

不均一環境下における 走化性粒子集団のダイナミクス

専修大学 ネットワーク情報学部 小田切 健太*

Kenta Odagiri
School of Network and Infomation, Senshu University

1 はじめに

生物・非生物を問わず、輸送現象を考える際に基本となるのは、一様な環境における物体の移動である。しかし現実の世界では、このような理想的環境はほとんど存在せず、非一様（不均一）な環境が一般的である。土壌中の物質拡散やアモルファス物質における電子輸送、細胞内での生体分子の拡散などが不均一環境下における輸送現象として挙げられる。近年、これらの現象は「異常拡散」というキーワードのもと、その普遍性を理解すべく精力的に研究が進められている。

また、環境の不均一性は、物質輸送を駆動する要因にもなりえる。電気泳動や熱泳動といった泳動現象は、電場や温度場の勾配、すなわち場の不均一性が物質輸送の駆動力となる。細胞や微生物の走化性、走温性、走電性といった外部刺激に応答して移動する走性も、環境の不均一性によって生じる輸送現象といえる。

そこで本稿では、不均一環境下における走化性粒子の輸送現象に着目し、環境の不均一性、特に移動を制限する障害物の設置が、走化性粒子のダイナミクスにどのような影響を与えるのかについて紹介する。

* k-oda@isc.senshu-u.ac.jp

2 モデル

走化性とは、細胞や微生物などが周囲の化学物質（誘引物質）の濃度に応じて、方向性を持った運動を行う性質である。より好ましい環境（ここでは誘引物質の濃度が高い場所、正の走化性）に粒子が移動するために、以下の2つの挙動（戦略）を考える。

1. 勾配検知型：濃度勾配を検知して濃度が高い方向へ移動
2. その場検知型：その場の環境を検知して、好ましければその場に滞在、悪ければ周囲へランダムに（等方的に）移動

上記2つのタイプの挙動について、格子間隔 δ 、時間間隔 τ の2次元正方格子モデルから導出される粒子集団の時間発展方程式は、以下ようになる。ただし、 $u(x, y, t)$ および $c(x, y, t)$ は、位置 (x, y) 、時刻 t における粒子密度および誘引物質濃度である。

導出については、1次元格子モデルの場合 [1] と同様に、粒子の分布についての Master 方程式から Fokker-Plank 方程式を導出し、粒子の確率分布を粒子の密度分布とみなすことで走化性を示す粒子集団の時間発展方程式を導出する。

■勾配検知型 粒子がいる場所およびその周囲の誘引物質濃度の情報を利用し、誘引物質の濃度勾配を検知することで好ましい環境に移動する「勾配検知型」の場合、粒子密度 $u(x, y, t)$ の時間発展方程式は以下ようになる。

$$\frac{\partial u(x, y, t)}{\partial t} = D \nabla \left[\nabla u(x, y, t) - 2 \frac{f'(c(x, y, t))}{f(c(x, y, t))} u(x, y, t) \nabla c(x, y, t) \right] \quad (1)$$

ただし、 $D \equiv \frac{\delta^2}{5\tau}$ 、 $f'(c) \equiv \frac{\partial f(c)}{\partial c}$ であり、 $f(c)$ は誘引物質濃度の重みづけをする任意の関数である。

$f(c) = \exp\left(\frac{\beta}{D}c\right)$ とおくと、式 (1) は以下の様になる。

$$\frac{\partial u(x, y, t)}{\partial t} = \nabla \left[D \nabla u(x, y, t) - 2\beta c(x, y, t) u(x, y, t) \nabla c(x, y, t) \right] \quad (2)$$

これは、細胞性粘菌の走化性に関する現象論的数理モデルとして良く知られている Keller-Segel(KS) モデル [2] の線形な応答関数を持つ場合と同じである。右辺第1項は粒子集団のランダムな移動（拡散）、第2項は誘引物質に対する走化性の効果を表わし、 β は走化性の強さを表わす。以下では、勾配検知型を KS モデルと呼び、式 (2) を用いる。

