https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/2DMAT

はじめに：測定データ解析向け汎用数理フレームワーク「2DMAT」v.2.1

星健夫(鳥取大工学部/KEK-IMSS-SPF)

1. 2DMAT:データ解析による計測イノベーション
2. 当座対象実験：2次元物質構造解析向け量子ビーム回折実験
3. ソフトウェア「2DMAT」の概要

付録　最近の主な論文

参考：2DMATの開発経緯

2020-2021年度東大物性研「ソフトウェア開発・高度化プロジェクト」の成果物

主な開発者：星，吉見一慶・本山裕一(東大物性研)

謝辞（実験系）：望月出海・和田健・Rezwan Ahmed(KEK-IMSS-SPF), 高山あかり(早稲田),
花田貴(東北大), Wolfgang Voegeli(学芸大), 白澤徹郎(産総研)
（計算系）：福島孝治(東大), 山本有作(電通大)

関連イベント：2021年4月第1回講習会，同年9月研究会，2022年4月第2回講習会(本日)

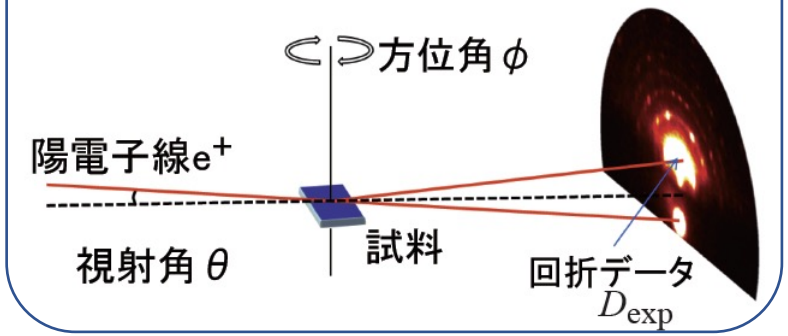
2DMAT：データ解析による計測イノベーション

- データ解析のブレークスルーは，計測技術に革新をもたらす（例：クライオ電子顕微鏡法，2017年ノーベル化学賞）
- 2DMATは，測定データ解析を主目的とした，汎用な数理フレームワーク．
  最適化・モンテカルロ法など，多彩な解析手法を実装．実験系研究者が利用することを，想定．
- 並列アルゴリズムを特徴として，パソコンからスパコンまで，幅広い計算機で有用．
  東大物性研スパコンにはプレインストール済み．
- モジュール化されたPython3プログラムで，実験手法・解析手法のさらなる追加が容易．

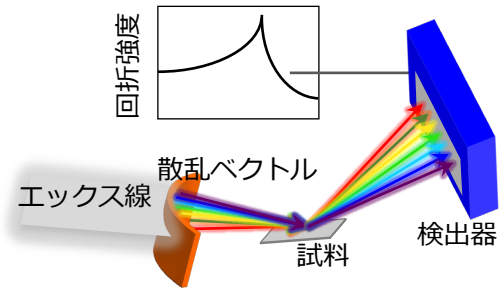
当座対象実験：2次元物質構造解析向け量子ビーム回折実験

- 2次元物質（原子数層からなる極薄膜物質）は，電池・触媒・デバイスなど，新規な産業応用が期待されている．
  しかし，3次元（従来）構造に比べて，構造解析が困難（シグナルが微弱，構造が多様）．

全反射高速陽電子回折(TRHEPD)

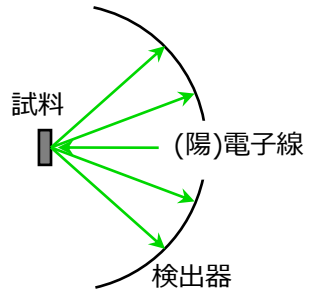


表面エックス線回折(SXRD)

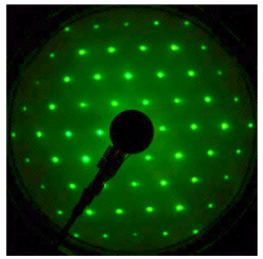


（2021年度に対応）

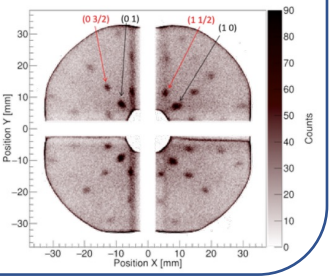
低速電子回折(LEED)・低速陽電子回折(LEPD)



