

有限次元スピングラスの理解へ向けて¹

— ベーテ近似とその発展 —

京都大学 大学院情報学研究科システム科学専攻 大関 真之²

1 前書き

スピングラスの理論はいわゆる無限次元に相当する平均場理論が発展・整備されてきたものの、有限次元に有効な理論となると普遍性及び有効性共に非常に乏しい有様である。有限次元のスピングラスの理解に向けては、どうしても数値計算に頼らざるを得なかった。出来る限り手あかのついた理論を好む人間にとっては、非常に残念な状況である。それと同時にチャレンジングな分野であるという錯覚さえ覚えるかもしれない。しかしながら一旦スピングラスのこれまでの理論を勉強しようと関連図書を開くと、その複雑さに唖然とする事が光景としてよくあることも否定できない。

2 平均場近似

典型的なスピングラスモデルのハミルトニアンを以下のように例として挙げる。

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j. \quad (1)$$

ここで J_{ij} が磁性体内の不純物の効果により符号が一樣ではないスピン間の複雑な相互作用を表す。簡単のためスピン変数は $S_i = \pm 1$ とイジング変数であるとする。統計力学の処方箋に乗っ取れば、系のハミルトニアンが与えられた状況では、ある温度 ($1/\beta$) での平衡状態は Gibbs-Boltzmann 分布で与えられる。その規格化定数に相当する分配関数を通して、自由エネルギーを計算する事が出来れば、熱力学極限における系の熱平均値から自然界における多体系の様相を予言する事が出来る。しかしながらその計算には膨大な計算量が素朴には必要であり、原理的には不可能な状況にあるのが常である。稀に対称性の良い系で、その計算量が飛躍的に通減される場合、厳密な解析が実行可能となる。

¹本研究は、ローマ大学の Ulisse Ferrari 氏、Tommaso Rizzo 氏、及び Giorgio Parisi 氏との共同研究による。

²E-mail: mohzeki@i.kyoto-u.ac.jp

そこで平均場近似である。本来はミクロな自由度であるスピン同士が、相関を持っているためミクロな状態を記述する分布関数 $P(\{\sigma_i\}) = P(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$ は分解する事が出来るとは思えない。しかしながら近似として、以下のような試行関数を用意する。

$$Q(\{\sigma_i\}) = \prod_{i=1}^N Q_i(\sigma_i). \quad (2)$$

この試行関数が、本来の分布関数に出来るだけ近ければ、近似として良好となる。異なる分布関数の間の計量として、Kullback-Leibler 情報量を採用する。その定義は、

$$D(Q|P) = \sum_{\{\sigma_i\}} Q(\{\sigma_i\}) \log \frac{Q(\{\sigma_i\})}{P(\{\sigma_i\})}. \quad (3)$$

である。この計量の $Q_i(\sigma_i)$ が確率分布であるという条件付き最小化によって、試行関数の最適解を構成する事が出来る。実際にスピングラス模型の場合に求めてみると、

$$Q_i(\sigma_i) \propto \exp \left\{ \left(\sum_{j \in \partial i} \beta J_{ij} M_j \right) \sigma_i \right\}. \quad (4)$$

ここで $M_i = \sum_{\sigma_i} \sigma_i Q_i(\sigma_i)$ である。最終的には局所的な磁化に相当する M_i に対する自己無撞着方程式を得る事が出来る。

$$M_i = \tanh \left(\sum_{j \in \partial i} \beta J_{ij} M_j \right). \quad (5)$$

この固定点が平均場近似の解として採用されて、相転移を含む多体系の豊富な振る舞いを知る手がかりとなる。

3 ベーテ近似

さらに一步進めて、近接する2体までの相関を取り入れたような分解を確率分布関数に施したものを試行関数として採用した場合、平均場近似より精度の良いものが得られることが期待できる。それがベーテ近似である。

$$Q(\{\sigma_i\}) = \prod_{i=1}^N Q_i^{-(d_i-1)}(\sigma_i) \left(\prod_{j \in \partial i} Q_{ij}(\sigma_i, \sigma_j) \right). \quad (6)$$

ここで ∂i とはサイト i に近接するサイトを表し、 d_i はその近接数を表す。2体の分布関数 $Q_{ij}(\sigma_i, \sigma_j)$ だけでなく、1体の分布関数の $d_i - 1$ の幂で割るのは、分布関数間の重なりの方を考慮したためである。この場合、 $Q_{ij}(\sigma_i, \sigma_j)$ 及び $Q_i(\sigma_i)$ が確率の規格化に従うべしとした条件に加えて、2体の分布関数を周辺化する事により、1体の分布関数に帰着するべしという以下の条件を更に課した条件付き最小化を行う事でベーテ近似解を得る事が出来る。実際にスピングラス模型に対するベーテ近似解を求めてみると、まず局所磁化に関連した媒介変数 $M_j^{(i)}$ の固定点方程式が得られる。

$$M_j^{(i)} = \tanh \left\{ \sum_{l \in \partial j/i} \tanh^{-1} \left(t_{jl} M_l^{(j)} \right) \right\}. \quad (7)$$

ここで $t_{ij} = \tanh \beta J_{ij}$ である。局所磁化 M_i とは以下の関係で結ばれる。

$$M_i = \tanh \left\{ \sum_{j \in \partial i} \tanh^{-1} \left(t_{ij} M_j^{(i)} \right) \right\} \quad (8)$$

一般にこの系統的近似手法はクラスター変分法 [1] と呼ばれ、分布関数を如何に分解して近似的に構成するかでその精度は決まる。例えばベーテ近似の精度を更に上げる事を考えるならば、さらに多体の分布関数を次々に組み合わせて行けばよい。

本研究ではその潮流とは異なる形でベーテ近似の精度を上げる手法を実際にスピングラス模型に対して利用する事を試みた。方向性自体は場の理論ベースで G. Parisi と F. Slanina が示し [2]、特に本研究では格子上での実装を考えた A. Montanari と T. Rizzo らがアイデア [3] が下地になっている。

4 周辺のスピンの分布関数の分解近似

局所的な物理量（スピン系の場合は磁化、近接 2 体相互作用を持つエネルギー）を計算するのに必要な 1 体及び 2 体の分布関数は原理的には、あるサイト i に注目した時にそれを取り囲むスピン $\sigma_{\partial i} = \{\sigma_l\} (l \in \partial i)$ の分布関数で記述される。まず 1 体の分布関数は、

$$P_i(\sigma_i) \propto \sum_{\sigma_{\partial i}} P_{\partial i}(\sigma_{\partial i}) \exp(\beta h_i \sigma_i + \sum_{j \in \partial i} J_{ij} \sigma_i \sigma_j) \quad (9)$$

であり、近接する 2 体の分布関数は、2 通りの書き方があるが、

$$P_{j \rightarrow i}(\sigma_i, \sigma_j) \propto \sum_{\sigma_{\partial i/j}} P_{\partial i}(\sigma_{\partial i}) \exp(\beta h_i \sigma_i + \sum_{l \in \partial i/j} J_{il} \sigma_i \sigma_l) \quad (10)$$

$$P_{i \rightarrow j}(\sigma_i, \sigma_j) \propto \sum_{\sigma_{\partial j/i}} P_{\partial j}(\sigma_{\partial j}) \exp(\beta h_j \sigma_j + \sum_{l \in \partial j/i} J_{jl} \sigma_j \sigma_l) \quad (11)$$

と書ける。この周辺スピンの分布関数を如何に近似するかということで、多体系を近似的に解析する事を考える。満たさなければならない自然な条件は、2 体の分布関数からどちらのサイトの和から計算しても局所磁化は等しいものでなければならないということから、

$$\sum_{\sigma_i, \sigma_j} \sigma_k P_{j \rightarrow i}(\sigma_i, \sigma_j) = \sum_{\sigma_i, \sigma_j} \sigma_k P_{i \rightarrow j}(\sigma_i, \sigma_j) \quad (12)$$

が $k = i, j$ 両者について成り立たなければならない。これを状態方程式として採用する。

周辺スピンの分布関数の近似として、素朴に思いつくのは、周辺にある各スピンは独立であるとして、

$$P_{\partial i}(\sigma_{\partial i}) = \prod_{j \in \partial i} P_j^{(i)}(\sigma_j) \quad (13)$$

とするものである。これを上記の状態方程式に課すと、ベーテ近似と同じ自己無撞着方程式を得る事が出来る。その際、先ほど媒介変数であった $M_j^{(i)}$ の意味はより明確化されて、

$$M_j^{(i)} = \sum_{\sigma_j} \sigma_j P_j^{(i)}(\sigma_j) \quad (14)$$

である事がわかる。それでは周辺スピンの間で2体の相関まで存在するとして計算したらどうだろう。それはベータ近似の精度を更に上げる事が出来る事が期待される。実際に状態方程式から以下の新しい自己無撞着方程式を得る事が出来る。

$$M_j^{(i)} + \sum_{j_k \in \partial i/j} C_{j,j_1}^{(i)} \frac{t_{ij_1} T_{j,j_1}^{(i)}}{1 + t_{ij_1} M_{j_1}^{(i)} T_{j,j_1}^{(i)}} = T_i^{(j)} + \sum_{l_k \in \partial j/i} t_{jl_1} t_{jl_2} \Gamma_{i,l_1,l_2}^{(j)} C_{l_1,l_2}^{(j)} \quad (15)$$

を得る。ここで表記の簡略化のため、以下の量を定義した。

$$T_{j_1,j_2,\dots,j_k}^{(i)} = \tanh \left\{ \sum_{l \in \partial i/j_1,j_2,\dots,j_k} \tanh^{-1} \left(t_{il} M_l^{(i)} \right) \right\} \quad (16)$$

$$t_{ij_1} t_{ij_2} \Gamma_{j,j_1,j_2}^{(i)} = t_{ij_1} t_{ij_2} \frac{T_{j,j_1,j_2}^{(i)} - T_j^{(i)}}{1 + t_{ij_1} t_{ij_2} M_{j_1}^{(i)} M_{j_2}^{(i)} + t_{ij_2} M_{j_1}^{(i)} T_{j,j_1,j_2}^{(i)} + t_{ij_1} M_{j_2}^{(i)} T_{j,j_1,j_2}^{(i)}}. \quad (17)$$

5 終わりに

最後に上記の改良されたベータ近似でどのような結果が得られるかについて簡単に述べておく。まずランダムネスのない有限次元のイジング模型については、ベータ近似と比較して既存の結果で知られている相転移点により近い解を得る事が確認できる。また先行研究では、相関関数を求める際に、2次元では紫外発散に悩まされて解析に失敗しているが、本研究では数値的に格子上の相関関数を実際に計算する事で回避する事が出来た。スピングラス模型に関しては強磁性—常磁性転移に関してはベータ近似より正確な相転移点を計算する事に成功している。一方スピングラス転移に関しては、数値計算上での素朴な実装による固定点への収束が見られないという問題がベータ近似レベルでも残っているため、この解消が急務である事が改めて確認された。数値計算上での実装を工夫して、スピングラス転移付近での固定点への収束を促す手法 [4] を併用する事により、本手法がスピングラス模型の更に精度のよい近似手法である事を確認することがまず第一歩であろう。

参考文献

- [1] R. Kikuchi, Phys. Rev. **81** (1951) 988.
- [2] G. Parisi and F. Slanina, J. Stat. Mech. (2006), L02003.
- [3] A. Montanari and T. Rizzo, J. Stat. Mech. (2005), P10011.
- [4] A. L. Yuille, Neural Computation **14**, (2002), 1691

スピングラスの零点とカオス

大阪大学 サイバーメディアセンター 小渕 智之¹

1 はじめに

統計力学における最も面白い題材の一つは相転移であろう。相転移を正しく理解するためには、自由エネルギーの（熱力学極限で現れる）特異点に関する情報を引き出さなくてはならない。分配関数の零点は自由エネルギーの諸性質を、特異点を含め“完全に”与えてくれる方法であり、また有限系から無限系へ近付く際の特異性の現れ方を比較的わかりやすく可視化してくれるなど、他の方法には無い幾つかの利点を持つ²。

零点理論の起源は 1952 年の Lee と Yang [1] の仕事に遡る。彼らは、零点が存在しない領域では、自由エネルギーが必ず（熱力学極限でも）解析的であることを一般的に証明した。また同時に、具体例として強磁性イジングモデルの零点分布を解析し、零点が相転移と密接に関係していることを明示した。その後、彼らの結果を拡張する研究が行われ、様々な成果が挙げられてきた。

しかしこれまで、スピングラス (SG) のようなフラストレーションやランダムネスを有する複雑な系において、零点が解析されたことはほとんどなかった。これは専ら、ランダム系特有の解析の難しさに原因があった。ところが近年、ランダム系の統計力学の解析技法の向上に伴って、ランダム系でも零点分布をシステマティックに求める方法が開発され、この状況が打開されつつある [2]。本稿では、この方法を用いて得られた最新の結果 [3] と関連事項について紹介する。

2 定式化とモデル

2.1 零点と分配関数とレプリカ法

分配関数 $Z = Z(y)$ がパラメータ y (温度、外場など) に関して解析的でかつ積展開が出来ると仮定しよう。このとき分配関数は $Z(y) = C \prod_i (y - y^{(i)})$ のように書ける。 C はさしあたり興味のない解析的ファクター、 $y^{(i)} = y_1^{(i)} + iy_2^{(i)}$ は i 番目の零点で一般に複素数である。対応する零点分布は、分配関数と直接結び付けることが出来る:

$$\rho(y_1, y_2) = \frac{1}{N} \sum_i \delta(y - y^{(i)}) = \frac{1}{2\pi N} \left(\frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} \right) \ln |Z(y)|. \quad (1)$$

最右辺の導出にはデルタ関数が以下のように書けることを利用した:

$$\delta(y) = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} \right) \ln |y|. \quad (2)$$

¹E-mail: obuchi@cp.cmc.osaka-u.ac.jp

²しかし、あまり使われないややマニアックな手法でもある。

さて以下ではランダム系を取り扱うので、式 (1) の両辺をランダムネスに関する平均 $[\dots]$ を施し、 $[\rho(y_1, y_2)]$ を計算することに注力する。右辺は対数のランダム平均 $[\ln |Z(y)|]$ となるが一般にこれを評価するのは難しいので、これをレプリカ法によって回避する。

$$[\ln |Z(y)|] = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{2n} \ln [(ZZ^*)^n]. \quad (3)$$

* は複素共役である。これは通常のレプリカ解析 [4] に沿った計算が可能な量である。ただ、注意すべきは $(ZZ^*)^n$ という分配関数とその共役の積があるために、処理すべき秩序変数の数が大幅に増えることである³。その点に注意しさえすれば、通常のレプリカ解析とほぼ同様の方法で $[\ln |Z(y)|]$ 、ひいては零点密度が評価できる。

2.2 モデルとその性質

本稿では p 体相互作用と r 体相互作用の入った全結合の球形スピングラスを取り扱う。ハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = - \sum_{i_1 < \dots < i_p} J_{i_1 \dots i_p} S_{i_1} S_{i_2} \dots S_{i_p} - \epsilon \sum_{i_1 < \dots < i_r} K_{i_1 \dots i_r} S_{i_1} S_{i_2} \dots S_{i_r}. \quad (4)$$

S_i は $\sum_{i=1}^N S_i^2 = N$ という拘束条件の下で任意の値をとる実数である。 $J_{i_1 \dots i_p}, K_{i_1 \dots i_r}$ は平均 0、分散がそれぞれ $p!/N^p, r!/N^r$ のガウス変数である。

この系は、 p, r の値に応じてレプリカ対称性の破れ (RSB) [4] の Step 数及び温度に関するカオス効果（温度カオス）の有無を制御することができる。カオス効果とは、対応するパラメータ（温度カオスなら温度）を微小に変化させた時、平衡状態の典型的スピン配位が急激に変化する効果で、SG などのグラス系に特有の現象である。従ってこの系を解析することにより、カオス効果-RSB-零点の関係性を明瞭に議論することができる。これがこの系を解析する理由である。

3 結果

3.1 複素温度の場合

まず、本稿の主要な成果である複素温度の場合の結果を示す。図 1 に複素温度相図を示した。左から順に $(p, r) = (2, 0)$ (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) となっている。ここから読み取れることとして次の 3 つが挙げられる。P2 相 (RS 解) という 2 次元的零点分布を持った相がいずれの場合も虚軸周辺に存在すること、RSB の有無は SG 相の零点の有無に直接は関係ないこと、カオス効果のあるときにはスピングラス相内に零点があること⁴、である。特に興味深い SG 相の零点は次のように解釈される：SG 転移は、低温でエルゴード性が破れ沢山の⁵熱力学的“状態”が相空間中に出現することにより引き起こされると考えられている⁶。それら“状態”は、互いが無限に高い自由エネルギー壁に隔てられ

³ Z^n から来る n^2 個、 $(Z^*)^n$ から来る n^2 個、 Z^n と $(Z^*)^n$ 間の n^2 個で、合計 $3n^2$ 個の SG 秩序変数を処理する必要がある。また今の場合、それらの秩序変数は複素数値を取ることに注意。これら秩序変数の処理についての詳細は [3] を参照されたい。

⁴ 実軸直上でも零点密度が有限の値をとることは確認している。

⁵ システムサイズの指数関数オーダー。

⁶ もう少し詳しくいうと、これはスピングラスの平均場描像である。有限次元のスピングラスあるいは実際のスピングラス物質の相転移が、このような平均場描像で記述されるかどうかについては長い議論があり今も決着していない。

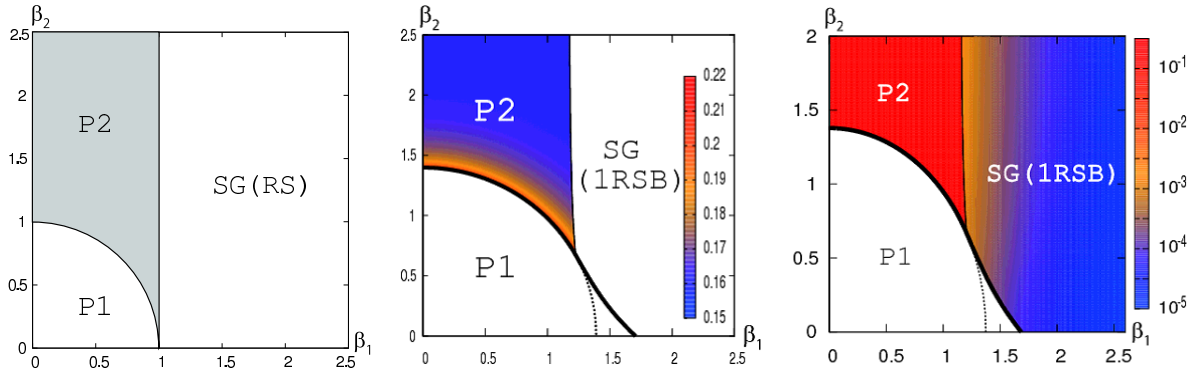


図 1: $(p+r)$ -体相互作用球形 SG モデルの複素温度 ($\beta = \beta_1 + i\beta_2$) 相図と零点密度。左から $(p, r) = (2, 0)$ (RSB 無、温度カオス無); $(3, 0)$ (RSB 有、温度カオス無); $(3, 4)$ (RSB 有、温度カオス有)。太線の相境界上には 1 次元的な零点分布が存在する。白抜き部は零点が存在しない。P1, P2 相は RS 解で記述される。

た熱力学的に安定な“相”である。SG 相はそのような沢山の“相”を内包しており、温度などのパラメータ変化によって自由エネルギーへ最も主要に寄与する“相”は変わり得る。カオス効果はこの“相”の切り替わりとして捉える事が出来る事が知られている⁷。零点が相転移と結びついているという Lee-Yang の主張とこのカオス効果の描像を合わせて考えれば、カオス効果と零点が結びついていることは自然である。

もう一点注意することとして、SG 相内に零点分布があっても、その自由エネルギーは解析的であると言うことが挙げられる。実際、SG 相内の自由エネルギーは少なくとも実軸上で解析的であることが知られている ($(p, r) = (3, 4)$ を含む)。これは、式 (1) がポアソン方程式であり電磁気学とのアナロジーが通用することに気が付くと簡単に理解できる⁸。

3.2 複素磁場の場合

次に複素磁場の結果を以下に示す。解析の結果、 $(p, r) = (2, 0)$ の場合は RSB を考慮する必要はなく、また、磁場に関する虚軸上 (h_2 軸) のみ零点が現れることが分かった。図 2 に $T-h_1-h_2$ 空間の相図と幾つかの温度における零点密度グラフを示す。今の場合、磁場カオスは存在しないことが知られているので、磁場実軸周辺に零点が存在しないことは自然としても、 $h_1 \neq 0$ の領域に全く零点が存在しないのは複素温度の場合とは対照的であり興味深い。現在これに関する物理的考察及び $p \geq 3$ の場合の解析を進めている段階である。

4 まとめ

本稿では、球形スピングラスの温度及び磁場に関する分配関数の零点の解析結果を紹介し、零点・RSB・カオス効果の関係性について議論した。特に重要な知見として、スピングラス相に 2 次元的な零点分布が存在するには RSB が必要なこと、実軸上の零点の有無がスピングラス相におけ

⁷しつこいようだがこれは飽くまで平均場描像である。カオス効果は有限次元のスピングラスでも起こると考えられているが、そのカオス効果は、このような“相”の切り替わりとは必ずしも捉えられないと思われる。

⁸零点分布は電荷分布、自由エネルギーは静電ポテンシャルに対応する。2 次元電荷分布がある領域で静電ポテンシャルが解析的になり得るように、2 次元零点分布がある領域で自由エネルギーは解析的になり得る。

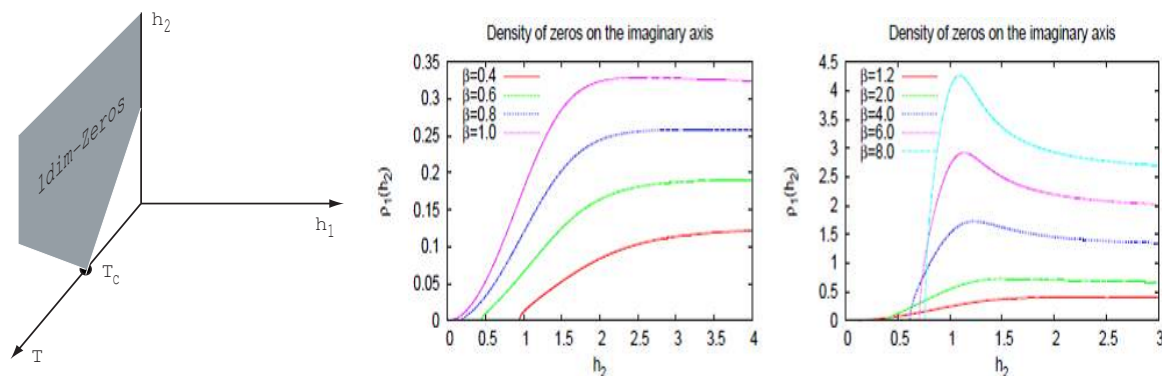


図 2: $p = 2$ -体相互作用球形 SG モデルの複素磁場 ($h = h_1 + ih_2$) 相図 (左) と虚軸上零点密度の転移点より高温側 (中) と低温側 (右) での振る舞い。絶対零度では $h_2 = 1$ で零点密度が発散する。

るカオス効果と密接に結びついていること、という 2 点が挙げられる。特に後者は、カオス効果の新しいプローブを提供するだけでなく、自由エネルギーの特異性としては“現れない”カオス効果を零点が検出しているという点で、零点の新奇な側面を明らかにしている。

分配関数の零点を調べるという問題は、統計物理の問題の中でもややマニアックなものである。しかし、カオス効果のように単に自由エネルギーを計算するだけでは分からない性質が、零点解析によって理解できるとあれば、その解析はより重要性を増すのではないだろうか。本稿の結果が、そのような零点解析の地位向上に役立ち、統計物理における新奇な知見や解析法を提供することにつながれば幸いである⁹。

謝辞

本研究の結果は東工大の高橋和孝氏との共同研究である。また、今回報告した数値計算の一部には京大基研計算機システムを利用しました。ここに感謝申し上げます。

参考文献

- [1] C. N. Yang and T. D. Lee, Phys. Rev. **87** (1952) 404; T. D. Lee and C. N. Yang, Phys. Rev. **87** (1952) 410
- [2] Y. Matsuda, M. Müller, H. Nishimori, T. Obuchi and A. Scardicchio, J. Phys. A **43** (2010) 285002; K. Takahashi, J. Phys. A **44** (2011) 235001
- [3] T. Obuchi and K. Takahashi, J. Phys. A **45** (2012) 125003
- [4] H. Nishimori, スピングラス理論と情報統計力学, 岩波書店 (1999)
- [5] I. Bena, M. Droz and A. Lipowski *Int. J. Mod. Phys. B* **29** (2005) 4269
- [6] G. Düring and J. Kurchan *Europhys Lett.* **92** (2010) 50004

⁹零点の地位向上のため比較的最近の面白い零点研究の成果について紹介しておく。一つの方向性として、非平衡ダイナミクスのある種の母関数の零点を解析するというものがある。ダイナミクスの場合、動的不安定性や分岐現象は熱力学極限を取らずとも存在するが、その特徴づけを零点によってできる可能性があるらしい [5]。また量子モンテカルロにおける負符号問題の難しさの特徴づけに零点理論を用いるものもある [6]。

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

京都大学 大学院情報学研究科 原田 健自¹

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。この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行われてきた。しかし、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。この手法のデモンストレーションとして、2次元イジングモデルの有限サイズスケーリングを取り上げる。

1 スケーリング解析

スケーリング則とは次のような法則であり、臨界現象を特徴づける法則である。

$$A(t, h) = t^x \Psi(ht^{-y}), \quad (1)$$

ここで、 t と h はシステムを記述する変数で、臨界点は $t = h = 0$ とする。指数 x や y は臨界指数と呼ばれ、臨界現象をクラス分けするようなユニバーサルなものであると考えられている。

スケーリング則がもし成立すれば、様々な t と h のデータを、

$$(X_i, Y_i, E_i) \equiv (h_i t_i^{-y}, t_i^{-x} A(t_i, h_i), t_i^{-x} \delta A(t_i, h_i)) \quad (2)$$

のよう変換して得られるデータ点 (X_i, Y_i) は $Y_i = \Psi(X_i)$ のようにスケーリング関数 $\Psi()$ の上に乗るはずである。そのような臨界指数などを評価することをスケーリング解析と呼ぶ。

ただ、スケーリング関数自身は前もってわからないので、従来法では、スケーリング関数をパラメトリックな関数と仮定して、最小二乗法で臨界指数、スケーリング関数ともに統計的検定によって評価してきた。しかし、スケーリング関数がパラメトリックな関数で記述できる保証はなく、例えば、多項式を仮定した場合には適用範囲の問題等があった。

¹E-mail: harada@acs.i.kyoto-u.ac.jp

2 バイズ流スケーリング解析

データの臨界指数等の物理的なパラメータ $\vec{\theta}_p$ とスケーリング関数への依存は、次の確率密度で定義される統計モデルとして記述する。

$$P(\vec{Y}|\Psi, \vec{\theta}_p) \equiv \mathcal{N}(\vec{Y}|\vec{\Psi}, \mathcal{E}), \quad (3)$$

ただし、 $(\vec{Y})_i \equiv Y_i$, $(\vec{\Psi})_i \equiv \Psi(X_i)$, $(\mathcal{E})_{ij} \equiv E_i^2 \delta_{ij}$, $\mathcal{N}(\vec{y}|\vec{\mu}, \Sigma) \equiv \frac{1}{\sqrt{|2\pi\Sigma|}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\vec{y} - \vec{\mu})^t \Sigma^{-1}(\vec{y} - \vec{\mu})\right)$.
ここで、スケーリング関数の統計モデルを $P(\Psi|\vec{\theta}_h)$ で表すと、データのパラメータに対する条件付き確率は、形式的に、

$$P(\vec{Y}|\vec{\theta}_p, \vec{\theta}_h) \equiv \int P(\vec{Y}|\Psi, \vec{\theta}_p) P(\Psi|\vec{\theta}_h) d\Psi. \quad (4)$$

となる。これら条件付き確率を用いることで、パラメータのデータに対する条件付き確率は以下のようなになる (バイズの公式)。

$$P(\vec{\theta}_p, \vec{\theta}_h|\vec{Y}) = P(\vec{Y}|\vec{\theta}_p, \vec{\theta}_h) P(\vec{\theta}_p, \vec{\theta}_h) / P(\vec{Y}), \quad (5)$$

したがって、 $P(\vec{\theta}_p, \vec{\theta}_h) = \text{const}$ と仮定すると、Eq. (4) を用いることで、データからのパラメータの推定を行える。これがバイズ流スケーリング解析である。

3 ガウス過程回帰に基づくバイズ流スケーリング解析

多くの自然な仮定の下で導出される Eq. (4) は、データ点がガウス過程に従う統計モデルと等価であった。そこで、最初から、データ点が次のガウス過程に従うとして、スケーリング解析を行うことを提案する。

$$P(\vec{\theta}_p, \vec{\theta}_h|\vec{Y}) \propto \mathcal{N}(\vec{Y}|0, \Sigma), \quad \Sigma = \mathcal{E} + \Sigma', \quad (\Sigma')_{ij} \equiv K(X_i, X_j). \quad (6)$$

ここで、 $K(\cdot)$ をカーネル関数といい、本研究では次のガウシアンカーネルを用いることを提案する。

$$K(X_i, X_j) = \theta_2^2 + K_G(X_i, X_j), \quad K_G(X_i, X_j) \equiv \theta_0^2 \exp\left(-\frac{(X_i - X_j)^2}{2\theta_1^2}\right). \quad (7)$$

4 2次元イジングモデルの有限サイズスケーリング例

2次元イジングモデルは自発磁化をもつ秩序相へ無秩序相から連続相転移する最も有名なモデルである。秩序変数 M の2次と4次のモーメント比で定義されるのが Binder Ratio U である。有限サイズの系の Binder Ratio U は次のようなスケーリング則に従うことが期待される。

$$U \equiv \frac{1}{2} \left(3 - \frac{\langle M^4 \rangle}{\langle M^2 \rangle^2} \right) = \Psi_B((1/T - 1/T_c)L^{1/\nu}), \quad (8)$$

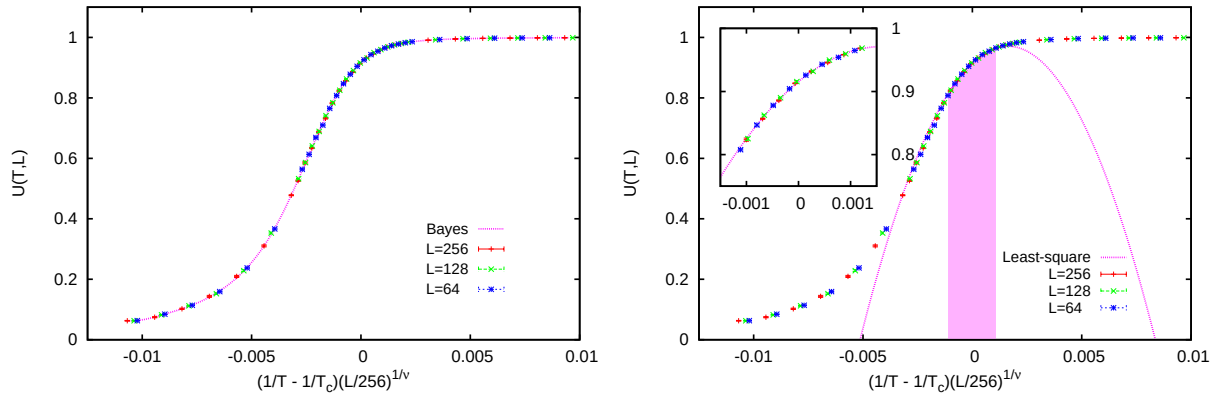


図 1: Binder Ratio の有限サイズスケーリング. 左図はガウス過程回帰 (GP regression) を適用した. その結果, $1/T_c = 0.440683(7)$, $1/\nu = 0.996(2)$ と評価できた. 右図は従来法で, スケーリング関数は 2 次式を過程した. ただし, スケーリング解析に用いたデータは臨界点近傍だけでインセットに拡大したデータだけである. インセットは全体図ではピンクの領域を拡大したものである. その結果, $1/T_c = 0.44069(2)$, $1/\nu = 1.00(2)$ と評価できた.

