

細胞内環境を想定した反応拡散系モデリング

大阪大学 サイバーメディアセンター 応用情報システム研究部門 富樫 祐一
(現所属: 神戸大学 大学院システム情報学研究科 計算科学専攻)

研究の目的

生体に見られる諸現象を反応拡散系としてモデル化した研究は数多い。ところが、細胞内環境を反応拡散系としてとらえた場合、

- 存在量・速度の大きく異なる多種多様な成分・反応が関与しており、時に少数個の分子しか存在しない成分も含まれる。
- 生体高分子は構造の異なる複数の状態を取りえ、反応が状態に左右される場合がある。
- 膜や細胞骨格・能動輸送の存在や、分子が混み合った(充填率の高い)環境のために、分子の移動が必ずしも通常の拡散に従わない。

といった特徴がある。それゆえ、細胞内の過程には、一般的な反応拡散方程式(偏微分方程式)を用いたモデリングが有効とは限らない。これまでの手法で表現されない重要な現象が存在する可能性がある。

そこで、本研究では、反応拡散系に上のような特徴が加わった場合に、通常反応拡散系とはどのような違いが生ずるか、反応速度の異常や特異な時空間パターンが見られないか、明らかにすることを目的とする。これにより、細胞内での情報伝達やパターン形成過程をモデル化しそのメカニズムを解明することに寄与すると期待される。

主な研究内容と結果

1. 細胞内部や膜が高分子で混雑していることの影響に注目し、分子機械をその状態(位相)に依存して大きさの変化する粒子として表現することにより、分子間の力学的な相互作用が反応に及ぼす影響を表現する簡単なモデルを構成、シミュレートした。粒径の変化による分子の再配置を伴う、特徴的な進行波パターンが現れた。系の密度、粒子の移動度、状態変数のゆらぎの大きさを変化させた場合に、状態の時空間パターンや反応速度が相転移的に変化するのが観察された。
2. 粒子間の反応を陽に導入してモデルを拡張した。酵素反応を想定し、状態に依存した基質結合と生成物解離、並びに、制御物質の結合による活性の変化を導入した。分子機械の動作が、分子間に隙間を生じさせ基質・生成物の流れを引き起こすことにより、不活性な分子機械のクラスと、活性化された分子機械を含む流路との分離が生ずる場合があることを示した。現在、パターンの時空間スケールなど詳細な検討を進めている。

背景画像: 分子機械を含む反応拡散系のモデル化・シミュレーションの一例

大きな円盤が分子機械(酵素)に、色の違いは機械の状態の違いに、小さな円盤は低分子(基質や反応生成物など)にそれぞれ対応する。機械の構造(状態)の変化を、粒径の変化として表現しモデル化した。