「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24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はなく、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．事後評価対象の研究課題・研究者名

件数：　12 件

※研究課題名、研究者名は別紙一覧表参照

3．事前評価の選考方針

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うるのか、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．事前評価の選考の経緯

　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	73 件	23 件	12 件	内訳	3年型	12 件（0 件）
					5年型	0 件（0 件）

（　)内は大挑戦型研究課題としての採択内訳数。

※平成19年度に発足した本研究領域においては、平成20年度に新設された研究期間5年の研究課題、平成21年度に新設された大挑戦型研究課題は募集対象外であった。このため、研究期間3年の通常型研究課題のみ、採用候補課題として選定した。

5．研究実施期間

平成 21 年 10 月～平成 25 年 3 月

6．領域の活動状況

領域会議：7回（全 11 回）

成果報告会：1 回（全 3 回）

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、組織責任者などに対して、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。

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きがけの名を外し「JST 数学キャラバン」と改めている。

・さきがけ数学塾：3 回（全 4 回）（主として大学生を対象に、JST 施設にて実施）

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：7 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　JST 主催、（山形大学理学部共催）
H23.5.14　JST 主催、（神戸大学理学部共催）
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）
H24.6.17　JST 主催、（千葉大学理学部共催）
H25.1.05　JST 主催、福島大学数理情報学系ほか主催
H25.1.13　岡山大学特別教育研究プロジェクト主催、（JST 共催）

7．事後評価の手続き

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。

（事後評価の流れ）

平成 24 年　8 月　第 10 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　11 月　成果報告会開催(一般参加者および総括・アドバイザーによる評価)
平成 25 年　1 月　第 11 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 25 年　3 月　研究期間終了(12 件)
平成 25 年　3 月　研究報告書提出
平成 25 年　3 月　研究総括による事後評価
平成 25 年　3 月　被評価者への結果通知

8．事後評価項目

（1）外部発表（論文、口頭発表等）、特許、研究を通じての新たな知見の取得等の研究成果の状況
（2）得られた研究成果の科学技術への貢献
（3）諸分野との協働実績、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．事後評価

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 12 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。

1. 石川　博研究者 「非記号計算の基礎理論の構築と構造学習への応用」

膨大な画像や映像等のアナログ情報で表される現実の世界と、インターネットに代表され、デジタル記述されるサイバー世界における情報の概念の間に橋渡しを試みる極めて野心的かつ応用上も重要な問題である。我々の外界は基本的に非記号の世界であるが、そこから我々は自然に有用な情報を抜き出している。そのような対応を自然に定義し、複雑な構造を持つ情報一般を統一的に扱う理論を構築するのが目的となる。非記号計算が通常のチューリング計算を含むことを厳密に示し、さらに熱力学的エントロピー、量子計算との関係を考察するなど、興味深い。また構造学習、特に確率的アルゴリズムについて考察し、具体的にアルゴリズム、すなわち与えられたデータをある確率分布からのサンプルと仮定し、そのデータの属する空間に自然な写像の組み合わせで得られる写像でその分布を送り、送り先のエントロピーが減少する場合を探す場合について開発、実装したことは応用上注目に値する。全体として、石川氏の課題は今後のデジタル社会における避けて通れない重要な問題であり、今後の発展が期待される。

2. 一宮　尚志研究者 「数学を応用した動力学シミュレーション法の開発」

ミクロの支配法則からマクロの振る舞いを導出することは、我々の世界の階層性を理解する上で本質的であり、統計力学の基本問題である。分子動力学法はミクロの世界での振る舞いを有効に計算するために開発された一般的な方法であるが、要素数が膨大な場合や、長時間計算には現実的でないことが多い。一宮氏は繰り込み群の手法を用いて、この手法の加速化を試み、小数系の場合には、精度を保ちつつ、その加速化に成功した。これは今後の発展によっては、大きなポテンシャルをもつと言える。しかし生命系や実際の材料系においては、関与する要素数は多く、メモリー消費も無視できなくなるので、より本質的な改良が不可欠であろう。しかし、元の問題の困難さを考えると、一つの一里塚を残したといえる。今後の新たな数学との協働によりブレークスルーを目指して欲しい。

3. 伊藤　公人研究者 「インフルエンザウイルスの遺伝子変異に内在する数学的構造の探求」

ウイルスの変異予測という困難な問題に現場のウイルス学を含む複数分野の研究者との協働による挑戦的なさきがけ課題である。変異の詳細が不明であるが故に、その解析はdata-drivenな手法となる。MDS空間上で、ウイルスの遺伝子配列の時間発展をプロットすると、一定の曲率を持つ曲線として観測されることから、異なる年代のHA間の相対的な距離に規則性があることが示唆された。このことからHA1領域のアミノ酸置換の速度分布は、あるパラメータ値をもつガンマ分布としてよく近似でき、予測が可能となる。これはこの分野における大きな発見であると考えられ、伊藤氏により新たな道が開かれたと言える。今後予測精度の向上とその検証が進めば、インフルエンザ予防に大きな力を発揮することになるであろう。

4. 川北　素子研究者 「符号・暗号のための代数曲線論」

情報通信技術における符号理論、暗号理論の重要性はいうまでもない。とくに有限体上で定義された代数曲線の有理点数は符号理論、暗号理論において大事なパラメータとなる。一方代数曲線論の中で、それは十分研究されたとは言えない。有理点数に関する Hasse-Weil 上界に達する代数曲線は最大曲線と呼ばれ、色々な性質が知られているが、川北氏による最大曲線でない Serre 上界に達する代数曲線の発見は今後、暗号理論においてどのような発展が見込まれるか期待をもって見ていきたい。これらの成果の発表も含め、関連分野とのより積極的な協働が必要であろう。

5. 北畑　裕之研究者 「非平衡系における界面張力の数理物理学」

界面張力を介して2、3次元の場合の形の変形とそれに伴う運動の統一的理解を目指す研究で、近年注目を集めている active matter とも密接に関係する。実験、モデリング、シミュレーションがうまく融合した興味深い研究である。整理されてゆけば、一般の変形可能な自走系に対する形と動きの数学理論につながると期待される。これは 3 次元で特に興味深い。また界面張力が空間的に不均一な液滴系に対して、微分幾何学者との協働も推進しているようで、さきがけの場の力をさらに有効利用し、単独ではできない相互作用の面白さを結果として是非残していただきたい。

6. 斉藤　朝輝研究者 「真軌道によるシミュレーションの実現とその応用」

カオス解は初期値への敏感性を一つの特徴付けとして用いられるように数値計算でその正確な挙動を誤

差なしで計算することには原理的な難しさが伴う。斉藤氏は区分的1次写像、区分的1次分数写像で表現できる力学系に対し、整数係数の（連立）3次方程式の解で相空間の点を指定するという巧みなアイデアを発案するなどし、それらの系で現れるカオス解の真軌道の計算機による生成に成功した。区分的1次あるいは分数写像という制約は付くが、この結果は計算機による複雑ダイナミクスを探究する際の大きな理論的支えとなる結果であり、大いに評価したい。その応用の発展性は言うまでもないが、同時にグレブナー基底の考えなど、代数学との関連もいろいろ出てきており、数学内部での深まりも期待される。

7. 坂上　貴洋研究者 「揺らぐ結び目構造の数理」
　トポロジー的拘束のある高分子系に対するメソスケールでの現象論の構築を目指したことはさきがけの課題としてふさわしく、一定の成果を収めたことは高く評価できる。具体的には環状鎖の空間形態に課される二種類のグローバルな拘束：一つは、原点に帰ってくるということに由来する拘束であり、もう一つの拘束は、鎖が交差出来ないことから来る。この一旦形成された環状鎖のトポロジーは揺らぎの中で不変に保たれる。坂上氏はトポロジー不変の拘束条件により出現する特徴的長さ（トポロジー長）を基に、メソスケールでの現象論を構築し、そこから系のマクロな性質を記述することを目指した。特に、(I) 二次元の孤立環状鎖、(II) 細管中での結び目の局在、(III) 濃厚環状鎖溶液の三つの具体的な系について研究を行った。それぞれの系において、トポロジー長の数理的表現を導出し、トポロジーの効果がどのように系の大局的な振る舞いを支配しているのかを明らかにした成果は大きい。また、これらとは少し違った観点から、「トポロジー不変」の拘束条件の数学的表現についての研究にも着手し、結び目不変量の一つである「彩色数」を求める確率的アルゴリズムを提案し、計算複雑性の視点から議論を行った。この方面への今後の発展も期待できる。

8. 田村　隆志研究者 「非線型マクロ経済モデルのためのフレームワークの構築」
　合理的期待の仮定の下でのマクロ経済モデルにおける非線形効果を厳密に取り扱うためのフレームワークの構築を目指した研究であり、それ自体は一つの意味のある重要な課題設定と思われる。問題の困難点、例えば、経済主体の抱く予想・期待がどのように決定されるか広く合意されたモデルがないことにあると指摘するが、それも含めどのように問題を設定するかについても、さきがけ期間中に挑戦してほしい内容であった。本さきがけ研究の成果は、外乱が非常に小さいか、あるいは定常状態でのインフレ率が高くゼロ金利制約の影響が小さい場合に、適当な仮定の下、合理的期待を満たす解が存在することを示したものであり、それは「遠い将来の予想の微小な変動に対する安定性」という意味づけがクリアに与えたとあるが、それを論文等に発表することにより、その是非を問い、より広く議論されることがなかったことは極めて残念なことである。

9. 寺前　順之介研究者 「非線形情報理論：環境雑音を活用する次世代情報処理の実現」
　強い揺らぎと高精度な情報処理が共存する仕組み、揺らぎそのものの起源、さらに揺らぎを積極的に用いて情報処理精度を高める機構などを解明するという脳神経ネットワークダイナミクスにおける極めて根源的かつ困難な問題に立ち向かう、さきがけにふさわしい課題であり、それに対し一定の成果を挙げたことは大きく評価できる。寺前氏の言うようにこれは雑音を抑制する情報処理から、雑音を活かす情報処理への転換を可能にする理論基盤として重要である。最初の共存できる仕組みについては、ゆらぎの効果を確率微分方程式の方法論により取り込み、それとこれまでの非線形振動子の数理を統合する事で、一般の雑音を受ける非線形振動子の位相記述を確立する事に成功した。一方、自発揺らぎの起源に関しては、低頻度非同期発火をどのように実現しているかは長い間の疑問であった。寺前氏は最新の生理実験による興奮性神経細胞間の結合強度分布に着目し、自発揺らぎが生成される事を数理的に示し、この揺らぎが様々な生理実験を統一的に説明する事を明らかにした。この成果は重要である。実際、多数の弱結合と極めて少数の強結合の共存は脳神経ネットワークのみならず、より広い生命科学さらには社会ネットワークにも応用できる可能性が高い。実験家との協働により今後さらなる成果が生み出されるであろう。さらに数学へのフィードバックも期待される。

10. 浜野　正浩研究者 「情報論理学の新パラダイムがもたらす生物現象の計算構造の解明」
　具体的な生化学相互作用である、RNA 干渉に対して、従来は計量的な定式化によって分析されることが主であった生物現象の複雑系システムの解明を計算論理学の立場から構造的に行おうとする新たな試みであり、さきがけ研究としてふさわしい。最初のテーマ「RNA 干渉の計算構造の解明」においては RNA 干渉が持つデジタルな構造に注目し、とくにフィードバックを備えたものとして知られる再帰的 RNA 干渉を考えた。siRNA が命令の抑制として働きエラーを確率的に阻止することに注意し、 Minsky 機械の停止性と RNA 干渉の確率的な停止性の関連を考慮すれば再帰的 RNA 干渉の確率的な Turing 完全性を示し得ることは極めて興味深い。

プロセス間の通信を計算として捉える新しい計算観は'00 年代の始めに、多数の因子が絡み合う細胞内相互作用の記述を可能とした。この流れをうけ浜野氏は Kohn の分子相互作用マップ記述のために Danos らによって開発された κ 計算を、従来の相互作用などとは本質的に異なる生物現象(ヌクレオチドや核酸の間のリン酸結合や水素結合や Watson-Crick 相補性を基本単位とする相互作用)に応用し、相互作用のチャネルのパターンの組み合わせによる内側からのきめ細かい直接的な記述が可能であることを示した。また記述言語の構文論(シンタックス)と意味論(セマンティクス)の対応を RNA 干渉に具体的に構成することにより、プロセス計算の利点"何故コンパクトな記述で十分なのか?" に対する答えの根拠を規則精錬に関する意味論の不変性で捉えることに成功した。これらを化学マスター方程式や一般的な細胞内遺伝子ネットワークを記述する確率プロセス計算に拡張できるとそのインパクトは大きいと思われ、今後の発展が期待される。最後に浜野氏が今後の展開で述べている生命システムの最も本質となる構造(reciprocity)は情報論理学の基本手法である圏論を用いた随伴性によって抽出できるであろうと述べている点は注目していきたい。

11. 水口　毅研究者 「力学系における不安定対称解の探査と制御の新展開」
理学・工学の分野における様々な現象においてその不安定解に注目し、それを軸に記述し、制御するという視点は複雑に遷移するダイナミクスを対象にする場合の非常に有効な視点である。

水口氏は対称性の観点から不安定解の探査、分類を行い、制御する手段の開発をめざす課題および力学系の相空間の構造を解明する上で不安定対称解が果たす役割を考察するという課題の2つをテーマに掲げ研究を推進した。前者の不安定解の探査においては、初期条件の制御が困難な場合でも適用可能な方法には、時系列解析を用いた方法とフィードバックを用いた方法があり、水口氏はラスロップによって導入された時系列解析の手法をより一般化した方法を提案した。その思想は系が有する対称性に対応した変換の像との距離を測定せよと解釈することができ、系が他の対称性を有する場合に一般化することに成功し、多くの系において不安定解の探査と分類に有用な方法論を与えたことは高く評価できる。後者の相空間構造の解明ではカオス的な振る舞いを保ちながら系の対称性が統計的に破れる(あるいは回復する)という特徴を持つアトラクタマージングクライシスという分岐現象に着目し、とくに対称性が破れた側から分岐点に近づいた場合に、対称不安定解が重要な役割を果たすことを示したことは重要な発見である。実際、対称なベイスンの境界上にはマージング解(以下、M 解)と呼ばれる特定の不安定対称解があり、これが対称性の回復の予兆等に重要な役割を果たすことが明らかにされた。水口氏の仕事は数理の視点の面白さが出ていると言える。今後この視点の有効性はさらに拡大すると思われる。

12. 溝口　紀子研究者 「非線形放物型方程式の解の爆発とその応用」
爆発問題はなんらかの意味で集中・凝集が起きる場合には、避けて通れない問題である。実際には値が無限にならなくとも、そう近似することで明確にある。溝口氏は藤田方程式および KS-方程式に対し多くの貢献を成した。前者の藤田方程式に対しては、「Nehari 多様体(Nehari 関数を用いて定義される)と定常解の安定多様体が横断的に交わる」という無限次元力学系的な結果を証明することによって、藤田方程式の解の爆発に関する大きな未解決問題のひとつを解決したことは評価に値する。また KS-方程式に対し、「爆発はどの程度頻繁に起きるのか」という基本的な疑問に対して、球対称解の範疇で爆発解をあたえる初期値は無限次元あることを厳密に示し、解決の扉を開いた寄与は大きい。今後は他分野研究者とも連携し、新たな数学の問題発掘にも貢献して欲しい。

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・常務理事
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　　関西大学　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　研究部門長

（参考）

件数はいずれも、平成25年3月末現在。

（1）外部発表件数

	国　内	国　際	計
論　文	8	66	74
口　頭	82	68	150
その他	2	2	4
合　計	92	136	228

（2）特許出願件数

国　内	国　際	計
0	0	0

（3）受賞等

・坂上貴洋
日本物理学会　第5回（2011 年）日本物理学会若手奨励賞(2011/3/26)
文部科学省　平成 24 年度科学技術分野の文部科学大臣表彰　若手科学者賞(2012/4/17)
・寺前順之介
日本物理学会　第4回（2010 年）日本物理学会若手奨励賞(2010/3/22)
The 3rd International Conference on Cognitive Neurodynamics　Best Paper Award (2011/6/11)
・溝口紀子
女性科学者に明るい未来をの会　第 31 回（2011 年）猿橋賞(2011/4/19)

（4）招待講演

国際　26 件
国内　18 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　事後評価実施　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 25 年 3 月末現在） （応募時所属）	研究費 （百万円）
石川　博 （兼任）	非記号計算の基礎理論の構築と構造学習への応用 （名古屋市立大学、早稲田大学）	早稲田大学理工学術院　教授 （名古屋市立大学　准教授）	25
一宮　尚志 （兼任）	数学を応用した動力学シミュレーション法の開発 （京都大学、岐阜大学）	岐阜大学大学院医学系研究科　准教授 （京都大学グローバル COE 特定研究員）	9
伊藤　公人 （兼任）	インフルエンザウイルスの遺伝子変異に内在する数学的構造の探求 （北海道大学）	北海道大学人獣共通感染症リサーチセンター　准教授 （同上）	30
川北　素子 （兼任）	符号・暗号のための代数曲線論 （滋賀医科大学）	滋賀医科大学医学部　准教授 （同上）	7
北畑　裕之 （兼任）	非平衡系における界面張力の数理物理学 （千葉大学）	千葉大学大学院理学研究科　准教授 （同上　講師）	32
斉藤　朝輝 （兼任）	真軌道によるシミュレーションの実現とその応用 （はこだて未来大学）	公立はこだて未来大学システム情報科学部　准教授 （同上）	19
坂上　貴洋 （兼任）	揺らぐ結び目構造の数理 （九州大学）	九州大学理学研究院　助教 （京都大学福井謙一記念研究センター研究員）	33
田村　隆志 （兼任）	情報幾何学の計算論的神経科学への応用 （大阪大学、大阪府立大学）	大阪府立大学学術研究院　准教授 （大阪大学大学院基礎工学研究科　助教）	8
寺前　順之介 （兼任）	非線形情報理論：環境雑音を活用する次世代情報処理の実現 （理化学研究所、大阪大学）	大阪大学大学院情報科学研究科　准教授 （理化学研究所脳科学総合研究センター基礎科学特別研究員）	11
浜野　正浩 （専任）	情報論理学の新パラダイムがもたらす生物現象の計算構造の解明 （東京大学）	科学技術振興機構　専任研究者 （沖縄科学技術研究基盤整備機構　研究員）	18
水口　毅 （兼任）	力学系における不安定対称解の探査と制御の新展開 （大阪府立大学）	大阪府立大学大学院工学研究科　講師 （同上）	9
溝口　紀子 （兼任）	非線形放物型方程式の解の爆発とその応用 （東京学芸大学）	東京学芸大学教育学部　准教授 （同上）	21

※本領域では、研究場所について複数記載した。

研　究　報　告　書

「非記号計算の基礎理論の構築と構造学習への応用」

研究タイプ：通常型
研究期間：　平成 21 年 10 月～平成 25 年 3 月

研　究　者：　石川　博

1.　研究のねらい

本研究では、昨今増加が著しい画像や映像、各種計測データ等のアナログ情報で表される現実の世界と、インターネットに代表され、デジタル記述されるサイバー世界における情報の概念の間に橋渡しをすることを目指す。

画像の中に物体を見つけることなどを目的とするパターン認識を、我々は画像などデータについての直感に基づいて、どのように見える特徴がどのように配置されているかというモデルを設計し、それを見つけることで実現してきた。しかし、画像レベルから遠い抽象的なパターンを見つけようとすると、我々の直感は限られ、それは難しくなる。

そのため、人間の直感に頼らずに自動的にモデルを作る一般技術が望まれ、機械学習が研究されている。しかし、パラメータ学習はツマミのついた機械のセッティングを見つけるようなもので、ツマミの位置は探すが、機械そのもの、つまりモデルは人手で設計される。一方、顕在的なモデルを持たない方法では、モデルを記述するための表現が存在しないために、パターンの存在を見つけても、それを表す方法がないので、階層的にそのパターンの空間の中にさらにパターンを探すというようなことができない。

パターン認識では、あらかじめ人間が指定する対象の特定の配置のようなものをパターンと呼んでいる。つまり、我々が見つけたい対象の個別例と、それから我々が直感的に外挿したものの総体として、漠然とパターンという言葉を使っている。しかし具体的に前もって知らないパターンを自動的に発見するためには、パターンとは何であるかという一般的かつ客観的な基準が必要である。本研究ではそのような基準について考えてみたい。パターンの反対はランダムな対象である。つまり、ある対象がランダムから遠いほど、その対象中にはパターンが存在する。記号列の場合を考えると、短いプログラムで書き出すことが可能な記号列ほどパターンを持つと考えられる。

記号列だけでなく、もっと一般の対象について同様なことが考えられるだろうか。本研究では、一般の対象に一様な「符号化」を与えることで、非記号の世界において計算と情報の概念を自然に定義し、複雑な構造を持つ情報　一般を統一的に扱う理論を構築する。また画像などの高次元データ中にパターンを見つけることへの応用を目指す。

2.　研究成果

（1）概要

理論面では、現実世界のモデルとして従来の計算の概念に何が不足し、それが非記号計算の導入によっていかにして与えられるのか、本質的に何が違うのかについて考察するとともに、可能な計算の理論的限界等の研究をした。具体的にはまず、自然数を特徴付ける写像によって生成される非記号計算の「図式」によってチューリング計算が可能であることを示し、

非記号計算が通常のチューリング計算を含むことが確立した。次に、物理学で使われるようになっている Shannon の意味の情報の概念について、構造の天下りに与えられていないデータから構造を見いだすことを目指す観点から検討した。特に、物理学における熱力学的エントロピーと計算の関連についての従来理論が非記号化によってどう影響されるか検討した。また、非記号計算の理論を量子計算に拡張するために理論の一般化を検討した。非記号計算には計算のステップに当たる明示的な概念がないが、これを確率化あるいは量子化する場合に、「同時」の概念がないと全確率が1になるという条件を入れにくいことが判明した。関連して非記号計算同様ステップの概念がない論理ネットワークについても調査・検討した。最後に、物理現象一般を量子計算として捉えるアイデアが最近流布しているようなので調査したが、定式化と言える主張はないようであることが判った。

応用を目指した実装では、非記号計算によるパターン発見を計算機上でシミュレートするための基本機構の研究をした。構造の天下りに与えられていないデータから構造を見いだすことを目指すため、特定の構造を仮定しないように、また写像として与えられる任意の構造を平等に扱えるようにする必要があるが、一方で完全に一般にすると実行効率が非現実的に悪くなるので、そのバランスを考えつつ設計・実装を行った。その上で、与えられたデータをある確率分布からのサンプルと仮定し、そのデータの属する空間に自然な写像の組み合わせで得られる写像でその分布を送り、送り先のエントロピーが減少する場合を探すアルゴリズムを開発、実装した。その詳細は検討中である。

(2)詳細

研究テーマ A 「記号計算理論の構築」

現実世界のモデルとして、従来の計算の概念に何が不足し、それが非記号計算の導入によっていかにして与えられるのか、本質的に何が違うのかについて考察するとともに、純粋に数学的・理論計算機科学的側面として、可能な計算の理論的限界等の計算可能性理論的側面の研究をした。具体的には以下の通りである。

- 自然数を特徴付ける写像によって生成される図式によってチューリング計算が可能であることを示した。図式によって直接チューリングマシンを構成する証明と、任意の帰納的部分関数が図式によって表現できることを示す証明との両方がある。一方、自然数を特徴付ける写像によって生成される図式はチューリング計算でシミュレート可能であることも証明した。これらの証明により、非記号計算が通常のチューリング計算を含むことが確立された。
- 情報の概念が物理学などでますます使われるようになっているが、それは大部分 Shannon の意味においてである。つまり、何らかの状況において複数の可能性があり、そのうちどれであるか特定できる状態、あるいはそれぞれの可能性の確率を推定できる状態を「情報を持っている」と称する。この複数の可能性が何であるかを指定するのは「理論」の設定の一部となっていて天下りに与えられ、それを理論の中で記述対象として扱う場合は希である。構造の天下りに与えられていないデータから構造を見いだすこと

