

タイル型分子の反応モデル

Tile Automaton: a model for metabolism

東大教養 山本知幸 金子邦彦

1 はじめに

並列性のあるシステムを構築、制御することは物理学や工学、政治経済の世界での難問である。「設計通り」にゆくことはあまり多くなく、安全係数に頼って安定している場合もあれば破綻を来している場合もある。

その原因の一つとして考えられるのがダイナミクスの多義性(因果律が一对多/多対多でしか記述できない)である。論理やダイナミクスの適用条件が環境に依存する場合、もはや因果律は一对一ではなくなる。例えば、それは拡大図は描けても、全体像には矛盾が生じるもの-代謝系のマップ、経済、脳(?)-あるいは、運動(状態数が実数)が絡んでくるもの-生物の発生過程、自立分散系における制御-などであるが、ここでは代謝系の形成に関してモデルを構成した。また、複雑なシステムに現れる「多義性・階層性・自己組織」の関係とは何かということを見出すための思考の枠組としても Tile Automaton を提案する。

2 代謝系

代謝は、細胞の内部で、要素が混ざりあった状態の中で起こる一連の化学反応である(その過程をトレースすると複雑な図形になって、ここには書けない)。これに手を加えることは難しいのは、入り組んだマップを知ることのみならず、それが何を「意味」するか理解することが困難だからであると考えられる。

各部分は書けても、全体像を把握できないのは部分が周囲と関係を持っているからである。それは雑音ではなく、必要な情報である。個々の過程自体が複雑であることは言うまでもないが、反応が分ったあとどう全体像をつかむかについて考えてみたい。現在の所、並列に実行される動的ネットワークを記述する有効な方法は見出されていないし、そこには陽に書き下せる論理は存在しないかも知れない。

ある時点である場所にある物質が存在するということが何を示すか。ある反応を進める要素というだけでなく、それが存在することで他の反応に影響を及ぼしていることも考えられる。非常に多義性を含んだシステムである。

システムには、何段階ものコンテキストの「層」が存在する様に思える。自己組織的に形成される過程で、意味を持たなかった部分が意味を持つようになるとか、他のコンテキストとの相互作用で新しいメタ=コンテキストが生まれるといったことが起きていると思われる。そのようなシステムを構築するには、どうすべきであろうか。これがこの研究の中心的テーマの一つでもある。

3 モデル

モデルは次の要素から成っている。

- 樹目(セル)に区切られた空間中に、セルがつながって構成されたタイルが存在、運動する“世界”
- タイルが接触すると“ルール”にしたがって反応が起こって、タイルが分裂、変形、生成、消滅を起こす

目的:ニミマルなルール(の集合)から、複雑な振舞いをつくり出し、メタダイナミクスが出現するかを見出す。例えば、タンパク質の機能は形で決まっている。形で記述されるルールで、代謝系がどこまで形成されるだろうか。

CAとの違い:タイルの形(セルの「つながり」)という関係が陽にコードされている。形という階層でのルールを書くことが出来るため、分子との対応をつけやすくなる(系の持つ情報量の振り分け方の違い)

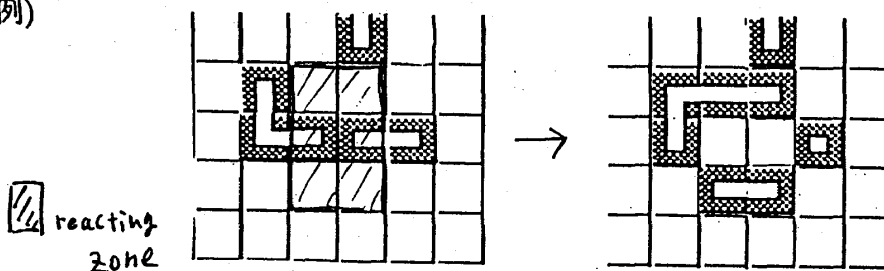
4 ルール

基本ルール:

