

別紙 4

報告番 -	※ 甲 第 号
----------	---------

主 論 文 の 要 旨

論文題目 The Study of Generalized-Ensemble Algorithms
for Determining the Density of States:
Applications to the Ising Model, Ice I_h Model,
and Biomolecular System
(状態密度推定のための拡張アンサンブル法の研究:
イジング模型、氷 I_h 系および生体高分子系への応用)

氏 名 林 卓 弥

論 文 内 容 の 要 旨

スピングラス系や生体高分子系のような多自由度複雑系におけるエネルギーランドスケープではエネルギーの極小状態が無数に存在する。従来のカノニカルアンサンブルに従ったコンピュータ・シミュレーションを実行すると、それらのエネルギー極小状態に系が留まってしまうという問題がある。すなわち、多自由度複雑系における通常のシミュレーションでは、十分な状態空間を探索することができず、計算結果の信頼度が低下する。この問題に対処するため、拡張アンサンブル法と総称される手法が提案されている。

本論文では、系の性質を特徴付ける物理量である状態密度を高精度で得るため、2つの拡張アンサンブル法、すなわち Replica-Exchange Wang-Landau Method (REWL 法)と Multicanonical Replica-Exchange Method (MUCAREM 法)を、この順番で組み合わせたアルゴリズムである REWL-MUCAREM 法を開発した。そして REWL-MUCAREM 法を性質の異なる3つの系に適用し、その結果を与えた。

本論文でははじめに、REWL-MUCAREM の計算アルゴリズムを検証するため、REWL、MUCAREM、REWL-MUCAREM の3つの方法で正方格子イジング模型のモンテカルロシミュレーションを実行し、得られた状態密度を比較した。その結

果、REWL-MUCAREM によって得られた状態密度は、それぞれの方法で別々に推定された状態密度よりも正確であることが示された。

本論文では次に、氷 I_h 系の残余エントロピーを REWL-MUCAREM モンテカルロシミュレーションによって計算した結果を与えた。氷 I_h の残余エントロピーは理論的にも実験的にも推定することが難しい物理量の 1 つだが、近年の計算科学の発展に伴って、シミュレーションによる推定値の計算誤差は、実験誤差よりも小さい値を与えるようになった。現在では、氷 I_h の残余エントロピーは計算アルゴリズムを検証する良いモデルの 1 つになりつつある。しかし、シミュレーションによる残余エントロピーの推定値には、小さな不一致が残っている。本研究の REWL-MUCAREM による結果は、他のシミュレーション手法を使用したグループの結果と良く一致すると共に、1 つの先行研究の結果が、他の研究結果と不一致である原因が、乱数発生プログラムが生成する乱数の不均一性に起因することを見出した。

本論文では更に、タンパク質のフォールディング問題に REWL-MUCAREM モンテカルロシミュレーションを適用した。計算対象はヘリックス-コイル構造転移を示すアラニン重合体とした。タンパク質系における構造サンプリング効率を上げるため、遺伝的アルゴリズムを追加した REWL-MUCAREM を提案した。結果として、タンパク質のような複雑多体系においても、正確な状態密度を推定できた。

以上のように本論文では、性質の異なる 3 つの多自由度複雑系に本研究で提案した REWL-MUCAREM を適用し、その有用性を示した。