を目指す本研究の観点からこの点を検討した。

- 物理学における熱力学的エントロピーと計算の関連についての従来理論が非記号化によってどう影響されるか検討した。熱力学的エントロピーが missing information として理解できるということは定着しているようである。その情報の量を記述するのに Shannon の記述が使われる（歴史的順序は逆）。（物理の意味の）位相空間を格子に仕切って、その中のどこにあるかという意味で上記の「複数の可能性」を指定している。この定式化は基本的に Boltzmann から変わっていないが、単純に格子に仕切る根拠がないのと、その格子の細かさ、「解像度」を指定しなければならないところが理論として不備である。位相空間を有限個の箱に分けるにしてもいくらでも可能性があるので、それを相対化するために、W. H. Zurek（Phys. Rev. A, 40(8), 1989）は分け方自体を記述してそのアルゴリズム情報量をエントロピーの中に含めるということを提案した。しかしそのためには状況を一旦記号列に符号化しなければならない。ここで鶏が先か卵が先かという状況が生じるのだが、論文中では明確でない。以上のように古典論的にはエントロピーは微視的に正確に定義されていないという結論に達した。
- ここで非記号計算を使った定式化ができないか検討したが、単純には結びつかなかった。Zurek の理論でも解像度を高くしていくとエントロピーが発散する問題はそのままだが、システムの状態を無限精度で指定するには無限大の情報量が必要であるのはある意味当然である。実数値を指定するような情報量を間引いて定義できないか考察している。この無限精度の問題の通常の説明は、量子論に行けば解決するというものだが、量子力学にもいわゆる連続スペクトルのようなものはある。量子情報でも qubit で表される離散スペクトルの場合しか扱われていないようであるが、理論的には不備である。
- 非記号計算の理論を量子計算に拡張するために理論の一般化を検討した。非記号計算では対象となる空間の部分集合を指定することにより、その空間の各点に 1 か 0 を与えていると考えることができるが、この各点に与えるものをそれぞれ[0,1]にするか複素数にするという単純な発想である。非記号計算には通常の多くの計算モデルと違って計算のステップ（すなわち時間）に当たる明示的な概念がないという特徴があるが、これを確率化する場合（あるいは量子化する場合）に、「同時」の概念がないと全確率が1になるという条件を入れにくいことが判明した。つまり、ある範囲で積分したら 1 になるような条件を入れるための範囲が明らかでない。これは量子計算において演算子がユニタリであるという条件に対応する。
- 関連して非記号計算同様ステップの概念がない論理ネットワークについて調べた。量子論理ネットワークや量子チューリング機械のユニバーサリティの定義には、非可算無限個ある量子計算機構を可算コード化するために無理に計算可能数に結びつけようとする不自然さがあるようなので、非記号計算を使ってこれを自然に定義できないか検討した。論理ネットワークをアルゴリズムや計算のモデルとして他のモデルと同じ土俵に乗せるためには、固定長の入力を持つネットワークの、入力長分の無限個の族を考える。他のモデルと比べるためにはさらに有限的な記述ができる必要があるので、入力長からネットワークの記述を計算するチューリングマシンが存在するという条件をつけて一様族などという。しかしそれではチューリングマシンに依存した定義になってしまうので、非記号

計算を使って定義できないか検討した。これは可能であると思われる。

- 物理現象一般を量子計算として捉えるアイデアが最近流布しているようなので調査したが、著名な研究者によるものではあるが内容的にはアイデアの段階を出ていないようで、定式化と言える主張はないようであることが判った。

研究テーマＢ「非記号計算の構造学習への応用」

非記号計算を計算機上でシミュレートするための基本機構の研究をした。まず基本ソフトウェアを実装し、それを土台として構造学習のための基本機構を研究した。また構造学習アルゴリズムの開発のために既存の学習アルゴリズム、特に確率的アルゴリズムについて調査した。

本研究では、構造の天下りに与えられていないデータから構造を見いだすことを目指すため、特定の構造を仮定しないように、また写像として与えられる任意の構造を平等に扱えるようにする必要があるが、一方で完全に一般にすると実行効率が非現実的に悪くなるので、そのバランスを考えつつ設計・実装を行った。

その上で、与えられたデータをある確率分布からのサンプルと仮定し、そのデータの属する空間に自然な写像の組み合わせで得られる写像でその分布を送り、送り先のエントロピーが減少する場合を探すアルゴリズムを開発、実装した。

与えられたデータのエントロピーを特異的に減少させる写像を見つけるために、各空間で典型的（ランダム）な分布も同じ写像で送って比較する。そのために異なる空間におけるエントロピーの推定方法を検討、実装した。次元が変わった場合のエントロピーの比較について改良・検討中である。

3.　今後の展開

理論的な知見はまとめて今後発表したい。応用の研究は途上であるので継続する。後者の成果がないと前者も発表しにくいので、後者の継続を重視する。

4.　自己評価

理論的な部分は当初のねらいどおり様々な検討を行うことができた。応用部分は時間が足りなかったが、基本的にねらいどおりの方向に進捗している。

5.　研究総括の見解

膨大な画像や映像等のアナログ情報で表される現実の世界と、インターネットに代表され、デジタル記述されるサイバー世界における情報の概念の間に橋渡しを試みる極めて野心的かつ応用上も重要な問題である．我々の外界は基本的に非記号の世界であるが，そこから我々は自然に有用な情報を抜き出している．そのような対応を自然に定義し、複雑な構造を持つ情報 一般を統一的に扱う理論を構築するのが目的となる．非記号計算が通常のチューリング計算を含むことを厳密に示し，さらに熱力学的エントロピー，量子計算との関係を考察するなど，興味深い．また構造学習，とくに特に確率的アルゴリズムについて考察し，具体的にアルゴリズム，すなわち与えられたデータをある確率分布からのサンプルと仮定し、そのデータの属する空間に自然な写像の組

み合わせで得られる写像でその分布を送り、送り先のエントロピーが減少する場合を探す場合について開発、実装したことは応用上注目に値する．全体として，石川氏の課題は今後のデジタル社会における避けて通れない重要な問題であり，今後の発展が期待される．

6．　主な研究成果リスト

（1）論文（原著論文）発表

1. Hiroshi Ishikawa. “Transformation of General Binary MRF Minimization to the First Order Case.” IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence. 2011, vol. 33, pp. 1234-1249.
2. T. Windheuser, H. Ishikawa, and D. Cremers. “Generalized Roof Duality for Multi-Label Optimization: Optimal Lower Bounds and Persistency.” Twelfth European Conference on Computer Vision (ECCV2012), 2012, pp. 400-413, Springer-Verlag.

（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、プレスリリース等）

- 学会発表： 石川博 ［招待講演］「パターンとは何か――非記号計算と一般対象の情報計量」第 12 回情報論的学習理論ワークショップ (IBIS 2009)，九州大学．pp. 24-45. 2009/10/21
- 学会発表： 石川博 「最適化としてのパターン自動発見にむけて」 電子情報通信学会パターン認識・メディア解研究会(PRMU)，藤原総合文化会館（栃木県日光市）．電子情報通信学会技術研究報告 vol.109, no. 344, PRMU2009-146, pp. 49-54. 2009/12/18
- 学会発表： 石川博 ［特別講演］「ビジョンにおける高階最適化と学習～ボトムアッププローチ～」 電子情報通信学会パターン認識・メディア解研究会(PRMU) 2010 年 9 月 5 日，福岡大学 2010/9/5
- 著作物： Hiroshi Ishikawa and Olga Veksler. “Optimizing Multi-Label MRFs with Convex and Truncated Convex Priors.” Chapter 4 of "Markov Random Fields for Vision and Image Processing," edited by Andrew Blake, Pushmeet Kohli, and Carsten Rother, MIT Press, September 2011. ISBN: 978-0-262-01577-6.
- 著作物： Hiroshi Ishikawa. “Graph Cuts—Combinatorial Optimization in Vision.” Chapter 2 of "Image Processing and Analysis with Graphs: Theory and Practice", Edited by Olivier Lézoray and Leo Grady, CRC Press, July 2012. ISBN: 978-1-439-855072.

研　究　報　告　書

「数学を応用した新しい動力学シミュレーションの開発」

研究タイプ：通常型
研究期間：　平成 21 年 10 月～平成 25 年 3 月
研　究　者：　一宮　尚志

1.　研究のねらい

分子動力学シミュレーションは、物理・化学・工学・医学など、多くの分野において研究に不可欠なツールとなっている。しかし分子動力学シミュレーションの応用が広がるにつれて、従来のシミュレーション法には多くの限界があることも明らかになってきた。その中でも応用上重要と思われるのが、計算時間の問題である。新規医薬品の開発などにおいては、1ミリ秒～1秒程度の間のタンパク質の動きをシミュレーションする必要がある。しかしながら、通常の MD でこのようなシミュレーションを行おうとすると、数か月から 1 年以上の時間が必要となり、大量にシミュレーションを行うのは現実的ではない。そこで、計算を高速で行うため、物理学などの知識を応用したさまざまなシミュレーション手法が提案されてきたが、数学的考察を用いた高速化のアプローチは存在しなかった。分子動力学は数学の中でも力学系と呼ばれる分野と関係が深い。動力学シミュレーションを数学的に解析し、力学系のアイディアを応用することで、高速な動力学シミュレーションに貢献可能ではないかと考えられる。

一方、分子動力学シミュレーションを数学的に見直すことは、数学にとっても意味があると思われる。たとえば、分子動力学シミュレーションでよく使われる能勢—フーバー方程式は、過去の力学系研究ではあまり考えられてこなかった構造をしている。このような力学系の構造を数学的に明らかにすることで、数学の進歩に寄与することが第二の狙いである。

まとめると、本研究の狙いは以下の 2 点となる。

A. 数学の知識を活用し、新しい高速な動力学シミュレーション法を開発する。
B. 分子動力学シミュレーションのアルゴリズムを数理の観点から分析し、その構造を調べる。

2.　研究成果

（1）概要

繰り込みの考え方を応用した新しい動力学シミュレーションの手法を考案した。一般に繰り込みとは、系の性質をできるだけ変更せずに粗視化を行う技法である。短い時空間スケールでの振る舞いを、パラメータの変化という形に「繰り込む」ことにより、大きな時空間スケールでの系の振る舞いを記述する方程式を得ることができる。これを有効に使えば、長時間の原子の振る舞いを記述する方程式を導出できるのではないか、というのが本研究のアイディアである。繰り込みの手続きについては、数学や物理学において多くの手法が提案されているが、動力学シミュレーションに直接応用可能なものはなかった。

本研究において、研究者はランジュバン方程式（有限温度分子動力学シミュレーション

で使われる確率微分方程式の一種）の数値解法に対する新しい繰り込み法を考案し、これに基づいたシミュレーション法を提案した。確率微分方程式の数値計算法であるオイラー―丸山法について粗視化を行い、この繰り込みを用いた新しいシミュレーション法を考案した。この新しいシミュレーション法と、従来よく使われているオイラー―丸山法による数値計算の結果を、30 個の原子からなる鎖の運動のシミュレーションで比較したところ

- 計算結果自体はどちらも定量的に一致している
- 計算時間は温度などの条件にもよるが、1/2～1/4 程度に短縮化される
- 従来の方法では並列化による高速化は殆ど見られないが、新しい方法では並列化による高速化が大きく、場合によっては30%程度高速化する
- ただしメモリ消費量は大きくなる

といったことが判明した。

以上のことから、この新しいシミュレーション技法は、比較的少ない原子の長時間の動きをスーパーコンピュータ上でシミュレーションする場合などに有効であると思われる。

（2）詳細

研究テーマ A：数学を応用した新しい動力学シミュレーション法の開発

繰り込みの考え方を応用し、新しい有限温度での動力学シミュレーションの手法を提案した。具体的には、以下の通りである。

$$\frac{dx}{dt} = -\eta\frac{\partial V(x)}{\partial x} + \sigma\xi$$

ランジュバン方程式

$$\Downarrow$$

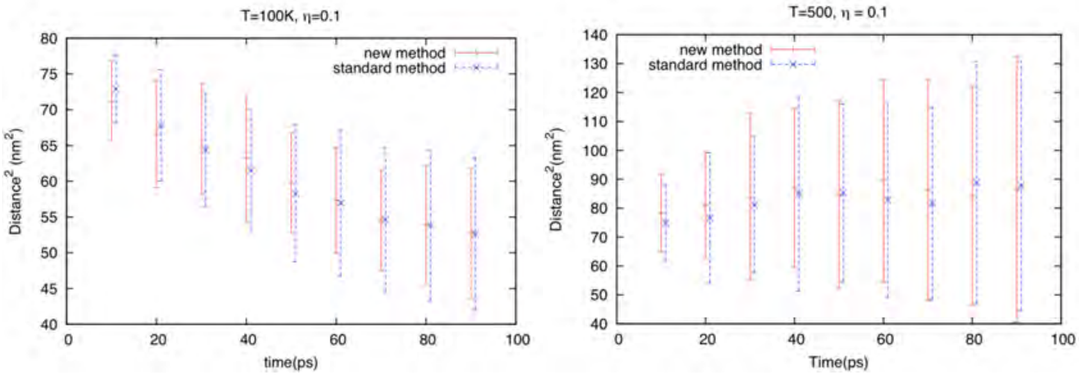
$$x(t+\Delta t) = x(t) - \eta\frac{\partial V(x)}{\partial x}\bigg|_{x=x(t)} + \sigma\sqrt{\Delta t}\xi$$

オイラーー丸山アルゴリズム

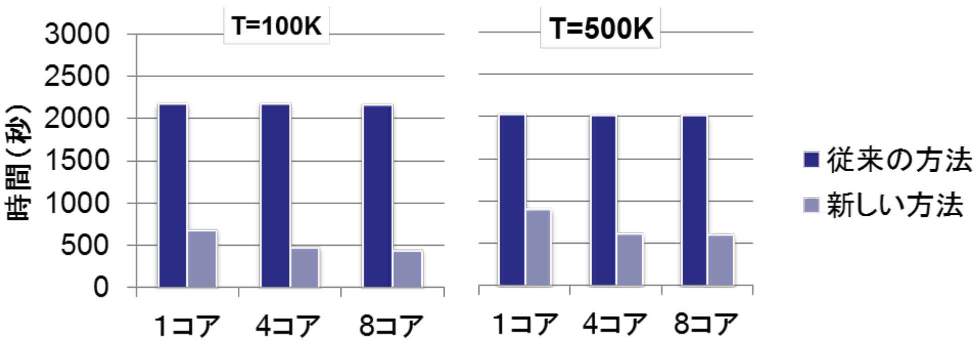
有限温度の動力学シミュレーションにおいて、よく使われる方程式にランジュバン方程式がある。この方程式を数値的に解く手法としては、オイラーー丸山アルゴリズムがよく使われている。

このような数値計算のアルゴリズムは、ある時刻 t の状態 x(t)から時刻 t+Δtの状態 x(t＋Δt)への写像とみなすことができる。 この写像に対して繰り込みの手法を適用するというのが今回提案した手法の主要なアイディアである。繰り込みとは、一般に粗視化の効果をパラメータの変化に押し込めることで、モデルの定量的変化を抑える手法である。今の場合には、x(t)→x(t＋Δt)という写像から、x(t)→x(t＋2Δt)という写像を構成する手法となる。この手法をもう一度繰り返すと、 x(t)→x(t＋2Δt)という写像から、x(t)→x(t＋4Δt)という写像を得られる。これを利用して、x(t)→x(t＋2^nΔt)という写像を構成し、これを用いて動力学シミュレーションを行おう、というのが本手法のアイディアである。今回は、初期値 x(t)と分散σという二つのパラメータに粗視化の効果を繰り込む手法を考案した。

この新しいシミュレーション法の性能を確かめるため、新しい手法と従来からあるオイラー―丸山法によるシミュレーションを行い、その結果を比較することにした。モデルとしては、炭素原子30個が鎖状につ ながった系を仮想的に考え、温度100K の場合500K の場合、 各々30 回ずつの数値シミュレーションを行った。



シミュレーション結果の一部を上図に示す。これは、鎖の両端の原子の間の距離の時間変化を示したものであり、点は平均値、縦線の長さは標準偏差を表す。今回提案した方法による結果(赤)と、従来のオイラー—丸山法(青)で示した結果は定量的に一致していることがわかる。



シミュレーションに要した時間を上に示す。今回開発したシミュレーション法は、温度に依らず従来法より高速であった。特に低温、かつ使用するCPUコアの数が多い場合に高速化が顕著であり、温度1OOK、8 コアの場合には4倍近くまで高速化されている。

以上のように、今回新しく開発したアルゴリズムは、既存のアルゴリズムと定量的に一致する結果を与える高速なアルゴリズムである。欠点としては、繰り込みの過程において行列計算を必要とするためメモリの消費量は大きくなることが挙げられる。この点から、本提案手法は比較的少数の原子からなる系を長時間シミュレーションするのに向いている手法と思われる。この内容は現在論文に纏めて投稿中である。

研究テーマ B:分子動力学のアルゴリズムの数学的解析

能勢—フーバー力学系の挙動について、数値計算を用いた研究を行った。能勢—フーバー力学系は、有限温度でのシミュレーションによく使われるモデルであるが、その詳しい性質はよくわかっておらず、一部の系で KAM 的なトーラスが存在するとの報告があるのみである。

本研究では、特に遷移現象のダイナミクスの理解を中心に研究を行った。一つのエネルギー極小状態から別のエネルギー極小状態への系の変化である遷移は、以下の理由で研究対象として興味深い。

・ハミルトン系の遷移現象は、ヘテロクリニック軌道や、法双曲不変多様体の理論等を通してよく理解されている。能勢—フーバー力学系はハミルトン系ではないが、KAM 的なトーラス構造を持つなどハミルトン系に似た特徴を持っており、ハミルトン系の理論の拡張で対応できる可能性がある。

$$\frac{dx_i}{dt} = p_i/m_i$$

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial V(x)}{\partial x_i} - \frac{\eta p_i}{Q}$$

$$\frac{d\eta}{dt} = \sum \frac{{p_i}^2}{m_i} - 3Nk_BT$$

能勢—フーバー力学系

・能勢—フーバー力学系は、Gibbs 分布を不変測度として持つことが知られているが、遷移確率に対する Arrhenius 則が成り立つかどうか不明である。

・応用の面では、遷移現象の分子動力学シミュレーションはもっとも難しい問題のひとつである。能勢—フーバー力学系の遷移現象について理解することで、遷移確率を加速させる新たな方法が得られる可能性がある。

以上のような動機から、遷移現象を伴うモデルとして、1 次元周期ポテンシャル中の能勢—フーバー力学系について数値的に研究を行った結果、以下のようなことが分かった。

・遷移の時間相関が大きく、Arrhenius の法則は成り立っていない。
また、その相関は物理的な意味を持たないパラメータに強く依存している。このことから、遷移を伴うダイナミクスのシミュレーションを行うのに能勢—フーバー力学系は適していないものと思われる。

・ハミルトン系の遷移の理論では、不安定固定点を繋ぐヘテロクリニック軌道が重要な役割を果たすことが知られているが、能勢—フーバー力学系で不安定固定点に対応するものは、ポテンシャルの微分が0の点に存在する不安定解（x＝一定、p＝0）である。しかしながら、ハミルトン力学系におけるヘテロクリニック軌道に対応するものを考えるのはこの系では容易ではなく、さらに研究が必要である。

3.　今後の展開

研究テーマ A：数学を応用した新しい動力学シミュレーション法の開発

今回開発した数値計算アルゴリズムに関して、さらに改良、高速化を重ねると共に、実用化を図りたいと考えている。特に、スーパーコンピュータを用いたタンパク質の折り畳みのシミュレーション技術として、実用化を目指していきたい。

研究テーマ B：分子動力学のアルゴリズムの数学的解析

今回の研究では具体的な成果は出なかったが、多くの研究者から興味深く、意義のある問題であると評価を頂いている。今後は力学系により詳しい数学研究者の協力を得つつ、研究を進め、ハミルトン系の遷移の理論に対応する能勢—フーバー力学系の遷移の理論を構築したい。

4.　自己評価

狙いのうち、数学の知見や技法を応用したシミュレーション技法の開発に関しては、従来の方法よりも高速なシミュレーション技法を提案することができた。実際のシミュレーションに応用するには時間が足りず間に合わなかったが、まずまずの成果であると評価している。

一方、分子動力学シミュレーションアルゴリズムの数学的解析に関しては、予定よりも成果が下回ることになった。これに関しては、事前に想定していたよりもはるかに問題が難しく、研究者の数学的素養では解決できなかったことが要因である。できる限り早期に、ハミルトン力学系等に詳しい研究者の協力を仰ぐべきであったと反省している。

5.　研究総括の見解

ミクロの支配法則からマクロの振る舞いを導出することは、我々の世界の階層性を理解する上で本質的であり、統計力学の基本問題である。分子動力学法はミクロの世界での振る舞いを有効に計算するために開発された一般的な方法であるが、要素数が膨大な場合や、長時間計算には現実的でないことが多い。一宮氏は繰り込み群の手法を用いて、この手法の加速化を試み、小数系の場合には、精度を保ちつつ、その加速化に成功した。これは今後の発展によっては、大きなポテンシャルをもつと言える。しかし生命系や実際の材料系においては、関与する要素数は多く、メモリー消費も無視できなくなるので、より本質的な改良が不可欠であろう。しかし、元の問題の困難さを考えると、一つの一里塚を残したといえる。今後の新たな数学との協働によりブレークスルーを目指して欲しい。

6.　主な研究成果リスト

（1）論文（原著論文）発表

なし

（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、プレスリリース等）

学会/国際会議発表

1. Takashi Ichinomiya, “Deterministic Diffusion in Nose-Hoover system”, StatPhysHK, HongKong Baptist University, 2010.7.14
2. Takashi Ichinomiya, “Mathematical Aspect of Molecular Dynamical Simulation methods”, International work shop ″Emerging Topics in Nonlinear Science″, Shross-Goldrain, Itary, 2010.9.15
3. Takashi Ichonomiya, “Renormalization approach to solve Langevin’s equation”, EASIAM 2011, Waseda University Kitakyushu Campus,　2011. 6. 29.
4. 一宮　尚志、″Langevin 方程式の数値計算に対する繰り込み的アプローチ″、″日本物理学2011年秋季大会、富山大学″、2011.9.22
5. Takashi Ichinomiya, “Renormalization approach to solve Langevin equation numerically”, Dynamics Days US 2012, Baltimore, 2012. 1.5

研　究　報　告　書

「インフルエンザウイルスの遺伝子変異に内在する数学的構造の探求」

研究タイプ：通常型
研究期間：　平成 21 年 10 月～平成 25 年 3 月
研　究　者：　伊藤　公人

1.　研究のねらい

インフルエンザウイルスの主要抗原はヘマグルチニン(HA)であり、感染およびワクチン接種によりHA に対する血中抗体の産生が誘導される。インフルエンザの予防にはワクチン接種が有効であるが、人の集団内で流行するうちに HA の抗原領域に変異を持つウイルスが選択されて流行するウイルスの抗原性が年々変化する。このため、流行株の抗原性に合わせてワクチン株を変更する必要がある。

WHO が推奨したワクチン株と実際にそのシーズンに流行したA 香港型 (H3N2)インフルエンザウイルスを比較すると、1997 年以降の 15 シーズンのうち 9 シーズンでワクチン株と流行株が一致しない。ワクチン株は、新しい変異株が流行する数ヶ月前に選定しなければならず、流行株を先回りして予測することが重要となる。

本研究では、インフルエンザのワクチンを先回りして準備するために、世界各国のサーベイランスで得られる大量の遺伝子データからウイルスの遺伝子変異に内在する数学的構造を発見し、将来の変異を予測することを目的とする。ウイルス学・計算機科学・数理科学の研究者が協働して、過去に流行したインフルエンザウイルスの遺伝子配列を大規模に解析し、ウイルス遺伝子の時間発展を説明する数理モデルおよびその解析手法を開発する。将来の変異ウイルスの遺伝子配列を実際に予測して、予測の精度および数理モデルの妥当性を評価する。具体的には、下記の3つの研究項目を達成する。

(1) ウイルス遺伝子の次元圧縮写像の探索
(2) ウイルス遺伝子の時間発展を説明する数理モデルの構築
(3) インフルエンザウイルスの変異予測および予測精度の検証

これらの研究項目を通じ、インフルエンザウイルスの遺伝子変異に内在する数学的構造を探求し、過去・現在・未来における遺伝子変異のダイナミクスに迫る。

インフルエンザウイルスは、医学、疫学、獣医学等の分野で古くから広く研究されているが、将来の変異を高い精度で予測する手法は未だ存在しない。従来、生物の進化は現存する種の遺伝情報から過去に遡る方向で研究されてきた。しかし、ウイルスの変異予測では、過去から現在、そして未来に向う進化を研究しなければならない。ウイルス学・計算機科学・数学の研究者が一丸となって本課題に取り組むことにより、数学と生命科学の研究者の連携を促進すると同時に、数理科学分野における新たな方法論の開拓をねらう。

