

令和 6 年 9 月 14 日現在

機関番号：12601

研究種目：基盤研究(B)（一般）

研究期間：2020～2023

課題番号：20H01824

研究課題名（和文）詳細つりあいを破るマルコフ連鎖モンテカルロ法の深化と相関の強い多体系への応用

研究課題名（英文）Markov-chain Monte Carlo without detailed balance and its application to strongly correlated many-body systems

研究代表者

藤堂 眞治（TODO, Synge）

東京大学・大学院理学系研究科（理学部）・教授

研究者番号：10291337

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 13,400,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、マルコフ連鎖モンテカルロ法の基本原理の深化と応用の拡大に焦点を当てた。特に、確率的ポテンシャルスイッチングの原理や経路積分モンテカルロ法の新しい更新方法を提案し、シミュレーションにおける自己相関時間を短縮に成功した。また、量子ダイマー模型の有限温度相転移や量子多体系のエンタングルメントエントロピーの計算、高次元系の量子相関や自己学習モンテカルロ法の高速更新アルゴリズムも開発した。さらに、テンソルネットワークマルコフ連鎖モンテカルロ法を開発し、モンテカルロ法の指数加速を実現し、負符号問題解決への道筋を見出した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究の学術的意義は、マルコフ連鎖モンテカルロ法の基本原理を深化させ、新しいアルゴリズムを提案することで、シミュレーションの精度と効率を大幅に向上させた点にある。これにより、量子物理学や統計物理学における複雑な量子多体系のシミュレーションが可能となり、新たな知見を得ることができる。一方、社会的意義としては、マルコフ連鎖モンテカルロ法によるシミュレーション技術の進歩が、材料科学や情報技術、金融工学、量子コンピューティングなど多岐にわたる分野での応用を促進し、産業界や経済界における革新と競争力の向上に寄与する点が挙げられる。

研究成果の概要（英文）：This study focuses on deepening the fundamental principles of the Markov Chain Monte Carlo (MCMC) method and expanding its applications. In particular, the principles of probabilistic potential switching and novel updating methods for the path-integral MCMC were proposed, successfully reducing the autocorrelation time in simulations. Additionally, we calculated the finite-temperature phase transitions of the quantum dimer model and the entanglement entropy of quantum many-body systems. We developed high-speed updating algorithms for MCMC with self-learning and quantum correlations in higher-dimensional systems. Furthermore, we created a tensor network MCMC method, achieving exponential acceleration of the MCMC and finding a path to solving the sign problem.

研究分野：計算物理・物性理論

キーワード：マルコフ連鎖モンテカルロ法 詳細つりあい 計算物理 強相関多体系 量子モンテカルロ法 量子相関 テンソルネットワーク 負符号問題

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

マルコフ連鎖モンテカルロ法は、統計物理の分野で提案され発展してきたが、それにとどまらず、素粒子物理、原子核物理、生物物理、化学、統計、金融、医学など、現在さまざまな分野で必要不可欠な数値解析手法となっている。マルコフ連鎖モンテカルロ法は、数学的には確率過程を用いて任意の標的確率分布に従う状態変数を生成する方法であると言える。その遷移確率は 2 つの条件を満たさなければならない。ひとつは「つりあい条件 (balance condition、以下 BC)」、もうひとつの条件は「エルゴード性」である。BC は標的分布が不変分布となる条件である。一方、エルゴード性は不変分布が初期状態によらず一意であることを保証する。

マルコフ連鎖モンテカルロ法の根本原理は、Metropolis ら(1953)による最初の提案から 70 年以上たった今も全く変わっていない。しかしながら、その枠組のなかでマルコフ連鎖モンテカルロ法は着実に進化を遂げてきた。その進化はおおよそ 5 つのレベルに分類できる。

レベル 1 - モデルの表現: マルコフ連鎖モンテカルロは「状態」の間を遷移する確率過程であり、遷移ネットワークと呼ばれるグラフとして表現される。まず必要なことは、「状態」(グラフのノード)を定義し、それらの「重み」を決めることである。イジング模型の平衡状態のシミュレーションでは、スピン配位が状態であり重みはボルツマン重みである。量子統計力学においては、虚時間経路積分(Suzuki-Trotter 分解)により、 d 次元量子系の統計力学を $d+1$ 次元系の古典系統計力学に焼き直すことで、状態と重みを導入している。一方、ベイズ推定においては、事前確率と尤度の積である事後確率が重みである。

