

平成30年6月5日現在

機関番号：17401

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2016～2017

課題番号：16K13824

研究課題名(和文) ベイズ推定を用いた固体光学スペクトル解析法の革新

研究課題名(英文) Innovation of solid optical spectral analysis using Bayesian inference

研究代表者

赤井 一郎 (Akai, Ichiro)

熊本大学・パルスパワー科学研究所・教授

研究者番号：20212392

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,900,000円

研究成果の概要(和文)： 固体光学スペクトルの解析にベイズ推定を適用し、物理モデルの統計的妥当性と、パラメータの統計的分布を評価する方法論を確立し、以下の対象に適用した。

(1) 亜酸化銅励起子系やタイプII超格子系の高密度電子・正孔・励起子共存系の光学スペクトル解析にベイズ分光法を適用し、励起子トラップポテンシャルの形成と、電子正孔液滴状態の安定化の統計的確認を得た。(2) 格子振動ダイナミクスのベイズ分光では、フーリエ変換と比べ2桁高精度な周波数推定と初期位相の推定ができることを示した。更に(3)ベイズ分光法を用いて、スペクトルの均一幅と不均一幅の識別や、振動性波形におけるベイズ推定のノイズ耐性について明らかにした。

研究成果の概要(英文)： I proposed a methodology to evaluate the statistical validity of the physical model and the statistical distribution of the physical parameters by applying Bayesian inference to the following analyses of solid-state optical responses.

(1) On the spectral analyses for the excitonic systems in Cu₂O thin crystals and the type II superlattice semiconductor, our methodology has provided statistical evidences for the potential formation to trap the excitons and stabilization of electron-hole droplet states. (2) On the analysis for the phonon dynamics, it has been demonstrated that our methodology can estimate the vibrating frequency with higher precision in two-orders than the Fourier transformation and can estimate vibrating initial phase. (3) Such Bayesian spectroscopy was employed both to distinguish the homogeneous and inhomogeneous broadening factors for the spectral peaks and to evaluate noise tolerance in the phonon dynamics analysis.

研究分野：データ駆動科学、光物性物理学

キーワード：励起子 コヒーレントフォノン ベイズ推定 仮想計測解析 スパースモデリング X線光電子スペクトル 放射光計測

1. 研究開始当初の背景

光物性研究で行われる、固体材料の光スペクトル測定は、材料内の電子や格子の情報を得る非破壊計測法である。更に、分光技術を駆使することで電子や格子状態のエネルギーを高精度に計測することが可能で、超短パルスレーザーを用いることで超高速なダイナミクス計測も可能である。

これまでそれらの解析では、スペクトル分解から物性特徴量を抽出・解析してきたが、それら特徴量の統計的妥当性、解析に用いる物理モデルの妥当性などを判定する手段がなかった。

2. 研究の目的

固体光学スペクトルの解析にベイズ推定を適用し、スペクトルを説明する物理モデルの統計的妥当性と、各スペクトル成分のパラメータの統計的分布(分散)を評価する方法論を確立する。

3. 研究の方法

計測データが得られる因果律にベイズの定理を適用し、原因の事後確率分布を評価する。

物理現象の原因である物理モデルやそのパラメータを θ とし、計測で得られるデータを D とすると、その同時確率 $P(\theta \cap D)$ は因果律に沿って $P(\theta \cap D) = P(D|\theta)P(\theta)$ と書けるが、この同時確率は、ベイズの定理によって $P(\theta \cap D) = P(\theta|D)P(D)$ と書くこともできる。

本研究では、このベイズの定理 $P(\theta|D) = P(D|\theta)P(\theta)/P(D)$ を用いて、データ D が与えられた条件下で、原因 θ の事後確率分布 $P(\theta|D)$ を評価する。具体的には、以下の【課題1】～【課題3】に従って、スペクトルパラメータの確率分布、スペクトル解析に用いる物理モデルの妥当性が評価できる新しいスペクトル解析法を構築する。

