

令和 3 年 7 月 14 日現在

機関番号：34412

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2018～2020

課題番号：18K03471

研究課題名(和文)ヘテロ結合型力学モデルの構造設計による機能創生プロセスの探求

研究課題名(英文)Emergence of functional dynamics in heterogeneously-connected dynamical elements

研究代表者

柳田 達雄 (Yanagita, Tatsuo)

大阪電気通信大学・工学部・教授

研究者番号：80242262

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,300,000円

研究成果の概要(和文)：共有結合・分子結合、分岐やループなどの非一様な結合構造による局所運動が生体高分子の機能に関与している。本研究は、生体高分子を粗視化した力学モデルである質点がバネでつながった系、ビーズスプリングモデル、が創出するダイナミクスを数値および理論的に解明し、機能生成に重要と考えられる不均一運動状態の動的生成機構を明らかにした。具体的には、1)ヘテロ結合分子と溶媒粒子が相互作用により系全体がエネルギー非一様状態となる準平衡状態が長時間維持される理論機構、2)分子内の非一様性運動の生成機構、3)動的剛性の生成機構を数値解析、エネルギー等分配則、特異摂動論により解明した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

生化学反応は構成要素のヘテロ結合により作り出された非平衡で多スケールのダイナミクスであり、分子の揺らぎや局所的な運動が機能に密接に関連している。高分子を粗視化した数理モデルであるビーズスプリング系を理論的、数値的に解析し、多時間スケールな結合構造から創出される現象：1)長時間維持される非平衡状態、2)高分子、溶媒のエネルギー非一様性、3)分子内での非一様なエネルギー状態、4)エネルギー励起に伴う分子形態の動的な変化、の数理機構を解明した。これらの基本機構が解明は、生体反応をはじめ交通網、流通網などの社会システムで起こりうる非一様性の生成や制御に対する指針が与えられ学際的な意義もある。

研究成果の概要(英文)：Inhomogenous local dynamics is an important role in the function of biopolymer. We consider the Hamiltonian dynamics of the bead-spring molecule which is known as a simple coarse-grained model for polymer. The model molecule interacts with solvent particles. We have shown the following both theoretically and numerically: 1) The solvent particles are more energetic than that of the model molecule. 2) inhomogeneous energy state in the molecule lasts a long time, which we call quasi-equilibrium. 3) the stability of the form of the molecule changes by excitation of vibrational mode in the molecule, which we call dynamical stiffness. These mathematical mechanisms of non-equilibrium phenomena might be a key role in the function of biopolymer.

研究分野：非線形ダイナミクス

キーワード：非線形・非平衡ダイナミクス ビーズスプリングモデル ハミルトン力学系 非一様性 特異摂動論
エネルギー等分配 ネットワーク 高分子

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

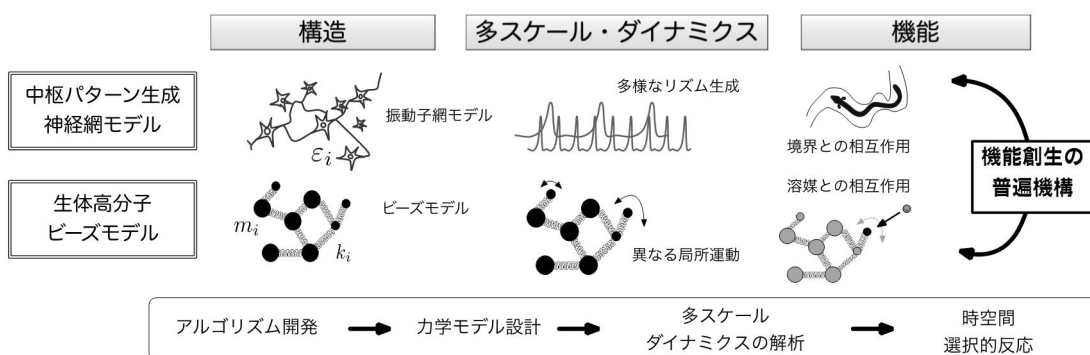
様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

自然界には外乱や環境変化に抗して安定に機能するシステムが多く存在する。例えば、中枢パターン生成神経網では、ニューロン同士の結合構造がリズム的な動物の運動を創生している。また、共有結合・分子結合、分岐やループなどの結合構造による局所運動が生体高分子の機能に關与している。これら機能の創出には、ヘテロな結合構造とそれにより生成される多スケールダイナミクスが重要な役割を担っていると考えられている。

