解 説

生物情報処理システムの実現へ向けて*

——ニューラルネットを例として

Toward Realization of Biological Information
Processing Systems

長島知正** 土屋 尚***

Tomomasa NAGASHIMA and Takashi TSUCHIYA

Key words: biological information processing, neural net, self-organization, artificial intelligence, Hopfield net, associative memory, spin-glass, combinatorial optimization problem, parallel computer

1. は じ め に

生物, 情報, 工学というものを並べて考えたとき, それらを貫く基本的関係は何であり, 更にそれを記述する形式としてどんなものがあり得るだろうか? 著者に与えられた標題は“生物情報処理”というものであった. このような未解決で, しかも幾重にも困難な問題を内包した課題に対して, すべての立場の人を納得させることは望むべくもないが, 以下では, 著者らのイメージから生物情報処理というものをとらえたとき, 視野に入っている問題の一部を紹介し, 読者の参考 to 供することにしたい.

我々は生物のもつ最も基本的かつ特徴的機能はその情報処理能力にあると考える. 一口に情報処理能力といっても, それは多岐にわたる. 二, 三の例をあげてみよう. まず, 第一にあげられるのは遺伝情報に関するものであり, その情報処理の仕方に関しては, 分子遺伝学の進展により著しく理解が進み, その結果遺伝子操作という新しい技術の体系が現在急速に出来上がつつあることは良く知られている. 第二, 第三の例として, 個体の発生・分化及び免疫機構をあげることができる. これらについては, 第一の例にあげた遺伝

情報の処理方式とは異質であり, いまだ定説が確立されていないが, 近年様々な試みがなされており, その情報処理機構は極めて興味深いものがある. それらの理解の鍵を握る概念として, システムの自己組織化¹⁾²⁾あるいは適応といった概念が有効と考えられているが, 生物情報処理技術として実用化を考えていくためには, 自己組織化と呼ばれるものの機能の多様性を明らかにすると同時に, それらの人工的な実現方法も解決しなければならない. こうした問題についてはこれ以上触れる紙幅の余裕がないので別の機会にゆずり, 本稿の主題に移りたい. なお, 以下で紹介する内容との関連で, 免疫機構に学んだ情報処理装置が可能であるとの提唱もなされている³⁾ことを付け加えておこう.

生物の中でも, 高等動物, とりわけヒトの情報処理能力ということから, 脳の働きを思いうかべる人は多いであろう. 人間の脳の機能として顕著にみられる知的情報処理能力に関してはその工学的実現が人工知能(AI)と総称されるやり方で追求されてきている. それは一口で言えば現在の発達したコンピュータを利用し, その上に走らせるソフトウェアを工夫することにより, 人間の知的機能である, 考える(推論する)ことを代行させようとするものである⁴⁾. AIの実用的価値は最近の産業界の動きを見ると, エキスパートシステムや自然言語処理システムを中心にほぼ認められたといってよく, 今後の発展は従来のソフトウェアの自然な延長として約束されている.

* 原稿受付 昭和62年10月2日

** 室蘭工業大学工学部(室蘭市水元町27-1)

*** (株)アドバンス自然科学研究所(東京都目黒区大橋2-8-18)

ところで、最終的目標は上に述べた AI と同じく人間の脳の機能の工学的実現であっても、そこに至る過程には異なる立場、手段があり得る。以下で述べるのは、ソフトウェアに頼るだけでなくハードウェアそのものを脳の構成要素である神経細胞を直接模したもので作りあげ、知的機能をもたせられるようにしようという立場からの研究である。これもやはり数十年の歴史をもっている。McCulloch と Pitts のニューロンのモデル化⁵⁾、Rosenblatt のパーセプトロン⁶⁾などはこの方面の先駆といえる。

長い歴史がありながら数年前までこの方面はあまり注目されることはなかったが、このところにわかにニューラルネットワークという名で総称されて脚光を浴びるようになってきた。次節でニューラルネット・ブームとでもいえる最近の動きの発端となった、Hopfield のモデル (Hopfield ネットと呼ばれる) とその発展についてやや詳しく考察したい。ニューラルネットと呼び得るものは概に数多く提出されているが、ここではそのすべてを紹介している紙幅がないので最近の解説を参照されたい⁷⁾⁸⁾。

我々がここでニューラルネット、とりわけ Hopfield ネットをとりあげるのは、それが単なる脳機能のモデルとして注目されるだけでなく、一つの新しい道具として世に出ようとしているからである。アメリカではニューラルネットを専門とする会社が数社以上も設立され⁹⁾、今年の AI 学会ではモデルが展示されている。工学的実現をはかるといふ点では最早問題はないともいえるであろう。

