

抽象化学反応系の挙動に関する研究について

鈴木 泰博, 田中 博

東京医科歯科大学 難治療疾患研究所 生命情報学

〒 113-0034 東京都文京区湯島 1-5-45

Call: 03-5803-5840, Fax: 03-5803-0274

suzuki.com@mri.tmd.ac.jp, tanaka@tmd.ac.jp

はじめに 我々は局所的な相互作用から大局的な構造が出現する機構に興味を持っている。そして、かかる機構を研究するためのモデルとして我々は化学系に着目している。実際の化学系の挙動は極めて複雑であるため、研究が行なわれている。我々は極めて単純な抽象化学系“ARMS”を構築した。

我々は系のシミュレーションを通し、かかる単純なモデルでも自己触媒サイクルや非線形様な化学振動が再現できることを確認した。また、ARMSの挙動の数理的特徴付けに関する研究を行ない、系の秩序パラメータを発見した。さらに、このパラメータが、S. Wolfram [2], C. Langton[1]らが提唱しているセルラオートマトンの挙動のクラスに関係していることを発見した。

本来 ARMS はマルチセット上での抽象書き換え系として定義されるが [3]、以下では少し異なった定式化をおこなう。

ARMS 我々の構築した化学系“Abstract Rewriting system on MultiSets (ARMS)”とは直観的には“Continuous fed Stirred Tank Reactor”のような反応槽である。系内では予め決められた(化学)反応規則に従い、溶液内の分子がお互いに作用する。実際には分子は記号列、反応槽は槽内の分子の数を示した“状態ベクトル”で示される。例えば、槽内に分子 a_1 が4つと a_2 が2つある場合は分子ベクトルは $(a_1, a_2) = (2, 1)$ と示される。分子の種類が k の場合に大きさ l の状態空間 M は一般には $N^l (N < l)$ となる。

時刻 t における系の状態が、 $x_0(t) \in M$ のとき、 x_1 は x_0 の関数として次のように定まる $x_1(t+1) \in M = f(x_0(t)) \in M, f: M \rightarrow M$ 。反応規則は反応に用いる記号の数を示した反応規則ベクトルで示される。例えば、 $aa \rightarrow b: r_e$ の反応規

則ベクトルは“ a ”を2つ消費して、 b 1つを生成するとみなし、 $(a, b) = (-2, 1)$ となる。

反応“ p ”は状態ベクトル x への反応規則ベクトルの足し合わせ \oplus で定義される。反応規則ベクトルを以下では加法作用素 r_k と呼ぶ。例えば、状態 $x_0 = (a, b) = (2, 0)$ に r_e を適用した場合は、 $x_0 = (2, 0) \oplus (-2, 1) = (0, 1) = x_1$ となる。

加法作用素内 r_i 内の成分 a_k, a_l は、 $\frac{\partial r_i}{\partial a_k, a_l}$ とあらわす。また、 $\sum_{k=1}^n a_k \in x < 0$ のような反応規則を“cooling rule”, $\sum_{k=1}^n a_k \in x > 0$ のような反応規則を“heating rule”と呼ぶことにする。

我々は加法作用素の性質に着目することにより、系の挙動についてある程度予測することができる。例えば、ある加法作用素 r_1, \dots, r_n について、もし $\alpha_1 r_1 \oplus \dots \oplus \alpha_n r_n = 0, \alpha_k > 0$ ならば系は振動する。その際、 α_i のすべての組合せだけ周期が存在することになる(ただし、初期状態を考慮しなければならない)。以上の離散力学系 (ARMS 力学系) を用いて Brusselator model の解析をしてみよう。

The Brusselator model Brusselator は Belousov-Zhabotinsky 反応のような化学振動の数理モデルとして有名である。Brusselator model は次の4つの化学反応式からなる; $A \xrightarrow{k_1} X, B + X \xrightarrow{k_2} Y + D, 2X + Y \xrightarrow{k_3} 3X, X \xrightarrow{k_4} E$ 。

この反応は A, B から X, Y を経て、最終的に D, E が生成するような化学反応系になっている。Brusselator model の第2式、4式では逆反応を仮定していないので、 A, B が連続的に反応槽に送り込まれている (CSTR) と考えることができる。Brusselator model を ARMS 力学系としてみなすと、4つの加法作用素 $r_k = (A, B, D, E, X, Y)$; $r_1 = (-1, 0, 0, 0, 1, 0), r_2 = (0, -1, 1, 0, -1, 1), r_3 =$

