

ISSN - 2760 - 2710

August 2025

Cybermedia HPC Journal

サイバーメディア HPC ジャーナル



D3センターWebサイト
<https://www.d3c.osaka-u.ac.jp/>

No.15

目 次

特集：データ駆動型大学を目指す大阪大学における研究データ管理・利活用 村田 忠彦、甲斐 尚人 大阪大学 D3センター	1
大規模計算機システム利用者研究報告	8
ホイスラー波を利用した新奇なレーザー核融合デザインの探索 佐野 孝好 大阪大学 レーザー科学研究所	9
In silicoスクリーニングを用いて、毒性ウィルスタンパク質と宿主タンパク質との相互作用を予測する 河口 真一 大阪大学 大学院生命機能研究科	13
Gigagauss magnetic field generation by bladed microtube implosion M. Murakami Institute of Laser Engineering, The University of Osaka	17
第一原理計算を用いた非調和フォノン特性データベースの構築 大西 正人 統計数理研究所 先端データサイエンス研究系	21
超臨界地熱発電を志向した超臨界地熱環境下での人工地熱貯留層造成シミュレーション 緒方 奨 大阪大学 大学院工学研究科	25
生成座標法に基づく核分裂の微視的記述 鵜沢 浩太郎 京都大学 大学院理学研究科	29
Computational Exploration of π -4f Magnetic Interaction in the Excited-State Heterometallic Triple-Decker Porphyrinoid Lanthanide Complex Anas Santria ^{1,2} 、Naoto Ishikawa ¹ ¹ Graduate School of Science, The University of Osaka ² Research Center for Chemistry, National Research and Innovation Agency	32
データ駆動型軟磁性材料開発のための大規模シミュレーションと機械学習の活用 小野 寛太、塚原 宙 大阪大学 大学院工学研究科	36
大規模言語モデルを用いた文献からの知識抽出と細胞内ネットワークの数理モデルのデータ駆動的な抽出 荒金 究 大阪大学 蛋白質研究所	39
太平洋赤道上の深い循環を駆動するエネルギー供給プロセスの解明 寺田 雄亮 東京大学 大学院理学系研究科	43
連星系における共通外層期の軌道進化を対象とする3次元磁気流体計算 水谷 耕介 大阪大学 大学院理学研究科	47
塑性変形による温度上昇の分子動力学法を用いた解析 李 響 大阪大学 大学院工学研究科マテリアル生産科学専攻	51
電荷注入現象の解明を目的とした金属/ポリマー界面モデリング 片瀬 大祐 東京大学 大学院工学系研究科電気系工学専攻	55

医薬品有害事象プラットフォームへの言語生成AIの搭載による安全性情報の収集・分析の効率化	59
浅野 弘斗	大阪大学 大学院薬学研究科
超臨界翼における特異な遷音速フラッター現象のメカニズム解明	63
三宅 冬馬	北海道大学 大学院工学院
Machine Learning Metadynamics for Modeling Drug Release of Phosphoramidate-based Antibody-drug Conjugates in Cancer Treatment	67
Rizka Nur Fadilla, Yoshitada Morikawa	大阪大学 大学院工学研究科
超高強度レーザーによるイオン化の物理とその制御	71
畑 昌育	量子科学技術研究開発機構 関西光量子科学研究所
Logarithm conformation representationによる圧縮性流体方程式の導出と数値計算	75
中澤 嵩	金澤大学 学術メディア創成センター
溝付き粘弾性体の滑り摩擦の連続体解析	79
岩下 航	大阪大学 大学院基礎工学研究科
機械摩擦の摩耗焼付き機構解明に資するマルチスケールモデルの開発	83
杉村 奈都子	鹿児島工業高等専門学校 機械工学科
Electron radiation damping effects in laser-plasma interactions	87
顧 彦珺	大阪大学 産業科学研究所
運動論的レーザープラズマ相互作用で発生する非熱的高速電子特性の解析	91
高木 悠司	大阪大学 大学院理学研究科/大阪大学 レーザー科学研究所
自然の多面的価値の理解に向けたランドスケープの埋め込み表現の開発	95
芳賀 智宏	大阪大学 大学院工学研究科
SiO ₂ 反応性イオンエッチング分子動力学シミュレーションのための機械学習原子力場の構築	99
浜口 智志	大阪大学 工学研究科マテリアル生産科学専攻
The Multiscale-based Data-Driven Subgrid-Scale Model for Large-Eddy Simulation of Wall-Bounded Turbulent Flow	103
Bahrul Jalaali, Kie Okabayashi	Department of Mechanical Engineering, Graduate School of Engineering, The University of Osaka
固体群と流体の三次元連成数値シミュレーションを用いた混合粒径土砂流の力学機構の解明	107
山口 栄治	琉球大学 大学院理工学研究科工学専攻社会基盤デザインプログラム
不規則系におけるナノスケール熱輸送のシミュレーション解析	111
Yijia WU, Anilkumar Chirag	東京大学 大学院工学系研究科
Suppression of electron acceleration by strong self-amplified magnetic field in quasi-parallel collisionless shocks	114
Minh Nhat Ly	大阪大学 大学院理学研究科

センター報告	118
・ 2024年度大規模計算機システム利用による研究成果・論文一覧	119
・ SC24出展報告	135
・ 第30回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2024)報告および 第31回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2025)告知	142
・ 大規模計算機システム利用者講習会等の紹介	144
・ 2025年度大規模計算機システム利用講習会	147
・ 2024年度大規模計算機システム利用講習会アンケート集計結果	148
・ 2025年度「HPCI利用」の活動状況	156
・ 2025年度「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点」の活動状況	158
・ 2024年度大規模計算機システム公募型利用制度（追加募集）の活動状況	160
・ 2025年度大規模計算機システム公募型利用制度の活動状況	162
・ 大規模計算機システムQ&A	164
利用規程等	166
・ 規程関係	167
大阪大学D3センター大規模計算機システム利用規程	167
大阪大学D3センター大規模計算機システム利用負担額一覧	169
大阪大学D3センター大規模計算機システム試用制度利用内規	170
・ 附表	171
大規模計算機システム ホスト一覧	171
スーパーコンピュータSQUIDのジョブクラス一覧	171
2024年度大規模計算機システム稼働状況	173
募 集	174
・ 大規模計算機システムを利用して行った研究・開発等の記事の募集について	175
・ 大規模計算機システム利用案内（サービス内容・サービス時間等）	176

ー データ駆動型大学を目指す大阪大学における
研究データ管理・利活用 ー

特 集

データ駆動型大学を目指す大阪大学における研究データ管理・利活用

村田 忠彦、甲斐 尚人
大阪大学 D3センター

1. はじめに

今年度から研究データ管理に関して、今後、研究者が発表する学術論文およびその根拠データの即時オープンアクセス（即時 OA）が義務化されることになりました。といっても全ての学術論文が対象になるわけではありません。2024年2月16日に内閣府統合イノベーション戦略推進会議決定として示された「学術論文等の即時オープンアクセスの実現に向けた基本方針」の中では、「公的資金のうち2025年度から新たに公募を行う即時オープンアクセスの対象となる競争的研究費を受給する者に対し、該当する競争的研究費による学術論文および根拠データの学術雑誌への掲載後、即時に機関リポジトリ等の情報基盤への掲載を義務付ける」[1]（下線は著者）と示されています。その中でも、即時 OA 対象は、「電子ジャーナルに掲載された査読済みの研究論文（著者最終稿を含む）及び根拠データ（掲載電子ジャーナルの執筆要領、出版規定等において、透明性や再現性確保の観点から必要とされ、公表が求められる研究データ）」となっており、電子化されていない媒体や査読なしの学術論文は対象から外れています。関連して政府から出されている情報は表1のとおりです。

このような研究データ管理の制度的整備が進む中、大阪大学が教育・研究・経営などの多方面にわたりデータを活用することでさまざまな社会課題を解決する「データ駆動型大学」を目指すため、2024年10月1日に大阪大学 D3センター（ディースリーセンター）が発足しました。本稿では、データ駆動型大学推進の一つの柱である「研究」面でデータを活用していくため、大阪大学における研究データの管理と利活用に向けた取り組みを紹介します。

なお、「公的資金」とは、「国又は資金配分機関から大学、研究開発法人に対して交付、補助又

表1 即時 OA に関する情報（政府発信）

公開日	資料名	発信母体
2023/5/14	G7科学技術大臣の共同声明	G7科学技術大臣会合コミュニケ（仙台）
2023/5/21	G7広島首脳成果文書（項目40）	G7首脳コミュニケ（広島）
2023/6/9	統合イノベーション戦略2023	閣議決定
2023/10/30	公的資金による学術論文等のオープンアクセスの実現に向けた基本的な考え方	CSTI 有識者議員
2024/2/16	学術論文等の即時オープンアクセスの実現に向けた基本方針	内閣府統合イノベーション戦略推進会議
2024/2/21 2024/10/8改正	学術論文等の即時オープンアクセスの実現に向けた基本方針の実施にあたっての具体的方策	関係府省申合せ

表2 即時 OA の対象となる学術論文を主たる成果とする競争的研究費制度(制度改廃により適宜修正)

府省名	資金配分機関	制度名
文部科学省	日本学術振興会	科学研究費助成事業
文部科学省	科学技術振興機構	戦略的創造研究推進事業
文部科学省	日本医療研究開発機構	戦略的創造研究推進事業（革新的先端研究開発支援事業）
文部科学省	科学技術振興機構	創発的研究支援事業

は委託する全ての経費を対象とする。公的資金は、公募型の研究資金とその他の経費（機関に対する基盤的な経費である運営費交付金等）からなる。」

（2024年2月16日に内閣府統合イノベーション戦略推進会議）と定義されています。具体的な公募型研究資金としては、表2に示す研究費が該当しています。運営費交付金を含めたこれらの研究費を用いて行われる研究には、研究データ管理（RDM: Research Data Management）が義務付けられるため、

大阪大学で研究を推進する全ての研究者が関係する取組みとなります。

また、公開が義務付けられる「根拠データ」とは、2024年2月21日（2024年10月8日改正）に発出された「学術論文等の即時オープンアクセスの実現に向けた基本方針の実施にあたっての具体的方策」では、次のように定義されています。「根拠データは、基本方針に示している『掲載電子ジャーナルの執筆要領、出版規程等において、透明性や再現性確保の観点から必要とされ、公表が求められる』掲載学術論文の根拠データをいう。Supplemental Data等の公表を前提としているデータであり、査読の過程等で求められるデータ等公表を前提としていないデータは含まない。（中略）今般の基本方針により、従来公開していなかった研究データを『根拠データとして公開を新たに求めるものではない。』したがって、学術論文の根拠データとして、これまで公開していなかったデータの公開が求められているわけではありませんが、以下に説明するオープンサイエンスの文脈で、研究データの共有と公開を進めることにより、一層の研究の発展が期待されています。

オープンサイエンスは、まず「研究論文のオープンアクセス」を中心に取組まれ、最近では、論文の根拠データをはじめとする「研究データの共有と公開」を含めた概念になってきました[2,3]。国内外のオープンサイエンスの流れを概観するとともに、大阪大学でのオープンサイエンスの取り組みを紹介します。

研究論文のオープンアクセスのきっかけとして有力であるのは、1994年にプリンストン大学にいた Harnad による問題提起で、査読前論文のオンライン上での公開を行うというものでした。2002年には、ブダペスト・オープン・アーカイブ・イニシアティブ（BOAI）でオープンアクセスの2つの方法が提案されました。1つは著者自身が論文を公開するセルフアーカイブ、もう一つは出版社が無料で論文へのアクセスを認める方法でした。現在では前者がグリーンオープンアクセス、後者がゴールドオープンアクセスとして知られています。

大阪大学では、2020年4月17日に総長裁定で「大阪大学オープンアクセス方針」を定め、「本学は、出版社、学会、学内部局等が発行した学術雑誌に掲載された本学教職員の研究成果（以下「研究成果」という。）を、本学において運用する学術機関リポジトリ「大阪大学学術情報庫（OUKA）」（以下「リポジトリ」という。）、又はその他該当研究成果の著者が選択する方法によって公開する」としています。OUKA は The University of Osaka Knowledge Archive の略で、大阪大学附属図書館が運用する学術機関リポジトリの名称です。学術機関リポジトリとは、「単独あるいは複数の大学コミュニティの知的生産物を入手し保存する電子的コレクションであり、その情報内容が、機関で範囲限定され、学術的であり、累積的かつ永続的であり、オープンで相互運用可能なもの」[4]、とりわけ日本においては、「大学でうみだされた学術成果をオープンアクセスの状態で発信する装置としての役割を担う」[5]とされています。

オープンサイエンスのもう一つの柱である「研究データの共有と公開」については、次のような経緯で、大阪大学で整備されてきました。2014年7月24日に文部科学省から日本学術会議になされた「研究活動における不正行為への対応等に関する審議について（依頼）」を受けて、2015年3月6日に日本学術会議が「科学研究における健全性の向上について（回答）」を発表しました[4,6]。大阪大学においても、2015年8月6日に「大阪大学における研究データの保存等に関するガイドライン」を定め、本学で研究活動を行う研究者等に対して「公的な資金によって実施された研究で生み出された成果やそのもととなるデータ等は、公的資産としての性格も有することから、それらを適切に管理・保存し、必要に応じて開示することは、本学で研究活動を行う研究者等に課せられた責務」としています。また、その保存期間について、文書、数値データ、画像等の資料については、論文等の成果発表後、原則として10年間とすること、実験試料、標本等の試料については、論文等の成果発表後、5年間とするとなっています。ただし、「詳

細については、研究データの性質及び研究分野の特性に応じて各部局において定める」となっています。このように大阪大学では、研究データを論文等の成果発表後、5年または10年の期間にわたって研究者が保持することを責務としています。

さらに、2023年3月24日に総長裁定で「大阪大学研究データポリシー」を策定しています。そこでは、大阪大学の研究者の責務として「研究活動の公正性を示すのみならず研究データそのものの価値を高めるために、(中略)当該研究者が判断する適切な方法により、研究データを取得・収集し、保存しなければならない」とされています。また、研究データの公開と利活用に関して、「研究活動において、研究データが新時代に適合する分野融合型の研究を推進する貴重な種と成り得るという認識のもと、可能な限り当該データを社会に公開し、その利活用の促進に努めることを原則とした上で、関係する法令、学内規則、研究倫理その他の規範や別途大学内で定められる研究データの公開・利活用に関する方針を遵守しなければならない。また、公開にあたっては、利活用を促進するために研究データの品質の確保に努めなければならない」と定めています。

2. オープン・アンド・クローズ戦略

前述のように研究データの保存・共有・公開が推奨されていますが、すべての研究データの即時公開が求められているわけではありません。2016年1月22日に閣議決定された第5期科学技術基本計画[7]では、公的資金による研究成果や、その他の研究成果としての研究二次データについても、分野により研究データの保存と共有方法が異なることを念頭に置いた上で可能な範囲で公開することを示しつつ、「ただし、研究成果のうち、国家安全保障等に係るデータ、商業目的で収集されたデータなどは公開適用対象外とする。また、データへのアクセスやデータの利用には、個人のプライバシー保護、財産的価値のある生活部の保護の観点から制限事項を設ける。なお、研究分野によって研究データの保存と共有の方法に違いがあること

を認識するとともに、国益等を意識したオープン・アンド・クローズ戦略及び知的財産の実施等に留意することが重要である」として、研究データの公開・共有方法を戦略的に計画するべきであるとしています。

研究データを公開するかどうかに関わらず、研究活動で取得・収集される研究データを適切に保存することは、研究の透明性や再現性を担保するための出発点であり、将来的なデータ共有や利活用を可能にするための前提条件となります。また、取得から保存に至るまでの来歴を明らかにし、FAIR 原則 (Findable, Accessible, Interoperable, Reusable) [8]に準拠した形での管理も推奨されています。さらに、研究終了時や異動・退職時などには、保存するデータと破棄するデータを適切に分類し、保存期間終了後には適切な処理を行うことが求められます。本学では、こうした研究データの中長期的な管理を支えるために、データ集約基盤(ONION: Osaka university Next-generation Infrastructure for Open research and open Innovation)の整備と運用を進めています。ONIONはファイルシステムのEXAScaler、WebストレージのONION-file、オブジェクトストレージのONION-objectで構成されています。ONION-objectを活用することで、研究室での研究データの保存や共有といった用途に利用できます。

一方で、研究データの共有や公開は、効率的な研究遂行や研究成果の透明性向上、新たな知見の創出に資するものの、その実施には慎重な判断が必要となります。特に、研究データには個人情報や知的財産などが含まれることもあり、「可能な限りオープンに、必要な限りクローズに (as open as possible, as closed as necessary)」[9]という原則に基づき、データや研究分野の特性、関係法令や契約条件などを踏まえた上で、データの共有や公開の可否を判断する必要があります。

研究データの共有や公開にあたって、保存された研究データを検索できる仕組みが必要となります。2024年2月21日(2024年10月8日改正)に発出された「学術論文等の即時オープンアクセスの実

現に向けた基本方針の実施にあたっての具体的方策」では、学術論文及び根拠データを「機関リポジトリ等の情報基盤」に登録することを求めています。ここで「機関リポジトリ等の情報基盤」とは、「研究データの管理・利活用のための我が国の中核的なプラットフォーム」として位置付けられている NII Research Data Cloud（以下、NII RDC）上で学術論文及び根拠データが検索可能となるものとしています。したがって、研究者個人のホームページ等で公開したとしても、NII RDC から検索可能ではないため、該当しないこととなります。すなわち、研究データを共有、公開できるようにしていたとしても、検索できる仕組みとして登録していなければならないことになっています。大阪大学では、NII RDC から検索可能な形で、学術論文及び根拠データを公開できるようにするため、研究データ管理支援のためのシステムを構築しています。

3. 研究データ管理支援

3.1 データ管理計画（DMP）と政策動向

すでに第1章で概観したように、近年では、研究の透明性および再現性の確保、ならびに国際的なオープンサイエンスの潮流への対応を目的として、研究データの適切な管理と公開が強く求められています。こうした背景の中、日本においては、代表的な公的研究資金である科学研究費補助金（科研費）において、研究者に対して新たに対応が求められています。具体的には、まず研究開始前にデータ管理計画（DMP: Data Management Plan）を策定し、研究の進捗に応じて適宜更新することです。さらに、毎年度の実施状況報告書や研究終了後の実績報告書の提出時に、公開した研究データに関するメタデータ等を提出する必要があります。これらの情報は、科研費データベース（KAKEN）へと登録され、研究データの利活用促進とオープンサイエンスの推進に資する仕組みとなっています。

3.2 DMP に関する作成支援学内支援活動

このような制度面での変化を受け、本学の主に

研究推進部、附属図書館、D3センター・情報推進部が連携し、学内の支援体制の整備を進めています。研究推進部は、DMP に基づき記載される科研費の実施状況報告書・実績報告書について、公開データのメタデータの正確性を担保するため、学内全体への情報提供を実施しています。全部局の科研費担当係宛に提供された情報を通じて、メタデータ項目の記載方法などの留意点や機関リポジトリ OUKA の活用などが周知され、研究現場における混乱の最小化が図られました。

また、研究者に対する啓発および支援体制を多角的に展開しています。中心的な役割を担うのがオープンサイエンス推進室であり、DMP の基本的な考え方や作成方法についての解説などを学内ポータルサイトで公開し、研究者自身が自律的に対応できる環境の整備を進めています。この一環として、本学は「AI 等の活用を推進する研究データエコシステム構築事業」の成果である教材『オープンサイエンス時代における研究データマネジメント基礎』[10]を用い、学内で新任教員研修（FD 研修）において DMP の意義と実務的対応についての解説を行っています。この教材では、DMP が果たすべき役割、意義について触れられています。これらの情報を踏まえながら、研究者自身が「研究の質を高める戦略的ツール」として DMP を位置づけ直す契機となるような解説が行われています。このような取り組みにより、本学では DMP を単なる制度対応ではなく、研究活動の設計および成果管理を支える重要な要素として根付かせることを目指しています。

3.3 大阪大学における支援基盤の整備

基盤整備の側面では、研究データの保存と共有を担うデータ集約基盤 ONION、公開を担う機関リポジトリ OUKA、そして研究マネジメント総合支援システムの三者を連携させることで、研究データのライフサイクル全体を支援する環境の整備を進めています（図 1 参照）。研究マネジメント総合支援システムは、資金配分機関が提示する様式例に準拠した DMP 作成支援や研究プロジェクトの管

理、研究財源との紐づけ、研究成果の管理に至るまでを一貫して支援し、研究者の煩雑な手続きを大幅に簡略化することを目指しています。OUKAの利用促進においては、附属図書館が主導し、研究データの登録に対応した基盤改修に合わせて、学内ウェブサイト上（大阪大学学術情報庫 OUKAでの研究データ公開について[11]）で登録手順などを掲載し、利用者支援を強化しています。さらに、リポジトリに登録された研究データにはDOI（永続的識別子）を付与することも可能であり、外部からの引用・利活用が促進される設計となっています。

このように、本学では、第1章で述べた「大阪大学研究データポリシー」や第2章で述べた「オープン・アンド・クローズ戦略」の考え方、すなわち、研究データを適切に保存しつつ、公開可能なデータについては積極的に共有・公開していくという本学の方針に基づき、この方針を実現するため、制度・人材・基盤の三位一体による支援体制の構築に取り組んでいます。

4. データ駆動型大学にむけた研究データ管理

本学における研究データ管理の取組は、さらなる高度化・定着化に向けて、今後取り組むべき重要な課題として以下の2点が挙げられます。

（1）研究分野ごとの特徴を踏まえたメタデータの作成

研究データの価値を最大限に高め、その利活用を促進するためには、分野ごとの特性を反映したメタデータの作成が欠かせません。メタデータにはさまざまな段階があり、書誌情報のような基本的な記述項目から、再利用性や相互運用性を高めるための高度な情報まで幅広く存在します。FAIR原則に配慮した設計が求められる一方で、研究者の過度な作業負担とならないよう工夫が必要です。

今後は、研究者が負担なくメタデータを作成できるよう、データ生成段階からデータに関する情報を自動抽出するなど、研究者の負担軽減と精度の両立を図ることが重要です。

（2）中途段階のデータの保存と管理

研究活動で生成させる研究データは、新時代に適合する分野融合型の研究を推進する貴重な種と成り得ます。特に分野によっては、データに高い資産的価値が認められ、大学経営の戦略的な資源となる可能性もあります。

しかしながら、中途段階のデータは構造化が不十分である場合も多く、保存対象の選定や管理方法については分野ごとの特性に応じた対応が求められます。そのため、安全かつ柔軟に保管できる

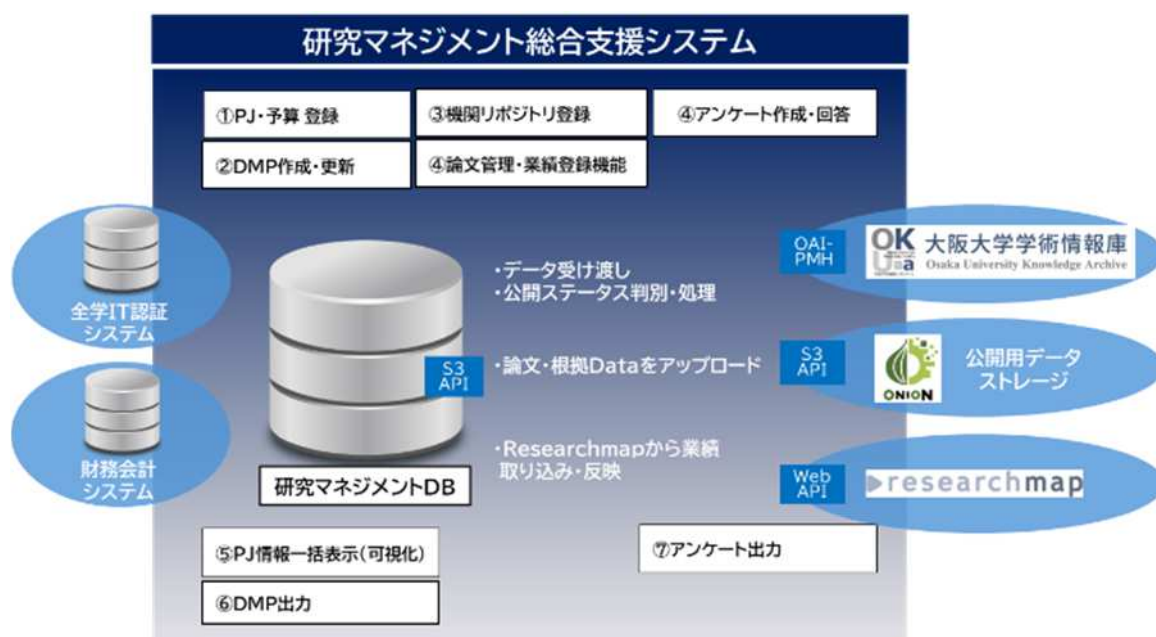


図1 データ公開基盤 ONION、機関リポジトリ OUKA、研究マネジメント総合支援システム

データ基盤の整備などが求められます。これにより、中途段階のデータを有効な資産として位置づけ、持続的に活用していけるような環境の構築が求められます。

謝辞

本研究は文部科学省「AI等の活用を推進する研究データエコシステム構築事業」、「オープンアクセス加速化事業」の支援を受けたものです。

参考文献

- [1] 内閣府統合イノベーション戦略推進会議、学術論文等の即時オープンアクセスの実現に向けた基本方針、2024年2月16日（公開）。
- [2] OECD, Making Open Science a Reality, OECD Science Technology and Industry Policy Papers, **25**, pp.1-108 (2015).
- [3] 池内、OECD レポート：オープンサイエンスの実現に向けて、情報管理、**58-12**, 919-923 (2016)
- [4] 栗山、総論 学術情報リポジトリ、情報と科学の技術、**55-10**、413-420 (2005).
- [5] 土出、赤澤、呑海、日本の大学図書館における学術機関リポジトリの変遷と課題、図書館界、**64- 2**、188-196 (2014).
- [6] 家、研究者としてわきまえるべき基本的な注意義務、並びに、実験データ等の保存機関及び方法に関するガイドライン、学術の動向、14-19 (2015).
- [7] 内閣府、第5期科学技術基本計画 (2016).
- [8] Wilkinson, M. D., Dumontier, M., Aalbersberg, I. J., et al., The FAIR Guiding Principles for scientific data management and stewardship, Scientific Data, **3** (2016).
- [9] European Commission, H2020 Programme: Guidelines on FAIR Data Management in Horizon 2020, Version 3.0 (2016).
- [10] オープンサイエンス時代における研究データマネジメント基礎』, <https://jpcoar.repo.nii.ac.jp/records/2000502>, 最終閲覧日2025年5月24日.
- [11] 大阪大学学術情報庫 OUKA での研究データ公開について, https://ir.library.osaka-u.ac.jp/portal/doc/ouka_researchdata.pdf, 最終閲覧日2025年5月24日.

大規模計算機システム利用者

研究報告

※「研究報告」では、利用者様が大阪大学 D3 センターの大規模計算機システムを、どのように利用しているのか報告
いただいています。ここでは、大規模計算機システム公募型利用制度採択者からの研究報告を掲載します。

ホイッスラー波を利用した新奇なレーザー核融合デザインの探索

佐野 孝好

大阪大学 レーザー科学研究所

1. はじめに

慣性核融合研究の究極的な目標は、高密度のイオンを如何に効率的に加熱し核融合反応を起こすかである。つまりレーザー駆動慣性核融合では、注入するレーザーエネルギーを、燃料物質であるイオンの熱エネルギーに効率的に変換できなければならない。しかし、通常はレーザー・プラズマ相互作用の最初の段階で、電磁波のエネルギーのほとんどが電子に輸送されてしまうという根本的な課題がある。その場合、電子からイオンへのエネルギー変換は衝突過程を通じてゆっくりと進行し、一般にその効率も非常に悪い。したがって、もし電磁波からイオンに直接エネルギー変換できる物理機構が見つければ、この課題を解決する重要なブレイクスルーになりうる。そして、例えば高速点火方式と呼ばれる圧縮と加熱を分業で行うレーザー核融合方式において、従来方式とは全く異なる新しい加熱デザインを提供できるかもしれない。

そこで我々は、レーザーからイオンへの直接的かつ効率的なエネルギー変換機構を探索することを目的として研究を進めている。その中で発見した興味深い加熱機構が、定在ホイッスラー波の崩壊現象である。通常、プラズマ中を伝播するレーザー光には臨界密度が存在し、固体密度を越えるような高密度プラズマ中を伝播することはできない。しかし、非常に強い磁場が存在すると、この状況は一変する。もし、電子サイクロトロン振動数がレーザー光の振動数より大きくなると、磁力線に沿って進行する低振動数のホイッスラー波が、プラズマ中を伝播できるようになる。その場合、臨界密度という制限は存在せず、ホイッスラー波はどのような密度のプラズマに対しても侵入できる。そうなると、電磁波であるホ

イッスラー波と高密度プラズマが直接相互作用できることになり、従来考えられていなかった新しい物理機構によって、効率的なエネルギー変換や粒子加速現象が期待される[1-3]。また、この特性を利用することで、直線偏光のレーザー光を円偏光に変換するプラズマデバイスを設計することも可能である[4]。面白いことに、この機構が起こるための実効的なプラズマ条件は、高強度レーザープラズマや磁場閉じ込め核融合プラズマ、さらには惑星間プラズマと共通しているため、このプラズマ加熱機構は幅広い分野の応用研究に展開できる。

2. ホイッスラー波の伝播特性

高強度ガラスレーザーなどの波長 1 ミクロン程度のレーザー光の場合、ホイッスラー波が伝播するための臨界磁場強度は、およそ 10 キロテスラ (1 テスラは 1 万ガウス) に相当する。すなわち、この 10 キロテスラがレーザー・プラズマ相互作用に質的な違いをもたらす必要条件となる。近年、大阪大学の激光 XII 号レーザーなど世界中の大型レーザー実験によって、1 キロテスラ程度の強磁場の生成が数多く確認されている[5]。さらに、その 1000 倍である 1 メガテスラの発生も、数値シミュレーションによって既に予言されており、その実証実験が計画されている[6]。つまり、10 キロテスラを越える極限磁場の実験室利用が目前に迫っており、「高強度レーザーと超臨界高密度プラズマの直接相互作用」の現実味が急速に高まっている。

電磁波の振動数が与えられたとすると、臨界密度や臨界磁場強度が計算できる。臨界磁場強度の大きさは、電磁波の振動数に比例するため、レーザー波長には反比例することになる。つまり、波

長 10 ミクロンのレーザーに対してはホイッスラー波伝播に要求される磁場強度は 1 キロテスラに緩和される。したがって、レーザーを用いた原理実証実験には炭酸ガスレーザーの使用が魅力的かもしれない。また、無衝突近似が成り立つ範囲では、さらに波長の長い電磁波を考えることで、磁場核融合プラズマやさらには惑星磁気圏プラズマ、太陽風プラズマでも全く等価な現象が期待できる。

我々はプラズマ粒子コード (Particle-In-Cell; PIC) を用いた第一原理シミュレーションによって、高密度プラズマ中の大振幅ホイッスラー波の伝播過程を理論的に明らかにしてきた[1-4,7]。解析手法の特色としては、できるだけ簡潔な系を用いて現象の本質を抽出することで、複雑なプラズマ基礎過程を一つ一つ丁寧に理解していくことを目的としている。そして、高密度プラズマと電磁波との直接相互作用について広いパラメータ空間を網羅的に調べ上げることで、効率的なエネルギー吸収過程や粒子加速機構の最適化を達成させたいと考えている。

このイオン加熱現象は空間一次元速度三次元を考慮することで扱うことができる。真空中に一樣密度の高密度プラズマターゲットを初期にセットし、そこに円偏光レーザーを照射する系を考える。レーザー光の伝播方向に臨界磁場強度を超える外部磁場を印加しておく、照射されたレーザー光はホイッスラー波としてプラズマ中にもそのまま侵入できる。さらに定在波を発生させるために、レーザーはターゲットの両側から対向で照射する。ちなみに、直線偏光のレーザーを照射しても、その一部はホイッスラー波としてプラズマ中を伝播することが可能であるが、我々の解析では磁場の向きに対して右回り円偏光のレーザー光を最初から仮定して計算している。その時の電磁場の時間発展の様子を、図 1 に示している。このシンプルな系を特徴付ける無次元パラメータは、それぞれの臨界値で規格化されたプラズマ密度、外部磁場強度及びレーザー振幅の 3 つのみ

になる。定在波が発生しているターゲット中央部で、縦方向 (レーザー進行方向) の静電場が突如発生しているが、これがイオンを加速する力として働くことになる。

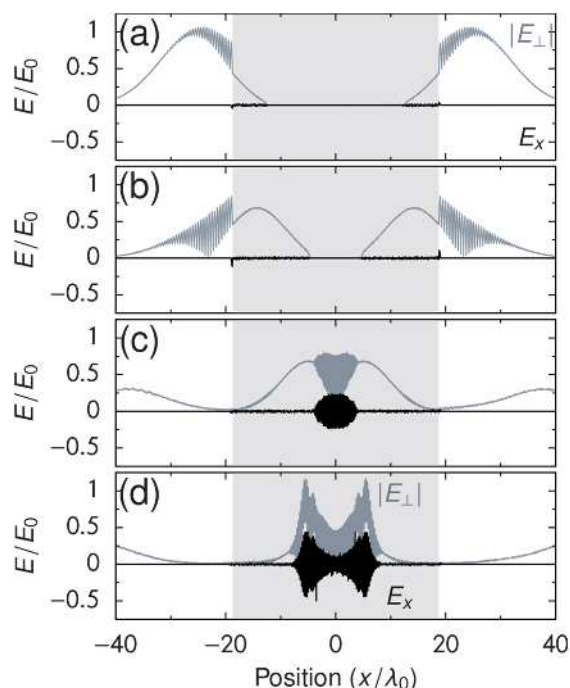


図 1： 対向ホイッスラー波と高密度プラズマターゲットとの相互作用の時間発展の PIC シミュレーション例。(a) から (d) に時間発展をしている。真空中に置かれたターゲットの両側から高強度レーザーを照射すると、その一部がホイッスラー波としてプラズマ中に侵入する (a, b)。プラズマ中心部で定在波が形成されると、縦電場が発生しプラズマ中のイオンの運動に大きな影響を与えることになる (c, d)。

3. 慣性核融合プラズマへの応用と加熱効率

定在ホイッスラー波加熱のレーザー核融合への応用を考えてみる。近年、レーザー核融合の点火デザインの中に外部磁場によるプラズマ制御の効果を取り入れる例は多く[8,9]、新しい研究展開の鍵となっている。例えば、磁場による界面流体不安定や熱伝導の抑制が検討されているが、我々の方法は、これらとは全く別の視点からの磁場の活用と言える。

ホイッスラー波を活用することで、磁場閉じ込

めとレーザー加熱を複合した、新しい「磁場閉じ込めレーザー核融合」という新展開が期待できるかもしれない。密度を固体密度以上に上げるためにレーザー爆縮をすることで、同時に外部印加磁場も増幅させることもできる。この時、磁気圧はガス圧よりも高くなっているため、磁場閉じ込めプラズマの状態に近い。その場面で、定在ホイッスラー波加熱を起こすことができれば、全く新しいデザインの核融合点火方式となりうる。また、この加熱機構では 100 keV を超える温度も実現可能なため、ターゲットとして水素・ホウ素反応を期待したアンモニアボランを使うことも面白いだろう。このような多種イオンを含むターゲットで定在ホイッスラー波加熱がどのように進行するのか、エネルギー利得が 1 を超える実験デザインは果たして可能か、などの疑問について整理してみたい。

核融合応用を考える際には、エネルギー利得が最も重要な指標となる。高利得のためにはプラズマの密度をできるだけ高くする必要がある。定在ホイッスラー加熱で達成されるイオン温度は図2に示されている。この図からは、もしレーザー強度が高ければ、たとえプラズマ密度が固体水素密度よりも高くても 10 keV を超えるような核融合プラズマが形成されることが示唆されている。そこで、別のレーザーによって爆縮された状態の重水素-三重水素 (DT) プラズマをターゲットとして考えてみる。我々の考える系では様な強磁場が不可欠な要素のため、磁場に直交する方向への円柱形状の爆縮と相性がいいだろう。例えば、固体密度の 30 倍の圧縮を想定してみる。この場合、イオン温度 40 keV にするために必要なレーザー強度は $I_0 = 1.09 \times 10^{21} \text{ W/cm}^2$ 程度となった。また、高いエネルギー変換効率の実現のためには、屈折率はできるだけ 1 に近い必要があるため、外部磁場強度としては $B_{\text{ext}} = 2.14$ メガテスラを仮定している。加熱領域はホイッスラー波のパルス長で決まるが、ここではレーザー周期の 200 倍、すなわち 106 fs としている。この場合のイオン温度の理

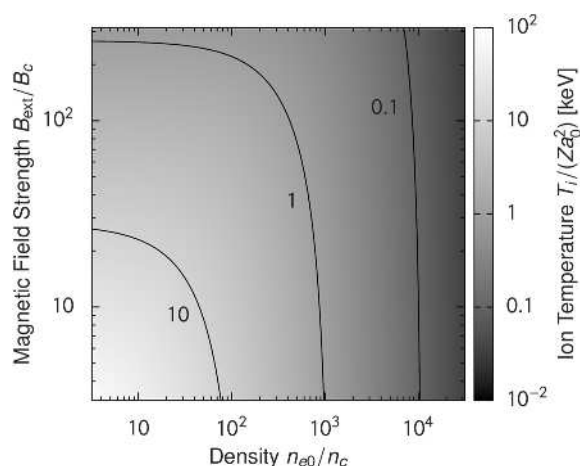


図2：定在ホイッスラー波加熱によって達成できるイオン温度のパラメータ依存性。最終的な温度は、3つのパラメータ(密度、磁場強度、レーザー強度)で予測可能である。プラズマ密度と外部磁場強度が与えられた時の最大イオン温度をグレイスケールで示しているが、温度はレーザー強度で規格化した値で示していることに注意して欲しい。

論予測値は約 140 keV である。このシミュレーションでは、爆縮された DT コアプラズマのイオン温度を 40 keV まで加熱することに成功できた。

この時のエネルギー利得を概算してみると、 $G \sim 2.5$ となる。また、定在ホイッスラー波加熱は高密度コアプラズマの中心部でのみ起こすことができるため、膨張速度が抑制され核融合反応をより長い時間持続させることができる[3]。もちろん $G \sim 1$ は、まだ発電炉としては不十分である。さらなる高利得のためには、高密度圧縮が不可欠という結論になる。また、この利得計算には爆縮レーザーの寄与は考慮されていない。もし爆縮レーザーのエネルギーが加熱レーザーと比べて無視できれば、上の見積もりは妥当となる。しかし、仮定した 2 メガテスラに対抗して爆縮を実現するには相当のエネルギーを要することになる。これは大きな課題になることは間違いないが、自己生成磁場を理想的な構造に制御しながら爆縮・加熱を進めるデザイン設計が可能かどうか、さらに検討することは興味深いと感じている。

4. まとめと今後の課題

レーザープラズマを用いてキロテスラを超える強磁場を発生・制御することができるようになってきた。このような強磁場を応用した実験を検討するためには、強磁場中におけるレーザー・プラズマ相互作用という基礎過程を理解する必要がある。もちろん磁化プラズマ中の電磁波の特性は数多く研究されてきているが、相対論的強度のレーザーとの相互作用など、まだまだ面白い問題が残されている状況である。我々は対向ホイッスラー波のつくる定在波を活用した、臨界密度を超える高密度プラズマ中での効率的なイオン加熱過程を発見した。この機構の最も重要な特徴は、電磁波のエネルギーが電子を介することなく直接イオンに輸送されることである。この利点を生かして、レーザー駆動慣性核融合の新しいプラズマ加熱機構としての有用性を検討している。簡単な数値シミュレーションの結果から、爆縮された高密度DT燃料プラズマにホイッスラー波を照射することで数 10 keV を超えるようなイオン温度の実現が確認されている。さらに、水素とボロンを含むターゲットを熱的な pB 核融合反応が可能な数 100 keV に加熱することも原理的に可能であることも示した。今後は、将来的に実験可能なより現実的なシステムデザインの構築や、実験を模擬するような多次元幾何学構造の元での加熱実現性などを調べるのが理論シミュレーションの課題になるであろう。

我々のイオン加熱機構に必要な実効的な磁場の強度は、ホイッスラー波の波長に依存する。高強度レーザーを想定した波長 1 ミクロンで 100 キロテスラに相当する磁場は、波長 1 センチメートルでは 1 テスラとなる。ITER などのトカマクプラズマで使われる 5 テスラの磁場を利用して、磁力線に沿った方向にホイッスラー波を励起できれば、磁場閉じ込め核融合プラズマのイオンを加熱できるかもしれない。また、惑星磁気圏で観測される波長 100 km を超えるホイッスラー波と、ナノテスラの惑星間磁場でも相似的な現象が十

分に起こりうる。これらの例だけに留まらず、パルサーなどのコンパクト天体周辺における輻射とプラズマの相互作用への応用なども可能であると考えており、「強磁場中での波動粒子相互作用」をキーワードにした学際的な展開を積極的に進めていきたい。

参考文献

- [1] T. Sano et al., Phys. Rev. E, 96, 043209 (2017).
- [2] T. Sano et al., Phys. Rev. E, 100, 053205 (2019).
- [3] T. Sano et al., Phys. Rev. E, 101, 013206 (2020).
- [4] T. Sano et al., Phys. Rev. E, 102, 053214 (2020).
- [5] S. Fujioka et al., Sci. Rep., 3, 1170 (2013).
- [6] M. Murakami et al., Sci. Rep., 10, 1 (2020).
- [7] M. Hata et al., Phys. Rev. E, 104, 035205 (2021).
- [8] S. Fujioka et al., Phys. Plasmas, 23, 056308 (2016).
- [9] S. Sakata et al., Nat. Commun., 9, 3937 (2018).

In silico スクリーニングを用いて、毒性ウィルスタンパク質と宿主タンパク質との相互作用を予測する

河口 真一

大阪大学 大学院生命機能研究科

1. はじめに

細胞内で生命現象の物理化学的反応を担っているのは、多くの場合、タンパク質である。タンパク質は、20 種類のアミノ酸が連なったポリマーであり、アミノ酸配列に応じた立体構造に折り畳まれる。生物のゲノム DNA にコードされているタンパク質の種類は、ヒトで約 20,000 種類も存在する。これらのタンパク質が相互作用し、複合体を形成することによって、複雑な生体反応が制御されている。従って、タンパク質の機能を研究する場合には、それと相互作用するタンパク質を探索することがよく行われる。相互作用するタンパク質を実験的に同定する研究も広く行われているが、時間と労力が多いため、迅速なスクリーニング手法が望まれている。

タンパク質間の相互作用は、各タンパク質の立体構造表面の特性によって決まる。タンパク質の立体構造を決定するには、当該タンパク質を単離精製する必要があるが、多くのタンパク質については、実験的に立体構造を決定することは行われていない。一方で、最近、DeepMind 社によって開発された AlphaFold2 という AI プログラムは、アミノ酸配列の共進化情報を利用して、タンパク質の立体構造を高精度で予測できるとして注目されている¹。さらに、タンパク質の複合体構造も予測できることが期待されている²。そこで、AlphaFold2 を利用して、迅速なタンパク質複合体のスクリーニングを行うことが試みられている³。このような in silico のスクリーニング系は、実験上の制約がある強毒性タンパク質の場合に、特に有用だと考えられる。AlphaFold2 を用いて、強毒性タンパク質と複合体を形成する可能性のあるタンパク質を絞り込むことによって、実験の負担を軽減し、毒性タンパク質の病理学的メカニズムの研究を促進できる。

2. 研究方法

2.1 クリミア・コンゴ出血熱ウイルス (CCHFV) の NP タンパク質

本研究では強毒性ウイルスであるクリミア・コンゴ出血熱ウイルス (CCHFV) のタンパク質に着目した。CCHFV は、アフリカ、アジア、ヨーロッパの一部で発生しており、主にマダニを介して感染する。感染した場合には非常に重篤な症状を示し、致死率は 10~40% にもなる⁴。CCHFV のゲノムにコードされているタンパク質のうち、NP タンパク質は、ウイルスの RNA に結合して、ウイルス粒子内にパッキングする役割を担っている。さらに、ヒトの細胞内では、アポトーシスという細胞死の誘導に関わることが報告されている⁴。NP タンパク質は、482 アミノ酸残基からなり、単独の立体構造はすでに明らかにされている⁵。N 末領域と C 末領域によって形成される Head ドメインと、中央領域の Stalk ドメインに分けられる (図 1)。ドメインとは、タンパク質の立体構造における部分的なユニットを意味する。

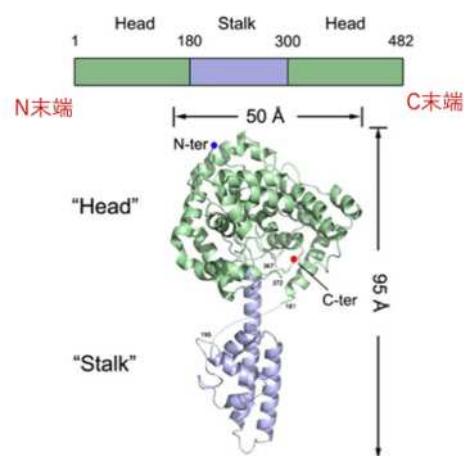


図 1 CCHFVのNPタンパク質の立体構造
NPタンパク質は、2つのドメインから成っている。

2.2 AlphaFold2 プログラムを用いたタンパク質複合体の構造予測

AlphaFold2 プログラム^{1,2}は、結合を予測したいタンパク質と似た配列をもつタンパク質を、多くの生物種から集め、保存性に従ってアライメントする。これによって、保存されているアミノ酸残基と、生物の進化に伴って変化している残基にわけける。NP タンパク質の変化と、ターゲットとなるタンパク質との変化に対応がみられる場合には、それら残基間の結合が保存されている可能性が考えられる（共進化）。アライメントの作成は、大阪大学 D3 センターにあるスーパーコンピュータ、SQUID の CPU ノードを用いて計算した。

AlphaFold2 では、上述のアライメント情報を基に、初期パラメータが異なる 5 つの予測構造を出力する。オリジナルの計算フローでは、1 つずつ順に計算していたが、本研究では、5 つの GPU を使って並列に計算し、予測時間を短縮している³。出力された 5 つの構造のうち、最もスコアの高いものを予測構造として採用した。1 つのタンパク質ペアの予測構造を計算する時間は、1~3 時間程度であり、タンパク質の長さと同タンパク質の数に依存していた。SQUID の計算資源を効果的に活用するため、タンパク質の長さが 1,000 アミノ酸残基以下のものに対してスクリーニングを行った。

3. AlphaFold2 を用いたタンパク質間相互作用の in silico スクリーニング

3.1 信頼性スコアの分布

本研究では、CCHFV 由来の NP タンパク質とヒトタンパク質とが、1 : 1 で結合すると仮定して、相互作用の可能性を、AlphaFold2 を用いてスクリーニングした。AlphaFold2 は、予測した複合体に対して、信頼性スコアを 0 から 1 の範囲で与える。先行研究から、スコアが 0.6 以下の場合には、計算毎にスコアが大きく異なる場合があり、信用性は低い³。

約 15,000 種類のヒトタンパク質について、NP タンパク質との二量体構造を予測させた結果、信

頼性スコアが 0.7 以上であるものが、93 種類ほど見つかった（図 2）。スコアが高いほど信頼性が高いと考えられるが、偽陽性も多い³。従って、さらに精度を高めることを目的として、以下の二次スクリーニングを行った。

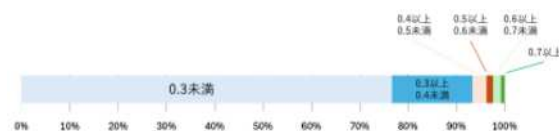


図 2 AlphaFold2による信頼性スコアの分布

CCHFV-NPタンパク質と15,000種類のヒトタンパク質との結合予測スクリーニングを行った。信頼性スコアは、0 から 1 の範囲で与えられ、大きいほど信頼性が高い。

3.2 複合体予測の二次スクリーニング

3.2.1 AlphaFold3 の利用

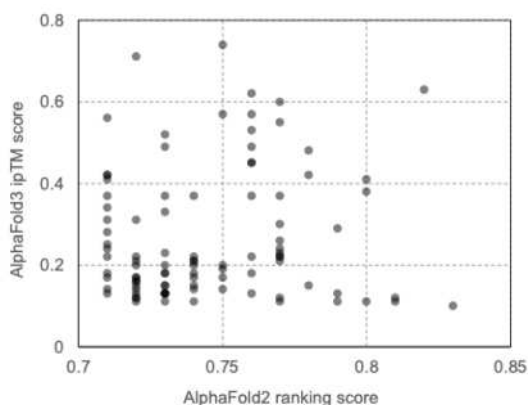


図 3 : AlphaFold Version 2 と 3 の比較

AlphaFold2 を用いた複合体予測を行っている最中に、改訂版である AlphaFold3 が発表・公開された⁶。予測精度も向上していることが期待される。そこで、AlphaFold2 で信頼性スコアが高い（0.7 以上）候補について、AlphaFold3 による複合体予測を行った（alphafoldserver.com/）。その結果、AlphaFold3 の予測では多くの候補が低いスコアを示し、2 つバージョンから得られる予測スコアには相関が見られなかった（図 3）。このことは、AlphaFold2 の予測精度が低いことを反映していると考えられるが、今後、AlphaFold3 における予測精度の実験的検証も必要である。

3.2.2 結合強度の見積もり

AlphaFold は複合体の構造を予測するプログラ

ムであるが、その複合体の結合強度を予測することはできていない。そこで、AlphaFold2によって予測された複合体の立体構造を基に、物理化学的に結合強度を見積もることを行った⁷。2つのタンパク質間の接触面にある荷電残基や疎水性相互作用を考慮して、解離定数を見積もられる。その結果、解離定数が1から1000 nMの範囲に予測されるタンパク質が多くみられた(図4)。

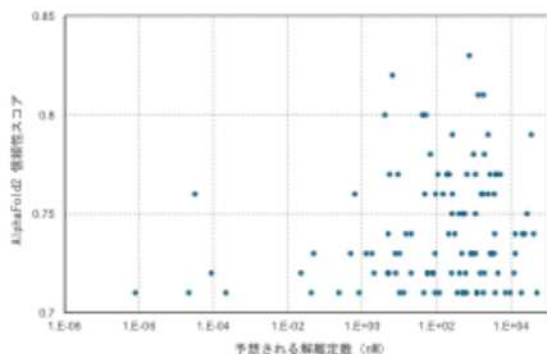


図4 複合体の解離定数の見積もり

AlphaFold2によって予測された複合体の立体構造を基にして、その解離定数を見積もった。

タンパク質間の結合を検出する目的には、共免疫沈降法がよく用いられるが、結合が強い(解離定数が小さい)ことが前提となる。一般的に、強い結合とされる解離定数が10 nM程度以下であれば、共免疫沈降法を用いて、2つのタンパク質間の結合を検出できると期待される。本スクリーニングにおいて、AlphaFold2の信頼性スコアが、0.7以上、見積もり解離定数が10 nM以下のタンパク質は、24個見られた。

4. 予測された複合体

二次スクリーニングの結果、CCHFV-NPタンパク質と複合体を形成する可能性が高い候補を得ることができた。AlphaFold2が予測した複合体構造を精査した。

4.1 #7052 タンパク質

#7052 タンパク質とNPタンパク質の予測複合体構造を図5に示す。#7052は、低分子量Gタンパク質を活性化するTBCドメインとキナーゼ様ドメインを併せ持つタンパク質であり、細胞

質に存在する。細胞内のmRNA輸送に関わるFERRY複合体に結合することが報告されているが、分子機能の詳細は不明である。

予測された複合体構造では、2つのタンパク質ともに、フレキシブルなループ領域は少なく、安定した構造であると考えられる。#7052のTBCドメインが、NPのHeadドメインと相互作用していることから、NPが#7052による低分子GTPase活性化を阻害しているのかもしれない。

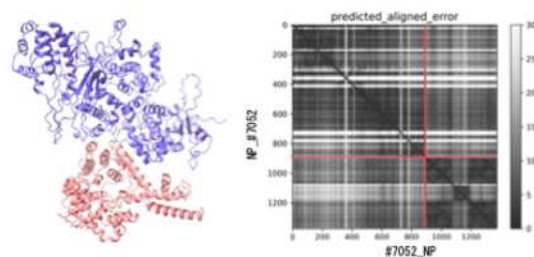


図5 AlphaFold2が予測したタンパク質複合体の立体構造(#7052_NP)

(左) タンパク質複合体の立体構造をリボンモデルで示す。#7052タンパク質は紫色、NPタンパク質は、オレンジ色で示す。(右) PAEプロットでは、#7052とNPタンパク質のアミノ酸残基を、X軸では左から、Y軸では上から並べている。アミノ酸残基が交差する点が黒色の場合、タンパク質複合体において、それら残基の相対的位置が確からしいことを表す。赤色の線は、タンパク質の境界を示す。

4.2 #7030 タンパク質

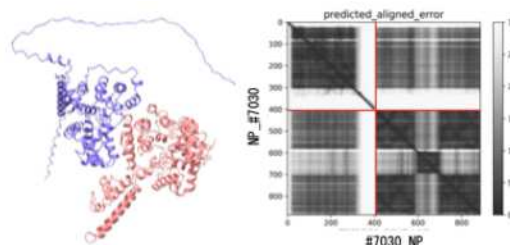


図6 AlphaFold2が予測したタンパク質複合体の立体構造(#7030_NP)

(左) タンパク質複合体の立体構造をリボンモデルで示す。#7030タンパク質は紫色、NPタンパク質は、オレンジ色で示す。(右) PAEプロットでは、#7030とNPタンパク質のアミノ酸残基を、X軸では左から、Y軸では上から並べている。アミノ酸残基が交差する点が黒色の場合、タンパク質複合体において、それら残基の相対的位置が確からしいことを表す。赤色の線は、タンパク質の境界を示す。

#7030 タンパク質も、TBCドメインを持つタンパク質である(図6)。TBCドメインを有するタンパク質は他にも数多く知られており、NPタンパク質は、それらのTBCドメインとも結合するかもしれない。本スクリーニングで示した2つのTBCドメインタンパク質(#7052と#7030)の他、さらに2つのTBCドメインタンパク質が、NPと結合する可能性があることが予測されている(AlphaFold2の信頼性スコアが0.68と0.65)。#7030は、C末端近くに1つの膜貫通領域があり、ERに局在する。TBCドメイ

ンは細胞質側に位置しており、ER 膜近傍で NP タンパク質と結合すると考えられる。

4.3 #9673 タンパク質

#9673 タンパク質は、カルボキシペプチダーゼのサブユニットとの 1 つであり、細胞外に分泌されて、基質タンパク質の分解に寄与する。C 末の小さいドメインを除いた大部分の領域には、ロイシンリッチリピートがあり、17 本のベータストランドが蹄鉄型フォールドを形成している。NP タンパク質は、蹄鉄型の内側と相互作用することが予測された (図 7)。これは、#9673 が、カルボキシペプチダーゼの他のサブユニットと結合する場所でもある。即ち、NP タンパク質が細胞外に存在する様な条件下では、カルボキシペプチダーゼの複合体形成が阻害され、その活性も損なわれる可能性がある。

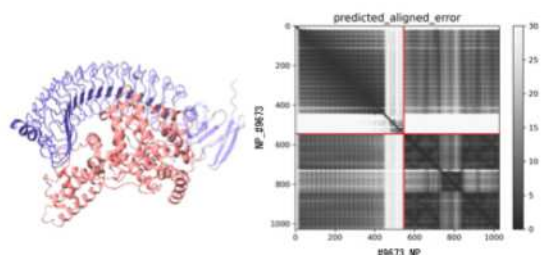


図 7 AlphaFold2 が予測したタンパク質複合体の立体構造 (#9673_NP)

(左) タンパク質複合体の立体構造をリボンモデルで示す。#9673 タンパク質は紫色、NP タンパク質は、オレンジ色で示す。(右) PAE プロットでは、#9673 と NP タンパク質のアミノ酸残基を、X 軸では左から、Y 軸では上から並べている。アミノ酸残基が交差する点が黒色の場合、タンパク質複合体において、それら残基の相対的位置が確からしいことを表す。赤色の線は、タンパク質の境界を示す。

今後、これらの相互作用について、実験的検証を行い、結合を確認できれば、CCHFV がもたらす疾患のメカニズムを明らかにできると期待される。

5. おわりに

現在、AlphaFold2 のような AI プログラムの開発が盛んに行われており、生命科学の発展に大きく貢献することが期待されている。しかし、そのような計算機科学と、それを利用する実験科学の間には、まだ隔たりがあるのが実情である。両者の隔たりを埋めて、最新の計算機科学を、実験科学が迅速に取り込むことができる環境が望まれる。AlphaFold によるタンパク質間複

合体の予測は、未だ精度が低いのが現状であるが、二次スクリーニング法の開発や、相互作用実験からのフィードバックを学習することによって、予測精度の向上が期待される。その結果、タンパク質の機能解析が効率的に推進されることが期待される。

このプロジェクトを進めるにあたり、サイバーメディアセンター応用情報システム研究部門の伊達進教授、高性能計算・データ分析融合基盤協働研究所の曾我隆特任准教授に大変お世話になりました。感謝の意を表します。

参考文献

1. Jumper, J. *et al.* Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold. *Nature* **596**, 583–589 (2021).
2. Bryant, P., Pozzati, G. & Elofsson, A. Improved prediction of protein-protein interactions using AlphaFold2. *Nat Commun* **13**, 1265 (2022).
3. Shinichi, K. *et al.* In silico screening by AlphaFold2 program revealed the potential binding partners of nuage-localizing proteins and piRNA-related proteins. *eLife* **13**, (2025).
4. Hawman, D. W. & Feldmann, H. Crimean–Congo haemorrhagic fever virus. *Nat Rev Microbiol* **21**, 463–477 (2023).
5. Guo, Y. *et al.* Crimean–Congo hemorrhagic fever virus nucleoprotein reveals endonuclease activity in bunyaviruses. *Proceedings of the National Academy of Sciences* **109**, 5046–5051 (2012).
6. Abramson, J. *et al.* Accurate structure prediction of biomolecular interactions with AlphaFold 3. *Nature* **630**, 493–500 (2024).
7. Xue, L. C., Rodrigues, J. P., Kastitis, P. L., Bonvin, A. M. & Vangone, A. PRODIGY: a web server for predicting the binding affinity of protein-protein complexes. *Bioinformatics* **32**, 3676–3678 (2016).

Gigagauss magnetic field generation by bladed microtube implosion

M. Murakami

Institute of Laser Engineering, The University of Osaka

I. INTRODUCTION

Ultrahigh magnetic fields play a crucial role in high-energy-density (HED) physics and laboratory astrophysics, enabling the study of extreme astrophysical phenomena^{1,2}, enhancing plasma confinement in fusion applications^{3,4}, and facilitating high-energy particle acceleration and radiation generation⁵⁻⁷.

Among them, the microtube implosion (MTI) scheme, illustrated in Fig. 1, has demonstrated the ability to produce megatesla-level magnetic fields⁸. In this scheme, a hollow cylindrical target with inner radius $R_0 \sim 1\text{--}10\text{ }\mu\text{m}$ is irradiated by ultra-intense femtosecond laser pulses ($I_L \sim 10^{20}\text{--}10^{22}\text{ W/cm}^2$), producing hot electrons of MeV energies. These hot electrons form a sheath field along the inner wall, which accelerates ions radially inward (implosion). A seed magnetic field deflects the ions and electrons in opposite azimuthal directions via the Lorentz force, inducing loop currents ($J_{i\phi}$ and $J_{e\phi}$) in the same direction, ultimately generating a strong axial magnetic field B_c . While effective, this scheme requires a kT-level seed field, introducing system complexity and limiting compact implementation.

To overcome these limitations, we propose a new concept: the bladed microtube implosion (BMI), illustrated in Fig. 2. The BMI scheme employs a hollow cylindrical target with a periodically slanted inner surface resembling sawtooth-shaped blades. This design breaks the cylindrical symmetry of the imploding plasma, causing azimuthally asymmetric ion acceleration and generating a spontaneous loop current around the center⁹. This self-generated current gives rise to a gigagauss-level axial magnetic field, even in the absence of an externally applied seed field.

The acceleration mechanism underlying BMI is conceptually akin to target normal sheath acceleration (TNSA), where laser-driven hot electrons rapidly escape into the central vacuum, creating sheath fields that accelerate ions normal to the inner surface. In BMI, the blade geometry redirects these ions slightly off-axis, inducing a net loop current that seeds the magnetic field. This geometry-driven anisotropy enables spontaneous field generation through collective plasma dynamics.

Unlike conventional flux compression schemes¹⁰⁻¹² that rely on compressing an initially applied seed mag-

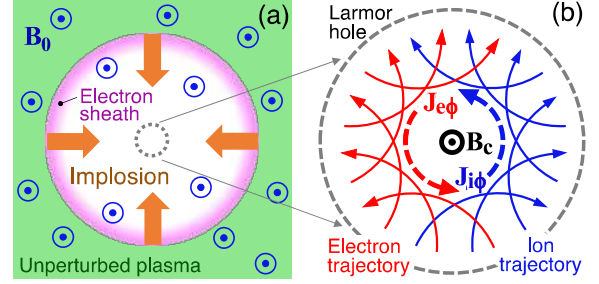


FIG. 1. (a) Top view of inner plasma dynamics during microtube implosion. Isothermal expansion of the inner-wall plasma into vacuum is driven by laser-produced hot electrons. (b) An ultrahigh magnetic field B_c forms at the center, induced by collective currents of ions and electrons deflected in opposite directions by the seed field B_0 . Reproduced from Ref.⁸.

netic field, the present bladed microtube implosion (BMI) concept fundamentally differs in its mechanism. Here, no external magnetic field is required at the outset. Instead, a spontaneous loop current is self-consistently generated near the center due to the asymmetric ion acceleration induced by the blade geometry. This loop current acts as an intrinsic seed, which is then amplified through collective plasma motion during the implosion process. The resulting magnetic field emerges from zero and grows rapidly to gigagauss levels, marking a distinct paradigm shift from seed-field compression to geometry-driven magnetic field creation.

II. PIC SIMULATIONS OF BLADED MICROTUBE IMPLOSION

A. Setup and laser configuration

The blade structure is intended to provide non-uniform initial conditions for the ion and electron flow under laser irradiation by geometrically breaking the symmetry, thus facilitating the spontaneous generation and amplification of the azimuthal electric current and magnetic

field. Below we perform 2D PIC simulations of BMI using the fully relativistic open-source code EPOCH¹³. The simulation box placed on the x - y plane has a size of $22\mu\text{m} \times 22\mu\text{m}$ at a rate of 100 cells/ μm or equivalently 10 nm/cell. The system is assumed to be uniform along the z -axis. Carbon with an initial density of $n_{i0} = 3 \times 10^{22}\text{cm}^{-3}$ is employed as the target material in this study, which is assumed to be fully ionized at the ionization state $Z = 6$, and the corresponding initial electron density is therefore $n_{e0} = 1.8 \times 10^{23}\text{cm}^{-3}$. Each square cell for the target material is filled with 100 pseudo ions and 200 pseudo electrons.

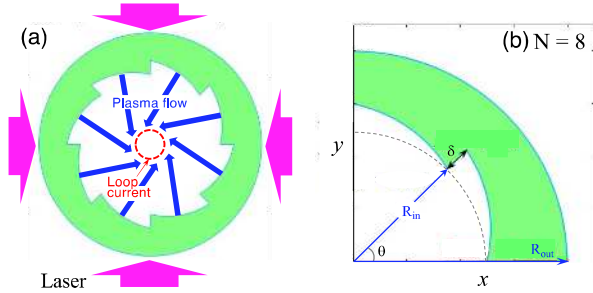


FIG. 2. (a) Core mechanism of BMI: blade heating by hot electrons drives azimuthal ion motion, inducing a loop current and ultrahigh magnetic field. (b) Example with eight blades.

In our simulations, both ions and electrons are treated as fully kinetic particles using the standard particle-in-cell (PIC) method implemented in the EPOCH code. In the simulations, a realistic proton-to-electron mass ratio $m_p/m_e = 1836$ is employed (the mass of a carbon ion is $m_i = 12m_p$). Binary collisions and ionization processes are neglected in this study, since the plasma is considered collisionless over the short laser interaction timescale (~ 100 fs). These approximations are justified by the relativistic energies of the electrons and the extremely high temperature of the system, where collective electromagnetic effects dominate the particle dynamics.

The target structure of BMI is characterized by four free parameters, i.e., the number of blades N , the innermost radius R_{in} , the outer radius R_{out} , and the gap on the blade edge δ . In Fig. 2b, $N = 8$, $R_{in} = 5\mu\text{m}$, $R_{out} = 8\mu\text{m}$, and $\delta = 1\mu\text{m}$ are employed as an example set of the parameters. The elementary shape of the bladed inner surface is given by a sinusoidal curve in this study, i.e., $r(\theta) = R_{in} + \delta \sin(N\theta/4)$ for $0 \leq \theta \leq 2\pi/N$, which is periodically assigned along the inner circle ($0 \leq \theta \leq 2\pi$) to form N -blades.

Four linear-polarized laser pulses with laser wavelength of $\lambda_L = 0.8\mu\text{m}$ and the peak intensity $I_L \sim 10^{21}\text{ W/cm}^2$ propagate toward the BMI target located at the center along the $\pm x$ - and $\pm y$ -axes. The polarization of the incident laser pulses are specified such that the electric field and the magnetic field components oscillate on the x - y

plane and along z -axis, respectively. The temporal profiles of the incident laser pulses have Gaussian distribution with the pulse duration $\tau_L = 100$ fs (FWHM: full width at half maximum), while the transverse profiles of the pulses are assumed to be plane waves.

B. Implosion dynamics

Figures 3(a)–(d) and 3(e)–(h) depict the temporal evolution of ion and electron density distributions, respectively, at four representative time points: $t = 125, 240, 300$, and 600 fs. These snapshots reveal the dynamic progression of the system throughout the implosion process. Upon irradiation by intense laser pulses, hot electrons generated at the outer surface rapidly traverse to the inner surface of the microtube and penetrate into the central vacuum region of the hollow target. This inward electron flux forms a sheath that induces a quasistatic electric field near the inner wall, which in turn accelerates wall ions toward the central axis [Figs. 3(a), 3(b), 3(e), and 3(f)]. Notably, as seen in Fig. 3(b), the resulting ion flow exhibits a symmetric off-center pattern, consistent with expectations based on the target geometry. As the imploding plasma front, composed of both ions and electrons, passes near the center of the target, a characteristic ring structure—referred to as a “Larmor hole”—emerges around the central region [Figs. 3(c) and 3(g)]. The Larmor hole typically measures 1–2 μm in diameter and represents the envelope of the gyro-orbits of charged particles. In a conventional microtube target without any inner-wall blade structure, the Larmor hole forms due to the deflection of particles by seed magnetic fields on the order of kilotesla.⁸ In contrast, in the BMI target, it arises from the geometrical asymmetry introduced by the blades, which induce a pronounced vortex-like motion of ions and electrons during the implosion.

Figures 3(i)–(l) and 3(m)–(p) show the temporal evolution of the ion and electron velocity fields and the magnetic field distributions, respectively. At the peak time of the magnetic field, as illustrated in Fig. 3(k), vortex motions of the ions and electrons are clearly observed—anticlockwise for ions and clockwise for electrons. This converging vortex configuration, consisting of clockwise electron motion and counterclockwise ion motion, forms a quasi-stationary current loop centered near the axis. This self-organized flow pattern underlies the magnetized stagnation structure clearly observed in Fig. 3(o). These counter-rotating flows act cooperatively to generate a strong azimuthal loop current on the order of peta-amperes per square centimeter in the anticlockwise direction. This intense current gives rise to a localized magnetic field of approximately 500 kT at the center, confined within an ellipsoidal region with major and minor axes of $2\mu\text{m}$ and $1\mu\text{m}$, respectively, as seen in Fig. 3(o). It is worth noting that the formation of such vortex structures and the associated magnetic field

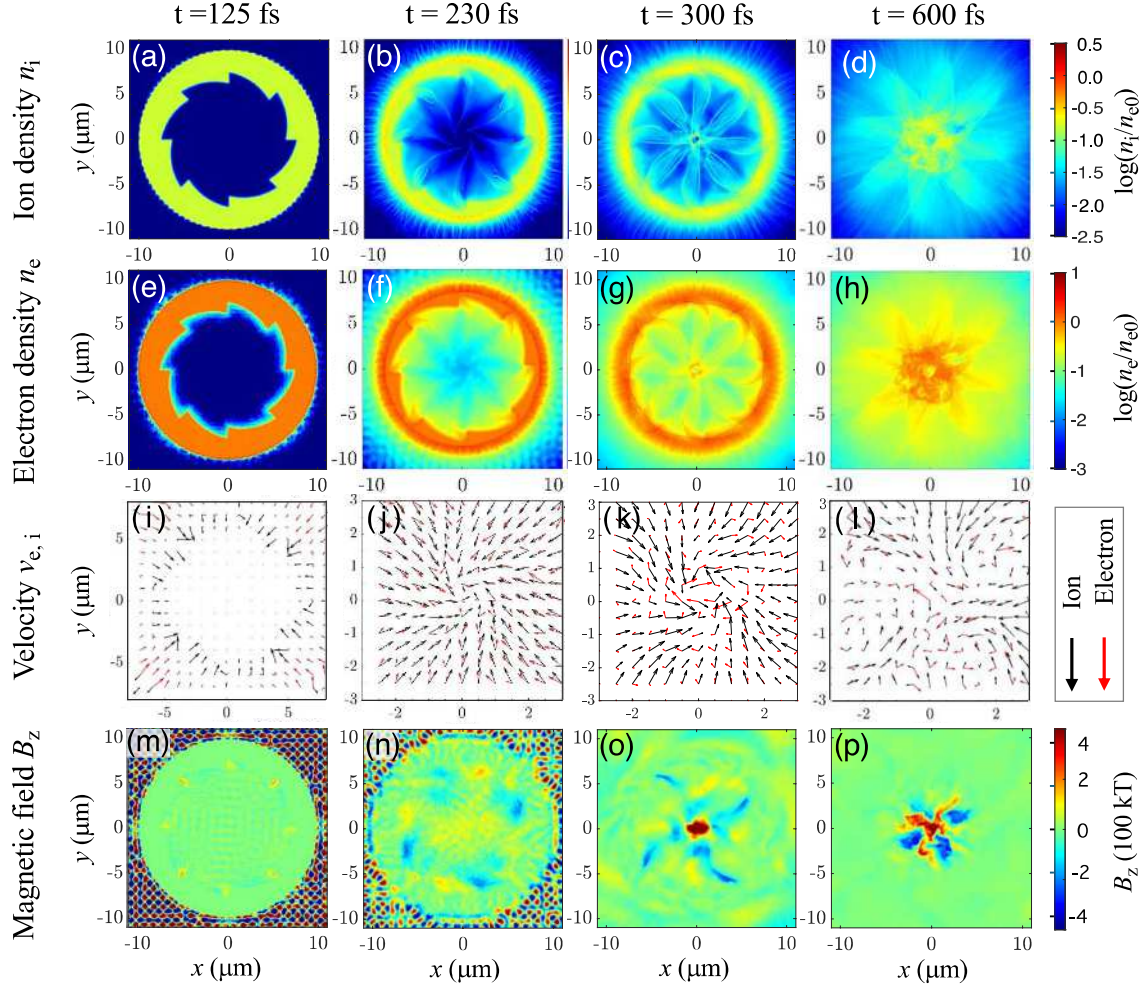


FIG. 3. Two-dimensional distributions of key physical quantities at four different times, under a laser pulse duration of $\tau_L = 100$ fs and peak time $t_p = 150$ fs. (a)–(d): ion density n_i ; (e)–(h): electron density n_e ; (i)–(l): Velocities of ions (black arrows) and electrons (red arrows), showing anticlockwise ion motion and clockwise electron motion in the central region, resulting in the same anticlockwise current generation. This converging vortex pattern forms the core of the stagnation structure.; (m)–(p): axial magnetic field B_z .

arises through a self-consistent positive feedback mechanism. Specifically, the initial loop current amplifies the central magnetic field, which in turn constrains the motion of charged particles more tightly via the Lorentz force—thereby reinforcing and further intensifying the loop current itself.

C. Magnetic field formation

Figure 4 shows the energy spectra of ions and electrons at two different times before ($t = 200$ fs) and after ($t = 300$ fs) the collapse of converging plasma at the center. The electron energy spectra at the both times are found to be well fitted by the Maxwell distribution with a

temperature of $T_e \simeq 13$ MeV (compare the fitted curve). This electron temperature can be well explained by the ponderomotive scaling¹⁴, i.e., $T_e(\text{MeV}) \approx 14\sqrt{I_{L21}\lambda_{L\mu m}^2}$, where I_{L21} and $\lambda_{L\mu m}$ are the laser intensity and the laser wavelength in units of 10^{21} W/cm² and μm , respectively. The scaling reads $T_e \sim 11$ MeV by applying $I_L = 10^{21}$ W/cm² and $\lambda_L = 0.8\mu\text{m}$. Besides, the high energy tail of the ion distribution is also found to have a similar temperature, $T_i \simeq 13$ MeV. While the ion temperature and the electron temperature are kept close to each other in the implosion phase ($t = 200$ fs), i.e., $T_e \approx T_i$, the kinetic energy of an imploding ion increases in time due to adiabatic expansion. The implosion velocity v_{imp} is then roughly estimated to reach the order of the sound speed, i.e., $v_{imp} \sim (1 - 2)c_s \sim (2.5 - 5.0) \times 10^9$ cm/s,

where the sound speed $c_s = \sqrt{ZT_e/m_i}$ is calculated with the aid of $T_e = 13$ MeV. The estimates well explain the obtained simulation result, $v_{\text{imp}} \sim 4 \times 10^9$ cm/s, and the corresponding kinetic energy of carbon ions $\mathcal{E}_{\text{imp}} \sim 100$ MeV.

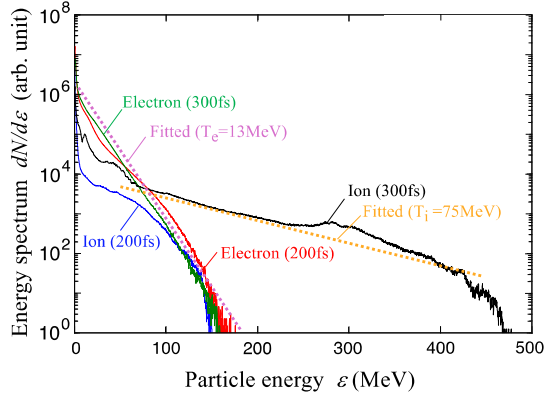


FIG. 4. Energy spectra for ions and electrons, corresponding to the two different times - slightly before ($t = 200$ fs) and slightly after ($t = 300$ fs) the rising of the strong magnetic field at the center. Figure 3 shows the corresponding 2D maps of key physical quantities at the two respective times.

Meanwhile, the ion energy spectrum at $t = 300$ fs in Fig. 4, corresponding to $T_i \approx 75$ MeV (compare the fitted curve) for the energy range $100 \text{ MeV} \lesssim \varepsilon \lesssim 400$ MeV, makes a striking contrast to the ion spectrum at $t = 200$ fs. This strong heating of ions and the generation of strong magnetic field at the center coherently occur. In other words, when the imploding ions are passing by the closest points to the center, the local density quickly increases to reach the same order of the solid density, and at the same time strong currents induced by both the ions and electrons generate the ultrahigh magnetic fields. The magnetic fields thus generated then trap the ions, which convert a substantial amount of their own imploding kinetic energy into thermal energy via ion-ion collisions. As a result, the ions remain tightly trapped by the self-generated magnetic field on the order of sub-megatesla, and are confined in this region for a duration exceeding a few picoseconds, which is substantially longer than the pulse duration of the applied laser (~ 100 fs).

The generation and saturation of the axial magnetic field can be interpreted as a feedback loop: ion and electron flow induced by the blades drive azimuthal currents, which generate axial magnetic fields, compressing the plasma further. This positive feedback continues until the system reaches a saturated state.

As the self-generated axial magnetic field increases, the Larmor radii of both electrons and ions shrink, confining their transverse motion more tightly around the axis. This magnetic confinement effectively compresses the plasma into a narrower region, thereby increasing the local current density and enhancing the magnetic field.

III. CONCLUSION

We have proposed and validated a novel target design—the bladed microtube (BMI) scheme—for the generation of gigagauss-level magnetic fields using laser-plasma interaction. The introduction of periodic blade structures induces a geometric asymmetry that breaks the symmetry of electron and ion flows, resulting in the formation of a strong loop current and the subsequent generation of an intense axial magnetic field.

Particle-in-cell (PIC) simulations have demonstrated that this geometry-driven mechanism can self-consistently amplify magnetic fields up to 450 kT without requiring any external seed field. An analytic model was developed to interpret the underlying dynamics and predict scaling laws, revealing a feedback loop between magnetic confinement and current enhancement.

This BMI concept opens a new path to compact, laser-driven, strongly magnetized plasmas, with potential applications ranging from inertial confinement fusion and laboratory astrophysics to high-field material science. The present study thus lays a robust theoretical and computational foundation for future experimental implementations.

