

物理的に実現可能なシステムを得るには

—非平衡統計力学に基づくシステム同定—

飯田一浩 NEC基礎研究所

〒305つくば市御幸が丘34番地 iida@exp.cl.nec.co.jp

Abstract

細胞など微細で込み入ったシステムの構造を理解するには、単純な原理から演繹するのではなく、むしろシステムの振る舞いからその構造を同定するという方法が妥当である。以下では非平衡統計力学の枠組みを借りて、生命という微小で創発的なシステムの構造を同定する手段を提案する。この方法は、密度 ρ を介して実測可能な物理量が得られるので、我々がモデル化するシステムが自然界で生じうるか、生じさせうるかを判断することにも役立つ。この枠組みは、生命以外の込み入った系にも適用できる。

キーワード：システム同定、生命の起源

1 はじめに

生命は、物質系でありながら能動的に振る舞い、進化する。筆者は、この著しい性質をもたらすシステム構造が何で、どんな法則に従って生じたのか、どうすれば再構築できるのかに興味がある。耳慣れない話題だとは思うが、統計物理の方法を異分野に適用する例と考えていただければ幸いである。

生命の最初のメカニズムを探す研究には、物質としての特徴に注目する有機合成のアプローチ [1][2] と、力学系としての性質に注目する理論的アプローチ [3][4] とがある。前者が、アミノ酸などの生体物質を自然合成するなど、リアリティーある成果を積み上げているのに対して、理論的アプローチは、必ずしもそうでない。

その原因として、物理法則を無視したマクロな数理モデルが使われたことが挙げられる。生命システムを記述するには、ミクロな物理法則が無視できない。生命は一般に考えられるよりも、かなり小さい。最も小さい細胞は、マイコプラズマ (*Mycoplasma*) でその直径は、100 nm である。この寸法は、現在市販されている超LSIの配線一本の太さ約350 nm よりさらに小さい。生命は、その起原において直径10 nm~100 nmの微小な物質系だったと推定される。さらに、この系は能動的に振る舞い進化する。進化する系をどう書けば良いだろうか？マクロな数理モデルでは、新しい系は生じ得ない。I/Oは記述できても、その背後にある物理法則に踏み込めない。

筆者は、物理化学的リアリティーの高いモデルが書けるという理由で、非平衡統計力学の表現を選ぶ。勿論、どんなに良くできたモデルでも、それが実際の出来事を再現しているとは言えない。しかしリアリティーの高いモデルは、それが自然界で生じうるか否かの判断を助け、得られたシステムを物質系で再構成する際にも有用な情報をもたらすに違いない。

以下では、非平衡統計力学の枠組みを借りて、既存の生命の振る舞いをもとに生命の物理モデルを構築する方法を提案する。まず、起原や進化などの創発的現象をこの枠組みでどう書くかを示す。次に、系の局所的な振る舞いから全系を支配する統計量 ρ を導く手段について述べる。

2 系の生成・消滅を記述する

生命の起原、細胞の分裂、進化といった出来事は、系そのものが生成消滅する現象であり、統計力学の外にあるようにも見える。しかし視点を変えれば、従来の枠組みで十分記述できる。我々が書く物理モデルは、一般に「全ての条件を既知と見なす」、言わば全体系のモデルである。「全体」は、書かれた後に生成消滅しえない。しかしその一部なら、生成消滅しうる。全体の中に、特定の条件を満たす部分があるとしよう。この部分系は、全体系の遷移、もしくは、それを検出する条件の変化に伴って現れたり消えたりするだろう。

