

AGORA 2022

数理的理解から 未来を見る勉強会

武石拓也(基盤科学系)

福井智宏(機械工学系)

蓮池紀幸(電気電子工学系)

加藤容子(応用生物学系)

吉田裕美(分子化学系)



本勉強会の目標

数学的理解から未来を紐解くためには、適切な数理モデルの構築とその理解が必要不可欠である。本勉強会では様々な専門分野の研究者が一堂に会し、それぞれの『数学』を持ち寄り、分野横断的に議論を重ねることによって理解を深めることを目指す。

令和6年度は、参加者の中の共通数学である、『**細胞のイオン膜透過ネットワークの電気化学**（分子科学系：吉田教授）』と『**偏微分方程式による新たな数理モデルの構築**（機械工学系：福井准教授）』の連携・融合を図る。

2023年度概要

メンバーの講演および外部講師による勉強会

8月30日 武石 拓也(基盤科学系)

8月30日 長谷川 健(京都大学化学研究所)

9月14日 早瀬 友裕(クラスター株式会社)

10月10日 蓮池 紀幸(電気電子工学系)

11月2日 加藤 容子(応用生物学系)

1月9日 吉田 裕美(分子化学系)

1月9日 広野 雄士(京都大学理学研究科)

2月5日 福井 智宏(機械工学系)



1月9日勉強会の様子

2024年度

開催した勉強会

・4月22日 ・10月21日

・5月27日 ・11月11日

・6月17日 ・11月25日

・7月22日 ・12月16日

・8月30日 ・1月20日

・10月7日 ・3月6日

3月18日～21日

講師: Prof. Achille Giacometti



1月20日勉強会の様子

勉強会の内容

前半

テキスト『実例で学ぶ化学工学』を使って数値シミュレーションの練習



6月17日勉強会の様子

勉強会の内容

後半

イオンの膜透過現象のモデル化と数値シミュレーション
実験



11月11日勉強会の様子

3月勉強会

March 18 (Tue) 13:30-14:30
Building 12 room 319

Invited speaker

Prof. Achille Giacometti

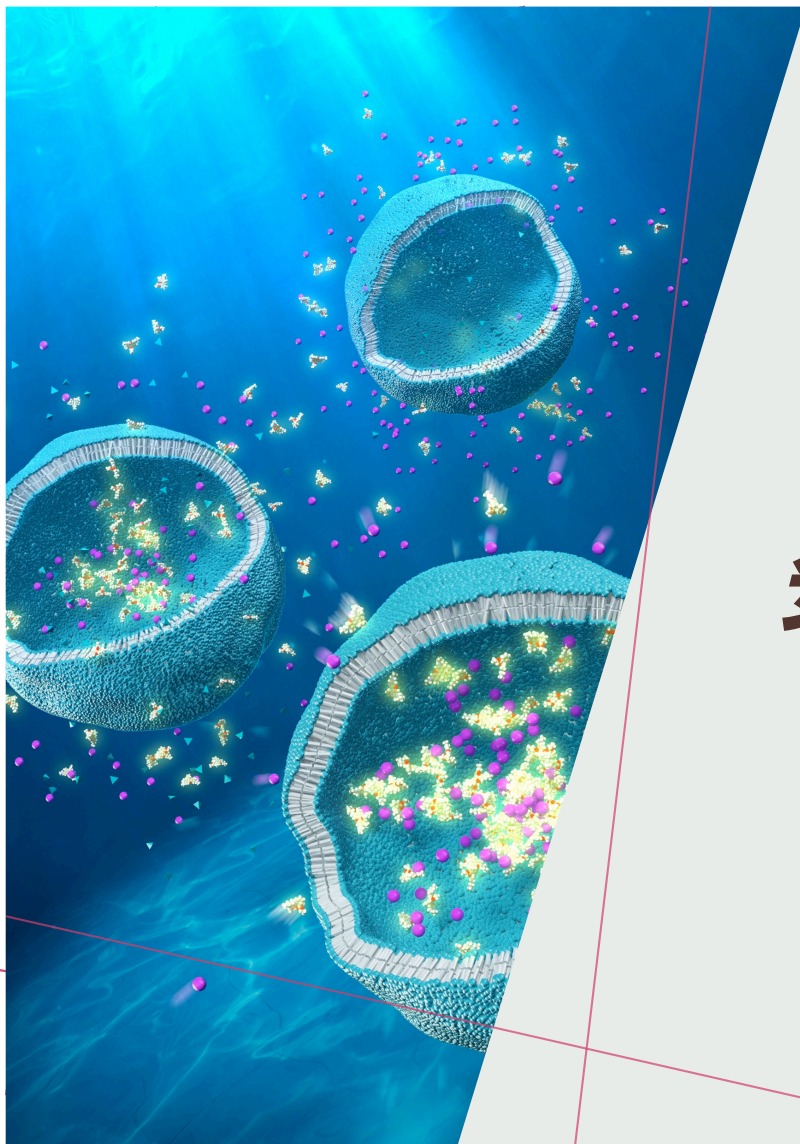
Dipartimento di Scienze Molecolari e Nanosistemi
Universita' Ca' Foscari Venezia Campus Scientifico Edificio Alfa



