

情報統計力学の最前線-情報と揺らぎの制御の物理学を目指して-

有限次元スピングラスの理解に向けて ベータ近似とその発展

大関 真之

京都大学大学院情報学研究科 システム科学専攻

スピングラスというと、情報統計力学の基礎・発展には欠かせないキーワードである。レプリカ法から始まる平均場近似解析というスピングラス理論の雛形が、スピングラスの性質を理解しようという元々の目的達成を超えて、情報科学や学習理論、ニューラルネットワークを始めとする神経科学等への応用にまでその触手を伸ばしてきたのだ。

果たして、スピングラス理論そのものの発展の現状はいったいどうなっているのだろうか。

平均場近似によるスピングラスの描像が、有限次元の物質で起こる現象を正しく記述できているのかは未だ決着のついていない大問題である。そして有限次元のスピングラスを定量的に議論のできる決定的な手法についても不足しているのが現状である。そのような中でも、西森によるゲージ理論を糸口に理論的なアプローチは続き、2次元のスピングラスモデルの相転移の問題については解決へと向かい始めた [1, 2, 3, 4]。それでは2次元を超えた、それこそ現実の物質に対応した3次元ではどうだろうか？

本講演では、今一度平均場近似から空間依存性を取り入れたベータ近似を振り返り、その補正を更に考える事によって、有限次元スピングラスモデルの相転移の問題を取り扱った最近の研究を紹介する。基本となる理論形式は、文献 [5] にある、相関関数を用いる事によってベータ近似の補正を考えた。ベータ近似は、情報科学の文脈では信念伝播法 (Belief Propagation) という名前で、推定の反復アルゴリズムとして利用されている。空間構造を持つような情報科学上の問題も実際存在しており、その舞台での新しいアルゴリズムの提唱としても期待できる内容となっている。そして重要なのは、計算量とのトレードオフで、系統的に精度を上げることが出来る。

本研究は、ローマ大学 Ulisse Ferrari 氏、Tommaso Rizzo 氏、Giorgio Parisi 氏との共同研究である。

参考文献

- [1] H. Nishimori, Prog. Theor. Phys. **66**, 1169 (1981).
- [2] J.-M. Maillard, K. Nemoto, and H. Nishimori, J. Phys. A **36**, 9799 (2003).
- [3] M. Ohzeki, Phys. Rev. E **79** 021129 (2009).
- [4] M. Ohzeki and H. Nishimori, J. Phys. A: Math. Theor. **42**, 332001 (2009).
- [5] A. Montanari and T. Rizzo, J. Stat. Mech. P10011 (2005).

情報統計力学の最前線-情報と揺らぎの制御の物理学を目指して-

スピングラスの零点とカオス

小渕 智之

大阪大学理学研究科 宇宙地球科学専攻

統計力学において導入される確率モデルは、分配関数という母関数によって特徴づけられ、任意のモーメントが分配関数とその微分から計算される。統計力学的に興味ある状況は、確率変数（ここではスピンと呼ぶ）の数が無限大の極限（熱力学極限）、特にその極限において分配関数に特異性が現れる場合であるが、このような状況において分配関数を計算することは大抵容易では無い。従って統計力学的研究では、この特異点の性質を調べる事に大きな労力を割く。

このような特異点を調べる変わった方法として、分配関数の零点を調べるというものがある。分配関数は物理量（実パラメータ）の関数であり本来正值であるが、パラメータを複素数に拡張することにより、一般の複素数値が取れるようになる。このときの分配関数の零点を見ることが、熱力学極限での特異性の性質が理解できる-というのが、この零点による方法である。

本発表では、近年筆者らによって求められた、いくつかのスピングラス（SG）モデルにおける零点分布の振る舞いと、そこから引き出される物理的知見について紹介する。SG はスピン間相互作用がランダムな系であり、レプリカ対称性の破れ (RSB) や、パラメータの微小変化に対する異常応答（カオス効果）など、変わった振る舞いがあることが知られている。結果の例として、図 1 に $(p+r)$ -体相互作用球形 SG モデルの複素温度相図と零点密度を示す。このモデルでは、パラメータを調節することにより、RSB や温度カオスの有無を制御出来る。詳細な解析の結果、RSB は SG 相内部に零点が存在するための必要条件であり、十分条件では無いことが分かった。また、SG 相内の零点分布とカオス効果が密接に関わっていることが示唆された。カオス効果は自由エネルギーの特異性としては現れないので、この結果は零点の新たな物理的意義を提供している。講演では、この結果に加え、複素磁場の場合や虚軸周辺の零点の物理的意義を捉える試みについても議論したい。なお本研究は高橋和孝氏との共同研究である [1]。

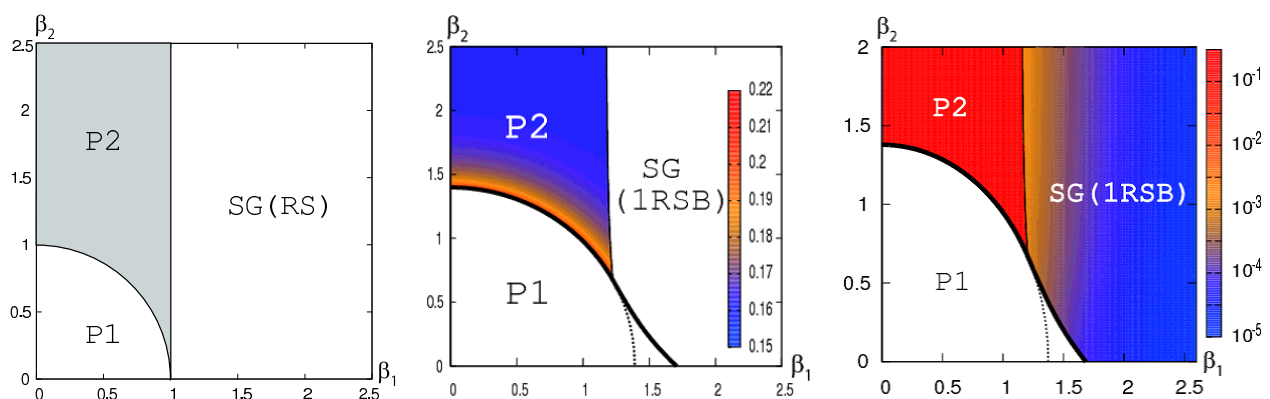


図 1: $(p+r)$ -体相互作用球形 SG モデルの複素温度 ($\beta = \beta_1 + i\beta_2$) 相図と零点密度。左から $(p, r) = (2, 0)$ (RSB 無、温度カオス無)、 $(p, r) = (3, 0)$ (RSB 有、温度カオス無)、 $(p, r) = (3, 4)$ (RSB 有、温度カオス有)。白抜き部は零点が存在しない。

[1]: T. Obuchi and K. Takahashi: arXiv:1110.0942 (To appear in *J. Phys. A*)

