least favorable prior)を提案した。すべての純粋状態が直交する場合には一様分布になるが、非直交の場合には、全く違う状況が起きることを示した。いいかえると、全くわからない場合でも、一様分布を仮定するのは望ましくない。

### C. 諸分野との協働について

幾何学的な手法と統計学の接点として、2011年7月に ICIAM にて“Recent development of geometrical approach to statistical analysis”というタイトルにてミニシンポジウムを企画。さきがけの三浦氏(2期生)、伊藤氏(3期生)にも発表していただき、統計理論と「幾何学的な観点」をとりいれて実データを扱っている研究者との交流の場を作った。なお、企画の段階では伊藤氏(北大)も訪問し議論を重ねていた。

またベイズ統計に関しては、駒木氏の科研費と共同で2009年12月に「ベイズ統計への情報理論的アプローチとその周辺」、2010年12月に「ベイズ統計・量子統計の新展開」を開催し、小規模ながら参加者間で活発な議論をすることができた。

量子統計に関しては、統計学会の周辺での開催がほとんどなく、量子情報・量子計算などの研究集会の中で個人単位で発表を行っているのが現状だった。そのような状況下で、2010年4月に主に理論物理・実験物理で統計に興味がある人が交流・情報交換するためのメーリングリストとして q-stats が発足した。私は物理分野との協働を模索しており、q-stats のコアメンバーとして物理や数学出身の若手と積極的に交流してきた。広く量子情報に携わる学生・若手研究者の交流のための研究集会である、関東 Student Chapter にて、2回ポスター発表を行い、逆に自分でもミーティングの機会を作ってきた。これらは個人の学術的な業績にはならないものの、結果として、統計関連学会連合大会(通称:連合大会)にて初の量子統計セッションを開催するという一歩を踏み出すことができた。

#### 4, 今後の展開

時系列モデルについて微分幾何学に基いた研究は、数学的にも応用的にも課題が多い。ARモデルであれば理論的には優調和事前分布に基いたスペクトル密度の推定量をもとに、1期先予測を構成することができる。これらの予測方法の数値的な検証が必要になってくる。また、計量経済学における多変量時系列モデルを用いた解析や、最近、空間統計学で利用されている空間ARモデルなどの理論的な解析にこれまでの結果を拡張することも考えられる。

量子統計モデルについては、数学的技巧を別として、古典統計理論の枠に入る概念の数学的な拡張(可換な量を非可換にうつす)は、ある程度、進められてきた。しかし、その一方で、波動関数のパラメータ族のような統計モデルの場合には、古典的な対応物が存在しない。より概念的な考察と整備が必要になり、それこそが統計学の根本である。事前分布の選択やはずれ値に対するロバストネス、推定量の許容性などは、統計理論の研究者にはなじみがあるが、物理学者にはなじみのない概念である。量子論の枠組みの中に、こういった概念をうまく組み込んで定式化するためには、実験的な状況がある程度理解している研究者との議論が必要である。残念ながら、さきがけ終了後は公のサポートもないものの、q-statsの中で交流・議論を通じて、豊かな成果を出していく予定である。

交流の場の提供という意味では、震災で1年ずれてしまったが、2012年7月開催の2nd ims-APRM(統計の国際会議)で海外の研究者も交えた量子統計セッションを企画している。また、2012年度のRIMS研究集会提案「量子論における統計的推測の理論と応用」が無事に採択。q-statsのメンバーに統計理論のチュートリアルと研究発表を10月下旬ごろ開催予定である。

#### 4, 自己評価

すべてが手探りであり、先行研究をマイナーチェンジするというよりは、新しいパラダイム・手法を提案する方向での研究だった。今から思うとかなりリスクであったかもしれない。常套手段があるわけでもなく、手探りのため、細かい点については、いろいろな方針をたてて試行錯誤しており、途中でとん挫したり、行き詰まった部分も多い。それでも、たとえば、ARモデル多様体については、ある程度、まとまった結果が得られたので良かったように思う。量子統計に関しては、数学的な拡張にしても、新しいアイデアの提案についても、統計・物理の両方の分野から否定的な評価を受けてなかなか論文としてpublishできずにいる。こちらは、q-statsの中で発表・議論を通して論文を改善していく予定である。現時点で見れば、苦労した割に形になった業績が少ないという感も否めない。個人の研究業績に関しては、最終年度に国内外の研究集会で発表したものを今後、論文の形でpublishすることが重要である。

一方で、分野間連携という観点では、当初の予想以上に大きく進展した。これはさきがけ領域会議などを通じて、他分野と積極的に連携をすすめている研究者に影響を受けたところが大きい。初めは、実験物理との直接連携がしっくりこない理由がわからずに苦労したが、実験物理と理論物理の間にも壁があることを知り、「まずは統計に興味ある理論物理の人と連携すればいい」という方針を得てから、連携のビジョンが見えるようになった。また、初めから統計のAさんと物理のBさんをすぐに協働させるようなお見合い方式でなく、「いつでも誰でも協働できる土壌づくり」を念頭において定期的に会うようにしたのが、大変うまくいっている。「協働(=結婚)」のプレッシャーがない！ 気が合う人をじっくり探せばいい。) 私の側からすれば、理論物理の人から、実験の人が実際にやっていることや関連文献を教えてもらうだけでなく、最近では統計学と

量子論が混ざった深い議論もできるようになってきた。その他、q-stats 以外にも、セッションや研究集会の企画など、これまで全く経験のないことも積極的に行った。海外の研究者の招へいなども、慣れない作業で時間もとられたが、非常に良い経験を積むことができた。今後は、こういった場を継続しつつ、具体的な研究成果を出していくことが重要である。

## 5. 研究総括の見解

時系列モデル、量子統計モデルにおいて従来の統計的推定を予測という観点から捉え直すと共に、より幾何学的性質にも着目して、優れた予測方法を与える手法をベイズ予測の最新の結果を用いて大きく進展させたことは評価できる。

とくに物理学者と継続して協働できる場 q-stats を作り、量子統計モデルの今後の基盤作りにも成功したことも高く評価できる。

本事業に参加することにより、その意識を変え、さきがけスピリットを最もよく体現した研究者の一人であると思う。垣根を越え、横断的な姿勢で研究することはたやすいことではなく、それを実施した田中氏の今後に大いに期待する。

## 6. 主な研究成果リスト

### (1)論文(原著論文)発表

1. TANAKA Fuyuhiko and KOMAKI Fumiyasu, "Asymptotic expansion of the risk difference of the Bayesian spectral density in the autoregressive moving average model", Sankhya Series A, Indian Statistical Institute, Vol.73-A (2011), pp. 162 – 184.
2. TANAKA Fuyuhiko, "Bayesian estimation of the unknown wave function" submitted to Physics Letters A.

### (2)特許出願

特になし

### (3)その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物等)

1. TANAKA Fuyuhiko,  
"Application of differential geometry to Bayesian estimation of spectral density",  
ICIAM 2011, Vancouver, BC, CANADA, July, 2011.
2. TANAKA Fuyuhiko and TAKEUCHI Takuma,  
"Hypothesis testing of a maximally entangled state under the unknown unitary process", The 14th Workshop on Quantum Information Processing, Montreal, CANADA, December, 2011.

# 研究報告書

## 「代数的符号理論による組合せ構造の解析と量子符号への応用」

研究期間：平成20年10月～平成24年3月

研究者：原田 昌晃

### 1. 研究のねらい

情報化社会においては数理学が色々な形で役に立っているが、その1つが符号理論である。誤りの発生する可能性のあるデジタル通信路における情報伝達において必要な理論の1つであり、ある程度の誤りの発生であれば自動的に訂正をすることが出来ることを保証するのが(誤り訂正)符号理論である。その起源は情報科学であるが、その後、豊富な数学的な理論を有することが分かり、次第に数理学の研究者の間で興味を持たれるに値する対象となっていくた。本さきがけ研究では、特に、代数的な研究が古くから行われている自己双対符号の研究を行い、符号理論における基礎研究の発展を目指す。また、近年、量子コンピュータの開発のために多方面からの研究が情報科学や物理学の研究者を中心に行なわれている。通常の誤りに(古典的な)符号理論が必要であったように、量子通信に必要なものの1つに量子符号理論の構築があげられ、最近、様々なタイプの量子誤りに対応出来る量子符号についての研究が行なわれている。本さきがけ研究では、現在、進展が期待されている量子符号への応用も目指す。本さきがけ研究では、主に、符号理論に関する次の3つのテーマについて、それぞれ関連させながら研究を行なうことをねらいとする：

- ◆ 長さ72の極値的な重偶自己双対2元符号の存在性を決定する未解決問題への挑戦、
- ◆ 計算機の支援による自己双対符号の分類問題への新たな方法での取り組み、
- ◆ 量子符号への応用を目指した組合せ構造の研究。

