

2021 年度 TIA 連携プログラム探索推進事業「かけはし」

調査研究報告書(公開版)

【研究題目】陽電子回折データ解析プログラムの高度化に向けての調査研究 II

【整理番号】TK21-048

【代表機関】高エネルギー加速器研究機構

【調査研究代表者（氏名）】望月 出海

【TIA 内連携機関：連携機関代表者】東京大：福島孝治，東北大：花田貴

【TIA 外連携機関】鳥取大学，早稲田大学，同志社大学

【報告書作成者】望月出海 【報告書作成年月日】2022 年 3 月 23 日

【連携推進（具体的な連携推進活動内容とその活動の効果等）】

高エネルギー加速器研究機構（KEK），産総研，東京大，東北大，さらに鳥取大，早稲田大，同志社大との連携により，昨年度かけはしにおいて，連携機関の星准教授（鳥取大）らを中心に，表面構造解析ソフトウェア「2DMAT」(<https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/2dmat/>) が開発された。

本年度は，本活動におけるソフトウェア機能の需要調査の結果を踏まえて，2DMAT に 2 種の最適化法（逐次最適化・ベイズ最適化）と 3 種の探索法（グリッド型探索・レプリカ交換型モンテカルロ法・ポピュレーションアニリング型モンテカルロ法）が実装された。また，本ソフトを利用できる測定ハードとして，従来の「全反射高速陽電子回折(TRHEPD,トレプト)法」に加えて，新たに「表面エックス線回折(SXRD)法」が追加された。

本年度調査研究の活動・成果報告会として，「スパコンを用いた実験データ解析の展開～量子ビームによる 2 次元物質構造解析への適用」(<https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/teams/news/937>) を 2021 年 9 月 29 日にオンライン開催した。本連携推進活動により，参画機関研究者の連携や，実験・計算・データ科学の分野融合が深まり，課題メンバーを中心に外部資金（JST 未来社会創造事業や CREST，科研費基盤 A，B など）の申請を行うに至った。残念ながら採択には至らなかったが，今後も本メンバーを中心に大型外部資金等の獲得を目指す。

【調査研究内容（実験等中心に背景・課題と実行された課題解決の内容と結果）】

本調査研究では、近年発展している統計科学の技術を活用しつつ、計測に関するハードウェア&ソフトウェアの相互連携を強化する方策や、2DMATのさらなる高速化・自動化・共有化・汎用化のための方策を調査し、計算時間や解析の信頼性を格段に向上させることを目的とした。そこで本調査研究では、2DMATをユーザーに広く提供するためのオンライン講習会を開催し、実地で利用してフィードバックしてもらうことで、ソフトウェアの利便性や汎用性の向上と共にユーザー拡大の方策を探った。

調査の結果、従来、熟練した専門家が試行錯誤していた構造解析、すなわち、最適な原子配列の探索とその最適化を、誰でも、経験に頼らず、自動で行える手法構築がユーザーから求められていることが分かった。そこで本年度は、そのための計算アルゴリズムとして、2DMATに、大域検索のためのグリッド探索法、レプリカ交換型モンテカルロ法・ポピュレーションアニーリング型モンテカルロ法、局所検索のためのベイズ最適化法を新たに実装した。本調査研究により、従来、熟練した専門家が試行錯誤していた構造解析を、一般のユーザーが簡便に短時間に行えるようになりつつある。

共同研究・競争的資金等の研究課題（2件）

- (1) 星健夫, 福島孝治, 山本有作, 吉見一慶, 深谷猛, 工藤周平, 望月出海, 高山あかり, 「超並列解析ソフト 2DMAT による全反射高速陽電子回折実験解析」, 「富岳」機動的課題 [計算機利用課題, hp210267], 2021年11月 - 2022年11月
- (2) 星健夫, 「二次元物質構造解析むけ実験データ解析の統合プラットフォーム」, 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 [プログラム開発課題], 2021年4月 - 2022年3月

