

## λ 関数群がなす自己触媒ネットワークの構造

柳井 孝介      伊庭 斉志

東京大学大学院新領域創成科学研究科基盤情報学専攻

本稿では分子を  $\lambda$  関数で抽象化したモデルを用いて、自己触媒ネットワークの発展を調べる。提案するモデルでは、AlChmey を拡張し、分子の反応にエネルギーと速度の概念が導入している。非平衡系の下で、ランダムな状態から分子群は反応を始め、自己制御系を安定に保つ構造が自発的に組織化されていく過程をみる。シミュレーションの結果から、適切な熱流量と熱損失率の下で、系は可逆な熱機関を形成し、複雑化していくことがわかる。

## Analysis on Interaction Network of $\lambda$ Functions

Kohsuke Yanai      Hitoshi Iba

Dept. of Frontier Infomatics, Graduate School of Frontier Sciences,  
The University of Tokyo.

In this paper, transition of self-reproductive chemical network is investigated by using an abstract chemical system, in which molecules are represented with  $\lambda$  expressions. Energy and reaction rate are incorporated in our model, and the chemical system is simulated under non-equilibrium condition. Repeating reaction, a cluster of randomly produced molecules organize a self-control and stable structure spontaneously. Experimental results indicate that the system composes a reversible heat engine and grow complex with a suitable heat flow and an energy loss rate.

### 1. はじめに

本稿ではエネルギーとエントロピーの概念をモデルに導入することにより、非平衡系での秩序の創発を試みる。

生命の普遍的な性質を探ることを考える。自己複製、動的自己維持、代謝、自己調節、進化などはしばしば生命の普遍的な性質として認識されている。しかしこれでは生命のマクロな現象を列挙したに過ぎない。我々の興味は、よりミクロな構造がいかにしてマクロな現象を創発するかであり、この創発のされ方こそが生命の普遍的な性質なのではないかと思われる。例えば、自己参照に関しては、チューリングマシンが自分自身の記述を計算に利用できることが計算機科学の重要定理として示されている（再帰定理 [Sipser 97]）。しかしこの定理は原理上、自己参照が可能であることをどうやってその機構を成さない。

生命には、遺伝子レベルから、たんぱく質、細胞内器官、細胞、器官、個体、社会へと多段に渡る階層構造があり、このレベルの階層化が生命を特徴付けていると言える。それぞれのレベルに創発現象がちりばめられており、これが我々の生命への理解を妨げる。各レベルでは複数の構成要素がネットワークを形成し、他あるいは全体と関係性の下に「系としての性質」を顕わにする。これが一つ上の階層の構成要素となり、さらに上の階層の現象を創発する。

本稿では、化学反応を計算モデルにより抽象化し、代謝ネットワーク、熱機関、系の分岐、散逸構造、negentropy（負エントロピー）の生成などの創発を見る。シミュレーションで得られた実験結果は、これらの現象を形成する理論的なシナリオのリアリティを提供する。

化学反応を計算モデルにより抽象化しようとする試みは、Artificial Chemistry [Dittrich 01] という名で知られている。Fontana の AlChemistry [Fontana

90] は分子を  $\lambda$  関数で表現し, 系の自己維持や自己触媒作用, ポリマー関数の出現など興味深い現象を創発することに成功している. また [Fontana 94] では, 同システムにて安定した2つの系が「のり」と呼ばれる分子集団を介して共存するダイナミクスが観測されたと報告されている. 鈴木らの ARMS (Abstract Rewriting System on Multisets) [Suzuki 97] は,  $\lambda$ -ガスをさらに抽象化したモデルであり, 記号と規則によって生命系をモデル化した. さらに鈴木らは ARMS に膜の概念を導入にして, ACS (Active Cell System) [Suzuki 00] を構築している. このモデルでは安定点が不安定化し Hopf 分岐するダイナミクスが再現できている. Păun の P Systems [Păun 00] も ACS とほとんど等価なモデルである. P Systems では充足可能性問題やハミルトンパス問題を解くアルゴリズムも提案されている. また最近では Fractal Proteins [Bentley 03] というモデルが提案されており, このモデルではマンデブロ集合によりたんぱく質を抽象化し, 細胞質, 遺伝子発現ネットワークまでもがモデル化されている.