2. 研究成果

(1)概要

本研究では、インフルエンザウイルスの遺伝子変異を予測するために、ウイルス学・計算機科学・数理科学の研究者が協働し、過去に流行したインフルエンザウイルスの遺伝子配列を大規模に解析し、ウイルスの遺伝子変異に内在する数学的構造を探求した。

(1) ウイルス遺伝子の次元圧縮写像の探索

A 香港型ウイルス(H3N2)の流行におけるウイルス表面分子(ヘマグルチニン;HA)の継時的変化を把握するために、過去 40 年間に人から分離されたウイルスの HA アミノ酸配列を多次元尺度構成法(MDS)により解析し、HA の進化を表す三次元地図を構築した。その結果、H3N2 亜型ウイルスの HA アミノ酸配列の進化の軌跡は、MDS 空間上で一定の曲率をもつ曲線上の幹と連続的に現れる房から構成されることが判明した。この現象を盆栽様モデルと名付け、その数学的構造を解析した。

(2) ウイルス遺伝子の時間発展を説明する数理モデルの構築

MDS 空間における曲線的な進化は、同じの位置のアミノ酸が複数回置換していることを意味する。また、MDS 空間上で、ウイルスの遺伝子配列の時間発展が、一定の曲率を持つ曲線として観測されたことから、異なる年代の HA 間の相対的な距離に規則性があることが示唆された。HA アミノ酸配列の各位置における置換頻度がガンマ分布に従うと仮定すると、この相対的な距離をよく回帰できることが判明した。また、人の集団でのウイルス感染、免疫、および変異を表す非線形状態空間モデルを構築し、計算機シミュレーションで盆栽様進化が現れることを確認した。

(3) インフルエンザウイルスの変異予測および予測精度の検証

異なる年代の HA 間の相対的な距離から回帰したガンマ分布のパラメータを利用し、過去 10 年に遡ってそれぞれ翌年のアミノ酸置換を予測する試験を行った。1997 年から 2008 年の各年に対し、HA アミノ酸配列から翌年のアミノ酸置換を予測し、実際に起こったアミノ酸置換と予測結果を比較したところ、本手法は再現率＝70%、適合率＝45%で翌年のアミノ酸置換を予測することが判明した。この結果、サーベイランスで得られる HA の遺伝子情報から、翌年の抗原変異株が持つアミノ酸置換を比較的高い精度で予測できることが示唆された[PLoS one, 2011]。

(2)詳細

(1) ウイルス遺伝子の次元圧縮写像の探索

大量の遺伝子情報から抗原変異に伴うアミノ酸置換の規則性を探索するために、過去 40 年間に人から分離されたウイルスの HA アミノ酸配列を多次元尺度構成法(MDS)により解析した。MDS 法とは、対象間の相違度に基づいて対象物を空間上の点に配置する解析手法であり、対象間の相違度を空間上の点の間の距離として視覚化することができる。NCBI より、H3N2 亜型ウイルスの HA1 領域 の塩基配列 6,806 本を取得し、アミノ酸配列に翻訳した。同一配列を削除して得られたアミノ酸配列 2640 本を MDS 法により解析し、HA の進化を表す三次元地図を構築した結果、H3N2 亜型ウイルスの HA アミノ酸配列の進化の軌跡は、MDS 空間上で一定の曲率をもつ曲線上の幹と連続的に現れる房から構成されることが判明した(図 1)。

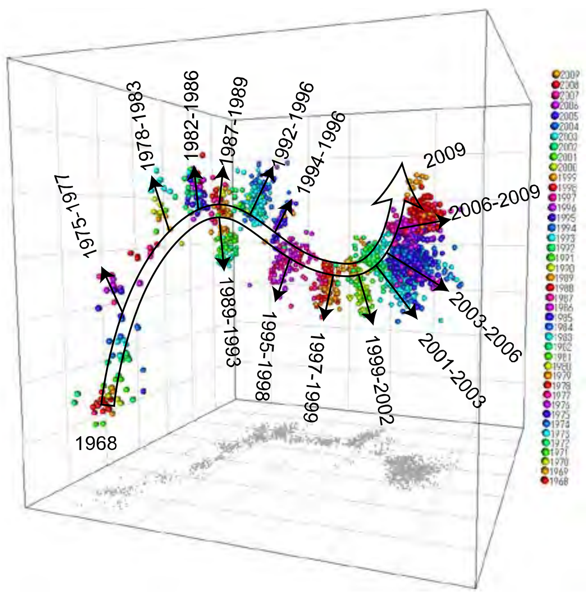


図 1. アミノ酸配列の時間発展
各点はウイルス株を表し、分離年によって色分けしてある。ウイルス株同士の距離は HA 配列での異なるアミノ酸の数を表し、1 グリッドで 10 箇所のアミノ酸の違いを表す。三次元の樹形が一本の長い幹と連続した短い房から構成されることから、ある流行株から派生した変異ウイルスの中から, 常に一種類のウイルス株が世界中でほぼ同時に選択淘汰されて流行を続けていることがわかる。

（2） ウイルス遺伝子の時間発展を説明する数理モデルの構築

MDS 空間における曲線的な進化は、同じの位置のアミノ酸が複数回置換していることを意味する。また、MDS 空間上で、ウイルスの遺伝子配列の時間発展が、一定の曲率を持つ曲線として観測されたことから、異なる年代の HA 間の相対的な距離に規則性があることが示唆された。A 香港型(H3N2) インフルエンザウイルスについて、1968 年のパンデミック時から現在までの HA のアミノ酸配列の変異を解析したところ、HA1 領域のアミノ酸置換の速度分布は、形状母数 $\alpha = 0.129$ 、平均置換速度 $\bar{r} = 0.0118$ のガンマ分布としてよく近似でき、分離年の差が t 年である二つのウイルス株間におけるアミノ酸置換の数 d は、

$$d = L \times (1 - (\alpha / (\alpha + \bar{r}t))^{\alpha}) \qquad (1)$$

という t の関数でよく近似できることが判明した(図 2)。ここで、L は HA1 領域のアミノ酸の数 328 を表す。この性質は、HA1 領域の特定のアミノ酸がウイルスの抗原性に深く関与し、頻繁に置換することと合致する。

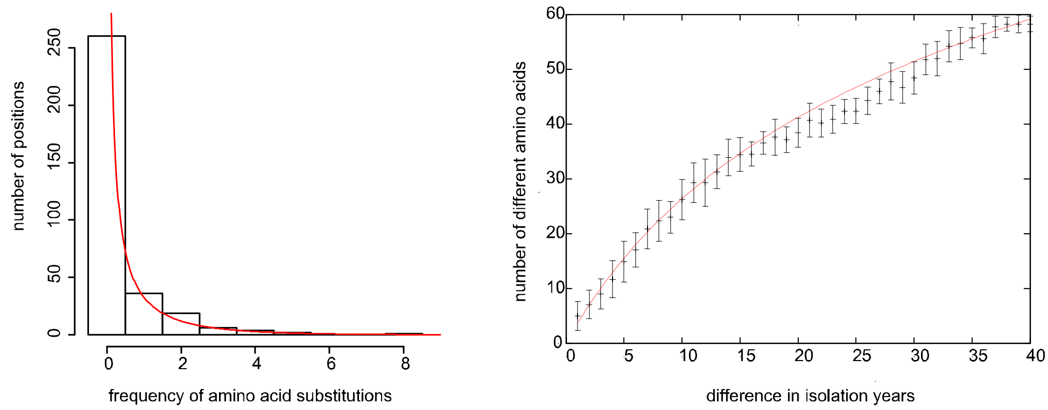


図 2. HA1 領域のアミノ酸置換の速度分布(左)とウイルス株間のアミノ酸置換数(右)

また、人の集団でのウイルス感染、免疫、および変異を表す非線形状態空間モデルを構築し、計算機シミュレーションにおいて盆栽様進化が現れることを確認した。

(3) インフルエンザウイルスの変異予測および予測精度の検証

式(1)により、ある年のウイルスが他の年のウイルスと比べたときの異なるアミノ酸の個数を予測できる。サーベイランスで得られるウイルス株の中から、翌年についての予測値との二乗誤差が最小となる株を特定し、その株の持つアミノ酸置換を翌年の変異として提示する手法を考案した。本手法により翌年のアミノ酸置換を過去に溯って予測し、実際のアミノ酸置換を比較したところ、60% 以上の再現率で翌年のアミノ酸置換を予測した。1997 年から 2008 年の各年に対し、HA アミノ酸配列から翌年のアミノ酸置換を予測し、実際に起こったアミノ酸置換と予測結果を比較したところ、本手法は再現率＝70%、適合率＝45%で翌年のアミノ酸置換を予測することが判明した。この結果、サーベイランスで得られる HA の遺伝子情報から、翌年の抗原変異株が持つアミノ酸置換を比較的高い精度で予測できることが示唆された[PLoS one, 2011]。同手法を最新のデータに適用した予測結果を図 3 に示す。

Test Year	Predicted substitutions	Actual substitutions in the next year
2001-2002	**R50G** E83K **V106A D144N** V202I **W222R G225D V226I**	**V106A D144N W222R G225D**
2002-2003	**L25I R50G H75Q E83K A131T H155T Q156H** G186S **V202I**	**L25I R50G H75Q E83K A131T H155T Q156H V202I**
2003-2004	Q75H **Y159F S189N S227P**	K145N **Y159F S189N V226I S227P**
2004-2005	H156R P227S T248I K326T	S193F D225N
2005-2006	**G50E** K83E **K173**E L194P	
2006-2007	Q33R T48I **G50E** D85G **K140I** K207R	**G50E K140I**
2007-2008	L3F K83N L157S P169Q K173N K310R	**K173**Q
2008-2009	**E62K** L70I **N144K K158N N189K** I260M R261Q	**E62K N144K K158N N189K**
2009-2010	R150K K189R A272T C277S	K62E K144N T212A
2010-2011	N31D D53N Y94H S124N P221L I230V E280A	N145S A198S V223I N312S

図 3.予測と実際の変異。青と赤は的中を表し、下線は変異時期の外れた予測を表す。

その他の研究成果

A. パンデミック(H1N1)2009 インフルエンザウイルスの表面分子の抗原構造予測

パンデミック(H1N1)2009 ウイルスとスペイン風邪の H1N1 ウイルスの HA の抗原構造を比較した。その結果、これら二つのウイルス HA の Sa および Sb 領域の構造は酷似していること、N 結合型糖鎖付加モチーフの位置と数が一致していることを見いだした。これらの類似性に基づき、パンデミック(H1N1)2009 ウイルスの今後の変異を予測した[PLoS one, 2010]

B. 遺伝子配列のリサンプリングアルゴリズムの開発

DNA シークエンシング技術の発展により、世界各国で得られた病原微生物の遺伝子情報がインターネット上に公開されている。しかし、サーベイランスの度合いには、地域、年代、宿主の何れにおいても大きな偏りがあり、適切な標本抽出となっていないため、データ解析へのサンプリングバイアスの影響が懸念された。本研究では、塩基配列データからサンプリングバイアスを除去するリサンプリングアルゴリズムを提案した[PLoS one, 2013]。

3. 今後の展開
人の集団におけるウイルスの感染・免疫・変異を、非線形状態空間モデルで表すことにより、本研究の予測手法をデータ同化の枠組みとして一般化することができ、感染症研究分野に新たな統計的手法を導入するとともに、変異予測の精度向上が期待される。

4. 自己評価
本研究の主要成果は、計算機科学(伊藤)、ウイルス学(高田)、計算科学(五十嵐)、数理科学(宮崎)といった出身分野の異なる研究者の協働により達成された。感染症研究におけるこのような異分野連携の例は少なく、諸分野連携によってのみ達成できた成果であると考える。また、本研究テーマに関連して、「ウイルス」、「最新医学」、「応用数理」、「遺伝」、「感染・炎症・免疫」等の学術雑誌より依頼を受け、計 5 報の総説を執筆した。学術集会においては、「日本ウイルス学会」、「数理生物学会」、「分子生物学会」、「情報処理学会」、「電子情報通信学会」、「人工知能学会」で口演を行った。さらに、さきがけ「生命現象の革新モデルと展開」分野の研究者と交流を深め、1 月には北海道大学において研究集会を催した。これらの共同研究、学会口演、研究集会、論文執筆を通し、諸分野の研究連携を大いに促進できたと考える。

5. 研究総括の見解
ウイルスの変異予測という困難な問題に現場のウイルス学を含む複数分野の研究者との協働による挑戦的なさきがけ課題である。変異の詳細が不明であるが故に、その解析は data-driven な手法となる。MDS 空間上で、ウイルスの遺伝子配列の時間発展をプロットすると、一定の曲率を持つ曲線として観測されることから、異なる年代の HA 間の相対的な距離に規則性があることが示唆された。このことから HA1 領域のアミノ酸置換の速度分布は、あるパラメータ値をもつガンマ分布としてよく近似でき、予測が可能となる。これはこの分野における大きな発見であると考えられ、伊藤氏により新たな道が開かれたと言える。今後予測精度の向上とその検証が進めば、インフルエンザ予防に大きな力を発揮することになるであろう。

6. 主な研究成果リスト
(1)論文(原著論文)発表

1. Ito, K., Igarashi, M., Miyazaki, Y., Murakami, T., Iida, S., Kida, H. and Takada, A. Gnarled-trunk evolutionary model of influenza A virus hemagglutinin. PLoS ONE. 2011. 6: e25953.
2. Igarashi, M., Ito, K., Yoshida, R., Tomabechi, D., Kida, H. and Takada, A. Predicting the antigenic structure of the pandemic (H1N1) 2009 influenza virus hemagglutinin. PLoS ONE . 2010. 5(1): e8553.
3. Yonezawa, K., Igarashi, M., Ueno, K., Takada, A., Ito, K. Resampling nucleotide sequences with closest-neighbor trimming and its comparison to other methods, PLoS one (in press)
4. Ito, K., Zeugmann, T. and Zhu, Y. Clustering the normalized compression distance for influenza virus data. Lect. Notes Comput. Sc, 2010, 6060: 130-146.
5. Sata, K., Hirata, K., Ito, K. and Kuboyama, T. Discovering networks for global propagation of

influenza A (H3N2) viruses by clustering. Lect. Notes Comput. Sc. 2009, 5712: 490-497.

（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、プレスリリース等）

新聞報道

1. 2010 年 2 月 15 日(月) 徳島新聞他，遊歩道ーインフルエンザ，「流行予測の手段探る」

招待講演等

1. Ito, K. (2012) Can computers predict the mutation of influenza viruses? OMRON Satellite Events, The 6th International Conference on Soft Computing and Intelligent Systems, The 13th International Symposium on Advanced Intelligent Systems, 20 November 2012, Kobe,Japan.(チュートリアル講演)

市民講演会

1. 伊藤公人．コンピューターでインフルエンザウイルスの変異を予測する、2011 年 10 月 23 日、岡山国際交流センター、岡山市
2. 伊藤公人．コンピューターでインフルエンザウイルスの変異を予測する、2011 年 11 月 20 日、日本未来科学館、東京都

総説

1. 伊藤公人．インフルエンザウイルスの変異予測．感染・炎症・免疫．2012．42 巻 4 号，54-56
2. 伊藤公人．数理科学はインフルエンザウイルスの変異を予測できるか？．応用数理．2012．22 巻 3 号，15-17
3. 伊藤公人，高田礼人．ウイルスはどうやって生き延びているのか？－インフルエンザウイルスの存続様式と進化．遺伝．2012．66 巻 4 号，358-364
4. 伊藤公人．バイオインフォマティクスによるインフルエンザウイルスの変異予測．最新医学．2011．66 巻 12 号，2632-2640
5. 伊藤公人．インフルエンザウイルスの抗原変異とバイオインフォマティクス．ウイルス．2011．61 巻 1 号，3-13

研　究　報　告　書

「符号・暗号のための代数曲線論」

研究タイプ：通常型
研究期間：　平成 21 年 10 月～平成 25 年 3 月
研 究 者：　川北　素子

1．　研究のねらい

情報通信技術が発達に、符号理論、暗号理論の重要性が益々高まって来た。1970 年、1980 年に、代数曲線を使って効率の良い符号、安全性の高い暗号を構成できることが発見された。ところが、具体的に使える代数曲線を決定しようとすると、代数曲線論でも未知の部分が多く残されていることが分かった。符号、暗号の視点から代数曲線論を研究し、情報通信に役に立つ数学の新しい発見を目指す。

2．　研究成果

（1）概要

有限体上で定義された代数曲線の有理点数は符号理論、暗号理論において大事なパラメータとなる。一方代数曲線論の中で、それは十分研究されたとは言えない。有理点数に関する Hasse-Weil 上界に達する代数曲線は最大曲線と呼ばれ、色々な性質が知られているが、最大曲線ではない Serre 上界に達する代数曲線は具体例が殆どなく、性質も分かっていない。私が以前発見した最大曲線でない Serre 上界に達する代数曲線の性質を調べ、さらに Wiman の曲線も Serre 上界に達することを発見した。

（2）詳細

研究テーマ A 「Serre 上界に達する Fermat 曲線の商曲線の性質」
Hasse-Weil 上界に達さず、Serre 上界に達する代数曲線は Fermat 曲線しか知られていなかったので、その性質を調べた。Jacobian が楕円曲線に完全分解し、それらの楕円曲線が虚数乗法を持つことが分かった。

研究テーマ B 「Serre 上界に達する新しい曲線の発見」
計算代数ソフト KASH を使って、色々な代数曲線について探索を行った結果、

Wiman 曲線(1897 年)　$x^6+y^6+1+(x^2+y^2+1)(x^4+y^4+1)-12x^2y^2=0$

Edge 曲線(1981 年)　$E_\alpha : T+\alpha S=0$

$$T := x^6 + y^6 + 1 + (x^2 + y^2 + 1)(x^4 + y^4 + 1) - 12x^2y^2 = 0$$

$$S := (y^2 - 1)(1 - x^2)(x^2 - y^2)$$

が Serre 上界に達することを発見した。
またデータベース http://www.manypoints.org/を多数更新出来た。
研究テーマ C「Wiman 曲線と Edge 曲線の性質」
　Wiman 曲線は標数が 2; 3; 5 以外の体上で Jacobian が

$$J_w \sim \varepsilon^6$$

と完全分解する。ここで $\varepsilon : y^2 = x(5x^2 - 95x + 2^9)$。

命題 1. Wiman 曲線が有限体 F_{p^2} 上で最大曲線となる必要十分条件は

$$\sum_{i=0}^{\left\lfloor \frac{m}{2} \right\rfloor} \frac{m!}{(i!)^2 (m-2i)!} \cdot 2^{9i} \cdot 5^{m-i} \cdot (-19)^{m-2i} \equiv 0 \qquad \bmod p,$$

である。ここで $m := \dfrac{p-1}{2}$。

3．　今後の展開

　　Wiman 曲線、Edge 曲線が有理点を多数持ち、optimal 曲線となることも多くあることを発見できたが、その方向に沿ってより広い範囲で optimal 曲線が存在すると予想している。今後それを見つけ、性質を明らかにしたい。
　また古典的な代数曲線の有理点数に関し、まだ研究されてないものも多くあり、コンピュータ探索でヒントを探し、論理的に解決させて行きたい。

4．　自己評価

　代数幾何符号から提起された問題「optimal 曲線を全て決定せよ」に対して、最大曲線でない Serre 上界に達するものを発見できた。1897 年に Wiman が定義した曲線であるが、古い代数曲線に符号理論の視点を入れると斬新な新しい結果が得られたことが、本研究の最大の成果と考えている。またそれまで知られていたのは次数12と23の Fermat 曲線の商曲線のみでしたが、これらが暗号理論の視点では、どうなるのかまで研究できなかったのが心残りである。

5．　研究総括の見解

　情報通信技術における符号理論、暗号理論の重要性はいうまでもない。とくに有限体上で定

義された代数曲線の有理点数は符号理論、暗号理論において大事なパラメータとなる。一方代数曲線論の中で、それは十分研究されたとは言えない。有理点数に関する Hasse-Weil 上界に達する代数曲線は最大曲線と呼ばれ、色々な性質が知られているが、川北氏による最大曲線でない Serre 上界に達する代数曲線の発見は今後、暗号理論においてどのような発展が見込まれるか期待をもって見ていきたい。これらの成果の発表も含め、関連分野とのより積極的な協働が必要であろう。

6. 主な研究成果リスト

(1)論文(原著論文)発表

なし

(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、プレスリリース等)

紀要

1.代数幾何符号のための代数曲線論, 数理解析研究所講究録 1752「諸分野との協働による数理科学のフロンティア」(2011), 3—6.

講演

1. 安全・高速な情報通信のための代数曲線論, JST 数学領域 第 4 回領域シンポジウム「越境する数学」, 東京大学, 2012 年 11 月.
2. Wiman's and Edge's sextic attaining Serre's bound, Mini Workshop on Algebraic Curves for Coding Theory and Cryptography, 滋賀医科大学, 2012 年 7 月.
3. Wiman's and Edge's sextic attaining Serre's bound, 日本数学会, 東京理科大学, 2012 年 3 月.
4. 代数幾何符号のための代数曲線論, 諸分野との協働による数理科学のフロンティア, 京都大学, 2010 年 11 月.