### 2. 研究成果

まずは、上に挙げた3つのテーマに関する研究成果を述べる。

- ◆ 長さ72の極値的な重偶自己双対2元符号の存在性を決定する未解決問題への挑戦：  
双対符号に一致する符号を自己双対符号とよび、代数的な性質を多く含むことから活発に研究が行なわれている符号のクラスである。自己双対2元符号の各符号語の重みは偶数になるが、さらに全ての符号語の重みが4の倍数になる場合を重偶とよぶ。重偶自己双対2元符号の重み多項式はある有限群の不変式環に属することなどから、その長さ  $n$  は8の倍数であり、その最小重みは  $4\lfloor n/24 \rfloor + 4$  以下であることが知られている(Mallows-Sloane (1973))。最小重みが  $4\lfloor n/24 \rfloor + 4$  に一致する場合を極値的とよぶ。長さ64以下(8の倍数)と長さ80においては、1970年代前半にはすでに極値的な自己双対2元符号が少なくとも1つは存在することが分かっていたが、長さ72では、構成への様々試みは上手くいかなかった。このような背景のもとで、1973年に、この分野の第一人者の一人である Sloane が *IEEE Trans. Information Theory* に発表した論文の中で、長さ72の極値的な重偶自己双対2元符号の存在性を決定せよ、という問題提起を行なった。このこともあり、今日では、代数的符号理論において非常に有名な問題として認識されている。

1990年代になって符号のアルファベットを有限体ではなく有限環、特に整数の剰余環にし



た研究も活発に行なわれるようになって来た。一つの結果として、重偶自己双対2元符号の自然な拡張として、位数  $2k$  の整数の剰余環  $Z_{2k}$  上にも重偶自己双対符号が定義されていることが挙げられる ( $k=1$  の場合がちょうど重偶自己双対2元符号に対応)。重偶自己双対2元符号との類似性も非常に多くみられ、例えば、長さ72に関しては極値的な符号が2元符号のときと同様に定義されている。

本さきがけ研究では、長さ72の  $Z_{2k}$  上の極値的な重偶自己双対符号の構成に取り組んだ。2以上の全ての整数  $k$  に対して、長さ24の  $Z_{2k}$  上の極値的な重偶自己双対符号が存在すること (Chapman (2000)、Gulliver-Harada (2001)) と72次元の極値的な偶ユニモジュラー格子の構成 (Nebe (印刷中)) を用いて、4以上の全ての偶数  $k$  に対して、長さ72の  $Z_{2k}$  上の極値的な重偶自己双対符号が存在すること示すことが出来た (論文は投稿準備中)。あらゆる  $k$  に対しても長さ72の  $Z_{2k}$  上の極値的な重偶自己双対符号の存在が分かったのは今回が初めてである。

このテーマに関するその他の研究成果としては、論文発表の [2], [3], [9] があり、特に [2] では長さ56と64において  $Z_4$  上の極値的な重偶自己双対符号に成功した (長さ72については上で述べた通り未解決である)。

◆ 計算機の支援による自己双対符号の分類問題への新たな方法での取り組み:

組合せ構造における基本的な研究として構成と分類への取り組みが挙げられる。符号を組合せ構造の1つだと考えて、本さきがけ研究では、上のテーマでも扱った自己双対符号に対して、計算機の支援によりその分類問題に取り組んだ。その中で最も重要だと思われる結果は、長さ40の重偶自己双対2元符号の分類を完成させることが出来たことである (Betsumiya-Munemasa との共同研究、論文は投稿中)。上でも述べた通り、重偶自己双対2元符号は長さが8の倍数のときのみ存在することが分かっている。重偶自己双対2元符号の分類は1972年に Pless によって始められ、そこでは長さ8と16のときの分類が完成した。その後、1975年に Pless-Sloane によって長さ24のときの分類が完成し、1992年に Conway-Pless-Sloane によって長さ32のときの分類が完成している。長さ32までの分類において採用された方法では長さ40の分類は難しいと思われ、本さきがけ研究において、新たな方法を開発することで長さ40の分類を完成させることが出来た。非同値な重偶自己双対2元符号の個数を次の表にまとめる:

長さ	8	16	24	32	40
個数	1	2	9	85	94343

このテーマに関するその他の研究成果として、論文発表の [1] ではユニモジュラー格子のフレームとよばれる特別な部分集合の分類に帰着させることで  $Z_k$  上の自己双対符号 ( $k=4, 6, 8, 9, 10$ ) の分類を進めることが出来、例えば  $k=4$  では長さ19まで分類を拡張させた。また、3元体、4元体上の自己双対符号とそれに関連したアダマール行列などの組合せ構造の分類についても取り組んだ (論文発表 [6], [7], [8], [10])。

◆ 量子符号への応用を目指した組合せ構造の研究:

様々なタイプの量子符号に関する研究が行なわれているが、本さきがけ研究で主に考えた

量子符号は次の論文の中で考えられている加法的な  $[[n, k, d]]$  量子符号とよばれるものである:

Calderbank–Rains–Shor–Sloane, Quantum error correction via codes over GF(4),  
*IEEE Trans. Information Theory* **44** (1998), 1369–1387.

特に、この論文では、4元体 GF(4) 上の(線形とは限らない)加法的な自己直交符号が加法的な量子符号に対応していることが示されている。ここで、与えられた符号が双対符号に含まれるときに自己直交符号とよばれる。(古典的な符号理論と同じように)  $n, k$  を固定した際に加法的な  $[[n, k, d]]$  量子符号が存在する最大の  $d$  を決定することが基本的な問題として考えられる。なお、次のデータベースで最新の結果がまとめられている:

Grassl, Code Tables, <http://www.codetables.de>.

さきがけ研究の以前に行なって来た(線形である)自己双対符号の研究を広げることで GF(4) 上の加法的な自己直交符号の研究に取り組んだ。ここでは、全ての GF(4) 上の加法的な自己双対符号 ( $k=0$  となる自己直交符号) はあるグラフから構成されるという結果 (Danielsen–Parker (2006)) に着目した。つまり、組合せ構造の1つであるグラフから自己双対量子符号が得られる訳である。正則(各頂点の次数が等しい)グラフの中から対称性の高いものを選び、構成される自己双対量子符号についての解析を行ない、特に、次の長さ  $n$  において上記のデータベースにおける今までの記録を更新する大きな  $d$  を持つ自己双対量子符号の構成に成功した:

$n$	56	57	63	70
$d$	15	15	16	16

このテーマに関するその他の研究成果として、論文発表の [4] と [5] では、ジャンプ量子符号とよばれる量子符号を与えることが出来る組合せ構造を構成するために互いに素な組合せデザインの構成に関する研究を行なった。

3つのテーマへの取り組み以外の研究活動の報告としては、まずはさきがけ研究の以前には参加していなかった工学的な立場での符号理論の研究集会やセミナーなどに参加した。また、2010年8月に開催されたRIMS合宿型セミナー「組み合わせ構造の解析と情報理論への応用」に参加し、工学的な立場での符号理論の研究者(企業に所属する研究者を含む)との交流を図った。数理科学的な立場と工学的な立場での符号理論における最新の動向を理解するために、2010年12月に上智大学理工学部で行なわれた「数学系と情報系の符号理論研究者の交流会」の世話人をした(共同)。さらに、何名かの工学的な立場での符号理論の研究者を山形大学理学部に直接招聘することで交流を行なった。また、この領域の一般に対する働きかけの活動の一環として、2011年2月に山形大学理学部で行なわれた第1回のJST数学キャラバン「拡がりゆく数学 in 山形」の世話人を行ない、2011年8月に金沢市で行なわれた第3回JST数学キャラバン「共生する数学」では符号理論の研究について一般向けに講演を行なった。

### 3. 今後の展開

有限環  $Z_{2^k}$  上の長さ72の極値的な重偶自己双対符号の存在については、本さきがけ研究

で部分的な解決を行なうことが出来たことから、当初の目標であった長さ72の極値的な重偶自己双対2元符号の存在性を決定する未解決問題の解決の糸口を見付けることが出来るのではないかと期待している。次に、自己双対符号の分類問題については、本さがけ研究で完成することが出来た分類の結果を他の組合せ構造などの問題に帰着させることを考えている。また、工学的な立場での興味の対象である符号の幾つかのクラスについて分類問題を考えることも意味があるのではないかと考えており、本さがけ研究で得られたことを発展させることによって、今後はこのような符号の分類問題にも取り組みたい。量子符号への応用を目指した組合せ構造の研究については、今後はグラフ理論だけでなく幅広く量子符号に関係する組合せ構造の研究が行なえると考えている。また、量子符号の構成に用いたGF(4)上の加法的な自己直交符号は、量子符号化における離散的な数理モデルとみなすことも出来る。本さがけ研究では、3つのテーマの対象である符号を中心に研究をして来たが、今後は、離散的な現象や構造の数理モデルとみなせる符号以外の組合せ構造の研究も幅広く行ないたい。

