

平成 30 年度 未来研究ラボシステム 研究成果報告書

研究種目： 新領域開拓 研究期間：平成 28 年 10 月～平成 31 年 9 月

研究課題名：一分子計測データに対する高頻度データ解析

ラボ長

所属：基礎工学研究科社会システム数理領域

氏名：深澤正彰

研究成果

本研究プロジェクトは、医学・生物物理分野で近年急速に進歩している、一分子の軌跡計測技術と、確率解析・数理統計学分野で、主にファイナンス時系列への適用を念頭に理論が発展した高頻度データ解析を融合し、生体分子システムの動態解明のための、モデリング・システムデザイン・データ解析を双方向に組み合わせた新しい研究領域を開拓するものである。

平成 28 年度における予備的な実験と、そのデータ解析から、対象とする時系列データが、線形バネで拘束されるブラウン運動を記述する 1 階の確率微分方程式に観測ノイズを加えたものにある程度近いことがわかった。特徴として相関の周期性および長期記憶性が見られ、これらは興味の対象の性質というより、実験デザインに起因するノイズの性質と考えられることから、平成 29 年度は 1) 実験デザインの改良、2) 周期性、長期記憶性を考慮した高頻度データ解析の理論構築を行った。平成 30 年度では本格的にモデル構築及びデータ解析に取り組み、以下の成果を得た。

- 1) ミオシン分子がアクチンフィラメントとの結合・分離を繰り返す様子を捉えた、一分子計測データを複数系列得ることに成功した。

図 1: x 方向の変位(上) y 方向の変位 (下)

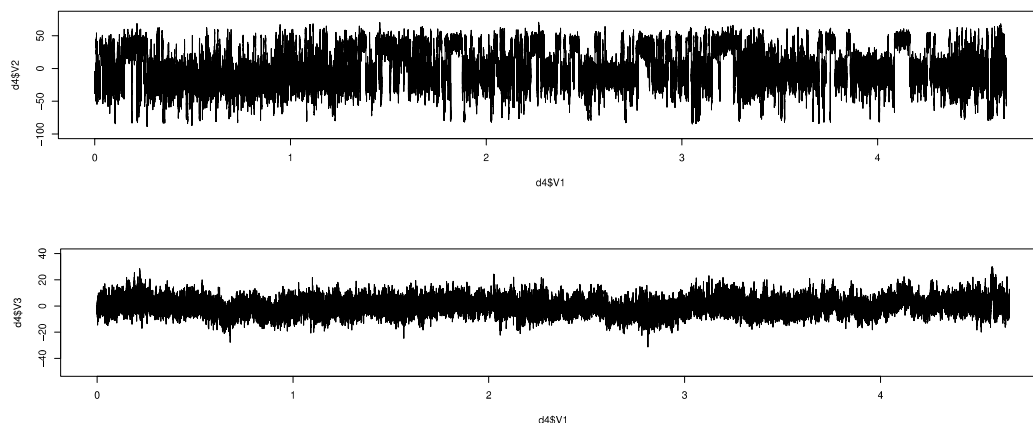
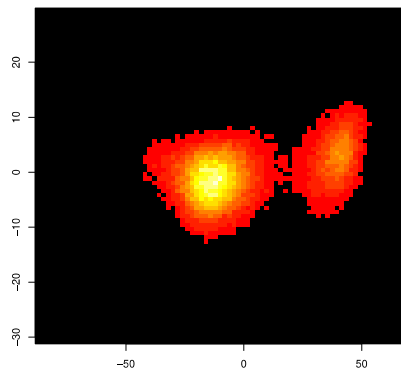


図 2: 2次元分布

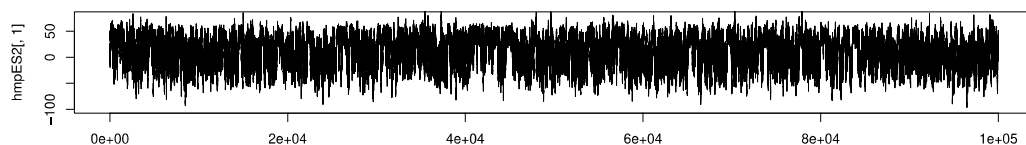


- 2) ミオシン分子の運動を記述する確率モデルとして、アクチンとの結合時・分離時に異なる平均回帰係数を持つレジームスイッチ型の隠れマルコフモデルを構成した。アクチンとの結合は、アクチンの結合部位でのみ起こるため、レジームスイッチの遷移確率が分子の位置に依存するよう、通常の隠れマルコフモデルを一般化した。数値シミュレーションによって、このモデルの下での定性的な振る舞いがデータと整合的であることを確認した。
- 3) 隠れマルコフモデルに対する古典的な推定方法である **Hamilton (1989): A new approach to the economic analysis of nonstationary time series and the business cycle, *Econometrica*, 57, 357-384** のフィルタリングを用いた最尤推定が、我々の一般化した隠れマルコフモデルでも有効であることを理論的に示し、実際にパラメータ推定及びスムージングによる状態推定を行った。

3) の推定結果は残念ながら以下の点で不満足なものであった。

- A) 推定されたパラメータは確かに尤度を最大化しているものの、そのパラメータを用いて生成されたシミュレーションデータは実データの様子とかなり異なっている。

図 3: 推定されたモデルにおける x 方向の変位



- B) 1回の推定に時間がかかるため、シミュレーションによって推定手法の精度を検証することが実質的に不可能である。

これらの問題を解決するため、現在モデルについて再検討を行っており、とくに連続時間モデルの確率解析を用いて、計算負荷の軽い近似尤度を導出することに取り組んでいる。

キーワード：一分子データ計測，高頻度データ解析

研究経費（H30年度）の内訳

備品費	消耗品費	旅費	謝金	その他	合計
0円	697,560円	182,440円	0円	0円	880,000円

共同研究者等

(1) 共同研究者（氏名・所属）

岩城 光宏 理化学研究所 生命システム研究センター

Alexandre Brouste Université du Maine, Département de Mathématiques

藤田 恵介 理化学研究所 生命システム研究センター

(2) 研究協力者（氏名・所属・学年（学生の場合））

高畠 哲也 システム創成専攻・社会システム数理領域 博士課程3年

発表論文等（平成31年3月31日現在）

研究代表者および主な共同研究者の研究業績のうち、本研究課題に関連するもののみを、現在から順に発表年次を過去に遡って記入してください。

[雑誌論文]

[1] Masaaki Fukasawa and Tetsuya Takabatake: Asymptotically efficient estimators for self-similar stationary Gaussian noises under high frequency observations, Bernoulli, forthcoming.

[2] Alexandre Brouste and Masaaki Fukasawa: Local asymptotic normality property for fractional Gaussian noise under high-frequency observations, The Annals of Statistics, forthcoming.

[3] 深澤正彰：高頻度データに対する Whittle 推定，統計数理 (2017) 第 65 巻 第 1 号 71–85.

[学会発表]

[1] 深澤正彰，高畠哲也（発表者）：非整数 Brown 運動に関連したモデルの高頻度観測データに基づく Whittle 推定，2017 年統計関連学会連合大会，南山大学.

外部資金獲得状況・申請状況（本研究課題に関連して、科研費、JST 等の競争的資金、受託研究、奨学寄付金を受給された場合、また、申請された場合はその状況を記入ください）

参考となるHP等

<http://www.sigmath.es.osaka-u.ac.jp/~fukasawa/>

<http://www.qbic.riken.jp/cdo/iwaki-subg/index.html>