

タイル型分子の反応モデル 2

Tile Automaton for Metabolism II

山本知幸*(東大教養)

1 はじめに

ここでは生命、とくにその基盤である代謝系に注目してそのプロセスと意味を考えることにする。手法としては人工生命的であり、次のような方針をとった。

- モデルは極端に単純化させる
- ルールはあくまでも即物的に (意味を過度に作り込まない)
- 局所的なルールのみ考慮する
- 内部状態を (必要以上に) 持たない

とくに、形 (空間中の構造) とのその動的ネットワークに着目して理解しようとしている。あくまでも見えるのは「形」とその位置的関係であるが、そこから観測された「状況」を作るプロセスというものを中心にして理解する手段を模索して行きたいと考えている。

一言でいうと、コンピューターゲーム “テトリス” のタイルが、任意の大きさを持ち、自由に運動して反応して形を変えて行くというのが、最も近いようである。

1.1 動機

生きている状態とは何かということを知りたいとする。生きているということは静的な状態ではなく、最低限の定義でも常にエネルギーを使用できる形に変換し続けることから、本質的に動的であると考えられる。

生体内では莫大な種類/量の物質が並列に反応を起こしているが、このことを理解するためには、如何なる手段が可能だろうか。徹底的に素な反応にまで分解すれば、一応何が起きているかを記述することは (その量を見捨て、原理的には) できる。しかし、それで理解したことになるかという話が別である。現れる全ての物質を表にして、それらの間の結合を調べ尽くして空欄を数値で埋めれば主要な経路を抽出する事は可能になる。勿論その重要性は認めるが、そこでの理解というものは表の中の数値を直接把握して理解できない以上「主要な経路」によるものであるから、背景の込み入った因果関係を見ないという事になる。ここでの背景の因果関係というのは、例えばスクラッチから代謝系を設計したり、その中でどの部分をどういじると目的を達せられるかということが予測できるようになるための、非自明かつ非明示的な情報ということと考えて頂きたい。

背景の因果関係は、システムに操作を加える時に顕在化する。ある部分の効率を上げたことが他の部分の反応を抑制したり、独立性の高い筈のモジュール間が干渉したりすることは十分起こり得る。そう行っ

*E-mail: yamamoto@complex.c.u-tokyo.ac.jp

ことをどうやって克服して行けると考えられるだろうか。少なくとも、完全な記述による理解という希望は叶えられないだろう。そうすると、非自明な因果関係を相互作用によって引き出して、行為者としての我々の内部における記述が首尾一貫した—consistency が成立する—場合をもっていうとしてこの中での定義とする。先に内部の記述をつくってからもう一度現実を見つめ直すという「人工」科学的な方法はこの意味で重要になると考えられないだろうか。この場合内部の記述が豊かでないと、自然も豊かに見えないのであるから。

2 目的

2.1 謎

細かく分解してみると細胞の中でも外でも変わらない「化学反応」であるのに何故それが細胞膜の中で行なわれると「生命」と呼ばれるのか。ここでの目的は、その「生きている」に対応する現象を構成することにある。この研究では、まず何故代謝系が複雑であるのかを理解したい。代謝系が複雑であることの原因は複数ある筈だが、まず一つの物質を作ることが目的にあるのではないからと考えることにする。例えば一つの生産物を目的とするような、通常の化学の思考とは異なる。さらに、複雑であるだけでなく、それが維持されていることも併せて考えなくてはならない。

どのように問題を定義するか考えるために、先達の手法に触れておきたい。我々が仮想世界または試験管の中に構築してきたシステムで、その様な特徴を持つものはあるだろうか。細胞から抽出した成分に多くを頼る自己複製系は別として、残念ながら存在しない。自己組織して維持するシステムは、CA でのスパイラルやハイパーサイクルをはじめとして多数存在するが、一度構造が出来てしまうとそこで進化が止まってしまう、構造自体の多様性はなくなってしまう。この場合はミニマルな条件を満たしているとはいえるが、釈然としないものがある。そこから、質的な進化を遂げる可能性があるだろうか。最初に出てきた、最も速く増殖する構造が世界を埋め尽くすのであるから、その構造を基盤にしたより高次の構造が出来るという可能性は低いと思われる。それにはスパイラルやハイパーサイクルのレベルでの相互作用と多様性が必要である。そうして、より高次の階層をつくりそれぞれが共存できるようでなくてはならないと考える。

2.2 「状態」と「情報」の違い

我々が複雑な対象を理解する場合、何らかの方法による縮約化がなされると考えてよいだろう。このとき対象は捨てられる部分である「地」と、注目される部分である「図」に分類される。ここで、図の部分の対象の内部で実効的に用いられる情報であると考え。つまり、系全体の「状態」として持っている情報と、「図」として実効的に利用される情報は異なる事がある。この、「図としての情報」を如何にして抽出するかということと、「図(あるいは背景の非自明だが重要な因果関係)とは何か」ということがこの研究の中心となる課題である。書き込むことはできても読み出せないメモリーと同様に、「そこにある」情報を使うことができなければ実効的には無意味である。

さらに情報のみでなくそれを取り出すプロセスも内在しているのであるから、「解釈」ということも「状態」依存していると考えてよい筈である。

2.3 情報生成

階層的になったシステムは、複数の文脈を持つ。ただし、それぞれが完全に独立しているという訳ではなく、あくまでも「見かけ」上の話である。それらの間の結合のために、システムを解釈する時はそれらの状態の組合せを考慮しなくてはならないために複雑性が増大してしまう。システムもその組合せの複雑さにより情報量を稼いでいると考えられる。

ここでは、解析するよりも構築する方に重点を置くことにする。階層的なシステムが非自明な初期条件から組織されなければならない。新たな文脈や階層を自ら作り出すというプロセス—自己発展するシステム—を作りたいと考えている。

発展するために必要な条件は何と考えられるか。文脈が増えるためには、そこに多義性がなくてはならない。つまり、一つの文脈しか許されないような厳格なシステムでは進化が起きないと考える¹。多義であるというのは、解釈体系(階層、文脈)によって異なる意味(時間発展)を返す状況であるとする。このような状況は、代謝系や生態系などの複雑なシステムでは自然と受け取れるが、人工のモデルで実現可能だろうか。様々な解釈を許容するということは、論理的思考のアプローチとは正反対の思想である。

3 モデル

このモデルは、樹目に区切られた世界の上を、樹目1つを占めるセルがつながって構成されたタイルが存在、運動し、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、消滅を起こすというものである。

基本ルール：

タイルを運動量に従って並列に動かす。運動量は各セルに等分配する
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(reacting zone)が反転する(図1)。複数の箇所で接触している場合は、その和をとる。
2. 反転して生成された部分と、近傍のタイルが接触している場合は結合する(図2)