出典: <https://www.unive.it/data/people/5591670>

Title: Solvent quality and solvent polarities: revisiting conventional paradigms

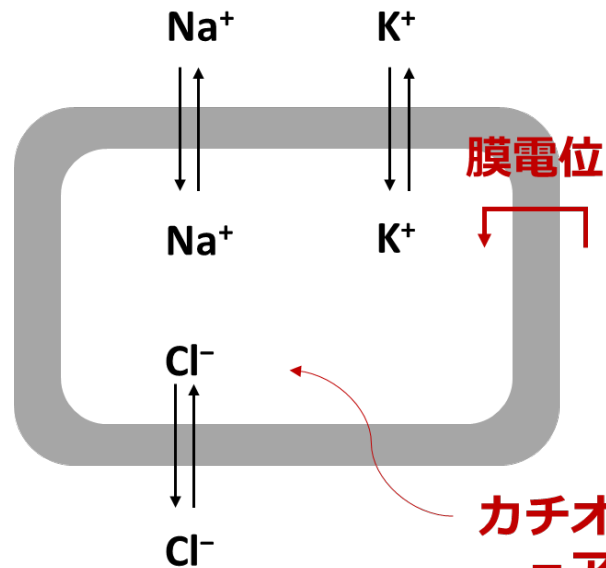
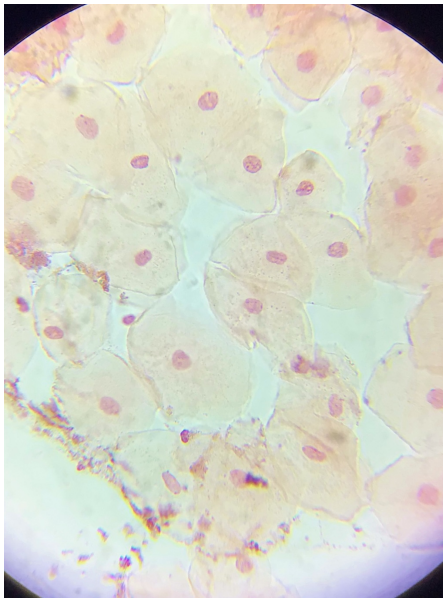
In a 1997 Commentary published in PNAS, Peter Wolynes suggested the possibility of an *in vacuo* folding, where “*it would be sensible for a protein to turn inside out with its hydrophilic or polar residue inside and hydrophobic apolar residues outside.*” In this talk I will review this idea, and I will argue that it raises the delicate issue of the definition of solvent quality and solvent polarities. I will then present three different stories based on extensive numerical simulations of the folding of polypeptides, synthetic polymers and formation of membranes all showing unexpected results. Finally, I will argue that the origin of these unconventional behavior can be traced back to the different driving forces acting in the different cases, and in turn to the unique properties of the hydrogen bonds interactions.



