ネットワーク上の力学系における機能と固定点数の相関

菊池誠

大阪大学サイバーメディアセンター

概要

遺伝子制御ネットワークのモデルにヒントを得て、入力ノードと出力ノードを持つランダムなネットワーク上の力学系を考える。入力に対する鋭敏な応答を「機能」として要求し、機能に対して力学系の固定点数がどう変化するかを調べたところ、機能が低いうちは固定点がひとつだが、機能が上がるに連れて固定点が 2 個のネットワークが増えることがわかった。

Correlation between function and the number of the fixed points in a dynamical system on network

Macoto Kikuchi

Cybermedia Center, Osaka University

Abstract

Inspired by the gene regulatory networks, we consider a dynamical system on network having one input node and one output node. Requiring a sensitive response to the input as the "function", we investigated how the number of the fixed point varies with the function. We found that while the system has one fixed point when the functionality is low, the ratio of the network having two fixed points increases as the functionality becomes higher.

---

1 序論

本講演ではネットワーク的に相互作用する素子による非線形な力学系を議論したい。そのような力学系は生命現象や社会現象をモデル化する際によく現れる。ここでは特に遺伝子制御ネットワークをヒントにした抽象的な力学モデルを扱うが、その生物学的な意味については議論せず、あくまでも力学系の問題として取りあげる。

個々の素子それ自体は比較的「穏やかで弱い応答」をするものとしよう。そのような素子が互いに相互作用し合っている状況を想定する。簡単のために入力素子と出力素子をひとつずつ持つネットワークについて考えよう。問題は、そのような弱い応答をする素子を使って入力に対して鋭敏な応答をするネットワークが作れるか、である。ネットワークの「機能」として、入力の on と off をなるべく明確に識別して鋭敏に応答することを要求する。つまり、ネットワークを用いて「入力識別器」を作ろうというわけである。できるだけ識別力の高いネットワークを作りたい。

といっても、高い機能を持つネットワークをいちから人為的に設計するのは難しい。そこで本研究ではいっさい設計をせず、ランダムにネットワークを作ってその中から高い機能を持つネットワークを探すことにしよう。もちろん高い機能を持つネット

ワークは極めて珍しいだろうから、正直にランダム生成したのでは見つけられないに違いない。そこで登場するのが、「レアイベントサンプリング」という技法である。

「レアイベントサンプリング」はその名の通り「稀な構造」や「稀な状態」を効率よくサンプルするための計算手法の総称である。本研究ではその中でも平衡統計力学の分野で開発されたマルチカノニカルモンテカルロ法を用いる。この手法によれば、原理的には、極めて稀な状態まで含めたランダム・サンプリングが可能である。そのようにして「ランダム」に作られたネットワークたちの中から高い機能を持つものを選び出し、それらに共通する性質を調べることにしよう。特に本研究では力学系としての固定点の数の変化に注目する。

2 モデルと計算方法

ノード数 N、エッジ数 K のランダムなネットワークを考える。エッジは向きづけられており、それが「制御」の方向を表している。計算を簡単にするために、ひとつのノード・ペア間を結ぶエッジは最大一本とし、「自己制御ループ」はないものとしよう。

各ノードには $[0,1]$ の範囲の値をとる変数 S_i(i はノード番号) が乗っている。これらについて離散時間の力学系

$$S_i(t+1) = R\{\sigma\delta_{i1} + \sum_j J_{ij}S_j(t)\} \qquad (1)$$

$$R(x) = \frac{1}{2}\{\tanh(x) + 1\} \qquad (2)$$

を設定する。相互作用 J_{ij} は $0, \pm 1$ のいずれかをとる定数であり、$J_{ij} \neq 0$ なら必ず $J_{ji} = 0$ となる。また σ は入力ノード (1 番) にだけ加えられる入力であり、やはり $[0,1]$ の範囲をとる。ネットワーク構造と J_{ij} の組み合わせでひとつの力学系が定義される。応答関数 $R(x)$ としては「ゆるやかな応答」をする関数を選んだ。各素子はまったく入力がないときには $S_i = 0.5$ を出力し続ける。

この力学系の定常状態を考えることにして、各ノードの入力に対する「応答」を長時間平均 $\bar{S}_i(\sigma)$ で定義する。問題にしたいのは on と off の差なので、各ノードの「感応度」を $|\bar{S}_i(1) - \bar{S}_i(0)|$ としよう。さらに、最大の感応度を持つノードを出力ノードと決め、出力ノードの応答を力学系全体の応答 $\bar{r}$(出力ノードの $\bar{S}$ である)、また出力ノードの感応度をこの力学系全体の感応度 F とする。目標はこの F をなるべく大きくすることである。

