
Evolving Biological Equilibrium System by HyperNeat

Anonymous Author(s)

Affiliation

Address

email

Abstract

우리는 Gene Protein Reaction(GPR) network를 Generation 하여, 뉴런의 학습 알고리즘을 탐색하는 Biological Evolution of Augmenting Topologies (BEAT)를 제시합니다. 최근 대두된 Deep Equilibrium model(DEQ)에서 동기를 얻어, 우리는 먼저 평형상태가 존재한다고 수학적으로 증명되는 Dynamical System을 정의합니다. 에너지 함수가 물리, 화학 법칙을 따르기 때문에, Computational biology 와 SNN의 biomodel(hodgkin-huxley 모델 등)을 표현할 수 있으며, 이는 DEQ 의 Implicit Layer을 정의하는 것과 같으므로, 기존 ANN 과 상호 교환 가능한 이점이 있습니다. 또한, Loss 값을 줄이는 파라미터를 학습하는 기존의 방법과는 달리, 우리는 Dynamical System 의 fixed point 가 기존의 ANN 학습 파라미터 역할을 수행하는, Equilibrium-Point-Input-Linear-Combination(EIL) 학습방법을 제시합니다. 이를 통해, Dynamical System의 파라미터가 진화함에 따라, 학습 알고리즘이 진화한다는 주목할만한 이점이 있습니다. 우리는 추가적인 학습 규칙 없이 단지, Dynamical System을 HyperNeat를 통해 진화시켰으며, 실제로 input 의 Normalize를 수행하는 측면 억제 단백질을 삽입할시, 학습속도의 20% 감소를 보여주며, 진화할수록 더욱 빠르게 학습합니다. 코드는 github.com/arizona95/BEAT 에서 확인할 수 있습니다.

1 Introduction

생물학적 뉴런을 수학적으로 기술하기 위하여, 여러 학문적 시도들이 있습니다.(Spiking neural network, Computational biology, Network Biology 등) 이는 궁극적으로, 단백질과 유전자, 이온의 상호작용 과정과, 각 기능들을 밝혀내어, 이를 통해 인간의 지능을 모방하는 데에 목표가 있습니다. 실제로, Computational biology 분야에서는, 단백질과 이온들의 상호작용을 수치화하여 그래프 모델로 표현합니다.(modeldb) 이는 odeSolver를 통해, 시간에 따른 시뮬레이션이 가능하며, 잘 짜여진 모델들은, 실제 측정된 실험값과 동일하거나, 엇비슷한 수치를 가집니다. 하지만, 이는 너무 복잡하고, 방대하며, 실험적 오차 등에 의해 많은 부분이 베일에 싸여져 있습니다. 이런 이유로, SNN 에서는 아직 생물학적으로 알고리즘이 밝혀지지 않은 back-propagation 알고리즘을 사용하여 비선형 학습의 문제점을 해결하고 있습니다.

반면, 진화적 시선으로 보면, 뉴런이란, 물리적 환경에서, 개체의 생존 이라는 GOAL 에 적합한 GPR Network가 유전자 알고리즘에 의해 선택된 것입니다. 우리는, 이 결과물을 모방하려는 이전의 학문과는 달리, 이러한 일련의 진화 과정 자체를 모방하는 데에 주목하여, 이러한 문제를 해결합니다.

이에, 첫 번째로, 지금까지의 뉴런 모델을 표현할 수 있는 Dynamical System의 정의가 필요합니다. 이는, 물리적, 생물학적 현상들이 모두 표현되어야 합니다. 우리는, 분자적인 관점에서의 물리적인 시스템과 에너지를 DS 에 표현하고자 하였습니다. 이것은, 결국 생물에서의 모든 뉴런모델을 표현할 수 있게 만듭니다.

두 번째로, 정의된 Dynamical System 가 별도의 Training 과정 없이 학습 알고리즘을 내포할 수 있어야 합니다. 하지만, 이는 ANN 의 관점으로 보면, back-propagation 이나, Q-learning 과 같은 학습 알고리즘 없이, Infinite Implicit Layer을 통과하는 것 자체가 학습이 되는 단 하나의 Deep Implicit Layer 을 기대하는 것과 다름없습니다. 이것이 가능합니까?