以下2章では実験で用いたモデルについて説明し, 3章ではシミュレーションによる実験結果を紹介する. 4章では得られた結果について考察し, 5章で本稿をまとめる.

## 2. モデル

### 2.1 概要

本稿で用いるモデルでは, 分子を Lisp の関数で表現し, 分子  $p, q$  間の反応を  $p(q)$  で表す. Lisp 関数で表される分子を複数用意し, これらを反応させることによって新しい分子を生成する. 反応を繰り返すことにより, 系全体がどのように発展していくかを見る. 本節で紹介するモデルは, AlChemistry の作為的な部分を取り除き, 代わりにエネルギーと反応速度の概念を導入したものである.

系はエピソード長  $L_e$ , 熱損失率  $\eta$  の2つの固定パラメータと, 系エネルギー  $E_{sys}$  を状態として持つ. ここで  $L_e$  は自然数,  $E_{sys}$  は実数であり,  $\eta$  は0以上1以下の実数である.

### 2.2 $\lambda$ 関数による分子の記述

分子は表1に示す基本演算子と変数により構成される, 1変数の関数として記述される. 簡単な分子

表1 分子表現に用いられる記号

非終端記号	
$\text{first}[expr]$	式 $expr$ の第1引数を与える
$\text{last}[expr]$	式 $expr$ の最終引数を与える
$\text{left}[expr1, expr2]$	式 $expr1$ の第1引数を $expr2$ としたものを与える
$\text{right}[expr1, expr2]$	式 $expr2$ の第1引数を $expr1$ としたものを与える
終端記号	
$a$	変数

の例を示す.

$$p : \text{first}[a] \quad (1)$$

$$q : \text{left}[\text{left}[a, \text{last}[a]], \text{first}[a]] \quad (2)$$

表1に示した基本演算子は関数の構造を変える関数である. 例えば,  $f, g$  を一般の関数として,

$$\text{first}[f[a, b, g[c]]] = a \quad (3)$$

$$\text{last}[f[a, b, g[c]]] = g[c] \quad (4)$$

$$\text{left}[f[a, b, c], g[d]] = f[g[d], b, c] \quad (5)$$

$$\text{right}[f[a, b, c], g[d]] = g[f[a, b, c]] \quad (6)$$

と作用する.  $\text{first}$  および  $\text{last}$  は関数のサイズを小さくする演算子であり, 一方  $\text{left}$ ,  $\text{right}$  は関数のサイズを大きくする演算子である.

### 2.3 反応規則

基本演算子  $\text{first}$ ,  $\text{last}$ ,  $\text{left}$ ,  $\text{right}$  と変数  $a$  で構成される関数は, 自分自身も引数の対象となることに注意されたい. 例えば, 前出の  $p, q$  に対して  $p(q)$  は計算可能である.  $p(q)$  は  $q$  の第一引数を返せばよいので,

$$p(q) = \text{left}[a, \text{last}[a]] \quad (7)$$

となる. 同様に  $p(p)$  も計算可能である. つまりそれぞれの分子は, データおよびデータを操作する手続きの双方を表す. これは Lisp の基本的な特徴の1つでもある. そこで分子間  $p, q$  の反応を  $p(q)$  で定義する. 分子間の反応を模式的に書くと,

$$p, q \rightarrow p, p(q) \quad (8)$$

となる. すなわち  $q$  が消費されて新しく  $p(q)$  が生成される.  $p$  は触媒作用をする分子と見なせる. ただし,  $p(q)$  の大きさが100を超える場合は,  $p(q)$  に再帰的に  $\text{first}$  を作用させることによって強制的に分子を小さくする. これは計算コストを抑えるための処置であり, 特に意味はない\*1.

\*1 巨大な分子は不安定になると解釈してもよい

ここで分子全体の集合  $A$  は

$$p \in A \wedge p: A \rightarrow A \quad (9)$$

というやや自己言及的な怪しい写像の集合であることに注意されたい。

ここで各分子のエネルギーを関数の大きさ（ノード数）で定義する．分子  $f$  のエネルギーを  $E[f]$  で表す．例えば，前出の例だと，

$$E[p] = 2 \quad (10)$$

$$E[q] = 7 \quad (11)$$

$$E[p(q)] = 4 \quad (12)$$

となる．式 8 の反応では，左辺のエネルギーは  $2 + 7 = 9$ ，右辺のエネルギーは  $2 + 4 = 6$  であり，エネルギーの差分  $d$  は 3 である．この値から熱損失率  $\eta$  だけさし引いた値を反応エネルギーと呼ぶ．触媒分子は無視できるので，分子  $f$  から分子  $g$  が生成されるとき反応エネルギーを  $E_r[f, g]$  と書くことにすると，厳密には

