

情報による観測量の変化速度の熱力学的な限界を発見

1. 発表者：

伊藤 創祐（東京大学大学院理学系研究科附属生物普遍性研究機構 講師）

Andreas Dechant（京都大学大学院理学研究科 特定研究員）

2. 発表のポイント：

- ◆ 熱力学的な観測量の変化速度と情報の抽象的な概念を結びつけることに成功した。
- ◆ 観測量の変化速度に関する情報による熱力学的な限界を新たに導出した。
- ◆ 有限の熱コストで機能している生体システムにおいて、この熱力学的な限界が情報処理速度に影響している可能性があるため、生体システムの熱力学的な理解が進むと期待される。

3. 発表概要：

近年、生体分子などの小さなシステムで、情報という抽象的な概念を考慮する必要性が盛んに議論されています。代表的な例は Maxwell のデーモン（注 1）とよばれる考え方であり、この考え方によると情報という概念も熱力学的なリソースとみなせるとされてきました。一方で、この情報という概念が熱力学的な観測量とどう関連し影響しうるかについては、現在に至るまで深く考察されてきませんでした。今回、東京大学理学系研究科の伊藤創祐講師と京都大学 Andreas Dechant 特定研究員は、確率過程で記述されるダイナミクスに情報幾何学の視点を加えることで、熱力学的な観測量の変化速度と、「Fisher 情報量」などの情報の抽象的な概念を結びつけることに成功しました。また観測量の変化速度に関する新たな熱力学的な限界を発見し、生体システムにおいて隠れた自由度を検出する方法を提案しました。有限の熱コストで機能している生体システムにおいて、この熱力学的な限界が情報処理速度に影響している可能性があるため、今後本結果を通じて生体システムの熱力学的な理解が進むと期待されます。

本研究成果は 2020 年 6 月 15 日（米国東部夏時間）、国際科学誌「*Physical Review X*」に掲載されました。

4. 発表内容：

近年、生体分子などの小さなシステムで、情報という抽象的な概念を考慮する必要性が盛んに議論されています。代表的な例は 19 世紀に提案された Maxwell のデーモンと呼ばれる思考実験を基にした考え方です。この考え方によると、確率過程でダイナミクスが記述される生体分子や生化学反応などの小さなシステムにおいては、Shannon の情報理論における情報量（例えば、相互情報量）と呼ばれる抽象的な量が仕事や熱などに変換可能であるとされます。この Maxwell のデーモンの理解が深まったことで、情報と熱の変換に関する具体

的な応用が提案され始め、近年大きな注目を集めています。一方でこの Maxwell のデーモンの考え方は、情報という抽象的な量と熱や仕事などの熱力学量との間の関係を理解する上では一つの見方でしかありません。例えば、熱力学的な観測量の揺らぎや変化速度が情報という概念とどう関連し、仕事や熱に関係する概念（エントロピー生成）にどう影響しうるかについては、現在に至るまで理解は進んではいませんでした。このような状況で、情報という概念と熱の関係の理解をより深化させていくことは、具体的な応用可能性を論じる上で必要になります。

今回、東京大学理学系研究科の伊藤創祐講師と京都大学理学研究科の Andreas Dechant・特定研究員は、機械学習やデータサイエンスの世界で注目を集めている情報幾何学（注 2）という数理的な分野で重要とされる「Fisher 情報量」と呼ばれる量に着目しました。この「Fisher 情報量」は幾何学的な情報量の一種ですが、時間に関する「Fisher 情報量」という量は、情報幾何においては確率分布の変化速度の指標になります。この指標を、確率過程で記述されるダイナミクスに導入し、確率で記述される熱力学上の観測量との対応関係を考えました。その結果として、観測量の変化速度や揺らぎ、熱や仕事といった熱力学的な量と情報の抽象的な概念を結びつけることに成功しました。さらに Cramér-Rao 不等式のような、従来推定理論に用いられてきた概念を熱力学に応用することで、観測量の変化速度に関する熱力学的な限界を表現する物理法則として、エントロピー生成や熱力学的な観測量の変化速度や揺らぎなどの間のトレードオフ関係である「熱力学的な不確定性関係」（注 3）の一種を導出することに成功しました。この「熱力学的な不確定性関係」によると、物理システムが状態変化していく変化速度について情報による限界があり、その限界はエントロピー生成や観測量の揺らぎといった熱力学的な量と密接に関わっていることがわかりました。

