

自己駆動粒子系の集団動力学と渋滞形成

東京大学・院工・航空宇宙 西成 活裕 (Katsuhiko Nishinari)

Department of Aeronautics and Astronautics

Faculty of Engineering, University of Tokyo

1 はじめに

車や人、一般に生物などは、自分自身で動けるため慣性の法則を満たさない。このような粒子をニュートン粒子と区別して「自己駆動粒子」(self-driven particle) という [1, 2]。そして自己駆動粒子の集団は、従来のニュートンの運動方程式を満たす多体系とは異なった様々な興味深い現象を示す。このような研究はここ十数年足らずの新しい分野であり、日本やドイツのグループを中心に活発に研究が行なわれている。

自己駆動粒子は運動の三法則を全て満たさないために、その精密な定式化は現在のところ極めて難しいと言える。特に粒子間の相互作用が心理的な要因に由来するものが多いため、その定量化は困難である。従って、現象論的な記述により対象の行動を単純にモデル化して、その振る舞いを定性的に理解する方法が主な研究の方法であり、これまで様々な自己駆動粒子系のモデルが提案されてきた。まず実験や観測から対象とする粒子群の行動の特徴をなるべく詳細に捉え、その集団内での行動決定に重要な要因をいくつか抽出する。例えば車どうしの場合、相互作用の力は衝突を避けようとする心理的な力が主なものであり、その力はお互いの速度差や車間距離に強く依存すると考えられる。その依存の仕方はきちんと測れるものではないが、何らかの仮定を設けることで実験データをうまく再現できるような新しい力を考えることができる可能性がある。

そしてそのような相互作用力が決まれば、次にその力で動く集団の多体問題を考えることになる。しかし運動の法則が無いために、力が決まってもその力を受けてどのように動くのかを次に指定しなければならない。これもまた現象の観測から運動法則を仮定して行くほかはない。車の場合、前の車から受ける力により、アクセルを加減速して動くわけであるが、そのときに時間遅れがあるかも知れないし、同じ力を受けても人によってはその感受性が異なり、アクセルワークも異なるかも知れない。このような可能性を考慮に入れながら運動法則をモデル化するのである。

いったんモデルが出来上がれば、今度はそれを解析して実験データの再現を試みる。良いモデルとは、実験と良く合う結果を出すことができ、かつ理論的にも取り扱いやすいものである。実験を再現できるのはもちろんであるが、そのモデルがあまりにも複雑であれば現象の真の理解にはなかなか結びつかない。やはり現象を捉えたミニマムモデルこそがまずは目指すべきところであろうと考えられる。シンプルでかつ広範囲のモデルに応用できるものの一つに ASEP (非対称単純排除過程) があげられる。これは排除体積効果を持つ粒子系の最も単純な運動を表すモデルであり、かつ厳密に解ける可解確率過程である。

本論文では、この ASEP を利用した最近のモデル化の例を 3 つ紹介したい。一つは車のモデル化で、ASEP に車間距離の概念を入れて拡張したものであり、これは従来から知られている車の最適速度モデルの確率過程版に対応したものになっていることが示される。次に蟻の行進の

モデル化で、ASEPにフェロモンのダイナミクスを入れた連立系とした拡張である。このフェロモンの効果により車には無い特徴が現れる。最後に、ASEPに粒子の出入りを考慮したラングミュアダイナミクスを入れることにより、分子モーターのモデルを作成する。そしてこのモデルは実験データをよく再現できることも示される。

2 車の確率最適速度モデル

車のモデルはこれまで様々なものが提案されているが、その中でも特に現実の交通流の持つ不安定性を説明することに成功しているものとして、最適速度 (OV) モデル [3] があげられる。OV モデルにおいては、各車は運動方程式

$$\frac{d^2}{dt^2}x_i(t) = a \left[V(\Delta x_i(t)) - \frac{d}{dt}x_i(t) \right], \quad \Delta x_i(t) = x_{i+1}(t) - x_i(t) \quad (1)$$

に従う。ここで、 $x_i(t)$ は時刻 t での i 番目の車の位置、 V は車間距離 $\Delta x_i(t)$ の関数で最適速度 (OV) 関数と呼ばれる。これは決定論的な運動法則であるが、より現実らしくするために確率を導入することもある。一般に、確率論的モデルは決定論的モデルに対してノイズを付加する形で構成されるが、ここでは確率分布関数を導入するという指針の下に確率セルオートマトンによる新しい交通流モデルを考えたい。

