

周波数のランダムな変調モデルの
一般化とその応用

丸 山 貴 志 子

博 士 (学術)

数 物 科 学 研 究 科
統 計 科 学 専 攻

平 成 3 年 度

目 次

1 序論	1
第 I 部 球面上の拡散過程と Fisher-Wright モデル	
2 球面上の拡散過程	5
2.1 拡散過程と確率微分方程式	5
2.2 球面上の拡散過程とランダム周波数変調モデル	8
2.3 まとめ	10
3 球面上の拡散過程と Fisher-Wright モデル	11
3.1 確率微分方程式による Fisher-Wright モデルの表現	11
3.2 $(k - 1)$ 次元の単位球面上における等方的な拡散	12
3.3 多重遺伝子の拡散モデル	13
3.4 定常分布	16
3.5 まとめ	16
第 II 部 ランダム周波数変調モデル	
4 連続時間 Markov 連鎖	17
4.1 連続時間 Markov 連鎖	18
4.2 特別な場合	20
4.2.1 二状態遷移模型	20
4.2.2 多状態遷移模型	22
4.3 まとめ	23
5 ランダム周波数変調モデル	24
5.1 はじめに	24

5.2 ランダム周波数変調モデル（1次元の場合）	25
5.2.1 二状態遷移模型	28
5.2.2 多状態遷移模型	29
5.2.3 非対称分布をもつ場合	34
5.3 スピニ緩和（多次元の場合）	37
5.4 まとめ	41
5.A 確率的な Liouville 方程式	43
 第 III 部 集団遺伝学への応用	 45
6 集団遺伝学への応用	46
6.1 はじめに	46
6.1.1 交配システムと遺伝的変異	48
6.1.2 ヘテロ接合度パラドクスおよびその他の問題	50
6.1.3 摆動淘汰モデルとの関係	51
6.2 自殖率一定の場合	51
6.2.1 モデルと解析	51
6.2.2 考察	57
6.3 自殖率の時間的な揺動と遺伝的変異（地理的構造なし）	60
6.4 自殖率の時間的な揺動と遺伝的変異（地理的構造あり）	65
6.5 まとめ	66
6.A 離散時間モデルと連続時間モデル	68
 7 結論	 71
謝辞	73
参考文献	74
図の説明	80

1章 序論

様々な現象において現れる、種々の乱雑さの効果がその現象にどのような影響を及ぼすかに興味がある。乱雑さには時間的なものと空間的なものがあるが、本論文では主として時間的な乱雑さに注目し、その性質と効果について議論する。時間的な乱雑さはしばしば確率過程として取り扱われる。例えば、物理学における確率過程の典型的なものはブラウン運動であり、物質系のミクロな熱運動の現れとして観測される。また、集団遺伝学では、世代交代における遺伝子の無作為抽出の効果が確率過程として取り扱われる。

確率過程は多くの分野で用いられており様々なモデルがあるが、本論文では、特にランダム周波数変調モデルに焦点をあて、方法論を展開する。ランダム周波数変調モデルは主として物理学における様々な現象の解析に応用されているが、このモデルと他分野で用いられているモデルとの類似性に注意すると、物理学において展開された方法論を他分野の問題へ適用できる。

本論文は、三つの部分より構成されている。まず、第I部（2, 3章）では、ランダム周波数変調モデルの特別な場合である球面上の拡散過程と Fisher-Wright モデルの類似性について述べる。それから、第II部（4, 5章）で、ランダム周波数変調モデルの一般化を行い、第III部（6章）で、このモデルの集団遺伝学への応用を行う。2章および4章は、それに続く章のための準備として基本的な事柄をまとめた章で、3章、5章および6章が本論文の研究成果を述べた章である。

ランダム周波数変調モデルは磁気共鳴吸収スペクトルの振舞いを説明するために Kubo (1954) と Anderson(1954) によって導入された。振動子の振動数がランダムな変調を受けるというモデルで、注目している спинの感じる磁場が周囲の環境揺らぎのために揺動するという現象に対応している。ランダム周波数変調モデルで扱われているのはスピニの回転軸が固定されている場合であるが、本論文では拡張して、回転軸が変わる場合もモデルに含めて考える。すなわち、ランダム周波数変調モデルをスピニの角速度がランダムに変化するモデルとして捉える。このモデルは、スピニの配向に注目すれば、球面上の確率過程とみなすことができる。さらに、磁場の揺動の相関がデルタ関数（白色雑音）の極限をとると、球面上

の拡散過程となる。一方、Fisher-Wright モデルは集団遺伝学で用いられる典型的な確率過程で、生物進化における遺伝子の無作為抽出の効果を議論するために導入されたモデルである。このモデルは変数変換を行うと、ある突然変異率の場合に球面上の拡散過程と一致することが我々の研究により明らかになった。2章で、球面上の拡散過程について基本的性質をまとめ、球面上の拡散過程とランダム周波数変調モデルとの関係について述べる。それから、3章で球面上の拡散過程と Fisher-Wright モデルの関係を明らかにする。

ランダム周波数変調モデルは磁気共鳴だけでなく様々な問題に応用されているが、従来の応用で取り扱われているのは、二状態遷移模型とガウス型模型という特殊な場合に限られていた。これら二つの確率過程は、前者が離散的な二つの状態をとるのに対して、後者は連続的な状態をとるという両極端な性質をもち、両者を扱う方法論も異なっていた。スピニ緩和や誘電緩和など具体的な現象への応用を行った場合、従来のモデルではうまく説明ができず、二つのモデルの中間的な振舞いを示すように思える例もある。そこで、我々は両者を特別な場合として含むような形で確率過程の一般化を行い、統一的な方法論での取り扱いを試みた。ここで導入する確率過程は Markov 連鎖の特別な場合であるので、4 章で、Markov 連鎖の基本的な性質についてまとめ、導入する確率過程の性質を調べる。5章では、このモデルをランダム周波数変調モデルに応用し、固有関数展開に基づいた定式化を行い、相関関数およびパワー・スペクトルの振舞いを調べた。この結果は Maruyama and Shibata (1988a) で議論されているが、多次元の場合へ拡張することを考えて、ここでは異なった定式化を行う。実際、多次元の場合への拡張も行った。多次元の場合も含めることにより、様々な現象に応用できるようになった。6章で、集団遺伝学への応用を行う。なお、ここで導入した確率過程は光散乱や誘電緩和など物理学における様々な問題にも応用されている。

6章では、植物における自殖（自家受粉）および地理的な構造と遺伝的変異の問題を考える。地理的な構造の効果がある場合の自殖と遺伝的変異の定量的な評価はこれまでになされていなかったので、まず、自殖率が一定の場合について自殖率と遺伝的変異の関係を明らかにした。自殖率は遺伝的要因と環境的な要因によって決まっていると考えられる。前者は花の形など形態に影響を与えるもので、後者は昆虫など花粉の媒体の状態を表すものである。後者の要因により自殖率は時間的あるいは空間的に揺動していると考えられる。そこで、この効果を考慮する。この問題は物理学におけるランダム周波数変調モデルの応用として考え

られ、第II部と同様の定式化を行うことができる。

最後に7章で本論文全体を通してのまとめを行う。

第 I 部

球面上の拡散過程と Fisher-Wright モデル

2 章 球面上の拡散過程

次章で、球面上の拡散過程と集団遺伝学における Wright-Fisher モデルの類似性について述べる。ここでは、そのための準備として、球面上の拡散過程について基本的な事柄をまとめておこう。

2.1 拡散過程と確率微分方程式

連続時間、連続状態の Markov 過程である拡散過程は、物理学、集団遺伝学など様々な分野でしばしば応用され、以下で述べるような性質をもつ (Feller, 1957; Karlin, 1966; 小倉, 1985)。

連続時間の Markov 過程 $X(t)$, $0 \leq t < \infty$ は連続状態 $R = \{a < x < b\}$ をとるものとする。推移確率分布 $P(y, s|x, t)$, $s \geq t$ を

$$P(y, s|x, t) \equiv \Pr(X(s) \leq y | X(t) = x) = \int_a^y p(z, s|x, t) dz \quad (2.1)$$

$$p(y, s|x, t) = \delta(y - x), \quad t = s \quad (2.2)$$

によって定義する。ここで、 $p(y, s|x, t)$, $s \geq t$ は推移確率密度で、規格化条件：

$$\int_a^b p(y, s|x, t) dy = 1, \quad p(y, s|x, t) \geq 0, \quad s \geq t \quad (2.3)$$

および、Chapman-Kolmogorov 方程式：

$$p(y, s|x, t) = \int_a^b p(y, s|z, u)p(z, u|x, t) dz, \quad s \geq u \geq t \quad (2.4)$$

を満足する。これより、時刻 s における確率密度 $p(y, s)$ は初期時刻 t における確率密度 $p(x, t)$ より、

$$p(y, s) = \int_a^b p(y, s|x, t)p(x, t) dx, \quad s \geq t \quad (2.5)$$

によって与えられる。

さらに、時間 t に関する連続性の条件として、任意の ϵ に対して

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h} \Pr(|\Delta X(t)| > \epsilon | X(t) = x) \equiv \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h} \int_{|z-x|>\epsilon} p(z, t+h|x, t) dz = 0 \quad (2.6)$$

が成り立つと仮定する。ここで、

$$\Delta X(t) \equiv X(t+h) - X(t) \quad (2.7)$$

である。この条件が満たされる場合の $X(t)$ を拡散過程とよぶ。

$\Delta X(t)$ の 1 次および 2 次のモーメント

$$\mu(x, t) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h} < \Delta X(t) >_{x,t} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h} \int_a^b (z - x) p(z, t + h | x, t) dz \quad (2.8)$$

$$D(x, t) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h} < [\Delta X(t)]^2 >_{x,t} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h} \int_a^b (z - x)^2 p(z, t + h | x, t) dz \quad (2.9)$$

は、それぞれドリフトおよび拡散とよばれる。また、(2.4) より、Kolmogorov の後向き微分方程式：

$$-\frac{\partial p(y, s | x, t)}{\partial t} = \mu(x, t) \frac{\partial p(y, s | x, t)}{\partial x} + \frac{D(x, t)}{2} \frac{\partial^2 p(y, s | x, t)}{\partial x^2}$$

(y, s) 固定, $0 < t < s$, $a < x < b$ (2.10)

および Kolmogorov の前向き微分方程式：

$$\frac{\partial p(y, s | x, t)}{\partial s} = -\frac{\partial}{\partial y} [\mu(y, s) p(y, s | x, t)] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} [D(y, t) p(y, s | x, t)]$$

$s > t$, $a < y < b$ (2.11)

が得られる。なお、これらの方程式をまとめて拡散方程式とよび、前向き方程式を物理学では Fokker-Planck 方程式とよぶ。

これまでの議論は、多次元の場合へ拡張することができる。 N 次元状態空間 R^N における N 次元拡散過程

$$X(t) = (X_1(t), \dots, X_N(t))^t$$

の推移確率密度を $p(y, s | x, t)$ と表せば、Kolmogorov の後向き微分方程式：

$$-\frac{\partial p(y, s | x, t)}{\partial t} = \sum_{i=1}^N \mu_i(x, t) \frac{\partial}{\partial x_i} p(y, s | x, t) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N D_{ij}(x, t) \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} p(y, s | x, t) \quad (2.12)$$

および Kolmogorov の前向き微分方程式：

$$\frac{\partial p(y, s | x, t)}{\partial s} = -\sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial y_i} [\mu_i(y, s) p(y, s | x, t)] + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{\partial^2}{\partial y_i \partial y_j} [D_{ij}(y, t) p(y, s | x, t)] \quad (2.13)$$

が成り立つ。ここで、 $\mu_i(x, s)$ はドリフト、 $D_{ij}(x, t)$ は拡散を表し、それぞれ

$$\begin{aligned}\mu_i(x, t) &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h} \langle \Delta X_i(t) | X(t) = x \rangle \\ &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h} \int_{R^N} (z_i - x_i) p(z, t + h | x, t) dz\end{aligned}\quad (2.14)$$

および

$$\begin{aligned}D_{ij}(x, t) = D_{ji}(x, t) &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h} \langle \Delta X_i(t) \Delta X_j(t) | X(t) = x \rangle \\ &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h} \int_{R^N} (z_i - x_i)(z_j - x_j) p(z, t + h | x, t) dz\end{aligned}\quad (2.15)$$

によって与えられる。

上で導入された拡散過程のダイナミクスは確率微分方程式によって表される。確率微分方程式には Ito 型と Stratonovich 型があり、これらは確率積分の定義と関連している (Stratonovich, 1966) : $a = t_1 < t_2 < \dots < t_n = b$ とすると、Ito 型積分は

$$\int_a^b \Phi(X(t), t) dX(t) = \text{l.i.m.}_{\Delta \rightarrow 0} \sum_{j=1}^{n-1} \Phi(X(t_j)) [X(t_{j+1}) - X(t_j)] \quad (2.16)$$

によって定義され、Stratonovich 型は

$$\int_a^b \Phi(X(t), t) \circ dX(t) = \text{l.i.m.}_{\Delta \rightarrow 0} \sum_{j=1}^{n-1} \Phi\left(\frac{X(t_j) + X(t_{j+1})}{2}\right) [X(t_{j+1}) - X(t_j)] \quad (2.17)$$

によって定義される。ここで、 \circ は Stratonovich 型の確率積分を表し、 $\Delta = \max(t_{j+1} - t_j)$ である。l.i.m. は limit in the mean (平均収束) を表す。

ドリフトおよび拡散が $\mu_i(X, t)$ および $D_{ij}(X, t)$ によって表される多次元拡散過程 $\{X_i(t)\}$ を Ito 型の確率微分方程式で表すと、

$$dX_i(t) = \mu_i(X, t) dt + \sum_{j=1}^N \sigma_{ij}(X, t) dB_j(t) \quad (2.18)$$

$$D_{ij}(X, t) = \sum_{k=1}^N \sigma_{ik}(X, t) \sigma_{kj}(X, t) \quad (2.19)$$

であり、Stratonovich 型の確率微分方程式で表すと、

$$dX_i(t) = m_i(X, t) dt + \sum_{j=1}^N \sigma_{ij}(X, t) \circ dB_j(t) \quad (2.20)$$

である。なお、両者の係数は

$$\mu_i(X, t) = m_i(X, t) - \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{ik}(X, t)}{\partial X_j} \sigma_{jk}(X, t) \quad (2.21)$$

によって関係づけられている。

さらに、多次元拡散過程 $\mathbf{X}(t)$ の関数の確率微分を与えておこう。 $f(x)$ を滑らかな関数であるとすると、 $f(\mathbf{X}(t))$ の確率微分が存在し、Ito型では

$$df(\mathbf{X}(t)) = \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \frac{\partial f}{\partial x_j}(\mathbf{X}(t)) \sigma_{jk}(\mathbf{X}, t) dB_k(t) \\ + \left[\sum_{j=1}^N \frac{\partial f}{\partial x_j}(\mathbf{X}(t)) \mu_{jk}(\mathbf{X}, t) + \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_k}(\mathbf{X}(t)) D_{jk}(\mathbf{X}, t) \right] dt \quad (2.22)$$

と書ける。これを Ito の公式という。一方、Stratonovich 型では

$$df(\mathbf{X}(t)) = \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \frac{\partial f}{\partial x_j}(\mathbf{X}(t)) \circ \sigma_{jk}(\mathbf{X}, t) \circ dB_k(t) + \sum_{j=1}^N \frac{\partial f}{\partial x_j}(\mathbf{X}(t)) m_{jk}(\mathbf{X}, t) dt \quad (2.23)$$

と書ける。これは

$$df(\mathbf{X}(t)) = \sum_{j=1}^N \frac{\partial f}{\partial x_j}(\mathbf{X}(t)) \circ dX_j(t) \quad (2.24)$$

形をしているので、Stratonovich 型に対しては通常の微分法が適用できることがわかる。

2.2 球面上の拡散過程とランダム周波数変調モデル

球面上の拡散過程とランダム周波数変調モデルの関係について述べておこう。

単位球 $S = \{0 \leq \theta < \pi, 0 \leq \varphi < 2\pi\}$ 上の等方的な拡散過程を考える。 (θ, φ) における推移確率密度 $p(\theta, \varphi, t)$ の満たす等方的な拡散方程式は

$$\frac{\partial p(\theta, \varphi, t)}{\partial t} = D \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} p(\theta, \varphi, t) \quad (2.25)$$

である。初期値を (θ_0, φ_0) とした場合の推移確率密度は

$$p(\theta, \varphi, t | \theta_0, \varphi_0, 0) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_l^m(\theta, \varphi) \overline{Y_l^m(\theta_0, \varphi_0)} e^{-l(l+1)Dt} \quad (2.26)$$

によって与えられ、 $Y_l^m(\theta, \varphi)$ は球面調和関数である。

ランダム周波数変調モデルについては 5 章で詳しく述べるが、振動子 $x(t)$ の振動数 $\Omega(t)$ がランダムな変調を受けるというモデルである。 $|x(t)|$ は一定であるので $|x(t)| = 1$ とおき、 $x(t)$ の実部 $x'(t)$ および虚部 $x''(t)$ を直交座標系にとれば、 $x(t)$ は単位円上の確率過程で、単位ベクトル $(x'(t), x''(t))$ の角速度 $\Omega(t)$ がランダムに変動するモデルとみなせる。ベクトルの配向する空間を多次元の場合に一般化すると、多次元の球面上の確率過程として拡張す

することができる。すなわち、多次元空間における単位ベクトル $S(t)$ の角速度ベクトル $\Omega(t)$ がランダムに変動するモデルとして一般化され、その運動方程式は

$$\dot{S}(t) = \Omega(t) \times S(t) \quad (2.27)$$

によって与えられる。ここで、 \times はベクトル積を表す。

拡散方程式は空間について 2 階の偏微分を含む方程式となっている。一方、ランダム周波数変調モデルの推移確率密度の満たす方程式は一般には 3 次以上の項を含む。しかしながら、 $\Omega(t)$ がガウス・白色過程の場合、両者は一致する。このことを以下で示そう。

簡単のため 3 次元の場合を考える。 $\Omega(t)$ がガウス・白色雑音の場合、(2.27) は Stratonovich 型の確率微分方程式とみなせ、

$$dS_i(t) = c \sum_{j=1}^3 S_j(t) \circ db_{ij}(t) \quad (2.28)$$

のように表される。ここで、 $b_{ij}(t) + b_{ji}(t) = 0$ 、 $b_{ij}(t)$ ($i > j$) は平均 0 分散 t の互いに独立な一次元ブラウン運動である。Ito 型と Stratonovich 型の関係を使えば、(2.28) は次のような Ito 型の確率微分方程式で表される：

$$dS_i(t) = -c^2 S_i(t) dt + c \sum_{j=1}^3 \sigma_{ij}(S, t) dB_j(t), \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.29)$$

$$\sigma_{ii}(S, t) = 0, \quad (2.30)$$

$$\sigma_{ij}(S, t) = -\sigma_{ij}(S, t) = -S_k(t), \quad i, j, k \text{ は循環数} \quad (2.31)$$

ここで、極座標：

$$S_1 = S \sin \theta \cos \varphi, \quad S_2 = S \sin \theta \sin \varphi, \quad S_3 = S \cos \theta \quad (2.32)$$

に変換すると、Ito の公式により (2.29) は

$$dS = 0 \quad (2.33)$$

$$d\theta = c \sin \varphi dB_1 - c \cos \varphi dB_2 + \frac{c^2 \cos \theta}{2 \sin \theta} dt \quad (2.34)$$

$$d\varphi = c \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \cos \varphi dB_1 + c \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \sin \varphi dB_2 - dB_3 \quad (2.35)$$

となる。これより、分散は

$$D_{\theta\theta} = c^2, \quad D_{\varphi\varphi} = c^2 \frac{1}{\sin^2 \theta}, \quad D_{\theta\varphi} = 0 \quad (2.36)$$

であるから、 $\{0 \leq \theta < \pi, 0 \leq \varphi < 2\pi\}$ 上の確率密度 f は次の拡散方程式に従う：

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{c^2}{2} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - \frac{\partial}{\partial \theta} \frac{\cos \theta}{\sin \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} f \quad (2.37)$$

単位球上の確率密度を p とすると

$$f(\theta, \varphi, t) = \sin \theta p(\theta, \varphi, t) \quad (2.38)$$

であるから、球面上の等方的な拡散方程式 (2.25) が得られる。ただし、 $D = c^2/2$ である。

従って、変調がガウス・白色雑音の場合、ランダム周波数変調モデルは球面上の等方的な拡散過程となる。

2.3 まとめ

この章では、次章のための準備として球面上の拡散過程について基本的なことをまとめ、ランダム周波数変調モデルと球面上の拡散過程の関係を明らかにした。本論文で特に焦点をあてているランダム周波数変調モデルは、多次元の場合に拡張すると多次元球面上の確率過程の特別な場合となり、変調がガウス・白色雑音の場合には球面上の拡散過程とみなせることがわかった。

3 章 球面上の拡散過程と Fisher-Wright モデル

ランダム衝突モデルから得られる Fisher-Wright モデルの確率微分方程式による表現はある突然変異率で球面上の拡散過程に対するものと一致することがわかった (Maruyama and Itoh, 1991a,b)。ここでは、球面上の拡散過程に対する推移確率密度の球面調和関数による展開と、Griffith (1979) によって与えられた Fisher-Wright モデルの固有関数展開との比較をする。

3.1 確率微分方程式による Fisher-Wright モデルの表現

生物進化を議論する場合、ある世代から次の世代へ遺伝子がどのようにして伝わるかを明らかにする必要がある。集団遺伝学では、どの遺伝子が次世代に伝えられるかはランダムに決定されるという仮定をおく。実際、どの遺伝子が次世代に伝えられるかを予測することはできないから、この仮定は妥当であろう。遺伝子の無作為抽出による効果は集団サイズが小さい場合に顕著に現れ、偶然的浮動として知られている。Fisher-Wright モデルは無作為抽出による効果を議論するために導入されたモデルで、多くの研究者によって研究されている。

Fisher-Wright モデルでは、次世代の遺伝子は現在の集団からの無作為抽出によって構成され、集団全体が一度に置き換えられる（すなわち、世代の重なりはない）と仮定されている。一方、世代の重なりを考慮したモデルに Moran モデルがある (Moran, 1958)。 k 種の対立遺伝子 A_1, A_2, \dots, A_k から成るサイズ $2N$ の集団（二倍体個体）を考える。集団からランダムに遺伝子を選び、死ぬか生きるかを問い合わせ、死ぬのであればそれ自身を含めた集団から無作為に抽出した遺伝子で置き換える。集団からランダムに選ばれた遺伝子が $(t, t + dt)$ の間に死んで新しい遺伝子で置き変わる確率は λdt によって与えられる。すなわち、単位時間の平均イベント数は λ 、寿命は λ^{-1} である。遺伝子置換の起こる前の A_i 遺伝子の数を k_i とすると、新しい遺伝子が A_i である確率は $\frac{k_i}{2N}$ である。拡散過程で近似した場合、Fisher-Wright モデルと Moran モデルは時間スケールの違いだけで一致する。

ところで、もう一つの妥当なモデルにランダム衝突モデル (Itoh, 1979) がある。 N 粒子か

ら成る集団を考え、その各々は k 種の対立遺伝子 A_1, A_2, \dots, A_k のうちの一つであるとする。

今、粒子間の衝突を考えよう。各粒子は $(t, t+dt)$ の間に λdt の確率で衝突が起こるとする。異なるタイプの粒子、 i と j が衝突した場合、確率 $1/2$ で両方の粒子がタイプ i に、確率 $1/2$ でタイプ j になる。衝突した粒子が同じ場合、変化は起こらない。

A_i の遺伝子頻度を x_i と書くことにすれば、タイプ i の粒子はタイプ j の粒子との相互作用によって $c\sqrt{x_i(t)x_j(t)} db_{ij}(t)$ だけ増加し、 $c\sqrt{x_i(t)x_j(t)} db_{ij}(t)$ だけ減少する。ここで、 $c = \sqrt{\lambda/2N}$ である。従って、ランダム衝突モデルは確率微分方程式 (3.1) によって近似できる：

$$dx_i(t) = \sum_{j=1, i \neq j}^k c\sqrt{x_i(t)x_j(t)} db_{ij}(t) \quad i, j = 1, 2, \dots, k \quad (3.1)$$

ここで、 $b_{ij}(t) + b_{ji}(t) = 0$ 、 $b_{ij}(t)$ ($i > j$) は平均 0 分散 t の互いに独立な一次元ブラウン運動である (Itoh, 1979a, b, 1984; Maruyama, 1981)。 (3.1) は共分散として $c^2 x_i(t)(\delta_{ij} - x_j(t))dt$ をもつ。これは、Fisher-Wright モデルの共分散と一致する。従って、Fisher-Wright モデルの表現として (3.1) を適用することができる。実際、この表現形式に基づいたコンピュータ・シミュレーションが Maruyama (1983), Maruyama and Nei (1982), Takahata (1981) らによってなされている。

(3.1) では突然変異の効果は考慮されていないが、この効果を考慮に入れ、対応する確率微分方程式で $x_i = y_i^2$ という変数変換を行うと、ある突然変異率で球面上のブラウン運動と関係づけられることがわかった。ここで、 y_i は球面上における拡散粒子の座標である。これより、球面上のブラウン運動に対する拡散方程式の解から、変数変換によって Fisher-Wright モデルの確率密度関数が得られる。一方、Griffith (1979) によって Fisher-Wright モデルの解が与えられているので、ここでは、両者の比較を行う。なお、Aki (1984) あるいは Shiga (1987) による Fisher-Wright モデルの表現形式でも同様の議論ができるであろうことを指摘しておく。

3.2 $(k-1)$ 次元の単位球面上における等方的な拡散

$(k-1)$ 次元の単位球上における等方的な拡散は次の確率微分方程式で表される。

$$dy_i(t) = \frac{-c^2}{8}(k-1)y_i(t)dt + \frac{c}{2} \sum_{j=1}^k y_j(t)db_{ij}(t) \quad i = 1, 2, \dots, k \quad (3.2)$$

