

平成 30 年 6 月 21 日現在

機関番号：32689

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2014～2017

課題番号：26800207

研究課題名(和文) 多体問題の動力学に基づく分子系および天体系の集団運動の統合的解明

研究課題名(英文) Study on the mechanisms for collective motions of molecular and astronomical systems based the methods of many-body problems

研究代表者

柳尾 朋洋 (Yanao, Tomohiro)

早稲田大学・理工学術院・准教授

研究者番号：40444450

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,700,000円

研究成果の概要(和文)：ミクロな分子運動からマクロな天体運動まで、自然の各階層における多体系の集団運動を統一的に理解することは、現代科学の重要な課題である。本研究では、非線形力学、統計力学、微分幾何学の手法を駆使してこの課題に取り組んだ。その結果、ミクロな分子運動の階層においては、回転型分子モーターの運動機構やDNAの高次らせん形成に関する新たな幾何学的モデルを提案することができた。また、原子集合体の解離運動を駆動する集団的内力の競合過程を特徴付けることができた。マクロな天体運動の階層においては、共鳴重力アシストと周期軌道の不変多様体を併用することにより、燃料消費を抑えた宇宙機の天体間遷移軌道の設計を実現した。

研究成果の概要(英文)：Understanding the fundamental mechanisms for collective motions of many-body systems, ranging from the microscopic molecular systems to macroscopic astronomical systems, is a significant challenge in modern science and technology. In this study, we have tackled this issue utilizing the methodologies of nonlinear dynamics, statistical mechanics, and differential geometry. As a result, we have developed novel dynamical models for the rotary motions of biological molecular motors and the formation of higher-order structures of DNA. We have also uncovered a dynamical mechanism for driving the dissociation of atomic clusters in terms of the competition between collective internal forces. As to the macroscopic astronomical systems, we have designed fuel-efficient transfer trajectories for space missions between the Earth and the Moon by using resonant gravity assists and invariant manifolds of periodic orbits.

研究分野：統計力学、非線形力学、応用数学

キーワード：多体問題 集団運動 分子モーター DNA クラスタ 共鳴 三体問題 重力アシスト

1. 研究開始当初の背景

ミクロな分子運動からマクロな天体運動まで、自然の各階層における多体系の集団運動を統一的に理解することは、現代科学の重要な課題である。本研究ではこの課題の達成に向けて、次の(1)-(3)のような背景に基づいて研究を開始した。

(1) 複雑分子系の集団運動と構造変化

多原子分子やクラスター、ナノ秩序構造体などの複雑分子系の構造変化の力学的機構を理解し、反応速度過程や反応分岐比を正しく理解することは、化学物理における重要な課題である。遷移状態理論などの従来の反応速度論は、平衡統計力学の仮定に立脚しており分子運動の詳細な力学的機構には踏み込んでいないため、反応速度の決定には限界がある。この事実は、近年の実験技術の進歩によってより一層明確になってきている。そこで、非線形力学と非平衡統計力学に基づく分子運動の新たな動力的な解明が、近年重要性を増してきている。

(2) 生体高分子と分子モーターの運動原理

熱ゆらぎの存在する環境下で正確に機能を発現する DNA、タンパク質などの生体高分子や分子モーターの運動原理を解明することは、生物物理学の重要課題であると同時に、新たなマイクロマシンの設計の観点からも興味深い。近年の一分子計測実験や数値計算法などの進展により、生体高分子や分子モーターの運動に関する知見やデータは急速に拡大している。そのような中、これらの知見やデータを統合し、生体高分子の機能発現の根本原理を説明する新たな理論の構築が求められている。

(3) 天体力学系の遷移現象と軌道設計

多体問題の観点からは、分子系のダイナミクスと太陽系などの天体系のダイナミクスとの間には多くの力学的アナロジーが成立する。本研究では、これらのアナロジーに着目することにより、小惑星および宇宙機の軌道解析に関する研究を進める。近年の宇宙ミッションにおいて、天体の重力を有効に利用する低エネルギー型の軌道設計は重要性を増している。低エネルギー型の軌道設計を行うには、従来の二体問題に基づく軌道設計手法を拡張し、制限三体問題や制限四体問題などのより高次元のモデルの中で、軌道解析を行うことが重要である。

2. 研究の目的

本研究の目的は、多体問題を理解するための非線形力学、非平衡統計力学、幾何学的手法を複合的に用いることによって、ミクロな分子系とマクロな天体系の双方に現れる集団運動の普遍原理を明らかにすることにあ

