

成長するひも状オブジェクトの 折りたたみについて

山崎研 M2 藤本将太郎

2016/07/08

アウトライン

- 研究背景
- 研究目的
- モデルの提案 + シミュレーション結果
 - ひも状細胞を弾性体としてとらえるモデル
 - 自然長増大による成長
 - 自然長, バネ定数を一定に保つモデル
 - 三角格子上で動くひも状オブジェクトのモデル
- 今後の課題

研究背景

Bacillus subtilis の栄養寒天培地上での成長パターンの研究

■ 寒天の硬さと栄養濃度によって生成されるパターンの分類とモデル化

- 1) K. Kawasaki, A. Mochizuki, M. Matsushita, T. Umeda, and N. Shigesada. Modeling spatio-temporal patterns generated by *Bacillus subtilis*. Journal of Theoretical Biology, Vol. 188, No. 2, pp. 177-185, 1997.

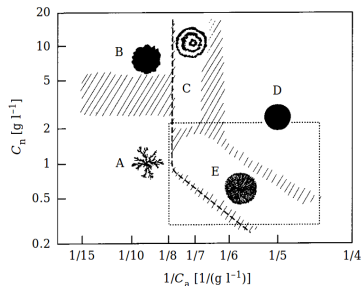


図 1 : 寒天の硬さと栄養濃度によって生成されるパターン¹⁾

研究背景

- 寒天が硬く，栄養濃度が高い条件下で成長初期に見られるひも状パターン
 - 2) Ryojiro Honda, Jun ichi Wakita, and Makoto Katori. Self-elongation with sequential folding of a filament of bacterial cells. Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 84, No. 11, p. 114002, 2015.



図 2 : バクテリア細胞のひも状構造のスナップショット ²⁾

研究背景



図 3 : バクテリア細胞の時間発展 (脇田研により撮影。x20, 900 倍速)

研究目的

- 2次元平面内でのひも状オブジェクトの挙動を記述するモデルを作成
 - 寒天培地上での細胞の成長の記述
 - 全長の指数関数的成長, k-folding 領域の長さに関する微分方程式の解の挙動を再現
- 平面上の1次元ひも状オブジェクトと見なせる他の現象の記述
 - Viscous fingering
 - Rayleigh–Taylor 不安定性

モデル

いくつかのモデルを作成

- ひも状細胞を弾性体としてとらえるモデル
 - 自然長増大による成長
 - 自然長，バネ定数を一定に保つモデル
- 三角格子上で動くひも状オブジェクトのモデル

ひも状細胞を弾性体としてとらえるモデル

- N 個の質点がそれぞればねで 1 次元的に繋がれている
- ばねの伸びによるフック則に従う力 F^s
- 曲げ弾性による力 F^b

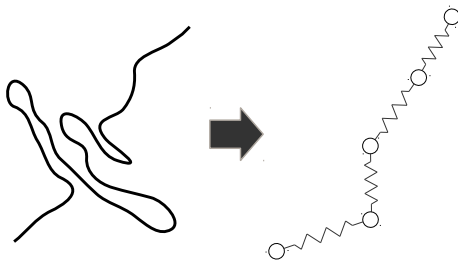


図 4 : ひも状細胞の質点とばねによるモデル化

運動方程式を立てて、オイラー法などで数値的に計算する

各質点に対する運動方程式

i 番目 ($i \in [0, N-1]$) の質点 ($m=1$) に関する運動方程式

$$\ddot{\mathbf{r}}_i = F_i^s + F_i^b - \gamma \dot{\mathbf{r}}_i \quad (1)$$

$$F_i^s = -K_{i-1}(d_{i-1} - n_{i-1}) + K_i(d_i - n_i) \quad (1.a)$$

$$\begin{aligned} F_i^b = E_i & \left(\frac{\mathbf{r}_{i-1} + \mathbf{r}_{i+1}}{2} - \mathbf{r}_i \right) \\ & - \frac{1}{2} E_{i-1} \left(\frac{\mathbf{r}_{i-2} + \mathbf{r}_{i+2}}{2} - \mathbf{r}_{i-1} \right) \\ & - \frac{1}{2} E_{i+1} \left(\frac{\mathbf{r}_i + \mathbf{r}_{i+2}}{2} - \mathbf{r}_{i+1} \right) \end{aligned} \quad (1.b)$$