2.1 SOV モデル [4]

まず、道路を一次元の周期格子とみなし、サイト数を L とする。各サイトには最大で一台の車が入るものとする。各車は、衝突と追越が禁止されていて、そして各ステップ毎に一斉に動く。時刻 t における各車 $i = 1, 2, \dots, N$ の位置を x_i^t とする。ここで、 i 番目の車の前方を $i+1$ 番目の車が走っているものとする。 $w_i^t(m)$ を、各車 $i = 1, 2, \dots, N$ が時刻 t に $m = 0, 1, 2, \dots, M$ サイト進む確率として、これを intention と呼ぶことにする。このとき規格化条件により

$$\sum_{m=0}^M w_i^t(m) = 1 \quad (2)$$

である。 $w_i^t \equiv \{w_i^t(m)\}_{m=0}^M$, $x^t \equiv \{x_i^t\}_{i=1}^N$ と書くことにして、intention の時間発展を次の形に定める。

$$w_i^{t+1}(m) = f(w_i^t; x^t; m). \quad (3)$$

ただし、 f は、 $w_i^t(0), w_i^t(1), w_i^t(2), \dots, w_i^t(M)$ および $x_1^t, x_2^t, x_3^t, \dots, x_N^t$, m の関数であって、系を特徴付けるものである。そして、各車は以下の手順に従って時間発展する。

1. 時刻 t における、車の配置 x^t と intention w_i^t から (3) に従って次の時刻における intention w_i^{t+1} を計算する。
2. 進むサイト数 V_i^{t+1} を確率分布 w_i^{t+1} に従って与える。すなわち、各時刻 t について、 $V_i^t = m \in \{0, 1, 2, \dots, M\}$ となる確率が $w_i^t(m)$ である。

3. 各車は前の車に衝突しないように進む。式で書けば以下のようなになる。

$$x_i^{t+1} = x_i^t + \min(\Delta x_i^t, V_i^{t+1}). \quad (4)$$

ただし,

$$\Delta x_i^t := x_{i+1}^t - x_i^t - 1 \quad (5)$$

であり, これは各車の車間距離を表している。

上述のモデルで特に最大速度を $M = 1$ とする。そして,

$$v_i^t := w_i^t(1) \quad (6)$$

とすれば, (2) から $w_i^t(0) = 1 - v_i^t$ である。我々は v_i^t の時間発展として以下の式を考える:

$$v_i^{t+1} = (1 - a)v_i^t + aV(\Delta x_i^t). \quad (7)$$

ここで, V は車間距離 Δx_i^t の関数であり, a は $0 \leq a \leq 1$ を満たす実数のパラメータである。これに対応する (3) は

$$\begin{cases} w_i^{t+1}(1) = (1 - a)w_i^t(1) + aV(\Delta x_i^t) \\ w_i^{t+1}(0) = 1 - w_i^{t+1}(1) \end{cases} \quad (8)$$

である。式 (7) は, 第一項が現在 (時刻 t) の intention であり, 第二項は現在の状況 (車間距離 Δx_i^t) を次の intention に取り入れる役割を果たしている。

一方, 車の座標 x_i^t の時間発展は,

$$x_i^{t+1} = \begin{cases} x_i^t + 1 & \text{確率 } v_i^{t+1} \\ x_i^t & \text{確率 } 1 - v_i^{t+1} \end{cases} \quad (9)$$

である。そして, 直前のサイトを車が占有していない場合に期待値の意味で

$$\langle x_i^{t+1} \rangle = \langle x_i^t \rangle + v_i^{t+1} \quad (10)$$

である。ただし $\langle A \rangle$ は A の期待値を表し, 式 (10) は $w_i^t(1) = v_i^t$ が最大速度 $M = 1$ の場合に車の速度に対応していることを示している。

以降, この $M = 1$ の場合に限って我々のモデルの性質を明らかにしていく。この場合, 上述のように, 我々が導入した intention という概念は車の速度に置き換えられるが, さらに既存のモデルとの対応が見られる。OV モデル (1) を離散化することによって得られる離散 OV モデル [5]

$$x_i^{t+1} = x_i^t + v_i^{t+1} \Delta t \quad (11)$$

$$v_i^{t+1} = (1 - a\Delta t)v_i^t + (a\Delta t)V(\Delta x_i^t) \quad (12)$$

と (7) および (10) を比較すると, 形式的な類似が見られる。よって, 我々は (7) により与えられる新しい確率モデルを確率最適速度 (SOV) モデルと呼び, これに合わせて関数 V を最適速度 (OV) 関数と呼ぶことにする。

