

**序論** 近年、コンピュータ性能の大幅な向上により、多くの物理・化学・生物学的現象のモデルがコンピュータ上でシミュレートされてきた。その中でも多くのシミュレーションは一般にシーケンシャルと呼ばれる逐次型のプログラムで記述されている。しかし、実世界での物理・化学・生物学的現象はシーケンシャルではなく、同時並行に変化していて、現実に近い形での計算が必要とされる。実際に並行型のプログラミングではモデルの修正などに伴う変更が簡単に行えると考えられる。本研究ではJava言語上で動くシーケンシャルではない並行型(コンカレント)なプログラムを用いて、実世界の現象をコンピュータ上でシミュレーションすることを目的とする。Java言語にはコンカレント動作のライブラリが最初から組み込まれており、それを元にシミュレーションを行った。今回そのモデルとして、1次元イジング模型、酵素と基質の反応、金平糖の突起生成のシミュレーションを取り上げる。

### シミュレーション及び結果と検討

(1)1次元イジング模型：1次元イジング模型で定義されている上下のスピンの向きがそれぞれ互いに素となる1つのスレッドを作成し、同時間内でスピンの向きがどう変わっていくのかを計測し、それを検証した。プログラム上ではスピンの向きは上向きを1、下向きを0とした。スピンの向きを変える規則として、1. 同じ向きに挟まれているスピンは必ずその同じ向きに変化する、2. 1に当てはまらない場合は乱数によって向きが決定される、3. スピンの並びをリング形状にするために周期的境界条件を導入する、というようにした。図1に1次元イジング模型シミュレーションの統計結果を示す。今回は全体のスピン数を70としている。結果はよく知られているように時間が経つにつれて図中(a)、(b)、(c)のように3つのパターンに分類されることが分かった。

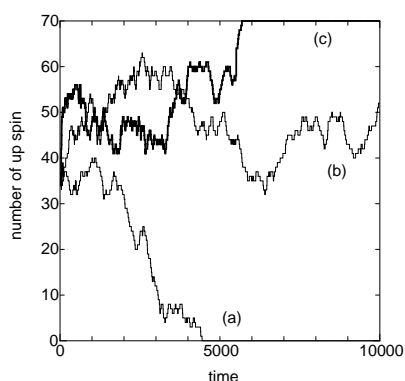
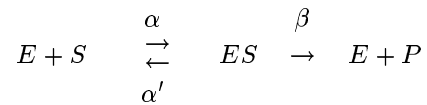


図1 1次元イジング模型の結果

(2)酵素と基質の反応：酵素反応において、一般に以下の化学式が成り立つと仮定する。



$E$ は酵素を $S$ は基質、 $P$ は生成物を表す。この式は反応速度論的に書かれており、 $\alpha$ 、 $\alpha'$ 、 $\beta$ はそれぞれ反応スピードを規定する確率に対応する。酵素は基質と与えられた確率によって別の物質 $ES$ へと変化し、さらに生成物を作るものとする。この確率的に動作する $E$ と $S$ のスレッドを作成し、どのように酵素が生成物に変化していくかを計測した。このシミュレーションにおいて反応速度論的の微分方程式との比較検証を行った。図2(a)、(b)にそれぞれの結果を示す。

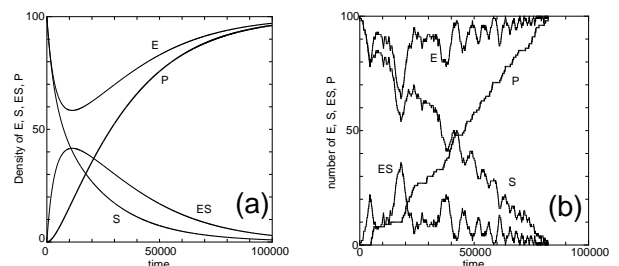


図2 酵素と基質の反応(a)微分方程式の解(b)シミュレーションの結果

図2ではある程度パラメータを合わせており、パラメータを変更することで、その結果はおおよそではあるが、一致していることがわかった。

(3)金平糖の突起生成：金平糖の突起生成シミュレーションでは、丸い核にランダムに砂糖を付着させ、突き出した部分ほど、砂糖が付着しやすくさせるというアルゴリズムを用いた。この砂糖の付着にマルチスレッドを用い、突起がどのように変化していくかを検証した。その結果、大きくなった突起は時間が立っても形が残り、逆に小さな突起は砂糖の付着によって埋もれていくような様子がうかがえた。

**総論** 以上のように並行動作のシミュレーションによって、より現実問題に忠実なシミュレーションが可能であると考えられる。また、汎用性の高いJava言語を用いることで、多くのシミュレーションへの応用が考えられる。

### 学会発表

橋口、小田部、松野：平成14年度応用物理学会九州支部講演会 於鹿児島大学工学部 講演予稿集 vol. 28 1Ba-3 p. 29