各質点に対する運動方程式

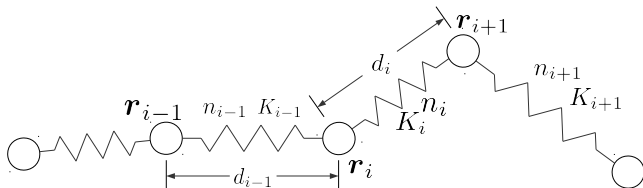


図 5 : 質点とばねに関する物理量

r_i : i 番目の質点の位置ベクトル

K_i : i 番目と $i+1$ 番目の質点間のバネのバネ定数

n_i : i 番目と $i+1$ 番目の質点間のバネの自然長

d_i : i 番目と $i+1$ 番目の質点間の距離

E_i : $i-1, i, i+1$ 番目の 3 つの質点により決まる曲げ弾性係数

各質点に対する運動方程式

- ひもの先端と終端がつながっている場合 (= 閉):
 - K_{-1} や n_{-1} , d_{-1} , E_0 , E_N は質点 0 と質点 $N-1$ の間で定義
- ひもの先端と終端が繋がれていない場合 (= 開):
 - $K_{-1} = E_0 = E_{N-1} = 0$ と再定義

行列式への変換

- \mathbf{x} : x 座標に関する配列
- \mathbf{y} : y 座標に関する配列
- $\dot{\mathbf{x}}$: x 方向の速度の配列
- $\dot{\mathbf{y}}$: y 方向の速度の配列

F_i^S を x 成分と y 成分で分けて考えると,

$$F_{x_i}^S = Z_i \cdot \mathbf{x}, \quad F_{y_i}^S = Z_i \cdot \mathbf{y}$$

このとき

$$Z_i = \begin{pmatrix} \cdots & 0 & -z_{i-1} & z_{i-1} + z_i & -z_i & 0 & \cdots \end{pmatrix} \quad \text{ただし } z_i \equiv K_i \left(\frac{n_i}{d_i} - 1 \right)$$

よって

$$F_x^S = Z \cdot \mathbf{x}, \quad F_y^S = Z \cdot \mathbf{y}.$$

行列式への変換

$$Z = \begin{pmatrix} z_{-1} + z_0 & -z_0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & -z_{-1} \\ -z_0 & z_0 + z_1 & -z_1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & -z_{N-3} & z_{N-3} + z_{N-2} & -z_{N-2} \\ -z_{-1} & 0 & \cdots & \cdots & 0 & -z_{N-2} & z_{N-2} + z_{N-1} \end{pmatrix}.$$

行列式への変換

$$z = \begin{pmatrix} z_{-1} & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & z_0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & \ddots & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & z_{N-3} & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & z_{N-2} \end{pmatrix}, \quad z^u = \begin{pmatrix} 0 & z_0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & \ddots & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & z_{N-3} & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & z_{N-2} \\ z_{-1} & 0 & \cdots & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

$$z^l = \begin{pmatrix} 0 & \cdots & \cdots & 0 & z_{-1} \\ z_0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \cdots & \ddots & \cdots & 0 & 0 \\ \cdots & 0 & z_{N-3} & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & 0 & z_{N-2} & 0 \end{pmatrix}, \quad z^{ul} = \begin{pmatrix} z_0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & z_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & \ddots & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & z_{N-2} & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & z_{N-1} \end{pmatrix}$$

のように表すことにすると,

$$Z = z + z^{ul} - z^u - z^l$$

行列式への変換

同じように、曲げ弾性による力 F_i^b を x 成分と y 成分で分けて考えると、

$$F_{x_i}^s = B_i \cdot x, \quad F_{y_i}^s = B_i \cdot y$$

$$B_i^T = \begin{pmatrix} \vdots \\ 0 \\ -\frac{1}{4}E_{i-1} \\ \frac{1}{2}E_i + \frac{1}{2}E_{i-1} \\ -E_i - \frac{1}{4}E_{i-1} - \frac{1}{4}E_{i+1} \\ \frac{1}{2}E_i + \frac{1}{2}E_{i+1} \\ -\frac{1}{4}E_{i+1} \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

行列式への変換

これを z と同様に行列 e

$$e = \begin{pmatrix} E_{-1} & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & E_0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & \ddots & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & E_{N-3} & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & E_{N-2} \end{pmatrix}$$

