

令和 5 年 6 月 21 日現在

機関番号：15301

研究種目：挑戦的研究（開拓）

研究期間：2020～2022

課題番号：20K20522

研究課題名（和文）高性能計算統計による物性実験データからの情報抽出と計測デザイン

研究課題名（英文）Information extraction and experimental design in condensed-matter experiments based on high-performance computational statistics

研究代表者

大槻 純也（Otsuki, Junya）

岡山大学・異分野基礎科学研究所・准教授

研究者番号：60513877

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 19,900,000円

研究成果の概要（和文）：高性能計算統計を応用した新しい物性実験のデータ解析法を考案した。具体的には、コンプトン散乱実験に注目した。物質にX線を照射した際に起こるコンプトン散乱のデータは、物質中の電子の運動量分布の情報を持っている。このデータは運動量分布を散乱軸に射影したものであるため、運動量分布そのものを得るには、コンピュータ画像診断法（CT）と同様の再構成が必要となる。しかし、測定で得られるデータ量が十分でないため、この再構成は困難である。この問題に圧縮センシングを応用することで、少ないデータからでも精度よく運動量分布を再構成する方法を提案した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

化合物中の電子の運動量分布あるいはその不連続面であるフェルミ面は、化合物の金属としての性質を特徴付ける重要な物理量である。本研究は、これまでフェルミ面の測定法としては応用が限られていたコンプトン散乱の可能性を広げるものであり、今後の応用が広がるものと期待される。また、本研究は計算統計を物性実験に応用した実例としての意義もあり、この方法論の物性実験への応用の広がりも期待される。

研究成果の概要（英文）：Applying high-performance computational statistics, we have developed a new method of analyzing condensed-matter experimental data. Specifically, we focused on Compton scattering experiments. Compton scattering occurs when a material is irradiated with X-rays, and its data contain information on the momentum distribution of electrons in the material. Since this data is a projection of the momentum distribution onto the scattering axis, reconstruction similar to computerized tomography (CT) is required to obtain the momentum distribution itself. However, this reconstruction is difficult because the data obtained from the measurement is not sufficient. We proposed a new method based on the compressed sensing to reconstruct the momentum distribution with high accuracy.

研究分野：物性理論

キーワード：計算統計 データ科学 圧縮センシング スパースモデリング コンプトン散乱 フェルミ面 フェルミオロジ

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

大規模データを扱うデータ科学の方法や機械学習が進歩しており、物質探索など物性研究にも応用され始めている。それでは、これらの新技术を応用して物性実験のデータから何か目に見えない情報を引き出すことはできないだろうか？

本研究ではスパースモデリングと呼ばれる方法論に着目する。スパースモデリングは注目するデータが潜在的に持つ「スパース性（疎性）」を利用して、与えられたデータから少数の重要なパラメータを見つけ出す方法論である。複雑な現象（結果）から本質的なパラメータ（原因）を見つけ出すという、いわば「大規模データに対する物理学的アプローチ」とも言える。このスパースモデリングを含む計算統計の方法を物性実験データ解析に応用して高性能かつ高速な解析を行うことで（高性能計算統計）、実験データの持つ情報を余すところなく抽出するビッグデータ時代の新しい実験データ解析が実現すると期待される。

2. 研究の目的

本研究の目的は、物性物理における実験データから物理情報を抽出するため、高性能計算統計の方法論に基づく革新的な解析手法を確立することである。特に、申請者らがそれぞれ独立に取り組んできた量子多体問題に対するスパースモデリング、推定の信頼度を見積もる交差検証法、機能性物質を対象とした角度分解光電子分光（ARPES）実験とその解析法、などを応用することで、従来の機械学習とは異なる新しい切り口の方法を展開する。

