科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 4年 6月14日現在

機関番号: 13901

研究種目: 新学術領域研究(研究領域提案型)

研究期間: 2017~2021 課題番号: 17H06469

研究課題名(和文)材料観察画像からの機能推定

研究課題名(英文) Material Function Estimation Based on Real Space Observation

研究代表者

一木 輝久(Ichiki, Akihisa)

名古屋大学・未来社会創造機構・特任准教授

研究者番号:40711156

交付決定額(研究期間全体):(直接経費) 42,930,000円

研究成果の概要(和文):機械学習を高機能材料の開発に利用することがマテリアルズ・インフォマティクスの主眼であるが、安全な材料開発のためには、予測された材料の機能を人間が理解できる形で説明する必要がある。そこで本研究では、物質の構造と機能という、材料科学における人間の理解の本質をなす二要素の間の関係を明らかすべく研究を行い、物質の3次元構造や、分子式によって示唆される物質の構造が、確かにその材料が示す物性値の予想に利用できることを示した。また、機械学習は一般に最適化問題として理解できるが、その計算時間と計算精度のトレードオフ関係を明らかにした。これによってより効率的な機械学習アルゴリズムが構築できるものと期待される。

研究成果の学術的意義や社会的意義 材料開発分野において機械学習の積極的利用の必要性が認識され、マテリアルズ・インフォマティクスという研究領域が開拓されて久しい、一方で、従来の機械学習は大量のデータに合わせた傾向を出力するにとどまり、材料の示す多様な物性を予測できるほどの表現力を獲得していない、また、通常の機械による学習は単なるパラメータの調節にすぎないため、背景にある理論が無視され、材料世界の科学的理解を助ける道具としては不十分である、本研究ではこの困難を解消し安心して機械学習を利用するため、(i)材料物性の理論的理解を助けるための機械学習、(ii)計算結果の精度とそれを得るまでにかかるコストの評価に焦点を当てて研究を行った。

研究成果の概要(英文): The use of machine learning for the development of highly functional materials is the main focus of materials informatics. However, for the safety of the materials development, it is necessary to explain the predicted functions of materials in terms of what humans can understand. In this study, we have investigated the relationship between the structure and function of a material, which are two essential elements of human understanding in materials science, and have shown that the three-dimensional structure of a material and the structure of a material suggested by its molecular formula can indeed be used to predict the physical properties that the material will exhibit. We also clarified the trade-off relation between computation time and computation accuracy for a solver of an optimization problem, which typically appears in the learning phase of machine learning. This is expected to lead to the construction of more efficient machine learning algorithms.

研究分野: 統計力学

キーワード: 統計力学 機械学習 マテリアルズ・インフォマティクス 最適化問題 量子アニーリング

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

機械学習においてモデリングとサンプリングは相補的な立場にある .材料科学で言え ば、材料設計(モデリング)ができれば物性が予測(サンプリング)され、物性が分 かれば材料の構造が推測できる、機械学習の発展で期待されるのは、モデリ ング面では現象予測の最適化、サンプリング面では計測過程の最適化である. 本計画研究では機械学習により、高速・高精度なフィルタを構築するだけで なく、計測過程を最適化した「頭脳つき計測機器」を提案することで、創発 的な機械学習利用の方法論の確立を図る.

材料の機能は、それを構成する素材、環境、プロセスなどの要因によって 物理量の場が決定され、その空間的構造を下地に発現する(図1).本計画 図1.材料における機能と構造 研究では、数学班(A03-1)、実験班(A03-3)、シミュレーション班(A02-2) との連携の下、分野横断的な独自の着想に基づきモデリングとサンプリン グの両面で新たな材料科学の枠組み形成を狙う.



図2.機械学習の利用

2.研究の目的

近年発展の目覚しい機械学習を利用することにより、材料科学を系統的に理解し、新規 材料の作製に利用しようというマテリアルズ・インフォマティクスに期待が集まってい る. 本計画研究では、新規機能性材料の設計・開発をアシストする人工知能を構築する べく、材料の実空間観察画像からその機能を高速かつ正確に推定する手法を、個別の試 料に関する検討および材料全般にまたがる横断的考察の両者に基づいて開発する、特に、 材料のトポロジーと機能の関係を理解することが本領域の課題である.本研究は、統計 的機械学習の手法を用いることで、理論での予想を実験で検証するためのデータ解析法 を与えるという従来のデータ解析の役割に加え、理論で見落とされていたトポロジーと 機能の非自明な相関を実験データから探索、新たな実験手法を提案するという役割も果 たす.

具体的には以下の課題に取り組む.

[課題 1] 機械学習を利用した構造 機能相関の抽出

試料の観察画像等の構造データからその機能と相関を持つ構造の特徴量を機械学習 によって抽出することを検討、性能評価を行い、新たな材料開発手法を提案する、

[課題 2] 機械学習を利用した最適計測の研究

測定対象となる試料の静的および動的モデルをリアルタイムで推測し、計測を適応的 に行うことで、コストを最適化した計測手法を検討・提案、性能評価を行う、また、デ - タ取得を効率よく行うためのアルゴリズムを検討する。

[課題3] 数理的視点からの高速化および高精度化の研究

材料物性の知見に根ざして、個別事例にとらわれない数理的観点から学習の高速化と 予測の高精度化について検討する.

対象とするデータは個別の試料である一方で、個別事例に閉じない領域横断的な材料 データ処理における機械学習の数理的性質を明らかにすることで、機械学習のマテリア ルズ・インフォマティクスへの汎用な応用可能性を示す.

3.研究の方法

それぞれの課題において、具体的に以下の研究項目に取り組んだ.

