

量子物質プロセスにおけるシミュレーションとデータ駆動科学

核融合研プラズマ量子プロセスユニット,
KEK物構研低速陽電子施設(客員), 東大物性研(客員) 星健夫

- ・ 東京大学工学部物理工学科卒業
- ・ 卒論は高温超電導体の実験研究. 大学院から計算物質物理学.

1. 計算物質物理学の潮流
 - (1) 計算科学のパラダイムチェンジ
 - (2) 密度汎関数理論(DFT)の勃興と成熟
2. 量子物質プロセスの手法と応用
3. 富岳を用いたベイズ推定と先端量子ビーム計測への応用
4. 大局的視点

計算物質物理学の潮流(1): 計算科学のパラダイムチェンジ

20世紀

コンピュータの誕生
→ 数値計算アルゴリズムの整備

パラダイムチェンジ
(古いプログラムは「死ぬ」?)

21世紀

- ・超並列コンピュータ(「京」「富岳」など)
- ・メニーコアCPU
- ・GPU搭載機の躍進(AI需要)
- ・量子計算機への期待

新しい数値手法による学際研究の可能性

参考: 20世紀のトップ10アルゴリズム

(F. Sullivan and J. Dongarra, Comp. Sci. Eng. 2, 22 (2000))

- ・ The Metropolis Algorithm (1946)
- ・ Simplex Method (1947)
- ・ Krylov Subspace Method (1950)
- ・ The Decompositional Approach to Matrix Computations (1951)
- ・ The Fortran Optimizing Compiler (1957)
- ・ QR Algorithm (1959)
- ・ Quicksort (1962)
- ・ Fast Fourier Transform (1965)
- ・ Integer Relation Detection (1977)
- ・ Fast Multipole Method (1987)

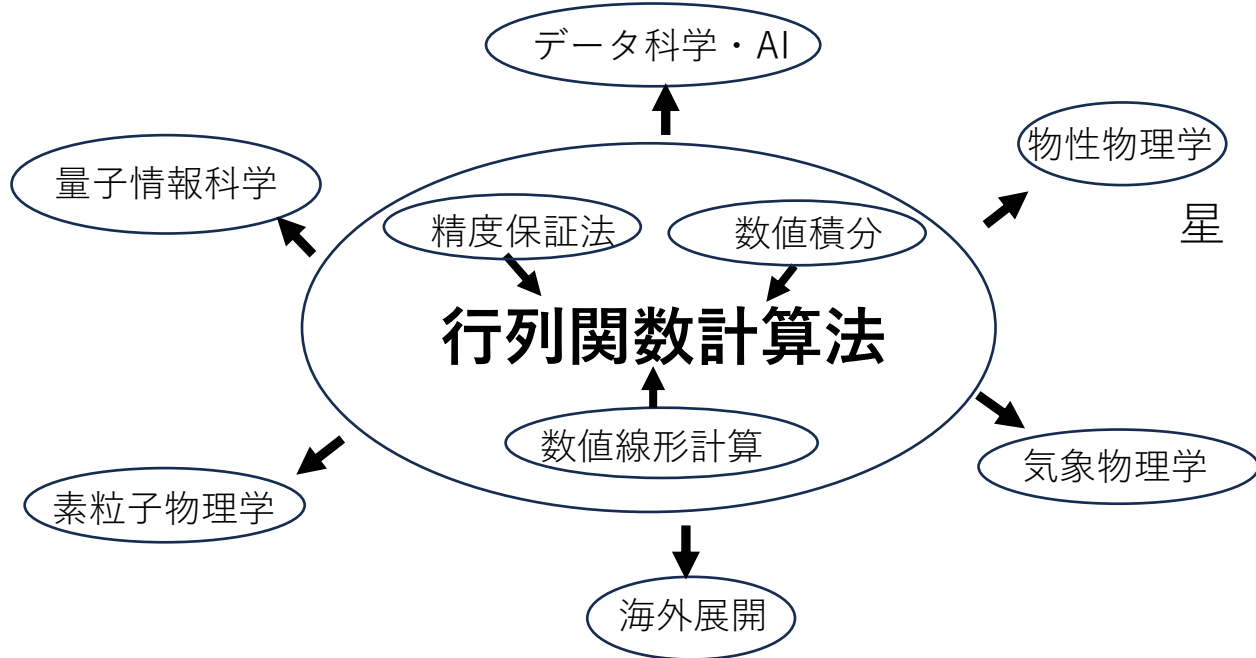
解説書籍「20世紀のトップ10アルゴリズム」, 2022年→



計算物質物理学の潮流(1): 計算科学のパラダイムチェンジ

20世紀

数理による学際研究例: 科研費基盤A「物理学・情報科学に共通する大規模行列関数の総合的数値計算法の創成」代表: 曾我部知広(名古屋大)



21世紀

- ・超並列コンピュータ(「京」「富岳」など)
- ・メニーコアCPU
- ・GPU搭載機の躍進(AI需要)
- ・量子計算機への期待

新しい数理手法による学際研究の可能性



解説書籍「20世紀のトップ10アルゴリズム」, 2022年→

計算物質物理学の潮流(2): 密度汎関数理論(DFT)の勃興と成熟

密度汎関数理論(Density Functional Theory, 1960-; プラズマ)
電子密度分布 $\rho(\mathbf{r})$ の汎関数としてエネルギー $E[\rho]$ を定義.



Walter Kohn (1923-2016)
(1998年ノーベル賞)

標準的プログラムの確立(1990年代~2000年代)

例: VASP, Quantum Espresso

計算データライブラリ整備(インフォマティクス)

例: 米国Materials Project (<https://materialsproject.org/>)

物質科学のインフラに(実験家も使うツールに)

未踏領域へのチャレンジ

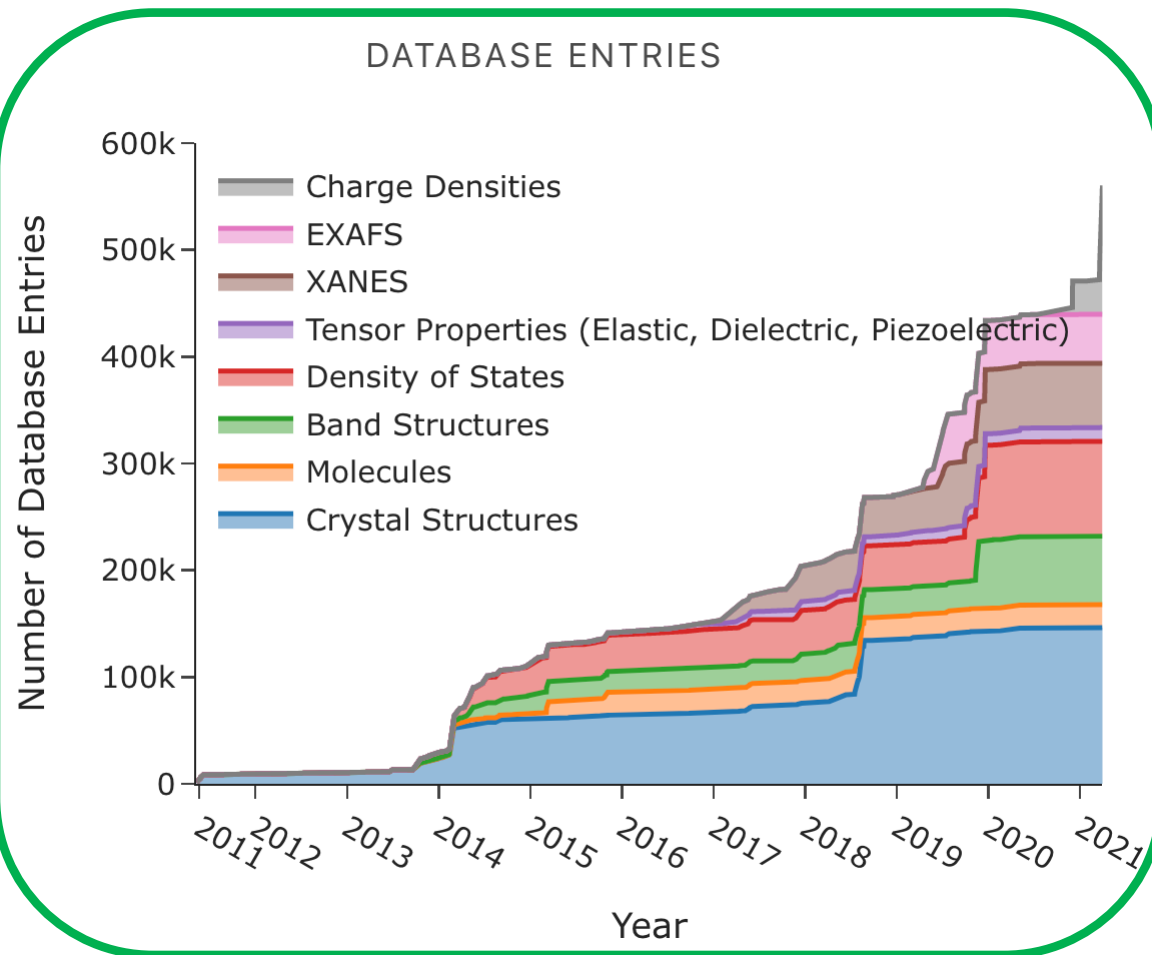
例: 大規模系(>10³原子系).

出口志向のマルチスケール理論(例: デバイス, 電池)

高密度高温系,

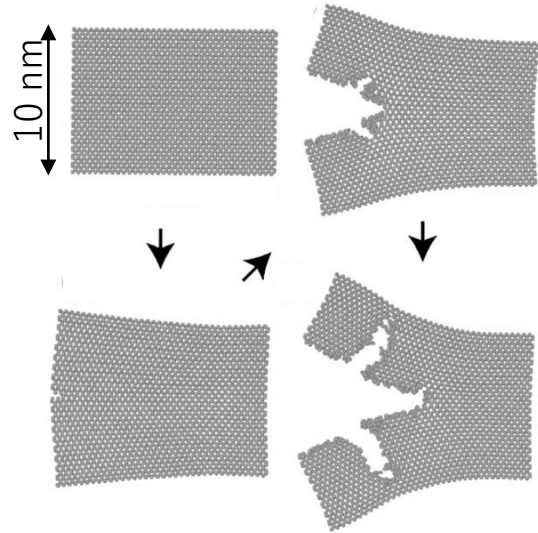
プロセス(非平衡・非定常・非断熱など)

物質+場(→計測, 加工)

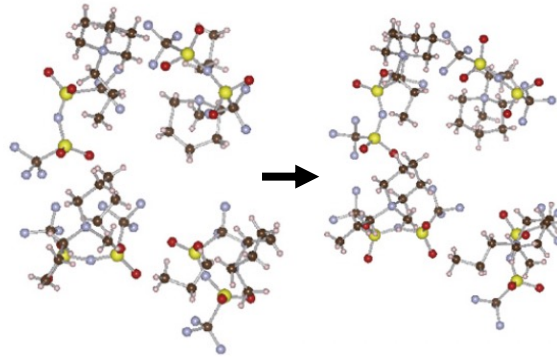


量子物質プロセスの手法と応用

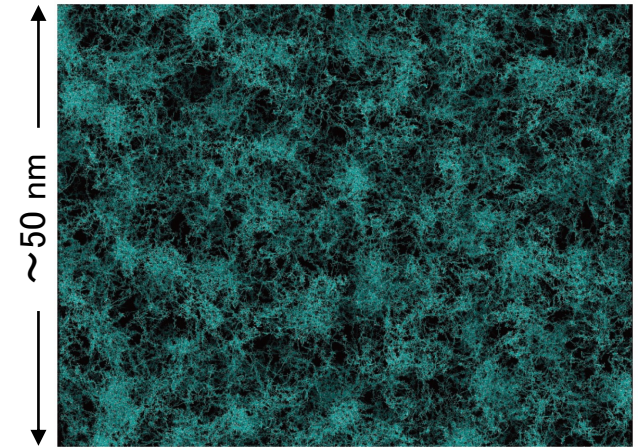
(a) シリコン脆性破壊



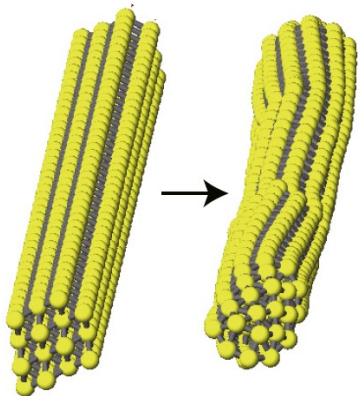
(c) イオン液体(電池研究)
(トヨタとの産学連携)



