ISSN-2760-2710

August 2026

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.16

大阪大学 THE UNIVERSITY OF OSAKA

D3 CENTER DIGITAL DESIGN, DATABILITY, AND DECISION INTELLIGENCE

目　次

特集：　オープンサイエンスを促進する計算・ストレージプラットフォーム　1
OCTOPUS: Osaka university Compute & sTOrage Platform Urging open Science
高橋 慧智　大阪大学 D3センター

大規模計算機システム利用者研究報告　12

サイバーフィジカル植物工場システムの開発　13
栗本 育三郎　木更津工業高等専門学校

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　17
：燃焼振動発生機構の解明と噴射条件の特定
寺島 洋史　北海道大学 大学院工学研究院

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　21
村上 匡且　大阪大学 レーザー科学研究所

Proton acceleration by collisionless shocks in black-hole coronae: first-principles　25
constraints for high-energy neutrino sources
Takayoshi Sano[1]、Minh Nhat Ly[1,2]
[1]Institute of Laser Engineering, The University of Osaka
[2]Department of Physics, Graduate School of Science, The University of Osaka

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　29
杉本 馨　京都大学 基礎物理学研究所

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　33
大西 正人　統計数理研究所 先端データサイエンス研究系

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　37
高木 悠司　大阪大学 レーザー科学研究所

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　40
桑原 卓哉　大阪公立大学 大学院工学研究科

Contribution of subthreshold energy ions' neutralization on defect formation in monolayer graphene　44
P. Vinchon[1]、L. Spiske[1]、Y. Miyamoto[2]、S. Hamaguchi[1]
[1]R³ (R-cubed) Institute of Newly-Emerging Science Design (INSD), The University of Osaka
[2]National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)

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　48
原 惇也　大阪大学 大学院工学研究科

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　52
長沼 大樹　モントリオール大学 コンピュータ科学専攻

機械学習力場MDによる原子層プロセス表面反応解析 56
浜口 智志、幾世 和将、Jomar U. Tercero、礒部 倫郎、Nicolas Mauchamp Lucas Spiske
大阪大学 エマージングサイエンスデザインR³センター

大規模原子シミュレーションによる炭素鋼の水素脆化メカニズム解析に 60
向けた機械学習ポテンシャルの開発
新里 秀平 大阪大学 大学院基礎工学研究科

Integrating Multi-scale Simulations and Inverse Design for Heterogenous Catalysis Materials 64
at Operating Conditions by Machine Learning Interatomic Potentials
Harry H. Halim 大阪大学 大学院工学研究科

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 68
水上 渉 大阪大学 量子情報・量子生命研究センター

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 72
横山 尋斗 東京大学 大学院工学系研究科電気系工学専攻

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 76
水谷 耕介 大阪大学 大学院理学研究科

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 80
栗原 諒 大阪大学 大学院基礎工学研究科

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 84
立木 健嗣、山中 敬太
大阪大学 大学院工学研究科 電気電子情報通信工学専攻

格子QCDを用いたハドロン内部のダイクォークの探索 88
西岡 蒼矢 大阪大学 大学院理学研究科

Deep Neural Network Potential for Modeling Formic Acid Dissociation in Aqueous Solution 92
Rizka Nur Fadilla、Yoshitada Morikawa
大阪大学 大学院工学研究科

Enhancing Phosphorescence in Platinum(II) Complexes through Intramolecular CH-N Interactions 96
Shufang Huang 大阪大学 大学院基礎工学研究科

Theoretical elucidation and design of local atomic structures 99
and their colossal permittivity properties of doped TiO_2
Dinh Ngoc Dung Department of Precision Engineering, The University of Osaka

Quantum Monte Carlo Study of the Electronic Structure and Spectroscopy of the Al_{13} Superatom 103
Meliton Chiong III[1]、Atsushi Nakajima[2]、Yoshitada Morikawa[1]
[1]Graduate School of Engineering, The University of Osaka
[2]Faculty of Science and Technology, Keio University

グラフ構造を活用した解釈可能な脳波モデルの開発 106
小峠 陸登 大阪大学 大学院情報科学研究科

Diquarks study from lattice QCD using the extended HALQCD method 110
Kai-Wen Kelvin-Lee、Noriyoshi Ishii
大阪大学 核物理研究センター

弾性波速度付近の高速滑り速度での摩擦則 114
岩下 航 産業技術総合研究所 製造基盤技術研究部門

Trans -ビス(イミノアゾレート)白金 (II) 錯体の励起状態の分子構造とりん光性特性制御 118
川守田 創一郎 大阪大学 大学院基礎工学研究科

計算化学アプローチによるマイナーアクチノイド分離抽出剤のミドルアップダウン型分子設計 122
金子 政志 大阪大学 大学院理学研究科

高エネルギー原子核衝突反応の大統計シミュレーションを用いた原子核形状の研究 126
坂井 あづみ[1]、村瀬 功一[2]
[1]長崎総合科学大学 総合情報学部、[2]大阪大学 大学院理学研究科

局所非調和振動計算によるロドプシンのアミドバンド予測 130
松山 奈央 筑波大学 大学院理工情報生命学術院 数理物質科学研究群

分子動力学法による塑性仕事の熱変換効率の予測の境界条件依存性 134
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

A priori Test of Data-Driven Subgrid-Scale Model with Few-shot 138
Learning for Large-Eddy Simulation of Turbulent Channel Flow
Bahrul Jalaali、Kie Okabayashi
Department of Mechanical Engineering, Graduate School of Engineering,
The University of Osaka

ホウ素中性子捕捉療法における深部がん照射計画の開発•最適化 142
守實 友梨 大阪大学 大学院工学研究科環境エネルギー工学専攻

半導体光学冷却に向けたホストゲスト構造のハロゲン化ペロブスカイト結晶の冷却能力評価 145
田中 大地 大阪大学 大学院工学研究科

First-principles finite-temperature study of polyethylene 149
using stochastic self consistent harmonic approximation
Samuel Eka Putra Payong Masan、Yoshitada Morikawa
Department of Precision Engineering, Graduate School of Engineering,
The University of Osaka

センター報告 153
・2025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 154
・SC25出展報告 172

・第31回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2025)報告および 180
第32回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2026)告知
・大規模計算機システム利用者講習会等の紹介 182
・2026年度大規模計算機システム利用講習会 185
・2025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 186
・2026年度「HPCI利用」の活動状況 194
・2026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 196
・2025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 198
・2026年度大規模計算機システム公募型利用制度の活動状況 199
・大規模計算機システムQ&A 201

利用規程等 203
・規程関係 204
大阪大学D3センター大規模計算機システム利用規程 204
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 206
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 208

・附表 209
大規模計算機システム　ホスト一覧 209
スーパーコンピュータSQUIDのジョブクラス一覧 209
スーパーコンピュータOCTOPUSのジョブクラス一覧 211
2025年度大規模計算機システム稼働状況 212

募　　集 213
・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 214
・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） 215

― オープンサイエンスを促進する
計算・ストレージプラットフォーム ―

OCTOPUS: Osaka university Compute & sTOrage Platform Urging open Science

特　集

オープンサイエンスを促進する計算・ストレージプラットフォーム OCTOPUS: Osaka university Compute & sTOrage Platform Urging open Science

高橋 慧智
大阪大学 D3 センター 先進高性能計算基盤システム研究部門

1. はじめに

本センター [1]では、2024 年度末に運用を終了したペタフロップス級ハイブリッド型スーパーコンピュータ OCTOPUS [2]の後継機として、新たな計算基盤の導入を進めてきた。本稿では、2025 年 9 月に試験運用を開始し、同年 12 月より本格運用を開始した新 OCTOPUS について、その導入の背景・経緯、システムの概要や特徴的な機能、そして利用方法を紹介する。

本センターでは、2021 年 5 月より運用している高性能計算・データ分析基盤システム SQUID [3]を中核に計算資源を提供してきた。一方、2017 年 12 月より運用していた旧 OCTOPUS は 2024 年 3 月末をもってサービス終了し、その後は本センターの計算資源が SQUID のみとなる状況が続いていた。SQUID は運用開始直後から高い利用率を維持し、繁忙期となる年度末には長い待ち時間が常態化していた。利用者の皆様からも、SQUID の待ち時間緩和や計算資源の拡充を望む声を多くいただいていた。

こうした状況を受け、本センターは旧 OCTOPUS の後継として新たな計算基盤の構築を計画した。新 OCTOPUS では、運用開始時点で最新である Granite Rapids 世代の Intel 製プロセッサを採用し、限られた予算の中で最大限の計算性能を引き出すとともに、SQUID とのジョブの分散による繁忙期の混雑緩和、さらには計算来歴の追跡・管理機能の提供によるオープンサイエンスの推進という 3 つのコンセプトに基づき設計した。

本稿ではまず OCTOPUS 導入の背景および本センターを取り巻く状況を述べ、続いて調達方針、システムの概要、特徴的な機能、利用方法を順に紹介する。

2. OCTOPUS 導入の背景・経緯

2.1 D3 センターの高性能計算環境

本センターでは、2026 年 6 月現在、3 種類の計算基盤を運用している。1 つ目は、2021 年 5 月より運用している高性能計算・データ分析基盤システム SQUID である。SQUID は汎用 CPU ノード群、GPU ノード群、ベクトルノード群からなるハイブリッド型スーパーコンピュータであり、総理論演算性能は 16.591 PFLOP/s に達する。2 つ目が本稿で紹介する計算・ストレージ基盤 OCTOPUS である。3 つ目は 2024 年 11 月より運用しているクラウド基盤 mdxII である。さらに、SQUID と同時に 2021 年 5 月より運用しているデータ集約基盤 ONION [4]を介して、これら計算基盤と学内外の研究データを連携させる仕組みを提供している。

各計算基盤は、利用者の計算ニーズや研究スタイルに応じて使い分けることを想定している。SQUID は大規模並列計算や機械学習のための中核的な計算基盤、OCTOPUS は汎用 CPU 計算向けの計算基盤、mdxII は仮想計算機環境を必要とする研究や常時稼働を要するサービスの提供基盤として、それぞれ役割分担している。

2.2 旧 OCTOPUS の歩みとその後継機への期待

旧 OCTOPUS は 2017 年 12 月より運用を開始したペタフロップス級ハイブリッド型スーパーコンピュータである。汎用 CPU ノード群、GPU ノード群、Xeon Phi ノード群、大容量主記憶搭載ノード群の 4 種類からなる構成は当時として先駆的なものであり、多様な研究分野の計算ニーズに応える基盤として広く活用された。

しかし、旧 OCTOPUS は 2024 年 3 月末をもって契約満了を迎えサービス終了となった。旧 OCTOPUS のサービス終了後、本センターの汎用

CPU 型スーパーコンピュータは SQUID の汎用 CPU ノード群のみとなった。SQUID は旧 OCTOPUS と比べて大きな演算性能を持つものの、汎用 CPU に対する計算需要は本学全体で年々増加傾向にあり、特に年度末の繁忙期には待ち時間の長期化が顕著であった。この状況を踏まえ、汎用 CPU 型計算資源の強化が不可欠だと判断し、新 OCTOPUS の調達準備を進めてきた。

2.3 新 OCTOPUS のコンセプト

新 OCTOPUS の設計にあたり、次の 3 つのコンセプトを掲げた。

1 つ目は「最新プロセッサの早期提供」である。新 OCTOPUS では、2024 年 9 月に発表された Intel 社の最新世代プロセッサ Intel Xeon 6（コードネーム Granite Rapids）を全国の大学計算基盤センターに先駆けて導入し、運用開始時点での高い汎用 CPU 演算性能の提供を目指した。

2 つ目は「繁忙期の混雑緩和」である。新 OCTOPUS の計算資源を SQUID の汎用 CPU 資源と相補的に利用できるよう設計し、特に年度末などの繁忙期に利用者のジョブを SQUID と OCTOPUS へ分散させ、ジョブ待ち時間の短縮を図る。

3 つ目は「オープンサイエンスの支援」である。近年、研究データの再現性確保や研究成果の透明性向上、研究データの再利用促進といったオープンサイエンスへの取り組みが学術界で広がっている。新 OCTOPUS では、計算結果がどのようなデータとプログラムを用いて生成されたかを追跡・管理する計算来歴管理機能を提供し、本学のオープンサイエンス推進に貢献する。

これら 3 つのコンセプトは、次節以降で述べる調達方針およびシステム設計の指針となった。

3. 新 OCTOPUS の調達と方針

3.1 調達経緯

新 OCTOPUS の調達準備は、旧 OCTOPUS のサービス終了が決定した 2023 年度後半より本格的に開始した。本センターでは、2.3 節で述べた 3 つのコンセプトを実現するための要素技術調査、想定構成の検討、各社からの情報収集を継続的に進めてきた。

新 OCTOPUS は汎用 CPU ノード群を中心とした構成を採用した。これは、2.2 節で述べた汎用 CPU 需要の増大と繁忙期の待ち時間長期化に加え、GPU やベクトルプロセッサは SQUID が既に提供していることを踏まえた判断である。一方、汎用 CPU ノードに搭載するプロセッサについては、コンセプトに掲げた「最新プロセッサの早期提供」を実現するため、運用開始時期に発表される最新世代のプロセッサを採用できるよう、仕様書の表現や評価指標の設計を慎重に決定した。

計算ノード以外の構成要素についても、本センターが既に運用している SQUID や ONION との親和性を考慮しながら、利用者の利便性が高くなるよう、フロントエンドノードの構成、ストレージシステム、ネットワーク構成について検討を重ねた。

新 OCTOPUS は「全国共同利用スーパーコンピューティングシステム」を調達名称とし、一般競争入札方式で調達した。まず、市場調査と仕様検討のため、2021 年 8 月、2022 年 2 月、2023 年 12 月の 3 回にわたって資料提供招請を実施し、各社から資料の提出を受けた。これらを精査した上で仕様書案を作成し、2024 年 5 月 1 日に意見招請を公示、5 月 9 日にオンラインで仕様書案説明会を開催し、6 月 28 日を締切として各ベンダ企業からの意見を招請した。寄せられた意見を踏まえて最終仕様書を確定させたのち、2024 年 10 月 7 日に入札官報公告を実施し、同年 10 月 15 日にオンラインで入札説明会を実施した。入札期限は 2024 年 12 月 3 日に設定し、技術審査委員会による審査を経て、2025 年 1 月 31 日に開札となった。その結果、日本電気株式会社が落札し、借入期間を 2025 年 9 月 1 日から 2031 年 8 月 31 日とする契約が締結された。以後、新 OCTOPUS の構築に向けて、本センターと日本電気株式会社、ならびに各機器ベンダとの緊密な連携のもとで設計・構築作業を進めた。

3.2 設計方針

新 OCTOPUS の設計にあたっては、2.3 節で述べた 3 つのコンセプトを実現するため、次の方針を採用した。

「最新プロセッサの早期提供」については、運用

開始時点で発表されたばかりの Intel Xeon 6 プロセッサ（Granite Rapids）の最上位モデルを採用し、1 ノードあたり 128 コア×2 基（合計 256 コア）の高密度な構成とした。この構成により、1 ノードあたり 16.384 TFLOP/s の高い理論演算性能を達成している。

「繁忙期の混雑緩和」については、OCTOPUS と SQUID のスケジューラに同一の NQSV を採用し、ジョブスクリプトの記述方法を可能な限り共通化することで、利用者が両システムいずれにもジョブを投入しやすい環境を整えた。また、OCTOPUS のフロントエンドから SQUID のファイルシステムを、SQUID のフロントエンドから OCTOPUS のファイルシステムをそれぞれマウントしており、両システム間のファイルの受け渡しが容易に行えるようにした。

「オープンサイエンスの支援」については、本センターの高性能計算・データ分析融合基盤協働研究所で研究開発を進めている計算来歴管理基盤 SCUP-HPC [5]を OCTOPUS 上で提供した。SCUP-HPC を用いれば、OCTOPUS 上で生成された計算結果が、どのような入力データとプログラムからどのように生成されたかを追跡・管理できる。

さらに、これら 3 つのコンセプトに加えて、組合せ最適化問題を高速に解く NEC Vector Annealing [6]、繁忙期にジョブの一部をパブリッククラウドへオフロードするクラウド連動機能、グループ単位で占有可能な仮想フロントエンドサーバ機能も併せて提供し、利用者の多様な計算ニーズに応える基盤とした。

4. 新 OCTOPUS の概要

4.1 全体構成

新 OCTOPUS の全体構成を図 1 に示す。OCTOPUS は、汎用 CPU 計算ノード群（NEC LX201 Ein-1、140 ノード）、ファイルサーバ（DDN ES400NVX2）、フロントエンドサーバ群（HPC 用フロントエンドノード 2 台、占有型フロントエンドノード 1 台）、ならびに管理サーバ群などから構成される。計算ノードとファイルサーバ間は InfiniBand NDR による相互結合網で接続し、フロントエンドネットワーク（Ethernet）を介して学内ネットワークと接続している。

図 1：新 OCTOPUS の全体構成

OCTOPUS の総コア数は 35,840、総理論演算性能は 2.293 PFLOP/s に達する。表 1 に OCTOPUS の構成概要を示す。また、図 2 に本センターの IT コア棟に設置された OCTOPUS の外観を、図 3 に OCTOPUS 設置エリアの入り口を示す。OCTOPUS のラックには、蛸と桜のラックペイントを施している。このデザインは、OCTOPUS の導入・運用開始を記念して一般公募したラックデザインコンテストの最優秀賞作品を採用したものである。

表 1：新 OCTOPUS の構成概要

項　　目	内　　容
汎用 CPU 計算ノード	NEC LX201 Ein-1 140 ノード（総コア数 35,840、総理論性能 2.293 PFLOP/s）
相互結合網	InfiniBand NDR（200 Gbps）
フロントエンドサーバ	HPC 用フロントエンドノード 2 台、占有型フロントエンドノード 1 台
ストレージ	DDN ES400NVX2（並列ファイルシステム Lustre、有効容量 3.58 PB、実効スループット 40 GB/s）
ジョブスケジューラ	NEC NQSV
OS	Red Hat Enterprise Linux Rocky Linux

図 2：OCTOPUS の外観（ラックペイント）

図 3：OCTOPUS 設置エリアの入り口

4.2　汎用 CPU 計算ノード

OCTOPUS の汎用 CPU 計算ノードは、NEC LX201 Ein-1 という型番のサーバである。1 ノードに、Intel Xeon 6980P プロセッサを 2 基、768 GiB の主記憶（32 GiB DDR5-6400 DIMM 24 枚）、InfiniBand NDR200 HCA を 1 基、Gigabit Ethernet インタフェース 1 基を搭載している。表 2 に NEC LX201 Ein-1 の構成を示す。

表 2：NEC LX201 Ein-1 の構成

項　　目	仕　　様
プロセッサ	Intel Xeon 6980P（Granite Rapids、2.0 GHz、128 コア）2 基
理論演算性能	16.384 TFLOP/s （= 8.192 TFLOP/s × 2CPU）
メモリ構成	768 GiB （32 GiB DDR5-6400 DIMM 24 枚）
メモリ帯域幅	1,228.8 GB/s （= 614.4 GB/s × 2CPU）
ネットワーク	InfiniBand NDR200 Gigabit Ethernet
冷却方式	水冷 （CPU コールドプレート方式）

Intel Xeon 6980P は、Intel 社が 2024 年 9 月に発表した Intel Xeon 6 プロセッサシリーズの最上位モデルである。コードネーム Granite Rapids として知られるこのプロセッサは、Intel 3 プロセスで製造され、Redwood Cove マイクロアーキテクチャに基づくコアを 128 コア搭載する。各コアは 2.0 GHz で動作し、AVX-512 命令セット（512 ビット幅の SIMD 命令）や AMX 命令セット（行列積演算命令）に対応する。1CPU あたりの理論演算性能（倍精度）は 8.192 TFLOP/s、1 ノードあたりでは 16.384 TFLOP/s である。

Intel Xeon 6980P は、SQUID が採用する Intel Xeon Platinum 8368（Ice Lake-SP 世代、38 コア）に対して、コア数で約 3.4 倍、1CPU あたりの理論演算性能で約 2.8 倍と、複数世代を経ているため大幅な性能向上を達成している。一方、1CPU あたりの消費電力も 270 W から 500 W へと約 1.8 倍に増加しているため、本ノードでは SQUID と同様に液冷方式を採用し、安定した性能を引き出す。計算ノードラックの背面を図 4 に示す。

メモリは 1 ノードあたり 768 GiB を搭載し、SQUID の汎用 CPU ノード（256 GiB）の 3 倍の容量にあたる。メモリ世代も DDR4-3200 から DDR5-6400 へ進み、1CPU あたりのメモリ帯域幅は 614 GB/s で SQUID の汎用 CPU ノード（204 GB/s）の約 3.0 倍にあたる。

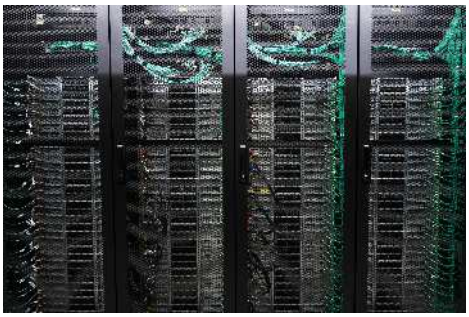


図 4：計算ノードラック背面

4.3　ファイルシステム

OCTOPUS のファイルシステムは、DDN 社製 DDN ES400NVX2 ストレージアプライアンスを中心に構成する並列ファイルシステム（Lustre）である。ストレージサーバ 1 台、エンクロージャ 4 台、NFS サーバ 2 台、メタデータバックアップサーバ 1 台、モニタリングサーバ 1 台で構成する。図 5 に DDN 製ストレージアプライアンスの外観を示す。

並列ファイルシステムの有効容量は 3.58 PB、実効スループットは 40 GB/s 以上で、SQUID の並列ファイルシステム（有効容量 21.20 PB、最大想定実効スループット 160 GB/s 以上）と比べれば容量・帯域幅は小さいが、OCTOPUS のノード規模に見合った構成である。なお、OCTOPUS のフロントエンドからは SQUID のファイルシステムを /sqfs としてマウ

ントしており、両システム間で容易にファイルを共有できる。

図 5：DDN 製ストレージアプライアンス

4.4　相互結合網

OCTOPUS の相互結合網は、最新世代の InfiniBand NDR を採用している。計算ノードは、各ノードあたり 1 本の InfiniBand NDR200（200 Gbps）リンクで接続する。InfiniBand NDR は、PCI Express Gen5 に対応した HCA とスイッチによって構成し、ノード間通信において広帯域幅と低遅延を実現する。これにより、MPI 等を用いた大規模並列計算を可能にしている。

4.5　フロントエンドノード

OCTOPUS のフロントエンドノードは、HPC 用フロントエンドノード 2 台、占有型フロントエンド用ノード 1 台で構成する。HPC 用フロントエンドノードは、利用者が日常的にログインし、プログラムの開発・コンパイル、ジョブの投入・確認などに用いるノードである。各フロントエンドノードは、計算ノードと同じ Intel Xeon 6980P プロセッサを 2 基、768 GiB の主記憶、NVIDIA L4 GPU を 1 基搭載しており、利用者は計算ノードと同じ CPU 環境でプログラムを開発できる。NVIDIA L4 GPU は、リモート可視化等に活用できる。

占有型フロントエンドノードは、特定の利用者グループが占有して使える仮想フロントエンドサーバを提供するためのノードである。プロセッサは Intel Xeon 6980P を 2 基、メモリは 1,152 GiB を搭載する。占有型フロントエンドの利用方法は 5.3 節で詳述する。

4.6　性能

OCTOPUS の性能を、旧 OCTOPUS および SQUID との諸元比較と、実アプリケーションによるベンチマークの 2 つの観点から示す。

表 3 に、旧 OCTOPUS、SQUID、OCTOPUS それぞれの汎用 CPU ノードの性能諸元を示す。新 OCTOPUS の Intel Xeon 6980P は、SQUID の Intel Xeon Platinum 8368 と比べて、コア数で約 3.4 倍、1CPU あたりの理論演算性能で約 2.8 倍、メモリ帯域幅で約 3.0 倍、メモリ容量で約 3.0 倍、LLC 容量で約 8.8 倍と、世代間で大幅な性能向上を達成している。

表 3：旧 OCTOPUS・SQUID・新 OCTOPUS の諸元比較

項　目	旧 OCTOPUS	SQUID	新 OCTOPUS
搭載 CPU	Intel Xeon Gold 6126 2 基	Intel Xeon Platinum 8368 2 基	Intel Xeon 6980P 2 基
コア数 /CPU	12 コア	38 コア	128 コア
演算性能 /CPU	0.998 TFLOP/s	2.918 TFLOP/s	8.192 TFLOP/s
メモリ帯域幅/CPU	127 GB/s	204 GB/s	614 GB/s
メモリ容量	192 GB	256 GB	768 GB
LLC 容量 /CPU	19 MB	57 MB	504 MB
電力/CPU	125 W	270 W	500 W

次に、実アプリケーションでの性能比較を示す。図 6 は、Intel Xeon Platinum 8380（SQUID の CPU と同世代）と Intel Xeon 6980P（新 OCTOPUS の CPU）の各種 HPC アプリケーション（WRF 4.2.2、RELION 4.0.1、LAMMPS、GROMACS 2024、HPCG 2.1、NAS Parallel Benchmarks SP/IS/MG、OpenFOAM 10）での性能比較である。Phoronix 社による性能評価結果 [7] をもとに作成した。アプリケーションによる差はあるものの、概ね 2.6〜5.1 倍の性能向上が見られる。

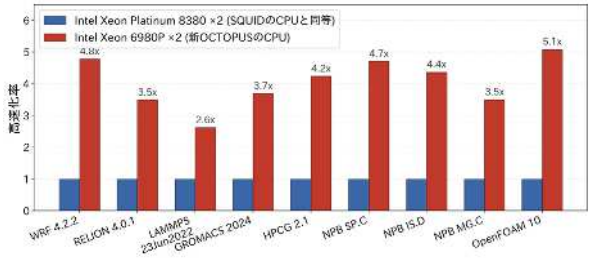


図 6：Intel Xeon 8380 と Intel Xeon 6980P のアプリケーション性能比較（Phoronix 社の評価結果 [7]より）

また、SPEChpc 2021 ベンチマーク [8]の tiny サイズを用いて、本センターで SQUID と OCTOPUS の実測値も比較した。図 7 にその結果を示す。縦軸は SQUID を 1.0 とした相対性能、横軸は各ベンチマークアプリケーションである。SQUID は 2 MPI × 38 OpenMP スレッドの構成、OCTOPUS は 2 MPI × 128 OpenMP スレッドの構成および 256 MPI の構成での結果を示す。OCTOPUS は、SQUID に対しておよそ 1.7〜8.3 倍の性能向上を達成している。

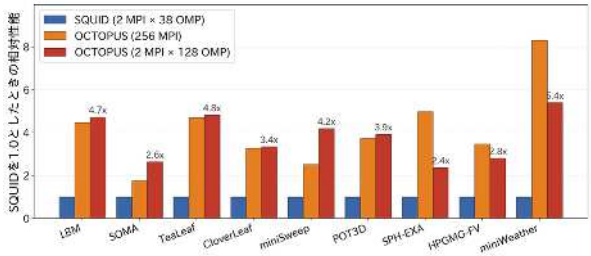


図 7：SPEChpc 2021 ベンチマーク（tiny サイズ）による SQUID と OCTOPUS の実測性能比較（縦軸は SQUID を 1.0 としたときの相対性能）

以上の結果から、新 OCTOPUS は旧 OCTOPUS や現行 SQUID の汎用 CPU ノードと比べて、スペック上のみならず、実アプリケーション性能で大幅な向上を達成していることがわかる。

5. 新 OCTOPUS の特徴的な機能

本節では、新 OCTOPUS に搭載した特徴的な機能を、計算来歴の追跡・管理機能（SCUP-HPC）、擬似量子アニーリング（NEC Vector Annealing）、占有型フロントエンドノード、クラウド連動機能、そして提供ソフトウェアの順に紹介する。

5.1 計算来歴の追跡・管理機能（SCUP-HPC）

近年、研究データの再現性確保や研究成果の透明性向上は、学術界全体で関心の高いテーマとなっている。一方、スーパーコンピュータ上で行われる大規模な数値計算では、計算結果がどのような入力データとプログラムを用いて、いかなる手順で生成されたかという「計算来歴」の記録は、依然として利用者個人の努力に委ねられている。

本センターでは、2.3 節で述べたコンセプトの一つ「オープンサイエンスの支援」を実現するため、計算来歴管理基盤 SCUP-HPC（System for Constructing and Utilizing Provenance on High-Performance Computing Systems） [5]の研究開発を進めてきた。SCUP-HPC は、本センターと NEC が 2021 年に設立した高性能計算・データ分析融合基盤協働研究所で開発された技術であり、OCTOPUS 上で得られた計算結果が、どのようなデータとプログラムを用いて、どのように生成されたかを追跡・管理する機能を提供する。

SCUP-HPC を用いると、利用者が OCTOPUS 上でプログラムを実行して研究データを生成する際に、入力データ・プログラム・出力データの関係性が自動的にデータカタログとして記録される。記録された来歴情報は、研究活動の効率化、データの信頼性・再現性の向上、データ活用の促進に寄与する。さらに、来歴情報は OCTOPUS 利用者以外も閲覧可能な形での公開を予定しており、研究データの再利用の促進や、他の研究者との連携の活性化への貢献も見込まれる。

なお、来歴追跡機能はデフォルトでは無効であり、利用者がジョブスクリプト中で明示的に有効化することで利用できる。これにより、来歴追跡が不要な計算（試行錯誤やデバッグ目的の計算など）と、来歴追跡を残したい計算（最終的な研究成果に紐づく計算）とを利用者が使い分けられる。SCUP-HPC の詳細な利用方法は本センターのウェブページ [14]を参照されたい。

5.2 擬似量子アニーリング（NEC Vector Annealing）

OCTOPUS では、組合せ最適化問題を高速に解くソフトウェアとして、NEC Vector Annealing [6]を無償で提供している。NEC Vector Annealing は、量子アニ

ーリングマシンと同等の動作を従来型のプロセッサ上で擬似的に実現するソフトウェアであり、QUBO（Quadratic Unconstrained Binary Optimization）形式で記述された最適化問題を高速に求解できる。

組合せ最適化問題は、膨大な選択肢の中から、制約条件を満たしつつ評価関数を最小化（あるいは最大化）する組み合わせを見つける問題である。順番決め、スケジューリング、マッチング、資源配分など、産業界や学術研究の現場の多くの実問題が組合せ最適化問題として定式化できる。これらは選択肢の数が増えるにつれて計算量が急速に増加するため、現実的な時間で解を得るのが困難になることが多い。NEC Vector Annealing は、ヒューリスティックではあるものの、こうした問題に対して実用的な時間内に高品質な解を返す。

NEC Vector Annealing は Python および C++言語の API を備えており、利用者は使い慣れたプログラミング言語から呼び出せる。組合せ最適化問題を QUBO 形式に定式化し、NEC Vector Annealing の API に渡せば求解できる。具体的な利用方法は本センターのウェブページ [6]に詳述している。

5.3 占有型フロントエンドノード

OCTOPUS では、特定の利用者グループが仮想フロントエンドサーバを占有して使える「占有型フロントエンドノード」を提供している。本機能は追加料金が発生する有償サービスである。

従来の HPC 用フロントエンドノードはすべての利用者で共有するため、複数の利用者が同時にソフトウェアのコンパイルや高負荷なプリ・ポスト処理をすると、フロントエンドノードの計算資源（CPU、メモリ）が逼迫し応答性能が低下することがある。とりわけ可視化処理やデータ前処理のように、長時間にわたり大きな計算資源を消費する処理は、他の利用者への影響が問題になりやすい。

占有型フロントエンドノードでは、利用者グループごとに仮想マシンとして専有できるフロントエンドサーバを提供する。各グループは割り当てられた仮想 CPU 数とメモリ容量を自由に使え、他グループの利用状況に左右されることなく安定した応答性能で利用できる。負荷の高いプリ・ポスト処理や長時間にわたる対話的処理を効率良く実行できる。

占有型フロントエンドノードの利用を希望される利用者グループは、本センターまでお問い合わせいただきたい。

5.4 クラウド連動機能

OCTOPUS では、利用者から投入されたジョブの一部をパブリッククラウド上で実行する「クラウド連動機能」を提供している。本機能は、SQUID で実現されたクラウドバースティング機能 [3]を継承したものであり、繁忙期にジョブ待ち時間が長期化した際、クラウド上の計算資源を活用して待ち時間を短縮する。

利用者は、ジョブスクリプト中でクラウド転送を許可するオプションを明示的に指定することで、当該ジョブをクラウド実行の対象にできる。クラウド転送を許可したジョブは、OCTOPUS 高負荷時にスケジューラの判断でクラウド上へ転送され実行される。クラウド資源はオンプレミス資源に比べてコストが高いことから、本機能の運用は本センターの予算状況に依存する。利用方法の詳細は本センターのウェブページを参照されたい。

5.5 提供ソフトウェア

OCTOPUS では、各種言語処理系、ライブラリ、コンテナランタイム、ISV アプリ、HPC アプリケーションを提供している。

言語処理系としては、Intel oneAPI Base/HPC Toolkit、GNU Compiler Collection、Python、R、Octave 等を提供している。ライブラリとしては、MPI 実装（Intel MPI、Open MPI）、数値計算ライブラリ（Intel oneMKL、GNU Scientific Library）、I/O ライブラリ（NetCDF、Parallel NetCDF、HDF5）、機械学習フレームワーク（TensorFlow、Keras、PyTorch、pbdR）等を整備している。

コンテナランタイムとしては、HPC 分野で広く利用されている Apptainer に加え、Podman、Docker を提供している。これにより利用者は自身の計算環境を柔軟にコンテナとして構築・実行できる。ISV アプリとしては、Gaussian、IDL、AVS/Express Developer、Amazon DCV を提供している。

また、HPC 分野で広く利用されているオープン

ソースのアプリケーションとして、GROMACS、OpenFOAM、LAMMPS、GAMESS、ABINIT-MP、RELION、ADIOS、VisIt、CTFFIND、FLASHcode、FreeFem++、GENESIS、MotionCor3、SMASH、Quantum ESPRESSO、ResMap、OpenMX、NEC Vector Annealing、ParaView、Gnuplot、ImageMagick、NcView 等を提供している。各ソフトウェアのバージョンは順次更新されるため、最新の情報は本センターのウェブページ [13]を参照されたい。

6. 利用のために

6.1 SQUID との共通点・相違点

OCTOPUS は SQUID と同じく D3 センターが運用する計算基盤であり、利用方法に多くの共通点がある。一方、両システムは異なる目的のもとに調達されたため、いくつかの相違点もある。

ログイン方法は、いずれも SSH（パスワード＋OTP）を用いる点が共通する。ユーザ名とパスワードも両システムで共通である。ただし、フロントエンドノードと OTP はシステムごとに異なるため、利用者は各システムのフロントエンドノードへ、当該システム用の OTP を用いてログインする。

ジョブ投入方法も、両システムが同一のジョブスケジューラ（NEC 製 NQSV）を採用しており、ジョブスクリプトの記述方法に大きな違いはない。ただし、ジョブクラスの構成（キュー名、ノード数、投入数・実行数制限等）はシステムごとに異なるため、ジョブスクリプト中のキュー指定は適切に変更する必要がある。

ファイルシステムについては、OCTOPUS ではホーム領域 100 GB/ユーザ、グループ領域 5 TB/グループを提供する。SQUID のホーム領域 10 GB/ユーザの 10 倍の容量にあたり、pip 等をはじめとする各種ツールを利用しやすいよう配慮している。また、両システムのフロントエンドノードからは、互いのファイルシステムをマウントしている。SQUID からは /octfs として、OCTOPUS からは /sqfs として相手側へアクセス可能で、両システム間でのファイルの受け渡しや、SQUID の計算結果を OCTOPUS で解析する（あるいはその逆）といった利用が容易に行える。

6.2 利用負担金

OCTOPUS の利用負担金について述べる。本センターの利用負担金の考え方は過去の SQUID 紹介記事 [3]や旧 OCTOPUS 紹介記事 [2]に詳述されているため、ここでは概要のみ示す。本センターの利用負担金は、スーパーコンピュータ運用に伴う消費電力相当のみを利用者にご負担いただく構造とし、可能な限り低額に設定している。

OCTOPUS は、SQUID と同じくポイント制の利用負担金体系を採用する。表 4 に利用負担金を示す。利用者は事前に「OCTOPUS ポイント」をコース単位で購入し、ジョブ実行時に消費されたポイントに応じて課金される仕組みである。10 万円コース（1,000 ポイント）から 500 万円コース（60,000 ポイント）までの 5 段階を用意しており、購入額が大きいほどポイント単価が割安となる。

表 4：OCTOPUS の利用負担金

区分	基本負担額（税別）	OCTOPUS ポイント
共有利用	10 万円	1,000
共有利用	50 万円	5,250
共有利用	100 万円	11,000
共有利用	300 万円	34,500
共有利用	500 万円	60,000

ジョブは、ジョブスクリプトを記述した上で qsub コマンドを用いて投入する。ジョブスクリプトには、ジョブクラス（キュー）の指定、利用グループの指定、最大経過時間の指定、計算ノードで実行するコマンド等を記述する。表 5 に OCTOPUS で提供するジョブクラスの一覧を示す。OCTOPUS では、通常優先度の OCT、高優先度の OCT-H、ノード共有の OCT-S、デバッグ用の DBG、対話利用の INT の 5 種類のジョブクラスを提供している。OCT、OCT-H、OCT-S は最大 120 時間の経過時間を指定可能で、研究の本実行向けである。一方、DBG および INT は最大 10 分の経過時間で、プログラムのデバッグや軽量な対話処理向けである。

表 5：OCTOPUS のジョブクラス

ジョブクラス	最大実行時間	最大コア数	最大メモリ	最大ﾉｰﾄﾞ数	備考
OCT	120 時間	32,768	92.75 TiB	128	通常優先度
OCT-H	120 時間	32,768	92.75 TiB	128	高優先度
OCT-S	120 時間	128	371 GiB	1	ノード共有
DBG	10 分	512	1,484 GiB	2	デバッグ用
INT	10 分	512	1,484 GiB	2	対話利用

ジョブ実行時に消費される OCTOPUS ポイントは、使用したノード時間に対して、ノード群・利用優先度ごとに定められた消費係数、ならびに季節係数、燃料係数を乗じて算出される。表 6 に汎用 CPU ノード群の消費係数を示す。消費係数は利用優先度（高優先度、通常優先度、シェア（1/2 ノード）、シェア（1/4 ノード））ごとに設定しており、利用者は計算ニーズに応じてジョブクラスを選び分けることで消費ポイントを節約できる。1 ノード未満のコア数しか使わない場合は、OCT-S ジョブクラスを指定のうえ、ジョブスクリプトにおいて 1 ノード未満のコア数およびメモリ量を要求することで、ノード共有利用となり消費ポイントが減る。なお、燃料係数は直近の電気料金を勘案して設定しており、2026 年 6 月時点では 0.85 である。

表 6：OCTOPUS の消費係数（汎用 CPU ノード群）

利用優先度	消費係数（1 ノード時間あたり）
高優先度	0.6219
通常優先度	0.5287
シェア（1/2 ノード）	0.3732
シェア（1/4 ノード）	0.2488

さらに、ストレージ容量の追加は HDD 1 TB あたり年額 2,000 円で購入できる。利用負担金の詳細は本センターのウェブページ [12]を参照されたい。

6.3 利用申請・公募利用制度

OCTOPUS の利用には、本センターへの利用申請が必要である。利用申請の手続きは本センターのウェブページ [9]に詳述している。利用申請が承認されると、アカウントが発行され、OCTOPUS へログインしてジョブを投入できる。

また、本センターでは、研究開発の育成・高度化支援の観点から、本センターのスーパーコンピュータを利用する研究課題を公募する「公募型利用制度」を実施している。本制度には、（1）若手・女性研究者支援萌芽枠、（2）大規模 HPC 支援枠、（3）人工知能研究特設支援枠の 3 つの枠を設けている。本制度で採択された研究課題は、利用負担金の全額を本センターが負担する。公募型利用制度の詳細については本センターのウェブページを参照されたい。

さらに、2026 年度課題より、OCTOPUS を HPCI [10]および JHPCN [11]へ計算資源として拠出している。HPCI および JHPCN では、課題公募に採択されれば、利用負担金を研究者が負担することなく OCTOPUS を利用できる。例年、JHPCN では 12 月半ば頃より 1 月初旬、HPCI（一般課題）では 9 月頃から 11 月初旬にかけて課題が募集されている。本センターの高性能計算機事業からも、ウェブページやメーリングリストを通じてこれらの課題募集についてアナウンスしている。OCTOPUS を利用する研究課題のご提案・ご応募をご検討いただきたい。

7. おわりに

本稿では、2025 年 9 月に試験運用を開始し、同年 12 月より本格運用を開始した新 OCTOPUS（オープンサイエンスを促進する計算・ストレージプラットフォーム）について、導入の背景・経緯、調達方針、システムの概要、特徴的な機能、そして利用方法を紹介した。

新 OCTOPUS は、Intel Xeon 6 プロセッサ（Granite Rapids、128 コア）を 1 ノードあたり 2 基搭載した汎用 CPU 計算ノードを 140 台備え、総コア数 35,840、総理論演算性能 2.293 PFLOP/s となる構成のスーパーコンピュータである。本センターでは、新 OCTOPUS を通じて、（1）最新プロセッサの早期提

供、(2) SQUID とのジョブ分散による繁忙期混雑緩和、(3) 計算来歴管理機能 SCUP-HPC によるオープンサイエンス支援、という 3 つのコンセプトの実現を進めていく。

最後に、新 OCTOPUS の調達・構築にあたりご協力いただいた日本電気株式会社、ならびに各機器ベンダ・各ソフトウェアベンダの皆様に深く感謝申し上げる。また、新 OCTOPUS の調達にあたり本センター内外で多大なご支援とご協力をいただいた皆様にも深く感謝申し上げる。

新 OCTOPUS のさらなるサービスレベル向上のため、率直なご意見・ご要望を引き続きお寄せいただければ幸いである。

参考文献

[1] 大阪大学 D3 センター, https://www.d3c.osaka-u.ac.jp/.

[2] 伊達 進, "ペタフロップス級ハイブリッド型スーパーコンピュータ OCTOPUS: Osaka university Cybermedia cenTer Over-Petascale Universal Supercomputer ~サイバーメディアセンターのスーパーコンピューティング事業の再生と躍進にむけて~", HPC ジャーナル, Sep. 2018.

[3] 伊達 進, "高性能計算・データ分析基盤システム (SQUID: Supercomputer for Quest To Unsolved Interdisciplinary Datascience) ~わが国の学術・産業の発展を支える研究基盤の実現に向けて~", HPC ジャーナル, Sep. 2021.

[4] データ集約基盤 ONION, https://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/onion/.

[5] Y. Namiki, T. Hosomi, H. Tanushi, A. Yamashita, S. Date, "SCUP-HPC: System for Constructing and Utilizing Provenance on High-Performance Computing Systems", IEEE Access, vol. 13, pp. 141090-141107, 2025. [DOI: 10.1109/ACCESS.2025.3597831]

[6] NEC Vector Annealing 利用方法（OCTOPUS）, https://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/system/manual/octopus2-use/vector-annealing/.

[7] Phoronix, "Intel Xeon 6980P Performance Review", https://www.phoronix.com/review/intel-xeon-6980p-performance.

[8] SPEChpc 2021 Benchmark Suites, https://www.spec.org/hpc2021/.

[9] 利用申請, https://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/service/shinsei/.

[10] 革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ (HPCI), https://www.hpci-office.jp/.

[11] 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 (JHPCN), https://jhpcn-kyoten.itc.u-tokyo.ac.jp/ja/.

[12] 利用負担金, https://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/service/cost/.

[13] OCTOPUS ソフトウェア・ライブラリ一覧, https://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/system/manual/octopus2-use/software/.

[14] SCUP-HPC 利用方法 (OCTOPUS), https://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/system/manual/octopus2-use/dps4h/.

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。

サイバーフィジカル植物工場システムの開発

栗本育三郎
木更津工業高等専門学校 情報工学科
（令和 8 年 4 月現在：環太平洋大学 東京キャンパス 国際経済経営学科 DX イノベーションコース）

1. はじめに

近年、少子高齢化や地球温暖化に伴う食料生産の不安定化を背景として、環境制御により安定的に作物生産を行う植物工場への関心が高まっている。特に太陽光型植物工場は、エネルギーコストの低減と環境負荷の軽減の観点から重要な生産方式として注目されている。植物工場においては、温度・湿度・CO_2 濃度といった環境要因が作物の生育に大きな影響を与える。なかでも水蒸気飽差（Vapor Pressure Deficit; VPD）は光合成や蒸散に密接に関係する指標であり、その適切な制御が収量および品質の向上に寄与することが知られている。本研究グループではこれまでに、細霧発生システムを用いた VPD 制御によりトマト収量を 10〜20%向上させることに成功している[1]。

しかし、VPD 制御においては振動や定常偏差の問題が残されており、大規模な環境データの有効活用や、最適な制御則の設計は未だ十分とはいえない。また、実植物工場での試行はコストや時間の制約が大きく、新たな制御手法の検証には限界がある。

そこで本研究では、大阪大学 D3 センターの大規模 HPC を活用し、植物工場のデジタルツインを基盤としたサイバーフィジカル植物工場システムの構築を目指す。サイバーフィジカル技術を駆使して環境計測制御を最適化し、VPD をパラメータとした植物生理、環境応答、光合成最大化の機序をモデル化すること、また、生産者、研究者、開発者、経営者、学習者に対して環境や生育情報、予測情報を複合現実として提供し、植物工場の高度化を実現することである。図 1 に提案するサイバーフィジカル植物工場システムの概念図を示す。

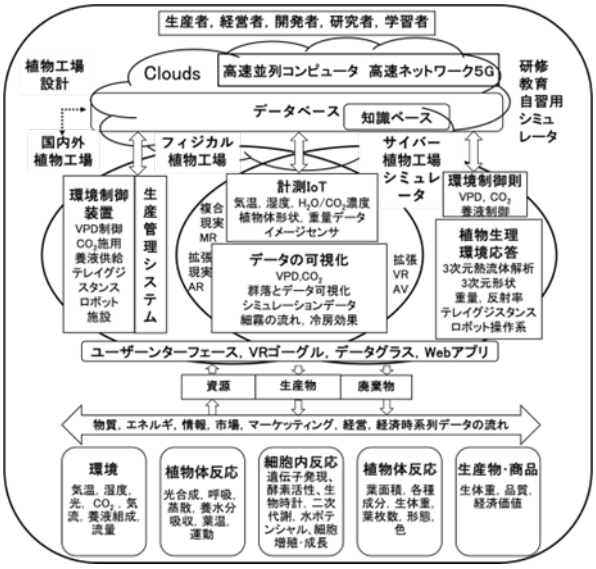


図 1 サイバーフィジカル植物工場システム概念図

2. 研究目的と概要

本研究の目的は、以下の 2 点に集約される。

・熱流体解析と計測データを統合したデジタルツインの構築

・VPD 制御の高精度化および新たな制御手法の検証

サイバー空間に構築した植物工場モデルと実環境の計測データを統合することで、環境応答や植物生理の理解を深めるとともに、制御手法の設計・評価を効率的に行うことが可能となる。さらに、得られた知見を生産・経営・教育へと展開することにより、データ駆動型農業の高度化を目指す。

3. 対象システムと課題設定

対象とした施設は、千葉大学環境健康フィールド科学センターに設置された太陽光型植物工場（5 号棟）である。施設の一部の写真を図 2 に、施設全体および解析領域の平面図を図 3 にそれぞれ示す。図 3 中、

左側の領域は対照区（環境制御等を行わない領域）、右側の領域（緑色線の領域）は実験区（環境制御を実施）である。図中の青丸は風速や湿度を計測するセンサ位置を示す。本施設では細霧発生システムを用いて温度および湿度を制御し、VPD を目標値に維持する制御が行われている。しかし実システムでは以下の制約が存在する。

・制御入力は細霧噴霧による加湿のみ

・非線形かつ時空間分布を持つ環境変動

これらの制約により、従来制御では振動や制御誤差が発生していた[1][4]。したがって、本研究では離散値入力および制御むだ時間を考慮した制御手法と大規模細霧発生シミュレーションによる状態推定を統合的に取り扱うことを課題とした。

図 2 対象施設外観（千葉大学環境健康フィールド科学センター太陽光型植物工場 5 号棟）

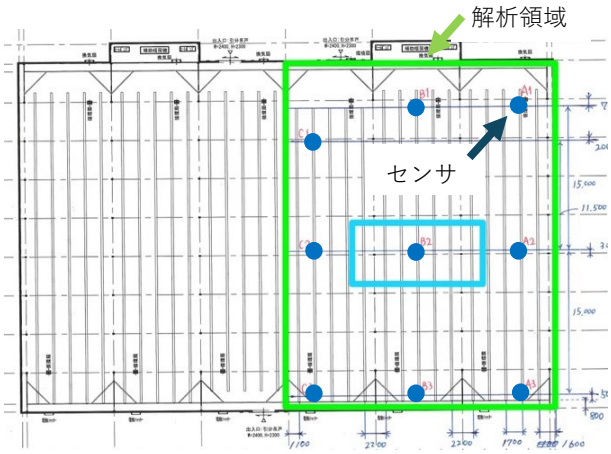


図 3 施設全体の平面図

4. 計算手法と HPC 利用

4.1 数値シミュレーション環境

本研究では、大阪大学 D3 センターの大規模 HPC SQUID を利用した。シミュレーションには汎用熱流体解析ソフト STREAM と独自開発の VPD 制御ソフトウェアを組み合わせた。解析の詳細については既報[2]を参照されたい。対象モデルは約 400 万メッシュの三次元空間であり、温度・湿度・気流を同時に解析する。基準計算では、60,000 タイムステップ（約 300 秒）の解析に対して 8 ノードで約 6 時間を要する。図 4 には熱流体解析による細霧と VPD の代表的な分布（瞬時値）を示す。図中の緑色丸印はセンサ位置を示すものであり、図 3 中の青丸に対応する。

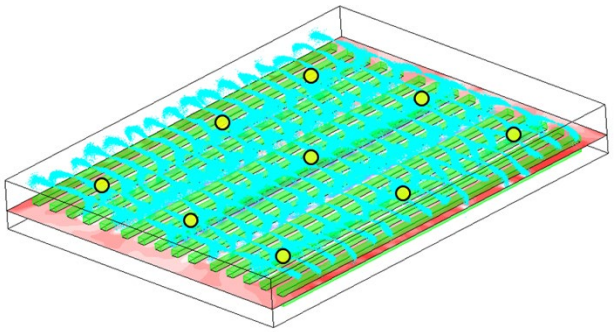


図 4 熱流体解析によって得られた細霧・VPD の代表的な分布

4.2 データ同化

デジタルツインの高精度化のために、アンサンブルカルマンフィルタ（EnKF）によるデータ同化を導入した[3]。データ同化処理では、初期条件を変化させた複数のシミュレーション（アンサンブル）同時並行で実行し、アンサンブルのばらつきと観測データに基づいて逐次補正を行っていく。本解析では計算負荷軽減のため、施設内の小領域（図 3 中、水色枠で囲まれた領域）での実施とした。この領域中に観測点を 16 点配置し、アンサンブル数 : 76 としてデータ同化させた。本解析においては、事前に真値に対応づける解析を実施し、実際の解析との誤差を評価している。観測点における空気温度の時間履歴を図 5 に、真値との誤差を図 6 にそれぞれ示す。図中、実線は地上高 1.25 m における温度履歴であり、破線は

3.75 m のものである。図 7 にはデータ同化処理を加えた際の、観測点における空気温度の真値との誤差の時間履歴である。データ同化を行うことで実環境に近い状態推定を実現することに成功した。

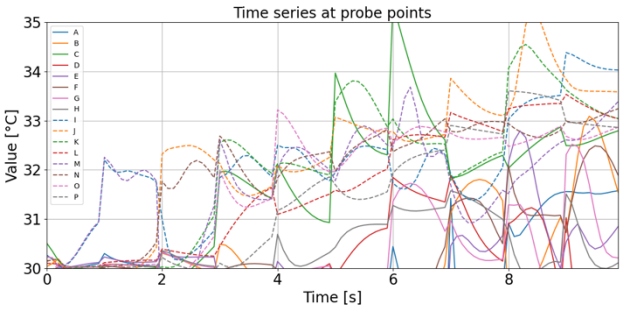


図 5 観測点における空気温度の時間履歴
（データ同化処理前）

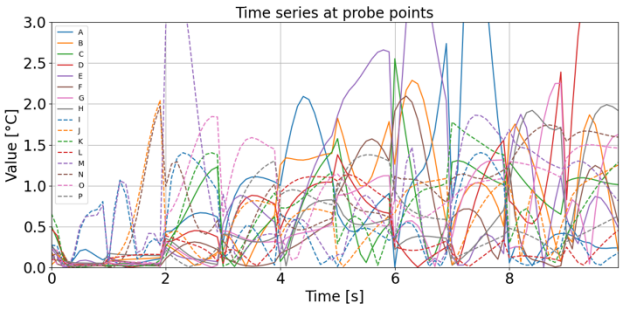


図 6 真値との誤差の時間履歴
（データ同化処理前）

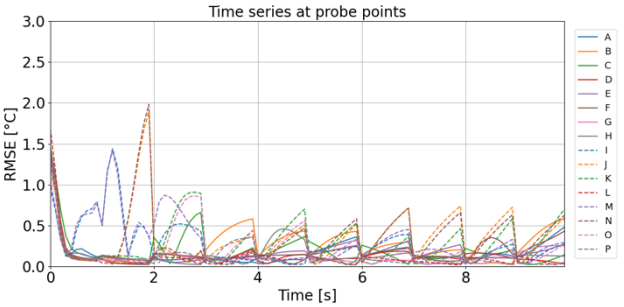


図 7 データ同化処理を施した際の、
真値との誤差の時間履歴

5. 制御手法の検討

ここまでで述べた HPC 環境上のデジタルツインを用いて、以下の制御手法を評価した。

5.1 モデル予測制御

むだ時間および入力制約を考慮したモデル予測制御系を設計し、さらに静的量子化器により離散値入力を実現した。代表計測点における VPD 値の時間履歴を従来手法（比較手法）と提案手法で比較したものを図 8 に示す。ここでは目標 VPD 値を 1.0 kPa と設定しており、従来手法では定常偏差が発生していたが、提案手法では目標値への追従性が向上していることが確認できる。その結果として、VPD 値の平均値：1.2726 → 1.0912、平均二乗誤差：約 11.02%低減が確認され、制御性能の改善が得られた[4]。

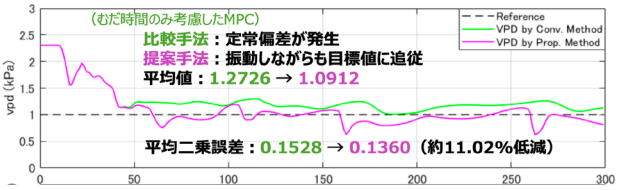


図 8 代表計測点における VPD 値の時間履歴

5.2 動的量子化制御

さらに、離散値区間による量子化誤差を低減するため、2 組のパラメータを切り替える動的量子化器を提案した。代表計測点における VPD 値の時間履歴を従来手法と提案手法で比較したものを図 9 に示す。その結果、過渡応答における振動低減および定常偏差の抑制を達成し、従来手法に対して優位性を示した[5]。

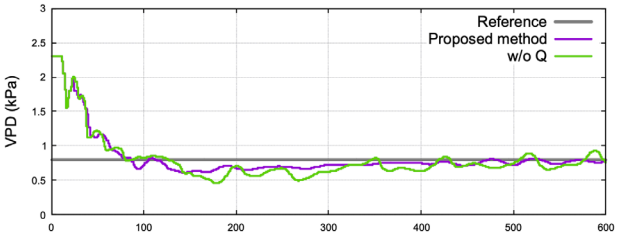


図 9 動的量子化制御を付加した際の代表計測点における VPD 値の時間履歴

6. 成果

本研究により、以下の成果が得られた。

(1) 大規模デジタルツインの構築

大規模 HPC 環境により、高解像度かつ長時間の植物工場シミュレーションを実現し、現実系の挙動を

再現可能なモデルを構築した。

(2) データ同化による精度向上

EnKF により観測データとの整合性を向上させ、実環境に近い状態推定を達成した。

(3) 制御性能の改善

離散値入力・むだ時間を考慮した制御により、VPD の制御精度を向上させた。特に、振動の抑制・定常偏差の低減・応答性の改善が確認された。

(4) HPC 活用の有効性

膨大な計算資源を要する熱流体解析とデータ同化を統合することで、従来の実験ベース研究では困難であった検討を実現した。

7. まとめ

本研究では、大阪大学 D3 センターの大規模 HPC を活用し、大規模シミュレーションとデータ同化の統合により、従来困難であった高精度な環境再現と制御手法の検証が可能となった。

本成果によって、高精度なサイバーフィジカル植物工場システムの実現可能性を示すことができた。一方、実施設規模でのデータ同化やリアルタイム制御の課題も明らかとなった。今後は、実環境との双方向連携を実現し、より高度なサイバーフィジカル植物工場システムの構築を目指す。

謝辞

本研究の一部は、大阪大学 D3 センター2025 年度公募型利用制度（大規模 HPC 支援）により実施された。また、JSPS 科研費基盤研究(B)23K23734 の支援を受けている。ここに謝意を表する。

参考文献

[1] K. Watanabe, Y. Asano, I. Kurimoto, T. Nukaya, A. Kano, and T. Maruo, “Development of Temperature and Vapor Pressure Deficit Control System Using Variable Rate Fogging in Plant Factory with Solar Light”, Transac. of the Society of Instrument and Control Engineers, Vol. 52, No. 5, pp. 292–298, 2016.

[2] Y. Itoh, et al.: “Development of control method on numerical simulation of temperature and humidity environment in a sunlight type plant factory,” the SICE Annual Conf., pp. 1262–1266, 2023.

[3] 中村ら，日本機械学会関東支部 第 32 期総会・講演会, GS0211, 2026.3

[4] 西山ら，第 13 計測自動制御学会制御部門マルチシンポジウム, 1PS-38, 2026.3

[5] 福田ら，第 13 計測自動制御学会制御部門マルチシンポジウム，1PS-57, 2026.3.

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

寺島 洋史
北海道大学 大学院工学研究院

1. はじめに

近年、世界各国で宇宙開発の機運が高まっており、ロケットの運用需要が急激に増加することが見込まれる。宇宙開発を安定的に取り組むためには、信頼性の高いロケット輸送技術の確立が不可欠であり、その中でも、ロケットエンジンは、ロケット運用能力を決定付ける最重要コンポーネントといえる。

ロケットエンジンの開発において、現在でも大きな課題となるのが、燃焼振動の問題である。燃焼振動は、燃焼室内の圧力変動と発熱変動が相互作用する燃焼不安定現象として古くから知られている[1]。大きな圧力振動が発生した場合、燃焼室が破壊に至ることもあり、その予測が非常に重要となる。しかし、圧力波と発熱（化学反応）が連成する複雑な物理現象であること、噴射条件や燃焼器の幾何形状などの様々な要因が絡むことから、現在でも発生機構は十分に解明されておらず、予測も困難とされる。

燃焼振動に関する研究は実験と数値シミュレーション、いずれにおいても多数行われてきた[2、3]。申請者らは、水素酸素ロケットエンジンを対象に、経験的に燃焼振動が発生しやすいとされる低温燃料噴射[1]に着目した燃焼振動シミュレーションを実施してきた[4]。その結果から、低速度比および低混合比条件下で、大きな圧力振動が発生することを示した。さらに、大きな圧力振動の発生原因として、燃焼器上流部に残存した未燃水素の燃焼による火炎面積の増大が燃焼振動の発生原因となることを示した。

本研究課題では、これまでの水素を用いた解析結果[4]を基に、管理運用の容易さから近年ロケット燃料として注目される炭化水素系燃料メタンを用いたロケットエンジン燃焼振動シミュレーションを実施する。達成目標は、ロケットエンジンの燃焼器内で発生する燃焼振動現象に対する燃料特性の影響を明らかにすることである。具体的には、水素を用いた解析で得られた混合比および速度比による圧力振動有無の分類がメタンにも適用可能かを調べる。さらに、強い圧力振動が発生した場合、その発生機構が水素とどのように異なるのかを明らかにする。

これまでのロケットエンジン解析では、利用頻度が高い水素を用いた解析が多く、メタンを用いた研究は実験およびシミュレーションのいずれにおいても少ない。今後、ロケット燃料として管理運用が容易かつ安価なメタンが用いられる可能性は高く、本研究の成果はその利用に貢献できるものと考えられる。

2. 数値解析法

本研究では、単一噴射器を持つロケット燃焼器に対し、詳細反応機構を考慮した直接数値解析を実施した。水素とメタンの比較を行い、燃焼振動現象に対する燃料特性の影響を明らかにする。

2. 1　支配方程式と数値解析法

支配方程式には、圧縮性 Navier-Stokes 方程式、化学種の質量保存式、熱的完全気体を仮定した状態方程式を用いた。紙面の都合から具体的な数値計算手法に関しては文献[4]を参照いただきたい。

2. 2　計算条件

本研究では、主に計算コストの観点から 2 次元

解析を行った。燃焼流れ場は 3 次元ではあるが、2 次元仮定であっても燃焼振動マップの不安定境界が実験[1]と概ね一致すること、燃焼振動の軸方向モード周波数において、解析で得られた値と理論値が概ね一致することを確認している[4]。

図 1 に解析対象の概略図を示す。解析対象にはミュンヘン工科大の実験[5]で使用された単一噴射器のロケット燃焼器を用いた。なお、噴射面より上流部分は解析対象としていない。格子点数は 766×279 点とした。事前に、粗い計算格子（538×189 点）および細かい計算格子（1088×401 点）を用いた解析で格子収束性の確認を行っており、燃焼振動発生有無や燃焼流れ場が格子解像度によって大きく変化しないことを確認した。

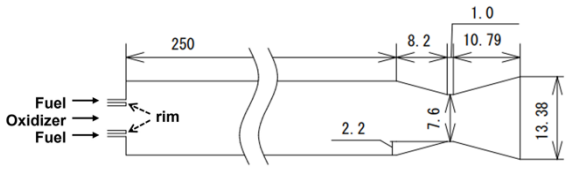


図 1：解析対象の概略図

燃料温度は理想気体仮定が適用できる下限値近くにそれぞれ設定し、水素 80 K、メタン 200 K に設定した。一方、酸化剤（酸素）は 300 K とした。ターゲット燃焼圧は 24 bar である。水素を用いた先行研究[4]において、燃焼振動は混合比（O/F）および速度比（VR）を用いて整理できることが示されているため、本研究のメタン解析においても混合比と速度比を変化させた。以降、条件の名称として OF#VR#を使用する。

メタン酸素の反応には、38 化学種 291 反応の詳細反応機構 FFCM-1[6]を用いた。

3. 結果と考察

3. 1　燃焼流れ場と圧力振動

図 2 に、燃焼器上流部の温度分布を示す。左の境界面からメタンおよび酸素が噴射され、非予混合火炎が形成、生成された高温燃焼ガスが下流へ流れていく。また、リム背後（図 1）の再循環領域は非予混合火炎の基部（アンカー）として重要な領域となる。

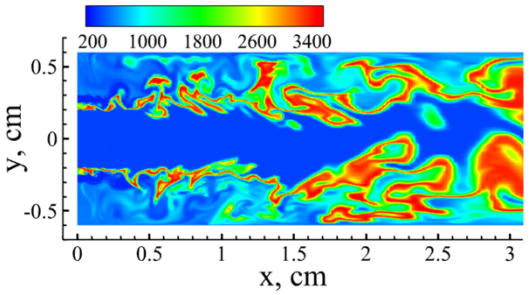
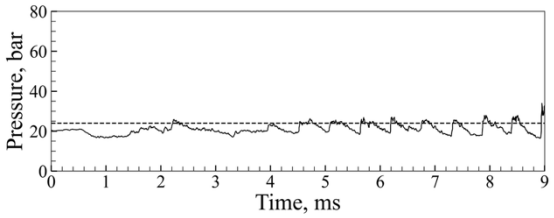
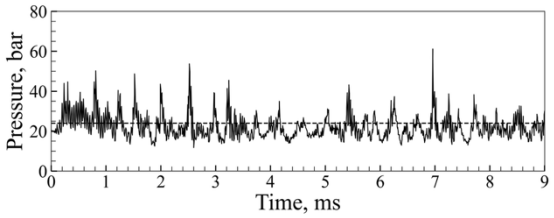


図 2：噴射器近傍の瞬間温度場（OF4VR1）

図 3 に、$x = 3$ cm、$y = 0.5$ cm における圧力時間履歴を示す。点線はターゲット燃焼圧を示す。OF4VR1 条件では多少の振動が見られるものの、ターゲット燃焼圧付近を推移しており、強い燃焼振動は発生していない。一方、OF4VR4 条件では、圧力の最大値が 60 bar 付近まで上昇する強い燃焼振動が観察された。FFT 解析によって、支配モードが 1 次の軸方向モードに相当することから、本振動は軸方向の燃焼振動と確認した。



(a) OF4VR1

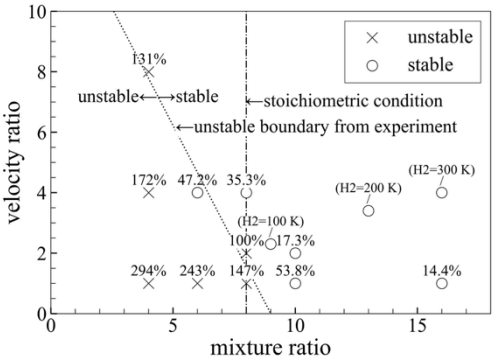


(b) OF4VR4

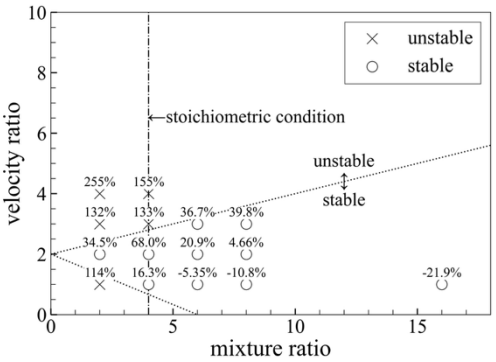
図 3：燃焼器内の圧力時間履歴

図 4 に、水素およびメタン解析で得られた燃焼振動マップを示す。横軸は混合比であり、縦軸は速度比である。マル印は燃焼振動が発生しなかっ

た条件、バツ印は燃焼振動が発生した条件を表す。プロット上部の数値はターゲット燃焼圧に対する最大圧力値を表す指標である[4]。また、水素の解析結果に示す破線は実験[1]における不安定境界である。水素の場合、低混合比もしくは低速度比ほど燃焼振動が発生しやすくなる傾向があるが、メタンの場合、低速度比条件では水素と同様の傾向を示すが、高速度比条件では水素と異なる傾向を示す。つまり、メタンは速度比が大きいほど燃焼振動が発生するという水素とは逆の傾向を示すことが明らかになった。



(a) 水素

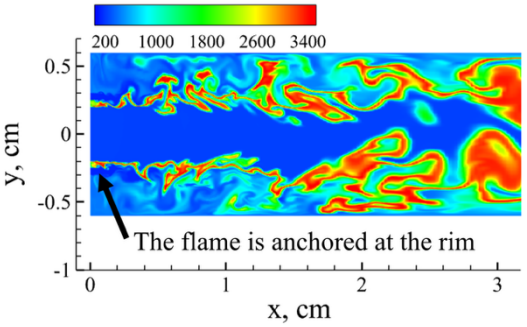


(b) メタン

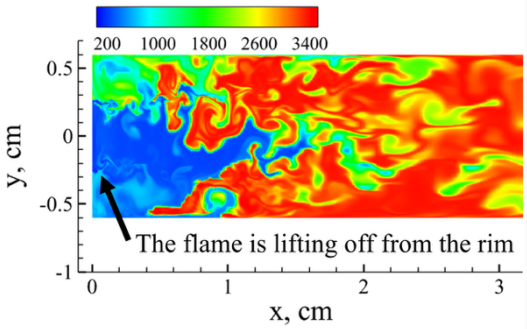
図 4：燃焼振動マップ

3. 2　速度比に対する燃焼振動発生傾向の違い

前節の結果から、燃料種によって燃焼振動の発生傾向が異なることが示された。その原因を調べるため、図 5 に、噴射器近傍の瞬時温度場を示す。一般的に、ロケット同軸噴射器では非予混合火炎が形成され、リム背後がそのアンカーとなる。メタンの OF4VR1 条件（燃焼振動が発生しない条件）では、非予混合火炎の基部がリム背後に形成していることが確認できる。一方で、強い燃焼振動が観測されたメタンの OF4VR4 条件では、火炎がリム背後領域から消失し、浮き上がり火炎となることが示されている。水素ではすべての条件で浮き上がり火炎は観察されていないため[4]、浮き上がり火炎となることが、燃料種による燃焼振動の傾向の違いを生み出した原因と考えられる。



(a) OF4VR1（燃焼振動が発生しない）

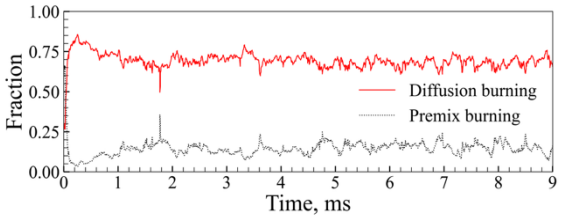


(b) OF4VR4（燃焼振動が発生）

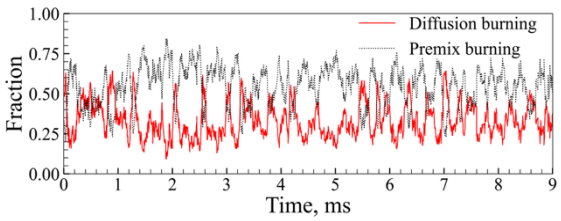
図 5：瞬間温度場の比較

浮き上がり火炎形成と強い燃焼振動発生の関係を調べるため、図 6 に、Flame Index を用いた burning fraction（BF）の時間履歴を示す。BF は全体発熱量における予混合火炎および非予混合火炎の割合を表すものである[4]。ルム背後に火炎基部が形成される OF4VR1 条件では、非予混合火炎の割合が 90%以上を占めている（水素ではすべての条件でこの傾向を有する）。一方、OF4VR4 条件では、予混合火炎の割合が非予混合火炎の割合を上回ることがわかる。これは、浮き上がり火炎の発生により、未燃燃料と酸化剤が混

合し未燃予混合気が形成されたことを意味する。予混合気の自着火は発熱および圧力変動を引き起こすため、メタンの OF4VR4 条件では、強い燃焼振動が発生したといえる。



(a) OF4VR1



(b) OF4VR4

図 6：Burning fraction の時間履歴

3. 3　浮き上がり火炎：速度比と消炎の関係

メタンの OF4VR4 条件では、浮き上がり火炎が形成されたことで、強い圧力振動が発生した。浮き上がり火炎が形成する理由を考察するため、オープンソフト Cantera を用いた対向流非予混合火炎の消炎解析を実施した。図 7 に解析結果を示す。変曲点が消炎条件に相当し、その点のひずみ率が大きいほど、消炎しにくいことを意味する。水素とメタンの結果（3 つの異なる反応機構で解析）を比較すると、メタンが水素に対して消炎しやすいことがわかる。ひずみ率は速度比に相当するものであり、メタンが低速度比条件でも消炎しやすい、つまり浮き上がり火炎を形成しやすい特性を持つことが示された。

4. おわりに

本研究では、詳細反応機構を用いた圧縮性流体解析により、ロケット燃焼器における水素とメタンの燃焼振動特性の比較を行い、燃焼振動機構に対する燃料種の効果を調べた。燃焼振動の発生において、混合比に対する傾向は、水素とメタンで同じであったが、速度比に対する傾向は、低速度比条件は同じであるが、高速度比条件では逆の傾向を示した。温度場の比較から、水素のすべての条件およびメタンの低速度比条件では、非予混合火炎がリム背後領域から形成されている一方、メタンの高速度比条件では浮き上がり火炎が形成する。これは、水素火炎と比較して、メタン火炎が伸張に対して消炎しやすいためであり、メタンの特徴といえる。浮き上がり火炎により、未燃予混合気が形成され、その自着火によって圧力および発熱振動が強まり、強い燃焼振動が発生したと考えられる。以上により、混合比および速度比という観点から、燃焼振動に対する燃焼種の効果を明らかにすることができた。

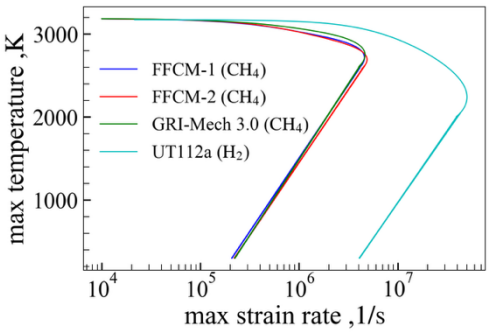


図 7：対向流非予混合火炎の消炎解析結果

参考文献

(1) D.T. Harrje, Liquid propellant rocket combustion instability, **194**, NASA, (1972).

(2) Y. C. Yu, et al., J. Propul. Power, **28**, 876-887, (2012).

(3) M. E. Harvazinski, et al., Phys. Fluids, **27**, 045102, (2015).

(4) R. Shimoyama and H. Terashima, Phys. Fluids, **37**, 097128, (2025).

(5) S. Silvestri, et al., EUCASS, **26**, (2017).

(6) G. Smith, et al., FFCM-1, (2016).

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

村上匡且
大阪大学レーザー科学研究所

1. はじめに

レーザー駆動イオン加速は、コンパクトな高エネルギー粒子源として、がん治療を含む医療応用、プロトンラジオグラフィ、高エネルギー密度物質の生成、核融合高速点火、さらには大型加速器への入射器など、広範な応用が期待されている。特に、200-300 MeV を超える高品質プロトンビームは、応用研究における重要な指標であり、さらに GeV 級へ到達すれば実験室規模の粒子源としての可能性は大きく広がる。

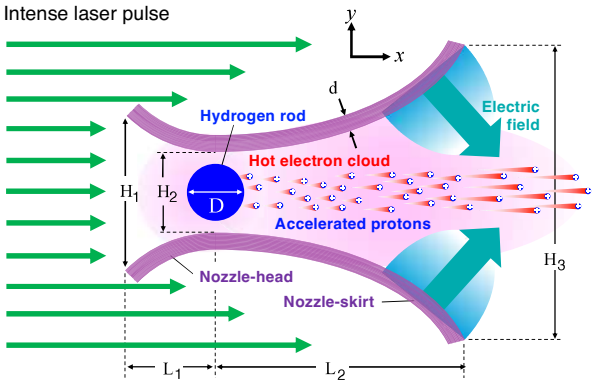


Fig. 1. A cross-sectional schematic view of MNA target. MNA target employs a micronozzle housing a solid hydrogen rod (H-rod), which is placed at around the nozzle-neck to maximize the proton emission. Aluminum is here employed as the nozzle material just as an example. The role of the micronozzle can be understood as a kind of power lens, as it were, to integrate the applied laser energy onto the tiny H-rod to bring about significantly higher energies than without the nozzle structure.

一方、従来の代表的な機構であるターゲットノーマルシース加速（TNSA）は、薄膜ターゲット背面に形成されるシース電場によりプロトンを加速するもので、実験的実装が比較的容易である反面、電場が局所的で持続時間も短いため、エネルギー増大には限界がある。また、放射圧加速、衝撃波加速、磁気渦加速、ブレイクアウト・アフターバーナー等の方式も提案されているが、ターゲット条件やレーザー条件に対して高い精密性を要求する場合が多い。

本研究の目的は、ターゲット構造そのものを一種の「マイクロ加速器」として設計し、レーザーエネルギーを単に吸収するだけでなく、電場の形成位置、空間的広がり、持続時間を幾何学的に制御することで、従来機構を超える加速性能を実現することである。提案するマイクロノズル加速（MNA）は、ノズルヘッド、ノズルスカート、水素ロッドからなる複合構造を利用し、ホット電子の流れと電荷分離場をノズル出口方向へ誘導する。

MNA の特徴は、加速が単一の局所電場に依存せず、Run-up、Main-drive、Afterburner の三段階に自然に分解される点である。すなわち、初期のロッド表面加速、ノズル出口近傍の主加速、レーザー照射終了後の自由膨張に伴う追加加速が連続的に接続される。このような「構造誘起型の多段階加速」は、従来の平板ターゲットでは得られない本質的な優位性であり、本研究の学術的意義はここにある。

2. 粒子シミュレーション

MNA の解析には、ミクロンサイズの複雑な構造体、固体密度プラズマ、相対論的ホット電子、長距離にわたるプロトン輸送を同時に取り扱う必要がある。このため、数値計算には高い空間分解能、十分な計算領域、長時間積分が要求される。特に、レーザー照射終了後に発現する Afterburner 段階は、照射中の高速現象だけでなく、その後の自由膨張過程まで追跡しなければならない。

本研究では、オープンソースの相対論的 PIC コード EPOCH を用い、二次元 (x,y) 平面で計算を行った。代表的計算では、格子間隔を 10 nm 程度、

計算領域を 100-200 μm × 40 μm 程度に設定し、GeV 級プロトンが計算領域外へ不自然に流出して結果を歪めないよう十分な空間を確保した。レーザー波長は 0.8 μm、パルス幅は 100 fs、スポットサイズは 10 μm とし、強度を 3×10^{21} W/cm² から 10^{22} W/cm² 程度まで変化させた。

この規模の PIC 計算では、格子数、粒子数、時間ステップ数のいずれも大きく、通常の研究室計算機では系統的なパラメータ探索が困難である。JHPCN の計算資源を利用することで、ノズル構造の有無、レーザー強度、プロトンエネルギーの時間発展、電場分布、位相空間分布を比較し、MNA の物理機構を統一的に検証することができた。

また、本研究はレーザー物理、プラズマ物理、粒子加速、数値計算科学が密接に関係する学際的課題である。公募型共同研究として実施することで、単なる計算実行にとどまらず、計算モデルの妥当性、データ可視化、物理解釈の検討を継続的に行うことができた点も重要である。

3. マイクロ構造体としての特色

これまで、マイクロ構造ターゲットを用いたレーザーエネルギー集中と高エネルギー粒子生成の可能性について検討してきた。ナノワイヤ、マイクロチューブ、マイクロバブルなどの構造体では、平板ターゲットに比べてレーザー吸収やホット電子生成が増強されることが知られている。しかし、イオン加速の観点では、生成された電場が局所的である場合、最終エネルギーは電場強度だけでなく加速距離および持続時間によって制限される。

この問題を克服するため、本研究では「ノズル」という幾何構造に着目した。ノズルは流体力学では流れを加速・整形する基本構造であるが、レーザープラズマにおいても、ホット電子と電荷分離場を空間的に整形する役割を果たし得る。MNA では、ノズルヘッドが入射レーザーおよびホット電子を水素ロッド付近へ集め、ノズルスカートが出口方向に広がる長距離電場の形成を助ける。

これまでの基礎検討により、ノズル構造を持たない水素ロッド単体または通常の薄膜ターゲットでは、加速は TNSA 型に近く、レーザー終了後には最大エネルギーの増加がほぼ停止することが確認された。これに対して、MNA ターゲットでは、レーザー終了後もプロトンエネルギーが増加し続ける特徴的な振る舞いが現れた。この差異が、今年度の詳細解析で明らかにした Afterburner 機構の出発点である。

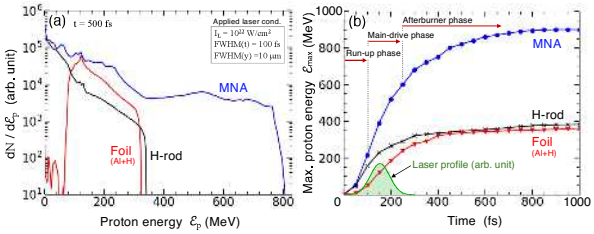


Fig. 2. (a) The proton energy spectra for the MNA, the H-rod, and the foil targets. The H-rod (2μm-diameter) is just the bullet body taken out from the MNA target, while the foil target is composed of a 1μm-thick aluminum with 50nm-thick solid hydrogen layer over-coated on the rear surface. (b) The temporal evolution of the three cases of (a). For the MNA target, the maximum proton energy Emax is read to be increasing at the rate of 160 MeV/100 fs even after the laser illumination is finished at t ≃ 250fs.

4. ノズルヘッドによる初期集束と Run-up 段階

レーザーが MNA ターゲットに入射すると、ノズルヘッド内面でホット電子が生成される。ノズルヘッドは単なる支持構造ではなく、レーザー場およびホット電子流を水素ロッド付近へ集める「パワーレンズ」として作用する。シミュレーションでは、ノズル構造を有する場合、水素ロッド近傍の横電場 Ey がノズルなしの場合に比べて大きく増幅されることが示された。

この初期段階では、水素ロッド表面からプロトンが放出され、局所的なシース電場によって前方へ押し出される。この段階を Run-up 段階と呼ぶ。Run-up 段階の役割は、最終エネルギーの大部分を与えることではなく、後続の Main-drive 段階へプロトンを適切に導入することである。すなわち、プロトンをノズル出口方向の強電場領域へ送り込むための準備段階である。

5. Main-drive 段階における長距離電場形成

MNA の中心的特徴は、ノズル出口付近に形成される広範囲の縦電場 Ex による Main-drive 段階である。シミュレーションでは、レーザー照射初期には強電場がノズル内面近傍に局在するが、レーザーピーク時刻以降、ノズル出口方向へ広がる強電場領域が形成されることが確認された。この電場は平板ターゲットで見られる局所的シース場とは異なり、ノズルの開口スケールにわたって空間的に拡張している。

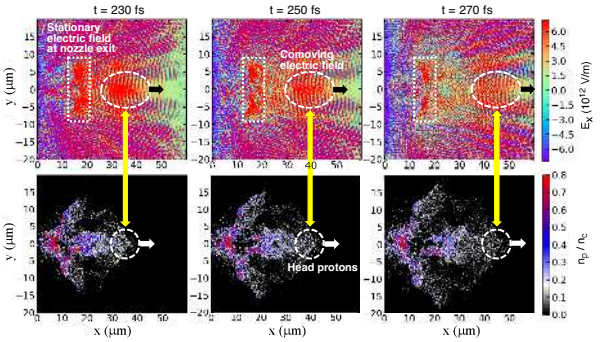


Fig. 3. Upper row: 2D profiles of the longitudinal electric fields Ex. Lower row: proton density profiles at different times, at sequential times, t = 230, 250, and 270 fs for the MNA target, which correspond to the early times of the afterburner phase; n_c denotes the critical density. The head protons are observed to be continuously accelerated by the comoving electric field. Applied laser and target conditions are the same as in Fig. 2.

この長距離電場により、プロトンはノズル出口へ向かって連続的に加速される。電場強度は 10^{14} V/m オーダーに達し、しかも数十 μm のスケールで作用するため、プロトンは短時間に数百 MeV 以上のエネルギーを獲得する。特に、ノズルスカート外面に照射されたレーザー周辺部もホット電子を生成し、それがノズル出口周辺の正電荷化と電場形成に寄与する。

図 3 に示す電場、プロトン密度、電子密度、磁場の時間発展から、MNA では電場形成と粒子分布が強く結合していることが分かる。プロトンは単純な一点加速ではなく、ノズル内部から出口、さらに下流領域へ進む過程で段階的にエネルギーを得る。これが、MNA が TNSA を超える第一の理由である。

6. エネルギースペクトル：TNSA との比較

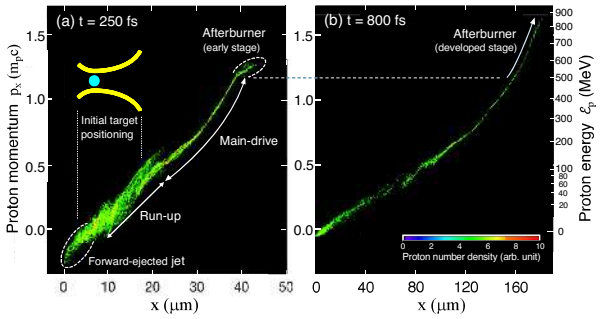


Fig. 4 The phase space plots at t = 250 fs and 800 fs, showing how the protons are accelerated through the three different phases. The proton energies increase mainly after they are ejected out of the nozzle through the main-drive and the afterburner phases.

MNA、孤立水素ロッド、薄膜ターゲットを比較すると、最大プロトンエネルギーおよびスペクトル形状に明瞭な差が現れる。孤立水素ロッドおよび薄膜ターゲットでは、基本的には TNSA 型の加速となり、レーザー照射終了後には最大エネルギーの増加がほぼ停止する。一方、MNA ではレーザー終了後もエネルギーが増加し続け、最終的に約 900 MeV に到達する。

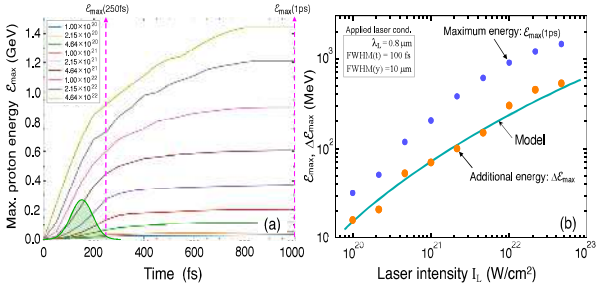


Fig. 5. (a) Temporal evolution of the maximum proton energies at different peak laser intensities (the upper- left inset in units of W/cm2). The green Gaussian profile denotes the laser pulse. The time, t = 250 fs, is taken here as the beginning of the afterburner phase. (b) Maximum proton energies at the end, E_{max}(1 ps) (blue circles), and the additional energies gained in the afterburner phase, $\Delta E_{max} = E_{max}(1\ ps) - E_{max}(250\ fs)$ (orange circles). The solid curve is obtained by a simple analytical model based on a self-similar analysis.

エネルギースペクトルにおいても、MNA は単調減少型ではなく、400-800 MeV 付近に比較的平坦な高エネルギー成分を示す。このことは、プロトン束が比較的一様な電場を一定距離にわたって経験していることを示唆している。すなわち、MNA は単に最大エネルギーを上げるだけでなく、高エネルギー側の粒子数を増やす点でも有利である。

時間発展を見ると、MNA では $t \simeq 100$ fs 以降

に急速なエネルギー増加が始まり、t ≃ 250 fs までに数百 MeV へ達する。その後も Afterburner 段階によりさらに増加し、最終値は TNSA 型ターゲットの約 2 倍以上となる。この差は、ノズル構造によって電場の空間スケールと時間スケールの双方が拡張された結果である。

7. まとめと今後の展望

本研究により、マイクロノズル構造を用いた GeV 級プロトン生成の基本原理を、PIC シミュレーションにより明確に示すことができた。特に、MNA が従来の TNSA と異なり、Run-up、Main-drive、Afterburner の三段階からなる構造誘起型加速であることを示した点は重要である。最大エネルギーが約 900 MeV に達し、10^22 W/cm2 級レーザーで GeV 級プロトン生成が現実的に視野に入ることを示した。

MNA は、コンパクトな GeV 級プロトン源として、高エネルギー密度物理、プロトンラジオグラフィ、さらには二次粒子生成などへ応用可能である。今後、三次元シミュレーションと実験検証を段階的に進めることで、本方式を単なる概念提案から実用的な高エネルギー粒子源へ発展させることを目指す。本研究の成果は、MNA が単なるターゲット形状の工夫ではなく、レーザー生成ホット電子、静電場、プラズマ膨張を一体化した新しい加速概念であることを示すものである。JHPCN の大規模計算資源を用いることで、この複合過程を時間発展として分解し、各段階の物理的寄与を明らかにできた点に本共同研究の最大の成果がある。

応用面では、MNA により得られる高エネルギープロトン束は、従来の薄膜 TNSA 源と比べて高エネルギー側の粒子数を増やせる可能性があるため、厚い試料の透過イメージングや高エネルギー密度物質の時間分解診断に有用である。特に、ps 以下の短パルス性と μm スケールの発生源サイズを併せ持つ点は、従来加速器では得難い特徴であり、レーザー実験に同期したプローブとしての価値が高い。

参考文献

1. Cowan, T. E. et al. Ultralow emittance, multi-MeV proton beams from a laser virtual-cathode plasma accelerator. Phys. Rev. Lett.92, 204801 (2019).
2. Romagnani, L. et al. Dynamics of electric fields driving the laser acceleration of multi-MeV protons. Phys. Rev. Lett. 95, 195001(2005).
3. Borghesi, M. et al. Measurement of highly transient electrical charging following high-intensity laser-solid interaction. Appl. Phys.Lett. 82, 1529 (2003).
4. Krushelnick, K. et al. Energetic proton production from relativistic laser interaction with high density plasmas. Phys. Plasmas 7, 2055 (2000).
5. Pukhov, A. et al. Three-dimensional simulations of ion acceleration from a foil irradiated by a short-pulse laser. Phys. Rev. Lett. 86, 3562 (2001).
6. Murakami, M. et al. Generation of high-quality mega-electron volt proton beams with intense-laser-driven nanotube accelerator. Appl. Phys. Lett. 102, 163161 (2013).
7. Patel, P. et al. Isochoric heating of solid-density matter with an ultrafast proton beam. Phys. Rev. Lett. 23, 125004 (2003).
8. Roth, M. et al. Fast ignition by intense laser-accelerated proton beams. Phys. Rev. Lett. 86, 436 (2001).
9. Krushelnick, K. et al. Ultrahigh-intensity laser-produced plasmas as a compact heavy ion injection source. IEEE Trans. Plasma Sci. 28, 1184 (2000).
10. Bulanov, S. V. et al. Feasibility of using laser ion Accelerators in proton therapy. Brief Commun. 28, 453 (2002).
11. Foukal, E. et al. Particle selection for laser-accelerated proton therapy feasibility study. Med. Phys. 30, 1660 (2003).
12. Snavely, R. A. et al. Intense high-energy proton beams from petawatt-laser irradiation of solids. Phys. Rev. Lett. 85, 2945 (2000).
13. Wilks, S. C. et al. Energetic proton generation in ultra-intense laser-solid interactions. Phys. Plasmas 8, 542 (2001).
14. Murakami, M. et al. Self-similar expansion of finite-size non-quasi-neutral plasmas into vacuum: Relation to the problem of ion acceleration. Phys. Plasmas 13, 012105 (2006).
15. Qiao, B. et al. Stable GeV ion-beam acceleration from thin foils by circularly polarized laser pulses. Phys. Rev. Lett. 102, 145002 (2009).
16. Henig, A. et al. Radiation-pressure acceleration of ion beams driven by circularly polarized laser pulses. Phys. Rev. Lett. 103, 245003 (2009).
17. Gonzalez-Izquierdo, B. et al. Radiation pressure-driven plasma surface dynamics in ultra-intense laser pulse interactions with ultra-thin foils. Appl. Sci. 8, 336 (2018).
18. Silva, L. O. et al. Proton shock acceleration in laser-plasma interactions. Phys. Rev. Lett. 92, 015002 (2004).
19. Fiuza, F. et al. Laser-driven shock acceleration of monoenergetic ion beams. Phys. Rev. Lett. 109, 215001 (2012).
20. Yin, L. et al. GeV laser ion acceleration from ultrathin targets: The laser break-out afterburner. Laser Part. Beams 24, 291 (2006).
21. Yin, L. et al. Break-out afterburner ion acceleration in the longer laser pulse length regime. Phys. Plasmas 18, 063103 (2011).