る。特に本研究では、以下の重点課題(1)-(4)に焦点を合わせる。

(1) 複雑分子系の高次元ダイナミクスを支配する少数の集団変数を抽出し、複雑分子系において協同的な集団運動が発生する力学的機構を明らかにする。

(2) ATP 合成酵素のような回転型分子モーターの運動における「回転」の意味を根本から問い直し、全角運動量ゼロおよび全トルクゼロで向きを変える回転型分子モーターの新たなモデルを提案する。

(3) 二重らせん構造に由来する DNA の非対称な弾性特性が、DNA の高次らせん構造および高次折り畳み構造の形成において果たす役割を明らかにする。

(4) 制限三体・四体問題の力学モデルに立脚して、太陽-地球-月系を始めとする太陽系内のカオスの輸送機構を解析し、深宇宙探査軌道の設計に通じる新手法を提案する。

3. 研究の方法

本研究を遂行する上での重要な基礎となる理論的基盤は、次の(1)-(4)の通りである。

(1) 多体系の運動における集団変数の抽出

分子から天体まで、多体系の集団運動を正しく理解するためには、多体系の変形と回転を正しく記述する理論的枠組みが必要である。そこで本研究では、物体の変形運動を正しく記述するゲージ理論に超球座標の手法を融合して考案した超球モード解析と呼ぶ手法を多角的に用いる。この手法を用いることにより、多体系の高次元の集団運動を本質的に支配する少数の集団変数を抽出し、運動を低次元に縮約して記述することが可能となる。さらに、これらの集団変数の運動を支配する動的な駆動力の役割を探求することも可能となる。

(2) 物体の変形と回転のゲージ理論

上記(1)の物体の変形運動を記述するゲージ理論は、ATP 合成酵素やべん毛モーターなどの回転型分子モーターの新たな運動モデルの構築に応用可能である。このゲージ理論は本来、落下するネコが体の変形運動によって幾何学的位相を生み出し、全角運動量ゼロの条件下で宙返りをするという「ネコの宙返り」効果を数学的に正しく記述する理論として発展したものである。本研究では、このゲージ理論に基づいて、全角運動量ゼロ・全トルクゼロの条件下で変形運動のみによって向きを変える生体高分子の数値モデルを作成し、ATP 合成酵素の回転軸の新たなモデル構築に応用する。

(3) らせん型フィラメントのモデル

らせん構造は、生体高分子の最も基本的かつ普遍的な構造であり、DNAの2重らせん、タンパク質の α ヘリックス、アクチンフィラメント、微小管など、らせん構造を有する生体高分子は多数存在する。さらに、らせん構造の変形運動に由来する幾何学的効果は、生体高分子や分子モーターの機能発現において普遍的に重要な役割を果たしていることが期待できる。本研究では、展開型宇宙構造物の設計手法を応用して、らせん構造を有する弾性フィラメントのモデルを構築し、DNAをはじめとする生体高分子の非対称な弾性特性の解析に応用する。

(4) 多体問題に基づく天体の軌道解析

宇宙空間における小惑星や宇宙機の軌道解析においては、制限三体問題のような多体系の力学モデルが近年重要性を増している。本研究では、このような力学モデルにおいて存在が知られている各種の不安定共鳴軌道やLyapunov軌道、Halo軌道、擬衛星軌道(Quasi-Satellite Orbit, QSO)およびこれらの周期軌道に付随する不変多様体の相空間構造に関する知見を多角的に活用し、燃料消費量を抑えた宇宙機の軌道設計を行う。また、天体の軌道の離心率を考慮した楕円制限三体問題や、制限三体問題に新たな一天体の摂動の影響を追加した制限四体問題も用いる。

4. 研究成果

本研究では上述の理論的基盤および方法論に基づき、ミクロな分子運動から、マクロな天体運動まで、多体系の集団運動を多角的な観点から探求した。その代表的な研究成果は次の(1)-(4)の通りに纏められる。

(1) 集団的内力によるクラスターの解離

本研究ではまず、上述の3(1)節で述べた超球モード解析の手法を用いて原子クラスターの解離現象を、3つの集団変数(慣性半径) a_1, a_2, a_3 に働く2種類の集団的内力の競合過程の観点から探求した。ここで、2種類の集団的内力とは、原子間相互作用に由来するポテンシャル力と、超球座標に付随して生じる動的な内部遠心力である。図1(a)には、Lennard-Jonesポテンシャルによって相互作用する4原子クラスターが解離するまでの3つの慣性半径 a_1, a_2, a_3 の時間発展を平均化した結果を示す。図1(b)には、最大の慣性半径 a_1 に働く上述の2種類の内力の時間発展を平均化した結果を示す。クラスターが定常的に振動している時($t < 0$)には、ポテンシャル力は a_1 に対して負方向に働いて解離を阻止する一方、内部遠心力は正方向に働いて解離を駆動しようとしており、両者は釣り合っていることが分かる。ところが、解離の直前に両者のバランスは破れ、解離の瞬間($t=0$)には、ポテンシャル力と内部遠心力は