ここで, T_c は臨界温度で ν は相関長の発散を特徴付ける臨界指数である. また, L は系の格子サイズである.

モンテカルロ法で $L = 256$ までの Binder ratio を求め, それを有限サイズスケーリングした結果が Fig. 1 である. この図からわかるように, 新手法では全データを用いても, 厳密解 ($1/T_c = \ln(1 + \sqrt{2})/2 = 0.4406867925 \dots$, $1/\nu = 1$) を含む臨界温度や臨界指数の評価が行えている. 一方, 従来法では, 臨界点近傍のデータだけを用いる必要があり, スケーリング関数をノンパラメトリックに扱う新手法の有効性が示された.

5 まとめ

臨界現象のスケーリング解析において, スケーリング関数をノンパラメトリックに扱うベイズ推定に基づく新手法を提案した. さらに 2 次元イジングモデルを例にその有効性を示した. 本手法で用いたガウス過程回帰の導出などは, [1] に詳しく述べられている. さらに, 三角格子など他の例も含めた様々な適用例についても同文献に掲載されているので参照していただきたい.²

参考文献

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

²本手法を実装した参照コードを用意したので, 興味のある人は著者まで連絡して下さい.

情報統計力学による光計測技術へのアプローチ¹

群馬工業高等専門学校^A 奈良女子大学^B 雑賀洋平^{A,2} 上江洌達也^B

1 イントロダクション

近年、統計力学とベイズ推論との間にみられる類似性に着目することで、情報科学／工学の諸問題にたいしても統計力学の概念や計算技法が強力なツールになりえることが明らかにされ、物理と情報とをつなぐ基盤として情報統計力学[1,2]が整備された。現在では、情報統計力学は情報科学／工学を中心に、情報通信、計測制御など様々な領域に展開されている。

光学計測[3]-[10]の領域では、望遠鏡技術[3],[4]、合成開口レーダを利用したリモートセンシング[5]など、干渉計を用いた光学計測技術が数多く開発された。このような技術では、干渉縞から計測される位相差が $[-\pi, \pi]$ の主値領域に限定されるために、エイリアシングが発生して位相差に 2π 程度の不連続が現れることがある。したがって、位相差から原光波面の正確な情報を取り出すために、位相差の組から原光波面を再構成する“位相アンラッピング”と呼ばれる情報技術が必要である。この問題にたいして、最小自乗推定[3],[4]、ベイズ推論にもとづく MAP 推定[6]、最大エントロピー法[7]など、様々な立場からの接近が試みられてきた。情報統計力学からも、波面再構成とスピニンググラスの統計力学との対応にもとづく接近[8]が試みられた。しかしながら、この問題について必ずしも系統的な解析がなされたわけではない。

本研究では、情報統計力学と光学計測技術との類似性に着目して、ベイズ推論にもとづく最大事後周辺確率 (MPM) 推定を用いた位相アンラッピングの計算技法[10]を構築した。つぎに、モンテカルロシミュレーションを用いて、適応光学における典型的な光波面にたいする MPM 推定による位相アンラッピングの技法の系統的な性能評価を行った。とくに、ハイパーパラメタ空間における相図をもとに MPM 推定の静的性能評価を行い、MPM 推定におけるモデルシステムを構成する項の役割について検証した。光波面の面性を保持する表面コンシステント条件をモデルシステムに導入することで MPM 推定が有効な領域が拡大できることを明らかにした。また、必ずしも多くのサンプル点でエイリアシングが発生しない原光波面を用いる、という事前情報をあらかずモデルを導入することで、さらに、MPM 推定が有効な領域が拡大されることを明らかにした。併せて、平均二乗誤差の時間発展にもとづく性能評価から MPM 推定の動的性質を明らかにした。

2 定式化のあらまし

ここでは、3 状態イジングモデルの統計力学に立脚して、ベイズ推論にもとづく MPM 推定を

¹ この原稿は、基研研究会「情報統計力学の最前線」における講演内容をまとめたものである。

² E-mail: saika@ice.gunma-ct.ac.jp

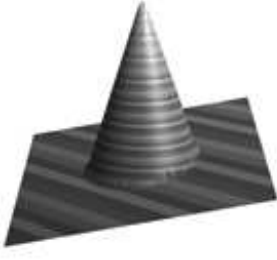


図 1. 原光波面

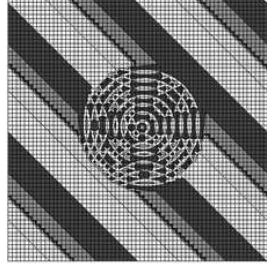


図 2. 図 1 の原光波面の干渉縞

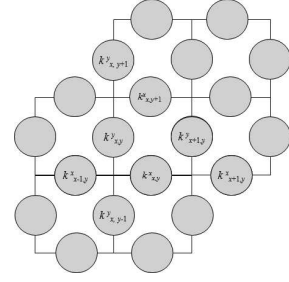


図 3. モデルシステム

用いた位相アンラッピングの問題を定式化する.

まず, 図 1 に示すように, 適応光学における典型的な光波面 $\{\xi_{x,y}\} (0 < \xi_{x,y} < +\infty, x, y=1, \dots, L)$ を考える. つぎに, 図 2 に示すように, 干渉計を用いた光学計測を行い干渉縞 $\{\zeta_{x,y}\} (\zeta_{x,y} = \text{mod}(\xi_{x,y} + \pi, 2\pi) - \pi, x, y=1, \dots, L)$ を観測する. 干渉縞から観測した位相差の組 $\{\tau_{x,y}^x\} (\tau_{x,y}^x = \text{mod}(\zeta_{x+1,y} - \zeta_{x,y}, 2\pi) - \pi)$ および $\{\tau_{x,y}^y\} (\tau_{x,y}^y = \text{mod}(\zeta_{x,y+1} - \zeta_{x,y}, 2\pi) - \pi)$ を位相アンラッピングのために利用する. つぎに, 図 3 に示すように, 正方格子上の 3 状態イジングモデル $\{k_{x,y}^x\} (k_{x,y}^x = -1, 0, +1, x=0, \dots, L-1, y=0, \dots, L)$ および $\{k_{x,y}^y\} (k_{x,y}^y = -1, 0, +1, x=0, \dots, L, y=0, \dots, L-1)$ を考え, ベイズ推論にもとづく MPM 推定を用いて原光波面を再構成する. すなわち, MPM 推定による位相アンラッピングでは,

$$\hat{k}_{x,y}^x = \arg \max_{k_{x,y}^x = -1, 0, +1} \Pr(k_{x,y}^x | \{\tau_{x,y}^x\}, \{\tau_{x,y}^y\}),$$

$$\hat{k}_{x,y}^y = \arg \max_{k_{x,y}^y = -1, 0, +1} \Pr(k_{x,y}^y | \{\tau_{x,y}^x\}, \{\tau_{x,y}^y\})$$

にもとづいて, 各サイトにおける事後周辺確率を最大化するように原光波面を再構成する. このとき, 事後周辺確率分布関数は,

$$\Pr(k_{x,y}^x | \{\tau_{x,y}^x\}, \{\tau_{x,y}^y\}) = \sum_{\{k_{x,y}^x\} \neq k_{x,y}^x} \sum_{\{k_{x,y}^y\}} \Pr(\{k_{x,y}^x\}, \{k_{x,y}^y\} | \{\tau_{x,y}^x\}, \{\tau_{x,y}^y\})$$

$$\Pr(k_{x,y}^y | \{\tau_{x,y}^x\}, \{\tau_{x,y}^y\}) = \sum_{\{k_{x,y}^y\} \neq k_{x,y}^y} \sum_{\{k_{x,y}^x\}} \Pr(\{k_{x,y}^x\}, \{k_{x,y}^y\} | \{\tau_{x,y}^x\}, \{\tau_{x,y}^y\})$$

である. ここで, 事後確率分布関数の評価には, ベイズ公式にもとづいて事前分布関数のモデルおよび尤度を用いる. 本研究では事前分布関数のモデルとして, 必ずしも多くのサンプル点でエイリアシングが発生しない原光波面を用いる, という事前情報をあらわすモデル:

$$\Pr(\{k_{x,y}^x\}, \{k_{x,y}^y\}) \propto \exp \left[-\frac{h}{T_m} \sum_{(x,y)} (|k_{x,y}^x| + |k_{x,y}^y|)^2 \right]$$

を仮定する. このとき, h, T_m はハイパーパラメタである. また, 尤度として, 原光波面は滑らかな曲面を構成することをあらわすために,

$$\Pr(\{\tau^x\}, \{\tau^y\} | \{k^x\}, \{k^y\}) \propto \exp \left[-\frac{1}{T_m} \left\{ \frac{J}{(2\pi)^2} H_{\text{int}}(\{k^x\}, \{k^y\}) + \frac{\Gamma}{(2\pi)^2} H_{\text{sc}}(\{k^x\}, \{k^y\}) \right\} \right]$$

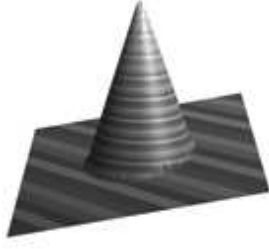


図 4. 復元した光波面

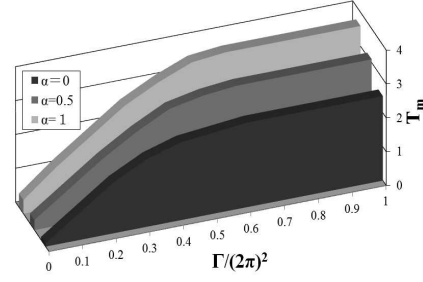


図 5. MPM 推定が有効なパラメタ領域

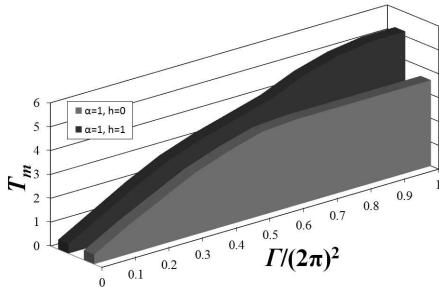


図 6. MPM 推定が有効なパラメタ領域

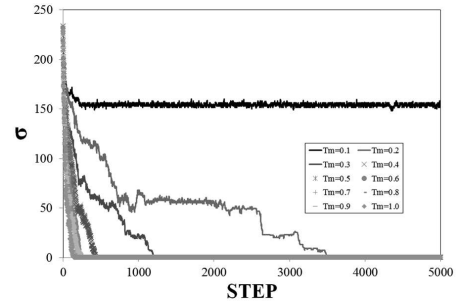


図 7. 平均二乗誤差の MCS 数依存性

を用いる。このとき、

$$H_{\text{int}}(\{k^x\}, \{k^y\}) = \sum_{(x,y)} (\tau_{x,y}^x - \tau_{x+1,y}^x + 2\pi(k_{x,y}^x - k_{x+1,y}^x))^2 + \sum_{(x,y)} (\tau_{x,y}^y - \tau_{x,y+1}^y + 2\pi(k_{x,y}^y - k_{x,y+1}^y))^2$$

$$+ \alpha \sum_{(x,y)} (\tau_{x,y}^x - \tau_{x,y+1}^x + 2\pi(k_{x,y}^x - k_{x,y+1}^x))^2 + \alpha \sum_{(x,y)} (\tau_{x,y}^y - \tau_{x+1,y}^y + 2\pi(k_{x,y}^y - k_{x+1,y}^y))^2$$

$$H_{\text{sc}}(\{k^x\}, \{k^y\}) = \sum_{(x,y)} (\tau_{x,y}^x + \tau_{x+1,y}^y - \tau_{x+1,y}^x - \tau_{x,y}^y + 2\pi(k_{x,y}^x + k_{x+1,y}^y - k_{x,y+1}^x - k_{x,y}^y))^2$$

である。 $H_{\text{int}}(\{k^x\}, \{k^y\})$ は光波面の滑らかさを強調する項であり、 $H_{\text{sc}}(\{k^x\}, \{k^y\})$ は原光波面が曲面を構成するという表面コンシステント条件をあらわす項である。このとき、 J, α, Γ はハイパーパラメタである。また、原光波面の再構成には、MPM 推定を用いて導出した $\{k^x\}, \{k^y\}$ から原光波面 $\{z_{x,y}\} (0 < z_{x,y} < +\infty, x, y = 0, \dots, L-1)$ を求めることができる。

また、ベイズ推論にもとづく MPM 推定の性能評価には、平均二乗誤差：

$$MSE = \sum_{x=0}^{L-1} \sum_{y=0}^{L-1} (z_{x,y} - \xi_{x,y})^2$$

を用いる。

3 性能評価

ここでは、モンテカルロシミュレーションを用いて、MPM 推定の典型的な光波面にたいする

静的／動的性質を評価した結果を示す。

まず、図 2 に示す、適応光学における典型的な原光波面にたいする MPM 推定の性能評価から MPM 推定が有効なパラメタ領域を明らかにした。性能評価の際には、パラメタごとに 20000MCS のモンテカルロシミュレーションを実行し、平均二乗誤差の評価には 10 サンプルについての統計平均をとった。図 5 に示すように、表面コンシステント条件を導入することで、MPM 推定が有効なパラメタ領域が拡大することを明らかにした。ここでは、 $\sigma=0.2$, $J=1$, $h=1$ とおいた。また、図 6 に示すように、原光波面を観測する場合、必ずしも多くのサンプル点ではエイリアシングが起こらないという事前情報を導入することで、MPM 推定がこの問題に有効な温度領域をさらに拡大できることを明らかにした。ここでは、 $\sigma=0.2$, $J=1$, $h=1$ とおいた。同様に、図 7 に示すように、平均二乗誤差のステップ数依存性から、MPM 推定の動的性質について検証した。MPM 推定が有効な領域では、パラメタ T_m についてなるべく大きな値を設定することで、より速やかな位相アンラッピングを実現できることを明らかにした。これらの結果は、MPM 推定による位相アンラッピングの有効性を示すものである。

4 まとめと今後の課題

上記の章では、リモートセンシングにおける位相アンラッピングの問題にたいして、ベイズ推論にもとづく MPM 推定を用いた位相アンラッピングの手法を構築し、適応光学における典型的な光波面にたいするモンテカルロシミュレーションを行い静的／動的性質を明らかにした。今回の研究をもとに、光波面の面性を保持する表面コンシステント条件をモデルシステムに導入することで MPM 推定が有効な領域が拡大できることを明らかにした。また、必ずしも多くのサンプル点でエイリアシングが発生しない原光波面を用いる、という事前情報をあらかずモデルを導入することで、さらに、MPM 推定が有効な領域が拡大されることを明らかにした。併せて、平均二乗誤差の時間発展にもとづく性能評価から MPM 推定の動的性質を明らかにした。

今後の課題としては、今回のベイズ推論にもとづく MPM 推定を現実のリモートセンシングの問題に応用して、実用可能性について吟味することである。

参考文献

- [1] H. Nishimori, “Theory of spin glasses and information; An introduction”, Oxford, London, 2001.
- [2] K. Tanaka, J. Phys. **35**(37) (2002), R31.
- [3] D. L. Fried, J. Opt. Soc. Am. **67** (1977), 370.
- [4] R. H. Hudgin, J. Opt. Soc. A. **67** (1977), 375.
- [5] R. M. Goldstein and H. A. Zebker, Nature, **328** (1987), 707.
- [6] L. Guerriero, G. Nico, G. Pasquariello and Stramaglia, Appl. Opt. **37** (1998) 3053.
- [7] G. Nico, et al., IEEE Trans. Signal. Processing, **48**(9) (2000), 2545.
- [8] Y. Saika and H. Nishimori, Prog. Theor. Phys. Suppl., **157** (2005), 292.
- [9] A. P. Shanker and H. Zebker, J. Opt. Soc. Am. A, **27**(3) (2010) 605.
- [10] Y. Saika and T. Uezu, IEICE. Technical Report, NLP2012-4 (2012), 61.

Cavity 法による相互依存型ネットワークの解析

東京工業大学大学院 総合理工学研究科 渡辺 駿介¹, 樺島 祥介

1 はじめに

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わされる。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。

¹E-mail: watanabe.s.as@m.titech.ac.jp

2 相互依存型ネットワークにおけるカスケード現象

本稿で考察する相互依存型ネットワークでは、ネットワーク A におけるサイトとネットワーク B におけるサイトは 1 対 1 対応で依存していると仮定する。つまり A におけるサイトが故障すれば、B におけるサイトも故障する。このモデルにおける連鎖破壊が以下のように記述される [1]。

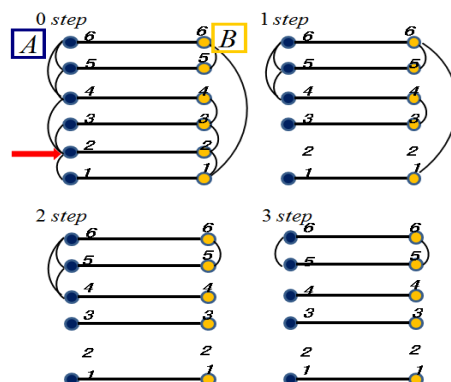


図 1: 相互依存型の連鎖破壊の概念図

第 0 段階 :A に対してランダムサイトアタックを行う。図は番号 2 のサイトがアタックされたことを赤い矢印で示している。それによって番号 2 に接続されていたボンドも消滅される。

第 1 段階 :A において番号 2 のサイトが取り除かれた（故障した）ことにより、B におけるサイト番号 2 のサイト、及び番号 2 のサイトに接続されていたボンドも取り除かれる。A は 3 つのクラスタに分割される。

第 2 段階 :B におけるクラスタと A におけるクラスタとを比較し、B 側から観測して双方のクラスタが一致するように B におけるボンドを消滅させる。ここでは番号 1 と番号 6 を接続するボンドと、番号 3 と番号 4 を接続するボンドが消滅させられる。それによって B も 4 つのクラスタに分割される。

第 3 段階 :B におけるクラスタと A におけるクラスタとを比較し、A 側から観測して双方のクラスタが一致するように A におけるボンドを消滅させる。ここでは番号 4 と番号 6 を接続するボンドが消滅させられる。

この例では第 3 段階で双方のクラスタが一致したことにより、連鎖破壊は終了する。一般的には第 2 段階と第 3 段階が、両方のネットワークのクラスタが完全に一致するまで交互に繰り返される。

3 理論解析

3.1 Cavity 法による定式化

次数分布 $P(k)$ により特徴づけられるランダムネットワークを考える．今，サイト i が GC に入っているかどうかを調べたい．サイト i に k 本のボン드가接続されているとすると， $k-1$ 本の入力と 1 本の出力とに分けて考え，かつサイト i が cavity(空洞) であるとする．サイト i と結合していたサイト同士はサイト i が cavity である場合には分断されるため，GC に属すかどうかに関して互いに独立であるともみなすことが出来る (局所ツリー近似) ．

ネットワークのランダムアタック確率を $1-p$ とし，あるひとつのサイトに着目する．サイトに接続されているボンダから，GC に属していないことを示す入力メッセージが入力される確率はボンダ 1 本当たり，アタックによって故障したサイト (割合 $1-p$) 及び，故障していないサイト (割合 p) の内 GC に属していないものの和である．着目しているサイトと結合しているサイトがどのような次数分布を持つかを知るにはボンダの次数分布 $R(k) = kP(k) / \sum_l lP(l)$ を考えればよい．このことから

$$I = 1 - p + p \sum_k R(k) U_k \quad (1)$$

となる．入力 I は一様入力として計算されるのに対し，出力 U_k は次数 k に応じて変化することに注意したい．ランダムネットワークを考える場合，次数 k のサイトからの出力 U_k は，一様入力 I の $k-1$ 本分の積として計算されるので，次式が成り立つ．

$$U_k = I^{k-1} \quad (2)$$

I, U は式 (1), (2) から自己無撞着に求めることができる．

任意のサイトが GC に属す確率 μ は，サイトの次数分布 $P(k)$ を使って次式で表わすことが出来る．

$$\mu = p \sum_k P(k) (1 - I^k) \quad (3)$$

3.2 グラフ理論との比較

グラフの次数分布のみを考慮する場合，Cavity 法における定式化による導出結果とグラフ理論における定式化による導出結果は一致する．

グラフ理論では，「ランダムに選んだボンダの端にあるサイトが故障していない場合に，GC に属していないというメッセージを出力する確率」と解釈できる f という量を，以下によって自己無撞着に求めている [3, 4]．

$$\begin{aligned} f &= \tilde{H}(f, p) = \frac{\sum_k k P(k)}{\langle k \rangle} (f p + 1 - p)^{k-1} \\ &= \sum_k R(k) (1 - p + p f)^{k-1} \end{aligned} \quad (4)$$

この f と生成関数 $G(x) = \sum_k P(k)x^k$ を用いて, GC の大きさは次式で評価される。

$$\mu = p(1 - G(fp + 1 - p)) \quad (5)$$

Cavity 法との対応を示す. 数式 (1), 数式 (2) より

$$\begin{aligned} U_k &= I^{k-1} = (1 - p + p \sum_k R(k)U_k)^{k-1} \\ &= [\sum_k R(k)(1 - p + pU_k)]^{k-1} \\ &= [1 - p + p \sum_k R(k)U_k]^{k-1} \end{aligned} \quad (6)$$

式 (6) の両辺に $R(k)$ をかけて, k に関して和をとる.

$$\sum_k R(k)U_k = \sum_k R(k)[1 - p + p \sum_k R(k)U_k]^{k-1} \quad (7)$$

これと式 (4) から Cavity 法における $\sum_k R(k)U_k$ とグラフ理論における f が等価であることが分かる. すなわち, I は f を用いて以下のように表現することが出来る.

$$I = 1 - p + p \sum_k R(k)U_k = 1 - p + pf \quad (8)$$

3.3 パーコレーション閾値の評価

式 (1)~(3) を相互依存型ネットワークに適用することで, 連鎖破壊後の GC の大きさを理論的に評価することが出来る. 特に $\mu = 0$ とする条件からパーコレーション閾値 p_c を求めることで, ランダムアタックに対するネットワークの頑健性を特徴づけることが可能になる.

3.2 に示したように, 次数に相関のないネットワークについては Cavity 法はグラフ理論と等価な結果を与える. Cavity 法の利点は次数相関のあるネットワークの拡張が容易なことであると考えられる.

謝辞

日頃より多くの知識や示唆を頂いた竹田助教に深く感謝致します.

参考文献

- [1] S. V. Buldyrev, R. Parshani, G. Paul, H. E. Stanley, and S. Havlin, Nature **464**, 1025 (2010).
- [2] Y. Shiraki, and Y. Kabashima, Phys. Rev. E **82**, 036101 (2010).
- [3] M. E. J. Newman, Phys. Rev. E **66**, 016128 (2002).
- [4] J. Shao, S. V. Buldyrev, L. A. Braunstein, S. Havlin, Phys. Rev. E **80**, 03615 (2009).

1-Bit 圧縮センシングの統計力学的解析

東工大 総理工
許インイン¹, 樺島祥介

1 はじめに

画像、音声、動画などのデータはサイズが大きいため、圧縮された形で保存される場合が多い。こうした観点に立つと、せっかく労力をかけて取得したデータの大半保存する際にただ捨てられるのは、コストの無駄のように思える。実際、実世界にあらわれる多くのデータは高次元で表現されているものの、表現基底を適切に変換すると、ゼロの成分が多く含まれ、スパースに表現される。**圧縮センシング**とは、原信号がこのようなスパースであるという仮定の下で、データを取る段階において、圧縮した形で計測する方法である。この圧縮し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 [1]。

こうした研究では、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ものがほとんどである。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形ではなく、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**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方法である。1-Bit 圧縮センシングでは、元の情報を計測した時の各成分の符号 (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、統計力学で発展した性能解析法であるレプリカ法により、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解明する。

¹E-mail: yingxu@sp.dis.titech.ac.jp

2 1-Bit 圧縮センシング

1-Bit 圧縮センシングの数理モデルを説明する．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 $\mathbf{x}$ を任意の正定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

$$|\mathbf{x}|^2 = N \quad (2)$$

とし，以下の方針によって信号を復元する．

$$\min |\mathbf{x}|_1 \quad \text{subj. to} \quad \mathbf{y} = \text{sign}(\mathbf{A}\mathbf{x}) \text{ and } |\mathbf{x}|^2 = N \quad (3)$$

3 統計力学的解析

1-Bit 圧縮センシングのモデルの分配関数は

$$Z(\beta; A, \mathbf{x}^0) = \int d\mathbf{x} \delta(|\mathbf{x}|^2 - N) \Theta(\mathbf{y} \mathbf{A} \mathbf{x}) e^{-\beta |\mathbf{x}|} \quad (4)$$

で与えられる．ただし， $\Theta()$ は階段関数である． $A, \mathbf{x}^0$ を固定した時の復元結果は， $\beta \rightarrow \infty$ における (4) の積分の主要項に対応する．性能評価を行うためには，様々な $A, \mathbf{x}^0$ に対する復元結果の平均を求める必要がある．これを統計力学のレプリカ法

$$\frac{1}{N} \left[\ln Z(\beta; A, \mathbf{x}^0) \right]_{A, \mathbf{x}^0} = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial n} \frac{1}{N} \left[\ln Z^n(\beta; A, \mathbf{x}^0) \right]_{A, \mathbf{x}^0} \quad (5)$$

を用いて $N \rightarrow \infty$ で行った．

4 結果その1

得られた結果の一部を図1に示す. 図1は原信号のスパース率 $\rho = 0.0625$ の場合の平均自乗誤差 (MSE) のグラフである. この結果は参考文献 [2] に示されている実験的評価と近い性能を示している.