Proton acceleration by collisionless shocks in black-hole coronae: first-principles constraints for high-energy neutrino sources

Takayoshi Sano[1] and Minh Nhat Ly[1,2]

[1]Institute of Laser Engineering, The University of Osaka
[2]Department of Physics, Graduate School of Science, The University of Osaka

Abstract. This research aim to study collisionless shocks in active-galactic-nucleus (AGN) coronae utilizing high-performance-computing particle-in-cell (PIC) simulations. The question is whether a hot plasma corona around a supermassive black hole can accelerate protons fast enough to explain the TeV neutrino signal from the Seyfert galaxy NGC 1068, while remaining faint in TeV gamma rays. The simulations, originally reported in Ly et al. [1], follow shock formation, magnetic-field amplification, particle injection, and diffusive shock acceleration (DSA) from first principles. Across the surveyed coronal parameter space, quasi-parallel trans-relativistic shocks generate their own magnetic turbulence and accelerate protons robustly. The measured dimensionless acceleration rate is $\mathcal{R}_{\rm acc} = d(\gamma\beta_{\rm sh}^{-2})/d(t\Omega_{\rm ci}) \simeq 0.1$, and the non-thermal proton energy fraction is approximately 10%. These values are high enough, within the representative NGC 1068 coronal model considered here, for protons to reach ~ 100 TeV before cooling or escaping. The report also identifies the main limitation of the present survey: the calculations are 1D3V and therefore prioritize long ion-time evolution and parameter coverage over fully multidimensional turbulence.

1. Introduction

High-energy neutrinos are useful probes of cosmic-ray acceleration because they are produced when energetic hadrons interact with gas or radiation fields. The nearby Seyfert galaxy NGC 1068 is a particularly important example: IceCube has reported TeV neutrino emission from this source, whereas the corresponding TeV gamma-ray flux is strongly suppressed [2–4]. This combination points to a compact, radiation-rich accelerator near the central supermassive black hole. In such an environment, neutrinos escape, but high-energy gamma rays are absorbed by photon-photon pair production [5–7]. A hot AGN corona is therefore a natural candidate site.

The remaining problem is microphysical. Neutrinos with energies $E_\nu \sim 1.5$–15 TeV require parent protons with energies of order $E_p \sim 30$–300 TeV. Phenomenological models can assume an acceleration time or a diffusion coefficient, but those quantities depend on plasma processes at scales far below the size of the corona. In particular, the coronal shocks of interest are expected to be hot, weakly magnetized, trans-relativistic, and in many cases only mildly supersonic. These conditions are outside the simple strong-shock picture usually adopted in analytic models.

Diffusive shock acceleration (DSA) is a leading mechanism for converting bulk flow energy into non-thermal particles [8, 9]. In DSA, charged particles gain energy by crossing a collisionless shock many times while scattering off magnetic fluctuations on both sides of the shock. The key question for an HPC calculation is therefore clear: can the shock generate the turbulence and injection conditions needed for DSA, without imposing them by hand? The PIC method addresses this question by evolving particles and electromagnetic fields self-consistently.

2. Physical model and Numerical method

We consider a hot corona of radius $R_c = r_c R_g$ around a black hole of mass $M_{\rm BH}$, where $R_g = GM_{\rm BH}/c^2$ is the gravitational radius. If the shock is driven by infalling gas, its speed is of the order of the free-fall speed,

$$\frac{v_{\rm sh}}{c} \simeq 0.14 \left(\frac{r_c}{100}\right)^{-1/2}, \tag{1}$$

where $v_{\rm sh}$ is measured in the upstream rest frame and $\beta_{\rm sh} \equiv v_{\rm sh}/c$. The sonic Mach number $M_s = v_{\rm sh}/c_s$ depends on the sound speed $c_s = [\gamma_{\rm ad}(T_i + T_e)/m_i]^{1/2}$, with ion temperature T_i, electron temperature T_e, ion mass m_i, and adiabatic index $\gamma_{\rm ad} = 5/3$. For MeV-scale ion temperatures, shocks with M_s of a few are expected. The Alfvénic Mach number $M_A = v_{\rm sh}/v_A$ depends on $v_A = B_0/(4\pi n_0 m_i)^{1/2}$, where B_0 and n_0 are the upstream magnetic field and density. Millimeter measurements of radio-quiet Seyferts indicate coronal fields of roughly 10–100 G, motivating moderate M_A values [10–12]. The likely two-temperature nature of collisionless coronal plasmas motivates the survey over T_i/T_e [13, 14].

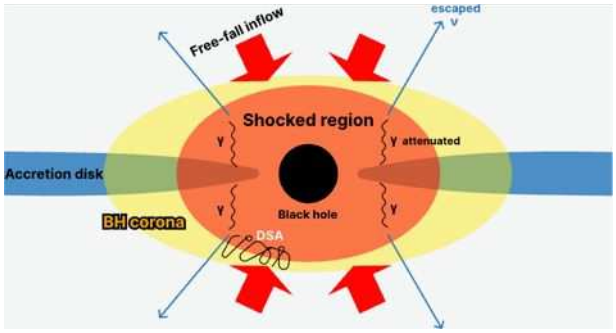


Figure 1. Physical picture of the neutrino-production scenario in a black-hole corona [1]. Infalling plasma can form a collisionless shock inside the hot corona. Protons accelerated near the shock interact with gas and photons, producing neutrinos (ν) that escape. The accompanying gamma rays (γ) are attenuated by the dense X-ray/UV radiation field, so the source can be neutrino bright while remaining faint at TeV gamma-ray energies.

The simulations follow Ly et al. [1] and use the open-source PIC code Smilei [15]. A drifting electron-ion plasma reflects from a conducting wall, launching a shock into the incoming flow in the downstream rest frame. The model is one-dimensional in space and three-dimensional in velocity and field components (1D3V). This design is a practical HPC compromise: it keeps the kinetic physics of ion and electron motion while making it possible to follow hundreds of ion gyroperiods over a large parameter survey. The upstream magnetic field is quasi-parallel, with an initial obliquity $\theta_{Bn} = 30^\circ$ relative to the shock normal. Times are reported in units of the ion gyrofrequency

$$\Omega_{\rm ci} = \frac{eB_0}{m_i c}, \tag{2}$$

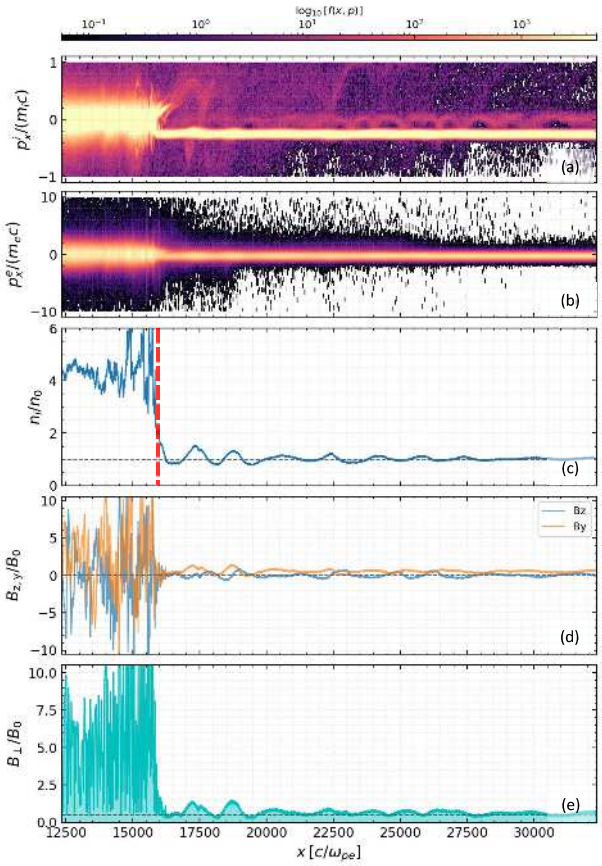


Figure 2. Reference quasi-parallel shock structure from the PIC simulation [1]. Panels (a) and (b) show ion and electron phase space. Panel (c) shows the ion-density jump that identifies the shock front. Panels (d) and (e) show transverse magnetic-field fluctuations and their amplified amplitude. The figure illustrates the complete kinetic sequence: ion reflection, upstream streaming, magnetic-field amplification, and particle scattering.

with proton charge e and speed of light c.

The HPC cost is set by the separation between electron and ion kinetic scales. The grid spacing and time step must resolve the electron plasma scale, whereas shock formation, upstream magnetic-field growth, and DSA appear only after many ion gyroperiods. The largest runs therefore require very long domains, millions of time steps, and large particle numbers to control noise in the non-thermal tail. This scale hierarchy is precisely why a reduced fluid or test-particle calculation is insufficient: such methods would have to assume the turbulence level, injection threshold, and diffusion coefficient that the PIC simulations measure self-consistently.

3. Shock structure and acceleration mechanism

Figure 2 shows the reference run with $M_s = 8$, $M_A = 26$, $T_i/T_e = 10$, and $v_{\rm pt}/c = 0.25$. A sharp ion-density ramp marks the shock front. A population of reflected and accelerated ions streams into the upstream region, carrying an electric current. This current amplifies transverse magnetic fluctuations ahead of the shock. In most of the survey, the dominant fluctuations are consistent with the non-resonant streaming instability, often called Bell's instability [16]; at lower M_A, resonant modes can also contribute. In either case, the important physical outcome is the same: the shock generates the scattering centers required for DSA [1, 17].

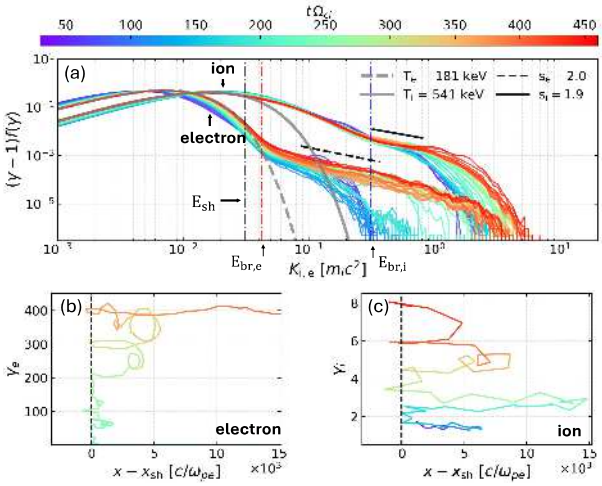


Figure 3. Downstream spectra and tracked particle trajectories [1]. Panel (a) shows the time evolution of the ion and electron energy spectra; the thermal peak is followed by a non-thermal tail. Panels (b) and (c) track representative electron and ion trajectories relative to the moving shock front. Repeated returns to the shock, together with secular growth of γ, are the kinetic signatures of DSA.

The downstream spectra and representative particle tracks are summarized in Figure 3. Both ions and electrons develop non-thermal tails above their thermal populations, but their energetics differ. Protons are injected efficiently and can repeatedly return to the shock. Electrons require pre-acceleration because their smaller gyroradii make it harder for them to sample the ion-scale turbulence. This scale separation explains why electron acceleration is more sensitive to upstream temperature and local magnetic-field amplification than proton acceleration.

For source modeling, the main value of the PIC calculation is that it replaces an uncertain microphysical assumption with a measured number. AGN-neutrino models often write the acceleration time in terms of a prescribed diffusion coefficient or gyrofactor. Here, the turbulence, scattering, and energy growth emerge from the same kinetic calculation. The measured acceleration rate can therefore be inserted into radiation and neutrino models without separately choosing an arbitrary scattering strength.

4. Results

4.1. Proton acceleration rate

After the shock and upstream turbulence reach a quasi-steady state, the maximum proton Lorentz factor grows approximately linearly with time, as expected for DSA. The simulations measure the dimensionless rate

$$\mathcal{R}_{\rm acc} \equiv \frac{d(\gamma\beta_{\rm sh}^{-2})}{d(t\Omega_{\rm ci})} \simeq 0.1, \tag{3}$$

where γ is the proton Lorentz factor [1]. Across the survey, this value varies only by a factor of about two. Equivalently, the time needed to reach a given Lorentz factor is

$$t_{\rm acc}(\gamma) \simeq \mathcal{R}_{\rm acc}^{-1}\gamma\beta_{\rm sh}^{-2}\Omega_{\rm ci}^{-1} \simeq 10\,\gamma\beta_{\rm sh}^{-2}\Omega_{\rm ci}^{-1}. \tag{4}$$

The scaling has the expected DSA form for Bohm-like diffusion: a stronger magnetic field increases $\Omega_{\rm ci}$, and faster shocks accelerate particles more rapidly as $\beta_{\rm sh}^2$ [8, 9]. The weak

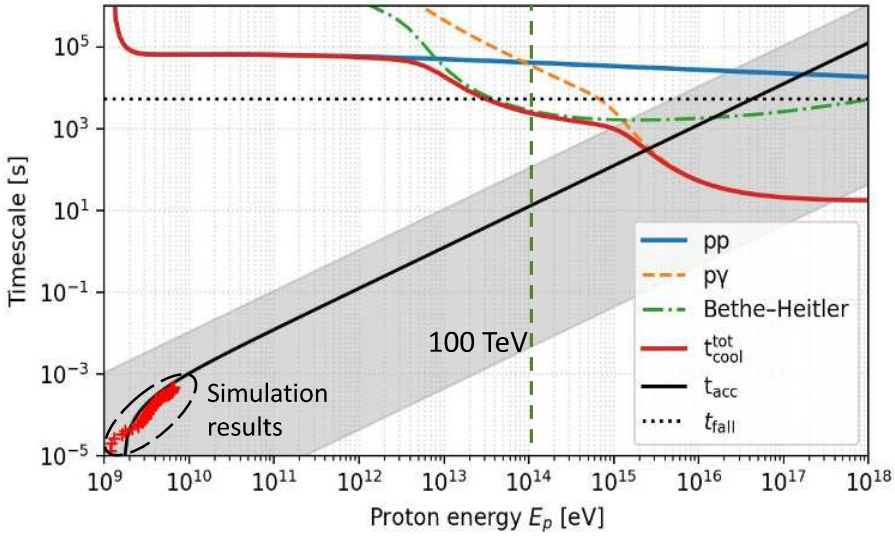


Figure 4. Application to NGC 1068 using the simulation-calibrated acceleration rate [1]. The black line is the proton acceleration time $t_{\rm acc}$, while the colored curves show cooling times from pp, $p\gamma$, and Bethe-Heitler interactions in the coronal plasma. The vertical dashed line marks $E_p \simeq 100$ TeV, a representative parent-proton energy for TeV neutrinos. Efficient shock acceleration is viable where $t_{\rm acc}$ is shorter than both cooling and dynamical times.

dependence on M_s is especially important for AGN coronae, because coronal shocks may be only mildly supersonic.

The main departures from the typical value occur when the character of the self-generated turbulence changes. At very low M_A, magnetic fluctuations are weaker and acceleration slows. At very high M_A, intermittent magnetic structures can partly disrupt the regular shock-crossing cycle. Over the coronal range favored by current observations, however, the acceleration rate remains close to Equation (3). This robustness is the central computational result of the parameter survey.

4.2. Energy partition

The energy fraction carried by each component is computed from the downstream particle spectrum,

$$\frac{E_j^k}{E_{\rm tot}} = \frac{\int d\gamma\,(\gamma-1) m_j c^2 f_j^k(\gamma)}{\sum_{j,k}\int d\gamma\,(\gamma-1) m_j c^2 f_j^k(\gamma)}, \tag{5}$$

where $j \in \{i, e\}$ denotes ions or electrons, $k \in \{\rm th, nt\}$ denotes thermal or non-thermal particles, m_j is the particle mass, and f_j^k is the corresponding distribution function. Across the survey, non-thermal ions receive roughly 10% of the downstream particle energy. This efficiency persists even for $M_s \simeq 2$, a regime that is often assumed to be unfavorable for strong acceleration. Non-thermal electrons remain below 1%, and for coronal-like $T_i/T_e \gtrsim 10$ are typically closer to 10^{-3}. This low electron fraction is consistent with the sensitivity of electron injection to pre-heating, thermal speed, and magnetic obliquity in quasi-parallel shocks [18, 19].

5. Implications for NGC 1068

Figure 4 applies the simulation-calibrated acceleration rate to NGC 1068. For representative coronal parameters $M_{\rm BH} = 10^{7.2} M_\odot$, $R_c = 20 R_g$, $B_0 = 100$ G, and $\beta_{\rm sh} = 0.32$, Equation (4) gives an acceleration time of order seconds at $E_p \sim 100$ TeV. This is shorter than the relevant cooling times from proton-proton, photomeson, and Bethe-Heitler interactions, and also shorter than the coronal dynamical time. The finite-size Hillas condition is satisfied for magnetic fields above roughly 10 G and shock speeds above a few percent of the speed of light [1, 7, 20].

The 10% non-thermal proton energy fraction is also sufficient at the energy budget level. If the shock radius is comparable to the coronal radius, the available shock power is large enough that the proton luminosity required for the IceCube spectrum is only a few percent of the estimated shock power. Thus the HPC simulations provide a quantitative bridge between the microscopic plasma physics of collisionless shocks and the macroscopic neutrino luminosity of AGN cores [1, 4, 7].

The conclusion is not that every AGN corona must be a neutrino source. Rather, the calculation removes a major obstacle for shock-based models: under coronal-like conditions, quasi-parallel collisionless shocks can accelerate protons rapidly and efficiently enough to supply the required parent cosmic rays. The same dense radiation field that enables efficient neutrino production also hides the accompanying gamma rays, making the scenario consistent with the multi-messenger appearance of NGC 1068.

6. Discussion and Conclusion

The important outcome from this research is that the result is not based on a single demonstration run. The survey campaign spans cold and two-temperature plasmas, low and moderate sonic Mach numbers, different Alfvénic Mach numbers, and different shock velocities. Across these cases, the proton acceleration rate and non-thermal energy fraction remain clustered around $\mathcal{R}_{\rm acc} \simeq 0.1$ and $E_i^{\rm nt}/E_{\rm tot} \sim 10\%$. These simulation-calibrated values can be reused by source modelers as sub-grid inputs for radiation and neutrino-production calculations in AGN coronae.

The main caveat is dimensionality. The present survey uses 1D3V simulations, which are ideal for reaching long ion times and broad parameter coverage but cannot capture all trans-

verse filamentation, shock rippling, and multi-dimensional turbulence. Future two- and three-dimensional simulations will be needed to test how these effects modify the numerical coefficient in Equation (3). Even so, the present survey establishes a physically grounded baseline: if shocks form in radio-quiet AGN coronae with magnetic fields of order 10–100 G and speeds of order $0.1c$–$0.5c$, they can provide both the acceleration timescale and the proton power required by the observed neutrino emission.

References

[1] Minh Nhat Ly, Yoshiyuki Inoue, Yasuhiko Sentoku, and Takayoshi Sano. Proton acceleration by collisionless shocks in supermassive black hole coronae: Implications for high-energy neutrinos. *The Astrophysical Journal*, 2026. doi: 10.3847/1538-4357/ae61ab.

[2] S. R. Kelner, F. A. Aharonian, and V. V. Bugayov. Energy spectra of gamma rays, electrons, and neutrinos produced at proton-proton interactions in the very high energy regime. *Physical Review D*, 74: 034018, 2006. doi: 10.1103/PhysRevD.74.034018.

[3] S. R. Kelner and F. A. Aharonian. Energy spectra of gamma rays, electrons, and neutrinos produced at interactions of relativistic protons with low energy radiation. *Physical Review D*, 78:034013, 2008. doi: 10.1103/PhysRevD.78.034013.

[4] IceCube Collaboration. Evidence for neutrino emission from the nearby active galaxy ngc 1068. *Science*, 378:538–543, 2022. doi: 10.1126/science.abg3395.

[5] Yoshiyuki Inoue, Dmitry Khangulyan, Susumu Inoue, and Akihiro Doi. On high-energy particles in accretion disk coronae of supermassive black holes. *The Astrophysical Journal*, 880:40, 2019. doi: 10.3847/1538-4357/ab2715.

[6] Kohta Murase, Shigeo S. Kimura, and Peter Meszaros. Hidden cores of active galactic nuclei as the origin of medium-energy neutrinos. *Physical Review Letters*, 125:011101, 2020. doi: 10.1103/PhysRevLett.125.011101.

[7] P. Padovani, E. Resconi, M. Ajello, et al. High-energy neutrinos from the vicinity of the supermassive black hole in ngc 1068, 2024.

[8] L. O'C. Drury. An introduction to the theory of diffusive shock acceleration of energetic particles in tenuous plasmas. *Reports on Progress in Physics*, 46:973–1027, 1983. doi: 10.1088/0034-4885/46/8/002.

[9] Roger Blandford and David Eichler. Particle acceleration at astrophysical shocks: A theory of cosmic ray origin. *Physics Reports*, 154:1–75, 1987. doi: 10.1016/0370-1573(87)90134-7.

[10] Tomonari Michiyama, Yoshiyuki Inoue, and Akihiro Doi. The centimeter-to-submillimeter broad-band radio spectrum of the central compact component in ngc 1068. *Publications of the Astronomical Society of Japan*, 75:874–882, 2023. doi: 10.1093/pasj/psad044.

[11] S. del Palacio, C. Yang, S. Aalto, et al. Millimeter emission from supermassive black hole coronae. *Astronomy & Astrophysics*, 701: A41, 2025. doi: 10.1051/0004-6361/202554936.

[12] Isaac M. Mutie, Santiago Del Palacio, Robert J. Beswick, et al. A consistent radio to sub-mm pc-scale study of the nucleus of ngc 1068. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 539:808–819, 2025. doi: 10.1093/mnras/staf524.

[13] Ryoji Kawabata and Shin Mineshige. Radiative spectra from disk corona and inner hot flow in black-hole x-ray binaries. *Publications of the Astronomical Society of Japan*, 62:621, 2010. doi: 10.1093/pasj/62.3.621.

[14] Feng Yuan and Ramesh Narayan. Hot accretion flows around black holes. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, 52:529–588, 2014. doi: 10.1146/annurev-astro-082812-141003.

[15] J. Derouillat, A. Beck, F. Perez, et al. Smilei: A collaborative, open-source, multi-purpose particle-in-cell code for plasma simulation. *Computer Physics Communications*, 222:351–373, 2018. doi: 10.1016/j.cpc.2017.09.024.

[16] A. R. Bell. Turbulent amplification of magnetic field and diffusive shock acceleration of cosmic rays. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 353:550–558, 2004. doi: 10.1111/j.1365-2966.2004.08097.x.

[17] Damiano Caprioli and Anatoly Spitkovsky. Simulations of ion acceleration at non-relativistic shocks. i. acceleration efficiency. *The Astrophysical Journal*, 783:91, 2014. doi: 10.1088/0004-637X/783/2/91.

[18] Siddhartha Gupta, Damiano Caprioli, and Anatoly Spitkovsky. Return currents in collisionless shocks. *The Astrophysical Journal*, 968:17, 2024. doi: 10.3847/1538-4357/ad3e75.

[19] Siddhartha Gupta, Damiano Caprioli, and Anatoly Spitkovsky. Speed-dependent threshold for electron injection into diffusive shock acceleration, 2025.

[20] A. M. Hillas. The origin of ultra-high-energy cosmic rays. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, 22:425–444, 1984. doi: 10.1146/annurev.aa.22.090184.002233.

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

杉本 馨
京都大学 基礎物理学研究所　（現所属：芝浦工業大学 SIT 総合研究所）

1. イントロダクション

1.1　連星中性子星合体

中性子星とは主に中性子により構成された天体であり、半径が 10km 程度しかない。一方で太陽程度の質量を有し、表面重力は地球表面の一千億倍に達する。また、磁気圏での最大磁場強度は 10^8~10^{15}G と見積もられている。

2つの中性子星が互いの周りを公転する物理系を連星中性子星と呼ぶ。互いの重力の影響により相対距離が小さくなっていき、最終的に中性子星同士の衝突・合体を経て、より重たい中性子星やブラックホールが形成されると考えられている（図 1 参照）。合体の際に電磁波以外にも重力波が同時に観測されており[1]、これらの信号から極限環境下の物理過程の解明を目指す「マルチメッセンジャー物理学」という新たな研究分野が誕生した。加えて、合体の最中に r-過程を通じて金などの重元素が生成されている可能性も示唆されており、核物理の検証という観点からも重要な現象である。

1.2　磁気散逸過程とプリカーサ(Precursor)

合体時・合体後の状態は、上記の重力波・電磁波の観測により解析できると考えられているが、合体前の中性子星の磁気圏構造などを推定する方法は確立されていない。中性子星の磁気圏には

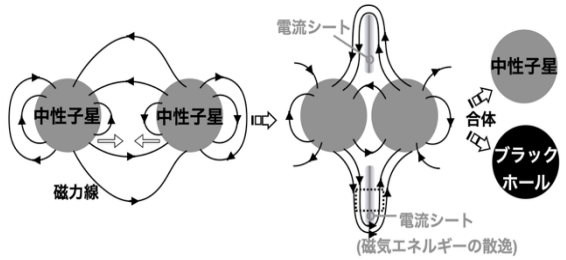


図 1. 連星中性子星合体の概略図。ここでは２つの中性子星の持つ磁気モーメントが互いに反転している場合を考えている。

膨大なエネルギーが存在するため、何らかの散逸過程を通じて強力な電磁波信号が駆動される可能性がある。そこで、注目されているのがプリカーサ（precursor）と呼ばれる合体前の先行電磁波である。先行研究[2]では、一般相対論的磁気流体シミュレーションにより合体前の磁気圏構造の解析が行われた。2 つの中性子星の磁場が反平行のまま接近すると、その相互作用面では磁場の散逸に伴い電流シートが形成され、磁気リコネクションにより生じたプラズモイド（プラズマを含む磁気島）の合体から電磁波が生成されるモデルが議論されている。しかし、プリカーサが観測された例はなく、磁気エネルギーの散逸過程にはさらなる検証が必要である。特に、先行研究は流体描像ゆえに非熱的粒子の発生や、2 光子衝突による電子陽電子対生成過程などの粒子描像のエネルギー変換過程の詳細は明らかとなっていない。

本研究では粒子描像での磁気圏プラズマのダイナミクスを理解すること、特に、磁気リコネクションの成長・磁気エネルギーの散逸過程・輻射スペクトルのパラメータ依存性を明らかにすることを目的とする。今回の研究では、磁気リコネクションの駆動要因の一つであるティアリング不安定性（後述）に着目した。先行研究で得られた相対論的環境下でのティアリング不安定性の成長率[3]の理論式から見積もられる最大成長波数が数値シミュレーションの結果と合わないことが確認されていた。ここでの相対論的とは、磁場エネルギー密度がプラズマの静止エネルギー密度より大きい状況（$\sigma \equiv B^2/8\pi\rho c^2 > 1$: B=磁場強度, ρ=プラズマ質量密度, c=光速）を指す。今後のシミュレーションとの検証を見据え、理論式の修正を行なった。また、荷電粒子に対する輻射減衰過程・対生成過程の影響を考慮した包括的

な理論式が確立されていない。当該相対論的な環境下での磁気リコネクションの成長速度を理解するには、これらの物理過程を考慮した包括的な理論式が必要となる。そこで、輻射減衰過程を考慮したティアリング不安定性の成長への影響とプラズモイド形成・合体への影響も数値的に調査した。

2. 計算の準備

2.1 ティアリング不安定性

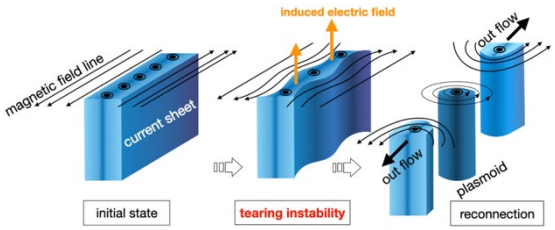


図 2：平面電流シートにおけるティアリング不安定性の概略図。後に磁気リコネクションへと発展する。

ティアリング不安定性の概略を述べるために、図 2 の左端のような平面電流シートとそれを挟み込む反平行磁場が平衡状態にある系を設定する。このシート中に局所的かつ小さな摂動(例えば電流摂動)が生じたと仮定する。すると、プラズマは摂動を消去する（電流を補填する）ため電場を発生させる。しかし、荷電粒子には質量があるため瞬時に電流の補填は達成されない。加えて、荷電粒子は磁力線方向に熱速度で動くことができ、結局、電流を補填する前に当該加速（電場）領域から出ていってしまう。摂動で生じた電場が生き残り、ファラデーの法則に従い摂動磁場（磁力線の歪み）が成長する。この成長した磁場を消去しようとさらに強い電場が発生するが、先ほどと同じように、完全には電流の補填が起きないので磁場の成長と電場の成長が交互にフィードバックされる。これがティアリング不安定性の大まかな流れである。今回取り扱うような相対論的環境における波数 k 毎のティアリング不安定性の線形成長率$\gamma(k)$の理論式は先行研究により導出されており、以下の形で書ける[3]。

$$\gamma(k)\tau_c = \frac{2\sqrt{2}}{\pi} kw(1-k^2w^2)\frac{\beta^{\frac{3}{2}}}{\Gamma_\beta} \qquad (1)$$

ここでw、β、Γ_βはそれぞれ電流シートの厚み、電流を構成する荷電粒子の平均的なドリフト速度の大きさを光速で規格化した値、βから定義されるローレンツ因子を指す。τ_cはシートの厚みwを光速cで割った値である。1.2 で述べたように本研究では(i)理論式の修正を行い、スーパーコンピュータ SQUID による大規模で高精度なシミュレーションとの比較を行った。新しい理論式の詳細は現在論文投稿準備中[4]であり、本報告書では数値検証結果を中心に報告する。シミュレーション手法として Particle-In-Cell(PIC)を用いる。PIC シミュレーションの技法自体はよく知られたものであり、詳細について著名な文献[5]を参考されたい。そして、(ii)荷電粒子からの輻射減衰過程を考慮した場合でのティアリング不安定性の線形成長への影響とプラズモイド形成・合体に対する影響を PIC シミュレーションにより調査した。

3. 二次元大規模並列 PIC 計算

3.1 理論式検証のためのシミュレーション設定

新しく得られた理論式を検証するために二次元平面でのティアリング不安定性の PIC シミュレーションを SQUID（汎用 CPU 群, 20~200 nodes）により実行した。使用した PIC コードは阪大レーザー研の千徳靖彦教授謹製 PICLS[6]である。

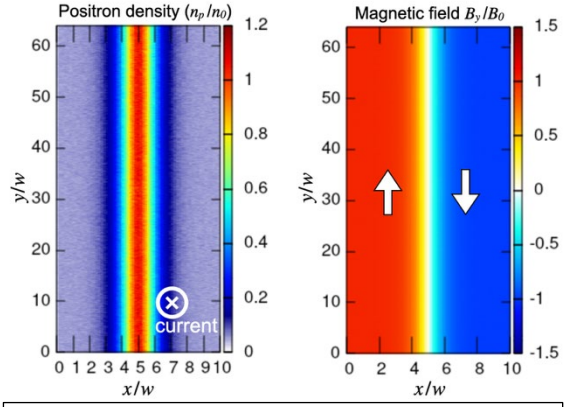


図 3(左)は初期の粒子密度プロファイル。電荷中性を満たすに電子、陽電子は同じ分布を持つ。(右)は初期磁場プロファイルを表している。電流シート中心を境に、磁場の向きが反転している。

計算領域は図 3 に示すような xy 平面上の長方形領域であり、z 方向については物理量が一様な分布を持っていると仮定している。今回の計算では、相対論的温度における宇宙プラズマとして電子-陽電子ペアプラズマを想定している。粒子密度・磁場は Harris¥平衡状態[7]にあり、それぞれ以下の式で表される。

$$n(x) = n_0 \cosh^{-2}\left(\frac{x}{w}\right) \tag{2}$$

$$B_y(x) = B_0 \tanh\left(\frac{x}{w}\right) \tag{3}$$

粒子は xy 平面（紙面）に対し垂直な方向に流れて電流を形成し当該磁場を支えている。一方で、磁場は磁気圧によって電流シートを支えている。原理的には、微小な数値ノイズによりティアリング不安定性が駆動され得るが、その場合、多大な計算時間を要する可能性がある。そこで、次式を満たす人工的なベクトルポテンシャル摂動を印加し不安定性を駆動した。

$$\delta A_z(x,y) \propto \exp\left(-\frac{x^2}{{l_x}^2} - \frac{y^2}{{l_y}^2}\right)\cosh^2\left(\frac{x}{l_x}\right) \tag{4}$$

ここで、$l_x = 2w,\ l_y = w$である。初期パラメータとして、粒子の温度を $10m_ec^2$ に固定し、β = 0.3, 0.5, 0.8 の場合で計算を行った。m_e は電子の静止質量を指す。0.5, 0.8 の場合では x, y 方向のグリッド数はそれぞれ 2000, 12000 とし、w=200 グリッドとした。0.3 の場合では全体的に成長率が小さいため、数値ノイズを抑えるようにグリッド数を各方向において 4 倍（高精度化）した。また、いずれの計算においても、1 セルあたりの平均粒子数は電子（陽電子）50 個である。時空間グリッドの間には、$c\Delta t = \Delta x$が成立している。領域の境界条件は y 方向に対して周期境界条件、x 方向に対して Conducting-Wall 条件を課している。

3.2　輻射減衰過程を考慮した計算設定

上述の PICLS コードには電磁場にさらされた荷電粒子に対する輻射減衰の効果を運動方程式の中に自己無撞着に含めることができる。これを利用して、ティアリング不安定性の線形成長に対する輻射減衰の影響を調査した。3.1 にある β = 0.8 の計算設定をベースとし、温度を 25 m_ec^2(σ = 50), 100 m_ec^2(σ = 200)の 2 通りでシミュレーションした。また、プラズモイドの生成・合体に対する影響の調査も行った。初期のプラズマの温度を 100 m_ec^2、β = 0.8 とした。初期の摂動の形として、

$$\delta A_z(x,y) \propto \exp\left(-\frac{x^2}{{l_x}^2}\right)\cos\left(\frac{2\pi}{L_y}y\right) \tag{5}$$

という周期的な摂動を印加しプラズモイドを発生させた。L_y は y 方向の計算領域の長さである。この計算では非線形段階までの長時間計算を行う都合上、w = 100 グリッドとした。

時空間グリッドの関係性、境界条件は 3.1 の設定と同じである。

4. 計算結果

4.1　成長率理論式の検証

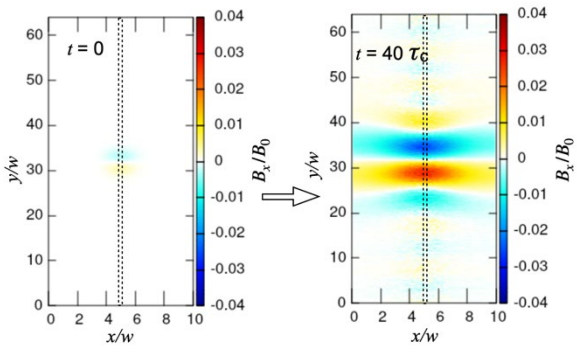


図 4. 磁場の x 成分 B_x の時間発展。図中の波線は平均値$\overline{B_x}(y)$を計算する領域を示す。

3.1 で述べた β = 0.8 の場合での磁場摂動の時間発展の様子を図 4 に示す。初期に与えられた状態（図 4 左）に比べ、成長が進んだ段階（図 4 右）では強度の増加および分布の拡大が確認できる。また、y 方向に対して磁場の正負が周期的に反転した小さな構造も現れている。図 4 中の波線領域に示された 0.49 < x/w < 5.1 の幅で B_x の平均分布$\overline{B_x}(y)$を計算する。この$\overline{B_x}(y)$を y 方向に関してフーリエ変換し、各波数 k のフーリエ係数の大きさに対して、横軸を時間、縦軸を係数の大きさとした場合の傾きから成長率を導出した。既存の理論式から見積もられる最大成長波数 $k_{\max}$ は $k_{\max}w$ = 0.577 の位置に現れるが、先述の通り、PIC シミュレーションの結果と不整合であることが知ら

れていた。シミュレーションでは $k_{max}w = 0.39$ 程度の長波長側に最大成長率が現れていた。今回新しく得られた理論式ではこの最大成長波数を正確に再現することを確認できた。

4.2　輻射減衰の影響

荷電粒子に対する輻射減衰の計算の on/off を切り替え 4.1 と同じようにして、成長率を導出した。シミュレーションの結果、輻射減衰の効果が小さい場合(σ = 50)では輻射減衰過程を考慮しない計算結果と同じ成長率が得られたが、輻射減衰の効果が大きい(σ = 200)場合では差異が確認された。まず、最大成長波数がより短波側にシフトした。加えて、全体的に成長率が増加し、特に短波長側での成長率の増加が顕著にみられた。詳細な解析は今後の課題であるが、上記の振る舞いの原因として、輻射減衰により粒子がエネルギーを失うことでプラズマ全体の圧力が下がり、シートが磁気圧によって押し潰されやすくなったことが考えられる。

次に、プラズモイド生成・合体に対する輻射減衰のシミュレーション結果を図 5,6 に示す。図 5 では初期の粒子（陽電子）密度分布と式(5)に係る初期磁場摂動の分布を示している。この周期的な磁場構造に応じてプラズモイドが形成される。図 6 は輻射減衰を考慮しない場合と考慮した場合での陽電子密度の時間発展に着目している。輻射減衰を考慮しない場合では、形成されたプラズモイド同士が合体を経てより巨大化・高密度へ遷移していくことが確認された。一方で、輻射減衰を考慮した場合では合体は抑制され、むしろ、プラズモイドのサイズが縮小していき、それに伴い密度が上昇していく様子が見られた。プラズモイドのサイズは、合体の際に生じる電磁波の波長を決める要素であるため、輻射減衰を考慮することの重要性を示す結果である。パラメータによっては、プラズモイドの合体が完全に抑制される可能性もあるため、さらなる検証が必要である。

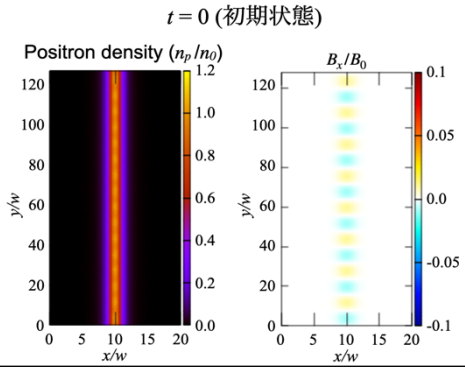


図 5.　プラズモイドの発生・合体に対するシミュレーションの初期設定。

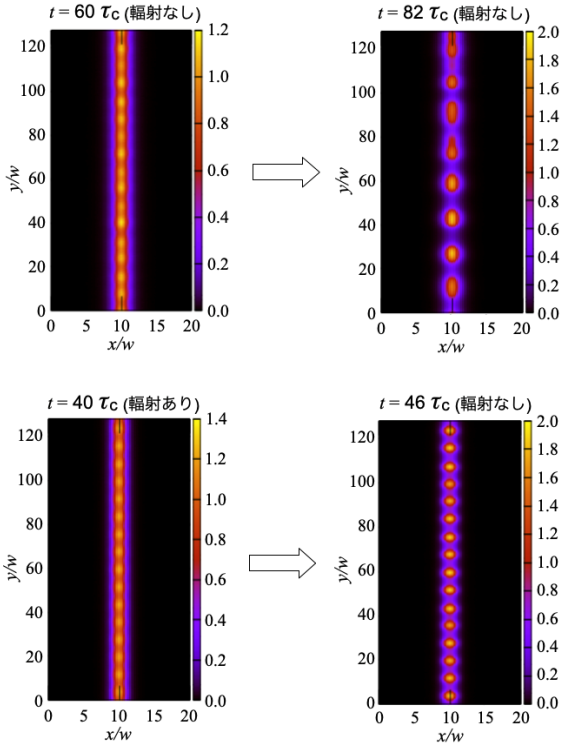


図 6. プラズモイドの時間発展に対する輻射減衰の影響。

参考文献

(1) B.P. Abbott *et al*., ApJL, **848**, L12, (2017).

(2) E.R. Most and A.A. Philippov, ApJL, **893**, L6, (2020).

(3) M. Hoshino, ApJ, **900**, 66, (2020).

(4) K. Sugimoto and K. Ioka, in prep.

(5) C.K. Birdsall and A.B. Langdon, *Plasma Physics via Computer Simulation*, McGraw-Hill, New York, (1985)

(6) Y. Sentoku and A.J. Kemp, J. Comput. Phys., **227**, 6846, (2008)

(7) E.G. Harris, Nuovo Cim., **23**, 115, (1962)

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

フォノンは結晶中の原子の集団振動に起因する準粒子であり、熱伝導をはじめとして電子・光・磁気・機械特性など多様な物性に重要な役割を果たす。熱マネジメントの観点から、格子熱伝導率を含む非調和フォノン特性への理解は、次世代電子デバイスのパッケージング材料や熱電変換材料の設計において不可欠である。また超電導体では電子ーフォノン結合が臨界温度を決定する重要な因子であり、磁性体においてもスピンーフォノン相互作用が物性に影響する。このように、フォノン特性の理解は熱物性だけでなく、材料科学における幅広い分野で重要な課題となっている。

近年、マテリアルズ・インフォマティクス（MI）の急速な発展により、大規模データと機械学習を組み合わせた材料探索が加速している。Materials Project（約 20 万材料）・Alexandria（580 万構造）・ICSD などの材料データベースが整備され、電子バンド構造・形成エネルギー・誘電特性などの電子物性については大規模なデータが蓄積されてきた。一方で、フォノンに起因する非調和物性（格子熱伝導率・フォノン寿命・散乱率・スペクトル熱伝導率など）に関するデータベースは依然として限られており、材料探索への活用が進んでいない。

格子熱伝導率の第一原理計算には大規模超格子構造（数十〜300原子規模）に対する大量の力計算が必要であり、1 材料あたり数 100 NH を要する。このため、既存の大規模計算研究においても取り扱われる材料数は 100 材料程度にとどまっていた。近年のスーパーコンピュータ環境の発展により、大量の計算を並列・自動的に実

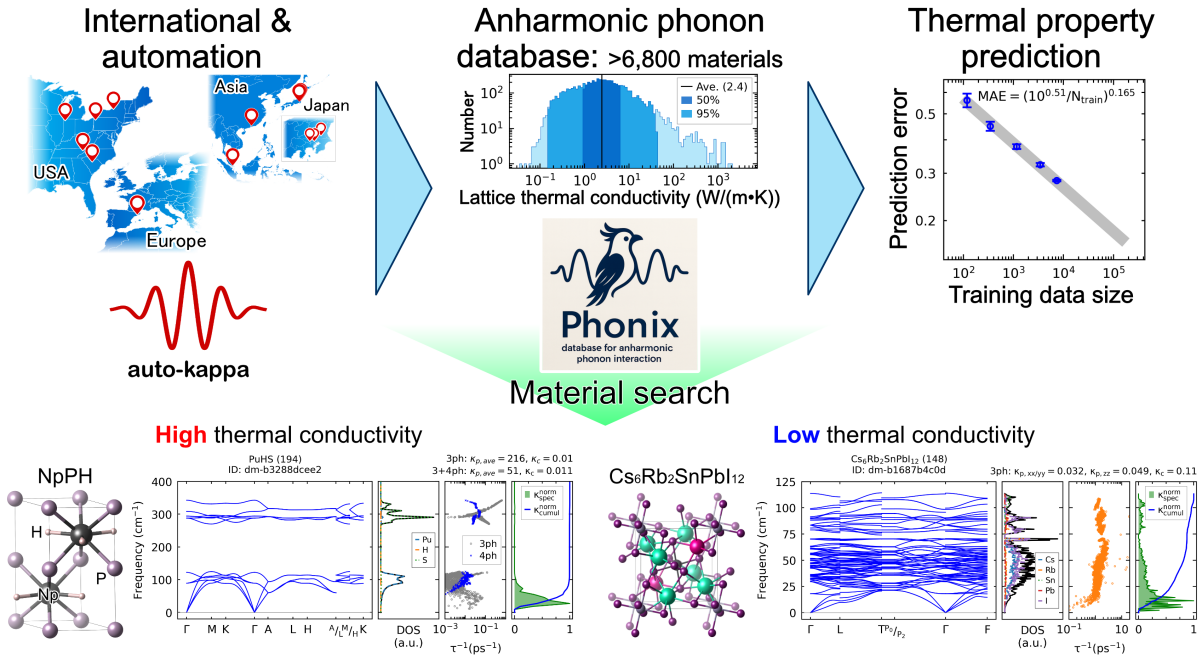


図 1. 本プロジェクトの概要：非調和フォノン特性の第一原理計算を自動化（auto-kappa）し、国際的な協力のもと約 7,000 材料以上の熱伝導率を含むデータベース（Phonix）を構築した。構築したデータベースと GNN を用いて熱物性予測の機械学習モデルを構築し、深層学習スケーリング則を実証した。さらに予測モデルを用いて約38万材料をスクリーニングし、低熱・高熱伝導の候補材料を特定した。

行するハイスループット計算が現実的となりつつある。本研究では、auto-kappa と名付けた自動化計算ワークフローを開発し、大阪大学 D3 センターの SQUID をはじめとする大規模計算機を活用することで、約 7,000 材料以上の非調和フォノン特性を計算し、大規模データベース（Phonix）を構築することに成功した（図 1）。

また本プロジェクトでは、auto-kappa ソフトウェアをオープンソースとして公開するとともに、国内外の研究者との国際共同研究として大規模なデータ生成を推進した。これにより、異なる機関の計算資源を有効活用し、単独の研究グループでは困難な規模のデータセットを効率的に構築することが可能となった。本稿では、本研究の計算手法・結果・考察を報告する。

2. 計算手法・モデル等

2-1. 第一原理計算の設定

第一原理計算には平面波基底の密度汎関数 DFT コード VASP [1,2]を使用した。交換相関汎関数には GGA/PBEsol 汎関数を採用し、イオンコアは射影増強波（PAW）法で扱った。カットオフエネルギーは推奨値の 1.3 倍に設定し、k 点数は $N_i = \max(1, \mathrm{int}(R_k/|\mathbf{b_i}|) + 0.5)$（$R_k = 20$ Å）により決定した。構造最適化は完全緩和 2 回（VASP オプション：ISIF = 3）、次いで格子定数固定での原子位置最適化（ISIF = 2）の計 3 段階で実施し、フォノン計算における虚数振動数の発生を抑制した。

2-2. フォノン特性の計算

フォノン特性の解析には ALAMODE [3]を用いた。慣用単位胞を基に最大 150 原子の超格子を自動生成し、有限変位法（変位 0.01 Å）により調和力定数（FC2）を評価した。調和フォノン特性では q 点密度を 500, 1000, 1500 q-points·Å^3/atom の 3 種類に設定し、Born 有効電荷から非解析補正（NAC）を適用した。

非調和力定数（FC3）の計算では、カットオフ距離を max(4.3 Å,第 3 近接原子間距離）に設定し、変位量 0.03 Å を使用した。必要な変位パターン数が 100 以上の場合は LASSO 回帰、それ以下では有限変位法を適用した。得られた力定数から BTE を解いて格子熱伝導率を算出した。虚数振動数が生じた場合は厳密な多段階構造最適化や大規模超格子（最大 200 原子）の導入を自動的に実施した。これら一連の処理は auto-kappa（https://github.com/phonix-db/auto-kappa）により統合・自動化されている。

2-3. SQUID を用いたハイスループット計算

大規模ハイスループット計算には、主に大阪大学 D3 センターの SQUID の CPU ノードを約 65 万 NH 使用した。auto-kappa では、1 材料あたり 1 ノードを割り当てたジョブを多数同時に投入することでハイスループット計算を実現した。各ノード内では VASP および ALAMODE の計算を MPI 並列により実行し、ノード間通信のオーバーヘッドを生じさせない高効率な並列計算を実施した。ALAMODE によるメモリ増大にはノード内並列数の自動制御で対応した。

HPCI の枠組みでは、海外の共同研究者も計算資源を利用可能であり、米国・欧州・アジアの複数機関が参加した国際共同計算体制を構築した。この体制により、データ生成の大幅な加速と多様な材料系へのカバレッジ拡大が実現した。

2-4. 機械学習モデルの構築

得られたデータを用いてグラフニューラルネットワーク（GNN）に基づく機械学習モデルを構築した。スカラー量（室温の格子熱伝導率：κ_p）の予測には CGCNN [4]を、スペクトル・累積熱伝導率（κ_{cumul}）の予測には等変ニューラルネットワーク e3nn [5]を採用した。CGCNN では原子種・電気陰性度などの 9 種物性からなる 1-hot エンコーディングをノード記述子とし、e3nn では SE(3)対称性を考慮した等変な 3 次元エッジ記述子を用いた。データは材料ベースで 80/10/10%に分割し、50 アンサンブルにより予測の不確かさも評価した。

3. 計算結果

3-1. Phonix データベースの構築

本研究では、Phonondb および Materials Project に収録された非金属・非磁性の結晶材料を中心

に約 2 万材料を対象とした。SQUID をはじめとする大規模計算機を用いたハイスループット計算により約 7,000 材料以上の非調和フォノン特性の計算を完了し、Phonix データベース（https://phonix-db.org）として公開した。現時点では約 7,000 材料の非調和フォノンデータが公開されており、フォノン分散・状態密度（DOS）・格子熱伝導率・フォノン寿命・スペクトル熱伝導率などのデータを提供する。

Phonix データベースに収録された材料は幅広い結晶系・対称性を有し、ほぼ全ての空間群を網羅している。また、単位砲内の原子数は最大 160 個であり、複雑な結晶構造も含まれている。格子熱伝導率 κ_{lat}（300 K）の分布は 10^{-1} から 10^{3} W/(m·K) 以上に広がり、平均値は約 2.4 W/(m·K)、全材料の 50%が 0.15〜6.3 W/(m·K)の範囲に分布する。体積と熱伝導率の間には $\log_{10}(\kappa_{lat}) \propto -1.89\log_{10}(V_{atom}) + 2.76$ の関係が確認された。また全材料の 8.4% でフォノン波動性の寄与（κ_c）がフォノン粒子性の寄与（κ_p）以上になることが確認され、複雑な構造をもつ材料では波動的熱輸送が重要になることが示された。

3–2. 計算精度の検証

計算精度の検証のため、Phonondb データおよび 103 種の単結晶化合物の実験値と比較した結果、全体的に良好な一致が確認された。一部で計算値が実験値を上回る傾向があり、4 フォノン散乱・スピン軌道相互作用・長距離相互作用などが現在の 3 フォノン計算パイプラインに含まれていないことが主な原因と考えられる。特に高熱伝導材料では 4 フォノン散乱の寄与が顕著であり、これを考慮した計算では実験値との一致が改善されることが確認されている。

また、超格子サイズや q 点密度の収束不足も一部の材料での誤差要因となりうる。超格子サイズを 200 原子以上、q 点密度をより高く設定した場合に精度が向上することが確認されており、今後の改善策として検討されている。機械学習モデルの活用により、こうした計算コストの高い収束チェックを効率化することも今後の課題のひとつである。

3–3. 機械学習モデルの精度とスケーリング則

機械学習モデルの訓練結果として、学習データ数（N_{train}）と予測誤差（MAE）の関係において、κ_pに対してMAE $\propto N_{train}^{-0.165}$、累積熱伝導率（$\kappa_{cumul}$）に対してMAE $\propto N_{train}^{-0.141}$というべき乗則スケーリングが確認された。これは大規模言語モデルで発見された深層学習における “neural scaling law” が熱物性予測にも成立することを初めて実証した結果であり、データ数の増加に伴い予測精度が継続的に向上することを意味する。$N_{train} = 7{,}308$のとき MAE(test) = 0.282（$\log_{10}$スケール）が達成された。

なお、高熱伝導材料の予測精度（MAE = 0.68）は低熱伝導材料（MAE = 0.27）と比べて低く、高熱伝導材料が単純な組成・構造を持ちモデルが学習できる構造情報が少ないことや、4 フォノン散乱の無視による過大評価が原因と考えられる。

3–4. 大規模スクリーニング

構築したモデルを用いて GNoME データベース[6]の約 38 万材料をスクリーニングした結果、高熱伝導材料（$\kappa_p^{3ph} > 200$ W/(m·K)）として 169 材料、低熱伝導材料として最低の 21 材料を特定した。高熱伝導材料の候補として六方晶系 $P6_3/mmc$ 型の NpPH （$\kappa_{p,zz}$ = 277 W/(m·K)）、PaPH（$\kappa_{p,yy}$ = 264 W/(m·K)）、PuHS（κ_p = 216 W/(m·K)）が特定された。ただし 4 フォノン散乱を考慮すると NpPH の熱伝導率は約 78 W/(m·K) まで低下する。

低熱伝導材料の候補としては $Cs_6Rb_2SnPbI_{12}$（$\kappa_{lat} \approx 0.15$ W/(m·K)）が最低値を示し、特定された 9 材料中 6 材料がセシウムを含む複雑な組成であった。これらの低熱伝導材料では異なる原子種のフォノンモードが広い周波数域に分散しており、非調和な相互作用を促進することが低熱伝導の原因と考えられる。

4. 考察

本研究により、第一原理計算に基づく大規模非調和フォノン特性データベースの構築と機械学習予測の有効性が実証された。スケーリング則の確認はデータ駆動型材料探索において重要な知見であり、大規模データ生成への継続的な取り組みが予測性能向上に直結することを示している。大阪大学 D3 センターの SQUID が提供する大規模並列計算環境は、本プロジェクトの高スループット計算を支える不可欠な基盤となった。

さらなる精度向上には、4フォノン散乱・フォノン繰り込み効果・電子ーフォノン相互作用の導入が必要であり、これらの計算コストは 3 フォノン計算に比べて 1〜2 桁増大する。機械学習ポテンシャル（MLP）の導入や利用ソフトウェアの GPU 化による計算効率化が今後の重要な課題である。本データベースは格子熱物性に留まらず、電子ーフォノン相互作用を通じた超電導転移温度・キャリア移動度や、スピンーフォノン相互作用を通じた磁気特性の理解にも活用できる可能性があり、超電導体・スピントロニクス材料など幅広い分野での応用が期待される。

Phonix データベースが幅広い空間群・原子数にわたる多様な結晶構造を含む点は、第一原理フォノンデータベースと比較して際立った特徴であり、普遍的な物性予測モデルの構築に向けた基盤データとしての価値は高い。今後は、自動実験と組み合わせた closed loop 型材料探索への応用が期待され、第一原理計算・機械学習・実験の三者を統合したデータ駆動型の材料開発プラットフォームの構築に向けた重要な基盤となることが期待される。

参考文献.

[1] G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B 47, 558 (1993).

[2] G. Kresse and J. Furthmüller, Phys. Rev. B 54, 11169 (1996).

[3] T. Tadano, Y. Gohda, and S. Tsuneyuki, J. Phys.: Condens. Matter 26, 225402 (2014).

[4] T. Xie and J. C. Grossman, Phys. Rev. Lett. 120, 145301 (2018).

[5] M. Geiger and T. Smidt, arXiv:2207.09453 (2022).

[6] A. Merchant et al., Nature 624, 80 (2023).

[7] M. Ohnishi et al., npj Computational Materials 12, 150 (2026). DOI: 10.1038/s41524-026-02033-w.

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

高木 悠司
大阪大学 レーザー科学研究所

1. はじめに

1.1 ハイパワーレーザーによる高エネルギー密度プラズマの生成

出力がペタワット級の高強度ハイパワー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状態を実現できる。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り、レーザー核融合・実験室宇宙物理実験等様々な応用研究に用いられている。

レーザーからプラズマへのエネルギー変換過程は、レーザーの集光強度によって大きく変化する。強度が 10^{18} W/cm^2 以上の相対論的領域ではレーザー電場によるプラズマ中電子の相対論的速度への直接加速が支配的であり、10^{13} W/cm^2 以下の比較的低強度領域では逆制動輻射（衝突）による電子加熱が主となる。両者の間に位置する強度が $10^{14\text{-}16}$ W/cm^2 の近相対論的強度領域でのレーザープラズマ相互作用(Laser-plasma interaction: 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 (Two plasmon decay instability: TPD) 等のパラメトリック不安定 (Parametric instability: PI) と総称される LPI がレーザーからプラズマへのエネルギー変換において重要な役割を果たす事が知られている[1]。

PI はレーザー波によるプラズマ波（と散乱波）励起現象であり、不安定によって大振幅の電子プラズマ波 (Langmuir wave: LW) が励起されると、周囲の電子を捕獲し自身の位相速度まで捕獲電子を加速させる。この電子捕獲及び加速機構はレーザー遮断密度以下の低密度プラズマ中においてレーザー周期の 10-100 倍程度で成長し、波のエネルギーを得た電子は数 100 eV～数 keV の熱的平衡にある周囲の流体的プラズマより一桁以上エネルギーの高い非熱的高速電子となる。発生した高速電子は遮断密度以上の高密度プラズマ中にレーザーのエネルギーを輸送し、レーザー駆動衝撃波等のプラズマ流体運動に影響を与える。レーザー核融合では爆縮用レーザーの強度がこの近相対論的領域に達し爆縮性能を左右する為、長年この強度領域での PI の成長及び高速電子発生過程の研究が行われてきた[2]。特に近年、衝撃点火方式と呼ばれる高速電子によるエネルギー輸送を衝撃波増強に積極的に利用するレーザー核融合方式が提唱され[3]、本方式を想定したレーザー・プラズマ条件下での PI の成長及び PI によって発生する高速電子フラックスの精確な見積もり等が重要となっている。

1.2 誘導ラマン散乱（SRS）による非熱的高速電子発生

PI の中でも SRS は大振幅の LW を励起し、典型的には数 10 keV の高速電子を発生させる。また、SRS 再散乱等の多段階過程を経る事でより位相速度の速い LW の励起を可能とし、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[4-5]。

従来 SRS による高速電子発生の理論は、一様密度プラズマ中での SRS による単一モード（波数・周波数）LW 励起モデルとその励起 LW の簡素化マクスウェル速度分布プラズマ中での砕波モデルとの組み合わせによって理解されてきた[6]。また、密度が非一様なプラズマ中や長時間の非線形成長過程での LW 励起や高速電子発生過程については、ブラソフや Particle-in-cell (PIC)等

の運動論的シミュレーションを用いて調べられてきた。運動論的シミュレーションはレーザー波や励起プラズマ波と電子との波動粒子間相互作用を取り扱える。

著者はこれまで 1 次元 PIC シミュレーションを用いて、レーザー生成プラズマでよく見られる指数関数的密度分布を持つプラズマ中でのレーザー周期の $10^{3\text{-}4}$ 倍程度の長時間に渡る SRS の成長と電子加速過程について研究を行ってきた。前年度までの研究から、10^3 倍を超える LPI 下では LW による電子捕獲では無く、SRS の成長飽和に伴い生じる揺動電場中での統計的な加速過程によって、数 100 keV の平均エネルギーを持つ相対論的高速電子発生が可能となる事が分かってきた[7-9]。そこで本年度は、2 次元 PIC シミュレーションを実施し、プラズマ分布の多次元性及びレーザーの偏光方向が SRS の成長とこの統計的加速過程にどの様に影響するかを調査した。

2. 2 次元 PIC シミュレーションを用いた SRS 成長・相対論的高速電子発生過程の調査

2.1 シミュレーション設定

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)の時間発展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。衝突無しの 2 次元 PIC シミュレーションを行った。使用した PIC コードは PICLS コード[10]で、設定は前年度行った 1 次元計算[7]を y 方向に広げたものである。2 次元に拡張した事で、レーザー伝搬軸(x 軸)上外の波数ベクトルを持つプラズマ波励起が可能となり、また、レーザーの偏光面がパラメーターとして増える。ここでは、p 偏光（電場は y 方向、磁場は z 方向に振動）と s 偏光（電場は z 方向、磁場は y 方向に振動）の二通りに関して、y 方向をレーザー波長 λ の 20 倍に広げた計算結果を示す。レーザーは平面波（レーザー強度の空間分布は y 方向に一様）で強度は 10^{16} W/cm^2 で時間的に一定に設定し、初期のプラズマの密度スケール長 L は λ の 50 倍に設定し、レーザー周期 τ_L の 12000 倍まで計算を行った。

2.2 シミュレーション結果

図 1 に p 偏光、図 2 に s 偏光での計算におけるプラズマ電子密度の時間変化を示す。偏光の違いによって密度揺動の成長に違いが見られ

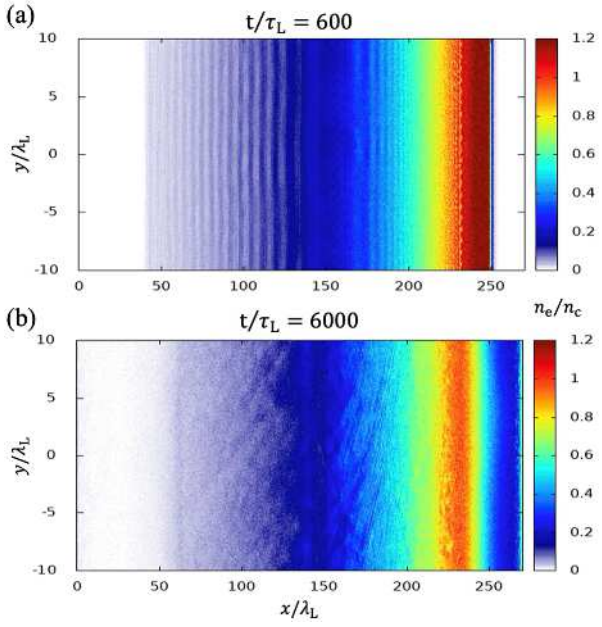


図 1：p 偏光 2 次元計算での電子密度分布発展。

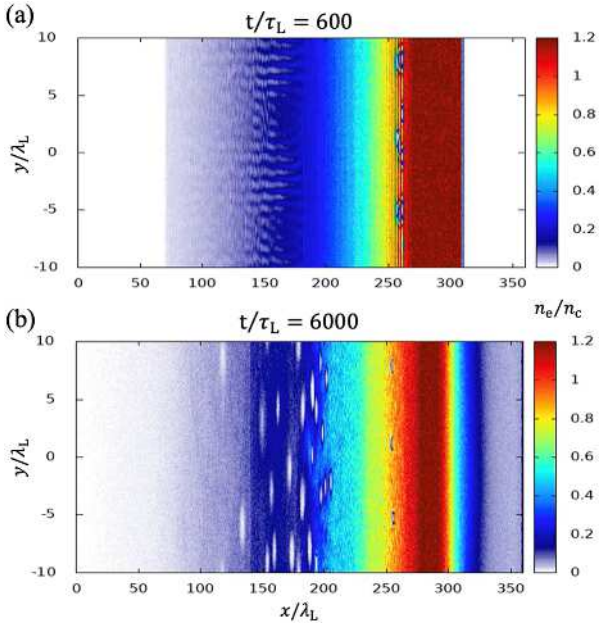


図 2：s 偏光 2 次元計算での電子密度分布発展。

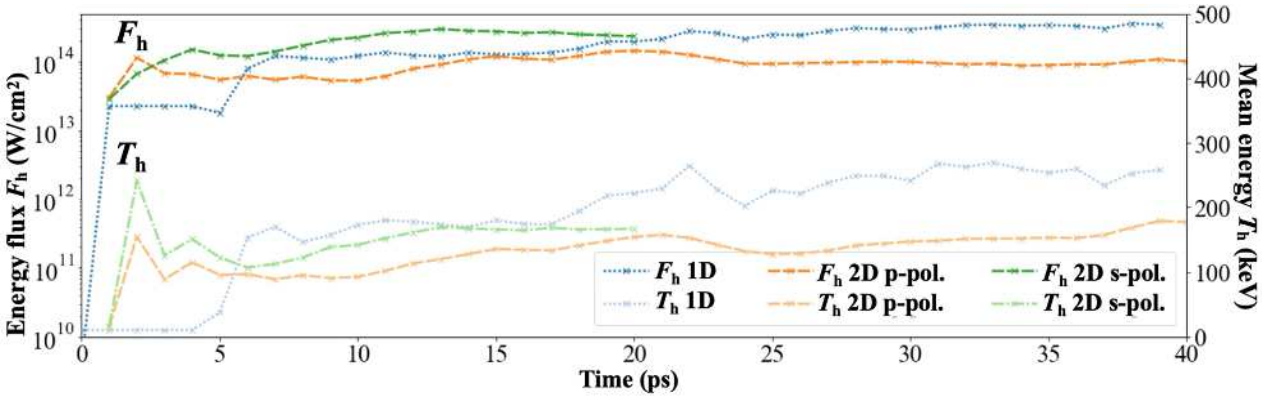


図 3：非熱的高速電子フラックスの平均エネルギー T_h とエネルギーフラックス F_h の時間変化。

た。特に長時間の相互作用（図 1 及び 2 の(b)）では，$n_e/n_c < 0.5$ の領域での密度空孔の形成に大きな違いが現れる。これは、主にレーザー電場の振動方向の違いに起因する。密度空孔内では孤立したレーザー電磁場の圧力が周囲のプラズマ圧力と拮抗することで、周囲のプラズマとの間に大きな密度差を形成する。p 偏光の場合には、レーザーがプラズマ密度分布（y）方向に電子を振動させる。ここで電子プラズマ波が共鳴的に励起されることでレーザー場は減衰し、大きな密度差を保持できず、比較的小さな密度揺動の成長に留まる。一方 s 偏光の場合にはレーザー電場は z 方向に振動する為、電子プラズマ波を励起できない。よって比較的大きな密度変化を持った空孔が形成される。

図 3 に両計算及び 1 次元計算で発生する高速電子の平均エネルギー T_h とエネルギーフラックス F_f の比較を示す。どの計算も T_h, F_h 共に似た様な時間発展・値を示すことが分かった。すなわち、プラズマ分布と偏光方向の関係により生じる密度空孔の違いは、T_h, F_h には大きな影響を及ぼさない。これは 1 次元計算による過去の研究において、密度空孔が高速電子発生過程に大きく影響しないとする結論と一致する[9]。

3. おわりに

本研究では大規模 2 次元 PIC 計算を用いて、レーザーの偏光方向を変えた計算での、レーザープラズマ相互作用中での高速電子発生過程の変化を調査した。結果、$n_e/n_c < 0.5$ の領域でのプラズマ密度揺動の形成に大きな違いが現れた一方で、発生する高速電子の平均エネルギー T_h 及びエネルギーフラックス F_h には大きな違いは見られなかった。今後、パラメトリック不安定の成長過程の比較及びより詳細な高速電子発生・加速過程の調査を行う予定である。

参考文献

(1) P. Michel, “Introduction to Laser-Plasma Interactions”, Chap. 8, (2023). Springer
(2) J. D. Lindl et al., Phys. Plasmas **11**, 339-491 (2004).
(3) D. Batani et al., Nucl. Fusion **54**, 054009 (2014).
(4) C. Rousseaux et al., Phys. Fluids B **4**, 2589 (1992).
(5) D. Kumar, et al., Plasma Phys. Control. Fusion **62**, 125024 (2020).
(6) B. J. Winjum et al., Phys. Rev. Lett. **110**, 165001 (2013).
(7) 高木悠司、サイバーメディア HPC ジャーナル **No. 14** (2024).
(8) 高木悠司、サイバーメディア HPC ジャーナル **No. 15** (2025).
(9) Y. Takagi et al., Accepted to Phys. Rev. Research (https://doi.org/10.1103/7zsq-4n4j).
(10) Y. Sentoku and A. J. Kemp, J. Comput. Phys. **227**, 6846-6861 (2008).

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

桑原 卓哉
大阪公立大学 大学院工学研究科

1. はじめに

グラファイトおよびグラフェンは、sp^2炭素から構成される炭素系 2 次元材料である。これらは常温常圧下で最も熱力学的に安定な炭素相として存在するが、高圧下では sp^3炭素から成るダイヤモンドへ転移することが知られている。また、ナノスケールにおいて、2 つの表面が非整合（incommensurate）な接触状態にあるとき、超潤滑（摩擦係数 μ が 10^{-2}以下）を示す。この現象は、層内の強い共有結合、π 電子の非局在化（すなわち高い芳香性）、そして層間の弱いファンデルワールス（vdW）相互作用に起因する。しかし、マクロスケールにおける超潤滑の実現は、表面粗さ、原子欠陥、不純物、あるいは塑性変形によって妨げられてきた。特に、不規則に応力状態が変化する実用条件下で芳香性表面構造を維持または自己修復することは非常に困難であり、同時にマクロスケール超潤滑にとって重要な課題である。現在、このような芳香性表面構造を活用した研究は、主としてグラファイトや多結晶グラフェンの気相成長に依存しており、加えて芳香性潤滑剤添加剤を用いたグラファイト層のその場形成や、メタンガスの触媒変換によるグラファイト層形成も展開されている。

これに対し、異なる in situ アプローチとして、有機摩擦調整剤のメカノケミカル反応とアモルファスカーボン（a-C）の塑性変形を利用する方法がある。a-C は、sp^2炭素と sp^3炭素から構成される非晶質（アモルファス）材料である。a-C における超潤滑発現には、界面化学結合が存在しないこと、および接触ポテンシャルエネルギー表面の凹凸（corrugation）が超平滑であることが必要である。これらの要件は、一般的に表面の未結合手（ダングリングボンド）を水素原子や水酸基（OH）で不活性化することによって満たされる。これに対し、芳香族化（aromatization）プロセスでは、a-C がせん断によってグラフェンへ変換されること、そして H/OH 終端に依存することなく芳香環の自己終端性を利用する [1]。この構造転移は、突起同士（アスペリティ同士）の接触部で起こり、その局所域における高接触・せん断応力が結合解離と sp^3-sp^2 転移を誘起する。しかし、この a-C のせん断による相転移を活用したグラフェン形成とそれに起因する超潤滑発現は、その自己生成・自己治癒性故に工学応用において有望であるにもかかわらず、その原子スケール機構は依然として不明瞭であり、超潤滑界面の自在制御実現における障壁となっている。

芳香族化プロセスにおいて重要でありながら見落とされてきたものに、化学的不純物の存在である。不純物の存在は、一般に芳香族性の低下や摩擦不安定性と結び付けられるが、近年の研究では、不純物が芳香族ラメラ構造の形成を触媒し得ることが示唆されている。水素や酸素などの不純物は、成膜時に意図的に導入される場合もあれば、環境由来の化学種や潤滑剤がトライボケミカル反応を通じて偶発的に供給する場合もある。実験では、a-C の構造転移に対する内因性および外因性のドーピングの影響が検討されてきた。ここでは、成膜時に意図的に導入されるものと、トライボケミカル過程によって偶発的に導入されるものの双方を含めて化学的不純物をドーパントと呼ぶ。例えば、グリセロールで潤滑された a-C に対する量子力学分子動力学（QM/MD）シミュレーションでは、グリセロール由来の水素・酸素によるトライボケミカルなドーピングが起こり、その後の機械的混合を経てせん断誘起芳香族化が発動し、摩擦が大きく低下することが示され

た [2]。しかし、ドーパントが a-C のせん断塑性変形下で超潤滑な芳香族界面形成をどのように触媒するのか、その機構は不明のままである。

そこで本研究では、ドーパントの有無とその含有量を変数とし、a-C のせん断変形について、QM/MD を用いた系統的シミュレーションを行った。得られた 1000 個の MD トラジェクトリーを詳細に解析することで、メカニズムの解明を行った [3]。

2. 計算手法およびモデル

本研究では、密度汎関数強結合近似（DFTB）法を用いて、約 1000 個の a-C モデルの QM/MD せん断シミュレーションを実施した。モデル作成に関して、シミュレーションに原子をランダムに配置後、5000 K から 0 K まで急冷することにより、8 種類の異なるドーパントについて、ドーパント濃度C_X（≲ 22 at. %）を変化させた a-C バルクモデルを作成した。また、各C_Xについて、6 種類の異なるサンプルを用意した。その後、Lees–Edwards 境界条件を用いて、一定のせん断速度$v = 100\text{m s}^{-1}$を付与し、さらに Berendsen 法により 3 方向すべてに一定圧力$P = 5$ GPa を印加した。温度Tは、Peters 熱浴を用いて 300 K に維持した。運動方程式は、速度 Verlet アルゴリズムにより時間刻み 0.5 fs で積分した。せん断応力τは、応力テンソルのσ_{zx}成分から算出し、最後の 0.1 ns にわたって平均化した。

3. 結果および考察

3.1 a-C のせん断シミュレーション

せん断誘起芳香族化（shear-induced aromatization）における添加元素の役割を明らかにするため、1 ns の QM/MD シミュレーションを実施した。1000 個の MD シミュレーションの結果を図 1 に示す。ここでは、検討した全ての添加元素（すなわち H、N、O、F、Si、P、S、Cl）について、せん断応力とドーパント濃度を関連づけた構造–物性マップを示している。さらに、sp^2 炭素原子の含有量の関数として、無添加の a-C のせん断応力も図 1 に示す。これらの構造–物性マップは、周期表における添加元素の位置に従って整理されている。以下では、元素 X をドープした a-C およびその濃度を、それぞれ a-C:X および C_X と表記する。これらの構造–物性マップにおいて、各マーカーは個々の MD 軌道の最後の 0.1 ns から算出したせん断応力 τ および摩擦係数 μ を表し、色は摩擦形態を示している。ここで、μ は τ/P_N と定義され、P_N は印加された垂直圧力である。摩擦形態は、摩擦界面の構造解析に基づいて、cold-welding（CW）、aromatic passivation、および non-aromatic passivation に分類

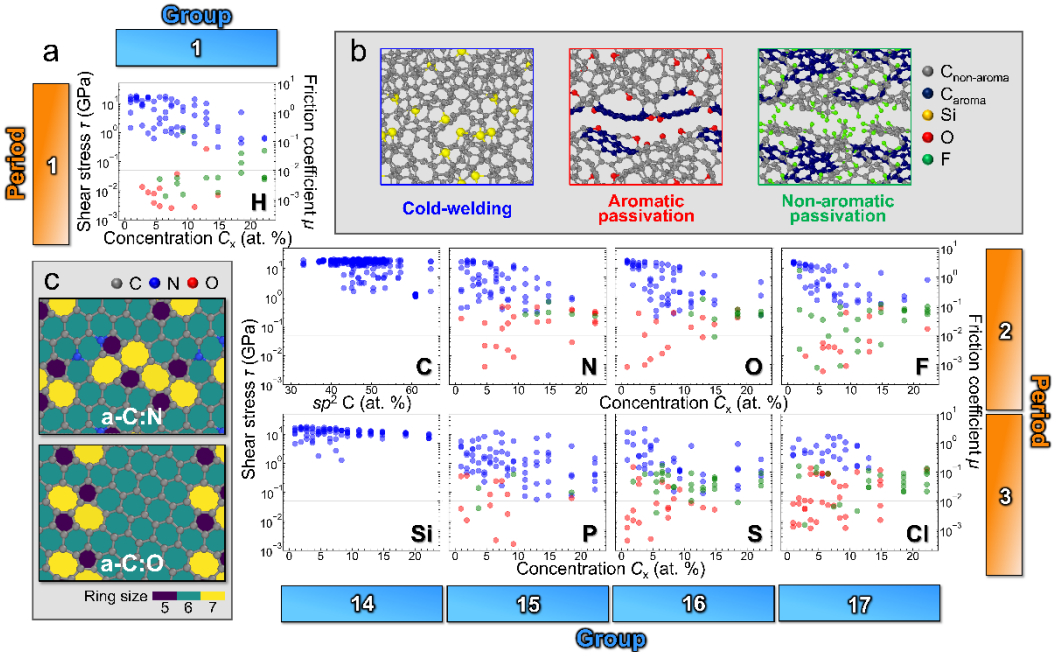


図 1　a-C の QM/MD せん断シミュレーションにおける添加元素の影響

した。CW は高摩擦を特徴とする一方、aromatic passivation および non-aromatic passivation は低摩擦状態を表す。non-aromatic passivation では、a-C:H における C–H や a-C:O における C=O などの官能基による表面終端が支配的である。これに対し、aromatic passivation は、多環芳香族表面間の低摩擦界面によって特徴づけられる。

これらの構造–物性マップにおける応力には大きなばらつきが見られるが、これはせん断誘起芳香族化プロセスおよびその結果として生じる界面原子構造のランダム性に起因する。芳香族界面の核生成と成長には、CW 状態下での原子の機械的攪拌が必要であり、この過程は本質的にランダムである。そのため、応力のばらつきは CW 状態の生存確率を反映している。同時に、結果として得られる原子構造は、環統計、芳香族性指数、および原子スケールの表面粗さにおいて異なり、それらの要素により異なる摩擦応答を示す。

ここで、最も重要な結果は、四価元素のみから構成される系では、シミュレーション時間スケール内に低摩擦界面が形成されないことである。すなわち、a-C:Si や無添加の a-C にでは、CW のみが観察された。これに対し、四価未満の添加元素を加えることによって、non-aromatic passivation および aromatic passivation の双方を通じて、せん断誘起による低摩擦界面の形成が起こった。これらの低価数元素では、C_X の増加に伴い CW における τ と、シミュレーション全体を通じて CW に留まる確率が急激に減少した。さらに、一価の元素（H、F、Cl）および二価の元素（O、S）では、aromatic passivation は比較的低い C_X（$\lesssim$ 15 at. %）で観察された一方、non-aromatic passivation は高 C_X（$\gtrsim$ 15 at.%）で顕著に見られた。このことは、これらの一価および二価ドーパントには、多環芳香族界面の形成を促進する最適濃度が存在することを示している。

また、興味深いことに、N や P などの三価元素を添加した a-C は、他の元素とは異なる挙動を示した。non-aromatic passivation（緑色マーカー）の数は、一価および二価元素の場合と比べて著しく少ない。特に N では、aromatic passivation が $C_X >$ 20 at.%の領域まで広がっている。これはおそらく、N が芳香環に参加できることに起因すると考えられる。例えば、グラファイト状 C_3N_4 構造を形成できる一方、二価の O は 図 1c の例に示す原子構造からも分かるように、芳香環に参加しにくい。さらに、これらの表面は 5〜7 員環、すなわち sp^3 炭素の欠陥を含んでおり、アモルファスグラフェンに類似している。この sp^3 炭素ドメインを介して下部の a-C バルクに接続しており、この 2.5 次元的骨格により力学的な安定性が保たれると考えられる。

3.2 a-C のせん断誘起グラフェン生成メカニズム

1000 個の QM/MD トラジェクトリーを解析した結果、添加元素とせん断変形の相乗効果により促進する a-C の芳香族化メカニズムが明らかになった。図 2 にこのせん断誘起芳香族化プロセスの 6 ステップモデルを示す。同時に、酸素含有量 $C_X = 4.6$ at.%の a-C:O および a-C:N に対する代表的なトラジェクトリーから抽出したスナップショットを示す。

ステップ 1: 熱力学的に準安定な a-C バルクには、もともとナノボイドが内在しており、これを細孔胚（pore embryos）と呼称する。バルク中には、sp^2芳香族炭素原子が O 原子（または N）近傍にしばしば局在している。

ステップ 2: 塑性せん断変形は、炭素原子の sp^3 から sp^2 への転移を誘起し、その結果として局所的な密度低下が生じる。このステップでは、細孔胚や芳香環は一時的に形成されるが、塑性せん断流動の下ではすぐに破壊される。

ステップ 3: O 原子が細孔壁の一部になるにつれて、細孔胚は徐々に成長し、その過程で C–C 結合の切断が伴う。例えば、sp^3炭素原子間の C–C 結合が切断されると、細孔壁に sp^2炭素原子が生成される。O の挿入はダングリングボンドを不活性化し、C–O–C または C=O 基を形成する一方で、隣接する sp^2炭素原子は終端されないまま残る。

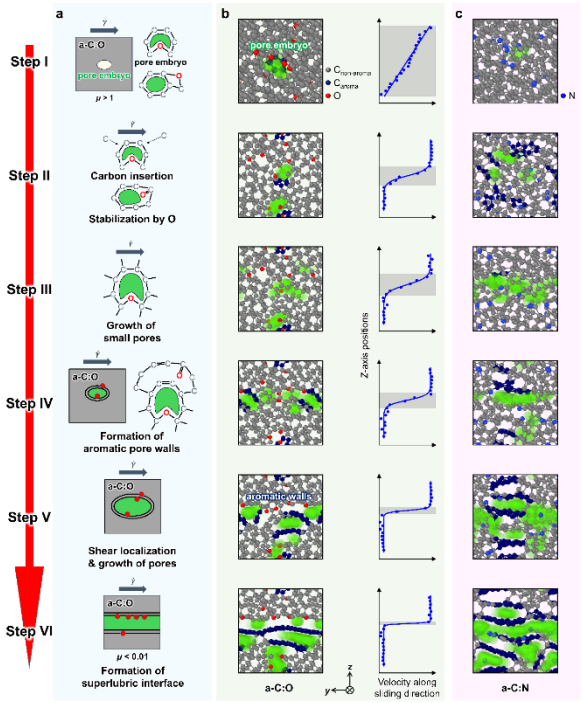


図 2 せん断により誘起されるグラフェン生成のメカニズム

この局所的な O による炭素ダングリングボンドの終端化は排除体積を生み出す。N の場合は、NC_3 基が形成される。これは N が 3 価であり、多環芳香族物質の一部になりうることを意味する。

ステップ 4: 継続的なせん断誘起塑性変形により、さらに O または N の挿入が進み、細孔壁中の非芳香族 sp^2 炭素が芳香族 sp^2 炭素へと変換される。

ステップ 5: O または N の蓄積と芳香環の形成がせん断の局在化を引き起こし、それがさらなる細孔成長を促進する。

ステップ 6: 最終段階では、残存する少数の弱い層間 C–C 結合が切断され、非芳香族 sp^2 ネットワーク構造が芳香環ネットワーク構造へと変換されて、アモルファスグラフェン表面が出現する。下層は O または N の官能基で終端されており、高い接触圧下でも sp^3 ドメインへ構造が再構成されるのを防ぐ。最表面層は部分的に芳香性を有し、sp^3 炭素ドメインを介して二層目の芳香族層と接続しており、これはダイヤモンドから黒鉛への相転移を想起させる。

以上のメカニズムは 4 価のドーパント（シリコン）を除くすべての低価数ドーパントにおいて有効であり、普遍的なグラフェン生成のメカニズムの解明に成功した。

4. おわりに

本研究では、QM/MD を用いたハイスループット計算によって、a-C の超潤滑発現を支配するグラフェン形成に関して、そのメカニズムの解明とその設計指針の提案に成功した。一方、現実系においては、3 元系やヤング率等の他の特性との妥協点を理解することが重要であり、実験による再現が今後の課題である。

参考文献

[1] T. Kuwahara, G. Moras, and M. Moseler, Friction Regimes of Water-Lubricated Diamond (111): Role of Interfacial Ether Groups and Tribo-Induced Aromatic Surface Reconstructions, Phys. Rev. Lett. **119**, 096101 (2017).

[2] T. Kuwahara, P. A. Romero, S. Makowski, V. Weihnacht, G. Moras, and M. Moseler, Mechano-chemical decomposition of organic friction modifiers with multiple reactive centres induces superlubricity of ta-C, Nat. Commun. **10**, 151 (2019).

[3] T. Kuwahara, K. Horiguchi, L. Mayrhofer, G. Moras, and M. Moseler, Shear-Induced Emergence of Aromatic Superlow-Friction Interfaces in Amorphous Carbon: Triggering Chemical Impurities and Atomic-Scale Mechanisms, Adv. Sci. **13**, e75566 (2026).

Contribution of subthreshold energy ions' neutralization on defect formation in monolayer graphene

P. Vinchon[1] , L. Spiske[1], Y. Miyamoto[2] and S. Hamaguchi[1]
[1]*R³ (R-cubed) Institute of Newly-Emerging Science Design (INSD), The University of Osaka*
1-2, Machikaneyama, Toyonaka, Osaka 560-0043, Japan,
[2]*National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)*
1-1-1 Umezono, Tsukuba, Ibaraki 305-8560 Japan
vinchon.pierre.insd@osaka-u.ac.jp

1. Introduction

Since its isolation in 2004, monolayer graphene has been the focus of numerous research efforts to harness its properties. In particular, it is necessary to control structural defects in the graphene lattice, as they can be either beneficial or detrimental to the final application. Little attention has been focused on the influence of very-low energy ions (Energy <25 eV) on graphene structure. Indeed, numerous experimental and theoretical studies established a strict energy threshold for defect generation in graphene at 18-22 eV. Still, graphene irradiation by low-pressure Argon plasma containing ions with kinetic energy around 12 eV results in a significant generation of defects [1]. Such a phenomenon is not yet clearly understood. One hypothesis considers that, at such low kinetic energy, ions can neutralize themselves to the surface. Hence, a fraction of the ion's potential energy (15.7 eV) could be transferred to the lattice on a similar timescale to the impact and contribute to defect generation [2].

To test this assumption, accurate first-principle numerical simulations are needed. Real-time Time-Dependent Density Functional Theory (TDDFT) for Ehrenfest dynamics enables the analysis of electrons and ions altogether directly coupled with a Molecular Dynamics scheme. The proposed approach can overcome the conventional theory, which relies on a classical adiabatic picture in which electrons are always sitting in their ground state throughout atomic motions.

2. Numerical Simulation scheme

Real-time TDDFT simulations using the open-source code FPSEID[21] were performed to investigate ion interactions with suspended graphene. A detailed presentation of the numerical simulation scheme can be found in [3,4]. Calculations were performed using a plane-wave basis set. Norm-conserving pseudopotentials and a cut-off energy of 60 Ry were implemented. The periodic structure is presented in Figure 1, consisting of a graphene model with 50 atoms within a hexagonal simulation box. Ar ion (Ar^+) and neutral (Ar(N)) are introduced at the beginning of the simulation with an initial velocity in the Z direction corresponding to a kinetic energy of 1eV. Since both ions and electrons are treated, a small time step of 0.726 as (0.726×10^{-18} s) is required. Simulations are run using the vector-node available on the supercomputer SQUID, at the University of Osaka. Ar^+ case has been run up to 260 fs, while the Ar(N) case could have been run up to 180 fs. Output data files were written every 100 timesteps. Two impact location has been chosen, to grasp how it can influence the end results. In total, four simulations run has been carried out, which took over 4

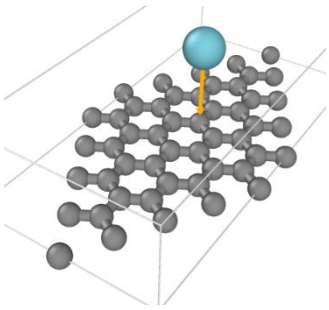


Figure 1: TD-DFT simulation set up with 50 Carbon atoms (black ball) and 1 Ar atom or ion (blue ball). The orange arrow represents Ar velocity.

weeks per run to reach the desired simulation time. A custom MATLAB code was developed to perform data analysis.

3. Results and Discussion

3.1 Atoms behavior

From the simulation output, the kinetic energy evolution of Ar^+ and Ar(N) with time can be extracted from the velocity values. Figure 2 presents the evolution of both Ar^+ and Ar(N) as a function of simulation time when a) atoms collide on the top of a carbon atom and b) in the center of the hexagonal lattice

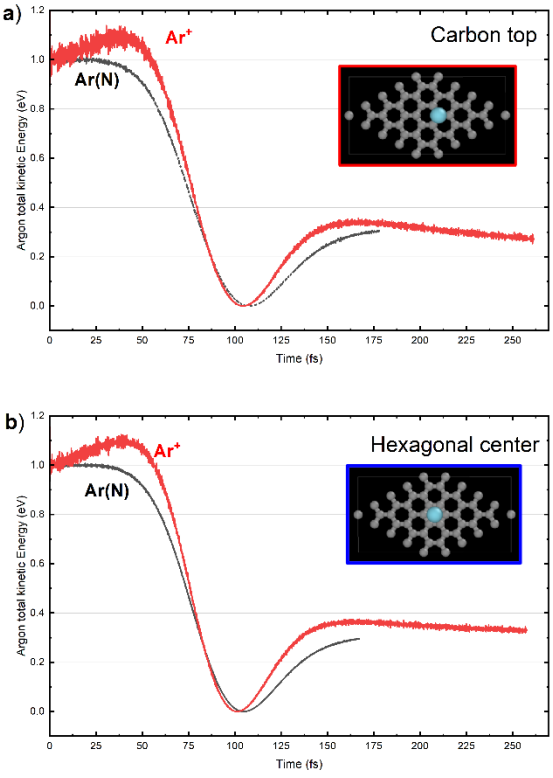


Figure 2: Ar^+(full red line) and Ar(N) (dashed black line) kinetic energy evolution as a function of simulation time for a) a head on collision with a Carbon atom and b) when the targeting the center of an hexagonal lattice.

Interestingly, regardless of impact position, no significant change is observed during impact. Figure 2a shows that as time goes on, Ar(N) and Ar^+ are getting closer to the graphene layer. Consequently, Ar(N) kinetic energy decreases to become null at 110 fs before increasing again as it is being repelled, acquiring a final kinetic energy of 0.30 eV. On the other hand, Ar^+ is first affected by an attractive force, which can be related to the image charge effect, as the entire simulation is positively charged. After 50 fs, Ar^+ kinetic energy decreases to reach a null value at 105 fs before rising and reaching a maximum around 15fs. Then, Ar^+ slowly loses its kinetic energy as it goes further away from graphene's surface, due to the attractive force from the mirror charge image influence. It is interesting to extract the amount of kinetic energy lost by Ar(N) and Ar^+ by impacting graphene and compare to the classical view of maximum energy transfer as expressed as :

$$E_{transf} = \frac{4M_C M_{Ar}}{(M_C+M_{Ar})^2} E \quad (1)$$

With M_C and M_{Ar} being the mass of Carbon and Argon respectively, and E being the initial kinetic energy of Ar(N) or Ar^+. From equation 1, 71% would be the maximum portion of energy transferred to graphene. From the TDDFT calculations, Ar(N) and Ar^+ lost 70% and 68%, respectively, of their initial kinetic energy. While the agreement between the TDDFT and classical estimation of energy transfer is excellent for the Ar(N) case, the Ar^+ case is slightly worse. This minor discrepancy might hint that Ar+ interaction with graphene varies compared to its neutral counterparts. To investigate it, it is pertinent to focus on the Force applied to Ar, normal to the graphene plane, as a function of simulation time. Furthermore, to better take into account the charge image influence, the force applied on Ar^+ can be estimated as [5] :

$$F_z = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0(2d)^2} \quad (2)$$

With e, the elementary charge, ε_0 the vacuum permittivity, and d the distance between the ion and the substrate. Figure 3 compares the force exerted on Ar normal to graphene extracted from TDDFT simulation for both Ar^+ and Ar(N) with the analytical form presented in equation 2 as a function of Ar position relative to the position of the closest carbon in

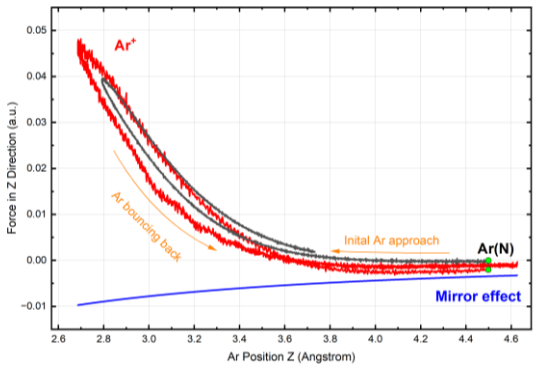


Figure 3: Force evolution exerted on Ar^+(red line) and Ar(N) (black line) as a function of the distance between Ar and the targeted Carbon atom. Force estimation for the charge

graphene.

