

出来る限り、以下の様式に沿った議事録を作成下さいますようお願いいたします。

(様式 2)

議事録番号

提出 令和 7 年 3 月 28 日

会合議事録

研究会名：理論研究会「計算科学の新展開：TN スキームと量子・古典融合」

日 時：3 月 27 日 (木) 10:00 ~ 19:00

場 所：AP イノゲート大阪 11F C ルーム

出席者：(議事録記載者に下線)

坂井徹(兵庫県立大学), 遠山貴巳(東京理科大学), 上田宏 (大阪大学)、森田克洋 (東京理科大学)、杉本貴則(大阪大学)、宮腰祥平 (大阪大学)、渡辺亮 (大阪大学)、諏訪秀磨 (東京大学)、真鍋秀隆 (大阪大学)、Rongyang Sun (理研)、幸城秀彦 (理研)、奥西巧一 (新潟大学)、松本祥 (京都大学)、西野友年 (神戸大学)、渡邊由美子(大阪大学)、藤堂眞治(東京大学)、根来誠(大阪大学)、Stanislav Kedzuch (理研)、前島展也 (筑波大学)、伊藤悦子 (京都大学)、古内理人 (兵庫県立大学)、柚木清司 (理研)、中野裕一郎 (大阪大学)、大塚雄一 (理研)

計 24 名

議題：新しい多体系の数値解析法についての情報交換

議事内容：

上田宏 (大阪大学)：はじめに

主に物性・化学・計算という分野の融合を目指して、最近の発展が著しい量子アルゴリズム・テンソルネットワーク・数値対角化・分子動力学・機械学習等を利用した計算科学について、素粒子物理、物性物理、量子化学、機械学習、量子計算など、多岐にわたる分野の最先端の研究を展開している研究者の方々に招待講演をお願いし、基礎的事項から最近注目を集めている研究課題への応用までの話をお願いしております。とくに、スーパーコンピュータ富岳を有する理研・計算科学センターと、SPring-8 の放射光科学の連携についても検討し

ていただきたい。

総合討論

遠山貴巳(東京理科大学)

最近稼働を始めた Nano Terasu と SPring-8 の両方をカバーする特定放射光施設ユーザ共同体が立ち上がり、この組織における理論研究会として、放射光と計算科学の連携を進めているので、是非この機会にこの研究会に加入していただき、連例研究を推進していただきたい。Nano Terasu は軟X線による電子状態解析・オペランド分光・イメージング・RIXS（共鳴非弾性X線散乱）に特化しており、とくに RIXS においては、現在世界1の分解能を誇ることから、これを生かした精度の高い計算技術との連携により、インパクトの高い連携研究を提案していただきたい。

坂井徹（兵庫県立大）：

新しい量子アルゴリズム・テンソルネットワーク・機械学習などを導入した最先端の計算手法が紹介され、その発展が議論されるとともに、これらのアルゴリズムを量子コンピューター実装機で実現し、さらに精度の高い材料開発を目指す計算科学が紹介された。一方、SPring-8 II 計画により、さらに集光度や分解能を高度化した放射光科学の実現が期待される状況で、高度化した計算科学との緊密な連携が求められる。今後も、このような放射光科学と計算科学の連携を目指す共同研究の提案を広く受け、SPRUC 理論研究会が中心となって、連携体制を継続していただきたい。近い将来、放射光実験の研究者と理論研究者の連携のための合同研究会を開催したい。

*A4 縦

*会合で使用した 資料（差し支えないもの）を添付してください。

研究会のプログラムは以下のとおり

プログラム

3月27日(木)

10:00-10:10 上田 宏（阪大量子情報・量子生命研究センター）

はじめに

座長：遠山貴巳(東京理科大学)

- 10:10-10:40 上田宏 (大阪大学)
多体系の解析を対象とした量子アルゴリズムにおける
テンソルネットワーク法の有用性
- 10:40-10:55 森田克洋 (東京理科大学)
有限温度ランチョス法によるフラストレート量子スピン系の解析
- 10:55-11:10 杉本貴則(大阪大学)
多体トポロジカル状態解析のための量子アルゴリズム
- 11:10-11:25 宮腰祥平 (大阪大学)
量子回路構築のための密度行列繰り込み群手法の展開
- 11:25-11:40 渡辺亮 (大阪大学)
ツリーテンソルネットワークの構造最適化ライブラリ TTNOpt の
紹介
- 11:40-13:30 昼食
- 16:30-16:55 中野博生 (兵庫県立大)
座長：坂井徹(兵庫県立大学)
- 13:30-14:00 諏訪秀磨 (東京大学)
テンソルネットワークのモンテカルロサンプリング
- 14:00-14:15 真鍋秀隆 (大阪大学)
The State Preparation of Multivariate Normal Distributions using Tree
Tensor Network
- 14:15-14:30 Rongyang Sun (理研)
Parallel tensor network state methods for simulating unitary quantum
dynamics
- 14:30-14:45 幸城秀彦 (理研)
ボンド交代スピン鎖の実時間ダイナミクス解析
- 14:45-15:30 休憩
座長：柚木清司 (理研)
- 15:30-16:00 奥西巧一 (新潟大学)
MPS decomposition of MC snapshots and its entanglement
spectrum
- 16:00-16:15 松本祥 (京都大学)
テンソルネットワークを用いた 2-flavor Schwinger 模型の質量ス
ペクトル計算
- 16:15-16:30 西野友年 (神戸大学)

超立方体格子上での自由フェルミ系に対するエネルギー変形

16:30-16:45 遠山貴巳 (東京理科大学)

ドーピングされた1次元モット絶縁体の励起ダイナミクス：DDMRGによる
計算

16:45-17:00 総合討論

17:00-19:00 懇談会