迈向范畴代数人工化学的初步探索

Joe Pratt-Johns*† Toby St. Clere Smithe‡ Chris Guiver* Kevin Hughes*Peter Andras*

我们构造了一个函子，为相互作用组分的代数模型赋予动力学。该构造推广了 Fontana 和 Buss 在人工生命领域提出的一种计算模型，即 AlChemy；在这一模型中，分子及其化学相互作用由 λ演算项及其应用和后续归约来模拟。我们探讨了将范畴论作为组织工具应用于代数人工化学的未来方向，重点是形式化这类模型的代数方面与动力学方面之间的联系。

1 引言

作为人工生命的一个分支，人工化学旨在构建分子及其交互的模型，并在计算机模拟中运行，最终目标是观察被认为具有生命特征的涌现现象。自 20 世纪 90 年代以来，以代数构件为基础制定人工化学的交互规则，已取得成功 [2, 7, 9, 15]。

我们注意到，所有这类代数人工化学 都涉及从代数结构构建动力系统。我们着手描述这类构造中的一个小类，并假设范畴论是完成这一工作的恰当语言。事实上，我们受到应用范畴论文献中从底层组织结构构造动力系统的启发，例如 Baez等人在反应网络背景下提出的“灰盒化”函子 [1]。

我们所考虑的代数构件类别，是单排序 Lawvere 理论 [10] 的模型（或代数）。给定一个这样的理论 $\mathscr{T}$以及一个态射 $P \in \mathscr{T}$，我们构造一个函子

$$\mathsf{Flask}_P^{\mathscr{T}} : \mathscr{T}\mathsf{Alg} \to \mathsf{Mark},$$

它将一个马尔可夫过程赋予一个 $\mathscr{T}$-代数。这一构造推广了我们的主要动机示例，即 Fontana 和 Buss [7, 8] 提出的最小化学零。

Flask 构造是一个概念验证，旨在说明范畴论可作为人工生命研究中的一种实用组织工具，既能实现模型之间的形式化比较，又能为实验提供通用的组合式代码库。最后一节中，我们将提及三个可能的未来方向。

记号： 我们用 $\mathbb{N}$ 表示自然数，其中 $0 \in \mathbb{N}$。集合 S 上的多重集是一个函数 $S \to \mathbb{N}$。S 上的有限支撑多重集（即仅在有限多个元素上非零）的集合记作 $\mathbb{N}_{\mathrm{fs}}^S$。

*计算、工程与建筑环境学院，爱丁堡纳皮尔大学，爱丁堡，英国
†通讯作者
‡Kodamai Ltd

A. Hadzihasanovic 和 J.-S. P. Lemay：应用范畴论 2025（ACT 2025），EPTCS 442，2026，第 60–74 页，doi:10.4204/EPTCS.442.5

© J.Pratt-Johns、T. Smithe、C. Guiver、K. Hughes、P. Andras 本作品采用知识共享署名许可协议授权。

2 预备知识

本节回顾 Lawvere 理论和马尔可夫过程的概念。在此过程中，我们定义范畴 $\mathscr{T}$Alg 和 Mark——Flask 函子的定义域和值域。

2.1 Lawvere 理论

Lawvere 理论是一类范畴，它们编码了代数理论的句法方面，以及该理论中适用于句法形式的公理。例如，群的 Lawvere 理论编码了通过群乘法、取逆元和使用群单位元进行并行和/或顺序复合所能执行的所有运算，也编码了每个群中都成立的此类运算之间的所有等式。本文只关注单排序Lawvere 理论，以下不再特别说明这一限定。关于详细论述，请参阅 [3]。

定义 2.1。一个*Lawvere* 理论是一个具有有限积的范畴，并带有一个称为泛对象的特定对象X，使得每个其他对象都同构于X^n，其中$n \in \mathbb{N}$。

Lawvere 理论中的每个态射 $X_n \to X^m$都对应某种可对n 个输入执行、并产生m 个输出的运算。这些态射包括由笛卡尔结构提供、为所有理论所共有的结构态射——例如“交换”态射 $\langle \pi_2, \pi_1 \rangle : X^2 \to X^2$。

Lawvere 理论通常通过给出一组有限的非结构态射（即“基”），以及这些态射所满足的一组有限公理来定义；公理以交换图的形式给出。在给定这样的基后，理论中的其余态射都是由笛卡尔结构生成的，并以这些公理为关系。

定义 2.2. Lawvere 理论的一个代数 $\mathscr{T}$ 是一个保积函子 $\mathscr{T} \to$Set。范畴 $\mathscr{T}$Alg 的对象是 $\mathscr{T}$-代数，态射是自然变换。

一个 $\mathscr{T}$-代数（在同构意义下）由一个集合 $|A| = A(X)$ 确定，称为该代数的载体；此外，对于 $\mathscr{T}$ 中的每个态射 $X^n \to X$，还要指定一个 n 元运算 $|A|^n \to |A|$。

Lawvere 理论及其代数分别提供了本文所用的语法和语义概念。

2.2 马尔可夫过程及其态射

就我们的目的而言，马尔可夫过程由一个集合 S（其元素为状态）以及一个映射 p 构成，该映射为每个状态 s 指定一个定义在 S 上的有限支撑概率分布 $p(s)$。我们设想时间以离散步流逝；如果在时间 t 处于状态 s，那么分布 $p(s)$描述了对于每个 $s' \in S$，在时间 $t+1$发现自己处于状态 s' 的概率。

换一种说法，马尔可夫过程是 Set 上（有限）分布单子的一个余代数。范畴 Mark 的对象是这类余代数，态射则是余代数同态。回顾分布单子之后，我们将给出 Mark 的显式定义。

定义 2.3。 Set 上的分布单子 记作 D，首先是一个函子 Set $\to$Set，定义如下。

- 对于一个集合 S，定义 $D(S)$ 为函数 $d : S \to [0,1]$ 的集合，使得– $d(s) > 0$ 仅对有限多个 $s \in S$ 成立，并且– $\sum_{s \in S} d(s) = 1$。我们将此类函数称为（有限）分布，并常将其写成形式和 $d = \sum_{s \in S} d(s)s$。

