

ISSP 学術奨励賞を受賞して

現・株式会社 Preferred Networks リサーチャー
元・杉野研究室 博士課程 永井 瞭

この度、物性研究所所長賞という名誉ある賞を賜り、大変光栄に感じております。受賞の対象となったテーマは、私が大学院生時代を通して研究し続けてきた「密度汎関数理論の機械学習による構築」というものです。受賞に至るほどの成果を上げられたのは、ひとえに物性研での大学院生生活が恵まれているおかげでした。スパコン等の計算資源はとても潤沢でしたし、海外研究留学にも物性研のプログラムで行くことができました。また、議論したいときにいつでも応じてくれる教職員に囲まれていたことがありがたかったです。密度汎関数理論にまつわる技術は多岐にわたっており、少し文献を読んだだけでは分野の全体を把握できないものです。私も習いはじめた頃にはわからないことが多すぎてよく壁にぶつかっていたのですが、すぐにその道のベテランの方々からの的確に必要なことを教えてもらい、おかげで道が開けたことが何度もありました。また、柏自体がのんびりした場所ですし、理論系の研究室でもどっしり腰を据えて研究に望む雰囲気が全体的にあったおかげで、大規模な研究に集中して打ち込むことがしやすい環境でもあり、これもまた自分に合っていたと思います。こういった要素は慣れてしまうと当たり前と感じてしまうものですが、他の機関の現状を聞くに決して当たり前とは限らないことを知り、大変恵まれていたと感じました。この環境を維持・向上するために日頃から努力して下さっている物性研の皆様には感謝が尽きません。

受賞内容の研究について簡単に紹介します。密度汎関数理論とは、物質中の電子状態を求めることができる理論で、その計算精度とコストのバランスから実用的な物性計算に幅広く用いられています。しかし、その理論には不完全な部分があり、そのせいで物性計算に致命的な(定性的な評価を誤ってしまうような)誤差が乗ることがあります。その不完全を機械学習という情報理論分野から現れた技術を使って埋めることが、私の研究テーマです。機械学習というと今でこそ多くの分野に浸透した技術ですが、私が手付け始めた頃は物理学や物質シミュレーションへの応用という点では黎明期でした。その中で、機械学習を組み合わせ

せることで密度汎関数理論を系統的に精度改善することができるフレームワークを示したことで、多くの研究者グループから反響を頂くに至りました[1-3]。今回、そういった私の研究活動を身近なコミュニティから評価していただいたことでとても嬉しく思っています。

実は、私は願望として「密度汎関数理論などの第一原理計算技術の基礎理論・技術を新たに研究しようとする大学院生・研究者が増えてほしい」と常日頃から考えています。日本では第一原理計算の結果を使った物性評価の研究は盛んですが、その第一原理計算自体の性能向上をおこなっている人はそこまで多くない印象です。第一原理計算の開発が盛んだった時代がかつてあったのですが、その時期に一気に理論や技術が高度化しすぎて、傍目からはすでに固まった技術に見えてしまっているのが現状だと思います。そのため、ある程度の期間で成果を出さなければならない大学院生などからは敬遠される傾向にあるのだと思っています。そういった面は確かにあるのですが、実際にはこの分野にはまだまだ改良すべき点が多くあり、より多くの人がこの分野に携わることで今後解決されていくのではないかと期待しています。私自身、抽象性の高い理論や数値技術の改良が、現実世界の具体的な物質の計算精度改善につながる楽しさがあるこの分野が好きで、より多くの人にこの楽しさを共有したいという願望もあります。今回の受賞がきっかけで、計算の基礎理論改善にもまだやれることがあるということを知って貰えるきっかけになればいいと思います。

今現在は民間企業で物質科学関連のシミュレーション手法の研究開発を行っております。アカデミアとは異なる環境ですが、相変わらず新しい技術を追い求める仕事も行っております。再び物性研の皆様に興味を持ってもらえる計算技術を提案できるよう、今後も努力していきたいと思っております。

- [1] R. Nagai, R. Akashi and O. Sugino, “Completing density functional theory by machine learning hidden messages from molecules”, npj Comput. Mater. **6**, 43(2020).
- [2] Y. Suzuki, R. Nagai, and J. Haruyama, “Machine learning exchange-correlation potential in time-dependent density-functional theory”, Phys. Rev. A, **101**, 050501, (2020).
- [3] R. Nagai, R. Akashi and O. Sugino, “Machine-learning-based exchange correlation functional with physical asymptotic constraints”, Phys. Rev. Res, **4**, 013106 (2022).