

ミクロな相互作用からマクロにおけるパターン形成

加藤 毅 京都大学大学院理学研究科

はじめに

この研究会は今回で3回目を迎えた。これまで、生物学や物理化学の多くの専門家によって、非専門家向けに生物学における様々な現象についてレクチャーして頂いたことに深く感謝したい。

そこにおいて、生体现象は実に様々で、それらを理解するために実に多様な数理的手法が用いられていることが分かった。そこでは、様々な状況にあった個々の方法が取られているが、それらは一つ一つがばらばらなのではない。その世界には確固とした共通の原理が存在することが、これまでのこの研究会での講演からも明らかになっている。ここでは、その一つの「原理」を取り上げたい。

生体现象は多くの種類のパターンを持つ。例えば、魚やシマウマの縞模様のような非常にマクロなものから、体内時計のようなミクロな相互作用システムの中に現れるものまで様々である。そのような現象はすべて、様々な種類のタンパク質どうしが相互作用することで複雑にからみ合いながら形成されている、システムの中から現れる。一方で、タンパク質間の相互作用を化学反応としてみれば、それはお互いの分子が持つ電子軌道を共有することで反応がおこる。電子の軌道を追跡することは不可能であり、その意味で電子軌道は極めてランダムであるといえる。

まとめると、ミクロなスケールで、電子どうしのランダムなやり取りが積み重なって、(電子のものに比べて) 大きなスケールから見ると、パターンを形成するのである。

このような一般的な原理は生物の持つ特有の現象であり、それを理解したいことからここでの話しは始まっている。

1 ミクロなスケールにおける写像の繰り返しと合成

さて、 $f: [0, 1] \rightarrow [0, 1]$ を連続な写像とする。この時、その繰り返し：

$$\{x, f(x), f^2(x), f^3(x), \dots, f^n(x), \dots\}$$

の軌道は n が十分大きい時に予測不可能という意味でランダムである一方で、その解析的な研究は力学系の分野で深く成されている。ここでは、その軌道 $\{f^n(x)\}_{n=0,1,\dots}$ を一つの分子の電子軌道に対応させて、それらの間の相互作用を定め、それらをマクロな視点から見てみる。

ここで、二つの写像：

$$f, g: [0, 1] \rightarrow [0, 1]$$

をとり、それらの繰り返しを次のようにあらわす。

$$O_1(x) = \{f^k(x)\}_{k=0,1,\dots}, \quad O_2(x) = \{g^k(x)\}_{k=0,1,\dots}$$

ここでは、それらを oscillatins と呼ぶ ([K3])。

今、片側符号力学系を：

$$X_2 = \{(a_0, a_1, \dots) : a_i \in \{0, 1\}\}$$

であらわす。その時、各元 $\bar{k} = (k_0, k_1, \dots) \in X_2$ に対して、ファミリーの区間写像：

$$\{h^m(x)\}_{m=0,1,\dots}, \quad h^m : [0, 1] \rightarrow [0, 1]$$

を次で定める。まず、

$$d_i(x) = \begin{cases} f(x) & i = 0, \\ g(x) & i = 1. \end{cases}$$

とおく。その時、 h^k を次で定める：

$$h^m(x) \equiv d_{k_m} \circ d_{k_{m-1}} \circ \dots \circ d_{k_0}(x).$$

h^m は $(\bar{k}, f, g)$ で定まることに注意したい。

今、

$$\pi : [0, 1] \rightarrow \{0, 1\}$$

を、 $\pi([0, \frac{1}{2})) \equiv 0$, $\pi([\frac{1}{2}, 1]) \equiv 1$ とおく。この時、各 $x \in [0, 1]$ について π と h^k を合成することで a.e. x に対して別の X_2 の元：

$$\pi((h^1(x), h^1(x), \dots)) \equiv (\pi \circ h^0(x), \pi \circ h^1(x), \dots) \in X_2$$

を得る。則ち、 (x, f, g) を固定すると、 $\bar{k} \in X_2$ に対して、別の元 $\pi((h^1(x), h^1(x), \dots)) \in X_2$ が定まった。これにより、次の写像：

$$\Phi(x, f, g) : X_2 \rightarrow X_2$$

が $\Phi(x, f, g)(\bar{k}) \equiv \pi((h^0(x), h^1(x), \dots))$ で定まるが、それをここでは interaction map と呼ぶ。Interaction map は一般には連続な写像であるが同型ではない。そのような性質は、点 $x \in [0, 1]$ の取り方に依存している。

