

RDSSA を用いた相互に通信する分子通信系シミュレーション法構築

Construction of Simulation Method for Mutual Molecular Communication System using RDSSA

堀研究室 学籍番号：82411805 川口竜輝

1. 研究背景・目的

細胞は伝達物質であるシグナル分子を別の細胞に送り、細胞内で化学反応が発生し、それによる濃度変化を情報として伝達する。このような細胞間で情報を相互に伝達する系は分子通信系と呼ばれる。分子通信系では、系内部の分子が少数であるため、化学反応や分子の伝達が確率的におこり、細胞内部の分子数変化が情報となる。分子通信系においては、系内部の細胞濃度が系全体の状態に大きな影響を与えることが知られている^[1]が、情報として受け取る各細胞内部の分子数変化をシミュレーションする手法は計算時間が長いという課題があった。そこで、細胞内部の分子数変化を高速に計算する Reaction-Diffusion Stochastic Simulation Algorithm (RDSSA)^[2] がつくられたが、相互通信するうえで送信細胞と受信細胞が区別されているため、双方向の通信ができないという問題があった。そこで、本研究ではシグナル分子が到達する確率分布が分子の放出時刻だけ時間変化する点に着目し、RDSSA^[2] に適用させることで、相互に通信する分子通信系をシミュレーションし、その濃度依存性を検証する。

2. 相互通信可能な分子通信系

1 次元の分子通信系において、時刻 $t = t_0$ に放出された分子が時刻 t 、位置 $[\xi, \xi + d\xi)$ に存在する確率を $p(\xi, t|t_0)$ とするとき、 $p(\xi, t|t_0)$ は拡散方程式に従い、分子が位置 $\xi = \xi_1$ に到達する確率 $F(t)$ は

$$F(t) = 1 - \int_{-\infty}^{\xi_1} p(\xi, t|t_0) d\xi \quad (1)$$

である。ここで、時刻 $t = 0$ に放出された分子が時刻 t 、位置 $[\xi, \xi + d\xi)$ に存在する確率を $p_0(\xi, t)$ とするとき、 $p(\xi, t - t_0|t_0) = p_0(\xi, t)$ が成立するため、分子の到達確率分布は放出時刻だけ時間移動する。これを利用して、受信細胞で生成されたシグナル分子の放出時刻を用いて到達確率分布を計算し、RDSSA^[2] を適用することで相互通信を行うことができる。

3. 数値例による検証

Fig. 1 にあるように、細胞が 2 つ存在する 1 次元の分子通信系を考える。ただし、系の拡散係数 $\mu = 3.0 \times 10^{-4} \text{ mm}^2 \text{ min}^{-1}$ 、細胞間距離を L とする。ここで細胞 1 内部には分子 A, B, X が存在し、次の細胞内部の反応によってシグナル分子 Y を放出する。

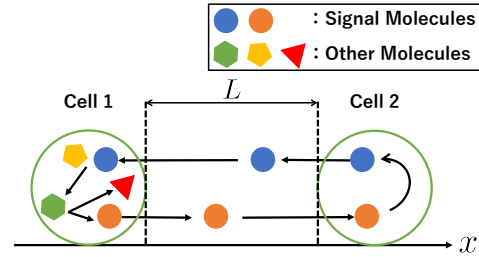
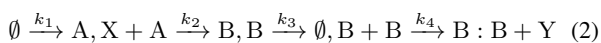


Fig. 1: Image of Molecular Communication System

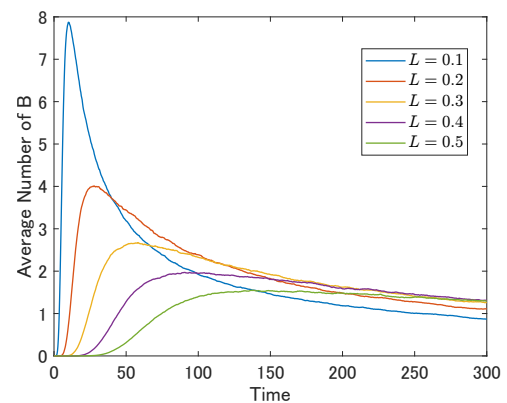


Fig. 2: Comparison of the time evolution of the average number of B among each L

細胞 2 内部には分子 Y が存在し、次の反応によってシグナル分子 X を放出する。



この時、時刻 $t = 0$ において細胞 1 から分子 Y が 10^2 個放出されたとき、細胞 1 における分子 B の時間発展を 10^4 回シミュレーションし、その平均を $L = 0.1 \mu\text{m}, 0.2 \mu\text{m}, 0.3 \mu\text{m}, 0.4 \mu\text{m}, 0.5 \mu\text{m}$ に対して計算した。ただし、 $k_1 = 5.0 \text{ min}^{-1}$ 、 $k_2 = \log(2)/20 \text{ min}^{-1}$ 、 $k_3 = k_4 = k_5 = 0.02 \text{ min}^{-1}$ とした。この時、各 L に対する分子 B の時間発展を Fig. 2 に示す。Fig. 2 より、細胞間距離が短いほど分子 B の過渡応答が急峻であり、距離依存性を持つことが確認できる。

4. 結論と今後の展望

本稿では、RDSSA^[2] に対して、シグナル分子が到達する確率分布が分子の放出時刻だけシフトすることを利用して相互通信可能な分子通信系のシミュレーションを構築した。今後の展望としては、現在の手法を利用し、2 次元の相互通信する分子通信系に対してシミュレーションを行い、濃度依存性の検証を行う。

参考文献

- [1] M. Yamagishi et al., *International Symposium on Micro-NanoMechatronics and Human Science*, pp. 1-5, 2018.

[2] 原星周, 慶應義塾大学修士論文, pp.1-50, 2023.