

(続紙 1)

京都大学	博士 (理学)	氏名	植野 正嗣
論文題目	Modeling System Bath Hamiltonian with a Machine Learning Approach (機械学習的アプローチによる系・熱浴ハミルトニアンモデリング)		
(論文内容の要旨)			
<p>溶液やタンパク質などの環境の中にある分子の振動運動は分子内だけでなく環境からも影響を受ける。そのため量子力学シミュレーションにおいて不可逆性を考慮するという大きな困難が生じる。原理的には無限の環境自由度を考える必要があるが、全系を量子力学に基づきシミュレーションすることは不可能である。そこで系を主系と熱浴に分けるモデルがよく使われる。環境としての周囲の分子から生じる自由度は、調和振動子熱浴の運動と主系・熱浴の相互作用として扱う。</p> <p>そのような調和振動子熱浴 (HOB) モデルは単純であるが広く応用されている。環境はスペクトル密度関数 (SDF) により特徴づけられ、適切に定めることで溶液やタンパク質など様々な環境を記述することができる。そのためSDFを決定する方法は重要であるが、分光スペクトルから実験的に求める方法は不活性モードの存在により、また分子力学シミュレーションから求める方法は非線形性やポテンシャル曲面の最適化という問題により適用が困難となる。</p> <p>今回、機械学習的なアプローチによりSDFを決定する手法を提案する。Wiener-Khinchinの定理に基づき、SDFはサンプル毎のパワースペクトルの分散としても求まる。このパワースペクトルを自己符号化器における潜在変数とみなし、サンプルを生成する関数を考える。この潜在変数からサンプルを生成する関数は系のハミルトニアンから設計する。そしてこの関数を、生成されたサンプルと生成したサンプルの誤差を最小化するように最適化する。この手法により、非線形項をあらわにした形で表現してSDFを評価し、また同時に系を記述するポテンシャルを特徴づけるパラメータも同時に最適化することができる。</p> <p>この手法を用い、液体の水の3つの分子内振動について、熱浴のSDFと分子振動間の結合係数を非線形項も含め評価した。結果に基づき、力場パラメータが非線形項に与える影響と、また水の凝縮相におけるエネルギー移送経路を推測した。また、色素2量体における励起子について、ハミルトニアンの対角項・非対角項とその熱浴のSDFを評価した。その結果を用い線形吸収スペクトルと2次元電子スペクトルのシミュレーションを行った。</p>			

(続紙 2)

(論文審査の結果の要旨)

申請者は、機械学習を応用し環境を含んだ系を調和振動子熱浴モデルで表したときのパラメータを得る手法の開発を行った。

申請者はパワースペクトルを活用した機械学習モデルを構築した。従来の手法の物理を踏まえたうえでモデルを設計したため、最適化により得られたパラメータは物理的にも意味があるものとなっている。また、非線形性がある系や、結合した熱浴が励起子の移動とともに切り替わるといった、従来の手法では困難な系にも応用できることを示した。

非線形な結合は現実には広く見られる系であり、本学位論文で提案されたアルゴリズムは系と熱浴の相互作用をより正確に理解するうえで重要な手法であると考えられる。さらにこの手法で決定されるスペクトル密度関数と系のモデルのパラメータは量子動力学シミュレーションなどさらなる物理モデルに応用でき、そのような分野への貢献も期待できる。

機械学習モデルによるスペクトル密度関数とハミルトニアンのパラメータ決定を行った研究は本学位論文が初めてであり、当該分野に及ぼす影響も大きいと考えられる。

よって、本論文は博士（理学）の学位論文として価値あるものと認める。また、令和3年7月27日、論文内容とそれに関連した事項について試問を行った結果、合格と認めた。

要旨公表可能日： 年 月 日以降