LEED



LEPD



（2021年度に対応）

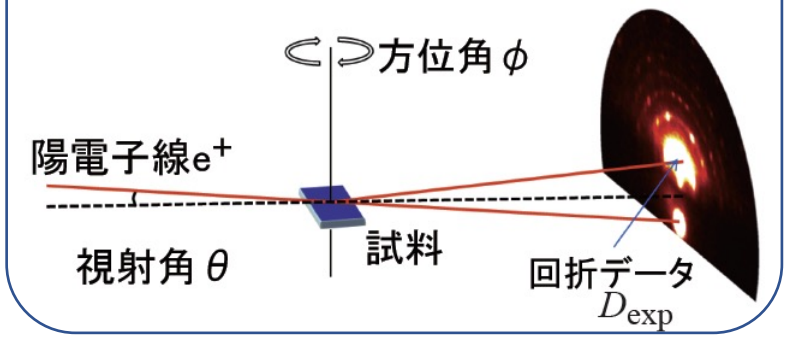
2DMAT：データ解析による計測イノベーション

- データ解析のブレークスルーは，計測技術
- 2DMATは，計測データ解析を主目的と
- 最適化・モンテカルロ法など，多彩な解析
  並列アルゴリズムを特徴として，パソコン
- ポータビリティのあるPython3プログラム
- 実験系研究者が利用することを，想定．

当座対象実験：2次元

- 2次元物質(原子数層からなる極薄膜物
  しかし，3次元(従来)構造に比べて，構

全反射高速陽電子回折(TRHEPD)