数理モデルの対象

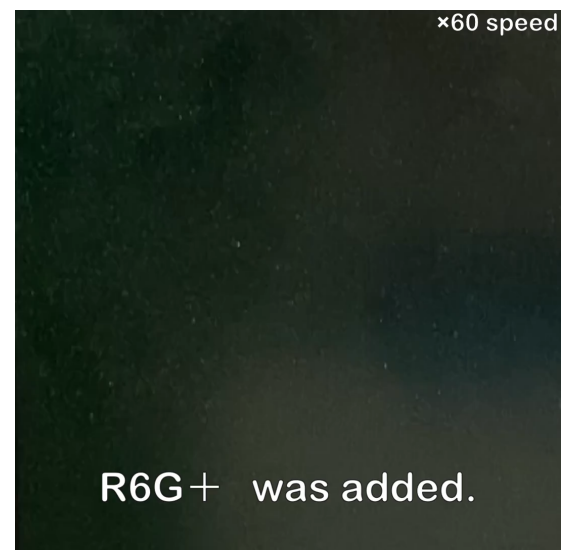
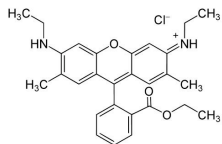
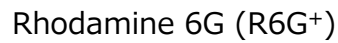
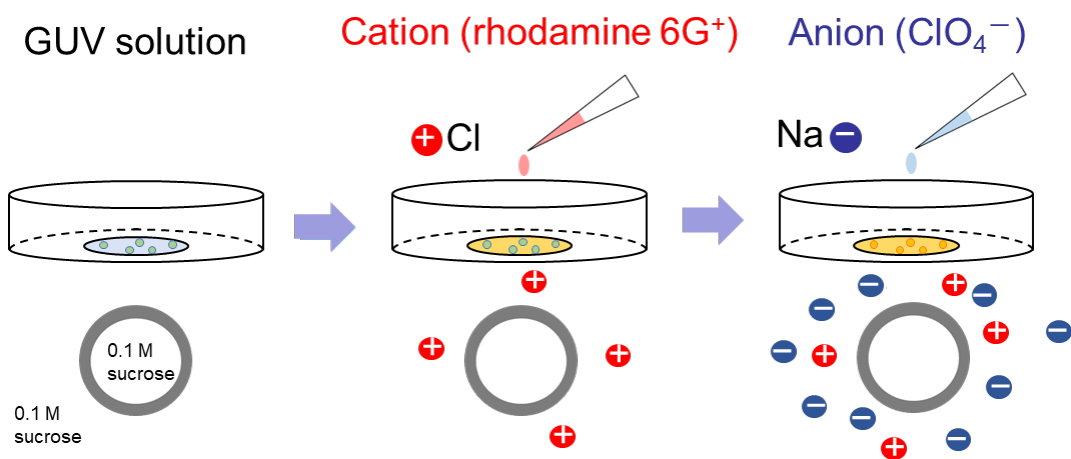
イオンの膜透過ネットワークを電気化学的に考える

電位, 電気的中性



カチオンの正電荷の総量
= アニオンの負電荷の総量

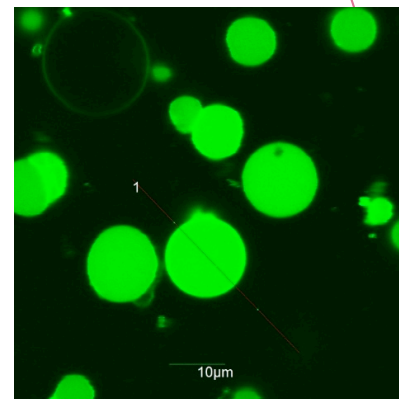
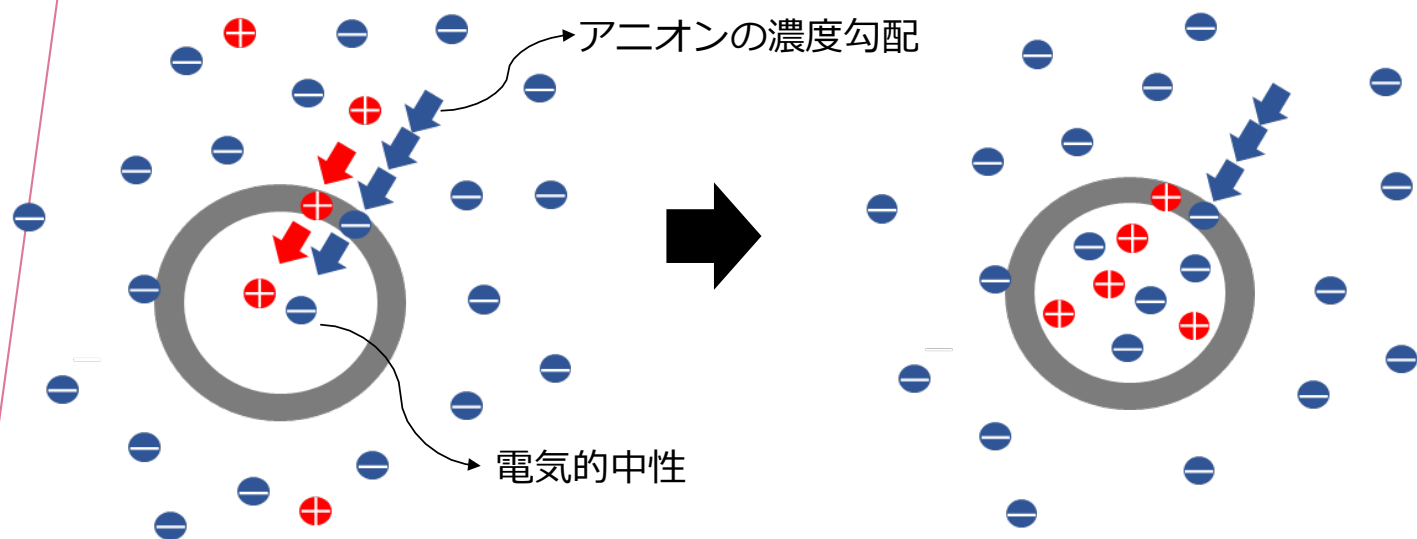
イオンのリポソーム内自動濃縮