(e) 有機(高)分子集合体
(フレキシブルデバイス)
(→住友化学との産学連携)

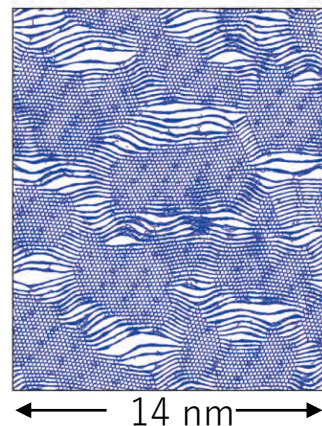


(b) らせん型金ナノワイヤ

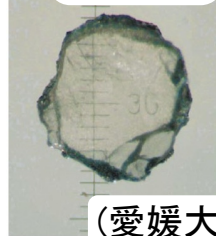


エレクトロニクス, 電子ビーム

(d) ナノ複合カーボン

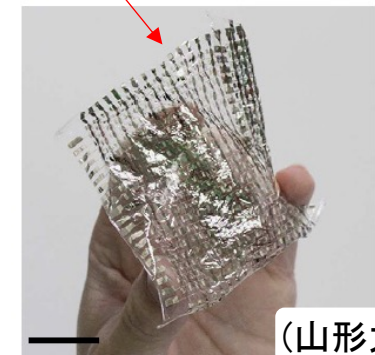


ナノ多結晶
ダイヤモンド(*1)
(~0.1mm)



(愛媛大)

(*1) Irifune, *et al.*, Nature 421, 599 (2003).



(山形大)

フレキシブルデバイス例(*2)

(*2) Fukuda, *et al.*,
Nature Comm. 5, 4147 (2014)

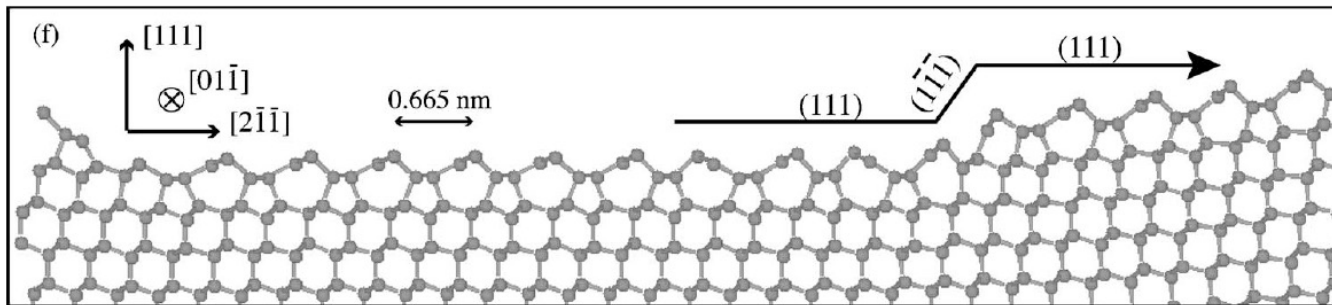
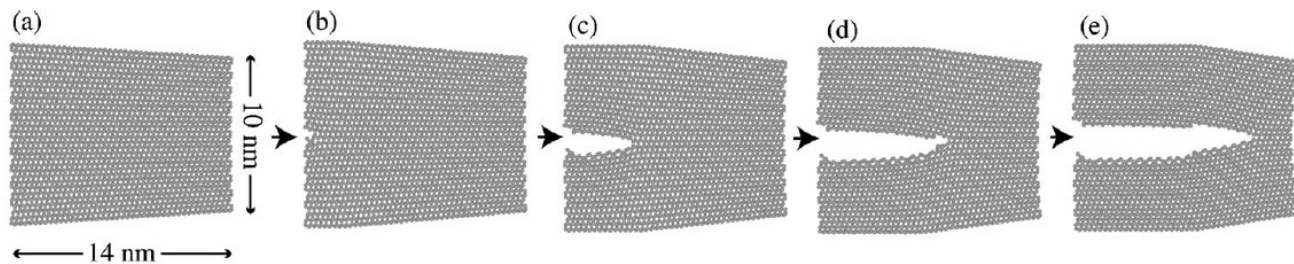
シリコン脆性破壊の大規模(10nmスケール)シミュレーション

(関連分野：材料強度)

T. Hoshi, *et al.*, Phys. Rev. B 72, 075323 (2005).

(レビュー) T. Hoshi and S. Ito, Chap. 14, *Handbook of Silicon Based MEMS Materials and Technologies*, 3rd Edition, Elsevier (2020)

- シリコン単結晶：脆性破壊研究の理想的材料
- 結論：実験で得られる破断面の理解に、動的理論が重要であることを示した。



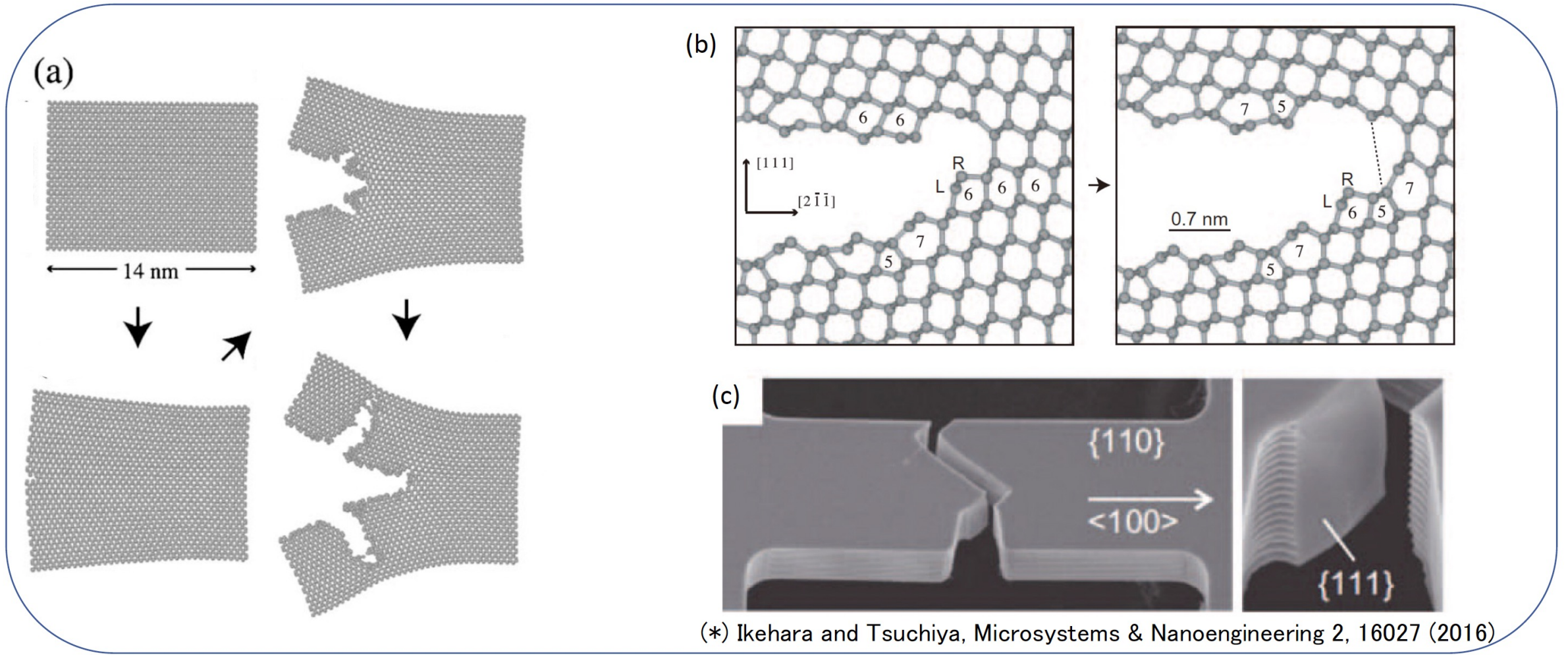
(実験) T. Ikehara,
T. Tsuchiya,
Microsyst. Nanoeng. 2 ,
16027 (2016)



図11 (a) シリコン脆性破壊シミュレーション例.

(b) シリコン脆性破壊シミュレーションにおける破面ベンディング(折れ曲がり)形成部分の拡大

(c) 実験系での破面ベンディングの走査電子顕微鏡(SEM)像(*).



らせん型多層シェル金ナノワイヤの生成機構

(関連分野：ナノエレクトロニクス)

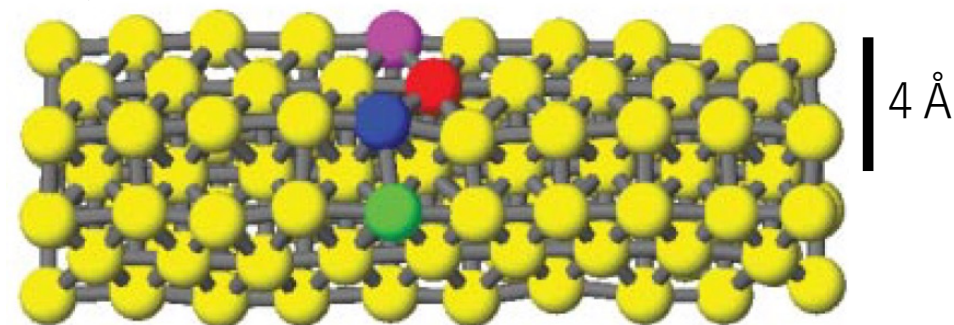
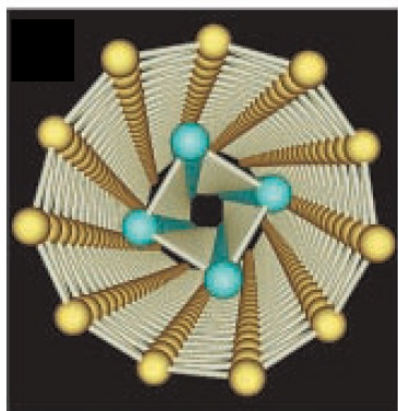
Y. Iguchi, *et al.*, Phys. Rev. Lett. 99, 125507 (2007).

(総説) T. Hoshi, *et al.*, *Handbook of Nanophysics*, vol. 4, Chap. 36, CRC Press (2010)

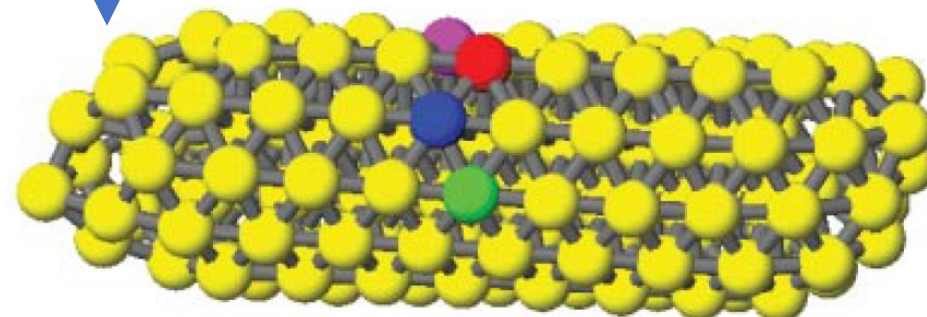
「魔法数」で特徴付けられるらせん型多層シェル金ナノワイヤの出現(*)に対して、その生成機構を量子力学的に説明 (5d軌道電子の異方性に起因)

(*) 実験：高柳邦夫(東工大(当時))ら
Y. Kondo and K. Takayanagi,
Science 289, 606 (2000).

