

抽象化学ネットワークの構築について

鈴木泰博、田中博

東京医科歯科大学 難治疾患研究所

我々はネットワークの発展進化に関し興味があり、要素間の相互作用に基づくネットワークモデルについて研究を行ってきた。そのため、記憶構造をもったランダムネットワークを構築し計算機シミュレーションなどを行ってきた。その結果、要素間に記憶構造が導入されることにより、リンクの太さに関して階層的な構造が出現することを確認した。我々はこのネットワークと抽象化学系を組み合わせ、新たなネットワークモデルを構築した。

Network model based on an Abstract chemical system

Yasuhiro Suzuki and Hiroshi Tanaka

Medical Research Institute,

Tokyo Medical and Dental University

We are interested in the process of a network's growth. We model a network based on the relationship among elements. Our model is composed of directed graph. Each node of the graph remembers the history of visited node. The history gives the probability of transition from the node. Thus transition probability is changed dynamically. We observed that as the network is growing, there emerges the power law distribution in the transition probability. And it effects the behavior of information flow in the network. We combine the network model with the abstract chemical system, Abstract Rewriting System on Multisets (ARMS).

1 はじめに

近年、オープンダイナミクスが注目を浴びている。オープンダイナミクスとは以下のような性質をもった系のダイナミクスをさす。

1. 異質な性質を持つ要素が、中央集権的なコントロールや大局的な均質相互作用下にあるわけではなく、不完全で遅延を伴うような情報の下で不均質な相互作用を局所的に行う
2. システムが新たな要素の侵入や絶滅があるという開放性をもつにもかかわらず、外部からの影響や内部での関係性の変化に対して、多様性を持った柔軟性を示す
3. システムのダイナミクスの結果として、自由度の数自身と相互作用自身が変化していく系でありかつ、あらかじめ決定することのできる設計図や運動に従っているとするとする記述が困難である

我々は代謝系などの生体ネットワークや遺伝子ネットワークなどの生物系におけるネットワークの構造とその発展に興味があり、かかる性質とそのネットワーク構造について、相互作用(抽象化学系)とネットワークの発展の両面から研究を行ってきた。

1.1 抽象化学系

抽象化学系は複雑系および人工生命での新たな研究分野である。我々はかねてより抽象化学系, Abstract Rewriting System on MultiSets (ARMS) を提案し研究を行ってきた。抽象化学系とは1つの独立した研究分野というよりは、従来から様々な分野で行われてきた化学系の抽象モデルに関する相関領域的な総称である。ARMSでの計算は、直観的には、溶液中で浮遊している分子がランダムに衝突し反応作用が生じるような反応槽内の化学溶液の状態変化に対応する。実際には化学物質が記号に、反応槽がマルチ集合に、反応規則が書き換え規則にそれぞれ対応する。

ARMSでの計算の例 書き換え規則 R を, $R = \{a \rightarrow b, br_1, a, b \rightarrow cr_2\}$ とし, $\{b, a, a\}$ を初期状態とする。この場合, r_2 を適用すると, $\{b, a, a\} \rightarrow \{c, a\}$ のように書き換えが行われる。

1.2 ポリヤの壺のネットワーク

ポリヤの壺とは確率モデルの一つである。そして、赤と黒の玉が数個ずつ入っている壺から1つの玉を取り出した場合に、その玉の色が赤であれば2つの赤の玉を壺に戻す試行により壺の内部状態が試行により動的に変動していくモデルとして定義される。

このモデルを用いてネットワークモデルを構築する。まず、各々のノードには番号がふられ(0,1,2,...), 自分のノード番号以外のノード番号が書かれたポリヤの壺がある。ランダムに選択されたノードではまず壺がふられ、次に出た番号のノードへリンクを張る。そして、リンクを張った先のノード番号が書かれたボール2つをそのノードの壺に戻す。以下、これを繰り返す。

このモデルでは最初ほどのノードへリンクを張るのかは全くランダムに選択されるが、試行を繰り返すうちにリンク先に偏りが生じ、やがて太いリンクと細いリンクが混在するようになる。このリンクの太さの分布を調べてみるとベキ的な構造になっており、リンクの太さにおいて階層構造が出現していることを確認した。

