

## 審査の結果の要旨

論文提出者氏名 松本 茂紀

相対論・量子論とともに現代物理学の支柱をなす統計物理学は、熱平衡状態の分子論を端緒とし、非平衡状態の解明を目指して発展し始めた理論である。統計アンサンブルを使った熱平衡状態の理論が確立し、そこからのずれとして線型非平衡状態、さらには非線形非平衡を記述することを目標に研究が進められている。相対論が時空の記述、量子論が物理世界の分析を担当し、統計物理学は分析した結果の全体への統合を担っているのである。本博士論文は、分子スケールのモデルに基づく大規模な粒子動力学シミュレーションにより、主に非線型非平衡現象を解析し、その結果をまとめたものである。題目「Simulation of Flow (流れの計算統計物理学)」にある「Flow (流れ)」は、平衡状態には巨視的な流れがないことに比し、非平衡状態は巨視的な流れにより特徴づけられることを踏まえたものである。

本論文では、メソスケールでの熱流から巨視的な動物の群れまで以下の問題を扱っている：

### (3章) アモルファス固体の熱伝導

剛体球分子をランダムに配置したアモルファス固体中の熱伝導を、面心立方結晶構造の場合と分子動力学シミュレーションにより比較し、伝導機構を分析した。この研究はある種のアモルファス固体に見られる高い熱伝導率について、もっとも簡単な説明を与えるものと評価される。

### (4章) 乱流

剛体球分子を一千万個単位で使い、分子運動に基づいて乱流を再現し解析した。2次元のエンストロフィーカスケードおよび3次元コルモゴロフ乱流場を確認し、特に分子運動スケールと乱流カスケードとがどのように関係しているかを示す初めての理論研究と評価される。

### (5章) 遺伝子からタンパク質合成にいたる遺伝情報発現の流れ

m-RNA 上を運動するリボゾーム分子がどのようにしてタンパク質を合成するか、特に合成速度を決める要因を明らかにするために、関係する生体高分子の粗視化モデルを提案し解析した。リボソームの渋滞転移がタンパク質合成を律速する様子を再現した。さらに温度や t-RNA の濃度への依存性も解析し、実験結果の説明に成功した。

### (付録) 2次元空間中の動物群の逃避・捕獲

逃避者1を捕獲者1が追いかける問題は、戦術学の基礎として数学的な研究が長く続けられている。この問題への多体性の効果を解析するために、群れの逃避・捕獲運動の理論研究の試みを報告した。

以上の成果は、個々の現象論的な重要性および非平衡統計物理学上の意義は大きいもの

と評価される。さらに、こうした研究、特に乱流の解析を実現するために開発した、高速並列シミュレーションプログラムおよび可視化システムは高く評価される。扱える粒子モデルを剛体球・弾性球に限って最適化を徹底することにより、現在までに実用化されたプログラムの中では最高の性能を持つものと考えられる。具体的には、ノートブック型のパソコンで数百万粒子程度、デスクトップパソコンであれば数千万粒子程度を毎秒シミュレーションしつつ3次元描画することができる。大型のスーパーコンピュータを使うことにより、10000 並列程度までは実用的であることも示され、1兆粒子規模の非平衡シミュレーションを実現することが可能であると推定される。この業績は、現在のスーパーコンピュータの発展と相俟って、複雑な巨視的な現象に対するナノテクノロジー開発の出発点としても高く評価できる。

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。