

Tile Automaton による代謝系生成への考察

東大教養 山本知幸

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

1 はじめに

化学反応の連鎖から代謝反応系が生成されたり、さらに代謝系によって生成された大きな分子の機械的運動から器官や細胞までが作り出されて行く様子をまのあたりにしようと思い、タイル・オートマトンを構成した [1]。これは、様々な形を持ったタイルが空間中を動きまわり、衝突するとルールにしたがって反応(形を変える)するというものである。

このモデルでは、factory と呼ばれる機械的な構造が自己組織されて無限にタイルを生産して吐き出し続けるという結果が得られている。反応のルールにおいてタイルの面積が増えることは許されているが、継続的にタイルを生産し続けることは非自明である。タイルがクラスターを作っていれば連鎖的な反応が起きるが、大抵の場合はばらばらになったり融合して大きなタイルになったりして、生産を続ける事ができない。つまり流れ出すタイルを引きとめることと、生産したタイルを外に吐き出すことの2つの機能が必要なのである。

しかし「生産」など大局的にみた機能は分かるものの、そのプロセスの詳細な部分は上手く説明する事ができないでいる。ある一つのタイルの意味というものは、速度や周囲のタイルとの関係のなかにあって、いわば文脈の中に埋もれてしまっているためにタイル一つの意味というものを見出すことは出来なくなっている。そこで、今回は空間を取り除くことにより、形の面での複雑さを取り出そうと考え、Tank version を構成した。

2 モデル

2.1 手順

全ての分子(タイル)はタンクの中の水溶液として存在し、激しく攪拌されているというメタファーに基づき、次の手順で反応を進める。

1. 2つのタイルが任意に選ばれて一組のペアとなる
2. ペアとなったタイルは、任意の配置で接触させられ、中間状態に入る
3. 割合ルール(後述)で、反応を起こすか否かを判定する

4. 中間状態のまま、しばらく待機する。この間にも反応ペアとして選択されることがあり、その場合は多体反応が起きる
5. 中間状態の解離、または反応ルールにしたがい形を変え、またタンクに戻される

2.2 反応ルール

反応のルールは、基本ルールといくつかのサブルールからなる。

1. 基本ルール (反転ルール)

タイルが接触した面 (colliding side) の近傍 (reacting zone) の状態を反転し、セル (面素) が生成 / 消滅する (図 1)。複数の箇所で接触している場合や、複数のタイルが接触している場合は、それらの reacting zone の和をとって、同様に反転させる。これにより、大きな領域が一つのタイルとして結合する場合もある。

2. 割合ルール

基本ルールを適用する前に、このルールにより反応するか否かを決定する。反応しない場合は、解離する (詳細は後述)。ここでは、その名の通り reacting zone 内にあるセルの割合で反応を許可する。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であるが、とくに断わりがない場合は $(r_H, r_L) = (0.55, 0.0)$ である。下限はあまり影響しない。(図 2 参照)。

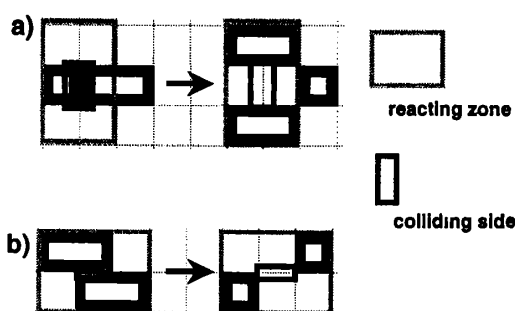


図 1: 基本ルール。セルの占める面積は保存しないことに注意

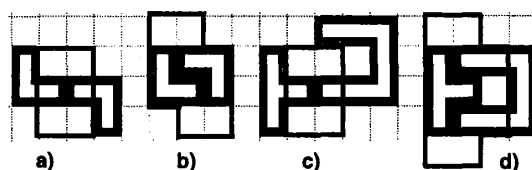


図 2: タイルの接触の例。同じタイルでも位置によって reacting zone に占める面積が違うのに注意。それぞれのセルが reacting zone に占める割合は、a: $2/6$, b: $6/10$, c: $2/6$, d: $8/13$ である。

