周期解を持つ自励１階常微分方程式系構築のための逆問題解法

A Method to Solve Inverse Problem for System of Autonomous First-order Ordinary Differential Equations

近山英輔[1]

要旨

一般的に、逆問題とは、解から、解を満たす方程式などを求める問題や、出力から、入力や関係性を求める問題を示し、広範囲の問題を含んでいる。この研究ノートでは、tの関数を解として持つ自励１階常微分方程式系を求める逆問題の解法について記述する。本解法では、観測データが周期的で、かつ自励系を仮定する場合に適用でき、解析的に微分方程式モデルを求めることができる。適用を想定している系としては、遺伝子発現量の時系列計測データを取得する実験のような、変数や不明な要素が非常に多い実験データの解析であり、この解法は、そのような目的に有用であると期待できる。

キーワード

逆問題、自励常微分方程式系

この研究ノートでは、以下の、tの関数を解として持つ自励１階常微分方程式系を求める逆問題の解法について記述する。

$$\begin{cases} X_1(t) = \displaystyle\sum_{j=1}^{n_1} r_j e^{i\omega_j t} + c_1 \\ X_2(t) = \displaystyle\sum_{j=n_1+1}^{n_2} r_j e^{i\omega_j t} + c_2 \\ \quad\vdots \\ X_M(t) = \displaystyle\sum_{j=n_{M-1}+1}^{n_M} r_j e^{i\omega_j t} + c_M \end{cases} \tag{1}$$

ここで、r_j、ω_j、c_k、n_kは定数で、$r_j, c_k \in C$、$\omega_j \in R$である。n_M個のω_jの中には異なるN個のω_jがあり、$N > M$とする。この解法は、ある現象についての、多変量の時系列観測データなどから、その現象の微分方程式モデルを近似的に求める場合を対象としている。

一般的に、逆問題とは、解から、解を満たす方程式などを求める問題や、出力から、入力や関係性を求める問題を示し、広範囲の問題を含んでいる。この類の問題では、数値的な最適化によるものなどが一般的であるが、本解法が対象とする問題は、その中のごく限られた特殊例に過ぎない。本解法では、観測データが周期的で、かつ自励系を仮定する場合に適用でき、解析的に微分方程式モデルを求めることができる。ただし、観測変数だけでなく、追加の変数が必要になるという欠点があるため、適用範囲はさらに限られる。適用を想定している系としては、遺伝子発現量の時系列計測データを取得する実験のような、変数や不明な要素が非常に多い実験データの解析[1,2]である。そのような実験は、分子生物学や医学の研究分野でよく行われており、現在では、数万種類の遺伝子発現量の時系列解析

[1] CHIKAYAMA, Eisuke [情報システム学科]

が可能になっている。しかし、細胞内には計測できない物質や未知の物質が存在するため、未計測データの存在を仮定して、それを数理モデルとして解析したい場合もある。本解法はそのような場合に有用になると期待できる。

(1)をtで微分すると以下を得る。

$$\begin{cases} \dfrac{dX_1}{dt} = \displaystyle\sum_{j=1}^{n_1} i\omega_j r_j e^{i\omega_j t} \\ \quad\vdots \\ \dfrac{dX_M}{dt} = \displaystyle\sum_{j=n_{M-1}+1}^{n_M} i\omega_j r_j e^{i\omega_j t} \end{cases} \tag{2}$$

この式の右辺を自励系の表現、即ち、$X_1, \cdots, X_M$のみの式で表すことができれば、目的の解法が得られることになる。

まず、例で提案の解法を示し、最後に一般化する。

以下の簡単な例を考える。

$$\begin{cases} X_1 = 5\sin t + \sin 2t - 7\cos 2t + 10 \\ X_2 = -2\sin t + 3\cos 2t - \cos 3t + 10 \end{cases} \tag{3}$$

式(3)を満たす自励微分方程式系を求める逆問題をどのように解くか、ということが課題になる。式(3)を微分すると、

$$\begin{cases} \dfrac{dX_1}{dt} = 5\cos t + 2\cos 2t + 14\sin 2t \\ \dfrac{dX_2}{dt} = -2\cos t - 6\sin 2t + 3\sin 3t \end{cases} \tag{4}$$

