

2 分子間相互作用に基づくネットワーク型計算機械の研究

2 *Studies on Network Computational Machines Based on Molecular Interactions*

鈴木 秀明

SUZUKI Hideaki

要旨

ネットワーク人工化学の提案から現在に至るまでの研究成果をまとめる。まずノードの鎖の折りたたみによって作られるクラスタを能動機械として動作させるモデルを紹介した後、ネットワークダイナミクスの底辺をなす弱いエッジのつなぎ変え規則についての研究を総括する。ネットワークに定義された‘エネルギー’の最小化基準で空間的な制約を表現する方法の成果とその限界について論じた後、それを打開するものとしてノードにアクティブな機能(プログラム)を実装したモデル、さらにそのプログラムをエージェントに持たせてネットワーク内を移動できるようにしたモデルを紹介する。この最後のモデルは「プログラム・フロー・コンピューティング」という新しい計算のモデルとして今後研究の進展が見込まれる。

Recent studies on network artificial chemistry (NAC) is surveyed. First, a model of active clusters created through the mathematical folding of node chains is presented, and next the studies on the rewiring rule of weak edges which constructs the base of the NAC's dynamics are summarized. The rule is formulated with the criterion of the minimization of newly defined network ‘energy’, and with experimental results, its effectiveness and limitation are discussed. Then we turn to a new scheme of the NAC that underwent the following modifications to the design. The former inactive solvent nodes are equipped with active (functional) programs, and finally the programs are implemented in agents that move through edges of the network and conduct the programs at nodes. This last model, “program-flow computing”, can be applied to some computational problems.

【キーワード】

人工化学, 複雑ネットワーク, エージェント, 自己組織化, プログラム・フロー・コンピューティング
Artificial chemistry, Complex network, Agent, Self-organization, Program-flow computing

1 分子の論理を利用した新しいアルゴリズムの構築を目指して

1.1 構成論的アプローチ

我々の体を形作っている細胞は、数億個の分子(水を除く)が精妙に相互作用しながら、遺伝・代謝などの様々な生命活動を営んでいる巨大機械である。この機械は人工の機械にはいまだ持ち得ない高い自律性、適応性、頑強性、信頼性、自己修復性を持っており、近年その設計

原理やメカニズムを探ろうと、生物学、化学、物理学、情報科学を総動員した研究が様々な分野で精力的に進められている。特に情報科学との接点で見ると、システムバイオロジーのように生物細胞まるごと1個の詳細なモデルを構築しそれを多大の計算リソースをかけてシミュレーションするような野心的な試みも行われるようになってきた。けれども仮に我々が無限の計算機リソースを持ち、生物細胞内に起こっていることすべてを計算機内に写し取り、シミュ

レーションしたからといって、我々はそれで本当に細胞の『設計原理』を理解したと言えるだろうか？特に冒頭に述べたような、細胞の持つ様々な有用な性質の“わけ”を理解したことになるだろうか？

我々 KARC (神戸研究所 未来 ICT 研究センター) 生物アルゴリズムプロジェクトでは生物の持つ有用な性質を持った計算・通信機械を作るために、上のような詳細なモデルから出発するやり方とは異なる、言わばボトムアップ・アプローチ (足し算アプローチ) (図 1 参照) のやり方で研究を進めている。具体的には細胞内の分子レベルの活動を詳細に検討し、それを基に情報処理や学習のためのモデルを構築する。このモデルとしては分子の物理化学的特性すべてを記述した計算的に大きなコストのかかるフルスペックのモデルよりは粗い、しかしながら分子の論理がきちんと取り込まれて自己集合や自己組織化といった生物分子の持つ望ましい性質を示し得る程度に詳しいものを用意することを目標にする。我々はこのようなモデルの構築とその妥当性検証を通して、生物的特性の本質を分子レベルで理解する手がかりを得ると同時に、新しい (非ノイマン型の) 情報処理・情報通信のモデルを提案することを目標においている。

1.2 人工生命と人工化学

このように構成論的に生命の本質に迫ろうとこれまで行われてきた研究に「人工生命」という研究アプローチがある [2]。人工生命とは大まかに言って、生命進化のお膳立てを計算機その他の人工的な媒質の中に用意してシミュレーションし、そこに観察される生命ライクな振舞いを通して生命を構成論的に理解したり、それを応用することで工学的なシステムの設計を行おうという学問である。また、さらにその一分野として最近では、原始地球で起こった生化学反応 / 化学進化のための条件を計算機の中に用意し、細胞や遺伝情報の進化等の創発的な現象を起こさせようとする「人工化学」の研究も進められている [5] - [7]。要素プロセスのメカニズムが量子力学にまで立ち戻って詳細に特定でき、しかも集合的な動きとして自己組織化 (self-organization) や自己集合 (self-assembly) を起こし複雑な構造や機能を創出することが分かっている化学反応系は、自己組織的な計算システムを設計しようとする際の理想的なお手本の一つであり、これにより従来の人工生命 — そこでは人間が直観に頼ってモデルを考案しなければならない — より着実な方法でモデルの設計や評価を行うことができる。

2003 年鈴木らはこの人工化学のために用意しなければならない環境を検討し、それを次の五つの構成要素にまとめた [16] :

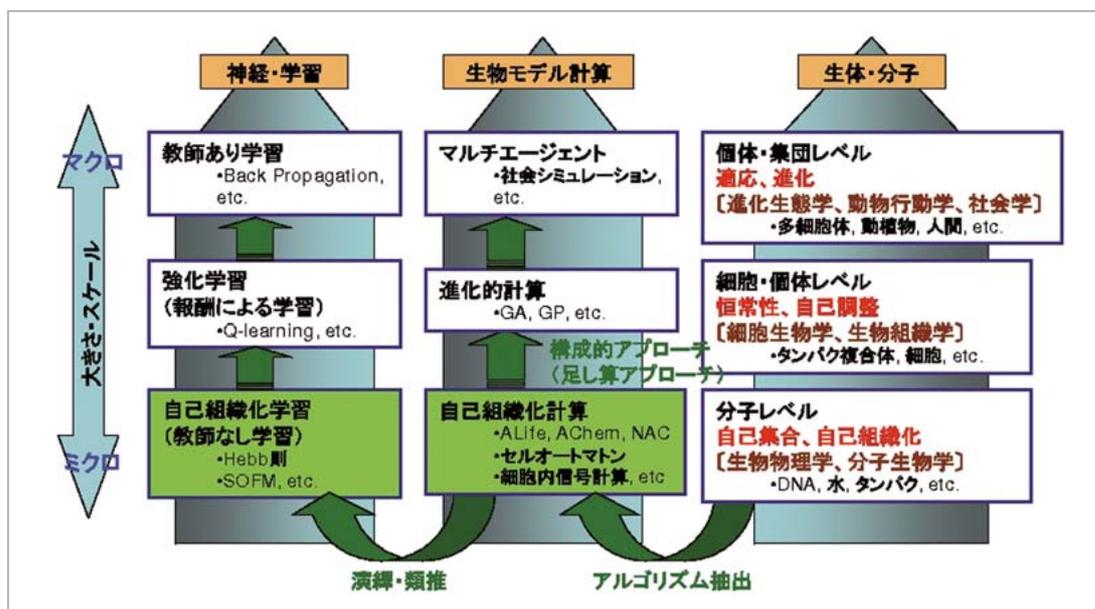


図 1 ボトムアップアプローチの概念図

- 情報の空間
- 要素シンボル
- シンボルの移動ルール
- シンボル間の反応ルール
- 処理を上位から補正／指導するマネージャー

この中でも特に、空間とその中におけるシンボルの移動ルールは人工環境の底辺を成す最も基本的な枠組みであり、これをいかにデザインするかでモデルの良否が大きく左右される。従来人工生命／化学の研究ではこの枠組みとしてコアメモリ等の1次元アドレス空間[12][14][15]、セルオートマタに代表される2/3次元ラティス空間[10][9][13]、囲い込まれたシンボル間の順序を全く考慮しないタンク構造[7][28]、等を用いてきたが、これらはいずれも長所短所の両方を持ち合わせており、自己組織的な壁の形成やシンボルの移動／結合を柔軟に表現する枠組みになっていなかった[16]。

1.3 ネットワーク人工化学

この問題に対し鈴木らはシンボル間の空間的な位置関係を純粋にトポロジカルなネットワークで表現するネットワーク人工化学(Network Artificial Chemistry, NAC)を提案し、研究を進めている[17]–[27]。

周知のように生化学反応で主役を務める溶質分子たちは、溶媒(水)中を動きまわりながら互

いに衝突を繰り返す。この動きは3次元溶液空間の物理特性と各分子の大きさ、形に制約されているが、NACではこの制約をネットワークにおけるエッジのつなぎ変え規則に焼き直す。図2に溶液系とNACの比較の関係を示す。

NACで用いるネットワークはノードとエッジから成るグラフであり、ノードは分子や原子クラスタを、エッジはそれらの間の衝突／結合の関係をそれぞれ抽象的に表現する。生物の分子相互作用が主としてファン・デア・ワールス結合、水素結合、イオン結合、共有結合の四つによって引き起こされる事実に習って、NACのエッジはwa、hy、io、cvの四つに種類分けされ、それぞれ異なる結合の強さが定義される。弱いエッジはあらかじめ用意された受動的ルールによって時々刻々つなぎ変えられ、その関係性の中から、強いエッジがノードやクラスタの持つ能動的働きにより形成される。

本章ではこのNACの初期の代表的な研究例[23]として2に1次元的なノード鎖が‘折りたたみ’により能動的なクラスタに変換されてあたかもタンパク質のように、親疎水分離や分子鎖複製といった処理をネットワークの中で行う様子を紹介する。

また3においてはNACのダイナミックスの底辺をなす、エッジの受動的なつなぎ変えルールについての研究[24]を紹介する。NACノード

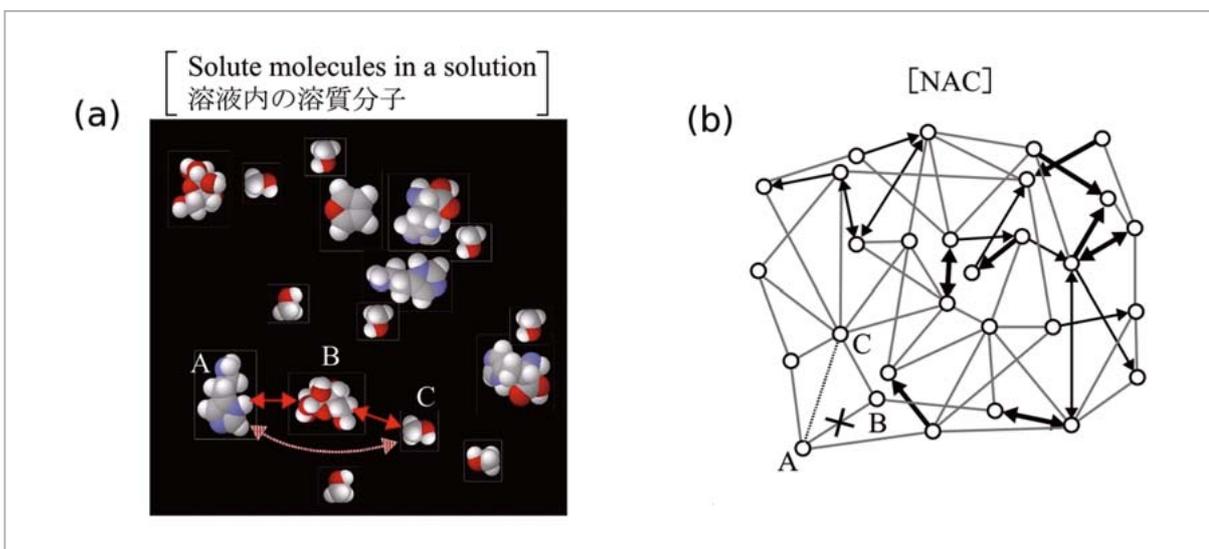


図2 (a) 溶液内の溶質分子と (b) ネットワーク人工化学の対応図

(a) においては分子の動きは3次元溶液空間によって制約され、(b) においてはノードの動きはつなぎ変え規則によって制約される。分子AとB、BとCが互いに衝突しているとき、次にAとCが衝突する確率が高い。

に対応する生物分子は本来 3 次元溶液空間内をブラウン運動により動き、互いに接触したり衝突したりしている。図 2(a) の \Leftrightarrow に示されるように、これら溶質分子はおおざっぱに言って、‘空間的に近い’分子、すなわち現在自分が衝突している分子と接触もしくは衝突関係にある近傍分子と次に衝突する確率が高く、また逆に遠く隔たった分子同士がすぐに衝突することはない。この空間的な制約がネットワークのつなぎ変え規則にどのように反映されるかを調べるため、まず D 次元剛体球のランダムウォークを数値シミュレーションし、それから剛体球の‘接触グラフ’においてエッジが生成／消滅する確率を度数や最短距離、あるいは第 2 最短パス長の関数としてプロットする。一方 NAC グラフに対してはグラフの‘エネルギー’を定義し、それを最小化するように定めたエッジのつなぎ変え規則を用いてシミュレーションを行い、つなぎ変えによるエッジの生成／消滅確率がランダムウォークの実験結果と定性的に一致すること、そしてそれがグラフ全体の接続性を保ったままクラスタ係数(C)や平均経路長(L)の値を剛体球接触グラフと同様の値に近づけるものであることを示す。