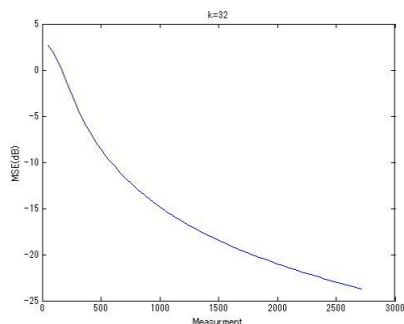


図 1: 縦軸は原信号 $\mathbf{x}^0$ と復元信号 $\hat{\mathbf{x}}$ との誤差 MSE(db) を表す.

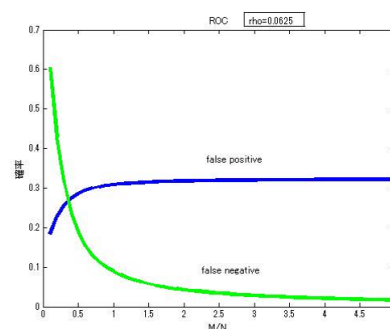


図 2: 縦軸は確率, 横軸は $\frac{M}{N}$ を表す.

5 結果その2

復元結果のよし悪しを評価するには, MSE のほかに**受信者操作特性** (ROC) もさまざまな場合に重要である. 図2は理論による評価の結果である.

この結果は, MSE がよい値になっている場合でも, 各信号成分がゼロか非ゼロかを判定する目的では必ずしも高い性能を与える訳ではないことを示唆している. 具体的には, 1 信号成分あたりの観測数 $\frac{M}{N}$ が無限大の極限であっても, 信号成分がゼロであるのに非ゼロと判定してしまう確率 (false positive) はゼロにならない. したがって, $L1$ 復元法は ROC のためのデータ量効率化にはつながらないと考えられる.

参考文献

- [1] Candes, Emmanuel J. and Wakin, Michael B. (2008) *An Introduction To Compressive Sampling [A sensing/sampling paradigm that goes against the common knowledge in data acquisition]*. IEEE Signal Processing Magazine, 25 (2). pp. 21-30. ISSN 1053-5888
- [2] 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

奈良女子大学大学院 人間文化研究科 物理科学専攻 大谷 遥, 吉田 緑, 上江洌 達也¹

人が寝ている間に夢を見ることで、記憶を整理しているという考えがある [1][2]。記憶の整理とは、必要な記憶の強化と不必要な記憶の削除である。我々は、後者の不必要な記憶の削除つまり反学習について有限個のパターンを埋め込んだ Hopfield model[3] を用い研究してきた。Hopfield model では、埋め込んだ記憶の他に複数の記憶が混合した混合状態も安定な領域を持っている [4]。我々は、学習する上ではこの混合状態が不必要な記憶であると考え、反学習する対象とみなし研究をしてきた [5]。ここでは、複数の混合状態の反学習について報告する。

1 Hopfield model

1.1 従来の Hopfield model

ニューロンの総数を N 、ニューロンの状態を s_i ($i = 1 \sim N$) とする。ここで、 $s_i = +1$ は発火状態、 $s_i = -1$ は非発火状態を表す。ここに、 p 個のパターンを埋め込む。埋め込むパターンを $\xi^\mu = \{\xi_1^\mu, \xi_2^\mu, \dots, \xi_N^\mu\}$ ($\mu = 1 \sim p$) と表す。ここで $\xi_i = \pm 1$ とする。これらのパターンは相関を持たないとし、各 i, μ について独立に、

$$\text{Prob}[\xi_i^\mu = +1] = \text{Prob}[\xi_i^\mu = -1] = \frac{1}{2} \quad (1)$$

とする。また、ニューロン全体の状態を $\mathbf{s} = \{s_i\}$ とする。 j 番目のニューロンから i 番目のニューロンへの結合荷重を J_{ij} とすると、Hopfield model のシナプス結合荷重 J_{ij} は、

$$\begin{cases} J_{ij}^H = \frac{1}{N} \sum_{\mu=1}^p \xi_i^\mu \xi_j^\mu & (i \neq j), \\ J_{ii}^H = 0 \end{cases} \quad (2)$$

と与えられる。ある時刻 t での i 番目のニューロンへの入力信号 $h_i(t)$ は、

$$h_i(t) = \sum_{j(\neq i)} J_{ij} s_j(t) \quad (3)$$

と表される。非同期更新を行うとき、次の時刻 $t+1$ でのニューロンの状態 $s_i(t+1)$ は、

$$s_i(t+1) = \text{sgn}\{h_i(t)\} \quad (4)$$

となる。

¹E-mail: {mashiroke,uezu}@ki-rin.phys.nara-wu.ac.jp

1.2 Mixed state

Hopfield model において想起されるものは、埋め込んだ複数のパターン ξ^μ (Hopfield attractor) と、奇数個の埋め込みパターンが混合したものの $\xi^{mix} = \{\xi_1^{mix}, \xi_2^{mix}, \dots, \xi_N^{mix}\}$ である。これを Mixed state と呼ぶ。最も単純な Mixed state は、3つの埋め込みパターンが混合したものである。

$$\xi_i^{mix} = \text{sgn}(\pm \xi_i^1 \pm \xi_i^2 \pm \xi_i^3) \quad (5)$$

つまり、 ξ^{mix} はパターン ξ^1 、 ξ^2 、 ξ^3 の混合状態である。符号の組み合わせは8通りあるが、符号が反転したのも同時に埋め込まれるので、考慮すべき混合状態は $\xi_i^4 = \text{sgn}(\xi_i^1 + \xi_i^2 + \xi_i^3)$ 、 $\xi_i^5 = \text{sgn}(\xi_i^1 + \xi_i^2 - \xi_i^3)$ 、 $\xi_i^6 = \text{sgn}(\xi_i^1 - \xi_i^2 + \xi_i^3)$ 、 $\xi_i^7 = \text{sgn}(\xi_i^1 - \xi_i^2 - \xi_i^3)$ 、の4つとなる。

1.3 反学習項を加えた Hopfield model

以下では、ニューロンが確率的に状態更新する場合を考える。ニューロン i の状態が ± 1 をとる確率を、

$$\text{Prob}[s_i(t+1) = \pm 1] = \frac{1 \pm \tanh\{\beta h_i(t)\}}{2} \quad (6)$$

とする。ここで、 $\beta = \frac{1}{T}$ とし、 T はノイズの強さを表す。ここでは、「温度」と呼ぶ。Hopfield model では ξ^4 は $T < 0.46$ の範囲で安定である。想起される状態を忘れさせることを反学習と呼び、1つ目の反学習する対象を混合状態 ξ^4 とする。ここでは、反学習する対象が決まっているため結合荷重を変化させることで反学習を行う。結合荷重の変化分を、

$$\Delta J_{ij} = -\frac{\eta}{N} \xi_i^4 \xi_j^4 \quad (7)$$

とする。 η は反学習係数である。式 (7) は混合状態のみを反学習するように見えるが、 ξ^4 と ξ^μ の相関は $\langle \xi^4 \xi^\mu \rangle = \frac{1}{2}$ ($\mu = 1 \sim 3$) である。つまり、混合状態を反学習することによって埋め込んだパターンの成分も取り除いていることになる。本研究では、式 (7) が attractor にどのような影響を及ぼすか調べた [5]。その結果、反学習係数 η が $\eta \sim 0.5$ で混合状態が消失することがわかった。そのとき、埋め込んだパターンが安定な領域は一定であることもわかった。

2 複数の混合状態の反学習

ここでは、複数の混合状態の反学習について考える。2.1 では反学習する混合状態を2つに増やした場合について考え、2.2 では結合荷重を一般化した場合について考える。

2.1 2つの混合状態の反学習

ここでは、2つの混合状態を同時に反学習する場合について考える。2つ目の反学習する対象を混合状態 $\xi^5 = \text{sgn}(\xi_i^1 + \xi_i^2 - \xi_i^3)$ とする。このときの結合荷重の変化分を、

$$\Delta J'_{ij} = -\frac{\eta}{N} \xi_i^4 \xi_j^4 - \frac{\zeta}{N} \xi_i^5 \xi_j^5 \quad (8)$$

とする。 ζ は混合状態 ξ^5 の反学習係数である。

ここで、1つの混合状態を反学習した場合と2つの混合状態を反学習した場合にどのような違い

があるのか調べるため数値計算を行った。以下に、マルコフチェイン・モンテカルロシミュレーション (MCMC) の結果を示す。ニューロンの初期状態を Hopfield attractor 又は Mixed state とし、 $\mathbf{m} = (m^1, 0, 0, m^4)$ 又は $\mathbf{m} = (m^1, m^1, m^1, m^4)$ とする。ニューロン数を $N = 100,000$ 、モンテカルロステップを 500 とする。グラフの縦軸はニューロンの状態 s とパターン ξ^μ ($\mu = 1 \sim 5$) とのオーバーラップ m^μ 、横軸はモンテカルロステップを表す。ここで、実線は反学習係数 ζ が 0 でないときの m^μ を表し、記号は反学習係数 ζ が $\zeta = 0$ のときの m^μ を表す。また、 m^1 は赤色、 m^2 は緑色、 m^3 は青色、 m^4 は桃色、 m^5 は水色で表す。

図 1 の結果から、 ζ の値が小さい場合は $\zeta = 0$ の結果と定性的に同じであると考えられる。図 2~4



図 1: $\eta = 0.5, T = 0.2, \zeta = \pm 0.1$, Mixed state 的 図 2: $\eta = 0.5, T = 0.2, \zeta = -0.5$, Mixed state 的



図 3: $\eta = 0.5, T = 0.7, \zeta = 0.5$, Mixed state 的 図 4: $\eta = 0.5, T = 0.7, \zeta = -0.5$, Mixed state 的

の結果から、 ζ の値が大きい場合は、 $\zeta > 0$ では 2 つ目の混合状態を不安定化させ、 $\zeta < 0$ では 2 つ目の混合状態を安定化させることがわかった。混合状態同士の相関について、

$$\langle \xi^4 \xi^5 \rangle = \langle \xi^4 \xi^6 \rangle = \langle \xi^4 \xi^7 \rangle = \langle \xi^5 \xi^6 \rangle = \langle \xi^5 \xi^7 \rangle = \langle \xi^6 \xi^7 \rangle = 0 \quad (9)$$

となる。よって全ての混合状態 $\xi^4, \xi^5, \xi^6, \xi^7$ 同士の相関もないと考えられる。

2.2 結合荷重の一般化

今までは、数個の混合状態の反学習を考えてきた。ここでは、全ての混合状態を取り除くために、結合荷重を一般化する。1 つの混合状態の反学習を行う場合の結合荷重は、

$$J_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\mu=1}^3 \xi_i^\mu \xi_j^\mu - \frac{\eta}{N} \xi_i^4 \xi_j^4 \quad (10)$$

であった。これを一般化すると、

$$J_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\mu=1}^7 \zeta_\mu \xi_i^\mu \xi_j^\mu \quad (11)$$

となる。 $\zeta_\mu < 0$ のときが反学習である。ここでは $\zeta_1 = \zeta_2 = \zeta_3 = 1$ とし、 $\zeta_4 \sim \zeta_7$ は負とする。ここで、サブラティス磁化を導入する。 $\Lambda_1 = \{i | (\xi_i^1, \xi_i^2, \xi_i^3) = (1, 1, 1)\}$ とし、 $\Lambda_2 \sim \Lambda_8$ も同様に表す。サブラティス磁化 M_l を

$$M_l = \frac{1}{|\Lambda_l|} \sum_{i \in \Lambda_l} s_i = \frac{8}{N} \sum_{i \in \Lambda_l} s_i \quad (12)$$

と定義する。このとき、オーバーラップ m^μ は、

$$m^\mu = \frac{1}{8} \sum_{l=1}^8 \xi^{\mu,l} M_l \quad (13)$$

と表される。平衡状態では、 $M_{l+4} = -M_l$ であることがわかるので $M_1 \sim M_4$ で $m^1 \sim m^7$ を表すことができる。ここで、 $\mathbf{m} = (m^1, m^2, m^3, m^4)^T$ 、 $\mathbf{M} = (M_1, M_2, M_3, M_4)^T$ とおくと、

$$\mathbf{m} = \frac{1}{4} X \mathbf{M} \quad (14)$$

$$\mathbf{M} = 4X^{-1} \mathbf{m} \quad (15)$$

$$X = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (16)$$

となる。したがって、系の平衡状態を m^1, m^2, m^3, m^4 の4変数のみで表すことができることがわかる。

3 まとめと今後の課題

2つの混合状態を反学習した結果、反学習係数 ζ が小さい場合は $\zeta = 0$ の場合と定性的には同じであった。また、それぞれの混合状態は相関がないため2つ目の混合状態の反学習は $\zeta > 0$ では2つめの混合状態を不安定化させ、 $\zeta < 0$ では2つめの混合状態を安定化させることがわかった。

さらに、結合荷重の一般化により、 $m^1 \sim m^7$ の7つの系の平衡状態が $m^1 \sim m^4$ の4変数のみで表すことができることがわかった。今後の課題としては、一般化された結合荷重を用い、全ての混合状態の反学習をし、相図を描くことが挙げられる。また、本研究では有限個のパターンを埋め込んだファイナイトローディングの場合を対象としているため、無限個のパターンを埋め込んだ場合の研究が挙げられる。

参考文献

- [1] F. C. Crick, G. Mitchison, “The function of dream sleep,” *Nature* **304** (1983), 111-114.
- [2] J. J. Hopfield, D. I. Feinstein, R. G. Palmer, “‘Unlearning’ has a stabilizing effect in collective memories,” *Nature* **304** (1983), 158-159.
- [3] J. J. Hopfield, “Neural Networks and Physical Systems with Emergent Collective Computational Abilities,” *Proceedings of the National Academy of Sciences of USA* **79** (1982), 2554-2558.
- [4] John Hertz, Anders Krogh, Richard G. Palmer, *INTRODUCTION TO THE THEORY OF NEURAL COMPUTATION*, Santa Fe Institute Studies in the Sciences of Complexity, Addison-Wesley Publishing Company, (1991).
- [5] 大谷 遥, 吉田 緑, 上江洸 達也, IEICE Technical Report **111** (2012), 19-24.

表現型ゆらぎによる進化の促進

東京大学 総合文化研究科 齊藤 稔¹, 石原秀至², 金子邦彦³

表現型可塑性が進化速度を加速するというボールドウィン効果には、様々な議論が存在し、数理的な決着が依然付いていない。本研究で我々は多峰の適応度地形ではボールドウィン効果が起こることを解析的に示した。また大きすぎる表現型可塑性はエラーカタストロフを導くことも示した。

1 イントロダクション

ダーウィン進化において、遺伝可能な形質は基本的には遺伝型のみであるため、表現型の動的な性質はしばしば見落とされがちである。しかし一個体時間中の体細胞適応などといった表現型の可塑性は進化過程に大きく寄与する。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, 2]。ボールドウィン効果によれば、表現型可塑性により進化は加速される、とされる。しかし、逆にそのような可塑性が進化速度を遅くするという理論研究（シミュレーション [3]、解析計算 [4, 5]）も存在するため、ボールドウィン効果の有効性について決着がついていない。それらの先行研究は、単峰の適応度地形を用いた（図 1(a)）。しかし、実際の生命が感じる適応度地形は多数の局所最大値を持つような多峰の適応度地形であると考えられる [6]。我々は多峰の適応度地形として最も単純な $\cos$ 型の適応度地形を用い、表現型可塑性が進化を加速するのかを調べた。結果として、多峰の適応度地形では表現型可塑性は一般的に進化を加速することを示した。

表現型可塑性には環境に対して応答的なもの（例えばサバクトビバッタのように、群衆密度に応じて表現型を変化させるような表現型可塑性）と完全にランダムな環境に非応答的な表現型可塑性（大腸菌の見せる確率的遺伝子発現 [7] など）に分けられる。本研究は主に非応答的なもの（表現型ゆらぎ）を扱ってはいるが、応答的な表現型可塑性についても同様の結果が得られると思われる。

2 表現型ゆらぎによる適応度地形の変形

集団の各個体が一次元連続値を取る遺伝型 g および表現型 x を持つような個体集団の進化ダイナミクスを考える。ここで表現型 x は遺伝型 g から $P(x|g)$ の確率で発現し、発現した表現型 x に

¹E-mail: saito@complex.c.u-tokyo.ac.jp

²E-mail: shuji@complex.c.u-tokyo.ac.jp

³E-mail: kaneko@complex.c.u-tokyo.ac.jp

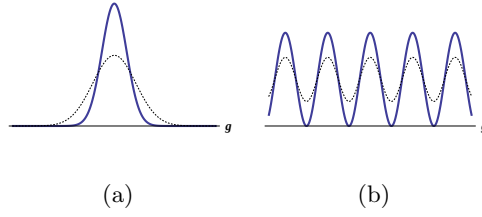


図 1: 実線はもとの適応度地形、点線は表現型可塑性によって変形された適応度地形を表す

応じて適応度が $V(x)$ で与えられるとする。このとき、遺伝型 g を持つ個体が平均的に得る適応度 $f(g)$ は

$$f(g) = \int V(x)P(x|g)dx \quad (1)$$

と表される。ここで $P(x|g)$ を単純なガウス分布 $P(x|g) = \exp(-\frac{(x-g)^2}{2\Sigma})/\sqrt{2\pi\Sigma}$ であるとする、表現型ゆらぎ Σ の大きさによって実効的な適応度 $f(g)$ は図 1(a),(b) のように変形する。我々は多峰をもつような適応度地形の最も単純な例として図 1(b) のような周期ポテンシャルについて解析した。

3 進化ダイナミクス

人口サイズ固定の、世代間の重なりが無い、無性生殖する集団の進化ダイナミクスを考える。 t 世代目の集団は、 $t+1$ 世代目に適応度に比例した確率で子孫を残せるとすると、遺伝型 g を持つ個体が次世代に残す子孫の総数は $f(g)N^t(g)/\langle f \rangle$ となる。ただし、 t 世代目の集団の遺伝型の分布を $N^t(g)$ とし、また $\langle f \rangle = \int_g dg N^t(g)f(g)$ である。ただし人工サイズは 1 に規格化されているとする ($\int_g N(g)dg = 1$)。次世代の個体の遺伝型は突然変異により ξ だけ親世代の遺伝型とこととする。ここで ξ を平均 0 分散 D_g (突然変異率) のガウス乱数であるとする、進化ダイナミクス全体は

$$N^{t+1}(g) = M_{g,g'}[\frac{f(g)N^t(g)}{\langle f \rangle}] \quad (2)$$

と書ける。ここで $M_{g,g'}$ は突然変異演算子である。この式を時間連続の過程であるとみなし、また突然変異率 D_g が小さいと仮定すると

$$\frac{\partial N(t,g)}{\partial t} = \frac{f(g) - \langle f \rangle}{\langle f \rangle} N(t,g) + \frac{D_g}{2\langle f \rangle} \frac{\partial^2}{\partial g^2} f(g) N(t,g). \quad (3)$$

のような偏微分方程式に近似できる。

4 エラーカタストロフ

本研究ではもっとも単純な多峰の適応度地形 $V(x) = 1 + \cos \alpha x$ を用いる。適応度地形は表現型ゆらぎにより $f(g) = 1 + e^{-\alpha^2 \Sigma/2} \cos \alpha x$ のように変形される (図 1(b))。この $f(g)$ を用いて、(3) 式

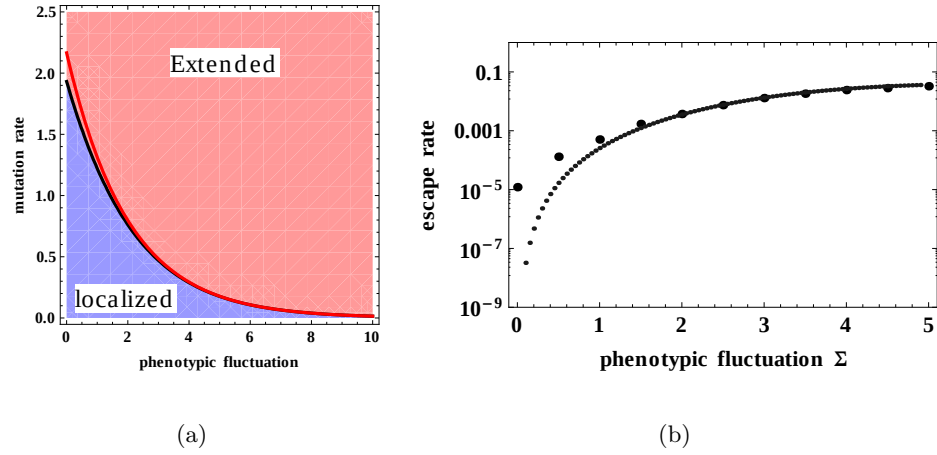


図 2: (a) 横軸は表現型可塑性の大きさ、縦軸は突然変異率を表す。右上の extended 領域ではエラーカタストロフが起きる。(b) 峰間の遷移率の表現型可塑性の強さ Σ 依存性。 Σ が増大すると遷移率も増大する。

を解く。 $N^t(g)$ を平均 G , 分散 V_g のガウス分布していると仮定すること、(3) 式から G , V_g の発展方程式が得られる。このような解析から突然変異率 D_g と表現型可塑性 Σ の値によって、 V_g が発散する領域と有限の値にとどまる領域に分かれることがわかる (図 2(a))。 $\langle f \rangle = 1 + e^{-\alpha^2(\Sigma + V_g)} \cos \alpha G$ であるため、 V_g が発散する領域では適応度が 1 という極端に低い値になる。これは、ある適応度の峰にいる集団が次世代の集団をその峰まわりに留まらせることができなくなり、多くの個体が峰から転げ落ちてしまうことに起因する。このような適応度の低下はエラーカタストロフ [8] と見なすことができる。

5 表現型可塑性が進化速度に及ぼす影響

V_g が有限値にとどまる領域でも、集団は遺伝型空間をランダムウォークして拡散していく。ここで、集団の拡散速度を進化速度であると見なし⁴、表現型ゆらぎの影響でこの拡散速度がどのような影響を受けるか調べた。(3) 式は適切な変数変換を行うとシュレーディンガー方程式に変換できる。適応度地形の峰間の遷移率は、シュレーディンガー方程式のダブルウェルポテンシャルの遷移率として以下のように計算できる。

$$\Gamma = \frac{\hbar\omega}{\langle f \rangle \pi} \exp \left(-\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} \int_b^a \sqrt{U(y)} dy \right) \quad (4)$$

ただし $U(y)$ はポテンシャル、 a, b はそれぞれ被積分関数が最大を取る y の値と 0 を取る y の値である。この式から計算された遷移率を図 2(b) に示す。(2) 式のシミュレーションから直接計算さ

⁴ 遺伝型空間の拡散により、より高い適応度を持つ新奇の遺伝型を発見できる確率が高まるため、ここではそのような拡散速度を進化速度とみなした。

れた遷移率と良く一致しているのが分かる。この遷移率と遺伝型空間の実行拡散係数（すなわち進化速度）の関係は

$$D_e = 2\frac{\Gamma}{2}\left(\frac{2\pi}{\alpha}\right)^2. \quad (5)$$

である。ここで重要なのは図 2(b) で、表現型ゆらぎにより遷移率、すなわち進化速度が必ず加速されるという点である。

6 まとめ

本研究で我々は、多峰の適応度地形ではかならず表現型可塑性は進化を加速すると示した。ただし、大きすぎる表現型ゆらぎはエラーカタストロフを導いてしまう。実際の生命が感じる適応度地形は多峰になっているという実験報告もあるため [9]、我々の結論は単峰の適応度地形を用いた先行研究よりも有効であると言える。

参考文献

- [1] M.J. Baldwin. A new factor in evolution. *The American Naturalist*, 30(354):441–451, 1896.
- [2] G.G. Simpson. The baldwin effect. *Evolution*, 7(2):110–117, 1953.
- [3] H. Dopazo, MB Gordon, R. Perazzo, and S. Risau-Gusman. A model for the interaction of learning and evolution. *Bulletin of Mathematical Biology*, 63(1):117–134, 2001.
- [4] R.W. Anderson. Learning and evolution: A quantitative genetics approach. *Journal of Theoretical Biology*, 175(1):89–101, 1995.
- [5] L.W. Ance. Undermining the baldwin expediting effect: Does phenotypic plasticity accelerate evolution? *Theoretical Population Biology*, 58(4):307–319, 2000.
- [6] S. Wright. The roles of mutation, inbreeding, crossbreeding and selection in evolution. In *Proceedings of the sixth international congress on genetics*, volume 1, pages 356–366, 1932.
- [7] MB Elowitz, AJ Levine, ED Siggia, and PS Swain. Stochastic gene expression in a single cell. *Science (New York, NY)*, 297(5584):1183, 2002.
- [8] M. Eigen. Selforganization of matter and the evolution of biological macromolecules. *Naturwissenschaften*, 58(10):465–523, 1971.
- [9] S.S. Fong, A.R. Joyce, and B.Ø. Palsson. Parallel adaptive evolution cultures of escherichia coli lead to convergent growth phenotypes with different gene expression states. *Genome research*, 15(10):1365–1372, 2005.