研　究　報　告　書

「非平衡系における界面張力の数理物理学」

研究タイプ:通常型
研究期間:　平成 21 年 10 月～平成 25 年 3 月
研　究　者:　北畑　裕之

1.　研究のねらい

界面張力(表面張力)に関する研究は 18 世紀にはすでに始められており、Laplace、Young らによって、界面張力とは界面をできるだけ小さくする力であるということが見出された。それ以降も、界面張力に関してさまざまな研究がなされ、平衡系における界面張力の数学的・物理的な記述についてはほぼ完成された理論がある。すなわち、界面張力とは「界面があるために余分に得られる単位面積あたりの自由エネルギー」と考えることができる。これに基づいて、系の自由エネルギーに関する変分問題を解くことによって、界面張力についてよく知られているヤング-ラプラスの式やラプラス圧の関係式が得られる。

平衡系においては、界面張力はどこでも一様であり、そのような場合については、界面張力に関する議論はすでに確立されている。しかし、界面張力に勾配があったり、界面張力が時間変化するような非平衡系においては、界面の取り扱いについての理論はさまざまな取り扱いが提案されているが、まだ確立されているとは言い難い。しかし、現実の系を考えると時間的に変化する系、不均一な系がほとんどであり、その性質を調べ、その普遍的・統一的な記述を得ることは、さまざまな分野において重要である。

そこで本さきがけ研究では、非平衡系における界面張力に関して数学および物理の立場からどのように記述できるかを探ることを目的とした。具体的には、「流体力学としてのマランゴニ効果の理解」(研究テーマ A)と「界面活性剤の界面における非線形拡散とその数理物理学的記述」(研究テーマ B)の二つを柱とした。前者は、界面に界面張力の勾配があるような液滴が自発的運動を引き起こすような系について流体力学をベースとして解析的な記述を目指す理論的研究を主とし、後者は界面における界面活性剤のふるまいがいろいろな点で重要であるため、実験と数理モデリングを行うことにより、新たな知見を得ることを目指した実験的・数値的研究を主としていた。もちろん、この 2 つのテーマは独立したものではなく、相互にフォローアップするものであり、これらの 2 つの柱により、最終的には、時間変化したり空間的に非一様な場合の界面張力を取り扱える数理・物理の構築を目指した。

2.　研究成果

(1)概要

非平衡系における界面張力に関して、「流体力学としてのマランゴニ効果の理解」(研究テーマ A)と「界面活性剤の界面における非線形拡散とその数理物理学的記述」(研究テーマ B)の二つの柱に沿って研究を進めた。

研究テーマAにおいては、界面張力勾配のある液滴の運動挙動について、レイノルズ数が小さい時に流体力学の基礎方程式となるストークス方程式を用いて議論を進めた。その結果、液滴内で化学波が伝播するような場合の液滴の運動に関して、流体場を解析的に求めることに

より、周囲の表面張力をルジャンドル展開したときの 1 モードの係数に液滴の運動速度が比例することを明らかにし、実験と比較してその妥当性を確かめた。さらには、流体場を考慮したときの液滴の分岐構造や、液滴の回りに界面活性剤を供給するような粒をつけたときの液滴の回転の挙動についても同様のアプローチで議論できることを示した。これらの成果の中で、(i)化学波と結合した液滴の運動、と(ii)界面活性剤粒子が接触している液滴の回転の 2 つのテーマについて詳しく紹介する。

研究テーマ B においては、数理モデリングをベースとして界面活性剤の界面での拡散挙動や対流の生成、粒子の自発運動への影響を研究した。その中で、特に昇華性と界面活性を持つ樟脳を使った実験を行った。まず、水面に樟脳粒を固定した時に発生するマランゴニ対流に関して実験的に測定するとともにその数理モデリングを行った。この際、別の界面活性剤を水に混ぜることにより、樟脳分子の界面活性が対流に与える影響が変化するため、その効果を議論した。さらには、樟脳粒を水面においたときに自発的に界面張力の勾配を回りに作って運動するが、その際の粒の形状の影響を議論した。詳細では、おもに(iii)樟脳粒の形状が自発的運動に与える影響について詳しく紹介する。

（2）詳細

以下に二つの研究テーマそれぞれに関して、計 3 つの研究について具体的に得られた研究成果を詳しく紹介する。

<u>研究テーマA 「流体力学としてのマランゴニ効果の理解」</u>

(i) 化学波と結合した液滴の運動

われわれは液滴内に自発的に発生する化学波と液滴自体の重心運動が結合するようなモデル系を提案した。すなわち、パターン形成は反応拡散移流系で記述され、そのパターンを構成する化学物質の濃度が界面張力を変化させることにより、マランゴニ効果を介して液滴内外の対流構造を生み出すとともに液滴の運動を駆動する。液滴の運動が十分遅いと仮定すると、界面張力プロファイルを決めれば液滴の運動が一意的に決まるため、パターンの結合と運動をうまく関連付けて議論できる。界面張力が非一様な液滴について、その液滴内外での流れが十分に遅いとしてストークス近似のもとで流体力学的に取り扱うことを試みた。すなわち、任意の界面張力勾配を与えた液滴において、対流が生成し、その対流によりどのような運動が引き起こされるかについて解析した。具体的には、レイノルズ数が小さいとしてストークス方程式

$$\eta \nabla^2 \boldsymbol{v} - \nabla p = 0,$$

（$\boldsymbol{v}$ は流速、p は圧力、ηは粘性係数）で近似する。さらに液滴の形は球形を保ち、等速で液滴が運動していると仮定すると、液滴内外の流れ場の一般解は重調和関数を用いて求められる。液滴の表面に界面張力の勾配があるとして境界条件を適用すると、液滴自体の運動速度が得られる。今、界面張力γは極座標で表した時の極方向からの偏角θのみの関数であるとすると、液滴は極を結ぶ軸の方向に運動し、その速さ u は

$$u = -\frac{2}{3\left(3\eta^{(\mathrm{i})} + 2\eta^{(\mathrm{o})}\right)} \Gamma_1,$$

と求められる。ただし、Γ_1は$\gamma(\theta)$のルジャンドル変換

$$\gamma(\theta)=\sum_{n=1}^{\infty}\Gamma_n P(\cos\theta),$$

の 1 モードの係数であり、$\eta^{(i)}$、$\eta^{(o)}$は、それぞれ液滴の内外の粘性係数である。

この議論を BZ 反応液滴の運動の実験と対応させて考察した。BZ 反応の色の変化は酸化状態と還元状態の違いに対応し、酸化状態のほうが還元状態よりも界面張力が大きいことが知られているため、上に述べた議論を適用して運動を議論することができる。BZ 反応のモデル式としては、Oregonator と呼ばれる常微分方程式が化学反応の時間発展を適切に表すことが知られている。そこで、液滴内での化学反応を Oregonator モデルを用いて計算し、そこから液滴の運動速度、位置の変化を計算した。その結果、実験と定性的に一致するような結果が得られた（図 1）。

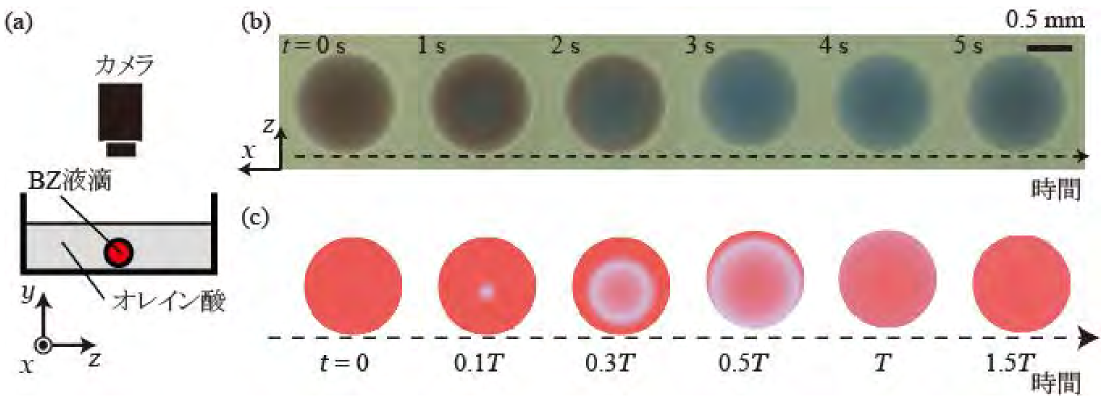


図 1： 化学波と結合した液滴の運動。(a) 実験装置図。(b) 実験のスナップショット。$t\sim 2$ s で円状に広がった青い化学波が液滴の下側に接触し、液滴は上側に動き始める。$t\sim 3$ s で液滴全体に化学波が広がり、液滴は反対側に動き始める。(c) Oregonator モデルとストークス方程式の解を用いた数値計算の結果。実験結果と定性的に一致する結果が得られた。

(ii)界面活性剤粒子が接触している液滴の回転

(i)で行ったストークス方程式に基づく議論を 2 次元平面で行うことにより、並進運動とともに運動の基本的なモードである回転運動について考察した。3 次元の場合と同様に 2 次元の液滴の界面での界面張力分布を仮定し、液滴内部の対流構造と液滴の重心運動速度をストークス近似のもと計算する。2 次元で考えることにより、軸対称を仮定しなくても簡単に解が得られるため、2 次元面内での重心の運動を記述することができる。

実験において界面活性剤の粒子を界面につけたときに油滴が水面を回転しながら運動する現象が報告されている。この現象を界面での界面活性剤の濃度に着目してモデル化した。その際、界面活性剤の粒の位置を固定した座標系に乗って考えると議論がわかりやすくなる。結果として、粒子の位置を基準として界面活性剤の濃度分布の対称成分と非対称成分が重要であることが明らかとなった。回転速度は濃度分布の非対称成分に起因することが明らかとなり、また、回転運動がピッチフォーク分岐によって起こることが示唆された。

研究テーマB 「界面活性剤の界面における非線形拡散とその数理物理学的記述」

(iii) 樟脳粒の形状が自発的運動に与える影響

樟脳の粒を水面に浮かべると樟脳粒から樟脳分子が水面に拡散する。拡散した樟脳分子は水面の表面張力を低下させる。また、樟脳分子は気相中に昇華する。つまり、樟脳の表面濃度を u とすると

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\nabla^2 u - au + f \ ,$$

という時間発展方程式で考えることができる。右辺第 1 項は水面での樟脳分子の拡散、第 2 項は気相への昇華、第 3 項は樟脳粒からの供給を表す。f は、樟脳粒が存在する領域でのみ値を持つような関数である。表面張力γは樟脳濃度の関数であるとし

$$\gamma = \gamma(u) ,$$

と書ける。ただし、実験による知見から$\gamma(u)$は減少関数である。樟脳粒は表面張力の境界での積分により力を受けて動くとする。すなわち

$$m\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t^2} = -\eta\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} + \oint \gamma \boldsymbol{e}_n \mathrm{dl} \ ,$$

と書ける。ここで r は樟脳粒の重心座標、m は樟脳粒の質量、ηは摩擦係数である。また一周積分は樟脳粒の周囲に関する積分とする。このような樟脳粒を水面に浮かべると等方的な形状であっても、わずかな揺らぎにより対称性が破れ、一方向に運動することが知られている。1 次元系においては長山らにより分岐解析がなされており、例えば摩擦係数を変えることで静止状態が安定状態から不安定化することが示されている。そこで、形状の変化を考えるため、2 次元で樟脳粒を円形およびそこから、摂動的に変化させた場合についての安定性の解析を行った。特に楕円形状へと変化させた場合に、どの方向への運動がまず駆動されるかについて解析を行った。その結果、樟脳粒が楕円形状の場合、必ず楕円の短軸方向に動くことが解析的に求められた。数値計算や実験によっても同様の結果が得られ、最も単純な場合に樟脳粒の形状が運動に対してどのように影響するかを求める方法を示すことができた。図 2 に実験結果を示す。他の微小変形の場合にも同様の方法により、運動方向を議論できると考えられる

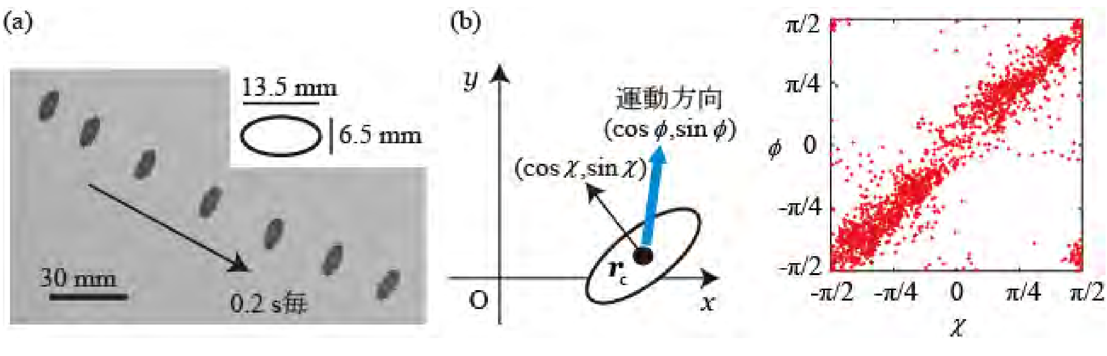


図 2：楕円形樟脳の自発運動の実験結果。(a) 0.2 s おきの楕円形樟脳のスナップショットを重ねたもの。(b) 短軸方向の角度χと運動方向の角度ϕ の相関。(a)、(b)ともに、楕円形の樟脳粒が短軸方向に運動していることを示している。

3. 今後の展開

研究テーマ A の流体方程式を基礎とした液滴運動の記述に関しては、これまでは液滴の変

形は考えてこなかった。しかしながら、液滴の界面に界面張力の勾配があるとき、そのルジャンドル展開の 2 以上のモードの係数は液滴の変形を引き起こすことが示唆されている。そのため、今後の展開として、液滴の形状の変化についての議論、また液滴が変形しながら運動するときの相関関係についての議論を進めていきたいと考えている。このような研究が進めば、近年、盛んに研究されている生物の運動を抽象化したアクティブマターの研究に重要な知見を与えることが期待される。

研究テーマ B に関しては、実験的に界面における界面活性剤分子の挙動を捉えることを工夫して進めて行きたいと考えている。直接観測するのは非常に困難であるので、数理的、物理的な考察を通して、間接的に観察することも視野に入れつつ進めて行きたいと考えている。また、界面活性剤を放出する粒子の形状が運動に与える影響に関しては、これまでは形状を円からの微小なずれとして取り扱ってきたが、大きく変形した時についての解析的、数値的な取り扱いについても確立していきたい。特に 2 モードの変形に関しては、楕円座標系で議論することにより、運動についての理解が深まるだけではなく、Mathieu 関数と呼ばれる特殊関数についての数学的知見を新たに得ることもできるのではないかと期待している。

4. 自己評価

上に述べたように当初、得られると予想された結果に関してはほぼ期間内に達成することができた。ただし、長期的な視点として申請時に書いていた、非平衡系における界面張力に関する普遍的な記述、またそこから数学に資する結果は十分に得られたとは言えない。そのような点では、当初描いていた目的、研究方針に関しては最低限の目標は達成できたのではないかと考える。また、今回得られた結果は、長期的目標に向かうマイルストーンとなるべきものであり、長期的目標に向かって今後も研究を進めて行きたいと考えている。

また、さきがけ研究を通して、他のさきがけ研究者と議論を進める中で新たなテーマが生まれ、当初予想していなかったような研究の方向性が得られた。まだ論文や特許の形での公開まではいたっていないが、今後、共同研究を続けることで論文や特許の形で公表できる成果になると確信している。

5. 研究総括の見解

界面張力を介して2、3次元の場合の形の変形とそれに伴う運動の統一的理解を目指す研究で、近年注目を集めている active matter とも密接に関係する。実験、モデリング、シミュレーションがうまく融合した興味深い研究である。整理されてゆけば、一般の変形可能な自走系に対する形と動きの数学理論につながると期待される。これは 3 次元で特に興味深い。また界面張力が空間的に不均一な液滴系に対して、微分幾何学者との協働も推進しているようで、さきがけの場の力をさらに有効利用し、単独ではできない相互作用の面白さを結果として是非残していただきたい。

6. 主な研究成果リスト

（1）論文（原著論文）発表

1. Hiroyuki Kitahata, Natsuhiko Yoshinaga, Ken H. Nagai, and Yutaka Sumino, "Spontaneous motion of a droplet coupled with a chemical wave", *Phys. Rev. E* (2011) **84**, 015101/1-4.
2. Yumihiko Ikura, Ryoichi Tenno, Hiroyuki Kitahata, Nobuhiko J. Suematsu, and Satoshi Nakata, "Suppression and Regeneration of Camphor-Driven Marangoni Flow with the Addition of Sodium Dodecyl Sulfate", *J. Phys. Chem. B* (2012) **116**, 992-996.
3. Hiroyuki Kitahata, Natsuhiko Yoshinaga, Ken H. Nagai, and Yutaka Sumino, "Spontaneous motion of a Belousov-Zhabotinsky reaction droplet coupled with a spiral wave", *Chem. Lett.*, (2012) **41**, 1052-1054.
4. Hiroyuki Kitahata, Keita Iida, and Masaharu Nagayama, "Spontaneous motion of an elliptic camphor particle", *Phys. Rev. E* (2013) **87**, 010901/1-4.
5. Ken H. Nagai, Fumi Takabatake, Yutaka Sumino, Hiroyuki Kitahata, Masatoshi Ichikawa, and Natsuhiko Yoshinaga, "Rotational motion of a droplet induced by interfacial tension", *Phys, Rev. E*, (2013) **87**, 013009/1-5.

（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、プレスリリース等）

主要な学会発表：

1. Hiroyuki Kitahata, Natsuhiko Yoshinaga, Ken H. Nagai, and Yutaka Sumino, "Spontaneous motion of a droplet driven by interfacial tension gradient coupled with chemical reaction", Gordon Research Conference: Oscillations and Dynamic Instabilities in Chemical Systems, July 4-9, 2010, Luicca, Italy.
2. Hiroyuki Kitahata, Natsuhiko Yoshinaga, Ken H. Nagai, and Yutaka Sumino, "Spontaneous motion of a droplet driven by interfacial tension gradient", PacifiChem 2010, Dec. 15-20, 2010, Honolulu, USA.
3. Hiroyuki Kitahata, "Spontaneous motion of a droplet coupled with chemical reaction", Gordon Research Conference: Oscillations and Dynamic Instabilities in Chemical Systems, Oct. 12-13, 2011, Surabaya, Indonesia. (Invited talk (Keynote Lecture))
4. Hiroyuki Kitahata, Keita Iida, and Masaharu Nagayama, "Motion of an elliptic camphor disk driven by surface tension", Gordon Research Conference: Oscillations and Dynamic Instabilities in Chemical Systems, July 15-20, 2012, Waterville, USA.
5. Hiroyuki Kitahata, Natsuhiko Yoshinaga, Ken H. Nagai, and Yutaka Sumino, "Spontaneous motion of a droplet coupled with pattern formation", Dynamics Days Europe XXXII, Sep. 2-7, 2012, Gothenburg, Sweden.

研　究　報　告　書

「真軌道によるシミュレーションの実現とその応用」

研究タイプ：通常型
研究期間： 平成 21 年 10 月～平成 25 年 3 月
研 究 者： 斉藤 朝輝

1． 研究のねらい

この研究課題では、計算機で正確に実行できる整数演算のみを用いて、区分的線形写像を含む区分的一次分数写像の真軌道生成法を確立し、さらに、それをカオス現象のシミュレーション解析に応用することを目的としていた。真軌道を使った誤差のないシミュレーションを可能にすることによって、カオス・非線形力学系の関連する諸分野（物理など）の新たな発展の道を拓くとともに、真軌道の情報通信（暗号通信など）への活用を可能にすることも、目指していた。

2． 研究成果

（1）概要
この研究課題では、研究テーマ A「真軌道生成法の確立」と研究テーマ B「真軌道生成法の応用」とに分けて研究を進めた。整数演算のみを用いて十分長い真軌道の生成が期待できるのは、区分的線形写像を含む区分的一次分数写像のみであると考えられるが、生成する方法自体は複数考えられる。研究テーマ A では、数表現として、(1) 3 次方程式の係数、(2) 連立 3 次方程式の係数、(3) 代数体の基底による展開から得られる有理数ベクトル、をそれぞれ用いて、真軌道生成法の構築を行った。特に、(3)の方法は、一般の区分的 1 次分数写像に適用可能な真軌道生成法となっている。また、この研究課題では、真軌道生成法を理論的に構成するだけでなく、実際に物理的に意味のある系などに適用して、その有効性を確認した。特に、研究テーマ B では、従来のシミュレーション法では精密な解析が困難であった、(1) Noise-Induced Order 現象、(2) Hamilton 系、を対象に、真軌道を用いたシミュレーション解析を行った。さらに、この真軌道生成法によって最も研究の発展が期待できる対象である、通常のカオスとは異なる特異性を示す力学系（学習・適応制御系など）の研究も併せて行った。
（2）詳細

研究テーマ A「真軌道生成法の確立」

(1). 3 次方程式の係数を使った 1 次元区分的 1 次分数写像の真軌道生成法

既約な整数係数 3 次多項式 px^3+qx^2+rx+s の唯一の実根として表される総実でない実 3 次無理数は、整数係数の組 (p,q,r,s) で表現できる。この数表現が、1 次元区分的 1 次分数写像の真軌道を生成する上で、有効であることを明らかにした。ただし、1 次元区分的 1 次分数写像は、$x \mapsto (ax+b)/(cx+d)$ という写像で、a,b,c,d は $ad-bc \neq 0$ をみたす整数である。特に、区分的写像を扱う上では、空間上の点がどの領域（区間）に含まれるかの判定を正確に行う必要があるが、この表現を用いる場合には領域判定を正確かつ簡単に行うことができる。この結果にもとづいて、1 次元区分的 1 次分数写像の真軌道生成法を構築した。さらに、実際に、確立した真軌道生成法を、Bernoulli 写像, Tent 写像, 変形 Bernoulli 写像などに適用し、その有効性を確認した。

図 1(a)および(b)は、Bernoulli 写像および変形 Bernoulli 写像の真軌道をそれぞれプロットしたものである。従来のシミュレーション法ではこれらの写像の軌道生成は非常に困難であったが、我々の方法により、これらの写像が典型的軌道として本来もっているカオス的および間欠的な真軌道を生成できる。また、図 2(a)および(b)は、得られた真軌道の統計的性質を調べるため、Bernoulli 写像および変形 Bernoulli 写像の不変測度を、それぞれ推定したものである。推定値（黒丸）は、それぞれの写像の不変密度（赤）とよく一致しており、我々の方法によって生成された真軌道は、よい統計的性質（典型的な軌道と同じ性質）を示すことがわかる。

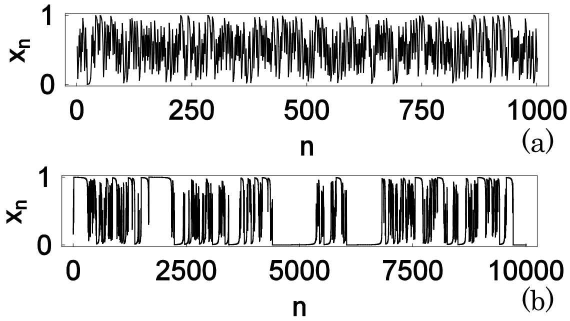


図 1： (a) Bernoulli 写像および(b) 変形 Bernoulli 写像の真軌道

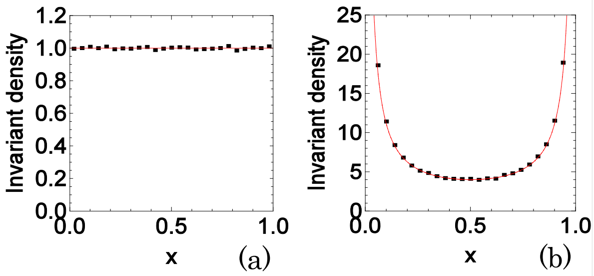


図 2： (a) Bernoulli 写像および(b) 変形 Bernoulli 写像の不変密度

(2). 連立 3 次方程式の係数を使った 2 次元区分的 1 次分数写像の真軌道生成法

2次元平面の点を整数係数の連立3次方程式の解で指定する場合、その点は連立3次方程式の整数係数の組で表現できる。この場合には、グレブナー基底を用いる領域判定法が有効であることが明らかとなった。この結果にもとづいて、2次元区分的 1 次分数写像の真軌道生成法を構築した。実際に、確立した2次元区分的 1 次分数写像の真軌道生成法を、パイこね変換, アーノルドの猫写像, Double dragon 写像, Jacobi-Perron Algorithm にともなう写像(JPA), Modified Jacobi-Perron Algorithm にともなう写像(MJPA)などに適用

し、その有効性を確認した。

図 3(a)と(b)は、JPA と MJPA の真軌道をプロットしたものである。これらの写像は多次元連分数アルゴリズムで用いられているものであるが、上に挙げた Bernoulli 写像等と同じく、従来のシミュレーション法を使って軌道生成を行うと問題が生じる。MJPA とは異なり、JPA では対角線 $y = x$ の上側で密度が高くなることが知られているが、我々の方法から得られた真軌道も、これと一致した傾向を示していることがわかる。JPA および MJPA では定義域が無限に分割されているが、このような写像に対しても、我々の真軌道生成法は適用可能である。

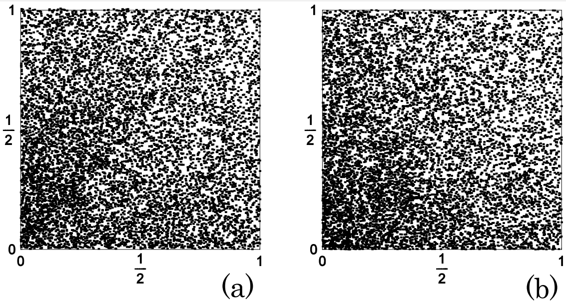


図 3: (a) JPA および(b) MJPA の真軌道

(3). 代数体の基底による展開にもとづく一般次元の区分的 1 次分数写像の真軌道生成法

有理数係数の n 次元区分的1次分数写像の真軌道を生成する上では、次数が $n+1$ より大きな代数体の基底による展開にもとづく数表現が有効であることが明らかとなった(区分的線形写像の場合には、総実でない実 3 次体を考えれば十分である)。この場合にも、領域判定は誤差なしで実行できる。この結果にもとづいて、一般の区分的 1 次分数写像に適用可能な真軌道生成法を構築した。さらに、実際に、確立した真軌道生成法を、(2)で扱った MJPA や Open Flow System (OFS)などに適用し、その有効性を確認した。

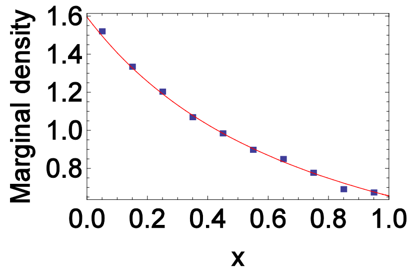


図 4: MJPA の x 軸上の周辺密度

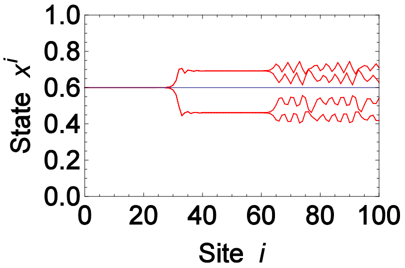


図 5: OFS のシミュレーション結果

MJPA に関してはエルゴード的不変測度が具体的にわかっている。図 4 は、真軌道を用いて x 軸上の周辺密度の推定を行った結果である。理論値(赤)とよく一致することがわかる。また、図 5 は、100 次元区分的線形写像であらわされる OFS をシミュレートした結果である。倍精度浮動小数を用いたシミュレーション(赤)では系に存在しない人工的挙動(空間方向に分岐する4周期運動)が現れるのに対して、真軌道を用いたシミュレーション(青)では系が本来もつ安定1周期解に収束する。

