

計測インフォマティクスと高速計算技術の融合 と全反射高速陽電子回折 (TRHEPD) への応用

Fusion of measurement informatics and high-performance computation and
its application to total-reflection high-energy positron diffraction (TRHEPD)

鳥取大院工^A, 九大院工^B, KEK 物構研低速陽電子^C, 東大院総合文化^D

星健夫^A, 阪田大志郎^A, 尾家翔太郎^B, 望月出海^C, 田中悟^B, 兵頭俊夫^C, 福島孝治^D

^A Tottori Univ., ^B Kyushu Univ., ^C KEK(IMSS-SPF), ^D Univ. Tokyo

T. Hoshi^A, D. Sakata^A, S. Oie^B, I. Mochizuki^C, S. Tanaka^B, T. Hyodo^C, K. Hukushima^D

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

高速計算(HPC)技術との融合により, 汎用な測定データ解析手法を開発し, 全反射高速陽電子回折 (TRHEPD, トレプト) 実験[1]に適用した(予備的研究[2,3]). 手法は探索型逆問題解析であり, 最適化過程と感度解析からなる. 目的状態量 X に対して, 測定量 D の順問題モデル関数 $D_{cal} = D_{cal}(X)$ が与えられているとする. 最適化過程では, 実測量 D_{exp} との残差関数 $R = |D_{cal}(X) - D_{exp}|$ を数値的に最適化する. 感度解析では, 残差関数の最適点近傍を稠密に計算し, 残差関数の曲率情報を陽に計算する. 分散共分散行列の固有値問題を解き, 異方的な不確かさ(感度)を得る. 感度解析は, 変数 X として選ぶべきパラメータセットが自明でない場合に, 適切な選択を可能とする. 最適点近傍の緻密計算は, 一般に総演算量が多くなるが, スーパーコンピュータ(超並列型計算機)を使い高速計算する. 上記手法を, 2次元物質の新しい非破壊構造解析法である TRHEPD 実験に適用し, 有用性を確認した. 対象物質として, $\text{Si}_4\text{O}_5\text{N}_3$ / 6H-SiC (0001)- $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ R30° 表面[4] を取り上げた. 一波条件回折データ(ロッキングカーブ)から表面 8 原子層の z 座標($X \equiv (z_1, \dots, z_8)$)を解析した(図 1). 残差関数は異方的であり (例: 図 1(b)), 感度解析は変数選択の基礎となる系統的解析手法であることが確認された.

[1] <https://www2.kek.jp/imss/spf/>; 総説として, Y. Fukaya, et al., J. Phys. D 52, 013002 (2018). [2] Tanaka, et al., Acta. Phys. Pol. A 137, 188 (2020); JJAP Conf. Ser., in press; (arxiv:1910.05743). [3] 星他, 物理学会, 2020 年 9 月. [4] Shirasawa, et al., Phys. Rev. Lett. 98, 136105 (2007).

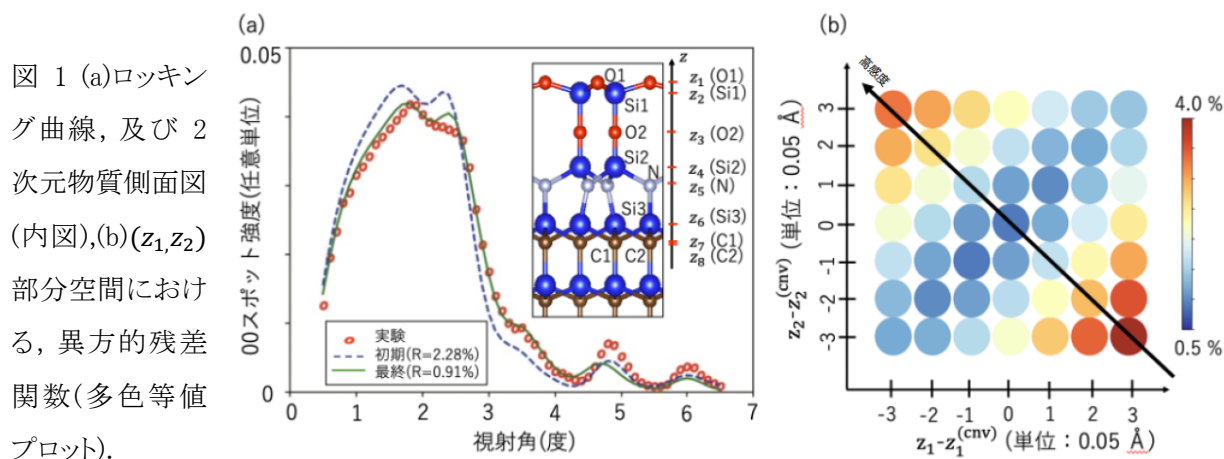


図 1 (a)ロッキン
グ曲線, 及び 2
次元物質側面図
(内図), (b) (z_1, z_2)
部分空間におけ
る, 異方的残差
関数(多色等値
プロット).