

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

核融合科学研究所

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。従来は、2次元物質構造解析向け全反射高速陽電子回折実験(Total reflection high-energy positron diffraction, TRHEPD, トレプト)のみに対応していたが、プログラムの拡張により、触媒表面構造解析向け偏光全反射蛍光-X線吸収微細構造(Polarization Dependent Fluorescent X-ray Absorption Fine Structure, PTRF-XAFS)実験にも対応した。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/>)。本研究は、望月出海(KEK)、高草木達(北大触媒研)など、実験系研究者との共同研究である。

2. 研究成果の内容

2DMAT に対して、超並列計算機におけるプログラムチューニングを行った。特に、超並列モンテカルロ法 (Population Annealing(PA)法) に基づくベイズ推定の高並列効率化にとりくんだ。Wisteria-o でチューニングしたプログラムを、富岳で性能テストし (課題 hp230304)、極めて高い並列効率(ノード数  $N=3,072\sim 82,944$  ノードの強スケール型並列効率  $\alpha=0.89$ )を得た。

TRHEPD 実験における応用として、Ge(001)-c4x2 表面系、水素吸着された CeO<sub>2</sub> 表面系、アルミニウム上のシリセン系、に適用した (継続中) [2,3,4,6,7]。さらに、TRHEPD 順問題ソルバーである量子散乱問題(偏微分方程式求解)向け高速数値計算解法を提案した[1]。一方、PTRF-XAFS 実験においては、Ni/ $\sigma$ -MBA/TiO<sub>2</sub>(110)系でテスト計算を行った[5]。また、実験系研究者を想定した講習会[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-o 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. 今後の展望

今後は上記 2 種計測データの解析を進め、さらに他計測手法へと発展させる。先端計測のデータ解析を、スパコンの新しいキラーアプリとしたい。TRHEPD 実験・PTRF-XAFS

実験は KEK での計測であり、KEK での計測とスパコンでのデータ解析をセットにすることで、大型実験施設とスパコンの連携体制が確立される。さらに、物質科学以外の計測として、核融合・プラズマ分野の計測（例えば、核融合研における大型ヘリカル装置 (<https://www-lhd.nifs.ac.jp/>)) も対応予定である。

## 5. 成果発表

### (1) 学術論文

[1] S. Kudo, Y. Yamamoto, T. Hoshi, A fast and efficient computation method for reflective diffraction simulations, *Computer Physics Communications* 296, 109029/1-9 (2024)

[2] (依頼解説記事) 星健夫, 望月出海, 田中悟, 兵頭俊夫, 福島孝治, 全反射高速陽電子回折 (TRHEPD) を用いた表面構造決定におけるデータ駆動型感度解析, *日本陽電子科学会誌* 21 号, pp.3-9 (2023).

### (2) 学会発表

[3] (招待講演) 星健夫, 触媒 XAFS や陽電子回折などの計測データ解析ソフトの産業応用, R026 先端計測技術の将来設計委員会第 16 回研究会, 日本学術振興会産学連携課, 2024 年 3 月 13 日.

[4] (招待講演) 深谷有喜, 佐藤祐輔, 星健夫, 中野陽斗, 吉見一慶, 小森文夫, 松田巖, 陽電子回折・光電子分光・データ科学によるシリセンの構造探査, 東大物性研短期研究会「物質科学シミュレーションと先端実験のデータ連携」, 2024 年 2 月 19 日.

[5] 星健夫, 沢頭孟, 高草木達, 計測データ解析フレームワーク 2DMAT による PTRF-XAFS 解析, 東大物性研短期研究会「物質科学シミュレーションと先端実験のデータ連携」, 2024 年 2 月 19 日.

[6] (招待講演) 星健夫, 富岳におけるベイズ推定を用いた全反射高速陽電子回折 (TRHEPD) のデータ解析, 第 9 回 大型実験施設とスーパーコンピュータとの連携利用シンポジウム, 東京, 2023 年 9 月 4 日.

[7] (招待講演) I. Mochizuki, T. Hanada, T. Hoshi, K. Wada, R. Ahmed, T. Hyodo, An effective use of total-reflection high-energy positron diffraction (TRHEPD) for the detection of H atoms: application to H-terminated CeO<sub>2</sub> (111)-1x1 surface, 16th International Workshop on Slow Positron Beam Techniques & Applications (SLOPOS-16), Orléans, France, 2023 年 7 月 16 日.

### (3) その他

[8] 2DMAT 講習会-CCMS Web ハンズオン-, 東大物性研/ハイブリッド開催, 2024 年 3 月 28 日; <https://ccms.issp.u-tokyo.ac.jp/event/6432/>

筑波大学計算科学研究センター 2023 年度学際共同プログラム利用報告書

使用計算機	使用計算機に ○	配分リソース※		
		当初配分	移行*	追加配分
Cygnus				
Pegasus				
Wisteria/BDEC-01	○	220,000		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。 *バジェット移行を行った場合、「+2000」「-1000」のように記入				