3. 研究の方法

主に、スパースモデリングと呼ばれる方法論を用いる。実験等で得られるデータは適当な基底変換を施すことで圧縮可能である。例えば、画像データであれば、フーリエ変換して高振動数成分を消去することで圧縮できる。データが圧縮可能ということは、そのデータが持つ有意な情報がそれだけ少ないということの意味する。したがって、原理的には、圧縮限度の情報量だけ測定をすれば、必要な情報は取得できる。このような考え方にに基づき、計算統計の方法によりそれを実現した計測および解析法を「圧縮センシング」と呼ぶ。実際に測定に応用する場合には、その測定データがどんな基底変換により圧縮できるか、を見極めることが重要である。

4. 研究成果

本研究では、コンプトン散乱に注目した。X線を化合物に照射すると、コンプトン散乱により波長の変化したX線が観測される。この波長の分布を観測することで、化合物中の電子の運動量分布の情報が得られる。しかし、得られるデータは、運動量分布を散乱ベクトルに射影（2重積分）したものであり、3次元波数空間中の運動量分布そのものを得るには、コンピュータ画像診断法（CT）と同様の再構成が必要となる。しかし、以下の理由により、運動量密度分布の再構成は、通常のCTよりも困難である。

- 通常のCT法では、1次元データから2次元の密度分布を再現するが（図1(a)）、コンプトン散乱では、1次元データから3次元の密度分布を再現しなければならない（図1(b)）。
- CT法では、射影する角度を連続的に変化させてデータを取得できるが、コンプトン散乱では、実験時間

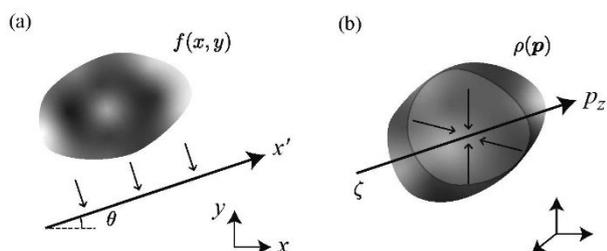


図1 (a) 通常のCT法と (b) 本研究の対象とする状況。

の制限により、10 本程度の散乱軸でしかデータを取得できない。
 このように、極めて厳しい条件であるため、通常の方法では精度よく 3 次元の運動量分布を再構成することが難しい。

本研究では、この問題に圧縮センシングの方法を応用し、コンプトン散乱のデータから 3 次元波数空間における運動量分布を再構成する方法を考案した。その際、運動量分布がフェルミ面近傍で激しく変化し、フェルミ面から離れた運動量領域ではあまり変化しないという固体中の電子に共通する性質を利用した。これは言い換えると、運動量分布の勾配が限られた領域でのみ大きな絶対値を持つ「スパース性」といえる。このスパース性を取り入れた解析法を定式化することで、少ない測定データをフェルミ面近傍の構造を再現するために利用し、従来の方法よりも精度のよい解析法が実現した。実際に第一原理計算による化合物のデータを用いた数値計算により、この新しい方法論の有用性を実証した (図 2)。

この成果は、電子のフェルミ面測定としては応用が限られていたコンプトン散乱の可能性を広げるものである。また、コンプトン散乱はバルク敏感で様々な環境下でも実験ができるため、フェルミ面測定として広く利用されている ARPES 実験やドハース・ファンアルフェン効果測定と相補的な手段であり、今後の応用が広がるものと期待される。本研究は、計算統計を物性実験に応用した実例であり、この方法論の応用の広がりも期待できる。