REFERENCES

- ¹G. Gregori, B. Reville, and F. Miniati, *Physics Reports* **601**, 1 (2015).
- ²V. Prat, S. Mathis, B. Buysschaert, J. Beeck, D. Bowman, C. Aerts, and C. Neiner, *Astronomy & Astrophysics* **635**, A106 (2020).
- ³K. Li, Z. Liu, Y. L. Yao, Z. Zhao, C. Dong, D. Li, S. Zhu, X. T. He, and B. Qiao, *Nuclear Fusion* **62**, 076008 (2022).
- ⁴W. Chen and Z. Wang, *Chinese Physics Letters* **37**, 125001 (2020).
- ⁵L. Comisso, G. R. Farrar, and M. Muzio, arXiv:2401.08913 (2024), preprint.
- ⁶Z.-Q. Huang, B. Reville, J. Kirk, and G. Giacinti, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **524**, 1731 (2023).
- ⁷H. Feng, Z. Zhou, Y. Wu, Z.-J. Gao, Y. Liang, N. Huang, L. Yan, H. Deng, Y. Du, R. Li, W. Lu, W. Huang, and C. Tang, *Physical Review Applied* **15**, 044032 (2021).
- ⁸M. Murakami, J. J. Honrubia, K. Weichman, A. V. Arefiev, and S. V. Bulanov, *Scientific Reports* **10**, 16653 (2020).
- ⁹Y. Gu and M. Murakami, *Scientific Reports* **11**, 23592 (2021).
- ¹⁰A. D. Sakharov, *Soviet Physics Uspekhi* **9**, 294 (1966).
- ¹¹O. V. Gotchev, J. P. Knauer, P. Y. Chang, D. D. Meyerhofer, and R. Betti, *Physical Review Letters* **103**, 215004 (2009).
- ¹²J. P. Knauer, O. V. Gotchev, P. Y. Chang, D. D. Meyerhofer, and R. Betti, in *51st Annual Meeting of the APS Division of Plasma Physics* (Atlanta, GA, USA, 2009) abstract available at <https://meetings.aps.org/Meeting/DPP09/Session/GP8.43>.
- ¹³T. D. Arber, K. Bennett, C. S. Brady, A. Lawrence-Douglas, M. G. Ramsay, N. J. Sircombe, P. Gillies, R. G. Evans, H. Schmitz, A. R. Bell, and C. P. Ridgers, *Plasma Physics and Controlled Fusion* **57**, 113001 (2015).
- ¹⁴S. C. Wilks, W. L. Kruer, M. Tabak, and A. B. Langdon, *Physical Review Letters* **69**, 1383 (1992).

第一原理計算を用いた非調和フォノン特性データベースの構築

大西 正人

統計数理研究所 先端データサイエンス研究系

1. はじめに

フォノンは原子の集団振動であり熱輸送特性に大きな影響を及ぼす。一方、フォノンは電子、マグノン、フォトンなどと相互作用することにより、熱物性以外にも電気、磁気、光学、機械特性などに影響を及ぼす。近年、マテリアルズ・インフォマティクス (MI) 技術が急速に発達しており、情報科学と材料科学を融合した様々な材料開発手法により、電池、触媒、磁性材料などに関する物性において成果が挙げられている。また無機材料のデータベースとして Materials Project、AFLOW、AtomWork などの従来のデータベースに加え、2023 年末頃から DeepMind[1]、META[2]、Microsoft[3]などが超大規模データベースを発表するなどデータ量の増強も加速している。しかし、特に従来のデータベースでは、主に電子物性（バンドギャップ、電子バンド構造等）をまとめたものであり、熱機能材料に関しては熱伝導率などのフォノン非調和物性のデータが不足している。

非調和フォノン物性の計算には多数の超格子構造の力計算が必要であるため計算コストが高くなるが、近年の計算能力の発達と HPCI を含めた我が国の優れた計算環境により、非調和フォノン特性の大規模計算も可能になってきた。そこで申請者らは世界中の共同研究者と協力して、非調和フォノン特性の解析プロセスの標準化とそれを組み込んだ自動化計算ソフトウェアの開発、さらにそれを利用した非調和フォノン特性データベース構築を進めている。本年度は、自動計算によるデータベースの構築を進めながら、構築したデータベースと機械学習を用いたスペクトル熱伝導率などの非調和フォノン特性の予測モデル構築を進めた。過去の自動計算も合わせ、約 6,000 材料の非調和フォノン特性の計算に成功し、この

データとグラフニューラルネットワークを用いた非調和フォノン特性の予測を行った。また、構築した予測モデルを用い、DeepMind が発見した約 38 万の新材料データベースから低熱・高熱伝導材料のスクリーニングを行うことで、高性能な熱機能材料の候補材料を特定した。

このように、本研究で構築した非調和フォノン特性データベースを用いることで、高精度な非調和フォノン特性の予測が可能であることを示した。今後は、電子・フォノン相互作用や高次の非調和フォノン相互作用などを考慮したデータを追加することで、より広範囲な材料開発への発展が期待できる。

2. 第一原理非調和フォノン特性解析

本研究では図 1 に示すような、第一原理非調和フォノン特性解析プロセスを自動化した[4]。まず、与えられた任意の結晶構造の基本単位胞 (primitive cell)、慣用単位胞 (conventional cell)、超格子構造 (原子数 150 個以下) を決定する。次に、フォノン計算では力の計算精度が重要なため、複数ステップの構造緩和計算を行う。このように用意した構造を用いてフォノン特性を計算する。複素周波数が発生した場合は、さらに厳しい構造緩和計算、大きな超格子構造の利用、4 次の非調和効果によるフォノン繰り込みの考慮などを行う。これまでの自動計算ではフォノン繰り込みは考慮しておらず、最も基本的な計算方法である、

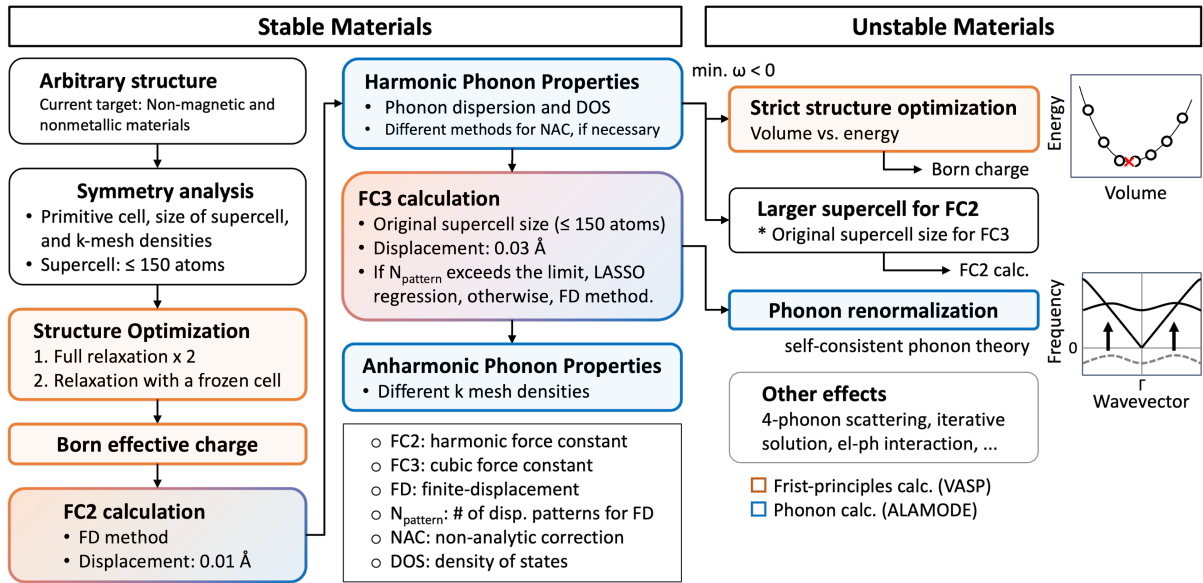


図 1. 自動化した第一原理フォノン計算プロセス

緩和時間近似を用いてボルツマン輸送方程式を解くことで 3 フォノン散乱の散乱頻度を計算している。対象とした材料は、Phonondb に含まれる全て材料と Materials Project に含まれる材料のうち非金属・非磁性材料で合わせて 21,452 材料であり、そのうち約 6,000 材料の非調和フォノン特性の計算が終了している。

上記の第一原理フォノン特性解析には、第一原理計算に VASP [5]、フォノン計算には ALAMODE[6] を用いており、Python を用いた自動化や結晶構造の操作には、ASE[7]、Pymatgen[8]、Spglib[9]、Pymatgen[8]、Phonopy[10, 11]、Custodian[8]、SeeK-path library[9, 12] などの Python ライブラリを利用している。

3. 計算結果と考察

3-1. 深層学習スケーリング則

自動計算により得られた約 6,000 材料の非調和フォノン特性のデータセットと機械学習を用いて格子熱伝導率 (κ_p : p は粒子性を表す添字) の予測をした。機械学習には CGCNN (crystal graph convolution neural network) [13] を用いた。学習データに用いるデータ数を変化させた時に、データ

サイズと誤差 (mean absolute error) をプロットしたところ図 2(a)左図のように、対数プロットで直線となるようなスケーリング則 [14] が確認された。スケーリング則は $(MAE) = (A/N_{\text{train}})^{\alpha}$, ($A, \alpha > 0$) と表されるが、今回観察されたスケーリング則の強さ (係数 α) は 0.125 であり、大規模言語モデル (0.095) [14] や結晶材料の力の予測 (0.21) [1] で得られたスケーリング係数と同程度の値となった。

それぞれのデータ数に対する第一原理計算と予測値を比較したところ、図 2(a)右図に示すように、予測値と計算値がよく一致していることが分かる。データ数が多いほど計算値と予測値が一致する線 (黒線) 上にデータが集まっており、データ数の増加に伴う予測精度の向上が確認できる。

スケーリング則が観察されたことは、データ数を増加させると誤差が減少を続けることを意味しており、今後のさらなるデータ数増強による予測精度向上が期待される。一方で、例えば、MAE を 0.2 まで減少させるためには、200,000 材料以上の非調和フォノン特性のデータが必要になる。この計算コストは現在利用している、全て第一原理計算で力の計算をする手法では現実的ではなく、今後は機械学習ポテンシャルを利用したデー

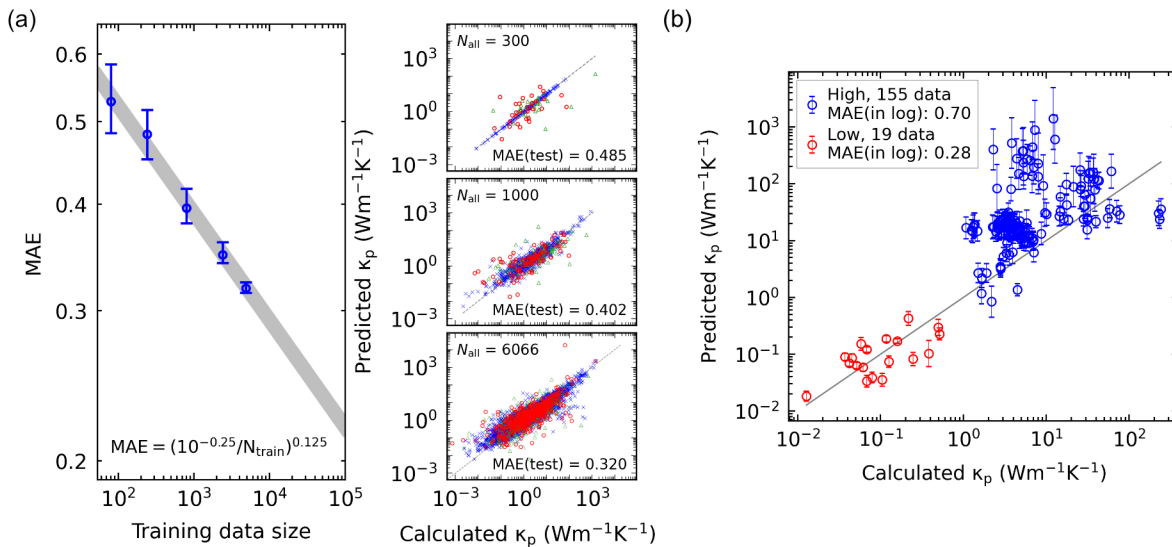


図 2. 構築した非調和フォノンデータベースを用いた格子熱伝導率の予測。(a) スケーリング則の実証。学習データサイズを変化させた時の平均誤差 (mean absolute error, MAE) の変化(左)。MAE は $\log \kappa_p$ に対して計算した値であり、エラーバーは 20 回のアンサンブル平均の 90%信頼度を表す。灰色の線は図中に記載したフィッティング曲線である。異なるデータ数における第一原理計算値と予測値のパリティプロット (右)。データ数がデータ数が多い場合に、計算値と予測値が一致する直線周りにデータが集中していることが分かる。青、赤、緑のマーカーは、それぞれ学習 (training)、検証 (validation)、テストデータの結果である。(b) 予測モデルと DeepMind の GNoME データベースを用いたスクリーニングの結果。

タ数増強も検討する必要がある。

3-2. 低熱・高熱伝導材料の探索

上記のように GNN を用いて構築した予測モデルを適用して、DeepMind の 38 万の新材料結晶構造データベース[1]から低熱・高熱伝導材料をスクリーニングした。その際の予測結果と予測後に第一原理計算をした値を比較すると、図 2(b) に示すように、高熱・低熱伝導材料の分類は可能であることが確認できた。また、低熱伝導材料 (赤いプロット) では MAE (mean absolute error) が 0.28 となり、6,000 材料全て使った場合 (MAE ≈ 0.32) よりも予測精度が高かった。一方で、高熱伝導材料 (青いプロット) では MAE が 0.70 となり予測精度が低くなった。どちらの場合も、予測がより低いあるいは高い材料に着目していることから、平均の予測精度よりは悪くなることは問題ない。その上で、高熱伝導に関しては、今回

の計算では 4 フォノン散乱の影響を考慮していないことから、学習データの理論値に誤差が乗りやすいことが原因で、予測値が実際の値を過大評価しやすいと予測される。

いずれにしても、本課題では、6,000 材料といった大規模データを用いることで、熱機能性材料の予測が可能になることを実証に成功した。今後は、熱伝導率などのスカラー値だけでなく、モード依存のフォノン緩和時間など複雑なフォノン特性の予測も進める予定である。

4. おわりに

本プロジェクトは 2022 年頃から始めたものであり、ようやくある程度の量のデータが集まり機械学習を行うことが可能になった。本報告書には熱伝導率の値のみを記載したが、構築したデータベースを用いてスペクトル熱伝導率やフォノン分散の予測も可能である。これらをまとめた成果

は近日中に学術論文として投稿予定であり、構築したデータベースも併せて公開予定である。今後は、高次の非調和ポテンシャルの考慮や電子・フォノン相互作用などのデータも追加する予定である。データ数の増強には機械学習ポテンシャルの利用も検討しているが、これらの特性を精度良く解析するには現状では第一原理計算が必要となる。構築したデータベースは熱物性のみではなく、電子・磁気・光学・機械物性など様々な分野の材料開発に貢献すると期待される。

参考文献

- (1) A. Merchant et al., *Nature*. **624**, 80–85 (2023).
- (2) L. Barroso-Luque et al., *arXiv* (2024), doi:10.48550/arxiv.2410.12771.
- (3) J. Li et al., *arXiv* (2025), doi:10.48550/arxiv.2503.11568.
- (4) M. Ohnishi et al., (2025), doi:10.48550/arxiv.2504.21245.
- (5) G. Kresse and J. Furthmüller, *Phys. Rev. B*. **54**, 11169–11186 (1996).
- (6) T. Tadano et al., *J. Phys.: Condens. Matter*. **26**, 225402 (2014).
- (7) A. H. Larsen et al., *J. Phys.: Condens. Matter*. **29**, 273002 (2017).
- (8) S. P. Ong et al., *Comput. Mater. Sci.* **68**, 314–319 (2013).
- (9) A. Togo et al., *Sci. Technol. Adv. Mater.: Methods*. **4**, 2384822 (2024).
- (10) Togo et al., *J. Phys.: Condens. Matter*. **35**, 353001 (2023).
- (11) Togo, *J. Phys. Soc. Jpn.* **92**, 012001 (2023).
- (12) Y. Hinuma et al., *Comput. Mater. Sci.* **128**, 140–184 (2017).
- (13) T. Xie and J. C. Grossman, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 145301 (2018).
- (14) J. Kaplan et al., *arXiv* (2020), doi:10.48550/arxiv.2001.08361.

超臨界地熱発電を志向した超臨界地熱環境下での 人工地熱貯留層造成シミュレーション

緒方 奨

大阪大学 大学院工学研究科

1. はじめに

日本は世界第三位の地熱賦存量を誇る地熱資源大国であり、そのポテンシャルは約 2300 万 kW と非常に高く、世界最高水準に位置する。このような豊富な資源を使用する地熱発電は普及が渴望されるエネルギー源である。しかし、現状として日本の総発電量に占める地熱発電の割合はわずか 0.3% にとどまり、ほとんど普及していない。近年、このような状況を背景に、地熱発電の促進を目的とした地熱増産システム（Enhanced Geothermal System: EGS）の研究開発が活発化している。その中でも特に、貯留層造成型 EGS は、深度約 2~5km に存在する高温岩体（Hot Dry Rock: HDR）を人工的に改変し、地熱貯留層として機能させる技術である。地熱貯留層とは、発電に必要な熱エネルギーを持ち、透水性が確保され、水を保持できる地質構造を指す。このような地熱貯留層を人工的に造成する手法の一つに水圧破砕（Hydraulic Fracturing）がある。これは、高圧の流体を岩体に注入し、亀裂を形成することで水の流れを促進し岩体の透水性を向上させる技術である。こうして形成された亀裂群が地熱貯留層として機能し、効率的な地熱回収が可能となる。また、水圧破砕手法の中でも高い有効性が確認されているのが粘性の低い超臨界流体（超臨界 CO₂ や超臨界水）を活用した破砕である。例えば、既往の室内実験[1][2]から、特に高温環境下での超臨界 CO₂ を用いた破砕により複雑な三次元的亀裂ネットワークが形成されるため、熱交換面積が大きく抽熱に有利な地熱貯留層が造成できる可能性があることが報告されている。そのため、このような超臨界 CO₂ を用いた破砕を貯留層造成 EGS にも適用する方針が検討されつつある。しかし、地下深部での水圧破砕法の一回当たりの実施コス

トは非常に高価（少なくとも数億~数十億円程度）となるため、大規模な実岩体が対象となる実施工の場合、上述した既往の室内実験[1][2]等で確認されている様な複雑な亀裂ネットワークが十分に発達・連結し、発電に供し得る大規模貯留層が形成され得る可能性があるのか、といった点を数値解析により事前予察しておくことが極めて重要となる。しかし、超臨界流体による破砕プロセスを実岩体規模で計算可能な数値シミュレータはこれまで開発されておらず、上述した様な事前予察は未だ実現していない。

そこで本研究では、超臨界流体（超臨界 CO₂）を用いた破砕プロセスを実岩体規模で計算可能な解析コードを新たに開発し、超臨界 CO₂ を用いた人工貯留層造成過程に対する数値シミュレーションを実現することを目的とする。これにより、超臨界 CO₂ を用いた場合の人工貯留層造成過程を仮想の計算機空間上で表現可能となり、これまでは室内実験規模のみで観察されてきた複雑な亀裂ネットワークが発電に供し得る大規模貯留層（メートル規模）を形成し得るのかどうかといった点を検討する。

2. 開発したシミュレータの概要

超臨界流体圧入に伴う岩石破砕過程を計算するシミュレータは力学-水理連成型であり、シミュレータを構成する力学計算（岩石の変形・亀裂発生進展過程の計算）と水理計算（岩石実部・亀裂部における単相・二相流体の流動計算）のそれぞれにおける計算性能を 3 次元でのより大規模な数値解析に供し得るレベルへと向上させた。具体的には、力学計算で用いている解析手法である陽解法ベースの ECZM -FEM（Extrinsic Cohesive Zone Model : ECZM を導入した FEM）と、水理計

算で用いている解析手法である陰解法ベースの DFM-FEM (Discrete Fracture Matrix : DFM モデルを導入した FEM) をそれぞれ、GPU (Graphics Processing Unit) による並列計算と CPU (Central Processing Unit) による並列計算によって高速化させた。なお、ECZM は要素分離を伴う亀裂発生進展計算に用いられる代表的な結合力モデルの一種であり、DFM は亀裂部要素と岩石実部要素の双方での流体流動を計算可能な離散亀裂ネットワークモデルの一種である。また、従来の一般的な ECZM と DFM を用いて岩石破碎解析を行う場合は、シミュレーション中に亀裂が発生するたびに新たに亀裂面要素を挿入するという煩雑なリメッシュ作業が必要であり、このような逐次的処理は並列計算の高速化を大きく妨げる要素となる。これを鑑み本研究では、リメッシュを必要としない独自の亀裂面挿入アルゴリズムを導入した ECZM と DFM を用いている。リメッシュを必要としない ECZM の詳細については既報 [3] を参照されたい。また、GPU 並列計算と CPU 並列計算においては、複数枚の GPU カード及び複数個の CPU コアに基づく複数マシン間 (分散メモリ型) での並列計算に対応可能な形へとプログラムコードを改良 (分散メモリ型に適した並列計算規格である MPI : Message Passing Interface に基づき改良した) しており、スパコン上でも問題なく実行可能である。なお、上述した様に、要素分離可能な三次元亀裂発生進展解析手法に対して、複数枚の GPU カードを用いた高性能並列計算の実装に成功した事例は国際的にも稀有であり、岩石破碎シミュレーションツールとして高い優位性を有している。また、搭載した並列計算の性能を検証するため、GPU を 1 枚、2 枚、4 枚と変更して同一の 3 次元破碎解析を実施したところ、GPU1 枚の場合に対し 2 枚で平均 2.0 倍、4 枚で平均 3.5 倍の高速化を示しており、GPU 枚数に応じた良好なスケーラビリティを確認できた (図 1)。

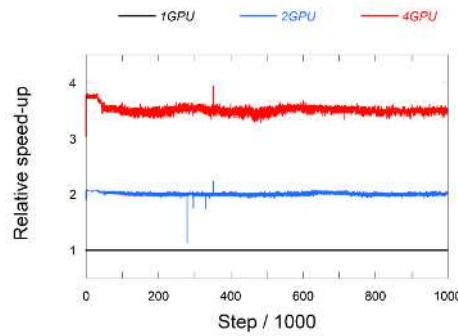


図 1: 3 次元破碎解析実行中の GPU1 枚の場合の計算速度と 2 枚、4 枚の場合の計算速度の比

3. 数値シミュレーションの事例

3.1 数値シミュレーションの妥当性検証

実験との比較より開発シミュレータの妥当性を検証するため、東北大で実施された大型の火山岩サンプルに対する真三軸応力下における超臨界 CO₂ 水押破碎実験の数値解析を行った。

具体的には、温度が 150℃、鉛直応力 σ_v が 50MPa、最大水平応力 σ_{Hmax} が 35 MPa、最小水平応力 σ_{Hmin} が 20 MPa の条件において実施された、一辺 10 cm の立方体状の江持安山岩サンプル (直径 1 cm、長さ 10 cm のボアホールを有する) に対する水飽和状態からの超臨界 CO₂ 水押破碎実験を模擬した数値解析を実施した。解析領域は実験で用いたサンプル (10 cm×10 cm×10 cm の立方体、中央に直径 1cm、長さ 10 cm のボアホール) を模擬した 3 次元モデルを設定し、外端境界には、実験同様に鉛直応力 σ_v を 50MPa、最大水平応力 σ_{Hmax} を 35 MPa、最小水平応力 σ_{Hmin} を 20 MP 与えた (図 2)。また、実験同様にボアホール中央の長さ 10 mm の区間を破碎流体圧入区間に設定した (図 2 中の赤色領域)。破碎流体圧入区間からの流体注入については、実験では CO₂ の水押開始から後押水 (粘度が約 100 mPa・s の 0.25 wt% のスクレログルカン水溶液) がボアホールに到達する約 7 秒までは超臨界 CO₂ のみが圧入され、それ以降は後押水が岩石内に圧入されていることを考慮した設定を行った。

具体的には、超臨界 CO_2 の水押開始後 7s 以前では圧入区間内の円孔壁面境界における超臨界 CO_2 の飽和度を 1 とし、それ以降では飽和度を 0 に規定するという条件を設定した。また、圧入区間での注入圧 P_{in} [MPa]については、実験におけ

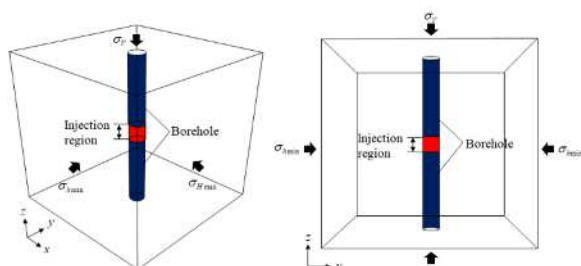


図 2: 解析モデルにおける拘束応力条件

表 1: 解析に用いたパラメータの

パラメータ名	設定値
孔隙率 [%]	23.5
浸透率 [m^2]	3×10^{-16}
ヤング率 [GPa]	8.0
ポアソン比 [-]	0.2
引張強さ [MPa]	5
粘着力 [MPa]	20

る注入圧の時間履歴をトレースした近似関数を圧入区間内の円孔壁面境界に与えることで表現した。解析領域内の温度は一律に 150°C の等温条件、初期の岩石内の間隙流体圧は一律 10MPa とし、間隙内は増粘されていない水で飽和されている設定とした。解析モデルの物性値には、これまでに計測済みの江持安山岩の物性値[4]を適用した(表 1)。

以下、数値解析より得られた結果を紹介する。解析において亀裂がサンプル外端に到達した時点(注入開始後 7.4 s)での、岩石サンプル内の三次元的な亀裂造成形態についての実験と解析結果の比較を図 3 に、岩石サンプル内の鉛直方向中央深度の断面における亀裂造成形態についての実実験と解析結果の比較を図 4 に示す。図 3 より数値解析では、三次元的な亀裂造成形態をよく再

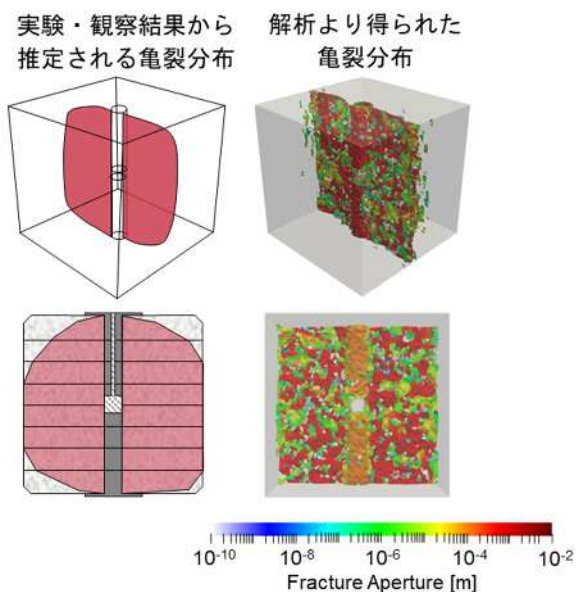
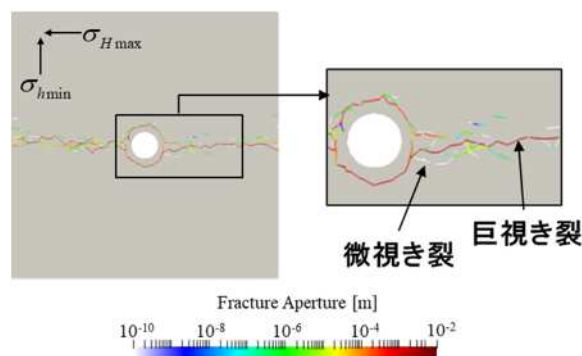


図 3: 岩石サンプル内の三次元的な亀裂造成形態の比較



(a) 数値解析より得られた江持安山岩サンプル断面内の亀裂の開口幅分布



(b) 実験で観察された江持安山岩サンプル断面の亀裂形態

図 4: 岩石サンプル断面の亀裂造成形態の比較

現できていることが確認できる。また、図 4 より、岩石サンプル内の二次元断面で見た場合でも亀裂進展方向に加え、巨視亀裂周辺に複数の微視亀裂が形成されているという点など、実際の亀裂形態を数値解析により再現できていることが確認

され、開発したシミュレータの岩石破碎プロセスに関する妥当性が確認された。

3.2 メートル規模の実岩体を想定した破碎解析

続いて、 $1\text{m} \times 1\text{m} \times 50\text{cm}$ の規模の岩体を想定した破碎解析を行った。対象とする破碎問題は、水飽和した岩体における超臨界 CO_2 の圧入による破碎とした。解析で用いた有限要素メッシュを図5に示す。注入域については集中的な亀裂が造成されることが予想されるため、円孔から半径 10cm 以下の領域では要素サイズを 5mm 以下に設定し、半径 30cm 以上の領域については最大要素サイズが 10mm となるように設定した。円孔から半径 $10 \sim 30\text{cm}$ の領域については $5 \sim 10\text{mm}$ の遷移域となるように設定した。作成された有限要素メッシュは四面体で作成され、要素数約 300 万、節点数約 50 万となった。なお、解析では超臨界 CO_2 の注入流量は 50 mL/min とした。

以下に得られた解析結果を紹介する。円孔境界の間隙水圧の平均値の時間推移を図6に、岩体中の亀裂造成形態を図7に示す。超臨界 CO_2 の粘性の低さに起因し、超臨界 CO_2 を用いた破碎では注入開始後早い段階（ 12 秒段階）で急激に円孔内の流体圧が低下しており（図6）、この圧力低下により図7の様に岩体内の亀裂進展に伴う人工貯留層の造成規模の拡大が抑制される可能性が明らかになった。

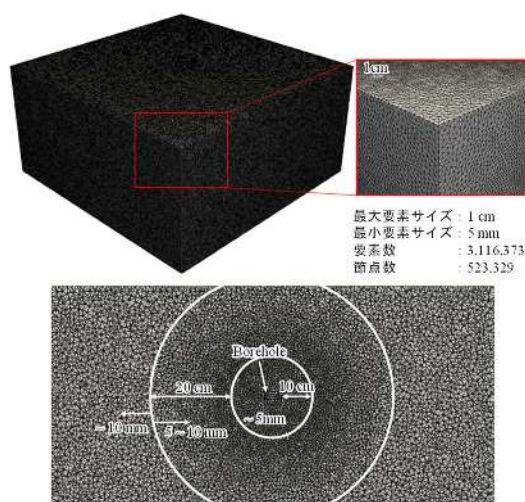


図5：解析に用いた有限要素モデルとメッシュ

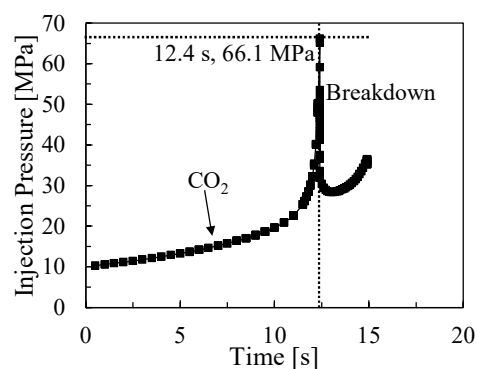


図6：解析より得られた円孔圧の時間推移

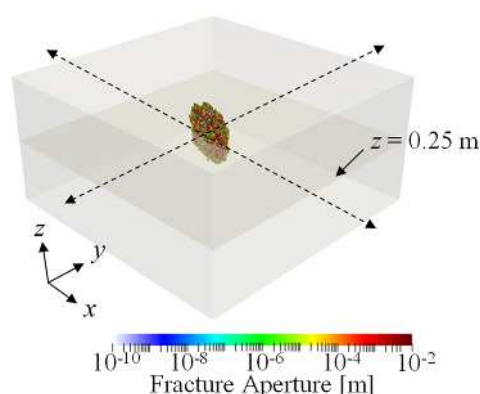


図7：円孔圧低下後の亀裂進展分布

4. おわりに

本研究では、超臨界 CO_2 を用いた破碎プロセスを実岩体規模で計算可能な解析コードを新たに開発し、超臨界 CO_2 を用いた人工貯留層造成過程に対する数値シミュレーションを実施した。その結果、超臨界 CO_2 の粘性の低さに起因し、超臨界 CO_2 を用いた破碎では注入開始後早い段階で注入圧が低下しやすいため、亀裂が進展しづらく岩体中での大規模な人工貯留層を造成することが困難である可能性が明らかになった。

参考文献

- (1) X. Zhang, et al., Fuel, **190**,370-378, (2017)
- (2) Z. Zhao, et al., J. Pet. Sci. Eng., **166**, 739-746, (2018)
- (3) Y. Maeda, et al., Comput. Geotech., **166**, 105942, (2024)
- (4) K. Takuma, et al., Geothermics, **120**, 103007, (2024)

生成座標法に基づく核分裂の微視的記述

鶴沢 浩太郎

京都大学 大学院理学研究科

1. はじめに

核分裂は原子核が大きく変形して分裂する現象である。分裂時に発生する大きなエネルギーは原子力エネルギーとして利用されているほか、分裂時に生成される不安定な原子核は RI ビームを生成するための主要な方法の一つである。以上のような工学的な重要性に加え、r 過程と呼ばれる天体中での元素合成過程では、中性子過剰なアクチノイド原子核の核分裂特性が元素合成の収率に大きく影響することが知られている。これらの目的のためにも核分裂現象の正確な理解と精度の良い理論予測が必要とされている。

2. 核分裂の微視的定式化

原子核は陽子と中性子の複合体であるため、核分裂現象を記述するためには陽子と中性子の多体系に対するシュレディンガー方程式を解く必要がある。しかし、核分裂においては

- ① 原子核の形状が大きく変化するため摂動論や線形応答理論を適用できない
- ② 集団運動と一粒子運動の間に発生する複雑な相互作用の取り扱いが困難
- ③ 原子核の変形を記述する核構造理論の結果を核分裂断面積にコヒーレントに接続する方法が確立していない

という課題があった。これらの問題を解決するため、本研究では生成座標法+非平衡グリーン関数法に基づく核分裂モデルを開発した [1]。非平衡グリーン関数法はナノデバイスにおける電流やコンダクタンスを微視的に計算するために使われる手法である。文献[2]では非平衡グリーン関数法の核分裂反応への適用可能性が指摘された。しかし、現実の核分裂

では原子核が高エネルギーに励起するため、自由度が膨大になり、数値計算が不可能であると考えられていた。本研究では以下で述べる定式化上の工夫と数値計算手法の改良によって、235 ウランの核分裂断面積の微視的計算を初めて実現した。

3. 非平衡グリーン関数法の計算ステップ

3.1 基底の生成とハミルトニアン行列の計算

核分裂の過程では原子核の変形と内部励起の効果を取り入れることが重要となる。そのためハートリーフォック波動関数 $|HF(Q, E)\rangle$ を用いて多体の波動関数 $|\Psi\rangle$ を以下のように用意する：

$$|\Psi\rangle = \int_{Q=14b}^{Q=83b} dQ \int_0^{E_{max}-V(Q)} dE f(Q, E) |HF(Q, E)\rangle \dots (1)$$

図1は式(1)で定められた模型空間を表したものであり、変形度 Q ごとに、 E_{max} までの励起状態を基底として採用している。

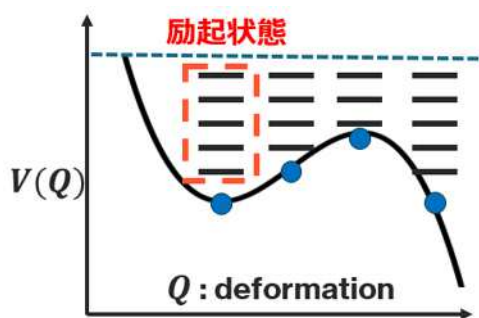


図1：模型空間の模式図

以上の定式化により、変形と励起の効果を整合的に取り入れている。

続いて、生成座標法[3]の手続きに従い、基底間の重なり行列 N とハミルトニアン行列 H を計算する：

$$N_{ij} = \langle Q, E | Q' E' \rangle \dots (3)$$

$$H_{ij} = \langle Q, E | H | Q' E' \rangle \dots (4)$$

3.2 グリーン関数と核分裂断面積

非平衡グリーン関数法では行列 N, H を用いてグリーン関数

$$G(E) = (EN - H)^{-1} \dots (5)$$

を計算する。ここで、 E は励起エネルギーを表す外部パラメータであり、 -1 は逆行列計算を表す。グリーン関数を用いて、核分裂断面積は

$$\sigma_{n,f}(E_n) = \text{Tr}[G(E_n)\Gamma_n G^\dagger(E_n)\Gamma_{fis}] \dots (6)$$

と導かれる。ここで Γ_n と Γ_{fis} は H に含まれる崩壊幅行列である。核分裂断面積 $\sigma_{n,f}(E_n)$ は E_n の運動エネルギーをもつ中性子が入射した際に核分裂が起こる確率に相当する。なお、本研究で使用するハミルトニアン行列はランダム項を含むため、 $\sigma_{n,f}(E_n)$ を繰り返し計算し、アンサンブル平均をとる必要がある。

3.3 E_{max} の決定と核分裂断面積の収束性

式(1)で導入された E_{max} はエネルギーのカットオフを表し、 E_{max} が大きいくほど計算結果は正確になる。しかし、ハミルトニアン行列の次元は E_{max} の大きさに対し指数関数的に増加する。そのため、適切な値の E_{max} を決定する必要がある。図2は E_{max} と行列次元の関係をプロットしたものであり、核分裂における典型的なエネルギーでは $O(10^5)$ となる。

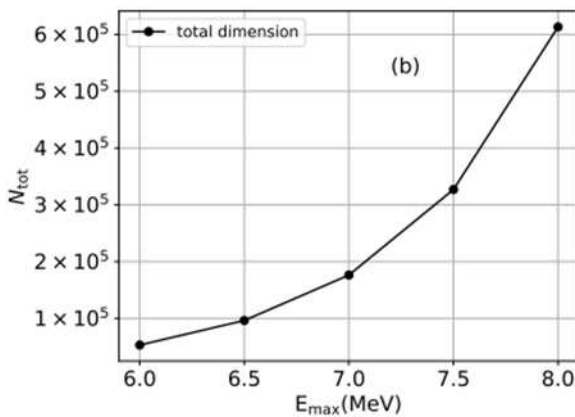


図2: E_{max} と行列次元の関係

このことから、 $O(10^5)$ 次元の線型方程式を繰り返し解き、サンプル数と E_{max} 両方に対し収束性を確認する必要がある。以上のような大規模な

数値計算は通常のスーパーコンピュータを使用しても困難である。

そのため、SQUIDのGPUノードの高い計算能力に着目し、以下の計算上の工夫を行った。

- ① 取り扱うハミルトニアン行列 H は巨大次元かつ疎行列であるため、GPUのメモリ上に直接載せることができる
- ② 式(2)の線型方程式のソルバーとして `cupyx.scipy.sparse.linalg.lsmr` を使用した。本ソルバーはクリロフ部分空間法的一种であるLSMR法のGPU実装であり、本研究で扱う行列に対し高いパフォーマンスを示す
- ③ SQUIDのGPUノードには8台のNVIDIA A100 GPUが搭載されているため、それらをMPI並列で使用することで、異なる乱数で得られる8サンプルを同時に計算した。

以上により現実的な時間内での核分裂断面積の計算を実現した。計算結果の詳細について次章で説明する。

4. 計算結果

図3に E_{max} を変化させ計算した $\sigma_{n,f}(E_n = 10\text{keV})$ を示す。

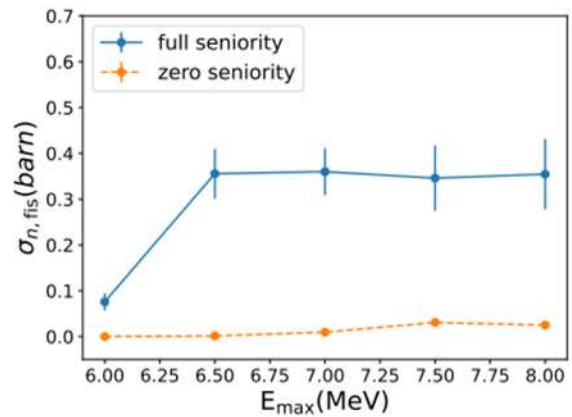


図3: E_{max} と $\sigma_{n,f}$ の関係

統計平均に使用したサンプル数は80である。青線が主要な計算結果であり、橙線は先行研究で使用されたzero-seniority近似を用いた場合であ

る。近似なしの計算結果（full seniority）と大きな差異があることがわかる。

この図から、 $7\text{MeV} \leq E_{\text{max}}$ の領域で断面積の値が収束しており、用いた模型空間が十分であることがわかる。 $E_{\text{max}} = 8\text{MeV}$ での断面積の値を JENDL-5[4]の評価値とともにプロットした結果が図4である。図から、計算結果と評価値のずれは1桁であることが確認できる。

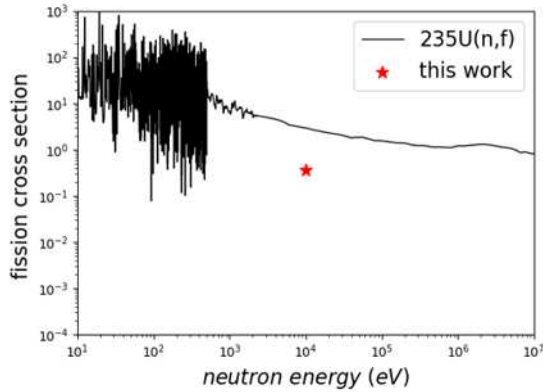


図4：本手法により得られた $\sigma_{n,f}$ と JENDL-5 の評価値との比較

5. おわりに

本研究課題では、核分裂断面積を微視的に導出するために、生成座標法＋非平衡グリーン関数法に基づく核分裂模型の定式化を行った。本手法ではグリーン関数を得るための逆行列計算に多大な計算コストが必要となるが、SQUID の GPU ノードに搭載されている NVIDIA A100 GPU を 8 台 MPI 並列で使用し LSMR 法で線型方程式を解くことで、核分裂断面積の計算を現実的な時間内で実現した。断面積の値は $7\text{MeV} \leq E_{\text{max}}$ の領域で収束することが確認でき、評価値との誤差は 1 桁であった。以上の結果は微視的なレベルで核分裂断面積を計算可能であることを示した初めての研究結果であり、今後の微視的核分裂理論の発展において重要な視点を与えられられる。

参考文献

- (1) K. Uzawa and K. Hagino, arXiv:2504.01572

(accepted in Phys. Rev. C).

- (2) Y. Alhassid, G. F. Bertsch, and P. Fanto, Annals of Physics 424, 168381 (2021).
(3) P. Ring and P. Schuck, The Nuclear Many-Body Problem (Springer-Verlag, Berlin, 2000).
(4) O. Iwamoto et al., Nucl. Sci. Technol., 60(1), 1-60 (2023).

Computational Exploration of π -4f Magnetic Interaction in the Excited-State Heterometallic Triple-Decker Porphyrinoid Lanthanide Complex

Anas Santria,^{1,2} and Naoto Ishikawa¹

¹Graduate School of Science, The University of Osaka

²Research Center for Chemistry, National Research and Innovation Agency

1. Introduction

In our previous reports, we established the existence and fundamental characteristics of magnetic interactions in mono- and bis-phthalocyanine/porphyrin lanthanide(III) complexes. [1] These interactions occur between the total angular momentum of the localized 4f system (**J**) and the orbital angular momentum generated from the cyclic π -conjugated system (**L**), henceforth referred to as the **J-L** interaction. Through combined MCD experiments and *ab initio* calculations, we observed that these interactions can exhibit either ferromagnetic- or antiferromagnetic-type, depending on the lanthanide ion (e.g., Ferromagnetic for Tb, Er, Yb; antiferromagnetic for Dy). The studies have mapped how **J-L** manifests in single- and double-decker structures and how ligand identity and coordination geometry affect the sign and magnitude of these interactions. [2] Building on this foundation, this work shifts its focus to a heterometallic, triple-decker phthalocyanine formulated as Pc_3LnY (where Ln^{3+} and Y^{3+} occupy metal sites). By introducing a diamagnetic Y^{3+} center in place of one of the metal sites, a system is created in which (a) Ln^{3+} experiences an altered coordination environment without magnetic disruption from the second metal ion and (b) the overall ligand field and π -electron delocalization framework are modified relative to the homometallic analogue. In this way, the Tb-Y system serves as an important bridge between our double-decker model and the more extensive ligand stack.

Here, our investigation focused on heterometallic triple-decker phthalocyanine complexes containing

terbium(III) and yttrium(III) to gain initial insights into photoinduced **J-L** interactions. By pairing Tb^{3+} with a diamagnetic Y^{3+} center in a three-layer phthalocyanine stack, we constructed a model system where the **J-L** character can be examined without the interference of additional 4f orbital contributions, and where the ligand field and π -electron topology evolve across the three phthalocyanine rings.

2. Computational Methods

The structure of TAP_3Y_2 (TAP = Tetraazaporphyrin (basic structure of phthalocyanine); Y = yttrium) was constructed using the Avogadro program. The geometry optimization process was carried out using Gaussian 16, revision C.01, at the B3LYP level of theory with Grimme D3 dispersion and Becke-Johnson damping. The basis set 6-31G(d,p) was utilized for C, H, and N atoms, while LANL2DZ basis sets were employed for the Y ion.

Multiconfigurational calculations were carried out using OpenMolcas version 24.10. ANO-RCC basis sets were applied to all atoms. The computational procedure involved a complete/restricted active space self-consistent field (CASSCF/RASSCF) calculation, followed by restricted active space state interaction (RASSI) and Single_Aniso modules analyses.

3. Results and Discussion

In this study, we extend our investigation of the magnetic interaction between the angular momentum generated by the localized 4f system, particularly the total angular momentum (**J**) of $\text{Ln}(\text{III})$ and the orbital angular momentum (**L**) of π -conjugated ligands, to the

triple-decker phthalocyaninato complex TAP_3TbY . This system is fascinating due to its extended π system, sandwich-type coordination, and the axial asymmetry introduced by the inclusion of the diamagnetic Y(III) ion in the middle layer. For comparison, we refer to the previously studied double-decker Pc_2Tb^- complex, which serves as a benchmark for evaluating the effect of sandwich layer expansion on the strength and properties of **J-L** interaction.

3.1 The Ground State Structure of TAP_3TbY

To establish a foundation for studying **J-L** interactions in the excited state of TAP_3TbY , we first determined its ground multiplet structure using CASSCF with an active space that contains seven 4f orbitals housing eight electrons, referred to as CAS(8,7). The geometric structure was derived from the optimized TAP_3Y_2 structure by substituting one Y with a Tb ion. In this calculation, seven roots of configuration interaction (CI) were employed, leading to forty-nine distinct electron configurations in the terbium 4f manifold. Notably, these seven 4f orbitals are positioned between occupied π orbitals (directly below) and unoccupied π orbitals (directly above), ensuring the 4f manifold remains well separated from the π ligand framework. This orbital arrangement serves as the basis for all subsequent analyses.

When examining the ground multiplet states of TAP_3TbY , we found a closely isolated $|\pm 6\rangle$ doublet at essentially zero energy (separated by only 0.004 cm^{-1}), composed of equal contributions of 50% $|+6\rangle$ and 50% $|-6\rangle$. This nearly pure $J_z = \pm 6$ character reflects the predominantly axial crystal field, albeit slightly weaker than its Pc_2Tb^- . The first excited doublet appears at 290.7 cm^{-1} and already shows a 50/50 mixture of $|+5\rangle$ and $|-5\rangle$, indicating the onset of J_z mixing at lower energies compared to Pc_2Tb^- (where the corresponding pure $|\pm 5\rangle$ state is located at 337.1 cm^{-1}). At 471.9 cm^{-1} , the next state consists of about 41% $|\pm 4\rangle$ and 18% $|0\rangle$, while the nearest level at 492.6

cm^{-1} is once again dominated (50%) by $|\pm 4\rangle$, indicating that the purity of $|\pm 4\rangle$ is only partially restored. Above this, at roughly 536 cm^{-1} , there are two nearly degenerate multiplets where $J_z = \pm 3$ and ± 1 are mixed in equal parts (25% each), and at 543.8 cm^{-1} , a balanced (50/50) $|\pm 2\rangle$ doublet appears. At 594.9 cm^{-1} , the first singlet with predominantly $|0\rangle$ character (82%) appears, accompanied by a minor $|\pm 4\rangle$ contribution, and two additional mixed multiplets near 626.7 cm^{-1} complete the low-lying multiplet.

Compared to Pc_2Tb^- , where each low-lying multiplet remains essentially a pure $|\pm J_z\rangle$ doublet up to nearly 800 cm^{-1} , the TAP_3TbY complex exhibits a smaller energy gap between $|\pm 6\rangle$ and its first excited multiplet, along with a significant mixing of the J_z components at intermediate energies. This difference indicates that the triple-decker TAP ligand field, while still largely axial, introduces a low-symmetry perturbation that reduces the crystal field splitting.

Having established the energy positions and wave function composition of the ground multiplet sublevels, we can now proceed to incorporate π orbital interactions into the excited state analysis. In the next section, we will build on these ground state energies, specifically the zero-field splitting of the $|\pm 6\rangle$ doublet, to explore how excitation into the π manifold modifies the **J-L** coupling. By including three highest occupied π orbitals (HOMO, HOMO-1, and HOMO-2) and six lowest unoccupied π orbitals (LUMO, LUMO+1, LUMO+2, LUMO+3, LUMO+4, and LUMO+5) in addition to the 4f orbitals, we will evaluate the extent to which π electron delocalization influences the terbium **J-L** interactions in the TAP_3TbY excited state.

3.2 Excited States of TAP_3TbY

With the ground-state multiplet structure established, we next direct our attention to the π - π^* excited states of TAP_3TbY , aiming to quantify how the orbital angular momentum generated by the ligand (**L**) interacts with the total angular momentum of the 4f

system (**J**) upon π - π^* excitation. To capture the relevant 4f and π -orbital characteristics, the active space was expanded from CAS(8,7) to CAS(14,16). In this CAS(14,16), the seven 4f orbitals of Tb(III) are positioned between the three highest occupied π orbitals and the six lowest unoccupied π^* orbitals of the TAP₃ structure. By applying a total of 388 CI roots, we obtained the total low-lying energy of the spin-orbit (SO) states as 2716.

Table 1. Selected transition energy and angular momenta of TAP₃TbY extracted from CASSCF/RASSI/SINGLE_ANISO calculations.

Doublet	Energy (cm ⁻¹)	Osc. Strength (initial doublet → final doublet)	L _z	S _z	J _z = L _z + S _z
1	0		3.00	3.00	6.00
294	29311	0.04 (1→294)	6.01	3.00	9.01
295	29313	0.04 (1→295)	0.03	3.00	2.97
347	31266	0.06 (1→347)	4.95	3.00	7.95
348	31273	0.06 (1→348)	1.10	2.98	4.08
595	39005	0.06 (1→595)	4.41	3.00	7.41
596	39014	0.06 (1→596)	1.57	3.00	4.57

The analysis of the oscillator strength was conducted to identify the SO states that contribute to the Q-band absorption of TAP₃TbY. Several transitions from the two nearly degenerate lowest SO states (designated as doublet 1) to the higher energy, nearly degenerate excited SO states were found to exhibit significant oscillator strengths. Notable transitions include those to SO states 588 and 589 (doublet 294, 29311 cm⁻¹), 590 and 591 (doublet 295, 29313 cm⁻¹), 694 and 695 (doublet 347, 31266 cm⁻¹), 696 and 697 (doublet 348, 31273 cm⁻¹), 1190 and 1191 (doublet 595, 39005 cm⁻¹), and 1191 and 1193 (doublet 596, 39014 cm⁻¹), as summarized in Table 1.

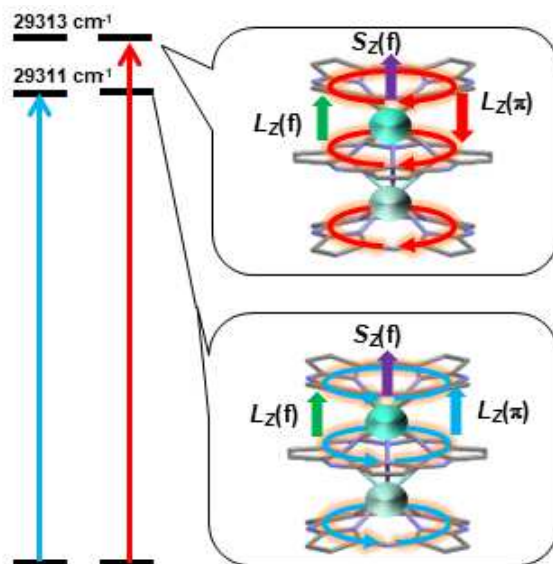


Figure 1: Schematic **J-L** interaction in the excited states of TAP₃TbY.

Further analysis was conducted on the values of $|L_z|$ and $|S_z|$ for all selected doublets. In the ground doublet (doublet 1), $|L_z| = 3.00$ and $|S_z| = 3.00$ combine to yield $|J_z| = 6.00$, which aligns well with the pure $J_z = \pm 6$ projection for Tb³⁺. Because L_z in the ground doublet is generated solely by the 4f system, this L_z is referred to as $L_z(4f)$. Upon transitioning to doublet 294, $|L_z|$ increases to approximately 6.01 while $|S_z|$ remains at 3.00, resulting in $|J_z| = 9.02$. In other words, the $\pi \rightarrow \pi^*$ transition contributes about three units of orbital angular momentum (ΔL_z about +3) parallel to $L_z(4f)$, as illustrated in Figure 1. In the higher excited doublet, doublet 295 (the pair of doublet 294), the $|L_z|$ decreases to approximately 0.03 while $|S_z|$ remains at 3.00, yielding $|J_z| = 2.97$. Here, ΔL_z about -3 indicates that the π -derived orbital momentum is oriented antiparallel to $L_z(4f)$. Since the parallel arrangement is more stable than the antiparallel arrangement, the interaction favors a ferromagnetic-type interaction. For other pairs of excited doublets, such as doublets 347 and 348, as well as doublets 595 and 596, the situation is similar, with a parallel arrangement occurring in each lower excited doublet: ΔL_z about 1.9 and 1.6 for the pairs 347/348 and 595/596. Regarding

the magnitude of the interaction, similar to our previous reports [1,3], Δ_{JL} is defined as the half-energy separation between the lower and higher excited states. Consequently, we obtained the Δ_{JL} values of about 1 cm^{-1} , 3.5 cm^{-1} , and 9.5 cm^{-1} for the pairs 294/295, 347/348, and 595/596, respectively.

3.3 Diamagnetic Analogue Comparison for Orbital Angular Momentum

To verify that the π system is indeed the source of additional angular momentum, we compared the results with those of the isostructural diamagnetic analogue, TAP_3Y_2 . In this calculation, we included six electrons in the three highest π orbitals (HOMO, HOMO-1, HOMO-2) to the active space 1, and six lowest unoccupied π orbitals (LUMO, LUMO+1, LUMO+2, LUMO+3, LUMO+4, and LUMO+5) to the active space 3. This resulted in several excited doublet states with significant $|Lz|$ values, such as 2.34, 2.97, and 2.66, for the excited states at 19895 cm^{-1} (doublet 2), 28754 cm^{-1} (doublet 4), and 33473 cm^{-1} (doublet 6), respectively. Here, the observed Lz values are generated solely from the π ligand system, and thus, the observed Lz is referred to as $Lz(\pi)$. Among these, the transition to doublet 4 (28754 cm^{-1}) has an oscillator strength of 0.08 and $|Lz|$ of 2.97. This value closely aligns with the ΔLz observed in the TAP_3TbY transitions, especially for the pair doublets 294/295, confirming that the additional angular momentum originates from the ligand π system. This direct comparison validates our interpretation of the **J–L** interaction as a coupling between the angular momentum generated by the 4f system and the angular momentum produced by the cyclic π system of the porphyrinoid ligand.

4. Conclusion

In conclusion, this study provides a comprehensive computational exploration of the π –4f magnetic interactions in the excited states of heterometallic

triple-decker porphyrinoid lanthanide complexes. By comparing the diamagnetic TAP_3Y_2 complex with the paramagnetic TAP_3TbY system, we clarified how ligand-centered π – π^* excitations can interact with the 4f orbitals of a single Tb(III) ion through **J–L** coupling. Multireference *ab initio* calculations demonstrate that the excited-state splitting correlates with the π orbital angular momentum, affirming the crucial role of the ligand electronic structure in influencing the 4f excited-state magnetism. These findings highlight the potential of porphyrinoid-based platforms to engineer excited-state magnetic interactions, offering new insights for the rational design of photoresponsive lanthanide complexes for molecular magnetism and quantum information applications

Acknowledgements

All calculations have been done using supercomputer system SQUID at the Cybermedia Center (currently:D3 Center), The University of Osaka.

References

- (1) (a) K. Kizaki, et al., *Chem. Commun.*, **53**, 6168-6171, (2017); (b) T. Fukuda, et al., *Chem. Eur. J.*, **23**, 16357-16363, (2017). (c) A. Santria, and N. Ishikawa, *Inorg. Chem.*, **59**, 14326-14336, (2020); (d) K. Kizaki, et al., *Inorg. Chem.*, **60**, 2037-2044, (2021); (e) A. Santria, and N. Ishikawa, *Inorg. Chem.*, **60**, 14418-14425, (2021); (f) L.C. Adi, et al., *Dalton Trans.*, **51**, 6186-6196, (2022); (g) K. Kizaki, et al., *Inorg. Chem. Front.*, **10**, 915-925, (2023); (h) A. Santria, サイバーメディア HPC ジャーナル, 2023, 13, p. 45- 49; (i) L. C. Adi, et al., *Dalton Trans.*, **53**, 628-639, (2024).
- (2) A. Santria, and N. Ishikawa, サイバーメディア HPC ジャーナル, 2024, 14, p. 47- 52;
- (3) A. Santria, and N. Ishikawa, *J. Phys. Chem. A*, **128**, 6722-6728, (2024)

データ駆動型軟磁性材料開発のための大規模シミュレーションと機械学習の活用

小野 寛太、塚原 宙

大阪大学 大学院工学研究科

1. はじめに

軟磁性材料は、電力変換機器の効率化やデバイスの小型化を実現する不可欠なコア素材である。特にモーターやトランスを高周波領域（数 kHz～MHz）で駆動する際、飽和磁束密度（Bs）の向上と共にヒステリシス損失、渦電流損失、余剰損失の低減が要求される。

従来、多くの研究では材料の組成や製造条件の試行錯誤によって性能改善を図ってきた。しかしながら、試料作製と評価のサイクルが長期化し、最適条件の絞り込みには膨大な実験工数を要していた。

近年注目を浴びているナノ結晶軟磁性材料について、われわれはその微細構造と磁歪が高周波でのエネルギー損失に与える影響に着目し研究を進めている。大規模シミュレーションにより、低エネルギー損失のナノ結晶軟磁性材料の設計指針を計算機シミュレーションにより確立することができれば、実験工数を大幅に削減できる。

また、近年の HPC 技術の飛躍的進化と機械学習アルゴリズムの高度化により、従来では解析困難であった大規模データから隠れた相関を抽出し、材料設計にフィードバックすることが現実的となっている。

本研究では LLG 方程式に基づく大規模シミュレーションと機械学習解析を融合し、「材料微細構造 ⇔ 高周波エネルギー損失」の関係性をデータから明らかにし、データ駆動型の新たな材料設計指針を確立することを目的としている。

2. 計算モデル

磁化ダイナミクスは下記の Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) 方程式に従う。本研究では、磁壁の運動と磁歪効果を同時に記述可能な数値モデルを構築した。

$$\frac{d\mathbf{m}}{dt} = -\gamma\mathbf{m} \times \mathbf{H}_{\text{eff}} + \alpha\mathbf{m} \times \frac{d\mathbf{m}}{dt}$$

ここで有効磁界 $\mathbf{H}_{\text{eff}}$ には、交換相互作用、双極子相互作用に加え、磁歪による弾性エネルギー項を含める。弾性エネルギー項は以下のように表される：

$$\begin{aligned} E_{\text{el}} &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} C_{ijkl} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl}, \quad \varepsilon_{ij} \\ &= \frac{1}{2} (\partial_i u_j + \partial_j u_i) - \varepsilon_{ij}^0 \end{aligned}$$

ここで ε_{ij}^0 は磁歪による自由ひずみテンソルである。本モデルでは、結晶粒内部の磁歪定数の異方性と多結晶性を考慮するため、各結晶粒をランダムに配向させたボクセルメッシュを生成し、座標変換行列を用いて磁歪テンソルを局所的に回転させて実装している

3. 大規模並列計算

大規模シミュレーションでは、有限差分法を用い、大規模並列計算を実行した。図 1 はナノ結晶軟磁性材料モデルの歪み分布を表している。図 1 に示すようにランダムに配向した多結晶モデルでは、結晶粒ごとに異なる歪みを示している。このモデルに外部から交流磁界を印加し、このときの磁化分布と歪み分布

を上述した大規模シミュレーションにより計算し、ナノ結晶軟磁性材料の動的挙動を解明することを目的とした研究を行なった。

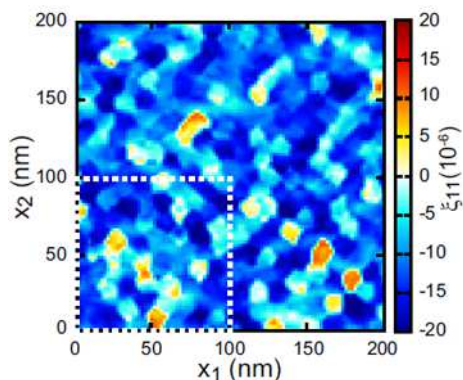


図1 ナノ結晶軟磁性材料モデルの歪み分布

4. 結果と考察

ナノ結晶軟磁性 α -Fe 系材料の高周波におけるコア損失に対する磁歪の影響を解析した。その結果、有効異方性定数(K)の結晶径依存性について実測値と高精度で一致した。具体的には、結晶径 D が約 10 nm 以下の領域では、不均質歪みに起因する第 1 項が支配的となり、 $\langle K \rangle$ が D^6 にほぼ比例して急激に増大する様子が確認された。一方、結晶径が約 30 nm 以上に成長すると、不均質歪みの寄与が飽和し、均質歪みによる定数項に漸近して緩やかな変化に収束した。これにより、結晶粒径を 20–40 nm の領域に制御することで、異方性起源のエネルギー寄与を最小化しつつ飽和磁束密度を維持できる材料設計の指針が得られた。

次に、損失の周波数依存性について、Bertotti–Sühl モデルを組み合わせた理論予測式に従って、50 kHz から 1 MHz までの高周波領域で実験的に評価した結果、すべての試料において余剰損失が $f^{1.5}$ でスケールリングすることがわかった。特に、飽和磁歪 λ_s が増大するにつれて損失が増大し、モデルパラメータとして導入した粘性係数 η は増大と高い相関を示した。このことは、磁壁が変調磁界に追従する際の遅延現象が、磁歪を介したエネルギー

散逸の主要因であることを明確に示唆している。従来の単純な電流抑制のための電気抵抗向上や磁気異方性制御だけでは説明困難だった余剰損失成分を、磁歪を起源とする粘性の散逸モデルとして定式化した。

さらに、結晶径と磁歪パラメータの複合効果を評価したところ、ナノ結晶軟磁性材料の最適設計領域が明確化された。すなわち、 λ_s を可能な限り小さく抑えつつ、結晶径 D を約 30–40 nm にチューニングすることで、異方性寄与と粘性による散逸のトレードオフを最適化できる可能性が示された。

また、図 2 に示すように 100 と 111 方向の磁歪定数を制御することが可能であれば、バルクでの見かけ上の磁歪定数をゼロに近づけられることがわかった。このように物理パラメータを自由に振って、材料特製の応答を観察できるところが大規模シミュレーションの利点であり、このような手法により材料設計指針を得ることが可能となる。

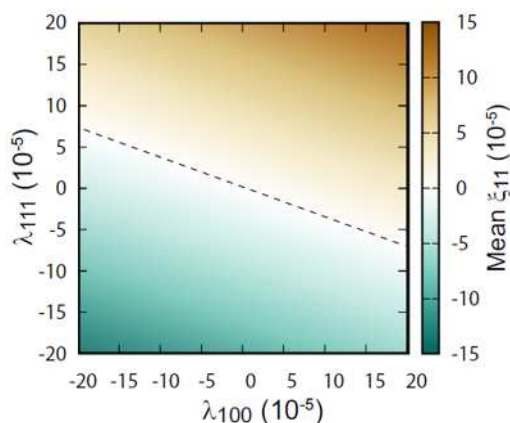


図2 100 と 111 方向の磁歪定数と平均磁歪定数

マルチスケールモデリングと実験とを統合的に行うことで、シミュレーションと実際のマテリアルとの間に存在する乖離を大幅に縮小し、データ駆動型の材料開発プロセスの信頼性が高くなることが示唆される。

5. おわりに

本研究により、ナノ結晶軟磁性 α -Fe 系材料における高周波でのコア損失の微視的起源を、理論モデルによる大規模シミュレーションと実験データとの連携により明らかにした。結晶径依存性を定量化し、磁壁運動に伴う磁歪を起源とするエネルギー散逸が余剰損失の支配的メカニズムであることを明らかにし、その周波数依存性を実測データと比較し、高い整合性が得られることがわかった。これらを統合した評価から、材料設計指針を得ることができた。今後は、本手法を量子ビーム実験データとのマルチモーダル統合解析に拡張し、さらに他系材料（フェライト、メタマテリアルなど）への展開を行うことで、汎用的なデータ駆動型材料開発プラットフォームの実用化を加速することが期待される。本研究成果は、高周波電力変換システムの高効率化と省エネルギー化に貢献する技術基盤として、産業応用への展開に大きく寄与すると考えられる。

参考文献

1. G. Herzer, *Acta Materialia* 61, 718 (2013).
2. R. Parson et al., *J. Magn. Magn. Mater.* 476, 142 (2019).
3. S. Bhattacharyya et al., *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 19, 035002 (2011).
4. J. X. Zhang and L. Q. Chen, *Acta Materialia* 53, 2845 (2005).
5. Hiroshi Tsukahara, Haodong Huang, Kiyonori Suzuki & Kanta Ono, *NPG asia materials* 16, 19 (2024).