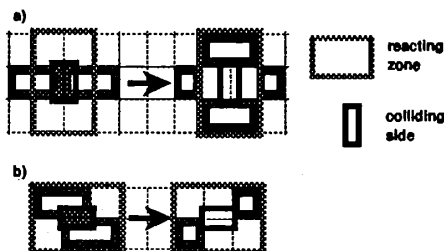


図1: 基本ルール1。セルの占める面積は保存しないことに注意

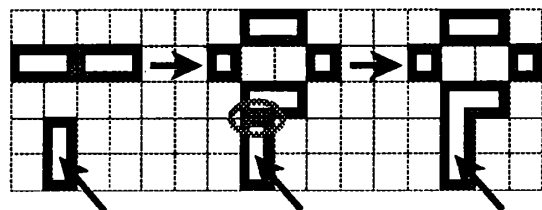


図2: 基本ルール2。矢印で示したタイルは反応には参加していないが、反応でできたタイルと結合している。なお、運動量は平均される

さらに、次に述べる補助ルールを加えた。

● 反応割合

reacting zone 内にあるセルの割合で反応が抑制される

パラメータは反応が起きる上限と下限を決め、それぞれ r_H 、 r_L とする。 $(r_H, r_L) = (0.5 \sim 0.6, 0.0 \sim 0.2)$ 程度とするのが標準的。このルールの導入により、セルの増加/減少をコントロールできる。密度が高い部分を反応させてしまうと、セルが減少するためである。また、何らかの方法で反応を抑制しないとタイルどうしが接触して分子機械的な構造を作ることができなくなる。なお、接触しているタイルがクラスターを作っている時はその集団ごとに反応性を判定する。大きなタイルがあれば、離れたところからの情報が伝達されることになり、システムの複雑性を増加させる。また、表面積が大きい

¹メタレベルに飛べれば別だが

程反応が起こりにくく生き残る可能性があるので一形が複雑で大きなタイルを出現させることができるようになるので—非明示的には、大きな構造の出現/崩壊を制御することになる。図 3を参照されたい。

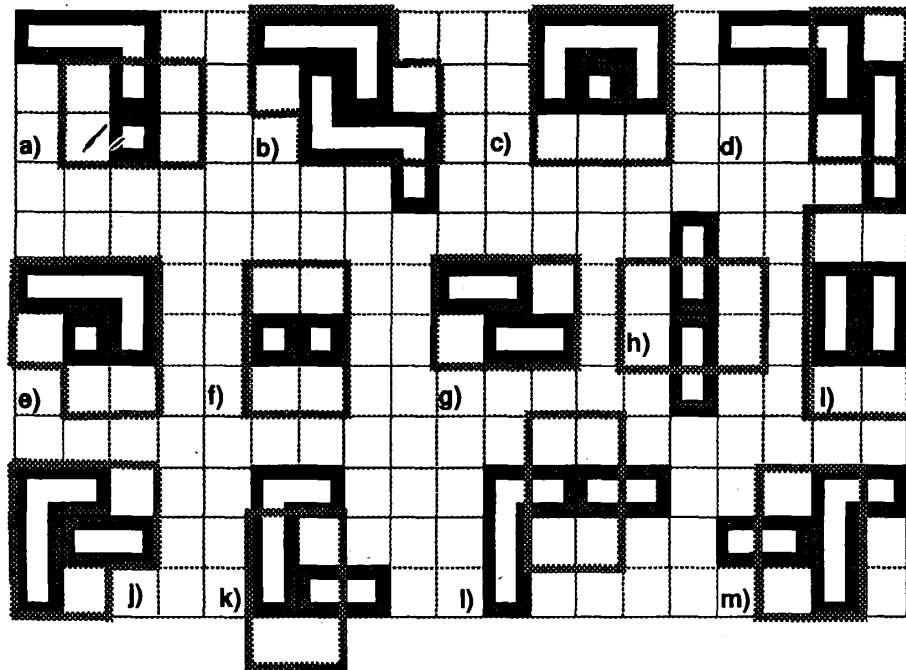


図 3: タイルの接触の例。同じタイルでも位置によって reacting zone に占める面積が違うのに注意。それぞれのセルが reacting zone に占める割合は、a: 2/6, b:8/10, c:6/9, d:4/6, e:5/8, f:2/6, g:4/6, h:2/6, i:4/8, j:6/8, k:3/6,l:2/6, m:4/6 である。

- 反射

割合ルールで、反応しなかった場合は弾性衝突させる。クラスターの組み換えを促進させる。

- バネ

衝突を防ぐ。運動方向へのカップリング

- 第二最近傍 (自分を中心とする 5×5) 内のタイルを結合
- パラメーターはバネの自然長 x_0 と定数 k

反応によってバネの数は増減する。このために反応の前後でエネルギーは保存されない。吸熱/発熱反応が起きていることに相当する。とくに開境界になっているときにはここで供給されるエネルギーがタイルを静止させないために重要になっている。

- 抵抗

基準速度 v_{ref} を越えたタイルはその超過分に対し速度に比例する抵抗をうける。ここでは $v_{ref} = 1.0$ 、比例定数 $\nu = 0.5$ を標準値とした。

なお、時間刻幅はタイルが重なることの無いように、毎ステップに高々1セル分だけ動けるように調整している。そのため、時刻が同じでもそれに至るのに要したステップ数は異なることになる。

最後に、昨年からの改良点について触れる。

- 運動量の導入 (以前はランダムウォーク)
運動方向に意味を持たせ、反応の文脈と干渉させ、より複雑な挙動を起こさせる。
- 実数状態の導入
ただし、表示/反応/運動する時は粗視化している
- 並列アップデート
以前は 逐次アップデートをしており、この場合自明なクラスタリングが起きていた。一度渋滞すると、全てのタイルが正しい順番で正しい方向に動かなくてはそれが解消されないために、反応も運動もかなり抑制されてしまっていた。

4 結果

統一的な解釈には到達していないので、概要と幾つかのトピックに関して簡潔に述べることにする。まず自明な終状態としては、以下のようなものが挙げられる。

- 周期: タイルが小さなもの 2 つまで減ると、周期状態に落ちやすい (一般には起こりにくい)
- 合体: 一つのタイルに結合して、成長してしまう
- 中の詰まったクラスターとなって止まる
- タイルが全て流れ落ちて終わる (境界が開いている場合)

これら自明な終状態は目で見て明らかであるが、そうでないものを分類することはあまり進んでいない。たとえば周期境界条件ではタイルが外に出て行かないために、タイルが複数存在すれば何らかの反応が起きている。なお、周期境界条件では 3 つの独立なセル (セル一つのタイル 3 つ) からはじめた場合でもタイルが空間全体に広がるのが一般的にみられる。

4.1 増殖

話をわかりやすくするために、ここでは境界をオープンにする。ここでは世界の端に接触したタイルは落ちてしまうので、運動量と運動エネルギーが減少することに注意されたい。そのためにバネの導入がここでは必須になる。