共に鋭い正のインパルスを生じている。このように、ポテンシャル力と内部遠心力の釣り合いが破れることによって、クラスターの解離が生じることが分かった。

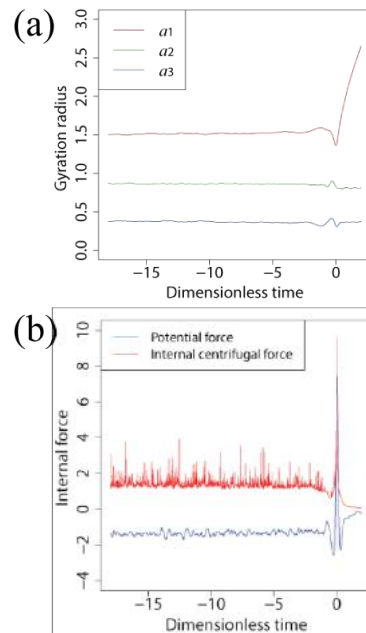


図1: (a) 3つの慣性半径 a_1, a_2, a_3 の時間発展。(b) 2種類の集団的内力の時間発展。全て平均化されている。

(2) 回転型分子モーターの幾何学的モデル

本研究ではまず、らせん構造を有する高分子鎖において振れが伝播すると、上述の3(2)節で述べた「ネコの宙返り」効果による幾何学的位相が生じて、全角運動量ゼロおよび全トルクゼロのまま大きな向きの変化が生じ得ることを理論と数値実験によって示した。さらに、高分子鎖のらせん構造のカイラリティと振れの伝播方向によって、この幾何学的な宙返り効果の方向性が決まることを理論と数値実験によって明らかにした。この幾何学的な宙返り効果は、通常想定されるような高分子鎖の剛体的な回転運動とは質的に異なるものであり、回転型分子モーターの運動に対して新たな可能性を提供するものと期待できる。そこで本研究では、この幾何学的な宙返り効果を、回転型分子モーターの代表例として知られるATP合成酵素の中心軸の運動の粗視化モデルに応用した。その応用例を図2に示す。

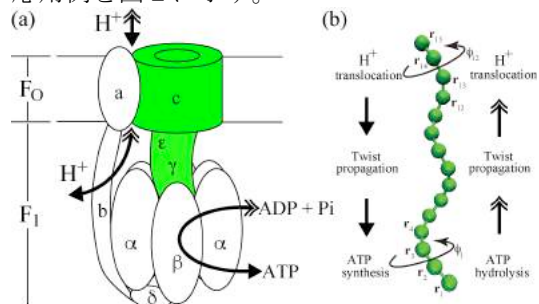


図2: (a) ATP合成酵素の構造と機能を示す模式図。中央の緑色の部分が「回転軸」の役割を果たすことが知られている。(b) (a)の「回転軸」について、本研究で作成したらせん構造を有する高分子鎖の幾何学的モデル。

(3) DNA の高次らせん構造のカイラリティ
DNA の交差や振れ合いは、遺伝子発現やクロマチン制御において重要な役割を果たしている。本研究では、上述の 3 (3) 節で述べたらせん型フィラメントのモデルを応用して二重らせん構造を有する DNA の数値モデルを作成し、その非対称な弾性特性を解析した。さらに応用として、複数の DNA の交差と振れ合いにおける左右の方向性 (カイラリティ) の選択に関するモデルを提案した。その結果、右回りの 2 重らせん構造を有する DNA (B-DNA) は、非対称な弾性特性のために熱ゆらぎの中で自発的に右方向に交差し、左回りに振れ合う傾向を有する可能性が示唆された。その一例を図 3 に示す。

