

令和 4 年 6 月 20 日現在

機関番号：15101

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2019～2021

課題番号：19H04125

研究課題名(和文) 超並列マシンを用いた計算統計と測定技術の融合

研究課題名(英文) Unification of computational statistics and measurement technology by massively parallel machine

研究代表者

星 健夫 (HOSHI, Takeo)

鳥取大学・工学部・准教授

研究者番号：80272384

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 13,500,000円

研究成果の概要(和文)：先端的計算手法(最適化法とデータ駆動型感度解析)を用いて汎用測定データ解析プログラム2DMATを開発・公開し、次世代触媒や次世代電子デバイスなどの工学応用が期待されている2次元物質(原子数層からなる極薄膜物質)構造解析実験にて実践した。具体的には、高エネルギー加速器研究機構(KEK)低速陽電子実験施設における革新的非破壊測定実験である、全反射高速陽電子回折法(トレプト法)を対象とした。さらに、スーパーコンピュータ富岳を用いた高速計算(弱スケーリング型並列計算)が達成された。また、プログラムを拡張し、解析できる実験の種類を増やした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

先端的コンピュータと先端的計算手法を、計測技術と融合させることで、新たなイノベーションに挑む研究である。本課題では全反射高速陽電子回折法を対象としたが、数理的アプローチは汎用であり、他実験(表面エックス線回折・低速電子回折)にも適用できる。成果物であるプログラム2DMATはネット公開され、学術・産業界の実験系研究者が無償で利用することができる。こうした計測イノベーションにより、物質開発サイクルが圧倒的に加速され、次世代触媒や次世代電子デバイスなどでの産業イノベーションへ昇華されることが期待される。

研究成果の概要(英文)：Using advanced computational methods (optimization method and data-driven sensitivity analysis), we have developed and released a general-purpose measurement data analysis program, 2DMAT, and applied it to structural analysis experiments of two-dimensional materials (ultra-thin materials consisting of several atomic layers), which are promising candidates for industrial applications such as next-generation catalysts and electronic devices. In particular, we used the total reflection high-energy positron diffraction (TRHEPD) method, which is an innovative nondestructive measurement method at the Low-energy Positron Experimental Facility of the High Energy Accelerator Research Organization (KEK). Furthermore, high-performance computations (weakly scaled parallel computations) using the supercomputer "Fugaku" were achieved. The types of applicable experiments are expanded.

研究分野：計算科学

キーワード：超並列計算 計算統計 2次元物質 次世代触媒 全反射高速陽電子回折 データ駆動型感度解析 ポピュレーションアンサンブル型モンテカルロ法 スーパーコンピュータ富岳

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

本課題は、計算・データ駆動科学と実験科学の融合を背景とする。以下、各論を述べる。

(1) 超並列計算時代の先端測定技術とデータ解析手法の融合

先端測定技術は実測定とデータ解析からなり、データ解析手法の発展によってブレークスルーが生まれうる。近年のブレークスルーとしては、クライオ電子顕微鏡 (2017 年度ノーベル化学賞) が記憶に新しい。一方、現・次世代計算機は、小型計算機 (メニーコア CPU 搭載型 PC) から大型計算機 (富士などのスーパーコンピュータ) までが並列計算機であり、並列アルゴリズムの利用によって潜在能力が開花される。並列アルゴリズムとは、「手分け」できる、つまり、ほぼ独立な多数プロセスに分解できるアルゴリズムのことである。上記より、並列計算機向けのアルゴリズムを開発・実践することで、新たなブレークスルー誕生が予見される。

一般に、測定データ解析の数理的基盤は、実験データ $D = (D_1, \dots, D_m)$ から、対象物理量 (知りたい量) $X = (X_1, \dots, X_n)$ を求めることである。実験系研究者からは、高速高信頼データ解析手法、つまり、高信頼性が担保された上での高速データ解析手法が、望まれている。本課題では探索型逆問題解析を想定し、測定手法ごとに物理法則に基づく順問題ソルバー $D_{\text{cal}}(X)$ が与えられているものとする。順問題ソルバー $D_{\text{cal}}(X)$ は、偏微分方程式求解などを含む、複雑な非線形関数であることを想定する。この場合、実験・計算の測定データの距離 (残差) 関数 $F(X) = d(D, D_{\text{cal}}(X))$ を目的関数とした、探索問題となる。ここで距離関数は、典型的には 2 乗ノルム $d(D, D_{\text{cal}}(X)) = |D - D_{\text{cal}}(X)|$ を意味する。計算手法の 1 つは、最適点 $X^* = \text{argmin}_X F(X)$ を求める最適化法である。さらに、実験条件・実験装置由来の不確かさ (uncertainty) を陽に扱う解析手法に、大きな需要がある。

(2) 2次元物質と全反射高速陽電子回折実験

Sec. 1-(1) のアプローチは汎用であるが最初の応用として、2次元物質 (原子数層からなる極薄膜物質) 向け非破壊構造測定である、全反射高速陽電子回折実験 (Total-Reflection High-Energy Positron Diffraction, TRHEPD, トレプト) [1] に着目した。

