

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)

令和元年度 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31年4月1日～令和2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

- (a) SDP 法に基づく磁気構造解析手法実装 (J-PARC ユーザ向けの粉末回折用リートベルトソフトウェアに導入)に向けての準備・調査。さらに、SDP 法に基づく 2 次計画問題の解法への需要とその解析に関する調査。
- (b) 電子線後方回折の格子情報なしの指数付け (EBSD ab-initio indexing) ソフトウェアの論文執筆・web 公開 (新規手法・ソフトウェア開発は (株) 日本製鉄との共同研究として山形大で実施)
- (c) フーリエ変換の打ち切り誤差を解消する新規手法の研究。
- (d) 形態モデリングなど、数理結晶学・数理生物学に関わる数学研究

(2)「日産アーク」グループ

① 主たる共同研究者: 富安 啓輔 ((株) 日産アーク、主任研究員)

② 研究項目

- ・解析対象となる実験データの提供・背景の調査

§2. 研究開発実施の概要

(a) について 2018 年度に開発したソフトウェアを元に手法の調査を行った。また、すでに SDP 法の有効性が確認できて論文にもなっている解析を J-PARC の粉末回折装置ユーザ向け磁気構造解析ソフトウェア Z-Rietveld に SDP 法を導入するための調査を開発チームのメンバー・日産アーク G とともに開始し、2020 年度に SDP 法の普及に向けた研究会を実施する準備を行った。

(b) について、電子線後方回折 (EBSD) の ab-initio indexing (格子情報なしの指数付け) のための新規手法を開発し (手法は、粉末回折用 ab-initio indexing ソフトウェア CONOGRAPH 開発の際に得た数学手法・知見に基づく)、オープンソースのソフトウェアとして web 公開した (<http://ebsd-conograph.osdn.jp/InstructionsEBSDConograph.html>)。特に、既存ソフトウェアが非常に正確なゼロ点 (EBSD の場合、projection center) の入力を要求するのに対し、開発したソフトウェアでは非常に robust に正解の格子定数が得られることを確認した。詳細を述べた論文は投稿中である (arxiv: <https://arxiv.org/abs/2003.13403>)

(c) について日産アーク G より NMR および電子顕微鏡データの提供を受けて手法の調査および計算コードの実装を行った。2 次元画像への拡張および結果の可視化部分は外注により開発を実施した。(d) については特に、粉末回折法への応用で International Table Vol. H に引用されている Kaplansky 予想についての論文が International Journal of Number Theory に受理された。