本研究は(I)所与された多スケールダイナミクスを創出するヘテロな結合構造をもつ力学モデルの構造設計するための効率的アルゴリズムの開発。(II)中枢パターン生成神経網および生体高分子を模した具体的な力学モデルの設計。(III)構造設計した力学モデルを比較検討し構造ダイナミクス 外界との選択的応答という階層間の相互干渉により機能創出される普遍的なプロセスを探索する。さらに、得られた普遍的知見を活かして、交通網構造・流通網構造などの社会システムが安定に機能するための設計指針を与える。

近年、数理・生物・経済・社会科学など多分野において結合網構造と機能の關係が着目され、次数相関/同類度/階層性などによる結合網構造を特徴付ける新しい概念や計算アルゴリズムの開発が進行している。一方で、このような静的解析から、結合網の生成プロセスや力学素子が網状結合したモデルの動的性質の研究に変化しつつある。しかしながら、スケールフリー性などの特徴をもつ結合網の生成規則の発見的な研究が中心であり、結合構造と生成されるダイナミクスとの關係は解明されていない。例えば、中枢パターン生成神経網では、ニューロン同士の結合構造が外界に協調したリズム運動を創生している【S. Grillner, Science (1985)】。また、生体高分子では、ヘテロな結合構造が生み出す局所的な運動や揺らぎが機能と密接に關係している事がアクトミオシン系などにおいて示唆されている【T. Yanagida et.al, Nature (1984)】。これを背景として、同期最適な結合振動子網の設計【T. Yanagita and A. Mikhailov, Phys. Rev. E (2012)】や分子の結合構造に付随する局在運動を見出し、その理論的解釈を与え最近注目されている【T. Konishi, T. Yanagita, J. Stat. Mech. (2016)】【小西哲郎, 柳田達雄, 日本物理学会誌 72 (2017)】。このように、結合構造に起因した多スケール・ダイナミクスは、外界との相互作用により安定な機能創生を担っている。



2. 研究の目的

本研究は、具体的な神経網および生体分子の粗視化した力学モデルを設計し、結合構造から機能創生に至る一連のプロセスに共通する数理機構を探索する。中枢パターン生成神経網および生体高分子のヘテロな結合構造を具体的に設計し、構造、多スケールダイナミクス、外界に対する選択的応答という機能創出プロセスの普遍機構の解明が目的である。具体的には、中枢パターン生成神経網のモデルとして振動子結合網モデル、生体高分子のモデルとしてビーズスプリングモデルを用いて、各モデルの結合構造を設計し、機能創生の数理機構を解明する。

3. 研究の方法

I. 構造設計アルゴリズムの開発とその効率化

同期特性の優れた結合振動子網をマルコフ連鎖モンテカルロ法により設計し、その結合網構造を解析してきた。この方法を発展させ、神経網・生体高分子で見られる多様な時空間スケールを持つダイナミクスを創生する力学モデルを設計するための効率的アルゴリズムを開発する。

II. ヘテロ結合型力学モデルの構造設計と多スケール・ダイナミクスの生成原理

所与された多スケール・ダイナミクスを生成するヘテロ結合型力学モデルの設計する。結合構

造から多スケール・ダイナミクスが生成される機構を解明する．具体的には，(A) 中枢パターン生成神経網の力学モデル，(B) 生体高分子の力学モデルの結合構造を設計して，多スケール・ダイナミクスが生成する不安定多様体・ヘテロクリニック軌道などの相空間構造を明らかにする．

III. 多スケールダイナミクスの選択的な応答機構の探求

設計した2つの具体的な力学モデルと外界との干渉から創生される機能を解析する．外界との相互作用の時空間スケールに対する選択的な応答を機能と考える．構造，多スケールダイナミクス，選択的応答の各階層間の干渉により機能が創生される普遍機構を探求する．

4. 研究成果

本研究は，生体高分子を模した具体的な力学モデル，質点がバネでつながったモデルでありビーズスプリングモデルと呼ばれる【図1】，ダイナミクスを数値および理論的に解析した．これにより，機能生成に重要と考えられる不均一運動状態の動的生成機構を明らかにした．特に，異なる運動の時間スケールをシステムが内包している場合における熱平衡状態への緩和過程を解析した．