式 (10) と (11) の関係は, (10) が成立する条件 (すなわち直前のサイトに車がない) が満たされている間は (10) は (11) の確率拡張になっている。しかし, そうでない場合は強制的に前進が禁止され同じサイトに留まることになり, (11) と相容れない。これは, OV モデルは衝突を回避する仕組みを備えていないことによる。

2.2 SOV モデルに含まれる可解な確率モデル

SOV モデル (7) は一つの内部パラメータ a を持っているが、 $a = 0$ および $a = 1$ の場合によく知られた可解なモデルに帰着される。まず、 $a = 0$ の場合、(7) から

$$v_i^{t+1} = v_i^t = \cdots = v_i^0 \quad (13)$$

であるから、すべての i に対して $v_i^0 = p$ ($0 < p < 1$) とすれば、SOV モデルは確率 p を持つ ASEP に帰着される。(特に $p = 1$ の場合はルール 184 セルオートマトンである。) ASEP では、密度を ρ 、流量を $Q(\rho)$ とすると

$$Q(\rho) = \frac{1}{2} \left[1 - \sqrt{1 - 4p\rho(1 - \rho)} \right] \quad (14)$$

となることが知られている。これを表す図は基本図と呼ばれ、集団の振る舞いを特徴づける重要な図である。次に $a = 1$ の場合、(7) は

$$v_i^{t+1} = V(\Delta x_i^t) \quad (15)$$

となり、次の intention は現在の車間距離 Δx_i^t のみから決まる。この場合、 i 番目の箱に Δx_i^t 個の玉が入った箱と玉の系と考えれば、これはゼロレンジ・プロセス (ZRP) [6] と呼ばれる確率過程と同等である。この確率過程についても、車の配置に対する確率分布が厳密に計算可能である。サイト数 L 、車の台数 N に対して、ZRP の基本図は次の手順に従って計算される：

$$\rho := \frac{N}{L}, \quad Q(\rho) = \frac{N}{L} \sum_{x=0}^{L-N} V(x)p(x), \quad (16)$$

ただし、 $p(x)$ はある車の車間距離が x サイトとなる確率であって、これは以下のように計算される：

$$h(x) := \begin{cases} 1 - V(1) & (x = 0) \\ \frac{1 - V(1)}{1 - V(x)} \prod_{y=1}^x \frac{1 - V(y)}{V(y)} & (x > 0) \end{cases} \quad (17)$$

とすると、

$$p(x) := h(x) \frac{Z(L - N - 1, N - 1)}{Z(L, N)}, \quad (18)$$

ここで、 $Z(L, N)$ は

$$Z(L, N) = \sum_{x=0}^{L-N} Z(L - x - 1, N - 1)h(x), \quad (19)$$

$$Z(x, 1) = h(x - 1), \quad Z(x, x) = h(0), \quad (20)$$

により逐次計算される。

2.3 確率最適速度モデルの性質

確率最適速度モデルは可解な確率モデルを内在的なパラメータにより繋ぎ合わせた形になっているが、このパラメータが一般の値をとる場合には厳密に解くことは難しい。そこで、計算機シミュレーションにより SOV モデルの持つ特性を明らかにする。ここでは OV 関数を

$$V(x) = \frac{\tanh(x-c) + \tanh c}{1 + \tanh c}, \quad c = \frac{3}{2} \quad (21)$$

として SOV モデルの基本図を詳しく考察する。

$a = 1$ の場合は ZRP の可解性から基本図は厳密に計算されるが、 $a = 0.8$ 程度であれば ZRP の解でこのモデルが十分に近似できていることが分かった。これに対して、SOV モデルは $a = 0$ で ASEP に帰着されるにも拘らず、 $a \sim 0$ では SOV モデルの基本図と ASEP のそれとは全く異なった形になる。それを Fig.1 に示した。Fig.1(a) には時刻 $t = 1000$ ($\times$) および $t = 5000$ ($\bullet$) の基本図を、Fig.1(b) には十分に時間が経過した後 ($t = 50000$) の基本図を示してある。基本図に不連続点が出てきていることが分かる。確率モデルでこのように同一の密度に対して複数の異なる安定状態が存在する現象はあまりこれまで報告例がない。