우리는, 이 질문에 대하여, 최근 대두되고 있는 deep equilibrium model에서 동기를 얻어- 새로운 접근법인 Equilibrium-Point-Input-Linear-Combination(EIL) 학습모델을 제시합니다. 이 접근 방법의 핵심은 Equilibrium-Point 가 기존 ANN 의 학습 파라미터의 역할을 수행하게 하는 것입니다. 이는 실제로 생물이 Training을 하는 방식이며, Action을 결정하는 시간과, Feedback을 받아들이는 시간이 분리되어있는 등, 제시된 학습모델 알고리즘과 유사성을 나타냅니다. EIL 학습모델은 ANN Training 에 대한 새로운 관점을 제공한다고 믿습니다.

세 번째로, 이런 Dynamic System을 진화시킬수 있어야 합니다. 우리는 신경망 진화 방법중 하나인 NEAT 알고리즘을 채택하였습니다. 그중, 대규모 네트워크의 생성과, 네트워크의 패턴반복 등이 필요한 Dynamic System에 합당한 HyperNeat 알고리즘을 채택하였습니다.

2 background

작성중

2.1 DEQ model

DEQ 모델은, weight-tied 된 Deep Layer 에서, Layer 의 층을 무한대로 보낸 형태임.

2.2 Differentiating optimization problems

논문에서 제시한 Dynamical System 은, KKT condition 의 확장버전이라고 볼수 있음. 확장요소는 다음과 같음. 1. 쿼드라틱 에너지에, $x \ln x$ 와 운동량 텀을 추가했으며, 2. subspace 란 질량보존의 법칙을 만조하는 space 임. 하지만 여기에 추가적으로 external flow 를 들임으로서, 생물학적인 항상성에 대한 고려를 함. 3. flow 는 gradient 나, projection gradient 흐름으로 이를 최적화하지 않음. 이 논문에서의 flow 는 굉장히 제한적이며, 흐를 수 있는 basis 벡터들을 정해놓고, 이들의 선형결합흐름 하지만 전체적인 흐름의 합은 에너지를 감소시키는 방향으로 (gradient 와 내적이 양수가 되도록) 흐름.

2.3 HH model

HH 모델은 3개의 생물학적 채널이, 이온에 따른 전류,전압에 따라 상호작용하며 Spike 라는 현상을 만들어냄. 논문에서 제시하는 Dynamical System 은 여기에 표현된 모든 생물학적 현상을 표현 가능함. 부록 참조

2.4 HyperNeat

HyperNeat 는 이리이러함

3 EIL Training

이 논문에서는, 학습과정의 새로운 접근법인 Equilibrium-Point-Input-Linear-Combination(EIL)를 제시합니다. DEQ 에서의 학습 과정은 Algorithm 1 과 같이, Deep Layer 의 Weight 를 고정하여, 하나의 Implicit Layer 를 무한번 반복하는 형태로 output 을 계산합니다. 이는 곧 평형점 z^* 가 입력값 x 에 대한 output 이 대며, y 와의 Loss 를 계산하게 됩니다. 그 후, Implicit Layer 의 파라미터를 이 Loss 를 통해 업데이트 합니다. 반면, 논문에서 제시하는 EIL Training 에서는, Algorithm 2 와 같이, 학습이 진행되는 동안, Implicit Layer 의 파라미터는 불변합니다. 먼저, 주어진 초기값 (파라미터에 포함되어 있습니다.) 으로 제일 처음 평형점 z^* 를 찾습니다. 이것은 최초의 파라미터 (아직 학습하기 전) 가 됩니다. 이 상태에서 input x 를 시스템에 입력합니다. DEQ 와는 다르게, 전체 input 을 x 로 치환하지 않고, x 와 z^* 의 선형결합을 시킨 벡

터가, Layer 의 다음 input 이 됩니다. 그후, 새로운 평형점 $z^{*'}$ 에 도달할 때 까지, z 와 output matrix O_z 의 내적값을 우리는 output 으로 취급합니다. 이러한 output 은, environment 환경에서의 Action 이 되어 그에 상응하는 fitness score 를 얻거나, 기대한 output y 와의 거리를 이용해 loss 값을 구할 수 있습니다. 이 과정을 거쳤다면, 이러한 피드백 값을 다시 새로운 평형점과 선형결합을 시켜, Layer 의 다음 input 이 되도록 합니다. 이는 EIL Training 부분에서 학습을 하는 과정이며, 새로운 input 을 맞이한 시스템은 또다른 평형점을 생성합니다.