大規模言語モデルを用いた文献からの知識抽出と細胞内ネットワークの数理モデルのデータ駆動的な抽出

荒金 究

大阪大学 蛋白質研究所

1. はじめに

細胞は内的なゲノム情報と外的な環境情報を統合し、増殖、分化、細胞死などの多様な運命制御を行う。このような振る舞いを可能にするのは、細胞内のタンパク質をはじめとした生体分子の相互作用からなる細胞内ネットワークである。遺伝子変異などの要因でこのネットワークの制御構造が乱れると、細胞の運命制御に乱れが生じ、がんなどの疾患の発症につながる事が知られている[1]。そのため、このような細胞内ネットワークの動態を理解することが細胞の運命決定や制御機構の解明に必要不可欠であると考えられる。

しかしながら、細胞内ネットワークは大きく複雑であり、一つの変化が全体に及ぼす影響を予測することは非常に困難である。この問題を解決する手法として、ネットワーク中の分子間の反応を常微分方程式でモデル化し、シミュレーション解析を通じてネットワークの振る舞いを理解する数理モデリングが用いられてきた。数理モデリングはネットワーク内のそれぞれの分子の時間的動態を定量的に議論できるようになり、より細胞内の分子メカニズムに迫ったモデルを立てることが可能になる。また、過去には疾患のような細胞の好ましくない状態を抑制あるいは脱するために最適な薬剤標的の予測・発見にもつながった[2]。

数理モデリングは強力なアプローチである一方で、モデルの構築に膨大な事前知識を要するというボトルネックを抱えている。これは、観察された現象を説明可能かつ生物学的に有意義な予測が可能なモデルを作るためには、扱っている細胞の種類や観察条件などの生物学的な文脈に基づいてモデルに含める遺伝子や相互作用を選択

しなければならないためである。従来は、研究者が蓄えた生物学的知識や経験を基に、そして関連する論文やデータベース等を調査することで数理モデル構築は行われてきた。

こうした背景から、注目すべき細胞内ネットワークをデータ駆動的に構築するスケーラブルな手法の開発が期待される。そこで本研究では、深層学習技術を活用し、これまで人の手によって行われていた文献情報からの知識抽出を自動化し、細胞の動的な振る舞いを説明可能な数理モデルをデータ駆動的に構築する手法を開発することを目指す。

2. 文脈依存的な情報抽出パイプラインの構築

上記の課題に取り組むために、与えられた生物学的な文脈に即した遺伝子間相互作用を文献から抽出するパイプラインを構築した（図1）。以下では、パイプラインの各段階の説明を行う。

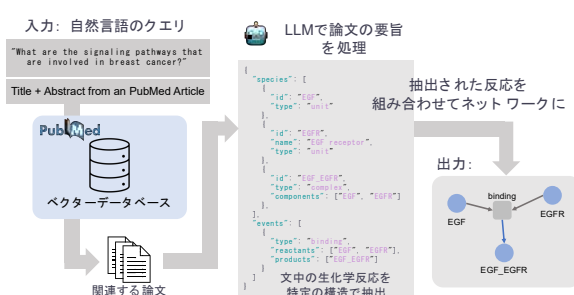


図1：情報抽出パイプラインの概要

まず、文脈依存的な情報抽出を実現するために、与えられた文脈に関連する論文を検索可能なシステムを構築した。これには、テキストをそれが表す意味や文脈に基づいて高次元空間に埋め込むことができる Sentence Transformer [3]という自然言語モデルを用いて、生物医学系の論文データベースである PubMed の処理すること

で、入力となる自然言語のクエリに対して文脈的に近い論文を検索可能なベクターデータベースを作成した。これにより、特定の文脈に関連する論文のみから情報抽出を行うことが可能になる。

次に、ベクターデータベースから取得された論文から、目的の情報を抽出する手法を構築した。ChatGPTをはじめとする大規模な生成言語モデルは、特定のタスクを解く際に、それに特化した学習を行わずとも、入力となるプロンプトで指示するだけで高い性能を示すことが知られている[4]。そこで、OpenAI の gpt-3.5-turbo に対して、検索された論文のアブストラクトに含まれる遺伝子間相互作用や生化学反応を、決まった構造で抽出するようなプロンプトを与えることで、文献から計算機上で扱いやすい構造で情報抽出を行うことを試みた。

最後に、このようにして抽出されたネットワークを統合し、最終的な出力ネットワークを得る。ここでは、抜き出された遺伝子等の分子の名前を、Gilda[5]というソフトウェアを用いてデータベースの ID に紐付けて標準化を行った。紐づけられた ID によって、論文によって異なる表記がされている場合でも遺伝子の同一性を認識することができるようになり、ネットワークの統合を行うことが可能になる。

このパイプラインを用いて得られる出力ネットワークの例を図 2 に示す。これは、EGFR パスウェイの数理モデリングに関する論文[6]を入力とし、ベクターデータベースから近傍 100 件の論文を処理した際の結果である。実際に、EGFR を中心として、他の関連遺伝子との相互作用や下流の遺伝子の活性化反応を含むようなネットワークが抽出されることが確認できた。

しかしながら、出力されたネットワークには、化学量論的に誤った反応を含むことがある。そのため、このネットワークを数理モデルとして用いる場合は、そのような反応を修正、あるいは取り除くような処理が必要である。

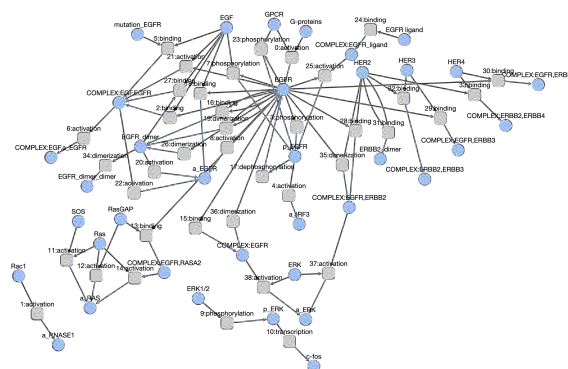


図 2：出力ネットワークの例

3. ドメイン知識の有無による影響の検証

一般に、特定のドメインに特化したタスクを言語モデルに解かせる際には、そのドメインのコーパスで学習されたモデルの方が高いパフォーマンスを示すことが知られている。実際に生物や医学の知識に関わるようなタスクにおいては、PubMed で事前学習されたモデルが良い性能を示すことが確認されている[7], [8]。そこで、上記のパイプラインで用いた Sentence Transformer のドメイン知識の有無がベクターデータベースの性能に及ぼす影響を検証した。

比較には、元々用いていた一般的なコーパスで事前学習されたモデルに加えて、PubMed で事前学習された二つのモデルを用いた（表 1）。また、これらのモデルを用いて作成されたベクターデータベースの性能を定量的に比較するために、(1) Title-abstract matching と (2) MeSH term matching という二つの評価タスクを考案した。

(1) では、論文のタイトルを埋め込んだ際に、同じ論文の要旨から作られたベクトルが近傍に埋め込まれていたかを評価した。PubMed の論文 20 万件を用いて、評価指標として Mean Reciprocal Rank (MRR) と上位 10 件までの

Normalized Discounted Cumulative Gain (nDCG@10) を用いた。(2) では、PubMed の論文にトピック等に基づいて付与される Medical Subject Headings (MeSH) term を用いて、入力として与えられた論文と、その近傍に埋め込まれた論文の MeSH Term の類似性を評価した。

表 1 : 比較した Sentence Transformer モデル

Model name	Pretraining dataset type	Fine-tuning dataset type	References
sentence-transformers/multi-qa-mpnet-base-dot-v1	Wikipedia, BooksCorpus, and other corpora [9]	Collection of Q&A corpora from various domains	[3], [10]
NeuML/pubmedbert-base-embeddings	PubMed abstracts, PubMedCentral full texts[8]	PubMed title-abstract pairs & similar title pairs	[11]
pritamdeka/S-PubMedBert-MS-MARCO	PubMed abstracts, PubMedCentral full texts[8]	MS-MARCO Q&A dataset	[12], [13]

ここでは入力論文として[6]を使用し、上位 500 件の論文と入力論文の MeSH term の一致度を F1 スコアで評価した。

これらの評価タスクでの各モデルのスコアを表 2 にまとめる。平均して、ドメイン知識を有するモデルの方が評価タスクでより良い性能を示すことが確認できた。特筆すべき点として、PubMed で事前学習された二つのモデルのうち、直接 PubMed の title-abstract pair でファインチューニングされたモデルよりも Q&A データセットで学習されたものの方が突出して良い性能を示すことがわかった。これは、文意を反映した文章埋め込みを学習させるには、Q&A がより適したデータセットであることを示唆する結果であると考えられる。

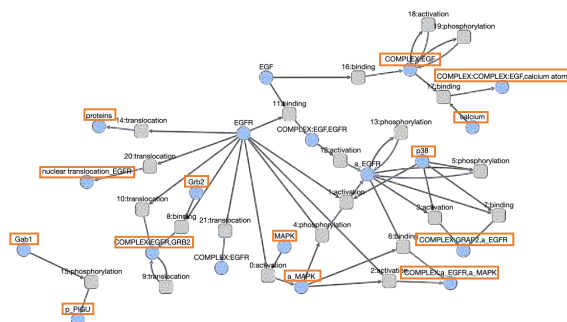


図 3 : ドメイン知識を有するモデルを用いた際の出力ネットワーク

最後に、評価タスクで最も性能が良かったモデルのベクターデータベースを用いて、図 2 と同条件で得られるネットワークの出力結果の比較を行った (図 3)。元々のモデルを用いて得ら

れたネットワークと比較して、より小さいネットワークが得られた。これはベクターデータベースから取得される論文の関連性が上がったことにより、ノイズと捉えられる関連性が低い反応が含まれにくくなったためではないかと考えられる。しかし、これを確かめるためには厳密なネットワークの評価指標が必要になる。

4. おわりに

今回の手法を発展させる上で、解決すべき課題がいくつか考えられる。一つは、論文から抽出されるネットワークの正確性を評価する必要がある。これには、あらかじめ正解のわかっているデータセットを作成し、それを用いて言語モデルの性能評価を行う必要がある。

他にも、出力されたネットワークの評価指標についても考える必要がある。これには、入力された生物学的文脈に対する出力ネットワークの妥当性や、化学反応ネットワークとしての妥当性などの要素を盛り込む必要があると考えられる。しかし、どのようなネットワークが妥当であるかは細かい実験条件等によって大きく異なることもある。そのため、言語モデルのみを用いて上述の問題を全て解決する手法はあまり現実的ではない可能性がある。そのため、あらかじめ多くの相互作用を網羅した大きなネットワークを用意し、そこに文脈情報を反映して、

表 2 : ベクターデータベースの性能比較

Model name	Title-abstract		MeSH term
	MRR	nDCG@10	Average F1 Score
sentence-transformers/multi-qa-mpnet-base-dot-v1	0.257	0.108	0.246
NeuML/pubmedbert-base-embeddings	0.382	0.168	0.260
pritamdeka/S-PubMedBert-MS-MARCO	0.431	0.200	0.353

関連性が高いと考えられるサブネットワークを抽出するようなアプローチも考えられる。このようなアプローチを採用すれば、入力された文脈に対して「骨組み」のようなネットワークを提案し、そこから周辺のノードやエッジを追加・削除して編集できるようなインタラクティブなツールの開発にも繋げることが可能である。

- Systems, 16857-16867, (2020).
- (10) <https://huggingface.co/sentence-transformers/multi-qa-mpnet-base-dot-v1>
- (11) <https://huggingface.co/NeuML/pubmedbert-base-embeddings>
- (12) P. Deka, et al., J. Data Intell., **3**, 474-505, (2022).
- (13) <https://huggingface.co/pritamdeka/S-PubMedBert-MS-MARCO>

参考文献

- (1) M. A. Clarke and J. Fisher, Nat. Rev. Cancer, **20**, 343-354, (2020).
- (2) B. Schoeberl, et al., npj Syst. Biol. Appl., **3**, 1-17, (2017).
- (3) N. Reimers and I. Gurevych, Proc. of the 2019 Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing and the 9th International Joint Conference on Natural Language Processing (EMNLP-IJCNLP), 3982-3992, (2019).
- (4) T. Brown, et al., Proc. of the 34th International Conference on Neural Information Processing Systems, 1877-1901, (2020).
- (5) B. M. Gyor, et al., Bioinf. Adv., **2**, 1-5, (2022).
- (6) B. N. Kholodenko, et al., J. Biol. Chem., **274**, 30169-30181, (1999).
- (7) J. Lee, et al., Bioinformatics, **36**, 1234-1240, (2020).
- (8) Y. Gu, et al., ACM Trans. Comput. Healthcare, **3**, 1-23, (2021).
- (9) K. Song, et al., Proc. of the 34th International Conference on Neural Information Processing

太平洋赤道上の深い循環を駆動するエネルギー供給プロセスの解明

寺田 雄亮

東京大学 大学院理学系研究科

1. はじめに

赤道太平洋の中層（深さ 500–2000m）では Equatorial Intermediate Current (EIC) が数十年平均した場として赤道に沿って西向きに流れており、西岸から東部まで広い東西幅を持っていることが知られている（図 1a）[1,2]。EIC やその変動は海中の酸素などの物質循環[3]や気候変動[4]に影響を及ぼしている可能性が指摘されているが、EIC を駆動するメカニズムが未解明であるため、物質循環や気候変動の研究で広く用いられる海洋大循環モデル内で適切に再現されていないのが現状である。

EIC のような赤道上の東西流の駆動源としては赤道を跨ぐ流速を伴う数ヶ月周期の変動（季節内変動）が提案されており[5]、赤道太平洋の深さ 1000m では海盆の東部に集中して存在していることが報告されている（図 1b）[6]。しかしなが

ら深さ 1000m には季節内変動の直接的な起源となりうるものが存在しないため、季節内変動がどこからもたらされるのかは未解明であった。さらに離れた場所からもたらされた季節内変動が、深い場所に存在する太平洋の EIC の形成にどれだけ寄与するのかも不明であった。

そこで本研究では理想化海洋モデルを用いて数値実験を行い、太平洋東部における深い季節内変動の起源を検証する。さらにこの季節内変動の EIC 駆動への寄与を定量的に評価する。

2. 海盆東部における深い季節内変動の起源

赤道太平洋東部、深さ 1000m で観測された深い季節内変動については、その直上の海面付近に存在している活発な季節内変動が起源であると予想されてきた[7]。しかしながら海面付近と中層との間には密度が深さと共に大きく変化する

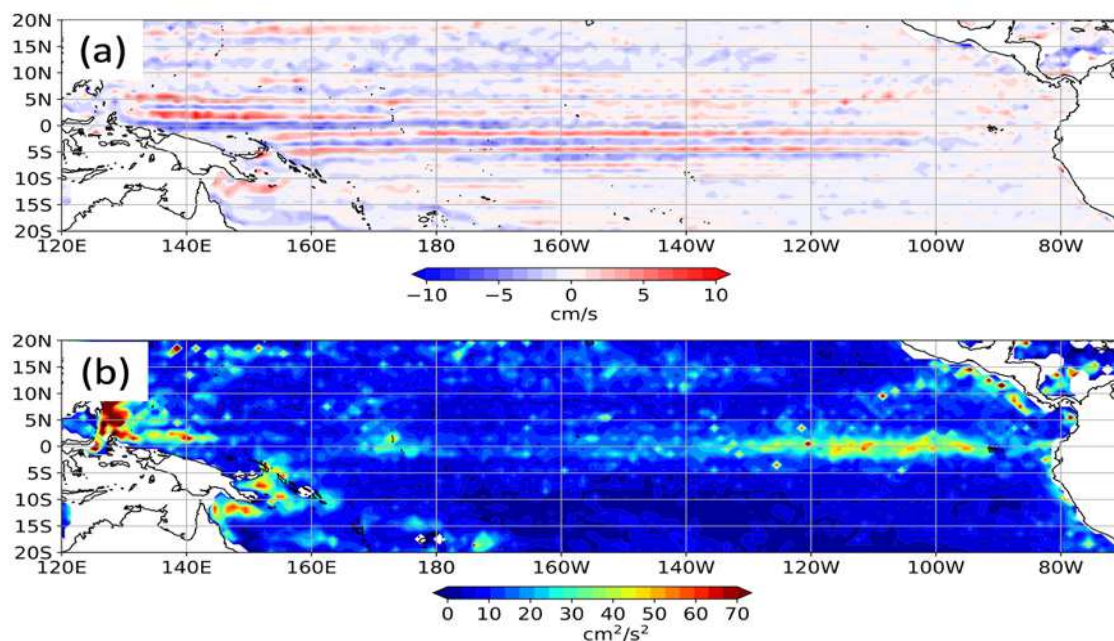


図 1：1997 年から 2022 年の深さ 1000m における流速推定データ[2]を使用し、1 度格子ごとに計算された(a)東西流速(東向きが正)と(b)eddy kinetic energy(EKE)の南北成分。赤道付近では EKE の南北成分は季節内変動のエネルギーに対応する。

る密度躍層が存在し、密度躍層の上下で海洋は異なる振る舞いをする。そこで密度躍層を超えて海面付近から中層に季節内変動をもたらすメカニズムについて数値実験を用いて検証した。

2.1 矩形海洋モデルを用いた数値実験

流体の基本方程式であるナビエ-ストークス方程式を有限要素法で解くために、MIT General Circulation Model (MITgcm)[8]を使用して太平洋赤道域を模した深さ 5000m、南緯 20 度から北緯 20 度、東経 130 度から西経 80 度の矩形海洋モデルを構築した。また現実的な密度躍層を再現するために観測された赤道太平洋の水温の鉛直分布[9]を初期値、及び側面境界条件として与えた。このような設定のもとで、海面付近の季節内変動を海面応力強制に近似して赤道上的西経 140-100 度に与え計算を行った。なお水平格子間隔は 0.25 度、鉛直方向は 100 層とし、300MPI プロセスを用いた空間分割で並列計算し、2 年分の積分を実施した。また計算結果は 3 日ごとに 3 日平均値を出力した。

2.2 計算結果

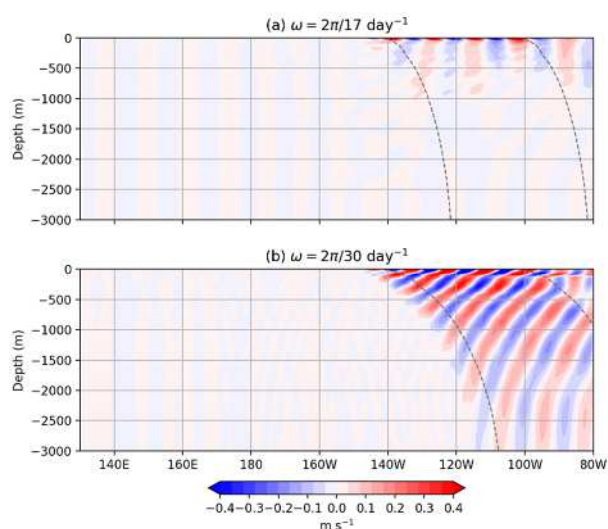


図 2：(a)17 日周期と(b)30 日周期の強制を与えた場合の積分開始後 183 日目の赤道上の深さ-経度断面における南北流速分布

図 2a は強制の東西波長を 12 度、周期を 17 日

とした場合の結果を示している。強制を与えた経度帯(140-100W)では直下に南北流速の縞状構造がみられ、波動が励起されていることがわかるが、励起された波動は深さ 500m 付近にある密度躍層で反射されて 500m 以深の中層に到達できていない。一方強制の周期を 30 日とした場合には下向き、東向きの波動のビームが形成され、中層に到達している(図 2b)。これは海面付近で励起された波動が下・東向きにエネルギーを輸送していることを意味し、理論的に計算されるエネルギーの輸送経路(図 2 中の破線)とも矛盾しない。

東赤道太平洋の海面付近の変動はさまざまな周期の成分を含んでいることが報告されている[10]ため、さらに異なる周期の強制を与えた場合についても実験し、各実験において中層に供給されたエネルギーを計算して比較を行った(図 3)。結果は中層へのエネルギー輸送効率が強制の周期に依存することを示すものであった。特に周期が短いと赤道波動を励起できないか励起できても波動の鉛直波長が長すぎて密度躍層で反射され、周期が長すぎると励起される波動の鉛直波長が短く散逸されやすいことで中層にエネルギーを供給できていなかった。以上のような周期選択性から 20-30 日程度の周期をもつ変動のみが密度躍層を超えて中層にエネルギーを供給することが判明した。

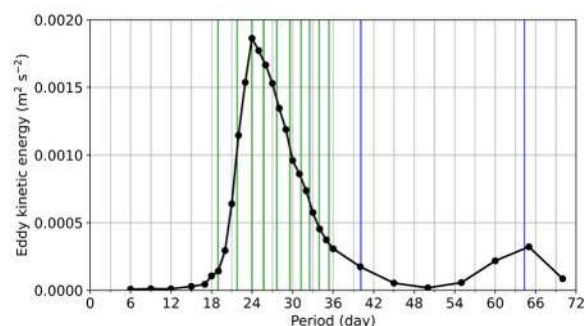


図 3：与えた強制の周期ごとの深さ 1000-2000m に到達した季節内変動のエネルギー。緑・青線は赤道波動が応答可能な周期を示す。

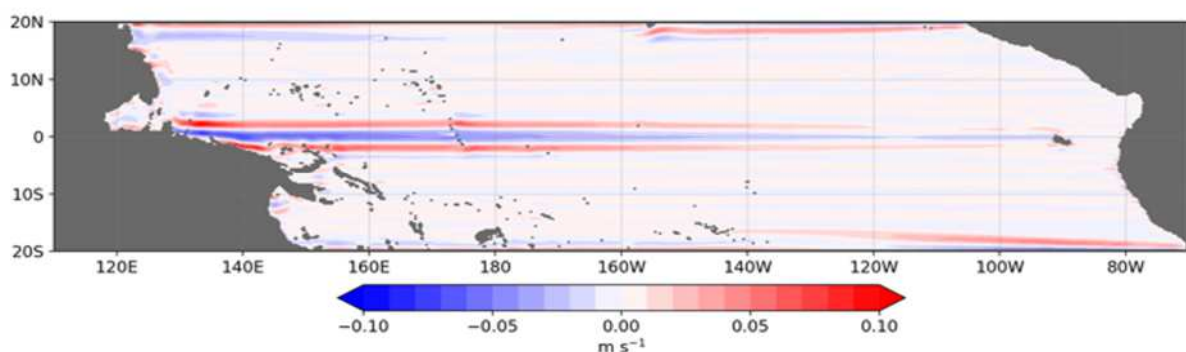


図 4：積分開始後 50-100 年目の深さ 1000m における東西流速の平均値

3. 赤道太平洋中層における西向き海流の形成

前節で明らかになった赤道太平洋東部で波動伝播を通して中層にもたらされる季節内変動と、赤道上を西向きに流れる EIC との関係を明らかにするため、これら 2 つの要素を再現する理想化海洋モデルを構築し、数値実験を実施した。

3.1 赤道太平洋の領域海洋モデル

ここでは前節より現実的な状況を考えるため、前節で使用したモデルを東西に東経 110 度から西経 70 度まで拡張し、図 4 のように海岸線を側面境界として与え、時間平均した一定の貿易風を海上風強制として与え続ける実験を行った。ここでは空間分割を 450MPI プロセスとし、100 年分積分を実施した。計算結果は 5 日ごとに 5 日平均値を出力した

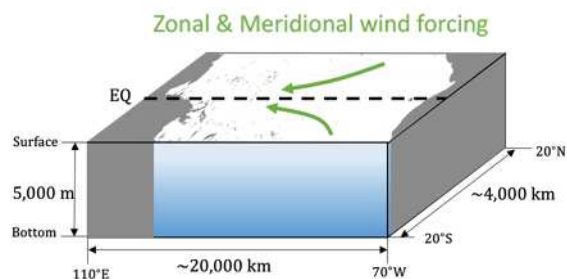


図 5：モデルの計算領域

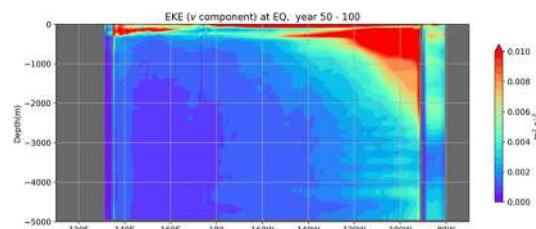


図 6：積分開始後 50-100 年目の赤道上、深さ-経度断面上の季節内変動のエネルギー分布。

計算の結果、図 5 のように海盆東部で下向き・東向きのエネルギー輸送が再現された。さらにこの輸送を担う波動の周期は 30 日であり、前節の結果と矛盾しないものであった。また 50 年平均した流速場は中層において赤道上で西向きであり EIC が現実的な構造と流速で再現された(図 6)。さらに EIC の南北にある東向きの流れも再現され、これら流速も観測(図 1a)と矛盾しないものであった。

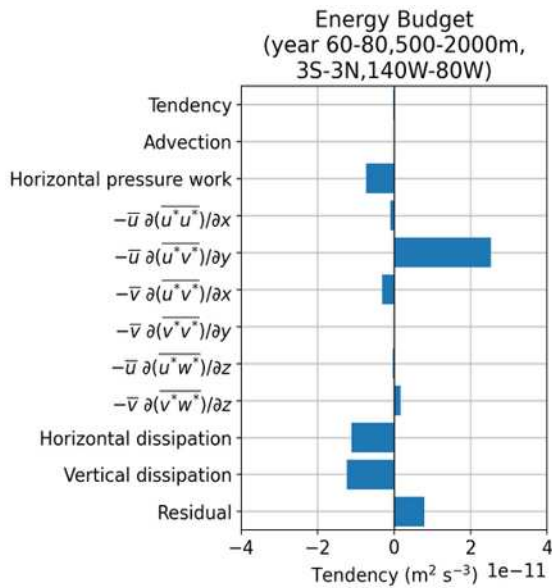


図 7：積分開始後 60-80 年目の結果を用いて評価された EIC のエネルギー方程式の各項。正の値が EIC に対するエネルギー供給に対応する。

3.2 季節内変動と EIC の関係

季節内変動と EIC の関係を調べるため、計算された流速場(u, v, w , それぞれ東西、南北、鉛直成分)を 75 日の時間フィルターを用いて季節内変動(u^*, v^*, w^*)と EIC($\bar{u}, \bar{v}, \bar{w}$)に分解し、EIC のエネルギー方程式の各項を評価することで EIC の形成過程を調べた(図 7)。

その結果 EIC にエネルギーを最も多く供給する項は $-\bar{u} \partial(\bar{u}^* \bar{v}^*) / \partial y$ であることが明らかになった。この項は中層の季節内変動(図 5)が東西運動量を南北方向に収束させる[11]ことで西向きに流れる EIC をさらに西向きに加速していることを意味する。すなわち実験結果は海面付近から供給されてきた季節内変動が EIC の形成・維持に最も重要な役割を果たしていることを示している。

4. おわりに

本研究では赤道太平洋の深い循環に注目し、理想化海洋モデルを用いた数値実験を用いてエネルギー供給プロセスの検証を行った。その結果、東部における海面付近の活発な変動が新た

に海洋波動を励起し、密度躍層を越えるために適切な周期を持った波動のみが中層まで到達し、深い循環にエネルギーを供給していることが明らかになった。本研究ではエネルギーの供給に注目したが、最終的になぜ西向きの流れが選択されるかなど詳細な力学メカニズムを解明するため、計算結果のさらなる解析を計画している。

参考文献

- (1) S. Cravatte, et al., Journal of Physical Oceanography 47.9, 2305-2324, (2017).
- (2) K. Lebedev, et al., IPRC Technical Note, 2(4), 20, (2007).
- (3) L. Stramma, et al., Journal of Geophysical Research: Oceans, 115(9), 1-12, (2010).
- (4) P. Brandt, et al., Nature, 473(7348), 497-500, (2011).
- (5) B.L. Hua, et al., Journal of Fluid Mechanics, 610, (2008).
- (6) A. Delpech, et al., Journal of Geophysical Research: Oceans, 125(8), 1-23, (2020).
- (7) F. Ascani, et al., Journal of Physical Oceanography, 45(6), 1709-1734, (2015).
- (8) J. Marshall, et al., Journal of Geophysical Research: Oceans, 102(C3), 5753-5766, (1997).
- (9) J.R. Reagan, et al., WORLD OCEAN ATLAS 2023 Product Documentation National Centers for Environmental Information, (2024).
- (10) M. Wang, et al., Journal of Physical Oceanography, 50(10), 3009-3024, (2020).
- (11) R.J. Greatbatch, et al., Geophysical Research Letters, 28(5), 819-822, (2018).

連星系における共通外層期の軌道進化を対象とする3次元磁気流体計算

水谷 耕介

大阪大学 大学院理学研究科

1. はじめに

重力波放射をはじめとする高エネルギー現象は近接した連星系で起こる。このような近接連星の連星間距離 ($10^{-7} \sim 10^{-2}$ au) は恒星連星の典型的な連星間距離 ($10^{-1} \sim 10^2$ au) に比べ数桁以上小さい (1 au は現在の地球と太陽の距離)。このことから連星は進化の過程において連星間距離を効率的に減少させる段階を経ていると考えられている。このようなメカニズムとして共通外層期 [1] が有力視されている (図 1)。共通外層期は、連星のうち巨星となった星がもう一方の天体をその内部に取り込む段階である。この段階において連星の軌道エネルギーが効率的に共通外層部へ移動し、軌道が縮小する。その結果、はじめに比べ連星間距離が数桁程度縮小した近接連星が形成される。

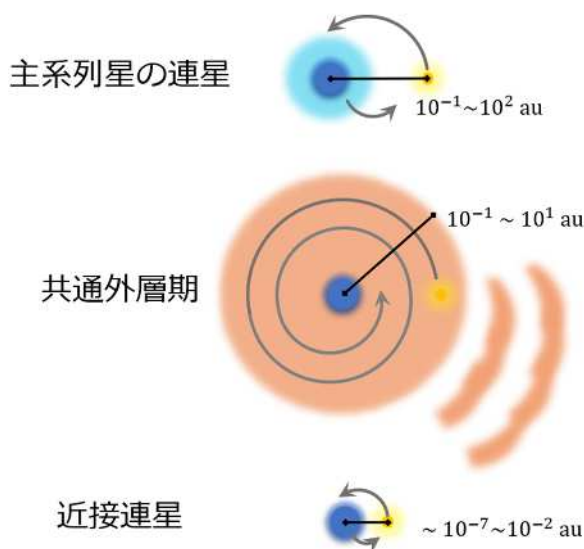


図 1：共通外層期の概要

連星進化については高エネルギー現象の起源を理解する上で重要な共通外層期であるが、現在で

もその機構は十分に理解されておらず、連星進合理論の不定性として残されている。ブラックホール連星をはじめとするコンパクト連星の合体は重元素の有力な起源と考えられているが、このようなコンパクト連星合体の発生率は連星進合理論に大きく依存している。共通外層期における軌道縮小について、現状は物理的な根拠に乏しいパラメータを仮定することで計算を行っており、モデルのアップデートが喫緊の課題である。

現在まで共通外層期の詳細な物理の解明が進んでいない背景には共通外層期が3次元かつ非線形な現象であり、この現象の理解には3次元流体計算が必須となる点がある。これまでに共通外層期を対象とした3次元流体計算がいくつか行われてきたが、そのほとんどが小質量星に焦点を当てており、大質量星で起こる共通外層期に関する議論は十分にされていない。そこで本研究では大質量星で起こる共通外層期に焦点を当て、特に連星の軌道進化について調査を行う。

共通外層期を経て形成される近接連星は合体時に相対論的ジェットを駆動したり、時空を大きく歪ませて重力波を発生させたりするなど、多くの理論の検証の場を提供する役割を担う高エネルギー現象を引き起こす。このような高エネルギー現象は宇宙物理学の分野の中でも非常に盛んに研究されている。共通外層期における連星のパラメータ、とくに連星間距離の進化を決定することは高エネルギー現象を取り扱う上でのより正確な初期条件を与えることを意味する。

2. 計算における困難と過去の研究について

共通外層期は連星進化を理解する上で重要であるにもかかわらず、数値計算における多くの困難のためにシミュレーション例は未だ数少ない。特に重要な問題として、計算領域内における密度差が大きいことが挙げられる。この密度差に起因する問題に対処するため、現状多くの計算では流体を粒子に近似して計算を行う粒子法がよく用いられている[2, 3]。しかし、この手法は密度差に強い反面、解像度が密度に依存するという特徴を持っている。そのため、共通外層期において放出される低密度な主星外層部の時間発展を正確に追うことは難しい。宇宙物理学において理論的な研究を行う際には、観測できる可能性や観測されるであろう特徴に対して言及する必要があることから、観測との比較を行うことができる計算が求められている。

3. 本研究のアプローチ

共通外層期前後の連星軌道進化を調査するため、我々は赤色超巨星と主系列星の連星に対する3次元磁気流体シミュレーションを実行した。またこの結果をもとに連星軌道の進化がどのように起こるかを調査した。図2に実行した計算の初期条件を示す。本計算ではカーテン座標を用い、計算領域の中心に双極子磁場を埋め込んだ赤色超巨星を置く。数値的に解く方

程式はMaxwell方程式と流体方程式を組み合わせた磁気流体方程式であり、計算には計算コードであるAthena++ [4]のフレームワークを使用している。また、行った計算の空間補間と時間積分の精度はどちらも2次である。今回用いる計算コードは空間に格子を配置して計算を行うオイラー法で実装されている。オイラー法は自身の所望する解像度を明示的に選ぶことができるため、例えば低密度な放出物の性質を調査する場合などに適している。

我々は、Athena++に対して新たに連星の軌道進化計算を行う機能を実装した。連星の軌道進化計算では伴星にかかる力（主星外層部からの重力、主星中心部からの重力、慣性力）を時々刻々と積分する。この積分にはLeap-frog法を採用した。

本計算を行う際に計算上の困難を回避するためにいくつかの工夫を行った。まず本計算の対象である恒星はほとんど真空である宇宙空間に存在している。このため星中心と星外部での密度差は20桁を超える。このような密度差を扱うことは非常に難しいため、本計算では主星中心部に重力緩和を施すことで中心部の密度を下げている。本研究の対象である共通外層期において重要であるのは主星表面に近い外層部であるため、このような処置をとった。しかし本計算は依然として10桁以上の密度・圧力差を含む系を扱う計算である。次に本計算は計算領域の原点を主星中心にとる非慣性系で計算を行う。一般に、密度が相対的に大きい対象の移流を正確に解くことは難しい。これは数値計算において少なからず数値拡散が入るためである。本計算においてこのような原因による誤差を減らすために密度の大きい主星が動かないフレームで計算を行う。この手法は密度の高い領域が主星中心部に集まっているときに有効に働く一方で、伴星が主星内部へ落ち多くの質量が主星から剥ぎ取られた後にはフレームが大きく揺れるため計算結果の解釈には注意を払う必要がある。

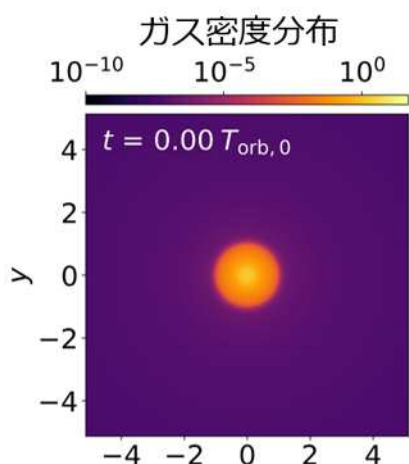


図2：計算開始時点での密度分布

4. 結果

4.1 主星外層部の時間進化

現時点で完全に解析は完了していないが、結果の概要について述べる。図3は数値計算から得られた公転面上における密度分布の時間発展である。計算が進むにつれ密度分布が変化していく様子が見える。開始直後において主星表面に波が現れている。これは伴星の動きによって

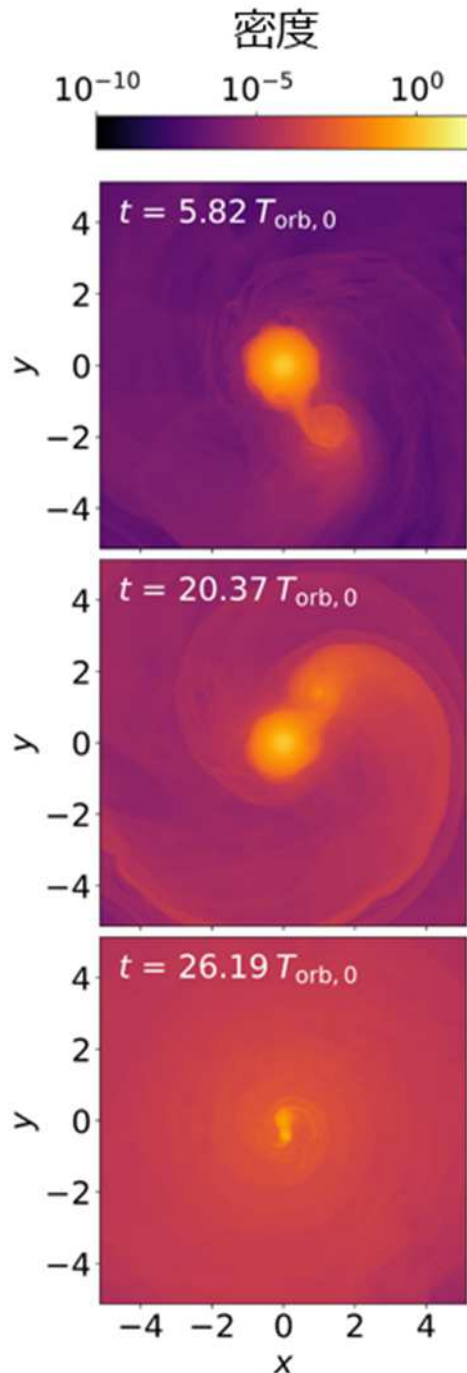


図3：公転面上における密度分布の時間

周期的に変化するポテンシャルに対して共鳴した波であり、物理的なものである。計算が続いていくにつれ主星から伴星部へと質量が移っていくことがわかる。これらの質量は角運動量を持っているため伴星の周囲に円盤を形成する。また主星や伴星の背後から質量が抜けていく様子を確認することができる。このような質量損失は同時に系から角運動量を持ち去っていくため、連星間距離は次第に近づいていく。連星間距離が小さくなると質量移動が活発になりさらに角運動量が失われ…、というようにこの進化は加速度的に進み、いずれ伴星は主星内部へと進入する。この後伴星は数周程度で主星中心部へと落ち込み、最終的に近接連星が形成される。このように連星間での質量移動が始まる時点から計算を開始し、伴星が中心部で安定軌道に落ち着くまでの計算をオイラー法で扱う計算例は少ない。さらなる結果の解析を行い、観測との対応を考えたり周連星円盤の形成条件の確認を行ったりすることで新規性の高い結果を得ることができると考えられる。

4.2 連星軌道の時間進化

計算した非慣性系における連星の軌道を図4に示す。計算の初期は安定した円軌道にあった伴星が徐々に内側へと落ちていき、一気に主星内部へと進んでいる。また、最終的に主星中心部へと落ちたのちに再び安定した軌道に移っていることがわかる。なお最終的な連星間距離は6.05 auとなっており、初期の連星間距離（30 au）の1/5程度になっている。

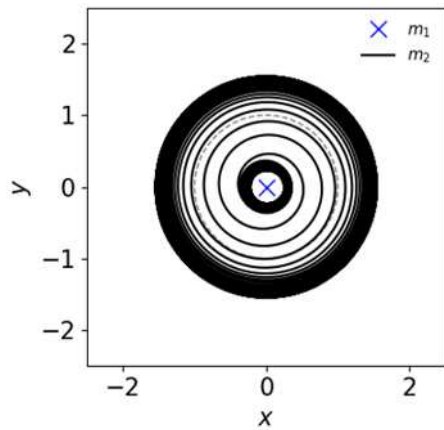


図4：連星軌道のプロット。黒い実線は伴星の軌道を示す。本計算は主星中心を原点にとっているため主星は動いていない。灰色の点線は計算開始時点での主星表面の位置を示している

5. おわりに

本研究では近接連星の形成において重要である共通外層期に焦点をあてた3次元流体計算を行った。オイラー法による計算を行うことでより詳細な放出物の時間発展を追うことができた。今後は計算結果の更なる解析や輻射輸送といった重要な物理過程の導入を行っていく予定である。

参考文献

- (1) N. Ivanova, et al., The astronomy and astrophysics review, **21**, 59 (2013).
- (2) S. T. Ohlmann, et al., The Astrophysical Journal Letters **816**, 6 (2016).
- (3) M. Y. M. Lau, et al., Monthly notices of the Royal Astronomical Society, **512**, 5462–5480 (2022).
- (4) J.M. Stone, et al., The Astrophysical Journal Supplement Series, **249**, 4 (2022).

塑性変形による温度上昇の分子動力学法を用いた解析

李 響

大阪大学 大学院工学研究科 マテリアル生産科学専攻

1. はじめに

近年、加工後の材料の組織および特性を高精度で予測することが重要となっている。そのためには、加工中および加工後の温度が正確に予測される必要がある。材料に付与される塑性変形仕事 W^P は、その大部分が熱 ΔQ に変換され、材料の温度を上昇させる。このとき、塑性仕事は熱に変換される割合は熱変換効率 Taylor-Quinney coefficient (TQC) β と呼ばれる。したがって、正確な TQC を温度予測に用いることが必要となる。

従来（特に市販の有限要素解析ソフト）では、材料によらず TQC は一定で $\beta = 0.9$ と仮定されることが多かった。すなわち、エネルギー散逸の量は W^P の 90% であると経験的にされていた。しかし最近、実験的研究が多く行われるようになり、TQC は定数ではなく、変形のモード、速度、材料の種類などへの依存性があることが報告されている⁽¹⁾。

これまでの TQC の実験的測定では、変形中の材料の温度上昇 ΔT をその場測定して次式で β を求めるのが一般的である（積分式 β^{int} ）。

$$\beta^{\text{int}} = \frac{\Delta Q}{\Delta W^P} = \frac{c\Delta T}{\Delta W^P} \quad (1)$$

ここで、 c ($\text{JK}^{-1}\text{m}^{-3}$) は比熱、 ΔT は材料の温度上昇、 ΔW^P は塑性仕事の増加である。また、TQC は、温度上昇および塑性変形仕事の時間微分でも定義される（微分式 β^{diff} ）。

$$\beta^{\text{diff}} = \frac{dQ}{dW^P} = \frac{cdT}{dW^P} \quad (2)$$

実験で TQC を評価する場合には、変形中における試験片の温度上昇を正確に測定することが必要であり、変形と同時に起こる熱伝導と熱膨張による温度変化への影響をほぼ 0 に抑制する必要がある⁽²⁾。すなわち、断熱定積の熱力学的境界条件がその前提となる。そのため、ほとんどの

TQC の実験的研究は、高速変形（ひずみ速度 $\dot{\epsilon} \geq 10^3 \text{s}^{-1}$ ）を施すことによって、熱伝導・熱膨張に時間を与えず、近似的に断熱定積の条件を満足させる手法を用いていた。ただし、現在、正確な TQC が必要となる場面はほとんど開放系（低速変形など）であり、この評価手法は断熱定積の境界条件がその前提であるから、その結果をそのまま開放系（低速変形など）に応用することが難しい。

ところで、分子動力学（MD）計算では、熱力学的境界条件を事前に規定すれば、温度、応力（圧力）、エネルギーなどの熱力学量が正確に計算できるそのため、あらゆる熱力学的境界条件での TQC を正確に求められる可能性がある。そこで、本稿では MD 法を用いて TQC を求め、その結果を実験値と比較検討する。そして、TQC の熱力学的境界条件への依存性について考察する。

2. 解析方法

2.1 TQC の計算方法

変形仕事（弾性仕事 ΔW^e と塑性仕事 ΔW^P の和）は系内にとどまり、その一部が蓄えられる（ ΔW^S ）。その他は熱 ΔQ として散逸される。そのエネルギーの保存則は、

$$\Delta W^e + \Delta W^P = \Delta Q + \Delta W^S \quad (3)$$

と表すことができる。さらに、 ΔQ は、

$$\Delta Q = \Delta E_C + \Delta E^e + \beta \Delta W^P \quad (4)$$

と表すことができる。ここで、 ΔE_C 、 ΔE^e はそれぞれ熱伝導、熱膨張によるエネルギー収支を表す。従来の TQC の実験的研究は、Split Hopkinson Pressure Bar (SHPB) などを用いて、試験片に高速変形を施すことによって、 ΔQ を ($\Delta Q = \beta \Delta W^P$) に近似するような手法で行われてきたが、これから TQC を高精度に予測するために、熱伝導、熱膨張の影響を考慮することが必要である。

分子動力学シミュレーションでは、モデルを構

成する個々の原子のポテンシャルエネルギー E_p 、運動エネルギー E_k を計算できる。モデルの内部エネルギーは、

$$U = E_p + E_k \quad (5)$$

と定義される。 W^s は、内部エネルギーの収支に、温度の変化をもたらすエネルギーの収支 ($c\Delta T$) 除外したもので、

$$\Delta W^s = \Delta U - c\Delta T \quad (6)$$

と表すことができる。また、TQC は、塑性変形仕事は熱として散逸した割合を表すもので、その反面のエネルギー蓄積 E^{stored} を計算する際に、内部エネルギーの収支から、弾性エネルギーを除去する必要がある。

$$\Delta E^{\text{stored}} = \Delta U - \Delta W^e - c\Delta T \quad (7)$$

したがって、エネルギー蓄積による TQC の計算式 β_1 は、

$$\beta_1^{\text{int}} = 1 - \frac{\Delta U - \Delta W^e - c\Delta T}{\Delta W^p} \quad (8)$$

$$\beta_1^{\text{diff}} = 1 - \frac{dU - dW^e - cdT}{dW^p}$$

である。温度の変化を反映する項 $c\Delta T$ (cdT) では、熱伝導によるエネルギー収支が考慮される。

本稿では、TQC の従来の定義式 (式 1) を β_0 、新しい計算式 (式 8) を β_1 で表す。

分子動力学シミュレーションの応力-ひずみデータから、塑性仕事を計算する。まず、応力とひずみ増分から変形仕事の増分を計算する。

$$dW = \sum_{i=1}^6 \sum_{j=1}^6 \delta_{ij} \sigma_{ij} d\epsilon_{ij} \quad (9)$$

$$\Delta W = \int_0^t dW$$

そして、弾性エネルギー W^e は、剛性マトリックス C_{ijkl} および応力 σ_{kl} によって

$$W^e = C_{ijkl} \sigma_{kl} \sigma_{kl} \quad (10)$$

のように計算することができる。 W^e は、応力で計算するものであり、体積が一定な境界条件では、熱膨張の効果に相当するエネルギー収支も含まれている。 ΔW (dW) から ΔW^e (dW^e) を引いたものが ΔW^p (dW^p) となる。

2.2 MD の計算条件

アルミニウム (Al) の原子モデルを新たに構築して、分子動力学シミュレーションに用いた。モデルは完全結晶である。モデルの原子数は 27,000,000 であり、結晶構造は面心立方格子 (FCC) である。

LAMMPS⁽⁴⁾を用いて MD シミュレーションを行う。原子間相互作用を表すポテンシャルは EAM ポテンシャル⁽⁵⁾を用いた。それぞれ断熱定積 (NVE アンサンブル) と定温定積 (NVT アンサンブル) の熱力学的境界条件で単純せん断変形を施す。

ここで、完全結晶モデルの分子動力学法による変形の計算では、エネルギーの収支に転位の形成エネルギーが含まれる。これを避けるために、安定な初期欠陥を導入しておく必要がある。そこで、本研究では表 1 に示す条件で著者らが提案した P-P-D (Pre-Pause-Deform) 法⁽³⁾という計算ステップを用いる。P-D-D 法では、TQC の計算のための本変形 (Deform) を行う前に、完全結晶のモデルに予変形 (Pre) を施し初期欠陥を自発的に形成させてから変形を停め (Pause)、除荷 (すなわち応力を 0 にする。表 1 では $\sigma = 0$ と表す) して初期欠陥が平衡になるまで構造緩和させる。P-P-D 法によって、モデルに熱力学的に安定な初期欠陥を導入しておくことができる。Pause では、除荷によって予変形による弾性ひずみ ϵ^e が 0 に戻る。そして、本変形 (Deform) において TQC を評価する。ここでは、本変形の開始点でのひずみは 0 ($\epsilon = 0$) とする。

表 1 : MD シミュレーションの条件

Stage	Pre	Pause	Deform
Ensemble	①	②	
Deformation	Shear		Shear
Time, t / ps	700	500	500
Pressure, p / Pa	-	$\sigma_{13} = 0$	-
Strain, $\Delta\epsilon$	0.35	$-\epsilon^e$	0.25
Strain rate, $\dot{\epsilon}$ / s ⁻¹	5×10^8	0	5×10^8

※アンサンブル : ①-NVT、②-NPH

2.3 計算リソース

本研究では、LAMMPS による分子動力学シミュレーションはすべて、大阪大学 D3 センターのスーパーコンピュータ SQUID の CPU ノード群を利用して行った。計算リソースは一回あたり、64 ノードで 8 時間程度であり、ストレージは約 250GB である。

3. 解析結果

3.1 P-D-D 法

図 1 に、P-P-D 法を用いて得られた応力-ひずみ曲線を示す。Pre-deformation は、モデルの初期状態は完全結晶であるため、大きな応力オーバーシュートが発生した。一方、Deform の段階では、応力オーバーシュートが起らず、応力-ひずみ曲線は弾完全塑性に近い挙動を示している。よって、本研究では、P-D-D 法によって応力オーバーシュートを最小化することができた。

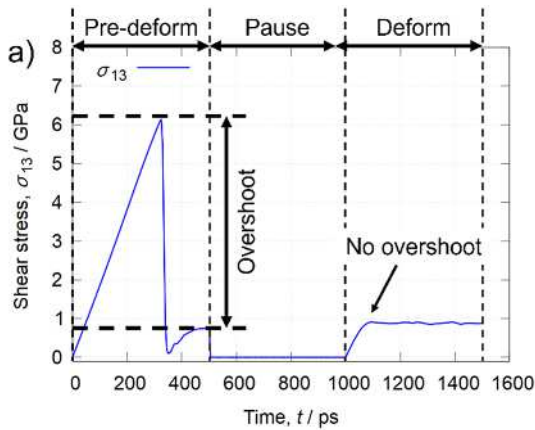


図 1 : P-P-D 法による応力オーバーシュートの最小化

3.2 新しい定義式による TQC の予測

小正準集団 (NVE アンサンブル) および正準集団 (NVT アンサンブル) 下の TQC を予測する。塑性流動が安定な領域 (せん断ひずみ $\varepsilon_{13} > 0.05$) では、 β_0 と β_1 の予測結果が一致している。せん断ひずみ $\varepsilon_{13} > 0.20$ の領域では、 β の曲線がすでに収束したと考えられ、 $\varepsilon_{13} > 0.20$ での平均値 $\bar{\beta}$ を TQC の予測値とする。NVE アンサンブルでは、 $\bar{\beta}^{\text{int}}_0 = \bar{\beta}^{\text{int}}_1 = 1.02$ ($\bar{\beta}^{\text{diff}}_0 = \bar{\beta}^{\text{diff}}_1 = 1.05$)、NVT

アンサンブルでは、 $\bar{\beta}^{\text{int}}_0 = \bar{\beta}^{\text{int}}_1 = 0.97$ ($\bar{\beta}^{\text{diff}}_0 = \bar{\beta}^{\text{diff}}_1 = 1.03$) の結果が得られた。

4 考察

4.1 TQC の境界条件への依存性

NVE では、TQC の予測結果は NVT での予測結果より大きい。図 2 に、NVE と NVT での変形中の転位密度の変化を示す。両方とも、転位密度はまず増加し、時間が 100~200 ps の間に最大値に到達してから減少していた。これは、変形中に動的回復 (Dynamic Recovery) が発生したと示している。動的回復は、変形仕事を駆動力とした転位の再配置による転位構造の最適化の過程である。NVE アンサンブルでは、その転位密度の最大値、およびその最終値は NVT の場合より小さい値を示している。

NVE では、変形中で発生した熱 Q はモデルの中に原子の内部エネルギーとしてとどまり、その後の変形プロセスに影響する。一方で、NVT では、 Q は発生した時点ですぐにサーモスタットによって除去され、その後の変形プロセスに影響しない。したがって、NVE モデルでの動的回復の駆動力が塑性仕事全体 W^p で、NVT モデルは、その動的回復の駆動力が熱にならなかった塑性仕事 ($W^p - Q$) である。NVE モデルはその動的回復の駆動力が大きく、転位密度の減少量が大きいことが、TQC の予測値が 1 を超えた原因として考えられる。

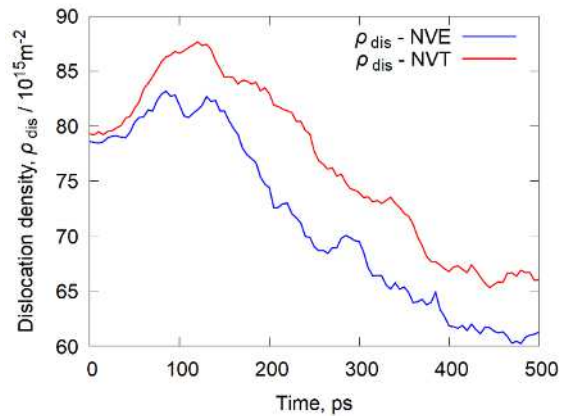


図 2 : 小正準集団 (NVE) および正準集団 (NVT) での変形に伴う転位密度 ρ_{dis} の変化。

4.2 TQC の分子動力学モデルの最適化

本研究では、計算結果の精度を保ちつつ計算リソースの利用効率の向上を図り、異なる原子数のモデルを用いて、NVE アンサンブルで同じ条件で単純せん断変形の分子動力学シミュレーションを行った。ここでは、NVE アンサンブルを使用した原因は、その計算時間が最も短いからである。

それぞれのモデルの原子数、1回の計算に必要な計算リソースとそのTQCの予測値を表2に示す。原子数が1,720,000のモデルが文献値 $\beta_{\text{Ref.}}$ に最も近い値を得た。ただし、Ref. (6)では、高速変形（近似的な断熱条件）での試験片の温度上昇をその場測定し、TQCの定義式 β_0 でTQCを計算するような手法を用いた。Ref. (6)では、熱伝導・熱膨張が無視され、熱力学的境界条件が断熱定積に近似されていた。熱伝導については考察されなかったため、温度上昇の測定結果およびTQCの予測結果が過小評価された可能性がある。そのため、Ref. 7の実験からの正確なTQCの予測結果は、0.96より大きいと考えられる。本研究で調査されたモデルは、原子数が1,720,000のものから $\beta_{\text{Ref.}}$ と一致したTQCの予測値、原子数が27,000,000のものから1.00を超えたTQCの予測値を得た。

原子数が576,000と1,720,000のモデルでは、そのモデルの体積が小さく、その格子欠陥が互いの弾性場に影響されやすく、その進展が実際の材料と異なる可能性があり、その密度の計算結果も瞬時的に発散する恐れがあるが、原子数が27,000,000のモデルでは、そのMD計算およびその結果データの後処理に膨大な計算リソースが必要であるため、汎用的ではないと考えられる。よって、さらなる考察は必要であるが、本研究では、原子数が1,720,000の原子モデルが最も適切であると考えられる。よって、これからのTQCのMD計算では、原子数が100万個以上の超大規模原子モデルを用いる必要があると考えられる。

表2：モデルの原子数および計算リソースが

TQCの予測結果への影響

The number of atoms, N	Node×time, t / hours	$\bar{\beta}_0^{\text{int}}$	$\beta_{\text{Ref.}}$
576,000	17.6	0.95	0.96 ⁽⁶⁾
1,720,000	34.4	0.96	
27,000,000	221.9	1.02	

5. おわりに

塑性仕事の熱変換効率（Taylor-Quinney coefficient, TQC）を正確に予測するために、純アルミニウムの大規模原子モデルを新たに構築して、それぞれ断熱定積（NVE）、定温定積（NVT）の境界条件で分子動力学計算を行い、以下の知見を得た：

- ・塑性変形の分子動力学計算によくある応力オーバーシュートを避けるために、P-P-D法を提案した。超大規模原子モデルを用いたP-P-D法によるシミュレーションでは、応力オーバーシュートが完全に抑制された。
- ・ β の計算結果は、分子動力学シミュレーションの境界条件に依存する。TQCの正確な実験値は、NVTでの計算結果とNVEでの計算結果の間にあると考えられる。
- ・TQCの計算結果はモデルの原子数に依存性がある。これから、計算結果の妥当性と計算の効率向上を両方考慮して、モデルの原子数は少なくとも100万個以上が必要であると考えられる。

参考文献

- (1) D. Rittel et al., J. Mech. Phys. Solids, 107 (2017), 96.
- (2) D. Rittel, Mech. Mater., 31 (1999), 131.
- (3) 李響ほか: JIMM 2023 年春期講演大会, (2023), P98.
- (4) S. Plimpton, J. Comp. Phys., 117 (1995), 1-19.
- (5) M.I. Mendeleev et al., Phil. Mag., 88-12 (2008), 1723.
- (6) T. Zhang et al., Acta Mech. Sin., 34 (2018), 327.

電荷注入現象の解明を目的とした金属/ポリマー界面モデリング

片瀬 大祐

東京大学 大学院工学系研究科電気系工学専攻

1. はじめに

有機高分子絶縁材料は、従来の無機絶縁材料と比較して安価かつ軽量であり、成型が容易であることから、さまざまな電気機器に広く用いられている。例えば、電子デバイスや電気自動車、配電系統の直交変換装置に使用されるインバータやコンバータといったパワーモジュールでは、封止材や基板の絶縁材料としてシリコンゲルやエポキシ樹脂が使用されている。また、広く普及している CV ケーブルでは、絶縁層として架橋ポリエチレン (XLPE) が用いられている。再生可能エネルギーの大量導入や電力機器の小型化・高効率化のため、絶縁ポリマーにはさらに高い信頼性、耐圧性能、長寿命が求められている。しかし、高分子絶縁材料はその高次構造が複雑であり制御も困難であることや、絶縁体中の電子の挙動を記述する理論的基盤が未整備であることから、その物性や劣化機構に関する研究は発展途上である。

絶縁ポリマーを用いた機器では、金属電極とポリマーの界面で熱電子放出や電界放出により金属からポリマー内部へ電荷が注入され、材料の劣化や絶縁破壊を引き起こすことが知られている。図 1 に示すようなパワーモジュールでは構造的に高電界となるチップ終端部においてアルミワイヤから空間電荷が注入されることで局所的に電界が集中し、デバイス全体の性能低下を招く要因となる。このような問題の解決には、金属/ポリマー界面における電荷注入の制御手法の開発が必要である。そのために、注入電流に指数関数的に影響する支配的パラメタである界面の電荷注入障壁の決定機構解明が求められている。図 2 に示すように金属/絶縁ポリマー界面における電荷注入障壁は、金属のフェルミ準位 (E_F) とポリマーの価電子帯上端 (VBM)、伝導帯下端 (CBM)

とのエネルギー差として定義される。金属/半導体界面ではフェルミ準位の一致により半導体側で電荷が偏り、バンドベンディングが生じることが知られている。一方、絶縁材料はバンドギャップが大きいので、フェルミ準位を厳密に定義することが難しい。また、分子サイズが大きく、モルフォロジーや双極子の配向などの構造的要因が複雑に絡むため、高分子材料の解析には高い計算負荷と時間が必要となる。また、実験的な裏付けも依然として乏しいのが現状である。

そこで私たちの研究室では、X 線光電子分光法 (XPS) を用いた、金属/絶縁ポリマー界面の電荷注入障壁の測定手法を新しく開発した[1]、[2]。これまでに金と 7 種類のポリマーとの各界面について XPS による測定と第一原理計算の両方から界面の正孔注入障壁を求めている[3]。第一原理計算による解析では界面における真空準位シフト、ポリマーのイオン化エネルギー、ポリマー中

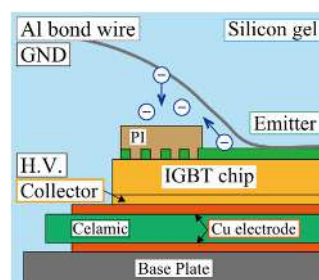


図 1 : IGBT チップ終端部の電荷注入現象

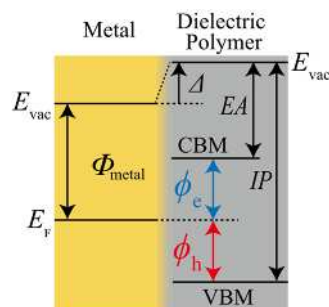


図 2: 金属/絶縁ポリマー界面の電子準位接続

の極性基や接合状態の差異による影響について定量的な議論が可能である。そのため、本研究の目的である金属/絶縁ポリマー界面の電子準位接続解明のために、実験による測定と第一原理計算による解析を相補的に利用することが不可欠である。

2. 第一原理計算による絶縁ポリマー/金属界面の電荷注入障壁計算手法

金属/ポリマー界面の正孔注入障壁 ϕ_h を計算するため、本研究ではポリマーのイオン化エネルギー IP 、金属の仕事関数 Φ_{metal} 、界面における真空準位シフト Δ をそれぞれ計算した。それぞれの計算結果から式(1)に示すように正孔注入障壁を評価した。

$$\phi_h = IP - \Delta - \Phi_{\text{metal}} \quad (1)$$

各種ポリマーのイオン化エネルギー IP は ΔSCF 法[4]によって求めた。計算対象とするポリマーに対応するオリゴマーを対象として電氣的に中性な状態と、電子を1つ失い正に帯電した状態の最適構造における総エネルギーをそれぞれ計算し、両者の差分をイオン化エネルギーとして求めた。オリゴマーの構造最適化、および総エネルギーの計算は Gaussian16W を使用し、B3LYP/6-31g(d)レベルで行った。金属の仕事関数と真空準位シフトは Quantum Espresso に実装された DFT により計算した。汎関数として vdw-DF[4]を採用し、ウルトラソフト擬ポテンシャルを用いた。まず金属の単位格子について構造最適化計算を行い、格子定数を求めた。格子定数は波動関数と電荷密度のカットオフはそれぞれ 50 Ry、400 Ry とし、k-point メッシュは $9 \times 9 \times 9$ として計算した。計算された格子定数に基づき a , b , c 軸方向にそれぞれ 4 層の金属原子からなる金属層を作成し、 c 軸方向に 20 Å の真空層を確保してスラブモデルの初期構造を作成した。スラブモデルの面方位は(100)面とした。金属の仕事関数の面方位ごとの差異は c 軸で一番下の 1 層を固定し、それ以外の原子の構造最適化により金属スラブモデルを構成した。波動関数と電荷密度のカットオフは 50

Ry、400 Ry、k-point メッシュは $5 \times 5 \times 1$ とした。最適構造のスラブモデルに関して静電ポテンシャル分布を計算し、真空層の準位とフェルミ準位の差を仕事関数として求めた。全ての構造最適化計算において、最大の力が 0.026 eV/Å 以下になることを収束条件とした。また金属層と真空層の間に各ポリマーのオリゴマーを挿入して金属/ポリマー界面モデルの初期構造を構成した。金属とポリマーの接合状態の影響を検討するため、図3に示すように金属とポリマーの物理的な接触のみを考慮した物理吸着モデルと、ダングリングボンドを仮定して化学的な結合を考慮した化学吸着モデルの2種類を作成した。本研究では図2中矢印で示した向きを真空準位シフトの正の向きとした。

3. 計算結果

Ag、Au、Pt の格子定数はそれぞれ 4.24 Å、4.25 Å、4.04 Å と計算された。それぞれの値は文献値[5]の 4.08 Å、4.07 Å、3.91 Å という値と 5%以内の誤差で一致した。各々の計算結果から、各金属のスラブモデル初期構造を構築し、構造最適化、仕事関数計算を行った結果を表1に示す。各金属の仕事関数は、それぞれ 4.4 eV、5.2 eV、5.7 eV

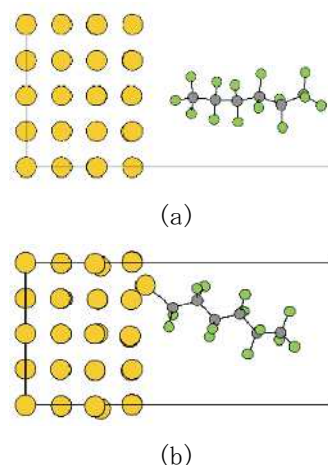


図3 金属/PTFE 界面モデル模式図
(a)物理吸着モデル (b)化学吸着モデル

表1 仕事関数計算結果

	Ag(100)	Au(100)	Pt(100)
計算値	4.4	5.2	5.7
文献値 ^[6]	4.36	5.22	5.75

表 2 Δ SCF 法による絶縁ポリマーのイオン化エネルギー計算結果

	PE	PP	PTFE	PI	PS	PET	PPS
計算値	8.9 eV	8.5 eV	10.4 eV	6.7 eV	7.1 eV	8.1 eV	6.3 eV
文献値	8.5 eV ^[7]	8.75 eV ^[8]	10.6 eV ^[9]	6.2 eV ^[10]	6.95 eV ^[11]	7.35 eV ^[8]	6.0 eV ^[12]

と算出された。これらは文献値[6]の 4.35 eV、5.22 eV、5.75 eV と 0.1 eV 以内の誤差で一致している。ポリマーのイオン化エネルギーについては、 Δ SCF 法によって算出した各ポリマーの値と、対応する文献値[7-12]を表 2 に示す。それぞれの計算値は文献値と良く一致しており、本計算手法の信頼性が確認された。

各金属/ポリマー界面において、物理吸着および化学吸着を仮定したそれぞれのモデルに対して真空準位シフトの計算を行った結果を図 4 に示す。接合状態の違いにかかわらず、界面の真空準位シフトは Pt との界面で最も小さく、次いで Au、Ag の順に大きくなる傾向が見られた。ただし、金属種の変更に対するシフトの変化量は、ポリマーごとに異なっていた。

また、化学吸着モデルは物理吸着モデルに比べ、金属種の違いによる真空準位シフトの変動幅が大きくなる傾向が見られた。特に金属/PTFE 界面モデルにおいては、物理吸着モデルの真空準位シフトが Ag/PTFE で -0.1 eV、Au/PTFE で -0.2 eV、Pt/PTFE で -0.1 eV であるのに対し、化学吸着モデルでの真空準位シフトは、Ag/PTFE で 1.6 eV、Au/PTFE で 1.2 eV、Pt/PTFE で 0.9 eV と、いずれも物理吸着モデルより 1 eV 以上大きな値が計算された。

4. 考察

図 5 に第一原理計算による正孔注入障壁計算結果と XPS による正孔注入障壁の測定結果を示す。第一原理計算によって求めた正孔注入障壁の計算値と XPS による実測値の誤差を評価するため、平均平方根二乗誤差(RMSE: Root Mean Square Error)を計算した。物理吸着モデルを用いた計算値と実測値の RMSE は 0.76 eV であり、化学吸着モデルを用いた計算値と実測値の RMSE は 0.97 eV であった。このことから、測定試料の金属/ポ

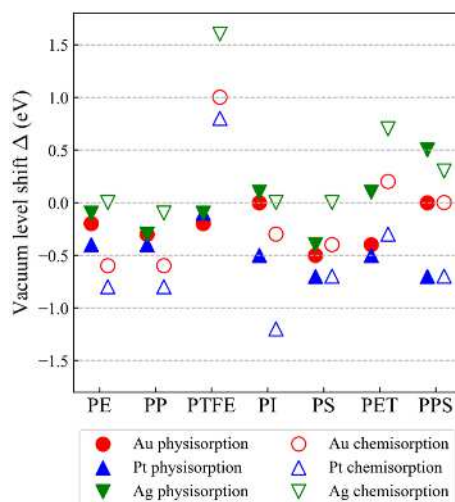
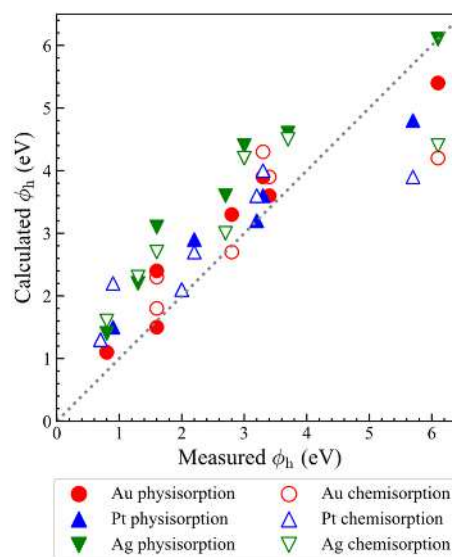


図 4 金属/ポリマー界面モデルを用いた界面における真空準位シフト計算結果

図 5 金属/ポリマー界面の正孔注入障壁 ϕ_h 測定結果と計算結果の比較

リマー界面は物理吸着モデルにより模擬した界面状態に近いと考えられる。また、本研究の化学吸着モデルは物理吸着モデルに比べ、金属種の違いによる真空準位シフトの変動幅が大きくなる傾向が見られた。計算対象としたポリマーの中でも、特に PTFE と各金属界面では接合状態の違いによって真空準位シフトの値が 1 eV 以上変化した。これは、PTFE の電子親和力が大きく、金属層と化学的に結合しているときに金属と PTFE の

間で電荷が移動するためと考えられる。今後、試料の界面状態が正孔注入障壁に与える影響について検討するために、第一原理計算によって正孔注入障壁を計算する金属/ポリマー種を拡張する予定である。

参考文献

- (1) R. Yoshinaga, H. Suzuki, R. Okano, M. Kobayashi, A. Kumada and M. Sato, "Determination of Band Alignment at Au/PTFE and Au/PP Interfaces by First-Principles Calculations and XPS," *IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul.*, 30(5), pp. 2010-2015, (Oct. 2023).
- (2) 片瀬 大祐, 鈴木 遥登, 好永 るり佳, 小林 正起, 熊田 亜紀子, 佐藤 正寛, "Au/ポリプロピレン界面, Au/ポリイミド界面のバンドアラインメントの解明," *電学論 A*, 143(5), pp. 201-202, (May. 2023).
- (3) D. Katase, H. Suzuki, M. Kobayashi, A. Kumada and M. Sato, "Probing the Band Alignment at the Au/Polymer interface, " *IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul.*, Vol.30, No.6, pp.2923–2925 (2023)
- (4) M. Dion et al.: "Van der Waals Density Functional for General Geometries," *Phys. Rev. Lett.*, Vol.92, No.24 246401 (2004)
- (5) W. P. Davey: "Precision Measurements of the Lattice Constants of Twelve Common Metals," *Phys. Rev.*, Vol.25, pp.753–761 (1925)
- (6) G. N. Derry, M. E. Kern, and E. H. Worth: "Recommended Values of Clean Metal Surface Work Functions." *J. Vac. Sci. Technol. A*, Vol.33, No.6 060801 (2015)
- (7) M. Fujihira, and H. Inokuchi: "Photoemission from Polyethylene," *Chem. Phys. Lett.*, Vol.17, No.4 pp.554–556 (1972)
- (8) N. R. Rajopadhye, and S. V. Bhoraskar: "Ionization Potential and Work Function Measurements of PP, PET and FEP Using Low-Energy Electron Beam," *J. Mater. Sci. Lett.*, Vol.5, No.6 pp.603–605 (1986)
- (9) K. Seki et al.: "Electronic Structure of Poly(Tetrafluoroethylene) Studied by UPS, VUV Absorption, and Band Calculations," *Phys. Scr.* Vol.41, No.1 pp.167–71 (1991)
- (10) N. Sato, et al.: "Photoelectron Emission on Polyimide Films Irradiated by Proton," In *IEEE 2018 Condition Monitoring and Diagnosis (CMD)*, pp.1–4. (2018)
- (11) S. Asada, K. Seki, and H. Inokuchi: "Ultraviolet Photoelectron Spectroscopy of Poly(p-Phenylene Sulfide) (PPS)," *Chem. Phys. Lett.*, Vol.130, No.3 pp.155–159 (1986)
- (12) N. Ueno, W. Gädeke, E. E. Koch, R. Engelhardt, and R. Dudde: "Quasi-Molecular Angle Dependence of Photoemission from Thin Films of Polystyrene," *J. Electron Spectros. Relat. Phenomena*, Vol.36, No.2 pp.143–151 (1985)

医薬品有害事象プラットフォームへの言語生成 AI の搭載による
安全性情報の収集・分析の効率化

浅野 弘斗

大阪大学 大学院薬学研究科

1. はじめに

医薬品は疾病治療に不可欠である一方、有害事象という予期せぬ健康被害を引き起こすリスクを内包する。抗がん剤投与時の悪心・嘔吐のように医薬品との因果関係が明らかな「副作用」は添付文書に記載され、予防や対処法が確立されている。しかし臨床現場では、因果関係が明確でなく、予期の難しい「有害事象」が発生しうる。これらの情報を適切に収集・評価することは、患者の安全確保において極めて重要である¹⁾。

各国の規制当局は有害事象報告を収集・公開しており、代表例として日本の医薬品医療機器総合機構（PMDA）による医薬品副作用データベース（JADER）や、米国食品医薬品局

(FDA)の有害事象報告システム (FAERS) が挙げられる。特に FAERS は、2025 年 4 月時点で約 3,018 万件の報告を含む世界最大規模のデータベースであり、医薬品の市販後安全性監視、とりわけ臨床試験では検出困難な稀な事象や長期的な影響を把握するための不可欠な情報源となっている。

薬剤師をはじめとする医療従事者には、これらの安全性情報を収集・評価し、治療方針の決定に活かす役割が期待される。しかし、従来の添付文書やガイドライン中心の情報収集に加え、FAERSのような大規模データベースを自在に活用するには、データベース処理、プログラミング、統計解析といった専門的なスキルが不可欠であり、これが臨床現場での大きな障壁となっている²⁾。

我々はこの課題を解決すべく、Web アプリケーション型の有害事象解析プラットフォーム「Adverse Events Signal-detection Tool (AEST)」を

開発してきた³。AESTは、医薬品名を入力するだけでFAERSを統計解析し、結果をグラフ等で可視化するツールである(図1)。



図 1 AEST の解析画面

これにより、IT や統計の専門知識がなくとも、誰もが短時間で世界最大級のデータベースから知見を得ることが可能となり、医療現場での応用が期待される。

しかし、AEST が提供する統計解析結果や可視化情報を正確に解釈し、臨床判断に繋げるには、統計解析結果や可視化された情報を整理して理解しやすく示すことが求められる。そのため、専門性が異なる多様な医療従事者が本ツールを有効に活用できるよう、解析結果の「解釈」を支援する機能の追加が課題として挙げられる。

近年、情報科学分野では ChatGPT に代表される大規模言語モデル（LLM）が登場し、自然言語処理に大きな変革をもたらした。LLM は汎用的な能力に加え、高度に専門化された領域でも顕著な性能を示している。例えば、米国専門医試験において、追加学習なしで高いスコアを達成したとの報告もある^{4,5}。これは、AI が医学・薬学分野の臨床、教育、研究において強力な支援ツールとなり得ることを示唆している。以上の背景から、本研究では、医薬品有害事象情報

の臨床活用をさらに促進する AI システム開発を目的とする。具体的には、日本の薬剤師国家試験をベンチマークとして用い、ローカル環境で動作する LLM の薬学分野における基礎性能を評価するとともに、ファインチューニングによる薬学特化 LLM の構築と性能向上を試みた。

2. 手法

2.1 薬剤師国家試験

本研究では、2012 年（第 97 回）から 2024 年（第 109 回）までに実施された日本の薬剤師国家試験（Japanese National Pharmacist Examination; JNEP）の過去問題を用いた。JNEP は、厚生労働省の管轄下で年 1 回実施される国家資格試験であり、薬剤師として業務を遂行する上で必須となる基本的な知識と技能を評価することを目的とする。試験では、実践的な薬学的知識、関連法規、職業倫理など、臨床現場で不可欠とされる広範な能力が問われる。各年の試験は、物理、化学、生物、衛生、薬理、薬剤、病態・薬物治療、法規・制度・倫理、実務の 9 科目 345 問の多肢選択式問題で構成される。全ての問題は 1 つまたは 2 つの正解を持ち、解答は指定された選択肢と完全に一致した場合にのみ正解とみなされる。また、一部には連問形式が採用されており、解答には設問の文脈や先行する問題への解答を考慮する必要がある。合格基準は相対基準で変動するが、例えば第 109 回試験では、必須問題で 70%以上、各科目で 30%以上、全体で約 61%（210/345 問）以上の正答率を満たし、かつ医療倫理・安全上不適切な選択肢である「禁忌肢」の選択が 2 つ以下であることが求められた。

2.2 データセット

本研究で用いた LLM はテキスト入力のみに対応するため、化学構造式や図表など、視覚的情報の解釈を必要とする問題は評価対象から除外した。加えて、厚生労働省から正答の訂正などが公式に発表された問題も除外した。また、連問を構成する問題の一部にでも視覚情報が含ま

れる場合は、文脈依存性を考慮し、その連問全体をデータセットから除外することで、評価の妥当性を確保した。

2.3 LLMs

本研究では、4 つのローカル LLMs を使用した（表 1）。

表 1 研究で用いた LLMs の一覧

Short Forms for Models	Model Full Names	Parameters	Developer
phi-4	Phi-4	14 Billion	Microsoft Corporation
DSR1-Qwen32B	DeepSeek R1 Distill Qwen	32 Billion	High-Flyer
CA-DSR1-32B	DeepSeek R1 Distill Qwen fine-tuned for Japanese	32 Billion	High-Flyer and CyberAgent, Inc
CA-DSR1-14B	DeepSeek R1 Distill Qwen fine-tuned for Japanese	14 Billion	High-Flyer and CyberAgent, Inc

2.4 Low-Rank Adaptation (LoRA)

LoRA は、パラメータ効率の良いファインチューニング技術であり、大規模言語モデルの計算効率の良い適応を可能にする。LoRA の基本原理は、 W_0 と表される事前学習済みモデルの元の重みを固定し、適応中の重みの変化量 (ΔW) を表現するために訓練可能な低ランク行列を注入することである。

元の重み行列を下記とした場合、

$$W_0 \in \mathbb{R}^{d \times k}$$

LoRA は更新量 ΔW に対し低ランク分解を用いて下記のように近似する。

$\Delta W = BA$, where $B \in \mathbb{R}^{d \times r}$ and $A \in \mathbb{R}^{r \times k}$
 効率に関する重要な点は、ランク r が元の次元 d および k よりも大幅に小さいことである（すなわち、 $r \ll \min(d, k)$ ）。行列 A と B のみが訓練され、順伝播は元の演算 $h = Wx$ (x は入力、 h は出力) を以下のように更新する。

$$h = W_0x + \Delta Wx = W_0x + BAx$$

この式により、モデルは低ランクの更新行列（ A および B ）のみを学習することで新しいタスクに適応でき、 W 行列全体をファインチューニングする場合と比較して、訓練可能なパラメータの数を大幅に削減できる。広範な計算資源を要する従来のフルファインチューニングとは異なり、LoRA はコスト効率および資源効率に優れたアプローチを提供する⁶。

本研究では、前述した 4 つの LLM をベースモデルとし、それぞれに対して LoRA を用いたフ

ファインチューニングを実施した。その際、訓練データは訓練用と検証用に 9:1 の比率でランダムに分割した。

2.5 プロンプト

モデルへの入力には、共通のプロンプト構造を採用した。出力形式を統一するため、プロンプトの冒頭に指示文 (instruction header) を配置した。

2.6 性能評価

LLM の性能は、モデルが生成した解答と公式解答を照合して評価した。評価プロセスは、過去の研究に倣い、自動評価と人手によるレビューの 2 段階で実施した。まず、正規表現を用いて、規定フォーマットに則った解答を自動で抽出し、正誤を判定した。次に、自動抽出が困難であった不規則な形式の出力や曖昧な解答については、薬剤師による目視確認を行い、最終的な判定を下した。採点基準は、正答ごとに 1 点、誤答、不完全な出力、および解答を特定できなかった場合は 0 点とした。主要評価指標には、テストデータセットに対する正答率 (Accuracy) を用いた。

2.7 計算資源

本研究の全ての計算は、大阪大学サイバーメディアセンター (現:D3 センター) のスーパーコンピュータ「SQUID」上で実行した。評価時のモデル推論は、計算効率と数値安定性を両立させるため、半精度浮動小数点数 (FP16) で行った。また、LoRA によるファインチューニングでは、モデル性能の低下を抑制しつつ GPU メモリ使用量を削減するため、8 ビット量子化を適用した。

3 結果と考察

3.1 全体の正答率

ベースラインモデルの正答率は 55.15% から 76.36% の範囲であり、DSR1-Qwen32B が 76.36% と最高値を示した (表 2)。LoRA によるファインチューニング後のモデルでは、正答率は 54.54% から 76.97% の範囲となり、LoRA 適用後の DSR1-Qwen32B が 76.97% で最良の成績を達成した。CA-DSR1-32B および DSR1-Qwen32B は、ベースライン時点で第 109 回 JNEP の合格基準 (60.87%) を上回る成績を示した。ファインチューニングによる正答率の変化はモデルごとに異なり、変化なし (-0.61%) から最大 +5.45% の大幅な向上まで観察された。特に 4 モデル中 3 モデルでファインチューニング後に性能向上が認められ、phi-4 は最も顕著な改善を示した。これらの結果は、ローカル LLM の開発およびファインチューニング手法の有効性を示すものである。

3.2 ドメイン別正答率

分野別の正答率において、生物学、衛生学、病態生理学・薬物治療学、臨床実務では、ベースライン時点で一般的な合格基準 (約 60%) を上回る高い正答率が得られた (表 3)。特に生物学では、CA-DSR1-32B および DSR1-Qwen32B が満点を達成し、LoRA 適用後もその成績を維持した。また、衛生学は、全モデルでファインチューニング後の正答率が一貫して上昇した。薬理学、薬剤学、病態生理学・薬物治療学といった専門性の高い薬学領域では、LoRA ファインチューニングによって特定モデルで顕著な

表 2 全体の正答率の一覧

Model	Accuracy (%)		Difference (Fine -tuned - Base), %
	Base Model Accuracy, No./Total (%)	LoRA Fine -tuned Model Accuracy, No./Total (%)	
CA-DSR1-14B	91/165 (55.15)	90/165 (54.55)	-0.61
CA-DSR1-32B	106/165 (64.24)	112/165 (67.88)	3.64
DSR1-Qwen32B	126/165 (76.36)	127/165 (76.97)	0.61
phi-4	100/165 (60.61)	109/165 (66.06)	5.45

向上が見られた。phi-4 はこれら 3 領域全てで改善 (+11.1%、+14.3%、+3.8%) を示し、CA-DSR1-32B は病態生理学・薬物治療学で+11.5%の大幅な増加を示した。これらの知見は、ファインチューニングが専門領域での性能向上に寄与すること、LoRA が薬学知識の獲得に有効であることを示している。

法規・制度・倫理では、日本語特化調整を行っていない DSR1-Qwen32B および phi-4 がベースラインで良好な成績 (約 54%) を示し、LoRA 適用後にそれぞれ+16.7%、+12.5%と大幅な向上を達成した。これは、これら日本語非対応とされるモデルであっても、日本特有の法規・規制知識を内在的に保持している可能性を示唆する。

一方、化学ではモデルごとに LoRA ファインチューニングの効果が大きく異なった。CA-DSR1-14B および DSR1-Qwen32B はベースラインで比較的良好な成績 (50%、100%) を示したが、ファインチューニング後は正答率が大幅に低下した (-50.0%)。一方、ベースライン正答率が最も低かった CA-DSR1-32B (25%) は、LoRA 適用後に+50.0%と大幅な改善を示した。ただし、サンプル数が少ない (n=4) ため、このファインチューニングの効果のばらつきに対しては今後更なる調査が必要であると考える。

4. おわりに

AEST 解析結果の「解釈」を支援する機能の追加という課題に対し、ローカル環境で動作す

る LLM の応用可能性を検討した。本研究では、薬学領域におけるローカル LLM の性能を JNEP で評価し、薬学的専門知識を付与するファインチューニング手法の有効性を探索した。これらの成果は、機密性の高い医療情報を扱う環境下で、ユーザーの知識レベルやニーズに応じた情報解釈支援システムの構築に向けた基礎的知見を提供するものであると期待する。

参考文献

- Skelly, C. L., Cassagnol, M. & Munakomi, S. Adverse Events. in *StatPearls* (StatPearls Publishing, Treasure Island (FL), 2025).
- Nango, D., Sekizuka, T., Goto, M. & Echizen, H. Analysis of Information on Drug Adverse Reactions Using U.S. Food and Drug Administration Adverse Event Reporting System (FAERS). *Yakugaku Zasshi* **142**, 341–344 (2022).
- 浅野弘斗 *et al.* 有害事象解析プラットフォーム AEST の開発. in (京都, 2023).
- Schubert, M. C., Wick, W. & Venkataramani, V. Performance of Large Language Models on a Neurology Board–Style Examination. *JAMA Network Open* **6**, e2346721 (2023).
- Longwell, J. B. *et al.* Performance of Large Language Models on Medical Oncology Examination Questions. *JAMA Network Open* **7**, e2417641 (2024).
- Hu, E. J. *et al.* LoRA: Low-Rank Adaptation of Large Language Models. Preprint at <https://doi.org/10.48550/arXiv.2106.09685> (2021).