2次元物質は3次元物質 (結晶) にはない性質を持ち、次世代触媒や次世代電子デバイスなど、革新的工学応用が期待されている。3次元物質の非破壊構造解析 (原子座標決定) は、エックス線回折が決定版として広く使われている。しかし、2次元物質の非破壊構造解析は、シグナルが微弱、構造が多様、などの理由で、実験的に困難とされていた。近年、2次元物質非破壊構造解析のブレークスルーとして TRHEPD が注目され、上記困難を打破することが期待されている。TRHEPD は、科研費基盤 S (2012-2016 年度、代表: 兵頭俊夫 (KEK)) などを通じて実用化された、日本発の革新的測定技術である。TRHEPD は、陽電子の物理的性質により表面選択性 (表面付近のサブナノメートル領域の原子のみを選択的にプローブしていること) があり、2次元物質 (特に原子数層からなるサブナノメートルの厚みを持った系) の構造解析に理想的である。一方 TRHEPD は高度な実験技術であるため、現状では、高エネルギー加速器機構 (KEK) 物質構造科学研究所 (IMSS) 低速陽電子実験施設 (SPF) (<https://www2.kek.jp/imss/spf/>) のみ、実用的測定が実施されており、全国共同利用の対象となっている。TRHEPD 法は新しい測定手法であり、その超高精度をフルに活かすための、高速・自動解析手法が望まれていた。

(3) 本課題に至る経緯

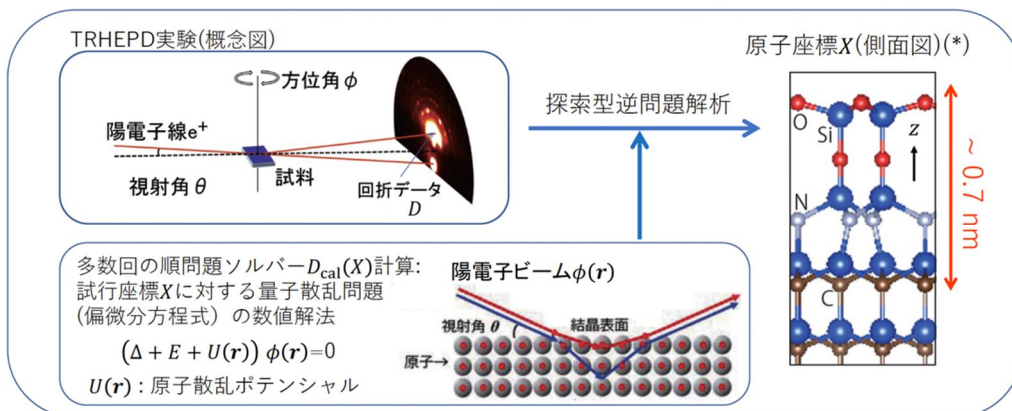
Sec. 1-(2) の状況で、実験系研究者である望月 (KEK; 本課題分担者) らが、計算・データ駆動科学系研究者である星 (鳥取大; 本課題代表者)・福島 (東大; 本課題分担者) に、TRHEPD データ解析向けソフトウェア開発について相談し、本課題に発展した。

2. 研究の目的

本課題の目的は、TRHEPD 実験のデータ解析を先駆として、実験データ解析に並列計算手法を導入し、高速高信頼データ解析 (高信頼性が担保された上での高速データ解析) を実現することである。

(図 1 に例)。そのような解析は、一般に総演算量が多くなるが、並列アルゴリズムを用いることで実用化さ

図1 測定データ解析フレームワーク「2DMAT」による2次元物質構造非破壊測定 (例)



(*) 新規な2次元半導体 $\text{Si}_4\text{O}_5\text{N}_3 / 6\text{H-SiC} (0001) - (\sqrt{3} \times \sqrt{3}) R30^\circ$;
Hoshi, et al. (Mochizuki, Hukushima), Comp. Phys. Commun. 271, 108186 (2022)

せる．計算機は，小型計算機（PC）から「富岳」などのスーパーコンピュータを想定する．成果物となるデータ解析フレームワークは 2DMAT(ツーディーマツト)と呼称することにした．具体的項目は，項目(a) データ解析ソフトウェア「2DMAT」の開発，項目(b) TRHEPD 実験のデータ解析，項目(c) 対象実験の拡張，項目(d) データ解析ソフトウェアの普及に向けた活動，である．ソフトウェア開発の一部については，吉見一慶（東大）らと行った．