- F或对于集合之间的映射 $f\colon S \to T$、分布 $d \in D(s)$ 以及元素 $t \in T$，定义

$$D(f)(d)(t) = \sum_{s \in f^{-1}(t)} d(s).$$

单子结构由以下自然变换给出。

- 单位 $\eta\colon \mathrm{Id} \to D$，其组件为 $\eta_S\colon S \to D(S)$，满足 $\eta_S(s)$ 将 s 映射为 1，并将任意 $s' \neq s$ 映射为 0。

- 乘法 $\mu\colon D^2 \to D$，其组件 $\mu_S\colon D(D(S)) \to D(S)$ 定义如下

$$\mu_S(d)(s) = \sum_{e \in D(S)} e(s) \cdot d(e).$$

分布的形式和记号有诸多优点，是一种“良好”的记法。例如，将和式中的同类项合并后，我们可以得到

$$D(f)(d) = \sum_{t \in T} \left(\sum_{s \in f^{-1}(t)} d(s) \right) t = \sum_{s \in S} d(s) f(s).$$

本文其余部分，尤其是定理 5.4 的证明中，我们将使用分布的求和记号。

定义 2.4。马尔可夫过程范畴 Mark 以其对象命名。也就是说，Mark 的一个对象是一个集合 S 以及一个映射 $S \to D(S)$。从 $p\colon S \to D(S)$ 到 $q\colon T \to D(T)$ 的态射是集合映射 $f\colon S \to T$，满足 $q \circ f = D(f) \circ p$。

3 代数人工化学

Dittrich 等人 [5] 指出，大多数人工化学（AC）都可以分解为三个组成部分：一个分子类型集合、一组反应规则以及一种动力学。

给定一个分子类型集合M，反应规则是一种形式图形

$$a_1 + \cdots + a_n \to b_1 + \cdots + b_k$$

其中每个 a_i、 $b_j \in M$。一个由分子类型集合和反应规则集合构成的二元组（M、 R）在文献中也被称为化学反应网络。

人工化学的动力学包含建模者在基础化学反应网络之上，就如何实现模型所作的多种选择。这可能包括分子所处的空间、如何描述其状态，以及系统如何随时间演化。重要的是，时间演化始终“基于”反应规则，也就是说，可以将反应规则非正式地视为最终实现的一个参数。

反应规则有两种定义方式：显式定义或隐式定义。显式定义就是一份有限规则列表：建模者事先知道所有交互。在这种情况下，分子类型集合通常只是一组没有额外结构的符号。显式人工化学已经与范畴论有所结合，例如，可以通过解释化学反应网络的开放佩特里网来实现 [1]。

当分子类型具有额外结构时，可以采用隐式定义，从而用一个公式给出一组反应规则。在这种情况下，并非所有可能的交互都事先已知。这类人工化学与人工生命尤为相关，因为它们具有开放性；通过一个公式便可定义无限多条反应规则。例如，考虑某些长链有机聚合物的偶联；我们无法列出这类反应所有可能情况的有限规则列表，但可以根据试剂推断任何给定偶联的结果。

一个代数的人工化学（AAC）是一种隐式人工化学，其分子和反应规则所依托的类别来自某种代数结构。例如，一种简单的 AAC 以有限字符串为分子类别，并由下列公式给出一组非有限的反应规则

$$l_1 + l_2 \to \mathsf{concat}(l_1, l_2),$$

适用于每一对试剂分子（l_1,l_2）。这是一个 AAC，因为有限字符串在连接运算下构成一个幺半群，而反应规则是根据幺半群运算构造的。迄今为止，这还不是一个精确的定义；事实上，本文的目的之一就是用具体的方式定义代数人工化学，或者至少定义其中一个较小的类别。

我们注意到，在这种情况下，分子集合由幺半群 Lawvere 理论的一个代数给出，而反应规则的公式则由该代数作用于乘法态射所得的像编码。剩下的就是赋予这种化学以动力学。我们的构造 Flask，是一种为 AAC 赋予动力学的特定选择，其中反应规则现在是形式上的参数。在下一节中，我们将通过一个更有意思的 AAC 重复这一观察。

4 AlChemy

Walter Fontana 和 Leo Buss [8] 是早期倡导者，主张使用代数结构来模拟分子的交互，更广义地说，模拟复杂涌现系统中组件之间的交互。他们的研究计划涉及研究由各种计算模型乃至证明论产生的人工化学，后来被称为“AlChemy”，并取得了可复现的成果：在选择压力 [7, 11] 的作用下，人工分子形成了自维持组织。近期，人工生命社群的研究展现出对 AlChemy 的重新关注。Mathis 等人 [11] 为原始代码编写了 Python封装，使他们得以复现原始结果，并以更高的严谨性和清晰度开展新的统计分析。Kruszewski 等人 [9] 研究了受 AlChemy 启发、基于组合逻辑的化学体系中涌现的自复制代谢。Folena 等人 [6] 则研究了类似化学体系中酶的涌现。我们指出，以 AlChemy 为范式的人工化学并不试图准确模拟真实化学或对其作出预测，而是对开放性以及组件间构造性交互这些理念作了极致提炼，并受到生命系统化学的启发。我们用作示例的是 AlChemy 原始研究中最简单的模型：最小化学零（MC0）。

4.1 MC0 的定义

MC0 的环境称为“反应器”。反应器的状态是无类型 λ 演算项的一个多重集。在每个离散时间步，通过使一对随机选取的 λ 项发生碰撞，并将其应用的归约结果加入反应器，来更新状态。我们按照 Dittrich等人的 [5] 三个组成部分给出完整描述。

• **分子**。分子集合M是无类型 λ 演算中项的集合。也就是说，选取一个可数的变量集合V，并将M定义为满足以下条件的最小集合：

– $V \subset M$ （变量）。– $t \in M$ 且 $x \in V \implies \lambda x$。

$t \in M$ （抽象）。– $t_1, t_2 \in M \implies t_1\ (t_2) \in M$ （应用）。

同时，为 λ演算选择一种确定性操作语义。这是一个部分函数$R \subset M \times M$，称为归约，它将告诉我们如何对一个项求值，以（希望）达到范式。通过设定停止前要执行的归约次数上限，我们得到一个函数$E : M \to M$，它会反复应用归约，直到没有可应用的归约，或达到上限。