臨界現象に対するベイズ推定を用いたスケーリング解析手法

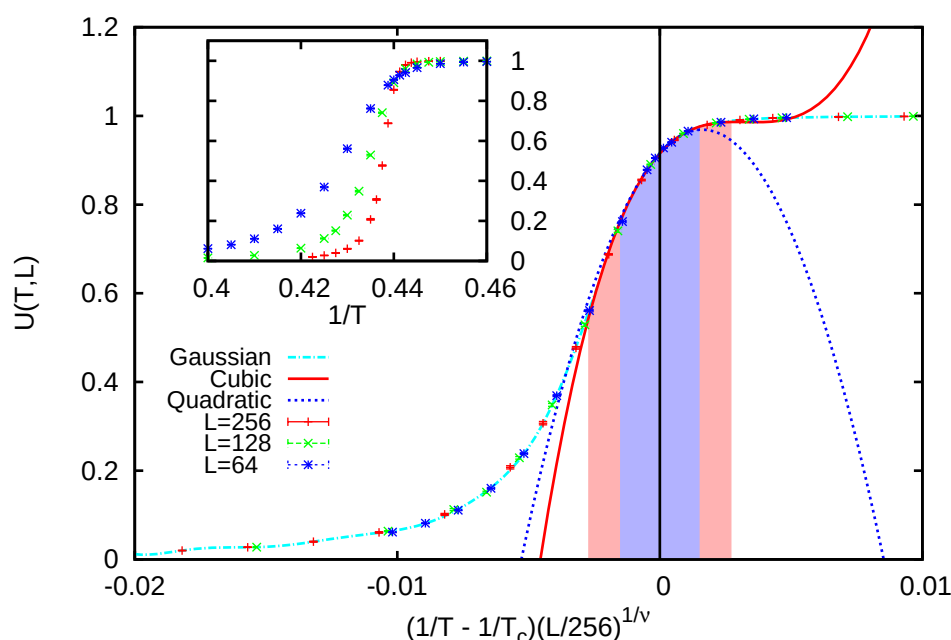
原田 健自

京都大学大学院情報学研究科

臨界現象はスケーリング則によって特徴づけられる現象であり、素粒子から社会現象まで、幅広い分野で現れる普遍的な現象である。

スケーリング則の検証はスケーリング解析と呼ばれ、従来、 χ^2 検定のような統計的検定をベースにして行われてきたがスケーリング関数の仮定を必要とするなど、多くの問題点があった。それらの問題点を解決するため、我々はベイズ推定をベースとしたスケーリング解析の為に新しい統計的手法を提案した [1]。特に、近年、複雑なデータ解析に用いられて成功を収めているガウス過程回帰を用いた解析手法を提案した。

我々の手法は、小数の (ハイパー) パラメータを用いるだけで、幅広いスケーリング則に適用可能である。具体的には、スケーリング関数をパラメトリックな関数に限定しないという特徴があり、臨界現象一般に適用可能である。講演では、2次元イジングモデルの臨界現象を例とし方法の詳細を述べる。¹



図：2次元イジングモデルの Binder パラメータの有限サイズスケーリング解析。ダッシュ線 (ライトブルー) は我々の手法、ソリッド (レッド) 線とドット (ブルー) 線は χ^2 検定による結果。Inset: 2次元イジングモデルの Binder パラメータ U 。 T は温度、 L はシステムサイズ。

[1] Kenji Harada, Physical Review E **84** (2011) 056704.

¹ この手法のための実行コードを含むツールキットの紹介も行う予定である。

情報統計力学の最前線-情報と揺らぎの制御の物理学を目指して-

情報統計力学による光計測技術へのアプローチ

雑賀洋平^A 上江洸達也^B

^A群馬高専 電子情報工学科, ^B奈良女子大学 理学部

近年, 統計力学とベイズ推論との類似性に着目して, 統計力学の領域で開発された技法が情報科学/工学の諸問題に応用され, 物理と情報を繋ぐ基盤が整備された. 現在では, 統計力学は通信工学, 量子情報など, 様々な領域に応用されるようになった.

光波計測の領域では干渉計を用いた計測技術が開発され, 望遠鏡技術, リモートセンシングを含む, 多くの問題に応用されてきた. このような技術では, 干渉計を用いて観測された干渉縞から取得した主値領域 $[-\pi, \pi]$ に限定される位相差から元の光波面を再構成する位相アンラッピング[1]が重要な課題となる. この問題にたいして, 最小自乗推定やベイズ推定をはじめとして多くの技法[2,3]が提案されてきた.

本研究では, 3 状態イジングモデルの統計力学にもとづいて, ベイズ推論にもとづく最大事後周辺確率 (MPM) 推定をもちいた位相アンラッピングの技法を構築する. ここでは, 典型的な光波面(図 1)を干渉計により計測された干渉縞(図 2)から得られる位相差の主値 $\{\tau^x(i,j)\}$ ($\tau^x(i,j)=-1,0,+1, i=1,\dots,L-1, j=1,\dots,L$)および $\{\tau^y(i,j)\}$ ($\tau^y(i,j)=-1,0,+1, i=1,\dots,L, j=1,\dots,L-1$)から元の光波面を再構成する. 正方格子上の 3 状態イジングモデル $\{S^x(i,j)\}$ ($S^x(i,j)=-1, 0, +1, i, j=1,\dots,L$) $\{S^y(i,j)\}$ ($S^y(i,j)=-1, 0, +1, i, j=1,\dots,L$)をもちいて, 事後周辺確率分布を最大化するように位相アンラッピングを行う. モンテカルロ法による性能評価を行い, 典型的な光波面(図 1)にたいして MPM 推定が有効なパラメタ領域(図 3)および動的性質を明らかにした. これより, 光波面についてのコンシステンシー条件下では, 広い温度領域において MPM 推定が有効であることを示した. また, 1 次元モデルにたいする系統的な性能評価を行った結果を併せて紹介する.

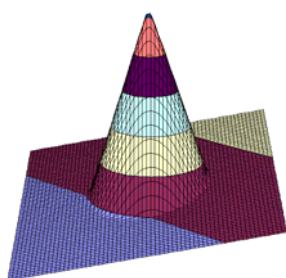


図 1. 光波面の典型例



図 2. 干渉縞

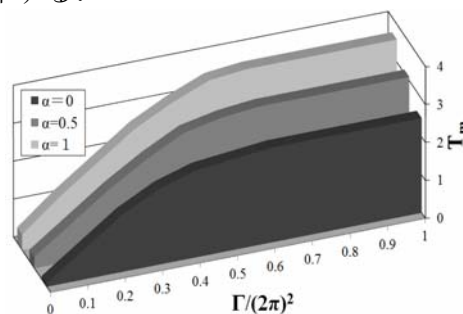


図 3. 相図

参考文献

- [1] D. L. Fried, JOSA, **67**, p. 370, 1977.
- [2] N. Nico, Palubinskas and M. Datcu, IEEE Trans. Signal Processing, **48**, p. 2545, 2000.
- [3] Y. Saika and H. Nishimori, PTP Supplement, **157**, p. 292, 2005.