3．研究の方法

Sec.2 の項目に沿って，説明する．

- ・ 項目(a) データ解析ソフトウェア 2DMAT の開発・・・並列アルゴリズムに基づき，汎用データ解析ソフトウェア（フレームワーク）2DMAT を開発・公開する．当座の目標は TRHEPD であるが，他実験にも適用できるように，汎用性を持たせる．順問題ソルバー $D_{cal}(X)$ をモジュール化したプログラムを開発することで，実現する．順問題ソルバーは，試行座標 X に対する量子散乱問題の数値解法をさす(図 1 左下)．具体的には，陽電子ビーム波動関数 $\phi(r)$ に対する偏微分方程式 $(\Delta + E + U(r))\phi(r) = 0$ に帰着される．ここで $U(r)$ は原子散乱ポテンシャル（原子による散乱ポテンシャル）を表し，原子座標 X で決まる．プログラム言語として Python を用いるが，高速性を要求される順問題ソルバー部分は，Fortran/C 言語による高速計算コードを接続する．以下の 5 つの探索 アルゴリズムを実装する；(i) Nelder-Mead 最適化(局所更新型最適化)，(ii) グリッドサーチ，(iii) ベイズ最適化(PHYSBO ライブラリ[2]利用)，(iv) レプリカ交換型モンテカルロ法[3]，(v) ポピュレーションアニーリング型モンテカルロ法[4]．このうち(i)以外は，標準的な並列化手法である Message Passing Interface(MPI)を用いている．また (iv)(v)は，福島（東大；本課題分担任）が提案者の一人となっている．
- ・ 項目(b) TRHEPD 実験のデータ解析・・・2DMAT により，TRHEPD の実験データを解析する．その際，不確かさ(Sec.1-(2))を陽に扱う手法を開発・実践する．
- ・ 項目(c) 対象実験の拡張・・・2DMAT の発展として，TRHEPD 以外の実験手法に対応させる．具体的には，TRHEPD と同様に 2 次元物質非破壊構造解析実験である，表面エックス線回折(Surface X-ray Diffraction, SXR)・低速電子回折(Low-energy Electron Diffraction, LEED)に対応させる．TRHEPD・SXR・LEED は，同じ試料に対して測定が行われることが多い．全てが 2DMAT でサポートされることにより，統合的解析が可能になる．
- ・ 項目(d) データ解析ソフトウェアの普及に向けた活動・・・ドキュメント（英語・日本語）作成・講習会開催などを行う．

4．研究成果

(1) 手法開発とプログラム公開

プログラム 2DMAT に Sec.3 に述べた 5 つのアルゴリズム全てを実装し，公開した[5-8]．さらに花田貴（東北大）らと，上記研究で利用された TRHEPD 順問題ソルバーを，sim-trhepd-rheed として公開し，第一原理計算(プログラムコード Quantum ESPRESSO)との連携機能などの機能強化を行なった[9]．2DMAT は，東大物性研スーパーコンピュータにインストールされるソフトウェアとなった．波及研究として，2DMAT のレプリカ交換型モンテカルロ法機能を，2 次元物質構造解析以外への応用研究（並列型固有値計算アルゴリズムの性能予測）に用いた[10]．解析数理手法の発展として，ポピュレーションアニーリング型モンテカルロ法を用いたベイズ推定の方法を提案した[11]．また，順問題の数理基盤である固有問題向け高速数値計算解法研究[12][13]・高精度計算研究[14]，および，波及研究としてベイズ最適化手法の発展[15]を行った．

(2) 富岳などのスーパーコンピュータでの高い並列性能ベンチマーク

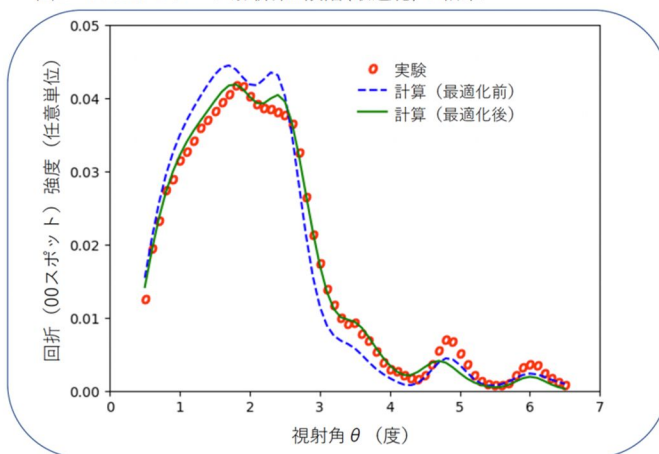
2DMAT の並列アルゴリズムは，小型計算機のみならず，スーパーコンピュータの潜在能力をフルに引き出すことができる．特に，ポピュレーションアニーリング型モンテカルロ法[4]は，非自明な超並列アルゴリズム（1 万以上の並列計算）であり，富岳での並列性能ベンチマークを行った（課題番号 hp210228，hp210267；論文準備中）．富岳における $N=2,048-32,768$ 並列(MPI プロセス)数を使ったテスト計算（1 ノードあたり 4 プロセスを設定）で，ほぼ理想的な並列性能を得た(弱スケール型並列効率 =0.994)．並列数 N は統計学的サンプル数に比例するので，「統計精度（サンプル数 N ）をあげても実行時間が変わらない」と言う意味で，高速高信頼データ解析(高信頼性が担保された高速データ解析)が実現されている．

