

情報の幾何学から熱力学的な不確定性原理を発見

～生体内の“ゆらぐ化学反応”による情報伝達の普遍的な理解へ～

ポイント

- ・情報理論の幾何学的手法である「情報幾何」と「ゆらぐ系の熱力学」の関係を見出す。
- ・生体内の化学反応などに適用できる「熱力学的な不確定性原理」を理論的に導出。
- ・情報幾何によって理解が進んでいる機械学習等の概念の、生体内の情報伝達の理解への応用に期待。

概要

北海道大学電子科学研究所附属社会創造数学研究センターの伊藤創祐助教は、機械学習やニューラルネットワーク（脳機能の数学モデル）の分野で近年大きく注目を集めている「情報幾何^{*1}」と呼ばれる手法と、熱力学と情報理論の融合理論である情報熱力学^{*2}の基礎理論として盛んに研究が行われている「ゆらぐ系の熱力学^{*3}」との関係を明らかにすることで、生体内の化学反応などに適用可能な「熱力学的な不確定性原理^{*4}」を理論的に導出することに成功しました。

熱力学的な不確定性原理は、「状態間の遷移のスピードを上げるためには、十分な熱コストが必要」という法則性を表しており、量子力学において量子速度限界として知られていた結果の熱力学バージョンであると考えられます。

本成果は、酵素反応などの生体内の化学反応で行われる情報伝達にも、量子力学の不確定性原理のような普遍的な原理が存在することを明らかにしました。さらに、情報幾何の手法で理解が進んでいる機械学習やニューラルネットワークの分野の概念が、熱力学を通して生物の情報伝達の理解に応用される可能性をも切り拓きました。

本研究は、科学研究費助成事業若手研究(B)の支援を受けて実施されました。なお、本成果は、2018年7月18日（水）公開のPhysical Review Letters誌に掲載されました。

【背景】

近年、機械学習やニューラルネットワークなどのコンピューティング技術の発展が、人間を含む生物の情報処理と比較する形で、脚光を浴びています。この機械学習やニューラルネットワークなどのコンピューティング技術の基礎理論として、情報幾何とよばれる情報理論の幾何学的手法が大きな注目を集めることになりました。

一方、細胞レベルの生体内の情報処理に注目すると、細胞内では確率的にゆらぎうる化学反応によって情報伝達が行われていることが知られています。この生体内の情報処理を普遍的な物理法則によって理解する試みとして、熱力学と情報理論の融合理論「情報熱力学」やその基礎理論である「ゆらぐ系の熱力学」の研究が近年盛んに行われています。

このような状況を踏まえ、異なる二つの分野「情報幾何」と「ゆらぐ系の熱力学」の間にある深遠な関係の一端を明らかにする研究を行いました。

【研究手法】

本研究は、確率分布の時間発展を記述する、マスター方程式とよばれる方程式を理論的に考察することで行われました。

「ゆらぐ系の熱力学」において、熱力学量はこのマスター方程式を用いて導入することができます。一方で「情報幾何」における幾何学量は確率分布を用いて記述することができます。マスター方程式が与えられたもとで注意深く考えると、「情報幾何」の幾何学量は「ゆらぐ系の熱力学」における熱力学量によって表現できることを、理論的に導出することができます。

このような手法によって、異なる二つの分野である「情報幾何」と「ゆらぐ系の熱力学」を繋ぐことに成功しました。

【研究成果】

本研究は「情報幾何」で扱われてきた幾何学量が、「ゆらぐ系の熱力学」においては熱力学量として解釈されることを明らかにしたものです。この新解釈によって、普遍的な熱力学法則が新たに明らかになりました。

特に「情報幾何」における幾何学的な不等式を「ゆらぐ系の熱力学」の言葉で解釈することで、生体内の化学反応などに適用可能な「熱力学的な不確定性原理」の導出に成功しています。この「熱力学的な不確定性原理」は「状態間の遷移のスピードを上げるためには、十分な熱コストが必要になる」という法則性を表しており、生体内での化学反応などで一般的に成り立つと考えられます。

この幾何学的な不等式による導出は、量子力学の「不確定性原理」の一種として知られてきた「量子速度限界」を導出する際に使われた手法と同種のものであり、そのため本研究結果は「量子速度限界」の非量子的な熱力学バージョンであると考えすることができます。

また本結果は、熱力学と幾何学の間密接な関係^{*5}の理解を前進させたものだとも考えることができます。もともと熱力学と幾何学の間関係は1970年代から議論されていましたが、これまでの理論では熱平衡状態から遠く離れたシステムには適用することができませんでした。ここ10年で発展した「ゆらぐ系の熱力学」の理論の様々なブレイクスルーを経由することで、生体内での化学反応のような平衡状態から遠く離れたシステムにおいても、熱力学と幾何学の間関係を利用できるようになりました。

【今後への期待】

本結果によって、生体内の化学反応で行われる情報伝達においても、量子力学の不確定性原理のような普遍的な原理が存在することが明らかになりました。今後も、同様の手法により生体内の情報処理の普遍的な法則・原理が発見されることが期待されます。また、「情報幾何」の手法で理解が進んでいる機械学習やニューラルネットワークの分野の概念が、「ゆらぐ系の熱力学」の理論によって解釈されることで、生物の情報処理の理解に応用される可能性が期待できます。

論文情報

論文名	Stochastic thermodynamic interpretation of information geometry (情報幾何のゆらぐ系の熱力学による解釈)
著者名	伊藤創祐 (北海道大学電子科学研究所)
雑誌名	Physical Review Letters (物理学の専門誌)
DOI	10.1103/PhysRevLett.121.030605
公表日	2018年7月18日(水)(オンライン公開)