下図：(11-4)型らせん構造の模式図と
透過型電子顕微鏡(TEM)実験



↓ (11-4)型螺旋型多層シェル出現



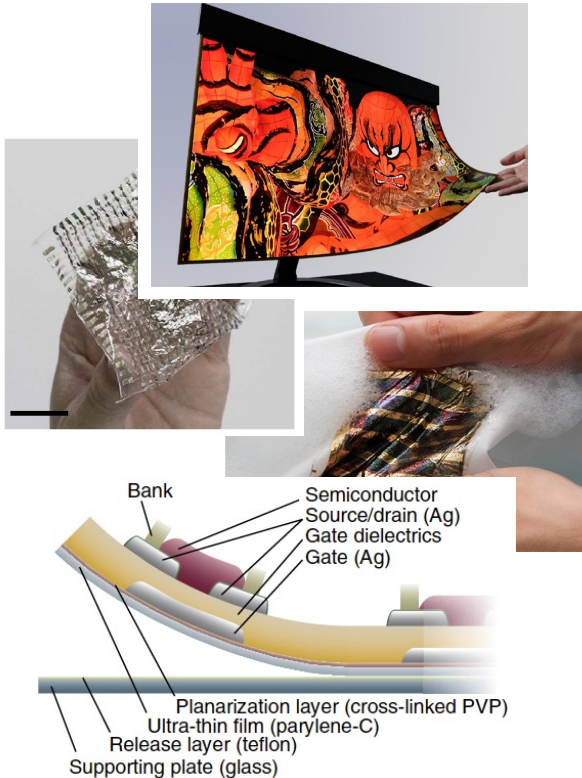
他にも(7-1),(13-6-1)など,

フレキシブル (薄くて柔らかく曲げたり巻いたりできる)光電子デバイス

- ・ 住友化学との産学連携研究
- ・ 白川英樹(2000年ノーベル賞)ら, 伝統的に日本が強い
- ・ 印刷技術で製造された非理想(乱れのある)構造→大規模(10-100nm系)計算が必須

例

- ・ ディスプレー (電流→光)
- ・ 太陽電池・(バイオ)センサー (光→電流)

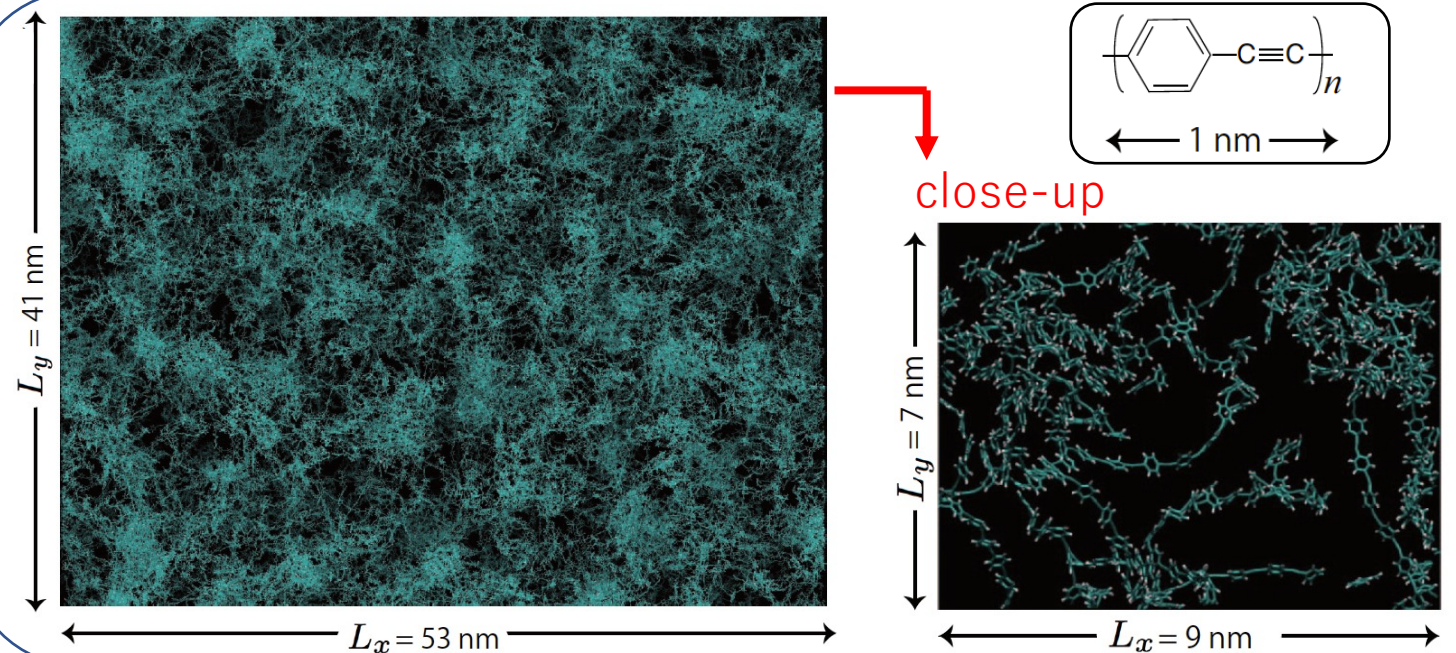


有機EL高分子(poly-(phenylene-ethynylene))集合体の計算

T. Hoshi, *et al.*, Proc. ScaLa16 in SC16, 33 (2016)

→電気伝導機構の解明(速い鎖内伝導+遅い鎖間伝導)→受賞など

図: 計算系(1億原子, ~200nmスケール)

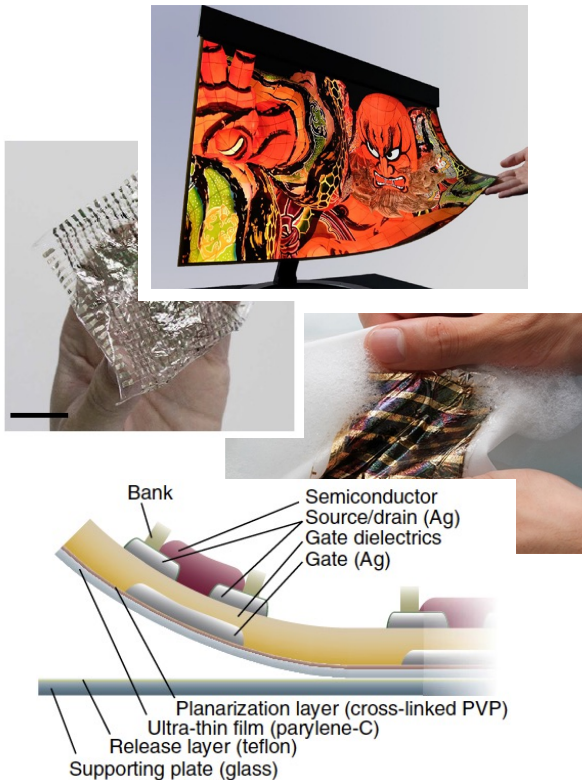


フレキシブル (薄くて柔らかく曲げたり巻いたりできる)光電子デバイス

- ・ 住友化学との産学連携研究
- ・ 白川英樹(2000年ノーベル賞)ら, 伝統的に日本が強い
- ・ 印刷技術で製造された非理想(乱れのある)構造→大規模(10-100nm系)計算が必須

例

- ・ ディスプレー (電流→光)
- ・ 太陽電池・(バイオ)センサー (光→電流)



有機EL高分子(poly-(phenylene-ethynylene))集合体の計算
T. Hoshi, *et al.*, Proc. ScaLa16 in SC16, 33 (2016)

動画: 計算系(1億原子, 200nmスケール)での
量子(ホール波束)ダイナミクスシミュレーション(~1ps)

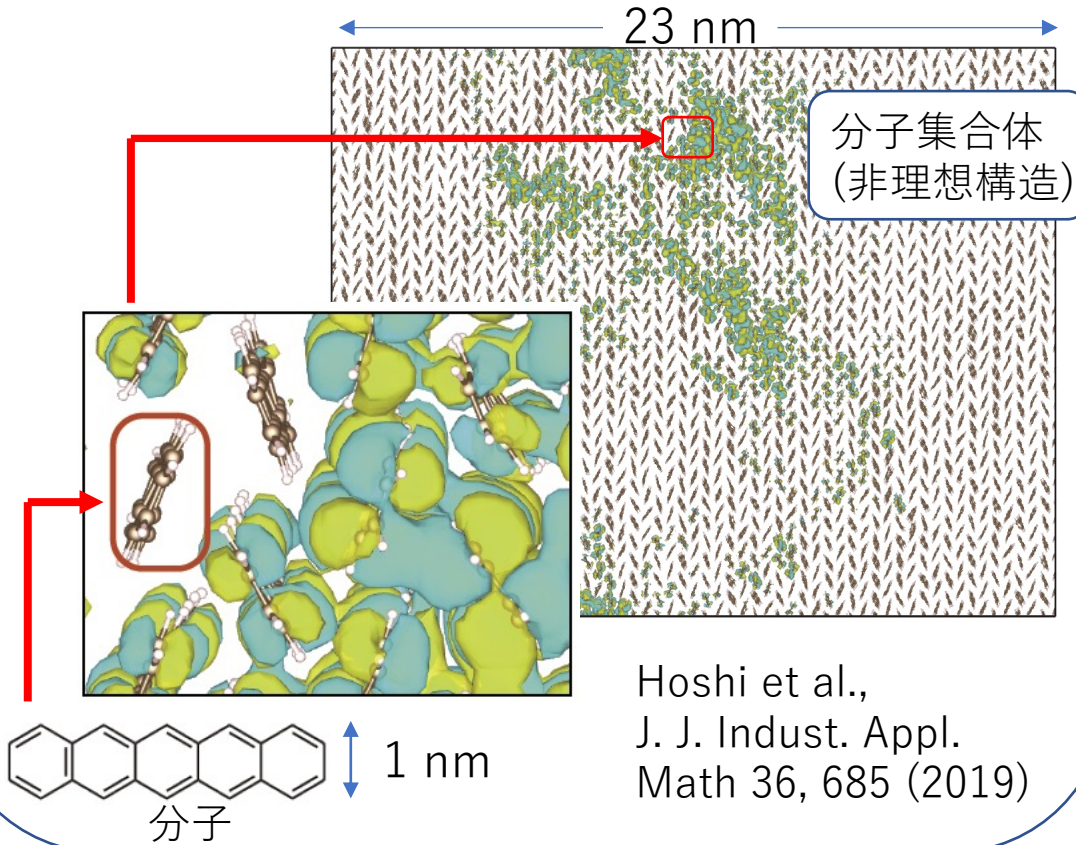
$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}_{\text{eff}} \psi$$
$$\psi \equiv \psi(\mathbf{r}, t)$$



フレキシブル (薄くて柔らかく曲げたり巻いたりできる)光電子デバイス

大規模電子状態計算 (分子集合体計算)

例：ペンタセン薄膜



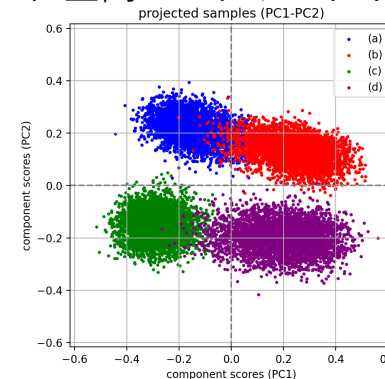
?