初期条件におけるセルの数だけが異なる 2 つの実行結果を示すことにする。セルの数はそれぞれ 256 個と 255 個とした。これを、それぞれ「世界 256」、「世界 255」と呼ぶことにする。その他のパラメーターは全て同じで、システムサイズ 96×72 , 反応割合上限 $r_h = 0.55$, 下限 $r_l = 0$, バネ自然長 $x_0 = 2.0$, バネ定数 $k = 0.1$, 初期条件では x, y 方向それぞれ中央の 50% の部分にセルをランダムに配置した。世界 256 については図 4, 5 を、世界 255 については図 6, 7 を参照されたい。

この僅かな差で「生死」が分けられる。世界 256 の方は少なくとも時刻 4000 までの存在が確認されているのに対して、世界 255 の方は時刻 1000 付近にでタイルが外に落ちて消滅してしまう。過程をおって見ても、衰退の明らかな証拠らしいものは見当たらない。むしろ時刻 500~900 では世界 256 の方が衰退しているように見える。

では、先に世界 256 の方の時間発展を追うことにする。まず、時刻 0 では単純な形のタイルしか無いことに留意されたい。時刻 100 ではすでに大きなタイルが出現している。ここまでに約 400 ~ 800 ステップ要

している。この時点では初速の方向により幾つかの地点で衝突がおこって小さなクラスターができています。小さなクラスターは寿命が短いので、あるものは既に繋がって先にのべたように大きなタイルを形成した。

時刻 200 ではすでに多くのタイルが世界から落ちている。中央部左よりにタイルが集中しているが、その他のクラスターは既になくなってしまい、生産を続けるもののみが残っている。大きなタイルが孤立しているわけではなく、小さなタイルが取り付いていることに注意されたい。時刻 300 から 900 にかけても同様にタイルの多様さが維持されているという傾向が続く。世界の周辺の孤立したタイルは生産ができないので流れ落ちるのみである。時刻 900 までではこの世界は衰退に向かうように見えるが、その後もタイルの生産をし続ける。時刻 4000 ではかなり大きなクラスターを作っている。内部もかなり詰まっているが、ここに到達するまでにはかなりの時間がかかるのでまだ解析に着手していない。周辺部ではかなり活発に生産活動が起きている。

一方、世界 255 の方は時刻 800 においてすでに滅亡寸前である。時刻 400 までは世界 256 と同様、タイルの分布は豊富である。ここまではこちらの方が繁栄しているようにみえるにも拘らず、時刻 500 を過ぎた頃からタイルの間隔が疎になりはじめる。生産が起きてはいるが、流出するタイルを補うには不足しているようである。初期条件における僅かな違いが、長時間の後にこのように決定的な差をうむのである。

その構造自体が取り出されたわけではないが、タイルの増殖は生産を続ける非自明な構造が形成されることによりなされる应该说よいと思われる。ただし、ローカルには割合ルールにより、reacting zone 内のセルの割合でセルの増加率をコントロールすることができる。確かに r_H を 0.5 にしてしまうと、半分より少ないセルが反転するのであるから必ずセルが増えることはわかる。0.5 ではセルの数は変わらず、それ以上では減少することを併せて考えるとここで用いている 0.55 ~ 0.60 では減少もありえ、自明とは言い切れない。しかし「増える」方向へ陽に誘導するルールは他に無く、さらにタイルが次々に世界から流出するという条件下で反応を続けるためには不十分であろう。「プロセス」という運動方向の構造も併せてもたねばならないと考えている。このことを、内部での文脈から増殖する方向が選ばれたと考える理由としたい。

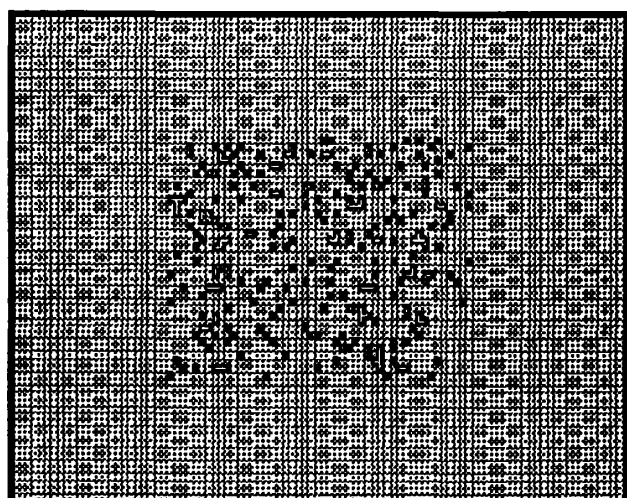
ここでいう「タイルの増殖」は、単純な複製とは異なる。図 8、9 に世界の中にあるタイルと世界から落ちたタイルそれぞれのヒストグラムを示した。時間依存のグラフ(それぞれ上・中段)を見ると少なくとも定常ではないということはわかる。合計(下段)のヒストグラムをみるとサイズ依存性は指数的に減衰して行きそれから大きく外れてはいない。特定のタイルが特に多いということはなく、特定のタイルのみを作るような単純な複製は行なわれていないことが見てとれる。

5 検討

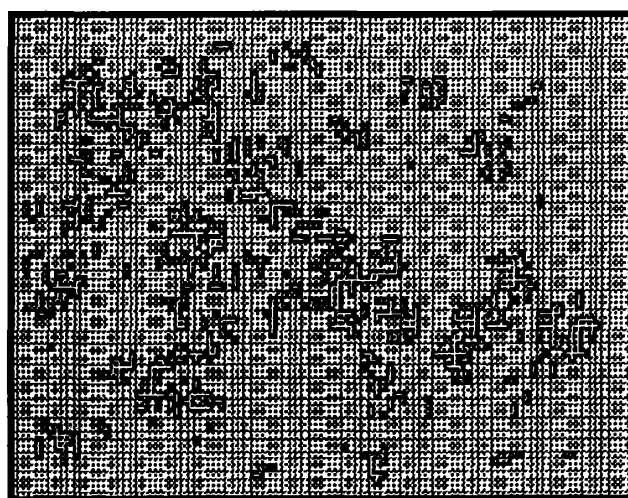
5.1 何が起きているのか

世界 256 のように増殖を続ける状況が出現したが、これにはどのような意味があると考えられるだろうか。相互作用が連鎖していないと、自明な終末を迎えてしまうということは、経験的に言うことができる。適当にパラメーターを選んで小さな孤立したクラスターの中でしか反応が起きていないようにすると、見ていることのできるくらいの時間のうちに一つにまとまるか、割合ルールにより反応が抑制されるまでに密に固まったクラスターになってほとんど反応を止めてしまう。