情報統計力学の最前線-情報と揺らぎの制御の物理学を目指して-

Cavity 法による相互依存型ネットワークの解析

渡辺 駿介

東京工業大学大学院総合理工学研究科 知能システム科学専攻

ネットワークに関する研究は今まで数多くなされてきたが、そのほとんどが単一ネットワークに関するものであった。近年、新しいタイプのネットワークとして相互依存型ネットワークが研究されている[1]。これは2つの異なるネットワークが結合したシステムであり、各ネットワークのサイト(ノード)は1対1対応で、もう一方のネットワークのサイトと結合している。つまり片方のサイトが故障すれば、それと結合しているもう片方のサイトも故障する。この相互依存型ネットワークの特性によって、わずかなサイトの故障がネットワーク全体の壊滅的な故障(カスケード現象)につながる可能性がある。

ネットワーク全体として故障にどれくらい耐性を持つのかを調べる手法として統計力学におけるパーコレーション(浸透)の解析法が挙げられる。パーコレーションとは、サイトがシステム内でどのようにつながっているか、またその特徴がシステムにどのように反映しているかを対象とする理論である。各サイトがどれくらい互いに結合しているかを示す指標としてしばしば giant component(GC)が用いられる。GCはネットワーク内で互いに結合しているサイトで構成される最大の部分集合のことであり、その大きさは各サイトがGCに接続される確率の総和を全サイト数で除した比率で表される。

本研究では相互依存型ネットワークに対してランダムサイトアタックを行ったときの giant component(GC)の大きさを解析的、実験的に評価することで、破壊に強いネットワーク構造を検討する。実験的な手法としては実際にランダムネットワークをランダムグラフでモデル化して、ランダムサイトアタックを行うことでGCの大きさを測定する。解析的な手法としては cavity 法[2]を用いる。Cavity 法ではネットワークが局所的に tree 構造で近似できると仮定し、対象となるサイトを Cavity (空洞) とすることで、そのサイトと結合している周りのサイトたちがGCに属するかどうかに関して独立であるとみなすことができる。これによって、対象のサイトがGCに属しているかどうかを、それと結合する周りのサイトの情報のみで決定することができる。ランダムネットワークでは局所的な構造が不明であっても、次数が等しいサイトは同等の情報を持つと考えられるので、自己無撞着に cavity 場を決定することでサイトが全体のGCに含まれるかどうかを評価することが出来る。

参考文献

- [1]S. V. Buldrev, R. Parshani, G. Paul, H. E. Stanley and S. Havlin, Nature, 464(2010), pp. 1025-1028
- [2]Y. Shiraki, Y. Kabashima, Phys.Rev.E82,036101(2010),pp.984-985

情報統計力学の最前線-情報と揺らぎの制御の物理学を目指して-

1-Bit 圧縮センシングの統計力学的解析

許 インイン

東京工業大学 知能システム科学専攻

圧縮センシングとは、原信号がスパースである（ゼロ成分が多い）という仮定の下で、データを採取する段階において、圧縮した形で計測する方法である。こうした圧縮されたデータから元の情報を復元できるような計測方法と復元方法が現在広く研究されている。

圧縮センシングの研究では、圧縮されたデータは任意の精度の実数値であると仮定することが多い。しかしながら、通信量や記憶量などの制約のある現実的な状況では、圧縮された表現をデータサイズの大きい実数値ではなく、離散的な量子化データに変換したほうが有利になる場面も想定される。1-Bit 圧縮センシング[1]とは、ハードウェアでの実現を念頭に置き、圧縮された表現の量子化まで考慮した圧縮センシングの枠組みである。1-Bit 圧縮センシングでは、元の情報を計測した際の各成分の符号（プラスかマイナスか）の情報のみを用いて、元の情報を復元することを目指す。今回の研究では、レプリカ法により、1-Bit 圧縮センシングによって実現される性能を理論的に分析した。

1-Bit 圧縮センシングの数値モデルを以下のように作る。原信号はスパースであると仮定し、未知の N 次元の実ベクトル $\mathbf{x}$ とする。 $\mathbf{x}$ の成分のうちゼロでないものの割合をスパース率と呼び、 ρ で表す。観測過程としては、大きさ $M \times N$ の行列 $\mathbf{A}$ を用いて、 M 次元のバイナリデータ $\mathbf{y}$ が、

$$\mathbf{y} = \text{sign}(\mathbf{A}\mathbf{x}) \quad (1)$$

により得られると仮定する。ただし、(1) は $\mathbf{x}$ を任意の正整数によって定数倍しても不変なため、この条件のみからは $\mathbf{x}$ の大きさを決めることはできない。そこで、信号の規格化条件を $|\mathbf{x}|^2 = N$ とし、以下の方針によって信号を復元する。

$$\min |\mathbf{x}|_1 \quad \text{subj to} \quad \mathbf{y} = \text{sign}(\mathbf{A}\mathbf{x}) \quad \text{and} \quad |\mathbf{x}|^2 = N$$

レプリカ法による解析から、文献 [1] に示されている数値実験結果と整合する性能が得られた。このことは [1] で提案されている近似アルゴリズムが厳密解法と近い性能を備えていることを示唆している。

参考文献

- [1] Boufounos, P.T. and Baraniuk, R.G. Rice Univ, Houston, *1-Bit compressive sensing* Information Sciences and Systems, 2008. CISS 2008. 42nd Annual Conference on, pp.16-21, 10.1109/CISS.2008.4558487

反学習項を入れた Hopfield model の統計力学的研究

大谷 遥, 吉田 緑, 上江洩 達也

奈良女子大学大学院 人間文化研究科 物理科学専攻

夢の役割の1つは、記憶を整理することであるという説がある。つまり、夢を見ることによって不必要な記憶を削除するという説である [1][2]。これに関して、我々は重要な記憶を強化し、不必要な記憶を弱める方法を調べたい。そこで、我々は Hopfield モデル [3] の相互作用に、1つの混合状態からなる反学習項を付け加えたモデルを研究してきた。平衡状態の静的安定性と動的安定性の関係について報告し、反学習項を2つ入れた場合の研究についても報告する。

ハミルトニアンは以下の式で表される。

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} s_i s_j$$

ここで、反学習させた結合荷重 J_{ij} を $J_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\mu=1}^p \xi_i^\mu \xi_j^\mu - \frac{\eta}{N} \xi_i^{\text{mix}} \xi_j^{\text{mix}}$ 、混合状態 ξ_i^{mix} を $\xi_i^{\text{mix}} = \text{sgn}(\sum_{\mu=1}^3 \xi_i^\mu)$ とおいた。 η は反学習係数である。

平衡状態の静的安定性と動的安定性が一致することを数値計算で確認した。さらに $|\eta|$ を大きくしていくときの最初の不安定化が、静的及び動的に同時に起こることを理論的に示す。

さらに、反学習項を2つ入れた場合を調べた。2つ目の混合状態 $\xi_i^{\text{mix}2}$ を $\xi_i^{\text{mix}2} = \text{sgn}(\xi_i^1 + \xi_i^2 - \xi_i^3)$ とし、結合荷重 J'_{ij} を $J'_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\mu=1}^p \xi_i^\mu \xi_j^\mu - \frac{\eta}{N} \xi_i^{\text{mix}} \xi_j^{\text{mix}} - \frac{\zeta}{N} \xi_i^{\text{mix}2} \xi_j^{\text{mix}2}$ とおいた。ここで、 ζ は2つ目の反学習係数である。 $|\eta| = 0.5$ で、 ζ が小さい場合には反学習項が1つの場合と定性的には同じであることを確認した。以下にモンテカルロシミュレーションによる数値計算の結果を示す。ニューロン数を $N = 100,000$ とし、初期値を Mixed state としてシミュレーションを行った。縦軸はオーバーラップ $m^1, m^2, m^3, m^{\text{mix}}, m^{\text{mix}2}$ を表し、横軸はモンテカルロステップ数を表す。ここで、 $\zeta = 0.1$ のときの m^μ のシミュレーションの値を実線で、又、 $\zeta = 0$ のときの値を $\times$ で表す。 $\zeta = 0$ と $\zeta = 0.1$ の結果はほとんど一致している。