表 3 ドメイン別正答率の一覧

Domain	n	CA-DSR1-14B			CA-DSR1-32B			DSR1-Qwen32B			phi-4		
		Base (n)	Fine-tuned (n)	Δ(%)	Base (n)	Fine-tuned (n)	Δ(%)	Base (n)	Fine-tuned (n)	Δ(%)	Base (n)	Fine-tuned (n)	Δ(%)
Physics	11	7	6	-9.1	9	8	-9.1	8	9	9.1	8	7	-9.1
Chemistry	4	2	0	-50.0	1	3	50.0	4	2	-50.0	3	3	0.0
Biology	9	7	9	22.2	9	9	0.0	9	9	0.0	6	6	0.0
Hygiene	25	15	16	4.0	18	19	4.0	20	22	8.0	15	17	8.0
Pharmacology	27	10	8	-7.4	17	17	0.0	23	20	-11.1	11	14	11.1
Pharmaceutics	14	7	7	0.0	7	8	7.1	9	8	-7.1	7	9	14.3
Pathophysiology/Drug Therapy	26	16	15	-3.8	18	21	11.5	24	22	-7.7	19	20	3.8
Laws/Regulations/Ethics	24	12	13	4.2	12	12	0.0	13	17	16.7	14	17	12.5
Practice	25	15	16	4.0	15	15	0.0	16	18	8.0	17	16	-4.0

超臨界翼における特異な遷音速フラッター現象のメカニズム解明

三宅 冬馬

北海道大学 大学院工学院

1. はじめに

翼のフラッター現象とは、流体の空気力と翼の構造力および慣性力とが連成して生じる自励振動現象である。フラッターが発生すると翼に発散的な振動が生じるため、フラッターは非常に危険な現象として知られている。Figure 1 にフラッター境界の概念図を示す。従来の対称翼では、遷音速域において生じる翼面上の衝撃波が系を不安定化するため、フラッターが生じやすい領域（遷音速ディップ）が一つ生じることが知られている。一方、現在広く用いられている超臨界翼型は翼上面が平坦で翼後縁近傍で大きなキャンバーを持つことから、フラッター特性が変化すると考えられる。Persoon ら[1]は超臨界翼を用いた遷音速フラッター試験を行い、特定の迎角において2つの遷音速ディップが生じることを示した。またMiyake ら[2]は2次元フラッター解析によってダブル遷音速ディップを捉えることに成功しており、衝撃波の位相特性から不安定メカニズムについて説明した。これまでは2次元解析でのメカニズム解明が主であったが、実際の翼は後退角や翼端を有しているため流れ場の3次元性は無視できない。従って、本研究では超臨界翼を用いた3次元遷音速フラッター解析を行い、流れ場の3次元性がフラッター特性に及ぼす影響について調査する。

2. 数値計算手法および計算条件

流体の支配方程式としてレイノルズ平均した3次元圧縮性 Navier-Stokes 方程式を用いた。また乱流モデルとして SA モデルを用いた。構造側には弾性体の運動方程式を用い、モード法による解析を行った。流体—構造の連成には弱連

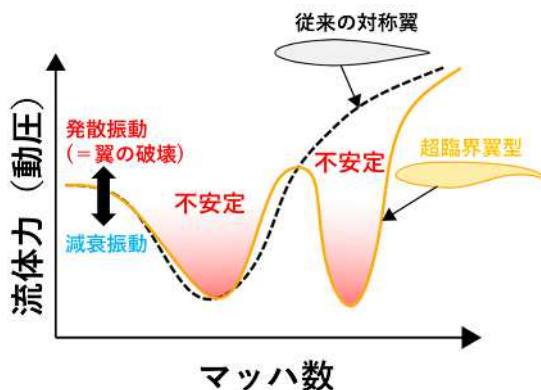


図1：フラッター境界の概念図

成法を用いた。本解析では Aeroelastic Research Wing 2 (ARW2)を対象に計算を行った。ARW2 はアスペクト比 10.3、テーパー比 0.286、前縁後退角 28.8deg の3次元超臨界翼であり、過去の実験で高マッハ数域における不安定性が確認されている[3]。

3. 結果と考察

3.1 静的計算

まず静的な状態での検証計算としてマッハ数 $M_\infty = 0.9$ 、迎え角 $\alpha = 0$ degでの流れ場を実験と比較した。その結果を Fig. 2 に示す。まず Fig. 2(a)に示す翼上面圧力係数分布から、翼根から翼端にかけて衝撃波が生じていることが分かる。次に Fig. 2(b)に示す 70.7%スパン位置の主流方向速度分布に着目すると、翼上下面で強い衝撃波が生じており、その背後で流れがはく離していることが分かる。また Fig. 2(c)に示す断面圧力係数分布の比較から、本解析結果は衝撃波位置やその背後での圧力分布などが実験と良く一致しており、妥当な計算が行えていることが分かる。

3.2 フラッター計算

次にフラッター解析の結果について述べる。

Figure 3 に本解析で得られたフラッター境界を示す。Figure 3 より、マッハ数の増大とともにフラッター動圧は低下し、 $M_\infty = 0.82$ で最小となることが分かる。また、さらにマッハ数を大きくするとフラッター動圧は急激に増大し、その後、再度フラッター動圧は低下する。そして $M_\infty = 0.94$ で極小となったのちフラッター動圧は再度増大する。このように本解析では先行研究[2]と同様のダブル遷音速ディップを捉えることができた。

ダブル遷音速ディップの発生要因について調査するため各マッハ数における流れ場を比較する。Figure 4 に各マッハ数における翼上面圧力係数分布、Fig. 5 に翼上面速度勾配分布をそれぞれ示す。ここで Fig. 5 中のピンク色の部分は速度勾配が負、つまり流れがはく離している領域を表す。Figure 4(a)より、一つ目のディップの底である $M_\infty = 0.82$ では翼上面に衝撃波が生じていることが分かる。Fig. 5 には示していないが、 $M_\infty = 0.82$ では、はく離は生じていないことを確認している。従って、 $M_\infty = 0.82$ では翼上面に生じた衝撃波の不安定化作用によりフラッター動圧が低下したと考えられる。また $M_\infty = 0.88$ では Fig. 4(b)および Fig. 5(a)に示すように、翼上面に強い衝撃波が生じ、さらに翼根部からスパン中央付近にかけて衝撃波背後で流れがはく離していることが分かる。衝撃波背後ではく離が生じた場合、衝撃波振動が系を安定化することが分かっており[4]、 $M_\infty = 0.88$ においても衝撃波振動の安定化作用によってフラッター動圧が回復したと考えられる。さらにマッハ数を大きくした $M_\infty = 0.94$ では Fig. 4(c)および Fig. 5(b)に示すように翼上面衝撃波はさらに強くなり、スパン全域にわたって衝撃波背後ではく離が生じていることが分かる。 $M_\infty = 0.88$ との流れ場の違いは衝撃波背後のはく離域の大きさであるため、スパン全体ではく離が系の不安定

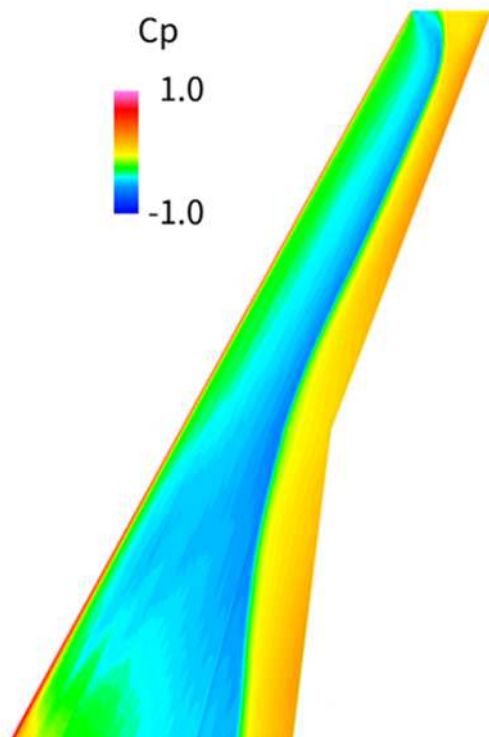
化につながっていると考えられるが詳細なメカニズムについては不明である。さらにマッハ数を大きくすると、Fig. 4(d)に示すように衝撃波は翼後縁に達し、翼上面のほとんどが超音速流れとなる。衝撃波が後縁に達すると衝撃波が後縁位置で固定され空気力の変化も小さくなる。加えて Fig. 5(c)に示すように衝撃波背後ではなく離も生じなくなる。そのため、フラッター動圧は大きくなる。

4. おわりに

本研究では超臨界翼 ARW2 を用いた 3 次元フラッター解析を行いフラッター特性について調査した。その結果、ARW2 では低マッハ数側でのディップに加えて、高マッハ数側においてもディップが生じることが分かった。また流れ場から低マッハ数側のディップは翼面上の衝撃波振動によるものであり、従来の典型的な遷音速ディップ特性が表れていることが分かった。一方、高マッハ数側のディップはスパン全域にわたって衝撃波背後で流れがはく離した場合に生じるものであることが分かったが、その詳細なメカニズムは不明である。従って今後、強制振動翼解析などを行い、高マッハ数側でフラッター動圧が低下する理由について調査していく。

参考文献

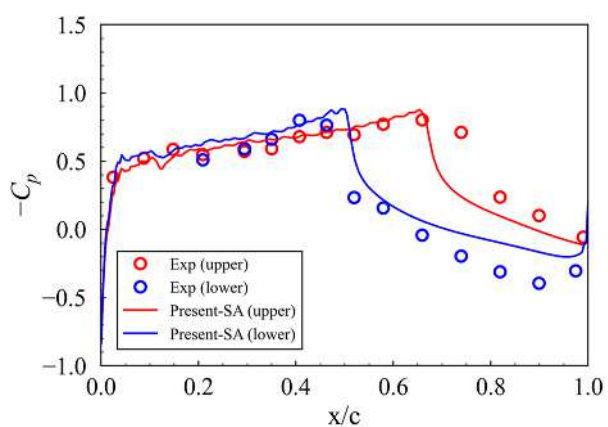
- (1) Persoon, A. J., et al., J. Aircraft, **21**, 906–912, (1984).
- (2) Miyake, T., and Terashima, H., AIAA J., **61**, 5365–5376, (2023).
- (3) David A. et al., AIAA Paper 1985-0598, (1985).
- (4) Selland, S., et al., AIAA J., **62**, 4881–4887, (2024).



(a) 翼上面圧力係数分布



(b) 70.7%スパン位置における主流方向速度分布



(c) 70.7%スパン位置における圧力係数分布の比較

図2 : $M_\infty = 0.9$ における流れ場

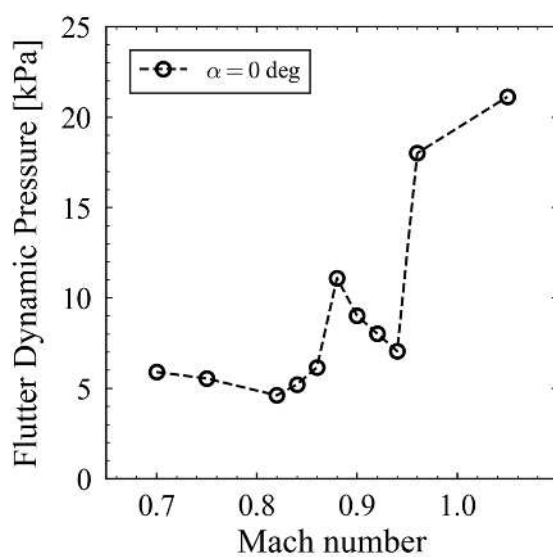


図3 : フラッター境界

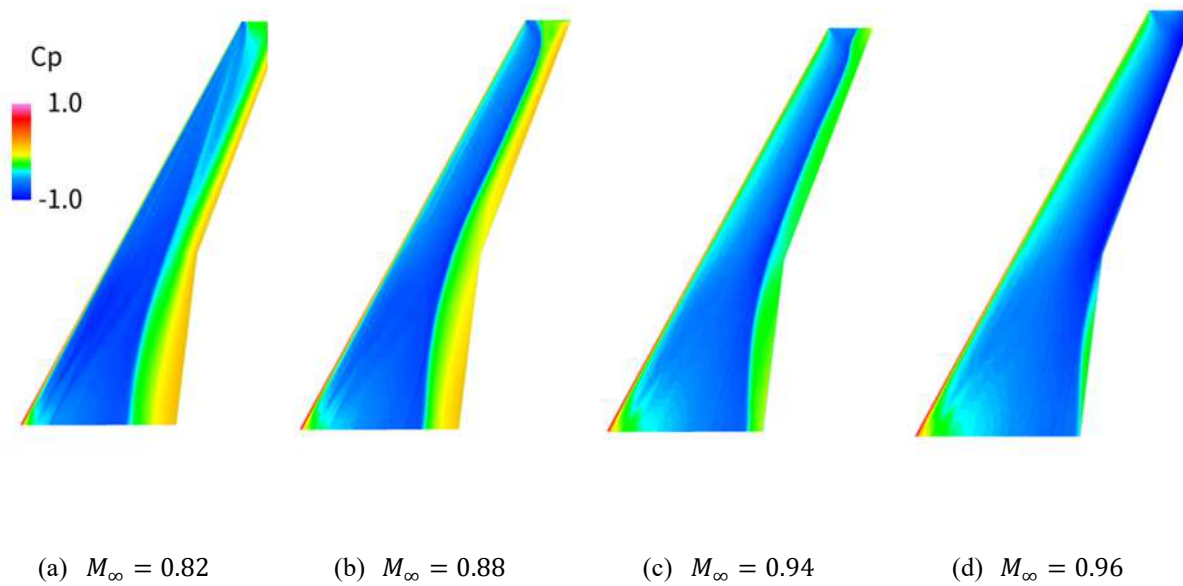


図4：各マッハ数における翼上面圧力係数分布

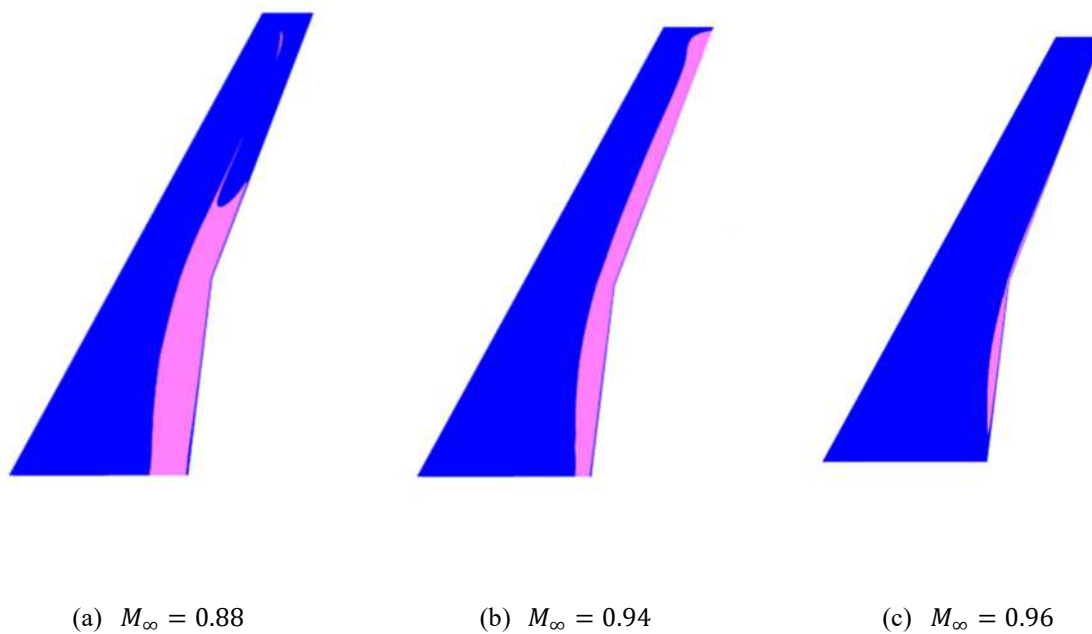


図5：各マッハ数における翼上面速度勾配分布

Machine Learning Metadynamics for Modeling Drug Release of Phosphoramidate-based Antibody-drug Conjugates in Cancer Treatment

Rizka Nur Fadilla and Yoshitada Morikawa

大阪大学 大学院工学研究科

1. Introduction

Antibody-drug conjugates (ADCs) are biopharmaceutical agents that deliver payloads, such as chemotherapeutic drugs, to cancer cells. The goal is to kill cancer cells while minimizing the damage to healthy cells, which is a common challenge in cancer chemotherapy. This is achieved by conjugating a cytotoxic agent to an antibody via a linker that targets the cancer cells. ADC efficacy depends on antibody specificity, linker cleavage selectivity (stability in the bloodstream but cleavage within cancer cells), and payload potency. [1,2]

Linker instability is a key challenge in the development of the ADC. This instability can cause premature payload release into the bloodstream before reaching the targeted cancer cells. This release can lead to toxicity, as shown by the withdrawal of mylotarg from the market in 2010 [3], following its FDA approval in 2000. Understanding these challenges is essential for successful development of ADCs.

The phosphoramidate-based linker (see Fig. 1) is among the several proposed linkers that address linker instability. It shows stability at neutral pH, corresponding to the extracellular environment, while enabling rapid release under the acidic

conditions found in cancer cells. This linker has proven effective in delivering diverse payloads, which could enhance the efficacy of the ADC [4-6]. Despite these promising results, no ADC using this linker has been approved. A possible explanation is the insufficient mechanistic understanding of the payload release.

Exploring the potential energy surface (PES) of chemical reactions is vital for understanding the payload release mechanisms of phosphoramidate-based linkers. PES reveals reaction pathways and energy barriers, helping to optimize linker design and control drug release kinetics. Accurately representing PES requires solving the Schrödinger equation approximated using density functional theory (DFT). However, DFT's computational cost of DFT often limits its application in statistical sampling, such as in metadynamic simulations. [7]

Recent advancements in machine learning methods have demonstrated the capability of accurately modeling the PES when trained accurate data. We developed a machine learning interatomic potential using a Deep Potential method for phosphoramidate in an aqueous environment. This potential was used to investigate the payload release mechanism of the phosphoramidate-based linker.

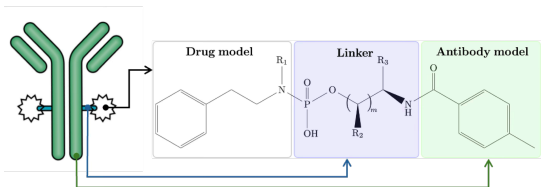


Fig. 1: Components of antibody-drug conjugates with phosphoramidate-based linker. Symbols R_1 , R_2 , and R_3 denote the substituent of the linker.

2. Computational Method

2.1 Deep Potential

We employed the Deep Potential (DP) framework [8] to construct a machine-learning interatomic potential. In the DP framework, the potential energy is expressed as the sum of atomic energies. Each atomic energy was determined based on the local environment within a specified cutoff radius. This procedure converts the local atomic environment into a descriptor that preserves translational, rotational, and permutational symmetries. The descriptor was fed into a deep neural network to predict the atomic energy and corresponding forces. The neural network was trained on atomic configurations and their corresponding energies and forces using DFT calculations. Once trained, the DP model drove the dynamic simulations. The DP framework was implemented using the DeePMD-kit [9].

2.2 Density-functional Theory (DFT)

Density functional theory (DFT) is a quantum-based approach used to investigate the electronic structures of molecules and materials. DFT-based calculations were used to generate training data for the DP network. CP2K software [10] was employed to compute the energy and atomic forces using revPBE-D2/TZV2P as the exchange-correlation

functional/basis set and the GTH pseudopotential [11,12]. The training data comprised two systems: pure bulk water and phosphoramidate in aqueous solution. Fig. 2 and 3 show the typical training structures used in this study.

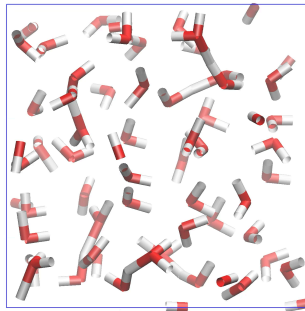


Fig. 2: Pure bulk water. The red and white colors denote oxygen and hydrogen atoms, respectively.

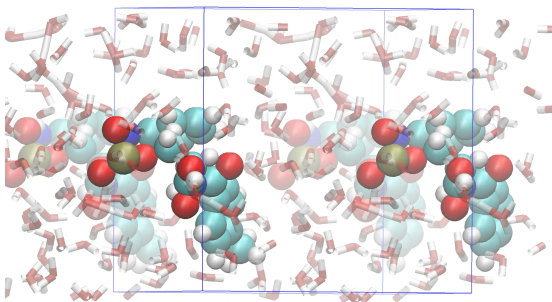


Fig. 3: Phosphoramidate-based ADC in aqueous solution. The red, white, green, blue, and brass colors denote oxygen, hydrogen, carbon, nitrogen, and phosphorus atoms.

2.3 Metadynamics

Metadynamics is a simulation technique that accelerates rare-event sampling by introducing a bias potential. This bias potential was applied to the selected collective variables (CVs) that characterized the chemical reaction. In our study, we selected two CVs: the P-N coordination number, reflecting P-N bond cleavage, and the P-O coordination number,

representing P-O bond formation. To perform the metadynamic simulation, we employed Plumed [13] in conjunction with LAMMPS [14].

3. Validation of Deep Potential

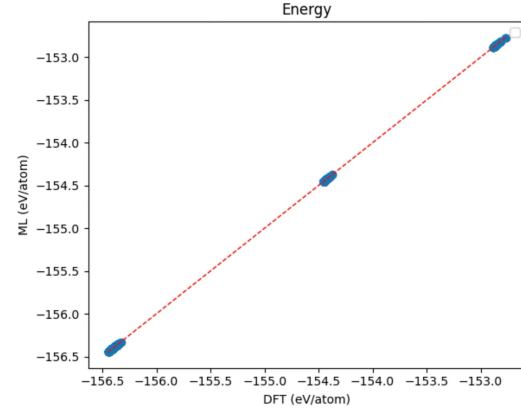
To evaluate the accuracy of the developed potential, we compared the machine learning (ML) potential predictions of energy and atomic forces with the results from density functional theory (DFT) (Section 3.1). In addition, we examined the oxygen-oxygen radial distribution function against the experimental results (Section 3.2).

3.1 Energy and Force

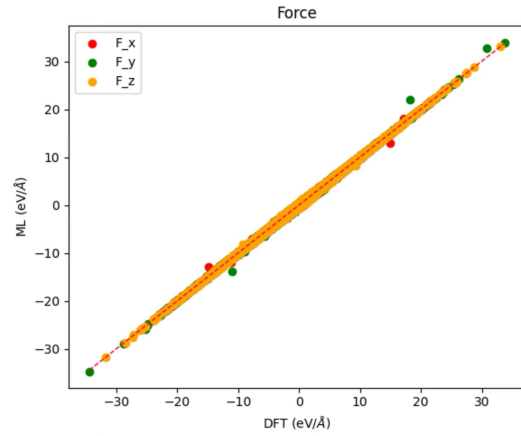
Fig. 4 presents parity plots comparing the energy and atomic forces determined by DFT and ML across 5,765 test data points. These test data were excluded from the training process and comprised pure bulk water and phosphoramidate in an aqueous solution. The root mean square errors (RMSE) for energy and atomic forces are 0.63 meV/atom and 67.88 meV/Å, respectively, indicating a high-quality potential.

3.2 Radial Distribution Function

The performance of the ML potential was further corroborated by examining the oxygen-oxygen radial distribution function (RDF) of pure bulk water, as shown in Fig. 5. The deviation between the predicted RDF and experimental data was small. The ML potential predicted a slightly higher localization of water molecules than the experimental observations. This results, along with the parity plot, suggests that our developed ML potential demonstrates a reasonable level of accuracy.



(a)



(b)

Fig. 4: Parity plot of (a) energy and (b) atomic forces.

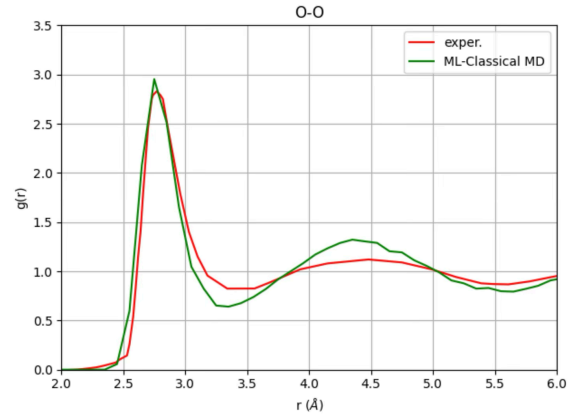


Fig. 5: Oxygen-oxygen radial distribution function of water.

4. P-N hydrolysis

ML metadynamics was employed to simulate the release of payload, which was represented by the cleavage of the P-N bond,

to elucidate the detailed mechanism. In the presence of COOH, it was observed that nitrogen protonation occurred, transitioning from a single N-H coordination to a dual N-H coordination, prior to the cleavage of the P-N bond. [15] This protonation results in slight elongation of the P-N bond, thereby facilitating its cleavage. At neutral pH, COOH tends to deprotonate and exists as COO⁻ (see Fig. 6). The presence of COO⁻ forms a relatively strong hydrogen bond with the nucleophile H₂O, aiding H₂O in attacking the phosphorus center and promoting P-N bond cleavage. To strengthen our argument, we compared this simulation with one conducted in the absence of COOH, which is currently in progress.

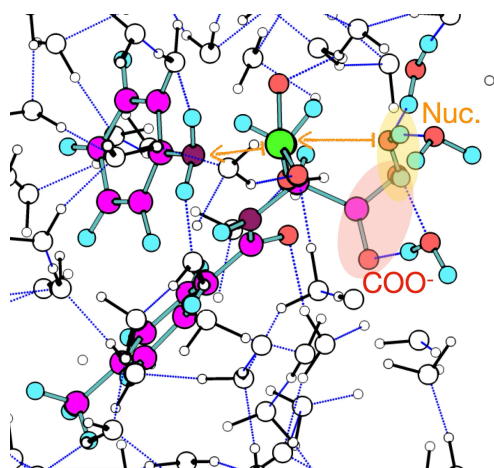


Fig. 6: COO⁻ assisting the nucleophile (Nuc.) H₂O to attack the phosphorus center.

5. Conclusion

We developed a machine learning potential grounded in the Deep Potential framework to model the interatomic interactions of phosphoramidate in aqueous environments. When paired with metadynamic simulations, this potential effectively captures rare events such as payload release through P-N bond cleavage. Our results suggest that in

the presence of COOH, nitrogen protonation precedes bond cleavage, and COO⁻ facilitates nucleophilic attack by stabilizing H₂O near the phosphorus center. Upon completion of this study, we anticipate that the payload release mechanism can be elucidated in detail.

Bibliography

- (1) R. V. J. Chari, et al., *Angewandte Reviews*, **53**, 3751-4005 (2014).
- (2) A. Samantasinghar, et al., *Biomedicine & Pharmacotherapy*, 113308 (2023).
- (3) A. D. Ricart, *Clinical Cancer Research*, **17**, 6417-6472 (2011).
- (4) C. J. Choy, et al., *Bioconjugate Chemistry*, **27**, 824-830 (2016).
- (5) C. J. Choy, et al., *Bioconjugate Chemistry*, **27**, 2206-2213 (2016).
- (6) F. P. Olatunji, et al., *Bioconjugate Chemistry*, **32**, 2386-2396 (2021).
- (7) A. Barducci, et al., *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, **1**, 826-843 (2011).
- (8) L. Zhang, et al., *Physical Review Letters*, **120**, 143001 (2018).
- (9) H. Wang, et al., *Computer Physics Communications*, **228**, 178-184 (2018).
- (10) T. Kühne, et al., *Journal of Chemical Physics*, **152**, 194103 (2020).
- (11) S. Goedecker, et al., *Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys.*, **54**, 1703 (1996).
- (12) C. Hartwigsen, et al., *Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys.*, **58**, 3641 (1998).
- (13) G. A. Tiberllo, et al., *Computer Physics Communications*, **185**, 604 (2014).
- (14) A. P. Thompson, et al., *Computer Physics Communications*, **271**, 10817 (2022).
- (15) R. N. Fadilla, et al. *Cybermedia HPC Journal*, **14**, 89-92 (2024)

超高強度レーザーによるイオン化の物理とその制御

畑 昌育

量子科学技術研究開発機構 関西光量子科学研究所

1. はじめに

超高強度レーザーにより加速される荷電粒子には、がん治療やレーザー核融合、イオン加速器の入射器といった多くの応用の可能性がある[参考文献 1,2]。さらに、レーザーによって生成・加速される高価数電離重イオンの場合には、重イオン衝突実験に代表される核物理への応用において大きな魅力がある[参考文献 2]。重イオン加速器は多くの加速器の複合体として構成されるが、この加速器の上流において重イオンを高価数電離状態にしておくことは、下流の加速器における加速効率を飛躍的に高めるため、非常に有用である。従来の重イオン加速器では、この前段における電離度が数価程度であり、仮に電離度を数十価にできたとするならば、その加速効率は単純に10倍となり、装置のコンパクト化、低コスト化が見込め、冒頭に述べた応用研究の大きな進展に繋がる。そのため、重イオン加速器に使われている従来のイオン源に代わる新しいイオン源としてレーザー加速重イオンは非常に有望視されており、Rare Isotope Beam Facilities においてレーザー加速重イオンの技術を使う提案もなされている[参考文献 2]。

実際にレーザー加速イオンを次世代の加速器に利用する場合、レーザー加速イオンを精確に制御できなければならない。しかしながら、レーザー駆動イオン加速の如何なる手法もイオン加速器からの要求を完全には満たせていない。イオン加速器に利用する上では、レーザー加速イオンが準単一高価数電離状態、準単色エネルギー分布であることが望ましい。ここで、準単一高価数電離状態とは、電離度分布において特定の高価数にイオンが局在している状態を指す。仮に、イオンの

電離過程を制御して準単一高価数電離状態を作ることができたとすると、同一の加速場があれば加速イオンのエネルギー分布は準単色になる。したがって、準単一高価数電離状態を作ることが肝要である。そこで、本研究では、超高強度レーザーと固体ターゲットとの相互作用において、イオン化過程の物理を解明し、任意のイオンを準単一高価数電離状態で引き出す(加速する)手法の確立を目指す。本報告書では、その第一歩として実施した、金のような重イオンの電離過程・加速過程について大規模計算機シミュレーションを駆使して調べた結果について報告する。

2. 超高強度レーザープラズマ相互作用におけるイオン化過程

本研究では、超高強度レーザーによるイオン加速機構として TNSA (Target Normal Sheath Acceleration) を想定する。TNSA によるイオン加速では、薄膜ターゲットにレーザーを照射してターゲット前面で高エネルギー電子を発生させる。この高速電子が薄膜裏面を飛び出す際に励起される準静的電場(シース場)によって薄膜裏面のイオンを加速する。そのため、TNSA の加速効率を高めるにはシース場に高い価数まで電離したイオンを送り込む必要がある。高強度レーザー照射下のプラズマ中では、強い電場による電場電離と高温・高エネルギーの自由電子が束縛電子と衝突することにより電離する衝突電離の2つの過程が重要である。どちらの過程がどこで支配的になるかは、レーザー照射条件およびターゲットの材質や厚さなどのターゲット条件によることがわかってきた[参考文献 3]。

図1に超高強度レーザープラズマ相互作用に

おけるイオン化過程をまとめた。図中の過程①および③は、電場電離によるものであるが、TNSA の場合、過程①によって電離したイオンはターゲット前面の吹き出しプラズマであるプリプラズマ中で生成されるため、裏面のシース電場によって加速されることはない。そのため、電場電離でイオンを高価数状態にするには、過程③を利用する。また、過程②および④は電子衝突電離によるものである。高強度レーザーによって作られる高エネルギー電子は、MeV を超えるエネルギーまで加速されており、固体密度のターゲットでもサブミクロン薄膜ではあまり衝突を起こさず電離頻度は小さい。そのため過程②によって高価数のイオンを大量に作ることは難しい。一方、過程④は、超高強度レーザーによって keV 程度まで温まったバルク電子による衝突電離であるが、こちらは電離確率が高く、大量の高価数のイオンを作ることができる。しかしながら、バルク電子の加熱はレーザー照射面側から起きるため、TNSA による取り出しを試みるには薄膜の厚さを十分に薄くする必要がある。過程⑤は、プラズマからの輻射による光電離であるが、この過程は、薄膜ターゲットにおいては、他のイオン化過程に比べて支配的ではないため、考慮しない。以上の議論から、過程③と④のどちらかが高価数電離イオンを取り出す上で有効であることがわかる。

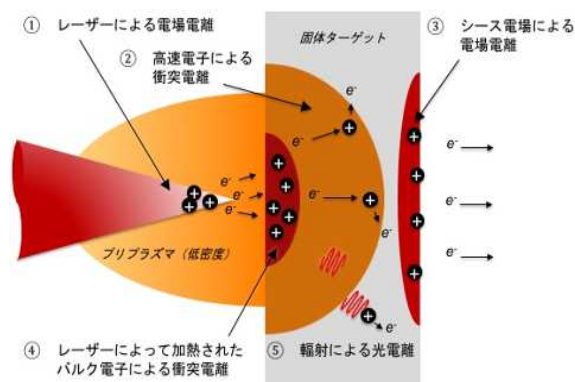


図1：超高強度レーザープラズマ相互作用におけるイオン化過程

3. 二次元大規模並列計算による金イオン加速シミュレーション

本研究では、金薄膜ターゲットを用いた金イオン加速シミュレーションを通して、電離過程③と④について詳細に調べることを目的とする。シミュレーションには、クーロン衝突、衝突電離・電場電離の物理モデルを組み込んだ多次元電磁粒子コード PICLS [参考文献4] を用いる。

3.1 シミュレーションセットアップ

レーザーの時間・空間プロファイルはガウシアンとして、強度、スポット径 (FWHM)、パルス幅 (FWHM) を $3.2 \times 10^{22} \text{ W/cm}^2$ 、 $1.5 \text{ }\mu\text{m}$ 、 30 fs とした。ターゲットとして厚み 200 nm の金を採用した。ターゲット前面にプリパルス生成プレプラズマとして、スケール長 28.3 nm の指数関数型密度プロファイルをもたせて金イオンの密度を $0.003n_{\text{cr}}$ から $30n_{\text{cr}}$ まで上昇させて固体密度 $38.4 n_{\text{cr}}$ の金に接続させた。ここで、 n_{cr} は非相対論的強度のレーザーが伝播できなくなる密度、すなわち臨界密度を表す。このような条件で、レーザーを標的に対して入射角 45° で照射し、金イオンの電離・加速過程を調べた。

3.2 加速金イオンの特性

図2にシミュレーションによって得られた加速金イオンのエネルギースペクトルとエネルギーごとの最終イオン化過程の割合、そして、最終的なイオン化過程が衝突である場合と電場である場合の平均電離度のエネルギー依存性を示す。この結果から、 $\sim 13 \text{ MeV/u}$ 以上の金イオンの最終イオン化過程は衝突電離が支配的で、電場電離では $51+$ 程度までしか電離できないことが明らかになった。また、低い電離度が原因で電場電離によってイオン化したイオンは最大でも 15 MeV/u 程度までしか加速されなかった。他方、衝突電によって高価数に電離されものは最大で 26 MeV 程度まで加速されていた。

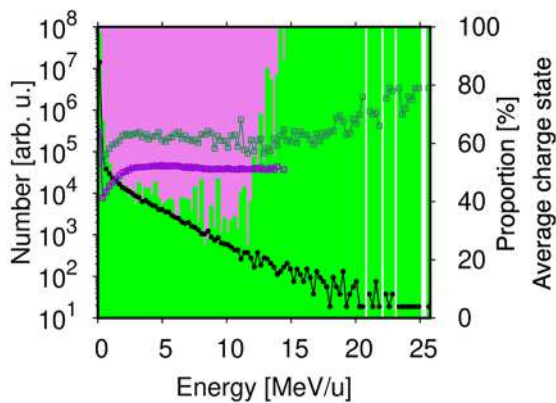


図 2：加速された金イオンのエネルギースペクトル（黒線）、最終イオン化過程が衝突電離（黄緑）または電場電離（桃色）の割合、および、それぞれのイオン化過程ごとの平均電離度（緑線：衝突電離、紫線：電場電離）

3.3 シースによる電場電離とバルク電子の加熱による衝突電離

レーザーピーク照射時の裏面シース場を計測したところ 90 TV/m 程度の準静的電場が生じており、パルス幅程度の時間の間、持続していることがわかった。BSI (Barrier Suppression Ionization) モデル [参考文献 5] を使ってこの電場で到達可能な電離度を求めると 55+ となった。しかし、前節の結果から、最終的に電場電離によって電離される金の電離度は 51+ に留まっており 55+ には届いていなかった。

次に、レーザーピーク照射時の金薄膜ターゲットの裏面側バルク電子温度を 100 keV 未満の電子の平均エネルギーから見積もった。図 3 に、レーザーピーク照射時のバルク電子温度（単位は eV）の空間プロファイルを示す。図から、レーザー照射部（ $X = 30 \mu\text{m}$, $Y = 30 \mu\text{m}$ ）においてバルク電子が 40 keV 程度まで加熱されていることがわかる。これらの熱的な電子は金イオンに衝突することができればエネルギー的には 77+ まで電離することが可能である。前節でみたように、最終的に衝突電離でイオン化した金イオンの平均電離度は 60+ 程度から 79+ まで分布しており、衝突電離によって電場電離より

も高価数に金が電離されるために、最終的に電場電離で電離している金イオンの電離度が BSI モデルを使った見積もりと合わなくなっていると考えられる。

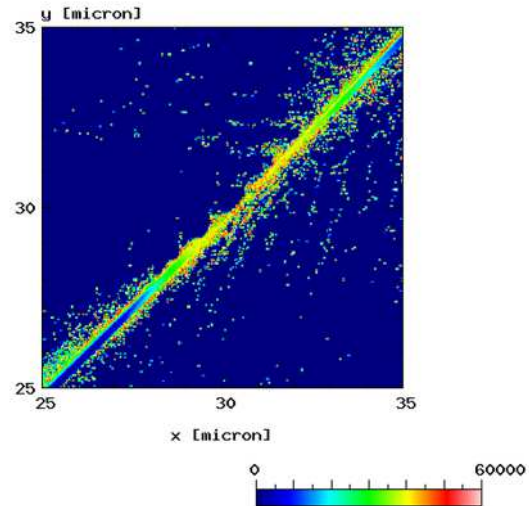


図 3：レーザーピーク照射時のバルク電子温度の空間プロファイル（単位は eV、レーザーは左側境界から X 軸に沿って平行に照射、焦点位置は $X = Y = 30 \mu\text{m}$ ）

4. おわりに

本研究では、加速手法としてよく知られている TNSA を採用し、現在の技術で到達可能な超高強度レーザーのパラメータを使って、原子番号の大きい金のレーザー駆動イオン加速シミュレーションを実施し、その電離過程・加速過程について調べた。その結果、厚み 200 nm の金ターゲットを超高強度フェムト秒レーザーで効率的に加熱し、衝突電離が支配的な状態を作ること、高価数の金イオンを取り出し加速可能であることを明らかにした。

本研究では、加速手法としてよく知られている TNSA を採用したため、薄膜ターゲットと超高強度レーザー装置さえあれば、容易に実験が可能である。このことは、本研究の与えるインパクトに直結している。今後、本研究の結果が実験的に可能であるかが検証されることが待たれる。また、高価数・高エネルギーの重イオン

を作ることが可能であるため、重イオン加速器の入射器としてレーザー駆動イオン加速器が使われるといったことも期待したい。

参考文献

- (1) H. Daido, et al., Rep. Prog. Phys. **75**, 056401 (2012).
- (2) M. Nishiuchi, et al., Phys. Plasmas **22**, 033107 (2015).
- (3) M. Nishiuchi, et al., Phys. Rev. Research **2**, 033081 (2020).
- (4) R. Mishra, et al., Phys. Plasmas **20**, 072704 (2013).
- (5) S. Augst, et al., J. Opt. Soc. Am. B **8**, 858 (1991).

Logarithm conformation representationによる 圧縮性流体方程式の導出と数値計算

中澤 嵩

金沢大学 学術メディア創成センター

1. はじめに

圧縮性流体場の特徴的な物理現象として最も代表的なものとして、衝撃波と境界層乱流との相互干渉である Shock Wave Boundary Layer Interaction (SWBLI) が挙げられる。この SWBLI は境界層乱流よりも遥かに複雑な乱流場となっていることから、結果的に空気抵抗が増大するとされており、SWBLI の最適制御は高速流体機器の抵抗低減化に必要不可欠である。

H. Ozawa et al. (1) は、衝撃波が発生する箇所に Bump を設けることで衝撃波の分布が変形し、SWBLI の構造に影響を与えることを発見しており、この Bump のことを Shock Control Bump (SCB) と呼称している。また、K. Mazaheri et al. (2) や E. Jinks et al. (3) は、代表的な 2 次元翼断面である RAE2822 において揚抗比や圧力の最小化問題を解くことで SCB の設計を行い、SWBLI が抑制されていることを数値的に示している。しかしながら、これらの先行研究では SCB の形状を高々数個程度の媒介変数で設定したパラメトリックな最適設計を行っており、SWBLI の正確な物理現象を十分に考慮している訳ではない。

一方、本研究構想では全ての自由度を用いる随伴解析を基礎技術とする形状最適化問題を採用することで、対象としている物理現象に対して忠実な最適設計を目指している。ところが、圧縮性流体の数値計算には SWBLI を解像する必要があるため、伴う膨大な計算コストを必要とする。例えば、空間刻み Δx は 10^{-3} 程度が、時間刻み Δt は 10^{-6} 程度が一般に用いられる。また、格子点数は 1 次元で 10^4 、2 次元で 10^8 、3 次元で 10^{12} 程度を必要とする。そして、形状最適化問題を解くことを想定すると数十回の順問題を解く必要があり、

この点において圧縮性流体場の膨大な計算コストが致命的となる。

圧縮性流体の数値解析において物理量が不連続に変化する現象をどのように扱うかが問題となり、現在までに Gudunov 法を原型として様々な近似リーマン解法及び高次多項式による空間再構築を中心に研究が行われてきた (4)。このような解法は、数値振動を抑制するための制限関数・人工粘性といった共通点を持っており、MUSCL や WENO、AUSM といった手法が提案されている。しかし、制限関数・人工粘性が数値拡散の原因となり、衝撃波や接触不連続面の界面を鈍らせる結果につながる。このような数値的な課題を回避するために、tanh 関数によって不連続な物理量を近似することで数値拡散を抑制する THINC 法が F.Xiao et al. (5) によって提唱されている。近年では高忠実・非散逸な数値計算手法として、人工粘性を用いずに、運動エネルギーとエントロピーを高精度に保存させる KEEP スキームが提案され (6)、MHD 乱流や燃焼乱流の数値シミュレーションに活用されている。

これらの先行研究で扱われてきた数値計算スキームにおいて、時間刻み Δt は全空間で一定値を取る必要があるため、空間方向の計算コストを如何に抑制できるかといった点が、計算コスト抑制に向けた解決の糸口となり得る。そこで本研究では、SWBLI を解像可能な高い計算精度と形状最適化問題を現実的な計算時間で実行可能な低い計算コストを両立する数値計算手法を構築し、圧縮性 Navier-Stokes 方程式に適用する。

SCB の最適設計は抵抗低減に留まらず、航空機設計にとって重要な役割を果たす。航空機が運航時に迎角を上げると翼面上で SWBLI が発生し、

それに伴い衝撃波後方の境界層が乱流場の振動により剥離し、その結果として境界層と衝撃波が時間周期的に干渉する現象をバフエット現象と呼ぶ。このバフエット現象は主翼にかかる応力を時々刻々変化させるため、機体の振動や翼の損傷、操縦性の悪化、構造設計への悪影響等が懸念されている。そこで、本研究構想で構築する形状最適化問題が SWBLI の抑制による抵抗低減化に役立つことが実証されれば、バフエット現象の自励振動を抑制する道筋が立つ。

2. 数値・計算モデルの構築

圧縮性流体を扱う研究分野では、保存系の方程式を用いることが一般的である。その理由は、密度・運動量・内部エネルギー・運動エネルギー・エントロピー・エンストロフィー等の物理量を保存させるためには、発生した衝撃波の数値フラックスを高精度に評価する必要があり、保存系圧縮性 Euler 方程式を有限体積法や不連続 Galerkin 法、KEEP スキーム等を用いて離散化することで実現することが可能であると、多くの数値計算結果から裏付けられているからである。ところで、保存量は密度 ρ ・速度 $\mathbf{u}$ ・圧力 p で構成されていることから、 ρ 、 $\mathbf{u}$ 、 p を保存させることが可能な非保存系圧縮性 Euler 方程式を解くが可能であれば、保存量もまた保存させることが可能となる。しかし、非保存系圧縮性 Euler 方程式では数値フラックスを精度よく解像することは一般に困難であり、数値振動・オーバー/アンダーシュートが発生し、妥当な数値計算結果が得られないとされてきた。

このような圧縮性流体場の数値計算に関する大きなトレンドにあって申請者は、保存系圧縮性 Euler 方程式から導出した新規・非保存系圧縮性 Euler 方程式 (Table 1 参照) に対する数値計算スキームを開発することにした。この新規・非保存系圧縮性 Euler 方程式は、保存系圧縮性 Euler 方程式と同一のリーマン不変量を持つことが示されており、その利用に数学的な矛盾は生じない。

その上で、従来手法で用いられてきたような数学的な妥当性が全く与えられていない制限関数・人工粘性を用いず、微分幾何や変分問題、誤差解析、数値解析等の数理論理学を基礎学問とする技術を全面的に採用した新規・非保存系圧縮性 Euler 方程式に対する数値計算スキームを構築した代表的なテスト問題の一つである 1 次元 Sod Shock Tube Problem に適用したところ、格子点数を 90% 削減しつつ、エネルギーを保存させることに成功し、厳密解とほぼ同様の密度・圧力・速度分布を有する数値解が得られ、その有効性を実証している。

Table 1 新規・非保存系の圧縮性 Euler 方程式

$$\begin{aligned}\rho \frac{Da_\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0, \\ \rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} + p \nabla a_p &= 0, \\ p \frac{Da_p}{Dt} + \gamma p \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0.\end{aligned}$$

3. 研究方法

新規・非保存系圧縮性 Euler 方程式 (Table 1 参照) を導出する過程で、密度 ρ と圧力 p に log を取った (LCR: Logarithm Conformation Representation)、 $a_\rho = \log \rho$ 、 $\mathbf{u}$ 、 $a_p = \log p$ 及び速度 $\mathbf{u}$ を未知変数としている。この LCR を採用することで、密度 ρ と圧力 p のオーダーを大幅に緩和することが可能となる。この LCR は、これまでレオロジーの分野で代表的な研究対象である非ニュートン流体の数値計算に対して積極的に用いられてきた。しかし、申請者が知る限り、少なくとも航空工学分野における圧縮性流体においては全く活用されてこなかった。このような経緯であるため、新規・非保存系圧縮性 Euler 方程式に関する物理的な性質については、これまで全くと言っていいほど解析されることが無かった。

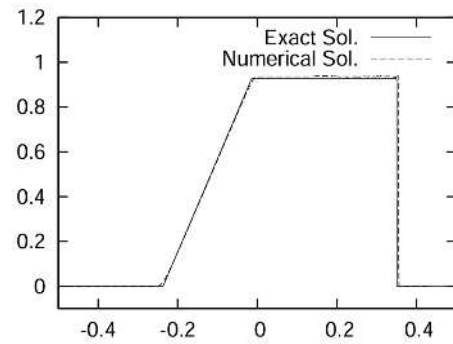
このような状況を鑑みて、新規・非保存系圧縮性 Euler 方程式に対して、位相速度・適合方程式・

リーマン不変量といった物理的な性質が、保存系圧縮性 Euler 方程式と一致することを示した。その結果、適切な数値計算手法を構築することで、保存系圧縮性 Euler 方程式を用いた先行研究と同一な結果が得られるのではないかと考えられた。本研究構想では、FreeFEM++にインプリメントされている Adaptive Mesh Refinement (AMR) ソルバーを活用する。この AMR ソルバーは、応用数学者の P. J. Frey and F. Alauzet (7) や A. Loseille and F. Alauzet (8) によって提案され、有限要素法における誤差である 2 回微分項を最小化させるようにアルゴリズムが構築されている Anisotropic AMR ソルバーであり、“エッジの方向”は Streamline に沿わせ、“エッジの長さ”は応力集中している領域で小さく取することで、物理量の 1 回微分を高精度に近似することが可能となる。

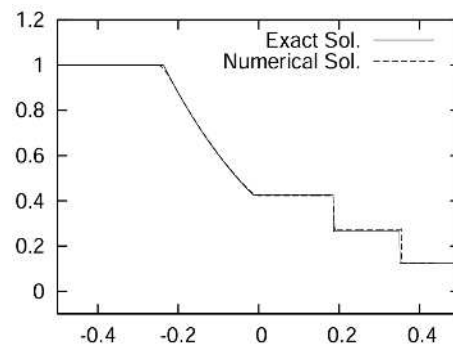
物質微分の近似には Semi-Lagrange Method (SLM) を採用する。この SLM は時刻 $t^n = n\Delta t$ の速度 $\mathbf{u}^n$ から Δt 上流の物理量を算出することで物質微分を数値的に近似するスキームとなっている。LCR や AMR と併用することで、“エッジの方向”は Streamline に沿うため Δt 上流の座標はエッジの近傍に存在することになり、更には衝撃波の界面付近のように数値計算精度を要求するような領域であっても、“エッジの長さ”が小さく設定されるため、高精度に物質微分を近似することが可能となる。

4. 数値計算結果：圧縮性 Euler 方程式

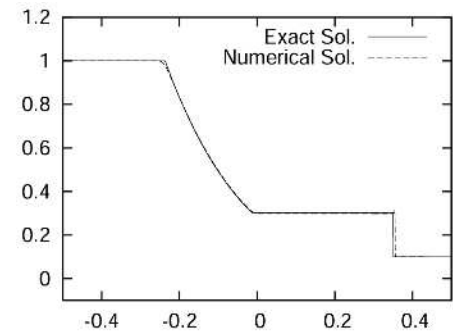
上記で詳述した LCR と AMR、更には SLM を組み合わせた数値計算手法を開発し、圧縮性 Euler 方程式における代表的なテスト問題である 1 次元 Sod Shock Tube Problem に対して適用し、厳密解と比較して良く一致していることを確認している (Fig.1)。更に、有限要素メッシュを固定した場合と AMR を用いた場合を比較して、格子点数を 10 分の 1 に抑えることに成功しており、この点は形状最適化問題を解く際に順問題の計算時間を抑制できるため極めて重要な知見であった。



(a) 密度



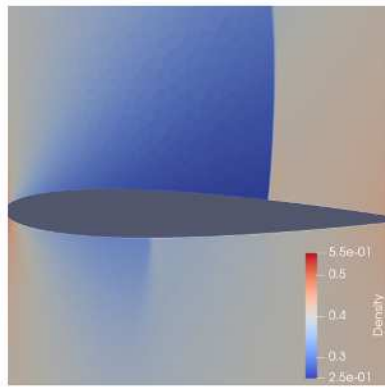
(b) 速度



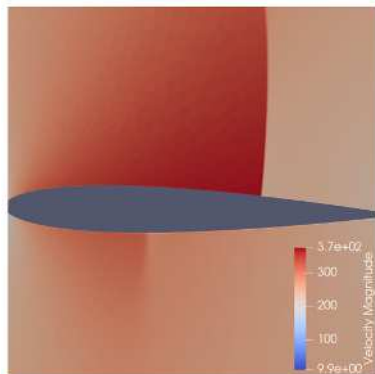
(c) 圧力

Fig.1. 1 次元 Sod Shock Tube Problem

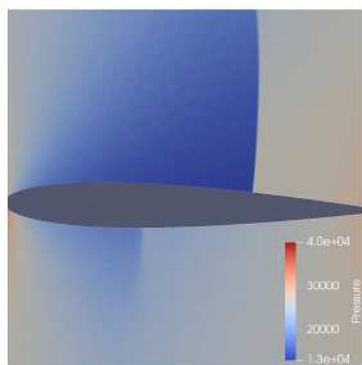
更に、マッハ数 0.8・迎角 1.25 における NACA0012 周り Euler 流れ (Fig.2) に対して適用し、翼周りの c_p コンターや c_d 値や c_l 値等が先行研究 (9) と比較して良く一致していることを確認している。



(a) 密度



(b) 速度の絶対値



(c) 圧力

Fig.2. NACA0012 周りの Euler 流れ

5. 数値計算結果：圧縮性 Navier-Stokes 方程式

Fig.3 は $Re = 200, t = 1$ における 2 次元 Viscous Sod Shock Tube Problem の数値計算結果であり、G. Zhou et al. (PoF, 2018) と同様の結果が得られた。格子点数は固定メッシュの場合には 4.5×10^6 程度となるが、AMR を採用することで 2×10^5 程度までに削減することが出来た。しかし、シングルスレッドでは計算時間が膨大となるため、大阪大学 D3 センター-SQUID を用いて大規模並列計

算を行った。その際、計算に必要なスペックとしては、20 Core・120GB Memory・600 時間を要したが、 $Re = 500, 750, 1000$ においては更に複雑な乱流場が発生することから計算コストの増加が予想された。



(a) 密度



(d) 温度

Fig.3. 2 次元 Viscous Sod Shock Tube Problem.

参考文献

- (1) H. Ozawa et al., AIAA Journal, (2008).
- (2) K. Mazaheri et al., Aerospace Sci. and Tech., (2015).
- (3) E. Jinks et al., Aerospace Sci. and Tech., (2018).
- (4) 藤井孝蔵, 流体力学の数値計算法, 東京大学出版, (1994).
- (5) F. Xiao et al., Int. J. Num. Meth. Fluids, (2005).
- (6) Y. Kuya et al., J. Comp. Phys., (2018).
- (7) P. J. Frey and F. Alauzet, Com. Methods in appl. Mech. and Eng., (2005).
- (8) A. Loseille and F. Alauzet, SIAM J. on Num. Anal., (2011).
- (9) Y. Nishimura et al., JAXA-SP, (2011).

溝付き粘弾性体の滑り摩擦の連続体解析

岩下 航

大阪大学 大学院基礎工学研究科

1. はじめに

表面が接触する 2 つの固体に相対運動を生じさせようとする、それを妨げようとする力が働く。この現象は摩擦と呼ばれる。靴やタイヤと地面の間、機械のしゅう動部など、様々な身近な場面で摩擦が発生するため、摩擦の制御は工学的に重要な課題である。

従来の摩擦制御には、潤滑剤の添加や表面のコーティングなどによって摩擦界面の特性を変える手法が主に用いられてきた。しかし、これらの手法は潤滑剤を供給できる環境に限られ、摩耗による影響を受けるため、環境条件や持続性に制約がある。一方で、潤滑や材料の変更を伴わずに、物体の形状設計による摩擦制御も試みられてきたが、体系的な指針が確立されておらず、試行錯誤に依存していた。したがって、省エネルギーの設計開発において適応性と持続性の高い摩擦制御を実現するためには、物体形状の設計戦略の確立が不可欠である。

一般に摩擦の法則として知られるアモントン則では、摩擦抵抗は物体形状に依存しないとされている。しかし、この法則の現象論的な説明では応力の一様性を仮定しており、その仮定が適用できない場合にはアモントン則が破れる可能性がある。

実際に、これまでの我々の研究では、3 次元有限要素法 (FEM) シミュレーションと理論解析によって、アモントン則の破れと滑りの核形成の関係を調査してきた [1, 2]。そこでは、図 1 のように物体側面を駆動し、応力の非一様性を生じさせることで、アモントン則の破れが生じることを確認した。駆動側の摩擦面から局所的な滑り (核形成) が発生し、そのサイズが臨界値に達したとき

に、核形成が不安定化し、系全体の滑りをもたらす。核形成の臨界サイズは物体形状や外部圧力に依存して変化し、摩擦抵抗にも影響を与えることが分かった。また、摩擦面の 2 次元的なパターンに加え、溝の深さも摩擦抵抗に影響を与えることが明らかになり、3 次元の大規模計算の重要性が示された。

これらの結果から、物体のアスペクト比やサイズ、溝の設置によって摩擦抵抗を制御できる可能性が示唆される。しかし、これまでの結果は側面駆動系に限定されており、一様せん断を受ける系への適用可能性は不明であった。例えば、図 2 に示すようなディスク状のシステムで摩擦面が平坦な場合には、系全体で一様にせん断応力が変化する。そのような場合には、核形成が発生する余地がなく、アモントン則が成り立つことが予想される。したがって、このような系における摩擦制御のための形状設計の指針は明確ではない。

よって、本研究では、一様せん断の系においても、摩擦面の形状設計による摩擦抵抗の制御方法を検討した。結果として、摩擦面にうねりの形状を加えることで核形成を生じさせ、溝の形状と組み合わせ、効果的に摩擦抵抗を制御できることが明らかになった [3]。この成果は、形状設計を活用した摩擦制御の適用範囲を拡大する上で重要な意味を持つ。

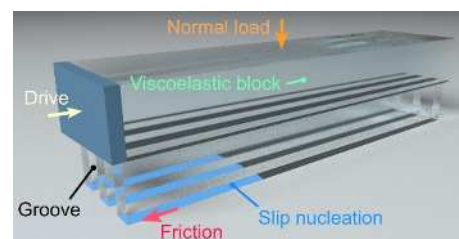


図 1：側面駆動の系



図 2：摩擦滑りを伴うディスク状のシステム

2. 設定と手法

FEM を用いた数値シミュレーションによって、図 3 に示す剛体基板上の溝付き粘弾性ブロックの滑り運動を解析した。ブロックの上面は上部の平坦な剛板に固定されている。上板はブロックを x 方向に十分に遅い速度 V で基板に平行に駆動する。時間 t における上板の移動距離は $U_x = Vt$ と表される。また、空間平均 P_{ext} を持つ外部圧力を上板に加える。 x, z 方向にそれぞれ周期 L, W の周期境界を設定した。ここで、粘弾性モデルは、一般に固体の計算で用いられる、弾性要素と粘性要素が並列に接続された Kelvin-Voigt モデルを採用した。本解析は、50 万節点、数十億タイムステップの大規模な計算を要する。計算は、In-house の Fortran プログラムコードを Intel コンパイラでコンパイルし、2,000MPI プロセスを用いた空間分割による並列計算により実行され、約 30 時間を要する。

摩擦力は局所的にアモン-クーロン則が成り立つと仮定して与える。そこでは、局所の摩擦応力と局所の圧力の比を局所摩擦係数と定義し、局所摩擦係数を局所滑り速度 v の関数として与える。ここで、局所の静摩擦係数と動摩擦係数をそれぞれ μ_s と μ_k 、特性速度を v_c とする。静止状態の場合、局所摩擦係数は μ_s 以下で静止状態を保つように与えられる。滑り状態の場合、局所摩擦係数は、 v が v_c 以下で、 v の増加によって μ_s から μ_k に減少し、 v が v_c 以上で、 μ_k に固定される。

図 3d に示すようなうねりを導入し、局所的な核形成を引き起こす不均一な圧力と摩擦強度を作り出す。変形がないときの摩擦面の高さ $y^{(\text{bott})}(x)$ は、小さな最大振幅 A を用いて $y^{(\text{bott})}(x) = A[1 - \cos(2\pi x/L)]/2$ で表される。ここでは、外部圧力がかかると、摩擦面が基板と全接触する。

粘弾性体は静止状態と勢いよく滑る状態を交互に繰り返す周期的なスティックスリップ運動をする。勢いよく滑る状態の直前に系全体の摩擦力は最大値を取り、その値と垂直抗力の比をマクロな静摩擦係数 μ_M と定義する。溝の幅に比例する摩擦面の面積減少率 ϕ と溝の深さ d 、うねりの最大振幅 A を変化させた際の静止摩擦係数 μ_M の挙動を解析した。

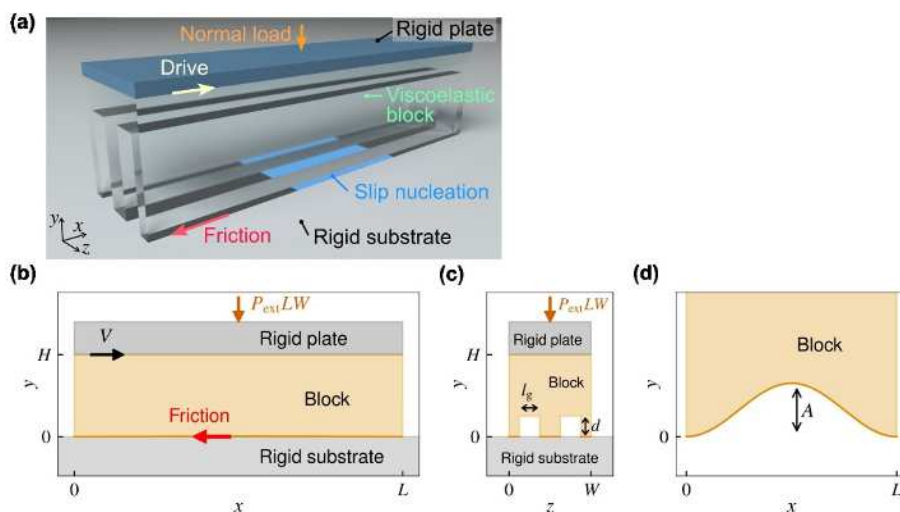


図 3：a うねりと溝のある 3 次元溝付きブロック。b, d $z = 0$ での z 方向と垂直な断面。c x 方向と垂直な断面。d y 方向に拡大した摩擦面。

3. 物体形状と摩擦抵抗の関係性

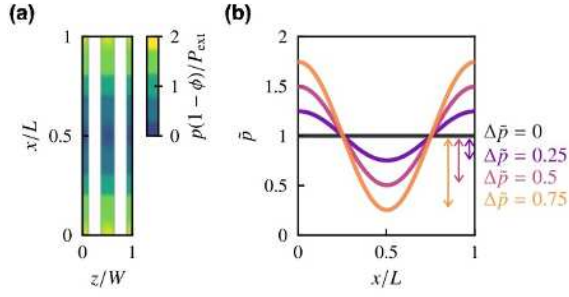


図 4 : **a** $\phi = 0.5$ 、 $d/H = 0.75$ 、 $A/H = 0.0099$ ($\Delta \tilde{p} = 0.75$) での $U_x/L = 7.5 \times 10^{-3}$ における p の空間分布。白い部分が溝部である。**b** $\phi = 0.5$ 、 $d/H = 0.75$ での $U_x/L = 7.5 \times 10^{-3}$ における A を変えたときの $\tilde{p}$ の空間分布。

図 4a は摩擦面の圧力 $p(x, z)$ の空間分布を示す。うねりの形状により、圧力は $x/L = 0.5$ で最小値をとり、 $x = 0$ または L で最大値をとる。圧力は z 方向にほぼ一様であり、その空間分布 $p(x, z, t)$ は時間に依らずほぼ定常である。ここで、 z 方向に平均し規格化した圧力 $\tilde{p}(x)$ を導入する。図 4b に示すように、 $\tilde{p}(x)$ は余弦型のプロファイルを持つ。 $\tilde{p}(x)$ の振幅 $\Delta \tilde{p}$ は、圧力分布の不均一性を表している。本節では、規格化した圧力 $\tilde{p}(x)$ の同じプロファイルでの結果で比較するために、 ϕ 、 d 、および $\Delta \tilde{p}$ を指定して、それを実現する A の値を採用する。

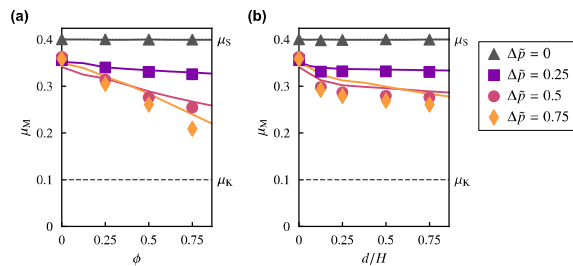


図 5 : **a** $d/H = 0.75$ での ϕ に対する μ_M の依存性。**b** $\phi = 0.5$ での d に対する μ_M の依存性。点線は μ_S 、破線は μ_K を表す。シンボルと実線はそれぞれ 3 次元 FEM と 1 次元モデルの結果を表す。

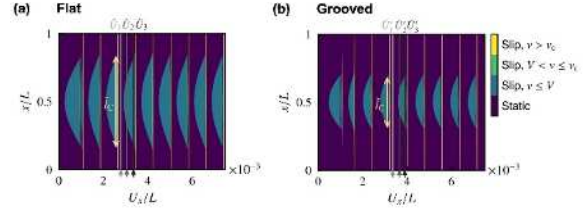


図 6 : **a** $\phi = 0$ 、**b** $\phi = 0.5$ 、 $d/H = 0.75$ 、 $\Delta \tilde{p} = 0.75$ での $z = 0$ における U_x に対する v の空間分布の依存性。紫色は静止領域を表す。青、黄緑、黄色の領域はそれぞれ $v \leq V$ 、 $V < v \leq v_c$ 、 $v > v_c$ での滑り領域を表す。

図 5a は、異なる値の $\Delta \tilde{p}$ での静止摩擦係数 μ_M の ϕ 依存性を示す。 μ_M は、 $\Delta \tilde{p} = 0$ では ϕ に依存せず μ_S で一定を保つものに対して、 $\Delta \tilde{p} > 0$ では ϕ の減少関数であることが分かる。図 5b は、異なる値の $\Delta \tilde{p}$ での μ_M の d 依存性を示す。 μ_M は、 $\Delta \tilde{p} = 0$ では d に依存せず μ_S で一定を保つものに対し、 $\Delta \tilde{p} > 0$ では d の減少関数である。

図 6a は、 $\phi = 0$ 、 $\Delta \tilde{p} = 0.75$ での $z = 0$ における U_x に対する滑り速度 v の空間分布の依存性を示す。摩擦面での滑り速度 $v(x, z)$ は z 方向にほぼ一様で、 x 方向の成分が支配的である。滑りの核形成は、圧力 $\tilde{p}(x)$ が最も弱い中心から始まる。滑り領域は、臨界長 $\tilde{l}_c$ に達すると急激に加速し、界面全体に伝播する。滑りによって内部応力が緩和されると、領域全体が再び静止状態となる。図 6b は、 $\phi = 0.5$ 、 $d/H = 0.75$ での $z = 0$ における U_x に対する v の空間分布の依存性を示している。滑りの核形成は中心から起こり、臨界長 $\tilde{l}_c$ を持ち、図 6a と同じ挙動を示している。図 6a と比較すると、臨界長 $\tilde{l}_c$ は溝が形成されることにより減少していることが分かる。

さらに、シミュレーションから得られた知見を基に 1 次元モデルを構築した。このモデルは図 5 に示すようにシミュレーションの結果を定量的に再現する。このモデルの解析の結果、摩擦面の形状と摩擦抵抗や核形成の臨界長の関係についての次のような考察が得られた。うねりによる不均一な圧力プロファイルは核形成の開始と成長

を決定し、溝のサイズは系の剛性を低下させることで核形成の臨界長を減少させる。このように核形成のプロセスが物体形状によって変化することで静止摩擦係数も変化する。

本研究で扱った一様せん断系の摩擦制御における形状設計の指針は次のようにまとめられる。

- ・ 高静止摩擦を得るためには、溝の有無にかかわらずうねりを小さくすることが必要である。
- ・ 低静止摩擦を得るためには、圧力の不均一性を生じさせる程度のうねりと大きな溝を導入することが有効である。

4. おわりに

本研究の大規模計算と理論解析によって、一様せん断系の摩擦の制御には、溝やうねりを含む摩擦面の形状設計が重要であることが明らかになった。これらの結果は、試行錯誤に依らない摩擦製品の設計に寄与することが期待される。

また、動摩擦についても大規模計算を実施し、粘弾性体の極めて速い滑りにおいて特異な摩擦現象が観測された [4]。今後、この動摩擦の摩擦面形状に対する依存性を調べていくことで、高速滑りが発生し得るタイヤなどの形状設計の指針の確立を目指す。

謝辞

課題全般について、大槻道夫教授にご指導いただいた。課題参加者として、織田晃登氏、佐伯宏大氏、井上隆介氏、田中健太郎氏、寺井歳三氏にご協力いただいた。本内容は、ETH Zurich の D.S. Kammer 助教との共同研究によって得られた成果である。可視化結果は、同研究室の N. Lilitrakul 氏が開発したソフトウェアを用いて、SQUID 上で作成した。本研究は、JSPS 特別研究員奨励費 JP22KJ2190 の助成を受けた。

参考文献

(1) W. Iwashita, H. Matsukawa & M. Otsuki, Sci.

Rep., **13**, 2511, (2023).

(2) W. Iwashita, H. Matsukawa & M. Otsuki, Tribol. Lett., **72**, 25, (2024).

(3) W. Iwashita, M. Castellano & D.S. Kammer, The 26th International Congress of Theoretical and Applied Mechanics, (2024).

(4) W. Iwashita & M. Otsuki, The 4th Malaysian International Tribology Conference, (2024).

機械摩擦の摩耗焼付き機構解明に資する マルチスケールモデルの開発

杉村 奈都子

鹿児島工業高等専門学校 機械工学科

1. はじめに

脱炭素・ゼロエミッション社会に向けて、機械工学の分野においてはエネルギーロスの低減、すなわち機械を効率的に動かす（高効率化の）ための摩擦損失の低減が強く求められる。たとえばその一策である潤滑油の低粘度化は粘性由来の摩擦を下げ一方で、固体接触を防ぐのに有効である油膜圧力を低下させ、摩擦固体表面の直接接触の機会ひいては焼付きの可能性を増大させる（図1）。そこで、摩擦損失低減の実現には、油側の低粘度化とともに、摩擦固体表面の耐焼付き性能の向上が欠かせない。しかしながら、焼付くあるいは焼付きを回避する条件を求めるために必要な「焼付きが生じる過程」については、不明確な点が多い。そこで我々はこの焼付き機構を解明する目的で、Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) 法による大規模並列化トライボシミュレータを構築し、開発を進めている[1,2]。

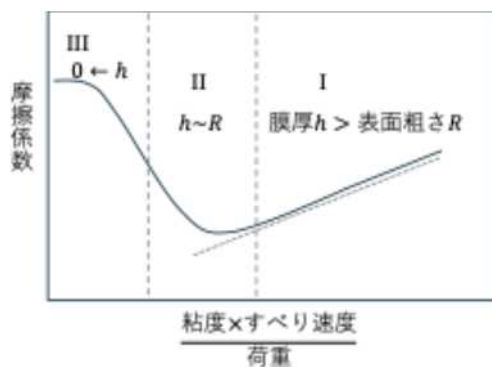


図1 ストライベック曲線。

摩擦固体界面の表面粗さ R よりも大きい油膜厚さ h （摩擦固体間隙）が維持される間は、粘性が下がると摩擦係数も下がる（I 流体潤滑領域）。しかしさらに粘性が下がると維持される油膜厚さが表面粗さ程度となり、固体接触が始まるために摩擦係数が急激に上昇する（II 混合領域）。本報告ではさらに進んで固体間摩擦が主となる III の境界潤滑領域を対象とする。

本計算モデルは、連続体としての弾塑性変形（"マクロ視点"）と、ナノクロ相互作用を繰り返した界面相互作用（"ミクロ視点"）を併存させており、摩擦の種々仮定理論を置かず、摩擦の根源であるマルチスケールなエネルギー散逸機構を効率的に計算できることが特徴である。大規模多粒子間相互作用計算のための並列化には FDPS[3]を利用している。

本シミュレータはその開発過程において、定常摩擦におけるスティックスリップ現象[4]、酸化被膜摩擦低減効果 [5]、境界潤滑摩擦における塑性流動と発熱の進展過程 [2]の議論に用いられた。また、HPCI の利用開始により、凸凹の衝突を皮切りに界面で摩耗、塑性流動、発熱が繰り返され、やがて凸凹の高温発熱がせん断面全体に一気に広がるシミュレーションが可能となった [2]。これは焼付き直前を想定して極度に柔らかい（3 桁ほどヤング率の低い）物質での仮想的なシミュレーションであったが、並行して実金属材料によるフラッシュ（閃光）温度の起源と温度分布の解析を開始した。たとえば昨年度は剪断部材 Al,Fe,Ni に対して表面性状

（接触界面に均等に4つ配した凸凹の Ra サイズ）と剪断速度を変えてシミュレーションした結果、①摺動速度の増加とフラッシュ温度の上昇の正の相関②Ra（小）に比べて Ra（大）ではさらに温度が上昇傾向③Al<Fe<Ni とフラッシュ温度が大きく増大し、Al と Fe,Ni では時間変化に差異のあることを報告した。①②は理論的に説明ができ、③については熱伝導率 κ の大小

（Al>>Fe,Ni）、界面相互作用力の大小

（Al<<Fe<Ni）である程度説明ができる。加えて別途、微小荷重による弾性接触シミュレーシ

ョンを実施し接触圧力と接近量を求めた結果、接近量は過大評価であったものの、接触圧力は Hertz の接触理論に基づく解析値にほぼ一致し、その応力の振動数は接触振動数にオーダーレベルで一致した[1]。

以上を踏まえて今年度は、(1)Al ならびに Ti についてさらに複雑な表面パターンを用いて接触剪断発熱と応力分布の解析を行なった。加えて(2)一辺 10 マイクロメートルスケールの広域剪断面における実界面性状での摩擦計算を開始した。さらに(3)凸凹の弾性衝突を経てなお複数回の摩擦と凝着を実現するシミュレーションを実現した。この(1)-(3)により、さらに焼付きモデルとして本シミュレータによって議論できる摩擦事象の充実を図った。

2. SPH 法と SQUID での計算資源

SPH 法は、粒子の集合体として連続体を離散化し、連続体の挙動を粒子の Lagrange 的な運動により表現する、粒子法の代表的な一手法である。粒子法では重み関数を用いて周囲の粒子との連続性を担保するのが一般的な方法であり、今回は B スプライン関数を用いた。また、重み関数の及ぶ距離を半径にして 2.5 粒子直径分とした[6]。摩擦シミュレータに SPH 法を採用した理由として粗視化粒子としての機能を持たせやすいという内容が挙げられる。冒頭に"ミクロ視点"と表現したものであり、この原子分子からのボトムアップについては参考文献[7]を参照されたい。

計算は SQUID の汎用 CPU ノード群を用い、OpenMP によるスレッド並列と MPI 並列のハイブリッド並列とした。1 ノード 76 コアあたり 4 プロセス (19 スレッド) 並列での使用を基本として、混み具合を勘案して 19 ノードあるいは 38,76 ノードの並列計算を実施した。ジョブ時間は 24 時間~48 時間/回で、待ち時間は繁忙期以外、1 日以内であった。

なお、シミュレーションのインプットファイルとして剪断固体の初期配置を設定するが、こ

の初期配置の作成に SQUID を用いる際にはインタラクティブノードを活用した。

(1)-(3)のシステム設定と 24 時間ジョブで計算できる物理時間の目安を表 1 に示す。剪断速度が大きく接触速度が大きいほど、また、固体の弾性率が大きいほど、特性速度は大きくなり、Courant-Friedrichs-Lewy 条件を満たすには小さな積み時間が必要になる。そのため、同一時間内に計算できる物理時間は短くなる。なお、Al の高い熱伝導率による熱拡散速度に配慮して、CFL 数を 1/10000 のオーダーに設定している。

表 1 ヤング率、剪断速度と 24 時間ジョブにおける計算可能物理時間の関係。CFL 数 3×10^{-4} , 使用ノード数 19。

	粒子数	ヤング率	剪断速度 20m/s	剪断速度 50m/s	剪断速度 210m/s
[1]	48 万	500GPa	5.5ns	4.5ns	
[2]	853 万	6.9MPa			19ns
[3]	43 万	69GPa		9ns	8ns

3. 結果

特に(1)-(2)について詳述する。

(1)Al, Ti による接触剪断摩擦発熱の解析

図 2 のように、剪断固体上部界面に対して下部界面を、接触面積が異なるように 4 領域に分けて異なる凸凹を配置して、接触状態からの発熱挙動と応力分布をシミュレーションした。

まず、剪断速度(20~210m/s)とフラッシュ温度の正の相関が Al, Ti について確認された[8]。さらに Al について、発熱は接触面積が大きい箇所から優位に始まり周辺部に広がるが(図 3 上段、波線囲部)、接触面積の小さい領域でも弾性から塑性への移行に伴い発熱が生じていることが見て取れる(図 3 下段)。

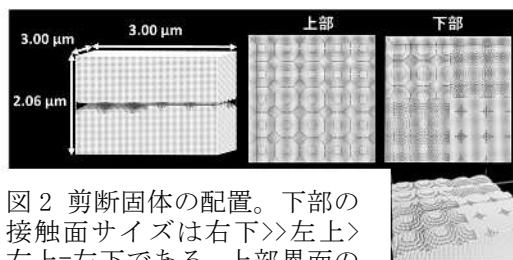


図2 剪断固体の配置。下部の接触面サイズは右下>>左上>右上=左下である。上部界面の接触面サイズは、下部右上ないし左下よりも小さい。

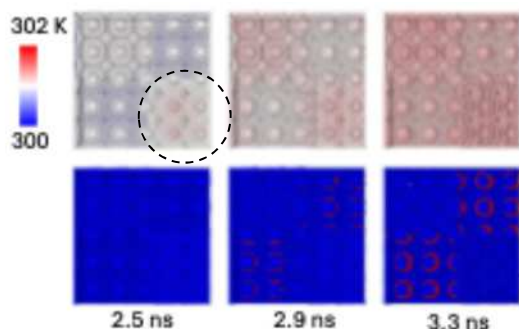


図3 界面温度分布(上段)と弾塑性分布(下段:青・弾性, 赤・塑性)の時間推移。

(2)広域実界面性状における摩擦摩耗シミュレーション

これまで、規則的なモデル凸凹界面を用いたシミュレーションによって、メソスケールでの凝着あるいは繰り返し摩耗の特性検出を模索してきた。その結果、剪断に対する摩擦応答力の時間履歴を変数とする所定の関数値が、初期接触部からの距離に応じて協同的に変動し続けることと、凝着が保持されずに接触と摩耗が繰り返されることには相関を見出せることが明らかとなった。しかし、界面性状が複雑な場合には、この関数値を凝着保持あるいは繰り返し摩耗の指標とすることは適さない。今年度、摩擦面方向に対して至極、凸凹高さの小さい実界面性状の特徴をそのまま単位 SPH 粒子形状に反映させた、高解像度な非等方性(長さ比 水平8:鉛直1)モデルを実用化した(図4)。このモデルにより、特性値として界面全体のエネルギー値に着目をして解析を進めた。

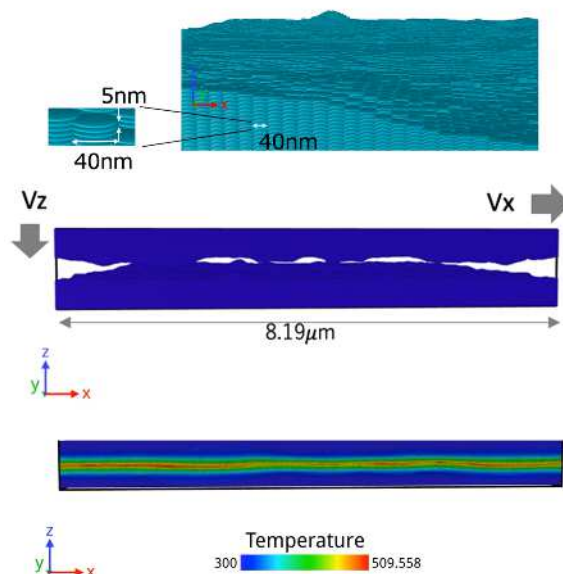


図4 非等粒子による実界面凸凹モデル。剪断方向 40nm, 荷重方向 5nm ディスク型粒子で実界面性状を表現。実界面データを1象限におき、システムの残り3象限に対象展開して周期境界条件を用いて計算。剪断が進むと界面全体が高温域となる(最下段)。

剪断と摩耗凝着の進行に伴い界面温度が上昇するが、この温度上昇に寄与するひずみエネルギーと界面反応エネルギーの時間変化に着目すると、剪断初期にはひずみエネルギーがまず優位に上昇し、摩耗の進行に従い界面反応エネルギーが優位に上昇することが確認された(図5)。これは等方性モデルによる凝着摩耗シミュレーションでも見られた傾向である。また、荷重が大きい場合には降伏するまでひずみエネルギー優位の状態が持続することも確認された(図6) [9]。

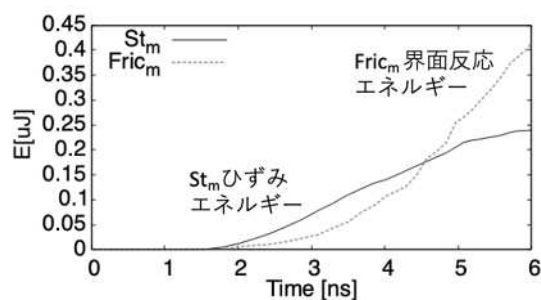


図5 ひずみエネルギー St_m と界面反応エネルギー $Fric_m$ の時間推移の典型例。

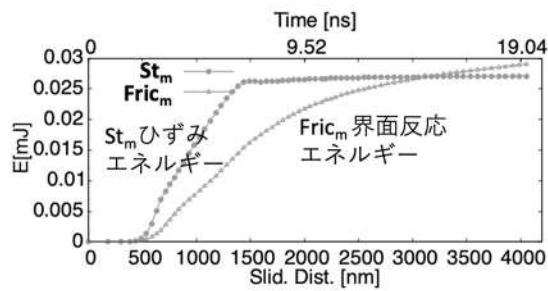


図 6 $v_z = 5v_x$ におけるひずみエネルギー St_m と界面反応エネルギー $Fric_m$ の時間推移。

4. 考察とまとめ

(1)の Al,Ti による接触剪断試験では発熱の初期過程を詳しく議論した。また(2)の非等方モデルを用いた実界面性状による摩擦試験では凝着や摩擦の指標としてひずみエネルギーと界面反応エネルギーの時間推移に着目をして解析を進めた。こうした解析は、摩擦凝着ひいては焼付き低減を目指す界面改質において、界面の反応性と硬さ（界面修飾）をどのように制御すればよいか、という問題に対してヒントを与えるものと期待される。(3)については、スタガードに配した界面凸凹の剪断衝突シミュレーションにおいては、仮想的な柔素材で難なく接触凝着と摩擦の繰り返しの再現が計算される一方で、金属の実材料レベルのヤング率においては弾性衝突による剪断固体の反跳が、計算資源内での接触凝着と摩擦の繰り返しの再現を阻むという課題があった。今年度、2m/s でのモデル凸凹界面での剪断試験によってこの問題は解決されたが、剪断距離を稼ぐためには CFL 数を 1/10 オーダまで大きくする必要があり、熱拡散を正確に考慮して発熱温度を議論するには至らなかった。今後、物理時間を $\mu s, ms, s$ レベルへと伸ばして発熱凝着の過程を解析するには、複数のシミュレーションを組み合わせるなどの時間延長に関する特別な工夫が必要であると考えている。

参考文献

- (1) 杉村奈都子:粒子法による大規模摩擦焼付きシミュレーション,サイバーメディア

HPC ジャーナル,14 (2024)103

- (2) N.Sugimura,L.V.Sang,Y.Mihara,H.Washizu: Mesoscale smoothed particle hydrodynamics simulation of seizure and flash temperature for dry friction of elastoplastic solids in a newly developed model, J.Compt.Sci.,82(2024)102325
- (3) M. Iwasawa, A. Tanikawa, N. Hosono, K. Nitadori, T. Muranushi, J. Makino, PASJ, 68 (2016) 54-1
- (4) L.V. Sang, A.Yano, S.Fujii, N.Sugimura, H.Washizu, EPL,122 (2018) 26004
- (5) L.V.Sang, A.Yano, A. Isohashi, N.Sugimura, H.Washizu, Tribol. Int., 135(2019) 296
- (6) 酒井譲,山下彰彦:SPH 理論に基づく粒子法による構造解析の基礎的検討,日本機械学会論文集(A 編)67,659(2001)1093
- (7) 杉村奈都子: 粒子法による摩擦面の解析技術,月刊トライボロジー,6 月号 (2025) 46
- (8) A.Fujita, N.Sugimura, H.Washizu: Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) Simulation to analyze the Frictional Heat Generation and Plastic Flow of Al and Ti (2025) submitted
- (9) 杉村奈都子,石原大嵩,藤田晃徳,杉村剛,三原雄司,鷲津仁志 :広域界面の凝着過程を対象とした大規模並列 SPH シミュレーション・2, トライボロジー会議 2024 秋名護 D54 (2024)

Electron radiation damping effects in laser-plasma interactions

顧 彦珺

大阪大学 産業科学研究所

1. Introduction

The high power laser has experienced rapid development in the past decades and 10 PW class laser facilities have already been under operating [1]. The state-of-the-art lasers are able to deliver the short pulse with the peak intensity up to 10^{22} W/cm² [2, 3]. The next generation 100 PW laser facilities are expecting to further enhance the intensity to 10^{23-24} W/cm² [4, 5].

