

細胞内環境を想定した反応拡散系モデリング

神戸大学 システム情報学研究科 計算科学専攻 富樫 祐一, 顧 傑, 大仲 修平

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。

主な研究内容と結果

反応に伴う分子機械の構造変化が周囲に及ぼす影響、また、分子間の力学的な相互作用が反応過程に及ぼす影響を表現できる簡単なモデルを構成し、シミュレーションによりその振舞いを考察している。

前年度に、反応生成物が分子機械(酵素)を活性化する場合に、一定の条件の下で、分子機械の動作(構造変化)が基質・生成物の流れを促進すること、これにより、不活性な分子機械のクラスタと、活性化された分子機械を含む流路との分離が起こることが観察された。本年度は、この現象に注目し、パターンの発生条件や時空間スケールなどの詳細を検討するとともに、実際の細胞内環境における現象の可能性を考察した。また、分子機械と低分子とが分離したパターンも観察されたため、同時に検討を行った。特に拡散が遅い場合、分子機械の動きが周囲の基質や生成物の輸送の様相を大きく変化させ、空間的な構造(クラスタ)の安定性にも影響することが示された。これらの結果は、混雑環境下において、分子機械の構造変化と機能との相関が、系の時空間パターンに顕著な効果を及ぼす可能性を示しており、細胞内における分子の「動き」の重要性を示唆している。

背景画像: シミュレーションの一例(分子機械のクラスタの生成)

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・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。