

反応ネットワークにおける分子数の離散性効果

東京大学大学院総合文化研究科 富樫 祐一

化学反応系において、分子の個数が離散的（整数）であることが、系の振舞いにどのような効果を及ぼしうるか、計算機シミュレーションを通じて議論する。自己触媒的な反応系において、分子数の離散性が本質的であるような新たな状態への遷移が起こることを示す。生物のような大規模な反応ネットワークを持つ系において、分子数の離散性を利用した現象が生ずる可能性についても、あわせて論ずる。

化学反応系のダイナミクスを考える際には、通常、速度方程式を用いることが多い。そこでは、各成分の量は連続量（実数）として取り扱われる。

ところが、各成分の分子数は、整数でしかありえない。分子数が小さい成分がある場合には、その有限性・離散性が問題となりうる。速度方程式によるアプローチが適用できるとは限らない。

このような、分子数が小さい系の振舞いを考える際には、確率微分方程式が多く用いられてきた。だが、確率微分方程式は、連続極限での挙動に連続量としてゆらぎを加えたものであり、分子数が離散的であることそのものの影響を取り扱うことはできない。

本研究では、この分子数の離散性が本質的であるような効果を問題とする。連続極限での挙動にゆらぎを加えたものとしてはとらえきれない新たな状態が、分子数が離散的であることによって現れてくる可能性について議論する。

まず、第2章では、最小限のモデル反応系として、4種類の分子 $X_i (i=1, \dots, 4)$ からなる自己触媒的なループ $X_i + X_{i+1} \rightarrow 2X_{i+1}, X_5 \equiv X_1$ を考える。反応容器外での各成分の濃度は一定に保たれているものとし、容器の内外に拡散による分子の出入りがあるものとする。

連続極限では、各成分の濃度変化は、速度方程式を用いて考えることができる。各成分の濃度は、振動しながら固定点（定常状態）に収束してゆく。反応容器の体積 V が大きい（分子が多い）時の振舞いは、概ね、この連続極限での挙動にゆらぎが加わったものと見なすことができる。

ところが、 V が小さい（分子が少ない）時には、これとは全く異なる挙動を示す。ゆらぎが大きく、かつ、分子数が離散的であることにより、各成分 X_i の分子数 (N_i) が0にまで達するようになる。ひとたび $N_i = 0$ となると、 X_i を生成する反応が完全に停止し、次に X_i 分子が流入するまで $N_i = 0$ の状態が続く。これにより、 N_1, N_3 が比較的大きく、かつ、殆どの時間に渡って $N_2 = N_4 = 0$ であるような新たな状態（1-3 rich 状態）が現れる（同様に、2-4 rich 状態：殆どの時間に渡って $N_1 = N_3 = 0$ も現れる）。この1-3 rich 状態では、ただ1個の X_2 もしくは X_4 分子の流入により、各成分の分子数が急激に変化するような、特徴的な振舞いが見られる。

この状態が現れるためには、分子数のゆらぎと離散性の双方が必要である。連続極限では対応する状態は存在せず、この状態を連続極限での挙動にゆらぎを加えたものとしてとらえることはできない。 V を変化させると、この状態への明確な遷移が見られる。

第3章以降では、より複雑な反応ネットワークの中で、分子数の離散性がどのような効果を及ぼしうるか論ずる。

<http://chaos.c.u-tokyo.ac.jp/~togashi/>