

「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズ
インフォマティクスのための基盤技術の構築」

平成29年度採択研究者

2018年度 実績報告書

柳井 毅

名古屋大学トランスフォーマティブ生命分子研究所
教授

人工ニューラルネットワーク理論に基づく
第一原理量子多体シミュレータの開発

§ 1. 研究成果の概要

制限ボルツマンマシンに基づくニューラルネットワークの構造を分子系の多電子波動関数の表現に応用するための基礎開発を行った(図 1). これまでは, 期待値計算は全空間基底展開による厳密計算に基づいており, 計算コストは全組み合わせ数に比例するものであった. この点に対して, 本研究では **Metropolis-Hasting** に基づくモンテカルロ法を実装し期待値計算のスケラビリティの問題に対処する実装及びプログラム開発を進めた. モンテカルロ積分は容易に並列化することが可能がある. プログラムは, スレッドおよびMPI並列法によるハイブリッド並列化法に基づく実装を達成した. モンテカルロ積分では, 局所エネルギーの計算に要するコスト削減が求められる. ハミルトニアンは二体相互作用が限定されている点を利用し, 直接演算法の取り入れを考慮した定式化を行った. この計算ではレキシカル数列を用いたアドレス計算法(図 2)により高速な計算を達成できることを確認している. また, モンテカルロベースの実装を単純な分子系のテスト計算を行い, 厳密解に収束することを確認できた. 学習を収束させるには数値的な難しさがあることが分かってきている. この点をどのように克服するかが今後の課題と言える.

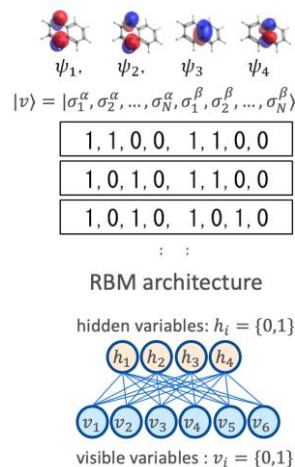


図 1

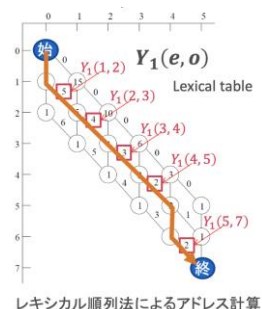


図 2

§ 2. 研究実施体制

- ① 研究者:柳井 毅 (名古屋大学トランスフォーマティブ生命分子研究所 教授)
- ② 研究項目
 - ・ニューラルネットワークに基づく量子計算法の定式化および計算機への実装