Algorithm 1 Compare Learning Algorithm

<pre> 1: procedure DEQ $f_\theta(x)$ 2: while epoch do 3: $z^{post} \leftarrow x$ 4: while $z^{post} - z^{pre} < \varepsilon$ do 5: $z^{pre} \leftarrow z^{post}$ 6: $z^{post} = f_\theta(z^{pre}, x)$ 7: end while 8: $z^* \leftarrow z^{post}$ 9: compute $\mathcal{L}(z^*, y)$ 10: $\theta \leftarrow \theta - \alpha \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \theta}$ 11: end while 12: end procedure </pre>	<pre> 13: procedure EIL $f_\theta(x)$ 14: $z^{post} \leftarrow \theta[x_0]$ 15: while $z^{post} - z^{pre} < \varepsilon$ do 16: $z^{pre} \leftarrow z^{post}$ 17: $z^{post} = f_\theta(z^{pre}, x)$ 18: end while 19: $z^* \leftarrow z^{post}$ 20: while epoch do 21: $z^{post} \leftarrow z^* + x \cdot I_z$ 22: $\hat{y} = emptylist$ 23: while $z^{post} - z^{pre} < \varepsilon$ do 24: $\hat{y}.append(z^{post} \cdot O_z)$ 25: $z^{pre} \leftarrow z^{post}$ 26: $z^{post} = f_\theta(z^{pre}, x)$ 27: end while 28: $z^* \leftarrow z^{post}$ 29: $\ell \leftarrow \text{compute } \mathcal{L}(Active(\hat{y}), y)$ 30: $z^{post} \leftarrow z^* + \ell \cdot L_z$ 31: while $z^{post} - z^{pre} < \varepsilon$ do 32: $z^{pre} \leftarrow z^{post}$ 33: $z^{post} = f_\theta(z^{pre}, x)$ 34: end while 35: end while 36: end procedure </pre>
--	--

4 Dynamical System

분자들의 물리적인 움직임을 그대로 구현한 Dynamic System을 제시합니다. 물리화학적 법칙(옴의 2번째 법칙, 확산법칙, 아레니우스 법칙, 김스 자유에너지, 네른스트 방정식) 등을 제시한 System 으로 설명할 수 있습니다. 또한, 생물학적 기능모델(ion Channel, Voltage-Gate channel, HH model, membrane Potential, ATP-ADP Homeostasis) 들이 이러한 DS 로 구현 가능합니다. 분자들의 상태 (구성요소, 구성상태, 운동량, 운동방향, 위치) 가 같은것을 grouping 하여 하나의 node 로 생각합니다.

4.1 Energy

Dynamic System 의 에너지함수는, 실제 물리량에 기반하여 정의합니다. DS 에는 총 4가지 에너지 – 엔트로피, 엔탈피, 전기적 에너지, 운동에너지 의 합으로 표현되며, 물리,화학적 관점에서 보면, 이는 온도가 일정한 system 에서의 물리적 에너지가 표현 가능합니다.

$$H(x, p) = S_{entropy} + H_{enthalpy} + U_{electric} + E_{kinetic} \quad (1)$$

Entropy 엔트로피란, 정보이론에서 각 상태가 존재할 확률 으로 정의합니다. 분자 시스템으로 바꾸어 적용해 보면, 이는 분자가 그 상태로 존재할 확률을 의미하며, 이는 아레니우

스 법칙에 의해, 자신의 에너지상태에 반비례 합니다.

$$S_{entropy}(x, p) = x^T \ln\left(\frac{x}{x^*}\right) \quad x^* \propto e^{-E_x} \quad (2)$$

Enthalpy 엔탈피란, 분자의 내제된 에너지를 의미합니다. 상태가 같은 분자들을 하나의 node 로 표현했기 때문에, 이는 상수가 됩니다.

