

動的な反応ネットワークに基づく反応拡散系の構築

○小橋口 洋[†]

鈴木 麗璽[‡]

有田 隆也[‡]

[†] 名古屋大学大学院 人間情報学研究科

[‡] 名古屋大学大学院 情報科学研究科

Construction of a reaction-diffusion system based on dynamic reaction networks

○Hiroshi Kohashiguchi[†] Reiji Suzuki[‡] Takaya Arita[‡]

[†] Graduate School of Human Informatics, Nagoya University

[‡] Graduate School of Information Science, Nagoya University

Abstract: This paper aims to clarify the interactions between the emergence of reaction networks caused by the micro-level interactions among molecules and the pattern formation caused by the macro-level interactions among emerged networks. For this purpose, we constructed a reaction-diffusion model based on dynamic reaction networks by expanding Fontana’s AlChemY (Fontana, 1991) into a one dimensional space, in which molecules generated by reactions within each grid can diffuse into neighboring grids. The results have shown that a stable pattern which consists of different reaction networks emerged through competitive interactions among self-reproductive networks.

1 はじめに

複雑なシステムの起源、特に生命の起源の探求において、多様性の創発と維持は重要な論点である。特に生物の体表パターン生成に代表される、反応拡散系におけるチューリングパターンのような自発的なパターン形成については、主に解析的な手法によりその振舞いが研究されてきた。しかし、これらに関する従来の研究では、分子間の反応ネットワークを構成する分子の種類はごく少数に限られ、細胞内の反応系のような複雑な分子間の相互作用に基づく大域的なパターン形成に関しては議論が不十分であった。また、分子間の相互作用のルールもあらかじめ限定されたものであり、反応ネットワークそのものの創発や変動、複数の異なる反応ネットワーク間の相互作用がパターン形成に与える影響についても議論がなされていない。

また、近年、抽象化学と呼ばれる、化学の本質を抽象化しこれを計算過程の1つとしてとらえ、計算機上に実装することで生命の化学反応系の普遍的形式を解明する構成論的研究が盛んになっている。具体的には、Fontana らの λ 計算 [1]、Ikegami らの Turing マシンとテープ [2]、Suzuki らの文字集合の書き換え [3] などで表現され、化学分子、生命個体、遺伝子などを構成要素とした、生命の様々な段

階における動的な振舞いの研究に用いられている。しかし、これらの研究においては、要素間相互作用によって創発したネットワーク間の相互作用と、チューリングパターンのような自発的な空間パターン形成との接点については注目されていなかった。

以上の2つの視点を踏まえ、本研究は、分子間の相互作用によって生じるミクロなレベルの反応ネットワークの創発と、創発したネットワーク間の相互作用によるマクロなレベルでのパターン形成との関係を明らかにすることを目的とする。そのために、本研究では抽象化学系による動的な反応ネットワークに基づく反応拡散系モデルを構築した。本研究では、抽象化学系として Fontana の AlChemY [1] を採用する。AlChemY は、 λ 計算を簡略化した体系の上に化学反応の最小レベルを抽象化したもので、分子と化学反応をそれぞれ λ 関数と関数合成により表現することで分子間の相互作用がネットワーク構造を形成する過程を明らかにするものである。本モデルは、AlChemY を動的な反応ネットワークを1次元格子上に拡張し、格子内で化学反応が生じると同時に近隣の格子に分子が拡散するものとした。本稿では特に、分子の生成や拡散にかかわるパラメータの系全体への影響、生成されるネットワークの特徴とその進化過程、ネットワーク間の競合によって生

じる空間的パターンに注目して実験および解析を行った。

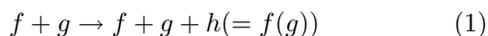
2 λ関数に基づく1次元反応拡散系モデル

2.1 概要

世界はλ関数の集合 (Turing Gas) と円形に配置された格子による空間で構成される。それぞれの分子 (λ関数) は格子空間内で1次元方向の自由度をもち、分子間の反応と格子間の拡散の相互作用が与えられる。反応に関しては本モデルでは2体衝突のみを取り扱う。