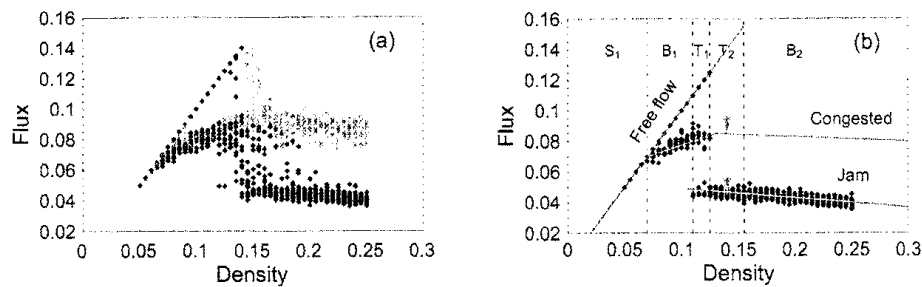


図 1: (a) The expanded fundamental diagram around the discontinuous region with $a = 0.01$ at $t = 1000$ (gray crosses), $t = 5000$ (black circles) starting from two typical states; the uniform state with equal spacing of vehicles and $p(\equiv v_i^0) = 1$, and the random state with random spacing and $p = 1$. We observe three distinct branches, which we call the free-flow, congested, and jam branch. They survive even in the stationary state, which is plotted at $t = 50000$ in (b). In (b), we also depict the averaged curves in three branches (gray lines), and distinguish the regions qualitatively by the vertical dotted lines from S_1 to B_2 .

さらに、密度 $\rho = 0.14$ (領域 T_2 内) での流量の時間変化を調べる (Fig.1(b) の矢印)。Fig.2 に流量の時間変化 (a) およびそれに対応する時空図 (b) を示す。Fig.2(a) によれば、初期配置として等間隔な配置を取るとこれは $t \simeq 5000$ まで自由相にあり、そこから中間相への速やかな遷移を起こす。そして、 $t \simeq 7500$ までその中間相に留まり、そこから再び遷移を起こし渋滞相に落ちる。このように長時間安定な準安定状態が存在することは確率モデルにおいては予想外のことである。Fig.2(b) では 3 つの安定または準安定状態に応じてはっきりと区別される 3 つのパターンが見られる。初期に等間隔に配置された車は各々自由に走行する。しかし、時刻 $t \simeq 5000$ から突然小さなクラスターが多数発生している状況が見取れる。これらの小さなクラスター群は生成と消滅を繰り返

し、そして、時刻 $t \simeq 12000$ から急速に大きな渋滞に発達している。一度形成された渋滞は一定の速度で進行方向と反対に伝播していく。このような、長時間の寿命を持つ状態間の動的相転移 (dynamical phase transition) と、この遷移現象を引き起こしている急な自発的準安定状態の破れ (sharp spontaneous metastability breaking) は今までのモデルには見られないものである。

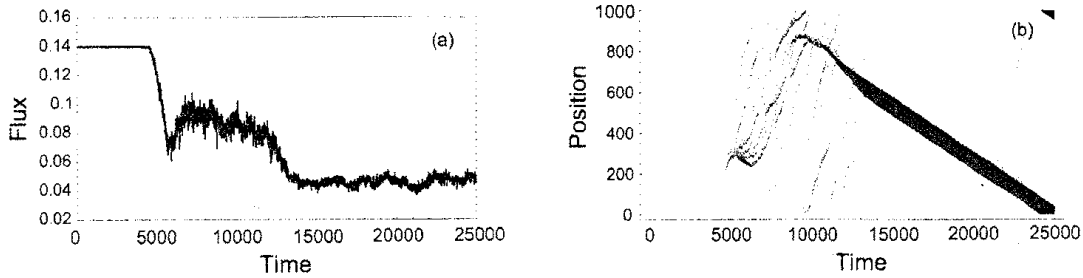


図 2: (a) The time evolution of the flux in the case $\rho = 0.14$ starting from the uniform state. We see two plateaus at the flux $Q = 0.14$ with a lifetime $T \simeq 5000$, and $Q \simeq 0.08$ with $T \simeq 7000$ before reaching the stationary state. (b) The corresponding spatiotemporal figure is shown.

