

審査の結果の要旨

論文提出者氏名 大坪 舜

エントロピー生成は非平衡系のエネルギー散逸の定量的な指標であり、ゆらぐ系の熱力学において中心的な役割を果たす。エントロピー生成にまつわる普遍的な法則として、ゆらぎの定理や情報熱力学などがこれまで知られていたが、最近になって熱力学不確定性関係 (Thermodynamic Uncertainty Relation, TUR) と呼ばれる関係式が発見され、盛んに研究されている。TUR はカレントのゆらぎとエントロピー生成の間のトレードオフを表す不等式である。一方、ゆらぐ系の典型例である生体系において、実験技術の向上により化学反応の素過程に近いダイナミクスを観測することが可能になってきており、実験データからエントロピー生成を推定する方法の開発が望まれている。

そのための推定手法として、TUR を応用したエントロピー生成の変分推定法が提案されている。しかしそのような先行研究には、以下のような問題点があった。(1) TUR はエントロピー生成の下限しか与えず、どのような状況で正確な推定を行えるかが不明であった。(2) 実データ (有限の軌跡データ) から如何にして効率的な推定を行うかについての、数値的な最適化手法がほとんど研究されてこなかった。(3) 非線形、非定常、高次元といった状況で良い推定を与えられるかが不明であった。

本論文においては、エントロピー生成の変分表現を用いた推定についての理論的・数値的研究を行い、これらの問題点を克服することに成功した。とくに、TUR による変分推定に加え、他の変分表現 (NEEP と呼ばれる) についても解析的な研究を行い、これらが正確な推定を与える場合やその有効性についての理論的な基盤を確立した。それに基づき、勾配上昇法やニューラルネットワークなどの機械学習を用いた実用的な推定手法の開発を行い、モデル系を用いて数値的にその有効性を確かめた。とくに、本論文で得られた手法が上記 (3) の非線形、非定常、高次元といった状況に有効であることを示した。すなわち、本論文ではエントロピー生成に機械学習を適用するためのプラットフォームを確立し、その有効性を確かめたとと言える。

第1章では、導入として本研究の背景について簡単に紹介されている。第2章では、ゆらぐ系の熱力学が詳細に説明されている。第3章では TUR の概要および最近の進展、本論文に關係する先行研究の結果が説明されている。第4章ではエントロピー生成の推定について先行手法が詳細に説明されている。

第5章で、本論文の一つ目の主要な結果が議論されている。まず短時間極限の TUR (short-time TUR) が定式化され、その等号達成条件について解析的に調べられている。その結果、short-time TUR はランジュバン系において等号達成可能でエントロピー生成の正確な推定を与えるが、マルコフジャンプ系では一般にそうでないことが明らかにされている。次に short-time TUR に勾配上昇法などの機械学習手法を適用した変分推定法が提案され、モデル関数の設定など軌跡データへの適用を考慮した議論がされている。そして提案手法について、線形や非線形、高次元のランジュバンモデルや1次元マルコフジャンプモデルを使って、先行手法と比較しながら数値的に有効性が実証されている。特に、非線形や高次元ランジュバン系において推定のデータ効率が低いこと、またマルコフジャンプ系では軌跡データのサンプル時間間隔に対する頑健性を有することが明らかにされている。

第6章で、本論文の二つ目の主要な結果が議論されている。まず short-time TUR と NEEP の間の理論的な関係性が明らかにされている。次に非定常過程における効率的な推定法として、熱力学力を時間依存性も含めて学習する連続時間推定法が提案されている。そして

2つの非定常ランジュバンモデルを使って、提案手法が熱力学力およびエントロピー生成の正確な推定を与えることを数値的に実証している。特に、順伝播型ニューラルネットワークを熱力学力のモデル関数として採用して連続時間推定を行うことにより、軌跡データのアンサンブル数だけでなく各軌跡に含まれる時点数を増やすことで推定が収束し、したがってデータ効率が低いことが示されている。

第7章で、本論文のまとめと将来の展望が述べられている。付録Aでは、補足的な成果として、 F_1 -ATPase と呼ばれる生体分子機械の情報熱力学について反応拡散モデルに基づいた議論が行われている。

以上のように本論文では、エントロピー生成の変分表現に基づいた推定法が包括的に研究されている。提案手法は幅広いクラスの確率過程に適用可能であり、特に非線形、高次元、非定常などの複雑な系においても有効であることが示されている。また、エントロピー生成の変分表現について系統的な理解が与えられている。これらの成果は、ゆらぐ系の熱力学の基礎付けのみならず、その将来的な生物実験への応用可能性を高めるものである。したがって統計物理学および生物物理学への顕著な貢献が認められ、物理工学への寄与は大きい。よって本論文は博士（工学）の学位請求論文として合格と認められる。