

論文の内容の要旨

論文題目 離散的反応系 — 分子の離散性がもたらす状態遷移
Discrete Reaction System — Transition induced by Discreteness of Molecules

氏名 富樫 祐一

反応系において、分子が離散的な存在であることによって、系の新たな振舞いが生ずる可能性について論ずる。

反応系の振舞いを考える際には、各成分の量（濃度）を変数とした微分方程式を用いることが多い。実際には、各成分は分子からなるものであり、その量（分子数）は離散的（整数）でしかありえない。分子が比較的多いうちは、ゆらぎを連続的なノイズと見なす確率微分方程式的な手法を用いることができる。さらに分子が少なくなると、その離散性そのものが無視できなくなる。

本論文では、微分方程式・確率微分方程式を用いた方法では現れない、分子の離散性が本質的であるような現象の可能性を、計算機シミュレーションに基づいて論ずる。

離散性による自己触媒系の状態遷移（第2章）

分子数の離散性による、連続極限（速度方程式）では現れないような新たな状態への遷移について論ずる。

モデルとして、4種類の成分からなる自己触媒的な反応のループ $X_i + X_{i+1} \rightarrow 2X_{i+1}$ （反応速度定数 r_i ）を用いる（ $X_5 \equiv X_1$ ）。反応容器（体積 V ）は、物質浴

(各成分 X_i の濃度 s_i) と接しており、拡散による分子の出入り (速さ D_i) があるものとする。

ここでは全ての成分が等価 ($r_i = r$, $D_i = D$, $s_i = s$) な場合を考える。連続極限では、各成分の濃度 x_i は安定固定点 ($x_i = s$) に収束してゆく。 V が十分に大きければ、系の振舞いはこれにゆらぎを加えたものとみなせる。

V が小さくなると、各成分 X_i の分子数 N_i が 0 にまで達するようになる。 $N_2 = N_4 = 0$ (1-3 rich 状態) もしくは $N_1 = N_3 = 0$ (2-4 rich 状態) に達すると、反応が完全に停止する。ただ 1 個の分子の流入により N_i が急激に変化する (スイッチする) 性質を持つことから、これらの状態をスイッチング状態と呼ぶことにする。

スイッチング状態は、分子数が、それが離散的であるがゆえに、完全に 0 にまで達することによって生じている。体積 V を変化させると、スイッチング状態への明確な遷移が見られる。各成分の分子の平均流入間隔 $1/DsV$ が、反応のタイムスケール $1/rs$ より長くなるのが、スイッチング状態が生ずるための条件である。

離散性による状態遷移をもたらすマクロな性質の変化 (第 3 章)

第 2 章で論じた離散性による状態遷移が、過渡的な現象にとどまらず、系のマクロな性質にも影響を及ぼしうることを示す。ここでは各成分の長時間平均濃度 \bar{x}_i を考える。

再び、第 2 章の自己触媒的な反応ループを用いる。今度は、パラメタ r_i , D_i , s_i が成分ごとに異なる場合を考える。

スイッチング状態が生ずるための条件は、各成分の分子の平均流入間隔 $1/DsV$ と反応のタイムスケール $1/rs$ との関係によっていた。パラメタが成分ごとに異なると、これらのタイムスケールにも成分ごとに違いが生ずる。

連続極限では \bar{x}_i は V によらない。分子の離散性を考えた場合、 V が小さくなりスイッチング状態が現れるようになると、 \bar{x}_i に変化が生ずる。

この変化を生ずる機構を、

- Case I 流入の離散性と反応速度の関係
- Case I' 流入の離散性の非対称性
- Case II 流入の離散性と流出の速さの関係

に分類して考える。

離散性による反応拡散系の定常状態の変化 (第 4 章)

