

# 分子の到達確率を利用した双方向分子通信系のシミュレーション法

## Simulation Method for Mutual Molecular Communication System using Hitting Probability of Molecules

堀研究室 学籍番号：82411805 川口竜輝

### 1. 研究背景・目的

細胞は別の細胞から放出された伝達物質であるシグナル分子を吸収し、細胞内部で化学反応が発生する。分子通信系はこの機構によりシグナル分子の送信と受信を相互に行い、分子数の勾配を情報として伝達する。分子通信系では、系内部の分子が少数であるため、確率的な反応や分子の到達が発生し、系内部の細胞濃度が細胞内の状態に影響を与えることが知られている<sup>[1]</sup>。しかし、この現象の計算手法は系の空間全体に対して行うため計算時間が長いという課題があった。そこで、シグナル分子を受信する細胞内部の分子数変化を高速に計算するシミュレーション法<sup>[2]</sup>が構築されたが、この手法は送信細胞から放出されたシグナル分子の到達確率を用いて時間発展を計算し、送信細胞内部の時間発展を計算しないため、双方向の通信を計算できないという課題があった。そこで、本研究ではシグナル分子が到達する確率が分子の放出時刻だけ時間変化する点に着目し、求めた確率分布を送信細胞に適用することで相互に通信する分子通信系のシミュレーション法を提案する。

### 2. 相互通信可能な分子通信系

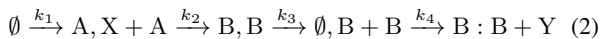
1次元の分子通信系において、時刻  $t = t_0$  に放出された分子が時刻  $t$ 、位置  $[\xi, \xi + d\xi)$  に存在する確率を  $p(\xi, t|t_0)$  とするとき、 $p(\xi, t|t_0)$  は拡散方程式に従い、分子が位置  $\xi = \xi_1$  に到達する確率  $F(t)$  は

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

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。この性質を利用し、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することで相互通信する分子通信系のシミュレーションを構築する。

### 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, B:B 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。



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。

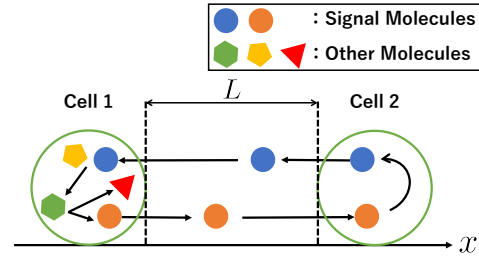


Fig. 1: Image of Molecular Communication System

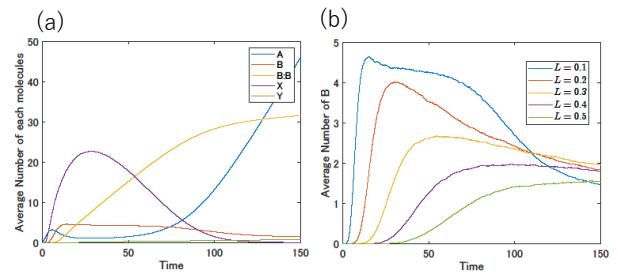


Fig. 2: (a) Time evolution of the average number of each molecules (b) Comparison of the time evolution of the average number of B among each  $L$

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、細胞2における分子の時間発展を  $10^4$  回シミュレーションした結果を Fig. 2 (a) に示す。ただし、 $k_1 = 0.8 \text{ min}^{-1}$ 、 $k_2 = \log(2)/20 \text{ min}^{-1}$ 、 $k_3 = k_4 = k_5 = 0.02 \text{ min}^{-1}$ 、 $L = 0.1 \mu\text{m}$  とした。Fig. 2 (a) より、分子 X が遅れて増加していることが確認でき、定性的な結果と一致する。また、 $L = 0.1 \mu\text{m}$ ,  $0.2 \mu\text{m}$ ,  $0.3 \mu\text{m}$ ,  $0.4 \mu\text{m}$ ,  $0.5 \mu\text{m}$  に対する分子 B の時間発展をそれぞれ  $10^4$  回計算した結果を Fig. 2 (b) 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、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法を構築した。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.