2.3 中間状態・時間

中間状態である期間は、タイルの形などによらず一定とした。反応するか否かにより、待機時間をそれぞれ T_r 、 T_w としたが、標準的な値は $T_w = T_r = 0.02$ である。また、時間刻幅 dt は総タイ

ル数 N_t に依存し、 $dt = 1/N_t$ とした。各時刻に起きる反応の数はパラメータ n_r で表し、 $n_r = 10$ が標準的である。これは中間状態にあるタイルの数を増やすので、多体反応の割合を上げることになる。

2.4 境界条件

自明な自己複製は基本ルールでは許されていないが、それでも非常に単純な複製ループが存在している。それらを何らかの形で抑圧しないと多様性が現れない。そのために次のような境界条件を設けた。

- population limit

タイルが増えすぎると dt が収束して時間が進まなくなり、また中間状態も相対的に無限に延びてしまう。ただし、新しいタイルの侵入を許すために制限数の 2 倍を越えた時点でポピュレーションをリスケールする。ここでは、population limit は 400 とした。

- density limit

単純なループを構成するサイズ 1,2 のタイルによりタンクが占領されるのを防ぐため、population limit の 10% を各タイルの population の最大値とした。

- supply of small tiles

非自明なネットワークを構成するのにも、材料の流入がないと実現できない。一度非自明(つまりは大きな)なタイルが出来ても、反応してしまうと消えてしまう。これを防ぐには、ポピュレーションを実数にして濃度として扱えば良い。しかし、このモデルにおける中間状態は明らかに「個体」をベースとして扱っているので、実数ポピュレーションは適用できない。そのための次善の策ではあるが、「サイズ 5 以下のタイルは、一度出来ると供給される」とした。供給とはいえ、1 より減らないだけである。

3 結果

分子の反応ネットワークが発展してゆく様子を見るために、単純なタイルのみの状態を初期条件とした。ここで得られた結果をまとめると：

1. 多体反応による多様性の増加

中間状態に多くのタイルがいることで多体反応が起き易くなる。但し、サイズ 5 以下のタイルは保護されているので、多様性はそれよりも大きなタイルとして現れなくてはならない。サイズ 5(ペントミノ)のタイルの種類が増える事により、タイルの多様性が急に増えることが見出された。

2. unit と呼ばれる、特徴的なタイルの出現

サイズ 20 程度で、類似した形をもったタイルの集合が現れた。それぞれの unit は、割合ルー

ルにより反応しにくい密な領域 (core) と、細長く伸びて変形しやすい領域 (arm) からなる (図 5 参照)。unit は次に挙げる joint growth という機能の単位になっている。

3. joint growth (unit の重合による成長)

unit が重合して、複雑な形に成長する。ただしどの unit でも重合できるという訳ではなく、connector として使える形状は非常に限られている。詳しくは後述する。

図 3 にスナップショットを、タイルの質量のヒストグラムを図 4 に示した。各スナップショットには、サイズ 20 近辺にタイルの数が落ち込むギャップがあることがみてとれる (特に時刻 20 と 45)。このことは、タイルが何らかの構造をもった成長をしている事を示唆している。unit のサイズは、arm が変形するために一定していないものの、30 より大きくなることはまれである。それ以上大きいタイルは、サイズ 20 から 30 の unit が重合して出来る。大きいタイルを調べてみると、いくつかの unit を含んでいるように見える (図 3 の枠内の大きなタイル参照)。

しかし、unit や joint grow した大きなタイルは入り組んだ境界をもつために反応を起こし難いといえ、先端から小さいタイルの攻撃を受けると容易に分解されてしまう。タイルの個数からいうと小さなタイルと出会う確率の方が圧倒的に大きいので、ほとんどの反応は分解過程であると考えて良い。また、この場合大きさは「緩和時間」の長さを与えるとして良いだろう。