At the initial position (4.5 Å), Ar(N) is not subjected to any force, confirming it is introduced sufficiently far from graphene. As the distance decreases below 3.8 Å, a repulsive force appears, which will attain its maximum at 2.8 Å. Interestingly, as it is being repelled, the force evolution with position differs depending on Ar(N) direction. On the other hand, Ar^+ is attracted to graphene as expected from the charge image effect. The force deduced from equation (2) is higher by an order of magnitude than calculated by TD-DFT. Still, as Ar^+ reaches 3.6 Å, the force becomes null before reaching a maximum at 2.7 Å. Then, the force decreases to reach a final negative value, but lower than at the beginning of the simulation. Such disparity suggests that Ar^+ is partially neutralized. In the TD-DFT scheme, it could be interpreted as a probability for Ar^+ neutralization.

3.2 Electrons behavior

From the FPSEID21 , it was possible to output charge density files for every time step. It resulted in many large files, totaling 120 Gbs for only one case. Hence, more effort is needed to fully grasp the physics hidden in those data. Still, it was possible to map charge density for various times. Figure 4 presents a cross-section view of the charge density map of graphene and Ar+ atoms a) initially and b) after 100 fs, as Ar+ reaches the graphene surface.

Comparing Figures 4a and 4b, it can be clearly seen that the Ar's electron cloud is significantly merging with graphene's electrons. However, the overall distribution of Ar's electrons seems relatively unperturbed. However, the carbon atom that is impacted has shifted down, and its electron cloud did so as well. Nevertheless, little change can be observed.

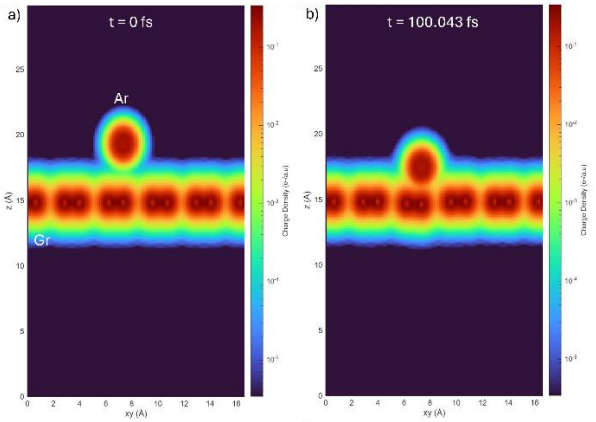


Figure 4: Charge density distribution at a) initial time and b) at 100.043 fs. Note that the color bar is in log scale.

To better investigate graphene's electron behavior, it was interesting to investigate sigma bonds evolution in graphene's plane. To do so, charge density was integrated over the maximum values close to atoms' central positions. Figure 5 presents the absolute value of charge density a) initially, b) after 100.043 fs, and c) the difference between the two is shown.

Figure 5a and 5b show no obvious differences in charge density of sigma bonds during Ar+ irradiation. Both figures show very clearly sigma bond maxima, while electron density is minimum at the center of each hexagonal lattice. However, Figure 4c shows some variations. Electron density at the sigma bonds close to the impacted carbon are weaker as it seems the charge accumulates on the closest neighboring atoms. Overall, it seems only the closest carbon atoms are affected by Ar+ impact. Such behavior is also observed in the Ar(N) case and does not appear to be unique to the ion. Nevertheless, more work is necessary to investigate electron dynamics.

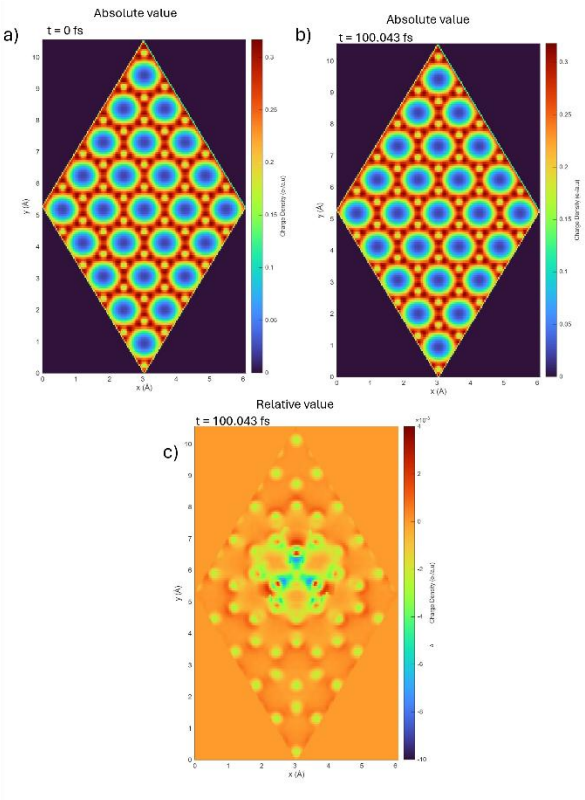


Figure 5: charge density distribution in graphene plane a) initially, b) after 100.043fs. Relative change between a) and b) is shown in c)

4. Conclusion

First-principle simulations such as RT-TDDFT have been used to investigate Ar+ and Ar(N) interaction with suspended graphene. Kinetic energy loss due to impact is close to what is expected classically. However, forces exerted on the ion and neutral differ, partially due to the charge image effect. Furthermore, from Ar ion behavior, partial neutralization of the ion seems to occur. Such phenomena cannot be seen in current charge-density-state analysis. Further data analysis is required to grasp its influence on graphene. Especially, it is planned to extract the density of states of electrons to determine if any excited electrons are generated during the Ar^+ impact.

Acknowledgements

This work was partly supported by the use of Supercomputer System SQUID at the D3 Center, the University of Osaka (2025-Exp-04) and by the Japan Science and Technology Agency (JST)'s "Adopting Sustainable Partnerships for Innovative Research Ecosystem (ASPIRE)" Project JPMJAP2321.

References

[1] P. Vinchon, X. Glad, G. Robert Bigras, R. Martel, L. Stafford, Preferential self-healing at grain boundaries in plasma-treated graphene, Nat. Mater. 20 (2021) 49–54. https://doi.org/10.1038/s41563-020-0738-0.

[2] P. Vinchon, L. Stafford, N. Mauchamp, S. Hamaguchi, On the role of positive ion neutralization in defect generation in monolayer graphene exposed to sub-threshold energy ions, Journal of Physics D: Applied Physics 59 (2025) 025202. https://doi.org/10.1088/1361-6463/ae2877.

[3] Y. Miyamoto, A. Rubio, Application of the Real-Time Time-Dependent Density Functional Theory to Excited-State Dynamics of Molecules and 2D Materials, J. Phys. Soc. Jpn. 87 (2018) 041016. https://doi.org/10.7566/JPSJ.87.041016.

[4] O. Sugino, Y. Miyamoto, Density-functional approach to electron dynamics: Stable simulation under a self-consistent field, Physical Review B (1999). https://doi.org/10.1103/physrevb.59.2579.

[5] M.A. Lieberman, A.J. Lichtenberg, Principles of Plasma Discharges and Materials Processing: Second Edition, 2005. https://doi.org/10.1002/0471724254.

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

原 惇也
大阪大学 大学院工学研究科

1. はじめに

第 6 世代移動通信システム（6G）では、多数の低消費電力センサが多層的に配置された大規模ネットワークを通じて、画像、音響、振動、環境計測などの多モーダルな時空間データが広域かつ常時収集されると見込まれている。このような大規模ネットワークでは、収集されるデータが端末ごとに異なる分布を持ち、しかも総量が膨大になるため、データを 1 か所に集約して解析する従来の枠組みは、通信負荷とプライバシの両面で限界に直面する。

こうしたデータを各端末に分散したまま解析する基盤として、連合学習（federated learning、以下 FL）が有力である。FL は、生データを中央サーバに集約せず、各クライアントが手元のデータで局所モデルを学習し、サーバがそのモデルパラメータのみを集約して全体モデルを構築する分散学習の枠組みである。各クライアントは生データを共有せずにモデルパラメータだけを送信するため、通信量の削減とプライバシ保護を両立でき、医療、金融、IoT など幅広い応用が期待されている[1], [2]。

一方、大規模センサネットワークでは、低消費電力かつ狭帯域の無線通信を介してパラメータが伝送されるため、フェージングやパケット損失などにより、伝送の過程で雑音や欠損が混入しやすい。劣化したパラメータをそのまま集約すると、全体モデルの精度が低下しうる。クライアント間の関係を反映せずに単純平均をとる集約は、データ分布の偏りを無視するため過平滑を招き、特に分布が偏在する状況では精度の劣化が顕著になる。

本報告では、多モーダル時空間データの解析を担う連合学習において、低電力センサ通信に伴う雑音と欠損への頑健性を高める手法を提案する。提案手法は、クライアント間の関係を表すグラフの推定と、モデルパラメータの復元とを、単一の最適化問題として同時に解く。グラフと信号を交互ではなく同時に最適化することで、雑音を含む観測からでも両者が互いを補正し合う点に特徴がある。本問題は非凸であるが、これを凸関数の差（difference-of-convex、以下 DC）計画問題に再構成し、近接 DC アルゴリズム（proximal DC algorithm、以下 PDCA）により局所最適解への収束を保証して解く。MNIST および CIFAR-10 を用いた数値実験により、雑音および欠損の下で既存手法を上回る精度が得られることを示す。

2. グラフに基づく連合学習と課題

FL における集約とは、各クライアントの局所パラメータをサーバで束ねて全体モデルを得る処理である。代表的な FL では、初期化、局所モデル更新、大域モデル更新の 3 段階を、通信ラウンドごとに繰り返す。最も単純な大域モデル更新は局所パラメータの平均であるが、クライアントごとにデータ分布が偏ると、平均は各クライアントの違いを無視するため過平滑となり、精度が落ちうる。そこで、クライアント間の関係を反映した重み付き集約が求められる。

クライアント間の関係はグラフで表現できる。各クライアントを 1 つの頂点に対応させ、頂点の集合と辺の集合からなるグラフを考える。グラフの各頂点上で定義されるベクトルをグラフ信号 $\boldsymbol{x}$ とよぶ。グラフに基づく連合学習（graph-based FL、以下 GFL）は、受信したパラメータの類似度からクライアント間グラフを構成し、各クライアントの局所パラメータをグラフ信号とみなして、グラフ上で滑らかになるように集約を行う。ここ

で平滑性は、隣接行列を $\boldsymbol{W}$、グラフラプラシアンを $\boldsymbol{L}$ とするとき、ラプラシアン二次形式 $\boldsymbol{x}^{\top}\boldsymbol{L}\boldsymbol{x} = \sum_{(m,n)\in\mathcal{E}} [\boldsymbol{W}]_{mn}([\boldsymbol{x}]_m - [\boldsymbol{x}]_n)^2$ で測られ、この値が小さいほどグラフ信号が隣接するクライアント間で滑らかに変化することを表す[3]。クラスタごとに平均をとる集約や、各クライアントの一次近傍で平均をとる集約は、いずれもこの枠組みの特殊な場合である[7], [8], [9]。

グラフが未知の場合には、滑らかなグラフ信号からグラフ自体を推定する手法を用いる[4]。これは、ラプラシアン二次形式に加えて、頂点の孤立を防ぐ項と辺の疎性を促す項を最小化する凸問題として定式化される。しかし、グラフはパラメータ間の類似度から構成されるため、パラメータが雑音や欠損を含むとグラフ自体が不正確になり、集約の品質が連鎖的に劣化しうる。グラフ推定とその後の集約を逐次に行う素朴な方法は、この劣化のために準最適な解に陥る。

3. グラフ推定と信号復元の同時最適化

提案手法は、クライアント間グラフの推定とパラメータの復元とを同時に行う。全体像を図 1 に示す。まず、伝送による劣化をモデル化する。第 k クライアントのパラメータ $\boldsymbol{x}_k$ は、欠損を表すマスク $\boldsymbol{m}_k$ と加法性白色ガウス雑音を受けて劣化し、観測モデルは次式で与えられる。

$$\tilde{\boldsymbol{x}}_k = \boldsymbol{m}_k \odot \boldsymbol{x}_k + \boldsymbol{n}_k, \quad \boldsymbol{n}_k \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{0}, \sigma_k^2 \boldsymbol{I})$$

ここで $\odot$ は要素積、$\boldsymbol{m}_k$ は欠損したパラメータを零とするマスクベクトル、σ_k は雑音の標準偏差である。サーバは、各クライアントから劣化した観測のみを受け取り、それらを並べた行列を $\tilde{\boldsymbol{X}}$ と表す。

提案手法は、集約後のパラメータ $\boldsymbol{\Psi}$ とクライアント間グラフの隣接行列 $\boldsymbol{W}$ とを、次の最適化問題を解いて同時に推定する。

$$\min_{\boldsymbol{\Psi}, \boldsymbol{W}\in\mathcal{W}} \frac{\mu}{2} \| \boldsymbol{M} \odot \boldsymbol{\Psi} - \tilde{\boldsymbol{X}} \|_{\boldsymbol{Z}}^2 + \alpha \operatorname{tr}(\boldsymbol{W}\mathcal{D}(\boldsymbol{\Psi})) - \beta\, \boldsymbol{1}^{\top}\log(\boldsymbol{W}\boldsymbol{1}) + \gamma \| \boldsymbol{W} \|_1$$

ここで $\boldsymbol{M}$ はマスクを並べた行列、$\boldsymbol{Z} = \operatorname{diag}(\zeta_k)$ はデータ量に応じた重み（$\| \boldsymbol{A} \|_{\boldsymbol{Z}}^2 = \operatorname{tr}(\boldsymbol{A}^{\top}\boldsymbol{Z}\boldsymbol{A})$）、$[\mathcal{D}(\boldsymbol{\Psi})]_{mn} = \| \boldsymbol{\psi}_m - \boldsymbol{\psi}_n \|^2$ は行間のユークリッド距離行列、$\mathcal{W}$ は対称かつ非負で対角が零の隣接行列の集合、$\alpha, \beta, \gamma, \mu$ は正則化パラメータである。第 1 項は劣化した観測への忠実性を、第 2 項 $\operatorname{tr}(\boldsymbol{W}\mathcal{D}(\boldsymbol{\Psi}))$ はラプラシアン二次形式に等しくグラフ上での平滑性を、第 3 項の対数障壁は各頂点が孤立しないための連結性を、第 4 項の ℓ_1 ノルムは辺の疎性を、それぞれ促す。マスク $\boldsymbol{M}$ を含む第 1 項により、欠損した成分はグラフ上の平滑性を通じて周囲のクライアントから補完される。

第 2 項は $\boldsymbol{W}$ と $\boldsymbol{\Psi}$ について双凸であり、問題全体は非凸であるため、有限回での収束保証を得ることは難しい。提案手法では、この双凸項を 2 つの凸関数の差として書き直すことで全体を DC 計画問題に再構成し、PDCA によって解く。PDCA は、凹部分の勾配を用いた線形化と近接写像とを交互に適用する反復法であり、少なくとも局所最適解への収束を保証する。初期グラフは受信パラメータ間のコサイン類似度から構成し、各通信ラ

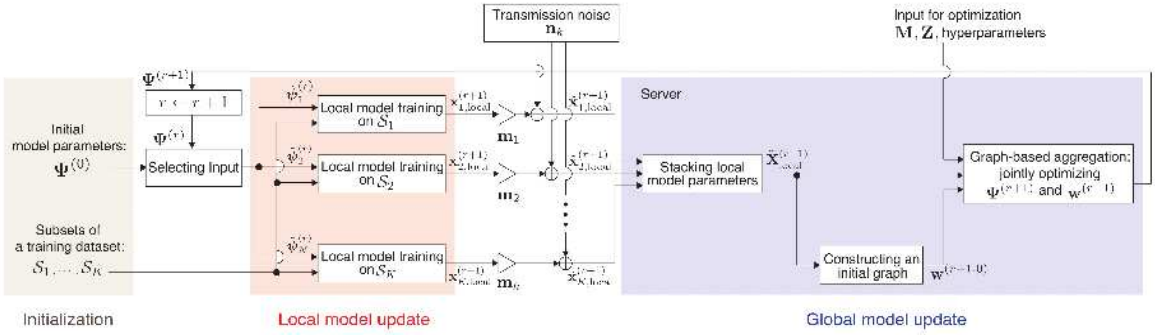


図 1：提案する連合学習の全体像

ウンドの大域モデル更新の内部でこの最適化を実行する。式変形とアルゴリズムの詳細は文献[5]に譲る。

4. 数値実験

画像分類によって提案手法を評価する。MNISTおよびCIFAR-10の訓練データを、偏りを制御するディリクレ分布 $\mathrm{Dir}_K(\kappa)$ で $\kappa = 0.05$ として各クライアントに分割し、偏在した分布を模擬する。クライアント数 $K = 20$、通信ラウンド数 $R = 30$ とし、各クライアントは、3×3の畳み込み層2層（ReLU活性化と2×2最大プーリングを伴う）と全結合層2層からなる畳み込みニューラルネットワークを、学習率 $\eta = 0.01$、局所エポック数 $E = 5$ の確率的勾配降下法で学習する。比較手法は、標準的なFLである FedAvg[1]とFedProx[6]、グラフに基づくFLである CFL[7]、FedAMP[8]、pFedGraph[9]の5手法、ならびにグラフ推定と信号復元を逐次に解く2段階法である。伝送雑音の標準偏差は初期パラメータの平均絶対値に比例させ、比例係数 $s \in \{0.1, 0.2\}$ の2水準とする。提案手法の正則化パラメータは $\alpha = 0.05$、$\mu = \beta = \gamma = 1$ とし、各条件について10試行の平均精度で評価する。

表1に各手法の平均精度を示す。提案手法（PDCA）は、すべての雑音水準とデータセットで最も高い精度を達成し、逐次に解く2段階法を大きく上回る。これは、グラフ推定と信号復元を同時に解くことの効果を示している。図2はCIFAR-10、雑音水準 $s = 0.2$ におけるラウンド毎の平均精度であり、提案手法が全ラウンドを通じて一貫して既存手法を上回ることを示す。

次に、パラメータの一部をランダムに欠損させ、欠損率に対するロバスト性を評価する。図3に、欠損率を0から0.1まで変化させたときの平均精度を示す。提案手法は、欠損率が10%以下であれば精度低下を10%未満に抑えており、平滑性の仮定に基づいて欠損した成分を周囲のクライアントから補完できることを確認した。

表1：2つのデータセットと雑音水準 s における平均精度（%）の比較。

手法	MNIST		CIFAR-10	
	s=0.1	s=0.2	s=0.1	s=0.2
提案（PDCA）	**95.17**	**92.68**	**83.86**	**78.04**
提案（2段階法）	**88.99**	**83.77**	**72.30**	**69.90**
FedAvg [1]	90.48	89.96	77.31	74.80
FedProx [6]	90.38	90.19	76.69	74.10
CFL [7]	92.96	91.21	78.35	75.70
FedAMP [8]	93.12	92.40	78.70	75.12
pFedGraph [9]	92.76	92.01	78.19	75.24

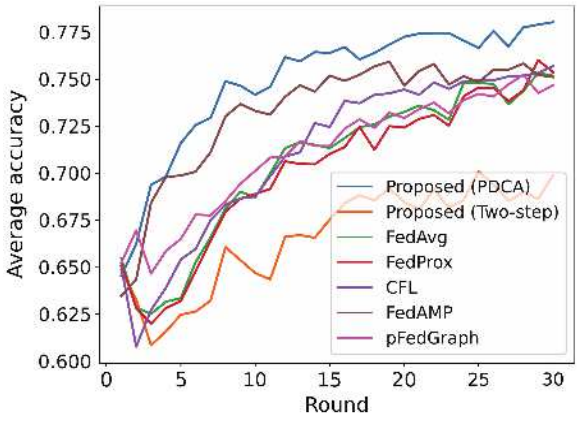


図2：CIFAR-10、雑音水準 s=0.2 におけるラウンド毎の平均精度。

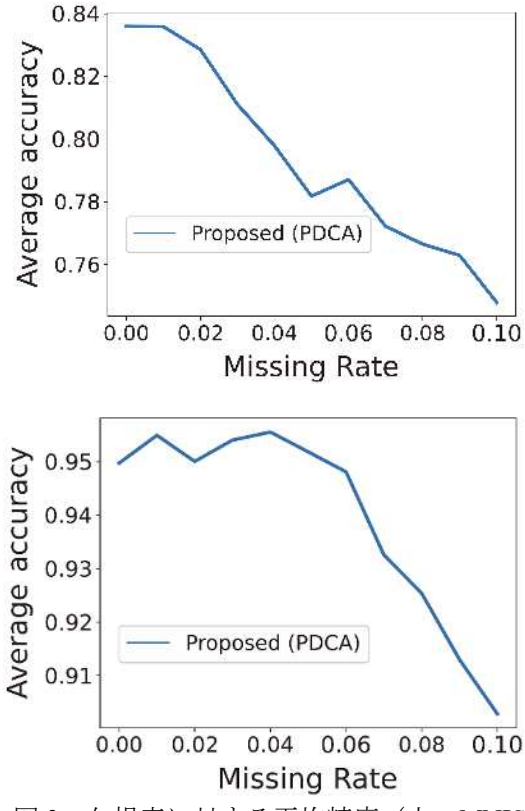


図3：欠損率に対する平均精度（上：MNIST、下：CIFAR-10、s=0.1）。

5. おわりに

本報告では、雑音を伴う通信下での連合学習に対し、クライアント間グラフの推定とパラメータの復元とを同時に解くロバストな集約手法を提案した。集約後のパラメータがクライアント間グラフ上で滑らかに変化するという仮定のもとで、グラフとパラメータの同時最適化を DC 計画問題として定式化し、PDCA により局所最適解への収束を保証して解いた。2 つのベンチマークでの画像分類実験により、雑音および欠損の下で既存手法を上回ることを確認した。本手法は、6G で想定される大規模多層センサネットワーク上の多モーダル時空間データ解析に向けた、ロバストな分散学習基盤になりうる。今後は、より大規模なクライアント数や、画像以外のモダリティを含む実データへの適用が課題である。

謝辞

本研究の一部は、大阪大学 D3 センターの大規模計算機システム SQUID を利用した。

参考文献

(1) B. McMahan, E. Moore, D. Ramage, and B. A. y Arcas, "Federated learning of deep networks using model averaging," arXiv:1602.05629, 2016.

(2) P. Kairouz, H. B. McMahan, B. Avent, et al., "Advances and open problems in federated learning," Found. Trends Mach. Learn., vol. 14, no. 1-2, pp. 1-210, 2021.

(3) D. I. Shuman, S. K. Narang, P. Frossard, A. Ortega, and P. Vandergheynst, "The emerging field of signal processing on graphs," IEEE Signal Process. Mag., vol. 30, no. 3, pp. 83-98, 2013.

(4) V. Kalofolias, "How to learn a graph from smooth signals," in Proc. AISTATS, pp. 920-929, 2016.

(5) J.-y. Gotoh, A. Takeda, and K. Tono, "DC formulations and algorithms for sparse optimization problems," Math. Program., vol. 169, pp. 141-176, 2018.

(6) T. Li, A. K. Sahu, M. Zaheer, M. Sanjabi, A. Talwalkar, and V. Smith, "Federated optimization in heterogeneous networks," in Proc. Mach. Learn. Syst., vol. 2, pp. 429-450, 2020.

(7) F. Sattler, K.-R. Müller, and W. Samek, "Clustered federated learning," IEEE Trans. Neural Netw. Learn. Syst., vol. 32, no. 8, pp. 3710-3722, 2020.

(8) Y. Huang, L. Chu, Z. Zhou, L. Wang, J. Liu, J. Pei, and Y. Zhang, "Personalized cross-silo federated learning on non-iid data," in Proc. AAAI Conf. Artif. Intell., vol. 35, no. 9, pp. 7865-7873, 2021.

(9) R. Ye, Z. Ni, F. Wu, S. Chen, and Y. Wang, "Personalized federated learning with inferred collaboration graphs," in Proc. ICML, pp. 39801-39817, 2023.

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

Fantastic Generalization Measures Reloaded: Adapting to Modern Neural Network Challenges

長沼 大樹

モントリオール大学 コンピュータ科学専攻 ／ Mila – Quebec AI Institute

1. はじめに

深層ニューラルネットワークは画像認識や自然言語処理など多岐にわたる分野で目覚ましい成果を上げているが、未知データに対する汎化性能を事前に予測する手段は依然として大きな課題である[1]。学習時に得られる情報のみからテスト時性能を高い信頼性で見積もる手法は、実応用の安全性・信頼性確保の観点から強く求められる。

Jiang らは 2020 年、CIFAR-10／SVHN を用いて 40 種類の汎化指標を網羅的にベンチマークし、PAC-Bayes 境界や Sharpness 系指標が良好な相関を示す一方、古典的なノルムベース指標は必ずしも汎化性能を反映しないことを報告した[2]。しかし、それから約 6 年が経過した現在、Transformer や基盤モデルの登場をはじめとする大きなパラダイムシフトを経験しているにも関わらず、現代的な要求に即した網羅的再評価は十分に行われてこなかった。

本研究では、大阪大学 D3 センターの大規模計算機システム「SQUID」を活用し、(i)分布外（Out-of-Distribution、以下 OOD）汎化、および(ii)信頼性校正（Confidence Calibration）の二つの観点を中心に、43 種類の汎化指標の網羅的再評価を実施した。1 万通り以上のハイパーパラメータ設定でモデルを学習し、現代ニューラルネットワークに適した汎化指標群を体系的に明らかにすることを目指した。

2. 研究背景と問題設定

深層学習モデルの汎化を説明するために、VC 次元やパラメータ数に基づく古典的容量論[3]、PAC-Bayes 理論、ノルム・マージン基盤の複雑度評価、損失曲面の平坦性を捉える Sharpness 系指標など、多くの理論的枠組みが提案されてきた。これらは原理的に IID（Independent and Identically Distributed）設定下で導出されており、実応用で頻発する分布シフト下での挙動については体系的検証が乏しい。

近年では予測の信頼度と精度の整合性を測るキャリブレーション指標が安全性重視の応用場面で注目を集めており[4]、IID 環境下で良好にキャリブレートされたモデルが分布シフトに対する頑健性も高い傾向が指摘されている。しかし、これらを「汎化性能の予測子」として大規模に評価した研究は乏しい。本研究は、Jiang らの枠組み[2]を踏襲しつつ、(i)OOD 設定への評価範囲の拡張、(ii)キャリブレーション指標および情報量規準の追加、を二大改良点として位置づけ、現代の実応用要求を反映した汎化指標の網羅的再評価を行うものである。

3. 計算手法と汎化指標

3.1 評価対象の汎化指標

本研究では学習済みモデルと訓練データのみから算出可能な 43 種類の汎化指標を以下の 6 カテゴリに整理し、同一実装・同一評価条件で一括測定した。すなわち、(a)Baseline & Output-based（VC 次元、パラメータ数、出力エントロピー等）、(b)Norm & Margin-based（$\ell 2/\ell 1$ ノルム、スペクトルノルム、Path-norm、Frobenius 距離等）、(c)Sharpness-based（SAM 型摂動損失、Hessian 上位固有値、PAC-Bayes 境界等）、(d)Optimization-based（勾配ノイズ分散、勾配ノルム、入力勾配ノルム等）、(e)Information Criteria（AIC、WAIC、TIC）、(f)Calibration & Confidence（ECE、MCE、ACE、温度スケーリング誤差等）の 6 種である。

このうち(e)と(f)は、Jiang らの先行研究には含まれておらず、本研究の独自拡張である。情報量規準は対数尤度と複雑度補正を組み合わせる古典的枠組みを深層学習向けに適応した実装を採用し、キャリブレーション指標は予測確率分布と経験的精度の整合度を多様な統計量で評価した。

3.2 学習設定とデータセット

学習には、CIFAR-10[5]に加え、OOD 評価用として CIFAR-10-C および CIFAR-10-P[6]を採用し、さらに DomainBed の PACS、VLCS ベンチマークを用いてドメインシフト環境を構成した。モデルアーキテクチャは、CIFAR-10 系で 3 層 CNN（SimpleCNN）、ResNetV2-32、Network in Network（NiN）の 3 種を、DomainBed 系で ImageNet-1k 事前学習済み ResNet-50＋線形分類器を用いた。

ハイパーパラメータは、最適化手法（SGD/RMSProp/Adam）、学習率、weight decay、バッチサイズ、Dropout 率、ランダムシードの各軸に対してグリッド探索を行い、合計で 1 万通り以上の学習条件を構成した。本規模の網羅的探索を実現できたのは、まさに SQUID の大規模並列計算リソースの恩恵である。

3.3 評価指標と相関分析手法

汎化ギャップの予測精度は、Kendall の順位相関係数 τ を用いて評価した。各汎化指標 μ と評価対象の汎化ギャップ g について、ハイパーパラメータ軸 a 以外を固定した固定条件グループ S 内で τ を計算し、有効シード集合での平均をとってグループ代表値 $\bar{\tau}(S)$とした。さらに、軸 a に対する固定条件グループ集合 Sa にわたる平均

$$\tau mean(a) = (1/|Sa|) \Sigma \bar{\tau}(S)$$

を算出することで、各軸変動に対する汎化指標の順位整合性を体系的に可視化した。なお、IID 汎化ギャップ（GenGap_CIFAR10）に加え、OOD 評価指標として訓練精度-CIFAR-10-C/P テスト精度の差（OODGenGap_C/P）、ならびに IID テスト精度-OOD テスト精度の差（OODTestGap_C/P）の双方を採用し、IID と OOD の両側面からの予測力を同時に検証できる枠組みとした。

4. SQUID 上での大規模並列実験

本研究の中核をなす 1 万通り以上の学習試行は、大阪大学 D3 センターのスーパーコンピューター SQUID（汎用 CPU ノード群および GPU ノード群）の公募型利用枠を用いて実施した。1 学習試行あたり、CIFAR-10 の 100 エポック学習および 43 指標の同一バッチでの一括計測を行うため、典型的に数 GB 規模のチェックポイント・勾配統計を保持しながら計算する必要がある。これを単一マシンで網羅的に実行することは現実的でなく、SQUID の数百ノード規模の並列実行能力が不可欠であった。

実験のスケジューリング面では、ハイパーパラメータ集合をジョブ配列化し、ノード割り当てを動的に管理する独自パイプラインを構築した。これにより、計算資源を最大限効率的に利用しつつ、再現性を担保するためのシード固定・チェックポイントの世代管理・指標計算の冪等化を実現した。最終的に得られた実験データはモデル毎におよそ 43 指標×6 個以上の評価対象（GenGap_CIFAR10、OODGenGap_C 、 OODGenGap_P 、 OODTestGap_C 、OODTestGap_P、ドメインシフト指標等）の組み合わせをもち、解析に供する規模となった。

また、Sharpness 系や Hessian ベースの指標は二階微分情報を要するため計算コストが大きい。Hutchinson 推定や少数 Lanczos 反復、ノード内 GPU 並列とジョブ並列の二段並列化により、現実的な所要時間で網羅測定を可能にした。SQUID の大容量メモリと高速インターコネクトが、計算量の重い指標群をスコープに含められた決定的要因である。

5. 結果と考察

5.1 カテゴリ別の IID／OOD 相関の俯瞰

図 1 に、各汎化指標の IID 汎化ギャップに対する Granulated Kendall τ（横軸）と OOD 汎化ギャップに対する τ（縦軸）の散布を、汎化指標 6 カテゴリ別に示す。各点は単一の汎化指標とハイパーパラメータ軸の組であり、原点を中心とした象限が IID／OOD の順位整合性の符号関係を表す。

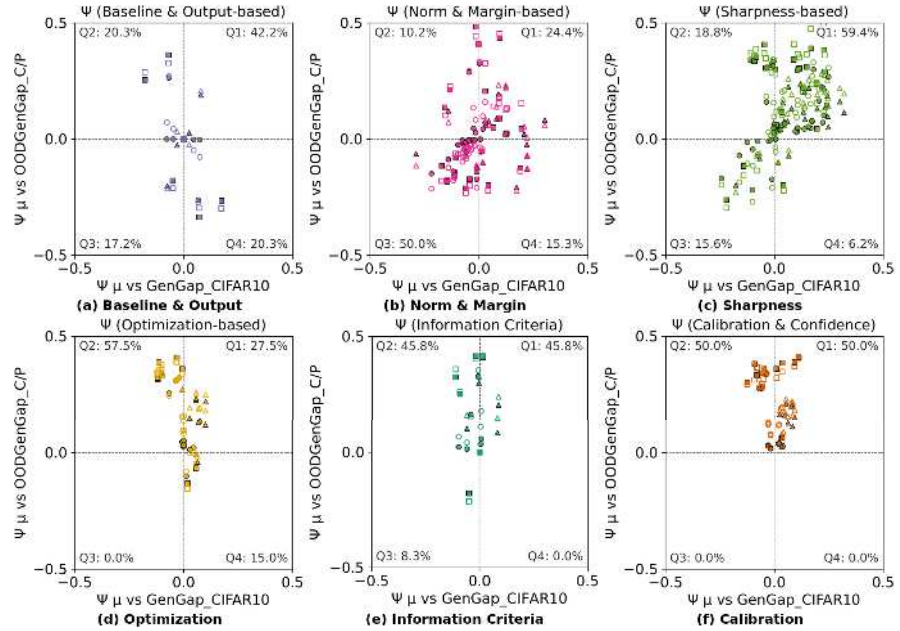


図 1：カテゴリ別の IID／OOD 相関 ψ の散布図（横軸：IID 汎化ギャップとの τ、縦軸：OOD 汎化ギャップとの τ）

Sharpness 系（c）は両軸とも正相関の象限（Q1）に多くの点が集中し、IID／OOD 双方に頑健な予測力を示す。Norm & Margin 系（b）は Q3 に多く偏在し両者で負相関を示す傾向にある。一方、Optimization-based（d）、Information Criteria（e）、Calibration（f）は Q1 に加えて Q2（IID で負・OOD で正）にも相応の質量があり、IID 単独では見えてこなかった有効性が OOD 設定下で初めて顕在化する点が読み取れる。

5.2 アーキテクチャ別の軸ごとの整合性

図 2 に、3 層 CNN（SimpleCNN）および ResNetV2-32 における各汎化指標の軸別 τ mean(a) のヒートマップを示す。行が評価対象（IID／OOD 汎化ギャップおよび OOD テスト差）、列が汎化指標、各セルがハイパーパラメータ軸ごとの平均 τ mean を表す。両アーキテクチャに共通して、学習率（lr）軸では Information Criteria、Calibration、Optimization-based、Sharpness-based の一部が高い順位整合性を示した。一方、ResNetV2-32 では OODTestGap_C/P の行で負の τ mean を示す指標群が広範囲に観測され、同一指標でも評価対象によって符号が反転しうることが確認された。

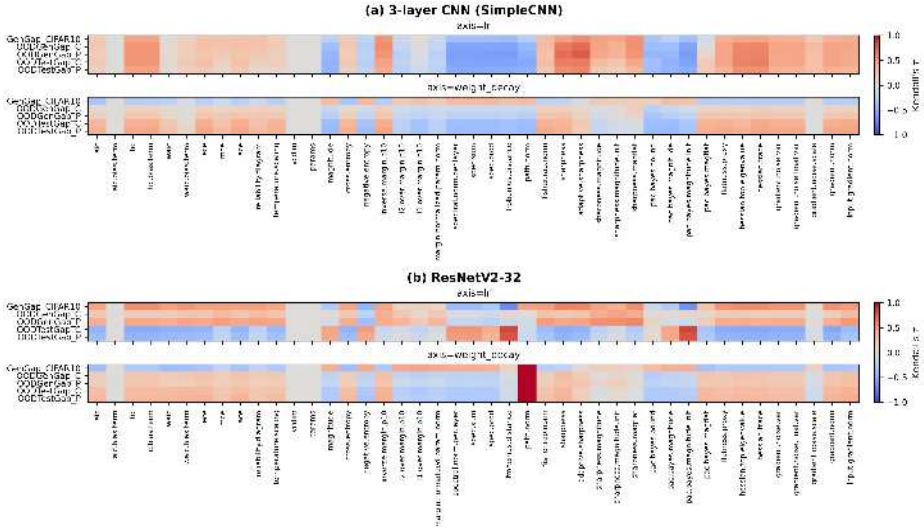


図 2：軸別 τ mean(a) ヒートマップ（(a)3 層 CNN, (b) ResNetV2-32）

5.3 IID と OOD で異なる有効性

weight decay 軸の検討では、Information Criteria、Calibration、Optimization-based の複数指標が OOD 汎化ギャップに対して正の τ mean を示す一方、IID 側に対しては負の τ mean を示す領域が観測された。同一の指標であっても IID／OOD のいずれを評価対象とするかで順位整合性の符号が反転しうることが明確となった。これは、IID 環境で良好なモデル選択指標が必ずしも OOD 汎化を予測するとは限らないという実応用上の警鐘であると同時に、IID 単独では予測力に乏しいと見なされてきた Information Criteria や Calibration 系指標が OOD 設定下では有効な信号源となりうることを示している。

5.4 普遍的に予測力を持つ単一指標は存在しない

全体として、Sharpness 系指標は比較的安定した予測力を保持する一方、IID と OOD のいずれの評価対象、いずれのアーキテクチャにおいても一貫して高い順位整合性を示す「普遍的な単一指標」は確認されなかった。本結果は、特定の汎化指標のみに依拠したモデル選択は本質的にリスクを伴うこと、および評価対象の分布特性・モデル系列に応じて指標群を組み合わせる必要があることを強く示唆する。

DomainBed 系の PACS／VLCS でも、IID 試験ドメインでの有効指標と未観測ターゲットドメインへの汎化の有効指標が必ずしも一致せず、IID モデル選択の限界[7]と整合する結果が得られた。

6. おわりに

本研究では、SQUID の大規模計算リソースを活用し、CIFAR-10／CIFAR-10-C／CIFAR-10-P および DomainBed 系ベンチマーク上で、43 種類の汎化指標を 1 万通り以上のハイパーパラメータ条件で網羅評価した。その結果、(1)IID と OOD で有効性が反転する指標群が体系的に存在すること、(2)Information Criteria および Calibration 系指標が OOD 設定下で新たな信号源となりうること、(3)単一指標による普遍的なモデル選択は困難であることを明らかにした。

本成果の一部は情報処理学会全国大会（IPSJ 2026）[9]においてすでに口頭発表を行い、包括版を論文[8]として国際会議 ICML 2026 に投稿中である。「OOD 設定下で初めて有効性を示す Calibration・Information Criteria 系指標」という知見は、安全性が求められる医療・自動運転等の応用における信頼性評価に直接資するものと考える。今後は分布シフトの種類および severity の拡張、Transformer 系・基盤モデル系への適用、複合的モデル選択基準の確立を進めていきたい。

末筆ながら、大規模計算機システム SQUID の利用機会を提供してくださった大阪大学 D3 センターおよび関係各位、ならびに共同研究者の皆様に深く感謝申し上げる。

参考文献

(1) C. Zhang, et al., Understanding deep learning requires rethinking generalization, ICLR, 2017.
(2) Y. Jiang, et al., Fantastic Generalization Measures and Where to Find Them, ICLR, 2020.
(3) V. N. Vapnik, The Nature of Statistical Learning Theory, Springer, 1995.
(4) C. Guo, et al., On Calibration of Modern Neural Networks, ICML, 2017.
(5) A. Krizhevsky, Learning Multiple Layers of Features from Tiny Images, Tech. Rep., Univ. of Toronto, 2009.
(6) D. Hendrycks, T. Dietterich, Benchmarking Neural Network Robustness to Common Corruptions and Perturbations, ICLR, 2019.
(7) I. Gulrajani, D. Lopez-Paz, In Search of Lost Domain Generalization, ICLR, 2021.
(8) S. Nakai, Y. Fadhloun, K. Mathlouthi, K. Yoshida, G. Talluri, I. Mitliagkas, H. Naganuma, Revisiting Generalization Measures Beyond IID: An Empirical Study under Distributional Shift, ICML, 2026 (投稿中).
(9) 中井 蒼頼, 吉田 晃太朗, 長沼 大樹, 深層学習における広義の汎化指標の特性分析, 情報処理学会全国大会 (IPSJ 2026), 2026.

機械学習力場 MD による原子層プロセス表面反応解析

浜口 智志、 幾世 和将、Jomar U. Tercero、礒部 倫郎、Nicolas Mauchamp Lucas Spiske
大阪大学エマージングサイエンスデザイン R³センター

1. はじめに

現在、半導体デバイスは最先端でプロセスノード 3nm のデバイスが量産されており、近年中に 2nm 未満のデバイスの実用化が期待されている。今後の半導体製造プロセスにおいて、様々な材料に対して、エッチングや薄膜堆積のような表面加工を原子層程度の精度で行うことが求められており、[1] 原子レベルでプラズマに暴露されている物質表面の化学反応と物理的相互作用の両者を同時に解析できる分子動力学（MD）シミュレーションが重要となる。また、MD シミュレーションの精度や信頼性は原子間ポテンシャル（力場）の精度に強く依存しているため、MD シミュレーションにより、信頼できる精度で表面反応を再現するためには、原子間間相互作用エネルギーや力場を、正確に、且つ、効率よく予測できる原子間ポテンシャルモデルの作成が必要不可欠である。

近年、材料科学の分野において、大量の第一原理シミュレーションデータと機械学習を用いて、MD に用いられる力場をサロゲートモデルで表現する機械学習（ML）力場の活用が盛んである。本研究の目的は、この ML 力場による MD シミュレーションを、半導体製造プロセスに現れる様々なプラズマ表面相互作用の解析に活用することにある。

2. 原子層プロセス

最先端の半導体チップでは、その構成要素であるトランジスタが極めて微細で、かつ、複雑な三次元構造を取ることにより、一定のチップ面積の上に、多数のトランジスタを集積して搭載している。このため、半導体製造工程においては、ナノメートル以下の精度で、成膜やエッチング等の加工を行う必要がある。近年、半導体製造工程の中でも、最も精度の高い加工法として注目されているのが、原子層堆積（ALD）・原子層エッチング（ALE）等と呼ばれる原子層プロセスである。紙面の都合により詳細は割愛するが、基本的に、ALD では、成膜プロセスにおいて、原子層を一層ずつ堆積し、ALE では、エッチングプロセスで、表面の物質を、一層ずつ除去する。こうした原子層プロセスの実現には、物質表面における化学反応の精密な制御が必要である。

3. プラズマプロセス用 MD シミュレーションにおける ML 力場の課題

原子層プロセスでは、プラズマを用いない熱 ALD なども幅広く実用化されているが、半導体製造工程では、工程により、できるだけウエハの温度を上げずに表面加工を行うことことが求められる。このような場合は、気体をプラズマ化して、化学反応性高いラジカル（活性種）を生成したり、あるいは、プラズマ中のイオンを電場により加速して、イオン衝撃と化学反応との相乗効果により、効率的な加工を行うことが可能となる場合がある。このようなプラズマを用いるプロセスを、プラズマプロセスという。

プラズマプロセスにおける表面化学反応を MD シミュレーションを用いて解析するには、原子を並べて構成する物質表面のモデルに、比較的高いエネルギーでイオンを入射する必要がある。イオンと中性原子の間の相互作用は複雑であるが、これまでの経験から、イオンの代わりに同じエネルギーで入射する中性原子を衝突させるシミュレーションを行っても、その際に表面で生ずる化学反応を、実験と比較できる範囲で、比較的

良い精度で再現できることが知られている。その理由は、正イオンが表面に衝突する直前に、オージエ効果により中性化して、中性原子として衝突する場合が多い事、及び、通常は、入射エネルギーが、イオンの中性化により放出されるエネルギー（例えば、アルゴンイオンの場合 15 eV 程度）よりもはるかに高いため、中性化に関与するエネルギーの影響は無視できると考えられているためである。このため、通常、高エネルギーイオン入射の MD シミュレーションは、 同じ運動エネルギーをもつ中性原子入射で代用する。

古典的な Stillinger-Weber, Tersoff, EAM 等の原子間力場を用いる場合、このような高エネルギー原子のシミュレーションは問題なく行うことができる。一方、ML 力場では、Materials Project 等の個体の第一原理シミュレーションデータをもとに力場が構成されているため、個体内の特定の原子間の距離が極めて近い場合については、通常、正しい原子間力を表さない。また、原子間距離が極めて近い場合、DFT シミュレーションが発散することがあり、訓練データが得られない場合もある。このため、既存の ML 力場を用いた MD シミュレーションで、高エネルギー原子の衝突現象を行おうとすると、計算が不安定化する。

もう一つの問題は、計算規模である。高エネルギー原子入射の MD シミュレーションでは、入射原子が物質内に深く侵入し、運動エネルギーが物質の振動（フォノン伝播）と熱エネルギーに変換されるため、イオンが入射する物質のモデルサイズを十分大きくとる必要がある。典型的には、水平方向に数ナノメール、深さ方向は１０ナノメートル以上が必要である。しかも、入射を、最低、数千回程度を行わないと、表面構造の変化を含めて、定常状態に達しない場合が多い。古典的力場モデルに比べて、力場評価に２０倍程度の計算時間がかかり、必要なメモリ領域も大きな ML 力場は、限られた計算環境では、現実的なイオン入射シミュレーションが難しい場合がある。

4. シミュレーション手法

こうした課題を解決するために、本研究では、ML 力場の構築に関して、二つのアプローチをとる。一つは、これまでの古典的モデルの式を拡張してパラメータ数を増やし、最適化手法を用いて、ML 力場を作るのと同じ DFT 訓練データを用いて、パラメータの値を決定する。この場合、ほぼすべての古典モデルの式は、原子間の距離が短い場合、古典的な反発力に自然につながるため、訓練データが熱平衡系の原子配置しか含まなくても、高エネルギー入射シミュレーションに問題ない。さらに、関数形が比較的単純なため、力場の評価時間が、通常の ML 力場にくらべて極めて短い。一方、大きな問題は、こうした関数形の表現力が弱く、熱平衡系に対して、予測する原子間力場の精度が著しく低い可能性がある。

もう一つの手法では、既存の ML 力場モデルを活用し、かつ、近距離相互作用に関しては、Ziegler-Biersack-Littmark (ZBL) 項を MD シミュレーション実行に、追加する。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、近距離反発力の精度に問題があるＭＬ力場に強制的に反発力を持たせることで、高エネルギー原子入射時に、原子間衝突が確実に起こる。ただし、ＭＬ力場を完全に外挿領域で用いるため、ZBL ポテンシャルによる反発力に加えて、ＭＬ力場による非現実的な力が各原子に印可される可能性が

ある。本研究では、この可能性は十分認識したうえで、計算が実際に安定して進行するかどうかを見極めることのみを目標とした。

本研究では行っていないが、第３の方法として考えられるのが、訓練データに原子間距離が近い DFT 計算結果を追加することである。原子間距離が極めて近い原子を含む系で、DFT 計算が発散しない場合に限って、この手法は活用可能である。

4.1　訓練データの構築

本研究では、Si、SiO_2, SiN, また、これらに H と F を適宜に混ざった原子配置、および、Si，O, N, H, F からなる比較的小さな分子やラジカル、クラスター等のエネルギーと力場データを、Quantum Espresso を用いて構築した。これら Si 系以外にも、各種金属酸化物のデータをポテンシャル・力場データを構築した。具体的には、構造最適化された物質の各種結晶構造に対して、拡大・圧縮を行い、その後、原子座標に変位を加えることで多様な結晶構造を生成し、DFT 計算によるポテンシャルと力場データを生成した。また、ランダムに原子を配置し DFT 計算による構造安定化を行うことにより、関連するアモルファス構造に対するポテンシャルと力場データも生成した。

4.2　Stillinger-Weber 関数の決定

1980 年代に開発された古典ポテンシャル関数は、少数の DFT 計算から得られた系のポテンシャル値を再現するか、また、場合によっては、その MD シミュレーションから得られる結果が実験結果を再現するようにポテンシャル表現式の数値パラメータが決定された。いずれにせよ、今日の ML 力場の決定に用いられるような、大量な訓練データを高精度で再現するようには設計されていない。本研究では、古典的な Stillinger-Weber 関数 [2]に Si の多様な訓練データを fitting して、パラメータ値を決定した。

4.3　機械学習原子間ポテンシャルの構築

本研究では、SevenNet を用いて、上述の訓練データを用いて、当研究グループで取得した訓練データだけと用いた ML 力場、SevenNet の基盤モデルをファインチューニングして得たモデルを作成し、こられのモデルから得られる基本的な結晶構造や力学パラメータが、実験値や DFT から得られる値に近いものを選んで、数値シミュレーションに活用した。

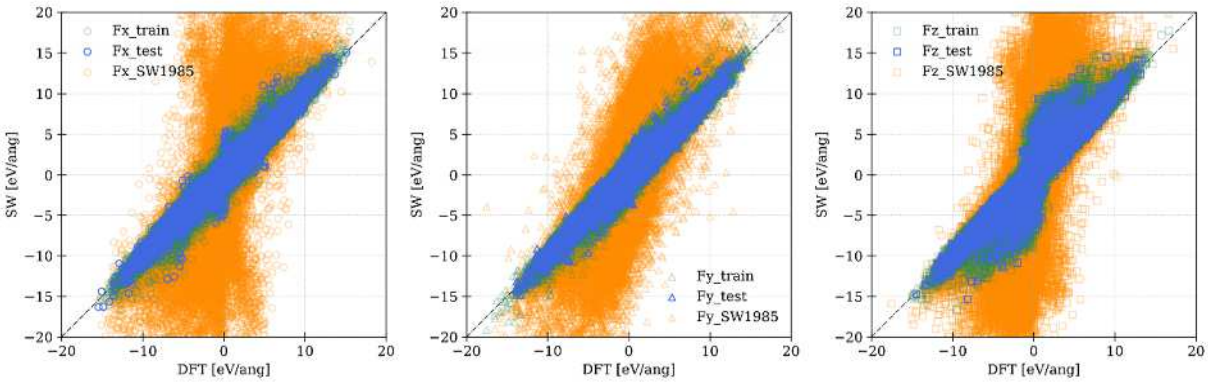


Fig. 1: Stillinger-Weber 関数に、Si の原子クラスター、ダイヤモンド結晶、アモルファス構造すべてに対してパラメータ fitting を行った場合の力場に対する DFT シミュレーションデータ・予測値のプロット。左から、各原子に働く x, y, z 方向に働く力を表している。青が本研究成果、オレンジが古典的 Stillinger-Weber 関数。本研究によるパラメータ値が、すべての場合に、DFT 値に近い値を出していることがわかる。

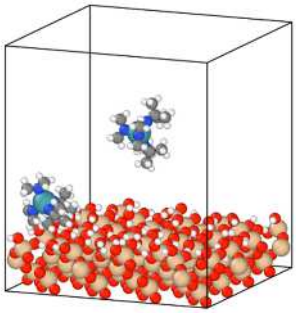


Fig. 2: 水素終端されたSiO_2表面にMoS_2のALDの最初の成膜過程であるプリカーサである$Mo(NtBu)_2(NMe_2)_2$の吸着プロセスシミュレーション

5. 結果

最初にStillinger-Weber関数に対する訓練データによるfitting の結果をFig.1 に示す。パラメータの決定は、最初に、Stillinger-Weber 関数の２体相互作用を、２体のみの訓練データ（Si 原子２個のクラスター）のみを行って決定し、次に、この結果を固定して、同関数の３体部分を、３体のみの訓練データ（Si 原子３個のクラスター）のみから決定した。ここまでの作業でStillinger-Weber 関数のすべてのパラメータは決まってしまうが、次に、この値から出発して、ダイヤモンド構造やその一部が乱れた構造、および、完全なアモルファス構造の訓練データに対して、更に、Stillinger-Weber 関数のパラメータを最適化した。

最適化にあたっては、loss function として、系の全ポテンシャルエネルギーを原子数で割った一原子当たりのエネルギー値の誤差、および、x, y, z 方向の力の誤差それぞれの誤差の和を用いた。ただし、エネルギー値と、力の値は、それぞれ１の order の値となるように、適宜規格化しており、エネルギーの誤差と力の誤差がバランスよく最小化されるように定義されている。Loss function の最少化には、CMA-ES (Covariance Matrix Adaptation Evolution Strategy) を用いた。[4]

ただしこのように最適化したStillinger-Weber関数では、ダイヤモンド構造が安定化せず、すぐにアモルファス化してしまうという致命的な問題があることが確認された。即ち、表現力が足りない原子間ポテンシャルでは、訓練データを増やすと、いずれの構造をあらわすにも精度が足りなくなる可能性がある。今後、パラメータ数を増やしたモデルに対して、最適化を進める。

ALD シミュレーションの一例として、Fig.2 に、SevenNet を用いたMoS_2の成膜プロセスシミュレーションの図を挙げる。

謝辞

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、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] K. Nojiri, *Dry Etching technology for semiconductors*. Springer, Berlin 2015

[2] F. H. Stillinger and T. A. Weber, Phys. Rev. B **31**, 5262 (1985).

[3] Y. Park *et al.*, *J. Chem. Theory Comput.* **20** 4857 (2024)

[4] N. Hansen and A. Ostermeier, Evol. Comput. **9**, 159 (2001).

大規模原子シミュレーションによる炭素鋼の水素脆化メカニズム解析に向けた機械学習ポテンシャルの開発

新里 秀平
大阪大学 大学院基礎工学研究科

1. はじめに

炭素鋼をはじめとする鉄鋼材料は現代のインフラを支える基幹材料であるが、水素を含む環境下では水素脆化に起因する早期破壊が生じやすく、その抑制は重要な工学的課題である。この問題に対処するためには、鉄、炭素、水素間の基本的な原子間相互作用を精緻に理解することが不可欠となる。これまで、鉄系材料を対象とした経験的原子間ポテンシャル（Empirical Interatomic potential; EIP）の開発が精力的に進められてきた。Fe-C-H 三元系においては、既存の EIP を組み合わせるハイブリッド化戦略が広く採用されており、結合次数ポテンシャルや MEAM ポテンシャル、ReaxFF などの EIP が構築され、水素の分布挙動や炭素の役割の解明に貢献してきた。このようなハイブリッドポテンシャルは構成要素となる各 EIP の特性を引き継ぐため、望ましくない非物理的な特性が導入されることがある。さらに、古典的な関数形式には固有の表現限界があり、すべての関連特性を同時に高精度で再現することは困難となる。

近年、機械学習を活用した原子間ポテンシャルの開発が急速に進展しており、第一原理計算に迫る精度を大幅に低い計算コストで実現できることが示されている。本研究では密度汎関数理論（Density Functional Theory；DFT）に基づく第一原理計算による大規模データベースを基に、α-Fe-C-H 三元系用の高精度ニューラルネットワーク原子間ポテンシャル（Neural Network Interatomic potential；NNIP）を構築し、大規模原子モデルを用いた変形シミュレーションを行うことで、炭素鋼の破壊過程における固溶炭素および水素の影響を解析した。

2. 機械学習ポテンシャルの構築

α-Fe-C-H 三元系の NNIP を構築し、その信頼性を評価した。教師データ生成のための第一原理計算には Vienna Ab-initio Simulation Package（VASP）[1]を使用した。原子間ポテンシャルの構築には、n2p2[2]および Neuroevolution potential（NEP）構築パッケージ GPUMD[3]を使用した。教師データセットとして、純鉄、鉄–水素系、鉄–炭素系、鉄–炭素–水素系の固相、ならびに水素ガス、炭素単体およびメタン（CH_4）を含む合計 62,743 構造の第一原理計算結果を用いた。得られた教師データセットのうち 90%を学習用、10%を検証用として原子間ポテンシャルを構築した後、純鉄、鉄–水素系、鉄–炭素系、鉄–炭素–水素三元系のそれぞれについて、材料特性、水素および炭素の固溶特性、ならびに各種格子欠陥との相互作用を計算することで、構築したポテンシャルの信頼性を評価した。これらの NNIP を用いた分子動力学計算には、Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator（LAMMPS）[4]および GPUMD を使用した。

図 1 に、構築したポテンシャルによるエネルギーおよび力の予測値と DFT 計算値との比較を示す。構築した原子間ポテンシャルの二乗平均平方根誤差（Root Mean Squared Error; RMSE）は、エネルギーに対して学習セットが 3.17 meV/atom、検証セットが 3.11 meV/atom であり、力に対して学習セットが 92.6 meV/Å、検証セットが 93.1 meV/Å であった。以上より、エネルギー・力ともに DFT との良好な一致が確認された。さらに、各種欠陥の形成エネルギーおよび移動障壁、ならびにそれらに対する炭素原子と水素原子の影響についても、第一原理計算の結果を良好に再現で

きることを確認している[5]。

3. 大規模モデルを用いた変形解析

3.1 計算条件

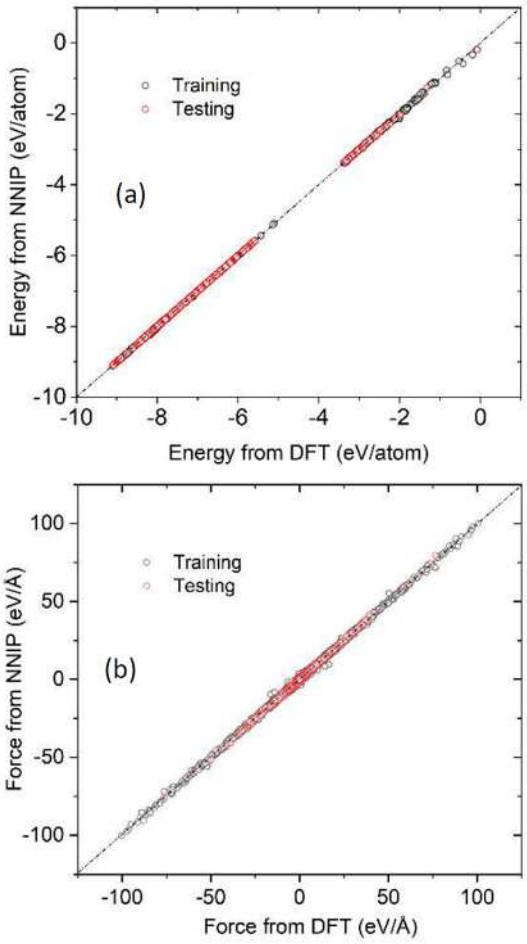


図 1：構築した NNIP の検証結果。(a)エネルギー、(b)原子間力

本シミュレーションでは、$80a_0 \times 80a_0 \times 80a_0$ のサイズに 1,024,000 個の Fe 原子を含むモデルを使用した。初期方位は x[100]、y[010]、z[001]とし、すべての方向に周期境界条件を適用した。引張シミュレーションに先立ち、以下の前処理を実施した。まず、256 個の空孔-格子間原子対をランダムに挿入した後、体積一定の条件下で z 方向に約 20%の予備圧縮を行い、EAM ポテンシャル[6]を用いた NVT アンサンブル下で 900 K、100 ps の等温定積 MD シミュレーションにより欠陥を導入した。続いて、本研究で構築した NNIP を用いて NPT アンサンブル下で 300 K、0Pa、1 ps の等温等圧保持を実施し、基準モデル（Model-I）を作成した。Model-I に C 原子を添加したモデルを Model-II、さらに H 原子を追加したモデルを Model-III とした。Model-II および Model-III については、ゼロ圧力・300 K の NPT アンサンブル下で 25 ps 保持することにより、添加原子の分布を平衡化した。引張シミュレーションは、z 方向に工学ひずみ速度 2×10^8 s^{-1} を一定速度で印加し、x、y 方向はセル内圧力が 0 Pa となるようにセルサイズを制御した。温度は 300 K、時間ステップは 0.5 fs とした。原子間ポテンシャルの学習および大規模モデルを用いた各シミュレーションは大阪大学 D3 センターの大規模計算機システム SQUID の GPU ノードを利用して実施した。

3.2 解析結果

予備圧縮後に実施した単軸引張 MD シミュレーションの結果を図 2〜6 に示す。応力–ひずみ関係を図 2 に、転位密度の経時変化を図 3 に、モデル全体での空孔数を図 4 に示す。なお、2 個以上の空孔が集積した空孔クラスターについては、その体積を単空孔の体積で割ることで単空孔数に換算して計上している。すべてのモデルにおいて、

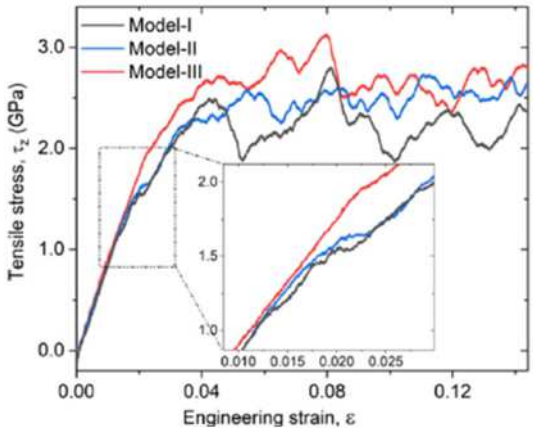


図 2：各モデルの応力ひずみ関係

一軸引張荷重を加えた際に予備圧縮によって導入された転位密度が減少することが確認され、機械的焼鈍が進行していることが裏付けられた。この機械的焼鈍は各モデルでひずみ 0.01〜0.02 付近で顕著になり、事前に導入された転位の活動開始に対応する。転位運動を開始するために必要な

応力は Model-I が最も低く、次いで Model-II、Model-III の順に大きくなる。この挙動は、転位付近に存在する炭素および転位にトラップされた水素がいずれも転位運動の活性化を阻害していることに起因すると考えられる。ひずみがさらに増加すると、Model-I における転位活動が特に顕著になり、著しい機械的焼鈍が生じて転位密度が大幅に減少する（図 3）。対照的に、Model-II および Model-III では転位運動がより限定的であり、

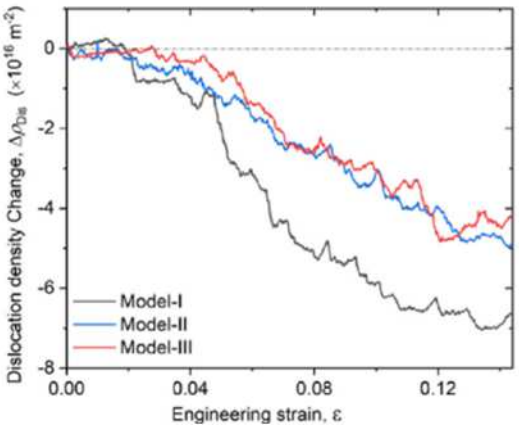


図 3：変形中の転位密度変化

転位密度の減少は緩やかになる。とりわけ Model-III では、炭素および水素が移動する転位と相互作用してその運動をさらに阻害するため、転位運動の抑制がより顕著である。ひずみ 0.04 を超えると、すべてのモデルで流動応力がほぼ一定となる。この時点で Model-II と Model-III を比較すると、Model-III の流動応力がわずかに高い。この違いは、水素が転位に及ぼす抵抗に加え、図 4 に示すように Model-III が Model-II よりも多くの空孔を生成することで転位運動が制限され、必要な応力が上昇することに起因する。一方、Model-I と Model-II は炭素も水素も含有量が異なるにもかかわらず、ひずみ 0.04 以降で非常に類似した流動応力を示す。これは、Model-I ではより広範な機械的焼鈍によって転位密度が大幅に減少する（図 3）とともに、生成された空孔・空孔クラスターが転位運動を阻害し、塑性変形への抵抗を増大させるためである。

図 4 に示すように、塑性変形の進行に伴い空孔および空孔クラスターが形成される。これらの

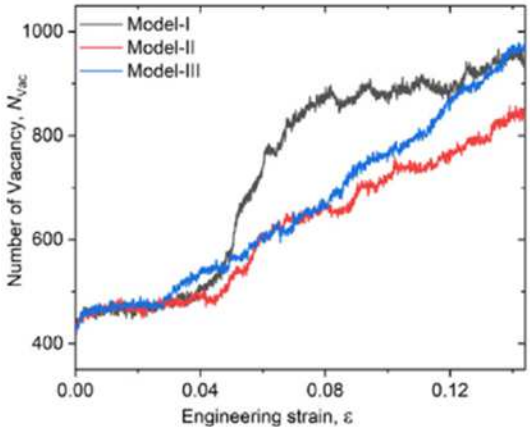


図 4：変形中の空孔数変化

欠陥は後続の転位との相互作用を通じてさらなる空孔・空孔クラスターの生成を促進し得る。ただし、空孔・空孔クラスターの生成には自己侵入型格子間原子の形成も伴い、格子間原子は室温でも急速に拡散するため、その多くは空孔・空孔クラスターと再結合してこれらの欠陥を消滅させる。分子動力学シミュレーションにおける高いひずみ速度はこうした再結合を制限するが、純粋な α-Fe に対する実験的なひずみ速度下では、多くの空孔・空孔クラスターが再結合によって除去される可能性が高い。一方、炭素や水素が存在する場合は前節で示したとおり溶質と空孔との間に引力相互作用が生じ、炭素および水素は空孔と複合体を形成することでこれらの空孔を安定化させる。図 5 はその証拠として、空孔に捕捉された炭素および水素原子数の時間変化を示している。この安定化により格子間原子との再結合による空孔の消滅が抑制され、空孔の生成や空孔クラス

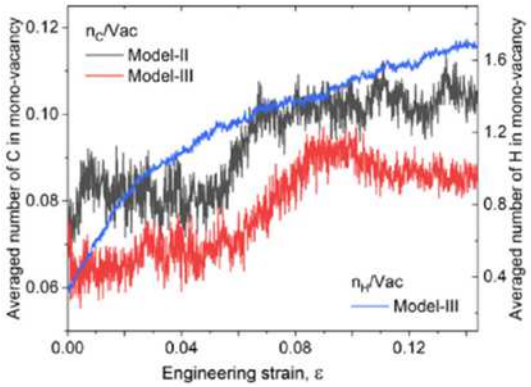


図 5：変形中のトラップ炭素・水素原子数変化

ターの成長が促進される結果、最終的には材料の破損を早めることにつながる恐れがある。

各モデルの塑性ひずみ速度が異なるため、図4のデータをモデル間で直接比較することは必ずしも適切ではない。そこで、各ひずみにおける空孔生成率 $\dot{N}_{\mathrm{Vac}}$ を相当塑性ひずみ速度 $\dot{\varepsilon}_{\mathrm{eq}}$ で正規化し、正規化空孔生成率 $\dot{n}_{\mathrm{Vac}} = \dot{N}_{\mathrm{Vac}}/\dot{\varepsilon}_{\mathrm{eq}}$ を定義する。相当塑性ひずみ速度は次式で与えられる：

$$\dot{\varepsilon}_{\mathrm{eq}} = \sqrt{\frac{2}{3}\dot{\varepsilon}^{\mathrm{p}}_{ij}\dot{\varepsilon}^{\mathrm{p}}_{ij}}, \quad \dot{\varepsilon}^{\mathrm{p}}_{ij} = \dot{\varepsilon}^{\mathrm{tot}}_{ij} - \dot{\varepsilon}^{\mathrm{e}}_{ij}, \quad \dot{\varepsilon}^{\mathrm{e}}_{ij} = S_{ijkl}\dot{\sigma}_{kl}$$

ここで、$\dot{\varepsilon}^{\mathrm{p}}_{ij}$、$\dot{\varepsilon}^{\mathrm{tot}}_{ij}$、および $\dot{\varepsilon}^{\mathrm{e}}_{ij}$ は、それぞれ塑性ひずみ速度テンソル、全ひずみ速度テンソル、および弾性（真）ひずみ速度テンソルである。全ひずみ速度テンソルはシミュレーションセルの変形から直接得られる。弾性ひずみ速度テンソルは、変形中に弾性コンプライアンステンソル S_{ijkl} が変化しないと仮定し、純鉄のS_{ijkl}を用いて、シミュレーションセルに作用する真応力 σ_{ij} から算出する。塑性変形が顕著になるひずみ 0.05～0.14 の範囲における $\dot{n}_{\mathrm{Vac}}$ の平均値を図 6 に示す。3 つのモデルのうち Model-I が最も低い正規化空孔生成率を示し、Model-II、Model-III の順に高くなる。この生成率は空孔–格子間原子間の再結合による空孔消滅を暗黙的に考慮している点に留意されたい。これらの知見は、炭素または水素を添加すると塑性変形中に空孔・空孔クラスターなどの格子欠陥の形成が促進され、特に水素がこの効果を増幅させる傾向があることを示している。空孔・空孔クラスターの増殖は転位とこれらの欠陥との衝突確率をさらに高め、より多くの空孔やより大きな空孔クラスターの形成につながる。以上のことから、水素の存在は塑性変形に伴う材料損傷を加速させ得ると考えられる。

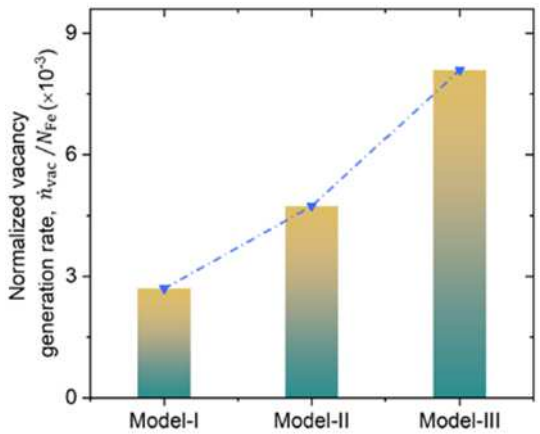


図 6：各モデルの正規化空孔生成率

4. おわりに

本研究では、α-Fe-C-H 系を対象とした、第一原理計算によって得られる広範な材料特性を再現可能な高精度な NNIP を構築し、100 万原子規模のモデルを用いた MD 引張シミュレーションを実施した。その結果、炭素と水素の両方が転位の移動を阻害すること、また塑性変形中に新たに形成される空孔（および空孔クラスター）も同様に転位の運動を妨げることが明らかになった。炭素および水素による溶質-転位相互作用や、空孔-炭素/水素複合体の形成が、空孔と格子間原子の再結合を阻害するため、空孔の生成速度が加速され、最終的には空孔のさらなる蓄積を促進し、材料損傷を激化させることを示した。本シミュレーションにおけるひずみ速度は、実験で一般的に用いられるものよりもはるかに高いものの、これらの知見は、欠陥を介した塑性変形における固溶原子の基本的な役割に関する重要な洞察を提供する。

参考文献

(1) G. Kresse and J. Furthmüller, Phys. Rev. B, **54**, 11169, (1996).
(2) A. Singraber, et al., J. Chem. Theory Comput., **15**, 3075-3092, (2019).
(3) K. Xu, et al., MGE Advances, **3**, e70028, (2025)
(4) A.P. Thompson, et al., Comput. Phys. Commun., **271**, 108171, (2022).
(5) F.S. Meng, et al., JOM, **77**, 8101-8117, (2025).
(6) M. Wen, Comput. Mater. Sci., **197**, 110640, (2021).

Integrating Multi-scale Simulations and Inverse Design for Heterogeneous Catalysis Materials at Operating Conditions by Machine Learning Interatomic Potentials

Harry H. Halim
大阪大学 大学院工学研究科

1. Introduction

Heterogeneous catalysts play an essential role in energy conversion, chemical production, and environmental applications. In particular, the catalytic conversion of carbon dioxide into valuable chemicals is an important research topic toward the development of renewable energy technologies and a sustainable carbon cycle. However, catalytic reactions under operating conditions involve complex atomic-scale processes, including molecular adsorption, surface diffusion, bond breaking and formation, co-adsorption effects, and surface reconstruction. Therefore, understanding and designing catalytic materials requires simulation methods that can connect atomic-scale reaction mechanisms with long-time and large-scale dynamical behaviour.

Density Functional Theory (DFT) is a powerful method for evaluating adsorption structures, reaction energies, and activation barriers on catalyst surfaces with high accuracy. Nevertheless, the computational cost of DFT makes it difficult to directly simulate large systems or long-time dynamics under realistic reaction conditions. To overcome this limitation, machine learning interatomic potentials (MLIPs) have attracted increasing attention. By learning energies and forces from first-principles calculations, MLIPs can reproduce DFT-level atomic interactions at a much lower computational cost, enabling large-scale molecular dynamics and other multi-scale simulations [1].

In this study, we integrate DFT-based database, MLIP- training, multi-scale simulations, and inverse design to establish a computational framework for heterogeneous catalysis materials under operating conditions. As a target application, we focus on catalysis related to methanol synthesis through CO_2 hydrogenation. DFT, Molecular dynamics, metadynamics, and microkinetic modelling are combined to investigate dynamic surface behaviour under actual operating conditions. Through this approach, we aim to move beyond conventional material screening based only on static properties, such as adsorption energies and reaction barriers, and to develop a design strategy that accounts for the dynamic nature of catalytic processes under realistic operating conditions.

2. Computational Model

The computational model used in this study consists of Cu-based catalyst surfaces with adsorbed reaction species relevant to CO_2 hydrogenation and the water–gas shift reaction. Several surface configurations, adsorbate states, and reaction intermediates were considered to describe catalytic processes under realistic reaction conditions. In particular, the model was designed to capture not only ideal flat/pristine surfaces, but also dynamically reconstructed surfaces and cluster-like Cu structures that can appear during the reactions.

3. Large-scale Atomistic Simulations Using Machine Learning Interatomic Potentials

3.1 Construction of DFT Training Datasets and MLIPs

To perform large-scale atomistic simulations with first-principles accuracy, we constructed a workflow that combines DFT database generation, atomic representation, machine learning, and multi-scale simulations, as illustrated in Fig. 1.

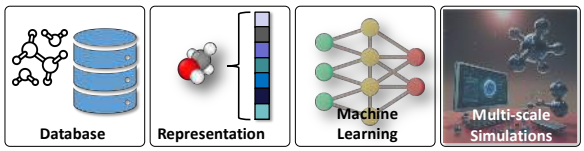


Fig. 1 : Schematic workflow for constructing machine learning interatomic potentials and applying them to multi-scale atomistic simulations.

The training datasets were constructed based on Density Functional Theory (DFT) calculations. The datasets included various Cu surface configurations, adsorbate states, and reaction intermediates relevant to CO2 hydrogenation and the water-gas shift reaction. These DFT calculations provided reference atomic structures, total energies, and atomic forces for training machine learning interatomic potentials.

The machine learning interatomic potentials were constructed using DFT-generated data and improved through an active learning procedure. In this procedure, preliminary molecular dynamics simulations were performed using the current potential, and newly sampled atomic configurations were evaluated according to their relevance and uncertainty. Important configurations were then added to the training dataset, and the potential was retrained. This iterative procedure allowed us to efficiently improve the accuracy and transferability of the potential while avoiding an unnecessarily large database. High-performance computing resources were essential for this workflow because many DFT calculations and repeated training cycles were required. The resulting machine learning interatomic potentials enabled molecular dynamics simulations of Cu-based catalytic systems at much larger length and time scales than direct DFT calculations, while retaining accuracy close to the first-principles reference data.

3.2 Large-scale Molecular Dynamics Simulations

Using the trained machine learning interatomic potentials, we performed large-scale molecular dynamics simulations of Cu-based catalytic systems. These simulations enabled us to investigate surface dynamics that are difficult to capture using static surface models or direct DFT calculations. In particular, we focused on adsorbate-induced surface restructuring and the formation of dynamic active sites under reaction conditions.

For CO_2 hydrogenation, the simulations revealed that hydrogen adsorption can significantly modify the structure of the Cu(100) surface. The time evolution of the lateral coordination number of Cu atoms showed that increasing hydrogen coverage results in the formation of the threefold hollow sites through hydrogen-induced surface restructuring. Such dynamic changes in the local coordination environment are important because they can create active sites that are absent in ideal flat-surface models.

We also investigated the effect of Cu cluster formation on the water-gas shift reaction. The simulations showed that Cu clusters formed on Cu(111) can enhance the catalytic activity compared with the flat Cu(111) surface. The calculated turnover frequency exhibited good agreement with experimental trends, suggesting that dynamically formed Cu clusters act as highly active catalytic sites. These results demonstrate that MLIP-based molecular dynamics simulations are useful for identifying active sites that emerge only under realistic reaction conditions.

4. Dynamic Active Sites in Cu-based Catalysts

The MLIP-based molecular dynamics simulations revealed that active sites in Cu-based catalysts are not always fixed structures. Instead, they can dynamically emerge under reaction conditions through adsorbate-induced surface restructuring and cluster formation. This finding is important because conventional static surface models often cannot describe the structural evolution of catalyst surfaces during reactions.

4.1 Hydrogen-induced Surface Reconstruction on Cu(100)

First, we investigated the effect of hydrogen adsorption on the Cu(100) surface. Exposure to hydrogen adsorbates induces surface reconstruction, forming a rotated Cu(100) structure, denoted as R-Cu(100), and a line-shifted Cu-row structure, denoted as LS-Cu(100). The snapshots of the pristine and reconstructed surfaces are shown in Fig. 2. Quantitatively, the time evolution of the lateral coordination number of Cu atoms was analyzed at 300 K under different hydrogen coverages. As the hydrogen coverage increased, the average coordination number shifted toward approximately 6 (Fig. 3). This indicates that hydrogen adsorption induces significant restructuring of the Cu surface and promotes the formation of three-fold hollow sites [2].

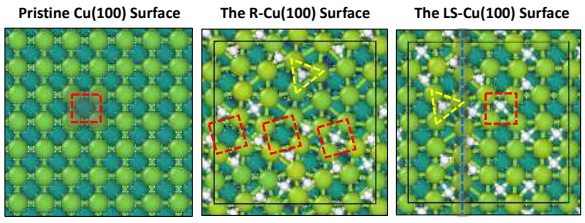


Fig. 2 : Atomic structures of the pristine Cu(100), R-Cu(100), and LS-Cu(100) surfaces formed by hydrogen-induced surface reconstruction.

This result suggests that hydrogen does not only participate as a reactant, but also modifies the surface morphology of the catalyst. The dynamically formed three-fold hollow sites may provide local environments that are different from those on the ideal Cu(100) surface. Therefore, the catalytic properties under reaction conditions can differ from those predicted by static surface models.

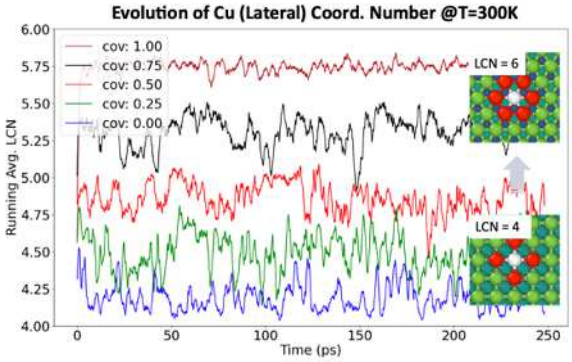


Fig. 3 : Time evolution of the lateral coordination number of Cu atoms on Cu(100) at 300 K under different hydrogen coverages. Increasing hydrogen coverage shifts the average coordination number toward approximately 6, indicating hydrogen-induced surface restructuring and formation of three-fold hollow sites similar with Cu(111) surface.

4.2 Cu Cluster Formation and Water-Gas Shift Reaction Activity

Second, we studied the effect of Cu cluster formation on the water-gas shift reaction. The simulations showed that Cu-cluster-modified surfaces exhibit higher catalytic activity than the flat Cu(111) surface. In particular, the calculated turnover frequency was significantly enhanced by the presence of Cu clusters [3].

The temperature dependence of the calculated turnover frequency showed good agreement with experimental trends (Fig. 4). This indicates that dynamically formed Cu clusters can act as highly active catalytic sites for the water-gas shift reaction. These results demonstrate that the catalytic activity of Cu surfaces is strongly influenced by structural changes that occur under reaction conditions.

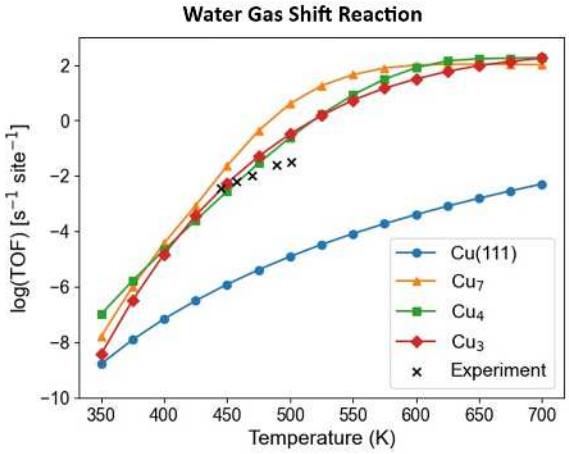


Fig. 4 : Temperature dependence of the turnover frequency for the water–gas shift reaction on flat Cu(111) and Cu-cluster-modified surfaces. The Cu-cluster surfaces show significantly higher activity than flat Cu(111), and the calculated trend agrees well with experiment.

Overall, the results show that dynamic active-site formation is a key factor in Cu-based catalysis. By combining DFT calculations, MLIPs, and large-scale molecular dynamics simulations, it becomes possible to capture surface evolution that is difficult to observe using static models alone.

5. Conclusion

In this study, we performed large-scale atomistic simulations of Cu-based catalysts using DFT calculations, machine learning interatomic potentials, and molecular dynamics simulations. By constructing DFT-based training datasets and using active learning, we developed machine learning interatomic potentials that enable efficient simulations of catalytic surfaces beyond the length and time scales accessible by direct first-principles calculations.

The simulations revealed that active sites in Cu-based catalysts can dynamically emerge under reaction conditions. Hydrogen adsorption induced significant reconstruction of the Cu(100) surface and promoted the formation of three-fold hollow sites. In addition, Cu clusters formed on Cu(111) enhanced the catalytic activity of the water-gas shift reaction, showing good agreement with experimental trends. These results demonstrate that dynamic surface structures play an important role in determining catalytic performance.

Overall, this work highlights the importance of treating catalyst surfaces as dynamic systems rather than ideal static models. The combination of high-performance computing, DFT, MLIPs, and molecular dynamics provides a powerful framework for understanding catalytic reactions under realistic conditions. In future work, this approach will be extended to kinetic Monte Carlo simulations, rare-event sampling, and inverse catalyst design for discovering improved catalytic materials.

References

(1) S. Choung, W. Park, J. Moon, and J. W. Han, Chemical Engineering Journal, 494, 152757, (2024).

(2) W. O. N. F. Rajaelo, H. H. Halim, M. F. Anshor, Y. Yamada, S. Ramadhani, F. A. Mubarok, S. E. M. Putra, A. L. Ivansyah, T. D. K. Wungu, Suprijadi, Y. Morikawa, and F. Muttaqien, ACS Catalysis, 16, 5, 5068-5079, (2026).

(3) M. F. Anshor, H. H. Halim, and Y. Morikawa, Physical Chemistry Chemical Physics, 28, 11187-11197, (2026).

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

水上 渉
大阪大学 量子情報・量子生命研究センター

1. はじめに

近年、情報科学と化学の融合領域において、機械学習ポテンシャル（Machine Learning Interatomic Potential: MLIP）と呼ばれる、物質を構成する原子間に働くエネルギーと力を予測する機械学習モデルの研究が盛んに行われています。

原子・分子のスケールで見ると、化学とは化合物がある構造 X から別の構造 X′へと変化する過程を理解する学問です。化学反応に伴う熱は両構造のポテンシャルエネルギーE(X)と E(X′)の差として与えられ、両者を結ぶ最小作用経路上の一次の鞍点（遷移状態）のエネルギーからは反応速度を算出できます。さらに E(X)の微分量は、屈折率を決める分極率（電場による二階微分）をはじめ、種々の物性値と直接結び付いています。

このように、化合物のある構造情報 X をインプットして、その化合物のエネルギーを返すような「ポテンシャル関数」は、分子・原子レベルでの化学の理解を支える最も基礎的な関数の一つと言えます。言い換えれば、任意の化合物 X に対して、E(X)を高精度かつ高速に予測できるモデルを構築できれば、それは化学分野における「基盤モデル」ということができるでしょう。

2010 年代後半までは、機械学習により構築されたポテンシャル関数は、特定の系に特化したものか、精度を大きく欠くものかのいずれかでした。しかし近年、グラフニューラルネットワーク（GNN）の発展と大規模な第一原理計算・量子化学計算データセットの公開を背景に、多様な化合物に適用可能な「汎用」MLIP が登場してきています[1]。汎用 MLIP は第一原理計算に匹敵する精度を保ちながら桁違いに高速であり、多くの場合、計算コストが系のサイズに対して線形にスケールします。そのため、従来は扱えなかった大規模系をこれまでにない信頼性をもって検証できる道具として大きな注目を集めています。

一方で、「汎用」と謳いつつ現在の汎用 MLIP にはまだまだ課題が山積みです。第一に、「汎用」と称するモデルの大半は、有機系化合物か無機系化合物のいずれか一方のみを対象としてきました。第二に、高性能な汎用 MLIP は高価なクローズドモデルであったり、ライセンスに制限があったりするなど、必ずしも使いやすいものではないという問題もありました。我々は、真に化学分野の基盤モデルと呼びうるモデルは、有機・無機の双方に対応し、周期表のできる限り広い範囲をカバーし、かつ誰もが利用できる形で提供されることが求められていると考えています。

こうした問題意識のもと、我々は 2024 年度までに、計算設定の異なる第一原理計算データセットを再計算なしに統合する手法 Total Energy Alignment（TEA）を開発し、これを用いて有機系・無機系を単一のニューラルネットワークで扱える世界初の汎用 MLIP「MACE-Osaka24」を構築、MIT ライセンスで公開しています[2]。MLIP コミュニティ全体の進展も伴って上記の二点については、大きな改善が見られています。

残された大きな課題の一つは、元素カバレッジの拡張です。既存の汎用 MLIP の学習データは、アクチノイドをはじめとする重元素をほとんど含んでいません。とりわけ超ウラン元素を含む系は、放射性ゆえに実験が極めて困難でシミュレーションへの期待が大きい一方、出発点となる実験データが少ないこともあり第一原理計算のデータ整備そのものが進んでいませんでした。そこで本年度は、アクチノイドを含む重元素系の第一原

理計算データセット HE26 を新たに整備し、これを TEA により既存の有機系・無機系データセットと統合したうえで、97 元素を網羅する汎用 MLIP「MACE-Osaka26」を構築しました[3]。

2. データセット統合法 Total Energy Alignment (TEA)

このセクションでは、本年度の成果の前提となる TEA について説明します。第一原理計算/量子化学計算は有機系と無機系とで異なるソフトウェアエコシステムを形成しながら発展してきました。そのため、有機分子系の公開データセットと無機系のそれとの間には全エネルギーの基準や内殻電子の扱いに起因する深刻な非互換性があります。例えば代表的な無機系データセット MPtrj [4]は VASP という平面波基底と内殻を PAW 法という方法で取り扱い、密度汎関数法(DFT)の交換相関汎関数法の交換相関には PBE を用いています。一方で、有機系データセット OFF23 [5]は、Psi4 という Gauss 基底を用い内殻電子も露わに取り使った全電子計算となっています。汎関数も ωB97M（と D3(BJ)補正）というものが使われており、これは PBE とは出自や性質が大きく異なります。この様々な違いの結果、分子データセット QM9 [6]を両者の設定で計算して比較すると決定係数 R2 は-103.6 にも達します。これが意味するのは、これらのデータを単純に混合してモデルを学習することはできないということです。この問題に対する、素朴な対処法は、有機系のデータセットを無機系のデータセットで使われているソフトウェアと計算条件で全て再計算して作り直すことですが、現代の大規模データセットは 1 億以上の構造を含むものもあり、そうした大規模データセットを作り直す計算資源を確保することは Meta のような大手 IT 企業を除けば極めて困難です。

TEA は、この問題に対応するために開発されました。詳細は省きますが、TEA では、内殻電子の取り扱いの違いを整合させる Inner Core Energy Alignment（ICEA）と、孤立原子エネルギーおよび原子化エネルギーに基づいて電子状態計算手法の違いを線形変換で補正する Atomization Energy Correction（AEC）の二段階により、この非互換性を解消します。前述の QM9 を用いた検証では TEA の適用により R2 は 0.9965（RMSE 0.84 eV）まで改善し、補正パラメータの決定に必要な参照計算も実用上 1000 点程度で済みます。TEA の補正は原子化エネルギーなどの相対量のみに基づくため任意のデータセットの組に適用可能であり、「データ整備の民主化」を実現する基盤技術となっています[2]。

3. 重元素データセット HE26 と汎用 MLIP「MACE-Osaka26」の構築

HE26 は、本研究で開発した重元素・アクチノイド領域向けの第一原理計算データセットである。既存の大規模データセットです。MPtrj や OFF23 は、一般的な結晶材料や有機分子を広く含む一方で、Am、Cm のような minor actinide や Cf のような超ウラン元素、さらに Fr、At、Ra、Po、Rn といった重元素をほとんど含んでいませんでした。そのため、既存の汎用 MLIP は周期表の広い範囲を扱えるように見えても、核燃料、核廃棄物、アクチノイド含有セラミックスなどに重要な重元素化合物には適用が難しい状況にありました。HE26 はこの欠落を埋めるために作られたデータセットです。VASP を用いた 59,438 構造の DFT 計算の結果からなります。このデータセットでは、既存データでは希少な 8 つの重元素、Am、Cm、Cf、Fr、At、Ra、Po、Rn が明示的に含まれているのが特徴です。

HE26 は大きく三つのサブセットから構成される。第一の BHE（Basic Heavy Element）は、重元素の元素固体や二元酸化物など、最も基本的な構造を集めたものです。第二の CHE（Complex Heavy Element）は、COD、文献、無機物質データベースなどから収集した、重元素を含む多元素・複雑組成の化合物構造を含みます。第三の CCFO は

Compositionally Complex Fluorite Oxides で、蛍石型 ThO2 を出発点として、アクチノイド、ランタノイド、希土類、Zr、Nb などを置換した混合酸化物群となっています。特に CCFO は、minor actinide を含む混合酸化物燃料や、アクチノイド含有高エントロピーセラミックスを意識して設計されています。したがって HE26 は、単なる元素拡張用の補助データではなく、核材料分野で重要な組成複雑性と重元素化学を MLIP に学習させるための基盤データと位置づけることができます。

この HE26 を用いて作った MLIP が MACE-Osaka26 です。ここでは、HE26 は単独で使われるのではなく、結晶材料データである MPtrj、有機分子データである OFF23 と統合されています。MPtrj と OFF23 の間のエネルギースケールの不整合は先述の TEA プロトコルによって解消されており、HE26 は MPtrj と互換性のある計算条件で生成されているため、この統合データセットへ補正なしに直接組み込むことができるようになっています。こうして分子・結晶・重元素化合物という異なるドメインを一つの MACE モデルに学習させた結果、MACE-Osaka26 は従来モデルでは扱えなかった重元素を含めて 97 元素をカバーするモデルとなりました。

ただし、MACE-Osaka26 はまだまだ課題があります。HE26 の参照計算は PBE に基づき、一部の遷移金属を含む酸化物・フッ化物には DFT+U 補正が適用されているものの、アクチノイドで重要になるスピン軌道相互作用を扱っておらず、そもそも f 電子系における PBE 汎関数の信頼性も十分とは言い難い。加えて、HE26 はデータ数が MPtrj や OFF23 に比べて小さく、広範な化学環境を提供する訓練データとはなっていない。HE26 は、今後の重元素データセット開発のあくまで出発点であり、ここで挙げた課題の解決は今後おこなっていく計画です。

4. MACE-Osaka26 モデルの検証と応用

構築した MACE-Osaka26 モデルの検証としては、まず、HE26 に含まれる重元素系を対象とした格子定数計算を実施した。まず BHE では格子定数の RMSE は 0.4488 Å となり、CHE では 133 構造を評価対象として格子定数の RMSE が 0.0477 Å となった。CCFO については、fluorite 型酸化物を対象に、Th から Cf までのアクチノイド系列で格子定数を評価したところ、MACE-Osaka26 の DFT に対する RMSE は 0.0067 Å に抑えられていることが確認された。ランタノイド、Y、Zr、Nb を含む fluorite 型酸化物でも、RMSE は 0.0124 Å と同程度の精度が得られていることも確認している。

次に、AnO_2（An = Th, Pa, U, Np, Pu, Am, Cm, Cf）に対して二次および三次の原子間力定数計算もおこなった。計算には phono3py[7]を用い、96 原子の 2×2×2 fluorite supercell、変位幅 0.03 Å、10×10×10 q 点メッシュを採用した。$Am_{0.25}U_{0.75}O_2$ については、12 原子の U_4O_8 conventional cell 中の U を 1 つ Am に置換して $U_3Am_1O_8$ とし、これを 2×2×2 に拡張したモデルで扱った。得られた力の定数から、格子熱伝導率を Wigner transport equation を解くことで算出した。その結果、8 種の AnO2 すべてにおいて虚数フォノン振動数が一切現れず、単一の普遍的モデルでアクチノイド系列全体の動的安定性を再現できることが確認されました。得られた格子熱伝導率の温度依存性は、実験データが存在する UO_2、ThO_2、NpO_2、PuO_2、AmO_2、CmO_2 について、300–1500 K の広い温度範囲で実験報告と整合しています。また、$Am_{0.25}U_{0.75}O_2$ の格子熱伝導率を純粋な UO_2 および AmO_2 と比較したところ、Am ドープによる熱伝導率の大幅な低下が定量的に再現され、Am 濃度がわずかに異なる実験値（$Am_{0.20}U_{0.80}O_2$）とも良い一致を示しました。

5. おわりに

本稿では、有機・無機化合物を包括する「化学分野の基盤モデル」の構築に向けた本年度の取り

組みとして、アクチノイドを含む重元素の第一原理計算データセット HE26 の整備と、これを TEA により既存の有機系・無機系データセットと統合して学習した、97 元素対応の汎用 MLIP「MACE-Osaka26」の構築について報告しました。MACE-Osaka26 は、既存の汎用 MLIP がほとんど扱えなかった重元素領域においても格子定数を DFT と整合する精度で再現し、アクチノイド酸化物系列全体の動的安定性や格子熱伝導率の温度依存性を単一のモデルで記述できることを確認しました。特に、マイナーアクチノイドを含む混合酸化物燃料を模した Am–U–O 系の熱伝導率評価は、実験が極めて困難な系をシミュレーションで定量的に評価できることを示すと同時に、汎用 MLIP が有機・無機化学の枠を超えて原子力材料のような応用分野へ直接貢献しうることを示すものであり、化学の基盤モデルの射程の広さを物語る成果と考えています。

一方で、第 3 節で述べたとおり、スピン軌道相互作用の取り扱いや f 電子系に対する交換相関汎関数の信頼性、重元素領域の訓練データの規模など、残された課題も少なくありません。今後は、より信頼性の高い参照計算に基づくデータの拡充を進めるとともに、応用先のさらなる開拓を通じてモデルの検証と改良を重ねていく計画です。MACE-Osaka26 は前年度の MACE-Osaka24 と同様にオープンなモデルとして公開しており、周期表のほぼ全域を誰もが利用できる形でカバーする、真の意味での「化学分野の基盤モデル」の確立に向けて、今後も研究を進めていきます。

参考文献

(1) I. Batatia, et al., J. Chem. Phys., **163**, 184110, (2025).