このような多時間スケールをもつ分子と溶媒粒子が相互作用する場合には，溶媒粒子の運動エネルギーが分子のそれよりも大きくなる状態が長時間維持される準平衡状態を見出し，エネルギー等分配則を適用することにより定量的な予測をし，現在論文投稿中である【図2】．

このような，ヘテロな結合構造が生み出す局所的な運動や揺らぎが機能と密接に関係している事がアクチン系などにおいて示唆されており，モデル系で観測された不均一運動も生体分子の機能と密接に関連していると考えられる．

さらに，多時間スケール分子の高周波の伸長運動モードの励起にともなう新奇な現象を見出した．これは，運動の励起に伴い剛性が動的に創生されるという現象であり，特異摂動法により詳細な数理解析による動的剛性の創出に関する学術論文を投稿準備中である．この現象は，多スケールダイナミクスやヘテロなエネルギー励起が創生する不均一運動であり，生体分子の機能創生の解明につながる．

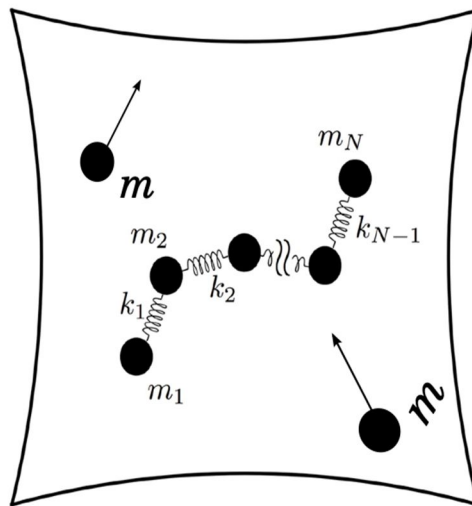


図1：ビーズスプリングモデル

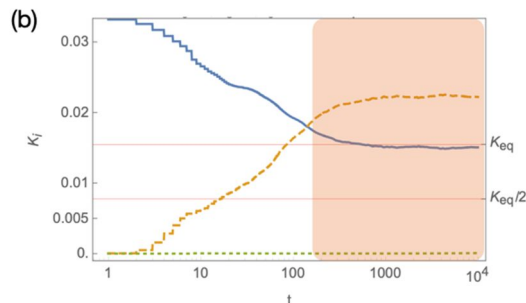


図2：多重時間スケールを内包するビーズスプリングモデルで現れる準平衡状態．溶媒粒子の運動エネルギーが高い状態を長時間保持する．

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計9件（うち査読付論文 7件/うち国際共著 2件/うちオープンアクセス 0件）

| | |
|--|-------------------------------|
| 1. 著者名 Kotani Kiyoshi, Ogawa Yutaro, Shirasaka Sho, Akao Akihiko, Jimbo Yasuhiko, Nakao Hiroya | 4. 巻 2 |
| 2. 論文標題 Nonlinear phase-amplitude reduction of delay-induced oscillations | 5. 発行年 2020年 |
| 3. 雑誌名 Physical Review Research | 6. 最初と最後の頁 033106-033122 |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevResearch.2.033106 | 査読の有無 無 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |
| 1. 著者名 Nakao Hiroya, Yamaguchi Katsunori, Katayama Shingo, Yanagita Tatsuo | 4. 巻 31 |
| 2. 論文標題 Sparse optimization of mutual synchronization in collectively oscillating networks | 5. 発行年 2021年 |
| 3. 雑誌名 Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science | 6. 最初と最後の頁 063113 ~ 063113 |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1063/5.0049091 | 査読の有無 無 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |
| 1. 著者名 YANAGITA Tatsuo, KONISHI Tetsuro | 4. 巻 75 |
| 2. 論文標題 NUMERICAL ANALYSIS OF NEW OSCILLATORY MODE OF BEAD-SPRING MODEL | 5. 発行年 2019年 |
| 3. 雑誌名 Journal of Japan Society of Civil Engineers, Ser. A2 (Applied Mechanics (AM)) | 6. 最初と最後の頁 I_125 ~ I_133 |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.2208/jscejam.75.2_I_125 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |
| 1. 著者名 Watanabe Nobuhiro, Kato Yuzuru, Shirasaka Sho, Nakao Hiroya | 4. 巻 100 |
| 2. 論文標題 Optimization of linear and nonlinear interaction schemes for stable synchronization of weakly coupled limit-cycle oscillators | 5. 発行年 2019年 |
| 3. 雑誌名 Physical Review E | 6. 最初と最後の頁 042205 -0422020 |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevE.100.042205 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |

