

ネットワーク上の情報熱力学とその生体情報処理への応用

伊藤 創 祐 〈北海道大学電子科学研究所 sosuke.ito@es.hokudai.ac.jp〉

沙川 貴 大 〈東京大学大学院工学系研究科 sagawa@ap.t.u-tokyo.ac.jp〉

情報は生物にとって欠かせないものである。生物たる我々は日々情報を取得し、様々な状況でそれを利用している。その意味で情報は身近なものである一方、情報が科学的に広く研究され始めるのは物理学の歴史と比較すると最近のことであり、C. E. Shannon の 1948 年の論文に端を発する情報理論の成立まで待たなければならない。

しかしながら、Shannon が情報理論を創始する 20 年以上前、物理学の文脈で情報について考え、Shannon にも影響を与えた研究があった。熱力学における Maxwell のデーモンのパラドックスの本質を描き出した L. Szilard による 1922 年の研究である。そして 1960 年代以降、R. Landauer らによって、情報と熱力学の関係は本格的に研究されるようになった。現在では情報理論と物理学の融合は熱力学に留まらず様々な分野で盛んに行われており、「情報は物理的な実在である (Information is a physical entity)」という Landauer の主張に深く広い意味づけがなされるようになってきている。

とくに情報理論と熱力学の融合分野である「情報熱力学」は、この 10 年で理論実験ともに急速に発展した。その背景の一つは、1990 年代後半から盛んに研究が行われてきた「ゆらぎの熱力学 (stochastic thermodynamics)」である。Szilard がその萌芽を見出し Shannon が創始した情報理論は、ゆらぎの熱力学と深い関係があることが明らかになってきた。

また近年の実験技術の進歩により、単一分子のような微小な系の熱ゆらぎを精密に

測定できるようになり、実際に Maxwell のデーモンが実現されるようになってきた。たとえば単一コロイド粒子系の電場制御によって、定量的な Maxwell のデーモンが 2010 年に世界で初めて実現された。その後デーモンは単一電子箱や核磁気共鳴 (NMR) など多彩な系で実現されるようになってきている。

我々は生体システムへの応用を目標の一つとし、情報熱力学の理論を発展させてきた。複雑な確率過程を記述可能なベイジアンネットワークという概念を活用し、ゆらぎの熱力学を拡張することで、情報熱力学の適用範囲を広げることになった。その結果として、生体内部における化学反応の熱力学と、生体システムが受容体などのセンサーで感じる「情報」の関係を、定量的に議論することが可能になった。

たとえば大腸菌 (*E. coli*) が餌を探すための仕組みである走化性は、生体情報処理の代表例の一つとしてよく研究されている。我々は、この大腸菌の化学反応ネットワークに情報熱力学を適用した。その結果として、生体系の情報伝達のロバストさ (頑健性) を熱力学の観点から定量化し、それと移動エントロピー (transfer entropy) と呼ばれる情報量の関係を明らかにすることに成功した。さらに大腸菌においては、通常の熱力学的な効率率は低いが、情報熱力学的な効率率は高いことが、現実的な実験パラメータを用いたシミュレーションによって明らかになった。

—Keywords—

Maxwell のデーモン :

J. C. Maxwell が 1867 年ごろに提唱した熱力学第二法則の基礎に関する思考実験。個々の気体分子の状態を観測し、制御できる存在 (デーモン) を仮定すると、熱力学第二法則を破るようみえる。現代的には、デーモンをフィードバック・コントローラーとみなし、情報の役割を考慮に入れることで、このパラドックスを定量的に解決することができる。歴史的には、デーモンと第二法則の整合性についての研究の過程で、情報と物理の関係の理解が大きく進展した。

移動エントロピー :

時間発展する二つの確率変数間で伝達される情報量を定量化する概念であり、時系列解析で広く用いられる。確率的に時間発展する時系列 X , Y を考えたとき、過去の Y の状態を知っているという条件のもとでの「現在の Y と過去の X の相互情報量」が、 X から Y への移動エントロピー (transfer entropy) である。

大腸菌の走化性 :

真正細菌である大腸菌 (*E. coli*) が、餌となる化学物質 (リガンド) の濃度勾配を検出し、濃度の大きい方向へ移動する性質。これを実現するシグナル伝達はフィードバックを含む適応過程の典型例であり、モデル系として実験理論双方でよく調べられている。