マルチカノニカルモンテカルロ法 (McMC) はもともとは平衡統計力学の文脈において「エネルギーが一様になるようなサンプリング手法」として開発された。[1] 一般の物理系ではエネルギーが低いほどそのエネルギーを持つ微視的状態の数は少なくなるので、McMC ではエネルギーが低い状態ほど高頻度に出現するように重みづけをする。とはいえ、その重みがあらかじめ分かっているならモンテカルロ計算するまでもなく、統計力学の計算はできてしまう。McMC のポイントは「あらかじめ分かっていない重みを機械学習によって推定する」ところにある。その学習方法にはいくつか可能性があるが、本研究では Wang-Landau 法を採用する。[2] 我々は以前の研究で、この手法を用いれば出現確率が 10^{-200} 以下という極めて稀な状態もサンプリングできることを確認している。[3]

さて、我々の目標は F の大きな力学系を得ることなので、F を「エネルギー」とみなして、F に関して一様な分布が得られるように McMC 法を行う。得られた分布に学習で求められた重みの逆数を掛けることにより、ネットワークをランダムサンプリングした場合の F の分布が得られるのである。

3 結果

ここではノードに接続されたエッジの平均数が 5 の場合の結果を示す。図 1 は F の出現確率である。F を 0 から 1 のあいだで 100 等分し、各 bin に入る F の確率を求めている。これを見ると、F が大きなネットワークは極めて稀であることがわかる。

図 2 と 3 はそれぞれ $F = 0.7 \sim 0.71$ と $0.99 \sim 1$ に含まれるネットワーク 10 個ずつの応答 $\bar{r}$ の σ 依存性である。σ を 0 から 1 の間で 0.01 刻みにとり、それらに対し、全 S_i を 0.5 にセットした状態から出発して、定常に達した以後の平均値をプロットした。

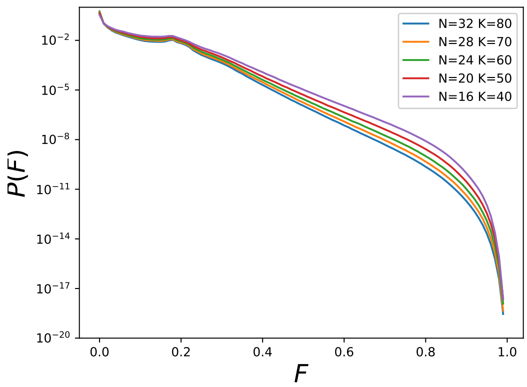

図 1: F の出現確率

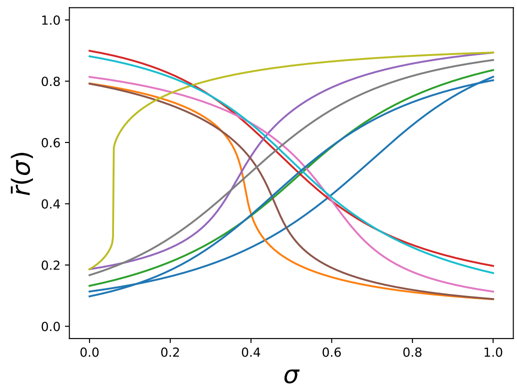

図 2: $F = 0.7 \sim 0.71$ での応答の σ 依存性

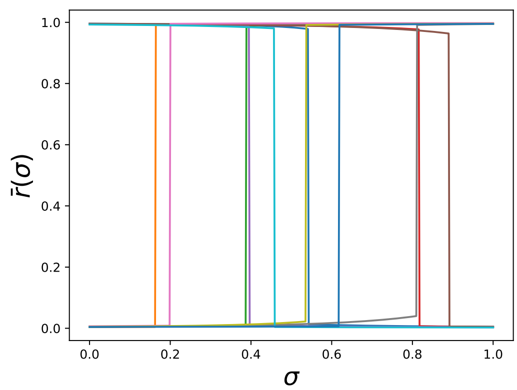

図 3: $F = 0.99 \sim 1$ での応答の σ 依存性

これを見ると、$F = 0.7 \sim 0.71$ ではおおむね応答が滑らかに変化しているのに対し、$0.99 \sim 1$ では階段状にジャンプしている。これより、まずこれらの系は力学系の固定点を使って入力に応答していることがわかる。そしてこの振る舞いの違いは、前者では力学系の固定点が入力とともに滑らかに移動しており、他方、後者では 2 個の固定点がある σ の値で切り替わっていることを意味している。すなわち、固定点が自己組織的に形成され、その数が機能とともに変わっているのである。これは、入力に対して鋭敏に応答するためには固定点の移動だけでは対応しきれず、固定点切り替えを使うしかないことを意味している。流体の温度勾配が大きくなると、熱伝導では熱を運びきれずに対流が発生することになぞらえてもいいだろう。このように鋭敏な応答を要求するだけで二個目の固定点が「創発」する現象は興味深い。