| | |
|---|-------------------------------|
| 1. 著者名 Kato Yuzuru, Yamamoto Naoki, Nakao Hiroya | 4. 巻 1 |
| 2. 論文標題 Semiclassical phase reduction theory for quantum synchronization | 5. 発行年 2019年 |
| 3. 雑誌名 Physical Review Research | 6. 最初と最後の頁 033012 -0330127 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.1.033012 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |

| | |
|---|-------------------------------|
| 1. 著者名 Carletti Timoteo, Nakao Hiroya | 4. 巻 101 |
| 2. 論文標題 Turing patterns in a network-reduced FitzHugh-Nagumo model | 5. 発行年 2020年 |
| 3. 雑誌名 Physical Review E | 6. 最初と最後の頁 022203 -0222015 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevE.101.022203 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |

| | |
|---|-----------------------------|
| 1. 著者名 Kato Yuzuru, Nakao Hiroya | 4. 巻 101 |
| 2. 論文標題 Semiclassical optimization of entrainment stability and phase coherence in weakly forced quantum limit-cycle oscillators | 5. 発行年 2020年 |
| 3. 雑誌名 Physical Review E | 6. 最初と最後の頁 012210-012219 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevE.101.012210 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |

| | |
|--|-------------------------------|
| 1. 著者名 Nakao Hiroya, Yasui Sho, Ota Masashi, Arai Kensuke, Kawamura Yoji | 4. 巻 28 |
| 2. 論文標題 Phase reduction and synchronization of a network of coupled dynamical elements exhibiting collective oscillations | 5. 発行年 2018年 |
| 3. 雑誌名 Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science | 6. 最初と最後の頁 045103 ~ 045103 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5009669 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 該当する |

| | |
|--|---------------------|
| 1. 著者名 H. Nakao and I. Mezic | 4. 巻 1 |
| 2. 論文標題 Koopman eigenfunctionals and phase-amplitude reduction of rhythmic reaction-diffusion systems | 5. 発行年 2018年 |
| 3. 雑誌名 Proceedings of the SICE Annual Conference 2018 | 6. 最初と最後の頁 74-77 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 該当する |

〔学会発表〕 計20件 (うち招待講演 5件 / うち国際学会 9件)

| |
|--|
| 1. 発表者名 Tatsuo Yanagita |
| 2. 発表標題 Dynamics of bead-spring model in quasi-equilibrium |
| 3. 学会等名 Mathematical Science of Complex Systems: Physics, Chemistry, Biology, Information and Chaos (招待講演) (国際学会) |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|------------------------------------|
| 1. 発表者名 小西哲郎, 柳田達雄 |
| 2. 発表標題 束縛鎖状系の運動エネルギーと分散の質量比依存性 |
| 3. 学会等名 日本物理学会 第76回年次大会 |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 柳田達雄, 小西哲郎 |
| 2. 発表標題 強結合 Bead-Spring 分子の準平衡状態の解析 |
| 3. 学会等名 日本物理学会 第76回年次大会 |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 Yuzuru Kato and Hiroya Nakao |
| 2. 発表標題 Continuous Measurement and Feedback Control for Enhancement of Quantum Synchronization |
| 3. 学会等名 Proceedings of the 59th IEEE Conference on Decision and Control (CDC) (国際学会) |
| 4. 発表年 2020年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 柳田達雄, 小西哲郎 |
| 2. 発表標題 強結合 Bead-Spring 分子の準平衡状態の解析 |
| 3. 学会等名 日本物理学会 第76回年次大会 |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|------------------------------------|
| 1. 発表者名 小西哲郎, 柳田達雄 |
| 2. 発表標題 束縛鎖状系の運動エネルギーと分散の質量比依存性 |
| 3. 学会等名 日本物理学会 第76回年次大会 |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 Tatsuo Yanagita |
| 2. 発表標題 Dynamics of bead-spring model in quasi-equilibrium |
| 3. 学会等名 Mathematical Science of Complex Systems: Physics, Chemistry, Biology, Information and Chaos (招待講演) (国際学会) |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 柳田達雄, 小西哲郎 |
| 2. 発表標題 ネットワーク結合パネ玉モデルにおける準平衡状態とエネルギー等分配への緩和 |
| 3. 学会等名 日本物理学会 2020年第75回年次大会 |
| 4. 発表年 2020年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 小西哲郎, 柳田達雄 |
| 2. 発表標題 束縛のある鎖状多体系の熱平衡状態: 質点の運動エネルギーの分散 |
| 3. 学会等名 日本物理学会 2020年第75回年次大会 |
| 4. 発表年 2020年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 柳田達雄, 小西哲郎 |
| 2. 発表標題 擬似的に束縛された系の準平衡状態と誘導的緩和現象とゆらぎ |
| 3. 学会等名 日本物理学会 2019年秋季大会 |
| 4. 発表年 2019年 |

