

計算科学アライアンス 海外派遣報告書

東京大学大学院理学系研究科物理学専攻
桂研究室 博士1年 吉岡信行

はじめに

2018年2月18日より3月11日にかけての3週間、計算科学アライアンスの海外派遣プログラムを利用して、マールブルク(ドイツ)・チューリッヒ(スイス)・ロサンゼルス(アメリカ)に滞在した。その主な目的は三者三様に異なるものの、いずれの地も、物性物理の分野で最前線を走る研究者との議論に溢れ、私の研究生活にとって得難い糧となった。それぞれの期間について、順に報告する。

2/18 - 2/24 マールブルク：街とスクール

グリム兄弟生誕の地であるドイツの都市マールブルクでは、[FOR1807 Winter school](#)に参加した。ドイツ・スイス・オーストリアによる共同研究プロジェクトの一環として、大学院生・ポスドクを対象に、入門的講義やハンズオンセッションなどが設けられた。内容はテンソルネットワーク・量子モンテカルロ・量子散逸系・機械学習などを網羅している。俯瞰的な座学と、実践的なコード実行のバランスに優れ、知識の深化を伴う、非常に充実したスクールであった。また、ポスターセッションでは自身の研究を発表する機会を頂き、好評に博した。

コーヒータイムやランチタイムなどの休憩時間が、国際的研究会やスクールでは贅沢に用意されている。物理学者の食事時間が長いためではなく、参加者間の議論を促すためだ。この時間を利用し、講師の一人である Lei Wang と議論した。彼は機械学習と物性物理の横断的領域にて、先駆的な研究を数多く行なう、パイオニアの一人である。深層ボルツマンマシンによる波動関数構築・シミュレーションの効率化、そしてさらに発展的な方向性として、Google 発の技術「[WaveNet](#)」の応用など、多岐にわたるトピックについて情報交換・コメントを頂いた。執筆時に進行中の研究プロジェクトが、Lei Wang との議論から大いに



マールブルク城。グリム兄弟を称え、シンデレラのガラス(?)の靴が置かれている。

インスピレーションを得ていることを鑑みても、非常に実りある1週間だった。

2/24 - 3/3 チューリッヒ：議論の渦

上述のウィンタースクール終了後、鉄道に揺られ、チューリッヒに到着する。滞在を決めた理由は、自身の研究分野で最も活発な地域の一つだからだ。多くの研究者が機械学習の応用に興味を持っており、[オープンな輪講](#)も行われている。滞在中には私も発表を担当した。自己相関を下げるような有効ハミルトニアン構築によって、モンテカルロシミュレーションの効率化を実現した論文2編を紹介した。本報告書の執筆時点では公開されていないが、解説のブログ記事も近日中に記載される予定である。

短い期間にも関わらず、ホストとして滞在接受入れてくださった、チューリッヒ大学の Neupert グループには、[自身の研究に関するセミナー](#)の機会まで頂いた。ニューラルネットワークを用いた、乱れたトポロジカル超伝導体の相判定だ。機械学習の一般的な問題意識、手法に内在する物性

物理学の親和性などを導入した後、自身の研究での具体的な課題と解決策について紹介した。

さらに滞在を有益にしたのは、大学院生・サバティカルで滞在中の Prof. Claudio Chamon (ボストン大学)・ETH Zurich の研究者たちと重ねた議論だ。特に Neupert グループミーティングで目の当たりにした、学生-教員間の対等さ、それに起因する議論の活発さと発想の柔軟さには、驚嘆を禁じ得なかった。また、私自身の研究のアイデアが議題とされた際には、方向性・発展性が明確になる喜びと、共同研究の萌芽への期待の高まりが感じられた。

3/3 - 3/10 ロサンゼルス：最大の学会

物性物理の研究者にとって、3月はアメリカ物理学会([APS March Meeting](#))の季節である。世界中のホットピックが共有される。私が口頭発表したセッションを始めとして、機械学習×物性物理の会場は満員御礼が続き、[入場制限すらみられた](#)。自身の関わる分野の注目度・湧出するアイデアへの昂揚感と共に、流れの速さへの焦燥感も同時に覚えることとなった。

Evert van Nieuwenburg(Caltech)との議論は特に印象深く、示唆的である。Invited speaker としての講演で、彼は[再帰ニューラルネットワーク](#)を導入し、物性物理への応用を紹介した。ニューロンにデータを「記憶」させることで、時系列データもしくは物理系の時間発展を紐解く道具として利用できるため、幅広い可能性を模索する価値がある。実験データのノイズ除去の可能性の議論や、機械学習分野での発展的なアイデアの情報交換など、有益な時間を過ごすことができたと感じている。

おわりに

上に述べた議論・学会発表・知的刺激はほんの一部であり、その全ては到底列举できません。そんな素晴らしいも無茶な出張計画を可能にくださった、計算科学アライアンスの海外派遣プログラムに御礼申し上げます。特に、事務手続きを再

三に渡りご教示してくださった大久保先生、書類に対応くださった事務の皆様に、この場を借りて深く感謝致します。どうもありがとうございました。