$$d = E[f] - E[g] \quad (13)$$

$$E_r[f, g] = d - \eta|d| \quad (14)$$

と書ける．エネルギー差分  $d$ ，反応エネルギー  $E_r$  は負になることもあるが，エネルギーの損失項である  $\eta|d|$  は常に正となることに注意されたい．分子間の反応がおこると，反応エネルギーが系エネルギー  $E_{sys}$  に加えられる．すなわち，反応がおこると系エネルギーは

$$E_{sys} \leftarrow E_{sys} + E_r[f, g] \quad (15)$$

と変化する．

例えば，関数のサイズが大きくなる反応ばかりが繰り返されると，系エネルギー  $E_{sys}$  は減少していく．またコピー反応（反応が起きても生成された分子が前の分子と同一である反応）が繰り返される場合は， $d = 0$  であるから系エネルギー  $E_{sys}$  は変化しない．

## 2.4 系の遷移

$L_e$  回の反応の系列をエピソードという．つまりエピソードとは

$$m_{1,1}, m_{1,2} \rightarrow m_{1,1}, m_{1,3} \quad (16)$$

$$m_{2,1}, m_{2,2} \rightarrow m_{2,1}, m_{2,3} \quad (17)$$

⋮

$$m_{L_e,1}, m_{L_e,2} \rightarrow m_{L_e,1}, m_{L_e,3} \quad (18)$$

という形式の反応の記録である．1 エピソードの反応が終わったとき，エピソード前の系エネルギー  $E_{before}$  よりエピソード後の系エネルギー  $E_{after}$  の方が 0 に近ければエピソードを決められた回数だけ繰り返す．つまり  $E_{sys} = 0$  を理想の状態とし，この状態に近づくようにエピソードを繰り返す．ただし，分子が不足して反応を行うことができなくなった場合はそこでエピソードを打ち切る．

シミュレーションは以下のステップで行われる．

Step 1 ランダムに 100 個分子を生成する．

Step 2  $E_{before} := E_{sys}$  とする．

Step 3 ランダムに 2 つの分子を選択し，上で述べた反応を行い新しい分子を生成する．これをエピソード長  $L_e$  だけ繰り返しエピソードを記録する．

Step 4  $E_{after} := E_{sys}$  とし， $|E_{before}| - |E_{after}| > 0$  ならエピソードを繰り返す．

Step 5  $|E_{sys}| < 1000$  ならランダムに生成した分子を 1 つ系に加える．そうでなければランダムに選んだ分子を 1 つ系から取り除く．また分子数が 500 を超えた場合はランダムに分子を選んで消去する．

Step 6 Step 2 に戻る．

ランダムな分子集団から系はスタートし，反応を繰り返して系の発展を見る．Step 2 から Step 5 までを 1 サイクルと呼び，1 サイクルで最低  $L_e$  回の反応がおきる．反応が起こる前と起こった後では全体の分子数は変化しないが，Step 5 の作用で 1 サイクルでは分子数は変動する．Step 5 では系にノイズを加えるとともに，系エネルギーが高すぎるあるいは低すぎると，系が縮小していくことをモデル化している．逆に系エネルギーが  $\pm 1000$  以内であれば，ランダムな分子が加わることにより，系の分子数は増えていく．

## 3. シミュレーション

### 3.1 エピソードの繰り返しを行わない場合

まず 2 章で述べたモデルの基本的な振る舞いを見るために，エピソードの繰り返しを行わない場合についてシミュレーションする．すなわち Step 4 を実行しない．この系では系のダイナミクスに対し，系エネルギーの変動からのフィードバックがない．よって系はエネルギー的な制御，制約を受けずに，系の自然な状態へ移行すると思われる．つまり，このシミュレーションでは系の平衡状態への遷移の過程を観察する．エネルギー的に解放された場合に，エン