• **反应规则**。MC0 的反应规则由以下公式描述

$$t_1 + t_2 \to t_1 + t_2 + E(t_1(t_2)).$$

也就是说，对于每个 $(t_1, t_2) \in M^2$，都存在一个上述形式的反应规则。请注意，此处的“+”仍然是一个形式符号，并非 λ演算语法的一部分。

• **动力学**。为了让 MC0 根据上述公式给出的反应规则具备动力学，首先初始化一个有限的分子集合。我们可以将这些分子视为某个“反应器”中流体的分子，每个分子都具有非零动能，使它们能够以恒定速率发生碰撞。时间以离散步推进；每一步执行以下操作。

– 从反应器中均匀随机地选取两个分子，t_1 和 t_2, ，不放回。这两个分子将发生“碰撞”。– 应用上述反应规则。也就是说，将 $E(t_1(t_2))$ 加入反应器。– 均匀随机地选取第三个分子（可以是t_1, t_2, 或 $E(t_1(t_2))$），并将其从反应器中移除，从而保持分子总数不变。

4.2 模型推广

为了推广 MC0，我们必须确定这一构造所依据的“故事”是什么，故事中的哪些角色应视为参数，以及每个参数应属于哪个空间。下面将介绍一种从一般角度描述上述构造的方法。从现在起，我们将调整术语，以涵盖更广泛的建模语境：“分子”将改称“组件”，而反应规则的公式将称为“协议”。

• **组件**。组件由语法和语义给出。语法描述组件属于哪一“类事物”，因此也决定它们可以通过哪些方式进行交互。对于任何一类组件，只要其组件对之间存在“交互”的诠释，就可以使用相同的反应规则和动力学重复 MC0 构造；因此，在例 6.1 中，我们将其视为语法。语义的选择定义了“交互机制”；它告诉我们组件实际上是什么，以及交互意味着什么。在 MC0 中，交互“意味着”应用及随后的归约。在我们讲述这个故事时，我们将把语法视为一个（单排序的）Lawvere 理论，$\mathscr{T}$，把语义视为 $\mathscr{T}$的一个代数。

• **协议**。给定组件的语法，协议是具有如下形式的反应规则公式

$$t_1 + \cdots + t_k \to s_1 + \cdots + s_l, \tag{4.1}$$

其中每个t_i是表示句法项的元变量，每个s_j是由这些t_i构成的句法项。将该公式等价地写成变量$t1,\ldots,t_k$上的一个l元组句法公式。因此，当语法由 Lawvere 理论给出时，这一信息由一个态射编码

$$P : X^k \to X^l,$$

其中 X 是该理论中的泛对象。协议描述组件相遇时会发生什么——也就是说，它描述组件以何种顺序和组合方式 interact。

- **动力学**。我们将 MC0 的反应器视为一个离散马尔可夫过程。该过程在每个时间步的状态，就是此时反应器中存在的分子集合。

注 4.1。这里有一个需要注意的记号细节，涉及形式符号“+”。首先，我们将规则 $A + B \to C$ 和 $B + A \to C$ 视为不同的规则。这样处理是为了允许试剂的顺序影响动力学——例如，在进行字符串拼接时，我们需要选择哪个试剂字符串排在前面。不过请注意，公式 4.1 无论左侧形式和式的顺序如何，定义的规则集合都相同，因为变量是对每一种组件类型进行量化的。相反，反应规则右侧的顺序通常与动力学无关，因此 $A \to B + C$ 和 $A \to C + B$ 可以视为“相同”的反应规则。从这个角度来看，协议与反应规则集合之间存在多对一的对应关系。下文的 Flask 构造体现了这一点：$\mathrm{Flask}^{\mathscr{T}}_{\langle P_1,\ P_2\rangle} = \mathrm{Flask}^{\mathscr{T}}_{\langle P_2,\ P_1\rangle}$。

5 Flask 函子

在本节中，我们将上述构造 MC0 及相互作用组分类似模型的思路整理为一个函子

$$\mathrm{Flask}^{\mathscr{T}}_{P} : \mathscr{T}\mathsf{Alg} \to \mathsf{Mark}$$

它从代数结构定义一个马尔可夫过程。该函子有两个参数：

- 组分所属的代数结构类型（一种 Lawvere 理论 $\mathscr{T}$），我们称之为域；
- 协议 （先前称为“反应规则的公式”），它是一个来自 $\mathscr{T}$ 的态射P 。

延续 Fontana 和 Buss 的类比，我们的构造 Flask 将任意代数理论中的任意代数的项放入一件简单的“玻璃器皿”中，充分混合，然后根据协议，观察这些项随机碰撞时会发生什么。为与 Fontana 和 Buss 的用语保持一致，也可以用“反应器”代替“烧瓶”。

5.1 直观

在给出完全一般性的定义之前，我们先用自然语言描述当域 $\mathscr{T}$ 为群的 Lawvere 理论时的 Flask 构造。在这种情况下， $\mathscr{T}$-代数就是一个群。我们还应选择一个“协议”——即群理论中的一个态射——它将规定 Flask 中发生“碰撞”时会发生什么。

对 P 的一个自然选择是 $\star\colon X \times X \to X$，即诱导群乘法的态射。将 $P = \star$ 应理解为采用以下反应规则公式作为产生 Flask 中动力学的协议：

$$g_1 + g_2 \to g_1 g_2.$$

换言之，当两个群元素发生碰撞时，它们会从系统中被移除，并被替换为对应于其群乘积的单一项。

现在我们可以描述 $\mathrm{Flask}_P^{\mathscr{T}}$ 的作用。对于群 G，$\mathrm{Flask}_P^{\mathscr{T}}(G)$ 是一个马尔可夫过程，其状态空间是由G 上的有限支撑多重集构成的集合。在化学类比中，一个状态是由G 的元素标记的“分子”集合。转移概率可以通过以下概率过程来描述，该过程根据旧状态 σ生成新状态 τ：