研究テーマ B「真軌道生成法の応用」

(1). Noise-Induced Order 現象の真軌道シミュレーション

Noise-Induced Order 現象(NIO 現象)とは、Matsumoto と Tsuda によって発見された、ノイズによってカオスが壊され、ある種の周期性が現れる現象のことである。非線形現象の中

でも特に重要なものの一つと言えるが、従来の固定精度浮動小数点数を用いるシミュレーション法では、数値誤差が混入してしまうため、精密な解析が困難であった。一方で、ノイズの印加に関しては、例えば有理数ノイズに限ることにすれば、真軌道生成法の中に組み込むことが可能である。ここでは、真軌道生成法を Doi によって提案された TWFS (tent with a flat segment) 写像に用いることにより、誤差無しの NIO 現象のシミュレーションが可能であることを確認した(図 6)。また、高精度な分岐図の描画が可能であることも確認した。さらに、Doi によって提唱されたアトラクタ平均化仮説の検証も行った。特に、従来の方法では扱うことが不可能だった数値誤差のスケールでのシミュレーションを行い、例えば、Doi の行ったシミュレーションにおいて数値誤差による NIO が起こらなかったことに関して、説明を行った(図 7)。

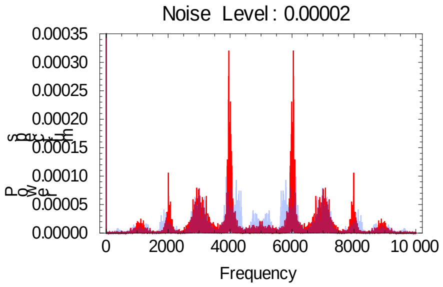


図 6: NIO 現象を示す鋭いピークを持つパワースペクトル

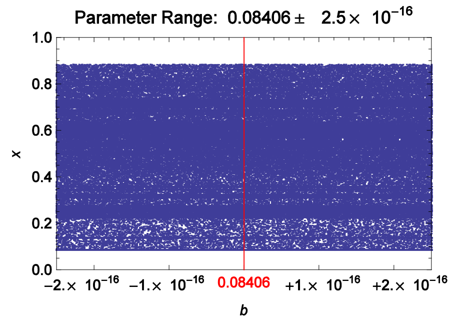


図 7:数値誤差と等しい幅をもつ分岐図(カオス領域が占有している)

(2). Hamilton 系の真軌道シミュレーション

Hamilton 系は正準方程式で記述される力学系で、古典力学における最も基本的な系の一つと言える。Hamilton 系で現れるカオスの研究では、これまで標準写像と呼ばれる 2 次元写像が広く用いられてきた。特に、相空間にトーラスが存在するかについて関心が持たれてきたが、数値誤差の混入する従来のシミュレーション法では、仮に極小のトーラスが存在したとしても、それを見つけ出すことは困難であった。真軌道シミュレーションを行うため、ここでは標準写像の 2 次元区分的線形写像版を用いた。図 8 は、あるパラメータで相空間の構造を描画したものである。真軌道シミュレーションでも、標準写像でよく知られている結果(例えば、KAM トーラスの崩壊やカオス領域の拡大など)が再現できることを確認した。また、加速モードトーラスの存在しないパラメータ領域に関して、トーラス(楕円型周期軌道)の探索も行った。しかしながら、現在までのところ、双曲型周期軌道は比較的簡単に見つかるものの、楕円型周期軌道の発見には至っていない(図 9)。

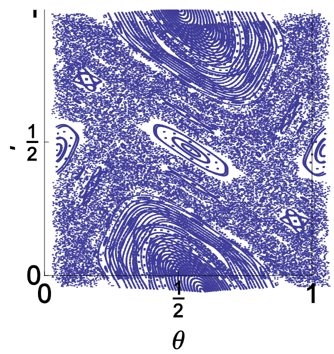


図 8: 最終 KAM トーラス崩壊後の相空間の構造

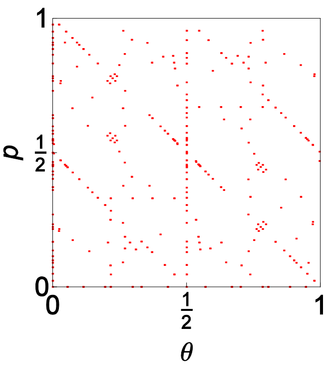


図 9: 楕円点を探す過程で見つかった双曲点

3.　今後の展開

真軌道生成法の確立に関しては、一般の次元の区分的線形写像および区分的1次分数写像に適用可能な方法が構築できたことで、ひとまずは完結したといってよい（ただし、グレブナー基底を用いる領域判定法や、真軌道生成法の他のバリエーションなど、理論的に追いかけるとおもしろい話題は依然残っている）。今後は、真軌道生成法の応用に力を入れて取り組んでいきたい。特に、次の 3 方向での応用を目指している。

(1). 非線形系・複雑系の誤差のないシミュレーション解析

非線形科学や複雑系の分野には、数値誤差が系の性質を本質的に壊してしまう可能性があるにもかかわらず、これまで固定精度浮動小数点数を使ったシミュレーションを行わざるを得なかった対象が数多く存在する。このような対象の中でも、例えば、Noise-Induced Order 現象，Hamilton 系，カオス的遍歴現象，学習・記憶のダイナミクスなどを対象に、真軌道生成法を使ったシミュレーション解析を行っていきたい。非線形・複雑系の分野でも、特に重要な未解決課題と言えるこれらの対象に対して、真軌道生成法を使ったシミュレーション解析を推し進めることにより、今後これらの分野の研究の新たな発展を狙っていきたい。

(2). 数学への貢献

例えば、多次元連分数アルゴリズムである Jacobi-Perron Algorithm にともなう写像の不変密度は求まっていないが、真軌道を使ったシミュレーションで実験的に不変密度の厳密な形を推定できる可能性がある。このような数学での未解決問題に対しても、真軌道生成法を活用していきたい。

(3). 真軌道の工学的利用

不変測度などの性質のよくわかっている写像の真軌道を、例えば、擬似乱数生成，モンテカルロ法，情報通信（暗号通信など）などに活用することも目指していきたい。

以上の(1)から(3)を通して、真軌道シミュレーションという新しいシミュレーション法をさらに大きく発展させていきたい。

4.　自己評価

この研究課題では、一般の次元の区分的線形写像および区分的1次分数写像に適用可能な真軌道生成法の構築を最大の目標としてきた。その目標が達成できたことは、第一に評価したい。従来のシミュレーション法とは比較にならないほど高精度な、真軌道によるシミュレーションを行う上での基礎が、この研究課題によってはじめて出来上がったと考えている。

また、真軌道生成法の理論的研究にとどまらず、実際に、それを Noise-Induced Order 現象，Hamilton 系，Open Flow System 等のシミュレーション解析に応用したことも、評価したい。これらの対象は、非線形科学分野の中でも挑戦的な対象といえるが、これらの研究を新たに発展させて行く上での足掛りを作れたと考えている。また、今後、真軌道シミュレーションという新しいシミュレーション法を活用していく上でのテストケースとしての意義もあったと考えている。

一方で、当初計画したよりも、真軌道生成法の応用に関する研究を推し進めることができなかった。特に、カオス的遍歴現象のシミュレーション解析には、手をつけることができていない。その原因としては、真軌道生成法の理論的な構築に時間をとられてしまったこと、また、選んだ対象がどれも非線形科学分野の未解決課題といってもよい対象で、重要な結果を得るため

には、それぞれの対象ごとに時間をかけた取り組みが必要だったこと、などが挙げられる。

5．　研究総括の見解

カオス解は初期値への敏感性を一つの特徴付けとして用いられるように数値計算でその正確な挙動を誤差なしで計算することには原理的な難しさが伴う。斉藤氏は区分的1次写像、区分的1次分数写像で表現できる力学系に対し、整数係数の（連立）3次方程式の解で相空間の点を指定するという巧みなアイデアを発案するなどし、それらの系で現れるカオス解の真軌道の計算機による生成に成功した。区分的1次あるいは分数写像という制約は付くが、この結果は計算機による複雑ダイナミクスを探究する際の大きな理論的支えとなる結果であり、大いに評価したい。その応用の発展性は言うまでもないが、同時にグレブナー基底の考えなど、代数学との関連もいろいろ出てきており、数学内部での深まりも期待される。

6．　主な研究成果リスト

（1）論文（原著論文）発表

1. Asaki Saito and Keiji Konish, Dynamical singularities in adaptive delayed-feedback control, Phys. Rev. E 84, 031902 (2011) [7 pages].

（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、プレスリリース等）

1. 斉藤朝輝, 真軌道生成法の Noise-Induced Order 現象への応用, Workshop「数論とエルゴード理論」、金沢大学 (2011/2/19)
2. Asaki Saito, Shunji Ito, True Orbit Computation Using Integer Arithmetic, International Conference “Far-From-Equilibrium Dynamics 2011”, 京都大学 (2011/1/6)
3. 斉藤朝輝、伊藤俊次, 整数演算に基づくカオス写像の真軌道生成, 日本物理学会 2010 年秋季大会、大阪府立大学 (2010/9/24)
4. Asaki Saito, Shunji Ito, Realization of True Orbit Simulation Using Integer Arithmetic, International Workshop “Emerging Topics in Nonlinear Science”, Schloss Goldrain, Italy (2010/9/14)
5. Asaki Saito, Shunji Ito, Computation of true chaotic orbits using cubic surds, Workshop “Computability of discontinuous functions and related topics 09-1”, 京都産業大学 (2009/12/18)

研 究 報 告 書

「揺らぐ結び目構造の数理」

研究タイプ：通常型
研究期間： 平成 21 年 10 月～平成 25 年 3 月
研 究 者： 坂上 貴洋

1. 研究のねらい

日常生活において、「紐」を「結ぶ」ということは意外なほど数多く経験する。紐は、クシャクシャとすれば、容易に絡まり合い、また、両端を結べば、「結び目構造」が固定される。紐を切断することなく、異なる結び目不変量を持つ構造間の行き来をすることは出来ない。結び目理論は、三次元空間中の紐状物体の絡まり合いの記述を中心に、他の様々な科学分野との関連を深め合いながら発展してきた。

同様なことは、ミクロスケールでも存在し、私たちの細胞内の DNA やタンパク質の構造や機能においても結び目に起因するトポロジーの効果は極めて重要であると考えられている。日常生活で目にするマクロな結び目と、生体高分子にみられるミクロな結び目との大きな差異は、「揺らぎ」にある。即ち、生体高分子は、与えられたトポロジー一定の拘束条件下で大きく揺らいであり、その統計的な構造は機能と直結する。結び目理論のみでは、このミクロな結び目の振る舞いの記述は不可能であるのはほぼ自明であるが、これに加え、確率論、弾性論、統計物理学、高分子科学を含めた分野融合的視点から捉えることにより大きな可能性が広がってくる。

数理科学としての高分子物理の主要な課題は、この揺らいだ紐状分子の定量的な記述と、そこから導かれる機能の予言であるが、トポロジー効果については、その取り扱いの難しさのため、未解決問題が山積みである。現状では、環状鎖の空間構造、動的性質を統一的に扱える理論的枠組みは皆無であるといっても過言ではなく、環状高分子の振る舞いについて、理論サイドからは網羅的なシミュレーションによる手探りの研究が主流である。このような中、本研究では、トポロジー的相互作用に起因する長さスケールを同定し、環状高分子鎖の空間階層構造を数理的に記述する枠組みを構築することを目指した。より長期的には、構築した枠組みと数学における結び目理論との関連を追及することにより、環状高分子鎖の自然な記述法を提案し、高分子科学や生命科学における結び目が関連する諸問題の飛躍的発展を目指している。

2. 研究成果

（1）概要

長い鎖状分子は、熱揺らぎの中で様々な空間形態（コンフォメーション）をとり、その様子はランダムウォークのモデルにより表現される。その数理的記述は、ゴム弾性をはじめとする高分子性物質のユニークな物性を理解する上で本質的に重要である。そのような視点から見たとき、両端の閉じた鎖、即ち、環状鎖の特徴は如何なるものであろうか。言うまでもなく、線形鎖と環状鎖の違いは、「端」の有無にある。この化学構造上の微小な差異は、環状鎖の空間形態に二種類のグローバルな拘束を課す。一つは、原点に帰ってくるということに由来する拘

束であり、その効果は従来からよく知られていた。これに対し、もう一つの拘束は、鎖が交差出来ないことにより生ずる。鎖の非交差性のために、一旦形成された環状鎖のトポロジーは揺らぎの中で不変に保たれるのである。揺らぐ結び目のマクロな（熱力学的）性質を求める正統な手段は、バネ・ビーズ模型のようなミクロなモデルから出発して分配関数を計算することであろう。しかし、これを厳密に実行するのは、現段階では原理的に不可能であり、また、近似評価を行うにも、様々な技術的困難が伴う。この困難の要因は、上に挙げた「トポロジー不変」の拘束条件にある。

本研究では、ミクロとマクロの中間領域にあたる「メソスケール」における記述に主眼を置いた。トポロジー不変の拘束条件により出現する特徴的長さ（トポロジー長）を基に、メソスケールでの現象論を構築し、そこから系のマクロな性質を記述することを目指した。トポロジーの効果が重要となる系は数多くあるが、特に、(I) 二次元の孤立環状鎖、(II) 細管中での結び目の局在、(III) 濃厚環状鎖溶液の三つの具体的な系について研究を行った。それぞれの系において、トポロジー長の数理的表現を導出し、トポロジーの効果がどのように系の大局的な振る舞いを支配しているのかを明らかにした。

また、上記とは少し違った観点から、「トポロジー不変」の拘束条件の数学的表現についての研究にも着手した。ここでは、結び目不変量の一つである「彩色数」を求める確率的アルゴリズムを提案し、計算複雑性の視点から議論を行った。

（２）詳細

(I)「二次元の孤立環状鎖の統計則」

揺らぐ結び目構造の研究という文脈に於いて、二次元系での環状高分子鎖は特殊な位置を占める。三次元では、トポロジカルに異なる無数の結び目構造が存在するのに対し、二次元では、自明な結び目しか存在しない。そのため、トポロジカルな拘束は、軌道の非交差性の条件と等価となる。その理解は、二次元に於ける原点回帰の self-avoiding walk の問題としての理論的興味のみならず、実用的には、原子間力顕微鏡や電子顕微鏡を用いた環状高分子鎖の一分子イメージングの問題に直結する。

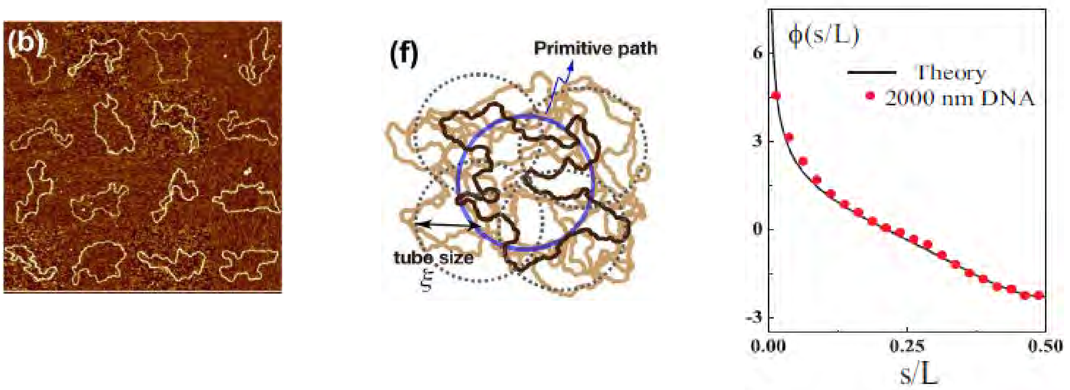


図 1、（左）基板上に吸着した環状 DNA（pSH1 plasmid: 全長 2016nm）の原子間力顕微鏡像。（中）鎖が交差できないことに由来するトポロジー長(tube size)の概念図。（右）環状鎖のボンド相関関数。（Europhys. Lett. Vol. 91, 68002:1-6 (2010)より）

近年、原子間力顕微鏡を用いた環状 DNA の詳細な統計構造解析から、これまで未知であった鎖に沿った長距離の方向相関の存在が報告された（Phys. Rev. Lett., vol. 101, 148103 (2008) ）。本研究では、この長距離相関の原因が鎖の非交差性にあることを見いだし、それを定量的に記述する理論を構築した。非交差性によるトポロジカルな拘束条件を、幾何学（空間）的な拘束条件に読み替えることにより、この系の大局的振る舞いを支配するトポロジー長を同定し、それを基にした長波長揺らぎの数理的記述法を確立した（図 1 参照）。

(II)「細管中での結び目の局在」

微小空間中での高分子鎖の性質は様々な観点から興味深い。例えば、ゲノム DNA を直径数百ナノメートル程度の細管の中に閉じ込めると、DNA は管の軸方向に伸張し、準一次元的な振る舞い（図 2 左）を見せるが、その制御は近年のナノバイオロジー技術における主要なテーマの一つである。

図 2、細管中に閉じ込められた DNA の模式図。右図で、太線の部分は絡まっている。

細管中で DNA を操作していると、しばしば DNA がもつれて分子内で絡まり合いが生じることがある（図2右）。これは、数学的に厳密な意味での結び目ではないが、一方で、直感的には、図2の左と右の状態間の相違は明らかに認識される。本研究では、この両者を定量的に区別する方法を導入し、図 2 右のような「直感的結び目」の安定性について議論を行った。特に注目したのが、「分子鎖全体のどの程度の部分が結び目部分の形成に関与しているか？」という、結び目構造の局在性の問題である。この問いに対して、結び目形成に伴うセグメント濃度上昇（混雑効果）によるエントロピー効果のために、結び目の大きさは、鎖長には依存せずに、細管の直径のみにより決まるサイズに強く局在することを理論的に明らかにし、系統的な数値シミュレーションにより検証を行った。その他、細管中での結び目のサイズ揺らぎを記述する分布関数や、結び目がほどけるときの動的過程についての議論を行い、擬一次元中での揺らぐ結び目の振る舞いを記述する基礎的理論を構築した。

(III)「濃厚環状鎖溶液の統計力学」

線形鎖と環状鎖の差異が最も顕著に現れるのは濃厚溶液であると考えられる。線形鎖の濃厚溶液では、ある一本の鎖に着目すると、それを取り囲む周りの鎖と激しく絡まり合っていて、その空間形態は、排除体積効果の遮蔽のために理想鎖とほぼ同様となることはよく知られている。これに対し、どれもが他の分子と絡み合い(link)の無いような環状鎖の濃厚溶液の性質は、これまでほとんど知られておらず、高分子科学における最難問の一つとされてきた。

本研究では、他の環状鎖と絡まり合わないというトポロジカルな拘束を、実効的な排除体積効果として取り扱う手法を提唱し、メソスケールでの現象論的理論を構築した。これにより、環状鎖のサイズの分子量依存性スケーリング則をはじめとした、これまで、実験、数値シミュレーションにより経験的に知られてきた様々な結果を統一的な視点から捉えることが可能となっ

た。さらに、濃厚環状鎖溶液の統計則と、柔らかな物体のパッキング問題との関連、類似性を見抜き、そこから、トポロジー長の幾何学的な解釈を提案した（図 3）。

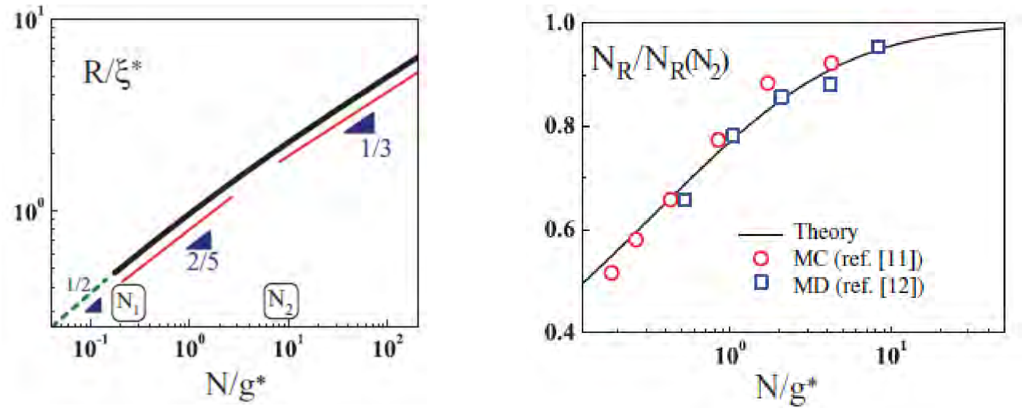


図 3、濃厚環状鎖溶液での着目環状鎖の空間サイズ（左）と隣接リング数（右）の分子量依存性。（Phys. Rev. E, vol. 85, 021806 (2012)より）

３． 今後の展開

・ 濃厚環状鎖溶液に関連する諸問題への展開

研究期間中に構築した理論的枠組みを基に、濃厚な環状鎖溶液における様々な未解決問題に取り組んでいきたい。具体例として、高分子混合溶液の相溶性に対するトポロジーの効果、濃厚環状鎖溶液のレオロジー、環状高分子の薄膜物性などが挙げられる。どれも基礎科学的な興味のみならず、トポロジー効果による新規物性発現の可能性を持つ工業的にも重要な課題である。また、濃厚環状鎖溶液の統計物理学は、染色体の高次構造と密接な関係があることが明らかになりつつある。紐上分子のパッキングにおけるトポロジーという視点から、染色体の構造、機能という生命現象の根幹に関わる問題にアプローチしていきたいと考えている。

・ 一分子系における諸問題への展開

希薄溶液中の一分子のみに注目した場合も、多くの問題が残されている。研究期間中には、基盤上（二次元）での環状高分子鎖の定量的記述に成功したが、三次元中の環状高分子鎖の振る舞いについても、トポロジー長を同定し、同様なレベルでの理解を得たいと考えている。また、揺らぐ結び目構造の拘束空間中での振る舞いや、外場への動的応答についても、本研究で得られた成果を更に発展させ、取り組んでいきたい。ここには、微小チャネル中での生体高分子鎖の操作や、電気泳動による DNA 結び目の分離など、ナノバイオロジー分野と関連する多くの重要課題がある。

４． 自己評価

濃厚環状鎖溶液を取り扱う現象論の構築は、今後の発展性も含めて、本さきがけ研究の中で得られた最も大きな成果である。振り返ってみると、これは、当初の研究計画には入っていなかったが、環状鎖におけるトポロジー効果についての勉強を進めていくうちに、自然と研究対象となっていった。このような古典的な難問にじっくり取り組むことが出来たのも、さきがけと

いう場があったからこそであると思われる。結果として、研究の大目標であった環状鎖の系におけるトポロジー効果の理解を大きく進展させることが出来た。その一方で、具体的な項目として当初予定していたテーマのうち、期待通りの成果を上げられなかったものや、まだ、未着手のままであるものもある。これらは、今後の課題である。

5．　研究総括の見解

トポロジー的拘束のある高分子系に対するメソスケールでの現象論の構築を目指したことはさきがけの課題としてふさわしく、一定の成果を収めたことは高く評価できる。具体的には環状鎖の空間形態に課される二種類のグローバルな拘束：一つは、原点に帰ってくるということに由来する拘束であり、もう一つの拘束は、鎖が交差出来ないことから来る。この一旦形成された環状鎖のトポロジーは揺らぎの中で不変に保たれる。坂上氏はトポロジー不変の拘束条件により出現する特徴的長さ（トポロジー長）を基に、メソスケールでの現象論を構築し、そこから系のマクロな性質を記述することを目指した。特に、(I) 二次元の孤立環状鎖、(II) 細管中での結び目の局在、(III) 濃厚環状鎖溶液の三つの具体的な系について研究を行った。それぞれの系において、トポロジー長の数理的表現を導出し、トポロジーの効果がどのように系の大局的な振る舞いを支配しているのかを明らかにした成果は大きい。また、これらとは少し違った観点から、「トポロジー不変」の拘束条件の数学的表現についての研究にも着手し、結び目不変量の一つである「彩色数」を求める確率的アルゴリズムを提案し、計算複雑性の視点から議論を行った。この方面への今後の発展も期待できる。

6．　主な研究成果リスト

（1）論文（原著論文）発表

1. T. Sakaue, ″Ring Polymers in Melts and Solutions: Scaling and Crossover″, Phys. Rev. Lett. 106, 167802:1-4 (2011).
2. T. Sakaue, ″Statistics and geometrical picture of ring polymer melts and solutions″, Phys. Rev. E, 85, 021806:1-11 (2012).
3. T. Sakaue, G. Witz, G. Dietler and H. Wada, ″Universal bond correlation function for two-dimensional polymer rings″ , Europhys. Lett. 91, 68002:1-6 (2010).
4. C.H. Nakajima and T. Sakaue, ″Computing a Knot Invariant as a Constraint Satisfaction Problem″, J. Phys. Soc. Jpn. 81, 035001:1-2 (2012).
5. C.H. Nakajima and T. Sakaue, “Localization and size distribution of a polymer knot confined in a channel”, Soft Matter, in press

（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、プレスリリース等）

主要な学会発表

1, “Fluctuating Ring and Knot”

Lecture Series in Physics of Self-organization Bio/Nano Systems, POSTECH, Korea, (2011/2/1).
2, “Ring Polymers in Melts and Solutions”, 第一回ソフトマター研究会, (2011/8/4).
3, 「拘束下の高分子鎖:幾何学、力学、トポロジーの効果」、日本物理学会 2011 年秋季大会、(2011/9/22).
4, “Statistics and geometrical picture of ring polymer melts”, Regional Bio-Soft Matter Workshop-2011: Non-equilibrium Statistical Physics in Bio-Soft Systems, Taipei, Taiwan, (2011/10/29).