表 2 エピソードの繰り返しを行わない系

	系	$L_e$	$\eta$	熱流量	その他
type 1	A	1	0.5	0	分子数 100 で固定
	B	1	0.5	0	分子数 1000 で固定
	C	1	0.5	0	分子数 500 で固定
	D	1	0.5	0	
type 2	a	1	0.5	0.75	
	b	1	0.5	0.89	
	c	1	0.5	0.9	
	d	1	0.5	1.5	

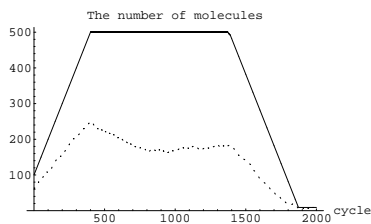


図 1 D の総分子数と分子の種類数

トロピー最大化の原理がどのような形で系に現れるかをみる．表 2 に示すような系でシミュレーションを行った．

### §1 type 1

まず D の結果を参照されたい．図 1 は D の総分子数と分子の種類数を，図 2 は系エネルギー  $E_{sys}$  の遷移を示している．横軸はサイクル数を表す．グラフから分かるように，エピソードの繰り返しが無い系では， $E_{sys}$  は減少し続け，系エネルギーが 1000 を超えたところで，Step 5 の作用で分子の数が減少し始める．そして 2000 サイクル付近でエネルギー不足により系は消滅する．Step 5 は本質ではないので，A と B の系では分子数は固定とし，系がどのように振舞うかを観察した．

図 3，図 4，図 5 はそれぞれ A の分子数，系エネルギー，全ノード数を表す．総分子数は 100 で一定であるが，分子の種類は少しずつ減って 10000 サイクル目には 18 種類になる．ただし，そのうちたったの 2 種類で全体の 60% を占め，残りの分子はそれぞ

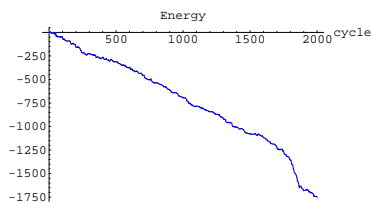


図 2 D の系エネルギー  $E_{sys}$

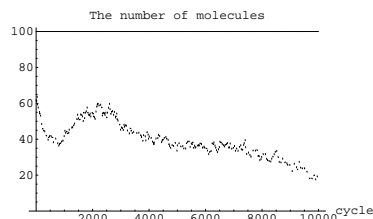


図 3 A の総分子数と分子の種類数

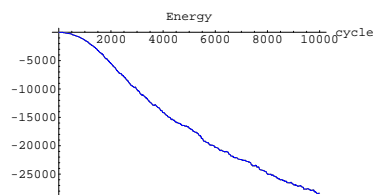


図 4 A の系エネルギー  $E_{sys}$

れ 1~5 個ずつしかない．その 2 種類の分子は

left type : left[left[...left[a, a], a], a], ..., a]

right type : right[right[...right[a, a], a], a], ..., a]

で，それぞれ長さは最大の 100 になっており，個数は left type が 51，right type が 19 であった．これはポリマーである．left type も right type も，自分自身あるいは相手を触媒として自分自身を生成できる．ゆえにこれら 2 つの分子が自分を創り続けるため，系は安定する．図 6 は 10000~11000 サイクル間の分子の数の遷移を表している．10000 サイクル目の時点での分子数が多い 3 つを表示している．図 6 から分かるようにこの系は安定している．ただし，長さが限界まで来ているため制限を設けなければさらに大きくなる可能性があり，その意味では安定とは言い切れない．図 4 と図 5 から分かるように，分子が巨大化するにつれ，それに必要な系エネルギーが搾取され，系エネルギーはほぼ線形に減少していった．これはサイクルを経るに従ってポリマーが成長していったことを意味する．

B は分子数 1000 で固定としたが，A と同様に分子の種類は減少する（図 7）．系エネルギーも減少し，分子サイズは大きくなる（図 8）．しかし 10000 サイクルの時点で最も数が多い分子は恒等関数  $a$  であり，分子全体の 23% を占めた．また他の多数派分子も大きさの小さいものが多かった．ただし図 9 に示すように，全体として分子サイズが大きくなっていく傾向が見られた．

