

シミュレーションについて

Physics Lab. 2020 生物物理班

20020/09/20, 21

1 物理シミュレーションとは

物理ではこれまで実際に対象を様々な環境や条件にすることで性質等を調べ上げる実験的アプローチと、物理の基本方程式や既に知られている経験則的な法則等の数式を用いて現象を理解しようとする理論的アプローチが主に行われてきました。しかし、近年の計算機の能力のめざましい向上から、計算機を用いて物理現象を理解しようという試みが行われています。それがシミュレーション的アプローチです。

シミュレーションでは、調べたい現実の対象から何らかの形で計算機で再現できるようなモデルを構成し、これに様々な状況を与えることができます。

また、物理で広く使われている方程式は微分方程式の形を取っています。微分は無限小の幅の変化についての式ですが、シミュレーションでは無限小を取り扱うことはできません。そこで、とても小さいけれど無限に小さいわけではない幅での変化として微分方程式を近似し、差分方程式として取り扱うことで物理の方程式を再現できます。¹

シミュレーションは対象のモデルの精度や微分を近似した際の誤差などに注意が必要ですが、知りたい性質に対して十分な精度のモデルを用意し、知りたい性質と比べて十分誤差が無視できるような近似を行うことができれば、実験と理論のいいとこ取りができる手法です。

2 今回のシミュレーションの目的

実験で観察された螺旋波の形成や、粘菌の密度、異なる性質を持つ粘菌種の混合による螺旋波の変化を粘菌の簡単なモデルから再現し、調べること。

3 用いたモデル

粘菌のモデルとしては、反応拡散の力学系という既に調べられている分野からの類推と既に知られていた粘菌の状態変化の研究から、休止期、興奮期、不応期の3状態を考える3状態モデルを用いました。休止期では自身の周囲のcAMPの濃度を観察し、一定の閾値以上になると興奮期に移行します。興奮期

¹微分方程式を差分方程式にする例
物質の拡散を表す拡散方程式は2次元の場合

$$\frac{\partial}{\partial t}u(x, y, t) = c\nabla^2u(x, y, t) = c\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)u(x, y, t)$$

と表されます。これを差分方程式にした場合、シミュレーションでの x の刻み幅を Δx 、 y の刻み幅を Δy 、時間の刻み幅を Δt とすると、2次元の拡散方程式の差分方程式は

$$\frac{u(x, y, t + \Delta t) - u(x, y, t)}{\Delta t} = c\left(\frac{u(x + \Delta x, y, t) - 2u(x, y, t) + u(x - \Delta x, y, t)}{\Delta x^2} + \frac{u(x, y + \Delta y, t) - 2u(x, y, t) + u(x, y - \Delta y, t)}{\Delta y^2}\right)$$

となります。これが差分方程式の拡散方程式です。この差分方程式は $\Delta x, \Delta y, \Delta t$ を十分小さく選ぶことで現実の拡散を再現でき、 $\Delta x, \Delta y, \Delta t \rightarrow 0$ の極限で元の微分の拡散方程式に一致します。

ではある時間の間準備として待機したのち、粘菌の種ごとに決められた量の cAMP を周囲の放出します。決められた時間が経過すると次の不応期に移行します。不応期では周囲の cAMP を観察することもなく、放出もせずに何もしません。種ごとの決められた時間が経過すると休止期に移行します。3 状態モデルはこの 3 つの状態の移行を繰り返すモデルです。

異なる種類の粘菌モデルとして興奮期と不応期の時間がより長いものも用意しました。

実験では粘菌が十分に薄く広がり、2次元に分布するとみなせることを踏まえて、二次元の小さなマスに cAMP の濃度を割り当て、その上に粘菌が存在するようにしました。他にも、シミュレーションをする上で放出された cAMP が周囲に拡散していくこと、粘菌が cAMP を分解する酵素を周囲に放出していることも考慮しました。

4 結果・考察

拡散の量のパラメータや粘菌の密度を調整すると、実験でみられたような螺旋波やターゲットパターンが発生、維持されることが観察されました。

また、実験で観察されていた細胞の種類によって螺旋波の速度が変わる現象を再現することができました。特に興奮期に cAMP を放出する時の準備時間が大きく影響していることがわかりました。

一方で、螺旋波の形が初期条件や粘菌の配置に強く依存し、複数回の実験でも同じような螺旋波が観察されたことは矛盾する結果となりました。

また、螺旋の形成はパラメータの変化に敏感で、密度や拡散や減衰の定数、粘菌モデルの各種時間を変化させると螺旋波が形成されず崩れてしまう場合や cAMP がなくなってしまう興奮期に移行できない場合、あるいは逆に cAMP が飽和して秩序だった波が生成されない場合などが確認できました (図 4)。現実の系ではこれより広い範囲で螺旋波が観測できるため、こうした不安定な状態を安定化させる機構が含まれているのではないかと考えられます。

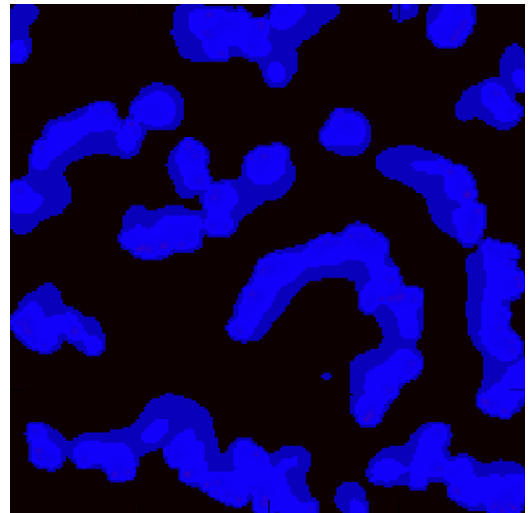


図 1: うまくいかなかった例