[課題 1] 機械学習を利用した構造 機能相関の抽出

実験班などと連携して、CNT と高分子の複合材料(1次元的)や網目状の高分子材料の解析をおこなった.また、シミュレーション班と連携して高分子材料の3次元構造データに対して解析をおこなった.特に、CNT の解析においては、実空間顕微鏡画像から物性値を予測するため、画像に対して電荷キャリアの疑似ポテンシャルを推定し、パーコレーションから電気伝導度を推定した.また、高分子の立体構造を示したシミュレーションデータに対しては、光分子構造を決定するFlory-Huggins 理論との整合性の観点から理論に登場する幾つかのパラメータの値をデータから決定し、物性予測に役立てた.また、変分オートエンコーダを用いて材料の立体構造から低次元の特徴量を抽出し、これと相関のある物性値を予測した.

[課題 2] 機械学習を利用した最適計測の研究

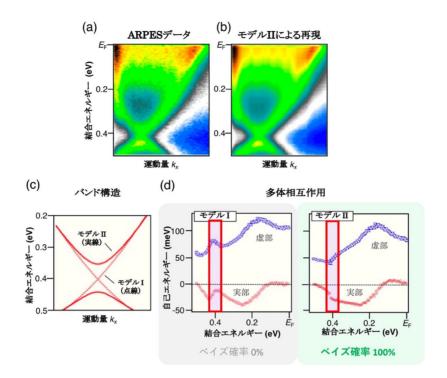
低分解能の計測で精度の良い予測を実現するため、生体分子をターゲットとしてその動的挙動をスパースモデリングを利用して高精度で予測した.また、ベイズ推定や量子アニーリングを利用した原子の配置推定をおこなった.これらは計測装置を簡便化しながら精度の良い測定を行うための技術を提供するものである.

[課題3] 数理的視点からの高速化および高精度化の研究

情報理論、非平衡統計力学、確率過程の知見を元に、機械学習の学習フェーズの数理的側面を理解した.特に、非平衡定常状態の物理の視点から最適解への緩和の速いダイナミクスが示唆される.これは機械学習における学習が速いアルゴリズムと対応するものである.また、スペクトルギャップの一般論から、最適化問題における解の精度と計算時間のトレードオフ関係を示すことができた.これは機械学習において、計算コストと予測精度のトレードオフ関係を与えるものとして理解される.

4. 研究成果

(1) ベイズ推定による高精度なモデル選択 ARPES によって得られたトポロジカル絶縁体のバンド構造に対し、ベイズ推定によるモデル選択を施すことによって相対論的 Dirac 電子の質量を高精度で求めることに成功した.従来の解析方法では有限解像度のバンド構造データに対してパラメータ推定を行ってもモデル選択の自由度が残されていたが、選択されたモデルの良し悪しを統計力学的な手法を用いて定量的に評価することによって物理の異なる複数のモデルから妥当なモデルを選択することができる.この手法は ARPES イメージだけに限らず、広範な実験データの解析に応用できるため、将来的にはさまざまな機能性材料の研究を効率よく行える可能性がある.



(2) 非エルミート系におけるスキンモードの理解

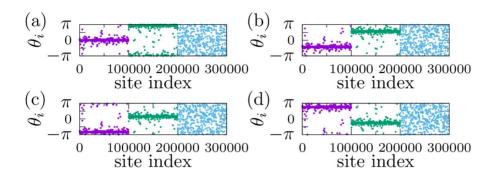
非エルミート系では物質表面の境界条件に鋭敏なスキンモードと呼ばれる励起モードが生じることが知られており、これによってさまざまなトポロジカル物性が発現する。今回、この境界条件に敏感なスキンモードを、高次元エルミート系の境界とみなして統一的に記述することに成功した。これによって複雑な境界条件を持つ一般次元の物質における表面物性を統一的に予想できると期待される。特に非エルミート系の表面では従来の物質では知られていない特異な輸送現象が見られるなど、バルク材料にはない新規のトポロジカル物性が発現することが期待されている。この意味で、本研究は次世代材料への理論的アプローチを大きく前進させたものと言える。



スキンモードの例.物質の端(境界)に局在した励起モードが発生し、これによって特異な輸送が発現する.

(3) 結合振動子系におけるキメラ状態の厳密な解析手法

結合振動子系において、全ての振動子の固有振動数が同一の場合は位相のそろった振動子の集団(クラスター)が複数存在するキメラ状態は起こらないと考えられていた。これに対し、振動子の初期位相がローレンツ分布に従う場合、Kuramoto-Sakaguchi モデルと呼ばれる結合振動子系の典型的なモデルでは、任意時刻の位相分布を厳密に追跡することが可能であることが示された。この方法を拡張することによって、位相の初期分布が複数のローレンツ分布の重ね合わせで与えられる場合についても、任意時刻の位相分布を厳密に追跡することができる。これによって、初期条件に依存して遷移過程で長時間キメラ状態が持続する場合がありうることが示された。結合振動子系が作り出す時空間パターンは脳モデルに代表されるように、記憶や計算といった情報処理機能と密接に関係する。今回の成果は、リザバーコンピューティングなど物理系の時空間パターンを利用した情報処理装置の性能評価や設計指針を与えるための基礎になると期待される。



単一固有振動数の振動子集団によるキメラ状態. 振動子の位相が揃った集団(クラスター)が複数見出せる.

(a)-(d)の順に時間が経過している.

(4) ナノクラスタの電子線 CT データからの3次元再構成

金のナノクラスタに電子線を照射することで得られる電子線 CT データはナノクラスタの原子配置の情報を持っているものと期待できる.しかし、ナノクラスタの質量は小さいため、電子線を多数回照射すると、クラスタ自体の構造が変化してしまう恐れがある.このため、ナノクラスタについて、3次元的な原子配置を得るために様々な角度から電子線を照射することは困難であった.そこで、スパースモデリングの手法を利用することにより、電子線の照射回数を減らしながら、高精度で原子の3次元配置を推定することを目指した.