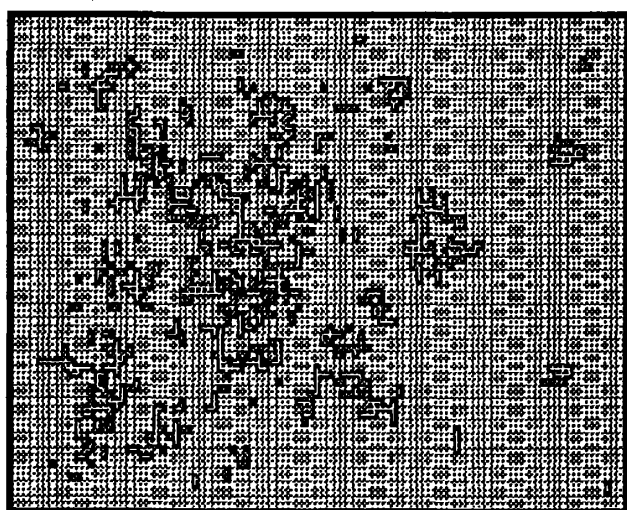
ライフゲームと違って、タイルは反応しなければ自分の形を維持したまま運動し続けることができる。つまり、接触しないかぎり反応が起きない。1 つだけでは全く意味をなさない。また、その大きさと形はセルがつながっているかぎり自由であるから、コネクションの形態とサイズが可変であるといえる。とくに反応割合の判定はつながった一連のタイルの集合ごとに行なうから、衝突/反発して集合のメンバーの変化が起きた部分とは離れた領域の反応をコントロールし得る。こういったことから、サイズの異なるものを同時に扱うことによる複雑さの進化が見られる。