2.2 抽象化学系

本モデルにおける化学反応は Fontana の AlChemistry[1] を基礎にしている。化学分子を抽象的にλ関数で表現し、このように関数で表現された分子 f, g 間の化学反応の結果を関数合成 $f(g)$ で表現する。この場合、関数 f は触媒分子、関数 g は反応分子になっている。分子モデルに関数を使用することで、反応分子としてのリスト的表現と、触媒としての関数変換的機能の両方を記述することができる。本モデルでは、触媒分子 f と反応分子 g の反応による生成物を h とすると次のような化学反応を想定している。



これは、分子 f と g が反応し、新たな分子 h が生成されるものの、 f と g はそのまま残る反応であることを示している。ただし、1ステップでの反応において生成される新規分子と既存の分子の構成比率は後述する手順によってステップごとに調節される。

2.3 反応の計算方法

λ関数は具体的には6種類の基本演算子と1種類の変数項 (変数名 a) を組み合わせたリスト¹で表現される。リスト間の相互作用である関数合成はリストの第1項を関数として解釈し、それ以降の関数を引数として考え処理を実行するものとする。基本演算子による処理内容を表1に示す。関数 $f = (+ a)$ と $g = ((* a a)(- a))$ を例として関数合成 $f(g)$ を考える。この場合、 $f(g) = (+ g)$ となるから、表1から演算子 $+$ は引数となるリストの先頭要素を返すので、これを g に適用すると $f(g) = ((* a a)$ が得られる。次に、 $f = ((+ a)(* a a)(> a))$ のような1つのリストに複数のリスト (この例では3つ) が含まれている場合の関数合成 $f(g)$ を考える。一般に $f = (f_1 f_2 \dots f_n)$ のような複数の関数が入った形のリストに任意の関数 g を代入して

¹(a (b c)) のような木構造をなすデータ形式。

値を計算する場合、まず内部の関数による関数合成 $f_n(g)$ を計算し、それらの結果を f_{ng} とする。次に、リストの第1項を関数として解釈し、それ以降の関数を引数として考える関数合成の規則から、 $f(g)$ はそれらの結合したリスト $f(g) = (f_{1g}(f_{2g}) f_{1g}(f_{2g}) \dots f_{(n-1)g}(f_{ng}))$ とする。

この計算は再帰的に行われるため計算が停止しない場合がある。このため、1回の反応には計算回数の上限 e_{max} を設ける。また、関数合成の結果のリストの文字数にも上限 l_{max} を設ける。これらの条件を満たした上で、さらに関数合成の結果が最低1つの基本演算子と最低1つの変数を持っている場合、その反応は「反応的」であるとし、計算結果として得られた合成関数をその反応による生成物とみなす。もしこれら条件を1つでも満たさない場合は、その反応は「弾性的」であるとされ反応は無効とされる。

表 1: 各演算子の処理内容

演算子	引数の数	戻り値
+	1	リストの先頭要素
-	1	リストの先頭要素を削除した残りのリスト
>	1	リストの最後の要素
<	1	リストの最後の要素を削除した残りのリスト
*	2 or 1	引数2の場合: 2つのリストの結合 引数1の場合: 引数のリスト
,	1	引数のリスト

2.4 1次元反応拡散系

シミュレーションは、円形に配置された L 個の格子からなる1次元空間内において1. 格子内の相互作用すなわち反応, 2. 格子間の相互作用すなわち拡散のループからなる。なお、本研究では動的な分子間の反応ネットワークの挙動について興味があるため、Fontana の AlChemistry と同様に $f(g) = g$ となるようなコピー反応は禁止した。このような反応を許した場合、自分を含め全ての分子をコピーするコピー関数の出現を許してしまい、多くのシミュレーションにおいて空間全体がコピー関数のみによる集合へと収束してしまう。このため、後に論じる自己複製分子に依存しない自己再生産的なネットワークが生じなくなるためである。1ステップにおいて次に示す反応プロセスを行った後、拡散プロセスが実行され、このステップが繰り返されることでシミュレーションが進行する。

2.4.1 関数の初期化

初期値としてのランダムな関数の作成手順は、まず演算子と変数の集合から確率 P で変数が演算子のどちらかを選び、変数ならそこで終わり、オペレータなら必要な引数の個数だけ再度ランダム抽出を繰り返して関数を完成させる。この手順で作成された関数をリストとして K 個連結

