

TA(澤端 日華瑠)の研究紹介

2019.11.26 情報・計算科学基礎Q3

数物科学専攻 博士後期課程2年 澤端 日華瑠

指導教員 石井 史之

- 自己紹介
- 計算実験コースについて
- 簡単に計算物性研究室の研究紹介
- 計算実験コースを選んで良かった点

- 自己紹介
- 計算実験コースについて
- 簡単に計算物性研究室の研究紹介
- 計算実験コースを選んで良かった点

自己紹介(1) -スペック-



博士後期課程2年(大学8年目)

2016 金沢大学理工学域長賞

2016 - 2018

吉田育英会マスター21

2018 - 現在

GSリーディングプログラム分野融合型

数物科学グローバル人材育成コース

2020 - 2021 (予定)

日本学術振興会特別研究員(DC2)

←**学部1年生のときの写真**

自己紹介(1) -スペック-



研究 (指導教員 石井先生)

「トポロジカル物質の第一原理計算」
→ 物質を頑張って計算してる

使える(?)プログラミング言語

C/C++, Python, Bash script,
Fortran, Javascript, Julia etc.

興味がある数学の分野

位相幾何学、離散幾何学

自己紹介(2) -普段の生活-

先週1週間

月 火 水 木 金

先生と議論 セミナー	プログラムの 整備 計算科学TA	セミナー プログラムの 整備	共同研究者と議論 (遅刻) プログラムの マニュアル作成	先生と議論 (の予定が寝落ち) 物理学実験TA 共同研究の 計算をスパコンに投入
-------------------	----------------------------	--------------------------	---	--

土 日

12時間睡眠	セミナーの 発表準備 プログラミング の勉強(競プロ)
--------	--

大学院(研究室)は

- 1. 先生・共同研究者と議論、資料作成
- 2. プログラムを作る、直す、テストする
- 3. 物質を計算する、論文を調べる、データを纏める
- 4. 学会発表、論文執筆

自己紹介(2) -普段の生活-

月 火 水 木 金

寝てる	寝てる	セミナー	寝てる	物理学実験TA 雑用関係
セミナー	計算科学TA	ちょっと研究	本腰入れて研究	

土 日

12時間睡眠	好きな勉強
--------	-------

- 大学院(研究室)は
- 1. 先生・共同研究者と議論、資料作成
 - 2. プログラムを作る、直す、テストする
 - 3. 物質を計算する、論文を調べる、データを纏める
 - 4. 学会発表、論文執筆