さて、 $\Phi(x) \equiv \Phi(x, f, g)$ の繰り返し：

$$\{\Phi(x)^t(\bar{k})\}_{t=0,1,\dots} \subset X_2$$

を考えてみよう。これにより、二つのパラメーターが現れたことになる。Oscillation $\{f^n(x)\}_{n=0,1,\dots}$ の n と、上の t である。 $\Phi(x)$ という写像は、 f や g のすべての n についての値 $\{f^n(x), g^n(x)\}$ がある程度分らないと定まらない。‘ある程度’といったのは、その π による像が分かっているだけで、いってみれば、それらの間の相互作用の ‘おおまかな形’ が分かれば良いといえる。その意味で、 t のスケールは n のものより大きく、 $\Phi(x)$ という写像から導かれる幾何学的な性質の中に、始めに述べた ‘マクロなパターン’ を見つけることがその原理に対応するであろう。

2 マクロなスケールにおける自己同型群と可積分系

今、 $x \in [0, 1]$ が正則 (regular) であるとは、 $\Phi(x, f, g) : X_2 \cong X_2$ が同型写像を導くときをいう。 $R(f, g) \subset [0, 1]$ で正則な点全体をあらわす。この時、

$$G = \text{gen} \{ \Phi(x, f, g) : x \in R(f, g) \} \subset \text{Aut } X_2 = \text{Aut } T_2^*$$

を正則な $\Phi(x, f, g)$ で生成される X_2 の自己同型部分群とする。 G はファミリーの写像 (f, g) のみにより定まる。 $\text{Aut } T_2^*$ は非常に大きい群であることが知られており、一般には G は非常に大きい、または空集合かもしれない。

さて、 f と g の二つの元による相互作用は、よりたくさんの写像どうしの相互作用に一般化することができる。その意味で、次のことがわかる。

Theorem 2.1 (K3) *There is a family $\{f, g, \alpha, \beta\}$, four maps on the interval so that the corresponding G is isomorphic to the so-called lamplighter group, the semi direct product of $\oplus_{\mathbb{Z}} \mathbb{Z}_2$ with $\mathbb{Z}$.*

Lamplighter 群は幾何学的群論で良く知られたもので、二元生成無限表示群である。このことは、ミクロな相互作用に対応する写像達を選ぶことにより、それらの間の相互作用から定まる、マクロな対象である自己同型部分群がよい性質を持つことをいっている。

次に、可積分系で良く知られている、Lotka Volterra 方程式：

$$\frac{d}{dt} u_n = u_n(u_{n+1} - u_{n-1})$$

を扱う。これは生物どうしの捕食の関係を記述したものである。これを離散化、さらには超離散化することで、次の Lotka Volterra cell automaton:

$$v_n^{t+1} - v_n^t = \max(0, v_{n+1}^t - L_0) - \max(0, v_{n-1}^{t+1} - L_0)$$

を得ることができ、この解はソリトンを持つことが知られている。

さて上では、 $\pi : [0, 1] \rightarrow \{0, 1\}$ を用いたが、もう少し細かく、 $\pi_L : [0, 1] \rightarrow \{0, 1, \dots, L-1\}$ を全く同様に定めることができる。また、 $X_L = \{(a_0, a_1, \dots) : a_i \in \{0, 1, \dots, L-1\}\}$ と置くことで、片側符号力学系のアルファベットの数を増やしておく。

これにより、写像の有限個のファミリー $\{f_i\}_i$ から次の interaction map:

$$\Phi(x, \{f_i\}_i) : X_L \rightarrow X_L$$

を同様に得ることができる。この時、その繰り返し：

$$\{\Phi(x, \{f_i\}_i)^t(\bar{k})\}_{t=0,1,\dots} \subset X_L$$

を考える。

Theorem 2.2 (K3) *There is a family $\{f_i\}_i$ so that the corresponding iteration $\{\Phi(x, \{f_i\}_i)^t(\bar{k})\}_{t=0,1,\dots}$ give solutions of the Lotka Volterra cell automaton.*

In particular they contain solitons.

エントロピー：このように、写像のファミリーを用いることで、可積分系や樹木への作用などを構成することができる。生物学の見地からは、これらミクロシステムに多少の揺らぎがあっても、マクロなシステムが安定でなければ長い時間生体を維持することはできない。そこで、ファミリーの写像の構造安定性を研究することは自然といえる。第一ステップとして、位相的エントロピーを考えよう。ここでは本質的に二つのエントロピーを考える必要がある。則ち、ミクロにおいて、ファミリーの写像の相互作用のエントロピー、そしてマクロにおいて、それらから構成された相互作用写像 Φ のエントロピーである。概念的には、ミクロにおけるエントロピーは値が高く相対的にマクロなほうは低いことが、パターン形成を計るある程度の目安になるであろう。