1.4 改良ネットワーク人工化学

上述したように、NAC ダイナミックスの基本を成し自己組織化能力を決定付ける主たる要素は、弱いエッジ(waやhy)のつなぎ変え規則である。3 に述べるネットワークエネルギーによるつなぎ変え規則はグラフの定性的性質を剛体球の接触グラフと同じものにするには成功したものの、これによってできるネットワークをユークリッド空間を完全に代替する仮想的空間として見たとき、その成果はいまだ満足すべきものではない。一つの例が液体の結晶化である。例えば物質としての水は、常温で水分子同士が水素結合により緩く結合し合うネットワークを形づくっているが、零度以下ではこのネットワークが規則的なものへと変化し結晶構造(氷)を形成する。この結晶構造は極論すれば、水分子の物理特性と 3 次元空間制約が原因となることができるものであるが、このような規則的な構造をエネルギーの最小化原理だけで空間情報(角度や位置 etc.)をもたないグラフに創出させること

は難しい。3 の数値シミュレーションによって得られるグラフのクラスタ係数と平均パス長の値もスモールワールド[30]、もしくはそれより少しレギュラーに寄った値が限界であり、グラフ全体のまとまりを保ったままより大きな L 値に収束させることは達成され得なかった[21][24]。

この困難の一つの原因として考えられるのがこれまでの NAC の溶媒ノードでは無視してきた水分子の‘特殊性’である。水はベンゼン等の有機溶剤と異なり、水素結合により全体で擬似的な規則格子を形作るある種の異常な液体であり、これが例えば疎水性相互作用や脂質二重膜の形成の主要因にもなっている。(疎水性相互作用は通常、非極性分子が水分子の規則ネットワークに参加できず、排斥されて集まる現象と説明される。)この親水性・疎水性に基づく分子間相互作用は生命分子のダイナミックスの基本の一つであり、究極的には水分子がこのように静的・受動的な分子ではないアクティブで働きを持った分子だったからこそ生命は自己組織化／進化したと言うこともできる。我々は今まで 2 にあるように NAC における能動的なマシンとしてはデータフロークラスタ(\Leftrightarrow タンパク質)だけを考え、溶媒ノード(\Leftrightarrow 水)には特に能動的な働きは仮定してこなかったが、グラフに規則性(結晶構造)を自己組織化させ大きな L 値を持つようなものへと変化させるにはどうしても、溶媒ノードに能動的な働きを持たせ周辺エッジを制御する必要が出てくる。

この考えに基づき試みられたのが 4 で紹介する NAC ノードに持たせたプログラム(能動的な機能)の実行によるエッジつなぎ変えである。プログラムは水分子が持つ複雑な働きを参考にしてデザインされ、その実行を通してネットワークに構造が形成する可能性について調べられる[25][27]。ターゲット構造として 2 次元正方格子を念頭におき、Java のメソッドとしてノード・インスタンスに実装されたノードプログラムを全ノードが並列・独立に実行することにより擬似レギュラー構造が創出される様子を調べる。

5 では以上の研究の延長線上に考案されたネットワーク人工化学の新しい枠組みに[26]ついて紹介する。図 3 にこの『改良ネットワーク人工

化学』におけるグラフと生化学反応系との新しい対応関係を示す。ノードはこれまでのように分子／原子クラスタを直接表わすのではなく数個～数十個の分子を含むナノメートルスケールの微小な空間領域を表わし、分子／原子クラスタはネットワーク中を動くエージェントで表現される。エッジはそれら空間領域に属する分子／原子クラスタ間の接触や結合の関係を集合的に表わす。機能的なプログラムは固定したノードではなくネットワークの中をエッジに沿って移動するエージェントに実装され、それらがエージェントのノード到着と同時に発火(反応)する／実行されることによりエッジのつながり変えが引き起こされる。実験ではこの枠組みのもと3種類の分子のプログラムをデザインすることにより、親水性のクラスタ構造が組織化され、それが‘中心体’により分裂していく様子が示される。このモデルはまた、ノードをCPU、エッジを通信線、エージェントをプログラムとして見ると通信路で結ばれた多数のCPUがそこを歩き来する多数種類のプログラムを並列実行する「プログラム・フロー・コンピューティング」と呼ぶべき計算のモデルになっている。

2 能動機械としてのコントロールフロー・クラスタ

2.1 はじめに

本節ではネットワーク人工化学において1次

元的なノード鎖が‘折りたたみ’によりクラスタに変換され、能動的な機械として動くモデル^[23]について紹介する。作られたクラスタは強い結合のエッジでまとまり、それらがエッジに沿って互いにトークンを流しながら並列動作することでデータフローマシンとして動作する。ノードの改変、強いエッジのつながり変えといったNACにおける能動的処理はこのデータフローマシンによって行うことができる。ここに提案する折りたたみは言わば、遺伝子型(ノード鎖)から表現型(データフローマシン)へのある種の変換処理であり、NACの中に大きな機能機械を入れ込もうとする時の一つの方法論を与える。

以下ではまず、**2.2**でNACの基本デザインについて簡単に述べた後、**2.3**でノード鎖の折りたたみについてのアルゴリズムを、**2.4**でデータフローマシンの動作を詳述する。**2.5**で実験結果の幾つかを述べ、**2.6**で結論とモデルの意義についてまとめる。

2.2 基本モデル

本節で用いるNACのグラフは2種類のノードと3種類のエッジを持つ。生物になぞらえて、ノードは水特性として「親水性」と「疎水性」のものに分けられ、エッジは強い順に Covalent (cv, 有向、共有結合)、Hydrogen (hy, 有向、水素結合)、van del Waals (wa, 無向、ファンデアワールス結合)と分けられる。

NACの wa エッジは次の(1)～(4)の処理を順

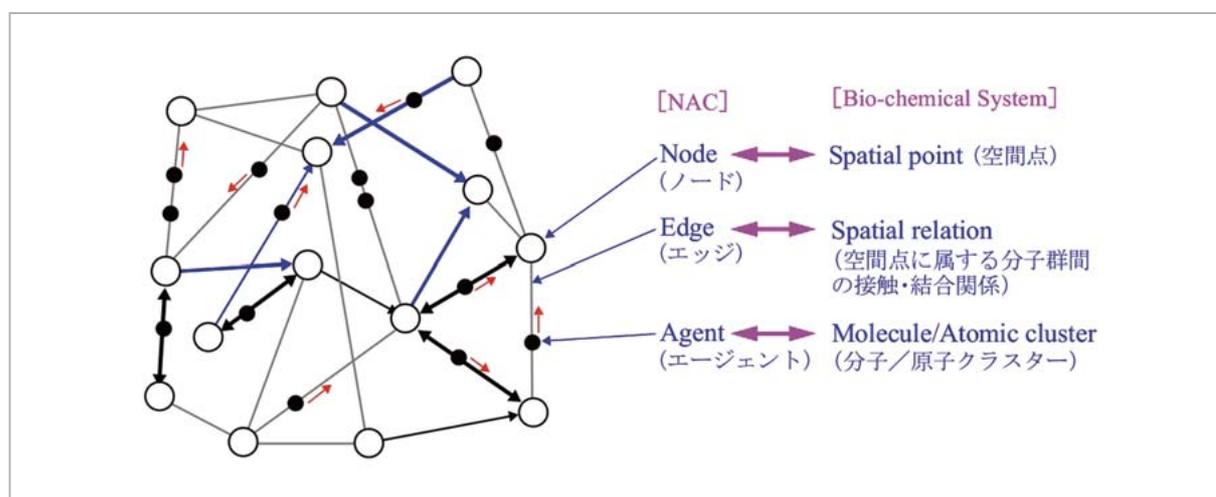


図3 改良ネットワーク人工化学と生化学反応系の対応図

分子エージェントはプログラムを持ち、それらがネットワーク中を移動しながら計算を行う。

番に繰り返すことによりローカルにつながり変えられる：

- (1) 基準ノード A をネットワークからランダムに選ぶ。
- (2) A から wa によって隣接するノード中、最大度数のノード B を選ぶ。
- (3) A から wa によって距離 2 または 3 にあるノード中、最小度数のノード C を選ぶ。
- (4) ノード A、C の水特性の別を調べ、結合のための特定の条件を満足していたならば、エッジ AB を切断し、エッジ AC を新たに生成する。

ここで、(4)における結合の条件としては親-親、疎-疎、親-疎の順に結合が生じやすいように定める[11]。このつながり変え規則のもとではグラフは small-world 性[30]の強いものへ、また度数分布が一様なものへと進化する。

2.3 ノード鎖の数理的折りたたみ

NAC 中で遺伝情報は図 4 に示されるようなノード鎖によって表現される。各ノードは文字または文字列を持っており、それらは機能文字 (a, b, ...) とテンプレート文字 (0, 1, ...) から構成される。機能文字はそれぞれあらかじめ定義された機能を持つが、それらはノード鎖のままでは動作し得ない。

このようなノード鎖は図 5 に示されるような処理を経て折りたたまれる。まず「凝集 (agglomeration)」により、隣接するノードの列は機能文字の直前で区切られ、区切られた部分ノード鎖は a1122、e0122 といったまとまった文字列を持つ 1 個のノードに変換される (図 5(b))。その後、(b) のノード鎖のすべてのノードペアの間に wa エッジが張られノード鎖がまるめられる (tangling; 図 5(c))。また、各ノードの中のテンプレート文字に注目し、そこに '5' が含まれていたらその直後の cv エッジを切断する (cutting cvs; 図 5(d))。

このようにして folding のための準備が整うと、「折りたたみ (folding)」では、テンプレート文字列間の相補マッチングに基づき、cv エッジ、hy エッジが生成される。ここでテンプレート文字 0, 1, 2, 3 は $0 \Leftrightarrow 1$, $2 \Leftrightarrow 3$ の関係で相補的にマッチングするものとする。マッチングしたテ

ンプレートを持つノードの間には cv もしくは hy エッジが新たに張られる。エッジの向きは 0 で始

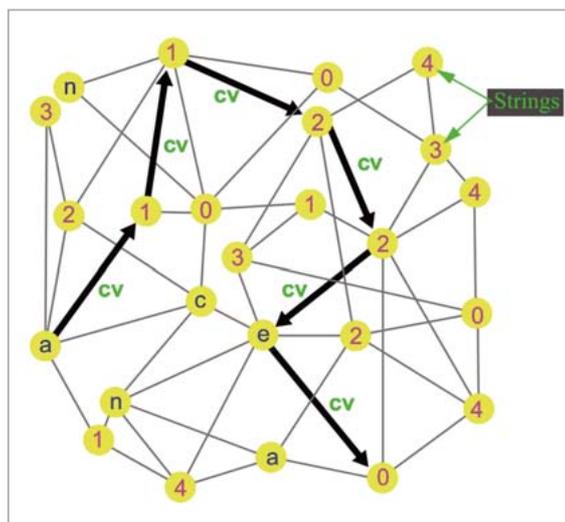


図4 NAC ノード鎖の例

鎖は方向を持ち、cv エッジによって順につながっている。各ノードは文字または文字列を持ち、鎖に沿っての文字列の並びが遺伝情報となる。図の例では a1122e0 ...