したものを初期関数とする。

2.4.2 反応

任意の格子内における全分子種の濃度の和を 1 以下に保ちつつ、1 ステップ毎にそれぞれの格子において全分子種の組合せの反応を計算する。 x_i^n で格子 n における分子種 i の濃度を表し、反応 $j(k)$ による分子種 i の反応率は次の式で与えられる。

$$f_{ijk}^n = \frac{a_{ijk} x_j^n x_k^n}{\sum_{k,l,m} a_{klm} x_l^n x_m^n} \quad (2)$$

ここで、 a_{ijk} は 2 つの分子間の反応ルールであり $j(k) = i$ のとき 1 で、その他の場合は 0 である。 a_{ijk} は AIChem の規定する計算体系により一意に決定される。この式では、全ての組合せの反応の内、 $j(k) = i$ が成立する反応の割合を表現している。なお格子位置 n は周期境界条件 $n = 0 = L - 1$ を満たすとす。

各格子における反応後の分子種 i の濃度 $x_i'^n$ は式 (2) を用いて次の式で与えられる。

$$x_i'^n = x_i^n (1 - \delta) + \sum_{j,k} \delta f_{ijk}^n, \quad i = 1, 2, \dots \quad (3)$$

ここで、 δ は新規分子の生成率であり、同時に既存の分子の消去率を調節するパラメータである。

式 (3) で全格子の状態を更新した後、 $x_i'^n < 1/N$ となった分子種 i は消去する。ここで N は格子内に存在できる分子種の上限度である。 $\sum_i x_i'^n > 1$ となる場合は、 $\sum_i x_i'^n = 1$ になるように正規化する。

2.4.3 拡散

ϵ を拡散の強度とし、格子 n における分子種 i の拡散後の濃度 $x_i''^n$ は以下の式で与えられる。

$$x_i''^n = x_i'^n (1 - \epsilon) + \frac{\epsilon}{2} (x_i'^{n-1} + x_i'^{n+1}) \quad (4)$$

この式は、隣合うの格子の分子を $\epsilon/2$ に応じた濃度で交換することを表現したものである。式 (4) で全格子の状態を更新した後、 $x_i''^n < 1/N$ となった分子種 i は消去する。 $\sum_i x_i''^n > 1$ となる場合は、 $\sum_i x_i''^n = 1$ になるように正規化する。この後、 $x_i''^n$ は次のステップの反応に使われる。

3 実験結果

3.1 基本的挙動の解析

はじめに、本モデルの基本的挙動を明らかにするため、新規分子の生成率 δ と拡散係数 ϵ の影響に注目して実験を

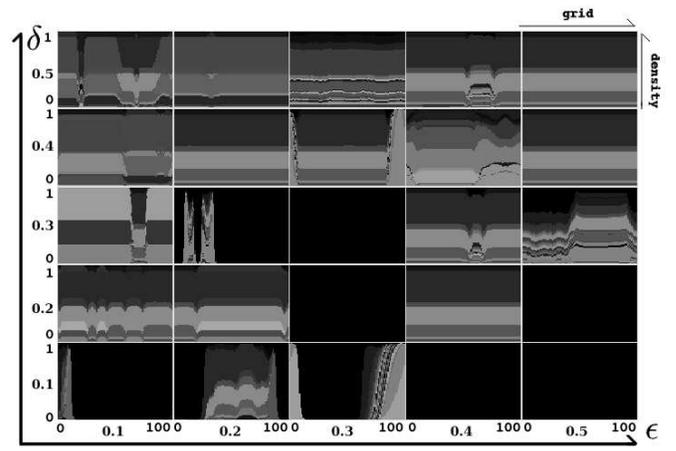


図 1: 各パラメータにおける 1000 ステップ経過後の全空間における分子の構成。

行った。なお、本稿ではすべての実験において $L = 100$, $N = 500$, $e_{max} = 50$, $l_{max} = 25$, $P = 0.3$, $K = 4$ を用い、初期状態として、それぞれの格子についてランダムに 10 種類の分子を生成し、等しく濃度 0.1 ずつを与えて実験を行った。