$f, g : [0, 1] \rightarrow [0, 1]$ とし、 $\Phi(x) : X_2 \rightarrow X_2$ を相互作用写像とする。今、ファミリーの相互作用写像を

$$\Phi : X_2 \times [0, 1] \rightarrow X_2 \times [0, 1]$$

$\Phi(\bar{k}, x) = (\Phi(x)(\bar{k}), x)$ で定める。

一般に、距離空間 (Y, d) とその上の連続写像 $f : Y \rightarrow Y$ に対して、位相的エントロピー $h_t((Y, d), f) \in \mathbf{R}$ が定まる。マクロな相互作用写像とミクロなファミリーの写像の両方の性質が反映するエントロピーをここでは定める。

Definition 2.1 *The interaction entropy is given by the topological entoropy:*

$$h_t(f, g) = h_t(\Phi).$$

f, g 二つの写像から作られる相互作用写像 $\Phi(x)$ について、 $\Phi(x)(\bar{k}) = (k'_0, k'_1, \dots)$ とおくと、 k'_i が $(k_0, \dots, k_i)$ で決まってしまうことから、単独の相互作用写像の位相的エントロピー $h_t(\Phi(x))$ は自明になることが分かっている。一方で、Lotka Volterra cell automaton などの場合は、 k_{i+1} までの情報、つまり一つ先のことまで分かっていると k'_i が定まらない。このことによりその位相的エントロピーは自明ではなくなる。このことと、ソリトン形成になにか関係があれば面白い。

ソリトンは数理物理の様々な場面で発見されている極めて重要な現象であり、その形成のメカニズムを理解することは大問題であると思われる。ファミリーの写像から作られた相互作用写像の「ソリトン具合」（つまりどのくらいソリトンの持つ性質に近い）を計るようなエントロピーを構成することが望まれるが、それはおそらくは位相的エントロピーより細かい情報を必要とするように思える。

3 空間の形成

DNA から構成される相互作用システムからタンパク質が作られる。タンパク質は何か形を持った実体があり、タンパク質の機能は、本質的にその形で決定される。

そこで、上で行われているファミリーの写像間の相互作用から、何か空間を構成することが自然に考えられるが、これを

Space form problem

とここでは呼ぶ ([K4])。ここでは、space form problem の一つの定式化を述べる。

一般的に、ファミリーの写像を用いることで、相互作用のグラフとここで呼ぶ有限グラフが以下のようにして構成される。それは初期条件 X_0 を与えることで、自動的に有限グラフの無限列：

$$X_0, X_1, X_2, \dots$$

を成すことが示されるが、それは符号力学系の有限グラフ版と言える。幾何学的に符号力学系は、マルコフ分割など空間上の写像から引き出される力学系の、大域的な性質を記述するものとしてあらわることから、ここではその逆問題を考える。則ち、相互作用のグラフの無限列から、ある空間 X とその上の（自己同型）写像 A と構成することを考える。その時 (X, A) は上で述べた space form problem における一つの定式化を与え、イメージ的にはタンパク質 X とその状態 $\{x, A(X), A^2(X), \dots\}$ を与えるようなものである。

そこで、まず相互作用グラフを構成する。 $f, g : [0, 1] \rightarrow [0, 1]$ を取り、 $\Phi(x, f, g) : X_2 \rightarrow X_2$ を相互作用の写像、 $\pi : [0, 1] \setminus \frac{1}{2} \rightarrow \{0, 1\}$ を射影とする。さらに別の連続写像 $d : [0, 1] \rightarrow [0, 1]$ をとる。

今 $z \in [0, 1]$ とある $\bar{k} \in X_2$ について、次の等式：

$$\Phi(x, f, g)(\bar{k}) = \pi((d(z), d^2(z), \dots)) \equiv (\pi(d(z)), \pi(d^2(z)), \dots) \in X_2$$

が成り立つとする。この時、marked oriented edge を

$$(f, x) \xrightarrow{(g, \bar{k})} (d, z)$$

で書く。

分子間の相互作用は、それが行われる部位において近接することにより可能となる。そしてそれぞれの形がお互いに重なりあうことにより近接することができるのである。ここではその形を X_2 の元とみなすことで、上の等式は二つの分子が近接している状態と見なす。よって上の矢印は相互作用している状態を現している。

これを一般化して、ファミリーの写像 $\{f_0, \dots, f_k\}$ とファミリーの点 $\{x_0, \dots, x_l\}$ をとる。各 $(i, j, x) \in \{0, \dots, k\}^2 \times \{x_0, \dots, x_l\}$ に対して、 $\bar{k}(i, j, x) \in X_2$ を与えよう。

このようにして、符号列のファミリー $\{\bar{k}(i, j, x_h)\}_{i,j,h=0}^{i,j=k,h=l} \subset X_2$ が与えられた。これらについて、頂点とエッジの集合を以下で定める：

$$V = \{(f_i, x_j) : 0 \leq i \leq k, 0 \leq j \leq l\} \text{ (the set of vertices),}$$

$$E = \{e_{i,j,k} : (f_i, x_h) \xrightarrow{(f_j, \bar{k}(i,j,x_h))} (f_k, x_v) : \} \text{ (the set of edges).}$$