世界からランダムにタイルを一つ選び、他のタイルに接触していない場合はランダムに1移動かす。接触している(または動いて接触した)タイルがある場合は

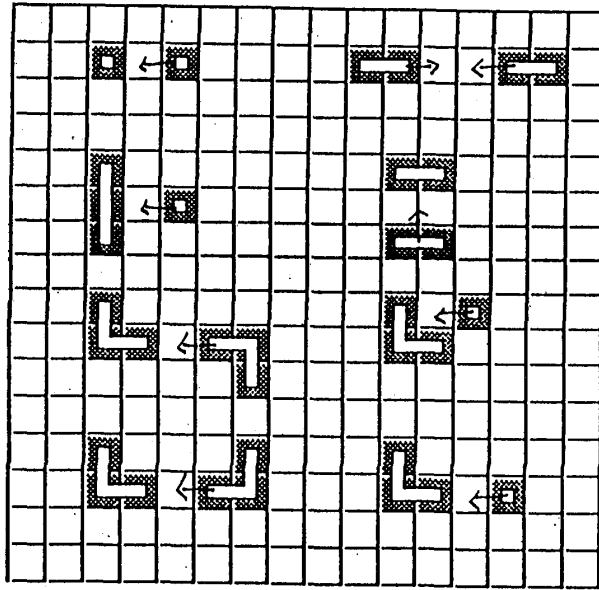
1. 異なるタイル同志が接触した面の近傍の和 (reacting zone) が反転する。
2. 反転して生成された部分と、反応に加わったタイルの残りの部分が接触している場合は付着させる。
3. 反応に加わっていないタイルと接触した場合は付着させない。

(例)

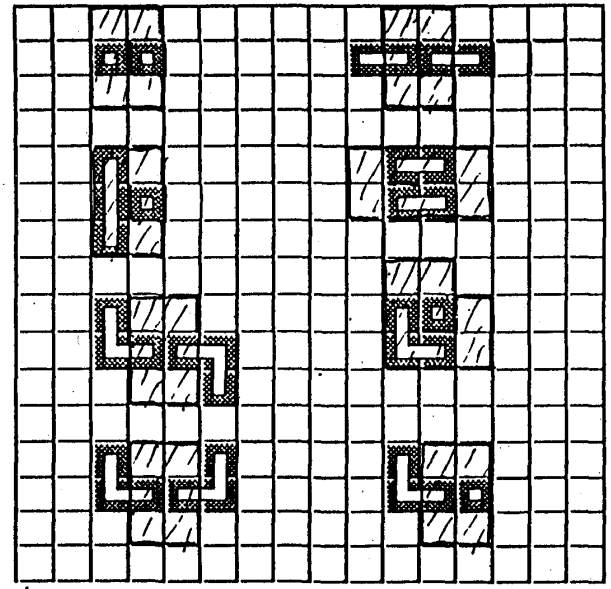
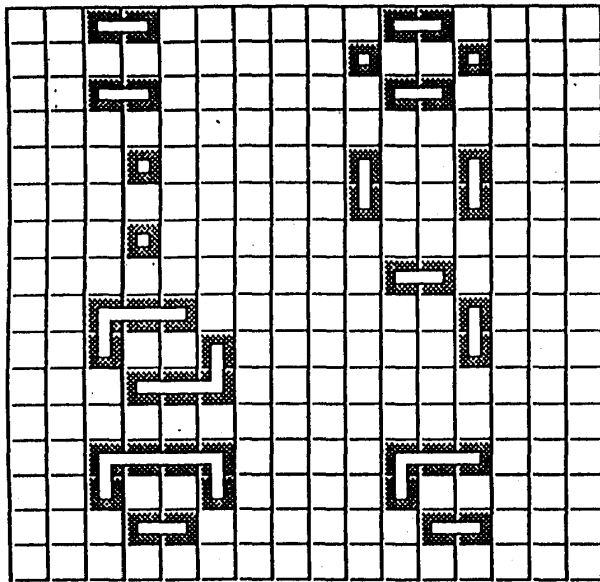