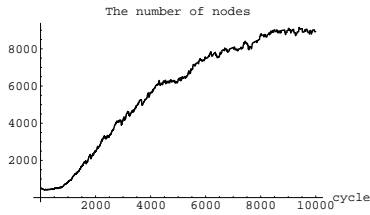


図 5 A の全ノード数

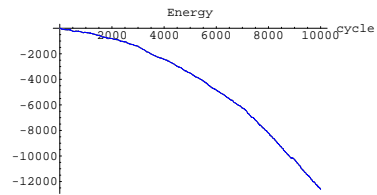


図 8 B の系エネルギー  $E_{sys}$

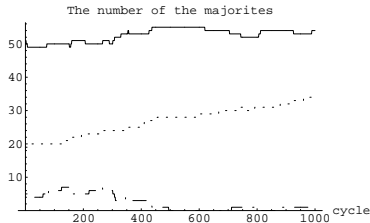


図 6 A の多数派分子の 10000 サイクル以後の遷移

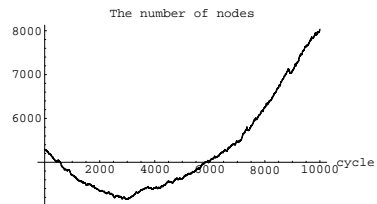


図 9 B の全ノード数

A と B は 10000 サイクルの時点での状態が全く異なるため、一見全く異なる性質を持つように思われるが、十分サイクル数を経れば、B は A と似た振る舞いを持つと考えられる。それは B の分子サイズが増加傾向にあるためである。A, B における恒等関数  $a$  の数の遷移を図 11, 図 12 に示す。B において、恒等関数  $a$  は減少中であることが分かる。また A においても初期には恒等関数  $a$  が全体の 40% を占めていたことが分かる。また C, すなわち集団数を 500 で固定した場合にも同様に上に凸の遷移を示した。C の 10000 サイクル目には left type の小さいポリマーと恒等関数  $a$  が混在していた。ゆえに B においても、さらにサイクルを進めることによって、恒等関数  $a$  は減少し、より大きい分子が台頭してくると思われる。

以上の重要な点は、

- (1) エネルギー的に解放された系ではエネルギーは線形に減少していく
- (2) 恒等関数およびポリマーがアトラクターである

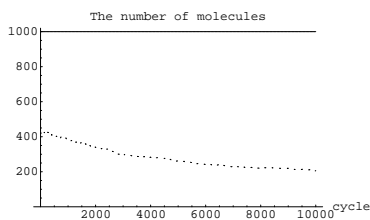


図 7 B の総分子数と分子の種類数

(3) 恒等関数相からポリマー相へと相が転移するの 3 点である。これは系にノイズを入れても同様の傾向が見られた。

## § 2 type 2

type 2 の系 (a, b, c, d) では、Step 5 を用いて系のサイズを動的に動かし、替わりに反応が一回起こるたびに系エネルギーを一定量増やすことにした。このエネルギーを熱流量と呼び、 $h$  と書くことにする。すなわち一回反応が起こるごとに、

$$E_{sys} \leftarrow E_{sys} + E_r[f, g] + h \quad (19)$$

と変化する。先ほどまでは  $h = 0$  であった。4 章で述べるように、この値は重要な意味を持つ。type 1 の実験結果より系エネルギーは線形に減少するので、サイクルごとに一定量の熱流量を与えてやれば、系はエネルギー不足で崩壊せずに維持できる。

図 13 と図 14 に b の実験結果を示す。6500 サイクル目を堺にエネルギーが増加から減少へと変化する。その後、線形に減少していった最終的に 18000 サイ

