

MERIT 長期海外派遣 報告書(2019.10.7-2019.11.21)

理学系研究科物理学専攻

永井瞭

概要

自身の研究テーマは機械学習という情報科学由来の手法と、計算物質科学において重要な手法である密度汎関数を融合させたものです。しかし、このような研究手法は最近現れたばかりで、両手法に対して深い理解を持つ研究者は非常に限られています。そこで、海外派遣制度を利用して、密度汎関数理論の基礎研究の大家であると同時に、機械学習を取り込んだ手法開発も精力的に行っている Burke 教授のもとに訪問し、研究を行いました。

研究内容

これまで密度汎関数は物理的条件などを慎重に組み合わせて手探りの開発が行われていました。一方、自身の研究では、機械学習手法を用いればこれらの既存の汎関数と同等かそれ以上の精度を持つ汎関数を、高精度波動関数理論のデータから機械的に構築できることが示されました。しかし、提示した手法にはまだまだ不明な点が多く、より高精度化するにはどのようなアプローチが適切か不明瞭でした。そこで、Burke 教授からこれらの不明な点を分析するための提案を頂き、非常に興味深い方法で手法の性質を分析しました。結果として、手法の精度向上に必要な様々な条件が判明し、より良い汎関数開発のために重要な洞察を得ることができました。

研究以外の活動

なりゆきで Burke 教授の DFT の授業を受けることになったのですが、さすが本元だけあって非常にレベルが高く、並大抵のテキストには書かれていないような基礎理論に関する深い理解を得ることが

できました。

生活面では、アーバインは大学関係者と富裕層が多く、人々のマナーや教養の平均が非常に高い街だと感じました。また、土地が広大なぶん生活には車がほぼ必須で、学生や職員のほとんどはキャンパス内の寮・家に住むか車で通っていました。

謝辞

海外派遣に当たり快く受け入れてくださった Kieron Burke 教授と Burke group の皆様、旅費の支援をしてくださった物性研究所海外学生派遣プログラムおよび杉野研究室、そして事務手続きをしてくださった国際交流室の皆様感謝いたします。



ラグーナ・ビーチと常時快晴なカリフォルニアの空