ここで、 $b_{ij}(t) + b_{ji}(t) = 0$ で、 $b_{ij}(t)$ ($i > j$) は平均値 0 分散 t の互いに独立な一次元のブラウン運動である。Ito の公式を利用すると、対応する Fokker-Planck 方程式が得られる。

例えば、 $k = 2$ の場合、 $y_1 = \cos \theta$, $y_2 = \sin \theta$ とおくと、Fokker-Planck 方程式は

$$\frac{\partial p}{\partial t} = D \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} p \quad (3.3)$$

である。ここで、周期的な境界条件は $p(\theta + 2n\pi, t) = p(\theta, t)$ である。 $D = \frac{c^2}{8}$ である。この解は

$$p(\theta, t | \theta_0, 0) = \frac{1}{2\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-Dn^2 t} \cos(n(\theta - \theta_0)) \quad (3.4)$$

によって与えられる。

$k = 3$ の場合は、極座標 $y_1 = \sin \theta \cos \varphi$, $y_2 = \sin \theta \sin \varphi$, $y_3 = \cos \theta$ を用いると、Fokker-Planck 方程式は

$$\frac{\partial p}{\partial t} = D \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} p \quad (3.5)$$

のように与えられ、解は

$$p(\theta, \varphi, t | \theta_0, \varphi_0, 0) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_l^m(\theta, \varphi) \overline{Y_l^m(\theta_0, \varphi_0)} e^{-l(l+1)Dt} \quad (3.6)$$

である。ここで、 $Y_l^m(\theta, \varphi)$ は球面調和関数である。

3.3 多重遺伝子の拡散モデル

A_1, \dots, A_k は集団における k 種の対立遺伝子を表すとしよう。中立な突然変異を仮定し、 A_i から A_j への突然変異の確率は u_{ij} であるとする。Griffith (1979, 1980) は $u_{ij} = u_j$ を仮定し、推移確率密度（Fokker-Planck 方程式の解）の漸近展開を与えた。なお、突然変異率 0 の場合の厳密解はすでに Kimura (1956) によって与えられていた。

Griffith が解いたのは次のような Fokker-Planck 方程式である：

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \sum_{i=1}^{k-1} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{2} \sum_{j=1}^{k-1} \frac{\partial x_i(\delta_{ij} - x_j)}{\partial x_j} - M_i \right) p \quad (3.7)$$

ここで、

$$M_i = \varepsilon_i - \theta x_i$$

$$\varepsilon_i = 4N u_i > 0, \quad i = 1, 2, \dots, k$$

$$\theta = \sum_{i=1}^k \varepsilon_i$$

である。定常解は Wright (1960) によって与えられている：

$$\Gamma(\theta) \prod_{i=1}^k x_i^{\varepsilon_i - 1} / \Gamma(\varepsilon_i). \quad (3.8)$$

初期頻度 z_1, z_2, \dots, z_k に対する解は直交多項式展開によって与えられ、

$$\Gamma(\theta) \left(\prod_{i=1}^k (x_i^{\varepsilon_i - 1} / \Gamma(\varepsilon_i)) \right) \left(1 + \sum_{n=1}^{\infty} \rho_n(t) Q_n(x_1, x_2, \dots, x_k \mid z_1, z_2, \dots, z_k) \right) \quad (3.9)$$

である。なお、 $x_j > 0, j = 1, 2, \dots, k$ である。ここで、

$$\rho_n(t) = \exp\left\{-\frac{1}{2}n(n-1)t - \frac{1}{2}\theta nt\right\}$$

Q_n は $n, \theta, x_1, x_2, \dots, x_k$ および z_1, z_2, \dots, z_k によって表される複雑な多項式である。

ところで、 $(k-1)$ 次元の球面上における等方的な拡散は、 $y_i^2 = x_i$ とおくと、(3.2) より

$$dx_i(t) = \frac{c^2}{4}(1 - kx_i(t))dt + \sum_{j=1}^k c\sqrt{x_i(t)x_j(t)}db_{ij}(t). \quad (3.10)$$

のように変換される。一方、(3.7) によって表される拡散過程は

$$dx_i(t) = M_i dt + \sum_{j=1}^k \sqrt{x_i(t)x_j(t)} db_{ij}(t). \quad (3.11)$$

のように表される。従って、(3.10) に対応する Fokker-Planck 方程式は (3.7) の特別な場合である。全ての i に対して $\varepsilon_i = 1/2$ とおき、適当な時間スケールをとれば、これらの方程式は一致する。

例えば、 $k = 3$ の場合の推移確率は 2 次元球面上の等方的な拡散に対する推移確率を用いれば表される：

$$p(x_1, x_2, x_3, t \mid z_1, z_2, z_3, 0) = \sum_{\substack{y_i^2(0) = z_i, 0 \leq y_i(0) \\ \text{and } y_i^2 = x_i, \text{ for } i = 1, 2, 3}} p(\theta, \varphi, t \mid \theta_0, \varphi_0, 0) \left| \frac{\partial(\theta, \varphi)}{\partial(x_1, x_2)} \right| \quad (3.12)$$

ここで、

$$y_1(0) = \sin \theta_0 \cos \varphi_0, \quad y_2(0) = \sin \theta_0 \sin \varphi_0, \quad y_3(0) = \cos \theta_0$$

および

$$y_1 = \sin \theta \cos \varphi, \quad y_2 = \sin \theta \sin \varphi, \quad y_3 = \cos \theta$$

である。同様にして、 $k = 2$ に対する推移確率は (3.4) によって表される。

さて、(3.10) と (3.11) に対応する二つの拡散方程式の固有値を比較しよう。任意の次元 k に対して、球面上の拡散方程式は

$$\frac{\partial f}{\partial t} = D \left[\frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} + \dots + \frac{\partial^2}{\partial y_k^2} \right] f, \quad (3.13)$$

によって与えられる。ここで、制約条件 $y_1^2 + \dots + y_k^2 = 1$ が満足される。(3.13) の固有関数は球面調和関数とよばれている。 l 次の球面調和関数は次の式を満足する：

$$f_l(\tau y_1, \tau y_2, \dots, \tau y_k) = \tau^l f_l(y_1, y_2, \dots, y_k) \quad (3.14)$$

$\tau = -1$ とおけば、

$$f_l(-y_1, -y_2, \dots, -y_k) = (-1)^l f_l(y_1, y_2, \dots, y_k) \quad (3.15)$$

という関係を得る。(3.4) と (3.6) に現れる固有関数は $f_l(y_1, y_2, \dots, y_k)$ の特別な場合である。

$k = 2$ の場合を考えよう。 $y_i^2 = x_i$ という変換を用いると、円周上には与えられた x_i に対応する点が四点ある。 x_i の推移確率を求めるために、これに対応する四つの項を集めなければならない。これらの項を集め、(3.15) の関係を用いれば、奇数の n に対する項はお互いに打ち消し合う。従って、 $i = 1, 2$ に対して $\varepsilon_i = 1/2$ とおくと、(3.9) に現れる固有値の各々は (3.4) から得られるものと一致していることがわかる。

$k = 3$ の場合は、変換 $y_i^2 = x_i$ を用いれば、球面上に x_i に対応する点が八点ある。上で述べたものと同じ理由により、奇数の l に対する項は消え、偶数の l に対する項は残る。従って、 $\theta = 3/2$ のとき (3.6) から得られる固有値は (3.9) と一致する。

任意の次元 k に対して、ラプラシアンは

$$\begin{aligned} \Delta_{R^k} &= \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} + \dots + \frac{\partial^2}{\partial y_k^2} \\ &= \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{k-1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \Delta_{S^{k-1}} \end{aligned} \quad (3.16)$$

のように書ける。ここで、 $r^2 = y_1^2 + y_2^2 + \dots + y_k^2$ である。今、 $\Delta_{S^{k-1}} f(y) = -\lambda f(y)$ とおこう。(3.14) を $f_l(r y) = r^l f_l(y)$ と書き、 $\Delta_{R^k} f(y) = 0$ に代入すると、 $\Delta_{S^{k-1}}$ の固有値

$$\lambda = l(l+k-2) \quad (3.17)$$

が得られる。任意の k 、特別な突然変異率 $\varepsilon_i = 1/2$ に対して、(3.7) の解は球面調和関数 f_l によって展開できる。 $k = 2$ および 3 の場合と同様に、変換 $y_i^2 = x_i$ を用いると奇数の l に対する項は消える。よって、 $l = 2n$ とおくと固有値は $\lambda = 2n(2n+k-2)$ によって与えられる。これらの固有値は $D = 1/8$ とおくと、Griffith の結果 (3.9) と一致していることがわかる。

3.4 定常分布

Fisher-Wright モデルに対する定常分布は Wright (1969), Watterson (1976) および Griffith (1979) によって議論された。 $k = 3$ の場合に $i = 1, 2, 3$ に対して $\varepsilon_i = 1/2$ とすると、(3.8) より $\frac{1}{2\pi} \frac{1}{\sqrt{x_1 x_2 x_3}}$ を得る。極座標 :

$$x_1 = \sin^2 \theta \cos^2 \varphi, \quad x_2 = \sin^2 \theta \sin^2 \varphi, \quad x_3 = 1 - x_1 - x_2 \quad (3.18)$$

を考える。ここで、 $\{0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}, 0 \leq \varphi \leq \frac{\pi}{2}\}$ である。

$\{0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}, 0 \leq \varphi \leq \frac{\pi}{2}\}$ における確率密度は

$$\frac{1}{2\pi} \frac{1}{\sin^2 \theta \cos \theta \cos \varphi \sin \varphi} \left| \frac{\partial(x_1, x_2)}{\partial(\theta, \varphi)} \right| = \frac{2}{\pi} \sin \theta.$$

によって与えられる。単位球の $\{0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}, 0 \leq \varphi \leq \frac{\pi}{2}\}$ における密度は $\frac{2}{\pi}$ である。単位球の範囲 $\{0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}, 0 \leq \varphi \leq \frac{\pi}{2}\}$ は、面積 $\frac{4\pi}{8}$ であるから確率密度は球面上で一様である。ゆえに、(3.18) の変数変換によって、球面上で一様な確率密度は $\frac{1}{2\pi} \frac{1}{\sqrt{x_1 x_2 x_3}}$ に変換される。一般の k に対しても同様な議論が可能であろう。

3.5 まとめ

Fisher-Wright モデルは頻度の和が 1 という平面上に拘束された確率過程であり、頻度の平方根を新しい変数と考えると球面上の等方的な確率過程とみなせるが、ある突然変異率では球面上の等方的な拡散過程となることを示した。Griffith (1979, 1980) は遺伝子 A_i から遺伝子 A_j の突然変異率が遺伝子 A_j のみによる場合の拡散方程式の解を固有関数展開により与えているが、非常に複雑で理解しにくいものであった。我々が議論したのは Griffith のモデルの特別な場合であるが、球面上の等方的な拡散過程はよく知られているので、理解しやすくなっている。

第 II 部

ランダム周波数変調モデル

4 章 連続時間 Markov 連鎖

この章では、時間が連続的で状態空間が離散的な確率過程（連続時間 Markov 連鎖）の特別な場合である二状態遷移模型およびその線形結合として表される多状態遷移模型を導入し、その性質を調べる。次章以下で、この確率過程に従う運動力を受けている系の振舞いを論じるが、ここでは、そのための準備を行う。

4.1 連続時間 Markov 連鎖

まず、連続時間 Markov 連鎖の基礎概念のいくつかをまとめておこう (Feller, 1957; Karlin, 1966; 小倉, 1985)。

現在の系の状態が与えられれば、それ以前の過去の挙動は未来に影響しないという性質のことを Markov 性というが、確率過程がこの性質を満たすとき、その過程を Markov 過程とよぶ。特に、離散的な状態のみをとる場合は Markov 連鎖とよばれる。

離散的な状態空間 $R_d = \{a_i, i = 1, 2, \dots\}$ をもつ連続時間 Markov 過程を $X(t)$ としよう。推移確率行列 $P = [p_{ij}]$ を

$$Pr\{X(t+s) = a_i | X(s) = a_j\} = p_{ij}(t) \quad (4.1)$$

$$p_{ij}(0) = \delta_{ij} \quad (4.2)$$

と表すと、規格化条件：

$$\sum_i p_{ij}(t) = 1, \quad p_{ij}(t) \geq 0, \quad t > 0 \quad (4.3)$$

および、Chapman-Kolmogorov 方程式：

$$\sum_k p_{ik}(t)p_{kj}(h) = p_{ij}(t+h), \quad t, h > 0 \quad (4.4)$$

を満足する。これより、時刻 t における確率分布：

$$P_i(t) \equiv Pr\{X(t) = a_i\}$$

は初期分布 $P_j(0)$ が与えられれば、

$$P_i(t) = \sum_j p_{ij}(t)P_j(0) \quad (4.5)$$

のように求められる。

さらに, $p_{ij}(t)$ は $t > 0$ で連続で,

$$\lim_{t \rightarrow 0} p_{ij}(t) = p_{ij}(0) = \delta_{ij} \quad (4.6)$$

を満たすと仮定すると, $p_{ij}(t)$ は $t = 0$ で微分可能である。微係数を

$$\left. \begin{aligned} \lim_{h \rightarrow 0} \frac{p_{jj}(h) - 1}{h} &= \frac{dp_{jj}(0)}{dt} = -\kappa_j \equiv \lambda_{jj} \quad (\leq 0) \\ \lim_{h \rightarrow 0} \frac{p_{ij}(h)}{h} &= \frac{dp_{ij}(0)}{dt} = \lambda_{ij}, \quad i \neq j, \quad (\geq 0) \end{aligned} \right\} \quad (4.7)$$

とおこう。ここで, λ_{ij} は Markov 連鎖の無限小パラメータである (λ_{ij} を生成パラメータ, 行列 $\Gamma = [\lambda_{ij}]$ を生成行列とよぶこともある)。さらに,

$$\sum_{i \neq j} \lambda_{ij} = -\lambda_{jj} = \kappa_j < \infty \quad (4.8)$$

を仮定する。この場合 Markov 連鎖は保存的であるという。

(4.7) を用いると, (4.4) より Kolmogorov の後向き微分方程式:

$$\dot{p}_{ij}(t) = -p_{ij}(t)\kappa_j + \sum_{k \neq i} p_{ik}(t)\lambda_{kj}, \quad j = 1, 2, \dots, \quad i \text{ 固定} \quad (4.9)$$

および Kolmogorov の前向き微分方程式:

$$\dot{p}_{ij}(t) = -\kappa_i p_{ij}(t) + \sum_{k \neq i} \lambda_{ik} p_{kj}(t), \quad i = 1, 2, \dots, \quad j \text{ 固定} \quad (4.10)$$

が得られる。これより、初期分布を与えると、Markov 過程の確率分布は求められる。

こうして与えられる推移確率に対して、次の関係を満たす分布 $\{Q_i\}$ を定常分布という:

$$\sum_j p_{ij}(t)Q_j = Q_i, \quad i = 1, 2, \dots, \quad 0 \leq t < \infty \quad (4.11)$$

$$\sum_i Q_i = 1, \quad Q_i \geq 0 \quad (4.12)$$

このとき、 $P_i(t) = P_i(0) = Q_i$ が成り立つことがわかる。時刻 t における確率分布 $P_i(t)$ は (4.10) と同様の式を満足するので、その式において $\dot{P}_i(t) = 0$ とおけば、定常分布 Q_i は求められる。

推移確率 $p_{ij}(t)$ と定常分布 Q_i をもつ Markov 過程は強定常過程であり、平均値および相關関数は次のようにして求めることができる：

$$\langle X(t) \rangle = \sum_i a_i Q_i \quad (4.13)$$

$$\begin{aligned} R(\tau) &= \langle X(t)X(t+\tau) \rangle - \langle X(t) \rangle^2 \\ &= \sum_i \sum_j a_i [p_{ij}(\tau) - Q_i] Q_j a_j, \quad \tau \geq 0 \end{aligned} \quad (4.14)$$

また、ここで述べている Markov 過程について、 $t = 0$ に状態 i にあった系が少なくとも時刻 t までその状態にとどまる確率は

$$Pr\{X(\tau) = a_j, 0 \leq \tau \leq t\} = e^{-\kappa_i t} \quad (4.15)$$

によって与えられるので、状態 i における待ち時間（滞在時間） L の確率分布はパラメータ κ_i の指数分布をもつ。

4.2 特別な場合

前節では Markov 連鎖の一般的な場合について述べたが、1ステップで高々隣合う状態にしか遷移できない場合、この過程を出生死滅連鎖という。このとき、(4.7) で定義された係数は

$$\lambda_{ij} = \begin{cases} \lambda_j & i = j + 1 \\ \mu_j & i = j - 1 \\ -(\lambda_j + \mu_j) & i = j \\ 0 & \text{その他} \end{cases}, \quad \mu_0 = 0, \quad \kappa_j = \lambda_j + \mu_j \quad (4.16)$$

と書ける。出生死滅連鎖の特別な場合として、以下で述べる二状態遷移模型や Poisson 過程などがある。

4.2.1 二状態遷移模型

二つの状態 $\Delta_0, -\Delta_0$ をとる Markov 過程 $X(t)$ を考えよう。推移確率行列 $P = [p_{ij}]$ は

$$\dot{P}(t) = \Gamma P(t) \quad (4.17)$$

を満たし、生成行列 Γ は

$$\Gamma = \begin{pmatrix} -\lambda & \mu \\ \lambda & -\mu \end{pmatrix} \quad (4.18)$$

のように与えられる。ここで、

$$\lambda = \frac{\gamma}{2}(1 + \sigma), \quad \mu = \frac{\gamma}{2}(1 - \sigma) \quad (4.19)$$

とおこう。初期条件 $P(0) = 1$ を用いれば、(4.17) の Laplace 変換は

$$P[s] = \int_0^\infty e^{-st} P(t) = (s - \Gamma)^{-1} \quad (4.20)$$

となる。この逆変換を行うことによって推移確率は次のように求められる：

$$p_{\epsilon, \epsilon'}(t) = \frac{1}{2}(1 - \epsilon\sigma) + \frac{1}{2}\epsilon\epsilon'(1 + \epsilon'\sigma)e^{-\gamma t} \quad (4.21)$$

ここで、 $\epsilon, \epsilon' = \pm 1$ 。+1 は状態 Δ_0 、-1 は状態 $-\Delta_0$ に対応する。(4.21) より、平衡分布は初期条件によらず

$$p_{\epsilon, \epsilon'}(\infty) = \frac{1}{2}(1 - \epsilon\sigma) = Q_\epsilon \quad (4.22)$$

のように与えられる。

相関関数 $X(t)$ から平均値 X_0 を分離し

$$X(t) = X_0 + X_1(t), \quad X_0 = \langle X(t) \rangle = -\Delta_0\sigma \quad (4.23)$$

とおき、時間順 $t > t_1 > t_2 \dots$ を仮定しよう。(4.21) より、

$$p_{\epsilon,+}(t) - p_{\epsilon,-}(t) = \epsilon e^{-\gamma t} \quad (4.24)$$

$$p_{\epsilon,+}(t) + p_{\epsilon,-}(t) = 2Q_\epsilon + \epsilon\sigma e^{-\gamma t} \quad (4.25)$$

の関係が得られることに注意する。

j 時間相関関数は

$$\begin{aligned} & \langle X_1(t)X_1(t_1)\dots X_1(t_{j-1}) \rangle \\ &= \sum_{\epsilon_1, \dots, \epsilon_{j-1}=\pm 1} \Delta_0^j (\epsilon + \sigma) \prod_{i=1}^{j-1} (\epsilon_i + \sigma) p_{\epsilon_{i-1}, \epsilon_i}(t_{i-1} - t_i) Q_{\epsilon_{j-1}} \end{aligned} \quad (4.26)$$

によって与えられる。 $\epsilon_0 = \epsilon$ 、 $t_0 = t$ である。(4.24) を利用すると、相関関数は

$$R(\tau) = \langle X_1(t)X_1(t + \tau) \rangle = \Delta_1^2 e^{-\gamma\tau} \quad (4.27)$$

のように与えられる。ここで、

$$\Delta_1^2 = \Delta_0^2(1 - \sigma^2) \quad (4.28)$$

とおいた。任意の j に対しては、次のようにして漸化式が得られる：(4.26)において、(4.24)を利用して ϵ_{j-1} についての和をとると、

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \Delta_0^2 (1 - \sigma^2) e^{-\gamma(t_{j-2} - t_{j-1})} \sum_{\epsilon_i, \dots, \epsilon_{j-2} = \pm 1} \Delta_0^{j-2}(\epsilon + \sigma) \\ & \times \prod_{i=1}^{j-2} (\epsilon_i + \sigma) p_{\epsilon_{i-1}, \epsilon_i}(t_{i-1} - t_i) \epsilon_{j-2} \end{aligned}$$

が得られる。(4.25)を利用して、 ϵ_{j-2} について和をとると、

$$\begin{aligned} & \Delta_0^2 (1 - \sigma^2) e^{-\gamma(t_{j-2} - t_{j-1})} \sum_{\epsilon_i, \dots, \epsilon_{j-3} = \pm 1} \Delta_0^{j-2}(\epsilon + \sigma) \\ & \times \prod_{i=1}^{j-3} (\epsilon_i + \sigma) p_{\epsilon_{i-1}, \epsilon_i}(t_{i-1} - t_i) [Q_{\epsilon_{j-3}} + \sigma \epsilon_{j-2} e^{-\gamma(t_{j-3} - t_{j-2})}] \end{aligned}$$

となる。これより、次の関係が得られる：

$$\begin{aligned} & \langle X_1(t) X_1(t_1) \dots X_1(t_{j-1}) \rangle \\ & = \langle X_1(t) X_1(t_1) \dots X_1(t_{j-3}) \rangle \langle X_1(t_{j-2}) X_1(t_{j-1}) \rangle \\ & \quad + 2 \Delta_0 \sigma \langle X_1(t) X_1(t_1) \dots X_1(t_{j-3}) X_1(t_{j-1}) \rangle \end{aligned} \tag{4.29}$$

この関係を繰り返し用いれば、任意の j 時間相関関数は計算できる。最初のいくつかを書き下しておこう：

$$\begin{aligned} & \langle X_1(t) \rangle = 0 \\ & \langle X_1(t) X_1(t_1) \rangle = \Delta_1^2 e^{-\gamma(t-t_1)} \\ & \langle X_1(t) X_1(t_1) X_1(t_2) \rangle = 2 \Delta_0 \sigma \langle X_1(t) X_1(t_2) \rangle \\ & \langle X_1(t) X_1(t_1) X_1(t_2) X_1(t_3) \rangle \\ & = \langle X_1(t) X_1(t_1) \rangle \langle X_1(t_2) X_1(t_3) \rangle + 4 \Delta_0^2 \sigma^2 \langle X_1(t) X_1(t_3) \rangle \end{aligned}$$

4.2.2 多状態遷移模型

前節で導入した二状態遷移模型の線形結合で表される確率過程 $Y(t)$ を導入しよう：

$$Y(t) = \sum_{i=1}^N X_i(t) \tag{4.30}$$

$X_i(t)$ は二つの状態 $\Delta_0, -\Delta_0$ をとるので、 $Y(t)$ は $\{(N - 2i)\Delta_0, i = 0, \dots, N\}$ という $N + 1$ の状態をとる。生成行列 $\Gamma = [\lambda_{ij}]$ は

$$\lambda_{ij} = \begin{cases} (N - j)\lambda & i = j + 1 \\ j\mu & i = j - 1 \\ -(N - j)\lambda - j\mu & i = j \\ 0 & \text{その他} \end{cases}, \quad i, j = 0, \dots, N \quad (4.31)$$

のように書け、平衡分布は

$$Q_i = \frac{(N - i + 1)\lambda}{i\mu} Q_{i-1}$$

を満たす。規格化条件：

$$\sum_{i=0}^N Q_i = \left(1 + \frac{\lambda}{\mu}\right)^N Q_0 = 1$$

より平衡分布は次のような二項分布となる：

$$Q_i = \binom{N}{i} \left(\frac{\lambda}{\lambda + \mu}\right)^i \left(\frac{\mu}{\lambda + \mu}\right)^{N-i} = \binom{N}{i} \left(\frac{1+\sigma}{2}\right)^i \left(\frac{1-\sigma}{2}\right)^{N-i} \quad (4.32)$$

ここで、(4.19) を利用した。また、平均値および相関関数は

$$\langle Y(t) \rangle = -N\Delta_0\sigma \quad (4.33)$$

$$R(\tau) = \langle Y(t)Y(t + \tau) \rangle - \langle Y(t) \rangle^2 = N\Delta_0^2(1 - \sigma^2) \quad (4.34)$$

のように与えられる。

4.3 まとめ

次章でランダム周波数変調モデルの揺動力として導入する確率過程が、連続時間 Markov 連鎖の特別な場合としてどのような性質をもつかを示した。ここで導入した確率過程は平衡分布として二項分布をもち、特別な場合として二状態遷移模型とガウス型模型を含む Markov 過程である。従来の物理学における応用で用いられているのは二つの特別な場合に限られていたので、ここで導入した確率過程はごく自然な一般化である。

5 章 ランダム周波数変調モデル

この章では、前章で導入した連続時間 Markov 連鎖の周波数変調モデルへの応用を行い、久保によるスペクトル形状理論に基づいた定式化を行う。従来の応用では二状態遷移模型とガウス型模型という特別な確率過程が扱われているだけであるが、ここで述べる定式化に従えば、二つの確率過程を特別な場合として含むような形で一般化することができる。

5.1 はじめに

磁気共鳴吸収スペクトルの線幅を説明するために、Kubo (1954, 1962) と Anderson (1954) は磁場の揺らぎに対する確率過程モデルを導入した。以来、このモデルはランダム周波数変調モデルと呼ばれ、磁気共鳴だけでなく様々な問題にも応用されてきたが、従来の応用では二状態遷移模型とガウス型模型という特別な場合に限られていた (Kubo, 1962; Sato and Shibata, 1984, 1986a, 1986b; Shibata and Sato, 1987)。また、このようなスペクトルの形状を調べるためにの理論が発展した (Kubo, 1962)。

