論文の内容の要旨

論文題目　非整数階微分によるフラクタル構造体の輸送特性のモデリング

氏名　島本 憲夫

## １．研究の背景

生体細胞では，種々のタンパク物質が拡散輸送されることにより情報伝達が行われ，これらの物質が輸送される速さが細胞の振る舞いに大きく関係している．そのため，分子の拡散特性を知ることは重要な課題であるが，細胞近傍では，様々なタンパク物質が混在し，細胞外マトリクスを構成する高分子鎖が複雑にからみあった構造を持っているため，解析が非常に難しい拡散問題である．このような複雑構造体中での拡散輸送は，細胞の物質輸送の例に限らず，様々な物理の中で出現する現象であり，工学的な側面においても重要な問題の一つである．複雑構造体中の拡散輸送のダイナミクスを再現し解析する方法として，数値シミュレーションによる方法が考えられる．拡散特性を忠実に再現するためには，構造の細部まで模倣した系で数値計算を行う必要があるため相当量の計算機パワーが必要になり，数値シミュレーションでの再現にはかなりの困難が予想される．そのため，複雑構造体中での拡散輸送の特性をうまく表現できるようなモデル化を行うことは重要な取り組みであると考える．

## ２．非整数階微分を導入した拡散輸送のモデリング

複雑構造体の捉え方については様々な考え方があるが，本研究では自己相似的なべき乗の特性を持つフラクタル構造体を対象に考え，フラクタル構造体における拡散輸送のモデリング方法について考察を行う．

拡散による輸送は，温度や濃度等の物理量の出入りについて，時間的な変化量と空間的な変化量との釣り合いとして定式化され，これは，時間についての一階微分，空間についての二階微分による熱伝導方程式あるいは拡散方程式としてモデル化される．一般に，連続体での温度や濃度等の物理量の時間や空間の変化率は，その物理量の変化量ついての時間あるいは距離の変化量に対する比，つまり，時間あるいは空間に関する微分として求められる．しかし，フラクタル構造を持った系の上での時間や距離の変化量は，フラクタル次元に関係してべき乗的に変化するため，フラクタル構造体での物理量の変化率を計算する場合，これまでの微分形式をそのまま用いることはできない．

そこで，本研究では，フラクタル構造体上での物理量の変化率の評価方法について，構造体が有するフラクタル次元に基づいた階数で微分する非整数階微分（Fractional Calculus）

の考え方を導入する．一般に数学や物理で用いられている通常の微分や積分の演算は，１階の微分，１回の積分といったように整数値で実行される演算であるが，非整数階数の微分積分は，階数を非整数値に拡張した演算である．通常の微積分は各点での値で算出されるのに対して，非整数階の微積分は，過去からの履歴の積算によって導かれる．そのため，過去の経過が振舞いに影響するような履歴性のある系や，長期記憶性を持つようなべき乗的な特性を持った物理現象の記述に有効な手法であると考えられており，多くの領域での工学的な応用についての研究成果が報告されている．

## ３．本研究の内容

本研究では，様々な物理で出現する拡散による輸送に焦点をおき，べき乗的な特性を持つフラクタル構造体を対象として， フラクタル性の特徴を微積分の中に取り組むことができる非整数階微分を導入して熱伝導・拡散方程式のモデリングを行い，空間的フラクタル性と時間的なフラクタル性の観点からフラクタル構造がもたらす拡散特性について考察を行った．

### （１）空間的フラクタル性

フラクタル性を有する構造体での拡散輸送の特性を考察するため，フラクタル構造体での熱伝導現象について考えた．

まず非整数階微分によるモデリングの妥当性についての解析的な検証を行うため，無限平板における定常一次元熱伝導の温度分布を求める問題を取り上げた．熱伝導方程式をたてる際に Fourier の法則に基づいて熱流束の計算を行うことになるが，フラクタル構造体での熱流束として，フラクタル構造特有の有効熱伝導率を用いる方法と，温度勾配をフラクタル次元に基づいた非整数階微分によって導く方法を考えた．この２つの方法によって得られる熱伝導方程式を解析的に解いて双方の解が一致することを示し，非整数階微分によるモデリングにより，フラクタル構造体での熱伝導問題を解くことができることを示した．

