

## 物質構造解析に用いるフーリエ解析・大域的最適化の高度化

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



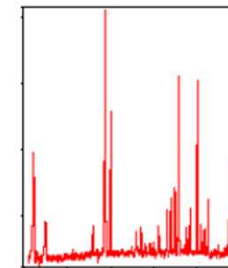
### 目的：

非線形最適化におけるローカルミニマムの問題、フーリエ変換の打ち切り誤差による偽のピークの発生などの問題を解決する新しい数値計算技術を、回折・散乱などの実験データ解析に導入し、数理結晶学のデータ解析基盤を提供する。

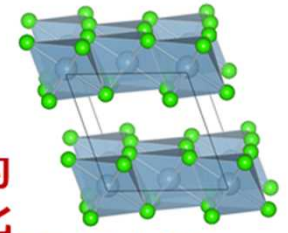
### 研究概要：

一般に非線形最適化に基づく実験科学分野の解析では、局所最小値（ローカルミニマム）の問題から、正しい解であると結論するのに非常に慎重な解析を要するとされているが、磁気構造解析や、結晶構造解析における占有率や原子種の導出は、凸緩和法により短時間で解の保証まで行える2次計画問題のクラスに該当することが分かっている。この他、フーリエ変換の打ち切り誤差の問題の解消など、新しい数値計算の知見を用いて、様々な実験データの解析における問題解決を実施する。

### 様々な回折・散乱データ



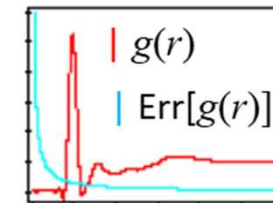
大域的  
最適化



双対定理に  
よる解の保証



統計的  
フーリエ変換



- ・偽ピーク検出
- ・信頼幅計算

従来法と異なる方法で  
データの情報を最大限に利用

# Realization of Common Platform Technology, Facilities, and Equipment that creates Innovative Knowledge and Products

## Upgrading of the Fourier and global optimization techniques used in material structure analysis

**Project Leader :** Ryoko OISHI-TOMIYASU  
Associate Professor, Laboratory of Advanced Software in Mathematics,  
Institute of Mathematics for Industry, Kyushu University



### Summary :

In the analysis of experimental data based on nonlinear optimization methods, it is generally considered that very time-consuming procedures are required for concluding that the true solution has been obtained.

However, for example, magnetic structure analysis and acquisition of occupancies or chemical species in crystal structure analysis belong to the type of problem for which the framework of convex relaxation can be used to ensure the obtained solution in very short time. In this project, various new techniques such as removal of truncation errors in the Fourier analysis will be also applied, in order to open up new capabilities of mathematical data analysis.