Under such the high intensity, the electron radiation effect becomes important since the momentum of the emitted photons becomes comparable to the electrons [6]. The dynamics and the trajectories of the electrons will be significantly changed by the damping force provided by the photon emission processes as shown in Figure 1. In laser-plasma interactions, the electrons absorb energy from the EM (electromagnetic) field of the laser pulse and the electrostatic field such as the laser wakefield [7]. The radiation friction effect is dominant when the rate of radiation emission overcomes the rate of absorption. In the extreme conditions, the energy gain is balanced by the radiation loss, then the electron acceleration is fully damped. In the condition of high energy electron and strong EM field case, the photon radiation transits from the classical regime to QED (quantum electrodynamics) regime. Novel physical processes such as electron-positron pair creation, gamma-photon emission and QED-cascade come into play under these extreme intensity conditions. The abundant new phenomena provide possibilities of studying high-energy density physics, laboratory astrophysics, and to address the fundamental physics in QED [8-11].

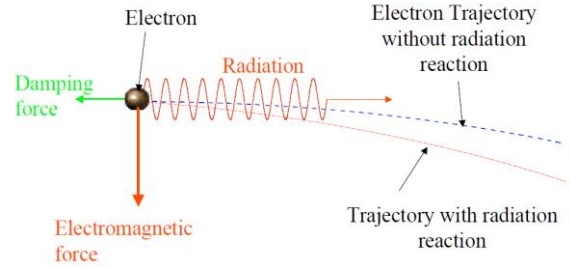


Fig. 1 : The schematic of the electron radiation and radiation damping effect.

2. Computational Model of Radiation Reaction in Laser-plasma interactions

In laser-plasma interactions, one of the widely used numerical tool is the kinetic code PIC (particle-in-cell) simulation. In general PIC simulations, physical particles (electrons and ions) are represented by a number of pseudoparticles (super-particles). The fields generated by the laser pulse and the motion of particles are calculated by a Finite Difference Time Domain (FDTD) method. All the electromagnetic field components are calculated within a grid with fixed spatial resolution. The forces generated by these fields are applied on the pseudoparticles and used to update their velocities and positions according to Lorentz equation. At the end of the loop, the new calculated pseudoparticles' positions and velocities are used to update the fields again via Maxwell equations according to the currents and charge distributions. The typical algorithm and calculation loop of PIC code is shown in Figure 2.

Therefore, it is also clear that the electron radiation effect is not included in the general PIC calculations. It is understandable that in the low intensity laser case, the radiated photons have relatively low energy. Their contributions to the total energy balance and

the change of the electron trajectories are not so significant. It is still a reasonable approximation to neglect the radiation effects.

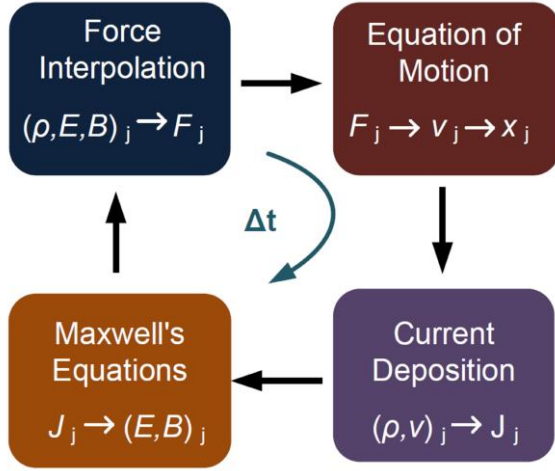


Fig. 2 : The typical loop of PIC code.

However, as mentioned in the introduction part, such approximation will be invalid under the high intensity laser and strong field case. Therefore, it is necessary to modify the code by adding the radiation effect to satisfying the laws of energy conservation and momentum conservation.

The first and straightforward way is to model the classical radiation according to the Landau-Lifshitz radiation damping force [6], $F_{rr} =$

$$-\left(\frac{2e^4}{3m_e^2c^5}\right)\gamma^2\mathbf{v}\left[\left(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \frac{\mathbf{B}}{c}\right)^2 - (\mathbf{E} \cdot \mathbf{v})^2/c^2\right].$$

Then update the damping force in Lorentz equation, as $F = q\left(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \frac{\mathbf{B}}{c}\right) + F_{rr}$. In this case, the emitted photons are treated as the EM field with relatively long wavelength. The corresponding algorithm is shown in Figure 3.

```

! Compute Lorentz force
F_L = charge * (E + v x B)

! Compute radiation reaction force
F_RR = (2.0 * charge**3 / (3.0 * mass * c**3)) *
  (gamma * (E + v x B) x B +
   (charge / mass) * (E . v) * E -
   (charge**2 / mass**2 * c**2) * (E**2 - c**2 * B**2) * v)

! Update momentum
p = p + dt * (F_L + F_RR)
  
```

Fig. 3 Algorithm for classical radiation correction.

However, in the high energy photon emission case,

the QED effects such as nonlinear Thomson scattering and Compton scattering become dominant. The radiation process becomes stochastic, and the wavelength of the emitted high energy photons is extremely short. Such the photons should be treated as particles. Therefore, the Monte Carlo approach is applied in modeling the radiation. The quantum efficiency parameter as $\chi_e = \frac{e\hbar}{m^3c^4} \sqrt{(F^{\mu\nu}p_\nu)^2}$ is calculated to sample the photon emission probability. The Monte Carlo process is shown in Figure 4.

```

! Look up the photon emission probability from a table
prob_emit = lookup_emission_probability(chi, dt)

! Generate a random number
rand_number = random()

! If random number < prob_emit, photon is emitted
if (rand_number < prob_emit) then
  photon_emitted = .true.
else
  photon_emitted = .false.
end if
  
```

Fig. 4 Monte Carlo Algorithm

Once the photon emission is confirmed, the corresponding photon energy and momentum should be calculated in order to update the electron motion by the conservation law of energy and momentum. The calculation is shown in Figure 5.

```

if (photon_emitted) then
  eta = sample_spectrum(chi) ! Sample photon energy fraction
  photon_energy = eta * gamma * me * c^2
end if

if (photon_emitted) then
  electron_energy = electron_energy - photon_energy
  p_new = update_momentum(p_old, photon_energy)
end if
  
```

Fig. 5 Calculation of energy and momentum for photons and electrons.

By adding the Monte Carlo method in the standard PIC loop, it is possible to model the high energy photons emission process in a self-consistent way.

3. Simulation Results

Here the typical simulation results are presented to show the radiation damping effect on the electron dynamics. The simulation is limited in the 2D x-y

plane with a size of $0.25\text{mm} \times 0.1\text{mm}$. The resolutions on each direction are both $0.01\mu\text{m}$, i.e. the cells number is 25000×10000 . The total number of pseudoparticles is 1.5×10^{10} . The total time is 780 fs which corresponds 2.7×10^4 timesteps. The simulation was running on SQUID-CPU nodes with 20 nodes and accomplished in 1D22H22M.

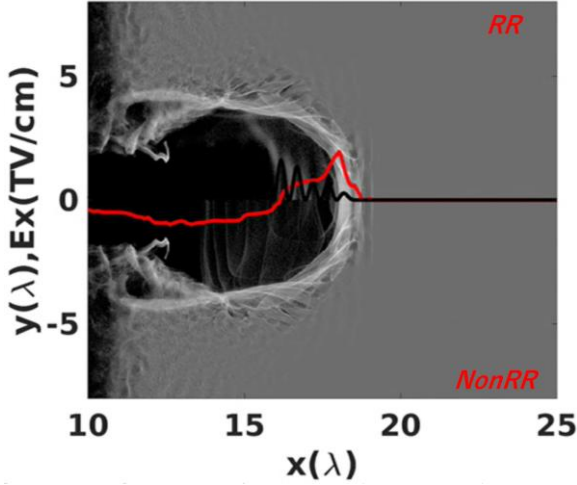


Fig. 6 The electron density comparison in the condition with and without the consideration of radiation effect.

The radiation and non-radiation simulation results are compared in Figure 6. The upper half is the electron density distribution in the case with radiation consideration. The lower half is the corresponding one without radiation effect. The red line and black line are the longitudinal and transverse electric field on the laser axis. It is clear that the electron density distributions are quite similar in the region where the laser field is weak. It is consistent with the theory that the low field region indicates a minor quantum efficiency parameter. Therefore, the probability for high energy photon radiation and strong damping force generation is almost negligible. However, in the region where the laser field is intensive (on laser axis and within the pulse duration), the electron distributions become completely different. In the case of non-radiation, the electrons are drifting into the upstream of the laser pulse with the modulated

structure. The electrons in the case of radiation show relatively slow back drifting. The confinement effect is actually due to the damping effect originating from the photon radiation. The momentum of the photons is in the direction of the electron drifting resulting a delay to the electron motion. The red spots shown in Figure 7 demonstrate the sampling of the emitted photons when the electrons are penetrating the laser field. Most of the photons move in the direction opposite to the laser field.

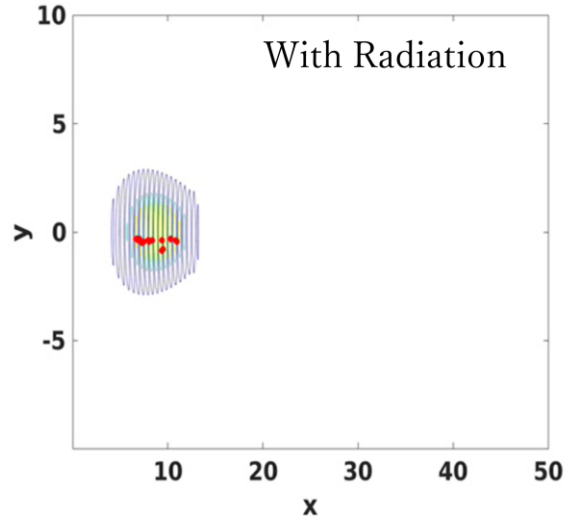


Fig. 7 Photon emission inside the laser field

4. Discussions

Although the high energy photon radiation and the corresponding damping effects have been modeled and realized in the simulations, there are still some necessary improvements and optimizing of the code.

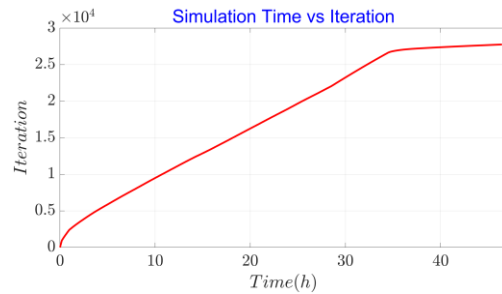


Fig. 8 The iteration evolution of the simulation

As presented in the time evolution of the iterations in Figure 8, the simulation becomes much slower after 35 hours, i.e. 2.6×10^4 steps. By checking the data, it shows that a large number of photons are

produced and accumulated in the simulation box at that time. Also, the electron distribution becomes strongly nonuniform due to the pushing of the laser field. A large number of electrons are concentrated resulting a high density region. In the standard MPI process, the simulation region is uniformly separated according to the spatial region. The non-uniform distribution resulting a high particle loading on one calculating domain. The other domains with less particle calculation have to wait until all the domains enter the next timestep. It significantly reduces the efficiency of the simulation. Therefore, a dynamic balancing or adaptive loading method is necessary to add in the future.

5. Conclusion

High power laser facility provides the ultra-intense laser pulse which induces the strong radiation reaction and QED effects in laser-plasma interactions. To model the electron radiation process and the damping effects of the electron dynamics, the classical radiation and Monte Carlo QED algorithms are plugged in the standard PIC code. The simulation results show a large number of photons emitting in the central region of the pulse center and a strong damping effect on the electron motion. The current 2D simulations are not sufficient since the z-direction oscillation contribution is not well resolved. Another issue in the simulation is the electron concentration and the unbalanced particle loading effects. To simulate the interactions efficiently, it is necessary to solve the problem by dynamic balancing or adaptive loading method.

References

- (1) C. Danson, et al., *High Power Laser Sci. Eng.* **9**, e18 (2021).
- (2) V. Yanovsky, et al. *Opt. Express* **16**, 2109 (2008).
- (3) A. S. Pirozhkov, et al. *Opt. Express* **25**, 20486 (2017).
- (4) G. Mourou, G. Korn, W., Sandner, & J. Collier, *Extreme Light Infrastructure (Whitebook)* (THOSS Media GmbH, Berlin, Germany, 2011).
- (5) G. Chriaux, et al. *AIP Conf. Proc.* **1462**, 78 (2012).
- (6) A. I. Nikishov A I and V. I. Ritus, *Sov. Phys. Usp.* **13**, 303 (1970).
- (7) T. Tajima, T. & J. M. Dawson, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 267 (1979).
- (8) G. A. Mourou, T. Tajima, & S. V. Bulanov, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 309 (2006).
- (9) A. Di Piazza, K. Z. Hatsagortsyan, & C. H. Keitel, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 254802 (2009).
- (10) A. Di Piazza, K. Z. Hatsagortsyan, & C. H. Keitel, *Rev. Mod. Phys.* **84**, 1177 (2012).
- (11) S. V. Bulanov, *Plasma Phys. Control. Fusion* **59**, 014029 (2017).

運動論的レーザープラズマ相互作用で発生する 非熱的高速電子特性の解析

高木 悠司

大阪大学 大学院理学研究科／大阪大学 レーザー科学研究所

1. はじめに

1.1 高強度レーザーとプラズマとの相互作用

10^{16} J 級の大型高強度レーザーを用いて物質を加熱・圧縮することで、温度が数千万度、圧力が数百億気圧に達する高温高密度プラズマを作り出せ、高压物性研究・核融合研究等のプラットフォームになると共に、高エネルギー粒子源等への応用も期待されている（図 1）。現在このような高エネルギー密度プラズマを実験室内で作り出せるのは高強度レーザーだけである。

高強度レーザーとプラズマとのレーザープラズマ相互作用（Laser plasma interaction: LPI）は、レーザー強度・パルス波形等のレーザー照射条件にターゲットの形状・材質等の条件も組み合わせ合わせた、多数のパラメーターが関与する複雑な物理過程である。特に、レーザー強度が 10^{17} W/cm² 以上の運動論・相対論的強度領域と 10^{13} W/cm² 以下の流体的領域との中間に位置する 10^{14-16} W/cm² 付近の強度領域での LPI は、熱的平衡にある流体的プラズマと運動論的非線形過程で発生する非熱的高速粒子とが混在する非平衡状態にあるため、流体モデルや運動論モデルでの解析が難しく理解が進んでいない。

1.2 中間的強度でのレーザープラズマ相互作用

強度が 10^{14-16} W/cm² 付近の中間的領域での LPI では、誘導ラマン散乱（Stimulated Raman scattering: SRS）・ブリルアン散乱（Stimulated Brillouin scattering: SBS）・二電子波崩壊不安定性（Two plasmon decay: TPD）等のパラメトリック不安定性（Parametric instability: PI）と呼ばれる LPI によるレーザー光の吸収・散乱が起こる（図 2）。これらの過程はピコ秒スケールで成長し、発生する周囲のプラズマより一桁以上高エネルギーの非熱的電子は高密度プラズマ内部にエネルギーを輸送し、衝撃波等のナノ秒スケールの流体運動に影響を与える。例えば代表的な PI である SRS は、レーザー電磁波が散乱波と電子プラズマ波（Langmuir wave: LW）を共鳴的に励起する LPI であるが、励起された大振幅の LW（Large-amplitude LW: LALW）は周囲のプラズマ中の電子を捕獲し自身の位相速度程度まで加速させる事で、典型的には数 10 keV 程度のエネルギーを持つ高速電子を発生させる。また、SRS 再散乱等の多段階の LW 励起過程を経る事で、100 keV を超える相対論的エネルギーを持った高速電子の発生も報告されている [1-2]。

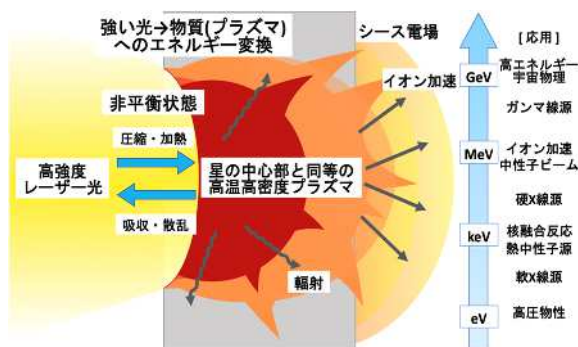


図 1：レーザー光と物質との相互作用の模式図。

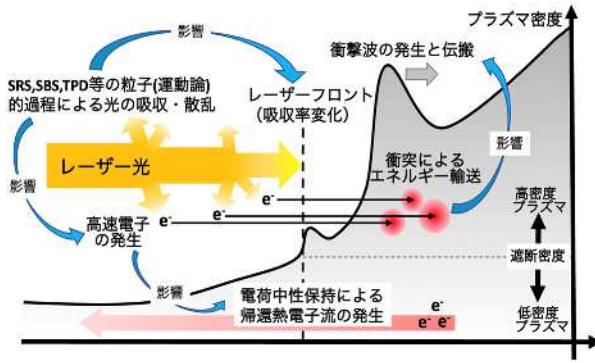


図2：レーザー強度が 10^{14-16} W/cm² 程度の領域で起こるレーザープラズマ相互作用の模式図。

一方で、前年度までの研究から数 10 ps の長い LPI 下では、LALW による電子捕獲では無く揺動電場中での統計的加速により数 100 keV の平均エネルギーを持つ高速電子が定常的に発生する事が分かってきた[3]。よって本年度は、この揺動電場中での統計的加速と多段階の LW 励起による加速の二つの加速機構がそれぞれの様に高速電子発生に関与しているかを明らかにする為に、電場のフーリエ解析情報から励起電場モードの時間変化について調査を行った。

2. 高速電子発生過程のシミュレーション

中間的領域の LPI の難しさは粒子的・流体的二つの時空間スケールが含まれる点にある。本研究では両者を切り分け、高速電子発生の方に焦点を当て Particle-in-cell (PIC)法による運動論的シミュレーションからその詳細を調べる。

2.1 シミュレーションの設定

PIC 法では格子状に分割したシミュレーション空間内にプラズマを模した荷電粒子を配置する。空間内での荷電粒子の運動に伴い発生する電磁場及び外部電磁場（レーザー場）を各空間格子上でマクスウェル方程式に従って求める。荷電粒子の運動は自分の位置する格子上の電磁場から運動方程式に従って計算される。

SRS による電場のモード励起状態を調べる為に高解像度 1 次元 PIC シミュレーションを行っ

た。PIC コードは PICLS コード[4]を使用した。図3にシミュレーションの設定を示す。1次元シミュレーション空間 x 軸上に陽子と電子からなる水素プラズマを配置し、左 (x 軸負方向) からレーザーを照射した。レーザーは p 偏光（電場は y 方向、磁場は z 方向に振動）を用い、レーザー波長 λ は 1 μm 、レーザー強度は 10^{16} W/cm² に設定した。シミュレーション中レーザーは常に照射し続ける。空間格子サイズは 1/100 μm （レーザー波長 λ を 100 分割）に設定した。タイムステップは PICLS のアルゴリズムの都合上 ≈ 0.033 fs（レーザー周期を 100 分割）に自動的に決定される。水素プラズマの（数）密度 n の初期設定は、最大密度をレーザー遮断密度 n_c （ $\sim 10^{21}$ /cm³）の 1.2 倍、最小密度を $1.2/e^4 \approx 0.02$ 倍に固定し、指数関数的な密度勾配を仮定した。密度勾配のスケール長 L は $L = 600 \mu\text{m}$ とした ($n \propto \exp(-x/L)$)。陽子と電子はそれぞれ一空間格子につき 100 個ずつ配置し、初期温度がそれぞれ 1 keV と 5 keV となる様に初期運動量分布を持たせた。シミュレーション空間は 1 次元だが電磁場の空間及びプラズマの運動量空間は 3 次元である。

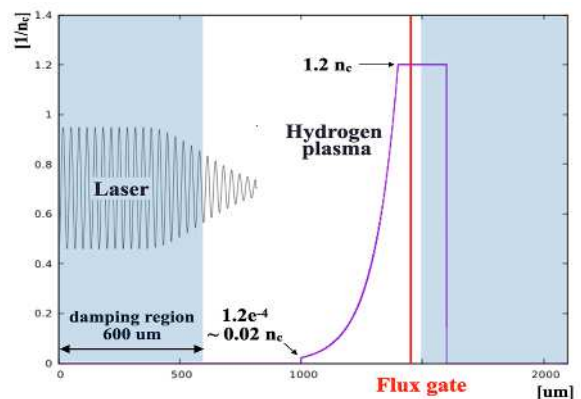


図3：1次元PICシミュレーションの設定。

2.2 電場のモードスペクトルの測定

シミュレーション結果を図4-5に示す。図4は $t = 40$ ps と 41 ps における電子密度 n_e (上)、

横（レーザー）電場 E_y （中）、縦(LW)電場 E_x （下）の空間分布である。 $n_e = n_c/4$ 付近及び $n_e = n_c/16$ を中心とした $n_e < 0.2 n_c$ の領域に SRS による密度空孔（キャビティ）が発生している。 E_y の空間分布を見ると、キャビティにおいて入射レーザー波の約 3 倍の大振幅場が形成されていることが分かる。この領域での E_y と E_x のフーリエ解析の結果が図 5 になる。図 5 (a) は E_y のモードを示しており、入射レーザー波とその反射波に対応した $\omega = \omega_L$ に強い信号が見られる（ k_L, ω_L はそれぞれレーザーの波数と周波数）。また、 $0.1 < \omega/\omega_L < 0.5$ の領域にもキャビティによる強い信号が見られる。 E_x のモードを示し

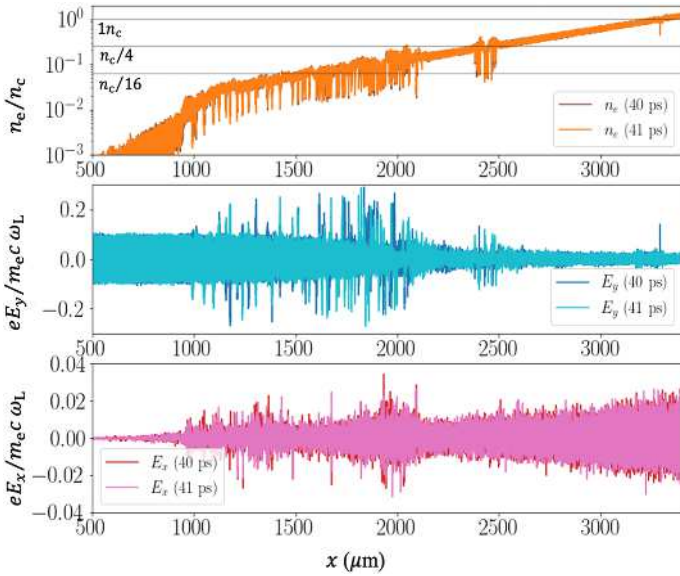


図 4 : $t = 40, 41$ ps における電子密度（上）、横（レーザー）電場（中）、縦(LW)電場（下）の空間分布。

た(b)を見ると、この領域でのプラズマの密度・温度からあり得る範囲内においてあらゆるモードの波が同程度の信号強度で存在しており、LALW は発生していない事が分かる。よって $t = 40$ ps では LALW による電子捕獲・加速は起こり得ず、統計的加速によって数 100 keV の平均エネルギーを持つ高速電子が発生している事が示唆される。

2.3 モードスペクトルの時間変化

両加速機構の時間的遷移を調べる為に、より

早い時刻($t = 20$ ps)との比較を行った。シミュレーション中から先行研究[5-6]で SRS 再散乱が起こるとされている $0.1 < n_e/n_c < 0.2$ の領域を切り出してフーリエ解析を行い結果を比較した。結果を図 6 に示す。図 6 (a), (b) は切り出した領域の電子密度、(c), (d) はその領域中での E_y のスペクトル、(e), (f) は E_x のスペクトルである。

(a), (b) を見ると、 $t = 20$ ps に成長し始めたキャビティは $t = 40$ ps には $0.15 n_c$ 以下全体に広がっている事が分かる。(c), (e) を見ると、 $t = 20$ ps では後方への SRS (Backward SRS: BSRS) とその再散乱の強い信号、また弱いながら前方への SRS (Forward SRS: FSRS) を示す信号も確認できる。

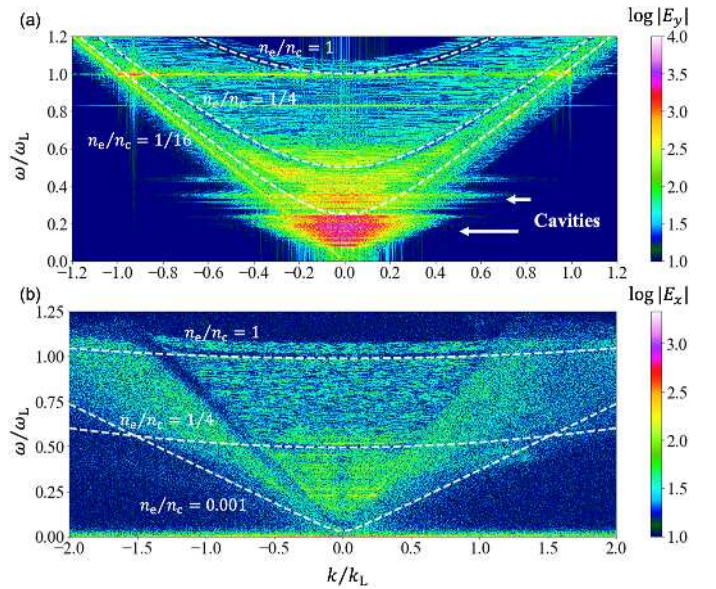


図 5 : $t = 40-41$ ps 間の(a) E_y （レーザー）電場と(b) E_x （LW)電場のフーリエ解析結果。

一方で(d), (f)を見ると、 $t = 40$ ps ではこれらの SRS の信号は全て消滅している事が分かる。

よって、シミュレーションの早い段階には従来提唱されてきた SRS 再散乱による 100 keV 以上の相対論的エネルギーへの電子加速が起こり得る一方で、遅い段階では SRS の信号は消滅しており統計的加速へと加速過程が遷移している事が伺える。 $t = 40$ ps での SRS 消滅の理由は現在明確ではないが、キャビティの成長によるプラズマ密度の大きな不均一が原因ではないかと考えている。

3. おわりに

レーザー強度が 10^{14-16} W/cm² の領域でのレーザーとプラズマとの相互作用における数 100 keV の平均エネルギーを持つ高速電子の発生過程について、高解像度大規模 1 次元 PIC シミュレーションを用いてその詳細を調べた。シミュレーション中から電場の時空間変化の情報を取得し、そのフーリエ変換からモード解析を行った。シミュレーションの早い段階 ($t = 20$ ps) には先行研究と同様に SRS の理論から予測される位置に強い信号が確認された一方で、遅い段階 ($t = 40$ ps) ではそれらの SRS を示す信号は全て消滅している事が判明した。

参考文献

- (1) C. Rousseaux et al., Phys. Plasmas **4**, 2589 (1992).
- (2) E. L. Dewald et al., Rev. Sci. Instrum. **81**, 10D398 (2010).
- (3) 高木悠司、サイバーメディア HPC ジャーナル **No. 14** (2024).
- (4) Y. Sentoku and A. J. Kemp, J. Comput. Phys. **227**, 6846-6861 (2008).
- (5) B. J. Winjum et al., Phys. Rev. Lett. **110**, 165001 (2013).
- (6) Q. S. Feng et al., Phys. Rev. E **105**, 045208 (2022).

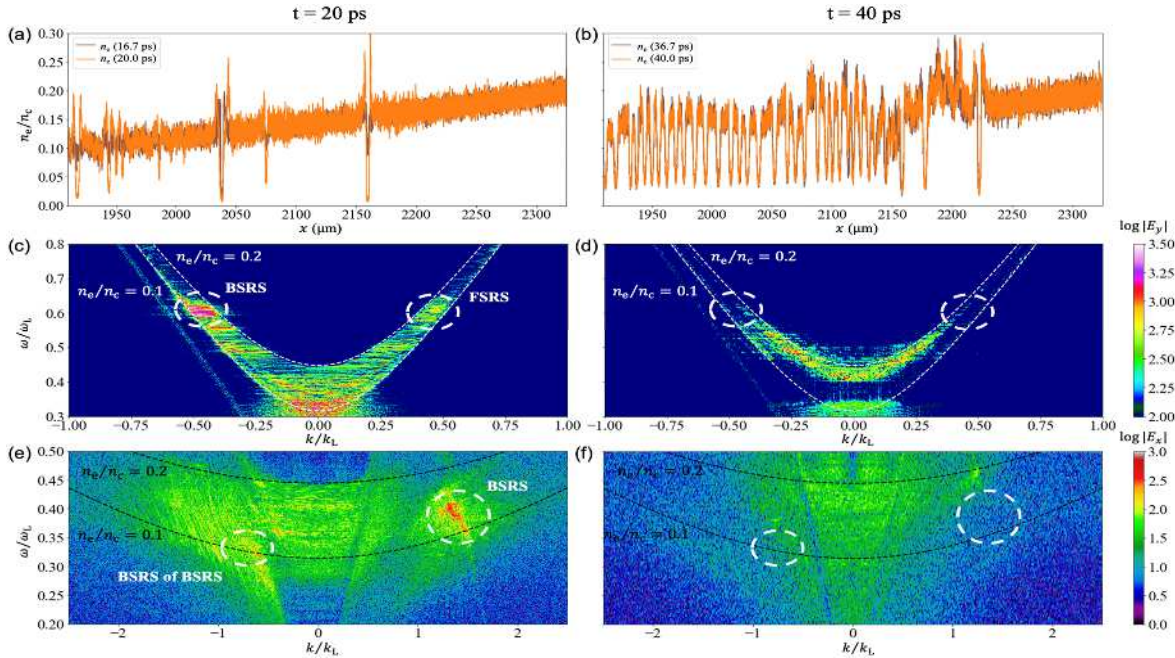


図 6 : $t = 20, 40$ ps での (a), (b) 電子密度、(c), (d) E_y スペクトル、(e), (f) E_x スペクトルの比較。

この結果からこの強度領域での 100 keV 以上への電子加速機構は、従来提唱されてきた SRS による LALW の励起とその LALW による電子捕獲・加速から SRS によるキャビティ成長とそれに起因して生じる揺動電場中での統計的加速過程へと、時間的に変化する事が示唆された。

自然の多面的価値の理解に向けたランドスケープの埋め込み表現の開発

芳賀 智宏

大阪大学 大学院工学研究科

1. はじめに

景観生態学をはじめとする環境分野の地理空間情報解析では、空間に存在する地物の種類と配置を分析し、人間社会と自然生態系を包含する社会・生態システムの構造と機能を明らかにしてきた。近年では、自然の多面的価値を評価することの重要性が認知され、特定の生物種の分布の予測するような自然の内在的価値中心の研究に加えて、自然が人間社会にもたらす道具的価値や、人間と自然の関わりの中で生まれる関係価値など、質的側面の評価が求められている [1]。

地理空間情報解析で一般に用いられる土地利用・被覆のデータは、メッシュやポリゴン単位でそこに存在する地物の情報を要約して一つのクラスラベルを付与する抽象化されたデータである。このため、自然環境調査の成果物である環境省の植生図では人工的土地利用の分類が少ない、国土利用の調査で用いられる国土数値情報の土地利用細分メッシュでは自然生態系の情報が少ないなど、データセットの作られた目的によってどの項目をどの程度抽象化するかが異なる。このため、社会システムと自然生態システムの横断的に解析する際には、一つの情報源のみで双方のシステムの情報を網羅することが困難である。

近年は OpenStreetMap (OSM) など、個別の地物の情報をポイント・ライン・ポリゴン情報として保持した大規模かつオープンなデータが公開されるようになってきた。しかし、カテゴリ数の多さや、集計した際に疎ベクトルになるなどの技術的な課題から、環境分野での利用は限定的である。

このギャップを埋めるため、Hex2Vec [2] や GeoVeX [3] など、表現学習を応用し、大規模かつ詳細な地理空間情報を低次元の密ベクトル化する手法が提案され、下流タスクでの優位性を示し

た [2, 3]。また、地物名をグリッドの中心からの距離に応じて並べることで、そのグリッドについての疑似的な文章を作成し、BERT で埋め込みベクトルを作ることも提案されている [4]。

本研究では、社会・生態システムのランドスケープの地理空間情報を統合した埋め込みベクトルを作成し、1. 気候変数の推定、2. 人口・地価の推定、3. 継続的な市民科学活動の実施の有無、4. 保全地域で重視されている自然の価値の分類の4つの下流タスクで性能を評価した。

2. 方法

2.1 使用したデータの説明

地域の社会・生態システムの空間的な状態を統合的に評価するために、自然植生と人工的地物の情報を両方用いた。自然植生の情報については、日本全国標準土地利用メッシュデータ (LULC) を用いた [5, 6]。このデータは、環境省の5万分の1植生図をもとに、自然植生に関わる土地利用・被覆は45種類、人工的土地利用は4種類のカテゴリに分類した1km解像度のメッシュデータである。また、人工的な地物の情報が豊富に記録されているOSMの12,404種類のタグから先行研究を参考に316タグを抽出した。これらの2つの種類のデータを、Uber H3 grid system の resolution 8 (約1×1km解像度) で集計した。具体的には、LULCではグリッド内の49種類の土地利用・被覆カテゴリ別の面積割合、OSMではグリッド内の316タグ別の出現個数を集計し、日本全国597,109グリッドに対して、355次元のデータセットを作成した。

2.2 モデルの説明

OpenStreetMap から埋め込みベクトルを作成することができる Hex2Vec と GeoVeX を用いた。

Hex2Vec は word2vec を参考に開発されたモデルである。Skip-gram with negative sampling を用いて、任意の 2 つのグリッドについて空間的に隣接しているかを 2 値分類するタスクを学習する過程で、各グリッドの埋め込みベクトルを獲得する [2]。一方で GeoVeX は、畳み込みニューラルネットワーク (CNN) を用いたオートエンコーダであり、注目しているグリッドに加えて周辺のグリッドの情報を参照して 32 次元の埋め込みベクトルを獲得する [3]。

本研究では、日本全国の 597,109 グリッドを対象とした。A. LULC のみを用いた場合 (LULC)、B. OSM のみを用いた場合 (OSM)、C. LULC と OSM を列方向に結合した場合 (統合) の 3 通りの入力データセットを作成し、Hex2Vec と GeoVeX で埋め込みベクトルを作成した。各モデルの epoch 数は 128、バッチサイズは Hex2Vec は 2048、GeoVeX は 512、学習率は 0.001 とした。埋め込みベクトルの次元数にはデフォルトを採用し、Hex2Vec は 50、GeoVeX は 32 次元とした。

2.3 埋め込みベクトルの特性の評価

3 種類の入力データセットと 2 種類の埋め込みモデルで作成した 6 種類の埋め込みベクトルについて、空間分布と埋め込みベクトル軸の解釈可能性を評価した。先行研究を参考に、各埋め込みベクトルを独立成分分析で 3 次元に削減したのちに、各軸を 0–255 にスケールリングして RGB 画像として可視化し、空間的な特性を視覚的に評価した。その際、自然言語分野の単語埋め込みベクトルの解釈で用いられる手法を参考に、独立成分分析後の 3 次元の各軸について上位 100 個のグリッドを抽出し、出現頻度の高い特徴量を確認した [7, 8]。これにより、人工的土地利用を表す軸には R、二次的土地利用を表す軸には G、自然性の高い土地利用を表す軸には B を割り当てた。

2.4 下流タスクを用いた応用可能性の評価

地理空間情報の埋め込みベクトルの先行研究でよく用いられる下流タスクである 1. 年平均気温・年降水量の回帰、2. 人口・地価の回帰に加えて、生態系保全に関連する下流タスクとして、3.

継続的な市民科学活動の実施の有無の分類、4. 環境省が認証した自然共生サイトで認証された自然の価値・機能の分類の合計 4 種類の下流タスクに対して、埋め込みベクトルの性能を評価した。A. LULC データセットを説明変数として用いた結果をベースラインとして、入力データセットと埋め込みモデルの組合せごとに性能を評価した。分類タスクではロジスティック回帰モデル、回帰タスクでは、重回帰モデルを用いた。日本の地方 9 区分で空間ブロッキングを施した交差検証を行い、交差検証誤差でモデルの性能を評価した。

3. 結果

3.1 埋め込みベクトルの特性の評価

図 1 に各埋め込みベクトルを可視化した結果を示す。3 種類の入力データセットを FastICA のみで 3 次元に削減した結果からは、A. LULC データセットでは都市部と森林の違いが明確に現れた。A. LULC データセットでは 49 種類のラベルのうち 45 種類が植生の分類であるため、都市部よりも森林植生の分類の空間的特徴が強調された。一方で、B. OSM および C. 統合データセットを FastICA で次元削減した場合、各軸の上位 100 個の地物間の特徴の違いを定性的に解釈することができず、図 1 から、次元削減の過程で情報が損失されたことが示された。

Hex2Vec と GeoVeX モデルによる埋め込みベクトルを用いた場合、A. LULC データセットを用いた場合は森林植生が、B. OSM データセットを用いた場合は都市部が詳細に分類された。C. 統合データセットを用いた場合は、自然生態系と都市の両方が詳細に分類された。特に Hex2Vec では、A. C. のデータセットでは、西日本の暖温帯常緑広葉樹林、東日本から東北にかけての冷温帯落葉広葉樹林、北海道の針広混交林へと連続的に変化するという日本の森林植生の特徴を捉えた埋め込みベクトルが作成された。GeoVeX による埋め込みでも、A. C. のデータセットで同様の森林植生の違いが表現されたが、Hex2Vec よりも地域間の違いは小さかった。

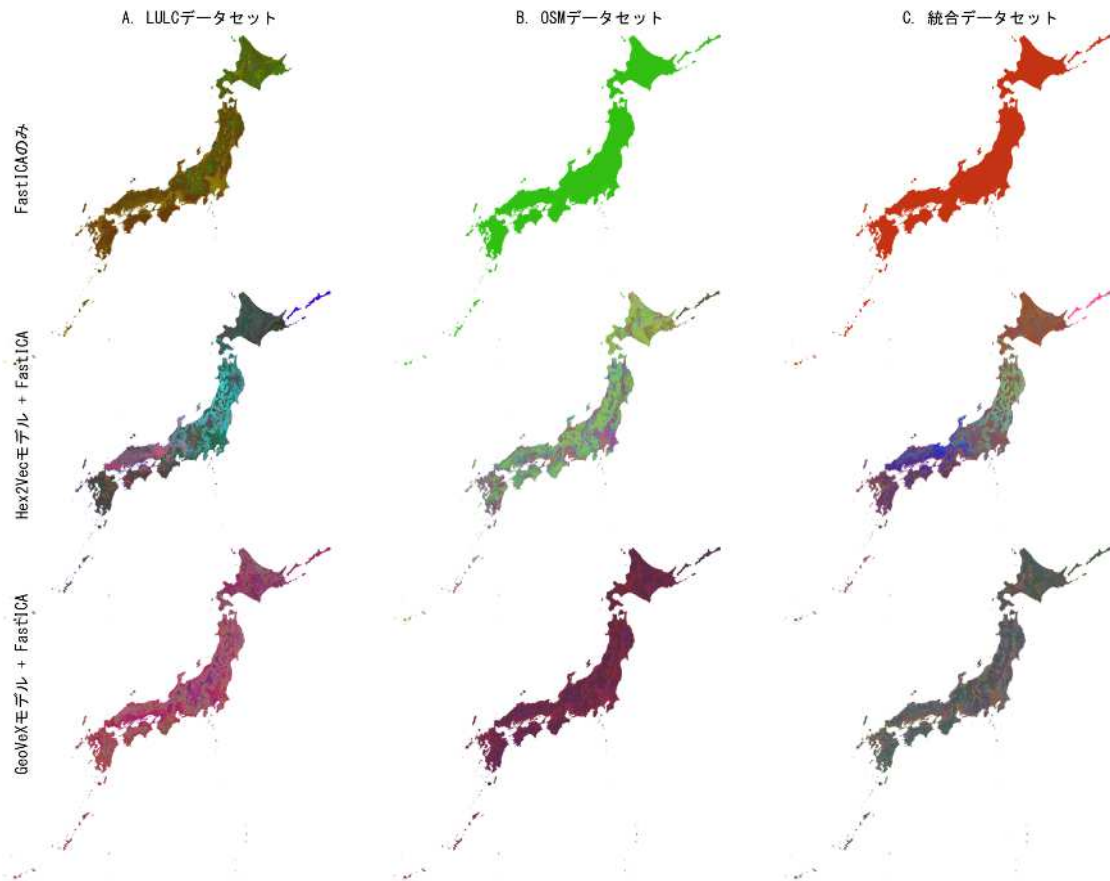


図 1. 各埋め込みベクトルの視覚的比較

3.2 下流タスクでの性能評価

下流タスクの交差検証誤差を表 1 に示す。全ての下流タスクで、埋め込みベクトルを用いた場合に性能が向上したが、最も性能が高かった埋め込みモデルと入力データセットの組み合わせはタスクによって異なった。気候変数の回帰タスクでは、Hex2Vec – 統合データセット、社会・経済変数の回帰タスクと、定期的な生物調査の有無の分類タスクでは、Hex2Vec – OSM データセットの組み合わせが最も高い性能を示した。また、環境省の自然共生サイトの認証の有無や、認証の際に自然の価値のどの側面を重視したかを分類するタスクでは、GeoVeX を用いた埋め込みベクトル群が高い性能を示した。

4. 考察

4.1 埋め込みベクトルの特性

3.1 の結果から、OSM や日本全国標準土地利用メッシュのような、分類が詳細な地理空間情報

データに対しては、一般的な次元削減の手法よりも、表現学習を用いた埋め込みベクトルを作成することで各グリッドの特徴を情報損失を抑えて低次元に削減することができる事が示された。

また、埋め込みベクトルの作成に用いるモデル内部のアルゴリズムの違いによって、埋め込みベクトルの空間的性質が変化することも明らかになった。Hex2Vec では、“*Everything is related to everything else, but near things are more related than distant things*”という“*first law of geography*”に従って、各グリッドが隣接しているかどうかを学習している [2, 9]。一方で GeoVeX では、入力データとデコーダの出力の誤差を評価する際に、中心のグリッドからの距離に応じて誤差に重みをかける方法を採用している。どちらも地理空間的データの空間分布に配慮しているが、入力データの大域的特徴を学習する CNN を用いたオートエンコーダの構造を採用した GeoVeX では、隣接するグリッドの埋め込みベクトルの特徴量が類似し、

表 1. 下流タスクでの交差検証誤差

モデル・データ	Top1のタスク	回帰タスク (RMSE)				分類タスク (AUC)				
		気候		社会・経済		生物調査	環境省の認証制度			
		年平均気温	log10(年降水量)	log10(人口)	log10(地価+1)	定期的な調査	認証の有無	理由1. 重要な場	理由2. 重要な種	理由3. 重要な機能
ICA - 土地利用	0	3.36 ±1.33	0.15 ±0.05	0.81 ±0.27	0.57 ±0.29	0.61 ±0.08	0.63 ±0.14	0.63 ±0.16	0.62 ±0.19	0.58 ±0.22
ICA - OSM	1	4.22 ±1.6	0.15 ±0.05	0.76 ±0.08	0.52 ±0.13	0.68 ±0.07	0.69 ±0.1	0.69 ±0.12	0.71 ±0.14	0.52 ±0.32
ICA - 統合	0	4.30 ±1.62	0.14 ±0.04	0.68 ±0.17	0.46 ±0.13	0.63 ±0.07	0.68 ±0.11	0.70 ±0.15	0.67 ±0.15	0.46 ±0.36
hex2vec - 土地利用	0	2.20 ±0.94	0.13 ±0.04	0.52 ±0.06	0.41 ±0.09	0.75 ±0.07	0.56 ±0.17	0.60 ±0.18	0.65 ±0.21	0.73 ±0.22
hex2vec - OSM	3	3.50 ±1.34	0.15 ±0.05	0.49 ±0.04	0.36 ±0.08	0.80 ±0.07	0.63 ±0.12	0.61 ±0.07	0.57 ±0.12	0.53 ±0.26
hex2vec - 統合	2	2.15 ±0.94	0.12 ±0.05	0.52 ±0.09	0.41 ±0.15	0.76 ±0.07	0.62 ±0.15	0.63 ±0.16	0.66 ±0.19	0.66 ±0.22
GeoVex - 土地利用	3	2.97 ±1.43	0.14 ±0.05	0.66 ±0.15	0.51 ±0.17	0.70 ±0.05	0.71 ±0.23	0.72 ±0.22	0.71 ±0.24	0.62 ±0.25
GeoVex - OSM	1	3.84 ±1.56	0.14 ±0.05	0.60 ±0.12	0.46 ±0.12	0.76 ±0.06	0.64 ±0.1	0.65 ±0.1	0.63 ±0.12	0.76 ±0.22
GeoVex - 統合	1	2.87 ±1.26	0.14 ±0.05	0.57 ±0.13	0.44 ±0.15	0.75 ±0.06	0.71 ±0.13	0.70 ±0.11	0.70 ±0.16	0.65 ±0.24

Hex2Vec よりも森林や都市域など生態系や地域別の特徴の違いが小さくなったと考えられる。

下流タスク別の性能評価実験の結果からは、特に社会経済に関わる変数の予測において人工的地物の情報が多く含まれる OSM の情報を用いた場合の性能が高くなった。保全活動の実施の有無や人々の自然に対する価値の認識など、人間の活動や社会の状態との関わりが深いタスクに対しては、埋め込みベクトルを用いることが有効である可能性が示唆された。

5. 今後の展望

地理空間情報の表現学習は比較的新しい分野である。埋め込み手法そのものについては、1. 各埋め込みモデル別の適切な空間解像度の検討、2. 距離的に近いかどうかを判別する、社会・生態システムの機能の類似性を判別するなど、表現学習のタスクの検討、3. リモートセンシングとの連携した継続的なデータ作成、また、埋め込みベクトルの解釈可能性の向上に向けては、4. 埋め込みベクトルの軸の意味的解釈手法の開発、5. 埋め込みベクトルに対する各地物情報の寄与の評価、さらに、埋め込みベクトルを応用した地理空間情報解析のために、6. 文章や写真、生物情報など様々なデータとのマルチモーダル学習への発展が期待される。これまでに蓄積されてきた多様な地理空間情報を統合して解析することで、地域内の自然の多様な価値を認識・発見することにつながることを期待する。

謝辞

本研究成果は、大阪大学 D3 センターの大規模計算機システムを利用して得られたものです。また、環境省・(独) 環境再生保全機構の環境研究総合推進費 (JPMEERF23S12116) の支援を受けました。研究の構想・実施の段階では、国立情報学研究所の北本朝展教授、大阪大学工学研究科の松井孝典助教に貴重な議論の機会をいただきました。ここに謝意を表します。

参考文献

- (1) IPBES, IPBES secretariat, 620, (2022).
- (2) S. Woźniak, P. Szymański, Proc. of the 4th ACM SIGSPATIAL International Workshop on AI for Geographic Knowledge Discovery, 61–71, (2021).
- (3) D. Donghi, A. Morvan, Proc. of the 6th ACM SIGSPATIAL International Workshop on AI for Geographic Knowledge Discovery, 3–13, (2023).
- (4) Y. Gao, et al., Applied Sciences, **12**, 24, 12942, (2022).
- (5) M. Akasaka, et al., Integrative Observations and Assessments, 209–229, (2014).
- (6) 小川みふゆら, 保全生態学研究, **18**, 69-76, (2013).
- (7) H. Yamagiwa, et al., arXiv, (2023).
- (8) 芳賀智宏ら, 環境情報科学論文集, **38**, 141-147, (2024).
- (9) W. R. Tobler, Economic Geography, **46**, 234–240, (1970).

SiO₂ 反応性イオンエッチング分子動力学シミュレーションのための

機械学習原子力場の構築

浜口 智志

大阪大学 大学院工学研究科 マテリアル生産科学専攻

1. はじめに

近年、半導体デバイスの高集積化および微細化に伴い、半導体プロセス技術はナノスケールに移行しており、原子レベルでの表面反応機構の解明が求められている。こうした半導体プロセス技術のシミュレーションを行う上で重要となるのが、エネルギーや力を予測する原子間ポテンシャルである。本研究では、反応性イオンエッチングおよび物理スパッタリングシミュレーションに適した汎化性能の高い機械学習原子間ポテンシャルの構築することを目的とする。また、モデルに組み込む原子種が増えることで複雑化すると予想される原子間ポテンシャルの開発プロセスに対して、機械学習を用いた自動化の手法を提案する。さらに、作成した機械学習原子間ポテンシャルを大規模な半導体プロセス技術の分子シミュレーションに適用し、半導体製造プロセスにおいて見られるプラズマ表面反応のメカニズム解明を目指す。半導体製造プロセスにおいて多用されている SiO₂ を基板材料とし、Si イオンおよび O イオンを入射することでスパッタ率の予測を行う。さらに、シミュレーション結果を実験値と比較することでシミュレーションの精度を評価する。¹⁾

2. シミュレーション手法

2.1 データセットの作成

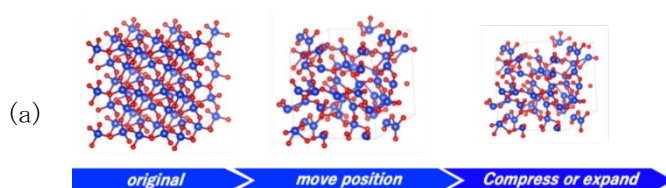
本研究では、結晶データ、アモルファスデータ、分子データの 3 パターンのデータ生成手法によって構造データを作成した。たとえば、結晶データでは、まず初めに、1 つ目の構造データの作成方法について説明する。最初に、Materials

Project から SiO₂ の結晶構造類型を取得した。次に、これらの結晶構造を構造最適化した後、それぞれに対して、Fig. 1 (a) に挙げたように、0.5 から 1.5 倍の範囲で格子を圧縮または膨張させ、さらに、その後、内部座標にランダムな変位を加え、結晶付近の多様な構造データを作成した。Fig. 1 (b) と (c) に同様に構築したアモルファスデータ、(e) に、分子データを示す。

なお、本研究では、本研究では一般化勾配近似 (GGA) の一形態である PBE 交換相関汎関数を用いて、密度汎関数理論 (DFT) に基づく第一原理計算を実施した。また、DFT 計算には PAW 法を用い、計算の実行には計算ソフト Quantum Espresso 7.2 を用いた²⁻⁴⁾。さらに、Dimer データに関しては、Gaussian16 を用いて全エネルギー及び各原子にかかる力を計算した。

2.2 機械学習原子間ポテンシャルの構築

本研究では、機械学習原子間ポテンシャルのフレームワークとして、Harvard 大学の研究グループが開発した Allegro モデルを用いた。Allegro モデルは GNN と Equivariant Neural Network を組み合わせた機械学習原子間ポテンシャルである⁵⁾。



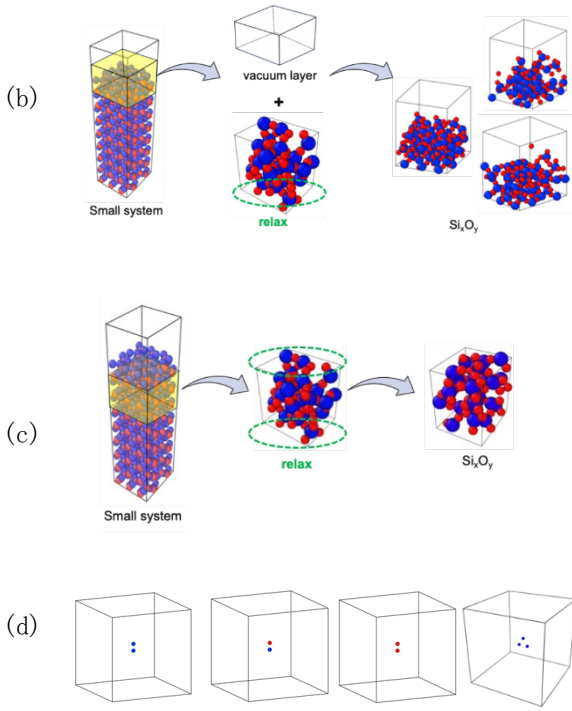


Fig. 1 Methods to create structural data (crystal, amorphous with a surface, amorphous, and dimer/trimer molecules).

2.3 原子間ポテンシャルにおける近接距離相互作用の表現

本研究では、第一原理計算ソフトの信頼性の観点から、例えば、Si-Si 結合では 1Å 以下の原子間距離を有する構造データをデータセットから取り除いた。そのため、そのまま学習を行うと、機械学習原子間ポテンシャルは原子間距離が 1Å 以下の原子の相互作用を正しく予測することができない。そこで、本研究では、Allegro のフレームワークを用いて、ポテンシャルに反発性の Ziegler-Biersack-Littmark (ZBL) 項を追加した。Allegro にて使用される ZBL ポテンシャルは次式で与えられる。

$$E_{ij}^{ZBL} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_i Z_j e^2}{r_{ij}} \phi\left(\frac{r_{ij}}{a}\right)$$

ここで

$$a = \frac{0.46850}{Z_i^{0.23} + Z_j^{0.23}}$$

$$\phi(x) = 0.18175e^{-3.19980x} + 0.50986e^{-0.94229x} + 0.28022e^{-0.40290x} + 0.02817e^{-0.20162x}$$

また、 e は電子電荷、 ϵ_0 は真空の誘電率、 Z_i と Z_j はそれぞれ 2 つの原子の核電荷を示す。これにより、機械学習原子間ポテンシャルの学習時に、ZBL ポテンシャルの重みが設定され、近接相互作用を ZBL ポテンシャルで表現することが可能になる。

Allegro ではニューラルネットワークから、中心原子 i と近傍原子 j の間に働くエッジエネルギー E_{ij} を出力する。本研究では、 E_{ij} に ZBL 項を追加することで ZBL ポテンシャルとの組み合わせを実施した。すなわし、 E_{ij} は

$$E_{ij} = E_{ij}^{NN} + E_{ij}^{ZBL}$$

で与えられ、 E_{ij}^{NN} はニューラルネットワークから出力されるエッジエネルギーを、 E_{ij}^{ZBL} は式 (3-24) の ZBL ポテンシャルを用いて計算されたエッジエネルギーを示す。モデルの学習過程では、 E_{ij} を用いて計算された系全体のエネルギー E_{system} が正解値に近くなるように、重みの更新が行われる。つまり、予め ZBL ポテンシャルによるエネルギー分が足し合わされた状態で学習が開始し、系全体のエネルギーから ZBL ポテンシャルによるエネルギー分を差し引いた値が、学習過程にて変化する。

3. 機械学習原子間ポテンシャルの学習結果

本研究では、まず、Si の構造を正しく再現するため、Si のデータセットから構築した。各構造の原子数およびデータ数を Table 1 に示す。Table 1 では、列名「Dataset type」に構造データの生成方法の種類、列名「Structure name」に構造の名前、列名「Number of atoms in structure」に 1 構造データに含まれる原子数、列名「Number of data instances」に構造データの数を記載している。SiO₂の機械学習原子間ポテンシャルを作成するために使用したデータセットも同様に構築した。

4. 分子動力学法による物理スパッタリングシミュレーション結果

本研究では、(100)面をもつ結晶 Si、及び、め、Alpha quartz 型の SiO₂ をエッチング対象材料としてシミュレーションボックスを作成し、スパッタリングシミュレーションを実施した。シミュレーションボックスでは、SiO₂ の場合 16、200 個の原子数を有する、46.2×44.4×113.6Å の大きさの SiO₂ 個体作成した。基板は構造最適化により、*x*、*y*、*z* 軸の方向のシミュレーションボックスの大きさを変化させた後、300 K にて 100 ps 熱化を行った。シミュレーションボックスは、平面方向 (*x*、*y* 軸の方向) に周期境界条件を用いている。

本研究では、(100)面をもつ結晶 Si、及び、め、Alpha quartz 型の SiO₂ をエッチング対象材料としてシミュレーションボックスを作成し、スパッ

タリングシミュレーションを実施した。シミュレーションボックスでは、SiO₂ の場合 16、200 個の原子数を有する、46.2×44.4×113.6Å の大きさの SiO₂ 個体作成した。基板は構造最適化により、*x*、*y*、*z* 軸の方向のシミュレーションボックスの大きさを変化させた後、300 K にて 100 ps 熱化を行った。シミュレーションボックスは、平面方向 (*x*、*y* 軸の方向) に周期境界条件を用いている。照射エネルギーは、250 eV、500 eV、750 eV、1000 eV の 4 条件で実施した。スパッタリングシミュレーションは NVIDIA A100 GPU を 8GPU 使用して行った。なお、本研究では、スパッタ率が安定する $1 \times 10^{15} \text{cm}^{-2}$ 以上の ion dose の範囲に対して、スパッタ率を算出した。

Table 1: Structure information of each polymorph of Si.

Dataset type	Structure name	Number of atoms in structure	Number of data instances
Crystal data	Cubic	8~64	9,652
	Hexagonal	32	6,426
	Tetragonal	32	5,222
	Orthorhombic	16	3,712
	Trigonal	24	3,352
	Slab	56	561
Amorphous data	Amorphous	15~109	6,154
Morecular data	Dimer	2	69
	Trimer	3	824
	Tetramer	4	149
All	-	2~109	36,121

本研究では、機械学習原子間ポテンシャルを用いたスパッタリングシミュレーションの結果を評価するため、実験値および経験的ポテンシャルのシミュレーション結果と比較した。実験値は、複数の文献から、イオンビームを用いたスパッタリングの結果を引用した。Si のセルフスパッタリングの実験および SiO₂ 基板に 0 イオンを入射したスパッタリングの実験は、高真空中に置かれた基板に対して、特定のエネルギーのイオンビームを照射してスパッタするイオンビームスパッ

タ法を用いて実施された。また、経験的ポテンシャルのシミュレーションでは、Si 基板を用いたシミュレーションには Stillinger-Weber ポテンシャルを用い、SiO₂ 基板を用いたシミュレーションでは、 Tersoff ポテンシャルを用いて実施した。経験的ポテンシャルを用いたシミュレーションは、機械学習原子間ポテンシャルを用いたシミュレーションと同様の条件で実施した。

Fig. 2 に、本研究で開発した機械学習力場を用いた MD シミュレーションの結果の一例を示

す。Fig. 2 の例では、同ポテンシャルを用いて、Si 基盤を構築し、 Si^+ イオンを入射イオンとして、横軸に入射イオンの運動エネルギー、縦軸に、スパッタリング・イールド（イオン入射あたりに、表面が正味に失う Si 原子数の平均値）を示している。このイールド値が正の値であれば、表面のエッチングが起こっており、府であれば、入射した Si が堆積していることを示す。赤で示した線が、本研究で得られた力場によるもの、緑が実験値、青が Stillinger-Weber の典型的なパラメータを採用して得られた結果である。数値がすべて負の値であるのは、堆積が起こっているためである。実験値とシミュレーション値は、傾向は一致しているが、定量的には、よく合っているとは言えない。この原因の究明は、今後の研究課題である。

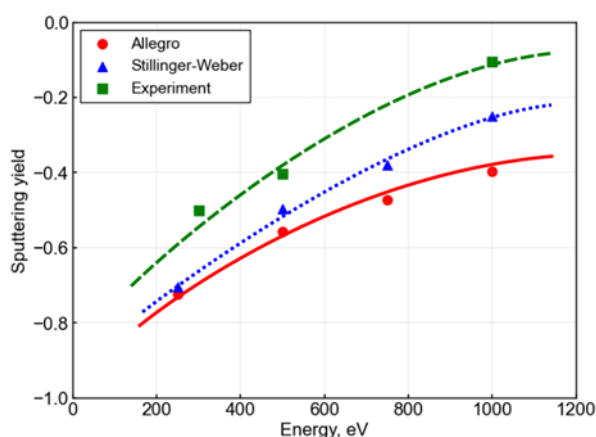


Fig. 2: Sputtering yield vs injection energy.

5. おわりに

本研究では、第一原理計算および機械学習の技術を活用し、半導体製造技術の過程で見られる非熱平衡現象に適した機械学習原子間ポテンシャルを開発した。さらに、作成した機械学習原子間ポテンシャルを用いて、従来の知見や実験値と本研究のシミュレーション結果を照らし合わせながら、スパッタリングシミュレーションの精度について考察した。

具体的には、GNN に基づいた機械学習のフレームワークを活用して、Si および SiO_2 の機械学

習原子間ポテンシャルを作成する際に、近距離相互作用に ZBL ポテンシャルを統合した。これにより、従来の機械学習原子間ポテンシャルでは困難であった物理スパッタリングシミュレーションへの応用範囲を拡張した。最終的に、Si の機械学習原子間ポテンシャル、 SiO_2 の機械学習原子間ポテンシャル、能動学習を用いた SiO_2 の機械学習原子間ポテンシャルの 3 種類のモデルを用いて、Si のセルフスパッタリングシミュレーションを実施した。

謝辞

本報告書は、同研究を修士論文研究として行った大阪大学工学研究科マテリアル生産科学専攻の田中駿也氏の修士論文の一部をまとめたものである。本研究は、大阪大学 D3 センター大規模計算機システム公募型利用制度「人工知能研究支援枠」の支援を受けて行われた。また、本研究の一部は、日本学術振興会科研費基盤(A)21H04453、科学技術振興機構(JST) 先端国際共同研究推進事業(ASPIRE)” PMJAP2321 の支援により行われた。

参考文献

- 1) 田中駿也「 SiO_2 エッチング分子動力学シミュレーションのための機械学習原子間力場の構築」 修士論文(大阪大学工学研究科マテリアル生産科学専攻、2025 年3月)
- 2) P. E. Blöchl, Physical Review Journals, Vol. 50, No. 17953 (1994), pp. 1-4.
- 3) P. Giannozzi, et al., J. Physics: Condensed Matter, Vol. 21, No. 39 (2009), pp. 1-19.
- 4) P. Giannozzi, et al., J. Physics: Condensed Matter, Vol. 29, No. 46 (2017), pp. 1-30.
- 5) A. Musaelian et al., Nature Communications, Vol. 14, No. 579 (2023), pp. 1-15.

The Multiscale-based Data-Driven Subgrid-Scale Model for Large-Eddy Simulation of Wall-Bounded Turbulent Flow

Bahrul Jalaali, Kie Okabayashi

Department of Mechanical Engineering, Graduate School of Engineering, The University of Osaka

1. Introduction

Turbulent flows are ubiquitous in both natural and industrial fields. It has a critical role in various applications, such as aircraft, turbomachinery, and weather forecasting. Characterized by chaotic and unsteady motion, turbulence involves a broad range of vortices across different scales. The use of numerical simulations with reliable computational methods serves as valuable tools for fundamental research in turbulent flow. A direct numerical simulation (DNS) resolves all turbulence scales, but its computational cost is prohibitive for practical use due to its immense computational resources on fine mesh. Among existing modeling approaches, large-eddy simulation (LES) has become a widely used compromise between accuracy and computational efficiency. In LES, large-scale vortices are directly resolved using the numerical scheme, while a turbulence model is introduced to account for the small-scale vortices. The scales that are explicitly resolved are referred to as grid-scale (GS), whereas the small-scale are known as subgrid-scale (SGS) or residual stress (τ_{ij}), with the latter represented by SGS model. Many SGS models have been proposed such as the Smagorinsky (SMAG) model which is one of the most typical SGS models. However, these conventional models, which rely on linear eddy viscosity assumptions, often struggle to accurately capture the complex features of SGS.

Recently, advances in computational resource and machine learning have enabled the development of data-driven SGS models using deep neural networks (DNN). The data-driven SGS model aims to predict τ_{ij} without relying on explicit mathematical and physical assumptions. Early efforts, such as Gamahara &

Hattori[1], used multilayer perceptrons (MLP) trained on filtered DNS (fDNS) data to predict τ_{ij} , while later Liu et al.[2] demonstrated an improved performance using convolutional neural networks (CNN) due to their ability on capturing spatial features. Despite this potential of data-driven SGS models, capturing the multiscale dynamics of turbulent fields remains challenging, particularly due to the nature of turbulent energy cascade where kinetic energy is progressively transferred from large to smaller vortices. To address this, we propose a multiscale CNN-based SGS model (MSC-SGS) which incorporates features across multiple spatial resolutions ranging from large to small vortices and evaluate its effectiveness on predicting τ_{ij} .

2. Methodology

The problem setting of this study is wall-bounded turbulent channel flow between two parallel flat plates driven by a constant pressure gradient with Reynolds number (Re) of 180. LES computation is conducted by solving the spatially filtered forms of the continuity and Navier–Stokes equations expressed in Eqs. (1) and (2).

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_i \bar{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{1}{\text{Re}} \frac{\partial}{\partial x_j} (-\tau_{ij} + 2\bar{D}_{ij}) \quad (2)$$

The overbar denotes the filtering operation and $\bar{D}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right)$, is the GS rate-of-strain tensor. Here, $\bar{u}$ and $\bar{p}$ denotes the velocity and pressure, respectively. The SGS components, $\tau_{ij} = \bar{u}_i \bar{u}_j - \bar{u}_i \bar{u}_j$, are unclosed term and need to be modeled. Here, the data-driven SGS model is proposed to predict τ_{ij} . A schematic diagram of data-driven SGS framework is depicted in Fig. 1. The data-driven SGS model is trained in a supervised manner using fDNS dataset that comprises a set of input

data X_{tr} and label data (τ_{ij}^{fDNS}) . The training step (*a priori* test) aims to establish a functional relation between the input and output variables, thus yielding a nonlinear regression $\tau_{ij}^p = \mathcal{F}(X_{tr}; w)$, where w indicates the weight of the neural network and τ_{ij}^p is the predicted τ_{ij} . The training process aims to determine the optimum weight such that $w = \text{argmin}_w (\mathcal{L}(\tau_{ij}^p, \tau_{ij}^{fDNS}))$, where $\mathcal{L}$ denotes the loss function. Subsequently, the trained data-driven SGS model is implemented in the CFD framework of actual LES computation to assess its performance (*a posteriori* test).

Here, the dataset is obtained using DNS data of a turbulent channel flow where it has been validated by comparing with Kim et al.[3]. DNS data are subsequently filtered using box filter to separate the GS and SGS components, resulting in the fDNS data. To satisfy the Galilean and rotational invariant of turbulence model, the GS variable of $\bar{D}_{ij}$ is used as the input variable. Therefore, the input (X_{tr}) and label data τ_{ij}^{fDNS} can be defined in Eqs. (3) and (4).

$$X_{tr} = \{x \in R^{6 \times N_x \times N_y \times N_z}; x = \bar{D}_{ij}\} \quad (3)$$

$$\tau_{ij}^{fDNS} = \{\tau_{ij}^{fDNS} \in R^{6 \times N_x \times N_y \times N_z}\} \quad (4)$$

As illustrated in Fig. 2, the MSC-SGS model incorporates multiscale representation of turbulent fields. The input features are separated into a quarter, half, and full scale which corresponds to large-, intermediate-, and full-scale vortices by using low-pass filter operation. Next, these inputs are sequentially encoded and then concatenated to form a comprehensive multiscale representation. To account for three-dimensional spatial interactions in turbulent flows, the MSC-SGS model utilizes 3D convolutional kernels with a uniform size of 3 across each spatial direction. For a more profound explanation of the MSC-SGS model and its training procedure, readers are referred to the study by Jalaali & Okabayashi[4].

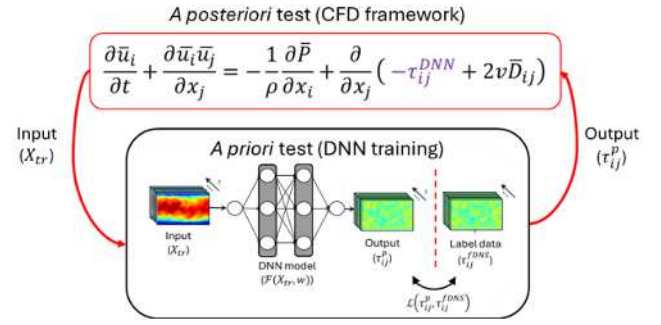


Figure 1. Schematic diagram of data-driven SGS framework.

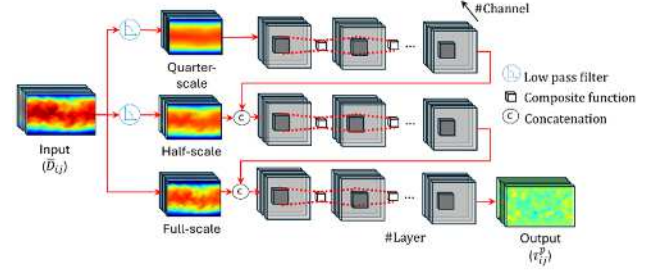


Figure 2. Schematic illustration of the MSC-SGS model network structure.

3. Result and discussion

In *a priori* test, the correlation coefficient (CC) expressed in Eq. (5) is introduced to evaluate the performance of the data-driven SGS model where $\langle . \rangle$ denotes the ensemble average in the streamwise-spanwise (x - z) direction and in time.

$$CC = \frac{\langle (\tau_{ij}^{fDNS} - \langle \tau_{ij}^{fDNS} \rangle) (\tau_{ij}^p - \langle \tau_{ij}^p \rangle) \rangle}{\sqrt{\langle (\tau_{ij}^{fDNS} - \langle \tau_{ij}^{fDNS} \rangle)^2 \rangle} \sqrt{\langle (\tau_{ij}^p - \langle \tau_{ij}^p \rangle)^2 \rangle}} \quad (5)$$

Figure 3 shows the correlation coefficient (CC) as a function of wall-normal distance (y^+), averaged over all components of τ_{ij} . The MSC-SGS model consistently yields high CC values, particularly in the region $5 < y^+ < 30$, where shear-dominated turbulence and SGS dynamics are prominent. A reduction is observed near the wall ($y^+ < 5$) due to diminished flow variability, while high correlations are observed for $y^+ > 30$. Compared to previous studies of Gamahara & Hattori[1], Bose & Roy[5], and Park & Choi[6], the MSC-SGS model demonstrates higher overall CC value, underscoring the advantage of incorporating multiscale information.

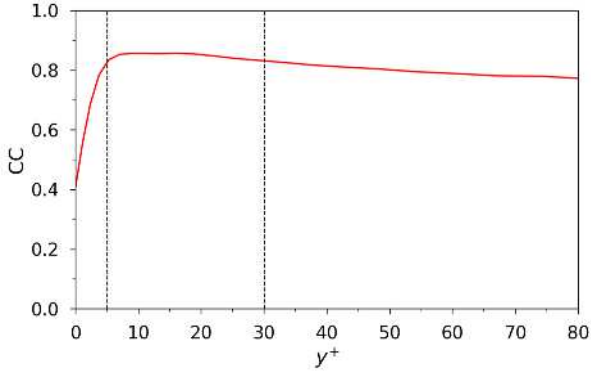
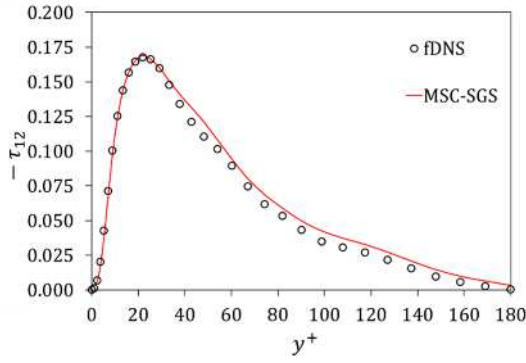
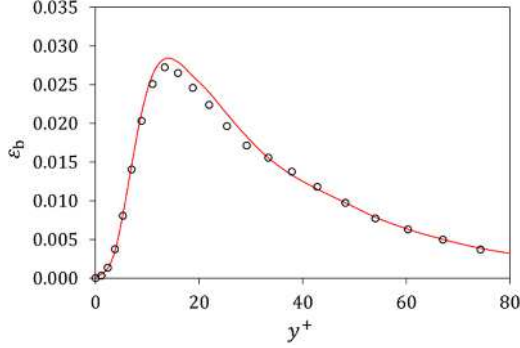


Figure 3. CC averaged in streamwise–spanwise (x - z) direction and in time between τ_{ij}^p and τ_{ij}^{fDNS} .



(a)



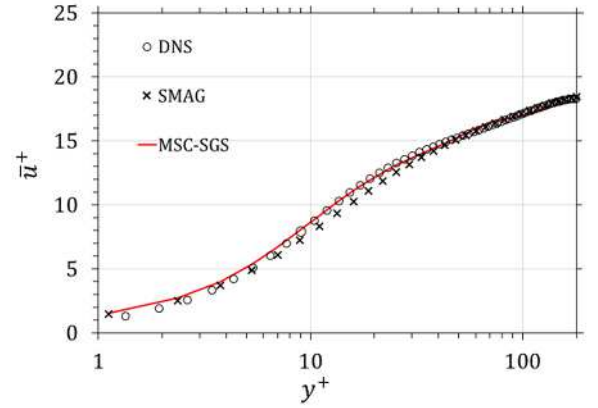
(b)

Figure 4. Wall-normal distribution of (a) τ_{12} and (b) SGS backscatter

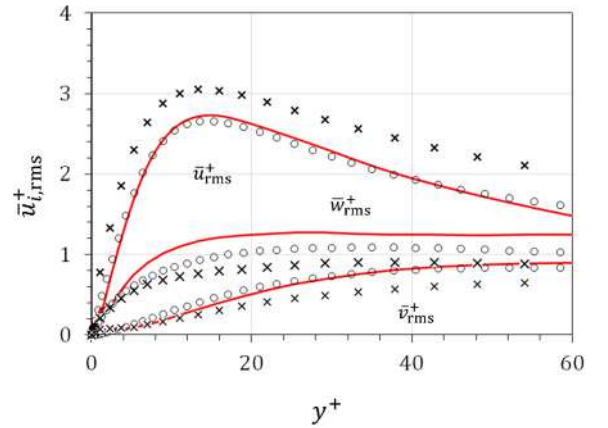
Figure 4(a) shows wall-normal distribution of τ_{12} , the dominant shear stress component in wall-bounded flows. Fig. 4(b) presents the SGS backscatter ($\varepsilon_b = -\frac{1}{2}\langle \varepsilon_{sgs} - |\varepsilon_{sgs}| \rangle$) where $\varepsilon_{sgs} = -\tau_{ij}\bar{D}_{ij}$ represents SGS backscatter (energy transfer from small to large fluctuations) and accurately capturing this term is important for turbulence modeling. From the results, the MSC-SGS model closely aligns fDNS results for both

quantities. Nevertheless, as noted in Park & Choi[6] and Duraisamy[7], *a priori* result does not guarantee accuracy in *a posteriori* simulations, prompting further LES validation of the model.