3 蟻のモデル化とフェロモン

次に蟻の集団行動を交通流としてとらえ、その流量密度特性を詳細に考察してゆこう。蟻の動きの基本になるモデルは以下の通りである。蟻同士はフェロモンを用いてお互いのコミュニケーションを実現している。このフェロモンの効果を取り入れるため、最近我々は新たな変数を導入した2変数確率セルオートマトンモデルを提案した [7]。それは以下の通りである。簡単のため蟻は1次元の道を1方向のみに進むとする。まず、空間をセルに分け、各々のセルをラベル i ($i = 1, 2, \dots, L$) で番号付けする。そして、蟻とフェロモン用の変数として、 S_i 、及び σ_i を用意する。蟻は常にフェロモンを通路に残していくが、フェロモンはある時間が経過すれば自然に蒸発する。蟻はフェロモンの方向に惹きつけられるので、フェロモンがある場合と無い場合では前に進む場合の「進みやすさ」が変わると考えられる。以上を加味して、蟻の運動とフェロモンの状態更新を分けて以下のように2つのステージに分けてモデル化する。

ステージ1

蟻がある時刻 t にセル i にいたとする ($S_i(t) = 1$)。もしも前に蟻がいるならば ($S_{i+1}(t) = 1$)、セル i の蟻は動かない (排他原理)。そして、前に蟻がいないときは、前に進もうとするが、フェロモンの有る無しに応じて進むホップ確率 p が以下のように変わる。

$$p = \begin{cases} Q & \text{if } \sigma_{i+1}(t) = 1, \\ q & \text{if } \sigma_{i+1}(t) = 0, \end{cases} \quad (22)$$

このように2種類の確率 q, Q を導入し、フェロモンがある方が動きやすいので一般に $q < Q$ とおける。この確率で蟻を前に動かすのがステージ1である。

ステージ2

次にステージ1で蟻がいるセルはすべてフェロモンを生成する。つまりもし $S_i(t+1) = 1$ ならば $\sigma_i(t+1) = 1$ とする。また、蟻がいないセルのフェロモンは確率 f で蒸発するとする。すなわち、もし $S_i(t+1) = 0$ かつ $\sigma_i(t) = 1$ ならば確率 f で $\sigma_i(t+1) = 0$ とする。

3.1 ゼロレンジ過程による解析

ゼロレンジ過程を用いるとこのモデルがうまく解析できる。これは、前にホップする確率がギャップサイズに関して決まる、というモデルである。そしてフェロモンの蒸発現象により、ギャップサイズでホップの確率が決まるのはこのモデルに合っていると考えられる。そこで、前進速度を平均場の考えで

$$V(x) = Q(1-f)^{x/v} + q(1 - (1-f)^{x/v}) \quad (23)$$

と置けば良いことに気がつく。ここで、 x は蟻どうしの距離、 v は蟻の平均速度とした。第1項は前の蟻が残したフェロモンが蒸発せずに残っている場合で、このとき確率 Q でホップできる。第2項はフェロモンが蒸発してしまう場合で前進確率は q になる。これをゼロレンジ過程の公式 (16) に代入すれば流量が計算できる。Fig.3 が理論曲線とシミュレーション結果の基本図の比較である。理論曲線はほぼきちんとシミュレーションを再現していることが分かる。興味深いのは、車と異なり、あるところで急激に流量が増加していることである。これは周期系の特徴で、蟻は低密度のときはクラスターを形成して動いているが、密度が上がるとクラスターサイズが大きくなる。するとそのクラスターの一番最後の蟻が残したフェロモンをクラスター先頭の蟻が利用できる確率が高くなるためである。

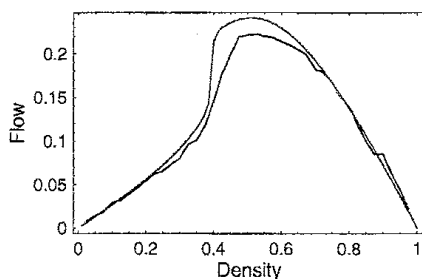


図 3: ゼロレンジ過程による流量密度の理論曲線とシミュレーション結果。折れ線がシミュレーション。パラメータは $Q = 0.75, q = 0.25, f = 0.005$ 、そしてシステムサイズは $L = 200$ 。

3.2 開放系と相図

次に開放系での相図を考えよう。これまでは周期系における定常状態を考えていたが、左端から確率 α で蟻が流入し、右端から確率 β で流出するとしよう [8]。このとき、流入と流出のバランスにより、Fig.4(a) に示すように系がパラメータに依存して異なる相を示す。相は全部で3つあり、