(1) 【課題1:スペクトル分解のための定式化と実装】

ベイズ推定では、データ・セットを $D = \{..., (x, y), ...\}$ として、パラメータセット θ の事後確率 $P(\theta|D)$ を評価する確率モデルを用いる。物理モデルで与えられるスペクトルを $y_i \leftarrow f(x_i; \theta)$ とし、重畳するノイズを n_i とすると、測定スペクトルは $y_i = f(x_i; \theta) + n_i$ で、平均二乗誤差は、データ点数を N とすると $E(\theta) = \sum_{i=1}^N [y_i - f(x_i; \theta)]^2 = \sum_{i=1}^N n_i^2$ となる。ノイズが正規分布(分散 σ^2)ならば、 $P(\theta|D) \propto \exp[-NE(\theta)/\sigma^2]$ と表す確率モデルとなる。 $P(\theta|D)$ を取得するアルゴリズムには、メトロポリス法や交換モンテカルロ法を用いた。

(2) 【課題2:物理モデル選択法】

データが与えられる確率 $P(y|x, \theta)$ は $P(y|x, \theta) \propto \exp[-NE(\theta)/\sigma^2]$ で、フィッティング残差である平均二乗誤差 $E(\theta)$ を用いて書ける。

ここでベイズ逆温度 β を $\beta \leftarrow N/\sigma^2$ と考え、

$E(\theta)$ をエネルギーと見れば、 $P(y|x, \theta)$ は統計力学で用いられるボルツマン分布の表式と等価であることが分かる。その結果、ベイズ推定で得られる $P(\theta|D)$ に対して、 $E(\theta)$ を用いて分配関数 $Z = \sum_{\theta} \exp[-\beta E(\theta)]$ を計算することは容易で、ベイズ自由エネルギー $F = -\ln Z$ も評価できる。この F を最小化する解の探索は、物理モデルの複雑(エントロピー)化を抑えた統計的に最も適切な解の探索法である。

(3) 【課題3: 極限計測におけるパラメータ推定限界の評価】

パラメータの事後確率分布 $P(\theta|D)$ の広がりには、重畳するノイズ強度に強く依存する。微弱光計測を行う極限測定ではS/N比が低下して確率分布も広がる。よって評価したい特徴量が、必要とする精度で推定可能であるかどうか、また、必要な精度を得るために必要な実験条件の検討は重要である。そのため本研究では、ベイズ推定を用いて行う仮想計測解析(VMA: Virtual Measurement Analysis)を行う。

4. 研究成果

当初の【課題1】～【課題3】に沿って以下の(1)～(4)の成果を得た。それらに加え、(5)～(6)に示すスパースモデリング(SpM)を適用した研究成果も得ることが出来た。

(1) 光物性スペクトルのベイズ分光

以下の系を対象にベイズ分光を行った。

① 亜酸化銅黄色励起子系のスペクトル分解

MgO基板の隙間に融解・エピタキシャル再結晶化させたCu₂O薄膜結晶は、超低温環境下で励起子ボーズ・アインシュタイン凝縮(X-BEC)が期待できる系である。

本研究では、X-BEC実現に必須である励起子を閉じ込める空間ポテンシャルが、薄膜結晶内に形成されているか否かを、励起子吸収スペクトル解析から明らかにした。

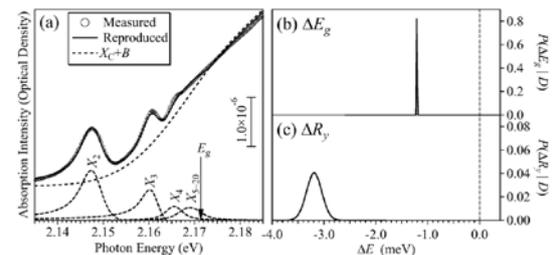


図1: 引用 [雑誌論文] [1]

その結果を図1に示した。図(a)がスペクトルの解析結果である。図(b),(c)は、バンドギャップエネルギー E_g と励起子結合エネルギー R_y が薄膜化することによって変化した結果を、事後確率分布で示したもので、母体結晶の値を示す縦破線からともに減少し、励起子のトラップポテンシャルが形成されていることを、統計的確証をもって示した。