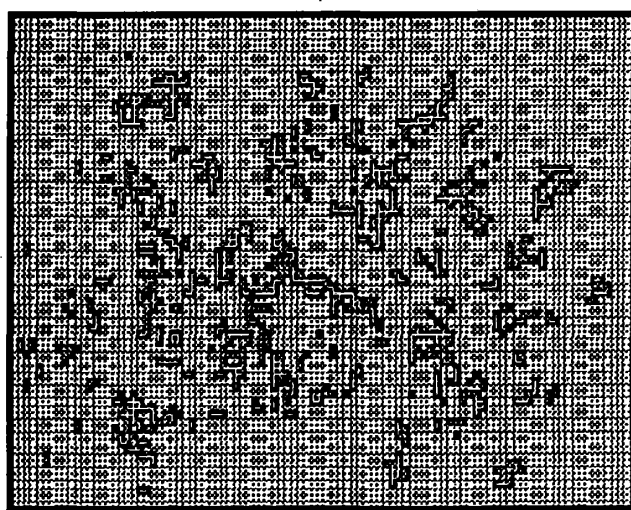
time: 0



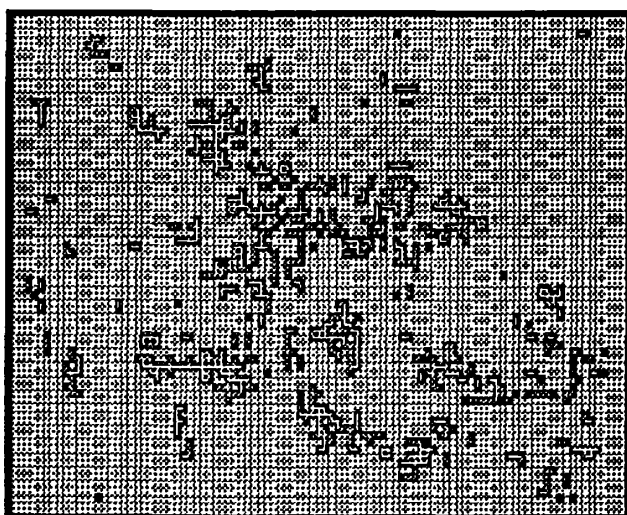
time: 100



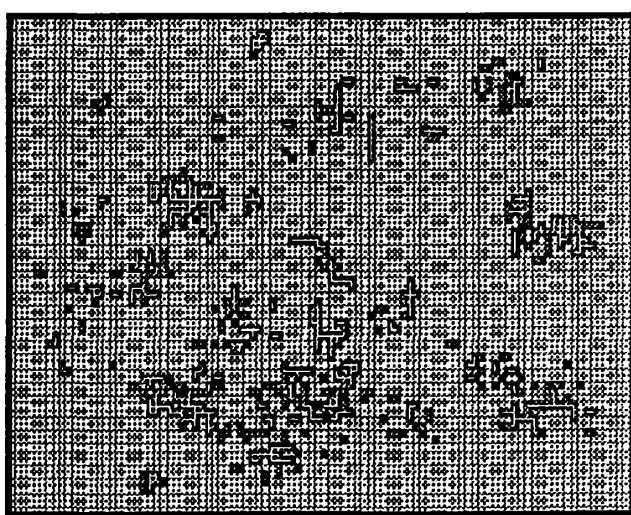
time: 200



time: 300



time: 400



time: 500

図 4: 世界 256。時刻 0 から 500 まで

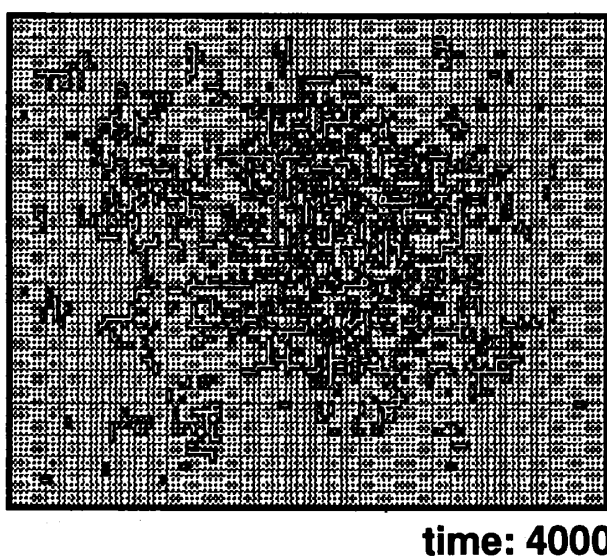
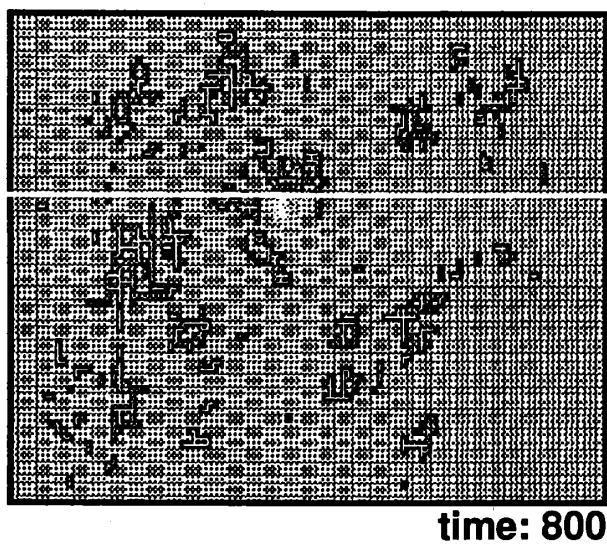
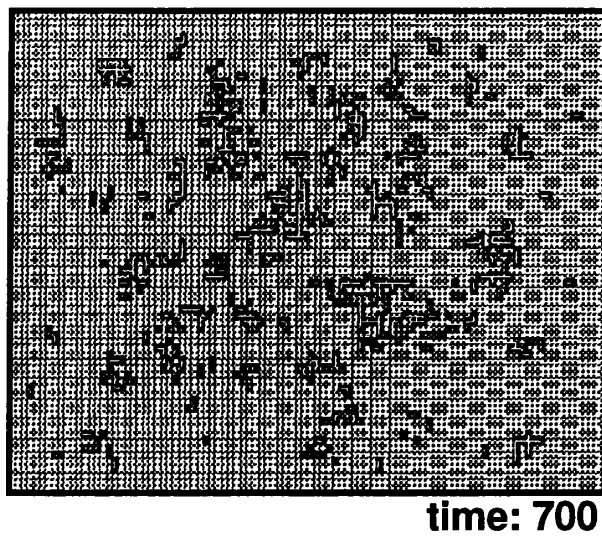
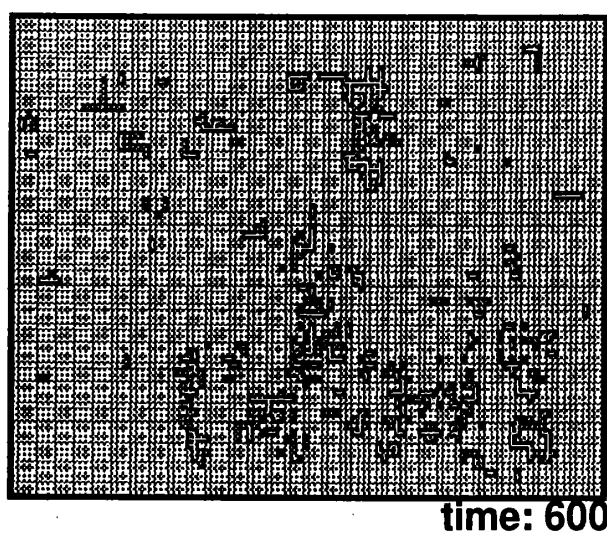
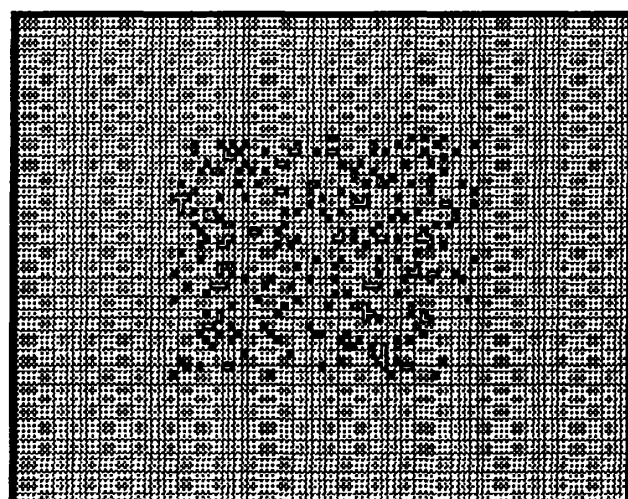
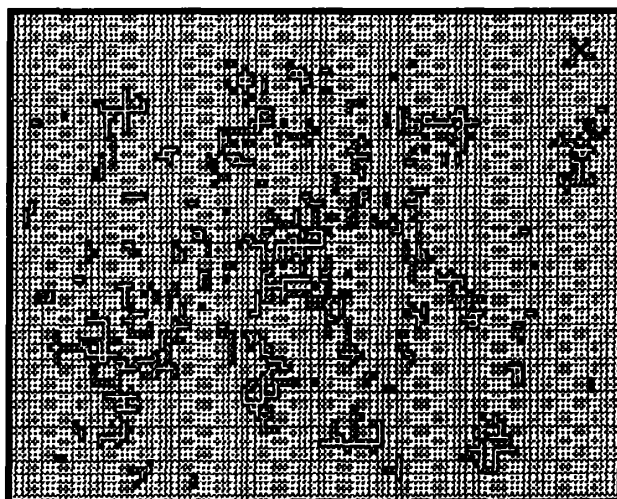