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

大阪大学 理学研究科 物理学専攻 白井 伸宙¹

本研究では大きな構造揺らぎを持つタンパク質である天然変性タンパク質を扱う。このタンパク質はターゲット分子と結合した時のみある特定の構造へと折れ畳む性質を持っている。複数の生物種にまたがる DNA の解析により、このようなタンパク質はヒトなどの高等な生物により多く含まれることがわかっており、構造を持たないという特徴が複雑な生物の機能にとって重要な役割を持っている可能性があると考えた。この構造揺らぎの利点について探るため、天然変性タンパク質の構造揺らぎの効果を単純化して取り入れた格子ガスモデルを構築し、解析を行った。その結果、密度変化誘起型結合過程という新しい結合過程を考えることにより、構造揺らぎが大きいタンパク質だけが分子密度に依存したシグナル受信の ON と OFF を切り替えられることが分かった。この性質は天然変性タンパク質の利点として挙げることができ、熱測定による検証が可能と考えられる。以下、研究の詳しい内容について説明する。

1 導入

1.1 天然変性タンパク質

タンパク質の結晶構造が初めて解かれて以来、タンパク質はその機能を果たすために構造が必要だと考えられてきた。しかし、20 世紀の終わり頃、構造を持たずに機能を果たせるタンパク質が大量に見つかった。これが**天然変性タンパク質 (intrinsically disordered protein; IDP)**である [1]。IDP は他の分子が存在しないとき、部分もしくは全体が構造を持たず揺らいでいるが、ターゲットとなる生体分子の存在下ではある特定の形に折れ畳んで結合する (図 1)。このような結合過程を通じてシグナル伝達等の機能を果たす。そして IDP は原核生物より真核生物、真核生物の中でも哺乳類などの高等な生物に多く含まれており [2]、細胞中では特に核内に局在していることから、IDP は DNA とのやり取りを担いながら核の形成と共に重要性が増し、進化の過程で多くの機能を持つようになったのではないかと推測できる。これらの推測のもと、構造が揺らぐ IDP に見出された利点を探るために研究を行った。

1.2 構造揺らぎが持つ利点と新しい結合過程

IDP の構造揺らぎの利点について述べている研究はすでに存在しており、構造揺らぎにより結合反応距離を伸ばすことができるという fly-casting mechanism[3] もその一つである。しかし、こ

¹E-mail: shirai@cp.cmc.osaka-u.ac.jp

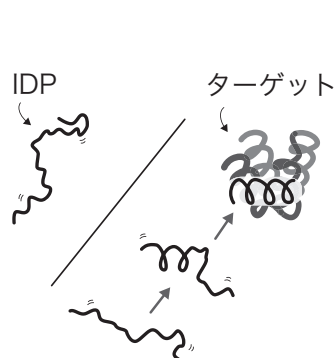


図 1: 天然変性タンパク質 (IDP) の概念図

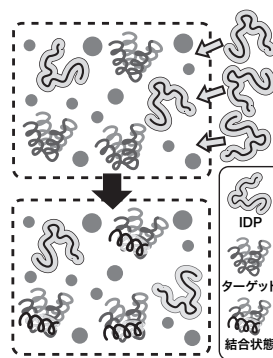


図 2: 密度変化誘起型結合過程の概念図

これらの研究では結合過程の詳細について議論するものが多く、ダイナミクスの詳細を追わなければならないため、実験による検証が困難であった。そこで本研究では、熱測定等の実験によってマクロな測定量として測りうる利点について取り扱った。

生体内では IDP は分子混雑した核内に多く存在しており、他の分子の排除体積効果を強く受けていると考えられるが、分子混雑を模した *in vitro* の実験から、混雑した環境下でも IDP は構造を持たず揺らいでいると報告されている [4]。この時、IDP はエントロピー的に安定な状態にあり、結合時の折れ畳んだ状態よりも実効的に大きな体積を占めていると考えられる。もし結合過程の前後で実効的な体積が変化するならば、分子密度を高くすることによって結合過程を誘起することが可能である。ここではこの過程を密度変化誘起型結合過程と呼ぶ。IDP がこの密度変化を誘起する分子となる場合 (図 2 上段)、追加された IDP が核内の分子密度を増加させ、IDP とターゲット分子の結合過程を誘起するシグナル伝達過程を考えることができる (図 2 下段)。

生物が核内の密度変化によって結合過程を誘起し、シグナルを伝えるという機構は提唱されたことがなく、新しい結合過程であると言える。そして、構造揺らぎによる実効的な体積変化が大きいほど密度変化に敏感に反応すると考えられるので、この密度変化誘起型結合過程の中に IDP の構造揺らぎの利点が存在していると考えられる。

2 モデル

上記の密度変化誘起型結合過程を統計力学モデルで表現するため、IDP とターゲット、詰め物分子の三成分を用いた格子ガスモデルを構築した。まず、IDP の構造揺らぎが大きく、実効的な体積が大きい状態 (体積大状態) と結合状態における折れ畳んだ状態 (体積小状態) の 2 つの状態を取ると仮定する (図 3 左側)。そして体積大状態は実効的な体積 v と内部エントロピー σ の二つを用いて記述されたとする。考えている格子モデルにおいて v は占有サイト数を意味し、 $v = 3$ としている。内部エントロピー σ は実効的な体積の中で構造揺らぎを持った IDP が取る複数のコンフォメーションが持つエントロピーを表し、 σ が大きいほど構造揺らぎが大きいと考える。

系は $L \times L$ の二次元正方格子を考え、IDP を n_{IDP} 個、ターゲットを n_{TM} 個、詰め物分子を n_{F} 個含んでいるとする。ハミルトニアンは IDP とターゲットの結合数 n_{bs} と IDP とターゲットの結合エネルギー E_{bs} を用いて

$$\mathcal{H} = E_{bs} n_{bs}$$

と表される。ここでは $E_{bs} = -2$ を用いる。また、内部エントロピー σ を加味した温度 T での分配関数は

$$Z(T, \sigma) = \sum_{n_{bs}} \sum_{n_{lv}} w(n_{bs}, n_{lv}) e^{\sigma n_{lv}} e^{-\mathcal{H}/k_B T}$$

と表され、 n_{lv} は体積大状態の IDP の数、 $w(n_{bs}, n_{lv})$

はある指定された n_{bs} と n_{lv} の下での格子ガスの配置の数である。図 3 では $L = 4$ で各分子数が $(n_{IDP}, n_{TM}, n_F) = (4, 3, 4)$ で指定される系において $(n_{bs}, n_{lv}) = (1, 2)$ となる配置を表している。体積大状態が持つ内部エントロピーのため、同じ配置の中に $e^{\sigma n_{lv}} = e^{2\sigma}$ の状態が含まれており、図 3 の配置から導かれる分配関数への寄与項は $e^{2\sigma} e^{2/k_B T}$ である。

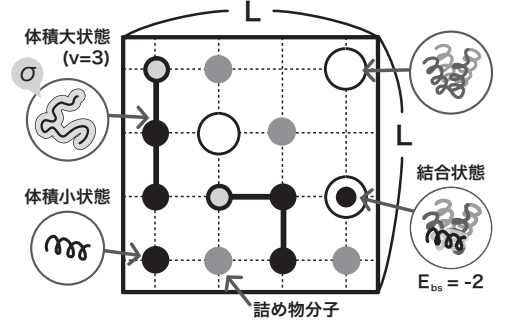


図 3: 格子ガスモデルの概要

3 結果

構築した格子ガスモデルについて、モンテカルロ法的一种である拡張アンサンブル法を用いて熱平衡状態を実現し、 n_{bs} の熱平均値 $\langle n_{bs} \rangle$ を異なる σ, n_{IDP}, n_F の条件で求めた。図 4 は $\sigma = 0$ 、図 5 は $\sigma = 10$ での $\langle n_{bs} \rangle$ のグラフ及び n_{IDP} が異なる 2 つの熱平均値の差

$$\Delta \langle n_{bs} \rangle_{n_{IDP} \rightarrow n'_{IDP}} = \langle n_{bs} \rangle_{n'_{IDP}} - \langle n_{bs} \rangle_{n_{IDP}}$$

のグラフが描かれている。 $\Delta \langle n_{bs} \rangle_{n_{IDP} \rightarrow n'_{IDP}}$ はシグナルとして追加された IDP が結合反応を誘起する過程における受信強度を表している。2 つの図の $\Delta \langle n_{bs} \rangle_{4 \rightarrow 12}$ (一点鎖線) のグラフを比べると、 σ が大きく構造揺らぎの効果が大きい方が密度変化誘起型結合過程のシグナル受信強度が温度によらず高いことが分かる。では今度は温度を $T = 0.4$ に固定し、より広い n_F の範囲でシグナル受信強度はどのように変化するかを見てみる。

図 6 ではいくつかの σ の条件と体積大状態を仮定しない系について、 $\Delta \langle n_{bs} \rangle_{4 \rightarrow 8}$ の n_F 依存性を示している。図 4 と図 5 の $\Delta \langle n_{bs} \rangle_{4 \rightarrow 8}$ に対応する部分は $n_F = 120$ の点であり、より n_F が小さい領域において受信強度の大小が逆転し、 σ が大きい系はシグナルをほとんど受信しなくなる。

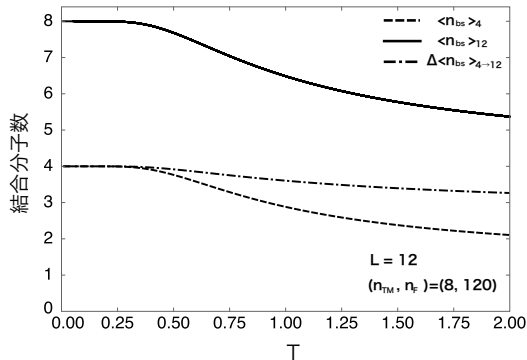


図 4: $\sigma = 0$ とした系での $\langle n_{bs} \rangle$ および $\Delta \langle n_{bs} \rangle$ の温度変化

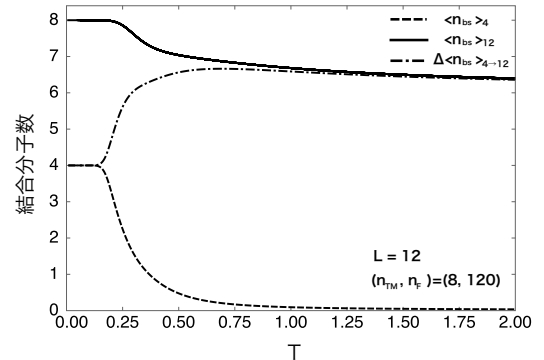
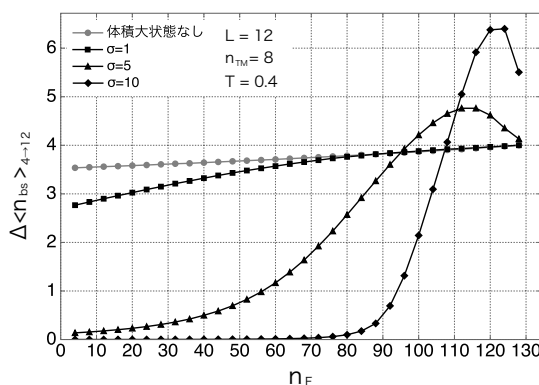


図 5: $\sigma = 10$ とした系での $\langle n_{bs} \rangle$ および $\Delta \langle n_{bs} \rangle$ の温度変化

図 6: $\Delta\langle n_{bs} \rangle_{4 \rightarrow 8}$ の n_F 依存性

4 議論

図 6 から、体積大状態を仮定しない条件から順に σ を変化させ構造揺らぎを大きくしていくと、密度変化誘起によって得られる結合ペアの数が初期密度に対してなだらかな反応からスイッチ型の反応へと変化し、詰め物分子の初期密度を調節することによって受信を感知しない状態と敏感に感知できる状態を変化可能であることがわかった。

ある閾値を超えたシグナルに対してのみ応答するようなスイッチ型の反応の存在は広く知られているが、その多くは遺伝子制御ネットワークの中のポジティブ・フィードバックが持つダイナミックな性質として説明されてきた。本研究で明らかになった IDP の構造揺らぎに起因するスイッチ反応はこれまで理解されてきた反応とは起源が異なり、熱平衡状態での物理量という静的な性質によって記述されている。上記のようなシグナルに対する応・不応の切り分けが可能なスイッチ型の反応機構は構造揺らぎを持つ IDP の新しい利点として挙げることができ、熱平衡量によって記述されるため、密度変化誘起型の結合反応を模した熱測定の実験により検証が可能であると考えられる。

5 まとめ

構造揺らぎの効果を単純化して表した格子ガスモデルから、密度変化誘起型結合過程という新しい結合過程を考えることにより IDP の構造揺らぎに利点を見出すことができた。今後、熱測定による密度変化誘起型結合過程の議論に期待したい。

参考文献

- [1] H. J. Dyson and P. E. Wright, *Nat. Rev. Mol. Cell Biol.* **6** (2005), 197.
- [2] J. J. Ward et al., *J. Mol. Biol.* **337** (2004), 635.
- [3] B. A. Shoemaker, J. J. Portman and P. G. Wolynes, *PNAS* **97** (2000), 8868.
- [4] B. C. McNulty, G. B. Young and G. J. Pielak, *J. Mol. Biol.* **355** (2006), 893.

競合により誘起されるタンパク質の天然変性

大阪大学 サイバーメディアセンター^{a,b}, 蛋白研^a, 理^b, 生命機能^b
松下勝義^{a,1}, 菊池 誠^b

1 導入

タンパク質は生体内で、構造物の材料、物質輸送、貯蔵、物質分解、生成制御等々の機能を果たしている [1]. タンパク質はアミノ酸の一次元鎖からなり、そのアミノ酸の配列がタンパク質の立体構造を特定する. タンパク質の機能はその特定構造で決まると考えられており、アミノ酸配列から特定構造を予測し、それを通して機能を説明することがタンパク質研究の主要なテーマである. ところが、タンパク質構造研究の進展とともに、中には構造を取らず揺らぐ部分を持つものが多く存在することが知られるようになった. そのようなタンパク質の揺らいだ部分は天然変性領域と呼ばれている. ここでは変性という言葉が特定構造を取れず揺らいでいる状態を指している. 先に述べたようにタンパク質構造がタンパク質の機能を規定すると考えられてきたので、天然変性領域は長らく研究者たちに無視されていた. ところが、1999 年 Wright と Dyson による天然変性領域の役割の実験的な解析の総合的報告がきっかけとなり [2] 研究者たちの注目を集めだした [3].

天然変性領域には大きく分けて二つのカテゴリーがある. ひとつは親水性のアミノ酸配列からなるもので、タンパク質の構造をとる駆動力である疎水性に乏しいために構造を取らない. 多くの場合タンパク質の構造を取っている部分のジョイントとして働いており、多くの蛋白質に見られる. 一方で疎水性アミノ酸の配列からなる天然変性領域の存在が知られており、他のタンパク質との結合部の役割を果たす [2, 4]. 通常疎水性であれば水中で構造を取らずに揺らいでいることは不安定であると考えられるが、なぜそのような状況が維持されているかは知られていない. 本研究はこのような天然変性領域の維持にタンパク質構造上の競合が重要な役割を果たしている可能性を検討したものである.

構造上の競合の役割を理解するためには、まず、どのようなアミノ酸配列が特定構造を取りうるかを知らなければならない. 実はアミノ酸配列が特定構造を取るためには構造上の競合を引き起こすような相互作用の矛盾がないことが必要であることが知られている. このことは郷の整合性原理 [5] や Bryngelson-Wolynes の競合極小原理 [6] として知られている事実である. この原理から疎水性アミノ酸の配列が特定構造を取らず、揺らぐためには構造上の競合が存在すれば良いのではないかという仮説が導かれる. そこで我々は本研究でタンパク質の構造上の競合を引き起こす相互作用が存在するモデルを考え、天然変性領域がその構造競合により引き起こされる可能性を調べた.

¹E-mail: kmatsu@cp.cmc.osaka-u.ac.jp

2 模型

天然変性領域における競合の役割を調べる手段として、まず、輪湖-斎藤-Muñoz-Eaton (WSME) 模型 [7] を導入し、その上で競合を取り入れるための拡張を行う。WSME 模型は各アミノ酸に二進自由度 m_i を考える。 $m_i = 1$ の場合、そのアミノ酸配列と対応する特定構造を取ると考える。一方、 $m_i = 0$ の場合、それ以外の構造を取っていると考える。

ある状態 $\{m_i\}$ に対して、Energy $\mathcal{H}$ は以下で与える

$$\mathcal{H}_0 = - \sum_{\{\langle i,j \rangle\}_n} \varepsilon_{i,j} \prod_{k=i}^j m_i. \quad (1)$$

ここで左辺の和をとる集合 $\{\langle i,j \rangle\}_n$ は特定構造において接触しているアミノ酸ペアのものである。例えば、二次構造の代表的な例である α ヘリックス構造では、4 個のアミノ酸をまたいで水素結合を作り接触するが、その場合 i 番目のアミノ酸と $i+4$ 番目のアミノ酸のペアの集合が $\{\langle i,j \rangle\}_n$ である。このエネルギーが対応する特定構造を取るエネルギー利得 ($\varepsilon_{i,j}$) を表すことが容易に理解できるだろう。一方、状態 $\{m_i\}$ は $m_i=0$ となるアミノ酸が存在するごとに複数の構造を粗視化して代表している。従って、この状態は次のエントロピー $\mathcal{S}$ を持つ。

$$\mathcal{S}_0 = \sum_i s_i (1 - m_i) \quad (2)$$

s_i は i 番目のアミノ酸の状態数の対数、つまりエントロピーである。状態 $\{m_i\}$ は Boltzmann 因子 $\exp(-\beta \mathcal{H}_0 + \mathcal{S}_0)$ を持ち、対応する分配関数はその配位和として表される。ここで β は逆温度である。以上が WSME 模型であり、タンパク質折りたたみの経路をよく説明する。

本研究ではさらに構造上の競合を生み出すようなアミノ酸間接触を考える。具体的には次のエネルギー

$$\mathcal{H}_\eta = - \sum_{\{\langle i,j \rangle\}_u} \eta_{i,j} c_{i,j} \prod_{k=i}^j (1 - m_i), \quad (3)$$

$$\mathcal{H}_\kappa = \sum_i \kappa_i \tau_i(\{m_i\}, \{c_{i,j}\}) m_i. \quad (4)$$

を $\mathcal{H}_0$ に加える。ここで $c_{i,j}$ は二進自由度で、 $c_{i,j}=1$ で構造の競合を引き起こす i と j 番目のアミノ酸接触ができていることを表す。一方で $c_{i,j}=0$ では接触がないことを表す。式 (3) は接触によるエネルギー利得 ($\eta_{i,j}$) を表し、式 (4) は接触が特定構造 ($m_i=1$) の形成を阻害する事に由来するエネルギー負担 (κ_i) を表す。 τ_i は $\max_{\{c_{k,l}\}} \{c_{k,l} | k \leq i \leq l\}$ であり、各アミノ酸がその接触により影響を受けるかどうかを表す関数である。さらに、この接触による構造の制限を考慮に入れ次のエントロピー損失を $\mathcal{S}_0$ に加える。

$$\mathcal{S}_\mu = - \sum_i s_i \mu_i \tau_i(\{m_i\}, \{c_{i,j}\}) (1 - m_i), \quad (5)$$

最終的に、分配関数は、

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{m_i\}} \exp[-\beta \mathcal{H} + \mathcal{S}] \quad (6)$$

で与えられる。ここで $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_\eta + \mathcal{H}_\kappa$, かつ $\mathcal{S} = \mathcal{S}_0 + \mathcal{S}_\mu$ である。

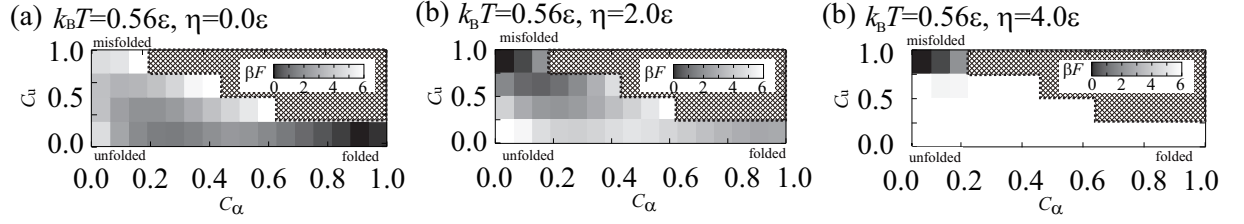


図 1: 自由エネルギー地形: (a) α ヘリックス ($\eta=0.0\epsilon$), (b) 天然変性 ($\eta=2.0\epsilon$), (c) ヘアピン状態 ($\eta=4.0\epsilon$). C_α, C_u はそれぞれヘリックス, ヘアピン構造の秩序変数を表す.

3 結果

ここから競合による天然変性の可能性を探索するため, 我々の競合接触を考慮した模型の実際の天然変性領域への応用を考える. 本研究では特にタンパク質天然変性領域として神経特異的転写抑制因子 NRSF/REST(PDB:2CZY)[8] を選んだ. この天然変性領域は 15 個のアミノ酸配列からなり, 天然ではコリプレッサー mSin3 と結合して α ヘリックス構造を取る [9]. 配列は主に疎水性からなっているものの mSin3 がいないと変性状態をとることが知られている. この天然変性領域に関しては全原子計算により α ヘリックスやヘアピン状の構造を観測可能なほど取ることが知られている [10]. 従ってこの天然変性領域は α ヘリックス構造とヘアピン構造の間で構造の競合が起きており, それが変性状態の原因になっている可能性がある. 我々はそれを確かめるため, 変性状態になりうる模型のパラメータ探索を数値的に行った. ここでは探索を簡単にするため全てのパラメータをアミノ酸のサイト番号によらないという仮定を置いた ($\epsilon_{i,j} = \epsilon, s_i = s, \mu_i = \mu, \eta_{i,j} = \eta, \kappa_i = \kappa$.) また, 様々な要件を勘案しここでは $s=1, \mu=1/4, \kappa=1$ を選んだ. さらに, 我々は特定構造として α ヘリックス構造, 競合する構造としてヘアピン構造を選んだ. このときアミノ酸ペア集合 $\{\langle i, j \rangle\}_n$ は前述の α ヘリックスのものを, 一方で $\{\langle i, j \rangle\}_u$ として 2-14, 5-11, 7-9 番目のペアを選んだ.

通常天然に存在するタンパク質は特定構造状態を最安定状態として持つ. ここでは, 競合がない場合 ($\eta = 0$) はその状況が現れることを要求し, 特定構造状態が安定化する特徴温度である折りたたみ温度 ($k_B T_c = 0.58\epsilon$) より少し下の温度を選ぶ. 我々は温度 $k_B T$, ヘアピンを作る接触の結合定数 η を変えて天然変性状態を探索し, 全原子計算の結果と整合する結果が得られるパラメータ領域を見出した. 以下天然変性が現れるように温度を $k_B T = 0.56\epsilon$ に固定し, 代表的な自由エネルギー地形として図 1(a) に α ヘリックスを取る場合 ($\eta=0$), (b) に天然変性 ($\eta = 2\epsilon$), (c) にヘアピン構造を取る場合 ($\eta = 4\epsilon$) のものをそれぞれ濃淡プロットした. ここで自由エネルギー地形は $\beta F(C_\alpha, C_u)$ は

$$\beta F(C_\alpha, C_u) = \ln \sum_{\{m_i\}} \delta(C_\alpha - C_\alpha(\{m_i\})) \delta(C_u - C_u(\{m_i\})) \exp[-\beta \mathcal{H} + \mathcal{S}] \quad (7)$$

で与えられる. これらの地形はヘリックスの秩序変数 $C_\alpha(\{m_i\}) = \sum_i m_i / N_\alpha$ とヘアピンの秩序変数 $C_u(\{m_i\}) = \sum_{\{\langle i, j \rangle\}} c_{i,j} \prod_k (1 - m_k) / N_u$ の空間でプロットされている. ここで N_α と N_u は最大値を 1 とする規格化定数である. 見てわかるようにヘリックス状態 $(C_\alpha, C_u) = (1, 0)$ からヘアピン状態 $(0, 1)$ へ, ヘアピンを作る接触の結合定数 η を強くすると移っていくのが分かる. その中間で図 1(b) に見えるようにヘリックス状態からヘアピン

状態まで広範囲の構造空間に状態が優位に分布する、天然変性状態が現れている。この天然変性状態は全原子計算で得られた肥後達の結果に整合している。

4 まとめ

我々は今回、天然変性を再現する競合の可能性を理論的に検討した。競合の効果を考慮するため、WSME 模型を拡張し、あるパラメータで全原子シミュレーションの結果に整合する結果を得た。また我々はこの天然変性状態が他のタンパクへ結合する際、結合と折りたたみの共起に重要な役割を果たすことを示し、現在論文投稿中である。

謝辞

この研究は新学術領域「天然変性タンパク質の分子認識と機能発現」の支援を受け行われた。また阪大蛋白研肥後氏、早大高野氏、梅澤氏、及び阪大サイバーの菊池研メンバーとの議論を大いに参考にさせていただいた。この場を借りて感謝の意を表したい。

参考文献

- [1] B. Alberts *et al.*, *Molecular Biology of the Cell* (Garland Science, 2007).
- [2] P. E. Wright and H. J. Dyson. *J. Mol. Biol.* **331** (1999) 293.
- [3] P. Tompa, *Structure and Function of Intrinsically Disordered Proteins* (Chapman and Hall/CRC, 2009).
- [4] A. K. Dunker *et al.* *Pac. Symp. Biocomput.* **3** (1998) 473.; K. Sugase, *et al.* *Nature* **447** (2007) 1021.
- [5] N. Go, *Annu. Rev. Biophys. Bioeng.*, **12** (1983) 183.
- [6] J. D. Bryngelson and P. G. Wolynes. *J. Phys. Chem.* **93** (1989) 6902.
- [7] H. Wako and N. Saitô. *J. Phys. Soc. Jpn.* **44** (1978) 1931. ; H. Wako and N. Saitô, *J. Phys. Soc. Jpn.* **44** (1978) 1939. ; V. Muñoz *et al.*, *Proc. Nat. Acad. Sci.* **95** (1998) 5872. ; V. Muñoz and W. A. Eaton. *Proc. Nat. Acad. Sci.* **96** (1999) 11311. ; P. Bruscolini and A. Pelizzola, *Phys. Rev. Lett.* **88** (2002) 258101. ; K. Itoh and M. Sasai. *Proc. Natl. Acad. Soc.*, **107** (2010) 7775.
- [8] C. J. Schoenherr and D. J. Anderson, *Science* **267** (1985) 1360.; J. A. Chong *et al.*, *Cell* **80** (1995) 949.
- [9] M. Nomura *et al.*, *J. Mol. Bio.* **354** (2005) 903.
- [10] J. Higo *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **133** (2011) 10448.

細胞内反応における情報伝達と分子の少数性

東京大学生産技術研究所[†], 東京大学大学院総合文化研究科[‡],
JST さきがけ^{*} 上村 淳^{†,‡,1}, 小林 徹也^{†,*}

1 導入

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 [1, 2]. 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、環境変化への迅速な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 [3, 4, 5]. 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、線形遺伝子発現モデルを用いて、情報がいかに伝達されるかを相互情報量を用いて調べた。

2 線形遺伝子モデル

図 1 に示されるような線形遺伝子発現モデルを考える。各時刻 t において、DNA(X_t) は active または inactive のいずれかを取り、状態間の遷移レートを r_{on} , r_{off} とする。DNA の状態に依存して、mRNA がレート f_M^{on} または f_M^{off} で転写反応により生成される。また mRNA から Protein がレート f_P で翻訳反応により生成される。ここで時刻 t での mRNA と Protein の量をそれぞれ Y_t , Z_t とする。mRNA および Protein は各々 d_M, d_P で分解する。

DNA の状態がいかに mRNA および Protein の量に反映されているかをみるために相互情報量を考える。一般に入力 X と出力 Y の間の相互情報量は以下のように定義される。

$$I[X; Y] = \int dX \int dY P(X, Y) \log_2 \frac{P(X, Y)}{P(X)P(Y)}. \quad (1)$$

¹E-mail: kamimura@complex.c.u-tokyo.ac.jp

ここで、相互情報量は以下の2つの重要な性質を持つ。一つ目は、任意の一対一対応の関数 $f(X)$, $g(Y)$ について $I[X; Y] = I[f(X); g(Y)]$ が成り立つ。これは X または Y を変換して得られる量に対して相互情報量が不変であることを意味し、何が重要な量であるかが明確ではない場合や実験的に得られたデータの処理が多い生物学的な場面で重要である。二つ目は、マルコフ過程により X から Y が生成され、 Y から Z が生成された場合、データ処理不等式 $I[X; Y] \geq I[X; Z]$ が成り立つ。

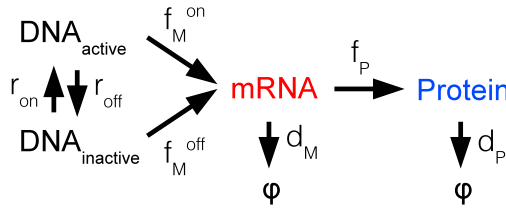


図 1: 線形遺伝子発現モデル

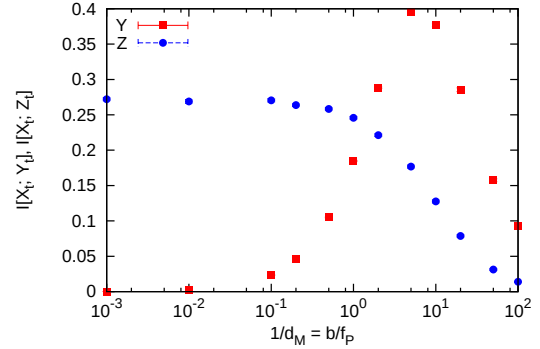


図 2: mRNA の寿命 ($1/d_M$) を変化させたときの相互情報量 $I[X_t; Y_t]$, $I[X_t; Z_t]$ の変化. ここで, $r_{on} = r_{off} = 0.03$, $f_M^{on} = 14$, $f_M^{off} = 10$, $b = 1$, $d_P = 0.1$ とした.

このモデルを Gillespie algorithm を用いて数値計算を行った。図 2 に mRNA の寿命 ($1/d_M$) を変化させた場合の相互情報量 $I[X_t; Y_t]$, $I[X_t; Z_t]$ を示す。ここで、バーストサイズ $b = f_P/d_M$ は固定している。まず、 $I[X_t; Y_t]$ については最大となる最適な mRNA の寿命が存在し、それより寿命が短くなると Y_t に含まれる X_t の情報は減少する。一方、 $I[X_t; Z_t]$ を見ると mRNA の寿命を短くし、量を減らすほうがより情報が含まれていることがわかる。この結果は、Protein の段階でより情報を得るには mRNA 寿命は短くし、平均数を減らしたほうがよいことを示している。また、このパラメータ領域では $I[X_t; Z_t] > I[X_t; Y_t]$ となりデータ処理不等式を破っているように見える。しかし実際 Protein の量 Z_t は瞬間の Y_t のみから得られるのではなく、 Y の時系列 $Y_{0:t}$ から生成された結果であるため、データ処理不等式は $I[X_t; Y_{0:t}] \geq I[X_t; Z_t]$ となり、矛盾しない。

3 議論

本研究では線形遺伝子発現モデルを用いて、バーストサイズを固定しながら mRNA の寿命を変化させた。その結果、寿命を短くしたほうが、より Protein の量に DNA の状態の情報が含まれることがわかった。また、中間過程 (mRNA) の瞬間的な量に情報が含まなくても、その時系列を用いて下流に情報を伝達していることを概念的に示した。本稿では確率論的シミュレーションの結果を示したが、ノイズをガウス分布で近似すること [2] が妥当な範囲ではより解析的な結果も得られ、数値計算とも一致している。また、本研究では線形な反応を扱ったが、実際に中間過程の時系列

$Y_{0:t}$ に含まれる情報を, 複数の反応系で最適に複合できることが示されている [6, 7, 8].