受賞
・第 5 回日本物理学会若手奨励賞
・平成 24 年度科学技術分野の文部科学大臣表彰 若手科学者賞

研 究 報 告 書

「非線型マクロ経済モデルのためのフレームワークの構築」

研究タイプ：通常型
研究期間： 平成 21 年 10 月～平成 25 年 3 月
研 究 者： 田村 隆志

1． 研究のねらい

現代のマクロ経済学では、個々の経済主体が自身の効用や利益を最大化するという仮定のもとモデルが構築されています。これは数学の確率制御理論の応用にほかなりません。さらに興味深い点として、それらの経済主体同士の行動を適当な仮定(例えば市場の均衡)のもと結びつけ分析している点、さらにモデルに経済主体の将来に対する期待を合理的期待という仮定のもとに取り込んでいる点が挙げられます。

合理的期待の仮定のもとでは、将来の予想が現在の経済変数を決定し、またその現在の経済変数が将来の予想を決定するという循環構造をモデルは抱えることになります。モデルの解とはこのような循環構造のある意味不動点として特徴づけられます。従来、合理的期待を仮定してモデルを解く場合、定常状態の周りで線形化して数値的に解き、解析するのが一般的です。高次の近似を扱う先行研究もありますが、その場合、モデルの解の存在が厳密に取り扱われていないというのが私の理解です。

本研究では合理的期待の仮定の下でのマクロ経済モデルにおける非線形効果を厳密に取り扱うためのフレームワークの構築を目指しました。これは単に数学的興味にとどまらず、ゼロ金利制約下でのマクロ経済モデルの振舞いや、金利の期間構造を取り扱う際に実際に重要になるものです。

2． 研究成果

（1）概要

そもそもの難しい点は経済主体の抱く予想・期待がどのように決定されるか広く合意されたモデルがないことにあります。経済主体の消費・貯蓄・投資などの行動はそれが抱く予想に基づいて、何らかの効用や利益を最大化するように決定されると経済学では信じられていて、モデルに組み込まれています。しかし、そもそも、その予想・期待がどのように決定されたものかが問題になりますし、これが決まらないとモデル内での経済主体の行動も決まらず、モデルが解けないことになります。そこで現代の経済学では経済主体が持つ予想・期待は合理的である、という仮定をおいてモデルを解くことが広く行われています。ここでいう合理的とは、経済主体が抱く予想と、その結果決定された経済行動から導かれる経済変数の分布が一致するという意味です。

注目すべきことは、この段階でもやはり、期待がどのように決定されるかモデルに明示的に組み込まれているわけではなく、暗黙的に解く必要があることです。マクロ経済モデルが線形の場合にはこれは線形代数の範囲で非常にうまくいっていました。しかし、ゼロ金利制約がある場合、自然にモデルは非線形となりうまくいきません。

先行研究では、ゼロ金利制約を扱うために、将来時点の経済状態を完全に予測可能と仮定したり、social plannerを導入したりしていましたが、これらがモデルを解くためのアドホックな仮定であることは否めません。これらの仮定はモデルの安定性を無条件に良くするものであり、マクロ経済モデルの解析の主題の一つが安定性の解析であることを踏まえると受け入れがたい仮定です。

本研究では、外乱が非常に小さいか、あるいは定常状態でのインフレ率が高くゼロ金利制約の影響が小さい場合に、適当な仮定の下、合理的期待を満たす解が存在することを示しました。ゼロ金利制約が存在する場合も、従来のモデルの自然な拡張として取り扱うことが理論上は可能であることを示しました。

（2）詳細

従来は線形近似したモデルを解析の対象としていたので、基本的に線形代数の知識を使ってモデルは解かれていました。本研究の設定では有限次元の線形空間の話に帰着することはできませんので、関数方程式の問題として定式化し、適当な仮定の下に解が存在することを示しました。具体的には外乱を表す確率過程の状態空間を、リャプノフ関数の等高線で区切り、技巧的に写像の適用を繰り返し行うことで、縮小写像を構成し、解の存在を示すというものです。抽象的な方法ではありますが、解釈として遠い将来の予想の微小な変動に対してモデルが安定であるということが、縮小写像が構成できることに対応しているので、それほど現実離れした話ではないと考えています。

従来の線形モデルにおける線形代数を使った解法の自然な拡張になっています。逆を言えば、従来単なる線形代数のテクニックとしてしか捉えられていなかったものに、「遠い将来の予想の微小な変動に対する安定性」という意味づけがクリアに与えたと言えると思います。またモデルの高階近似を用いる方法に比べ、計算機での実装はより難しくなっていますが、ゼロ金利制約を自然に扱えるようになっていると思います。

3．　今後の展開

理論的には解の存在を示しましたが、実際の数値計算では線形モデルに比べ取り扱いが難しいものになっています。数値計算で容易に取り扱えるような近似方法を確立することが応用面での課題であると考えています。また本研究の結果は、合理的期待という仮定だけからは解が一意に定まらない場合があることを強く示唆しており、期待が形成される過程そのものを明示的にモデルに組み込む必要があるだろうと予想されます。そのようなモデルを構築する方法の研究が今後必要であろうと思われます。金利の期間構造の解析に関しては、マクロ経済モデルの高階近似を正面から行う方法の他に、単純なマクロ経済モデルと誘導型モデルを組み合わせる方法が考えられ、この場合には数理ファイナンスへの応用、特にリスク中立確率の挙動を調べることに応用出来ると考えています。

4．　自己評価

得られた非線形モデルの解の存在は非自明なものではありますが、それが定性的・定量的にどのような意味を持つかの解析にいたっておらず、質・量共にあまり芳しい成果を上げることができませんでした。

5．　研究総括の見解

合理的期待の仮定の下でのマクロ経済モデルにおける非線形効果を厳密に取り扱うためのフレームワークの構築を目指した研究であり、それ自体は一つの意味のある重要な課題設定と思われる。問題の困難点、例えば、経済主体の抱く予想・期待がどのように決定されるか広く合意されたモデルがないことにあると指摘するが、それも含めどのように問題を設定するかについても、さきがけ期間中に挑戦してほしい内容であった。本さきがけ研究の成果は、外乱が非常に小さいか、あるいは定常状態でのインフレ率が高くゼロ金利制約の影響が小さい場合に、適当な仮定の下、合理的期待を満たす解が存在することを示したものであり、それは「遠い将来の予想の微小な変動に対する安定性」という意味づけがクリアに与えたとあるが、それを論文等に発表することにより、その是非を問い、より広く議論されることがなかったことは極めて残念なことである。

6．　主な研究成果リスト

（1）論文（原著論文）発表

なし

（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、プレスリリース等）

講演

1. 非線形マクロ経済モデルに現れる数学, JST 数学領域　第 4 回領域シンポジウム「越境する数学」, 東京大学, 2012 年 11 月.

研 究 報 告 書

「非線形情報理論:環境雑音を活用する次世代情報処理の実現」

研究タイプ:通常型
研究期間: 平成 21 年 10 月～平成 25 年 3 月
研 究 者: 寺前 順之介

1. 研究のねらい

我々の脳や細胞内の遺伝子制御ネットワークなど，生命は，外界の情報を読み取り，状況に応じてそれらを適切に処理するための高度な情報処理システムを進化させて来た．これらの情報処理システムは，既存のコンピュータが行う情報処理とは対照的に，強い揺らぎ（ノイズ・雑音）の存在下で安定して動作するという著しい特徴を持つ．現存のコンピュータは，安定した情報処理を実現するために，膨大なエネルギーを割いて雑音を抑制しているが，雑音を許容する生命情報処理システムは，その必要がなく，わずかなエネルギー消費のみで安定した動作が可能になっている．情報処理に伴うエネルギー消費の急速な増大は，現代社会が直面している喫緊の課題であり，生命の情報処理システムのような雑音下で動作できる頑健な情報処理システムが実現すれば，その社会的メリットは計り知れない．本研究では，その新しい情報処理システムの実現に資するために，強い雑音の下で動作する生命情報処理原理と背景にある数理構造の解明をねらう．数理的な手段を用いる事で，単なる生命現象の理解に留まらず，人工的な新規情報処理システムの設計原理を獲得できる事が強く期待出来る．強い揺らぎと高精度な情報処理が共存する仕組み，揺らぎそのものの起源，さらに揺らぎを積極的に用いて情報処理精度を高める機構などを解明する．本研究では特に，我々の脳，なかでも大脳皮質での揺らぎとそこで実現している情報処理に重点をおく．脳は生命情報処理の中心であり，情報処理に特化して進化した器官であるため，その研究は生命情報処理研究の突破口として最も有望であり，かつ，機械学習や大規模データ処理，ブレインマシンインターフェイス，制御など多様な応用分野が期待出来る．神経生理学と協働し，最先端の生物学的知見と数理的アプローチとを統合する事で，課題の解決を図り，雑音を抑制する情報処理から，雑音を活かす情報処理への転換を可能にする理論基盤を確立する．

2. 研究成果

（1）概要

本研究における成果は「雑音を受ける非線形振動子の数理的記述の確立」と「大脳皮質の自発揺らぎの解明」の二つに大別出来る．

生命現象は自律的かつ動的な現象である．自律的なダイナミクスのうち最も基礎的な現象が振動現象であるため，生命現象の多くが，安定した振動子（非線形振動子，リミットサイクル振動子），あるいはその集合として理解される．例えば脳を構成する神経細胞も，一定電流を受ける条件下では非線形振動子として記述される事が知られている．非線形振動子から振動タイミングに関する知見を系統的に取り出す数理的手法として，非線形振動子の位相縮約と呼ばれる手法が確立されており，非線形振動子の性質，特に，非線形振動子の集団現象の理解を可能にする強力な理論体系を提供してきた．しかし，雑音の下で振動する非線形振

動子の位相縮役法は未解明に残されていた．神経細胞をはじめ生体内での振動子は，ほぼ例外無く何らかの雑音の下で振動しているため，適切な位相縮約法の不在は，生命の振動現象や神経情報処理解明の妨げとなって来た．本研究では，確率微分方程式の理論と非線形振動子の数理を統合する事で，一般の雑音を受ける非線形振動子の位相記述を確立する事に成功した．

第二の成果は，大脳皮質での自発揺らぎの理論的解明である．大脳皮質は，認知，判断，推定といった．我々の高次脳機能の実現において中心的な役割を担う脳の部位であるが，その神経活動は，強い揺らぎ（神経雑音）を伴っている．この揺らぎは，神経ネットワーク自身によって自発的に形成され，我々の認知に影響を与えている事が実験的に示唆されてきたが，その詳細，特に，その揺らぎの起源と神経情報処理における機能的意義は未解明であった．神経細胞は強い非線形素子であるため，非常に同期しやすく，揺らぎを生成し維持する事は困難な事がその原因であった．本研究では，最新の生理実験によって得られた，興奮性神経細胞間の結合強度分布が鍵となり自発揺らぎが生成される事を数理的に示し，この揺らぎが様々な生理実験を統一的に説明する事を示した．さらに神経細胞間での情報伝達精度が，この揺らぎの存在下で，ほぼ最適になる事を明らかにした．神経情報処理において雑音が積極的に生成され，実際に情報処理精度を高める事を数理的に示した重要な研究成果である．

（2）詳細

研究テーマ A「多様なノイズを受ける非線形振動子の位相記述の確立」（原著論文発表 1, 2）

生命現象の記述に現れる振動子を含め，非線形振動子は一般に多変数による高次元の微分方程式として記述される．この高次元の微分方程式から，振動のタイミングを記述する「位相」と呼ばれる単一変数が従う微分方程式（位相方程式）を系統的に導きだす数理的手法が非線形振動子の位相縮約である．これまで位相縮約は非線形振動子が時間的に連続な外力を受ける事を前提に研究が進められていたが，生命現象など雑音の存在下での振動子や振動子ネットワークの挙動を解明するために，位相縮約法の雑音下への拡張が強く求められていた．

位相縮約では，十分安定な非線形振動子（リミットサイクル振動子）で，安定軌道への緩和時間スケールが十分短い事，つまり緩和が速い事，を用いる．この短い緩和時間を展開パラメータとして用いる事で，安定軌道からずれる効果に対する位相への影響が摂動的に評価される．しかし，雑音下での非線形振動現象では，雑音自身が持つ短い時間スケールが加わるため，軌道への緩和時間スケールと雑音の持つ時間スケールという二つの短時間スケールを扱う必要が生じ，ナイーブな手法では正確な位相方程式を導出出来ない事が知られていた．この困難は，二つの時間スケールの比を固定した後に摂動的な一次の効果を取り入れる事で解決し，雑音下の位相記述では，単一の位相方程式ではなく時間スケールの比をパラメータとする位相方程式の族が導出される事が寺前自身らの先行研究で明らかになっていた．しかし，そこで用いられた手法は雑音強度分布がガウス分布である事を前提としており，一般の強度分布を持つ雑音での位相縮約法は未解明であったため適用範囲が限られた物であった．本研究では，この課題を解決し，任意の時間構造と，強度分布を持つ雑音に対して非線形振動子の位相縮約を完成し，一般の位相方程式を導出する事に成功した．

短い時間スケールを展開パラメータとする代わりに，より単純に雑音強度自身を展開パラメータとして用い，ただし，展開の二次の効果まで取り入れる事で正確な位相方程式（位相確率微分方程式）が求められた．導出された方程式は，雑音の自己相関関数と，振動子の振幅方向への感受性関数との畳み込みの形で記述される新規な項を含む．本研究では，その妥当性を数値的にも検証し，さらに導出された位相方程式から，位相の平均角速度，拡散係数，共通雑音下でのリアプノフ指数など，位相ダイナミクスを特徴付ける様々な量を求め，雑音の持つ固有の構造に依存して，様々な非自明な効果が現れる事を具体的に示す事に成功した．

研究テーマ B「大脳皮質の自発的揺らぎの起源と機能の解明」（原著論文発表 3, 4）

大脳皮質は外界からの刺激が無くても随時弱い神経活動を続けている．これは大脳皮質の自発発火活動と呼ばれており，この活動中に神経細胞の膜電位は強い揺らぎを伴う，各神経細胞が生成するスパイク時系列の不規則性が高い，そのスパイク列の同期性が低い，神経細胞膜の典型的な時間スケールに比べて発火頻度が著しく低いといった特徴を持つ．このためこの活動は神経系の背景雑音と呼ばれる事もあるが，一方で我々の認知に影響を与える事が示唆されるなど，神経情報処理に極めて重要な効果を持つのではないかと考えられて来た．

本研究では数理的な手法により，大脳皮質での自発揺らぎの起源と，神経情報伝達における機能の両者を同時に明らかにする事に成功した．自発揺らぎの起源としては，単一神経細胞が信頼性の高い素子として振る舞う事や，雑音源として活動する部位が脳内に存在しない事などから，神経細胞ネットワークの働きにより生成されている可能性が示唆されていたが，神経細胞自身は非線形性の強い閾値発火素子であるため，簡単に同期発火あるいは高頻度発火を起こしやすく，低頻度非同期発火の実現は困難であった．この困難の主因は，興奮性神経細胞間の結合強度が一般に非常に弱い事にある．神経細胞は互いにスパイク発火を生成しそれを伝達する事で情報を伝達するが，スパイク発火は次の神経細胞の膜電位を上昇させ，その上昇が十分大きくなる事で再び次のスパイク発火を引き起こして情報伝達を実現する．そのため神経細胞間の結合強度とはスパイクによる膜電位の上昇度で定量化出来るが，典型的には数十から数百のまとまったスパイク入力が無ければ次のスパイクを誘導出来ないほど神経細胞間の結合強度は弱い．このため，自発的な活動の維持にはまとまったスパイク入力が必要となり，高頻度か高同期性の活動しか得られなくなっていた．

興味深い事に，実験的には，極めて稀に典型的な結合強度の数十倍を超える非常に大きいスパイク応答も観測される事が知られていた．これらは，これまで特異な外れ値として無視されて来たが，本研究では，多数の弱結合と極めて少数の強結合の共存こそが重要であり，その共存が大脳皮質自発揺らぎの生成と維持を説明する事を示した．結合強度分布は裾の厚い分布である対数正規分布で良く記述できる．この分布を考慮して神経ネットワークモデルの数値計算を行う事で，様々な生理学的知見に合致する自発揺らぎが自然に生成される事を示した．さらにその揺らぎの影響を，確率微分方程式を用いて解析する事で，各神経細胞へ入力する少数の強いシナプスを介した入力が，ちょうど実験的に観測される結合強度分布と自発揺らぎの強度の時に最適に下流のスパイク発火へと伝達することを示した．つまり，自発揺らぎはある種の確率共鳴現象のような仕組みを各神経細胞に対して実現しており，それ

によって強いシナプスを介した情報伝達精度が最適化されていえる. 見方を変えれば, 各神経細胞は, 自発揺らぎを用いて強いシナプスからのスパイク入力を調整するゲート素子のように振る舞っており, 大脳皮質はその確率的ゲート素子のネットワークであると見る事が出来る. これはこれまで考えられて来た神経情報処理の仕組みとは全く異なる視点を提供しており, 神経情報処理メカニズムを解明する極めて重要なステップとなる研究成果である.

3. 今後の展開

これまでの研究成果により, 大脳皮質では自発揺らぎが単一神経細胞レベルでの情報伝達精度を最適化する事が分かり, 単一神経細胞を確率的なゲート素子として捉えられる全く新しい可能性が示唆された. しかし, この素子を構成要素とするネットワークがどのような性質を持ち, どのような情報処理能力を持つのかは未解明の課題である. この問題の解決は, 大脳皮質がネットワーク全体として, どのような情報処理を行っているのかという神経科学の最重要課題解決の突破口になる可能性が高く, 本研究成果の重要な展開として期待出来る.

少数の非常に強い影響と, 多数の弱い影響の両方によって相互に結合する系は大脳皮質の神経細胞に留まらず自然界に広く見いだせる可能性がある. 具体的には我々の社会, 生態系, 細胞内の制御ネットワークなどがその潜在的な候補として挙げられる. 本研究は大脳皮質の情報伝達を対象にしたが, もし同様の特性がこれらの他のネットワークでも観測されれば, 本研究成果をこれらの分野に拡張出来る. その可能性を追求したい. またこれら多様な分野の実験的知見を合わせ用いる事で, 揺らぎを生成し調整して情報処理を行う基礎的なメカニズムの解明をさらに加速させたい.

雑音を利用する情報処理メカニズムの解明は工学的応用に大きなインパクトが期待出来る. 低エネルギーで動作する確率的情報処理デバイスや, 通信ネットワーク等の適応的制御アルゴリズム, 脳型の確率的情報処理メカニズムの提案といった課題は, これまでも様々な研究が行われているが, 本研究成果はこれらの分野に直接応用出来る可能性が高い. 実際にデバイスを作成し, アルゴリズムを提案するなど, 単なる現象の解析を超えて, 有用な工学的応用を実現したい.

4. 自己評価

大脳皮質の自発揺らぎの起源と機能の解明できた事に関しては, この課題が長く理論神経科学の重要な未解決問題であった点, この神経活動が大脳皮質の基底状態であり神経科学全体への大きな波及効果が期待出来る点, 生物学的な実験結果と数理的な解析との協働がこの問題解決の決め手であった点, 本研究のねらいであった雑音と生命の情報処理との関係解明に大きく貢献出来た点などを踏まえ成功を収めたとして評価したい. しかし, この研究成果ではまだ, 雑音を活かす情報処理そのものが理解出来たとは言い難く, その点は大きな課題である. また本研究成果が数学の利用に留まっており, 例えば新しい数学の問題を提示するなど, 数学そのものに貢献できなかった点も課題である. この二つの課題は無関係ではなく, 今後, 本研究で得られた成果に基づきさらに研究を進め, 雑音を積極的に生成し調整して実現される「情報処理」そのものを明らかにできれば, そこに新たな数学の問いが自然に山積しているのではないかと期待している. 今後も精力的に研究を進め, 何としてもその地点まで到達したい. また, 本研究が脳科学との協働に偏りすぎており, 工学的応用研究や他の生命科

学研究との協働に至れなかった点も課題である．本研究は，これらの分野との関連も深く，様々な貢献が期待出来るが，それを十分実行できなかった．今後はこれら多分野との連携を進める事で，本研究をさらに発展させていきたい．

5．　研究総括の見解

強い揺らぎと高精度な情報処理が共存する仕組み、揺らぎそのものの起源、さらに揺らぎを積極的に用いて情報処理精度を高める機構などを解明するという脳神経ネットワークダイナミクスにおける極めて根源的かつ困難な問題に立ち向かう、さきがけにふさわしい課題であり、それに対し一定の成果を挙げたことは大きく評価できる。寺前氏の言うようにこれは雑音を抑制する情報処理から、雑音を活かす情報処理への転換を可能にする理論基盤として重要である。最初の共存できる仕組みについては、ゆらぎの効果を確率微分方程式の方法論により取り込み、それとこれまでの非線形振動子の数理を統合する事で、一般の雑音を受ける非線形振動子の位相記述を確立する事に成功した。一方、自発揺らぎの起源に関しては、低頻度非同期発火をどのように実現しているかは長い間の疑問であった。寺前氏は最新の生理実験による興奮性神経細胞間の結合強度分布に着目し、自発揺らぎが生成される事を数理的に示し、この揺らぎが様々な生理実験を統一的に説明する事を明らかにした。この成果は重要である。実際、多数の弱結合と極めて少数の強結合の共存は脳神経ネットワークのみならず、より広い生命科学さらには社会ネットワークにも応用できる可能性が高い。実験家との協働により今後さらなる成果が生み出されるであろう。さらに数学へのフィードバックも期待される。

6．　主な研究成果リスト

（1）論文（原著論文）発表

1. Hiroya Nakao, Jun-nosuke Teramae, Denis S. Goldobin, and G. Yoshiki Kuramoto, Effective long-time phase dynamics of limit-cycle oscillators driven by weak colored noise, Chaos, 2010, 20, 033126
2. Denis S. Goldobin, Jun-nosuke Teramae, Hiroya Nakao, and G. Bard Ermentrout, Dynamics of Limit-Cycle Oscillators Subject to General Noise, Phys. Rev. Lett., 2010, 105, 154101-1-4
3. Jun-nosuke Teramae, Yasuhiro Tsubo, and Tomoki Fukai, Optimal spike-based communication in excitable networks with strong-sparse and weak-dense links, Sci. Rep., 2012, 2, 485
4. Naoki Hiratani, Jun-nosuke Teramae, and Tomoki Fukai, Associative memory model with long-tail-distributed Hebbian synaptic connections, Front. Comput. Neurosci., 2013, 6, 102

（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、プレスリリース等）

主要な学会発表（国際会議招待講演）

[1] A long-tailed EPSP distribution accounts for the up-state, low-rate asynchronous firings,

and precise firing sequences in cortical networks, Jun. 3 (2010), NIPS (Seiriken) International Workshop,"Fresh Perspectives of Computation in Neuronal Systems"