自己紹介(3) -学会とか論文とか-

2016 - 現在まで

参加した学会+勉強会

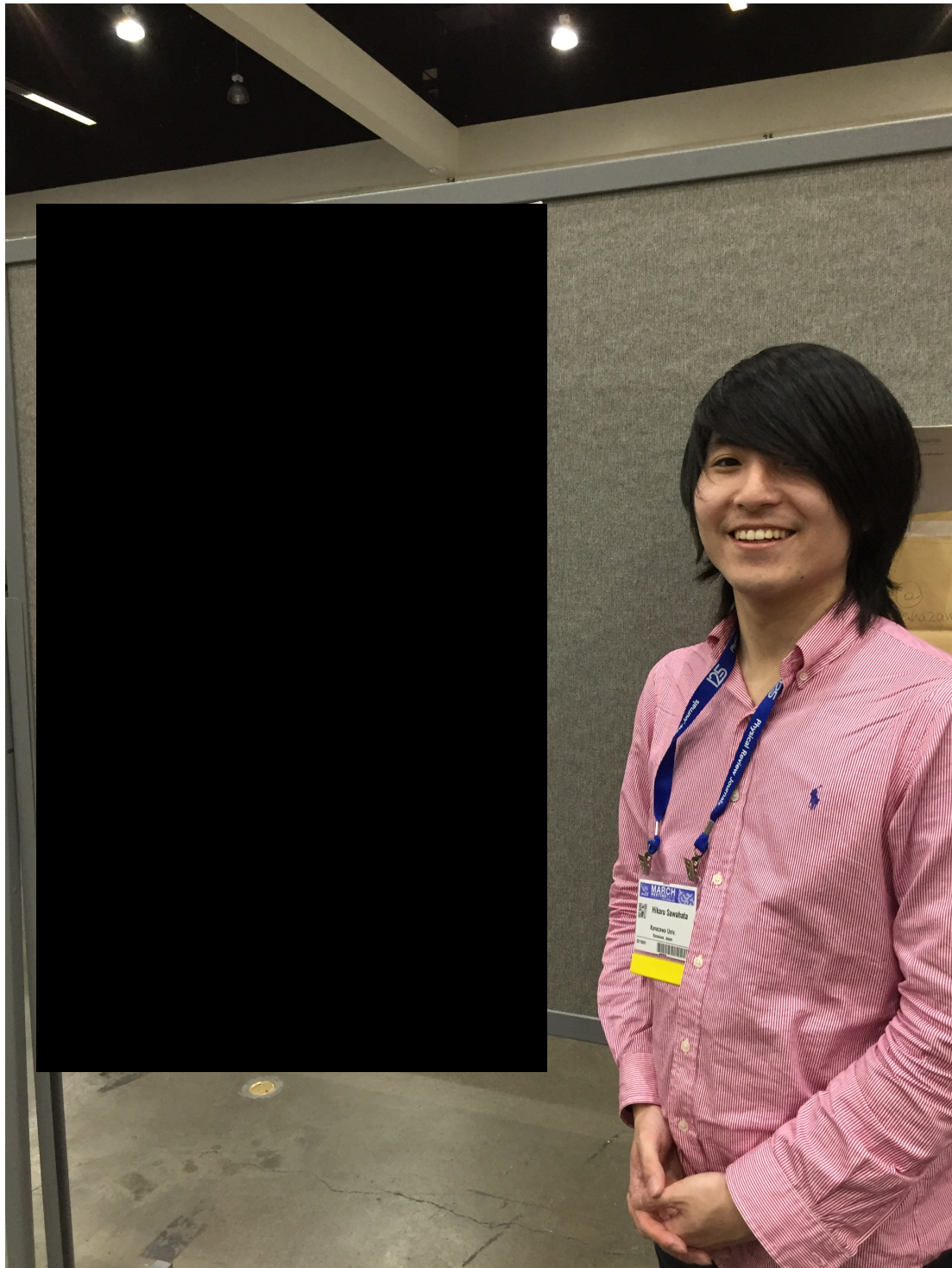
14回 + 4回

国内: 東京、大阪、京都、

名古屋、筑波、岐阜、

神戸、仙台

国外: アメリカ、中国、韓国



←2018年アメリカのロサンゼルスにて

自己紹介(3) -学会とか論文とか-

ロサンゼルスでのデニーズで見波君、山口君と



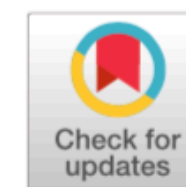
自己紹介(3) -学会とか論文とか-

Applied Physics Express **12**, 075009 (2019)

<https://doi.org/10.7567/1882-0786/ab25d3>

LETTER

Electric-field-induced Z_2 topological phase transition in strained single bilayer Bi (111)



Hikaru Sawahata^{1*}, Naoya Yamaguchi¹ , and Fumiyuki Ishii^{2*}

¹Graduate School of Natural Science and Technology, Kanazawa University,

²Nanomaterials Research Institute, Kanazawa University,

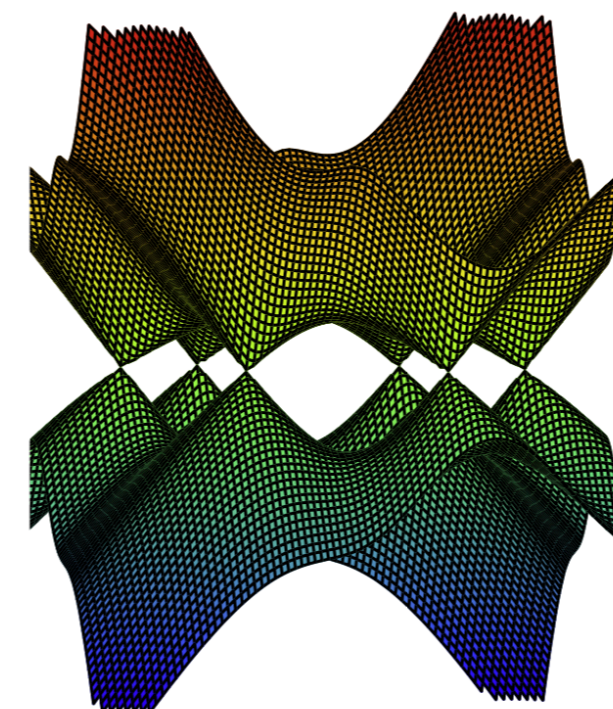
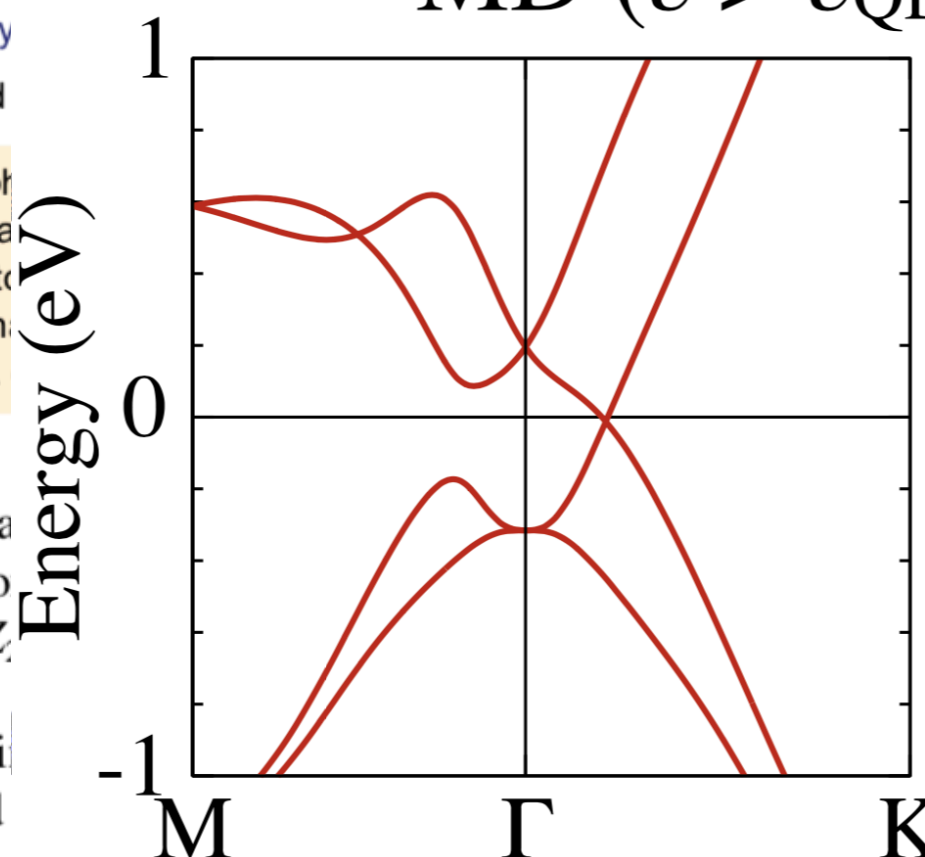
*E-mail: sawahata@cphys.s.kanazawa-u.ac.jp; ishii@cphys.s.kanazawa-u.ac.jp

