

原 啓明

(12) Random walk の拡張とその 2, 3 の応用

東北大・工 原 啓 明

Random walk の理論は、これまで拡散、高分子、格子グリーン関数等の問題で使われて来たことは周知の通りである。ここではこの Random walk の理論を、

- (I) 過程に“メモリー”を入れて非線型にする。
- (II) Walker の“モード”を通じて環境との結合をとり入れる。

以上の 2 点を考慮して拡張する。拡張したものを以下 GRW (Generalized random walk) と書く。応用として、この GRW から線型、或いは非線型の Fokker-Planck (FP) 方程式を導き、その解を経路積分の形で求め、過程に対する Hamiltonian を導出する。この際スケーリング則の考えを使う。次に GRW の中で上記(II)を考えた CRW (Coupled RW) を使って酵素反応の生成速度を従来とは違った立場で求め、Michaelis-Menten の表式からの“ずれ”を出す。

GRW の漸化式は次の様に見える¹⁾

$$\begin{aligned}
 W(m, N) = & \tilde{P}_{N-1}^+(m|m-1)W(m-1, N-1) \\
 & + \tilde{P}_{N-1}^-(m|m+1)W(m+1, N-1) \\
 & + \tilde{R}_{N-1}(m)W(m, N-1)
 \end{aligned} \tag{1}$$

$W(m, N)$ は Walker が N 回のステップの後に場所 m に到達する確率を表わす。又 \tilde{P}_{N-1}^{\pm} は $N-1$ 番目のステップで $m \mp 1$ から m へとび移る確率、 \tilde{R}_{N-1} は m にとどまっている確率を表わし、これ等は各ステップで $\tilde{P}_N^+(m+1|m) + \tilde{P}_N^-(m-1|m) + \tilde{R}_N(m) = 1$ と規格化されている。Walker のメモリーは \tilde{P}_{N-1}^{\pm} , \tilde{R}_N が以前の W や \tilde{P}^{\pm} , \tilde{R} に依存する形で導入する。又環境の Walker に対する影響は場所を表わす軸と平行な軸 (一次元の GRW の場合) を多数考えこれでモードを表わす。このモード間のジャンプを考えると (1) は次の様になる²⁾ (i はモードを指定する添字)

$$W^{(i)}(m, N) = \tilde{P}_{N-1}^{+(i)}(m|m-1)W^{(i)}(m-1, N-1)$$

(12) Random walk の拡張とその 2,3 の応用

$$\begin{aligned}
& + \tilde{P}_{N-1}^{-(i)}(m|m+1) W^{(i)}(m+1, N-1) \\
& + \tilde{R}_{N-1}^{+(i, i-1)}(m) W^{(i-1)}(m, N-1) \\
& + \tilde{R}_{N-1}^{-(i, i+1)}(m) W^{(i+1)}(m, N-1) \tag{2}
\end{aligned}$$

規格化条件は $\tilde{P}_N^{+(i)}(m+1|m) + \tilde{P}_N^{-(i)}(m-1|m) + \tilde{R}_N^{+(i, i-1)}(m) + \tilde{R}_N^{-(i-1, i)}(m) = 1$ である。(2) は行列で書けば形式的には (1) と同じになる。(1), (2) でモデルに合わせて \tilde{P}^+ , \tilde{R} を適当な形にとれば, そのモデル過程のシュミレーションが可能となる。

解析的議論のため, (1), (2) における量に対応する連続変数 $x (= \frac{m}{a})$, $t (= \frac{N}{t_0})$ と連続関数 w , \tilde{P}^+ , r を導入する。 a と t_0 はそれぞれ Walker の歩幅と単位時間である。 a^2/t_0 を一定にして, $a, t_0 \rightarrow 0$ とした (1), (2) の展開を行うと

$$\frac{\partial w(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(\tilde{K}_1 w) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2}(\tilde{K}_2 w), \quad (\tilde{P}^+ + \tilde{P}^- + \tilde{r} = 1), \tag{3}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial w^{(i)}(x, t)}{\partial t} &= \frac{1}{t_0}([i \rightleftharpoons i+1] + [i \rightleftharpoons i-1]) - \frac{\partial}{\partial t}([i \rightleftharpoons i+1] + [i \rightleftharpoons i-1]) \\
& - \frac{\partial}{\partial x}(\tilde{K}_1^{(i)} w^{(i)}) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2}(\tilde{K}_2^{(i)} w^{(i)}), \\
& (\tilde{P}^{+(i)} + \tilde{P}^{-(i)} + \tilde{r}^{+(i+1, i)} + \tilde{r}^{-(i-1, i)} = 1), \tag{4}
\end{aligned}$$

となる。ここで

$$\tilde{K}_1(x, t) = (\tilde{P}^+(x, t) \mp \tilde{P}^-(x, t)) \left(\frac{a/t_0}{a^2/t_0} \right), \quad [i \rightleftharpoons j] = r^{(i, j)} w^{(j)} - r^{(j, i)} w^{(i)},$$

(3) の \tilde{K}_2 は規格化条件より $\tilde{K}_2(x, t) = (1 - \tilde{r}(x, t)) a^2/t_0$ と書ける。まずメモリーなし (\sim をとって以下区別) の場合, このとどまる確率 r によって過程を Type A, B に分類してみる。(図 1 参照)