レベル 2 - アンサンブルの選択: ターゲットとなる重みが定まったとしても、必ずしもその重みを使ったマルコフ連鎖モンテカルロを行う必要はない。拡張アンサンブル法では、人工的な重みを導入することでスピングラスなど多数の局所最適構造がある系における収束を加速する。あるいは、追加の自由度や複数のレプリカを導入することも可能である。拡張アンサンブル法は 1990 年代に提案され、今では分子科学やデータ科学などの分野でも広く使われている。

レベル 3 - 遷移候補の生成: これは遷移ネットワークにおいてどのノードを線でつなぐかということに相当する。棄却率を上げずにできるだけ「遠く」の状態に遷移できるのが理想であるが、一般的に遷移候補の「遠さ」とその採択率はトレードオフの関係にある。1987 年に導入されたクラスタアルゴリズムは、対象となる物理系の特性を最大限活用することで、棄却率を上げずに大域的なスピン更新を行う。クラスタアルゴリズムは量子系への拡張もなされている。

レベル 4 - 遷移確率の構成: Metropolis-Hastings 法や熱浴法が用いられてきたが、21 世紀に入ってからその構成方法が見直されるようになってきた。これまで、BC より厳しい「詳細つりあい条件(detailed balance condition、以下 DBC)」が遷移確率に課されていた。DBC の下では、全ての遷移過程に対して逆過程が存在し、任意の 2 つの状態間で行き来する確率流がつりあう。一方、BC だけでは遷移確率の選び方は自明でなく、DBC を破る遷移確率を系統的に構成することは、一般的に困難であると考えられてきた。しかし、申請者のグループは 2010 年にそのような遷移確率を与える全く新しいアルゴリズムを発表した。BC は DBC より弱い条件なので、遷移確率の解空間が広がり、棄却率のより小さい解を見つけることができる。さらに DBC を破ることで、状態空間に正味の確率流が生じ、効率的に空間を探索できる。実際、多くの興味ある場合に、全く棄却のない遷移確率を選ぶことが可能であり、従来の方法に比べ数倍から 100 倍収束が加速されるという驚くべき結果が得られている。

レベル 5 - 遷移確率に沿った状態生成: Walker のエイリアス法や非一様なポアソン過程のための間伐法など、基本的な乱数生成方法は 1970 年代から知られていたが、マルコフ連鎖モンテカルロ法と組み合わせることで、ランダムなビットの効率的な生成、長距離系に対するオーダー N 法などが可能となった。後者では、スピン数 N の二乗に比例した計算時間が必要となるため大規模系の精度の高い計算はこれまで困難であった。しかし、申請者のグループは Walker 法と一般化した Fortuin-Kastelyn 表示を組み合わせることにより $O(N)$ アルゴリズムモンテカルロ法の開発に成功した。この手法は BC を厳密に満たしており、長距離相互作用の効果を近似なしに取り入れることが可能である。これまでスピン数が 100-1,000 程度に限られていた長距離相互作用系のシミュレーションが一気に 1,000,000 スピンの系にまで広げられ、ナノ磁性体の直接シミュレーションや、相転移現象のより詳細な解析が可能となった。 $O(N)$ 法はイベント連鎖モンテカルロ法とも組み合わせられ、長距離相互作用する粒子系にも応用が進んできている。

1980 年代以降、大規模でより複雑な問題に対してマルコフ連鎖モンテカルロ法を適用するために、特にレベル 1~3 (表現・アンサンブル・遷移候補) に関して様々な創意工夫がなされてきた。一方で、レベル 4 や 5 に関して大きな発展の余地があることが認識されるようになったのはごく最近のことであり、新しいブレークスルーが生み出される機運が高まっていた。

2. 研究の目的

本研究の目的は、マルコフ連鎖モンテカルロ法を基本原理から見直し、さらに深化させることにある。近年、独立に提案された、確率の埋め立てに基づく棄却なしモンテカルロ法、イベント連鎖モンテカルロ法など、DBCを破るマルコフ連鎖モンテカルロ法に共通する原理を見出し、それを一般化することでより広い問題に適用可能なモンテカルロ法の新しい枠組みを構築する。さらに、関連の強い多体系に応用し、関連の効果が本質的な役割を果たす相転移現象や量子相の解明を目指す。また、開発したアルゴリズムに基づくソフトウェアの整備、分野の枠組みを超えたデファクトスタンダードとなりうるライブラリの公開も本研究の大きな目的の一つである。