特願2020-082512, 国際出願 PCT/JP2021/17165

Langmuir, 2022, **38(46)**, 14208.

濃縮機構

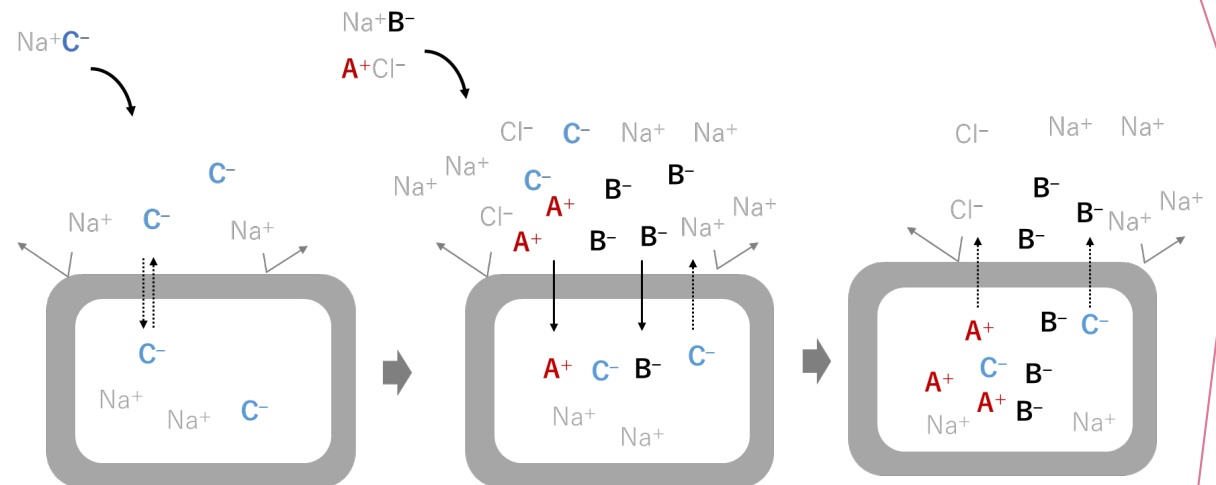
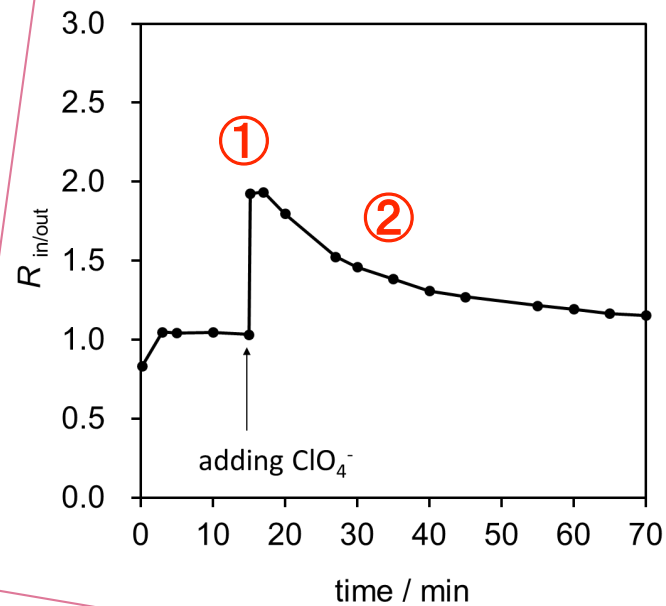
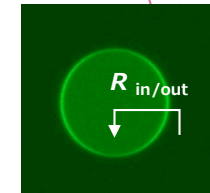