② GaAs/AlAs タイプII 超格子系の高密度電子・正孔・励起子共存系

光励起の素励起である電子・正孔対や励起

子、励起子分子の高密度相は光物性研究の重要な課題である。

本研究では、電子・正孔が空間的に分離した空間間接型(タイプ II)電子・正孔対で液滴状態が安定化するか否かを、高密度励起された GaAs/AlAs タイプ II 超格子の発光スペクトルのスペクトル分解から調べた。得られる発光スペクトルには、電子・正孔液滴と励起子共鳴発光、励起子分子発光が共存し、従来解析法では統計的確認が得られない。それに対し、本研究では、図 2 に示したスペクトルパラメータの事後確率分布を得た。これでは、電子・正孔液滴の化学ポテンシャル μ が、励起子系のエネルギーから有意な安定化エネルギー ϕ だけ、安定化していることが分かる。

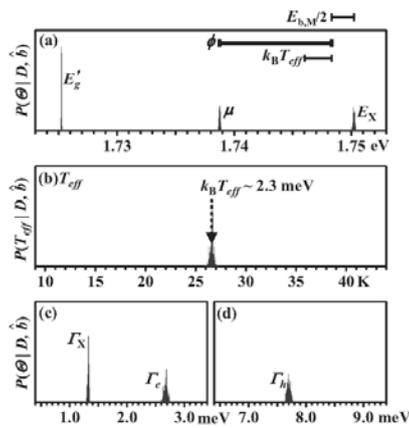


図 2 引用 [雑誌論文] [4]

以上の結果等は、以下の通り発表した。
 成果物: [雑誌論文] [1]; [4]; [6], [学会発表] [1]; [4~7]; [11~17]; [19]; [22~25]; [27]; [35]; [37]; [41]; [42]; [48]; [52]

(2) 格子振動ダイナミクスのベイズ分光

フェムト秒レーザーパルスを用いると、固体材料中の格子振動をコヒーレントに励振させることが可能である。そのコヒーレントフォノン(CP)の計測は、光誘起構造変化の初期過程ダイナミクス解明の有効な手段である。しかし CP 信号の解析には、従来フーリエ変換が用いられていた。

それに対し本研究では、CP 信号の振動性振幅がダイナミクスを反映して時間変化する特性を組み込んだ物理モデルを用いてベイズ分光を行った。その結果、図 3 に示した様に、

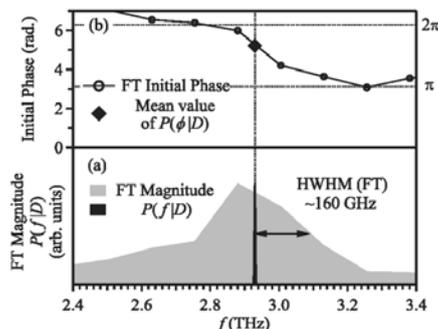


図 3 引用 [雑誌論文] [5]

フーリエ変換と比較して、振動周波数を 2 桁

高精度[図(a)]に、かつ、振動初期位相も高精度に推定[図(b)]できることを示した。

以上の結果等は、以下の通り発表した。
 成果物: [雑誌論文] [5], [学会発表] [7]; [11]; [16]; [24~25]; [31]

(3) 光物性スペクトルの仮想計測解析

次の 2 つの仮想計測解析を行った。

① 励起子遷移の均一幅と不均一幅の識別

光学遷移ピークの均一幅には、励起子の寿命などの物性量が含まれるのに対し、試料の不均一性や測定器関数に不均一幅は、その物性量の推定の障害となる。

本研究では、不均一幅を変化させた人工スペクトルデータを対象にベイズ分光を行い、不均一幅が均一幅より小さい条件では、1 つのスペクトルピークのベイズ分光によって、均一幅と不均一幅の識別と正しい推定ができることを示した。

② CP 信号のノイズ耐性

CP 信号はプローブ光強度に対して $10^{-3\sim 6}$ の比率の微弱な強度変化を捉えたもので、低い S/N 比の CP 信号で高精度な推定を実現することが求められる。

本研究では、CP 信号に重畳するノイズ強度を変えた人工データを用意し、それらのベイズ分光を行った。その結果、信号強度や振動振幅のダイナミクスを表す時定数はノイズ耐性が低いのに対し、振動周波数と振動初期位相は、CP 信号がノイズに埋もれるような厳しい条件でも高精度に推定できることを示した。

以上の結果等は、以下の通り発表した。
 成果物: [雑誌論文] [1], [学会発表] [2]; [7]; [11]; [16]; [19]; [24~25]; [52]

