

未来社会創造事業 探索加速型
「共通基盤」領域
年次報告書(探索研究)

H30 年度 研究開発年次報告書

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～平成31年3月31日

§1. 研究開発実施体制

(1)「九大」グループ

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

- ・打ち切り誤差を消失する統計的フーリエ変換の 1 次元版コード開発と改善
- ・正規分布構造の制約を導入した SDP 法のコード開発と結果の検討

§2. 研究開発実施の概要

フーリエ変換に関わる 1 次元版コード開発はほぼ終了した。小角散乱・全散乱など、様々な散乱・回折の実験データに適用する準備はできたと言える。合わせて結果の検討も実施している。本手法については高次元版の方がむしろ需要はありそうだが、何の計測データに適用するかという問題は調査の必要が残っている。点群の表現論の計算を実施すると、観測誤差の統計誤差推定を理論上厳密に実施した上で、計算時間の大幅な短縮ができるので、これについて理論展開も実施した。

また、正規分布構造の制約を導入した SDP 法のコード開発を、一部予算を用いた外注により、実施した。これは未知構造解析(結晶学の位相回復)を、理論的に綺麗な定式で解こうとしているので、本プロジェクトの中では一番ハイリスク・ハイリターンの部分と言える。結果の検討を行うには、パラメータの選択が必要であり、またこれまでに実施した系と比較すると大規模計算となるので、それを実施するための準備を行っている。こちらの SDP を用いた研究でも打ち切り誤差の問題から制約条件の緩和が必要となるので、今回提案した 2 つのアイデアを(同一の対象に用いるということではなく)数学的な意味で一つの方法としてまとめられないか、というテーママネージャーからの提案についても検討を行っている。

加えて、回折・散乱に関わる計測分野の背景を調査した。電子線後方回折の ab-initio indexing に関するソフトウェアの結果の整理を実施した。