

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

核融合研, KEK 物構研低速陽電子, 東大物性研 星健夫

講演者は現在, 望月出海・和田健・兵頭俊夫(KEK 物構研低速陽電子)および, 吉見一慶(東大物性研)・福島孝治(東大総合文化)・山本有作(電通大情報理工)らと共同で, 先端計測向け汎用データ解析フレームワーク 2DMAT[1,2]を開発し, 全反射高速陽電子回折(TRHEPD, 図 1(a))を用いた 2 次元物質構造解析へ応用している. データ解析では計算 (動力学的回折理論) によって実験データを再現できる原子座標が探索され, 局所解に陥ることなく真解を見つける効率的な手法が実現している. 計測とデータ解析が一体化されたことで TRHEPD を用いた研究が格段に加速した.

2DMAT の特徴として, 現・次世代の計算機は小型計算機 (PC) からスーパーコンピュータまでが並列計算機であるため, これら計算機に最適な高速計算 (並列) アルゴリズムを採用している. 特に, ポピュレーションアニーリングモンテカルロ法(PAMC)[3]を用いたベイズ推定を中心にレビューする. データ解析は, 回折観測データ (ロッキング曲線) D から 2 次元物質 (表面付近のサブナノメートル領域) 原子座標 X を推定する逆解析である (D, X は高次元ベクトル量). ベイズ事後確率分布 $P(X|D)$ がヒストグラムとして得られるので, 複数解 (解候補) の検出, 観測データに含まれる不確かさの定量化, などが可能である.

テスト系として Ge(001)-c(4x2)表面(図 1(b)内図)の一波条件実験(z 座標の決定)に対し, 6 変数 ($X \equiv (z_1, \dots, z_6)$) 解析を行った. ボルツマン分布型の不確かさ強度パラメータ τ を用いた. パラメータ τ の最適値 τ^* では, 確率分布が真解付近のみに局在しており, 事前知識 (initial guess) なしで真解が得られた. また, 最適値より小さな τ ($\tau < \tau^*$) の値での周辺事後確率分布 $P(z_1, z_2|D) \equiv \int P(z_1, \dots, z_6|D) dz_3 \dots dz_6$ (図 1(b)) では, 複数の解候補 (真解・局所解) が検出された. これにより, PAMC 法が真解・局所解が検出・区別できる大域解析であることが確認された. 先端トピックとして, 表面水素原子の検出[4]などがある. さらに 2DMAT は, RHEED/LEED/SXRD/LEPD などの 2 次元物質構造解析向け計測[1]や, 高草木達(北大触媒研)らとのオペランド PTRF-XAFS を用いた触媒研究[5]などにも応用されつつある.

発展課題として, マルチモーダル (複数種) 計測むけの統合型データ解析手法開発があり, 物構研計測装置での試料ホルダー共通化とあわせ, さらなるブレークスルーが期待できる.

[1] <https://github.com/issp-center-dev/2DMAT/>; Y. Motoyama, *et al.*, *Comp. Phys. Commun.* 280, 108465 (2022); [2](解説記事)星他, *陽電子科学* 21, 3 (2023). [3] K. Hukushima and Y. Iba., *AIP Conf. Proc.* 690, 160 (2003). [4] (招待公演)Mochizuki *et al.*, SLOPOS-16, フランス, 2023 年 7 月. [5]星他, 触媒科学計測共同研究拠点(JURCC)共同研究(提案型), 2022-2023 年.
図 1(左図) (a) TRHEPD 実験概念図. (b) Ge(001)-c(4x2) 表面 (内図) に対するデータ解析過程での周辺事後確率分布 $P(z_1, z_2|D)$.