プレスリリース（1件）

高速データ解析で極薄膜物質の原子配列解析を加速～全反射高速陽電子回折における新しいデータ解析法の導入～, 2021年11月24日

<https://www.kek.jp/wp-content/uploads/2021/11/pr20211124.pdf>

論文（1報）

- (1) T. Hoshi, D. Sakata, S. Oie, I. Mochizuki, S. Tanaka, T. Hyodo, K. Hukushima, “Data-driven sensitivity analysis in surface structure determination using total-reflection high-energy positron diffraction (TRHEPD)”, *Computer Physics Communications*, **271** 108186-108186 (2022).

学会発表（17件）

- (1) 星健夫, 吉見一慶, 本山裕一, 岩本晴道, 一ノ瀬颯人, 阪田大志郎, 「2次元物質構造測定むけデータ解析ソフト 2DMAT v.2 の開発と全反射高速陽電子回折実験への応用」, 日本物理学会年次大会, 2022年3月16日
- (2) 星健夫, 一ノ瀬颯人, 岩本晴道, 阪田大志郎, 吉見一慶, 本山裕一, 「データ解析ソフト 2DMAT v.2 β の開発と全反射高速陽電子回折実験への応用」, 陽電子科学と

- その理工学への応用, 2021年12月10日, 京都大学複合原子力科学研究所
- (3) 星健夫, 一ノ瀬颯人, 岩本晴道, 阪田大志郎, 吉見一慶, 本山裕一, 「データ解析ソフト 2DMAT v.2 β の開発と全反射高速陽電子回折実験への応用」, 陽電子科学とその理工学への応用, 2021年12月10日, 京都大学複合原子力科学研究所
 - (4) 望月出海, 和田健, Rezwan Ahmed, 兵頭俊夫, 「SPF の試料準備チェンバー整備」, 陽電子科学とその理工学への応用, 2021年12月10日, 京都大学複合原子力科学研究所
 - (5) 和田健, 望月出海, 星健夫, Rezwan Ahmed, 兵頭俊夫, KEK 低速陽電子実験施設における低速陽電子ビーム生成ユニットの改修と最近の共同利用の成果, VACUUM2021 真空展, 2021年12月1日
 - (6) T. Takeda, M. Hamada, Y. Tujikawa, I. Mochizuki, T. Hoshi, T. Hyodo, A. Takayama, "The layer-number dependence on structure of graphene/SiC studied by TRHEPD", The 9th International Symposium on Surface Science (ISSS-9), 2021年11月30日
 - (7) 星健夫, 望月出海, 岩本晴道, 一ノ瀬颯人, 阪田大志郎, 吉見一慶, 本山裕一, 福島孝治, 汎用データ解析ソフト 2DMAT と全反射高速陽電子回折実験への適用, 第6回計測インフォマティクス研究会 (人工知能学会第2種研究会), 2021年11月26日
 - (8) 星健夫, 「ポピュレーションアニーリングを用いた超並列ベイズ推定」, スパコンを用いた実験データ解析の新展開～量子ビームによる2次元物質構造解析への適用, 2021年9月29日
 - (9) 望月出海, 「低速陽電子実験施設における全反射高速陽電子回折(TRHEPD)装置」, スパコンを用いた実験データ解析の新展開～量子ビームによる2次元物質構造解析への適用, 2021年9月29日
 - (10) 一ノ瀬颯人, 本山裕一, 吉見一慶, 星健夫, 「全反射陽電子回折(TRHEPD)むけ測定データ解析ソフト 2DMAT におけるベイズ最適化」, 日本物理学会秋季大会, 2021年9月21日
 - (11) 星健夫, 岩本晴道, 福島孝治, 「先端測定データ解析における超並列モンテカルロ計算」, 応用物理学会秋季学術講演会, 2021年9月11日
 - (12) 岩本晴道, 本山裕一, 吉見一慶, 福島孝治, 星健夫, 「先端測定データ解析に向けた超並列モンテカルロ法計算」, 日本応用数理学会, 2021年9月8日
 - (13) 濱田雅史, 辻川夕貴, 武田朋也, 阪田大志郎, 望月出海, 星健夫, 兵頭俊夫, 高山あかり, 「TRHEPD による Pb/Si(111)表面超構造の構造解析: $\sqrt{3} \times \sqrt{3} \leftrightarrow 3 \times 3$ の構造相転移の起源」, 日本物理学会秋季大会, 2021年9月
 - (14) 武田朋也, 濱田雅史, 辻川夕貴, 望月出海, 星健夫, 兵頭俊夫, 高山あかり, 「SiC

