

未来社会創造事業 探索加速型
「共通基盤」領域
終了報告書(探索研究)

令和2年度
終了報告書

平成30年度採択研究開発代表者

[研究開発代表者名：富安 亮子]

[九州大学 マス・フォア・インダストリ研究所 准教授]

[研究開発課題名：物質の構造解析に用いるフーリエ解析・
大域的最適化の高度化]

実施期間：平成30年11月15日～令和3年3月31日

§ 1. 研究実施体制

(1)「九大」グループ(九州大学)

① 研究開発代表者: 富安 亮子 (九州大学マス・フォア・インダストリ研究所、准教授)

② 研究項目

数理的解析手法の開発と結果の検証、特に

- ・ 解析手法の開発
- ・ ソフトウェア開発

(2)「日産アーク」グループ((株)日産アーク)

① 主たる共同研究者: 富安 啓輔 (日産アーク、デバイス解析部、主任研究員)

② 研究項目

数理的解析手法の実験的検証、特に

- ・ 実験データの提供
- ・ 数理的背景に関する情報を取得・提供

§ 2. 研究実施の概要

研究期間中は以下の研究をそれぞれ実施した。

1. 凸緩和法の導入に関する調査 (高エネ研・(株)日産アークとの共同研究)
2. フーリエ変換の打ち切り誤差を解消する方法の改善と検証
3. 電子線回折菊池パターンの解析に関わる数学的調査 ((株)日本製鉄との共同研究)
4. 新しい高密度充填法を用いた準結晶構造モデリング

1. は領域開始直前の 2018 年 10 月末にサイエンス分野で論文[1] (末尾を御参照のこと) が出ている。数学の貢献が大きい発明であるが、研究期間中はその社会実装として、J-PARC の粉末構造解析ソフトウェア Z-Rietveld への実装を日産アーク・J-PARC の担当者とともに実施した。実際の実験データに使えること、全ての大域的最適化の取得や、一つしか大域的最適解が存在せず解の唯一性が証明された事例などが実際の実験データで得られている (ただし[1]および研究開発代表者の以前の論文で十分検証されていた)。開発したソフトウェアの整備や結果の検証を日産アーク・J-PARC の担当者で行っている。今後、IUCr25 など得られている結果を紹介する予定である。

2019 年度に重点的に 2. の研究を行い、高次元化・理論の改良、コード開発、実験データの取得・適用まで実施しているが、2020 年度から 2. 及び 4. の研究の優先順位を変更した。とはいえ、この件も期間中にコード開発までは終了しており、今後、論文を投稿する予定である。2020 年度は、2. に関する研究発表も行っている。

3. の EBSD ab-initio indexing は、日本製鉄との共同研究の成果で、2019 年度末に開発ソフトウェアを公開(<http://ebsd-conograph.osdn.jp/InstructionsEBSDConograph.html>)し、2020 年度末に論文[2] が受理・公開された。代表者が過去に粉末回折 ab-initio indexing 用に実施した以下の手法開発を、EBSD の状況に適用したものである。(1)、(3)では EBSD 向けの理論開発も実施している。

- (1) 消滅則の悪影響を自然に除去できる *ab-initio indexing* の方法(回折ピーク情報の組合せ方)
- (2) 大きな観測誤差がある状況でも、正しいブラベー格子の *type* が得られることが証明されているブラベー格子の推定法
- (3) 得られた解のソート基準を与える *de Wolff figure of merit* の粉末回折の通常の場合以外を考慮した一般化

加えて、[2]でバンド抽出の精度により対称性が低い場合に無数の解が存在し得ることを示した。この分野では基盤となる成果である。格子に関わる数学的な議論は、サイエンス分野の研究者は理解に時間がかかる内容に当たるようで、そのため受理までに時間を要した。

2020年度は、4. を主に実施している。研究開発代表者が2016年頃から開始していた研究で数理生物学・結晶学に応用可能で、デザイン分野との産学連携も実施できる内容になっている。そのため、リーマン面の密な *packing* を生成する新しい方法として2021年2月に九大より発明届を提出した。論文の第一報[3]は、応用基盤を与える4つの定理を中心とする純粋数学の形式で書いた。出願前であるため、*arxiv* は現時点で公開していない。

[1] Tomiyasu, K., Oishi-Tomiyasu, R., Matsuda, M. & Matsuhira, A new mathematical approach to finding global solutions of the magnetic structure determination problem, *Scientific reports*. 8:1 (2018), 16228:1--8.

[2] R. Oishi-Tomiyasu, T. Tanaka & J. Nakagawa, *Distribution rules of systematic absences and generalized de Wolff figures of merit applied to electron backscatter diffraction ab initio indexing*, *Journal of Applied Crystallography* 54:2 pp.624—635 (2021).

[3] R. Oishi-Tomiyasu, S. E. Graiff-Zurita, B. Kane, *Packing theory derived from phyllotaxis and products of linear forms*, submitted.