非理想構造分子集合体の物質設計

2つのアプローチ

1. デバイスプロセスの直接シミュレーション
2. インフォマティクス (非理想構造の記述子)

例：非理想構造高分子の主成分分析 (データ空間でのクラスタリング)



フレキシブルデバイス (紙のように柔らかい)



- ディスプレー (電流→光)
- トランジスタ
- 太陽電池 (光→電流)

- コード開発：大規模疎行列方程式（シフト型線形方程式）向け汎用数値計算ライブラリ「K ω 」
- 特徴：波動関数の代わりに伝搬関数を用いる量子力学計算手法．量子力学的物質計算全般に有用．
東大物性研との共同研究．プログラム公開(<https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/komega/>)

波動関数と伝搬(グリーン)関数の関係

Generalized eigen-value (GEV) equation

$$H \mathbf{y}_k = \varepsilon_k S \mathbf{y}_k$$

H, S : Hermitian, S : positive definite ($S \doteq I$)

wavefunction
formulation

$$G = \sum_k \frac{\mathbf{y}_k \mathbf{y}_k^T}{z - \varepsilon_k}$$

Generalized shifted linear (GSL) equations

$$(zS - H) \mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (z: \text{complex energy})$$

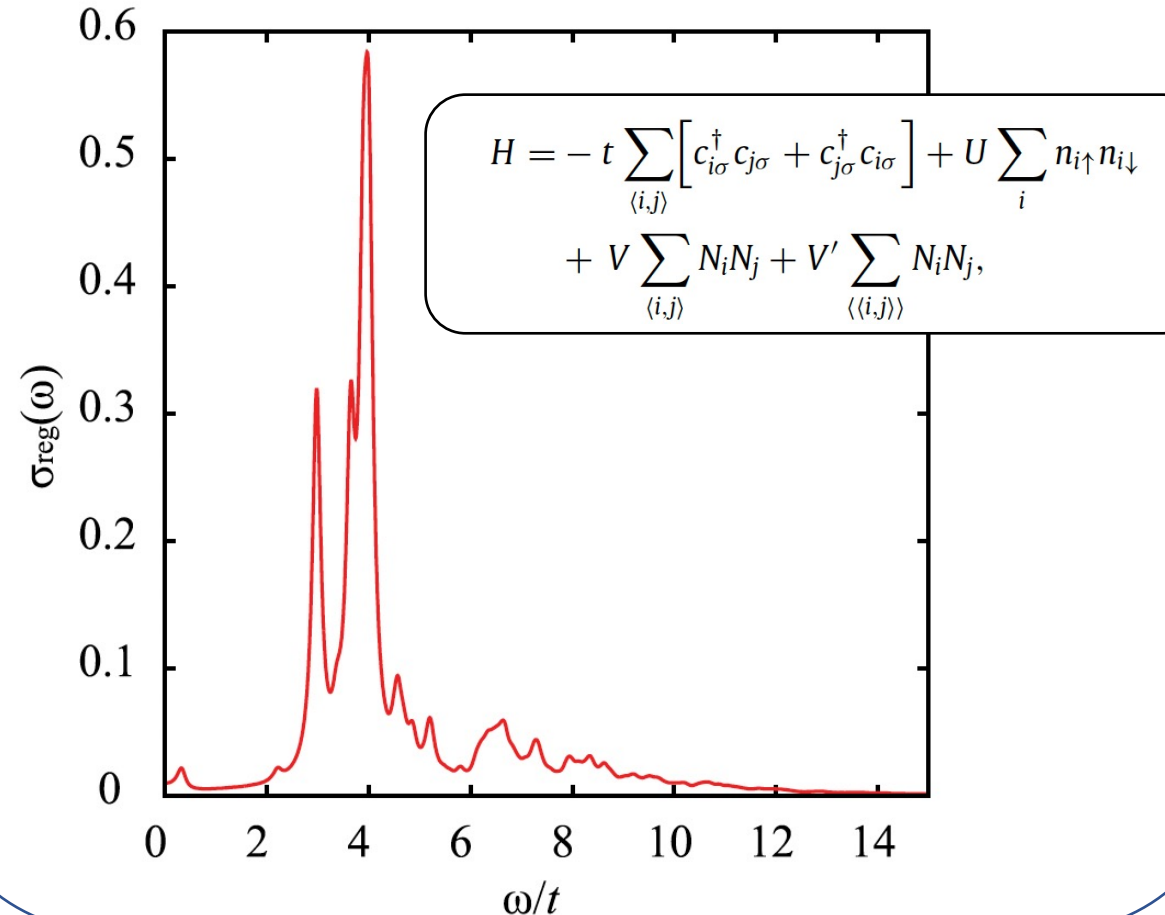
non-Hermitian

$$\longrightarrow \mathbf{x} = G \mathbf{b}$$

with $G \equiv (zS - H)^{-1}$: the Green's function

the propagation
(Green's) function
formulation

図6 拡張ハバードモデル(内図に数式)の光学伝導度計算.



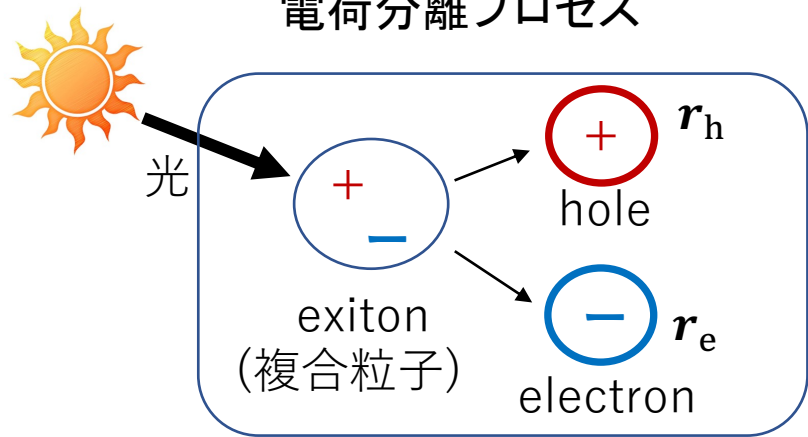
有機フレキシブルデバイス向けの励起電子状態理論

(関連分野：光電子デバイス(光 \rightleftharpoons 電流))

T. Fujita *et al.*, J. Chem. Phys. 151, 114109 (2019)..

(総説*) T. Fujita and T. Hoshi, *Recent advances of the fragment molecular orbital method - Enhanced performance and applicability*, pp 547–566, Springer (2021)

概念図：有機太陽電池の
電荷分離プロセス

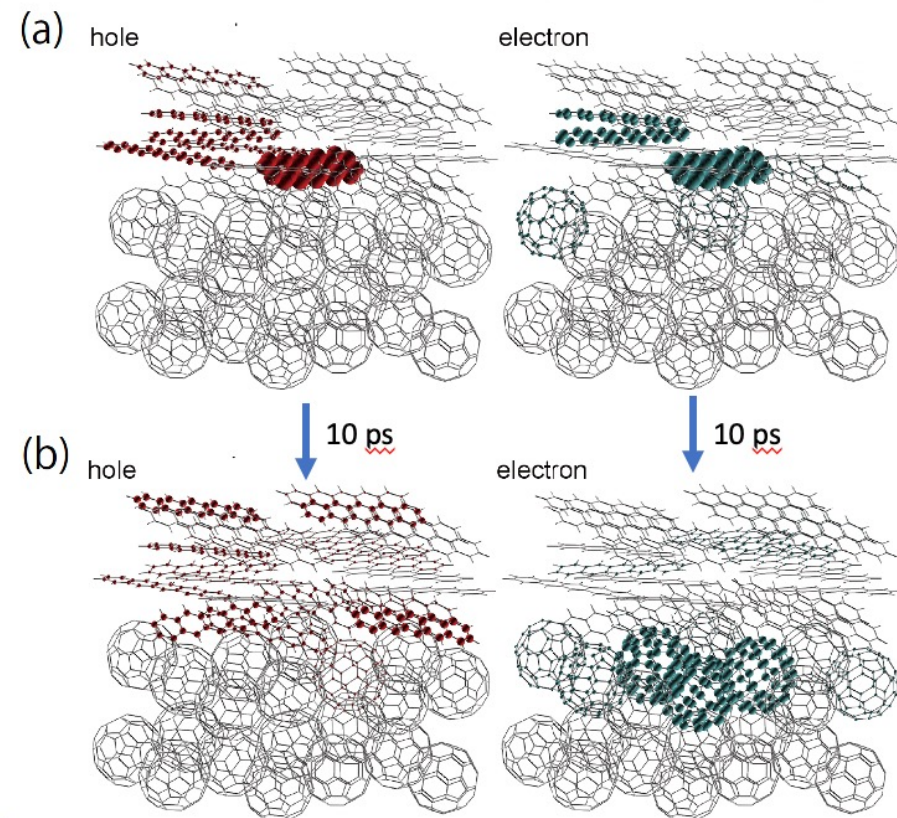


理論：2体波動関数 $\Psi(\mathbf{r}_h, \mathbf{r}_e)$
のダイナミクス

\mathbf{r}_h : 正電荷粒子 (hole) の座標

\mathbf{r}_e : 負電荷粒子 (electron) の座標

図8 \longrightarrow
本論文の結果を用いた、
電荷分離プロセスの
予備的研究。
モデルハミルトニアン
を用いた計算 (総説*)
(a) $t=0$, (b) $t=10$ psにお
ける, hole, electron 分布

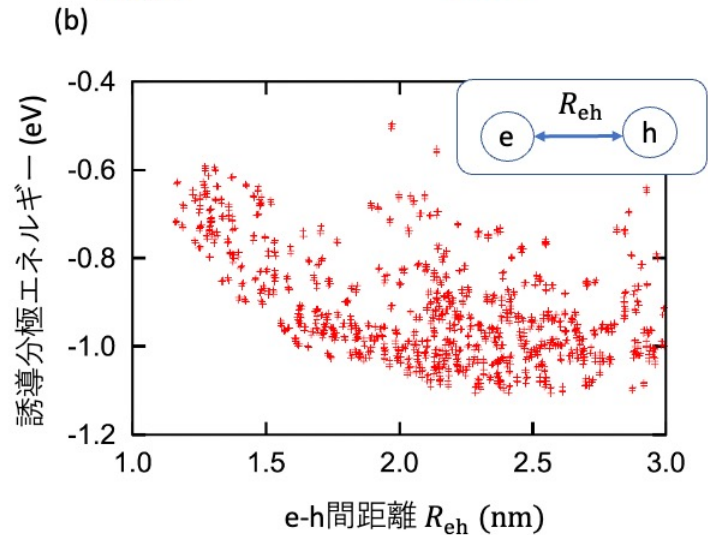


- ・対象：有機太陽電池界面での電荷分離プロセス（光→電流）
- ・手法：藤田貴敏(QST)らによる独自第一原理計算プログラム(ABINIT-MP+GW)
標準的電子状態計算を超えた（「beyond-DFT」）第一原理計算。

(a) $\Sigma(r_1, r_2, i\omega) = -\frac{1}{2\pi} \int d\omega' G(r_1, r_2, i\omega + i\omega') W(r_1, r_2, i\omega')$,
自己エネルギー

$G(r_1, r_2, i\omega) = \sum_p \left[\frac{\psi_p(r_1) \psi_p^*(r_2)}{i\omega - \epsilon_p + E_F} \right]$,
グリーン関数

$W(r_1, r_2, i\omega) = v(r_1, r_2) + \int dr_3 dr_4 v(r_1, r_3) \chi_0(r_3, r_4, i\omega) \times W(r_4, r_2, i\omega)$,
遮蔽されたクーロン相互作用 × 生のクーロン相互作用