ランダム周波数変調モデルは変調の強さ Δ と速さ γ という二つのパラメータによって特徴づけられている。スペクトルの形状は無次元パラメータ $\alpha (\equiv \Delta/\gamma)$ (Kubo number) とともに変わる。系の運動が激しい $\alpha \rightarrow 0$ では、“運動による尖鋭化 (motional narrowing)”といわれる現象が起こり、スペクトルのピークが鋭くなる。

従来の応用でしばしば用いられてきた二つの確率過程は、離散的な二つの状態をとる二状態遷移模型、および連続的な状態をとるガウス型模型であって、両極端な性質をもつ。方法論も両者では異なっている。前者では行列形式の理論 (Kubo, 1962) が展開され、後者では三次以上のキュムラントが消えるという性質あるいは Hermite 多項式展開 (Kubo and Toyabe, 1967; Hiraiwa, 1975; Risken, 1984) が用いられている。

ところで、これら二つの確率過程は減衰理論における二つの展開公式 (Shibata and Arimitsu, 1980) とそれぞれ密接に関係づけられている。二状態遷移模型では時間畳み込み公式 [TC(time convolution) formula] において三次以上の部分キュムラント (partial cumulants) が消え、ガウス型模型では非時間畳み込み公式 [TCL(time convolutionless) formula] におい

て三次以上の順序づけられたキュムラントが消える。基礎方程式が行列形式で与えられる（演算子の非可換性が関与する）場合、後者の性質は利用できないことがある。高次のキュムラントを評価しなければならないが、部分キュムラントの方が評価しやすいことが多い (Sato and Shibata, 1986b, 1987)。

このように二つの過程は独立な方法論で議論されることが多いが、ここでは統一的な取り扱いを試みた。以下で導入する多状態遷移模型は二つの過程を特別な場合として含み、さらに両者の中間的な性質をもつ場合をも含むので、応用上大変有効であろう。

5.2 ランダム周波数変調モデル（1次元の場合）

ランダム周波数変調モデルというのは、ある振動子 $x(t)$ の振動数 $\Omega(t)$ が周囲の環境などの影響でランダムな変調を受けるというモデルである。振動子は次の運動方程式によって表される：

$$\dot{x}(t) = i\Omega(t)x(t) \quad (5.1)$$

ここで、 $x(t)$ は複素数で、実部が振動子の座標、虚部が運動量を表す。 $\Omega(t)$ は確率過程である。

このモデルは、磁気共鳴や誘電緩和など、様々な物理現象に応用されているが、扱われている問題に応じて、 $x(t)$ はスピンの磁気モーメントあるいは原子、分子の双極子モーメントなどを表す (Anderson, 1954; Kubo, 1962)。 $x(t)$ の相関関数のフーリエ変換はスペクトル $I(\omega)$ を表し、我々が求めたい量である。

$$I(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\langle x^*(0)x(t) \rangle}{\langle x^*x \rangle} \exp[-i\omega t] dt \quad (5.2)$$

ここでは、久保によるスペクトル形状理論 (Kubo, 1962) に従い、確率的な Liouville 方程式に基づいた定式化を行おう。久保の定式化によるとスペクトルは以下のようにして求められる。

(5.1) 式において、 $\Omega(t)$ は発展演算子 Γ によって特徴づけられる Markov 過程であると仮定する。すなわち、Markov 過程の取り得る状態を変数 λ で表すと、時刻 t に系を状態 λ に見いだす確率密度 $P(\lambda, t)$ の従う式は

$$\dot{P}(\lambda, t) = \sum_{\lambda'} \Gamma_{\lambda, \lambda'} P(\lambda', t) \quad (5.3)$$

のように書けるとする。なお、 λ は離散的であるとした。連続的であれば、 Γ は微分演算子で表される（例えば、(5.A7) をみよ）。時刻 t に変数 x と λ によって表される状態に系を見いだす確率密度 $W(x, \lambda, t)$ は確率的な Liouville 方程式

$$\frac{\partial}{\partial t} W(x, \lambda, t) = -i \frac{\partial}{\partial x} [\Omega_\lambda x W(x, \lambda, t)] + \sum_{\lambda'} \Gamma_{\lambda, \lambda'} W(x, \lambda', t) \quad (5.4)$$

によって表される（付録 5.A）。ここで、 Ω の発展演算子 Γ は x の運動に依らない、すなわち、 x の Ω への反作用は無視できるということが仮定されている。

ところで、初期条件：

$$W(x, \lambda, 0) = \delta(x - x') \delta(\lambda, \lambda')$$

を課すと、(5.4) の解は時間 t の間の状態 (x', λ') から状態 (x, λ) への遷移確率を表す。これを $W(x, \lambda, t|x', \lambda')$ と書くこととする。ここで、 $\delta(\lambda, \lambda')$ は変数 λ が連続的か離散的かに応じて Dirac のデルタ関数 $\delta(\lambda - \lambda')$ あるいは Kronecker のデルタ $\delta_{\lambda, \lambda'}$ を表す。

過程 $\Omega(t)$ の定常性を仮定すると発展演算子 Γ は時間に依存しなくなる。さらに、過程 $\Omega(t)$ は

$$\sum_{\lambda'} \Gamma_{\lambda, \lambda'} P_0(\lambda') = 0 \quad (5.5)$$

によって定義される平衡状態をもつとし、初期条件：

$$W(x, \lambda, 0) = W_0(x) P_0(\lambda) \quad (5.6)$$

を仮定しよう。そうすると、 $x(t)$ の規格化された相関関数は次のように表される。

$$\phi(t) = \frac{\langle x^*(0)x(t) \rangle}{\langle x^* x \rangle} \quad (5.7)$$

$$= \int dx \int dx' \sum_{\lambda} \sum_{\lambda'} x W(x, \lambda, t|x', \lambda') x'^* W_0(x') P_0(\lambda') / |x'|^2 \quad (5.8)$$

さらに、

$$w(\lambda, t|\lambda') = \int dx \int dx' x W(x, \lambda, t|x', \lambda') x'^* W_0(x') / |x'|^2 \quad (5.9)$$

とおけば、

$$\phi(t) = \sum_{\lambda} \sum_{\lambda'} w(\lambda, t|\lambda') P_0(\lambda') \quad (5.10)$$

のように書ける。ラプラス変換を

$$\phi[s] \equiv \int_0^\infty \exp[-st]\phi(t)dt = \sum_\lambda \sum_{\lambda'} w_{\lambda,\lambda'}[s] P_0(\lambda') \quad (5.11)$$

$$w_{\lambda,\lambda'}[s] \equiv \int_0^\infty \exp[-st]w(\lambda,t|\lambda')dt \quad (5.12)$$

のように書くことにすれば、(5.2)式より、スペクトルは

$$I(\omega) = \frac{1}{\pi} \Re \phi[i\omega] = \frac{1}{\pi} \Re \sum_\lambda \sum_{\lambda'} w_{\lambda,\lambda'}[i\omega] P_0(\lambda') \quad (5.13)$$

のように表される。ここで、 \Re は実部をとることを意味する。

演算子 Ω および Γ をそれぞれ $\Omega = [\Omega_{\lambda,\lambda'}]$, $\Gamma = [\Gamma_{\lambda,\lambda'}]$ のように定義し、表記の簡略化のため Dirac の表記法にしたがって $(0|\Gamma = 0, \Gamma|0) = 0$ を満足するベクトルを導入し、

$$(0|\lambda) = 1, \quad (\lambda|0) = P_0(\lambda) \quad (5.14)$$

と定義すれば、規格化条件

$$(0|0) = \sum_\lambda (0|\lambda)(\lambda|0) = \sum_\lambda P_0(\lambda) = 1 \quad (5.15)$$

を満たす。さらに、演算子 $X(t)$ および $X[s]$ を導入し、行列要素を

$$w(\lambda,t|\lambda') = (\lambda|X(t)|\lambda'), \quad (5.16)$$

$$w_{\lambda,\lambda'}[s] = (\lambda|X[s]|\lambda') \quad (5.17)$$

とおけば、相関関数およびスペクトルはそれぞれ

$$\phi(t) = \sum_\lambda \sum_{\lambda'} (0|\lambda)(\lambda|X(t)|\lambda')(\lambda'|0) = (0|X(t)|0) \quad (5.18)$$

$$I(\omega) = \frac{1}{\pi} \Re (0|X[i\omega]|0) \quad (5.19)$$

によって与えられる。従って、相関関数あるいはスペクトルを求めるには、 $X(t)$ あるいは $X[s]$ の、 Γ の固有値 0 に対応する固有状態で行列要素をとったものがわかれればよい。

(5.4)式より、 $X(t)$ は

$$\dot{X}(t) = i\Omega X(t) + \Gamma X(t) \quad (5.20)$$

を満たす。初期条件は

$$X(0) = \delta(\lambda, \lambda') = 1 \quad (5.21)$$

であるから、ラプラス変換により

$$X[s] = \frac{1}{s - i\Omega - \Gamma} \quad (5.22)$$

となる。

5.2.1 二状態遷移模型

従来の物理学における応用では $\Omega(t)$ として二状態遷移模型とガウス型模型という二つの簡単な Markov 過程が考えられている。ここでは、 $\Omega(t)$ が二状態遷移模型の場合について述べる。

$\Omega(t)$ は、 Δ_0 あるいは $-\Delta_0$ という二つの値のどちらかを平衡では等確率でとる Markov 過程であるとする。この場合、演算子 Ω および Γ は次のように与えられる：

$$\Omega = \begin{pmatrix} \Delta_0 & 0 \\ 0 & -\Delta_0 \end{pmatrix} = \Delta_0 \sigma_z \quad (5.23)$$

$$\Gamma = \frac{\gamma}{2} \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\gamma}{2}(-1 + \sigma_x) \quad (5.24)$$

ここで、1 は単位行列、 $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ は Pauli のスピン行列である：

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (5.25)$$

$\sigma_z|\pm\rangle = \pm|\pm\rangle$ を満足する σ_z の固有状態 $|+\rangle = (1, 0)^t$, $|-\rangle = (0, 1)^t$ を用いると、 Γ の固有状態は

$$|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\{|+\rangle + |-\rangle\}, \quad (5.26)$$

$$|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\{|+\rangle - |-\rangle\} \quad (5.27)$$

と書け、

$$\Gamma|0\rangle = 0, \quad \Gamma|1\rangle = -\gamma|1\rangle \quad (5.28)$$

である。

(5.22) より、

$$X[s] = \begin{pmatrix} s - i\Delta_0 + \frac{\gamma}{2} & -\frac{\gamma}{2} \\ -\frac{\gamma}{2} & s + i\Delta_0 + \frac{\gamma}{2} \end{pmatrix}^{-1} \quad (5.29)$$

であるから、スペクトルは

$$I(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma \Delta_0^2}{(\omega^2 - \Delta_0^2)^2 + \omega^2 \gamma^2} \quad (5.30)$$

となる。一方、逆変換により相関関数は

$$\phi(t) = [\cosh(\gamma t/2a) + a \sinh(\gamma t/2a)] e^{-\gamma t/2} \quad (5.31)$$

となる。ここで、

$$a = \frac{1}{\sqrt{1 - 4(\Delta_0/\gamma)^2}} \quad (5.32)$$

とおいた。

5.2.2 多状態遷移模型

$\Omega(t)$ として二状態遷移模型の拡張である多状態遷移模型を導入しよう。これは、Maruyama and Shibata (1988a) で議論したモデルと同じものであるが、ここでは異なった定式化を試みる。 N 個の二状態遷移模型の線形結合によって表される確率過程を考える：

$$\Omega(t) = \sum_{n=1}^N \Omega_n(t) \quad (5.33)$$

ここで、 $\Omega_n(t)$ は 5.2.1 節で与えられている二状態遷移模型であるとする。演算子 Ω および Γ は次のように与えられる。

$$\Omega = \sum_{n=1}^N \Omega_n, \quad \Gamma = \sum_{n=1}^N \Gamma_n \quad (5.34)$$

$$\Omega_n = 1 \otimes \dots \otimes \underset{n\text{番目}}{\Delta_0 \sigma_z} \otimes \dots \otimes 1, \quad (5.35)$$

$$\Gamma_n = 1 \otimes \dots \otimes \underset{n\text{番目}}{\hat{\gamma}} \otimes \dots \otimes 1, \quad (5.36)$$

$$\hat{\gamma} = \frac{\gamma}{2}(-1 + \sigma_x) \quad (5.37)$$

角運動量の合成とのアナロジーにより、 Γ の固有状態を Γ_n の固有状態の直積によって組み立てよう。 Γ_n の固有状態、 $|m\rangle_n$ は

$$\Gamma_n |m\rangle_n = -m\gamma |m\rangle_n, \quad m = 1, 2$$

を満足し、 σ_z の固有状態 $|\pm\rangle$ を用いると

$$|0\rangle_n = \frac{1}{\sqrt{2}}\{|+\rangle + |-\rangle\}, \quad (5.38)$$

$$|1\rangle_n = \frac{1}{\sqrt{2}}\{|+\rangle - |-\rangle\} \quad (5.39)$$

と書ける。

まず、 Γ_n のゼロ固有値に対応する固有状態の積を考える。

$$|0\rangle_1|0\rangle_2\dots|0\rangle_N$$

これに Γ を演算させると、

$$\Gamma|0\rangle_1|0\rangle_2\dots|0\rangle_N = 0$$

であるから、この積を $|0\rangle$ とおくと Γ の固有状態になっており、固有値は 0 である：

$$|0\rangle = |0\rangle_1|0\rangle_2\dots|0\rangle_N \quad (5.40)$$

$$\Gamma|0\rangle = 0 \quad (5.41)$$

次に、上昇演算子 U を定義し、 $|0\rangle$ に演算させて Γ の固有状態を求めよう。上昇演算子は

$$U = \sum_{n=1}^N U_n \quad (5.42)$$

$$U_n = \mathbf{1} \otimes \dots \otimes \hat{u}_{n\text{番目}} \otimes \dots \otimes \mathbf{1} \quad (5.43)$$

のように定義される。ここで、

$$\hat{u} = \frac{1}{2}(\sigma_x + i\sigma_y) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix} \quad (5.44)$$

$$\hat{u}|0\rangle_n = |1\rangle_n, \quad \hat{u}|1\rangle_n = 0 \quad (5.45)$$

である。 U を $|0\rangle$ に演算させると

$$U|0\rangle = |1\rangle_1|0\rangle_2\dots|0\rangle_N + |0\rangle_1|1\rangle_2\dots|0\rangle_N + \dots + |0\rangle_1|0\rangle_2\dots|1\rangle_N$$

となり、これに Γ を演算させると、

$$\Gamma U|0\rangle = -\gamma U|0\rangle$$

である。したがって、 $U|0\rangle$ は Γ の固有状態となっている。規格化を考慮に入れると

$$\Gamma|1\rangle = -\gamma|1\rangle \quad (5.46)$$

$$|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}U|0\rangle \quad (5.47)$$

である。

さらに、上昇演算子 U を演算させていくと Γ の固有状態が次々と求まる。 n 回演算させた時の固有状態を $|n\rangle$ と書けば、

$$\Gamma|n\rangle = -n\gamma|n\rangle \quad (5.48)$$

$$U|n\rangle = \sqrt{(n+1)(N-n)}|n+1\rangle \quad (5.49)$$

である。この関係をくりかえして使えば、

$$|n\rangle = \sqrt{\frac{(N-n)!}{N!n!}}U^n|0\rangle \quad (5.50)$$

のように $|0\rangle$ から $|n\rangle$ が求められる。

なお、(5.49) 式において係数は角運動量合成とのアナロジーにより容易にわかる。角運動量 L の z 成分 L_z の固有状態を $|l, m\rangle$ 上昇演算子を $L_+ = L_x + iL_y$ とすると、

$$L_+|l, m\rangle = \sqrt{(l-m)(l+m+1)}|l, m+1\rangle$$

のような関係が成り立っている。ここで、 m は $-l$ から l までの $2l+1$ 個の整数を取る。一方 n は 0 から N までの $N+1$ 個の整数を取るから、

$$N = 2l, \quad n = l + m$$

すなわち

$$l = N/2, \quad m = n - N/2$$

のような変数の置き換えを行うと (5.49) が得られる。

同様にして、下降演算子は次のように定義される。

$$D = \sum_{n=1}^N D_n \quad (5.51)$$

$$D_n = 1 \otimes \dots \otimes \hat{d}_{n\text{番目}} \otimes \dots \otimes 1 \quad (5.52)$$

ここで,

$$\hat{d} = \frac{1}{2}(\sigma_z - i\sigma_y) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (5.53)$$

$$\hat{d}|0\rangle_n = 0, \quad \hat{d}|1\rangle_n = |0\rangle_n \quad (5.54)$$

である. (5.49) 式に対応する式は

$$D|n\rangle = \sqrt{n(N-n+1)}|n-1\rangle \quad (5.55)$$

のように与えられる.

そこで (5.20) における, $X(t)$ を Γ の固有状態で展開する.

$$X(t) = \sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^N |n\rangle c_{n,m}(t) (m| \quad (5.56)$$

一方, Ω は昇降演算子によって

$$\Omega = \Delta_0(U + D) \quad (5.57)$$

のように書ける. すなわち

$$\Omega|n\rangle = \Delta_0 \sqrt{(n+1)(N-n)}|n+1\rangle + \Delta_0 \sqrt{n(N-n+1)}|n-1\rangle$$

$$\Gamma|n\rangle = -n\gamma|n\rangle$$

であるから, (5.20) より展開係数については次の関係が成り立っている.

$$\begin{aligned} \dot{c}_{n,m}(t) &= i\Delta_0 \sqrt{(n+1)(N-n)} c_{n+1,m}(t) \\ &+ i\Delta_0 \sqrt{n(N-n+1)} c_{n-1,m}(t) - n\gamma c_{n,m}(t) \end{aligned} \quad (5.58)$$

ラプラス変換すると

$$\begin{aligned} sc_{n,m}[s] - c_{n,m}(0) &= i\Delta_0 \sqrt{(n+1)(N-n)} c_{n+1,m}[s] \\ &+ i\Delta_0 \sqrt{n(N-n+1)} c_{n-1,m}[s] - n\gamma c_{n,m}[s] \end{aligned} \quad (5.59)$$

である. ここで, 初期条件は $c_{n,m}(0) = \delta_{n,m}$ である. $a_n = c_{n+1,m}/c_{n,m}$ とおけば, $n = 0$ の時

$$c_{0,m}[s] = (s - i\Delta_0 \sqrt{N} a_0[s])^{-1}$$

$n \neq 0$ の時

$$a_{n-1}[s] = \frac{i\Delta_0 \sqrt{n(N-n+1)}}{s + n\gamma - i\Delta_0 \sqrt{(n+1)(N-n)}a_n[s]}$$

である。この関係を逐次的に使えば

$$\begin{aligned} c_{0,m}[s] &= \frac{1}{s + \frac{N\Delta_0^2}{s + \gamma + \frac{2(N-1)\Delta_0^2}{s + 2\gamma + \dots}}} c_{0,m}(0) \\ &\quad \vdots \\ &= s + (N-1)\gamma + \frac{N\Delta_0^2}{s + N\gamma} \end{aligned} \quad (5.60)$$

のように連分数の形に書ける。

$$(0|X|0) = \sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^N (0|n)c_{n,m}(m|0) = c_{0,0} \quad (5.61)$$

より、スペクトルは

$$I(\omega) = \frac{1}{\pi} \Re c_{0,0}[i\omega] \quad (5.62)$$

となる。

一方、相関関数は個々の確率過程の独立性により次のように与えられる：

$$\begin{aligned} \phi(t) &= \left\langle \exp \left[\int_0^t \Omega(t') dt' \right] \right\rangle = \prod_{n=1}^N \left\langle \exp \left[\int_0^t \Omega_n(t') dt' \right] \right\rangle \\ &= [\cosh(\gamma t/2a) + a \sinh(\gamma t/2a)]^N e^{-N\gamma t/2} \end{aligned} \quad (5.63)$$

ここで導入したモデルは極限として二状態遷移模型とガウス型模型の両方を含む。 $N = 1$ とおけば二状態遷移模型、 $N\Delta_0^2 = \Delta^2$ とおいて $N \rightarrow \infty$ の極限を取ればガウス型模型となる。

図 5.1-3 の (a) にスペクトル、(b) に相関関数の振舞いを示した。実線、破線、一点破線、点線はそれぞれ $N = 1, 2, 3, 10$ を表す。図 5.1 は $\alpha = 0.2$ という変調の速い場合を表しているが、“運動による尖鋭化”とよばれる現象が見られ、 $N = 1$ と $N = 10$ の間にあまり差が見られない。一方、図 5.3 は $\alpha = 5.0$ という静的な場合を表している。静的な構造が反映され、 N の違いによって振舞いが極端に変わることがわかる。図 5.2 にこれらの中間的な場合 ($\alpha = 1.0$) が示されている。

5.2.3 非対称分布をもつ場合

今まで述べてきたモデルは $\Omega(t)$ の分布が対称的であった。ここでは、非対称な分布をもつ場合を考えよう (Maruyama and Shibata*)。

二状態遷移模型 $\Omega(t)$ は平衡では Δ_0 あるいは $-\Delta_0$ を確率 $(1-\sigma)/2$ あるいは $(1+\sigma)/2$ でとるものとする。そうすると、 Ω および Γ は次のように与えられる。

$$\Omega = \begin{pmatrix} \Delta_0 & 0 \\ 0 & -\Delta_0 \end{pmatrix} = \Delta_0 \sigma_z \quad (5.64)$$

$$\Gamma = \begin{pmatrix} -\lambda & \mu \\ \lambda & -\mu \end{pmatrix} \quad (5.65)$$

ここで、平衡条件により、

$$\lambda = \frac{\gamma}{2}(1 + \sigma), \quad \mu = \frac{\gamma}{2}(1 - \sigma) \quad (5.66)$$

である。

Γ の固有値を x 、固有状態を $(a, b)^t$ とする：

$$\begin{pmatrix} -\lambda & \mu \\ \lambda & -\mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = x \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (5.67)$$

固有値方程式：

$$\begin{vmatrix} x + \lambda & -\mu \\ -\lambda & x + \mu \end{vmatrix} = 0 \quad (5.68)$$

より、固有値は $x = 0$ および $x = -(\lambda + \mu) = -\gamma$ となる。対応する固有状態はそれぞれ

$$|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{\lambda^2 + \mu^2}} \begin{pmatrix} \mu \\ \lambda \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (5.69)$$

である。

次の方程式を満たす演算子を上昇演算子 \hat{u} と定義する：

$$\hat{u}|0\rangle = |1\rangle, \quad \hat{u}|1\rangle = 0 \quad (5.70)$$

(5.69) より、

$$\hat{u} = \frac{1}{2} \sqrt{1 + \sigma^2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix} \quad (5.71)$$

である。

同様にして、下降演算子 \hat{d} は

$$\hat{d}|0\rangle = 0, \quad \hat{d}|1\rangle = |0\rangle \quad (5.72)$$

のように定義され、

$$\hat{d} = \sqrt{\frac{2}{\lambda^2 + \mu^2}} \begin{pmatrix} \frac{\lambda\mu}{\lambda + \mu} & -\frac{\mu^2}{\lambda + \mu} \\ \frac{\lambda^2}{\lambda + \mu} & -\frac{\lambda\mu}{\lambda + \mu} \end{pmatrix} \quad (5.73)$$

である。

\hat{u} および \hat{d} を用いると、

$$\Omega = \frac{\Delta_0}{\sqrt{1+\sigma^2}}[(1-\sigma^2)\hat{u} + (1+\sigma^2)\hat{d}] - \frac{2\Delta_0\sigma}{\gamma}\Gamma - \Delta_0\sigma \quad (5.74)$$

と書ける。 $X(t)$ を

$$X(t) = \sum_{n=0}^1 \sum_{m=0}^1 |n\rangle c_{n,m}(t) \langle m| \quad (5.75)$$

のように展開すると係数 $c_{n,m}(t)$ は

$$\dot{c}_{0,m}(t) = i\Delta_0 \frac{1-\sigma^2}{\sqrt{1+\sigma^2}} c_{1,m}(t) - i\Delta_0\sigma c_{0,m}(t) \quad (5.76)$$

$$\dot{c}_{1,m}(t) = i\Delta_0 \frac{1+\sigma^2}{\sqrt{1+\sigma^2}} c_{0,m}(t) + i\Delta_0\sigma c_{1,m}(t) - \gamma c_{1,m}(t) \quad (5.77)$$

を満足する。したがって、ラプラス変換により

$$c_{0,m}[s + i\Delta_0\sigma] = \frac{1}{s + \frac{\Delta_1^2}{s + \gamma_1}} \quad (5.78)$$

となる。ここで、

$$\Delta_1^2 = \Delta_0^2(1-\sigma^2), \quad \gamma_1 = \gamma - 2i\Delta_0\sigma \quad (5.79)$$

である。

多状態遷移模型 5.2.2節のよう二状態遷移過程の線形結合によってモデルを構成する。

$$\Omega(t) = \sum_{n=1}^N \Omega_n(t) \quad (5.80)$$

ここで、 $\Omega_n(t)$ は 5.2.3 節で与えられている非対称分布をもつ場合の二状態遷移模型であるとする。

5.2.2節と同様にして Γ の固有状態を合成し, X を展開しよう。 Γ の固有値 $-n\gamma$ に属する固有状態を $|n\rangle$, 上昇演算子および下降演算子をそれぞれ U と D とすると, (5.49) および (5.55) が成り立っている。 Ω は

$$\Omega = \frac{\Delta_0}{\sqrt{1+\sigma^2}}[(1-\sigma^2)U + (1+\sigma^2)D] - \frac{2\Delta_0\sigma}{\gamma}\Gamma - \Delta_0\sigma \quad (5.81)$$