次に，非定常二次元問題を取り上げ，フラクタル構造体と連続体での熱拡散過程の違い，およびフラクタル次元（非整数の微分階数）の違いによる熱拡散過程の挙動についての考察を行った．フラクタル構造体の熱拡散の特性は，構造体が有する複雑さの指標であるフラクタル次元に関係するものと考えられる．x-y 方向でフラクタル次元が異なるような異方性を有する構造を想定し，フラクタル次元の違いによる熱拡散過程の振る舞いの比較を行った．非定常二次元の非整数階微分による熱伝導方程式を考え，Grünwald-Letnikov の定義に基づいた差分式により記述して数値的に解いた．通常熱伝導では指数関数に基づく熱拡散となるが，フラクタル熱伝導では long-tail の温度分布を示し，べき乗的に熱拡散すること

を示した．そのときのべき乗則は，フラクタル次元に相関したべき指数による漸近特性を持つことを示した．

（２）時間的フラクタル性

時間的なフラクタル性を有する系として，障壁の存在や粒子に作用する力によって運動を抑止されるような環境下での粒子の拡散特性について考察を行った．

(i) 障壁を伴う粒子の拡散

通常，Brown 運動に基づいた拡散においては，拡散係数は観測時間に関係なく一定値になることが知られているが，生体細胞内外近傍での分子の拡散運動では，ある範囲で拡散係数が観測時間とともに減少するような異常拡散と呼ばれる現象が観測されている．これは，細胞近傍に混在する様々なタンパク物質や細胞外マトリクスを構成する高分子鎖などの多くの障壁によって分子の拡散運動が阻害されることによって生じる効果と考えられ，このよう分子の拡散では，分子が移動する距離の分布や，分子がある領域に停留する時間の分布がべき乗分布になることが知られており，Brown 運動としての扱いができなくなる．

このような障壁によって停留を伴うような粒子の拡散は，時間発展に対して変位が間欠的に変化する確率過程として考えることができ，Continuous Time Random Walk（CTRW）法に基づいて，時間に関する非整数階微分の拡散方程式としてモデル化することができる．CTRW 法に基づいて拡散係数の解析式を導出すると，非整数の時間微分階数の大きさをべき指数に持った関数として表現することができ，この時間微分階数は拡散係数の振る舞いを特徴づける指標となる．本研究では，拡散係数を推定するための時間微分階数の見積もり方法の提案を行った．提案方法は，ヒアルロン酸水溶液中の 1 分子観測の実験報告例との比較において良好な結果の一致を示しており，非整数階微分に基づいたモデルが異常拡散を再現できることを示した．

(ii) 履歴力の影響を受ける粒子の拡散

粒子の拡散運動を記述する方法として，Newton 力学に基づいた Langevin 方程式による方法がある．Stokes 法則に基づいて速度に比例した粘性抵抗力と揺動力として Gaussian Noise を導入したものが最も基本的な Langevin 方程式であり，この場合は Brown 運動になる．履歴性の効果を入れた粘性抵抗力や時間に関してべき乗的な相関を持った揺動力を導入した一般化された Langevin 方程式が考えられており，このような粒子の運動は，Brown 運動とは異なる挙動を示すことが知られている．

履歴性の効果を入れた粘性抵抗力とべき乗的な時間相関を持つ搖動力について，非整数階微分を用いて記述して一般化 Langevin 方程式に代入すると，時間に関して非整数階微分に拡張した Langevin 方程式に変換することができる．これを Fractional Langevin 方程式と呼び，履歴力とべき乗的な時間相関を持つ揺動力の影響を受ける粒子の拡散運動のモデル化を行った．この Fractional Langevin 方程式を Laplace 変換法により解析的に解いて，変位，速度，平均二乗距離，拡散係数について，Mittag-Leffler 関数にて記述した解析解を導出した．得られた解析解を基に，Brown 運動と対比して，変位，速度，平均二乗距離，拡散係数の各物理量の挙動特性と微分階数との関係について示した．長時間経過での漸近的な関係から，履歴力とべき乗的な時間相関を持つ搖動力が，異常拡散となる特徴的な拡散過程をもたらすことを解析的に示した.

以上の考察から，通常微分による拡散輸送の方程式において，微分演算を非整数階の微分に拡張することは，時間的あるいは空間的なフラクタル特性をもった系の拡散輸送のモデル化に有効であることを示した.