3. 研究の方法

マルコフ連鎖モンテカルロは様々な分野で広く使われ、国内国外を問わずマルコフ連鎖モンテカルロ法を用いた応用研究は非常に活発に行われている。しかしながら、マルコフ連鎖モンテカルロ法の原理にまで立ち戻り、深化させようという試みは決して多いとは言えない。離散変数系に対する棄却なしマルコフ連鎖モンテカルロ法の基礎には、「確率の埋め立て」という、これまでとは全く異なる視点に基づく幾何学的な手法が導入されている。この手法では、ある種の最適化問題を解く際に、コスト関数の微分などの情報に基づいて漸近的に最小化するのではなく、幾何学的手続きを与えることにより、最小解を構成すると同時に、下限を満たす最適解の存在を証明しているところが独創的な点である。一方、イベント連鎖モンテカルロ法においても、連続的な状態変化を離散的なイベントでサンプリングしなおすという幾何学的な解釈が基礎にある。このような幾何学的アプローチは、物性物理や統計物理、特に計算統計物理の分野ではあまり試みられてこなかった。しかし、我々の最近の研究結果は、このアプローチは実際に有用であり、これまでの枠組みを根本的に変えてしまう可能性を秘めていることを強く示唆している。これまで量子モンテカルロ法、古典モンテカルロ法を中心に、様々な手法開発とその応用研究に取り組んできた実績をもとに、DBCを破るマルコフ連鎖モンテカルロ法に共通する原理の確立、新しいモンテカルロ法の枠組みの構築、関連の強い多体系のシミュレーション、新しいアルゴリズムに基づくソフトウェアの開発・公開について研究を進めた。

4. 研究成果

(1) マルコフ連鎖モンテカルロ法の基本原理

確率的ポテンシャルスイッチングの原理について考察を進め、連続極限において、イベント連鎖モンテカルロ法の基礎となっている因数化されたメトロポリス法と等価であることなど、マルコフ連鎖の基本概念間の関係・関連に関する研究を進めた。

(2) 経路積分モンテカルロ法

ボーズ粒子系に対する経路積分モンテカルロ法において、粒子の対称性を正しく取り入れる新しい更新方法を提案した。ハミルトニアンモンテカルロ法において詳細つりあいを破る方法を提案し、シミュレーションの自己相関時間をさらに短縮することが可能となった。さらに、スピングラス系のシミュレーションで開発された交換モンテカルロ法を組み込んだ新しい拡張アンサンブル法を開発した。異なる虚数時間スライスでゆっくりと相互作用をオンにし、相互作用のない状態から完全に相互作用する状態へと移行させることで、巻きつき数の更新が素早く実現できることを示した。

(3) 量子ダイマー模型の有限温度相転移

量子ダイマー模型では、ダイマーの配置に強い幾何学的な制限がある。確率級数展開 (SSE) に基づく効率的なクラスター更新法を、ダイマーとモノマー、および多体相互作用を含む、より一般的なクラスの模型に拡張した。さらに、交換モンテカルロ法を組み合わせることで、巻き付き数を固定しないシミュレーションを実現した。これらの手法を用いて、詳細な有限温度相図を得た。特に、絶対零度でのコラムナーダイマー相が中間相なしに RK 点まで伸びていることを強く示唆する結果を得た。

(4) 高次元系における量子相関

基底状態量子モンテカルロ法とレプリカ法を組み合わせ、量子多体系のエンタングルメントエントロピーを直接計算することができる。虚時間方向の境界条件のサンプリングのために Wang-Landau 法を導入し、高並列計算のためのライブラリ開発を行った。

(5) 自己学習モンテカルロ法の高速更新アルゴリズム

連続時間補助場アルゴリズムによる不純物モデルのシミュレーションに対して、二分木技術を用いた自己学習モンテカルロ法を開発した。従来の手法では配位の頂点数に対して線形に増加していた計算コストを、対数的なコストに低減することで、非常に効率的に重み変化を計算することが可能となった。