- 从多重集 σ 中均匀随机地、不放回地选取两个元素。它们分别由群元素标记，例如$g1$ 和 $g2$。
- 定义 τ 为这样一个多重集：从 σ 中移除选出的元素，并添加一个由群元素$g1g2$ 标记的元素。

对于群同态 $\psi: G \to H$，我们将 $\mathrm{Flask}_P^{\mathscr{T}}(\psi)$ 定义为推前

$$\mathrm{Flask}_P^{\mathscr{T}}(\psi) = \psi_* : \mathbb{N}_{\mathrm{fs}}^G \to \mathbb{N}_{\mathrm{fs}}^H,$$

对每个 $\tau \in \mathbb{N}_{\mathrm{fs}}^G$ 和 $h \in H$，定义为

$$\psi_*(\tau)(h) := \sum_{g \in \psi^{-1}(h)} \tau(g).$$

换言之，$\mathrm{Flask}_P^{\mathscr{T}}(\psi)$ 通过应用 ψ 对每个多重集中的成员重新标记。该映射是马尔可夫过程态射 $\mathrm{Flask}_P^{\mathscr{T}}(G) \to \mathrm{Flask}_P^{\mathscr{T}}(H)$ 并非显而易见，而证明归结为说明 ψ 是群同态。

5.2 一般情形下的 Flask 函子

现在，我们给出 $\mathrm{Flask}_P^{\mathscr{T}}$ 的形式化定义，将其推广到任意 Lawvere 理论 $\mathscr{T}$ 和态射 $P \in \mathscr{T}$。首先，我们引入用于处理多重集的记号。

记号 5.1. 设 S 是一个集合，且 $\sigma: S \to \mathbb{N}$ 是一个由 S 标记的成员构成的多重集。对于元素 $s \in S$，若该多重集的支撑集包含标记为 s 的元素，我们用 σ_s 表示移除该元素后得到的多重集。因此，

$$\sigma_s(t) := \begin{cases} \max\{0, \sigma(t) - 1\} & \text{when } t = s \\ \sigma(t) & \text{otherwise.} \end{cases}$$

类似地，我们用 σ^s 表示引入一个标记为 s 的成员后得到的多重集：

$$\sigma^s(t) := \begin{cases} \sigma(t) + 1 & \text{when } t = s \\ \sigma(t) & \text{otherwise.} \end{cases}$$

对于任意多次移除再引入的操作，我们记作

$$\sigma_{s_1,\ldots,s_n}^{t_1,\ldots,t_m} := (\cdots((\cdots(\sigma_{s_1})\cdots)_{s_n})^{t_1}\cdots)^{t_m} \quad \forall t_i, s_j \in S.$$

请注意，上述定义中移除和引入的顺序很重要，因为我们在 σ_s的定义中不允许出现负重数。

记号 5.2. 设 $\sigma\colon S \to \mathbb{N}$ 是一个有限支撑的多重集，并设 $s \in S^k$ 且 $k \in \mathbb{N}$。我们将 $\mathrm{pick}_s(\sigma) \in \mathbb{R}$ 记为从 σ 中均匀随机地无放回选取 s 的概率，即选取k 个成员。因此，

$$\mathrm{pick}_{(s_1,\ldots,s_k)}(\sigma) = \frac{\sigma(s_1)\sigma_{s_1}(s_2)\cdots\sigma_{s_1,\ldots,s_{k-1}}(s_k)}{N(N-1)\cdots(N-k+1)},$$

其中 $N = \sum_{s\in S}\sigma(s)$。当 $N = 0$ 时，我们设 $\mathrm{pick}_{s_1,\ldots,s_k}(\sigma) = 0$。

定义 5.3。 设 $\mathscr{T}$是一个 Lawvere 理论，其泛对象为 X。设 $P\colon X^k \to X^l$是 $\mathscr{T}$ 中的一个态射。具有域 $\mathscr{T}$和协议 P 的*Flask* 函子 $\mathrm{Flask}_P^{\mathscr{T}}\colon \mathscr{T}\mathrm{Alg} \to \mathrm{Mark}$ 定义如下：

- 对于一个 $\mathscr{T}$-代数A，我们定义马尔可夫过程

$$\mathrm{Flask}_P^{\mathscr{T}}(A) : \mathbb{N}_{\mathrm{fs}}^{|A|} \to D(\mathbb{N}_{\mathrm{fs}}^{|A|})$$
$$\sigma \mapsto \begin{cases} \sum_{a\in|A|^k} \mathrm{pick}_a(\sigma)\left[\sigma_a^{A(P)(a)}\right] & \text{when } l > 0 \text{ and } k \le \sum_a \sigma(a) \\ \sum_{a\in|A|^k} \mathrm{pick}_a(\sigma)\left[\sigma_a\right] & \text{when } l = 0 \text{ and } k \le \sum_a \sigma(a) \\ \eta(\sigma) & \text{when } k > \sum_a \sigma(a), \end{cases}$$

  其状态空间是有限支撑映射的集合 $|A| \to \mathbb{N}$。回顾一下，由于 A 保持积，$A(P)$ 可视为映射 $|A|^k \to |A|^l$。

- 对于代数态射$f\colon A \to B$，我们将 $\mathrm{Flask}^{\mathscr{T}}{}_P(f)$ 定义为 f_X 的推前。也就是说，

$$\mathrm{Flask}_P^{\mathscr{T}}(f) := (f_X)_* : \mathbb{N}_{\mathrm{fs}}^{|A|} \to \mathbb{N}_{\mathrm{fs}}^{|B|}$$
$$\sigma \mapsto \left[b \mapsto \sum_{a\in f_X^{-1}(b)} \sigma(a) \right].$$

定理 5.4. $\mathrm{Flask}_P^{\mathscr{T}}$： $\mathscr{T}\mathrm{Alg} \to \mathrm{Mark}$ 是一个良定义函子。