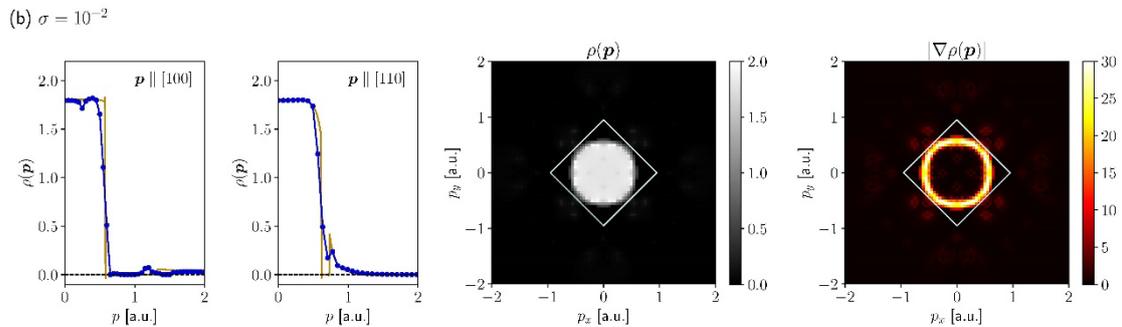


図 2 新しい解析法により得られた運動量分布。左から $\mathbf{p} \parallel [100]$, $\mathbf{p} \parallel [110]$, $p_z = 0$ 面における強度図, 勾配の大きさの強度図 (フェルミ面を強調するため)。白線の枠は第一ブリルアンゾーン。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計16件（うち査読付論文 16件／うち国際共著 4件／うちオープンアクセス 7件）

1. 著者名 Wallerberger Markus, Badr Samuel, Hoshino Shintaro, Huber Sebastian, Kakizawa Fumiya, Koretsune Takashi, Nagai Yuki, Nogaki Kosuke, Nomoto Takuya, Mori Hitoshi, Otsuki Junya, Ozaki Soshun, Plaikner Thomas, Sakurai Rihito, Vogel Constanze, Witt Niklas, Yoshimi Kazuyoshi, Shinaoka Hiroshi	4. 巻 21
2. 論文標題 sparse-ir: Optimal compression and sparse sampling of many-body propagators	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 SoftwareX	6. 最初と最後の頁 101266-1~11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.softx.2022.101266	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 Li YaJun, Sun ZeXu, Kataoka Noriyuki, Setoguchi Taro, Hashimoto Yusuke, Takeuchi Soichiro, Koga Shunjo, Demura Satoshi, Noguchi Kanako, Sakata Hideaki, Mizuguchi Yoshikazu, Matsushita Tomohiro, Wakita Takanori, Muraoka Yuji, Yokoya Takayoshi	4. 巻 92
2. 論文標題 Photoelectron Holography Study of La(0,F)BiS2	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 044801-1~7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.92.044801	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 Sawahara Takahiro, Matsumoto Ryo, Nakahira Yuki, Usui Hidetomo, Kataoka Noriyuki, Saitou Ryusei, Wakita Takanori, Yokoya Takayoshi, Yamashita Aichi, Goto Yosuke, Takano Yoshihiko, Miura Akira, Mizuguchi Yoshikazu	4. 巻 8
2. 論文標題 Synthesis and Characterization of a Trigonal Layered Compound AgInS2	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 11288~11292
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.2c08289	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 Shinaoka Hiroshi, Chikano Naoya, Gull Emanuel, Li Jia, Nomoto Takuya, Otsuki Junya, Wallerberger Markus, Wang Tianchun, Yoshimi Kazuyoshi	4. 巻 63
2. 論文標題 Efficient ab initio many-body calculations based on sparse modeling of Matsubara Green's function	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 SciPost Physics Lecture Notes	6. 最初と最後の頁 1~27
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.21468/SciPostPhysLectNotes.63	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 H. Fujiwara, K. Terashima, J. Otsuki, N. Takemori, H. O, Jeschke, T. Wakita, Y. Yano, W. Hosoda, N. Kataoka, A. Teruya, M. Kakihana, M. Hedo, T. Nakama, Y. Onuki, K. Yaji, A. Harasawa, K. Kuroda, S. Shin, K. Horiba, H. Kumigashira, Y. Muraoka, T. Yokoya	4. 巻 106
2. 論文標題 Anomalous large spin-dependent electron correlation in the nearly half-metallic ferromagnet CoS ₂	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 085114-1 ~ 13
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.106.085114	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, Tamura Ryo, Yoshimi Kazuyoshi, Terayama Kei, Ueno Tsuyoshi, Tsuda Koji	4. 巻 278
2. 論文標題 Bayesian optimization package: PHYSBO	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Computer Physics Communications	6. 最初と最後の頁 108405-1 ~ 8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cpc.2022.108405	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 Li YaJun, Sun ZeXu, Kataoka Noriyuki, Setoguchi Taro, Hashimoto Yusuke, Takeuchi Soichiro, Koga Shunjo, Muro Takayuki, Demura Satoshi, Noguchi Kanako, Sakata Hideaki, Matsushita Tomohiro, Kawasaki Ikuto, Fujimori Shin-ichi, Wakita Takanori, Muraoka Yuji, Yokoya Takayoshi	4. 巻 91
2. 論文標題 Incorporation Site and Valence State of Sn Atoms in Sn-Substituted La(0,F)BiS ₂ Superconductor	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 054602-1 ~ 4
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.91.054602	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 Yokoya Takayoshi	4. 巻 91
2. 論文標題 Photoelectron Diffraction and Holography Studies on Dopant Local Structures	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 091007-1 ~ 10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.91.091007	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 Motoyama Yuichi、Yoshimi Kazuyoshi、Otsuki Junya	4. 巻 105
2. 論文標題 Robust analytic continuation combining the advantages of the sparse modeling approach and the Pade approximation	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 035139-1~7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.105.035139	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 Shinaoka Hiroshi、Otsuki Junya、Kawamura Mitsuaki、Takemori Nayuta、Yoshimi Kazuyoshi	4. 巻 10
2. 論文標題 DCore: Integrated DMFT software for correlated electrons	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 SciPost Physics	6. 最初と最後の頁 117-1~31
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.21468/SciPostPhys.10.5.117	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 品岡寛、近野直也、野本拓也、大槻純也、吉見一慶	4. 巻 56
2. 論文標題 温度グリーン関数の情報圧縮に基づく高速量子多体計算法	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 固体物理	6. 最初と最後の頁 301~314
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	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 Pugliese G. M.、Tortora L.、Paris E.、Wakita T.、Terashima K.、Puri A.、Nagao M.、Higashinaka R.、Matsuda T. D.、Aoki Y.、Yokoya T.、Mizokawa T.、Saini N. L.	4. 巻 1
2. 論文標題 The Local Structure of the BiS2 Layer in RE(0,F)BiS2 Determined by In-Plane Polarized X-ray Absorption Measurements	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physchem	6. 最初と最後の頁 250~258
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/physchem1030019	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 該当する