Received May 15, 2019; revised May 29, 2019; accepted May 29, 2019

For controlling critical electric fields of the topological phase transition system through first-principles calculations. We found that the topological phase can be switched to a trivial insulator by the electric-field-induced topological phase transition. This transition could be applied to novel spintronic devices.

The electric-field-driven Z_2 topological phase transition plays an important role in the application of topological materials^{1,2)} to novel devices. The Z_2 topological phase has dissipation-free spin currents at the Fermi level, and its special edge state is robust against magnetic impurities. If the topological phases could

MD ($\varepsilon > \varepsilon_{\text{QBT}}, E = E_c$)



- 自己紹介
- 計算実験コースについて
- 簡単に計算物性研究室の研究紹介
- 計算実験コースを選んで良かった点

計算実験コースについて(1)

そもそも何故計算なんてやる必要があるの…?



"The fundamental laws necessary for the mathematical treatment of large parts of physics and the whole chemistry are thus fully known, and the difficulty lies only in the fact that application of these laws leads to equations that are too complex to be solved."

ポール・ディラック

Proc. Roy. Soc. (London) , A123, 714 (1929).

計算実験コースについて(1)

そもそも何故計算なんてやる必要があるの…?



物理法則は完全にわかっている、

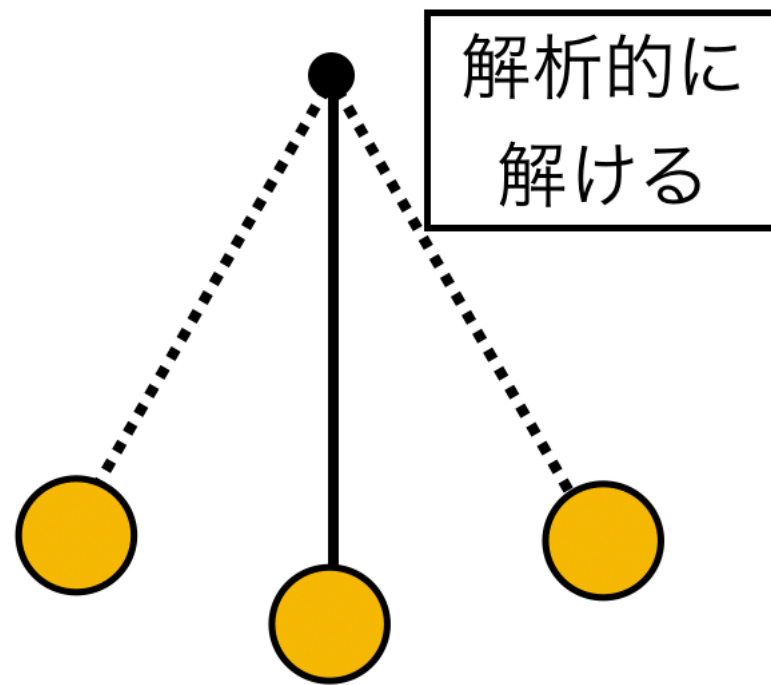
ただし厳密に適用すると

複雑すぎて解けない

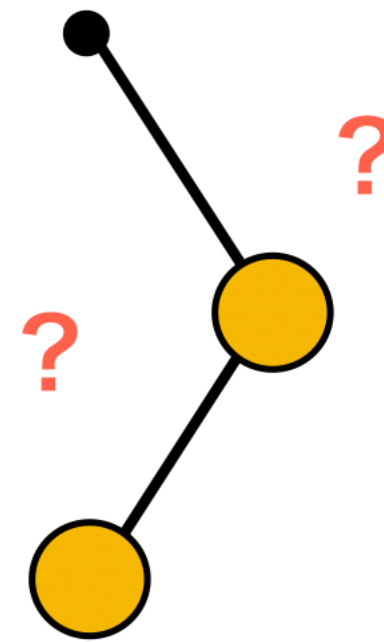
ポール・ディラック

計算実験コースについて(1)