5 . 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計7件(うち査読付論文 6件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 5件)

[雑誌論文] 計7件(うち査読付論文 6件 / うち国際共著 1件 / うちオープンアクセス 5件)	
1.著者名	4 . 巻
Manaka Okuyama, and Masayuki Ohzeki	89
2.論文標題	5.発行年
Inequality for Local Energy of Ising Model with Quenched Randomness and Its Application	2020年
3.雑誌名	6.最初と最後の頁
Journal of the Physical Society of Japan	064704 1-4
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	 査読の有無
10.7566/JPSJ.89.064704	有
オープンアクセス	国際共著
オープンアクセスとしている(また、その予定である)	-
1 . 著者名	4 . 巻
Ryoji Miyazaki, Yuta Kudo, Masayuki Ohzeki, and Kazuyuki Tanaka	102
2 . 論文標題	5 . 発行年
Simple relation between frustration and transition points in diluted spin glasses	2020年
3.雑誌名	6.最初と最後の頁
Physical Review E	012135 1-7
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	査読の有無
10.1103/PhysRevE.102.012135	有
オープンアクセス	国際共著
オープンアクセスとしている(また、その予定である)	-
1 . 著者名	4 . 巻
Yuki Bando, Yuki Susa, Hiroki Oshiyama, Naokazu Shibata, Masayuki Ohzeki, Fernando Javier Goemez-Ruiz, Daniel A. Lidar, Sei Suzuki, Adolfo del Campo, and Hidetoshi Nishimori	2
2.論文標題	5 . 発行年
Probing the universality of topological defect formation in a quantum annealer: Kibble-Zurek mechanism and beyond	2020年
3 . 雑誌名	6.最初と最後の頁
Physical Review Research	033369 1-20
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	査読の有無
10.1103/PhysRevResearch.2.033369	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
オーフンデクセスこしている(また、ての予定である)	スコッの
1.著者名	4 . 巻
Ryo Okugawa, Ryo Takahashi, and Kazuki Yokomizo	102
2.論文標題	5 . 発行年
Second-order topological non-Hermitian skin effects	2020年
3.雑誌名	6.最初と最後の頁
Physical Review B	241202(R) 1-6
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	査読の有無
10.1103/PhysRevB.102.241202	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
	i -