2. Hopfield ネット

2.1 McCulloch-Pitts モデル

脳の構成要素は神経細胞 (ニューロン) と、それに栄養を与えるグリア細胞であるが、情報処理機能に着目する時は普通前者のみを問題にする。ニューロンの内部は外に対して電位が低く一定に保たれている。しかし何らかの原因でこの電位が上がり、ある臨界値を越えるとインパルスを発し線維状に延びた神経細胞の内部を伝わる。それが神経終末に達すると今度は化学物質の放出により他のニューロンの電位に影響を与える。化学的伝達を担う部分をシナプスというが、これは相手のニューロンの電位を上げる興奮性のシナプスと、下げる抑制性シナプスの2種がある。各ニューロンは非常に多くの他のニューロンとこれらのシナプス結合を結んでインパルスのやりとりをしているが、興奮性入力と抑制性入力の効果の総和が臨界値を越える

かどうかでそのニューロンがインパルスを発する、つまり興奮するかどうかを決めている。以上は非常に単純化したニューロンの性質の記述であり、すでにモデル化されているといってもよい。

実際 McCulloch と Pitts は、この臨界値の存在と総和性に着目し次のような二状態モデルとして定式化した⁵⁾。つまり i 番目のニューロンの離散化した時間 t における状態 $V_i(t)$ は

$$V_i(t+1) = \theta \left[\sum_{j \neq i} T_{ij} V_j(t) - U_i \right] \quad (1)$$

で決定されるとする。 θ は Heaviside 関数 [$\theta(x) = 1 (x \geq 0)$, $\theta(x) = 0 (x < 0)$] で、 T_{ij} はニューロン j からニューロン i へのシナプス結合の強度を表し、興奮性の時は正、抑制性なら負である。 U_i は臨界値である。従って、 V_i は興奮していれば 1、そうでなければ 0 をとる。このモデルは単純化されすぎているとはいえず少なくともニューロンの本質の側面を表現しており、何より扱いやすいので広く研究されてきた。式 (1) は各ニューロンの次の時間ステップでの状態を導くいわばアルゴリズムであり、系の大きさと結合 T_{ij} を与えることによりどのような神経回路網のシミュレーションも可能である。

2.2 連想記憶

今、 N 個のニューロンがすべて互いに T_{ij} を通じて相互作用しているネットワークを考える。さらにこれは脳のモデルとしては望ましい仮定ではないが、すべての相互作用が対称、すなわち $T_{ij} = T_{ji}$ 、であるとすると¹⁰⁾、この時エネルギー関数

$$E = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1, j \neq i}^N T_{ij} V_i V_j \quad (2)$$

を定義すると、 V_i に変化 ΔV_i が生じた時の関数 E の変化 ΔE は

$$\Delta E = -\Delta V_i \sum_{j=1, j \neq i}^N T_{ij} V_j \quad (3)$$

で与えられるから、式 (1) のアルゴリズムでこの系が時間発展する時、関数 E が必ず減少する方向に向かうことがわかる。つまり関数 E のローカルな極小へ落ち込むまで系の時間発展が進行するのである。

この $T_{ij} = T_{ji}$ の系は、 T_{ij} が 0 のまわりに正規分布している場合、磁性体の分野で注目されているイジングスピンのスピングラスを分子場近似で理解しようとする模型 (SK 模型と呼ばれる) と同等である¹¹⁾。SK 模型では多くの極小が存在していることが知られ、スピングラスでの知見を導入することにより Hopfield ネットの性質が理解できる。このように古くから知ら

れた式 (1) で発展する系に対して, $T_{ij} = T_{ji}$ とすれば工学的に言えば評価関数である E が存在しネットワーク全体の方向づけを行っていること, 及び物性物理学で詳しく調べられているスピングラスモデルとの等価性を指摘したことが Hopfield の功績といえよう. これにより多くの物理学者が Hopfield ネットの研究に参入することになった.

Hopfield ネットには一種の連想記憶の能力をもたせることができる. N 個あるニューロンの, ある特定の興奮パターンを記憶させるべき情報であると考え, このパターンが上述した E 関数の安定な極小値に対応するように結合の強さ T_{ij} を選ぶことができれば, 系は適当な初期条件に対応する入力パターンから出発し, この安定点へ向かう. これは, 連想記憶のモデル化といってもよいし, 情報検索に対応するといってもよいだろう.

