

1P059

結合セルオートマトンによる多体系における形態形成の研究

(東大院・総合文化) ○小田切健太、高塚和夫

【序】

自然界では様々な形態形成を観察できる。形態形成過程において、様々な要因が複雑に絡み合っている事が現象の理解を困難にしている。多くの形態形成に関する研究では現象論的に構築された微分方程式によるモデル化が行われており、反応拡散方程式はその代表例である。これに対して、本研究では Cellular Automata (CA) 法による現象の理解を目指している。CA 法は空間をセルと呼ばれる単位構造に分割しセル同士の相互作用により複雑なパターン・現象を再現する手法で、非線形現象の研究手段として様々な分野で用いられている。CA 法では局所間の相互作用を規則 (アルゴリズム) として表す事で、微分方程式によるモデルでは難しい局所間の物理量のゆらぎや時系列・環境に応じた規則の変更等を簡単に表現できる。そこで本研究では、これらの事象を考慮した多体系における形態形成過程のモデル化を行った。本発表では表面上での原子のクラスター形成過程を想定した化学反応と、細胞分裂や自己触媒反応を想定した自己増殖系での化学反応における形態形成について紹介する。

【例 1、表面上での化学反応】

従来の反応拡散方程式等では表現が困難な温度の時空間熱ゆらぎを考慮した原子レベルの確率過程モデルを構築した。モデルは次の様に記述される。

- ・粒子は表面上の熱によりランダムな揺動力を受け、表面上を運動する。
- ・表面上の粒子が近接する事で化学反応 (化学結合) が生じ、生成した反応熱は表面に伝わる。
- ・表面上の熱を消費して、粒子間結合の解離や粒子の運動が行われる。

これまでに、初期の熱量の違いでクラスター形成過程を分類できる事、熱拡散の速さの違いによりクラスター形成過程や構造に違いが生じる事、クラスター界面での安定な粒子と不安定な粒子の競合がクラスター形成に影響を与える事などが分かっている[1]。

より多彩な形態形成過程を調べる為、モデルを多成分系に拡張した。多成分系では粒子間に働く短距離相互作用ポテンシャルの値を変える事で成分の区別を行う。ポテンシャルは粒子間の結合エネルギーとも考えられるので、異種粒子間のポテンシャルの値は異種粒子間結合の強さを表している。本研究では結合の強さの違いによるクラスター形成過程の変化を調べる為、様々な異種粒子間結合の強さにおける 2 成分系での数値実験及び解析を行った。各系でのクラスター内部の粒子分布を比較すると、異成分間結合が弱い系では黒い粒子 (成分 2) の方が白い粒子 (成分 1) に比べて内部に配置しているのに対し、強い系では両者が均一に配置しているのが観察できる (図 1)。これを定量的に確認する為には各成分での構造因子と平均結合数を計算した所、観察通りの内部構造を示す結果が得られた。

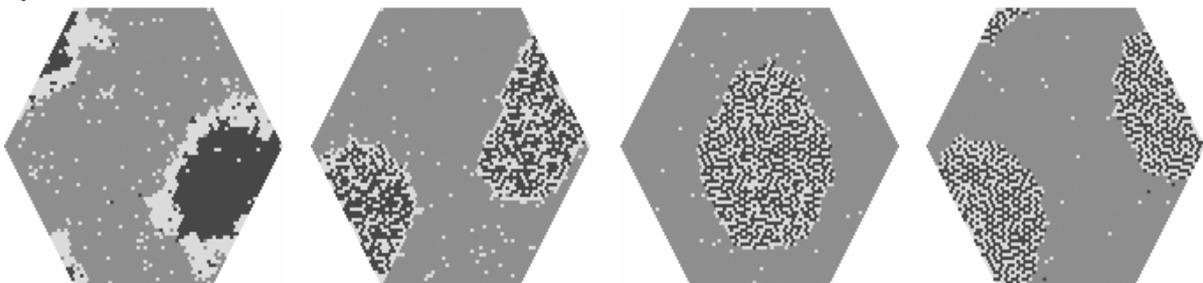
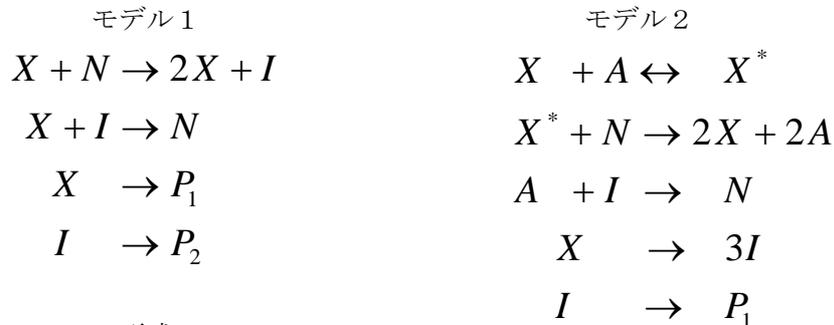


