

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)とスケールフリーネットワークという数理モデルを主対象にこれまでの研究を継続・発展させた。

線形閾値関数に基づく階層型ニューラルネットワークは、ブール関数を線形閾値関数に制約した BN の部分クラスと解釈することができ、その計算能力などについてこれまで数多くの研究が行われてきた。今年度はシグモイド関数を閾値関数としてデータからパラメータを学習したニューラルネットワークから、ブール関数の形式で知識を抽出する方法を開発した。なお、シグモイド関数は線形閾値関数を連続関数で近似したものと考えられる。具体的には、閾値関数が多数決関数および **nested canalyzing** と呼ばれるブール関数に相当する場合に、そこから効率的かつ正確にそれらの形式で関数を効率的に抽出するアルゴリズムを開発し、さらに、それらを組み合わせることにより学習済みのニューラルネットワークからブール関数の形式で知識を抽出する手法を開発した。そして計算機実験により既存の知識抽出手法と比較し、より簡潔な表現が得られる場合が多いことなどを示した[1]。

スケールフリーネットワークは次数分布がべき乗則にほぼ従うネットワークのことで、多くの生物情報ネットワークがこの性質を持つとされている。このスケールフリーネットワークに関して、我々が近年発展させてきた最小支配集合 (MDS) を用いたネットワーク制御手法の改良と応用を行った。以前の研究で確率的に辺が故障(利用不可となる)するようなネットワークに対して確率的な最小支配集合 (PMDS) を定義し、その計算手法やサイズの解析を行ったが、今年度は PMDS に必ず含まれる頂点、必ず含まれない頂点などを同定するための計算手法の高速化を試みた。具体的には、前処理により比較的単純な規則でそれらの頂点の一部分を同定し、残りの頂点については以前に開発した整数計画法に基づく方法を用いて分類するという手法を開発した。これを動的に変化する神経系の複雑ネットワーク解析に適用した。有効性などについては現在、検討中となっている。

発表論文(謝辞なし)

- [1] P. Liu, A. A. Melkman, T. Akutsu, Extracting boolean and probabilistic rules from trained neural networks, *Neural Networks*, 126, 300-311, 2020.