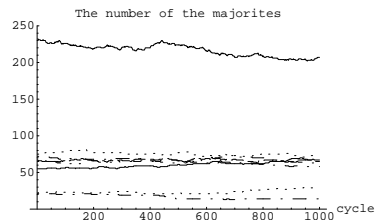


図 10 B の多数派分子の 10000 サイクル以後の遷移

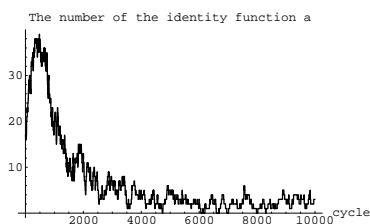


図 11 A における恒等関数の遷移

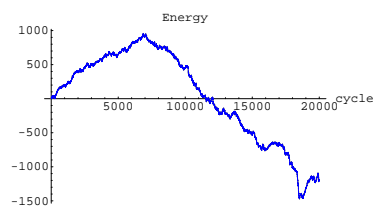


図 14 b の系エネルギー  $E_{sys}$

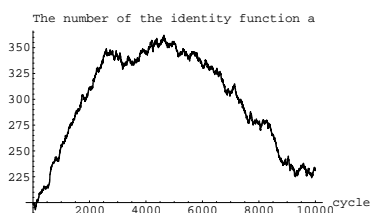


図 12 B における恒等関数の遷移

クル目で系は崩壊する．これは 6500 サイクル目を堺にしてエネルギーの減少の速度が変化することを意味する．6500 サイクル前後の分子の状態を調べてみたが、特に目立った違いはなかった．つまり 6500 サイクル目を堺に系がダイナミクスの点で相転移したと考えられる．また 6500 サイクル付近で系エネルギーが 1000 に達しそうになっていることに注意されたい．c は b よりも少しだけ熱流量を増やした系であるが、この系では、6500 サイクル付近で系エネルギーが 1000 に達してしまい、そのまま系エネルギーは増加し続け系は崩壊してしまった．つまり、ただ熱流量を増やすだけでは系を安定させることはできない．a では熱流量が足らずにエネルギーは減少してしまい、d では熱流量過多でエネルギーが増加して系が崩壊してしまった．0.89 と 0.9 の間に境界がある．境界より熱流量が多ければ、系は自身が持つ熱により崩壊し、境界より熱流量が少なければエネルギー不足で崩壊する．

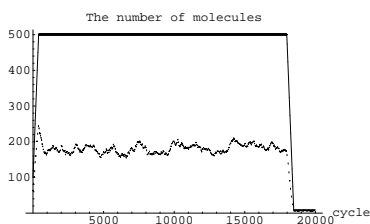


図 13 b の総分子数と分子の種類数

表 3 標準的な系

	系	$L_e$	$\eta$	熱流量	その他
type 3	I	1	0.5	0	
	II	1	0.5	0.75	
	III	1	0.5	1.5	
	IV	1	0.5	3.0	
	V	1	0.5	6.0	
type 4	i	1	0.0	3.0	
	ii	1	0.5	3.0	恒等関数を禁止
	iii	5	0.5	3.0	

### 3.2 標準的な系

話を元に戻して、標準的な系でシミュレーションを行う．つまり Step 4 を実行して、エネルギーが 0 に近づくようなエピソードを繰り返すようにする．話を簡単にするため、次の最も単純な規則を採用する．

規則 A：エネルギーが 0 に近づくようなエピソードであれば、もう 10 回同じエピソードを繰り返す．

これにより、系に反応速度のようなものが導入されたことになる．好ましい反応は好ましくない反応に比べて 10 倍起こる．表 3 に示す系でシミュレーションを行った．

#### §1 type 3

type 3 では熱流量だけを系ごとに変えて実験を行った．実験結果は以下のようになった．

- I では系 a よりも長く維持するが結局エネルギー不足で 6000 サイクル目で崩壊．
- II ~ IV では系は安定する．
- V では熱流量を処理できずに系は自身の持つ熱で崩壊する．

熱流量が大きいほど大きいポリマーで安定し（長さ 100 には達していない）、熱流量が小さくなるにつれて、ポリマーも小さくなり他の分子が混在するようになる．安定する領域が 0.75 ~ 3.0 と広いことに注意されたい．ただしこの値は境界ではない．

III の分子数、系エネルギー  $E_{sys}$ 、ノード数をそれぞれ図 15、図 16、図 17 に示す．これから分かるように系エネルギーは安定し、崩壊せずに系を維持

表 4 III の多数派分子

#	個数	大きさ	分子
1	123	1	a
2	80	9	right type ポリマー
3	40	3	rightH[a, a]
4	29	7	rightH[rightH[rightH[a, a], a], a]
5	26	5	rightH[rightH[a, a], a]
6	23	13	right type ポリマー
7	17	21	right type ポリマー
8	12	11	left type ポリマー
9	9	11	right type ポリマー
10	9	73	混合型
11	8	11	last type ポリマー
12	7	13	first type ポリマー
13	6	9	first type ポリマー
14	5	17	混合型
15	5	2	firstH[a]