(2) T. Shiota, K. Ishihara, T. M. Do, T. Mori and W. Mizukami, arXiv:2412.13088, (2024).

(3) N. Kuroda, K. Ishihara, T. Shiota and W. Mizukami, arXiv:2603.03223, (2026).

(4) B. Deng, et al., Nat. Mach. Intell., **5**, 1031, (2023).

(5) D. P. Kovács, et al., J. Am. Chem. Soc., **147**, 17598, (2025).

(6) R. Ramakrishnan, et al., Sci. Data, **1**, 140022, (2014).

(7) A. Togo, et al., J. Phys.: Condens. Matter, **35**, 353001, (2023).

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

横山 尋斗
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

絶縁材料としての有機高分子は、無機材料に比べて軽量かつ成形性・経済性に優れ、パワーモジュールの封止材や電力ケーブルの絶縁層など幅広い分野で利用されている。脱炭素化に伴う電力機器の小型化・高電界化が進むなか、絶縁ポリマーには一層高い絶縁信頼性と長寿命が求められている。しかし高分子は高次構造が複雑で、絶縁体中の電子輸送を記述する理論的基盤も発展途上にあり、その劣化機構の理解には多くの課題が残されている。

絶縁機器では、金属電極とポリマーの界面から注入された電荷が空間電荷の蓄積や局所的な電界集中を引き起こし、材料の劣化や絶縁破壊に至る。注入電流は界面の電荷注入障壁に指数関数的に依存するため、この障壁を支配する因子の解明は絶縁性能の制御において本質的に重要である。

著者らのグループは、X 線光電子分光法（XPS）による界面電荷注入障壁の測定手法を開発するとともに、第一原理計算による相補的解析を進めてきた [1]、[2]。これらの研究では、金属/絶縁ポリマー界面の正孔注入障壁 φ_{h} を、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 を用いて式（1）により評価している[1]。

$$\varphi_{\mathrm{h}} = IP - \Delta - \Phi_{\mathrm{metal}} \quad (1)$$

物理吸着を仮定したモデルの計算値は XPS 実測値と二乗平均平方根誤差 0.76 eV で整合しており[1]、界面の電荷注入障壁がポリマー固有の量子化学的物理量（とりわけイオン化エネルギー）と金属側の電子状態から見積もれることが示された。

このことは、絶縁ポリマー設計において分子スケールの量子化学的物理量（ミクロ物理量）の網羅的把握が鍵となることを示唆する。しかし膨大な化学空間に存在する多数のポリマーへ第一原理計算を逐一適用することは、計算コストの観点から現実的でない。こうした課題に対し、機械学習による代理モデルで分子構造から物性を高速に予測し、膨大なポリマー化学空間を効率的に探索するポリマーインフォマティクスの枠組みが、材料開発を加速する有力な手段として急速に発展している[3]。そこで本研究では、界面電荷注入解析で重要となる代表的な量子化学記述子を多数のポリマーについて大規模に計算し、これらを分子構造から予測する機械学習モデルを構築した。本稿では、これら一連の量子化学記述子計算と機械学習予測の手法および結果を報告する。

2. 手法

絶縁性能や分子間相互作用に関連する代表的な 12 種の量子化学記述子を選定した。各ポリマーは繰り返し単位（モノマー）をメチル基で末端処理した構造として表現した。

量子化学計算には Gaussian 16 を用い、汎関数 B3LYP を採用した。理論レベルは B3LYP/6-31G(d)とし、二次収束法（scf=xqc）を併用した。計算は構造最適化、体積・分極率・イオン化エネルギー・振動数計算、および自己無矛盾反応場（SCRF）計算からなり、初期構造は Open Babel により SMILES から生成した。これらの計算フローは文献[4]を参考にした。

各記述子の定義は以下のとおりである。分子量 mw（g/mol）および原子あたりの電子数 Ne/Na（無次元）は RDKit 表現から算出した。モル体積 Vm（bohr³/mol）は体積計算から取得した。電子状態量として最高被占軌道エネルギー homo（eV）、最低空軌道エネルギー lumo（eV）、および

HOMO–LUMO ギャップ Egap（= lumo − homo、eV）を用いた。垂直イオン化エネルギー Eiv（eV）および垂直電子親和力 Eav（eV）は、中性分子の最適構造を固定したままカチオン・アニオンの一点計算を行い、ΔSCF 法による全エネルギー差として求めた。応答物性として等方分極率 alpha（bohr³）および双極子モーメント mu（Debye）を取得した。さらに SMD 連続誘電体モデルを用い、水中および n-オクタノール中の中性分子エネルギーと気相値との差を、溶媒和エネルギー変化 dEw（eV）および dEo（eV）として定義した。

各記述子を分子構造から予測する回帰モデルとして、拡張結合性フィンガープリント（ECFP）を入力とする多層パーセプトロン（MLP）を構築した。入力特徴量にはメチル末端化 SMILES から生成した半径 2・2048 ビットの Morgan フィンガープリント[5]を用い、回帰器には scikit-learn の MLPRegressor[6]を、ハイパーパラメータには Optuna による探索を採用した。

モデルの評価には 5 分割交差検証を用い、各分割の予測を 5 個のアンサンブル平均として統合した。使用するデータは約 1.2 万種のポリマーに対する記述子計算結果である。さらにデータ数に対する予測精度の変化を評価するため、データ量を系統的に変化させてモデルの予測精度を取得し、各データ数で乱数条件を変えた 3 回のサブサンプリングの平均と標準偏差を評価した。

3. 結果と考察

構築したモデルによる全データに対する予測結果を図 1 のパリティプロットに示す。各記述子について予測値は真値とよく一致し、決定係数 R^2 は多くの記述子で 0.84〜0.95 の範囲にあった。特に垂直電子親和力 Eav では $R^2 = 0.95$、標準偏差で規格化した NRMSE = 0.23 と最も高い精度が得られた。一方、双極子モーメント mu は $R^2 = 0.58$、NRMSE = 0.65 と、他の記述子に比べて予測が困難であった。

データ数に対する予測誤差の変化を図 2 に示す。いずれの記述子においても、規格化した予測誤差はデータ数の増加に伴っておおむね減少し、その挙動は冪則 $y = a\,n^{-b}$ によってよく記述された。減衰指数 b は記述子によって異なり、Eav では $b = 0.18$ と最も急峻に誤差が減少したのに対し、mu では $b = 0.06$、Vm では $b = 0.09$ と緩やかであった。なお、図 1 および図 2 の NRMSE は、いずれも真値の標準偏差で規格化した RMSE として定義した。

多くの記述子が分子構造のフィンガープリントから高精度に再現できたことは、これらの量子化学的物理量が主として局所的な化学組成や結合様式によって決定されることを示唆している。実際、分子量 mw や原子あたり電子数 Ne/Na のように構成原子に直接対応する量に加え、軌道エネルギーや電子親和力といった電子状態に関わる量についても高い予測精度が得られた。これは、これらの量が分子内の限られた近傍環境に強く支配され、Morgan フィンガープリントが捉える二次元的な部分構造情報によって十分に表現できることを意味している。

これに対して双極子モーメント mu の予測精度が低かったのは、双極子モーメントが分子全体の三次元的な電荷分布と立体配座に敏感であり、二次元的な結合情報に基づくフィンガープリントでは表現が難しいためと考えられる。さらに mu は減衰指数 b が小さく初期精度も低いことから、データ拡充のみによる改善が限定的であることを示している。配座依存性の強い物理量に対しては、三次元構造を反映した記述子の導入が今後の課題となる。

機械学習モデルの予測誤差が学習データ数に対して冪則的に減少する挙動は、自然言語処理や画像認識をはじめとする幅広い分野で経験的に観測される普遍的な性質であり、その冪指数は学習効率の指標として広く用いられている[7]。分子物性予測においても、学習曲線を用いて記述子や回帰手法ごとのデータ効率を比較し、目標精度の達成に要するデータ規模を見積もる枠組みが確立されてきた[8]。本研究で得られた記述子ご

との冪則挙動はこれらの知見と整合しており、量子化学記述子の構造ベース予測におけるデータ効率の差を定量的に裏付けるものである。

学習曲線が冪則に従うことは、追加のデータ取得によって到達しうる予測精度をあらかじめ見積もるうえで有用な指針となる。減衰指数 b の大小は記述子ごとのデータ効率の違いを反映しており、Eav のように b が大きい量はデータ数の増加によって効率的に精度が向上する一方、mu のように b が小さい量では、同等の精度向上に多大なデータを要する。この知見は、限られた計算資源のもとでどの記述子にデータ取得を優先すべきかを判断する際の指針ともなる。

本研究で計算・予測の対象とした記述子には、界面電荷注入障壁の評価で中心的役割を果たすイオン化エネルギーに対応する垂直イオン化エネルギー Eiv が含まれており、$R^2 = 0.90$ と良好な精度で構造から予測できることが確認された。これは、界面解析で重要となる分子スケールの物理量を、膨大な化学空間に対して低コストで推定できる見通しを与えるものである。さらに、ここで整備した量子化学記述子群は、分子動力学（MD）記述子や力場（FF）記述子と組み合わせた階層的・物理情報型記述子の一部として活用されている[9]。これらを用いることで、一部物性に対して学習データの物性範囲や分子構造の分布外への外挿予測が可能であること[10]が示されている。今後は、データベースのさらなる拡大を通じて、ポリマー物性を高い汎化性能で予測するための基盤を構築する予定である。

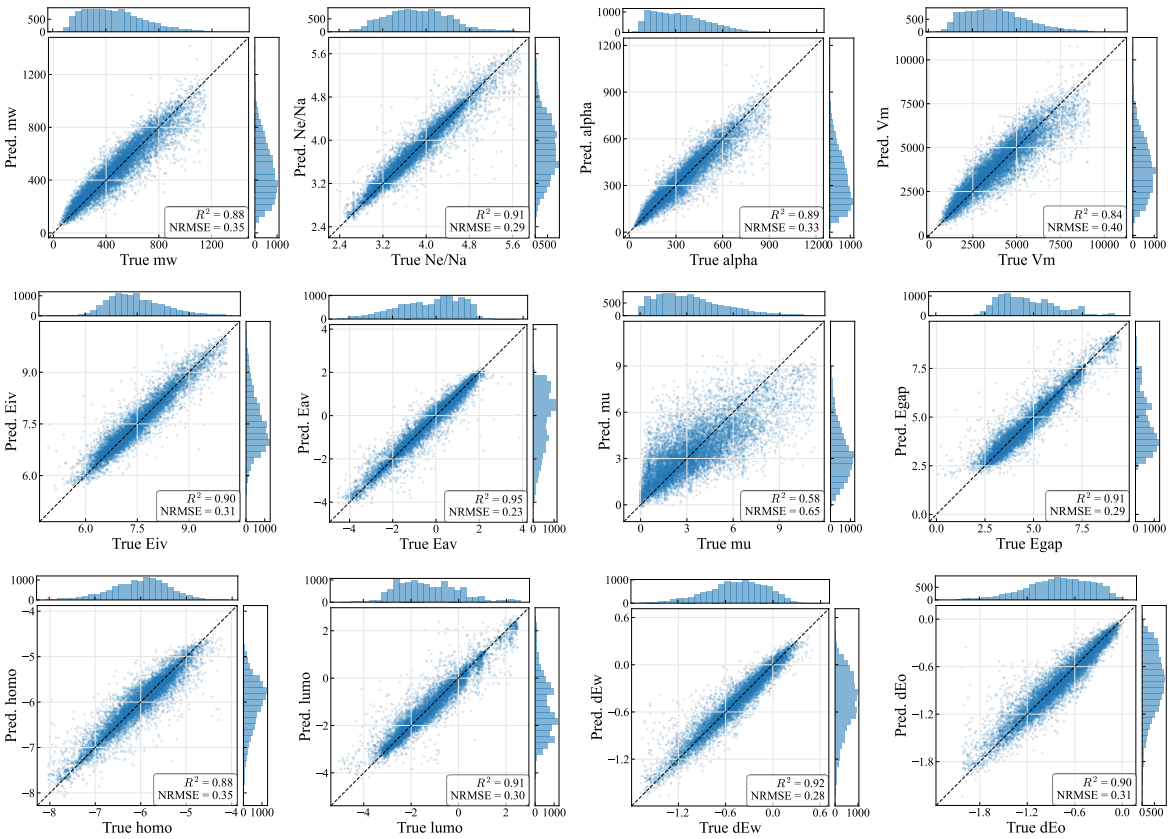


図 1：12 種の量子化学記述子に対する予測値と真値のパリティプロット。破線は $y = x$、各パネルの右下に決定係数 R^2 と NRMSE（真値の標準偏差で規格化した RMSE）を示す。

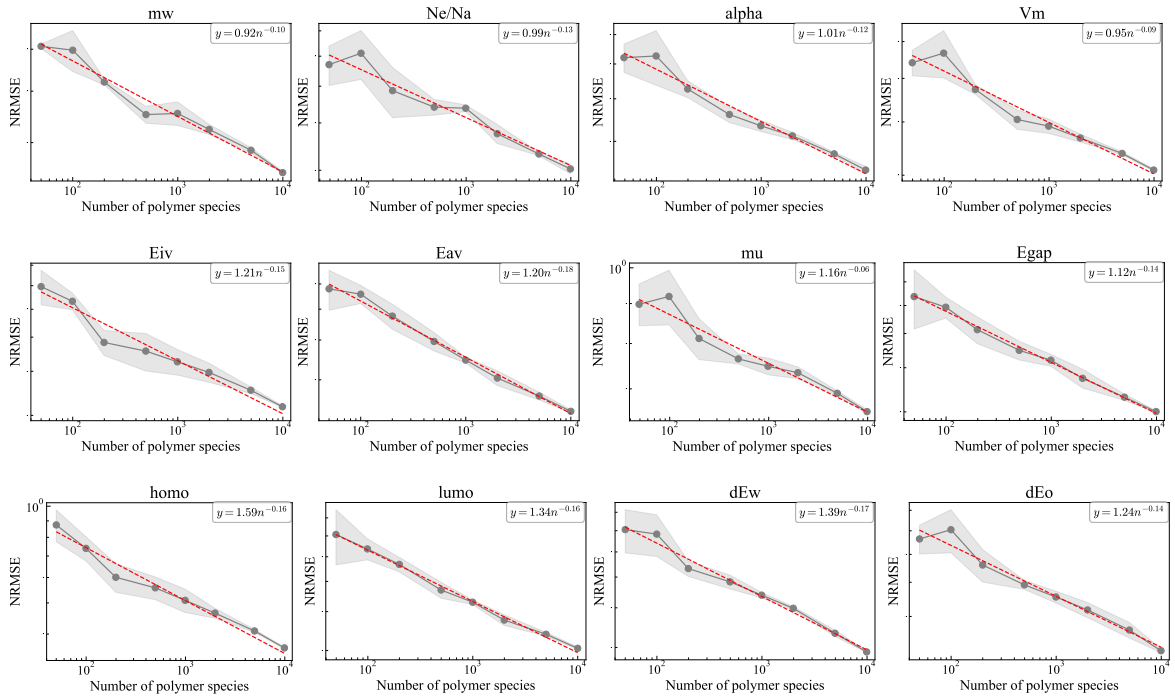


図 2：各記述子におけるデータ数に対する予測誤差の変化。横軸はモデルで使用したポリマー種数、縦軸は NRMSE（真値の標準偏差で規格化した RMSE）、赤破線は冪則 $y = a\,n^{-b}$ による最小二乗フィットを表す。

参考文献

(1) 片瀬 大祐, 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, サイバーメディア HPC ジャーナル, **15**, 55-58 (2025).

(2) D. Katase, et al., IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul., **30**, 2923-2925 (2023).

(3) L. Chen, et al., Mater. Sci. Eng. R Rep., **144**, 100595 (2021).

(4) H. Shimakawa, et al., npj Comput. Mater., **10**, (2024).

(5) D. Rogers, M. Hahn, J. Chem. Inf. Model., **50**, 742-754 (2010).

(6) F. Pedregosa, et al., J. Mach. Learn. Res., **12**, 2825-2830 (2011).

(7) J. Hestness, et al., arXiv:1712.00409 (2017).

(8) F. A. Faber, et al., J. Chem. Theory Comput., **13**, 5255-5264 (2017).

(9) H. Yokoyama, et al., IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul., online (2026).

(10) H. Yokoyama, et al., Appl. Phys. Lett., **127**, 232704 (2025).

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

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}~10^{-2} au）は、恒星連星の典型的な連星間距離（10^{-1}~10^{2} au）に比べ数桁以上小さい。この連星間距離の隔たりをつなぐ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。

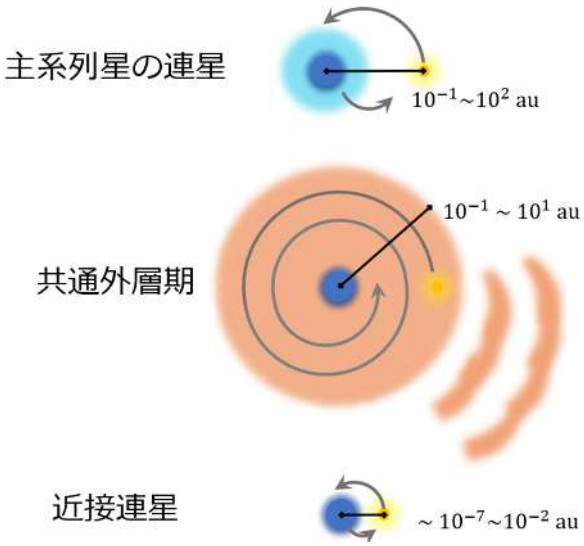


図 1：共通外層期の概要

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いない。特に、失われた軌道エネルギーがどの程度外層部の放出に使われるのか、はぎ取られた外層部がどのような構造を形成するのか、一度連星から遠ざかったガスが再び系へ戻るのか、といった点は未解明である。これらの問題はいずれも共通外層期後の連星間距離や周囲のガス分布を決定するため、近接連星の形成過程を理解する上で重要である。

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 次元的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扱った 3 次元流体計算例はいくつか存在するが[2]、観測との比較に焦点を当てた例は限られている。また、過去の計算の多くは小質量星を対象としており、中性子星やブラックホールへ進化し高エネルギー現象を引き起こす大質量星で起こる共通外層期については、未だ十分に調べられていない。大質量星では対流や輻射といった物理過程も重要となるため、より現実的な 3 次元計算が必要である。

さらに、共通外層期における立体構造の形成には磁場が重要な役割を果たす可能性がある。磁場を考慮した研究[3]では、極方向へ高速なアウトフローが形成されることが示されており、その形状が双極惑星状星雲と似ていることも指摘されている。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、磁場を考慮した 3 次元磁気流体計算を行った。さらに、共通外層期の対応突発天体として考えられている高輝度赤色新星との直接比較を行うことを目指し、輻射輸送コードの開発も進めた。

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限られている。特に深刻な問題として、計算領域内における密度差が大きいことが挙げられる。共通外層期では高密度な星内部と低密度な放出物という

20 桁以上にもなる密度差を扱う必要がある。このような問題では、数値的な安定性を保ちながら長時間の時間発展を追うことが難しい。

この密度差に起因する問題に対処するため、これまでの共通外層期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きた。粒子法は大きな密度差を扱いやすいという利点を持つ。一方で、解像度が粒子分布に依存するため、低密度な放出物の構造を高い精度で追跡することは難しい。しかし共通外層期における低密度な放出物は、観測される光度曲線やスペクトルを決める重要な要素であるため、その時間発展を正確に追うことが求められる。

また、観測との比較を行うためには、単に最終的な連星間距離を求めるだけでは不十分である。はぎ取られた外層部が赤道面方向に円盤状構造を形成するのか、極方向へアウトフローを作るのか、あるいは一部が再び連星近傍へ戻るのかといった 3 次元構造を調べる必要がある。このような構造は、光がどの方向へ逃げやすいか、どの程度の時間スケールで冷却されるか、観測者から見た明るさがどのように変化するかに影響を与える。したがって、共通外層期を観測と結びつけるためには、低密度放出物を十分な解像度で扱うことができる 3 次元流体計算が不可欠である。

3. 本研究のアプローチ

本研究では、大質量星で起こる共通外層期に焦点を当て、放出物の性質に対して磁場が与える影響を調査した。対象とする系は、82.1 太陽質量の赤色超巨星と 35.0 太陽質量の伴星からなる連星系[4]である。このような大質量連星は、後にブラックホール連星となり、重力波源へと進化する可能性がある。初期の連星間距離は30.0 auである。

本研究の特徴の一つは、連星が相互作用を始める Roche Lobe Overflow から計算を開始している点である。多くの共通外層期の計算では、伴星を主星表面付近に置いた状態から計算を始める場合がある。しかし、共通外層期直前の質量移動や放出物の形成は、その後の軌道進化や外層部構造に影響を与える可能性がある。そこで本研究では、伴星が主星外層部へ徐々に接近し、共通外層期へ移行していく過程を含めて計算した。

計算には 3 次元磁気流体計算コード Athena++[5]を用いた。本計算コードは空間を格子状に分割して方程式を解くオイラー法に基づいている。オイラー法では、粒子法とは異なり、密度分布に直接依存せず計算格子を配置できる。そのため、低密度な放出物に対しても、あらかじめ指定した解像度を確保できる。この特徴は、共通外層期における放出物の時間発展や観測量との対応を調べる上で大きな利点となる。

初期条件として、主星中心に双極子磁場を持つ赤色超巨星を配置した（図 2）。主星は静水圧平衡を満たすように構成し、主星表面における磁気圧がガス圧の 1/1000 となるように磁場強度を設定した。本研究では、初期には比較的弱い磁場が伴星との相互作用を通じてどのように増幅され、放出物の構造へ影響を与えるかを調べた。

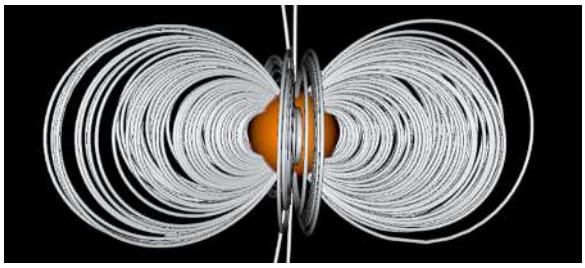


図 2：計算初期条件と双極子磁場

本計算では計算領域の原点を主星中心に取っているため、密度の高い主星中心部を静止させた座標系で計算することができる[6]。これは数値拡散による誤差を抑える上で有効である。

一方で、本計算には数値的な困難も残されている。本研究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そのまま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し、中心部の密度を下げている。本研究で重要なのは主星表面に近い外層部とそこから放出されるガスであるた

め、この処置によって主目的となる物理を保ちながら計算を安定化している。

また、観測との比較を行うためには、流体や磁場だけでなく輻射輸送を考慮した計算が必要である。高輝度赤色新星の光度曲線は、放出物がどのように膨張し、冷却し、光を放出するかによって決まる。そこで本研究では、磁気流体計算と並行して Flux-Limited Diffusion 法[7]による輻射輸送モジュールの開発も行った。

4. 結果

4.1 磁場による角運動量輸送

まず、磁場が共通外層期における軌道進化に与える影響を調べた。計算の結果、最終的な連星間距離は、磁場なしの場合で6.05 au、磁場ありの場合で5.63 auとなり、磁場を考慮した場合の方がやや小さい連星間距離へ到達した。この違いは、磁場が角運動量輸送を促進することと関係している。磁場はガス同士をつなぐ張力として働き、局所的な流体運動だけでは輸送されにくい角運動量を、より効率的に外側へ運ぶことができる。そのため磁場なしの場合と比較して、磁場ありの場合では連星周囲のガスにおいて角運動量がより広い範囲へ輸送される。

4.2 磁場構造の時間発展

次に、磁場構造そのものの時間発展を調べた。

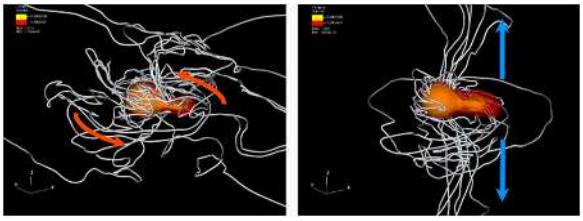


図 3：磁場構造の時間発展。白線は磁力線を、色付きの面は密度の等値面を表す。

図 3 に、共通外層期前後における磁場構造の変化を示す。計算開始時には主星内部に双極子磁場を与えているが、伴星が主星外層部へ侵入し公転運動を続けることで、周囲のガスとともに磁力線が引き伸ばされ、巻き上げられる。この過程によって磁気エネルギーが増加し、磁場が力学的に重要な役割を持つようになる。さらに、発達した磁場は磁気圧によって極方向へ集められる傾向を示した。これは、磁場が単に局所的に増幅されるだけでなく、放出物全体の 3 次元構造を変化させることを意味している。共通外層期に形成される放出物の形状は、高輝度赤色新星や惑星状星雲の観測的特徴と関係するため、この結果は観測との比較を行う上で重要である。

4.3 極方向アウトフローの形成

磁場構造の変化に伴い、極方向へのアウトフローが形成されることも確認された。図 4 に、公転面に垂直な面上での動径方向速度分布を示す。磁場なしの場合と比較して、磁場ありの場合では極方向に沿って外向きの速度を持つガスが明瞭に現れており、磁場の効果によって極方向アウトフローが駆動されていることが分かる。このようなアウトフローの駆動機構としては、磁気圧駆動、磁気遠心力、ガス圧駆動などが考えられる。本計算では、伴星の運動によって磁場が巻き上げられ、その結果として増加した磁気圧が極方向へのガスの加速に寄与している可能性がある。

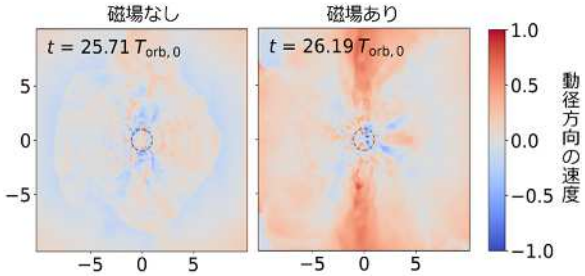


図 4：磁場の有無によるアウトフローの違い。公転面に垂直な面における動径速度を示す。

極方向アウトフローは、双極惑星状星雲の形成とも関連する可能性がある。観測される惑星状星雲の中には、赤道面方向にくびれを持ち、極方向へ伸びた双極構造を示すものがある。このような形状の起源として、連星相互作用や共通外層期が重要であると考えられてきた。本研究の結果は、共通外層期中に伴星の運動によって磁場が増幅され、その磁場が双極的なアウトフローを駆動しうることを示している。

4.4 輻射輸送コードの開発

高輝度赤色新星との比較を行うためには、流体

の運動だけでなく輻射輸送を考慮した計算が必要である。本研究では、Athena++に対して Flux-Limited Diffusion 法[7]を用いた輻射輸送モジュールの開発を行った。Flux-Limited Diffusion 法は、光学的に厚い領域では輻射を拡散として扱い、光学的に薄い領域では光速を超える非物理的な輻射輸送が起こらないように制限を加える手法である。このため、恒星内部のように光学的に厚い領域から、放出物外縁のように光学的に薄い領域までを含む問題に対して有用である。

従来実装では、時間ステップ間における温度変化が十分小さいことを仮定して方程式を線形化していた。しかし、強い温度勾配や不連続面を含む問題では、この仮定が十分に成り立たず、収束性や精度に課題があった。そこで本研究では、Newton-Raphson法による非線形解法を導入した。各 Newton-Raphson 反復で得られる線形化方程式は、Multigrid 法によって解くようにした。

この実装により、従来法と比較して接触不連続面をより正確にとらえることが可能となり、解の収束性も改善されたことを確認した（図 5）。一方で、線形問題に対しては従来実装と大きな差は見られず、新たな実装が既存手法と整合的であることも確認できた。今後はこの輻射輸送モジュールを磁気流体計算へ組み込み、高輝度赤色新星との直接比較を目指す。

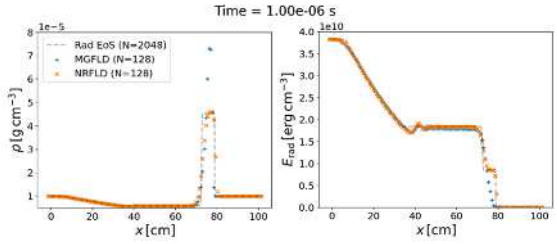


図 5：輻射輸送コードのテスト（衝撃波管問題）

5. おわりに

本研究では、大質量連星系で起こる共通外層期を対象として、磁場を考慮した 3 次元磁気流体計算を実施した。オイラー法に基づく計算コードを用いることで、中心連星部だけでなく低密度な放出物に対しても解像度を確保し、共通外層期におけるガス構造の時間発展を調べた。

その結果、伴星の運動によって磁場構造が大きく変化することを確認した。さらに、増幅された磁場によって極方向へのアウトフローが駆動されることも分かった。このような双極的構造は、双極惑星状星雲の形成や高輝度赤色新星の観測的特徴と関連する可能性がある。

加えて本研究では、高輝度赤色新星との比較を目指して Flux-Limited Diffusion 法による輻射輸送コードの開発を行った。Newton-Raphson 法と Multigrid 法を組み合わせた非線形解法を導入することで、従来実装よりも接触不連続面を正確にとらえ、解の収束性を改善できることを確認した。テスト計算により今後の応用に向けた基盤を整えることができた。

今後は、開発した輻射輸送モジュールを 3 次元磁気流体計算へ組み込み、放出物がどのように冷却され、どのような光度曲線を生み出すかを調べる予定である。これにより、高輝度赤色新星の観測との比較を行い、共通外層期における磁場、輻射、軌道進化の相互作用を明らかにしていきたい。

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, L9 (2016).

(3) M. Ondratschek, et al., Astronomy & Astrophysics, 660, L8 (2022).

(4) P. M. Ricker, et al., Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 489, 2013 (2019).

(5) J. M. Stone, et al., The Astrophysical Journal Supplement Series, 249, 4 (2020).

(6) J. MacLeod, et al., The Astrophysical Journal, 863, 5 (2018).

(7) G. D. Levermore, G. C. Pomraning, The Astrophysical Journal, 248, 321 (1981).

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

栗原 諒

大阪大学 大学院基礎工学研究科

1. はじめに

近年再生可能エネルギー由来の電力を使用した CO_2 の電気化学的還元による資源化（CO_2 電解）が注目されている。なかでも銅触媒は、CO やギ酸といった C_1 化合物に加えて、エチレン、エタノール、プロパノールなどの付加価値の高い C_{2+}化合物を高い選択性で生成できる唯一の触媒として知られている [1,2]。C_{2+}化合物の選択性向上に向けて、銅触媒上での C-C 結合形成過程を詳細に理解することが重要である。

CO_2 電解における反応活性は、触媒表面の幾何構造や電子状態だけでなく、電極/電解質界面のナノスケールでの局所環境に大きく依存する。これまで、CO_2 電解において電解質として使用されるアルカリカチオンが C_{2+}化合物生成の反応速度および選択性に大きな影響を与えることが報告されてきた [3]。一般に、K^+や Cs^+などのアルカリカチオンは、電極/電解質界面における局所電場の形成や中間体安定化を通じて CO_2 還元反応を促進し、C_{2+}化合物の選択性を向上させると考えられている。一方で、触媒層近傍では、CO_2 還元反応に伴う局所的な pH の上昇により(重)炭酸イオンが生成し、これらがアルカリカチオンと反応することで塩が析出する。CO_2 電解系では、この塩析出が物質輸送の阻害を引き起こし、長期耐久性を低下させる主要因となる [4]。このような背景から、我々はアルカリカチオンに依存しない CO_2 電解系の構築を目指し、アルカリカチオンの代わりとして有機カチオンを用いた銅触媒での CO_2 電解を検討した。その結果、有機カチオンとしてテトラアルキルアンモニウムカチオンを用いることでアルカリカチオンを含まない電解液でも高い C_{2+}生成選択性が得られることを実証した [5]。この結果は、高分子電解質としての有機カチオンの利用など、有機カチオンの分子構造やサイズを設計することで、電極/電解質界面の反応場を制御できる可能性を示唆している（図 1(a)）。

しかしながら、有機カチオンが銅触媒表面の電極/電解質界面において CO_2 還元反応にどのような影響を及ぼすのかは十分に理解されていない。特に、図 1(b)に示した C_{2+}生成の重要な反応素過程である CO 二量化、すなわち C-C 結合形成に対して、有機カチオンがどのように寄与するのかは未解明である。そこで本研究では、第一原理分子動力学計算(*ab initio* molecular dynamics, AIMD)により、水溶媒を明示的に含む界面モデルを構築し、電極/電解質界面における CO 二量化過程のメカニズムを解析した。C-C 距離を反応座標とした拘束条件付き AIMD 自由エネルギー計算を行うことで、有機カチオン存在下における CO 二量化反応の詳細な機構を明らかにすることを目的とした。

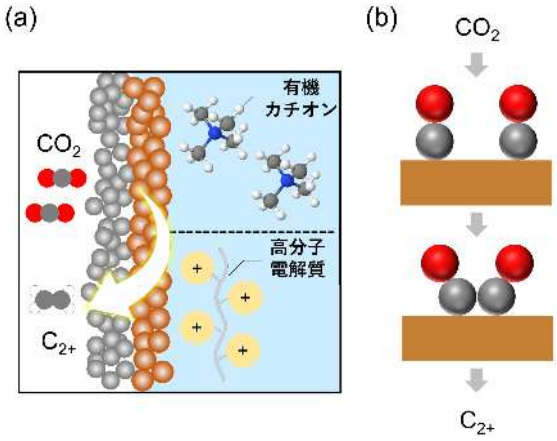


図 1. (a)CO_2 電解における電極/電解質界面.
(b)CO 二量化反応概略図.

2. 計算条件

第一原理分子動力学計算は、Vienna *Ab initio* Simulation Package（VASP）を用いて行った。電子状態計算には密度汎関数理論（DFT）を用い、内殻電子と価電子の相互作用は projector augmented wave（PAW）法により取り扱った。交換相関汎関数には generalized gradient approximation（GGA）に基づく Perdew–Burke–Ernzerhof（PBE）汎関数を用いた。また、分散力相互作用を考慮するため、Grimme の DFT-D3 補正を適用した。平面波基底のカットオフエネルギーは 400 eV とし、k 点メッシュは 3 × 3 × 1 の Monkhorst–Pack 法を用いた。電子状態の自己無撞着計算におけるエネルギー収束条件は 10^{-7} eV とした。スメアリングには Methfessel–Paxton 法を用い、スメアリング幅は 0.1 eV とした。

図 2 に計算に使用した構造例を示した。計算モデルには、4 × 4 の表面周期を持つ 3 層 Cu(100)スラブを用い、最下層の Cu 原子は固定した。計算セルには周期境界条件を適用した。Cu(100)表面上には CO 分子を 2 分子吸着させ、さらに水分子を明示的に配置した。電解液中の有機カチオンの効果を調べるため、水溶媒中にテトラアルキルアンモニウムカチオンを 1 分子導入した。また、系全体の電気的中性を保つために、対アニオンとして F^-を 1 個導入した。

AIMD 計算は NVT アンサンブルで行い、温度は Nosé–Hoover 熱浴により 300 K に制御した。時間ステップは 1 fs とした。CO 二量化過程を記述する反応座標として、2 つの CO 分子の炭素原子間距離、すなわち C–C 間距離(d_{C-C})を用いた。C–C 間距離に拘束を課した平衡化計算を 5 ps 実行した後、Slow-Growth 法に基づいて C–C 間距離を変化させ、CO 二量化過程の自由エネルギー変化を算出した。

3. 結果

3-1　CO 二量化反応に対する水分子の影響

はじめに、カチオンを含まない電極/電解質界面における CO 二量化反応の自由エネルギー曲面を算出した。図 3(a)に結果を示す。銅(100)面における CO 二量化反応の活性化エネルギーは 0.44 eV と算出された。

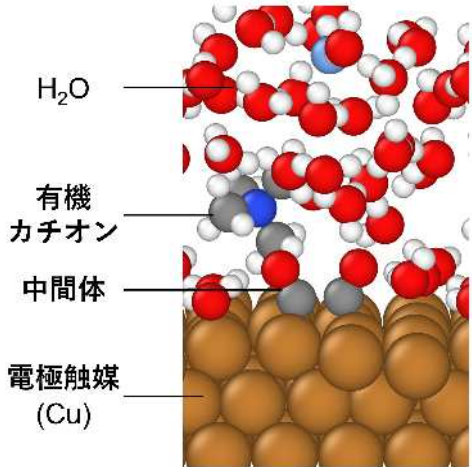


図 2. 計算に使用した構造例.

電極/電解質界面における CO 二量化反応のメカニズムを解析するため、溶媒である水分子の影響を調べた。反応中間体と水の相互作用を検討するため、CO 分子に対する水素結合数を解析した。吸着 CO 分子の酸素原子は水素結合アクセプターとして働くため、周囲の水分子と水素結合を形成することが可能である。図 3(b)に CO 二量化反応における CO 分子に対する水素結合数を示す。C–C 間距離が短くなるにつれて水素結合の数が増加することが確認された。さらに、水素結合が反応中間体の安定性に及ぼす効果を検証するために、差分電荷密度解析を行った。図 3(c)および 3(d)に水分子の有無における差分電荷密度を示した。反応初期(d_{C-C}=3.0 Å)では CO に対して水素結合がほとんど形成されておらず、図 3(c)に示すように CO の電荷は水分子の有無によりほとんど変化しない。一方で反応終期(d_{C-C}=1.5 Å)では CO に対して多数の水素結合が形成されるため、図 3(d)に示すように CO 分子の電荷が変化していることがわかる。特に、水素結合の形成により CO 二量体の酸素原子の電子密度が増加する。実際に、反応終期(d_{C-C}=1.5 Å)において CO 二量体の電荷を Bader 電荷解析により算出したところ、水分子がない場合は CO 二量体の総電荷は−0.85 e、水分子が存在する場合は−1.58 e と大きく電荷が変化

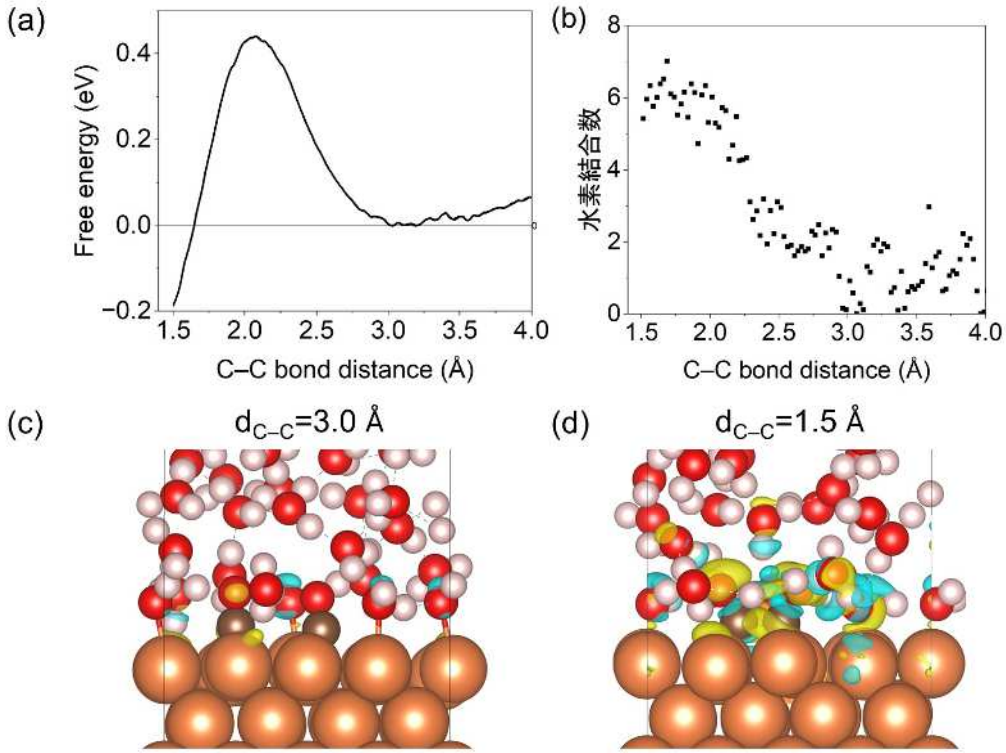


図 3. (a)CO 二量化反応の自由エネルギー変化. (b)CO に対する総水素結合数. 50 構造ごとの平均水素結合数を算出. (c), (d)反応初期および反応終期での差分電荷密度解析により得られた電子密度再分布. C–C 間距離はそれぞれ(c)3.0 Å、(d)1.5 Å. 黄色およびシアンの等値面は、それぞれ電子密度の増加領域および減少領域を示す. 等値面の値は ±0.003 e/Å^3 とした.

することが確認された。以上の結果から、CO 二量化反応において、C–C 結合の形成とともに溶媒水分子と水素結合が形成され CO 二量体が安定化されると考えられる。

3-2 CO 二量化反応に対するテトラアルキルアンモニウムカチオンの影響

次に電解質として使用される有機カチオンが CO 二量化反応に及ぼす影響を調べた。本研究では、代表的な有機カチオンであるテトラアルキルアンモニウムを含む電極/電解質界面モデルを用いて有機カチオンの効果を検証した。

まず、サイズの異なるテトラアルキルアンモニウムを用いて CO 二量化反応の自由エネルギー変化を算出した。アルキル鎖の長さの異なるテトラメチルアンモニウム(TMA)、テトラエチルアンモニウム(TEA)、テトラプロピルアンモニウム(TPA)を用いた際の自由エネルギー曲線を図 4(a)に示す。活性化エネルギーは有機カチオンの大きさにより変化し、最も小さい TMA を用いた際に 0.30 eV となり最小となった。有機カチオンの大きさが及ぼす影響を調べるため、CO 二量体の C–C 結合の中点から有機カチオンの中心 N 原子間の距離と CO 二量化反応の活性化エネルギーの関係を図 4(b)に示した。有機カチオンのサイズが大きいほどカチオンと CO 二量体の距離は大きくなり、それに伴って活性化エネルギーも増加する傾向が示された。

そこで、有機カチオンと CO 二量体の距離が重要な因子であると考え、有機カチオンの種類を TMA で固定し、CO 二量体に対するカチオンの距離を変えた 3 つの構造(position1, position2, position3)を用いて CO 二量化反応の自由エネルギー変化を算出した。その結果を図 4(c)に示す。TMA と CO 二量体が最も近い構造(position1)で活性化エネルギーが最小となり、最も遠い構造(position3)で活性化エネルギーが最大となった(図 4(d))。

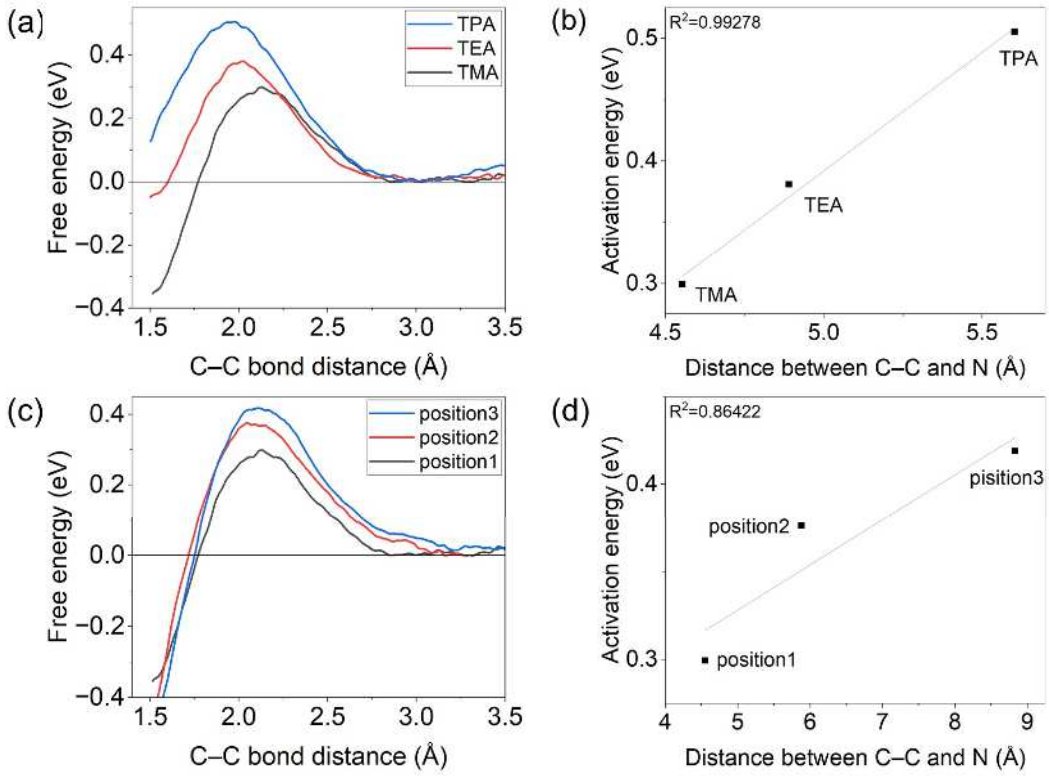


図 4. (a)テトラアルキルアンモニウムを含む電極/電解質界面における CO 二量化反応の自由エネルギー変化. (b)CO 二量体とテトラアルキルアンモニウムのカチオン中心窒素原子間の平均距離と活性化エネルギーの関係. (c)異なる位置にテトラメチルアンモニウムを配置した電極/電解質界面における CO 二量化反応の自由エネルギー変化. (d)CO 二量体とテトラメチルアンモニウムのカチオン中心窒素原子間の平均距離と活性化エネルギーの関係.

以上より、有機カチオンを含む電極/電解質界面での CO 二量化反応では、有機カチオンが CO 二量化反応の活性化エネルギーを変化させ、二量体とカチオンの距離に依存して活性化エネルギーの大きさが変化することが明らかとなった。

4. まとめ

本研究では、AIMD を用いて、電極/電解質界面における C_{2+}生成の重要な反応素過程である CO 二量化反応を解析した。カチオンを含まない界面モデルでは、C–C 距離の短縮に伴って CO 二量体と周囲の水分子との水素結合による相互作用が確認された。また、テトラアルキルアンモニウムカチオンを含む界面モデルを用いた解析では、カチオンと反応中間体との距離が CO 二量化反応の活性化エネルギーに大きく影響することが明らかとなった。

以上より、CO_2 電解における C_{2+}生成反応では、触媒表面だけでなく、界面に存在する水分子や有機カチオンによって形成される反応場が重要な役割を果たすことが示唆された。本研究の結果は、アルカリカチオンに依存しない CO_2 電解系を設計する上で、有機カチオンの分子構造および界面配置の制御が有効な指針となることを示している。

参考文献

(1) K. Kamiya, *et al.,* Chem. Sci., **17**, 4363–4374 (2026)

(2) Y. Hori, *et al.*, Electrochimica Acta, **39**, 11–12, 1833–1839 (1994)

(3) Y. Xu, *et al.,* Nat Energy, **11**, 387–399 (2026)

(4) S. Kato, *et al.*, ChemSusChem, **17**, e202401013 (2024)

(5) R. Kurihara, *et al.,* EES Catal., **3**, 1055–1061 (2025)

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

立木 健嗣、山中　敬太
大阪大学 大学院工学研究科 電気電子情報通信工学専攻

1. はじめに

チャープパルス増幅（CPA）法によるペタワット級レーザーの実現に伴い、超高強度レーザーと物質の相互作用による高輝度ガンマ線発生が注目されており、核変換技術[1]や非破壊検査等への応用が期待されている。レーザー駆動ガンマ線源では、レーザーを物質に照射した際に電離して生じた電子が、レーザー電場と相互作用して加速され、シンクロトロン放射や制動放射などの物理現象によって X 線・ガンマ線を発生させる。しかし、通常の平坦な固体ターゲットを用いると、表面での高密度プラズマの発生によってレーザーの大部分が反射してしまい、ガンマ線へのエネルギー変換効率が低いという課題があった。

そこで我々は、その構造的特性により物質内部へのレーザー伝搬が可能となることで効率的な効率的にガンマ線を発生できると考えられるノワイヤアレイ構造に着目し、その有効性をシミュレーションや実験を通して示してきた[2-4]。ナノワイヤアレイとは、ナノスケールの円柱状構造が規則的に配列したものであり、ワイヤ間をレーザーが伝搬して深部まで到達することにより、ガンマ線の生成効率が向上することが確認されている。この手法では、ワイヤの間隔、長さ、直径などの構造パラメータによってガンマ線変換効率が大きく変化することが知られている。そのため、実験やレーザー駆動ガンマ線源の実用化においてこれらのパラメータ最適化は必要不可欠であり、我々はこれまで Particle-in-Cell (PIC) 法と呼ばれるプラズマシミュレーションを用いてこれを行ってきた。

一方で、この手法は非常に多くのマクロ粒子を取り扱うことから計算負荷が高く、多数のパラメータスキャンを要する際には 2 次元シミュレーションによる最適化が主であった。しかし、図 1 の様に 2 次元計算ではナノワイヤアレイ構造を回折格子のような周期構造としてしか扱うことができず、実際の 3 次元構造における最適化には限界があった。

そこで本研究では、3 次元 PIC シミュレーションを用いて各構造パラメータとガンマ線発生効率との関係を検証し、厳密なワイヤ構造における構造パラメータの最適化を行った。本稿では、その結果について報告する。

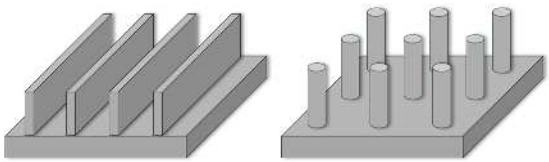


図 1 ：ナノワイヤ模式図。(a)二次元シミュレーションで再現されるナノワイヤアレイ構造。(b)実際のナノワイヤアレイ構造。

2. 計算手法

レーザープラズマ相互作用の解析手法として幅広く使用されている Particle-in-Cell（PIC）法を用いて計算を行った。PIC 法では、相対論的運動方程式による多数の荷電粒子を代表するマクロ粒子の運動計算と、マクスウェル方

程式によるメッシュ状に離散化された空間の電磁場の計算を交互に行うことで、複雑なプラズマ相互作用を第一原理的に計算することができる。

3 次元計算を行うと計算量が著しく増大するため、本研究では GPU を活用した PIC コードである「PIConGPU」を採用した。計算機には大阪大学 D3 センターのスーパーコンピューターSQUID を利用し、GPU ノード群でシミュレーションを実行した。GPU の多数のスレッドと広帯域メモリによる処理速度の向上により、3 次元計算においても多数のパラメータ解析を行うことが可能となった。

また、PIConGPU には、Gonoskov らによる局所定常場近似に基づく量子電気力学（QED）的な光子放出モデル[5]が実装されており、規格化ベクトルポテンシャルa_0が$a_0 \gg 1$となるような超高強度領域における光子発生の計算が可能である。本研究では、これらの計算環境とコードを活用してシミュレーションを実行した。

3. 計算条件

本研究におけるシミュレーションのセットアップを図 2 に示す。計算領域には基盤及び長さ5μmのケイ素ナノワイヤを配置した。ナノワイヤの直径は 150 nm, 300 nm, 600 nm で変化させた。また、x および z 軸方向に周期境界条件を適用することで無限に広がるナノワイヤアレイを模擬しており、シミュレーション空間のサイズを変更することで、ワイヤ間の間隔が 0.25 μm, 0.5 μm, 1.0 μm, 2.0 μm となるように各体系の調整を行った。

ターゲットは中性ケイ素原子として配置し、ADK モデルおよびBSI モデルを用いてイオン化過程を計算している。ケイ素の初期イオン密度n_iは$n_i = 5 \times 10^{22}\ \mathrm{cm}^{-3}$とした。 1 セル当たりのマクロ粒子数は初期状態で 4 としたが、イオン化に伴い電子が生成されるため、電子の粒子では最大 56 となる。

空間格子サイズは、固体プラズマの表皮深さを十分に解像するため、y 方向を 5nm、x および z 方向を 10 nm とした。タイムステップはプラズマ振動の解像に十分な 2 as とした。また、レーザー入射方向である y 軸の境界条件には到達した粒子を削除する解放強化を採用するとともに、解放協会における電磁場の反射を防ぐために PML 吸収層を配置している。

レーザー条件として、波長 810 nm、パルス幅 20fs、ピーク強度は$5 \times 10^{21}\ \mathrm{W/cm^2}$のガウス型時間包絡を持つ平面波を y 軸負方向から入射した。光子生成過程には先述したシンクロトロン放射プラグインを使用した。なお、本シミュレーションの強度領域においては電子・陽電子対生成や発生した光子と電磁場の非線形相互作用は無視できると考えられる。そこで、光子の配置・輸送計算は省略し、発生した光子情報の出力を行うことで計算負荷の低減を図っている。

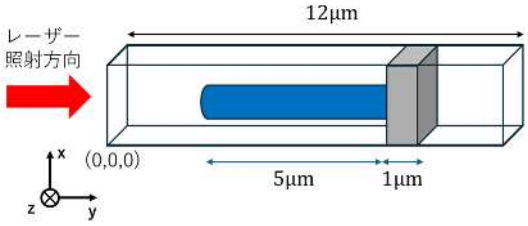


図 2：シミュレーション概略図

4. 計算結果

4.1 ナノワイヤアレイの優位性

まず、ナノワイヤアレイ構造の優位性を検証するために、平板ターゲットとの比較検

証を行った。ナノワイヤターゲットの各パラメータは、ワイヤ間隔を1.0 μm、直径を300 nm、基板厚を1.0 μmとした。一方で、平板ターゲットは厚さを1.0 μmとし、ナノワイヤターゲットと平板ターゲットとで初期に配置される総原子数が同一になるよう設定した。

図 3 に、生成された光子のエネルギースペクトルを示す。ナノワイヤターゲットの場合、MeV以上の高エネルギー光子の発生数が全体的に増加しており、1MeV 以上の光子数に注目すると、平板ターゲット時は2.51×10^{8}個であるのに対し、ナノワイヤターゲット時は2.10×10^{10}個となり、約二桁の高指数上昇が確認された。したがって、ナノワイヤ構造の導入によって、発生するガンマ線の高エネルギー光子数の飛躍的な増加が実証された。

図 4 は、光子の発生位置をエネルギー密度分布として示したものである。平板ターゲットでは表面付近でのみ高い光子エネルギー密度が観測されるが、ナノワイヤターゲットの場合は、ワイヤ内部およびその周辺の広域において多数の光子発生が見られる。これは、ナノワイヤ部やワイヤ間に引き出された電子が、通常の固体ターゲットと比較して低密度なプラズマを形成し、それが体積的に加熱されることで、効率的な光子生成が促進されたためと考えられる。

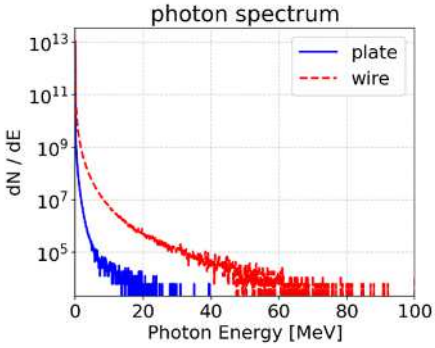


図 3：光子のエネルギースペクトル

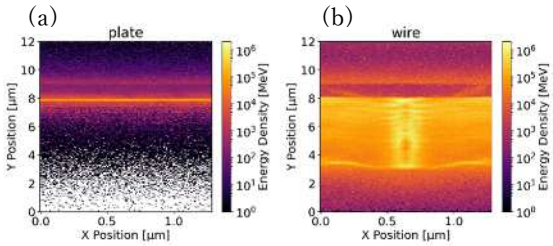


図 4：発生した光子エネルギー密度の空間プロファイル（a）平板ターゲット。(b)ナノワイヤターゲット。

4. 2 最適パラメータ比較

シミュレーションの次元数による最適パラメータの違いを検証するため、2 次元および 3 次元空間において同一パラメータを用いたシミュレーションを行った。図 5 に、次元間の違いが最も顕著に表れたワイヤ間隔に対する 1 MeV 以上の光子収量の変化を示す。ワイヤ間隔の影響を評価するため、ワイヤ直径はすべて300 nmで統一し、光子収量は両次元で比較できるようスケールを調整している。

図 5 より、2 次元シミュレーションにおける最適なワイヤ間隔は4.0 μmであったのに対し、3 次元シミュレーションにおける最適な間隔は1.0 μmへと変化した。この違いは、3 次元化によってターゲットの空間充填率が低下したこと、および Z 方向へのプラズマ膨張が可能になったことに起因すると考えられる。Z 方向への自由度が存在することで自己ピンチ後のプラズマ膨張が急速に進み、ワイヤ内部およびワイヤ間の電子密度が適度に低下した結果、レーザーがより深部まで浸透し、電子との相互作用領域が拡大したためと推測される。

実際に図 6 の電子密度分布を見ると、同一のタイムステップであっても、2 次元の場合は強いピンチ効果によって$10^{30}\ m^{-3}$程度の高い電子密度が維持されているのに対し、3 次元の場合はワイヤ先端付近で既にプラズマの膨張が始まっており、より低い密度状態にあることが確認できる。さらに、図 7 に示す光子のエネルギー密度分布においても、2 次元の場合は膨張したワイヤ先端（$y = 3\ \mu m$ 付近）にのみ局所的に光子の発生が集中しているが、3 次元の場合はワイヤ側面やワイヤ間の広い領域で高いエネルギー密度の光子が発生していることが分かる。

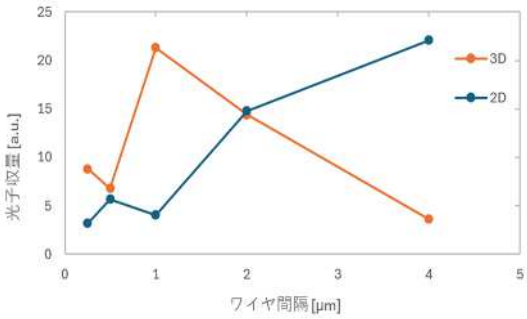


図 5：光子収量とワイヤ間隔

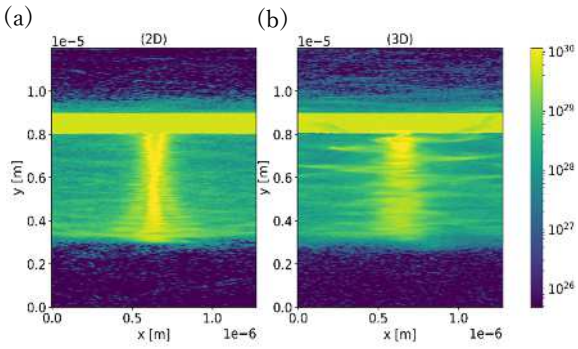


図 6：電子密度分布。(a)二次元シミュレーション。(b)三次元シミュレーション

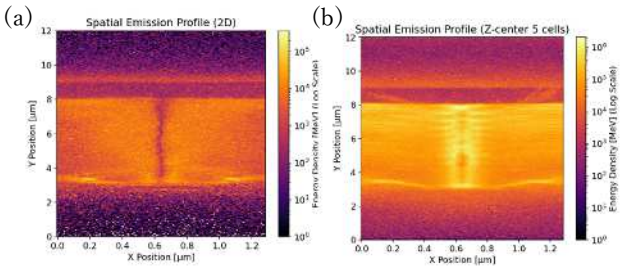


図 7：光子発生時のエネルギー密度分布
(a)二次元シミュレーション
(b)三次元シミュレーション

5. おわりに

本研究で我々は、三次元シミュレーションを用いたパラメータスキャンを行い、二次元シミュレーションによる最適化とは異なる結果が得られることが判明した。三次元では二次元と比較してより狭いワイヤ間隔で最も光子発生効率が高くなり、それは三次元化によるピンチ後の膨張速度の違いによるものだと考えられる。

本研究では、実験における光子発生効率が最適なナノワイヤアレイターゲット設計指針を示すことができた。今後は、ガンマ線の角度分布や時間依存性を解析することで、高輝度なガンマ線源開発に取り組む。

参考文献

(1) K. Imasaki, et al., Energy Convers. Manag. **49**, 1922-1927 (2008).
(2) T. Nishikawa, et al., Appl. Phys. Lett. **75**, 4079-4081 (1999).
(3) S. Bagchi, et al., Appl. Phys. Lett. **90**, 141502 (2007).
(4) K. Yamanaka, et al., The 46th Annual Meeting of the Laser Society of Japan (2026).
(5) A. Gonoskov, et al., Phys. Lett. E **92**, 023305 (2015).

格子 QCD を用いたハドロン内部のダイクォークの探索

西岡 蒼矢
大阪大学 大学院理学研究科

1. はじめに

単一チャームバリオンであるΛ_cと Σ_c^+は、1 つのアップクォーク、1 つのダウンクォーク、および 1 つのチャームクォークから構成される。両者の違いはアイソスピンにあり、Λ_cはアイソスカラー、Σ_c^+はアイソベクトルである。

この違いは、それぞれのバリオン内に形成される ud クラスターの性質に由来する。Λ_c では ud は$J^P = 0^+$、I=0、カラー $\bar{3}$のスカラーダイクォークを形成する一方、Σ_cでは $J^P = 1^+$、I=1、カラー表現 $\bar{3}$の軸性ベクトルダイクォークを形成する。質量の序列 $m_{\Lambda_c} < m_{\Sigma_c}$ は、カラー磁気相互作用およびインスタントン誘起相互作用によってスカラーダイクォークの方がより軽くなることを反映している。

ダイクォークは多くの QCD 現象において重要な役割を果たすと考えられているが(1)、カラー閉じ込めのため、性質を直接調べることは困難である。そのため、ダイクォークの性質は実験ではなく現象論的解析から推定されている。

通常の格子 QCD では、2 点相関関数に物理的な極が存在しないため、ダイクォーク質量を直接求めることはできない。これまでの格子 QCD 研究は、大きく二つの方法に分類される。

(i) ゲージ固定した相関関数を用いる方法 (2~4) は、定性的には期待される結果を再現するものの、閉じ込めとの整合性に関する問題が残る。

(ii) 静的クォーク法(5~8) では、カラー電荷を中和するために静的クォークを導入し、ゲージ不変な相関関数を構成する。この方法によりダイクォークの質量差を調べることが可能だが、静的クォークとの相互作用エネルギーに起因する $O(\Lambda_{QCD})$ の不定性を本質的に含んでいる。

近年では、HAL QCD 法(9,10)を拡張した手法(11)が提案されている。この手法では、スカラーダイクォーク質量をクォーク-ダイクォークポテンシャル模型のパラメータとして扱うことで、これらの問題を回避し、Λ_cに対して有効に適用されている。

本研究では、この枠組みを軸性ベクトルダイクォークへと拡張し、Σ_cをチャームクォークとダイクォークからなる束縛状態として記述することで、そのダイクォーク質量を導出する。

2. 方法

軸性ベクトルダイクォークは非中性のカラー電荷 $\bar{3}$を持つため、その 2 点相関関数は QCD のカラー閉じ込めにより粒子極を持たず、単一指数関数によるフィッティングから質量を抽出することはできない(12)。この問題を回避するため、本研究ではダイクォーク質量を、格子 QCD から得られる等時刻クォーク-ダイクォーク Nambu-Bethe-Salpeter（NBS）波動関数を用いて HAL QCD 法により構築した有効クォーク-ダイクォーク模型のパラメータとして扱う。

この手法に従い、クーロンゲージにおける重心系での Σ_c^{++} の等時刻クォーク-ダイクォーク NBS 波動関数を、Rarita-Schwinger 形式で

$$\psi_{i\alpha}(x-y;J,M) \equiv \langle 0|D_{ai}(x)q_{a\alpha}(y)|\Sigma_c^{++}(J,M)\rangle$$

と定義する。ここで、$|0\rangle$は QCD 真空を表し、$|\Sigma_c^{++}(J,M)\rangle$は静止系における正パリティ基底状態の$\Sigma_c^{++}$バリオンであり、J および M はそれぞれ全角運動量および磁気量子数を表す。本研究では J=1/2, 3/2 の場合に限定する。$q_{a\alpha}(y)$はチャームクォークの Dirac スピノル場であり、a=1, 2, 3 はカラー添字、α=1, 2 は Dirac 非相対論表示における上 2 成分に制限した Dirac 添字である。また、$D_{ai}(x)$はダイクォーク場であり、

i=1, 2, 3 は空間成分に制限したローレンツ添字で、

$$D_{ai}(x) \equiv \epsilon_{abc}\, u_b^T(x)\, C\, \gamma_i\, u_c(x)$$

と定義される。ここで、$u(x)$はアップクォーク、$C \equiv \gamma_4\gamma_2$ は電荷共役行列である。

等時刻 NBS 波動関数は、正のユークリッド時間領域ではクォーク-ダイクォーク 4 点相関関数

$$C_{i\alpha}(x,y,t;J) = \sum_n \langle 0|D_{ai}(x)q_{a\alpha}(y)|n\rangle e^{-E_{nt}} \langle n|J|0\rangle$$

と関係付けられる。ここで、$|n\rangle$はハミルトニアンの第 n 固有状態、E_nは固有エネルギー、Jはソース演算子を表す。大きな時間極限において、各スピンチャネルの基底状態 NBS 波動関数は

$$\psi_{i\alpha}(r \equiv x-y; J,\ M) \propto C_{i\alpha}(x,y,t;J_{J,M})$$

として得られる。

クォーク-ダイクォーク NBS 波動関数は

$$\left(\hat{H}_0 + \hat{V}\right)\psi(r;J,M) = \left(M_J - m_q - m_D\right)\psi(r;J,M)$$

を満たすと仮定する。ここで

$$\hat{H}_0 = -\frac{\nabla^2}{2\mu}, \qquad \mu = \left(\frac{1}{m_q} + \frac{1}{m_D}\right)^{-1}$$

である。m_qおよびm_Dはそれぞれチャームクォーク、ダイクォークの質量であり、現時点では未知パラメータとして扱う。エネルギーシフト

$$E_J = M_J - m_q - m_D$$

はΣ_c^{++}バリオンの束縛エネルギーに対応する。ポテンシャルは

$$\hat{V} \simeq V_0(r) + V_s(r) s_q \cdot s_D$$

と近似する。ここで$V_0(r)$, $V_s(r)$は中心力およびスピン依存力のポテンシャルである。さらに、

$$s_q \cdot s_D = -1, \quad J = 1/2$$

$$s_q \cdot s_D = 1/2, \quad J = 3/2$$

を用いることで、Schrodinger 方程式は全スピンに応じた 2 つのチャネルへ分離できる。これらの方程式を解くことで、$V_0(r)$ および$V_s(r)$は

$$V_0(r) = \frac{1}{2\mu}\left(\frac{3}{2}\frac{\nabla^2\psi_{3/2}(r)}{\psi_{3/2}(r)} + \frac{1}{2}\frac{\nabla^2\psi_{1/2}(r)}{\psi_{1/2}(r)}\right) + C_0$$

$$V_s(r) = \frac{1}{3\mu}\left(\frac{\nabla^2\psi_{3/2}(r)}{\psi_{3/2}(r)} - \frac{\nabla^2\psi_{1/2}(r)}{\psi_{1/2}(r)}\right) + C_s$$

のように表される。ここで

$$C_0 = \left(2M_{3/2} + M_{1/2}\right)/3 - m_q - m_D$$

$$C_s = 2\left(M_{3/2} - M_{1/2}\right)/3$$

である。これらの関係式は、

$\psi_J(r)$、M_J、m_q、m_Dを入力として$V_0(r)$ および$V_s(r)$を与える。ここで、m_qおよびm_D は未知の質量パラメータとして扱われ、通常の指数関数フィットによって決定されるものではないことに注意する。

河内と佐々木は、$c\bar{c}$ 系において同様の問題に直面し、HAL QCD 法と整合的にチャームクォーク質量を決定する手法を提案した(13)。

彼らはスピン依存ポテンシャルが長距離極限で消失することを要請している。本研究でもこれに従い、$V_s(r) \to 0\ (r \to \infty)$を課すことで、

$$\mu = -\lim_{r\to\infty} F_{KS}(r)$$

を得る。後の議論のために河内-佐々木関数

$$F_{KS}(r) \equiv \frac{1}{2\left(M_{3/2}-M_{1/2}\right)}\left(\frac{\nabla^2\psi_{3/2}(r)}{\psi_{3/2}(r)} - \frac{\nabla^2\psi_{1/2}(r)}{\psi_{1/2}(r)}\right)$$

を導入する。これにより得られた換算質量 μ と、$c\bar{c}$ 系で河内-佐々木法から求められたチャームクォーク質量m_cを用いることで、

軸性ベクトルダイクォーク質量は

$$m_D = \left(\frac{1}{m_\mu} - \frac{1}{m_c}\right)^{-1}$$

として求められる。

3. 第一原理計算のセットアップ

本研究では、PACS-CS Collaboration により生成された$32^3 \times 64$格子上の$2+1$フレーバーQCDゲージ配位(14)を用いた。

これらのゲージ配位は、$\beta = 1.90$における RG 改良 Iwasaki ゲージ作用と、$C_{SW} = 1.715$の非摂動的 O(a)改良 Wilson (clover)クォーク作用を、$\kappa_{ud} = 0.13700$および$\kappa_s = 0.13640$で用いて生成されたものである。このパラメータセットは、格子間隔

$$a = 0.0907(13) \quad \text{fm}$$

$$a^{-1} = 2176(31) \ \text{MeV},$$

空間サイズ

$$L = 32a \simeq 2.90 \quad \text{fm}$$

に対応する。チャームクォークは、文献(15)で与えられたパラメータを用いた相対論的重クォ

ーク（Relativistic Heavy Quark; RHQ）作用を採用し、クエンチ近似によって導入した。

2 点相関関数および 4 点相関関数は、ゲージ配位にクーロンゲージ固定を施した後、smeared ソースを用いて計算したクォーク伝播関数から構成した。統計精度を向上させるため、各ゲージ配位に対して時間方向に 32 箇所、空間方向に 2 か所のソース位置を用いた。さらに、時間反転対称性および電荷共役対称性を利用することで、統計量を 2 倍に増加させた。統計誤差は、20 配位を 1 ビンとした Jackknife 法によって評価した。本計算条件で得られた代表的なハドロン質量は、

$m_N \simeq 1583$ MeV, $m_\pi \simeq 702$ MeV

$m_{\eta_c} \simeq 3025$ MeV, $m_{J/\psi} \simeq 3144$ MeV

$m_{\Lambda_c^{1/2+}} \simeq 2690$ MeV, $m_{\Sigma_c^{1/2+}} \simeq 2777$ MeV

$m_{\Sigma_c^{3/2+}} \simeq 2859$ MeV

である。

4. 計算結果

得られた 4 点相関関数の結果を図 1 に示す。これは正規化した 4 点関数

$$\tilde{C}(r,t) \equiv \frac{C(r,t)}{C(0,t)}$$

をいくつかの時刻についてプロットしたものである。Smeared ソースを用いた結果として、非常に収束がよく、ほとんど NBS 波動関数になっていると考えられる。今回の計算では$t/a = 13$で収束したものとして用いることとした。

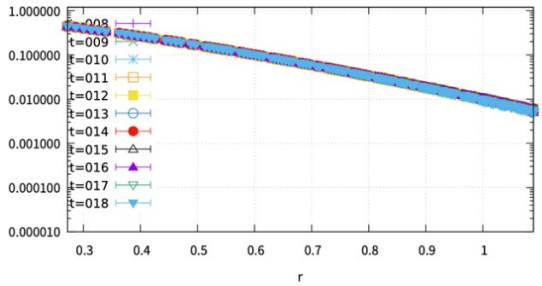


図 1　4 点関数

図 2 はこれらの NBS 波動関数から河内-佐々木関数を計算した結果である。ノイズは目立つものの一定の値に向かって収束している様子が見て取れる。多重 gaussian フィットを行った結果として、

$$\mu = 627 \text{ MeV}$$

という値を得た。

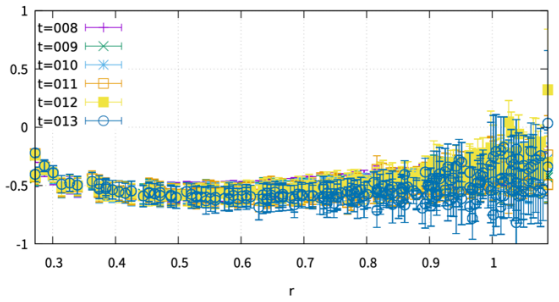


図 2　河内-佐々木関数(8≦t/a≦13)

河内-佐々木法を$c\bar{c}$系に適用して得られているチャームクォーク質量

$$m_c = 1951 \text{ MeV}$$

を用いると1^+ダイクォーク質量は

$$m_D = 924 \text{ MeV}$$

と得られた。また図 3 に示すようにスピンに依存しないポテンシャル$V_0(r)$についてはコーネル型のものが具体的に得られた。

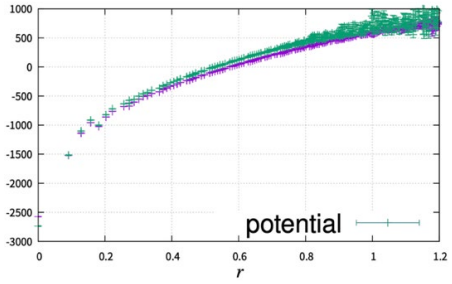


図 3　クォーク-ダイクォークポテンシャル

5. まとめ

本研究では，2+1 フレーバー格子 QCD を用いて，軸性ベクトルダイクォーク質量およびクォーク-ダイクォークポテンシャルを調べた。

軸性ベクトルダイクォークはカラー電荷を持つため、その 2 点相関関数には極が存在せず通常の質量抽出法を適用することはできない。

この問題を克服するため，本研究では HAL QCD 法を拡張した河内-佐々木法を用い，ダイクォーク質量とクォーク-ダイクォークポテンシャルを同時に決定した。

計算には，Iwasaki ゲージ作用および O(a)改良 Wilson フェルミオンを用いて生成された $32^3 \times 64$ PACS-CS ゲージ配位（$m_\pi \simeq 702$ MeV，a=0.0907(13) fm）を使用した．チャームクォークにはクエンチ近似の RHQ 作用を採用した。その結果，軸性ベクトルダイクォーク質量

$$m_D \simeq 924 \text{ MeV}$$

を得た。この値は同じゲージ配位を用いた(11)で報告されているスカラーダイクォーク質量

$$m_{SD} \simeq 1273 \text{ MeV}$$

よりも小さい。しかし、この質量の逆転に関する問題は現在進行中のΛ_cに関する計算で大幅に見直される可能性がある。

また、抽出したクォーク-ダイクォークポテンシャルは、短距離的なスピン依存ポテンシャルと Cornell 型中心ポテンシャルから構成されることが分かった。今後、Λ_cとの比較を通してダイクォークの比較を行う予定である。

なお、格子 QCD 計算は，大阪大学核物理研究センター（RCNP）および大阪大学 D3 センター（D3C）の支援のもと、D3C のスーパーコンピュータ SQUID を利用して実施した。また本研究では格子 QCD ライブラリ bridge++(16)の改良版を使用した。

参考文献

(1) R. L. Jaffe. Exotica. Nucl. Phys. B Proc. Suppl. 142 (2005) 343.

(2) M. Hess, F. Karsch, E. Laermann, and I. Wetzorke. Diquark masses from lattice QCD. Phys. Rev. D 58 (1997) 111502 .

(3) Ronald Babich, Nicolas Garron, Christian Hoelbling, Joseph Howard, Laurent Lellouch, and Claudio Rebbi. Diquark correlations in baryons on the lattice with overlap quarks. Phys. Rev.D 76 (2007) 074021.

(4) Yujiang Bi, Hao Cai, Ying Chen, Ming Gong, Zhaofeng Liu, Hao-Xue Qiao, and Yi-Bo Yang. Diquark mass differences from unquenched lattice QCD. Chin. Phys. C 40 (2016) 073106

(5) C. Alexandrou, Ph. de Forcrand, and B. Lucini. Evidence for diquarks in lattice QCD. Phys. Rev. Lett. 97 (2006) 222002 .

(6) Konstantinos Orginos. Diquark properties from lattice QCD. PoS LAT2005 (2006) 054.

(7) Jeremy Green, John Negele, Michael Engelhardt, and Patrick Varilly. Spatial diquark corre-lations in a hadron. PoS LATTICE2010 (2010) 140.

(8) Anthony Francis, Philippe de Forcrand, Randy Lewis, and Kim Maltman. Diquark properties from full QCD lattice simulations. JHEP 05 (2022) 062.

(9) Noriyoshi Ishii, Sinya Aoki, and Tetsuo Hatsuda. Nuclear force from lattice QCD. Phys. Rev. Lett. 99 (2007) 022001.

(10) Sinya Aoki, Tetsuo Hatsuda, and Noriyoshi Ishii. Theoretical foundation of the nuclear force in QCD and its applications to central and tensor forces in quenched lattice QCD simulations. Prog. Theor. Phys. 123 (2010) 89.

(11) Kai Watanabe. Quark-diquark potential and diquark mass from lattice QCD. Phys. Rev. D 105 (2022) 074510.

(12) R. L. Workman et al. Review of Particle Physics. PTEP 2022 (2022) 083C01.

(13) Taichi Kawanai and Shoichi Sasaki. Interquark potential with finite quark mass from lattice QCD. Phys. Rev. Lett. 107 (2011) 091601.

(14) S. Aoki et al. 2+1 Flavor Lattice QCD toward the Physical Point. Phys. Rev. D 79 (2009) 034503.

(15) Y. Namekawa et al. Charm quark system at the physical point of 2+1 flavor lattice QCD. Phys. Rev. D 84 (2011) 074505.

(16) S. Ueda, S. Aoki, T. Aoyama, K. Kanaya, H. Matsufuru, S. Motoki, Y. Namekawa, H. Nemura, Y. Taniguchi, and N. Ukita. Development of an object oriented lattice QCD code 'Bridge++'. J. Phys. Conf. Ser. 523 (2014) 012046.

Deep Neural Network Potential for Modeling Formic Acid Dissociation in Aqueous Solution

Rizka Nur Fadilla and Yoshitada Morikawa
大阪大学 大学院工学研究科

1. Introduction

Acid dissociation in aqueous solutions is a fundamental process that influences numerous chemical phenomena.[1-3] Despite its apparent simplicity, acid dissociation involves both the transfer of protons from the acid to adjacent water molecules and reorganization of the solvent to stabilize the resulting anion and hydronium ion. Accurately capturing these processes continues to pose a substantial challenge for computational modeling.

Ab initio molecular dynamics (AIMD) provides a powerful approach for modeling acid dissociation. This method captures changes during chemical reactions, enabling the analysis of proton transfer mechanisms, solvation dynamics, and intermediate states, which cannot be accurately represented by classical molecular dynamics or empirical force fields. Such atomic-level insights are crucial for understanding acid-base behavior in chemical and biological environments and improving predictions of reaction kinetics, thermodynamics, and mechanisms. However, AIMD's computational demand for AIMD arises from solving the electronic Schrödinger equation at every simulation step, which significantly limits the accessible trajectory length. This constraint restricts extensive sampling for the free-energy calculations required for the acid dissociation constant calculations.

In recent years, machine learning interatomic potentials (MLIPs) have demonstrated remarkable capability in reproducing the potential energy surfaces predicted by ab-initio calculations while reducing the computational cost.[4,5] Among these approaches, the Deep Potential (DP) framework [6] has emerged as a powerful method for enabling long-timescale molecular dynamics simulations with near ab initio accuracy. Consequently, Deep Potential Molecular Dynamics (DPMD) has become an effective approach for investigating acid dissociation using an explicit solvation model.

Formic acid, among weak acids, serves as a suitable benchmark system due to its simple molecular structure, well-characterized dissociation mechanism, and extensive availability of both experimental and theoretical data. Its moderate acidity, with an experimental pK_a of approximately 3.75 at room temperature, provides a good test for assessing the capability of DP to accurately describe proton transfer and the solvent-mediated stabilization of dissociated ions.

2. Computational Method

2.1 Deep Potential (DP)

We utilized the DP framework to develp MLIP. Within this framework, the total energy of

a system is decomposed into atomic energies, each of which is calculated based on the local environment within a pre-defined local cutoff radius. This approach transforms the local atomic environment into a descriptor that maintains translational, rotational, and permutational symmetry. This descriptor is then fed into a deep neural network to predict the atomic energy and the corresponding atomic forces. The neural network was trained on atomic configurations, along with their respective energies and forces, using DFT data. Following training, the DP model was employed to perform atomistic simulations. The DP framework was implemented in DeePMD-kit [7].

2.2 Density-functional Theory (DFT)

Density Functional Theory (DFT) is a quantum mechanical approach employed to investigate the electronic structures of molecules and materials. In this study, DFT was utilized to obtain the energy and atomic forces that served as training data for constructing the DP model. The VASP software [8,9] was used to calculate the energy and atomic forces, using r^{2}SCAN and r^{2}SCAN0 as the exchange-correlation functionals along with the PAW pseudopotential. The training data included two systems: pure bulk water and formic acid in an aqueous solution. Fig. 1 and 2 depict the typical training structures used in this study.

2.3 Umbrella Sampling

Due to the infrequent nature of acid dissociation events, conventional molecular dynamics simulations are insufficient for adequate sampling. Therefore, umbrella sampling [10] was utilized to enhance sampling along the reaction coordinate. This reaction coordinate is defined by the coordination number. The reaction coordinate was divided into fifty windows, and the simulations were constrained with harmonic biasing potential. The biased probability distribution obtained were then integrated using umbrella integration [10] to reconstruct the dissociaiton free energy profile hence pK_a can be calculated. The simulations were performed using LAMMPS [11] patched with Plumed [12].

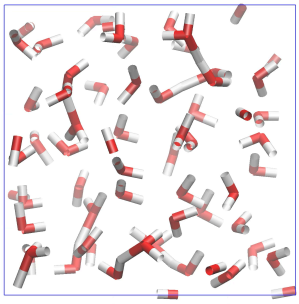


Fig. 1: Bulk water. The red and white colors denote oxygen and hydrogen atoms, respectively.

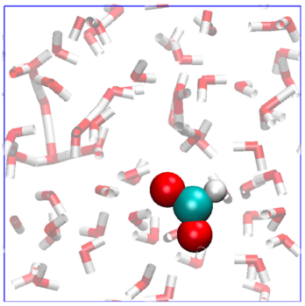


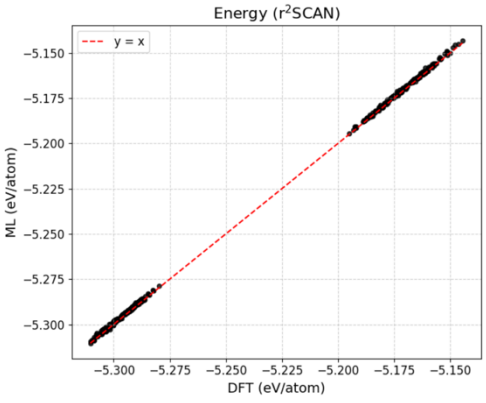
Fig. 2: Formic acid in aqueous solution. The red, white, and green colors denote oxygen, hydrogen, and carbon atoms, respectively

3. Validation of Deep Potential

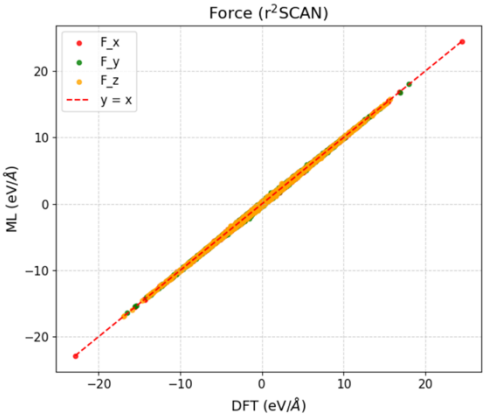
3.1 Energy and Force

Fig. 3 displays parity plots that compare the energy and atomic forces determined by DFT and machine learning (ML) across 420

test data points. These test data points were not included in the training process. For DP@r^{2}SCAN, the root mean square errors (RMSE) for energy and atomic forces are 1.15 meV/atom and 55.35 meV/Å, respectively, which indicates a good accuracy for the MLIP. MLIP@r^{2}SCAN0 demonstrated a comparable level of accuracy. This accuracy level was also consistent with our previous works [13,14].



(a) Energy



(b) Atomic Forces

Fig. 3: Parity plot for DP@r^{2}SCAN.

3.2 Bulk Water Properties

Fig. 4 presents the oxygen-oxygen radial distribution function (OO-RDF) of water predicted by DP@r^{2}SCAN and DP@r^{2}SCAN0 at 300 K and 350 K. DP predicts overstructured bulk water at 300 K for both r^{2}SCAN and r^{2}SCAN0, with r^{2}SCAN0 predicting a less overstructured configuration. This overstructuring arises from the omission of nuclear quantum effects (NQE) from simulations. As noted in previous studies, an approach to partially simulate the NQE is to increase the temperature. Our results demonstrate that an additional 50 K can approximate the experimental OO-RDF at 300 K, which is in agreement with previous studies. We also performed NPT simulations to predict equilibrium bulk water density, resulting in r^{2}SCAN and r^{2}SCAN0 prediction of 0.96 gr/cm^3, close to the experimental bulk water density of 0.997 gr/cm^3.

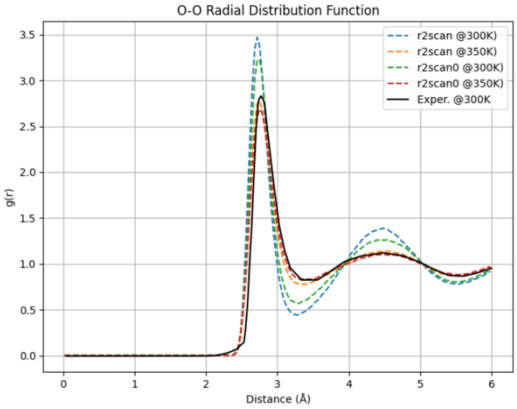


Fig. 4: Oxygen-oxygen radial distribution function of water.

4. Formic Acid Dissociation

Structures were sampled from umbrella sampling trajectories in the initial state (non-dissociated, IS), transition state (TS), and final state (dissociated, FS). For each ensemble, the O*-H RDF was calculated, as depicted in Fig. 5. The progressive shift of the first peak position towards larger values confirms the dissociation process. The coordination number, which is indicative of the hydration structure, can be determined by integrating the RDF, shown in the right axis of Fig. 5. To enhance clarity, the hydration structures of IS and FS are visualized in Fig. 6. Upon verifying the reliability of the sampled trajectory, we

will proceed to the free energy calculations and ensure their convergence, which is our ongoing work.

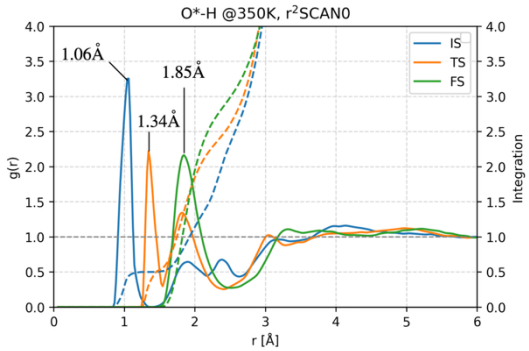


Fig. 5: O^*–H radial distribution function of the initial states (IS), transition states (TS), to final states (FS).

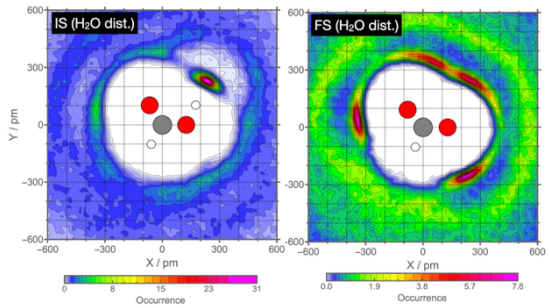


Fig. 6: Hydration structure of formic acid (left) and formate (right) in aqueous solution.

5. Conclusion

We developed an MLIP using a DP framework to model formic acid dissociation with explicit solvation. The accuracy of the DP was validated against the DFT reference data and experimental bulk water properties, demonstrating reasonable agreement and indicating an accurate DP model. Subsequently, DP was integrated with umbrella sampling simulations to enhance the observation of dissociation, which was confirmed to progress reasonably. We are currently calculating the dissociation free energy. Following the completion of the formic acid case, we aimed to benchmark the applicability of this framework to more complex cases, such as molecules with multiple dissociation sites, and to investigate in detail the contributions of steric effects present in complex molecules.