のよう書けるので, (5.58) に対応する式として

$$\begin{aligned} \dot{c}_{n,m}(t) &= i \frac{\Delta_0}{\sqrt{1+\sigma^2}} [(1-\sigma^2)\sqrt{(n+1)(N-n)}c_{n+1,m}(t) \\ &\quad + (1+\sigma^2)\sqrt{n(N-n+1)}c_{n-1,m}(t)] \\ &\quad - n\gamma_1 c_{n,m}(t) - N\Delta_0\sigma c_{n,m}(t) \end{aligned} \quad (5.82)$$

が得られる。ラプラス変換は

$$\begin{aligned} c_{0,m}[s + iN\Delta_0\sigma] &= \\ &\frac{1}{s + \frac{N\Delta_1^2}{s + \gamma_1 + \frac{2(N-1)\Delta_1^2}{s + 2\gamma_1 + \dots}}} c_{0,m}(0) \quad (5.83) \\ &\quad s + (N-1)\gamma_1 + \frac{N\Delta_1^2}{s + N\gamma_1} \end{aligned}$$

となる。

ここで, $\Omega(t)$ は (5.80) に加えて定数項 Ω_0 をもつと仮定すると, スペクトルは

$$I(\omega) = \frac{1}{\pi} \Re c_{0,0}[i(\omega - \Omega_0)] \quad (5.84)$$

によって与えられる。一方, 相関関数は次のようになる:

$$\phi(t) = [\cosh(\gamma_1 t/2a) + a \sinh(\gamma_1 t/2a)]^N \exp[-N\gamma_1 t/2 + i(\Omega_0 - N\Delta_0\sigma)t] \quad (5.85)$$

ここで,

$$a = \frac{1}{\sqrt{1 - 4(\Delta_1/\gamma_1)^2}} \quad (5.86)$$

とおいた。

図 5.4-5 にいろいろな α に対するスペクトルおよび相関関数の振舞いを示した。対称的な分布をもつ場合と同様に, 変調の速さを表すパラメータとして $\alpha (= \Delta/\gamma, \Delta^2 = N\Delta_0^2)$ を用

いた。これらの図では、上から下にいくにしたがって α は小さくなっていく。図 5.4.a-e はスペクトルを表すが、一番下の図ではスペクトルの尖鋭化が見られる。また、 α が大きくなるにしたがって非対称になっていき、静的な構造が反映されてくることが分かる。対応する相関関数の実部および虚部が図 5.5.a-e および図 5.5.a'-e' にそれぞれ示されている。このように、非対称分布をもつ場合は、対称的な分布をもつ場合には見られない興味深い振舞いが見られる。

5.3 スピン緩和（多次元の場合）

5.2節では、(5.1)式のような1次元の運動方程式を扱ったが、ここでは、多次元の場合への応用を行う。典型的な例としてスピン緩和を議論する。

スピン S に対する運動方程式は次のように書ける。

$$\dot{S}(t) = \frac{\gamma'}{\hbar} H(t) \times S(t) \quad (5.87)$$

磁場 $H(t)$ は

$$\begin{aligned} H(t) &= H_0 + H_1(t), \\ H_0 &= (0, 0, H_0)^t, \\ H_1(t) &= (H_x(t), H_y(t), H_z(t))^t \end{aligned}$$

であると仮定しよう。行列形式で書くと (5.87) は

$$\dot{S}_\alpha(t) = \sum_{\beta=x,y,z} \Omega^{\alpha,\beta}(t) S_\beta(t), \quad \alpha = x, y, z \quad (5.88)$$

と書ける。ここで、 $\Omega^{\alpha,\beta}(t)$ は行列 $\Omega(t)$ の (α, β) 成分を表し、

$$\Omega(t) = \Omega_0 + \Omega_1(t), \quad (5.89)$$

$$\Omega_0 = \omega_0 Z, \quad (5.90)$$

$$\Omega_1(t) = \omega_x(t)X + \omega_y(t)Y + \omega_z(t)Z \quad (5.91)$$

である。 X, Y, Z は

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad Y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad Z = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.92)$$

によって与えられる。また、 $\alpha = 0, x, y, z$ に対して $\omega_\alpha = (\gamma'/\hbar)H_\alpha$ とおいた。

(5.88) に対する確率的な Liouville 方程式は

$$\frac{\partial}{\partial t} W(S, \lambda, t) = - \sum_{\alpha=x,y,z} \frac{\partial}{\partial S_\alpha} [(\Omega S)_\alpha W(S, \lambda, t)] + \Gamma W(S, \lambda, t) \quad (5.93)$$

である。これまでと同様に

$$\begin{aligned} w_{\alpha,\beta}(\lambda, t | \lambda') &= \int dS \int dS' S_\alpha W(S, \lambda, t | S', \lambda') S'_\beta W_0(S') / S'_\alpha S'_\beta \\ &= (\lambda | W_{\alpha,\beta}(t) | \lambda'), \quad \alpha, \beta = x, y, z \end{aligned} \quad (5.94)$$

とおけば、 $W_{\alpha,\beta}(t)$ は

$$\dot{W}_{\alpha,\beta}(t) = \sum_{\epsilon=x,y,z} \Omega^{\alpha,\epsilon} W_{\epsilon,\beta}(t) + \Gamma W_{\alpha,\beta}(t) \quad (5.95)$$

を満たす。これを用いれば、相関関数およびスペクトルは

$$\phi_{\alpha,\alpha}(t) = \frac{\langle S_\alpha^*(0) S_\alpha(t) \rangle}{\langle S_\alpha^*(0) S_\alpha(0) \rangle} = (0 | W_{\alpha,\alpha}(t) | 0) \quad (5.96)$$

および

$$\begin{aligned} I_{\alpha,\alpha}(\omega) &= \frac{1}{\pi} \Re \phi_{\alpha,\alpha}[i\omega] \\ &= \frac{1}{\pi} \Re (0 | W_{\alpha,\alpha}[i\omega] | 0) \end{aligned} \quad (5.97)$$

のように書ける。

断熱的な揺らぎ $\omega_z(t)$ のみが存在し、 $\omega_x(t) = \omega_y(t) = 0$ の場合を考えよう。 $\omega_z(t)$ としては 5.2.3 節で導入した非対称分布をもつ場合の多状態遷移模型を考える。すなわち、

$$\omega_z = \sum_{n=1}^N \omega_{z,n}, \quad \Gamma = \Gamma_z = \sum_{n=1}^N \Gamma_{z,n} \quad (5.98)$$

$$\omega_{z,n} = 1 \otimes \dots \otimes \underset{n\text{番目}}{\Delta_0 \sigma_z} \otimes \dots \otimes 1 \quad (5.99)$$

$$\Gamma_{z,n} = 1 \otimes \dots \otimes \underset{n\text{番目}}{\gamma} \otimes \dots \otimes 1 \quad (5.100)$$

とする。ここで、 γ は (5.65) によって与えられる。

Γ_z の固有値 $-n\gamma$ に対応する固有状態を $|n\rangle$ とし、

$$\Gamma_z |n\rangle = -n\gamma |n\rangle \quad (5.101)$$

上昇および下降演算子をそれぞれ U_z, D_z とすれば,

$$\omega_z = \frac{\Delta_0}{\sqrt{1+\sigma^2}}[(1-\sigma^2)U_z + (1+\sigma^2)D_z] - \frac{2\Delta_0\sigma}{\gamma}\Gamma_z - N\Delta_0\sigma$$

であるから,

$$\begin{aligned} \Omega_1|n\rangle &= \frac{\Delta_0}{\sqrt{1+\sigma^2}}Z[(1-\sigma^2)\sqrt{(n+1)(N-n)}|n+1\rangle \\ &\quad +(1+\sigma^2)\sqrt{n(N-n+1)}|n-1\rangle] \\ &\quad -2n\Delta_0\sigma Z|n\rangle - N\Delta_0\sigma Z|n\rangle \end{aligned} \quad (5.102)$$

となる。したがって,

$$W_{\alpha,\beta}(t) = \sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^N |n\rangle c_{n,m}^{\alpha,\beta}(t) (m|, \quad \alpha, \beta = x, y, z \quad (5.103)$$

のように展開すると $|n\rangle$ の規格直交性により,

$$\begin{aligned} \dot{C}_{n,m}(t) &= [(\omega_0 - N\Delta_0\sigma)Z - n(\gamma 1 - 2\Delta_0\sigma Z)]C_{n,m}(t) \\ &\quad + \frac{\Delta_0}{\sqrt{1+\sigma^2}}Z[(1-\sigma^2)\sqrt{(n+1)(N-n)}C_{n+1,m}(t) \\ &\quad \quad +(1+\sigma^2)\sqrt{n(N-n+1)}C_{n-1,m}(t)] \end{aligned} \quad (5.104)$$

である。ここで,

$$C_{n,m}(t) = [c_{n,m}^{\alpha,\beta}(t)], \quad \alpha, \beta = x, y, z$$

とおいた。ラプラス変換すると

$$\begin{aligned} sC_{n,m}[s] - C_{n,m}(0) &= \\ &[(\omega_0 - N\Delta_0\sigma)Z - n(\gamma 1 - 2\Delta_0\sigma Z)]C_{n,m}[s] \\ &+ \frac{\Delta_0}{\sqrt{1+\sigma^2}}Z\{ (1-\sigma^2)\sqrt{(n+1)(N-n)}C_{n+1,m}[s] \\ &\quad +(1+\sigma^2)\sqrt{n(N-n+1)}C_{n-1,m}[s] \} \end{aligned} \quad (5.105)$$

である。ここで、初期条件は

$$C_{n,m}(0) = \delta_{n,m}C_{n,m}(0)$$

である。

$$A_n = C_{n+1,m}C_{n,m}^{-1}$$

とおけば、 $n = 0$ の時

$$C_{0,m}[s] = \frac{1}{\Lambda - \sqrt{N} \frac{\Delta_0}{\sqrt{1+\sigma^2}} (1-\sigma^2) Z A_0[s]} C_{0,m}(0)$$

$n \neq 0$ の時

$$A_{n-1}[s] = \frac{\Delta_0 \sqrt{1+\sigma^2} \sqrt{n(N-n+1)}}{\Lambda + nG_1 - \frac{\Delta_0}{\sqrt{1+\sigma^2}} (1-\sigma^2) \sqrt{(n+1)(N-n)} Z A_n[s]} Z$$

となる。ここで、

$$\Lambda = s\mathbf{1} - (\omega_0 - N\Delta_0\sigma)Z$$

$$G_1 = \gamma\mathbf{1} - 2\Delta_0\sigma Z$$

とおいた。これらを逐次代入すると、

$$\begin{aligned} C_{0,m}[s] &= \\ &\frac{1}{\Lambda - Z \frac{N\Delta_1^2}{\Lambda + G_1 - Z \frac{2(N-1)\Delta_1^2}{\Lambda + 2G_1 - Z \dots Z \frac{N\Delta_1^2}{\Lambda + NG_1}}}} C_{0,m}(0) \quad (5.106) \end{aligned}$$

のように連分数の形に求められる。(5.96) および (5.97) より、横緩和は

$$\phi_{x,x}(t) = \phi_{y,y}(t) = c_{0,0}^{x,x}(t) \quad (5.107)$$

および

$$I_{x,x}(\omega) = I_{y,y}(\omega) = \frac{1}{\pi} \Re c_{0,0}^{x,x}[i\omega] \quad (5.108)$$

によって表され、縦緩和は

$$\phi_{z,z}(t) = c_{0,0}^{z,z}(t) \quad (5.109)$$

および

$$I_{z,z}(\omega) = \frac{1}{\pi} \Re c_{0,0}^{z,z}[i\omega] \quad (5.110)$$

によって表される。

基礎方程式が行列形式で表されている場合でも、前節と同様にして固有関数展開を行えば解けることが分かった。このような定式化は次章でも用いる。

5.4 まとめ

この章では多状態遷移模型をランダム周波数変調モデルに適応し、その性質を調べた。さらに、基礎方程式が行列形式で表される場合（スピニ系）の定式化も行った。

ここで導入したモデルは非常に多様な様相を示し、様々な問題に応用できる可能性がある。非対称性を取り入れた場合の振舞いはさらに多様であり、現実の現象に適応しうるであろう。実際に、光散乱現象 (Maruyama and Shibata, 1988b, 1988c) および誘電緩和現象 (Shibata, Uchiyama and Maruyama, 1989) に応用し、興味深い結果が得られた。

物理系を論じている場合、確率過程には注目している系に対する熱浴の効果が縮約されていると考えられる。このような取り扱いを熱浴の古典的な取り扱いという。これに対して、熱浴を量子的に取り扱う研究もなされ、格子振動などが仮定されている。注目している系と熱浴の相互作用に対してある特別な仮定をした場合のスペクトル (Arimitsu, Ban and Shibata, 1984) は非対称な場合の我々のスペクトルと類似した様相を呈する。ここで導入した確率過程の数学的な取り扱いは非常に簡単であるので、様々な現象に応用すれば、有用性が示されるであろう。

最後に、最近の誘電緩和に関する研究で、実験データが我々のモデルによって非常によく説明できたという報告があったので、このことについて述べよう。我々のモデルの誘電緩和への応用は、Shibata, Uchiyama and Maruyama (1989) で提案され、SUM (Shibata-Uchiyama-Maruyama) モデルとして、実験データの解析に用いられている (Amou, 1991)。

Amou (1991) は DNA の周囲にある水和水の動的性質を明らかにするために TDR 法による誘電緩和の測定を行った。常温では、B 型 DNA ゲル中には、三種類の異なった水が存在している。DNA 近くに強く束縛された第一水和水、その外側をとりまく第二水和水、DNA の影響を受けていない自由水である。水和水の動的性質を反映して、常温では三つの緩和モードが存在する。自由水の緩和を表す高周波モード、生体物質特有の生命結合水に由来する低周波モード、それから、生命結合水の外側で弱く拘束されている水（速い結合水）による中間モードである。Amou (1991) は、水和水の動的性質を知るために誘電緩和スペクトルの温度変化を TDR 法により調べ、最も低周波側に現れる生命結合水のモードは従来のフィッティングの式では説明できないが、SUM モデルによってうまく説明できることを示した。図 5.6 に SUM モデルによるフィッティングの結果を示す。高周波領域でデータのばらつきがみ

られるが、これは測定装置の精度上の問題であり、それ以外の領域では広範囲にわたった一致がみられている。

付録 5.A 確率的な Liouville 方程式

運動方程式：

$$\dot{x}(t) = F_{\Omega(t)}(x(t)) \quad (5.A1)$$

を考えよう。ここで、 $F_{\Omega(t)}(x(t))$ は $x(t)$ に依存するとともに、Markov 過程 $\Omega(t)$ にも依存するとする。例えば、(5.1) で扱っているのは

$$F_{\Omega(t)}(x(t)) = i\Omega(t)x(t)$$

と書ける場合である。なお、 $\Omega(t)$ の時間発展は $x(t)$ とは独立であるという仮定をおく。(この仮定は、時系列解析などでシステムの状態と独立にノイズ発生させるのと同じである。)

$(x(t), \Omega(t))$ を (x, Ω_λ) に見いだす確率密度 $W(x, \lambda, t)$ の従う方程式は確率的な Liouville 方程式とよばれる。運動方程式が (5.A1) のように与えられる場合、確率的な Liouville 方程式は確率の流れの保存則より、 x での確率流に基づく項と $\Omega(t)$ の状態変化に基づく項の重ね合わせによって表される：

$$\frac{\partial}{\partial t} W(x, \lambda, t) = -\frac{\partial}{\partial x} J_\lambda(x, t) + \sum_{\lambda'} \Gamma_{\lambda, \lambda'} W(x, \lambda', t) \quad (5.A2)$$

ここで、 $J_\lambda(x, t)$ は $\Omega(t) = \Omega_\lambda$ における x での確率流を表し、

$$J_\lambda(x, t) = F_\lambda(x)W(x, \lambda, t) \quad (5.A3)$$

である。また、 $\Omega(t)$ の時間発展が $x(t)$ と独立であるという仮定により右辺第二項の係数 $\Gamma_{\lambda, \lambda'}$ は x に依らない。

$x(t)$ の状態に関係なく $\Omega(t)$ を Ω_λ に見いだす確率密度 $P(\lambda, t)$ は

$$P(\lambda, t) = \int W(x, \lambda, t) dx \quad (5.A4)$$

のように与えられる。この時間変化は (5.A2) より

$$\dot{P}(\lambda, t) = - \int \frac{\partial}{\partial x} J_\lambda(x, t) dx + \sum_{\lambda'} \Gamma_{\lambda, \lambda'} P(\lambda, t) \quad (5.A5)$$

$$= \sum_{\lambda'} \Gamma_{\lambda, \lambda'} P(\lambda', t) \quad (5.A6)$$

となる。

例えば、非対称分布をもつ場合の二状態遷移模型であれば、 Γ は (5.65) のように与えられる。また、ガウス型模型であれば、

$$\Gamma = \frac{\partial}{\partial \lambda} \gamma \left(\lambda + \Delta^2 \frac{\partial}{\partial \lambda} \right) \quad (5.A7)$$

のような微分演算子となり、 λ' についての和はなくなる。

第 III 部

集団遺伝学への応用

6 章 集団遺伝学への応用

この章では、4, 5章で導入した確率過程の集団遺伝学への応用を行う。地理的な構造をもった植物集団における自殖と遺伝的変異の問題を取り挙げる。まず、自殖率一定の場合の遺伝的変異と地理的構造について議論し、それから、自殖率が時間的あるいは空間的に変動する場合について議論する。自殖率が時間的に変動する場合のモデルは5章で取り扱ったランダム周波数変調モデルの拡張と見なすことができる。

6.1 はじめに

集団遺伝学とは生物集団における遺伝的構成がどのようなメカニズムに従っているかを探求する学問である。歴史的には Mendel の遺伝学と Darwin の自然淘汰説とが確率論、統計学によって統合されることにより生まれた。集団遺伝学、本来の目的は生物進化のメカニズムを探ることにある。生物進化は突然変異のような個体レベルでの変異と集団レベルでの変異の蓄積という二つのプロセスからなるが、後者のプロセスを研究するのが集団遺伝学である。集団の遺伝子構成を遺伝子頻度で表し、その変化を記述する数学的なモデル（確率過程モデル）を立て、集団に蓄積される遺伝的変異などの評価を行う。

生物進化に関しては、分子生物学の進歩とあいまって多くの新事実が明らかにされてきている。以前の研究は表現型レベルの変化に限られていたため、遺伝子レベルでの変化を的確に捉えることができなかった。分子生物学の発達により、遺伝子とその副産物であるタンパク質の間の関係が明らかになり、相同的なタンパク質のアミノ酸配列を比較することによって、遺伝的変異を定量的に評価することが可能になったのだ。Kimura (1968) は実験事実を説明するために、分子進化の中立説を提唱した。“有利な突然変異の蓄積により、適応的な進化が起こる”という Darwin の自然淘汰説に対し、Kimura の中立説は“分子レベルでの進化的な変化が自然淘汰に関して、ほとんど中立な突然変異遺伝子の偶然的浮動による”ことを主張している (Kimura, 1983)。最近では、DNA 塩基配列を決定する方法が開発され、DNA レベルでのデータが得られるようになり、生物進化の研究は新しい局面を迎えており、データの蓄積にともない、中立説を支持する証拠も次々に得られてきている。DNA データは大量

の情報を含んでいるので、今後多くの事柄が明らかになるであろうと期待される。

遺伝子頻度の変化を扱う従来の集団遺伝学に対して、分子レベルのデータと直接関係したモデルを扱おうといった試みもなされている。その一つは遺伝子系図学(genealogy)とよばれるもので、分子レベルのデータから遺伝子間の系統関係を推定し、進化機構との関連を研究する。そこでは、二つの遺伝子間の距離という新しい概念が導入されている。

生物進化を議論する場合、遺伝情報がある個体から次の個体にどのような遺伝様式に従って伝達するかを明確にする必要がある。現存する生物の多くは、二倍体個体で有性生殖を行う。そのため、個々の塩基置換(point mutation)や挿入、欠失(insertion-deletion)だけでなく、組換え(recombination)などの効果も考慮しなければならない。また、不等交叉や遺伝子変換といった遺伝子間の相互作用も重要である。最近、工学や物理学の方で遺伝子アルゴリズムを最適化問題へ応用しようという研究がなされ、進化的な変化には、点突然変異だけでなく組換えのようなある程度まとまった単位(domain)での変化が重要であるということが指摘されている。このように実際の遺伝子は多様な変換の機構をもっているが、実際の解析が可能なのは簡単な場合に限られている。Ohta (1980, 1984) は多重遺伝子族の形成過程における不等交叉や遺伝子変換の効果をシミュレーションによって調べているが、モデルは極めて複雑である。

Derrida and Peliti* は点突然変異のみを考慮するという簡単な場合に、遺伝子系図学と物理学におけるスピングラスの理論との類似性を示した。実際の遺伝子の変化は非常に複雑であり、物理学との対応づけはそれほど単純ではないが、類似性に注意すれば見通しがよくなる可能性がある。

有性生殖の過程では、どのような交配様式が取られているかということも考慮しなければならない。交配様式としては、自殖、ランダム交配などがある。自殖とは、二倍体個体の二つの遺伝子が同じ親個体に由来する場合をいう。この場合、AA や BB のような遺伝子型(ホモ接合体)をもつ個体は同じ遺伝子型の子孫だけを残し、ヘテロ接合体(AB)をもつ個体は AA, AB, BB 三種類の遺伝子型を $1/4$, $1/2$, $1/4$ の確率で生じる。一方、ランダム交配のもとでは、どの個体とどの個体が交配するかは全くランダムに決定される。また、集団が地理的に分布しているために交配の相手が制限されることもある。この効果は地理的構造として取り入れられ、Wright の島模型あるいは Kimura の飛石模型に基づいた研究がなされ

ている。

この章では、植物における自殖と地理的構造が遺伝的変異に与える効果について議論する。分子レベルにおける様々な遺伝子変換の機構も興味深い問題であるが、ここでは、交配システムに焦点をあて、遺伝子レベルでの突然変異の効果だけを考える。なお、遺伝子レベルでの変異の研究から分子レベルでの変異への一般化は容易にできる（6.2節）。

6.1.1 交配システムと遺伝的変異

交配システムは遺伝子が次世代にどのような様式で遺伝するかを表しているが、植物は実際に多様な交配システムをもつ。それがどのようにして進化してきたかということは植物進化における中心的な問題の一つである。この問題は生態学における最適化問題として取り扱われ、与えられた条件のもとでどのような交配システムが進化するかといったことが議論されている。また、遺伝的変異は実験によって測定できる量であるので、これがどのようなメカニズムによって決定されているかを調べることも重要な問題である。ある交配システムを仮定したとき、どのくらいの遺伝的変異が期待されているかといった理論的な研究から、実験データの解析がなされている。しかしながら、データの十分な説明はできていない（6.1.2節）。

植物における交配システムはその性表現と密接に関連している。花は植物における生殖器官で、雄しべ（雄性生殖器官）と雌しべ（雌性生殖器官）をもつ。雄しべと雌しべの両方をつける花を両性花、雄しべだけをつける花（雄花）や雌しべだけをつける花（雌花）を単性花とよぶ。個体レベルでは、一つの個体が両性を示す場合と、雄花と雌花のどちらかをつけ単性の性表現を示す場合がある。また、集団レベルでは、すべての個体が同じ両性の性表現を示す同型の場合（雌雄同株）と異なる性表現をもつ個体が混在する異型の場合がある。後者は、性型のちがいが遺伝的に決まっている場合（雌雄異株）と環境条件や個体の大きさ年齢など非遺伝的な要因によって決定されている場合（性転換を行う場合）に分類される。なお、ここでは、両性花のみをつける雌雄同株の個体を考えよう。

両性花では同一の個体の花の花粉によって卵が受精し、種子ができることがあるが、これを自家受粉という。一方、他個体の花の花粉によって受精することは他家受粉とよばれる。

Brown (1990) は、植物の交配システムを次の五つに分類している：

1. 大部分が自家受粉（自殖）を行う種（他殖率、 $t < 0.10$ ）

2. 大部分が他家受粉（他殖）を行う種（自殖率, $s < 0.05$ ）

3. 自家受粉と他家受粉の両方を行う種

4. 単為生殖を行う種

5. 配偶子内自殖を行う種

自家受粉や他家受粉が有性生殖で、減数分裂した卵と精核が受精することによって種子ができるのに対して、単為生殖は無性生殖で、卵は減数分裂せず、精核と受精することなく種子となる。単為生殖を行う種としては、セイヨウタンポポやドクダミ、ベニシダなどが知られている。自家受粉を行う場合 AB という遺伝型をもった親からは AA , AB , BB 三種類の遺伝型が $1/4$, $1/2$, $1/4$ の確率で生じるが、一方、単為生殖の場合は遺伝的組換えがなく AB という遺伝型がそのまま保持されることになる。また、配偶子内自殖は配偶子が倍加することによって接合体をつくることである（すなわち、常にホモ接合体となる）。もちろん、これらの分類は厳密なものではない。

有性生殖と無性生殖、自殖と他殖といった交配システムの多様性はなぜ進化したのであるか。このような問題は進化生物学における基本的な問題で、ゲーム理論の枠組みで議論されている (Iwasa, 1990a, b)。“進化的に安定な戦略 (ESS)” という概念を導入することにより、ある程度の理解が可能となっている。自家受粉と他家受粉が混在している場合、自家受粉による種子は卵だけでなく花粉からも遺伝子が伝えられているが、一方、他家受粉の場合は卵からの遺伝子が伝えられているだけである。したがって、自家受粉できる個体の方でできない場合にくらべて遺伝子を残す確率は最大で二倍である。このため、自家受粉できる個体の割合は世代を重ねるにつれて増加し、他家受粉をすることにメリットがなければ、自家受粉できる個体だけになってしまふ。ところが一般に自家受粉によって生じた子孫は他家受粉による子孫にくらべて生存力がおとることが知られている。この効果は近交弱勢とよばれる。自殖が進化するか他殖が進化するかはこれらの効果の大小によって決まっていると考えられる。また、無性生殖と有性生殖に関しては、長期的には有性生殖が有利であるが、短期的には無性生殖が有利であるといった興味深い事実が明らかになっている。