また、一般化についても調べた。結合荷重 J''_{ij} を $J''_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\mu} \zeta_\mu \xi_i^\mu \xi_j^\mu$ とおいた。全ての可能な混合状態は $\xi_i^4 = \text{sgn}(\xi_i^1 + \xi_i^2 + \xi_i^3)$ 、 $\xi_i^5 = \text{sgn}(\xi_i^1 + \xi_i^2 - \xi_i^3)$ 、 $\xi_i^6 = \text{sgn}(\xi_i^1 - \xi_i^2 + \xi_i^3)$ 、 $\xi_i^7 = \text{sgn}(\xi_i^1 - \xi_i^2 - \xi_i^3)$ の4つである。この全ての可能な混合状態を反学習する場合も、系の平衡状態は $m^1, m^2, m^3, m^{\text{mix}}$ の4変数で記述できる。

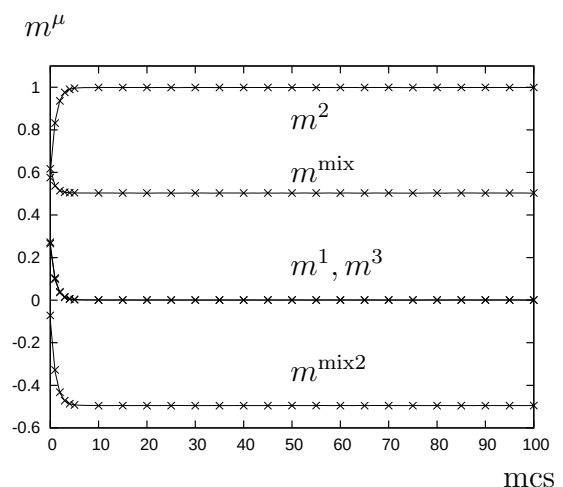


図 1: $T = 0.2, \eta = 0.5, \zeta = 0.1$, 初期値: Mixed state

- [1] F. C. Crick, G. Mitchison, “The function of dream sleep,” Nature, vol.304, pp.111-114, 1983.
- [2] J. J. Hopfield, D. I. Feinstein, R. G. Palmer, “‘Unlearning’ has a stabilizing effect in collective memories,” Nature, vol.304, pp.158-159, 1983.
- [3] J. J. Hopfield, “Neural Networks and Physical Systems with Emergent Collective Computational Abilities,” Proceedings of the National Academy of Sciences of USA, vol.79, pp.2554-2558, 1982.

情報統計力学の最前線-情報と揺らぎの制御の物理学を目指して-

表現型ゆらぎによる進化の促進

斉藤 稔

東京大学 総合文化研究科

生物の形質は遺伝子などに代表される遺伝的形質（遺伝型）と実際に現れてくる非遺伝的形質（表現型）に分けられる。この遺伝型 - 表現型の対応は必ずしも 1 対 1 ではなく、しばしば同じ遺伝型から異なる表現型が現れうる。このような現象を表現型の可塑性と呼ぶ。しかし次世代に継承可能な形質は基本的には遺伝型のみであるため、このような表現型可塑性は進化という文脈ではしばしば見落とされがちである。しかし表現型可塑性は進化過程に大きく寄与しうる。このような効果はボールドウィン効果と呼ばれている[1]。オリジナルのボールドウィン効果は一個体の環境に対する応答的な現象について扱ったものであるが、一方で完全に非応答的な表現型のゆらぎが集団の進化速度にどのような影響を及ぼすのかは議論の余地がある。本研究では非応答的な表現型ゆらぎですら進化速度を加速できることを示す。

[1] J.M.Baldwin, Am. Naturalist 30, 441 (1896), G.G.Simpson, Evolution 7, 110 (1953)

情報統計力学の最前線-情報と揺らぎの制御の物理学を目指して-

格子ガスモデルを用いたタンパク質 結合プロセスの熱力学的解析

白井 伸宙

大阪大学大学院 理学研究科 物理学専攻

天然変性タンパク質とは結合過程の前後で動的な性質が大きく変化するタンパク質であり、ターゲット分子との結合・解離がこのタンパク質の機能を特徴付けている。本研究では、天然変性タンパク質が持つ「非結合状態における構造のゆらぎ」が具体的にどの生理機能に対し、どのような意味を持つかについて議論する。

これまでの研究では、天然変性タンパク質とターゲット分子の一対一の関係性に注目したゆらぎの利点が説明されてきた。そしてこれらの説明ではダイナミクスが直接からむ議論がなされ、比較的短いタイムスケールと分子の大きさ程度の長さのスケールでの利点はあげられているが、熱力学的にはつきり特徴付けられるような差は現れない。そこで本研究では、多数の天然変性タンパク質と多数のターゲット分子の間関係性に注目し、さらにシグナル伝達という具体的な機能を取り上げ、ゆらぎの効果的な一面を統計力学的モデルを用いて切り取ることに挑戦した。

まず格子ガスモデルにより、1サイトもしくは複数サイトを占める粒子として天然変性タンパク質とターゲット分子を表現し、有限の空間に閉じ込める。さらに、結合過程に伴う天然変性タンパク質のゆらぎの変化を、実効的な体積の変化と内部自由度の変化として表現した。この空間内の粒子数密度を増やすと、天然変性タンパク質はそれぞれの体積を保つための空間を失い、エントロピックに安定化していた状態から、収縮してターゲット分子と結合するエンタルピックに安定化する状態へ遷移する。この状態遷移により、天然変性タンパク質からターゲット分子への情報伝達が達成される。そして、このシグナル伝達機構が機能するためには、天然変性タンパク質の体積変化のスケールと天然変性タンパク質がゆらぐために残された空間のスケールがある程度近い必要があり、この環境を作り出すのに細胞内の混雑した環境が一役買っているのではないかと考えられる。

最後にこのようなシグナル伝達機構があるとした時、密度変化に敏感でスイッチライクに働くようにするにはどうしたらよいか、という問について考えてみる。天然変性タンパク質の結合過程をより協同的にするよう、内部自由度を大きくすれば良いことがわかる。これは「天然変性タンパク質がよりゆらいでいた方が良い」ことを表しており、従って天然変性タンパク質がゆらぐ積極的な意味を一つ用意することができたといえる。ポスター発表では細胞内の環境について実験からわかっていることを加味し、このようなシグナル伝達の機構が細胞内で起こりうるかについても議論したい。

情報統計力学の最前線-情報と揺らぎの制御の物理学を目指して-

結合と折りたたみの共起における タンパク質構造安定化

松下勝義^{A,B}、菊池誠^{A,C,D}

大阪大学理学研究科 サイバーメディアセンター^A,
同 蛋白研究所^B, 理学研究科^C, 生命機能研究科^D

タンパク質は熱力学的に安定な構造を取る。この性質はタンパク質の物性のもっとも基本的なもので、Anfinsenの熱力学的仮説[1]として知られている。通常タンパク質は自発的に構造を取るが、天然変性領域とよばれる自発的に構造を取らないタンパク質の一部は、他のタンパク質と結合することで構造を取る。この現象は「結合と折りたたみの共起 (Coupled folding and binding)」などと呼ばれ、近年タンパク質物性研究において注目されている現象である[2]。

タンパク質の自発的構造形成は、Goの無矛盾原理[3]やBryngelson-Wolynes[4]の競合極小原理などで説明されてきた。それらの原理はタンパク質相互作用がタンパク質構造に競合効果をもたらさないことを主張する。しかし一般にはタンパク質は複数の構造を取りうる例が知られており、その中で競合効果が重要な役割を果たしているのではないかと考えられてきている。一つの例として、タンパク質がリガンドとの結合で構造を変えるアロステリー効果はそのような例の一つである可能性が指摘されている[5]。我々は天然変性を示しているタンパク NRSF とターゲットの Sin3 の結合[6-9]において、競合に由来するアロステリー効果が Sin3 に誘起され、NRSF による Sin3 の機能制御が行われている可能性を示した。

[1] C. B. Anfinsen, *Science* **181**, 223 (1973).