#### 4. 自己評価

1つ目のテーマである「長さ72の極値的な重偶自己双対2元符号の存在性を決定する未解決問題への挑戦」については、 $k$ が4以上の偶数のときに位数 $2k$ の有限環 $Z_{2k}$ 上の長さ72の極値的な重偶自己双対符号の存在性を決定することが出来たが、申請時の目標であった長さ72の極値的な重偶自己双対2元符号(上の符号の $k=1$ の場合にあたる)の存在性を決定させることは残念ながら本さがけ研究期間内には達成出来なかった。原因としては上記の結果さえ得るのに非常に時間が掛かり、2元符号の場合への取り組みが十分出来なかったことが挙げられる。 $Z_{2k}$ 上の長さ72の極値的な重偶自己双対符号で存在が未解決な場合も含めて、今後も解決に向けての取り組みを続けていきたい。2つ目のテーマである「計算機の支援による自己双対符号の分類問題への新たな方法での取り組み」については、幾つかの自己双対符号の分類を行なう方法を開発し、特に、最大課題であった長さ40の重偶自己双対2元符号の分類を完成させることが出来たので、このテーマに関しては十分な結果が得られたと考えている。最後のテーマである「量子符号への応用を目指した組合せ構造の研究」については、今までの記録を更新する大きな最小重みを持つ加法的な自己双対量子符号の構成を組合せ構造であるグラフを考えることで行なった。このことは、古典的な符号理論における枠組みと比較すれば、量子符号の枠組みにおける代数的符号理論の立場での研究と見なすことが出来るはずで、この側面からの研究を行なうことはメリットがあると思われる。

また、3つのテーマへの取り組みの他に、さがけ研究以前では参加していなかった工学的な立場での符号理論の研究集会やセミナーなどに参加し、工学的な立場での符号理論の研究者と交流を図る機会を作った。その交流から幾つかの研究の芽となるアイデアを得ることが出来たので、今後もこの活動を続けて、今までになかったような符号理論の展開に少しでも寄与したいと考えている。

#### 5. 研究総括の見解

符号理論の数学的整備はデジタル通信の発展に不可欠のものである。とりわけ誤り訂正符号理論は重要である。原田氏は代数的見地から自己双対符号の研究を行い、4以上の全ての偶数を位数とする整数の剰余環上の長さ72の極値的な重偶自己双対符号の存在証明を初めて

行うなどこの方面での顕著な成果を残したことは高く評価できる。

同時に計算機支援による自己双対符号の分類、とりわけ困難と思われた長さ40の分類を新たな方法の開発と共に成し遂げたことは、より一般的な状況への可能性を示唆するものである。さらに量子符号への応用を目指した組み合わせ構造からのアプローチは今後の発展が大いに期待される。

一方、企業での研究者を含む情報理論、符号理論の研究者との横断的交流会の組織やアウトリーチ活動も積極的に行い、本領域の認知度も高めることにも貢献したことも評価したい。

## 6. 主な研究成果リスト

### (1) 論文(原著論文)発表

1. M. Harada and A. Munemasa, On the Classification of Self-Dual $Z_k$ -Codes, <i>Lecture Notes in Comput. Sci.</i> <b>5921</b> , 78–90 (2009)
2. M. Harada, Extremal Type II $Z_4$ -Codes of Lengths 56 and 64, <i>Journal of Combinatorial Theory, Series A</i> <b>117</b> , 1285–1288 (2010)
3. M. Harada and T. Miezaki, An Upper Bound on the Minimum Weight of Type II $Z_{2k}$ -Codes, <i>Journal of Combinatorial Theory, Series A</i> <b>118</b> , 190–196 (2010)
4. M. Araya and M. Harada, Mutually Disjoint Steiner Systems $S(5,8,24)$ and $5-(24,12,48)$ Designs, <i>Electronic Journal of Combinatorics</i> <b>17</b> , #N1 (2010)
5. M. Araya, M. Harada, V.D. Tonchev and A. Wassermann, Mutually Disjoint Designs and New $5$ -Designs Derived from Groups and Codes, <i>Journal of Combinatorial Designs</i> <b>18</b> , 305–317 (2010)
6. K. Betsumiya, M. Harada and H. Kimura, Hadamard Matrices of Order 32 and Extremal Ternary Self-Dual Codes, <i>Designs, Codes and Cryptography</i> <b>58</b> , 203–214 (2011)
7. M. Harada, C. Lam, A. Munemasa and V.D. Tonchev, Classification of Generalized Hadamard Matrices $H(6,3)$ and Quaternary Hermitian Self-Dual Codes of Length 18, <i>Electronic Journal of Combinatorics</i> <b>17</b> , #R171 (2010)
8. M. Harada and A. Munemasa, Classification of Quaternary Hermitian Self-Dual Codes of Length 20, <i>IEEE Trans. Information Theory</i> <b>57</b> , 3758–3762 (2011)
9. M. Harada and T. Miezaki, An Optimal Odd Unimodular Lattice in Dimension 72, <i>Archiv der Mathematik</i> <b>97</b> , 529–533 (2011)
10. M. Harada and A. Munemasa, On the Classification of Weighing Matrices and Self-Orthogonal Codes, <i>Journal of Combinatorial Designs</i> <b>20</b> , 40–57 (2012)

### (2) 特許出願

なし

### (3) その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物等)

1. 招待講演: M. Harada, On the Classification of Extremal Type II  $Z_4$ -Codes of Length 24, Korea-Japan Workshop on Algebra and Combinatorics, 2009 年 2 月 9 日

2. 招待講演 : M. Harada、Mutually disjoint 5-designs and new 5-designs、One Day Workshop on Algebraic Combinatorics、2009 年 10 月 14 日
3. 招待講演 : 原田昌晃、自己双対符号とその周辺、第 55 回代数学シンポジウム、2010 年 8 月 12 日
4. 招待講演 : 原田昌晃、Self-dual codes -an introduction-、第 9 回代数学と計算、2011 年 11 月 8 日
5. 解説記事 : 原田昌晃・木田雅成、「Magma」、数学セミナー、2010 年 9 月号、44-47 日本評論社.
6. 解説記事 : 原田昌晃、「72次元の極値偶ユニモジュラー格子の存在について」、数学セミナー、2012 年 1 月号、13-17 日本評論社.

# 研究報告書

## 「システム生物学に関わる情報と記述の諸問題」

研究期間：平成 20 年 10 月～平成 24 年 3 月

研究者：春名 太一

### 1. 研究のねらい

典型的な複雑系である生命システムの記述にはすべての現象がそこに還元できる基礎方程式に相当するものはないと考えられ、依って立つ視点によって様々な理解の仕方を試みるのが必須です。本研究では、システム生物学に関わる分野において従来は自明とされてきた様々な概念の基礎を問い直すことで、個々の問題に対して新しい理解の仕方を提案することを目指しました。特に、圏論的双対性をはじめとした、従来は利用されてこなかった数理工的手法を導入することで未知の概念・現象が発見されることを期待しました。

### 2. 研究成果

上述の目標に対して、大きく分けて3つの具体的なテーマについて研究を行い、以下の成果を得ました。

(テーマ 1: 圏論的双対性に基づく複雑ネットワークの研究)

複雑ネットワークの科学は生命、社会、工学などに現れるネットワークの構造と機能を様々な数理工的指標や数理モデルを通じて理解することを目指します。あるシステムがひとたびネットワークとして表現されてしまえばシステムの要素や要素間の相互作用がもともと何であったかという側面は捨象され、抽象的な点や辺として扱われます。しかし、神経ネットワークや遺伝子転写制御ネットワーク、生態系フローネットワークといった生命システムに関わるネットワ

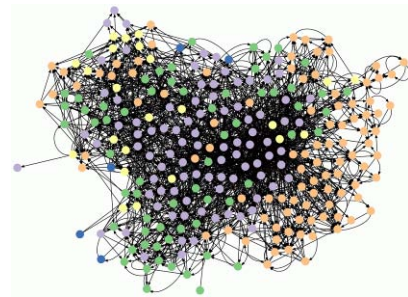


図 1. 線虫の神経ネットワーク。

ークを含む多くの現実世界のネットワークでは要素や要素間相互作用は抽象的な点や辺ではなく、要素では何らかのプロセスが走っており、要素間相互作用はプロセス間のインターフェイスとみなすことができます。本研究では、このアイデアを圏論の枠組みの中で表現し、その数理工的性質を調べる中で、圏論的な意味での普遍的な非自明なネットワーク構造を発見しました。具体的には、辺が向きを持つ(辺は矢印として書かれる)有向ネットワークにおいて「プロセス間のインターフェイスとしての相互作用」というアイデアを圏論における左 Kan 拡張を利用してある条件を満たす dinatural transformation として記述し、これらのなす圏における普遍的対象(始対象)として従来の有向経路に双対的な矢印の向きを交互に辿るという側方経路が現れることを示しました。また、上述の圏の構成自体は有向ネットワークの圏に対してだけ



図 2. 側方経路 (上)、有向経路 (下)。

なく任意の前層の圏に対して可能です。しかし、始対象の存在が示せるための条件は自明ではなく、ここではその一つの十分条件を与えました。その十分条件は有向二部ネットワークなどの有向ネットワーク以外の重要なデータ構造も含まれます。