(3) TRHEPD 実験のデータ解析

TRHEPD 実験のデータ解析法として，新しい 2 段階解析方法を提案し，炭化ケイ素（SiC）表面上に作製した新しい 2 次元(極薄膜)半導体材料である $\text{Si}_4\text{O}_5\text{N}_3/6\text{H-SiC}(0001)-(\sqrt{3} \times \sqrt{3})\text{R}30^\circ$ 表面（以下 SiON）(図 1 右に側面図)へと適用した[7]．SiON は厚さ 0.7nm 程度の多層構造であり，サブナノメートル領域のプロープを主対象とする TRHEPD にとって，理想的な系といえる．表面に垂直な方向を z 軸として，原子最表面から 8 原子層分にあたる 8 変数 $X \equiv (z_1, z_2, \dots, z_8)$ を決める問題として設定した．

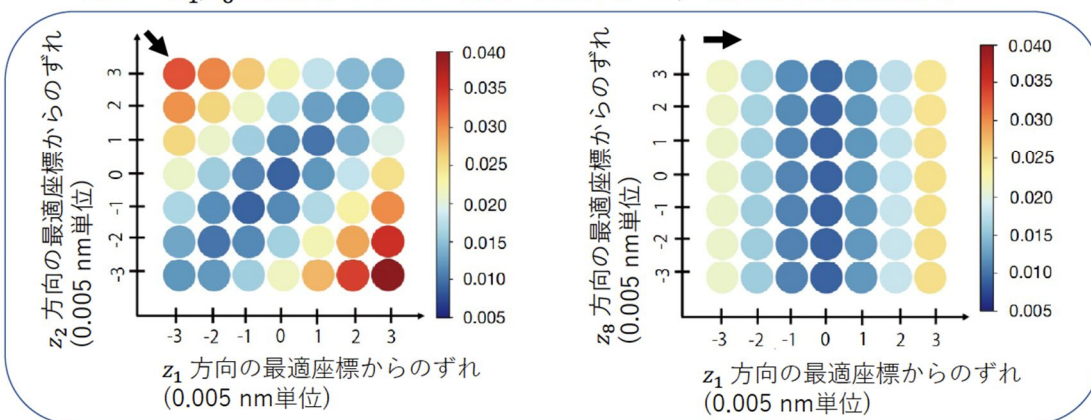
2段階解析方法の1段階目は最適化手法である。用いたTRHEPD法の測定データは、00スポット(最も強い鏡面反射シグナル)強度の視射角依存曲線(ロッキング曲線)である。それを図2に赤丸で示した。これと、量子散乱理論を用いて計算した結果(計算データ、図2の曲線)を比較した。最適化前のデータ(今回は他の実験手法による先行実験で報告されている構造データに基づく曲線)より、最適化後のデータの方が、より実験に近づくことが分かる。

図2 TRHEPDデータ解析第1段階(最適化)の結果



2段階解析方法の2段階目は、不確かさを陽に扱う、データ駆動型感度解析法である。本系では座標情報は、8次元データ空間におけるベクトル $X \equiv (z_1, z_2, \dots, z_8)$ で与えられる。ここでの感度解析は、ベクトル量 X のうちどの(8次元空間中の)方向の変位が、どの程度、目的関数 F に影響を与えるのかを解析している。8次元データ空間は人間による直接知覚は困難であるが、最適点を中心とした分散・共分散行列の固有値解析により、8次元空間内の感度の高い方向、低い方向を見つけることができた。図3では、解析結果のうち、対照的な特徴をもつ2次元部分データ空間を例として可視化した。図3左図では、左上から右下に向かう太い矢印方向に色(目的関数の値)が大きく変化し、この方向に感度が高いことがわかる。この方向は、第1層と第2層の層間距離($z_1 - z_2$)が変化する方向になる。つまり、この層間距離を少し変えるだけで、目的関数(実験デ

図3 感度解析の結果。目的関数 $F = F(z_1, z_2, \dots, z_8)$ の値を色で表示。8次元データ空間 (z_1, z_2, \dots, z_8) に対する感度解析により、特徴的な2次元部分空間を抽出。
左図: (z_1, z_2) 空間図。太矢印の方向(右下方向)が、高感度方向。
右図: (z_1, z_8) 空間図。太矢印の方向(右方向)が、相対的な高感度方向。



ータと計算データの差)が大きく変わる。同様に、図3右図では、左右方向に感度が高く上下方向には低いことから、縦軸方向(z_8 変化の方向)に対しては相対的に感度が低いことがわかる。このような解析により、このSiON系に対するTRHEPD実験では、陽電子が最表面から6層程度の深さを選択的にプローブしていることがわかった。

上記感度解析から、TRHEPDの表面選択性が、データ駆動科学の立場から立証されたこととなる。感度解析は、どの範囲の原子座標を最適化法(第1段階解析)の変数とするべきかの客観的な指針も与える。