$$H_{enthalpy}(x, p) = e^T x \quad (3)$$

Electric Potential Energy 전기적 포텐셜 에너지는, 전류를 만드는 움직임과 관련 있습니다. 옴의 법칙은, 옴의 제 2 법칙에서 왔으며, 이는 에너지 함수의 gradient 와 수직으로 흐르는 hamiltonian movement 를 보이는 전자의 움직임과, 전자가 움직이면서 양성자와 충돌하는 종단속도의 움직임이 각각 전류와 저항이 됩니다.

$$U_{electric}(x, p) = \frac{1}{2} x^T V x \quad (4)$$

Kinetic Energy 분자들의 운동량 에너지 입니다. 전기적 포텐셜 에너지는, hamiltonian movement 로 인해 운동량으로 전환됩니다.

$$E_{kinetic}(x, p) = \frac{1}{2m^T} [p \circ p \circ x] \quad (5)$$

Total Energy 전체 에너지의 공식은 다음과 같습니다. 엔트로피와 에너지를 묶어서 하나의 상수로 표현합니다.

$$H(x, p) = x^T \ln\left(\frac{x}{x^*}\right) + e^T x + \frac{1}{2} x^T V x + \frac{1}{2m^T} [p \circ p \circ x] \quad (6)$$

$$= x^T \ln x + a^T x + \frac{1}{2} x^T V x + \frac{1}{2m^T} [p \circ p \circ x] \quad (7)$$

4.2 Condition

이러한 Dynamic System 은, fixed point 로 항상 수렴해야 합니다. 이를 위해서는 첫째로, Dynamic System 이 항상 에너지를 감소시키는 쪽으로 흐른다는 것, 두번째로, Dynamic System 이 가질수 있는 에너지는 유계 조건을 만족해야 할것 입니다. 첫번째 조건은, 항상, 그 점에서의 gradient 와 flow 의 내적값이 양수가 되어야 한다는 것과 동치입니다. 두번째 조건은, 다음과 같은 Subspace 안에서 움직인다는것을 보임으로서 증명할 수 있습니다.

$$\frac{d}{dt} M^T x = 0, \quad M > 0, \quad x > 0 \quad (8)$$

위 조건이 만족하면, 질량 보존의 법칙에 의해 어떠한 분자가 무수히 많이 생기는것은 불가능하듯이, 초기 상태에서부터 x 가 가질 수 있는 양의 상한선이 전해집니다. 따라서 정의된 에너지는 유계 조건을 만족합니다.

이를 위해서, 4가지의 흐름 유형을 정의하고, 각 flow 가 이러한 condition 을 만족함을 증명합니다.

4.3 Flow

Gradient 점 x, p 에서의 gradient 를 계산하면 다음과 같습니다.

$$\frac{\partial H}{\partial x} = (\ln x + 1)^T + a^T + x^T V + \left(\frac{1}{2m} \circ p \circ p\right)^T \quad \frac{\partial H}{\partial p} = \left(\frac{1}{m} \circ p \circ x\right)^T \quad (9)$$

Chemical Flow 다음과 같은 flow 로, 화학반응현상과 확산현상 을 설명할 수 있습니다.

$$\frac{dx}{dt} = -M^\perp \left[k^T \circ \left(e^{\frac{\partial H}{\partial x} r(M^\perp)} - e^{\frac{\partial H}{\partial x} r(-M^\perp)} \right) \right]^T = -M^\perp \left[k^T \circ \left(e^{\frac{\partial H}{\partial x} M^\perp} - 1 \right) \circ e^{\frac{\partial H}{\partial x} r(-M^\perp)} \right]^T \quad (10)$$

Hamiltonian Flow 다음과 같은 flow 로, 전기적 현상을 설명할 수 있습니다.

$$\frac{dx}{dt} = M^\perp \left[v^T \circ \left(\frac{\partial H}{\partial p} M^\perp \right) \circ (e^{\ln x^T |M^\perp|}) \right]^T \quad \frac{dp}{dt} = M^\perp \left[v^T \circ \left(\frac{\partial H}{\partial x} M^\perp \right) \circ (e^{\ln x^T |M^\perp|}) \right]^T \quad (11)$$