[2] P. Tompa, *Structure and Function of Intrinsically Disordered Proteins* (Chapman and Hall/CRC, 2009).

[3] N. Go, *Adv. Biophys.* **18**, 149 (1984).

[4] J. D. Bryngelson and P. G. Wolynes, *PNAS* **84**, 7524 (1987).

[5] D. U. Ferrreiro *et al.*, *PNAS* **108**, 3499 (2001).

[6] J. A. Chong *et al.* *Cell* **80**, 949 (1995).

[7] C. J. Schoenherr and D. J. Anderson, *Science* **267**, 1360 (1995).

[8] M. Nomura *et al.*, *J. Mol. Bio.* **354**, 903 (2005).

[9] J. Higo *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **133**, 10448 (2011).

情報統計力学の最前線-情報と揺らぎの制御の物理学を目指して-

細胞内反応における情報伝達と分子の離散性

上村 淳, 小林徹也
東京大学 生産技術研究所

効率的な情報伝達は、様々な細胞現象において重要である。例えば、時間的に変化する環境に応答するためには、外界の情報をレセプターなどの活性から複数の段階から成る細胞内反応を経て伝達する必要がある。また、それに対する応答として遺伝子を発現する場面においても、その情報に基づいて正確に関与する分子を転写・翻訳反応によって生成する必要がある。

しかし、近年の実験的な知見から、環境による影響や細胞内分子の少数性などに起因して関与するシグナルや、その伝達を仲介する分子は非常に揺らいでいることが明らかとなってきた。この細胞内における情報伝達の確率性は、各段階でできる限り S/N 比を上げてノイズを押さえようとする工学的な情報伝達の設計とは異なるように思われる。では、細胞はどのような機構で正確に情報を伝達できているのか、という疑問が生じる。

本研究では、揺らぐ環境下における細胞内反応による情報伝達について、単純な線形遺伝子発現モデルを用いて相互情報量を計算することにより、情報がいかに伝達されるかを調べた結果を示す。特に分子の離散性により情報をデジタル的に伝達するような状況での情報伝達効率について議論する。

情報統計力学の最前線-情報と揺らぎの制御の物理学を目指して-

神経スパイク発火の非ポアソン性を用いた情報伝達

小山 慎介

統計数理研究所

神経スパイク発火信号の発生は一般に不規則であり、観測されたスパイク時系列から発火率変動を推定することは容易ではないが、スパイク発火の非ポアソン性を適切にモデル化することで、変動を緻密にとらえることができる。本発表では、非ポアソン性を考慮に入れた経験ベイズ推定を経路積分法を用いて解析し、推定可能な最小の発火率変動がスパイク間隔の変動係数 C_V にスケールされることを示す。

$\{t_i\} \equiv \{t_1, t_2, \dots, t_n\}$ を区間 $[0, T]$ に観測されるスパイク時系列とし、 $\lambda(t)$ を時間変動する発火率とする。 $\lambda(t)$ を発火率にもつスパイク時系列の確率密度関数を $p_\kappa(\{t_i\}|\{\lambda(t)\})$ とする。ここで κ はスパイク発火の局所的な規則性を表すパラメータであり、 C_V に関連づけられるものとする。推定のため、発火率変動の滑らかさについての事前分布

$$p_\gamma(\{\lambda(t)\}) = \frac{1}{Z(\gamma)} \exp \left(-\frac{1}{2\gamma^2} \int_0^T (d\lambda/dt)^2 dt \right) \quad (1)$$

を導入する。ここで γ は $\lambda(t)$ の滑らかさを表すパラメータである。観測データ $\{t_i\}$ からの $\lambda(t)$ の推定は、ベイズの公式より導かれる事後分布

$$p_{\kappa, \gamma}(\{\lambda(t)\}|\{t_i\}) = \frac{p_\kappa(\{t_i\}|\{\lambda(t)\})p_\gamma(\{\lambda(t)\})}{p_{\kappa, \gamma}(\{t_i\})} \quad (2)$$

に基づいておこなわれる。また、パラメータ κ と γ の値は、周辺尤度関数

$$p_{\kappa, \gamma}(\{t_i\}) = \int D\{\lambda(t)\} p_\kappa(\{t_i\}|\{\lambda(t)\}) p_\gamma(\{\lambda(t)\}) \quad (3)$$

を最大化するものを選ぶ。以上が経験ベイズ法の処方箋である。本発表では、式 (3) の経路空間における周辺化を経路積分法によって評価し、経験ベイズ法の振る舞いを解析した結果を報告する。

Hierarchical Noise-Intensity Fluctuations in Langevin Modeling

Yoshihiko Hasegawa¹ and Masanori Arita²

¹Dept. of Biophys. and Biochem., Univ. of Tokyo, email: hasegawa@cb.k.u-tokyo.ac.jp

²Dept. of Biophys. and Biochem., Univ. of Tokyo, email: arita@bi.s.u-tokyo.ac.jp

abstract

Langevin models have become increasingly important in modeling systems subject to fluctuations. In general, fluctuations are space- and time-dependent phenomena; hence, the noise intensity fluctuates temporally and/or spatially. We consider a Langevin model, where the noise-intensity is governed by the Ornstein–Uhlenbeck process [1]:

$$\dot{x} = f(x) + g(x)s\xi_x(t); \quad \dot{s} = -\gamma(s - \alpha) + \sqrt{\gamma}\xi_s(t), \quad (1)$$

where α denotes the mean of $s(t)$, and $\xi_x(t)$ and $\xi_s(t)$ are white Gaussian noise with correlation functions $\langle \xi_x(t)\xi_x(t') \rangle = 2D_x\delta(t - t')$ and $\langle \xi_s(t)\xi_s(t') \rangle = 2D_s\delta(t - t')$ (D_x and D_s are the noise-intensity). In Eq. (1), we call a term $s\xi_x(t)$ *stochastic intensity noise* (SIN), because the noise-intensity is modulated by a stochastic process. The kurtosis of SIN is $\kappa = 9 - 6/(1 + \rho)^2$, where $\rho = D_s/\alpha^2$ represents the squared variation coefficient, ratio between the variance and the squared mean in Eq. (1). Figure 1 shows examples of time course of SIN [(a) and (b)] as well as their histograms [(c) and (d)].