- (6) 長距離相互作用系における有効次元の変化
量子臨界現象において、長距離相互作用は系の有効次元を変化させる。「空間/虚時間軸方向の相関比を同一かつ最適な値にする」という指導原理のもとでモデルのパラメータを自動的に調整することにより、一次元横磁場イジング模型の量子相転移におけるユニバーサリティクラス境界を決定に成功した。
- (7) 局所ユニタリ変換による負符号問題の低減
低温で負符号を消すことは量子モンテカルロ法にとって重要な課題である。絶対零度で負符号が消えるためのハミルトニアンが満たすべき条件から、コスト関数を定めることで最適化問題としてユニタリ変換を探す枠組みを考案し、符号問題の軽減に成功した。特に、Frustration-Free と呼ばれる量子スピン系においては、先行研究では不可能であった最適解が得られるだけでなく、その他のモデルにおいても先行研究よりも優れた結果が得られた。
- (8) テンソルネットワークマルコフ連鎖モンテカルロ法
テンソルネットワーク表現とマルコフ連鎖モンテカルロ法を組み合わせた、全く新しいサンプリング手法を開発した。この手法では、テンソルネットワークにおける系統誤差が完全に取り除かれる。また、ボンド次元を増やすことで統計誤差を指数関数的に減らすことが示された。さらに、虚数磁場のかかった負符号問題のある系、量子回路におけるユニタリ時間発展の問題に適用し、ボンド次元を増やすことで負符号問題が効率的に取り除かれることを示した。
- (9) プログラム開発・公開
計算物質科学アプリ・ツールをおさめた統合パッケージ MateriApps LIVE! について、新しいアプリ・ツールの追加、OS のバージョンアップなど整備を進めた。インストールスクリプト集 MateriApps Installer も大幅なバージョンアップを行い、東大物性研のスパコンシステムへの対応を行った。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計13件（うち査読付論文 13件 / うち国際共著 1件 / うちオープンアクセス 3件）

1. 著者名 Ido Kota, Kawamura Mitsuaki, Motoyama Yuichi, Yoshimi Kazuyoshi, Yamaji Youhei, Todo Synge, Kawashima Naoki, Misawa Takahiro	4. 巻 298
2. 論文標題 Update of H : Newly added functions and methods in versions 2 and 3	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Computer Physics Communications	6. 最初と最後の頁 109093 ~ 109093
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cpc.2024.109093	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 玉井 敬一、大久保 毅、ヴィン チュオン ズイ チュオン、名取 直毅、藤堂 眞治	4. 巻 JSAI2023
2. 論文標題 人工深層ニューラルネットワークが示す吸収状態転移	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 人工知能学会全国大会論文集	6. 最初と最後の頁 2
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.11517/pjsai.JSAI2023.0_2Q60S20b02	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Xu RuQing G., Okubo Tsuyoshi, Todo Synge, Imada Masatoshi	4. 巻 277
2. 論文標題 Optimized implementation for calculation and fast-update of Pfaffians installed to the open-source fermionic variational solver mVMC	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Computer Physics Communications	6. 最初と最後の頁 108375 ~ 108375
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cpc.2022.108375	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Motoyama Yuichi, Yoshimi Kazuyoshi, Kato Takeo, Todo Synge	4. 巻 20
2. 論文標題 MateriApps LIVE! and MateriApps Installer: Environment for starting and scaling up materials science simulations	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 SoftwareX	6. 最初と最後の頁 101210 ~ 101210
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.softx.2022.101210	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 諏訪 秀麿、藤堂 眞治	4. 巻 77
2. 論文標題 確率の流れをあやつるモンテカルロ法 詳細つりあいの破れとリフティング	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 日本物理学会誌	6. 最初と最後の頁 731 ~ 739
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.11316/butsuri.77.11_731	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yoshikawa Seiji, Sato Ryuhei, Akashi Ryosuke, Todo Synge, Tsuneyuki Shinji	4. 巻 157
2. 論文標題 A noise-robust data assimilation method for crystal structure determination using powder diffraction intensity	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 224112 ~ 224112
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0125553	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ishikawa Fumihito, Suwa Hidemaro, Todo Synge	4. 巻 90
2. 論文標題 Neural Network Approach to Construction of Classical Integrable Systems	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 093001 ~ 093001
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.90.093001	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Adachi Daiki, Okubo Tsuyoshi, Todo Synge	4. 巻 105
2. 論文標題 Bond-weighted tensor renormalization group	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 L060402
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.105.L060402	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Morishita Tomoyuki、Todo Synge	4. 巻 91
2. 論文標題 Randomized-Gauge Test for Machine Learning of Ising Model Order Parameter	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 44001
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.91.044001	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Li Botao、Todo Synge、Maggs A.C.、Krauth Werner	4. 巻 261
2. 論文標題 Multithreaded event-chain Monte Carlo with local times	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Computer Physics Communications	6. 最初と最後の頁 107702 ~ 107702
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cpc.2020.107702	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Nakanishi Ken M.、Fujii Keisuke、Todo Synge	4. 巻 2
2. 論文標題 Sequential minimal optimization for quantum-classical hybrid algorithms	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.2.043158	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Adachi Daiki、Okubo Tsuyoshi、Todo Synge	4. 巻 102
2. 論文標題 Anisotropic tensor renormalization group	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.102.054432	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Hoshi Takeo, Kawamura Mitsuaki, Yoshimi Kazuyoshi, Motoyama Yuichi, Misawa Takahiro, Yamaji Youhei, Todo Synge, Kawashima Naoki, Sogabe Tomohiro	4. 巻 258
2. 論文標題 K : Open-source library for the shifted Krylov subspace method of the form $(zI-H)x=b$	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Computer Physics Communications	6. 最初と最後の頁 107536 ~ 107536
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cpc.2020.107536	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計20件 (うち招待講演 14件 / うち国際学会 7件)