■その場検知型 粒子がいる場所での誘引物質濃度の情報のみを利用して、その場の環境が好ましかればその場に滞在し、環境が悪ければ周囲へランダム（等方的）に移動することで好ましい環境に移動する「その場検知型」の場合、粒子密度 $u(x, y, t)$ の時間発展方程式は以下ようになる。

$$\frac{\partial u(x, y, t)}{\partial t} = D' \nabla \left[\left(1 - \chi(c(x, y, t)) \right) \nabla u(x, y, t) - \chi'(c(x, y, t)) u(x, y, t) \nabla c(x, y, t) \right] \quad (3)$$

ただし、 $D' \equiv \frac{\delta^2}{4\tau}$, $\chi'(c) \equiv \frac{\partial \chi(c)}{\partial c}$ であり、 $\chi(c)$ は誘引物質への応答関数である。右辺第2項は走化性による移動を表わすのに対し、第1項はその場の誘引物質濃度に依存して実効的な拡散係数 $D'(1 - \chi(c))$ が変化することを表わしている。

応答関数 $\chi(c)$ は、[1] の場合と同様に以下のような関数とする。

$$\chi(c) = \frac{1 + \tanh(\alpha(c - c_0))}{2} \quad (4)$$

ただし、 c_0 は誘引物質への応答の閾値、 α は応答の鋭敏さを表わす。以下では、その場検知型を IM モデル（等方移動、Isotropic Moving）と呼び、式 (3) を用いる。

3 結果

2次元空間上に粒子が移動できない障害物をランダムに設置し（図1）、障害物の存在確率 p の変化が2つの走化性モデルでのダイナミクスに与える影響について調べた。1次元の場合と同様に、誘引物質濃度の値が異なる2つのピークをもつ環境において、粒子集団が低いピーク（準安定状態）から高いピーク（最安定状態）へと移動するときのダイナミクスを考える。ここでは「準安定状態からの脱出」と「最安定状態への緩和」の2段階に分けて考え、それぞれにかかる時間である平均脱出時間（Mean First Passage Time）と緩和時間（Relaxation Time）を計算する [3]。それぞれの段階では、円形領域において以下のように誘引物質の濃度分布を設定する。

1. 脱出 中心が誘引物質濃度の最大値、領域境界が最小値（図1 (b)）
2. 緩和 中心が誘引物質濃度の最小値、領域境界が最大値（図1 (c)）

ここでは、誘引物質の濃度分布は定常的であるとする。

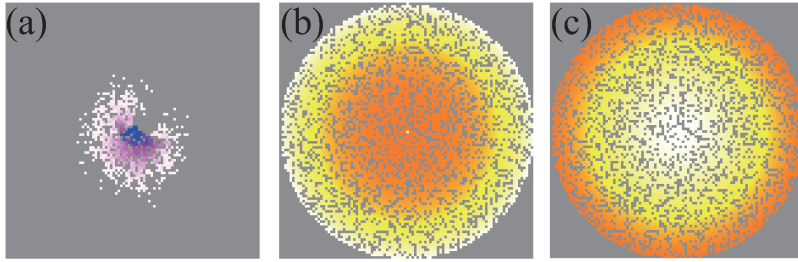


図 1: (a) 粒子集団の密度分布と (b) 誘引物質の濃度分布 (1. 脱出)、(c) 誘引物質の濃度分布 (2. 緩和)。(b), (c) の灰色の部分は、粒子が侵入できない障害物が設置された場所。色が濃い場所ほど密度（濃度）が高い。障害物が設置された場所を迂回して粒子が広がっていく様子が分かる。

それぞれの段階でかかる時間を計算するために、格子モデルによるシミュレーションを行う。障害物を確率 p でランダムに設置した上で、円形領域中心に 10000 個の粒子を配置し、各粒子が初めて領域境界に到達した時間の平均値を求める。障害物の配置を変更したシミュレーションを 100 回行い、各回における到達時間の平均値 T および T' の平均を、平均脱出時間 $\langle T \rangle$ および緩和時間 $\langle T' \rangle$ とする。

3.1 平均脱出時間

誘引物質濃度が最小の円形領域中心から出発した粒子が、誘引物質濃度が最大の領域境界まで到達するのにかかる平均脱出時間 $\langle T \rangle$ を求めた。結果は図 2 のようになり、1次元の場合と同様に両モデルとも走化性の効果を強くするに従い、 $\langle T \rangle$ が増加していることが分かる。また、障害物の設置確率 p の上昇に伴い、 $\langle T \rangle$ が増加する。これは障害物の設置により粒子が移動できる確率が減少するため、自然な結果である。