今、物理量の分布に基づいて「生命らしさ」を判定する条件を書いたとしよう。これを検出条件とする観測装置を、例えば実関数 $\Psi[\mathbf{r}; \rho]$ に代表させよう。この時、我々が注目する生命というシステムの存在領域 D は、形式的に

$$D = \{ \mathbf{r} \mid \Psi[\mathbf{r}; \rho] > 0 \} \quad (1)$$

と書ける。 ρ は全系の物理量の分布を決める密度である。観測装置 Ψ による検出結果として D が決まると、部分系の振る舞いを規定する密度 ρ_D は次のように決まり、その部分系に由来する物理量 A の値 $\langle A \rangle_D$ が得られる。

$$\rho_D = \psi_D \rho, \quad \psi_D = C \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_D), \quad (\mathbf{r}_D \in D), \quad (2)$$

$$\langle A \rangle_D = \int d\Gamma A \rho_D. \quad (3)$$

C は規格化定数。量子系の場合、

$$\hat{\rho}_D = |\mathbf{r}_D\rangle \hat{\rho} \langle \mathbf{r}_D|, \quad \langle A \rangle_D = \text{Tr}(\hat{A} \hat{\rho}_D). \quad (4)$$

「生命らしさ」を検出する Ψ は、生物学的知見を元に、生命が満たすべき必要条件を与え、物理の言葉に翻訳することで得られる。例えば、生体はエントロピー収支が負になる [5] という特徴を持つ。この条件は ρ の関数として、 $\int_{\Sigma} ds \cdot \mathbf{j}_s(\rho) < 0$, などと書ける¹。個々の条件は生命の一面でしかないが、それらを積み重ねることで、我々が認知している生命の輪郭に近づいてゆける。

3 局所の遷移から全系の構造を導く

では、系全体の振る舞いを決める $\rho(t)$ はどう書けば良いだろうか。生命の全ての特徴を産み出す ρ の方程式をいきなり書き下すことは不可能に思える。そこで、逆に系の局所的な振る舞いから全体の ρ を再構築する戦略をとる。局所の遷移に関する情報もまた、生物学的知見から得られる。例えば、神経の情報伝達に不可欠なイオンの能動輸送 [6] では、膜の内外の電位差がちょうど -70 mV になるように N_a^+ が細胞の外側に向かって輸送される。その流れを流束 $\mathbf{j}$ に代表させることができる。

このような局所の遷移を表す流束 $\mathbf{j}$ のモデルを与えることができれば、次のステップは、その流束 $\mathbf{j}$ を逆問題のデータとして捉え、 $\rho(t)$ や、その遷移をもたらすハミルトニアン H などを順次決定することである。そうして得られる方程式系をシミュレートし、先の Ψ が代表する必要条件群に照らし

¹ $\mathbf{j}_s$ は外界との間のエントロピーの流束。 Σ は D の境界面。 ds は面素ベクトル。

て妥当性を評価し、修正を加え、再度評価することを繰り返す。その過程で、我々の方程式系は次第に生命らしい振る舞いをするようになるだろう。

以下では、局所的遷移を記述する流束 j のモデルから、 ρ 、および H 等のパラメタを導く。

3.1 元になる理論

生命は非平衡、非定常な解放系である。このような系の ρ を直接求めることは難しいが、局所平衡の仮定の下で得られる ρ_q を介して構成できる。Zubarev[7] は、非定常、非平衡な量子系の統計演算子 $\hat{\rho}_\varepsilon$ と、局所平衡の仮定の下で得られる統計演算子 $\hat{\rho}_q$ とが

$$\hat{\rho}_\varepsilon(t) = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \varepsilon \int_{-\infty}^0 dt' e^{\varepsilon t'} e^{iLt'} \hat{\rho}_q(t+t'), \quad (5)$$

なる関係にあることを示した。 ε は、時間の対称性を破るために導入された正の数で、熱力学的遷移 $V \rightarrow +\infty$ (N/V 一定) の後に $\varepsilon \rightarrow +0$ とすることで、 ρ_ε が Liouville 方程式を満たすように工夫されている。 iL は Liouville 演算子 $(1/i\hbar) [\cdot, H]$ である。