お問い合わせ先

北海道大学電子科学研究所 助教 伊藤創祐 (いとうそうすけ)

T E L 011-706-9436, 011-706-9458 F A X 011-706-9437

メール sosuke.ito@es.hokudai.ac.jp

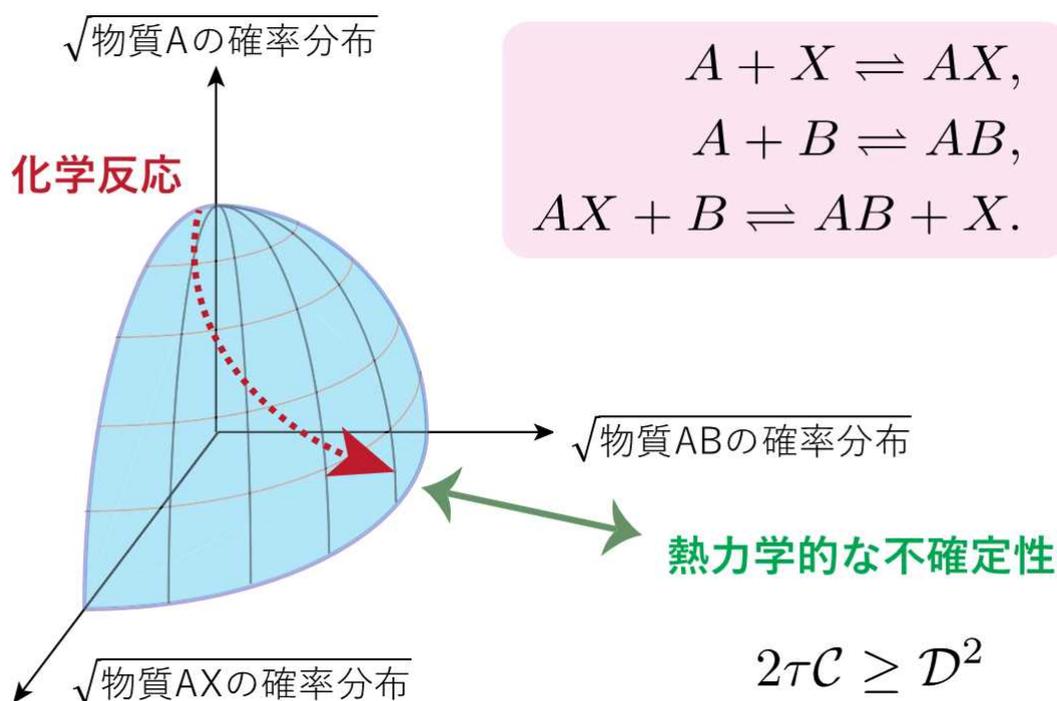
U R L <http://mlns.es.hokudai.ac.jp>

配信元

北海道大学総務企画部広報課 (〒060-0808 札幌市北区北8条西5丁目)

T E L 011-706-2610 F A X 011-706-2092 メール kouhou@jimuhokudai.ac.jp

【参考図】



本研究の概念図。ある物質 A, AX, AB の確率分布に対して「情報幾何」によって幾何学が導入される。この時, A, AX, AB 間の化学反応は赤い矢印で書かれた経路で表現される。この経路の幾何学量が「ゆらぐ系の熱力学」によって解釈されることによって, 熱コスト C と遷移時間 τ の間の「熱力学的な不確定性原理」が導ける。D は出発点とゴールの間の最短距離。

【用語解説】

- *1 情報幾何 … 確率分布の集合からなる空間における幾何学を考える情報理論・統計学的手法。多くの日本人科学者が成立に貢献した。機械学習やニューラルネットワークなど, 確率分布が重要な役割を果たす分野の基礎理論として注目を集めている。
- *2 情報熱力学 … マクスウェルのデーモンと呼ばれる 19 世紀の熱力学の問題に端を発する, 情報理論と熱力学の融合理論。情報熱力学において, 情報量と熱力学量は変換可能なものとして扱われる。熱力学第二法則を情報量を含んだ形で一般化した情報熱力学第二法則とよばれる結果が, 近年注目を集めている。

- *3 ゆらぐ系の熱力学 … 確率分布の発展方程式をベースにした熱力学理論であり、熱平衡状態から遠く離れたシステムにも適用可能な熱力学理論として盛んに研究されている。この理論を用いると、熱力学第二法則などの熱力学法則を導出することが可能であり、情報熱力学の基礎理論にもなった。確率的熱力学、ゆらぎのエネルギー論、ゆらぎの定理とも呼ばれる。

- *4 不確定性原理 … 量子力学においては、「時間とエネルギー」など異なる二つの量のバラツキの積が、常にある一定の値以下にはならないという、二つの量の間トレードオフ関係を主張する原理。この不確定性原理の一種として、状態遷移間の変化スピードの限界を与える「量子速度限界」が知られている。近年、「ゆらぐ系の熱力学」の理論の発展により、非量子的な場合にも様々なタイプの熱力学的なトレードオフ関係が「熱力学的な不確定性原理」の名の下で発見されてきている。本研究結果は、その中でも「量子速度限界」に相当する「熱力学的な不確定性原理」だと考えることができる。

- *5 熱力学と幾何学間の密接な関係 … 1970年代に導入された Weinhold 幾何や Ruppiner 幾何が有名。熱平衡状態における熱力学的なエントロピーや、内部エネルギーを用いて幾何学が導入される。現在に至るまでに、「情報幾何」との関係や、ブラックホールの熱力学との関連などが議論されている。