

|              |  |
|--------------|--|
| Title        | 分布急尖性を考慮した量子モンテカルロ法による原子局所力計算の改善に関する研究   |
| Author(s)    | 前園, 涼  |
| Citation     | 科学研究費補助金研究成果報告書: 1-4   |
| Issue Date   | 2012-05-31   |
| Type         | Research Paper   |
| Text version | publisher  |
| URL          | <a href="http://hdl.handle.net/10119/10589">http://hdl.handle.net/10119/10589</a>                            |
| Rights       |  |
| Description  | 研究種目: 若手研究 ( B ), 研究期間: 2010 ~ 2011, 課題番号: 22760061, 研究者番号: 40354146, 研究分野: 物性理論, 科研費の分科・細目: 応用物理学・工学基礎/工学基礎 |

## 科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成24年 5月 31日現在

機関番号：13302

研究種目：若手研究（B）

研究期間：2010～2011

課題番号：22760061

研究課題名（和文） 分布急尖性を考慮した量子モンテカルロ法による原子局所力計算の改善に関する研究

研究課題名（英文） New sampling method for leptokurtic distributions in QMC calculation

研究代表者

前園 涼 (MAEZONO RYO)

北陸先端科学技術大学院大学・情報研究科・准教授

研究者番号：40354146

研究成果の概要（和文）：

物質科学を対象とした量子モンテカルロ法電子状態計算においては、素朴な中心極限定理が成立しない事が明らかとなっている。この事が波動関数の変分最適化や局所力算定における数値的不安定性の原因となる。サンプリングに人為的な重みを導入した拡張アンサンブル法により高次モーメント積分の発散を抑え、エッジワース展開可能な中心極限定理に復元出来る。このような改良化サンプリング法を実装し、変分最適化計算の数値的安定性や収束速度の向上を実証した。

研究成果の概要（英文）：

We implemented an improved sampling method for QMC electronic structure calculations with leptokurtotic behaviour is its sampling distribution. The leptokurtotic property is the origin of the numerical instabilities in variational optimization and evaluations of local forces. Some appropriate extended ensemble sampling is proved to give better numerical stability and faster convergence in the variational optimization.

交付決定額

(金額単位：円)

|        | 直接経費      | 間接経費    | 合計        |
|--------|-----------|---------|-----------|
| 2010年度 | 1,500,000 | 450,000 | 1,950,000 |
| 2011年度 | 1,200,000 | 360,000 | 1,560,000 |
|        |           |         |           |
|        |           |         |           |
| 総計     | 2,700,000 | 810,000 | 3,510,000 |

研究分野：物性理論

科研費の分科・細目：応用物理学・工学基礎/工学基礎

キーワード：応用数学、確率論、計算物理、統計数学、物性理論

## 1. 研究開始当初の背景

物質科学を対象とした量子モンテカルロ法においては、サンプリングの対象空間に量子力学的反対称性に起因する発散異常節面が多数存在する事により、素朴な中心極限定理が成立しない事が明らかとなってきた。サンプリング値の分布関数は逆冪減衰を伴う急尖的分布となり正規分布に基づく素朴な誤差解析は正当化されない。この事は、これ

まで困難に阻まれてきた分子構造最適化における局所力算定の数値的病理を説明し、根本的打開可能性の光明を与える。

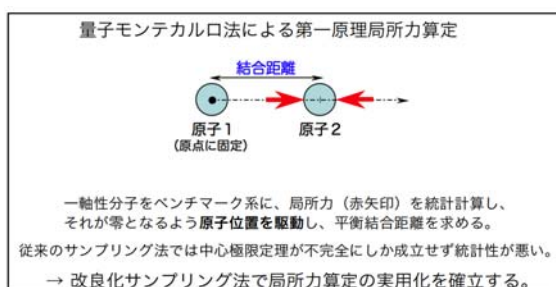
## 2. 研究の目的

サンプリングに人為的な重みを導入した「変数変換」を施す事で、問題の根源である高次モーメント積分の発散を抑え「強い形での中心極限定理（エッジワース展開可の極限

分布)」に復元する方策が可能である。従前のサンプリング法に「変数変換」を施す事で中心極限定理を強い形で復活させる事が可能だからである。本課題では、この改善方策を第一原理電子状態計算コードに実装し、局所力算定（分子構造最適化）の改善事例を確立する。

