

学位論文 博士 (工学)

大規模並列計算を活用した
レプリカ交換モンテカルロ法の最適化：
一次相転移を示す液晶モデルへの展開

2024 年度

慶應義塾大学大学院 理工学研究科

小和口昌愛

報告番号	㊦ 乙 第	号	氏 名	小和口 昌愛
主 論 文 題 名： 大規模並列計算を活用したレプリカ交換モンテカルロ法の最適化： 一次相転移を示す液晶モデルへの展開				
(内容の要旨) 液晶の相転移現象とは、配向と並進の自由度を持つ分子が液相と固相の両方を持つ相に転移する現象である。産業応用が進展している一方で、液晶の相転移に関する理論的メカニズムには未解明な点が多い。理論的および実験的アプローチに加えシミュレーションを用いることで、分子の配置や相互作用を詳細に解析し、相転移現象の理解が深まる。統計力学において、相転移現象は熱力学関数の異常な挙動によって特徴付けられ、システムサイズが無限大に近づくときに厳密に現れる。相転移が発生すると熱力学関数は不連続な変化や発散を示す。例えば、一次相転移ではエンタルピーが不連続に変化し、潜熱が関与する。二次相転移では、熱容量や磁化率が相転移点で発散し、特定のべき乗則に従う臨界指数を持つ。これらの現象を理解するためには大規模システムの計算が必要であるが、次元の増加により必要な計算資源は指数関数的に増加するため困難となる。マルコフ連鎖モンテカルロ法 (Markov-Chain Monte-Carlo, MCMC) は確率分布から直接サンプリングし、局所的な遷移ルールを通じて次の状態を生成する手法で、次元の呪いに対して比較的強い。しかし、液晶の相転移現象を正確に捉えるには、計算効率の改善が不可欠である。MCMC を改良したレプリカ交換モンテカルロ法 (Replica-Exchange Monte-Carlo Method, REMC) は、複数の系 (レプリカ) を異なる温度で同時に MCMC を行い、定期的に状態を交換することで位相空間を効率的に探索する。本研究では、REMC および液晶相転移シミュレーションに関する課題を克服し、手法の最適化を提案する。REMC は系の平衡状態を効率的に探索するが、交換パラメータの種類や配置間隔の選定に未解決の議論がある。例えば、温度が交換パラメータの基礎概念である一方、相転移を含む系での交換確率は著しく低下する。これは一次元であれば単純な凸関数で表せる評価関数で解決可能だが、二次元以上では複雑化する。本研究では、二次相転移と一次相転移を含む液晶モデルを対象に、REMC のパラメーター間隔最適化を行う。進化戦略アルゴリズムを用いて交換パラメーターの間隔最適化を図り、ハミルトニアンレプリカ交換法を導入して一次相転移を回避する二次相転移交換軸を導入する。本博士論文では、MCMC の基本概念、REMC および拡張アンサンブル法、交換最適化アプローチの概要を説明し、得られた結果と考察を述べるものである。				

Thesis Abstract

No. 1

Registration Number	☒ "KOU" ☐ "OTSU" No. *Office use only	Name	Akie Kowaguchi
Thesis Title Optimization of the Replica-Exchange Monte-Carlo Method Using Large-Scale Parallel Computing: Application to Liquid Crystal Models Exhibiting First-Order Phase Transitions			
Thesis Summary The phase transition phenomenon in liquid crystals involves molecules with both orientational and translational degrees of freedom transitioning into phases with liquid and solid properties. While industrial applications, such as liquid crystal displays, are advancing, theoretical mechanisms and detailed understanding of these transitions remain incomplete. Simulations, along with theoretical and experimental approaches, enable detailed analysis of molecular arrangements, interactions, and resulting properties, thus enhancing understanding and offering academic and engineering significance. In statistical mechanics, phase transitions are characterized by anomalous behaviors of thermodynamic functions, which manifest accurately as the system size approaches infinity. During a phase transition, thermodynamic functions may exhibit discontinuous changes or divergences. First-order transitions involve discontinuous changes in properties like enthalpy, while second-order transitions involve divergences in properties like heat capacity, adhering to specific critical exponents. Understanding these phenomena requires large-scale system computations, which are challenging to implement and analyze. The Replica-Exchange Monte-Carlo (REMC) method enhances the traditional Markov-Chain Monte-Carlo (MCMC) method by running multiple systems (replicas) at different temperatures and exchanging states periodically, enabling efficient exploration of the energy space. This study aims to optimize REMC and address challenges from previous research. Specifically, we will tackle issues such as exchange frequency, type of exchange parameters, and parameter spacing. With advanced computational resources, the optimal configuration of these settings is critical. We will implement molecular simulations on liquid crystal models with both first order and second-order phase transitions to optimize REMC parameters. Using Evolution-Strategy algorithms, we aim to optimize exchange parameter intervals without prior knowledge. Additionally, introducing the Hamiltonian replica-exchange method will create an exchange axis for second-order transitions, avoiding first-order transitions. By addressing these issues, we aim to enhance REMC's efficiency and applicability for complex liquid crystal models. This dissertation discusses the basics of MCMC, extended ensemble methods including REMC, exchange optimization, phase transition phenomena, and molecular simulation methods, followed by results, discussions, and conclusions.			