図 1: 各系での粒子分布。左から順に異成分間結合が強くなっていく。

【例 2、自己増殖系】

自己増殖過程は、細胞分裂や自己触媒的な化学反応など非常にありふれた自然現象である。本研究では、化学反応系、細胞分裂による分化、バクテリアのコロニー形成の相違点や共通点を研究対象として、自己増殖系における形態形成の統一的な理解を目指す。その為にまずは基本のミニマルモデルの

構築をすすめている。基本モデルとして、 X (自己増殖因子)、 X^* (X の活性状態)、 A (活性化因子)、 N (栄養因子)、 I (抑制因子) の5種程度から構成される反応式群を設定する。モデルの妥当性を検討する為に、バクテリアのコロニー形成、チューリングパターンの形成、時空間振動パターンの形成についてモデルを適用させた。今回適用した基本モデルは以下の2つである。



○バクテリアのコロニー形成

単細胞生物であるバクテリアは培地の硬さと栄養物濃度に応じて、様々な形状のコロニーを形成する事が知られている。Mimura らによる反応拡散方程式モデルでは、多様な形状のコロニー形成を比較的よく再現している[2]。本研究では基本モデル1を元に実験事実等を反映した独自のCA計算規則を立て、多様な形状をある程度再現した(図3)。

○チューリングパターンの形成

細胞分裂における分化過程(形態形成)で重要な役割を果たすと考えられる活性因子-抑制因子の効果を検討しておく為、チューリングパターンの形成過程を調べた。本研究では基本モデル1を元にして本研究独自の計算規則により、典型的なチューリングパターンが再現された(図4)。

なお基本モデル2を用いても、チューリングパターンは再現されている。

○時空間振動パターンの形成

時空間振動パターンの代表例としては、周期的な酸化還元反応が繰り返されるBZ反応が挙げられる。BZ反応の数理モデルとしてオレゴネーターは現象を良く再現している。本研究では基本モデル2を用いて、BZ反応で見られる様な時空間振動パターンやパターンの自己複製も再現した(図5)。

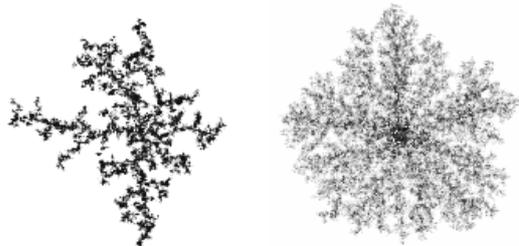


図3 : バクテリアのコロニー形成

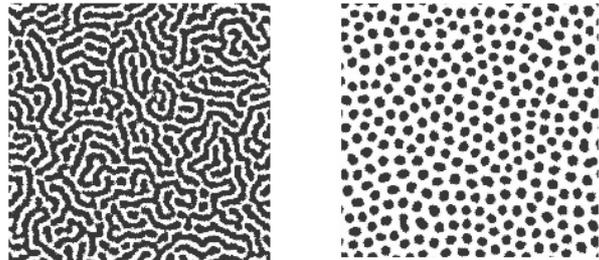


図4 : チューリングパターン

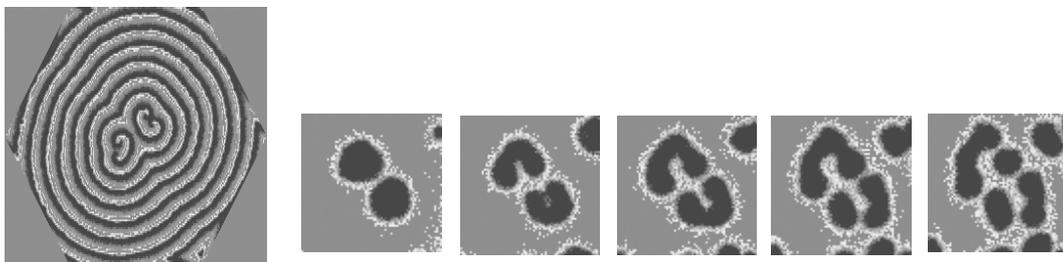


図5 : 時空間振動パターン。BZ反応で見られる様な同心円パターン(左)。パターンの自己複製(右)。

参考文献

[1] S. Yaguma, K. Odagiri, and K. Takatsuka, *Physica D* **197**, 34 (2004).
 [2] M. Mimura, H. Sakaguchi, and M. Matsushita, *Physica A* **282**, 283 (2000).