(4) 対象実験の拡大

対象実験の拡大として、TRHEPDと同様に2次元物質非破壊構造解析実験である、SXR・LEEDに2DMATを対応させた。SXRはVoegeli(学芸大)らと、Voegeliの順問題ソルバー-sxrddcalcを公開した[16]。順問題ソルバー-sxrddcalcを2DMATと接続することで、SXRの解析が可能となった。一方LEED解析は、LEED解析の世界標準ソフトであるSATLEED[17]を接続することで実現した。ただし、SXR、LEEDへの対応は、テスト計算だけにとどまり、実実験データの解析は、今後の展望である。また、TRHEPDよりさらに新しい2次元物質非破壊構造解析実験である低エネルギー陽電子回折(Low-energy Positron Diffraction, LEPD)[18]も、SATLEEDを用いれば解析が可能である。LEPDの解析も、今後の展望である。

(5) データ解析ソフトウェアの普及に向けた活動

2DMATの普及のため、ドキュメント(英語・日本語)作成・公開のほか、実験系研究者向け

のオンライン講習会(2021年4月, 2022年4月)・オンライン研究会(2021年9月)を開いた(参加者: 各回約30名)[19].

(6) その他の成果

望月(KEK; 本課題分担者)は TRHEPD の成果により, 日本陽電子科学会奨励賞を受賞した[20].

<引用文献>

- [1] (総説として) Fukaya, et al., J. Phys. D 52, 013002 (2019).
- [2] Motoyama, et al., Comp. Phys. Commun. 278, 108405 (2022).
- [3] Hukushima and Nemoto, J. Phys. Soc. Jpn., 65, 1604 (1996).
- [4] Hukushima and Iba, AIP Conf. Proc. 690, 200 (2003).
- [5] Tanaka et al. (Hoshi, Mochizuki), Acta. Phys. Pol. A 137, 188 (2020).
- [6] Tanaka et al. (Mochizuki, Hoshi), JJAP Conf. Series, in press; Preprint: <https://arxiv.org/abs/2002.12165>
- [7] Hoshi et al. (Mochizuki, Hukushima), Comp. Phys. Commun. 271, 108186 (2022); プレスリリース「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～」
- [8] Motoyama, et al. (Hoshi), Preprint: <https://arxiv.org/abs/2204.04484/>; <https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/2DMAT/>
- [9] Hanada et al. (Hoshi), Comp. Phys. Commun. 277, 108371 (2022); <https://github.com/sim-trhepd-rheed/>
- [10] Kohashi et al. (Hoshi), JSIAM Letters 14, 13 (2022).
- [11] Inoue, et al. (Hukushima), J. Phys. Soc. Jpn. 90, 104801 (2021).
- [12] Hoshi, et al., Comp. Phys. Commun. 258, 107536 (2021).
- [13] (総説, 書籍, 分担執筆) Hoshi, et al., 21st Century Nanoscience - A Handbook: Nanophysics Sourcebook (Volume One), (執筆範囲: Chap. 15: Numerical methods for large scale electronic state calculation on supercomputer), CRC Press (2019).
- [14] Hoshi, et al., J. Comp. Appl. Math. 376, 112830 (2020).
- [15] Sato et al. (Hukushima), Phys. Rev. Materials 4, 33801 (2020).
- [16] Voegeli, et al., Appl. Surf. Sci. 252, 5259 (2006); <https://github.com/sxrddcalc/>
- [17] M. A. Van Hove, et al., Surf. Sci. Rep. 19, 191 (1993); https://www.icts.hkbu.edu.hk/VanHove_files/leed/leedpack.html
- [18] Wada, et al. (Mochizuki), e-J. Surf. Sci. Nanotechnol. 16, 313 (2018).
- [19] (a) オンライン講習会「2DMAT 講習会-CCMS Web ハンズオン-」, 2021年4月20日; <https://ccms.issp.u-tokyo.ac.jp/event/4570>
(b) オンライン研究会「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; <https://ccms.issp.u-tokyo.ac.jp/event/457>
(c) オンライン講習会「2DMAT 講習会-CCMS Web ハンズオン-」, 2022年4月26日; <https://ccms.issp.u-tokyo.ac.jp/event/5274>
- [20] 望月出海, 2019年度日本陽電子科学会奨励賞, 「全反射高速陽電子回折法によるルチル型 TiO₂(110)-(1x2)表面原子配置の決定」; <https://positron-science.org/04award/index.html>,

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計9件（うち査読付論文 9件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 6件）