どうすれば特定の興奮パターンを E 関数の安定な極小値に対応するように選べるだろうか. 記憶させるべきパターンが p 個あるとする. この時, シナプス結合の強さを

$$T_{ij} = \sum_{\mu=1}^p (2V_i^{\mu} - 1)(2V_j^{\mu} - 1) \quad (4)$$

ただし $T_{ii} = 0$, と選ぶ. ここに V_i^{μ} はあるパターン μ を決められた時の i 番目のニューロンの状態を表す. すると式 (1) の i 番目のニューロンへの入力の総和を表す項, すなわち式 (1) の [] 内の第 1 項は

$$\sum_j T_{ij} V_j^{\mu} = \sum_{\mu} (2V_i^{\mu} - 1) \left[\sum_j V_j^{\mu} (2V_j^{\mu} - 1) \right] \quad (5)$$

と書き換えられる. 式 (5) の [] の中身が違ったパターン, つまり $\mu \neq \mu'$ に対して 0 となり, 同じパターン ($\mu = \mu'$) に対してのみ値をもつように, 入力パターンを選ぶことができれば上式は

$$\sum_j T_{ij} V_j^{\mu} \propto (2V_i^{\mu} - 1) \quad (6)$$

となって, 式 (1) で臨界値 U_i を 0 にとってみればすぐわかるように, V_i^{μ} の値は時間が経っても変化しない. つまり $\mu \neq \mu'$ に対して生ずるノイズを無視すれば, 式 (4) のような結合をとれば記憶すべきパターンを安定にできるのである. 少数の非常に違ったパターンを考える限り, $\mu \neq \mu'$ に対して 0 という上記の条件は守られる. こうして, 系全体に広がって一つの記憶を保つような非局所的記憶とその検索のモデルが実現されるのである.

最近では $T_{ij} = T_{ji}$ という非生物的な仮定をはずせば, おぼえさせたいいくつかの記憶パターンを順々に

「思い出す」ことのできるネットワークが可能となることも示されている¹²⁾.

2.3 最適化問題

Hopfield ネットの重要性は連想記憶の実現にとどまらない. むしろ以下に述べる特殊な目的, すなわち組合せ論的最適化問題を解くための並列コンピュータとしての意義の方が大きいといえる. 実際この方向での実用化の可能性が高いために, ニューラルネット専門の会社が続々と興されたりしているのである.

2.1 項では時間もニューロンの電位も離散的にして考えたが, ここでは各ニューロンを回路的に実現される一つの増幅器と考え, 連続的な時間と電位に対する次の微分方程式で表されるネットワークを考えよう¹³⁾.

$$C_i \frac{du_i}{dt} = \sum_{j=1}^N T_{ij} V_j - \frac{u_i}{R_i} + I_i \quad (7)$$

ここに, u_i は i 番目の増幅器の入力電圧, C_i は入力容量, I_i は外部からの入力電流, T_{ij} は i と j の増幅器を結ぶ結線のコンダクタンスで抵抗 $R_{ij} = 1/|T_{ij}|$ をもつ. $V_j = g(u_j)$ はシグモイド型の入出力関係を表し, R_i は入力抵抗を ρ_i とした時の ρ_i と R_{ij} の並列結合値である. R_i と C_i を i によらないと仮定し, T_{ij}/C を T_{ij} , I_i/C を I_i とあらためて書くと, 今考えているネットワークの時間発展は

$$\frac{du_i}{dt} = -\frac{u_i}{RC} + \sum_{j=1}^N T_{ij} V_j + I_i \quad (8)$$

となる. なお, 興奮性と抑制性のシナプスに対応させるため, 各増幅器は正常 (正) と逆転 (負) の出力端子をもつ.

2.2 項で考えたのと同様に, 式 (8) で発展する系も, $V_j = g(u_j)$ のシグモイドが急になり, $T_{ij} = T_{ji}$ であれば, エネルギー関数

$$E = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N T_{ij} V_i V_j - \sum_{i=1}^N V_i I_i \quad (9)$$

の局所的なミニマムに向かって行くことを示せる¹⁴⁾.

式 (8) の系で最適化問題を扱うことができる. それにはまず T_{ij} と I_i を適当に選んで, 極小化されるべき関数を作る. これがいわばプログラミングに当たる訳である. 次に入力電圧 u_i の組が与えられれば, ネットワークは自動的に関数の極小に相当する安定点へ向かうのである.

Hopfield と Tank は有名な組合せ論的最適化問題である Traveling-Salesman Problem (TSP) を式 (8) と (9) を使って解いてみせた¹⁵⁾. TSP とは「 n 個の町を重複せずに回って帰る最短の順路を求めよ,」とい

う問題で、NP 完全問題の一つとして知られている。つまり計算時間が e^n で増加すると信じられている問題の一つである¹⁵⁾。TSP をニューラルネットで解くためには問題をネットワークで表現する必要があるが、彼らは n^2 個のニューロン (増幅器) を仮想的に正方行列の形に並べ、行を町の名前に対応させ、列番号を何番目に回るかの順番に対応させた。最終的に各行と列にただ一つだけ 1 の出力を出すニューロンが残り、他はすべて 0 となる状態、すなわち順列行列の形が得られればそれが一つの解を表現している。この順列行列の形が極小値に対応するような関数形 E_1 をみつけることは容易である。このような可能な道すじのそれぞれの長さに対応する関数 E_2 もたやすく書ける。関数 $E_1 + E_2$ を表現し得る最小限必要な結線 T_{ij} も又この問題では実現させることはむずかしくない。

n が 10 と 30 の場合に対して、上記のニューラルネットを通常のデジタルコンピュータ上でシミュレートした結果が文献 13) で報告されている。例えば、 $n=10$ では試行回数の約半数が最短又はその次の道を選んだ。必ずしも最短の解は得られなくても、ニューラルネットによる解は非常にそれに近い解にしまっているため、実用的には十分であるといえる。