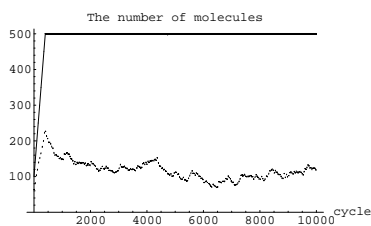


図 15 III の総分子数と分子の種類数

できている．ノード数も発散せずに 4000 台で振動している．また，10000 サイクルの時点での多数派分子を表 4 に示す．図 18 は分子 #1 ~ 5 の 10000 ~ 11000 サイクルにおける数の遷移を表している．この図からもそれぞれの分子が安定して存在していることがわかる．また恒等関数  $a$  の数を調べてみると，単調減少はしておらず，40 ~ 200 の間で振動して安定していることが分かった．

図 19 は表 4 に示した分子がお互いに互いを作りあう様子を示している．#1 の分子が関わる反応は多すぎるのこの図では省略している．矢印の根元が反応により消費される分子，矢印の先が反応後に生成される分子を表しており，点線は反応の触媒を表している．この図からわかるようにまず分子は触媒分子 #8, 10, 14, 15 と，反応分子 #2, 3, 4, 5, 6, 7, 9 に分かれる．触媒 15 によって反応は右に進み，他の触媒では反応は左に進む．反応する分子はランダムに選ばれるので，触媒分子の数によって反応がどちらに進みやすいかが決定される．このように可逆な過程を振動することによって，系は安定していると思われる．

## §2 type 4

最後に熱流量以外のパラメータを変更して実験を行った結果を簡単に紹介する．これらの系について

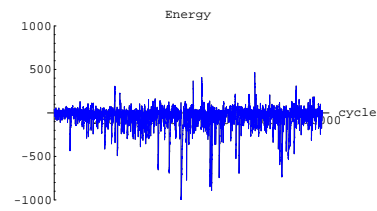


図 16 III の系エネルギー  $E_{sys}$

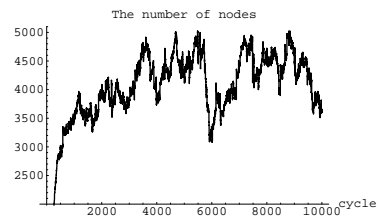


図 17 III の全ノード数

はまだ調査中である．

i は熱損失率  $\eta$  を 0 とした系である．この系では，熱損失がないため，熱流量として入ってくるエネルギーを消費する手段がない．よって系エネルギーは増大し，6000 サイクルぐらいで崩壊した．

ii は恒等関数  $a$  を生成しない系である．反応によって恒等関数  $a$  が生成されたときは，反応に失敗したとして生成された分子を系に加えないようにした．この場合でも恒等関数がある場合と同様に系は安定した．しかし，分子は十分に収束できず，分子の種類が 400 程度と非常に大きかった．恒等関数が存在しない系ではノイズに弱いと考えられるので，ノイズを弱めることによって，系が収束することが予想される．

iii はエピソード長を  $L_e = 5$  とした系である．この系も安定し，type 3 の系と同様の傾向が見られた．IV よりもエネルギーの振動の振幅が大きく，全ノード数が多かった．

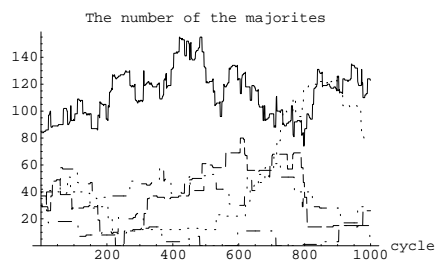


図 18 III の多数派分子の 10000 サイクル以後の遷移



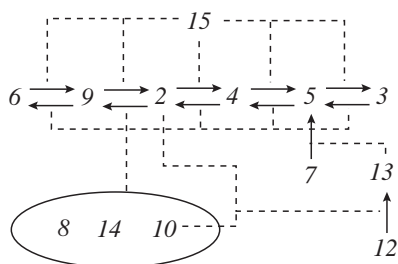


図 19 III の分子ネットワーク

#### 4. 考 察

3章で得られた結果をまとめると以下ようになる。

- (1) エピソードの繰り返しを行わない場合、ポリマー分子の巨大化に歯止めがかからず、分子のサイズが増加し巨大分子を生成するために系のエネルギーは減少し続ける。
- (2) エピソードの繰り返しを行わない場合、系に線形に熱流量を加えても、系は崩壊する。
- (3) 標準的な系、すなわちエネルギーが0に近くような反応を繰り返す場合は、系は安定する。ただし熱流量が大きすぎても小さすぎても系は崩壊する。
- (4) 標準的な系で熱損失率を0にした場合は、入ってくる熱を処理しきれずに系は崩壊する。
- (5) エピソードの繰り返しを行わない場合、恒等関数  $a$  の数はいったん増加した後、ほぼ単調に減少し、ポリマー分子に系をのっつけられる。一方、標準的な系では振動しつつ一定数を保ち、ポリマー分子と共存する。