1.著者名	4 . 巻
Ichiki Akihisa、Okumura Keiji	101
2.論文標題	5 . 発行年
Diversity of dynamical behaviors due to initial conditions: Extension of the Ott-Antonsen	2020年
ansatz for identical Kuramoto-Sakaguchi phase oscillators	2020—
	6.最初と最後の頁
3.雑誌名	
Physical Review E	22211
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	査読の有無
10.1103/PhysRevE.101.022211	有
	13
オープンアクセス	国際共著
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	
オープンデジセスにはない、又はオープンデジセスが倒難	-
****	T
1.著者名	4 . 巻
Sogabe Maina、Ohzeki Masayuki、Fujimoto Koji、Sehara Fujisawa Atsuko、Nishimura Satoshi	13
2.論文標題	5.発行年
Restored interlaced volumetric imaging increases image quality and scanning speed during	2020年
	20204
intravital imaging in living mice	C 840 L 8 // 6 7
3.雑誌名	6.最初と最後の頁
Journal of Biophotonics	201960204
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	査読の有無
10.1002/jbio.201960204	無無
10.1002/3010.201900204	////
オープンアクセス	
	国際共著
オープンアクセスとしている(また、その予定である)	-
1.著者名	4 . 巻
	4.巻
1.著者名 Otsuki Junya、Ohzeki Masayuki、Shinaoka Hiroshi、Yoshimi Kazuyoshi	_
Otsuki Junya、Ohzeki Masayuki、Shinaoka Hiroshi、Yoshimi Kazuyoshi	89
Otsuki Junya、Ohzeki Masayuki、Shinaoka Hiroshi、Yoshimi Kazuyoshi 2 . 論文標題	5 . 発行年
Otsuki Junya、Ohzeki Masayuki、Shinaoka Hiroshi、Yoshimi Kazuyoshi	89
Otsuki Junya、Ohzeki Masayuki、Shinaoka Hiroshi、Yoshimi Kazuyoshi 2 . 論文標題 Sparse Modeling in Quantum Many-Body Problems	5.発行年 2020年
Otsuki Junya、Ohzeki Masayuki、Shinaoka Hiroshi、Yoshimi Kazuyoshi 2 . 論文標題 Sparse Modeling in Quantum Many-Body Problems 3 . 雑誌名	89 5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁
Otsuki Junya、Ohzeki Masayuki、Shinaoka Hiroshi、Yoshimi Kazuyoshi 2 . 論文標題 Sparse Modeling in Quantum Many-Body Problems	5.発行年 2020年
Otsuki Junya、Ohzeki Masayuki、Shinaoka Hiroshi、Yoshimi Kazuyoshi 2 . 論文標題 Sparse Modeling in Quantum Many-Body Problems 3 . 雑誌名	89 5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁
Otsuki Junya、Ohzeki Masayuki、Shinaoka Hiroshi、Yoshimi Kazuyoshi 2 . 論文標題 Sparse Modeling in Quantum Many-Body Problems 3 . 雜誌名 Journal of the Physical Society of Japan	89 5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁
Otsuki Junya、Ohzeki Masayuki、Shinaoka Hiroshi、Yoshimi Kazuyoshi 2 . 論文標題 Sparse Modeling in Quantum Many-Body Problems 3 . 雜誌名 Journal of the Physical Society of Japan	89 5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁
Otsuki Junya、Ohzeki Masayuki、Shinaoka Hiroshi、Yoshimi Kazuyoshi 2 . 論文標題 Sparse Modeling in Quantum Many-Body Problems 3 . 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	89 5.発行年 2020年 6.最初と最後の頁 012001~012001 査読の有無
Otsuki Junya、Ohzeki Masayuki、Shinaoka Hiroshi、Yoshimi Kazuyoshi 2 . 論文標題 Sparse Modeling in Quantum Many-Body Problems 3 . 雜誌名 Journal of the Physical Society of Japan	5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 012001 ~ 012001
Otsuki Junya、Ohzeki Masayuki、Shinaoka Hiroshi、Yoshimi Kazuyoshi 2 . 論文標題 Sparse Modeling in Quantum Many-Body Problems 3 . 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.89.012001	89 5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 012001 ~ 012001 査読の有無 有
Otsuki Junya、Ohzeki Masayuki、Shinaoka Hiroshi、Yoshimi Kazuyoshi 2 . 論文標題 Sparse Modeling in Quantum Many-Body Problems 3 . 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.89.012001 オープンアクセス	89 5.発行年 2020年 6.最初と最後の頁 012001~012001 査読の有無
Otsuki Junya、Ohzeki Masayuki、Shinaoka Hiroshi、Yoshimi Kazuyoshi 2 . 論文標題 Sparse Modeling in Quantum Many-Body Problems 3 . 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.89.012001	89 5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 012001 ~ 012001 査読の有無 有
Otsuki Junya、Ohzeki Masayuki、Shinaoka Hiroshi、Yoshimi Kazuyoshi 2 . 論文標題 Sparse Modeling in Quantum Many-Body Problems 3 . 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.89.012001 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)	5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 012001 ~ 012001 査読の有無 有
Otsuki Junya、Ohzeki Masayuki、Shinaoka Hiroshi、Yoshimi Kazuyoshi 2 . 論文標題 Sparse Modeling in Quantum Many-Body Problems 3 . 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.89.012001 オープンアクセス	5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 012001 ~ 012001 査読の有無 有
Otsuki Junya、Ohzeki Masayuki、Shinaoka Hiroshi、Yoshimi Kazuyoshi 2 . 論文標題 Sparse Modeling in Quantum Many-Body Problems 3 . 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.89.012001 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) [学会発表] 計35件(うち招待講演 15件 / うち国際学会 14件)	89 5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 012001 ~ 012001 査読の有無 有
Otsuki Junya、Ohzeki Masayuki、Shinaoka Hiroshi、Yoshimi Kazuyoshi 2 . 論文標題 Sparse Modeling in Quantum Many-Body Problems 3 . 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.89.012001 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) 【学会発表】 計35件(うち招待講演 15件 / うち国際学会 14件) 1 . 発表者名	89 5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 012001 ~ 012001 査読の有無 有
Otsuki Junya、Ohzeki Masayuki、Shinaoka Hiroshi、Yoshimi Kazuyoshi 2 . 論文標題 Sparse Modeling in Quantum Many-Body Problems 3 . 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.89.012001 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) [学会発表] 計35件(うち招待講演 15件/うち国際学会 14件)	89 5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 012001 ~ 012001 査読の有無 有
Otsuki Junya、Ohzeki Masayuki、Shinaoka Hiroshi、Yoshimi Kazuyoshi 2 . 論文標題 Sparse Modeling in Quantum Many-Body Problems 3 . 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.89.012001 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) 【学会発表】 計35件(うち招待講演 15件 / うち国際学会 14件) 1 . 発表者名	89 5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 012001 ~ 012001 査読の有無 有
Otsuki Junya、Ohzeki Masayuki、Shinaoka Hiroshi、Yoshimi Kazuyoshi 2 . 論文標題 Sparse Modeling in Quantum Many-Body Problems 3 . 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.89.012001 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) 【学会発表】 計35件(うち招待講演 15件 / うち国際学会 14件) 1 . 発表者名	5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 012001 ~ 012001 査読の有無 有
Otsuki Junya、Ohzeki Masayuki、Shinaoka Hiroshi、Yoshimi Kazuyoshi 2 . 論文標題 Sparse Modeling in Quantum Many-Body Problems 3 . 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.89.012001 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) 【学会発表】 計35件(うち招待講演 15件/うち国際学会 14件) 1 . 発表者名 Masayuki Ohzeki	5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 012001 ~ 012001 査読の有無 有
Otsuki Junya、Ohzeki Masayuki、Shinaoka Hiroshi、Yoshimi Kazuyoshi 2. 論文標題 Sparse Modeling in Quantum Many-Body Problems 3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.89.012001 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) 【学会発表】 計35件(うち招待講演 15件/うち国際学会 14件) 1. 発表者名 Masayuki Ohzeki	5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 012001 ~ 012001 査読の有無 有
Otsuki Junya、Ohzeki Masayuki、Shinaoka Hiroshi、Yoshimi Kazuyoshi 2 . 論文標題 Sparse Modeling in Quantum Many-Body Problems 3 . 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.89.012001 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) 【学会発表】 計35件(うち招待講演 15件/うち国際学会 14件) 1 . 発表者名 Masayuki Ohzeki	89 5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 012001 ~ 012001 査読の有無 有
Otsuki Junya、Ohzeki Masayuki、Shinaoka Hiroshi、Yoshimi Kazuyoshi 2. 論文標題 Sparse Modeling in Quantum Many-Body Problems 3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.89.012001 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) 【学会発表】 計35件(うち招待講演 15件/うち国際学会 14件) 1. 発表者名 Masayuki Ohzeki	5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 012001 ~ 012001 査読の有無 有
Otsuki Junya、Ohzeki Masayuki、Shinaoka Hiroshi、Yoshimi Kazuyoshi 2. 論文標題 Sparse Modeling in Quantum Many-Body Problems 3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan 掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.89.012001 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) 【学会発表】 計35件(うち招待講演 15件/うち国際学会 14件) 1. 発表者名 Masayuki Ohzeki	89 5 . 発行年 2020年 6 . 最初と最後の頁 012001 ~ 012001 査読の有無 有