| |
|-------------------------------------|
| 1. 発表者名 柳田達雄, 小西哲郎 |
| 2. 発表標題 パネで結合した鎖状質点系に現れる振動モードの解析 |
| 3. 学会等名 第65回理論応用力学講演会 |
| 4. 発表年 2020年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 Tatsuo YANAGITA |
| 2. 発表標題 Emergence of quasi-equilibrium in Hamiltonian system |
| 3. 学会等名 XXXIX. Dynamics Days Europe, International Conference on Dynamics (国際学会) |
| 4. 発表年 2019年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 Tatsuo Yanagita and Tetsuro Konishi |
| 2. 発表標題 Slow relaxation to equipartition and emergence of quasi-equilibrium in slow-fast Hamiltonian systems |
| 3. 学会等名 The 10th Dynamics Days Asia Pacific Huaqiao University Xiamen China (招待講演) (国際学会) |
| 4. 発表年 2018年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 Tatsuo Yanagita |
| 2. 発表標題 Emergence of quasi-equilibrium and slow relaxation to equipartition in heterogenous Hamiltonian dynamical systems |
| 3. 学会等名 Dynamics Days Europe 2018 (国際学会) |
| 4. 発表年 2018年 |

| |
|---------------------------------------|
| 1. 発表者名 柳田達雄・小西哲郎 |
| 2. 発表標題 擬似的に束縛された鎖状系の準平衡状態と誘導的緩和現象 |
| 3. 学会等名 日本物理学会 2018年秋季大会 (同志社大学) |
| 4. 発表年 2018年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 小西哲郎・柳田達雄 |
| 2. 発表標題 束縛のある鎖状多体系の熱平衡状態：質点の運動エネルギーの期待値と末端部のエネルギー過剰 |
| 3. 学会等名 日本物理学会 2018年秋季大会（同志社大学） |
| 4. 発表年 2018年 |

| |
|------------------------------------|
| 1. 発表者名 柳田達雄・小西哲郎 |
| 2. 発表標題 擬似的に束縛された鎖状系の緩和現象 |
| 3. 学会等名 日本物理学会 第73回年次大会（東京理科大学） |
| 4. 発表年 2018年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 H. Nakao |
| 2. 発表標題 Koopman eigenfunctionals and reduced description of partial differential equations |
| 3. 学会等名 IPAM workshop on Operator Theoretic Methods in Dynamic Data Analysis and Control (Institute for pure and applied mathematics UCLA) (招待講演) (国際学会) |
| 4. 発表年 2019年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 H. Nakao |
| 2. 発表標題 Phase and amplitude description of complex oscillatory systems |
| 3. 学会等名 Physics of Biological Oscillators: New Insights into Non- Equilibrium and Non-Autonomous Systems(Chicheley Hall Buckinghamshire UK) (招待講演) (国際学会) |
| 4. 発表年 2018年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 H. Nakao |
| 2. 発表標題 Phase-Amplitude Reduction - Synchronization and Control of Collective Oscillations in Networks of Dynamical Systems |
| 3. 学会等名 2018 Gordon Research Conference on Oscillations and Dynamic Instabilities in Chemical Systems(Les Diablerets Conference Center Les Diablerets Switzerland) (国際学会) |
| 4. 発表年 2018年 |

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

| | 氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号) | 所属研究機関・部局・職 (機関番号) | 備考 |
|-------|---|--------------------------------------|----|
| 研究分担者 | 中尾 裕也 (Nakao Hiroya) (40344048) | 東京工業大学・工学院・教授 (12608) | |

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

| | |
|---------|---------|
| 共同研究相手国 | 相手方研究機関 |
|---------|---------|