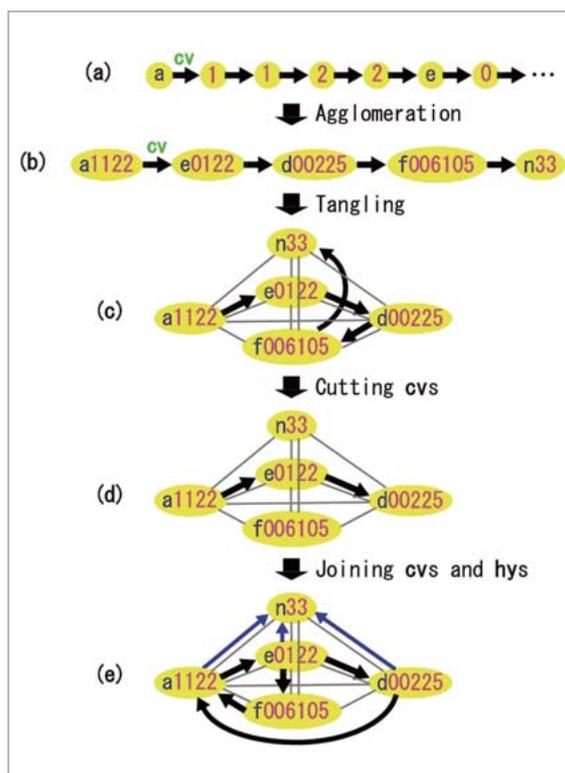


図5 ノード鎖の折りたたみ手順

(a) 初期ノード鎖、(b) 凝集 (agglomeration) 後のノード鎖、(c) まるめ込み (tangling) 後のクラスタ、(d) cv 切断 (cutting cvs) 後のクラスタ、(e) 折りたたみ (folding) 後のクラスタ。

まるテンプレートから 1 で始まるテンプレートへ、2 で始まるテンプレートから 3 で始まるテンプレートへとし、各々その向きに cv もしくは hy エッジが生成される。図 5 の例では、00 から 11 へ cv が、01 から 10 へ cv が、22 から 33 へ hy が新たに生成している。

2.4 データフロークラスタの動作

ノード鎖が折りたたまってノードクラスタとなると、それは cv エッジに沿ってトークンを流しながら並列動作するデータフローマシンとして動作する。たいていの場合、ノードはトークンを受け取るとその値が「真」の場合に発火し、機能文字 (a, d, ...) が持つルーチンを実行する。結果に応じたトークン値がセットされ、それが次のノードに受け渡される。

図 6 に前節の折りたたみによって生じたデータフローマシン 'splitase' (分裂酵素) の例を示す。このマシンは 1 個の活性部位ノード (n33) と 3 個のオペレーションノード (a1122, e0122, d00225, f006105) から成る。オペレーションノードは hy エッジを介して 1 個の活性部位を共有しており、それを通して外部ノードに対して様々な処理を施す。処理はまずノード a1122 が発火し、活性部位が別のオペランドノードに hy を張り直す動作から始まる。その後 e0122 が発火し、新しいオペランドノードが cv に関して孤立しているか否かがチェックされ、もし孤立している場合は「真」のトークンが、孤立していない場合は「偽」のトークンが e0122 から cv に沿って流される。ノード d00225 が真トークンを受け取ると、オペ

ランドノードに働きかけ、その水特性を疎水性に変更し、その後 a1122 にトークンを戻す。一方ノード f006105 は偽トークンを受け取った時に発火する機能を持ち、これが発火するとトークン値は「真」に変換され a1122 に流される。このデータフロークラスタは活性部位 n33 に隣接するオペランドノードを次々に疎水性に変換していく能力をもち、これによって油性分子がどんどん生産され、細胞分裂を引き起こす要因となる。

図 7 にはデータフロークラスタ 'replicase' (複製酵素) の設計例を示した。クラスタは 3 ノードの活性部位と 16 ノードのオペレーション部から成る。ノード鎖の基本的な複製処理は Hutton [8] が提案したものに基づく。このマシンでは右側半分のノード番号 11~17 で構成される cv によるループが中心的な役割を果たす。この部分がトークンを受け渡ししながら順番に動作することにより、活性部位は近傍のランダムなノードへ hy エッジを生成し、チェーンノードと文字列を比較し、等しければ cv を新たに生成し、チェーンに沿って一歩歩くという動作を行っていく。ノード鎖の複製が完成すると活性部位はノード鎖から離れ (hy を切り)、別のノード鎖を探し始める。

2.5 実験

2.5.1 ネットワークの分離

図 6 に示した splitase を用いたネットワーク分離の実験を行う。初期ランダムネットワーク中に 26 個のノードから成るノード鎖を 1 本入れ、凝集、まるめ込み、cv 切断の処理を行った後、(1) 受動的な wa エッジのつなぎ変え、(2) wa、wa エッジの接続による folding 及び (3) トークンを流しながらの能動的処理を行う。これら三つの処理を繰り返すことでネットワークはトポロジーを変化させ、構造を自己組織化する。図 8 にこの実験の典型的な結果を示した。splitase により疎水性ノードが生産されるにつれてグラフは親水性、疎水性の領域に分離し、最後に親水性のクラスタを疎水性ネットワークが取り囲む構造が創出している。

2.5.2 ノード鎖の複製

初期ランダムネットワークに 191 個のノードから成る replicase ノード鎖を 1 本、10 個のノー

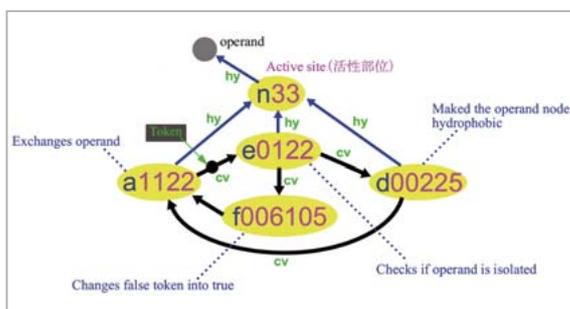


図6 データフローマシン splitase (分裂酵素) の例

26文字からなるノード鎖

'a1122e0122d00225f006105n33' が折りたたまれて作られたもの。

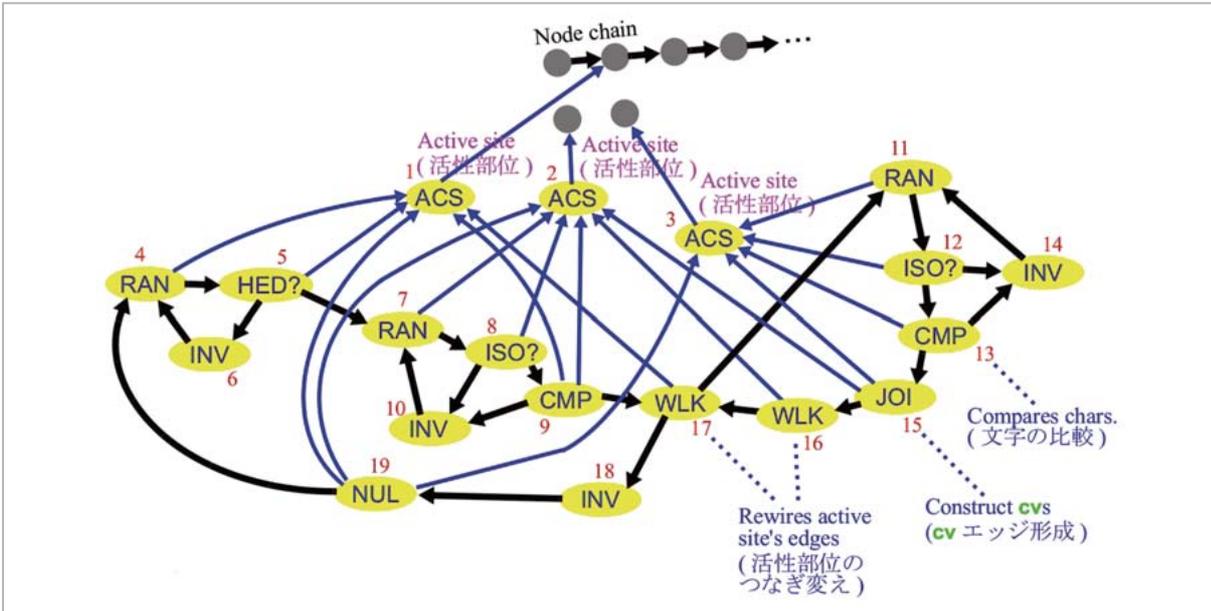


図7 データフローマシン *replicase* (複製酵素) の設計例

191文字からなるノード鎖

'a1101122311000k00011223f001005a11100611001232e01000232g22300101232f001106101115a11110222e00000222g22201001223f111116000015h101102326222i232i1101022300001f00010j22262326223001115n3325n3235n333' が折りたたまれて作られたもの。ノード中の3~4文字のニモニックは機能文字の動きをより解りやすく表現したもの。

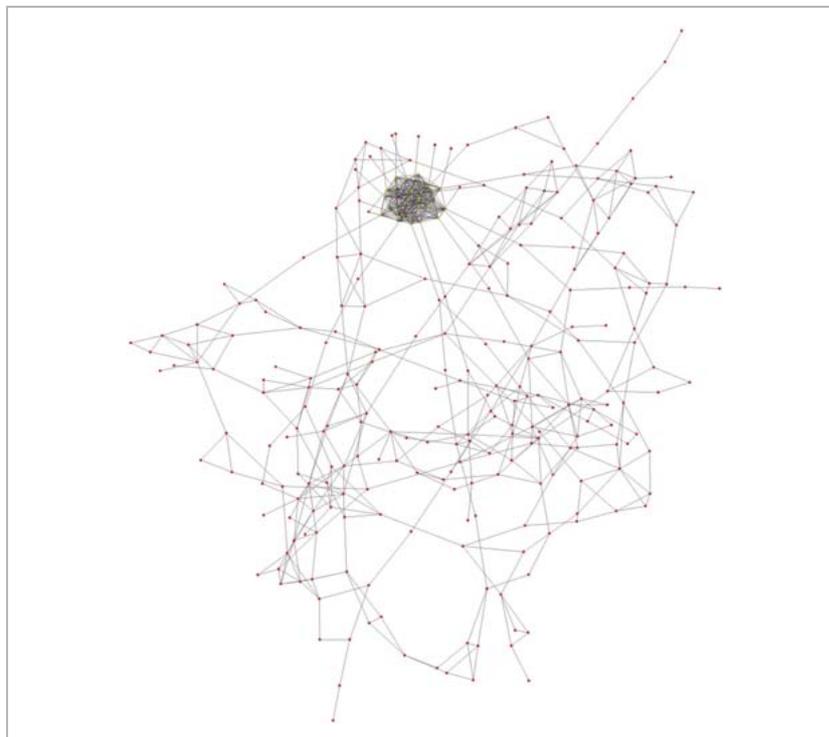


図8 ネットワークが親水性、疎水性の領域に分離した例

上部の小さな塊が親水性クラスター、それ以外が疎水性である。グラフはノード数 $N=300$ 、平均度数 $W_0=5$ のネットワークに1本の *splitase* チェーンを入れて初期処理を行い、繰り返し処理を $t=260$ 回行った後のもの。*wa* エッジの生成確率は親-親ノードペア間で $P_{ww}=1.0$ 、疎-疎ペア間で $P_{ww}=0.3$ 、親-疎ペア間で $P_{ww}=0.0$ にそれぞれ取った。現状のモデルでは *splitase* を止める機構がないため、この後さらに繰り返し処理を続けると、40タイムステップ後に親水性領域はクラスター自身を除いて消滅する。これ以降本章のすべての図において、ネットワーク可視化には市販ソフトウェア *aiSee* [3] を用いた。

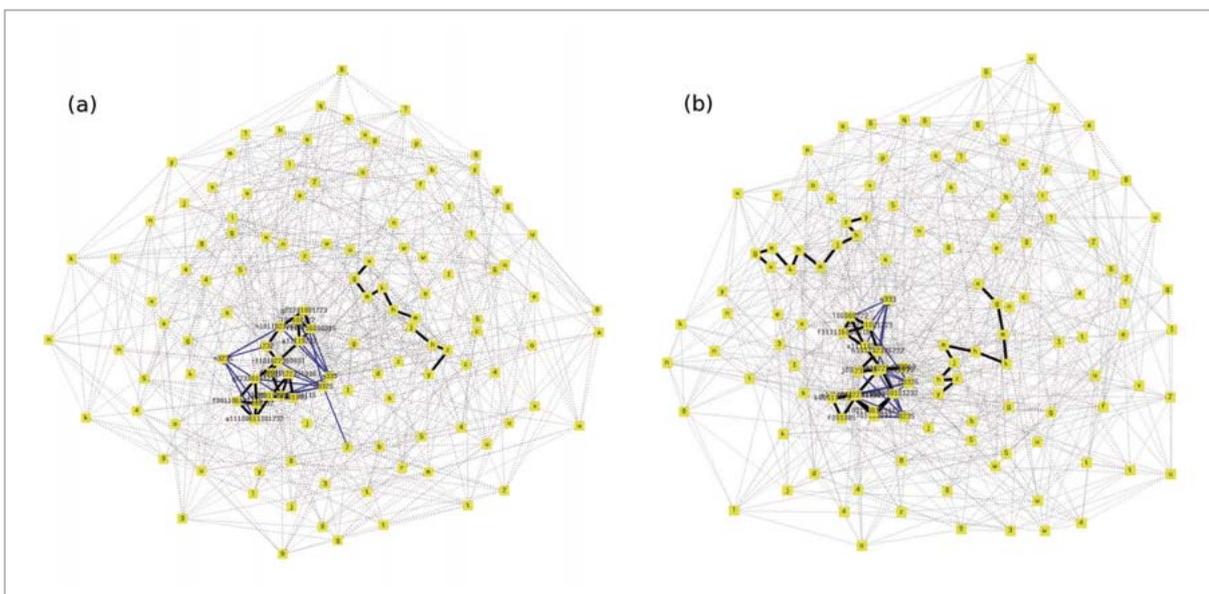


図9 *replicase*によるノード鎖複製の例

(a) 繰り返し処理 50 回後のスナップショット、(b) 繰り返し処理 710 回後のスナップショット。ノード数は $N=300$ 、平均度数は $W_0=5$ 、*wa* エッジ生成確率は $P_{ww}=1.0$ 。

ドから成る折りたたまれないオペランドノード鎖を 1 本入れ、前節と同様の処理を行う。図 7 に典型的な結果を示した。この例では *replicase* クラスタによってオペランドノード鎖と全く同じ文字列シーケンスを持つコピーノード鎖がネットワーク中に作られている。

2.6 結論と考察

ネットワーク人工化学の上で動作する能動的マシンとしてのデータフロークラスタを提案し、それを 1 次元的なノード鎖から数理的な折りたたみによって構成するアルゴリズムを示した。提案手法に基づいて *splitase* (分裂酵素) と *replicase* (複製酵素) をデザインし、それらの動作を実験的に検証した。