と、その上下左右へ要素を平行移動した行列 $e^l, e^d, e^r, e^u, e^{ld}, e^{rd}, e^{lu}, e^{ru}$ を考えると、

$$B = -\frac{1}{4} (e^{ld} + e^{rd} + e^{lu} + e^{ru}) + \frac{1}{2} (e^l + e^d + e^r + e^u) - e$$

となる。

自然長増大

- ひも状オブジェクトの成長を記述するために、バネの自然長が増大するようにする
- 自然長がある閾値を超えた時、その線分要素を内分する新たな点を追加 (\Rightarrow 増殖)
- n_k : 時刻 t_k , ($k = 0, 1, \dots, n$) における自然長

$$n_{k+1} = n_k + \alpha \Delta t_k$$

α : 単位時間あたりの自然長の成長率

- 線分の単位長さあたりのエネルギーが保存されるように各時刻におけるバネ定数 K_k を

$$K_{k+1} = K_k n_k / n_{k+1}$$

のように補正

分裂時の操作 (位置, 速度)

自然長がある一定の閾値 (n_c) を超え, 点を追加する際に更新される物理量

- 質点の速度
- 自然長
- バネ定数

二つの質点の中点の座標に新たな質点を追加する:

$$\mathbf{r}_j = \frac{\mathbf{r}_{i+1} + \mathbf{r}_i}{2}$$

- 新たに追加する点の速度は両端の2点の速度の平均
- 運動量の保存 追加した点に与えた分だけ2点は運動量を失う

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{v}_j^{k+1} = \frac{\mathbf{v}_i^k + \mathbf{v}_{i+1}^k}{2} \\ \mathbf{v}_i^{k+1} = \mathbf{v}_i^k - \frac{1}{2}\mathbf{v}_{i+1}^k \\ \mathbf{v}_{i+1}^{k+1} = \mathbf{v}_{i+1}^k - \frac{1}{2}\mathbf{v}_i^k \end{array} \right.$$

分裂時の操作 (自然長, バネ定数)

分断された二つのばねの長さの比が次の自然長の比となる
今の場合分割された二つのばねの自然長は, 分裂前の自然長の 1/2

$$n_j^{k+1} = n_{j+1}^{k+1} = \frac{n_i^k}{2}$$

分裂の前後でエネルギー保存

$$K_j^{k+1} = K_{j+1}^{k+1} = 2K_i^k$$

実演

シミュレーション結果

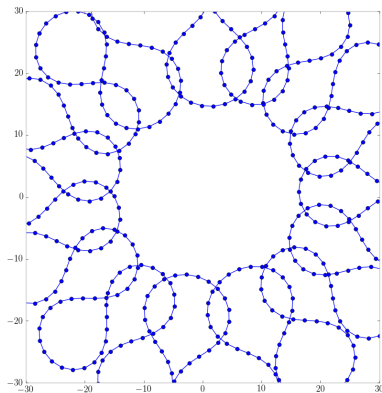


図 6 : 閉条件でシミュレーションを行った場合

シミュレーション結果のまとめ

- 適切なバネ定数，弾性係数を設定する必要がある
- バネの本数は倍々に増え，全体の長さは指数関数的に増えていると見なせるかもしれない
- 1 回折れ曲がってできた 2 本のひも状構造がくつつきながら成長していく振る舞いは観察されない
∴ バネの重なりを許しているため

自己排他性を追加した場合

各バネの交差が起こらないようにルールを変更

- 質点位置の更新のタイミングで交差判定を行う
- 交差している箇所について、その交差を解消するように新しく移動後の点を取り直す
- 他の箇所に対しても再度交差判定を行う
- 最終的に交差した箇所がなくなるまで過程を続ける
- この間に時間ステップは進めず、最終的な配置が決定してから時間ステップを1進める

自己排他性を追加した場合

うまくいっていない。

- 一般的には剛体球ポテンシャルなどを仮定
 - 自然長が増大+長さ一定の保証なし → 線分の交差判定
 - (と思っていたが，自然に実装できる?)
- 交差解消が無限ループ

自然長，バネ定数を一定に保つモデル

先ほどのモデルの問題点を解決するため

- 自然長，バネ定数を一定に保つ
- ある時間間隔ごとにランダムに点を1つずつ追加し，成長を再現

シミュレーション結果

(実演)

