

超並列データ駆動科学による革新的二次元物質構造解析法

Novel structure analysis method for two-dimensional material by massively parallel data-driven science

星健夫
鳥取大学

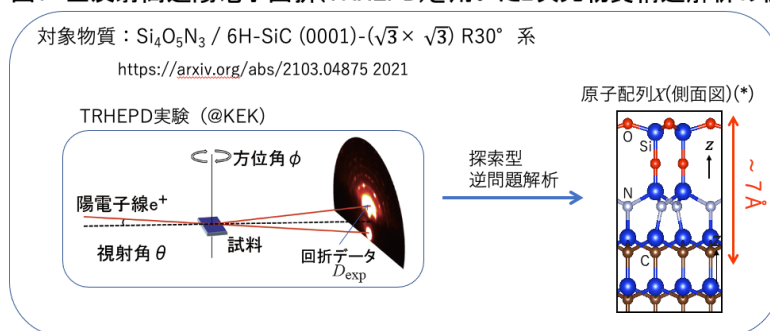
1. 研究目的

二次元物質構造解析向け量子ビーム回折実験を対象として、先端測定における超並列型データ解析手法を構築・応用している。現状では、KEKにおける新しい測定技術である全反射高速陽電子回折実験(Total reflection high-energy positron diffraction, TRHEPD, トレプト)(段落末(注1)。以下同様)を対象としており、超並列計算機を前提としたソフト開発と応用を行っている(注2)。実験回折データ D_{exp} から対象物質原子座標 X を求める、探索型逆問題解析を行う($D_{\text{exp}} \Rightarrow X$) (図1)。本研究は、望月出海(KEK)・高山あかり(早稲田大)など、実験系研究者との共同研究である。

(注1) <https://www2.kek.jp/imss/spf/>; 総説: Y. Fukaya, *et al.*, Total-reflection high-energy positron diffraction (TRHEPD) for structure determination of the topmost and immediate sub-surface atomic layers, *J. Phys. D.* 52, 013002 (2018).

(注2) 既存論文: K. Tanaka, *et al.*, Development of data-analysis software for total-reflection high-energy positron diffraction (TRHEPD), *Acta. Phys. Pol. A* 137, 188 (2020).

図1 全反射高速陽電子回折(TRHEPD)を用いた二次元物質構造解析の例



2. 研究成果の内容

最適化アルゴリズム(Nealder-Mead法), 及び, グリッド型探索を組み合わせた解析ソフトを開発し(成果(1-1)), 実問題 ($\text{Si}_4\text{O}_5\text{N}_3 / 6\text{H-SiC}$ (0001)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ R30° 系 (図1右図), $\text{Pb/Si}(111)$ - $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 系, など) へと応用した(成果(2-1, 2-2, 2-3, 3-1))(図

1).

3. 学際共同利用が果たした役割と意義

プログラムは超並列型計算機を前提としており、Oakforest-PACS2048 ノード利用までの並列計算を利用した。2048 ノードまでの並列計算が通常ジョブとしてできる機会は限られており、学際共同利用の利用は非常に有意義だったと考えている。

4. 今後の展望

並行プロジェクトを通じて、プログラムは「2DMAT (TWO-Dimensional MATerial structure analysis)」の名称で公開された(注 3)。ここでは、並列 (レプリカ交換) モンテカルロ法・ベイズ最適化法, などの解析アルゴリズムが拡充されており, 今後, 活用していく。また, 手法開発の展望としては, 超並列型(ポピュレーションアニーリング型)モンテカルロ法の実装, 及び, 対応実験の拡張 (表面エックス線回折・低速電子線回折など) を行っていく。

(注 3) 2020 年度東京大学物性研究所ソフトウェア開発・高度化プロジェクト「二次元物質構造解析むけ実験データ解析の高度化」, 代表: 星健夫;

(<https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/2dmat/>; <https://github.com/issp-center-dev/2DMAT>)

5. 成果発表

(1) 学術論文

(1-1) K. Tanaka, *et al*, Two-stage data-analysis method for total-reflection high-energy positron diffraction (TRHEPD), JJAP Conf. Series, in press; Preprint:<https://arxiv.org/abs/2002.12165> 2020

(2) 学会発表

(2-1) 星健夫他, 全反射高速陽電子回折(TRHEPD)における計測インフォーマティクスと高速計算技術の融合, 応用物理学会, 2021 年 3 月.

(2-2) 濱田雅史他, Pb/Si(111)- $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ 表面超構造における構造の原子密度依存性: 全反射高速陽電子回折法とデータ駆動科学による構造解析, 物理学会, 2021 年 3 月.

(2-3) 星健夫, AI と高速計算機による先端計測の革新, 産学連携オンラインマッチング EXPO, 2020 年 12 月.

(3) その他

(3-1) (Preprint): T. Hoshi, *et al*, Data-driven sensitivity analysis in a total-reflection high-energy positron diffraction (TRHEPD) experiment of the $\text{Si}_4\text{O}_5\text{N}_3 / 6\text{H-SiC} (0001)-(\sqrt{3}\times\sqrt{3}) R30^\circ$, <https://arxiv.org/abs/2103.04875> 2021

使用計算機	使用計算機 に○	配分リソース※	
		当初配分	追加配分
Cygnus	-	-	-
Oakforest-PACS	○	266,667	-
※配分リソースについてはノード時間積をご記入ください。			