上グラフェンにおける構造の層数依存性：全反射高速陽電子回折], 日本物理学会
秋季大会, 2021年9月

- (15) 一ノ瀬颯人, 本山裕一, 吉見一慶, 星健夫, 「先端2次元物質構造測定データ解析
ソフト2DMATによる大域探索」, 応用物理会中四国支部学術講演会, 2021年7
月31日
- (16) 和田健, 望月出海, 兵頭俊夫, 永井康介, 岩瀬広, 峠暢一, 「KEK物構研低速陽電子
実験施設の加速器ベース低速陽電子ビーム生成ユニットの更新」, 第58回アイソ
トープ・放射線研究発表会, 2021年7月9日
- (17) 和田健, 「加速器ベース低速陽電子ビームによる陽電子回折実験の現状と将来展
望」, 日本表面真空学会2021年度関東支部講演大会, 2021年4月3日

【今後の活動予定】

KEK物構研低速陽電子実験施設において, TRHEPD法が共同利用実験に供されてい
る。その構造解析が2DMATによって高度化され, 最表面の特性を利用した新奇材料の
原子配列の解析がより高速・高精度に可能となった。高性能触媒材料, 省エネ・パワー
デバイス材料, スピントロニクス関連材料など, 最表面の特性を利用した素材開発は今
後ますます重要になってくる。そのような新奇な材料の表面構造解析をテーマとして,
本課題の成果を活かした申請を参画機関研究者と連携して行い, 科研費基盤A, JST-
CREST, JST未来社会創造事業などの大型の競争的資金の獲得を目指す。

今後も調査研究を継続して2DMATを広くユーザーに提供し, 実地で利用してフィー
ドバックしてもらうことで, 本ソフトの利便性・汎用性の向上と共に, 多様な実験手法
によるデータ解析への適用の可能性を探る。

【SDGs17目標について、調査研究成果について、貢献ができると思われる項目があれば、最大3つまで☑をご記載下さい。】

研究成果に関連するSDGs目標がある。

関連するSDGs目標は無い

1 <input type="checkbox"/> 貧困をなくそう	2 <input type="checkbox"/> 飢餓をゼロに
3 <input type="checkbox"/> すべての人に健康と福祉	4 <input type="checkbox"/> 質の高い教育をみんなに
5 <input type="checkbox"/> ジェンダー平等を実現しよう	6 <input type="checkbox"/> 安全な水とトイレを世界中に
7 <input type="checkbox"/> エネルギーをみんなに、そしてクリーンに	8 <input type="checkbox"/> 働きがいも経済成長も
9 <input checked="" type="checkbox"/> 産業と技術革新の基盤を作ろう	10 <input type="checkbox"/> 人や国の不平等をなくそう
11 <input type="checkbox"/> 住み続けられるまちづくりを	12 <input type="checkbox"/> つくる責任、つかう責任
13 <input type="checkbox"/> 気候変動に具体的な対策を	14 <input type="checkbox"/> 海の豊かさを守ろう
15 <input type="checkbox"/> 陸の豊かさを守ろう	16 <input type="checkbox"/> 平和と公正をすべての人に

17 □パートナーシップで目標を達成しよう

以上