$\hat{\rho}_q(t)$ が、

$$\hat{\rho}_q(t) = \frac{1}{Z} e^{-\hat{f}}, \quad Z = \text{Tr}(e^{-\hat{f}}), \quad (6)$$

$$\hat{f}(t) = \int d^3r \beta(\mathbf{r}, t) \{ \hat{H}(\mathbf{r}, t) - \mu(\mathbf{r}, t) \hat{n}(\mathbf{r}, t) \}, \quad (7)$$

で得られること、さらに初期分布 $\hat{H}(\mathbf{r}, 0)$, $\hat{n}(\mathbf{r}, 0)$ を既知として、保存則から

$$\hat{H}(\mathbf{r}, t) = \hat{H}(\mathbf{r}, 0) - \int_0^t dt' \nabla \cdot \hat{j}_H(\mathbf{r}, t'), \quad (8)$$

$$\hat{n}(\mathbf{r}, t) = \hat{n}(\mathbf{r}, 0) - \int_0^t dt' \nabla \cdot \hat{j}_n(\mathbf{r}, t'), \quad (9)$$

であることに注目すれば、エネルギーの流束密度演算子 $\hat{j}_H$ 、粒子の流束密度演算子 $\hat{j}_n$ を元に真の統計演算子 $\hat{\rho}_\varepsilon$ が得られることがわかる。($\beta(\mathbf{r}, t)$, $\mu(\mathbf{r}, t)$ はそれぞれ、位置 $\mathbf{r}$ での温度の逆数、化学ポテンシャルに対応する未定乗数であり、エントロピー最大原理から決まる。)

3.2 古典系での同定

第(5)式は、古典系でも成り立つ。 N 個の粒子から成り、その状態 γ が各粒子の位置² $\mathbf{r}_n$ と運動量 $\mathbf{p}_n$ の組 $\gamma \equiv \{ \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_N \}$ で決まるような系を考えよう。この時、状態 γ にある粒子の流束密度 $j_n(\mathbf{r}; \gamma, t')$ から、全系の $\rho_\varepsilon(\gamma, t)$ が得られることを示す。

今、エネルギーの流束密度 $j_H(\mathbf{r}; \gamma, t)$ 、および粒子の流束密度 $j_n(\mathbf{r}; \gamma, t)$ が $\mathbf{r}_1 \sim \mathbf{r}_N$, $\mathbf{p}_1 \sim \mathbf{p}_N$ の関数として与えられたとする。この時、 $\rho_q(\gamma, t)$ は、

$$\rho_q(\gamma, t) = \frac{1}{Z} e^{-f(\gamma)}, \quad Z = \int d\gamma e^{-f(\gamma)}, \quad (10)$$

$$f(\gamma, t) = \int d\mathbf{r}^3 \beta(\mathbf{r}, t) \{ H(\mathbf{r}; \gamma, t) - \mu(\mathbf{r}, t) n(\mathbf{r}; \gamma, t) \} \quad (11)$$

²添え字 n は粒子の番号。

で与えられる。 $H(\mathbf{r}; \gamma, t)$, $n(\mathbf{r}; \gamma, t)$ は, $j_H(\mathbf{r}; \gamma, t)$, $j_n(\mathbf{r}; \gamma, t)$ に加え, 時刻 $t=0$ におけるエネルギー密度 $H(\mathbf{r}; \gamma, 0)$, 粒子密度 $n(\mathbf{r}; \gamma, 0)$ を既知として, 保存則から導ける。さらに, (5) 式で,

$$e^{t' iL} \rho_q = \exp\{t' iL \rho_q\}, \quad (12)$$

$$iL \rho_q = -\rho_q \{iL f(\gamma)\}, \quad (13)$$

$$iL f(\gamma) = \int d^3r \beta(\mathbf{r}, t) \{ \{iL H(\mathbf{r}; \gamma, t)\} - \mu(\mathbf{r}, t) \{iL n(\mathbf{r}, \gamma, t)\} \}, \quad (14)$$