下面的引理汇总了定理 5.4 的证明中用到的多重集与推前之间的关系。

引理 5.5. 设 $f\colon A \to B$ 是集合之间的映射，并设 σ 是 A 上一个有限支撑的多重集。令 $a \in A$、$(a_1, \ldots a_k) \in A^k$，以及 $(b_1, \ldots, b_k) \in B^k$。那么

(i) $f_*(\sigma a) = (f_*\sigma) f(a)$; *(ii)* $f_*(\sigma_a) = (f_*\sigma) f(a)$，只要 $\sigma(a) \ge 1$; *(iii)* $f_*(\sigma_{a_1,\ldots,a_k}) = (f_*) f(a_1) \ldots, f(a_k)$，只要 $pick_{a_1,\ldots,a_k}\sigma > 0$;

(iv)

$$\mathrm{pick}_{b_1,\ldots,b_k}(f_*\sigma) = \sum_{\substack{a_i\in f^{-1}(b_k)\\ i=1,\ldots,k}} \mathrm{pick}_{a_1,\ldots,a_k}(\sigma).$$

证明。 (i). 设 $b \in B$。我们分两种情况讨论。

情况 1： $f(a) = b$。则

$$f_*(\sigma^a)(b) = \sum_{x\in f^{-1}(b)} \sigma^a(x) = \left(\sum_{x\in f^{-1}(b)} \sigma(x)\right) + 1 = (f_*\sigma)_{f(a)}(b).$$

情况 2： $f(a) \neq b$。则

$$f_*(\sigma^a)(b) = \sum_{x \in f^{-1}(b)} \sigma^a(x) = \left(\sum_{x \in f^{-1}(b)} \sigma(x) \right) = (f_*\sigma)_{f(a)}(b)$$

(ii). 假设 $\sigma(a) \geq 1$。那么 $\sigma_a(a) = \sigma(a) - 1$ 且 $\sigma_a(x \neq a) = \sigma(x)$。令 $b \in B$。我们分两种情况讨论。

情况 1： $f(a) = b$。那么，利用上述对 σ_a 的刻画，我们有

$$f_*(\sigma_a)(b) = \sum_{x \in f^{-1}(b)} \sigma_a(x) = \left(\sum_{x \in f^{-1}(b)} \sigma(x) \right) - 1 = f_*(\sigma)(b) - 1.$$

另一方面，

$$f_*(\sigma)_{f(a)}(b) = \max\{0, f_*(\sigma)(b) - 1\} = f_*(\sigma)(b) - 1,$$

因为至少存在一个 x，它位于b的原像中，且满足 $\sigma(x) \geq 1$。

情况 2： $f(a) \neq b$。那么

$$f_*(\sigma_a)(b) = \sum_{x : f(x) = b} \sigma_a(x) = \sum_{x : f(x) = b} \sigma(x) = f_*\sigma(b) = (f_*\sigma)_{f(a)}(b).$$

(iii). 我们对k进行归纳。基例由(ii)部分得出，因为 $\mathrm{pick}_a \sigma > 1 \implies \sigma(a) \geq 1$。事实上，由于 $\mathrm{pick}_{a_1,\ldots,a_k} \sigma > 0 \implies \sigma(a_k) \geq 1$，归纳步骤也由(ii)部分得出：

$$\begin{aligned} f_*(\sigma_{a_1,\ldots,a_k}) &= f_*((\sigma_{a_1,\ldots,a_{k-1}})_{a_k}) = (f_*\sigma_{a_1,\ldots,a_{k-1}})_{f(a_k)} = \\ &= (f_*(\sigma)_{f(a_1),\ldots,f(a_{k-1})})_{f(a_k)} = f_*(\sigma)_{f(a_1),\ldots,f(a_k)}. \end{aligned}$$

在第三个等式中，我们使用归纳假设，同时利用以下事实：$\mathrm{pick}_{a_1,\ldots,a_k} \sigma > 0 \implies \mathrm{pick}_{a_1,\ldots,a_{k-1}} \sigma > 0$。

(iv). 只需证明

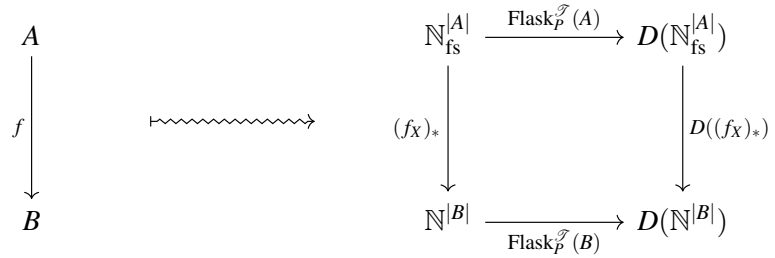
$$f_*\sigma(b_1) \times (f_*\sigma)_{b_1}(b_2) \times \cdots \times (f_*\sigma)_{b_1,\ldots,b_{k-1}}(b_k) = \sum_{\substack{a_i : f(a_i) = b_i \\ i = 1,\ldots,k}} \sigma(a_1) \times \sigma_{a_1}(a_2) \times \cdots \times \sigma_{a_1,\ldots,a_{k-1}}(a_k).$$

要看出这一点，最快的方法是注意到，σ 和$f_*\sigma$ 会为同一个袋中的每个令牌赋予两个不同的标签——“A标签”和“B标签”。对于每个具有a这一A标签的令牌，其B标签为$f(a)$。等式两边都在逐个取出令牌的过程中，统计从袋中收集标签（$b1,\ldots,b_k$）的方式数；左边直接计数，右边则对每个A标签向量（其对应的标签集合也意味着我们收集到了B标签（$b1,\ldots,b_k$）），将收集标签（$a1,\ldots,a_k$）的方式数相加。

□

定理 *5.4* 的证明。 设 $f : A \to B$ 是一个 $\mathscr{T}$-代数的态射。我们需要证明 $\mathrm{Flask}_P^{\mathscr{T}}(f) = (f_X)_*$ 确实是相关马尔可夫过程的态射。也就是说，我们需要证明下面的交换图