Collision Flow 이것은 분자들의 충돌에 의해 운동량의 감소를 의미합니다. Hamiltonian Flow 와는 달리, 이러한 Flow 는 System 의 에너지를 감소시킵니다. 실제 물리적 현상에서는, 저항에서 열에너지가 발산되듯이, 분자들의 병진 또는 회전운동, 즉 열에너지로 바뀌게 됩니다. 하지만 이러한 온도는 빠르게 주변으로 전파됩니다. 따라서 이 항을 무시함으로서 계산량을 감소시킬 수 있습니다.

$$\frac{dp}{dt} = -c \circ \left(\frac{\partial H}{\partial p} \right)^T \quad (12)$$

External Homeostasis Flow 이것은 3가지 flow 와는 다르게, condition 을 위반하는 형태의 flow 입니다. 하지만 이는 기존의 목표인 에너지의 발산을 초래하는 flow 가 아닙니다. 증명은 부록을 참조하시기 바랍니다.

$$\frac{dx}{dt} = h \circ (x_h - x) \quad (13)$$

Total Flow 전체 흐름 공식은 다음과 같습니다. Dynamical System 이란, 이에 필요한 13개의 상수에 의해 정의될 수 있습니다.

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= M^\perp \left[-k \circ (e^{\frac{\partial H}{\partial x} r(M^\perp)} - e^{\frac{\partial H}{\partial x} r(-M^\perp)})^T + v \circ \left(\frac{\partial H}{\partial p} M^\perp \right)^T \circ (e^{\ln x^T |M^\perp|})^T \right] + h \circ (x_h - x) \\ \frac{dp}{dt} &= -M^\perp \left[\left(\frac{\partial H}{\partial x} M^\perp \right)^T \circ v \right] - c \circ \left(\frac{\partial H}{\partial p} \right)^T \end{aligned} \quad (14)$$

4.4 Discrete biological Dynamical System

우리는 위에 정의된 system 을 , odesolver 로 풀어서 평형점을 찾을것 입니다. 그러나, 잦은 log 와 exp 함수 때문에 계산 난이도가 높습니다. 따라서 우리는 정의한 Dynamical System 의 축소모형인 Bio Model 을 제시합니다. 각 Node 에 유전자 정보와 공간 정보를 부여합니다. 이는 추후 시스템의 진화시 HyperNeat 에서의 substrate 가 됩니다. 대부분의 log 와 exp 계산은, 노드들의 space 를 grouping 함으로 인해 곱함수로 바꿀수 있습니다.

Gene of Entity Every $x_i \in X^{set}$, has their own Gene $g_i \in G^{set} = M_g(R)$. 이를 mapping 하는 함수는 다음과 같이 정의됩니다. $f_g : X^{set} = \{x_1, x_2, \dots, x_n\} \mapsto G^{set} = \{g_1, g_2, \dots, g_g\}$ 또한, 모든 유전자 g_i 에 대해, corresponding to the component by Component function f_c 를 정의합니다. $f_c : G^{set} = \{g_1, g_2, \dots, g_g\} \mapsto C^{set} = \{c_1, c_2, \dots, c_c\}$ 임의의 유전자 g_i, g_j, g_k 에 대해, Whether a chemical reaction is satisfied can be determined as a Reaction function f_r $g_i + g_j \Rightarrow g_k \Leftrightarrow f_r(g_i, g_j) = g_k$

Space of Entity Every $x_i \in X^{set}$ has their own Space s_i that $x_i \in X^{set}$, 함수 f_s 에 대해, 다음과 같이 하나의 space 로 대응됩니다. $f_s : X^{set} = \{x_1, x_2, \dots, x_n\} \mapsto S^{set} = \{s_1, s_2, \dots, s_s\}$

A Matrix S can be defined as follows. $S_{ij} := \begin{cases} 0 & \text{if } f_s(x_i) \neq s_j \\ 1 & \text{if } f_s(x_i) = s_j \end{cases}$

There is a distance function $f_d > 0$, 이것은 space 끼리의 distance 를 결정하는 matrix 입니다. 계산상의 이득을 위해서, 우리는 space neighbor 이라는 개념을 도입합니다. 즉, 일정 거리 이상 떨어진 space 들의 거리를 무한대로 만들어, 전기적 포텐셜 에너지에서 제외시킵니다.