この数理的な折りたたみ処理は生物タンパク質分子の折りたたみになぞらえて設計されたものであり、両者は次のような共通の特徴を有している。

[表現の完全性]

1 次元的なシーケンスの違いに応じて様々な形のクラスタが構成できる。生物タンパク質の形が十分なバリエーションを持ちえることはタンパク質の持つ機能、さらに、それによって構成される生物種の多様性によって間接的に示されているが、本節で示したアルゴリズムに基づ

いてクラスタを構成する場合も、適当なシーケンスさえ用意されれば原理的にいかなるトポロジーのノードクラスタ(部分ネットワーク)でも構成することができる。

[相補マッチングの利用]

形、もしくは文字の相補的なマッチングを基準にしている。タンパク質の折りたたみは基本的にそれを構成するアミノ酸残基の形や大きさ、物理化学的特性により決まる。この時、一つの基準となるのが残基列間のある種の相補的なマッチングであり、それが良く照合するように折りたたまれば、出来上がるタンパク質はエネルギー的に安定となる。図 5(b) から(c)への折りたたみはこれを簡略化し数理的に実現したものであると言える。人工生命の研究ではこのような文字列間の相補マッチングで関係性を決定する方法が幾つかのシステムで用いられてきたが(例えば[12])、本アルゴリズムもそれを採用している。

3 エネルギー最小化に基づくネットワークのつなぎ変え規則

3.1 はじめに

本節においてはエッジの受動的なつなぎ変えルールについての一つの研究例として、ネット

ワークにエネルギーを定義し、それを最小化するという基準によりエッジのつなぎ変えを行ったモデルについての研究結果を紹介する[24]。

以下ではまず、3.2 でユークリッド空間の中を動く剛体球のランダムウォークをシミュレーションし、空間構造が球の接触関係をどのように制約するかを調べた後、3.3 でエネルギーに基づく NAC エッジのつなぎ変え規則を定式化する。これを用いた NAC の実験結果を 3.4 で述べた後、3.5 に結言を与える。

3.2 剛体球のランダムウォークシミュレーション

3.2.1 実験方法

溶液中の分子の拡散(ブラウン運動)をユークリッド空間でのランダムウォークによりモデル化するために、周期的境界条件を満たす D 次元の連続空間を考え、その中に半径 R_1 の D 次元剛体球を N 個入れると考える。毎タイムステップ、各剛体球はランダムに選ばれた移動ベクトルだけ中心座標を移動させる(ホップする)が、もしその移動が近接の 2 剛体球の中心点間の距離を $2R_1$ 未満にする場合はその移動を取り消す。単純化と計算コスト削減のため、 R_1 及び移動ベクトル長 Δ は全剛体球、全ホップについて一様とし、また移動ベクトルの向きは任意の角度ではなく、 $2D$ 通り(各次元について正負 2 方向)の中からランダムに選ばれるとする。

剛体球間の衝突/接触の関係を接触半径 R_2 を用いて定義する。剛体球ペアはその中心点間のユークリッド距離 d が $2R_1 \leq d \leq 2R_2$ を満たす場合に接触していると見なす。特に 2 個の剛体球の間に他の剛体球が入れない時に限りその 2 個は接触していると見なし $R_2 = 2R_1$ とする([4] 邦訳 p.890)。こうして作られる接触グラフがランダムウォークに応じて時々刻々変化していく中で、グラフの幾つかの特性を計測する。

まず我々は接触グラフのクラスタ係数 C と平均パス長 L を通常定義に従って計測する[30]。またエッジの結合と切断の確率 P_{join} と P_{cut} を次のようにして計算する。あるタイミングでノード A が移動してノード C との間に新たにエッジを生成したとする。この時、エッジ生成直前の AC 間の最短パス長 l と C の度数 k を計測し、頻度

行列 $N_{\text{join}}(l, k)$ に 1 加える。またこの時、 C だけでなくグラフ内の他のすべてのノードについても l, k も計測し $N(l, k)$ に 1 加える。シミュレーションの最後に $P_{\text{join}}(l, k) = N_{\text{join}}(l, k) / N(l, k)$ を計算することによりエッジ生成確率 P_{join} の期待値を求める。同様に、あるタイミングでノード A の移動によりエッジ AB が消滅した場合、エッジ消滅直前の AB 間の第 2 最短パス長 l_2 と B の度数 k を計測し、頻度行列 $N_{\text{cut}}(l_2, k)$ に 1 加える。また A に隣接したすべてのノードの l_2 と k を調べ、 $N_2(l_2, k)$ に 1 加える。最後に $P_{\text{cut}}(l_2, k) = N_{\text{cut}}(l_2, k) / N_2(l_2, k)$ により P_{cut} を計算する。

3.2.2 パラメータ設定

実験のための重要なパラメータとして、まず剛体球の半径と移動ベクトル長の比 R_1 / Δ の典型的な値を、脂質分子の親水性頭部(溶質)が水(溶媒)に囲まれてブラウン運動する場合を想定して計算する。毎秒溶質分子が溶媒分子を衝突する回数を z 、溶質分子の半径を r_1 、溶質分子の溶媒分子に対する平均の相対速度を V_r とおく。 z は半径 $R_1 + r_1$ 、高さ $|V_r|$ の円筒の中にある溶媒分子の平均個数に等しく、図 10(a) のように書ける。ここに ρ は溶媒分子の単位体積当たりの個数である。 V_r は溶質分子の平均速度ベクトル V と溶媒分子の平均速度ベクトル v の合成ベクトルであるが、今の場合溶媒分子の動きの方向は完全にランダムと仮定してよいので v と V は直交していると見なせ、従って図 10(b) となる。ここでエネルギー等分配則 $(1/2)M|V|^2 = (1/2)m|v|^2$ を用い速度比を図 10(c) のように見積った。 $M = 255$ と $m = 18$ はそれぞれ脂質頭部($C_8O_6PNH_{18}$)と水(H_2O)の分子量である。図 10(a) 式と図 10(b) 式を用いると R_1 / Δ 比は図 10(d) のように求められる。この値を参考にして、本実験では剛体球半径、接触半径、移動ベクトル長をそれぞれ $R_1 = 4.0$ 、 $R_2 = 8.0$ 、 $\Delta = 0.1$ に選ぶ。

また剛体球が空間内にランダムに配置している場合の接触グラフの平均度数 \bar{k} は次のように評価できる。 $V_D(r) = \pi^{D/2} r^D / (D/2)!$ を半径 r の D 次元球の体積とする。一辺 X の立方体に体積 $V_D(R_1)$ の剛体球が N 個入っている状態は個数密度という意味では $X^D - N \cdot V_D(R_1)$ の体積中にサイズゼロの点が N 個入っている状態に近似できる。この時、個数密度は図 10(e) であり、 \bar{k} はこ

$$\begin{aligned}
 \text{(a)} \quad & z = \pi(R_1 + r_1)^2 \cdot |\mathbf{V}_r| \cdot \rho \\
 \text{(b)} \quad & |\mathbf{V}_r| = \sqrt{|\mathbf{V}|^2 + |v|^2} = \sqrt{1 + \frac{255}{18}} \cdot |\mathbf{V}| = 3.89 \cdot |\mathbf{V}| \\
 \text{(c)} \quad & \frac{|v|}{|\mathbf{V}|} = \sqrt{\frac{M}{m}} = \sqrt{\frac{255}{18}} \\
 \text{(d)} \quad & \frac{R_1}{\Delta} = \frac{R_1}{|\mathbf{V}|/z} \\
 & = \frac{R_1}{|\mathbf{V}|} \cdot \pi(R_1 + r_1)^2 \cdot |\mathbf{V}_r| \cdot \rho \\
 & = 3.89 \cdot R_1 \cdot \pi(R_1 + r_1)^2 \cdot \rho \\
 & = 3.89 \times (3.63 \times 10^{-10} [m]) \times 3.14 \\
 & \quad \times (3.63 \times 10^{-10} [m] + 1.5 \times 10^{-10} [m])^2 \times 3.34 \times 10^{28} [1/m^3] \\
 & \approx 39.0 \\
 \text{(e)} \quad & \frac{N}{X^D - N \cdot V_D(R_1)} \\
 \text{(f)} \quad & \bar{k} = \frac{N}{X^D - N \cdot V_D(R_1)} \times (V_D(2R_2) - V_D(2R_1))
 \end{aligned}$$

図10 剛体球ランダムウォークシミュレーションのパラメータ設定

の密度に半径 $2R_1$ 以上、半径 $2R_2$ 以下の D 次元球殻の体積を掛けたものに等しく図 10(f) のように求められる。この式から例えば $D = 3$ 、 $X = 93.0$ 、 $N = 200$ 、 $R_1 = 4.0$ 、 $R_2 = 8.0$ の条件下では平均度数は $\bar{k} = 4.0$ と見積もられる。

3.2.3 シミュレーション結果

実験は $D = 2$ と $D = 3$ の双方で行った。どちらの場合も C 、 L の値は次のような特性を持つことが確認された： C 値はランダムグラフのものより 10~20 倍大きくなり、 L 値はランダムグラフのものより約 2 倍大きい値で推移する。これは剛体球接触グラフがスモールワールドネットワーク [30] ($C \gg C_{\text{rand}}$, $L \approx L_{\text{rand}}$) とレギュラーネットワーク ($C \gg C_{\text{rand}}$, $L \gg L_{\text{rand}}$) の中間に位置することを示している。

図 11 に $D = 3$ の実験によるエッジの結合/切断確率についての結果を示す ($D = 2$ 次元の結果もほぼ同様であることが確認されている)。これによると、 $P_{\text{join}}(l, k)$ が l の小さい領域では l の増加とともに指数関数的に減少し、 k の増加とともに

に 1 次関数的に減少することが分かる。これは分子の衝突を考えると自然な結果で、 l の増加による分子間距離の増加及び k の増加による接触のための有効衝突断面積の減少により衝突確率が減少すると考えられる。なお図 11(a) によると $l = 2$ 、 $k \sim$ 大の領域では P_{join} の多少の増加が観察されるがこれはこの条件でしかで見られず、ノイズの影響によるものと思われる。また l が大きい領域では P_{join} が再び増加するが、これは空間の有限性による効果である。もし空間サイズ、そしてグラフのノード数が無限であれば、分母の $N(l, k)$ は l の増加とともに無限に増大するが、有限グラフでは $l \sim$ 大の領域で $N(l, k)$ が減少に転じるため、少数の例外ノードの作用により P_{join} が増大すると考えられる。

一方図 11(b) によると、 $P_{\text{cut}}(l_2, k)$ は $l_2 \sim$ 小の領域では小さい値に保たれるが、ある値を境に急激に増大することが分かる。増加の境目となる l_2 の閾値は k の増加とともに減少し、例えば $k = 8$ の時は、たとえ $l_2 = 3$ でも $P_{\text{cut}}(l_2, k)$ は非

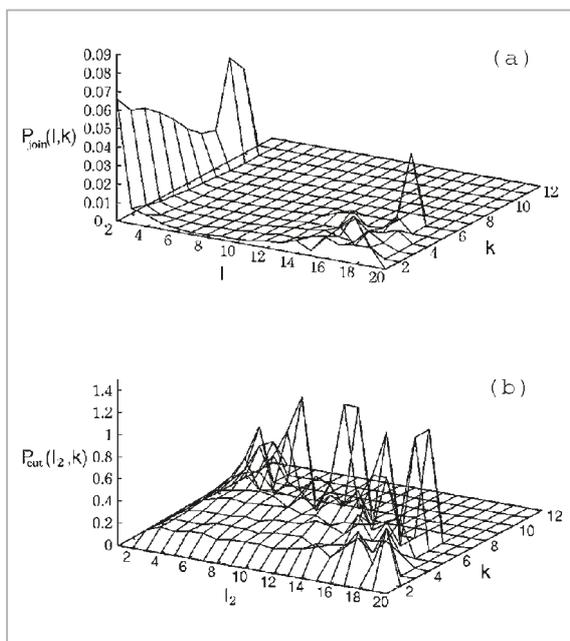


図 11 剛体球ランダムウォークシミュレーションの結果

(a) ノードペア間のエッジの結合確率 P_{join} (ここに l はペア間の最短パス長、 k は一方の端点の度数)。(b) エッジの切断確率 P_{cut} (ここに l_2 はエッジの端点間の第 2 最短パス長、 k は一方の端点の度数)。一辺の長さ $X = 93.0$ の $D = 3$ 次元ユークリッド空間の中に $N = 200$ 個の剛体球を入れた。剛体球半径、接触半径、移動ベクトル長は各々 $R_1 = 4.0$ 、 $R_2 = 8.0$ 、 $\Delta = 0.1$ で、この条件下で剛体球の容積密度は 0.067 、接触グラフの度数の実測値は $\bar{k} = 3.8$ となった。デスクトップ PC による約 4 日のシミュレーションにより 100,000 タイムステップ実行した平均値である。