Two dimensional Fokker–Planck equation (FPE) of Eq. (1) is given by $\partial_t P(x, s; t) = L_{FP}P(x, s; t)$, where L_{FP} is an FPE operator. We developed an approximation scheme for the FPE, which casts the two dimensional equation into one dimensional equation in terms of x , by using the adiabatic elimination. The obtained equation is given by [1]

$$\partial_t P(x; t) = [-\partial_x f(x) + \{D_x(D_s + \alpha^2)\} \Delta_g + \{(D_x^2 D_s(4\alpha^2 + D_s))/\gamma\} \Delta_g^2] P(x; t), \quad (2)$$

with $\Delta_g = \partial_x^2 g(x)^2 - \partial_x g'(x)g(x)$. Although Eq. (2) includes higher-order derivatives than the second, we have solved Eq. (2) with perturbation expansion and showed that it can be applied to several nonlinear systems including a gene expression mechanism [1].

We also investigated statistical properties of systems driven by SIN, specifically in bistable and ratchet potentials [1] with matrix continued fraction method. We calculated the mean first passage time and stochastic resonance in the bistable potential, and the current in the ratchet potentials.

References

- [1] Y. Hasegawa and M. Arita, Physica A, 389, 4450 (2010); Y. Hasegawa and M. Arita, Physica A, 390, 1051 (2011); Y. Hasegawa and M. Arita, Phys. Lett. A, 375, 3450 (2011); Y. Hasegawa and M. Arita, arXiv:1112.5287.

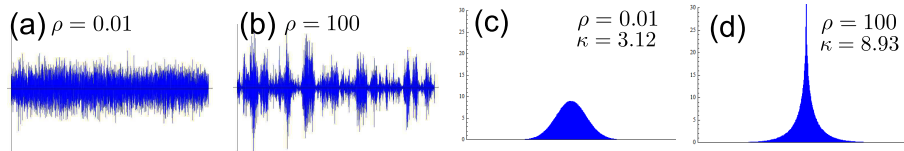


Figure 1: (a) and (b) Time course of SIN created by MC simulations. (c) and (d) Histograms of SIN. ρ and κ denote the squared variation coefficient and the kurtosis, respectively.

情報統計力学の最前線-情報と揺らぎの制御の物理学を目指して-

Cleverest Maxwell's demon

鹿野 豊

分子科学研究所

Entropy is one of the most cardinal concepts in the modern science. The interplay of entropy in classical physics and information science has been studied intensively since it was first pointed out by Brillouin in the general context. The well-known example is Maxwell's demon. The paradox was resolved by Landauer and Bennett considering the demon's memory, which is well known as the information erasure principle. In this poster, to clarify the essence of the information erasure, we consider an asymmetric Szilard engine model of Maxwell's demon. We show the equivalence between information theoretical and thermodynamic entropies when the demon erases information optimally. The work gain by the engine can be exactly canceled out by the work necessary to reset demon's memory after optimal data compression a la Shannon before the erasure [1]. More specifically, the 1-bit memory erasure and reset should be the cost of the work $k_B T \ln 2$ in the symmetric 0 – 1 memory model. It is noted that this is only used by the combined gas law. In the Landauer and Bennett mechanism, the equivalence between the information theoretical and thermodynamical entropies were unclear since there does not appear the information theoretical entropy. This comes from the optimal data compression. Here is our main result. Furthermore, I would like to give the presentation on the relationship between the information theoretical and statistical entropies.

参考文献

- [1] A. Hosoya, K. Maruyama, and Y. Shikano, Phys. Rev. E **84**, 061117 (2011).

情報統計力学の最前線-情報と揺らぎの制御の物理学を目指して-

宇宙の非一様性を測る KL 情報量

森田 正亮

沖縄工業高等専門学校

標準的宇宙論では、宇宙は大域的には一様・等方であり、いわゆる FLRW 宇宙モデルで十分よく記述されると考えられている。その一方で、宇宙には無数の銀河や銀河団が存在し、少なくとも局所的には極めて非一様である。そのような非一様宇宙を大域的に平均化したとしても、それが FLRW 宇宙モデルに一致するとは限らない。このことに着目して、非一様宇宙を平均化することによって得られる実質的な宇宙パラメータは、FLRW 宇宙モデルのそれとどのくらい違うのか、という問題は宇宙論研究において「平均化問題」と呼ばれている。最近では、遠方の Ia 型超新星の観測から示唆される「宇宙の加速的膨張」との関連で活発に議論されている。

この発表では、非一様宇宙の平均化の手法において、宇宙の非一様性を測る自然な尺度として KL 情報量（相対エントロピー）が得られることを示す。また、この尺度のエントロピーとしての妥当性、特に時間的増大性について調べ、宇宙パラメータや加速的膨張との関係を議論する。

情報統計力学の最前線-情報と揺らぎの制御の物理学を目指して-

緩和と情報による冷却限界

伊藤創祐, 佐野雅己

東京大学理学系研究科 物理学専攻

”Maxwell の悪魔 ”の問題が提起した, ”情報”と仕事の関係が近年注目を浴びており, 系の状態と測定結果間の相互情報量を用いて, 熱力学第二法則はフィードバック制御下で拡張された. この”情報”と仕事の関係は実験的にも確かめられ, 回転ブラウン運動を行うコロイド粒子系を用いて情報-仕事変換が達成された [1].

一方で, フィードバック制御によってブラウン粒子の速度揺らぎを減らすことで”温度”を下げる系が実験的に作られている [2]. コロイド粒子の速度と逆向きのフィードバック力をレーザーピンセットを用いて加えることで, 実験的にミリケルビンレベルの低温が実現され, ノイズキャンセレーションや BEC などの低温での量子効果の達成などの広い応用が期待されている.

我々は実験 [2] のような系においても, 実験 [1] と同じような形で”Maxwell の悪魔”の文脈で冷却現象を”情報”の観点から理解し, フィードバック制御によって達成可能な冷却限界と”情報”の関係を導出した [3].

この”情報”と冷却限界を議論するために, 我々はまずフィードバック制御された 1 次元 Langevin 系で, 拡張された熱力学第二法則の議論を非平衡遷移下での揺動散逸定理の議論を用いることで, フィードバックによる低温実現に対して議論を行い, 定常状態を仮定したときに以下の式が導出されることを発見した.

$$\frac{T - T_{\text{eff}}}{T} \leq \frac{\sum_i \langle I_i \rangle}{\tau} \frac{m}{\gamma} \quad (1)$$

ここで T は熱浴の温度であり, T_{eff} はブラウン粒子の速度揺らぎから定義されるコロイド粒子の”温度”, $\sum_i \langle I_i \rangle$ は時間 τ 間で得られた相互情報量の総和であり”情報”に相当する部分である. m はブラウン粒子の質量, γ は摩擦係数である.

この式は有効温度の熱力学的な原理的下限を決定する式となっており, 系の緩和時間 (m/γ) と結びついているので題名通り”緩和と情報による冷却限界”と呼ぶことができる. フィードバック制御下で達成可能な定常分布に対して条件を与える制限式である. また, この式は N 次元 Langevin においても同じ形に帰着することが確かめられており, 複数次元においても普遍的に”緩和と情報の冷却限界”の描像が存在している.