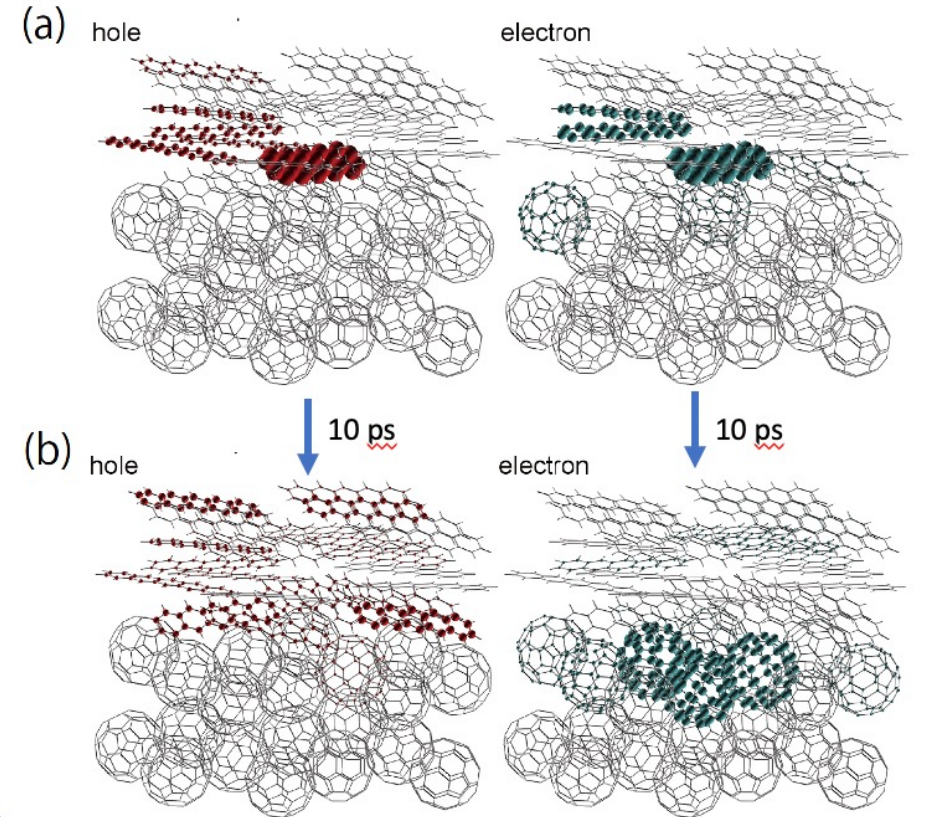


← 図7

- (a) 準粒子(GW)理論の基礎方程式(一部).
(b) 結果:
有機界面系(ペンタセン・フラレン)系における誘導分極エネルギーのelectron-hole (e-h)間距離依存性 (内図に模式図)

図8 →

本論文の結果を用いた、電荷分離プロセスの予備的研究。
モデルハミルトニアンを用いた計算
(a) $t=0$, (b) $t=10$ psにおける, hole, electron分布



富岳を用いたベイズ推定と先端量子ビーム計測への応用

核融合研, KEK物構研低速陽電子施設(客員), 東大物性研(客員) 星健夫

目次

- ・ 計測データ解析フレームワーク「2DMAT」
- ・ 超並列モンテカルロ法によるベイズ推定
- ・ 全反射高速陽電子回折(TRHEPD)への応用
- ・ まとめ

謝辞：和田 健・望月出海

(KEK物構研低速陽電子),
吉見一慶・本山裕一(東大物性研),
福島孝治(東大総合文化),
花田貴(東北大金研),
高草木達・朝倉清高(北大触媒研),
岩本晴道, 木下直希, 中野陽斗,
寺地雄真(鳥取大院工; 学生)

(*)謝辞

- ・ 2DMAT(<https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/2dmat>)は,
「2020・2021年度 東大物性研 ソフトウェア開発・高度化プロジェクト」など
の支援を受け開発・公開され, ISSPスーパーコンピュータにプリインストールされている。
- ・ 2DMATの一部データは, ISSP data repositoryにおける以下ディレクトリにアップロードされている;
2DMAT Gallery (<https://datarepo.mdcl.issp.u-tokyo.ac.jp/repo/17>)

データ駆動科学の立場から開発された、 新しい計測データ解析フレームワーク「2DMAT」

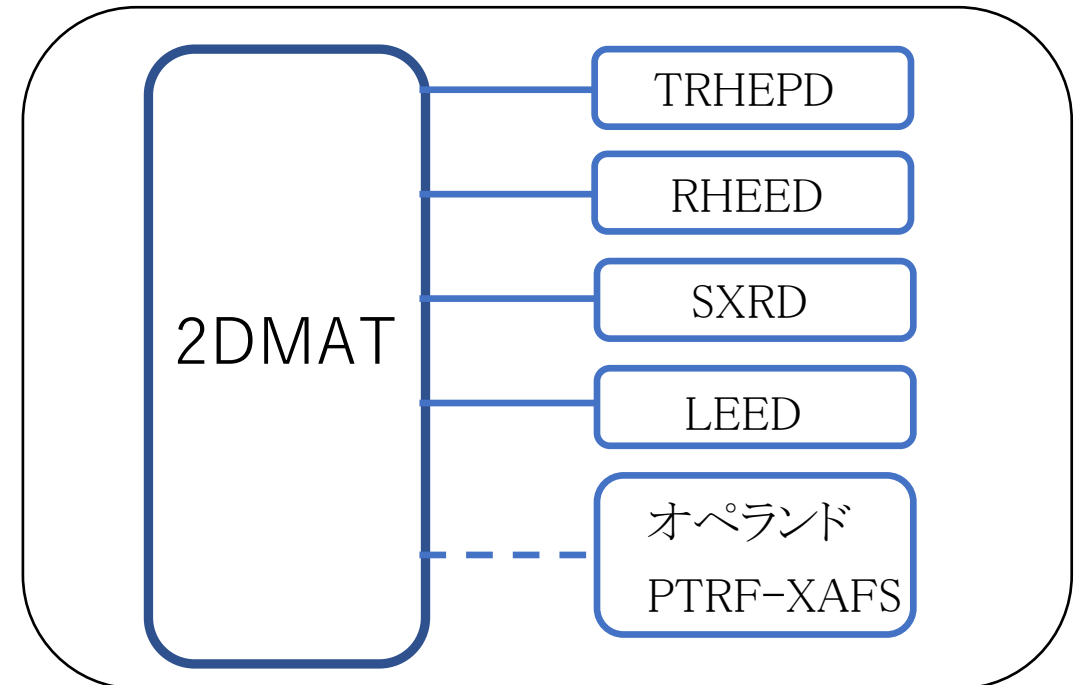
<https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/2DMAT/>; Motoyama, *et al.*, Comp. Phys. Commun. 280, 108465 (2022)

特徴1: 高信頼な計測データ解析を, 高速に実行

- 「見えないものを, 見る」(測定限界突破)
→ 不確かさ・ノイズに隠された「真の情報」を抽出.
- 人的試行錯誤を伴わない
→ 大域解析(解のinitial guessは, 不要)
- 並列(「手分け」できる)アルゴリズム(PCからスパコンまで)

特徴2 : 汎用性:さまざまな計測手法に対応

- 当座対象:2次元物質むけ計測
 - (1) 全反射高速陽電子回折(TRHEPD, トレプト)(本発表)
 - (2) 反射高速電子回折(RHEED)
 - (3) 表面エックス線回折(SXRD)
 - (4) 低速電子回折(LEED)
 - (5) (予定) オペランド偏光全反射蛍光(PTRF)
X線吸収微細構造(XAFS)(高草木・朝倉(北大触媒研))
- 他実験にも対応可.



データ駆動科学の立場から開発された、 新しい計測データ解析フレームワーク「2DMAT」

<https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/2DMAT/>; Motoyama, *et al.*, Comp. Phys. Commun. 280, 108465 (2022)

◎ 大域型逆問題解析

- ・ 内容：測定量 $D \equiv (D_1, \dots, D_m)$ (観測データ) から
目的状態量 (欲しい量) $X \equiv (X_1, \dots, X_n)$ を得る.

・ 解析原理：

- 1) 物理学により，測定量 D を目的量 X の関数 (順問題ルーチン) で与える

$$D_{\text{cal}} \equiv D_{\text{cal}}(X) \quad (1)$$

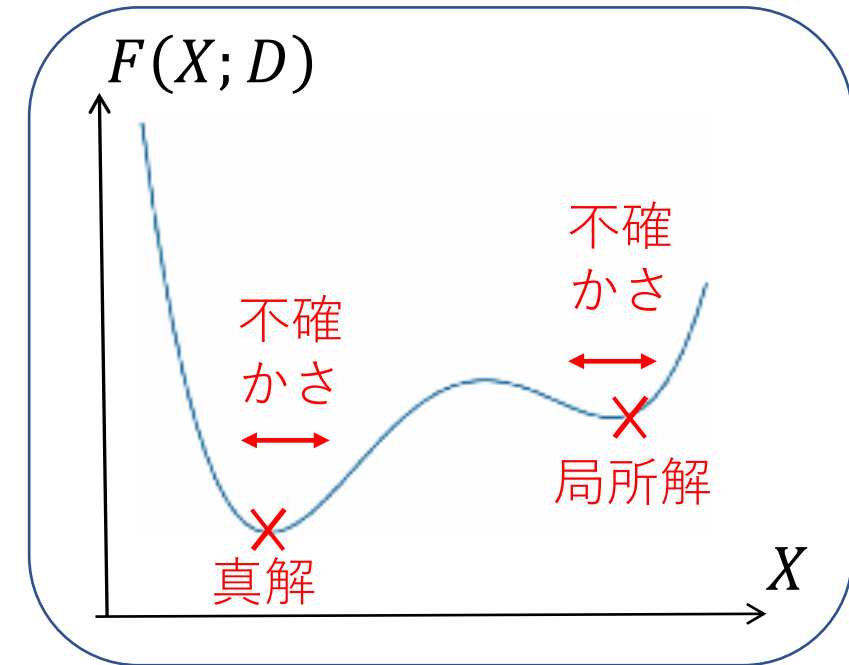
→ 「順問題ルーチン」を取り替えることで様々な実験に対応

- 2) 計算値 $D_{\text{cal}}(X)$ と実測値 D の残差を目的関数 $F(X; D)$ とする.

例えば， $F(X; D) \equiv \sum_i (D_i - D_{\text{cal},i}(X))^2 \quad (2)$

→ 最適化・不確かさ解析を実行

図 目的関数 $F(X; D)$ の概念図



対象実験:全反射高速陽電子回折(Total-reflection high-energy positron diffraction; TRHEPD, トレプト)

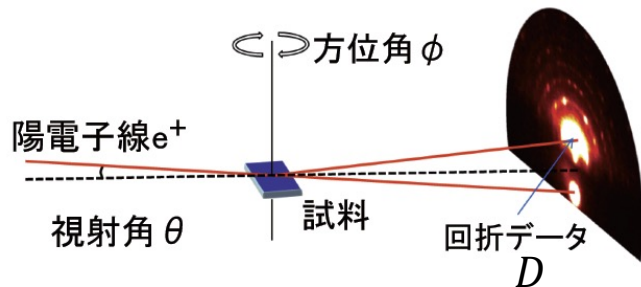
総説 : Fukaya, *et al.*, J. Phys. D 52, 013002 (2019)

解析例 : [1] Hoshi, *et al.*, Comp. Phys. Comm. 271, 108186 (2022)

- 2次元の構造非破壊計測の革新手法 (図1), KEKで実用的測定可(全国共同利用).
反射高速電子回折(Reflection high-energy positron diffraction; RHEED)の陽電子版
陽電子を用いることで, 表面領域 (厚さ < 1nm)のみをプローブできる.
- 回折データ (各スポットの強度) から表面原子配列を決定する

実験装置模式図

(<https://www2.kek.jp/imss/spf/>)