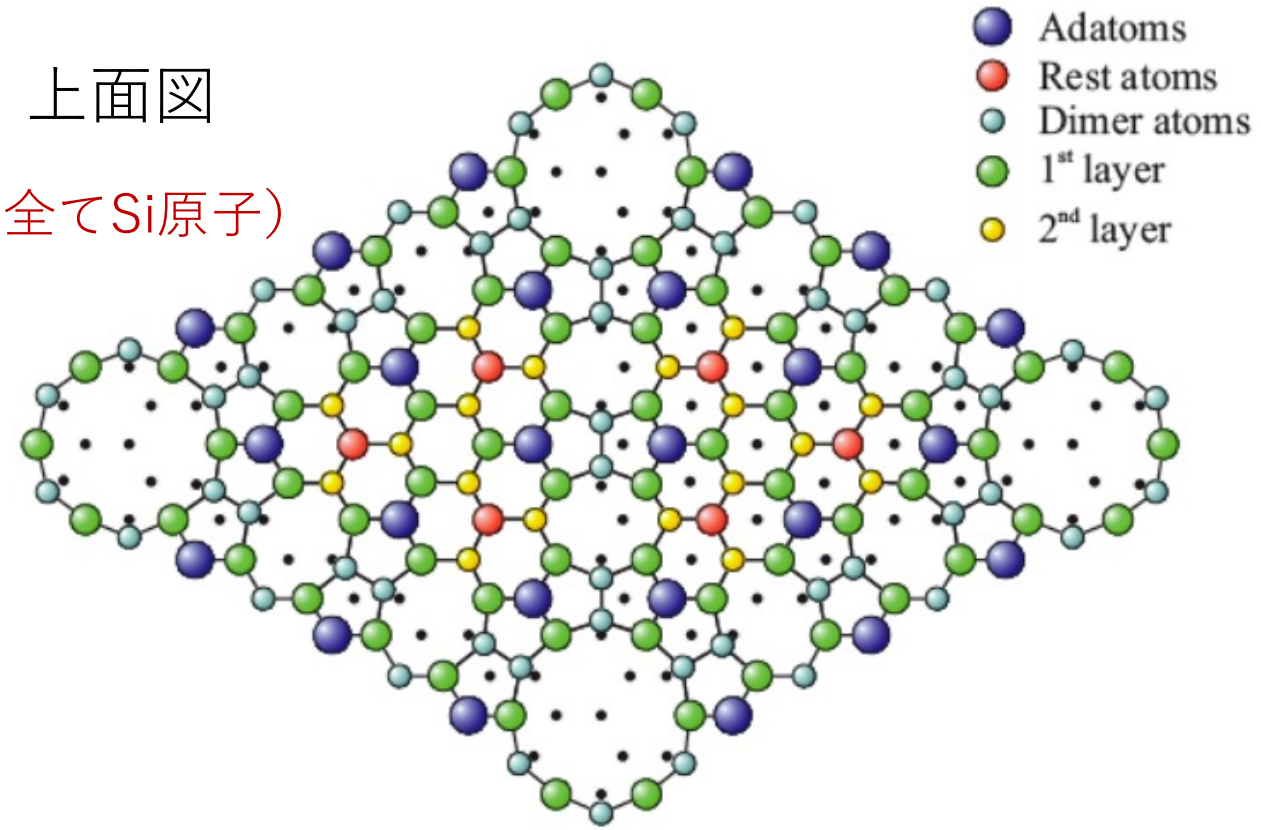


表面

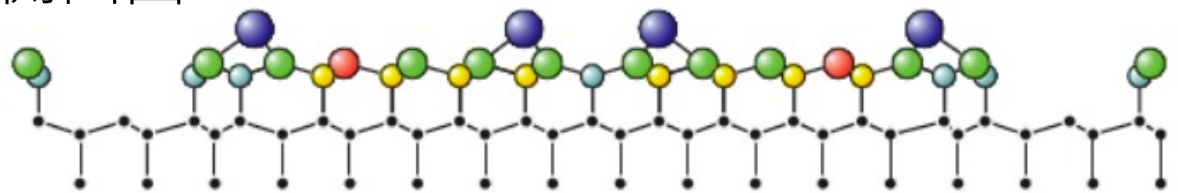
複雑な表面構造の例：Si(111)-7x7面

上面図

（全てSi原子）



側面図

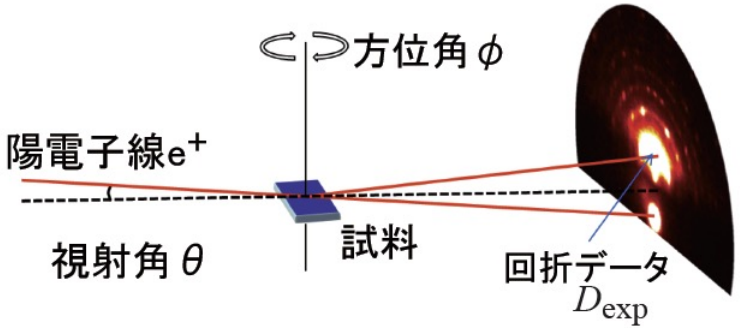


Y. Motoyama, *et al.*, https://arxiv.org/abs/2204.04484

ソフトウェア「2DMAT」の概要

量子ビーム計測

- TRHEPD/RHEED
- SXRD
- LEED/LEPD



注：他現象(他問題)も追加可

任意に
組み合わせ
可能

原子座標

データ解析法

(1) 局所探索(Nelder-Mead法)
(2) ベイズ最適化
(3) グリッド探索
(4) レプリカ交換モンテカルロ法
(5) ポピュレーションアニーリング
モンテカルロ法

注：(2)-(5)は並列計算(MPI対応)