$(0, 0, 0, 0, 1, -1), r_1 = (0, 0, 0, 1, -1, 0)$, が得られる。ここで特に r_2, r_3 に着目してみると、 $\alpha_1 \frac{\partial r_2}{\partial X, Y} \oplus \alpha_2 \frac{\partial r_3}{\partial X, Y} = 0$ s.t. $\alpha_1 = \alpha_2$, であり、 r_2 と r_3 が等しい頻度で適用できる場合には振動が生じることがわかる。 r_2 の適用には X の存在が不可欠であり、そのためには r_1 の適用が不可欠である (r_3 は X の生成に Y を必要とし、 Y は他のどの作用素でも生成されない)。したがって、 r_1 の反応が振動生成には必要であることがわかる。

我々は *ARMS* を用いて *Brusselator model* のシミュレーションを行ない、ホップ分岐様の現象が再現できることを確認している [4]。

ARMS の秩序パラメータ 我々は以上の *ARMS* の挙動に関する予想に基づき、*ARMS* の秩序パラメータを定義し、シミュレーションを通してその適合性を検証した。ここで、*ARMS* の秩序とは発生するサイクルの周期の多様性に対応する。

我々は *ARMS* の計算の停止性の指標となる λ_e パラメータを定義した [4]。 λ_e パラメータは

$$\lambda_e = \frac{\sum r_{\Delta S > 0}}{1 + (\sum r_{\Delta S < 0} - 1)}$$

と定義される。ここで $\sum r_{\Delta S > 0}$ は適用された *heating rules* の総数に、 $\sum r_{\Delta S < 0}$ は *cooling rules* の総数に対応する。このパラメータが 0 もしくは 1 よりも大きい場合は *ARMS* の計算は停止しやすくなり、1 に近付くと停止しにくくなる。計算が停止しにくければしにくいほど、多様な周期のサイクルが出現する。我々は λ_e パラメータの適合性をシミュレーションを通して検証した [4]。

セルラーオートマタとの関係 セルラーオートマタの挙動に関するパラメータおよびクラスとしては、Langton による λ パラメータと、Wolfram の 4 つのクラスがよく知られている。我々は λ_e パラメータとこれらパラメータとの関連を研究し、それらが共通して計算の停止のしやすさの指標になっていることを発見した (詳しくは [4])。

ラングトンやカウフマンは系がカオティックな挙動に至る「縁」のところで、秩序の多様性が増大することを指摘しており、また、ラングトンとウォルフラムはその領域では計算の停止は予測不可能になると述べているが、この「カオスの縁」は *heating rule* と *cooling rule* (もしくはそれに相当する遷移規則) の適用比率が非対称的になることにより生じ

る秩序であり、その領域は中程度の停止性をもつために計算の停止性については予測が困難になると考えられる。

Higher Order ARMS 以上では 1 階の *ARMS* について現在までの研究結果を概説したが、以下では現在研究を進めている高階の *ARMS* について簡単に概説する。まず、状態空間 M における可観測域 *window* の概念を導入する。*window* とは状態空間の部分空間のことであり S^k と表される。 S^k とは状態ベクトル内で観測可能な次元数を示している。例えば、 S^2 の空間では 2 次元以下の状態ベクトルしか観測することができない。

ある状態 x に対し”分子”は $S^k (k < n)$ に存在する記号列として定義される。*window* サイズ k の値が増加すると共に”分子”として認識される大きさは次第に大きくなっていく。各々の *window* サイズでは、認識される”分子”を基底とする状態空間を定義することができ、1 階の *ARMS* と同様に *ARMS* 力学系が定義できる。

高階の *ARMS* では、*window* サイズによって多様な分子の創発がみられ、自然界で有限の物質の組合せから多様な物質が構成されるように、高階の *ARMS* でも有限の分子の組合せから多様な分子が構成される。かかる多様な分子に関する高階の *ARMS* 力学系は、従来の力学系とは異なり計算や、*window* サイズに応じて系の相空間が動的に変化する。このような性質は生命の動作原理を解明するために適したモデルであると考えている。

参考文献

- [1] C. G. Langton, Life at the edge of chaos. In *Artificial Life II*, Addison Wesley, 1991.
- [2] S. Wolfram, Cellular Automata and Complexity, 1994.
- [3] Y. Suzuki and S. Tsumoto, H. Tanaka, Analysis of CYcles in Symblic Chemical System based on Abstract Rewriting System on Multisets, MIT press, 1996.
- [4] Y. Suzuki and H. Tanaka, Order parameter for Symbolis Chemical System, *Alife VI*, MIT press, 1998.