

二国間交流事業 共同研究報告書

令和6年4月5日

独立行政法人日本学術振興会理事長 殿

[日本側代表者所属機関・部局]
名古屋大学・トランスフォーマティブ生命分子研究所
[職・氏名]
教授・柳井 毅
[課題番号]
JPJSBP 120229601

1. 事業名 相手国: ベトナム (振興会対応機関: VAST) との共同研究

2. 研究課題名

(和文) 人工ニューラルネットワークの開発と分子光化学への応用

(英文) Development and applications of an artificial neural network method to investigate molecular photochemistry

3. 共同研究実施期間 2022年4月1日 ~ 2024年3月31日 (2 年 0 ヶ月)【延長前】 年 月 日 ~ 年 月 日 (年 ヶ月)

4. 相手国側代表者(所属機関名・職名・氏名【全て英文】)

International University, Vietnam National University in Ho Chi Minh City
(VNU-HCM) • Lecturer • Tran Lan

5. 委託費総額(返還額を除く)

本事業により執行した委託費総額		4,419,704 円
内訳	1年度目執行経費	2,375,000 円
	2年度目執行経費	2,044,704 円
	3年度目執行経費	- 円

6. 共同研究実施期間を通じた参加者数(代表者を含む)

日本側参加者等	12 名
相手国側参加者等	4 名

* 参加者リスト(様式 B1(1))に表示される合計数を転記してください(途中で不参加となった方も含め、全ての期間で参加した通算の参加者数となります)。

7. 派遣・受入実績

	派遣		受入
	相手国	第三国	
1年度目	0	2	0 (0)
2年度目	0	1	0 (0)
3年度目			()

* 派遣・受入実績(様式 B1(3))に表示される合計数を転記してください。

派遣: 委託費を使用した日本側参加者等の相手国及び相手国以外への渡航実績(延べ人数)。

受入: 相手国側参加者等の来日実績(延べ人数)。カッコ内は委託費で滞在費等を負担した内数。

8. 研究交流の概要・成果等

(1)研究交流概要(全期間を通じた研究交流の目的・実施状況)

量子化学計算に基づく物質シミュレーションは、近年、物質の創成研究において重要な役割を担っている。本研究は、量子化学計算の中核となる多電子波動関数を算出する新規計算法に関して方法論開発を行う。当研究室では最近、人工ニューラルネットワーク(ANN: Artificial Neural Networks)に基づく機械学習のアルゴリズムを利用する波動関数計算法(ANN 法)を開発してきた(P.-J. Yang, M. Sugiyama, K. Tsuda, and T. Yanai, J. Chem. Theory Comput. **16** (6), 3513-3529 (2020))。交流先の相手国の研究者 Tran 博士との交流により、本手法の拡張を目指した。

(2)学術的価値(本研究交流により得られた新たな知見や概念の展開等、学術的成果)

相手国の研究者は励起状態に関する理論研究を活発に行っている若手研究者である。近年、励起状態のモンテカルロ計算の最適化に関する新手法の提案を行っている(L. N. Tran, A. R. Shea and E. Neuscamman, J. Chem. Theory Comput. **15**, 4790, 2019)。本交流では、当研究室の ANN 法と励起状態のモンテカルロ計算の最適化法を融合する理論的手法の構築が試みられた。高精度第一原理量子化学計算を高速化・大規模化する技術の基盤となることが期待されるものである。

(3)相手国との交流(両国の研究者が協力して学術交流することによって得られた成果)

既存の基底状態用のプログラムコードを両グループで共有し、オンライン上でのディスカッションでアイデアの共有がなされた。各グループは独立して直にコードを改変し、励起状態理論のプロトタイプを実装した。拡張理論に関する定式化について両グループ間で電子メール・オンライン会議にて議論を進めた。

(4)社会的貢献(社会の基盤となる文化の継承と発展、社会生活の質の改善、現代的諸問題の克服と解決に資する等の社会的貢献はどのようにあったか)

相手国ベトナムにて 2023 年 2 月 19～23 日第 10 回 APCTCC (アジア環太平洋理論計算化学)国際学会が開かれ、アジア環太平洋諸国の理論・計算化学者を集めた国際会議が開かれた。相手国代表 L. N. Tran 博士は同会議の組織員として貢献した。当研究室から2名の研究者が参加し、招待講演を行うと同時に研究交流がなされた。

(5)若手研究者養成への貢献(若手研究者養成への取組、成果)

本研究での開発に当研究室の大学院生が参画した。研究成果として、人工ニューラルネットワーク法の量子計算への展開について査読論文1報が出版された。カナダ開催の国際計算化学学会(WATOC2022)に大学院生を派遣し、学会発表および国際的交流が行われた。WATOC2022 は、量子化学分野の最大規模の国際会議の一つとして位置づけられ、12 講演者による基調講演、252 講演者による招待講演、180 講演者による招待コミュニケーション講演、数百件のポスター講演が実施された。コロナ禍でありオンライン開催が予定されるという認識であり旅費に含めていなかったが、現地開催となり計画を変更し出席することになった。本研究課題である量子化学と機械学習の融合研究は最重要な注目トピックとして扱われており、本二国間共同研究の成果・進捗報告及び情報収集という観点で本会議への参加が必要であり、実施計画を進めるうえで有益であった。研究代表は若手研究者である当研究室の研究者がベトナムでの学会に参加し、若手育成に繋がる取り組みがなされた。

(6)将来発展可能性(本事業を実施したことにより、今後どのような発展の可能性が認められるか)

相手国の研究者は励起状態に関する理論化学的研究を活発に行っている若手研究者である。また、同研究者は、環境化学・大気化学に関連するシュウ酸鉄の光触媒反応についても研究を行ってきており、成果を上げてきている。この交流を通じて、我が国の研究者の国際性が向上するだけでなく、先端的な理論手法の吸収が促進され、我が国の若手研究者養成への貢献に繋がる足がかりとなると考えられる。

(7)その他(上記(2)～(6)以外に得られた成果があれば記載してください)

研究期間中、相手国代表 L. N. Tran 博士は、Vietnam National University in Ho Chi Minh City の講師として昇進した。