

特集 生命動態システム科学 ○ II. 数理生物学 □ 6. 組織・多細胞社会

(5) “埋め込む” ことで大規模複雑システムを理解する

田嶋 達裕 豊泉 太郎

Tajima Satoshi, Toyozumi Taro : 理化学研究所 脳科学総合研究センター
Tajima Satoshi : 日本学術振興会特別研究員

■モデル化困難な大規模データを理解する

生命科学は計測・操作技術の革新と解析・モデル化の理論的進展が協調することで発展してきた。特に近年では、多変数の経時変化を同時記録する技術が急速に進歩し、大規模な生命現象のダイナミクスに関する大量のデータを取得することが可能となりつつある。なかでも、神経科学における計測技術の進展は著しく、脳全体の神経細胞の活動変化を記録できる時代に到達した¹⁾。しかし、いくら大量のデータを取得できても、従来型の恣意的に単純化したモデルの延長だけでは、全脳の動態とその背後のネットワーク構造の全貌を理解することは難しい。

ここでは、もう一つのアプローチとして、非線形力学系の研究において広く用いられてきた基本的な概念である“埋め込み”に注目する。なぜなら、以下で述べるように、埋め込みは具体的なモデルを仮定せずに、システムの因果構造を推定するための一般的な枠組みを与えるからである。

■自律力学系における埋め込み

埋め込みとは、直観的には“滑らかな一対一の対応関係がある”という意味である。特に力学系における重要な概念として、“Takens の定理”として知られる“時間遅れ座標系を用いた埋め込み”が挙げられる²⁾。これは多変数(例えば x, y, z, \dots)からなる自律系が決定論的なダイナミクスを持っているとき、系の一部(例えば変数 x)について十分なステップ数の履歴($x_t, x_{t-\tau}, x_{t-2\tau}, \dots$)を新たな座標系(時間遅れ系)としてみると、時間遅れ系で再構成された系の振る舞いは元の状態空間での振る舞いと一対一に対応する、ということを一様に保証するものである(図 A)。

■強制力学系における埋め込みと因果

一方、“埋め込み”が必ずしも成り立たない場合がある。それは影響関係が一方的な場合(強制系)

である。実は、このことが系の因果構造に関する、さらに重要な情報をもたらす。

例えば、二つの自律系(X, Y)があり、一方が他方に影響するが、逆の影響はない場合を考えてみよう(図 B)。このとき、下流の系の変数のダイナミクスは、上流の系を含めた全体の状態を埋め込むことができることが知られている³⁾。しかし、上流の変数をいくら観測しても、下流の振る舞いは一般的には埋め込めない。これは直観的には明らかである。逆に言えば、このような埋め込み関係の非対称性が観測された場合、これは背後にある因果関係が非対称である可能性を示唆する。実際、この性質を用いて因果関係を推定する手法が、生態学などの分野で試みられている⁴⁾。さらに、多変数からなる比較的複雑な系においても、埋め込みを用いて因果構造を推定できることがシミュレーションから確認できる(図 C)⁵⁾。

■埋め込みの情報理論的意味

埋め込みの可否は、“ある変数 x の履歴を与えられたときに、系の変数 y をどの程度曖昧さなく推定できるか”という意味で、情報理論的に解釈できる。具体的には時間遅れ座標($x_t, x_{t-\tau}, x_{t-2\tau}, \dots$)による条件付きエントロピー $H(y|x_t, x_{t-\tau}, x_{t-2\tau}, \dots)$ がゼロか否かによって、2変数間の埋め込み関係が定量的に表現でき、これは従来提案されてきた非線形予測などにに基づく指標とも対応づけられる⁵⁾。

さらに、埋め込み定理を用いた解析は、ノンパラメトリックな従来手法をも補完し得る。例えば、しばしば因果推定に用いられる移動エントロピーは“ある変数の未来を予測するために、自分自身の履歴のほかに、他の変数の情報がどの程度必要か”を指標とする。しかし、移動エントロピーの問題点として、結果の“埋め込み次元依存性”が指摘されている。すなわち、系が自律的で決定

