

論文審査の要旨および学識確認結果

報告番号	甲 乙	第 号	氏 名	岡田 清志郎
論文審査担当者：				
主査	慶應義塾大学教授	博士（工学）	泰岡 顕治	
副査	慶應義塾大学准教授	Ph. D.	安藤 景太	
	慶應義塾大学准教授	Ph. D.	彭 林玉	
	慶應義塾大学准教授	博士(工学)	荒井 規允	
(論文審査の要旨) 学士（工学）、修士（工学）岡田清志郎 君の学位請求論文は「分子シミュレーションに特化した効率的な乱数生成手法の提案と深層学習を用いた乱数生成の有効性の検討」と題し、10 章から構成されている。 近年の計算機性能の向上とそれに合わせた数値計算手法の発展に伴い、分子シミュレーション分野においても粗視化手法を組み合わせた並列化計算が主流となっている。粗視化手法による分子シミュレーションは、粗視化した際に失われる現象を補うために乱数を利用した手法が用いられ、並列化における高速乱数手法が求められている。また、統計力学に基づく確率分布をサンプリングすることにより、効率的に対象とする系の統計量を得る分子シミュレーションが行われており、効率的な乱数発生手法の確立が重要となる。さらに、乱数の性質と計算コストのバランスを改良することは重要であり、計算コストの観点から乱数生成手法そのものの開発も求められている。本論文では、分子シミュレーションに着目し、各数値計算手法に特化した乱数生成手法を提案し、従来以上の計算効率を達成する乱数生成手法の提案を行っている。 第 1 章では本論文の背景および目的、構成を、第 2 章では分子シミュレーションにおける乱数生成について、第 3 章では分子シミュレーションと乱数生成法に関する理論について説明している。第 4 章から第 9 章に結果を示している。 第 4 章では、散逸粒子動力学法(DPD 法)へ与える暗号学的ハッシュ関数型乱数生成手法による影響の調査と改善を行っている。DPD 法を用いた大規模並列計算をする際には、暗号学的ハッシュ関数を用いた乱数生成手法が近年利用されてきたが、計算コストが大きいことが課題であった。本章では、乱数シード値により複雑な bit 列を持つ数値を利用することで、乱数生成に必要なハッシュ関数の軽量化を達成した。第 5 章では、DPD 法のための新規乱数生成手法の開発を行っている。DPD 計算の過程で常に生成される数値の乱雑性を利用することで、従来のハッシュ関数の約 62 倍の速度で乱数を生成することに成功している。生成された乱数は乱数検定に一般的に用いられる NIST 乱数検定に合格することを示した後、この手法を利用することによる計算精度の変化を複数の観点から評価し、精度に影響なく計算が実行できることを示している。第 6 章では、モンテカルロ(MC)分子シミュレーションのための新規乱数生成手法の開発を行っている。第 5 章で開発した数値計算過程で副次的に生成される数値の乱雑性を利用することによる乱数生成手法を、MC 法にも適用している。乱数を多用する MC 法において、MC 計算そのものの過程で生じる数値の乱雑性を利用し、乱数生成することで、極めて少ない演算で良質な乱数を生成できることを示した。 第 7 章では、深層モデルを活用した乱数生成手法について、第 8 章では深層学習に関する理論について説明している。第 9 章では、深層生成モデルを利用した乱数生成手法の開発を行っている。様々な計算手法に特化した乱数生成手法を開発することは容易ではなく、専門家の高度な知見に基づく開発が必須である。そこで、本章では深層学習を利用したデータ駆動型の乱数生成手法を実現することで、将来的な新規乱数生成アルゴリズム開発の可能性を示している。 最後に第 10 章で研究全体に関する結論を述べている。 以上要するに、本論文の著者は、分子シミュレーションに特化した効率的な乱数生成手法と深層学習を用いた乱数生成の有効性に関して研究を行った。その成果は、分子シミュレーションにおける乱数生成手法を提案するだけでなく、乱数を用いたシミュレーション研究に寄与するものである。また、深層学習を用いた乱数生成については、深層学習を利用したデータ駆動型の新規乱数生成手法の開発に貢献するものであり、工学分野への応用が期待できる。よって、本論文の著者は博士(工学)の学位を受ける資格があるものと認める。				
学識確認結果	学位請求論文を中心にして関連学術について上記審査委員で試問を行い、当該学術に関し広く深い学識を有することを確認した。 また、語学（英語）についても十分な学力を有することを確認した。			