有名な振り子の問題



単振り子



2重振り子

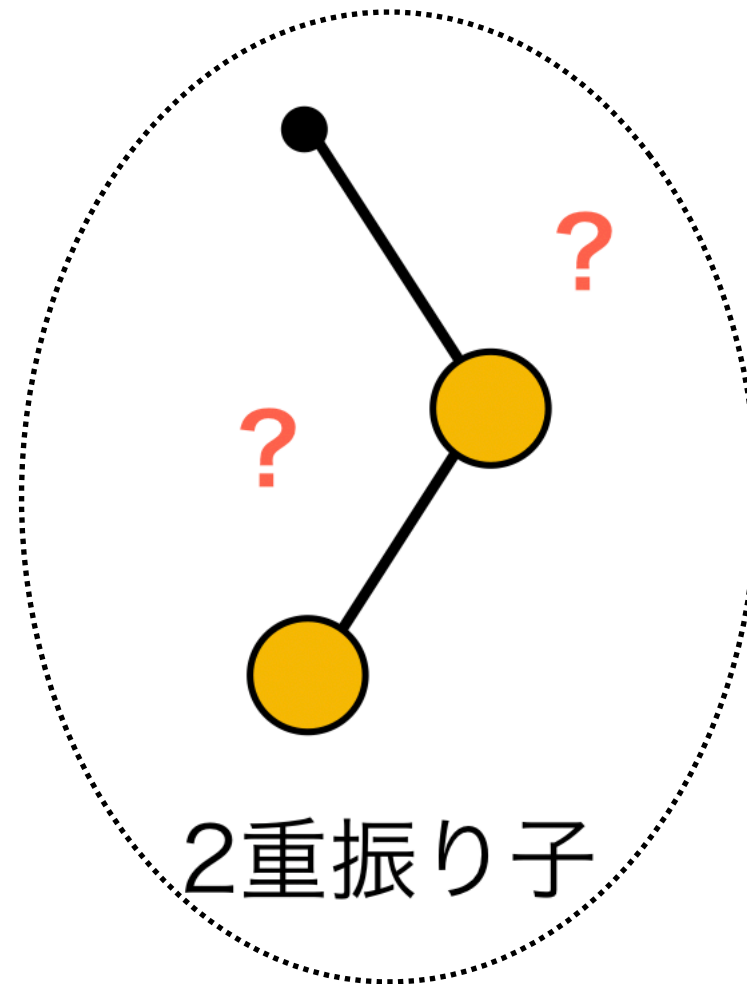
ちょっと複雑になるだけで解けない

→世の中の問題は殆ど全てが複雑な問題

計算実験コースについて(1)

有名な振り子の問題

計算機(コンピュータ)
を使えば
挙動を予測することが
出来る！！



※Q4で習う数値積分を使って解ける

計算実験コースについて(2)

2年3年の授業(授業がいっぱいあって大変?)

物理学の理論

力学、電磁気学

量子力学、

熱統計力学

計算の理論、実習

計算実験、数値計算

計算機言語

計算実験コースについて(2)

2年3年の授業(授業がいっぱいあって大変?)