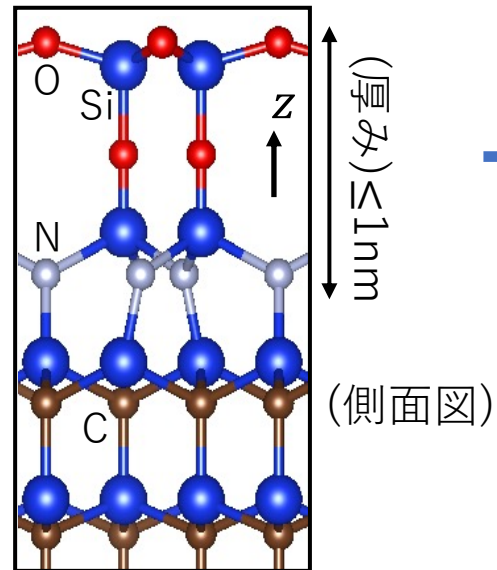


逆問題
解析

$(D \Rightarrow X)$

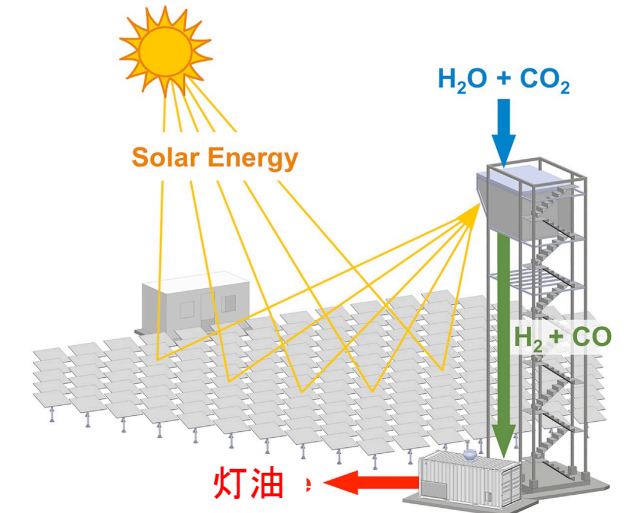
2DMAT
(解析ソフト)

2次元物質(表面) 構造
(原子座標) Xの決定例



出口の1つ:

カーボンニュートラル向け触媒開発
例: $\text{CO}_2 + \text{水} + \text{太陽光}$ で灯油生成



Zoller *et al.*, Joule 6,1606 (2022)

新規 2次元(極薄膜)半導体:

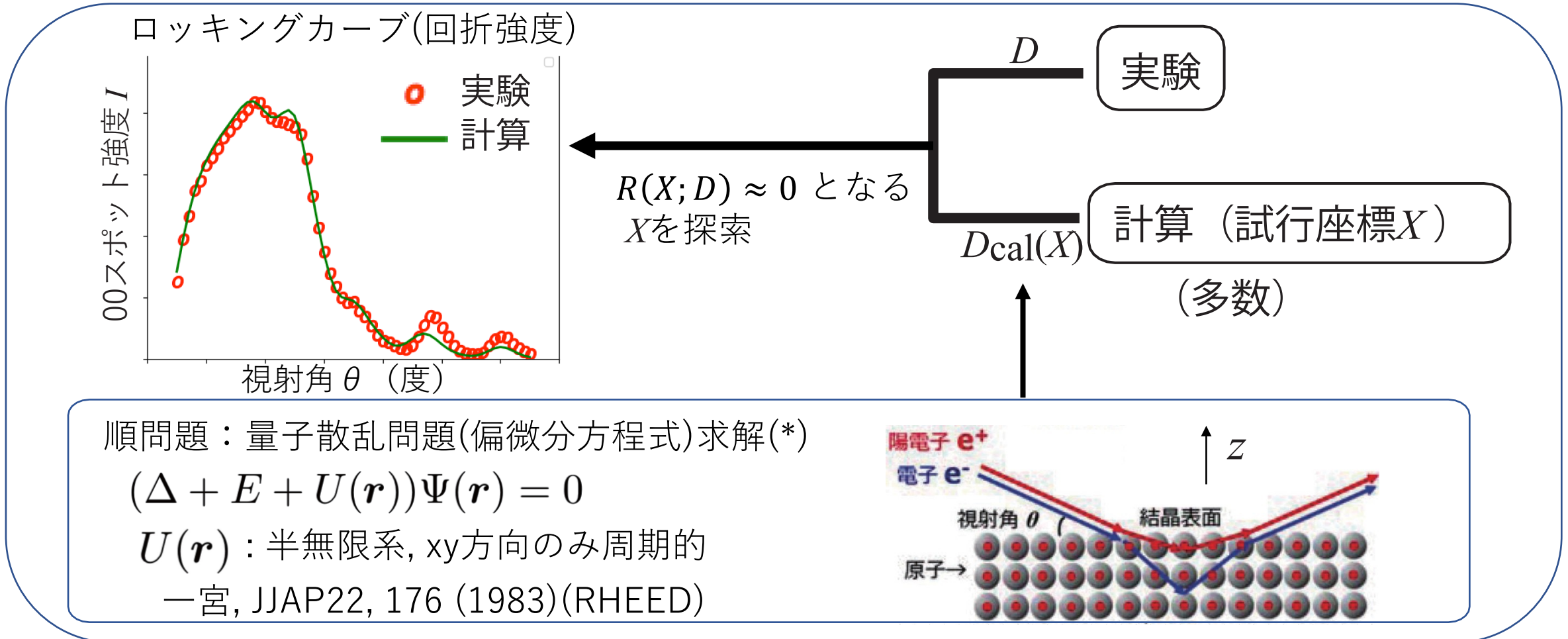
$\text{Si}_4\text{O}_5\text{N}_3 / 6\text{H-SiC}(0001) - (\sqrt{3} \times \sqrt{3}) \text{R}30^\circ$

TRHEPDにおけるデータ解析

例：[1] Hoshi, *et al*, Comp. Phys. Comm. 271, 108186 (2022)

解析原理：測定量（回折強度）における，実験データ D と計算データ $D_{\text{cal}}(X)$ の数値的一致
→ 「R因子（残差）」 $R(X; D) \equiv |D_{\text{cal}}(X) - D|$ の2乗が，目的関数 ($F(X; D) \equiv R(X; D)^2$)

図 TRHEPDにおけるデータ解析の概要図



(*)利用ルーチン：SIM-TRHEPD-RHEED (<https://github.com/sim-trhepd-rheed/>; Hanada, *et al*, Comp. Phys. Commun. 277, 108371 (2022))

データ駆動科学の立場から開発された、 新しい測定データ解析フレームワーク「2DMAT」

<https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/2DMAT/>; Motoyama, *et al.*, Comp. Phys. Commun. 280, 108465 (2022)

◎ 大域型逆問題解析

- ・ 内容：測定量 $D \equiv (D_1, \dots, D_m)$ (観測データ) から
目的状態量(欲しい量) $X \equiv (X_1, \dots, X_n)$ を得る.

・ 解析原理：

- 1) 物理学により，測定量 D を目的量 X の関数(順問題ルーチン)で与える

$$D_{\text{cal}} \equiv D_{\text{cal}}(X) \quad (1)$$

→ 「順問題ルーチン」を取り替えることで様々な実験に対応

- 2) 計算値 $D_{\text{cal}}(X)$ と実測値 D の残差を目的関数 $F(X; D)$ とする.

例えば， $F(X; D) \equiv \sum_i (D_i - D_{\text{cal},i}(X))^2 \quad (2)$

→ 最適化・不確かさ解析を実行

・ 5種解析法が実装

- (1) 局所探索型最適化(Nelder-Mead法)
- (2) グリッド型探索
- (3) 並列化ベイズ最適化(PHYSBOライブラリ(*)を利用)
(*): <https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/PHYSBO/>

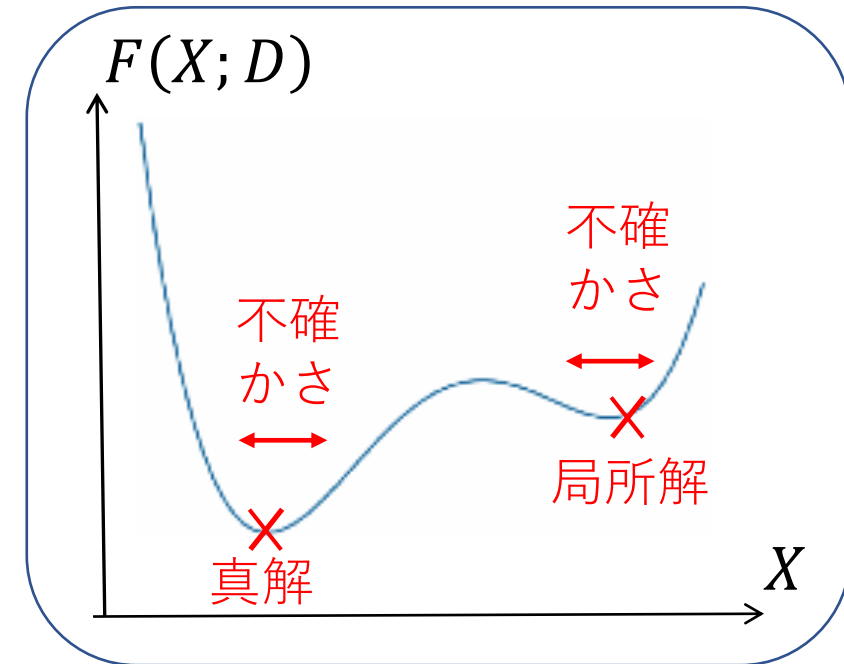
- (4) レプリカ交換(RE)モンテカルロ(MC)法

- (5) **ポピュレーションアニーリング(PA)モンテカルロ(MC)法**

→ 「富岳」などの超並列計算機に最適

ベイズ推定

図 目的関数 $F(X; D)$ の概念図

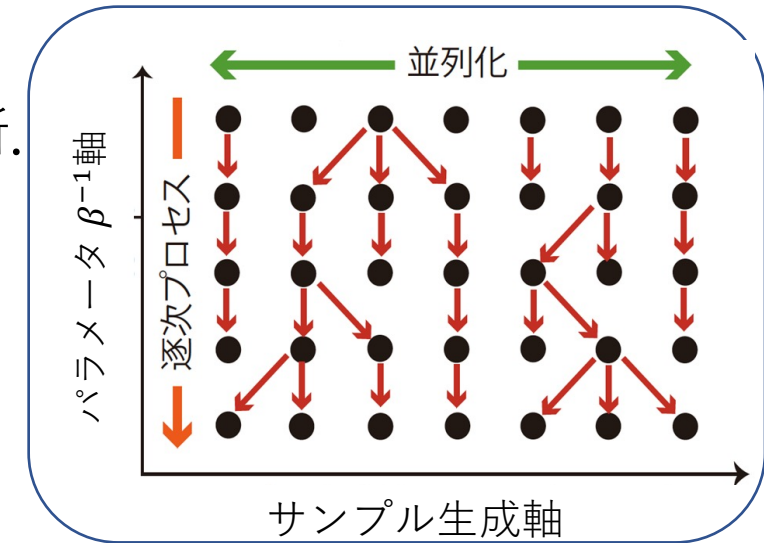


使用解析手法：ポピュレーションアニーリングモンテカルロ法(PAMC法)

K. Hukushima and Y. Iba., AIP Conf. Proc. 690, 160 (2003).

- 並列化されたモンテカルロ法の1種で，大域解析を実現。
→ レプリカと呼ばれる多数サンプルデータを，乱数により生成・更新。
→ 100万以上の並列自由度。「富岳」に理想的(右図)
- パラメータ β (β^{-1} が観測データの不確かさ強度)に依存した事後確率分布 $P(X|D;\beta)$ をヒストグラムとして表現(下図)。

