

## 原始細胞の発生と進化の抽象モデル

東京大学総合文化研究科

○小野直亮 池上高志

{nono,ikeg}@sacral.c.u-tokyo.ac.jp

### Abstract Model of Emergence and Evolution of Primitive Cells.

Naoaki Ono Takashi Ikegami

#### Introduction

原始地球の海の中で、最初の細胞がどのようなものであったか、そしてそれがどのようにして形成されたのかという問いは、生命の起源に関する問題のなかでも最も重要なものの一つである。そのような原始の細胞に最低限要求される性質には何があるだろうか。細胞の自己維持の性質が挙げられる。生命の基本構造として、細胞には、代謝によって膜分子を供給し、成長し、分裂するという性質が要求される。そのような性質がどうやって原始的な化学反応の世界で獲得されたのかについては、手がかりがほとんどないのが現状である。また、細胞膜の自己組織化と、膜分子の代謝とが考慮されているような原始細胞についての理論的なアプローチとしては今まで Varela & McMullin [1] や Barry & McCaskill [2] などが提案したモデルがあるが、これらのモデルでは、細胞が形成され、進化してくる過程については議論されていない。

我々は簡単な物理モデルによって原始細胞の代謝と膜の形成のモデルを構成した [3]。そして、細胞のような構造を持たない原始的な化学反応の系から細胞のように代謝によって自分自身を維持する構造が形成されることを示し、さらにこの構造が成長し、自発的に分裂することでその数を殖やしてゆくことを示した。

#### Model

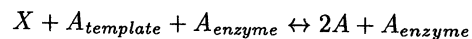
二次元空間上の化学分子の拡散と反応を離散化された確率的ダイナミクスでシミュレートする。化学分子は抽象的な記号として扱われ、格子状の反応空間を移動しながら互いに相互作用する。一つのサイトには任意の数の分子が入ることができ、同じサイト内の分子同士で化学反応することができる。シミュレーションの手法としては、1ステップごとに全ての分子に対して隣接するサイトへの移動、分子の向きの回転、及び、別の分子への化学変化の確率を計算し、乱数によって次のステップでの状態を決定する方法をとっている。その遷移確率は次のように計算される。

各々の分子に対し分子の化学ポテンシャルと周囲の分子との力学的相互作用による空間ポテンシャルを考え、状態遷移の確率  $p$  は遷移前と後の二つの状態の間の分子のポテンシャルの差 ( $\Delta E$ ) から次の式

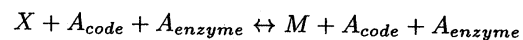
$$p = ke^{-\beta\Delta E}$$

によって与えられるものとする。 $k$  は、サイトの移動の場合には全ての分子に共通な定数 ( $k_{\text{dif}}$ )、向きを持つ分子の回転の場合には ( $k_{\text{rot}}$ )、分子の化学変化の場合にはそれぞれの反応経路に与えられた値をとる。係数  $\beta$  はこのシミュレーションの中では規格化されて 1 に固定されている。

化学反応の経路としては原始的な自己触媒反応系として単純なハイパーサイクルを考える。自己触媒分子  $A$  があり、 $A$  は原料となる高ポテンシャルの分子  $X$  から別の  $A$  を鋳型として  $A$  自身を複製する反応を触媒する。



この自己触媒反応とは別に、 $A$  は細胞膜の構成要素となる分子  $M$  の生成も触媒するものとする。



この触媒反応により、 $X$  と  $A, M$  との間の反応の係数 ( $k_A, k_M$ ) は、反応するサイトにある触媒分子の数に依存した値を持つ。サイト  $x$  の分子  $A$  の密度 (そのサイトにある  $A$  の数) を  $A(x)$  と書くとするとそのサイトでの反応の係数は

$$k_A(x) = k_{A0} + C_A A(x)^2$$

のような形となる。 $k_{A0}$  は触媒がない場合の自発的な反応の係数を、 $C_A$  は  $A$  による触媒反応の活性をそれぞれ表している。 $X$  を含むすべての分子は自発的に低ポテンシャルの分子  $Y$  に分解する。この係数はすべての分子に共通で  $k_Y$  とする。また、このままでは系全体が熱平衡に至った状態で定常になるのが自明なため、系が非平衡状態にあって、エネルギーの供給と散逸があることを仮定する必要がある。ここでは  $Y$  から  $X$  が一定の速度で生成されていることを仮定し、 $X$  から  $Y$  への反応係数  $k_Y$  に対し、 $Y$  から  $X$  への反応係数は  $k_Y + S_X$  となっている。また、このシミュレーションではこの 4 種類の分子の他に、化学反応には加わらない媒質の水分子に相当するものとして分子  $W$  を加え、全部で 5 種類の分子を扱う。

次に分子同士の空間的な相互作用を考える。5 種類の分子のうち、 $A, W$  の 2 種と  $M$  とは水と油のように互いに反発する性質を持っているが、 $X$  と  $Y$  は中立で、どちらとも反発はしないものとする。この相互作用により、分子の空間

ポテンシャルは、近傍のサイト上の分子の持つ反発ポテンシャルの値を合計したものとなる。以下のシミュレーションでは、 $M$  の作るポテンシャルに分子の向きに依存する異方性がある場合を考え、 $M$  の向きによって、となりのサイトの分子と強く反発する方向と殆んど反発しない方向があるものとしている。この異方性により  $M$  の回転による向きの変化を考える必要が生じるが、これは分子の反応、拡散と同様に式 (1) を用いて回転の前後のポテンシャルの差より遷移確率を計算し、その確率に従ってランダムに向きを変えるものとしている。またこの時、向きの異なる  $M$  同士の間でも互いに反発し合うことを仮定し、近くにある  $M$  同士は向きを揃えようとする性質を持つものとしている。