物理学の理論

力学、電磁気学

量子力学、

熱統計力学

計算の理論、実習

計算実験、数値計算

計算機言語

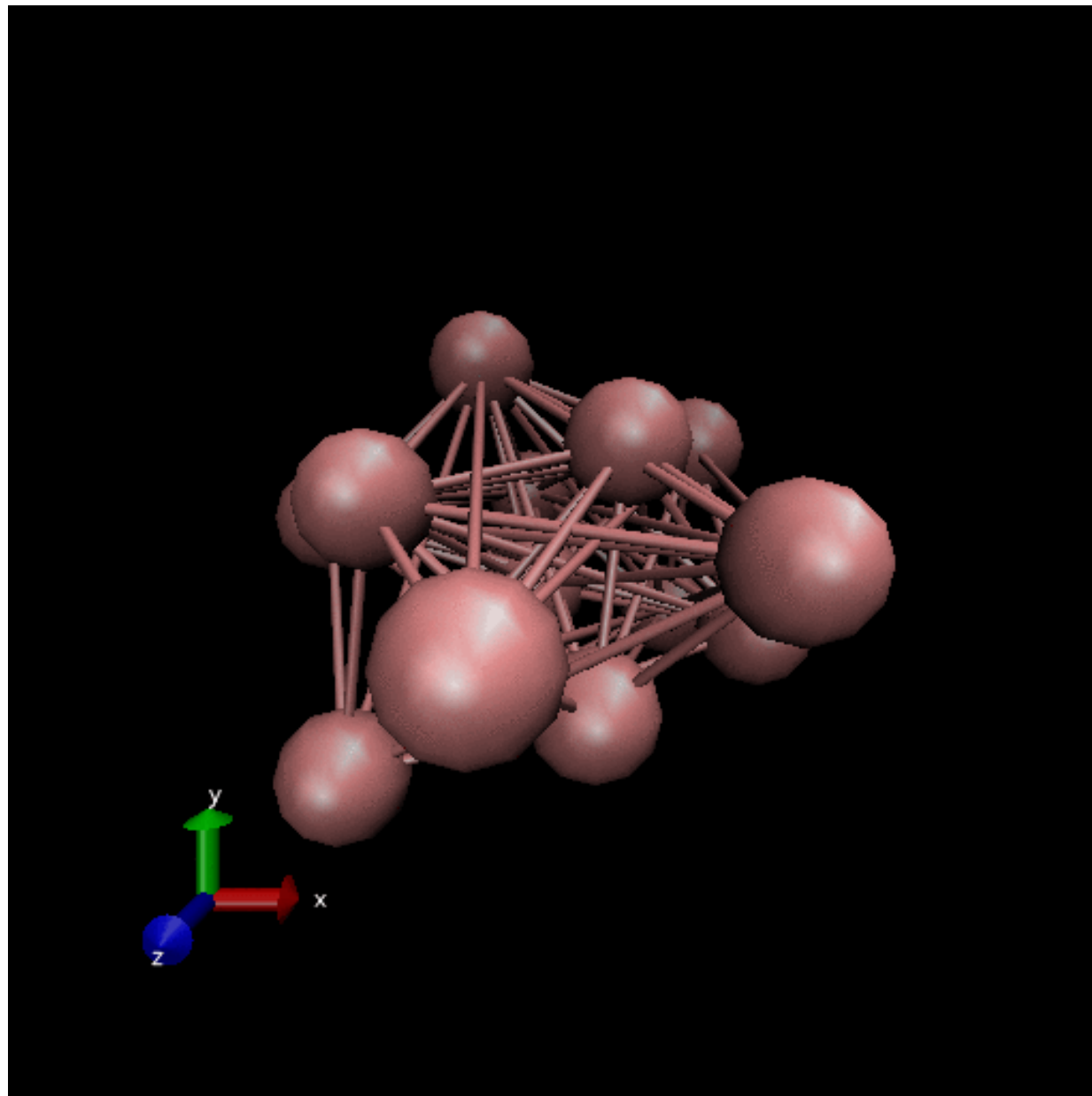


相互に密接に関わる

→ **理解が深まる**

計算実験コースについて(2)

3年の計算実験の実習で作った課題



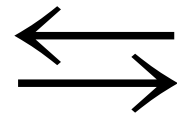
アルゴンクラスターの
固液相転移を見る

→**熱力学、統計力学の
理論への理解が深まる**

- 自己紹介
- 計算実験コースについて
- 簡単に計算物性研究室の研究紹介
- 計算実験コースを選んで良かった点

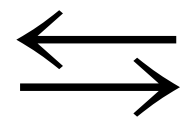
簡単に研究紹介(1)

物質は原子から出来ている



簡単に研究紹介(1)

物質は原子から出来ている

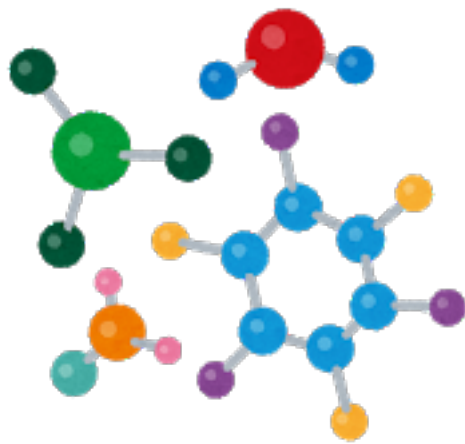


原子の情報だけから

物質の性質は**全て説明出来る**

簡単に研究紹介(1)

構造、原子を指定

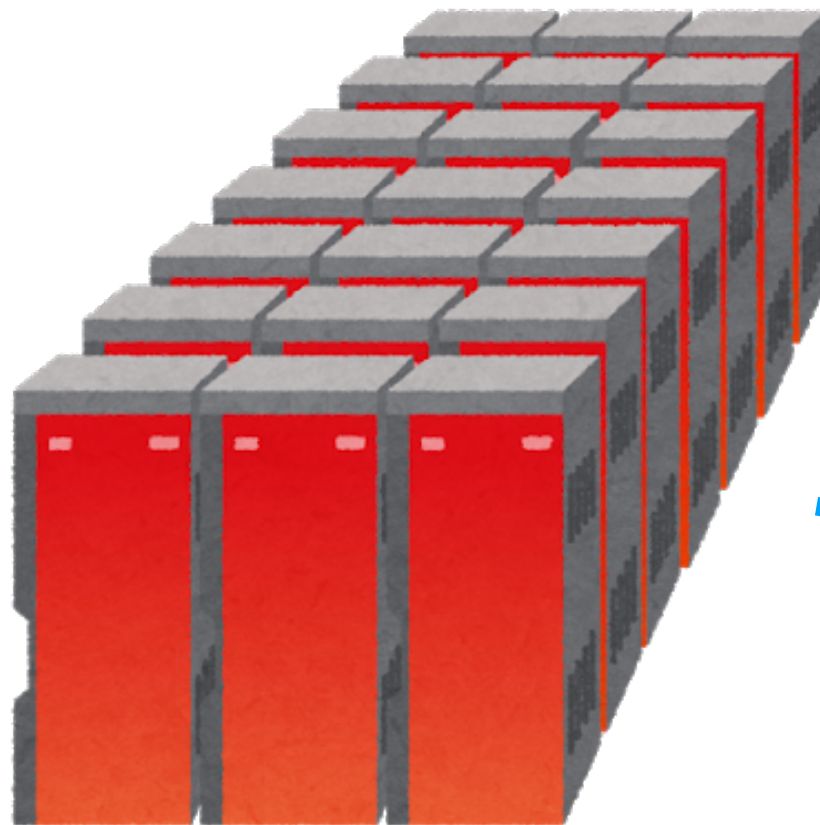


電気が通る？通らない？

磁石につく？つかない？

熱が通りやすい？通りにくい？

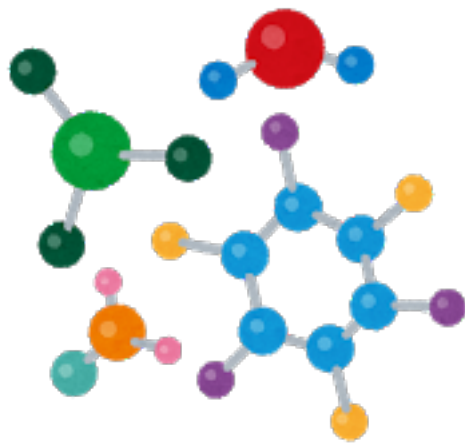
硬い？柔らかい？



スーパーコンピュータを動かす(プログラム)