図 1 は $0.1 \leq \delta \leq 0.5$, $0.1 \leq \epsilon \leq 0.5$ の範囲でそれぞれ 0.1 刻みで各パラメータを設定して行った試行において、1000 ステップの時点での各格子の分子の構成を図示したものである。縦軸は用いた δ 、横軸は ϵ を示す。各パラメータ設定に対応する図の横軸は格子の番号を示し、縦軸は、各格子において存在する分子の濃度を分子種ごとに固有の色を決めて積み重ねて表示したものである。ただし、図中の黒色は、格子内において分子が満たされていない部分の量を示しており、黒一色の矩形は 1000 ステップ以前に絶滅していることを示す。なお、本稿では絶滅とは格子内の分子が全て消滅している状態を指すものとする。

各パラメータ設定において共通する過渡的な振舞いとしては、格子毎に分子構成が全く異なる初期状態から、まず空間全体の分子種の濃度の総量が一旦低下した後、局所的に格子の濃度が増加して行く。この後、分子が他の格子に徐々に侵入することにより同じ分子構成が格子に広まっていく現象や、他の格子からの影響を受けず自然に格子内の分子が消滅する現象や、分子の生成による波動などが見られた。

以上のような過程を経て、最終的に収束する空間的パターンは、(1) 全空間が単一のネットワークに支配される場合 ($\delta=0.4, \epsilon=0.2$), (2) 全空間において絶滅する場合 ($\delta=0.3, \epsilon=0.3$), (3) 所々の格子で絶滅しているが、いくつかの分子の島が存在する場合 ($\delta=0.3, \epsilon=0.2$), (4) 全ての格子は分子で満たされていて局所的に複数のネットワークが存在する場合 ($\delta=0.2, \epsilon=0.1$) のいずれかが観測され

表 2: 各パラメータにおける絶滅頻度

$\delta \backslash \epsilon$	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5
0.5	0/10	0/10	0/10	2/10	3/10
0.4	0/10	0/10	1/10	2/10	3/10
0.3	0/10	1/10	2/10	3/10	3/10
0.2	0/10	3/10	4/10	3/10	10/10
0.1	1/10	3/10	6/10	9/10	4/10

た。また、 ϵ が大きい程最終的に全空間が単一種のネットワークに支配されやすいという傾向が見られた。

表 2 は、同様にして、パラメータ設定ごとに 10 試行の実験を行ったときの絶滅頻度を表す。同図から、 δ が小さく、 ϵ が大きい程、絶滅する頻度は高くなった。この原因としては次のようなことが考えられる。このモデルでは前世代の全ての分子種は常に δ の割合で減らされるため、他の分子種から生成されない分子種は減少していく。また、自分自身を生成可能なコピー関数の存在は禁止されている。従って、格子内に分子が維持されるには、互いに他分子を生成し合う閉じた自己再生産的ネットワークが形成されていなければならない。このためには格子内にそれまでにない新たな分子を生成することにより一定の分子種の多様性を維持することで、閉じたネットワークを構成可能な分子種の組合せを探索する必要がある。ここで、新規分子の生成率である δ が小さい場合、反応ルールとしては成功しているものの生成された新規分子種の濃度が $1/N$ を下回っている可能性が高いため結果的にその新規分子種は削除される可能性が高い。従って、効率的な閉じたネットワークの探索ができず絶滅に陥りやすいと考えられる。 ϵ についても同様に、全ての分子種は拡散によって ϵ に比例して濃度が減少するため、生成されたばかりの少ない量の新規分子種は削除されてしまう可能性が高く、効率的な閉じたネットワークの探索が行えないことが絶滅頻度の高さに起因していると考えられる。

実際、絶滅せずに存在し続けるネットワークのすべては、互いに他の分子を生産し合うことにより全体の分子を維持する自己再生産的ネットワークとなっている。図 2 は、 $\delta = 0.2$, $\epsilon = 0.1$ の条件で生じた自己再生産的ネットワークの例である。破線の始点が関数を担う触媒分子で、実線の始点はその引数となる反応分子、実線の終点は両者の合成関数で与えられる生成物としての分子である。図 2 は全ての構成メンバーがいずれかの反応の生成物となっている。また、表 3 はこのネットワークを構成する分子の構造 (リスト) と濃度を示したものである。ネットワークを構成する分子構造は分子 11401, 18288, 8700 と、これらの連結したリストから成っており、これら 3 つの基本的なモノマー的分子がポリマー的分子を構成してい