### Results

初期状態として空間全体に一樣に  $A$  が分布した状態からシミュレーションを始める。初期の  $A$  の密度とリソースの供給率が十分に高ければ、 $A$  は自己複製を続け、密度を一定に保つことができる。このとき  $A$  は同時に  $M$  を生産するが、生産された  $M$  は  $A$  や  $W$  と反発するため、相分離によりそれぞれの分子が空間的に互いに排斥し合ったクラスターが形成される。反発に異方性がなければこのクラスターは水面の油滴のように円い形が最も安定であり、 $Y$  への分解と  $A$  による供給とのつり合いによって、Turing-pattern によく見られるようなスポットのパターンを最終的な定常状態として作り出すことが示せる。しかしこのモデルでは  $M$  に異方性があるため、そのクラスターは反発の弱い方向に押し潰され、反発の強い方向に引き伸ばされた細長い構造をとろうとする。その結果、向きによる反発の差が大きい場合では、図 1a に示したような細く伸ばされたクラスター同士が繋がり合い適当な間隔で分散したひも状のパターンが形成される。

このようにひも状につながった  $M$  のクラスター (以下  $M$  の“膜”と呼ぶことにする) は、場合によってはある領域を囲い込む形になり、閉じた領域を作り出す。ただし、この膜は、分子  $A$  は通過させないが  $X, Y$  は通過させる半透膜となっている。そのため膜の内側の  $A$  の密度が少しでも周囲より高くなった場合、 $A$  の自己触媒反応で  $X$  が消費される速度も速くなり、内部の  $X$  の密度が低くなる。すると、周りの領域との濃度差に従って膜の外側から内側へ  $X$  が流入し、さらに  $A$  の複製反応を促すという正のフィードバックが働くことになる。この領域が周りの  $X$  を吸収し、成長してゆくのにに対し、膜の外側では  $X$  が不足してくるにより  $A$  の自己複製が維持できなくなる (図 1b)。

この膜に囲まれた領域 (以下“細胞”と呼ぶ) は成長するに従い、より多くの膜分子を生産する。やがて余剰となった分子  $M$  は細胞の内側に新しい膜を形成し始める (図 1c)。この新しい膜は細胞の成長に従って伸びてゆき、最終的に元の細胞を二つの娘細胞に分割する形となる。この成長と分

裂のプロセスは、周りから  $X$  が吸収できる限り繰り返されつづけ、細胞がその数を殖やしてゆくことがわかる (図 1d)。この結果は原始的な細胞が、前細胞的な代謝系のなかから自発的に形成されてくる可能性を示唆していると言える。今後このモデルをより詳しく解析し、このような「原始細胞」の発生と進化の過程、それを可能にする物理的な条件などを解明することを目標としている。

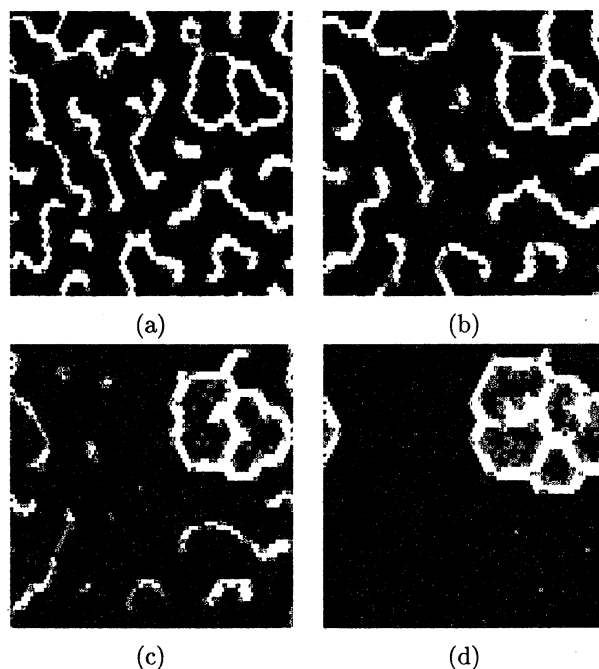


図 1: 一樣な初期条件からの細胞の形成。(a) 自己触媒分子が一樣に分布している状態から、代謝により膜分子が生成され、“膜”の断片 (白い領域) が形成される。(b) 膜が閉じた領域“細胞”の中へ、密度の差によって分子が集められてくる。(c) 細胞が成長し、内側に新しい膜を作り始める。細胞の外側では代謝が維持できなくなる。(d) 細胞が分裂を繰り返して、数を殖やしている。

### 参考文献

- [1] B. McMullin and F.J. Varela. Rediscovering computational autopoiesis. *Proc. of ECAL97* 38-47, 1997.
- [2] J. Breyer, J. Ackermann and J. McCaskill. Evolving Reaction-Diffusion Ecosystems with Self-Assembling Structures in Thin Films. *Artificial Life* 4, 25-40, 1998.
- [3] Ono, N. & Ikegami, T. Model of Self-Replicating Cell Capable of Self-Maintenance. *Proc. of ECAL99*, 399-406, 1999.