簡単に研究紹介(1)

構造、原子を指定

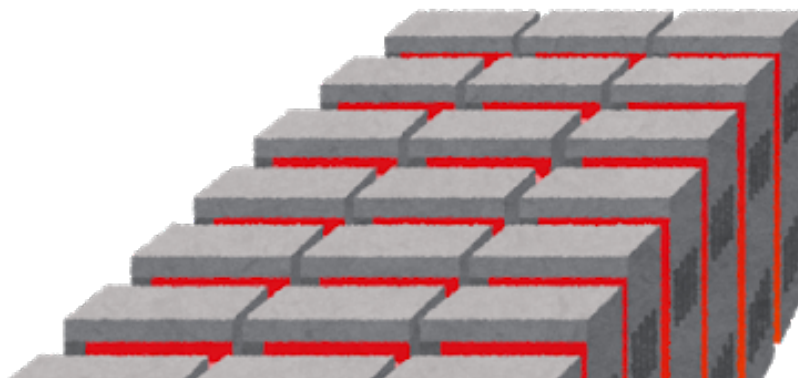


電気が通る？通らない？

磁石につく？つかない？

熱が通りやすい？通りにくい？

硬い？柔らかい？

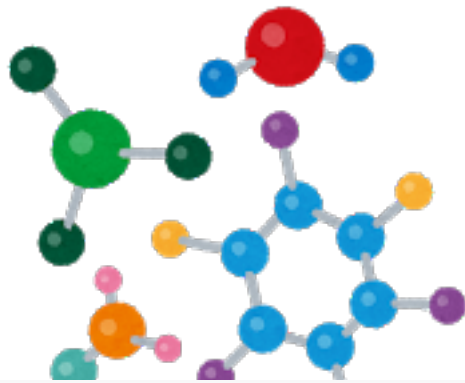


原子だけから物質の性質が予測出来るなら

→ 物質設計が実験をせずに可能に！！

簡単に研究紹介(1)