しかし、それに対抗して joint growth が機能として出現している。確かに小さなタイル同士でも重合する事はあるが、分解に対抗できる程速く成長できない。更に、つながる事の出来るタイル同士でも位置を間違えて反応するとコネクターの arm を壊してしまう。他にコネクターになれる arm が無いと、分解されるのみである。もちろん分解の過程で arm が修復される事もあるが、その確率は小さいと考えられる。つまり、joint grow を実現するためにはコネクターとして使える arm が複数必要であり、それが unit のサイズを規定していると考えている。

joint growth の結果として重要な事は、時間的に分化した反応ネットワークが出現したという事である。小さいタイルによる自明な複製サイクルや分解サイクルに対抗できる速度であり、さらにそれらとは別のセマンティクスを持ったネットワークが joint growth によって形成されている。このネットワークがどれだけ独立性を持っているか確かめるために、ある程度時間が経って joint growth がはじまった後で、境界条件のうちサイズ 5 以下のタイルの保持を外してみた。すると、unit をはじめ小さいタイルは速やかに消えてしまうが、joint growth は起きていることが確かめられた。もちろん joint grow したタイルの「緩和時間」は長いですが、それよりも joint grow が起きて、材料である unit が無くなるまでそれが続くことがみてとれた。つまり、しばらくするとタンクの中はサイズ 1 や 2 の自明なタイルと、少ないとはいえ大きな joint grow したタイル (小数の unit と、それらの分解途中の小さなタイルも含む) という両極端な分布の構成になる。このことから、joint growth のネットワークは完全ではないにせよ独立性をもっている事が見てとれる。