1. 著者名 Kazuyuki Tanaka, Izumi Mochizuki, Takashi Hanada, Ayahiko Ichimiya, Toshio Hyodo, Takeo Hoshi	4. 巻 -
2. 論文標題 Two-stage data-analysis method for total-reflection high-energy positron diffraction (TRHEPD)	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 JJAP Conf. Series, to appear	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Takashi Hanada, Yuichi Motoyama, Kazuyoshi Yoshimi, Takeo Hoshi	4. 巻 277
2. 論文標題 sim-trhepd-rheed- Open-source simulator of total-reflection high-energy positron diffraction (TRHEPD) and reflection high-energy electron diffraction (RHEED)	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Computer Physics Communications	6. 最初と最後の頁 108371/1-10
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.cpc.2022.108371	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Takeo Hoshi, Daishiro Sakata, Shotaro Oie, Izumi Mochizuki, Satoru Tanaka, Toshio Hyodo, Koji Hukushima	4. 巻 271
2. 論文標題 Data-driven sensitivity analysis in surface structure determination using total-reflection high-energy positron diffraction (TRHEPD)	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Computer Physics Communications	6. 最初と最後の頁 108186/1-7
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.cpc.2021.108186	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Hisashi Kohashi, Harumichi Iwamoto, Takeshi Fukaya, Yusaku Yamamoto, Takeo Hoshi	4. 巻 14
2. 論文標題 Performance prediction of massively parallel computation by Bayesian inference	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 JSIAM Letters	6. 最初と最後の頁 13-16
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.14495/jsiaml.14.13	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Hiroaki Inoue, Koji Hukushima, and Toshiaki Omori	4. 巻 90
2. 論文標題 Estimation of Neuronal Dynamics of Izhikevich Neuron Models from Spike-Train Data with Particle Markov Chain Monte Carlo Method	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 104801/1-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.90.104801	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Takeo Hoshi, Mitsuaki Kawamura, Kazuyoshi Yoshimi, Yuichi Motoyama, Takahiro Misawa, Youhei Yamaji, Syngye Todo, Naoki Kawashima, Tomohiro Sogabe	4. 巻 258
2. 論文標題 K - Open-source library for the shifted Krylov subspace method of the form $(zI - H)x=b$	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Computer Physics Communications	6. 最初と最後の頁 107536/1-10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cpc.2020.107536	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Nobuya Sato, Tomoki Yamashita, Tamio Oguchi, Koji Hukushima, and Takashi Miyake	4. 巻 4
2. 論文標題 Adjusting the descriptor for a crystal structure search using Bayesian optimization	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Materials	6. 最初と最後の頁 33801/1-6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevMaterials.4.033801	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kazuyuki Tanaka, Takeo Hoshi, Izumi Mochizuki, Takashi Hanada, Ayahiko Ichimiya, Toshio Hyodo	4. 巻 137
2. 論文標題 Development of data-analysis software for total-reflection high-energy positron diffraction (TRHEPD)	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Acta Physica Polonica A	6. 最初と最後の頁 188-192
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.12693/APhysPoIA.137.188	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Takeo Hoshi, Takeshi Ogita, Katsuhisa Ozaki, Takeshi Terao	4. 巻 376
2. 論文標題 An a posteriori verification method for generalized Hermitian eigenvalue problems in large-scale electronic state calculations	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Computational and Applied Mathematics	6. 最初と最後の頁 112830/1-13
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cam.2020.112830	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計47件 (うち招待講演 11件 / うち国際学会 7件)