6.1.2 ヘテロ接合度パラドクスおよびその他の問題

1960年代から、電気泳動法による植物における酵素タンパクの遺伝的変異が報告されているが、これらの研究により、植物集団の遺伝的構造についていくつかの一般的な知見が得られてきた（Brown, 1979; Hamrick and Godt, 1990）。例えば、他家受粉を行う種は自家受粉を行う種と比べて高いレベルの遺伝的変異をもっているが、自家受粉を行う種は他家受粉を行う種と比べて非常に大きな集団間の分散を示すということがわかった（Hamrick and Godt, 1990）。また、他家受粉を行う種はランダム交配の場合と比べてヘテロ接合度が低く、自家受粉を行う種は高いという結果が得られた（“ヘテロ接合度パラドクス”，Brown, 1979）。

このようなパターンがどのようにして植物集団で進化したのかを理解するためには、植物集団の性質を考慮した集団遺伝学的なモデルを組み立て、その性質を調べる必要がある。植物集団における遺伝子レベルの進化モデルを組み立てる際、いくつかのことながらを考慮しなければならない。まず、植物集団は様々な交配システムをもつので（Brown, 1990），そのことを考慮しなければならない。さらに、分集団という局所的構造は植物に共通した性質であるから（Barrett and Husband, 1990），地理的構造を考慮し、移住および局所的な絶滅の遺伝的変異への効果を調べる必要がある。最後に、遺伝子レベルの進化に関しては、無限アレルモデル（Kimura and Crow, 1964）を考慮することが妥当であろうと考えられる（Fuerst and Ferrell, 1980）。

Maruyama and Kimura (1980) は移住と絶滅の効果を取り入れたモデルを研究したが、自殖の効果は取り入れなかった。そこで、6.2節では、自殖の効果を取り入れた有限集団の島模型を調べる。淘汰に関しては中立性を仮定し（Kimura, 1983），無限アレルモデルを用いる。共通の祖先遺伝子をもつ確率（probabilities of identity by descent）は直接観測量と関係しているので、この量を計算する。これから、遺伝子頻度に関する二次モーメントが計算できる。このモデルから得られる結果を用いれば、集団内および集団間の変異、ヘテロ接合度パラドクスの問題等を考察することができる。さらに、6.3節および6.4節では自殖率が時間的に運動する場合を論じる。

6.1.3 搖動淘汰モデルとの関係

環境がランダムに変化することによる影響は自然淘汰に限らず、突然変異率や集団サイズなどにも影響を及ぼすであろうと考えられるが、特に自然淘汰への効果を考慮にいれたモデルを搖動淘汰モデルという。分子レベルで見いだされる多型現象の維持機構として、中立な突然変異の偶然的浮動が重要であるとする中立説に対して、搖動淘汰説は分子レベルでも環境搖動による適応的差異の効果が重要であると主張する (Matsuda and Ishii, 1980)。

遺伝子間の適応的差異は淘汰有利度で表されるが、これが確率変数で空間的な分布をもつ場合と確率過程で時間的に搖動する場合を考えられる。Matsuda and Ishii (1980) は時間的な搖動が二状態遷移模型で表されるという特別な場合に平衡分布がどのように表されるかを調べている。一方、Ohta and Tachida (1990) は弱有害遺伝子の効果として、空間的に淘汰有利度が異なっている場合の効果を論じている。空間的にも時間的にも淘汰有利度はほぼ一定の値で中立と見なせるとする中立説に対して、時間的あるいは空間的な変動を伴うとする搖動淘汰説あるいは弱有害説の方が理解し易いように思える。

以下で提案する自殖率の搖動モデルは現象としては搖動淘汰のモデルと異なっているが、数学的には類似している。搖動淘汰のモデルでは淘汰有利度が時間的あるいは空間的に変動すると考えるのに対し、ここでは、自殖率が変動するモデルを考慮する。また、搖動淘汰のモデルでは遺伝子頻度の分布が取り扱われているが、ここでは、集団内あるいは集団間の遺伝的変異のパターンを取り扱う。

6.2 自殖率一定の場合

まず、自殖率が一定の場合について集団遺伝学的なモデルをたて、自殖率および地理的構造と遺伝的変異の関係を明らかにしよう。なお、この節での議論は Maruyama and Tachida* に基づいている。

6.2.1 モデルと解析

Kimura and Crow (1964) の無限アレルモデルを仮定し、突然変異率は u であるとする。世代は重なりがなく、時間は離散的であるとする（一年生の植物のモデル）。 n 個のコロニーからなる雌雄同株の植物集団を考え、各コロニーは有効サイズ N をもつとする。遺伝子頻度の二次モーメントを記述するためには三つの尺度（共通の祖先遺伝子をもつ確率）が必要

である。その三つは、集団からランダムに取り出した個体の二つの遺伝子が共通の祖先遺伝子をもつ確率として定義される近交係数 f 、一つのコロニーの異なった個体から取り出した二つの遺伝子が共通の祖先遺伝子をもつ確率 θ_1 および異なったコロニーから取り出した二つの遺伝子が共通の祖先遺伝子をもつ確率である。ランダム交配を行っていれば、確率 f と確率 θ_1 は同じであるが、植物が部分的な自殖を行っていると、これらは違ってくる。

現在の世代における f 、 θ_1 および θ_2 を与えたとき、次世代における確率は以下のようにして求められる。まず、絶滅による影響を考える。絶滅は開花以前に起こると仮定する。次に配偶子状態の時の影響—突然変異、自殖および花粉の散布—をいっしょに考える。最後に種子の散布の効果が考慮されている。

絶滅 e は世代当りの絶滅率であるとする。絶滅が起これば、絶滅したコロニーは絶滅したコロニーを含めた n 個のコロニーからランダムに選ばれた一つのコロニーによって置き換えられると仮定する。この絶滅モデルは Maruyama and Kimura (1980) のモデルと同じであり、Slatkin (1977) のモデルと類似している。絶滅の後、 f と θ_1 はそれぞれ絶滅前と同じであるが、 θ_2 は変化する。絶滅後の確率 θ_2 を θ_2^* と書こう。二つの遺伝子は異なる二つのコロニーから取り出されるのであるが、その二つのコロニーがどちらも絶滅を経験していない確率は $(1 - e)^2$ 、少なくとも一方が絶滅している確率は $e(2 - e)$ であるから、

$$\theta_2^* = (1 - e)^2 \theta_2 + e(2 - e) \left[\frac{1}{n} \theta_1 + \left(1 - \frac{1}{n}\right) \theta_2 \right] \quad (6.1)$$

である。この結果はベクトル形式にまとめて書くことができ、

$$\boldsymbol{\theta}^* = E\boldsymbol{\theta} \quad (6.2)$$

である。ここで、

$$\boldsymbol{\theta}^* = (f, \theta_1, \theta_2^*)^t, \quad \boldsymbol{\theta} = (f, \theta_1, \theta_2)^t, \quad (6.3)$$

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & \frac{e(2-e)}{n} & (1-e)^2 + \left(1 - \frac{1}{n}\right) e(2-e) \end{pmatrix} \quad (6.4)$$

である。

突然変異、自殖および花粉の散布 次に、突然変異、自殖および花粉の散布の効果を考えよう。各々の接合体は前世代から雌と雄の配偶子を選び出すことによって形成される。雌の

配偶子は同じコロニーからランダムに取り出されると仮定される。一方、雄の配偶子（花粉）が雌の配偶子と同じ親の配偶子から取り出される確率は s である。そうでなければ、雄の配偶子は $(1-s)(1-m_p)$ の確率で雌の配偶子と同じコロニーからランダムに取り出されたもので、 $(1-s)m_p$ の確率で飛散してきたもの（同じコロニーから飛散してきた場合を含む）である。これらの効果を考慮した後の確率 f, θ_1 および θ_2^* をそれぞれ f', θ_1^{**} および θ_2^{**} と表すことにする。

まず、 f' を考える。接合体が自殖によって形成されたとすれば、その二つの遺伝子は確率 $(1+f)/2$ で共通の祖先遺伝子をもつ。そうでなければ、雄の配偶子は $(1-m_p)$ の確率でそのコロニーに由来し、 m_p の確率で飛散してきたものである。雄の配偶子が同じコロニーに由来するとき、確率 $1/N$ で雌の配偶子と同じ個体に由来し、確率 $(1-1/N)$ で異なった個体に由来する。それゆえ、もし、接合体が自殖によって形成されたのでなければ、二つの遺伝子は確率 ρ_2 で共通の祖先遺伝子をもつことになる：

$$\rho_2 = (1-m_p)\rho_1 + m_p \left[\frac{1}{n}\rho_1 + \left(1 - \frac{1}{n}\right) \theta_2^* \right]$$

ここで、

$$\rho_1 = \frac{1}{N} \frac{1+f}{2} + \left(1 - \frac{1}{N}\right) \theta_1$$

であるから、

$$f' = \left[s \frac{1+f}{2} + (1-s)\rho_2 \right] (1-u)^2 \quad (6.5)$$

が得られる。ここで、 $(1-u)^2$ は二つの遺伝子がどちらも突然変異でない確率である。

次に θ_1^{**} を考えよう。二つの遺伝子は同じコロニーの異なった個体から取り出される。今の場合、花粉だけが飛散するので、三つの場合を区別しなければならない。

1) 取り出された二つの遺伝子が両方とも雄の配偶子に由来する確率は $1/4$ である。この場合、両方がそれぞれのコロニーに由来する確率（飛散してきたのでなく）は $(1-m_p)^2$ 、少なくとも一方が飛散してきた確率は $m_p(2-m_p)$ である。だから、二つの遺伝子が共通の祖先遺伝子をもつ確率は

$$\frac{1}{4} \left\{ (1-m_p)^2 \rho_1 + m_p(2-m_p) \left[\frac{1}{n}\rho_1 + \left(1 - \frac{1}{n}\right) \theta_2^* \right] \right\} \quad (6.6)$$

である。

2) 一つの遺伝子が雄の配偶子に由来し、もう一つが雌の配偶子である確率は $1/2$ である。この場合、共通の祖先遺伝子をもつ確率は ρ_2 である。だから、二つの遺伝子が共通の祖先遺伝子をもつ確率は $(1/2)\rho_2$ である。

3) 両方が雌の配偶子に由来する確率は $1/4$ である。この場合はどちらも飛散しない。だから、共通の祖先遺伝子をもつ確率は $(1/4)\rho_1$ である。

1), 2) および 3) をまとめて、突然変異を考慮すると、

$$\theta_1^{**} = \left\{ \left(1 - \frac{m_p}{2}\right)^2 \rho_1 + \frac{m_p}{2} \left(2 - \frac{m_p}{2}\right) \left[\frac{1}{n} \rho_1 + \left(1 - \frac{1}{n}\right) \theta_2^* \right] \right\} (1-u)^2 \quad (6.7)$$

となる。

同様にして、

$$\theta_2^{**} = \left\{ \left(1 - \frac{m_p}{2}\right)^2 \theta_2^* + \frac{m_p}{2} \left(2 - \frac{m_p}{2}\right) \left[\frac{1}{n} \rho_1 + \left(1 - \frac{1}{n}\right) \theta_2^* \right] \right\} (1-u)^2 \quad (6.8)$$

である。

これらの効果は次のように記述できる：

$$\theta^{**} = (1-u)^2 M_p (\theta^* + x), \quad (6.9)$$

ここで

$$\theta^{**} = (f', \theta_1^{**}, \theta_2^{**})^t, \quad x = (1, 0, 0)^t, \quad (6.10)$$

$$M_p = \begin{pmatrix} \frac{s}{2} + (1-s) \frac{a}{2N} & (1-s) \left(1 - \frac{1}{N}\right) a & (1-s) \left(1 - \frac{1}{n}\right) m_p \\ \frac{b}{2N} & \left(1 - \frac{1}{N}\right) b & \left(1 - \frac{1}{n}\right) c \\ \frac{1}{2N} \frac{c}{n} & \left(1 - \frac{1}{N}\right) \frac{c}{n} & 1 - \frac{c}{n} \end{pmatrix} \quad (6.11)$$

である。なお

$$a = 1 - m_p + \frac{m_p}{n},$$

$$b = \left(1 - \frac{m_p}{2}\right)^2 + \frac{m_p}{2} \left(2 - \frac{m_p}{2}\right) \frac{1}{n},$$

および

$$c = \frac{m_p}{2} \left(2 - \frac{m_p}{2}\right)$$

とおいた。

種子の散布 最後に種子の散布の効果を考える。 m_s は世代当たりの種子の散布率であるとする。種子の散布が起こっても、 f' は変わらないので、同じ f' を用いる。種子の散布の後の確率 θ_1^{**} および θ_2^{**} をそれぞれ θ'_1 および θ'_2 とする。同じコロニーの異なった個体から二つの遺伝子を取り出す場合、二つの個体は $(1 - m_s)^2$ の確率で同じコロニーに由来し、 $m_s(2 - m_s)$ の確率で少なくとも一方が飛散してきたものである（飛散して元のコロニーに戻るという可能性も含める）。後者の場合、二つの遺伝子が由来するコロニーが同じであるか、あるいは異なっているかという確率はそれぞれ $1/n$ および $(1 - 1/n)$ である。したがって、

$$\theta'_1 = (1 - m_s)^2 \theta_1^{**} + m_s(2 - m_s) \left[\frac{1}{n} \theta_1^{**} + \left(1 - \frac{1}{n}\right) \theta_2^{**} \right] \quad (6.12)$$

である。同様にして、

$$\theta'_2 = (1 - m_s)^2 \theta_2^{**} + m_s(2 - m_s) \left[\frac{1}{n} \theta_2^{**} + \left(1 - \frac{1}{n}\right) \theta_1^{**} \right] \quad (6.13)$$

が得られる。

この結果をベクトル形式で表すと、

$$\boldsymbol{\theta}' = M_s \boldsymbol{\theta}^{**} \quad (6.14)$$

である。ここで、

$$\boldsymbol{\theta}' = (f', \theta'_1, \theta'_2)^t, \quad (6.15)$$

$$M_s = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & (1 - m_s)^2 + \frac{m_s(2 - m_s)}{n} & \left(1 - \frac{1}{n}\right) m_s(2 - m_s) \\ 0 & \frac{m_s(2 - m_s)}{n} & (1 - m_s)^2 + \left(1 - \frac{1}{n}\right) m_s(2 - m_s) \end{pmatrix} \quad (6.16)$$

である。

これらの結果をまとめると、次世代における共通の祖先遺伝子をもつ確率は

$$\boldsymbol{\theta}' = (1 - u)^2 M_s M_p (E\boldsymbol{\theta} + \mathbf{x}) \quad (6.17)$$

のように記述される。

平衡では、 $\boldsymbol{\theta}' = \boldsymbol{\theta}$ とおけば、

$$\boldsymbol{\theta} = [1 - (1 - u)^2 M_s M_p E]^{-1} (1 - u)^2 M_s M_p \mathbf{x} \quad (6.18)$$

が得られる。分母分子それぞれについて、 e, u, m_p および m_s に関して二次以上の項を無視すると以下の式が得られる：

$$f = \frac{1 + 4Nu \frac{s}{2} r}{1 + 4Nu \left(1 - \frac{s}{2}\right) r}, \quad (6.19)$$

$$\theta_1 = \frac{1}{1 + 4Nu \left(1 - \frac{s}{2}\right) r}, \quad (6.20)$$

$$\theta_2 = \frac{e + m}{e + m + nu} \theta_1 \quad (6.21)$$

ここで、

$$r = \frac{e + nm + nu}{e + m + nu}, \quad m = \frac{m_p}{2} + m_s$$

とおいた。このように高次の項を無視すると、種子および花粉の散布の効果はまとめて m によって表される。配偶子の半分が花粉として散布されることを反映して、 $m_p/2$ となっている。

図 6.1-3 に、自殖、散布および絶滅が“共通の祖先遺伝子をもつ確率の平衡値”へ及ぼす影響を図示した。率 u, m および e は (6.19)–(6.21) に Nu, Nm あるいは Ne の形で入っているから、従来のパラメータ化にならって、 $4Nu, 4Nm$ および $4Ne$ をパラメータとして使う。

図 6.1 には、自殖率 s に対する共通の祖先遺伝子をもつ確率の振舞いが示されている。 $s = 0$ の時、 f と θ_1 は同じ値であるが、 s が増加するにつれ、両者の差は大きくなっていく。(6.19)–(6.21) より、 f, θ_1 および θ_2 は s とともに増加することが分かる。自殖率はこれらの値に対してコロニーのサイズが変わった時と同じような影響を与える。実際、 $N(1 - s/2)$ を有効コロニーサイズと見なせば、(6.20) と (6.21) は自殖のない場合の結果 (Maruyama and Kimura, 1980) と一致している。なお、この性質は Golding and Strobeck (1980) によって、ランダム交配集団に対して指摘されている。

図 6.2 は散布率の効果を表している。 $4Nm = 0$ ($4Nu = 0.01$) に対して、 f および θ_1 は大きいが、 θ_2 は絶滅の影響がなければ小さい。 $4Nm$ が増加すると、 f と θ_1 は減少するが、 θ_2 は増加する。 θ_1 と θ_2 は最終的には同じ値に近づく。

散布効果はコロニー間の差を小さくし、他のコロニーから異なった遺伝子を導入することによってコロニー内あるいは個体内の変異を増加させる。

最後に、図 6.3 には、絶滅の効果が示されている。 $4Ne$ の増加とともに、三つの確率は大きくなっている。このモデルで、絶滅は異なったコロニーの遺伝子を混ぜ、全集団サイズを小さくするという二つの効果をもたらす。 $4Ne$ の増加に伴う f の増加は後者の効果によりコロニー内の遺伝的変異が減少したことによる。

6.2.2 考察

前の節では、三つの確率 f , θ_1 および θ_2 の平衡値を計算した。これらの確率から、遺伝子頻度の二次モーメントを計算することができる。ここでは、植物における変異のパターンの説明するために、前節の結果の意味を考えよう。

Hamrick and Godt (1990) は植物の遺伝子レベルのデータを集め、交配システムといった遺伝様式のパターンと遺伝的形質の間の関係についていくつか的一般化を行った。交配システムに対して、他殖を行う種は、自殖を行う種に比べて高いレベルの遺伝的変異をコロニー内にもつ。自殖を行う植物に対して、遺伝的変異のインデクスは 0.074, 風媒花をもつ植物は 0.148 である。一方では、自殖を行う植物は他殖を行う植物より高いコロニー間の遺伝的変異をもつ。自殖を行う植物および風媒花をもつ植物に対する G_{ST} の値 (Nei, 1973) はそれぞれ 0.51 と 0.099 である。他のパラメータを一定に保ちながら自殖率が変わる時、これらの量がどうなるか我々のモデルを用いて調べよう。この考察には、Nei (1973) の尺度よりも Cockerham (1969) の遺伝子頻度分析を使う (Weir and Cockerham, 1984), というのは、後者の方が共通の祖先遺伝子をもつ確率に直接関係していて、サンプルサイズに依存しないからである。両者の間の違いはサンプルサイズ（個体とコロニーの数）が大きくなると小さくなる。

コロニー内の遺伝子頻度の分散のすべてのアレルについての和 σ_w^2 とコロニー間の分散 σ_b^2 を考えよう。無限アレルモデルにおいて、共通の祖先遺伝子をもつ確率を用いれば、

$$\sigma_w^2 = 1 - \theta_1 \quad (6.22)$$

$$\sigma_b^2 = \theta_1 - \theta_2 \quad (6.23)$$

のように書ける。 σ_w^2 はコロニー内の遺伝的変異に対応し、(6.20) を用いれば、

$$\sigma_w^2 = 1 - \frac{1}{1 + 4Nu \left(1 - \frac{s}{2}\right)r} \quad (6.24)$$

である。これは自殖率 s の単調減少関数である。だから、我々のモデルは他殖を行う種が自殖を行う種よりコロニー内に高い遺伝的変異をもつという観測事実を定量的に説明している。自殖によってどのくらいこの量が減少するかは他のパラメータによっている。

G_{ST} はコロニー間の分散の全体の分散に対する比の尺度であるから、次の分散成分の関数で表される：

$$\frac{\sigma_b^2}{\sigma_w^2 + \sigma_b^2} = \frac{\theta_1 - \theta_2}{1 - \theta_2} \quad (6.25)$$

(6.20) と (6.21) を用いれば、

$$\frac{nu}{4Nu \left(1 - \frac{s}{2}\right) (e + nm + nu) + nu} \quad (6.26)$$

となる。これは、自殖率 s の単調増加関数である。自殖率が 0 から 1 へと増加するとき、この量は高々二倍である。自殖を行う植物において、 G_{ST} は他殖を行う種 (Hammrick and Godt, 1990) の五倍になるから、コロニーサイズあるいは絶滅率が二つの種で異なっているというように他の要因を考慮しなければならない。

次にヘテロ接合度パラドクスについて議論しよう。遺伝子レベルのデータを解析することにより、Brown (1979) は次のこと気に気づいた。

1. 他殖を行う種では、ランダム交配に比べてヘテロ接合度が一般的に小さい。
2. 自殖を行う種では、中立の場合の Wright の近親交配則の結果と比べて、ヘテロ接合度が一般的に大きい。

彼の記述で、Wright の固定確率 F_{IS} は標本平均した量として使われているが、 F_{IS} は近似的には次の式で定義される f_{IS} と等しい：

$$f_{IS} = \frac{f - \theta_1}{1 - \theta_1} \quad (6.27)$$

(Cockerham, 1969)。 (6.19)–(6.21) を用いれば、

$$f_{IS} = \frac{s}{2 - s} \quad (6.28)$$

となる。地理的な構造によらず、これは一定で s のみに依る。この関係を用いると、与えられた s に対する期待値が得られるが、ヘテロ接合度パラドクスは観測値が期待値からずれて

いるということを示している。そこで、地理的な構造があるにも拘らず、そのことが考慮されていない場合を考えよう。この場合、全集団のインデックス (θ_2) と局所的な集団のインデックス (θ_1) の間の混同があるかもしれない。(6.27)において θ_1 を θ_2 で置き換えると、インデックスは

$$\frac{f - \theta_2}{1 - \theta_2} = \frac{f_{IS} + \alpha}{1 + \alpha} \quad (6.29)$$

となる。ここで $\alpha = (\theta_1 - \theta_2)/(1 - \theta_1)$ とおいた。(6.28) と (6.29) の間の差は

$$\frac{f - \theta_2}{1 - \theta_2} - f_{IS} = \frac{\alpha}{1 + \alpha}(1 - f_{IS}) \geq 0 \quad (6.30)$$

であるから、他殖を行う種におけるヘテロ接合度が予測される値より小さいのは（第一のパラドクス）、 θ_1 と θ_2 の混同によるとして定量的に説明することができる。この説明は Brown (1979) が、Kirby (1975) と Hedrick and Cockerham (1984) の公式を用いて、突然変異のない場合にしたものと類似している。

一方、第二のパラドクスはヘテロ接合度の過多を示しているのであるが、(6.30) はむしろ逆の傾向を示す。全集団と局所的な集団を混同しているとすると、我々のモデルはより大きな過多を示すことになる。だから、自殖を行う種におけるヘテロ接合度の過多を説明するためには、ヘテロ接合の優位性など他の要因を考慮しなければならない (Brown, 1979)。実際、全集団と局所的な集団の混同は起こっていると思われる所以、このことも含めてヘテロ接合度の過多を説明しなければならないことを我々の結果は示している。

遺伝子レベルのデータに対して、無限アレルモデルは一般に妥当であろうと考えられる。しかしながら、最近の分子生物学により、DNA 塩基配列レベルでの変異まで分かるようになった (Clegg, 1990)。このレベルでは、無限アレルモデルよりもむしろ Kimura (1969) と Watterson (1975) の無限サイトモデルの方が妥当であろう。この論文で与えられている式から、交差のない場合に無限サイトモデルの分離しているサイトの数 k の確率母関数 (Watterson, 1975) を計算することができる。 $\theta(u)$ は共通の先祖遺伝子をもつ確率の一般的な式を表すとしよう。 k に対する母関数 $\Theta(z)$ は Griffiths (1981) によって最初に導入され、その後 Tachida (1985) によって若干異なった方法で導かれたのであるが、以下のようである：

$$\Theta(z) = \sum_{k=0}^{\infty} g(k)z^k = \theta(u(1-z)) \quad (6.31)$$

ここで, $q(k)$ は, $\theta(u)$ を計算するときと同様に, 集団からランダムに取り出した二つの遺伝子の分離しているサイトの数が k である確率を表している. $q(k)$ は (6.31) を z について k 回微分し, $z = 0$ とおくことによって得られる.

k のモーメントも (6.31) から計算できる. 例えば, k の平均値は

$$E[k] = \sum_{k=0}^{\infty} kq(k) = \Theta'(0) \quad (6.32)$$

によって与えられ, 次のようにして計算される. $F(z), \Theta_1(z)$ および $\Theta_2(z)$ はそれぞれ, f, θ_1 および θ_2 に対応する母関数であるとする. (6.19)–(6.21) および (6.28) から得られる $f = f_{IS} + (1 - f_{IS})\theta_1$ という関係に注意すると,

$$F'(0) = (1 - f_{IS})\Theta'_1(0) \quad (6.33)$$

である. ここで, (6.20) より, $\Theta'_1(0)$ は次の式のように計算できる:

$$\Theta'_1(0) = \theta_1^2 4N \left(1 - \frac{s}{2}\right) ur \left\{1 - \frac{n(n-1)mu}{(e+m+nu)(e+nm+nu)}\right\} \quad (6.34)$$

(6.21) と (6.34) から, $\Theta'_2(0)$ も得られる:

$$\Theta'_2(0) = \frac{1}{e+m+nu} [(e+m)\Theta'_1(0) + nu\theta_2] \quad (6.35)$$

分離しているサイト数の平均値は, 遺伝子の組がどのようなグループから取り出されたかに応じて, (6.33), (6.34) および (6.35) のどれかによって表される.