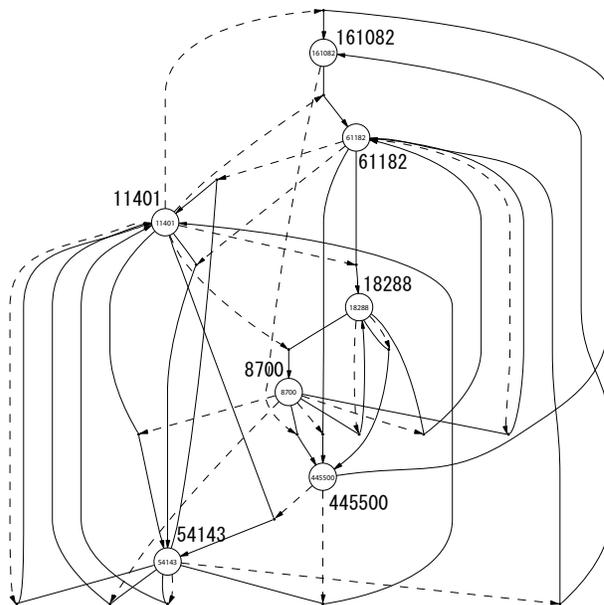


図 2: 自己再生産的ネットワーク

表 3: 図 2 のネットワークの構成内容

分子名	濃度	分子構造
11401	0.346	(> (* a a))
54143	0.196	((> (* a a)) (> (* a a)))
61182	0.114	(((< a) (a)) ((a) ((< a) (a))))
18288	0.106	((a) ((< a) (a)))
161082	0.096	((((a) ((< a) (a))) (((< a) (a)) ((a) ((< a) (a))))))
8700	0.08	((< a) (a))
445500	0.062	(((((< a) (a)) ((a) ((< a) (a)))) (((a) ((< a) (a))) (((< a) (a)) ((a) ((< a) (a))))))

る構造となっている。

ここで、このようなグラフのトポロジーとして閉じたネットワークは全て一見して自己再生産的かと思われるが、そうではない場合がある。単位分子種あたりの反応経路数に大きな偏りがあるような場合には、一時的には系内の全ての分子種が生産される可能性はあるが、その偏りのため生成経路が集中している分子種が生成経路の少ない分子種を圧迫し、消滅させることで結局自らの生成経路も失ってネットワーク全体が消滅してしまう場合がある。従って自己再生産的ネットワークとは、反応が閉じつつ、系内の全ての分子種への反応経路のバランスがとれたネットワークであると言える。

3.2 ネットワークの進化

前節から、絶滅せずに存在するネットワークは自己再生産的であることが判明した。このネットワークは、拡散により隣接格子に流入すると流入先において増殖することができるため、格子全体に広がることができる。ここで、複数の自己再生産的ネットワークが格子中に同時に広ま

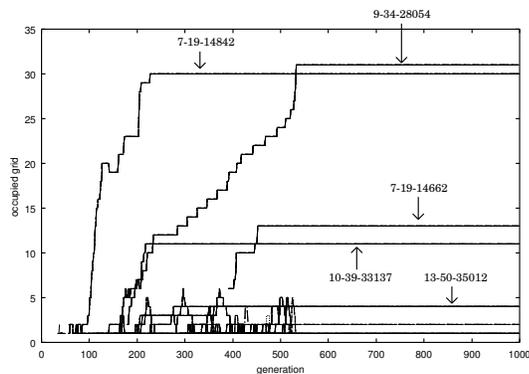


図 3: ネットワークが占める格子数の時間発展

ることを考えると、より複製効率の高いネットワークほどすばやく格子を占有することができるため、ネットワーク間において生存競争が生じるといえる。そこで、ネットワークの競合の過程を解析するため、閉じたネットワークごとに占める格子数の推移に注目した。図 3 は $\delta = 0.2$, $\epsilon = 0.1$ での実験において、反応が閉じたネットワークの種類ごとに占有した格子数の時間発展を示したものである。横軸はステップ数、縦軸は各ネットワークの占有格子数を示す。それぞれの凡例の番号は、「ネットワークの構成分子種数 - 反応の数 - ネットワークの ID」をあらわしている。

この試行において、1000 ステップを通して 2514 種類のネットワークが出現し、最終的に 12 種類のネットワークで構成される定常状態に収束した。同図から、まず、200 ステップ以前の早い段階で 7-19-14842, 9-34-28054, 10-39-33137 の占める格子数が大きく増加していることがわかる。その後、400 ステップ付近から 7-19-14662 という新たなネットワークが出現し、その後も存在続けた。これはネットワーク間の相互作用により生じた新たなネットワークであると考えられ、注目すべきである。また、約 200 ステップから 550 ステップにおいて、断続的に格子数の増減を繰り返したネットワークも存在した。

