

QDpy を用いた反応拡散モデルの最適化

吉田 瑠華 (指導教員：オベル加藤ナタナエル)

1 はじめに

分子群ロボットの振動する自己組織化を制御するためには、振動するシグナルが必要である。今回、私の研究では、振動するシグナルのシミュレーションと最適化のフレームワークを実装し、それを分子捕食者-捕食者システムに適用することに成功した。

1.1 自己組織化

物質や個体が、系全体を俯瞰する能力を持たないのに関わらず、個々の自律的な振る舞いの結果として、秩序を持つ大きな構造を作り出す現象のことである。

1.2 分子群ロボット

群ロボットとは、局所的な相互作用のみで複雑な組織化を行うことができる多数の自律的なロボットのことであり、普通のロボットと異なる点としては、各要素は極めて小さい(10 μ m)、各要素は単純で同一な規則によって行動する、全体的な行動を規定する規則は存在しない、ボトムアップで構築される、の4点が挙げられる。

1.3 反応拡散

反応拡散系とは、物質がお互いに変化し合うような局所的な化学反応と、空間全体に物質が広がる拡散の、二つのプロセスの影響によって変化する様子を数理モデル化したものである。

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a\Delta u + f(u, v) \quad (1)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = d\Delta v + g(u, v) \quad (2)$$

a, d は拡散定数、 Δu , Δv は u, v のラプラシアン、 $f(u, v)$, $g(u, v)$ は化学反応式である。

1.4 捕食者被食者システム

生物の捕食-被食関係による個体数の変動を表現しています。捕食-被食関係を数学的モデルにしたものにロトカ-ヴォルテラの方程式がある。

$$\frac{dx}{dt} = ax - bxy \quad (3)$$

$$\frac{dy}{dt} = cxy - dy \quad (4)$$

この式から予想される捕食者と被食者の集団の行動は、以下の4パターン(両種の絶滅、餌生物のみの定常状態、持続的な振動、減衰した振動の後に捕食者と餌生物の安定した共存)になる。捕食者-捕食者モデルはこの研究においては活性化因子-抑制因子モデルと置き換えられる。

2 方法

2.1 数理モデル

化学反応式を次の数理モデルに設定して、反応拡散方程式をたてた。式(1)は草を被食者が食べて増殖する自己触媒反応。式(2)は捕食者が被食者を捕食し、

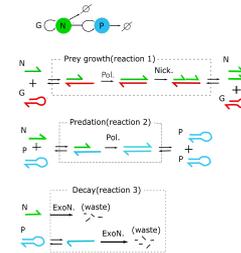


図1: 捕食者-被食者-草のネットワーク。ポリメラーゼ (Pol.) は二本鎖を拡張する酵素、ニッカーゼ (Nick.) は特定の領域を切る酵素、エキソヌクレアーゼ (ExoN.) は一本鎖 DNA を切断する酵素である。

増殖する自己触媒反応。式(3)は捕食者や被食者が死亡する反応式(1)(3)は Michaelis-Menten 式に、式(2)は質量作用速度論に従う。式(4)(5)は式(1)(2)(3)の化学反応に加え、拡散も加味した微分方程式である。 Δp , Δn はラプラシアンを表す。

$$G + N \rightarrow G + N + N \quad (5)$$

$$N + P \rightarrow 2P \quad (6)$$

$$N, P \rightarrow \phi \quad (7)$$

$$\frac{dn}{dt} = \frac{g \cdot n}{1 + \beta \cdot g \cdot n} - p \cdot n - \lambda \cdot \delta \cdot \frac{n}{1 + p} + Dn \cdot \Delta n \quad (8)$$

$$\frac{dp}{dt} = p \cdot n - \delta \cdot \frac{p}{1 + p} + Dp \cdot \Delta p \quad (9)$$

2.2 QDpy

評価関数と特徴量を設定し、QDpy を使って捕食者被食者分子生態系を最適化した。QDpy は、最近の Quality-Diversity アルゴリズムを Python で実装したフレームワークである。ネットワーク(今回は化学反応)と、評価関数と特徴量を入力すると、x 軸と y 軸に特徴量、色で評価値を持つ三次元の図で最適化の結果を出力する。

2.3 ミカエリスメンテン式

Michaelis-Menten equation とは酵素反応速度論の基本式である。

$$v = \frac{d[P]}{dt} = \frac{V_{max}[S]}{K_m + [S]}$$

V_{max} は基質濃度が無限大のときの反応速度である。 K_m はミカエリス・メンテン定数と言い、 $v = V_{max}/2$ (最大速度の半分)を与える基質濃度を表す。