構造、原子を指定

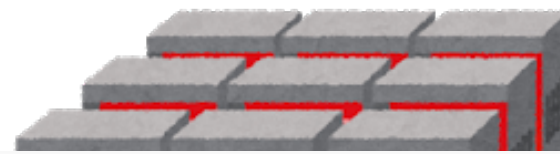


電気が通る？通らない？

磁石につく？つかない？

熱が通りやすい？通りにくい？

硬い？柔らかい？



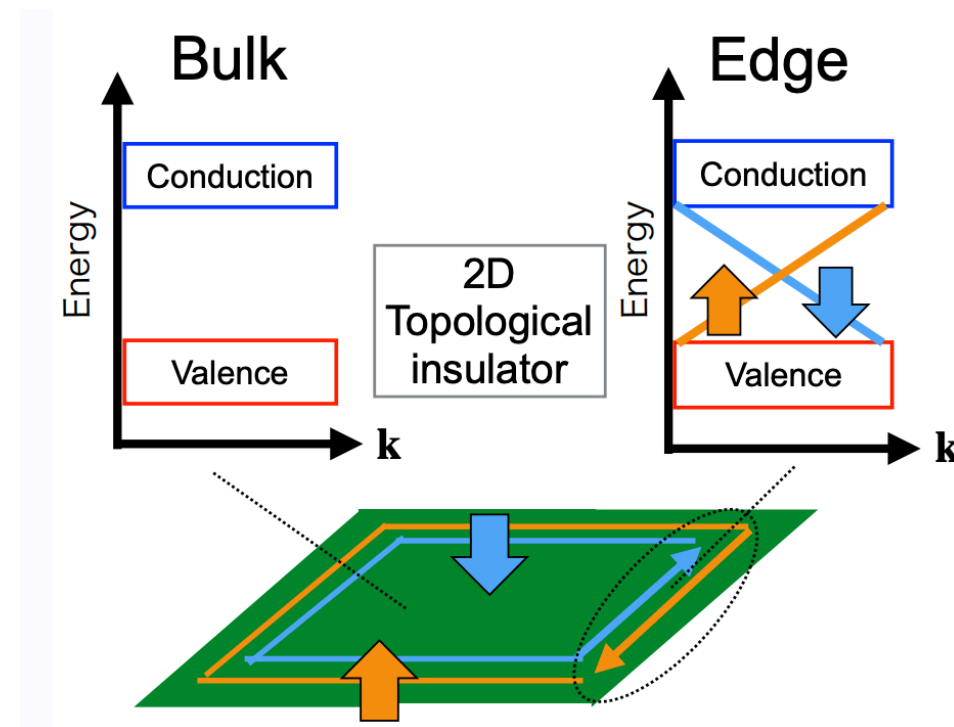
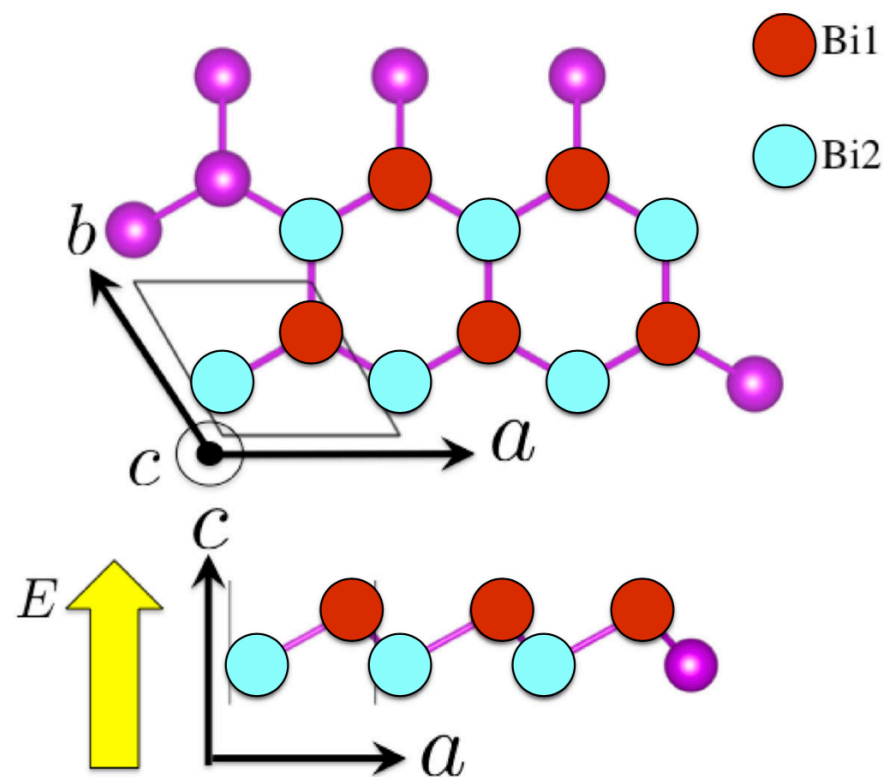
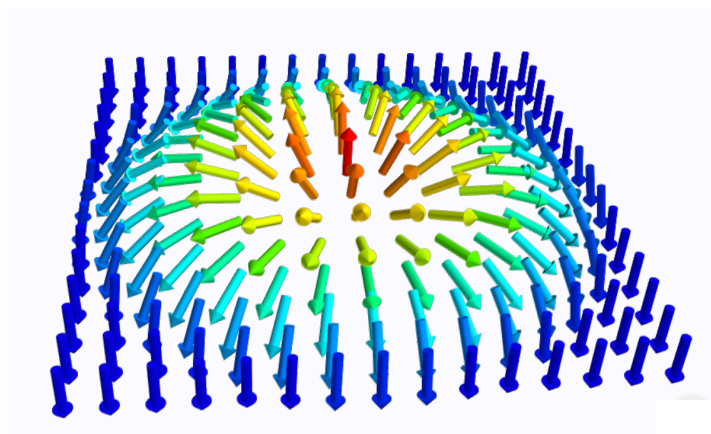
革新的な物質は**テクノロジーを進化させる**

原子だけから物質の性質が予測出来るなら

→ 物質設計が実験をせずに可能に！！

簡単に研究紹介(2)

トポロジカル物質



- 自己紹介
- 計算実験コースについて
- 簡単に計算物性研究室の研究紹介
- 計算実験コースを選んで良かった点

計算実験コースを選んで良かった点

- 計算によってより深く物理や数学の理論を理解することが出来る

計算実験コースを選んで良かった点

- 計算によってより深く物理や数学の理論を理解することが出来る
- スキルを聞かれたときに「一応、プログラミングが出来ます」と答えられる

計算実験コースを選んで良かった点

- 計算によってより深く物理や数学の理論を理解することが出来る
- スキルを聞かれたときに「一応、プログラミングが出来ます」と答えられる
- **実験をしなくて良いので自由な時間が多い**
(朝寝てられる、夜遅く起きてなくて良い)

最後に、プログラミングが苦手な学生へ

佐藤天彦名人、人工知能に敗北決定 将棋・電王戦

2017年5月20日21時21分

シェア ツイート ブックマーク メール 印刷



ポナンザのロボットアーム（手前）と対戦する佐藤天彦名人＝20日午後、兵庫県姫路市の姫路城、水野義則撮影



将棋の棋士と人工知能（AI）が戦う第2期電王戦二番勝負（ドワンゴ主催）の第2局が20日、兵庫県姫路市の姫路城で行われ、佐藤天彦（あまひこ）名人（29）がPONANZA（ポナンザ）に敗れた。これでポナンザの2連勝となり、将棋界の頂点に立つ名人の敗北が決まった。

佐藤名人は現役の名人として初めて公の場でソフトと対戦した。電王戦は今期で終了することが決まっている。近年、注目を集めてきたAIとの戦いは一区切りとなる。

対局は午前10時に始まった。双方が陣形を整え合った後、ポナンザが先手を取った。



将棋ソフト
PONANZA開発者
山本 一成

本人Twitterアイコンより

朝日新聞2017年5月20日

最後に、プログラミングが苦手な学生へ

コンピュータが苦手だった

→大学留年をきっかけに

「何かに挑戦しよう」

とプログラミングを始める



将棋ソフト
PONANZA開発者
山本 一成

最後に、プログラミングが苦手な学生へ

将棋の棋譜を自動作成 天井カメラの映像をAIが解析 将棋連盟とリコーが開発

連載をフォロー

会員限定有料記事 毎日新聞 2019年6月23日 11時00分 (最終更新 6月23日 11時12分)

