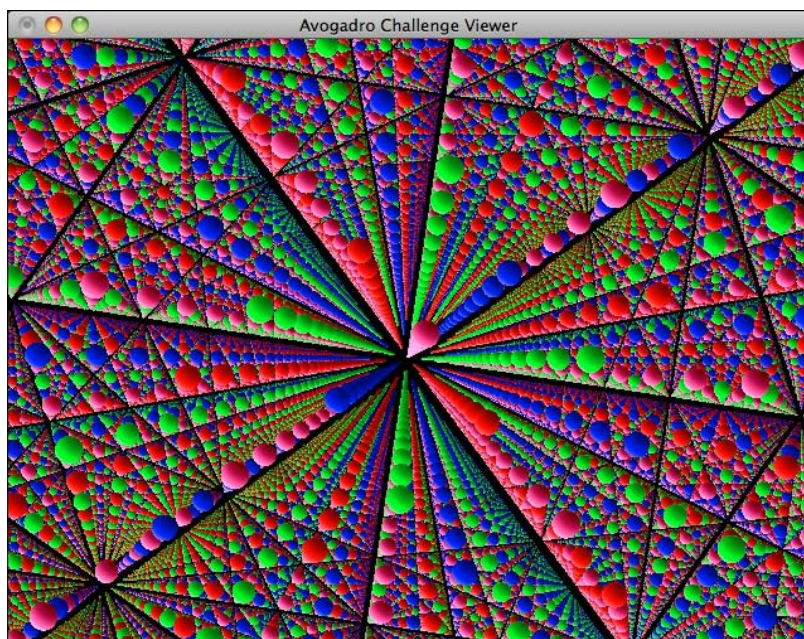


論文題目 Simulation of Flow
- Molecular Dynamics Approach to Classical and Complex Flow Phenomena -
(流れの計算統計物理学)

氏 名 松本 茂紀

我々は実に様々な“流れ”の中で生活している。流れというと、直ちに思い浮かぶのが水や空気などの流体の流れであろう。これは、水や気体の分子の流れであり、古典的な物質流であると言える。流れには他にも、熱伝導の様な物質ではなくエネルギーの流れや、人や動物さらには車など複雑な動きをするモノたちの交通流が挙げられる。この様に、流れには大きく3つのタイプが考えられる。何れの流れも、個々の要素が寄り集まり、それらの大局的な性質として現れる。これらの流れを制御することが、工学的応用において大きな課題であり、実に様々な研究がなされてきた。しかし、依然として未解決な問題が数多く残されている。その主な原因の一つは、個々の要素による流れの発生起源が明確でないことにある。一般に、流れの性質が現れる運動スケールと、個々の要素の運動スケールとが大きく違う事から、解析が非常に困難であった。しかし、今日の計算機技術の発達により、個々の要素の運動から大規模な集団運動の計算が可能となった。そこで私は、大規模な数値計算技術を確認し、様々な流れの発生起源にかかわる重要な結果を得ることができた。本論文では、大規模計算および解析に関わる技術の確認、およびそれらを用いた様々なタイプの流れの発生に関する研究について報告するものである。

数値シミュレーションにより扱われる現象とそのスケールは実に様々である。分子動力学的手法により、ミクロな粒子の輸送現象の起源が確認されたのが、原子・分子サイズから数ナノメートルのスケールである。更に、対流や気泡生成といった流体的な性質が現れ始める事が、マイクロメートル近傍のスケールで確認されている。そして現在、数百TFLOPS(一秒間あたりの浮動小数演算)の実用的なスーパーコンピュータは、1秒間に約千億粒子の座標更新が可能な演算性能を有しており、マイクロメートルスケールの現象のシミュレーション可能性を示唆した。更にその上のスケールでは、巨大生体分子の様に機能を持った複雑な分子が現れ始める。これらの分子を扱うには、分子スケールよりも粗視化した分子スケールが必要となる。



図：大規模シミュレーション向けに開発した可視化ツール

これら分子スケールのシミュレーションは、マイクロな構造や輸送を理解するためには非常に強力な手法であり、今日の計算機によって流れの発生するスケールの計算が到達可能になった。そこで、計算機性能を最大限引き出す数値シミュレーションを可能にするプログラムコードを作成した。更に、シミュレーション結果の解析や現象の理解を深めるための手法として、3次元の可視化プログラムを開発した。その実行画面を図に示す。既存の可視化プログラムに比べ、大規模な3次元粒子系の描画に特化したプログラムであり、インタラクティブに空間や時間経過を観測することが可能である。これらのツールは、今後の大規模数値シミュレーションで初めて観測される諸現象の解析のための重要なツールになると考えている。