Electric Potential Energy 새롭게 정의된 gene-space 정보에 의해, 전기적 포텐셜 에너지 Operator Matrix V 는, 계산될 수 있습니다.

$$U_{electric}(x, p) = \frac{1}{2}x^T V x \quad V = q\left(\frac{1}{D+I} - I\right)q^T \quad q = \text{diag}((Mq_c)^T)S \quad (15)$$

Discrete Flow 구성요소의 space 가 다름/같음에 따라, 허용되는 flow 를 정해놓는다. 같은 space 에서는 chemical flow 만이 용납되며, 두개의 reactant 가 하나의 product 를 만드는 행위만 허용된다. Na^+ voltage-gated 의 활성요소는 3개의 활성-활성인자가 결합해야 활성요소의 기능으로 작동할 수 있다. 이러한 다분자 product 등은 n번 논문과 같이 2분자들의 reaction 모형으로 세세히 나눌 수 있으므로, 모든 화학반응이 표현 가능하다. 다른 space 에서는, diffusion flow 와 hamiltonian flow 가 가능하다. external space 에서는 external flow 가 흐를 수 있으며, 노드마다 이런 flow 를 가질수도, 가지지 않을 수도 있다.

Discrete Calculate In Same space Flow, Electric Potential Energy and Kinetic Energy are not change.

$$\therefore \frac{dU_{electric}}{dt} = x^T V = x^T q\left(\frac{1}{D+I} - I\right)q^T, \quad \frac{dx^T \text{diag}((Mq_c)^T)S}{dt} = 0_{1 \times s} \quad (16)$$

또한, space neighborhood system 에 의해, V 매트릭스가 sparse matrix 가 된다. 이런 이유로, 계산량을 현저히 줄일 수 있다. 부록을 참조하세요

5 Evolving

진화적 알고리즘은, 이 논문에서 제시하는 주요 이슈가 아니다. 추후에 더 좋은 알고리즘이 개발되면, 진화속도가 더 빨라질 수 있다. n 번 논문에서 소개한 HyperNeat 알고리즘에 의해 Dynamical System 을 진화시키게 된다. 이번 논문에서는, HyperNeat 가 발견시킨 neural network 로부터 어떻게 Dynamical System 을

References

References follow the acknowledgments. Use unnumbered first-level heading for the references. Any choice of citation style is acceptable as long as you are consistent. It is permissible to reduce the font size to small (9 point) when listing the references. **Note that the Reference section does not count towards the eight pages of content that are allowed.**

[1] Alexander, J.A. & Mozer, M.C. (1995) Template-based algorithms for connectionist rule extraction. In G. Tesauro, D.S. Touretzky and T.K. Leen (eds.), *Advances in Neural Information Processing Systems 7*, pp. 609–616. Cambridge, MA: MIT Press.

[2] Bower, J.M. & Beeman, D. (1995) *The Book of GENESIS: Exploring Realistic Neural Models with the GEneral NEural Simulation System*. New York: TELOS/Springer-Verlag.

[3] Hasselmo, M.E., Schnell, E. & Barkai, E. (1995) Dynamics of learning and recall at excitatory recurrent synapses and cholinergic modulation in rat hippocampal region CA3. *Journal of Neuroscience* **15**(7):5249-5262.

A Proof : Flow satisfies the condition

하나의 코어 아이디어 중 하나는, 이러한 Flow 들이 Condition 을 만족하는가 이다. 이는, 첫번째로, system 이 에너지가 감소하는 방향으로 흐르는 Decrease Energy 와, 두번째로, x 가 $M^T x = C$ 를 만족하는 subspace 에서 움직인다는, Conservation of Mass 에 관한것, 마지막으로 이러한 flow 는 x 를 음수로 만들지 않는다는 Positive Of Mass 에 관한 증명이다. 기호 M_+ 는 어떠한 양의 matrix 를 의미하며, 정확한 값을 의미하지 않는다. ex) $2 \cdot M_+ = M_+$

A.1 Chemical Flow

Flow

$$\frac{dx}{dt} = -M^\perp \left[k^T \circ \left(e^{\frac{\partial H}{\partial x} r(M^\perp)} - e^{\frac{\partial H}{\partial x} r(-M^\perp)} \right) \right]^T \quad (17)$$

$$= -M^\perp \left[k^T \circ (e^{\frac{\partial H}{\partial x} M^\perp} - 1) \circ e^{\frac{\partial H}{\partial x} r(-M^\perp)} \right]^T \quad (18)$$