謝辞

本研究は JST さきがけおよび日本学術振興会特別研究員制度の援助を受けている.

参考文献

- [1] R. Cheong, A. Rhee, C. J. Wang, I. Nemenman, A. Levchenko, *Science* **334** (2011) 354.
- [2] G. Tkacik, A. M. Walczak, *J. Phys. Condens. Matter* **23** (2011) 153102.
- [3] V. Shahrezaei, P. S. Swain, *Current Opinion in Biotechnology* **19** (2008) 369
- [4] A. Eldar, M. B. Elowitz, *Nature* **467** (2010) 167
- [5] M. Ueda, T. Shibata, *Biophys. J.* **93** (2007) 11.
- [6] T. J. Kobayashi, *Phys. Rev. Lett.* **104** (2010), 228104.
- [7] T. J. Kobayashi, A. Kamimura, *Phys. Biol.* **8** (2011), 055007.
- [8] T. J. Kobayashi, *Phys. Rev. Lett.* **106** (2011), 228101.

点事象列のベイズ的解釈

— 経路積分法によるアプローチ —

統計数理研究所 小山 慎介¹

神経スパイク発火時刻や地震発生時刻のような点事象の系列として記述される現象を考える。一見規則性がない点事象列に対して、一定の発生率から不規則に生成されたのか、もしくは時間的に揺らぐ発生率から規則的に生成されたのか、というふたつの解釈があり得る。本稿では、これらの解釈の選択に経験ベイズ法を用いる。与えられた点事象列に対して、負の自由エネルギーに相当する周辺尤度関数上にふたつの解釈に対応する極大値があり、もっとも適切な解釈が相転移と同様のメカニズムで一方から他方に移り変わることを、経路積分法を用いた解析により示す。

1 はじめに

神経スパイクの発火時刻や地震の発生時刻、文章中の単語の出現位置など、点事象の系列で記述できる現象はたくさんある [1, 10, 11]。観測される点事象列は、現象に内在および外在する要因により、一見規則性がなく確率的に発生しているように見なせることが多い。このような観測データから背後にあるメカニズムを抽出することは、現象を理解するための第一歩である。

本稿では、観測された一見規則性のない点事象列に対して、その不規則性が生成機構に内在するものなのか、もしくは外因的な非定常性によるものなのかを決定する問題を考える。(神経スパイク時系列解析の文脈でこの問題を論じたものとしては、[6, 10] を参照せよ。) 2 節では、この問題を経験ベイズ推定の枠組みで定式化し、3 節では経路積分を用いた解析を紹介する。

2 経験ベイズ法

$\{t_i\} = \{t_1, t_2, \dots, t_n\}$ を区間 $[0, T]$ に観測される点事象の発生時刻とする。 $\lambda(t)$ を発生率にもつ点事象列のモデルとして、非定常リニューアル過程を考える [4, 6]。 $\{t_i\}$ の確率密度関数は

$$p_{\kappa}(\{t_i\}|\{\lambda(t)\}) = \prod_i \lambda(t_i) f_{\kappa}(\Lambda(t_i) - \Lambda(t_{i-1})) \quad (1)$$

¹E-mail: skoyama@ism.ac.jp

で与えられる。ここで $\Lambda(t) = \int_0^t \lambda(u) du$ 、および $f_\kappa(x)$ は平均が 1 に規格化された事象発生時刻の間隔分布である。ここでは、ガンマ分布

$$f_\kappa(x) = \kappa^\kappa x^{\kappa-1} e^{-\kappa x} / \Gamma(\kappa) \quad (2)$$

を用いることにする [9]。 κ は分布の形を決めるパラメータであり、値が大きいほど分布の幅は狭くなり、より規則的な点事象列を生成する。 $\lambda(t)$ の推定のため、発生率変動の滑らかさについての事前分布

$$p_\gamma(\{\lambda(t)\}) = \frac{1}{Z(\gamma)} \exp \left[-\frac{1}{2\gamma^2} \int_0^T \left(\frac{d\lambda(t)}{dt} \right)^2 dt \right] \quad (3)$$

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

$$p_{\kappa,\gamma}(\{\lambda(t)\}|\{t_i\}) = \frac{p_\kappa(\{t_i\}|\{\lambda(t)\})p_\gamma(\{\lambda(t)\})}{p_{\kappa,\gamma}(\{t_i\})} \quad (4)$$

を最大化するものを選ぶ (maximum a posteriori, MAP 推定)。またパラメータ κ と γ の値は、周辺尤度関数

$$p_{\kappa,\gamma}(\{t_i\}) = \int D\{\lambda(t)\} p_\kappa(\{t_i\}|\{\lambda(t)\}) p_\gamma(\{\lambda(t)\}) \quad (5)$$

を最大化するものを選ぶ。ここで、 $\int D\{\lambda(t)\}$ は経路空間上の積分を表す。以上が経験ベイズ法の処方箋である [2, 7, 8]。

3 経路積分法による解析

周辺尤度関数 (5) は経路積分法を用いて評価することができる [4, 5]。そのために周辺尤度を次のように書き換える。まず、発生率を $\lambda(t) = \mu + x(t)$ のように平均 μ とそのまわりのゆらぎ $x(t)$ に分解すると、 $\lambda(t)$ の変動の時間スケールが隣り合う事象の平均間隔 $1/\mu$ よりも大きいという条件下で、周辺尤度は

$$p_{\kappa,\gamma}(\{t_i\}) = e^{\mathcal{L}(\kappa)} \cdot \mathcal{F}(\kappa, \gamma) \quad (6)$$

と因子分解される。ここで $\mathcal{L}(\kappa)$ は発生率が μ で与えられるガンマ分布 (2) の対数尤度であり、

$$\mathcal{F}(\kappa, \gamma) = \frac{1}{Z(\gamma)} \int D\{x(t)\} \exp \left[-\int_0^T L(\dot{x}, x) dt \right] \quad (7)$$

は発生率ゆらぎ $x(t)$ の寄与を表す。 $L(\dot{x}, x)$ はラグランジュ関数であり、

$$L(\dot{x}, x) = \frac{1}{2\gamma^2} \dot{x}^2 + \kappa x(t) - \kappa \sum_i \delta(t - t_i) \log \left(1 + \frac{x(t)}{\mu} \right) \quad (8)$$

で与えられる。

周辺尤度をこのように書き換えると、発生率ゆらぎの MAP 推定値 $\hat{x}(t)$ は、オイラー・ラグランジュ方程式

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial L}{\partial x} = 0 \quad (9)$$

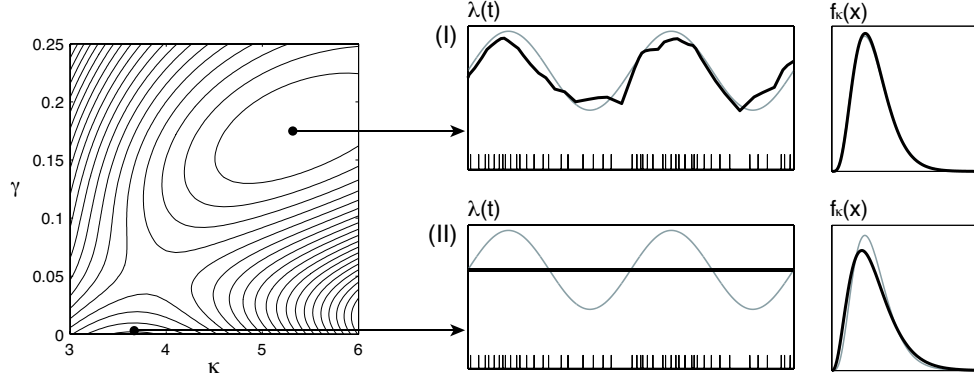


図 1: 対数周辺尤度の等高線（左）と、推定した発生率および間隔分布（右）。与えられた点事象列（右図のラスタープロット）に対して、対数周辺尤度はふたつの極大値を持ち、それぞれ解釈 (I) と (II) に対応する。右図の灰色の線はもとの発生率および間隔分布を表し、太線は推定したものを表す。

を解くことで得られ、 $\mathcal{F}(\kappa, \gamma)$ は準古典近似により、

$$\mathcal{F} = \frac{R}{Z(\gamma)} \exp \left[- \int_0^T L(\dot{\hat{x}}, \hat{x}) dt \right] \quad (10)$$

と評価できる。ここで R は二次ゆらぎの寄与で、

$$R = \frac{1}{\sqrt{2\pi\gamma^2 T}} \left[\frac{\det(-\partial_t^2 + \gamma^2 \frac{\partial^2 L}{\partial x^2})}{\det(-\partial_t^2)} \right]^{-\frac{1}{2}} \quad (11)$$

で与えられる。この計算には、Gelfand-Yaglom の方法が使える [3]。

もとの発生率が $\lambda(t) = \mu + \sigma \sin \frac{t}{\tau}$ で与えられる場合の結果を図 1 に示す。与えられた点事象列に対して、対数周辺尤度関数上にふたつの極大値が存在して、それぞれふたつの解釈：(I) 「時間的にゆらぐ発生率から規則的に生成された」、もしくは (II) 「一定の発生率から不規則に生成された」に対応する。もとの発生率 $\lambda(t)$ の時間変動が小さいときは、データから変動を検出することはできず、(II) の解釈が選ばれる。発生率の変動の度合いを表す量 $\kappa\tau\sigma^2/\mu$ が 2 より大きくなると、周辺尤度関数上の (I) に対応する極大値が (II) に対応する極大値よりも大きくなり、解釈 (I) が選ばれる [4]。

4 まとめ

本稿では、経験ベイズ法に基づく点事象列の解釈を、経路積分法を用いて解析した。与えられた点事象列に対して、経験ベイズ法はふたつの自然な解釈、「一定の発生率から不規則に生成された」もしくは「時間的にゆらぐ発生率から規則的に生成された」を提示し、もっとも確からしい解釈はもとの発生率変動の度合いに応じて決まる。

本稿ではまた、このような連続時間確率過程のベイズ推定の解析に経路積分法が有効であることを示した。

参考文献

- [1] E. G. Altmann, J. B. Pierrehumbert and A. E. Motter, PLoS ONE **4** (2009), e7678.
- [2] B. P. Carlin and T. A. Louis, Bayes and Empirical Bayes Methods for Data Analysis. (2000), Chapman and Hall, 2nd edition.
- [3] H. Kleinert, Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics, and Financial Markets. (2009), World Scientific Publishing Company, 5th edition.
- [4] S. Koyama, T. Omi, R. E. Kass and S. Shinomoto, Submitted.
- [5] S. Koyama, T. Shimokawa and S. Shinomoto, J. Phys. A: Math. Gen. **40** (2007), E383.
- [6] S. Koyama and S. Shinomoto, J. Phys. A: Math. Gen. **38** (2005), L531.
- [7] D. J. C. Mackay, Neural Comp. **4** (1992), 415.
- [8] C. E. Rasmussen and C. K. I. Williams, Gaussian Processes for Machine Learning. (2006), The MIT Press.
- [9] T. Shimokawa, S. Koyama and S. Shinomoto, J. Comp. Neurosci. **29** (2010), 183.
- [10] S. Shinomoto et al., PLoS Comp. Biol. **5** (2009), e1000433.
- [11] X. Zhao, T. Omi, N. Matsuno, and S. Shinomoto, New J. Phys. **12** (2010), 063010.

ランジュバンモデルにおける階層的ノイズ強度ゆらぎ

東京大学大学院理学系研究科生物化学専攻 長谷川 禎彦, 有田 正規

1 モデルと解析手法

ランジュバン方程式によるモデル化は、ゆらぎの影響を受ける系の解析において重要性が高まっている。一般的に、ゆらぎは時間空間依存性を持つため、ランジュバン方程式におけるノイズ強度は時間空間的に変動する。我々はノイズ強度変動の時間依存性を考慮するために、ノイズ強度が Ornstein-Uhlenbeck 過程に従うモデルを考案した[1,2]：

$$\frac{dx}{dt} = f(x) + g(x)s\xi_x(t), \quad \frac{ds}{dt} = -\gamma(s - \alpha) + \sqrt{\gamma}\xi_s(t). \quad (1)$$

式(1)で α は $s(t)$ の平均、 $\xi_x(t)$ と $\xi_s(t)$ は白色ガウスノイズを表す ($\langle \xi_x(t') \xi_x(t) \rangle = 2D_x \delta(t' - t)$ 及び $\langle \xi_s(t') \xi_s(t) \rangle = 2D_s \delta(t' - t)$ を満たす。 D_x と D_s はノイズ強度)。式(1)の $s\xi_x(t)$ の項はノイズ強度が確率的に変動することから、stochastic intensity noise (SIN)と呼んでいる。図1に SIN の典型的な軌跡を示す。 ρ を SIN の二乗変動係数とすると ($\rho = D_s/\alpha^2$)、(a)–(b)は $\rho = 0.01$ と 100 の場合の時間変化を表し、(c)–(d)はそれぞれの場合のヒストグラムを示したものである。

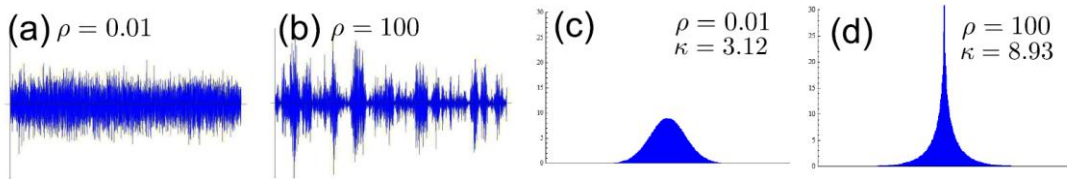


図1. (a)–(b) SIN の時間変化。 (c)–(d) SIN のヒストグラム。 ρ と κ はそれぞれ二乗変動係数と尖度を表す。

式(1)を Stratonovich 積分で解釈すると、Fokker-Planck 方程式 (FPE) $\partial_t P(x,s;t) = L_{FP} P(x,s;t)$ は、FP 演算子

$$L_{FP} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(f(x) + D_x g(x) g'(x) s^2 \right) + D_x s^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} g(x)^2 + \gamma \frac{\partial}{\partial s} (s - \alpha) + \gamma D_s \frac{\partial^2}{\partial s^2}, \quad (2)$$

で記述される。式(2)はポテンシャルの形で記述できないため、定常分布であっても解析的に解くことが出来ない。そこで、 s の時間スケールが x の時間スケールより小さいと仮定し (つまり $\gamma \gg 1$)、断熱消去 (adiabatic elimination) を用いて (x, s) に関する方程式を x に関する方程式に縮約した。断熱消去を用いることで、式(2)は以下の式に変形される：

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x;t) = \left[-\frac{\partial}{\partial x} f(x) + Q \Delta_g + \frac{R}{\gamma} \Delta_g^2 \right] P(x;t). \quad (3)$$

ここで、 $R = D_x D_s (4\alpha^2 + D_s)$ と $Q = D_s + \alpha^2$ であり、 Δ_g は以下で定義される微分演算子である：

$$\Delta_g = \frac{\partial^2}{\partial x^2} g(x)^2 - \frac{\partial}{\partial x} g'(x) g(x). \quad (4)$$

式(3)及び(4)は x に関して二次より高次の微分項を含むため, Higher order Fokker-Planck 方程式 (HFPE) と呼ばれる. ここでは式(3)の定常分布を摂動展開を用いて解く. $\varepsilon=R/(\gamma Q)$ とし, $\varepsilon \ll 1$ を仮定すると式(3)の定常分布は $P_{st}(x)=\Pi_0(x)+\varepsilon\Pi_1(x)+\dots$ の形で摂動展開される. この展開を式(3)に代入し, ε のオーダーで比較すると二つのカップルした微分方程式が得られる:

$$O(1) \quad \left\{ \frac{f(x)}{Q} + g'(x)g(x) \right\} \Pi_0(x) = \frac{\partial}{\partial x} g(x)^2 \Pi_0(x) \quad (5)$$

$$O(\varepsilon) \quad \left\{ \frac{f(x)}{Q} + g'(x)g(x) \right\} \Pi_1(x) = \frac{\partial}{\partial x} g(x)^2 \Pi_1(x) + \phi(x). \quad (6)$$

ここで, $\phi(x)=\{\partial_x g(x)^2 - g'(x)g(x)\}\partial_x\{\partial_x g(x)^2 - g'(x)g(x)\}\Pi_0(x)$ である. 式(5)–(6)はそれぞれ一次常微分方程式であるため, 多くの問題において解析解を求めることが可能である.

2 モデル計算

得られた手法をいくつかのモデルに適用し, モンテカルロ法と比較した結果を図 2 に示す. 図 2(a)–(c)はそれぞれ, (a) 単安定加算ノイズモデル ($f(x)=-x, g(x)=1$), (b) 双安定乗算ノイズモデル ($f(x)=x-x^3, g(x)=x$), (c) 遺伝子スイッチモデル ($f(x)=ax^2/(x^2+k)-bx+c, g(x)=1$) における定常分布を式(5)–(6)で求めたものである. 図 2 の実線は HFPE による解, 点線は HFPE の高次項を無視した通常の FPE による解, そして丸印はモンテカルロ法による解である. RMS はモンテカルロ法の結果との二乗平均平方根 (root mean square) 距離を表す (小さい方がモンテカルロ法の結果に近い). 図 2 から明らかなように, HFPE による解はモンテカルロ法の結果とよく一致している. 一方で, HFPE の高次の項を除いた FPE による解は, HFPE による解より RMS が大きい. このことから, HFPE の高次の項が重要であることが分かる.

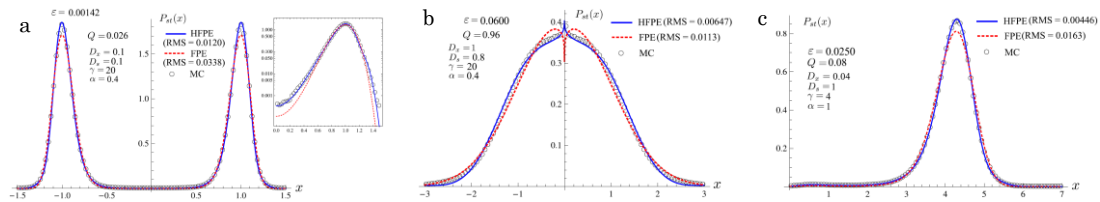


図 2. 式(5)–(6)により得られた定常分布の解析解. (a) 線形加算ノイズ, (b) 双安定乗算ノイズ, (c) 遺伝子スイッチモデル.

本報告では SIN による定常分布の計算手法を示したが, 文献[3,4]では双安定系やラチェット系における影響解析を matrix continued fraction method (MCFM)を用いて行なっている. 特に, 双安定における平均第一通過時間 (MFPT) や確率共鳴の解析から, MFPT と信号増幅率は ρ に関してトレードオフの関係にあることを明らかとしている.

参考文献

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

Cleverest Maxwell's demon¹

分子科学研究所 鹿野 豊²

我々は、最もマクスウェルの悪魔がいたときのみ、シラードエンジンの系において平衡熱力学で定義されるエントロピーと情報論的エントロピーが一致するということを示した。何故、そのような問題を考えるのかというモチベーションをこの原稿に寄稿する。

1 本研究の結果

1 粒子をシリンダの中に入れ、温度 T の熱浴につけておくとする。そこに、パーティションを入れ、マクスウェルの悪魔がシリンダの右左どちらに粒子が入っているかを測定をする。そして、入っている方向に重りをつけ、その後、パーティションのストッパーを外す。すると、系は等温膨張をし、パーティションはシリンダの端まで移動する。その際、重りは重力に逆らいあがるので仕事を取り出したことになる。そして、最後にパーティションを抜く。これをシラードエンジンと呼ぶ。この系に熱力学的な話を持ち出して良い場合は、現在までのところ、このエンジンを何個ももってくるか、このエンジンを何回も回すかし、熱力学が適用できる条件で上記の話は成立する。この回数か個数を N として表し、非常に大きな数とする。というのも、1回のシラードエンジンのサイクルでは、系が等温膨張をするという過程で齟齬が起きる。片側は粒子が何も入っていない、本来であれば真空膨張をしてしまうからである。なので、この点に注意しながら、今後の話を進める。しかし、これだけでは熱力学サイクルを元に戻したのにも関わらず、熱力学から定義される仕事を取り出されているので熱力学第二法則が破られているとしてパラドックスとして知られていた。その後、ランダウアー・ベネットによるマクスウェルの悪魔のメモリ消去ということを考えることにより、問題が解決される。それには下記の合理的であると考えられる仮定を置く。

1. マクスウェルの悪魔がパーティションや重りをつけたり外したりする際に仕事はかからない。

¹この原稿は、基研研究会「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 —」のプロシーディングス原稿である。会議を主催された安田宗樹氏、小渕智之氏、大関真之氏および京都大学基礎物理学研究所に感謝いたします。

²E-mail: yshikano@ims.ac.jp

2. マクスウェルの悪魔には情報的的操作（計算）を許す。その計算のコストはかからない。
3. マクスウェルの悪魔がシリンダの左右の測定の際に、測定のコストはかからない。

2 番目の仮定から、メモリの系は対称でなくてはならないということが導かれる。その際、3 番目の仮定はメモリのシステムをシラードエンジンと同じようなシリンダのシステムに真ん中にパーティションを入れた物理的モデルと等価であるということが導かれる。その際、ボイル・シャルルの法則しかメモリの物理的モデル系には適用しないとする³。これで情報を消去する際には、どれだけの仕事が必要であるのかということを計算できるようになった。ここで我々が示したことは、非対称なシラードエンジンを考えた際に、マクスウェルの悪魔パラドックスを解決するためには、マクスウェルの悪魔が最適な情報圧縮を行った後にそれを物理的モデル系にマップして消去すると、 N が大きい極限での評価で非対称なシラードエンジンからとれる仕事と消去するのに必要な仕事が一致をする。つまり、平衡熱力学で定義されるエントロピーと情報論的エントロピーとが一致する [1]。これは、ランダウアー・ベネットがもともと考えていたシナリオでは、最適な情報圧縮という概念が入り込めなかった。というのも、対称なシラードエンジン系では情報圧縮しない結果と同じになるからである。これが我々の主要な結果である。

2 モチベーション

何故、このような思考実験を問題にするのかということを以下で議論する。これまで、エントロピーという概念は平衡熱力学系、平衡統計力学系、およびブラックホールなどの物理系で議論されてきた。シャノンによる近代的情報科学の勃興以来、情報科学の文脈の中でもエントロピーという概念が使われてきた。これらの概念は相互に関係しそうなものであるが、そのそれぞれが違う文脈で定義されたものである以上、数式としての類似性しか見出すことが出来なかった。そこで、ブリリアンによる「すべての物理的プロセスを情報科学的観点から論じなす」という視点にたち、物理学の中であまり扱うことのできなかったダイナミクスの視点を情報科学に内在する操作論的思考により、定量化するということを主な論点とする。この問題として最適な系は、もともとダイナミクスを操作論的に定義をしてきた平衡熱力学であり、本研究 [1] はその第一歩であると思う。今後、マクスウェルの悪魔が自然界の中にあるプロセスの中でどのような役割を果たし、最も賢いという条件はどのような場合であるのか。果たして、このような問題を提起することにより、どれくらい自然科学観に貢献できるのか。これらを確かめるために今後も研究していく。

³熱力学第二法則の矛盾を避けるのに、熱力学第二法則を用いるということ避けるためである。また、この部分に関しては論文 [1] の記述を改善した点である。

謝辞

本研究は細谷暁夫氏、丸山耕司氏との共同研究であり、共に議論したことを感謝する。

参考文献

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

宇宙の非一様性を測る KL 情報量

沖縄高専 森田 正亮¹

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が、現実の宇宙は少なくとも局所的には極めて非一様である。そのような局所的非一様性を含む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。このことから生じる「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ダイナミクスは、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。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し、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議論する。

1 序論

現在の標準的宇宙論では、宇宙は大域的には一様・等方な Friedmann-Lemaître-Robertson-Walker (FLRW) 宇宙モデルで十分よく記述されると考えられている。このモデルは様々な観測事実をうまく説明する一方で、そこでなされている一様・等方という仮定の妥当性は必ずしも自明ではない。なぜなら、現実の宇宙は局所的には極めて非一様であって、そのような局所的非一様性を含む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からである。これは、宇宙の時間発展を記述するアインシュタインの重力場方程式が本質的に非線形であることと関係している。この事実は宇宙論における「平均化問題」と呼ばれ、最近の宇宙論研究で主要な課題となっている「宇宙の加速的膨張の観測」に対する理論的な裏付けにおいて、可能性の一つとして、しばしば取り上げられている。（このことに関する包括的なレビューは [1] を参照。）

この発表では、非一様宇宙を平均化する手法に関する最近の仕事を概観し、局所的非一様性が大域的な宇宙膨張にいかに関与を与えるか、また非一様性が実効的なダークエネルギーとなり得るのか、を調べる。さらに、この平均化の手法において、宇宙の非一様性を測る尺度として KL 情報量（相対エントロピー）が自然に得られることを示し、この尺度が「宇宙のエントロピー」として妥当であることの検証として、特に時間的増大性について「宇宙の加速的膨張」と絡めながら議論する。

¹E-mail: morita@okinawa-ct.ac.jp

2 非一様宇宙の平均化

まず, Buchert [2] によって定式化された非一様宇宙を平均化する手法の概略を述べ, その基本方程式を導く. 簡単のため, 宇宙は渦がなく, 圧力を無視できるダスト流体で満たされているとし, その密度を ϱ , 4 元速度を u とする. また, 座標系として以下のようなものを選ぶ:

$$ds^2 = dt^2 + g_{ij}dX^i dX^j; \quad u = (1, \mathbf{0}). \quad (1)$$

これは, この設定で自然な座標系の選び方であり, 「同期化された共動座標系」と呼ばれる. ここで, g_{ij} は時間一定超曲面上の 3 次元メトリックである.

次に, テンソル $\Theta_{ij} := (1/2)\dot{g}_{ij}$ を導入する. ドット ($\dot{}$) は時間微分を表す. また, このテンソルのトレース $\theta := g^{ij}\Theta_{ij}$ (局所膨張率と呼ばれる) とトレースレス部分 $\sigma_{ij} := \Theta_{ij} - (1/3)\theta g_{ij}$ (ずりテンソルと呼ばれる) を定義する. これらの量を用いると, 連続の方程式と Raychaudhuri 方程式は, それぞれ

$$\dot{\varrho} + \varrho\theta = 0, \quad (2)$$

$$\dot{\theta} = -4G\varrho - \frac{1}{3}\theta^2 - 2\sigma^2, \quad (3)$$

と書かれる. 式 (3) の右辺にある $\sigma^2 := (1/2)\sigma_{ij}\sigma^{ij}$ は二乗ずり率である.

