

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	小和口 昌愛
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 慶應義塾大学准教授 Ph.D. 彭 林玉			
慶應義塾大学教授 博士（理学），医学博士 藤谷 洋平			
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）小和口昌愛 君の学位請求論文は「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」と題し，9 章から構成されている。 液晶の相転移現象は，配向と並進の自由度を持つ分子が液相と固相の両方の特徴を持つ相である液晶相に転移する現象である．理論的，実験的アプローチに加えて分子シミュレーションを用いると未知の分子種の相転移点の予測や分子の配置などを詳細に解析できるため，液晶の相転移現象の理解が深まることが期待されている．相転移現象を理解するためには，相転移点近傍も含めて効率的に状態をサンプリングする必要がある．レプリカ交換モンテカルロ法(REMC)は，異なる温度の複数の系(レプリカ)の分子シミュレーションを同時に実行し，ある頻度で各系の温度を交換することにより位相空間を効率的に探索する方法である．しかし，相転移現象の計算に適用する際には，相転移点近傍で系の温度交換が起こりにくくなるという問題がある．本論文では，液晶相転移の系に関して，REMC に関するこの課題を克服する最適化の手法を提案している。 第 1 章では本論文の背景および目的，構成を，第 2 章ではマルコフ連鎖モンテカルロ法について，第 3 章では拡張アンサンブル法について，第 4 章では相転移と分子間相互作用について説明している．第 5 章から第 8 章に結果を示している。 第 5 章では，進化戦略アルゴリズムを用いて REMC の交換パラメータ分布を最適化する方法について述べている．交換パラメータが 1 つの場合は，評価関数は単純な凸関数で表現することが可能であるが，交換パラメータを複数に拡張する場合や，ハミルトニアンレプリカ交換法を用いて分子の異方性を交換パラメータとして扱う場合，評価関数はより複雑になる．こうした高次元かつ複雑な評価関数に対して，進化戦略アルゴリズムは効果的な最適化手法として機能することを示している。 第 6 章では，第 5 章で導入した進化戦略アルゴリズムを用いて REMC の温度分布を最適化した結果について述べている．従来の REMC の適用が比較的困難である Lennard-Jones ポテンシャルの液体/固体相転移と液晶のモデルである Yukawa ポテンシャルの Isotropic-Nematic 相転移を取り上げて計算している．本論文で導入した進化戦略アルゴリズムを用いた方法が，従来の方法に比べて，両系の相転移付近の状態をよくサンプリングすることを示し，この方法の有用性を示唆している。 第 7 章では，従来の REMC の適用が困難である液晶のモデルである Hess-Su ポテンシャルの Nematic-Solid 相転移に関して，進化戦略アルゴリズムに加えてハミルトニアンレプリカ交換モンテカルロ法を用いて二次相転移を起こすような交換パラメータを導入した．これにより，転移点近傍のレプリカ交換を効率よく行うことを示している。 第 8 章では，経路探索アルゴリズムによる高交換確率ルートの一括探索について述べている．本章では，事前にレプリカの数が決まっているという制約を取り除き，任意のパラメータ範囲において，特定の交換確率以上で全ての交換が発生するレプリカ数を見つけるプロセスを開発した．得られたパスはエントロピー勾配が緩やかな温度と圧力の間隔であることを示している。 最後に第 10 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，REMC における交換パラメータの最適化において，液晶の相転移を例として進化戦略アルゴリズムを用いた研究を行った．その成果は，液晶の相転移における REMC の交換パラメータの最適化手法を提案するだけでなく，相転移計算の研究に大きく寄与するものであり，新規材料開発などにおける相転移点予測などの工学分野への応用が期待できる．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。		