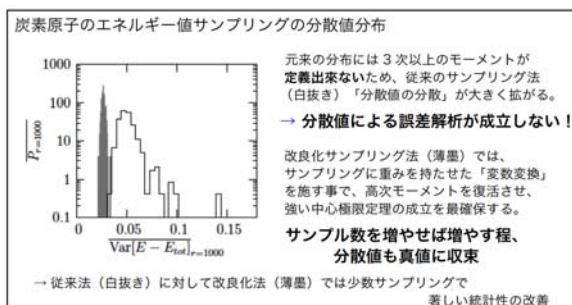
### 3. 研究の方法

現有基盤の量子モンテカルロ法コード上で、分子の局所力計算部分に新たに改良化サンプリングを実装拡張する。初年度中に安定稼働を確保した上で、一軸性分子を対象に限定し、局所力評価を行い、従来サンプリング法と比較した改良化サンプリング法の性能向上を詳細に分析し、方法論に関する論文成果として欧文誌に出版する。



### 4. 研究成果

ガウシアン基底系による改良サンプリング実装を適用して、一軸性分子、具体的には窒素分子や一酸化炭素分子に関する計算を取り扱う。基底エネルギーに関する変分最適化計算につき、改良サンプリングを適用した場合に、最適化計算の数値的安定性や収束速度の向上が見られる様子を実証した。評価対象である統計推定量算定のための蓄積ステップ数、及び、変分パラメタ更新を決定するための統計蓄積ステップ数が独立である点に着目した理論に基づいている。従前の方法では、前者と後者のステップ数は同数にとるのが慣用であったが、後者のステップ数は大幅に減じて最適化計算の質には影響を与えない事、これにより、最適化計算は更に高速化される事などを検証した。



### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者に

は下線)

[雑誌論文] (計 9 件)

1. M. Abbasnejad, M. R. Mohammadzadeh and R. Maezono, "Structural, electronic, and dynamical properties of Pca21-TiO(2) by first principles", Europhysics Letter, 97, 56003 : 1-6, 2012, 査読有

2. Kenta Hongo and Ryo Maezono, "A benchmark quantum Monte Carlo study of the ground state chromium dimer", Int. J. Quant. Chem. 112, 1243-1255, 2012, 査読有

3. Kenta Hongo and Ryo Maezono, "Quantum Monte Carlo simulations with RANLUX random number generator", Progress in NUCLEAR SCIENCE and TECHNOLOGY Vol. 2, 51-55, 2011, 査読有

4. Yukiumi Kita, Ryo Maezono, Masanori Tachikawa, Mike D. Towler, and Richard J. Needs, "Ab initio quantum Monte Carlo study of the binding of a positron to alkali-metal hydrides", J. Chem. Phys. 135, 54108:1-5, 2011, 査読有

5. Yutaka Uejima, Tomoharu Terashima, Ryo Maezono, "Acceleration of a QM/MM-QMC simulation using GPU", J. Comput. Chem. 32, 2264-2272, 2011, 査読有

6. R. Cherian, C. Gerard, P. Mahadevan, Nguyen Thanh Cuong, and Ryo Maezono, "Size dependence of the bulk modulus of semiconductors nanocrystals", Phys. Rev. B 82, 235321:1-7, 2010, 査読有

7. J.R. Trail and Ryo Maezono, "Optimum and efficient sampling for variational quantum Monte Carlo", J. Chem. Phys. 133, 174120:1-16, 2010, 査読有

8. Ryo Maezono, N.D. Drummond, A. Ma, and R. J. Needs, "Diamond to beta-tin phase transition in Si within quantum Monte Carlo", Phys. Rev. B 82, 184108:1-7, 2010, 査読有