3 . 学会等名

4 . 発表年 2020年

Ellis QPhML 2020 (招待講演) (国際学会)

1.発表者名
Masayuki Ohzeki
2.発表標題
Quantum annealing, its theory and several applications in industry
3.学会等名
School on Modern Physics(招待講演)(国際学会)
October on modern rhysros (Higheys) (Electric)
A JULY
4.発表年
2020年
1 . 発表者名
Masayuki Ohzeki
2 . 発表標題
Quantum Annealing and Its Application to Real World
Table 1 and 1 to Approach to tour of the state of the sta
NAME OF
3 . 学会等名
ISMVL 2020(IEEE International Symposium on Multiple-Valued Logic)(招待講演)(国際学会)
4.発表年
2020年
20204
1.発表者名
Manager 1 1 About 1
Masayuki Unzeki
Masayuki Ohzeki
Masayuki Onzeki
Masayuki Onzeki
2.発表標題
2.発表標題
2.発表標題
2.発表標題
2 . 発表標題 Quantum Annealing and its Application to Real Industry
2 . 発表標題 Quantum Annealing and its Application to Real Industry 3 . 学会等名
2. 発表標題 Quantum Annealing and its Application to Real Industry 3. 学会等名 RIEC International Symposium When AI Meets Human Science: The 4th Tohoku-NTU Symposium on Interdisciplinary AI and Human
2. 発表標題 Quantum Annealing and its Application to Real Industry 3. 学会等名 RIEC International Symposium When Al Meets Human Science: The 4th Tohoku-NTU Symposium on Interdisciplinary Al and Human Studies (招待講演) (国際学会)
2. 発表標題 Quantum Annealing and its Application to Real Industry 3. 学会等名 RIEC International Symposium When Al Meets Human Science: The 4th Tohoku-NTU Symposium on Interdisciplinary Al and Human Studies (招待講演) (国際学会)
2 . 発表標題 Quantum Annealing and its Application to Real Industry 3 . 学会等名 RIEC International Symposium When Al Meets Human Science: The 4th Tohoku-NTU Symposium on Interdisciplinary Al and Human Studies (招待講演) (国際学会) 4 . 発表年
2. 発表標題 Quantum Annealing and its Application to Real Industry 3. 学会等名 RIEC International Symposium When Al Meets Human Science: The 4th Tohoku-NTU Symposium on Interdisciplinary Al and Human Studies (招待講演) (国際学会)
2. 発表標題 Quantum Annealing and its Application to Real Industry 3. 学会等名 RIEC International Symposium When Al Meets Human Science: The 4th Tohoku-NTU Symposium on Interdisciplinary Al and Human Studies (招待講演) (国際学会) 4. 発表年 2020年
2. 発表標題 Quantum Annealing and its Application to Real Industry 3. 学会等名 RIEC International Symposium When Al Meets Human Science: The 4th Tohoku-NTU Symposium on Interdisciplinary Al and Human Studies (招待講演) (国際学会) 4. 発表年 2020年
2. 発表標題 Quantum Annealing and its Application to Real Industry 3. 学会等名 RIEC International Symposium When Al Meets Human Science: The 4th Tohoku-NTU Symposium on Interdisciplinary Al and Human Studies (招待講演) (国際学会) 4. 発表年 2020年
2. 発表標題 Quantum Annealing and its Application to Real Industry 3. 学会等名 RIEC International Symposium When Al Meets Human Science: The 4th Tohoku-NTU Symposium on Interdisciplinary Al and Human Studies (招待講演) (国際学会) 4. 発表年 2020年
2. 発表標題 Quantum Annealing and its Application to Real Industry 3. 学会等名 RIEC International Symposium When Al Meets Human Science: The 4th Tohoku-NTU Symposium on Interdisciplinary Al and Human Studies (招待講演) (国際学会) 4. 発表年 2020年
2. 発表標題 Quantum Annealing and its Application to Real Industry 3. 学会等名 RIEC International Symposium When Al Meets Human Science: The 4th Tohoku-NTU Symposium on Interdisciplinary Al and Human Studies (招待講演) (国際学会) 4. 発表年 2020年
2 . 発表標題 Quantum Annealing and its Application to Real Industry 3 . 学会等名 RIEC International Symposium When AI Meets Human Science: The 4th Tohoku-NTU Symposium on Interdisciplinary AI and Human Studies (招待講演) (国際学会) 4 . 発表年 2020年
2. 発表標題 Quantum Annealing and its Application to Real Industry 3. 学会等名 RIEC International Symposium When AI Meets Human Science: The 4th Tohoku-NTU Symposium on Interdisciplinary AI and Human Studies (招待講演) (国際学会) 4. 発表年 2020年 1. 発表者名 Ryo Okugawa
2 . 発表標題 Quantum Annealing and its Application to Real Industry 3 . 学会等名 RIEC International Symposium When AI Meets Human Science: The 4th Tohoku-NTU Symposium on Interdisciplinary AI and Human Studies (招待講演) (国際学会) 4 . 発表年 2020年