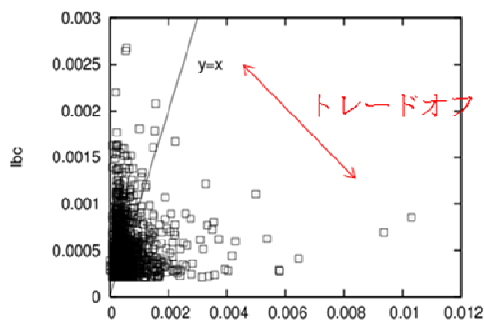


図 3. 線虫の神経ネットワークにおける側方媒介中心性(lbc)と有向媒介中心性(dbc)のトレードオフ関係。

次に、側方経路の複雑ネットワーク研究における意義を探るために幾つかの応用研究を行いました。(i) 現実世界のネットワークに対する代表的なヌルモデルでありかつ様々な性質について形式的に解くことのできるモデルとしてコンフィギュレーション・モデル(与えられた頂点の次数分布を持つランダムネットワーク)があります。Newman らによる母関数法を応用することでコンフィギュレーション・モデルにおける側方経路の様々な性質について形式的に解き、側方経路の無向経路・有向経路との違いをパーコレーション相転移が起こる条件の違いなどとして明示しました。(ii) 現実世界のネットワークの構造を側方経路の観点から調べるために新たな矢印の重要度の指標として側方媒介中心性を導入しました。線虫の神経ネットワークや生態系フローネットワークなどにおいて各矢印の側方媒介中心性と従来の有向媒介中心性の間には有意なトレードオフ関係があること、さらに、両者の分布と矢印の機能との間に明確な関係性があることを発見しました。(iii) 有向ネットワークのコミュニティ構造を抽出するアルゴリズムとして、側方媒介中心性の計算に基づくアルゴリズムを提案しました。コミュニティ抽出においては得られるコミュニティ構造の良さは品質函数と呼ばれる評価函数により測られます。ここでは提案アルゴリズムに対する品質函数として上述の普遍的対象に関連するモナドの自由代数の条件から導かれる側方矢印密度を導入しました。これは無向ネットワークにおける品質函数の一つであるリンク密度の側方経路版と考えられます。

また、複雑ネットワークに関する圏論的研究を進める過程で定常確率過程における順列エントロピーという話題に遭遇し、この方面でも圏論的双対性が有効であることを示しました。任意の全順序構造を備えた有限アルファベット上の定常確率過程に対して、シャノンエントロピーを文字列の出現確率からではなく、文字列の持つ順列の出現確率から計算したものは順列エントロピーと呼ばれ、実装が簡明かつノイズに強い時系列解析の方法として近年注目を集めています。Amigo らによる先行研究により極限を考えた順列エントロピー率は通常のエントロピー率と一致することが示されています。Amigo らによる証明はエルゴード理論による結果を本質的に用いておりかつ直感的に理解しづらいものになっていますが、本研究では文字列集合から順列集合への写像に双対的な(実際圏論的双対性的一种であるガロア接続とみなせます)、与えられた順列に対してその順列を実現するある意味で最小の文字列を対応させる写像を構成することで、Amigoらの結果を初等的にかつ直感的に理解し易い形で証明することができることを示しました。さらに、この方法を用いることで、従来の方法ではまったく扱うことができていなかった、定常確率過程の複雑さの指標の一つである残留エントロピーとその順列版の間の等式、および二つの定常確率過程間での情報の流れの向きと大きさの指標の一つである転送エントロピー率とその順列版の間の等式、などがエルゴード的隠れマルコフ過程に対して成立することを証明しました。

(テーマ 2: 化学反応系における離散性の研究)

細胞内などの小さな体積内で起こる化学反応は反応に参加する分子の個数が少なく、分子数のゆらぎや分子の個数の離散性がダイナミクスに対して本質的な役割を果たすと考えられ

まず、離散的・確率的な化学反応のダイナミクスは化学マスター方程式で記述されます。一般に化学マスター方程式を解析的に解くことは困難であり、従来は Gillespie アルゴリズムなどによる数値シミュレーションや van Kampen のサイズ展開などの近似手法を用いた解析が広く行われてきました。本研究では、特に化学マスター方程式に従うダイナミクスにおける離散性の役割を数理的に解析するために化学マスター方程式と化学フォッカー・プランク方程式の間を離散性の指標とみなせるパラメータ(離散性パラメータ)を導入して繋ぐ手法を提案しました。通常、化学フォッカー・プランク方程式は化学マスター方程式の連続変数近似とみなされますが、ここでは化学フォッカー・プランク方程式がマスター方程式で近似され(離散性パラメータが 0 に向かう極限で化学フォッカー・プランク方程式に収束)、離散性パラメータを 1 まで延長したときに化学マスター方程式が回復されるという図式となっています。応用として一変数の化学マスター方程式で記述できる自己触媒反応系における分岐現象を解析しました。解析したモデルでは定常解が単峰性から二峰性へと分岐しますが、分岐の条件は離散性パラメータに依存しないものとなっています。そこで、離散性の影響を定量的に調べるために定常時系列の大偏差統計に現れる母関数とマスター方程式の母関数表示との間の関係から相関時間を形式的に計算する手法を開発しました。この手法による計算によって分子数が 0 個になるという形での離散性のみが分岐後の相関時間に影響することを予測しました。実際に数値計算による結果と定量的によく合うことが確認できました。

(テーマ 3: 生命の起源に関わる化学進化の研究)

生命システムの作動にとって非平衡散逸構造は本質的な役割を演じています。生命の出現以前においては、非生物的な散逸システムが前生物的物质の化学進化に対して重要な貢献をした可能性があります。原始地球上で利用可能であった様々なエネルギー源の中で、温度勾配は最もありふれたものの一つです。海底熱水環境は温度勾配の地質的実現形態の一つであり、先行研究において生命の出現へと至る化学進化の場の候補として考えられてきました。近年、熱水孔近傍の鉱物に存在する微細孔内での温度勾配環境が注目を集めています。一方、原始地球上で容易に生成しえたと考えられている前生物的分子の一つとしてアミノ酸熱重合物ががあります。アミノ酸熱重合物は水中で自己集合し微小球を形成することが知られています。本研究では、微細な温度勾配

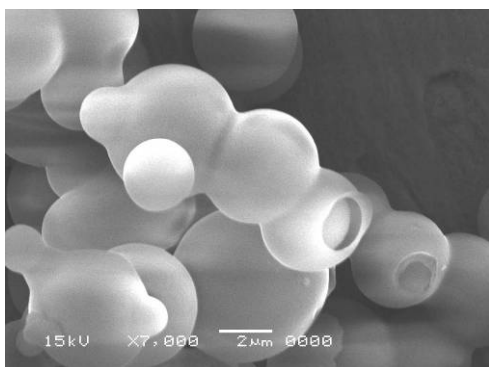


図 5. 微細温度勾配環境で形成されたアミノ酸熱重合物カプセルの走査型電子顕微鏡像

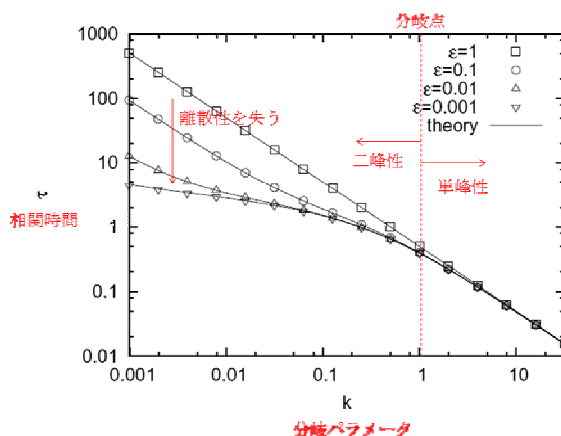


図 4. 離散性の相関時間への影響を理論計算と数値計算の間で比較した。ε は離散性パラメータ。



環境をガラスキャピラリーを用いて室内に実現し、その中でのアミノ酸熱重合物微小球の振舞いを調べました。その結果、ある条件下でアミノ酸熱重合物微小球が内部が中空となったカプセル構造へと転換されることを発見しました。さらに、実験装置を工夫することで、温度勾配にさらされたガラスキャピラリー内のごく限られた中間領域・温度でしかカプセルは形成されないことを示唆する実験結果を得ました。そこで、対照実験としてキャピラリー全体をその温度に保つ実験を行ったところカプセル形成は確認されませんでした。このことは、温度勾配に伴う熱拡散もしくは対流によると考えられる、高温域で溶解したアミノ酸熱重合物分子の低温域への移動がカプセル形成に重要な役割を果たしていることを示唆していると考えられます。また、アミノ酸熱重合物カプセルは原始的な膜としての機能と原始的な触媒としての機能の両者を有する可能性があり、カプセル形成が生命の起源の場の候補とされる地質環境を模倣した室内実験において起こることを示した本研究の結果は、生命の起源に対して一つの示唆を与えます。