9. Kenta Hongo, Ryo Maezono, Kenich Miura, "Random number generators tested on quantum Monte Carlo simulations", J. Comput. Chem. 31, 2186-2194, 2010, 査読有

[学会発表] (計 28 件)

1. 前園涼、"金属ナノワイヤにおける分散力の非加算性"、新学術領域「コンピューティクスによる非平衡・相関科学の開拓」、2012/3/16、東京大学本郷キャンパス・工学部六号館、東京
2. 上嶋裕、前園涼、"固体系の量子モンテカルロシミュレーションのGPGPUによる高速化"、第2回計算物質科学イニシアティブ(CMSI)研究会、2012/1/30、東北大学金属材料研究所、宮城
3. 前園涼、"Electron-Hole Bilayer system; Quantum Monte Carlo study"、文部科学省科学研究費補助金・新学術領域研究「動的相関光科学」、「コンピューティクスによる物質デザイン：複合相関と非平衡ダイナミクス」領域合同講演会、2012/1/5、京都大学化学研究所、京都
4. 前園涼、"Non-additivity in metallic tri-wire binding", 3rd Kanazawa U-Jaist joint meeting on computational science, 2011/12/21, 北陸先端科学技術大学院大学, 石川
5. 前園涼、"量子モンテカルロ法による電子状態計算"、文部科学省科学研究費補助金・新学術領域研究「動的相関光科学」、「コンピューティクスによる物質デザイン：複合相関と非平衡ダイナミクス」領域合同講演会、2011/9/26、大阪大学豊中キャンパス、大阪
6. Ryo Maezono, A. Misquetta, N. D. Drummond, and R. J. Needs, "Non-additivity in metallic tri-wire binding", Graphene Roadmap Consultation Workshop: First-Principles Computational Methodologies for Two-Dimensional Materials, 2011/9/14, Lancaster University, Lancaster, UK
7. 前園涼、"量子モンテカルロ法による電子状態計算"、文部科学省「革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ(HPCI)の構築」HPCI戦略分野2「新物質・エネルギー創成」計算物質科学イニシアティブ(CMSI)計算分子科学研究拠点(TCCI)第2回研究会、2011/8/11、理化学研究所 計算科学研究機構(AICS)6階講堂、神戸
8. 前園涼、"量子モンテカルロ法による電子状態計算"、理研セミナー、2011/7/8、理化学研究所 大河内記念ホール、埼玉
9. 前園涼、"多成分量子モンテカルロ法を用いた電子正孔系の研究"、文部科学省科学研究費補助金・新学術領域研究「動的相関光科学」第5回シンポジウム、2011/6/13、京都大学化学研究所、京都
10. 前園涼、"GPUを用いたFMO-QMC計算の高速化"、「物性とアーキテクチャ勉強会」、2011/5/9、東京大学本郷キャンパス・工学部六号館、東京
11. 前園涼、ジョン・トレイル、"量子モンテカルロ計算における分布急尖性とサンプリング法の改良"、日本物理学会2011年春季大会、2011/3/28、新潟大学、新潟
12. Ryo Maezono, "Binding of chromium dimer studied by QMC", 2nd Kanazawa U.-JAIST joint meeting on computational science, 2011/2/14, Kanazawa Univ., Japan Advanced Institute for Science and Technology, 石川
13. Ryo Maezono, "Electronic structure calculation using Quantum Monte Carlo technique", JAIST-CNSI Workshop 2011, 2011/1/13, California NanoSystems Institute, UCLA, Los Angeles, CA, USA
14. 前園涼、"多成分量子モンテカルロ法を用いた電子正孔系の研究"、物性研・CMSI・次世代ナノ情報 合同研究会「計算物質科学の課題と展望」、2011/1/5、東京大学物性研究所、千葉
15. Ryo Maezono, "Binding of chromium dimer studied by QMC", PACIFICHEM 2010, 2010/12/16, Sheraton Waikiki, Hawaii, USA
16. Yukiumi Kita, Ryo Maezono and Masanori Tachikawa, "Quantum Monte Carlo study of the positron binding to alkali metal hydrides", PACIFICHEM 2010, 2010/12/15, Sheraton Waikiki, Hawaii, USA
17. 前園涼、"GPU利用によるフラグメント分子軌道法QMC計算の高速化"、「物性とアーキテクチャ勉強会」、2010/12/8、東京大学本郷キャンパス・工学部六号館、東京
18. 前園涼、"電子ガス中の1原子問題：DMCのアプローチ"、新学術領域A03班合同研究会、2010/11/17、東京大学本郷キャンパス・工学部六号館、東京
19. 前園涼、"多成分量子モンテカルロ法を用いた電子正孔系の研究"、東北大学電気通信研究所共同プロジェクト「次世代第一原理計算手法の開発・応用」、2010/11/10、東北大