であることに注目して, 以上を (5) 式に代入すれば, $\rho_\varepsilon(\gamma, t)$ が得られる。ただし古典系での Liouville 演算子 iL は, Poisson 括弧を用いて

$$iL(\cdot) = \sum_k \left(\frac{\partial}{\partial q_k} \frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial}{\partial p_k} \frac{\partial H}{\partial q_k} \right), \quad (15)$$

(k は全次元につけた番号)。

さらに, 外部ポテンシャル密度 $V(\mathbf{r}; \gamma, t)$ の形式を与える時, 相互作用ポテンシャル $M(\mathbf{r}; \gamma, t)$ は, 運動エネルギー密度 $K(\mathbf{r}; \gamma, t) = \sum_n^N \frac{p_n^2}{2m} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n)$ と $H(\mathbf{r}; \gamma, t)$ から, 形式的に $M = H - (K + V)$ で得られる。この相互作用ポテンシャルの式は全く現象論的なものだが, その分析と簡約化を通じて生命現象の背後にある自然法則が見える可能性がある。

3.3 量子系での同定

量子系での問題は, $\hat{j}_H(\mathbf{r}, t)$, $\hat{j}_n(\mathbf{r}, t)$ が共に演算子であり, 直ちに与え難いことである。以下では, より扱いやすいモデルの流束を用いて, ρ の代わりにその状態密度を求める方法を示す。

区別できない N 個の粒子から成る系を仮定する時, その状態は単粒子状態 $s (= 1, 2, 3, \dots, S)$ を占拠する粒子数 $n(s)$ の列 $\vec{n} \equiv \{n(1), n(2), \dots, n(S)\}$ で決まる。状態密度を $P(\vec{n})$ ($\sum_{\vec{n}} P(\vec{n}) = 1$) とすれば, 系の統計演算子 $\hat{\rho}$ は,

$$\hat{\rho} = \sum_{\vec{n}} P(\vec{n}) |\vec{n}\rangle \langle \vec{n}| \quad (16)$$

と書ける。 $|\vec{n}\rangle$ は, 状態 $\vec{n}$ に対する $\hat{H}$ の固有ケットであり, 単粒子の固有ケット $|s\rangle$ から容易に構成できる (例えば, [8])。この時, 単粒子の固有エネルギー $E(s)$ を既知として, 状態 s の粒子の流束密度 $j(\mathbf{r}; s, t)$ を元に状態分布 $P(\vec{n})$ が得られることを示す。

局所平衡の仮定での統計演算子 $\hat{\rho}_q$ は, その状態密度を $P_q(\vec{n})$ として, 先と同じく $\hat{\rho}_q = \sum_{\vec{n}} P_q(\vec{n}) |\vec{n}\rangle \langle \vec{n}|$ と書ける。ここで基底が同じであることに注目すれば, (5) 式の $e^{iLt'}$ は $P_q(\vec{n})$ に影響しないことがわかる。従って,

$$P_\varepsilon(\vec{n}, t) = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \varepsilon \int_{-\infty}^0 dt' e^{\varepsilon t'} P_q(\vec{n}, t + t'). \quad (17)$$

$P_q(\vec{n}, t)$ は,

$$\begin{aligned} P_q(\vec{n}, t) &= \frac{1}{Z} e^{-f(\vec{n})}, \quad Z = \sum_{\vec{n}} e^{-f(\vec{n})}, \\ f(\vec{n}, t) &= \int d^3r \beta(\mathbf{r}, t) \{ H(\mathbf{r}; \vec{n}, t) - \mu(\mathbf{r}, t) n(\mathbf{r}; \vec{n}, t) \}, \end{aligned} \quad (18)$$

