XXXVII IUPAP Conference on Computational Physics（CCP2026）における研究発表と『剛体多角粒子系に拡張したイベントチェイン・モンテカルロ法の開発と平衡緩和の効率化』

名古屋工業大学大学院　工学研究科　工学専攻　博士前期課程
物理工学系　応用物理プログラム
勝田　響

この度は、貴会の海外研究発表給付金の対象者としてご採択いただき、大変嬉しく存じます。私は 2026 年 8 月 9 日（日）から 8 月 14 日（金）までの 6 日間、韓国・ソウル特別市の世宗大学コンベンションセンター（Sejong University Convention Center）にて開催された「XXXVII IUPAP Conference on Computational Physics（CCP2026）」に参加させていただきました。本会議は、国際純粋・応用物理学連合（IUPAP）の計算物理学委員会（C20）が主催する、計算物理学分野における国際的な学術会議であり、私は「剛体多角粒子系に拡張したイベントチェイン・モンテカルロ法の開発と平衡緩和の効率化」（原題：Unified Translation–Rotation Newtonian Event-Chain Monte Carlo: Efficient Equilibration of Hard Triangle System）について口頭発表いたしました。

剛体球・剛体円板系の平衡緩和には Event-Chain モンテカルロ法(ECMC)[1]、およびこれに粒子の速度と衝突則を導入した Newtonian Event-Chain モンテカルロ法(NEC)[2]が高い緩和効率を示すことが知られています[3]。一方、剛体三角形粒子系へ拡張する場合、並進運動には XenoSweep 法[4]と NEC を組み合わせた手法がすでに導入されていましたが、回転運動については各粒子ごとに独立にメトロポリス型の試行と GJK 法による接触判定を行う手法(Metropolis-Rotation NEC 型: MR-NEC)にとどまっており、粒子占有率が高い領域では棄却率の増大が計算効率のボトルネックとなっていました。そこで本研究では、並進と回転を棄却なしに単一の事象連鎖へ統合する新たなアルゴリズム(Unified Translation-Rotation NEC 型: UTR-NEC)を提案しました。UTR-NEC では、一定の並進距離を進むごとに回転イベントを挿入し(挿入頻度は調整可能なパラメータで制御)、回転角は解析的に導出した自由回転範囲から一様サンプリングすることで回転試行時の棄却を完全に排除しています。従来法(MR-NEC)との比較では、液相領域(ν=0.650~0.730)で CPU 時間あたりの並進の擬似拡散係数の比がほぼ一定で 4.6~5.0 倍となりました。回転ではさらに顕著な改善が見られ、占有率が最も高い ν=0.760 でも約 9 倍、低占有率領域では最大 165 倍に達しました。これは、MR-NEC では棄却されていた回転試行が、UTR-NEC ではすべて実効的な更新として活かされるためです。

会期中は、計算物理学分野の研究者らと何度か議論をさせていただきました。三角形以外の多角形粒子系への応用可能性という点で多くの質問をいただき、踏み込んだ議論ができました。

改めまして、貴会からのご支援に深く感謝申し上げます。また、これまでご丁寧にご指導くださいました磯部雅晴教授、ならびに磯部研究室のメンバーに感謝申し上げます。

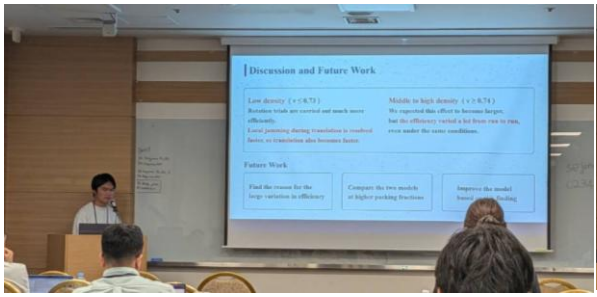
[1] E. P. Bernard, W. Krauth, and D. B. Wilson, Phys. Rev. E 80, 056704 (2009). (ECMC)

[2] M. Klement and M. Engel, J. Chem. Phys. 150, 174108 (2019). (NEC)

[3] Daigo Mugita and Masaharu Isobe, J. Chem. Phys. 161, 154508 (2024). (ECMC/NEC の効率に関する報告)

[4] M. Klement, S. Lee, J. A. Anderson, and M. Engel, J. Chem. Theory Comput. 17, 4686 (2021). (XenoSweep 法)

[5] J. A. Anderson, J. Antonaglia, J. A. Millan, M. Engel, and S. C. Glotzer, Shape and Symmetry Determine Two-Dimensional Melting Transitions of Hard Regular Polygons, Phys. Rev. X 7, 021001 (2017).



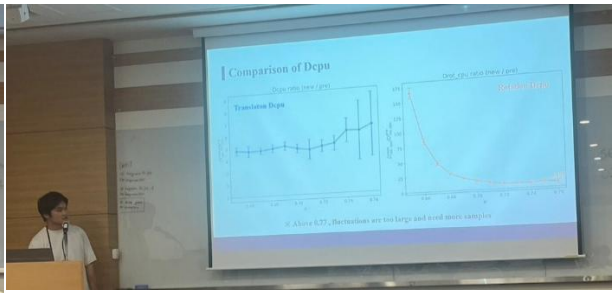


写真 1, 2：［世宗大学コンベンションセンターにて筆者の発表の様子］

写真 3：［世宗大学到着時の筆者の様子(右から 2 番目)］