交换。



令 $\sigma \in \mathbb{N}^{|A|}\mathrm{fs}$。需要检验的非平凡情形是 $k \leq \sum_a \sigma(a)$。记 $f{:=}f_X$，且 $f_k{:=}f_{X^k}$。根据定义，有

$$\left[D(f_*)\circ \mathrm{Flask}_P^{\mathscr{T}}(A)\right](\sigma) = \sum_{a\in|A|^k} \mathrm{pick}_a(\sigma)\left[f_*\left(\sigma_a^{A(P)(a)}\right)\right];$$
$$\left[\mathrm{Flask}_P^{\mathscr{T}}(B)\circ f_*\right](\sigma) = \sum_{b\in|B|^k} \mathrm{pick}_b(f_*\sigma)\left[(f_*\sigma)_b^{B(P)(b)}\right].$$

为简洁起见，定义

$$\alpha_a := f_*\left(\sigma_a^{A(P)(a)}\right);$$
$$\beta_b := (f_*\sigma)_b^{B(P)(b)}.$$

由引理 5.5，得

$$\alpha_a = (f_*\sigma)_{f^k(a)}^{f^l[A(P)(a)]} = (f_*\sigma)_{f^k(a)}^{B(P)(f^k(a))}$$

当 $\mathrm{pick}_a\sigma > 0$ 时。第二个等式源于f的自然性。因此，当 $\mathrm{pick}_a\sigma > 0$ 时，

$$f^k(a) = b \implies \alpha_a = \beta_b. \tag{5.1}$$

结合上述结果与引理 5.5 的 (iv) 部分，得

$$\begin{aligned}\sum_{a\in|A|^k}\mathrm{pick}_a(\sigma)\alpha_a &= \sum_{b\in|B|^k}\left[\sum_{a\in(f^k)^{-1}(b)}\mathrm{pick}_a(\sigma)\alpha_a\right]\\ &\overset{(5.1)}{=} \sum_{b\in|B|^k}\left[\sum_{a\in(f^k)^{-1}(b)}\mathrm{pick}_a(\sigma)\right]\beta_b\\ &= \sum_{b\in|B|^k}\mathrm{pick}_b(f_*\sigma)\beta_b.\end{aligned}$$

最后，由于 Mark 的复合与恒等与集合相同，赋值 $\mathrm{Flask}_P^{\mathscr{T}}$ 凭借推前的函子性质而成为一个函子。

□

我们也可以利用 D 的单子结构，将 Flask 函子扩展为包含多个协议。

定义 5.6. 给定一个由协议构成的n元组（$P1$，……，P_n），函子$\mathrm{Flask}_{P_1,\ \ldots\ldots,\ P_n}^{\mathscr{T}}$通过对$n$进行归纳来定义，并以定义 5.3作为基例。该定义的归纳步骤如下。

• 对于一个 $\mathscr{T}$代数A，马尔可夫过程$\mathrm{Flask}^{\mathscr{T}}_{P_1,\ \ldots\ldots,\ P_n}(A)$由复合给出

$$\mathbb{N}_{\mathrm{fs}}^{|A|} \xrightarrow{\mathrm{Flask}^{\mathscr{T}}_{P_1,\ldots,P_{n-1}}(A)} D(\mathbb{N}_{\mathrm{fs}}^{|A|}) \xrightarrow{D(\mathrm{Flask}^{\mathscr{T}}_{P_n}(A))} D^2(\mathbb{N}_{\mathrm{fs}}^{|A|}) \xrightarrow{\mu_{\mathbb{N}_{\mathrm{fs}}^{|A|}}} D(\mathbb{N}_{\mathrm{fs}}^{|A|}).$$

• $\mathrm{Flask}^{\mathscr{T}}_{P_1,\ \cdots,\ P_n}$ 对函数的作用与$n = 1$ 情形相同。

推论5.7。 $\mathrm{Flask}^{\mathscr{T}}_{P_1,\ \cdots,\ P_n}$ 是一个良定义函子。

证明。 证明采用对n的归纳法，基例为定理 5.4。归纳步骤由 μ的自然性得出，这保证了下图中的外部方形图可交换，因为左侧和中间的方形图分别根据归纳假设和定理 5.4 可交换。

$$\begin{array}{ccccccc}
\mathbb{N}_{\mathrm{fs}}^{|A|} & \xrightarrow{\mathrm{Flask}^{\mathscr{T}}_{P_1,\ldots,P_{n-1}}(A)} & D(\mathbb{N}_{\mathrm{fs}}^{|A|}) & \xrightarrow{D(\mathrm{Flask}^{\mathscr{T}}_{P_n}(A))} & D^2(\mathbb{N}_{\mathrm{fs}}^{|A|}) & \xrightarrow{\mu_{\mathbb{N}_{\mathrm{fs}}^{|A|}}} & D(\mathbb{N}_{\mathrm{fs}}^{|A|}) \\
\downarrow{\scriptstyle (f_X)_*} & & \downarrow{\scriptstyle D((f_X)_*)} & & \downarrow{\scriptstyle D^2((f_X)_*)} & & \downarrow{\scriptstyle D((f_X)_*)} \\
\mathbb{N}_{\mathrm{fs}}^{|B|} & \xrightarrow[\mathrm{Flask}^{\mathscr{T}}_{P_1,\ldots,P_{n-1}}(B)]{} & D(\mathbb{N}_{\mathrm{fs}}^{|B|}) & \xrightarrow[D(\mathrm{Flask}^{\mathscr{T}}_{P_n}(B))]{} & D^2(\mathbb{N}_{\mathrm{fs}}^{|B|}) & \xrightarrow[\mu_{\mathbb{N}_{\mathrm{fs}}^{|B|}}]{} & D(\mathbb{N}_{\mathrm{fs}}^{|B|})
\end{array}$$

□

6 个例子

我们通过若干例子来说明 Flask 函子。

例 6.1。 设 $\mathscr{I}$ 为一个 Lawvere 理论，其泛对象为 X，由单个态射 interact : $X^2 \to X$自由生成。这一理论的代数刻画了这样一种组件：它们具有某种交互方法，能够根据两个先前的组件生成一个新组件。一般而言，交互中先前组件的顺序很重要。我们将 MC0 恢复为某个 $\mathscr{I}$-代数在某个 Flask 函子下的像。