また今回得られた法則によって、システムのなかに隠れた自由度が存在するかどうかを検出できる可能性があります（図）。この隠れた自由度の存在を検出することは、生物学の応用上も重要なテーマです。なぜならばダイナミクスに関わる全ての自由度を実験で測定することは、生物学実験においては技術的に不可能なことがあるからです。そこで本研究で提案された手法を用いると、熱力学的な観測量の揺らぎや変化速度を測定することで、情報という抽象的な量を経由して生体システムに隠れた自由度があるかどうかを検出することができます。本研究で提案している具体的な応用例は、生体適応センサーや生体分子モーターなどの生体分子で構成されるシステムです。たとえば生体センサーの場合は、キナーゼ活性と受容体メチル化のメモリ（注 4）の二つの自由度がある確率過程のダイナミクスで記述されます。もし実験でキナーゼの活性の自由度だけしか測れない状況であっても、キナーゼ活性に関するフィッシャー情報量を計算することで、隠れた自由度である受容体メチル化のメモリの存在を検出できる可能性があることをモデルの数値計算から確かめました。

本研究のように普遍的な物理法則をベースにして、情報とエネルギーという二つの側面から生体システムがどのような原理で機能しているかを深く理解することは大切です。なぜならば、生体システムを有限のエネルギーコストで情報処理をしている「物理システム」だと考えると、その「物理システム」の設計原理を理解することにつながるからです。そして、

この生物の設計原理の理解は、将来の生命科学技術や人工デバイスの発展につながると期待できます。

本研究は科学研究費補助金新学術領域（研究領域提案型）「情報物理学でひもとく生命の秩序と設計原理」の計画研究班「情報熱力学による生体情報処理の理論研究」科研費番号（19H05796）および戦略的創造研究推進事業さきがけ「情報幾何と熱力学による生体コンピューティング理論」（JPMJPR18M2）の支援を受けて行われました。

5. 発表雑誌：

雑誌名：*Physical Review X*

論文タイトル：Stochastic time-evolution, information geometry and the Cramér-Rao Bound

著者：Sosuke Ito and Andreas Dechant*

DOI 番号：<https://doi.org/10.1103/PhysRevX.10.021056>

アブストラクト URL：<https://journals.aps.org/prx/abstract/10.1103/PhysRevX.10.021056>

6. 用語解説：

（注 1）Maxwell のデーモン

19 世紀の物理学者 J. C. Maxwell が考察した熱力学の思考実験。それによると小さいシステムの状態を測定して適切に制御することで、仕事などの利用可能なエネルギーを取り出すことが可能とされた。この思考実験を契機に、測定に使った情報が熱力学的なりソースとみなせるといふ考え方に繋がった。

（注 2）情報幾何学

確率分布の集合を表現する曲がった空間を考える幾何学の数理理論であり、数多くの日本人が貢献してきた分野である。数学者 C. E. Shannon に端を発する数学的な情報理論によると、情報という抽象的な量は確率分布をもとに記述されるため、この情報幾何学は情報処理を数学的に表現するのに適している。たとえば機械学習やデータサイエンスなどの情報処理を、幾何学の視点から数学的に表現するのによく用いられている。