PAMC法の概念図



注：ベイズ事後確率分布 $P(X|D)$ をベイズの定理から計算。

$$P(X|D;\beta) = \frac{P(D|X;\beta)P(X)}{P(D;\beta)}$$

$$P(D|X;\beta) \propto \exp(-\beta F(X, D))$$

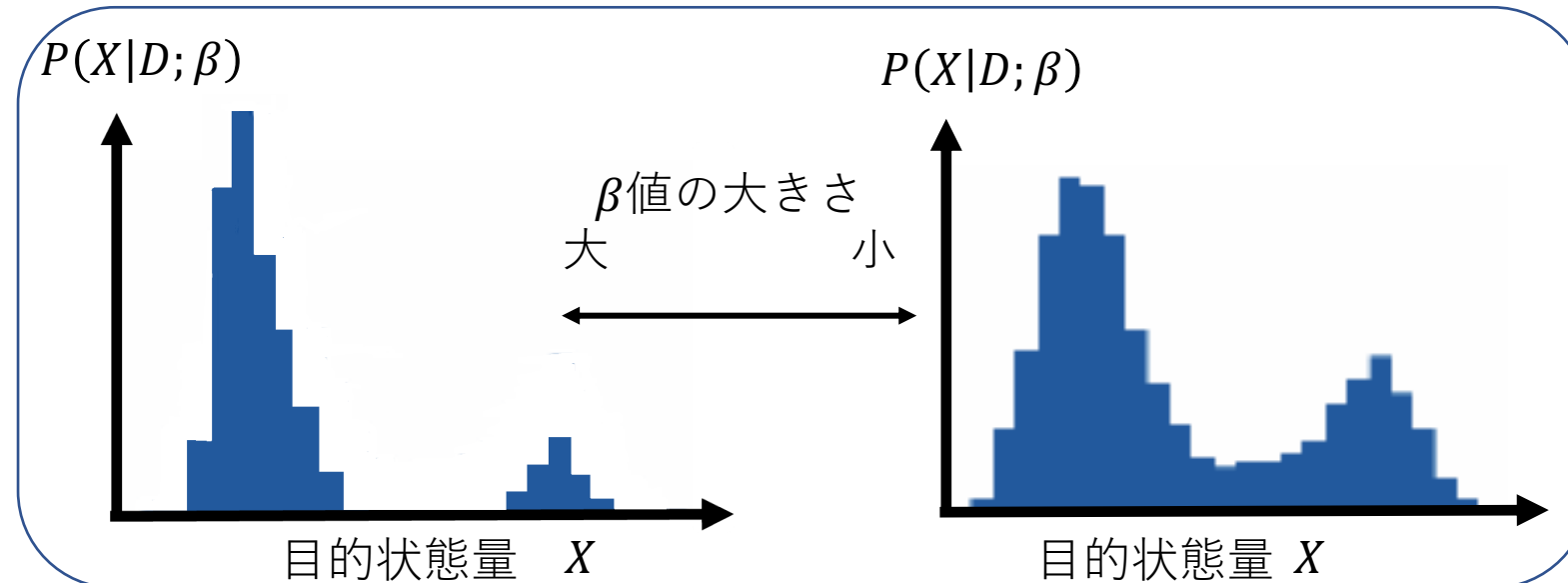
(ボルツマン型尤度関数)

$$F(X, D) \equiv R(X, D)^2:$$

(測定量についての
実験と計算の2乗残差)

$P(X)$ ：定義域で一様分布

ベイズ事後確率分布の模式図



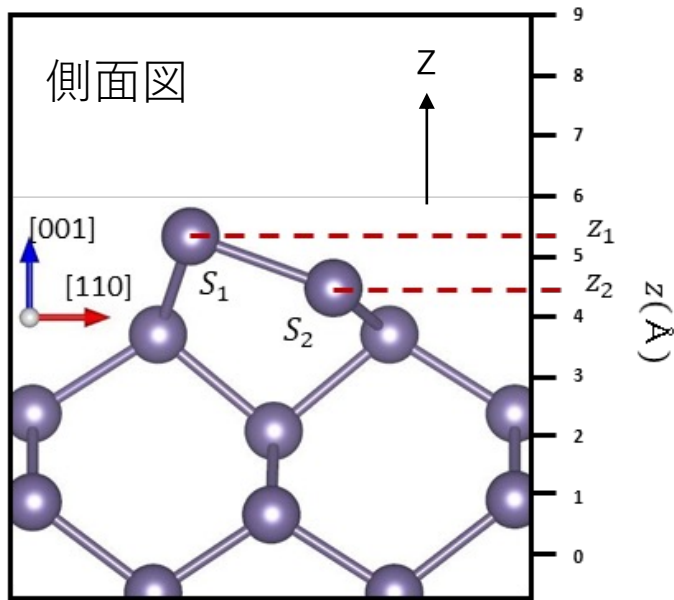
TRHEPD計測におけるベイズ事後確率分布計算のデモ: Ge(001)-c4x2表面構造解析

Motoyama, et al., Comp. Phys. Commun. 280, 108465 (2022)

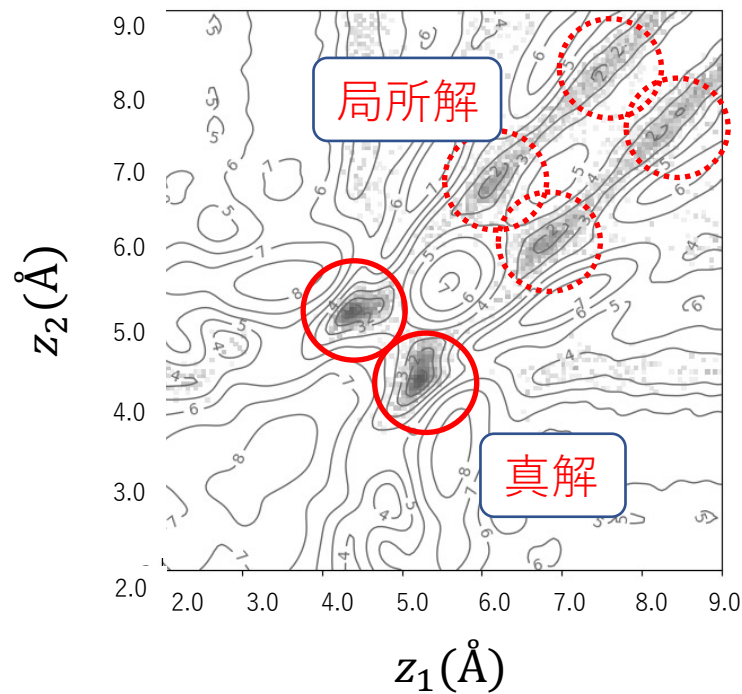
・ 最表面2原子のz座標(z_1, z_2)に対するベイズ事後確率分布 $P(z_1, z_2|D)$

→ 大域解析(initial guess不要). 不確かさパラメータ値 β により, 真解・局所解を検出・区別できる.

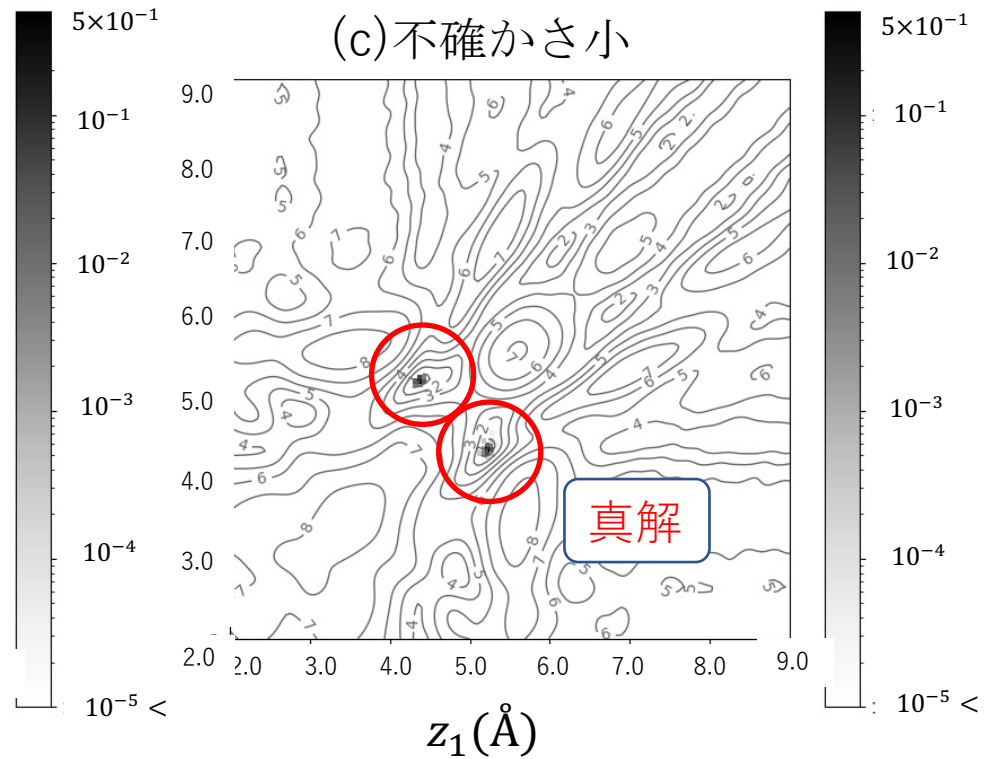
(a) 原子構造



(b) 不確かさ大



(c) 不確かさ小



注: 実測定データの代わりに, 人工データを利用

結果 : Ge(001)-c4x2表面構造解析 2変数探索

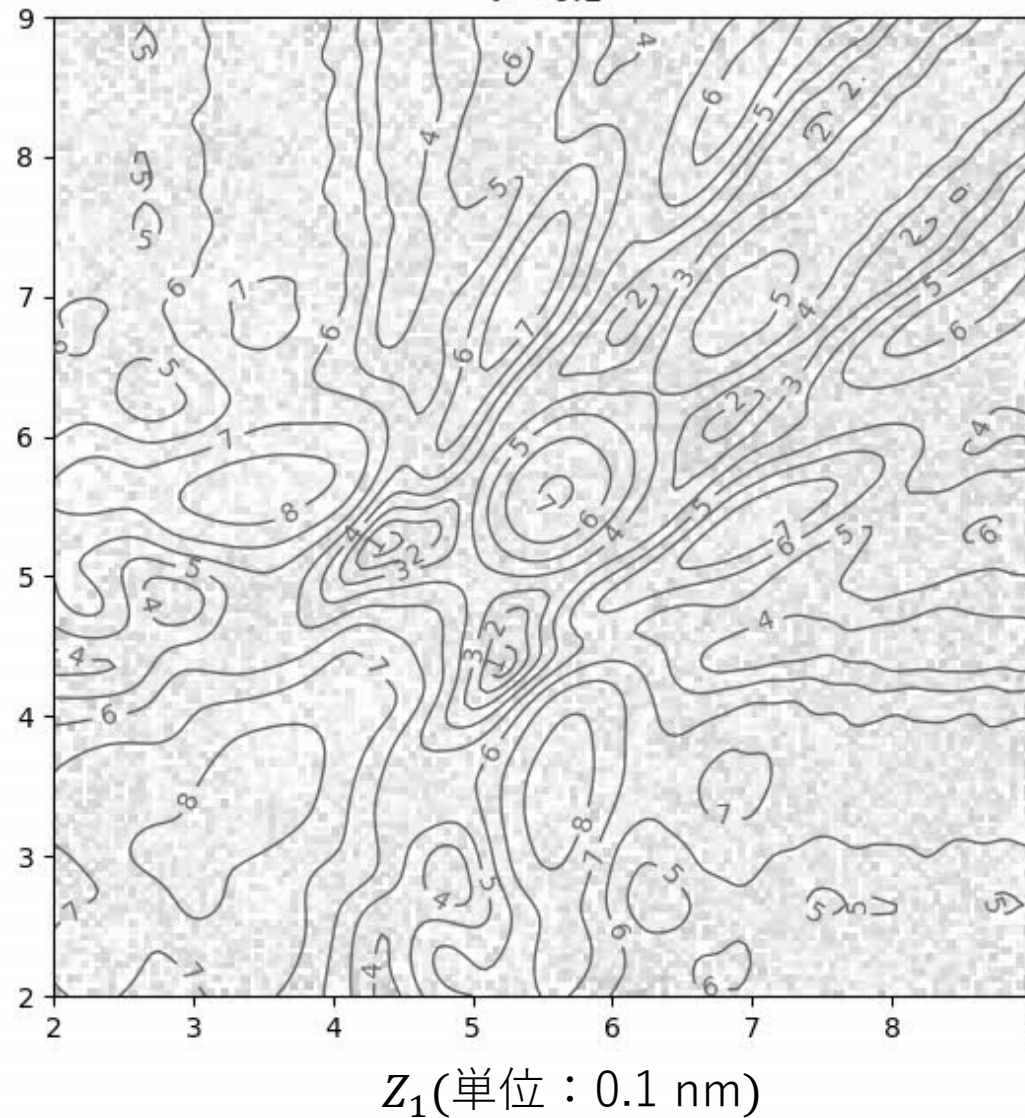
ベイズ事後確率分布 $P(z_1, z_2 | D)$ の不確かさパラメータ依存性 (不確かさ : 大→小)