• 令$P1$ 为协议

$$\langle \pi_1, \pi_2, \mathrm{app} \circ (\mathrm{Id}_X \times \pi_1) \rangle : X^2 \to X^3.$$

按照反应规则的通常记法，这可以写成

$$x_1 + x_2 \to x_1 + x_2 + \mathsf{interact}(x_1, x_2).$$

• 令$P2$ 为唯一的“删除”协议 $X \to 1$。

• 令L 为如下给出的 $\mathscr{I}$-代数：

– $L(X) = M$，即 λ 项的集合；– A(interact) 是映射 $(t_1, t_2) \mapsto E(t_1(t_2))$，它根据我们选定的归约方案计算两个项的应用及后续归约。

于是，MC0 反应器作为一个马尔可夫过程，由 $\mathrm{Flask}^{\mathscr{I}}_{P_1,P_2}(L)$ 描述。

我们对 MC0 的新描述梳理出了构成整个模型的三个部分。域 $\mathscr{I}$确定了我们关注的组件类型：能够成对进行建设性交互的组件。自然界中这类组件的例子包括耦合聚合物或有性生殖生物。接下来，协议规定了某些“碰撞事件”（或当

元数小于 2 时，简称“事件”）的机制，这些事件可能涉及成对组件之间的交互。协议 P_1 可视为代表了某种类似繁殖的过程，因为试剂会被保留下来；与之相反，在聚合物偶联中，最终留下的只有新分子。最后，代数L 提供了语义。它告诉我们组件究竟是什么，以及“交互”究竟意味着什么。聚合物偶联的语义可能类似于字符串连接，而生物体繁殖的语义则可能相当复杂。

协议和语义都根据域来定义，但彼此独立。以下两个例子与例 6.1 相比，在固定域 $\mathscr{I}$ 的同时修改了协议和语义。

例6.2。 Dittrich 等人 [5] 将数除法化学 作为构造性隐式化学的典型例子。其“分子”是大于 1 的自然数，反应规则为

$$a+b \to a+a/b$$

当b 整除a时。

我们可以用 Flask 构造一类类似的化学体系。令 $\mathscr{I}$与例 6.1 中相同，并令C 为协议

$$\langle \pi_1, \mathsf{interact} \rangle : X^2 \to X^2.$$

我们将左可约幺半群定义为满足以下条件的幺半群M： 对于所有$b,b',q \in M$，都有$bq = b'q \implies b = b'$。大于 0 的自然数构成一个（左）可约幺半群。每个可约幺半群M 都通过令$A_M(X) = M$，导出一个代数A_M，其中 $\mathscr{I}$，并且

$$A_M(\mathsf{interact})(a,b) = \begin{cases} a/b & \text{when } b|a \\ a & \text{otherwise.} \end{cases}$$

数除法化学（尽管这次将 1 也包含为一个分子）可还原为 $\mathrm{Flask}_C^{\mathscr{I}}(A^{\mathbb{N}_{\geq 1}})$。每个幺半群同态$f\colon M \to N$都会导出一个 $\mathscr{I}$-代数同态 $\hat{f}_X : A_M \to A_N$，其定义为 $\hat{f}_X = f$，因而也会导出一个马尔可夫过程态射 $\mathrm{Flask}_C^{\mathscr{I}}(\hat{f})$。

最后，我们通过一个简单的例子来说明 Flask 构造如何实现模型细化。换言之，语义的细化会传递为最终马尔可夫过程的细化。在这里，我们看到这一构造应用于一种显然与“真实”化学相去甚远的情形。

例6.3。 设C 与例6.2中的相同。这个交互域协议规定了一个用于对简单“通信系统”建模的设置。其思路是，两个组件之间的交互就是从第一个组件到第二个组件的一次通信。当我们选择一个 $\mathscr{T}$ 代数A 时，就是在选择组件的一组可能状态 $|A|$，以及一个映射 $A(\mathsf{interact}) : |A| \times |A| \to |A|$，用于描述通信接收方的状态应如何根据发送方的状态进行更新。最后，C 描述通信实际发生时的情况：发送方的状态保持不变，而接收方的状态则根据$A(\mathsf{interact})$进行更新。

考虑一座挤满了人的图书馆，我们希望以这种方式将其建模为一个通信系统。这意味着定义一个 $\mathscr{I}$-代数，其载体集是图书馆里的人可能处于的所有状态所组成的集合。例如，或许 $A(X) = \{l, m_n, m_q\}$，分别表示“图书管理员”“吵闹的成员”和“安静的成员”这几种状态。接着我们定义

$A(\mathsf{interact})(\mathrm{row},\mathrm{col})$	l	m_n	m_q
l	l	m_q	m_q
m_n	l	m_n	m_n
m_q	l	m_n	m_q

以表达这样的想法：例如，图书管理员与一名吵闹的成员交谈时，后者会变得安静；而吵闹的成员与一名安静的成员交谈时，后者会变得吵闹。假设每个时间步都有一个人随机与另一个人交谈，那么图书馆的动力学由马尔可夫过程 $\mathrm{Flask}_{\mathcal{C}}^{\mathscr{T}}(A)$给出。

现在，假设我们还有另一个用于对图书馆建模的 $\mathscr{T}$-代数 B，以及一个代数态射 $\mathrm{f} : \mathrm{A} \to \mathrm{B}$。这样的态射表示，A 是图书馆中通信的一个更精细的模型，同时与 B 相一致。例如，B 可以是由 $\mathrm{B(X)} = \{\mathrm{l}, \mathrm{m}\}$ and $\mathrm{B(interact)(x, y)} = \mathrm{y}$ 给出的模型，它无法区分嘈杂成员与安静的成员。由 $\mathrm{f}_X(\mathrm{l}) = \mathrm{l}$ 和 $\mathrm{f}_X(\mathrm{m}_q) = \mathrm{f}_X(\mathrm{m}_n) = \mathrm{m}$ 给出的 $\mathscr{T}$-代数态射，会被 $\mathrm{Flask}_{\mathcal{C}}^{\mathscr{T}}$映射为由各个模型导出的马尔可夫过程之间相应的态射。