この結果に対して, 実際の実験 [2] におけるパラメータを代入して, 冷却を達成するのに必要な測定誤差に関する定量的な予言が可能なことや, いくつかの異なる測定誤差の関数形とフィードバックのプロトコルで, (1) 式が常に成り立っており, 誤差理論として働いていることを紹介する.

[1] S. Toyabe, T. Sagawa, M. Ueda, E. Muneyuki and M. Sano, Nature Phys. **6**, 988 (2010).

[2] T. Li, S. Kheifets and M. G. Raizen, Nature Phys. **7**, 527 (2011).

[3] S. Ito and M. Sano, Phys. Rev. E **84**, 021123 (2011).

Zon-Cohen 特異性の物理的起源

根本 孝裕

東京大学大学院 総合文化研究科

1993 年、熱力学第 2 法則を超えて成り立つ等式、ゆらぎ定理が発見された。この定理はエントロピー生成のまれに起こるゆらぎの性質として表され、この性質は、非平衡物理学に対する理解を飛躍的に前進させた。系が定常状態にあるとき、全系のエントロピー生成の期待値は、系が熱浴に放出する熱の期待値と等しい。そして熱力学第一法則により、その期待値は外界がする仕事の期待値と等しい。従って定常状態を考える上では、仕事と熱、どちらを考えてもゆらぎ定理が成り立つことが期待される。ところが 2004 年、Zon と Cohen は、仕事に対するゆらぎ定理が常に成り立っている一方で、熱に対するゆらぎ定理は破れ得ることを主張したのである [1]。この破れは、熱に対するキュムラント母関数の特異性から得られる。ここではその特異性を Zon-Cohen 特異性と呼ぶ。未だに、特異性の物理的起源（粒子のどのような運動が特異性を引き起こすか）や、その特異性の普遍性（同様の特異性が Zon-Cohen が解析した系以外においても現れるのかどうか）について、理解は不十分である。

この問いに答えるため、本ポスターでは、周期ポテンシャル上のブラウン粒子系を考え、その周期を無限大にする極限操作を行う。Zon-Cohen が用いた系は、光ピンセットによって引きずられたブラウン粒子系である。従って極限操作によってその系を再現すれば、特異性がどのように現れるのかを観察することが出来る。またその際、粒子位置 $x(t)$ に対する biased 分布関数 $p_{h_w, h_q}(x)$

$$p_{h_w, h_q}(x) = C \langle e^{h_w W(t) + h_q Q(t)} \delta(x(t) - x) \rangle \quad (1)$$

に着目する。ここで $W(t)$ は外界が時刻 t までにする仕事、 $Q(t)$ は粒子が時刻 t までに散逸する熱、 C は規格化定数である。また h_w, h_q は biasing field (または counting field) と呼ばれる。biasing field はまれに起こるゆらぎの頻度を調節するためのコントロールパラメータとなる。従ってこの分布を用いることで、具体的に粒子のどのような運動が特異性を引き起こすのかを観察することが出来る。

解析の結果、(i) 熱の高次のゆらぎを計算する粒子の運動 (大きい $Q(t)$ を与える粒子の運動) が、ポテンシャルを駆け上がるという特異な振る舞いを示すこと、(ii) その特異な振る舞いが、2つの極限操作の非可換性を引き起こすこと、そして (iii) その非可換性が、Zon-Cohen 特異性を引き起こしていることが明らかになる。本ポスターでは、以上の内容を説明したい。

参考文献

- [1] R. van Zon and E. G. D. Cohen, Phys. Rev. Lett. **91**, 110601 (2003).

射影演算子法による大偏差統計関数の近似計算手法

松井 克仁, 宮崎 修次

京都大学大学院情報学研究科 複雑系科学専攻

時系列における揺らぎには、その背後にある現象の特徴が現れる。よって、このような揺らぎを解析し、元の現象を特徴づけることができれば、それは有用な手法となる。

よく知られた極限定理である中心極限定理とは、粗視化の幅が十分大きいとき有限時間平均の確率分布は長時間平均のまわりで正規分布で近似できるというものであった。それに対して、長時間平均の近傍だけでなく、とりうる全ての範囲における確率分布の漸近的な振る舞いを扱うのが大偏差原理である。つまり、大偏差原理は長時間平均のまわりの小さな揺らぎ（よく起こる現象）だけでなく、大きな揺らぎ（稀な現象）に対しても成り立つものである。この大偏差原理を応用して実際の物理現象の解析を行う理論が、大偏差統計理論である [1,2]。この大偏差統計理論は、これまでに拡散現象における非ガウスの特性の抽出や非双曲性の特徴づけなど様々な現象に適用されている。大偏差統計関数であるレート関数を用いて、様々な現象を揺らぎの特性という観点から特徴づけることができる。

このレート関数は解析的に求めるのは困難なため、実用的には数値計算で求めることになる。しかし、時系列から定義にしたがってレート関数を求めようとすると、有限サイズ効果により長時間平均の近傍の範囲しか求められないことが指摘されている [3]。

藤坂は、レート関数などの大偏差統計関数を森の射影演算子法を適用することによって求めるという理論的枠組みを構築した [4]。森の射影演算子法とは、決定論的な運動方程式から、それと同値な確率論的な運動方程式（一般化ランジュバン方程式）を導く手法であり、カオス力学系においては状態変数の二時間相関関数の計算に応用されるものである [5]。藤坂は、レート関数の母関数を二時間相関関数に見立てることにより、射影演算子法を適用し、一般化ランジュバン方程式を導出した。さらに、このようにして得られた一般化ランジュバン方程式には、記憶項が含まれているため解析は困難であるが、状態空間を拡張することによって記憶項を無視し、近似的に解くという手法も提案した [4]。

本研究では、カオス力学系の構造を反映して大きく揺らぐ量である局所軌道拡大率の時系列を考える。そして、射影演算子法を用いて計算した局所軌道拡大率に対するレート関数は有限サイズ効果の制限を受けないことを示す。さらに、このような計算手法（提案法）の妥当性を検証するために、可解カオスモデルに対して、解析解、定義に従った数値計算解、提案法による解を比較する。

参考文献

- [1] H. Fujisaka, Prog. Theor. Phys. **70**, 1264 (1983).
- [2] H. Fujisaka, Prog. Theor. Phys. **71**, 513 (1984).
- [3] H. Nakao, S. Kitada and A. S. Mikhailov, Phys. Rev. E **74**, 026213 (2006).
- [4] H. Fujisaka, Prog. Theor. Phys. **114**, 1 (2005).
- [5] H. Mori, Prog. Theor. Phys. **33**, 423 (1965).