モデルに熱流量と熱損失率を導入することによって、系は多様化して安定した。これは、熱流入がある非平衡系で、可逆な反応によって生じる熱損失を利用して系が複雑化したと言える。III では直線的な可逆反応系を安定に保ち、状態を振動させることで、熱流量を反応の損失で処理することに成功した。熱流量と熱損失は系が複雑化し安定する上で必要な要素であることが分かった。

熱損失は生命系が外部にする仕事に相当する。III は可逆反応系が外部からのエネルギーを仕事に変え、さらにそれを自己制御する機構を、簡単な反応の繰り返しの規則、すなわち反応速度から獲得したと見なせる。これは非平衡系からの秩序の創発である。

B と III はともに安定しているが図 10 と図 18 には、本質的な違いがある。B では分子の数に変動は少なく真に平衡に達しているのに対して、III では分子の数は激しく変動しつつも安定している。これは

は III が非平衡系で安定を保つために、過剰エントロピーを生成し続けていることを意味している。この系でのエントロピーの揺らぎは熱流量という形で負で現れ、これを消失させるため反応によりただちにエントロピーを生成して、局所的にエントロピーを最大にしていると考えられる。

生命系では外部エネルギーによって駆動された非平衡性により、非平衡再帰構造として生命を実現し、これを生命の物理的な基礎構造とする。非平衡性が強くなると、系の安定解は多重化し、内部パラメータにより解の不安定化や他の解への遷移が起こる。このような機構を下に、生命は直線的な非平衡性の勾配の中に円環変換（熱サイクル）を駆動させる。以上のような生命現象と同様のものが我々のモデルで創発できたと思われる。

#### 5. お わ り に

本稿では  $\lambda$  関数を用いたモデルを提案し、非平衡系での系の振る舞いを調べた。 $\lambda$  関数群の系で現れた性質が生命系とこれだけ似ているのは興味深い。

シミュレーションによる科学は作りこみになってはならない。自明性と簡易性、アナロジー、意味そして美しさのジレンマの中で、驚愕的な事実圧倒的なリアリティを付加することが「シミュレーションで理解する」ということなのだと思う。

#### ◇ 参 考 文 献 ◇

- [Bentley 03] Bentley, P. J.: Fractal Proteins, *Genetic Programming and Evolvable Machines*, Vol. 5, pp. 71–101 (2003)
- [Dittrich 01] Dittrich, P., Ziegler, J., and Banzhaf, W.: Artificial Chemistries - A Review, *Artificial Life*, Vol. 7, No. 3, pp. 225–275 (2001)
- [Fontana 90] Fontana, W.: Algorithmic Chemistry: A Model for Functional Self-Organization, in *A life II*, pp. 159–209, Addison-Wesley (1990)
- [Fontana 94] Fontana, W. and Buss, L. W.: The Arrival of the Fittest: Toward a Theory of Biological Organization, *Bulletin of Mathematical Biology*, Vol. 56, No. 1 (1994)
- [Păun 00] Păun, G.: Computing with Membraness, *Journal of Comput. Syst. Sci.*, Vol. 61, pp. 108–143 (2000)
- [Sipser 97] Sipser, M.: *Introduction to the Theory of Computation*, PWS Publishing Company (1997), 渡辺治他訳, 計算理論の基礎, 共立出版, 2000
- [Suzuki 97] Suzuki, Y. and Tanaka, H.: Symbolic Chemical System Based on Abstract Rewriting System and its Behavior Pattern, *Journal of Alife and Robotics*, Vol. 1, pp. 211–219 (1997)
- [Suzuki 00] Suzuki, Y. and Tanaka, H.: Chemical Evolution among Artificial Proto-cells, in *Proceedings of Alife VII*, pp. 54–63 (2000)