特願2020-082512, 国際出願 PCT/JP2021/17165

Langmuir, 2022, **38(46)**, 14208.

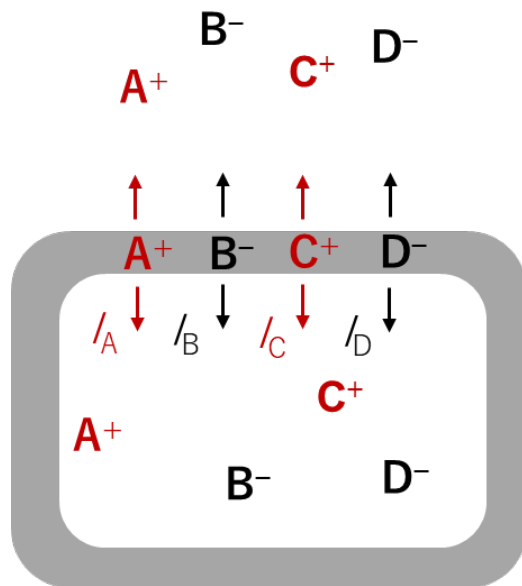
複雑な膜透過—3つのイオン—

C^- : $H_2PO_4^-$
 A^+ : Rhodamine 6G ($R6G^+$)
 B^- : ClO_4^-



① A^+ が急激に濃縮 **②** A^+ が C^- とともにゆっくりと放出

閉鎖系でのイオン透過



内部水相の電気的中性は保たれる

$$\sum_{k=1}^n I_k = 0$$

★イオンの相互補完発生

$$I_A + I_B + I_C + I_D = 0$$

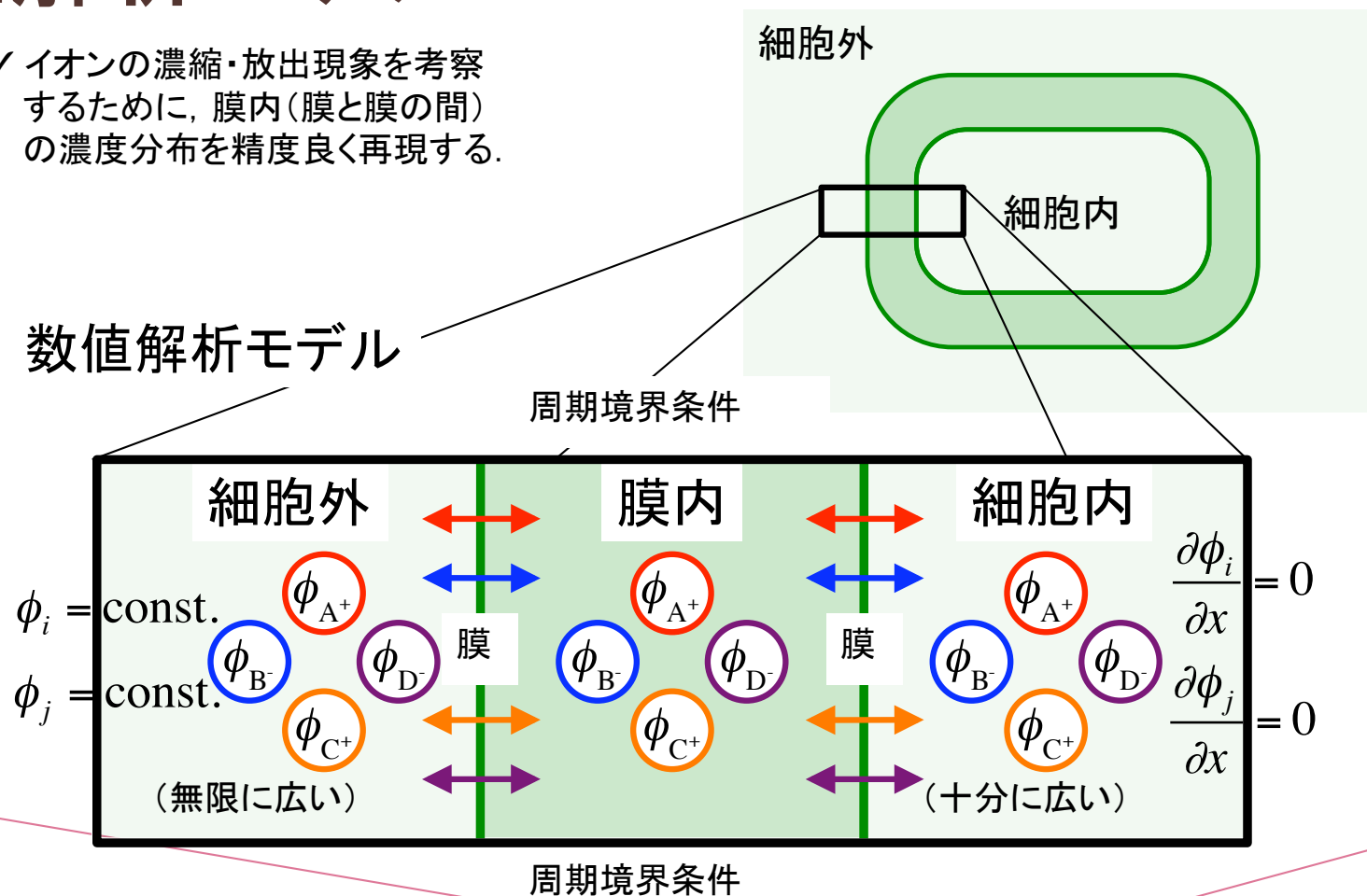
それぞれのイオンは、上記の式を満たすように膜透過する。

拡散＋電気的中性 → 特異な膜透過を表せるのでは？！

数値解析モデル

- ✓ イオンの濃縮・放出現象を考察するために、膜内(膜と膜の間)の濃度分布を精度良く再現する。

数値解析モデル



支配方程式

拡散方程式

カチオン(陽イオン)

