

## 陽電子回折における高速化データ駆動科学

## High performance data-driven science for positron diffraction

鳥取大院工, 星健夫

Tottori Univ., Takeo Hoshi

E-mail: hoshi@tottori-u.ac.jp

既発表[1,2]のレビューを中心として, 陽電子回折における高速化データ駆動科学を概観する. 我々[1,2]は, スーパーコンピュータ(スパコン)と大型実験施設の新たな連携として, 全反射高速陽電子回折(Total-Reflection High-Energy Positron Diffraction, TRHEPD, トレプト; 本シンポ他講演参照)むけデータ解析手法を開発している. 今日, 「京」・ポスト「京」(計画)などの世界的スパコンを用いた高速計算と, データ駆動科学の融合が脚光を浴びている. 本研究は, 回折実験データから表面原子座標を特定する, 逆問題解析(回折データ→原子座標)に相当する. データ解析は従来, 熟練研究者の知見と人的作業で行われてきた. 自動化・高速化・大域探索(モデルフリー・初期値不要)化により, 測定装置の潜在能力をさらに開花させる. 具体的には, 理論・実験の回折データ残差(R-factor)を評価関数とした大域探索型逆問題解析を行う(図 1). 特に TRHEPD は, (i)陽電子の物理的性質により, 量子散乱問題(偏微分方程式)を数値的に解く順問題計算(原子座標→回折データ; 図 1(a)) [3]の精度が非常に良い, (ii)視射角 (図 1(a)の  $\theta$ ) などを変えた多数回独立測定データのため, スパコン(超並列計算)との相性が非常に良い, という特徴をもつ. そのため, スパコンを用いた大域探索型逆問題解析に理想的である. 手法展望として, 超並列型モンテカルロ法(ベイズ推定)と融合する. これら数理手法は汎用であり, 他実験(電子線回折など)にも適用できる. 本発表は, ポスト「京」重点課題 7 から一部援助を受けている.

[1] 田中和幸, 星, 一宮彪彦, 望月出海, 三木一司, 兵頭俊夫, 物理学会, 2018 年 9 月. [2] 田中和幸, 星, 望月出海, 一宮彪彦, 兵頭俊夫, 本会ポスター発表. [3] Ichimiya, JJAP 22, 176 (1983).

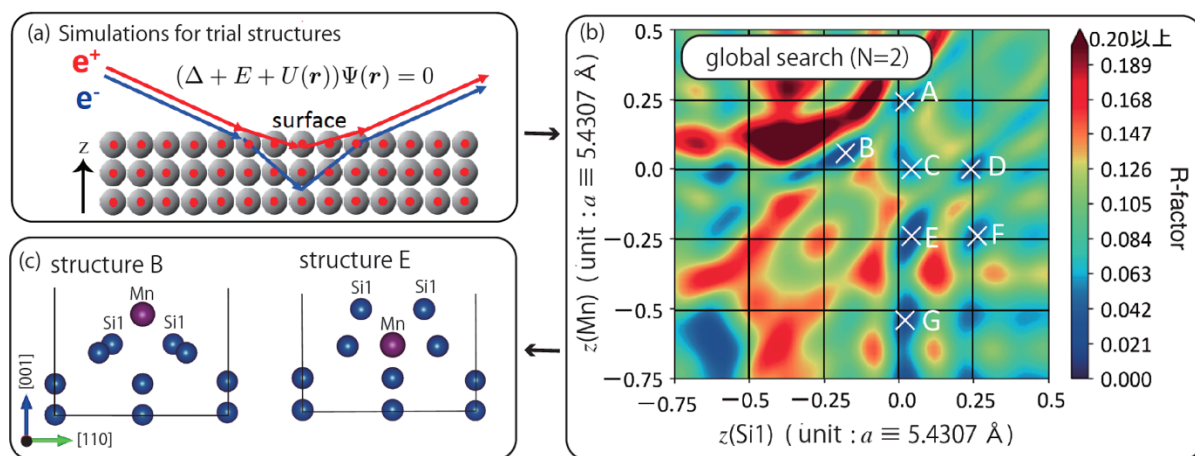


図 1 逆問題解析(回折データ→原子座標)の概要. (a) 順(量子散乱)問題[3]概念図. (b)大域探索と(c)結果構造. (b)(c)では Si(001)-Mn ワイヤ系([1], Murata, *et al.*, Nanoscale 10, 295 (2017))を例とした.