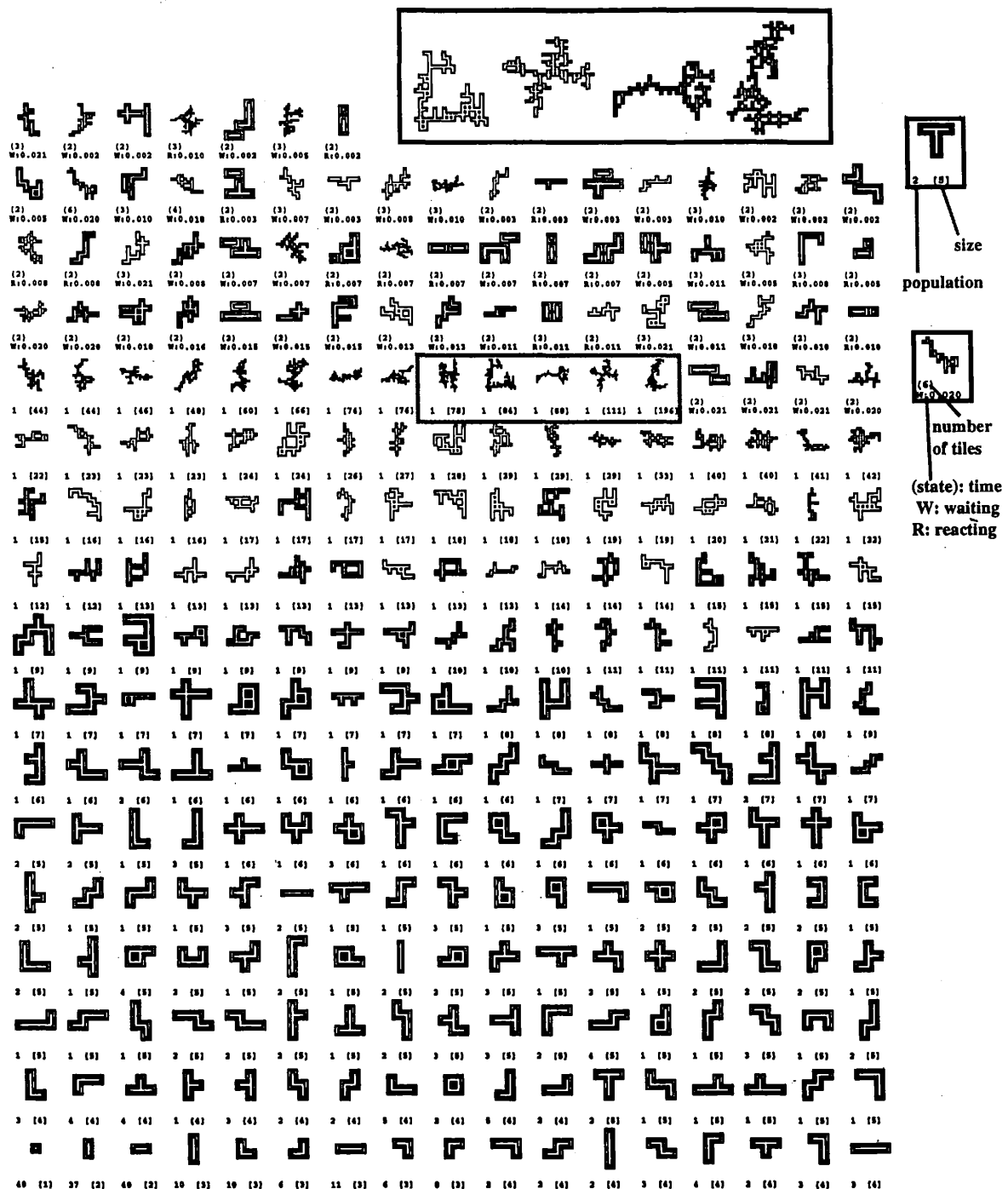


図 3: 時刻 17 におけるスナップショット。最も大きい 4 つのタイルを枠外に抜き出してある。

パラメータは $T_r = 0.01$, $T_w = 0.02$, $n_r = 10$.

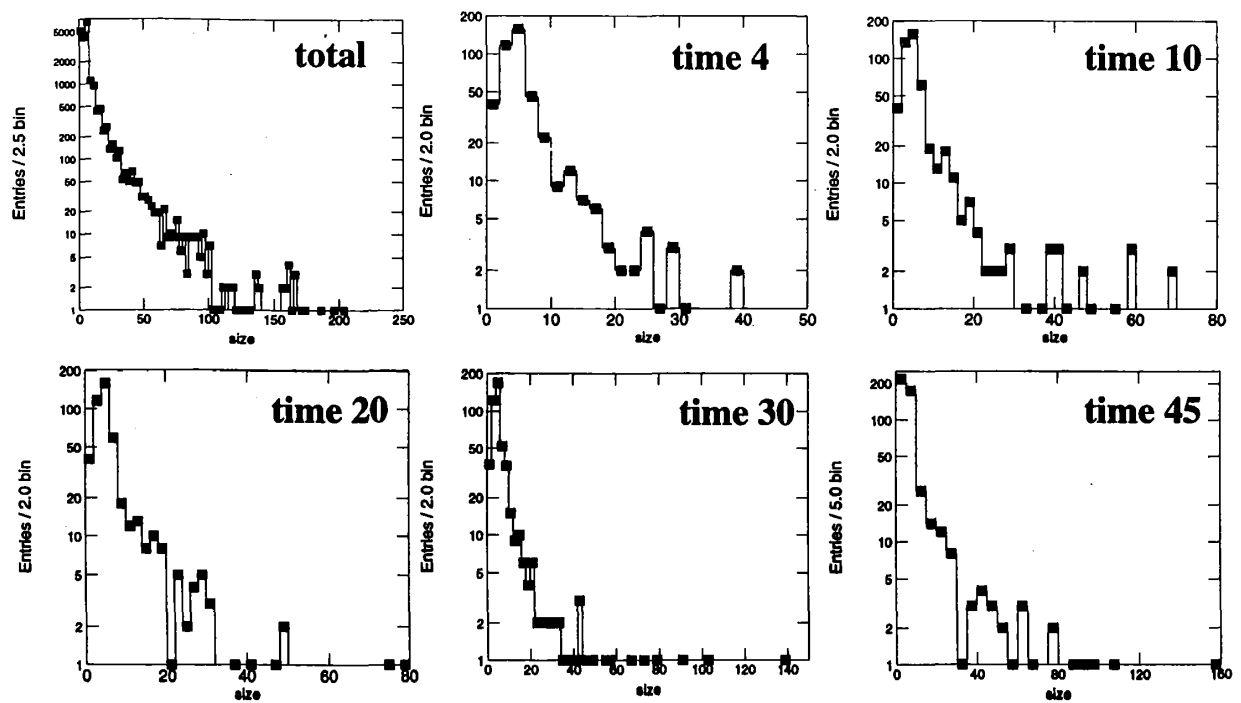


図 4: タイルの質量の度数分布 (片対数)。図 3 と同じものを、時刻を変えて表示してある。各スナップショットに、サイズ 20 付近に分布のギャップがあることに注意。