低密度相、高密度相と最大流量相である。この蟻のモデルは $f = 0$ または $f = 1$ の時に厳密に解ける ASEP（非対称単純排除過程）になるが、相図はこのとき確かに厳密解と一致している。そして新しい点はフェロモン蒸発率の導入により最大流量相が始まる臨界確率が単調に変化することである。その臨界確率と蒸発率の関係を Fig.4(b) に示してある。

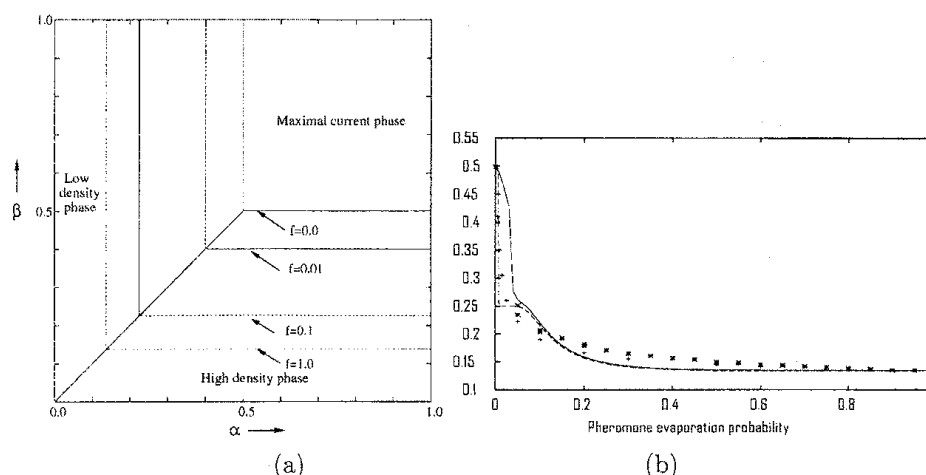


図 4: 開放系における相図 (a) と臨界確率の蒸発率依存性 (b)。蒸発率を変えると臨界点が移動することが分かる。(b) で点は数値計算、曲線はゼロレンジ過程による近似的な理論計算結果。

4 分子モーターの渋滞

最後に生体内での交通とその渋滞として、分子モーター「キネシン」の振る舞いについてモデル化してみよう。生体内でのミトコンドリアや小胞などの輸送は分子モーターにより能動的に行なわれている。それは微小管と呼ばれる道の上をキネシンやダイニンが加水分解のエネルギーで自ら方向性を持って動くものである [9]。また、分子モーターの不調により輸送が滞ると、それが様々な病気を引き起こすことも明らかになってきた。したがって分子モーターの挙動を理解することは大変重要であり、これまで主に 1 分子がどのように前進するかの実験的研究が行なわれてきた [10, 11]。分子モーターでもキネシンが近年良く調べられているが、人体のキネシンは 40 種類以上あり、その生化学的メカニズムも様々に異なり、すべてが解明されているわけではない。特に多分子が微小管上を動く際の集団現象には様々な未解決問題がある。今回は、比較的新しい単頭キネシンである KIF1A に焦点を当ててそのモデルを作成し、実験との比較や集団現象を考察する。

最近キネシンのモデルとして、ASEP (非対称単純排除過程) にラングミュアー運動を取り入れただけの単純なモデルが提案された [12, 13]。しかしこれは単純化しすぎたために現実の生物の動きと比べられるものではない。特に加水分解を全く考慮しておらず、実験との比較なども不可能である。分子モーターは酵素であり、その運動は生化学的サイクルによって決まっている。そこで、加水分解を考慮したモデルを近年筆者らは提案した [14]。そして、モデルにあるパラメー

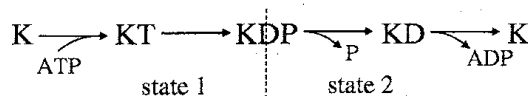


図 5: A biochemical cycle of a single KIF1A motor. They are divided into two mechanical states as shown by the broken lines.