Decrease Energy

$$\begin{aligned} \frac{dH}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial H}{\partial p} \frac{dp}{dt} \\ &= -\frac{\partial H}{\partial x} M^\perp \left[k^T \circ \frac{\partial H}{\partial x} M^\perp \circ \left(\frac{e^{\frac{\partial H}{\partial x} M^\perp} - 1}{\frac{\partial H}{\partial x} M^\perp} \right) \circ e^{\frac{\partial H}{\partial x} r(-M^\perp)} \right]^T \\ &= -\left(\frac{\partial H}{\partial x} M^\perp \right) \text{diag} \left[k \circ \left(\frac{e^{\frac{\partial H}{\partial x} M^\perp} - 1}{\frac{\partial H}{\partial x} M^\perp} \right)^T \circ (e^{\frac{\partial H}{\partial x} r(-M^\perp)})^T \right] \left(\frac{\partial H}{\partial x} M^\perp \right)^T < 0 \end{aligned} \quad (19)$$

Conservation Of Mass

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(M^T x) &= M^T \frac{dx}{dt} = -M^T M^\perp \left[k^T \circ (e^{\frac{\partial H}{\partial x} M^\perp} - 1) \circ (e^{\frac{\partial H}{\partial x} r(-M^\perp)}) \right]^T \\ &= 0_{c \times e} \left[k^T \circ (e^{\frac{\partial H}{\partial x} M^\perp} - 1) \circ (e^{\frac{\partial H}{\partial x} r(-M^\perp)}) \right]^T = 0 \end{aligned} \quad (20)$$

Positive Of Mass

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= -M^\perp \left[k^T \circ (e^{\frac{\partial H}{\partial x} M^\perp} - 1) \circ (e^{\frac{\partial H}{\partial x} r(-M^\perp)}) \right]^T \\ &= -M_+ M^\perp (e^{\frac{\partial H}{\partial x} M^\perp} - 1)^T = -M_+ M^\perp (e^{\frac{\partial H}{\partial x} [R(M^\perp) - R(-M^\perp)]} - 1)^T \\ &= M_+ (R(-M^\perp) - R(M^\perp)) (e^{\frac{\partial H}{\partial x} R(M^\perp)} - e^{\frac{\partial H}{\partial x} R(-M^\perp)})^T \\ &\geq -M_+ R(M^\perp) \left[e^{(\frac{\partial H}{\partial x} R(M^\perp))^T} \circ k \right] - M_+ R(-M^\perp) \left[e^{(\frac{\partial H}{\partial x} R(-M^\perp))^T} \circ k \right] \\ &\quad - R(M^\perp) \left[e^{(\frac{\partial H}{\partial x} R(M^\perp))^T} \circ k \right] = -R(M^\perp) \left[e^{(\ln x^T + h(x,p)) R(M^\perp)} \circ k \right] \\ &= -R(M^\perp) \text{diag}(e^{(\ln x^T R(M^\perp))^T}) \left[e^{(h(x,p) R(M^\perp))^T} \circ k \right] \\ &\quad \left[-R(M^\perp) \text{diag}(e^{(\ln x^T R(M^\perp))^T}) \right]_i = -R(M^\perp)_i \prod x_i^{R(M^\perp)_i^T} \\ &\quad - \sum R(M^\perp)_{ij} \prod x_i^{R(M^\perp)_{ij}} = \sum \begin{cases} 0 & \text{if } R(M^\perp)_{ij} = 0 \\ f(x,p) \circ x^{R(M^\perp)_{ij}} & \text{if } R(M^\perp)_{ij} \neq 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (21)$$

A.2 Hamiltonian Flow

Flow

$$\frac{dx}{dt} = M^\perp \left[v^T \circ \left(\frac{\partial H}{\partial p} M^\perp \right) \circ (e^{\ln x^T |M^\perp|}) \right]^T \quad (22)$$

$$\frac{dp}{dt} = M^\perp \left[v^T \circ \left(\frac{\partial H}{\partial x} M^\perp \right) \circ (e^{\ln x^T |M^\perp|}) \right]^T \quad (23)$$