2. 発表標題 Quantum Annealing and its Application to Real Industry 3. 学会等名 RIEC International Symposium When AI Meets Human Science: The 4th Tohoku-NTU Symposium on Interdisciplinary AI and Human Studies (招待講演) (国際学会) 4. 発表年 2020年 1. 発表者名 Ryo Okugawa
2. 発表標題 Quantum Annealing and its Application to Real Industry 3. 学会等名 RIEC International Symposium When AI Meets Human Science: The 4th Tohoku-NTU Symposium on Interdisciplinary AI and Human Studies (招待講演) (国際学会) 4. 発表年 2020年 1. 発表者名 Ryo Okugawa
2 . 発表標題 Quantum Annealing and its Application to Real Industry 3 . 学会等名 RIEC International Symposium When AI Meets Human Science: The 4th Tohoku-NTU Symposium on Interdisciplinary AI and Human Studies (招待講演) (国際学会) 4 . 発表年 2020年 1 . 発表者名 Ryo Okugawa 2 . 発表標題 Higher-order topological phases protected by chiral symmetry
2. 発表標題 Quantum Annealing and its Application to Real Industry 3. 学会等名 RIEC International Symposium When AI Meets Human Science: The 4th Tohoku-NTU Symposium on Interdisciplinary AI and Human Studies (招待講演) (国際学会) 4. 発表年 2020年 1. 発表者名 Ryo Okugawa
2 . 発表標題 Quantum Annealing and its Application to Real Industry 3 . 学会等名 RIEC International Symposium When AI Meets Human Science: The 4th Tohoku-NTU Symposium on Interdisciplinary AI and Human Studies (招待講演) (国際学会) 4 . 発表年 2020年 1 . 発表者名 Ryo Okugawa 2 . 発表標題 Higher-order topological phases protected by chiral symmetry
2 . 発表標題 Quantum Annealing and its Application to Real Industry 3 . 学会等名 RIEC International Symposium When AI Meets Human Science: The 4th Tohoku-NTU Symposium on Interdisciplinary AI and Human Studies (招待講演) (国際学会) 4 . 発表年 2020年 1 . 発表者名 Ryo Okugawa 2 . 発表標題 Higher-order topological phases protected by chiral symmetry
2 . 発表標題 Quantum Annealing and its Application to Real Industry 3 . 学会等名 RIEC International Symposium When AI Meets Human Science: The 4th Tohoku-NTU Symposium on Interdisciplinary AI and Human Studies (招待講演) (国際学会) 4 . 発表年 2020年 1 . 発表者名 Ryo Okugawa 2 . 発表標題 Higher-order topological phases protected by chiral symmetry 3 . 学会等名 The Second Tohoku University - RIKEN Joint Workshop: "Math Meets Quantum Materials" (招待講演) (国際学会)
2 . 発表標題 Quantum Annealing and its Application to Real Industry 3 . 学会等名 RIEC International Symposium When AI Meets Human Science: The 4th Tohoku-NTU Symposium on Interdisciplinary AI and Human Studies (招待講演) (国際学会) 4 . 発表年 2020年 1 . 発表者名 Ryo Okugawa 2 . 発表標題 Higher-order topological phases protected by chiral symmetry 3 . 学会等名 The Second Tohoku University - RIKEN Joint Workshop: "Math Meets Quantum Materials" (招待講演) (国際学会) 4 . 発表年
2 . 発表標題 Quantum Annealing and its Application to Real Industry 3 . 学会等名 RIEC International Symposium When AI Meets Human Science: The 4th Tohoku-NTU Symposium on Interdisciplinary AI and Human Studies (招待講演) (国際学会) 4 . 発表年 2020年 1 . 発表者名 Ryo Okugawa 2 . 発表標題 Higher-order topological phases protected by chiral symmetry 3 . 学会等名 The Second Tohoku University - RIKEN Joint Workshop: "Math Meets Quantum Materials" (招待講演) (国際学会)
2 . 発表標題 Quantum Annealing and its Application to Real Industry 3 . 学会等名 RIEC International Symposium When AI Meets Human Science: The 4th Tohoku-NTU Symposium on Interdisciplinary AI and Human Studies (招待講演) (国際学会) 4 . 発表年 2020年 1 . 発表者名 Ryo Okugawa 2 . 発表標題 Higher-order topological phases protected by chiral symmetry 3 . 学会等名 The Second Tohoku University - RIKEN Joint Workshop: "Math Meets Quantum Materials" (招待講演) (国際学会) 4 . 発表年
2 . 発表標題 Quantum Annealing and its Application to Real Industry 3 . 学会等名 RIEC International Symposium When AI Meets Human Science: The 4th Tohoku-NTU Symposium on Interdisciplinary AI and Human Studies (招待講演) (国際学会) 4 . 発表年 2020年 1 . 発表者名 Ryo Okugawa 2 . 発表標題 Higher-order topological phases protected by chiral symmetry 3 . 学会等名 The Second Tohoku University - RIKEN Joint Workshop: "Math Meets Quantum Materials" (招待講演) (国際学会) 4 . 発表年