また、図 4 は 1000 ステップ経過の時点で最も多くの格子を占めているネットワーク示したものである。同図からわかるように、多数の格子を占めたネットワークは少ない構成平均分子種数に対して、反応経路が比較的多い傾向があった。

次に、どのような性質を持つネットワークが最終的に生き残るのかを調べるために、ネットワークの平均構成分子種数と、新規分子の生成濃度の推移に注目した。図 5 に全格子中のネットワークの平均分子種数の時間発展を示す。横軸はステップ数、縦軸はネットワークの平均構成分子種数を示す。平均構成分子種数、初期状態の約 20 種から約 30 ステップで約 30 種弱まで増加した後、約 530 世代までに約 5 種までに減少に転じており、構成分子種数の少ない

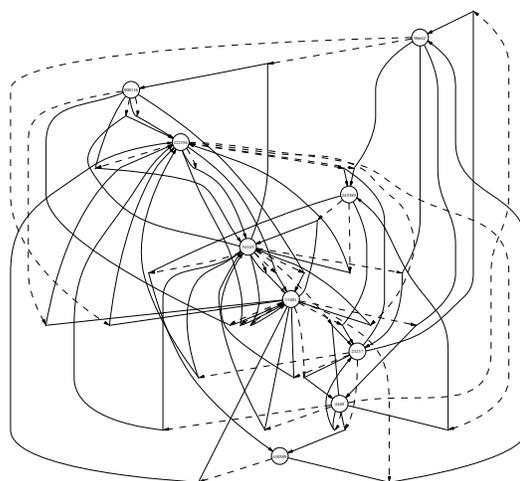


図 4: 最も多くの格子を占めたネットワーク 9-34-28054

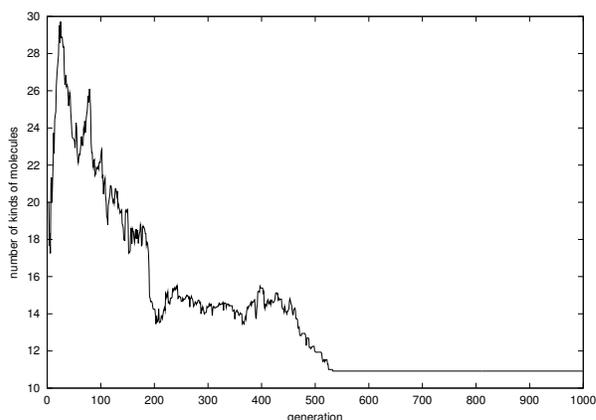


図 5: ネットワークの平均分子種数の時間発展

ネットワークが生き残っていることがわかる。分子種数の少ないネットワークが有利である理由は、ネットワークを構成する分子種数が少ないほど、格子内に存在する各分子種の濃度は高くなり、拡散の時により多くの分子が隣接格子に分子が移動できるためであると考えられる。

図 6 は、各格子における分子のすべての組み合わせにおける、成功する反応の割合、すなわち、反応成功経路比の平均の推移を示している。この値が大きいほど新規分子が生成されやすいため、閉じたネットワークにおいてはその複製効率を示す指標とみなすことができる。同図から、初期状態の 0.12 付近から徐々に増加し、約 500 ステップで最高値約 0.35 に達し、その後高い値で収束していることがわかる。これは、実際に時間経過とともに複製効率の高い自己再生産的ネットワークが生き残ったことを示しているといえる。以上から、構成分子種数が少なく、反応成功経路比の高いネットワークが最終的に多くの格子を占めていることがわかる。