Bibliography

(1) D. T. Manallack, et al., Chem. Soc. Rev., **42**, 485-496 (2013)

(2) L. Mamy, et al., Crit, Rev. Environ. Sci. Technol., **45**, 1277-1377 (2015)

(3) P. Patel., et al., Trends Pharmacol. Sci., **42**, 448-460 (2021)

(4) J. Behler, et al., Phys. Rev. Lett., **98**, 146401 (2017)

(5) K. T. Schütt, et al., Nat. Commun.. **8**, 1-8 (2017)

(6) L. Zhang, et al., Phys. Rev. Lett., **120**, 143001 (2018)

(7) H. Wang, et al., Comput. Phys. Commun., **228**, 178-184 (2018)

(8) G. Kresse, et al., Phys. Rev. B., **59**, 1758 (1999)

(9) G. Kresse, et al., Phys. Rev. B., **54**, 11169 (1996)

(10) J. Kästner, et al., J. Chem. Phys., **123**, 144104 (2005)

(11) A. P. Thompson, et al., Comput. Phys. Commun., **271**, 108171 (2022)

(12) G. A. Tribello, et al., Compute. Phys. Commun., **185**, 604-612 (2014)

(13) R. N. Fadilla, et al. Cybermedia HPC Journal, **14,** 89-92 (2024)

(14) R. N. Fadilla, et al. Cybermedia HPC Journal, **15,** 67-70 (2025)

Enhancing Phosphorescence in Platinum(II) Complexes through Intramolecular CH-N Interactions

Shufang Huang
大阪大学 大学院基礎工学研究科

1. Introduction

Phosphorescent transition-metal complexes have attracted sustained interest owing to their potential applications in organic light-emitting diodes, sensing, and bioimaging. Achieving high photoluminescence quantum yields in such systems is of critical importance. An effective strategy for designing highly emissive complexes is the use of rigid ligand frameworks, such as 2,2′-bipyridine and 2-phenylpyridine, which effectively suppress nonradiative decay and afford strong emission[1]. In contrast, complexes bearing flexible imine-based ligands are generally non-emissive, because of the structural relaxation and facile access to nonradiative decay pathways[2]. We previously found that in a series of *trans*-bis(iminomethylazolato)platinum(II) complexes, the pyrazole derivative exhibits strong phosphorescence, whereas the corresponding pyrrole and imidazole derivatives are weak or non-emissive[3]. This difference was attributed to the formation of intramolecular C–H···N hydrogen bonding between the pyrazole nitrogen and the alkyl C–H group of the opposing ligand, which is expected to suppress nonradiative decay.

In this work, a series of *trans*-bis(5-iminomethylpyrazolato)platinum(II) complexes bearing varied *N*-substituents were synthesized to systematically investigate the structure–phosphorescence relationships. The emission efficiencies exhibit a pronounced substituent dependence. Combined experimental and theoretical analyses reveal that this behavior arises from two structural factors. Molecular planarity controls the nonradiative decay rate (k_{nr}), with highly bent complexes being weakly emissive or non-emissive. Moreover, intramolecular C–H···N interactions, prominent in planar complexes, modulates both radiative (k_r) and nonradiative processes; stronger interactions enhance k_r while suppressing k_{nr}, resulting in efficient phosphorescence (Fig. 1).

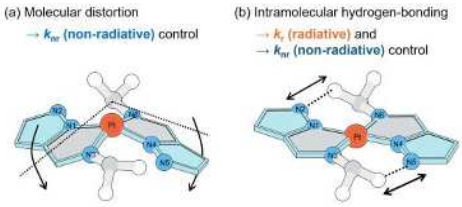


Fig. 1: Schematic illustration of the substituent-dependent control, highlighting (a) molecular distortion and (b) intramolecular hydrogen bonding.

2. Results and discussion

A series of complexes **1a–e** bearing different *N*-substituents on the pyrazolate ligands were synthesized, including polymethylene-bridged (vaulted) structures **1a** (n = 10) and **1b** (n = 12), as well as non-vaulted analogues bearing an alkyl chain (**1c**), a benzyl group (**1d**), and a trifluoroethyl group (**1e**). Their photoluminescence properties exhibit substituent dependent (Fig. 2). All complexes show yellow emission in 2-MeTHF at 298 K (λ_{298K} = 532–542 nm) with quantum yield (Φ_{298K}) increases markedly from 0.04 for **1a** to 0.72 for **1e** at 298 K, corresponding to an approximately 20-fold enhancement. In contrast, comparable emission efficiencies are observed at 77 K (Φ_{77K} = 0.64–0.72), indicating that the differences at 298 K originate from thermally activated deactivation processes.

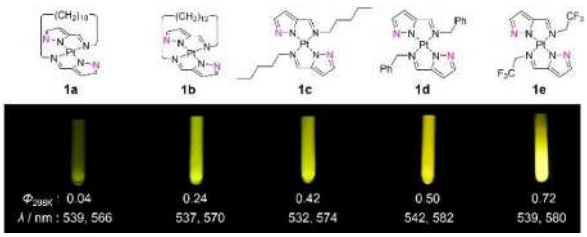


Fig. 2: Molecular structures and photographs of **1a–e** under 365 nm UV irradiation at 298K (1.0×10^{-4} M in 2-MeTHF)

Emission lifetimes were measured and the k_r and k_{nr} were determined (Fig. 3). At 298 K, k_r increases moderately from 7.3×10^4 s^{-1} for **1a** to 17.3×10^4 s^{-1} for **1e**, whereas k_{nr} decreases much more from 114.5×10^4 s^{-1} to 6.7×10^4 s^{-1}. These results demonstrate that suppression of k_{nr} is the dominant factor governing the enhancement of Φ_{298K} across the series. From **1a** to **1c**, the increase in emission efficiency is dominated by reduced k_{nr}, while for **1c–e**, both increased k_r and decreased k_{nr} contribute comparably.

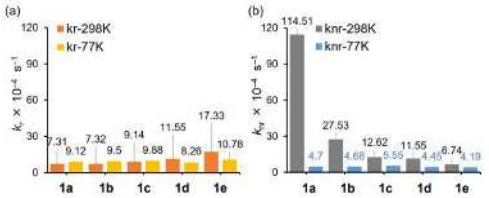


Fig. 3: (a) k_r and (b) k_{nr} of **1a–e** at 298 and 77 K (1.0×10^{-4} M in 2-MeTHF).

To elucidate the structural origin of these trends, DFT calculations were performed to examine molecular planarity and intramolecular hydrogen bonding. The dihedral angle ∠AB defined by the two opposing pyrazole rings was used to quantify molecular distortion. The vaulted complexes show molecular bending (∠AB = 21.6° for **1a** and 14.0° for **1b**), whereas non-vaulted complexes **1c–e** adopt nearly planar geometries (∠AB = 0.04–0.06°). Substituent-dependent variations are also observed in the intramolecular C–H···N hydrogen bonding, with average C–H···N distances decreasing from **1a**/**1b** (2.474 / 2.482 Å) to **1c–e** (2.447–2.231 Å), consistent with strengthened hydrogen bonding induced by more electron-withdrawing substituents (Fig. 4a). Notably, k_r correlates with the average C–H···N distance (Fig. 4b), indicating enhanced radiative decay upon hydrogen-bond strengthening. In contrast, distinct structural factors govern k_{nr}. For **1a–c**, ln(k_{nr}) correlates with the bending angle ∠AB (Fig. 4c), while within the planar series **1c–e**, ln(k_{nr}) depends primarily on the C–H···N distance (Fig. 4d). These results establish a two-stage structural mechanism for nonradiative decay, dominated by molecular distortion in bent complexes and by intramolecular hydrogen bonding in planar systems.

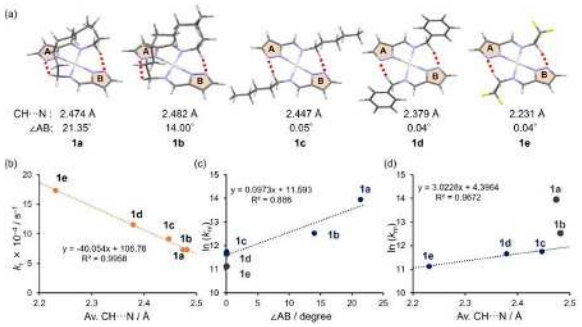


Fig. 4: (a) Optimized S_0 structures. (b) k_r plotted against the C–H···N distance. ln(k_{nr}) plotted against (c) the ∠AB and (d) the C–H···N distance.

To clarify the origin of the substituent-dependent variation in k_{nr}, the excited-state deactivation pathways were analyzed by evaluating the energies of the T_1 state and the minimum-energy crossing point (MECP) between T_1 and S_0. The energy barrier $\Delta\Delta E_{T1-MECP}$ increases monotonically from 13.8 to 19.1 kcal mol^{-1} across **1a–e** (Fig. 5a), indicates progressively hindered access to nonradiative pathways. Consistently, $\Delta\Delta E_{T1-MECP}$ exhibits a linear correlation with ln(k_{nr}) (Fig. 5b), confirming that nonradiative decay proceeds via thermally activated access to the MECP. Correlations with key structural parameters were further examined (Fig. 5c,d). For **1a–c**, $\Delta\Delta E_{T1-}$

$_{MECP}$ correlates strongly with the bending angle ∠AB, and within **1c–e**, $\Delta\Delta E_{T1-MECP}$ shows a strong dependence on the C–H···N distance. These results demonstrate that molecular planarity primarily governs k_{nr} by modulating access to the MECP, while intramolecular hydrogen bonding simultaneously enhances k_r and suppresses k_{nr}.

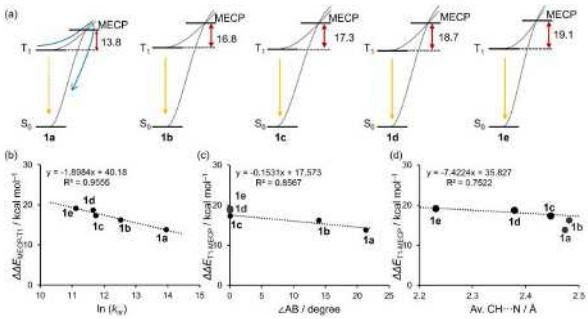


Fig. 5: (a) Energy diagrams of the S_0, T_1, and MECP states. Correlation plots of $\Delta\Delta E_{T1-MECP}$ against (b) ln(k_{nr}), (c) ∠AB and (d) C–H···N distance.

3. Conclusion

In this study, a series of *trans*-bis(5-iminomethylpyrazolato)platinum(II) complexes bearing varied *N*-substituents were investigated to elucidate structure–phosphorescence relationships. The photoluminescence efficiency shows a pronounced substituent dependence, varying by more than a factor of 20 across the series. Structural and photophysical analyses reveal that this behavior originates from two key factors: ligand-plane bending in chain-bridged complexes and intramolecular C–H···N hydrogen bonding in planar analogues. Correlations between rate constants, structural parameters, and the T_1–MECP activation energy demonstrate that nonradiative decay is governed by thermally activated access to the MECP, offering clear design guidelines for phosphorescent metal complexes.

References

(1) S. Lamansky, et al., J. Am. Chem. Soc., **123**, 4304–4312, (2001).

(2) (a) N. Komiya, et al., J. Am. Chem. Soc., **133**, 6493–6496, (2011). (b) S. Kawamorita, et al., Data Brief., **25**, 104300, (2019).

(3) S. Huang, et al., Chem. Lett., **54**, upaf206, (2025).

Theoretical elucidation and design of local atomic structures and their colossal permittivity properties of doped TiO_2

Dinh Ngoc Dung

Department of Precision Engineering, The University of Osaka

I. INTRODUCTION

Recently, colossal permittivity (CP) material continues to arouse considerable interest motivated by their myriad device miniaturization and high-energy-density storage applications. So far, capacitors using CP materials are mostly based on ferroelectrics such as $BaTiO_3$ [1]. Unfortunately, the high permittivity of this material is temperature sensitive and thus ferroelectric based capacitors are hampered by the poor temperature stability of their capacitance. A number of new materials with nearly temperature independent CP have been discovered and expected to become potentially useful capacitor materials. A prominent example is $CaCu_3Ti_4O_{12}$ which achieved a large dielectric constant above 10^4 over a large range of temperature [2]. Other non-ferroelectric transition-metal oxides including $La_{2-x}Sr_xNiO_4$ with CP near room temperature are also viable [3]. However, their high dielectric loss severely prevents them from being used to realize actual devices. Achieving CP and low dielectric loss in a single material is, therefore, still an extremely challenging task, which becomes even more difficult when other desirable properties such as temperature- and frequency-stability are added to the mix. The difficulty in achieving such behavior has greatly impeded the practical application of CP materials.

Doped TiO_2 material has aroused as a potential material which can overcome the roadblock of other CP material. The donor substitution are chosen as ion with valance 5 (V^{5+}, Nb^{5+},Ta^{5+}). Experimentalist has found that at high temperature, the colossal permittivity of this material is due to the Maxwell-Wagner effect. In this case, electrons prefer to accumulate at grain boundaries, leading to very high dielectric dipole. At low temperatures, even though the Maxwell-Wagner effect is suppressed, the permittivity of doped TiO_2 is still very high (about four-fold compared to the undoped case) [4]. Therefore, the mechanism of colossal permittivity of doped TiO_2 at this regime is still unclear. At low temperatures, where the Maxwell–Wagner effect is largely suppressed, our previous study has revealed that small polarons become the dominant contributors to the dielectric response in Nb-doped TiO_2 [5]. Polarons are quasiparticles originating from the coupling between charge carriers and lattice distortions [6]. In the presence of an external electric field, their flip-flop hopping via the dopant leads to an increase in polarization and, consequently, in permittivity. Since Nb doping significantly enhances the low-temperature permittivity of TiO_2, it is important to examine whether other pentavalent dopants, such as V and Ta, can produce similar effects. Understanding this might help clarify how different dopants influence polaron dynamics and dielectric properties.

Additionally, the external pressure may significantly influences the polaron hopping barrier in doped TiO_2. To explore the relationship between pressure and the polaron hopping barrier, I perform DFT calculations to determine the hopping energy barriers in V-, Nb- and Ta-doped TiO_2 under varying pressure conditions. By comprehensively understanding the migration mechanism of polarons, this study aims to provide valuable insights for designing novel atomic structures and enhancing the colossal permittivity properties of doped TiO_2-based

materials.

II. COMPUTATIONAL METHOD

DFT calculations were performed using the Vienna Ab initio Simulation Package (VASP)[7], employing the projector augmented-wave (PAW) method [8,9] to optimize both geometric and electronic structures. The hybrid HSEsol [10,11] functionals were used in combination with the following PAW potentials: Ti_pv ($3p^6 3d^3 4s^1$), V_pv($3p^6 3d^4 4s^1$), Nb_pv ($4p^6 4d^4 5s^1$), Ta_pv ($5p^6 5d^4 6s^1$), and O ($2s^2 2p^4$). This combination has proven to yield accurate calculations of both the polaronic nature of doped TiO_2 and the static dielectric constant of pure rutile TiO_2 [5]. Structural relaxations were conducted using a force convergence criterion of 10^{-3} eV/Å and a plane-wave energy cutoff of 550 eV. To study the stability of polaron in doped TiO2, a $2\sqrt{2} \times 2\sqrt{2} \times 4$ supercell was employed with a $\boldsymbol{\Gamma}$-centered k-point mesh of 1×1×2. The hopping of polaron in doped TiO_2 is investigated using a large supercell in the hopping direction of 2×2×6 with the k-point mesh is chosen as 2×2×1. To investigate polaron hopping barriers, the nudged elastic band (NEB) method [12] was applied, considering 5 intermediate images between each pair of localized polaron sites.

III. RESULTS AND DISCUSSION

A. Stability of polaron in V, and Ta – doped TiO_2

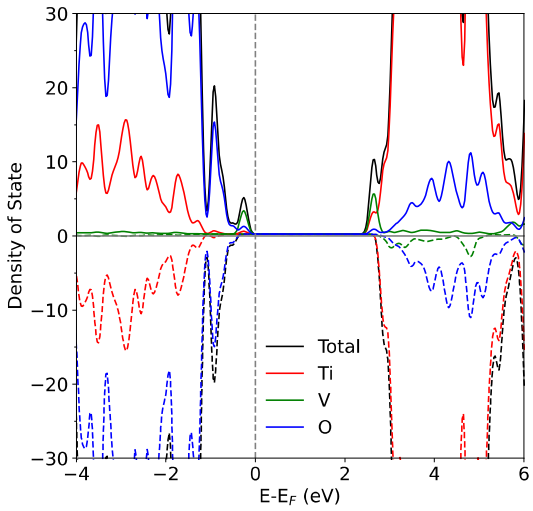


FIG. 1: Density of State of V-doped TiO_2

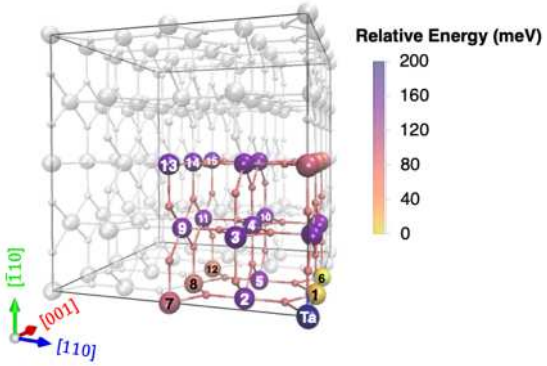


FIG. 2: The stability of polaron in Ta-doped TiO_2. Numbers correspond to the proximity of Ti sites to the Ta dopant.

Fig.1 show the Density of State (DOS) of V-doped TiO_2. In V-doped TiO_2, the localization results in a mid-gap state of V^{4+}. The proximity of this state to the valence band maximum indicates that the excess electron is strongly bound to the V dopant, leading to the formation of V^{4+}. It is worth noting that, regardless of the initial localization (even when the excess electron is initially forced to localized on a Ti site), the electron ultimately relaxes to the V site after structural optimization. Since the potential energy surface of V-doped TiO_2 exhibits a single-well profile, polarization switching might not occur.

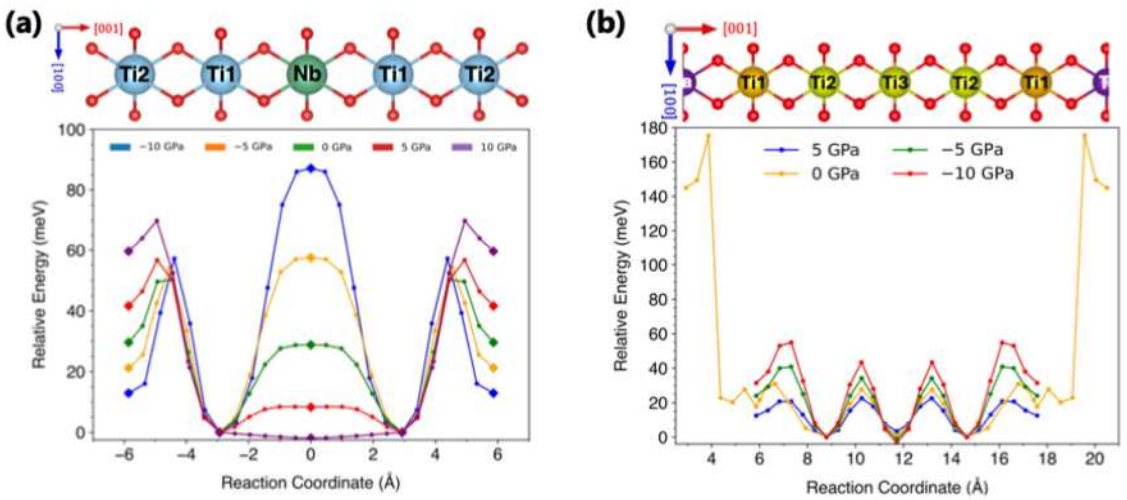


FIG. 3: The potential energy surface of polaron hopping in (a) Nb- and (b) Ta-doped TiO2 under ambient, tensile and compressive pressure

As a result, polarons do not contribute to the enhancement of the dielectric response of this material at low temperatures.

In Nb-doped TiO_2, the polaron is most stable at the first nearest-neighbor Ti site to the dopant, followed by the second nearest-neighbor site in the [001] direction. In Ta-doped TiO_2, we find that the stability of polarons differs significantly from that in Nb-doped TiO_2. Figure 2 shows the relative energies of polaron localized at different sites in Ta-doped TiO_2, labeled according to their proximity to the dopant. The polaron is most stable when localized at the sixth nearest-neighbor Ti site (the second nearest neighbor in the [001] direction).

B. Polaron hopping in Ta doped TiO_2

Figure 3a shows the hopping path of polaron along the [001] direction and the hopping barrier when polaron hopping between these sites. The hopping path and activation energy of polaron in Nb-doped TiO_2 are shown in Fig. 3b as reference. From this figure, it is clear that Ta-doped TiO_2 is not only different from Nb-doped TiO_2 in the stability of polaron but also the polaron hopping behavior. In particular, the polaron does not hop through the dopant since the barrier for this hopping is very high of 175 meV. Instead, the polaron hopping between Ti sites between Ta atoms is preferable since the barrier of this hopping is about 30 meV. Since Polaron in Ta-doped TiO_2 is confined between Ta dopants, at low doping concentration it is able to hop over longer distances and along more extended pathways than in Nb-doped TiO_2. This implies that Ta-doped TiO_2 exhibits a larger permittivity than Nb-doped TiO_2 at low temperature. Furthermore, the low hopping barrier of polarons in Ta-doped TiO_2 is comparable to that in pristine TiO_2 with an excess electron ($TiO_2 + e^-$). This indicates that at sites sufficiently far from the dopant, polaron hopping is only weakly influenced by the presence of Ta and closely resembles that of a free polaron.

C. Polaron hopping in Nb- and Ta- doped TiO_2 under pressure

The polaron hopping barriers in Nb- and Ta-doped TiO_2 are also strongly influenced by hydrostatic pressure. To investigate the effect of pressure, the structure optimization calculations were first performed. The hydrostatic compressive (5 and 10 GPa) and tensile (-5 and -10 GPa) pressures were then applied to find the optimized structure and hopping barrier of polaron at these pressures. We find that tensile pressure increases the energy barrier for polaron hopping in every pathway,

whereas compressive pressure has the opposite effect, leading to a decrease in the barrier.

IV. CONCLUSION

Our findings suggest that the mechanism behind the colossal permittivity of doped TiO_2 at low temperatures involves the hopping of excess electrons within the material. Pentavalent ions such as V, Nb and Ta have an additional electron in their outer shell compared to Ti atoms. In V-doped TiO_2, the excess electron is strongly bound to the V dopant, suppressing polaron hopping and dielectric dipole formation. When Ti is substituted with Nb or Ta, this excess electron can become localized, forming a quasi-particle known as a polaron. In Nb-doped TiO_2, DFT calculations confirm that the excess electron from Nb localizes on the nearest titanium atom, resulting in a molecular polaron configuration. In contrast, in Ta-doped TiO_2, the excess electron tends to localize on the second-nearest titanium atom along the [001] direction relative to the Ta atom.

This distinction also extends to the hopping mechanism. In Nb-doped TiO_2, polaron hopping occurs via the dopant site, whereas in Ta-doped TiO_2, hopping through the dopant is unfavorable. Instead, the polaron preferentially hops between Ti sites located between Ta dopants along the [001] direction. The more extended polaron hopping pathways are expected to enhance the permittivity than in Nb-doped TiO_2, but also result in increased dielectric loss at low temperature. In both cases, the hopping barrier is increase under tensile pressure and decrease under compressive pressure.

Reference

[1] S. Krohns et al., Nature Materials **10**, 899 (2011)

[2] P. Lunkenheimer et al., Eur. Phys. J. Special Topics **180**, 61 (2010)

[3] S. Krohns et al., Appl. Phys. Lett. **94**, 122903 (2009)

[4] M. Kawarasaki et al., Sci. Rep. **7**, 5351 (2017)

[5] D. V. An et al., Phys. Rev. B. (2026) (accepted)

[6] L.D. Landau, Phys. Z. Sowjetunion **3**, 644–645 (1933)

[7] G. Kresse and J. Furthmuller, Comput. Mater. Sci. **6**, 15 (1996)

[8] P. E. Blochl, Phys. Rev. B **50**, 17953 (1994)

[9] G. Kresse and D. Joubert, Phys. Rev. B **59**, 1758 (1999)

[10] J. P. Perdew et al., Phys. Rev. Lett. **100**, 136406 (2008)

[11] L. Schimka et al., J. Chem.Phys. **134**, 024116 (2011)

[12] G. Mills et al., Surf. Sci. **324**, 305 (1995)

Quantum Monte Carlo Study of the Electronic Structure and Spectroscopy of the Al_{13} Superatom

Meliton Chiong III[1], Atsushi Nakajima[2], Yoshitada Morikawa[1]
[1]Graduate School of Engineering, The University of Osaka
[2]Faculty of Science and Technology, Keio University

1. Introduction

Atomic clusters consisting of a few to several tens of atoms often exhibit physical and chemical properties that differ significantly from those of isolated atoms or bulk materials. Among these, certain atomic clusters possess well-defined electronic shell structures resembling those of individual atoms and are therefore referred to as superatoms. [1] Because their electronic properties can be tailored through composition and size, superatoms have attracted considerable interest as fundamental building blocks for next-generation functional materials, catalysts, and nanodevices. [2]

One of the most extensively studied superatoms is the aluminum 13-mer cluster, Al_{13}. The anionic cluster Al_{13}^- is exceptionally stable because its forty valence electrons completely fill the superatomic electronic shells according to the jellium model, giving rise to a closed-shell electronic configuration analogous to that of a noble gas atom. [3] Upon ionization, however, the electronic structure changes dramatically. The Al_{13} neutrals possess open-shell configurations that undergo structural distortions driven by the Jahn–Teller effect.

For more than two decades, the electronic structure of Al_{13} has remained the subject of active investigation. Photoelectron and photoionization spectroscopies have provided valuable information on the electron affinity and ionization energies of the cluster, [4] while first-principles calculations based on density functional theory (DFT) have been widely employed to interpret these measurements. While the electronic properties of Al_{13}^- anions are well established, those of the neutral and cationic Al_{13} remain controversial. In particular, theoretical predictions of the adiabatic and vertical ionization energy vary considerably depending on the level of theory, making quantitative comparison with experiment challenging. [5,6]

Diffusion Monte Carlo (DMC) is one of the most accurate first-principles methods for predicting electronic energies because it explicitly accounts for electron correlation, often achieving near chemical accuracy for systems where conventional approaches become unreliable. In this work, benchmark DMC calculations were performed to investigate the photodetachment of Al_{13}^- anions and photoionization of Al_{13} neutrals. The calculated results provide new insight into the electronic structure of this prototypical superatom and are directly compared with available experimental measurements.

2. Computational Methods

The electronic structures of Al_{13}^-, Al_{13}, and Al_{13}^+ were investigated using a hierarchical first-principles approach. Geometry optimizations and vibrational frequency calculations were first performed using DFT with the hybrid PBE0 exchange-correlation functional and 6-311+G(d,p) basis set. The optimized structures were then used to construct trial wave functions for quantum Monte Carlo (QMC) calculations using QMCPack [7].

The trial wave functions for quantum Monte Carlo are of the Slater-Jastrow type. [8] The Slater determinants were generated with Hartree-Fock (HF) and DFT, as well as multideterminant expansions from complete active space configuration interaction (CASCI). For the multireference calculation of Al_{13}^- anion, an active space of 20 electrons in 15 orbitals was chosen. The variational parameters in the Jastrow factor are linearly optimized using variational Monte Carlo (VMC) to minimize the energy of the system.

The optimized wave functions were subsequently employed in Diffusion Monte Carlo (DMC) calculations to obtain benchmark total energies with explicit treatment of electron correlation. [9] DMC is a stochastic projector method that gives the ground state by propagating the many-body trial wave function in imaginary time at a long time limit.

The adiabatic and vertical electron detachment energies (ADE and VDE) of Al_{13}^- and the adiabatic and vertical ionization energies (AIE and VIE) of Al_{13} were evaluated from the DMC total energies. Franck–Condon simulations were further performed to calculate vibronic spectra for direct comparison with experimental photoelectron spectra.

3. Results and Discussion

3.1 Electronic Structures of Al_{13} Clusters

Figure 1 shows the optimized structures of the Al_{13}^- anion, Al_{13} neutral, and Al_{13}^+ cation. The Al_{13}^- anion adopts an icosahedral structure, while removal of one electron induces a Jahn–Teller distortion to a distorted icosahedral geometry in the neutral cluster. Reoptimization of the previously proposed decahedral structure using an all-electron basis set converged to the distorted icosahedral geometry, confirming that the decahedral structure is an artifact of small-basis effective core potential calculations.

For the cation, the cap-like structure was confirmed as the global minimum. In addition, a low-lying oblate isomer was identified 0.51 eV above the cap structure. Although metastable, this oblate isomer plays a key role in interpreting the experimental ionization process. The frontier molecular orbitals

exhibit symmetry breaking consistent with the superatomic shell model and the Jahn–Teller distortion upon electron removal.

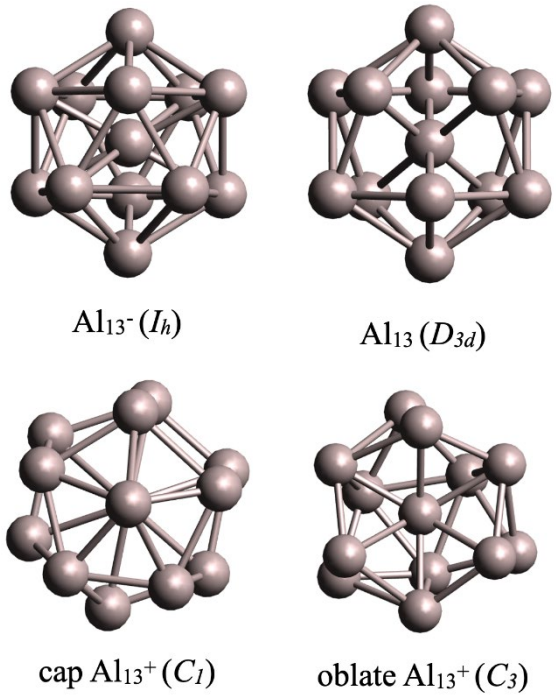


Figure 1: Isomers of Al_{13}^-, Al_{13}, and Al_{13}^+ optimized at the PBE0/6-311+G(d,p) level. The Al_{13}^- anion is icosahedral while the Al_{13} neutral undergoes a Jahn–Teller distortion to a distorted icosahedron. The Al_{13}^+ cation has two low-symmetry isomers: cap and oblate. The ground state cap isomer is 0.51 eV lower in energy than the metastable oblate.

3.2 Diffusion Monte Carlo Benchmark Calculations

Diffusion Monte Carlo calculations were performed using various basis sets and trial wave functions to evaluate their influence on the computed energies. Increasing the basis set from double-ζ to triple-ζ consistently lowered the DMC energies, indicating that basis-set quality remains important even within the fixed-node approximation. In contrast, the choice between Hartree–Fock and DFT trial wave functions had only a modest influence on the results, with DFT orbitals generally producing slightly lower energies. Single-determinant trial wave functions yielded lower DMC energies than the multideterminant CASCI expansions employed in this work and were therefore adopted for the benchmark calculations.

Finally, the use of pseudopotentials (BFD/VTZ) reduces the statistical error bars by a factor of 3–4 relative to all-electron calculations. Because the DMC provides an upper bound to the true ground-state energy within the local minimum defined by the nodal surface, it is appropriate to report the ADE, VDE, AIE, and VIE values using the lowest DMC energy obtained from the single-determinant DFT trial wave functions.

3.3 Photodetachment of Al_{13}^- Anions

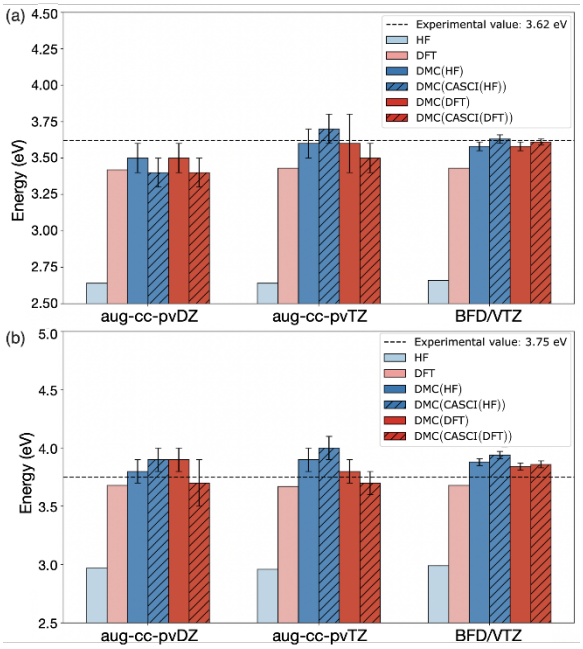


Figure 2: (a) Adiabatic detachment energies (ADE) and (b) vertical detachment energies (VDE) of Al_{13}^- calculated by DMC using different trial wave functions.

Figure 2 shows the ADE and VDE calculated by DMC using different trial wave functions. The calculated ADE of Al_{13}^- is 3.58 ± 0.03 eV in excellent agreement with experimental photoelectron spectra. [3] This value is obtained from the DMC energies with single-determinant DFT and using BFD pseudopotential with VTZ basis set. The calculated VDE is 3.84 ± 0.03 eV, which is about 0.1 eV higher than the experimental value. [10]

To better understand this discrepancy, the Franck-Condon factors (FCFs) are calculated. At 0 K, the most intense transition corresponds to the $9_5' + 24_3' \leftarrow 0''$ band. This is a combination-band transition from the vibrational ground state of the electronic ground state anion to a vibrational excited state of the electronic ground state of the neutral. At 260 K, low-frequency modes are thermally populated, enabling hot-band transitions. Although their individual FCFs are smaller than that of the fundamental transitions, the large number of accessible hot-band transitions leads to an overall shift of the spectral envelope toward lower energies. As a result, the simulated spectrum matches well with the experimental photoelectron spectrum produced at 260 K. This vibronic effect shifts the VDE to 3.80 ± 0.03 eV, bringing it into excellent agreement with experiment.

3.4 Photoionization of Al_{13} Neutrals

Unlike the photodetachment spectrum of Al_{13}^-, the photoionization of neutral Al_{13} has remained controversial. Although numerous theoretical studies have attempted to reproduce the experimental ionization energies, [11] the reported adiabatic ionization energies span nearly 1 eV depending on the computational method employed. [12] These

discrepancies highlight an important question on which structure and ionization pathways truly correspond to the observed experimental threshold, and does the measurement reflect an adiabatic or vertical process?

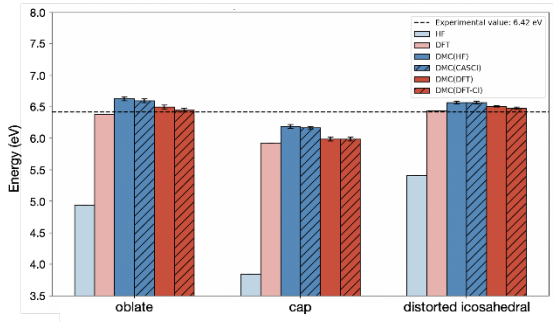


Figure 3: Adiabatic ionization energies for the ionization of Al_{13} neutral to oblate, cap, or distorted icosahedral isomer. The ionization energy leading to an oblate Al_{13}^+ cation matches well with the experiment.

To resolve this issue, photoionization was investigated by considering three possible cationic structures as shown in Figure 3: the cap ground state, the newly identified metastable oblate, and the distorted icosahedral structures. While the cap isomer is the global minimum of Al_{13}^+, its calculated AIE (5.99 ± 0.03 eV) is significantly lower than the experimental threshold. In contrast, ionization to the metastable oblate isomer gives an adiabatic ionization energy of 6.50 ± 0.03 eV, in excellent agreement with experiment. The distorted icosahedral cation yields a similar energy but was confirmed to be a transition state rather than a stable structure.

These results indicate that the experimentally measured ionization threshold should not be assigned to the cap-like ground-state cation, as has commonly been assumed. Instead, the threshold is attributed to the formation of the metastable oblate Al_{13}^+ isomer, while the cap structure is reached only after subsequent structural relaxation.

This interpretation resolves the long-standing discrepancy between theory and experiment and is further supported by recent laser photoionization mass spectrometry measurements. [13] The calculated vertical ionization energy of 6.95 ± 0.03 eV also provides excellent agreement with the higher-energy ionization feature observed experimentally.

4. Conclusion

In this study, benchmark diffusion Monte Carlo calculations were performed to investigate the electronic structure and spectroscopy of the aluminum superatom Al_{13}. The calculated adiabatic and vertical detachment energies of Al_{13}^- showed excellent agreement with experimental photoelectron spectra, demonstrating the accuracy of the quantum Monte Carlo approach for describing electron correlation in superatomic clusters.

For the photoionization of neutral Al_{13}, the calculations revealed that the experimentally observed ionization threshold corresponds to the formation of a metastable oblate Al_{13}^+ isomer rather than the cap-like ground-state cation. This finding resolves the long-standing discrepancy between theoretical predictions and experimental measurements and provides a consistent interpretation of the photoionization process.

The present work demonstrates that benchmark quantum Monte Carlo calculations can provide reliable electronic structures and spectroscopic properties for highly correlated systems. As computational resources continue to advance, these approaches will become increasingly valuable for investigating complex superatomic systems and guiding the interpretation of experimental spectroscopy.

References

(1) Z. Luo and A. W. Castleman Jr., Acc. Chem. Res., **47**, 2931–2940, (2014).
(2) A. C. Reber, et al., J. Am. Chem. Soc., **129**, 10189–10194, (2007).
(3) X. Li, et al., Phys. Rev. Lett., **81**, 1909–1912, (1998).
(4) J. Akola, et al., Phys. Rev. B., **58**, 3601–3604, (1998).
(5) Q. A. Smith and M. S. Gordon, J. Phys. Chem. A., **115**, 899–903, (2012).
(6) L. Candido, et al., Phys. Rev. B., **85**, 245404, (2012).
(7) P. R. Kent, et al., J. Chem. Phys., **152,** e1546, (2020).
(8) R. Jastrow., Phys. Rev., **110**, 6158–6169, (1999).
(9) P. J. Reynolds, et a., J. Chem. Phys., **98**, 1479–1484, (1955).
(10) C.-Y. Cha, et al., J. Chem. Phys., **100**, 995–1010, (1994).
(11) K. E. Schriver, et al., Phys. Rev. Lett., **64**, 2539–2542, (1990).
(12) A. Aguado and J. M. Lopez, J. Chem. Phys., **130**, 064704, (2009).
(13) M. Akutsu, et al., J. Phys. Chem. A., **128**, 6648–6657, (2024).
(14) M. Chiong, et al., J. Phys. Chem. A., **130**, 1851–1860, (2026).

グラフ構造を活用した解釈可能な脳波モデルの開発

小峠 陸登
大阪大学 大学院情報科学研究科

1. はじめに

てんかんは一般に、脳神経ネットワークに生じる異常な発作現象として知られている [1,2]。脳領域間に生じる異常な結合関係は、しばしば発作の指標として機能し、発作検知の自動化を目的として、これらの神経ネットワーク構造を明示的に表現できるグラフニューラルネットワーク（GNN）を用いた研究が行われている [3,4,5]。特に、脳活動の時間的な変化を考慮するため、脳波信号を時間とともに変化するグラフの系列として捉える枠組みが注目されている．特に,再帰型ニューラルネットワーク（RNN）などの時系列モデルと GNN を統合した動的（dynamic）GNN と呼ばれる手法が提案されており、脳波に内在する時空間的特徴の学習に用いられている。これらの手法は、時間ステップごとにグラフ構造を表現し、その系列を逐次的に処理することで、脳状態やネットワーク構造の時間的変化を捉え、発作検出精度の向上を可能にしている。しかし、グラフ表現と時系列表現を効果的に統合し、脳活動の時間変化を適切に捉えるには本質的に、以下の課題が存在する。

既存モデルの多くは動的なグラフ「モデル」を用いているものの、静的なグラフ「構造」を用いている場合が多い [3,4,5]。これらの手法では通常、初期の脳波データに基づいてチャンネル間の相関関係からグラフを事前に構築し、その構造をすべての時間ステップで共有する。この設計は、脳活動の空間構造が時間を通じて不変であるという仮定を暗黙的に置いている。一方で、図 1 に示すように、発作は脳内の異なる領域間において、神経細胞の同期化および非同期化が時系列的に進行する複雑なパターンを引き起こすことが知られている。

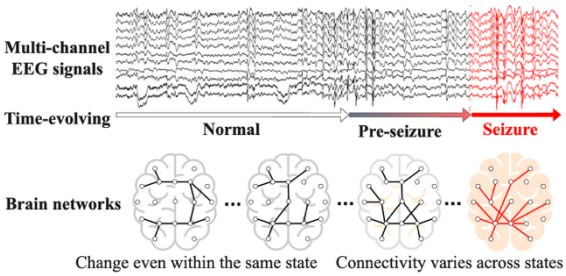


図 1：多次元脳波データとネットワークの変化

本研究ではまず、脳ダイナミクスを効果的に表現し、発作検出を高精度に行うために，脳ネットワークにおける進化的かつ動的な特性を効果的に学習する手法 EvoBrain を提案する。本研究の主な貢献は以下の通りである：

本研究では、神経科学的知見に基づき、2 ストリーム Mamba アーキテクチャ [6] とラプラシアン位置符号化を用いた GCN を統合する新しいモデル EvoBrain を提案する。EvoBrain は、動的 GNN ベースラインと比較して、AUROC で最大 23%、F1 スコアで最大 30%の性能向上を達成した。さらに、method は、既存の TAG モデルと比較して最大 17 倍高速である。

2. 提案手法

2.1 記号

本研究では、N チャネル、T スナップショットからなる多次元脳波信号を、動的グラフ G = (A、X)として定義する。ここで、A = (V、E)は動的なグラフ構造を表し、A は N × N × T の時間方向に拡張された隣接行列である。V および E は、それぞれ脳波電極、すなわちノードと、エッジを表す。多くの既存研究では、重み付き隣接行列 A を N × N の行列として時間 T にわたって固定し、すべての脳波スナップショットが同一のグラフ構造を共有する設定が採用されている。この設定では、各時刻においてノード特

徴 H のみが逐次的に更新される。

一方、本研究では、各エッジ $e_{i,j,t}$ が、時刻 t におけるチャネル v_i と v_j の間の結合関係を表す。対応する隣接要素 $a_{i,j,t}$ は実数値を取り、各時間ステップにおける 2 チャネル間の結合強度を定量化する。$e_{i,j,t}$ が存在する場合、$a_{i,j,t}$ は非ゼロ値を取る。

2.2 動的グラフ構造

脳波の記録全体から単一の静的グラフを構築する代わりに、各スナップショットごとに脳波グラフを構築することを提案する。まず、脳波データを一定間隔で短い区間、すなわちスナップショットに分割し、チャンネル相関を計算してグラフ構造の列を構築する。具体的には、t 番目のスナップショットにおけるエッジの重み a_{ijt} を、重み付き隣接行列 A の要素として定義する。これは、ノード v_i と v_j 間の正規化相互相関の絶対値として計算される。

情報の冗長性を防ぎ、疎なグラフを作成するために、隣接ノード間の相関をランク付けし、上位 τ 個の相関を持つエッジのみを保持する。すなわち、v_j が v_i の隣接ノード集合に含まれる場合、a_{ijt} は x_{it} と x_{jt} の正規化相互相関の絶対値として定義され、それ以外の場合は 0 とする。ここで、x_{it} と x_{jt} は、t 番目の脳波スナップショットにおける v_i チャンネルと v_j チャンネルを表す。また、隣接ノード集合は、相関値が高い上位 τ 個の隣接ノードの集合を表す。

この計算を T 個のスナップショットに対して行うことで、異なる時点における脳ネットワークを表す有向重み付き脳波グラフ G が得られる。言い換えると、脳波の動的性質は、これらのグラフ構造が時間経過に伴って変化する様子として捉えられる。

2.3 動的グラフニューラルネットワーク

本研究では、新たな TTG モデルを提案する。このモデルでは、GRU がノード特徴量を学習した後、グラフ畳み込みネットワーク、すなわち GCN を用いて、静的グラフ上の電極間における空間的依存性を捉える。この手法は、発作の検出のために、脳波データに内在する時空間的ダイナミクスを効果的に捉える。

モデルの入力には、脳波信号そのものではなく、その周波数表現を用いる。ここでは、特定の周波数振動やスパイクなどの波形を特定することを目的とする。先行研究に従い、脳波信号に短時間フーリエ変換、すなわち STFT を適用し、非負の周波数成分の対数振幅を保持する。その後、データセット全体で正規化を行う。時間スナップショットの列からなる脳波周波数表現は、$N \times T \times d$ のテンソル X として定式化され、N 個のノードの初期化と動的グラフ構築に用いられる。

ノードとエッジの特徴の時間的ダイナミクスを捉えるため、それぞれを別のプロセスとして扱う 2 ストリーム Mamba フレームワークを導入する。動的脳波グラフ G に対し、Mamba は選択的な状態更新が可能な線形 RNN と解釈できるため、短期記憶と長期記憶の両方のプロセスを含む脳のダイナミクスのモデリングに適している。

脳において、短期記憶は短い間隔で一時的な情報を保持する。一方で、長期記憶は長い時間スケールにわたって過去の経験を現在の処理へ統合することを可能にする。系列 x_t を処理する従来の RNN において、隠れ状態の更新は、前時刻の隠れ状態 h_{t-1} と現在の入力 x_t に基づいて計算される。ここで、ニューロン間のシナプス接続性を表す重み行列 W と U は、時間 t を通じて固定されている。しかし、実際のシナプスの重みは常に変化し続けており、神経調整物質などの化学物質によって制御されている。これにより、固定された重みを用いる従来の RNN では、長い系列にわたって時間変化する情報を柔軟にモデル化する能力が制限される。対照的に、Mamba は各要素、すなわちノード特徴量や重み付き隣接行列に対して、入力依存のパラメータを持つ線形 RNN と見なすことができる。隠れ状

態は時間変化する神経活動を符号化し、一時的な作業記憶と、より持続的な長期記憶追跡の両方の基盤として機能する。

ソフトプラス活性化関数は、ゲート変数が正の値を保持することを保証し、それによって過去の神経状態を保持することと新たな入力を取り込むことの間のトレードオフを調整する。具体的には、忘却項は古くて役に立たない情報や無関係な情報を減衰させるシナプス減衰や抑制プロセスに類似した選択的処理を実行する。逆に、更新項は顕著な新しい情報を選択的に強化し、統合する神経調節性ゲートを反映している。

脳波信号における空間的依存性を効率的にモデリングするために、グラフ畳み込みネットワーク、すなわち GCN と、ラプラシアン位置符号化、を用いる。神経科学分野の研究により、特定の機能は新皮質やブローカ野などの特定の脳領域と密接に関係していることが明らかになっている。しかし、GNN の基本的な計算機構により、グラフ自己同型の下で構造的に等価なノードは同一の表現となり、実質的に個々の独自性を失うことになる。

空間モデリングにおいて脳の空間特性を反映するため、ラプラシアン位置符号化を導入する。エッジ特徴量に対して、正規化ラプラシアン L を定義する。正規化ラプラシアン L に対して固有値分解を行うことで、固有ベクトル行列 U と固有値を含む対角行列 Λ が得られる。ネットワークのグローバルな幾何構造を捉えるため、最小の固有値に対応する最初の K 個の固有ベクトルを選択する。ノード i について、そのラプラシアンベースの位置符号化 pi は、これらの固有ベクトルにおけるノード i の成分を並べたベクトルとして与えられる。その後、ノードの時間特徴と位置符号化 pi を連結し、ノード特徴として用いる。空間依存性を学習するために GCN を適用する。これらのグラフ埋め込みは、脳波スナップショットの時間変化を捉え、各スナップショットはその特定の時間における脳の状態を反映している。GCN の各層は、隣接ノードとエッジから情報を集約することでノード埋め込みを更新する。

その後、発作検出タスクのために、最終層のノード埋め込み Z に対して Max Pooling を適用し、さらに全結合層とソフトマックス活性化関数を適用する。

3. 実験評価

3.1 タスク設定

本研究では、発作検出タスクに焦点を当てる。発作検出は、脳波データの特定区間が発作状態か非発作状態かを判別する 2 値分類問題として定式化される。本タスクは、自動発作モニタリングシステムの基盤となる重要な課題である。

3.2 データセット

手法の評価には、Temple University Hospital EEG Seizure dataset v1.5.2、すなわち TUSZ を用いた。TUSZ は公開されている脳波発作データベースの中で最大規模であり、5,612 件の脳波記録と、アノテーション付きの 3,050 件の発作イベントを含む。各記録は 19 チャネルの脳波から構成されている。TUSZ に対しては、公式に提供されているデータ分割に従い、特定の患者群をテスト用として使用した。

3.3 比較手法

比較手法として、4 つの動的 GNN 手法を選択した。具体的には、EvolveGCN-O、DCRNN、GRAPHS4MER および GRU-GCN を含めた。さらに、脳波向け基盤モデルとして、BIOT、LaBraM、EEGPT を評価に含めた。LaBraM および EEGPT については、公開されているベースモデルのチェックポイントからファインチューニングを行った。加えて、LSTM、CNN-LSTM、ならびに従来手法としてサポートベクターマシン、すなわち SVM と、ランダムフォレストも評価対象とした。

3.4 評価指標

評価指標として、Receiver Operating Characteristic 曲線下面積、すなわち AUROC と、F1 スコアを用いた。AUROC は、さまざまな閾値設定における性能を考慮し、クラス識別能力を包括的に評価する指標である。一方、F1 スコアは、適合率、すなわち precision と、再現率、すなわち recall のバランスを考慮した最適な閾値での性能に焦点を当てる。すべての結果は、異なる乱数シードを用いた 5 回の実行の平均として報告する。

3.5 実験結果

表 1: 発作検出の比較実験結果

	Detection			
	12s		60s	
Methods	AUROC	F1	AUROC	F1
SVM	0.765 ± 0.004	0.369 ± 0.007	0.720 ± 0.017	0.390 ± 0.019
Random Forest	0.778 ± 0.004	0.354 ± 0.005	0.739 ± 0.031	0.386 ± 0.038
LSTM	0.794 ± 0.006	0.381 ± 0.019	0.720 ± 0.014	0.392 ± 0.012
CNN-LSTM	0.754 ± 0.009	0.356 ± 0.008	0.680 ± 0.007	0.331 ± 0.016
BIOT	0.726 ± 0.016	0.320 ± 0.018	0.651 ± 0.024	0.280 ± 0.013
LaBraM	0.825 ± 0.003	0.472 ± 0.013	0.793 ± 0.002	0.469 ± 0.010
EEGPT	0.803 ± 0.005	0.415 ± 0.011	0.743 ± 0.003	0.406 ± 0.012
EvolveGCN	0.757 ± 0.004	0.343 ± 0.012	0.670 ± 0.017	0.340 ± 0.015
DCRNN	0.817 ± 0.008	0.415 ± 0.039	0.808 ± 0.014	0.435 ± 0.019
GRAPHS4MER	0.833 ± 0.005	0.413 ± 0.017	0.778 ± 0.021	0.439 ± 0.012
GRU-GCN	0.856 ± 0.009	0.505 ± 0.009	0.822 ± 0.013	0.438 ± 0.014
EvoBrain(Ours)	**0.877 ± 0.005**	**0.539 ± 0.009**	**0.865 ± 0.009**	**0.483 ± 0.006**

表 1 は、TUSZ データセットにおける発作検出タスクについて、12 秒および 60 秒のウィンドウ長を用いた各種モデルの性能比較を示している。提案手法は、すべての動的 GNN 比較手法を一貫して上回る性能を示し、大規模基盤モデルである LaBraM と比較してもパラメータ数が約 30 分の 1 でありながら、競争的な性能を達成している。12 秒ウィンドウの発作検出タスクにおいて、method は LaBraM と比較して AUROC を 14%、F1 スコアを 12%向上させた。また、60 秒ウィンドウのデータでは、EvolveGCN と比較して AUROC を 23%、F1 スコアを 30%、すなわち 0.340 から 0.483 へ向上させた。さらに、すべての TTG 系モデルが相対的に高い性能を示している。

4. おわりに

本研究では、動的マルチチャネル脳波グラフモデリング手法である EvoBrain を提案した。動的グラフモデリングを組み合わせることで、EvoBrain は脳ネットワークの進化的な性質を効果的に捉える。EvoBrain は、既存の動的 GNN モデルに対して AUROC で 23%、F1 スコアで 30%の性能向上を達成し、発作検出タスクにおいて高い性能を示した。以上の結果から、本研究は、信頼性が高く臨床的に意味のある脳波解析に向けた、実用的かつ理論的に裏付けられた新たな枠組みを提示する。

参考文献

(1) Burns, S. P. et al., Network dynamics of the brain and influence of the epileptic seizure onset zone, Proceedings of the National Academy of Sciences, pp. E5321--E5330 (2014).

(2) Li, A. et al., Neural fragility as an EEG marker of the seizure onset zone, Nature Neuroscience, pp. 1--10 (2021).

(3) Cai, D. et al., MBrain: A Multi-Channel Self-Supervised Learning Framework for Brain Signals, Proceedings of the 29th ACM SIGKDD Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, pp. 130--141 (2023).

(4) Ho, T. K. K. et al., Self-Supervised Learning for Anomalous Channel Detection in EEG Graphs: Application to Seizure Analysis, Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence, pp. 7866--7874 (2023).

(5) Tang, S. et al., Self-Supervised Graph Neural Networks for Improved Electroencephalographic Seizure Analysis, International Conference on Learning Representations (2022).

(6) Gu, A. et al., Mamba: Linear-Time Sequence Modeling with Selective State Spaces, arXiv preprint arXiv:2312.00752 (2024).

Diquarks study from lattice QCD using the extended HALQCD method

Kai-Wen Kelvin-Lee, Noriyoshi Ishii
大阪大学 核物理研究センター

1. Introduction

Diquarks are colored composite objects formed by two quarks. In nature, observing isolated diquarks is forbidden by the color confinement of Quantum Chromodynamics (QCD). Despite this restriction, the diquark structure remains a subject of intense interest in hadron physics, frequently serving as a foundational building block in phenomenological models to describe conventional hadrons and exotic states, such as tetraquarks and pentaquarks [1]. Because direct experimental isolation of diquarks is impossible due to confinement, first-principles studies via lattice QCD have emerged as an indispensable tool for investigating their properties.

Within the lattice QCD community, previous investigations into diquark properties generally fall into three categories. The first approach extracts the diquark's effective mass directly from the diquark two-point correlation functions employing a specific gauge-fixing condition, such as Landau gauge [2–4]. While stable effective mass plateaus are observed, this method does not rigorously address the presence or nature of a bound-state pole in the gauge-dependent propagator. The second approach investigates diquark properties within gauge invariant baryon states. Because baryons are color-singlet states, thus having gauge-invariant properties [5–8]. In practice, these authors introduce a static heavy quark to neutralize the color charge of the diquark, studying the resulting heavy-light-light baryonic system. Although this strategy fully respects *SU(3)* gauge invariance, the extracted mass differences between various diquark channels remain inherently contaminated by the interaction energy between the static quark and the diquark. In the third category, charmed baryons (such as the Λ_c and Σ_c) are treated as charm quark–diquark systems, and the extended HAL QCD potential method is applied to study the system's dynamics [9–11]. Within this framework, the interaction potential between the charm quark and the diquark can be successfully isolated from the total binding energy, allowing the diquark mass to be extracted. However, this requires pre-determining the charm quark mass from charmonium spectroscopy, which introduces systematic ambiguities and uncertainties into the final diquark mass.

In this study, we combine the advantages of these strategies by neutralizing the color charge of the diquark with a static quark with infinite mass and applying the extended HAL QCD method to extract the diquark mass and the quark–diquark potential. By adopting this approach, we can eliminate the systematic ambiguities associated with a finite charm quark mass while successfully isolating the static quark–diquark interaction energy from the diquark mass. In this article, we present our preliminary results for a baryonic system composed of a static heavy quark and a scalar ($J^P = 0^+$) diquark.

2. Extended HALQCD potential method

In this study, the angular momentum of our baryonic states can essentially be specified by the orbital angular momentum, L of the diquark relative to the static quark because of two reasons: First reason is that this study only covers the scalar diquark with $J^\pi = 0^+$. Second reason is that the spin of the static quark is completely decoupled and excluded from the rest of the baryonic system. This is because the static quark

corresponds to the heavy quark limit of the charm quark (Heavy Quark Spin Symmetry). Hence, our baryonic state can be denoted as $|B(L)\rangle$, where L is the orbital angular momentum between the diquark and the static quark.

We now define the equal-time Nambu-Bethe-Salpeter (NBS) wavefunction for our systems, this system consists of a static quark and a scalar diquark:

$$\psi_L(\mathbf{r}) \equiv \langle 0|D_c(\mathbf{x})Q_c(\mathbf{y})|B(L)\rangle, \quad r \equiv x - y,$$

where $Q_c(x)$ is the static quark field with color index c. $D_c(x)$ is the composite scalar diquark field defined as

$$D_c(x) \equiv \epsilon_{abc} u_a^T(x) C\gamma_5 d_b(x),$$

with $C \equiv i\gamma^2\gamma^0$ being the charge conjugation matrix.

Next, we demand this NBS wavefunction to satisfy the following Schrodinger equation:

$$\left(-\frac{\nabla^2}{2m_D} + \hat{V}\right)\psi_L(\mathbf{r}) = (\varepsilon_L - m_D),$$

where ϵ_L denotes the energy of the quark-diquark system and m_D denotes the diquark mass. The NBS wavefunction is extracted from the quark–diquark four-point correlator. For positive time separations $t > 0$, our quark-diquark four-point correlator is written as

$$C(\mathbf{r}, t; t_{\text{src}})$$
$$\equiv \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{\Delta}} \langle 0|D_c(\mathbf{r}+\mathbf{\Delta}, t)Q_c(\mathbf{\Delta}, t) \cdot \mathcal{J}^\dagger(t_{\text{src}})|0\rangle$$
$$= \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{\Delta}}\sum_{n} \langle 0|D_c(\mathbf{r}+\mathbf{\Delta}, t)Q_c(\mathbf{\Delta}, t)|n\rangle$$
$$\cdot \langle n|\mathcal{J}^\dagger(t_{\text{src}})|0\rangle \cdot e^{-E_n(t-t_{\text{src}})}$$

where V is the spatial volume, and the sum over $\mathbf{\Delta}$ projects to zero spatial momentum. The states $|n\rangle$ and energies E_n denote the n-th eigenstate and eigenenergy of the QCD Hamiltonian, respectively. $\mathcal{J}(t_{src})$ denotes the source operator. We will examine the wall and the exponentially smeared sources with several smearing size to check the ground-state saturation in this report.

In the large-t limit, the four-point correlator is dominated by the ground state, and the S-wave NBS wavefunction $\psi_s(\mathbf{r})$ is obtained as

$$\psi_S(\mathbf{r}) \propto C(\mathbf{r}, t; t_{\text{src}}) \quad \text{for large } t$$

The extracted NBS wavefunction corresponds to the S-wave since we are using the wall and exponentially smeared source.

Next, we define

$$\tilde{V}_0(\mathbf{r}) \equiv \frac{\nabla^2\psi_S(\mathbf{r})}{\psi_S(\mathbf{r})},$$

which we refer to as the prepotential. Using the Schrödinger equation, the prepotential is related to the potential as

$$\tilde{V}_0(\mathbf{r}) = 2m_D[V_0(\mathbf{r}) + m_D - \varepsilon_S],$$

where $\varepsilon_S \equiv \varepsilon_{L=S}$. Similarly, for the P-wave sector, the Schrödinger equation can be written as

$$(-\nabla^2 + \tilde{V}_0(r))\psi_P(\mathbf{r}) = \Delta\tilde{E}\,\psi_P(\mathbf{r}),$$

where $\varepsilon_P \equiv \varepsilon_{L=P}$ and $\Delta\tilde{E} \equiv 2m_D(\varepsilon_P - \varepsilon_S)$. We will refer to this equation as "pre-Schrödinger equation".

We determine the diquark mass m_D by requiring consistency between the baryonic masses obtained from the two-point correlators and those from the Schrödinger equation. This is done by solving the "pre-Schrödinger" equation using the prepotential $\tilde{V}_0(\mathbf{r})$ in the P-wave sector to extract $\Delta\tilde{E}$. Then, m_D is determined by

$$m_D = \frac{\Delta\tilde{E}}{2(\varepsilon_P - \varepsilon_S)},$$

using the values of ε_S and ε_P extracted from two-point correlators. The quark–diquark potential is reconstructed as

$$V_0(r) = \frac{1}{2m_D}\tilde{V}_0(r) - m_D + \varepsilon_S.$$

after obtaining m_D.

3. Numerical Result

3.1 Lattice Setup

Our lattice QCD calculations are performed using the

(2+1) - flavor ($ud + s$) gauge configurations generated by the PACS-CS Collaboration [12]. The ensemble consists of 399 configurations on a lattice of size, $L^3 \times T = 32^3 \times 64$, generated with the Iwasaki gauge action at $\beta = \frac{6}{g^2} = 1.9$ and the nonperturbatively *O(a)*-improved Wilson quark action at $(\kappa_{ud}, \kappa_s) = (0.13700, 0.13640)$ and $C_{SW} = 1.715$. This setup leads to a lattice spacing of a $\simeq$ 0.0907(13) fm ($a^{-1} \approx$ 2.176(31) GeV), a spatial lattice size of $La = 32a \approx$ 2.902 fm, a pion mass of $m_\pi \simeq$ 700 MeV, and a nucleon mass of $m_N \simeq 1.583(5)$ GeV. Coulomb gauge fixing is applied to fix the gauge. The wall source and exponentially smeared source with smearing function, $f(\boldsymbol{r}) = \exp(-\frac{|\boldsymbol{r}|}{b})$ with various smearing radii, b is employed. To reduce statistical fluctuations, hypercubic (HYP) smearing with HYP1 parameter set [13] is applied to the gauge links entering the static-quark propagators (Wilson lines). Various number of source points is employed to improve the statistical precision which will be discussed later in this article. Further noise reduction is achieved by averaging over the cubic rotational symmetry of the lattice as well as by utilizing time reversal and charge-conjugation symmetries. Statistical uncertainties are estimated using the jackknife method with a bin size of 15 configurations.

3.2 Two-point correlators and effective masses

We first calculate the effective masses for various baryonic systems with different diquark by performing a naïve exponential fit on the two-point correlator,

$$G(t) = < J_\Gamma(\vec{x}, t) J_\Gamma^\dagger(\vec{x}, 0) >$$

where $J_\Gamma(x) \equiv \epsilon_{abc} \left(\tilde{u}_a^T(x) C\Gamma \tilde{d}_b(x) \right) \tilde{Q} c(x)$ denotes the interpolating operator for the baryonic state where u, d, and $\tilde{Q}$ denote the spatially smeared quark fields, C denotes the charge conjugation matrix and *a,b,c* indicates the color indices. At the source time slice ($t = 0$), these smeared fields are constructed by convoluting the local quark fields $q \in \{u, d, Q\}$ with a function $f(x)$, thus we can write $\tilde{q}(\mathrm{t}) = \sum_{\mathbf{x}} q(\mathbf{x}, t_0) \cdot f(\mathbf{x})$. We apply $f(\mathbf{x}) = 1$ (Wall) and $f(\mathbf{x}) = exp(-|\mathbf{x}|/a)$ $(SRC01)$ in this report. The static quark propagator is replaced by a temporal Wilson line.

The effective mass is defined as follows:

$$m_{C\Gamma}(t) \equiv a^{-1} \log[G_\Gamma(t) / G_\Gamma(t+1)]$$

where a is the lattice spacing. In this report, we focus only on 2 baryonic states with $J^\pi = 0^+, 1^-$. They are constructed by choosing $\Gamma = \gamma_5$ and $\gamma_5\gamma_i$ respectively. These states are interpreted as the 0^+ diquark in *S*-wave and *P*-wave respectively. They will be used in the extended HALQCD method to obtain the scalar diquark mass later.

The diquark mass is calculated from this equation, $m_D = \frac{\Delta\tilde{E}}{2(\varepsilon_P - \varepsilon_S)}$ *so* it can be easily understood that the diquark mass is sensitive to the value of effective masses for the *P*-wave and *S*-wave states. Hence, identifying a stable plateau in the effective mass plot is crucial to extract an accurate ground-state effective mass. To ensure optimal overlap with the desired ground state, we employ and compare several different source operators. The results are shown in Figure 1.

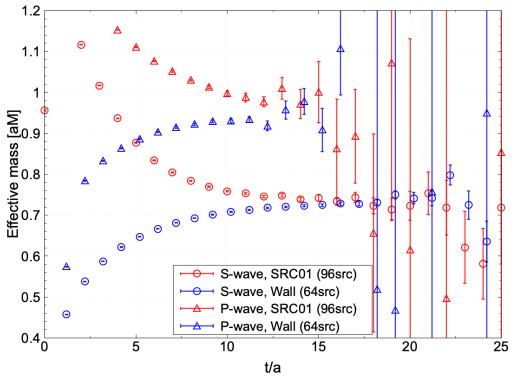


Figure 1 : Effective mass plot of of *S*-wave (circle) and *P*-wave (triangle) against t/a in lattice unit. The "Wall" denotes wall-source and "SRC01" denotes exponentially-smeared source with $f(\boldsymbol{r}) = \exp(-\frac{|\boldsymbol{r}|}{a})$. 96src and 64src is the number of source points used.

As seen in Figure 1, ground-state saturation is not fully

extracted in the P-wave sector (triangle), as overlapping plateaus are not achieved yet. By the definition of our effective masses mentioned earlier, the effective mass plateaus extracted from different source operators should overlap as shown in the S-wave sector (circle); an insufficient convergence among these operators indicates that contamination from excited states is not negligible yet. The choice of source operator is critical in this context, as different operators exhibit different ground-state convergence speeds. We also demonstrated the improvement in the stability of the effective mass plateau with an increasing number of source points, as shown in Figure 2. Specifically, a significantly more stable plateau can be extracted when employing 96 source points.

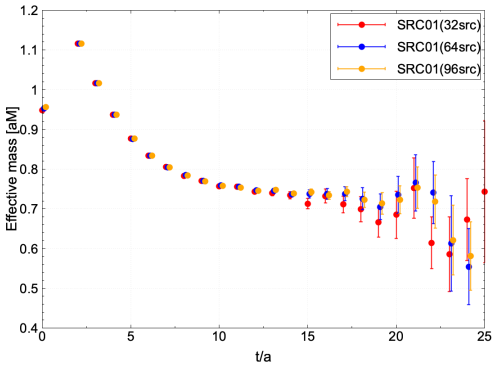


Figure 2：Effective mass plot of S-wave against t/a in lattice unit. A more stable plateau can be obtained when the number of source points increased.

The present results were obtained using the computational resources allocated by D3 Center, Cybermedia Center, The University of Osaka last year. To refine these findings and improve our statistical precision, future work will be carried out by increasing the number of source points or implementing a wider variety of source operators. Specifically, we will implement multiple exponentially smeared sources with different smearing radii to select the operator that optimizes ground-state saturation.

4. Conclusion

In this work, we presented a lattice QCD study of baryonic systems composed of a diquark and a static quark, aiming to determine both the diquark mass and the quark–diquark potential. We investigated the systematic relationship between effective mass convergence and the choice of source operators. Our current findings indicate that enhancing statistical precision and optimizing ground-state saturation are crucial next steps. Securing reliable effective mass plateau is essential before proceeding to the next phase of this project: extracting the diquark mass and the quark–diquark potential using the extended HAL QCD method.

5. Acknowledgement

This work was achieved through the use of Supercomputer System SQUID at the D3 Center, The University of Osaka under Project for Nurturing Student Competing with the World.

References

[1] R. L. Jaffe, Nucl. Phys. B Proc. Suppl.142 (2005)
[2] M. Hess *et al*, Phys. Rev. D 58 (1997) 111502.
[3] R. Babich *et al*, Phys. Rev. D 76 (2007) 074021.
[4] Y. Bi *et al*, Chin. Phys. C 40 (2016) 073106.
[5] C. Alexandrou *et al*, Phys. Rev. Lett. 97 (2006) 222002.
[6] A. Francis *et al*, JHEP 05 (2022) 062.
[7] K. Orginos e*t al*, PoS LAT2005, 2006, p. 054.
[8] J. Green *et al*, PoS LATTICE2010, 2010, p. 140.
[9] K. Watanabe, N. Ishii, Few Body Syst. 23(3) (2021) 45.
[10] K. Watanabe, Phys. Rev. D 105 (2022) 074510.
[11] S. Nishioka, N. Ishii, PoS (LATTICE2024) 305 (2025).
[12] S. Aoki *et al*, Phys. Rev. D 79 (2009) 034503.
[13] A. Hasenfratz, F. Knechtli, Phys. Rev. D 64 (3) (2001).

弾性波速度付近の高速滑り速度での摩擦則

岩下 航
産業技術総合研究所 製造基盤技術研究部門

1. はじめに

摩擦は、靴と地面に代表される日常生活から、機械システム、さらには地震現象に至るまで幅広く関係する基礎的物理現象であり、その予測・制御は工学および自然科学において重要な課題である。特にゴムやゲルなどの柔らかい粘弾性材料における摩擦は、タイヤや靴、人工関節などの性能に直結するため、その力学的理解と設計指針の確立が求められている。

固体摩擦の基本法則として、摩擦係数が荷重や接触面積、速度に依存しないとするアモントン-クーロン則が知られている。しかし、これは応力場が一様であるという仮定のもとで成り立つ経験則であり、粘弾性体のように変形を伴う系では必ずしも成立しない [1]。特に有限滑り速度下では、粘弾性変形に起因するヒステリシス摩擦が支配的となり、摩擦係数は速度に顕著に依存することが知られている [2]。

近年、柔らかい材料において滑り速度が弾性波速度（材料中を変形が伝播する速度）に近づく領域で、摩擦抵抗が急激に変化する現象が報告されている [3]。このような高速滑り条件は、航空機の着陸時のタイヤと地面の接触など実際の工学系においても出現し得るが、その力学的機構は十分に解明されていない。

本研究では、大規模並列数値計算を用いて、弾性波速度付近の高速滑りにおける粘弾性体の摩擦挙動を解析し、非一様変形と摩擦抵抗の関係を定量的に明らかにすることを目的とする。圧子と粘弾性基板の接触系を対象とし、粘性係数および滑り速度を系統的に変化させ、その結果として生じる摩擦抵抗および変形状態の変化を評価した。

2. 設定と手法

本研究では有限要素法（FEM）による直接数値計算を用いて、粘弾性体の高速滑り問題を解析した。図 1a に示すように、対象系は剛体圧子と粘弾性基板からなる接触問題であり、基板は 2 次元のケルビン–フォークト型粘弾性体（弾性応答と粘性応答を並列に有するモデル）としてモデル化した。

計算領域は周期境界条件を課した連続体とし、周期境界の影響が無視できるよう領域長Lを十分に大きく設定する（$L = 1{,}000D$）。基板の厚さはHとし、接触幅よりも大きく設定する（$H = 0.5D$）。基板の底面は一定速度Vで並進駆動する。直径Dの圧子には一定荷重Wを与え、基板との接触面で

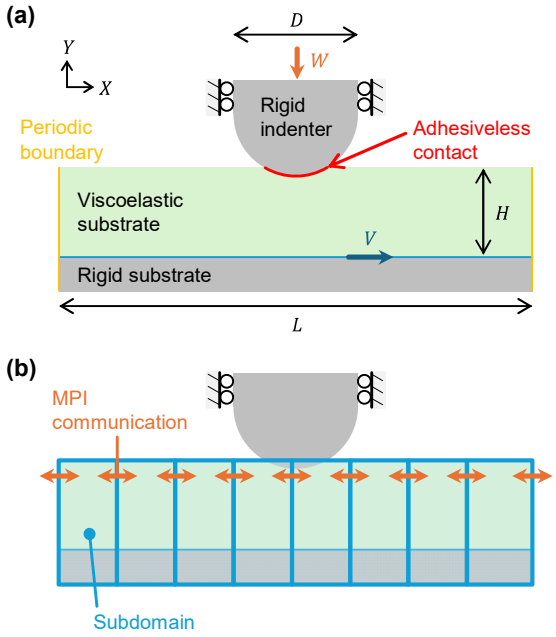


図 1：(a)速度Vで移動する粘弾性基板と剛体圧子の概略図。(b) MPI 並列における空間分割およびサブドメイン間通信の概略図。

は、圧子表面に対して法線方向の力のみが作用するものとし、界面の凝着摩擦は考慮しない。したがって、本研究で現れる摩擦力はヒステリシス摩擦に起因するものである。摩擦係数μは圧子に作用するX方向の力と荷重Wの比として定義する。

弾性波速度は基板の材料定数（ヤング率E、ポアソン比ν、密度ρ）により決定される。本研究では、基板の粘性係数ηおよび滑り速度Vを系統的に変化させ、弾性波速度付近の領域を重点的に解析した。以下では、チルダ (˜) 付きの物理量はD、E、ρを基準として無次元化された量を表す。

計算規模は最大で約 1,300 万節点、約 10 億タイムステップに及び、時間発展は陽解法により解いた。このような大規模問題を扱うため、MPI 並列化を実装し、図 1b に示すように空間を分割して計算を実施した。In-house の Fortran コードを Intel コンパイラでコンパイルし、並列数約 8,000 で計算を行い、実行時間は約 70 時間であった。

また、計算効率向上のため、1 つのシミュレーション内で複数の速度条件を取得するアルゴリズムを導入し、加速過程を共有することで計算資源の有効利用を図った。

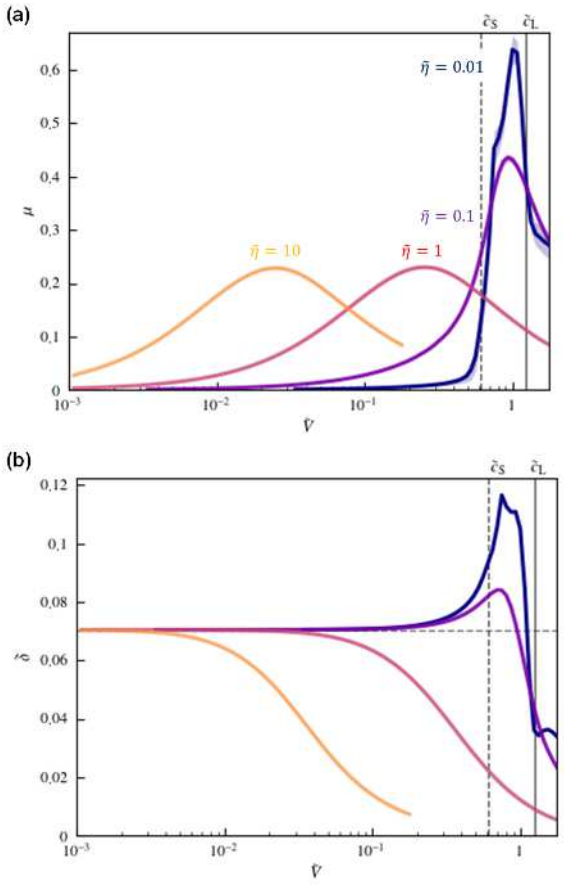


図 2:各粘性係数$\tilde{\eta}$における(a)摩擦係数μおよび(b)貫入量$\tilde{\delta}$の滑り速度$\tilde{V}$依存性。縦の点線と実線はそれぞれ横波速度$\tilde{c}_S$と縦波速度$\tilde{c}_L$を表す。(b)横の点線は静止時の貫入量を表す。

3. 結果と考察

図 2a に各粘性係数$\tilde{\eta}$での摩擦係数μの滑り速度$\tilde{V}$依存性を示す。いずれの条件においてもある速度でμがピークを持つが、その挙動は粘性係数$\tilde{\eta}$によって大きく異なっていることが分かる。高粘性領域（$\tilde{\eta} \geq 1$）では、滑り速度$\tilde{V}$に対して摩擦係数μは滑らかに増減し、μのピーク値はほぼ一定であるが、ピーク位置は$\tilde{\eta}$の低下とともに高速側にシフトする。一方、低粘性領域（$\tilde{\eta} \leq 0.1$）では、横波速度付近の滑り速度（$\tilde{V} \approx \tilde{c}_S$）で摩擦係数$\mu$が急激に増加し、縦波速度手前の滑り速度（$\tilde{V} \approx \tilde{c}_L$）で急激に減少する。ピーク位置は$\tilde{V} \approx \tilde{c}_L$でほぼ一定となるが、ピーク値は$\tilde{\eta}$の低下とともに増加する。

図 2b に各粘性係数$\tilde{\eta}$での圧子の貫入量$\tilde{\delta}$の$\tilde{V}$依存性を示す。ここで貫入量とは、圧子の基板への押し込み深さを表し、その値が大きいほど圧子は下方、小さいほど上方に位置する。貫入量$\tilde{\delta}$の挙動も粘性係数$\tilde{\eta}$によって大きく依存する。高粘性領域（$\tilde{\eta} \geq 1$）では、ある速度以上で$\tilde{\delta}$が滑らかに減少しており、その減少が開始する位置は$\tilde{\eta}$の低下に伴い高速側にシフトする。一方、低粘性領域（$\tilde{\eta} \leq 0.1$）では、横波速度付近の滑り速度（$\tilde{V} \approx \tilde{c}_S$）で$\tilde{\delta}$が増加し、横波速度と縦波速度の間の滑り速度（$\tilde{c}_S < \tilde{V} < \tilde{c}_L$）で急激に減少する。

これらの摩擦係数μと貫入量$\tilde{\delta}$の挙動は、変形状態の解析により理解できる。図 3 に変形状態のスナップショットを示す。図 3a に示すように、準静的な滑り速度の場合、圧子前後で対称な応力分布となるため、摩擦係数μは小さい。高粘性条件（$\tilde{\eta} \geq 1$）では、滑り速度$\tilde{V}$の増加に伴い粘性応

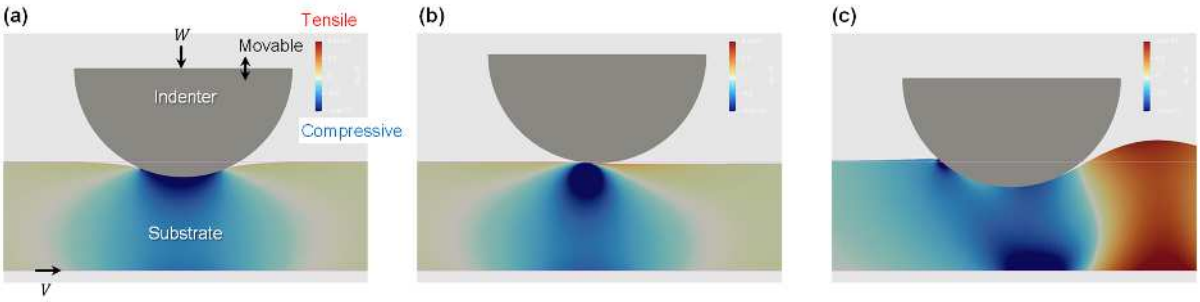


図 3：(a)準静的な滑り速度、(b) $\tilde{\eta} = 10$、$\tilde{V} = 0.18$、(c) $\tilde{\eta} = 0.01$、$\tilde{V} = 0.75$における変形状態のスナップショット。色は応力テンソルのトレースを表し、赤が引張、青が圧縮を示す。

力の非対称性が顕著になることで摩擦係数μが増加する。さらに滑り速度$\tilde{V}$が増加し粘性力が増大すると、図 3b に示すように、圧子が押し上げられ、変形が減少するため摩擦係数μは減少する。

低粘性条件（$\tilde{\eta} \leq 0.1$）では、圧子を押し上げるだけの粘性力に達する前に、滑り速度$\tilde{V}$が弾性波速度付近に到達する。弾性波速度に近づくと、図 3c に示すように、 接触後端付近では弾性回復が追いつかず、接触面での弾性応力が低下するため、圧子を支持する力が弱まり、圧子の貫入量δは増加する。さらに、変形の波が前方へ伝播する前に圧子と粘弾性基板が接触するため、接触前端は前進する。これらの効果によって、弾性波速度付近で摩擦係数μが急激に増加する。さらに滑り速度$\tilde{V}$が増加すると、接触前端付近で表面の変形が尖鋭化する特異な変形が生じ、応力集中によって圧子が急激に押し上げられる。その結果、貫入量δが急減し、摩擦係数μも急激に低下する。

以上より、弾性波速度の影響が顕著に現れる条件とその発現機構は、次のように整理できる。弾性波速度の影響が顕著に現れる条件は、粘性力によって圧子が押し上げられるより先に滑り速度が弾性波速度に到達する低粘性条件である。低粘性条件で弾性波速度に到達したとき、接触後端での弾性応力の低下により圧子の貫入量が増加するとともに、接触前端の前進により、応力分布の非対称性が顕著となり、摩擦係数が急激に増加する。さらに滑り速度が増加すると、接触前端付近の応力集中により圧子が急激に押し上げられ、貫入量が急減し、これに伴って摩擦係数も急激に低下する。一方、弾性波速度に到達する前に圧子が押し上げられる高粘性条件では、弾性波速度付近において既に貫入量がゼロに近く、接触状態の変化が限定されるため、上述のような弾性波速度の影響は限定的となる。

4. おわりに

本研究では、大規模並列 FEM 計算により、弾性波速度付近の高速滑りにおける粘弾性体の摩擦挙動を解析した。高粘性条件では、滑り速度に対して摩擦係数が滑らかに変化する一方、低粘性条件では、弾性波速度付近で特異な変形が生じ、摩擦係数が急激に変化することを示した。特に低粘性条件においては、圧子の貫入量の増加、接触後端での応力低下、および接触前端での応力集中といった現象が同時に生じ、これらが組み合わさることで弾性波速度付近における摩擦係数の急激な変化が生じることが明らかとなった。

本成果は、高速摩擦現象の理解に新たな視点を与えるとともに、タイヤなどの設計指針の構築に寄与する可能性を持つ。今後は、3 次元形状効果や張力場の影響を考慮した解析への拡張、および実験との定量比較を通じて、より実用的な摩擦制御指針の確立を目指す。

謝辞

本内容は島根大学の大槻道夫教授との共同研究によって得られた成果である。

参考文献

(1) W. Iwashita, H. Matsukawa & M. Otsuki, Sci. Rep., **13**, 2511, (2023).

(2) K. Nakano & M. Kono, Front. Mech. Eng., **6**, 38, (2020).

(3) T. Yashiki, et al., Phys. Rev. Lett., **124**, 238001, (2020).

(4) 岩下航, 大槻道夫, トライボロジー会議 2026 春 東京, F12, (2026).