1 . 発表者名 奥川亮、高橋亮、横溝和樹
突川冗、向 响 冗、 使 再仰倒
2.発表標題
2種の2次元高次トポロジカル表皮効果
3.学会等名 日本物理学会 2021年年次大会
口举彻廷子云。2021年午次八云
4. 発表年
2021年
1.発表者名
一木輝久
2 . 発表標題 トポロジーの道具としての深層学習
「かロノーの迫兵としての休息子自
3.学会等名
日本物理学会 2021年年次大会(招待講演)
2021年
1 . 発表者名 一木輝久
小牌人
2.発表標題
ノイズ付きResNetの定常状態
3.学会等名
日本物理学会 2021年年次大会
4 . 発表年
2021年
1.発表者名
一木輝久
2.発表標題
ニューラルネットワークによる結び目の標準化
3.学会等名
ディープラーニングと物理学2020 オンライン(招待講演)
4.発表年
4. 完衣牛 2021年

1.発表者名 一木輝久,奥村圭司
2.発表標題 大域結合位相振動子系におけるOtt-Antonsen仮説の一般化と初期状態依存した多様な系の振る舞い
3.学会等名 日本物理学会第75回年次大会
4 . 発表年 2020年
1.発表者名 Akihisa Ichiki
2 . 発表標題 Optimization Problems in Data Driven Science -Fundamentals and Applications in Materials Informatics-
3 . 学会等名 Material Research Meeting 2019(招待講演)(国際学会)
4 . 発表年 2019年
1.発表者名 Masayuki Ohzeki
2 . 発表標題 Quantum annealing and machine learning - new directions of quantum
3 . 学会等名 Using Physical Insights for Machine Learning(招待講演)(国際学会)
4 . 発表年 2019年
1.発表者名 Masayuki Ohzeki
2 . 発表標題 Quantum annealing and its application to deep learning - new direction of quantum annealing -
3 . 学会等名 DLAP2019(Deep Learning And Physics)(招待講演)(国際学会)
4 . 発表年 2019年

1.発表者名 奥村圭司,一木輝久
2 . 発表標題 結合振動子系でみられるノイズ誘起カオス同期
3.学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4.発表年 2019年
1 . 発表者名 Keiji Okumura, Akihisa Ichiki
2 . 発表標題 Chaotic synchronization induced by external noise in mean-field coupled limit cycle oscillators with two native frequencies
3 . 学会等名 XXXIX Dynamics Days Europe(国際学会)
4 . 発表年 2019年
1.発表者名 奥村圭司,一木輝久
2.発表標題 2種類のリミットサイクルの結合系でみられるノイズ誘起カオス同期
3 . 学会等名 電子情報通信学会 非線形問題研究会
4 . 発表年 2019年
1.発表者名 Akihisa Ichiki
2 . 発表標題 Laplacian eigenvalue problem: macroscopic and microscopic energetics for soft matter
3.学会等名 Polymers and networks via topology and entanglement (招待講演) (国際学会)
4.発表年 2019年

北
Laplacian distribution in polymer networks 3. 学会等名 新学術領域研究「次世代物質探索のための離散幾何学」成果発表会(招待講演) 4. 発表年 2019年 1. 発表者名 一木輝久,坂口茂,福泉陽佳 2. 発表標題 基底状態のエネルギーを最小化する空間分割 3. 学会等名 日本物理学会第74回年次大会 4. 発表年 2019年 1. 発表者名 徳田僖,世永公輝,野々村拓 2. 発表標題
Laplacian distribution in polymer networks 3. 学会等名 新学術領域研究「次世代物質探索のための離散幾何学」成果発表会(招待講演) 4. 発表年 2019年 1. 発表者名 一木輝久,坂口茂,福泉關佳 2. 発表標題 基底状態のエネルギーを最小化する空間分割 3. 学会等名 日本物理学会第74回年次大会 4. 発表年 2019年 1. 発表者名 徳田僖,世永公輝,野々村拓 2. 発表標題
新学術領域研究「次世代物質探索のための離散幾何学」成果発表会(招待講演) 4. 発表年 2019年 1. 発表者名 一木輝久,坂口茂,福泉麗佳 2. 発表標題 基底状態のエネルギーを最小化する空間分割 3. 学会等名 日本物理学会第74回年次大会 4. 発表年 2019年 1. 発表者名 徳田悟,世永公輝,野々村拓
2019年 1 . 発表者名 一木輝久,坂口茂,福泉麗佳 2 . 発表標題 基底状態のエネルギーを最小化する空間分割 3 . 学会等名 日本物理学会第74回年次大会 4 . 発表年 2019年 1 . 発表者名 徳田悟,世永公輝,野々村拓 2 . 発表標題
- 木輝久,坂口茂,福泉麗佳 2.発表標題 基底状態のエネルギーを最小化する空間分割 3.学会等名 日本物理学会第74回年次大会 4.発表年 2019年 1.発表者名 徳田悟,世永公輝,野々村拓 2.発表標題
基底状態のエネルギーを最小化する空間分割 3 . 学会等名 日本物理学会第74回年次大会 4 . 発表年 2019年 1 . 発表者名 徳田悟, 世永公輝, 野々村拓 2 . 発表標題
日本物理学会第74回年次大会 4 . 発表年 2019年 1 . 発表者名 徳田悟, 世永公輝, 野々村拓 2 . 発表標題
2019年 1 . 発表者名
徳田悟,世永公輝,野々村拓 2 . 発表標題
3 . 学会等名 日本物理学会第74回年次大会
4.発表年 2019年
1.発表者名 観山正道,中島千尋,大関真之
2.発表標題 STEM画像からの原子位置3次元再構成
3 . 学会等名 日本物理学会第74回年次大会
4 . 発表年 2019年

1.発表者名 中島千尋
2.発表標題 リサンプリング分散を用いた圧縮センシングの信頼性評価
c. 24 A Mr. 41
3.学会等名 数理工学ワークショップ PythonユーザーのためのGPU入門(招待講演)
4 . 発表年
2019年
1.発表者名
一木輝久
2 及丰福度
2.発表標題 空間分割とラプラス固有値問題
3.学会等名 研究集会 離散幾何解析とその周辺 2018(招待講演)
4 . 発表年
2019年
1.発表者名 一木輝久,坂口茂,福泉麗佳
2. 英丰福度
2 . 発表標題 容器に閉じ込められた物質の界面トポロジー変化
3.学会等名 第12回物性科学領域横断研究会(領域合同研究会)
4.発表年
2018年
1.発表者名 一木輝久
2 . 発表標題 確率過程による空間の最適分割と自由境界の固有値問題
3 . 学会等名 第1回物質と情報科学セミナー
4 . 発表年
2018年