Definition 3.1 *An interaction graph is a marked oriented graph, where the set of vertices V and edges E are given as above. We denote it by:*

$$G(\{f_i\}_i^k; \{x_j\}_j^l; \{\bar{k}(i, j, x_h)\}_{i,j,h=0}^{i,j=k,h=l})$$

このようにして、写像、点、そして符号列のファミリーから相互作用のグラフ X_0 が与えられた。さて次にこれらのファミリーから相互作用のグラフの無限列を与えよう。

$$X_2^{k,l} \equiv X_2^{k^2+l} = X_2 \times X_2 \times \cdots \times X_2$$

とおく。この時、ファミリーの相互作用写像から：

$$\Phi : X_2^{k,l} \rightarrow X_2^{k,l}$$

の写像が定まる。ここで、

$$\Phi(\{\bar{k}(i, j, x)\}) = \{\bar{k}'(i, j, x)\},$$

$$\bar{k}'(i, j, x) \equiv \Phi(f_i, f_j, x)(\bar{k}(i, j, x)).$$

これにより、別の相互作用グラフ：

$$\begin{aligned} \Phi_*(G(\{f_i\}_i^k; \{x_j\}_j^l; \{\bar{k}(i, j, x_h)\})) \\ = G(\{f_i\}_i^k; \{x_j\}_j^l; \Phi(\{\bar{k}(i, j, x_h)\})). \end{aligned}$$

が与えられる。これを繰り返すことにより、相互作用グラフの無限列：

$$(G_0, G_1, \dots),$$

$$G_i = G(\{f_i\}_i^k; \{x_j\}_j^l; \Phi^i(\{\bar{k}(i, j, x_h)\}_{i,j,h=0}^{i,j=k,h=l})).$$

が与えられた。この列は、有限グラフの有限集合の列として構成されている。

さて、組み合わせ論において、有限グラフから構成される多項式環のイデアル、トーリックイデアルについて深い研究がある。ここではそれを用いて空間とその上の写像についての定式化を以下で定める。 $(G_0, G_1, \dots)$ に対応して、トーリックイデアルの無限列：

$$(I_0, I_1, \dots)$$

がとれる。

今、 V を代数多様体とし、アファインチャート $\{V_i\}$ とその定義イデアル J_i をとる。 V 上の自己同型写像 A が $\{(V_i, J_i)\}_{i=1}^m$ について (stable) *algebraic Markov partition* を与えるとは、各 i についてある j があって、

$$A(V_i) \subset V_j$$

を満たすこととする。

Space form problem: 相互作用グラフの無限列から定まるトーリックイデアルの無限列 $(I_0, I_1, \dots)$ に対して、それがいつある (V, A) の代数的マルコフ分割から定まるものになるか。

この構成には相互作用グラフの組み合わせ論的な性質を調べる必要があることが分かる。

また、複素幾何学との関わりにおいて、トロピカル幾何学との関係から、射影幾何学における双対性を用いて、オートマトンの間の双対性が存在することが分かっている ([K4])。

4 終わりに

最初に生体の数理現象には様々な原理が働いていることを述べたが、ここでは主にパターン形成の現象、特に分子生物学の中心教義に関わることにについて取り上げた。その他のものとして少なくとも次の三つ、突然変異（比較的短い時間）、進化論（長い時間）とそして免疫が挙げられる。

曖昧な言い方ではあるが、進化論についてはスケール変換に関わる数学、免疫についてはなにか本質的に等式の解析ができる数学がそれぞれ有効であるように思われる。突然変異についてはまだよく分らない。等式の数学として特に作用素代数が可能性があるように筆者には思える。

References

- [CG] A. CARBONE AND M. GROMOV, *Mathematical slices of molecular biology*, Gaz. Math. 88 suppl. (2001).
- [K1] T.KATO, *Operator dynamics in molecular biology*, to appear in the Proceedings of International Conference of Natural Computation, Lecture Note in Computer Science.
- [K2] T.KATO, *Interaction states by iterating maps in molecular biology*, RIMS 講究録（符号と暗号の代数的数理） 1420 (2005).

- [K3] T.KATO, *Interacting maps, symbolic dynamics and automorphisms in microscopic scale*, to appear in International Journal of Pure and Applied Mathematics.
- [K4] T.KATO, *Geometric representations of interacting maps*, in preparation.
- [N] 可積分系の応用数理（中村佳正編），裳華房 (2000).
- [UK1,2,3] 数学者のための分子生物学入門（上野健爾、加藤毅編），
vol 1 物性研究 81-1 (2003), vol 2 (2004), vol 3 物性研究 本号.