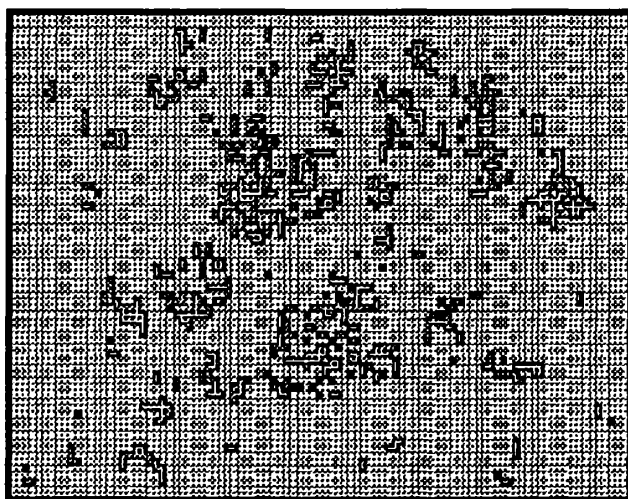
図 5: 世界 256。時刻 600 から 900 まで、および 4000



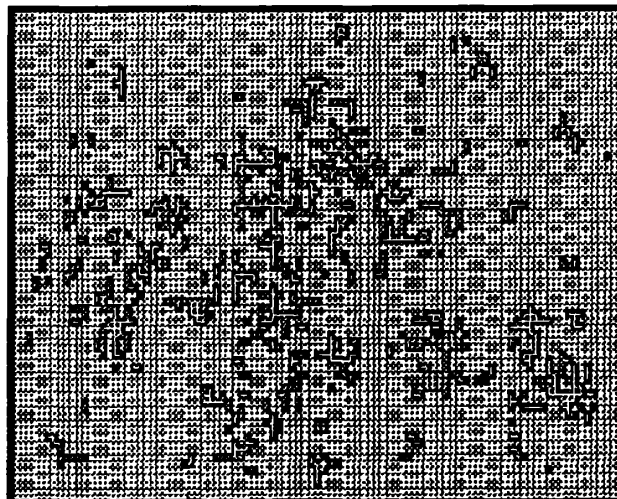
time: 0



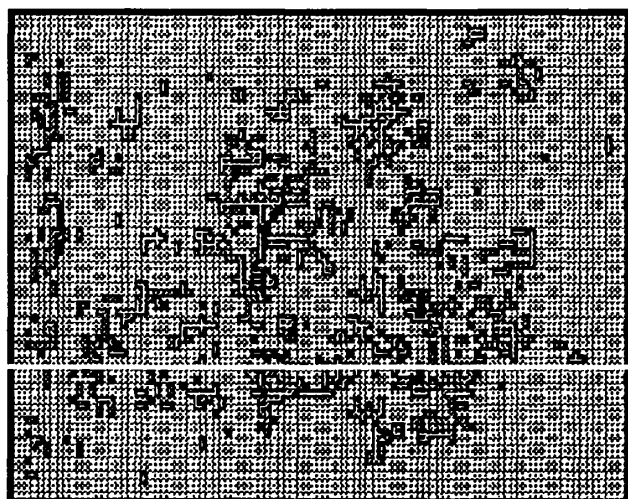
time: 100



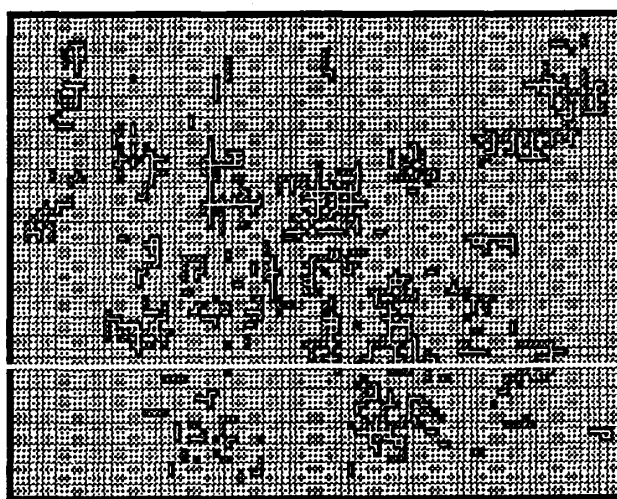
time: 200



time: 300

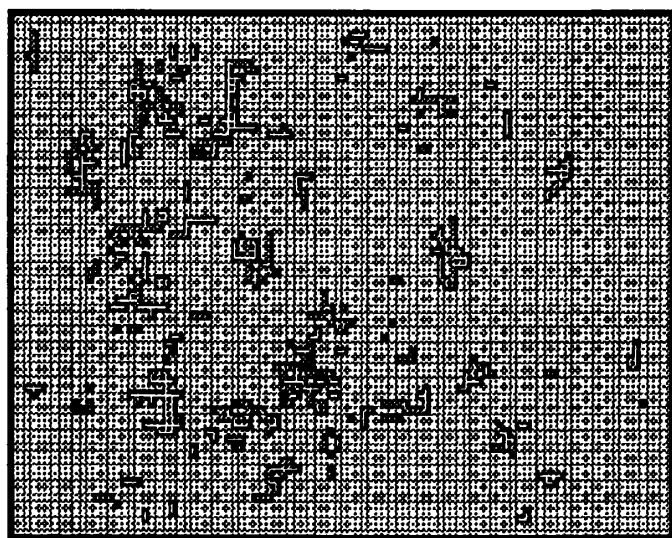


time: 400

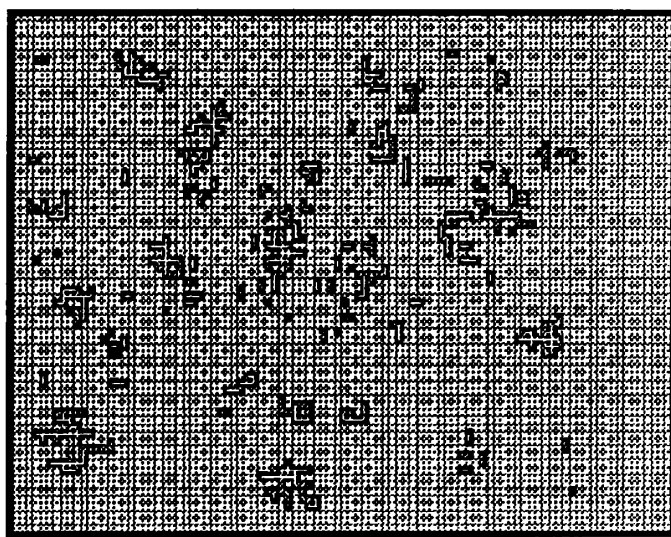


time: 500

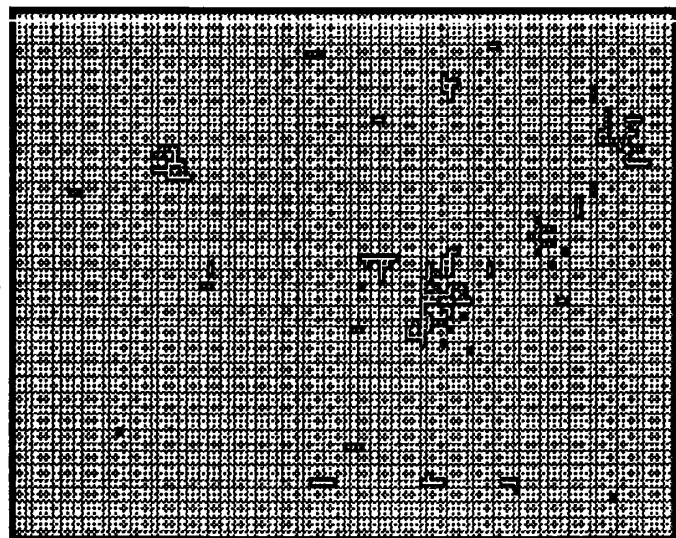
図 6: 世界 255。時刻 0 から 500 まで



time: 600



time: 700



time: 800

図 7: 世界 255。時刻 600 から 800 まで