で得られる。(18)式のエネルギー密度 $H(\mathbf{r}; \vec{n}, t)$ は、時刻 $t = 0$ における粒子密度 $n(\mathbf{r}; s, 0)$ 、および $\mathbf{j}(\mathbf{r}; s, t)$ を既知として

$$H(\mathbf{r}; \vec{n}, t) = \sum_{s=1}^S E(s) n(\mathbf{r}; s, t), \quad (19)$$

$$n(\mathbf{r}; s, t) = n(\mathbf{r}; s, 0) - \int_0^t dt' \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}; s, t') \quad (20)$$

で得られる。また状態 $\vec{n}$ のエネルギー流束密度 $\mathbf{j}_H(\mathbf{r}; \vec{n}, t)$ は、 $\sum_{s=1}^S E(s) \mathbf{j}(\mathbf{r}; s, t)$ である。

さらに、外部ポテンシャルの形式 $V(\mathbf{r}_n, \mathbf{p}_n)$ を与える時、粒子間の相互作用ポテンシャル $M(\vec{n})$ は形式的に $M(\vec{n}) = H(\vec{n}) - \{ K(\vec{n}) + V(\vec{n}) \}$ で得られる。

$$H(\vec{n}) = \sum_{s=1}^S E(s) n(s), \quad n(s) = \int d\mathbf{r}^3 n(\mathbf{r}; s, t), \quad (21)$$

$$K(\vec{n}) = \sum_{s=1}^S \sum_{n=1}^N \frac{p_n^2}{2m} \delta(s - s_n), \quad V(\vec{n}) = \sum_{s=1}^S \sum_{n=1}^N V(\mathbf{r}_n, \mathbf{p}_n) \delta(s - s_n). \quad (22)$$

(ここで、 $K(\vec{n})$ は運動エネルギー、 s_n は、 n 番目の粒子の単粒子状態である。)

3.4 粒子の性状を推定する

上のモデルでは、粒子の性状をほとんど仮定しなかった。これは、生命を形成しうる粒子の性質も併せて推定したいからである。先の分布には化学ポテンシャル μ 、質量 m 等、粒子の性状を直接示す指標が含まれている。さらに、異方性、スピンなど、我々が仮定しなかった粒子の性状に由来する成分は、全て相互作用ポテンシャル M に押し込まれるので、 M を分析することで、生命を生じうる粒子の性状を絞り込めると期待している。

以上、非平衡統計力学の枠組みを借りて生命のシステム構造を同定する方法を提案した。同定に至る道のためには、生物学的知見を整理・簡約化し、物理量に基づいて書かれた必要条件群や流束 $\mathbf{j}$ で書かれたシステム構造に翻訳するという息の長い仕事が続いている。回り道に見えるかもしれないが、検証過程を含むこの道が最も近道ではなかろうか。

参考文献

1. 「生命の誕生」, 講座進化5, 柴谷, 長野, 養老編, 東京大学出版会, 1991.
2. 「生命の起源を探る」, 柳川弘志, 岩波新書, 1989.
3. *The Origins of Order: Self-organization and Selection in Evolution*, S. Kauffman, Oxford University Press, 1993.
4. Fontana, W.(1992), "Algorithmic chemistry," In: *Artificial Life II,proceeding volume in the Santa Fe Institute Studies in the Science of Complexity*, C.G. Langton, J.D. Farmer, S. Rasmussen, and C. Taylor eds., Vol 10, Addison -Wesley, Reading, Mass.
5. 青木一郎 (1997), "エントロピー生理学入門", 生物物理 37:106-110.
6. 「医科生理学展望」, 原著14版, W.F. Ganong 著, 松田ら訳, pp. 26-31, 丸善, 1990.
7. Zubarev, D. N. and Kalashnikov, V.P. (1970), "Construction of statistical operators for nonequilibrium process," *Theoretical and Mathematical Physics* 3:126-134.
8. *Foundations of Statistical Mechanics Vol.I*, W.T.Grandy,Jr., D.Reidel Publishing Company, pp. 101-103,1987.