### 3. 今後の展開

(テーマ 1)の複雑ネットワークの部分については、まずは側方経路に基づくコミュニティ抽出アルゴリズムの現実世界のネットワークへの応用を行います。また、側方媒介中心性による方法だけでなく、モジュラリティの側方経路版なども考えることができ、より広い観点から有向ネットワークのコミュニティ構造の研究を行います。また、得られた応用の成果が圏論の中でどのように位置づけることができるのかを検討し、新しい数学的構成を行うことを進めていきます。(テーマ 1)の順列エントロピーの部分については、特に、隠れマルコフ過程に注目し、状態と振舞いとの関係性について順列エントロピーによってどこまで迫れるかを追求します。残留エントロピーは振舞いの複雑さを定量化する指標ですが、一方で状態のダイナミクスの複雑さの指標として統計的複雑性があり、残留エントロピーは統計的複雑性の下界を与えています。順列統計的複雑性をどう定義するか自体が非自明な問題であり、その先に通常の統計的複雑性と順列統計的複雑性との間にいつ等式が成立するかという問題があります。これらの問題と、文字列と順列の双対性と状態と振舞いの双対性という二つの双対性、の間には密接な関連があることが予想されますので、二つの双対性間の関係性を整理することから取り組み始めます。

圏論はこれまで自然科学の言葉としてはほとんど用いられてきませんでしたが、圏論には新しく定義を与えるとそこから生ずる重要な性質を導く理論展開がある程度自動的に進むといった側面があり、素朴な直感にとらわれず自然に思考していくための言語として優れた一面を持つと考えられます。上記の研究を推し進めていくことを通じて、自然科学、とりわけ生命現象を対象とする科学の新しい言葉としての圏論の可能性を追求します。

(テーマ 2)については、提案手法の多変数系での応用について取り組みます。特に、相関時間の形式的計算法を多変数へと拡張し、二変数系での確率振動への離散性の影響を評価する手法の開発を進めます。また、本研究の成果を確率微分方程式の言葉に翻訳することで、複雑系・非平衡物理・生物物理といった分野で一般的に使われる言葉と数学の言葉との溝を埋めることにも取り組んでいきます。

(テーマ 3)については、カプセル形成の機構を明らかにすることを目指す研究を行います。先行研究によって溶液の pH を塩基性へとずらした場合にもアミノ酸熱重合物微小球からカプセルが形成されることが知られています。実験結果から、塩基性 pH 環境および本研究で発見した微

細温度勾配環境のどちらの場合でも、要因は異なりこそすれ一度溶解したアミノ酸熱重合物分子が溶解しつつある微小球表面近くに流入してくることがカプセル形成にとって重要な段階となっていることが示唆されています。このことを出発点として両環境でのカプセル形成を同時に説明できる数理モデルの構築に取り組みます。また、このような実験から数理モデルへという方向だけでなく、将来的には得られた数理モデルの結果を新たな実験の設計へと還流させ、両者の相互発展から生命の起源へと迫るアプローチの展開を目指します。

#### 4. 自己評価

理論研究、実験研究ともに研究開始時に期待した方向とは具体的内容が異なるものがあり、いくつか反省点もありますが、一定の成果は得られたと考えています。

(テーマ1)の圏論によるネットワーク研究においては当初はネットワークモチーフとの関連を期待していましたが、統計を議論することと構造を議論することの間の相性の悪さがネックとなり、路線変更を行いました。結果的には、新しい圏の構成に基づく普遍的かつ非自明なネットワーク構造の発見へと繋がりました。それでも、圏論による議論と具体的なネットワーク解析との関係をどのように位置づけるかについては悩み続け、具体的なネットワーク解析の成果が部分的となってしまったことは一つの反省点です。順列エントロピーに関する結果については良い意味での想定外の成果であり、当該分野の進展に貢献できたと考えています。

(テーマ2)においても、当初は化学マスター方程式の化学フォッカー・プランク方程式による近似条件を調べることで化学反応系の離散性の影響を評価する方向を考えていましたが、最終的には研究成果の項目で述べたような異なる方向へと収束して行きました。しかし、当初とは異なる方向に向かったことにより、従来とは全く異なる新しい観点から離散性を理解する方法が進展できたと考えています。ただし、研究期間の後半で当テーマにまったく時間を配分することができず、主要な応用例が一点だけに留まったことは反省すべき点です。

(テーマ3)においても、当初は異なる物質を用いて実験を行っていましたが、研究期間途中で当初期待していた結果を他の研究者に先を越されて論文まで出版されてしまい、路線変更を余儀なくされました。しかし、このことが結果的には微小温度勾配環境でのアミノ酸熱重合物によるカプセル形成という新しい現象の発見へと繋がりました。ただし、当初は数理モデル化までを研究期間内の課題としていましたが、実験の遂行に時間を取られ、研究期間内にそこまで到達できなかったことは反省点です。

#### 5. 研究総括の見解

圏論的手法というこれまでにない新たな数理言語を用いて、自然科学とくにシステム生物学にアプローチしようという積極的姿勢は野心的であり、さきがけの趣旨にかなったもので大いに評価できる。生命科学にふさわしい言語は何なのかまだよくわかっていない状況において、生命系の複雑ネットワークに圏論的双対性を用いることにより、側方経路の存在や順列エントロピーに関わる興味深い発見は注目に値する。

また細胞等の小さな体積で起こる化学反応系では関与する分子数は少なくその離散性が本質的に問題となる。春名氏は、化学マスター方程式と化学フォッカー・プランク方程式の関連づけに成功し、その分岐構造が離散性パラメータの値によらず成立することを示した。化学マスター方程式を一般的に解くことは困難であることを考えるとこの関連づけの意義は大きい。

さらに生命の起源に関わる化学進化の実験も今後の発展が大いに期待できる興味深い結果が生み出されつつある。全体として生命とは何かについて数理的視点から真摯に追求する姿勢が感じられ、高く評価できる。

またさきがけのアウトリーチ活動においても積極的に参加し、その認知度を一般の人にも高めたことも評価したい。

## 6. 主な研究成果リスト

### (1) 論文(原著論文)発表

1. Taichi Haruna. Investigating the Gap between Discrete and Continuous Models of Chemically Reacting Systems. *Journal of Computer Chemistry, Japan* 9, 135–142, 2010.
2. Taichi Haruna. An Application of Category Theory to the Study of Complex Networks. *International Journal of Computing Anticipatory Systems* 23, 146–157, 2010.
3. Taichi Haruna. Global Structure of Directed Networks Emerging from a Category Theoretical Formulation of the Idea “Objects as Processes, Interactions as Interfaces”. In T. Lenaerts et al. (Eds.) *Advances in Artificial Life, ECAL 2011, Proceedings of the Eleventh European Conference on the Synthesis and Simulation of Living Systems*, pp. 310–317, 2011.
4. Taichi Haruna, Kohei Nakajima. Permutation Complexity via Duality between Values and Orderings. *Physica D* 240, 1370–1377, 2011.
5. Taichi Haruna, Yukio-Pegio Gunji, 2011. Double Approximation and Complete Lattices. *Fundamenta Informaticae* 111, 1–14.

### (2) 特許出願

なし

### (3) その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物等)

#### 学会発表

1. An Application of Category Theory to the Study of Complex Networks. Ninth International Conference on Computing Anticipatory Systems, Liege, Belgium, August, 2009.
2. Double Approximation and Complete Lattices. The Fourth International Conference on Rough Set and Knowledge Technology. Gold Coast, Australia, July, 2009.
3. A Theoretical Study on Molecular Discreteness. The Twelfth International Conference on the Simulation and Synthesis of Living Systems, University of Southern Denmark, Odense, Denmark, August, 2010.
4. Global structure of directed networks emerging from a category theoretical formulation of the idea “objects as processes, interactions as interfaces”. Eleventh European Conference on Artificial Life, Paris, France, August, 2011.
5. Microcapsule Formation by Thermal Heterocomplex Molecules from Amino Acids in a Thermal Gradient Microcapillary. Second International Conference on Morphological Computation. Venice, Italy, September, 2011.

#### 受賞

1. Best Paper Award to “Double Approximation and Complete Lattices”, The Fourth

International Conference on Rough Set and Knowledge Technology, Gold Coast, Australia,  
July 2009.

# 研究報告書

## 「シャノン限界の実現と次世代情報通信理論の構築」

研究期間：平成 20 年 10 月～平成 24 年 3 月

研究者：平岡 裕章

### 1. 研究のねらい

本研究のねらいは高速・高信頼情報通信システムの為に必要となる数学的基礎理論を構築することである。具体的には2つのプロジェクト「シャノン限界を実現する実用的な誤り訂正符号の開発」および「ネットワーク符号における層コホモロジーを用いた解析手法の開発」に取り組んだ。

### 2. 研究成果

#### 【プロジェクト1:シャノン限界を実現する実用的誤り訂正符号の開発】

このプロジェクトではシャノン限界を実現する実用的誤り訂正符号を開発することを目指した。その方針は最尤推定復号の代数構造を調べることで高精度・低計算型近似復号法を提案することである。以下に得られた成果を3つに分けて報告する。