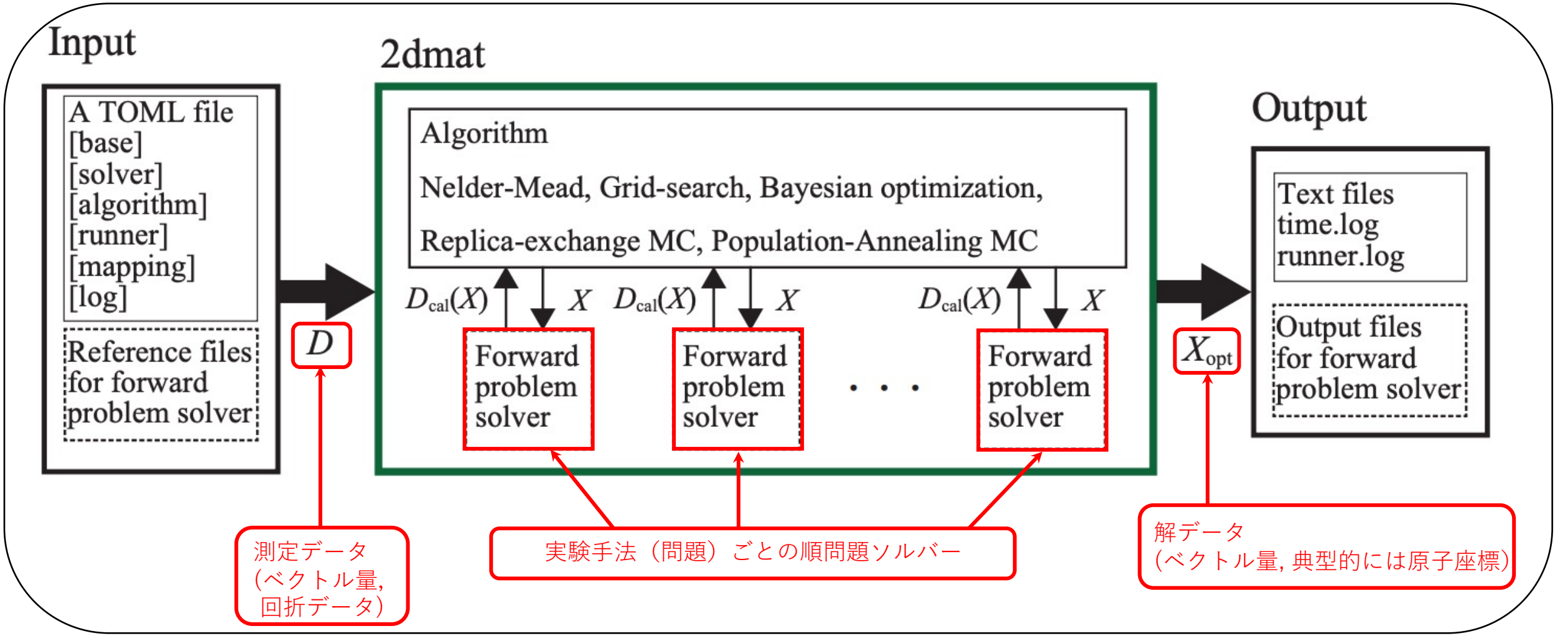
第一原理計算(高精度量子力学計算, Quantum Espresso)との連携

他測定量・種々の物性

ソフトウェア「2DMAT」の概要

・汎用データ解析むけ数理フレームワーク
　→ 5種解析手法と4種測定とで，任意組み合わせを可能に．

・解析ワークフローの概要図



付録　最近の主な論文　https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/2dmat/studies/

[1] (重要) 2DMAT最新版の全体像 (投稿中)
‘Data-analysis software framework 2DMAT
and its application to experimental measurements for two-dimensional material structures’,
Y. Motoyama, *et al.*,　https://arxiv.org/abs/2204.04484

[2] (重要) 最適化法と感度解析(分散・共分散行列固有値解析)を用いた,
$Si_4O_5N_3$ / 6H-SiC (0001)-($\sqrt{3}\times\sqrt{3}$) R30°　多層表面構造系の全反射高速陽電子回折(TRHEPD)データ解析.
‘Data-driven sensitivity analysis in surface structure determination
using total-reflection high-energy positron diffraction (TRHEPD)’
T. Hoshi, *et al.*, Comp. Phys. Commun. 271, 108186 (2022).
https://doi.org/10.1016/j.cpc.2021.108186
注：プレスリリース(鳥取大/KEK)「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

[3] 2DMATに接続して使われる，全反射高速陽電子回折(TRHEPD)順問題ソルバー(シミュレータ).
‘sim-trhepd-rheed - Open-source simulator of total-reflection
high-energy positron diffraction (TRHEPD) and reflection high-energy electron diffraction (RHEED)’,
T. Hanada, *et al.*, Comp. Phys. Commun., in press; https://arxiv.org/abs/2110.09477

[4] (物質科学以外への応用) スーパーコンピュータを用いた超並列計算において，　2DMATを使って性能を予測.
Performance prediction of massively parallel computation by Bayesian inference
H. Kohashi, *et al.*,　JSIAM Letters 14, 13 (2022)