Ritland (1990) は近交弱勢について議論し, 共通の祖先遺伝子をもつ確率を利用することによって, 自殖による子孫の相対的な生存力を評価した. 彼のモデルでは, 地理的な構造は考慮されていなかった. 生存力に関する近交弱勢の効果は簡単な置き換えによって我々のモデルに取り入れることができる. v_s は自殖による子孫の生存力, v_t は他殖による子孫の生存力であるとする. $\bar{v} = sv_s + (1-s)v_t$ とすると, ランダムに取り出した個体が自殖によって生成された確率は sv_s/\bar{v} , 他殖によって生成された確率は $(1-s)v_t/\bar{v} = 1 - sv_s/\bar{v}$ である. したがって, (6.19)–(6.21)において s を sv_s/\bar{v} で置き換えることによって, 近交弱勢の存在する場合の f, θ_1 および θ_2 を得ることができる.

6.3 自殖率の時間的な揺動と遺伝的変異（地理的構造なし）

これまで, 自殖率が一定の場合について述べてきたが, 実際の変異のパターンを十分に説明することはできなかった. そこで, 自殖率が時間的に揺動する効果について議論する.

まず、地理的構造がなく、集団が全体として一つの交配集団として振舞う場合 ($n = 1$) を考えよう。突然変異に関してはこれまでと同様の仮定をおき、世代あたりの突然変異率を u 、集団の有効サイズを N とする。簡単のため、絶滅による効果は考慮しない。第 t 世代における自殖率を $s(t)$ と書き、確率過程であると仮定する。世代 t は離散的であるのに対し、確率過程は連続時間のモデルであるが、整数の t のみが意味をもつと考える。

今の場合、必要な尺度は f と θ_1 の二つである。第 t 世代におけるこれらの値を $f(t)$ および $\theta_1(t)$ と書くと、これらの時間発展は次のように表される：

$$f(t+1) = \left\{ s(t) \frac{1+f(t)}{2} + [1-s(t)] \times \left[\frac{1}{N} \frac{1+f(t)}{2} + \left(1 - \frac{1}{N}\right) \theta_1(t) \right] \right\} (1-u)^2 \quad (6.36)$$

$$\theta_1(t+1) = \left[\frac{1}{N} \frac{1+f(t)}{2} + \left(1 - \frac{1}{N}\right) \theta_1(t) \right] (1-u)^2 \quad (6.37)$$

u および $1/N$ について二次以上の項は無視すると

$$f_1(t+1) = \left[\frac{1}{2N} + \frac{s(t)}{2} \left(1 - \frac{1}{N} - 2u \right) \right] f_1(t) + [1-s(t)] \left(1 - \frac{1}{N} - 2u \right) \theta_1(t) + 1 \quad (6.38)$$

$$\theta_1(t+1) = \frac{1}{2N} f_1(t) + \left(1 - \frac{1}{N} - 2u \right) \theta_1(t) \quad (6.39)$$

となる。ここで、

$$f_1(t) = 1 + f(t) \quad (6.40)$$

とおいた。

離散時間 t に対する差分方程式を微分方程式で近似すると

$$\begin{aligned} \dot{f}_1(t) &= f_1(t+1) - f_1(t) \\ &= \left[-1 + \frac{1}{2N} + \frac{s(t)}{2} \left(1 - \frac{1}{N} - 2u \right) \right] f_1(t) + [1-s(t)] \left(1 - \frac{1}{N} - 2u \right) \theta_1(t) + 1 \end{aligned} \quad (6.41)$$

$$\dot{\theta}_1(t) = \theta_1(t+1) - \theta_1(t) = \frac{1}{2N} f_1(t) - \left(\frac{1}{N} + 2u \right) \theta_1(t) \quad (6.42)$$

となる。なお、この近似の妥当性に関しては付録 6.A で議論する。

$$\phi(t) = (f_1(t), \theta_1(t))^t = (\phi_x(t), \phi_y(t))^t \quad (6.43)$$

とおくと、(6.41), (6.42) はベクトル形式にまとめて書くことができる：

$$\dot{\phi}(t) = A(t)\phi(t) + x \quad (6.44)$$

$$A(t) = X + s(t)Y, \quad x = (1, 0)^t \quad (6.45)$$

$$X = \begin{pmatrix} -1 + \frac{1}{2N} & 1 - \frac{1}{N} - 2u \\ \frac{1}{2N} & -\left(\frac{1}{N} + 2u\right) \end{pmatrix}, \quad Y = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\left(1 - \frac{1}{N} - 2u\right) & -\left(1 - \frac{1}{N} - 2u\right) \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.46)$$

今、自殖率 $s(t)$ は次のように与えられるとしよう：

$$s(t) = s_0 + \sum_{j=1}^K s_j(t) \quad (6.47)$$

ここで、 $s_j(t)$ は 4 章で導入した二状態遷移模型で、二つの状態 $-\Delta_0, \Delta_0$ をとるとする。なお、自殖率の平均および相関は、

$$\langle s(t) \rangle = s_0 - K\Delta_0\sigma \quad (6.48)$$

$$\langle (s(t) - \langle s(t) \rangle)(s(0) - \langle s(0) \rangle) \rangle = \Delta_0^2(1 - \sigma^2)e^{-\gamma t} \quad (6.49)$$

のように与えられる。

$0 \leq s(t) \leq 1$ より、 $0 \leq s_0 \leq 1$, $\Delta_0 \leq \min\left(\frac{s_0}{K}, \frac{1-s_0}{K}\right)$ である。5 章と同様の定式化に従うと、(6.44) に対する確率的な Liouville 方程式は

$$\frac{\partial}{\partial t} W(\phi, \lambda, t) = - \sum_{\alpha=x,y} \frac{\partial}{\partial \phi_\alpha} [\dot{\phi}_\alpha W(\phi, \lambda, t)] + \sum_{\lambda'} \Gamma_{\lambda, \lambda'} W(\phi, \lambda', t) \quad (6.50)$$

である。確率過程 $s(t)$ についての平均を $\langle \dots \rangle$ と表すことにすれば、 $\langle \phi(t) \rangle$ は

$$\langle \phi_\alpha(t) \rangle = \int d\phi \sum_\lambda \phi_\alpha W(\phi, \lambda, t) \quad (6.51)$$

$$= \sum_\lambda \sum_{\lambda'} w_\alpha(\lambda, t | \lambda') P_0(\lambda'), \quad \alpha = x, y \quad (6.52)$$

のように与えられる。ここで、

$$w_\alpha(\lambda, t | \lambda') = \int d\phi \int d\phi' \sum_\lambda \sum_{\lambda'} \phi_\alpha W(\phi, \lambda, t | \phi', \lambda') W_0(\phi') \quad (6.53)$$

$$\equiv (0|\Phi_\alpha(t)|0), \quad \alpha = x, y \quad (6.54)$$

とおいた。なお、 $|0\rangle$ は $\Gamma = [\Gamma_{\lambda,\lambda'}]$ のゼロ固有状態で、 $(0|\Gamma=0, \Gamma|0)=0$ を満たす。(6.50) より、 $\Phi(t) \equiv (\Phi_x, \Phi_y)^t$ は

$$\dot{\Phi}(t) = [X + \hat{s}Y + \Gamma]\Phi(t) + x \quad (6.55)$$

に従う。 Γ の固有値 $-m\gamma$ に対応する固有状態 $|m\rangle$ 、上昇および下降演算子をそれぞれ U, D とすれば、

$$\hat{s} = s_0 + \hat{s}' \quad (6.56)$$

$$\hat{s}' = \frac{\Delta_0}{\sqrt{1+\sigma^2}}[(1-\sigma^2)U + (1+\sigma^2)D] - \frac{2\Delta_0\sigma}{\gamma}\Gamma - K\Delta_0\sigma \quad (6.57)$$

である。これより、

$$\Phi_\alpha(t) = \sum_{m=0}^K \sum_{m'=0}^K |m\rangle c_{m,m'}^\alpha(t) (m'|, \quad \alpha = x, y \quad (6.58)$$

のように展開すると $|m\rangle$ の規格直交性により、

$$\begin{aligned} \dot{c}_{m,m'}(t) &= [X + (s_0 - K\Delta_0\sigma)Y - m(\gamma\mathbf{1} - 2\Delta_0\sigma Y)]c_{m,m'}(t) \\ &\quad + \frac{\Delta_0}{\sqrt{1+\sigma^2}}Y[(1-\sigma^2)\sqrt{(m+1)(K-m)}c_{m+1,m'}(t) \\ &\quad \quad + (1+\sigma^2)\sqrt{m(K-m+1)}c_{m-1,m'}(t)] + x\delta_{m,m'} \end{aligned} \quad (6.59)$$

である。ここで、

$$c_{m,m'}(t) = (c_{m,m'}^x(t), c_{m,m'}^y(t))^t$$

とおいた。

平衡解を求めるために $\dot{c}_{m,m'}(t) = 0$ とおけば、 $m = m' = 0$ の時

$$c_{0,0} = \frac{1}{\Lambda - \sqrt{K} \frac{\Delta_0}{\sqrt{1+\sigma^2}}(1-\sigma^2)YA_0}x$$

$m \neq 0$ の時

$$A_{m-1} = \frac{\Delta_0\sqrt{1+\sigma^2}\sqrt{m(K-m+1)}}{\Lambda + mG_1 - \frac{\Delta_0}{\sqrt{1+\sigma^2}}(1-\sigma^2)\sqrt{(m+1)(K-m)}YA_m}Y$$

となる。ここで、

$$A_m = c_{m+1,m'}c_{m,m'}^{-1}$$

$$\Lambda = -X - (s_0 - K\Delta_0\sigma)Y$$

$$G_1 = \gamma\mathbf{1} - 2\Delta_0\sigma Y$$

とおいた。これらを逐次代入すると、

$$c_{0,m'} = \frac{1}{\Lambda - Y} \frac{\frac{K\Delta_1^2}{Y}}{\Lambda + G_1 - Y} \frac{\frac{2(K-1)\Delta_1^2}{Y}}{\Lambda + 2G_1 - Y} \dots \frac{Y}{\Lambda + KG_1} Y \quad (6.60)$$

のように連分数の形に求められる。これより、二つの尺度 f および θ_1 の平衡値は

$$\langle f \rangle_{\text{eq.}} = c_{00}^x - 1 \quad (6.61)$$

$$\langle \theta_1 \rangle_{\text{eq.}} = c_{00}^y \quad (6.62)$$

のように与えられる。

自殖率の揺動がこれらの平衡値に及ぼす効果がどの程度か定量的に評価するため、自殖率が 0 か 1 二つの値を取るという特別な場合 ($s_0 = 0.5, K = 1, \Delta_0 = 0.5$) を考え、自殖率が 0 を取るか 1 を取るかという割合 σ を変えた時の振舞いを図 6.4 に示そう。横軸は自殖率の平均値 $\langle s \rangle$ である。実線は $\alpha = 0.2$ 、破線は $\alpha = 1.0$ 、点線は $\alpha = 5.0$ の場合を表している。変調の速い場合 ($\alpha = 0.2$)、自殖率はほぼ平均値を取っているようにみえるので、自殖率の揺動の効果は小さくなる。変調が遅くなるに従って、自殖率の揺動の効果は現れる。 $\langle s \rangle = 0$ または 1 では、自殖率の分散が小さくなるので揺動の効果は小さくなる。一方、 $\langle s \rangle = 0.5$ では揺動の効果が顕著に現れる。また、揺動の効果は $\langle f \rangle_{\text{eq.}}$ および $\langle \theta_1 \rangle_{\text{eq.}}$ を大きくする方向に働くことがわかる。すなわち、ヘテロ接合度は自殖率の揺動によって減少する。

図 6.5 には $\langle s \rangle = 0.5$ の時の α に対する $\langle f \rangle_{\text{eq.}}$ の振舞いを示した。 α を大きくしていくと、これらの値は増加し、ある α で最大となる。その後、減少し、一定の値に近づくことがわかる。

(6.60) を Δ_1^2 について展開してみよう：

$$\begin{aligned} \langle f \rangle_{\text{eq.}} &= \frac{1 + 2Nu(s_0 - K\Delta_0\sigma)}{1 + 4Nu[1 - \frac{1}{2}(s_0 - K\Delta_0\sigma)]} \\ &+ \frac{K\Delta_1^2 4Nu(1 + 2Nu)}{[2 + 2(\gamma - \Delta_0\sigma)][1 + 4Nu[1 - \frac{1}{2}(s_0 - K\Delta_0\sigma)]]^2} \end{aligned} \quad (6.63)$$

$$\begin{aligned} \langle \theta_1 \rangle_{\text{eq.}} &= \frac{1}{1 + 4N u [1 - \frac{1}{2}(s_0 - K \Delta_0 \sigma)]} \\ &+ \frac{K \Delta_1^2 2 N u}{[2 + 2(\gamma - \Delta_0 \sigma)] \{1 + 4N u [1 - \frac{1}{2}(s_0 - K \Delta_0 \sigma)]\}^2} \end{aligned} \quad (6.64)$$

それぞれ、第一項は揺動のない場合の結果、第二項は揺動の効果を表している。第二項は常に正の値をとるので、これらの値は揺動のない場合と比べて大きくなることがわかる。つまり、自殖率の揺動の効果はヘテロ接合度を小さくする方向に働く。従って、自殖率の揺動の効果を考慮に入れても、ヘテロ接合度パラドクスは十分に説明できないことがわかる。平衡値に関しては確率過程の平均値 ($s_0 - K \Delta_0 \sigma$)、分散 ($K \Delta_1^2$) および変調の速さ (γ) がおもに関係している。これらの値が等しければ、 k の値が異なっていても同じ効果が得られることがわかる。

6.4 自殖率の時間的な揺動と遺伝的変異（地理的構造あり）

ここでは、地理的構造を考慮に入れ、自殖率の揺動の効果を議論する。地理的構造としては Wright の島模型を考えよう。コロニーの数を n 、各コロニーの有効サイズを N とする。突然変異はこれまでと同様のモデルを仮定し、絶滅の効果は考えない。このモデルを記述するためには、6.2節で導入した三つの尺度 f, θ_1, θ_2 が必要である。

島模型を考え、移住に関しては 6.2節と同様のモデルを仮定しよう。第 t 世代における尺度 $f(t), \theta_1(t)$ および $\theta_2(t)$ をまとめて

$$\theta(t) = (f(t), \theta_1(t), \theta_2(t))^t \quad (6.65)$$

と書けば、この時間発展は (6.17) より

$$\theta(t+1) = (1-u)^2 M_s M_p(t) (\theta(t) + x) \quad (6.66)$$

のように表される。ここで、 M_s は (6.16) によって与えられ、 $M_p(t)$ は (6.11) において s を $s(t)$ で置き換えたものである。また、 $x = (1, 0, 0)$ である。

$$\phi(t) = \theta(t) + x = (\phi_x(t), \phi_y(t), \phi_z(t))^t \quad (6.67)$$

とおき、差分を微分で置き換えると、

$$\dot{\phi}(t) = \phi(t+1) - \phi(t) = A(t)\phi(t) + x \quad (6.68)$$

と書ける。ここで、

$$A(t) = X + s(t)Y, \quad x = (1, 0, 0)^t \quad (6.69)$$

$$X = \begin{pmatrix} -1 + \frac{1}{2N} & 1 - \frac{1}{N} - 2u - m_p(1 - \frac{1}{n}) & (1 - \frac{1}{n})m_p \\ \frac{1}{2N} & -\left(\frac{1}{N} + 2u + 2m(1 - \frac{1}{n})\right) & (1 - \frac{1}{n})2m \\ 0 & 2m/n & -2u - 2m/n \end{pmatrix} \quad (6.70)$$

$$Y = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\left(1 - \frac{1}{N} - 2u\right) & -\left(1 - \frac{1}{N} - 2u - m_p(1 - \frac{1}{n})\right) & (1 - \frac{1}{n})m_p \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.71)$$

である。なお、 $u, m_p, m_s, 1/N$ について二次以上の項を無視し、 $m = m_p/2 + m_s$ とおいた。

自殖率について、これまでと同様の仮定をおくと、同様にして平衡値を求めることができ
る。(6.60) の X, Y として上で定義したものを用いると、平衡値は

$$\langle f \rangle_{\text{eq.}} = c_{00}^x - 1 \quad (6.72)$$

$$\langle \theta_1 \rangle_{\text{eq.}} = c_{00}^y \quad (6.73)$$

$$\langle \theta_2 \rangle_{\text{eq.}} = c_{00}^z \quad (6.74)$$

のように与えられる。

$K = 1$ の場合の振舞いを図 6.6 に示す。横軸は自殖率の平均値 $\langle s \rangle$ である。実線は $\alpha = 0.2$ 、破線は $\alpha = 1.0$ 、点線は $\alpha = 5.0$ を表している。変調の速い場合 ($\alpha = 0.2$) は自
殖率が一定の値を取る場合に近い値をとるので、揺動の効果は $\langle f \rangle_{\text{eq.}}, \langle \theta_1 \rangle_{\text{eq.}}$ および
 $\langle \theta_2 \rangle_{\text{eq.}}$ を大きくする方向に働くことがわかる。すなわち、ヘテロ接合度は自殖率の揺動
によって減少するという地理的構造のない場合と同様な傾向がみられる。

図 6.7 に $\langle s \rangle = 0.5$ の時の α に対する $\langle f \rangle_{\text{eq.}}$ の振舞いを示した。やはり、ある変調
の速さで最大となっていることがわかる。

6.5 まとめ

この章では、地理的構造がある場合の自殖と遺伝的変異の関係を明らかにするために集団
遺伝学的なモデルを立てた。従来の集団遺伝学におけるモデルでは地理的構造と自殖のどち

らか一方しか考慮されていなかった。両者の効果をモデルに取り入れることによって、定量的な評価をすることができるようになった。

部分的な自殖を行う植物に関しては実験的研究によりいくつかの知見が得られているがそのうちのいくつかはこのモデルによって説明できることがわかった。しかしながら、“ヘテロ接合度パラドクス”は十分説明ができなかった。“ヘテロ接合度パラドクス”というのは自殖を行う植物におけるヘテロ接合度が予測される値より高いというものであるが、地理的構造の効果を考慮に入れると逆の傾向を示すことがわかった。

さらに、この章では自殖率の時間的揺動の効果をモデルに取り入れ、定量的な評価を行った。これまでの研究で“自殖率の時間的揺動の効果は小さいであろう (Brown, 1979)”といった記述はあるが、具体的なモデルによる評価はなされていなかった。我々のモデルによればこの効果がどの程度であるか調べることができる。我々のモデルにより、自殖率の揺動の効果はヘテロ接合度を減少させる方向に働くことがわかった。したがって、自殖率の揺動の効果を考慮に入れても“ヘテロ接合度パラドクス”は十分に説明できない。ヘテロ接合度パラドクスを説明するためには、自然淘汰などその他の効果をモデルに取り入れなければならない。

付録 6.A 離散時間モデルと連続時間モデル

この章では、自殖率の時間的な揺動を考慮したモデルで、離散時間モデルを連続時間モデルで近似するという取り扱いをした。一般に、離散時間モデルと比べて、連続時間モデルの方が取り扱いが容易である。この章で取り扱ったモデルも連続時間モデルで近似したことによって解けた。

ここでは、この近似の妥当性を評価するために離散時間モデルと連続時間モデルの両方が厳密に解ける場合について両者の比較をする。次のような離散時間モデルを考えよう：

$$x(t+1) = a(t)x(t) + b \quad (6.A1)$$

$a(t)$ は対称分布をもつ場合の二状態遷移模型で、

$$\langle a(t) \rangle = 0 \quad (6.A2)$$

$$\langle a(t)a(0) \rangle = \Delta^2 e^{-\gamma t} \quad (6.A3)$$

とする。 $(6.A1)$ より、

$$\begin{aligned} x(t) &= a(t-1)x(t-1) + b \\ &= a(t-1)\{a(t-2)x(t-2) + b\} + b \\ &= \dots \\ &= \prod_{i=1}^t a(t-i)x(0) + \{1 + \sum_{j=1}^{t-1} \prod_{i=1}^j a(t-i)\}b \end{aligned}$$

である。二状態遷移模型は

$$\langle a(t)a(t-1)a(t-2)\dots a(0) \rangle = \langle a(t)a(t-1) \rangle \langle a(t-2)\dots a(0) \rangle$$

という性質をもつので、

$$\langle a(2n-1)a(2n-2)\dots a(0) \rangle = \Delta^{2n} e^{-n\gamma} \quad (6.A4)$$

$$\langle a(2n)a(2n-1)\dots a(0) \rangle = 0 \quad (6.A5)$$

である。これより、

$$\begin{aligned} \langle x(2n) \rangle &= \Delta^{2n} e^{-n\gamma} x(0) + \{1 + \sum_{j=1}^{n-1} \Delta^{2j} e^{-j\gamma}\}b \\ &= \Delta^{2n} e^{-n\gamma} x(0) + \frac{1 - \Delta^{2n} e^{-n\gamma}}{1 - \Delta^2 e^{-\gamma}} b \end{aligned} \quad (6.A6)$$

および

$$\begin{aligned} \langle x(2n+1) \rangle &= \left\{ 1 + \sum_{j=1}^n \Delta^{2j} e^{-j\gamma} \right\} b \\ &= \frac{1 - \Delta^{2(n+1)} e^{-(n+1)\gamma}}{1 - \Delta^2 e^{-\gamma}} b \end{aligned} \quad (6.A7)$$

である。したがって、 $|\Delta| < 1$ とすると平衡値は

$$\langle x(\infty) \rangle = \frac{1}{1 - \Delta^2 e^{-\gamma}} b \quad (6.A8)$$

となる。

一方、(6.A1) に対応する連続時間モデルは

$$\dot{x}(t) \equiv x(t+1) - x(t) = (a(t) - 1)x(t) + b \quad (6.A9)$$

となる。これは積分により

$$x(t) = \exp \left[\int_0^t d\tau (a(\tau) - 1) \right] x(0) + \int_0^t dt' \exp \left[\int_{t'}^t d\tau (a(\tau) - 1) \right] b \quad (6.A10)$$

と解ける。ここで、

$$g(t) = \left\langle \exp \left[\int_0^t d\tau (a(\tau) - 1) \right] \right\rangle = e^{-t} \left\langle \exp \left[\int_0^t d\tau a(\tau) \right] \right\rangle \quad (6.A11)$$

とおき、 $g(t)$ のラプラス変換を $g[s]$ と書けば、二状態遷移模型の性質より

$$g[s+1] = \frac{1}{s - \frac{\Delta^2}{s+\gamma}} \quad (6.A12)$$

である。これを逆変換することによって

$$g(t) = A e^{(s_+-1)t} + B e^{(s_--1)t} \quad (6.A13)$$

となる。ここで、

$$\begin{aligned} A &= \frac{s_-}{s_- - s_+} & B &= \frac{s_+}{s_- - s_+} \\ s_\pm &= \frac{-\gamma \pm \sqrt{\gamma^2 + 4\Delta^2}}{2} \end{aligned}$$

である。また、

$$\int_0^t dt' g(t') = \frac{A}{s_+ - 1} \{ e^{(s_+-1)t} - 1 \} + \frac{B}{s_- - 1} \{ e^{(s_--1)t} - 1 \} \equiv h(t) \quad (6.A14)$$

である。

$$\begin{aligned}\lim_{t \rightarrow \infty} g(t) &= 0 \\ \lim_{t \rightarrow \infty} h(t) &= -\frac{A}{s_+ - 1} - \frac{B}{s_- - 1} = \frac{1}{1 - \frac{\Delta^2}{1 + \gamma}}\end{aligned}$$

より、

$$\langle x(\infty) \rangle = \frac{1}{1 - \frac{\Delta^2}{1 + \gamma}} b \quad (6.A15)$$

である。 (6.A8) と (6.A15) を比較すると、 $\gamma \ll 1$ および $\gamma \rightarrow \infty$ で両者は一致する。すなわち、変調の速さが離散的な時間単位に比べて充分遅い場合と逆に充分速い場合には離散時間モデルは連続時間モデルで近似できることが期待される。

7 章 結論

本論文では、物理学における典型的な確率過程であるランダム周波数変調モデルに焦点を当て、モデルの一般化とその応用を行なった。

ランダム周波数変調モデルとは、物理学における磁気共鳴吸収スペクトルの振舞いを説明するために Kubo (1954) と Anderson (1954) が提案したモデルで、ある振動子の振動数がランダムな変調を受けるというモデルである。ブラウン粒子の速度が揺動力によってランダムに変わるのがブラウン運動であるのに対して、スピンの角速度がランダムに変わるのがランダム周波数変調モデルである。本論文では、回転軸の方向の変わる場合もランダム周波数変調モデルに含めて議論した。

ランダム周波数変調モデルの拡張として捉えられる、ランダムなスピンの回転は、スピンの配向に注目し、揺動がガウス白色ノイズという極限をとると球面上のブラウン運動と一致する。一方、Fisher-Wright モデルはある突然変異率の場合に変数変換によって球面上のブラウン運動と一致する。そこで、第 I 部ではランダム周波数変調モデルの特別な場合である球面上のブラウン運動と Fisher-Wright モデルとの類似性について述べた。Fisher-Wright モデルの解は、突然変異率が変異先のみによるという特別な場合については Griffith が直交関数展開によって解いている。一方、球面上のブラウン運動の解は球面調和関数によって展開でき、よく知られている。両者の固有値および定常解を比較し、確かに一致していることを示した。Griffith の展開は複雑で解りにくいが、球面調和関数はよく知られているので、対応づけを行うことによって理解しやすいであろう。

第 II 部ではランダム周波数変調モデルの一般化を行った。従来のモデルでは揺動力として、二状態遷移模型とガウス型模型という両極端なモデルが考慮されているだけであったが、中間的なものも含まれるように一般化を行った。対称的な分布をもつ場合だけでなく、非対称的な分布をもつ場合への一般化も行った。このモデルは Maruyama and Shibata (1988a) で議論したものと同じであるが、ここでは、異なった定式化を試み、固有関数展開に基づいた定式化を行った。物理学における応用問題では、従来のモデルではうまく説明できないような状況があり、そのような場合、確率論的なモデルではなく、電子格子系などの微視的な

モデルを立てて説明しようという研究もなされている。微視的なモデルは取り扱いが難しいが、その点、ここで提案したモデルは取り扱いが容易であり、かつ、微視的なモデルに近い性質を示すので有用である。実際、誘電緩和への応用で、このモデルと実験データが極めてよく一致したという報告(Amou, 1980)がある。さらに多次元の場合への拡張も行った。

第III部では、ランダム周波数変調モデルの集団遺伝学への応用を行った。ここでは、地理的構造をもった植物集団における自殖と遺伝的変異の問題を取り扱った。地理的構造と自殖の両者を考慮に入れた集団遺伝学的なモデルはこれまでに考慮されていなかったので、両者の効果を考慮に入れ、遺伝的変異に与える影響を定量的に評価した。自殖を行う種は他殖を行う種と比べて、分集団ないの分散が小さく、分集団間の分散が大きいということが示された。“ヘテロ接合度パラドクス(Brown, 1979)”—自殖を行う種ではヘテロ接合度が予測される値より大きく、他殖を行う種では小さい—はうまく説明できなかった。そこで、自殖率が時間的に揺動している場合の効果をモデルに取り入れ、遺伝的変異に与える影響を調べた。このモデルは基礎方程式の形が多次元の場合に拡張したランダム周波数変調モデルと同じであるので、第II部で展開した方法論をそのまま適用することができ、平衡値が求められた。その結果、自殖率の時間的な揺動の効果はヘテロ接合度を小さくする方向に働くことがわかった。“ヘテロ接合度パラドクス”的説明はうまくできなかったが、自殖率の揺動がどのような方向に働くかを示すことができた。自殖率などのパラメータの推定は困難であると考えられるので、実験データなどは充分に検討する必要があると思われる。

謝辞

この研究は総合研究大学院数物科学研究科博士過程在学中に行われたものです。本研究を進めるにあたり、懇切丁寧なご指導を賜りました統計数理研究所の伊藤栄明教授に深く感謝致します。特に第Ⅰ部の内容については多数のご助言をいただきました。

第Ⅱ部は、お茶の水女子大学理学研究科修士過程在学中に行った研究を基礎として発展させたものです。暖かいご指導と励ましの言葉をくださいましたお茶の水女子大学柴田文明教授に心より感謝致します。

国立遺伝学研究所の館田英典先生には集団遺伝学の基礎を教えていただき、第Ⅲ部の問題へ導いていただきました。心よりお礼申し上げます。

統計数理研究所の田辺國士教授、長谷川政美教授、松縄規教授、田村義保助教授には、日々のご指導と、論文に関する有益なご助言をいただきましたことを感謝致します。

最後に、在学中、大変お世話になりました統計数理研究所の皆様に感謝致します。その他多くの方々が私を励まして下さいました。ここに、感謝の意を表します。

参考文献

2, 4章

Feller, W. 1957. An Introduction to Probability Theory and Its Applications. 2nd ed. Wiley, New York, 1957.