ターを全て実験より曖昧なく見積もることができることを示した。また、キネシンの渋滞の様子を実験とシミュレーションにより調べた。

4.1 単頭キネシン KIF1A のモデル

微小管はプロトフィラメントの束からなり、その 1 本のプロトフィラメントは α - β チュブリンといわれる単位タンパクが格子状に重合して出来ている。そしてキネシンは其上をマイナス端からプラス端の極性の方向に能動的に動いてゆく。まず、1 本のプロトフィラメントを L サイトの 1 次元格子でモデル化する。その 1 格子はチュブリン 1 つ分に相当し、その長さは 8 nm である。キネシンは加水分解サイクルの間に生化学的に 4 つの状態をとる。それはキネシン単独状態 (K)、ATP 結合状態 (KT)、加水分解後の ADP とリン酸が結合した状態 (KDP)、そしてリン酸を放出した ADP 結合状態 (KD) である (図 5)。ここで、キネシンのメカニカルな状態に注目すると、K と KT 状態は微小管に固定されており、全く動かないが、KD の状態では微小管上をブラウン運動できる。したがって、メカニカルな視点からはキネシンは微小管上で固定状態 (これを状態 1 とする) か、ブラウン運動状態 (これを状態 2 とする) の 2 つの状態に区別される。そして、キネシンは状態 1 から状態 2 への遷移、つまりリン酸を放出する際にその反作用で微小管から離れやすくなるという性質があるということである [11]。この微小管からの離脱はこのとき以外には起こりにくい。そして逆に微小管への付着はサイトが空いていればいつでも可能である。したがって、以上からキネシンの運動は 3 状態確率 CA モデルによってモデル化するのが妥当であろう。それは、あるサイトに何もいない (0)、状態 1 のキネシン (1)、状態 2 のキネシン (2) である。

時間はランダム更新とし、時間発展ルールについては、各素過程の遷移レートを以下のように与える。

$$\text{付着: } 0 \rightarrow 1 \text{ with } \omega_a dt \quad (24)$$

$$\text{離脱: } 1 \rightarrow 0 \text{ with } \omega_d dt \quad (25)$$

$$\text{加水分解: } 1 \rightarrow 2 \text{ with } \omega_h dt \quad (26)$$

$$\text{ラチェット: } \begin{cases} 2 \rightarrow 1 \text{ with } \omega_s dt \\ 20 \rightarrow 01 \text{ with } \omega_f dt \end{cases} \quad (27)$$

$$\text{ブラウン運動: } \begin{cases} 20 \rightarrow 02 \text{ with } \omega_b dt \\ 02 \rightarrow 20 \text{ with } \omega_b dt \end{cases} \quad (28)$$

微小管の両端はたんぱく質の構造がバルク部分と異なっていることが知られており、その離脱確率などはバルクのものと異なる。したがってバルクの付着率 ω_a の代わりに左端で α 、右端で δ

とする。同様にバルク離脱率 ω_d の代わりに左端で γ_1 、右端で β_1 とする。そして、ブラウン運動レート ω_b についても、左端では γ_2 、右端では β_2 とおく。ここで添え字 1, 2 はその状態のキネシンを意味しており、離脱は状態 1 のみ、ブラウン運動は状態 2 のみで起こる。また付着後は必ず状態 1 になっているので添え字は省略する。ここで、重要なことは ω_f と ω_s の比がブラウニアンラチェットから決まる、ということである。レート ω_f で前進し、 ω_s がラチェット機構が働かずにその場にとどまる割合を表している [14]。

4.2 パラメーターの決定とシミュレーション、および実験

このモデルに含まれるパラメーターはすべてこれまでの実験結果から見積もることができる。これはこのモデルの大きな特徴であり、曖昧な fitting parameters は無いため、実験と直接結果を比較することが出来る。まず、ラチェットの実験結果より $\omega_f/\omega_s \simeq 3/8$ が分かっており、さらに 1 分子実験での ADP リリースレートから $\omega_s + \omega_f \simeq 0.2 \text{ ms}^{-1}$ がいえる。そこでまず $\omega_s \simeq 0.145 \text{ ms}^{-1}$ and $\omega_f \simeq 0.055 \text{ ms}^{-1}$ とレートを見積もる事ができる。また離脱レートは $\omega_d \simeq 0.0001 \text{ ms}^{-1}$ となり、これはキネシン濃度によらない。また付着率は、キネシン濃度を C モルをすると、 $\omega_a = 10^7 C/\text{M}\cdot\text{s}$ と表すことができる。典型的な生体内でのキネシン濃度 C は 10 から 1000 nM であるため、 ω_a の許容範囲は $0.0001 \text{ ms}^{-1} \leq \omega_a \leq 0.01 \text{ ms}^{-1}$ と見積もれる。また、ミカエリス=メンテンの酵素反応式より、ATP 濃度を T とすると $\omega_h^{-1} \simeq (4 + 0.9/T)\text{ms}$ となる。したがって、 ω_h の範囲も $0 \leq \omega_h \leq 0.25 \text{ ms}^{-1}$ となる。最後に ω_b^{-1} であるが、これも実験より $\omega_b \simeq 1.125 \text{ ms}^{-1}$ となる。