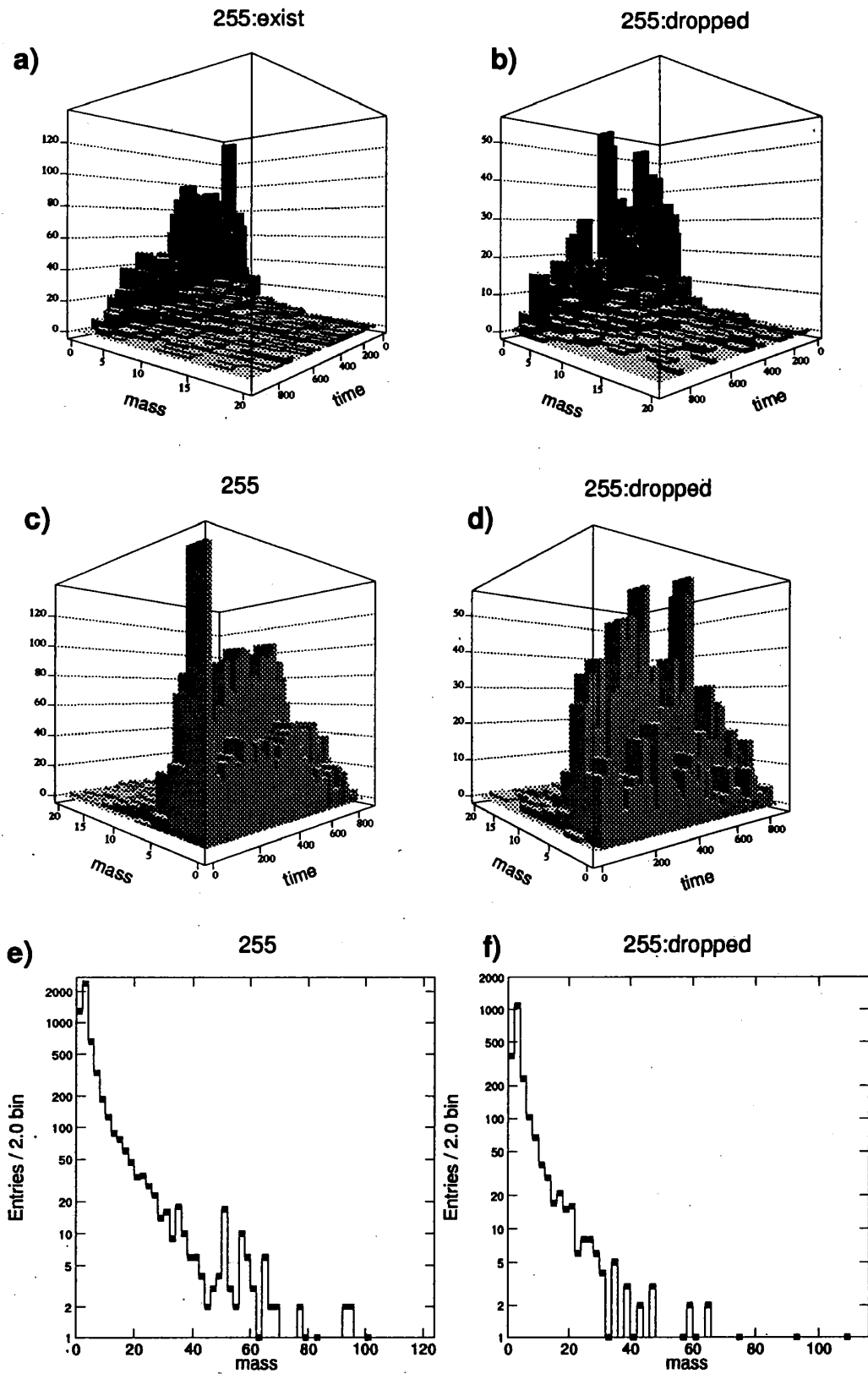


図 8: 世界 255 におけるタイルのヒストグラム。左側が世界の中にあるタイル、右側が落ちたタイルについてのグラフである。上中段は時間を区切って集計したもので、それぞれ同じ 3 次元グラフを別の方向から見ている。下段は全時間の合計。

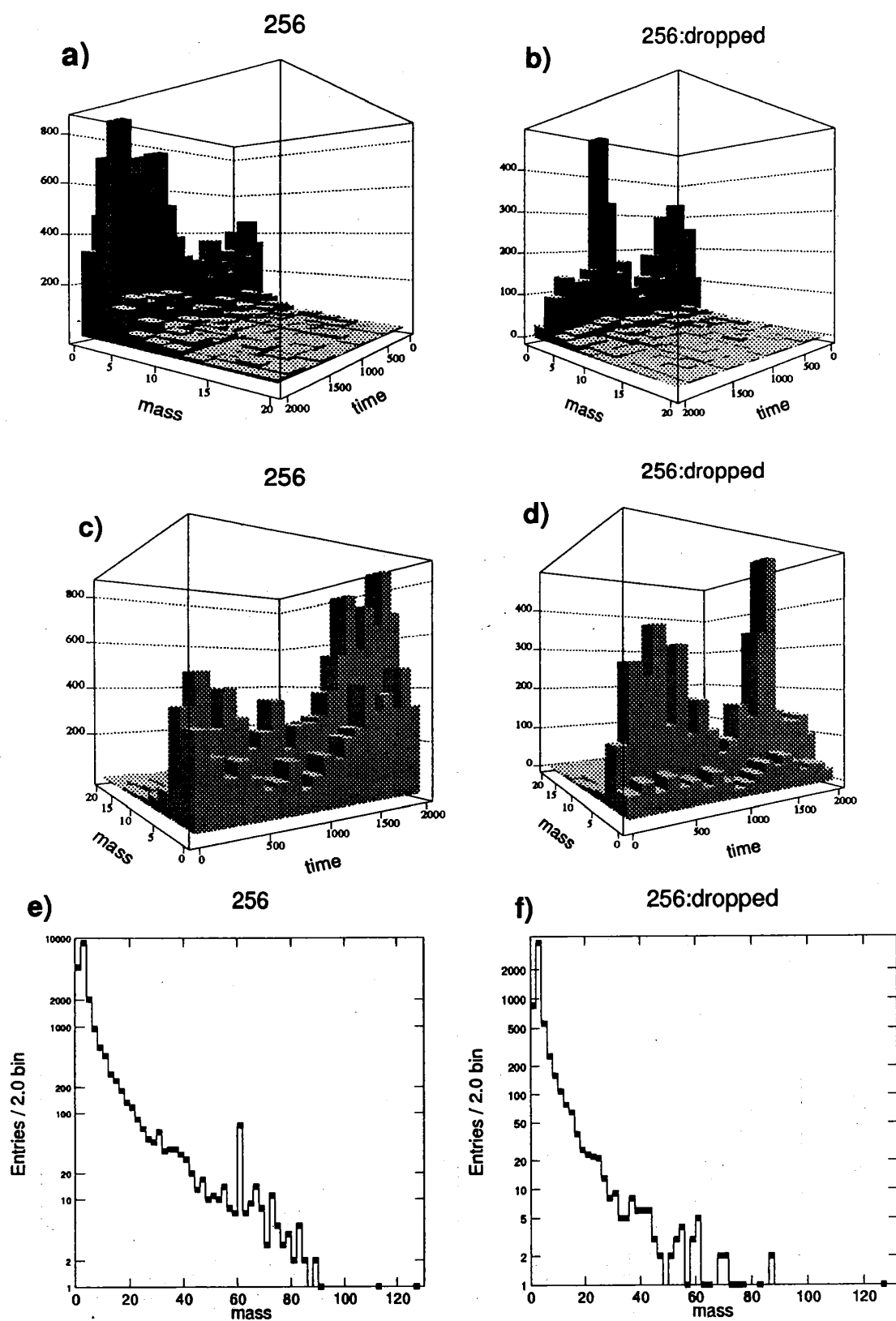


図 9: 世界 256 におけるタイルのヒストグラム

また、ルールを適用する上での情報はタイル同士の位置関係に強く依存している。クラスター内でのタイルの数の増加は、それに伴い組合せ論的に「場合の数」を増やしているといえることができる。つまり、タイルがクラスターを作ることによりシステムのエントロピーの底を掘下げるといえる作業をしていることになる。ただし、タイルが接触しつづも動くことができないと、その組合せが変えられないので、情報が増えても使うことができない。その意味で、クラスターが詰まりすぎてしまえばいけない。タイルは接触しつづも「適度に」空間を開けていなくては死んでしまうのである。