ここで, コンパクトな空間領域 $\mathcal{D}$ 上で, スカラー量 $A(t, X^i)$ の平均を次のように定義する:

$$\langle A(t, X^i) \rangle_{\mathcal{D}} := \frac{1}{V_{\mathcal{D}}} \int_{\mathcal{D}} A(t, X^i) \sqrt{g} d^3 X; \quad V_{\mathcal{D}}(t) := \int_{\mathcal{D}} \sqrt{g} d^3 X. \quad (4)$$

積分中に現れる $g := \det(g_{ij})$ は 3 次元メトリック g_{ij} の行列式を表す. この領域 $\mathcal{D}$ の体積 (及びその初期時刻での値 $V_{\mathcal{D}_i}$) を用いて, 実効的なスケール因子を $a_{\mathcal{D}}(t) := (V_{\mathcal{D}}(t)/V_{\mathcal{D}_i})^{1/3}$ と定義する. すると, 領域 $\mathcal{D}$ での平均的な膨張率は $\langle \theta \rangle_{\mathcal{D}} = \partial_t V_{\mathcal{D}}/V_{\mathcal{D}} = 3\partial_t a_{\mathcal{D}}/a_{\mathcal{D}}$ と表される. この平均化において注意すべき点は, 空間平均と時間発展という二つの操作の「非可換性」である. これはスカラー量 $A(t, X^i)$ の平均化に対して, 次のような「交換関係」で表される [2]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle A \rangle_{\mathcal{D}} - \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle_{\mathcal{D}} = \langle A\theta \rangle_{\mathcal{D}} - \langle A \rangle_{\mathcal{D}} \langle \theta \rangle_{\mathcal{D}} = \langle A - \langle A \rangle_{\mathcal{D}} \theta \rangle_{\mathcal{D}}. \quad (5)$$

ここで, $\bar{A} := A - \langle A \rangle_{\mathcal{D}}$ と $\bar{\theta} := \theta - \langle \theta \rangle_{\mathcal{D}}$ は, それぞれの量の平均からのずれを表す. 交換関係 (5) を使いながら式 (2) と (3) を平均化すると

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \varrho \rangle_{\mathcal{D}} + \langle \varrho \rangle_{\mathcal{D}} \langle \theta \rangle_{\mathcal{D}} = 0, \quad (6)$$

$$3\frac{\ddot{a}_{\mathcal{D}}}{a_{\mathcal{D}}} + 4G\langle \varrho \rangle_{\mathcal{D}} = Q_{\mathcal{D}}; \quad Q_{\mathcal{D}} := \frac{2}{3} \left(\langle \theta^2 \rangle_{\mathcal{D}} - \langle \theta \rangle_{\mathcal{D}}^2 \right) - 2\langle \sigma^2 \rangle_{\mathcal{D}} \quad (7)$$

を得る. 式 (7) の $Q_{\mathcal{D}}$ は backreaction 項と呼ばれる, 物質分布の非一様性に由来する項であり, 一様・等方な FLRW 宇宙モデルでは 0 である. したがって, この項があるために平均化された非一様宇宙の膨張則は FLRW モデルの膨張則からずれることになる. さらに式 (7) から, backreaction 項は「局所膨張率のゆらぎ」と「ずり率の平均」から成り, 前者は宇宙膨張を加速させる方向に, 後者は減速させる方向に, それぞれ働くことが分かる. この backreaction 項の例示計算として, FLRW 宇宙モデルの線形摂動を使った場合が文献 [3] で与えられている.

3 宇宙論での相対エントロピー

前節で述べた平均化の手法に基づいて、宇宙の非一様性を測る尺度を導入しよう。その際に注目するのは、物質密度分布 ϱ に対する「交換関係」である。それは次のように表される：

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \varrho \rangle_D \quad \left\langle \frac{\partial \varrho}{\partial t} \right\rangle_D = \langle \varrho \theta \rangle_D \quad \langle \varrho \rangle_D \langle \theta \rangle_D = \langle \varrho \theta \rangle_D. \quad (8)$$

これは、平均化された物質密度の時間発展と、局所的な物質密度を時間発展させた後で平均化したものとが、必ずしも一致しないことを意味する。この二つの差が物質密度に関するエントロピー生成に寄与する、と考えることにしよう。するとエントロピーを S とすると、次のように書ける：

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \varrho \rangle_D \quad \left\langle \frac{\partial \varrho}{\partial t} \right\rangle_D = \frac{\dot{S}}{V_D}. \quad (9)$$

この関係を満たす物質密度の汎関数 S を探すと、興味深いことに以下のような KL 情報量 (相対エントロピー) の形が見出される [4]：

$$S\{\varrho \parallel \langle \varrho \rangle_D\} := \int_D \varrho \ln \frac{\varrho}{\langle \varrho \rangle_D} \sqrt{g} d^3 X. \quad (10)$$

この S は通常の KL 情報量と同様、正の物質密度 ϱ に対して $\varrho \neq \langle \varrho \rangle_D$ ならば正定値となり、 $\varrho = \langle \varrho \rangle_D$ のときに限り 0 となる。なお、この量の 1-パラメータ拡張である Tsallis 相対エントロピーの形を考えることもできる (そのパラメータを q とする)：

$$S\{\varrho \parallel \langle \varrho \rangle_D\} := \frac{1}{q-1} \int_D \varrho \left[\frac{\varrho}{\langle \varrho \rangle_D} - 1 \right] \sqrt{g} d^3 X. \quad (11)$$

パラメータ q は Tsallis パラメータ q と $q = \frac{1}{1-q}$ という関係になっており、 $q \rightarrow 0$ の極限で式 (10) が再現される。

こうして式 (10) で定義されたエントロピー S が時間的増大性を持つかどうかを調べるために、 S の時間発展を考えよう。式 (8) と (9) から、 S の時間微分は直ちに

$$\frac{\partial}{\partial t} S\{\varrho \parallel \langle \varrho \rangle_D\} = \int_D \varrho \theta \sqrt{g} d^3 X = V_D \langle \varrho \theta \rangle_D \quad (12)$$

となることが分かる。式 (12) より、宇宙の構造形成の観点から S の時間微分は正となるであろうと期待される。なぜなら、重力不安定性のために、平均よりも物質密度の高い領域 ($\varrho > 0$) は重力的に収縮して ($\theta < 0$) 銀河などを形成するであろうし、平均よりも物質密度の低い領域 ($\varrho < 0$) はより速く膨張して ($\theta > 0$) ボイドとなると考えられるからである。

しかし、実際に非一様性がどのように進化するかは初期条件に依存し、それはとりわけ進化の早期で顕著である。十分な時間が経った後であれば初期条件の影響が小さくなり、上述のような進化をすると考えられるので、より正確には「十分な時間の後には、 S の時間微分は正となる」と言うべきであろう。このことから、 S の時間二階微分が正かどうか、つまり「時間的凸性」を調べるのが重要となる。式 (12) を時間について微分し、式 (3) と (5) を使うと、以下を得る：

$$\frac{\ddot{S}}{V_D} = 4 \langle G(\varrho)^2 \rangle_D + \frac{1}{3} \langle \varrho(\theta)^2 \rangle_D + 2 \langle \varrho^2 \rangle_D + \langle \varrho \rangle_D Q_D - \frac{2}{3} \langle \theta \rangle_D \frac{\dot{S}}{V_D}. \quad (13)$$

時間微分 $\dot{S}$ が十分な時間の後に正となるかどうかは、特に $\dot{S} = 0$ となる瞬間 (これを $t = t_c$ とする) における $\ddot{S}$ の符号が決定的に重要である。なぜなら、もし $\ddot{S}(t = t_c)$ が正であれば、それ以後は $\dot{S}$ が正であり続けることが保証されるからである。式 (13) より、このようになる場合として、例えば backreaction 項 Q_D が (少なくとも $t = t_c$ の瞬間に) 非負である場合が挙げられる。これは、「非一様性の存在が実効的な宇宙膨張を加速させる方向に働くならば、非一様性に伴うエントロピー生成が十分な時間の後には正となる」ことを示しており、観測されている宇宙の加速的膨張とエントロピー増大則の関係を示唆している点で興味深い。

時間微分 $\dot{S}$ の正定値性について、FLRW 宇宙モデルの線形摂動と球対称な Lemaître-Tolman-Bondi 解を用いた解析が文献 [5] で与えられている。

4 まとめと結論

この発表では、Buchert による非一様宇宙の平均化法の概略を述べ、実効的なスケール因子に対して、backreaction 項を持つ Friedmann 的な方程式が導かれることを示した。この backreaction 項のために、実効的な宇宙膨張が FLRW 宇宙の膨張則からずれることが分かる。また、この平均化法において、非一様性に対する自然な尺度が定義され、その尺度が式 (10) のように、情報理論でよく知られている KL 情報量 (相対エントロピー) と同じ形となることを明らかにした。この尺度のエントロピーとしての妥当性を検証するため、その時間的増大性を議論し、「backreaction 項が正ならば、この尺度は十分な時間の後には時間的に増大する」ことを示した。この結果は、宇宙の加速的膨張とエントロピー増大則を、非一様性の進化を介して関係づけている点で興味深い。

このように、非一様宇宙の平均化法における空間平均と時間発展の「非可換性」から、非一様性の尺度が自然に KL 情報量の形となること、またその時間的増大性が平均化法の枠組みで明快に示されることは、KL 情報量が非一様宇宙の記述にうまく適合しており、情報理論と非一様宇宙の相対論による記述・平均化法の間に深いつながりがあることを示唆していると考えられる。

参考文献

- [1] T. Buchert, Gen. Relativ. Gravit. **40** (2008), 467 [arXiv:0707.2153v3];
Class. Quantum Grav. **28** (2011), 164007 [arXiv:1103.2016v2].
- [2] T. Buchert, Gen. Relativ. Gravit. **32** (2000), 105 [arXiv:gr-qc/9906015v2].
- [3] N. Li and D. J. Schwarz, Phys. Rev. D **76** (2007), 083011 [arXiv:gr-qc/0702043v3].
- [4] A. Hosoya, T. Buchert, and M. Morita, Phys. Rev. Lett. **92** (2004), 141302
[arXiv:gr-qc/0402076v1].
- [5] M. Morita, T. Buchert, A. Hosoya, and N. Li, AIP Conf. Proc. **1241** (2010), 1074
[arXiv:1011.5604v1].

緩和と情報による冷却限界¹

東京大学 理学系研究科 伊藤 創祐²

1 はじめに

コロイド粒子系におけるフィードバック制御による冷却技術は、重力波検出のためのノイズキャンセレーション [1] や、レーザー冷却に代わる量子効果実現のためのデバイス [2] などを目的として研究が行われている。このフィードバックによる冷却は Brown 粒子の速度と逆向きのフィードバック力を加え続けることで達成され、特に近年になって Brown 粒子の瞬間的な速度の測定が可能になったことより、レーザーピンセットを用いて、コロイド粒子の速度揺らぎをミリケルビン領域まで下げることが可能になっている [2]。一方で、実験系では常にフィードバック装置の測定誤差などによってコロイド粒子の冷却限界が存在するが、この冷却限界に対する”一般的”な定量的議論は行われてこなかった。この問題に対し、Maxwell の悪魔の研究の文脈で得られた、フィードバック制御下における”情報”と熱力学第二法則同様の構造 [3] の議論から、我々は緩和時間当たりフィードバックのために測定した際に、得られる”情報”（系の状態と測定結果の間の相互情報量）によって、冷却限界が決定されるという式を導出した [4]。本原稿は論文 [4] の内容の一部および『基研研究会「情報統計力学の最前線」』で発表した研究の進展の一部をまとめたものである。

2 設定

ここでは我々が議論した設定について述べる。我々の結果は N 次元の Langevin 系でも拡張は可能であるが、ここでは簡単のため 1 次元 Langevin 系で議論を行おう。まず、次のような Langevin 方程式を考える。

$$m\ddot{x}(t) = -\gamma\dot{x}(t) + F(x(t), \lambda(t, y)) + \xi(t). \quad (1)$$

ここで m はコロイド粒子の質量、 γ は摩擦係数、 $\xi(t)$ は平均 0、分散 $2\gamma k_B T$ のホワイトガウスノイズ、 $F(x(t), \lambda(t, y))$ はフィードバック効果を含む外力で、フィードバック効果はコントロールパラメータ $\lambda(t, y)$ の測定結果 $y = \{y_i\} (i = 1, \dots, n)$ の依存性によって導入している。

¹本研究は東京大学理学系研究科の佐野雅己教授との共同研究である。

²E-mail: sosuke@daisy.phys.s.u-tokyo.ac.jp

フィードバックのための測定は次のようなものを考えている。 i 回目の測定を時刻 $t_i (0 \leq t_1 < t_2 < \dots < t_n \leq \tau = t_{n+1})$ に行うとし、そのときのコロイド粒子系の状態 $\Gamma(t_i) = \{x(t_i), \dot{x}(t_i)\}$ に対して、測定結果 y_i が条件付き確率 $p_i(y_i|\Gamma(t_i))$ によって与えられるとする。この条件付き確率 $p_i(y_i|\Gamma(t_i))$ は y_i と $\Gamma(t_i)$ を引数に持つ関数 $p_i(y_i|\Gamma(t_i)) = f_i(y_i, \Gamma(t_i))$ であり、他の時刻の測定結果や系の状態 $y_j, \Gamma(t_j) (j \neq i)$ によらないとする。

このような系で”情報”、つまり i 回目の測定結果と i 回目の測定時刻での系の状態の間の相互情報量 $\langle I_i \rangle$ という量は、時刻 t_i で系の状態 $\Gamma(t_i)$ をとる確率 $\rho_{t_i}(\Gamma(t_i))$ 、測定結果 y_i を得る確率 $p_i(y_i) = \int d\Gamma(t_i) \rho_{t_i}(\Gamma(t_i)) p_i(y_i|\Gamma(t_i))$ 、また同時分布関数 $p_i(y_i, \Gamma(t_i)) = p_i(y_i|\Gamma(t_i)) \rho_{t_i}(\Gamma(t_i))$ を用いて次のように定義される量である。

$$\langle I_i \rangle = \int d\Gamma(t_i) dy_i p_i(y_i, \Gamma(t_i)) [\ln \rho_{t_i}(\Gamma(t_i)) + \ln p_i(y_i) - \ln p_i(y_i, \Gamma(t_i))]. \quad (2)$$

この相互情報量 $\langle I_i \rangle$ という量は、系の状態 $\Gamma(t_i)$ と、測定結果 y_i が独立 ($p_i(y_i, \Gamma(t_i)) = p_i(y_i) \rho_{t_i}(\Gamma(t_i))$) であれば 0 になる非負の値であり、系の状態 $\Gamma(t_i)$ と、測定結果 y_i の相互依存性の尺度となる量である。

我々はこの相互情報量 $\langle I_i \rangle$ が与えられた Langevin 系の測度揺らぎ $\langle \dot{x}^2(t) \rangle$ に与える影響を調べ ($\langle \dots \rangle$ はアンサンブル平均)、得られた結果を用いて測定誤差が存在するときの冷却限界を議論した。

3 緩和と情報による冷却限界

ここでは得られた結果について説明する。具体的な導出は [4] を参考にしていただきたい。まず、揺動応答関係の破れと相互情報量の関係として次の式が成り立つ。

$$\frac{1}{k_B T} \int_0^\tau dt \gamma [\langle \dot{x}^2(t) \rangle - 2k_B T R(t; t)] \geq \langle \ln \rho_0(\Gamma(0)) - \ln \rho_\tau(\Gamma(t)) \rangle - \sum_i \langle I_i \rangle. \quad (3)$$

ここで、 $R(t; t')$ は応答関数であり、 $R(t; t') = \delta \langle \dot{x}(t) \rangle / \delta F(x(t'), \lambda(t', y))$ を意味する。式 (3) の左辺は同時刻での速度に関する揺動応答関係の破れを意味しており、この量の下限が実質的に相互情報量の和 $\sum_i \langle I_i \rangle$ で抑えられていることになる。

この式は、フィードバックによって粒子の速度揺らぎ $\langle \dot{x}^2(t) \rangle$ が、熱浴（媒質）からくる揺動力の応答 $R(t; t)$ よりも低くできる限界が、フィードバックに用いたときの”情報”で決まっているということを意味している。この事実は次のような時間粗視化を導入することでより鮮明になるだろう。十分長い τ に対して、時間粗視化 $E_\tau[\cdot(t)]$ を $E_\tau[\cdot(t)] = (1/\tau) \int_0^\tau dt \cdot(t)$ のように定義する。時間粗視化で系が定常状態に落ち着いてるとみなせる場合、コロイド粒子の温度 T_{eff} は時間粗視化を用いて、 $T_{\text{eff}} = E_\tau[\langle m \dot{x}^2(t) \rangle / k_B]$ と定義できるだろう。またこの温度 T_{eff} で揺動散逸定理を満たす ($E_\tau[\langle \dot{x}^2(t) \rangle - 2k_B T_{\text{eff}} R(t; t)] = 0$) ように $R(t; t) = 1/(2m)$ を仮定すると、十分長い時間 τ で時間粗視化で定常状態を導入できること ($\langle \ln \rho_0(\Gamma(0)) - \ln \rho_\tau(\Gamma(t)) \rangle \simeq 0$) から、

$$\frac{T - T_{\text{eff}}}{T} \leq \frac{\sum_i \langle I_i \rangle}{\tau} t_r, \quad (4)$$

という不等式が成り立つ。ここで t_r は系の速度に関する緩和時間 $t_r = m/\gamma$ であり、不等式 (4) の右辺は緩和時間当たりの相互情報量という量になっている。不等式 (4) はフィードバック制御下での粒子の温度 T_{eff} の冷却限界を与える不等式であり、この式は緩和時間という粒子の速度の情報を忘れる時間スケールで、どれだけの”情報”をフィードバックに活用可能かという値だけで、粒子の温度の下限が決まるといういわば、緩和と情報による冷却限界、となっている。

4 具体的な系での応用

ここでは不等式 (4) の具体的な応用を考え、実際の実験系での冷却限界を与える式を考えよう。

測定間隔 $\Delta t_i = t_{i+1} - t_i$ やフィードバックのプロトコルが時間に依存しない場合を考える。ここで、時間に依存しない、とは測定間隔が一定 ($\Delta t_1 = \Delta t_2 = \dots = \Delta t_n \equiv \Delta t$) で、測定誤差の関数 f_i が i によらず ($f_1 = f_2 = \dots = f_n \equiv f$)、コントロールパラメータ $\lambda(t, y)$ の y_i 依存性が、時刻 $t_i \leq t \leq t_{i+1}$ でのみ依存し、 i によらないということを意味している。このとき系は周期的な定常状態が実現される。よって周期的定常状態では測定時刻 t_i での分布は i によらず $\rho_{t_i} \equiv \rho$ で、各相互情報量は一定 ($\langle I_1 \rangle = \langle I_2 \rangle = \dots = \langle I_n \rangle \equiv \langle I \rangle$) である。

十分長い時間 τ をとると、不等式 (4) はさらに

$$\frac{T - T_{\text{eff}}}{T} \leq \frac{t_r}{\Delta t} \langle I \rangle, \quad (5)$$

とかけ、測定間隔と緩和時間の比が冷却限界を決定しているという描像が得られる。一般に $\langle I \rangle$ は ρ から計算されるので粒子の温度 T_{eff} の関数であり、この後の Gaussian の測定誤差の場合のように $\langle I \rangle (T_{\text{eff}})$ が T_{eff} の単調非減少関数であれば、 $\langle I \rangle$ 、 $t_r/\Delta t$ 、 T の非負性から次の自己無撞着方程式で粒子温度の下限 T_{eff}^* が決定される。

$$T_{\text{eff}}^* = T - T \frac{t_r}{\Delta t} \langle I \rangle (T_{\text{eff}}^*). \quad (6)$$

これにより、粒子の温度の下限は、熱浴の温度 T と緩和時間と測定時間の比 $t_r/\Delta t$ と相互情報量 $\langle I \rangle$ だけで決定されることになる。

具体的な場合として、粒子の速度に関する測定を行い、Gaussian の測定誤差がある場合を考えよう。条件付き確率 $p_i(y_i|\dot{x}(t_i)) = f(y_i, \dot{x}(t_i))$ は

$$f(y_i, \dot{x}(t_i)) = \sqrt{\frac{1}{2\pi\sigma_{\text{err}}^2}} \exp \left[-\frac{(y_i - \dot{x}(t_i))^2}{2\sigma_{\text{err}}^2} \right] \quad (7)$$

のように与えられて、時刻 t_i での分布 $\rho(\dot{x}(t_i))$ が温度 $T'_{\text{eff}} (\simeq T_{\text{eff}})$ の Maxwell-Boltzmann 分布で与えられるとき、相互情報量 $\langle I \rangle$ は

$$\begin{aligned} \langle I \rangle (T_{\text{eff}}) &= \int dy d\dot{x} f(y, \dot{x}) \rho(\dot{x}) \ln \frac{f(y, \dot{x})}{\int d\dot{x} \rho(\dot{x}) f(y, \dot{x})} \\ &= \frac{1}{2} \ln \left[1 + \frac{k_B T_{\text{eff}}}{m \sigma_{\text{err}}^2} \right]. \end{aligned} \quad (8)$$

と与えられる。この相互情報量が与える粒子の温度の下限 T_{eff}^* は自己無撞着方程式 (6) で与えられ、

$$\frac{\Delta t}{t_r} = \frac{1}{2} \frac{T}{T - T_{\text{eff}}^*} \ln \left[1 + \frac{k_B T_{\text{eff}}^*}{m \sigma_{\text{err}}^2} \right], \quad (9)$$

となる。この式 (9) は、測定誤差 σ_{err} の影響が粒子の温度の下限に与える影響を評価できる式となっている。またこの式 (9) から、 $\Delta t \rightarrow \infty$ の極限では $T_{\text{eff}}^* \rightarrow T$ となることと、 $\Delta t \rightarrow 0$ の極限でのみ $T_{\text{eff}}^* \rightarrow 0$ となることがいえる。前者の極限はフィードバックのない場合に相当し、通常の熱力学第二法則同様、系に外力を加えても粒子の温度は下がらないこと ($T_{\text{eff}} \geq T$) を主張している。また後者の極限は無限回測定によるフィードバックに対応しており、これは有限回操作では絶対零度に到達できないとする、熱力学第三法則と矛盾しない事実を主張している。

研究会では実際にフィードバックの仕方 $F(x(t), \lambda(t, y))$ を指定して、その数値計算結果と、式 (9) の比較を行い、式 (9) が冷却限界を与えていることを確認した。また実験のセットアップ [2] での物理量を用いて、式 (9) が与える下限との比較を行った。また、 N 次元 Langevin 系でも、同様の緩和と情報による冷却限界の式 (4) が導出できることを示した。これらの内容は現在論文準備中である。

謝辞

本研究に関して特に有益な議論をしていただきました、京都大学次世代研究者育成センター特定助教の沙川貴大氏、東京大学大学院総合文化研究科の佐々真一教授に感謝いたします。

参考文献

- [1] A. Vinante et al., Phys. Rev. Lett. **101**, 033601 (2008)
- [2] T. Li, S. Kheifets and M. G. Raizen, Nature Phys. **7**, 527 (2011).
- [3] T. Sagawa and M. Ueda, Phys. Rev. Lett. **104**, 090602 (2010).
- [4] S. Ito and M. Sano, Phys. Rev. E **84**, 021123 (2011).

Zon-Cohen 特異性の物理的起源

東京大学大学院 総合文化研究科 根本 孝裕¹

1 序論

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]。彼らは、この破れを拡張ゆらぎ定理 (extended fluctuation theorem) と呼んだ。近年の拡張ゆらぎ定理の研究については、[2] を参照されたい。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。

本稿では、この Zon-Cohen 特異性を簡単なモデルを用いて概観する。本稿の内容の詳細については [3] を参照されたい。

2 モデル

温度 T の溶媒中の 1 個のブラウン粒子を考える。簡単のため、ブラウン粒子の運動は 1 次元に制限されているとする。ブラウン粒子の時刻 t での位置を $x(t)$ ($-\infty < x(t) < \infty$) と書く。今、ブラウン粒子に次の周期ポテンシャルを課す。

$$U(x) = U_{\text{harmonic}}(x) - \frac{1}{2}k(x - 2nL)^2. \quad (1)$$

ただし、 n は $-L \leq x - 2nL < L$ の不等式によって決定される定数である。(1) の周期ポテンシャルを図 1 に示す。次に、この周期ポテンシャルを速度 v で x 軸の負の方向に動かすことを考える。すると、そのときのブラウン粒子の運動は、次のランジュバン方程式によって記述される。

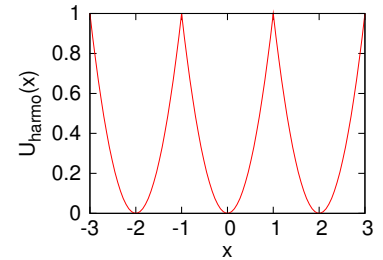


図 1: $k = 2$, $L = 1$ と置いた時の周期ポテンシャル (1)。

$$\dot{x}(t) = -\frac{1}{\gamma} \frac{\partial}{\partial y} U(y) \Big|_{y=x(t)+vt} + \sqrt{\frac{2T}{\gamma}} \xi(t). \quad (2)$$

¹E-mail: nemoto@jiro.c.u-tokyo.ac.jp

ここで、 $\xi(t)$ はガウス白色ノイズであり、 $\langle \xi(t) \rangle = 0$ と $\langle \xi(t)\xi(s) \rangle = \delta(t-s)$ を満たす。また、 γ は粒子の抵抗係数である。解析を簡単にするために、周期ポテンシャルと一緒に動く座標系を導入する。具体的に、新しい変数 $y(t)$ を $y(t) = x(t) + vt - 2nL$ によって定義する。ここで、 n は $-L \leq x(t) + vt - 2nL < L$ によって決定される整数である。この $y(t)$ は $[-L, L)$ 上の値しか取らない。(2) より、 $y(t)$ は次式によって時間発展することが分かる。

$$\dot{y}(t) = -\frac{1}{\gamma} \frac{\partial}{\partial y} U(y(t)) + v + \sqrt{\frac{2T}{\gamma}} \xi(t). \quad (3)$$

時刻 t までに、ブラウン粒子に対して周期ポテンシャルがした仕事を $W(t)$ 、ブラウン粒子の運動によって熱浴に吸収された熱を $Q(t)$ と置く。これらは、次の時間発展方程式に従う。

$$\dot{W}(t) = (-v) \left[-\frac{\partial}{\partial y} U(y) \right]_{y=x(t)+vt}, \quad (4)$$

$$\dot{Q}(t) = \dot{x} \circ [\gamma \dot{x} - \sqrt{2\gamma T} \xi(t)]. \quad (5)$$

ここで、 $\circ$ はストラトノビッチ積を表す。これら熱と仕事は次の熱力学第一法則を満たす。

$$\int_{t_1}^{t_2} dt \quad \dot{W}(t) - \dot{Q}(t) = U(x(t_2) + vt_2) - U(x(t_1) + vt_1). \quad (6)$$

以下、 $y(t)$ の初期分布関数 ($y(0)$ の分布関数) を $p(y)$ と置く。また、その初期分布関数における、ノイズによる期待値を $\langle \rangle_p$ と書く。

2.1 バイアスされた分布関数とキュムラント母関数

今、キュムラント母関数とバイアスされた分布関数を次式で定義する。

$$G(h, t|p) = \frac{1}{t} \log \left\langle e^{Q(t)h} \right\rangle_p, \quad (7)$$

$$P_h(y_0, y, t|p) = e^{-tG(h, t|p)} \left\langle \delta(y(t) - y) \delta(y(0) - y_0) e^{Q(t)h} \right\rangle_p. \quad (8)$$

ここで h はバイアス場 (biasing field) と呼ばれるパラメータである。(8) は、バイアス場によってバイアスされた、もともとの系とは別の系における $\delta(y(t) - y) \delta(y(0) - y_0)$ の期待値と見ることが出来る。ただしこの別の系とは、ランジュバン方程式 (3) から得られる $(y(s))_{s=0}^t$ の経路確率に、 $e^{Q(t)h - tG(h, t|p)}$ をかけて定義した新しい経路確率に従う系である。例えば、 $Q(t)$ が非常に大きいような、実際にはほとんど観測されない (経路確率が小さい) 経路が、 $h > 0$ のときのバイアスされた系においては、大きな経路確率を持つ。このことからバイアス場は、まれに起こる事象と関係していることが分かる。

ここで、バイアスされた分布関数が、熱についての条件付き確率と等しいという公式を紹介する。まず、次式によって同時分布関数を定義する。

$$P(y_0, y, q, t|p) = \langle \delta(y(0) - y_0) \delta(y(t) - y) \delta(Q(t)/t - q) \rangle_p. \quad (9)$$

また、同様に熱についての分布関数を $P(q, t|p) = \langle \delta(Q(t)/t - q) \rangle_p$ によって定義する。このとき、次式を示すことが出来る [3]。

$$P_h(y_0, y, t|p) = \frac{P(y_0, y, q, t|p)}{P(q, t|p)} + \frac{1}{1/t} o(1/t). \quad (10)$$

ただし q は次式で決定される h の関数である。

$$q = \operatorname{argmax}_q hq + \left(\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \log P(q, t|p) \right). \quad (11)$$

3 結果

今、 L をどんどん大きくして行くことを考えよう。すると、以下のように、バイアスされた分布関数がカノニカル分布に収束することを示すことが出来る。 y についてのカノニカル分布を

$$p_{\text{can}}^{U,v}(y) = \frac{1}{Z(v, \beta)} e^{-U(y) + \gamma v y} \quad (12)$$

で定義する。ただし、 $Z(v, \beta) = \int_{-L}^L dy e^{-U(y) + \gamma v y}$ である。このとき、次式が成り立つ [3]。

$$P_h(y_0, y, \tau | p_{\text{st}}^{U,v}) \sim p_{\text{can}}^{U,v,i}(y_0) p_{\text{can}}^{U,v,f}(y) + O(e^{-a\tau}). \quad (13)$$