[2] Long-tailed EPSP distribution accounts for low-rate asynchronous firings, the up-state, and precise firing sequences in cortical networks, Sep. 6 (2010), Workshop on spatio-temporal neuronal computation

[3] Spike timing and possible roles of noise in cortical computation, Nov. 25 (2010), 17th International Conference on Neural Information Processing

[4] Long-tailed EPSP distribution accounts for origin and role of noise in cortical networks, Mar. 3 (2011), Japan-German Joint Workshop on Computational Neuroscience

[5] Long-tailed EPSP Distribution Reveals Origin and Computational Role of Cortical Noisy Activity, May. 24 (2011), SIAM Conference on Applications of Dynamical Systems

受賞

[1] 日本物理学会 若手奨励賞, 2010 年 3 月 4 日

[2] Young Investigator Award, Asia Pacific Neural Network Assembly, 2010 年 11 月 24 日

[3] Best Paper Award, The 3rd International Conference on Cognitive Neurodynamics, 2011 年 6 月 11 日

[4] 包括型脳科学研究推進支援ネットワーク, 若手優秀発表賞, 2011 年 8 月 23 日

研　究　報　告　書

「情報論理学の新パラダイムがもたらす生物現象の計算構造　の解明」

研究タイプ：通常型
研究期間：　平成 22 年 1 月～平成 25 年 3 月
研　究　者：　浜野　正浩

1．　研究のねらい　1000字未満

多数の因子が絡み合う細胞内相互作用をプロセス計算を用いて記述する情報論理学と生物学の越境が今世紀の始めにおこった。当研究は、数理・情報論理学の周辺で21 世紀に入ってから明らかになりつつある計算論理学に対する新しいパラダイムをもちいて、従来は計量的な定式化によって分析されることが主であった生物現象の複雑系システムの解明を構造的に行おうとする試みであった。これにより、生物・生命現象に潜む計算構造を抽出しその計算論的複雑性を導くことを目指した。多くの要因が複雑に絡みあい、 要因の局所的な振る舞いと、大域的なそれとの橋渡しの困難に関して限界がある従来の計量的手法を、構造的・質的観点から、ここにきて3つの手法に関するスローガン(i) 離散的から連続的へ(ii) 局所的から並行的へ(iii) 静的から動的へ、から発展を見せている情報論理学の新たな視点を用いて解明していくことを目指した。
さらにこの論理学と生物学のインターアクションを通じて、新しい計算モデルを自然現象の中で構成することも目標とした。

2．　研究成果

（1）概要

具体的な生化学相互作用である、RNA 干渉に対して、研究のねらいを適用し研究した。
生化学相互作用として RNA 干渉を計算言語で記述することにより干渉の計算論的複雑性が抽出できた（再帰的 RNA 干渉の確率的 Turing 完全性）。 同時に、情報を相互作用として捉えるプロセス計算言語（κ 計算）を用いることにより、(時間が明示的に与えられた外側からの観察による伝統的な現象的モデルではなく)内側からのきめの細かい記述ができ、これが状態爆発に陥らない局所的でコンパクトな RNA 干渉の記述を可能にした。 さらに、得られた記述の意味論をマルチ型分岐過程として構成し、 干渉の持続可能性の規則精錬化に関する不変性を示した。これによりκに固有のコンパクト性の妥当さを保証できた。

（2）詳細

● 研究テーマ 1 「RNA 干渉の計算構造の解明」（下記成果リスト発表論文[1]）
RNA 干渉は小さな RNA(siRNA)がタンパク質を介さず直接遺伝子翻訳制御をしている機構であり生物学で注目を集めている。 この制御系が、計算や情報処理を実行していると捉えられれば RNA 干渉の増幅性やフィードバック機構を、情報論理学や計算の理論の観点から分析することが可能となる。(人工物ではない)自然現象を計算モデルとして捉えようとする試み

は生物系、物理系がどの程度の計算力や速さを持っているかの観点から活発な研究(例えばDNA計算や量子計算など)が行われており自然現象に基づいた新しい論理ゲート構成の基礎理論が与えられている背景がある。この研究ではむしろ、生物が細胞内で行っている"自発的"な計算機構を理解しようとする試みであった。

生物生命現象の計算構造を抽出するためには、これを計算言語で記述し、この記述を通してその計算論的意味や複雑性を分析しなければならない。 このことを RNA 干渉が持つデジタルな構造に注目して行った。 干渉を通じ RNA が1本鎖と2本鎖を取る事から Minsky のレジスタ機械に必要な2種類のレジスタが表現できる。 さらに1本・2本鎖は、siRNA による干渉や増幅により増減することから、マシンの命令を、相互作用を誘導する酵素(RdRp や Dicer)やタンパク質(argonaute)と解釈できる。しかしこの素朴な表現はレジスタの零テストができなく健全ではなく、命令の間のエラージャンプをしてしまう。 これを克服するものとして、生物学ではフィードバックを備えたものとして知られる再帰的 RNA 干渉を考えた。 このフィードバックが計算モデルでは siRNA が命令の抑制として働きエラーを確率的に阻止することに対応していることになる。 相互作用の副産物として増殖、蓄積する siRNA がエラー抑制を行うことより、Minsky 機械の停止性とRNA 干渉の確率的な停止性の関連を与えた。これにより再帰的RNA 干渉の確率的な Turing 完全性を示した。

● 研究テーマ 2「RNA 干渉のプロセス計算を用いたコンパクトな構文論とマルチ型分岐過程意味論」(下記成果リスト発表論文[2])

伝統的な情報論理学では、計算は Turing 機械や関数(λ関数や帰納的関数など)などによって捉えられていたが、'90 年代に Milner によって発展されたプロセス計算(π計算など)では、プロセス間の通信を計算として捉えることにより、計算機科学で基本となるプロトコル(通信手順)に対する計算言語を提供し、相互作用を計算構造と捉えることを可能とした。 この新しい計算観は'00 年代の始めに、多数の因子が絡み合う細胞内相互作用を、(通信チャンネルに相互作用の起こり易さを示す確率パラメーターを付与した)確率的なプロセス計算によって記述しようと試みる、 情報論理学の生物学へのおもいがけない越境を引き起こした。 研究テーマ2はこの流れをうけ Kohn の分子相互作用マップ記述のために Danos らによって開発されたκ計算を、従来の例(タンパク質相互作用など)とは本質的に異なる生物現象(ヌクレオチドや核酸の間のリン酸結合や水素結合や Watson-Crick 相補性を基本単位とする相互作用)に応用した。この現象に関する従来の研究でのモデリングは、濃度モデルなどの観察者が外側から見立てる現象論に基づいた決定論的なであったが、 テーマ2でのモデリングは相互作用のチャネルのパターンの組み合わせによる内側からのきめ細かい直接的な記述が可能になる。

さらに情報論理学視点が提供できる重要な手法である記述言語の構文論(シンタックス)と意味論(セマンティクス)の対応を RNA 干渉に具体的に構成することにより、この研究ではより理論的な分析を加える枠組みを考察した。 従来はモンテカルロ シミュレーションでの再現性などの実験的な側面を介してしか考察されなかったプロセス計算の利点"何故コンパクトな記述で十分なのか?" に対する答えの根拠を規則精錬に関する意味論の不変性で捉えた。

確率プロセス計算の一種であるκ計算は離散的なエージェントの間のサイトを介した確率

的な相互作用を規則に基づいて記述する Turing 完全な計算言語である。干渉では原始的なプロセスである siRNA が dsRNA に由来するものであるから切り出された場所を示す型を持っており、これらの複合体として RNA や dsRNA が記述できる。 従って干渉は型をもつこれらプロセスの相互作用からなるκによる構文論として定式化できる。これに対する意味論をマルチ型分岐過程として構成でき、RNA 干渉の循環性について分析を加えた。 RNA 干渉の持続可能性は RNA 干渉のモデル化の先行研究の中心問題であり、 上記テーマ 1 の計算機としての干渉の計算機解釈にも関連するものである。 構成したモデルでは各型の siRNA の個体数の世代による時間発展を捉えることができるので、干渉の停止性を siRNA の子孫の消滅性によって定式化できた。

この意味論ではまず、植物と動物の RNA 干渉の持続性(効率性)の違いを計算モデルの枠組みで特徴づけることができた。 実験文献で知られていた循環性を実現する様々なポリメリゼーションパスウェーをモデル化し、プロセス計算が定める確率的遷移系の停止性によって捉えることによってパスウェーの効率性を捉えた。 応用として特に植物に固有のウイルス抵抗性機構としての抑制機構の意味が捉えられた。

さらにこれらポリメリゼーション規則に関する規則精錬を与えた。これはコンパクトな記述から、環境に依存するグローバルな記述への変換を与えるものであり、規則抽象化と対称をなすものである。 意味論での指標(時間発展を与える遷移行列の Perron-Frobenius 根)が精錬化によって保存されていることを通じて、コンパクトな記述の十分性を示した。規則精錬化と規則抽象化の双対なペアーに関して不変となる何らかの具体的な意味の構成が言語のコンパクト性の基準になることを提案した。

3． 今後の展開

（プロセス計算の確率的離散的な意味論としてのマスター方程式モデル）

2で特殊な例に関して構成された計算言語の Markov 分岐過程意味論は、より一般的には、生化学反応のモデルとして知られる化学マスター方程式によって与えられる。これを言語の意味論として捉える研究が最近はじまったばかりである。 マスター方程式が記述する時間発展が定常状態をもつことと、計算体系の停止性や合流性の理論関連が与えられることが期待される。

さらに上記研究テーマ2で示された構文論的操作に関する不変なモデルは、より一般的な細胞内遺伝子ネットワークを記述する確率プロセス計算に適用できるであろう。このことを化学反応ネットワークの研究で知られており、くしくも情報論理学との相性のよい、一次反応ネットワークの形態のみにより決る平均や分散を特徴づける指標を用いて試みる。並行して起こる相互作用を計算として捉える確率プロセス計算とマスター方程式意味論の間の情報論理学視点が提供する基本的な対応に基づいて、規則精錬に関して不変な性質を得ることを準備している。

（マルチレヴェルモデリング）

プロセスやコンポーネントの間の相互作用から、いかに生物的機能が出現するのかを捉えることができたκのコンパクトな記述であったが、生物システムを理解するためには、 逆向きで相補的な分析"全体の機能がいかに相互作用に制約を加えるのかを"おこなわなければならない。これは例えば、細胞と組織の間の相補的な関系"創発と調整"に見られる。このためにマルチレヴェルモデリングへの拡張が求められる。この最も本質となる構造(reciprocity)は情報論理学の基本手法である圏論を用いた随伴性によって抽出できるであろう。

4.　自己評価

報告研究のねらいの具体例としての根拠であったRNA干渉に関しては、情報論理学が提供できる興味ある分析ができたと思う。一方研究のねらいが、研究手法を示す漠然と広いものであったため、当初の研究テーマに関しては未到達のものが多かった。従ってその他様々ある豊富な生物現象に関しての分析は不十分であり、理論情報科学から、豊富な例の宝庫である生物の具体例に切り込んでいく難しさを痛感した。特に何が越境する分野で問題になっているかの咀嚼が不十分なまま展開にいたらないテーマもあった。

論理学への連続化（微分可能λ計算）を用いたモデルはまったく手つかずに未解決に残された。確率離散意味論の熱力学的極限として得られる連続で決定論的な反応速度方程式に対する言語の解明が求まれる。

新パラダイムの中で最も本質的である計算に対する動的モデルは、当初、生物学で用いられるフィードバックが、モノイダル圏でのトレースや相互作用の幾何によって捉えられるのではないかと計画しその基礎となりうる理論を発展させたが（投稿中）、非常にプリミティブな意味論であるペトリネットで知られるモノイダル構造でさえどのように確率的に拡張できるのかが未解決であった。このためには、上記3の新しい意味論での計算論のアナロジーをより発展させる必要がある。

さらに生物でのフィードバックを解析するためにはデジタルな計算理論のみならず、当初計画では想定外だったアナログコンピューテーションなどとの関連も射程にいれなければならなくその深淵さを実感できた。

5.　研究総括の見解

具体的な生化学相互作用である、RNA 干渉に対して、従来は計量的な定式化によって分析されることが主であった生物現象の複雑系システムの解明を計算論理学の立場から構造的に行おうとする新たな試みであり、さきがけ研究としてふさわしい。最初のテーマ「RNA 干渉の計算構造の解明」においては RNA 干渉が持つデジタルな構造に注目し、とくにフィードバックを備えたものとして知られる再帰的 RNA 干渉を考えた。siRNA が命令の抑制として働きエラーを確率的に阻止することに注意し、 Minsky 機械の停止性とRNA 干渉の確率的な停止性の関連を考慮すれば再帰的 RNA 干渉の確率的な Turing 完全性を示し得ることは極めて興味深い。

プロセス間の通信を計算として捉える新しい計算観は’00 年代の始めに、多数の因子が絡み合う細胞内相互作用の記述を可能とした。この流れをうけ浜野氏は Kohn の分子相互作用マップ記述のために Danos らによって開発されたκ計算を、従来の相互作用などとは本質的に異なる生物現象(ヌクレオチドや核酸の間のリン酸結合や水素結合や Watson-Crick 相補性を基本単位とする相互作用)に応用し、相互作用のチャネルのパターンの組み合わせによる内側からのきめ細かい直接的な記述が可能であることを示した。また記述言語の構文論(シンタックス)と意味論(セマンティクス)の対応を RNA 干渉に具体的に構成することにより、プロセス計算の利点”何故コンパクトな記述で十分なのか?” に対する答えの根拠を規則精錬に関する意味論の不変性で捉えることに成功した。これらを化学マスター方程式や一般的な細胞内遺伝子ネットワークを記述する確率プロセス計算に拡張できるとそのインパクトは大きいと思われ、今後の発展が期待される。最後に浜野氏が今後の展開で述べている生命システムの最も本質となる構造(reciprocity)は情報論理学の基本手法である圏論を用いた随伴性によって抽出できるであろうと述べている

点は注目していきたい。

6.　主な研究成果リスト

論文(原著論文)発表

1. Masahiro Hamano, “RNA interference and Register Machines”, In Proc. of 6th Workshop on Membrane Computing and Biologically Inspired Process Calculi (MecBIC2012 Electronic Proceedings in Theoretical Computer Science 100, (2012), 107-112
2. Masahiro Hamano, “Sustainability of RNA-interference in Rule Based Modelling'', In Proc. of the Third International Workshop on Static Analysis and Systems Biology (SASB 2012), Electronic Notes in Theoretical Computer Science, Elsevier (2013), 15pages, To appear.

(2)特許出願

なし

(1)その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

(学会発表)

1. ″Kinetic simulations of RNA-interference: primer dependent and independent synthesis of dsRNA″,　日本バイオインフォマティクス学会年会　神戸　Nov. 2011

2. ″RNA interference and Register Machines″, MecBIC2012, Newcastle upon Tyne, UK,　Sep. 2012

3. ``Sustainability of RNA interference in Rule Based Modelling ″, SASB 2012, Deauville, France, Sep. 2012

研　究　報　告　書

「力学系における不安定対称解の探査と制御の新展開」

研究タイプ：通常型
研究期間： 平成 21 年 10 月～平成 25 年 3 月
研 究 者： 水口　毅

1．　研究のねらい

本研究のねらいは，理学・工学の様々な分野において現象の記述や制御の基礎となる力学系の不安定解に注目し，不安定解を探査し制御する方法を開発することである．元来，不安定解とはその名称通り不安定であり，初期条件をその直上にとればそこにとどまるが，擾乱を加えればその擾乱が微小であっても解から離れてしまう．このため，熱揺らぎなど何らかの擾乱が常に存在するような現実の系において，不安定解を見いだすことはほとんどない．しかし，制御問題やカオス・乱流現象の解明など様々な場面で不安定解はその姿を垣間見せ，その役割は決して小さくない．特にストレンジアトラクタの中に埋め込まれた不安定周期解や多重安定系のベイスン上にある不安定解はその力学系の振る舞いを理解する上で重要である．

こうした中で，我々は時系列解析およびフィードバックという互いに関連する二種類の手法によって，初期条件の設定が困難な実験系に対しても適用可能な不安定対称解の探査及び制御の方法の開発をめざした．この方法は，系の持つ対称性に着目することによって不安定解を分類し，それぞれの対称性を有する解を選択的に探査することを可能にする．この方法を様々な系に適用することで不安定対称解の探査を行い，制御する手段の開発をめざす（テーマ A）．同時に，力学系の相空間の構造を解明する上で不安定対称解が果たす役割を追求する（テーマ B）．

テーマ A では，注目する対称性に対応した変換の像との距離が重要であり，それを調べることで，不安定対称解への接近を特徴づけられることを示した．対称性の種類は自律系に対する時間推進対称性以外にも，複数の同一要素からなる系に対する要素の交換対称性や，空間的に広がった系に対する空間並進対称性や反転対称性などが考えられる．これらの基本的な対称性を組み合わせることで様々な種類の対称解が考えられる．

テーマ B では，多重安定な力学系に着目した．多重安定な系にはベイスンーすなわち複数ある安定状態のそれぞれに吸引される領域ーが存在しており，ベイスンもしくはその境界が相空間の構造を大雑把に特徴づけている．我々は，このベイスン境界上に存在する特定の不安定解に注目した．このような不安定解はその安定多様体がベイスン境界になっているという意味で，相空間構造とその変化を解析する際に重要となることを示した．

2．　研究成果

（1）概要

力学系の解には安定性，トポロジー，対称性など様々な性質があり，それらによって分類することができる．なかでも不安定解はその不安定性のために，観測・実現することが容易ではない．しかしながら，倒立振子の不安定固定点や惑星間輸送ネットワークの不安定周期軌道などの例に見られるように，不安定解は制御問題での重要な目標状態でありうる．また，乱流・カオス系での相関関数やスペクトルなどの統計的性質を解明する上でも重要な役割を果

たしている．さらに，多重安定系では，不安定解が相空間のベイスンやフローの構造を特徴づけることもある．このように様々な状況において不安定解の探査方法を確立することの意義は大きい．

本研究では特に系が対称性を有する場合に着眼し，まず対称性による不安定解の分類と選択的な探査に焦点をおいた（研究テーマ A）．対称性は力学系の最も基本的な性質の一つであり，解もそれを満たすか否かで分類される．さらに，対称性の自発的な破れや回復は相空間の構造変化を特徴づける重要な現象である．この時，解の数や安定性などの定性的な変化はいわゆる分岐を引き起こすが，不安定対称解に着目することで分岐点近傍での対称性の回復過程が特徴づけられることを示した（研究テーマ B）．

（2）詳細

研究テーマ A「不安定対称解の探査と制御」

不安定解の探査においては様々な研究がすでになされている．特に，初期条件制御が可能な力学系であれば，ニュートン法とその発展にあたる一連の方法は非常に強力であり，本研究でも得られた結果を検証するためのツールとして用いられた（後述するベイスン境界上に制限したダイナミクスをトレースするために，初期条件制御が必要不可欠な PIM トリプル方法の一種が用いられている）．しかし，初期条件の制御が困難な場合，これらの方法を適用することはできない．このような場合においても適用可能な方法には，大別して時系列解析を用いた方法とフィードバックを用いた方法がある．これらの方法は特にリミットサイクルの探査に対して有効である．本研究では，ラスロップによって導入された時系列解析の手法をもとに，一般化した方法を提案した．ラスロップの方法は，カオス系にてある時刻の状態と遅延時間 τ だけ過去の状態との距離 d を長時間測定し続け，距離 d が小さくなったときの状態が周期 τ の不安定周期解に近づいたと判断している．図1の実（赤）線はこの方法をローレンツ方程式の時系列に適用したもので，深い谷（a～d 等）の位置がストレンジアトラクタに埋め込まれた不安定周期解の周期をよく表している（p1～p4 は不安定固定点に対応し，a2 は a の二巻きに対応している）．ローレンツ方程式が自律系である，すなわち時間推進対称性を満たしていることに注意すると，遅延時間 τ だけ過去の状態とは時間推進という変換の像に他ならない．つまり，ラスロップの方法は系が有する対称性に対応した変換の像との距離を測定せよと解釈することができ，系が他の対称性を有する場合に一般化することができる．例えばローレンツ方程式が満たすもう一つの対称性（軸対称性）と時間推進の組み合わせに対して距離を定義し測定したのが図１の破（緑）線である．その谷（a，c）は軸対称な不安定周期解だけを選択的に探査している（論文1）．

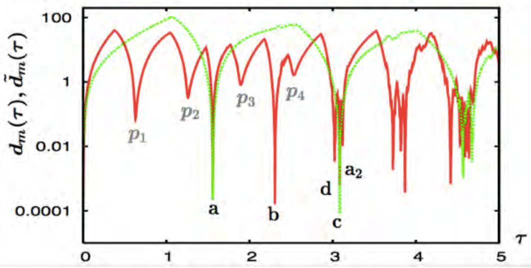


図1：ラスロップの方法及びその拡張によるローレンツ方程式の不安定周期解の探査例．横軸は遅延時間，縦軸は距離．実（赤）線はラスロップの方法．破（緑）線は軸対称性を組み合わせたもの．

この一般化は様々な対称性に拡張可能である．例えば，系が複数の同一要素から構成されていれば，要素の交換対称性が成立する（論文2）．また，空間的に広がった系で空間並進対称性や空間反転対称性が満たされている場合には，それらの組み合わせで時間的周期か

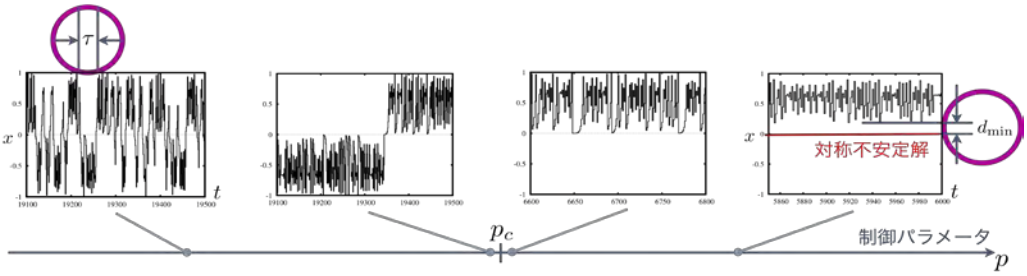


図2：アトラクタマージングクライシスの分岐点近傍での典型的な挙動と予兆．制御パラメータ p=pc で分岐が起きる．p<pc で対称性は保たれており，p>pc で対称性は破れている．四つのグラフは時系列の典型例であり，カオス的な挙動を保ちながら，pc で x=0 に対する反転対称性の破れもしくは回復が起こる．p<pc から分岐点に近づく場合は間欠的な振る舞いで対称性の破れが予兆される．これに対し，p>pc から分岐点に近づく場合，不安定対称解（x=0）への接近が対称性の回復を予兆する．

つ空間的偶（あるいは奇）関数や，時間推進と空間並進を組み合わせた変換に対して不変な相対的周期関数など様々なクラスの対称解が存在しうる．実際，蔵本・シバシンスキー方程式や複素ギンツブルグ・ランダウ方程式では時空間的なカオス状態の中にこれらの不安定対称解が埋め込まれていることが報告されている．

我々はさらに対称トーラスの場合に注目した．トーラス解ではその準周期性により，適切な遅延時間が存在しない．しかしながら，対称トーラスの場合には互いに対称なポアンカレ断面対をとることで不安定解との距離が測定できることを示した（論文２）．

研究テーマＢ「相空間構造の解明」

多重安定な系では，ベイスン―すなわちそれぞれのアトラクタに吸引される初期条件集合―とその境界によって相空間の構造が特徴づけられる．系が対称性を有する場合，自発的な対称性の破れや回復を伴う構造変化は解の数や安定性の変化と密接に関連づけることができる．本研究では特に，カオス的な振る舞いを保ちながら系の対称性が統計的に破れる（あるいは回復する）という特徴を持つことで知られるアトラクタマージングクライシスという分岐現象に着目した．対称性が保たれた側から分岐点へ近づく場合，間欠性すなわちバースト間時間の発散という形で分岐が予兆されることは知られている（図２参照．分岐点 pc に左から接近するにつれて，バースト間時間 τ が長くなり，pc で発散する．その発散はパラメータのずれに対してべき的に依存することが多い）．我々は，対称性が破れた側から分岐点に近づいた場合に，対称不安定解が重要な役割を果たすことを示した．対称なベイスンの境界上にはマージング解（以下，Ｍ解）と呼