内部に構造をもったクラスターが出来ることが直接増殖に結びつく訳ではない。例えばクラスターが周期に落ちてしまうということも充分考えられる。ここで、タイルの運動のカオス性が多様性を生むのに一役かっている筈である。各タイルの速度は実数であるし、互いに壁になりあってはいるがこの構図はビリヤードと同じである²。つまり強くカオス的な性質を帯びている。組合せ論的に場合の数が増えても、止まったりしてそれを「利用」できなくては意味が無いが、ここでカオスが周期性などを壊してあらゆる配置を探索する方向へと運動を導くのであるとすればどうか。

カオスがタイルの配置を次々と変え、変えられた配置によりタイルの形が変わって「ビリヤード」の境界条件が再構成される。内在的なコントロールが行なわれていることになる。タイルのルールのもつ組合せ論的な複雑さと、運動がカオスであることによる複雑さが噛み合っただけで増殖するクラスターというものを構成するに至ったというストーリーにはまだ証拠が不十分であるが、今後追求することにしたい。

5.2 並列性と実時間性

昨年の「複雑系2」で発表してからこの1年と少しの間に、モデルは全て書き直された。セルに運動量を持たせるために独立したオブジェクトとしたので、ほとんどは予期された量だったのだが、予想しなかった困難が「並列アップデート」という問題である。

例えば、分子動力学ではハードスフィアの場合には粒子間の衝突判定が難しい。実数時間のものを離散で行なうから、下手をすると重なりあう粒子が出来てしまう。そのために分子間の距離をいちいち表に示さなくてはならなくなるなど面倒である。タイルでは空間に離散的特徴があるので時刻幅の問題さえクリアすれば良いとタカをくくっていた。高々1セル分だけ進めるようにして、さらにぶつかりにくいように粒子間にバネを入れて反発させるようにした。が、それだけでは全くのところ不十分であった。

コーディングの過程で—とくにイベントループで—思い知らされたことは、どうやって逐次的な論理で並列性を実現するかということである。まず、移動の時点で問題が1つある。バネの寄与を計算し、速度をアップデートするのは容易だが、その行き先に他のタイルがあった場合はどうするか。タイルの速度が自分と同じ向きであれば、今いるその場所が空いて自分は動けるかもしれない。しかし向こうのタイルの行き先が空いているとは限らない。厳密にしようとする運動して干渉するタイルの依存関係を全て書き出して、順番に移動させなくてはならない。さらに周期境界条件の場合はデッドロックすることもあり得るので例外処理をしなくてはならない。しかし、実際にこのようなコーディングをした訳ではなく前述の通りバネが入っているためにデッドロックする可能性は少ないと判断して、行き先が別のタイルで占められていれば動かないようになっているだけである。当然この2つのタイルの間にはバネがあるので、短い時間の間に相互作用により速度の方向が衝突を避ける方向に変化するからである。

それよりも大きな問題は、タイルは反応すると形が変わることによる。反応が1箇所では起きなければ問題無いが、近傍で反応が起きると reacting zone が重なり合う場合がある。重なり合う部分にセルはないから(セルがあれば一つの反応として扱っている)、生成されたタイルが重なりあってしまうことになる。これは重なったタイルを繋げてしまえばよいが、問題はこれだけではない。反応で変形したタイルが他のタイルに接触した場合はどうか。基本ルールを素直に適用すれば結合させてしまえばよいことになるが、相手も反応で生成された場合はどうだろう。時間順序を壊していることになりはしないだろうか。そこで、い

²パチンコにはもっとよく似ているかも知れない

ちいち反応したことを判断するフラグを設定したりなどした。その他、細かいことまで相当気を使わなくてはならず、苦勞した。自然には、オブジェクトをばらまいておけば勝手に矛盾無く判断されるはずのことに何故ここまですなくてはならないのだろう。

プログラミング言語に限らず、論理の世界は全て逐次的である。逐次的であるということは、順序が保たれているので厳密性が保証されるし余計な干渉も起きない。例えば並列計算機でいくら並列性を上げるといっても、正しさを保証できるように同じメモリ番地に同時に書き込みを行なうことは出来ない³。しかし、プロセスを並列に実行しようとする、多かれ少なかれ干渉が起きる。むしろ、複雑系では干渉が起きる場合を作ろうとしているのではないだろうか。

それぞれのモジュールで計算が行なわれつつあるとすると、相互作用により状態が変化を受けるならばそれは計算途中で損傷を受けるということになる。全ての計算を1ステップの内に行なうことは不可能であるから、正しい結果は得られないということになるだろう。しかし、そこでモジュールの状態の「意味」が変わって、相互作用の結果として新しい「文脈」が生成されるのであればそれには何らかの意味があるの考えることは出来ないだろうか。つまり、計算の上での「正しい」意味が壊れることにより、「無意味」になるのではなく「多義」になる。そして、多義性から「新たな」意味/情報が生成されるという⁴。これには、計算の途中で相互作用が起こるという「実時間性」が本質的な作用をしている。

6 おわりに

生命の起源を究極的な目標としてはいるが、実のところこのモデルが何であり、何を説明するかという直接的な対応物はない。最初に思い浮かべたのは冒頭でも述べたように「テトリス」なのであるが、これが目的とするのは蛋白質の「意味」だった。つまり僅かな形の違いが異なる機能をもっているということは何であるのか。またそうしたものがどう組み合わせれば生きるという状況を作ることができるのか知りたかったのである。そこから代謝系へと範囲を拡大したのは、より根源の現象から解き明かしたいと考えたからである。もちろん「根源」を求め出すときりがない。そこで、ある基盤をつくりそこから上のスケールへとレベルを上げて構造を作り続けて行く仕掛けを発見しようとしたのである。その仕掛けに普遍性があれば、多分本質であろうから。

では、どうやって理解しようとするのか。化学反応で起きていることを直接的に論理で「正しく」書き下して意味を見つけることが出来ないと思われるが、その最大の理由は上に述べた通りである—実時間・並列的に多体反応が起きている。われわれも並列的に考える方法を見つけなくてはならない。言語は逐次的であるが脳細胞のレベルでは並列処理が起きているので、望みが無くはない筈である。計算機によってカオスの理解が進んだように、例えばこのタイル機械を使って—タイル「で」考えることを試みたい。

参考文献

- [1] E. Berlkamp, J. H. Conway and R. Guy, *Winning Ways for Your Mathematical Plays*, Academic Press, 1986,
- [2] M. Eigen, *The Hypercycle: A Principle of Natural Self-Organization*, Springer-Verlag, 1979,
- [3] K. Kaneko, "Chaos as a Source of Complexity and Diversity in Evolution", *Artificial Life*, 1(1994),

³ 正しさが保証されるのが計算機のメリットである

⁴ 勿論、自分の計算機で予期せずに起こられては困る