しかし、 p の増加による $\langle T \rangle$ の変化の定性的な違いは見られず、障害物の設置は準安定状態からの脱出におけるダイナミクスに質的な影響は与えていない。脱出の場合には誘引物への走化性に抗って移動する必要があり、走化性が強いほど脱出するのは難しくなる。そのため、障害物の影響による移動率の低下の影響は相対的に低くなり、結果として p を変化させても定性的な違いが現れないと考えられる。

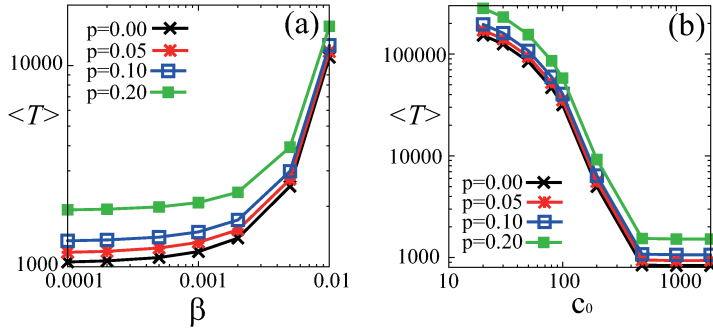


図 2: (a) KS モデルおよび (b) IM モデルにおける平均脱出時間 $\langle T \rangle$ 。

3.2 緩和時間

誘引物質濃度が最大の円形領域中心から出発した粒子が、誘引物質濃度が最小の領域境界まで到達するのにかかる緩和時間 $\langle T' \rangle$ を求めたところ、結果は図 3 のようになった。

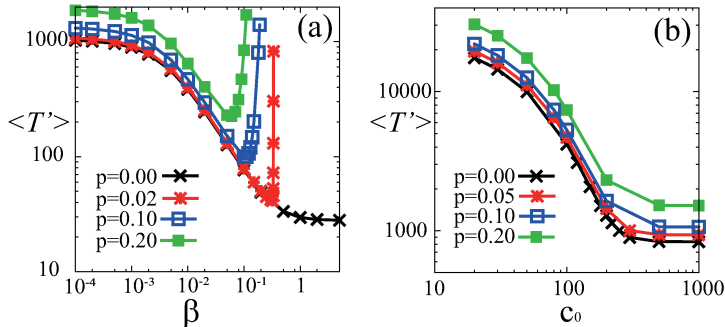


図 3: (a) KS モデルおよび (b) IM モデルにおける緩和時間 $\langle T' \rangle$ 。

IM モデルでは、1 次元の場合と同様に走化性が強いほど $\langle T' \rangle$ が非常に長くなる。 p の値を変えても、 $\langle T' \rangle$ の変化に定性的な違いはなく、脱出の場合と同様に障害物の設置は緩和ダイナミクスに質的な影響を与えていないと考えられる。

一方 KS モデルでは、走化性が強くなるに従い一度 $\langle T' \rangle$ が短くなるものの、さらに走化性が強くなると $\langle T' \rangle$ が長くなる。また、 p の違いにより $\langle T' \rangle$ が最小になる走化

性の強さが異なり、障害物の設置が緩和ダイナミクスに大きな影響を与えていることが示唆される。

そこで、異なる障害物の配置における緩和時間 T' の分布を調べることで、障害物が緩和ダイナミクスに与える影響について考える（注： $\langle T' \rangle$ は T' の平均値）。図 4 は、 T' の値がどのように分布しているかを示している。障害物が存在しない場合（図 4 (a),(b),(c)）や走化性が非常に弱い場合（図 4 (d),(g)）には、ほぼ対称な分布となる。一方、障害物が存在して走化性が強くなるに従い、対称な分布が崩れて平均から大きく外れた長い T' をもつ場合がでてくる（図 4 (e),(h)）。さらに走化性が強くなると、長い T' を持つ場合が多数現れ、ロングテールの分布となる（図 4 (f),(i)）。