反応拡散系において、分子の離散性によって成分の局在が生じ、それによって連続極限 (反応拡散方程式) とは異なる定常状態が生ずることを示す。

濃度の低い成分 A と、それによって生成される成分 B を考える。分子がその寿

命の間に拡散してゆく距離の典型値 (Kuramoto Length) $l = \sqrt{2D\tau}$ を考える (D は拡散係数、 τ は平均寿命)。

生成された分子 B の寿命が短いか拡散が遅く、 B の Kuramoto Length が A の平均分子間隔よりも十分に短ければ、成分 B は A 分子の周りに局在することになる。もし、成分 B の局在によって何らかの反応が (一様分布の場合よりも) 加速されるならば、連続極限 (反応拡散方程式) で考えた場合とは定常状態が変化する可能性がある。

例として、2次反応を含む反応拡散系を用い、定常状態の変化を議論する。

離散性によるパターン生成 (第5章)

分子の離散性が、反応拡散系のパターン生成にも影響を及ぼしうることを示す。

第4章で考えたように、分子の離散性は、成分の局在による定常状態の変化を生じうる。また、分子が有限時間内に拡散してゆく範囲は有限であり、拡散方程式のように無限遠まで瞬時に広がることは実際にはない。分子の離散性は、この2つの効果を通じて、パターン生成にも影響を及ぼしうる。

例として、第4章の反応拡散系で、拡散係数が成分ごとに異なる場合を考える。連続極限 (反応拡散方程式) ではパターンは生じないのに対し、分子の離散性を考えた場合にはスポット状のパターンが生成する可能性があること、またそれが上の2つの効果で説明できることを示す。

離散性による反応ネットワークのスイッチ (第6章)

反応が複雑なネットワークをなしている場合に、分子の離散性が与える影響について論ずる。特に、少数個の分子によって反応ネットワークの振舞いがスイッチされる可能性について考える。

前半では、4成分からなる反応ネットワークモデルを用いて、スイッチとして働く簡単な例を示す。

系が大きい (分子が多い) 時には、その振舞いは安定固定点の周りのゆらぎとしてとらえられる。系が小さくなると、いずれかの成分の分子数が0に達することにより、これとは別の2つの状態が現れる。これら3つの状態の間で、分子の流入に伴う自発的な遷移が観測される。この現象は、分子の離散性による反応ネットワークの変化 (切り離し) ととらえることができる。

後半では、多数の触媒反応がランダムに結合した系を用いて、分子の離散性を利用した状態のスイッチについて考える。外部から分子を加えた時の状態変化を観察する。

系が小さい場合には、いくつかの成分の分子数が0に達することによって新しい状態が生じており、少数個の分子を加えただけで別の状態にスイッチする。このた

め、同じ濃度に相当する分子を加えた時にも、系が大きい場合と比べて大きな変化を生じやすい。

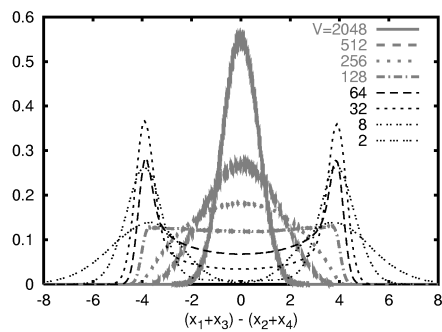
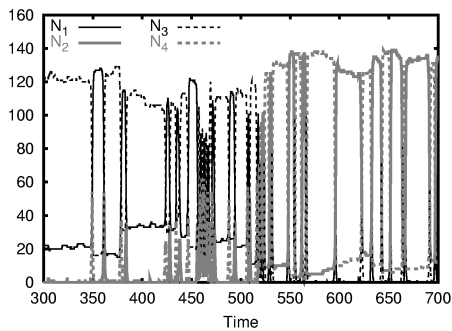
離散性によるネットワーク構造の変化（第7章）