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = k_i \left(\frac{\partial^2 \phi_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi_i}{\partial y^2} \right)$$

アニオン(陰イオン)

$$\frac{\partial \phi_j}{\partial t} = k_j \left(\frac{\partial^2 \phi_j}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi_j}{\partial y^2} \right)$$

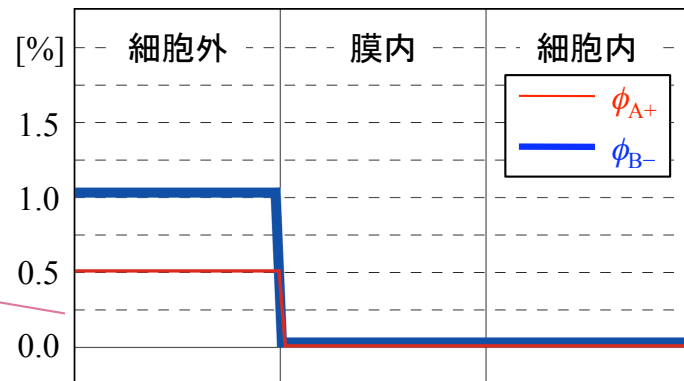
電気的中性条件

$$\sum_i \left\{ |e_i^+| \frac{\partial \phi_i}{\partial t} \right\} = \sum_j \left\{ |e_j^-| \frac{\partial \phi_j}{\partial t} \right\}$$

濃縮反応 (細胞外 $\phi_{A+} <$ 細胞内 ϕ_{A+})