Trans -ビス(イミノアゾレート)白金（II）錯体の励起状態の分子構造とりん光性特性制御

川守田 創一郎

大阪大学 大学院基礎工学研究科

1. はじめに

遷移金属錯体は、重原子効果と金属 d 軌道・配位子軌道の相互作用により多彩なりん光性を示すため、有機 EL、環境応答型センサー、イメージング材料など幅広い分野への応用が期待されている。これらの材料のりん光性を高効率化するには、励起状態における分子骨格の剛直性が重要とされる。励起状態の構造が柔軟な白金 (II) 錯体は発光において不利であり、励起状態で大きな構造変形が生じ、三重項励起状態 T_1 と基底状態 S_0 の最低エネルギー交差点（MECP）へ到達しやすくなることが、室温での発光効率を低下させる主要因と考えられている。この背景の元、申請者らは、構造柔軟性の高いイミン部位を有し、一般には発光に不利と考えられるイミノメチルアゾレート白金 (II) 錯体を対象として、分子構造の拘束によって失活経路への到達を妨げる設計法を継続的に検討してきた[1–5]。その過程で、これらの錯体は発光性に乏しいとの予想に反し、配位子構造や会合構造を適切に制御することで、一部の錯体が特異的に強い発光を示すことを実験的に見いだしている。

本研究では、この一連の知見を二つの段階に分けて発展させた。第一の段階では、同一の *trans*-ビス(イミノメチルアゾレート)白金 (II) 骨格を持ちながらアゾール環の種類と窒素位置のみが異なる錯体イミノピラゾレート (**1**)、2-イミノイミダゾレート (**2**)、5-イミノイミダゾレート (**3**)、イミノピロレート (**4**)、を比較し、どのアゾール骨格が強い室温りん光を与えるかを明らかにした。第二の段階では、そこで最も高い発光性を示したピラゾレート骨格に着目し、配位平面の湾曲と分子内 C-H···N 相互作用がりん光効率をどのように制御するかを検討した。

いずれの段階においても、放射速度定数 k_r を支配するスピン軌道相互作用と遷移確率、および非放射速度定数 k_{nr} を支配する T_1/S_0 間 MECP への到達障壁を、実験と量子化学計算の両面から個別に評価した。これにより、骨格選択と置換基効果の両面から発光制御の指針を得ることを目的とした。

2. 研究方法

錯体 **1**(C_5H_{11})-**4**(C_5H_{11}) について、脱気 2-メチルテトラヒドロフラン（2-MeTHF）溶液中で 298 K および 77 K における吸収・発光スペクトル、発光量子収率Φおよび発光寿命 τ を測定した。Φと τから、$k_r = \Phi/\tau$ および $k_{nr} = (1-\Phi)/\tau$ をそれぞれ算出した。298 K と 77 K の結果を比較することで、非放射失活の温度依存性を評価した。

量子化学計算は大阪大学のスーパーコンピュータ SQUID の cpu ノードを用い、量子化学計算ソフトである ORCA を用いて実施した。アゾール骨格を比較した錯体 **1**(C_5H_{11}) - **4**(C_5H_{11}) については B3LYP/def2-TZVP レベルで S_0、T_1 および S_0/T_1 間の MECP を最適化し、ピラゾレート骨格内の置換基効果を検討した錯体 **1**(vC_{10})、**1**(vC_{12})、**1**(C_5H_{11})、**1**(CH_2Ph) および **1**(CH_2CF_3) については長距離補正を含む CAM-B3LYP/def2-TZVP レベルで同様の最適化と MECP 探索を行った。いずれも RIJCOSX 近似と def2/J 補助基底を併用し、ZORA による相対論的 TDDFT 計算および RI-SOMF(1X) 法により励起エネルギー、振動子強度およびスピン軌道相互作用を求めた。分子内 C-H···N 相互作用については、NBO 解析、NCI 解析を併用して評価した。

3. アゾール骨格の違いによる発光性の比較

まず、同一の *trans*-ビス(イミノメチルアゾレート)白金 (II) 骨格を持ち、アゾール環の種類と窒素位置のみが異なる錯体 **1**(C_5H_{11})-**4**(C_5H_{11})（図 1）を比較し、アゾール骨格の違いが室温りん光に与える影響を検討した。

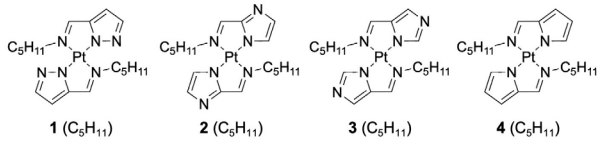


図 1　検討したピラゾレート、イミダゾレートおよびピロレート白金 (II) 錯体 **1**(C_5H_{11})-**4**(C_5H_{11})。

3.1. アゾール骨格に依存する発光性

298 K ではピラゾレート錯体 **1**(C_5H_{11}) が量子収率 0.42 の強い黄色りん光を示し、2-イミノメチルイミダゾレート錯体 **2**(C_5H_{11}) は 0.13 の中程度の発光を示した。これに対し、5-イミノメチルイミダゾレート錯体 **3**(C_5H_{11}) およびピロレート錯体 **4**(C_5H_{11}) はほぼ非発光であった。ところが 77 K では、全錯体が量子収率 0.60-0.71 というほぼ同水準の強いりん光を示した（図 2）。この顕著な温度依存性は、アゾール骨格による発光性の差が電子的な発光禁制によるものではなく、室温付近で活性化される非放射失活経路の起こりやすさに由来することを強く示唆している。

速度定数を見ると、錯体 **1**(C_5H_{11}) の発光寿命は 4.60 μs であり、k_r=9.14×10^4 s^{-1}、k_{nr}=12.62×10^4 s^{-1} であった。錯体 **2**(C_5H_{11}) では k_r が 3.19×10^4 s^{-1} へ低下し、k_{nr} は 21.4×10^4 s^{-1} へ増加した。錯体 **3**(C_5H_{11}) および **4**(C_5H_{11}) は室温での発光が弱く、速度定数を信頼性よく算出できなかったが、77 K では k_{nr} が 1.03-5.55×10^4 s^{-1} まで全錯体で低下し、強発光化した。すなわち、アゾール骨格の違いは k_r と k_{nr} の両方に影響するものの、室温での発光性を大きく左右しているのは k_{nr} の変化であることが分かる。

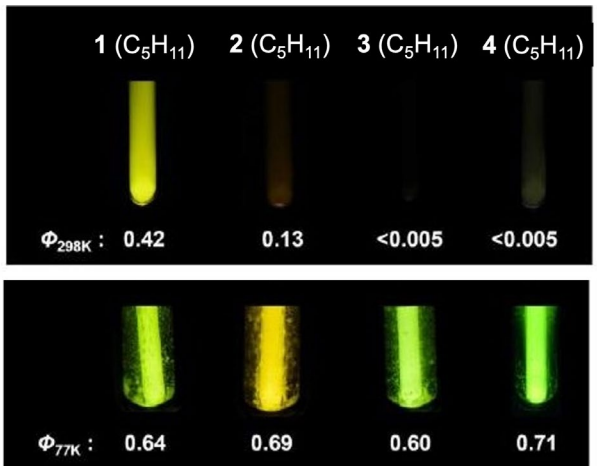


図 2　錯体 **1**(C_5H_{11})-**4**(C_5H_{11}) の 298 K（上）および 77 K（下）における発光と量子収率。

3.2. MECP を経由する非放射失活

S_0 および T_1 の最適化構造はいずれの錯体でも概ね平面四配位構造を保持したのに対し、MECP では全錯体に共通してイミン C=N 部位が N-Pt-N 平面から大きく折れ曲がった構造をとった。すなわち、アゾール環の種類が異なっても、柔軟なイミン部位の面外変形が非放射失活への共通の入口となっていることが構造最適化から確認された。

そこで、室温で観測された k_{nr} の差を構造変形に要するエネルギーの観点から説明するため、数値振動解析により T_1 極小点と MECP の Gibbs 自由エネルギーを求めた（図 3）。T_1-MECP 自由エネルギー障壁 ΔΔG は、錯体 **1**(C_5H_{11})-**4**(C_5H_{11}) についてそれぞれ 20.2、17.0、18.0、16.4 kcal mol^{-1} であり、k_r が最も大きく k_{nr} が最も小さい錯体 **1**(C_5H_{11}) が最大の障壁を持ち、逆にほぼ非発光の錯体 **4**(C_5H_{11}) が最小の障壁を持った。絶対値や錯体間の細かな差を完全には再現できないものの、錯体 **1**(C_5H_{11}) で *k*nr が抑制されるという全体傾向は実験結果と整合していた。錯体 **1**(C5H11) の強い室温りん光は、大きな *k*r と高いΔΔG の双方に由来すると考えられる。

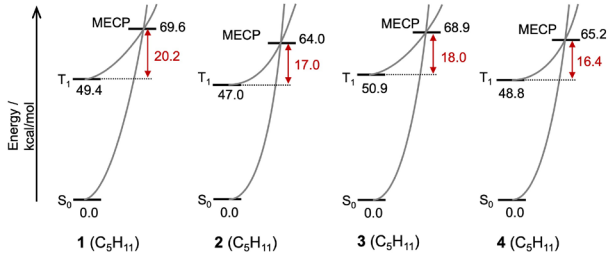


図 3　錯体 **1**(C_5H_{11})-**4**(C_5H_{11}) の S_0、T_1 および MECP の相対自由エネルギー。赤矢印はΔΔG(T_1-MECP) を示す。

4. ピラゾレート骨格内での置換基による連続的な発光制御

3 章の結果から、ピラゾレート骨格を持つ錯体 **1**(C_5H_{11}) が四つの中で最も優れた室温りん光を示すことが明らかになった。そこで次に、このピラゾレート骨格の中でさらに発光性を改善できるかを検討するため、イミン窒素上の置換基のみを系統的に変化させた trans-ビス(イミノメチルピラゾレート)白金 (II) 錯体 **1**(vC_{10})、**1**(vC_{12})、**1**(C_5H_{11})、**1**(CH_2Ph) お

および **1**(CH_2CF_3) と、分子内水素結合を形成できないピロレート類縁体 **4**(vC_{10})、**4**(vC_{12})、**4**(C_5H_{11})、**4**(CH_2Ph) および **4**(CH_2CF_3) を合成し、比較した（図 4）。

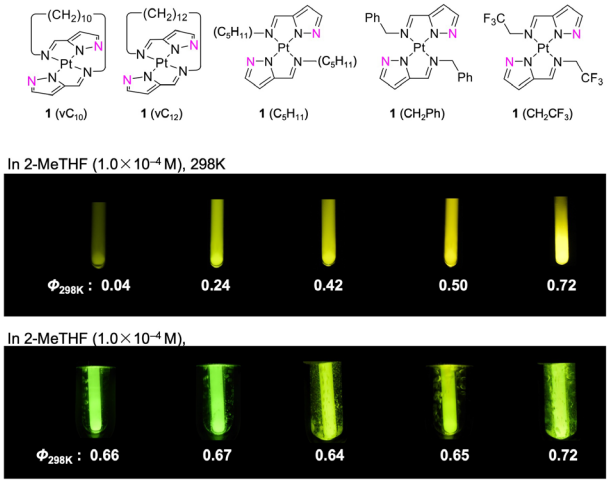


図 4　ピラゾレート錯体 **1**(vC_{10})、**1**(vC_{12})、**1**(C_5H_{11})、**1**(CH_2Ph) および **1**(CH_2CF_3) の分子構造と、2-MeTHF 中における 298 K および 77 K での発光。

4.1. 置換基によるりん光効率の制御

365 nm 光照射下において、ピラゾレート錯体 **1**(vC_{10})、**1**(vC_{12})、**1**(C_5H_{11})、**1**(CH_2Ph) および **1**(CH_2CF_3) は室温で黄色りん光を示した。一方、対応するピロレート錯体 **4**(vC_{10})、**4**(vC_{12})、**4**(C_5H_{11})、**4**(CH_2Ph) および **4**(CH_2CF_3) は同一条件でほぼ非発光であった。これらピラゾレート錯体の発光極大は 532-542 nm であり、発光量子収率は **1**(vC_{10}) の 0.04 から **1**(CH_2CF_3) の 0.72 まで連続的に増加した。すなわち、イミン窒素上の置換基を変えるだけで、量子収率は約 20 倍にまで増強された。

速度定数を比較すると、k_r は **1**(vC_{10}) の 7.31×10^4 s^{-1} から **1**(CH_2CF_3) の 17.33×10^4 s^{-1} へ約 2.4 倍増加した。これに対し、k_{nr} は 114.5×10^4 s^{-1} から 6.7×10^4 s^{-1} へ約 17 分の 1 まで低下した。したがって、この発光増強の主因は非放射失活の大幅な抑制であり、これに放射遷移確率の増加が加わったものと結論した。77 K で錯体間の k_{nr} の差が縮小したことも、熱活性化失活の寄与を支持した。

4.2. 配位平面の湾曲角と分子内水素結合

最適化した S_0 構造から、二つのピラゾール環のなす角∠AB と分子内 C-H···N 距離を抽出した。ポリメチレン鎖で渡環した **1**(vC_{10}) および **1**(vC_{12}) では∠AB がそれぞれ 21.6° および 14.0° となり、配位子骨格が大きく湾曲した。一方、非渡環型の **1**(C_5H_{11})、**1**(CH_2Ph) および **1**(CH_2CF_3) はほぼ平面構造をとった。また、C-H···N 距離は **1**(vC_{10})、**1**(vC_{12}) の約 2.5Å から **1**(CH_2CF_3) の 2.231Å まで短縮しており、置換基により分子内相互作用が段階的に強められることが示された。NBO 解析では、ピラゾール窒素の孤立電子対から C-H 結合の反結合性軌道への電子供与に由来する安定化エネルギーが、**1**(C_5H_{11}) の 1.88kcal mol^{-1} から **1**(CH_2CF_3) の 4.97kcal mol^{-1} へ増加し、NCI 解析および ^1H NMR の化学シフトも同じ傾向を示した。

4.3. MECP 探索による失活機構の解析

各錯体について T_1 構造と S_0/T_1 間の MECP を探索したところ、T_1 構造は S_0 構造と概ね類似しているのに対し、MECP ではイミン炭素および水素が配位平面外へ大きく変形しており、3 章で見た錯体 **1**(C_5H_{11})-**4**(C_5H_{11}) に共通する変形様式と一致した。T_1 極小点から MECP までのエネルギー差 $\Delta\Delta E(T_1\text{-MECP})$ は、**1**(vC_{10})、**1**(vC_{12})、**1**(C_5H_{11})、**1**(CH_2Ph) および **1**(CH_2CF_3) の順に 13.8、16.2、17.3、18.7、19.1 kcal mol^{-1} と系統的に増加し（図 5）、発光量子収率の増加と対応した。最も湾曲した **1**(vC_{10}) は T_1 構造が MECP 構造に近く、小さな変形で交差点へ到達できるのに対し、平面性が高く分子内 C-H···N 相互作用が強い **1**(CH_2CF_3) では、配位平面の変形と分子内相互作用の弱化の双方が必要となるため、障壁が大きく増大したと解釈される。

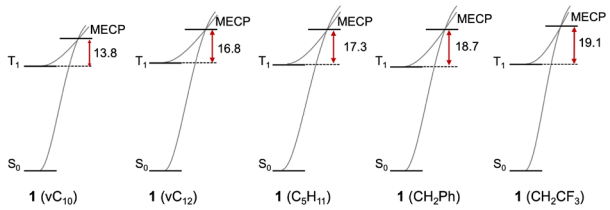


図 5　錯体 **1**(vC_{10})、**1**(vC_{12})、**1**(C_5H_{11})、**1**(CH_2Ph) および **1**(CH_2CF_3) の S_0、T_1 および MECP の相対エネルギー。赤矢印は T_1 極小点から MECP へ到達するための障壁 $\Delta\Delta E(T_1\text{-MECP})$ を示す。

この障壁は、実測値から得た ln(k_{nr}) と良好な直線相関を示した（図 6）。MECP を熱活性化失活過程の遷移状態とみなすと、k_{nr}=A exp(−Ea/RT) で表される Arrhenius 型の関係が期待され、計算で得た ΔE(T_1-MECP) と実測 k_{nr} の対応は、室温での非放射失活が主として T_1 から MECP への熱的到達によって進行することを直接支持する結果である。図 6 に示すように、湾曲角が段階的に変化する **1**(vC_{10})、**1**(vC_{12}) および **1**(C_5H_{11}) では∠AB の増大に伴って T_1 構造が MECP 構造に近づき障壁が低下する一方、平面な **1**(C_5H_{11})、**1**(CH_2Ph) および **1**(CH_2CF_3) では MECP へ近づく際に C-H···N 相互作用を部分的に切断する必要があり、相互作用が強いほど障壁が高くなる。骨格と置換基による発光性の差は、共通の MECP 失活機構として説明できた。

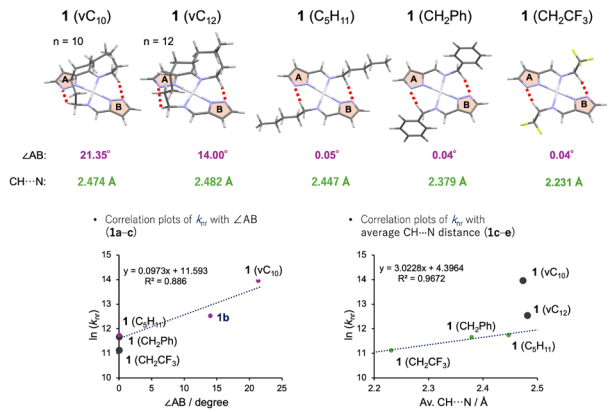


図 6　錯体 **1**(vC_{10})、**1**(vC_{12})、**1**(C_5H_{11})、**1**(CH_2Ph) および **1**(CH_2CF_3) の配位平面の湾曲角∠AB および分子内 C-H···N 距離と、非放射速度定数 k_{nr} との相関。

5. まとめ

本研究では、アゾール骨格の選択とピラゾレート錯体の置換基設計により、柔軟な白金 (II) 錯体の室温りん光を制御できることを示した。量子化学計算から、配位平面の平面性と分子内 C-H···N 相互作用が MECP への到達を妨げ、非放射失活を抑制することが明らかになった。これらの結果は、分子全体を一様に剛直化するのではなく、失活に直結する局所変形を抑えることが有効な設計方針となることを示している。

構造と速度定数の相関を調べると、湾曲角が段階的に変化する **1**(vC_{10})、**1**(vC_{12}) および **1**(C_5H_{11}) の比較では∠AB が大きいほど k_{nr} が増加し、ほぼ平面な **1**(C_5H_{11})、**1**(CH_2Ph) および **1**(CH_2CF_3) の比較では C-H···N 距離が短いほど k_{nr} が低下すると同時に k_r が増加した。すなわち、非放射失活を支配する構造因子は一つではなく、湾曲角が変化する分子群では配位平面の歪みが、平面な分子群では分子内水素結合の強さが支配的となる、二段階の構造制御機構が明らかとなった。

参考文献

[1] S. Huang, N. H.-T. Le, S. Kawamorita, S. Suzuki, T. Naota, *Chem. Lett.* **2025**, *54*, upaf206.

[2] N. H.-T. Le, R. Inoue, S. Kawamorita, N. Komiya, T. Naota, *Inorg. Chem.* **2019**, *58*, 9076-9086.

[3] J. Adachi, T. Mori, R. Inoue, M. Naito, N. H.-T. Le, S. Kawamorita, J. P. Hill, T. Naota, K. Ariga, *Chem. Asian J.* **2020**, *15*, 406-415.

[4] J. Adachi, M. Naito, S. Sugiura, N. H.-T. Le, S. Nishimura, S. Huang, S. Suzuki, S. Kawamorita, N. Komiya, J. P. Hill, K. Ariga, T. Naota, T. Mori, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2022**, *95*, 889-897.

[5] S. Kawamorita, S. Huang, A. Yoshida, S. Suzuki, T. Naota, *Chem. Eur. J.* **2025**, *31*, e01670.

計算化学アプローチによるマイナーアクチノイド分離抽出剤のミドルアップダウン型分子設計

金子 政志
大阪大学 大学院理学研究科

1. はじめに

原子力発電のバックエンド対策および放射性廃棄物の減容化・有害度低減において、高レベル放射性廃液（HLLW）中に含まれる長寿命のマイナーアクチノイド（MA：Am, Cm 等）を分離・回収する技術の確立は極めて重要な課題である。MA 分離プロセスとしては、相分離の迅速性や連続処理への適応性の観点から溶媒抽出法が世界中で広く検討されている。特に、環境負荷低減の観点から、炭素、水素、酸素、窒素のみで構成され、使用後に完全燃焼が可能な CHON 系抽出剤を用いた「SELECT プロセス」[1]は、使用済み燃料からの効率的な Am 分離を目指す次世代技術として期待を集めている。

しかし、HLLW 中には MA の約 10 倍量にのぼる希土類元素（RE）が混在しており[2]、これらは MA と極めて類似した化学的性質（イオン半径や 3 価の酸化状態など）を持つ。そのため、SELECT プロセスにおける NTAamide 系抽出剤では、MA/RE 間の相互認識能（分離係数）が十分に高くなく、相互の選択的分離を阻害することが実用化に向けた大きな課題となっていた[3]。

本研究は、この課題を打破すべく、計算化学アプローチを軸とした独自の分子設計手法を確立することを目的とする。具体的には、合成の容易さや耐放射線性能、高効率な相分離特性といった工学的実用要件から逆算する「トップダウン型分子設計」と、量子化学計算や分子動力学シミュレーションから高い MA/RE 分離係数を理論的に予測・創出する「ボトムアップ型分子設計」を相補的に融合させた、独自の「ミドルアップダウン型分子設計」を提案する。本報告では、工学試験における応用可能性を担保したまま、MA 選択的配位能力を飛躍的に向上させるための新たな計算化学的評価手法の開発、およびそれに基づく新規抽出剤の分子骨格最適化について詳述する。

2. 本プロジェクトにおける計算概要

図 1：本プロジェクトの概念図

本プロジェクトでは、図 1 で示すように、マクロな工学プロセスとミクロな量子化学をつなぐため、計算規模と対象の異なる三段階のマルチスケールシミュレーション手法を構築した。

第一段階では、数十原子規模の DFT-MO 計算に基づき、孤立系定常状態における MA および RE 錯体の平衡構造をモデリングする。アルキル鎖を短鎖化して計算コストを抑えつつ、錯形成エネルギー差から分離性能を予測する。第二段階では、数千原子規模の半経験的 DFT-MD 計算を用い、300 K における RE 錯体の平衡化計算を行う。長鎖アルキル鎖が配位構造へ与える動的影響や溶媒和ダイナミクスを評価する。第三段階では、数十万原子規模の古典 MD 計算により、抽出有機相の密度・粘度といったマクロな物性予測や、金属共存下での会合体形成挙動を解明する。

本年度は、既往の実験値との比較が可能な NTAamide 抽出剤等を対象に、これら各ステップの妥当性評価を進めるとともに、新規抽出剤の分子設計への着手を図った。

3. 計算結果と考察

3.1 Eu-NTAamide 錯体のモデリング

まず、分子構造予測の妥当性を検証するため、

既往の単結晶構造[4,5]を参照し、1 : 1 錯体である $[Eu(NTAamide)(NO_3)_3$ および 1 : 2 錯体である $[Eu(NTAamide)_2]^{3+}$のモデリングを行った（図 2）。

ORCA プログラムを用いた BP86/LCECP レベルでの DFT に基づく構造最適化計算を実施した結果、得られた平衡構造は、中心金属である Eu と配位子間の結合距離において、単結晶構造との比較で 0.1 Å 以下という高い精度で一致し、定量的予測に成功した。

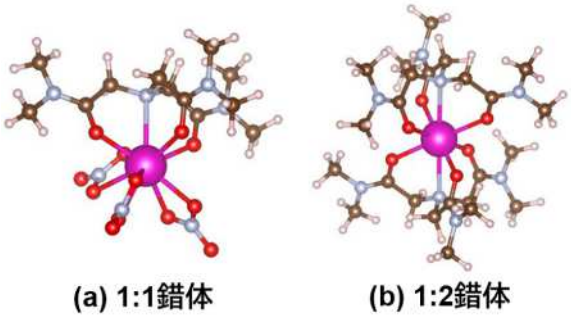


図 2：Eu-NTAamide 錯体の分子構造

3.2 Eu-NTAamide および Eu-DGA 錯体の配位ダイナミクス

NTAamide および DGA のアミド側鎖に長鎖アルキル鎖を導入した抽出剤錯体を対象に、溶媒和ダイナミクスが配位構造に与える影響を評価した。計算には ORCA プログラムに実装されている半経験的密度汎関数（DFT）法である GFNn-xTB 法（n=1, 2）を用い、温度 300 K、時間ステップ 1 fs にて計 25,000 ステップ（25 ps）の分子動力学（MD）計算を実施した。

中心金属 Eu と配位原子間の平均結合距離を算出し、既存の EXAFS（広域 X 線吸収微細構造）測定値と比較したところ（表 1）、GFN2-xTB 法（xTB2）を用いたシミュレーション結果が実験値[6,7]を極めて良く再現することを確認した。これにより、動的環境下における錯体構造予測手法としての妥当性を検証できた。

3.3 古典 MD シミュレーションによる溶液シミュレーション

有機相全体の動的挙動およびマクロな物性を評価するため、アミド側鎖にオクチル基を導入した DGA（TODGA）とドデカン溶媒からなる混合溶液の密度（ρ）および粘度（η）を対象とした古典分子動力学（MD）シミュレーションを実施した。

計算には LAMMPS プログラムを用い、体系全体の原子数は約 4 万個とし、ドデカンに対する TODGA のモル比 x = 0.0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.5, 0.7, 1.0 の計 7 つの溶液系について計算した。分子内の原子電荷には PBE/6-31G* レベルでの静電ポテンシャル（ESP）電荷を割り当て、分子力場には OPLS-LL および GAFF を採用した。

シミュレーションより得られた各物性値の温度依存性を図 3 に示す。密度は実験値[8]に対して系統的に過小評価する傾向が見られたものの、温度変化に対する極めて高い線形性を確認した。また、粘度についても実験値[8]を良好に再現する結果が得られ、本手法が有機相の溶液物性予測に有効であることを実証した。

表 1：xTB-MD 法による Eu-配位子間の結合距離

Methods	$[Eu(HONTA)_2]^{3+}$ (Å)			$[Eu(TODGA)_3]^{3+}$ (Å)		
	$Eu\text{-}N_{ave}$	$Eu\text{-}O_{ave}$	$Eu\text{-}C^{carb}_{ave}$	$Eu\text{-}O_{ave}$	$Eu\text{-}C^{carb}_{ave}$	$Eu\text{-}C^{ether}_{ave}$
xTB1-MD	3.11(16)	2.31(11)	3.38(11)	2.50(23)	3.35(11)	3.66(13)
xTB2-MD	2.82(14)	2.32(11)	3.26(12)	2.44(16)	3.30(11)	3.53(12)
EXAFS	*2.96(2)*[a]	*2.28(1)*[a]	*3.48(1)*[a]	*2.423(5)*[b]	*3.44(2)*[b]	*3.69(1)*[b]

[a]Ref. 6. [b]Ref. 7.

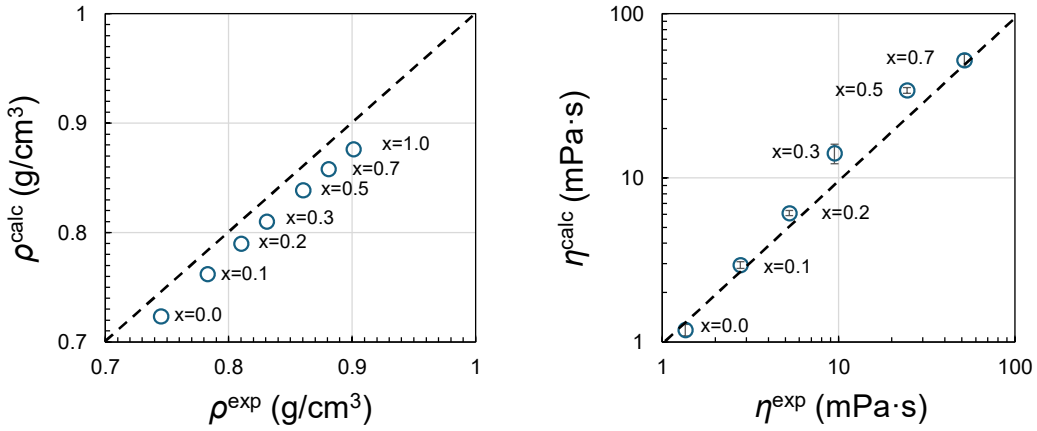


図 3：TODGA-ドデカン溶液の密度（ρ）及び粘度（η）の予測（実験値は Ref. 8 より取得）

3.4　新規抽出剤（1py，2py）の分子設計

本年度は、これまでに構築した計算化学アプローチを基盤とし、NTAamide の分子骨格を参考にした新規抽出剤の設計を展開した。親骨格のアミド基をピリジル基に置換した誘導体（図 4）を考案し、MA/RE 分離係数の理論予測を行った。その結果、アミド基を 1 つ置換した「1py」では 55、2 つ置換した「2py」では 1300 という予測値が得られ、従来の NTAamide（実験値 : 約 8[XX]，予測値 : 10）と比較して数倍から 100 倍にのぼる飛躍的な分離性能の向上が期待できることを見出した。

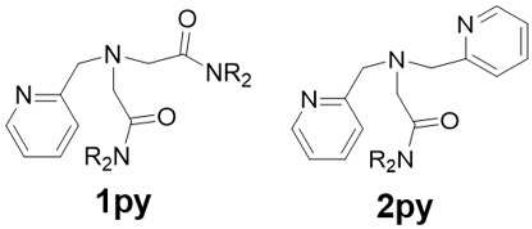


図 4：新規抽出剤の分子構造

今後は、高い分離能が予測されたこれらピリジル置換体を基本骨格とし、実際の SELECT プロセス（硝酸—ドデカン溶媒抽出系）への適用を可能にする最適なアミド側鎖（アルキル鎖等）の修飾条件を模索する。さらに、設計した抽出剤の有機合成を進め、実際の溶媒抽出実験を供することで、本ミドルアップダウン型分子設計手法の有用性を実証していく予定である。

4. おわりに

本研究では、工学的実用要件（トップダウン）と量子化学的知見（ボトムアップ）を相補的に融合させた「ミドルアップダウン型分子設計」の確立を目指し、計算規模の異なるマルチスケールシミュレーション手法の構築と妥当性評価、およびそれに基づく新規抽出剤の設計を行った。

孤立系での高精度な DFT 計算、半経験的分子動力学（xTB-MD）計算による錯体の動的配位構造予測、そして古典 MD 計算による溶液物性予測の各ステップにおいて、既往の結晶構造や EXAFS、粘度等の実験値を極めて良く再現する評価系を実証した。さらに、本手法を適用して設計したピリジル置換型新規抽出剤（1py, 2py）は、従来の NTAamide を遥かに凌駕する高い MA/RE 分離係数を持つ可能性を理論的に見出した。本成果は、実用性と高性能を両立する革新的分離剤開発への極めて有効なアプローチとなるものである。

参考文献

(1) プレスリリース, JAEA, (2019). https://www.jaea.go.jp/02/press2019/p19042401/

(2) JAEA-Review, 2015-002, (2015). doi: 10.11484/jaeri-review-2001-038

(3) H. Suzuki, Y. Ban, *J. Nucl. Sci. Technol.*, **62**, 157-166 (2025).

(4) P. Starynowicz, et al., *Polyhedron*, **22**, 2761-2765 (2003).

(5) Q. Wang, et al., *Dalton Trans.*, **41**, 3431-3438 (2012).

(6) A. Bhattacharrya, et al., *Dalton Trans.*, **46**, 16631-16639 (2017).

(7) M. R. Antonio, et al., *Dalton Trans.*, **44**, 515-521.

(8) J. Ravi, et al., *J. Radioanal. Nucl. Chem.*, **328**, 1301-1312 (2021).

高エネルギー原子核衝突反応の大統計シミュレーションを用いた原子核形状の研究

坂井 あづみ[1]、村瀬 功一[2]
[1]長崎総合科学大学 総合情報学部、[2]大阪大学 大学院理学研究科

1. はじめに

原子核を構成する陽子や中性子といったハドロンは、素粒子であるクォークとグルーオンから構成される。真空ではクォークは単体では存在できず、強い相互作用を媒介するグルーオンによってハドロン内部に閉じ込められている。極限的に高温または高密度の環境では、クォークが閉じ込めから解放されたクォーク・グルーオンプラズマ（QGP）相が現れる。粒子加速器を用いた高エネルギー原子核衝突実験では、光速近くまで加速した原子核を衝突させることで QGP を人工的に生成し、その性質を研究している。この加速器で生成される QGP は、現在、人工的に生成できる最も高温および最も高密度な極限物質であり、QGP の物性の探求は現代物理学の重要な研究テーマの 1 つである。

近年、葉巻型に変形しているとされるキセノン原子核同士（Xe＋Xe）の中心衝突で、鉛原子核同士（Pb＋Pb）の場合より大きな楕円フローv_2（ハドロン方位角分布の 2 次のフーリエ係数）が観測された[1]。これは、原子核の変形に起因すると考えられ、原子核形状制限の新手法として高エネルギー原子核衝突反応に期待が高まり、研究が活発になっている。低エネルギーの原子核衝突では変形核の回転や量子揺らぎの影響の考慮が必要なのに対し、高エネルギー衝突では瞬間的に原子核が衝突するため、原子核の形状が直接寄与する。原子核形状に定量的な制限をかけるため、統合的動的模型を用いたシミュレーションによる理論解析を通して、原子核形状と実験測定量の関係を定量的に評価する必要がある。

先行研究[2]では、ウラン原子核の衝突（U+U）におけるv_2, δp_T, $\langle v_2 \delta p_T \rangle$ の 3 つの測定量(ただし p_T はハドロン横運動量)から原子核形状の評価を行った。本研究では、ベイズ推定を行うことで、原子核変形パラメータを確率的に制限していく。

本研究では、高エネルギー原子核衝突を用いた原子核形状の制限を究極目標として Pb＋Pb（球形）と Xe＋Xe（変形核）衝突の大規模計算を行う。原子核形状の制限の方法として、2 つのアプローチを行う。まず、従来にない高統計のシミュレーションデータを用いて、原子核の変形が個々の測定量に与える影響を定量的に評価し、原子核変形の制限に使える測定量を新しく解析・特定する。さらに、大規模計算を用いることで、測定量から原子核変形パラメータをベイズ推定する枠組みを作る。

2. 統合的動的模型

本研究では、統合的動的模型[3,4]を用いて高エネルギー原子核衝突の数値シミュレーションを行う。衝突反応では、衝突初期の形状、QGP の時空発展、ハドロンの時空発展といった動的な過程が起こり、ハドロンの最後の運動量・角度分布が実験的に測定される。統合的動的模型では、それぞれの過程の模型を組み合わせることで、数値シミュレーションの結果と実験データを比較し、物性パラメータを制限する。現在までに、QGP は粘性の小さい流体的性質を持つことが明らかになり、その時空発展を記述する模型として相対論的流体模型が広く用いられている。測定量の中でも、因子化比r_n [5]の理解には流体の熱揺らぎ（流体ゆらぎ）を取り入れた揺動流体模型が不可欠であり[3,4]、本研究では、従来の粘性流体模型と揺動流体模型を用いて原子核形状の情報を探る解析を行う。

3. 結果

統合的動的模型の中でも、ハドロンの時空発展に用いるハドロン運動学 JAM コードの更新を行った。

3.1　シミュレーションコードの更新

JAM コードには、ハドロンの散乱・共鳴の模型が含まれる。最新のハドロン共鳴のリストへの切り替えを行った。また、流体とハドロン運動学接続の熱力学的一貫性を確保するために、流体の状態方程式の更新を行った。図 1 はこれらの更新前（JAM1）と更新後（JAM2）の粒子数とフローの比較である。

更新前と更新後ともに、実験の粒子数を概ね再現することが出来た。今回の更新により、Fortran から C＋＋に移行し、コードが扱いやすくなった。

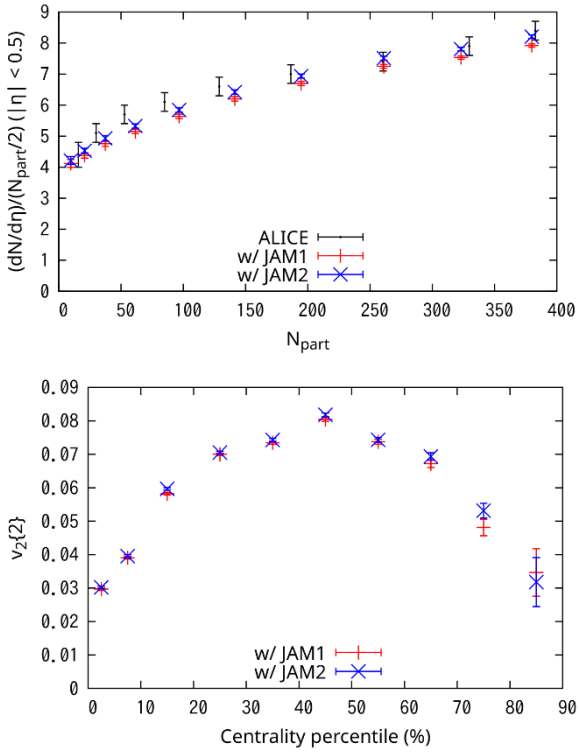


図 1：JAM の更新

3.2　シミュレーションコードの高速化

ハドロン運動学 JAM コードでは、2 粒子間の衝突判定を行う計算コスト大きく、ボトルネックになっていた。従来のコードでは、粒子数 N の 2 乗のオーダーの衝突判定を行っていたが、空間分割により近くの粒子間だけで衝突判定をするように更新した。空間を 15×10×10 に分割したことで、計算時間を37%に短縮することができた。図 2 は空間分割なし(w/o Div)と空間分割あり(w/ Div)での粒子数とフローの比較である。

空間分割により計算結果が影響を受けないことが検証された。

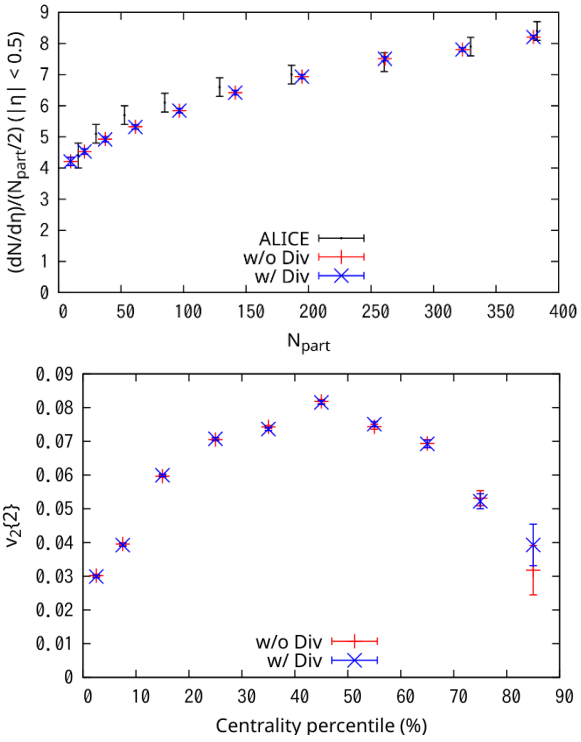


図 2：高速化の検証

3.3　モデルパラメータの再調整

統合的動的模型には、モデルパラメータがあり、測定量を再現するようにパラメータを選定する必要がある。本研究で対象とする鉛（球形）同士の衝突、キセノン（球形ないし変形）同士の衝突について、パラメータの探索を行った。

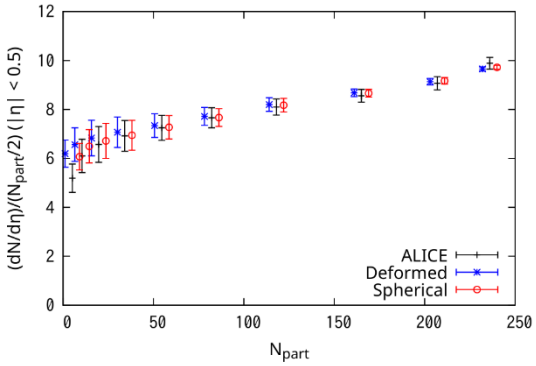


図 3：生成粒子数

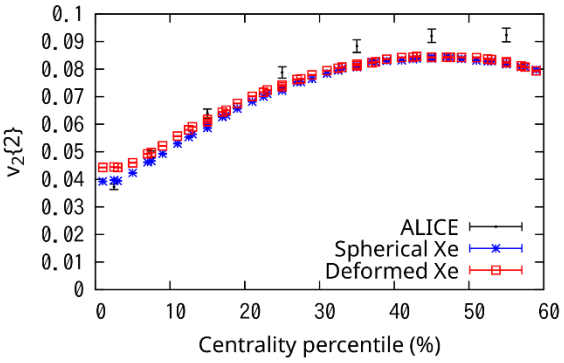


図 4：楕円フロー

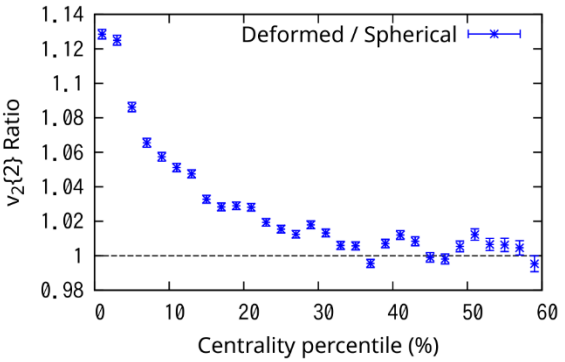


図 5：楕円フローの比（変形核/球形核）

キセノン原子核同士の衝突では 16 のパラメータセット、鉛原子核同士の衝突では 22 のパラメータセットで計算を行うことで、最適なパラメータの選定を完了した。調整したパラメータで、粘性流体模型、流体揺らぎを含むよう同流体模型でのシミュレーションをそれぞれ 2×10^6 衝突事象おこなった。

図 3 はキセノン衝突の変形・球形での粒子数と、実験の粒子数の比較である。事前のパラメータチューニングのもと、数値計算で実験結果の振る舞いを概ね再現できることが確認できた。

図 4 は 2 粒子相関法による楕円フローの、球形のキセノンと変形したキセノンの場合の比較である。今回の大統計を活かして中心度依存性が綺麗に求められていることが分かる。実験の傾向をほぼ再現している。非中心衝突（30%以降）でのずれは原子核形状のパラメータのみを変更した計算のためであり、今後のベイズ推定の解析で合わせる。中心（0–10%）で、変形キセノンにて楕円フローが増大する傾向が見られる。

図 5 では図 4 で見せた楕円フローについて、変形核の場合と球形核の場合の比をとったものである。これは実験での Xe+Xe (変形) と Pb+Pb (球形) の比と定性的に同じ振る舞いをする。今後は Pb+Pb（球形）による解析も進める。

既にこれらの結果は、京都大学基礎物理学研究所で行われた研究会 “Intersection of nuclear structure and high-energy nuclear collisions 2026” (2026 年 4 月 13～24 日) に発表 “Longitudinal flow decorrelations in Xe+Xe collisions and observables” (4 月 23 日) の中で部分的に紹介した。

今後は、より中心衝突(0–1%, 0–5%)における原子核変形のフローに対する影響、フロー因子化比 r_n という測定量に与える原子核変形の影響、それらに対する流体力学的ゆらぎの効果の検証、イベント形状工学と呼ばれるフロー強度に基づくイベント分類、衝突時の原子核の姿勢と測定量の関係など、さまざまな対象に対して解析を展開する。

4. ベイズ推定

ベイズ推定を行うための数値シミュレーションを行う。計算コストを下げるため、まずはガウス過程エミュレータを学習する。本研究では、Sobol sequence という数列を用いて、原子核変形のパラメータ β_2, β_4, γ などのパラメータ空間の中で 1000 点をサンプルし、各点について 4×10^5 事象の計算を行った。

縦初期揺らぎ有[4]と無[3]、粘性流体と揺動流体の比較を行うため、4 種類の設定でシミュレーションを行った。粘性流体については 7 次元パラメータ空間、揺動流体については流体揺らぎの cutoff を含めた 8 次元パラメータ空間でサンプリングを行った。用いたパラメータとその範囲は表 1 の通りである。

今後はこれらの結果を用いて学習を行い、エミュレータを用いて、実験データを入力として原子核変形パラメータのベイズ推定を行っていく。

表 1：ベイズ推定に用いるパラメータと範囲

パラメータ	範囲
初期の規格化定数	[50.0, 85.0] (glbgk[3]) [5.0, 12.0] (glpythia[4])
四重極変形β_2	[-0.1,0.3]
十六重極変形β_4	[-0.05,0.05]
ガンマ変形角γ	[0, 60°]
ずれ粘性η/s	[1/4π, 3/4π]
ずれ粘性の傾き	[0, 4/4π]
緩和時間$\tau_\pi/[\eta/(e+p)]$	[2.5, 5.5]
流体揺らぎの cutoff	[1.5, 2.5] (揺動流体のみ)

5. おわりに

本研究では、高エネルギー原子核衝突による原子核形状の制限を目的に、鉛（球形）原子核同士の衝突、キセノン（変形）原子核同士の衝突とその比較用のキセノン（球形）の数値シミュレーションを行った。本研究では、JAM の更新、流体方程式の状態方程式の再構築、空間分割による計算時間の短縮を達成した。また、シミュレーションに用いるパラメータの調整を完了し、統計を貯めることができた。

今後は数値シミュレーションの計算結果を用いて、測定量の解析や議論を行っていくことで、原子核形状の制限をしていく。

参考文献

(1) S. Acharya, et al. (ALICE), Physics Letter B, **784**, 82, (2018).

(2) M. I. Abdulhamid, et al. (STAR), Nature **635**, 8037, 67–72, (2024).

(3) A. Sakai et al., Physical Review C, **102**, 064903 (2020)

(4) A. Sakai et al., Physics Letters B, **829**, 137053 (2022).

(5) V. Khachatryan et al. (CMS), Physical Review C, **92**, 034911, (2015).

局所非調和振動計算によるロドプシンのアミドバンド予測

松山 奈央
筑波大学 大学院理工情報生命学術院 数理物質科学研究群

1. はじめに

G 蛋白質共役受容体（以降 GPCR）は、ループで繋がれた 7 本の α ヘリックスが細胞膜を貫通する構造をもつ膜蛋白質である。細胞外側への低分子リガンドの結合により膜貫通ヘリックスの立体構造変化が引き起こされ、その変化が細胞内へ伝わることで、共役する G 蛋白質を介したシグナル伝達が行われる。GPCR は生理活性物質のシグナル伝達を担っており、薬理学的な重要性から医薬品開発の標的である。

近年、GPCR の 1 つであるムスカリン性アセチルコリン受容体に対する、赤外（以降 IR）分光法を用いたリガンド結合誘起差スペクトル測定が行われた[1]。そのアミド I バンドを解析した結果、リガンド結合に伴う差スペクトルのバンド強度比が、細胞を用いた G 蛋白質活性化度合いと相関をもつことが示された。このことは、蛋白質の構造や水素結合状態を反映するアミド I バンドの変化が、薬効分類のプローブとなることを示しており、薬理作用のさらなる解析が期待される。一方で、蛋白質は複雑な構造をもつため、変化の見られたアミド I バンドの起源となる構造変化はまだ明らかとなっていない。そのため、理論計算によるバンドの帰属や解釈が求められている。

当研究室ではこれまでに、量子化学（QM）/分子力場（MM）法に基づく非調和振動計算法として、系の注目する部分（QM 領域）を振動計算する方法[2]、QM 領域の一部をグループ局所化して振動計算する方法[3]が開発されており、蛋白質内部水の振動スペクトルが計算された。現在はペプチドに対して、これまでの方法を拡張させた、各アミド基の局所的な振動計算から蛋白質全体の振動スペクトルを構築する、局所化振動計算法の開発が行われている。本研究では、この新たに開発された方法を GPCR の 1 つであり視覚の光受容蛋白質であるウシロドプシンに応用し、アミドバンドを予測した。

2. 方法[4]

結晶構造をもとに、ロドプシンの活性状態と不活性状態の構造に対する分子動力学（以降 MD）計算を実行し、得られた構造の振動解析から、それぞれの状態の IR スペクトルを求めた。MD 計算と振動解析の詳細は、2.1 節と 2.2 節に記載する。その後、活性状態と不活性状態のスペクトルの差をとり得られた差スペクトルと、IR 分光実験で観測された差スペクトルのアミドバンドの比較・解析を実施した。

2.1 MD 計算

活性状態（PDB ID 3PXO）と不活性状態（PDB ID 1U19）の結晶構造を取得し、CHARMM-GUI[5]を用いて、ロドプシン・POPC 二重膜・0.15M KCl 水溶液の膜蛋白質環境を全原子系で構築した。GENESIS[6]を用いた MD 計算により、系を平衡化した後、100 ns のトラジェクトリーを得た。MM パラメータは、水分子に対して TIP3P、それ以外に対して CHARMM36m を用いた。

2.2 振動解析

トラジェクトリーの最終スナップショットを、振動解析の初期構造に選択した。初期構造の各アミド基に対して水素結合解析を行った後、GENESIS と QSimulate-QM[7]を用いて QM/MM 計算を実行した。

各アミド基ごとに、図 1 に示す QM 領域と最適化領域で構造最適化を行い、それ以外の原子は MM 領域として扱い固定した。得られた各アミド

基の最適化構造を繋いでロドプシン全体の最適化構造とし、この最適化構造を初期構造として再度構造最適化を行うという方法を 4 回繰り返して、最終的に得られた最適化構造の振動状態を求めた。

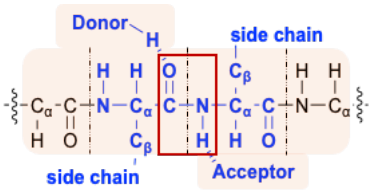


図 1：構造最適化の QM 領域（橙色ハイライト）と最適化領域（青色原子）

振動計算は、図 2 に示す QM 領域と計算領域で、各アミド基に対して実行した。調和振動計算で得た平衡構造の振動座標と基準振動モードを用いて、4 次テイラー展開ポテンシャル（以降 QFF）計算と 1 次のグリッド計算を行い、非調和ポテンシャルエネルギー曲面（以降 PES）を生成した。QM 領域は、汎関数が B3LYP-D3、基底関数が cc-pVDZ あるいは aug-cc-pVDZ で扱った。SINDO[8] による、Vibrational Self-Consistent Field 計算と 2 次の振動擬縮退摂動法計算（以降 VQDPT2）により振動状態を求め、IR スペクトルを得た。各アミド基の IR スペクトルを全て足し合わせることで、ロドプシンの IR スペクトルを求めた。

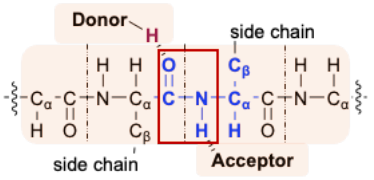


図 2：振動計算の QM 領域（橙色ハイライト）と計算領域（青色原子）

3. SQUID での計算時間

SQUID におけるロドプシンの計算には、1 ノード当たりに換算して、表 1 に示す実行時間を要した。QFF を求める過程で最も計算時間を要するが、今回の方法は構造最適化と振動計算を各アミド基ごとに実行できるため、並列計算が可能であり、大規模計算機を有効に活用できる方法である。

表 1：各過程での 1 ノード当たりの計算実行時間

	不活性状態 (hour)	活性状態 (hour)
MD 平衡化	12.7	12.6
MD production	128.4	126.6
構造最適化	404.2	392.6
調和振動計算	102.7	103.7
3 体項-QFF	3369.6	3373.8
1 体項-grid	638.0	634.4
VQDPT2	0.1	0.1
合計	4655.7	4643.8

4. 結果と考察[4]

4.1 計算と実験の差スペクトルの比較

図 3 に、調和振動計算（上）、非調和振動計算（中）、IR 分光実験[9]（下）より得られた、1220-1750 cm^{-1} 領域の IR 差スペクトルを示す。調和振動計算では、不活性状態の 1701 cm^{-1} (-) から活性状態の 1696 cm^{-1} (+) への低波数シフトが、構造変化に伴う最も大きな強度変化として示された。実験では、1655 cm^{-1} (-) から 1642 cm^{-1} (+)への低波数シフトが、最も大きな強度変化を示すアミド I バンドシフトとして観測されている[9]。 計算で示された低波数シフトは、このアミド I バンドシフトに相当すると考えられるが、実験結果より

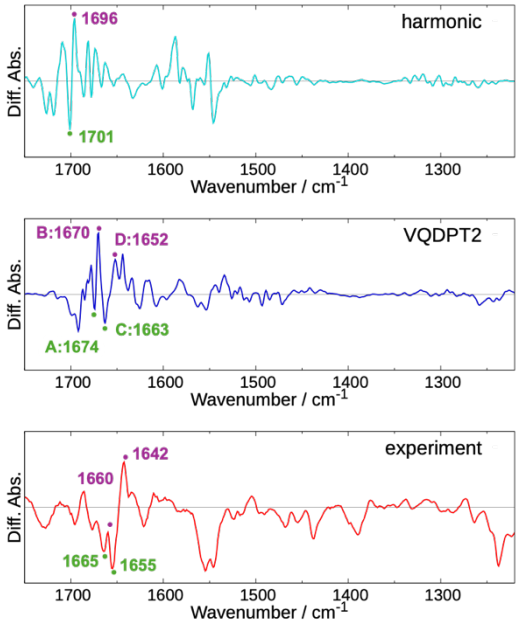


図 3：1220-1750 cm^{-1} 領域の IR 差スペクトル

も約 50 cm^{-1}高波数に示された。非調和振動計算では、1663 cm^{-1} (-) から 1652 cm^{-1} (+) への低波数シフトがアミドIバンドシフトに相当すると考えられ、実験結果との差は約 10 cm^{-1} に減少し、よい一致を示した。

4.2 アミドⅠバンドに寄与する領域

図 3 の非調和振動計算結果で示された、4 つのアミドⅠバンド（1674 cm^{-1}, 1670 cm^{-1}, 1663 cm^{-1}, 1652 cm^{-1}、以降それぞれピーク A, B, C, D と表示）について、バンド形成に寄与するロドプシンの領域を解析した。全スペクトルを、ヘリックス領域とループ領域のスペクトルに分割し、各スペクトルにおいて、4 つのバンドに相当するピークトップの波数と強度を表 2 に示す。ピーク A では、ヘリックスからの-246 km mol^{-1} の寄与をループからの 94 km mol^{-1} の寄与が打ち消して、全スペクトルは負のピークを形成する。ピーク B は、ヘリックスからの 405 km mol^{-1} とループからの 155 km mol^{-1} の寄与により正のピークを形成しているが、ヘリックスからの寄与の割合がより多い。ピーク C では、ヘリックスからの 121 km mol^{-1} の寄与によりループからの-304 km mol^{-1} の寄与が打ち消され、全スペクトルは負のピークを形成する。ピーク D は、ヘリックスからの 25 km mol^{-1} とループからの 274 km mol^{-1} の寄与により正のピークを形成しており、ループからの寄与の割合が多い。これらの結果は、ピーク A, B による高波数側のシフトは、主にヘリックスからの寄与により形成され、ピーク C, D による低波数側のシフトは、主にループからの寄与により形成されていることを示した。

4.3 アミドⅠバンドに寄与する残基

続いて、4 つのバンド形成に寄与するロドプシンの残基を解析した。ピーク A-D において、(1) ピークトップ±1 cm^{-1} の波数 (2) 不活性状態と活性状態の構造間の波数差が 10 cm^{-1} 以上の両条件を満たす残基を、図 4 でハイライトした。ピーク A：赤、B：青、C：紫、D：緑で残基を示し、ピーク A, C は不活性状態、ピーク B, D は活性状態の構造に表示した。ピーク A に 13 残基（ヘリックス：12、ループ：1）、ピーク B に 12 残基（ヘリックス：9、ループ：3）、ピーク C に 14 残基（ヘリックス：6、ループ：8）、ピーク D に 8 残基（ヘリックス：2、ループ：6）が該当した。ピーク A では、全てのヘリックスから寄与があった。ピーク A, B を形成する残基は主にヘリックスに分布し、ピーク C, D を形成する残基の分布はループに多くなっており、4.2 節で得られた結果と同様の傾向を示した。もう一つ重要な点は、不活性状態と活性状態の構造の重ね合わせでは、5 番目と 6 番目のヘリックスに大きな構造変化が見られたが、4 つのアミドⅠバンドに寄与する残基は全てのヘリックスに分布しており、構造変化の大きさだけがアミドIバンド変化に現れているわけではないことである。

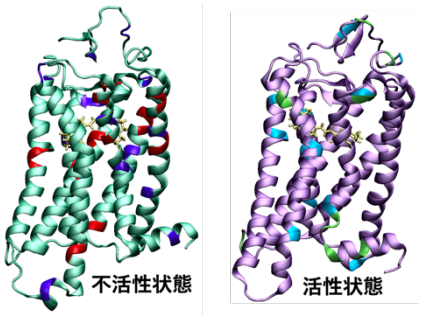


図 4：ピーク A-D に寄与する残基のハイライト

表 2：ヘリックス領域とループ領域のアミドⅠバンドの波数と強度

		ピーク A		ピーク B		ピーク C		ピーク D	
	残基数	波数	強度	波数	強度	波数	強度	波数	強度
ロドプシン全体	322	1674	-126	1670	527	1663	-251	1652	299
ヘリックス	209	1675	-246	1671	405	1661	121	1652	25
ループ	113	1673	94	1668	155	1662	-304	1652	274

波数の単位は cm^{-1}、強度の単位は km mol^{-1} で表示

4.4　レチナール周辺の分子の配置

最後に、アミドIバンド形成に寄与する残基の1つで、レチナール分子周辺に位置するThr118の構造変化とその波数変化の関係を解析した。図5（左）に示すように、QM/MM計算で得られた不活性状態の最適化構造において、Thr118側鎖のOH基は、Gly114主鎖のO原子と水素結合距離、レチナールのC_9-メチル基と立体障害の位置にあり、結晶構造で見られた配置[10]と同様であった。活性状態の構造になると、図5（右）に示すように、Thr118とGly114の間の水素結合が切断され、Thr118側鎖のOH基はレチナールに垂直な向きをとり、近くの水分子（水色）と水素結合を形成する配置に変わった。さらにThr118主鎖のO原子は、水分子と新たに水素結合を形成した。この水素結合の組み換わりにより、Thr118のアミドIは、1674 cm^{-1}から1615 cm^{-1}への59 cm^{-1}の低波数シフトを示した。

ここで改めて図5を確認すると、Thr118の周り4.0 Å以内において、不活性状態では水分子が1つも示されないのに対し、活性状態では複数示された。これは図6に示すように、活性状態では膜貫通ヘリックス内部に圧倒的多数の水分子（赤色）が存在する結果であり、活性化による6番目のヘリックスの動きで生じた、細胞質側と内部を繋ぐ空間にバルク水が流入することでもたらされる。

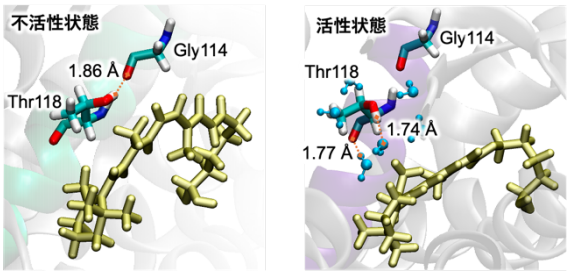


図5：Thr118とレチナール周辺の最適化構造

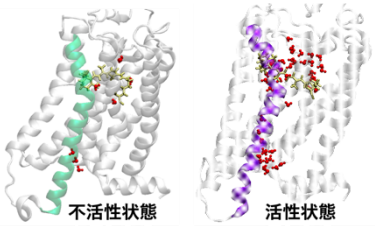


図6：最適化構造での水分子の分布

5. おわりに

GPCRの1つであるロドプシンに対して、当研究室で開発された局所化振動計算法を応用してアミドバンドを予測し、その変化と構造変化の関係の解析から、アミドIバンドシフトに寄与する受容体の領域や残基を明らかにした。現在は、蛋白質構造ゆらぎの影響を検証するため、多スナップショットを初期構造とした振動解析を行っているところである。

今回の方法は、各アミド基の振動状態を足し合わせてロドプシン全体の振動状態を求めるため、アミド基間のカップリングは含まない。また計算資源の制約から、PES生成は、QFFと1次のグリッド計算により行った。カップリングの取り込みや高次のグリッドポテンシャルでのPES生成により、スペクトル予測の精度向上が期待できる。

本研究の遂行にあたり、筑波大学数理物質系の八木清教授、名古屋工業大学大学院工学研究科の片山耕大准教授よりご指導、お力添えをいただきました。深く感謝申し上げます。

参考文献

(1) K. Katayama *et al*. *Commun. Biol.* **4**, 1321 (2021).
(2) K. Yagi *et al*. *J. Chem. Theory Comput*. **15**, 1924 (2019).
(3) K. Yagi, Y. Sugita, *J. Chem. Theory Comput*. **17**, 5007 (2021).
(4) N. Matsuyama, K. Katayama, and K. Yagi, *J. Phys. Chem. B* DOI: 10.1021/acs.jpcb.6c01639.
(5) S. Jo *et al*. *J. Comput. Chem.* **29**, 1859 (2008).
(6) J. Jung *et al*. *J. Phys. Chem. B* **128**, 6028 (2024).
(7) K. Yagi, S. Ito, and Y. Sugita, *J. Phys. Chem. B* **125**, 4701 (2021).
(8) K. Yagi, アンサンブル **24**, 122-129 (2022).
(9) K. Katayama *et al*. *J.Phys. Chem. Lett*. **10**, 7270 (2019).
(10) V. A. Lórenz-Fonfría *et al*. *J. Am. Chem. Soc.* **132**, 5693-5703 (2010).

分子動力学法による塑性仕事の熱変換効率の予測の境界条件依存性

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、塑性加工の高速化に伴い、被加工材の性能や特性などを高精度で予測することが重要になっている。ここで、加工中における被加工材の温度上昇は、その欠陥挙動、結晶組織などの進展を影響することによって、加工後のその性質や性能などを影響する。したがって、加工中における温度上昇を正確に予測することが必要である。

塑性加工中に、材料に付与される塑性変形仕事W^{p}から変換された熱（加工発熱）Qは、被加工材の温度を上昇させる主因である。塑性仕事が熱に変換される割合は、熱変換効率 Taylor-Quinney coefficient （TQC）βで表すことができる。したがって、加工中における温度上昇を正確に予測するためには、正確に TQC を評価する必要がある。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 を一定で$\beta = 0.9$と仮定されることが多かった。すなわち、塑性変形仕事由来の熱量はその 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、変形速度、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、実験による TQC の測定では、変形中の材料の温度上昇ΔTをその場測定して次式で求めるのが一般的である（積分式β^{int}）。

$$\beta^{\mathrm{int}} = \frac{\Delta Q}{\Delta W^{\mathrm{p}}} = \frac{c\Delta T}{\Delta W^{\mathrm{p}}} \tag{1}$$

ここで、c（$\mathrm{JK^{-1}m^{-3}}$）は比熱、ΔTは変形中の温度変化、ΔW^{p}は変形中の塑性仕事の変化を表す。また、温度上昇および塑性仕事の時間微分で定義される微分式β^{diff}（次式）も用いられている。

$$\beta^{\mathrm{diff}} = \frac{\dot{Q}}{\dot{W}^{\mathrm{p}}} = \frac{c\dot{T}}{\dot{W}^{\mathrm{p}}} \tag{2}$$

実験による TQC の評価には、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、熱力学的に断熱定積の境界条件を作る必要がある。そのために、高速変形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作るのが一般的な手法として用いられていた。ただし、変形速度そのものが TQC の影響因子であり(1)、高速変形による手法では、熱伝導・熱膨張を抑制できる一方で、TQC の測定結果にバイアスをもたらす可能性がある。

ところで、分子動力学（MD）計算では、熱力学的境界条件を規定することによって、変形の条件に依存せず、温度、応力、ひずみ、および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、MD を用いて TQC を正確に評価できることが期待されている。ただし、TQC は、その影響因子が多く、MD 計算の手法に影響される可能性があるため、MD 法による評価には、まず妥当な計算手法を設計する必要がある。そして、その結果の計算条件への依存性を考察する必要がある。

本研究は、MD 法を用いて TQC を求める手法を設計し、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　塑性変形の MD 計算

アルミニウム（Al）の完全結晶原子モデルを新たに構築して、MD シミュレーションに用いた。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。分子動力学シミュレーター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。

ここで、完全結晶モデルをそのまま変形させると、降伏応力が流動応力よりはるかに高くなる現象（応力オーバーシュート）が起こり、初期の弾性仕事が過剰に蓄積し、加工発熱に弾性仕事による散逸も含まれ、TQC の評価結果には誤差をもたらす可能性がある[6]。応力オーバーシュートを避けるために、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 P-H-D（Pre-Hold-Deform）法 [3]という計算プロトコルを用いた。P-H-D 法では、TQC の評価するための本変形（Deform）を行う前に、完全結晶のモデルに予変形（Pre-deform）を施し、初期欠陥を自発的に形成させてから、変形を停め、除荷（すなわち応力を 0 にする。表 1 では$\gamma = 0$と記す）して初期欠陥が安定するまで構造緩和させる（Hold)。そして、Deform の（変形以外の）設定条件で、もう一回構造緩和（Hold-2）を行い、Pre-deform と Hold における熱履歴などをリセットする。P-H-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、応力オーバーシュートを最小化することが期待される。アンサンブルへの依存性を調査するために、Deform はそれぞれ NVE、NVT、NPH または NPT アンサンブルで行った。

表 1：MD シミュレーションの条件

Stage	Pre	Pause	Deform
Ensemble	①	②	③
Deformation	Shear		Shear
Time, t / ps	500	500	500
Pressure, p / Pa	-	γ =0	-
Strain, $\Delta\varepsilon$	0.25	$-\gamma^{\mathrm{e}}$	0.25
Strain rate, $\dot{\varepsilon}$ / s^{-1}	5×10^{8}	0	5×10^{8}

※アンサンブル：①-NVE、②-NPH、③-NVE/NVT/NPH/NPT

2.2 TQC の計算

TQC は式 1 $(\beta^{\mathrm{int}} = \Delta Q/\Delta W^{\mathrm{p}})$ および式 2 $\left(\beta^{\mathrm{diff}} = \dot{Q}/\dot{W}^{\mathrm{p}}\right)$ を用いて計算する。TQC を計算するために、それぞれΔQ（$\dot{Q}$）とΔW^{p}（$\dot{W}^{\mathrm{p}}$）を計算する。

ΔQ（$\dot{Q}$）は、アンサンブルによってその計算方法が異なる。断熱的アンサンブル（NVE または NPH）では、変形中における温度上昇またはその時間微分を用いて、$(\Delta Q = c\Delta T)$または$\left(\dot{Q} = c\dot{T}\right)$で計算する。$c$は比熱であり、NVE では定積比熱$c_{\mathrm{v}}$、NPH では定圧比熱$c_p$を用いる。定温的アンサンブル（NVT または NPT）では、温度を制御する（本研究では 300K）際に、Nose-Hoover サーモスタット[7, 8]に仮想的熱伝導によってモデルから奪われたエネルギーの量を熱として定義する。

ΔW^{p}（$\dot{W}^{\mathrm{p}}$）は、全変形仕事ΔW（$\dot{W}$）から、弾性仕事ΔW^{e}（$\dot{W}^{\mathrm{e}}$）を除去して計算する。まず、応力σとせん断ひずみ増分$\dot{\gamma}$から、

$$\dot{W} = \sigma \cdot \dot{\gamma} \tag{3}$$

を計算する。そして、その時間積分でΔWを計算する。

$$\Delta W = \int_0^t \dot{W} dt \tag{4}$$

弾性仕事W^{e}および塑性仕事W^{p}（$\dot{W}^{\mathrm{p}}$）は、せん断剛性率Gおよび応力を用いて

$$W^{\mathrm{e}} = \frac{\sigma^2}{G}$$
$$W^{\mathrm{p}} = W - W^{\mathrm{e}} \tag{5}$$
$$\dot{W}^{\mathrm{p}} = \frac{dW^{\mathrm{p}}}{dt}$$

のように計算する。

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-H-D 法

図 1 に、P-H-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こらず、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-H-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。

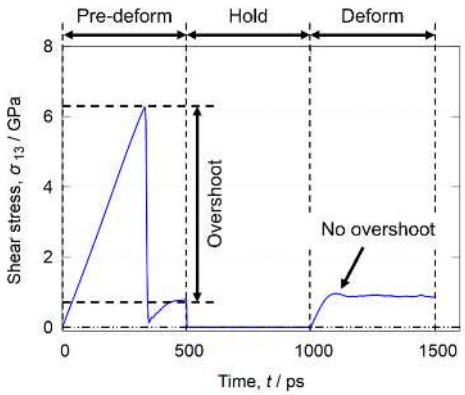


図 1：P-H-D 法による応力オーバーシュートの最小化

3.2 TQC の予測結果

表 2 に、それぞれのアンサンブル（NVE/NVT/NPH または NPT）における TQC の予測結果を示す。P-H-D 法を使用した MD シミュレーションを用いて、β^{int}とβ^{diff}を予測できた。TQC は、アンサンブルへの依存性を示した。NPH（断熱・定圧）において最も小さく、NVE（断熱・定積）において最も大きい結果を示した。

表 2：各アンサンブルでの TQC の予測結果

Ensemble	NVE	NVT	NPH	NPT
β^{diff}	0.987	0.997	0.949	0.953
β^{int}	0.967	0.961	0.924	0.935

4 考察

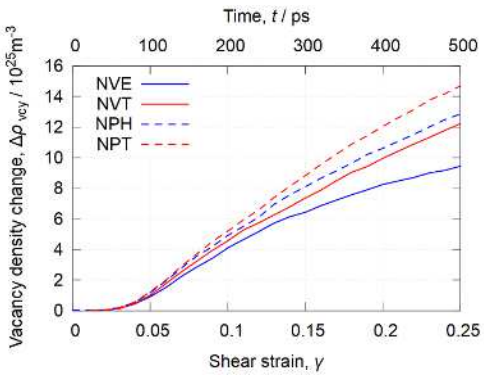
図 2 に、各アンサンブルでの変形中の a) 空孔密度および b) 転位密度の変化を示す。空孔密度は、いずれも単調に増加し、その増加量がアンサンブルごと明らかに差異を示した。転位密度は、変形初期に増加し、時間が 100~200 ps の間に最大値に到達してから減少していた。これは、変形中に動的回復（Dynamic Recovery）が発生したと示している。動的回復は、変形仕事を駆動力とした転位の再配置による転位構造の最適化の過程である。定積条件（NVE または NVT）では定圧条件（NPH または NPT）より、空孔密度が小さく（NPT>NPH>NVT>NVE）、転位密度が大きい（NVE≈NVT>NPT≈NPH）。ただし、いずれも TQC の予測値（NVE>NVT>NPT>NPH）またはその逆順とは一致しなかった。したがって, TQC は格子欠陥密度のみではなく、欠陥の種類、その挙動、およびそれらに伴うエネルギー収支も考慮して評価・予測する必要がある。

TQC のアンサンブルへの依存性は、塑性変形中のエネルギー収支を用いて解釈することができる。本研究で用いたアンサンブルは、Nose-Hoover サーモスタットまたはバロスタット[7,8]を用いて温度または圧力を制御する。その原子論的エネルギー収支は、次式で表すことができる。

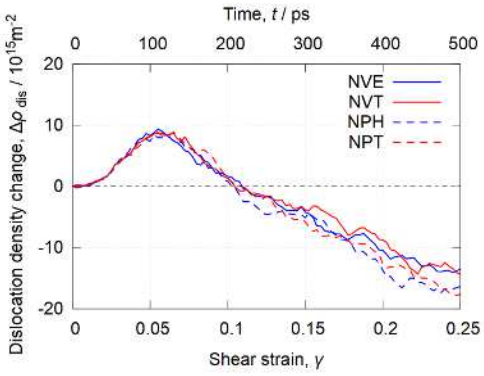
$$\dot{Q} = \beta^{\mathrm{diff}}\dot{W}^{\mathrm{p}} + \dot{E}_{\mathrm{thermostat}} - \dot{E}_{\mathrm{barostat}} \qquad (6)$$

ここで，$\dot{E}_{\mathrm{thermostat}}$ は，サーモスタットと原子モデルの間のエネルギー交換であり、原子モデルからエネルギーが除去されるときに正と定義する。$\dot{E}_{\mathrm{barostat}}$ は，バロスタットと原子モデルの間のエネルギー交換であり、すなわち体積仕事を表す。体積が増加するときに正と定義する。

本研究で用いたアンサンブルは, 原子論的な極限境界条件として考える必要がある。すなわち、NVE および NPH は系内に熱を保持するため温度上昇を生じる一方、NVT および NPT はサーモスタットを通じて熱を除去し、変形中を通じて温度を 300 K に維持していた（図 3a）。また、NVE および NVT では体積の変化が抑制され、体積は一定に保たれるのに対し、NPH および NPT では体積緩和が許容された（図 3b）。NPH では、NVE におけるエネルギー収支に加えて、発生した熱の一部が一定な圧力を維持するためにバロスタットに奪われた。その結果、NVE より低いもののゼロではない温度上昇が生じた（図 3a）。このとき，熱膨張が発生し（図 3b），塑性仕事から発生した熱の一部が消費された。体積の変化は NPT においても起こりうるが、同時にサーモスタットによって熱が除去されるため、熱膨張に寄与する熱量は小さく、観測されたのは構造緩和に起因する体積の増加のみであった（図 3b）。

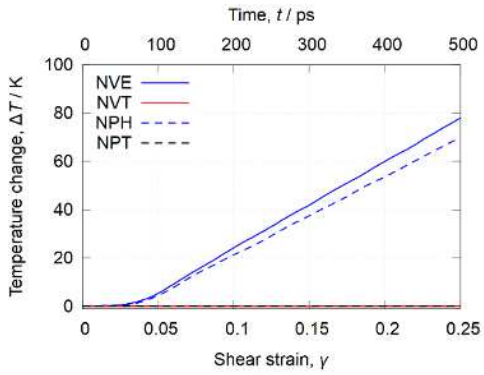


a) 空孔密度ρ_{vcy}

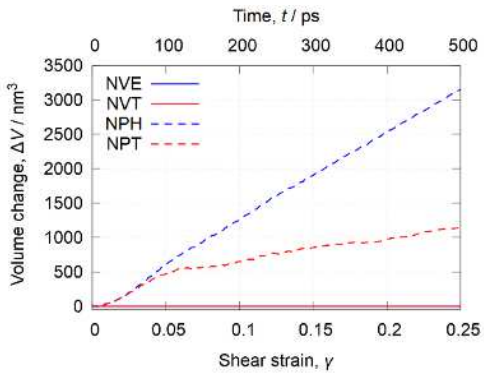


b) 転位密度ρ_{dis}

図 2：各アンサンブルでの変形に伴う a) 空孔密度ρ_{vcy}および b) 転位密度ρ_{dis}



a) 温度T



b) 体積V

図 3：各アンサンブルでの変形に伴う a) 温度Tの変化および b) 体積Vの変化

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）、断熱定圧（NPH）または定温定圧（NPT）の境界条件（アンサンブル）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-H-D 法を提案した。超大規模原子モデルを用いた P-H-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最小化できた。

・分子動力学シミュレーションによる TQC の予測結果は、その熱力学的境界条件（アンサンブル）に依存する。アンサンブルは、塑性変形仕事の熱、体積変化に伴う仕事、および欠陥によって蓄積されたエネルギーへの変換を決定し、TQC の値を影響する。本研究は分子動力学法による TQC の予測における条件設定、およびその予測結果の解釈に対して、基礎的な指針を提供した。

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. Mendelev et al., Phil. Mag., 88-12 (2008), 1723.

(6) J.C. Stimac et al., Acta Mater., 239 (2022), 118253.

(7) S. Nosé, J. Chem. Phys., 81, (1984), 511–519.

(8) W.G. Hoover, Phys. Rev. A, 31, (1985), 1695-1697.

A priori Test of Data-Driven Subgrid-Scale Model with Few-shot Learning for Large-Eddy Simulation of Turbulent Channel Flow

Bahrul Jalaali, Kie Okabayashi
Department of Mechanical Engineering, Graduate School of Engineering, The University of Osaka

1. Introduction

The use of numerical simulations is essential for investigations in turbulent flow. Among of them, large-eddy simulation (LES) has become widely adopted because it is considered cost-effective as well as more accurate than other coarse-grained models: In LES, the large vortices are explicitly resolved whereas the small vortices are modelled using a subgrid-scale (SGS) model. The SGS model has long been represented by mathematical models and has achieved a certain degree of success. Recently, there has been a rapid surge in the development of SGS models using deep neural networks (DNN), hereafter referred to as data-driven SGS models. Unlike mathematical models, these have the advantage of not involving any artificial assumptions or approximations. However, the data-driven SGS model often faces a generalization issue, where it refers to the ability of a data-driven SGS model to perform well on new "unseen" data, which are not fed in the training phase.

Several studies have been proposed to address this issue. Guan et al.[1] introduced a fine-tuning transfer learning (TL) technique to train data-driven SGS models on homogeneous turbulence. In their approach, DNN model that has been pre-trained using low Reynolds number (Re) dataset was re-trained using a dataset at higher Re, which is more complex and challenging condition than lower Re case. By using this scheme, the data-driven SGS model was able to predict higher-Re case with reduced training time. Although this model can predict higher-Re case, the capability to retain ability by predicting lower-Re remain questioned. Kim et al.[2] proposed a fusion DNN approach that combines channel flow and cylinder flow datasets on training phase to improve predictions across different domains. This approach exhibited a good prediction for SGS quantities in channel and cylinder flow. Nevertheless, incorporating data from both domains during training may not be regarded as generalization. In addition, for a data-driven SGS model to be generalized and applicable to various flow fields, a large amount of training data is required. Generating such massive high-fidelity turbulence datasets is impractical due to the immense computational cost. These challenges are frequently highlighted in data-driven turbulence modeling[3], making their application in engineering problems difficult.

To overcome the issues, this study introduces a data-driven SGS model with a TL algorithm to reduce the need for extensive re-training or large datasets for new flow condition. In this study, the analysis object is turbulent channel flow between two parallel flat plates, illustrated in Fig. 1. It is important to note that common data-driven model with TL is often experienced catastrophic forgetting where the model retrained using only new dataset may lose its ability to predict the previous knowledge. Therefore, the aim of this study is to predict high-Re case while maintaining accuracy to predict low-Re case. Here, we extended the multiscale convolutional neural network SGS model (MSC-SGS) introduced by Jalaali & Okabayashi[4,5], by incorporating a novel few-shot transfer learning (FSL) algorithm, hereinafter regarded to as MSC-FSL. The MSC-FSL model was re-trained on higher-Re case with merely a few portions of dataset. Despite that, the MSC-FSL model was able to maintain accurate prediction across both low- and high-Re case.

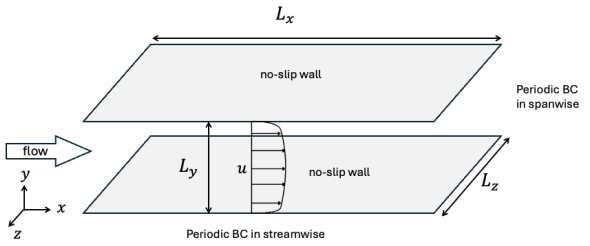


Figure 1. Channel flow domain with its boundary condition (BC).

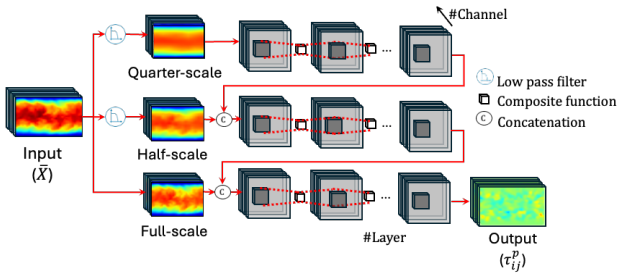


Figure 2. Schematic illustration of the MSC-SGS model network structure.

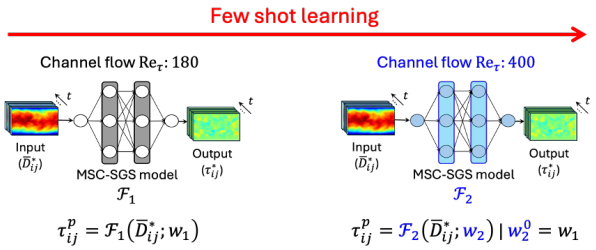


Figure 3. Schematic illustration of FSL algorithm. w_2^0 denotes the initial value of w_2 before retraining. $\bar{D}_{ij}^*$ is the normalized $\bar{D}_{ij}$.

2. Methodology

The problem setting is to develop a data-driven SGS model for LES that is capable of predicting both low- and high-Re. LES computation is conducted by solving the spatially filtered forms of the continuity and Navier–Stokes equations expressed in Eqs. (1) and (2).

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

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

The overbar denotes the filtering operation, Re_τ is the friction Re which is specific flow parameter for channel flows, 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 grid-scale rate-of-strain tensor. Here, $\bar{u}$ and $\bar{p}$ denotes the filtered velocity and pressure, respectively. The SGS components, $\tau_{ij} = \overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j$, are unclosed term and need to be modeled. Here, the MSC-FSL model is proposed to predict τ_{ij}. The present study is restricted to an *a priori* test, where the predictive capability of MSC-FSL model is evaluated without its implementation in actual LES framework.

The MSC-FSL model is developed from the MSC-SGS model[4,5]. The schematic of MSC-SGS model is depicted in Fig. 2. The MSC-SGS model was trained in a supervised learning. Predicted τ_{ij} (τ_{ij}^p) can be defined as $\tau_{ij}^p = \mathcal{F}(\bar{D}_{ij}; w)$, where $\mathcal{F}$ is the DNN model, $\bar{D}_{ij}$ is the input quantity, and w indicates the weight of the DNN. The training process aims to determine the optimum weight such that $w = \mathrm{argmin}_w\left(\mathcal{L}\left(\tau_{ij}^p, \tau_{ij}^{fDNS}\right)\right)$, where $\mathcal{L}$ denotes the loss function. For a more detailed explanation of the MSC-SGS model readers are referred to the study by Jalaali & Okabayashi[4,5].

Subsequently, the training procedure for MSC-FSL model is described where the schematic illustration of MSC-FSL framework is depicted in Fig. 3. The first step of training is to set the input quantity. Here the input and output normalization are employed; hence, the MSC-FSL can be formulated as:

$$\tau_{ij}^p / k_{\mathrm{sgs}} = \mathcal{F}_2(\bar{D}_{ij}\delta/U_{\mathrm{bulk}}, w),$$

where k_{sgs} is the SGS kinetic energy ($k_{\mathrm{sgs}} = \frac{1}{2}(\overline{u_k u_k} - \bar{u}_k \bar{u}_k)$, δ denotes the channel half-width, and U_{bulk} is the bulk velocity of channel flow. This normalization is intended to represent the similar physical characteristic regardless of Re_τ.

Subsequently, the MSC-FSL will be trained with low-Re dataset, $\mathrm{Re}_\tau = 180$, where this model is regarded to as $\mathcal{F}_1$. The training dataset is obtained from filtered direct numerical simulation (fDNS) data of a turbulent channel flow. During this training process, a total of 12,000 flow-field samples, each comprising paired input $\left(\bar{D}_{ij}^{\mathrm{fDNS}}\delta/U_{\mathrm{bulk}}\right)$ and label data $(\tau_{ij}^{\mathrm{fDNS}}/k_{\mathrm{sgs}}^{\mathrm{fDNS}})$, were used for training.

After the training of model $\mathcal{F}_1$ has converged, the TL procedure was performed by transferring the trained

parameters w_1 from $\mathcal{F}_1$ to new DNN model, regarded to as $\mathcal{F}_2$, which will be served as MSC-FSL model after retraining. These parameters w_1 were used to initialize the subsequent w_2 retraining process. Next, $\mathcal{F}_2$ was then retrained using datasets that consist of both $\mathrm{Re}_\tau = 180$ and $\mathrm{Re}_\tau = 400$ fDNS data, each comprising 600 flow-field samples. The use of this limited amount of training data constituted the key feature of FSL strategy. It is worth noting that FSL adopted in this study has a different characteristic than common FSL in computer science. The distinguishing characteristics of the novel FSL framework are described as follows. During retraining, only weight the parameters associated with the half-scale and quarter-scale branches were updated. In contrast, the weight parameters of the full-scale branch were frozen and retained the values of previous w_1. This approach is based on the universal characteristic of a small scale, regardless of Re. Therefore, it is assumed that $w_1 = w_2$ for a full-scale branch. The retraining process was conducted for 400 epochs.

3. Result and discussion

For comparison, this study presents the τ_{ij} prediction using the baseline MSC-SGS model[4,5]. Here, the MSC-SGS model did not employ normalization and FSL. Fig. 4 shows the wall-normal distributions of τ_{ij}, averaged over the $x-z$ directions for $\mathrm{Re}_\tau = 180$. In general, both MSC-SGS and MSC-FSL models accurately predicted all six components of τ_{ij}, despite of overestimated τ_{12} in MSC-SGS model. It is important to note that one of the limitations of TL-based model is catastrophic forgetting, in which the model lost previous acquired knowledge after retrained using new dataset. In this study, the MSC-FSL model was able to retain its predictive accuracy for low-Re case, $\mathrm{Re}_\tau = 180$, even after being retrained using new dataset which included $\mathrm{Re}_\tau = 400$. This result indicates that the MSC-FSL model mitigated catastrophic forgetting and preserved the knowledge acquired from the low-Re case.

The wall-normal distribution of the averaged τ_{ij} at $\mathrm{Re}_\tau = 400$ is depicted in Fig. 5. Consistent with the results on low-Re case, the MSC-FSL model accurately predicted all six components of τ_{ij}. Nevertheless, the predicted τ_{12} showed a noticeable discrepance as in higher-Re, vortices interactions were more intricate, resulting relatively more difficult to predict. However, more importantly, despite being retrained using only a few amounts of dataset in high-Re, the MSC-FSL model was relatively performed in satisfactory for predicting τ_{ij} in $\mathrm{Re}_\tau = 400$. In contrast, the baseline MSC-SGS model failed to predict high-Re.

The combination of nondimensional normalization and the novel FSL therefore provided effective generalization across both lower- and higher-Re cases. The ability to predict higher-Re flows is particularly important because such flows exhibit a broader range of interacting turbulent scales.

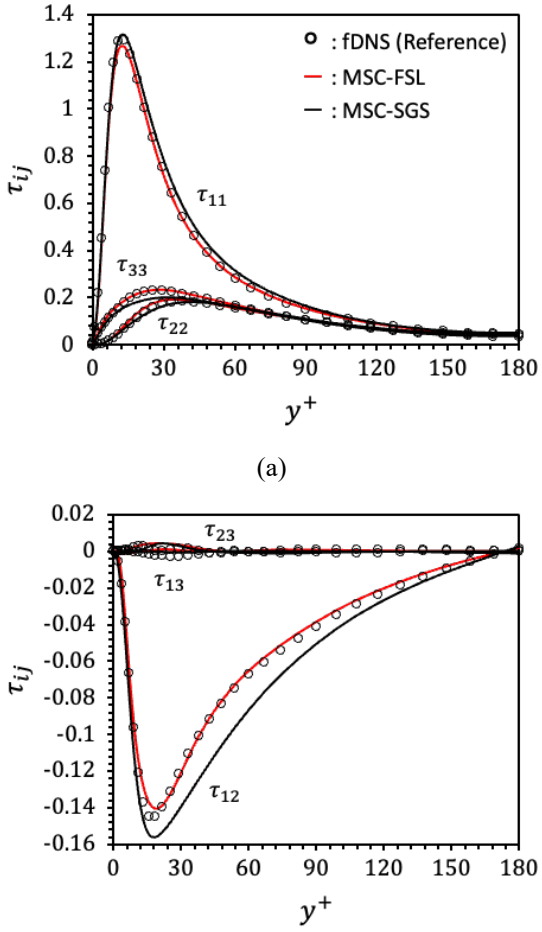
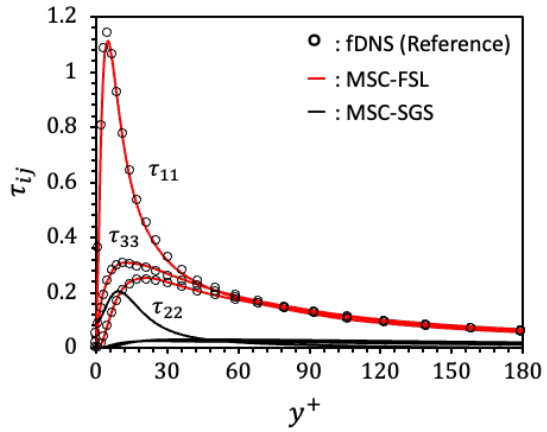
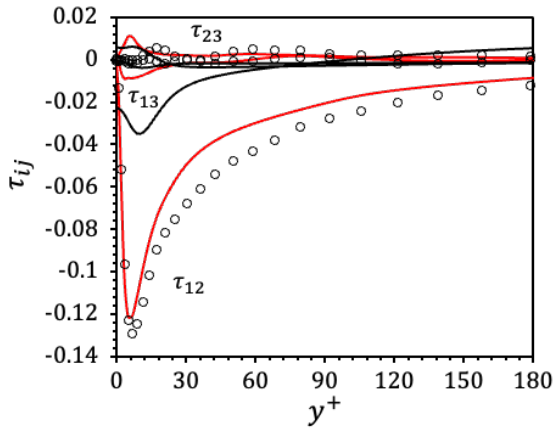


Figure 4. Wall-normal distribution of τ_{ij} for $\mathrm{Re}_\tau = 180$ for (a) isotropic and (b) anisotropic component.



(a)



(b)

Figure 5. Wall-normal distribution of τ_{ij} for $\mathrm{Re}_\tau = 400$ for (a) isotropic and (b) anisotropic component.

4. Conclusion and future direction

The MSC-FSL model was developed by incorporating FSL into a baseline MSC-SGS model[4]. This model exhibited a generalization capability by predicting SGS quantities across different Reynolds number cases which is an objective that remains challenging for common data-driven SGS model. Moreover, this model was also successfully mitigated the catastrophic forgetting, a common issue in TL models. As the next step, implementation into actual LES framework will be conducted.

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. JP25K07584 and Indonesian Education Scholarship Program (BPI), administered by the Center for Higher Education Funding and Assessment (PPAPT), Ministry of Higher Education, Science, and Technology of the Republic of Indonesia, and the Indonesia Endowment Fund for Education (LPDP), Ministry of Finance of the Republic of Indonesia, BPI No. 202205080366.

Reference:

(1) Y. Guan, A., et al. *Journal of Computational Physics*. (2022).

(2) M. Kim., et al. *J. Fluid Mech*. (2024).

(3) K. Duraisamy., et al. *Annu. Rev. Fluid Mech*. (2019).

(4) Jalaali, B., Okabayashi, K. *Journal of Turbulence*. (2026).

(5) Jalaali, B., Okabayashi, K. Cybermedia HPC Journal. (2025).

ホウ素中性子捕捉療法における深部がん照射計画の開発・最適化

守實 友梨
大阪大学 大学院工学研究科環境エネルギー工学専攻

1. はじめに

ホウ素中性子捕捉療法（Boron Neutron Capture Therapy: BNCT）は、がん細胞に集まりやすいホウ素化合物（^{10}B）を投与し、体外から中性子を照射することでがん細胞だけを選択的に破壊する放射線がん治療法である。10B に熱中性子が捕捉されると核反応により高線形エネルギー付与（Linear Energy Transfer: LET）のアルファ線（^{4}He）と ^{7}Li 反跳核が生成され、これらの飛程が細胞 1 個分程度（約 10 μm）であるためがん細胞のみを選択的に殺傷できる。BNCT は脳腫瘍や頭頸部がんへの適用が進んでおり、2020 年には切除不能な局所進行または局所再発の頭頸部がんに対して保険適用が認められた[1]。また、皮膚がんや悪性黒色腫などへの応用研究も進められている。

一方、膵臓がんや肺がんなど深部に位置し、内視鏡では発見しづらく手術も困難ながんに対しては BNCT の適用が十分に検討されていない。膵臓がんの 5 年相対生存率は約 10%と非常に低く[1]、深部がんへの新たな治療法開発は急務である。BNCT を深部がん治療に適用するうえでは、主に二つの技術的課題が存在する。第一に、BNCT で主に用いられる熱中性子は体内に入ると陽子との弾性衝突によりすぐに減衰するため、現在の治療深度は 5〜6 cm に限られている。深部腫瘍への対応策として 10 keV 周辺にピークを持つ熱外中性子の使用や、開頭手術を組み合わせたアプローチが試みられているが、いずれも課題を抱えている。第二に、国際原子力機関（IAEA）による BNCT の治療基準[2]は部位ごとの明確な定義がなく腫瘍位置による線量閾値が設定されていないため、照射プロトコルが不十分であり、照射位置の決定が個人依存になりやすいという問題がある。本研究では、これらの課題を解決するため、高速な線量計算システムの開発と照射位置最適化アルゴリズムの構築を目的とする。

2. 先行研究と本研究のアプローチ

深部がん照射に関連する先行研究として、遺伝的アルゴリズムを用いた照射位置最適化[3]や深層学習を用いた治療計画[4]が提案されている。遺伝的アルゴリズムを用いた手法は照射位置が 5 か所に固定され計算コストが大きく、腫瘍線量最大化のみを目的としているため正常細胞への影響が考慮されていないという問題がある。一方、深層学習ベースの手法はモンテカルロ法に比べて高速であるものの、特定のデータセットに依存しており物理法則を無視しがちで誤差が生じやすく、特殊ケースへの対応が困難である。また、単一方向からの照射のみを対象としているため多門照射への拡張が難しい。

これらの課題を克服するため、本研究では物理ベースのモンテカルロ計算を前提としつつ、事前計算データベースの活用により計算速度を大幅に向上させるアプローチを採用する。具体的には、腫瘍位置・照射角度・ビームエネルギーを変数とした照射データセットを D3 センターのスーパーコンピュータで大規模並列計算により構築し、これを基盤として照射プロトコルの最適化・多門照射への展開・深部がん専用スペクトルの探索へと研究を発展させる。

3. 研究方法

3.1 球モデルを用いた高速線量計算手法

本研究では、BNCT の線量計算を高速化する

ために、あらかじめモンテカルロコード PHITS で計算された簡易な頭部球モデル（半径 10 cm の脳細胞、頭蓋骨、皮膚の 3 層構造）を用い、その回転・重ね合わせで任意方向からの照射に対する線量分布を再現する手法を提案した。モンテカルロコードによる逐次計算は物理的精度が高い一方、1 回の計算に数時間を要するため臨床応用の妨げとなっている。本手法では事前計算データベースを参照することで、この計算コストを大幅に削減する。

データベースの構築には大阪大学 D3 センターのスーパーコンピュータ SQUID（汎用 CPU ノード群）を使用した。様々なエネルギーおよび照射角度のポイントソースデータを PHITS により計算し、エネルギー範囲 0.01 eV〜10 MeV、照射角度の余弦方向 $\cos\theta$ は 0〜1 の範囲で 40 群に分割したデータセットを作成した。$\cos\theta$ の例について図 1 に示す。中心点における余弦方向とエネルギーを変数とすることで、任意の角度における線量分布を回転操作により再現できるようにした。このデータベースの作成により、異なる照射条件に対して毎回モンテカルロ計算を行う必要がなくなり、照射計画の大幅な効率化が期待される。

3.2　線量計算アルゴリズム

構築したデータベースを用い、指定したビームの半径・エネルギーに対応するデータセットを選択し、中心から任意の方向へ回転移動させることで各ビームの線量分布を作成した。さらに複数方向のビームを重ね合わせることで多門照射を含む任意の照射配置に対する線量分布を算出した。BNCT 線量計算では、ホウ素線量（DB）、水素線量（DH）、窒素線量（DN）、ガンマ線量（Dγ）の各成分に対し、それぞれ相対的生物学的効果比（RBE）および複合生物学的効果係数（CBE）を乗じて足し合わせることで生物学的等価線量（Gy-Eq）を算出した。ホウ素線量の計算には MCNP タリーF4（反応率/cc/source）を用い、水素・ガンマ線量には F6 タリー（MeV/g/source）を用いた。各成分の計算結果にはカレントフラックス比（Current Flux Ratio: CF）を乗じることで、ビームの方向性を適切に反映させた。

3.3　ビーム特性の調査

深部がん照射に適したビーム条件を探索するため、ビーム半径、エネルギー、カレントフラックス比（CF 比）の 3 パラメータについて系統的な調査を行った。CF 比はビームの指向性を表す指標であり、平行ビームで CF=1.0、等方性では CF=0.5 となる。深部照射においては指向性の高い（CF 比の大きい）ビームが有効であるが、実際の加速器施設では CF 比の上限があるため、施設の制約内で最適なビーム条件を決定する必要がある。ビーム半径と線量分布の関係では、半径が小さいほど表面線量が高くなる一方、深部の腫瘍への集中照射が難しくなるトレードオフが存在することを確認した。エネルギーについては、IAEA の治療基準で推奨される 10 keV 付近の熱外中性子が深部治療に有利であることを計算により確認した。

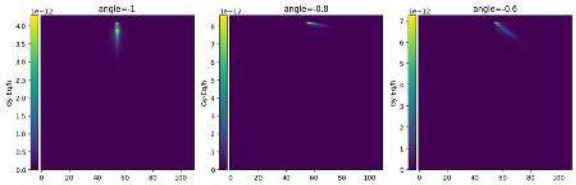


図 1：照射角度の余弦方向の例。angle は方向余弦 $\cos\theta$ の値である。-1 は直線ビームを示す。

4. 計算結果と考察

4.1　モデル計算精度の検証

提案した球モデルを用いた線量計算手法を PHITS によるモンテカルロ計算と比較し、精度を検証した。比較結果について図 2 に示す。相関係数は 0.966 と高い値を示し、計算速度については粒子数 1e6 において PHITS（計算時間 5 時間）と比較して約 100 倍の向上（1 分）が確

認された。部位ごとの対称平均絶対パーセント誤差（sMAPE）は、脳細胞で 9.5%、皮膚で 13%と実用的な精度を達成した。一方、頭蓋骨では 52%の誤差が生じており、これはポイントソースによる中心部分のビームの誤差が大きいためと考察される。この問題に対しては、ピークを緩和させるフィルターの導入やデータセットの細分化が有効と考えられるが、計算時間とのトレードオフに留意する必要がある。

ビーム半径とエネルギーを変えた場合の線量体積ヒストグラム（DVH）解析では、CF=0.8、ビーム半径 6 cm、エネルギー10 keV の条件において、腫瘍位置が表面から 4 cm の場合と 5 cm の場合を比較した。表面から 4 cm の腫瘍に対しては腫瘍最小線量が 20 Gy-Eq 付近に達したが、5 cm では腫瘍線量の低下が顕著であった。これは熱外中性子であっても体内での減衰の影響を受けることを示しており、多門照射による集中照射がさらに重要になることを示唆する。今後は MRI/CT データを用いた実際の頭部形状モデルへの外挿、および最適化アルゴリズムとの統合により、個別患者に対応した照射計画システムの実現を目指す。

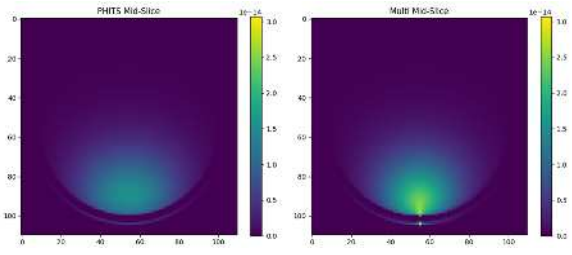


図 2：実際のモンテカルロ計算(左、PHITS)と本提案手法における計算結果(右)の比較

5. おわりに

本研究では、BNCT による深部がん治療を実現するための高速線量計算システムの開発を行った。大阪大学 D3 センターのスーパーコンピュータ SQUID を用い、エネルギー0.01 eV～10 MeV、照射角度 $\cos\theta$ =0～1（40 群）の範囲でポイントソースデータを PHITS で計算したデータベースを構築した。このデータベースをもとに球モデルの回転・重ね合わせにより線量分布を再現する手法を提案した結果、PHITS と比較して計算時間を約 100 倍短縮しながら脳細胞で 9.5%（相関係数 0.966）の精度を達成した。今後は、頭蓋骨部分の誤差低減のためのフィルター導入とデータセット細分化を進めるとともに、本手法を最適化アルゴリズムや実際の MRI/CT データへ適用することで、深部がんに対する BNCT 照射プロトコルの確立を目指す。さらに薬物動態（腫瘍/正常組織ホウ素濃度比: T/N 比）などの臨床パラメータを加えた包括的な深部がん照射プロトコルの策定へと発展させる予定である。

参考文献

(1) Center for Cancer Control and Information Services, National Cancer Center, Monitoring of Cancer Incidence in Japan - Survival 2009-2011 Report (2020).