1. 著者名 Wang Tianchun, Nomoto Takuya, Nomura Yusuke, Shinaoka Hiroshi, Otsuki Junya, Koretsune Takashi, Arita Ryotaro	4. 巻 102
2. 論文標題 Efficient ab initio Migdal-Eliashberg calculation considering the retardation effect in phonon-mediated superconductors	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 134503-1 ~ 8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.102.134503	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 Weh A., Otsuki J., Schnait H., Evertz H. G., Eckern U., Lichtenstein A. I., Chioncel L.	4. 巻 2
2. 論文標題 Spectral properties of heterostructures containing half-metallic ferromagnets in the presence of local many-body correlations	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 43263-1 ~ 14
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.2.043263	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 該当する

1. 著者名 Nagai Kazuki, Anada Masato, Nakanishi-Ohno Yoshinori, Okada Masato, Wakabayashi Yusuke	4. 巻 53
2. 論文標題 Robust surface structure analysis with reliable uncertainty estimation using the exchange Monte Carlo method	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Applied Crystallography	6. 最初と最後の頁 387 ~ 392
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1107/S1600576720001314	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 Nakanishi-Ohno Yoshinori, Yamasaki Yuichi	4. 巻 89
2. 論文標題 Multiplication Method for Fine-Tuning Regularization Parameter of a Sparse Modeling Technique Tentatively Optimized via Cross Validation	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 094804-1 ~ 8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.89.094804	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 -

[学会発表] 計41件(うち招待講演 7件/うち国際学会 1件)