7 未来方向

总之，我们将讨论三个可能的未来方向，以拓展上述构造，或至少从中汲取灵感。

7.1 引入空间

人工生命研究者对能够表现出类生命行为的系统很感兴趣。在这些语境中，“类生命”可以有许多种理解；早期人工生命研究中，Maturana 和 Varela 提出的一种观点 [12], 是自创生这一概念。

理解自创生系统的一种有效方式，是将其视为由组件及其彼此之间的结构关系构成。因而，自创生意味着这些关系会引发生产过程，这些过程同时

- 生成构成系统的组件（McMullin 将此称为 生产闭合 [14]），并且
- 维持上述组件之间的结构关系，使其不受混沌环境的影响（McMullin 将此称为空间闭合）。

在计算自创生中，组件结构关系的维持通常表现为某种物理边界，而系统会不断修复这一边界 [4, 13]。就目前而言，Flask 构造无法生成以这种方式诠释自创生的系统，因为组件无法在足以表达结构关系或边界的空间中 interact，而这些关系或边界本应能够得到维持。事实上，Maturana 和 Varela 提出的原始计算模型无法通过 Flask 构造来表达。

这自然引出了下一步：扩展我们对代数人工化学的描述，以构造这样的系统——组件在某种空间中存在并彼此 interact。重要的是，组件之间的空间关系应当影响其动力学，正如所有自创生计算模型中那样。

7.2 类型与逻辑

就目前而言，Flask 构造并不能推广 Fontana 和 Buss 提出的另外两个“最小化学体系”：MC1 和 MC2 [8]。在 MC1 中，分子由简单类型 λ 演算中的项来标记。交互再次被解释为应用，但现在分子仅在类型限制允许时才能 interact。在 MC2 中，分子由证明论中的无割证明来标记

线性逻辑的。交互通过使用切规则构造新证明来建模，随后利用切消归约为无割证明。

选择单排序 Lawvere 理论作为组件语法的来源，使 MC0 沿着不同于“MC”系列的方向得以推广。未来，我们希望摆脱 Lawvere 理论，以更一般的方式讲述 MC 系列的故事，并聚焦于简单类型 λ 演算的范畴语义，以及各种可接受某种形式的切消去定理的逻辑的证明理论。

7.3 实现

任何人工化学的一项重要特性是能够通过实际的计算机实现来支持实验。近期，Rainford 等人 [15] 提出了一种通用的程序化框架，用于描述和实现人工化学，称为 “MetaChem”。

我们项目的长期目标之一是为人工生命社群提供类似的工具。具体而言，我们希望运用代数人工化学的范畴论形式化，为通用且模块化的代码奠定基础，使人们能够在同一平台上对多种不同类型的模型进行实验。

参考文献

[1] John C. Baez & Blake S. Pollard（2017）：反应网络的组合框架。《数学物理评论》29(09)，第 1750028 页，doi:10.1142/s0129055x17500283。[2] Wolfgang Banzhaf（1993）：二进制数的自我复制序列。《基础 *I*：一般理论》。《生物控制论》69(4)，第 269–274 页，doi:10.1007/bf00203123。[3] Francis Borceux（1994）：代数理论，第 122–185 页。《数学及其应用百科全书》，剑桥大学出版社，doi:10.1017/CBO9780511525865。[4] Paul Bourgine & John Stewart（2004）：自创生与认知。《人工生命》10(3)，第 327–345 页，doi:10.1162/1064546041255557。[5]Peter Dittrich、Jens Ziegler & Wolfgang Banzhaf（2001）：人工化学——综述，doi:10.1162/106454601753238636。[6] Giampaolo Folena & Germ´an Kruszewski（2024）：人工化学中酶的涌现。载于：*2024*年人工生命会议，ALIFE 2024，麻省理工学院出版社，doi:10.1162/isal a 00791。[7] Walter Fontana & Leo W. Buss（1994）：如果“磁带被播放两次”，什么会保持不变？《美国国家科学院院刊》91，doi:10.1073/pnas.91.2.757。[8]Walter Fontana & Leo W. Buss（1996）：《对象的屏障：从动力系统到有界组织》。技术报告 SFI 工作论文：1996-05-035，圣菲研究所。可访问：https://www.santafe.edu/research/results/working-papers/the-barrier-of-objects-from-dynamical-systems-to-b。[9] Germ´an Kruszewski & Tom´aˇs Mikolov（2021）：人工化学中自复制代谢作为递归算法的涌现。《人工生命》27(3–4)，第 277–299 页，doi:10.1162/artl a 00355。[10] F. William Lawvere（1963年）：《代数理论的函子语义》。《美国国家科学院院刊》50(5)，第 869–872 页，doi:10.1073/pnas.50.5.869。[11] Cole Mathis、Devansh Patel、Westley Weimer & Stephanie Forrest（2024）：计算与化学中的自组织：重返 *AlChemy*。《混沌：非线性科学跨学科期刊》34(9)，doi:10.1063/5.0207358。[12] Humberto R. Maturana & Francisco J. Varela（1980年）：自创生与认知：生命的实现。施普林格荷兰，doi:10.1007/978-94-009-8947-4。

[13] Barry Mcmullin（1997）：计算自创生：原始算法。技术报告 SFI 工作论文：1997-01-001，圣菲研究所。可访问：https://www.santafe.edu/research/results/working-papers/computational-autopoiesis-the-original-algorithm。[14] Barry McMullin（2004）：计算自创生三十年：综述。《人工生命》10(3)，第 277–295 页，doi:10.1162/1064546041255548。[15] Penelope Faulkner Rainford、Angelika Sebald & Susan Stepney（2020）：*MetaChem*：人工化学的代数框架。《人工生命》26(2)，第 153–195 页，doi:10.1162/artl a 00315。

声明

不存在 利益冲突。本文的撰写未使用生成式人工智能 .