

4P102

離散時間マスター方程式を用いた不均一媒体中での拡散方程式の研究

豊橋技術科学大学大学院 情報・智能工学専攻 関野研究室

石井智茂, 墨智成, 関野秀男

A discrete-time master equation study on diffusion process in inhomogeneous medium

Toyohashi University of Technology Computer Science and Engineering Sekino laboratory

Ishii Tomoshige, Sumi Tomonari, Sekino Hideo

1 背景

流動モザイクモデルの提唱により, 細胞膜を構成する脂質二重膜は, 二次元の流体を形成し, 膜タンパク質はモザイク状に埋め込まれる形で, この流体中を動き回りながら, 細胞間の情報伝達や, 栄養素の摂取および代謝物の排泄等の役割を果たしていると考えられていた. ところが近年, 脂質ラフトの提唱により, 特定の場所に膜貫通蛋白質や脂質を集合/会合させ, 局在化させることで, 分子の組織化を行い, 様々な機能をもつ膜貫通蛋白質の集合/配列構造を細胞膜上に構築することにより, 上記の働きを効率的に行い, さらに外部環境の変化に応じて, 細胞膜分子の組織化をきわめて動的に変え, 構造体は生成・消滅を繰り返しているのではないかと考えられるようになった.

以上を踏まえ本研究では, この細胞膜の不均一性を空間に依存した拡散係数として考慮することにより, 細胞膜の不均一性に起因した膜貫通蛋白質の集合/拡散運動への影響を単純なモデルを用いて解析することを最終的な目標として研究を進める. その準備として, Fick の法則と連続の式から導かれる拡散方程式を出発点にして, 不均一媒体中における拡散過程を記述する離散時間マスター方程式を導出し, 空間に依存した拡散係数下でのシミュレーションを行った.

2 理論

本研究ではランダムウォークを解析するために, Fick の法則である式(1)と連続の式(2)から離散時間マスター方程式(3)を導いた. この方程式は解析的に確率分布の保存を満たす. 式(1)における $D(x, y)$ は格子上の座標 (x, y) における拡散粒子の拡散係数を表す. $\varphi(x, y, t)$ は格子上の座標 (x, y) での離散時間 t における拡散粒子の確率分布を示す.

$$J(x, y, t) = -D(x, y)\nabla\varphi(x, y, t) \quad (1)$$

$$\frac{\partial\varphi(x, y, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot J(x, y, t) \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \varphi(x, y, t + \Delta t) = & \left\{ 1 - \frac{D(x + \Delta x, y) + D(x, y)}{10D_0} - \frac{D(x - \Delta x, y) + D(x, y)}{10D_0} \right. \\ & \left. - \frac{D(x, y + \Delta y) + D(x, y)}{10D_0} - \frac{D(x, y - \Delta y) + D(x, y)}{10D_0} \right\} \varphi(x, y, t) \\ & + \frac{D(x + \Delta x, y) + D(x, y)}{10D_0} \varphi(x + \Delta x, y, t) + \frac{D(x - \Delta x, y) + D(x, y)}{10D_0} \varphi(x - \Delta x, y, t) \\ & + \frac{D(x, y + \Delta y) + D(x, y)}{10D_0} \varphi(x, y + \Delta y, t) + \frac{D(x, y - \Delta y) + D(x, y)}{10D_0} \varphi(x, y - \Delta y, t) \end{aligned} \quad (3)$$

3 モデル

本研究では, 上記の離散時間マスター方程式を用いてシミュレーションを行い, 不均一媒体中での粒子拡散の基本的な性質について解析した. 空間に依存した拡散係数 $D(x, y)$ に対して, 単純な周期関数の式(4)

$$D(x, y) = D_0 \times \left\{ 1 - A_x \times \sin\left(\frac{2\pi x}{L_x}\right) - A_y \times \sin\left(\frac{2\pi y}{L_y}\right) \right\} \quad (4)$$

を仮定したモデルを採用した. ここで A_x, A_y は拡散係数の変化率 L_x, L_y は1周期の長さをそれぞれ表す. 変化率 A_x, A_y が共にゼロの場合, $D(x, y) = D_0$ となることから, 均一媒体中での自由拡散に帰着する. すなわち A_x, A_y および L_x, L_y はそれぞれ不均一性の強さおよび周期を示している. また, $D(x, y)$ の空間平均値は D_0 と一致する事から, 本モデルにより, 媒体の不均一さに起因した通常拡散係数への影響を調べる事が出来る.