5 練習問題

以下のタイルの反応を評価しなさい



解答



1

Stickey RateRule MoveByForce Ge

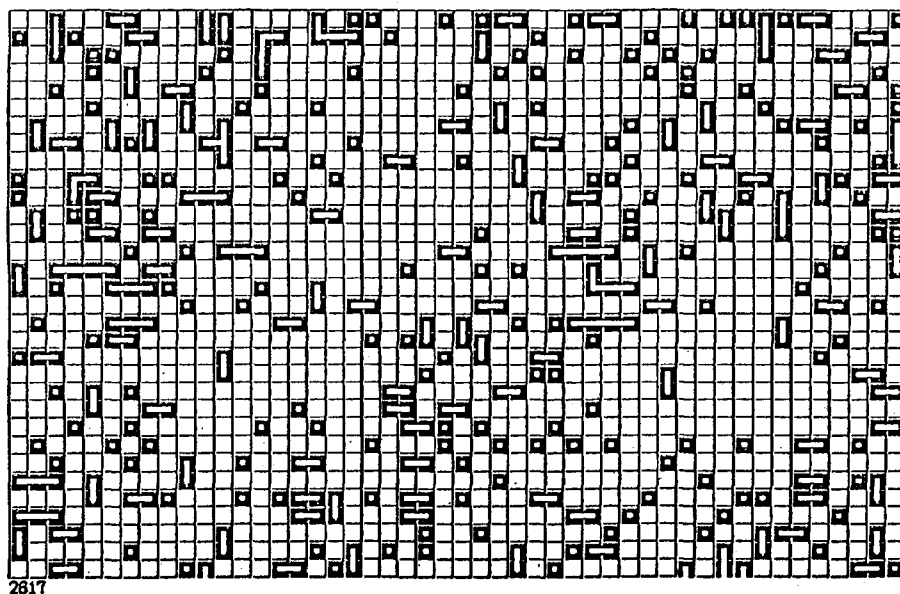
: 接触面

□ : reacting zone
この枠内と反応する。

6 基本ルールのみの場合の結果

- 初期条件に依らず、密集した形になる
- 形のバリエーションはほとんど無い
- 大きなタイルが出来ても、他のタイルに接触しているためにすぐに分解される

(例)



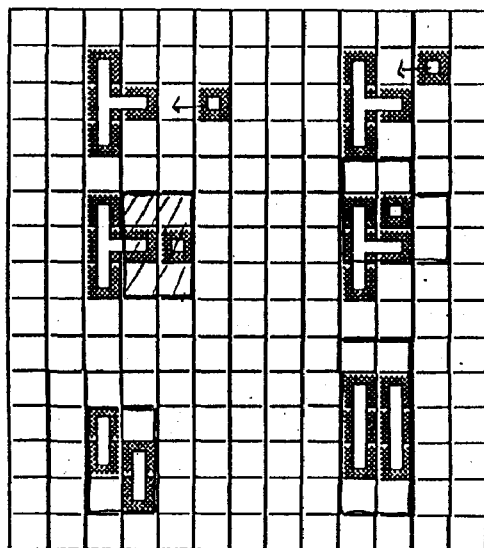
2817

48x32 100個の■からスタート.

7 反応割合ルール

reacting zone 内にタイルが $1/2$ 以上ある場合は反応が起きない
 →大きな構造の崩壊が抑制されるが、密集して落ち着くのはおなじ

(例)



□ 反応しない

▨ 反応する

8 検討

- タイルの形のバリエーションが少ない理由
 - タイルが伸びるための空間が不足している
- 時間的秩序が見られない理由
 - ランダム・ウォークの構造を破壊する力が大きすぎる

基本ルールに変更を加える必要がある

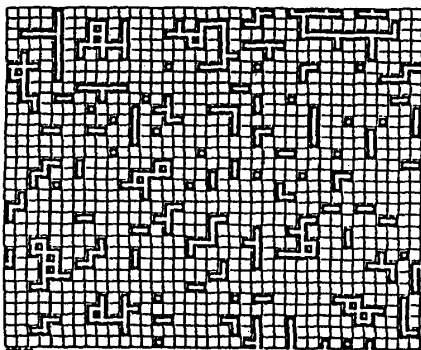
- 付着ルール
 - 基本ルール 3 を「付着させる」に変える
(より大きく環境に依存)
- 場の導入: 運動のルール
 - 符号は体積の偶奇で決める
 - 距離の 2 乗に反比例する