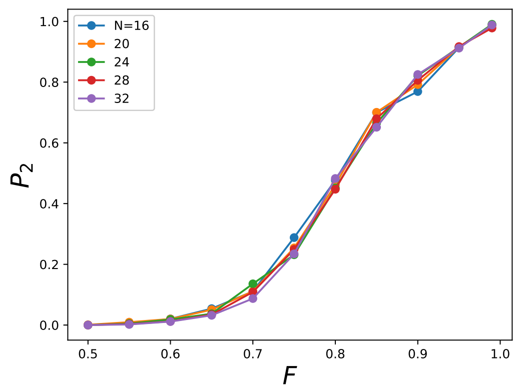

図 4: 固定点が 2 個のネットワークの出現率

そこで、さまざまな F に対してそれぞれ 1000 個程度のネットワークを作り、ジャンプが観測されるネットワークの比率をプロットしたものが図 4 である。これはおおむね固定点が 2 個のネットワークの存在率を表している。サイズ依存性がほぼないので相転移ではないが、シグモイド型のグラフであることから、ある F の値を境に固定点が 2 個のネットワークが急激に増えると言っていいだろう。

しかし、固定点切り替えのメカニズムを使うとヒステリシスが生じて、入力の急激な変化に出力が

追従できないのではないかという疑問がわく。そこで、入力を $\sigma = 0 \to 1 \to 0$ と時間的に急変させてみると、たしかにひとつの固定点に引っかかってもうひとつの固定点に飛べないネットワークも見つかる。これでは役に立たないのだが、実際には 62% ほどのネットワークはこの入力の急激な変化にきちんと追従できることがわかる。ただし、ヒステリシスは見られる。つまり、入力を少しずつ変化させた場合には $\sigma = 0 \to 1$ の過程とその逆過程とで出力がジャンプする σ の値が異なり、固定点が双安定となる σ の領域が存在することがわかる (図 5)。

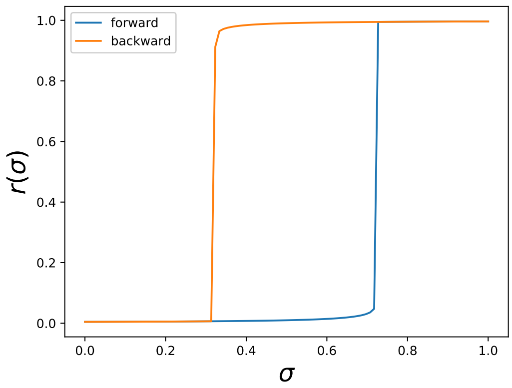

図 5: ヒステリシスの例。σ を 0.01 ずつ変えながら、各 σ の値で 100 ステップ経過後の出力 r をプロットしている

では、力学系の固定点を使って応答することになんらかのメリットがあるだろうか。図 6 はひとつのネットワークを例に、入力にノイズが加わった場合の応答の時系列を見たものである。ノイズがある入力に対しても応答は極めて安定的であり、入力をきちんと識別できていることがわかる。もともとノイズを考慮せずに作ったネットワークにもかかわらず、固定点を使うメカニズムにより、ノイズに対する安定性も獲得しているのである。

4　まとめ

入力の on-off に鋭敏に応答するという「機能」を要求すると、力学系が自己組織的に固定点を獲得し、機能が上がるとともに力学系の固定点がふたつ

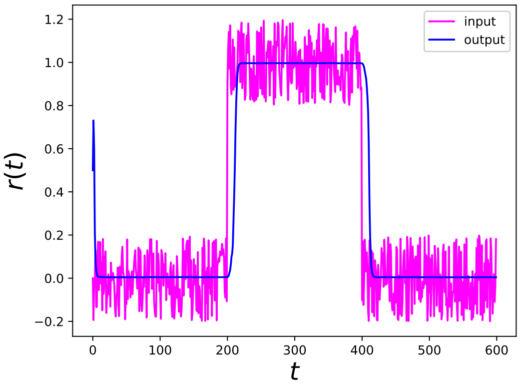

図 6: ノイズのある入力への応答

のネットワークが増えることがわかった。入力への応答に力学系の固定点を使うメリットは入力ノイズに対する安定性であった。固定点数が機能によって必然的に決まるというこの現象は興味深く、ネットワーク上の力学系でモデル化できる様々な現象に見られる可能性がある。

謝辞

本研究の主要部分は永田新太郎氏の修士論文に基づいている。モデル構築の大部分とマルチカノニカル法による計算の全ては永田氏が行なったものである。また、斎藤稔、松下勝義、藤本仰一、井上雅世の各氏より多くの議論と示唆をいただいた。

参考文献

[1] B.A. Berg and T. Neuhaus: Phys. Rev. B267 (1991) 249.

[2] F. Wang and D.P. Landau: Phys Rev Lett 86(2001) 2050.

[3] A. Kitajima and M. Kikuchi: PLOS One 10(2015) e0125062.

E-mail: kikuchi@cmc.osaka-u.ac.jp