(4) X 線光電子スペクトルのベイズ分光

SiC 基板上に成膜したグラフェン膜の X 線光電子スペクトル(XPS)のスペクトル分解のベイズ分光を行った。SiC を基板にした場合、グラフェンとの境界層に数原子層のバッファ層が存在すると考えられ、ベイズ分光のモデル選択を用いて、その多層膜構造を解明することを目的とした。現在この成果の論文投稿の準備中である。

以上の結果は、以下の通り発表した。
 成果物: [学会発表] [3]; [7]; [10]; [15]; [18]; [21]; [26]; [36]; [38~40]; [43]; [47]; [49]; [52]

(5) CP 信号の SpM

CP 信号に含まれる格子振動モードは本来少数(スパース)である。本研究では、その振動モードのスパース性を根拠に、L1 正則化法を用いて、CP 信号のモード分解にスパースモデリングを適用した。具体的には、流体力学で用いられる動的モード分解(DMD)法に L1 正則化法を組み合わせた SpDMD 法を用い、時系列データにその SpDMD 法を適用できる

ように拡張した方法を開発した。

開発された SpDMD 法は、時系列データの振動性ダイナミクス解明法の新規解析法であり、従来のフーリエ変換やウェーブレット変換では解析が困難な、振動初期位相などを高精度に推定することができる。

以上の結果等は、以下の通り発表した。

成果物: [雑誌論文] [3], [学会発表] [7]; [33]; [44]; [45]; [50]; [51]

(6) 放射光計測スペクトルの SpM

(1)~(5)の取り組みは、様々な科学計測で汎用化できるものである。本研究では、最先端計測が組織的に行われている放射光計測の研究領域に展開する研究も進めた。その結果、放射光計測の研究領域で、データ駆動科学研究の先駆的成果を上げている。

成果物: [雑誌論文] [2], [学会発表] [7~9]; [20]; [28~30]; [34]; [38~40]; [45]; [52~53]

5. 主な発表論文等

(研究代表者、連携研究者、研究協力者)

[雑誌論文] (計 6 件)

- [1] I. Akai, K. Iwamitsu, M. Okada / Bayesian spectroscopy in solid-state photo-physics / J. Phys.: Conf. Ser. (**accepted**), 13 ページ (2018). 査読有。
- [2] I. Akai, K. Iwamitsu, Y. Igarashi, M. Okada, H. Setoyama, T. Okajima, Y. Hirai / Sparse Modeling of an Extended X-Ray Absorption Fine-Structure Spectrum based on a Single-Scattering Formalism / J. Phys. Soc. Jpn. (**accepted**), 7 ページ (2018). 査読有。
- [3] S. Murata, S. Aihara, S. Tokuda, K. Iwamitsu, K. Mizoguchi, I. Akai, M. Okada / Analysis of Coherent Phonon Signals by Sparsity-promoting Dynamic Mode Decomposition / J. Phys. Soc. Jpn. **87**, 054003/1-5 (2018). 査読有。DOI: 10.7566/JPSJ.87.054003
- [4] K. Iwamitsu, Y. Furukawa, M. Nakayama, M. Okada, I. Akai / Bayesian Spectroscopy of Admixed Photoluminescence Spectra with Exciton, Biexciton and Electron Hole Droplet States in a GaAs/AlAs Type-II Superlattice / J. Lumin. **197**, 18-22 (2018). 査読有。DOI: 10.1016/j.jlumin.2018.01.002
- [5] S. Aihara, M. Hamamoto, K. Iwamitsu, M. Okada, I. Akai / High precision modeling of a damped oscillation in coherent phonon signals by Bayesian inference / AIP Adv. **7**, 045107/1-5 (2017). 査読有。DOI: 10.1063/1.4980021
- [6] K. Iwamitsu, S. Aihara, M. Okada, I. Akai / Bayesian Analysis of an Excitonic Absorption Spectrum in a Cu₂O Thin Film Sandwiched by Paired MgO Plates / J. Phys. Soc. Japan **85**, 094716/1-4 (2016). 査読有。DOI: 10.7566/JPSJ.85.094716

[学会発表] (計 53 件)

- [1] K. Iwamitsu, M. Okada, I. Akai / Bayesian

Spectroscopy with a Replica Exchange Monte Carlo Method for Study of a Biaxial Stress Effect on Excitons in a Cu₂O Thin Crystal / The 12th Int. Conf. on Excitonic and Photonic Processes in Cond. Mat. & Nano Mat. (EXCON 2018), Nara, Japan, 2018/7/13.