図に示す過程にスケーリング則: $x \rightarrow \lambda x = x' (\lambda m = m')$, $t \rightarrow \lambda^2 t = t' (\lambda^2 N = N')$ を使うと Type A では $\lambda < 1$, B では $\lambda > 1$ のときに $K_2(\lambda x, \lambda^2 t)$ は $K_2^0(\lambda^2 t)$ となりこのとき経路積分形に書くことが容易になる³⁾。又経路積分の指数部で Lagrangian を定義

原 啓明

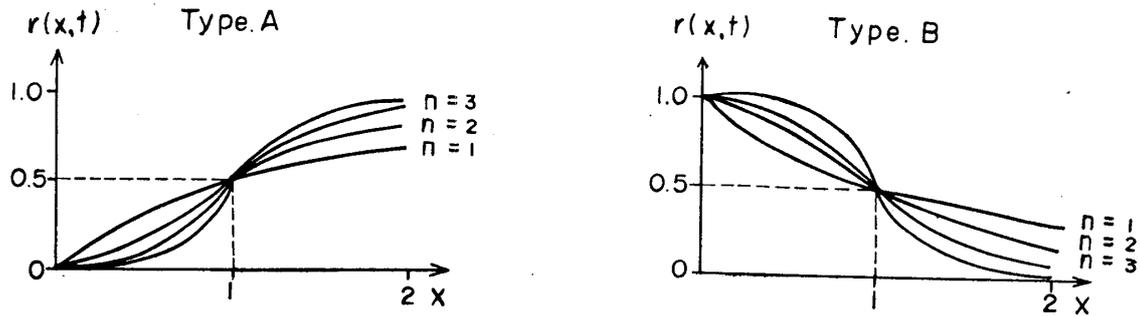


図 1. $r(x, t)$ による分類 (t は固定)

$$A : r(x, t) = \frac{x^n}{1+x^n} \varphi(t), \quad B : r(x, t) = \frac{x^{-n}}{1+x^{-n}} \varphi(t), \quad (x \neq 0)$$

$$1 \varphi(t), \quad (x = 0)$$

φ は $0 \leq \varphi \leq 1$ である。

すれば過程 (3) の有効 Hamiltonian が P^\pm, r で表現される。とくに (4) で P^\pm, r^\pm の間に適当な関係式を仮定すると別の方法でも有効 Hamiltonian を決めることが出来る。⁴⁾ (I) のメモリーのモデルとして $\tilde{P}^\pm(x, t) = P^\pm(x, t) \pm b w(x, t)$, b はメモリーを表わすパラメーター, $(P_{N-1}^\pm(m|m \mp 1) = P_{N-1}^\pm(m|m \mp 1) \pm b W(m \mp 1, N-2))$ をとると (3) は Burgers 方程式を少し修正した形になり ($P^\pm(x, t) = \frac{1}{2}$ の場合は Ref. 5), この非線形の式は Hopf-Cole 変換で又 FP 方程式となる。

次に (4) でメモリーなしの CRW を酵素反応系 (E : 酵素, S : 基質, P : 生成物)。



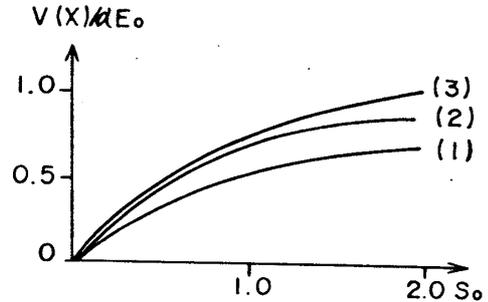
に適用する。⁶⁾ この時反応前の E と S の間では、線形関係によって S の空間的ふるまいが E で規定されているとする。そして基質が (5) でとり得る状態を反応前 (0 モード), 中間物質 (1 モード), 生成物 (2 モード) とモードで分けて (4) 式を使う。モード間の遷移は (5) の矢印に合せる。CRW では基質の空間的ふるまいが拡散の形でとり入れられ、局所的な生成速度は

$$v(x) = \frac{\alpha r_{10} E_0}{1 + r_{10}} G(x) \quad (\alpha : \text{定数}) \tag{6}$$

と表わされる。 $G(x)$ は拡散の項を含んでいる。又 E_0 は反応前の酵素の濃度, r_{10} は基質

(12) Random walkの拡張とその2,3の応用

が $0 \rightarrow 1$ モードへ移る確率である。酵素の活性点が1個以上のときは図2に示す様に(1) \rightarrow (2), (3)へずれる。又(5)の系に阻害剤が加わって r_{10} が小さくなる場合は、図1で示した Type A の $n=1 \rightarrow 2, 3$ へのずれと同じ“S字形”のずれが(6)の $G(x)$ の前の因子で表わされる。

図2. 生成速度 $v(x)$

(1): $r_{10} = s_0$

(2): $r_{10} = s_0 + \frac{1}{2} s_0^2$

(3): $r_{10} = s_0 + \frac{1}{2} s_0^2 + \frac{1}{3!} s_0^3$

参考文献

- 1) H. Hara, Prog. Theor. Phys. **60** (1978),
H. Hara, Phys. Rev. **B20** No. 4 (1979)
- 2) H. Hara and S. Fujita, Z. Physik **B32**
(1978), 99,
H. Hara, Z. Physik **B32** (1979), 405
- 3) F. W. Wiegel, Physica **33** (1967), 734,
T. Morita and H. Hara (to appear in Physica)
- 4) H. Hara and S. D. Choi (to appear in Z. Physik)
- 5) H. Hara (to appear in Z. Physik)
- 6) H. Hara and Y. Igarashi (1980 春の物理学会)