常に大きくなる。これは空間的制約を鑑みたグラフトポロジーの‘不自然さ’により理解できる。前述の C 値、 L 値に示されるように、剛体球接触グラフは空間的制約に起因するある種の規則性(regularity)を持ったグラフである。 D 次元レギュラーグラフの著しい特徴の一つに、ノードが D 次元空間にほぼ均等に分布しているため、あるノードペア間の最短パスにそれと長さがさほど異なる多数の別のパスが存在するという性質がある(言い替えると、あるノードペア間のパス長ヒストグラムにおいて最短パス付近での頻度はかなり大きくなる)。回りにノードが多数あるのに($k \sim$ 大)第 2 最短パス長が大きい($l_2 \sim$ 大)エッジはこの特徴に違反しており、このようなエッジを高い確率で切断することにより、剛体球接触グラフはレギュラーグラフに近づくと考えられる。

3.3 エッジのつなぎ変え規則

3.3.1 ノードの平均自由行路

統計物理の世界で知られている平均自由行路とは一つの分子が他の分子と衝突せずに進む平均距離として定義される量で、分子の大きさや密度だけで決まり、温度には依存しないパラメータである。NAC のグラフは 3 次元空間内の分子/原子クラスタの接触グラフのモデルであり、NAC において分子や原子同志の衝突はエッジの発生として表現される。ここで我々は分子/原子ペア間の空間的距離が NAC では擬似的にノードペア間の最短パス長 l で表わされると仮定し、新たなエッジ発生が試みられるノードペアは‘自由行路関数 (free path function)’ $P_{\text{fp}}(l) = \exp(-l/\lambda)$ に比例して選ばれるものとする。ここに λ は NAC の平均自由行路である。さらにこれだけだと、ごく稀に非常に大きなパス長 l だけ隔たったノードペアをグラフ上でサーチしなければならなくなるため、 $l \leq L_{\text{max}}$ と制限して計算コストを削減する。

3.3.2 ネットワークのエネルギー

NAC グラフのエネルギーはトポロジーに関する空間制約エネルギー E_s とエッジの結合エネルギー E_b の和として図 12(a) のように定義される。

E_s は各ノードの度数のばらつきを抑える項 (μ 項) とレギュラー性を与える項 (ν 項) の和で図 12(b) のように表わされる。ここに \sum_n はすべてのノード n についての和を、 k_n はノード n の実度数を、 \bar{k}_n はノード n の度数の期待値(ノードによって異なりうる)を、 $\sum_{\langle mn \rangle}$ はすべての隣接ノードペア mn についての和を、 \bar{k} は全ノードについての度数の平均値を、 $(l_2)_{mn}$ はノードペア mn 間の第 2 最短パス長をそれぞれ表わす。定数 α を正に取ることにより μ 項はノードの度数を目標値 \bar{k}_n に近づける働きを持ち(空間中に分布する一様な大きさを持った剛体球では一つの剛体球が無闇に多くの剛体球と接することはできない)、また ν 項は両端ノードの度数が大きく、第 2 最短パス長が長いエッジを高い確率で切断する働きを持つ。

一方エッジの結合エネルギー E_b は図 12(c) と書かれる。ここに e_{mn} はエッジ mn の結合エネルギー(エッジを切断するために必要なエネルギー)で、エッジの種類に応じて図 12(d) により定義

(a)		$E = E_s + E_b.$
(b)	$E_s = \frac{\mu}{N} \sum_n k_n - \bar{k}_n ^\sigma + \frac{\nu}{N} \sum_{\langle mn \rangle} \left\{ \left(\frac{k_m k_n}{\bar{k}^2} \right)^\gamma (l_2)_{mn} \right\}^\alpha$	
(c)	$E_b = -\frac{1}{N} \sum_{\langle mn \rangle} e_{mn}$	
(d)	$e_{mn} = \begin{cases} \epsilon^{(cv)} & mn \text{ が cv エッジの場合} \\ \epsilon^{(io)} & mn \text{ が io エッジの場合} \\ \epsilon^{(wa)} & mn \text{ が wa エッジの場合} \end{cases}$	
(e)	$\Delta E_b = \begin{cases} \frac{1}{N} \epsilon^{(cv-act)} & \text{cv エッジを結合する場合} \\ \frac{1}{N} (\epsilon^{(cv-act)} + e_{mn}) & \text{cv エッジを切断する場合} \\ -\frac{1}{N} e_{mn} & \text{cv 以外のエッジを結合する場合} \\ \frac{1}{N} e_{mn} & \text{cv 以外のエッジを切断する場合} \end{cases}$	
(f)	$P(\Delta E) = \begin{cases} \kappa \exp(-\beta \Delta E) & \Delta E \geq 0 \text{ の場合} \\ \kappa & -dE_{th} \leq \Delta E < 0 \text{ の場合} \\ 1 & \Delta E < -dE_{th} \text{ の場合} \end{cases}$	

図12 (a)～(e)ネットワークエネルギーの式及び(f)変形メトロポリス法の採択確率

される ($0 \leq \epsilon^{(wa)} \leq \epsilon^{(io)} \leq \epsilon^{(cv)}$)。

E は次節でエッジの結合/切断に伴う変化分 ΔE を計算するために用いられるが、特に cv エッジの結合/切断に当たっては活性化エネルギー $\epsilon^{(cv-act)}$ を追加し、 ΔE_b 全体では図 12 (e) のように評価される。

3.3.3 変形メトロポリスアルゴリズム

前小節で定式化されたネットワークのエネルギーを確率的に最小化するために、ここでは通常よく用いられるメトロポリス法を変形したものをを用いる。これはエッジの結合や切断を化学反応と見なし、化学反応速度論[4][29]の結果を用いて定式化される規則に類似したものになっている。

エッジのつなぎ変えは次の二つのステップを毎タイムステップ実行することにより行われる：

- (1) [エッジの結合] グラフ内のノードをランダムに選び、それから $P_{ip}(l)$ に比例する確率で選ばれたパス長 l だけ離れたノードをランダムに選ぶ。二つのノードの間にエッジを生成した場合のネットワークエネルギーの変化分 ΔE から採択確率 $P(\Delta E)$ を

計算し、その確率でエッジを結合する。

- (2) [エッジの切断] グラフ内のエッジをランダムに選び、それが切断された場合のネットワークエネルギーの変化分 ΔE を計算する。それにより採択確率 $P(\Delta E)$ を計算し、その確率でエッジを切断する。

ここに $P(\Delta E)$ にはメトロポリス法の採択確率を多少修正した図 12 (f) を用いる。 $\Delta E \geq -dE_{th}$ の時に $\Delta E < -dE_{th}$ の時とは異なる確率 ($\kappa < 1$) を設定することにより、図 11 (b) に見られるような確率の急峻な立上りが近似的に表現される。

エッジの結合/切断に伴うエネルギー変化 ΔE は図 12 (a)～(e) 式から計算されるが、このうち図 12 (b) 式中の ν 項の変化は、正確にはグラフの全エッジについての評価が必要になる非局所的な量であり、これをまともに計算すると計算コスト的に大きな負荷を伴う。そのために本節では図 13 に示される部分グラフを考え、エッジ **AB** を結合/切断する際の $\sum_{\langle mn \rangle}$ の評価にはこの部分グラフに現れるエッジについてのみ足し合わせを行うものとする。予備的な NAC つなぎ変

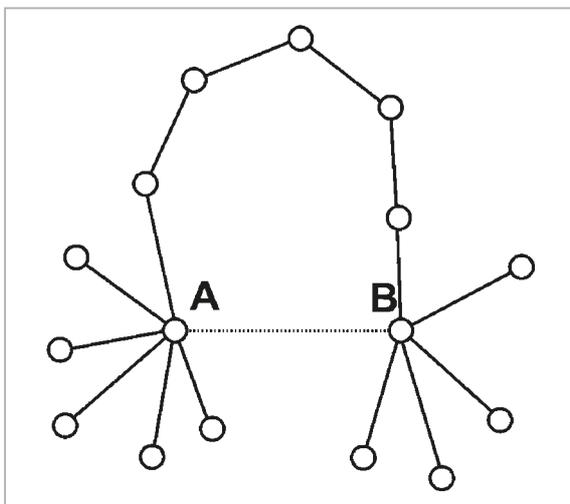


図13 空間制約エネルギーの ψ 項の変化を近似的に計算するための近傍部分グラフ

結合/切断しようとしているエッジの両端ノード A, B に直接つながるエッジ及び AB 間の最短パス(結合時)、もしくは第2最短パス(切断時)を構成するエッジから成る。

え実験の結果、こうして計算される $\Delta E'$ が本来の ΔE の十分に良い近似になっていることが確認されている。また計算コスト削減のため、 l_2 にも $l_2 \leq L_{max}$ の制限を設ける。

3.4 NAC シミュレーション

前小節に示したエネルギー最小化の基準に基づき NAC のつなぎ変えシミュレーションを行う。実験で用いられるパラメータ値は予備の実験の結果をもとにして以下のように定める： $\lambda = 2$ 、 $L_{max} = 15$ 、 $\mu = 0.01$ 、 $\sigma = 4$ 、 $\nu = 0.02$ 、 $\bar{k} = 4$ 、 $\gamma = 0.1$ 、 $\alpha = 2$ 、 $\kappa = 0.2$ 、 $\beta = 1500$ 、 $dE_{th} = 0.0015$ 。また本節では空間制約エネルギーに焦点を絞るために、エッジは wa だけを用意し、その結合エネルギーは $\epsilon^{(wa)} = 0$ に設定する。

初期状態としてノード数 $N = 200$ 、平均度数 $\bar{k} = 4$ のランダムグラフから出発する。図 14 にはクラスタ係数 (C) と平均経路長 (L) の時間的推移がプロットされているが、これによると約 10 万ステップ後、NAC グラフの C 値はランダムグラフによる初期値 ($C \approx 0.018$) の約 19.4 倍、 L 値は初期値 ($L \approx 3.95$) の約 1.5 倍になっており、スモールワールドとレギュラーの中間の特性を持つようになっていることが分かる。

また図 15 にはシミュレーションから計測された P_{join} と P_{cut} の期待値が示されているが、これは

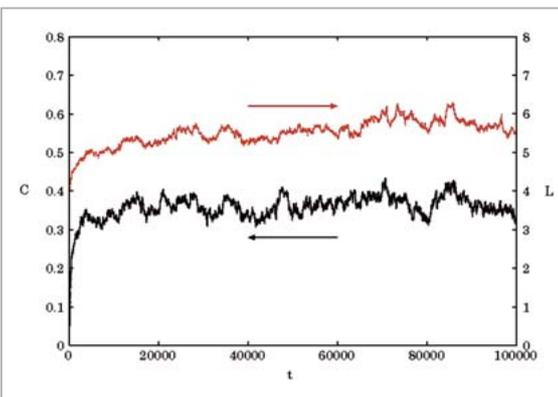


図14 NAC のつなぎ変えシミュレーションにおけるクラスタ係数 (C) と平均経路長 (L) の推移をグラフつなぎ変え 10 万ステップの間計測したもの

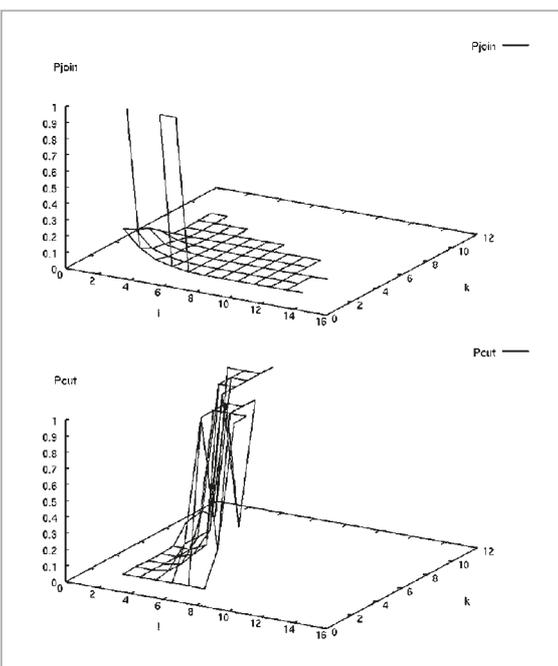


図15 NAC のつなぎ変えシミュレーションから計測されたエッジの結合/切断確率

つなぎ変え 20 万ステップの間に計算された ΔE の平均値を図 12(f) 式により P に変換したものを。図 11 と同じく、 P_{join} はペア間の最短パス長 (l) と一方の端点の度数 (k) の、また P_{cut} はエッジの端点間の第 2 最短パス長 (l_2) と一方の端点の度数 (k) の関数としてプロットされている。

ランダムウォークシミュレーションの結果 (図 11) と定性的に一致している。

初期グラフと 8 万ステップ後の NAC グラフを平面描画した図 16 ではつなぎ変え後のグラフは単連結でひとまとまり、かつエッジ交差の少ないものになっており、平面空間に写像しやすいトポロジーになっていることが分かる。