社会 > カルチャー > 速報 >



将棋棋譜記録システムのデモンストラ
ションを行う鈴木大介九段（左）と西尾明七
段。着手から1秒程度で棋譜に反映された
＝東京都渋谷区の将棋会館で2019年6月
20日午後3時22分。丸山准撮影

リコーと日本将棋連盟は20日、将棋の対局盤面を映す天井カメラの映像を人工知能（AI）に解析させ、棋譜を自動で作成するシステムを共同開発したと発表した。7月に本戦トーナメントがスタートする第9期女流王座戦（リコー主催）で実証実験を行い、来年4月以降の本格運用を目指す。記録係の不足を解消するのが狙いで、同連盟の佐藤康光会長は「将棋界の一つの課題が解消され、新たな一歩が踏み出せるのではないかと期待を寄せる。



Timeline



0



棋譜自動生成ソフト
開発者
木曾野 正篤

本人Twitterアイコンより

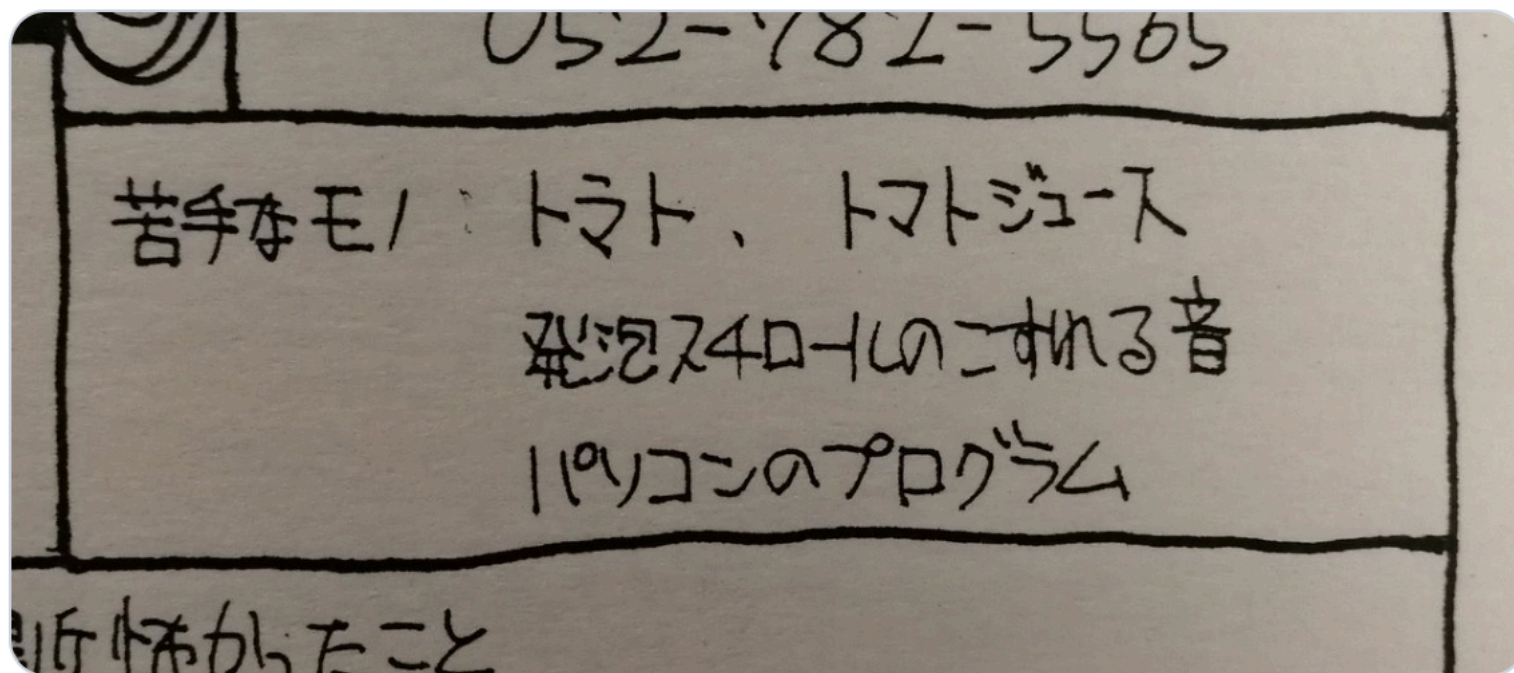
毎日新聞2019年6月23日

最後に、プログラミングが苦手な学生へ



Masahiro Kisono
@mkisono

私の学生時代のプロフィール トマトとプログラミングは克服したな



午後4:44 · 2019年9月14日 · [Twitter for Android](#)



棋譜自動生成ソフト
開発者
木曾野 正篤

本人Twitterアイコンより

最後に、プログラミングが苦手な学生へ

「今プログラミングが出来ない」を

コース選択の判断材料にするのは

勿体無い！

最後に、プログラミングが苦手な学生へ

プログラムを一切書かずに

計算実験コースを

卒業・修了した偉大な先輩もいる

→定式化(数学)も大事な仕事、

理論が一番大事