

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
2017年度採択研究者

2019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(RBM)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、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ー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である。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により高速な計算を達成できることを確認した。また、制限ボルツマンマシンに代わる新しい学習モデルとして、隠れ層なしの二体および三体のボルツマンマシン(RBM2 と RBM3)を導入することに成功した。本手法をバイオイメージング分子の基底状態計算に応用し、制限ボルツマンマシンおよび隠れ層なしのボルツマンマシンの精度を検証し、高精度な波動関数モデルであることを示す事ができた。その結果は、P.-J. Yang, M. Sugiyama, K. Tsuda, and T. Yanai, *J. Chem. Theory Comput.* 16, 6, 3513-3529 (2020) として論文発表した。

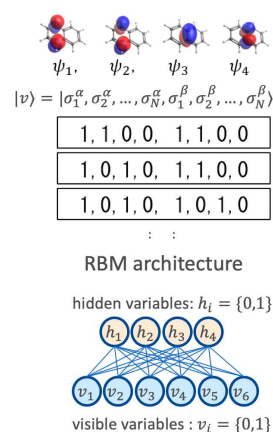


図 1

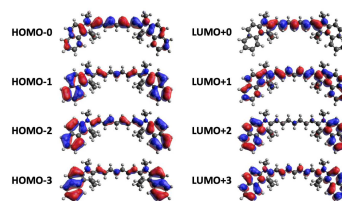


図 2 Indocyanine green (ICG)の分子軌道:
(左) 正準, (右) 局在化

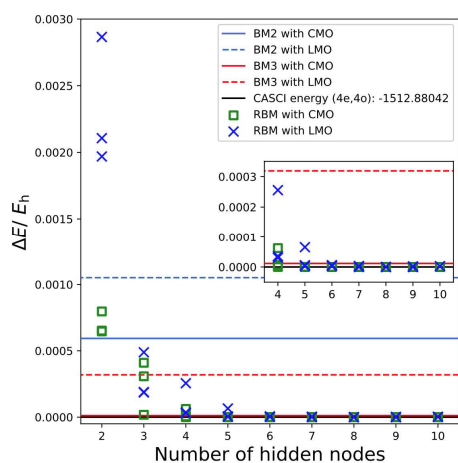


図 3

RBM, BM2, BM3 の学習モデルによる ICG 分子のエネルギー計算の結果。計算では、正準軌道および局在化軌道を用いることで、電子相関の取り扱いに関する性能を評価した。