（注 3）熱力学的な不確定性関係

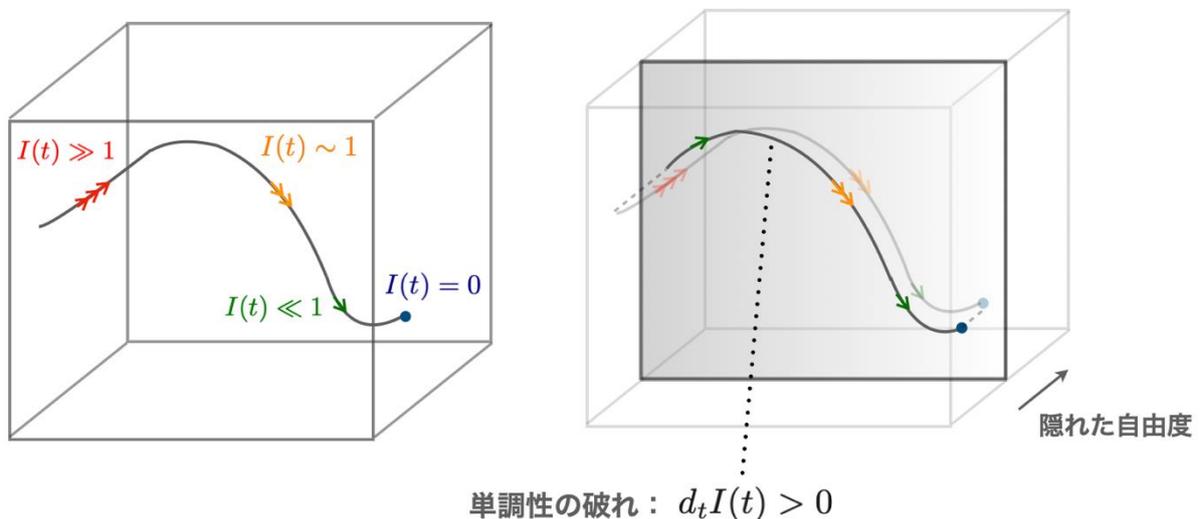
物理学の世界で近年注目を集めている熱力学に関する物理法則。量子力学が支配的になる微小な世界において、二つの量の観測結果のゆらぎ同士にトレードオフが生じ、正確に決定できないという物理法則（不確定性関係）が知られていた。今までは量子力学が支配的になる微小な世界特有の現象と思われていたが、近年生体分子のダイナミクスなど量子力学が支配的でない系においても、熱や仕事（エントロピー生成）などの量と熱力学的な観測量の揺らぎの間に、量子力学の不確定性関係と同様の法則性が成り立つことが盛んに議論されており、「熱力学的な不確定性関係」という名で研究されている。

(注4) キナーゼ活性と受容体メチル化のメモリ

生体内の情報処理における普遍的な現象として、外界の入力刺激に対して適応するという現象がある。このキナーゼ活性と受容体メチル化のメモリはこの適応を実現するセンサーの構成要素として典型的なものである。例えば大腸菌が外界から餌（リガンド）という入力刺激に対して適応するための適応センサーの場合、出力の一種であるキナーゼ（リン酸化する酵素の総称）の活性と受容体をメチル化の間に負のフィードバックがあることで、受容体のメチル化がメモリの役割を果たして現在の刺激の情報を記憶し、それに応じて適応するシステムがつけられている。近年この適応センサーの数理モデルは、情報処理の熱力学的な影響を議論するのによく参照されている。

7. 添付資料：

フィッシャー情報量(情報幾何学的な速度): $I(t)$



(図) 隠れた自由度を検出する手法の概念図。

フィッシャー情報量と呼ばれる幾何学的な速度を表現する情報量を用いることで、確率的なダイナミクスに速度を導入し、その量が満たすべき性質から隠れた変数の検出を提案しました。特に、定常状態に緩和するダイナミクスにおいて、全ての自由度が見えている下でのフィッシャー情報量は単調減少しますが、隠れた自由度がある場合は非単調になりえます。この非単調性から隠れた自由度が存在することを検出できます。