学、宮城

20. 前園涼、"量子モンテカルロ計算における分布急尖性とサンプリング法の改良"、計算物質科学イニシアティブ、2010/11/1、東京大学本郷キャンパス・工学部六号館、東京

21. Kenta Hongo, Ryo MAEZONO, Kenich Miura, "Random Number Generators Tested on Quantum Monte Carlo Simulations", The Joint International Conference of the 7th Supercomputing in Nuclear Application and the 3rd Monte Carlo, 2010/10/20, Japan Atomic Energy Agency, 東京

22. 前園涼、グエン・タン・クン、"拡散モンテカルロ法による銅表面への一酸化炭素の吸着に関する研究"、日本物理学会 2010 年秋季大会、2010/9/26、大阪府立大・なかもずキャンパス、大阪

23. Tomoharu Terashima, Ryo Maezono, "Acceleration of Quantum Monte Carlo simulation using GPU", Psi-k 2010 Conference, 2010/9/12, European Psi-k network, Berlin, Germany

24. 前園涼、"量子モンテカルロ法による電子状態計算"、若手研究者の分野交錯研究推進プログラム「ナノスケールの原子構造および電子状態とその変化の理論的設計」、2010/9/1、国際高等研究所、京都

25. 前園涼、"多成分量子モンテカルロ法を用いた電子正孔系の研究"、DYCE 理論ワークショップ、2010/8/9、大阪大学豊中キャンパス (理学部 H701 室)、大阪

26. Ryo Maezono, "Recent studies about bindings by QMC (I) (Cr-dimer and Si-cluster). 2. Recent studies about bindings by QMC (II). (DNA stacking, and Cu-surface)", Quantum Monte Carlo study group meeting, 2010/8/4, Institute of Atomic and Molecular Sciences, Academia SINICA, Taiwan

27. Ryo Maezono, "Weak interactions treated by DMC", Quantum Monte Carlo in the Apuan Alps VI, 2010/7/29, The Towler Insitute, Tuscany, Italy

28. 北幸海、前園涼、立川仁典、"アルカリ金属水素化物への陽電子吸着に関する理論的研究"、第 13 回理論化学討論会、2010/5/23 北海道大学学術交流会館、北海道  
〔図書〕(計 2 件)

1. K. Hongo and R. Maezono, "A Quantum Monte Carlo Study of the Ground State Chromium Dimer", Chapter 8, pp.91-99 (2012), in ACS monograph "Advances in Quantum Monte Carlo", (ACS Symposium Series, Vol. 1094), Shigenori Tanaka, Stuart M. Rothstein, William A. Lester, Jr., eds. (ISBN13; 9780841227507), American Chemical Society

2. 前園涼、「量子モンテカルロ法」、§ I. 2. 3、pp. 49-65、(2011) 赤井久純、白井光雲編「密度汎関数理論の発展とマテリアルデザインへの応用」、シュプリンガー・ジャパン/丸善、分担執筆

〔産業財産権〕

○出願状況 (計 0 件)

○取得状況 (計 0 件)

〔その他〕

ホームページ等

6. 研究組織

(1) 研究代表者

前園 涼 (MAEZONO RYO)

北陸先端科学技術大学院大学・情報科学研究科・准教授

研究者番号：40354146

(2) 研究分担者；無

(3) 連携研究者；無