

生物情報ネットワークの解析と制御
Analysis and Control of Biological Information Networks

京都大学 化学研究所 数理生物情報研究領域 阿久津 達也

研究成果概要

生物情報ネットワークの解析について、ブーリアンネットワーク(BN)とニューラルネットワークを主対象にこれまでの研究を継続・発展させた。

BN は遺伝子ネットワークの離散数理モデルの一つである。BN は、基本的に、同期してネットワーク全体の状態が変化するが、すべての可能な状態を考えた場合、次の時刻においてどのくらい元の状態が保存、もしくは、失われるかの理論解析を行った。特に、ブール関数として XOR 関数、Canalyzing 関数、閾値関数を用いた場合についてエントロピーを用いて解析した[1]。主要な結果の一つとして、XOR 関数の場合、入次数が奇数の場合にはエントロピーを保存する BN が存在するが、入次数が偶数の場合にはそのような BN が存在しないことを示した。また、Canalyzing 関数を用いた場合のエントロピーの上限と下限を導いた。

BN において静的もしくは周期的な定常状態はアトラクターとよばれるが、それらは細胞の種類などに関連する可能性があることから、その検出のために多数の研究が行われてきた。しかし、幅広い BN のクラスに対し $O(2^n)$ 時間より高速に周期的アトラクターを検出することのできるアルゴリズムは知られていない(ただし、 n は頂点数)。そこで、その壁を破るために、各頂点の状態についての事前情報を利用するアルゴリズムを開発した[2]。さらに、実際の生体ネットワークの BN モデルを用いてその有効性を評価した。

ニューラルネットワークの表現能力については以前より多数の研究が行われていた。しかし、まだ十分に解明されていない。そこで、他の数理モデルであるランダムフォレストと二分決定グラフ(BDD)との表現能力の違いを、頂点数や階層数を指標として理論的に解析した[3]。具体的には(あるモデル化のもとで)、任意のランダムフォレストは3層のニューラルネットワーク、深さ D の BDD は、 $O(\log D)$ 層のニューラルネットワークで表現可能であることを示すなどの結果を得た。

発表論文(謝辞なし)

- [1] S. Guo, P. Liu, W-K. Ching, T. Akutsu, On the distribution of successor states in Boolean threshold networks. *IEEE Trans. Neural Networks and Learn. Syst.*, 33(9), 4147-4159, 2022.
- [2] U. Münzner, T. Mori, M. Krantz, E. Klipp, T. Akutsu, Identification of periodic attractors in Boolean networks using a priori information. *PLoS Comput. Biol.*, 18(1), e1009702, 2022.
- [3] S. Kumano, T. Akutsu, Comparison of the representational power of random forests, binary decision diagrams, and neural networks. *Neural Comput.*, 34(4), 1019-1044, 2022.