

(東大総合) ○藤井幹也 高塚和夫

【序】

本研究では自己触媒的に増加していく化学反応を念頭に置き、細胞増殖のような seed が存在して、それが自己触媒的に増殖していく過程において見られる形態形成について理解を得る事を目的とする。そのため本モデルでは各反応物の分子スケールでのダイナミクスに立ち返り、並列計算機を利用した並列結合セルオートマトンを用いて構成した。このモデルを用いて自己触媒的に増殖していく分子集合体等の形態形成についての計算機実験を行った。ここでは現れた特異な現象について報告する。

【モデル】

次のモデルを並列計算機を用いた並列結合セルオートマトン(CA)上に構築する事により増殖していく細胞種 X, X^*, Y_l による形態形成を観察した。細胞種 X は活性化物質 A (activator) と反応し活性化され X^* となる。 X^* は栄養物質 N (nutrition) を摂取する事により分裂前駆体 Y_l となり、さらにもう一回 N を摂取する事で分裂する。さらに分裂の際に A 及び、 X^* を抑制する I (inhibitor) が生成される。但し、モデル1では分裂の際に I は生成されず、モデル2で I が生成されるとした。

・モデル1 (図1に模式図を示す)

- 1) $X + A \longrightarrow X^*$
- 2) $X^* + N \longrightarrow Y$
- 3) $Y + N \longrightarrow 2X + 2A$

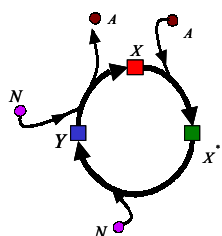


図1 モデル1の概略図

・モデル2 (図2に模式図を示す)

- 1) $X + A \longrightarrow X^*$
- 2) $X^* + N \longrightarrow Y$
- 3) $Y + N \longrightarrow 2X + 2A + 6I$
- 4) $X^* + I \longrightarrow 2N$

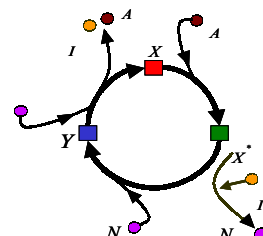


図2 モデル2の概略図

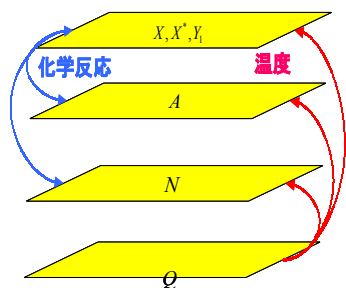


図3 並列結合セルオートマトンの概略図

計算方法をモデル1で説明する。(概略図を図1に示した。)細胞場のセルオートマトン (X, X^*, Y_l) 1個、環境場CA 2個 (N, A) 及び温度場CA (Q) 1個の計4個のセルオートマトンを用意した。温度場CA上では熱を熱粒子として扱い、ランダムウォークさせる事により熱の時空間揺らぎを実現した。細胞場CA、環境場CAが温度場CAと相互作用することにより、細胞及び粒子は温度揺らぎによる拡散運動をする。また、細胞場CAと各環境場CAも相互作用を行い、化学反応として各CA上の細胞と粒子は変化、生成、消滅する。細胞場CAと環境場CAが1回相互作用する間に、これらのCAと温度場CAは別の回数だけ相互作用させる事により、各粒子の拡散係数の違いを実現した。各CAの時間発展はそれぞれ異なる

CPU 上で実行され、CA 同士は MPI(Message Passing Interface) により一定の時間間隔、ルールで相互作用を行うようにした。

【結果・考察】

モデル 1 の数値実験より、空間異方性を持つものとそうでない物が現れた(図 4)。この空間異方性を持ったものは、その後の分裂増殖を経ても異方性を保持したままであった(図 5)。この異方性は、分裂初期における確率的揺らぎが維持されたまま成長したために現れたのだと考えられる。

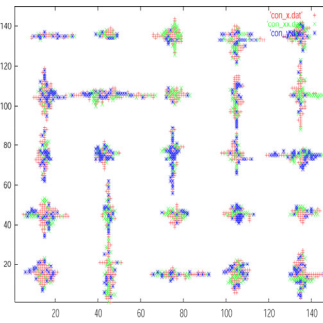


図 4 初期状態で空間に複数の seed を置いた。空間異方性を持つ物が現れた。25step

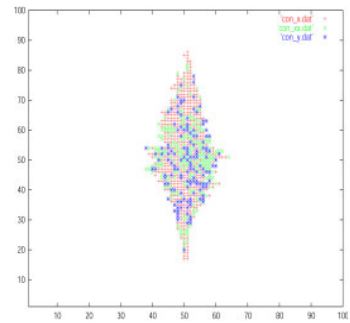


図 5 空間異方性は維持され、そのまま成長した。35step

また A の数密度を増やしたところ、分裂(成長)サイクルの位相差が集団的に現れるという現象も確認できた。(図 6) この現象も上述の現象と同じ用に分裂初期の確率過程による揺らぎが維持されたまま成長したために、このように位相差が集団的に現れたのだと考える事が出来る。形態形成を成す構成要素が自己触媒的に増加していく系では、分裂初期の確率過程による揺らぎが重要である事が示唆できる。

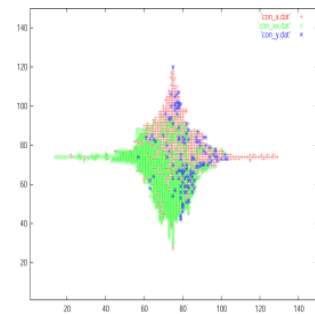


図 6 分裂サイクルの位相差が集団的に現れた。34step

次にモデル 2 のように A (activator) と I (inhibitor) が存在する場合のような場合の数値実験を行うと膜状の形態が現れた(図 7)。

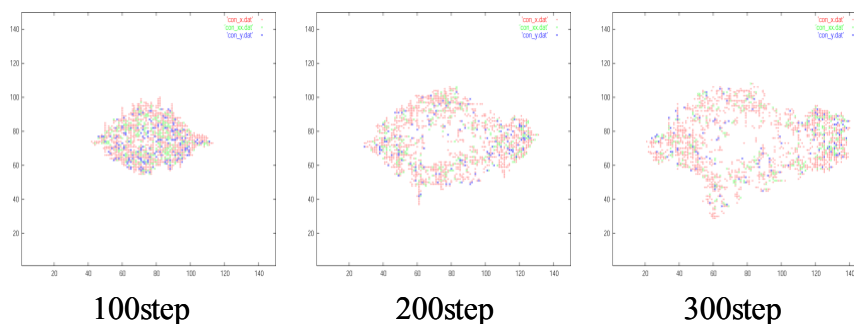


図 7 モデル 2 の数値実験の結果現れた膜状形態。各形態の下に step 数を示した。

【まとめ】

分子スケールのダイナミクス、分子運動の確率過程から出発し化学反応を考察する事を目的とし、並列結合セルオートマトンを構成した。この並列結合セルオートマトンを用いて、自己触媒的に増殖していく系をモデル化し、ダイナミクスを研究した。その結果いくつかの特異な現象が現れる事が確かめられた。計算の詳細・他の現象については当日発表する。