になる。(3)と(4)を見比べると、$\sin t$、$\sin 2t$、$\sin 3t$、$\cos t$、$\cos 2t$、$\cos 3t$の 6 関数の線形和になっている。そこで、

$$\begin{cases} X_3 = \cos t \\ X_4 = \sin 2t \\ X_5 = \sin 3t \\ X_6 = \cos 3t \end{cases} \tag{5}$$

と置いてみると、両辺を微分して、

$$\begin{cases} \dfrac{dX_3}{dt} = -\sin t \\ \dfrac{dX_4}{dt} = 2\cos 2t \\ \dfrac{dX_5}{dt} = 3\cos 3t \\ \dfrac{dX_6}{dt} = -3\sin 3t \end{cases} \tag{6}$$

を得る。一方、(3)に(5)を代入して、

$$\begin{cases} X_1 = 5\sin t + X_4 - 7\cos 2t + 10 \\ X_2 = -2\sin t + 3\cos 2t - X_6 + 10 \end{cases} \tag{7}$$

を得る。これを解くと、

$$\begin{cases} \sin t = 3X_1 + 7X_2 - 3X_4 + 7X_6 - 100 \\ \cos 2t = 2X_1 + 5X_2 - 2X_4 + 5X_6 - 70 \end{cases} \tag{8}$$

を得る。(4)と(6)に、(5)と(8)を代入すると、

$$\begin{cases} \dfrac{dX_1}{dt} = 4X_1 + 10X_2 + 5X_3 + 10X_4 + 10X_6 - 140 \\ \dfrac{dX_2}{dt} = -2X_3 - 6X_4 + 3X_5 \\ \dfrac{dX_3}{dt} = -3X_1 - 7X_2 + 3X_4 - 7X_6 + 100 \\ \dfrac{dX_4}{dt} = 4X_1 + 10X_2 - 4X_4 + 10X_6 - 140 \\ \dfrac{dX_5}{dt} = 3X_6 \\ \dfrac{dX_6}{dt} = -3X_5 \end{cases} \tag{9}$$

を得ることができ、(3)を満たす自励微分方程式系を求める逆問題を解くことができた。

次に、この方法を(1)に適用して一般化する。$e^{i\omega_j t}$の共役複素数の和と差で cos 関数と sin 関数は得られるから、(1)は(3)を含み、(1)に対し、同様な解法を定式化できる。

(1)と(2)にはN個の$e^{i\omega_j t}$しかない。これらを、

$$e^{i\omega_j t} \qquad (j = 1, \cdots, N) \tag{10}$$

と並べ、

$$X_k = e^{i\omega_k t} \qquad (k = M + 1, \cdots, N) \tag{11}$$

と置く。(11)を(1)に代入し、(10)の線形結合として整理すると、

$$YZ = X \tag{12}$$

と変形できる。ここで、

$$Y = \begin{pmatrix} y_{11} & \cdots & y_{1M} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ y_{M1} & \cdots & y_{MM} \end{pmatrix}, \tag{13}$$

$$Z = \begin{pmatrix} e^{i\omega_1 t} \\ \vdots \\ e^{i\omega_M t} \end{pmatrix}, \tag{14}$$

$$X = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_M \end{pmatrix} \tag{15}$$

であり、y_{jk}は$r_{k\prime}$のみの式、x_jはX_k、$r_{k\prime}$、$c_{k\prime\prime}$のみの式である。$|Y| \neq 0$ならば、逆行列が存在するので、

$$Z = \begin{pmatrix} e^{i\omega_1 t} \\ \vdots \\ e^{i\omega_M t} \end{pmatrix} = Y^{-1}X \tag{16}$$

となる。

(2)から$e^{i\omega_j t}$を消去すればよいので、(16)と(11)を(2)に代入して、目的の自励微分方程式系を得ることができた。従って、(10)、(11)を前提として$|Y| \neq 0$ならば、求める(2)の自励表現は一意に求めることができる。

参考文献

1) I. Arisi; A. Cattaneo; V. Rosato. Parameter estimate of signal transduction pathways. BMC Neuroscience. 2006, vol. 7 (Suppl 1), S6.

2) K. D. Dahlquist et al. Parameter Estimation for Gene Regulatory Networks from Microarray Data: Cold Shock Response in Saccharomyces cerevisiae. Bull. Math. Biol., 2015, vol. 77, pp.1457–1492.