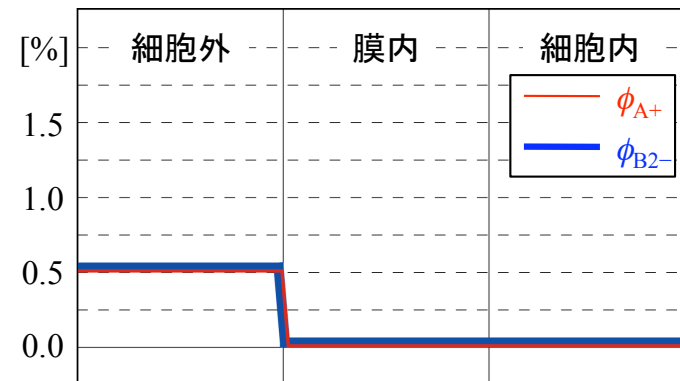
細胞外	膜内	細胞内
$\phi_{A+} = 0.5\%$ $\phi_{B-} = 1.0\%$		

ϕ_{A+}	細胞外	膜内	細胞内
ϕ_{B-}			



細胞外	膜内	細胞内
$\phi_{A+} = 0.5\%$ $\phi_{B2-} = 0.5\%$		

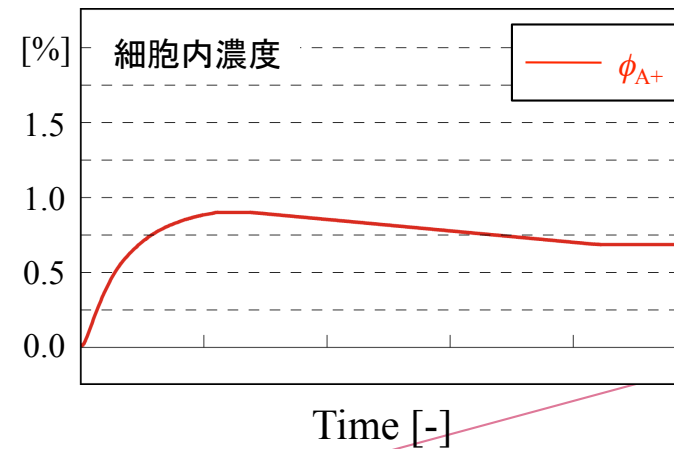
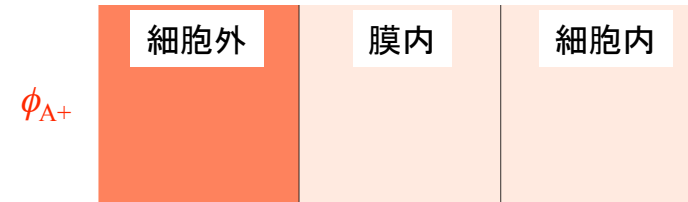
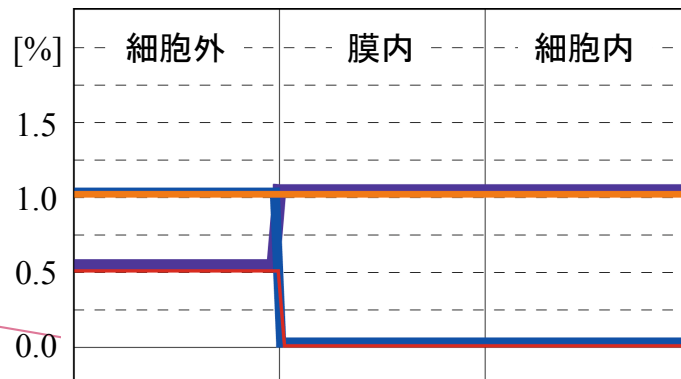
ϕ_{A+}	細胞外	膜内	細胞内
ϕ_{B-}			



濃縮・放出反応 (細胞外 $\phi_{A+} < \text{細胞内} \phi_{A+} \rightarrow \text{細胞外} \phi_{A+} \approx \text{細胞内} \phi_{A+}$)

細胞外	膜内	細胞内
$\phi_{A+} = 0.5\%$	$\phi_{A+} = 0.0\%$	$\phi_{A+} = 0.0\%$
$\phi_{B-} = 1.0\%$	$\phi_{B-} = 0.0\%$	$\phi_{B-} = 0.0\%$
$\phi_{C+} = 1.0\%$	$\phi_{C+} = 1.0\%$	$\phi_{C+} = 1.0\%$
$\phi_{D-} = 0.5\%$	$\phi_{D-} = 1.0\%$	$\phi_{D-} = 1.0\%$

✓ 4種類のイオンを組み合わせ、濃縮・放出反応の再現に成功.