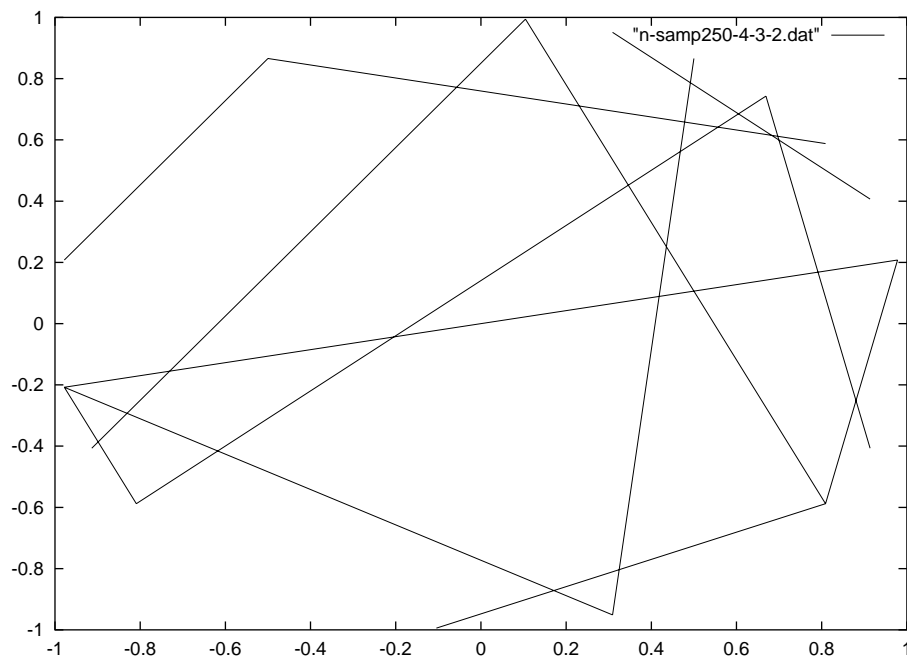


図 1: 反応ネットワークの例, 各々のエッジは反応規則を, 各々のノードは基質を表す. ここでは表示のため合計 20 種類の基質が円上にプロットされている.

2 抽象化学ネットワーク

以上の 2 つのモデルを組合せ抽象化学ネットワークモデルを構築する. このモデルではポリヤの壺のネットワーク (以下では”ポリヤネット”) が反応規則を生成し, それに基づいて ARMS で反応が生じる.

ARMS には予め反応規則が与えられていない. そこで, ポリヤネットで反応規則を生成する. この場合, ポリヤネットの各々のノードは a や b の反応規則で用いられる 1 種類の記号を表す (aa や ab のようなノードはない). 規則の左辺となる記号はマルチセット内の濃度に応じて確率的に選択される. ここで確率を高い濃度の記号が選択される確率が高くなるように定義する. 規則の右辺はその記号が対応するノードにあるポリヤの壺を振ることにより決定される.

例えば, a, b, c の 3 つの記号がある場合, 各々の記号はノードに対応し, ノード番号 a の壺は初期状態で {b, c}, ノード番号 b の壺は {a, c}, ノード番号 c の壺は {a, b} となっている. いま, ARMS のマルチセットの初期状態が {a, a, a, b, b, c} とすると, 規則の左辺として a が選択される確率は 3/6, b が

選択される確率は $2/6$, c が選択される確率は $1/6$ となる. この場合, 例えば, a が規則の左辺として選択されたとすると, a の壺 ($\{b, c\}$) を振る. その結果 b が出たら, $a \rightarrow b$ の反応規則を生成し, a の壺の状態を $\{b, b, c\}$ (b は新しく加えられた記号) に更新する. そしてこの反応規則を適用する. こうして, 反応毎にポリヤネットを振って反応を生成し, ARMS での反応に用いる. こうした計算を続けていくと図 1 のような反応ネットワークが形成される.

このネットワークは時間がたつにつれて構造をもつようになり, それは丁度, 化学反応における酵素や触媒のように反応をある定まった方向へと生じさせるようになる. その理由は, 一旦リンクが形成され強化されるとその記憶がネットワークに残るため, 反応による濃度変化により規則の左辺にあたる基質からの反応が停止し, 他の反応に入れ替わってもその後, もし, その基質が規則の左辺として選択されると, 過去に形成されたリンクを用いて規則の右辺を選択するためその結果として反応がある定まった方向へと生じさせられるようになる. しかし, 規則の左辺の選択は確率的であるため, 必ずしも常に同じ反応が生じるわけでもないし, また, 時間とともにポリヤネットに記憶されているネットワーク構造は動的に変化していくことが観測されている.

本抄録では抽象化学ネットワークの提案を行ったわけであるが, 今後はこのネットワークを実際の生物系や時系列データの学習へ応用した研究を行っていきたいと考えている.

参考文献

[Suzuki96] (1996) Suzuki, Y. S., Tsumoto and H. Tanaka. Analysis of Cycles in Symbolic Chemical System based on Abstract Rewriting System on Multisets, *Artificial Life V*: 522-528. MIT press.