- [2] 赤井一郎, 岩満一功, 岡田真人 / データ駆動科学に基づく光物性研究 / 日本物理学会 第 73 回年次大会 22pK502-1, 東理大・野田, 2018/3/22.
- [3] 有嶋駿士郎, 岩満一功, 高橋和敏, 岡田真人, 赤井一郎 / 原子層厚グラフェン X 線光電子スペクトルのベイズ分光 / 日本物理学会 第 73 回年次大会 22aPS-79, 東理大・野田, 2018/3/22.
- [4] 水牧仁一朗, 切通愛莉紗, 有嶋駿士郎, 岩満一功, 岡田真人, 赤井一郎 / レプリカ交換モンテカルロ法による Cu₂O 薄膜結晶の励起子発光偏光特性のベイズ分光 / 日本物理学会 第 73 回年次大会 22aPS-85, 東理大・野田, 2018/3/22.
- [5] 岩満一功, 中山正昭, 岡田真人, 赤井一郎 / ベイズ分光を用いた GaAs/AlAs タイプ II 超格子における高密度励起状態の時間分解発光スペクトル解析 / 日本物理学会 第 73 回年次大会 22aPS-90, 東理大・野田, 2018/3/22.
- [6] 山代哲也, 有嶋駿士郎, 切通愛莉紗, 岩満一功, 赤井一郎 / ベイズ分光の基礎: 直線回帰解析の再考 / 日本物理学会 第 73 回年次大会 22aPS-109, 東理大・野田, 2018/3/22.
- [7] 赤井一郎 / (**招待講演**) 光物性・放射光計測とデータ駆動科学の融合 / 2018 年超高分解能顕微鏡法分科会・研究会, マホロバマインズ三浦, 2018/2/23.
- [8] 赤井一郎, 岩満一功, 五十嵐康彦, 岡田真人, 岡島敏浩, 平井康晴 / EXAFS スペクトルのスパースモデリング-I / 第 31 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム 4D003, つくば国際会議場, 2018/1/10.
- [9] 瀬戸山寛之, 赤井一郎, 岩満一功, 五十嵐康彦, 岡田真人, 岡島敏浩, 平井康晴 / EXAFS スペクトルのスパースモデリング-II / 第 31 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム 4D004, つくば国際会議場, 2018/1/10.
- [10] 有嶋駿士郎, 岩満一功, 高橋和敏, 岡田真人, 赤井一郎 / ベイズ分光による原子層厚グラフェン・X 線光電子スペクトルのスペクトル分解 / 第 31 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム 10P038, つくば国際会議場, 2018/1/10.
- [11] 赤井一郎 / データ駆動科学に基づく光物性研究 / 新学術領域「疎性モデリング」第 5 回公開シンポジウム, 東大, 2017/12/20.
- [12] 山代哲也, 有嶋駿士郎, 切通愛莉紗, 岩満一功, 赤井一郎 / ベイズ推定による直線回帰解析の再考 I / 第 28 回光物性研究会 IB-28, 京大・宇治, 2017/12/8.
- [13] 岩満一功, 岡田真人, 赤井一郎 / ベイズ分光を用いた固体材料のデータ解析 / 第 28 回光物性研究会 IB-29, 京大・宇治,