#### 成果1. 最尤推定復号と同値な有理写像表現を導出しその力学系的性質を解明

本研究でもっとも独創的な点は最尤推定復号を有理写像として表現し、その有理写像の力学系的性質を通じて復号過程の骨格を抽出することである。具体的には各符号語(符号長を  $n$  とする)に符号語多項式と呼ばれる  $n$  変数多項式を割り当て、それらを用いて区間  $I = [0, 1]$  の直積空間  $I^n$  上で有理写像  $f: I^n \rightarrow I^n$  を構成する。相空間は標数 0 の実数体を用いて定義されており、各区間は条件付き確率に関する意味をもつ。ここで符号空間である有限体  $F_2 = \{0, 1\}$  を区間  $I = [0, 1]$  に自然に埋め込むことで、以下の性質を明らかにした。まず各符号語に対応する相空間上の点は有理写像の安定不動点である。また非符号語に対応する相空間上の点は不安定な不確定点であることも証明され、符号語と非符号語の有理写像における役割が明らかにされた。また相空間の中心点  $p = (1/2, \dots, 1/2)$  も有理写像の不動点であり、さらにその安定部分空間は符号語の方向、不安定部分空間は符号語の方を向いていることがわかった。最尤推定復号は受信語が定める初期値の有理写像力学系としての軌道を調べることに対応することから、セパリクスの役割をする中心点近傍が定める漸近挙が、最尤推定復号を調べる上で重要であることがわかった。

#### 成果2. 符号復号双対定理を証明し最尤推定復号の代数構造を解明

最尤推定復号の有理写像力学系としての研究から、中心点に最尤推定復号の情報が含まれていることが予想される。そこで有理写像を中心点でテイラー展開した近似多項式写像を用いて提案復号方式を提案した。高精度復号という観点からはテイラー展開の次数は多くとりたい。一方低計算という観点からは無駄な非線形項の係数は零であることが望ましい。本研究の理論的成果でもっとも重要な位置づけにある符号復号双対定理は、符号化の際の生成行列の代数構造をもちいることで、これら 2 つの要求を満足する誤り訂正符号を構成できることを証明した。これにより代数幾何符号で開発された符号化における種々の手法が復号化の設計に直接使用することが可能となった。特に最尤推定復号を代数的に調べることを可能とし、符号化の代数構造と確率推定型復号の性能についての新たな研究テーマを符号理論に提示することにつながった。

### 成果3. 提案復号方式の数値シミュレーションによる性能評価

提案復号方式の伝送誤り確率特性を数値シミュレーションにより解析した。図2は横軸を符号化率、縦軸を伝送誤り確率としたシミュレーション結果である。緑は2次、赤は3次の提案復号方式

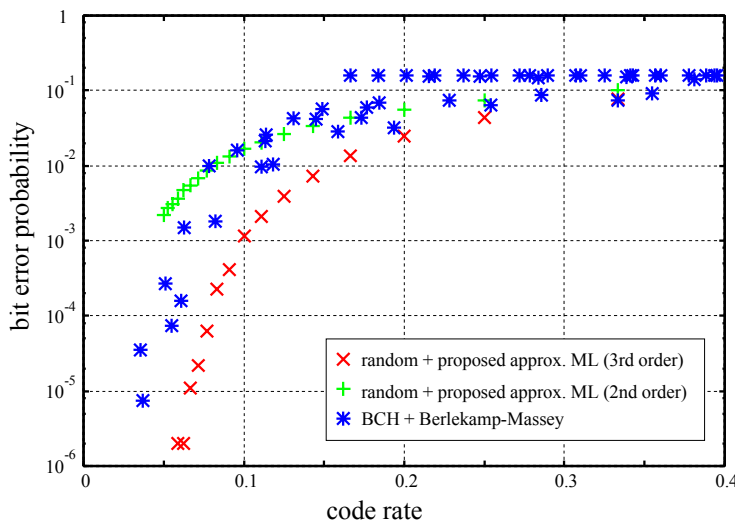


図2. 提案復号方式の性能評価(符号化率—伝送誤り確率特性)

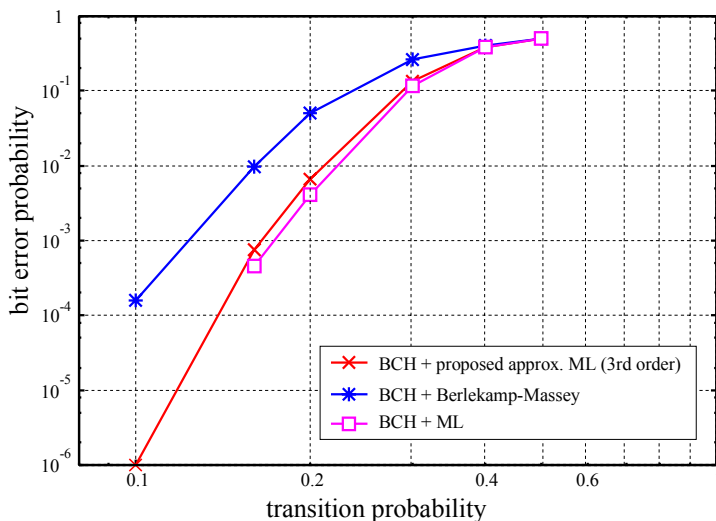


図3. 提案復号方式の性能評価(遷移確率—伝送誤り確率特性)

方式であり、符号化はランダム行列を用いて構成している。また比較のため BCH 符号(復号は Berlekamp 復号)についての計算結果を青のプロットとしてのもせてある。計算結果から 3 次提案復号法は BCH 符号より良い特性を示すことがわかる。図3は横軸を通信路の遷移確率とし、符号化は全て共通の生成行列を用いた際の伝送誤り確率特性である。青は Berlekamp 復号、赤は提案復号(3 次)、ピンクは最尤推定復号である。この数値シミュレーションから、提案復号方式は Berlekamp 復号に比べ著しく良い特性を示しており、理論限界値である最尤推定復号とほぼ同程度の特性であることが明らかになった。ここで比較の対象として用いた BCH 符号は誤

り訂正符号の中でも高性能なものとして知られていることから、本提案復号法に更なる改良を加えることでより高性能な誤り訂正符号を開発できることが期待される。

#### 【プロジェクト2:ネットワーク符号における層コホモロジーを用いた解析手法の開発】

このプロジェクトではネットワーク上での効率的情報伝送方式として注目されているネットワーク符号に対して新たな解析手法を提案し、実用化に向けた理論整備を進めることである。ここで提案した手法は層コホモロジーとそのホモロジー代数である。

#### 成果1. 情報流の層コホモロジー表現

ネットワーク上の各のノードが定める局所符号化ルールを用いて層を構成し、その層係数コホモロジー群が情報流と1対1に対応することを証明した。この対応関係によりコホモロジーに対して定まる数学的演算(積構造, 引き戻し, テンソル積等)が情報理論的意味をもつことになる。またネットワーク上の情報流が全てコホモロジー群として記述できることから、導来圏上で議論することも可能とし、双対層などを調べることも可能となった。

#### 成果2. ホモロジー代数の応用

コホモロジーの完全系列を成果1の対応関係のもとで適用することで、幾つかの実用的な問題へ応用できることを示した。例えば研究期間中に大域拡張問題と連結準同型写像, ネットワークの欠損問題と切除定理, 情報融合問題と Mayer-Vietoris 完全系列などの関係を明らかにした。

#### 3. 今後の展開

プロジェクト1については符号化の代数構造と近似最尤推定復号の特性評価について更に研究を進めて行く。特に符号の自己同型群が近似有理写像に不変式環の構造をいれるが、その代数構造を用いて伝送誤り確率の解析的評価を行っていきたい。

プロジェクト2については実用化の際に重要な問題である複数ソース型容量決定に関する未解決問題に取り組みたい。その為に導来圏上で全ての議論を再構成し、Verdier 双対定理のネットワーク符号における意味付けなどを考察していく。

#### 4. 自己評価

本研究で進めている最尤推定復号の代数構造は特に独創的な視点であり、このような新たな着想をもとに意味のある研究成果を挙げることができた点は評価したい。一方提案復号方式の伝送誤り確率の解析まで行うことができなかった。これについては今後更に研究を進めていき、シャノン限界を実現する符号開発を狙いたい。またネットワーク符号については現時点では層コホモロジー群という新たな視点が提供できたレベルであり、今後その有用性を示して行きたい。

#### 5. 研究総括の見解

シャノン限界を実現する実用的誤り訂正符号の開発およびネットワーク符号における層コホモロジーを用いた解析手法の開発という共にこれまでにない視点と新たな手法を導入し、困難な問題への挑戦が感じられ頼もしい。実際、前者に対しては、最尤推定復号を有理写像として表現し、



その力学系的性質から復号過程を調べるという全く新たな手法を編み出し、これにより符号復号双対定理を証明し、最尤推定復号の代数構造の解明に成功した。

これにより平岡氏の提案する復号方式は現実の設計にも応用可能となり、数値シミュレーションにおいても、BCH 符号の性能と同等以上であり、理論限界値に近い結果を出したことは大いに評価できる。

後者の課題についても層コホモロジーやホモロジー代数を実用的問題への応用も含め、ネットワーク符号の理論整備への今後の発展が期待されるものとなっている。

## 6. 主な研究成果リスト

### (1)論文(原著論文)発表

1. K.Hayashi and Y. Hiraoka, Rational Maps and Maximum Likelihood Decodings. In press(JJIAM)
2. R. Ghrist and Y. Hiraoka, Network Codings and Sheaf Cohomology, NOLTA 2011, 266-269.
3. R. Ghrist and Y. Hiraoka, Applications of Sheaf Cohomology and Exact Sequences to Network Coding, 京都大学数理解析研究所講究録 1752, 31-40, 2011.
4. 林和則, 平岡裕章, A dynamical system approach to coding theory: Rational map and maximum likelihood decodings, 京都大学数理解析研究所講究録 1742, 158-164, 2011.