酵素反応のネットワークを意識した複雑なネットワークで、分子の離散性がネットワークの実効的な構造にどのような影響を及ぼしうるか考える。

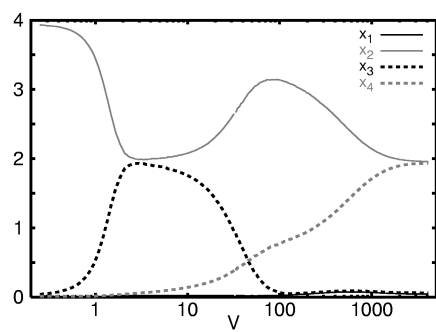
反応のモデルとして、ビット列の連結・切り離し $A + B \rightarrow A|B^*$, $A|B^* + C \rightarrow A + BC$ (A, B, C はそれぞれビット列) を用いる。反応がランダムに結合したネットワークを考える。存在可能な分子（ビット列）の種類は非常に多いが、実際に存在する成分はそのごく一部である。このため、実効的な（起こる可能性のある）反応のネットワークは、全ての反応のごく一部に限られる。

生物の細胞を意識して、外部から低分子（短いビット列）が供給されており、細胞内の物質の総量（総ビット数）が閾値を超えたら2つに分裂するとした。細胞間の競合は考えず、一方の娘細胞のみを取り出してシミュレーションを行う。

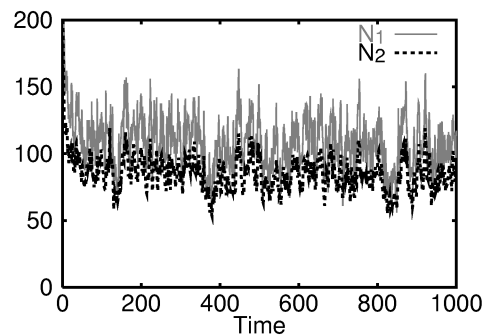
反応ネットワークのある部分が、その部分に属する成分と外部から与えられる低分子のみから、その部分に属する全ての成分を再生産できるならば、その部分は存在し続けることができる。系の大きさ（分裂閾値）を変えると、このような再生産可能な部分ネットワークの性質が変化する。外界からの成分供給の変化や特定の成分への攻撃によっても、性質の変化が見られる。これは環境に対する反応ネットワークの適応と考えることができる。



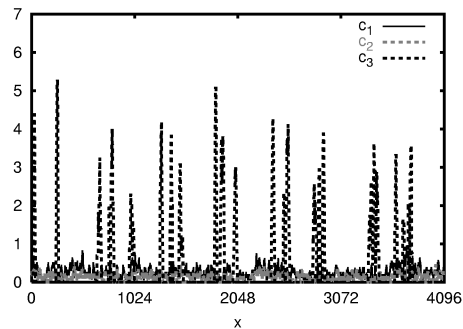
【第2章】(上) スwitchング状態にある系での N_i の変化の例。(下) 指標 $z \equiv (x_1 + x_3) - (x_2 + x_4)$ の分布の例。 $z = \pm 4$ のピークがswitchング状態に対応する。 V の変化に対し明確な遷移が見られる。



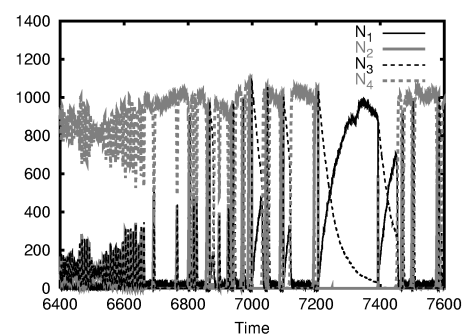
【第3章】 V を変えた時の平均濃度 \bar{x}_i の変化の例。連続極限では生じない大きな変化が見られる。



【第4章】成分 X_1, X_2 の分子数の変化の例。連続極限(共に0に収束する)とは定常状態に変化が見られる。



【第5章】各成分の空間分布の例。スポット状のパターンが現れている。



【第6章】(前半の4成分モデル) V が小さい時の、各成分の分子数 N_i の時系列の例。3つの状態間での遷移が見られる。