

論文審査の要旨および学識確認結果

報告番号	甲／乙第 号	氏 名	野村 昂太郎
論文審査担当者： 主査 慶應義塾大学教授 博士(工学) 泰岡 顕治			
副査 慶應義塾大学専任講師 Ph. D. 安藤 景太			
慶應義塾大学教授 工学博士 天野 英晴			
明治大学准教授 博士(理学) 光武 亜代理			
(論文審査の要旨) 学士(工学)、修士(工学) 野村昂太郎君の学位請求論文は「レプリカ交換分子動力学シミュレーションによる準一次元閉じ込め系の水の相挙動に関する研究」と題し、7章から構成されている。相転移は様々な工学分野に広く関わる現象であり例えば水の凝固が挙げられる。バルクの水は系の圧力と温度に応じて、18種類の固相と3種類のアモルファス相を呈することがこれまでに知られている。また、近年ナノチューブやナノスリットなどのナノ細孔内に閉じ込められた場合には、バルクでは見られないさまざまな結晶相を呈することが報告されてきた。ナノ細孔内に閉じ込められた系では、実験的な研究が難しく分子シミュレーションによる研究が行われてきたが、まだ十分にその相図が解明されているとは言えない。本論文では、分子動力学シミュレーションを用いてカーボンナノチューブを対象として閉じ込め系の水の相挙動に関する研究を行っている。 第1章では本論文の背景および目的、構成を、第2章では分子動力学(MD)シミュレーションの基礎理論を、第3章では本研究で用いているレプリカ交換 MD シミュレーションについて説明している。第4章から第6章に結果を示している。 第4章では、グラフィックスプロセッシングユニット(GPU)を用いてレプリカ交換 MD シミュレーションを高速化する研究を行っている。広い範囲の温度と圧力を交換するレプリカ交換 MD シミュレーションを行うために、温度と圧力が異なる複数のレプリカの計算を1つのGPUで実行するように実装を行っている。また、分散環境でのGPUの仮想化も取り入れ、準一次元閉じ込め系の水への最適化も行っている。 第5章では、第4章で高速化について評価するために、Lennard-Jones 流体を用いたレプリカ交換 MD シミュレーションを行っている。シミュレーションから得られたポテンシャルエネルギーの平均は、先行研究と良い一致を示し実装が正しく行われていることを確認している。また計算速度の測定では、64 GPU を使用して最大 8.13 TFlops の実行性能を達成しており、GPU のマルチプロセッサ数以上のレプリカ数で実行した場合に十分な計算性能を得ることを確認している。 第6章では、カーボンナノチューブ内に閉じ込められた水分子系に適用して相挙動についての解析を行っている。10 MPa < P < 500 MPa の圧力条件において、六角柱型の準一次元氷 (INT(6,0)) と液体の相図を描いている。圧力(縦)－温度(横) 線図において相平衡線が横に凸な曲線を描き、$dP/dT > 0$ の領域では低密度液体(LDL)と接し、相平衡線の頂点に当たる固相と液相の体積が等しくなる点(固液等容点、$dP/dT = \infty$)を境に高密度液体(HDL)に接することを見いだしている。この二種類の液体は固液等容点以下の温度では INT(6,0) によって隔てられて分かれているが、固液等容点より高い温度ではその区別がつかなくなることを見いだしている。一方先行研究で固液臨界現象が予測されていた圧力温度条件 (P > 1000 MPa の圧力条件領域)において、圧力が高くなるにつれて固相液相間の自由エネルギー障壁が徐々に小さくなり、P = 2950 MPa においてエネルギー障壁がなくなることを見いだしている。エントロピーの Challa-Landau-Binder パラメータも臨界点を表す値に収束しており、粒子数が無限大の極限でも固液相転移現象が起こることを予測している。さらに、INT(6,0) は圧力が大きくなるとその中空部分に水分子が詰まる INT(6,0)pf 構造へと相転移し、圧力を上げていくとより多くの水分子が中へ詰まるようになることを確認している。 最後に第7章で研究全体に関する結論を述べている。 以上要するに、本論文の著者は、カーボンナノチューブに閉じ込められた準一次元の水の系に対して、レプリカ交換 MD シミュレーションを適用して、その相挙動についての解析を行った。その成果は、ナノ細孔内に閉じ込められた系の相挙動を明らかにするだけでなく、レプリカ交換 MD シミュレーションの高速化による同シミュレーションの可能性を広げることに寄与した。よって、本論文の著者は博士(工学)の学位を受ける資格があるものと認める。			
学識確認結果	学位請求論文を中心にして関連学術について上記審査委員で試問を行い、当該学術に関し広く深い学識を有することを確認した。 また、語学(英語)についても十分な学力を有することを確認した。		