1. 発表者名 石川卓門, 竹尾陽子, 木村隆志, 吉見一慶
2. 発表標題 機械学習を用いたコヒーレント回折パターンのノイズ除去
3. 学会等名 日本物理学会 2023年春季大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 吉見一慶, 田村亮, 山地洋平, 三澤貴宏
2. 発表標題 ベイズ最適化を用いた有効模型推定ツール(BEEMs)の開発
3. 学会等名 日本物理学会 2023年春季大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 横谷尚睦, 片岡範行, 脇田高德, 藤原弘和, 福島優斗, 川口海周, 田中宏明, 森亮, 原沢あゆみ, 近藤猛, 組頭広志, 村岡祐治
2. 発表標題 ハーフメタルLa _{0.7} Sr _{0.3} MnO ₃ の高分解能スピン分解光電子分光
3. 学会等名 日本物理学会 2023年春季大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 齋藤竜聖, 片岡範行, 脇田高德, 景山晴加, 近藤隆祐, 野上由夫, 田中清尚, 横谷尚睦
2. 発表標題 角度分解光電子分光によるノーダルライン半金属LaTe _{1+x} Bi _{1-x} のバンド分散
3. 学会等名 日本物理学会 2023年春季大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 J. Otsuki
2. 発表標題 Multipolar susceptibilities within dynamical mean-field theory and its application to CeB6
3. 学会等名 Simon's collaboration lecture (Online) (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 片岡範行, 田中将嗣, 瀬戸口太郎, Li Ya jun, 川崎郁斗, 藤森伸一, 脇田高德, 横谷尚睦
2. 発表標題 層状窒化塩化物電子ドーピングTiNCIの電子構造研究
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 片岡範行, 花田祐二, 長尾雅則, 脇田高德, 横谷尚睦
2. 発表標題 ROBiS ₂ (R=La, Ce, Nd)の電子状態に対するRサイト置換効果
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 瀬戸口太郎, 片岡範行, Shiv Kumar, 出田真一郎, 島田賢也, 脇田高德, 村岡祐治, 横谷尚睦
2. 発表標題 VUV-ARPESによるハーフメタル強磁性体CrO ₂ の電子構造
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 大槻純也, 吉見一慶, 中西(大野)義典, M. Sekania, L. Chioncel, 水牧仁一郎
2. 発表標題 圧縮センシングによるコンプトン散乱データからのフェルミ面再構成と実験計
3. 学会等名 日本物理学会 第77回年次大会(オンライン開催)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 清水真, D. Guterding, 大槻純也, H. O. Jeschke
2. 発表標題 FLEX calculations for $-(\text{BEDT-TTF})_2\text{X}$ charge transfer salts
3. 学会等名 日本物理学会 第77回年次大会(オンライン開催)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 藤原弘和, 寺嶋健成, 大槻純也, 竹森那由多, H. O. Jeschke, 脇田高德, 矢野佑幸, 細田渉, 片岡範行, 照屋淳志, 垣花将司, 辺土正人, 仲間隆男, 大貫惇睦, 矢治光一郎, 原沢あゆみ, 黒田健太, 幸埴, 堀場弘司, 組頭広志, 村岡祐治, 横谷尚睦
2. 発表標題 ハーフメタル候補物質 CoS_2 における巨大スピン依存電子相関
3. 学会等名 日本物理学会 第77回年次大会(オンライン開催)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 本山裕一, 吉見一慶, 大槻純也
2. 発表標題 スパースモデリングを活用した多軌道系への解析接続手法の検証
3. 学会等名 日本物理学会 第77回年次大会(オンライン開催)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 脇田高德, 村岡祐治, 横谷尚睦
2. 発表標題 Si 3pバンドの共鳴光電子放出
3. 学会等名 日本物理学会 第77回年次大会 (オンライン開催)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 瀬戸口太郎, 片岡範行, 藤原弘和, 村岡祐治, 横谷尚睦
2. 発表標題 高品質CrO ₂ 薄膜の表面電子状態観測
3. 学会等名 日本物理学会 第77回年次大会 (オンライン開催)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 片岡範行, Li Yajun, 瀬戸口太郎, 出村郷志, 坂田英明, 川崎郁斗, 藤森伸一, 田中清尚, 脇田高德, 村岡祐治, 横谷尚睦
2. 発表標題 Pb置換La(0,F)BiS ₂ 超伝導体における電子状態の温度依存性
3. 学会等名 日本物理学会 第77回年次大会 (オンライン開催)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yoshinori Nakanishi-Ohno