### (2)特許出願

該当無し

### (3)その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物等)

日本数学会発表:

有理写像と最尤推定復号:符号一復号双対定理. 日本数学会2010年度秋期応用数学科分会, 2010年9月, 名古屋大学.

有理写像と最尤推定復号:復号誤り率特性. 日本数学会2010年度秋期応用数学科分会, 2010年9月, 名古屋大学.

アメリカ数学会発表:

A dynamical system approach to coding theory: duality in algebraic geometry codes. AMS Sectional Meeting, Special Session on Topological and Computational Dynamics, May 2010, Newark.

Rational maps and maximum likelihood decoding: dynamical system and invariant theory in decodings, March 2012, Honolulu.

国際会議発表:

Network Codings and Sheaf Cohomology, NOLTA2011, September 2011, Kobe.



# 研究報告書

## 「情報幾何学の計算論的神経科学への応用」

研究期間：平成20年10月～平成24年3月

研究者：三浦 佳二

### 1. 研究のねらい

脳活動などの、トレンドを持って時間変動するデータに対しては、定常性を仮定した従来のデータ解析手法では、必ずしも十分な情報が得られないため、非定常な時系列に対応できるデータ解析手法が必要とされている。特に、時系列のトレンドには“無限に多くの可能性”が存在する中で、その時間変動形に一切何の仮定も置かなくても揺らぎや相関などの高次統計量を推定できれば、大変有用なデータ解析手法となりうる。そこで、時間変動するデータから、時間変動しない情報のみを幾何学的に「射影」して取り出す数学的方法を考案する。仮にトレンドの可能性を場合分けしてプログラムを書いたとしても、“無限の可能性”に対応することは原理的に不可能であるが、これが情報幾何学の数学を有効に活用することで初めて可能となる。時系列データをこのような視点で捉えることで、脳科学を中心とした諸分野における重要問題の解決を目指した。

### 2. 研究成果

#### データ解析手法の開発としての数学的成果：

情報幾何学の1つの見方として、統計モデルに含まれるパラメタを「直交化」して応用に役立てる学問であると捉えることができる(図1)。

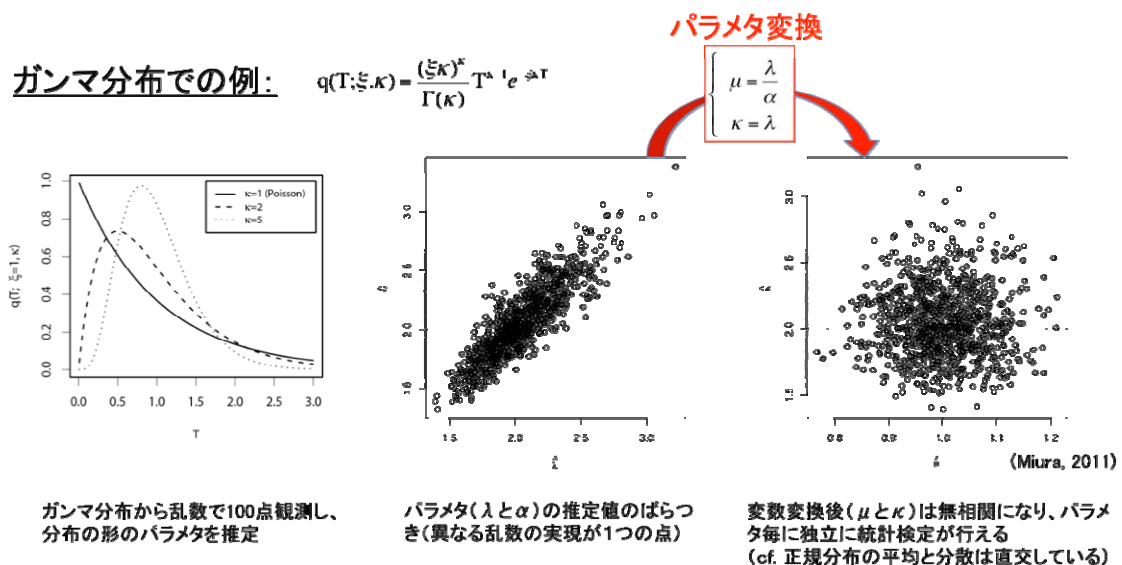


図1：情報幾何学の概略図

この情報幾何学の枠組みを、実質的に無限次元であるセミパラメトリックモデルに応用することで、無数にある「変動パラメタ」(例：平均値)がどのように変動しても、それを推定せず、有限個の「固定パラメタ」(例：相関)のみを正しく推定することができる(図2)。

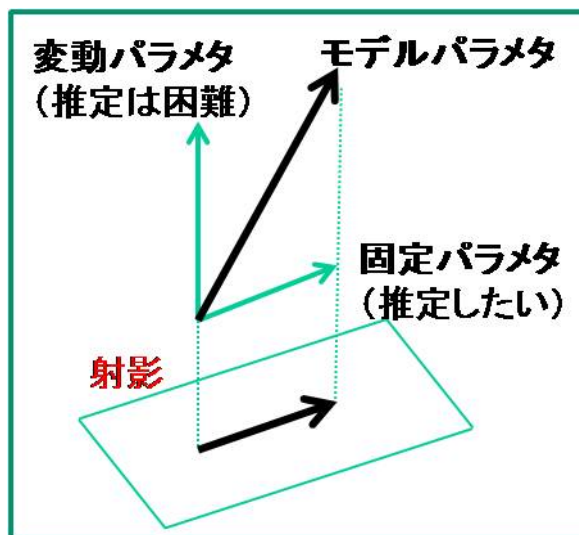


図2:情報幾何学の射影の模式図

この自由度の魔法を生かした枠組みを利用することを念頭において、脳活動等を確率モデルとして捉え、有益な情報のみを推定する方法の開発を目指し、次の3つの成果を得た(表1)。以下においては、これらを1つ1つ順に解説していく。

データの例	変動パラメタ	固定パラメタ
複数神経細胞の活動 (Miura, submitted)	シグナル (平均信号)	相関
神経細胞の発火パターン (Miura & Uchida, IEEE CDC 2008)	発火率	不規則性
動物の2択行動 (強化学習) (Miura, ICIAM 2011)	1つの選択をとる頻度 (行動価値)	同じ選択を続ける 傾向

表1:情報幾何学の枠組みでの推定に成功した例

1つ目の具体例では、任意のトレンドに対してノイズ相関を推定する方法を開発した。これを、脳活動の実データに対して応用した例においては、より時系列のトレンド成分を分離したノイズ相関を推定でき、ピークがクリアな相関関数を得ることができた（図3）。

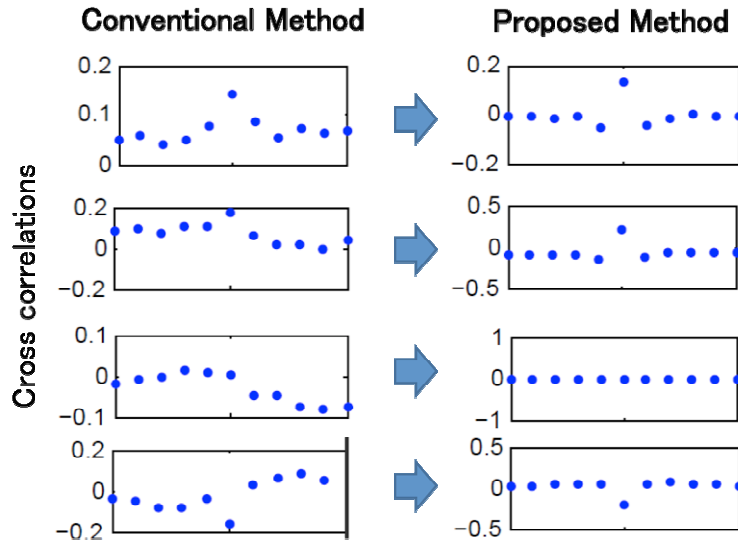


図3: 相関関数の推定, 提案法では同時刻( $\tau=0$ )のノイズ相関のみを正確に抽出できる

前の表の2つ目の例においては、神経細胞の発火パターン(点過程)のデータから、発火頻度が任意に時間変動していたとしても、不規則性(ガンマ過程のシェイプパラメタ)を推定する方法を、嗅覚皮質から計測した脳活動データに応用した。その結果、発火パターンの不規則性によって神経細胞を2個以上のグループに分類可能であることを発見した(図4)。

