

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/KEK

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(図 1)。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; 図 1(a)に模式図)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。実験回折データ D 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 ($D \Rightarrow X$) (図

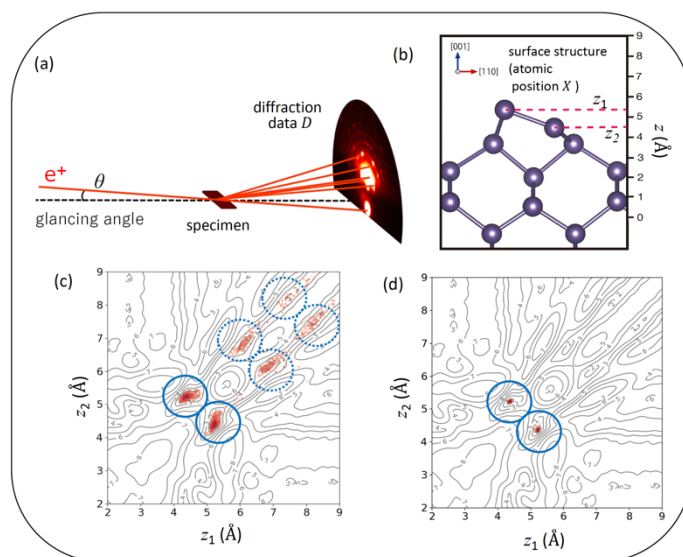


図1 全体構想「超並列データ駆動科学による革新的二次元物質構造解析法」

1)。本研究は、望月出海

(KEK)など、実験系研究者との共同研究である。解析ソフトウェアは、「2DMAT」として公開されている(<https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/2DMAT/>)。

2. 研究成果の内容

TRHEPD への応用研究と手法拡張を行った[1-3]。特に、Wisteria-o や富岳の超並列計算を最大限活用できる超並列モンテカルロ法 (Population Annealing(PA)法) に基づくベイズ推定などを実装し、プログラムを公開した[1]。PA 法では、ベイズ事後確率 $P(X|D)$ を高次元ヒストグラムとして計算される。手法として、典型的半導体である Ge(001)-c4x2(図 1(b)に側面図)の表面 1, 2 層原子の z 座標 ($X = (z_1, z_2)$) を取り上げた。図 1(c)(d)には、ベイズ事後確率 $P(z_1, z_2|D)$ を描いた。実験データに含まれる不確かさのパラメータを調整することで、真解・局所解の検出(図 1(c))・区別(図 1(d))ができることが示された。これは、実験データに対する高信頼な解析が実現できたことを意味する。またプログラムコードを超並列計算としてチューニングを行った。その成果を並行する「富岳」課題(hp220248)で検証し、極めて高い並列効率(ノード数 $N=3000\sim 12000$ ノードの強スケール型並列効率=0.98)を得た。また、実験系研究者を

想定した講習会[7], 触媒研究との融合を目指した研究会[8]も開催している。

3. 学際共同利用プログラム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, 実問題への適用の他, Wisteria-
上でプログラム開発・チューニングを行うことで「富岳」での高い並列効率 (Sec.
2) が達成できた。

4. 今後の展開

TRHEPD を対象としたデータ解析コードは完成したので, 今後はカーボンニュー
トラルを目指した環境型触媒表面(CeO_2 -(111)表面など)など, 応用研究に注力する。
さらに, 解析アルゴリズムは汎用であるので, 表面エックス線回折・低速電子回折・
オペランド偏光全反射蛍光(PTRF)-X 線吸収微細構造(XAFS)など, 関連した他実験手
法の解析を統合した「マルチプローブ・マルチモーダル計測」へ発展させる。

5. 成果発表

(1) 学術論文

[1] Yuichi Motoyama, Kazuyoshi Yoshimi, Izumi Mochizuki, Harumichi
Iwamoto, Hayato Ichinose, Takeo Hoshi, Data-analysis software framework
2DMAT and its application to experimental measurements for two-
dimensional material structures, Computer Physics Communications 280,
108465/1-11 (2022);プレスリリース(鳥取大/KEK)「先端量子ビーム計測技術向け
汎用データ解析ソフトウェア 2DMAT の開発～2次元物質研究の新展開～」

[2] Kazuyuki Tanaka, Izumi Mochizuki, Takashi Hanada, Ayahiko Ichimiya,
Toshio Hyodo, Takeo Hoshi, Two-stage data-analysis method for total-
reflection high-energy positron diffraction (TRHEPD), JJAP Conf. Series 9,
011301/1-9 (2023).

[3] Takashi Hanada, Yuichi Motoyama, Kazuyoshi Yoshimi, Takeo Hoshi, sim-
trhepd-rheed – Open-source simulator of total-reflection high-energy positron
diffraction (TRHEPD) and reflection high-energy electron diffraction
(RHEED), Computer Physics Communications 280, 108465/1-11 (2022).

(2) 学会発表 (主な発表のみ)

[4] 富岳における超並列データ駆動科学と先端計測への応用, 星健夫, ミニシン
ポジウム「超高速データ駆動科学と先端計測技術の融合による触媒科学イノベー
ション」, オンライン, 2023年3月30日(招待講演)。

[5] 富岳における超並列データ駆動科学と全反射高速陽電子回折(TRHEPD)への
応用, 研究会「深化するデータ科学と表面科学」, オンライン, 2023年3月28
日(招待講演)。

[6] Bridging between algorithms and applications: novel numerical libraries and the performance prediction by Bayesian inference, CECAM Flagship Workshop *Challenges and Advances in Solving Eigenproblems for Electronic-Structure Theory*, Lausanne, Switzerland, 2022 年 11 月 15 日 (招待講演).

(3) その他

[7] 2DMAT 講習会-CCMS Web ハンズオン-,オンライン, 2022 年 4 月 26 日;

<https://ccms.issp.u-tokyo.ac.jp/event/5274/>

[8] 研究会「超高速データ駆動科学と先端計測技術の融合による触媒科学イノベーション」,触媒科学計測共同研究拠点, オンライン, 2023 年 3 月 30 日

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			
Wisteria/BDEC-01	○	212,500	0
※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。			