ただしこのようにシミュレーションをするのではなく、ハードウェアとして直接ニューラルネットを実現すべきで、実際その方向に産業界は動きはじめているようである。また、実際の最適化問題に対して常に TSP のようにうまくいくかどうかはよくわからない。TSP の場合順列行列形式が与えられたことが成功した大きな原因と考えられる。

最後に、本節で述べられた方法は同種の問題に応用され得るが、生物と工学の接点という立場からは、たんに質の 3 次構造を予測する問題に有効に用いられる可能性があることを指摘しておく。

3. お わ り に

脳の情報処理の単純化したモデルから出発して、Hopfield ネットによる連想記憶の実現、さらに最適化問題を解く並列コンピュータに至るまでを大急ぎで見えてきた。こういった研究に対しては、大脳生理学者、工学者それぞれの立場から批判もある¹⁶⁾。脳に限らず、生物系の情報処理を工学的にとらえようとするとき¹⁷⁾、こうした批判はつきまとうであろう。しかし、著者は人工物により、いわば擬人化した型で“生物らしき”を表現することは次世代技術開発に対する一つの基本的戦略となる可能性は小さくないと考えてい

る¹⁸⁾。これを機会にこうした考え方も含めて、本学会員諸兄の御批判を仰ぐと共に、生物情報処理という未分化の研究分野に取り組もうという同好の士が現れることを期待したい。

謝 辞

示唆に富む議論によって著者 (T. N.) を啓発された北大工学部岸浪建史教授に謝意を表します。

参 考 文 献

- 1) H. ハーケン著 (斎藤彦彦, 小森尚志, 長島知正訳): シナプティックの基礎, 東海大学出版会 (1986).
- 2) 長島知正: 自己組織化の数理解説, 計測と制御, **25**, 7 (1986) 655.
- 3) J. D. Farmer, N. H. Packard and A. S. Perelson: The Immune System, Adaptation, and Machine Learning, *Physica*, **22 D**, (1986) 187.
- 4) 土屋 尚, 矢田光治: 人工知能の研究開発動向, 機能材料, **4**, 5, 7 (1985).
- 5) W. S. McCulloch and W. H. Pitts: A Logical Calculus of the Ideas Immanent in Nervous Activity, *Bull. Math. Biophys.*, **5**, 115, (1943).
- 6) F. Rosenblatt: Principles of Neurodynamics, Spartan Books, Washington D. C., (1962).
- 7) 特集「近未来コンピュータへの道」, *Computer Today*, **3** (1987).
- 8) 特集「ニューラル・ネット」, 数理科学, **7** (1987).
- 9) J. Kinoshita and N. G. Palevsky: ニューラルネットは実現するか? *ASCII*, **11**, 9, (1987).
- 10) J. J. Hopfield: Neural Networks and Physical Systems with Emergent Collective Computational Abilities, *Proc. Nat. Acad. Sci. USA*, **79**, (1982) 2554.
- 11) S. Kirkpatrick and D. Sherrington: Infinite-Ranged Models of Spin-Glasses, *Phys. Rev.*, **B 17**, (1978) 4384.
- 12) H. Sompolinsky and I. Kanter: Temporal Association in Asymmetric Neural Networks, *Phys. Rev. Lett.*, (1986) 2861.
- 13) J. J. Hopfield and D. W. Tank: "Neural" Computation of Decisions in Optimization Problems, *Biol. Cybern.*, **52**, (1985) 141.
- 14) J. J. Hopfield: Neurons with Graded Response have Collective Computational Properties Like those of Two-State Neurons, *Proc. Nat. Acad. Sci. USA*, **81**, (1984) 3088.
- 15) D. G. Bounds: New Optimization Methods from Physics and Biology, *Nature*, **329**, (1987) 215.
- 16) G. A. Carpenter et al.: Computing with Neural Networks, *Science*, **235**, (1987) 1226.
- 17) 長島知正, 永井喜則: 自己組織化の課題, 電気学会電子・情報・システム部門誌, **11** (1987).
- 18) 長島知正, 永井喜則, 香川 浩: 筋肉の力発生と収縮の新しいモデル化, 第 2 回生体生理工学シンポジウム, BPES '87 (1987).