- 2017/12/8.
- [14] 切通愛莉紗、有嶋駿士郎、岩満一功、赤井一郎 / Cu₂O 薄膜結晶における黄色 1S オルソ励起子発光強度の偏光依存性とそのベイズ分光 / 第28回光物性研究会 IB-31, 京大・宇治, 2017/12/8.
- [15] 赤井一郎 / (招待講演) 光物性におけるデータ駆動科学 / 第273回SPring-8セミナー / 第273回SPring-8セミナー, SPring-8, 2017/12/4.
- [16] K. Iwamitsu, M. Okada, L. Akai / (Invited) Bayesian Spectroscopy for Spectral and Normal Mode Analyses in Solid-State Materials / Int. Symp. on Kumamoto Synchr. Radiat. (ISKSR5), Kumamoto, Japan, 2017/11/1.
- [17] A. Kiridoshi, S. Arishima, M. Mizumaki, K. Iwamitsu, L. Akai / Bayesian spectroscopy of excitonic photoluminescence spectra in Cu₂O thin crystals / Int. Symp. on Kumamoto Synchr. Radiat. (ISKSR5), Kumamoto, Japan, 2017/11/1.
- [18] S. Arishima, K. Iwamitsu, K. Takahashi, M. Okada, L. Akai / Bayesian spectroscopy of x-ray photoelectron spectra in graphenes having atomic thicknesses on SiC substrates / Int. Symp. on Kumamoto Synchr. Radiat. (ISKSR5), Kumamoto, Japan, 2017/11/1.
- [19] 赤井一郎 / (招待講演) 光物性におけるデータ駆動科学 / 第273回SPring-8セミナー / 「MI² 新材料探索のためのデータ科学」チュートリアルセミナー・第6回計測インフォマティクス, JST 東京本部, 2017/11/1.
- [20] 赤井一郎, 岩満一功, 五十嵐康彦, 岡田真人, 岡島敏浩, 平井康晴 / スパースモデリングによる広域 X 線吸収微細構造の新規解析法 II / 日本物理学会 2017 年秋季大会 22aB21-6, 岩手大, 2017/9/22.
- [21] 有嶋駿士郎, 岩満一功, 高橋和敏, 岡田真人, 赤井一郎 / 原子層厚グラフェンの X 線光電子スペクトルのベイズ推定とモデル選択 / 日本物理学会 2017 年秋季大会 23pPSA-24, 岩手大, 2017/9/23.
- [22] 切通愛莉紗, 岩満一功, 赤井一郎 / Cu₂O 薄膜における黄色 1S ortho 励起子発光強度の偏光依存性とそのベイズ推定(1) / 日本物理学会 2017 年秋季大会 23pPSA-29, 岩手大, 2017/9/23.
- [23] 切通愛莉紗, 岩満一功, 赤井一郎 / Cu₂O 薄膜における黄色 1S ortho 励起子発光強度の偏光依存性とそのベイズ推定(2) / 日本物理学会 2017 年秋季大会 23pPSA-30, 岩手大, 2017/9/23.
- [24] L. Akai, K. Iwamitsu, M. Okada / (Invited) Bayesian spectroscopy in solid-state photo-physics / Int. Meet. on "High-Dimensional Data-Driven Science" (HD³-2017), Kyoto, Japan, 2017/9/13.
- [25] K. Iwamitsu, M. Okada, L. Akai / Bayesian spectroscopy for spectral and normal mode analyses in solid-state materials / Int. Meet. on "High-Dimensional Data-Driven Science" (HD³-2017), Kyoto, Japan, 2017/9/12.