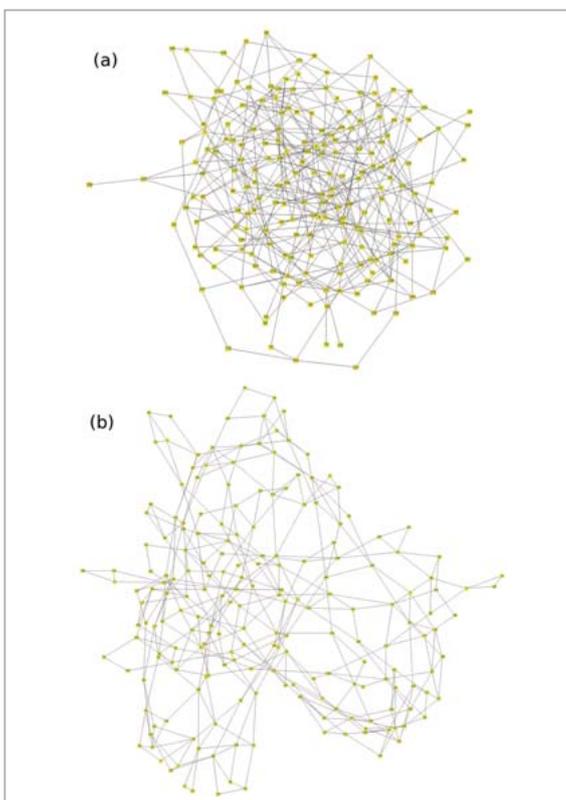


図16 (a)初期ランダムグラフと(b)8万ステップのつながり変え後のNACグラフを平面描画したもの

3.5 結論と考察

ネットワークにより分子や原始クラスター間の関係性を記述する「ネットワーク人工化学」におけるエッジのつながり変え規則を、ネットワークエネルギーの最小化という規範により導出、定式化した。得られたルールのもとでつながり変えシミュレーションを行ったところ、クラスター係数と平均パス長の値が剛体球接触グラフのものと近い値になり、またエッジの生成／消滅の確率のパラメータ(度数やパス長)依存性が D 次元空間中の剛体球ランダムウォークシミュレーションによるものと定性的に一致することが示された。出来上がったグラフは市販描画ソフトウェアによりエッジ交差の少ないものに平面描画され、絡まり度の少ない、より空間に埋め込み易いものへと変化していることが分かった。

本節において定式化されたつながり変えのルールは、言わば Watts-Strogatz のシナリオ [30] を逆に行って、 C , L を増大させ、ある種の空間的な制約を持ったグラフを作るものになっていると結論できる。

4 アクティブノードプログラムによるネットワーク構造の組織化

4.1 はじめに

本節では、NAC の溶媒ノードをアクティブノードと考え、そのノードプログラムをデザインする。水分子が持つ複雑な働きを参考にして設計されたプログラムを全溶媒ノードに持たせ、その並列実行によりエッジがつながり変わり、ネットワークに擬似レギュラー構造が形成する様子を示す [25][27]。

以下ではまず、4.2 でモデルの概要を述べた後、4.3 に実験結果を示し、4.4 に結論と考察を与える。

4.2 モデル

NAC プログラムは Java で実装される。各ノードやエッジは Java のノードクラスやエッジクラスのインスタンスで表わされ、それらはインスタンス変数によって相互にリンクを張り合う。ノードインスタンスは大きさ 4 のポインタアレイ `hy[]` を持ち、ノードに繋がる `hy` エッジを 4 本まで指し示せる。つながり変え実現のためのノードプログラムのアルゴリズムを図 17 に示す。

上記のアルゴリズムは基本的に、現在のノード (`this`) を基準にして `nde-this-nda-ndb-ndc-ndd` というパスを抽出し、それが長さ 4 のループを作るようにエッジを新たに生成させる。ここで、`dp` はパスの探索方向を指定する変数で、一つのループ内の隣り合った 2 本の `hy` エッジは中間のノードの `hy[]` で `dp` だけ違う場所に登録される。

4.3 実験結果

我々はノード数 $N=512$ 、度数が一様に $K=4$ のランダムグラフから出発し、毎タイムステップ各ノードにおいて `conduct_nd_prog()` を K 回実行する。図 18~19 に得られた典型的な結果を示す。

これらの図に示されるように、`conduct_nd_prog()` によるつながり変えはグラフの中に徐々に規則性を作りだし、約 100 タイムステップ後にはグラフは 2 次元正方格子シートを折りたたんだ図 19 のような構造になる。これから更に時間が経つと規則性は保たれたままシートは次第に

ほどかれ、約 1,000 タイムステップ後にはグラフはシートと紐が組み合わさったような図 20 のような構造となる。現在の `conduct_nd_prog()` のアルゴリズムはグラフの局所的なつながりだけを指定して全体の構造は特定しておらず、全体構造が 2 次元シートになるか 1 次元紐になるかの区別がない。幾つかの実験結果の示すところによると、現状のアルゴリズムではグラフはシートより紐に収束する傾向を示している。

```
public void conduct_nd_prog()
{
    // choosing pointer's displacement
    int dp = [either -1 or 1];

    // choosing this node's initial
    // adjacent node randomly
    Node nda = ad_rand();

    // choosing the next node
    Node ndb = nda.ad_next(this,dp);
    if(ndb==null) return;

    // choosing the second next node
    Node ndc = ndb.ad(nda,dp);

    // choosing this node's another
    // adjacent node
    Node nde = ad_next(nda,-dp);
    if(ndc==null OR ndc==this){
        if(nde==null) return;
        if(nde==ndb) return;

        remake_edge(ndb,nde);
        return;
    }

    // choosing the third next node
    Node ndd = ndc.ad_next(ndb,dp);
    if(ndd==this) return;

    remake_edge(this,ndc);
}
```

図 17 ノードプログラムのアルゴリズム

`ad_rand()` は `hy` エッジを介した隣接したノードを選ぶメソッド、`ad_next(nd1, dp)` は `nd1` が `hy [p]` を介して隣接しているという条件下で `hy [p+dp]` を介して隣接したノードを返すメソッド、`remake_edge(nd0, nd1)` は二つのノード `nd0, nd1` 間に適当なポイントで新たに `hy` エッジを生成するメソッドである。`·` はクラスメンバーを表わす Java のオペレータで、例えば `nda.xx` は `nda` のメンバーである `xx` を指す。

4.4 結論と考察

本節ではこれまでの NAC 研究で受動的な働きだけを持つと仮定されてきた溶媒ノードに、局所的情報だけを元に周囲のエッジをつなぎ変える能動的なプログラムを実装し、それらを並列実行するシミュレーション実験を行った。それ

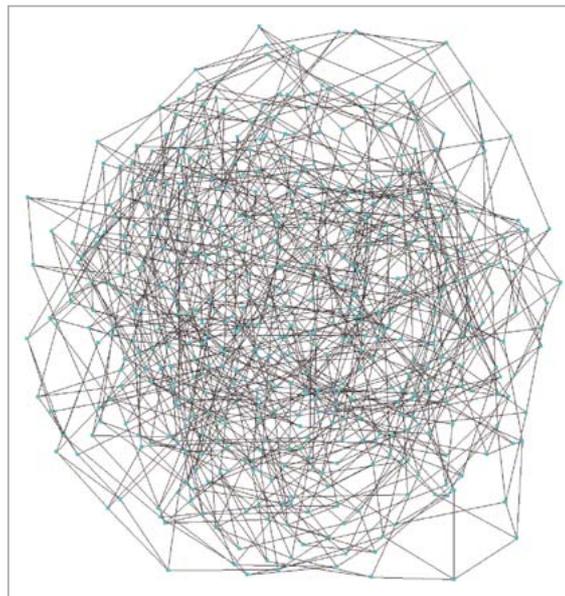


図 18 ノード数 $N=512$ 、一様度数 $K=4$ の初期ランダムグラフの 2 次元描画結果

クラスタ係数は $c \approx 0.0020$ 、平均パス長は $L \approx 5.0$ 。

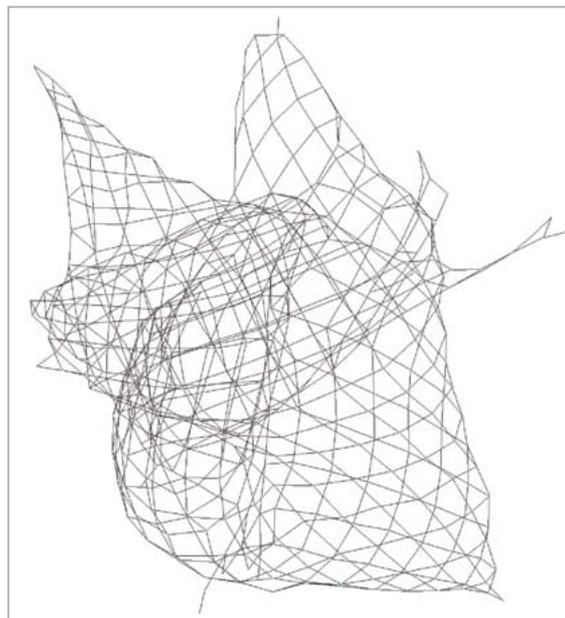


図 19 100 タイムステップ後の NAC グラフ

平均度数は $k \approx 3.81$ 、クラスタ係数は $c \approx 0.0$ 、平均パス長は $L \approx 13.5$ 。約 87% のノードが度数 $K=4$ を持つ。

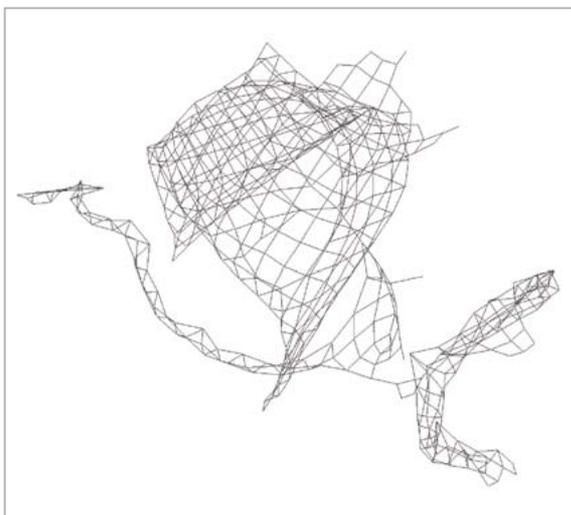


図20 1,000 タイムステップ後の NAC グラフ

平均度数は $K \doteq 3.84$ 、クラスタ係数は $c \doteq 0.0$ 、平均パス長は $L \doteq 18.0$ 。約 90% のノードが度数 $K=4$ を持つ。

によりグラフ全体に水の擬ラティス構造に相当する規則構造を自己組織化することに成功した。

これまでの NAC の研究で我々は、エッジをファン・デア・ワールスから共有までにタイプ分けし、その中で最も弱いファン・デア・ワールスエッジは物理的 / 空間的制約を反映した受動的つなぎ変え規則によって時々刻々つなぎ変えられると仮定してきた [21] [24]。また、溶媒ノードは通常は不活性であり、ネットワーク内の能動的なつなぎ変え処理はノード鎖が折りたたまってできる (タンパク質に相当する) データフロークラスタによってのみ実現されると仮定してきた [23]。しかしながら本節の結果は、我々がもしネットワークの中に組織化された構造を作ろうとした時、最も簡単で直接的な方法は、各ノードに水分子程度に複雑な機能を持つ能動的プログラムを実装することであることを示唆する。なおこのグローバルな機能や構造を創出するためにローカルな人工的プログラムを各処理ユニットに実装するやり方は、『アモルファス・コンピューティング』[1]とも共通のものである。

5 分子エージェントとプログラムフロー・コンピューティング

5.1 はじめに

前節のモデルをさらに進め、分子がエージェ

ントで、反応がエージェント・プログラムの計算で表わされる『改良ネットワーク人工化学』の枠組みを導入する [26]。システムの動作は基本的にエッジに沿った分子エージェントの移動、ノードにおけるプログラムの発火・実行によって行われ、これらの局所的な処理を通してエッジがつなぎ変わり、ネットワーク全体のトポロジーが変化する。三つのデザインされたエージェントプログラムを用い、擬似ラティス構造を持つ親水性クラスタの形成と分裂のシミュレーション実験を行う。

以下ではまず、5.2 で実験方法について述べた後、5.3 に結果を示し、5.4 に結論を与える。

5.2 実験方法

5.2.1 グラフ要素

実験プログラムはノード、エッジ及びエージェントをクラスにして Java でコードされる。ここにノードは空間としての点を、エッジは空間点間の関係を、エージェントは分子 (もしくは原子クラスタ) をそれぞれ表わしたものである。以下に述べるようにエッジは結合の強さに応じて幾つかの異なるタイプを持つが、この強さは個々の分子間の衝突・結合関係を表わしたのではなく、空間点に所属するエージェント群間の結合関係を集合的に表わしたものである。本節においてノードは親水性タイプと疎水性タイプ、エッジは共有結合タイプ (covalent, **cv**, 有向) と水素結合タイプ (hydrogen, **hy**, 有向) とファン・デア・ワールス結合タイプ (van der Waals, **wa**, 無向)、エージェントはタイプ 0 (クラスタ分裂用; 中心体) とタイプ 1 (**hy** つなぎ変え用) とタイプ 2 (**wa** つなぎ変え用) にそれぞれ分けられる。

図 21 に、これらのクラス・インスタンスの働きを主要な変数及びメソッドとともに模式的に示した。各インスタンスは **label**、**type** といった基本変数の他にリンクのための変数を持っており、これらをメソッドの実行により変更することによりグラフのつながり関係を変化させる。

5.2.2 実行オペレーション

シミュレーションは次の 4 ステップのオペレーションを順番に繰り返すことで進められる:

1. `Node.produce_agents()` [ノードによるエージェント生成]: 各ノードにおいてエージェ

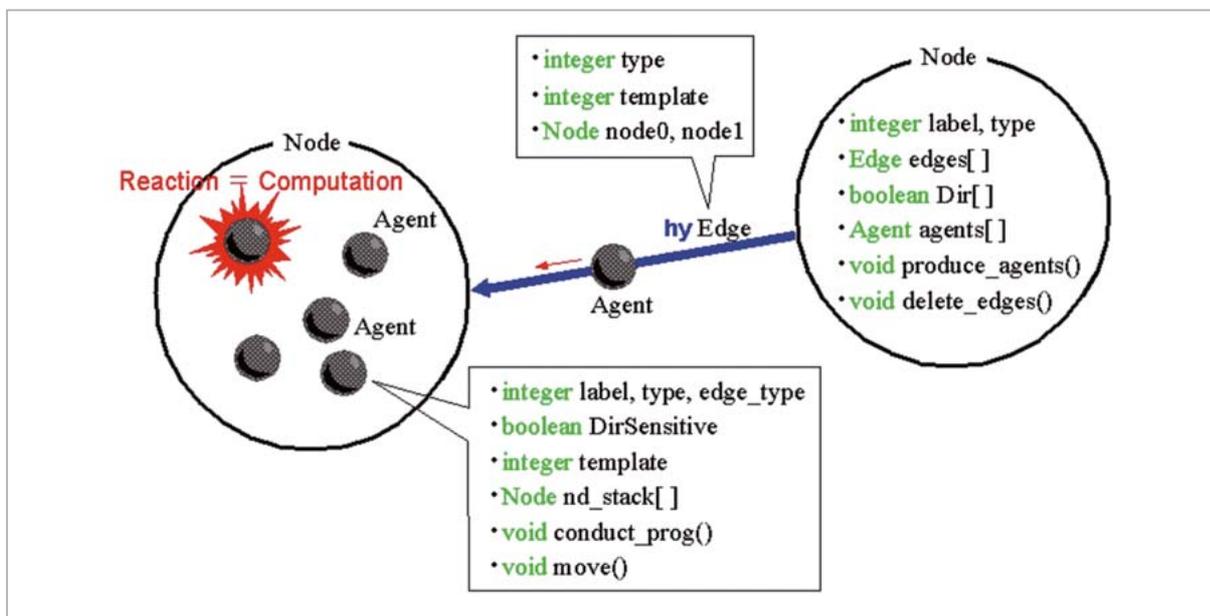


図21 ノード、エッジ、エージェントとそれらが持つ主要なインスタンス変数・メソッドの模式図

ノード変数 `edges[]` と `agents[]` はそれぞれ接続しているエッジと保有しているエージェントへのポインタ。エッジ変数 `node0` と `node1` はエッジの両端ノードへ、エージェントスタック `nd_stck[]` は過去にエージェントが訪れたノードへのポインタ。ノードメソッド `produce_agents()` と `delete_edges()` 及びエージェントメソッド `conduct_prog()` と `move()` は実行オペレーション用メソッド(本文を見よ)。

ントをあらかじめ指定された目標個数になるように生成または削除する。目標個数はノードとエージェントのタイプに応じて別々に決められる。

2. `Agent.conduct_prog()` [エージェントのプログラム実行]: エージェントの持つプログラムを実行する。その結果としてエッジのつながり変えが起きる。
3. `Node.delete_edges()` [ノードによるエッジ切断]: 各ノードはエッジ度数が上限値を越えないように、エッジを適当に切断する。上限度数はノードとエッジのタイプに応じて決められる。
4. `Agent.move()` [エージェント移動]: すべてのエージェントを現在のノードから次のノードへと移動する。経由するエッジはエージェント変数 `edge_type`、`DirSensitive`、`template` を考慮して決められる。

上記四つのうちで `Agent.conduct_prog()` 以外の三つは全ノード/全エージェント共通の処理であるが、`Agent.conduct_prog()` が実行するアルゴリズムはエージェントのタイプごとに異なる。おおまかに言ってタイプ1/タイプ2のエージェントはローカルに動きながら `hy` - 四角形/`wa` -

三角形を作りだし、タイプ0のエージェントは同一ノード中の他のタイプ2エージェントとの `label` の違いを認識し、異なる `label` のエージェントを削除すると同時にそれらが通ってきたエッジを切断する働きを持つ。より詳しいアルゴリズムについては^[26]を参照のこと。

ステップ1、3で用いられる目標個数と上限度数がノード(空間点)のタイプを規定する。例えば親水性ノードでは `hy` エッジの度数とタイプ1エージェントの個数が向き(`direction`)とテンプレート(`template`)に関わらず4であるが、疎水性ノードではこれらはゼロに設定される。これによりノードの疎水性(`hy` エッジを持たない性質)が指定される。ステップ4でエージェントがエッジを選ぶ基準は図22にまとめた。

5.3 実験結果

5.3.1 基本設定

実験は $N = 2000$ 個のノード(その内1400個が親水性、600個が疎水性)を含む初期レギュラーランダムグラフ(度数が均一なランダムグラフ)から出発する。`hy/wa` エッジの度数は各々全ノードで $K = 0/K = 4$ に設定され、エージェント数は含まない。600個の疎水性ノードは600個

の親水性ノードと一つずつ **cv** エッジで結ばれており、生物脂質分子と同様の両親媒性の双極子 600 個を形成する。本実験では **cv** エッジを切断・生成するオペレーションがないため、これら双極子は実験を通して保存される。

その後グラフに四つのオペレーションを繰り返し施し、グラフポロジーの変化を見る。途

エッジタイプ	エージェントタイプ		
	cv	hy	wa
type0	×	○	×
type1	×	○†	×
type2	○	○	○

図22 *Agent.move()* でのエッジの選択スキーム
○/×は各々エージェントがそのタイプのエッジを通れる/通れないことを表わす

†はエッジの選択の際、向き (**direction**) とテンプレート (**template**) を考慮することを表わす。

中 100 タイムステップの時点で、異なる **label** を持つ **type0** エージェントを 2 個用意し、ランダムに選ばれた 2 個の親水性ノードに代入する。

5.3.2 擬レギュラー構造を持つ親水性クラスターの形成と分裂

図 23 に得られた代表的な結果を示す。図 23(a) に示された初期ランダムグラフは、タイプ 1/タイプ 2 のエージェントの生成及びそれらによる **hy/wa** エッジの生成・つなぎ変えによりトポロジー変化を起こし、100 タイムステップ後には親水性ノードが **hy** ネットワークによって密に結ばれて中央に集積し、疎水性ノードが周辺に押しやられた殻構造を持つグラフとなる(図 23(b))。この中の **hy** ネットワークはタイプ 1 エージェントの働きにより擬 2 次元正方形に近い構造を形作り、その構造の持つ大きな平均パス長 (L) が次に起きる分裂の下地となる。(別にタイプ 1 のアルゴリズムを用い、疎水性ノードを入

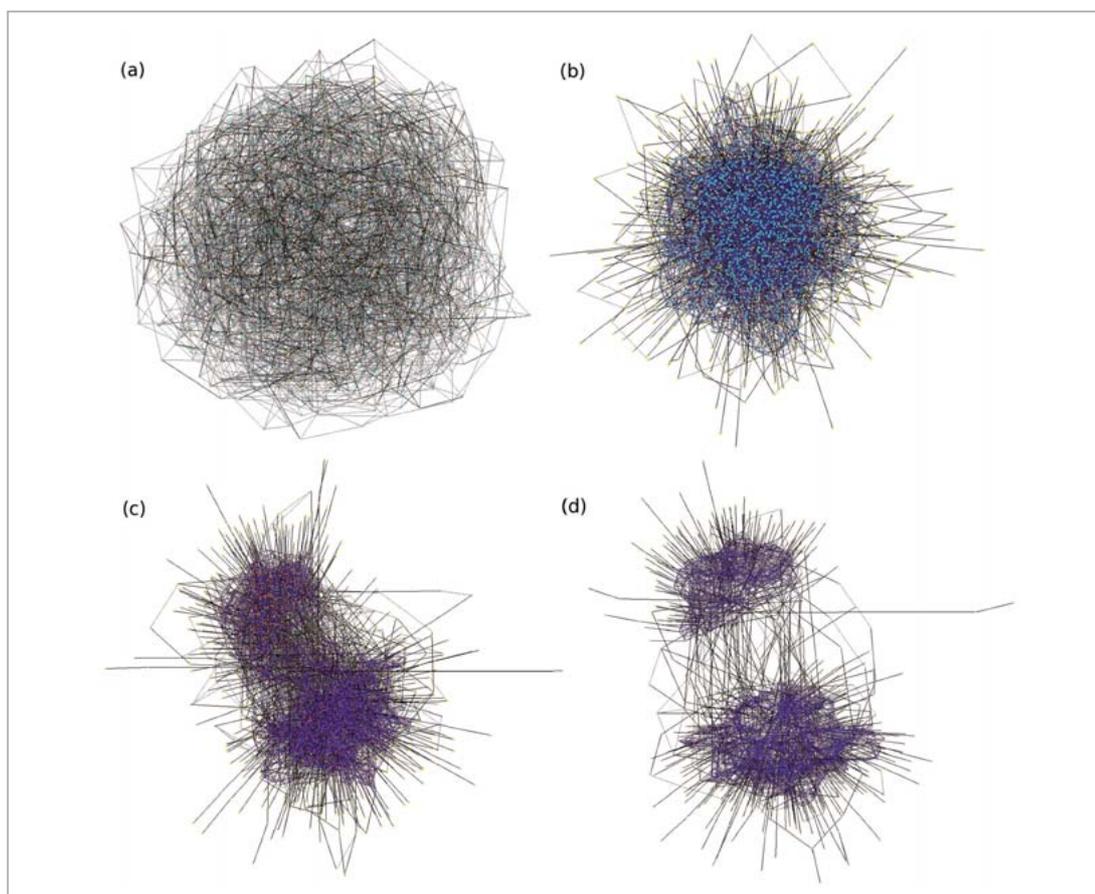


図23 (a)初期レギュラーランダム NAC グラフ及び (b) 100/(c) 180/(d) 500 タイムステップ後の NAC グラフを 2 次元描画したもの

ここには示されていないが、各グラフは (a) 0 個、(b) 7,867 個、(c) 22,222 個、(d) 28,449 個の分子エージェントを含む。

れないで行ったノード数 $N = 512$ の実験では、出来上がった **hy** ネットワークの平均パス長は $L \approx 6.7$ もの大きさ—これは同ノード数の 3 次元立方格子の $L = 6.01$ より大きい—になった。)

図 23 (b) 以降では注入されたタイプ 2 のエージェントの増殖と浸透が起こる。このエージェントは生物細胞内の中心体のように、それらが持つ **label** 値別に親水性ノードをクラスタ化する (分列させる) 働きを持っており、それによる分裂がタイムステップ数 150 から 250 にかけて起こる。図 23 (c) にその途中の様子を示した。このクラスタの分裂した状態は最後タイムステップ数 500 でシミュレーションを止めるまで続く (図 23 (d))。

図 24 にはこの実験を乱数の種を変えながら 10 回行い、300 タイムステップ後のグラフを平面描画し並べたものを示す。図に示されるように分裂してできるクラスタの大きさにばらつきはあるものの、どの実験でも定性的に同じ結果が得られていることが分かる。

5.4 結論

ネットワーク人工化学の新しい枠組みとして、分子エージェントがネットワークの中を動き回り、ノードにおいて発火し、その持つプログラムの実行によりネットワーク構造が変化するモデルを提案した。ネットワーク構造の自己組織化の例として、ファン・デア・ワールス・エッジつなぎ変え、水素エッジつなぎ変え、クラスタ分裂の 3 種類のエージェントプログラムを設計して実験を行い、擬レギュラー構造を持つ親水性クラスタの形成と分裂が起きる様子を確認した。

6 今後の展望

本章では主に、我々が過去 5 年の間にたどってきたネットワーク人工化学の研究の進展の様子を紹介してきたが、本節ではそこから生まれた新しい計算モデル「プログラム・フロー・コンピューティング」の今後の研究課題と工学応用の可能性について述べる。

「プログラム・フロー・コンピューティング」とは端的に言えば通信線 (エッジ) で結ばれた CPU (ノード) がそこを行き来する多数のプログラム

を並列実行するネットワーク型計算モデルである。この一つの応用例として最初に考えられるのは、グラフにまつわる最適化問題への適用である。図 25 はその一例を示したもので、グラフのノード彩色問題を単純なプログラムを持った多数のエージェントの並列実行により解いている。ここで用意したエージェントプログラムは「現在いるノードの色が一つ前にいたノードの色と同じならば、現在のノードの色を何か別のものに変える」というもので、それらが並列に実行されることにより、例えば図 25 の例では、初めノードにランダムに色を付けた状態から出発した