一木輝久
2 . 発表標題
確率過程とパターン形成
3 . 学会等名
第2回物質と幾何セミナー
4.発表年 2018年
1.発表者名 Utako Yamamoto, Masayuki Ohzeki, Megumi Nakao, Tetsuya Matsuda
Tanta Tantanicto, madayani onizoni, mogami nanad, rotodya matadaa
2 . 発表標題 Application of Q-Adam to deep neural network for deformation estimation of elastic object
The table of ta
3 . 学会等名 7th Adiabatic Quantum Computing Conference 2018 (国際学会)
4. 発表年
4.完装中 2018年
1.発表者名
山本 詩子、中尾 恵、大関 真之、松田 哲也
2.発表標題
カーネル法を用いた弾性体の部分観測情報に基づく変形推定
3.学会等名
第56回日本生体医工学会大会
4.発表年
2017年
1.発表者名
Utako YAMAMOTO, Hirohiko IMAI, Kei SANO, Masayuki OHZEKI, Tetsuya MATSUDA, and Toshiyuki TANAKA
2 . 発表標題
Time-series reconstruction using compressed sensing with ADMM in 2D magnetic resonance spectroscopic imaging
3. 学会等名
Time-series reconstruction using compressed sensing with ADMM in 2D magnetic resonance spectroscopic imaging(国際 学会)
4 . 発表年
2017年

1.発表者名

1.発表者名 Utako YAMAMOTO, Hirohiko IMAI, Kei SANO, Masayuki OHZEKI, Tetsuya MATSUDA, and Toshiyuki TANAKA
2. 発表標題 Time-series reconstruction using compressed sensing in 2D 1H-13C heteronuclear multiple quantum coherence MRSI
3.学会等名 第45回日本磁気共鳴医学会大会
4.発表年 2017年
1. 発表者名 Utako Yamamoto, Masayuki Ohzeki, Megumi Nakao, and Tetsuya Matsuda
2. 発表標題 Application of concept of quantum annealing to deep neural network for deformation estimation of elastic object
3.学会等名 Congress Quantum Machine Learning and Biomimetic Quantum Technologies (国際学会)
4.発表年 2018年
1.発表者名 徳田悟、相馬清吾、佐藤宇史、高橋隆、中西毅
2.発表標題 ARPESに対するベイズ的スペクトル分解:バンド分散のモデル選択
3.学会等名 日本物理学会第73回年次大会
4 . 発表年 2018年
1.発表者名 中島千尋
2.発表標題 電子線CTによる原子像再構成における再構成可能性判定
3.学会等名 日本物理学会第73回年次大会
4 . 発表年 2018年

1.発表者名 一木輝久、大関真之	
2.発表標題 詳細つりあいを破ったMetropolis法の拡張	
3 . 学会等名 日本物理学会第73回年次大会	
4.発表年 2018年	
1.発表者名 Akihisa Ichiki	
2.発表標題 Estimation of Structure-Function Correlation from Observed Materials Images	
3.学会等名 新学術領域「次世代物質探索のための離散幾何」キックオフワークショップ(招待講演)(国際学会)	
4 . 発表年 2018年	
〔図書〕 計5件	
1 . 著者名 Maria Schuld、Francesco Petruccione、大関 真之、荒井 俊太、篠島 匠人、高橋 茶子、御手洗 光祐、山城 悠	4 . 発行年 2020年
2.出版社 共立出版	5.総ページ数 ³⁶⁸
3.書名 量子コンピュータによる機械学習	
1 . 著者名 伊藤 聡、田村 亮、津田 宏治、犬丸 啓、折井 靖光、戸田 浩樹、廣瀬 修一、小林 正和、金子 弘昌、田中 譲、藤間 淳、上野 哲朗、小野 寛太、藤本 憲次郎、相見 晃久、一木 輝久、山下 智樹、常行 真司、北井 孝紀、本郷 研太、室野 隆博、前園 涼、森川 達哉、田中 將己、森分 博紀、堀内 佐智雄、石橋 章司、ほか	4 . 発行年 2021年
2.出版社 エヌ・ティー・エス	5.総ページ数 ²⁸⁴
3.書名 マテリアルズ・インフォマティクス開発事例最前線	

1.著者名 大関真之	4.発行年 2019年
2.出版社	5.総ページ数
オーム社	3 - 飛び、一 ン 女X 256
3 . 書名 Pythonで機械学習入門	
1.著者名 橋本 幸士、大槻 東巳、真野 智裕、斎藤 弘樹、藤田 浩之、安藤 康伸、永井 佑紀、青木 健 一、藤田 達大、小林 玉青、大関 真之、久良 尚任、福嶋 健二、村瀬 功一、船井 正太郎、柏 浩司、富谷 昭夫	4 . 発行年 2019年
2.出版社 朝倉書店	5.総ページ数 212
3 . 書名 物理学者,機械学習を使う	
	I
1 . 著者名 Irina Rish、Genady Ya. Grabarnik、竹澤邦夫、大関真之、高橋茶子、竹田晃人、徳田悟、藤本晃司、安 田宗樹	4 . 発行年 2019年
2 . 出版社 ジャムハウス	5 . 総ページ数 ²⁴⁸
3 . 書名 スパースモデリング 理論、アルゴリズム、応用	
〔産業財産権〕	
〔その他〕	
材料観察画像からの機能推定 http://structinfo-matsci.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
	大関 真之	東北大学・情報科学研究科・教授	
研究分担者	(Ohzeki Masayuki)		
	(80447549)	(11301)	

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