流れの中でも最も基本的で古典的な流れの一つが熱輸送である。熱輸送は、マクロな現象論からでは説明できない、マイクロな輸送特性を持っている。また、マイクロな分子構造により、大きく影響を与えられる。その一つの例として、非結晶中の熱伝導が挙げられる。一般的なガラスの伝導率は、結晶の約12%と低いが、窒化アルミニウムの場合では単結晶の約85%の値を示す。実際に、マイクロな非結晶構造が熱輸送に与える影響がどの程度であるかを、非結晶の簡単なモデルとして剛体球のランダムパッキングを用いて調査した。熱輸送を調べる前にまず、ランダムパッキングの構造を定義する必要がある。しかし、ランダム構造を定量的に特徴付けるのは非常に難しい。そこで、近接粒子数とその角度分布を定量化するオーダーパラメータを開発した。その解析の結果、空間的な制約があるにも関わらず、ある粒子の周りにランダムに粒子が配置された場合と同じ性質を示した。更に、その構造を支える接触粒子は、パックされた構造の端から端までパーコレートするクラスターを形成している。このクラスターにより、エネルギーは迅速に伝達され、高い熱伝導率を示す結果が得られた。ランダムパッキングの熱伝導は結晶構造に比べ、同密度下では5倍近く高く、同圧力下では10%ほど低い結果が得られた。これは、非結晶構造が与える熱輸送への効果は10%程度であるが、密度が低くとも高い熱伝導率を示す構造であることを示唆している。

古典的な流れの中でも、未解決で重要な問題なのが乱流である。乱流は、自然現象や産業などを通して生活に深く関係しているが、その本質的な理解は未だなされていない。乱流は、大小様々な渦の運動により特徴づけられている。更に、それらの渦は各スケールにおいて強く影響し合っている。そのため、大きな渦構造と粘性の効く微小なスケールを完全には分離することができず、非常に大規模な数値計算が求められる。一方で、流体方程式は粘性の様なマイクロな輸送を扱う事ができないため、壁表面での粗さや粘性の影響を直接扱う事が出来ず、依然として乱流現象の問題として残されている。そこで、マイクロな輸送と乱流の関係を明確にするため、分子動力学シミュレーションのアプローチを行った。

乱流を扱う為には、分子スケールから乱流が生じるスケールの計算をしなくてはならない。そこで、現在もっとも高速な分子動力学法のアルゴリズムを、単純な力学モデルである弾性球モデルへの最適化を行い、高レイノルズ数のシミュレーションを可能にした。このモデルで並行平板間流のシミュレーションを行ったところ、層流では非圧縮性粘性流体の性質と対応する性質が得られる。このことから、粒子密度に対する動粘性率を見積もることができる。その見積もりを基に、流体方程式から予測される乱流統計で最もよく知られている、エネルギーの波数スペクトルについて、等方性乱流条件を用いて調べた。その結果、コルモゴロフ理論から予言されたスペクトルと矛盾のない結果を得ることができた。更に、分子スケールでは散逸領域を直接観測できるため、流体方程式からは得られないミクروسケールのスペクトルを得ることができた。これにより初めて、マイクロな分子輸送とマクロな乱流との関係を捉えることができた。

古典的な流れのほかに、複雑な機能を持った物質の流れが交通流である。中でも、興味深い現象として交通渋滞が観測されている。この交通渋滞は細胞内でも観測されており、数十ナノメートルの巨大生体分子であるリボソームが渋滞を引き起こす。リボソームは、メッセンジャーRNAをたんぱく質へ翻訳する分子機械である。翻訳過程は、生物にとって基礎となる過程であり、外的環境変化に対する翻訳速度の変化は、遺伝病や細胞成長などに深く関係している。しかし、リボソームの構造の複雑さや、細胞内の混雑により解析が困難である。また、原子スケールのシミュレーションでは膨大な原子数が必要であるため、依然として数値計算も困難な状況である。そこで、翻訳過程の分子濃度や拡散効果を取り入れた粗視化された分子モデルを提案し、シミュレーションを行った。

リボソームは円筒形として粗視化し、内部の複雑な化学反応を簡単なルールで置き換えた。そのほかの分子は、球として粗視化し単純な力学モデルで表わす。水の効果は熱雑音であるとし、全ての粗視化分子は分子間力と熱揺らぎによって運動する。これらの簡単なモデルを用いて、リ

リボソームがメッセンジャーRNA上を一方向に翻訳する過程を実現することができた。更に、複数のリボソームが同時にメッセンジャーRNAを翻訳する際、リボソーム密度が高くなると渋滞現象を起こすことが確認できた。この様子は、交通渋滞を記述する確率数理モデルと似たような性質を示している。しかし、確率数理モデルでは外的環境に対する影響を扱う事ができない。一方この粗視化モデルでは、翻訳速度の濃度依存性や温度依存性を見積もることができる。その結果、翻訳するたんぱく質の種類による温度依存性の違いが確認できた。また、翻訳とは無関係の分子によるクラウディングの効果を示唆する結果を得た。これらは、実験的に得られる可能性のある、理論モデルから提案される結果である。

以上をまとめると、分子スケールシミュレーションにより、様々な流れの発生について調査を行った。古典的な流れである熱輸送や乱流については、ミクロな輸送を簡単な分子モデルにより数ナノメートルから数マイクロメートルのスケールでシミュレーションを行った。複雑な機能を持つ分子であるリボソームの翻訳過程については、粗視化分子を用いて数十マイクロメートルのスケールの運動を、分子揺らぎを考慮したモデルによりシミュレーションを行った。これにより、ミクロな構造や輸送から、それぞれの大局的な流れの発生機構を明らかにした。本論文は、自然科学においてはミクロスケールとマクロスケールの物理学を繋ぐ出発点となり、工学においては流れを制御し応用するための基礎研究となることを期待する。