2. 発表標題 Compressed sensing in scanning tunneling spectroscopy
3. 学会等名 The 11th Conference of the Asian Regional Section of the International Association for Statistical Computing (IASC-ARS) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大槻純也
2. 発表標題 圧縮センシングを用いたコンプトン散乱運動量密度3次元再構成
3. 学会等名 第71回SPring-8先端利用技術ワークショップ/第3回データ駆動科学によるデータ解析高度化 (SPring-8, オンライン開催) (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 大槻純也
2. 発表標題 強相関電子系におけるスパースモデリング
3. 学会等名 物性コロキウム (東北大学) (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 大槻純也
2. 発表標題 強相関電子系におけるスパースモデリングと圧縮センシング
3. 学会等名 第9回 情報計測オンラインセミナー (オンライン開催) (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 大槻純也, 吉見一慶, 中西 (大野) 義典, M. Sekania, L. Chioncel, 水牧仁一郎
2. 発表標題 コンプトン散乱データからのフェルミ面再構成: 圧縮センシングの応用
3. 学会等名 日本物理学会 2021年秋季大会 (オンライン開催)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 本山裕一, 吉見一慶, 大槻純也, 品岡寛
2. 発表標題 グリーン関数の解析接続ソフトウェア SpM version2
3. 学会等名 日本物理学会 2021年秋季大会 (オンライン開催)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 田村亮, 本山裕一, 吉見一慶, 寺山慧, 植野剛, 津田宏治
2. 発表標題 ベイズ最適化パッケージPHYSBOとその応用例
3. 学会等名 日本物理学会 2021年秋季大会 (オンライン開催)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 塩崎康平, 吉見一慶, 荒畑恵美子
2. 発表標題 オートエンコーダを用いた二次元イジング模型における相推定器の精度検証
3. 学会等名 日本物理学会 2021年秋季大会 (オンライン開催)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Y.J. Li, Z.X. Sun, N. Kataoka, T. Setoguchi, S. Takeuchi, Y. Hashimoto, T. Muro, S. Demura, K. Noguchi, H. Sakata, Y. Muraoka, T. Matsushita, T. Yokoya
2. 発表標題 Local structure study of Sn-substituted La(0,F)BiS ₂ superconductor using photoelectron holography
3. 学会等名 Material Research Meeting 2021, Yokohama, Japan, Hybrid 開催
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 片岡範行, 田中将嗣, 松本美香, Li Ya jun, 高木康多, 保井晃, 脇田高德, 村岡祐治, 横谷尚 睦
2. 発表標題 層状窒化塩化物 Na_xTiNCl の硬 X 線光電子分光
3. 学会等名 日本物理学会 2021年秋季大会 (オンライン開催)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 脇田高德, 矢野佑幸, 寺嶋健成, 水口佳一, 星和久, 後藤陽介, 村岡祐治, 横谷尚睦
2. 発表標題 層状超伝導体 $\text{LnO}_{0.5}\text{F}_{0.5}\text{BiS}_2$ ($\text{Ln} = \text{La}, \text{Ce}, \text{Pr}$ and Nd) の 4d-4f 共鳴光電子分光
3. 学会等名 日本物理学会 2021年秋季大会 (オンライン開催)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 片岡範行, 寺嶋健成, 水口佳一, 高野義彦, 脇田高德, 村岡祐治, 横谷尚睦
2. 発表標題 $\text{La}_{202}\text{Bi}_2\text{Pb}_{256}\text{-xSex}$ の電子構造研究
3. 学会等名 日本物理学会 2021年秋季大会 (オンライン開催)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Y.J. Li, Z.X. Sun, N. Kataoka, S. Takeuchi, T. Setoguchi, Y. Hashimoto, T. Muro, S. Demurra, K. Noguchi, H. Sakata, T. Matsushita, Y. Muraoka, T. Yokoya
2. 発表標題 Photoelectron holography study of Sn-substituted $\text{La}(\text{O},\text{F})\text{BiS}_2$ superconductor