1. 発表者名 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. 発表標題 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
3. 学会等名 日本物理学会年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 福島孝治
2. 発表標題 磁石材料探索に向けた計算科学的アプローチ
3. 学会等名 第236回研究会 / 第69回化合物新磁性材料専門研究会「新しい磁性研究のための量子ビームと計算科学の連携利用」(招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 星健夫
2. 発表標題 超並列アルゴリズムによる計測インフォマティクスの数理的革新
3. 学会等名 第9回 東京大学数理情報学談話会(招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 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
2. 発表標題 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
3. 学会等名 陽電子科学とその理工学への応用
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 和田健, 望月出海, 星健夫, Rezwan Ahmed, 兵頭俊夫
2. 発表標題 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
3. 学会等名 VACUUM2021真空展
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 T. Takeda, M. Hamada, Y. Tujikawa, I. Mochizuki, T. Hoshi, T. Hyodo, A. Takayama
2. 発表標題 The layer-number dependence on structure of graphene/SiC studied by TRHEPD
3. 学会等名 The 9th International Symposium on Surface Science (ISSS-9)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 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
2. 発表標題 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
3. 学会等名 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)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 星健夫
2. 発表標題 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
3. 学会等名 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
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 一ノ瀬颯人, 本山裕一, 吉見一慶, 星健夫
2. 発表標題 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
3. 学会等名 日本物理学会秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 星健夫, 若本晴道, 福島孝治
2. 発表標題 先端測定データ解析における超並列モンテカルロ計算
3. 学会等名 応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 星健夫, 小橋恒士, 山本有作, 深谷猛
2. 発表標題 ベイズ推定による超並列計算の性能予測
3. 学会等名 日本応用数理学会2021年度年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 岩本晴道, 本山 裕一, 吉見一慶, 福島孝治, 星 健夫
2. 発表標題 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
3. 学会等名 日本応用数理学会年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 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
2. 発表標題 TRHEPDによるPb/Si(111)表面超構造の構造解析: 3×3 3×3 の構造相転移の起源
3. 学会等名 日本物理学会秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 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
2. 発表標題 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
3. 学会等名 日本物理学会秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 一ノ瀬颯人, 本山裕一, 吉見一慶, 星健夫
2. 発表標題 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
3. 学会等名 応用物理会中四国支部学術講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 山本 有作, 工藤 周平, 星健夫
2. 発表標題 テイラー展開に基づく行列指数関数計算の誤差解析
3. 学会等名 2021年並列 / 分散 / 協調処理に関するサマー・ワークショップ (SWoPP2021)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 星健夫, 阪田大志郎, 尾家翔太郎, 望月出海, 田中悟, 兵頭俊夫, 福島孝治
2. 発表標題 全反射高速陽電子回折(TRHEPD)における計測インフォマティクスと高速計算技術の融合
3. 学会等名 日本応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 濱田雅史, 武田朋也, 辻川夕貴, 坂田大志郎, 望月出海, 星健夫, 兵頭俊夫, 高山あかり
2. 発表標題 Pb/Si(111)- 3x 3 表面超構造における構造の原子密度依存性: 全反射高速陽電子回折法とデータ駆動科学による構造解析
3. 学会等名 日本物理学会2021年春季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 星健夫, 本山裕一, 花田貴, 小西優祐, 吉見一慶
2. 発表標題 2DMAT: 全反射高速陽電子回折(TRHEPD)むけデータ解析ソフト
3. 学会等名 物性科学におけるデータ科学の今と未来(主催: 東大物性研)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 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
2. 発表標題 全反射高速陽電子回折によるPb 蒸着SiC 基板上グラフェンの構造解析
3. 学会等名 低速陽電子実験施設研究会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 濱田雅史, 武田朋也, 辻川夕貴, 阪田大志郎, 望月出海, 星健夫, 兵頭俊夫, 高山あかり
2. 発表標題 TRHEPD を用いたPb/Si(111)表面超構造の構造と原子密度解析
3. 学会等名 低速陽電子実験施設研究会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 星健夫, 本山裕一, 花田貴, 小西優祐, 吉見一慶
2. 発表標題 2DMAT: 全反射高速陽電子回折(TRHEPD)むけデータ解析ソフト
3. 学会等名 低速陽電子実験施設研究会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 星健夫
2. 発表標題 AIと高速計算機による先端計測の革新
3. 学会等名 産学連携オンラインマッチングEXPO
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 阪田大志郎, 尾家翔太郎, 望月出海, 田中悟, 兵頭俊夫, 福島孝治, 星健夫
2. 発表標題 全反射高速陽電子回折(TRHEPD)におけるデータ駆動科学と Si405N3 / 6H-SiC (0001)-(3× 3) R30° 多層表面
3. 学会等名 陽電子科学とその理工学への応用
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 濱田雅史, 辻川夕貴, 望月出雲, 星健夫, 兵頭俊夫, 高山あかり
2. 発表標題 全反射高速陽電子回折(TRHEPD)法とデータ駆動科学によるPb/Si(111)表面超構造の構造解析
3. 学会等名 日本表面真空学会学術講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 星健夫
2. 発表標題 陽電子回折によるモデルサンプリングとHPC
3. 学会等名 スマートサンプリング講演会(主催: 東京大学)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 星健夫, 田中和幸, 阪田大志郎, 尾家翔太郎, 望月出海, 田中悟, 兵頭俊夫
2. 発表標題 全反射高速陽電子回折(TRHEPD)を用いたSi405N3 / 6H-SiC (0001)-(3× 3) R30° 多層表面構造解析
3. 学会等名 日本物理学会2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 星健夫
2. 発表標題 AIと高速計算機による先端計測の革新
3. 学会等名 研究シーズオンラインマッチング展示
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 望月出海, 和田健, Rezwan Ahmed, 兵頭俊夫, 永井康介
2. 発表標題 汎用試料準備チェンバの整備
3. 学会等名 低速陽電子実験施設研究会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 福島孝治
2. 発表標題 ハミルトニアン・シミュレーテッドテンパリングについて
3. 学会等名 日本物理学会2021年春季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 田中和幸, 尾家翔太郎, 望月出海, 田中悟, 兵頭俊夫, 星健夫
2. 発表標題 全反射高速陽電子回折(TRHEPD)実験データ解析による Si405N3 / 6H-SiC (0001)-(3× 3) R30° 表面構造決定
3. 学会等名 日本物理学会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 星健夫
2. 発表標題 2次元物質構造測定データ解析におけるAI/HPC融合
3. 学会等名 ポスト京重点課題7研究会「放射光実験と計算科学の新たな連携を目指して」(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 福島孝治
2. 発表標題 データ駆動科学のための(非マルコフ連鎖)モンテカルロ法
3. 学会等名 ポスト京重点課題7研究会「放射光実験と計算科学の新たな連携を目指して」(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Takeo Hoshi
2. 発表標題 Novel linear algebraic solvers and numerical libraries for computational material science
3. 学会等名 Innovation in materials analysis by data assimilation of simulation and measurement (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 田中和幸, 尾家翔太郎, 望月出海, 田中悟, 兵頭俊夫, 星健夫
2. 発表標題 全反射高速陽電子回折(TRHEPD)実験データ解析によるSi405N3 / 6H-SiC (0001)-(3 × 3) R30°表面の構造探索
3. 学会等名 研究会「陽電子科学とその理工学への応用」
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 望月出海
2. 発表標題 全反射高速陽電子回折法によるルチル型 TiO ₂ (110)-(1×2)表面原子配置の決定
3. 学会等名 研究会「陽電子科学とその理工学への応用」(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 福島孝治
2. 発表標題 サンプリングによるデータ駆動科学
3. 学会等名 第22回情報論的学習理論ワークショップ (IBIS2019) (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kouji Hukushima
2. 発表標題 Application of population annealing to Bayesian statistics
3. 学会等名 Workshop "New methods in Monte Carlo simulations: parallel, adaptive, irreversible" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kouji Hukushima
2. 発表標題 Population Annealing with an extended ensemble
3. 学会等名 Workshop "New Algorithms for Optimization, Sampling, Learning, and Quantum Simulations" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kazuyuki Tanaka, Takeo Hoshi, Izumi. Mochizuki, Ayahiko Ichimiya, Toshio Hyodo
2. 発表標題 Data-driven scientific analysis of total-reflection high-energy positron diffraction (TRHEPD) data on surface atomic arrangement
3. 学会等名 Japan-China Joint Workshop on Positron Science (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Takeo Hoshi
2. 発表標題 Fusion of massively parallel data-driven science and novel measurement technology for surface structure analysis
3. 学会等名 11th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 星 健夫
2. 発表標題 陽電子回折実験に対する高速化データ駆動科学
3. 学会等名 第9回極限物質科学研究会-動力学的回折理論による結晶構造解析 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 中司湧星, 田中和幸, 篠原彩, 望月出海, 星健夫, 兵頭俊夫, 高山あかり
2. 発表標題 全反射高速陽電子回折(TRHEPD)法による単原子層銅シリサイドCu/Si(111)の構造解析
3. 学会等名 日本物理学会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名	Izumi Mochizuki, Yuki Fukaya, Yukihiro Endo, Akari Takayama, Shuji Hasegawa, Ayahiko Ichimiya, and Toshio Hyodo
2. 発表標題	Recent studies of Surface Structure Analysis with Total-Reflection High-Energy Positron Diffraction (TRHEPD) at Slow-Positron Facility, KEK
3. 学会等名	The 15th International Workshop on Slow Positron Beam Techniques & Applications (招待講演) (国際学会)
4. 発表年	2019年