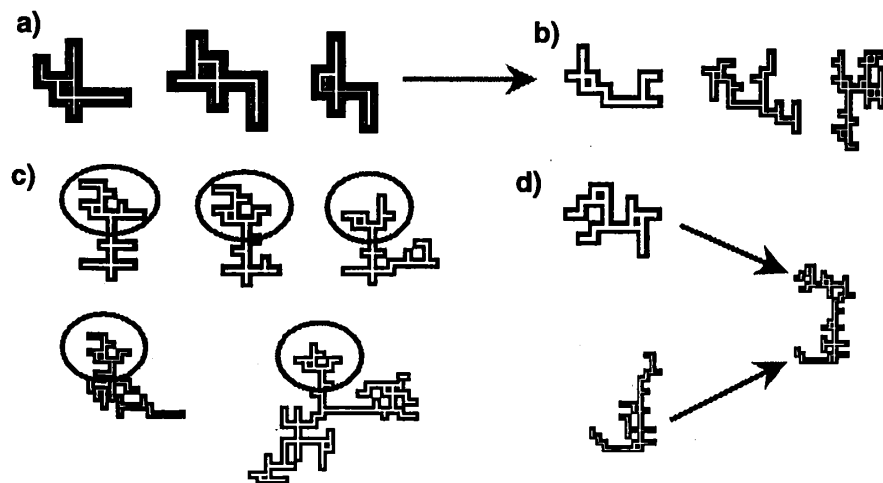


図 5: unit の例。a) 中心部の core、b) core に arm が付いて unit になる c) 同様な core をもつ unit の例 (family)、d) unit が重合して joint growth を起こす

4 おわりに

分解と言う機能が余りにも強いのか、ここでは「成長」以外の機能は現れていない。それは我々の見方と言う問題もあるが、境界条件の決め方などモデルの道具立てとしての「装置」の構造の問題であろう。いたずらに問題を複雑化させる事には意味は無いが、生命の起源や進化のような、モデル自体が発展しなくてはならない場合には複雑な装置が要求される。

ここでいう装置とは、例えば joint growth のような機能が形成された時に、その機能を捉えて、明確な差異として目に映るように引っ張りあげる仕組みのことである。このモデルにおいては、対抗すべき機能が「分解」なので、「伸びる」機能が顕在化していると言えるが、もし他の機能が潜在的に存在するとしても、それを調べる手立てが無いのである。モデルの内部にある情報論的複雑さとしては、組合せ問題はかなりの複雑さを持っているのであるから、タスクの与え方 / 装置の構成によって、機能を引き出す事は可能であるが、そのための技術を我々はまだ具体化出来ないでいる。

実際の代謝系のネットワークが複雑なのは、一続きの反応系では脆弱であるというだけでなく、副産物をも資源として活かして効率を上げなくてはならないということもあるし、別のローカルなネットワークとの干渉によって別のループが必然的に出来てしまうと言う事もあるだろう。また、反応しないものがある場合でも、その存在自体によって濃度が変化するとかの副次的な意味が顕在化することも考えられる。化学反応という局面だけでなく、物理的な面など複数の局面が絡み合っ一つ一つの複雑かつ強力なシステムを構成しているように思える。

我々の作るモデルでは、副作用や副産物はモデルの機能を解体するのみであるが、生体内では創造的な作用もするのではないかと考えている。それは、モデルの主要部の記述の複雑さというよりも、境界条件や初期条件、そして評価関数などといったモデルの構成の枠組自体の複雑さの問題であると考えている。少なくとも、自発的な発展を起こすモデルは作らなくてはならない。例えば、ここでのカオスの有用さとは多様性を引き出す事であるが [2]、内部でそれを解釈するプロセスを作らないと、多様性が「出ただけ」と言うところからの発展が出来ないのである。実数で記述された力学系的な複雑さをリアルタイムにデジタルな状態の変化として反映して多様さを固定し、さらにまたその変化を力学系に与えると言うフィードバックが Tile Automaton の空間が入った版の「装置」であった。そこから、さらに機能が発展する方法を模索している。Tile Automaton にいろいろ手を加えつつ、このような事に関する考察を深めてゆこうと考えている。

参考文献

- [1] Tomoyuki Yamamoto and Kunihiko Kaneko. Tile automaton for evolution of metabolism. In F. Morán et. al., editor, *Advances in Artificial Life (proceedings of ECAL'95)*, page 188. Springer, 1995.
- [2] Kunihiko Kaneko. Chaos as a source of complexity and diversity in evolution. *Artificial Life*, 1(1/2):163-177, 1994.