In a *a posteriori* test, the data-driven SGS model is implemented within an LES of turbulent channel flow, under conditions similar to those used in the DNS computation. The computational domain and grid resolution are $(L_x \times L_y \times L_z) = (2\pi\delta \times 2\delta \times \pi\delta)$ and $(n_x \times n_y \times n_z) = (32 \times 64 \times 32)$, respectively. For comparison, the conventional mathematics model of SMAG model with van Driest damping is also evaluated.



(a)



(b)

Figure 5. Wall-normal distribution of turbulence statistics of *a posteriori* result for (a) mean velocity and (b) root-mean-square velocity.

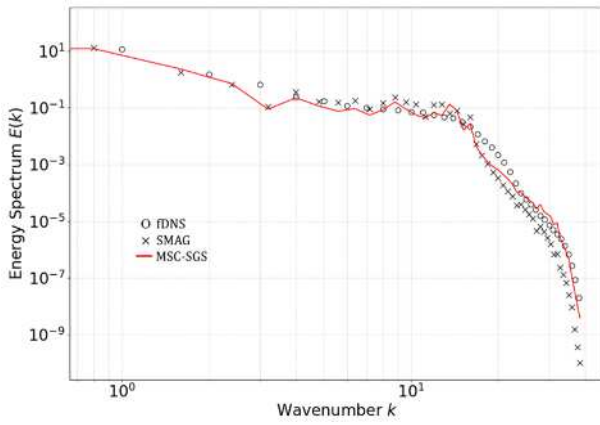


Figure 6. Energy spectrum of velocity fluctuations.

Figure 5(a) compares the mean velocity profiles of the MSC-SGS model, SMAG model, and DNS. The MSC-SGS model closely matches DNS mean velocity profile, while the SMAG model exhibits deviation. These discrepancies can be attributed to its reliance on a predefined eddy viscosity assumption. Fig. 5(b) shows the root-mean-square (rms) velocity statistics. In comparison with the DNS results, the SMAG model tends to overestimate $\bar{u}_{rms}^+$, while underestimating both $\bar{v}_{rms}^+$ and $\bar{w}_{rms}^+$ which indicates inadequate energy redistribution. On the other hand, although the MSC-SGS model slightly overpredicted the DNS for the $\bar{w}_{rms}^+$, it produces the $\bar{u}_{rms}^+$ and $\bar{v}_{rms}^+$ well owing to the appropriate energy redistribution.

Figure 6 presents the three-dimensional energy spectra of the velocity fluctuations. At low wavenumbers, both SMAG and MSC-SGS models agree well with fDNS, capturing large-scale structures. However, at high wavenumbers, the SMAG model underpredicts energy due to excessive dissipation. In contrast, the MSC-SGS model aligns closely with fDNS across all scales, indicating its ability to preserve fine-scale dynamics and accurately represent the energy cascade.

4. Conclusion and Future direction

In this study, the multiscale algorithm of the multiscale CNN-based SGS model (MSC-SGS) model was employed to predict the SGS residual stress τ_{ij} . The model encoded multiscale input representations

obtained through low-pass filtering at various scales. *A priori* results showed that the MSC-SGS model consistently achieved a high correlation coefficient across all wall regions. It also revealed that the MSC-SGS model provided accurate predictions for shear stress τ_{12} and SGS backscatter. In *a posteriori* tests, LES computations based on the MSC-SGS model showed good agreement with DNS data in terms of turbulence statistics and energy spectra, compared to the conventional mathematical model.

Despite its advantages, the MSC-SGS model has certain limitations such as the generalization ability to predict flow other than training dataset. Future work will focus on enhancing the model's ability to generalize across diverse flow conditions beyond the training datasets, thereby improving its applicability to a wider range of turbulent flow scenarios.

Acknowledgements

This work was partly supported by the Research Proposal-based Use of the Project for Nurturing Student Competing with the World at the Large-Scale Computer System-D3 Center, The University of Osaka. This study was financially supported by JSPS KAKENHI grant No. JP22K03925 and a grant from Indonesian Education Scholarship (BPI), Center for Higher Education Funding and Assessment (PPAPT), and Indonesian Endowment Fund for Education (LPDP).

Reference:

- (1) Gamahara, M., Hattori, Y. *Phys. Rev. Fluids*. (2017)
- (2) Liu, B., et al. *AIP Advances*. (2022)
- (3) Kim, J., et al. *J. Fluid Mech.* (1987)
- (4) Jalaali, B., Okabayashi, K. *Physics of Fluids*. (2025)
- (5) Bose, R., Roy, A.M. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*. (2024)
- (6) Park, J., Choi, H. *J. Fluid Mech.* (2021)
- (7) Duraisamy, K. *Phys. Rev. Fluid*. (2021)

固体群と流体の三次元連成数値シミュレーションを用いた 混合粒径土砂流の力学機構の解明

山口 栄治

琉球大学 大学院理工学研究科 工学専攻 社会基盤デザインプログラム

1. はじめに

土石流の連続体モデル^{例えば 1)}は、多数の粒子の平均的な運動を推定するため、計算負荷を抑えることができる。このため、広域な計算領域となる現地の土石流の解析に適している。また、土石流は混合粒径の粒子群で構成され、大粒子は表層に、小粒子は底部に集積する鉛直分級が生じる。粒子径で流動のしやすさは変わるため、精度の高い連続体モデルを構築するためには、分級の推定モデルの確立が必要である。

ここで、分級とは広域的に別の場所で似た粒径が集団化して分布する、ある状態を表す。本研究では、その状態に向かう粒子の運動を分級運動とよぶ。すなわち分級は、分級運動の時間積分値として現れる現象である。そのため、分級のモデル化にはまず分級運動を分析する必要がある。しかし、水理実験では、分級運動の詳細な計測が困難であり、分級モデルの妥当性の検証に課題がある。

数値解析を用いた分級現象の分析も進められている。固液混相流の解析手法に、粒子の運動をラグランジュ的に、周囲流体を粒子よりも小さな計算格子で解く連成解析法がある^{例えば 2)、3)}（以降この様な解析法を Interface-Resolved Simulation : IRS とよぶ）。IRS では、抗力係数などの曖昧な定数を用いず、複雑な流れに対する流体力を適切に推定できる。Fukuda²⁾らは、IRS の枠組で礫形状粒子群と水の運動を解く三次元連成数値解析法 APM (Arbitrary Particle Multiphase) を構築した。APM の検討より、球では実際の礫運動の推定が難しいことが示されている²⁾。しかし、IRS による分級の検討^{例えば 3)、4)}では、球群によるものが多く、礫粒子に対する分級運動は考察されていない。そのため、実際の土砂流の力学を考察するためには、まず礫粒子を用いた IRS を行い、IRS の解析

結果から礫粒子の分級運動とそれに効果を及ぼす要素を定量化して分析することが重要である。

本研究では、APM を用いて礫形状粒子群の混合粒径土砂流を解析する。そして、APM のミクロスケールの解析結果から、分級運動の定量的な指標に分級速度（平均的な粒子の鉛直速度に対する各粒径の鉛直速度の差）を用いて、マクロスケールにおける分級運動に及ぼす速度勾配と粒度分布の効果を分析する。

2. APM の解析法

本研究で用いた APM の解析法では、礫粒子群の運動の流れの解析に反映するため、粒子が存在する固相部分を密度が異なる流体として与え、全体を非圧縮性流れとして解いている。礫粒子群の運動解析では、流れの解析から流体力を評価し、剛体の運動方程式により個別要素法で個々の礫粒子の運動を解き、流れの解析の固相の位置と流速を修正する。解析手法の概要を以下に示す。詳細は文献を確認されたい。

2.1 流れ場の基礎式

流れ場における基礎式は、固相部分を考慮して、以下に示す粒子-流体混合系の一流体モデルを用いている。また、乱流モデルとして Smagorinsky モデルを用いた。

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = g_i - \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \{2(\nu + \nu_t) S_{ij}\} \quad (2)$$

$$\nu_t = (C_s \Delta)^2 \sqrt{2 S_{ij} S_{ij}} \quad (3)$$

ここに、 u_i は流体計算セル内で質量平均した i 方向流速、 P は圧力と SGS 応力の等方応力成分の

和、 ρ はセル内で体積平均した密度、 ν は動粘性係数、 g_i は重力加速度、 ν_t は SGS 乱流粘性係数、 S_{ij} はひずみ速度テンソル、 Δ は計算格子幅、 C_s は Smagorinsky 定数 (0.173) である。

2.2 流体力の評価方法

礫粒子に作用する流体力は、圧力項、拡散項を用いて評価し、これを礫粒子に含まれる範囲で体積積分して、以下の式で評価する。

$$F_i^f = \int_{\Omega_s} \left\{ -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \rho \frac{\partial}{\partial x_j} \{ 2(\nu + \nu_t) S_{ij} \} \right\} d\Omega \quad (4)$$

$$T_i^f = \int_{\Omega_s} \varepsilon_{ijk} r_j^f \left\{ -\frac{\partial P}{\partial x_k} + \rho \frac{\partial}{\partial x_l} \{ 2(\nu + \nu_t) S_{kl} \} \right\} d\Omega \quad (5)$$

ここに、 F_i^f は i 方向の流体力、 T_i^f は流体力によるトルクの i 方向成分、 r_j^f は礫粒子重心から力の作用的に向かう位置ベクトル、 Ω_s は礫粒子に含まれる領域である。

2.3 剛体運動の基礎式

剛体運動の並進運動に対する方程式を式 (6) に、回転運動に対するオイラーの運動方程式を式 (7) に示す。

$$M \ddot{r}_{G,i} = M g_i + F_i^f + F_i^c \quad (6)$$

$$\dot{\omega}_{i'} = I_{i'j'}^{-1} \{ R_{j'i} (T_i^f + T_i^c) - \varepsilon_{j'k'l'} \omega_{k'} I_{l'm'} \omega_{m'} \} \quad (7)$$

ここに、 M は礫粒子の質量、 $r_{G,i}$ は礫粒子の重心位置、 F_i^f 、 F_i^c は礫粒子表面に作用する力、上付 f 、 c は流体力および接触力による値を示し、下付 i は i 方向成分を示す。 ω_i は角速度、 $R_{j'i}$ は剛体に固定された座標から空間座標への座標変換の行列、 $I_{i'j'}^{-1}$ は慣性テンソルの成分で構成される行列の逆行列、 T_i^f 、 T_i^c は剛体の重心に作用するトルク、また、 $i' \sim m'$ は剛体に固定されたローカル座標の成分であり、ドット記号は時間に関する 1 階微分を示す。

3. 混合粒径土砂流の解析方法

解析に用いた礫粒子の形状を、図 1 に示す。また、解析条件を表 1 に示す。粒径階 k は小さい順とし、本研究は 3 粒径を用いて、最小粒径 d^1 に対する最大粒径 d^3 の比 (d^3/d^1) は 5 倍である。粒径は、礫粒子と同一体積の球の直径で定義した。



長径 a $a/d = 1.49$
 中径 b $b/d = 1.00$
 短径 c $c/d = 0.72$
 Shape Factor $c/\sqrt{ab} = 0.590$

図 1：解析に用いた粒子モデル

表 1：解析条件

粒径 d^k	d^1	d^2	d^3
	2.3 mm	5.9 mm	11.5 mm
粒子密度 ρ^s	2,810 kg / m ³		
初期投入量 V^s	2.73×10^{-4} m ³		
初期水深 h_0	0.0634 m		
水路勾配 θ	14 °		

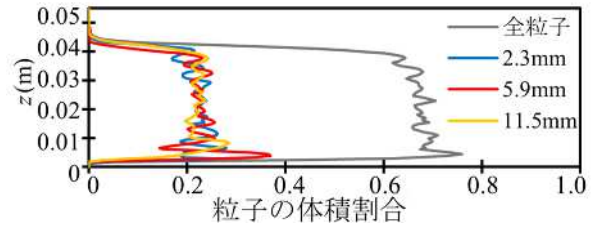


図 2：初期の粒子の体積割合の鉛直分布

水路長、幅は 0.1 m である。水路長を長くした場合、鉛直分級に起因した縦断的な分級により、流下に伴い縦断的に流動の変化が生じ、現象が複雑化する。本研究では、鉛直方向の時間的な変化である鉛直分級を考察するため、縦断方向の流動の変化は出来るだけ生じない方がよく、縦断的に周期境界を設けた。原点を水路底面の上流端の中央とし、流下方向を x 、左岸方向を y 、水路床に垂直で右手系を形成するように z の正の方向と定義した。流体計算格子は、最小粒径の 1/4 サイズ (0.545mm) とする。

解析では、最初に水平な水路に初期投入量 V^s の量の粒子を複数回に分けて、各投入回毎に大きな粒径の粒子から順に定量を投入して、各高さで各粒径が均等に混合した堆積土砂を形成した。図 2 に、初期の粒子体積割合の鉛直分布を示す。次に表 1 に示した水深 h_0 になるように水を与え、瞬間的に水路に勾配 θ をつけて土砂流を発生させた。勾配を設定してから時間を t と定義する。

本解析の計算格子は 1,027 万セル、礫粒子は 15,232 個である。これらの計算は、MPI と OpenMP のハイブリットとして、大阪大学のスーパーコン

ピューターSQUID の 1 ノードを用い、計算領域を 8 プロセスで並列化し、各プロセス内の計算は 9 スレッドの OpenMP で並列とした。

4. 分級運動に及ぼす速度勾配と粒度分布の効果

混合粒径土砂流の解析結果の流下状況を図 3 に示す。図から、 $t = 0.7\text{ s}$ 時点から表層で全粒径の粒子が流れ始め、流下が進むにつれて、表層から底部にかけて粒径の大きな順に集積する分級が進行している。

分級運動とそれに効果を及ぼす要素を分析するため、APM のミクロスケールの解析結果を用いて、各指標を定量化する。本研究では連続体モデルに資する知見を得るため、各指標はマクロスケールの値として定量化した。まず粒子の体積割合は、解析結果の粒径階 k の体積割合 α^k の同一高さの空間における 0.2 s 間の平均値 $\bar{\alpha}^k$ として、高さ z 毎に次式で求めた。

$$\bar{\alpha}^k = \frac{\int_t^{t+0.2\text{ s}} \iint \alpha^k dx dy dt}{\int_t^{t+0.2\text{ s}} \iint dx dy dt} \quad (8)$$

全粒子の体積割合 $\bar{\alpha}^{all}$ は、次式で求めた。

$$\bar{\alpha}^{all} = \sum_{k=1}^{k_{\max}} \bar{\alpha}^k \quad (9)$$

粒径階 k と全粒子の i 方向速度の時間平均値 $\bar{u}_i^k$ と $\bar{u}_i^{all}$ は、体積割合 α^k で重みづけして、次式で求めた。

$$\bar{u}_i^k = \frac{\int_t^{t+0.2\text{ s}} \iint \alpha^k u_i^k dx dy dt}{\int_t^{t+0.2\text{ s}} \iint \alpha^k dx dy dt} \quad (10)$$

$$\bar{u}_i^{all} = \frac{\sum_{k=1}^{k_{\max}} \int_t^{t+0.2\text{ s}} \iint \alpha^k u_i^k dx dy dt}{\sum_{k=1}^{k_{\max}} \int_t^{t+0.2\text{ s}} \iint \alpha^k dx dy dt} \quad (11)$$

分級運動の指標として、分級速度 $u_z^{k'}$ を全粒子の z 方向速度 $\bar{u}_z^{all}$ に対する各粒径の z 方向速度 $\bar{u}_z^k$ の差として次式で求めた。

$$u_z^{k'} = \bar{u}_z^{all} - \bar{u}_z^k \quad (12)$$

分級速度 $u_z^{k'}$ は、分級進行への各粒径の寄与を表す量である。また、分級運動に及ぼす要素として粒度分布の効果を確認するため、粒度分布の指標に平均粒径 $\bar{d}$ からの標準偏差 s を $\bar{d}$ で無次元化した変動係数 C_V を求めた。ここで、 $\bar{d}$ と s は高さ z 毎に次式で求めた。

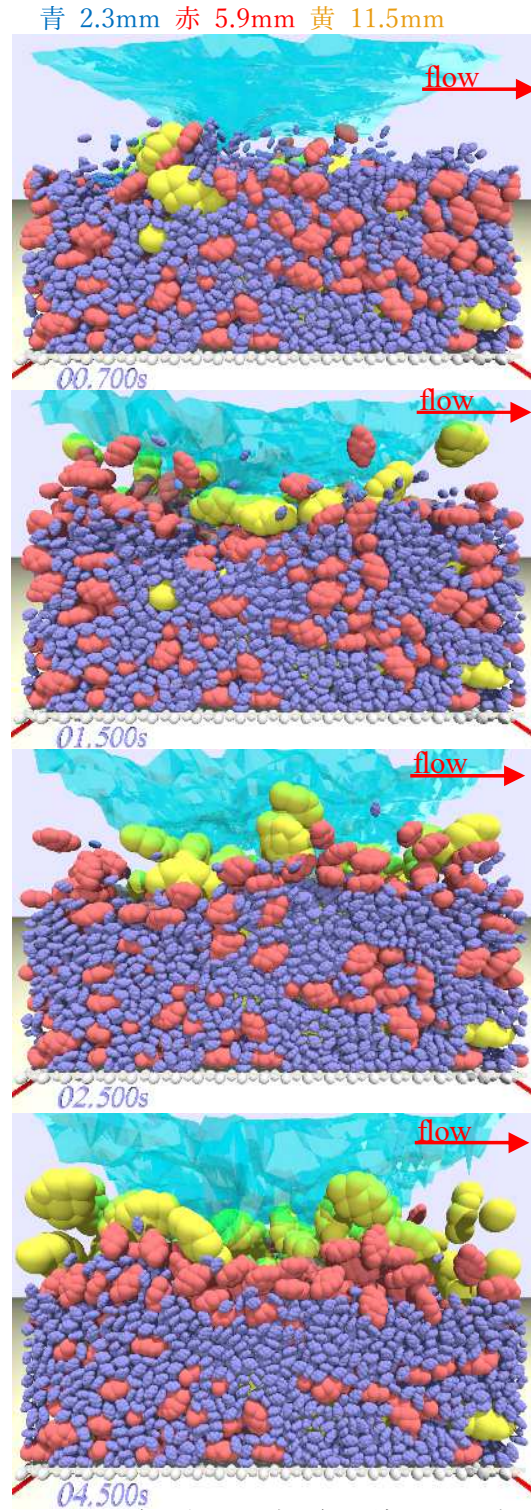


図 3：混合粒径土砂流の解析結果の 3D 描画

$$\bar{d} = \frac{\sum_{k=1}^{k_{\max}} \bar{\alpha}^k d^k}{\sum_{k=1}^{k_{\max}} \bar{\alpha}^k} \quad (13)$$

$$s = \sqrt{\frac{\sum_{k=1}^{k_{\max}} \bar{\alpha}^k (d^k - \bar{d})^2}{\sum_{k=1}^{k_{\max}} \bar{\alpha}^k}} \quad (14)$$

これらを用いて、 C_V は次式で求めた。

$$C_V = \frac{s}{\bar{d}} \quad (15)$$

C_V が大きいほど、各粒径の粒子がよく混合した

粒度分布の状態を表している。

分級速度 $u_z^{k'}$ を指標に、分級運動に及ぼす速度勾配の効果を確認する。図 4 に全粒径の粒子が流下する $t = 0.8 \text{ s} \sim 5.0 \text{ s}$ における、各粒径粒子の分級速度 $u_z^{k'}$ と x 方向速度の z 方向の勾配 $\partial \overline{u_x^k} / \partial z$ の関係を示す。図には粒度分布の指標である C_v の各範囲 ($C_v < 0.35$, $0.35 \leq C_v < 0.55$, $C_v \geq 0.55$) に分けて示した。図より、 $C_v \geq 0.55$ の時、速度勾配の増加に伴い、分級速度 $u_z^{k'}$ が小粒子は減少し、中粒子はあまり変化せず、大粒子は増加する分級運動への顕著な効果がみられる。 $0.35 \leq C_v < 0.55$ でも、大・小粒子は同様な傾向がみられるが、 $C_v \geq 0.55$ の時と比べてばらつきが大きい。中粒子は速度勾配の増加により、 $u_z^{k'}$ が減少する傾向がみられる。これは、中粒子が假定的に粒径の小さな粒度分布となり、速度勾配の増加に伴って相対的に下降したと示唆される。そして、 $C_v < 0.35$ の時、 $u_z^{k'}$ と速度勾配に相関は見られず、分級運動に速度勾配の効果が表れないことが確認された。

5. 結論

本研究では、固体群と流体の三次元連成数値解析法である APM を用いて、3 粒径土砂流を解析し、解析結果から分級運動に効果を及ぼす要素について分析した。

平均流を解く連続体モデルの構築に有効な知見としての分級運動に効果を及ぼす要素の分析を行うため、APM の解析結果について、同一高さの鉛直方向の平均粒子速度を用いて分級速度を求め、これを分級運動の程度を表す指標とした。そして、流下方向速度の鉛直勾配と粒度分布の変動係数（平均粒径に対する粒径の標準偏差）と分級速度の関係を分析した。

粒度分布の変動係数を考慮して、分級速度と速度勾配の関係を確認した。変動係数が 0.55 以上の範囲で、速度勾配の増加により分級が進行する顕著な効果を確認した。しかし、変動係数が小さくなると、速度勾配と分級速度の関係のばらつきは大きくなり、変動係数が 0.35 以下の範囲では、速度勾配は分級の進行に効果を及ぼさないこと

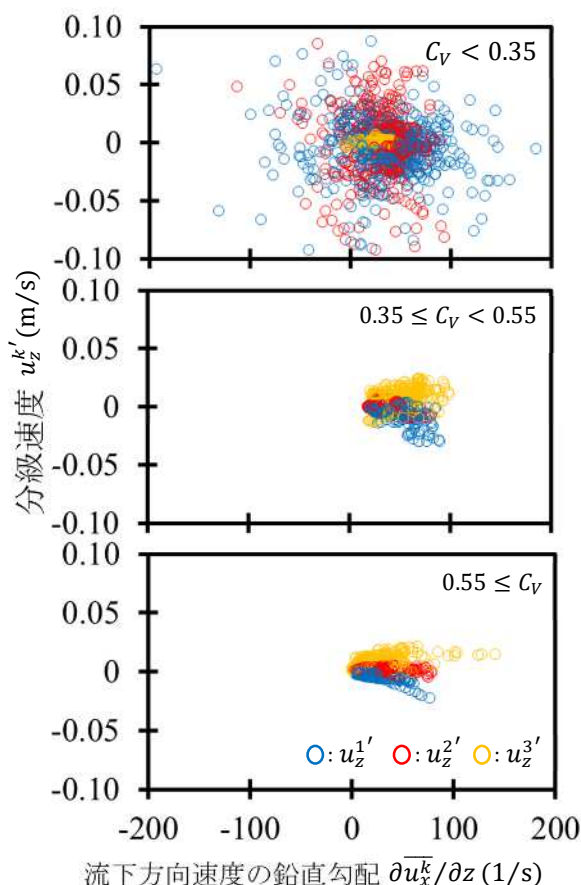


図 4 変動係数毎の分級速度と速度勾配の関係

が確認された。この成果を踏まえると、粒度分布の変動係数で分級のしやすい場の状態を評価して、速度勾配で分級を進行させるという、連続体としての分級モデルの構築が可能であることが示唆される。

今後さらに種々の条件による IRS の活用などを通して、土砂流の力学機構を明らかにし、分級を適切に考慮できる土砂流の連続体モデル構築につなげていくことが重要である。

参考文献

- (1) S. P. Pudasaini and M. Mergili, J. Geophys. Res.: Earth Surf., **124**, 2920-2942, (2019).
- (2) T. Fukuda and S. Fukuoka, Adv. Water Resour., **129**, 297-310, (2019).
- (3) T. Lai, C. W. Lin, and Y. J. Chou, Powder Technol., **427**, 118712, (2023)
- (4) 熱海孝寿, 他, 土木学会論文集 B1 (水工学), **77**, 2, I_619-I_624, (2021).

不規則系におけるナノスケール熱輸送のシミュレーション解析

Yijia WU, Anilkumar Chirag

東京大学 大学院工学系研究科

1. はじめに

固体材料における熱輸送の理解は、熱マネジメント技術における材料設計および最適化にとって極めて重要である。結晶においては、熱輸送は伝播性フォノンによって担われるとするフォノンガスモデル(phonon gas model: PGM)によって良く記述され、半古典的なボルツマン輸送方程式(Boltzmann Transport Equation: BTE)を用いることで効果的な解析が可能である。しかしながら、界面や結晶粒界、不純物、あるいは完全な非晶質化といった構造的無秩序が導入されると、フォノン輸送の挙動は大きく変化する。これは、散乱の増加や振動モードの局在化などの機構に起因している。特に完全非晶質材料においては、熱輸送は伝播的な性質から逸脱し、振動エネルギーのランダムウォーク的な拡散に支配される。

近年では、局在モードおよび拡張モード、さらにそれらの結合を考慮した 2 チャネルモデルが提案され、非晶質系における熱輸送の理解に向けた理論的枠組みが構築されつつある。しかしながら、現時点では依然として多様な無秩序材料に対して統一的な物理描像を提供するには至っておらず、さらなる理論的および数値的検討が求められている。

このような無秩序構造が熱キャリアの輸送をいかに抑制するかについて理解を深めることは、熱伝導の制御および最適化の観点から重要であり、熱絶縁材やバリアコーティングなど、先進的な熱マネジメント技術の開発に広く応用可能である。そのためには、振動モードごとの詳細な熱輸送メカニズムの解析が不可欠であり、高性能計算(HPC)の活用が重要な役割を果たす。

本研究では、不規則性が導入された代表的な 2 つの系、すなわちグラファイト層間化合物(Graphite

Intercalation Compounds: GICs)および不純物導入アモルファスシリコン(a-Si)を対象に、非平衡分子動力学(NEMD)法および振動モード解析を用いた熱輸送特性の比較解析を行う。

2. FeCl₃-黒鉛層間化合物における熱輸送解析

本研究では、グラファイトおよびその FeCl₃-グラファイト層間化合物(Graphite Intercalation Compounds: GICs)における熱伝導率挙動の理解をさらに深めることを目的として、層間構造(Stage-n)ごとの特性を詳細に調査した。ここでの「Stage-n」とは、隣接する FeCl₃ 層の間に存在するグラフェン層の数を意味する。

非平衡分子動力学(NEMD)法を用いたこれまでの解析により、熱伝導率が Stage 数に対して構造依存的な非単調な傾向を示すことが明らかとなった。このメカニズムを解明するために、スペクトルエネルギー密度(SED)解析を行い、周波数および波数に依存したフォノンの分散関係を抽出した。これにより、フォノンの平均自由行程およびコヒーレンス長といった熱輸送に関わる重要な物理量を定量的に算出した。その結果、純粋なグラファイトと比較して平均自由行程は減少し、コヒーレンス長は増加する傾向が確認され、FeCl₃ 層間化に伴う熱伝導率の抑制メカニズムに新たな知見を提供した(図 1a,b)。

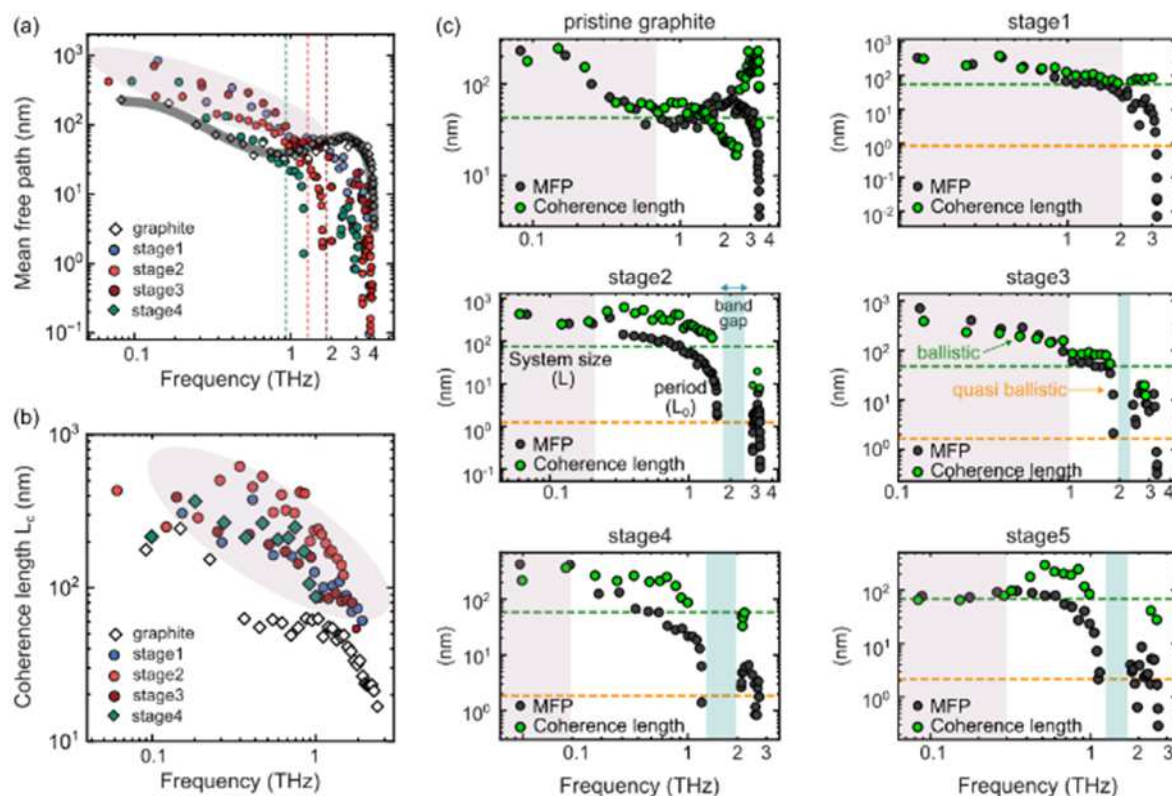


図 1: グラファイト層間化合物 (GIC) の各ステージにおける熱輸送特性の比較。a) 各 Stage GIC における平均自由行程の周波数依存性の比較。b) 各 Stage GIC におけるコヒーレンス長の比較。c) 各 Stage GIC における平均自由行程およびコヒーレンス長の直接比較。

3. 不純物導入によるアモルファスシリコンの熱輸送特性

アモルファスシリコン (a-Si) における不純物の影響を評価するため、非平衡分子動力学 (NEMD) シミュレーションを実施し、熱輸送特性の変化を調査した。非晶質材料においては、熱伝導は伝播モード(propagons)と非伝播モード(diffusons) の双方によって担われており、不純物がこれらの振動モードに及ぼす影響を定量的に評価することは困難とされている^[1,2]。

本研究では、Si 原子の一部をランダムに質量が 2 倍の Si 同位体に置換することで不純物を導入し、異なる原子濃度 (at%) に対してその影響を解析した。その結果、10 at%の不純物濃度において熱伝導率は 10~20%減少し、この傾向は実験結果とも良い一致を示した (図 2a)。密度状態 (Density of States) の計算からは、この熱伝導率

の低下は質量効果による音速の低下ではなく、他の要因によるものであることが示唆された。

興味深いことに、純粋系と不純物導入系において同程度の熱伝導率を予測する Allen-Feldman 理論^[2]では、本研究で観測された熱伝導率の顕著な抑制を説明することができなかった。そこで、固有モード分解 (Normal Mode Decomposition: NMD) を用いた解析を行った結果、リラクゼーション時間は大きく変化していないことが示された (図 2b)。一方、固有モードに基づく参加率 (Participation Ratio: PPR) の計算により、不純物の導入によって振動モードの局在化が顕著に強まっていることが明らかとなった。このモードの局在化こそが、熱伝導率低下の主要因であると考えられる。

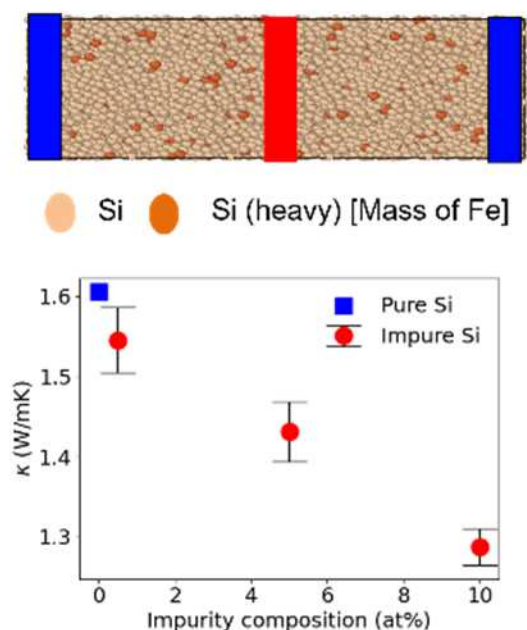


図 2：重い Si 同位体を導入したアモルファス Si (a-Si) に対する NEMD 計算結果。10 at%の不純物濃度において、熱伝導率が約 10～20%低下することが確認された。

4. おわりに

本研究では、 FeCl_3 層間化合物 (GICs) および不純物導入アモルファスシリコン (a-Si) を対象に、非平衡分子動力学 (NEMD) 法および振動モード解析を用いて熱輸送特性を評価した。GICs においては、層間構造の違いに起因するコヒーレント輸送からインコヒーレント輸送への遷移が明らかとなった。一方、a-Si では、不純物導入によって振動モードの局在化が強まり、それが熱伝導率の抑制に寄与していることが確認された。これらの結果は、構造的無秩序がフォノン輸送に及ぼす影響を定量的に理解するうえで有用であり、将来的な熱マネジメント材料の設計に向けた有益な知見を提供するものである。

参考文献

- (1) J.M. Larkin et al., Phy. Review B., 89, 144303 (2014)
- (2) P. B. Allen et al., Philosophical Magazine, 79, 11-12 (1999)

Suppression of electron acceleration by strong self-amplified magnetic field in quasi-parallel collisionless shocks

Minh Nhat Ly

大阪大学 大学院理学研究科

1. Introduction

Collisionless shocks are ubiquitous phenomena in space and astrophysical plasmas. In the ordinary shockwaves we frequently observe on Earth, energy dissipation is primarily driven by particle collisions. However, the hot and dilute extraterrestrial environments where astrophysical shocks are found are effectively collisionless, as binary particle collisions are rare. Through extensive studies of such systems, most notably Earth's bow shock and supernova remnants, we know that the magnetic field facilitates the dissipation of the shock's kinetic energy via collective interactions with charged particles (see Refs. 1, for a review).

One of the most important properties of collisionless shocks is their remarkable ability to accelerate particles to relativistic energies (2). These "cosmic accelerators" are believed to be responsible for the highly energetic particles, or cosmic rays, detected on Earth (3, 4). Both electrons and ions primarily gain energy through a process known as diffusive shock acceleration (DSA), which involves repeated scattering across the shock front by electromagnetic (EM) waves (2).

The physical characteristics of a shock, and consequently its ability to accelerate particles, are largely determined by the angle, θ_{Bn} , between the shock normal (the direction of shock propagation) and the upstream magnetic field (5). This parameter determines whether the shock is quasi-parallel ($\theta_{Bn} < 45^\circ$) or quasi-perpendicular ($\theta_{Bn} > 45^\circ$). It is well-established that quasi-parallel shocks can efficiently inject both electrons and ions into the DSA cycle, although ion acceleration is significantly more efficient than that of electrons (5, 6). In contrast, while electron

acceleration can occur at quasi-perpendicular shocks, the injection of ions into the DSA process has not been observed (5, 7).

Ion acceleration at quasi-parallel shocks is relatively well understood. Ions are reflected from the reforming shock front and stream into the upstream region, forming what is known as the shock precursor. In this precursor, the streaming ions amplify the magnetic field and generate the turbulence necessary to scatter particles back toward the shock (8, 9), which is a crucial step for completing the DSA cycle and preventing their escape.

In contrast, electron acceleration in quasi-parallel shocks is more complex and less understood (10, 11). Due to their much smaller Larmor radii, electrons require significant pre-acceleration before they can be injected into the DSA process. Their acceleration is believed to depend strongly on ion dynamics, as the turbulent fields generated by ions are the dominant mechanism for their energization. Unraveling the mechanisms of electron acceleration is crucial for interpreting astrophysical observations, as electrons are the primary source of the observed non-thermal radiation spectra (12).

In this research, we propose an additional constraint on electron acceleration within the DSA framework. We demonstrate that if the shock drives strong magnetic field amplification, it can become locally superluminal, which in turn suppresses electron DSA. This process is demonstrated self-consistently using first-principles Particle-in-Cell (PIC) simulations.

2. The Particle-in-cell method to study quasi-parallel shocks

In this section, we introduce the Particle-in-Cell

(PIC) method and outlines the simulation setup used to study quasi-parallel collisionless shocks. We will demonstrate two simulation setups: one that results in electron acceleration and one that does not.

2.1. Particle-in-cell method

The Particle-in-Cell (PIC) method is a kinetic approach that models plasma as a large ensemble of discrete macro-particles, representing both ions and electrons (see Ref. 13 for PIC method review). This technique is essential for our research as it facilitates a self-consistent study of the micro-scale physics that fluid-based models, such as magnetohydrodynamics (MHD), cannot resolve (14).

In the PIC method, macro-particles move freely within the simulation domain, driven by the equations of motion. The electromagnetic (EM) field, which provides the Lorentz force, is calculated on a grid. Consequently, macro-particles interact indirectly through the grid-based EM field. This approximation is valid because the plasma is collisionless and binary interactions between particles extremely rare. The feedback of particles for the EM field, charge and current densities, are computed at each time step by summing the contributions of all individual particles onto the grid. This self-consistent loop accurately captures the complex interplay between particle dynamics and wave generation, such as the ion streaming that drives turbulence and the subsequent particle scattering fundamental to the diffusive shock acceleration (DSA) process.

2.2. Simulation setup

The simulations employ the piston method, which models the shock in the downstream rest frame (Fig. 1) (5, 6). We employ public PIC code SMILEI for our calculation (15). Reflective boundary conditions are used for both the macro-particles and the EM fields. The initial plasma is given a drift velocity of $-v_{pt}$ filling the entire simulation domain. This plasma reflects off the boundary on the left. The shock emerges

from the interaction between the two counter-streaming flows and propagates to the right. Assuming a strong shock condition (compression ratio $r = 4$), the shock speed is $v_{sh}' = 1/3 v_{pt}$ in the downstream frame, which corresponds to $v_{sh} = 4/3 v_{pt}$ in the upstream rest frame.

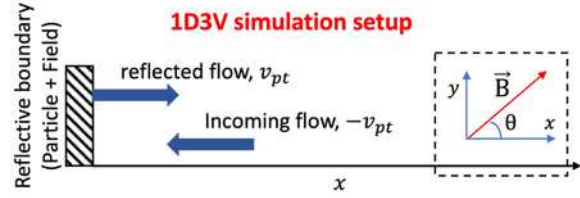


Figure 1. Schematic picture of PIC simulation setup using piston method.

Simulation parameters are summary as follow:

- Domain and Resolution: The simulation domain length is $L_x = 180224 [c/\omega_{pe}]$, where c is the speed of light and ω_{pe} is intrinsic plasma frequency. The spatial resolution is set to 10 grid cells per electron inertial length c/ω_{pe} . The time step is $dt = 0.4 \omega_{pe}^{-1}$ to satisfy the Courant–Friedrichs–Lewy condition (13, 15).

- Physical Parameters: In all simulations, the angle between the magnetic field and the shock normal is fixed at $\theta_{Bn,0} = 30^\circ$. The magnetic field is initialized as $\mathbf{B}_0 = B_0 [\cos(\theta_{Bn,0})\hat{x} + \sin(\theta_{Bn,0})\hat{y}]$. The injection velocity is $v_{pt} = 0.25c$, leading to a shock velocity of $v_{sh} = 0.33c$. The magnetic field strength is set in code units to yield a fixed Alfvén Mach number of $M_A = v_{sh}/v_A = 26$, where v_A is the Alfvén speed.

- Varied Parameter: We vary the sonic Mach number ($M_s = v_{sh}/c_s$), setting it to $M_s = 4$ and $M_s = 20$. Here, $c_s = \sqrt{(T_i + T_e)/m_i}$ is the plasma sound speed. We chose to vary M_s because these cases demonstrate different levels of magnetic field amplification. The $M_s = 20$ case, in particular, generates a turbulent field strong enough to suppress electron DSA.

3. Results

3.1. Evidence of electron DSA suppression

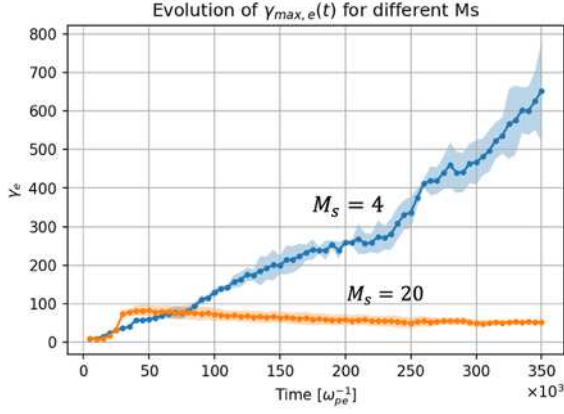


Figure 2. Maximum Lorentz factor $\gamma_{max,e}$ evolving overtime. $\gamma_{max,e}$ was obtained by tracking 10 highest energy electrons in the entire simulation domain and calculating their average γ_e .

In the $M_s = 4$ simulation (blue line in Fig. 2), electrons are continuously accelerated, with their energy steadily increasing throughout the simulation. This linear growth in energy is a classic signature of the Diffusive Shock Acceleration (DSA) mechanism operating effectively.

In simulation with $M_s = 20$ simulation, electrons initially gain energy by pre-acceleration processes, their acceleration halts, and the maximum Lorentz factor plateaus at around $\gamma_e \approx 100$. This stalling of acceleration provides clear evidence that the DSA process has been suppressed for electrons this case. The following sections will explore the physical reason for this suppression.

3.2. Magnetic field amplification

To understand the suppression of electron DSA, we examine the magnetic field structure at the shock. Figure 3 reveals that the $M_s = 20$ shock is associated with significantly stronger magnetic field amplification compared to the $M_s = 4$ case.

Figure 3 a) shows a snapshot of the magnetic field components B_y and B_z for the $M_s = 20$ simulation. The upstream magnetic fluctuation and amplification of perpendicular components ($x - x_{sh} > 0$) is causing by reflected-ions-trigger streaming instability (8).

Figure 3 b) quantifies the amplification in the upstream by showing the time-averaged perpendicular magnetic field, $B_{\perp} = \sqrt{B_y^2 + B_z^2}$. $M_s = 20$ show much stronger amplification than $M_s = 4$ which is consistent with results from previous studies (16). Notably, in the $M_s = 20$ simulation, the amplified magnetic field (orange line) exceeds the theoretical critical threshold required to suppress electron DSA (red dashed line). As will be discussed in the following section, this intense turbulence is the key mechanism that halts the electron acceleration process.

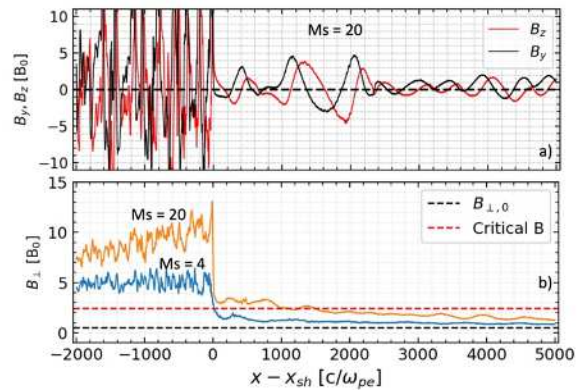


Figure 3. a) Magnetic field profile, B_y and B_z at $t = 225,000 \omega_{pe}^{-1}$ of simulation with $M_s = 20$. b) Time average over $t = 200,000 - 250,000 \omega_{pe}^{-1}$ of perpendicular magnetic field, $B_{\perp} = \sqrt{B_y^2 + B_z^2}$. The magnitude of $B_{\perp} [B_0]$ is compare with initial value $B_{\perp,0}$ and the theoretical critical value from Eq. 1. The position has been normalized with the shock position, x_{sh} .

3.3. Critical field condition

The reason for the suppression of electron DSA in the $M_s = 20$ case is straightforward. For electrons to be injected into the DSA process, they must travel upstream against the plasma flow, scatter off turbulent fields, and return to the shock. Since electrons diffuse primarily along magnetic field lines, their ability to escape upstream is highly dependent on the field's orientation.

If the perpendicular magnetic field is strongly amplified, the angle $\theta_{Bn} = \arccos(B_x/B_{tot})$ will

significantly increase ($B_{tot} = \sqrt{B_{\perp}^2 + B_x^2}$ is the total field amplitude). The speed an electron must achieve *along the magnetic field line* to outrun the shock front is $v_{sh}/\cos(\theta_{Bn})$. As the electrons velocity cannot exceed the speed of light, if $v_{sh}/\cos(\theta_{Bn}) > c$, the shock will become superluminal and subsequently impossible for electron to escape upstream. Hence, the critical condition for electron DSA is

$$\frac{B_{tot}}{B_0} < \frac{c}{v_{sh}} \cos(\theta_{Bn,0}). \quad (1)$$

4. Discussion and conclusion

In this study, we investigated the impact of the Sonic Mach number (M_s) on the efficiency of electron acceleration in quasi-parallel collisionless shocks. Using 1D Particle-in-Cell (PIC) simulations, we modeled two distinct scenarios: a low Mach number shock ($M_s = 4$) and a high Mach number shock ($M_s = 20$), while keeping other parameters like the Alfvén Mach number constant.

We clearly demonstrate that shock with $M_s = 20$ can drive strong magnetic field amplification, in which case electron DSA is suppressed. This results change common belief that high Mach number shock is always more efficient in particle acceleration (11). In mildly relativistic shocks regime, extreme amplification of magnetic field can significantly dampened electron acceleration process. The suppression is caused by the superluminal shock condition, which was triggered by intense magnetic field amplification in the $M_s = 20$ case. The resulting increase in the field line angle (θ_{Bn}) blocked the electrons' upstream return to the shock, halting the DSA process by violating the critical condition in Eq. (1).

In conclusion, our work has shown by first-principle that electron acceleration might be suppressed by strong self-amplified magnetic field in quasi-parallel collisionless shocks. This finding has important implications for astrophysical environments such as supernova remnants and galaxy clusters, where a wide

range of shock Mach numbers is expected. Future work using 2D and 3D simulations would be valuable to confirm if this suppression mechanism persists in higher dimensions.

References

- (1) A. Balogh and R. A. Treumann, *Physics of Collisionless Shocks: Space Plasma Shock Waves* (Springer, NY, 2013).
- (2) R. Blandford and D. Eichler, *Physics Reports* 154, 1 (1987).
- (3) L. O. Drury, *Astroparticle Physics* 39–40, 52 (2012).
- (4) P. Blasi, *Astron Astrophys Rev* 21, 70 (2013).
- (5) D. Caprioli and A. Spitkovsky, *ApJ* 783, 91 (2014).
- (6) J. Park, D. Caprioli, and A. Spitkovsky, *Phys. Rev. Lett.* 114, 085003 (2015).
- (7) R. Xu, A. Spitkovsky, and D. Caprioli, *ApJL* 897, L41 (2020).
- (8) A. R. Bell, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 353, 550 (2004).
- (9) A. Marcowith, A. J. Van Marle, and I. Plotnikov, *Physics of Plasmas* 28, 080601 (2021).
- (10) S. Gupta, D. Caprioli, and A. Spitkovsky, *ApJ* 968, 17 (2024).
- (11) S. Gupta, D. Caprioli, and A. Spitkovsky, *ApJ* 976, 10 (2024).
- (12) G. B. Rybicki and A. P. Lightman, *Radiative Processes in Astrophysics* (Wiley-Vch, Weinheim, 2004).
- (13) C. K. Birdsall and A. B. Langdon, *Plasma Physics via Computer Simulation* (McGraw-Hill, New York, 1985).
- (14) A. Marcowith, G. Ferrand, M. Grech, Z. Meliani, I. Plotnikov, and R. Walder, *Living Rev Comput Astrophys* 6, 1 (2020).
- (15) J. Derouillat et al., *Computer Physics Communications* 222, 351 (2018).
- (16) D. Caprioli and A. Spitkovsky, *ApJ* 794, 46 (2014).

センター報告

2024 年度大規模計算機システム利用による研究成果・論文一覧

この一覧は、本センター大規模計算機システムを利用して 2024 年 4 月から 2025 年 3 月までに得られた研究成果について、利用者から報告されたものを掲載しています。

1 学術雑誌掲載論文

- [1] Kunichika Tsumoto, Takao Shimamoto, Yuma Aoji, Yukiko Himeno, Yuhichi Kuda, Mamoru Tanida, Akira Amano, Yasutaka Kurata., "Chained occurrences of early afterdepolarizations may create a directional triggered activity to initiate reentrant ventricular tachyarrhythmias.", *Computer Methods and Programs in Biomedicine*, 261,108587, Jan.2025.
- [2] Zhiwen Jiang, Masahiko Shibahara, "Application of a thermal circuit model for the prediction of interfacial thermal resistance between water and a nanostructure surface using molecular dynamics simulations", *International Journal of Thermal Science*, 208, 109441, Feb. 2025.
- [3] Akio Ishii, "Energetical effects of the edges and vertices of face-centered-cubic Pd and Au nanoparticles: a density functional theory study", *computational materials science*, Vol.243 page 113122, 2024.
- [4] Akio Ishii, "Edge-and vertex-originated differences between nanoparticles and nanovoids: A density functional theory study of face-centered-cubic Al", *computational materials science*, Vol 246, page 113342, 2025.
- [5] Nanako Ishihara, Genta Chikatani, Hiroaki Nishijima, Hiro Tabata, Yoko Hase, Yoshiharu Mukouyama, Shuji Nakanishi, Shiho Mukaida, "Developing a design guideline of boronic acid derivatives to scavenge targeted sugars in the formose reaction products using DFT-based machine learning", *Chemistry Letters*, Vol.53, No.6, upae087, May. 2024.
- [6] Keitaro Ohashi, Kosei Nishimura, Kaito Nagita, Takuya Hashimoto, Shoko Nakahata, Takashi Harada, Toshiaki Ina, Shuji Nakanishi, Kazuhide Kamiya, "Size-Dependency of Electrochemically Grown Copper Nanoclusters Derived from Single Copper Atoms for the CO Reduction Reaction", *ChemSusChem*, e202402576, 2025.
- [7] 高木秀蔵, 鹿島千尋, 中谷祐介, 角田成美, 小川健太, 秋山諭, 妹背秀和, 朝田健斗, "降雨出水に伴う *Chattonella* 属赤潮の播磨灘内湾部から備讃瀬戸への広域輸送", *土木学会論文集*, Vol.80, No.17, 24-17226, Nov. 2024.
- [8] 出口博之, 鹿島千尋, 中谷祐介, "地形改変による波浪場の変化が閉鎖性内湾の流動・水質に及ぼす影響", *土木学会論文集*, Vol.80, No.17, 24-17233, Nov. 2024.
- [9] 鹿島千尋, 中谷祐介, "瀬戸内海における陸域・内部生産・外洋起源CODの分布", *土木学会論文集*, Vol.80, No.17, 24-17232, Nov. 2024.
- [10] 鹿島千尋, 中谷祐介, "瀬戸内海における湾灘別L-Q式の提案", *土木学会論文集*, Vol.81, No.16, 24-16119, 2025/2/1.
- [11] Takuya Akiyama, Tetsuro Kusamoto, Kazushi Mashima, Hayato Tsurugi, "Synthesis of Multisubstituted Cyclopentadiene Derivatives from 3,3-Disubstituted Cyclopropenes and Internal Alkynes Catalyzed by Low-Valent Niobium Complexes", *Journal of the American Chemical Society*, vol.146, p.33338, Nov. 2024.
- [12] Takashi Matsubara, Takehiro Aoshima, Ai Ishikawa, and Takaharu Yaguchi, "Deep Energy-Based Discrete-Time Physical Model for Reproducing Energetic Behavior", *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems*, 2025.

- [13] Takahito Yoshida, Takaharu Yaguchi, and Takashi Matsubara, "Loss Function for Deep Learning to Model Dynamical Systems", IEICE Transactions on Information and Systems, vol. E107-D, no. 11, pp. 1458-1462, 2024.
- [14] Takashi Matsubara, Yuto Miyatake, and Takaharu Yaguchi, "The Symplectic Adjoint Method: Memory-Efficient Backpropagation of Neural-Network-Based Differential Equations", IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems, vol. 35, no. 8, pp. 10526-10538, 2024.
- [15] Yasuya Nakayama, Yuki Matsuoka, Toshihisa Kajiware, "Simulating Brownian motion in thermally fluctuating viscoelastic fluids by using the smoothed profile method", Journal of Computational Physics, Vol.509, 113035, 2024.
- [16] Tomohiro Tokunaga, Toshihisa Kajiware, and Yasuya Nakayama, "Prediction of parison formation using process data in extrusion blow molding", Manufacturing Review, Vol.12, 2, 2025.
- [17] Yasuya Nakayama, "Brownian motion and microrheology in complex fluids under periodic boundary conditions", Seikei-Kakou, Vol.37, No.7, 2025.
- [18] Shuichi Suzuki, Ritsuki Tanaka, Ruifeng Shu, Takeshi Naota, "Stimuli - Induced Controls of Magnetic and Photophysical Properties Using Liquescent Open - Shell Ionic Molecular Systems", ChemPlusChem, vol. 89, e202400132, July/2024.
- [19] Ruifeng Shu, Takeshi Naota, Shuichi Suzuki, "Needlestick - Stimulation - Induced Conversion of Short - Wave Infrared - Light Transparency Using a Liquescent Radical Anion ", Small, vol. 20, 2311557, Aug/2024.
- [20] Sett Aung Naing, Takeshi Naota, Daisuke Shiomi, Kentaro Matsuda, Kazunobu Sato, Shuichi Suzuki, "Magnetic properties of N-nonylphenothiazine radical cations depending on counter anions ", Chemistry Letters, vol. 53, upae135, July/2024.
- [21] H. Matsuyama, T. Fujii, S. Miyauchi, S. Takeuchi, "Numerical study of pressure response to action potential by water permeation with ion transports", ASME Journal of Heat and Mass Transfer, Vol.146, No.101202, Jun.2024.
- [22] 日野 航生, 岡林 希依, "超解像機械学習による疎な疑似圧力センサ点データからの二次元圧力場推定とキャビテーション場の予測", 日本機械学会論文集, Vol. 90, No. 937, p. 24-00115, Sep.2024.
- [23] Taku Sakamoto, Kie Okabayashi, "Optimization of fluid control laws through deep reinforcement learning using dynamic mode decomposition as the environment", AIP Advances, Vol. 14, No. 11, p. 115204, Nov.2024.
- [24] Shota Akita, Kie Okabayashi, Shintaro Takeuchi, "Envelope boundary conditions for the upper surface of two-dimensional canopy interacting with fluid flow", Microfluidics and Nanofluidics, Vol. 29, No. 7, pp. 1-23, 2024/12/1.
- [25] Shungo Okamura, Kie Okabayashi, "Twin experiments for data assimilation of cavitating flow around a hydrofoil", International Journal of Multiphase Flow, Vol. 188 p. 105201, 2025/3/1.
- [26] 岡林希依, "データ駆動型キャビテーションモデルとその学習データセットの構築", ターボ機械, Vol. 53, No. 1, pp. 19-25, 2025/1/1.
- [27] S. Iwamoto, T. Shimura, H. Watanabe, T. Kobayashi, "Oxygen-related defects in 4H-SiC from first principles", Applied Physics Express, Vol.17, No.5, pp. 051008-1-051008-5, May 2024.
- [28] Zixu Xu, Kazuma Aoki, Shingo Tamaki, Sachie Kusaka, Yuuki Chimura, Isao Murata, "Design of Moderator Assemblies for Fast, Epithermal, or Thermal Neutron-Dominated n- γ Mixed Fields Using a D-D Neutron Source", Nuclear Technology, 1-13, Oct 2024.
- [29] Kazuaki Yamanaka, Ryusei Oketani, Yuya Mori, Takashi Sato, Seiji Tsuzuki, Hiroki Takahashi, Hirohito Tsue, "Thermal fluctuation-induced selective CO₂ uptake of seemingly nonporous N,C-protected dipeptide crystals as

elucidated by in situ X-ray crystallographic analysis", *CrystEngComm*, 26, March 2024.

- [30] Hiroki Yoshimura, Ryusei Oketani, Miki Naruoka, Norimitsu Tohnai, Ichiro Hisaki, "A Hydrogen-Bonded, Hexagonally-Networked, Layered Framework with Large Aperture Designed by Structural Synchronization of a Macrocyclic and Supramolecular Synthon", *Precis. Chem.*, 2, April 2024.
- [31] Koki Kasuya, Ryusei Oketani, Souta Matsuda, Hiroyasu Sato, Fumitaka Ishiwari, Akinori Saeki, Ichiro Hisaki, "Photo-responsive Hydrogen-Bonded Molecular Networks Capable of Retaining Crystalline Periodicity after Isomerization", *Angew. Chem. Int. Ed.*, 62, June 2024.
- [32] Haruka Kubo, Shunsuke Konishi, Ryusei Oketani, Takashi Hayashi, Ichiro Hisaki, "Transition Behaviors of Isostructural Hydrogen-Bonded Frameworks Composed of Naphthalene, Quinoxaline, and Pyrazinopyrazine Derivatives", *Chem. Eur. J.*, 30, 2024/8/1.
- [33] Taito Hashimoto, Mario de la Hoz Tomás, Ryusei Oketani, Boiko Cohen, Miki Naruoka, Norimitsu Tohnai, Abderrazzak Douhal, Ichiro Hisaki, "Single crystalline, Non-stoichiometric Hydrogen-bonded Organic Frameworks Showing Versatile Fluorescence Depending on Composition Ratios and Distributions", *Angew. Chem. Int. Ed.*, 64, 2025/1/1.
- [34] Nichole Marcela Rojas-Chaverra, Ryu Imamura, Hiroki Sato, Toby Passioura, Emiko Mihara, Tatsunori Nishimura, Junichi Takagi, Hiroaki Suga, Kunio Matsumoto, Katsuya Sakai, "A cyclic peptide-grafted Fc with hepatocyte growth factor functionality ameliorates hepatic fibrosis in a non-alcoholic steatohepatitis mouse model", *iScience*, 27(8):110426, Jul. 2024.
- [35] Takashi Ohta, Futaro Shirahata, "Friction drag model for axial turbulent flow along the surface of a circular cylinder based on the universal characteristics of wall turbulence", *Journal of Fluid Mechanics*, Vol.1000, pp.A35, Dec. 2024.
- [36] Kohama, S., Ito, T., Tsuboi, N., Ozawa, K., Hayashi, A.K., "Two-dimensional detailed numerical simulation of ammonia/hydrogen/air detonation: hydrogen concentration effects and transverse detonation wave structure", *Shock Waves*, 34(2), pp.139-154, 2024.
- [37] Yohei Yamaguchi, Xukang Zhang, Takumi Nishijima, Yu Hayashi, Hideaki Uchida, Yoshiyuki Shimodama, "Building stock energy modeling to assess annual progress in stock energy efficiency and carbon emission reduction of commercial buildings", *Energy & Buildings*, 324 (2024) 114909, 2024.
- [38] M. Liu, H. Matsui, D. S. Hamilton, S. D. Rathod, K. D. Lamb, N. M. Mahowald, "Representation of iron aerosol size distributions of anthropogenic emissions is critical in evaluating atmospheric soluble iron input to the ocean", *Atmospheric Chemistry and Physics*, 24, 13115-13127, Nov.2024.
- [39] H. Matsui, K. Kawai, Y. Tobo, Y. Iizuka, S. Matoba, "Increasing Arctic dust suppresses the reduction of ice nucleation in the Arctic lower troposphere by warming", *npj Climate and Atmospheric Science*, 7, 266, Nov 2024.
- [40] Shinya Mizuno, Yuki Komiyama, Haruka Ohba, "Proposal for optimizing number of servers in closed BCMP queueing network", *International Journal of Data Science and Analytics*, <https://doi.org/10.1007/s41060-024-00621-x>, August, 2024.
- [41] Shinya Mizuno, Haruka Ohba, "Limitations of calculating theoretical solutions for closed BCMP queueing networks and verification of alternative theoretical values by parallel simulation", *PLOS One*, 19(12), December, 2024.
- [42] K. Amano, K. Mizuno, T. Hiejima, "Suppression of flow separation in a scramjet inlet using Görtler vortices", *Physics of Fluids*, 37 [4], 046105, (14 pages), 2025.

- [43] Yoshinori Tomiyoshi, Takashi Honda, Toshihiro Kawakatsu, Takahiro Murashima, Erica Uehara, Tetsuo Deguchi, "Density Functional Theory for Cyclic Block Copolymer Melts", *Macromolecules*, Vol.57, no.22, p.10704-10716, Nov. 2024.
- [44] Yangen Li, Jun-Ping Du, Shuhei Shinzato, Shigenobu Ogata, "Tunable interstitial and vacancy diffusivity by chemical ordering control in CrCoNi medium-entropy alloy", *npj Computational Materials*, Vol.10, 134, June 2024.
- [45] Fan-Shun Meng, Shuhei Shinzato, Shihao Zhang, Kazuki Matsubara, Jun-Ping Du, Peijun Yu, Wen-Tong Geng, Shigenobu Ogata, "A highly transferable and efficient machine learning interatomic potentials study of α -Fe-C binary system", *Acta Materialia*, Vol. 284, 120408, December 2024.
- [46] Fan-Shun Meng, Jiu-Hui Li, Shuhei Shinzato, Kazuki Matsubara, Wen-Tong Geng, Shigenobu Ogata, "Formation of three-dimensional dislocation networks in α -iron twist grain boundaries: Insights from first-principles neural network interatomic potentials", *Computational Materials Science*, Vol. 253, 113812, May 2025.
- [47] Takeshi Omori, Yasutaka Yamaguchi, "Molecular anatomy of the pressure anisotropy in the interface of one and two component fluids: Local thermodynamic description of the interfacial tension", *The Journal of Chemical Physics*, 161(20), 204704, 2024.
- [48] Yinan Yang, Tsukasa Hori, Shinya Sawada, Fumiteru Akamatsu, "Accurate and rapid reactive flow simulations using dynamic load balancing and sparse analytical Jacobian approach ", *Physics of Fluids* , 36(8), Aug.2024.
- [49] Yinan Yang, Tsukasa Hori, Shinya Sawada, Fumiteru Akamatsu, "Numerical investigation on the effects of air-staged strategy and ammonia co-firing ratios on NO emission characteristics using the Conjugate heat transfer method ", *Fuel*, 368,131591-131591, May.2024.
- [50] Yinan Yang, Tsukasa Hori, Shinya Sawada, Fumiteru Akamatsu, "Toward the Development of Low-NO Ammonia Cofiring Furnaces: Numerical Investigation into the Secondary Injection System Using the Conjugate Heat Transfer Method ", *Energy & Fuels*, 38(11), May. 2024.
- [51] 青木睦, 井尻敬, 山口豪, 富井直輝, 高山健志, 稲田慎, 中沢一雄, 芦原貴司, "臨床応用に向けた非発作性心房細動の興奮動態と興奮旋回中心分布の 3 次元可視化インタフェースの開発", *生体医工学*, Vol.63, No.1, pp.25-32, Mar. 2025.
- [52] M. Ohnishi, T. Yamamoto, K. Fujimura, H. Shimizu, K. Yamamoto, and J. Shiomi, "Enhancing thermoelectric performance of Si-based clathrates via carrier optimization considering finite temperature effects", *ACS Chemistry of Materials*, Vol.36, p.10595–10604, 2024.
- [53] Ken Murakami, Keita Iida, Mariko Okada, "An Attention-Based Deep Neural Network Model to Detect Cis-Regulatory Elements at the Single-Cell Level From Multi-Omics Data.", *Genes to cells*, Vol. 30, No. 2, e70000, Mar. 2025.
- [54] C. Kaewnuratchadasorn, J. Wang, C.W. Kim, "Neural operator for structural simulation and bridge health monitoring", *Computer-Aided Civil and Infrastructure Engineering*, Vol.39, pp.872-890, 2024.
- [55] C. Kaewnuratchadasorn, J. Wang, C.W. Kim, "Physics-informed neural operator solver and super-resolution for solid mechanics", *Computer-Aided Civil and Infrastructure Engineering*, Vol.39, pp.3435-3451, 2024.
- [56] C. Kaewnuratchadasorn, J. Wang, C.W. Kim, X. Deng, "Geometry physics neural operator solver for solid mechanics", *Computer-Aided Civil and Infrastructure Engineering*, Vol.40, pp.1388-1404, 2025.
- [57] 山口栄治, 福田朝生, "固体群と流体の三次元連成数値解析による混合粒径土砂流の分級運動に及ぼす速度勾配と粒度分布の効果", *土木学会論文集特集号(水工学)*, 第 81 巻, 16 号, ID 24-16041, Feb. 2025.
- [58] 前田憲紀, 福田朝生, "粘性土河床の表面侵食および塊状侵食に費やされるエネルギー", *土木学会論文*

集特集号(水工学), 第 81 卷, 16 号, ID 24-16128, Feb. 2025.

- [59] Xiangrui Li, Wentao Chen, Gyoko Nagayama, "Phonon heat transfer across an SiC-SiC nanogap under an external uniform electric field", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 244, P. 126945, Mar. 2025.
- [60] Wentao Chen, Gyoko Nagayama, "Kapitza Length at Solid-Liquid Interface: From Nanoscale to Microscale", *Small Science*, Vol. 5, P. 2400626, Mar. 2025.
- [61] Gaurav Kumar, Gyoko Nagayama, "Enhanced capillary-driven flow in closed hierarchical microchannels", *Physics of Fluids*, Vol. 37, No. 2, P. 022151, Feb. 2025.
- [62] Yan-Jun Gu, Zhan Jin, Zhen-Zhe Lei, Shingo Sato, Kai Huang, Nobuhiko Nakanii, Izuru Daito, Masaki Kando, & Tomonao Hosokai, "Generation of highly stable electron beam via the control of hydrodynamic instability", *Scientific Reports*, 14,31162, 2024.
- [63] K. Kato, N. Nagatsuka, and K. Fukutani, "H₂ Molecule Generation from Dissociatively Adsorbed Water on TiO₂ through Photoexcitation", *Journal of Physical Chemistry C*, 28,8188, 2024/4.
- [64] Yukihiro Okumura, Tomohiro Tsubota, Kenta Kikuchi, Noritoshi Yagawa, Tomohiro Matsunami, "Premixed combustion characteristics of offgas during ammonia cracking process", *Fuel*, Vol.381, 11 pages, 133331, 2025.9 (IF=7.0).
- [65] Yukihiro Okumura, Tomohiro Tsubota, Naoya Matsuda, Tsukasa Hori, Fumiteru Akamatsu, "Flame structure and reaction diagnostics for ammonia diffusion flame with hydrogen flame stabilizer", *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol.40, 8 pages, 105765, 2024.8 (IF=5.3).
- [66] M. Sumita, K. Terayama, S. Ishida, K. Suga, S. Saito, K. Tsuda, "QCforever2: Advanced Automation of Quantum Chemistry Computations", *Journal of Computational Chemistry*, 45 • e70017, 2025.
- [67] Shunsuke Someya, Ryo Araki, Takahiro Tsukahara, "CNN for scalar-source distance estimation in grid-generated turbulence", *Applied Thermal Engineering*, Vol. 258, 124516, Jan. 2025.
- [68] Yuki Matsukawa, Takahiro Tsukahara, "Switching between supercritical and subcritical turbulent transitions in inner cylinder rotating Taylor-Couette-Poiseuille flow", *International Journal of Heat and Fluid Flow*, Vol. 112, 109667, Mar. 2025.
- [69] Kosuke Nakagawa, Takahiro Ishida, Takahiro Tsukahara, "Changes in the transition process of roughness-induced crossflow vortices due to freestream turbulence", *Flow Turbulence and Combustion*, Vol.114, pp. 827-855, Mar. 2025.
- [70] Tomoya Shiota, Kenji Ishihara, and Wataru Mizukami, "Universal neural network potentials as descriptors: towards scalable chemical property prediction using quantum and classical computers", *Digital Discovery*, Vol. 3, pp.1714-1728, Jul. 2024.
- [71] Tomoya Shiota, Kenji Ishihara, and Wataru Mizukami, "Lowering the exponential wall: accelerating high-entropy alloy catalysts screening using local surface energy descriptors from neural network potentials", *Digital Discovery*, Vol. 4, pp.738-751, Jan. 2025.
- [72] Viktor Khinevich, Wataru Mizukami, "Enhancing quantum computations with the synergy of auxiliary field quantum Monte Carlo and computational basis tomography", *arXiv*, arXiv:2502.20066, Feb. 2025.
- [73] Yusuke Teranishi, Shoma Hiraoka, Wataru Mizukami, Masao Okita, Fumihiko Ino, "Lazy Qubit Reordering for Accelerating Parallel State-Vector-based Quantum Circuit Simulation", *arXiv*, arXiv:2410.04252, 2024/10/1.
- [74] Tomoya Shiota, Kenji Ishihara, Tuan Minh Do, Toshio Mori, Wataru Mizukami, "Taming Multi-Domain, -Fidelity Data: Towards Foundation Models for Atomistic Scale Simulations", *arXiv*, arXiv:2412.13088, 2024/12/1.

2. 国際会議会議録掲載論文

- [1] Keitaro Ohashi, Kaito Nagita, Takashi Harada, Shuji Nakanishi, Kazuhide Kamiya, "A DFT Study on Single Metal Modified Covalent Organic Frameworks as Electrocatalysts", Electrosynthesis: Light, Life and Materials Perspective, Seoul, Korea, Jun. 2024.
- [2] N. Ishihara, G. Chikatani, H. Nishijima, H. Tabata, Y. Hase, Y. Mukouyama, S. Nakanishi, S. Mukaida, "Developing a Design Guideline of Boronic Acid Derivatives to Scavenge Targeted Sugars in the Formose Reaction Products using DFT-based Machine Learning", Electrosynthesis: Light, Life and Materials Perspective, Seoul, Korea, Jun. 2024.
- [3] K. Nagita, K. Kamiya, S. Nakanishi, Y. Hamamoto, Y. Morikawa, "CO Hydrogenation Promoted by Oxygen Atoms Adsorbed onto Cu(100)", Electrosynthesis: Light, Life and Materials Perspective, Seoul, Korea, Jun. 2024.
- [4] Keitaro Ohashi, Kaito Nagita, Takashi Harada, Shuji Nakanishi, Kazuhide Kamiya, "DFT Studies on C-C bond formation mechanism in electrochemical CO₂ reduction on single Cu - Modified Covalent Triazine Frameworks", PRiME 2024, Honolulu, Hawaii, 2024/10/1.
- [5] K. Nagita, K. Kamiya, S. Nakanishi, Y. Hamamoto, Y. Morikawa, "CO Hydrogenation Promoted by Oxygen Atoms Adsorbed onto Cu(100)", PRiME 2024, Honolulu, Hawaii, 2024/10/1.
- [6] Keitaro Ohashi, Kosei Nishimura, Kaito Nagita, Takashi Harada, Shoko Nakahata, Toshiaki Ina, Shuji Nakanishi, Kazuhide Kamiya, "Size-Dependency of Electrochemically Grown Copper Nanoclusters Derived from Single Copper Atoms in the CO Reduction Reaction", 8th International Conference on Multifunctional, Hybrid and Nanomaterials, Montpellier, France, 2025/3/1.
- [7] Shunya Tanaka, Yudai Kotani, Hiori Kino, Satoshi Hamaguchi, "Machine-learning-based force fields for molecular dynamics simulation of silicon and silicon dioxide ion beam etching", AVS70, November 2024.
- [8] Razmik Arman Khosrovian, Takaharu Yaguchi, Hiroaki Yoshimura, and Takashi Matsubara, "Poisson-Dirac Neural Networks for Modeling Coupled Dynamical Systems across Domains", The Thirteenth International Conference on Learning Representations (ICLR2025), Apr. 2025.
- [9] Takashi Matsubara and Takaharu Yaguchi, "Number Theoretic Accelerated Learning of Physics-Informed Neural Networks", The Thirty-Ninth AAAI Conference on Artificial Intelligence (AAAI2025), Feb. 2025.
- [10] Shinnosuke Saito and Takashi Matsubara, "Image Interpolation with Score-based Riemannian Metrics of Diffusion Models", ICLR 2025 Workshop on Deep Generative Model in Machine Learning: Theory, Principle and Efficacy (DeLTa), Apr. 2025.
- [11] Razmik Khosrovian, Takaharu Yaguchi, Hiroaki Yoshimura, and Takashi Matsubara, "Modeling Coupled Systems by Neural Networks with Poisson Structures and Ports", International Conference on Scientific Computing and Machine Learning 2025 (SCML2025), 2025/3/1.
- [12] Razmik Arman Khosrovian, Takaharu Yaguchi, and Takashi Matsubara, "Port-Hamiltonian Neural Networks for Learning Coupled Systems and Their Interactions", NeurIPS 2024 Workshop on Machine Learning and the Physical Sciences, 2024/12/1.
- [13] Yosuke Nishimoto and Takashi Matsubara, "Transformer-based Imagination with Slot Attention", NeurIPS 2024 Workshop on Compositional Learning, 2024/12/1.
- [14] Keigo Tsutsui, Phuoc Thanh Tran-Ngoc, Hirotaka Sato, and Takashi Matsubara, "Deep Dynamics Modeling of

- Interactions in Collective Behaviors of Insects", 2024 International Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications (NOLTA2024), 2024/12/1.
- [15] Razmik Arman Khosrovian, Takaharu Yaguchi, and Takashi Matsubara, "Learning Coupled Systems and their Connectivity Using Port-Hamiltonian Neural Networks", CAI2024 Workshop on Scientific Machine Learning and Its Industrial Applications (SMLIA2024), 2024/6/1.
 - [16] Keigo Tsutsui, Phuoc Thanh Tran-Ngoc, Hirotaka Sato, and Takashi Matsubara, "Deep Dynamics Modeling of Interactions in Insect Group Behavior", CAI2024 Workshop on Scientific Machine Learning and Its Industrial Applications (SMLIA2024), 2024/6/1.
 - [17] Masako Sugihara-Seki, Hiroshi Yamashita, Naoto Yokoyama, "Inertial focusing patterns of spherical particles in a viscoelastic flow through square channels", ICMF2025, May, 2025.
 - [18] Shota Akita, Kie Okabayashi, Shintaro Takeuchi, "Boundary conditions for the envelope of canopy interacting with two dimensional laminar flow", 77th APS Annual Meeting of the Division of Fluid Dynamics, No. R06.00003, Nov.2024.
 - [19] Kie Okabayashi, "Twin Experiments for Data Assimilation of Cavitating Flow around a Clark-Y11.7% Hydrofoil", 4th Asian Workshop on Hydraulic Machinery , pp. 34-35, Jan. 2025.
 - [20] Kie Okabayashi, "Optimization of fluid control laws through deep reinforcement learning using dynamic mode decomposition as the environment", 3rd Workshop on Data-Driven Fluid Dynamics, Vol. 1, Mar.2025.
 - [21] Keichi Takahashi, Takashi Abe, Akihiro Musa, Yoshihiko Sato, Yoichi Shimomura, Hiroyuki Takizawa, Shunichi Koshimura, "Modernizing an Operational Real-time Tsunami Simulator to Support Diverse Hardware Platforms", IEEE Cluster 2024, Sep. 2024.
 - [22] Xinpeng Liu, Hiroaki Santo, Yosuke Toda, Fumio Okura, "TreeFormer: Single-view plant skeleton estimation via tree-constrained graph generation", Proc. IEEE/CVF Winter Conference on Applications of Computer Vision (WACV'25, Feb. 2025.
 - [23] Zixu Xu, Masaya Matsuki, Kazuma Aoki, Yoshihiro Aritomo, Shingo Tamaki, Sachie Kusaka, Isao Murata, "Development of n- γ mixed fields by using a D-D neutron source for dosimetry studies of BNCT", The 37th Workshop on Radiation Detectors and Their Uses, KEK Proceedings 2023-1, pp. 30-42, 2024.
 - [24] Nobuyuki TSUBOI, Daiki KUBOTA, A. Koichi HAYASHI, "Two-dimensional Numerical Simulation on Dimethyl Ether / Oxygen Premixture Detonation in a Narrow Channel Using Reduced Chemical Reaction Model: Effects of Numerical Accuracy on Formation of Cellular Sub-Structure", 19th International Conference on Numerical Combustion, ICNC2024-1538, May, 2024.
 - [25] Takumi Ito, Nobuyuki Tsuboi, Kouhei Ozawa, Koichi A Hayashi, "3D Evaluation of H₂-Air Premixed Gas Injection Ports Number on Flow Field in Disk RDE", 19th International Conference on Numerical Combustion, ICNC2024-1577, May, 2024.
 - [26] Nobuyuki TSUBOI, A. Koichi HAYASHI, "Three-dimensional Numerical Simulation on Hydrogen/Air Spinning Detonation in Square Tube Using Higher-order Scheme with Entropy Limiter", International Workshop on Detonation for Propulsion 2024, June, 2024.
 - [27] Hyunseo Park, Shui Kohama, Nobuyuki Tsuboi, A. Koichi Hayashi, "Numerical Simulation on Two-Phase Detonation at Various Equivalence Ratios Using Eulerian-Eulerian Model for n-Heptane Fuel", The 8th International Symposium on Energetic Materials and their Applications, A1-1, 2024/11/1.
 - [28] Takumi Ito, Nobuyuki Tsuboi, Kohei Ozawa, Koichi Hayashi, "3D Numerical Simulation on Disk Type RDE

used Hydrogen-Air Premixed Gas and Non-premixed Gas with Multi-Ports Injection", AIAA SciTech2025, AIAA 2025-1974, 2025/1/1.

