

氏 名	中 西 哲 夫 <small>なかにし てつ お</small>
学位の種類	理 学 博 士
学位記番号	論 理 博 第 586 号
学位授与の日付	昭 和 52 年 11 月 24 日
学位授与の要件	学 位 規 則 第 5 条 第 2 項 該 当
学位論文題目	Time Dependent Fluctuation in a Nonlinear Chemical System (非線型化学反応系における時間的ゆらぎ)

論文調査委員 (主査) 教授 寺 本 英 教授 大 西 俊 一 教授 大 井 龍 夫

論 文 内 容 の 要 旨

化学反応過程を定量的に記述する理論的手法としては、緩和現象としての取扱い、微分方程式による決定論的な記述、さらに確率過程としての解析が展開されてきている。とくに近年、種々の生物現象の基礎になるような反応系を中心にして、それらの非線形性にもとづく特異的な現象を理論的な側面から解析することの重要性が認識され、この分野の研究が急速な展開をみせている。とくに非線形微分方程式系による決定論的な取り扱いが盛んに行なわれているが、化学反応過程の確率過程としての法式化は非線形反応系についてはほとんどなされていない。1 次反応系と簡単な 2 次反応系および高分子の関与した特殊な反応過程についての解析が行なわれているだけで、まだ未開発の問題が多い。

申請者は、そうした非線形反応系の興味ある例として、ある自己触媒作用をもった反応系を取りあげて、それに対応した確率過程モデルを作り、とくにゆらぎの特殊性を詳細に検討している。この反応系は開放系であって、ちょうど有名なロトカ・モデルに逆反応を取り入れたものになっている。申請者の研究の主眼は、系の平衡状態に近い定常状態近傍でのゆらぎと、平衡状態から大きくはずれた定常状態近傍でのゆらぎを対比して調べることにある。平衡状態からのはずれの尺度は、現象論的方程式から系全体の特性として定義される化学親和度を用いている。具体的には計算機シミュレーションによる定常状態近傍での標本過程を統計的に解析することによって、ゆらぎが内蔵している特性を明らかにしている。

まず、平衡状態では確率密度はポアソン分布になるが、平衡状態からはずれる、すなわち親和度が 0 から大きくなってくると、定常状態での確率密度がポアソン分布から次第に変形した形になることが明らかにされている。さらに、反応分子密度のゆらぎの自己相関関数および相互相関関数を分析し、平衡状態ではこれらの相関がなく各反応分子は統計的に独立な振舞いを示し、緩和も単純指数的であることを確かめている。これに反して、親和度が大きく、平衡状態からのはずれが大きいような定常状態でのゆらぎは、自己ならびに相互相関ともに顕著な振舞いを示し、そのスペクトル解析から、それが反応系の現象論的な特徴を反映していることを明確にしている。すなわち、ゆらぎのスペクトルにあらわ

れる最低の特性振動数は、もとの非線形反応方程式の線形近似で得られる特性振動数に近いことを示している。

参考論文 1 は振動的変化を示す反応系として生物集団の変動を記述するボルテラ方程式に対応した確率過程モデルを考え、その変動のゆらぎを同様な手法を用いて解析し、種々の興味ある結果を導いている。また、参考論文 2 は、流体力学の分野での研究であり、平板に付着した泡および液滴の形を、重力と表面張力の影響を考慮して解析したものである。

論文審査の結果の要旨

近年、種々の生物現象の素過程に関連したような化学反応系を中心として、それらの非線形性にもとづく特異的な現象を理論的な側面から解析することの重要性が認識され、この分野の研究が急速な展開をみせている。とくに、非線形微分方程式系による決定論的記述を用いての解析が盛んに行われているが、化学反応過程を確率過程として取扱う研究は、1 次反応系と簡単な 2 次反応系および高分子に関連した特殊な反応過程についての解析が行なわれているだけで、まだ未開発の問題が多い。

申請者は、そうした非線形反応系の興味ある例として、自己触媒作用のある 1 つの反応系を取り上げて、それに対応した確率過程モデルを作り、とくにゆらぎの特性を詳細に研究している。この反応系は開放系であって、有名なロトカ・モデルで逆反応をゆるしたものになっている。申請者の研究の主眼は、系の平衡状態に近い定常状態でのゆらぎと、平衡状態から大きくはずれた定常状態でのゆらぎを対比して調べることにある。現象論的反応方程式に対応した反応確率にしたがって計算機シミュレーションによって標本過程を発生させ、その統計的な解析を行なってゆらぎの特性を詳細に調べている。

まず、平衡状態では反応分子数の確率密度はポアソン分布になるが、平衡状態からはずれた定常状態では確率密度がポアソン分布から次第に変形した形になることが明らかにされている。さらに反応分子密度のゆらぎの自己相関関数および相互相関関数を解析して、平衡状態ではそれらの相関がほとんどなく、各反応分子は統計的に独立な振舞いを示し、緩和も単純指数的であることが確かめられている。これに反して、平衡状態から大きくはずれた定常状態近傍でのゆらぎは顕著な相関をあらわし、そのスペクトル解析から、それが反応系の現象論的な特性を反映していることを明確にしている。たとえば、ゆらぎのスペクトルにあらわれる最低の特性振動数は、もとの非線形反応方程式の定常点近傍での線形近似で得られる特性振動数に近似的に一致するが、非線形性にもとづく高振動ピークが表われることが示されている。

この研究は、とくに非線形系の平衡状態から大きくはずれた定常状態のゆらぎの特性について、重要な知見を与えており、単に化学反応系に限らず、種々の非線形現象のゆらぎに対しても重要な示唆を与えるものである。

参考論文は、本論文と同様な手法で振動的変化を示す反応系のゆらぎを解析したものと、流体力学の問題で平板に付着した泡および液滴の形を解析したものであるが、これらは申請者の秀れた研究能力を十分に示すものである。

よって、本論文は理学博士の学位論文として価値あるものと認める。