情報統計力学の最前線-情報と揺らぎの制御の物理学を目指して-

周期的ランダムテレグラフノイズによる同時エスケープ

一木 輝久

豊田中央研究所 先端研究センター

雑音に埋もれた弱い信号を取り出すには、摂動（外部入力）に対する応答の大きな系をデバイスとして用いればよい。この発想のもと、大きな応答を用いて微弱信号を増幅するデバイスとして、系の分岐を利用した bifurcation amplifier 等が挙げられる。一方、統計力学でよく知られるように、（H-定理が成立するという意味で、筋のいい）雑音存在下では、熱力学極限を取らない限り分岐現象は起こらない。従って、分岐を利用して、雑音に埋もれた微弱信号を取り出すには、ウィーナー過程などの確率論的に筋のいい雑音を回避するトリックが必要となる。

「筋のいい」雑音を回避する方法はさまざまに考えられるが、ここでは、白色ガウス雑音を閾値素子で2値化することを考える。このようにして得られる雑音はランダムテレグラフノイズの性質を持っている。

白色ガウス雑音を成型することで得られた雑音を、サドル・ノード分岐を示すポテンシャル系に印加することで分岐を引き起こし、これによって微弱信号を増幅させたい。このとき問題となるのは、入力データ長である。信号は雑音に埋もれていると考えているので、閾値素子に入ってくるのは雑音と微弱信号の重ね合わせである。この重ね合わせ信号は、受信データ列とみなせるが、実用上、そのようなデータ列は有限長である。では、有限時間の雑音で系に分岐を起こさせることができるか？この問題を解決するため、受信した有限長データを繰り返しポテンシャル系に入力することを考える。これがタイトルにある周期ランダムテレグラフノイズである。

サドル・ノード分岐を示すポテンシャル系に、周期的ランダムテレグラフノイズを印加した場合、初期条件をそろえた独立な系で、ポテンシャルの極小解からより安定な解への遷移が同時に起こることが観測されたので紹介する。独立な系では、雑音の実現値が異なるため、同時的なエスケープは一見、直観に矛盾している。しかし、この現象は、簡単な時間粗視化によって説明することができる。また、この同時エスケープは、ここで扱うランダムテレグラフノイズのように、離散的な値を取る雑音を周期的に印加しなければ起こらないことも示す。

情報統計力学の最前線-情報と揺らぎの制御の物理学を目指して-

熱場ダイナミクスを用いた量子エンタングルメントの研究

橋爪 洋一郎 鈴木増雄

東京理科大学大学院 理学系研究科応用物理学専攻

熱場ダイナミクスでは、状態の概念を拡張して、量子力学的な期待値の表現と統計力学的な期待値の表現とを統一することができる (Fano 1957, Prigogine et al. 1973, Takahashi and Umezawa 1975). すなわち、ヒルダ空間に拡張されたヒルベルト空間内に定義される状態

$$|\psi(\beta)\rangle = \frac{1}{\sqrt{Z(\beta)}} \sum_n e^{-\beta\mathcal{H}/2} |I\rangle \quad (1)$$

を用いて、 $\langle A \rangle = \langle \psi(\beta) | A | \psi(\beta) \rangle$ と書ける. ここで、 $|I\rangle$ は $\{|n\rangle\}$ と $\{|\tilde{n}\rangle\}$ の直積空間に定義される状態で、基底状態 $\{|n\rangle, |\tilde{n}\rangle\}$ には $\mathcal{H}$ の固有ベクトルでないものをもってよいことが示されている (Suzuki 1985). $\exp[-\beta\mathcal{H}/2]$ は $\{|n\rangle\}$ で張られる部分空間にしか作用しないため、ハミルトニアン作用した状態の構造を追うのに適している. 実際、この特徴を用いて、三角格子反強磁性体における RVB 状態の解析 (Suzuki 1986) や密度行列繰り込み群への応用 (Feiguin and White 2005) がなされている.

ところで、近年、ブラックホールや量子系における AdS/CFT 対応 (Maldacena 1997) などが知られ、エンタングルメントエントロピーの振る舞いが注目されている. エンタングルメントエントロピーとは、系全体を部分系 A と B に分割した際、例えば部分系 B のゆらぎが部分系 A にどの程度影響するかを示す量で、全系の密度行列 ρ_{All} を用いて

$$S_A = -k_B \text{Tr}_A \rho_A \log \rho_A; \quad \rho_A = \text{Tr}_B \rho_{\text{All}} \quad (2)$$

と定義される. 今後、量子計算の発展においてエンタングルメントエントロピーがさらに重要な役割を果たすことが期待できる.

本研究では、フラストレーションを含む量子系でのエンタングルメントエントロピーを調べる新しい視点として熱場ダイナミクスの方法を用いた. その結果、エンタングルメントを表現する密度行列 ρ_A は一般に

$$\rho_A = \rho_{A\text{-orig.}} + \rho_{\text{ent.}} \quad (3)$$

に分割できることがわかった. $\rho_{A\text{-orig.}}$ は部分系 A 自体の揺らぎに対応していて、 $\rho_{\text{ent.}}$ が本来のエンタングルメントに対応する. ここでエントロピー $S_{\text{ent.}} = -k_B \text{Tr} \rho_{\text{ent.}} \log \rho_{\text{ent.}}$ を定義してフラストレーションなどとの関係を調べる. 今回対象とする系は最も単純な 2 スピン系で、磁場 H が相互作用 J と競合する場合 $\mathcal{H}_1$ としない場合 $\mathcal{H}_2$ である. その結果、磁場が相互作用と同程度に大きくなると、 $S_{\text{ent.}}$ は、競合のある系 ($\mathcal{H}_1$) では、競合のない系 ($\mathcal{H}_2$) の約 7 倍程度に大きなエンタングルメントを持っていることが計算される.

このように、熱場ダイナミクスを用いたエンタングルメントの研究は状態に注目することができるため、非常に有用である.

彩色問題に関する量子アルゴリズム

山中雅則

日本大学理工学部 物理学科

グラフの彩色問題は古典的な問題であるが、今なお活発に研究されている。彩色問題は、主として頂点彩色と辺彩色に分けられ、例えば四色問題は頂点彩色の典型的な例である。

彩色問題において、与えられたグラフの染色数が求められていることは多い。一方で、染色数が与えられた場合の異なる塗り分けの具体的な表現とその総数の算出については頂点数の小さなグラフについて解決しているものもあるが、頂点数の大きな不規則グラフについては、計算量が指数関数的に増大することから困難であることが知られている。

平面的ではない不規則グラフの頂点彩色について、染色数はヒュードの公式で容易に算出することができる。しかし、頂点数の大きなグラフの彩色を、染色数ちょうどの色数で実際に彩色してみると良く分かることであるが（彩色可能であることは証明されているにも関わらず）実際の彩色はすぐに行き詰まることが多い。また、局所的な彩色を組み合わせることにより、グルーピングにより全体の彩色を行う試みも行き詰まることが多い。これは、全体の彩色のつじつまが大域的に決まっていることことを意味する。（もちろん、彩色が容易なグラフも存在するが、ここでは実際の彩色を求めることが困難なグラフを対象とする。例えば、頂点数が大きく、かつ、平面的ではない不規則グラフなどを考える。）

講演では、全ての異なる彩色の表現を生成する量子アルゴリズムを提案する。通常の彩色の手続きでは、色を局所的に一つずつ確定しながら全体の彩色を順次構成していく。これをここでは古典的彩色法と呼ぶ。古典的彩色法では、染色をスタートし途中で彩色が行き詰まると、あるステップまで戻って彩色のやり直しを行わなくてはならない。しかし、いったいどのステップまで戻り、どのような彩色でやり直せば良いのかは自明ではなく、系統的な改善方法は存在しない。また、行き詰まった彩色であったとしても、部分的には別の彩色の局所的な（正しい）彩色となっていることは十分有り得る。この研究では、彩色の異なる表現を量子力学的な重ね合わせ状態として表現することにより、量子アルゴリズムを用いてこれらの困難を回避し、具体的な全ての染色の表現を求めることを試みる。これを量子的彩色法と呼ぶ。