

物性研に着任して

物質設計評価施設 森田 悟史

2013年7月1日付けで物質設計評価施設川島研究室の助教に着任いたしました森田悟史(もりたさとし)と申します。この場をお借りしまして、簡単に自己紹介とこれまでの研究紹介をさせていただきます。

私は東京工業大学物性物理学専攻の西森秀稔教授の元で、学位を取りました。修士課程時代は、スピングラス模型の解析研究を行いました。相図上のある領域(西森ライン)で成立する関係式を駆使して証明した相関不等式が、最初の研究成果です。博士後期課程に進学してからは、量子アニーリングと呼ばれる量子計算アルゴリズムの一種について解析的な研究を行いました。最近、カナダのD-Wave社が量子アニーリングを実装したというニュースをご存じの方も多いかと思います。量子アニーリングは、古典的な焼きなまし法と同様に、解きたい問題に対応したハミルトニアン基底状態を作ることで、最適化問題の解を求める手法です。焼きなまし法は温度揺らぎを用いて状態を遷移させますが、量子アニーリングでは磁場などの外部パラメータによって量子揺らぎを導入します。非常にゆっくりとパラメータを動かすことで、断熱遷移によって状態を目的の基底状態へと到達させます。あまり急速に動かすと非断熱遷移により励起してしまい、正しい解を得られません。どれくらいゆっくりとパラメータを動かせば正しい答えに到達できるかを議論し、焼きなまし法よりも速く収束するアニーリングスケジュールの上限を解析的に求めました。

博士号取得後は、イタリア・トリエステにあるSISSAのGiuseppe Santoro教授の元で2年間、東京大学物理学専攻の宮下精二教授の元で1年間、量子アニーリングと関連する話題について研究を行いました。学生時代は主に解析的な計算を用いていましたが、このころから徐々に数値計算へ軸足を移しています。その後、東京大学物理工学専攻の今田正俊教授の元で、CMSI重点研究員として約2年間過ごしました。今田グループでは、第一原理計算に基づいた物質の低エネルギー有効模型を導出し、これを精度よく解析することでスピン液体などの新奇量子相の解明を目指しています。私は、後半部分の有効模型の高精度解析に用いられる多変数変分モンテカルロ法の改善、応用を進めてきました。この手法は変分原理に基づいた強相関電子系における基底状態計算手法で、多数の自由度を持つ変分波動関数を用いることで様々な相を表現できます。また、特定の量子数への射影演算子を導入することで、精度の高い計算が可能となっています。これまでの研究とはアプローチの仕方が全く異なるのですが、個人的には楽しんで取り組んでいました。着任当時はスーパーコンピュータ「京」が立ち上がったばかりで、「京」でプログラムを動かすことが最初の仕事となりました。頻りに神戸へ赴きコードの最適化、大規模並列化を行い、最終的には元のコードから約60倍もの高速化を達成することができました。その際には、計算物質科学センター神戸分室の皆様大変お世話になりました。

今後は物性研究所の一員として、主に数値計算手法の開発を通じて物性研究に貢献できるよう努力してまいります。まずは、変分モンテカルロ法の開発で培ってきた経験を活かして、川島研究室全体で取り組んでいるテンソルネットワークを用いた一連の手法の研究開発を行いたいと思います。若輩者ですが、ご指導ご鞭撻の程をよろしく願いたします。