Karlin, S. 1966. A First Course in Stochastic Processes. Academic Press, New York.

小倉久直 1985. 続物理・工学のための確率過程論, コロナ社.

Stratonovich, R. L. 1966. A new representation for stochastic integrals and equations. J. SIAM Control, 4: 362-371.

3章

Aki, S. 1984. On a decomposition of covariance matrix of the multinomial distribution. Research Memorandum, No. 274: 1-5, The Institute of Statistical Mathematics, Tokyo.

Griffiths, C. R. 1979. A transition density expansion for a Multi-Allele Diffusion Model. Adv. Appl. Prob. 11: 310-325.

_____. 1980. Allele frequencies in multidimensional Wright-Fisher models with a general symmetric mutation structure. Theor. Pop. Biol. 17: 51-70.

Itoh, Y. 1979a. Random collision process on oriented graph. Research Memorandum, No. 154: 1-20, The Institute of Statistical Mathematics, Tokyo.

_____. 1979b. Random collision models in oriented graphs. J. Appl. Prob. 16: 36-44.

_____. 1984. Random collision model for random genetic drift and stochastic difference equation. Ann. Inst. Statist. Math. 36: 353-362.

Kimura, M. 1956. Random genetic drift in a tri-allelic locus; exact solution with a continuous model. Biometrics 12: 57-66.

Maruyama, K. and Itoh, Y. 1991a. An application of isotropic diffusion on a sphere to Fisher-Wright model. Research Memorandum, No.404: 1-11, The Institute of Statistical Mathematics, Tokyo.

丸山貴志子, 伊藤栄明 1991b. ライト・フィッシャーモデルの確率微分方程式. 統計数理, 掲載予定.

Maruyama, T. 1983. Stochastic theory of population genetics, Bulletin of Mathematical Biology 45: 521-554.

Maruyama, T. and Nei, M. (1982) Genetic variability maintained by mutation and over-dominance selection in population genetics. Genetics 98: 441-459.

Moran, P. A. P. 1958. Random processes in genetics. Proc. Phil. Soc., 54: 60-71.

Siga, T. 1987. A certain class of infinite dimensional diffusion process arising in population genetics. J. Math. Soc. Jpn. 39: 17-25.

Takahata, N. 1981. Genetic variability and rate of gene substitution in a finite population under mutation and fluctuating selection. Genetics 98: 427-440.

Watterson, G. A. 1976. The stationary distribution of the infinitely-many neutral alleles diffusion model. J. Appl. Prob. 13: 639-651.

Wright, S. 1969. Evolution and the Genetics of Populations. Vol.2 University of Chicago Press, Chicago.

5章

天羽優子 1991. TDRによるDNA水和水の誘電緩和の研究. 修士論文, お茶の水女子大学.

Anderson, P. W. 1954. A mathematical model for the narrowing of spectral lines by exchange or motion. J. Phys. Soc. Jpn. 9: 316-339.

Arimitsu, T., Ban, M. and Shibata, F. 1984. A solvable model of microscopic frequency modulation. Physica A 123: 131-148.

- Hiraiwa, A. 1975. Stochastic models of spectral lines of transitions between mutiplets.
Master Thesis, University of Tokyo.
- Kubo, R. 1954. Note on the stochastic theory of resonance absorption. *J. Phys. Soc. Jpn.* 9: 935-944.
- _____. 1962. A stochastic theory of line shape, pp. 101-127. In D. ter Haar (ed.), *Fluctuation, Relaxation and Resonance in Magnetic Systems*. Oliver and Boyd, Edinburgh.
- Kubo, R. and Toyabe, T. 1967. A stochastic model for low field resonance and relaxation, pp. 810-823. In R. Blinc (ed.), *Magnetic Resonance and Relaxation*, North-Holland, Amsterdam.
- Maruyama, K. and Shibata, F. 1988a. From two-state jump to Gaussian stochastic processes. *Physica A* 149: 447-471.
- _____. 1988b. Theory of stationary light scattering in a fluctuating medium. *Physica A* 149: 507-534.
- _____. 1988c. Transient resonant light scattering under random perturbations. *Physica A* 135: 139-166.
- _____. * to be submitted.
- Risken, H. 1984. *The Fokker-Planck Equation*. Springer-Verlag, Berlin, Hidelberg, New York, Tokyo.
- Sato, I. and Shibata, F. 1984. Exciton migration in a fluctuating medium I. *Physica A* 128: 551-564.
- _____. 1986a. Exciton migration in a fluctuating medium II. *Physica A* 135: 139-166.
- _____. 1986b. Exciton migration in a fluctuating medium III. *Physica A* 135: 388-413.
- Shibata, F. and Arimitsu, T. 1980. Expansion formulas in nonequilibrium statistical

mechanics. *J. Phys. Soc. Jpn.* 49: 891–897.

Shibata, F. and Sato, I. 1987. Theory of low field resonance and relaxation I. *Physica A* 143: 468–493.

Uchiyama, C., Shibata, F. and Maruyama, K. 1989. A solvable model of dielectric relaxation. *Physica A* 161: 42–57.

6章

Barret, S. C. H. and Husband, B. C. 1990. The genetics of plant migration and colonization, pp. 254–277. *In* A. H. D. Brown, M. T. Clegg, A. L. Kahler, and B. S. Weir (eds.), *Plant Population Genetics, Breeding, and Genetic Resources*. Sinauer Associates Inc., Sunderland.

Brown, A. H. D. 1979. Enzyme polymorphism in plant populations. *Theoret. Popul. Biol.* 15: 1–42.

_____. 1990. Genetic characterization of plant mating systems, pp. 145–162. *In* A. H. D. Brown, M. T. Clegg, A. L. Kahler, and B. S. Weir (eds.), *Plant Population Genetics, Breeding, and Genetic Resources*. Sinauer Associates Inc., Sunderland.

Clegg, M. T. 1990. Molecular diversity in plant populations, pp. 98–115. *In* A. H. D. Brown, M. T. Clegg, A. L. Kahler, and B. S. Weir (eds.), *Plant Population Genetics, Breeding, and Genetic Resources*. Sinauer Associates Inc., Sunderland.

Cockerham, C. C. 1969. Variance of gene frequencies. *Evolution* 23: 72–84.

Derrida, B. and Peliti, L. Evolution in flat fitness landscape.

Fuerst, P. A. and Ferrel, R. E. 1980. The stepwise mutation model: An experimental evaluation utilizing hemoglobin variants. *Genetics* 94: 185–201.

Golding, G. B. and Strobeck, C. 1980. Linkage disequilibrium in a finite population that is partially selfing. *Genetics* 94: 777–789.

Griffiths, R. C. 1981. The number of heterozygous loci between two randomly chosen completely linked sequence of loci in two subdivided population models. *J. Math.*

Biol. 12: 251-261.

- Hamrick, J. L. and Godt, M. J. 1990. Allozyme diversity in plant species, pp. 43-63. In A. H. D. Brown, M. T. Clegg, A. L. Kahler, and B. S. Weir (eds.), Plant Population Genetics, Breeding, and Genetic Resources. Sinauer Associates Inc., Sunderland.
- Hedrick, P. W. and Cockerham, C. C. 1986. Partial inbreeding: equilibrium heterozygosity and the heterozygosity paradox. Evolution 40: 856-861.
- Iwasa, Y. 1990a. Evolution of the selfing rate and resource allocation models. Plant species Biol. 5: 19-30.
- 巖佐庸 1990b. 数理生物学入門, HBJ 出版局.
- Kimura, M. 1968. Evolutionary rate at the molecular level. Nature, Lond. 217: 624-626.
- _____. 1969. The number of heterozygous nucleotide sites maintained in a finite population due to steady flux of mutations. Genetics 61: 893-903.
- _____. 1983. The Neutral Theory of Molecular Evolution. Cambridge Univ. Press, Cambridge. 邦訳, 向井輝美・日下部真一訳, 分子進化の中立説, 紀ノ国屋書店.
- Kimura, M. and Crow, J. F. 1964. The number of alleles that can be maintained in a finite population. Genetics 49: 725-738.
- Kirby, G. C. 1975. Heterozygote frequencies in small subpopulations. Theoret. Popul. Biol. 8: 31-48.
- Maruyama, K. and Tachida, H.* Genetic variability and geographical structure in partially selfing population. to be submitted.
- Maruyama, T. and Kimura M. 1980. Genetic variability and effective population size when local extinction and recolonization of subpopulations are frequent. Proc. Natl. Acad. Sci. USA 77: 6710-6714.
- Nei, M. 1973. Analysis of gene diversity in subdivided populations. Proc. Natl. Acad. Sci. USA 70: 3321-3323.

Ohta, T. 1980. Evolution and Variation of Multigene Families. Lecture Notes in Biomathematics, Vol. 37, Springer-Verlag, Berlin, New York.

太田朋子 1984. 多重遺伝子族の進化, pp.39–55. 木村資生編, 分子進化学入門, 培風館.

Ohta, T. and Tachida, H. 1990. Theoretical study of near neutrality. I. Heterozygosity and rate of mutant substitution. *Genetics* 126:

Ritland, K. 1990. Gene identity and the genetic demography of plant populations, pp. 181–199. In A. H. D. Brown, M. T. Clegg, A. L. Kahler, and B. S. Weir (eds.), *Plant Population Genetics, Breeding, and Genetic Resources*. Sinauer Associates Inc., Sunderland.

Slatkin, M. 1977. Gene flow and genetic drift in a species subject to frequent local extinctions. *Theoret. Popul. Biol.* 12: 253–262.

Tachida, H. 1985. Joint frequencies of alleles determined by separate formulations for the mating and mutation systems. *Genetics* 111: 963–974.

Watterson, G. A. 1975. On the number of segregating sites in genetical models without recombination. *Theoret. Popul. Biol.* 7: 256–276.

Weir, B. S. and Cockerham, C. C. 1984. Estimating *F*-statistics for the analysis of population structure. *Evolution* 38: 1358–1370.

図の説明

5章

図 5.1 変調の速い場合 $\alpha = 0.2$ の (a) スペクトル: $I(\omega)$ および (b) 相関関数: $\phi(t)$.

実線は $N = 1$, 点線は $N = 10$ に対応する。なお、この章の図は $\Delta = 1$ として描いた。

図 5.2 中間的な変調の速さ $\alpha = 1.0$ の (a) スペクトル: $I(\omega)$ および (b) 相関関数: $\phi(t)$. 実線は $N = 1$, 破線は $N = 2$, 点線は $N = 10$ に対応する。

図 5.3 中間的な変調の速さ $\alpha = 5.0$ の (a) スペクトル: $I(\omega)$ および (b) 相関関数: $\phi(t)$. 実線は $N = 1$, 破線は $N = 2$, 一点破線は $N = 3$, 点線は $N = 10$ に対応する。

図 5.4 α を変えたときのスペクトル $I(\omega)$ の振舞い。 α の値は (a) 20.0, (b) 5.0, (c) 2.0, (d) 1.0, (e) 0.2 である。他のパラメータは, $N = 10$, $\sigma = 0.85$, $\Omega_0 = 3.16$ とした。

図 5.5 図 5.4 に対応する相関関数 $\phi(t)$ の実部 (a-e) および虚部 (a'-e')。

図 5.6 SUM モデルによるフィッティング。上から、誘電率の実部、虚部およびコールコールプロットを示す。Amou (1991) からの引用。

6章

図 6.1 自殖率 s に対する共通の祖先遺伝子をもつ確率の振舞い。パラメータ: $n = 100$, $4Ne = 0.0$, $4Nm = 1.0$, $4Nu = 0.01$ 。実線, 破線, 点線はそれぞれ f , θ_1 , θ_2 を表す。

図 6.2 $4Nm$ に対する共通の祖先遺伝子をもつ確率の振舞い。パラメータ: $n = 100$, $4Ne = 0.0$, $4Nu = 0.01$, $s = 0.5$ 。実線, 破線, 点線はそれぞれ f , θ_1 , θ_2 を表す。

図 6.3 $4Ne$ に対する共通の祖先遺伝子をもつ確率の振舞い. パラメータ : $n = 100$,

$4Nm = 1.0$, $4Nu = 0.01$, $s = 0.5$. 実線, 破線, 点線はそれぞれ f , θ_1 , θ_2 を表す.

図 6.4 自殖率が時間的に揺動し, 地理的構造のない場合の $\langle s \rangle$ に対する共通の祖

先遺伝子をもつ確率の振舞い. パラメータ : $N = 100000$, $u = 0.00001$, $s_0 = 0.5$,

$\Delta_0 = 0.5$. 実線, 破線, 点線はそれぞれ $\alpha = 0.2, 1.0, 5.0$ に対するものである.

図 6.5 自殖率が時間的に揺動し, 地理的構造のない場合の α に対する $\langle f \rangle_{\text{eq}}$.

の振舞い. パラメータ : $N = 100000$, $u = 0.00001$, $s_0 = 0.5$, $\Delta_0 = 0.5$, $\sigma = 0$.

図 6.6 自殖率が時間的に揺動し, 地理的構造のある場合(島模型)の $\langle s \rangle$ に対

する共通の祖先遺伝子をもつ確率の振舞い. パラメータ : $n = 1000$, $N = 100$,

$u = 0.00001$, $4Nm_p = 4Nm_s = 1$, $s_0 = 0.5$, $\Delta_0 = 0.5$. 実線, 破線, 点線はそ

れぞれ $\alpha = 0.2, 1.0, 5.0$ に対するものである.

図 6.7 自殖率が時間的に揺動し, 地理的構造のある場合(島模型)の α に対する

$\langle f \rangle_{\text{eq}}$ の振舞い. パラメータ : $n = 1000$, $N = 100$, $u = 0.00001$, $4Nm_p =$

$4Nm_s = 1$, $s_0 = 0.5$, $\Delta_0 = 0.5$, $\sigma = 0$.