1. 発表者名	Kazuyuki Tanaka, Takeo Hoshi, Izumi Mochizuki, Ayahiko Ichimiya, Toshio Hyodo
2. 発表標題	Data-scientific software for the surface structure analysis by total-reflection high-energy positron diffraction (TRHEPD)
3. 学会等名	The 15th International Workshop on Slow Positron Beam Techniques & Applications (国際学会)
4. 発表年	2019年

1. 発表者名	田中和幸, 星健夫
2. 発表標題	高速化データ駆動科学を用いた陽電子回折実験のデータ解析
3. 学会等名	JHPCN: 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点第11回 シンポジウム
4. 発表年	2019年

1. 発表者名	田中和幸, 星健夫, 望月出海, 一宮彪彦, 兵頭俊夫
2. 発表標題	高速化データ駆動科学を用いた全反射高速陽電子回折(TRHEPD)のデータ解析
3. 学会等名	アイソトープ・放射線研究発表会
4. 発表年	2019年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 Takeo Hoshi, Yusaku Yamamoto, Tomohiro Sogabe, Kohei Shimamura, Fuyuki Shimojo, Aiichiro Nakano, Rajiv Kalia and Priya Vashishta	4. 発行年 2019年
2. 出版社 CRC Press	5. 総ページ数 360
3. 書名 21st Century Nanoscience - A Handbook Nanophysics Sourcebook (Volume One) (分担執筆. 担当 : Chap. 15: Numerical methods for large-scale electronic state calculation on supercomputer)	

〔産業財産権〕

〔その他〕

<p>2DMAT(成果物ソフトウェア)公開ページ https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/2DMAT sim-trhepd-rheed(成果物ソフトウェア)公開ページ https://github.com/sim-trhepd-rheed/ 2DMAT(成果物ソフトウェア)講習会(2021年4月20日) https://ccms.issp.u-tokyo.ac.jp/event/4570 研究会「スパコンを用いた実験データ解析の新展開」(2021年9月29日) https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/teams/news/937 プレスリリース「高速データ解析で極薄膜物質の原子配列解析を加速」(2021年11月24日) https://www.tottori-u.ac.jp/item/19039.htm 望月出海：日本陽電子科学会2019年奨励賞を受賞 https://www2.kek.jp/imss/spf/topics/2019/12/061209.html 研究代表者(星健夫)のウェブページ http://www.damp.tottori-u.ac.jp/~hoshi/</p>
--

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	望月 出海 (MOCHIZUKI Izumi) (30579058)	大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構・物質構造科学研究所・助教 (82118)	
研究分担者	福島 孝治 (HUKUSHIMA Koji) (80282606)	東京大学・大学院総合文化研究科・教授 (12601)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------