2.4 初期設定

初期設定として、50*50 のセルに、捕食者、被食者、草が共存することにする。全面には草が、左上の 30*30 には被食者が、左上の 10*10 には捕食者がいる。初期の捕食者、被食者の位置は上記の通り固定の条件とし、

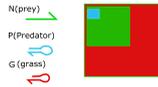


図 2: 被食者、捕食者、草の初期位置を示す。

変数として n の初期濃度, p の初期濃度, g の初期濃度とそれぞれの拡散係数, β , δ , γ を最適化する。

3 シミュレーション結果

QDpy を使ってシグナルの自己組織化を二つの評価関数で評価した。

3.1 実験 1

$t=15$ の時の濃度の合計を今までの時系列の中の n 濃度の最大値*セルの数で割って標準化した値を評価値とした。 β が小さい方が, 被食者の初期値が小さい方が評価値が大きい。

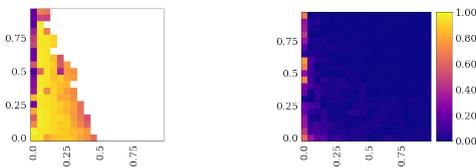


図 3: $x=n$ の偏差, $y=\beta$ 図 4: $x=init_n, y=\beta$

3.2 実験 2

評価値を $t=15$ の時の $50*50$ セルの対角線上の波の数に設定した。 β が小さい方が評価値が大きい。被食者の初期値には若干の相関が見られたが濃度の合計を評価値に設定した場合と比べて顕著には見られなかった。



図 5: $x=n$ の偏差, $y=\beta$ 図 6: $x=init_n, y=\beta$

3.3 実験 3

実験 1 と実験 2 の結果を実際に検証するために, $t=15$ の時の被食者の濃度をプロットし, 振動を形成するかを確認した。左二つの図は, 他の 8 変数は固定し n の初期値がそれぞれ $0.12, 0.90$ の場合の図である。波の数はどちらも 6 個であり, n の合計濃度も $5912, 4513$ であった。これらをまとめると, 波の数も, 濃度の合計も n の初期値との顕著な相関は見られなかった。右二つの図は, β の値がそれぞれ $0.0013, 0.90$ の場合の図である。波の数はそれぞれ 6 個, 0 個であり, n の濃度も $5912, 18$ であった。これらをまとめると, β が小さければ小さいほど, n は多く波を形成し, 濃度も高く



図 7: n の初期値と β を変更

なる。

4 まとめと課題

今回, 振動するシグナルのシミュレーションと最適化のフレームワークを実装し, それを分子捕食者-捕食者システムに適用することに成功した。今後は, n の初期値や β 以外にもより良い振動システムを与える条件を分析し探すつもりである。より複雑な分子ロボットの動きを可能にするために, シグナルを増やしたモデルやロトカ・ヴォルテラ競争方程式などの振動ネットワークも使ってシミュレーションを行い, より複雑な自己組織化をする分子群ロボットのシミュレーションに役立てていきたい。

参考文献

- [1] Teruo Fujii and Yannick Rondelez, Predator-Prey Molecular Ecosystems, 2013
- [2] Adrien Padirac, Teruo Fujii, André Estevez-Torres, and Yannick Rondelez: Spatial Waves in Synthetic Biochemical Networks, 2013
- [3] H. Dehne, A. Reitenbach, A. R. Bausch: Reversible and spatiotemporal control of colloidal structure formation, 2021
- [4] Anis Senoussi, Jean-Christophe Galas, André Estevez-Torres: Programmed mechano-chemical coupling in reaction-diffusion active matter, 2021
- [5] Masami Hagiya, Akihiko Konagaya, Satoshi Kobayashi, Hirohide Saito, and Satoshi Murata: Molecular Robots with Sensors and Intelligence, 2014
- [6] Nathanael Aubert-Kato, Ibuki Kawamata, Andre Estevez-Torres, Charles Fosseppez, Huy Dinh, Masami Hagiya, Nicolas Bredeche, Guillaume Gines, Leo Cazenille, Yannick Rondelez: Evolutionary Optimization of Self-Assembly in a Swarm of Bio-micro-robots, 2017
- [7] Leo Cazenille, Nicolas Bredeche, Nathanael Aubert-Kato: Exploring Self-Assembling Behaviors in a Swarm of Bio-micro-robots using Surrogate-Assisted MAP-Elites, 2017