1. 発表者名 藤堂真治
2. 発表標題 マルコフ連鎖とテンソルネットワーク
3. 学会等名 計算統計物理学の今日と明日 (招待講演)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 Synge Todo
2. 発表標題 Markov-Chain Monte Carlo in Tensor-Network Representation
3. 学会等名 Recent Developments in Computer Simulational Studies in Condensed Matter Physics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 藤堂真治
2. 発表標題 逆問題と量子コンピューティング
3. 学会等名 日本薬剤学会デジタル製剤学FG第1回シンポジウム (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 藤堂眞治
2. 発表標題 TensorMC: テンソルネットワーク・モンテカルロ法
3. 学会等名 Tensor Network 2023 (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Synge Todo
2. 発表標題 Markov-Chain Monte Carlo in Tensor-Network Representation
3. 学会等名 Extreme Universe Collaboration - 18th Colloquium (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Synge Todo
2. 発表標題 Markov-Chain Monte Carlo in Tensor-Network Representation
3. 学会等名 Advanced Study Group: Tensor Network Approaches to Many-Body Systems(招待講演)(国際学会) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 藤堂眞治
2. 発表標題 量子格子模型ソルバーALPS による強相関多体系のシミュレーション
3. 学会等名 JST-CRDS俯瞰ワークショップ「新しい計算物質科学の潮流」(招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 藤堂眞治
2. 発表標題 量子コンピューティング × テンソルネットワーク
3. 学会等名 第1回量子ソフトウェアシンポジウム 「量子技術と量子ソフトウェアの未来」(招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Synge Todo
2. 発表標題 Markov-chain Monte Carlo sampling in tensor-network representation
3. 学会等名 15th Asia Pacific Physics Conference (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 藤堂眞治
2. 発表標題 テンソルネットワーク形式でのマルコフ連鎖モンテカルロ
3. 学会等名 日本物理学会2022年秋季大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 藤堂眞治
2. 発表標題 統計物理・量子物理のためのプログラム開発技術
3. 学会等名 Stat & Quant Phys Autumn School 2022 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 藤堂眞治
2. 発表標題 ポスト富岳にむけた計算科学ロードマップ
3. 学会等名 第14回材料系ワークショップ(招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Syngé Todo
2. 発表標題 High-Performance Computing Infrastructure in Japan
3. 学会等名 Chinese Physical Society Fall-Meeting 2022(国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Syngé Todo
2. 発表標題 Algorithms and computational techniques for quantum + classical computing
3. 学会等名 Quantum+Classical: Exploring new technological opportunities of the next-gen computing with Quantum(国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 藤堂眞治
2. 発表標題 マテリアルイノベーションにむけた制度・拠点構築
3. 学会等名 JST-CRDS科学技術未来戦略ワークショップ「マテリアルイノベーションを実現する先進的計算物質科学」(招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 藤堂眞治
2. 発表標題 プログラム開発の技術
3. 学会等名 計算物理春の学校2023 (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Synge Todo
2. 発表標題 Novel approaches for tensor renormalization group method ATRG and BTRG
3. 学会等名 CCP2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 藤堂眞治
2. 発表標題 テンソルネットワーク表現に基づく量子多体系のシミュレーション
3. 学会等名 計算科学と実験科学が導く量子物質研究の最先端 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 藤堂眞治
2. 発表標題 モンテカルロサンプリングによるテンソルネットワーク縮約
3. 学会等名 日本物理学会 第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 藤堂眞治
2. 発表標題 MateriApps LIVE!による物質科学シミュレーション
3. 学会等名 第7回東北大学知のフォーラム(招待講演)
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

藤堂研究室ホームページ https://exa.phys.s.u-tokyo.ac.jp
--

6. 研究組織		
氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関