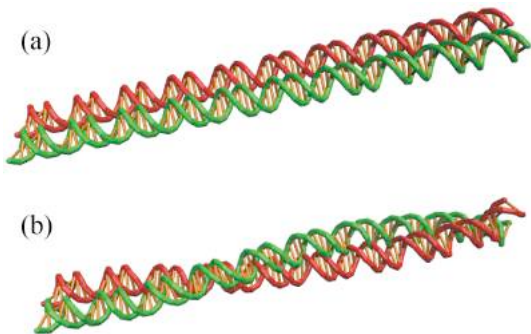


図 3 : 並置した 2 本の二重らせん DNA モデルの自発的なよじれ合い。

(4) 共鳴重力アシストを用いた月遷移軌道

天体間を遷移する宇宙機のミッションにおいて、燃料消費量の削減は重要な課題である。近年、天体の重力を利用して軌道変更や宇宙機の加減速を行う重力アシストの手法が注目を集めている。さらに、宇宙機と天体の公転周期が簡単な整数比となる共鳴軌道を重力アシストに応用することで、より効率的な軌道が得られることが分かってきた。本研究では、共鳴軌道の不変多様体を用いる共鳴重力アシストと、ラグランジュ点に付随する不変多様体チューブを併用することにより、燃料消費を抑えた軌道設計を行った。図 4 には、地球-月-宇宙機の平面円制限三体問題のモデルにおいて、地球周回軌道から出発して月近傍へと遷移する低エネルギー型軌道の設計例を示す。

本研究ではさらに、上述の共鳴軌道の不変多様体を用いる共鳴重力アシストと、月周りの不安定な Quasi-Satellite Orbit (QSO) の不変多様体を用いたローブダイナミクスとを組み合わせることで、月周りに長期間滞在可能な不安定 QSO に投入する低エネルギー型の軌道を設計した。また、地球-月系および火星-フォボス系の空間円制限三体問題において分岐解析を駆使することで、未だ十分に解析がなされていない空間的な不安定 QSO の新たなファミリーを複数明らかにした。

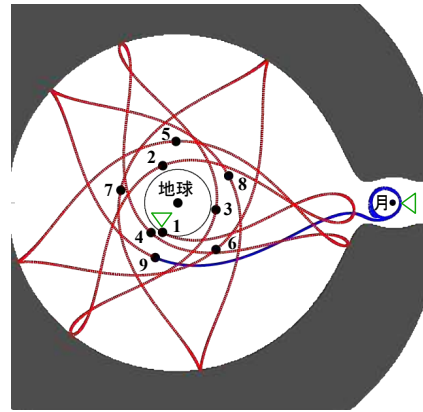


図 4 : 地球周回軌道から出発し、共鳴重力アシストを用いて月近傍へと遷移する低エネルギー型軌道。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 8 件)

(1) S. Uda, M. Li, T. Yanao, Geometric somersaults of helical chains through twist propagation, *Artificial Life and Robotics*, 査読有, Vol. 23, pp. 28-33, 2018. DOI: 10.1007/s10015-017-0388-8

(2) K. Oshima, S. Campagnola, T. Yanao, Global search for low-thrust transfers to the Moon in the planar circular restricted three-body problem, *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy*, 査読有, Vol. 128, pp. 303-322, 2017. DOI 10.1007/s10569-016-9748-2

(3) T. Yanao, T. Hino, Geometric somersaults of a polymer chain through cyclic twisting motions, *Physical Review E*, 査読有, Vol. 95, 012409 (pp.1-17), 2017. DOI: 10.1103/PhysRevE.95.012409

(4) K. Oshima, F. Topputo, S. Campagnola, T. Yanao, Analysis of medium-energy transfers to the Moon, *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy*, 査読有, Vol. 127, pp. 285-300, 2017. DOI 10.1007/s10569-016-9727-7

(5) T. Yanao, S. Sano, K. Yoshikawa, Chiral selection in wrapping, crossover, and braiding of DNA mediated by asymmetric bend-writhe elasticity, *AIMS Biophysics*, 査読有, Vol. 2, pp. 666-694, 2015. DOI: 10.3934/biophy.2015.4.666

(6) Y. Oka, T. Yanao, W. S. Koon, Roles of dynamical symmetry breaking in driving oblate-prolate transitions of atomic clusters, *The Journal of Chemical Physics*, 査読有, Vol. 142, 134105 (pp.1-18), 2015. DOI: 10.1063/1.4915928

(7) K. Oshima, T. Yanao, Jumping mechanisms of Trojan asteroids in the planar restricted three- and four-body problems, *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy*, 査読有, Vol. 122, pp. 53-74, 2015. DOI 10.1007/s10569-015-9609-4

(8) T. Yanao, K. Yoshikawa, Chiral symmetry breaking of a double-stranded helical chain through bend-writhe coupling, *Physical Review E*, 査読有, Vol. 89, 062713 (pp.1-16), 2014. DOI: 10.1103/PhysRevE.89.062713

[学会発表] (計 19 件)

(1) K. Oshima, T. Yanao, Families of unstable quasi-satellite orbits in the spatial circular restricted three-body problem, *AIAA Science and Technology Forum and Exposition 2018*, Kissimmee (USA), January 2018.