つぎにシミュレーション結果であるが、これは境界のレート変化による相図を調べるのが ASEP の場合一般的であるが、今回の系ではこのレートは実験的にもコントロールできるものではない。コントロール可能なものは $\omega_a - \omega_h$ であるため、これを 2 次元的に変化させて図を描いたものが (図 6) である。これより、ある条件では固定されたドメインウォールを観測することができ、その位置は ATP 濃度とキネシン濃度に依存することが分かる。ASEP の場合、ドメインウォールはランダムウォークすることが示されるが、この場合には一定の位置にとどまるところが興味深い。またこの結果は実験により確かめられ、確かにある条件でドメインウォールが微小管上に見えることが確認できた [14]。

参考文献

- [1] D. Helbing, Traffic and related self-driven many-particle systems, Rev. Mod. Phys. 73(2001), 1067-1141.
- [2] D. Chowdhury, L. Santen and A. Schadschneider, Statistical physics of vehicular traffic and some related systems, Phys. Rep. 329(2000), 199-329.
- [3] M. Bando, K. Hasebe, K. Nakanishi, A. Nakayama, A. Shibata and Y. Sugiyama, Phenomenological Study of Dynamical Model of Traffic Flow, J. Phys. I France 5(1995), 1389-1399.

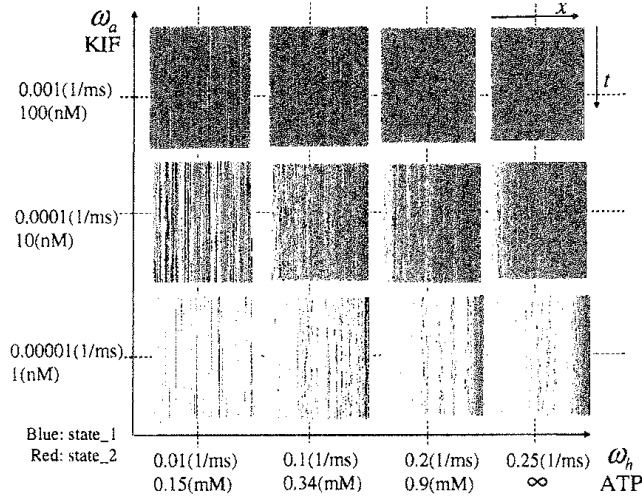


Figure 6: Diagram of the model in the $\omega_h - \omega_a$ plane, with the corresponding values for ATP and KIF1A concentrations given in brackets. These quantities are controllable in experiment. The boundary rates are $\alpha = \omega_a, \beta_{1,2} = \omega_d, \gamma_{1,2} = \delta = 0$. We see the formation of the immobile shock, whose position depends on both ATP and KIF1A concentrations.

- [4] M.Kanai, K.Nishinari and T.Tokihiro, Phys. Rev. E vol.72 (2005) p.035102(R).
- [5] S. Yukawa and M. Kikuchi, Coupled-map modeling of one-dimensional traffic flow, J. Phys. Soc. Jpn. 64(1995), 35-38.
- [6] F. Spitzer, Interaction of markov processes, Adv. Math. 5(1970), 246-290.
- [7] D. Chowdhury, V. Guttal, K. Nishinari and A. Schadschneider, J.Phys.A:Math.Gen., Vol. 35 (2002) p.L573.
- [8] A. Kunwar, A. John, K. Nishinari, A. Schadschneider and D. Chowdhury, J. Phys. Soc. Jpn., Vol.73 (2004) p.2979.
- [9] M. Schliwa (ed.), *Molecular Motors*, (Wiley-VCH, 2002).
- [10] Y. Okada and N. Hirokawa, Science **283**, 1152 (1999).
- [11] R. Nitta, M. Kikkawa, Y. Okada, and N. Hirokawa, Science **305**, 678 (2004).
- [12] A. Parmeggiani, T. Franosch, and E. Frey, Phys. Rev. Lett. **90**, 086601 (2003).
- [13] R. Lipowsky, S. Klumpp, and T. M. Nieuwenhuizen, Phys. Rev. Lett. **87**, 108101 (2001).
- [14] K. Nishinari, Y. Okada, A. Schadschneider and D. Chowdhury, Phys. Rev. Lett. **95**, 118101 (2005).