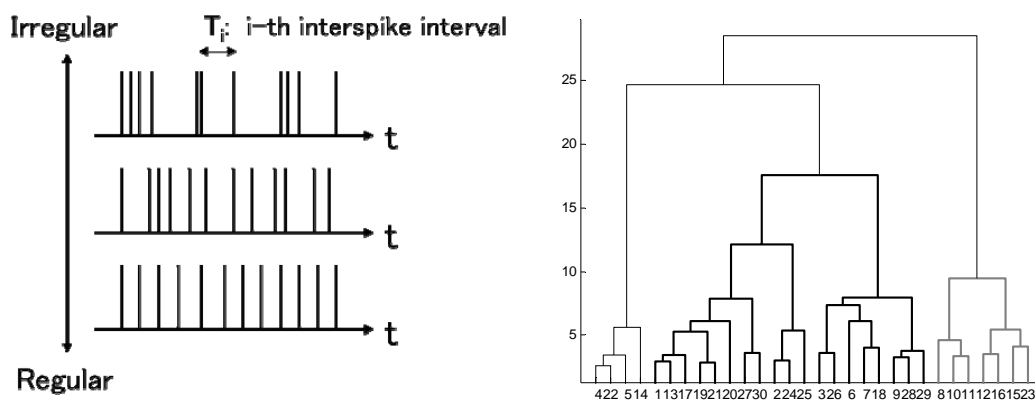


図4: 不規則性の異なるスパイクの例 / 不規則性を指標に用いた細胞のクラスタ分析

前の表の3つ目の例においては、バイナリー記号列(例えば0or1を並べたもの)に対して、0または1が出る頻度が途中で任意に変動しても、スイッチしやすさを推定する方法を提案した。

## 問題を解決する形での諸分野(脳科学)における成果

ハーバード大学内田直滋研究室への留学中の研究では、「無限とも言えるにおい物質の組み合わせを、脳がどう表現しているか」という大問題に挑んだ。特に、簡単な数理モデルから予言できる帰結として、神経活動にノイズ相関が存在すると脳の情報表現にとって都合が悪くなるという事実注目した（詳細は図5を参照）。

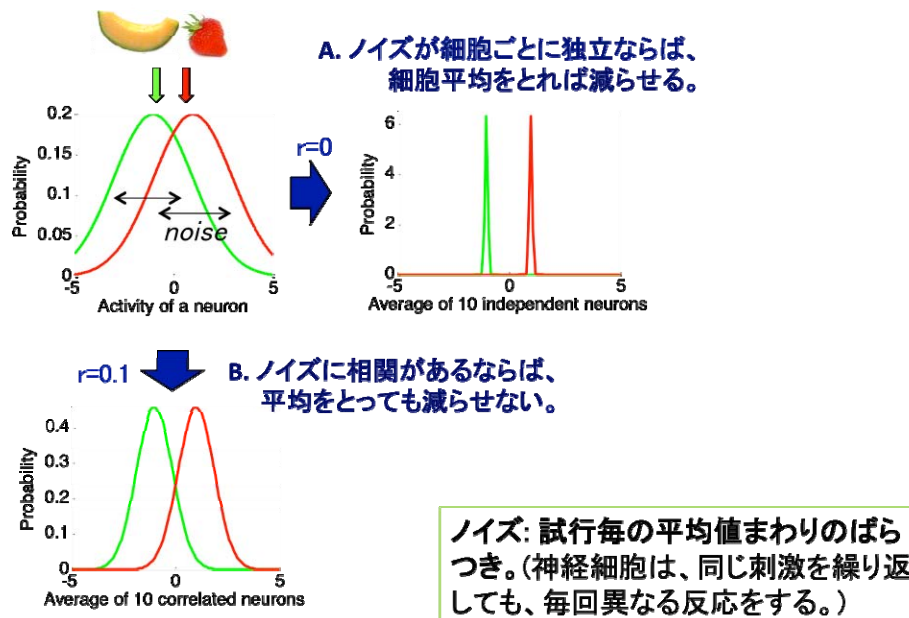


図5：不規則性の異なる単一神経細胞の応答は確率的で、刺激によって期待値が異なる（ $\pm 1$ ）ガウス分布とする（左上）。ノイズの相関係数が0の場合（右上）と、0.1の場合（左下）の、10細胞の活動の平均値の確率分布。平均応答は細胞に依存せず、相関係数も細胞ペアに依存しないという、一様性を仮定している。（三浦, 2011）

この結論はモデルの詳細によらない普遍性があり、実験脳科学者も耳を傾けざるを得ない本質的な問題である。また、数理モデルとデータ解析の併用によって初めて解明できる問題でもあるため、数学の力を発揮しやすいと考えた。例えば、従来、視覚系の分野ではノイズ相関が実質的に存在すると言われてきたが、2010年にScience誌に出た2本の論文以降、(脳活動から人間の手でトレンド成分を引けば)ノイズ相関は0であると主張する学派が現れて論争となっている。これを和解させるためには、本研究課題において開発した情報幾何学的なノイズ相関の推定手法が有効であると考えられた。

そこで、我々は、嗅覚系から記録された神経活動を解析し、ノイズ相関を計算した。その結果、脳の別の場所から計測されたこれまでの全ての報告と異なって、(トレンド成分を引くまでもなく)神経細胞間のノイズ相関が無視できるほど小さいことを観測した。これから、嗅覚系では、独立で冗長性の無い細胞活動を利用して、1つ1つの神経細胞は精度が高なくても、集団として効率的な符号化を行うことを発見した(Miura *et al.*, 2009)、なお、結果的に、情報幾何学を用いてトレンドを除くための手法は必要なく出番がなかったが、今後、視覚系から記録されたデータ解析にぜひ応用したいと考えている。

### 3, 今後の展開

今後も、本研究課題の枠組みでデータ解析手法を開発し、それを利用した応用例を積み重ねていきたい。特に応用面でのブレークスルーを常に意識して、諸分野において重要な問題を解決したいニーズと、数学サイドから提案可能な方法論のシーズのマッチングを探求し続けたい。

### 4, 自己評価

限られた具体例に関して、今回の枠組みに即してデータ解析手法を提案することができた点については、本研究課題は成功を収めたと言える。しかしながら、必ずしも、時系列を生成するどのような確率モデルであっても、任意の変動に対応できる推定が可能となるわけではなく、解ける・解けないは問題設定に依存する。どこまでが解ける問題なのかの判定ができるようになれば更に一般的に有効な方法論となりうるため、その境界をよりクリアにしていくことが今後の課題である。

### 5, 研究総括の見解

外界世界を脳がどう符号化しているかは極めて大きな問題である。三浦氏はハーバード大学において無限とも言える臭い物質を脳がどう表現しているのか、という問題に取り組んだ。その際に神経活動にノイズ相関があるかどうかは極めて重要となる。すなわちノイズが細胞毎に独立ならば、細胞毎の平均でそのようなゆらぎは取り去ることができるが、そうでなければ問題は一挙に複雑となる。しかしながらノイズ相関の有無の判定は単純ではない。それはトレンドとよばれる平均値などの変動が実際の時系列には一般に含まれるからである。

これを取り出す手法として情報幾何学的手法を開発し、それを神経活動の発火パターンを始め、いくつかの重要な応用例に適用し成功したことは大きく評価できる。

この方法は問題の詳細によらない普遍性を持ち、従ってより広い時系列への適用可能性の拡大は今後大きなインパクトをもつと期待される。

### 6, 主な研究成果リスト

#### (1)論文(原著論文)発表

- |  |
|--|
| 1. Keiji Miura, Naoshige Uchida, A Rate-Independent Measure of Irregularity for Event Series and Its Application to Neural Spiking Activity, Proceedings of 47th IEEE Conference on Decision and Control 2008:2006-11 (2008/12/10) |
| 2. Kazuho Watanabe, Hiroyuki Tanaka, Keiji Miura, Masato Okada, Transfer Matrix Method for Instantaneous Spike Rate Estimation, IEICE Transactions on Information and Systems.2009; E92-D(7):1362-1368 (2009/7/1)                  |
| 3. Masafumi Oizumi, Keiji Miura, Masato Okada, Analytical investigation of the effects of lateral connections on the accuracy of population coding, Phys. Rev. E 81, 051905 (2010) (2010/5/5)                                      |
| 4. 三浦佳二, ポピュレーションコーディングにおけるノイズ相関の影響, 日本神経回路学会誌, Vol. 18, No.2, 2011年6月号 (2011/6/5)   |

5. Keiji Miura, An Introduction to Maximum Likelihood Estimation and Information Geometry, Interdisciplinary Information Sciences, Vol. 17 (2011) , No. 3, pp. 155–174. (2011/11/30)

(2)特許出願

研究期間累積件数:0件

(3)その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物等)

主要な学会発表:

1. Keiji Miura, Zachary F. Mainen, Naoshige Uchida, Near zero noise correlations and active sampling underlie fast population codes in olfactory cortex, Society for Neuroscience, Chicago, IL; 10/2009 (2009/10/18)
2. Keiji Miura, An unbiased estimator of noise correlations under signal drift, EASIAM 2011, Kitakyushu, Japan (2011/6/28)
3. Keiji Miura, Application of information geometry to neuroeconomics, ICIAM 2011, Vancouver, Canada (2011/7/20)
4. 三浦佳二, イベント発生時刻の不規則性, 東北大×北大 数学連携 Summer Institute, 札幌 (2011/8/19)
5. Keiji Miura, Naoshige Uchida, Impact of structured noise correlations on efficacy of population coding, Society for Neuroscience 2011, Washington DC (2011/11/15)