(2) INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY, Advances in Boron Neutron Capture Therapy, IAEA, Vienna (2023).

(3) Y. Wang et al., Development of an automatic optimization program for the weight of multi-field irradiation in BNCT based on a genetic algorithm, Journal of Nuclear Science and Technology (2024).

(4) X. Wang et al., Enhanced difference ghost shuffle U-Net: A hybrid Monte Carlo deep learning denoiser for BNCT dose calculation, Medical Physics, 52(12), e70100 (2025).

半導体光学冷却に向けたホストゲスト構造の ハロゲン化ペロブスカイト結晶の冷却能力評価

田中 大地
大阪大学 大学院工学研究科

1. はじめに

光を半導体に照射することで温度を下げる「半導体光学冷却」は電気的配線が不要であることに加えて、冷媒やコンプレッサーを使用しないためコンパクトかつ無振動無冷媒非接触の冷却装置の実現が期待できる。冷却デバイスの振動除去は高性能な測定装置の開発にも貢献できる。

半導体では、フォトルミネッセンス (PL) と呼ばれる、光吸収により励起されたキャリアが再結合する際に光子を放出する現象が見られる。一般的には、PL 光の光子のエネルギーが励起光子より低い、ストークスシフトが生じる。一方で図 1 のように励起光子より高いエネルギーの光子を放出する過程をアンチストークスシフトという。励起光の照射により生成されるキャリアに半導体結晶の格子振動エネルギーが付与されるため、発光とともに冷却効果が生じる。しかし、励起したキャリアがすべて光子として放出されるわけではない。欠陥等が原因で量子効率が低く、別途熱エネルギーに変換される場合は十分な冷却能力を得ることができない。半導体に吸収された励起光子数に対する放出される光子数で表される、外部量子効率 (EQE) は 100% に極めて漸近する必要があると言われている。

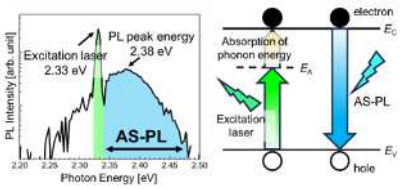


図 1：アンチストークスシフト

ハロゲン化鉛ペロブスカイト複合材料の $CsPbBr_3/Cs_4PbBr_6$ は 90% を超える高い EQE を持ち、アンチストークスシフトが確認された報告もあり、光学冷却実現に向けて注目されている。$CsPbBr_3$ は高い量子効率を持つが、安定性が低く空気や湿気にさらされると量子効率が低下する。そのため、高い安定性と広いバンドギャップを持つ Cs_4PbBr_6 結晶内に $CsPbBr_3$ 量子ドットが存在するホストゲスト構造の結晶を使用している (図 2 参考)。この結晶では発光冷却が確認されたという報告もされている。

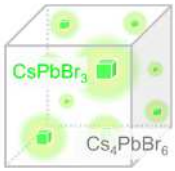


図 2：ホストゲスト構造結晶のイメージ図

しかし、発光冷却に向けて適切な材料特性や励起光強度に関しては未だ議論が続いている。その原因として PL に関する物理メカニズムが不透明であることがあげられる。ペロブスカイトの持つ高い量子効率とホストゲスト構造という特異な結晶構造の影響で、複雑な光学プロセスが形成されており、その解析は容易ではない。また、励起強度が増すと、励起キャリアが基底状態に戻る際に第三のキャリアを励起するオージェ再結合といった過程も確認されている。非輻射な過程なため、光学冷却実現にむけては弊害となる現象と考えられているが、定量的な評価は十分に行われていない。

PL の物理的メカニズムを解析することは、光学冷却の実現に向けた適切な条件を議論する上で不可欠である。そこで本研究ではキャリア

の挙動の数理モデルを構築し、PL における半導体内部の物理メカニズムの解明を目指す。

2. 複雑な発光機構とモンテカルロ法

2.1 フォトンリサイクリング(PR)現象

励起したキャリアが再結合し、生成された光子は全て結晶外に取り出されるわけではない。結晶から取り出される前に再吸収される現象のことを自己吸収効果という。自己吸収された光子は再びキャリアを励起し、そのキャリアは再び光子を生成する。図 3 のように光子の生成と吸収を繰り返す現象をフォトンリサイクリング(PR) 効果という。図 4 は EQE の内部量子効率 (IQE) 依存性をシミュレーションした結果である。IQE は励起したキャリアが輻射再結合する確率であり、結晶品質等により決定する。IQE が低い領域では、非輻射再結合が支配的な過程なため、PR 効果は光学特性にほとんど影響を与えない。一方で本研究では、高い量子効率は必須条件である。この領域では PR 効果が光学特性に大きく影響を与える。このように本研究のモデルでは繰り返す含む非線形な光学過程を考えなければならない。

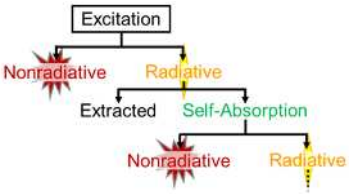


図 3：PR 効果のイメージ図

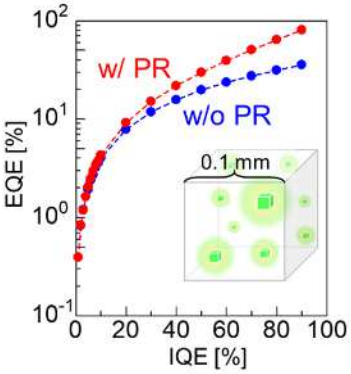


図 4：EQE の IQE 依存性

2.2 ゲスト結晶の不均一性

ホストゲスト構造のゲスト材料であり、発光中心でもある $CsPbBr_3$ 量子ドットは、粒径・空間分布が不均一な状態で存在する。粒径が小さくなると、量子効果によりドットの遷移エネルギーが高くなる。そのため、各ドットにより遷移エネルギーは不均一な値をとると考えられる。受光・発光特性が粒径により変化するため、平均化したモデルでは実際の挙動を再現できない。

2.3 モンテカルロ法

説明したように光学過程の非線形性とパラメータの不均一性という 2 点により、本研究で扱うモデルは、解析的なアプローチで解くことが非常に困難となっている。そこで、本研究ではモンテカルロシミュレーションと呼ばれる、乱数を使って現実の問題を数値的に再現し、試行を繰り返すことで統計学的に結果を予測する手法を採用した。例えば、今回の計算では、結晶に励起光子 1 つ照射し、試行を行い、結果を得る。また、1 つ照射し、その結果を得る。繰り返しの試行で得られた結果を足し合わせることで、冷却能を算出した。この方法では、各事象を逐次、確率過程としてシミュレーションするため、繰り返しを含む複雑な過程も再現可能である。また、試行ごとに分布に基づき、ランダムにパラメータを与えることで、ゲスト結晶の不均一性も自然に表現できる。しかし、精度の高い結果を得るためには試行回数を増やすことが必須であり、計算時間の増大がネックとなってしまう。

3. オージェ再結合の評価

励起強度を上げると、より多くの冷却ゲインを得られると考えられる。しかし、オージェ再結合により、ある領域から量子効率が低下し、冷却ゲインが低下する、もしくは加熱へと転換してしまう。これまでオージェ再結合は定量的

な理解は十分に行われてこなかった。これを評価することは、適切な励起光強度や冷却性能の上限などを評価することに繋がる。

本研究では、既に励起キャリアが存在するドットに、別のキャリアが励起した場合、オージェ再結合するというモデルを採用した。結晶中のある空間 V (体積 V [nm^3]) を考える。また、結晶を体積ごとに切り分けることにより、励起光照射面か裏面かなどの空間的異方性も解析可能である。$CsPbBr_3$ 量子ドットが体積比 1% で存在するとしているため、空間 V 中に存在する量子ドット数 N が求まる。

$$N = \frac{0.01\,V}{\frac{4}{3}\pi\bar{r}^3} \tag{1}$$

$\bar{r}$ [nm] は量子ドットの粒径の平均値である。波長 532nm の励起光 W (強度 W [mW]) を結晶に照射すると考える。この時、任意時間 T [ns] あたりに照射されている光子数 X と W の関係は電子素量 e を用いて次式で表せられる。

$$W = \frac{2.33\,\mathrm{e} \times 10^{-3}}{T \times 10^{-9}} \simeq \frac{3.73\,X}{T} \times 10^{-7} \tag{2}$$

$$T \simeq \frac{3.73\,X}{W} \times 10^{-7} \tag{3}$$

ここで、モンテカルロシミュレーションを用いて $CsPbBr_3/Cs_4PbBr_6$ 結晶に X 個の光子を投入するという試行を行う。その結果、空間 V にてオージェ再結合せずに励起が起きた数を N_{ex} とする。この時、空間 V 中に存在する任意のドットが単位時間あたりにオージェ再結合せずに励起する確率 β [ns^{-1}] は、

$$\beta = \frac{N_{ex}}{NT} \tag{4}$$

となる。励起状態から基底状態に遷移する時間であるキャリア寿命 τ [ns]を用いると、任意のドットが基底状態にいる確率 η_X は次のようになる。

$$\eta_X = \frac{1}{1+\beta\tau} \tag{5}$$

$CsPbBr_3$ ナノ結晶が全て基底状態にいるという状態からシミュレーションを開始した場合に求まる β の値は定常状態における値と異なる。照射直後は元々キャリアが存在するといったことが無いため、吸収された光子はオージェ再結合を経由することなく、再結合する。つまり、定常状態と比べて基底状態からの励起が多くなる。そのため、ナノ結晶が全て基底状態にいるとして求められる β の値は高くなり、吸収された光子が基底状態のナノ結晶に吸収される確率 は低くなる。ここで求められた確率を元にもう一度、X 個の光子を投入するという試行を行う。その結果得られる値を元にもう一度といった用に繰り返していけば、目的の値に収束していくと考えられる。

図 5 は 10 W の励起光を照射するとし、$X = 10^6, 10^8$ と設定し、$1/1+\beta\tau$を求める計算を各々 100 回繰り返した結果である。ただし、計算コストを削るために、光取り出しや吸収の空間的な異方性は考えず判定しており、空間を切り分けることなく一様にオージェ再結合の影響を計算している。

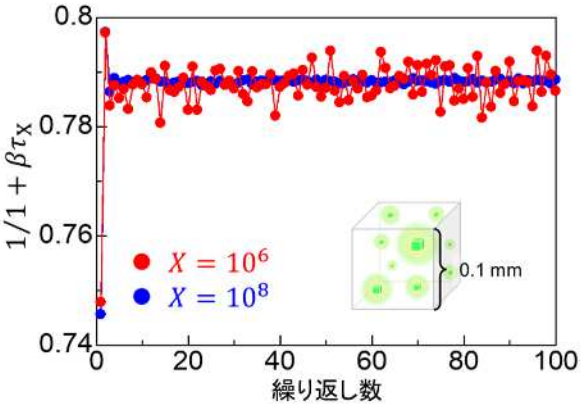


図 5：1/(1+β) τ の収束結果

試行回数が少ない場合は乱数による誤差の影響も大きく、なかなか収束しないことが確認された。正確に求める為には十分大きな X で複数回試行を行うことが必須である。しかし、計算時間が増大してしまうため、オージェ再結合のシミュレーションを現実的な時間内で収束させることは厳しかった。

4. 大規模計算による計算時間の短縮

4.1 並列計算

3 章にて説明した計算時間の増大という課題を解決するために、大規模計算システムを利用した。モンテカルロ法では、各光子が独立して計算されるため並列化による高速化との相性が良い。計算を組み立てるにあたっては、各試行が独立した構造を維持できるように注意した。独立したスレッド構造にすることで、スレッドにおいて他スレッドの結果待ちによる遅延が発生しないようにした。具体的には、各スレッドに結果を一時保存するバッファーを用意することで書き込み競合を回避するなどといったことである。また、乱数の生成もスレッド毎で管理することで、乱数系列の重複を回避し、試行回数を確実に稼げるように注意している。

図 6 は $X = 10^4$ の試行を 1 回繰り返す計算に対する強スケーリングを行った結果である。計算時間の短縮が確認され、計算時間と並列化数は反比例の関係であり、理想的な高速化が行えたと考えている。

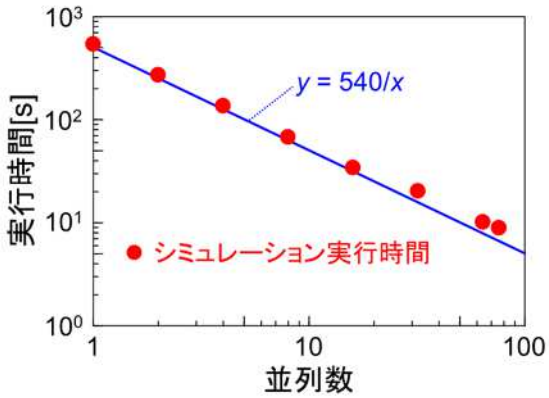


図 6：強スケーリングの結果(1 ノード)

4.2 オージェ再結合の評価

計算時間が短縮したことにより、オージェ再結合のシミュレーションを現実的な時間内で収束させることが可能となった。図 7 は長辺が 10 mm、短辺が 0.1 mm の板状の結晶を想定し、励起光強度を変化させたときの冷却効率 COP (Coefficient Of Performance) を求めたものである。一辺が 0.01 mm の立方体状の空間に切り分けてキャリア密度の空間異方性も考慮している。励起強度が増加すると徐々に冷却効率が低下し、その結果得られる冷却ゲインが減少することが分かる。このように、各条件下で適切な励起光強度や冷却性能の上限などを評価することが可能となった。

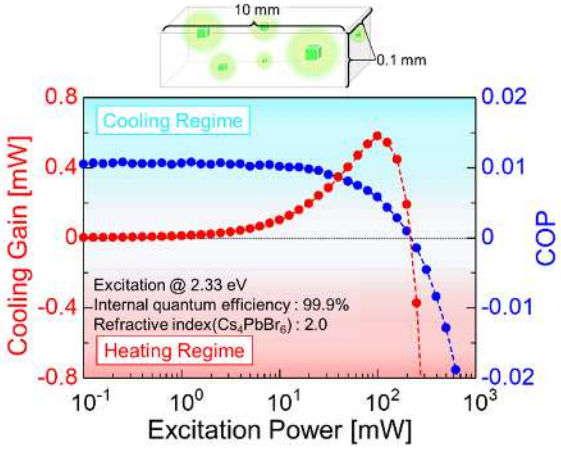


図 7：冷却ゲインおよび COP の励起光強度依存性のシミュレーション結果

5. おわりに

オージェ再結合を含めたモデルによるモンテカルロシミュレーションについての研究を行った。オージェ再結合を評価するためには莫大な試行回数のシミュレーションを行う必要があり、時間内で収束させることは厳しかった。そこで、大規模計算機を用いて計算時間の短縮を行い、各条件下で適切な励起光強度や冷却性能の上限などを評価することが可能となった。

参考文献

(1) Y. Kajino et al., Phys. Rev. Mater. 6, L043001 (2022).

(2) Y. Yamada et al., NANO LETT. 24, 11141 (2024).

(3) L. Liao et al., Crystals. 11, 1132 (2021).

First-principles finite-temperature study of polyethylene using stochastic self consistent harmonic approximation

Samuel Eka Putra Payong Masan, Yoshitada Morikawa
Department of Precision Engineering, Graduate School of Engineering, The University of Osaka

1. Background

Understanding finite-temperature properties of materials from first-principles is essential for predicting their structural, vibrational, and thermodynamic behavior.[1] While density functional theory (DFT) has become a powerful tool for describing materials at the atomic scale, accurate treatment of finite-temperature effects remains challenging because thermal fluctuations and anharmonic interactions are often beyond the harmonic approximation. The quasi-harmonic approximation (QHA) provides a practical approach by incorporating volume-dependent phonon contributions to the free energy;[2] however, it neglects explicit anharmonic effects arising from the interaction between vibrational modes.

The stochastic self-consistent harmonic approximation (SSCHA) provides a framework to include anharmonic effects in finite-temperature simulations by optimizing a temperature-dependent auxiliary force-constant.[3] Unlike QHA, SSCHA accounts for anharmonic renormalization of vibrational modes and allows the exploration of temperature-dependent potential energy landscapes. Recent developments have demonstrated the capability of SSCHA to describe complex anharmonic phenomena, including phonon renormalization, thermal expansion, and structural instabilities. However, the computational cost of SSCHA remains significant because it requires extensive sampling of atomic configurations and evaluation of forces and energies for many displaced structures.

Machine-learning interatomic potentials (MLPs) provide an efficient solution to this limitation by reproducing the accuracy of first-principles calculations while enabling large-scale sampling of the potential energy surface. By combining MLPs with advanced electronic-structure methods, it becomes possible to perform finite-temperature simulations with near first-principles accuracy at a computational cost suitable for extensive thermodynamic calculations.

In this work, we demonstrate the application of SSCHA for investigating the finite-temperature properties of crystalline polyethylene (PE) using a MLP trained on the meta-generalized gradient approximation Strongly Constrained and Appropriately Normed (r^2SCAN) functional. Polyethylene provides an ideal test system because its structural and vibrational properties are strongly influenced by weak intermolecular interactions and anharmonic effects. We examine the temperature-dependent free-energy landscape and vibrational properties obtained from SSCHA simulations.

2. Computational methods

The MLP used in this work is based on the message passing neural network interatomic potential implemented in NequIP.[4] It was trained with r^2SCAN energy and atomic forces of 2500 configurations. Evaluated on an independent test data, the model give

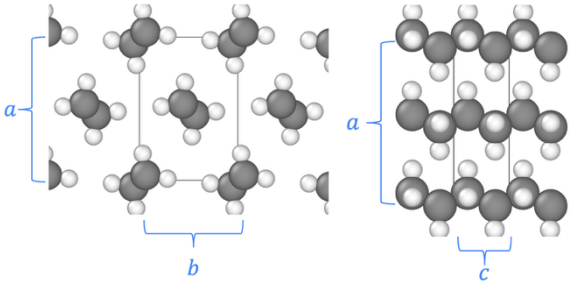


Figure 1 PE crystal structure.

a generalization error of 0.22 eV/atom and 25 meV/Å which are sufficiently small compared to the range of energy and forces sampling during SSCHA calculations.

The SSCHA calculations were performed using the Python-SSCHA package. We have used $2 \times 2 \times 4$ PE supercell throughout our simulations. The SSCHA free energy calculation was performed at 0, 100, 200, and 300 K using 1000 configurations. We have used Vinet equation of state to get the equilibrium PE lattice parameters.

3. Result and discussion

3.1. Free energy profile

Crystalline polyethylene adopts an orthorhombic structure, as illustrated in Figure 1. The crystal is characterized by three lattice parameters, a, b, and c where the c-axis is parallel to the polymer chains, while the a- and b-axes describe the intermolecular packing perpendicular to the chain direction.[5] Owing to the anisotropic nature of the crystal, the intermolecular interactions along the a and b directions are considerably weaker than the covalent bonding along the polymer backbone. Consequently, the temperature dependence of the free energy and vibrational properties is expected to differ among the three lattice directions.

Figure 2 shows the PE free energy profile at different temperature for a, b, and c lattice. The equilibrium structure at each temperature was determined from the minimum of the free-energy curve. At 0 K, the free-energy profiles exhibit well-

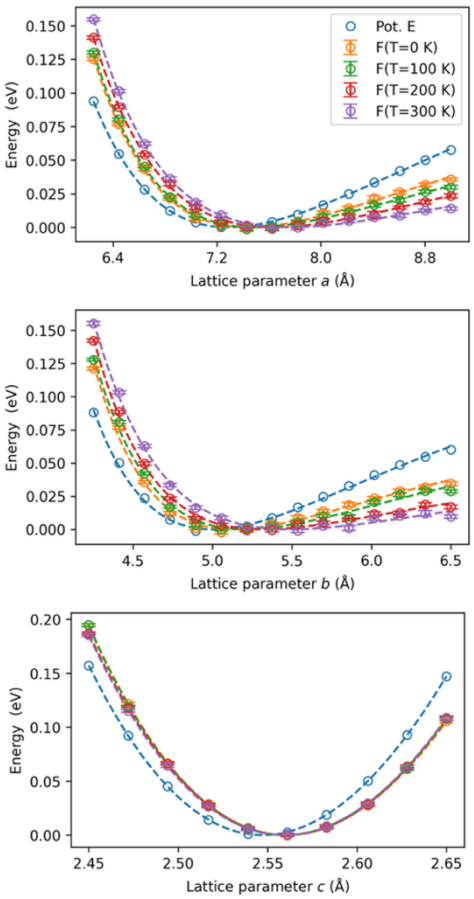


Figure 2: PE free energy profile along a, b, and c lattice. The dashed lines show the equation of state interpolation. The error bars of free energy show the SSCHA statistical error.

defined minima along all three lattice directions, corresponding to the stable equilibrium structure of polyethylene. The positions of these minima are slightly different from those obtained from the static potential energy surface, demonstrating that vibrational contributions play an important role even at low temperatures.

Compared with the potential energy curves, the free-energy profiles show a smoother dependence on the lattice parameters. This behavior originates from the vibrational contribution to the free energy, which incorporates the effects of atomic fluctuations around the equilibrium structure. As temperature increases, the vibrational contribution becomes increasingly significant and modifies the shape of the free-energy landscape. In particular, the minima become broader

and the curvature around the equilibrium position decreases, indicating a softer free-energy surface at elevated temperatures.

The temperature-induced shift of the free-energy minimum directly reflects thermal expansion. As the temperature increases, the equilibrium lattice parameters move toward larger values because the balance between the static energy and vibrational free-energy contributions changes. Therefore, the thermal expansion behavior can be understood as a consequence of the temperature-dependent evolution of the free-energy landscape.[6)]

At higher temperatures, the reduced curvature around the minimum indicates increased structural flexibility and enhanced thermal fluctuations. Such flattening of the free-energy landscape is expected to become increasingly important when approaching structural transformations or melting, where the stability of the crystalline phase is reduced. Although the present analysis focuses on the crystalline phase and does not directly determine the melting transition, the temperature-dependent free-energy landscape provides important insight into the changing stability of the structure under thermal excitation.

The smooth free-energy profiles obtained from the MLP potential demonstrate its capability to reproduce the first-principles-level energy landscape while enabling extensive finite-temperature sampling. These results establish a foundation for further investigation of thermal expansion, vibrational properties, and anharmonic effects in polyethylene using the SSCHA framework.

3.2. Temperature-dependent vibration

Figure 3 compares the SSCHA phonon dispersions of crystalline polyethylene at 0 and 300 K. The overall topology of the phonon spectrum is preserved upon heating, and no imaginary phonon frequencies are observed throughout the Brillouin zone. This confirms that the crystalline phase remains dynamically stable

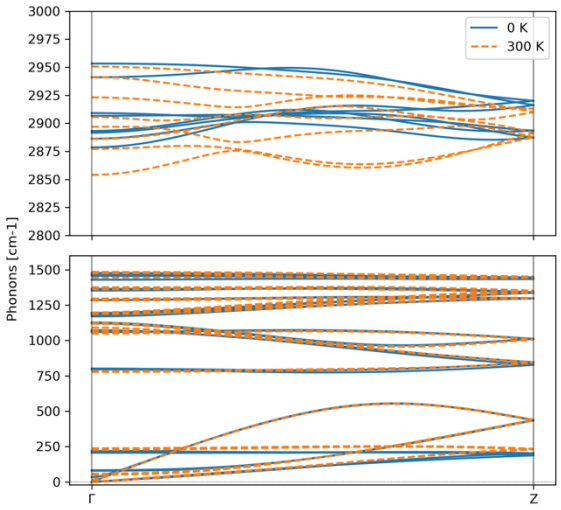


Figure 3: SSCHA auxiliary phonon dispersion of PE at 0 and 300 K.

at 300 K, while finite-temperature effects primarily manifest as the renormalization of phonon frequencies rather than qualitative changes in the vibrational spectrum.[7)]

The most pronounced temperature dependence is found in the low-frequency region below approximately 250 cm^{-1}. Several acoustic and low-energy optical branches exhibit appreciable frequency shifts together with changes in their dispersion. These modes correspond predominantly to collective molecular motions governed by relatively weak intermolecular van der Waals interactions. Consequently, they are particularly sensitive to thermal expansion and anharmonic lattice vibrations, making them the primary contributors to the temperature dependence of the vibrational free energy.

Noticeable phonon renormalization is also observed in the high-frequency C—H stretching region between approximately 2850 and 2950 cm^{-1}. Several stretching branches soften with increasing temperature, while their overall dispersion is preserved. The observed shifts originate from the anharmonicity of the C—H stretching potential and the coupling between intramolecular vibrations and thermally expanded crystal structures. Although the covalent C—H bonds remain intact, finite-temperature anharmonic effects

produce measurable changes in their vibrational frequencies.

In comparison, the intermediate-frequency modes between approximately 800 and 1500 cm^{-1} exhibit relatively smaller temperature-induced changes. These modes, which are mainly associated with C—C skeletal vibrations together with CH_2 bending, wagging, and twisting motions, retain nearly the same dispersion throughout the Brillouin zone. The smaller renormalization indicates that these intramolecular vibrations are less sensitive to thermal fluctuations than the low-frequency intermolecular modes.

The mode-dependent phonon renormalization illustrates the importance of explicitly including anharmonic effects in finite-temperature vibrational calculations. While the overall vibrational spectrum remains qualitatively unchanged, the selective shifts of both the low-frequency intermolecular modes and the high-frequency C—H stretching modes contribute to the temperature-dependent vibrational free energy. These results demonstrate that the SSCHA framework captures finite-temperature phonon renormalization while maintaining the dynamical stability of crystalline polyethylene.

4. Conclusion

In this work, we demonstrated the application of the SSCHA for investigating the finite-temperature properties of crystalline polyethylene using a machine-learning interatomic potential trained on the r^2SCAN functional. The calculated free-energy profiles provide a direct description of the temperature-dependent equilibrium structure and illustrate the origin of thermal expansion through the evolution of the free-energy landscape. Furthermore, the temperature-dependent phonon dispersions reveal mode-selective anharmonic renormalization while confirming the dynamical stability of the crystal up to 300 K. These results demonstrate that the combination of SSCHA and machine-learning potentials provides an efficient and accurate framework for first-principles finite-temperature simulations of molecular crystals, enabling large-scale anharmonic calculations that would otherwise be computationally prohibitive.

Reference

(1) Bartel, “Review of computational approaches to predict the thermodynamic stability of inorganic solids”, *J. Mater. Sci.*, **57**, 10475–10498 (2022).

(2) Togo, *et al.,* “Implementation strategies in phonopy and phono3py”. *J. Phys.:Condens. Matter.,* **35**, 353001 (2023)

(3) Monacelli, *et al.,* “The stochastic self-consistent harmonic approximation: calculating vibrational properties of materials with full quantum and anharmonic effects”, *J. Phys.:Condens. Matter.,* **33**, 363001 (2021)

(4) Batzner, *et al.,* “E(3)-equivariant graph neural networks for data-efficient and accurate interatomic potentials”, *Nat. Commun.*, **13**, 2453 (2022)

(5) Kawaguchi, *et al.*, “The Crystal Structure of Polyethylene at 4.5°K (Commemoration Issue Dedicated to Professor Keinosuke Kobayashi on the Occasion of His Retirement)”, *Bull. Inst. Chem. Res., Kyoto Univ.*, **55**, 054115 (1977)

(6) Davis, *et al.*, “Thermal Expansion of Polyethylene Unit Cell: Effect of Lamella Thickness”, *J. Appl. Phys.*, **41**, 4316-4326 (1970)

(7) Takahashi, “Infrared and Raman Spectra of Polyethylene and Polyethylene-d4 in He Temperature Region (5—300 K)”, *Macromolecules*, **34**, 7836—7840 (2001)

(8) Keçeli, *et al.*, “First-principles calculations on anharmonic vibrational frequencies of polyethylene and polyacetylene in the Γ approximation”, *J. Chem. Phys.*, **133**, 034110 (2010)

センター報告

2025 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 2025 年 4 月から 2026 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] Kodai Nonomura, Tsukasa Hori, Yinan Yang, Shinya Sawada, Fumiteru Akamatsu, “The effect of hydrocarbon–NOx interactions in the low-to-intermediate temperature range on the prediction of combustion behavior in a 10 kW ammonia/City gas co-firing furnace", Fuel, 416, 138441, 2026 年 7 月.

[2] Fumiki Takano, Masaki Hiratsuka, Kazuaki Z. Takahashi, “Finite-size effects on lamellar morphology and crystallinity in a crystallizable FENE-LJ polymer model", Scientific Reports, 16, 15368, 2026, Apr. 1 2026.

[3] 杉村奈都子, “粒子法を用いたメソスケールトライボロジーシミュレーション", トライボロジスト, Vol.70,8,507-514, 2025 年 8 月.

[4] 山口栄治,福田朝生, “三次元固液連成数値解析による濃度の異なる単一粒径土砂流の乱れ構造の分析", 土木学会論文集, 82 巻・16 号・25-16037, 2026 年 2 月.

[5] Zhan Jin, Masaki Kando, Yan-Jun Gu, Kai Huang, Nobuhiko Nakanii, Izuru Daito, Zhenzhe Lei, Shingo Sato, Hiroaki Sano, Toshiya Muto, Shigeru Yamamoto, Tomonao Hosokai, “Optimized laser wakefield acceleration: Generating stable, high-energy, monoenergetic electron beams and demonstrating extreme-ultraviolet free-electron lasers", PHYSICAL REVIEW RESEARCH, 8,013,207, Feb. 2026.

[6] Yakhshimurodov U, Yamashita K, Kawamura T, Miki K, Taguchi T, Saito S, Abugessaisa I, Miyagawa S, “In vitro polarized macrophages ameliorate adverse cardiac remodeling in a mouse model of transverse aortic constriction", Regenerative Therapy, Vol. 31, 2026, 101061, 2026 Jan 9.

[7] Andrew Marian Zajch, Yohei Yamaguchi, Keita Shono, Tomoki Shigematsu, Hideaki Uchida, Yoshiyuki Shimoda, “Temperature-time evaluation as a tool for ‘future-proofing’ urban building energy modelling (UBEM)", Energy and Buildings, 116033, Jun-25.

[8] Ritsuki Tanaka, Soichiro Kawamorita, Takeshi Naota, Daisuke Shiomi, Yui Tanaka, Kazunobu Sato, Nobuto Yoshinari, Shuichi Suzuki, “Synthesis and properties of dimethyldihydrophenazine radical cation with camphorsulfonate ion", Chemistry Letters, 54, 12, upaf210, Dec. 2025.

[9] Hiroyuki Ikagawa, Mamoru Tamura, Hajime Ishihara, “Electronically Forbidden Raman Pathways Create a New Contrast Mechanism in Single-Molecule TERS", Nano Letters, 未定(Accept済み), 未定(Accept済み).

[10] Wataru Shimooka, Hirotaka Kitoh-Nishioka, Shigeru Itoh, Akihiro Kimura, “Light harvesting mechanism of the multi-pigment reaction center with three chlorophyll species adapted to both visible and far-red light", Photosynthesis Research, Vol.106, no.8, 28-Jan-26.

[11] Masayuki Ono, Masaya Yamaguchi, Daisuke Motooka, Yujiro Hirose, Kotaro Higashi, Tomoko Sumitomo, Tohru Miyoshi-Akiyama, Rumi Okuno, Takahiro Yamaguchi, Ryuji Kawahara, Hitoshi Otsuka, Noriko Nakanishi, Yu

Kazawa, Chikara Nakagawa, Ryo Yamaguchi, Hiroo Sakai, Yuko Matsumoto, Tadayoshi Ikebe, Shigetada Kawabata, “Identifying genetic variations in emm89 Streptococcus pyogenes associated with severe invasive infections", eLife, 14:RP101938, July. 2025.

[12] Kazuo Nakazawa, Tohru Suzuki, Shin Inada, Nitaro Shibata, Kenshi Takayama, Takeshi Yamaguchi, Ryo Haraguchi, Naoki Tomii, Takashi Ashihara, “Development of paroxysmal atrial fibrillation in a virtual 3D atrial model: Visualization of excitation propagation using large-scale computer simulation.", Bulletin of Morinomiya University of Medical Sciences, Vol.20, 2026.

[13] Haruka Kubo, Ryusei Oketani, Ichiro Hisaki, “Desolvation-Induced Network Reformation and Cracking in the Single Crystals of Hydrogen-Bonded Frameworks Composed of Tetraazaanthraquinone and Anthraquinone Derivatives", Angew. Chem. Int. Ed., 64, e202510977, 2025/06/23.

[14] C. Kaewnuratchadasorn, J. Wang, C.W. Kim, Y. Yang, “Two-Dimensional Vehicle-Bridge Interaction Neural Operator for Digital Twin of Bridge Structures", Structural Control and Health Monitoring, 2025(1): 1031214, 2025.

[15] Meliton R. Chiong III, Atsushi Nakajima, Yoshitada Morikawa, “Clarifying photodetachment in Al13- anions and photoionization in Al13 neutrals using diffusion Monte Carlo", Journal of Physical Chemistry A, 139, 1851-1860, Feb. 2026.

[16] Shinichiro Akiyama, Raghav G. Jha, Jun Maeda, Yuya Tanizaki, Judah Unmuth-Yockey, “Tensor renormalization group approach to critical phenomena via symmetry-twisted partition functions", Physical Review D, 掲載決定.

[17] Kawai, K., H. Matsui, “Contributions of dust source regions to ice nucleating particles in mixed-phase clouds simulated with a global climate-aerosol model", Journal of Climate, 38, 4925-4939, Sep-25.

[18] Sora Nakasone, Asato Inoue, Ryo Kurihara, Hazuki Irie, Takashi Harada, Shuji Nakanishi, Kazuhide Kamiya, “Carbon Monoxide Reduction to Multicarbon Products at Ampere-Level Current Densities: A Comparative Assessment with CO2 Reduction Reactions", ACS Applied Energy Materials, Vol.8, No.22, 16802-16810, Aug. 2025.

[19] Hyebin Yoo, Taisuke Nakahama, Reiichi Sugihara, Yu Gao, Yuta Ishizawa, Jingqi Yang, Zihan Ni, Miyu Iwasaki, Yuki Kato, and Yukio Kawahara, “Aberrant multicellular interferon signaling underlies Adar1 mutation-driven Aicardi-Goutieres syndromelike encephalopathy", Cell Reports, vol. 45, issue 4, 117113, Apr. 2026.

[20] Claudio Bonanno, Margarita Garcia Perez, Antonio Gonzalez-Arroyo, Ken-Ichi Ishikawa, Masanori Okawa, “Non-perturbative determination of meson masses and low-energy constants in large-N QCD", Journal of High Energy Physics (2025)., Vol. 2025, no. 96, 2025.

[21] Hiroaki Tatsumi, Shunya Nitta, Atsushi M. Ito, Arimichi Takayama, Makoto Takahashi, Seongjae Moon, Eiki Tsushima, Hiroshi Nishikawa, “Experimental and first-principles insights into Ti-mediated Cu-Si3N4 interfaces for high-reliability electronic substrates", Acta Materialia, Vol.304, p.121813, 2026.

[22] S. Isayama, S. Matsukiyo, T. Sano and S. H. Chen, “Relativistic multistage resonant and trailing-field acceleration induced by large-amplitude Alfven waves in a strong magnetic field", Phys. Rev. E, 112, 055201, Nov. 2025.

[23] 朱家佑弥, 小池信昭, “逐次型データ同化津波予測における観測点選択に関する研究", 土木学会論文集, 81(17), 2025 年 11 月.

[24] Yuri Ishikura, Erika Uehara, Yuji Higuchi, “Decoupling the Structural Origins of Strength and Toughness in Industrially Relevant Heterogeneous Elastomers", Soft Matter, 2026, 22, 2704.

[25] Ken'ichiro Nakazato, Hajime Togashi, Kohsuke Sumiyoshi, Hideyuki Suzuki, “Role of Symmetry Energy at

Subnuclear Densities in Protoneutron Star Crusts", Progress of Theoretical and Experimental Physics, Vol.2025, No.12, p.123E01, Dec.2025.

[26] Yuto Sugimoto, Shinichiro Akiyama, Yoshinobu Kuramashi, “Phase structure of (3+1)-dimensional dense two-color QCD at T=0 in the strong coupling limit with the tensor renormalization group", Physical Review D, vol.113, no.3, ref.034503, Feb. 2026.

[27] T. Hiejima, H. Mamoru, “Compressibility effects of supersonic isentropic mixing layers", Physics of Fluids, 37 [7], 071707 (7 pages), Jul-25.

[28] Kunichika Tsumoto, Takao Shimamoto, Yuma Aoji, Yukiko Himeno, Yu-hichi 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, Vol.261, 108587, Apr. 2025.

[29] Bahrul Jalaali, Kie Okabayashi, “A priori assessment of rotational invariance in multiscale convolutional neural network-based subgrid-scale model for wall-bounded turbulent flows", Journal of Turbulence, DOI: https://doi.org/10.1080/14685248.2026.2634273, Feb-26.

[30] Daisuke Murayama, Satoshi Ohmura, Ryosuke Kodama, and Norimasa Ozaki, “Anisotropic hydrogen diffusivity in the superionic phase of C–H–O ternary system in ice giants", Physical Review B, 112, 214108, Dec. 2025.

[31] Reza Aulia Rahman, Tsutomu Uenohara, Yasuhiro Mizutani, Yasuhiro Takaya, “Second Harmonic Generation-Enhanced Photonic Nanojet Machining in Water Medium with Position Control for Submicrometer Ablation", Nanomanufacturing and Metrology, 8, 32, Dec. 2025.

[32] 鹿島千尋, 中谷祐介, “回帰木を用いた面源負荷量算定式のパラメータ影響度の解析", 土木学会論文集, Vol.82・No.16・25-16110, Feb. 2026.

[33] Y. Fukushima and T. Yoshidome, “Deep GIST: A Deep-Learning Model for Predicting the Distribution of Hydration Thermodynamics around Proteins", Journal of Chemical Information and Modeling, Vol. 66, 1429-1444, Feb. 2026.

[34] Akio Ishii, Keitaro Horikawa, “Quantitative analysis of hydrogen absorption in pure aluminum: Theoretical and experimental approaches", Materialia, Vol 42, page 102449, June, 2025.

[35] Yuichiro Toichi, Runa Okuda, Isamu Yamamoto, Shigemi Terakawa, Kazuyuki Sakamoto, “Electronic Structures of Thallium Islands Grown on Si(111)", Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 94, No. 12, p.123703, Nov. 2025.

[36] 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.

[37] Takayuki Myo, Mengjiao Lyu, Qing Zhao, Masahiro Isaka, Niu Wan, Hiroki Takemoto, Hisashi Horiuchi, Hiroshi Toki, Akinobu Dote, “Quadrupole transitions of 10C and their isospin symmetry with 10Be", Physical Review C, Vol.113, No.1, p.014301, Jan. 2026.

[38] Yinan Yang, Tsukasa Hori, Shinya Sawada, Fumiteru Akamatsu, “Simulation-based study of nitrogen sources and reaction pathways for NO formation in a 10-kW ammonia co-combustion furnace", Combustion and Flame, 286, 114788, 2026 年 4 月.

[39] 前田 憲紀, 福田 朝生, “粘性土河床の侵食に費やされるエネルギーに対する河床凹凸スペクトルの効果", 土木学会論文集, 82 巻・16 号・25-15053, 2026 年 2 月.

[40] L R Yin, Y J Gu, X F Li, Z Jin, S V Bulanov, T Hosokai, Q Kong, “A novel diagnostic method for electrons accelerated from relativistic magnetic reconnection via electron spin polarization", Plasma Physics and Controlled Fusion, 67, 105019, Oct. 2025.

[41] Ruifeng Shu, Takeshi Naota, Masatoshi Kozaki, Daisuke Shiomi, Shuichi Suzuki, “Room-Temperature Paramagnetic-to-Diamagnetic Switching Behavior in an Open-Shell Ionic Liquid with a Tetracyanoquinodimethane Radical Anion Salt", Chemistry A European Journal, 31, 65, e01449, Nov. 2025.

[42] Ryusei Oketani, Musashi Okada, Kentaro Takaji, Hajime Shigemitsu, Toshiyuki Kida, Takuya Nakashima, Ichiro Hisaki, “Spontaneous Chiral Symmetry Breaking in a Single Crystal", Chem. Sci., 16, 17621, 2025/08/19.

[43] X. Tian, J. Wang, X. Lu, “Exact Dirichlet boundary multi-resolution hash encoding solver for structures", Computer-Aided Civil and Infrastructure Engineering, 40(25), 4172-4192, 2025.

[44] Ueda, S., A. Sakai, S. Ohata, P. Khalzan, S. Matoba, K. Kondo, H. Matsui, “Concentration and size distribution of black carbon over the ablation area of Potanin glacier: Enrichment ability of surface weathering granular ice of water-insoluble particles with snow/ice melting", Atmospheric Chemistry and Physics, 26, 3167-3184, Mar-26.

[45] Kou Nishikubo, Kaho Hitomi, Reiichi Sugihara, Kyoka Higuchi, Lili Quan, Akiko Uyeda, Kentaro Okuyama, Masaaki Nameta, Shinsuke Shibata, Yuki Kato, and Rieko Muramatsu, “Integrated respiratory functions predict myelin status in the mouse brain", npj Biomedical Innovations, vol. 3, 9, Feb. 2026.

[46] 小池信昭, “経験的地震情報とリアルタイム地震情報をアンサンブルに設定した逐次型データ同化津波予測", 土木学会論文集, 81(17), 2025 年 11 月.

[47] T. Hiejima, “Onset of spiral vortex breakdown in supersonic flows", Journal of Fluid Mechanics, (in press), Apr-26.

[48] Ryosei Kojima, Yuki Saito, Kie Okabayashi, “Reconstruction of three-dimensional structures from two-dimensional sectional flow fields of cavitating turbulent flows using machine-learning-based super-resolution", Journal of Fluids Engineering, Vol. 148, Issue 2, No. 021209, Feb. 2026.

[49] 鹿島千尋, 中谷祐介, “瀬戸内海の海水交換：高解像三次元流動モデルを用いた数値解析", 土木学会論文集, Vol.81・No.17・25-17172, Nov. 2025.

[50] Takayuki Myo, Mengjiao Lyu, Qing Zhao, Masahiro Isaka, Niu Wan, Hiroki Takemoto, Hisashi Horiuchi, Akinobu Dote, “Shell and cluster structures in 20Ne in the variation of multiple bases of the antisymmetrized molecular dynamics", Physical Review C, Vol.112, No.6, p.064324, Dec. 2025.

[51] Ruifeng Shu, Takeshi Naota, Daisuke Shiomi, Shuichi Suzuki, “Multistage control of near-infrared and magnetic properties via π-dimer modulation in TCNQ radical anion salts", Chemical Communications, 61, 87, 17021, Sep. 2025.

[52] Shuichi Suzuki, Souta Uno, Tsuyoshi Murata, Yasushi Morita, Shin-ichiro Kato, Shun Dekura, Tomoyuki Akutagawa, Soichiro Kawamorita, Takeshi Naota, “Synthesis and Near-Infrared to Infrared Absorption Properties of a Hexabenzocoronene Radical Cation with a Double-Concave Structure", ChemistryEurope, 3, 6, e202500089, Nov. 2025.

[53] Kento Hashimoto, Toshiaki Fukada, and Shintaro Takeuchi, “Sedimentation of conductive particles in a two-dimensional enclosure with conjugate heat transfer including surface-to-surface radiation", International Journal

of Heat and Mass Transfer, Vol. 251, No. 127194, Jun. 2025.

[54] Bahrul Jalaali, Kie Okabayashi, “Multiscale convolutional neural networks for subgrid-scale modeling in large-eddy simulation", Physics of Fluids, Vol. 37, No. 065103, Jun. 2025.

[55] Shungo Okamura, Kie Okabayashi, “Twin experiments for data assimilation of cavitating flow around a hydrofoil", International Journal of Multiphase Flow, Vol.188, No. 105201, Jul. 2025.

[56] Hyunseo Park, Shui Kohama, A. Koichi Hayashi, Nobuyuki Tsuboi, “Numerical simulation on two-phase detonation at various equivalence ratios using eulerian-eulerian model for n-heptane fuel", Science and Technology of Energetic Material, Vol. 85, No.5, pp.91-97, 2025.6.11. https://doi.org/10.34571/stem.86.5_98.

[57] Yi Zhou, Taojun Hu, Yuji Sakamoto, Ao Huang, Xiao-Hua Zhou, Satoshi Hattori, “Copas-Heckman-Type Sensitivity Analysis for Publication Bias in Rare-Event Meta-Analysis Under Generalized Linear Mixed Models", Statistics in Medicine, 45.10-12.e70595, May.2026.

２．国際会議会議録掲載論文

[1] Qi Cao, Andrew Gambardella, Takeshi Kojima, Yutaka Matsuo, Yusuke Iwasawa, “Semantic Token Clustering for Efficient Uncertainty Quantification in Large Language Models", The 19th Conference of the European Chapter of the Association for Computational Linguistics (EACL 2026), Volume 2: Short Papers, pages 682-696, Mar-26.

[2] Tsukasa Hori, Kaname Kodama, Tadashi Ohnishi, Masanobu Kawazoe, Hiroichi Hase, Hiroyuki Kamura, Kaito Tsurusaki, Shinya Sawada, Fumiteru Akamatsu, “Numerical analysis of the temperature rise process in a metal disk heated by an impinging partially-premixed jet flame", 11th JSME-KSME Thermal and Fluids Engineering Conference (J-K TFEC11), Oct. 2025.

[3] Tsukasa Hori Tomoyasu Omoto Yudai Nonomura Rintaro Kagawa Yinan Yang, Deboprasad Talukdar, Shogo Wakashiro, Kokoro Konishi, Noriaki Nakatsuka, Ryutaro Magoshi Shinya Sawada Fumiteru Akamatsu, “Acceleration of Detailed Chemical Reaction Calculations Using GPU and High-Speed ODE Solvers with Application to Ammonia Combustion Furnaces", ICNC2025, Oct. 2025.

[4] Ryan Ramos, Vladan Stojnić Giorgos Kordopatis-Zilos, Yuta Nakashima, Giorgos Tolias, Noa Garcia, “Processing and acquisition traces in visual encoders: What does CLIP know about your camera?", EEE/CVF International Conference on Computer Vision, Oct. 2025.

[5] Kyosuke Mikami, Taimei Miyagawa, Wataru Kurebayashi, Naoki Serizawa, Tatsuhiko Teraoka, Minori Shirota, “Effect of the Number of V-shaped Slits on Atomization near an Air Spray Gun Nozzle", 22nd International Conference on Flow Dynamics (ICFD2025), OS27-38, Nov. 2025.

[6] Ippei Shibata, Koichi Tsujimoto, Toshitake Ando, Mamoru Takahashi, “Improved heat transfer performance of multiple impinging jets with individually controlled intermittent jets based on DNS", Proceedings of the Turbulence, Heat and Mass Transfer 11, 6 pages, Jul. 2025.

[7] Nana Oikawa, Gento Tsujimoto, Yohei Yamaguchi, Keita Shono, Andrew Marian Zajch, Tomoki Shigematsu, Hideaki Uchida, Yoshiyuki Shimoda, “Data acquisition on building systems and operations in Urban Building Energy Modeling", Building Simulation 2025, Aug-25.

[8] Tomonori Kouya, “Assessing the Performance of Mixed-Precision ILU(0)-Preconditioned Multiple-Precision Real and Complex Krylov Subspace Methods", ICCSA2025, 15890, 12, 2025/07/30.

[9] Takashi Ohta, Daisuke Michisaka, “DNS investigation of elementary processes in turbulent channel flow of

viscoplastic fluid", 11th International Symposium on Turbulence, Heat and Mass Transfer (THMT'25), Dec. 2025.

[10] Kota Nishida, Yoshihiro Midoh, Noriyuki Miura, Satoshi Kawakami, Alex Orailoglu, Jun Shiomi, “PrometheusFree: Concurrent Detection of Laser Fault Injection Attacks in Optical Neural Networks", 31st Asia and South Pacific Design Automation Conference (ASP-DAC), pp. 1152-1159, Jan. 2026.

[11] Yutaka Oda, Taisei Furukawa, Ryo Matsumoto, Ryo Nakayama, Ryosuke Matsumoto, “DNS of Turbulent Heat Transfer in a Channel Uniformly Heated by Thin-Film Wall Heater for the Validation of a ML-based Denoising Technique", 11th International Symposium on Turbulence, Heat and Mass Transfer 2025 (THMT'25), DNS-TR-2-01, Jul.2025.

[12] Mamoru Tamura, Hiroyuki Ikagawa, Hajime Ishihara, “Theoretical Investigation of Vibrational Imaging Induced by Electronically Forbidden Transitionsin Tip-Enhanced Raman Scattering", 16th International Conference on Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics (META 2026).

[13] Ngoc Dung Dinh, Van An Dinh, Quang Minh Ngo, Yoshitada Morikawa, “Theoretical elucidation of local atomic structures and colossal permittivity properties of Nb-doped TiO2", 50th Vietnam Conference on Theoretical Physics (VCTP-50), 4-7 August, 2025.

[14] Tomohide Yabuki, Ryuki Shono, Kenta Hatanaka, Yohei Sato, “Numerical investigation of convective heat transfer mechanisms in pool boiling.", The Eleventh JSME-KSME Thermal and Fluids Engineering Conference, JK-TFEC-1539, Oct. 2025.

[15] Youngmin KIM, Shunsuke Nozawa, Ryo Fukaya, Shin-ichi Adachi, “Investigating Structural Changes in Organic Molecules composed solely of Light Atoms using Time-Resolved x-ray Solution Scattering", Conference on Laser and Synchrotron Radiation Combination Experiment 2025 (LSC2025), Apr. 2025.

[16] Nanako Ishihara, Kaito Nagita, Tasuku Sugiura, Yoshiharu Mukouyama, Teruyasu Mizoguchi, Shuji Nakanishi, “High-Throughput MD Simulations of Li+ Conductivity in the Discharge Products of Li-O2 Batteries Using Machine Learning Potentials", 2025 MRS Spring Meeting & Exhibit., Apr. 2025.

[17] Kaho Hitomi, Yuki Kato, “Gene expression prediction in single cells via data-driven discrete dynamical systems", Pacific Symposium on Biocomputing (PSB2026), Poster, 41, Jan. 2026.

[18] Yoshiyuki Kido, Sosuke Kamisako, Yoshinori Tamada, Yasushi Okuno, “Optimizing Gene Regulatory Networks Inference Application on a Vector Processor", 2025 2nd Beyond Technology Summit on Informatics International Conference (BTS-I2C), pp.66-71, Dec. 2025.

[19] S. Moriyama, T. Hiejima, “Spectral proper orthogonal decomposition of Mach waves occurred from supersonic jets", 35th International Symposium on Space Technology and Science (ISTS2025), 2025-e-2-2, Jul-25.

[20] Bahrul Jalaali, Kie Okabayashi, “Interpretable multiscale data-driven subgrid-scale model for wall-bounded turbulence", 78th APS Annual Meeting of the Division of Fluid Dynamics, Nov. 2025.

[21] Haohui Jia, Zheng Chen, Lingwei Zhu, Rikuto Kotoge, Jathurshan Pradeepkumar, Yasuko Matsubara, Jimeng Sun, Yasushi Sakurai, and Takashi Matsubara, “ODEBrain: Continuous-Time EEG Graph for Modeling Dynamic Brain Networks", The Fourteenth International Conference on Learning Representations (ICLR2026), Apr. 2026.

[22] Daiki Yoshikawa and Takashi Matsubara, “PHyCLIP: ℓ_1-Product of Hyperbolic Factors Unifies Hierarchy and Compositionality in Vision-Language Representation Learning", The Fourteenth International Conference on Learning Representations (ICLR2026), Apr. 2026.

[23] Takeru Kitagawa, Mutsuki Fujii, Yasunari Takaki, Shinji Kambara, Yukihiko Okumura, “Heat transfer

characteristics on the economizer under new-fuel combustion", HTSJ International Heat Transfer Symposium 2025, No. IOS9-2-01, 3 pages, May, 2025.

[24] Reza Aulia Rahman, Tsutomu Uenohara, Yasuhiro Mizutani, Yasuhiro Takaya, “Position controlled photonic nanojet for machining in water medium by second harmonic generation", ISMTII / ICOIM 2025, May-25.

[25] S. Oi, Y. Ogura, T. Yokoi, K. Matsunaga, “DFT calculations of Peierls potentials of partial dislocations in GaP", The 20th International Conference on Strength of Materials, June 2025, Jun-25.

[26] Sora Nakai, Youssef Fadhloun, Kacem Mathlouthi, Kotaro Yoshida, Ganesh Talluri, Ioannis Mitliagkas, Hiroki Naganuma, “Revisiting Generalization Measures Beyond IID: An Empirical Study under Distributional Shift", ICML (Under Review).

[27] Yuki Matsukawa, Ryo Araki, Takahiro Tsukahara, “Flow state transition process and oblique pattern of Taylor-Couette-Poiseuille flow at a medium cylinder ratio", 10th IUTAM Symposium on Laminar-Turbulent Transition, Vol. 44, pp. 101-106, Jan. 2026.

[28] Ippei Shibata, Koichi Tsujimoto, Toshitake Ando, Mamoru Takahashi, “Control method to improve heat transfer characteristics of multiple impinging jets", Proceedings of the 35th International Symposium on Transport Phenomena, 2 pages, Sep. 2025.

[29] Tomoki Shigematsu, Andrew Marian Zajch, Yohei Yamaguchi, Keita Shono Keita, Hideaki Uchida, Yoshiyuki Shimoda, “Data acquisition on building systems and operations in Urban Building Energy Modeling", Building Simulation 2025, Aug-25.

[30] Tomonori Kouya, “Acceleration of multiple-precision algebraic equation solvers using AVX2", ICEET2025, 6, 2025.

[31] Tatsuya Yonemura, Takashi Ohta, “DNS of turbulent flow of liquid hydrogen with wall boiling", 11th International Symposium on Turbulence, Heat and Mass Transfer (THMT'25), Dec. 2025.

[32] Kota Nishida, Yoshihiro Midoh, Noriyuki Miura, Satoshi Kawakami, Alex Orailoglu, Jun Shiomi, “Concurrent Detection of Multiple Thermal Fault Injection Attacks on Optical Neural Networks", The 26th Workshop on Synthesis And System Integration of Mixed Information technologies (SASIMI2025), pp. 272-277, Oct. 2025.

[33] Sora Nakasone, Asato Inoue, Ryo Kurihara, Takashi Harada, Shuji Nakanishi, Kazuhide Kamiya, “Ampere-Level Carbon Monoxide Electroreduction to Multi-Carbon Products: A Comparative Study with CO2 Reduction", 76th Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry, Sep. 2025.

[34] Atshshi Okabayashi, Kosei Nishimura, Keitaro Ohashi, Takashi Harada, Shuji Nakanishi, Kazuhide Kamiya, “Single-Atom Catalysts for Electrode Reactions Involving Carbon, Nitrogen, Oxygen, and Hydrogen", Electrosynthesis: Light, Life and Materials Perspective, Oct. 2025.

[35] Shungo Okamura, Kie Okabayashi, “Twin Experiments for Data Assimilation of Cavitating Flow around a Hydrofoil Assuming PIV data as the Pseudo-measurement Data", 11th Int. Symp. on Turbulence, Heat and Mass Transfer, No. AI-1-03, Jul. 2025.

[36] Yosuke Nishimoto and Takashi Matsubara, “Object-Centric World Models for Relevance-Aware Reinforcement Learning", World Modeling Workshop, Feb. 2026.

[37] Akihiro Yamazawa, Shintaro Takeuchi, “Numerical lubrication model considering the history effect in narrow gaps under a low-resolution environment", American Physical Society Division of Fluid Dynamics Annual Meeting

2025, abstract ID: 2559529, Nov. 2025.

[38] Yosuke Nishimoto and Takashi Matsubara, “Object-Centric World Models for Causality-Aware Reinforcement Learning", The Fortieth AAAI Conference on Artificial Intelligence (AAAI2026), Jan. 2026.

[39] Shuto Eritate, Kei Kambara, Kazuyuki Uenoyama, Kazuhiro Maki, Shinji Kambara, Yukihiko Okumura, “Effect of ammonia off-gas on emission characteristics in 2kWth class small engine", International Workshop on Environmental Engineering 2025 (The Japan Society of Mechanical Engineers), No. E301, 3 pages, July, 2025.

[40] Zhifeng Xiao, Naoya Kusunoki, Yuki Takehara and Yukihiko Okumura, “Combustion characteristics of biosyngas under high-intensity conditions with a swirl-throttle structure", International Workshop on Environmental Engineering 2025, No. E304, 4 pages, July, 2025.

[41] K. Matsunaga, S. Oi, S. Hoshino, T. Sato, T. Yokoi, Y. Ogura, “Carrier Induced Structural Change of Dislocation Cores in Inorganic Semiconductors Showing Distinctive Light-Dependent Mechanical Properties", The 20th International Conference on Strength of Materials, Jun-25.

[42] Ryoko Ono, Yuki Matsukawa, Takahiro Tsukahara, “Response and its probability of localized turbulence pattern formation to decreasing Reynolds number in channel flow", The 11th JSME-KSME Thermal and Fluids Engineering Conference, JK-TFEC11-1153, Oct. 2025.

[43] Eitetsu Nakashima, Ryo Araki, Takahiro Tsukahara, “DNS-CNN simulation for high-Reynolds-number viscoelastic turbulent channel flow using 3D U-Net", 11th International Symposium on Turbulence, Heat and Mass Transfer, AI-1-01, Dec. 2025.

[44] Toshikazu Noda, Yuina Motozono, Kie Okabayashi, “A priori and a posteriori tests of data-driven cavitation model", 1st International Symposium on AI and Fluid Mechanics, No. S.12-A.2, May-25.

[45] Shumpei Yamaguchi, Asato Inoue, Sora Nakasone, Ryo Kurihara, Takashi Harada, Shuji Nakanishi, Kazuhide Kamiya, “Understanding the cathode interface in gas-phase CO2 electrolysis", Electrosynthesis: Light, Life and Materials Perspective, Oct. 2025.

[46] Eriko Nambu, Kazunori Nozaki, Yuri Takeda, Shigehisa Akiyama, Shumei Murakami, Hiroshi Hanamoto, Jumpei Murakami, Shota Nakamura, Takashi Sakamoto, Shinichi Sekine, Tomomi Yamada, Mikako Hayashi, Takashi Yamashiro, “Numerical Modering of Droplet Dispersion During Air Turbine Use", The 104th IADR General Session & Exhibition, March 25–28, 2026.

[47] Aiko Morimoto, Kazunori Nozaki, Eriko Nambu, Yuta Seino, Sho Katsura, Yoshihiro Morita, Shinichi Kita, Naoto Kai, Hidenori Tanushi, Susumu Date, Sota Kamaike, Toru Yarimizu, Seiichi Uzawa, Takashi Yamashiro, “Dental ID: A University-Led Framework for Secure Dental Care", The 104th IADR General Session & Exhibition, March 25–28, 2026.

[48] Aiko Morimoto, Kazunori Nozaki, Eriko Nambu, Yuta Seino, Shintaro Oka, Sho Katsura, Yoshihiro Morita, Shinichi Kita, Naoto Kai, Hidenori Tanushi, Susumu Date, Sota Kamaike, Toru Yarimizu, Seiichi Uzawa, Takashi Yamashiro, “Clinical Scientific Activities at the University of Osaka Dental Hospital Promoting Open Science", PRAGMA41, 2026.

[49] Yuta Toshima, Nobuyuki Tsuboi, Yusuke Maru, Fujita Kazuhisa, “Aerodynamic Characteristics Study on a Waverider using Numerical Simulations and Wind Tunnel Test : Validation of Numerical Analysis", 35th International Symposium on Space Technology and Science, Tokushima Japan, 2025.7.15.

[50] Yuichiro Honda, Hiroshi Terashima, Nobuyuki Tsuboi, “Verification of Hybrid Method for Multicomponent

Supercritical and Transcritical Fluids ~Comparison with conventional method for two-dimensional simulations~", The 36th International Symposium on Space Technology and Science, Tokushima, Japan, 2025.7.15.

[51] Ito Takumi, Nobuyuki Tsuboi, Kouhei Ozawa, Koichi A. Hayashi, “3D Numerical Simulation on Disk Type RDE used Hydrogen-Air Premixed Gas and Non-premixed Gas with Multi-Ports Injection: Relation Between Injection Mode and Flame Index", The International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS) 2025, Otawa, Kanada, 2025.7.29.

[52] Ito Takumi, Nobuyuki Tsuboi, Kouhei Ozawa, Koichi A. Hayashi, “3D Numerical Simulation on Disk Type RDE used Hydrogen-Air Premixed Gas and Non-premixed Gas with Multi-Ports Injection: Investigation of Pressure Loss Factors", American Institute of Aeronautics and Astronautics (AIAA) - SciTech, Florida, America, 2026.1.14.

[53] OKUDA. Hibiki, TSUBOI. Nobuyuki, HAYASHI. A. Koichi, “3D Numerical Simulation on Shock Front Structure of Hydrogen/Air Spinning Detonation -Effect of Higher-order Scheme-", ICDERS 2025 (30th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems), July 2025.7.29.

[54] Hyunseo Park, A.Koichi Hayashi, Nobuyuki Tsuboi, “Numerical Study on and Euler-Euler Model for Liquid-Gas Two-Phase Detonation in n-Heptane/Air 1Mixture", 30th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS), 168, Ottawa, Canada, 2025.7.29.

[55] Y. Ryu, N. Tsuboi, A. K. Hayashi, T. Obara, X.-M. Tang, “Numerical Simulation of Deflagration to Detonation Process Using Adaptive Mesh Refinement Method in Hydrogen/Oxygen Premixed Gas Mixture", 30th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS), (198), 2025.7.30, Ottawa.

３．国内研究会等発表論文

[1] 曽我隆, 内田孝紀, 伊達進, “MPI化支援関数群Muttonの実装と性能評価", 大学ICT推進協議会 2025 年度年次大会, 653-659, Dec.2025.

[2] 松永 耀、有馬健太、稲垣耕司,“第一原理計算を用いた TiN エッチング中の表面酸化膜の構造解析-表面終端構造および最表面の酸化構造-", 2025 年度精密工学会秋季大会学術講演会講演論文集, F02, 2025 年 9 月 17 日.

[3] 児玉 紀, 堀 司, 大西 正, 川添 政宣, 長谷 浩一, 嘉村 浩之, 鶴崎 海篤, 澤田 晋也, 赤松 史光, “固体流体熱連成を考慮した衝突噴流火炎による金属円盤加熱過程の数値解析", 第 62 回日本伝熱シンポジウム, May-25.

[4] 香川 麟太郎, 堀 司, 澤田 晋也, 赤松 史光, “レイノルズ応力方程式モデルを用いた非予混合二重スワール水素火炎の URANS 解析", 日本機械学会関西支部第 101 期定時総会講演会, Mar. 2026.

[5] 加藤弘一・福谷克之, “光の入射方向で変わるルチルTiO2 の２光子吸収確率", 第 86 回応用物理学会秋季学術講演会, 2025/9/9.

[6] 柴田一平, 辻本公一, 安藤俊剛, 高橋護, “個別に間欠制御された多重衝突噴流の熱流動特性", 日本機械学会 2025 年度年次大会講演論文集, 5 pages, Sep.2025.

[7] 坪井 和也, “Pt表面の吸着種の化学的条件が水素－空気乱流予混合火炎に及ぼす影響に関する検討", 第 63 回燃焼シンポジウム講演論文集, C114, 2025 年 11 月.

[8] 米村 建哉, 太田 貴士, “壁面沸騰を伴う液体水素乱流のDNSの実現と観察", 流体工学シンポジウム（第

76 回北陸流体工学研究会）, Dec. 2025.

[9] 水谷 耕介, 高棹真介, “共通外層期直前に放出される周連星ガスの構造：3 次元磁気流体計算と解析的モデルの比較", 天文学会 2026 年春季年会, Mar.2026.

[10] Kota Nishida, Yoshihiro Midoh, Noriyuki Miura, Satoshi Kawakami, Alex Orailoglu, Jun Shiomi, “PrometheusFree: Concurrent Detection of Laser Fault Injection Attacks in Optical Neural Networks", 信学技報, vol. 125, no. 382, VLD2025-92, pp. 97-97, 2026 年 3 月.

[11] Kanta Watanabe, Rui Asaoka, “モジュール分割した連節符号型論理ビットの性能評価", QIT53, .

[12] 山本紘生, 大森健史, “壁面の分子スケールの幾何学的不均一性が固液摩擦に及ぼす影響の分子動力学解析", 日本伝熱シンポジウム, 2025/5/15.

[13] 五十川弘行、田村守、石原一, “電子禁制を介した先端増強ラマン散乱の微視的応答理論", 第 36 回光物性研究会, .

[14] Ngoc Dung Dinh, Van An Dinh, Quang Minh Ngo, Yoshitada Morikawa, “Theoretical elucidation of local atomic structures and colossal permittivity properties of Nb-doped TiO2", The 26th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN-26), October 27-29, 2025.

[15] 河口真一、甲斐歳恵, “AlphaFoldが予測する疾患関連タンパク質と細胞内タンパク質との相互作用", 第４８回日本分子生物学会.

[16] 稲田慎, “電気生理学的および解剖学的に詳細な心臓モデルを用いた不整脈解析に関するシミュレーション研究 ―単一心筋細胞から大規模組織モデルまで―", 第 17 回日本安全性薬理研究会, Feb, 2026.

[17] Meliton R. Chiong III, Atsushi Nakajima, Yoshitada Morikawa, “Accurate reproduction of ionization energy and electron affinity of Al13 nanocluser via quantum Monte Carlo and vibronic analysis", 19th Annual Meeting of Japan Society for Molecular Science, September 9-12, 2025.

[18] 阪野 朱音, 大場春佳, 水野信也, “災害時における 2 次医療圏医療資源配分と搬送最適化", 日本ソーシャルデータサイエンス学会 2026 シンポジウム&研究発表会, Jan. 2026.

[19] Haruno Fusa, Chonho Lee, Yasunori Shinozuka, Sakuei Onishi, Hiromitsu Shiina, “日本の産業動物獣医学分野におけるオープンソース大規模言語モデルの評価", 人工知能学会全国大会（第 40 回）.

[20] 小岡聖和, 福永大輝, 沖田隆文, 帆足英二, “イオンビーム照射を受ける高速液体リチウムターゲット内部の熱輸送に関する研究", 日本原子力学会 2025 年秋の大会, 1L20, Sept. 2025.

[21] 石原菜々子, 名木田海都, 杉浦佑, 向山義治, 溝口照康, 中西周次, “機械学習ポテンシャルを用いたMD計算によるLi-O2 電池の放電生成物におけるLi+拡散挙動の解析", 第 66 回電池討論会, Nov. 2025.

[22] 人見 花帆, 加藤 有己, “データ駆動型離散力学系による時系列シングルセルデータ解析", 第 28 回情報論的学習理論ワークショップ (IBIS2025), Poster, 2a-R-24, Nov. 2025.

[23] 藤本賢人, 上廻蒼介, 木戸善之, 玉田嘉紀, 奥野恭史, “遺伝子ネットワーク推定アプリケーションのベクトルプロセッサ適用にかかる評価", 電子情報通信学会技術研究報告書（SWoPP2025）, vol. CPSY2025-30, pp.36-41, Aug. 2025.

[24] 守山宗和, 比江島俊彦, “超音速ジェット流から発生するマッハ波の伝播角度と周波数について", 日本流体力学会年会 2025, 3-31, Sep. 2025.

[25] 村田遼太, “改良Tri-octagon型多重衝突パルス噴流圧縮機構を有する　航空宇宙用試作エンジンの設計・製作", 宇科連北部支部 2026 年講演, p.4, Mar, 13.

[26] 中川隆一郎, 岡林希依, “翼周りキャビテーション流れのデータ同化における最適局所化", 第 22 回キャビテーションに関するシンポジウム, No. S5-2, Dec. 2025.

[27] 西本 遥裕, 松原 崇,“物体中心世界モデルと影響関係を考慮した方策学習", 第 3 回AIロボット駆動科学シンポジウム, Dec. 2025.

[28] 齋藤慎之介, 松原崇, “スコア関数を通して探る拡散モデルの幾何と応用", 第 28 回情報論的学習理論ワークショップ (IBIS2025), Nov. 2025.

[29] 奥村 幸彦, “アンモニア分解プロセスでのオフガスの燃焼利用", 日本機械学会技術講習会, 「カーボンニュートラル実現に向けた最新技術 － CO2 排出ゼロの燃焼技術 －」(日本機械学会 環境工学部門主催）,pp.1-25, 2025.12.

[30] 山﨑拓海, 上野原努, 水谷康弘, 高谷裕浩, “光カー効果に基づいたフォトニックナノジェットのビーム径制御", 日本機械学会 2025 年度年次大会, J131p-06, Sep. 2025.

[31] 鹿島千尋, 中谷祐介, 入江政安,“栄養塩類増加措置が播磨灘・大阪湾の窒素循環に及ぼす影響", 第 60 回日本水環境学会年会, P-2-02, Mar. 2026.

[32] 吉田友紀, 佐藤陽祐, 呉亭, 王道洪,“数値モデルで探る夏季積乱雲の電気的特性", 日本気象学会 2025 年度秋季大会予稿集, Vol.128, p. 642, Nov.2025.

[33] 大井脩司, 佐藤琢巳, 小椋優, 横井達矢, 松永克志, “GaPにおける部分転位の電子・原子構造とすべり移動度の解明", 日本金属学会 2025 年秋期(第 177 回)講演大会, Sep. 2025.

[34] 中井 蒼頼, 吉田 晃太朗, 長沼 大樹, “深層学習における広義の汎化指標の特性分析", IPSJ 2026, .

[35] 松井 功, 松本 あゆみ, 奥嶋 拓樹, 玉井 那実, 井上 和則, 猪阪 善隆, “腎生検画像における稀少糸球体病変検出のための半教師あり深層学習モデルの開発", 第 68 回日本腎臓学会学術総会, June. 2025.

[36] 村上弘, “完全ピボット選択付き密行列LU分解法の記憶参照のパターン変更による性能改善", 情報処理学会研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング, Vol.2026-HPC-203, No.78, pp.1-29, 2026 年 3 月.

[37] 奥田留奈, 戸市裕一朗, 寺川成海, 山本勇, 坂本一之, “Si(111)上に作製したTl薄膜結晶の電子状態", 2025 年度 関西薄膜・表面物理セミナー, 2025 年 11 月.

[38] 京田晴菜、Fitriana Syafira Az Zahrah、有馬健太、稲垣耕司, “第一原理計算を用いた Si(111) 表面上への Ag の吸着構造解析 -制御性に優れたAg ナノワイヤの形成に向けて-", 2025 年度精密工学会秋季大会学術講演会講演論文集, F08, 2025 年 9 月 17 日.

[39] 野々村 昂大, 堀 司, Yang Yinan, 澤田 晋也, 赤松 史光, “中低温域における NOx と炭化水素間の相互反応が 10kW 燃焼炉でのアンモニア／都市ガス混焼の燃焼挙動予測に及ぼす影響", 日本機械学会関西支部第 101 期定時総会講演会, Mar. 2026.

[40] 加藤弘一, “光触媒ルチルTiO2 の酸素空孔を介した太陽光２段階吸収反応", NIMSナノシミュレーションワークショップ, 2025/12/1.

[41] 古谷連, 田ノ上飛翔, 辻本公一, 安藤俊剛, 高橋護, “DNSによる三つの自由噴流から成る多重噴流の間欠制御", 日本機械学会 2025 年度年次大会講演論文集, 5 pages, Sep.2025.

[42] 菅谷 佳大, 太田 貴士, “DNSと定量的PFMを用いた液体金属乱流と過冷却凝固の観察", 流体工学シンポジウム（第 76 回北陸流体工学研究会）, Dec. 2025.

[43] 西田 孔太, 御堂 義博, 三浦 典之, 川上 哲志, Alex Orailoglu, 塩見 準, “光ニューラルネットワークに対する複数箇所にわたる熱故障注入攻撃の実行時検知", DAシンポジウム 2025, pp. 163-170, 2025 年 8

月.

[44] 大森健史,“拡散界面法による動的接触線を伴う流れの数値解析：分子運動論と現象論の接続を副題として", LBM研究会, 2025/12/5.

[45] 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,“3 次元心房モデルにおける高頻度ペーシングによる心房細動の誘発性および持続性に関するin silico研究", 第 45 回医療情報学連合大会（第 26 回日本医療情報学会学術大会）, Nov, 2025.

[46] Meliton R. Chiong III, Atsushi Nakajima, Yoshitada Morikawa, “Diffusion Monte Carlo study on the photodetachment in Al13- anions and photoionization in Al13 neutrals", 26th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations, October 27-29, 2025.

[47] 石原菜々子, 名木田海都, 杉浦佑, 向山義治, 溝口照康, 中西周次, “Li-O2 電池の放電生成物におけるLi欠陥誘起相分離によるLi+拡散挙動の変調", 第 48 回ケモインフォマティクス討論会, Nov. 2025.

[48] 人見 花帆, 加藤 有己, “データ駆動型線形離散力学系による時系列シングルセルデータ解析", NGS EXPO 2025, O2-5/P48, Oct. 2025.

[49] 比江島俊彦, “超音速流におけるスパイラル渦崩壊発生の十分条件について", 第 39 回数値流体力学シンポジウム, OS1-1-1-02, Dec. 2025.

[50] 本園 由奈, 田中 和雪, 岡林 希依, “翼周りキャビテーション流れのニューラルPDE ソルバーの構築", 第 22 回キャビテーションに関するシンポジウム, No. S5-1, Dec. 2025.

[51] 辻村 翔太, 星加 浩輔, 横山 綜馬, 楠 直哉, 吉本 篤規, 奥村 幸彦, “旋回-絞り構造バーナーのスケールアップに関する実験および数値解析的研究", 第 63 回 燃焼シンポジウム (日本燃焼学会主催), 講演No.B315, セッション：新燃料・代替燃料V,講演論文集：4 pages, 2025.11.

[52] 鹿島千尋, 中谷祐介, “栄養塩類増加措置が瀬戸内海の水質環境に及ぼす影響", 第 32 回瀬戸内海研究フォーラム, Sep. 2025.

[53] 内藤佳希, 佐藤陽祐, Ong Chia Rui, “数値気象モデルを用いた降雹の早期予測に向けた解析", 日本気象学会 2025 年度秋季大会予稿集, Vol.128, p. 635, Nov.2025.

[54] 大井脩司, 佐藤琢巳, 小椋優, 横井達矢, 松永克志, “GaPにおける部分転位の電子構造およびすべり移動度に対するキャリアトラップの影響", 第 35 回日本MRS年次大会, Nov. 2025.

[55] 松井 功, 松本 あゆみ, 安部 政俊, “腎生検画像における稀少糸球体病変検出のための半教師あり学習とResidual GANを用いたデータ拡張の統合的アプローチ", 第 7 回 日本メディカルAI学会学術集会, June. 2025.

[56] 金堂真太郎、有馬健太、稲垣耕司, “第一原理計算によるSiO2 上 Si 薄膜エッチングにおける基板局所ひずみ依存性の解析", 2026 年度精密工学会春季大会学術講演会講演論文集, G89, 2026 年 3 月 17 日.

[57] 香川 麟太郎, 堀 司, 澤田 晋也, 赤松 史光, “レイノルズ応力方程式モデル を用いた非予混合二重スワール水素 火炎の数値解析", 第 63 回燃焼シンポジウム, Nov. 2025.

[58] 加藤弘一・山崎隆浩・奈良純・福谷克之,“ルチルTiO2 中の酸素空孔の凝集による太陽 2 光子吸収確率変化", 第７３回応用物理学会春季学術講演会, 2026/3/14.

[59] 柴田一平, 辻本公一, 安藤俊剛, 高橋護, “多重衝突噴流の相互干渉を抑制し,伝熱性能向上させるための制御手法", 東海支部第 75 期総会･講演会講演論文集, 1 page, Mar.2026.

[60] 梶 優斗, 太田 貴士, “予混合燃焼を伴う壁乱流のDNSにおける火炎面変形の観察", 日本機械学会 北陸

信越支部 2026 年合同講演会, Mar. 2026.

[61] 藤井健博, 大森健史,“滑り速度のある表面に対する埋め込み境界法：射影法によるアプローチ", 数値流体力学シンポジウム, 2025/12/16.

[62] 稲田慎, 高山健志, 富井直輝, 井尻敬, 山口豪, 原口亮, 芦原貴司, 鈴木亨, 佐久間一郎, 柴田仁太郎, 中沢一雄, “心房への高頻度刺激による心房細動の誘発性および持続性の検討―コンピュータシミュレーションによる検討―", 第 64 回日本生体医工学会大会, Jun, 2025.

[63] Meliton R. Chiong III, Atsushi Nakajima, Yoshitada Morikawa, “Quantum Monte Carlo benchmarking and charge-transfer chemistry of superatomic Al13 clusters: From photoionization energetics to molecular complex formation", 106th Chemical Society of Japan Annual Meeting, March 17-20, 2026.

[64] 入江葉月, 名木田海都, 大橋圭太郎, 栗原諒, 中西周次, 神谷和秀, “CO2 電解還元におけるC-C結合形成段階としてのCO二量化反応の第一原理解析", 2025 電気化学秋季大会, Sep. 2025.

[65] Kou Nishikubo, Kaho Hitomi, Kyoka Higuchi, Reiichi Sugihara, Yuki Kato, and Rieko Muramatsu, “Prediction of brain myelin status from pulmonary function measurements", 第 68 回日本神経化学会大会, P1-131, Sep. 2025.

[66] 山澤晟嘉, 竹内伸太郎, “狭隘部における非定常潤滑モデルと数値解の埋め込みに関する研究", 日本流体力学会年会 2025, No. 5-06, Aug. 2025.

[67] 本田 俊之, 藤井 睦月, 高木 康成, 神原 信志, 奥村 幸彦, “新燃料燃焼下における水冷管周りの伝熱特性 ― エコノマイザ特性に及ぼす排ガス速度の影響 ―", 日本機械学会熱工学コンファレンス 2025, 講演No.D-61, セッションOS-8 バイオマス利用における熱工学的アプローチ(2),P.1, 2025.10.

[68] 鹿島千尋, 中谷祐介, “高解像三次元流動モデルを用いた瀬戸内海における海水交換の解析", 土木学会水工学委員会環境水理部会研究集会, 1-10, Jun-25.

[69] 淺井颯馬, 西澤誠也, 河合佑太, 佐藤陽祐, “3 次元多重格子法の実装によるSCALEモデルの気象雷モデルの高速化", 日本気象学会 2025 年度秋季大会予稿集, Vol.128, p. 643, Nov.2025.

[70] 松井 功, “医療従事者のためのAI基礎知識 ～ 人工知能の仕組みから医療応用まで ～", 第 70 回 日本透析医学会学術集会・総会, June. 2025.

[71] 西村耕成, 原田隆史, 中西周次, 神谷和秀, “環状錯体由来のCuナノクラスター触媒を用いたCO電解還元によるC-N結合形成反応", 第 3 回関西電気化学研究会, Dec. 2025.

[72] 諫山和弥, 中曽根空, 井上明哲, 西村耕成, 原田隆史, 中西周次, 神谷和秀, “CO電解における酢酸生成選択性の支配因子に関する研究", 第 3 回関西電気化学研究会, Dec. 2025.

[73] 諫山和弥, 中曽根空, 井上明哲, 西村耕成, 原田隆史, 中西周次, 神谷和秀, “CO電解における酢酸生成選択性を支配する因子の解明", 電気化学会第 93 回大会, Mar. 2026.

[74] 栗原諒, 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 還元反応の理論的解析", 電気化学会第 93 回大会, Mar. 2026.

[75] 跡部 真人, 米澤 明純, 清水 勇吾, 原田 珠里, 栗原 諒, 原野 幸治, 神谷 和秀, 井口 翔之, 信田 尚毅, “卑金属触媒を用いたアニオン交換膜型電解セル中での含窒素芳香族化合物の電解水素化反応", 電気化学会第 93 回大会, Mar. 2026.

[76] 岡林篤史, 西村耕成, 大橋圭太郎, 中畑祥子, 原田隆史, 中西周次, 神谷和秀, “Cu単原子触媒による電気化学的硝酸還元におけるN-N結合生成反応", 日本化学会第 106 春季年会(2026), Mar. 2026.

[77] 信田尚毅, 米澤明純, 清水勇吾, 原田珠里, 栗原諒, 原野幸治, 神谷和秀, 井口翔之, 跡部真人, “AEM型

リアクターを用いたコバルト触媒による含窒素芳香族化合物の電解水素化", 第 137 回触媒討論会, Mar. 2026.

[78] 中曽根 空, 諫山 和弥, 入江 葉月, 西村耕成, 井上 明哲, 栗原 諒, 原田 隆史, 中西 周次, 神谷 和秀, “Selective Acetate Production in the Electrochemical Reduction of Carbon Monoxide", 日本化学会第 106 春季年会(2026), Mar. 2026.

[79] 北川 武瑠, 藤井 睦月, 高木 康成, 神原 信志, 奥村 幸彦, “新燃料燃焼下におけるエコノマイザの伝熱特性に及ぼす排ガス速度の影響", 第 37 回中国四国伝熱セミナー・下関, セッションA2, 1 page, 2025.9.

[80] 辻村 翔太, 星加 浩輔, 横山 綜馬, 楠 直哉, 吉本 篤規, 奥村 幸彦, “旋回-絞り構造バーナーのスケールアップ", 第３４回日本エネルギー学会大会(日本エネルギー学会主催), 講演論文集: 講演No.5-1-2, セッション 5-1 燃焼・熱利用 1 pp.136-137, 2025.8.

[81] 横山 綜馬, 辻村 翔太, 星加 浩輔, 楠 直哉, 吉本 篤規, 井上 博之, 奥村 幸彦, “アンモニア専焼バーナーのスケールアップと燃焼安定化（旋回強さおよび絞り構造の最適化設計）", 日本機械学会 環境工学総合シンポジウム 2025, No.J301, 4 pages, 2025.7.

[82] 奥村 幸彦,“日本における新エネルギー輸入・利用（水素・アンモニア）の動向 ―電気事業に及ぼす影響―", 電気学会四国支部講演会, 招待講演（電気学会主催）, pp.1-87, 2025.8.

[83] 奥村 幸彦,“水素・アンモニアを燃料として使用する場合における法律整備について", 第５回 法工学・環境工学連携セミナー, ～「水素」をキーワードとした未来社会～ ,pp.1-15, 2025 7.

[84] 襟立 崇杜, 神原 慧, 上野山 和之, 牧 和宏（Willbe）, 神原 信志, 奥村 幸彦,“2kWth級小型エンジンの排ガス特性に及ぼすNH3 オフガス燃料の影響", 第 62 回日本伝熱シンポジウム, BPA-20, 4 pages, 2025.5.

[85] 奥村 幸彦,“アンモニアオフガスの燃焼利用 －新燃料の利用拡大に向けた提案―", 中四国熱科学・工学研究会研究討論会, 特別講演, pp.1-70, 2025.5.

[86] 奥村 幸彦, “アンモニアクラッキングプロセスでのオフガス利用 ～燃焼利用への拡大に向けた一提案～", 堀場製作所 アンモニア燃焼セミナー, 招待講演, pp.1-52, 2025.4.

[87] 松井 功, 松本 あゆみ, 猪阪 善隆, “腎病理画像解析におけるAIの応用 - 客観的評価から個別化医療への展望 - ", 第 45 回医療情報学連合大会, Nov. 2025.

[88] 加藤 光貴, 太田 貴士, “鉛直壁面間における自然対流乱流のDNSで予測される渦構造の特徴", 日本機械学会 北陸信越支部 2026 年合同講演会, Mar. 2026.

[89] 野々村 昂大, Yang Yinan, 堀 司, 澤田 晋也, 赤松 史光, “中低温域における NOxと炭化水素の相互反応がアンモニア／都市ガス混焼を適用した 10kW 燃焼 炉の炉内温度および化学種濃度分布に及ぼす影響", 日本機械学会 熱工学コンファレンス 2025, Oct. 2025.

[90] 中曽根 空, 井上 明哲, 栗原 諒, 諫山 和弥, 入江 葉月, 原田 隆史, 中西 周次, 神谷 和秀, “COの高電流密度電解還元における酢酸の選択的生成に関する研究", 第 15 回CSJ化学フェスタ 2025, Oct. 2025.

[91] 西窪 航, 人見 花帆, 樋口 京香, 杉原 礼一, 加藤 有己, 村松 里衣子, “肺機能測定による脳内の髄鞘状態の予測", JHリトリート 2025, P7-7, Jun. 2025.

[92] 清水 夏生, 奥村 幸彦, “アンモニア二段燃焼法における空気吹込み近傍の反応特性の解明", 第 37 回中国四国伝熱セミナー・下関, セッションA2, 1 page, 2025.9.

[93] 奥村幸彦,“アンモニアオフガスの燃焼利用とNH3/H2/N2 火炎の反応解析", 日本機械学会 2025 年度年次大会, セッション：クリーンエネルギー社会に貢献するエネルギー変換技術, No.J061-07, [No.25-1] 5

pages, 2025.9.

[94] 諫山和弥, 中曽根空, 井上明哲, 西村耕成, 原田隆史, 中西周次, 神谷和秀, “CO電解における酢酸生成選択性の支配因子に関する研究", 第 15 回CSJ化学フェスタ 2025, Oct. 2025.

[95] Kaho Hitomi, Yuki Kato, “Predicting cell states using data-driven dynamical systems", 2025 年日本バイオインフォマティクス学会年会 (IIBMP2025), PO-056, Sep. 2025.

[96] 稲田慎, “コンピュータシミュレーションを用いた右房への高頻度刺激による心房細動誘発性・持続性の検討", 心電学関連春季大会 2025, Apr, 2025.

[97] 古谷連, 田ノ上飛翔, 辻本公一, 安藤俊剛, 高橋護, “三本の多重自由噴流の間欠制御が流れに及ぼす影響", 東海支部第 75 期総会・講演会講演論文集, 1 page, Mar.2026.

[98] 内田 涼太郎, 太田 貴士, “DNSによる粘塑性流体の乱流維持のための臨界条件の探索", 日本機械学会北陸信越支部 2026 年合同講演会, Mar. 2026.

[99] 大本 共泰, 堀 司, 澤田 晋也, 赤松 史光, “GPU 実装による素反応を考慮した圧力ベース燃焼ソルバーの高速化", 日本機械学会 熱工学コンファレンス 2025, Oct. 2025.

[100] 森本 愛子、野﨑 一徳、南部 恵理子、清野 雄多、岡 真太郎、喜多 真一、釜池 聡太、鎗水 徹、甲斐 尚人、伊達 進、鵜澤 成一、山城 隆, “大学公式アプリを基盤とした 歯科病診連携システムの構築", AXIES, 2025.

[101] 井福剛司, 坪井伸幸, 伊藤隆, 野中聡, “再使用ロケット実験機RV-Xの空力特性に関する数値解析-低マッハ数・大迎角における乱流場への定常・非定常計算の比較評価-", 第 39 回数値流体力学シンポジウム, 2025.12.17.

[102] 戸島佑太, 坪井伸幸, 丸祐介, 藤田和央, “数値解析によるWaverider形状の空力特性評価：マッハ数変化による空力特性の変化", 第 69 回宇宙科学技術連合講演会, 札幌コンベンションセンター, 2025.11.26.

[103] 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 超音速風洞及び遷音速風洞を用いた風洞実験と数値解析の比較", 令和 7 年度宇宙航行の力学シンポジウム, 宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究所, 2025.12.8.

[104] 帆足真尋, 永島浩樹, 寺島洋史, 坪井伸幸, “極低温領域における酸水素混合の熱物性評価：PIMD(パス積分分子動力学)と SRK モデルの比較", 第 39 回数値流体力学シンポジウム, 2025.12.17.

[105] 本田悠一郎, 和田環希, 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〜三次元噴流問題に対する従来型手法ならびに実験との比較〜", 日本機械学会 九州支部 第 79 期総会・講演会, 2026.03.10.

[106] 木下 楓大, 戸島 佑太, 坪井 伸幸, 小澤 晃平, 丸 祐介, 藤田 和央, “TSTO実機開発に向けた簡易ウェーブライダー形状の空力特性評価:前縁鈍頭化による影響", 日本機械学会九州支部 第 79 期総会・講演会, 2026.3.10.

[107] 友常亮太, 帆足真尋, 寺島洋史, 坪井伸幸, “水素に関する噴流と主流の混合挙動の二次元数値解析：超臨界流れ場の熱物性評価", 日本機械学会九州支部九州学生会第 57 回学生員卒業研究発表講演会, 2026.3.9.

[108] 菅原悠, 井福剛司, 坪井伸幸, 伊藤隆, 野中聡, “再使用ロケットRV-Xの空力特性解析 : SA-DDESによるレイノルズ数効果について", 日本機械学会九州支部 九州学生会 第 57 回学生員卒業研究発表講演会, 未定, 2026.3.9.

[109] 伊藤 拓海, 坪井 伸幸, 小澤 晃平, 林 光一, “3 次元数値解析による水素空気予混合気多孔噴射を用いたディスク型 RDE の性能評価", 第 63 回燃焼シンポジウ, E121, 2025.11.5.

[110] 奥田響, 伊藤拓海, 坪井伸幸（九工大）, 林光一（青学大）, “水素/空気詳細化学反応モデルを用いた非定常デトネーションに関する数値解析：デトネーション速度の確率密度分布に関する考察", 日本航空宇宙学会西部支部講演会（2025）, 2025.11.17.

[111] Hyunseo Park, Nobuyuki Tsuboi, Kohei Ozawa, A.Koichi Hayashi, “Enhanced Droplet Evaporation Modeling for Two-Phase Detonation with n-Hepatane Fuel", 39th CFD symposium, OS1-2-5-01, Fukuoka, Japan, December 2025.12.17.

[112] 笠 友介, 坪井 伸幸, 小澤 晃平, 林 光一, 小原 哲郎, 関 陽子, Tang Xin-Meng, “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- 壁面境界条件の検証 -", 第 63 回燃焼シンポジウム, E133, 2015, 11.5.

[113] Benjamin Ygorra, Hibiki Okuda, Shoma Nakano, Tsuboi Nobuyuki, “Parallel Optimization of CFD Simulations Including Combustion with OpenMP and OpenACC", 39th Computational Fluid Dynamics Symposium, 802-0001, Kitakyushu, Japan, 2025.12.16.

[114] 須田悠太, 檜山瑞樹, 伊藤拓海, 坪井伸幸, 林光一, Dzieminska Edyta, 大西史倫, 富塚孝之, 高橋淳郎, 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 H2/O2 予混合気の爆轟遷移に関する数値解析：水蒸気添加と 3 次元の影響について", 第 57 回流体力学講演会／第 43 回航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム, 3A07, 2025.7.4.

[115] 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-酸素/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-", 第 63 回燃焼シンポジウム, E131, 2025.11.5.

[116] 五味 大地, 伊藤 拓海, 坪井 伸幸, 小澤 晃平, 林 光一, “水素・空気非予混合気を用いた回転デトネーションエンジンの 2 次元数値解析 ～噴射口ジオメトリの影響評価～", 2025 年度衝撃波シンポジウム, 2D2-3, 2026.3.5.

[117] 仲野 正馬, 坪井 伸幸, 奥田 響（九州工業大学）, 林 光一（青山学院大学）, “1 次元デトネーション解析コードにおける OpenMP, OpenACC 適用と性能評価：水素燃料の場合について", 第 65 回航空原動機・宇宙推進講演会, 3A04, 2026, 3.11.