- [29] Haruka Ohba, Shingo Sadakuni, Takashi Matsuda, Shinya Mizuno, "Constructing Ergodic Networks using Discrete Markov Chains ", The 51st International Conference on Computers and Industrial Engineering (CIE51).
- [30] Masakatsu Murakami, Diya Pan, "Generation of giga-electron-volt proton beams by micronozzle acceleration", 45th International Workshop on High- Energy-Density Physics with Intense Ion and Laser Beams.
- [31] Shunsuke Nishimura, Yoshihiro Baba, Toshihiro Tsuboi, "Influences of the Ground Conductivity on Electromagnetic Fields Associated with Lightning Strikes to Tall Structures", International Workshop on High Voltage Engineering, HV-24-086,p.5, Nov.2024.
- [32] Noguchi Renta, Sakuma Asahi, Kakazu Yuko, Iwata Hiroshi, Asano Yosuke, Itoh Yuichi, Sapkota Achyut, Shiraki Atsushi, Kurimoto Ikusaburo, "Relationship between VPD, Transpiration Rate and Vapor Conductance for Plants of Different Growth Levels", Proceedings of the SICE Annual Conference 2024, Aug.2024.
- [33] Fukuda Essei, Ito Masahide, Asano Yosuke, Kurimoto Ikusaburo, "Static-Quantized Control of Sunlight-Type Plant Factory with Input Saturation Including Discrete-Valued Section", Proceedings of the SICE Annual Conference 2024, Aug.2024.
- [34] T. Masuda, K. Tsujimoto, T. Ando¹, M. Takahashi, "EFFECT OF CONTROL PARAMETERS ON OSCILLATION-CONTROLLED IMPINGING JETS BY DNS", The 34th International Symposium on Transport Phenomena, 5 pages, Nov. 2024.
- [35] S. Murai, T. Tanoue, K. Tsujimoto, T. Ando, M. Takahashi, "DNS of multiple intermittent jets with different frequency", The 34th International Symposium on Transport Phenomena, 5 pages, Nov. 2024.
- [36] T.Tanoue, S. Murai, K. Tsujimoto, T. Ando, M. Takahashi, "Study of the Effect of Control Frequency and Phase Difference on the low Characteriatics in Multiple Intermittent Jets using DNS", The 34th International Symposium on Transport Phenomena, 5 pages, Nov. 2024.
- [37] Takayuki Aoki, "Innovative Simulation for Multiphase Flows and Fluid-structure Interactions", The 12th international conference on computational fluid dynamics (ICCFD12), 2024/7/15.
- [38] Masato Ohnishi, Terumasa Tadano, Shinji Tsuneyuki, and Junichiro Shiomi, "Enhancement of Thermoelectric Performance for Clathrate Compounds Considering Finite Temperature Effects", The 1st A3 Nano & Thermal Energy Engineering Workshop, Jan. 13-15th, 2024.
- [39] Masato Ohnishi, "Development of anharmonic phonon property database using first-principles calculations", The International Symposium on Multiscale Simulations of Thermophysics (MSTP)-2024, May 24-26, 2024.
- [40] Yukihiro Okumura, Tomohiro Tsubota, Naoya Matsuda, Tsukasa Hori, Fumiteru Akamatsu, "Flame structure and reaction diagnostics for ammonia diffusion flame with hydrogen flame stabilizer", CI's 40th International Symposium (Milano, Italy), 4H02: PROCI-D-23-00516, 8 pages, July 22-26, 2024.
- [41] Soma Yokoyama, Kosuke Hoshika, Shota Tsujimura, Naoya Kusunoki, Hiroyuki Inoue, Atsuki Yoshimoto, Yukihiro Okumura, "High intensity combustion of NH₃ by a burner with a swirl-throttle structure", International Joint Conferences Post-IWHT2024 and International Heat Transfer Seminar IHTS 2024, No. P1-26, 2 pages, October 10-12, 2024.
- [42] Shuto Eritate, Kei Kambara, Kazuyuki Uenoyama, Kazuhiro Maki, Shinji Kambara, Yukihiro Okumura, "Effect of equivalence ratio on emission characteristics in H₂/NH₃ engine", International Joint Conferences Post-IWHT2024 and International Heat Transfer Seminar IHTS 2024, No.P1-27, 2 pages, October 10-12, 2024.

- [43] Tomonori Kouya, "Performance Evaluation of Accelerated Complex Multiple-Precision LU Decomposition", ICCSA2024, Vol.14818, pp.3-19, Aug.2024.
- [44] Tomonori Kouya, "Performance Evaluation of Accelerated Real and Complex Multiple-Precision Sparse Matrix-Vector Multiplication", ICEET2024, pp.1-6, Dec.2024.
- [45] Haruno Fusa, Chonho Lee, Sakuei Onishi, Hiromitsu Shiina, "Metric for Evaluating Stable Diffusion Models Using Attention Maps", Proc. of the International Conference on Foundation and Large Language Models (FLLM2024) , pp. 535-541, 2024, November.
- [46] Yuki Matsukawa, Ryo Araki, Takahiro Tsukahara, "Flow state transition of mixed convection in vertical channel with horizontal pressure gradient", 13th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena, June 2024.
- [47] Kosuke Nakagawa, Shotaro Okazaki, Takahiro Ishida, Takahiro Tsukahara, "Effects of crossflow instability on the development process of a turbulent spot", Twelfth International Conference on Computational Fluid Dynamics, 6-B-02, July 2024.
- [48] E. Dzieminska, A. Kusanobu, A.K. Hayashi, N. Tuboi, M. Hiyama, T. Kodama, I. Nakamori, "Detonation initiation and propagation in detonation channel with a pool for an equivalence ratio of 0.8 to 1.2", 13th Mediterranean Combustion Symposium, June 2025.

3. 国内研究会等発表論文

- [1] 津元国親, 倉田康孝, "Inhibition of transient outward K⁺ current might prevent the development of early afterdepolarization-mediated triggered activity that triggers reentrant tachyarrhythmias in long QT syndrome type2", 第70回日本不整脈心電学会学術大会, Jul.2024.
- [2] 津元国親, 倉田康孝, "一過性外向きK⁺チャネル電流の撃発活動ならびに早期後脱分極形成における役割：数理解析とシミュレーション研究からの予測", 2024年度 生理学研究所心血管研究会, Oct.2024.
- [3] 津元国親, 倉田康孝, "心室性不整脈における一過性外向きK⁺チャネル電流の役割：in silico解析研究", 第71回中部日本生理学会大会, Nov.2024.
- [4] 津元国親, 倉田康孝, "QT延長症候群における一過性外向きK⁺チャネル電流抑制の抗不整脈作用：in silico解析研究", 第34回日本循環薬理学会学術集会, Dec.2024.
- [5] 津元国親, 倉田康孝, "Prevention of triggered activity formation in ventricular arrhythmias by transient outward K⁺ channel current inhibition: a simulation study and mathematical analysis", APPW2025, Mar.2025.
- [6] 大橋圭太郎, 神谷和秀, "共有結合性トリアジン構造体を担体に用いた単原子電極触媒", 触媒 (Catalysts and Catalysis) , 触媒学会, Vol.66, No.5, p248-253, Oct. 2024.
- [7] 入江葉月, 栗原諒, 中曽根空, 中畑祥子, 原田隆史, 中西周次, 神谷和秀, "異種金属ドーブ銅ナノ粒子触媒を用いた固体高分子型CO₂ 電解還元", 第14回CSJ化学フェスタ 2024, Oct. 2024.
- [8] 入江葉月, 名木田海都, 大橋圭太郎, 中西周次, 神谷和秀, "異種金属ドーブ銅ナノ粒子におけるCO₂ 電解還元でのC-C結合生成メカニズムの第一原理解析", 電気化学会第92回大会, Mar. 2025.
- [9] 栗原諒, 名木田海都, 原田隆史, 中西周次, 神谷和秀, "テトラアルキルアンモニウムカチオン水溶液中でのCO₂ 電解によるC₂+生成とその反応メカニズム解析", 電気化学会第92回大会, Mar. 2025.
- [10] 鹿島千尋, 中谷祐介, "瀬戸内海における湾灘別・季節別CODの起源解析", 第59回日本水環境学会年会, 3-D-11-1, Mar. 2025.
- [11] 鹿島千尋, 中谷祐介, "瀬戸内海における起源別CODの定量評価", 第31回瀬戸内海研究フォーラムin

大阪, Aug. 2024.

- [12] 中谷祐介, “非構造格子モデルを用いた瀬戸内海の流動水質に及ぼす外洋影響の数値解析”, 日本海洋学会秋季大会 数値海洋モデリングセッション, 24F-07-06, Sep. 2024.
- [13] コスロービアン ラズミックアルマン, 谷口 隆晴, 吉村浩明, 松原 崇, “深層学習による連成系のモデル化と相互作用の学習”, 第 27 回情報論的学習理論ワークショップ (IBIS2024), 11 月, 2024.
- [14] 吉岡朋哉, 松原崇, “深層学習による画像ベースのダイナミクス同定と最適制御”, 第 27 回情報論的学習理論ワークショップ (IBIS2024), 11 月, 2024.
- [15] 西本遥裕, 松原崇, “強化学習のための物体中心表現を用いた世界モデル”, 第 27 回情報論的学習理論ワークショップ (IBIS2024), 11 月, 2024.
- [16] コスロービアン ラズミックアルマン, 谷口隆晴, 松原崇, “Port-Hamiltonian Neural Network を用いた連成系のモデル化”, 2023 年度 第 37 回 人工知能学会全国大会 (JSAI2023), 5 月, 2024.
- [17] 吉岡朋哉, 賈昊暉, 松原崇, “ポート・ハミルトン系の深層学習によるモデル化と制御”, 2023 年度 第 37 回 人工知能学会全国大会 (JSAI2023), 5 月, 2024.
- [18] 西本遥裕, 松原崇, “物体中心表現を用いたTransformerベースの世界モデル”, 2023 年度 第 37 回 人工知能学会全国大会 (JSAI2023), 5 月, 2024.
- [19] 末吉耕大, 松原崇, “テキストと述語論理を用いた拡散モデル”, 2023 年度 第 37 回 人工知能学会全国大会 (JSAI2023), 5 月, 2024.
- [20] 筒井奎剛, Phuoc Thanh Tran-Ngoc, 佐藤裕崇, 松原崇, “深層学習による昆虫の行動モデリング”, 2023 年度 第 37 回 人工知能学会全国大会 (JSAI2023), 5 月, 2024.
- [21] 小池信昭, 朱家佑弥, 宇治田元彦, “逐次型データ同化津波予測における アンサンブルメンバーと観測点の 同時制御に関する研究”, 第 14 回巨大津波災害に関する合同研究集会.
- [22] 朱家佑弥, 小池信昭, “逐次型データ同化による津波予測における観測点制御に関する研究”, 第 14 回巨大津波災害に関する合同研究集会.
- [23] 秋田翔太, 岡林希依, 竹内伸太郎, “流れと相互作用する 2 次元キャノピー上端面の運動を模擬した境界条件”, 日本流体力学会年会 2024, No. 2FH205-09-01, Sep.2024.
- [24] 小島 涼誠, 岡林 希依, “質量保存則を拘束条件とする超解像機械学習による翼周り二次元キャビテーション流れの三次元流れへの拡張”, 第 38 回数値流体力学シンポジウム, No. OS4-2-1-01, Dec.2024.
- [25] 富田隼平, 竹内 伸太郎, “透過性壁面を有する流路におけるカプセル状膜構造物の流下に伴う溶媒・溶質透過の数値解析と数理モデリング”, 第 38 回数値流体力学シンポジウム, No. OS3-2-1-05, Dec.2024.
- [26] 山澤晟嘉, 祝峻太郎, 竹内伸太郎, “粒子を含む流れにおいて粒子間狭隘部の潤滑解を援用する数値解法の研究”, 第 38 回数値流体力学シンポジウム, No. OS2-2-2-01, Dec.2024.
- [27] 日野 航生, 岡林 希依, “超解像機械学習を用いたキャビテーション流れ場の疑似圧力センサ点データからの二次元圧力場推定”, 第 38 回数値流体力学シンポジウム, No. OS4-2-4-02, Dec.2024.
- [28] 畑昌育, “量子メス用レーザー駆動イオン入射器の数値シミュレーション”, ビーム物理研究会 2024.
- [29] 上野原 努, 才門 祐太, 松本 梨佳子, 水谷 康弘, 高谷 裕浩, “高調波を用いたフォトリソナノジェットの加工”, 2024 年度精密工学会秋季大会学術講演会, L10, Sep. 2024.
- [30] 上野原 努, 山崎 拓海, 水谷 康弘, 高谷 裕浩, “非線形光学現象を用いたフォトリソナノジェットの強度分布制御 FDTDシミュレーションによる強度分布制御方法の検討”, 2025 年度精密工学会春季大会学術講演会, G107, Mar. 2025.
- [31] 上野原 努, Reza Aulia Rahman, 才門 祐太, 水谷 康弘, 高谷 裕浩, “空気中と水中におけるフォトリソ

- ックナノジェットを用いたアブレーション加工の比較", 2025 年度精密工学会春季大会学術講演会, G105, Mar. 2025.
- [32] 杉原 礼一, 加藤 有己, 河原 行郎, “グラフ埋め込みと最適輸送を用いた空間的遺伝子発現情報のアライメント”, 第 77 回情報処理学会バイオ情報学研究会, Mar. 2024.
- [33] Reiichi Sugihara, Yuki Kato, and Yukio Kawahara, “A random walk approach to cluster and integrate spatial transcriptomics data”, 第 25 回日本RNA学会年会, Jun. 2024.
- [34] Reiichi Sugihara, Yuki Kato, and Yukio Kawahara, “A graph embedding approach to spatial omics analysis”, 第 4 回関西RNAクラブ, Aug. 2024.
- [35] 杉原 礼一, 加藤 有己, 河原 行郎, “グラフ埋め込みに基づく空間オミクス解析手法の開発”, NGS EXPO 2024, Sep. 2024.
- [36] Zixu XU, Masaya MATSUKI, Kazuma AOKI, Y shihiro ARITOMO, Shingo TAMAKI, Sachie KUSAKA, and Isao MURATA, “Characterization of various types of n- γ mixed fields by using a D-D neutron source”, 2022 Symposium on Nuclear Data, JAEA-Conf 2023-001, pp. 103-108, 2024.
- [37] 木原 瑞希, 佐藤 雅伸, “転基板上の液膜流れにおける動的接触角モデルの数値的および実験的評価”, 日本流体力学会 年会 2024.
- [38] 本告遊太郎, 村端秀基, 後藤晋, “イルカによる乱流の発生機構とそれに基づく遊泳機構”.
- [39] 野呂 寛, 太田 貴士, 永井 優河, 酒井 康行, “異なる条件の予混合燃焼における火炎伝播を伴う壁乱流の層流化プロセスの解明”, 日本流体力学会 年会 2024, Sep. 2024.
- [40] 皆本 慧, 太田 貴士, “過冷却条件の液体乱流で形成される凝固組織構造の特徴の予測”, 日本流体力学会 年会 2024, Sep. 2024.
- [41] 浪井 稀羽, 太田 貴士, “キャビテーションの影響による乱流せん断層の特徴”, 流体工学シンポジウム (第 74 回北陸流体工学研究会), Dec. 2024.
- [42] 増山 遼大, 太田 貴士, 皆本 慧, “異なる粗さモデルで再現した粗面乱流の統計的特徴の比較”, 流体工学シンポジウム (第 74 回北陸流体工学研究会), Dec. 2024.
- [43] 法邑 拓真, 太田 貴士, “壁乱流の流れ場と固体壁内部の直接数値シミュレーションの実現”, 流体工学シンポジウム (第 74 回北陸流体工学研究会), Dec. 2024.
- [44] 井野口 亮太, 太田 貴士, 浅野 柚, “高解像度DNSによるクエット乱流における渦キャビテーションの発生メカニズムの解明”, 日本機械学会 北陸信越支部 2025 年合同講演会, Mar. 2025.
- [45] 本田 悠一郎, 寺島洋史, 坪井伸幸, “多成分超臨界・遷臨界流体に対するハイブリッド法の検証～二次元噴流問題に対する従来型手法との比較～”, 第 38 回数値流体力学シンポジウム, OS1-2-4-04, Dec. 2024.
- [46] 戸島佑太, 坪井伸幸, 丸祐介, 藤田和央, “ウェーブライダー形状の空力特性評価: ISAS/JAXA超音速及び遷音速風洞を用いた 6 分力計測と再現性について”, 令和 6 年度宇宙航行の力学シンポジウム, ISAS2024-SFMA-025, Dec. 2024.
- [47] 木下楓大, 坪井伸幸, 小澤晃平, 丸祐介, 藤田和央, “簡易ウェーブライダー形状の空力特性における乱流モデルの影響評価”, 日本機械学会 九州支部九州学生会第 56 回学生員卒業研究発表講演会, 515, Mar. 2025.
- [48] 帆足真尋, 永島浩樹, 寺島洋史, 坪井 伸幸, “ロケットエンジン内部を想定した水素酸素混合の検証: 分子動力学シミュレーションと混合則の比較”, 日本機械学会 九州支部 第 78 期総会・講演会, 426, Mar. 2025.
- [49] 檜山 瑞樹, 坪井 伸幸, 林 光一, 中森 一郎, 富塚 孝之, 高橋淳郎, 大西 史倫, 小玉貴司, 玉内 義一,

“Artificial Thickening Flame 法を用いた障害物を有する管内での爆轟遷移に関する数値解析:MINIRUT 形状について”, 第 56 回流体力学講演会/第 42 回航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム, 3C04, July, 2024.

- [50] 久保田 大輝, 坪井 伸幸, 小澤 晃平, 林 光一, “ジメチルエーテル/酸素予混合気を用いた爆轟の数値解析～燃焼反応の詳細機構及び爆轟特性に与える空間精度の影響～”, 第 62 回燃焼シンポジウム, C215, Nov. 2024.
- [51] 奥田響, 坪井伸幸, 伊藤拓海, 林光一, “水素/空気詳細化学反応モデルを用いた 3 次元非定常デトネーションに関する波面構造解析 – 衝撃波面近傍の高次精度の影響 –, 2024 年度衝撃波シンポジウム, 1C2-1, Mar. 2025.
- [52] 笠友介, 坪井伸幸, 小澤晃平, 林光一, 小原哲郎, 松本弦太, “水素酸素予混合気における解適合格子を用いた衝撃波と火炎の干渉によるDDT過程に関する数値解析～入射衝撃波のマッハ数の違いがもたらす影響の調査～”, 2024 年度衝撃波シンポジウム, 1C2-2, Mar. 2025.
- [53] 五味大地, 伊藤拓海, 坪井伸幸, 小澤晃平, 林 光一, “水素/空気非予混合噴射条件下における回転デトネーションエンジンの 2 次元数値解析を用いた燃料/酸化剤質量流量と推進パラメータに関する調査”, 日本機械学会 九州支部九州学生会第 56 回学生員卒業研究発表講演会, 622, Mar. 2025.
- [54] 葛城千速, 小濱朱生, 坪井伸幸, 小澤晃平, 林光一, “詳細化学反応モデルを用いたアンモニア/亜酸化窒素デトネーションの数値解析—当量比が爆轟特性に与える影響について—”, 日本機械学会 九州支部九州学生会第 56 回学生員卒業研究発表講演会, 426, Mar. 2025.
- [55] 須田悠太, 須田悠太, 坪井伸幸, 林光一, Edyta Dzieminska, 富塚孝之, 高橋淳郎, 大西史倫, 中森一郎, 小玉貴司, 佐藤直弥, “障害物を有する管内におけるデフラグレーションからデトネーションへの遷移に関する数値解析: H₂/O₂ 予混合気における水蒸気の影響について”, 日本機械学会 九州支部九州学生会第 56 回学生員卒業研究発表講演会, 544, Mar. 2025.
- [56] 重松 朋生, 山口 容平, 芳澤 信哉, 内田 英明, 太田 豊, 下田 吉之 (大阪大学), 池本 佳史, 南 雅弘, 竹田 圭一 (関西電力送配電), “自治体脱炭素支援のための地域エネルギー需要推計モデルの開発”, 第 43 回エネルギー・資源学会研究発表会, 2024 年 8 月 6～7 日.
- [57] 小井川 奈々, 辻本 紘斗, 山口 容平, 正野 景大, Andrew Marian Zajch, 重松 朋生, 内田 英明, 下田 吉之 (大阪大学), “業務施設関連都市データに基づく自治体規模エネルギー需要モデリング”, 第 41 回エネルギーシステム・経済・環境コンファレンス, 2025 年 1 月 28 日.
- [58] 正野 景大, 山口 容平, 小井川 奈々, 辻本 紘斗, 重松 朋生, Andrew Zajch, 内田 英明, 下田 吉之 (大阪大学), “ボトムアップ型アプローチによる自治体エネルギー需要のモデリングと精度検証”, 第 41 回エネルギーシステム・経済・環境コンファレンス, 2025 年 1 月 28 日.
- [59] 守山宗和, 比江島俊彦, “超音速ジェット流におけるマッハ波のSPOD解析”, 日本流体力学会年会 2024, 3M101-04-01, Sep. 2024.
- [60] 比江島俊彦, “超音速流におけるスパイラル渦崩壊の発生について”, 第 38 回数値流体力学シンポジウム, OS1-1-2-05, Dec. 2024.
- [61] 藤山 敬太, 大森 健史, “気泡核生成に与える非凝縮性ガス影響の分子動力学解析”, 日本伝熱シンポジウム, May 2024.
- [62] 大森健史, “界面における圧力の非等方性と界面張力”, 日本流体力学会年会, Sep 2024.
- [63] 大森健史, “拡散界面法における界面応力モデル”, 数値流体力学シンポジウム, Dec 2024.
- [64] 曾我 隆, 細見 岳生, 山下 晃弘, 伊達 進, “ヤコビ法ループにおけるスレッドオーバーラップの評価”,

研究報告ハイパフォーマンスコМПьюテイング, 2024-HPC-195(24) 1-7, Aug.2024.

- [65] 曾我 隆, 細見 岳生, 山下 晃弘, 伊達 進, “ヤコビ法ループにおけるスレッドオーバーラップの評価”, 第 195 回HPC研究会, 2024-HPC-195(24) 1-7, Aug.2024.
- [66] 庄野竜生, 畑中健太, Sato Yohei, 矢吹智英, “数値計算で観察したブール沸騰における対流熱伝達特性”, 第 61 回日本伝熱シンポジウム講演論文集, E311, May.2024.
- [67] 庄野竜生, 畑中健太, Sato Yohei, 矢吹智英, “沸騰気泡表面での蒸発と壁面熱輸送の関係を調べる数値計算”, 熱工学コンファレンス 2024 予稿集, C13, Oct.2024.
- [68] 今津朗, 村田龍生, 佐藤陽平, 矢吹智英, 富岡孝太, 小泉祐輔, 池田響子, 山口正聡, 持田則彦, “微小重力環境における強制対流沸騰の数値計算”, 第 68 回宇宙科学技術連合講演会予稿集, 3J13, Nov.2024.
- [69] 増田竜海, 辻本公一, 安藤俊剛, 高橋護, “噴出角度を周期的に変化させた衝突噴流に対する制御パラメータの影響”, 日本機械学会 2024 年度年次大会講演論文集, 5 pages, Sep. 2024.
- [70] 村井詳悟, 田ノ上飛翔, 辻本公一, 安藤俊剛, 高橋護, “間欠周波数及び位相差が多重噴流に及ぼす影響”, 日本機械学会 2024 年度年次大会講演論文集, 5 pages, Sep. 2024.
- [71] 柴田一平, 辻本公一, 安藤俊剛, 高橋護, “個別に制御された多重衝突噴流の伝熱性能の改善”, 第 102 期日本機械学会流体工学部門講演会講演論文集, 4 pages, Nov. 2024.
- [72] 増田竜海, 辻本公一, 安藤俊剛, 高橋護, “スウィープ制御された衝突噴流の流動構造および伝熱特性のDNS解析”, 第 38 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, 5 pages, Dec. 2024.
- [73] 柴田一平, 辻本公一, 安藤俊剛, 高橋護, “個別に制御された多重衝突噴流の流動構造及び伝熱特性”, 東海支部第 74 期総会・講演会講演論文集, 1 page, Mar. 2025.
- [74] 村井詳悟, 田ノ上飛翔, 辻本公一, 安藤俊剛, 高橋護, “異なる周波数を持つ多重間欠噴流のDNS”, 東海支部第 74 期総会・講演会講演論文集, 1 page, Mar. 2025.
- [75] 増田竜海, 辻本公一, 安藤俊剛, 高橋護, “スウィープ制御による衝突噴流の伝熱特性の均一化”, 東海支部第 74 期総会・講演会講演論文集, 1 page, Mar. 2025.
- [76] 坪井 和也, 松家 隆雄, “DNSデータを用いた乱流予混合火炎面形状と流れ場並びに火炎特性との関係に関する検討”, 第 62 回燃焼シンポジウム講演論文集, B224, 2024 年 11 月.
- [77] 中沢一雄, 稲田慎, 岸田優作, 富井直輝, 高山健志, 井尻敬, 青木睦, 山口豪, 原口亮, 柴田仁太郎, 鈴木亨, 芦原貴司, “心房細動患者を想定した 3 次元心房モデルにおける興奮伝播ダイナミクスのin silico研究”, 第 44 回医療情報学連合大会, Nov. 2024.
- [78] 青木睦, 井尻敬, 山口豪, 富井直輝, 高山健志, 稲田慎, 中沢一雄, 芦原貴司, “3 次元心房モデル上における非発作性心房細動の興奮動態と興奮旋回中心分布の可視化手法”, 第 63 回日本生体医工学会大会, May 2025.
- [79] 稲田慎, 高山健志, 富井直輝, 井尻敬, 山口豪, 芦原貴司, 鈴木亨, 佐久間一郎, 柴田仁太郎, 中沢一雄, “コンピュータシミュレーションによる肺静脈起源心房細動の検討”, 第 63 回日本生体医工学会大会, May 2025.
- [80] 瀧 優太, 青木 尊之, 渡辺 勢也, Tan Hong Guan, 北川 翔, “スピードスケート・パシュート競技の空力解析”, 日本計算工学会・第 29 回計算工学講演会, 2024/6/11.
- [81] 瀧 優太, 青木 尊之, 渡辺 勢也, Tan Hong Guan, 木村 裕也, 山辺 芳, “スピードスケートのダイナミックな空力解析 ― パシュートのプッシュ姿勢 ―”, 日本流体力学学会年会 2024, 2024/9/25.
- [82] 瀧 優太, 青木 尊之, 渡辺 勢也, Tan Hong Guan, 木村 裕也, 山辺 芳, “AMR-LBM法によるスピードスケート・パシュート隊列の空力解析”, 日本流体力学学会・第 38 回数値流体力学シンポジウム,

2024/12/13.

- [83] 大西正人, 塩見淳一郎, “非調和フォノン特性の自動計算とデータベース構築”, 第 8 回フォノンエンジニアリング研究会, 2024 年 5 月 17-18 日.
- [84] 加藤弘一 福谷克之, “ルチルTiO₂ の表面下に存在する酸素空孔の凝集可能性”, 第 85 回応用物理学会秋季学術講演会, 2024/9/16.
- [85] 加藤弘一, “水素・電子トンネルによる光触媒TiO₂ 上水素ガス生成と酸素欠陥による光触媒”, NIMSナノシミュレーションワークショップ, 2024/12/2.
- [86] 加藤弘一 福谷克之, “太陽光下ルチルTiO₂ の酸素空孔準位を介した 2 光子吸収の理論予想”, 第 71 回応用物理学会春季学術講演会, 2025/3/14.
- [87] 辻村翔太, 星加浩輔, 横山綜馬, 楠 直哉, 奥村幸彦, “旋回-絞り構造バーナーによるアンモニアの高負荷燃焼”, 第 34 回環境工学総合シンポジウム 2024 (日本機械学会主催, 高野山大学), 講演番号: 307, 講演論文No.24-9, pp.268-271, 2024. 7.
- [88] 岡本惇生, 藤井睦月, 有馬景一郎, 遠藤修, 嶋田孝一, 佐藤哲也, 奥村幸彦, “濃淡燃焼によるNH₃/H₂ 燃焼限界の広域化と低NO_x 化に及ぼす影響”, 第 33 回日本エネルギー学会大会講演論文集(日本エネルギー学会主催, 東京, 早稲田大学), セッション燃焼・熱利用 1, 講演No.5-1-3, pp.144-145, 2024. 8.
- [89] 奥村幸彦, “脱炭素社会の実現へ向けたCO₂ フリーバーナーの開発”, 日本機械学会 2024 年度年次大会 (日本機械学会主催, 愛媛大学), No.J091-12, 5 pages, 2024.9.
- [90] 奥村幸彦, “アンモニアの燃焼利用とNH₃/H₂ 火炎の反応解析”, 第 61 回 石炭科学会議講演論文集(日本エネルギー学会主催, 高松), 【招待講演】 10 page, 2024. 10.
- [91] 奥村幸彦, “粗悪なガス燃料の燃焼安定化及び高負荷燃焼”, 2024 年度 日本工業炉協会 “いい炉の日 (11 月 6 日)” 記念講演会(日本工業炉協会主催, 東京都・機械振興会館), 【基調講演】, pp.1-7, 2024.11.
- [92] 岡本惇生, 有馬景一郎, 遠藤修, 嶋田孝一, 佐藤哲也, 奥村幸彦, “NH₃/H₂ 濃淡燃焼における火炎構造”, 第 62 回 燃焼シンポジウム講演論文集(日本燃焼学会主催, 大阪国際会議場), 燃焼排出物-II, 講演No.E332, 4 pages, 2024. 11.
- [93] 横山綜馬, 楠 直哉, 辻村翔太, 星加浩輔, 吉本篤規, 井上博之, 奥村幸彦, “アンモニア専焼バーナーにおける絞り-旋回構造の最適化”, 第 62 回 燃焼シンポジウム講演論文集(日本燃焼学会主催, 大阪国際会議場), 講演No.P124, 2 pages, 2024. 11.25.
- [94] 保田侑亮, 森田裕史, “粗視化分子動力学法による動的架橋点の異方性とダイナミクス・力学物性の相関解析”, 第 51 回レオロジー学会年会, 2024 年 05 月 16 日.
- [95] 保田侑亮, 森田裕史, “粗視化MD法による動的架橋エラストマーにおける 一次元配列と構造変化・力学物性の相関解析”, 第 73 回高分子討論会, 2024 年 09 月 27 日.
- [96] 幸谷智紀, “マルチコンポーネント型多倍長精度SpMVの高速化とその応用”, 第 50 回数値解析シンポジウム, Jun.2024.
- [97] 幸谷智紀, “可変長精度浮動小数点計算に対応した疎行列ベクトル乗算の性能評価”, 2024 年並列／分散／協調処理に関するサマー・ワークショップ (SWoPP 2024), Aug.2024.
- [98] 幸谷智紀, “Python 環境における多倍長精度基本線形計算モジュールの実装と性能評価”, 日本応用数理学会 2024 年度年会 OS, Sep.2024.
- [99] 幸谷智紀, “混合精度演算を用いた前処理付き多倍長精度複素Krylov 部分空間法の性能評価”, 環瀬戸内応用数理研究部会 第 28 回シンポジウム, Dec.2024.
- [100] 幸谷智紀, “多倍長精度代数方程式ソルバー高速化の試み”, 第 198 回HPC研究発表会, Mar.2025.

- [101] 稲垣耕司, “作機械学習ポテンシャルを用いたシミュレーションによるSi(100)2x1 水素終端表面上の過剰吸着水素の拡散過程の解析”, 2025 年第 72 回応用物理学会春季学術講演会, 14p-K507-9, 2025/3.
- [102] Haruno Fusa, Chonho Lee, Sakuei Onishi, Hiromitsu Shiina, “Text-to-Image モデルにおける多属性に対応したテンプレートベース評価手法”, 人工知能学会 JSAI2025 大会.
- [103] 三上京介, 加藤英人, 宮川泰明, 芹澤直樹, 寺岡達弘, 城田農, “CFDを用いたエアスプレーガンノズル近傍における液体微粒化解析”, 第 33 回微粒化シンポジウム, Dec. 2024.
- [104] Hiroaki Tatsumi, Shunya Nitta, Atsushi M Ito, Arimichi Takayama, Hiroshi Nishikawa, “Interfacial energy assessment of Cu/Si3N4 joints for power electronics substrate”, IIW 2024.
- [105] 中島英哲, 荒木亮, 塚原隆裕, “高抵抗低減領域での粘弾性チャネル乱流における 3D U-Netの構成応力予測性能調査”, 日本流体力学会年会 2024 講演論文集, 2FH101-04-03, Sep. 2024.
- [106] 菊池紘太, 岩本 直樹, 塚原隆裕, 荒木亮, 加藤晋介, 川口晋也, “サイクロンセパレータの各種ホップ形状による粒子挙動の変化”, 日本機械学会 2024 年度年次大会 講演論文集, Sep. 2024.
- [107] 中島 哲, 荒木亮, 塚原隆裕, “3D U-Netを用いた粘弾性チャネル乱流の構成方程式に対する代理モデルの妥当性検証”, 日本機械学会関東支部第 31 期総会・講演会 予稿集, 04E11, Mar. 2025.
- [108] 垣内習作, 塚原隆裕, 上野一郎, “矩形型自由液膜内温度差マランゴニ対流における基本定常流で異なるPr依存性”, 日本機械学会関東支部第 31 期総会・講演会 予稿集, Mar. 2025.

4. その他

- [1] 秋山拓弥, 山本晶, 笠原汰央, 草本哲郎, 劔隼人, “タングステン錯体を触媒とするアルキンとシクロプロペンの[2+2+1]-環化付加反応によるシクロペンタジエン誘導体の合成”, 日本化学会第 105 回春季年会, 2025 年 3 月.
- [2] 笠原汰央, 秋山拓弥, 草本哲郎, 劔隼人, “タングステン錯体を触媒とするアゾベンゼンと二種のアルキンの三成分カップリング反応”, 日本化学会第 105 回春季年会, 2025 年 3 月.
- [3] 黒田悠, 草本哲郎, 劔隼人, “可視光が促進するアルキルチタン錯体によるアルケンのヒドロアミノアルキル化反応”, 日本化学会第 105 回春季年会, 2025 年 3 月.
- [4] 上田瑛太郎, 草本哲郎, 劔隼人, “レドックス活性配位子を有するビス（イミド）モリブデン錯体の酸化還元特性と光応答性”, 日本化学会第 105 回春季年会, 2025 年 3 月.
- [5] 秋山拓弥, 草本哲郎, 真島和志, 劔隼人, “Mechanistic Insight for Synthesizing Multi-substituted Cyclopentadiene Derivatives from 3,3-Disubstituted Cyclopropenes and Internal Alkynes Catalyzed by Low-valent Niobium Species”, 第 70 回有機金属化学討論会, 2024 年 9 月.
- [6] 撫佐昭裕, “安全安心なスマートシティ実現にむけた津波災害デジタルツインシステムの開発”, マルチメディア、分散、協調とモバイル(DICOMO2024)シンポジウム（招待講演）, 花巻, 6 月 26 日から 28 日, 2024.
- [7] 鉾守 直樹, 撫佐 昭裕, “都市計画案作成システム、方法、及びプログラム”, 日本電気株式会社, 特願 2025-046575, 2025 年 3 月 21 日出願.
- [8] S. Iwamoto, H. Watanabe, and T. Kobayashi, “Investigation of oxygen-related defects in 4H-SiC from ab initio calculations”, oral, International Conference on Silicon Carbide and Related Materials (ICSCRM 2024), Raleigh, USA, Oct. 2024.
- [9] T. Kobayashi, S. Iwamoto, and H. Watanabe, “Impurity-vacancy complexes in 4H-SiC: stability and properties”, poster, International Conference on Silicon Carbide and Related Materials (ICSCRM 2024), Raleigh, USA, Oct.

2024.

- [10] 岩本 蒼典, 渡部 平司, 小林 拓真, “第一原理計算を用いた 4H-SiC 中不純物-空孔ペアに関する包括的調査”, 口頭発表, 第 85 回応用物理学会秋季学術講演会, 新潟, 日本, 2024 年 9 月.
- [11] 本田隆・富吉良徳・川勝年洋, “ループ構造を含むポリマーの自己無撞着場理論”, 第 73 回高分子討論会, 新潟大学五十嵐キャンパス, 2024 年 9 月 26 日.
- [12] 富吉良徳・本田隆・川勝年洋, “絡み目をもたない環状ブロック共重合体のミクロ相分離の密度汎関数法”, 第 73 回高分子討論会, 新潟大学五十嵐キャンパス, 2024 年 9 月 26 日.
- [13] 衣笠 美怜, 帆足 英二, 沖田 隆文, “核融合中性子源 Li ターゲットの安定性に関する研究 (1)流路形状と噴流厚さが内部流動構造に与える影響”, 日本原子力学会 2024 秋の大会, 3B04, 東北大学, 2024.
- [14] 福永 大輝, 帆足 英二, 沖田 隆文, “核融合中性子源 Li ターゲットの安定性に関する研究 (2)ビーム熱負荷除去における乱流構造の寄与”, 日本原子力学会 2024 秋の大会, 3B05, 東北大学, 2024.
- [15] 渡辺海人, “遺伝子発現推定アプリケーション SiGN-BN の GPGPU 移植”, 岡山理科大学, 学部卒業論文 (国内研究会あるいは国際会議に投稿予定), 2025 年.
- [16] 加藤 英人, 三上 京介, 宮川 泰明, 城田 農, 三木 舜太, 第 33 回微粒化シンポジウム 第 24 回写真コンテスト, 最優秀賞.

SC24 出展報告

伊達 進^{1,2,3} 高橋 慧智^{1,3} 速水 智教¹ Wassapon Watanakeesuntorn¹ 谷口 昂平^{1,3} 曾我 隆²

田主 英之² 並木 悠太^{2,4} 向園 悠⁵ 山本 隼矢^{1,3} 野口 祥生^{1,3} 村田 忠彦^{3,6}

¹先進高性能計算基盤システム研究部門 ²高性能計算・データ分析融合基盤協働研究所

³大学院情報科学研究科 ⁴日本電気株式会社 ⁵情報推進部情報基盤課 ⁶データ生成工学研究部門

2024 年 11 月に米国ジョージア州アトランタ市にて開催された国際会議／展示会 SC（通称 SC24）において、当センターの概要、研究内容、および事業内容を紹介するための展示ブースの出展を行った。本稿ではその展示内容や当日の様子等について報告する。

1. はじめに

大阪大学 D3 センター（旧称：サイバーメディアセンター）では、例年、米国で開催される国際会議 SC において展示ブースを出展する活動を継続している。SC とは、*The International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage, and Analysis* という正式名称を持つ、IEEE Computer Society および ACM SIGARCH によって開催されている国際会議であり、ハイパフォーマンスコンピューティング（HPC）分野におけるトップレベル会議の一つである。それと同時に、SC は HPC に関する最新機器や最先端技術の国際見本市でもある。そのため、北米を中心とした研究者や技術者に限らず、欧州、アジアの研究者や技術者が集う最大級の

国際会議／展示会となっている。新型コロナウイルス感染症の拡大以前において登録者数は 1 万人を超える数字が記録されていたが、コロナ禍で減少した参加者数は近年回復し、今年は昨年より 4,000 人近く増加、過去最高の 18,104 人が参加したと発表されている。当センターによる展示ブースの出展は、新型コロナウイルス感染症の拡大のため 2020 年度、2021 年度の展示は叶わなかったが、2000 年の初出展から数え、今回で 23 回目となる。

2024 年の SC（通称 SC24）は、米国ジョージア州アトランタ市にあるジョージアワールドコンgress センター（図 1）にて、11 月 17 日から 22 日までの期間で開催された。なお、アトランタでの SC の開催は初めてとなる。アトランタはジョージア州の州都であり、同州の北西部に位置する。昨年開催されたデンバーよりも南に位置し、北緯 33 度付近で気温も大阪に近かった。しかし、乾燥が激しく期間中に気温が低下したこともあって体調を崩すものもいた。また、昨年急速に進行した円安(1USD≒150JPY)の状況は今年も継続し、さらには現地での物価・人件費の高騰によりブース設営に関する費用はドル建てで 10%以上の値上がりとなった。その他物品の購入にあたっては、クレジットカードの決済手数料が引き上げられたこともあって、昨年以上の割高感があった。

そのような中でも、当センターの展示に携わった皆全てが責任感を持って展示を行い、結果として 600 名近い来訪者を獲得した。D3 センターの概要・ミッション・事業・研究活動、およびそれらの成果について説明を行い、当センターの国際的なプレゼンス向上、研究開発成果の紹介、大規模計算機システム事業の広報という点でのよきアウトリーチ活動となったと考えている。



図 1: Georgia World Congress Center.

2. 展示内容



図 2: 参加スタッフ記念撮影.

SC24 では、14 名の教職員(2 名の招へい教員含む)、1 名の高性能計算・データ分析融合基盤協働研究所所属の NEC 研究員、1 名の大学院生の合計 16 名(表 1) が大阪大学 D3 センターの出展する展示ブースにおいて、下記 6 テーマでのポスター展示を中心に本センターの概要、事業概要、および、当センターを中心とした研究紹介、成果報告・発表を行なった(図 2)。

- (1) *Large-scale Computing Systems at the D3 Center*
- (2) *Towards On-Time Network and Container Management in Cloud-Edge Continuum*
- (3) *Provenance Recording System / Metadata Management for Experimental Data*
- (4) *MPI Overlapping using Threads Operation / Reinforcement Learning in Job Scheduler*
- (5) *Advanced High-Performance Computing Infrastructure Systems Research Division*
- (6) *Synthetic Population for Real-Scale Social Simulations*

ブース展示は、11 月 18 日から 21 日までの 4 日間行われた。以下、ID バッジの読み取りデータをもとにブース来訪者の統計情報の一部をまとめる。ブース展示期間中の当ブースへの来訪者数は 597 名であった。訪問者数は去年の 431 名から大幅に増加した。

表 1: 参加スタッフ一覧

先進高性能計算基盤システム研究部門	
スタッフ	伊達 進 高橋 慧智 速水 智教 Wassapon Watanakeesuntorn 谷口 昂平 吉田 薪史 山本 隼矢 渡場 康弘 阿部 洋丈 (招へい准教授)
大学院生	野口 祥生
高性能計算・データ分析融合基盤協働研究所	
スタッフ	曾我 隆 田主 英之 細見 岳生 (招へい准教授) 並木 悠太 (NEC 研究員)
データ生成工学研究部門	
スタッフ	村田 忠彦
情報推進部情報基盤課	
技術職員	向園 悠

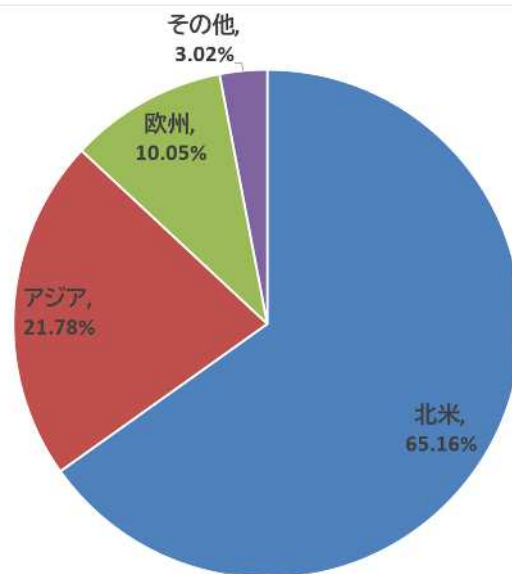


図 3: ブース来訪者 - 地域分類別.

ブース来訪者の地域別分類(図 3)を見ると、開催地の北米エリアからの来訪者が最大で全体の 65.16 %を占めている。続いて、日本を含むアジアからの来訪者が 21.78 %、欧州からの来訪者が 10.05 %であった。北米、アジア、欧州で全体の 97 %近くを占め、その他には中東、オセアニア、アフリカ、中南米の来訪者が含まれている。結果として、

多くの地域からの来訪者に対してアウトリーチ活動を行うことができた。

1日平均では、149.25人の来訪者があった。展示初日の11月18日はGrand Opening Gala Receptionで、午後7時から9時までの2時間の開催であったが、123人の来訪者があった。学生らが中心となって呼び込みを行った結果、最終日である4日目の11月21日に最多となる192人の来訪者があった。

また、昨年同様に、高度情報科学技術研究機構(RIST)が中心となって企画した連携企画で、来場者がHPCI構成機関のブースを周回してステッカーを集め、集めたステッカーに応じて景品がもらえる「HPCI Sticker Hunt」にも協力した。この連携企画も当センターのブースの集客に一役買ったといえる。

以下、SC24にて大阪大学D3センターで行ったポスター展示の概要について説明する（括弧内は担当者名）。

(1) “Large-scale Computing Systems at the D3 Center”（向園、吉田、速水）

本ポスターでは、D3センターで運用するシステムとして、スーパーコンピュータ「SQUID」、プライベートクラウド「mdx II」、ストレージシステム「ONION」について、それぞれのシステム構成や特徴について紹介した（図4、5）。

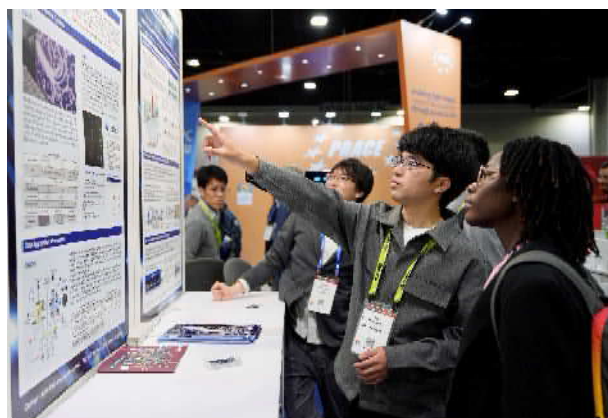


図 4：ポスター説明を行う向園。



図 5：ポスター説明を行う吉田。

ブースに来訪された方々からは、主に「各ノードの利用状況はどうなっているか?」「OS はなぜ Rocky Linux なのか?」「海外からでも利用可能なのか?」といった質問があった。特に GPU の利用率については国内外を問わず高いようで、GPU への需要の高さを改めて実感する機会となった。また「SQUID」や「ONION」といったユニークな名称が印象的だったようで、本学を知らない来訪者にも興味を持っていただき、そこからシステムの説明につなげることができた。前年度以前にも来訪されたと思われる方からは、「OCTOPUS はどうなったのか?」という質問もあり、サービスが終了したことや、次期システムの導入が予定されていることなどを説明した。

(2) “Towards On-Time Network and Container Management in Cloud-Edge Continuum”（谷口、Watanakesuntorn、山本）



図 6：ポスター説明を行う谷口。

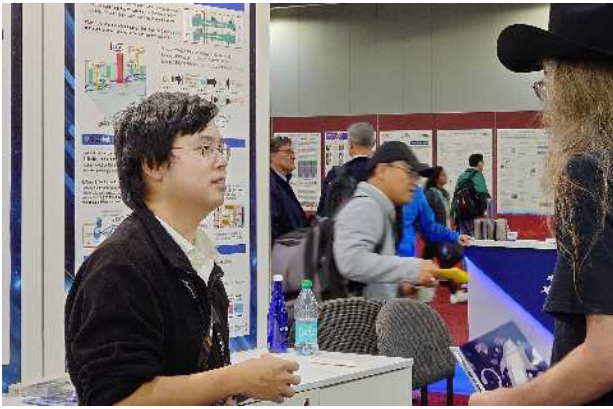


図 7：ポスター説明を行う Watanakeesuntorn.



図 8：ポスター説明を行う山本.

本ポスターでは、「ポスト 5G 情報通信システム基盤強化研究開発事業」の一環として取り組んでいる、Cloud-Edge Continuum Computing (CECC) Platform に関する研究成果を報告した（図 6、7、8）。CECC Platform は、クラウド、エッジ、およびデバイスを統合的に活用可能な計算機システムである。本研究では、広域ネットワーク上でデータ転送の遅延を保証する通信プロトコルやネットワーク資源管理手法についての成果を紹介した。また、クラウドやエッジにおける計算資源の即時確保と、迅速なコンテナ起動を実現するためのコンテナチェックポイントシステムの構想についても発表した。

発表では、CECC Platform のアーキテクチャやシミュレーション手法、特に Kubernetes の活用方法や、チェックポイント機能のランタイム実装に関する質問が多く寄せられた。また、交通シミュレーションを行う研究者から共同研究の提案も得られ、本プロジェクトの研究の方向性に共感を得られた。

(3) “Provenance Recording System / Metadata Management for Experimental Data”（並木、田主）

本ポスターでは、高性能計算・データ分析融合基盤協働研究所が研究開発を進めている、計算機システムにおいて既存のプログラムなどの資産に変更を加えることなく、自動的に結果データを得るために実行すべきプログラムとそれに与える入力ファイルを記述した来歴を記録するための手法、および非ネットワーク環境の小規模分析室に設置されてある共用分析装置から生み出される計測結果データにデータ利活用に必要なメタデータ、固有識別子を付与し、メタデータサーバへ収集、管理するまでのメタデータ管理システムに関する展示を行なった（図 9、10）。

来訪者のうち、来歴に対しては、特に大学、国立研究所の研究者から関心を持たれ、来歴が今後重要なメタデータとなりうることを確認できた。また、Python やコンテナ、オンラインから動的にデータを取得するような比較的新しい使い方に対する対応状況について質問を受け、あるべき姿の議論を行うことができた。日本国内と比較して多くの方の具体的な議論を行うことができ、特に米国において研究現場における研究データ管理への関心が高まっていることが窺えた。メタデータ管理システムに対しては、実験系データに関する展示内容であったためか、情報系がメインの来訪者からの関心度は低かった。一方で、オープンリサーチデータのデータ利活用の観点からのメタデータ付与の重要性の説明に対しては、分野を問わずその必要性への理解、および関心が窺えた。

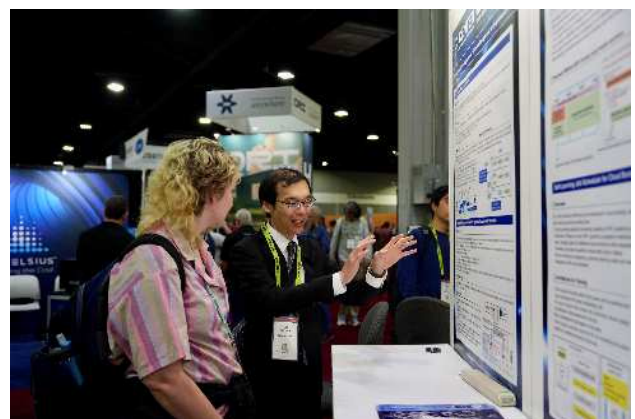


図 9：ポスター説明を行う並木.

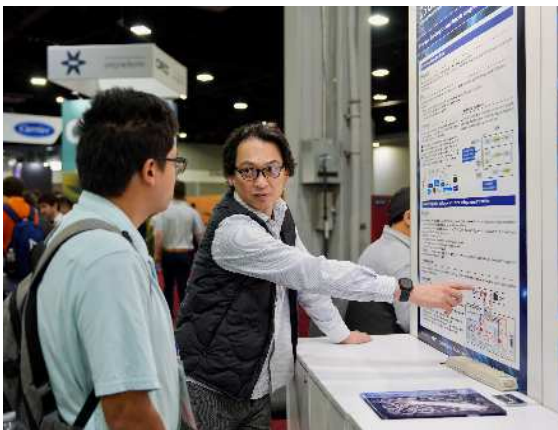


図 10: ポスター説明を行う田主.

(4) “MPI Overlapping using Threads Operation / Reinforcement Learning in Job Scheduler”
(曾我、野口)



図 11: ポスター説明を行う曾我.

高性能計算機を用いた大規模シミュレーションの実行時間を短縮する手法としてプロセス間の通信時間を隠蔽（オーバーラップ）するものがある。本研究が提案する演算処理と通信処理のオーバーラップ手法は、MPI ライブラリを用いる分散メモリ並列と OpenMP を用いる共有メモリ並列（スレッド並列）を共用する並列モデルを対象としており、スレッド操作により通信処理（スレッド 0 番が担当）と演算処理（0 番以外のスレッドが担当）を並列に実行することで通信時間の隠蔽を図る。提案手法では各スレッドに対する演算量を従来手法の動的割り当てから静的割り当てに変更することにより、OpenMP のオーバーヘッドを削減する。姫野ベンチマークプロ

グラムや数値流体力学（CFD）解析の実プログラムを用いて評価を行い、MPI の非同期通信を用いるオーバーラップ手法や動的割り当てスレッド操作を用いるオーバーラップ手法より、多くの通信時間を隠蔽することを示した（図 11）。

本ポスター後半では、深層強化学習を用いてオンプレミスとクラウドの計算資源を柔軟に活用するジョブスケジューリング手法について紹介した（図 12）。本研究は、学術機関で提供される HPC システムにおいて、クラウドバースティングによるユーザの待ち時間短縮を目指しつつ、クラウド計算資源の利用コストは最小化するという相反する目的を同時に達成するための機械学習モデルを提案した。提案手法では、Slurm プラグインを用いてジョブキュー情報とリソース状態をニューラルネットワークに入力し、その状況において適した資源割当を推論することを説明した。アルゴリズムの面では、選択されなかった行動との比較に基づく差分報酬を設計し、学習の安定性を高めている点を説明した。

質疑応答では、具体的なクラウド計算資源の事例としてどのようなプロバイダやインスタンスを想定しているのかについて質問があった。また、本手法がオンプレミスとクラウドの融合だけでなく、オンプレミス同士の複数 HPC システム間の連携にも適用可能ではないかという指摘があった。



図 12: ポスター説明を行う野口.

(5) “Advanced High-Performance Computing Infrastructure Systems Research Division” (速水、高橋)



図 13: ポスター説明を行う速水.



図 14: ポスター説明を行う高橋.

本ポスターでは、当センターの先進高性能計算基盤システム研究部門において実施している研究テーマの一部について紹介した（図 13、14）。「歯科パノラマ X 線画像解析のための AI モデル開発」では、歯科診断の補助のため、パノラマ X 線画像から様々な歯の情報（歯番号、歯髄の状態、修復の種類等）を自動的に抽出する AI モデルの研究開発について紹介した。最新の物体検出モデルである YOLOv8 を用い歯を検出した後、個々の歯の画像を分類器に入力するという全体構成を説明し、計算量削減や精度向上に向けた今後の展望についても述べた。来訪者からは、歯科に限らず医療関連データの収集や取扱いに関する質問があった。

「探索的データ解析のための広域科学データ流通基盤」では、広域ネットワークを介して遠隔データの探索的・対話的なデータ解析するためのデータ基盤について紹介した。既存のデータ基盤の多くは、

データの一部のみに興味がある場合や、精度の低下を許容して応答性を優先したい場合など、探索的データ解析の要件を十分に満たしていない。そこで、本研究では、広域拠点に分散した大容量配列データを細粒度・オンデマンド・適応品質で転送する、探索的データ解析のためのデータ流通基盤を目指している。来訪者からは、仮想メモリやファイルシステムのレイヤで実装しないのはなぜか、という質問があり、本基盤の設計について有益な議論ができた。

(6) “*Synthetic Population for Real-Scale Social Simulations*”（村田）

本ポスターでは、2019 年度から継続的に実施している JHPCN の合成人口プロジェクトと HPCI 共用ストレージ、2020 年度から 2027 年度まで実施する JST 未来社会創造事業における合成人口データを用いた社会シミュレーション事例に関する報告を行った（図 15）。合成人口プロジェクトでは、大阪大学 D3 センターのスーパーコンピュータを用いて、日本の全世帯の仮想個票を合成するとともに、北海道大学情報基盤センターのハイパフォーマンスインタークラウドを用いてデータベースを構築し、東京大学情報基盤センターと理化学研究所計算科学研究センターの HPCI 共用ストレージを用いてバックアップを確保している。今年度は、合成人口データの仮想実社会データへの拡張に関する報告を加えた。



図 15: ポスター説明を行う村田.

展示ブース訪問者からは、仮想個票の合成手法に関する質問が寄せられ、総務省統計局の e-Stat により、全ての自治体で同じフォーマットの統計データ

が利用可能であり、それに基づいて、統計データと仮想世帯集合の合成統計との差異を最小化する形で合成を行っていることを解説した。また、合成人口データを用いたシミュレーションとして震災や感染などの非常時のシミュレーションと共に、少子高齢化社会への対応など平常時のシミュレーションも展開されていることを紹介した。質疑を通して、仮想的な個票データの必要性やそれを用いたシミュレーションの意義についてディスカッションすることができた。

情報通信機構 NICT での展示

D3 センターのブース展示と並行して、先進高性能計算基盤システム研究部門と高性能計算・データ分析融合基盤協働研究所で研究開発中の RED-ONION (Research EnhanceD ONION) 技術について、高速データ転送技術の技術検証・性能評価を目的とした実演を、情報通信機構 NICT の研究展示ブースにて行なった (図 16)。

展示は、日米間の回線を用いて巨大研究データを 100 Gbps の回線を用いてサーバ間で転送を行うもので、一方のサーバのストレージに蓄積された 1 ファイルの巨大研究データをもう一方のサーバに高速に転送する。1 TB のデータの転送が 94 秒(実効 85.1 Gbps)で完了することを確認した。

本展示については、SC24 に先立って 2024 年 11 月 11 日に「大阪大学 D3 センターと NEC、国際会議・展示会 SC24 にて 100Gbps のファイル転送実験デモを展示」というタイトルでプレスリリース (<https://www.d3c.osaka-u.ac.jp/2024/11/pre-d3c-nec-sc24/>)を行なっている。

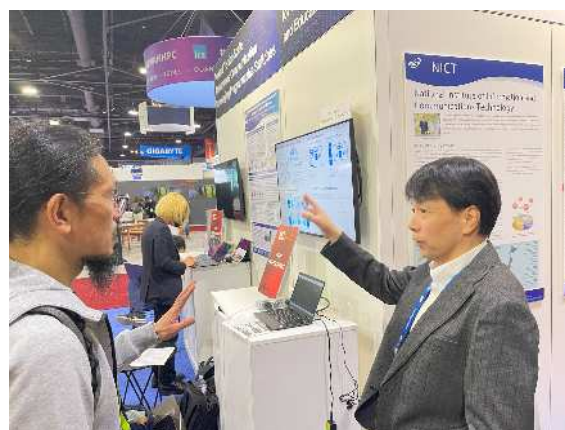


図 16: NICT ブースで展示内容を説明する細見.

3. おわりに

今年度の展示においても、大阪大学 D3 センターの大規模計算機事業をはじめとし、高性能計算・AI・ネットワーキングに関する研究成果について欧米を中心とした 597 名の来訪者にアウトリーチすることができた。来年度の SC は米国ミズーリ州セントルイス市で同時期に開催されるが、当センターのプレゼンス向上とともに、情報公開、アウトリーチ活動にも引き続き尽力していきたい。

関係各位には更なるご支援とご協力をお願いしたい。

当日展示したポスターの PDF や、その他の写真など、ここで紹介しきれなかった内容については下記ウェブページに掲載されています。こちらもぜひご覧ください。

<http://sc.cmc.osaka-u.ac.jp/>



第 30 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2024) 報告および 第 31 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2025) 告知

大阪大学 D3 センター教授 吉野 元

1. SuperCon2024

昨年 2024 年 8 月 19 日から 23 日までの 5 日間に高校生・高専生を対象とする「スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2024)」の本選を本年もオンラインにて開催しました。これに向けて予選が行われ、20 チームが予選を通過しました。(その結果は 5.Web に掲載されております。) オンライン開催であるため地域に関係なく、上位 20 チームが本選に参加する、ということになりました。

ここでは本選について説明いたします。このコンテストは、2 名又は 3 名を 1 チームとする高校生・高専生の参加者たちが、与えられた課題を解くプログラムを 3 日間に渡って作成し、最終日にスーパーコンピュータで実行して、解答の正確さや計算の速さを競うもので、そのレベルの高さから、別名「電脳甲子園」とも呼ばれています。過去の出場者が大学進学後に国際大学対抗プログラミングコンテストで活躍するなど、次世代の情報科学を担う若手育成にも貢献しており、2008 年度の文部科学大臣賞も受賞しています。

1995 年の第 1 回から 2005 年の第 11 回までは東京工業大学(東工大) 学術国際情報センター(Global Scientific Information and Computing Center:GSIC)の単独主催でしたが、2006 年の第 12 回からは大阪大学(阪大)(Cybermedia Center:CMC)も共同主催しています。予選に参加したチームの中から、富士川以東 50Hz 地域からは 10 チームが、60Hz 地域からはやはり 10 チームが参加していました。東工大と阪大の二つの会場で同時に開催した年は、wiki やポリコムなどで相互に交流し、開会式・表彰式などもポリコムを使って二元中継で行ってきました。このコンテストは 5 日間にも渡る長期戦で、実際にスーパーコンピュータを高校生・高専生が使うことができるという、世界的にも大変ユニークなものです。原則として毎

年交互に両大学のスーパーコンピュータを使います。2007、2011 年は阪大 CMC の SX-8R が、2009 年は SX-9 が、2015 年、2017 年は SX-ACE が使われました。2020 年の本選では SQUID が用いられる予定でしたが中止されました。その代わりに理化学研究所のスーパーコンピュータ富嶽を使った臨時イベント(富嶽チャレンジ)が開催されました。これを機に、理研もスーパーコンピューティングコンテストに参加することになり、2021 年、2022 年また 2023 年も本選では理研のスーパーコンピュータ富嶽が用いられました。2024 年は阪大のスーパーコンピュータ SQUID が初めて用いられました。前回同様、これまでの wiki、ポリコムに代わって discord、slack が相互交流に使われ、開会式・表彰式、問題説明、チュートリアルなどでは zoom が用いられています。

2. 予選

2024 年の予選課題は 6 月 5 日に下記(5.Web)の SuperCon web に公表されました。この予選課題を解くプログラムを作成し、6 月 21 日正午までにプログラムを含む必要書類を添付してメールで申し込んでもらいました。予選問題は、スーパーコンピュータを使わなくても学校や家庭にある普通のパソコンでも解けるような課題が出題されます。2024 年の予選課題は、東工大の作成チームによる「格子状の街の移動」というものでした。起伏の激しい碁盤目状の町の中の 2 点間の最短時間移動経路探索を高速に行うというものです。これを含め、過去の予選課題、本選課題は SuperCon web に全て掲載されています。また、参加者が 2 名以上集まらない人のために、希望者には「認定証」も発行しています。予選課題を正確に解くプログラムが書けたら、「SuperCon 1 級」が認定されます。問題のレベルに応じて 2 級と 3 級もあります。

3. 本選

本選の初日は開会式で参加チームの紹介、本選課題の発表、攻略法の解説がありました。本選課題は阪大の作成チームによる「森林火災の消火」という問題でした。これはある森林火災の数値モデルを用いて大規模な数値シミュレーションを行い、森林火災による森林の延焼を最小限に食い止める消火活動を立案するプログラムを作成するというものです。用いられた数値モデルは、感染症の伝搬のモデルとして有名な SIR モデルに類似したもので SQUID のベクトルノードでの高速並列計算が生かせるように設定したものです。実際の本選では、課題に取り組む前に、阪大のスーパーコンピュータ SQUID、また OpenMP/MPI を用いた並列プログラミングに関するオリエンテーションと講義が行われ、チームごとに本選課題を解くためのプログラム設計に入りました。そして、本選 2 日目から 4 日目の午前中まではチームごとにプログラムを作成しました。大学生・大学院生、スタッフがチューターとしてバグ取りなどを手伝いましたが、課題そのものに関する助言はしません。最終日の成果発表会、表彰式の後にはオンライン懇親会も行われました。本高校生・高専生の参加者たちと、両大学の教員、学生チューターたちが、プログラミングや大学について語らう大切な時間となっています。

4. SuperCon 2025 の告知

2025 年は 8 月 18 日（月）から 22 日（金）までの 5 日間での開催を予定しています。今年度もオンライン開催となります。新型コロナなどのパンデミックは現時点で起こっておりませんが、オンライン開催の方が全国の高校生にとって参加しやすいなどのメリットが大きいことが昨年度までの実施経験からわかり、オンライン開催とした次第です。予選課題は 5 月 28 日に公表、課題提出〆切は 6 月 13 日正午です。今回は、東京科学大のスパコン、TSUBAME を使用する予定です。本年もチャレンジする高校生・高専生、引率の先生方など参加者の皆さんに喜んでいただけるよう様々な工夫を凝らそうと関係者一同

考えています。本稿が皆様のお目に触れるときには既にスケジュールが進行しているかもしれませんが、もしも可能ならば皆様もお知り合いの高校生に SuperCon2025 というものがあり、大変に楽しい行事であることを呼びかけてください。また、来年以降、すなわち SuperCon2026 以降への参加、お申し込みをご検討頂ければ幸いです。

5. Web

コンテストページです。ぜひ一度御覧ください。

SuperCon2024（第 30 回大会）

<https://www.supercon.cii.isct.ac.jp/attwiki/index.php?SupercomputingContest2024>

SuperCon2025（第 31 回大会）

<https://www.supercon.cii.isct.ac.jp/>

大規模計算機システム利用者講習会等の紹介

大阪大学 D3 センター教授 降旗 大介

1. 概要

大阪大学の大規模計算機システムの利用者講習会について紹介しましょう。まず、D3 センターの教職員をはじめとしてこの大規模計算機システムの運営、開発、支援に関わっている人々は、ユーザにより有効にシステムを活用していただくために何が出来るか、と日々考えています。その一端が、マニュアル・ドキュメント類を充実させること、ユーザからの質問を受け付けて遺漏なく適切に返答する仕組み作りと維持、そうして得られたユーザにとって有益な情報を明文化するための web における FAQ の整備、などの活動になります。

そうした活動の中で重要なものの一つが、ここで紹介する利用者への情報提供（web によるシステム紹介や利用の手引等）と利用者向けの講習会です。情報提供は web で行えば場所・時間の制約がなく、ユーザの皆様が困ったときに即座に頼れる、非常に有益な存在です。そして、利用者への講習会は、ユーザへシステムや計算機の知識を伝える場だというだけでなく、講習会での質疑などを通じてシステム運営等に関わっている人とユーザとが直接やりとり出来る場でもあります。こうした場はお互いに大変貴重な機会です。そのため、利用者講習会にはしばしば、講習会担当者だけでなく、大規模計算機システムの運営・開発・管理・支援などを行っている関係者が立ち会うことがあります。そのように力が入った利用者講習会について、以下、本稿で皆様にご説明を申し上げます。

これら講習会の内容ですが、スーパーコンピュータの OS である Unix 環境や、プログラム投入のためのバッチシステム、一般の PC 等とは異なるスーパーコンピュータの特殊なハードウェアについての概要説明といった入門的内容からはじまります。さらに、スーパーコンピュータの面目躍如たる大規模計算を行うユーザにとって重要な並列計算の基礎、

OpenMP、MPI などの並列計算通信プロトコルの概要から GPU を使いこなすための OpenACC についてのプログラミング技法の詳細、intel コンパイラに関する詳しい解説、スーパーコンピュータ上のコンテナ利用講習会といった、大型計算機にまつわる内容の講習会もあります。そしてさらに発展的な講習会として、阪大が誇るスーパーコンピュータ SQUID 特有のハードウェアであるベクトルプロセッサ SX-Aurora TSUBASA を用いる高速化技法、昨今のデータ志向型研究へ対応可能な大阪大学のストレージシステム ONION の利用の仕方、KKR グリーン関数法を用いた第一原理計算プログラム AkaiKKR、“非”熱加工を理解・解析するための電子と光の相互作用をシミュレートする SALMON といった専門家用の特殊なソフトウェア等々、多岐にわたる内容のものが 있습니다。

これらの内容はユーザの要望に沿って運営関係者が検討し、計画を作っています。詳しくは次ページに掲載しております表に掲載しておりますが、大規模計算機の利用者だけではなく、学生、教員、研究者を幅広く対象とし、年に 10 回~20 回程度開催しております（2024 年度は 15 回開催いたしました）。これらについては、より詳細な情報を D3 センター大規模計算機システムの web において掲載しておりますので、ぜひご参照ください。

2. 多忙な方も参加しやすく

御存知の通り、近年は学部学生、大学院生、教員、そして職員も大変に多忙です。講習会に参加したくともスケジュールが合わないということがあります。こうした事情を考慮しまして、一部の講習会にはほぼ同じ内容の講習会を時期をずらして 5 月から 6 月後半に一回、9 月頭~12 月頃に一回と、年に二回開催するように工夫しています。この時期については、「学期始まりや学期末の時期は外して欲しい」「あ

まり遅い時期では、学生の研究開始に間に合わない」などのユーザの声をうけ、なるべく多くのユーザが参加できるようにと配慮して決定したものです。また、以前は利用者講習会は現場での対面開催のみでした。ですが、2019 年以降、その一部についてオンライン配信を開始し、ユーザがより参加しやすい形へと移行しつつあります。実際、講師の方々の協力もあり、2024 年もすべての利用者講習会を無事にオンラインにて実施することができました。

また、スーパーコンピュータの高度なプログラミングについてや、AkaiKKR、SALMON などの研究者用専門ソフトウェアについてなど、高度な内容の講習会では講師を確保しにくいという問題があります。これに対し、われわれは日本電気株式会社様、プロメテック・ソフトウェア株式会社様、エクセルソフト株式会社様、高度情報科学技術研究機構様、株式会社アカデメイア様、Q-LEAP 先端レーザーイノベーション拠点「光量子科学によるものづくり CPS 化拠点」部門様、量子科学技術研究開発機構 関西光量子科学研究所様などの皆様と協力して講師を確保するようにしており、これにより高度な内容の講習会の開催を実現しています。こうした努力の甲斐あってか、これまでに各講習会ともに一定数のユーザの参加をいただいております、ユーザの皆様のお役に立てるように自負しております。

3. 初学者にも優しく

対象がスーパーコンピュータということもあり、未参加の方にとって講習会は敷居が高いと思うこともあるでしょう。しかし、先に述べたように初学者向けの講習会もあります。2024 年の 15 回の講習会のうち 1/4 ほどの開催は初学者が対象のものと言ってよいでしょう。具体的には、OS である Unix の簡単な操作方法の解説や、スーパーコンピュータのハードウェアの概要説明、細かい技法の説明の前に必要となる並列計算の概念の説明、バッチシステムの解説、そしてコンパイラの説明などからなります。スーパーコンピュータを使うユーザというと、こうした知識やプログラミング技法について通じたプロ

フェッショナルばかりと想像されるかもしれませんが、そうではないのです。どなたも最初は初心者ですし、そもそもスーパーコンピュータの利用者は「計算したいことについての専門家」であって、計算機の専門家ではないのです。そして、細かい技術についてのマニュアルは豊富に見つかっても、初心者が把握しにくい基礎的な概念や手法についての良い資料・ドキュメント類は探しにくいものです。われわれ D3 センターでは、こうした利用者講習会を通じてより広い分野・方面の初学者に困難を克服してシステムを有意義に使ってもらうべく、常に初学者に優しくありたいと考え、このような講習会構成にしています。

4. プロフェッショナルな方も

もちろん、われわれは初学者ばかりでなくプロフェッショナルとも言うべき高度な能力を持つユーザへの支援も怠っておりません。各種の専門的な内容について、多くの講習会を計画し、そして実施しています。大阪大学の誇る大規模計算機である SQUID を利用しての講習会、近年の並列計算プログラミングに必須である OpenMP や MPI についての講習会、GPU プログラミングに必要な OpenACC の講習会や SQUID に搭載されているベクトルプロセッサ SX-Aurora TSUBASA の講習会、CPU ノードにおける高速化技法の講習会、近代型データストレージシステム ONION の講習会、そして、第一原理計算プログラム AkaiKKR や電子・光の相互作用シミュレータ SALMON の講習会も行っています。こうした高度な内容については座学のみでは情報がうまく伝わらない側面がありますので、一部の講習会では無料配布アカウントを用いて大規模計算機システムそのものを実際に使っていく実習形式をとっております。微細な部分に至る具体的な体験を通じて現実的な議論を行うことが出来る機会としてもユーザの皆様にご利用いただいております。

5. ぜひご参加され、そしてフィードバックを

講習会の情報については、われわれ D3 センターの web https://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/lecture_event/lecture/にて常に公開しております。情報は随時更新しておりますので、ぜひ頻にご覧になり、ご興味のある講習会に積極的にご参加ください。皆様のご参加を常に歓迎いたします。

また、大規模計算機のハードウェア、ソフトウェア、そしてユーザの使い方といったものは日々変化していくものです。上記に述べたように様々な工夫や努力を通じて開催している講習会ではありますが、こうした変化に合わせ、講習会のありかたも変化、進歩していく必要があります。そして、それにはユーザの方々からいただく意見がなにより重要です。そのフィードバックの先により良い講習会の実現があるのです。ユーザの皆様におかれましては、遠慮をせずに、いつでも構いませんので、講習会についての要望をぜひ D3 センターまでお聞かせください。

2025 年度 大規模計算機システム利用講習会

	講 習 会 名	開催日時	講 師
1	スパコンに通じる 並列プログラミングの基礎	6 月 3 日 9 月開催予定	D3 センター 宮武 勇登 准教授
2	初めてのスパコン	6 月 5 日 9 月開催予定	D3 センター 木戸 善之 招へい教員（招へい教授）、 情報基盤課 技術職員
3	OpenMP 入門	6 月 9 日	D3 センター 吉野 元 教授
4	汎用 CPU ノード 高速化技法の基礎 (Intel コンパイラ)	7 月 3 日	エクセルソフト株式会社
5	GPU プログラミング入門 (OpenACC)	7 月 18 日	プロメテック・ソフトウェア株式会社
6	スーパーコンピュータ バッチシステム入門 / 応用	7 月 23 日	日本電気株式会社
7	GPU プログラミング実践 (OpenACC)	7 月 25 日	プロメテック・ソフトウェア株式会社
8	SX-Aurora TSUBASA 高速化技法の基礎	7 月 29 日	日本電気株式会社
9	並列プログラミング入門 (OpenMP/MPI)	7 月 31 日	日本電気株式会社
10	ONION 活用講習会	調整中	日本電気株式会社
11	コンテナ入門	調整中	日本電気株式会社