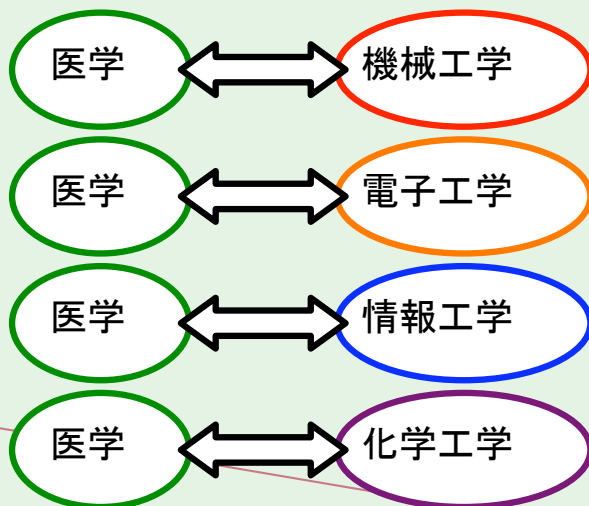


勉強会を振り返って

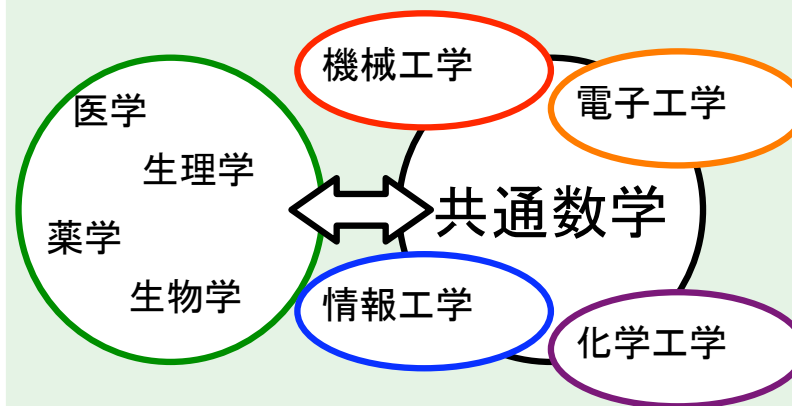
数理解の理解から未来を見る勉強会

共通数学の模索を通して、新しい価値の創造を目指す！

これまでの医工連携



これからの医工連携



量的観点から振り返る進捗・成果

- ・勉強会の開催数(学内講師, 勉強会メンバー)

計17回

- ・勉強会の開催数(外部講師)

計4回

- ・執筆論文数

0件

- ・研究費獲得状況

0件

質的観点から振り返る進捗・成果

普段、よく見慣れた方程式も、分野が異なると、その解釈や使い方が多種多様であることの気づきから、『共通数学』というキーワードを軸に、多くの勉強会を開催した。特に、単なる分野横断型の共同研究にとどまることなく、新しい価値の創造を目指し、数式を丁寧に扱いながら多くの議論を交わした。

例えば、陰的解法に代表される行列演算では、対角化できなければ普通はあきらめる(福井・機械工学系)ところを、ジョルダン標準形にすれば解ける(武石・基盤科学系)といったように、分野が異なると、そのアプローチや捉え方が全く異なる点が素晴らしく斬新に感じ取れた。

このような姿勢から生まれた新たな挑戦である、『特異的な化学反応を数値シミュレーションにより再現・考察する』では、単純にフォン・ノイマンの安定性解析が適用できないなど、極めて困難な課題が数多く存在したが、化学反応の背景にある微分方程式や、電気的条件等を含めた新しい解法の考案を丁寧に進めた。

このような活動を通して得られた新しい技術や考え方は、これまでの特定の工学単体を軸とした学術だけでは決して辿り着くことの出来ない『新たな創造力』を有しており、この新たな創造力を軸に、他分野(例えば医工学)との連携を模索するという方向性は、これまでに無い、全く新しい取り組み方ではないかと期待される。