(2) K. Oshima, T. Yanao, Transport dynamics of co-orbital asteroids via invariant manifolds for space mission trajectories, *68th International Astronautical Congress (IAC)*, Adelaide (Australia), September 2017.

(3) K. Oshima, F. Topputo, T. Yanao, Global search for low-energy transfers to the Moon with long transfer time, *27th AAS/AIAA Space Flight Mechanics Meeting*, San Antonio (USA), February 2017.

(4) S. Uda, M. Li, T. Yanao, Geometric somersaults of polymer chains through twist propagation, *The 2nd International Symposium on BioComplexity*, Beppu (Japan), January 2017.

(5) 大島健太, F. Topputo, 柳尾朋洋, インパルス推進を用いた低エネルギー型月遷移軌道のパレート最適解, 第 60 回宇宙科学技術連合講演会, 函館, 2016 年 9 月.

(6) K. Oshima, S. Campagnola, T. Yanao,

Global search for low-thrust transfers to the Moon in the planar circular restricted three-body problem, *26th AAS/AIAA Space Flight Mechanics Meeting*, Napa (USA), February 2016.

(7) K. Oshima, F. Topputo, S. Campagnola, T. Yanao, Medium-energy, retrograde, ballistic transfer to the Moon, *26th AAS/AIAA Space Flight Mechanics Meeting*, Napa (USA), February 2016.

(8) 柳尾朋洋, 柔らかい高分子軸の宙返り運動と生体分子モーターの回転機構, *生命ダイナミクスの数理とその応用:理論からのさらなる深化*, 東京, 2015 年 12 月.

(9) 大島健太, S. Campagnola, 柳尾朋洋, 平面円制限三体問題における月への低推力最適軌道の大域的探索, 第 59 回宇宙科学技術連合講演会, 鹿児島, 2015 年 10 月.

(10) T. Yanao, Geometric phases arising from wriggling motions of a polymer chain, *The 4th IGER International Symposium on Science of Molecular Assembly and Biomolecular Systems*, Nagoya (Japan), September 2015.

(11) T. Yanao, Roles of geometric phases in conformational transitions of molecular systems, *Computational and Geometric Approaches for Nonlinear Phenomena*, Tokyo (Japan), August 2015.

(12) T. Yanao, Driving mechanisms for isomerization and dissociation of molecular systems, *Geometry of Chemical Reaction Dynamics in Gas and Condensed Phases*, Telluride (USA), July 2015.

(13) K. Oshima and T. Yanao, Optimal transfers between Sun-Earth libration point orbits utilizing lunar gravity assists, *The 30th International Symposium on Space Technology and Science*, Kobe (Japan), July 2015.

(14) T. Yanao, Mode-specific effects in structural transitions of atomic clusters with multiple channels, *2015 SIAM Conference on Applications of Dynamical Systems*, Snowbird (USA), May 2015.

(15) 柳尾朋洋, 日野泰子, 高分子の振れ運動から生じる幾何学的位相と軸まわりの回転, *日本物理学会第 70 回年次大会*, 東京, 2015 年 3 月.

(16) K. Oshima, T. Yanao, Application of the jumping mechanism of Trojan asteroids to the design of a tour trajectory through the collinear and triangular Lagrange points, 25th AAS/AIAA Space Flight Mechanics Meeting, Williamsburg (USA), January 2015.

(17) 大島健太, 柳尾朋洋, トロヤ群小惑星の遷移機構に基づくラグランジュ点間周回軌道の設計, 第 58 回宇宙科学技術連合講演会, 長崎, 2014 年 11 月.

(18) 大島健太, 柳尾朋洋, トロヤ群小惑星の L4-L5 間遷移現象の力学的機構, 日本惑星科学会秋季講演会, 仙台, 2014 年 9 月.

(19) T. Yanao, Collective motions of complex molecular systems driven by spontaneous symmetry breaking, Energy Landscapes, Durham (UK), August 2014.

6. 研究組織

(1) 研究代表者

柳尾 朋洋 (YANA0, Tomohiro)

早稲田大学・基幹理工学部・准教授

研究者番号：40444450