うまくいっていない。

- 点を追加した際にすぐ発散してしまう
- 適切なパラメータと，斥力ポテンシャルの設定が必要

三角格子状で動くひも状オブジェクトのモデル

- 質点の位置を 2 次元ユークリッド空間上の点ではなく、格子間距離が一定となるような 2 次元格子上の点とする
 - 隣接する質点とは必ず等しい距離を保つことができる
 - 格子点を占めることのできる点の数を 1 つにすることで自己排他性を担保
- 三角格子を考える (正方格子: 4 回対称性, 三角格子: 6 回対称性)

三角格子の構成方法

三角格子をプログラム上で扱うのに適した形とするため

- 内部では行列
- 隣接関係を再定義
- 描画には図7のように潰した形を考える

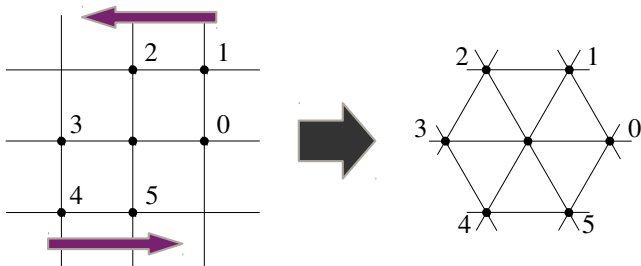


図7: 2次元正方格子を三角格子に対応させるための隣接関係の再定義

また、周期境界条件を課す。

ひも状オブジェクトの表現

- 始点となる格子点の座標 (正方格子における (行, 列)) を定める
- 始点から次の格子点へのベクトルを, 6 方向の単位ベクトル (図 8) u_α ($\alpha \in \{0, 1, \dots, 5\}$) のうちのひとつで表現
- オブジェクトの構成要素数だけベクトルの列を繋げれば, 全体が表現できる
- ひも状オブジェクト S は以下:

$$S = ((x, y), (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{N-1})), \alpha_i \in \{0, 1, \dots, 5\}$$

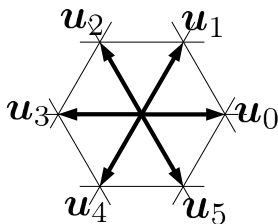


図 8 : 6 つの基本ベクトル

ひも状オブジェクトの格子への配置

重なりなく配置格子点を配置 → 自己回避ランダムウォーク (SAW) の問題

- 1 格子全体から占有されていない点をランダムに一つ選択
- 2 選択された点の隣接点で占有されていないものへ向かうベクトルをランダムに一つ選択

以上を繰り返せば良い。

Remark:

- deadlock 状態:
構成要素数が多くなり、隣接点がすべて占有されてそれ以上点を増やすことができない状態
- deadlock となった時は、一つ前のステップにさかのぼり、将来 deadlock する方向のベクトルを除く、占有されていない点に向かうベクトルを選択 (再帰的過程)

※すべてのパターンを試行しても deadlock となる場合、初期点を選ぶところからやり直す

「成長」を記述するまでの脱線

本来は三角格子上でのひも状オブジェクトの成長を記述するものだが
すこし脱線して三角格子上で遊んでみた

- 三角格子上の Vicsek モデル (本人が論文を書いている)
 - 三角格子上に 6 方向の単位ベクトルのうち 1 つを配置していく
 - 近隣のベクトルの影響を受けて次の時刻のベクトルの向きを決定
 - 温度 (ランダムネス) をパラメータとして相転移が見られる
- 「頭」からランダムに動く
 - deadlock したらそこで終了
 - オブジェクトサイズと deadlock するまでの時間の関係
 - 取りうる配置のうち、 $N - 1$ 回 deadlock しない配置を選んだ後、 N 回目に deadlock するパターンを選ぶ試行と統計的に等しい

三角格子状でのひも状オブジェクトの成長

WIP ...

- 三角格子上でのひも状オブジェクトの成長
- 自然長増大のモデルで剛体球ポテンシャルを導入
 - 緩和時間より長い間隔で成長すれば，適用可能？

参考文献

- K. Kawasaki, A. Mochizuki, M. Matsushita, T. Umeda, and N. Shigesada. Modeling spatio-temporal patterns generated by *bacillus subtilis*. Journal of Theoretical Biology, Vol. 188, No. 2, pp. 177-185, 1997.
- Ryojiro Honda, Jun ichi Wakita, and Makoto Katori. Self-elongation with sequential folding of a filament of bacterial cells. Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 84, No. 11, p. 114002, 2015.
- Zoltán Csahók and Tamás Vicsek. Lattice-gas model for collective biological motion. Phys. Rev. E, Vol. 52, pp. 5297-5303, November 1995.