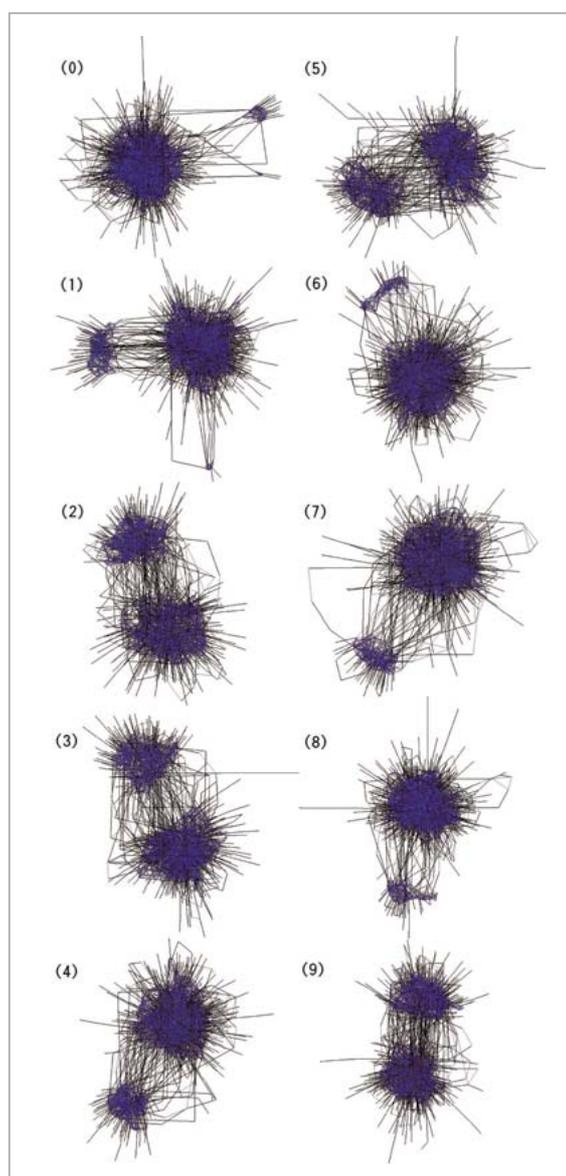


図24 異なる乱数系列を用いた 10 回の実験における 300 タイムステップ後の NAC グラフを 2 次元描画したもの

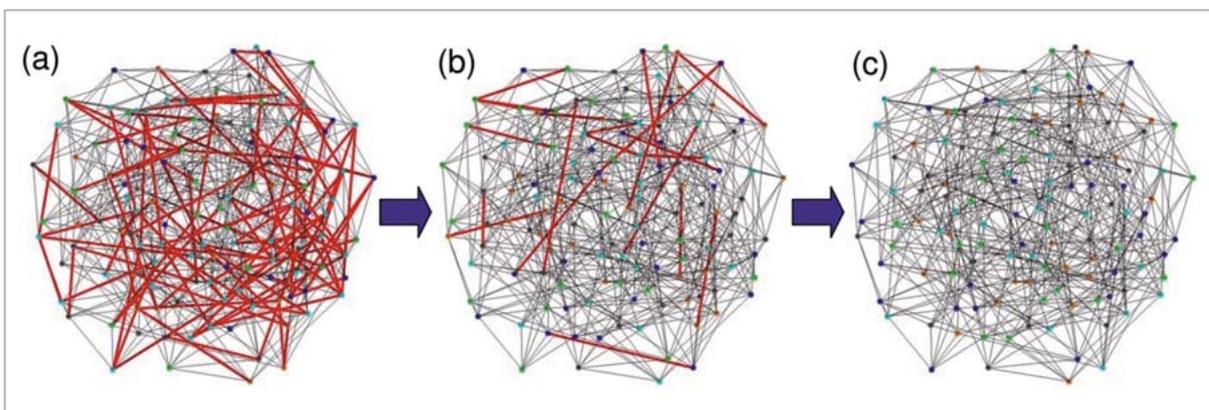


図25 プログラム・フロー・コンピューティングをレギュラー・ランダムグラフのノード彩色問題へ適用した例

グラフのノード数は $N=128$ 、一律の度数は $k=8$ で、それを5色にノード彩色する。(a)初期状態、(b)中間状態、(c)最終状態。図中、赤い色のエッジは両端ノードが同一色であることを表わす。グラフは最終状態で1,024個の分子エージェントを含む。

グラフ(図25(a))が、次第にノード間の競合を解消し(図25(b))、最終的にはすべてのエッジの両端に異なる色が割り付けられるようになっている(図25(c))。この例は単純なプログラムのローカルな選択によりグラフ彩色というグローバル最適解を求めたもので、他の多くのグラフにまつわる組み合わせ最適化問題へも同様のやり方が適用できる可能性がある。

もう一つ考えられるのはニューラル・ネットワーク情報処理への応用である。もともと現在使われている数理モデルとしてのニューラル・ネットは動物の脳における信号情報処理を手本にして考案されたものである。それら生体ニューロン内、もしくはニューロン間の情報処理をつかさどっているのは基本的には分子であり、ニューロンをノード、軸索をエッジでモデル化する人工ニューラル・ネットにおいても、その中に分子エージェントを実装しそれらに様々な機能(プログラム)を持たせることによって、信号伝搬や学習についての情報処理を統一的に記述できるかもしれない(図26)。

我々は今後これらのモデルの構築とその妥当性検証を通して、新しい(非ノイマン型の)情報処理・情報通信のモデルを提案することを目標に研究を進めている。

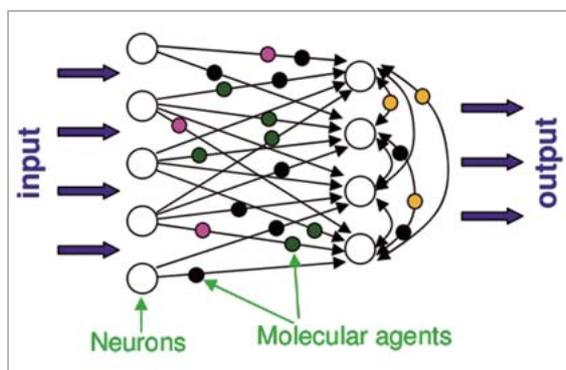


図26 プログラム・フロー・コンピューティングのニューラル・ネットワーク情報処理への適用の考え方

Hebb 則、側抑制、軸索形成、細胞分化等のための様々な分子エージェントを用意し、それらの発火(反応)と移動によりニューラルネットワーク内の信号伝搬や学習をエミュレートする。

謝辞

本章に述べた研究は著者が主に ATR ネットワーク情報学研究所(所長：下原勝憲教授)と情報通信研究機構の両方に所属していた間に、同志社大学・学術フロンティア共同研究プロジェクト「人間と生物の賢さの解明と、その応用」からの援助のもとに実施されたものである。

参考文献

- 1 Abelson, H., Allen, D., Coore, D., Hanson, C., Homsy, G., Knight, T.F., Nagpal, R., Rauch, E., Jay Sussman, G. J., and Weiss, R, "Amorphous computing", *Communications of the ACM*, 43 (5), 74-82, 2000.
- 2 Adami, C, "Introduction to Artificial Life", Springer-Verlag, Santa Clara, CA, 1998.
- 3 aiSee' ネットワーク可視化のための市販ソフトウェア. ばねモデル等のいくつかのアルゴリズムが用意されている。http://www.aisee.com/
- 4 Barrow, G.M, "Physical chemistry", Chapters 15-17. McGraw-Hill Education (1988) (邦訳)バロー著, 大門寛・堂免一成訳「物理化学 第6版(下)」東京化学同人, 1999.
- 5 Workshop and Tutorial Proceedings of the Ninth International Conference on the Simulation and Synthesis of Living Systems (Alife IX). Bedau, M., Husbands, P., Hutton, T., Kumar, S., Suzuki, H. (eds.), 2004.
- 6 Dittrich, P., Ziegler, J., and Banzhaf, W, "Artificial chemistries-a review", *Artificial Life* 7, 225-275, 2001.
- 7 Fontana, W, "Algorithmic chemistry", In : Langton, C.G. et al. (eds.) : *Artificial Life II: Proceedings of an Interdisciplinary Workshop on the Synthesis and Simulation of Living Systems (Santa Fe Institute Studies in the Sciences of Complexity, Vol. 10)*, Addison-Wesley, 159-209, 1992.
- 8 Hutton, T. J, "Evolvable self-replicating molecules in an artificial chemistry", *Artificial Life* 8, 341-356, 2002.
- 9 Imai, K., Hori, T., and Morita, K, "Self-reproduction in three-dimensional reversible cellular space", *Artificial Life* 8, (2), 155-174, 2002.
- 10 Langton, C. G, "Self-reproduction in cellular automata", *Physica D* 10, 135-144, 1984.
- 11 Ono, N., and Ikegami, T, "Artificial chemistry : computational studies on the emergence of self-reproducing units", In : Kelemen, J., Sosik, P. (eds.) : *Advances in Artificial Life (6th European Conference on Artificial Life Proceedings)*, Springer-Verlag, 186-195, Berlin, 2001.
- 12 Ray, T. S, "An approach to the synthesis of life", In : Langton, C. G. et al. (eds.) : *Artificial Life II: Proceedings of an Interdisciplinary Workshop on the Synthesis and Simulation of Living Systems (Santa Fe Institute Studies in the Sciences of Complexity, Vol. 10)*, Addison-Wesley, 371-408, 1992.
- 13 Sayama, H, "A new structurally dissolvable self-reproducing loop evolving in a simple cellular automata space", *Artificial Life* 5 (4), 343-365, 2000.
- 14 Suzuki, H, "An approach to biological computation : unicellular core-memory creatures evolved using genetic algorithms", *Artificial Life* 5 (4), 367-386, 1999.
- 15 Suzuki, H, "Evolution of self-reproducing programs in a core propelled by parallel protein execution", *Artificial Life* 6 (2), 103-108, 2000.
- 16 Suzuki, H., Ono, N., and Yuta, K, "Several necessary conditions for the evolution of complex forms of life in an artificial environment", *Artificial Life* 9 (2), 537-558, 2003.
- 17 Suzuki, H, "Artificial chemistry on small-world networks. (スモールワールド・ネットワークに基づく人工化学システムの提案)", In : 2004年度人工知能学会全国大会(第18回)論文集 2H4-03.

- 18 Suzuki, H, "Spacial representation for artificial chemistry based on small-world networks. In : Pollack, J., Bedau, M., Husbands, P., Ikegami, T., Watson, R.A. (eds.): Proceedings of the Ninth International Conference on the Simulation and Synthesis of Living Systems", Artificial Life IX, 507-513, 2004.
- 19 Suzuki, H, "Network artificial chemistry – molecular interaction represented by a graph. In : Bedau, M., Husbands, P., Hutton, T., Kumar, S., Suzuki, H. (eds.): Workshop and Tutorial Proceedings of the Ninth International Conference on the Simulation and Synthesis of Living Systems", AlifeIX, 63-70, 2004.
- 20 鈴木秀明, "ネットワーク人工化学系における分子鎖の計算論的折りたたみ", 計測自動制御学会(SICE)第32回知能システムシンポジウム資料, 383-386, 2003.
- 21 Suzuki, H., and Ono, N, "Statistical mechanical rewiring in network artificial chemistry. In : The 8th European Conference on Artificial Life (ECAL) Workshop Proceedings CD-ROM", Canterbury, UK, 2005.
- 22 鈴木秀明, 小野直亮 "分子拡散を表現するネットワークのつなぎ変え規則" 第11回創発システム・シンポジウム「夏の学校」講演資料集, 富山にて, 計測自動制御学会, 127-130, 2005.
- 23 Suzuki, H, "Mathematical folding of node chains in a molecular network", BioSystems 87, 125-135, 2007.
- 24 Suzuki, H, "An approach toward emulating molecular interaction with a graph", Australian Journal of Chemistry 59, 869-873, 2006.
- 25 Suzuki, H, "A node program that creates regular structure in a graph", In : International Conference on Morphological Computation, Conference Proceedings. Mar 26-28, ECLT, Venice Italy, 2007.
- 26 Suzuki, H, "A network cell with molecular tokens that divides from centrosome signals", In : Crook, N., Scheper, T. (eds.): Proceedings of the Seventh International Workshop on Information Processing in Cells and Tissues (IPCAT). Oxford Brookes University, 293-304, 2007.
- 27 Suzuki, H, "Structural organization in network artificial chemistry by node programs and token flow", In : SICE Annual Conference 2007 Proceedings. The Society of Instrument and Control Engineers (SICE), 1C10, 884-889, Japan, 2007.
- 28 Suzuki, Y., and Tanaka, H, "Chemical evolution among artificial proto-cells", In : Bedau, M. A. et al. (eds.): Artificial LifeVII: Proceedings of the Seventh International Conference on Artificial Life, MIT Press, Cambridge, 54-63, 2000.
- 29 Vemulapalli, G. K, "Physical chemistry", Chapters 23-33. Prentice-Hall Inc. (1993) (邦訳)ベムラパリ著, 上野ら監訳「物理化学Ⅲ 化学反応速度論と統計熱力学」丸善株式会社, 2000.
- 30 Watts, D. J., and Strogatz, S. H "Collective dynamics of 'small-world' networks", Nature, 393, 440-442, 1998.



すずき ひであき
鈴木秀明

未来ICT研究センター専攻研究員
博士(理学)・博士(情報学)
人工生命、人工化学、バイオインスパ
イアドな計算