- [26] S. Arishima, K. Iwamitsu, K. Takahashi, M. Okada, L. Akai / Bayesian spectroscopy of x-ray photoelectron spectra in graphenes having atomic thicknesses on SiC substrates / Int. Meet. on "High-Dimensional Data-Driven Science" (HD³-2017), Kyoto, Japan, 2017/9/12.
- [27] A. Kiridoshi, S. Arishima, M. Mizumaki, K. Iwamitsu, L. Akai / Int. Meet. on "High-Dimensional Data-Driven Science" (HD³-2017), Kyoto, Japan, 2017/9/12.
- [28] L. Akai / (Invited) Sparse modeling of extended x-ray absorption fine structures / (ISKSR4) 4th Int. Symp. on Kumamoto Synchr. Radiat., Kumamoto, Japan, 2017/5/15.
- [29] 赤井一郎, 岩満一功, 五十嵐康彦, 岡田真人, 岡島敏浩, 平井康晴 / (特別講演) EXAFS スペクトルのスパースモデリング / 物質・材料研究機構・九州シンクロトロン光研究センター合同シンポジウム, JST 東京本部, 2017/8/9.
- [30] 赤井一郎, 岩満一功, 五十嵐康彦, 岡田真人, 岡島敏浩, 平井康晴 / (招待講演) 放射光計測とデータ駆動科学の融合ー EXAFS 解析を中心にー / 第20回 XAFS 討論会, 姫路・じばさんびる, 2017/8/5.
- [31] 赤井一郎, 岩満一功, 岡田真人 / ベイズ推定によるコヒーレントフォノン減衰振動の高精度モデリング / 新学術領域「疎性モデリング」2017 年度第1回公開シンポジウム, 東大, 2017/6/6.
- [32] 赤井一郎, 岩満一功, 五十嵐康彦, 岡田真人, 岡島敏浩, 平井康晴 / EXAFS(広域 X 線吸収微細構造)のスパースモデリング / 2017 年度人工知能学会全国大会 2I4-OS-10b-1, 名古屋・ウインクあいち, 2017/5/24.
- [33] 岩満一功, 相原慎吾, 溝口幸司, 五十嵐康彦, 村田伸, 岡田真人, 赤井一郎 / SpDMD によるコヒーレントフォノンの減衰振動モード分解 / 2017 年度人工知能学会全国大会 2I2-1, 名古屋・ウインクあいち, 2017/5/24.
- [34] 赤井一郎, 岡島敏浩, 平井康晴, 岡田真人 / スパースモデリングによる広域 X 線吸収微細構造の新規解析法 / 日本物理学会「第72回年次大会」17pC22-5, 阪大・豊中, 2017/3/17.
- [35] 切通愛莉紗, 堤優太, 郡司昂弥, 相原慎吾, 岩満一功, 徳田悟, 岡田真人, 赤井一郎 / ベイズ推定による Cu₂O 薄膜における励起子発光のスペクトル分解 / 日本物理学会「第72回年次大会」19pC-PS-4, 阪大・豊中, 2017/3/19.
- [36] 有嶋駿士郎, 岩満一功, 相原慎吾, 高橋和敏, 徳田悟, 岡田真人, 赤井一郎 / 原子層厚グラフェンの X 線光電子スペクトルのレプリカ交換モンテカルロ法によるスペクトル分解 / 日本物理学会「第72回年次大会」19pK-PS-11, 阪大・豊中, 2017/3/19.
- [37] 岩満一功, 古川喜彬, 中山正昭, 徳田悟, 岡田真人, 赤井一郎 / ベイズ推定による GaAs/AlAs タイプ II 超格子の発光スペクトル解析 / 日本物理学会「第72回年次大会」20aB14-9, 阪大・豊中, 2017/3/20.
- [38] 赤井一郎 / (招待講演) 放射光計測におけるデータ駆動科学 / 第4回計算科学連携