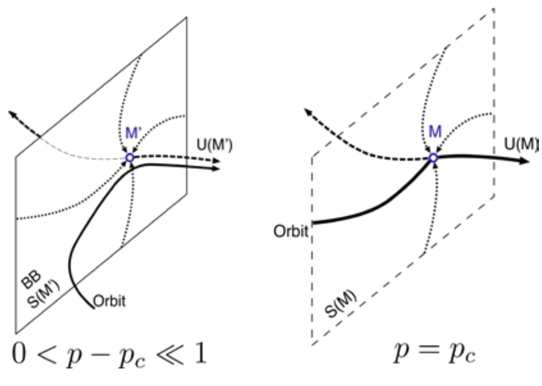


図 3：アトラクタマージングクライシスの分岐点近傍でのダイナミクスとマージング解．（左）対称性が破れた側の分岐点近傍の相空間の模式図．BB はベイスン境界．S(M'), U(M')はそれぞれマージング解 M'の安定多様体と不安定多様体．S(M')はベイスン境界と一致している．M'解はベイスン境界上に制限したダイナミクスのアトラクタである．軌道(Orbit)の最も外側の部分が M'の近傍を通る．（右）分岐点直上での相空間の様子．軌道が M 解に接触し対称性が回復される．このとき，軌道と M 解との距離もゼロとなる．

ばれる特定の不安定対称解があり，分岐点直上でストレンジアトラクタのもっとも外側の軌道がその不安定対称解に接触すると考えられる（図3）．このＭ解への接近によって対称性の回復が予兆される．Ｍ 解には固定点・周期解・トーラスなど様々なタイプが存在する．我々はそれぞれのタイプを実現する例を示し，テーマ Ａ によって得られた不安定対称解の探査方法を適用することで対称性の回復過程を特徴づけることに成功した（論文2）．特に，時間的な周期性が無いトーラスに対しても，適用できるという特長を持つ．まず， PIMトリプル法の一種を用いてベイスン境界に限定したダイナミクスをトレースし，そのアトラクタであるＭ解がトーラスであることを数値的に示した．しかし，この方法は初期条件の制御が必要な反復法の一種であり，実験・観測では実施困難である．我々は，初期条件制御が不要な方法として，互いに対称なポアンカレ断面対をとることで不安定対称解との距離を測定可能にした．この方法で Ｍ解が対称トーラスであることを確認し，同時に対称性の回復の予兆を捉えることに成功した（論文2）．

また，ベイスンの数が多い場合の不安定対称解の分布と相空間の構造の関係を調べるための準備として，ベイスン数を増やすことができるモデルを構成した．内部状態を有する同一種類の要素の集団に対し，各要素をなんらかの抑制因子によって相互作用させることで，要素を異なる内部状態の集団に分けることが可能である（論文3）．このような系では異なる内部状態を持つ要素数比が一定の範囲で存在することから，ベイスン数が要素数のオーダーで増加する．

また，名前のサイズと頻度を実測し，その分布が希少な領域でべき的な傾向を示すことを見いだした．ネットワーク上でユール過程と排他原理の効果を取り入れたモデルが分布のべき的傾向を定量的に再現することを示した（論文4）．分布関数は同じであっても系は多重安定である．これらの系の相空間構造と時間発展を調べることは今後の課題である．

3．　今後の展開

（1）制御による対称トーラスの安定化

着目する対称性に対応する変換の像との差に，ゲインと呼ばれる増幅係数を掛け元々の方程式に加えることでフィードバック項とすることができる．これはピラガスによって提唱された遅延フィードバックの一般化である．しかし，対称トーラスの場合，その準周期性から時間推進対称性が存在せず，上記の方法は適用できない．今回我々が提案したポアンカレ断面対をとる方法では，対称トーラスの安定化が期待できる．近年，時間推進および空間並進対称性を満たす偏微分方程式の相対的周期解が注目されているが，それらは本質的に対称トーラスであり，その探査に本方法が有効であると思われる．

（2）抑制型の大域結合系では，各要素が異なる内部状態に分かれ，各状態の要素数比が有限の範囲の値をとりうる．その結果，要素数のオーダーの状態が多重安定に存在することが，予備的な研究で確認されている．このようにベイスン構造が細かく分かれた系での不安定対称解の分布と相空間構造の関係を調べる．

（3）相空間構造を明確化するという目的において，不安定対称解を用いる方法は，対称性を有する系でなければ適用できない．より対称性の低い系にも適用できる有効な手段として，時系列解析を用いた系のダイナミクスの推定に着手した．一般に散逸力学系の時系列は初期条件の影響が残っている緩和過程とアトラクタに吸引された後の定常過程に分離することができる．

時系列から系のダイナミクスに関する情報を抽出することを考えた場合，緩和過程には定常過程にない情報が含まれている．比較的簡単なモデル方程式から生成したデータを使った結果，データの質と量が十分な場合，時系列データから元の方程式を推定することが可能であることが示された．その場合，過渡過程のデータが重要になる．実際の実験あるいは観測データでは，観測量の数や長さ，ノイズなどの様々な要因によって困難になることが予想される．しかし，たとえば局在構造の衝突現象といった数値モデルから得られるオーダーパラメータの非自明な挙動などは，比較的取り組みやすい問題であると考えられる．生物の動的挙動などの実測データに関しても取り組みたい．

4．　自己評価

テーマ A の不安定対称解の探査に関して，対称トーラスの探査法は偏微分方程式などへの応用も期待できるという意味で評価できる．しかし，空間的に広がった系での様々な対称解の探査およびフィードバックを用いた制御に関しては十分な追求ができず，今後の課題として残されている．テーマＢに関しては対称性の回復過程という相空間の構造変化を捉えることができた部分は評価できる．多安定状態系の解析に関してはこれからである．また，時系列解析によるダイナミクスの推定はその端緒についた段階であり，今後の発展が期待される．他の分野との協働という観点から考えると，基礎的なツールの開発にとどまり，具体的なデータを共有して解析するというところまで進めなかったという意味で追求不足であった．

5．　研究総括の見解

理学・工学の分野における様々な現象においてその不安定解に注目し、それを軸に記述し、制御するという視点は複雑に遷移するダイナミクスを対象にする場合の非常に有効な視点である。

水口氏は対称性の観点から不安定解の探査、分類を行い、制御する手段の開発をめざす課題および力学系の相空間の構造を解明する上で不安定対称解が果たす役割を考察するという課題の2つをテーマに掲げ研究を推進した。前者の不安定解の探査においては、初期条件の制御が困難な場合でも適用可能な方法には、時系列解析を用いた方法とフィードバックを用いた方法があり、水口氏はラスロップによって導入された時系列解析の手法をより一般化した方法を提案した。その思想は系が有する対称性に対応した変換の像との距離を測定せよと解釈することができ、系が他の対称性を有する場合に一般化することに成功し、多くの系において不安定解の探査と分類に有用な方法論を与えたことは高く評価できる。後者の相空間構造の解明ではカオス的な振る舞いを保ちながら系の対称性が統計的に破れる（あるいは回復する）という特徴を持つアトラクタマージングクライシスという分岐現象に着目し、とくに対称性が破れた側から分岐点に近づいた場合に、対称不安定解が重要な役割を果たすことを示したことは重要な発見である。実際、対称なベイスンの境界上にはマージング解（以下、M 解）と呼ばれる特定の不安定対称解があり、これが対称性の回復の予兆等に重要な役割を果たすことが明らかにされた。水口氏の仕事は数理の視点の面白さが出ていると言える。今後この視点の有効性はさらに拡大すると思われる。

6. 主な研究成果リスト

(1)論文(原著論文)発表

1. Y. Morita, N. Fujiwara, M. U. Kobayashi, T. Mizuguchi. "Scytale Decodes Chaos: A Method for Estimating Unstable Symmetric Solutions". CHAOS. 2010. vol 20. 013126-1-6
2. T. Mizuguchi, M. Yomosa, N. Fujiwara, M. U. Kobayashi. "A Detection Method of Symmetry Restoration Process of Attractor Merging Crisis". The European Physical Journal B. 2012. vol 85. 230-237
3. T. Mizuguchi, K. Sugawara, T. Kazama, "Task Allocation in Multistate Systems". Journal of Advanced Computational Intelligence and Intelligent Informatics. 2010. vol 14. 574-580
4. R. Hayakawa, Y. Fukuoka, T. Mizuguchi, "Size Frequency Distribution of Japanese Given Name". Journal of the Physical Society of Japan. 2012. vol 81. 094001-1-5

(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、プレスリリース等)

学会発表

1. T. Mizuguchi, "Symmetry restoration process in attractor merging crisis", Japan Slovenia Seminar on Nonlinear Science Kansai 2010 (Sakai, Japan, November, 2010)
2. T. Mizuguchi, "Symmetry restoration process and unstable symmetric tori", Far-from Equilibrium Dynamics 2011 (Kyoto, Japan, January, 2011)
3. T. Mizuguchi, M. Yomosa, N. Fujiwara, M. U. Kobayashi, "Role of unstable symmetric solutions in symmetry restoring processes.", Dynamics Days Europe 2011 (Oldenburg Germany, September, 2011)
4. T. Mizuguchi, "Estimation of dynamics focusing on a transient process", Frontiers in Dynamical Systems and Topology, (Kyoto, Japan, November 2011)

研　究　報　告　書

「非線形放物型方程式の解の爆発とその応用」

研究タイプ：通常型
研究期間： 平成 21 年 10 月～平成 25 年 3 月
研 究 者： 溝口　紀子

1．研究のねらい

非線形関数方程式論は解析学だけでなく幾何学や代数学の手法も取り入れながら発展してきた。また、実際に自然現象や社会現象を記述している非線形微分方程式も多く、数学以外の分野とも関連している。関数方程式論では有限時間における解の爆発は非線形問題に特有の現象であり、1960 年代に始まってから世界中で多くの数学者に研究され中心的な研究分野のひとつとなっている。数学では、偏微分方程式や偏微方程式系の解の時刻ｔでの空間的な最大値M(t)がｔがある時刻Ｔに近づくと無限大に発散するとき、解は時刻Ｔで爆発すると定義される。数学における爆発は、例えば、物質の燃焼のモデルでは発火に対応し、生物モデルでは細胞がある時間内にある場所に集中してその密度が測定不能なほど大きくなる事象に対応する。他にも多くの自然現象や社会現象で、（実際に数値が無限大になることはないが）実験や観測である時刻で数値が非常に大きくなることはあり得る。

このような現象を数学的な爆発と捉えることができれば、実験や観測から得られた混沌としたデータから数学的な手法を用いて論理的な側面からのより系統的かつ効率的な解析や予測が可能になるのではないかと考えられる。あるいは、実際に起きている現象は、数学的には有限時間で爆発する解に非常に近い解とみなせば、数値は無限大にならないが特異性に近い現象は説明できる。一方、数理生物学などからは数学の問題として見ても非常に興味深くその時点の数学では証明するのが困難な問題が数多く提供されてきた。この研究では、数学における爆発に関する結果や研究方法を他分野で実際に見られる現象に応用するだけでなく、他分野の問題から、それを解決するために新たに数学の理論や手法を開発することが必要となるような興味深い問題を発見するための糸口を探る。

2．研究成果

（1）概要

半線形熱方程式 $u_t = \Delta u + u^p$ （ただし、冪ｐは１より大きい定数とする）の解の性質を調べた。これは藤田方程式ともよばれる。藤田宏氏が 1960 年代にこの方程式を導入し、有限時間で爆発する解の存在を初めて証明して以来、この偏微分方程式は非線形放物型方程式の中でも集中的に研究されてきたもののひとつである。非線形項 u^p を関数 $f(u)$で置き換えるとより一般的な $u_t = \Delta u + f(u)$ となる。爆発問題を考える場合は u が非常に大きいときの $f(u)$ の値が重要なので、$f(u) \sim u^p$（u が大きいときのオーダーが等しいことを示す）ならば u^p の場合の結果から予測することができるという理由から、藤田方程式を研究することは重要である。本研究では、藤田方程式をはじめとして関連する偏微分方程式のさまざまな

解の挙動について調べた。

また、生物学から発生した数学的にも興味深い問題として次の偏微分方程式系がある:

$$(C)\ \begin{cases} u_t = \Delta u - \nabla(u\nabla v), \\ \gamma v_t = \ \Delta v - \mu v + u. \end{cases}$$

ただし、γ とμ はそれぞれ正の定数、非負の定数とし、空間次元は2とする。これは細胞性粘菌の集中現象を記述するモデルとして 1970 年に Keller と Segel によって提唱された。ここで、u は粘菌の密度を、v は化学物質の濃度を表している。粘菌が自ら生成する化学物質に向かって動く様子を表しているので走化性方程式系または Keller-Segel システムとよばれている。本来のシステムでは係数 γ は正の定数であるが、数学的にそれを研究するのは非常に困難だったので、 $\gamma = 0$ とした単純化されたシステム

$$(SC)\ \begin{cases} u_t = \Delta u - \nabla(u\nabla v), \\ \ 0 = \Delta v - \ \mu v + u \end{cases}$$

が導入され、これについては既に多くの論文が発表されている。本研究では、単純化されたシステム(SC)について、これまで他の多くの数学者がとってきたのとは異なる観点から爆発解の詳細な振る舞いを明らかにした。

本来のシステム(C)でも時間大域的に存在する解についてはだんだん分かってきた。しかし、爆発については特別な方法で構成されたひとつの解はあるが、「爆発はどの程度頻繁に起きるのか」という基本的な疑問に数学的に答えることができず、それは走化性方程式系における最大の未解決問題となってきた。本研究では、球対称解に対してその未解決問題を解いた。

(2)詳細

半線形放物型方程式

関数 $u\,(x,t),\ x = (x_1, x_2, \cdots, x_N)$ に対して、$\frac{\partial\, u}{\partial\, t}$ は u の t に関する偏導関数を、$\frac{\partial^2\, u}{\partial\, x_i^2}$ は u の x_i に関する2階偏導関数を表し、

$$u_t = \frac{\partial\, u}{\partial\, t}, \qquad \Delta\, u = \frac{\partial^2\, u}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2\, u}{\partial\, x_2^2} + \cdots + \frac{\partial^2\, u}{\partial\, x_N^2}$$

とする。藤田方程式とよばれる半線形拡散方程式$u_t = \ \Delta u + u^p$ (ただし、冪 p は 1 より大きい定数とする) に対して、エネルギーを定義することができ、エネルギーが時間に関して増加しないことは分かっている。その性質をもとにして、「初期エネルギーが負ならば、解は有限時間で爆発する」ことは既に証明されている。しかし、初期エネルギーが正の場合は複雑で、他の方程式(波動方程式など)でも重要な役割を果たす Nehari 関数を用いて研究されてきた。本研究では、解の爆発とは無関係に見える「Nehari 多様体(Nehari 関数を用いて定義される)と定常解の安定多様体が横断的に交わる」という無限次元力学系的な結果を証明することによって、藤田方程式の解の爆発に関する代表的な未解決問題のひとつを解決した([1])。 他に、藤田方程式に移流項を加えた偏微分方程式についても研究したが、これは次の走化性方程式系と密接に関連しているのでそこで述べる。

走化性方程式系

1970 年に Keller と Segel は細胞性粘菌の集中現象を記述するモデルとして偏微分方程式

系

$$(C)\ \begin{cases} u_t = \Delta u - \nabla(u\nabla v), \\ \gamma v_t = \ \Delta v - \mu v + u \end{cases}$$

を提唱した。ただし、γ は正の定数、 μ は非負の定数とする。$x = (x_1, x_2, \cdots, x_N)$ の関数 $f\,(x)$ の勾配は

$$\nabla f = \ \left(\frac{\partial f}{\partial x_1},\ \frac{\partial f}{\partial x_2}, \cdots, \frac{\partial f}{\partial x_N}\ \right)$$

で定義される。u は粘菌の密度を、v は化学物質の濃度を表している。第2方程式から化学物質は粘菌自身から生成され、第1方程式から粘菌は化学物質の勾配の変化が大きいところに向かって動く様子を表しているので走化性方程式系(chemotaxis system)とよばれている。本来のシステムでは係数 γ は正の定数であるが、数学的にそれを研究するのは非常に困難だったので、 $\gamma = 0$ とした単純化されたシステム(simplified chemotaxis system)

$$(SC)\ \begin{cases} u_t = \Delta u - \nabla(u\nabla v), \\ \ 0 = \Delta v - \ \mu v + u \end{cases}$$

が導入された。本来のシステム(C)はともに放物型の方程式からなるが、単純化されたシステム(SC)では第2方程式が楕円型になっているので、方程式の基本的な型が違うことから両者の数学的扱いは全く異なる。実際、(SC)では、楕円型方程式の基本解を用いて v を u で表し、その式から ∇v を計算して第1方程式に代入すればシステムではなく単独の偏微分方程式になる。この単独の偏微分方程式に数学的な理論や手法を適用するというのが(SC)を研究するための主なシナリオである。このようにして(SC)については多くの論文が発表されている。さらに、球対称の場合は、次の偏微分方程式に帰着できる:

$$(RSC)\ \ w_t = w_{rr} + \frac{N+1}{r} w_r - r\,w\,w_r + N w^2\,.$$

ただし、r は原点からの距離で、N は空間次元である。Keller と Segel が提唱した実際の生物モデルでは $N = 2$ であるが、他の応用分野では $N \geq 3$ の場合もある。この偏微分方程式から移流項 $r\,w\,w_r$ を除けば球対称解に対する藤田方程式である。

これまで発表された（SC）の爆発解に関する論文での主要な結果は、爆発時刻に近づくと解はデルタ関数的な特異性をもつという粗い評価であった。本研究では、球対称解に対して、爆発の速度を特定し、それをもとにして爆発点の近くでの解の漸近挙動を決定した。また、空間次元が 3 以上の場合に、 type I の爆発をする(RSC)の解は爆発時刻に近づくと球対称な後方自己相似解に漸近することを証明した([2])。ここで、type I の爆発は対応する常微分方程式 $w_t = N\,w^2$ の解と同じ速度での爆発を、type II の爆発は type I より速い速度での爆発を表す。さらに、type II の爆発をする(RSC)の解の空間的な形状は藤田方程式の type II の爆発解とは全く異なることを証明し、移流項が本質的に影響することを示した([3])。

本来のシステム(C)でも、有界領域で Neumann 境界条件のもとでの時間大域解については(SC)と同様の数学的手法が適用できるが、全平面では無限遠方での減衰の扱いが異なる。したがって、初期値問題では時間大域解が存在するための条件が最適化されていなかった。本研究では、初期時刻で u の平面上での積分が 8π より小さいという条件のみで時間大域解の存在を証明することによってその条件を最良の形にした([4])。

一方、(C)の爆発解については「特別な方法で構成されたひとつの解以外に爆発解が存在するか」という基本的な問題が数学的には解けない状態のままで、走化性方程式系における最大の未解決問題となっていた。本研究では、球対称解に対して $L^p \times W^{1,2}$ $(p > 1)$ 内の少なくともひとつの球に含まれる初期値から出発する解は有限時間で爆発することを証明した。これによって、爆発解をあたえる初期値は無限次元あることが分かった。さらに、少し位相を弱めた空間 $L^p \times W^{1,q}$ $(p \in (0,1),\ q \in (1,2))$ では爆発解に対応する初期値は稠密に存在することを示した。これらの結果とその証明のために新しく導入された数学的手法によって本来のシステム(C)の爆発解に関する研究がやっと緒に就いたということができる。

3．　今後の展開

走化性方程式系の本来のシステムは放物型 － 放物型であるが、それを数学的に扱うのが困難だったので、放物型 － 楕円型の単純化されたシステムが導入された。Keller と Segel が 1970 年に生物モデルとして提唱して以来、この放物型 － 放物型のシステムの爆発についてはひとつの特別な解の構成以外は数学的な研究はされていなかった。すなわち、「爆発はどの程度頻繁に起こる現象なのか」という基本的な問題が長年未解決だった。本研究で新しい方法を開発して球対称解についてはこの未解決問題を肯定的に解いた。これによって数学的に扱う方法が導入されたので、これからは解が爆発する様子を調べることができる。また、今はまだ球対称解に限っているので　今後はその制限をはずして一般的な解へと研究を拡げていきたい。さらに、この放物型 － 放物型方程式系の解が爆発した後、どのような振る舞いをするかを調べたい。

走化性方程式系は細胞が化学物質に向かって移動するシステムであるが、細胞と化学物質を他のものに変えたシステムもあり得るだろう。今後は他の反応拡散系についても研究したい。

4．　自己評価

生物モデルから生まれた問題で世界的にも多くの数学者の興味を引いてきた長年の未解決問題を完全に解決するためのブレイクスルーを得ることができ、これから世界中で本格的かつ多面的にこの放物型 － 放物型のシステムの研究が行われるようになるだろう。また、ここで開発した数学的な方法は他の放物型 － 放物型の方程式系の研究にも役立つのではないかと思われる。実際の細胞性粘菌の集中現象をモデル化した方程式系が数学的にも非常に興味深い構造をもち、それを解明するために多く数学者によって数学的手法が開発され数学が進歩したという事実を見ると、応用と数学は深い意味で繋がっているという感想をもった。さきがけ研究期間に私自身が他分野の研究者と連携して結果を得ることはできなかったが、このさきがけ研究を通じて私自身の研究の視野は広がったと思う。単に今すでにある数学を他分野に応用するという連携ではなく、連携することによってもたらされた問題を解くために新しい数学的な理論や手法の開拓を求められ、それによって数学が発展するような連携を3年半という短期間で行うことはできなかったので、引き続きそれを模索することが私自身の今後の課題である。

5.　研究総括の見解

爆発問題はなんらかの意味で集中・凝集が起きる場合には、避けて通れない問題である。実際には値が無限にならなくとも、そう近似することで明確にある。溝口氏は藤田方程式およびKS-方程式に対し多くの貢献を成した。前者の藤田方程式に対しては、「Nehari 多様体（Nehari関数を用いて定義される）と定常解の安定多様体が横断的に交わる」という無限次元力学系的な結果を証明することによって、藤田方程式の解の爆発に関する大きな未解決問題のひとつを解決したことは評価に値する。また KS-方程式に対し、「爆発はどの程度頻繁に起きるのか」という基本的な疑問に対して、球対称解の範疇で爆発解をあたえる初期値は無限次元あることを厳密に示し、解決の扉を開いた寄与は大きい。今後は他分野研究者とも連携し、新たな数学の問題発掘にも貢献して欲しい。

6.　主な研究成果リスト

（1） 論文（原著論文）発表

1. F. Dickstein, N. Mizoguchi, Ph. Souplet and F. Weissler , Transversality of stable and Nehari manifolds for a semilinear heat equation, Calc. Var. Partial Differential Equations 42 (2011), 547-562.
2. Y. Giga, N. Mizoguchi and T. Senba, Asymptotic behavior of type I blowup solutions to a parabolic-elliptic system of drift-diffusion type, Arch. Rational Mech. Anal. 201 (2011), 549-573.
3. N. Mizoguchi and T. Senba, A sufficient condition for type I blowup in a parabolic-elliptic system, J. Differential Equations 250 (2011), 182-203.
4. Nonexistence of radial backward self-similar blowup solution with sign-change, Proc. Roy. Soc. Edinburgh Sect. 141A (2011), 825-834.
5. N. Mizoguchi, Global existence for the Cauchy problem of the parabolic-parabolic Keller-Segel system on the plane, Calc. Var. Partial Differential Equations (to appear).

（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、プレスリリース等）

学会発表：

1. Refined asymptotics of blowup solutions to a simplified chemotaxis system, Parabolic and Navier-Stokes equations, 2012.9.3, Banach Center, Poland.
2. 非線形拡散方程式の爆発解について, 広島大学談話会, 2011.12.20, 広島大学.
3. Transversality of stable and Nehari manifolds for a semilinear heat equation, RIMS 研究集会, 2011.6.6-8, 京都大学数理解析研究所.
4. Global existence of solutions to the Keller-Segel system, Nonlinear PDE Seminar, 2011.2.11, Univ. Paris 13, France.

5. On type II blowup solution for a parabolic-elliptic system, PDE Seminar, 2010.2.17, Univ. Autonoma de Madrid, Spain.

受賞: 第31回猿橋賞

プレスリリース等: 日経サイエンス 2012年2月号 フロントランナー 挑む 第12回「微分方程式の解は爆発しても消えない」