Fig.5.1.a

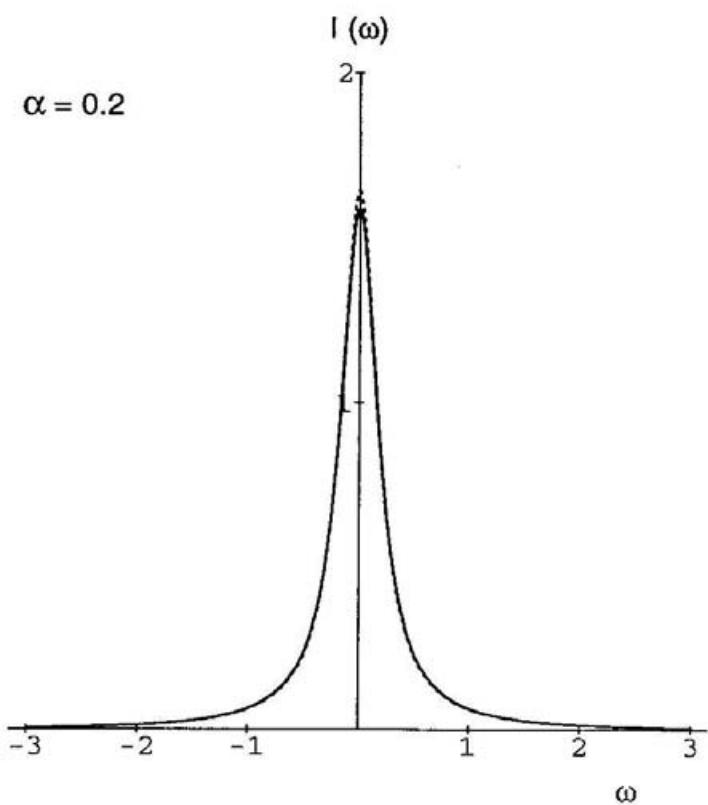


Fig.5.1.b

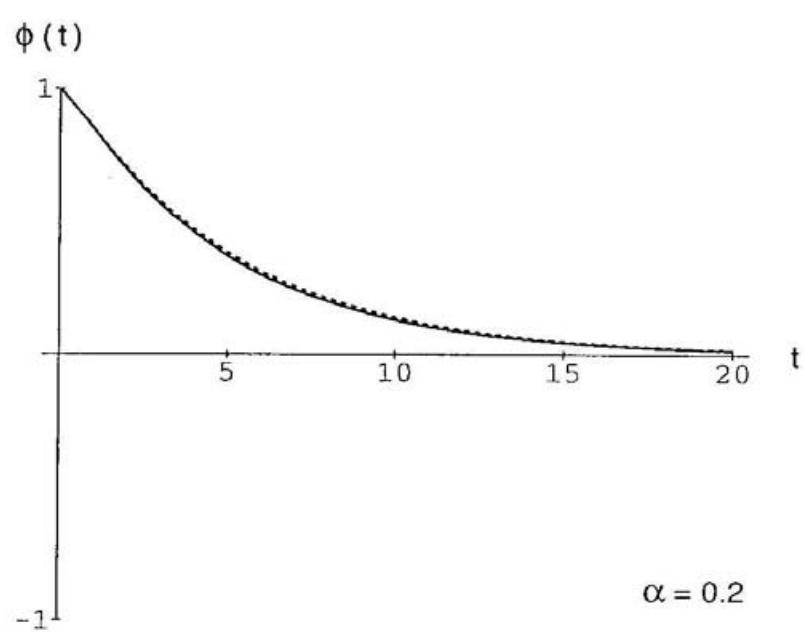


Fig.5.2.a

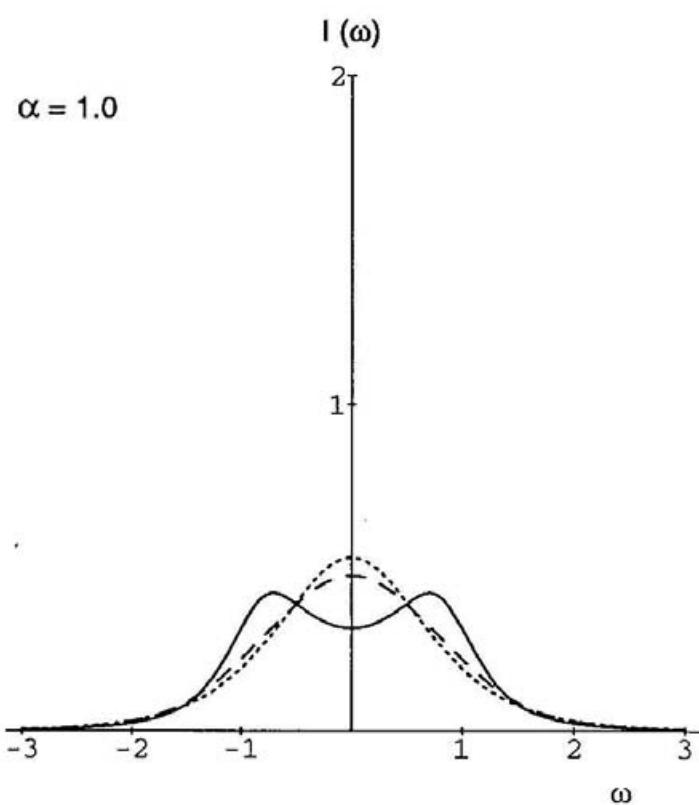


Fig.5.2.b

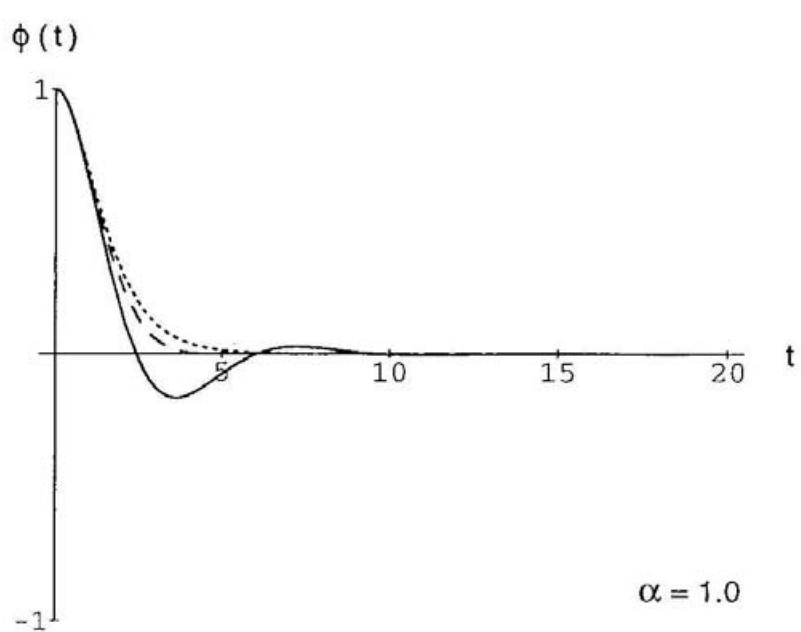


Fig.5.3.a

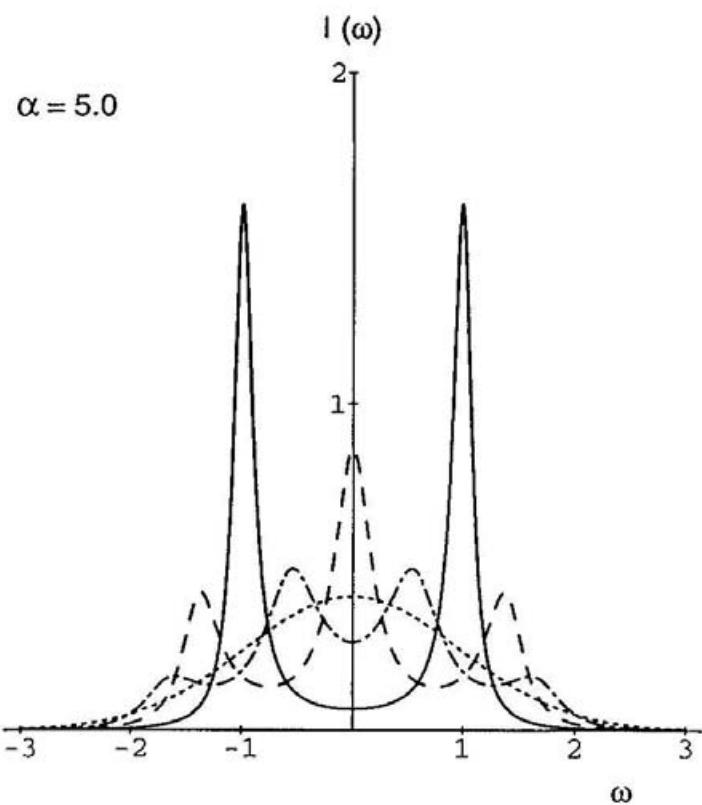


Fig.5.3.b

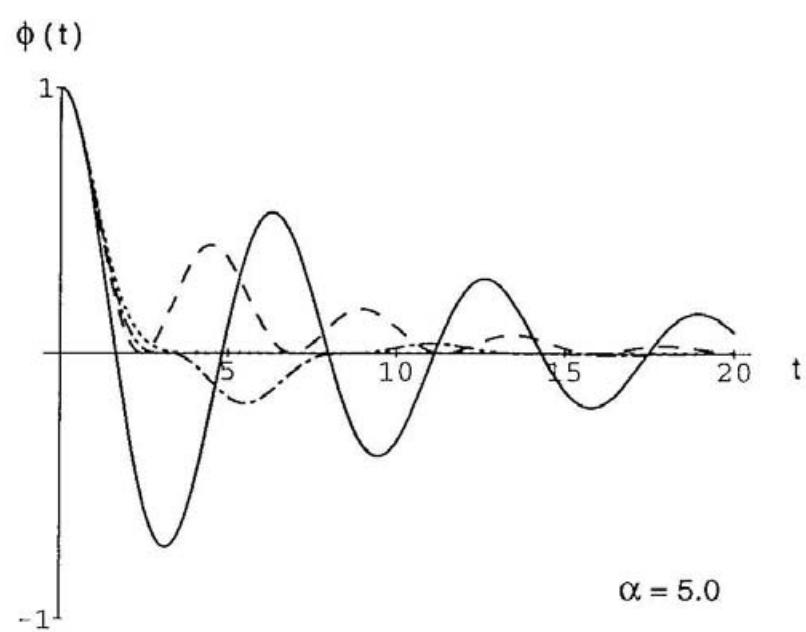


Fig.5.4

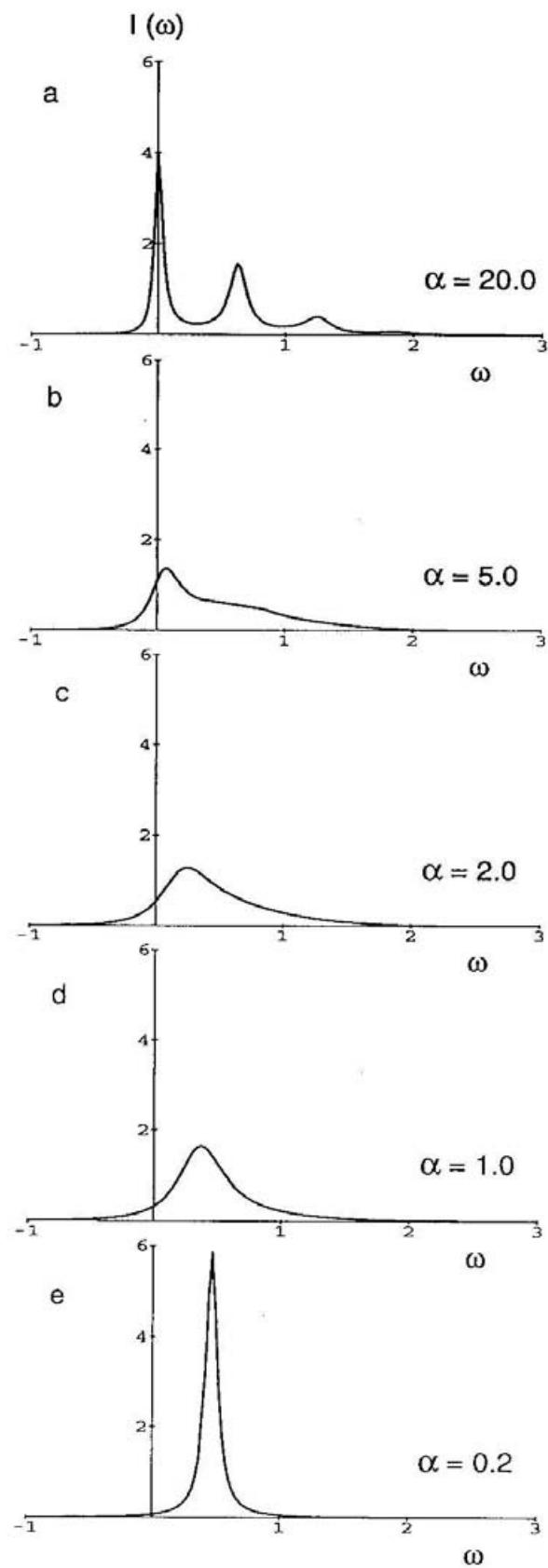
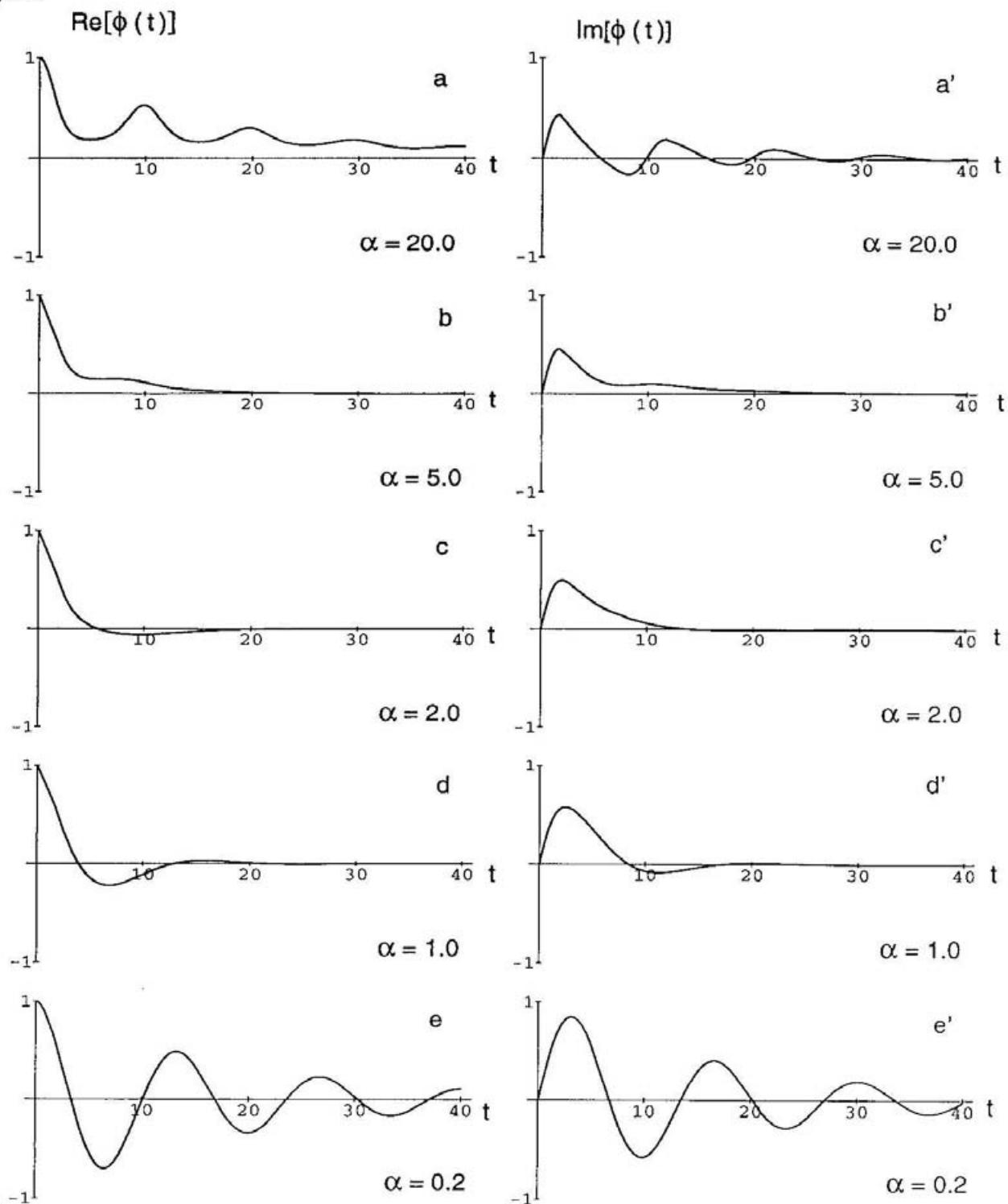


Fig.5.5



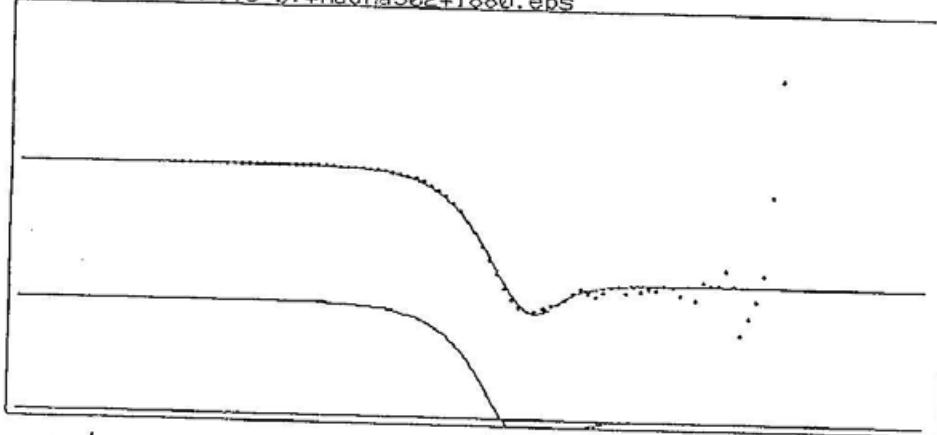
STRUCTURE DEFINITION

91-01-09 19:52

File b:¥nadna302¥1880.eps

TDR FITTING

- 1 Read File
- 2 Parameter
- 3 ϵ'
- 4 ϵ''
- 5 Cole-cole
- 6 Save
- 7 Quit



$\Delta \epsilon$	7.1000e+00	α	1.0000	α	1.0000	$\epsilon \infty$	8.5500e+00
Read	α	1.0000e+01	β	1.0000	β	1.0000	
N	20	$\Delta \epsilon$	0.0000e+00	$\Delta \epsilon$	0.0000e+00	σ_r	2.138240e+02
Δ	8.8800	τ	1.0000e+00	τ	1.0000e+00	σ_i	5.470707e+01
σ	0.1000						

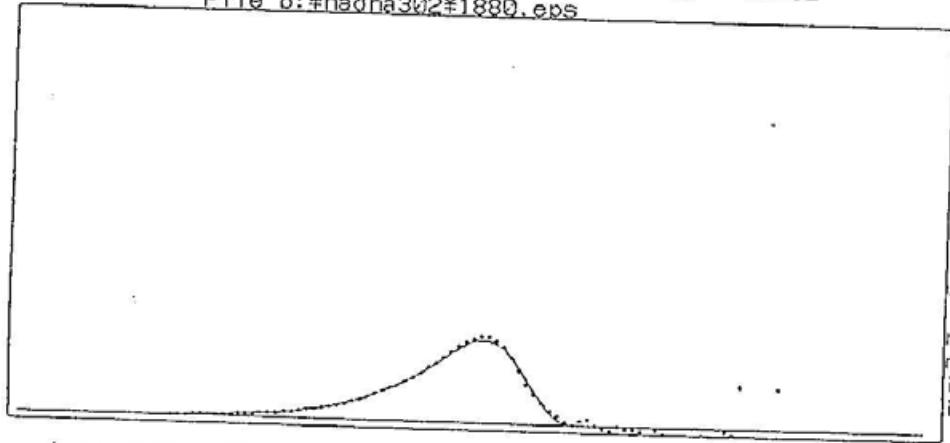
EASY TDR FITTING 302

91-01-09 19:52

File b:¥nadna302¥1880.eps

TDR FITTING

- 1 Read File
- 2 Parameter
- 3 ϵ'
- 4 ϵ''
- 5 Cole-cole
- 6 Save
- 7 Quit



$\Delta \epsilon$	7.1000e+00	α	1.0000	α	1.0000	$\epsilon \infty$	8.5500e+00
Read	α	1.0000e+01	β	1.0000	β	1.0000	
N	20	$\Delta \epsilon$	0.0000e+00	$\Delta \epsilon$	0.0000e+00	σ_r	2.138240e+02
Δ	8.8800	τ	1.0000e+00	τ	1.0000e+00	σ_i	5.470707e+01
σ	0.1000						

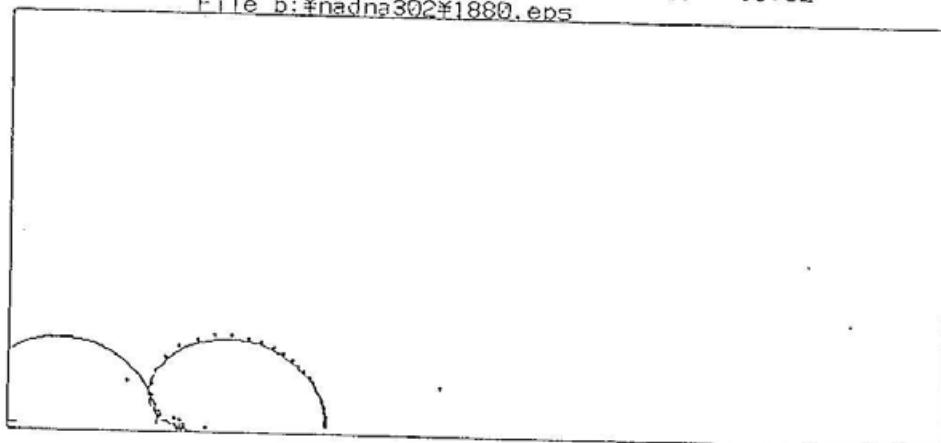
EASY TDR FITTING 302

91-01-09 19:52

File b:¥nadna302¥1880.eps

TDR FITTING

- 1 Read File
- 2 Parameter
- 3 ϵ'
- 4 ϵ''
- 5 Cole-cole
- 6 Save
- 7 Quit



$\Delta \epsilon$	7.1000e+00	α	1.0000	α	1.0000	$\epsilon \infty$	8.5500e+00
Read	α	1.0000e+01	β	1.0000	β	1.0000	
N	20	$\Delta \epsilon$	0.0000e+00	$\Delta \epsilon$	0.0000e+00	σ_r	2.138240e+02
Δ	8.8800	τ	1.0000e+00	τ	1.0000e+00	σ_i	5.470707e+01
σ	0.1000						

Fig.5.6

-85°C

Fig.6.1

Identity Probabilities

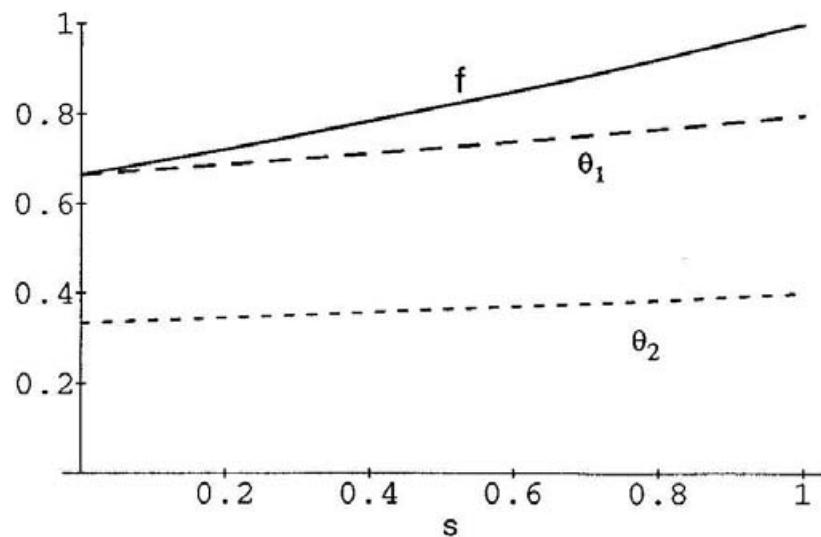


Fig.6.2

Identity Probabilities

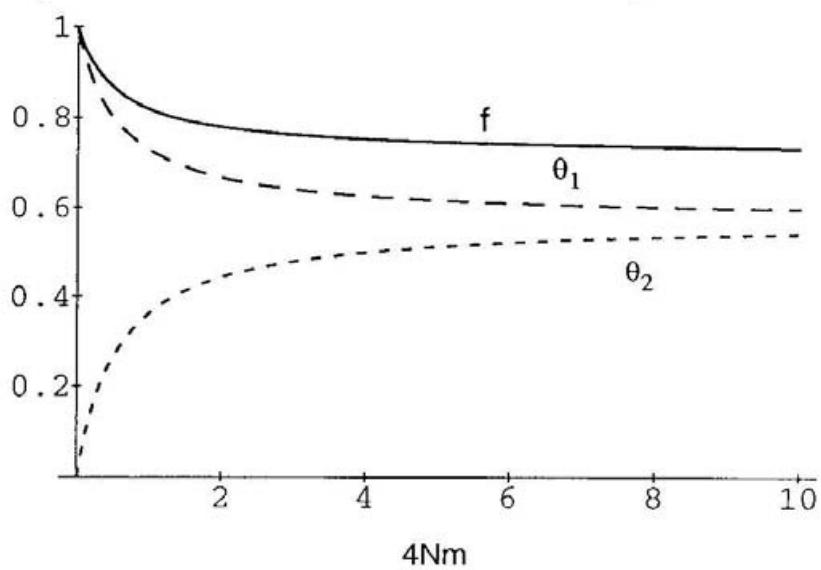


Fig.6.3

Identity Probabilities

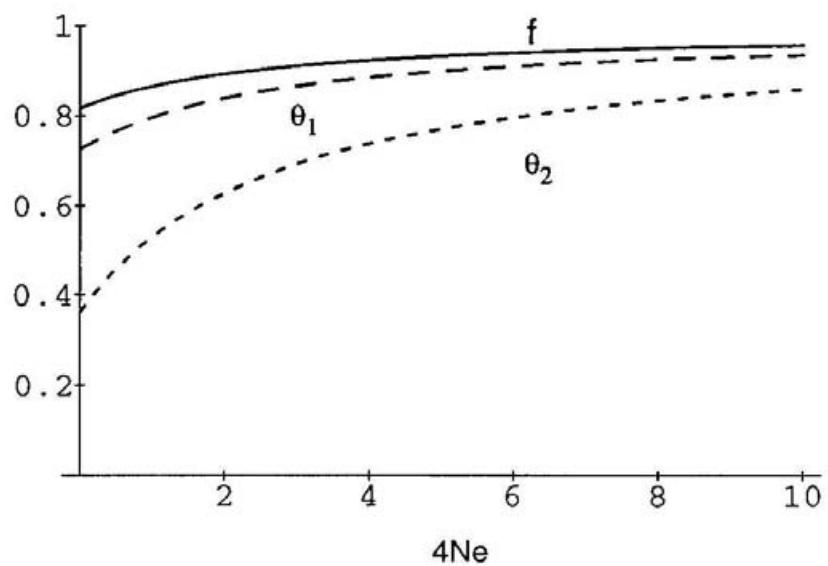


Fig.6.4

Identity Probabilities

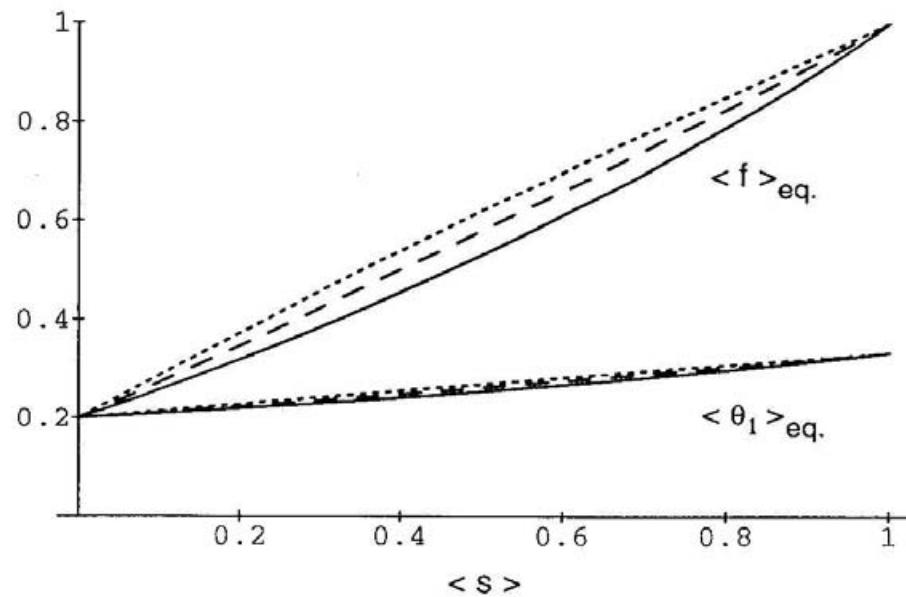


Fig.6.5

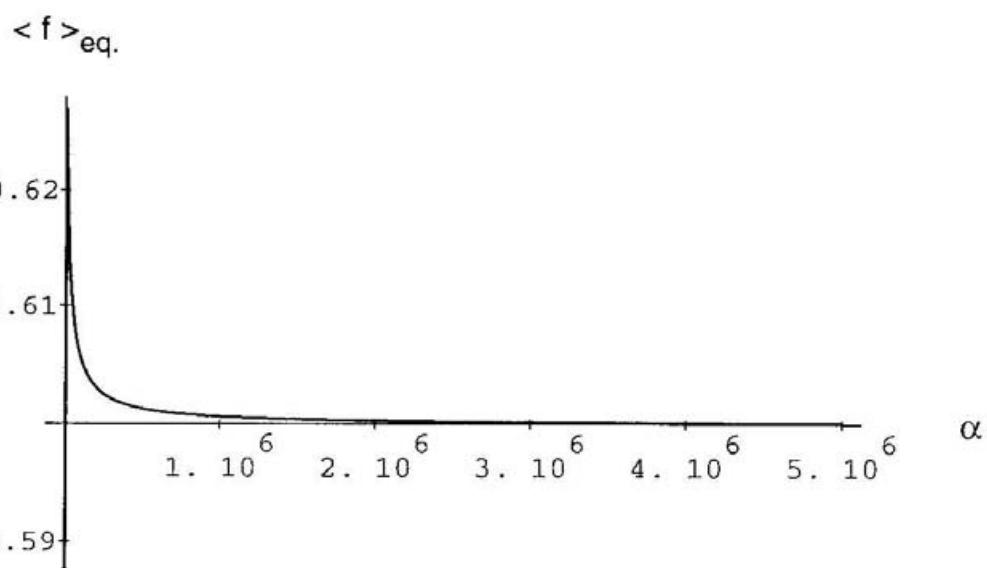
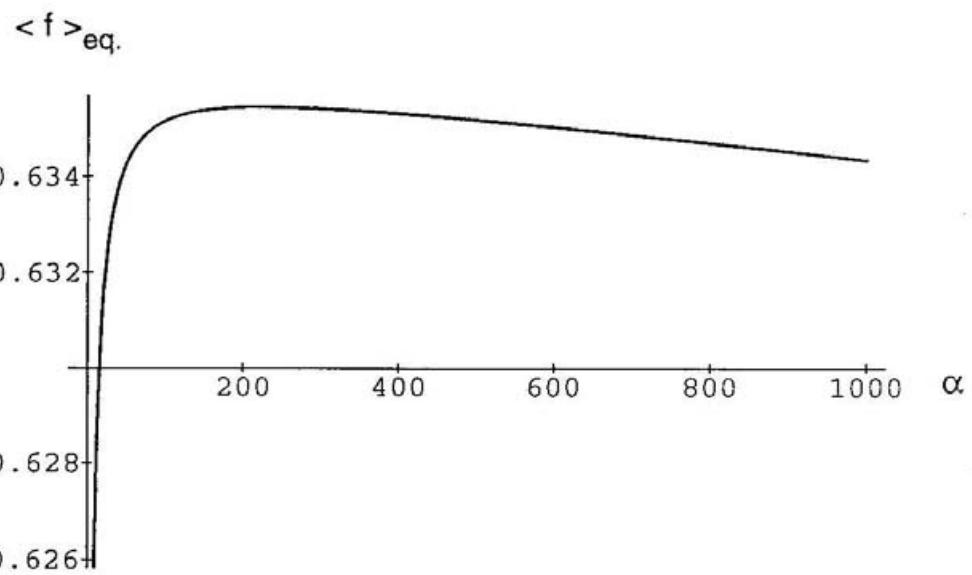


Fig.6.6

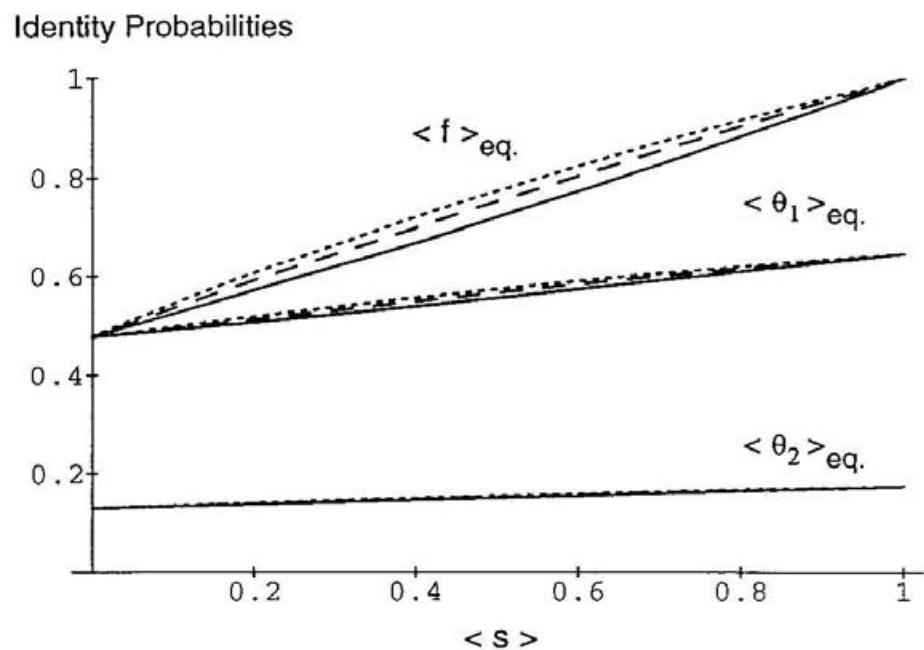


Fig.6.7