$\tau = 0.1$

等高線図の値 :

R因子(残差) $R(z_1, z_2) \times 100$

z_2 (単位 : 0.1 nm)



$5 * 10^{** -1}$

$10^{** -1}$

$10^{** -2}$

$10^{** -3}$

$10^{** -4}$

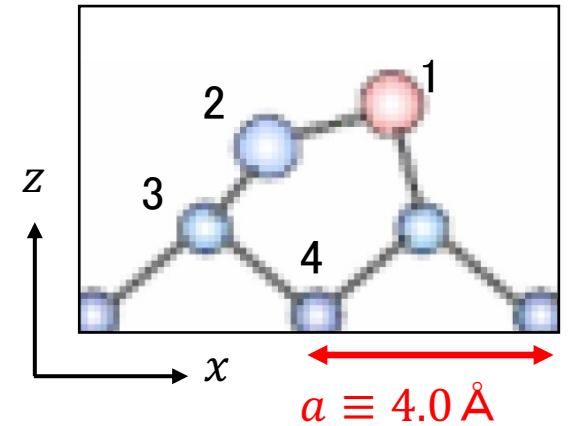
$10^{** -5} <$

Ge(001)-c4x2構造での多波条件実験 ((x,y,z) 座標の決定) 解析途中)

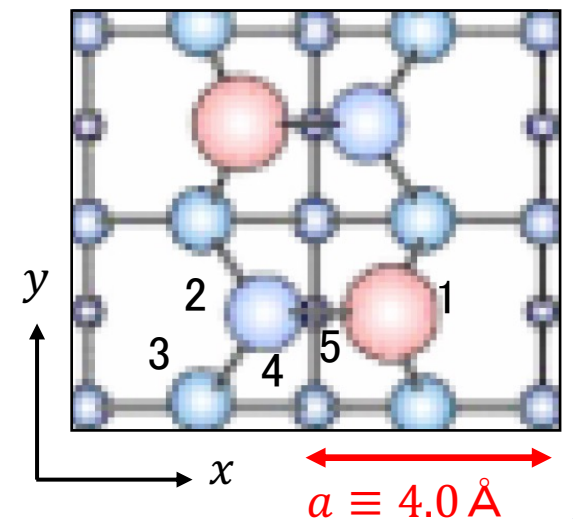
- ・回折スポットは, 2次元インデックス(h, k)で区別される.

Ge(001)-c4x2構造

(a) 側面図(一部)



(b) 上面図



<TRHEPD実験条件>

- ・ e^+ ビームエネルギー: 10 keV
- ・入射方位角 ϕ : $[110]$ (固定)
- ・入射視射角 θ : $0.5^\circ \sim 6.5^\circ$, 0.1° step

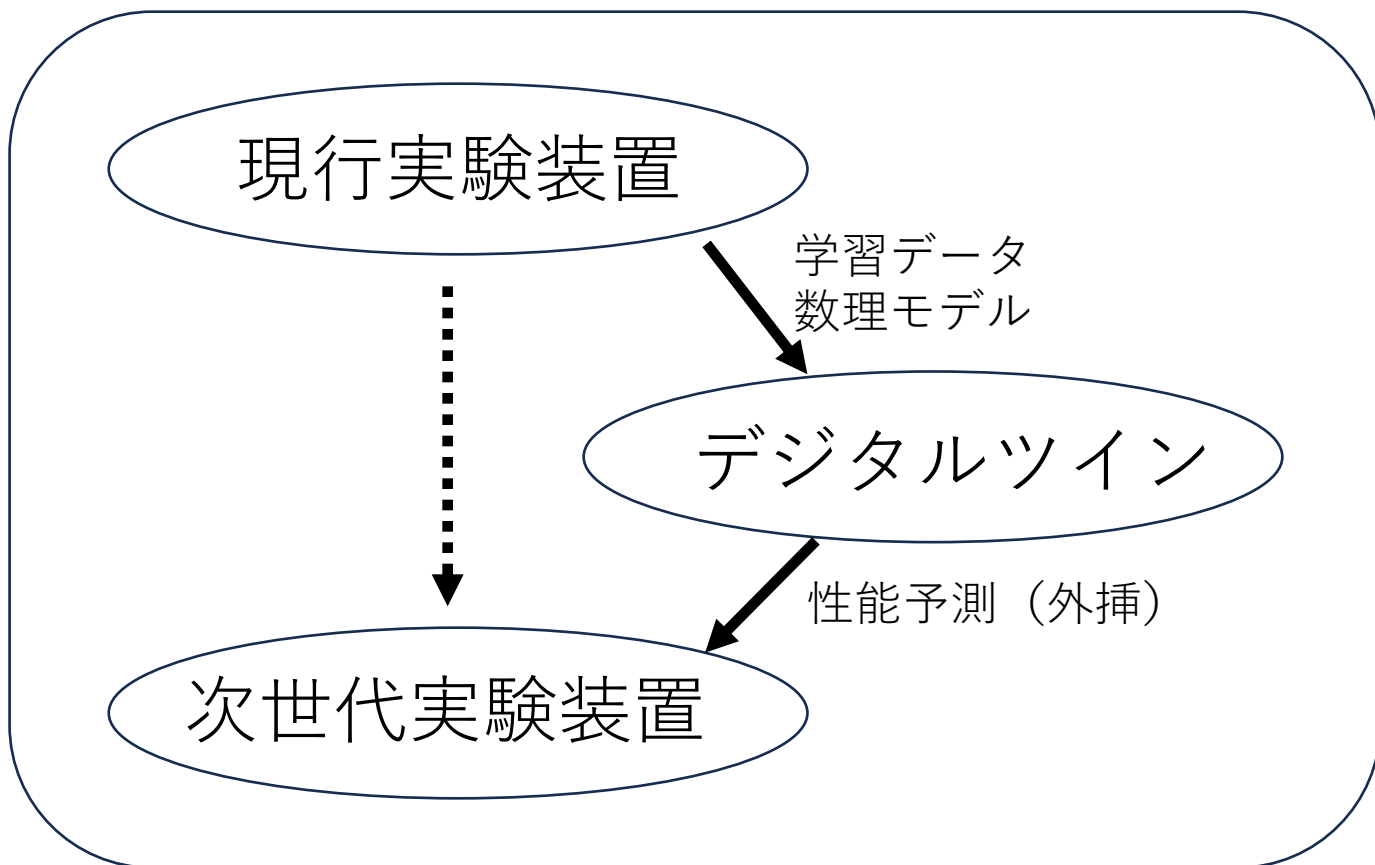
まとめ：

- ・ 「2DMAT」：データ駆動科学の立場から開発された，データ解析フレームワーク
「2DMAT」 (<https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/2DMAT/>)
- ・ 超並列モンテカルロ法(PAMC法)によるベイズ推定（ベイズ事後確率分布計算）
→「富岳」などの超並列計算機に理想的.
- ・ 全反射高速陽電子回折実験(TRHEPD,トレプト)で実践.
→回折データ D から，表面付近（厚さ：サブナノメートル）の原子座標 X を推定.
→大域解析(解へのinitial guess不要)で，真解（正しい原子座標・原子数）が得られた.
- ・ 展望：
 - (i) 「見えないものを，見る」(測定限界突破)
例：TRHEPDによる表面水素の検出（→次世代触媒・電池）
（望月ら，招待講演，SLOPOS-16, Orléans, France, 2023年7月16日）
 - (ii) 種々実験（TRHEPD, RHEED, SXRD, LEED, オペランドPTRF-XAFS），DFT計算との連携
→マルチプローブ計測（同一サンプルを多数手法で計測）における，
データ駆動科学の立場からの統合的データ解析
（関連：KEK物構研での試料ケース共通化）

大局的視点：計算物理学 + データ駆動科学 + 実験科学 + 数理・高速計算技術の融合

視点（1）次世代実験装置開発にむけたデジタルツイン開発

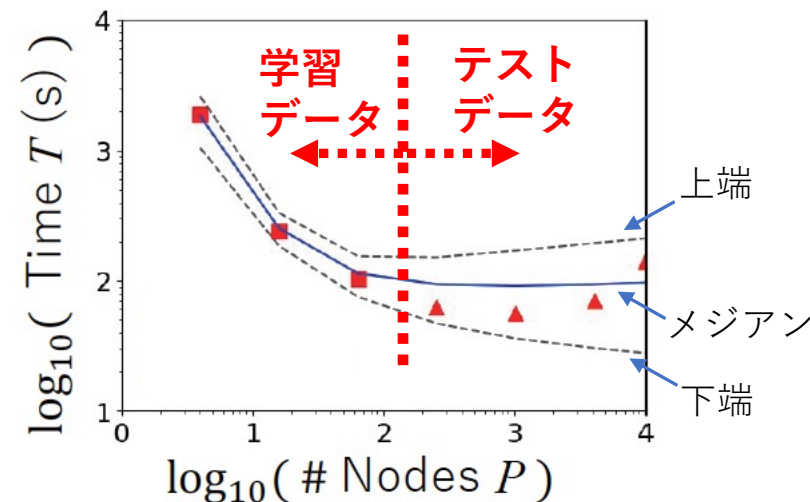
問題設定：要素パラメータが向上したときに、装置性能はどの程度向上するか？
(例：量子ビームをもちいた計測で、入射量子ビームの強度が十倍になる)



外挿型予測の例：

スパコンの計算性能予測（ベイズ推定）

[メジアン, 信頼性区間の上下端をプロット]



Kohashi *et al.*, JSIAM Letters 14, 13 (2022)

視点 (2) 現実的材料むけインフォマティクス

従来型材料インフォマティクス

目的：高機能化
対象：理想構造物質(結晶)

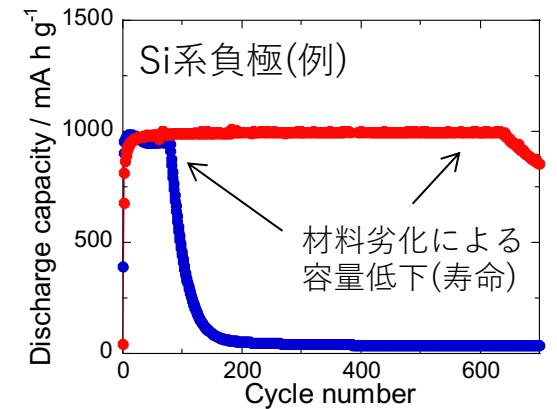
↓ 次世代

現実材料インフォマティクス

目的：高機能化と長寿命化の
ベストバランス
対象：非理想物質
(実際の製造プロセス)

例：有機エレクトロニクス

例：次世代リチウム電池負極
充放電サイクルによる寿命



Domi, *et al.*,
ACS Appl. Mater.
Interfaces 11, 2950 (2019)

視点 (3) 要素技術

- ・ 物質(+場)における種々の量子プロセス
(量子力学によるプロセス) 計算手法
- ・ 次世代高速計算むけ数理手法
(例：行列関数計算, GPU+精度制御型数値計算, 古典 + 量子コンピュータ)