

氏名	郷古浩道
学位(専攻分野)	博士(情報学)
学位記番号	情博第182号
学位授与の日付	平成17年11月24日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当
研究科・専攻	情報学研究科数理工学専攻
学位論文題目	One - and two - dimensional dynamics of Brownian motors and probability distributions (ブラウニアン・モーターの1次元, 2次元動力学および確率分布)
論文調査委員	(主査) 教授 宗像豊哲 教授 岩井敏洋 助教授 五十嵐顕人

論文内容の要旨

本論文では、いくつかの種類のリャレットモデルを考え、それぞれのモデルについて数値計算および解析的なアプローチを行っている。これによりそれぞれのモデルの性質を明らかにし、リャレットに関して新たな知見をもたらしている。

第1章は序論で、ブラウニアン・モーターの定義と種々のリャレットを用いたモデルを与え、それが幅広く研究されている背景を紹介している。リャレットモデルによって粒子の特定方向への運動が起こる仕組みについて説明している。また、リャレットモデルに関する過去の研究についても述べられている。

第2章では従来の研究を修正した新たなリャレットモデルを考えている。具体的には、ポテンシャル場を運動する粒子の間にばねによる相互作用がある場合にこの体系がどのような挙動を示すのかについてシミュレーションにより検証している。その結果、単一の粒子に方向性のある運動をさせるためには、熱浴の温度が非ゼロでなければならないのに対して、本章で扱う(粒子間相互作用による粒子間相関を持つ)複数粒子の場合には熱浴の温度が0の場合(熱浴からの影響がない)にも粒子が特定の方向に運動することを明らかにした。また、モデルのエネルギー効率についても考察した結果、単一粒子の場合と比較してこのモデルを用いると運動の効率が上昇することを明らかにした。そのほか、この粒子間の相互作用を取り入れたモデル系で粒子の速度が系の各種のパラメータにどのように依存するのかも調べ、従来の単一の粒子系では見られないこれらの特徴を発見するなど、リャレット系に対するより深い理解をもたらしている。

第3章では、リャレットモデルをさらに改良してその性質を調べている。従来リャレットモデルは第2章のように1次元のポテンシャルについて考えられていたが、本章では2次元平面上のポテンシャル場における相互作用を持つ粒子の運動を考察している。また、リャレットモデルは一般に分子モーターのモデルの候補のひとつとみなされているので、モデルの構築に際しては分子モーターの性質も考慮している。そして構築したモデルに関してシミュレーションを行っている。分子モーターに関する生物実験のデータとモデルのシミュレーション結果を比較し、両者が定性的には一致することを明らかにしている。これにより、このモデルが分子モーターの数理モデルの候補のひとつとしてみなすことができる可能性を示している。同時に、シミュレーション結果により1次元のモデルでは見られなかった現象が2次元のモデルにおいて観察されることが明らかになっている。

第4章では、座標によって異なる温度ノイズが作用するモデルを考えている。具体的には、2つの熱浴に作用し、周期ポテンシャル場を運動する粒子の性質について、シミュレーション及び理論の両面から考察している。まず、適切な境界条件を導入しFokker-Planck方程式を解くことにより確率密度流の解析解を求め、シミュレーションの結果と比較して両者が一致することを確認している。次に、Fluctuation Theoremと呼ばれる最近非平衡系の理論として注目されている定理がこのモデルにおいても成り立つことをシミュレーションにより確認している。これらの結果を利用して、粒子が特定の初期位置にあるとき確率分布がどのように時間に応じて変化するのかを近似的に調べるための新たな方法を提示している。その方法を用いて、シミュレーションを行い、長い時間が経過した後ではこの方法が実際の確率分布を近似していることを確かめて

いる。さらにその結果をふまえて、確率分布の時間変化に関して、パラメータ依存性が従来よりも簡単に検証できることを示している。最後に、本章で述べられている方法がほかの同様なモデルにも応用できる可能性を有する点についても述べられている。

第5章は結論で、本論文の2, 3, 4章で得られた結論をまとめている。

論文審査の結果の要旨

本論文は、ラチェットモデルに関してシミュレーションおよび理論の両面から幅広く研究したものである。具体的には、粒子間に相互作用がある場合のラチェットモデルの性質を1次元および2次元系に関して、シミュレーションにより考察しているほか、複数の熱浴に接する粒子の運動について解析的な考察を行っている。本論文で得られた結果は以下の通りである。

- (1) 粒子間にばねによる相互作用を持たせたモデルにおいては、熱浴からの温度ノイズによる効果がない場合でも粒子は集団として特定の方向に運動する。このことは、相互作用を持たない1粒子系の場合には粒子は特定の方向には運動しないことと対照的である。また、ばねによる相互作用が特定の値のときに粒子の速さは最大になり、さらに、エネルギー効率も上昇することを示した。(ただし、エネルギーの大部分は散逸される。)
- (2) 2次元のポテンシャル場を運動する、ばねでつないだ粒子のモデルを構築し、それをシミュレーションにより調べ、粒子が安定して特定の方向に運動することを示した。また、粒子数が多くなるほどばねでつないだ粒子全体が安定して特定の方向に運動する。この結果は、分子モーターの実験によって得られた結果と定性的に一致しているので、本論文のモデルは分子モーターの運動を従来のモデルよりもよく再現している。さらに、ポテンシャルの周期とばねでつないだ粒子の運動の速さの関係についても考察し、その結果は生物学の実験結果と定性的に一致した。
- (3) 2種類の熱浴に作用する粒子の運動を考えたモデルにおいて、長時間経過後の確率分布を近似的に計算する新たな手法を提示することに成功した。この手法は確率密度流が解析的に計算でき、定常状態揺らぎ定理(SSFT)が成立するような物理系に应用することが可能である。この手法を用いれば、モデルの性質を従来と比べて容易に調べることができる。

以上、本論文はブラウニアン・モーターに対するラチェットモデルに関して従来知られていなかった様々な知見を明らかにしている。これらの発見は今後のラチェットモデル、さらには確率過程の研究の発展に対しても資するものである。

よって、本論文は博士(情報学)の学位論文として価値あるものと認める。また、平成17年10月3日実施した論文内容とそれに関連した試問の結果合格と認めた。