3. 学会等名 日本物理学会 2021年秋季大会 (オンライン開催)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Y.J. Li, Z.X. Sun, N. Kataoka, S. Takeuchi, T. Setoguchi, Y. Hashimoto, T. Muro, S. Demurra, K. Noguchi, H. Sakata, T. Matsushita, Y. Muraoka, T. Yokoya
2. 発表標題 Photoelectron holography of Sn-substituted La(O,F)BiS ₂ superconductor(II)
3. 学会等名 日本物理学会 2021年秋季大会 (オンライン開催)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 藤原弘和, 寺嶋健成, 脇田高德, 矢野佑幸, 細田渉, 片岡範行, 照屋淳志, 垣花将司, 辺土正人, 仲間隆男, 大貫惇睦, 矢治光一郎, 原沢あゆみ, 黒田健太, 辛埴, 堀場弘司, 組頭広志, 大槻純也, 竹森那由多, H.O. Jeschke, 村岡祐治, 横谷尚睦
2. 発表標題 ハーフメタル候補物質CoS ₂ のスピ分解電子構造
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 片岡範行, 田中将嗣, 脇田高德, 村岡祐治, 横谷尚睦
2. 発表標題 層状窒化ハロゲン化物の電子構造
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 長野泰志, 中西(大野)義典, 福島孝治
2. 発表標題 共役変数を用いたガウス過程回帰の再定式化と統計物理的解析
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 吉見一慶
2. 発表標題 物性研究分野でのオープンソースソフトウェア開発・高度化プロジェクトの紹介
3. 学会等名 第13回K-CONNEX研究会（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 井戸康太、本山裕一、三澤貴宏、吉見一慶
2. 発表標題 第一原理有効ハミルトニアンに基づいた鉄系超伝導体の超伝導転移温度の予測器構築
3. 学会等名 物性科学におけるデータ科学の今と未来
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 本山裕一、吉見一慶、川島直輝、田村亮、寺山慧、植野剛、津田宏治
2. 発表標題 ベイズ最適化パッケージ PHYSBO
3. 学会等名 物性科学におけるデータ科学の今と未来
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 伊藤義士、吉見一慶、二国徹郎、荒畑恵美子
2. 発表標題 シミュレーションデータを教師とした機械学習によるBose原子気体超流動の温度推定
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 大槻純也
2. 発表標題 動的平均場理論による非局所相関の計算とGPU化
3. 学会等名 物性研究所スパコン共同利用・CCMS合同研究会「計算物質科学の新展開2020」(招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Tianchun Wang, Takuya Nomoto, Yusuke Nomura, Hiroshi Shinaoka, Junya Otsuki, Takashi Koretsune, Ryotaro Arita
2. 発表標題 Efficient ab initio Migdal-Eliashberg calculation considering the retardation effect in phonon-mediated superconductors
3. 学会等名 日本物理学会2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 長野泰志, 中西(大野)義典, 福島孝治
2. 発表標題 ガウス過程回帰の摂動論的近似
3. 学会等名 日本物理学会2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 長野泰志, 中西(大野)義典, 福島孝治
2. 発表標題 ガウス過程回帰の摂動論的近似
3. 学会等名 第23回情報論的学習理論ワークショップ
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 吉見一慶
2. 発表標題 スパースモデリングを用いた解析接続と圧縮基底の応用
3. 学会等名 東京大学物性研究所 機械学習セミナー
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

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
研究分担者	中西 義典 (Nakanishi Yoshinori) (00767296)	同志社大学・文化情報学部・准教授 (34310)	
研究分担者	吉見 一慶 (Yoshimi Kazuyoshi) (10586910)	東京大学・物性研究所・特任研究員 (12601)	
研究分担者	横谷 尚睦 (Yokoya Takayoshi) (90311646)	岡山大学・異分野基礎科学研究所・教授 (15301)	

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
---------	---------