

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 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

2. 個人研究者名

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)

3. 事後評価結果

人工ニューラルネットワークによる多体波動関数表現を組み入れた高速な第一原理量子化学計算法を開発し、既存の量子多体計算法の適応範囲を超えて、より多様な分子系に対して高精度量子多体計算を実現できる実践的な第一原理電子状態計算法の確立を目指した研究である。近年、制限ボルツマンマシン (RBM) を強相関物理モデルの量子多体計算に適用する研究が行われているが、柳井研究者は完全活性電子配置相互作用空間 (CAS-CI) を張る各電子配置におけるスピン軌道の電子占有の情報を記述子として、これを量子化学計算に拡張した。さらに RBM の代替として、隠れ層を有しない高次 BM を導入することを提唱し、RBM に対して安定性に優れることを示した。この手法を、バイオイメージング分子として知られるインドシアニングリーン (ICG) 分子に適用し、精密計算を実現している。

量子多体問題に対するアプローチは近年様々な新手法の登場で大きく進展しつつあるが、データ科学はその大きな潮流の一つとなりつつある。その中で、モデルを用いた研究ではなく、具体的な物質の第一原理計算における実用化の道を示し、その有用性を実証したことには、大きな意味があるといえよう。