ここで左辺中の $p_{\text{st}}^{U,v}(y)$ は y の定常分布である。また、右辺のパラメータ β_i, β_f は $\beta_i = \beta - h$ 、 $\beta_f = \beta + h$ で定義されるバイアスされた逆温度である。一方、(10) より、条件付き分布関数についても同様の結果を得ることが出来る。(11) の q と h の関係は、

$$q = \gamma v^2 (1 + 2Th) \quad (14)$$

となり、従って、

$$\frac{P(y_0, y, q, t|p)}{P(q, t|p)} \sim p_{\text{can}}^{U,v,\tilde{i}}(y_0) p_{\text{can}}^{U,v,\tilde{f}}(y) + \frac{1}{1/t} o(1/t) \quad (15)$$

を得る。ただし、 $\tilde{\beta}_i, \tilde{\beta}_f$ は $\tilde{\beta}_i = \beta - (q - \gamma v^2)/(2T\gamma v^2)$ 、 $\tilde{\beta}_f = \beta + (q - \gamma v^2)/(2T\gamma v^2)$ で定義される。ここで注意したい点は、(13)、(15) の右辺のカノニカル分布の逆温度は、それぞれパラメータ h や q によって修正されている点である。とくに、 h や q の絶対値がある値よりも大きくなると、その修正された逆温度が負になることに気付く。以下で見るように、この分布の反転が Zon-Cohen 特異性を引き起こすことになる。

3.1 負の逆温度と Zon-Cohen 特異性

キュムラント母関数の定義式 (7) 中の $\langle e^{Q(t)h} \rangle_{p_{\text{st}}^{U,v,\beta}}$ を考えよう。 $Q(t)$ は一般に時間 t に比例して大きくなる量である。従って t が十分大きいとき、鞍点法により、 $\langle e^{Q(t)h} \rangle_{p_{\text{st}}^{U,v,\beta}}$ の期待値を計算する上で必要になる粒子の軌跡は、 $Q(t)/t = q$ を与える軌跡（ここで q は (11)、すなわち (14)

で与えられる h の関数) のみであることが分かる。一方 (15) より、その q が $-\gamma v^2$ よりも小さくなると、すなわち h が $-\beta$ よりも小さくなると、その粒子の軌跡の終端分布が負の逆温度になることが分かる (もしくは、 q が $3\gamma v^2$ よりも大きくなると、すなわち h が β よりも大きくなると、その粒子の軌跡の初期分布が負の逆温度になることが分かる)。以下、 h が $-\beta$ よりも小さい場合を議論しよう。なお、 h が β よりも大きい場合についても、同様に議論することが出来る。

まず、イエンゼンの不等式から、

$$G(h, t | p_{\text{st}}^{U, v}) \geq \frac{h}{t} \int_0^t ds \langle \dot{Q}(s) \rangle_{p_{\text{st}}^{U, v, \beta}} = -\frac{h}{t} \langle U(y(\tau)) - U(y(0)) \rangle_{p_{\text{st}}^{U, v, \beta}} + \frac{h}{t} \int_0^t dt \langle \dot{W}(t) \rangle_{p_{\text{st}}^{U, v, \beta}} \quad (16)$$

を得る。ただし、熱力学第一法則 (6) を用いた。上の議論により、この式の最右辺は、終端分布が負である粒子の軌跡を用いて評価することが出来る。その結果、一項目は $-hU(L)/\tau$ と置くことが出来る。また二項目は、粒子の運動に対して次の仮定を置くことで無視することが出来る: 『その終端分布が負である粒子の軌跡において、粒子は、時刻 t 以外ではほとんどポテンシャルの底を運動しており、時刻が t に近づくと、急にポテンシャルを駆け上がり、そして $y(t) \simeq L$ となる。』従って以上により、次の不等式を得る。

$$G(h, t | p) \gtrsim -\frac{h}{t} U(L). \quad (17)$$

この不等式は、 h が $-\beta$ よりも小さいときには、キュムラント母関数において $L \rightarrow \infty$ の極限と $t \rightarrow \infty$ の極限が交換しないことを示唆している。 $L \rightarrow \infty$ の極限を最初にとるとキュムラント母関数は発散し、 $t \rightarrow \infty$ の極限を最初にとるとキュムラント母関数は発散しない。この発散が Zon-Cohen 特異性に他ならない。

ここでは直感的な議論を用いて Zon-Cohen 特異性を導出したが、別の方法からも上の発散を得ることが出来る。詳しくは文献 [3] を参照されたい。

参考文献

- [1] R. van Zon and E. G. D. Cohen, Phys. Rev. Lett. **91**, 110601 (2003); Phys. Rev. E **69**, 056121 (2004).
- [2] N. Garnier and S. Ciliberto, Phys. Rev. E **71**, 060101(R) (2005), F. Bonetto, G. Gallavotti, A. Giuliani, and F. Zamponi, J. Stat. Phys. **123**, 39 (2006), M. Baiesi, T. Jacobs, C. Maes, and N. S. Skantzos, Phys. Rev. E **74**, 021111 (2006), P. Visco, J. Stat. Mech. (**2006**) P06006, R. J. Harris, A. Rákos and G. M. Schütz, Europhys. Lett. **75**, 227 (2006), A. Rákos and R. J. Harris, J. Stat. Mech. (**2008**) P05005, A. Puglisi, L. Rondoni and A. Vulpiani, J. Stat. Mech. (**2006**) P08010, J. D. Noh and J.-M. Park, arXiv:1204.1004.
- [3] T. Nemoto, arXiv:1205.1903.

射影演算子法による 大偏差統計関数の近似計算手法¹

京都大学 情報学研究科 松井 克仁, 宮崎 修次²

(概要) 森肇が射影演算子法を用いてブラウン運動を解析してからおよそ半世紀が経った。この手法をカオス力学系に適用すると、カオス的に変動する力学変数の二時間相関関数について、閉じた方程式が得られる。これは記憶項を含み、解析が困難であるが、藤坂らは状態空間を拡張することで記憶項を無視し、二時間相関関数を近似的に求める手法とともに、これを用いて大偏差統計関数を計算する手法を提唱した。ここでは、時間遅れ座標を用いて状態空間を拡張し、可解カオスモデルの局所軌道拡大率のレート関数を具体的に求め、厳密な結果と比較する。中尾らが指摘した定義にしたがったレート関数の数値計算の有限サンプル効果の制限を受けず、大きな揺らぎが捉えられる。

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 [1]。このレート関数は解析的に求めるのは非常に困難なため、実用的には数値計算で求めることになる。そのときに、時系列データ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 [2]。つまり、長時間平均からの大きな揺らぎを特徴づけるという本来の目的が実際の時系列から求める限り達成できないということである。藤坂は、レート関数などの大偏差統計関数を森の影演算子法を適用することによって求めるという一般的な理論的枠組みを構築した [3]。森の射影演算子法 [4] 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時間相関関数の計算に応用されるものである。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一般に解くのは困難である。そこで、状態空間を拡張することによって近似的に解くということが提案された [3]。本研究では、実際の時系列から射影

演算子法を用いてレート関数を計算し、このようにして求めた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。そして、射影演算子法を用いた計算手法（提案法）の妥当性を検証するために、レート関数の解析解が得られる系に対して適用し、解析解、定義に従った数値解、提案法による解を比較した。

今、定常な時系列 $x_1, x_2, \dots$ を考える。この時系列の有限時間平均 $\bar{x}_T$ は以下のように t に依存する： $\bar{x}_T(t) = \frac{1}{T} \sum_{s=t}^{t+T-1} x_s$ 。この $\bar{x}_T(t)$ の確率密度関数 $P_T(u)$ は、以下のように時系列から定義することができる。

$$P_T(u) = \lim_{T' \rightarrow \infty} \frac{1}{T'} \sum_{t=1}^{T'} \delta(u - \bar{x}_T(t)) = \langle \delta(u - \bar{x}_T(t)) \rangle_t$$

ここで、 $\langle \dots \rangle_t$ は t に関しての長時間平均を表す。

時系列 x_t の定常性から、 $P_T(u)$ は $T \rightarrow \infty$ では、大数の法則より長時間平均 $\langle x_t \rangle_t$ にピークを持つ δ 関数となる。すなわち、 $P_T(u) \rightarrow \delta(u - \langle x_t \rangle_t)$ ($T \rightarrow \infty$) である。ここで、大きくはあるが有限の時間幅 T における $P_T(u)$ の漸近形は $P_T(u) \simeq \exp(-S(u)T)$, $S(u) \geq 0$ のようになることが大偏差原理として知られている。 $S(u)$ は T によらない、 u だけの関数であり、レート関数と呼ばれている。意味としては、 $T \rightarrow \infty$ にしていったときに、 $P_T(u)$ がどのように δ 関数に近づいていくかを表し、その時系列を特徴づける量である。このとき、母関数が次のように定義できる： $Z_q(T) = \langle e^{qT\bar{x}_T(t)} \rangle_t = \int_{-\infty}^{\infty} e^{qTu} P_T(u) du$ 。これに確率分布 $P_T(u)$ を代入すると、 $Z_q(T) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{[qu - S(u)]T} du$ となる。この式を鞍点法を用いて計算する。つまり、今 $T \gg 1$ であることを考えると、積分への寄与の大半を占めるのは $qu - S(u)$ が最大のときの被積分関数 $\exp[qu - S(u)]T$ であると考えられる。被積分関数 $\exp[qu - S(u)]T$ を、 $qu - S(u)$ を最大にする $u = u^*$ つまり $\frac{d}{du}[qu - Su] = 0$ を満たす u^* のまわりで展開し 3 次以上を無視すると $Z_q(T) \simeq e^{[qu^* - S(u^*)]T}$ が得られる。ここで、十分大きな T に対して、 $T\bar{u}_T$ は平均的に T に比例する量であるから、 $Z_q(T) \simeq e^{\phi(q)T}$ を満たす特性関数 $\phi(q)$ が存在すると考えられる。よって、この式と鞍点法の計算結果から次の関係式が求まる： $\phi(q) = qu^* - S(u^*) = \max_u [qu - S(u)]$ 。これは $S(u)$ と $\phi(q)$ がルジャンドル変換の関係になっていることを表している。

次に本研究において中心的な役割を果たすレート関

¹この研究は科学研究費補助金（基盤研究（c））課題番号「20540376」研究課題名「大偏差統計解析の新たな展開」の支援を受けている。本稿を2011年12月28日に急逝した森肇九州大学名誉教授に捧げる。

²E-mail: syuji@acs.i.kyoto-u.ac.jp

数 $S(u)$ を実際の時系列から数値的に計算する方法を示す. $S(u)$ と $\phi(q)$ がルジャンドル変換の関係になっているので, $S(u) = \max_q [qu - \phi(q)] = q \frac{d\phi(q)}{dq} - \phi(q)$ となり, $Z_q(T) \simeq e^{\phi(q)T}$ より特性関数 $\phi(q)$ は $\phi(q) \simeq \frac{1}{T} \ln Z_q(T)$ となることから, 各 q に対して母関数 $Z_q(T)$ を数値的に求めれば, q の関数として $S(u(q))$ が求まることになる. したがって, $S(u(q))$ と $u(q)$ をプロットすれば $S(u)$ が u の関数として求まることになる. 母関数 $Z_q(T) = \langle e^{qT\bar{x}_T(t)} \rangle_t$ については実際の時系列データから $e^{qT\bar{u}_T}$ の長時間平均を近似的に求めればよい. 以上のことをまとめると, 実際の時系列データから母関数 $Z_q(T)$ を求めれば, レート関数 $S(u)$ を数値的に求めることができる.

大偏差統計の応用例の一つとして非双曲性による局所軌道拡大率の大きな揺らぎの特徴づけがある. ここでは, 非双曲性について述べ, これが大きく大偏差統計によってどのように特徴づけられるのかをみる [5]. 本研究においては, 力学系として一次元写像のみを考える. 非双曲的な一次元写像 $x_{t+1} = f(x_t)$ はリターンマップにおいて, 滑らかな極値を持つものであり, 例としてはロジスティック写像 $x_{t+1} = 4x_t(1 - x_t)$ が挙げられる. 非双曲性の特徴を捉えるために, 局所軌道拡大率という量を考える. 局所軌道拡大率 λ_t とはカオスにおける軌道不安定性を特徴づける量として次のように定義される: $\lambda_t = \lambda_t(x_t) = \ln \left| \frac{df(x_t)}{dx} \right|$. 以下で与えられる局所軌道拡大率 λ_t の有限時間平均は有限時間リヤプノフ指数 $\Lambda_T(t)$ とよばれており, 長時間平均はリヤプノフ指数 Λ_∞ とよばれている: $\Lambda_T(t) = \frac{1}{T} \sum_{s=t}^{t+T-1} \lambda_s$, $\Lambda_\infty = \lim_{T \rightarrow \infty} \Lambda_T(t) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \sum_{s=t}^{t+T-1} \lambda_s$. リアプノフ指数は実用上のカオスの判定としてしばしば用いられていることから, 局所軌道拡大率はカオス力学系の個性を反映する量と考えられる. よって, 局所軌道拡大率 λ_t の時系列を考え, その揺らぎを大偏差統計で特徴づけられればカオス力学系を特徴づけることができる. 局所軌道拡大率 λ_t の時系列の揺らぎを大偏差統計で解析するということは, 以下で与えられる有限時間リヤプノフ指数 $\Lambda_T(t)$ の確率分布 $P_T(u)$ を考え, そのレート関数 $S(u)$ を調べるということである: $P_T(u) = \langle \delta(u - \Lambda_T(t)) \rangle_t$. このような, 局所軌道拡大率 (有限時間リヤプノフ指数) のレート関数 $S(u)$ を拡大率スペクトルという. 非

双曲的一次元写像ではリターンマップ上に傾きが 0 となる位置が存在する. そのため, この位置の近傍を軌道が通ったとき, 負の大きな局所軌道拡大率が生じ有限時間リヤプノフ指数は大きく揺らぐ. このような大きな揺らぎを大偏差統計によって捉えることにより, 非双曲性を特徴づけることができると考えられる. このような課題は以前から研究されており, 非双曲系には拡大率スペクトルに非解析性と直線構造という特徴が現れることが知られている. なお, 一般に拡大率スペクトルの解析的な表現は特別な場合しか求まらないが, 前述のロジスティック写像の拡大率スペクトルは以下のようなになる [5]: $S(u) = \Lambda_\infty - u$ ($u < \Lambda_\infty = \ln 2$), $u - \Lambda_\infty$ ($\Lambda_\infty < u < 2\Lambda_\infty$), ∞ ($u > 2\Lambda_\infty$).

森の射影演算子法 [4] を用いて, 時間相関関数の従う運動方程式を導くことができる. しかし, この運動方程式には記憶項があるため, 一般に解析的に解くのは困難である. そこで, この運動方程式を近似的に解く方法として状態空間の拡張を行う [3].

カオス軌道は不安定なため (ずれが指数関数的に増大してしまうため), ある一つの軌道が時々刻々どうなっていくかを調べるよりも, 多くの軌道に関して平均 (アンサンブル平均) した様々な統計量を調べた方が, そのカオスの性質を理解することができる. さらに, エルゴード性が成り立つときには, アンサンブル平均は長時間平均に等しくなるので, ある一つの軌道の長時間の振る舞いに関する統計量を調べればよいことになる. カオス軌道 $\{x_t\}$ の時間相関をみる統計量としては, 以下に与えられる時間相関関数 $C(\tau)$ がある. ここで, $\langle x_t \rangle_t = 0$ を仮定している: $C(\tau) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \sum_{t=1}^T x_{t+\tau} x_t$ ($\langle x_{t+\tau} x_t \rangle_t$). ここで, x_t の長時間平均 $\langle x_t \rangle_t$ が 0 でないときは, 時間相関関数を以下のように定義する (これは, 自己共分散関数ともよばれている): $C(\tau) = \langle \{x_{t+\tau} - \langle x_t \rangle_t\} \{x_t - \langle x_t \rangle_t\} \rangle_t = \langle x_{t+\tau} x_t \rangle_t - \langle x_t \rangle_t^2$.

森の射影演算子法とは, 決定論的な運動方程式から, 一般化ランジュバン方程式とよばれるそれと同値な確率論的な運動方程式を導く手法である. この射影演算子法をカオス力学系に適用すると, 状態変数に関する時間相関関数の運動方程式が得られる.

今, 一般の一次元カオス力学系 $x_{t+1} = F(x_t)$ に対して, その軌道に付随する任意の物理量 $\tilde{u}_t = \tilde{h}(x_t)$ を考える. $\tilde{h}(x)$ は任意の関数である. ここでは, $u_t = \tilde{u}_t -$

$\langle \tilde{u}_t \rangle_t$ の時間相関関数を求めよう. この物理量 u_t の従う運動方程式に対して, 射影演算子法を適用すると, 以下の一般化ランジュバン方程式が得られる: $u_{t+1} = \zeta u_t + \sum_{\tau=0}^{t-1} \Psi_{t-1-\tau} u_\tau + f_t$. この両辺に対して, u_0 を掛け不変密度で積分すると, 本来の思惑通りに $\langle f_t u_0 \rangle$ の項が 0 となり消える. よって, エルゴード性よりアンサンブル平均は長時間平均をなるので, 以下の時間相関関数の従う運動方程式が時間相関関数に関して閉じた形で得られる: $\langle u_{s+t+1} u_s \rangle_s = \zeta \langle u_{s+t} u_s \rangle_s + \sum_{\tau=0}^{t-1} \Psi_{t-1-\tau} \langle u_{s+\tau} u_s \rangle_s$. ここで, $C_t = \langle u_{s+t} u_s \rangle_s$ と置くと, $C_{t+1} = \zeta C_t + \sum_{\tau=0}^{t-1} \Psi_{t-1-\tau} C_\tau$ となる. この方程式には, 全ての過去からの寄与を表す記憶項 $\sum_{\tau=0}^{t-1} \Psi_{t-1-\tau} C_\tau$ が含まれている. その中の記憶関数 $\Psi_{t-1-\tau}$ は一般には未知であり, この方程式を解くには連分数展開などの複雑な計算が強いられる. そこで, ここではこのような立場はとらずに, 記憶項を無視するような近似を考える. それが状態空間の拡張による近似である. 状態空間の拡張とは, 今考えている状態変数 (物理量) u_t から以下のベクトルで与えられる新しい状態変数を構成することである: $\mathbf{u}_t = (u_t^{(0)}, u_t^{(1)}, \dots, u_t^{(m)})^T$. ここで, $u_t^{(0)} = u_t$ であり, $u_t^{(m)}$ は u_t の任意の関数であるが適切に (異なる時刻の情報がかちんと含まれるように) 選ばないと意味がない. 一般的には, 状態空間の拡張の仕方はいろいろと考えられるが, 本研究では直感的にも最も分かりやすい時間遅れ座標を用いて状態空間を拡張することにする. 時間遅れ座標を用いて状態空間を拡張すると, $\mathbf{u}_t$ は $\mathbf{u}_t = (u_t, u_{t+1}, \dots, u_{t+m})^T$ となる. この新しい状態変数 $\mathbf{u}_t$ の従う運動方程式に対して, 射影演算子法を適用することを考える. すると, この新しい状態変数 $\mathbf{u}_t$ には, m を適切に選ぶと異なる時刻の情報が十分に含まれていると考えられるので, 記憶項を無視した方程式 $\mathbf{u}_{t+1} \simeq \hat{\zeta} \mathbf{u}_t + \mathbf{f}_t$ が近似的に導出できると考えられる. ここで,

$$\langle \mathbf{u}_{s+t} \mathbf{u}_s^T \rangle_s = \left\langle \begin{pmatrix} u_{s+t} u_s & \dots & u_{s+t} u_{s+m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{s+t+m} u_s & \dots & u_{s+t+m} u_{s+m} \end{pmatrix} \right\rangle_s = \begin{pmatrix} \langle u_{s+t} u_s \rangle_s & \dots & \langle u_{s+t} u_{s+m} \rangle_s \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle u_{s+t+m} u_s \rangle_s & \dots & \langle u_{s+t+m} u_{s+m} \rangle_s \end{pmatrix}$$

とすると, 時間相関関数に対応する $\langle \mathbf{u}_{s+t} \mathbf{u}_s^T \rangle_s$ の従う運動方程式は $\langle \mathbf{u}_{s+t+1} \mathbf{u}_s^T \rangle_s \simeq \hat{\zeta} \langle \mathbf{u}_{s+t} \mathbf{u}_s^T \rangle_s$ となる. ここで,

$$\langle \mathbf{u}_{s+t} \mathbf{u}_s^T \rangle_s = \begin{pmatrix} \langle u_{s+t} u_s \rangle_s & \dots & \langle u_{s+t} u_{s+m} \rangle_s \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle u_{s+t+m} u_s \rangle_s & \dots & \langle u_{s+t+m} u_{s+m} \rangle_s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_t & C_{t-1} & \dots & C_{t-m} \\ C_{t+1} & C_t & \dots & C_{t-m+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ C_{t+m} & C_{t+m-1} & \dots & C_t \end{pmatrix} \hat{C}_t$$

とおけば, $\hat{C}_{t+1} \simeq \hat{\zeta} \hat{C}_t$ となる. ただし, $\hat{\zeta} = \langle \mathbf{u}_{s+1} \mathbf{u}_{s+0}^T \rangle_s \langle \mathbf{u}_{s+0} \mathbf{u}_{s+0}^T \rangle_s^{-1} = \hat{C}_1 \hat{C}_0^{-1}$ である. よって, $\hat{C}_t \simeq \hat{\zeta}^t \hat{C}_0 = (\hat{C}_1 \hat{C}_0^{-1})^t \hat{C}_0$ が得られる. 注目することは, 左辺の行列 $\hat{C}_t$ の (1, 1) 成分が本来求めたかった時間相関関数 C_t になっていることである. つまり, 右辺の行列 $\hat{C}_0, \hat{C}_1$ に関する計算をして, その (1, 1) 成分を取り出せばよい. このように単純な行列計算から時間相関関数を求めることができる. 時間相関関数の性質 $C_t = C_{-t}$ より, $\hat{C}_0$ は対称行列になる.

ここでは, 直接数値計算によってレート関数を求めると有限サイズ効果という問題が生じてしまうことを説明する. レート関数 $S(u)$ は, まず母関数 $Z_q(T)$ を時系列から求め, それから特性関数 $\phi(q)$ を求め, そのルジャンドル変換として求めることができるというものであった: $Z_q(T) = \langle e^{qT\bar{u}_T} \rangle_t$, $\phi(q) = \frac{1}{T} \ln Z_q(T)$, $S(u) = \max_q [qu - \phi(q)] = q \frac{d\phi(q)}{dq} - \phi(q)$. 母関数 $Z_q(T) = \langle e^{qT\bar{u}_T(t)} \rangle_t$ を求めるには, 長時間平均を時系列から計算する. 後の図で示すが, 時系列の長さ N が $8.0 \times 10^4, 8.0 \times 10^5, 8.0 \times 10^6$ のときの定義に従った直接数値計算によって求めた拡大率スペクトルは解析解が $-\infty < u < 2 \ln 2$ で定義されているにもかかわらず, 直接数値計算で得られる結果は長時間平均 $\ln 2$ の近傍しか得られていない. さらに, 時系列の長さのオーダーを大きくしていても, ほとんど変化がないことがわかる. このような問題は有限サイズ効果とよばれており, 直接数値計算ではレート関数の大きな揺らぎの範囲が再現できないことになる. このような問題が起こってしまう原因は, 数値計算においては時系列の長さ N と粗視化する時間幅 T が有限になってしまうことによる. 大きな揺らぎの部分というのは, 非常に稀な運動 (有限時間平均が非常に稀な値となるとき)

に対応しているので、そのような稀な運動というのは、時系列の長さが無限大に近い値をとらない限り観測されないということに起因していると考えられる。

このような問題点を解決する手法として、射影演算子法を用いた大偏差統計量の近似計算について説明する。母関数 $Z_q(t)$ をある変数 $s_t(\tau)$ の時間相関関数に見立てることがポイントである。今、変数 $s_t(\tau)$ を次のように定義する： $s_t(\tau) = L_q^t 1 = \exp\left(q \sum_{k=\tau}^{\tau+t-1} u_k\right)$ 。すると、母関数 $Z_q(t)$ は $Z_q(t) = \langle e^{q t \bar{u}_t(\tau)} \rangle_\tau = \langle s_t(\tau) \rangle_\tau = \langle s_t(\tau) s_0(\tau) \rangle_\tau$ のようにかける。これは、母関数 $Z_q(t)$ が変数 $s_t(\tau)$ における t 、つまり有限時間平均の幅 t について着目すると時間相関関数の形になっているということである。

ここで、前述のとおり、射影演算子法は状態変数についての時間相関関数を求める手法であったから、ここでもそれが適用できることがわかる。よって、同様にして射影演算子法を適用すると、 $s_t = s_t(x_\tau)$ の従う運動方程式は、 $s_{t+1}(\tau) = \zeta_q s_t(\tau) + \sum_{k=0}^{t-1} \Psi_q(t-1-k) s_k(\tau) + f_q(t)$ となり、時間相関関数の従う運動方程式は、 $\langle s_{t+1}(\tau) s_0(\tau) \rangle_\tau = \zeta_q \langle s_t(\tau) s_0(\tau) \rangle_\tau + \sum_{k=0}^{t-1} \Psi_q(t-1-k) \langle s_k(\tau) s_0(\tau) \rangle_\tau$ となる。ここで、記憶項を無視する近似を行うために、時間遅れ座標を用いて状態空間を拡張する。すなわち、次の新しい状態変数 $\mathbf{s}_t(\tau) = (s_t(\tau), s_{t+1}(\tau), \dots, s_{t+m}(\tau))^T$ を考えると、 $\mathbf{s}_t$ に対する時間相関関数の従う運動方程式は $\langle \mathbf{s}_{t+1}(\tau) \mathbf{s}_0(\tau)^T \rangle_\tau \simeq \hat{\zeta}_q \langle \mathbf{s}_t(\tau) \mathbf{s}_0(\tau)^T \rangle_\tau$ 、 $\hat{\zeta}_q = \langle \mathbf{s}_1(\tau) \mathbf{s}_0(\tau)^T \rangle_\tau \langle \mathbf{s}_0(\tau) \mathbf{s}_0(\tau)^T \rangle_\tau^{-1}$ となる。ゆえに、 $\langle \mathbf{s}_t(\tau) \mathbf{s}_0(\tau)^T \rangle_\tau \simeq \left(\hat{\zeta}_q \right)^t \langle \mathbf{s}_0(\tau) \mathbf{s}_0(\tau)^T \rangle_\tau = \left\{ \langle \mathbf{s}_1(\tau) \mathbf{s}_0(\tau)^T \rangle_\tau \langle \mathbf{s}_0(\tau) \mathbf{s}_0(\tau)^T \rangle_\tau^{-1} \right\}^t \langle \mathbf{s}_0(\tau) \mathbf{s}_0(\tau)^T \rangle_\tau$ において、左辺の $(1, 1)$ 成分に母関数 $Z_q(t)$ が現れる。

次に、非双曲系であるロジスティック写像の拡大率スペクトルを提案法で求め、解析解、直接数値計算解と比較した。時系列の長さは $N = 8.0 \times 10^5$ で、粗視化する時間幅は $T = 30$ とした。図1がその結果である。提案法 ($m = 0, 1, \dots, 5$) で求めた結果は直接数値計算解に比べて非常に大きな揺らぎの範囲まで捉えており、有限サイズ効果の制限を受けていないことがわかる。近似の精度を上げていくと (m を大きくしていくと) 再現できる範囲が小さくなっていくのは、今考えている状態変数が $\mathbf{s}_t(\tau) = (s_t(\tau), s_{t+1}(\tau), \dots, s_{t+m}(\tau))^T$

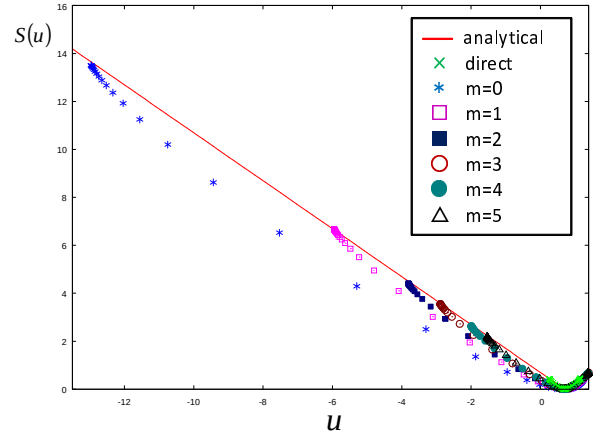


図 1: ロジスティック写像の拡大率スペクトルの比較

のように元々の時系列 $m+1$ 個で新しい状態変数 1 つが定義されているため、 s_t でみたときに m を大きくしていくとサンプル数の減少ということが起こるからだと考えられる。

時系列データから定義に従ってレート関数を求めると、稀な現象がその時系列において実現しているか否かが直接反映し、有限サンプル効果の影響を受ける。提案法では、時系列データから少数の相関係数を計算し、二時間相関関数や大偏差統計関数の従う運動方程式の係数として利用し、それを近似的に解いていることになる。従って、時系列において実現していない稀な確率で起こる現象を含み、有限サンプル効果に束縛されない広い範囲で、カオス力学系の数値解析データや実験の実測データから大偏差統計関数が得られる。

参考文献

- [1] Fujisaka, Prog. Theor. Phys. **70**, 1264 (1983).
- [2] Nakao et al., Phys. Rev. E **74**, 026213 (2006).
- [3] Fujisaka, Prog. Theor. Phys. **114**, 1 (2005).
- [4] Mori, Prog. Theor. Phys. **33**, 423 (1965).
- [5] Mori and Kuramoto, Dissipative Structures and Chaos (Springer, Berlin 1998).