4 結果及び考察

$D(x, y)$ の周期長を12, 24, 36に固定した場合の, ステップ数400における平均二乗変位から見積もられる通常拡散係数の変化率依存性を Fig.1 に示す. Fig.1 から分かる様に, $D(x, y)$ の変化率 A_x, A_y が大きくなるに従い, 通常

拡散係数が均一系($A_x=A_y=0$)での自由拡散係数 $D_0 = 0.8$ より小さくなっていく事が分かる。また、変化率の各値に沿って見た場合、周期長が長くなるに従い、通常拡散係数が減っていることが分かる。よって Fig.1 から、 $D(x,y)$ の変化率と周期長の両方が、通常拡散係数に影響を与える可能性が示唆される。しかしながらこれらの結果は、ステップ数が少ない事による人為的結果である可能性を含むので、以下でその検証を行う。

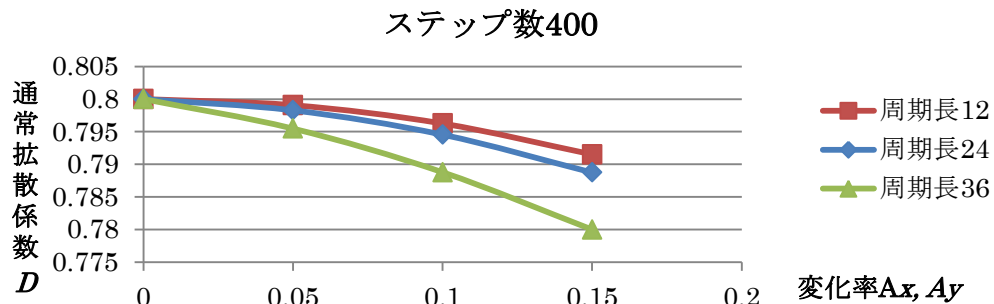


Fig.1 ステップ数 400 における各周期長に対する(通常)拡散係数の変化率依存性

ステップ数 400 において通常拡散にいたっているか確認するために、ステップ数 2400 における平均二乗変位から見積もられる通常拡散係数の変化率依存性(周期長 12 の場合)を Fig.2 に示す。

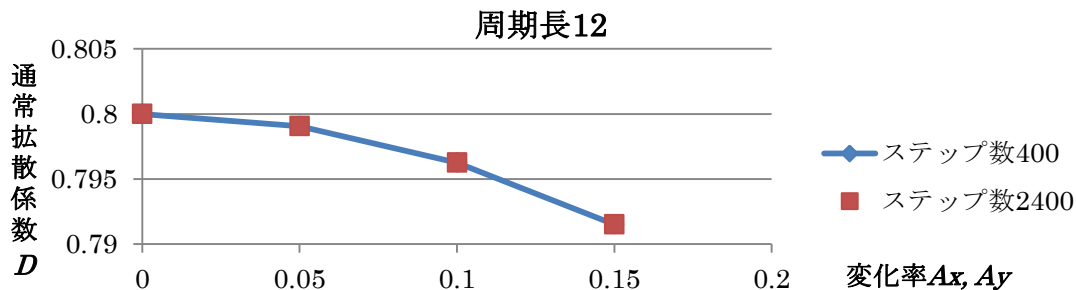


Fig.2 周期長 12 における各ステップ数に対する(通常)拡散係数の変化率依存性

Fig.2 から分かるように、ステップ数 400 とステップ数 2400 の結果が完全に一致した事から、周期長 12 の場合、400 ステップでも十分に通常拡散に達していると言える。この事から、拡散係数 $D(x,y)$ の不均一性の強さ(A_x, A_y)が増加するに従って、通常拡散係数は均一系の自由拡散係数より小さくなっていく事が分かる。

次に、通常拡散係数が周期長に依存しているかを長いステップ数のシミュレーションによって確かめるために、ステップ数 2400 における通常拡散係数の変化率依存性を Fig.3 に示す。

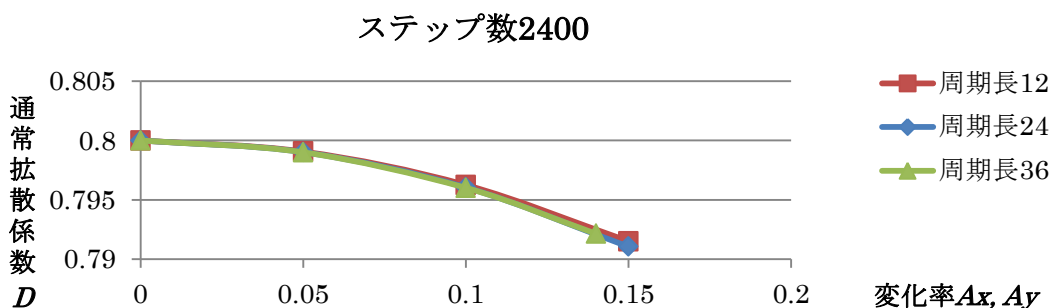


Fig.3 ステップ数 2400 における各周期長に対する(通常)拡散係数の変化率依存性

Fig.3 から分かる様に、ステップ数 2400 では周期長の変化による通常拡散係数の変化ほとんど見られず、周期長 24 および 36 の曲線は、十分に定常状態に達している周期長 12 の曲線に重なる傾向が伺える。このことから Fig.1 で示した、周期長 24 および 36 の結果は、400 ステップではステップ数が足りていないため、通常拡散に至っていない段階での結果であると言える。いずれにせよ、Fig.3 から、定常状態に至った際に通常拡散係数に対する $D(x,y)$ の周期長依存性は極めて小さいか、あるいは全くない可能性が示唆される。発表では、さらに長いシミュレーションによる結果との比較を報告する。今回示した結果は全て、 x 方向と y 方向の不均一性を等価に扱った場合のみの結果であったが、今後は異方性を考慮した場合も含め解析を進める予定である。