

Conditions for partial and full synchronization of indirectly coupled molecular oscillators  
(間接的に結合した分子振動子の部分的・完全同期の条件)

氏名 稲垣 志帆

この論文では抽象的なモデルと、酵素の飽和によって間接的に相互作用するrepressoratorと呼ばれる分子システムの両方に注目し、振動子集団の結合について研究した。過去20年間、合成生物学の進歩により、研究者は生体内および生体外の複雑な動的システムを実装することができるようになった。このような動的システムの中でも、特に振動子はその複雑な挙動と生物学的な関連性から注目されている。

まず、解析的な観点から研究できる拡張した蔵本モデルに注目した。具体的には脳波のパターンをモデル化することに応用した。平静な状態では $\alpha$ 波と呼ばれる脳波が優勢であるが、外部からの刺激が加わると高周波の $\beta$ 波や $\gamma$ 波が優勢になる。このモデルは2つの振動子が互いに同期しようとする振幅と位相が時間的に変化する時間発展方程式で構成されている。時系列データをプロットし、外部刺激があると振動子の周波数が上昇し、外部刺激がない状態で十分な時間が経過すると元の周波数に戻ることを確認した。周波数を算出するために観測位相を求めた。観測位相は、バンドパスフィルターをかけた時系列データと、ヒルベルト変換した時系列データから算出する。バンドパスフィルタとは、信号中の周波数成分を特定の帯域以外でカットするツールである。観測位相の時間変化の長時間平均が平均化された周波数となる。フィルタの中心周波数と周波数帯域の幅を変えて相図をプロットした。外部刺激がない場合は多くのパラメータで小さな周波数が観測され、外部刺激がある場合は多くのパラメータで大きな周波数が観測された。またフィルタの中心周波数や周波数帯域によって検出できる周波数が大きく異なるため、系ごとに適切なフィルタの中心周波数や周波数帯域を設定することが困難である。

しかし分子振動子のような他の振動系は外部刺激を利用することで、計算を行う方法として好都合である。それにもかかわらず、それらの結合系はほとんど研究されていないが、振る舞いの多様性を向上させる可能性がある。次にrepressoratorと呼ばれる分子振動子の集団が、酵素の飽和によって間接的に相互作用することを研究した。repressoratorは、3つの負のフィードバックのサイクルから成る。周期の計算には自己相関関数を用いた。酵素飽和のMichaelis定数と転写率という2つのモデルパラメータの関数としてどの程度同期しているかを計算した。結合したrepressoratorの相図は、非同期、部分的同期、完全同期の領域を示した。振動子の振幅が同程度の場合は常に少なくとも部分的に同期している。競合的な酵素飽和の影響を低くすると、系全体の同期性は低下する傾向にある。転写速度の差が非常に大きくなると、振動子の周期や振幅が違いすぎて同期がとれなくなる。興味深いことに、非同期になるパラメータセットの島が同期するパラメータセットに囲まれているのが観察され、振る舞いの非線形性が示された。この系をさらに分析するため、時系列データを利用した。repressoratorの1つは、先に述べた島で周期がほぼ2倍になり、異なるモードに到達しているように見える。この変化は自己相関関数では連續的であるが、システム全体の同期の急激な変化をもたらす。最後に系のスペクトル解析を行い、各振動子の固有周波数と、酵素の影響による追加周波数を浮き彫りにした。

分子ロボティクスにおいて間接的な結合は通常、より非線形で制御が難しいため、系に負の影響を与えると考えられている。しかし今回の結果では、間接結合が複雑な振る舞いの空間を提供し、異なる結合モード間の急激な遷移を可能にすることが示された。遷移領域付近に系を設定することで、時間的・空間的なパターンに応じて強制的に同期させたり脱同期させたりすることができる。振動子ごとに異なるタイプのロボットに影響を与える分子ロボットの制御装置の開発や、複数の振動子が同時にピークを迎える領域でロックするアクティブラマサの設計など幅広い応用が期待される。