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

豊田中央研究所 一木 輝久¹, 田所 幸浩

1 はじめに

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よう設計されたデバイスとしては、系の分岐を利用した bifurcation amplifier [1, 2] 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 [3, 4, 5] 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抽出したい。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、与えられた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、ポテンシャルの準安定状態からより安定な状態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、ここで取り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。

¹E-mail: aichiki@mosk.tytlabs.co.jp

2 モデル

ここで取り扱うモデルは極めて単純である。サドル・ノード分岐を示す離散時間力学系

$$X_{n+1} - X_n = \Delta[-U'(X_n) + F(s_n + z_n)], \quad (1)$$

$$U(X) = X^4/4 - X^2/2 - (a_c - \epsilon)X \quad (2)$$

を考えることにしよう。ここで、 Δ, ϵ はともに正のパラメータであり、 $a_c = 2/3\sqrt{3}$ とする。ちょうど $\epsilon = 0$ が分岐点に対応するため、 ϵ は分岐点までの距離と呼ばれる。さて、雑音 z_n に埋もれた弱い信号 s_n を取りだすことを考えよう。簡単のため、 z_n は白色ガウスノイズとする。我々が手にしているのは雑音混じりの信号 $s_n + z_n$ であって、直接 s_n 単独を得ることはできない。前節で述べたように分岐現象を利用して信号 s_n を取りだすことを考えたいが、 z_n が白色ガウスでは、H 定理のために分岐が起こらない。そこで、手元にある雑音混じりの信号 $s_n + z_n$ を関数 F で加工して系に加えるのである。ここでは簡単のため、 $F(y) = \theta \text{sgn}(y - \xi)$ とする。すなわち、 $s_n + z_n$ と閾値 ξ の比較に応じて、2 値 $\pm\theta$ のどちらかを外力として系に加えることにするのである。この外力によって誘起される分岐を捉えることで、信号 s_n を取りだそうというのである。ここで、今作った 2 値の雑音はランダムテレグラフノイズと呼ばれる種類の雑音であり、明らかに H 定理の成立条件の外に位置する雑音であることに注意しておこう。

また、我々が手にしている雑音混じりの信号 $s_n + z_n$ は有限個しかないという、現実の信号処理に付きまとう状況を考えてみよう。受信信号は $s_n + z_n$ ($n = 0, \dots, N-1$) だけである。今我々は、信号 s_n を分岐を利用して取り出そうと考えているわけだが、適当な初期条件から系を時間発展させた場合、分岐が起こるまでにかかる時間が問題となる。というのは、分岐が起こるまでにかかる時間が受信信号の長さ N よりも長ければ、有限個の信号によって誘起される分岐は観測されない。したがって、 N が分岐の起こるまでにかかる時間に対して不足している場合に備えて、系に加える外力 $F(s_n + z_n)$ に何らかの対策を施しておく必要がある。その対策としてもっとも単純なのは、手元にある受信信号を繰り返し使いまわすことであろう。すなわち、 $s_{n+N} + z_{n+N} = s_n + z_n$ と思って、外力 $F(s_n + z_n)$ をひたすら加え続けるのである。信号処理の場合、メモリに保存された $s_n + z_n$ を使えば、このようなことは容易に行える。このようにして作成した外力 $F(s_n + z_n)$ は周期的な雑音という性質を持っている。では、ランダムテレグラフノイズのような離散的な雑音が、周期的に加わった場合、系 (1) はどのように振る舞うのであろうか？次節でシミュレーション結果を紹介する。

3 シミュレーション結果：同時エスケープ

前節で述べたような系の設定のもとで、何が起こるかという、独立な系の集団に同期的なエスケープが見られる。分岐点までの距離 ϵ が正の場合、十分大きな X_0 を初期値として出発した系は、外力 $F(s_n + z_n)$ が存在しなければ、 X_n が正の値を取る準安定点にトラップされてしまう。し

かし、外力 $F(s_n + z_n)$ が存在する場合、 X_n が負の値を取る安定固定点への遷移が起こる場合がある。このような準安定状態からのエスケープが、独立な系で同時に起こるというわけである。

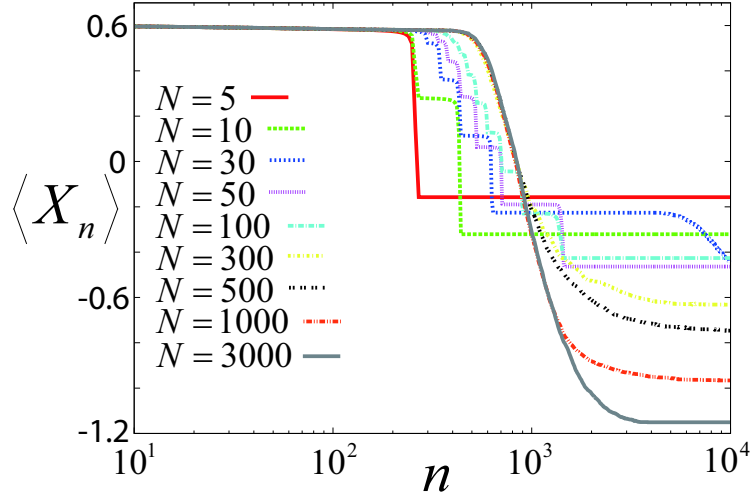


図 1: X_n のアンサンブル平均の時間変化とその雑音周期 N への依存性。

このことを示したのが図1である。シミュレーションでは簡単のため、任意時刻 n で $s_n = 0$ とし、初期条件は $X_0 = 1/\sqrt{3}$ とした。また、 $\Delta = 1/2, \epsilon = 0.0005, \theta = 0.00075, \xi = 1.0$ とし、白色ガウス雑音 z_n の分散は 1.0 とした。図1は多数の独立な系にわたる X_n のアンサンブル平均をプロットしたものである。したがって、図に見られるキンク状の変化は、独立な系たちが集団的に同時エスケープを起こしたことを意味している。ここで、シミュレーションに用いた雑音 z_n は系ごとに独立に生成したことに注意しておこう。すなわち、無相関に生成された雑音から、同時エスケープという集団秩序が生まれたのである。

図1から、雑音の周期 N が比較的小さい場合のみ、同時エスケープが起こっていることが見て取れる。 N が大きな場合には、 $\langle X_n \rangle$ は滑らかに変化しており、独立な系が個々に準安定状態からのエスケープをしていることが分かる。

4 粗視化による同時エスケープの説明

実は、図1に見られたような同時エスケープは、時間粗視化で簡単に説明することができる。雑音周期 N が小さい場合、準安定状態からのエスケープが起こるまでの時間は N より十分大きいと考えられるため、外力の時間平均 $I = \sum_{n=0}^{N-1} F(s_n + z_n)/N$ で系の長時間の振る舞いは記述されることが考えられる。したがって、エスケープを見るには式(1)の $F(s_n + z_n)$ を I で置き換えた

$$X_{n+1} - X_n = \Delta[-U'(X_n) + I] \quad (3)$$

を考えれば十分である。このとき、 I は2項分布 $\text{Prob}[I = \theta k/N] = \binom{N}{k} p^k (1-p)^{N-k}$ に従う確率変数である。ただし、 $p = \text{Prob}[z - \xi > 0]$ であり、 k は $-N \leq k \leq N$ かつ $(N+k)/2$ は整数とする。

一つのサンプル系に対して I の値が確定すると、 X_n は I の関数 $X_n(I)$ として決定論的に振る舞うことになる。したがって、アンサンブル平均は $\langle X_n \rangle = \sum_I \text{Prob}[I] X_n(I)$ として与えられることになる。実は、このようにして見積もった $\langle X_n \rangle$ が、 N が比較的小さな時には、非常に良い精度でシミュレーション結果を再現している。一方、 N が大きい時には、雑音周期とエスケープの起こる時間との間にクロスオーバーが起こるため、上述のような近似は成立しない。このときには、 I だけでなく雑音の詳細に応じた取り扱いが必要となる。

また、同時エスケープが起こるには、雑音がランダムテレグラフノイズのように離散的であったことも強く効いていることに注意しよう。 $F(s_n + z_n)$ が離散的なため、 I が離散分布となり、それが図 1 に見られるようなキンクの発生する原因となっている。さらには、分岐点までの距離 ϵ と I の分布との関係の調節も、同時エスケープに欠かせない項目である。 I は有限の領域にしか分布を持たない。一方、時間粗視化の観点から、エスケープにかかる時間は I の関数として $\tau(I)$ と与えられるが、 $\tau(I)$ は $I \rightarrow -\epsilon$ で発散することが分かる。したがって、図 1 に見られるようなキンクを大きくしたいなら、 I が $I = -\epsilon$ 付近に分布するようにしなければならない。つまり、 I のわずかな違いで τ が大きく異なるよう、メリハリをつけてやれば、キンクが大きく出るというわけである。逆に、 $I = -\epsilon$ から大きく外れたところに分布が位置していると、 $\tau(I)$ がどの I に対してもほぼ等しいため、キンクは見られなくなる。

5 おわりに

本稿では、ランダムテレグラフノイズという離散的な雑音を周期的に印加した系で見られる同時エスケープという現象について、現象の発見から発現原理まで見てきた。しかし、はじめに述べた本研究の目的たる、雑音に埋もれた信号を分岐現象を利用して取り出す、というところまではたどり着けていない。この目標達成には、さらなる研究を必要としている。本稿が、雑音の利用・制御を目指した統計物理の新たな展開の 1 ページに少しでも貢献できれば幸いである。

参考文献

- [1] M. I. Dykman and M. V. Fistul, Phys. Rev. B **71** (2005), 140508(R).
- [2] M. I. Dykman, Phys. Rev. E **75** (2007), 011101.
- [3] K. Kitahara, W. Horsthemke, and R. Lefever, Phys. Lett. A **70** (1979), 377.
- [4] C. R. Doering, W. Horsthemke, and J. Riordan, Phys. Rev. Lett. **72** (1994), 2984.
- [5] A. Ichiki, Y. Tadokoro, and M. I. Dykman, Phys. Rev. E **85** (2012), 031106.

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

東京理科大学 理学部 橋爪 洋一郎¹

理化学研究所 鈴木 増雄²

量子エンタングルメントを理解する新しい方法として、熱場ダイナミクスを用いた議論が有用であることを示す。ここでは主に熱平衡状態についての方法を述べるが、一般の非平衡状態においても熱場ダイナミクスを用いた議論は可能であることもわかった。また、密度行列を2重ヒルベルト空間に拡張して定義することで、状態を表現する空間が広がり、その結果として、エンタングルメントには2種類の現れ方があることもわかった。すなわち、状態間の非対角要素としての現れ方と、チルダ空間と元の空間の相関を示す要素としての現れ方である。

1 序論

我々は熱場ダイナミクスの方法を用いて、量子エンタングルメントの振る舞いを調べることができることを示した。熱場ダイナミクスの方法は状態に注目することができる点で、量子エンタングルメントを調べる時に非常に便利である。以下、熱場ダイナミクスを用いた量子エンタングルメントの取り扱いについてその要点を説明する。

1.1 熱場ダイナミクス

密度行列 $\rho(t)$ あるいは $\rho(\beta) = e^{-\beta\mathcal{H}}/Z(\beta)$ (ただし、 $Z(\beta)$ は分配関数) を用いると、物理量 A の統計力学的期待値 $\langle A \rangle_t$ および $\langle A \rangle_{\text{eq}}$ などは $\langle A \rangle_t = \text{Tr} A \rho(t)$ および $\langle A \rangle_{\text{eq}} = \text{Tr} A \rho(\beta)$ と表される。一方、量子力学的期待値 $\langle A \rangle_q$ は状態ベクトル $|\phi\rangle$ を用いて、 $\langle A \rangle_q = \langle \phi | A | \phi \rangle$ と表される。

熱場ダイナミクスでは、状態の概念を拡張することで、これらの期待値の表現方法を統合する [1–5]。通常、状態はヒルベルト空間内のベクトルとして表すことができる。このヒルベルト空間と、全く同形の空間 (すなわちチルダ空間) との直積によって表される2重のヒルベルト空間に新しい状態を定義する。もとのヒルベルト空間の基底として $\{|n\rangle\}$ を選んだとき、チルダ空間の基底は $\{|\tilde{n}\rangle\}$ と表す [1–5]。すなわち、2重ヒルベルト空間の基底は $\{|n\rangle \otimes |\tilde{m}\rangle\} (\equiv \{|n\rangle |\tilde{m}\rangle\})$ または $\{|n, \tilde{m}\rangle\}$ である。このような2重ヒルベルト空間内に、有限温度の状態ベクトル $|\psi(\beta)\rangle$ を

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

¹E-mail: hashizume@rs.tus.ac.jp

²E-mail: masuo.suzuki@riken.jp

と定義すれば、

$$\begin{aligned}\langle\psi(\beta)|A|\psi(\beta)\rangle &= \sum_n \sum_m \frac{1}{Z(\beta)} \langle n|e^{-\beta\mathcal{H}/2} A e^{-\beta\mathcal{H}/2}|m\rangle \langle \tilde{n}|\tilde{m}\rangle \\ &= \sum_n \sum_m \frac{1}{Z(\beta)} \langle n|e^{-\beta\mathcal{H}/2} A e^{-\beta\mathcal{H}/2}|m\rangle \delta_{n,m} = \langle A \rangle_{\text{eq}}\end{aligned}\quad (2)$$

となり、統計力学的期待値が物理量の演算子 A と状態ベクトル $|\psi(\beta)\rangle$ の内積で表される [4, 5]。 (2) の導出は Fano [1], Prigogine [2], 高橋-梅沢 [3] にしたがって $|I\rangle$ をハミルトニアン $\mathcal{H}$ の固有状態 $\{|n\rangle\}$ を用いて表したが、任意の完備直交系 $\{|\alpha\rangle\}$ を用いても $|I\rangle$ は不変である事が鈴木によって示されている [4, 5]。これを一般表現定理という。また、時間発展については

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = (\mathcal{H}(t) - \tilde{\mathcal{H}}(t)) |\psi(t)\rangle \quad (3)$$

によって与えられることが知られている [5]。

このような熱場ダイナミクスでは、直接状態に注目することができるため、状態が複雑に絡み合う問題に適している。実際、良く知られた問題の見直しだけでなく、三角格子反強磁性体における RVB 状態の解析 [6] や次近接相互作用を含む 1 次元系の DMRG に応用された [7] 他、ブラックホールの状態解析にも使われている [8]。

1.2 量子エンタングルメント

量子系では、量子揺らぎの影響を受け、状態が複雑に絡み合う状況が生じる。典型的にはシングレット状態の存在などがそれに当たるが、このような量子系の振る舞いを量子エンタングルメントと呼ぶ。

一般にエンタングルメントの強さを表すために、エンタングルメントエントロピーという指標が利用される。すなわち、系全体を部分系 A と B に分割し、B の揺らぎが A にどの程度影響を与えるかを表す量で、

$$S_A = -k_B \text{Tr}_A \rho_A \log \rho_A; \quad \rho_A = \text{Tr}_B \rho_{A+B} \quad (4)$$

と表される。ここで、 ρ_{A+B} は系全体のとりうる状態に対する密度行列である。また、 Tr_A および Tr_B は、それぞれ部分系 A および B についてのトレースを表す。

量子エンタングルメントは、例えば量子計算など [9, 10] において非常に重要な役割を果たす [11] だけでなく、近年、AdS/CFT 対応などとの関連 [12–16] でも見直されている。また、スピン系の統計力学としても研究が進んでおり、量子相転移における秩序変数の一種としても扱われることがある [17–23]。さらに、鈴木-トロッター変換 [24] によって、エンタングルメントエントロピーが古典系でのどのような量に対応するかの研究も進んでいる [25]。

2 熱場ダイナミクスを用いた平衡状態におけるエンタングルメントの解析

本研究では、まず、最も典型的な量子系の熱平衡状態におけるエンタングルメントを熱場ダイナミクスを用いて検討する。ハミルトニアンは

$$\mathcal{H}_1 = -J \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 - \mu_B H (S_1^z + S_2^z), \quad \mathcal{H}_2 = -J \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 - \mu_B H (S_1^z - S_2^z) \quad (5)$$

である。相互作用はともに $J > 0$ であるとし、強磁性的であるが、 $\mathcal{H}_1$ では外場 H が相互作用と競合しないのに対し、 $\mathcal{H}_2$ では外場 H が相互作用と競合している。これを一種のフラストレーションであるとみなす。ただし、スピンの大きさはともに $S = 1/2$ である。

これらの系が取りうる状態は $2^2 = 4$ 通りであり、 $|+, +\rangle \equiv |1\rangle, |+, -\rangle \equiv |2\rangle, |-, +\rangle \equiv |3\rangle, |-, -\rangle \equiv |4\rangle$ とする。 $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, |4\rangle\}$ はハミルトニアン固有状態ではないが、完備直交基底であるので、一般表現定理により熱場ダイナミクスの状態の基底として $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, |4\rangle\} \otimes \{|\tilde{1}\rangle, |\tilde{2}\rangle, |\tilde{3}\rangle, |\tilde{4}\rangle\}$ が利用できる。すなわち、熱場ダイナミクスの状態ベクトルは

$$|\psi(\beta)\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{Z(\beta)}} e^{-\beta \mathcal{H}_x/2} (|1, \tilde{1}\rangle + |2, \tilde{2}\rangle + |3, \tilde{3}\rangle + |4, \tilde{4}\rangle) \quad x = 1, 2 \quad (6)$$

である。このように (1) 式における状態ベクトルは 2 重ヒルベルト空間のすべての基底の線形結合ではないことに注意を要する。

ここで、拡張された密度行列 $\hat{\rho}(\beta)$ を、一般に、

$$\hat{\rho}(\beta) = |\psi(\beta)\rangle\langle\psi(\beta)| \quad (7)$$

として導入する。これは 2 重ヒルベルト空間で定義されるものであり、チルダ空間の状態の情報も含むもので、通常ヒルベルト空間に定義される密度行列 $\rho(\beta)$ とは異なるが、

$$\begin{aligned} \text{Tr} \hat{\rho} &\equiv \sum_l \langle \tilde{l} | \hat{\rho} | \tilde{l} \rangle = \frac{1}{Z(\beta)} \sum_{n,m,l} e^{-\beta \mathcal{H}/2} |n\rangle \langle m| e^{-\beta \mathcal{H}/2} \langle \tilde{l} | \tilde{n} \rangle \langle \tilde{m} | \tilde{l} \rangle \\ &= \frac{N_{\text{state}}}{Z(\beta)} \sum_l e^{-\beta \mathcal{H}/2} |l\rangle \langle l| e^{-\beta \mathcal{H}/2} = N_{\text{state}} \rho(\beta) \end{aligned} \quad (8)$$

であり、チルダ空間に関するトレースを取れば定数倍（とりうる状態の数 N_{state} ）の違いを除いて一致する。

すなわち (6) 式に対して拡張された密度行列 (7) は $\hat{\rho}^x(\beta) = |\psi(\beta)\rangle_x \langle\psi(\beta)|_x$ となる。そして、スピン 1 とスピン 2 のエンタングルメントを調べるために、(4) 式にしたがってスピン 1 の部分トレースをとると

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_{\text{spin2}}^x(\beta) &\equiv \text{Tr}_{\text{spin1}} \hat{\rho}^x(\beta) \\ &= A_x(K, h) |+, \tilde{+}\rangle \langle +, \tilde{+}| + B_x(K, h) |-, \tilde{-}\rangle \langle -, \tilde{-}| \\ &\quad + C_x(K, h) (|+, \tilde{+}\rangle \langle -, \tilde{-}| + |-, \tilde{-}\rangle \langle +, \tilde{+}|) \\ &\quad + D_x(K, h) (|+, \tilde{-}\rangle \langle +, \tilde{-}| + |-, \tilde{+}\rangle \langle -, \tilde{+}|) \end{aligned} \quad (9)$$

となる。ただし、 $A_x(K, h), B_x(K, h), C_x(K, h), D_x(K, h)$ はそれぞれ $K = J/k_B T, h = \mu_B H/k_B T$ を変数とする解析関数である。もちろんこのときの $+, -$ はスピン 2 の状態を表す。(6) 式において、ハミルトニアン $\mathcal{H}_x$ が作用するのはもとのヒルベルト空間の成分だけであり、チルダ空間の成分には作用しない。また、(9) 式でチルダ空間のスピンと元の空間のスピン振る舞いが異なるのは $D_x(K, h)$ を係数に持つ項である。しかも、この項は $\{|+, \tilde{-}\rangle, |-, \tilde{+}\rangle\}$ の部分空間で非対角成分を持たない。したがって、この項がチルダ空間と元の空間との相関に対応していてエンタングルメントの現れ方の一つとなっている。一方、 $C_x(K, h)$ を係数に持つ項は $\{|+, \tilde{+}\rangle, |-, \tilde{-}\rangle\}$ の非対角成分となっている。このことから、エンタングルメントの現れ方には 2 種類存在して、これまでの定義 (4) ではそれらが与えるエントロピーの総和を表していたのだと理解で

きる。また、 $\mu_B H \simeq J$ の時すべての温度領域で $D_2(\beta) > D_1(\beta)$ となる。このことから、フラストレーションがエンタングルメントに対してどのような効果を及ぼしているのかを知ることができる。すなわち、フラストレーションに起因する高度な縮退のために、すべての状態が同程度に起こりやすくなるため、チルダ空間でも元の空間でも揺らぎが強く、密度行列中でもその項が大きく寄与していることがわかる。

3 まとめ

熱場ダイナミクスの表現を用いると、状態を定義する空間が2重ヒルベルト空間に広がるため、量子状態のエンタングルした様子が理解しやすい。そして、フラストレーションがある場合には状態の縮退のために揺らぎが強く、エンタングルメントを表す項が支配的になることがわかった。ここでは、特に少数スピンの平衡系を中心に議論したが、一般の非平衡系でも同様の議論ができる。その結果、エンタングルメントは縮約された部分系の情報に起因していることもわかった。

参考文献

- [1] U. Fano, Rev. Mod. Phys. A **42** (1957), 74.
- [2] I. Prigogine et al., Chemica Scripta **4** (1973), 5.
- [3] Y. Takahashi and H. Umezawa, Collect Phenom. **2** (1975), 55.
- [4] M. Suzuki, J. Phys. Soc. Jpn. **54** (1985), 4483.
- [5] 鈴木増雄, 現代物理学叢書「統計力学」(岩波書店, 2000, 東京)
- [6] M. Suzuki, J. Stat. Phys. **42** (1986), 1047.
- [7] A. E. Feiguin and S. R. White, Phys. Rev. B **72** (2005), 220401.
- [8] W. Israel, Phys. Lett. **57A** (1976), 107.
- [9] P. Benioff, J. Stat. Phys. **22** (1980), 563.
- [10] P. Benioff, Phys. Rev. Lett. **48** (1982), 1581.
- [11] W. K. Wothers and W. H. Zurek, Nature **299** (1996), 802.
- [12] J. M. Maldacena, Phys. Rev. D **55** (1997), 7645; ibid Adv. Theor. Math. Phys. **2** (1998), 231; ibid Int. J. Theor. Phys. **38** (1999) 1113.
- [13] S. Ryu and T. Takayanagi, Phys. Rev. Lett. **96** (2006), 181602.
- [14] P. Calabrese and J. Cardy, J. Stat. Mech. (2004), P06002.
- [15] A. Kitaev and J. Preskill, Phys. Rev. Lett. **96** (2006), 110404.
- [16] M. Cadoni and M. Melis, Entropy **12** (2010), 2244.
- [17] H. H. Lin, Commun. Theor. Phys. **55** (2011), 349.
- [18] J. Ren, S. Zhu and X. Hao, J. Phys. B **42** (2009), 015504.
- [19] G. Vidal, J. I. Latorre, E. Rico and A. Kitaev, Phys. Rev. Lett. **90** (2003), 227902.
- [20] F. Verstraete, M. Popp and J. I. Cirac, Phys. Rev. Lett. **92** (2004), 027901.
- [21] J. A. Hoyos, A. P. Vieira, N. Laflorencie and E. Miranda, Phys. Rev. B **76** (2007), 174425.
- [22] F. Alet, S. Capponi, N. Laflorencie and M. Mambrini, Phys. Rev. Lett. **99** (2007), 117204.
- [23] G. Refael and J. E. Moore, Phys. Rev. Lett. **93** (2004), 260602.
- [24] M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. **56** (1976), 1454.
- [25] H. Matsueda, Phys. Rev. E **85** (2012), 031101.

彩色問題に関する量子アルゴリズム

日本大学理工学部 山中雅則¹

グラフの彩色の問題は古典的な問題であるが、今もなお活発に研究が行われている。グラフの彩色は、主に頂点彩色と辺彩色に分けられる。四色問題は頂点彩色の典型的な例であり、肯定的に解決されたが、命題自体を理解することは比較的簡単であるにも関わらず、解決までに100年以上を要したことは有名である。また、証明過程に計算機支援証明を用いており、これらの点に関して現在でも論争が続いている。

グラフの彩色可能性、染色数（彩色に必要な十分な色の数の最小数）、染色の表現の算出については、頂点数の小さなグラフや規則的なグラフについては解決されているものが多い。しかし、頂点数の大きなランダムグラフについて彩色可能性の判定を行うこと、染色数を求めること、全ての異なる染色の表現とその個数を求めることはいずれもNP困難であることが知られている。

例えば、球面に同相な曲面に描かれた平面グラフの頂点彩色を行う場合、四色定理により4色あれば十分であることが証明されている。一方で、彩色を行うのに4色も必要ではなく、例えば二部グラフのように2色あれば十分なグラフも存在するし、3色あれば十分なグラフも存在する。これらのグラフはそれぞれ染色数が2と3であるという。このような平面グラフの場合は、染色数を求めるとはいうものの、染色数は2か3か4で尽きている。種数1のトーラス上で平面的なグラフについては、7色あれば十分であることが証明されているが、これは十分条件であり、より少ない色の数で染色可能なグラフも多数存在する。一般的に、平面的ではないランダムグラフの染色数は、ヒュードの公式でその十分条件が与えられるが、グラフの埋め込まれるトーラスの種数が大きくなると必要条件としての染色数も大きくなる。このように、与えられた個々の具体的なグラフの染色数を求めることは、頂点数の増大とともに困難となっていくことがより実感として感じられるはずである。

この研究では、これらの問題について量子アルゴリズムを提案することでアプローチを試みた。頂点彩色については、以下の手順で全ての異なる染色の表現を量子力学的な重ね合わせ状態として得ることができる。

- (1) 与えられたグラフについて染色数を予想する。
- (2) グラフの頂点に染色数個の基底を用意して同じ重みで重ね合わせる。
- (3) 全ての頂点について同じ重みで重ね合わせた状態の直積の状態を作る。
- (4) 連結する頂点について、同じ状態を排除する変換を作用させる。
- (5) 全ての辺についてこの操作を1回ずつ実行する。
- (6) 最終結果がヌル状態である場合、正しい染色数は予想した染色数よりも大きいので、各

¹ E-mail: yamanaka@phys.cst.nihon-u.ac.jp

頂点に用意する状態を1つ増やして上記(1)から(5)の操作を行い、最終結果がヌルでない状態が得られるまで繰り返す。

- (7) 最終結果がヌル状態でなかった場合、正しい染色数は予想した染色数よりも小さい可能性があるので、各頂点に用意する状態を1つ減らして上記(1)から(5)の操作を行い、最終結果がヌルとなるまで繰り返す。
- (8) 最終結果がヌルとならない初めての状態の個数が染色数の正解となる。また、その際に生じた終状態は全ての異なる染色を量子力学的な重ね合わせ状態として得られている。

作用させる演算の回数は、与えられたグラフの辺の数に比例するので、このアルゴリズムは辺の数の関数として多項式回の演算で結果を得ることができることがわかる。