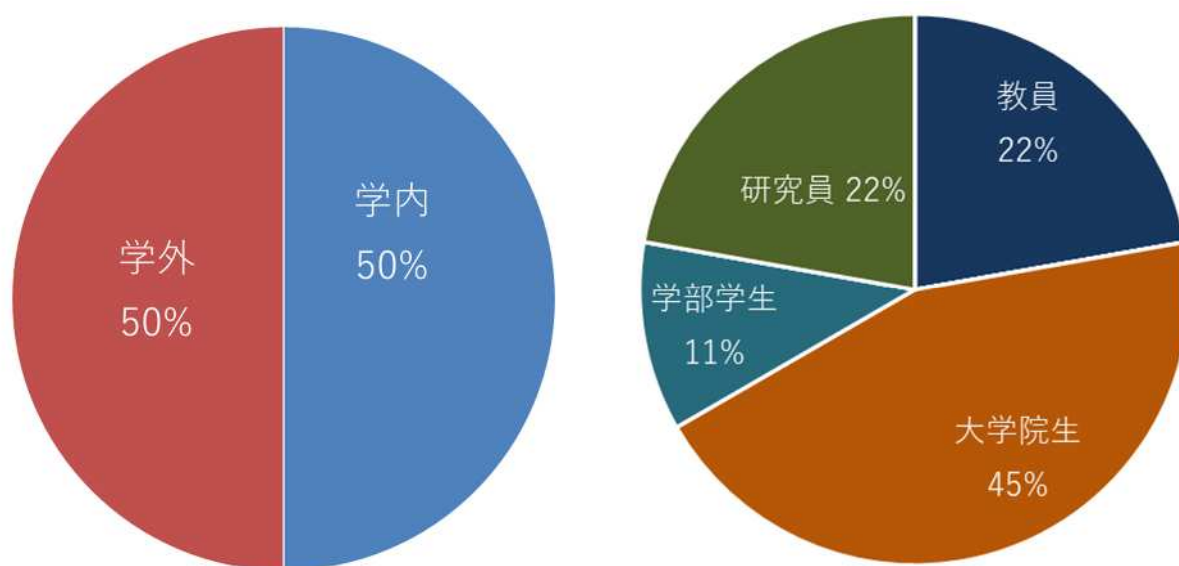
※全てオンラインでの開催

2024 年度 大規模計算機システム利用講習会 アンケート集計結果

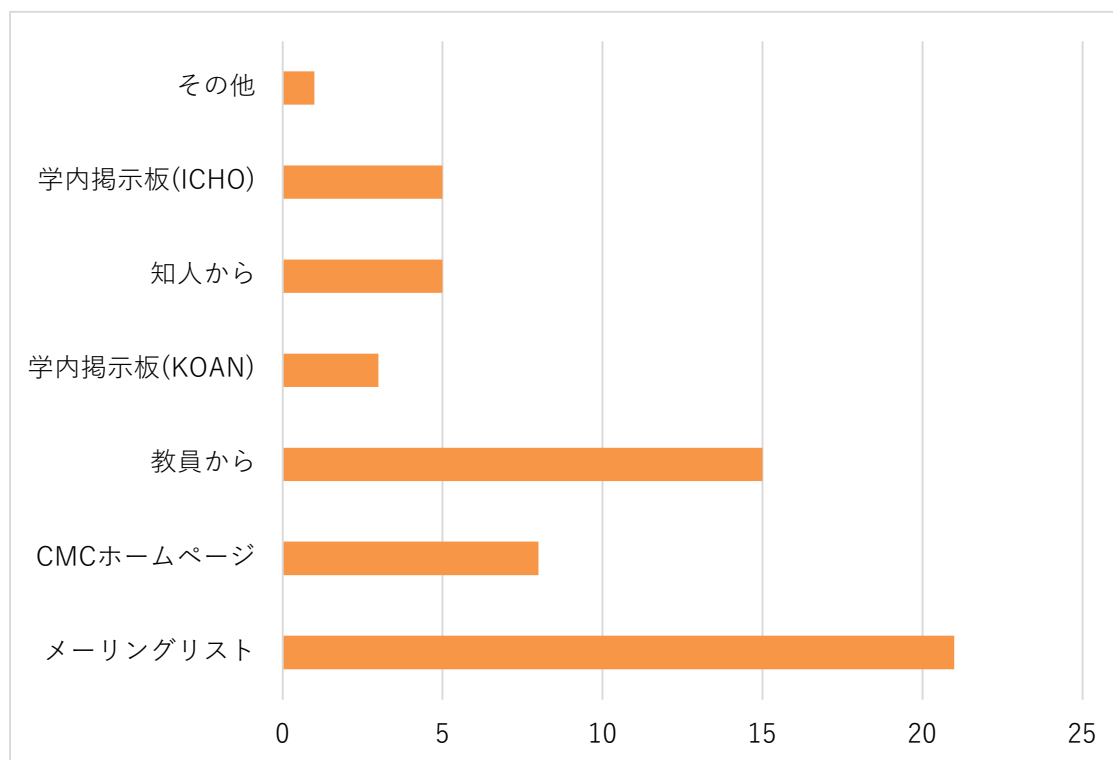
◆受講者数（すべてオンラインで開催）

講習会名	申込者数	受講者数
スパコンに通じる並列プログラミングの基礎(6/3)	28	22
初めてのスパコン(6/6)	23	17
OpenMP 入門(6/12)	17	13
並列プログラミング入門(OpenMP/MPI)(6/17)	14	9
スーパーコンピュータ バッチシステム入門 / 応用(6/18)	7	5
SX-Aurora TSUBASA 高速化技法の基礎(6/24)	3	2
ONION 活用講習会(6/26)	7	5
GPU プログラミング入門（OpenACC）(6/27)	12	10
コンテナ入門(6/28)	12	7
GPU プログラミング実践（OpenACC）(7/4)	17	12
汎用 CPU ノード 高速化技法の基礎（Intel コンパイラ）(7/9)	10	2
初めてのスパコン(9/5)	25	17
スパコンに通じる並列プログラミングの基礎(9/25)	31	21
合計	206	142

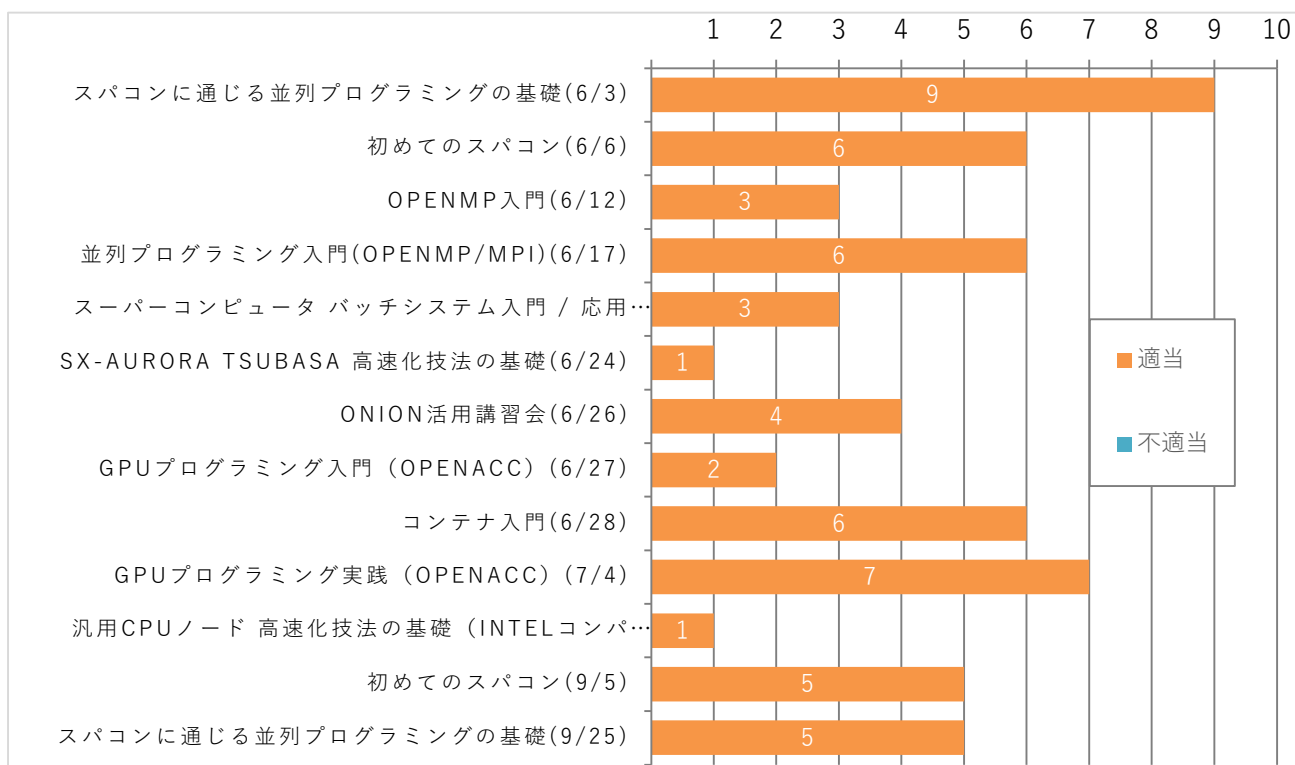
◆受講者の内訳



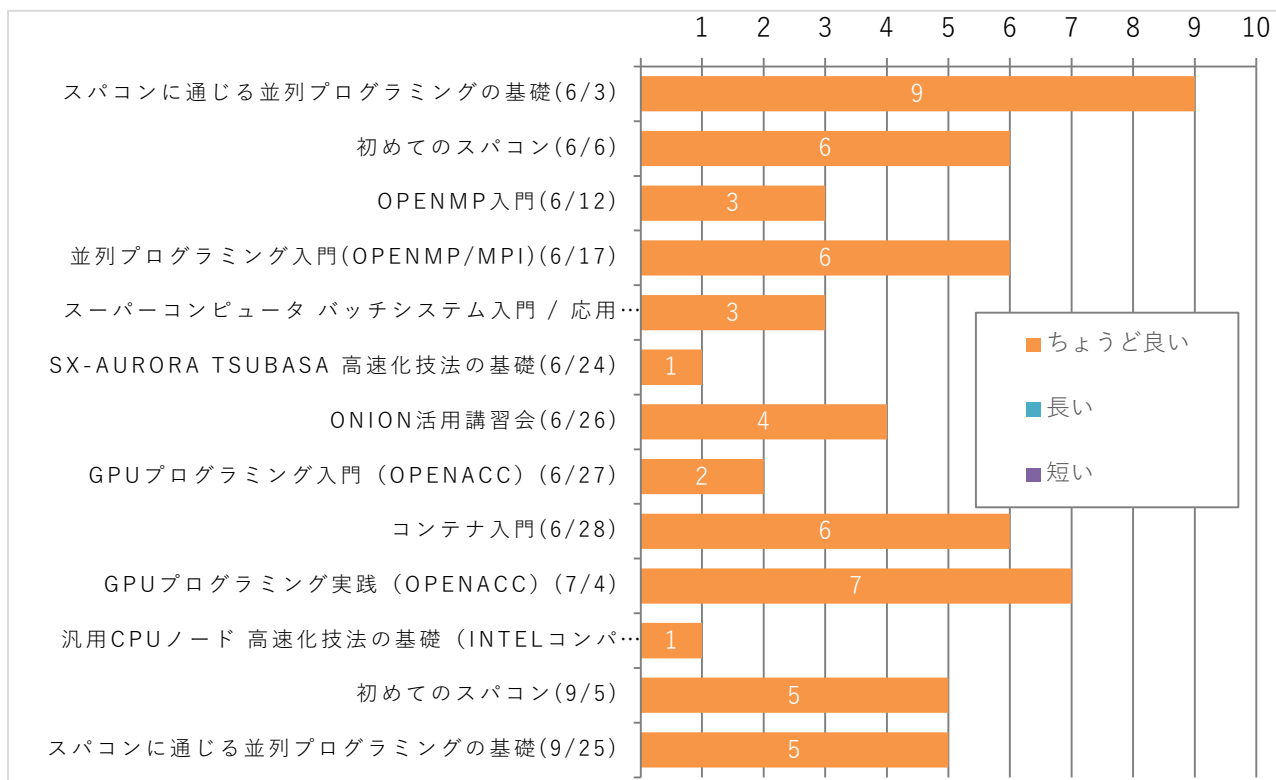
◆講習会についてどのようにお知りになりましたか。(複数回答可)



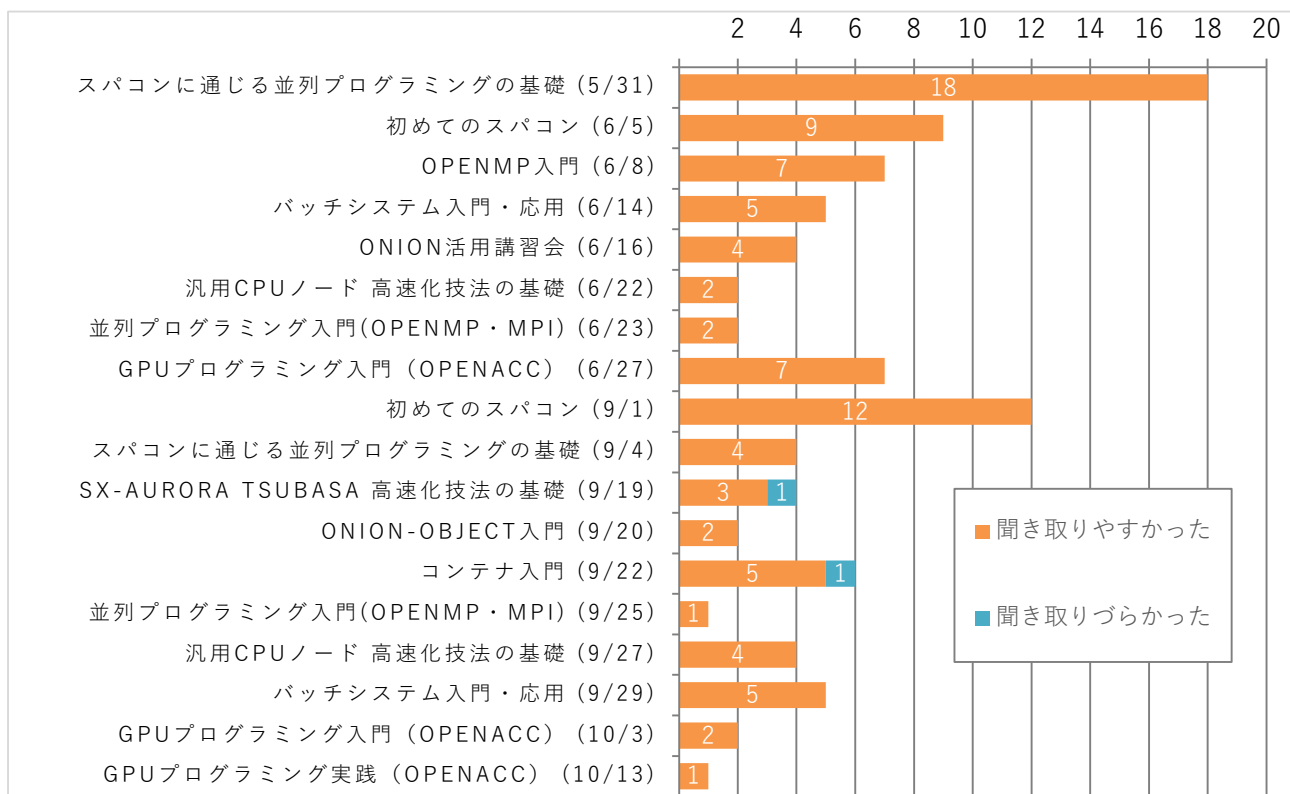
◆開催日は適当でしたか。



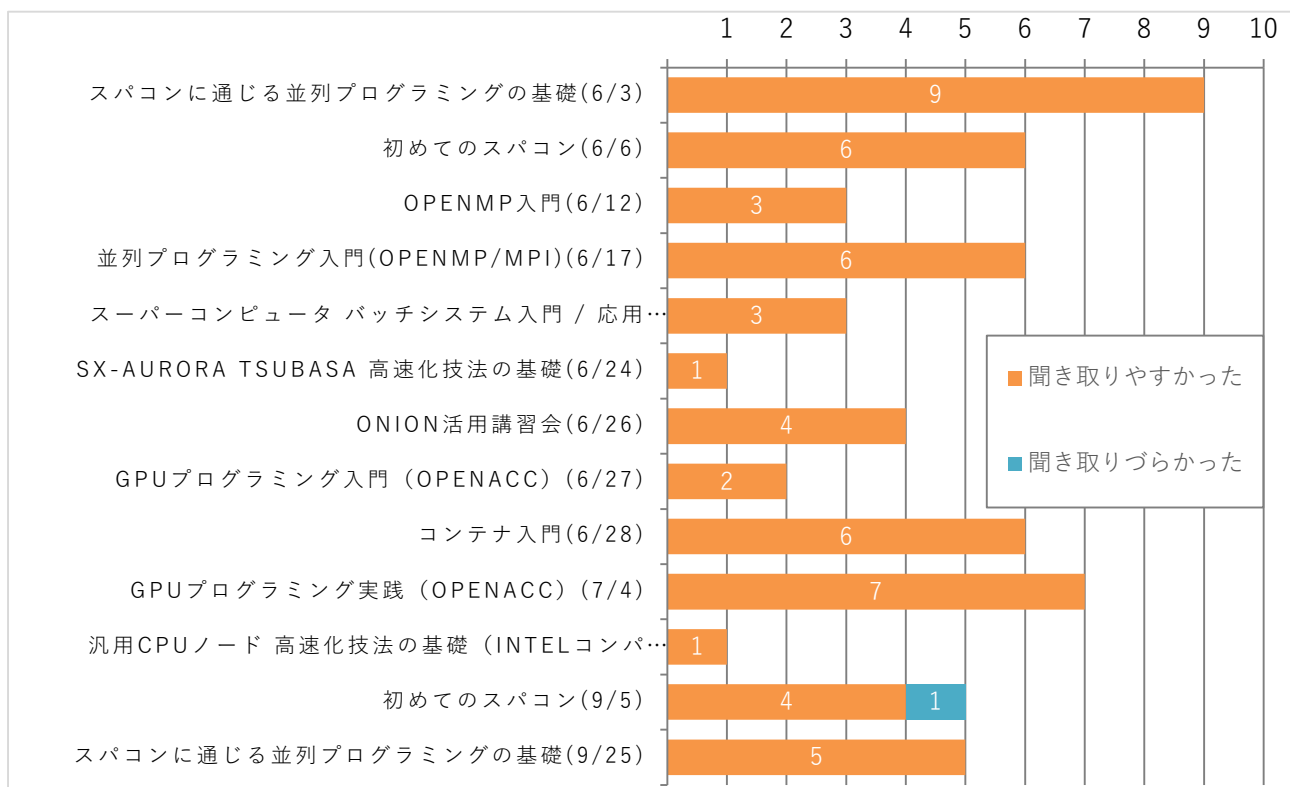
◆講習会の時間は適当でしたか。



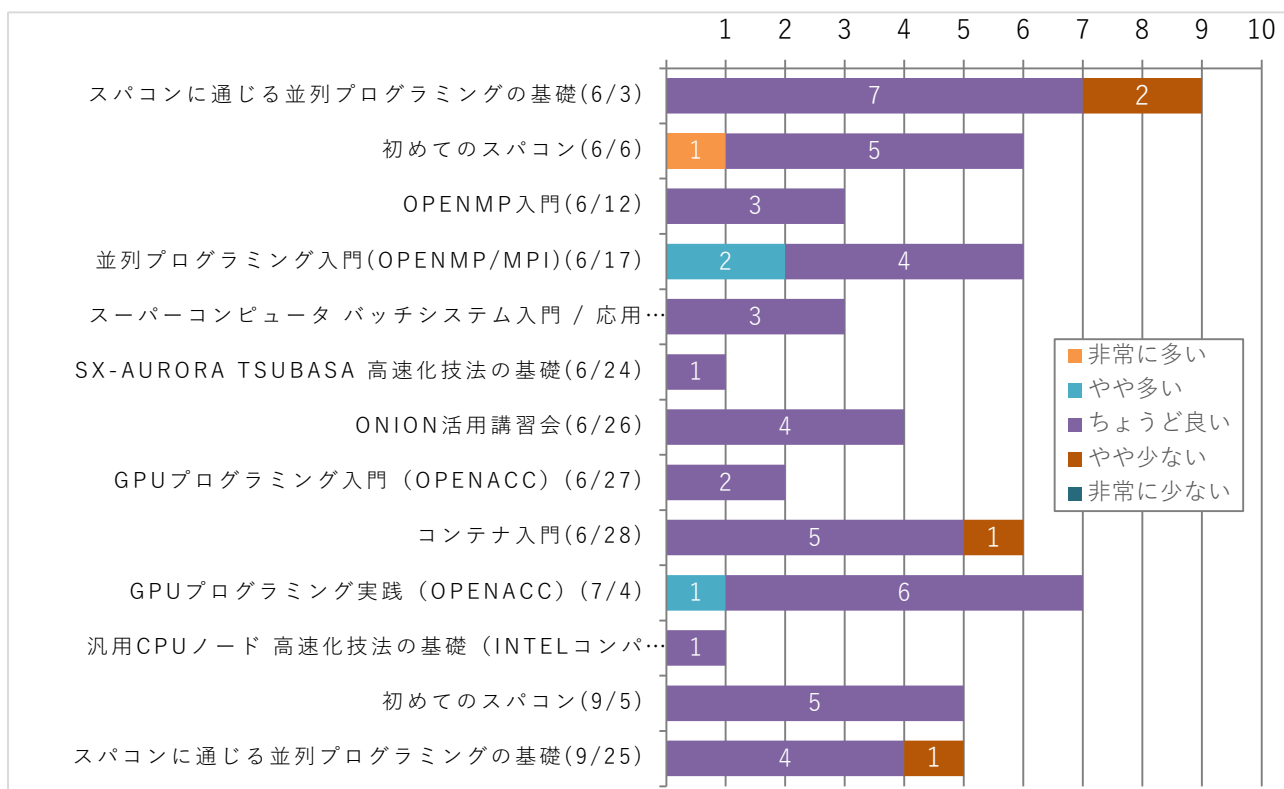
◆今回の講習会の音声はいいかがでしたか。



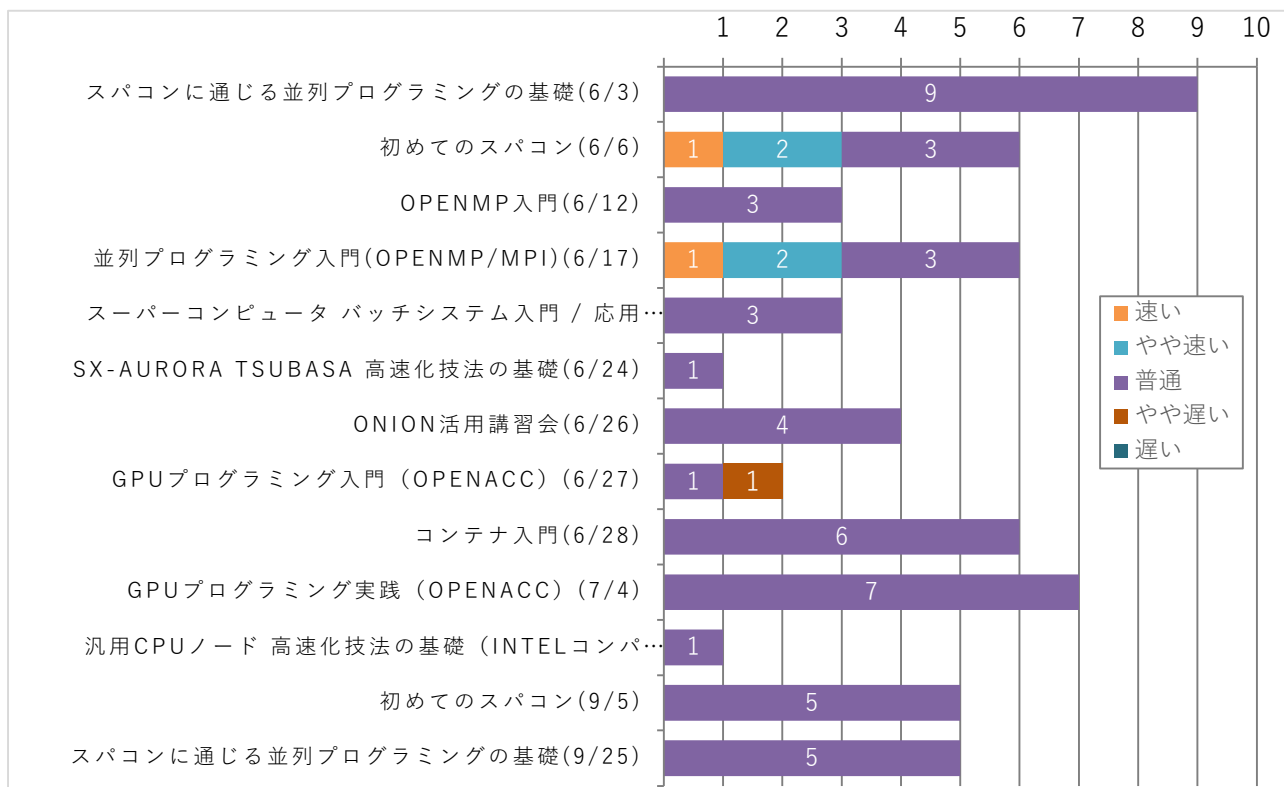
◆講習会の内容はどうでしたか。



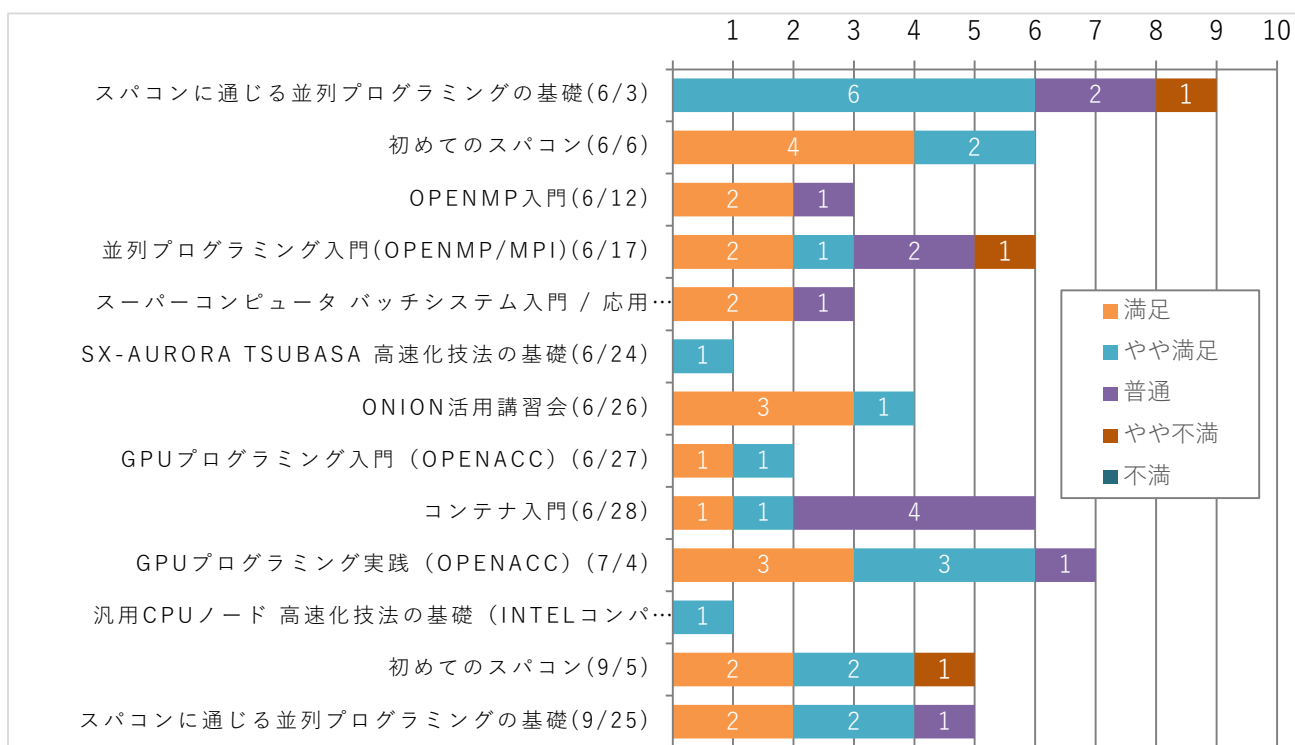
◆講習会で取り扱った内容量はどうか。



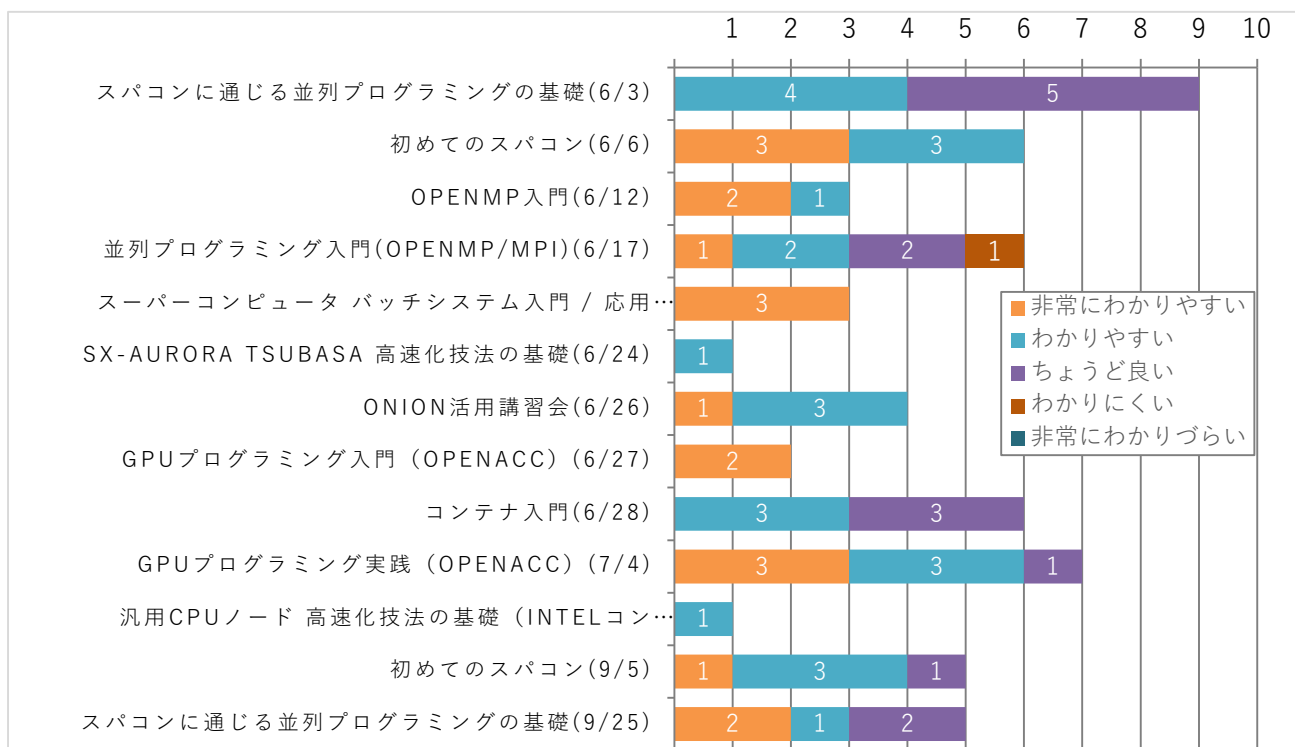
◆講師の進め方はどうか。



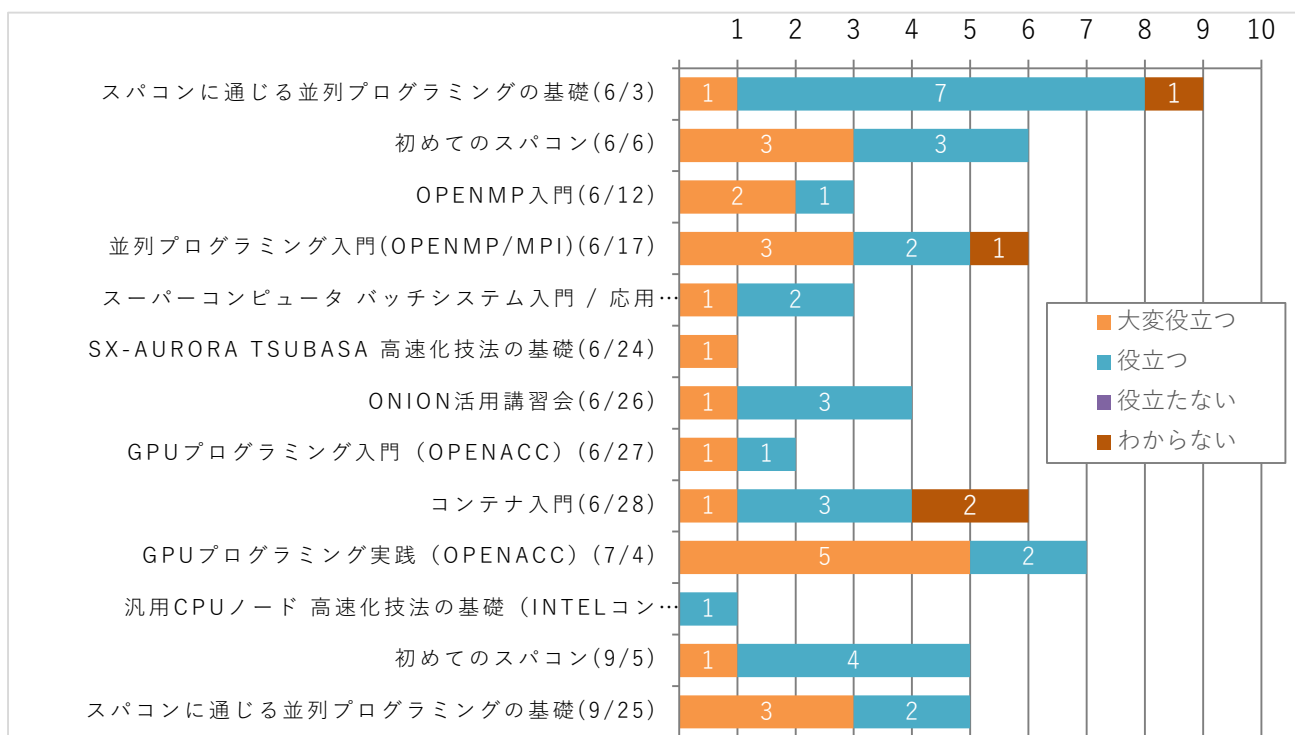
◆満足度は？



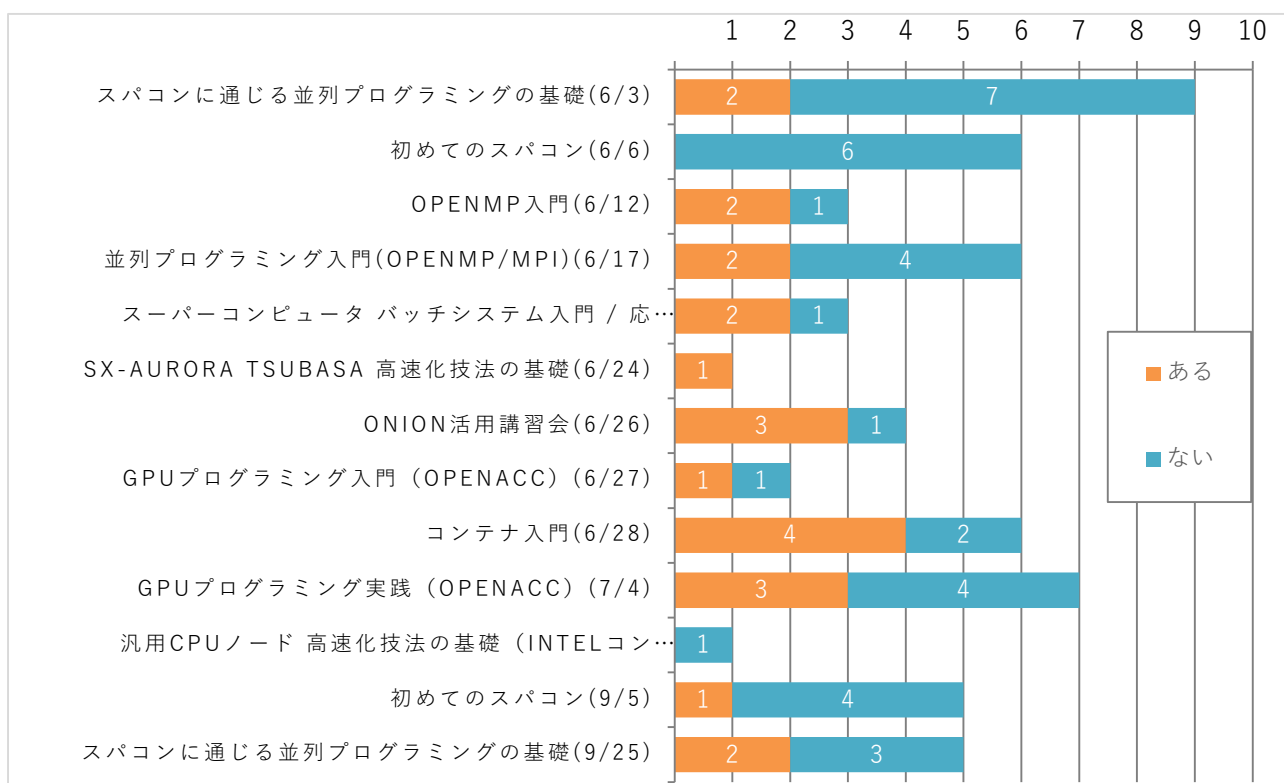
◆講習会の資料はどうでしたか。



◆皆さんの今後の研究・業務・勉学に役立つと思いますか。



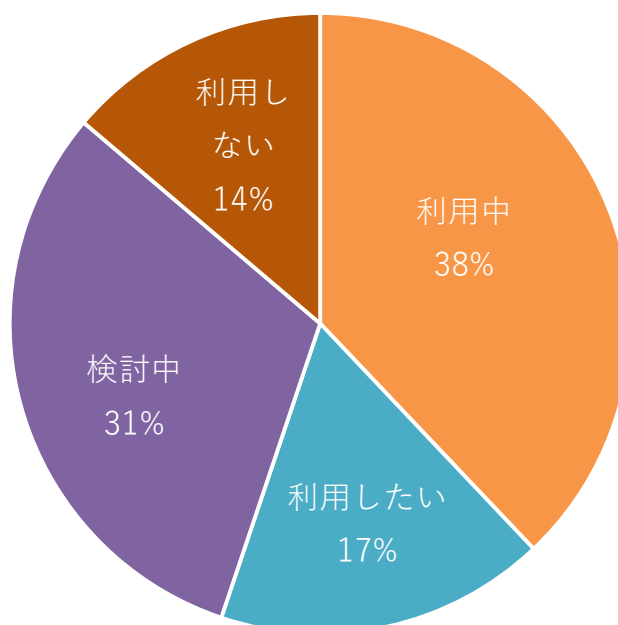
◆他の情報基盤センター等も含め、これまでにスーパーコンピュータを利用したことがありますか。



◆「ある」と回答された方の利用方法



◆D 3 センターの大規模計算機システムの利用を希望されますか。



2025 年度「HPCI 利用」の活動状況

HPCI (High Performance Computing Infrastructure) システムは、個別の計算資源提供機関ごとに分断されがちな全国の幅広いハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) ユーザ層が全国の HPC リソースを効率よく利用できる体制と仕組みを整備し提供することを目的として構築され、2012 年 10 月より運用開始しました。北海道大学、東北大学、筑波大学、東京大学、東京科学大学、名古屋大学、京都大学、大阪大学、九州大学の各情報基盤センター、及び理化学研究所、海洋研究開発機構、統計数理研究所が資源提供機関となり、計算機資源や、共有ストレージ、ネットワーク、認証基盤、可視化装置等といったシステムを、中立・公正で科学的・技術的・社会的根拠に基づき配分・提供しています。

本センターの計算機資源を利用する 2025 年度 HPCI 採択課題一覧

利用枠	研究課題名
一般課題	星形成と惑星形成分野を横断する大規模数値シミュレーション
一般課題	柔軟構造大気突入機の流体構造連成解析と動的モード分解
一般課題	有効電荷を加味した機械学習力場によるイオン液体・濃厚電解液系シミュレーション
一般課題	量子ユニタリ回路ダイナミクスで実現する新奇非平衡量子状態
一般課題	超高速・大規模 QM/MM 分子動力学計算に基づく酵素反応機構の解明
一般課題	カーボンニュートラルに向けたガスタービン燃焼器の乱流 LES 実証解析
一般課題	無衝突降着円盤中の磁化プラズマ乱流による粒子加速
一般課題	宇宙論的流体シミュレーションデータベースの構築と観測的宇宙論
一般課題	テンソルネットワーク法を用いた素粒子物理学の研究
一般課題	潤滑油中の添加剤および増稠剤の自己組織化シミュレーション
一般課題	気象の実際的問題への適用に向けた超水滴法の性能検証と改良
一般課題	不均一な構造を有するナノ物質や固液界面の光や電圧に対する応答機構
一般課題	フラグメント分子軌道法による構造生物学と量子化学の連携基盤の構築
一般課題	カーボンニュートラル実現に向けたデータ駆動に基づく革新的ポリマーナノコン ポジット 絶縁材料の創成技術
一般課題	自由エネルギー摂動法パイプラインの高度化
一般課題	スケールド・シュレーディンガー方程式の厳密解法による超精密量子化学計算
一般課題	第一原理計算を用いた非調和フォノン特性データベースの構築
若手課題	Non-dilute simulation of finite-size Kolmogorov-scale particles

若手課題	テンソル繰り込み群に基づく新しい相転移解析手法の開発と応用
若手課題	非平衡グリーン関数法を用いた核分裂の微視的機構の解明
若手課題	Direct numerical simulation on high Weber number bubbles: analysis of boundary layer development impact on bubbles
若手課題	水溶性高分子及び小分子の各種環境における集合様態と挙動に関する分子論的研究（１）
産業課題	深層学習を活用した高解像度空間的遺伝子発現データの大規模並列解析による動脈硬化メカニズムの解明
産業課題	次世代パワーデバイス用 SiC Remote Epitaxial 膜の Peel メカニズム解明

2025 年度「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点」の活動状況

「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点」は、北海道大学、東北大学、東京大学、東京科学大学、名古屋大学、京都大学、大阪大学、九州大学にそれぞれ附置するスーパーコンピュータを持つ 8 つの共同利用の施設を構成拠点とし、東京大学情報基盤センターがその中核拠点として機能する「ネットワーク型」共同利用・共同研究拠点として、文部科学省の認可を受け、平成 22 年 4 月より本格的に活動を開始しました。

本ネットワーク型拠点の目的は、超大規模計算機と大容量のストレージおよびネットワークなどの情報基盤を用いて、地球環境、エネルギー、物質材料、ゲノム情報、Web データ、学術情報、センサーネットワークからの時系列データ、映像データ、プログラム解析、その他情報処理一般の分野における、これまでに解決や解明が極めて困難とされてきた、いわゆるグランドチャレンジ的な問題について、学際的な共同利用・共同研究を実施することにより、我が国の学術・研究基盤の更なる高度化と恒常的な発展に資することにあります。本ネットワーク型拠点には上記の分野における多数の先導的研究者が在籍しており、これらの研究者との共同研究によって、研究テーマの一層の発展が期待できます。

2025 年度の課題募集には合計 74 課題が採択されました。このうち以下の 16 課題が本センターの計算機資源を利用することになっています。

課題代表者	研究課題名
中澤 嵩 様 (金沢大学)	Logarithm Conformation Representation による新規圧縮性流体ソルバーの開発
村上 匡且 様 (大阪大学 レーザー科学研究所)	マイクロノズル加速による GeV プロトン生成の 3 次元シミュレーション
松崎 義孝 様 (海上・港湾・航空技術研究所)	標準的な水環境評価に向けた流動生態系シミュレーションシステム EcoPARI のプラットフォーム構築
山口 雅也 様 (医薬基盤・健康・栄養研究所ヘルス・メディカル微生物研究センター)	大規模比較ゲノム解析による病原細菌の進化と病態発症機構の解明
森田 直樹 様 (筑波大学)	グラフ構造で一般化された動的負荷分散フレームワークに基づくマルチスケールシミュレータの開発
深谷 猛 様 (北海道大学)	QR 分解に関する高性能計算技術の研究
萩田 克美 様 (防衛大学校)	超大規模高分子系 MD データの位相幾何解析の並列高速化基盤検討
Takeshi Nanri 様 (Kyushu University)	Study on the real effect of non-blocking collective communications
佐藤 正寛 様 (東京大学)	環境循環型社会の実現に向けたポリマーインフォマティクスのデータ基盤構築
西澤 淳 様 (岐阜聖徳学園大学)	数値シミュレーションで読み解く最深宇宙の構造形成
滝沢 寛之 様 (東北大学)	複数拠点の連携による緊急ジョブ実行基盤の構築と評価
村田 忠彦 様 (大阪大学 D3 センター)	合成人口プロジェクト：エージェントへの生活行動時間割当て
森川 良忠 様 (大阪大学 大学院工学研究科)	機械学習駆動のマルチスケールシミュレーションによるグリーン触媒設計

安田 修悟 様 (兵庫県立大学)	AI leveraged multiscale scheme for kinetic equations
緒方 奨 様 (大阪大学 大学院工学研究科)	CO ₂ と水の注入による地下岩体フラクチャリングプロセスを予測する大規模数値シミュレーションと CO ₂ 活用型地熱発電への展開
高棹 真介 様 (大阪大学 大学院理学研究科)	現実的な原始惑星系円盤のガス散逸シナリオ構築に向けた多角的アプローチ

2024 年度 大規模計算機システム公募型利用制度 (追加募集) の活動状況

大阪大学D3センターでは、大規模計算機システムを活用する研究開発の育成・高度化支援の観点から、本センターが参画する「ネットワーク型」学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（JHPCN）や革新的ハイパフォーマンズ・コンピューティング・インフラ（HPCI）の目的を踏まえつつ、今後の発展が見込まれる萌芽的な研究課題や本センターの大規模計算機システムを最大限活用することで成果が見込まれる研究課題を公募しています。2024 年度は通常の募集に加えて追加募集を行い、以下の 12 課題を採択しました。

若手・女性研究者支援萌芽枠 採択課題

代表者名	研究課題名
顧 彦珺 様 (大阪大学 産業科学研究所)	レーザープラズマ駆動電子加速における放射減衰効果
高木 悠司 様 (大阪大学 理学研究科)	運動論的レーザープラズマ相互作用で発生する非熱的高速電子特性の解析
芳賀 智宏 様 (大阪大学 工学研究科)	自然の多面的価値の理解に向けたランドスケープの埋め込み表現の開発

大規模 HPC 支援枠 採択課題

代表者名	研究課題名
畑 昌育 様 (量子科学技術研究開発機構 関西光量子科学研究所)	超高強度レーザーイオン加速におけるイオン化の物理とその制御
中澤 嵩 様 (金沢大学)	Logarithm conformation representation による圧縮性流体方程式の導出と数値計算
岩下 航 様 (大阪大学 基礎工学研究科)	溝付き粘弾性体の滑り摩擦の連続体解析
杉村 奈都子 様 (鹿児島工業高等専門学校)	機械摩擦の摩耗焼付き機構解明に資するマルチスケールモデルの開発

人工知能研究支援枠 採択課題

代表者名	研究課題名
浜口 智志 様 (大阪大学 工学研究科)	反応性プラズマと物質の相互作用を解析するための機械学習原子間力場の構築

世界と伍する学生育成特設枠 採択課題

代表者名	研究課題名
Bahrul Jalaali 様 (Department of Mechanical Engineering, Graduate School of Engineering, Osaka University)	Data-driven subgrid-scale model for large-eddy simulation
山口 栄治 様 (琉球大学 大学院理工学研究科)	固体群と流体の三次元連成数値シミュレーションを用いた混合粒 径土砂流の力学機構の解明
YIJIA WU 様 (School of Engineering, The University of Tokyo)	Investigating dynamically super-disordered Graphite Intercalation systems for Metaphonics modeling through advanced Material Informatics and molecular dynamics simulations
Minh Nhat Ly 様 (Department of Physics, Graduate School of Science, Osaka University)	Particle acceleration in collisionless shocks with pre-existing turbulences by particle-in-cell simulations

2025 年度 大規模計算機システム公募型利用制度の活動状況

2025 年度も引き続き研究課題の公募を行い、以下の 27 課題を採択しました。

若手・女性研究者支援萌芽枠 採択課題

代表者名	研究課題名
桑原 卓哉 様 (大阪公立大学 大学院工学研究科)	深層学習と分子シミュレーションを用いた超潤滑界面の形成メカニズムの解明
鵜沢 浩太郎 様 (日本原子力研究開発機構)	非平衡グリーン関数を用いた核分裂反応の微視的記述
Pierre Vinchon 様 (Graduate School of Engineering, The University of Osaka)	Contribution of subthreshold energy ions' neutralization on defect formation in monolayer graphene
原 惇也 様 (大阪大学 大学院工学研究科附属 フューチャーイノベーションセンター)	6G を見据えた大規模多層センサネットワークにおける多モーダル 時空間データの解析

大規模 HPC 支援枠 採択課題

代表者名	研究課題名
栗本 育三郎 様 (木更津工業高等専門学校)	サイバーフィジカル植物工場システムの開発
寺島 洋史 様 (北海道大学 大学院工学研究院)	詳細反応機構を適用した高圧メタン酸素ロケットエンジン燃焼振動シミュレーション：燃焼振動発生機構の解明と噴射条件の特定
村上 匡且 様 (大阪大学 レーザー科学研究所)	マイクロノズル加速による超高エネルギープロトン生成の 3 次元シミュレーション
佐野 孝好 様 (大阪大学 レーザー科学研究所)	無衝突衝撃波・無衝突衝撃波の衝突現象における運動論的粒子加速機構の解明
杉本 馨 様 (京都大学 基礎物理学研究所)	連星中性子星合体における磁場エネルギー散逸過程の解明を目指したプラズマ粒子シミュレーション
大西 正人 様 (統計数理研究所)	第一原理計算を用いた非調和フォノン特性データベースの構築
高木 悠司 様 (大阪大学 大学院理学研究科)	運動論的レーザープラズマ相互作用による非熱的高速電子発生

人工知能研究支援枠 採択課題

代表者名	研究課題名
長沼 大樹 様 (モントリオール大学・Mila – Quebec Artificial Intelligence Institute)	汎化指標の網羅的評価の再考：現代ニューラルネットワークの課題への適応
浜口 智志 様 (大阪大学 大学院工学研究科)	機械学習力場 MD による原子層プロセス表面反応解析

新里 秀平 様 (大阪大学 大学院基礎工学研究科)	ニューラルネットワーク原子間相互作用を用いた高精度・大規模分子動力学計算に基づく水素環境下での欠陥動力学の解析と理論構築
Harry Handoko Halim 様 (Graduate School of Engineering, The University of Osaka)	Integrating Multi-scale Simulations and Inverse Design for Heterogenous Catalysis Materials at Operating Condition by Machine Learning Interatomic Potentials
水上 渉 様 (大阪大学 量子情報・量子生命研究センター)	有機・無機化合物を包括する化学のための基盤モデルの構築とその民主化

世界と伍する学生育成特設枠 採択課題

代表者名	研究課題名
横山 尋斗 様 (東京大学 大学院工学系研究科)	金属/絶縁ポリマー界面の接合状態が電荷注入障壁に及ぼす影響の定量的解析
水谷 耕介 様 (大阪大学 大学院理学研究科)	3次元輻射磁気流体計算を用いた連星系における共通外層期の軌道進化の調査
栗原 諒 様 (大阪大学 大学院基礎工学研究科)	第一原理分子動力学計算を用いた CO ₂ 電解還元における電極/電解質界面の反応メカニズム解析
山中 敬太 様 (大阪大学 大学院工学研究科)	配向ナノワイヤアレイと高強度レーザーの相互作用による高輝度ガンマ線生成
西岡 蒼矢 様 (大阪大学 大学院理学研究科)	格子 QCD の数値計算によるハドロン内部のダイクォークの探索
Rizka Nur Fadilla 様 (Graduate School of Engineering, The University of Osaka)	Deep Neural Network Potential for Unveiling Drug Release Mechanism of pH-sensitive Antibody-drug Conjugates Linkers in Acidic Solutions
Shufang Huang 様 (大阪大学 大学院基礎工学研究科)	凝集誘起発光を示す Pt (II) 錯体の固体状態における光励起状態の理論的および実験的研究
Dinh Ngoc Dung 様 (Graduate School of Engineering, The University of Osaka)	Theoretical elucidation and design of local atomic structures and their colossal permittivity properties of doped TiO ₂
Meliton R. Chiong III 様 (Graduate School of Engineering, The University of Osaka)	Exploring the structure and reactivity of Al ₁₃ clusters deposited on organic substrates by highly parallelized quantum Monte Carlo simulation
小峠 陸登 様 (大阪大学 大学院情報科学研究科)	グラフ構造を活用した解釈可能な脳波基盤モデルの開発
Kelvin Lee Kai Wen 様 (Research Center for Nuclear Physics, The University of Osaka)	Diquark mass and Quark-diquark potential from lattice QCD with a static quark

大規模計算機システム Q&A

当センターに寄せられた質問を掲載しております。
同じ内容を以下の Web ページでも閲覧いただけます。

<https://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/faq/>

Q. 年度途中で計算資源やストレージ容量の追加は可能でしょうか？

A. はい。可能です。資源追加の申請につきましては、以下の利用者管理 WEB システムから申請頂いております。

利用者管理システム（要認証）

<https://manage.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/saibed/>

申請手順につきましては、以下のページにまとめておりますので、ご参照ください。

一般利用（学術利用）資源追加申請

https://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/service/basic_resourceadd/

Q. 年度途中で利用負担金の支払い費目や支払い時期を変更できますか？

A. WEB システムからは変更できませんので、下記までご連絡ください。

大阪大学 情報推進部 情報基盤課 研究系システム班

Mail: system@cmc.osaka-u.ac.jp

TEL: 06-6879-8808

Q. ディスク容量を追加した場合、利用期限はいつまでですか？

A. 年度途中で申し込まれた場合でも、利用期限は年度末までとなります。翌年度にディスク容量を追加しない場合は、データの整理を3月中にお願いいたします。やむを得ない事情がある場合や、間に合わない場合は、ご連絡くださいませ。原則として、事前連絡無しにこちらでデータを削除することはありません。

Q. ユーザ間でファイルを転送することは可能でしょうか？

A. scp コマンドを使用することで可能です。

例えば、カレントディレクトリ下の abc ディレクトリの中のファイル sample.c を、b61234 のホームディレクトリに転送する場合は以下のようなコマンドとなります。

```
scp ./abc/sample.c b61234@localhost:
```

Q. 一度に大量のジョブを投入し、ジョブごとに入力ファイル/実行ファイルを変更したい

A. ファイル名に連続した数値が含まれている場合、パラメトリックジョブという投入方法で、一度に大量のジョブを投入できます。

パラメトリックジョブでは、ジョブスクリプト内の"\$PBS_SUBREQNO"環境変数に、-t で指定した数値(下記の例では 1 から 5 までの数値)が格納されます。qsub すると同時に 5 本のジョブが投入され、a.out に対してそれぞれ異なる入力ファイル(下記の例では input1 から input5)が設定されます。

ジョブスクリプト例(jobscript.sh)

```
#PBS -q SQUID
#PBS -l elapstim_req=0:30:00,cpunum_job=24
cd $PBS_O_WORKDIR
./a.out input$PBS_SUBREQNO
```

投入方法

```
qsub -t 1-5 jobscript.sh
```

qstat の表示例:パラメトリックジョブの場合、1 回の qsub につき 1 件分の表示となります

RequestID	ReqName	UserName	Queue	Pri	STT	S	Memory	CPU	Elapse	R	H	M	Jobs
123456[.].sqd	nqs	username	OC1C	0	QUE	-	-	-	Y	Y	Y	1	

sstat の表示例:-t で指定した数値分だけ表示されます

RequestID	ReqName	UserName	Queue	Pri	STT	PlannedStartTime
123456[1].sqd	nqs	username	OC1C	0.5002/	0.5002	QUE -
123456[2].sqd	nqs	username	OC1C	0.5002/	0.5002	QUE -
123456[3].sqd	nqs	username	OC1C	0.5002/	0.5002	QUE -
123456[4].sqd	nqs	username	OC1C	0.5002/	0.5002	QUE -
123456[5].sqd	nqs	username	OC1C	0.5002/	0.5002	QUE -

Q. 機種変更/紛失/何らかの問題で SQUID の 2 段階認証ができなくなった

A. 2 段階認証のリセットには管理者の操作が必要となりますので、お問い合わせフォームからお知らせください。その際、氏名、利用者番号、メールアドレスは登録時のものを記入してください。2 段階認証のリセット時にパスワードもあわせて初期化いたしますので、予めご了承ください。

お問い合わせフォーム

https://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/support/contact/auto_form/

利用規程等

・ 規程関係

大阪大学 D3 センター大規模計算機システム利用規程

(趣旨)

第1条 この規程は、大阪大学 D3 センター(以下「センター」という。)が管理及び運用する全国共同利用のスーパーコンピュータシステム及びワークステーションシステム(以下「大規模計算機システム」という。)の利用に関し必要な事項を定めるものとする。

(利用目的)

第2条 大規模計算機システムは、学術研究、教育等のために利用することができるものとする。

(利用者の資格)

第3条 大規模計算機システムを利用することのできる者は、次の各号のいずれかに該当する者とする。

- (1) 大学、短期大学、高等専門学校又は大学共同利用機関の教員(非常勤講師を含む。)及びこれに準ずる者
 - (2) 大学院の学生及びこれに準ずる者
 - (3) 学術研究及び学術振興を目的とする国又は地方公共団体が所轄する機関に所属し、専ら研究に従事する者
 - (4) 学術研究及び学術振興を目的とする機関(前号に該当する機関を除く。)で、センター長が認めた機関に所属し、専ら研究に従事する者
 - (5) 科学研究費補助金の交付を受けて学術研究を行う者
 - (6) 第1号、第3号又は第4号の者が所属する機関との共同研究に参画している民間企業等に所属し、専ら研究に従事する者
 - (7) 日本国内に法人格を有する民間企業等に所属する者(前号に該当する者を除く。)で、別に定める審査に基づきセンター長が認めた者
 - (8) 前各号のほか、特にセンター長が適当と認めた者
- (利用の申請)

第4条 大規模計算機システムを利用しようとする者は、所定の申請を行い、センター長の承認を受けなければならない。ただし、前条第6条の者は、この限りでない。

- 2 前項の申請は、大規模計算機システム利用の成果が公開できるものでなければならない。

(利用の承認)

第5条 センター長は、前条第1項による申請を受理し、適当と認めたときは、これを承認し、利用者番号を与えるものとする。

- 2 前項の利用者番号の有効期間は、1年以内とする。ただし、当該会計年度を超えることはできない。

(利用内容の変更)

第6条 大規模計算機システムの利用につき承認された者(以下「利用者」という。)は、申請書の記載内容に変更を生じた場合は、速やかに所定の手続きを行わなければならない。

(利用者番号の不正使用禁止)

第7条 利用者は、第5条第1項に規定する利用者番号

を当該申請に係る目的以外に使用し、又は他人に使用させてはならない。

(報告書の提出)

第8条 利用者は、当該申請に係る利用を終了又は中止したときは、速やかにその旨をセンター長に届け出るとともに、その利用の結果又は経過を所定の報告書によりセンター長に報告しなければならない。

- 2 前項の規定にかかわらず、センター長が必要と認めた場合は、報告書の提出を求めることができる。

- 3 提出された報告書は、原則として公開とし、センターの広報等の用に供することができるものとする。ただし、利用者があらかじめ申し出たときは、3年を超えない範囲で公開の延期を認めることがある。

(成果の公表)

第9条 利用者は、研究の成果を論文等により公表するときは、当該論文等到大規模計算機システムを利用した旨を明記しなければならない。

(経費負担)

第10条 利用者は、当該利用に係る経費の一部を負担しなければならない。

(負担額)

第11条 前条の利用経費の負担額は、国立大学法人大阪大学諸料金規則に定めるとおりとする。

(経費負担の免除)

第12条 前条の規定にかかわらず、次の各号に掲げる場合については、利用経費の負担を要しない。

- (1) センターの責に帰すべき誤計算があったとき。
- (2) センターが必要とする研究開発等のため、センター長が特に承認したとき。

(経費負担の方法)

第13条 利用経費の負担は、次の各号に掲げる方法によるものとする。

- (1) 学内経費(科学研究費補助金を除く。)の場合にあつては、当該予算の振替による。
- (2) 前号以外の場合にあつては、本学が発する請求書の指定する銀行口座への振込による。

(免責)

第14条 センターは、利用者が大規模計算機システムを利用したことにより被った損害その他の大規模計算機システムに関連して被った損害について、一切の責任及び負担を負わない。

(利用の制限)

第15条 センターは、大規模計算機システムの障害その他やむを得ない事情があるときは、利用者への予告なしに大規模計算機システムを停止することができる。

(利用承認の取消)

第16条 センター長は、この規程又はこの規程に基づく定め違反した者その他大規模計算機システムの運営に重大な支障を生じさせた者がいるときは、利用の承認を取り消し、又は一定期間大規模計算機システムの利用を停止させることがある。

(雑則)

第17条 この規程に定めるもののほか、大規模計算機システムの利用に関し必要な事項は、センター長が定める。

附 則

- 1 この規程は、令和6年10月1日から施行する。
- 2 大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用規程(平成12年3月13日制定)は、廃止する。
- 3 この規程施行前に大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用規程に基づき、令和6年度の利用承認を受けた利用者にあつては、この規程に基づき利用の登録があつたものとみなす。

別表第 1 7

大阪大学D3センター大規模計算機システム利用規程第 1 1 条の規定に基づく負担額

(1) SQUIDの負担額

(A) 占有

基本負担額	占有ノード数
1,150,000 円／年	汎用CPUノード群 1ノード
7,032,000 円／年	GPUノード群 1ノード
4,336,000 円／年	ベクトルノード群 1ノード

(B) 共有

	基本負担額	SQUIDポイント
コース	10万円	1,000 ポイント
	50万円	5,250 ポイント
	100万円	11,000 ポイント
	300万円	34,500 ポイント
	500万円	60,000 ポイント

(C) ストレージ容量追加

基本負担額	提供単位
2,000円／年	HDD 1TB
5,000円／年	SSD 1TB

備考

- 負担額は上記負担額で算出した合計額に、消費税（10%）を加えて得た額とする。
ただし、産業利用 成果非公開型の負担額は、上記負担額で算出した合計額に5を乗じ、消費税（10%）を加えて得た額とする。
- 登録時の利用期限または年度を越えて利用はできない。
- ストレージ容量は1申請単位でHDD 5TBを割り当てる。ただし、他のストレージ容量と合算できない。
- (A) は占有ノード数を追加する場合のみ変更申請を受け付ける。
- (A) の2ノード以上の基本負担額は、1ノードを基準に比例するものとする。
- (A) は資源提供状況により3か月単位の申請を受け付ける場合がある。
その場合の月額負担額は、1ノード年の基本負担額の1/10とする。
- (B) は年度の途中でコースの変更はできない。新たにコースを追加する場合は申請を受け付け
- 計算ノードの利用に使用するSQUIDポイントは、使用したノード時間に対して以下の消費係数、季節係数および燃料係数を乗じたものとする。季節係数は前年の利用状況等を鑑み、0を超える1以下の値を設定する。燃料係数は、直近の電気料金を鑑み、設定する。

ノード群	消費係数			季節係数	燃料係数
	高優先度	通常優先度	シェア		
汎用CPUノード群	0.3746	0.2998	0.2248	大規模計算機システム WEBページに記載	大規模計算機システム WEBページに記載
GPUノード群	2.2934	1.8348	1.3762		
ベクトルノード群	1.4140	1.1312	0.8484		

- (C) は年度の途中は追加申請のみ受け付ける。
- (C) は1つの申請グループにつき、HDD 500TB、SSD 10TBの追加を上限とする。

(2) ONION(オブジェクトストレージ)の負担額

基本負担額	提供単位
12,000 円／年	1TB

備考

- 年度の途中は追加申請のみ受け付ける。
- 負担額は上記負担額で算出した合計額に、消費税（10%）を加えて得た額とする。

大阪大学 D3 センター大規模計算機システム試用制度利用内規

第1条 この内規は、大阪大学D3 センター（以下「センター」という。）が管理運用する全国共同利用のスーパーコンピュータシステム及びワークステーション（以下「大規模計算機システム」という。）の試用制度を利用するための必要な事項を定める。

第2条 試用制度は、初めてセンターの大規模計算機システムを利用する者（以下「利用者」という。）に一定の期間利用させることによって、利用者の研究活動における大規模計算機システムの有用性を確認できるようにすることを目的とする。

第3条 試用制度を利用することができる者は、大阪大学D3 センター大規模計算機システム利用規程第3条に該当する者とする。

第4条 利用者は所定の申請手続きを行い、センター長の承認を得なければならない。

第5条 センター長は、前条の申請について適当と認めた場合は、利用者番号を与えて承認するものとする。

第6条 利用者の有効期間は初めて利用する計算機資源毎に3ヶ月間とする。ただし、当該会計年度を超えることはできないものとする。

2 利用有効期間内は別に定める資源量上限まで計算機資源毎に利用できるものとする。資源量上限を超えた場合は、利用を停止するものとする。

3 利用有効期間を超えた場合は、利用を停止するものとする。

第7条 利用者は、第5条に規定する利用者番号を当該申請に係る目的以外に使用し、又は他人に使用させてはならない。

第8条 センター長は、この内規に違反した場合、もしくは氏名等を偽り利用した場合、その他大規模計算機システムの運営に重大な支障を生ぜしめた場合には、当該利用の承認を取り消すことがある。

附 則

- 1 この内規は、令和6年10月1日から施行する。
- 2 大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム試用制度利用内規（平成12年11月30日制定）は、廃止する。
- 3 この内規施行前に大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム試用制度利用内規に基づき、令和6年度の利用承認を受けた利用者にとっては、この内規に基づき利用の登録があったものとみなす。

・ 附表

大規模計算機システム ホスト一覧

サーバ名	ホスト名
ログインサーバ (SQUID)	squidhpc.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp

※スーパーコンピュータなどの演算システムへは、ログインサーバ経由での接続となります。
(ホスト一覧表には明記していません)

スーパーコンピュータ SQUID のジョブクラス一覧

汎用 CPU ノード群

利用方法	ジョブ クラス	利用可能 経過時間	利用可能 最大 Core 数	利用可能メモリ	同時利用 可能ノード数	備考
共有利用	SQUID	120 時間	38,912 Core (76Core×512 ノード)	124 TB (248GB×512 ノード)	512 ノード	
	SQUID-R	120 時間	38,912 Core (76Core×512 ノード)	124 TB (248GB×512 ノード)	512 ノード	※1
	SQUID-H	120 時間	38,912 Core (76Core×512 ノード)	124 TB (248GB×512 ノード)	512 ノード	※2
	SQUID-S	120 時間	38 Core (76Core×0.5 ノード)	124 GB (248GB×0.5 ノード)	0.5 ノード	※3
	DBG	10 分	152 Core (76Core×2 ノード)	496 GB (248GB×2 ノード)	2 ノード	
	INTC	10 分	152 Core (76Core×2 ノード)	496 GB (248GB×2 ノード)	2 ノード	
占有利用	mySQUID	無制限	76Core×占有ノード数	248GB×占有ノード数	占有ノード数	

※1. クラスタを跨ぐ（相互接続網の帯域が狭い経路の）割当を許容するキュー。実行待ち時間が短縮される場合がある。

※2. 高優先度のため実行待ち時間が短縮されるが、ポイントの消費が大きくなる。

※3. 他のジョブとの1ノード内での資源共有を許容するキュー。ポイント消費が小さくなるが、他のジョブの影響を受ける可能性がある。

GPU ノード群

利用方法	ジョブ クラス	利用可能 経過時間	利用可能 最大 Core 数	利用可能メモリ	同時利用 可能ノード数	備考
共有利用	SQUID	120 時間	2,432 Core (76Core×32 ノード)	15.75 TB (504GB×32 ノード)	32 ノード	
	SQUID-H	120 時間	2,432 Core (76Core×32 ノード)	15.75 TB (504GB×32 ノード)	32 ノード	※1
	SQUID-S	120 時間	38 Core (76Core×0.5 ノード)	252 GB (504GB×0.5 ノード)	0.5 ノード	※2
	DBG	10 分	152 Core (76Core×2 ノード)	1,008 GB (504GB×2 ノード)	2 ノード	
	INTG	10 分	152 Core (76Core×2 ノード)	1,008 GB (504GB×2 ノード)	2 ノード	
占有利用	mySQUID	無制限	76Core×占有ノード数	504GB×占有ノード数	占有ノード数	

※1. 高優先度のため実行待ち時間が短縮されるが、ポイントの消費が大きくなる。

※2. 他のジョブとの1ノード内での資源共有を許容するキュー。ポイント消費が小さくなるが、他のジョブの影響を受ける可能性がある。

ベクトルノード群

利用方法	ジョブ クラス	利用可能 経過時間	利用可能 最大 Core 数	利用可能メモリ	同時利用 可能 VE 数	備考
共有利用	SQUID	120 時間	2,560 Core (10Core×256VE)	12 TB (48GB×256VE)	256VE	
	SQUID-H	120 時間	2,560 Core (10Core×256VE)	12 TB (48GB×256VE)	256VE	※1
	SQUID-S	120 時間	40 Core (10Core×4VE)	192 GB (48GB×4VE)	4VE	※2
	DBG	10 分	40 Core (10Core×4VE)	192 GB (48GB×4VE)	4VE	
	INTV	10 分	40 Core (10Core×4VE)	192 GB (48GB×4VE)	4VE	
占有利用	mySQUID	無制限	10Core×占有 VE 数	48GB×占有 VE 数	占有 VE 数	

※1. 高優先度のため実行待ち時間が短縮されるが、ポイントの消費が大きくなる。

※2. 他のジョブとの1ノード内での資源共有を許容するキュー。ポイント消費が小さくなるが、他のジョブの影響を受ける可能性がある。

2024 年度大規模計算機システム稼働状況

稼働状況

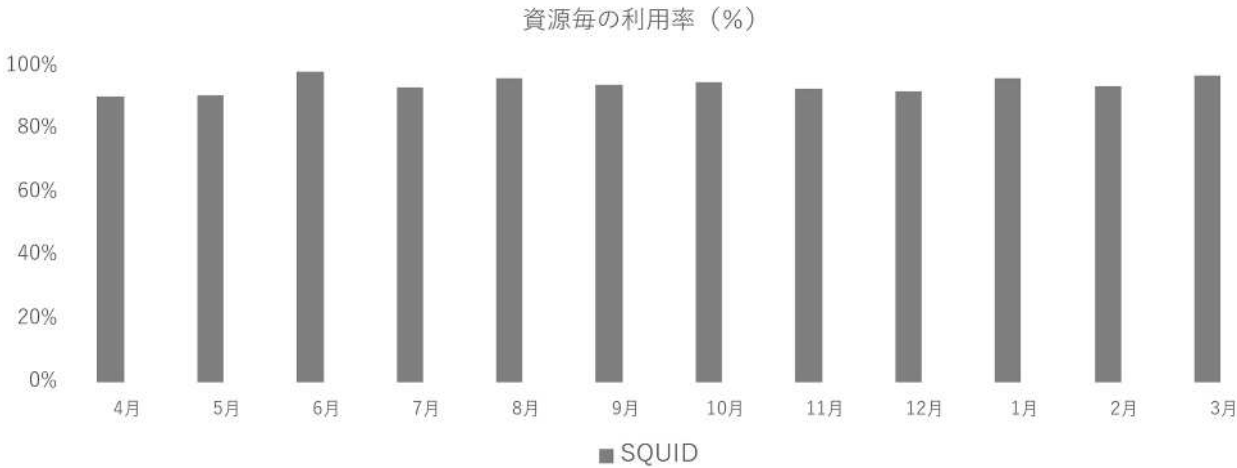
(単位:時間)

事 項		4	5	6	7	8	9	10	11	12	1	2	3	合計	月平均
稼働時間 (A)	計算サービス時間 (A1)	539:00	744:00	720:00	744:00	744:00	720:00	744:00	720:00	744:00	672:00	696:00	737:00	8524:00	710:20
	初期化・後処理時間 (A2)	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00
	業 務 時 間 (A3)	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00
	小 計	539:00	744:00	720:00	744:00	744:00	720:00	744:00	720:00	744:00	672:00	696:00	737:00	8524:00	710:20
保 守 時 間 (B)		181:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	72:00	0:00	7:00	260:00	21:40
故 障 時 間 (C)		0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00
その他の時間 (D)		0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00
運転時間 (A+B+C+D)		720:00	744:00	720:00	744:00	744:00	720:00	744:00	720:00	744:00	744:00	696:00	744:00	8784:00	732:00
稼働率 (A/(A+B+C+D)%)		74.86	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	90.32	100.00	99.06	— — —	97.02
運 転 日 数 (E)		30	31	30	31	31	30	31	30	31	31	28	31	365	30
一日平均稼働時間 (A/E)		17:58	24:00	24:00	24:00	24:00	24:00	24:00	24:00	24:00	21:40	24:51	23:46	— — —	23:21

処理状況

処理月	SQUID			
	共有利用		占有利用	利用率(%)
	ジョブ件数	CPU時間(時)	CPU時間(時)	
4月	72,974	358,734	1,613	90.0%
5月	73,988	668,024	1,820	90.5%
6月	79,495	945,632	1,440	98.0%
7月	180,924	879,375	1,492	92.9%
8月	122,403	878,809	744	95.8%
9月	42,484	736,593	720	94.0%
10月	69,042	966,037	744	94.9%
11月	247,548	949,661	759	92.8%
12月	225,951	1,028,825	2,232	92.0%
1月	161,118	986,393	2,016	96.2%
2月	143,612	966,465	2,016	93.6%
3月	94,791	1,084,134	1,474	96.7%
合計	1,514,330	10,448,682	17,070	

(注) 利用率は、次の計算式により算出している。
利用率 = (ノード時間積／稼働中ノードの合計サービス時間) * 100



募 集

大規模計算機システムを利用して行った研究・開発等の記事の募集について

（ センターでは、大規模計算機システムを利用して研究したことを主体とする内容の広報誌「サイバーメディア HPC ジャーナル」を発行しています。この広報誌に掲載する次の内容の記事を募集しますので、皆様のご投稿をお待ちしています。 ）

1. 随筆
2. 大規模計算機システムを利用して行った研究・開発の紹介
3. プログラムの実例と解説
4. その他、広報誌に掲載するにふさわしいもの

【原稿の執筆および提出方法】

1. 原稿の執筆は、以下の書式設定で作成をお願いします。
 - ・ ページ設定（Microsoft Word2010 の設定です。）
 - ・ 用紙サイズ A4 縦
 - ・ 1 ページの文字数と行数：行数 40、行送り 18.2 pt、1 頁 2 段書き
 - ・ フォント 本文 MS 明朝 10 pt
題名 MS ゴシック 14 pt、半角英数 Times New Roman
執筆者氏名 MS 明朝 10 pt、なお、姓と名の間及び機関と研究科と専攻名の間は半角スペースを入れる。
 - ・ 余白 上 20mm、下 20mm、左右 20mm、印刷形式：標準
 - ・ その他 セクションの開始位置：次のページから開始
用紙の端からの距離：ヘッダ 15mm、フッタ 17.5mm
垂直方向の配置：上寄せ
 - ・ 文字等の設定
 - ・ 年は西暦で記述する。
 - ・ 数字、英字は半角（書式：Times New Roman）、数字英字を括弧で閉じる場合は、括弧も同様に半角
 - ・ 文字、漢字は全角、文字漢字を括弧で閉じる場合は、括弧も同様に全角
 - ・ 日本語文中の句読点は半角の「,」「.」を使用せず、全て全角の「,」「。」とする。
2. Microsoft Word 以外の日本語ワープロソフト及び、その他の文書作成ソフトで作成された原稿を投稿される場合は、PDF ファイルに変換してください。
3. 原稿は、電子メールにて以下のアドレスにお送りください。
zyosui-kikaku-soumu@office.osaka-u.ac.jp
なお、送信の際、件名を「HPC ジャーナル原稿」と入力くださるよう、お願いします。
4. 電子メールの容量が 35MB を超える場合は、CD-R 等の電子媒体に記録のうえ、以下の送付先にお送りください。

【原稿の送付先】

〒567-0047

大阪府茨木市美穂ヶ丘5-1 大阪大学情報推進部情報企画課総務係

【注意事項】

1. お送りいただいた原稿を掲載する際、原稿の修正をお願いすることがありますのでご了承ください。
2. 提出いただいた原稿は、D3 センターのホームページにて公開いたしますので、ご了承ください。

大規模計算機システム利用案内（サービス内容・サービス時間等）

・ サービス内容

主なサービス内容	係・連絡先等	開館時間	
		月～金	土・日・祝休日
センター見学の申込、広報	情報推進部情報企画課 総務係（本館1F） 電話 06-6879-8804 zyosui-kikaku-soumu@office.osaka-u.ac.jp	8:30～12:00	閉
利用負担金に係る会計事務 （請求及び収納）	情報推進部情報企画課 会計係（本館1F） 電話 06-6879-8980,8981 zyosui-kikaku-kaikei@office.osaka-u.ac.jp		
利用案内、受付 利用案内、利用申請、利用負担金、 利用講習会受付、 計算機マニュアルの閲覧	情報推進部情報基盤課 研究系システム班（本館1F） 電話 06-6879-8808,8813 system@cmc.osaka-u.ac.jp	13:00～17:15	館
利用方法の問い合わせ スーパーコンピュータの利用方法	情報推進部情報基盤課 研究系システム班（本館1F） 電話 06-6879-8812,8813 system@cmc.osaka-u.ac.jp		

・ サービス時間

スーパーコンピュータ	オンラインサービス 24時間365日（注）
------------	-----------------------

（注）障害の発生等により、予告なしにサービスを中止することがあります。
計画停電・定期保守によりサービスを停止する場合は、ホームページでお知らせします。

・ 大規模計算機システムURL

大規模計算機システムホームページ	https://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/
大規模計算機システムポータル （スーパーコンピュータ等についての情報を 提供しています。マニュアルの閲覧、稼働 状況の表示、利用実績の確認等が行えます）	SQUID https://squidportal.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/portal/

・ 利用相談

プログラム、センターの利用に関する 質問・相談	利用相談を電子メールで受け付けます。 E-mail: system@cmc.osaka-u.ac.jp に質問・相談をお寄せください。 ※お問い合わせの際には、利用者番号をお申し出ください。
----------------------------	--

大阪大学サイバーメディア HPC ジャーナル No. 15
2025 年 8 月発行

編集 : 大阪大学 D3 センター

発行 : 大阪府茨木市美穂ヶ丘 5-1 (〒567-0047)
大阪大学 D3 センター
D3 Center, The University of Osaka
Tel: 06-6879-8804
URL: <https://www.d3c.osaka-u.ac.jp/>



D3 CENTER
DIGITAL DESIGN, DATABILITY,
AND DECISION INTELLIGENCE