[118] 石田隼, 坪井伸幸, 林光一, “詳細化学反応モデルを用いたジメチルエーテル/O2 予混合気の爆轟に関する 1 次元数値解析：反応モデルの影響", 第 65 回航空原動機・宇宙推進講演会, 3A05, 2026, 3.11.

[119] 齊藤 遼太, 坪井 伸幸, 小澤 晃平, 林 光一, Tang Xin-Meng, “障害物を有する管内における DDT 解析～解適合格子法を用いた数値シミュレーション～", 日本機械学会九州支部 九州学生会 第 57 回学生員卒業研究発表講演会, KYCONF26ST-187, 2026, 3.9.

[120] 坪井伸幸, “爆轟波の反応解析に対する高効率・高速時間積分法の評価", 第 39 回数値流体力学シンポジウム, OS1-2-5-04, 2025/12/17.

[121] 坪井伸幸, “爆轟波の反応解析に対する高効率・高速時間積分法の評価：着火遅れ時間と 1 次元爆轟について", 令和 7 年度 航空宇宙空力シンポジウム, 2026/1/31.

[122] 坪井 伸幸, 伊藤 拓海, 朝原 誠, 林 光一, “高圧水素噴流の浮き上がり火炎現象の大規模数値解

析：保炎機構と格子解像度の影響について", 第 57 回流体力学講演会／第 43 回航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム, 3A02, 2025.07.04.

４．著書

[1] Yuki Kato, Kengo Sato (eds. Michiaki Hamada et al.), “RNA-RNA and RNA-DNA Interactions", Springer Nature, Nov. 2025.

５．その他

[1] 岡林希依, “深層強化学習を用いた流体機械の形状改善・流体制御", 機械の研究 Vol. 77, No. 4, pp. 243-252 2025 年 4 月.

[2] Shunichi Koshimura, Yuichiro Tanioka, Diego Melgar, Brendan Crowell, Ronald Eguchi, Yusaku Ohta, Erick Mas, Bruno Adriano, Akihiro Musa, Yoshihiko Sato, Junko Yoshino, Naoya Morimatsu, Takayuki Suzuki, Hiroyuki Takizawa, Hiroaki Kobayashi, “Tsunami Digital Twin: Progress and Applications to Japan and the US", AGU25, New Orleans, USA, 15-19 Dec., 2025.

[3] Yuichiro Tanioka, Rinda Ratnasari, Takayuki Suzuki, Shunichi Koshimura, Akihiro Musa, Naoya Morimatsu, Yoshihiko Sato, Junko Yoshino, “Digital Twin for tsunami disaster resilience, incorporating data assimilation of ocean bottom pressure data - preparing for great Nankai earthquakes", AGU25, New Orleans, USA, 15-19 Dec., 2025.

[4] 鍬守　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, 特許出願 PCT/JP2026/10929, 2026 年 3 月 19 日.

[5] Yutaka Oda, “Numerical and experimental study of transient heat transfer in fully turbulent pulsating flows", The 10th Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow-2025 (ASCHT2025) (Invited talk), Wuhan, China, ID:202, Oct.2025.

[6] Tomoya Shiota, Klaas Gunst, Toshio Mori, Toru Shiozaki, Wataru Mizukami, “Integrating Classical and Quantum Software for Enhanced Simulation of Realistic Chemical Systems", arXiv:2506.18877, Jun. 2025.

[7] Tuan Minh Do, Tomoya Shiota, Wataru Mizukami, “Optimizing adsorption configurations on alloy surfaces using Tensor Train Optimizer", arXiv:2507.20827, Jul. 2025.

[8] Viktor Khinevich, Wataru Mizukami, “Symmetry-Adapted State Preparation for Quantum Chemistry on Fault-Tolerant Quantum Computers", arXiv:2601.08533, Jan. 2026.

[9] Yuichiro Yoshida, Takuma Murokoshi, Rika Nakagawa, Chihiro Mori, Yuta Katayama, Naoya Kuroda, Shigeki Furukawa, Hanae Tagami, Wataru Mizukami, “Doubling the size of quantum selected configuration interaction based on seniority-zero space and its application to QC-QSCI-AFQMC", arXiv:2602.07912, Feb. 2026.

[10] Naoya Kuroda, Tomoya Shiota, Kenji Ishihara, Wataru Mizukami, “Expanding Universal Machine Learning Interatomic Potentials to 97 Elements Towards Nuclear Applications", arXiv:2603.03223, Mar. 2026.

[11] S. Iwamoto, M. Hara, H. Watanabe, T. Kobayashi, “Theoretical study of group III-VII impurity-vacancy centers in 4H-SiC as a potential qubit", International Conference on Silicon Carbide and Related Materials (ICSCRM2025), 2025, oral.

[12] 岩本 蒼典, 原 征大, 渡部 平司, 小林 拓真, “第一原理計算による 4H-SiC 中不純物-空孔ペアの光学特

性評価", 第 86 回応用物理学会秋季学術講演会, 2025, 口頭発表.

[13] 山田 亮太, 岩本 蒼典, 原 征大, 渡部 平司, 小林 拓真, “量子技術への応用に向けた β-Ga2O3 中炭素-空孔ペアの第一原理計算", 第 86 回応用物理学会秋季学術講演会, 2025, 口頭発表.

[14] 岩本 蒼典, 原征 大, 渡部 平司, 小林 拓真, “第一原理計算による 4H-SiC 中の不純物-空孔複合型色中心の包括的探索", 応用物理学会 先進パワー半導体分科会 第 12 回講演会, 2025, ポスター発表.

[15] 山田 亮太, 岩本 蒼典, 原 征大, 渡部 平司, 小林 拓真, “量子技術応用に向けた β-Ga2O3 中不純物-空孔ペアの第一原理計算", 応用物理学会 先進パワー半導体分科会 第 12 回講演会, 2025, ポスター発表.

[16] 山田 亮太, 岩本 蒼典, 原 征大, 渡部 平司, 小林 拓真, “第一原理計算による β-Ga2O3 中スプリット型不純物-空孔ペアの特性評価", 第 73 回応用物理学会春季学術講演会, 2026, 口頭発表.

[17] Kuniaki Saito, Risa Shinoda, Shohei Tanaka, Tosho Hirasawa, Fumio Okura, Yoshitaka Ushiku, “HalDec-Bench: Benchmarking Hallucination Detector in Image Captioning", arXiv:2511.20515, Mar. 2026.

[18] Péter Udvarhelyi, “First-principles insights into the atomic structure of carbon-nitrogen-oxygen complex color centers in silicon", arXiv:2603.02644, Apr. 2026.

[19] Haruno Fusa, Chonho Lee, Yasunori Shinozuka, Sakuei Onishi, Kanshin Fusa, and Hiromitsu Shiina, “A Systematic Evaluation Framework for Large Language Models in Japanese Farm Animal Clinical Medicine", ICAIHE 2026 に投稿済（査読中）.

[20] 西田孔太, 御堂義博, 三浦典之, 川上哲志, Alex Orailoglu, 塩見準, “熱故障注入攻撃を実行時に検知する耐タンパ光ニューラルネットワークの検討", LSI とシステムのワークショップ 2025, ポスター発表, 2025 年 5 月.

[21] 西田孔太, “光ニューラルネットワークに対する複数箇所にわたる熱故障注入攻撃の実行時検知", DA シンポジウム 2025, 情報処理学会 SLDM 研究会 優秀ポスター発表賞, 2025 年 8 月.

[22] Kota Nishida, “PrometheusFree: Concurrent Detection of Laser Fault Injection Attacks in Optical Neural Networks", ASP-DAC2026, IEICE VLD Excellent Student Author Award for ASP-DAC 2026, 2026 年 3 月.

[23] 長友英夫, “10kJ 級爆縮用レーザーを用いた高速点火原理実証のための爆縮設計", 第 42 回 プラズマ・核融合学会年会, 2025 年 12 月 4 日, 京都市.

[24] H. NAGATOMO, Y. TAKAGI, Y. SENTOKU, T. JOHZAKI, “Implosion design considering a multi-objective optimization for fast ignition", 13th International Conference on Inertial Fusion Sciences and Applications, 16 September 2025, Tours, France.

SC25 出展報告

伊達 進[1,2,3]　髙橋 慧智[1,3]　速水 智教[1]　Wassapon Watanakeesuntorn[1]　谷口 昂平[1,3]　曽我 隆[2]
田主 英之[2]　並木 悠太[2,4]　山本 隼矢[1,3]　野口 祥生[1,3]　渡場 康弘[5]　村田 忠彦[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]ヒューマン・メタバース疾患研究拠点
[6]データ生成工学研究部門

2025 年 11 月に米国ミズーリ州セントルイス市にて開催された国際会議／展示会 SC（通称 SC25）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 Association for Computing Machinery (ACM) を中心に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、コロナ禍にあっては 10,000 人を下回っていた。しかし、近年参加者数は大幅に増加し、昨年は過去最高の 18,104 人、今年も速報値で 16,500 人以上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 24 回目となる。

2025 年の SC（通称 SC25）は、米国ミズーリ州セントルイス市にある America's Center Convention Complex（図 1）にて、11 月 16 日から 21 日までの期間で開催された。セントルイスは米国中西部ミズーリ州の東部、ミシシッピ川とミズーリ川の合流点に位置する都市である。昨年開催されたアトランタよりも北に位置するが、開催期間中は比較的暖かく過ごしやすい気温だった。しかし、季節の変わり目もあってか天候が崩れやすく、雨や曇りの日が多かった。また、一昨年より急速に進行した円安は今年一時的に緩和したが、政権交代後に再び円安が進行した。さらには米国での物価・人件費も高止まりしており、ブース展示にかかる費用を押し上げた。

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、結果として昨年を上回る 600 名以上の来訪者を獲得した。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。

図 1：America's Center Convention Complex.

2. 展示内容

SC25 では、12 名の教職員（1 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、3 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 つのポスター展示を中心に本センターのスーパーコンピュータ事業概要、および、当センターを中心とした研究紹介、成果報告を行なった（図 2）。

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
	髙橋 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
	門脇 龍聖
	森脇 健太
高性能計算・データ分析融合基盤協働研究所	
スタッフ	曽我 隆
	田主 英之
	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

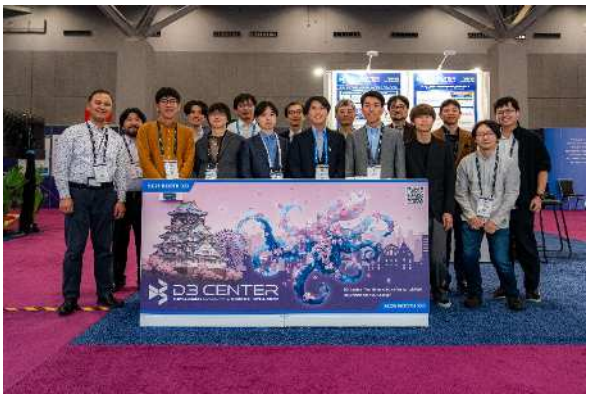


図 2：参加スタッフ記念撮影.

(1) *High-Performance Computing Systems at the D3 Center*
(2) *The Joint Research Laboratory for Integrated Infrastructure of High Performance Computing and Data Analysis*
(3) *Mitigating Resource Constraints for Flexible Scheduling in Cloud-Edge Continuum*
(4) *Towards Autonomous Packet Forwarding in Deterministic Networking / Initiatives Toward an Open Science Information Infrastructure at The University of Osaka*
(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 17 日から 20 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 634 名であった。訪問者数は昨年の 597 名から増加した。

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 66.72%を占めている。続いて、日本を含むアジアからの来訪者が 19.72%、欧州からの来訪者が 9.15%、中南米からの来報者が 2.84%であった。北米、アジア、欧州で全体の 96%近くを占め、その他には中東、オセアニア、アフリカ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、158.5 人の来訪者があった。展示初日の 11 月 17 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、105 人の来訪者があった（図 4）。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 20 日に最多となる 188 人の来訪者を記録した。

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。

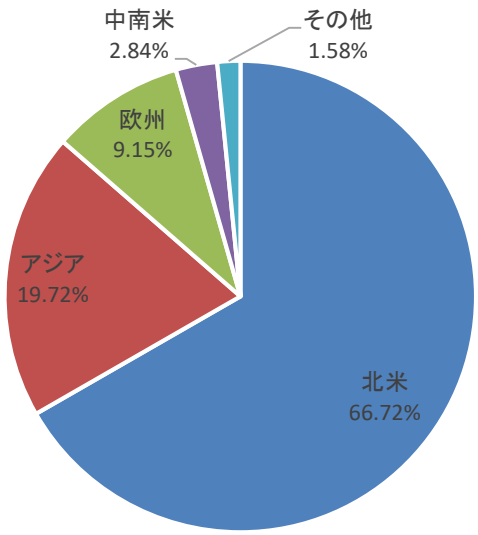


図 3: ブース来訪者 - 地域分類別.

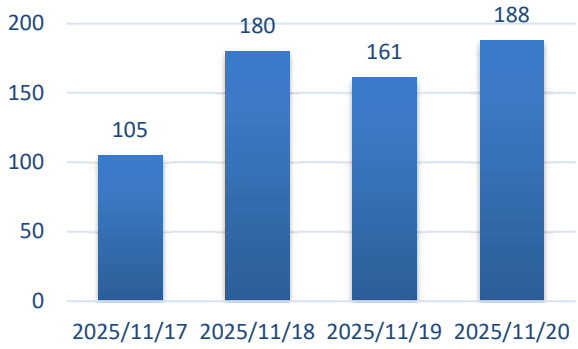


図 4：日付別来訪者数.

以下、SC25 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（括弧内は各ポスターの主な担当者名）。

(1) ***"High-Performance Computing Systems at the D3 Center"*（門脇、森脇、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」、そして 9 月より新たに稼働を開始した「OCTOPUS」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 5、6、7）。

図 5：ポスター説明を行う門脇.

図 6：ポスター説明を行う速水.

図 7: ポスター説明を行う森脇.

ブースに来訪された方々からは、SQUID と OCTOPUS の 2 つのシステムを運用する理由、OCTOPUS が CPU ノードのみである理由、どのような種類の計算が実行されているか、どんなソフトウェアが利用可能か、海外の研究者が利用可能か、ONION-object の S3 互換性はどの程度までの互換性を保証しているか、などの質問があった。

また、現行 SQUID の CPU、GPU、ベクトルノードを備えたヘテロジニアスなシステム構成は世界的にも珍しく、興味を持たれる方が多かった。

次期 SQUID がどういった構成を目指すのかに関しても質問があった。

(2) *" The Joint Research Laboratory for Integrated Infrastructure of High Performance Computing and Data Analysis"*（曽我、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の取り組みとして、来訪者に対し以下の研究課題に関する紹介を行った。

i) 計算科学の研究者がシミュレーションプログラムの並列化工数の削減と可読性の維持を目的とした MPI 化支援関数群 Mutton
ii) 計算機システムにおいてデータの来歴を記録するシステム
iii) 実験系データにおける、データ集約基盤 ONION へのデータ集約と連動したメタデータ収集・管理の概念実証システム構築

担当者はそれぞれ以下に述べるような紹介を行い、来訪者から質疑を受け、議論を行った。

i) MPI 化支援関数群 Mutton （担当 : 曽我、図 8）

図 8 : ポスター説明を行う曽我.

現在配布している MPI 化支援関数群 Mutton は Fortran インタフェースのみで、数値流体解析シミュレーションコードの MPI 化に必要な関数を提供しているが、来場された研究者の方から「粒子コードでも適用可能なのか」と質問を受けた。今後粒子コードの適用可能性を検証したいので、コードをお借りできないか提案を行った。その他、計算機センターの運用管理されている先生から詳しい説明を求められた。

ii) 計算機システムにおいてデータの来歴を記録するシステム（担当：並木、図 9）

図 9: ポスター説明を行う並木.

計算機システムにおけるシミュレーションやデータ分析によって生成された研究データの再現性を向上させるために、その生成過程を示す来歴情報を透過的かつ自動的に記録するシステムを紹介した。来訪者からはシステムの実装の詳細、運用方法、また具体的な操作の記録可否に関して質問を受け、今後の機能拡張やあるべき姿を議論した。質問の内容はいずれも具体的なもので、オープンサイエンス、研究公正の実現に向けた研究データの来歴への関心の高まりを感じられた。

iii) 実験系データの集約と連動してメタデータ生成・収集・管理を行う概念実証システムの構築（担当：田主、図 10）

図 10 : ポスター説明を行う田主.

前年度の SC24 において紹介した、研究データの利活用を促進するために必要なメタデータ生成・集約・管理を行うコンセプトをベースに、実験系研究データを対象として構築した、研究デー

タと連動してメタデータの自動登録を行う、概念実証メタデータ管理システムの紹介を行った。

前年度同様に、HPC 分野に関心を持つ来訪者にはまだデータ利活用をはじめとしたオープンサイエンスの概念は浸透していないように見受けられ、メタデータ自動付与そのものに対する関心度は高くはなかった。その中で、来訪者からは生成された研究データとメタデータファイルを保存する一時的ストレージがどこに配置されるのか、メタデータ管理システムがどれ位の頻度で新規データセットのチェックを行うのか、などの質疑を受けた。また、学内外の研究データを集約するデータ集約基盤 ONION に対しても関心を寄せられ、オブジェクトストレージの分散などに関する議論を行った。

(3) ***"Mitigating Resource Constraints for Flexible Scheduling in Cloud-Edge Continuum"***（**谷口、山本、Watanakeesuntorn**）

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」の取り組みとして、Cloud-Edge Continuum Computing（CECC）におけるネットワーク・計算資源管理スケジューラについて紹介した（図 11、12、13）。本スケジューラは、ユーザに対して透過的にアプリケーションをエッジ環境からクラウド環境へ移行することで、一部のユーザによるエッジ環境の計算資源の偏った利用を抑制しつつ、クラウド・エッジ両環境で高い資源利用率を維持できる。このスケジューラの実現に向けて、当研究部門では軽量仮想化手法であるコンテナのエッジ・クラウド間の透過的な移行手法と決定論的ネットワーク(DetNet: DETerministic NETwork)によるクラウド・エッジ間の通信遅延保証に関する研究成果を報告した。

聴衆からは、HPC の実務化の立場から、実運用時の想定アプリケーションと課金モデルについての質問があった。SC の参加者は科学計算のような大規模なアプリケーションを想定し、クラウドへの秒単位の移行時間は問題ないと考える。一方、テラバイト級のデータ転送時間に対しては、圧縮転送の活用という新たな知見が得られた。また、計算基盤の運用者からは、透過的な移行の必要性は理解できるが、実運用ではユーザーへの課金モデル通りの資源提供が求められるという指摘をいただいた。

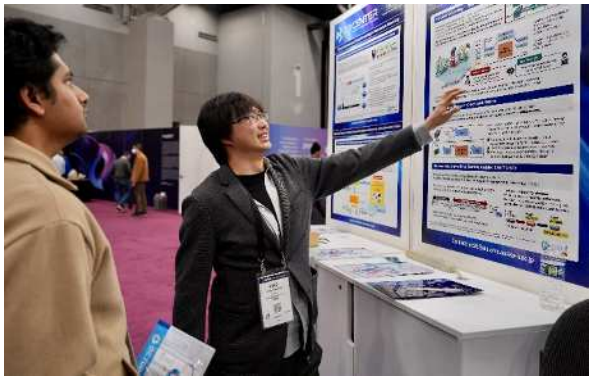


図 11：ポスター説明を行う谷口.

図 12：ポスター説明を行う山本.

(4) ***"Towards Autonomous Packet Forwarding in Deterministic Networking / Initiatives Toward an Open Science Information Infrastructure at The University of Osaka"*** (**Watanakeesuntorn、渡場**)

本ポスター前半では、「ポスト 5G 情報通信システム基盤強化研究開発事業」の研究として、決定論的ネットワークにおける自律型パケット転送について紹介した（図 13）。本研究では、パケット転送遅延のばらつきを最小化するために、ネットワーク経路上の各スイッチが自律的にパケット転送タイミングを制御する深層強化学習（DRL: Deep Reinforcement Learning）モデルを提案した。

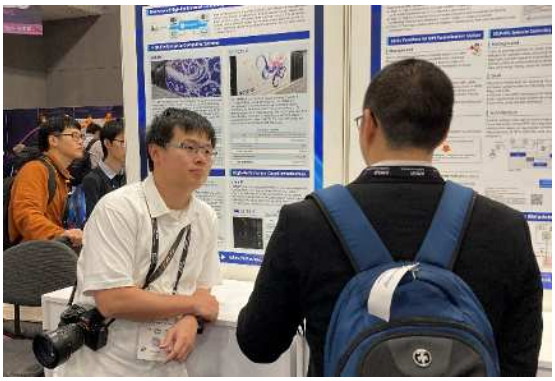


図 13：ポスター説明を行う Watanakeesuntorn.

DRL モデルの概要は次のとおりである。スイッチはフロー情報および隣接スイッチとの接続状況を監視し、これらのパラメータをモデルへの入力特徴量として与える。モデルは、各転送経路において遅延のばらつきが最も小さくなる確率を計算する。その結果に基づき、スイッチはパケットを即時に転送するか、一時的にスイッチバッファに保持するかを判断する。最後に、報酬関数がその行動を評価し、次回以降の意思決定を改善する。学習を繰り返すことで、モデルは段階的に遅延のばらつきを抑える方法を習得し、モデルが収束すると、ネットワーク全体でパケットがほぼ一定の間隔で届く安定した通信を実現できる。

聴衆からは本研究の評価環境についての質問が多く寄せられた。本研究の DRL モデルはスイッチ内部の独自実装であり、標準的なスイッチの実装ではないため、評価にはネットワークシミュレータを使用していると回答した。研究者からは実機での評価を望む声もあったが、本研究のネットワーク環境の複雑さからシミュレータによる評価に一定の理解が得られた。

本ポスター後半では、大阪大学におけるオープンサイエンス推進のための研究データ管理基盤整備の取り組みとして、小規模分析室で取得される測定データを安全に収集・流通させる仕組みと、そのデータ利活用を高度化するための解析基盤の構築について報告した。その実現に向けて、D3 センターで試行運用中のデータ集約・管理基盤である ONION を活用し、小規模分析室向け測定データ集約・配信システムを通じて、大容量の研究データを安全に集約・配信する枠組みを検討している。さらに、収集・配信されたデータの有効活用を図るため、理化学研究所が開発した 4 次元画像データの高速処理・高度解析ソフトウェア VCAT5 を導入し、データの流れの中で解析まで実施できる 4 次元画像解析サービス基盤を整備する構想である。本基盤は mdx II との連携を前提としており、集約された測定データの利活用性と解析可能性を高めることで、データ駆動型研究や分野横断的な研究連携を支援することを目指している。

本サービス基盤は、小規模分析室で生成される測定データを、安全なネットワーク環境の下で集約・管理し、必要に応じて配信できるようにするデータ基盤と、その上で高度な画像解析を実行する解析基盤とを統合したシステムである。中核となる要素は、研究データの集約・管理を担う ONION、4 次元画像データの高速処理・高度解析を担う VCAT5、ならびにデータサイエンスや分野横断型共同研究を支援する計算・研究基盤である mdx II である。本サービス基盤全体としては、従来のようにデータを収集・配信するだけでなく、集約されたデータに解析機能を接続することで、研究データの取得から活用までを一体的に支援するサービス基盤として位置付けられる。特に、4 次元画像データのような大容量かつ高度な処理を要する研究データについて、安全な流通と効率的な解析の両立を図る点に特徴がある。

(5) *"Advanced High-Performance Computing Infrastructure Systems Research Division"*（吉田、野口）

本ポスターでは、データセンタに配備された GPU を研究者が管理しているサーバに接続する GPU-as-a-Service とクラウドバースティング環境における強化学習ベースのジョブスケジューリング手法を紹介した（図 14、15）。

GPUaaS により研究者は機密データを手元のサーバに格納したまま、データセンタに配備された高性能な GPU を利用することが可能になる。

データセンターの GPU と研究者のサーバ間の長距離通信はアプリケーションの性能に影響を与える可能性があるため、GPUaaS 環境を構築し、アプリケーションの性能を測定した。来場者からは GPU とサーバ間通信の暗号化の方法、GPUaaS 環境に収容可能なサーバ数および GPU 数、一部のアプリケーションの性能劣化が大きい理由などの質問があった。

ポスター後半では、オンデマンドに一部のジョブをクラウドへオフロードして待ち時間を短縮する「クラウドバースティング」および、多目的強化学習を用いることで事前シミュレーションから多様なスケジューリング選択肢を獲得する手法について紹介した。来場者からは実験に使用したワークロードの特徴や、クラウド資源の利用形態について質問があった。また、クラウドをリザーブドインスタンスとした場合及びスポットインスタンスとした場合でそれぞれ何を考慮すべきかについても議論した。

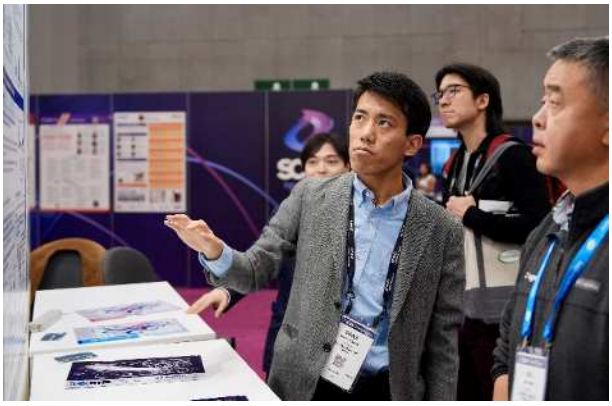


図 14：ポスター説明を行う吉田.

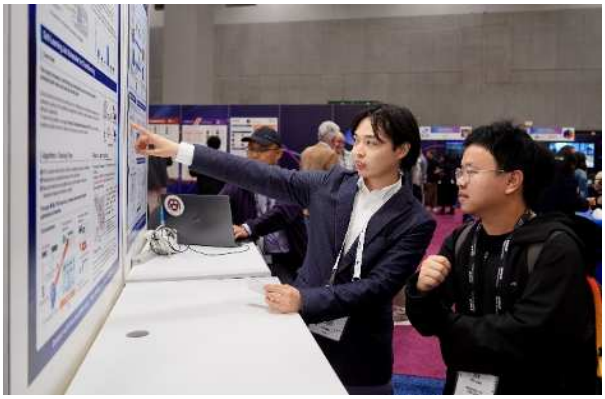


図 15：ポスター説明を行う野口.

(6) ***"Synthetic Population for Real-Scale Social Simulations"*** **(村田)**

図 16: ポスター説明を行う村田.

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16）。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、就業者への従業地割当てと、居住者への生活行動時間割当てのテーマを新たに追加して解説を行なった。

展示ブース来場者に対して，日本全体の過去４回の国勢調査に基づく人口データ合成により、日本国内のどの自治体に対するシミュレーションでも実施できる準備ができていることを説明し、具体的な地域に対するシミュレーションを実施するための基盤の必要性を理解してもらうことができた。また、来場者から日米の統計の違いについても質問があり、アメリカの統計ではサンプルの個票しか使えないこと、日本の統計でもサンプル個票は用意されているが、その個票を使うと第三者提供ができなくなることを説明し、人口

データを公表されている統計のみに基づいて合成することの重要性を理解してもらうことができた。

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。

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 634 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 は米国イリノイ州シカゴ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 31 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2025)報告および第 32 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2026)告知

大阪大学 D3 センター　教授　　吉野 元

1. SuperCon2025

2025 年 8 月 18 日から 22 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(SuperCon2025)」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、21 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 21 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、現在は D3 Center)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画することになり、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。続いて 2024 年は阪大のスーパーコンピュータ SQUID､2025 年は東工大の TSUBAME が用いられました。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

2025 年の予選課題は 5 月 28 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 13 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。2025 年の予選課題は、阪大の作成チームによる「地震活動推定問題」というものでした。これは地震のセルオートマトンモデルを用いたもので、正方格子状に配置された観測点でのある時点でのひずみデータから、その後の地震活動に関する推定を行う､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。本選課題は東工大の作成チームによる「洋上風力発電所の設置」という問題でした。これは海上で行う風力発電の風車（タービン）の設置パターンに関する最適化問題です。風車は互いに近くに置きすぎると風下の風車は発電効率が落ちてしまいます。また台数が増えすぎると設置コストが高くなります。発電する電力の最大化とともに、設置台数の最小化を狙うという複雑なタスクを行なってもらいました。実際の本選では、課題に取り組む前に、東工大のスーパーコンピュータ TSUBAME、また OpenMP/MPI を用いた並列プログラミング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。

4. SuperCon 2026 の告知

2026 年は 8 月 17 日（月）から 21 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 6 月 17 日に公表、課題提出〆切は 6 月 23 日正午です。今回は、理化学研究所のスパコン、富岳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 SuperCon2026 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 SuperCon2027 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。

SuperCon2025（第 31 回大会）
https://www.supercon.cii.isct.ac.jp/attwiki/index.php?SupercomputingContest2025

SuperCon2026（第 32 回大会）
https://www.supercon.cii.isct.ac.jp/attwiki/?SupercomputingContest2026

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　　降簱 大介

1. 概要

大阪大学 D3 センターの大規模計算機システムに関する利用者講習会等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、管理、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、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、そして利用者向けの講習会・セミナー・説明会等の開催です。

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。一方で、利用者講習会等は、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はありません。講習会の場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。そのように力の入った利用者講習会等について、以下、本稿で皆様にご説明を申し上げます。

2025 年度に実施した内容を概観しますと、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、並列プログラミングの考え方、OpenMP、MPI、GPU を使いこなすための OpenACC、Intel コンパイラを用いた高速化技法、コンテナ利用、SQUID に搭載されているベクトルプロセッサ SX-Aurora TSUBASA の高速化技法、ストレージシステム ONION の活用、第一原理電子状態計算プログラム AkaiKKR、電子と光の相互作用をシミュレートする SALMON など、多岐にわたる講習会を開催しました。さらに、2025 年度は、OpenStack ベースの仮想サーバ型計算プラットフォーム mdx II、2025 年 9 月から運用を開始した次世代計算・ストレージ基盤 OCTOPUS、Python チュートリアル、Docker、性能チューニングプログラム、公募型利用制度説明会・成果報告会、Cyber HPC Symposium 2026 なども含め、利用者の裾野を広げるための取り組みを進めました。

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ので、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、一部の講習会はほぼ同じ内容で時期をずらして開催するように工夫しています。たとえば、2025 年度は「初めてのスパコン」を 6 月と 10 月に、「スパコンに通じる並列プログラミングの基礎」を 6 月と 10 月に開催しました。また、スーパーコンピュータ利用説明会を 6 月中に複数回実施し、OCTOPUS 無料お試し利用説明会も 7 月、9 月に複数回開催するなど、利用を検討する方が参加しやすい機会をなるべく多く用意しました。

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てきました。2025 年度も多くの講習会・説明会をオンラインにて実施し、遠隔地からでも参加しやすい形を維持しました。特に、学外利用者、企業の研究者・技術者、HPCI 利用を検討する方、あるいはまずは試用してから本格利用を考えたい方にとって、オンラインで説明を受けられ、場合によってはお試しアカウントで実際に触れられることは、導入の障壁を下げる重要な仕組みになっています。

高度なプログラミング、AkaiKKR、SALMON、mdx II、Docker などの実践的な内容については、講師を確保することも容易ではありません。これに対し、

われわれは日本電気株式会社様、一般財団法人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、専門性の高い内容を実施できる体制を整えています。

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・説明会も数多くあります。2025 年度には、「スパコンに通じる並列プログラミングの基礎」「初めてのスパコン」「OpenMP 入門」「スーパーコンピュータ バッチシステム入門 / 応用」「スーパーコンピュータ利用説明会（初心者向け）」などを開催しました。これらは、OS である Unix の簡単な操作方法の解説、大規模計算機システムの利用方法、バッチシステム、並列計算の考え方、OpenMP による共有メモリ並列プログラミングなどを扱うものです。

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。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等を通じて、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ています。

2025 年度の特徴として、mdx II や OCTOPUS のような新しい計算・データ基盤への導入支援を行った点も挙げられます。mdx II については、仮想マシン作成、OpenStack の各種機能、Jupyter 環境構築などを扱いました。OCTOPUS についても、無料お試し利用説明会や利用説明会を通じて、2025 年 9 月から運用を開始した新しい基盤の特徴や申請方法を紹介し、新規利用者が入りやすい入口を用意しました。

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。2025 年度も、OpenMP/MPI による並列プログラミング、Intel コンパイラを用いた汎用 CPU ノード高速化技法、GPU プログラミング入門・実践、SX-Aurora TSUBASA 高速化技法、ONION 活用、コンテナ入門、AkaiKKR、SALMON など、多くの専門的な講習会を計画し、そして実施しました。

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。そこで、一部の講習会では無料お試し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う実習形式をとっております。OpenMP や MPI、OpenACC、SX-Aurora TSUBASA、AkaiKKR、SALMON などは、実際にコンパイルし、実行し、性能や挙動を確認してはじめて理解が深まる内容です。また、コンテナ入門や Docker セミナーでは、近年の研究ソフトウェア環境において重要性を増している再現可能な実行環境の構築・利用について扱いました。

さらに、性能チューニングプログラムでは、利用者の手元の非商用プログラムを本センターで預かり、大規模計算機に対する最適化および並列化を行う取り組みを実施しました。これは講習会という一方向の情報提供だけでは届きにくい、個別プログラムに固有の問題へ踏み込む支援です。公募型利用制度説明会や成果報告会、Cyber HPC Symposium 2026 も、制度の理解、研究成果の共有、将来の高性能計算機システムの必要性や人材育成について議論する場として、利用者コミュニティ全体にとって重要な役割を果たしています。

5. ぜひご参加され、そしてフィードバックを

講習会・セミナー・イベント・説明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/

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、ぜひ頻繁にご覧になり、ご興味のある講習会等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。2025 年度は、従来からの SQUID、ONION に関する内容に加え、mdx II、そして次世代計算・ストレージ基盤 OCTOPUS という新しい基盤に関する説明会・講習会も実施しました。これは、D3 センターの支援対象が、単なる「計算機の使い方」にとどまらず、計算、データ、ストレージ、仮想化、コンテナ、AI・機械学習、研究ソフトウェア環境全体へと広がっていることを意味しています。

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等ではありますが、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、より良い支援、そしてより良い大規模計算機システムの活用があります。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、講習会等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。

2026 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	初めてのスパコン ―ログインから実行まで―	6 月 1 日	情報基盤課 技術職員
2	スパコンに通じる 並列プログラミングの基礎	6 月 3 日	D3 センター 宮武 勇登 准教授
3	OpenMP 入門	6 月 5 日	D3 センター 吉野 元 教授
4	スーパーコンピュータ バッチシステム入門／応用	6 月 10 日	日本電気株式会社
5	コンテナ入門	6 月 12 日	日本電気株式会社
6	SX-Aurora TSUBASA 高速化技法の基礎	6 月 16 日	日本電気株式会社
7	並列プログラミング入門 （OpenMP/MPI）	6 月 24 日	日本電気株式会社
8	ONION 活用講習会	7 月 3 日	日本電気株式会社
9	汎用 CPU ノード 高速化技法の基礎 （Intel コンパイラ）	7 月 15 日	エクセルソフト株式会社
10	GPU プログラミング入門 （OpenACC）	7 月 23 日	プロメテック・ソフトウェア株式会社
11	GPU プログラミング実践 （OpenACC）	7 月 24 日	プロメテック・ソフトウェア株式会社

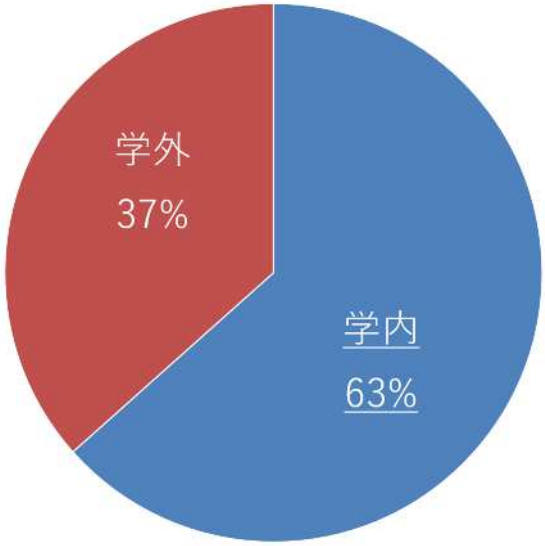
※全てオンラインでの開催

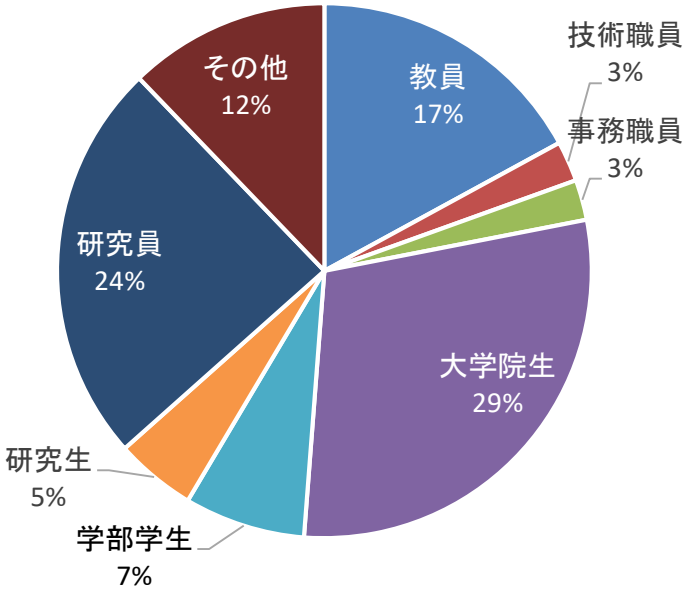
2025 年度 大規模計算機システム利用講習会 アンケート集計結果

◆受講者数（すべてオンラインで開催）

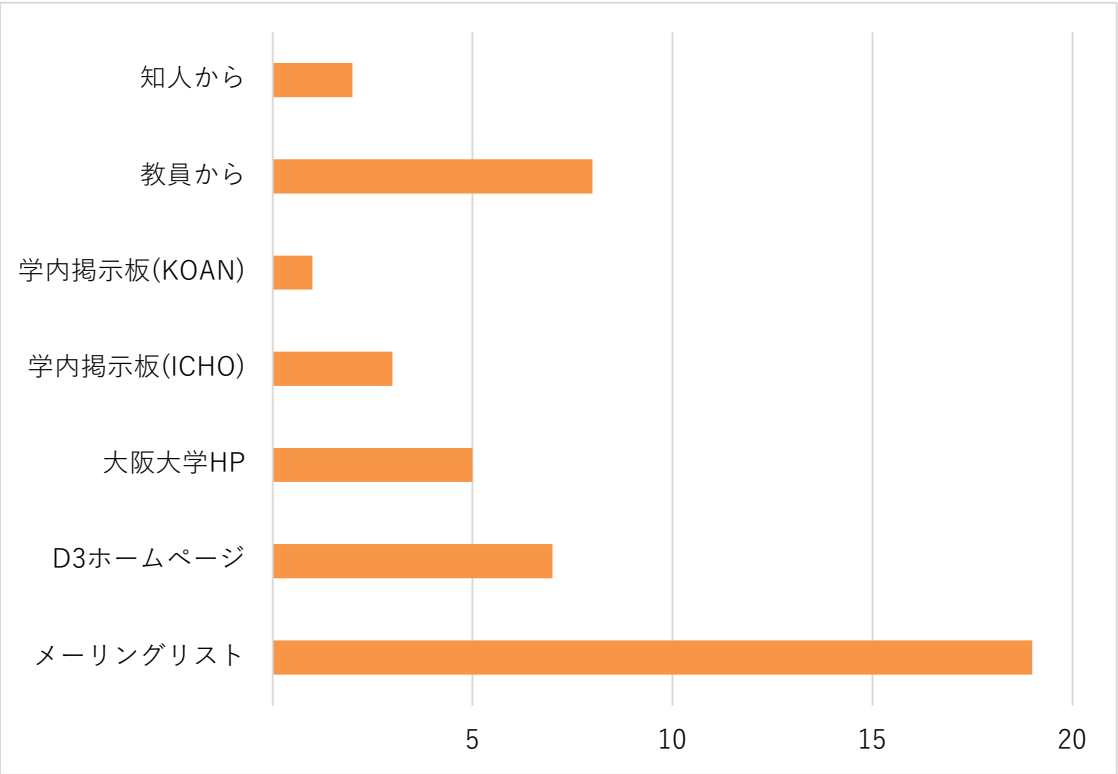
講習会名	申込者数	受講者数
スパコンに通じる並列プログラミングの基礎（6/3）	13	11
初めてのスパコン（6/5）	23	21
OpenMP 入門（6/9）	12	8
汎用 CPU ノード 高速化技法の基礎（Intel コンパイラ）（7/3）	8	8
GPU プログラミング入門（OpenACC）（7/18）	30	25
スーパーコンピュータ バッチシステム入門 / 応用（7/23）	11	9
GPU プログラミング実践（OpenACC）（7/25）	13	9
SX-Aurora TSUBASA 高速化技法の基礎（7/29）	3	2
並列プログラミング入門（OpenMP/MPI）（7/31）	3	3
ONION 活用講習会（9/30）	13	9
コンテナ入門（10/2）	9	7
初めてのスパコン（10/10）	20	15
スパコンに通じる並列プログラミングの基礎（10/17）	17	8
合計	175	135

◆受講者の内訳

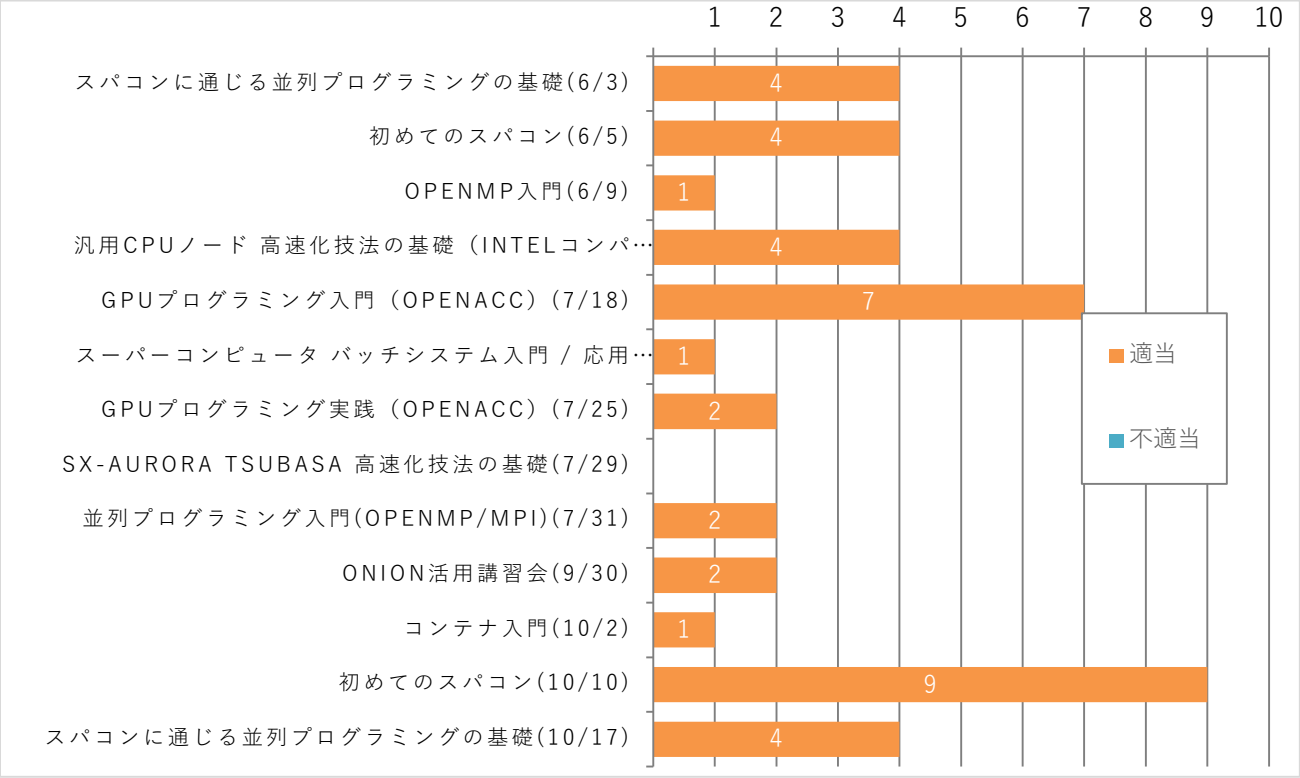




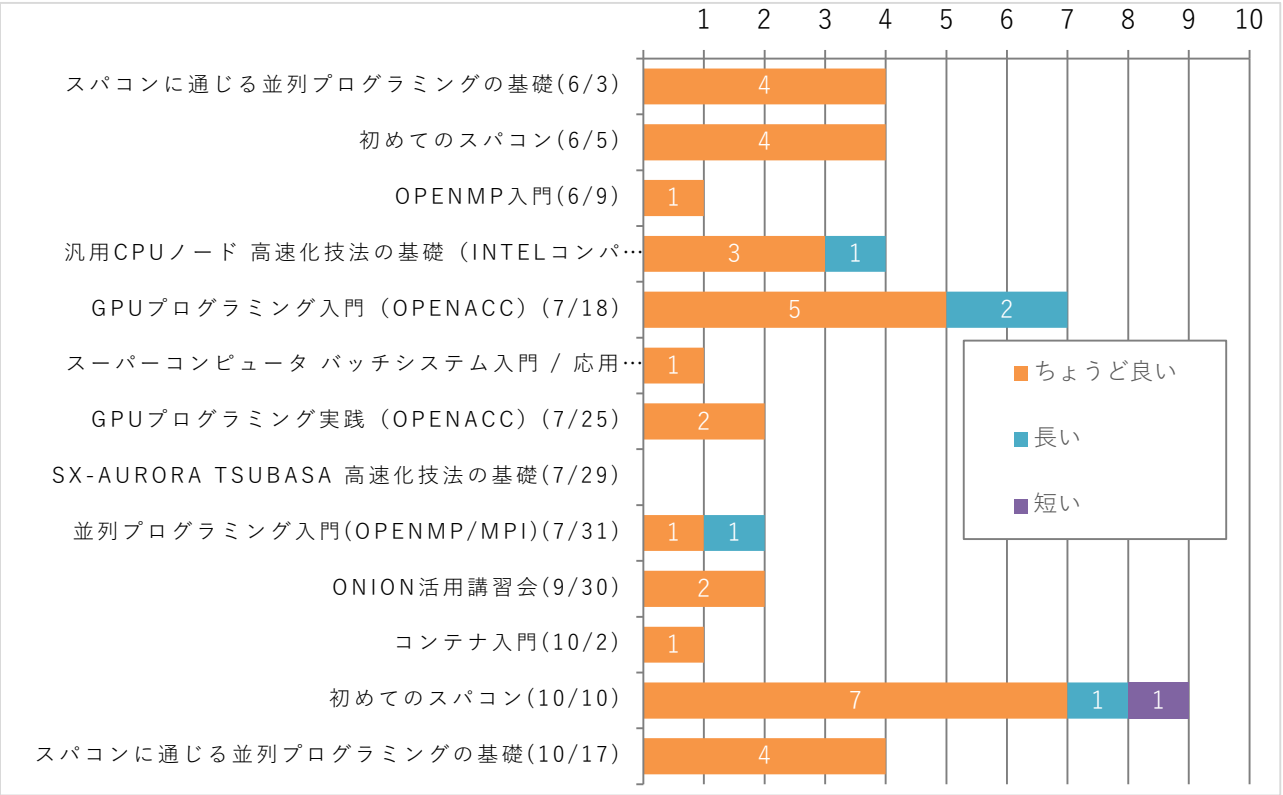
◆講習会についてどのようにお知りになりましたか。（複数回答可）



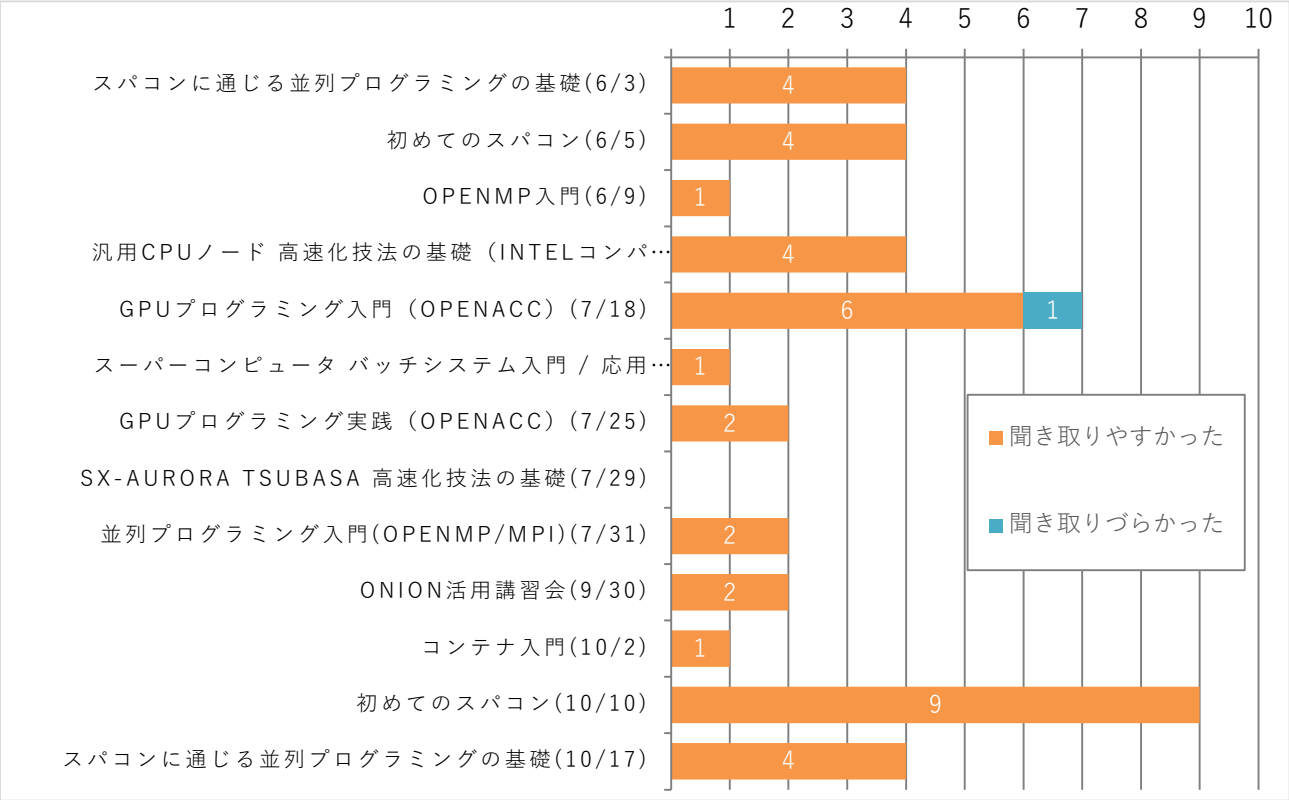
◆開催日は適当でしたか。



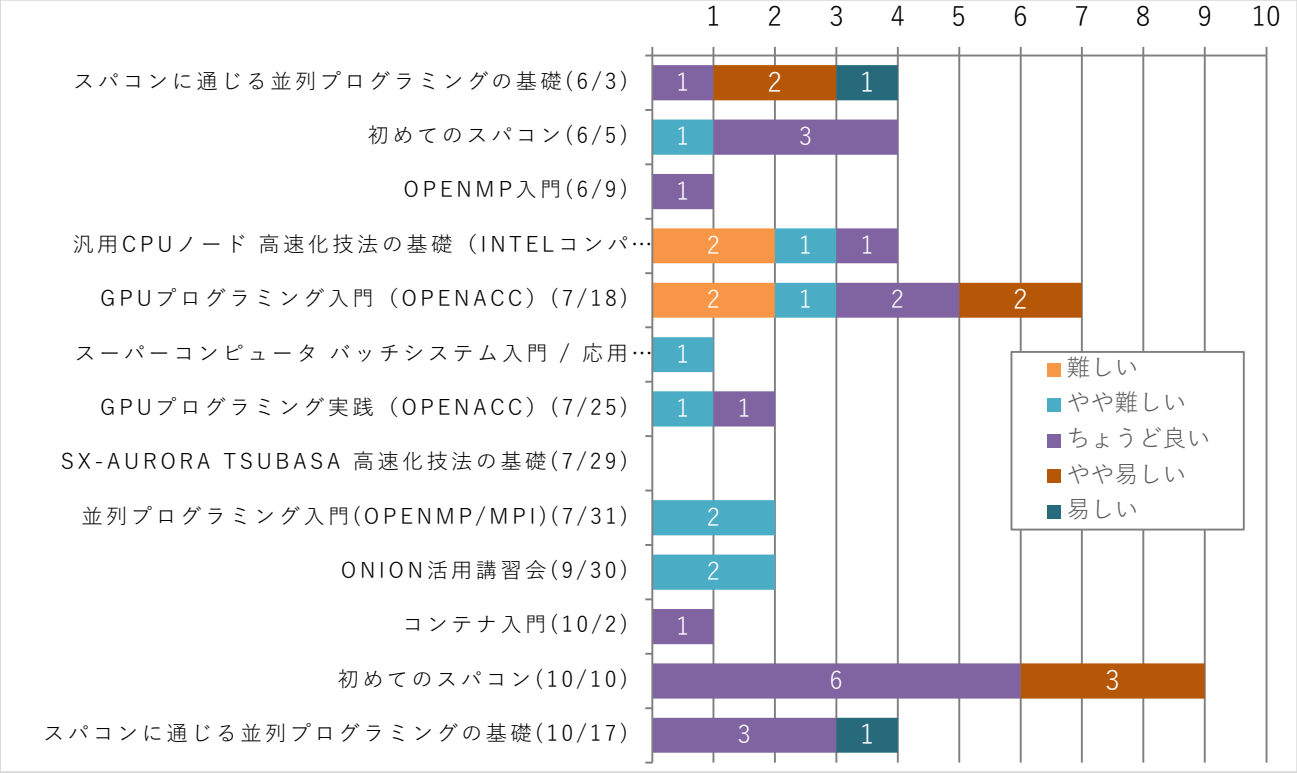
◆講習会の時間は適当でしたか。



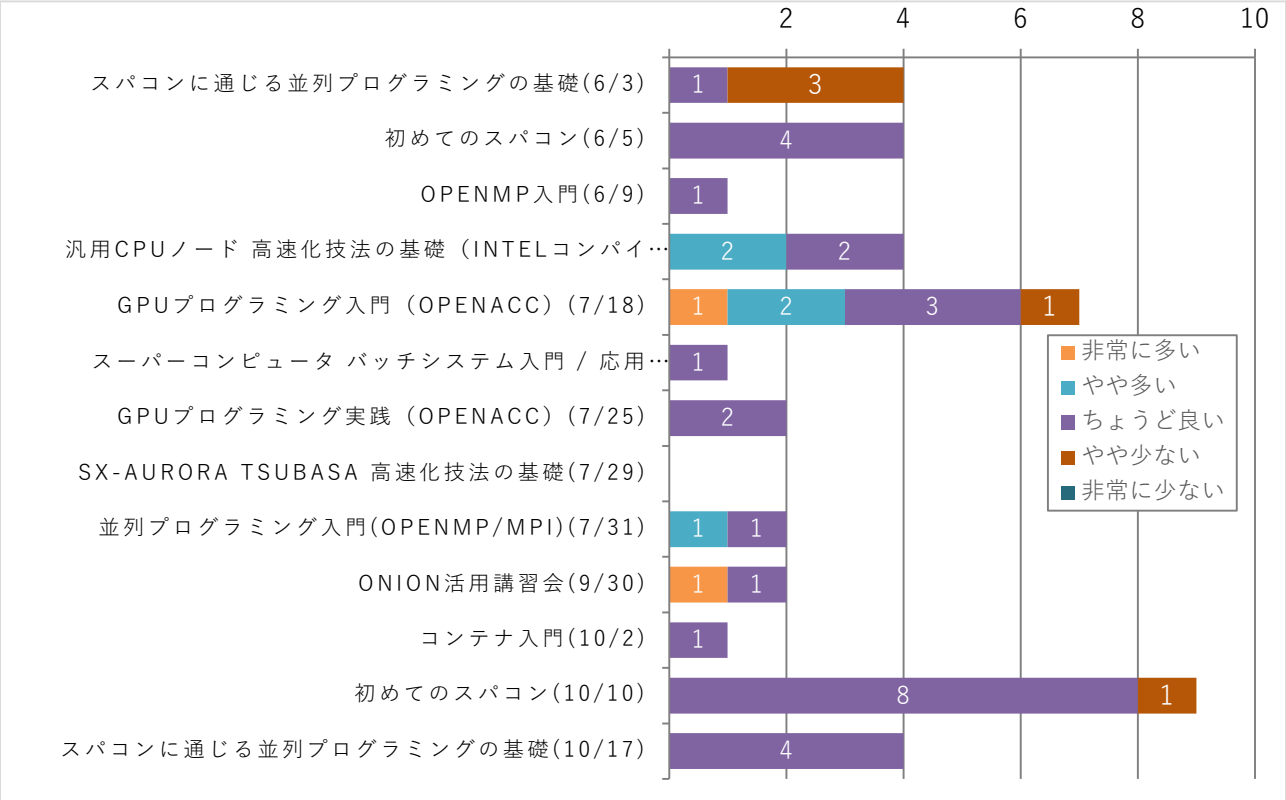
◆今回の講習会の音声はいいかがでしたか。



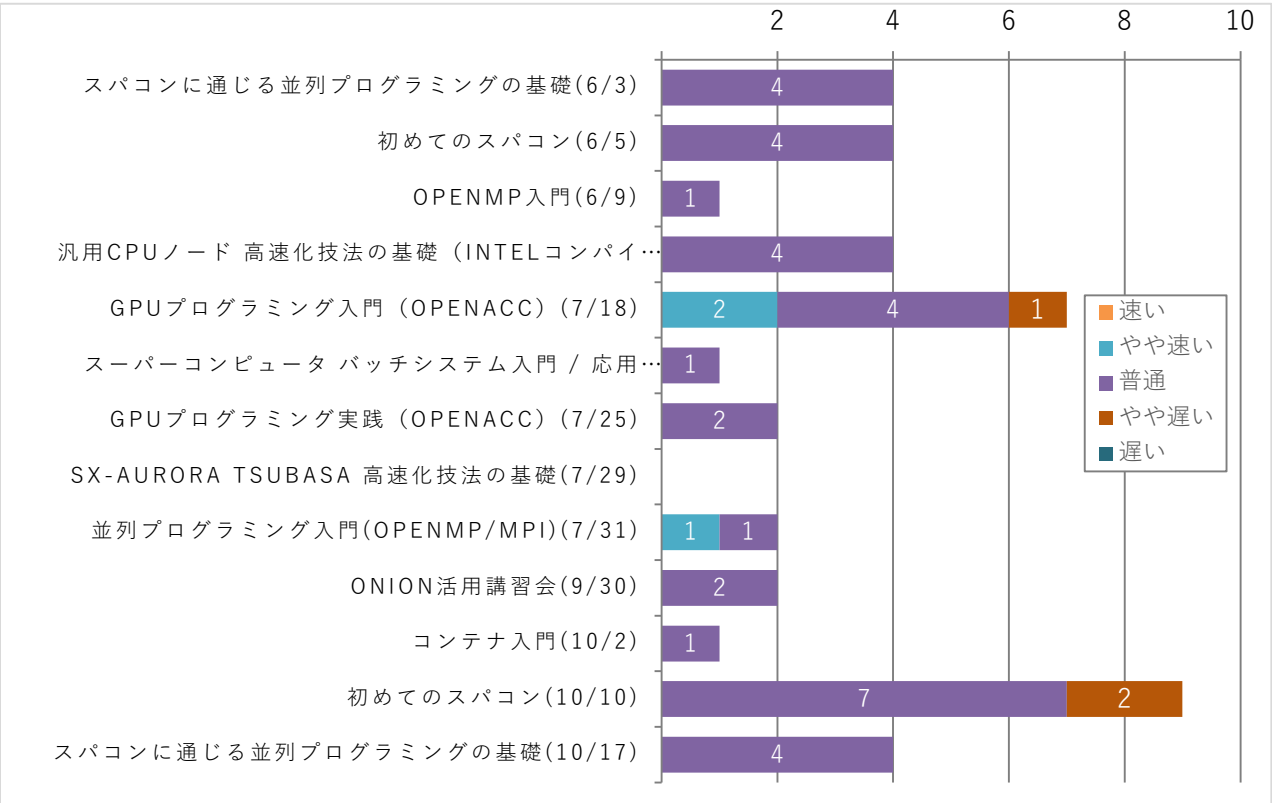
◆講習会の内容はどうでしたか。



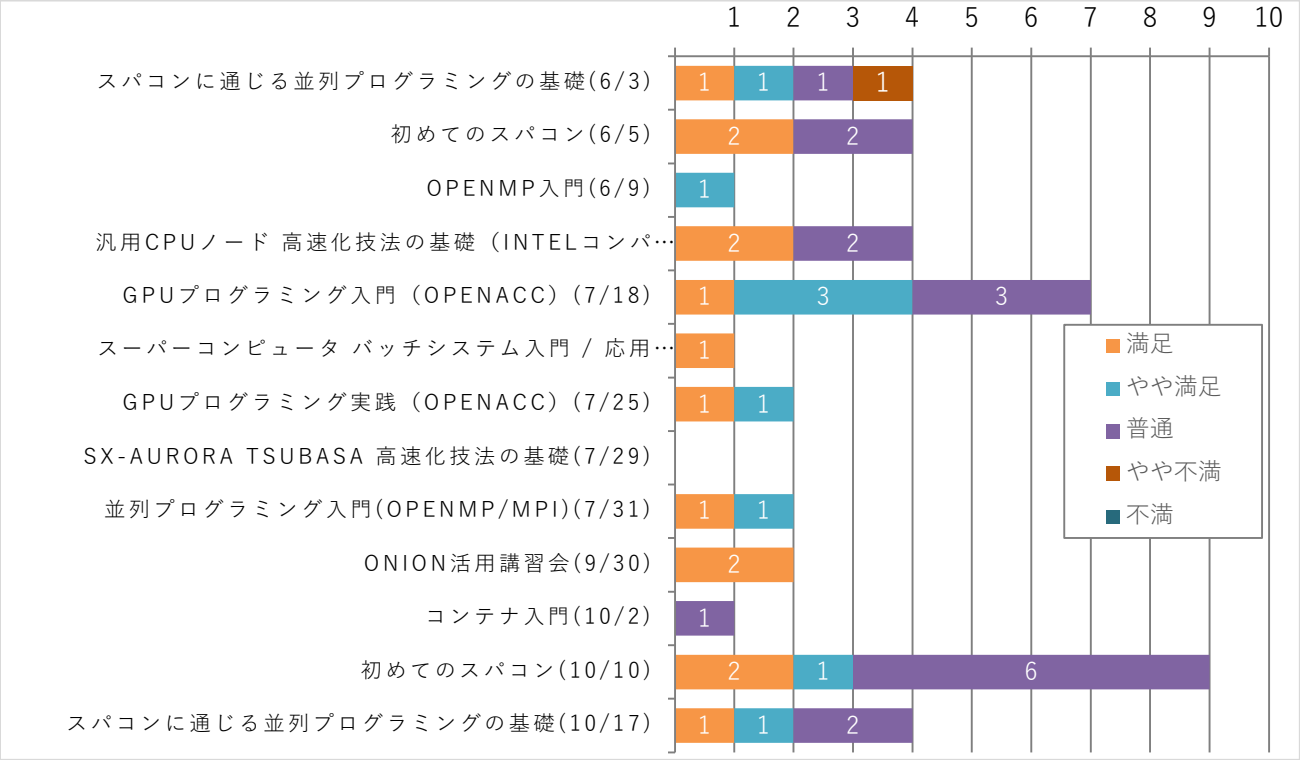
◆講習会で取り扱った内容量はどうでしたか。



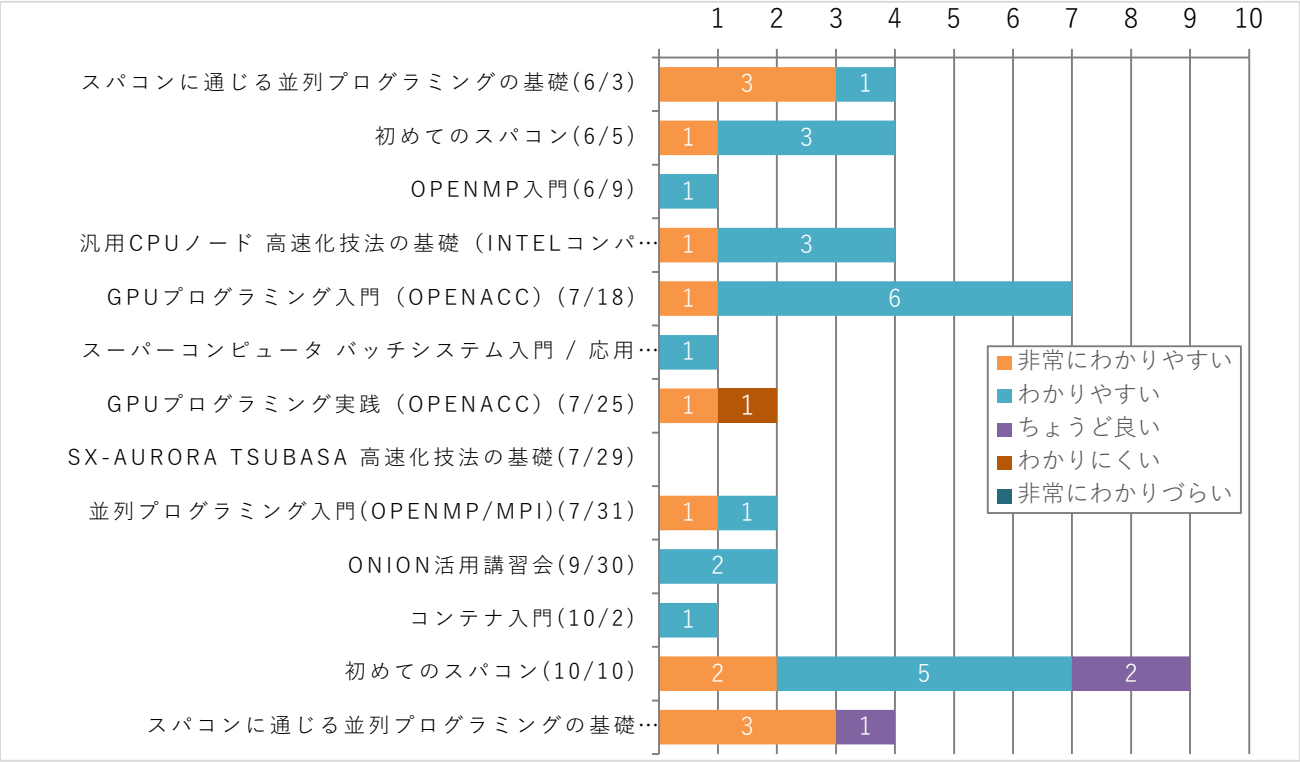
◆講師の進め方はどうでしたか。



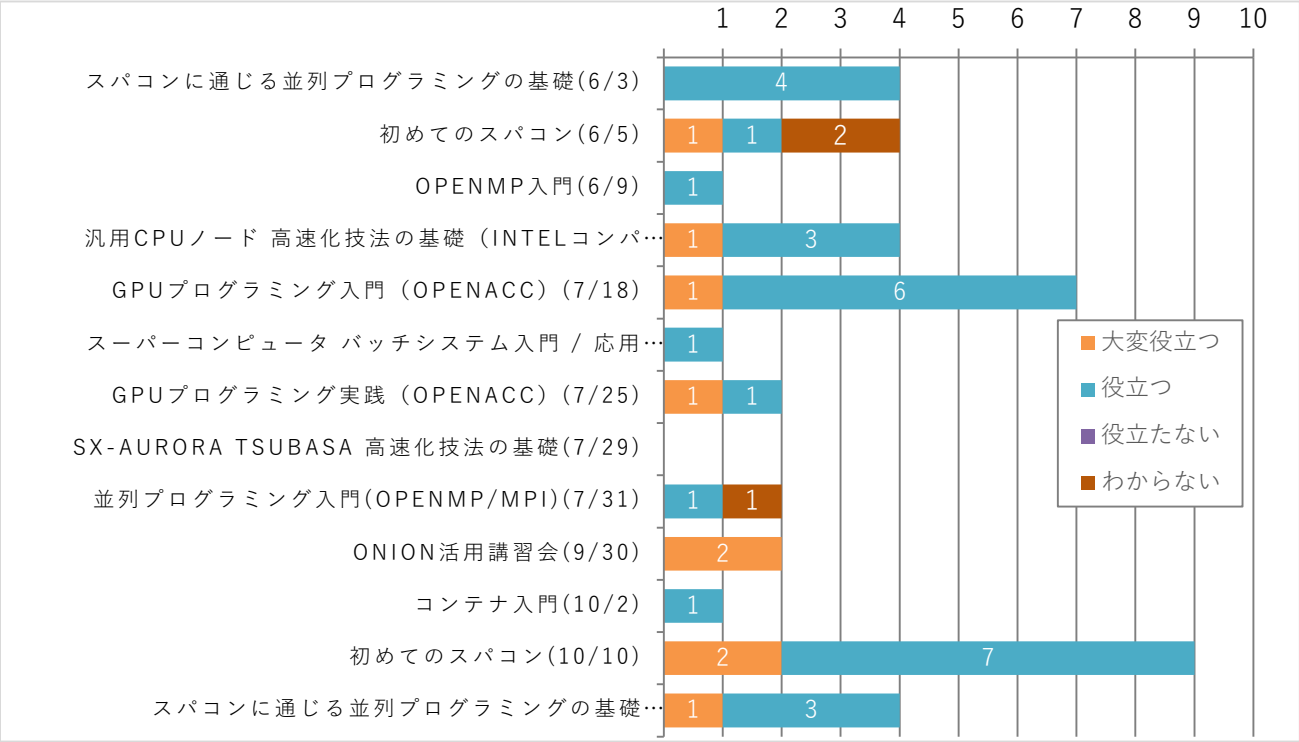
◆満足度は？



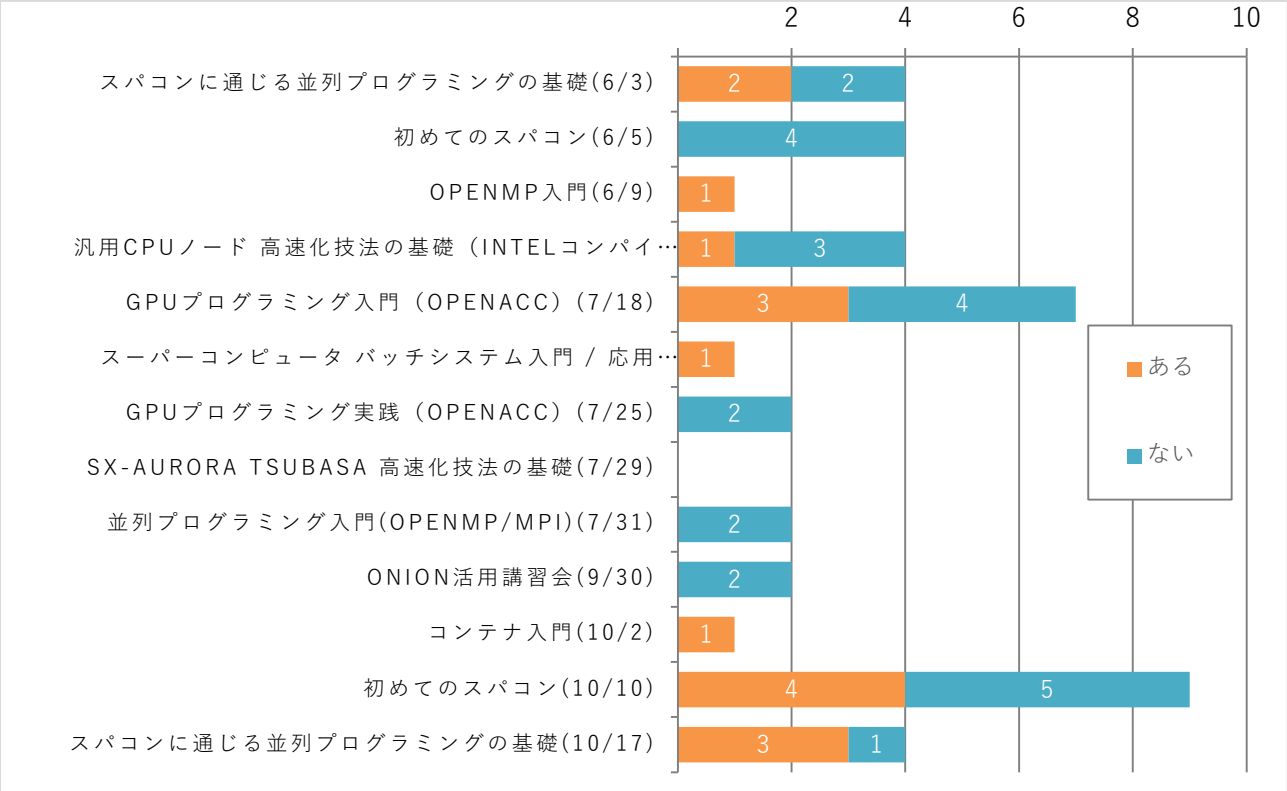
◆講習会の資料はどうでしたか。



◆皆さんの今後の研究・業務・勉学に役立つと思いますか。

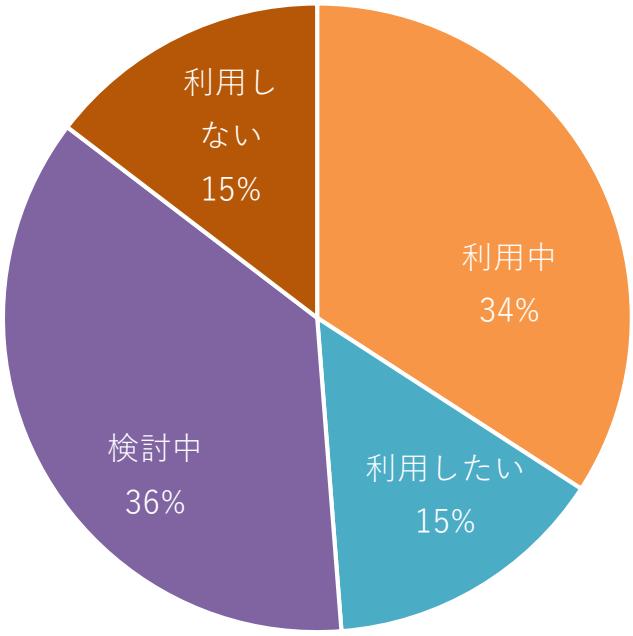


◆他の情報基盤センター等も含め、これまでにスーパーコンピュータを利用したことがありますか。



◆「ある」と回答された方の利用方法

◆Ｄ３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。



2026 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 2026 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	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	Regulation of Biomolecular Condensate Stability by Interface Electrostatics
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開発のための 乱流 LES/DNS 解析
一般課題	超高速 QM/MM および AI 駆動型分子動力学計算による 生体内反応機構の解明
一般課題	詳細反応機構を考慮した高圧メタン酸素ロケット燃焼振動解析： 発生機構と燃料種依存性の解明
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	分子生成 AI と計算科学を用いた低環境負荷絶縁ガスの 高精度物性予測と最適設計
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	スケールド・シュレーディンガー方程式の正確な解法による 超精密量子化学計算
一般課題	重クォーク QCD の熱力学ポテンシャルの構築
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
一般課題	機械学習力場 MD によるナノ細孔内の電解液挙動の解析
一般課題	滑り中の固体表面におけるせん断降伏の 反応性分子動力学シミュレーション
一般課題	タンパク質-リガンド結合過程における環境効果の究明

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 (2)
若手課題	テンソルネットワーク形式に基づく新しい相転移解析手法の開発と応用
若手課題	第一原理分子動力学シミュレーションを用いた 潤滑油添加剤のトライボケミストリーの解明
若手課題	ベイズ統計に基づく拡張アンサンブル MD と力場モデルの 検証・改良による RNA 分子の構造予測
若手課題	第一原理計算による磁化プラズマ中の高強度電磁波の研究
若手課題	Development of generative model to design catalytic materials for CO2 hydrogenation to green methanol
若手課題	転がり摩擦の大規模有限要素解析
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
産業試行 課題	グラフェン/4H-SiC 界面における SiC リモートエピタキシー 初期成長過程の解析

2026 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。

2026 年度の課題募集には合計 80 課題が採択されました。このうち以下の 17 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
望月 祐志　様 （立教大学）	FMO プログラム ABINIT-MP の次世代化
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
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
松崎 義孝 様 （海上・港湾・航空技術研究所）	流動生態系シミュレーションシステム EcoPARI の 活用と全国展開
森田 直樹　様 （筑波大学）	Deflation に基づく並列反復法前処理とその GPU 実装
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
大谷 寛明　様 （核融合科学研究所）	リアル粒子シミュレーションによるプラズマ科学の展開
中村 宜文　様 （理化学研究所）	HPC アプリケーションの継続的多拠点開発基盤
村田 忠彦　様 （大阪大学 D3 センター）	合成人口プロジェクト：日本全国の就業者への 従業地属性割当て
金子 政志　様 （大阪大学 理学研究科）	計算化学予測に基づく Middle-up-down 型 マイナーアクチノイド抽出剤設計
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
森川 良忠　様 （大阪大学 工学研究科）	Machine Learning-Driven Multi-Scale Simulations for Green Catalysis Design

緒方 奨　様 （大阪大学 工学研究科）	超臨界水圧破砕による網状き裂造成シミュレーションと超臨界地熱発電への適用
南里 豪志　様 （九州大学）	Study on the real effect of non-blocking collective communications
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
佐々木 大輔　様 （大阪公立大学）	薄い界面を含む工学問題に対する非定常流体解析手法の構築
塙 敏博　様 （東京大学）	Energy Efficient Operation for Supercomputer Systems

2025 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ス・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。2025 年度は通常の募集に加えて追加募集を行い、以下の 10 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
川守田 創一郎 様 （大阪大学 基礎工学研究科）	凝集有機発光特性を示す遷移金属錯体の固体中での 励起状態シミュレーション
金子 政志 様 （大阪大学 理学研究科）	計算化学アプローチによるマイナーアクチノイド分離抽出剤の ミドルアップダウン型分子設計
坂井 あづみ 様 （長崎総合科学大学）	高エネルギー原子核衝突反応の高統計シミュレーションを 用いた原子核形状の研究

大規模 HPC 支援枠 採択課題

代表者名	研究課題名
岩下 航 様 （産業技術総合研究所）	弾性波速度付近の高速滑り速度での摩擦則

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
松山 奈央 様 （筑波大学）	局所非調和振動計算によるロドプシンのアミドバンド予測
李 響 様 （大阪大学 工学研究科）	塑性変形におけるエネルギー散逸に関する分子動力学的研究
Bahrul Jalaali 様 （大阪大学 工学研究科）	Towards a generalizable data-driven subgrid-scale model for large-eddy simulation of turbulent flow with transfer learning algorithm
守實 友梨 様 （大阪大学 工学研究科）	ホウ素中性子捕捉療法における深部がん照射計画の 開発・最適化
田中 大地 様 （大阪大学 工学研究科）	半導体光学冷却に向けたホストゲスト構造の ハロゲン化ペロブスカイト結晶の冷却能力評価
Samuel Eka Putra Payong Masan 様 （大阪大学 工学研究科）	Multiscale investigation of carbon dioxide reforming of methane with machine-learning- combined density functional theory calculations and enhanced sampling

2026 年度 大規模計算機システム公募型利用制度の活動状況

2026 年度も引き続き研究課題の公募を行い、以下の 23 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
渡邊 大記 様 （大阪大学 基礎工学研究科）	容器の歳差運動に駆動される気液二相流の 大規模数値シミュレーション
豊内 大輔 様 （大阪大学 理学研究科）	宇宙論的輻射流体シミュレーションを用いた銀河と ブラックホール共進化過程の研究
大野 誠之 様 （大阪大学 歯学研究科）	タンパク質複合体間相互作用予測は病原体による 未知の感染機構を解明する
CUI Yi 様 （名古屋大学）	大規模階層 PINN 計算による電子風力駆動 ナノ構造形成メカニズムの解明
小嶋 秀和 様 （大阪大学 基礎工学研究科）	付着仕事に基づく濡れ性評価の新規手法の開発
宮川 泰明 様 （弘前大学）	V 字型スリット付きスプレーノズルにおける 初期微粒化過程の数値流体力学的解明
吉田 悠一郎 様 （大阪大学 量子情報・量子生命研究センター）	実用的な量子化学計算に向けた量子計算機と 大規模計算機の活用
鵜沢 浩太朗 様 （日本原子力研究開発機構）	非平衡グリーン関数法による核分裂の量子多体ダイナミクスの 解明
村山 大輔 様 （大阪大学 工学研究科）	高温高圧下のダイヤモンド核生成

大規模 HPC 支援枠 採択課題

代表者名	研究課題名
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
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

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 エマージングサイエンスデザイン R^3センター）	二次元半導体成膜プロセスの分子動力学解析を可能とする 機械学習力場モデル開発
Harry Handoko Halim 様 （大阪大学 工学研究科）	The Development of Machine-learning Interatomic Potentials for the Elucidating Dynamic Active Sites in Heterogenous Catalysis

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
吉川 航平 様 （大阪大学 基礎工学研究科）	機械学習を用いた過冷却水の 水素結合ダイナミクスを特徴付ける反応座標の探索
吉田 晃太朗 様 （東京科学大学）	大規模深層学習における次世代最適化アルゴリズムのための 分散学習手法 FSDP の設計
岡部 涼 様 （大阪大学 基礎工学研究科）	全原子型分子動力学シミュレーションを用いた 架橋高分子膜内におけるイオン輸送機構の解明
Muhammad Fadhlan Anshor 様 （大阪大学 工学研究科）	Formate-Induced Step Fluctuations on Cu Surfaces: Machine-Learning Interatomic Potentials Coupled with Automatic Process Explorer for Event Discovery and Kinetic Monte Carlo Simulation
鈴木 翔介 様 （筑波大学）	免疫チェックポイント・サイトカイン受容体を標的とした ダイナミクス駆動型バインダー設計
和田 辰也 様 （京都大学）	重クォーク QCD における純虚数化学ポテンシャル領域に おける相構造の解明
石原 菜々子 様 （大阪大学 基礎工学研究科）	機械学習ポテンシャルを用いた電解液存在下 Li_2O_2 表面の 電子・Li+輸送特性シミュレーション
水谷 耕介 様 （大阪大学 理学研究科）	共通外層期直前における周連星環境に関する 3 次元輻射磁気流体計算
髙野 宏征 様 （琉球大学）	水流に対して効果的な袋詰玉石工の配置検討
Samuel Eka Putra Payong Masan 様 （大阪大学 工学研究科）	Polyethylene adsorption on Cu surfaces studied with random phase approximation and machine-learning potential

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.osaka-u.ac.jp/acid/

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．年度途中に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、当該論文等に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。）の場合にあっては、当該予算の振替による。

(2) 前号以外の場合にあっては、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に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あるときは、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っては、この規程に基づき利用の登録があったものとみなす。

別表第１７

大阪大学D3センター大規模計算機システム利用規程第１１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

1 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。

2 登録時の利用期限または年度を越えて利用はできない。

3 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。

4 (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。

5 (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。

6 (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。
その場合の月額の負担額は、1ノード年の基本負担額の1/10とする。

7 (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る。

8 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		

9 (C) は年度の途中は追加申請のみ受け付ける。

10 (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）OCTOPUSの負担額

（A）占有

基本負担額	占有ノード数
1,907,000円／年	汎用CPUノード群 1ノード

(B) 共有

	基本負担額	OCTOPUS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) ディスク容量追加

基本負担額	提供単位
2,000円／年	1TB

備考

1 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。
2 登録時の利用期限または年度を越えて利用はできない。
3 ディスク容量は1申請単位で5TBを割り当てる。ただし、他のディスク容量と合算できない。
4 (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。
5 (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。
6 (A) は資源提供状況により10ノード以上3か月単位の申請を受け付ける場合がある。
その場合の月額の負担額は、1ノード年の基本負担額の1/10とする。
7 (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る。
8 計算ノードの利用に使用するOCTOPUS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
汎用CPUノード群	高優先度	通常優先度	シェア(1/2)	シェア(1/4)	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
	0.6219	0.5287	0.3732	0.2488		

9 (C) は年度の途中は追加申請のみ受け付ける。
10 (C) は１つの申請グループにつき、50TBの追加を上限とする。

(3)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

1 年度の途中は追加申請のみ受け付ける。
2 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あっては、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
ログインサーバ（OCTOPUS）	octopus.hpc.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。

スーパーコンピュータ OCTOPUS のジョブクラス一覧

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	利用可能最大メモリ量	同時利用可能ノード数	備考
共有利用	OCT	120 時間	32,768 Core (256 Core/ノード)	92.75 TiB (742 GiB/ノード)	128 ノード	
	OCT-H	120 時間	32,768 Core (256 Core/ノード)	92.75 TiB (742 GiB/ノード)	128 ノード	※1
	OCT-S	120 時間	128 Core	371 GiB	1 ノード	※2
	DBG	10 分	512 Core (256 Core/ノード)	1,484 GiB (742 GiB/ノード)	2 ノード	
	INT	10 分	512 Core (256 Core/ノード)	1,484 GiB (742 GiB/ノード)	2 ノード	
	VA	120 時間	256 Core	742 GiB	1 ノード	
	DPS	120 時間	32,768 Core (256 Core/ノード)	92.5 TiB (740 GiB/ノード)	128 ノード	※3
占有利用	myOCT	無制限	256 Core× 占有ノード数	742 GiB× 占有ノード数	占有ノード数	

※1. 高優先度キューに投入されたジョブは、システムが混雑して実行待ちが発生している場合に、次に実行するジョブとして優先的に選択されやすくなり、待ち時間の短縮が期待できます。実行予定が確定したジョブ(qstat コマンドで実行予定時刻が表示されるジョブ)を入れ替えるものではありません。なお、高優先度キューは通常キューに比べて消費係数が高く設定されており、実行時のポイント消費量は通常キューより多くなります。詳細はこちらをご参照ください。

※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。以下のとおり、計算規模に応じて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。

128 core 以下 かつ メモリ 371 GB 以下のジョブ → シェア(1/2)の消費係数を適用

64 core 以下 かつ メモリ 185 GB 以下のジョブ → シェア(1/4)の消費係数を適用

※3. DPS4H によって来歴採取を行うキュー。メモリ量以外の制限や優先度は OCT キューと同様。

2025 年度大規模計算機システム稼働状況

稼働状況

（単位：時間）

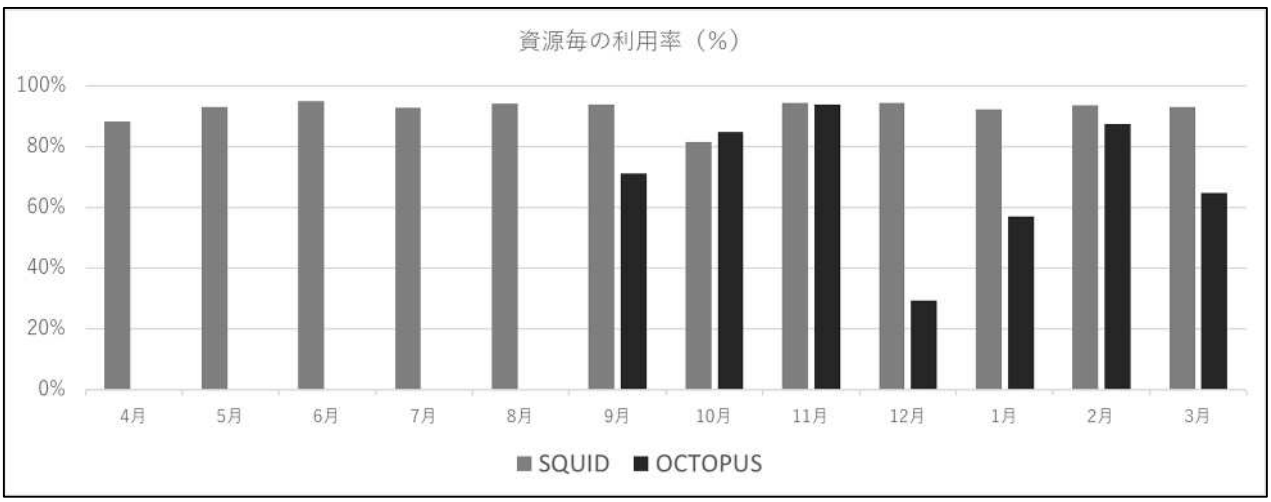
事項＼月			4	5	6	7	8	9	10	11	12	1	2	3	合計	月平均
稼動時間	計算サービス時間	(A1)	467:00	744:00	720:00	744:00	744:00	720:00	744:00	720:00	744:00	647:00	672:00	737:00	8403:00	700:15
	初期化・後処理時間	(A2)	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00
	業務時間	(A3)	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00
(A)	小計		467:00	744:00	720:00	744:00	744:00	720:00	744:00	720:00	744:00	647:00	672:00	737:00	8403:00	700:15
保守時間		(B)	253:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	97:00	0:00	7:00	357:00	29:45
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	672:00	744:00	8760:00	730:00
稼動率		(A/(A+B+C+D)%)	64.86	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	86.96	100.00	99.06	――	95.91
運転日数		(E)	30	31	30	31	31	30	31	30	31	31	28	31	365	30
一日平均稼動時間		(A/E)	15:34	24:00	24:00	24:00	24:00	24:00	24:00	24:00	24:00	20:52	24:00	23:46	――	23:01

処理状況

	SQUID				OCTOPUS		
	共有利用		占有利用	利用率(%)	共有利用		利用率(%)
処理月	ジョブ件数	CPU時間(時)	CPU時間(時)		ジョブ件数	CPU時間(時)	
4月	42,189	372,475	6,702	88.2%			
5月	407,479	766,656	10,416	93.1%			
6月	919,393	907,894	10,778	94.8%			
7月	143,768	957,113	11,160	92.7%			
8月	155,115	871,447	11,078	94.1%			
9月	257,812	929,025	10,800	93.8%	3,694	52,882	71.2%
10月	640,946	977,666	14,880	81.5%	10,127	87,310	84.7%
11月	372,195	977,606	14,400	94.4%	52,275	65,149	93.7%
12月	172,101	1,028,245	14,880	94.2%	510	8,763	29.2%
1月	121,191	859,326	18,763	92.1%	1,111	15,245	57.0%
2月	144,272	887,797	19,488	93.6%	970	6,492	87.4%
3月	166,629	1,017,172	20,636	93.0%	10,577	4,938	64.7%
合計	3,543,090	10,552,422	163,981		79,264	240,779	

（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、皆さん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

<table>
<tr><th rowspan="2">主なサービス内容</th><th rowspan="2">係・連絡先等</th><th colspan="2">開館時間</th></tr>
<tr><th>月～金</th><th>土・日・祝休日</th></tr>
<tr><td>センターの見学申込、広報</td><td>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</td><td rowspan="4">8:30～12:00

13:00～17:15</td><td rowspan="4">閉

館</td></tr>
<tr><td>利用負担金に係る会計事務
（請求及び収納）</td><td>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</td></tr>
<tr><td>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</td><td>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</td></tr>
<tr><td>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</td><td>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</td></tr>
</table>

・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/ OCTOPUS https://octopusportal.hpc.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.16
2026 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