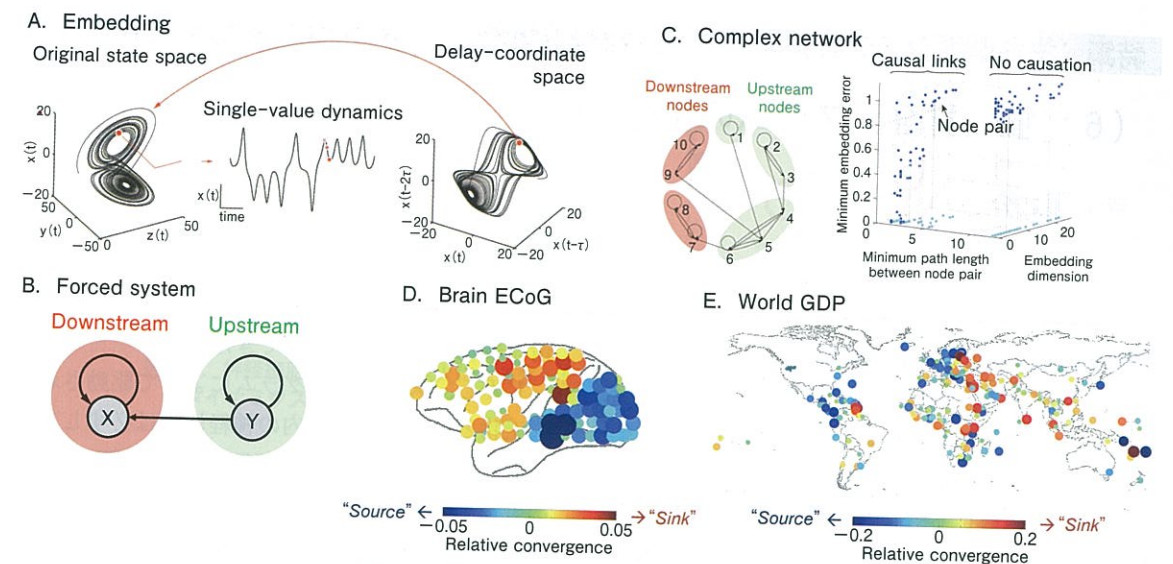


図 力学系の埋め込みと大規模システムの解析
全変数が相互作用する自律系(A)と異なり、作用の方向性がある強制系(B)や複雑ネットワーク(C)では相互の埋め込み関係に非対称性が生じる。この性質を利用して大規模な実データ(D, E)の背後にあるネットワーク構造を捉える。

論的な場合、ある変数の十分な履歴をみれば、その変数自身の未来を完全に予測できるため、他の変数からの情報を表す移動エントロピーは常にゼロになる。一方、埋め込み定理を用いた因果構造の推定ではこの問題は生じない⁵⁾。

■モデルフリー解析としての埋め込み

もう一つ、埋め込みの重要な特徴として、これがシステムについて具体的なモデルを一切仮定せずに議論できる点が挙げられる。特に大規模で複雑な系のデータを扱う場合、モデルの詳細に依存しないという性質は非常に有用である。モデル化が困難な大規模複雑システムについて、従来開発されてきたパラメトリックなモデル比較に基づくアプローチは適用困難な場合が多い。しかし、埋め込み定理に基づくモデルフリーの手法を用いることで、大自由度のシステムについても、有用な知見が得られる場合がある。

■大規模システムにおける埋め込み

われわれは上記の埋め込み定理に基づいて、全脳の皮質脳波(ECoG; <http://neurotycho.org>)および世界のGDP成長率(<http://data.worldbank.org>)の時系列データにおける変数間の埋め込み関係を解析した(図 D, E)。これらはいずれも100以上の変数からなる複雑なシステムである。しかし、埋め込み関係に注目すると、系の因果構

造の特徴を捉えることができる。例えば、視覚を遮断した状態の脳においても視覚野から前頭および頭頂への非対称な埋め込み(青→赤)があり、GDPにおいては、西ヨーロッパなどから他の地域への影響がみられる。これらは系のダイナミクスが生じるメカニズムやその機能に関して有用な知見を与えるものである。

■今後の展望

埋め込み定理の一般性と実データへの適用可能性は、大規模複雑系の解析における有用性を示唆する。今後、複雑な大規模データを扱う生命科学の分野において、埋め込みをはじめとする力学系の一般理論は、モデルと計測データを結ぶうえで重要な役割を担うだろう。

謝辞 本研究の一部は文部科学省「革新的技術による脳機能ネットワークの全容解明プロジェクト」により実施された成果である。

■文献

- Ahrens MB, Orger MB, Robson DN et al: *Nat Methods*. 10 : 413-420, 2013
- Takens F : In *Dynamical Systems and Turbulence*, Lecture Notes in Mathematics, pp. 366-381, Springer-Verlag, 1981
- Stark J : *J Nonlin Sci*. 9 : 255-332, 1999
- Sugihara G, May R, Ye H et al : *Science*. 338 : 496-500, 2012
- Tajima S, Toyozumi T : *Cosyne Abstr*. I-70, 2014 (連絡先: satoshiro.tajima@riken.jp)