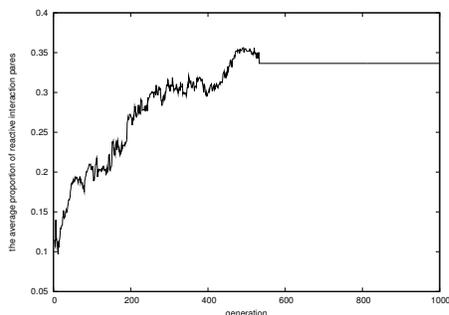


図 6: ネットワークの平均反応成功経路比の時間発展

3.3 空間的パターンの創発

前節では、自己再生産的ネットワークの競合による進化の過程について論じた。最後に、その結果として生じるネットワークの空間的パターンについて解析を行った。図 7 は、 $\delta = 0.2$, $\epsilon = 0.1$ の実験において、異なるネットワークが共存した状態で挙動が収束し、時間的に定常になったネットワークのパターンの例を示す。縦軸、横軸の意味は図 1 と同様である。また、図 8 は同じ試行において、ネットワークにおける分子の構成を各格子についてプロットしたものである。すべての格子が一樣な分子構成のネットワークで占められるのではなく、いくつかの異なる分子構成のネットワークが共存している様子がわかる。たとえば、格子番号 50 周辺では分子種数 9 のネットワークが存在するが、格子番号約 66 周辺では分子種数が 7 の異なるネットワークが存在することがわかる。同時に、異なるネットワーク間の境界では、分子種数が大きく増加していることがわかる。ネットワーク群の境界付近では、互いのネットワークの分子が混じり合って複雑なネットワークが維持されている。前述の 2 種の境界付近では、分子種数が 13 に増大している。

ここで、注目すべき点は、異なるネットワークの境界付近においては、格子における全分子の濃度の合計が若干減少している（図中最上部の黒色の領域が生じている）ことである。これは、境界領域においては、格子内の反応によって生じた新規分子の濃度が小さいことをあらわしており、他のネットワークから流入してきた異分子との反応が成功しないことで、異分子の侵入を互いに防いでいることによると推測される。

4 おわりに

ミクロレベルの分子間相互作用のダイナミクスとマクロレベルのパターン形成の相互の影響を明らかにするために、 λ 関数に基づく 1 次元反応拡散系モデルを構築し実験を行った。その結果、分子間ネットワークの創発とネッ

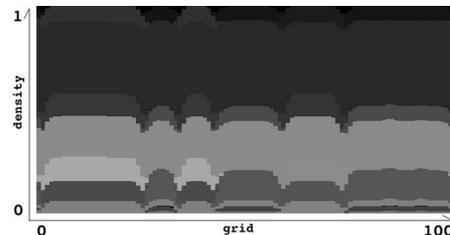


図 7: 時間的に定常な空間パターン。

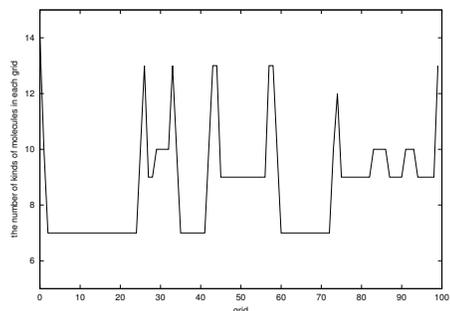


図 8: 各格子ごとのネットワークを構成する分子種数

トワーク間の相互作用について次のことが明らかになった。1) 各格子内で生じるネットワークは生き残るものと消滅するものがあり、生き残るものは自己再生産的なネットワークである。ネットワークが生き残る確率が高くなる条件としては、生成率 δ が大きく、拡散係数 ϵ が小さい場合であり、これはこの条件が格子内の反応で生じる新規分子を維持し、多様性を維持することが自己再生産的なネットワークの生成を可能にしているということに起因する。2) 自己生産的なネットワークは、隣接格子への拡大に伴うネットワーク間の競合によって、構成分子種数が少なく、構成分子種に対する反応経路が多いものへと進化する。3) ネットワーク間の競合の結果、1 次元格子上に異なるネットワークによって構成される定常的なパターンが生じる。これは、他のネットワークからの流入する異分子との反応が成功しないことで、流入を防ぐ働きによるものであると考えられる。

参考文献

- [1] W. Fontana: Algorithmic Chemistry, *Artificial life II*, pp. 159–209 (1991).
- [2] Ikegami, T. and Hashimoto, T.: Replication and Diversity in Machine-Tape Coevolutionary Systems, *Artificial Life V*, pp. 426–433 (1997).
- [3] Suzuki, Y. and Tanaka, H.: Chemical Evolution among Artificial Proto-cells, *Proc. of Artificial Life VII*, pp. 54–63 (2000).