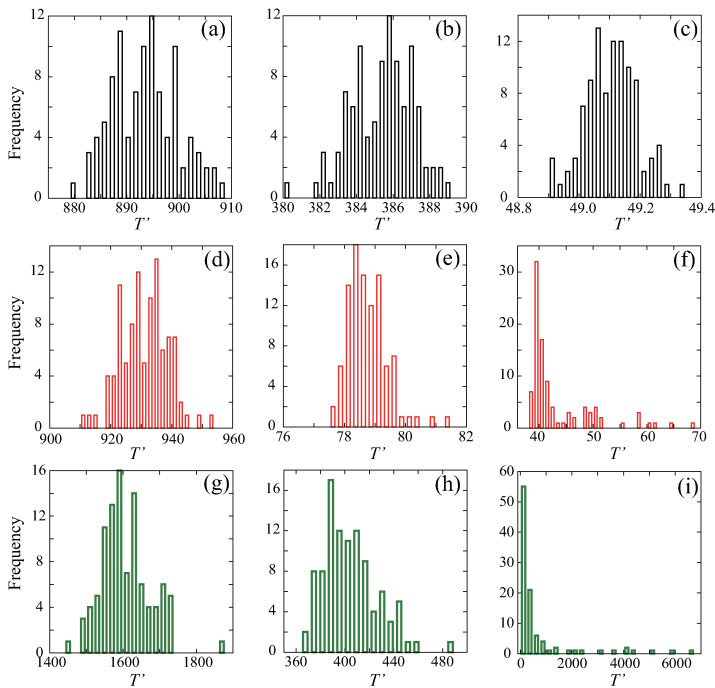


図 4: KS モデルにおける緩和時間 T' の分布。 $(p, \beta) =$ (a) (0.00, 0.001)、(b) (0.00, 0.01)、(c) (0.00, 0.20)、(d) (0.02, 0.001)、(e) (0.02, 0.10)、(f) (0.02, 0.33)、(g) (0.20, 0.001)、(h) (0.20, 0.02)、(i) (0.20, 0.10)。

上記の結果は次のように考えられる。障害物が存在しても走化性が非常に弱いと、相対的に拡散の影響が強くなるので、ランダムに動き回ることによって障害物を迂回して移

動することができる。そのため、障害物の設置は単に移動確率の低下を招くだけで、緩和ダイナミクスに質的な影響は与えないと考えられる。これは、等方的に移動する IM モデルにおいて、障害物の設置が緩和ダイナミクスに質的な影響を与えないことの原因でもあろう。

一方、走化性の効果が強くなるほど、誘引物質の濃度勾配に従って粒子は Ballistic な運動を示すようになり、結果として短い T' が多く現れる。しかし、一度障害物にひっかかってしまうと、濃度勾配に逆らって障害物を迂回することが非常に困難となり、長時間障害物にトラップされてしまう。障害物の設置確率が上昇して、障害物にトラップされる粒子が増えるほど、平均から大きく外れた長い T' が現れる。その結果、 T' の分布はロングテールを示し、全体の平均としての緩和時間 $\langle T' \rangle$ は増大する。図 3 (a) が示すように、 p の違いによって $\langle T' \rangle$ が最小となる走化性の強さが変化するの、障害物の存在確率が上がるほど粒子がトラップされる確率が上がることで長い T' を持つ場合が現れやすくなり、その結果として全体の平均としての $\langle T' \rangle$ が増大に転じやすくなるからである。

4 まとめ

本稿では、移動を制限する障害物が存在する不均一環境下での走化性粒子のダイナミクスについて、特に準安定状態から最安定状態への遷移ダイナミクスの観点から紹介した。その場合検知型 (IM モデル) の場合には、障害物の設置は脱出及び緩和のダイナミクスに質的な影響を与えないことが分かった。一方、勾配検知型 (KS モデル) の場合には、脱出ダイナミクスは障害物設置による質的な影響を受けないが、緩和ダイナミクスでは粒子が障害物にトラップされることで全体の緩和時間 $\langle T' \rangle$ に大きな影響を与えることが分かった。今後の解析では、障害物の設置による $\langle T' \rangle$ の増大（発散？）や T' の分布の変化と異常拡散現象との関連性について考えていきたい。

参考文献

- [1] 小田切 健太, RIMS 講究録 No.1994, pp. 190-197 (2016).
- [2] E. F. Keller and L. A. Segel, J. Theor. Biol. **26**, pp. 399-415 (1970).
- [3] N. G. Van Kampen, *Stochastic processes in physics and chemistry Third edition*. Elsevier (2007).