Preservation Energy

$$\begin{aligned}
\frac{dH}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial H}{\partial p} \frac{dp}{dt} \\
&= \frac{\partial H}{\partial x} M^\perp \left[v^T \circ \left(\frac{\partial H}{\partial p} M^\perp \right) \circ (e^{l_{nx^T} | M^\perp |}) \right]^T - \frac{\partial H}{\partial p} M^\perp \left[v^T \circ \left(\frac{\partial H}{\partial p} M^\perp \right) \circ (e^{l_{nx^T} | M^\perp |}) \right]^T \\
&= \left(\frac{\partial H}{\partial x} M^\perp \left[\left(\frac{\partial H}{\partial p} M^\perp \right)^T \right] - \frac{\partial H}{\partial p} M^\perp \left[\left(\frac{\partial H}{\partial p} M^\perp \right)^T \right] \right) \circ v \circ (e^{l_{nx^T} | M^\perp |})^T = 0
\end{aligned} \tag{24}$$

$$\therefore let f = \left[\frac{\partial H}{\partial x} M^\perp \right] \left(\frac{\partial H}{\partial p} M^\perp \right)^T$$

$$f = f^T = \left(\frac{\partial H}{\partial p} M^\perp \right) \left[\left(\frac{\partial H}{\partial x} M^\perp \right)^T \right] = \left[\frac{\partial H}{\partial p} M^\perp \right] \left(\frac{\partial H}{\partial x} M^\perp \right)^T$$

Conservation Of Mass

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}(M^T x) &= M^T \frac{dx}{dt} = M^T M^\perp \left[\left(\frac{\partial H}{\partial p} M^\perp \right)^T \circ v \circ (e^{l_{nx^T} | M^\perp |})^T \right] \\
&= 0_{c \times e} \left[\left(\frac{\partial H}{\partial p} M^\perp \right)^T \circ v \circ (e^{l_{nx^T} | M^\perp |})^T \right] = 0
\end{aligned} \tag{25}$$

Positive Of Mass

$$\begin{aligned}
\frac{dx}{dt} &= M^\perp \left[\left(\frac{\partial H}{\partial p} M^\perp \right)^T \circ v \circ (e^{l_{nx^T} | M^\perp |})^T \right] \\
&= M^\perp (M^\perp)^T \left[\frac{1}{m} \circ p \circ v \circ x \circ (e^{l_{nx^T} | M^\perp |})^T \right] = M_+ x
\end{aligned} \tag{26}$$

A.3 Collision Flow

Flow

$$\frac{dp}{dt} = -c \circ \left(\frac{\partial H}{\partial p} \right)^T \tag{27}$$

Discreate Energy

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial H}{\partial p} \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial p} \left[\left(\frac{\partial H}{\partial p} \right)^T \circ c \right] = -\left[\frac{\partial H}{\partial p} \circ \frac{\partial H}{\partial p} \right] c < 0 \tag{28}$$

A.4 External Homeostasis Flow

External Flow 는, 외부의 무한대의 질량을 가지고 있는 개체로부터 Dynamic flow 가 있다고 가정합니다. 이때, 전체 에너지는 실제로 양의 무한대가 됩니다. 하지만, 에너지의 기준점을 외부의 무한대의 질량에 맞추면, 새로 정의된 에너지 H' 값의 gradient 로 흐름을 알 수 있습니다. 질량보존은 이러한 flow 에서는 성립하지 않습니다.

Flow

$$\frac{dx}{dt} = h \circ (x_h - x) \tag{29}$$

Discreate Energy

$$let H' = H - x^T l_{nx_h}, \frac{\partial H'}{\partial x} = \frac{\partial H}{\partial x} - l_{nx_h^T} \tag{30}$$

$$\frac{dx'}{dt} = \frac{dx}{dt} + h \circ (e^{l_{nx_h} - l_{nx}} - 1) \circ e^{l_{nx}} = \frac{dx}{dt} + h \circ \left(\frac{x_h}{x} - 1 \right) x = \frac{dx}{dt} + h \circ (x_h - x)$$

Positive Of Mass

$$\frac{dx}{dt} = h \circ (x_h - x) \geq h \circ x = M_+ x \tag{31}$$

B Discrete Calculate of Bio Model

Discrete Chemical Flow