9 結果

1) 付着ルール

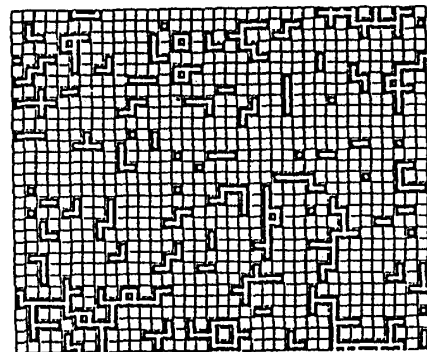
- タイルは伸びられるようになり、形が多様になった
- 各々の形の安定性は見られない
- 大きなタイルの出現

(例)



Stacey Move/Force :Slow/Value :5e10, list 37 x 31 at 100 Wed Jul 28 15:18:20 JST 1993

turn 87568



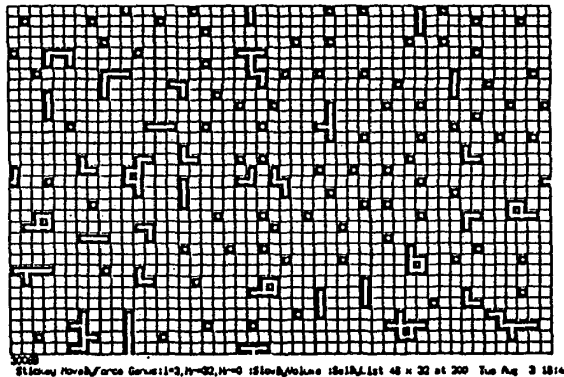
Stacey Move/Force :Slow/Value :5e10, list 37 x 31 at 100 Wed Jul 28 15:18:20 JST 1993

turn 99999

2) 付着ルール + 場

- タイルの大きさは抑制される
- 割合ルールを入れるとクラスターが出来る
- クラスター化すると、動きが緩慢になる。より長い観察時間が必要

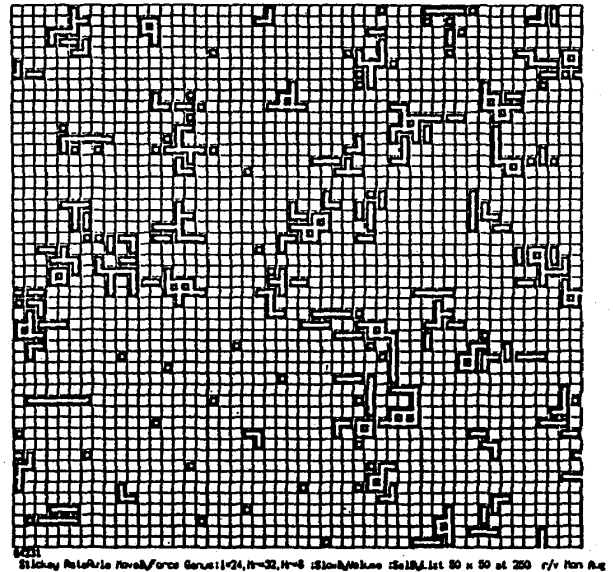
(例)



turn 30069

turn 64231

付着ルール



10 討論：課題と展望

- 代謝系と何が対応するか？
例えばクラスター状態がタンパク質や酵素の働きをし得るのではないかとと思われる。
(相手の識別が可能?)
- 分散型計算機としての応用
代謝自体、一種の計算と見ることも出来る。タイルを2次元メモリ上のビット、反応を演算と考えると並列計算が起きている。しかし、因果律は多対多であろう。
- ルールのもつ情報量の評価
アルゴリズム的長さの結果との関係

ただし、明確な emergent behavior は(まだ)発見されていない。如何なるものが現れるかも、あまり予測出来ていない。

11 まとめ

- 見たいもの
 - ルールの細部によらずに出現する構造
 - その出現の鍵を握る“ツボ”
- 見たいものが見えそうなルール
 - 割合・付着など、「周囲の状況に依存する」もの
 - 例えば小さいものから取り除くフィルターを掛けても改善されなかった
 - コンテキストの出現→自ら複雑化できる

局所的に処理をするルールは、期待以上の働きをしない。一見無意味に見えても、周囲とのインタラクションのあるルールの方が系に豊かな振舞いをさせることが出来る様である。

現時点では、まだ代謝系のような振舞いをするタイルを構成できていないが、この構成するという作業を通じてそのようなシステムの理解をすることが出来るのではないかと考える。