

審査の結果の要旨

論文提出者氏名 小松信義

修士(工学)小松信義提出の論文は「Numerical Irreversibility in Molecular Dynamics Simulation (数値的不可逆性に関する分子動力学的研究)」と題し、本文5章及び付録3項から成っている。

高層大気を飛行する機体が遭遇する希薄な流ればかりでなく、マイクロマシーンが遭遇する流れなど、分子運動そのものを取り扱うことが必要となる流れの解析では、分子動力学的手法が広範囲に用いられている。その一方、分子動力学法には基本的な課題も残されている。その一つが、本論文で取り上げるものであり、多粒子系の時間発展において生じる不可逆性の由来に関するものである。すなわち、分子動力学の基本となる力学系は、多粒子系の時間発展として可逆となるにもかかわらず、計算機による演算の結果は不可逆性を示すというものである。物理現象を表すという点では、計算機による演算結果は望ましい性質を示すものの、その由来は不明であり、応用に際して予想外の結果を与える懸念も生じる。本論文は、分子動力学法における不可逆性の由来を明確にし、その原因を定量化する手段を与えることを目的としている。

第1章は序論であり、分子動力学法において生じる不可逆性について、これまでの認識を概観し、物理現象としての多粒子系において生じる不可逆性の由来にも通じる問題であることを述べている。分子動力学法において生じる不可逆性は、計算機による演算上避けられない丸め誤差がその由来であるとの予想が述べられる。一方、そのような丸め誤差を回避できる分子動力学法が最近開発され、その手法に基づくことにより、丸め誤差の影響を定量化できる可能性があることが述べられている。

第2章では、分子動力学法について概観し、とくに、Levesqueらによって最近開発された、丸め誤差の影響を回避できる手法(Bit MD法)を概説している。この手法では、空間を微細格子に分け、各分子は格子点上のみの位置をとり得るものとしている。典型的な格子の大きさは、分子の大きさの 10^{-7} 程度であり非常に小さい。このBit MD法の分子動力学法としてのパフォーマンスの検証として、アルゴンの自己拡散係数を求め、浮動小数点演算を用いた標準的な分子動力学法(Float MD法)による結果との比較検討を行い、信頼できる値が得られることを確認している。

第3章では、不可逆過程を検討するためのモデルとして、よく用いられる速度反転問題を概説し、それに基づいて不可逆性の現れ方をBit MD法を用いて詳細に検討している。速度反転問題とは、初期状態において非平衡な状態にある、箱内の多数の分子の挙動を考えるもので、時間とともに平衡状態に近づいた後、ある時刻においてすべての分子速度を反転し、その後の時間発展を見るものである。即ち、分子速度反転時刻以降は、時間が逆転したことに相当する。従って、もし時間発展が可逆的であるとすると、同じ時間の後、初期の状態が出現することになる。Bit MD法による結果は厳密に可逆的な時間発展を示すことを確認している。この確認においては、分子

個々の位置、速度が厳密に復帰することのみならず、可逆性の定量的把握のため、エントロピーに相当する量として分子の速度分布関数から定義されるH関数を用いて、初期の値に復帰することを確認している。一方、Float MD法による結果は、従来より知られているように、不可逆的な振る舞いを示し、初期状態は出現しない。

まず、このような不可逆的な振る舞いが丸め誤差に起因するとの予想のもと、速度反転時に極微少な数値的ノイズを与え、それが元になって不可逆性が出現することを見いだしている。極微少な数値的ノイズとは、特定の1分子の座標を1格子長分ずらす操作であり、通常無視し得るほど極微少なずれであると言える。

つぎに、不可逆性の現れ方と、系を規定しているパラメータ（温度、密度）との関係を明らかにするため、不可逆性の現れかたをH関数の復帰度（初期のH関数の値と、初期に復帰すると目される時刻におけるH関数の値との差）で評価し、その関係を調べている。系を規定している種々のパラメータは系の不安定性を変え、その結果として、H関数の復帰度として不可逆性の現れ方に影響を与える。一方、種々のパラメータは、いわゆる衝突頻度として、不可逆性の現れ方に影響を与えることも明らかにしている。

Float MD法においては、単精度、倍精度演算等の演算精度に依存して、丸め誤差の大きさは異なり、不可逆性の表れ方も異なる。この振る舞いを明らかにするため、制御された数値的ノイズの「量」（数値的ノイズの大きさ、頻度、及びノイズが与えられる粒子の数）の効果を検討している。Float MD法における演算精度による不可逆性の表れ方の違いは、数値的ノイズの「量」に依存していることを見だし、具体的にFloat MD法で現れる数値的ノイズの「量」を定量化している。

第4章では、実用問題において、丸め誤差に由来する影響を検証することを目指し、フラグメンテーションの問題を取り上げている。フラグメンテーションとは、高温高圧の物質が急膨張した際、クラスターが生成される過程であり、さまざまな工学的応用を持つものである。この現象は高い非平衡性を示し、数値的微小ノイズを含む様々なノイズに敏感であることが予想されている。この問題に対して、Bit MD法をもとに、様々な丸め誤差程度の数値的ノイズの効果を検討している。その結果、丸め誤差程度の数値的ノイズは、生成されるクラスターの量・サイズ分布には、さほどの影響を与えないことが結論され、従来の研究の妥当性が示されている。

第5章は結論であり、分子動力学法において現れる不可逆性の由来が数値演算上生じる丸め誤差であることを確認し、さらに、実用問題においても、そのような丸め誤差が決定的な誤差要因になるかどうかの検証法を提案したことが述べられている。

以上要するに、本論文は分子動力学法において生じる不可逆性の原因を明確にするとともに、原因である丸め誤差の与える効果を検証する新たな手法を提案しており、宇宙工学に貢献するところが大きいと認められる。

よって、本論文は博士（工学）の学位請求論文として合格と認められる。