- センターセミナー，姫路・じばさんビル，2017/3/10.
- [39] 赤井一郎 / **(招待講演)** データ駆動科学による放射光計測データの新規解析法の提案 / SPring-8 材料構造の解析に役立つ計算科学研究会(第3回)，神戸・ニチイ学館，2017/2/27.
- [40] 赤井一郎，岡島敏浩，平井康晴，岡田真人 / 広域 X 線吸収微細構造のスパースモデリング / 第 27 回光物性研究会 IA-14，神戸大，2016/12/2.
- [41] 岩満一功，古川喜彬，中山正昭，徳田 悟，岡田真人，赤井一郎 / GaAs/AlAs タイプ II 超格子での定常発光スペクトルのベイズ解析 / 第 27 回光物性研究会 IIA-37，神戸大，2016/12/3.
- [42] 切通愛莉紗，堤 優太，郡司昂弥，相原慎吾，岩満一功，徳田 悟，岡田真人，赤井一郎 / ベイズ推定による Cu₂O 薄膜における励起子発光のスペクトル分解 / 第 27 回光物性研究会 IIB-50，神戸大，2016/12/3.
- [43] 有嶋駿士郎，岩満一功，相原慎吾，高橋和敏，徳田 悟，岡田真人，赤井一郎 / 原子層厚グラフェンの X 線光電子スペクトルのレプリカ交換モンテカルロ法によるスペクトル分解 / 第 27 回光物性研究会 IIB-55，神戸大，2016/12/3.
- [44] 相原慎吾，村田 伸，徳田 悟，溝口幸司，岡田真人，赤井一郎 / SpDMD によるコヒーレントフォノン信号のモード分解解析 / 第 27 回光物性研究会 IIIB-77，神戸大，2016/12/3.
- [45] I. Akai / **(Invited)** Data Driven Science by Sparse Modeling on Materials Informatics / (ISKSR3) 3rd Int. Symp. on Kumamoto Synchr. Radiat., Kumamoto, Japan, 2016/11/30.
- [46] K. Iwamitsu，S. Arishima，K. Takahashi，S. Tokuda，M. Okada，I. Akai / Bayesian analysis of X-ray photoelectron spectra in monolayer and multilayer graphenes grown on SiC(0001) / (ISKSR3) 3rd Int. Symp. on Kumamoto Synchr. Radiat., Kumamoto, Japan, 2016/11/30.
- [47] S. Aihara，S. Murata，S. Tokuda，K. Mizoguchi，M. Okada，I. Akai / Mode Decomposition of Coherent Phonon Signals by SpDMD / (ISKSR3) 3rd Int. Symp. on Kumamoto Synchr. Radiat., Kumamoto, Japan, 2016/11/30.
- [48] A. Kiridoshi，Y. Tsutsumi，K. Gunji，S. Aihara，K. Iwamitsu，S. Tokuda，M. Okada，I. Akai / Spectral decomposition of excitonic photoluminescence spectra in Cu₂O thin crystals by Bayesian inference / (ISKSR3) 3rd Int. Symp. on Kumamoto Synchr. Radiat., Kumamoto, Japan, 2016/11/30.
- [49] S. Arishima，K. Iwamitsu，S. Aihara，K. Takahashi，S. Tokuda，M. Okada，I. Akai / Spectral decomposition of X-ray photoelectron spectrum in graphenes having atomic thicknesses with a replica exchange Monte Carlo method / (ISKSR3) 3rd Int. Symp. on Kumamoto Synchr. Radiat., Kumamoto, Japan, 2016/11/30.
- [50] 赤井一郎，村田伸，相原慎吾，徳田悟，岩満一功，岡田真人 / SpDMD によるコヒーレントフォノン信号のモード分解解析(I) / 日本物理学会「2016 年秋季大会」14pAL-3，金沢大・角間，2016/9/14.
- [51] 相原慎吾，村田伸，徳田悟，岩満一功，溝口幸司，岡田真人，赤井一郎 / SpDMD によるコヒーレントフォノン信号のモード分解解析(II) / 日本物理学会「2016 年秋季大会」14pAL-4，金沢大・角間，2016/9/14.
- [52] 赤井一郎 / **(招待講演)** データ駆動科学の物性科学への適用 / 第 22 回稲盛フロンティア研究セミナー，九州大，2016/8/23.
- [53] 赤井一郎 / **(招待講演)** データ駆動科学の物性科学への適用と、放射光計測への展開 / 九州シンクロトロン光研究センター研究成果報告会，佐賀・サンメッセ鳥栖，2016/8/3.
- [図書] (計 0 件)
該当なし。
- [産業財産権]
○出願状況 (計 0 件)
該当なし。
- 取得状況 (計 0 件)
該当なし。
- [その他]
○受賞
[1] 相原慎吾 / 第 27 回光物性研究会 奨励賞，2016 年。
6. 研究組織
- (1)研究代表者
赤井 一郎 (AKAI, Ichiro)
熊本大学・パルスパワー科学研究所・教授
研究者番号：20212392
- (2)研究分担者
該当なし。
- (3)連携研究者
岡田 真人 (OKADA, Masato)
東京大学・大学院新領域創成科学研究科・教授
研究者番号：90233345
岩満 一功 (IWAMITSU, Kazunori)
熊本大学・理学部・教室系技術職員
研究者番号：00768236
中山 正昭 (NAKAYAMA, Masaaki)
大阪市立大学・大学院工学研究科・教授
研究者番号：30172480
- (4)研究協力者
相原 慎吾 (AIHARA Shingo)
濱本 真由美 (HAMAMOTO Mayumi)
有嶋 駿士郎 (ARISHIMA Syunshiro)
切通 愛莉紗 (KIRIDOSHI Arisa)
山代 哲也 (YAMASHIRO Tetsuya)