

論文審査の結果の要旨および担当者

報告番号	※ 甲 第 号
------	---------

氏 名 林 卓 弥

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)

論文審査担当者

主査 名古屋大学大学院理学研究科 教授 Ph.D. 岡本 祐幸

委員 名古屋大学大学院理学研究科 教授 博士 (理学) 紺谷 浩

委員 名古屋大学大学院理学研究科 准教授 博士 (理学) 倭 剛久

委員 名古屋大学大学院理学研究科 准教授 博士 (理学) 榎 互介

論文審査の結果の要旨

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に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困難で、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。

申請者は、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) をこの順序で組み合わせたアルゴリズムである REWL-MUCAREM法を開発した。

申請者ははじめに、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、それぞれの方法単独で推定された状態密度よりも正確であることが示された。

申請者は次に、氷 I_h 系の残余エントロピーを計算した。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のが難しい物理量の1つだが、近年の計算科学の発展に伴って、コンピューターシミュレーションによる計算の統計誤差は、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の計算は、シミュレーション手法を検証する良いベンチマークの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過去の推定値には小さな不一致が残っている。本研究で得られた REWL-MUCAREM を用いた結果は、他のシミュレーション手法を使用した複数のグループの結果と良く一致した。また、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、より計算結果の信頼性が高まった。

申請者は更に、タンパク質のフォールディング問題に REWL-MUCAREM 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多自由度複雑系においても、正確な状態密度が推定できた。そして、ヘリックス-コイル転移は、真空中では1次、水中では2次の相転移であることが示唆された。

以上の結果は、申請者が開発したシミュレーション手法 REWL-MUCAREM を性質の異なる3つの多自由度複雑系に適用し、その有効性を示したものであり、高く評価される。以上の理由により、申請者は博士(理学)の学位を授与される十分な資格があるものと認められる。