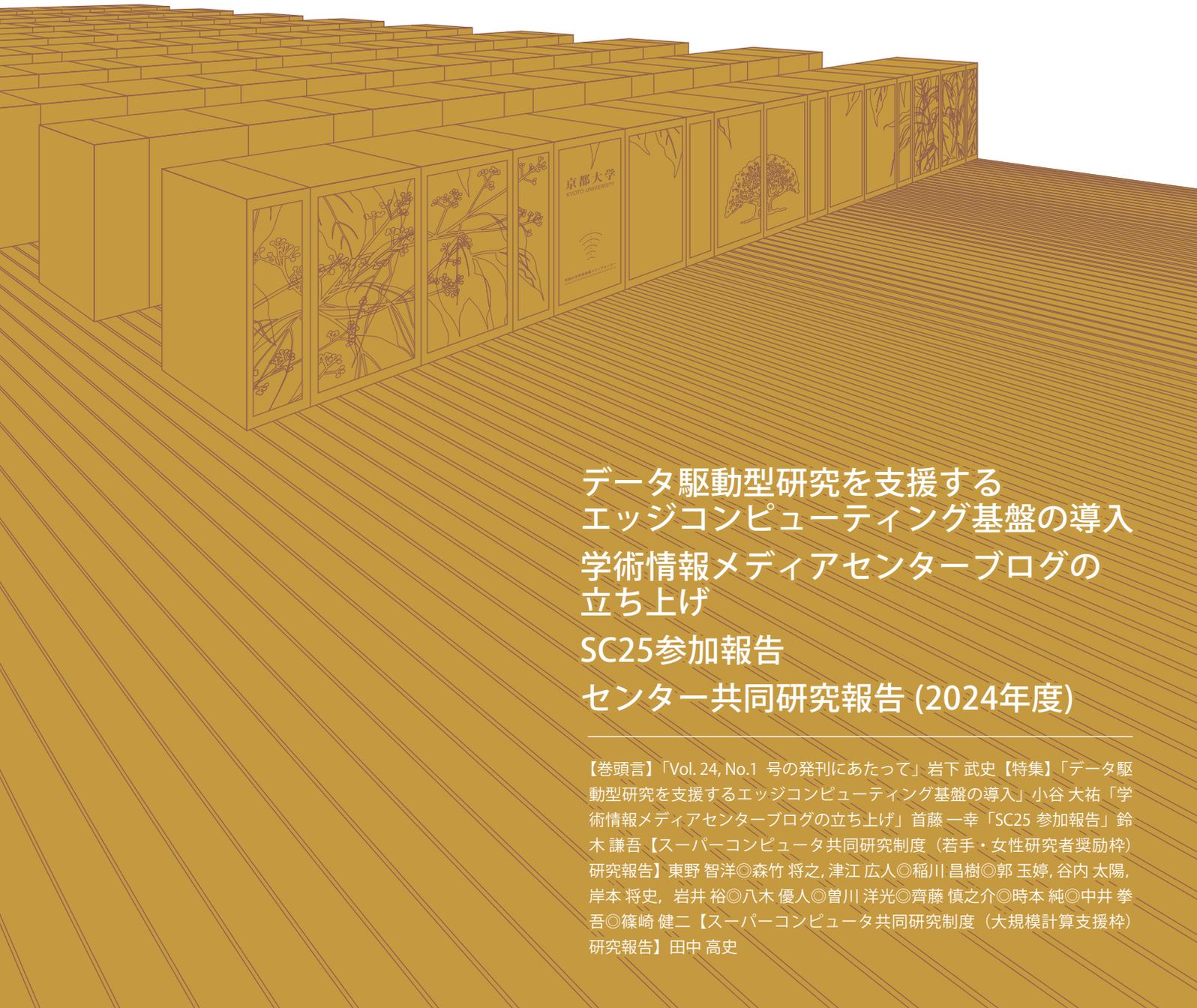


広報

全国共同利用版

Vol.24, No.1 2025

ISSN 1347-3581



データ駆動型研究を支援する
エッジコンピューティング基盤の導入
学術情報メディアセンターブログの
立ち上げ

SC25参加報告

センター共同研究報告 (2024年度)

【巻頭言】「Vol. 24, No.1 号の発刊にあたって」岩下 武史【特集】「データ駆動型研究を支援するエッジコンピューティング基盤の導入」小谷 大祐「学術情報メディアセンターブログの立ち上げ」首藤 一幸「SC25 参加報告」鈴木 謙吾【スーパーコンピュータ共同研究制度 (若手・女性研究者奨励枠) 研究報告】東野 智洋○森竹 将之, 津江 広人○稲川 昌樹○郭 玉婷, 谷内 太陽, 岸本 将史, 岩井 裕○八木 優人○曾川 洋光○齊藤 慎之介○時本 純○中井 拳吾○篠崎 健二【スーパーコンピュータ共同研究制度 (大規模計算支援枠) 研究報告】田中 高史

Vol. 24, No.1 号の発刊にあたって

京都大学学術情報メディアセンター

岩下 武史

京都大学学術情報メディアセンター（以下、本センター）の全国共同利用版「広報」は、本号で Vol. 24, No. 1 を迎えることになりましたが、この度、同広報は大きな変革を迎えることになりました。全国共同利用版広報は今号を最後に不定期刊行へと移行します。今後、これまで広報に掲載されてきた特集記事等の内容は、より速報性の高い本センター発のブログに移行する予定です。また、スパコンサービスに関する統計データやスーパーコンピュータ共同研究制度の報告については、本センターや情報環境機構の HP に掲載することを検討しています。なお、スーパーコンピュータのリプレースのように全国共同利用サービスに大きな変化が加わった場合には、これまでと同様の紙媒体の「広報」を発行し、ユーザの皆様に情報提供する予定です。

さて、本センターと情報環境機構は、「スーパーコンピュータ」に加えて、「エッジコンピューティング基盤」、本センターがデータ活用社会創成プラットフォーム協働事業体の一部として運用に参画している「mdx」について、これらを一体的に運用することとなりました。一体的に運用することで、各サービスの特徴や運用ノウハウを相互に共有し、より質の高いコンピューティングサービスの提供が可能となると考えています。各サービスが自律的かつ持続的に運用できることを原則としつつ、互いに協調しながらユーザのニーズに合わせたサービスを展開して参ります。

スーパーコンピュータに関連した話題では、日本の次期フラグシップマシンである富岳 NEXT について GPU が採用されることが決定し、GPU コンピューティングの普及・高度化、AI と HPC の応用を支援する拠点として、次世代 HPC・AI 開発支援拠点が設立されることとなり、本センターも協力機関として参画します。本拠点での具体的な取組はまだ定まっていませんが、講習会やハッカソンの開催、GPU プログラミングに関するドキュメントや e-learning 資料の整備などが実施されると見込まれます。計算科学においても AI 技術の利用が広がる中で、AI を利用した研究活動を支える情報基盤の拡充が不可欠と考えられており、その支援体制が強化されます。また、将来の HPCI の在り方について調査研究を行う HPCI 整備計画調査研究事業も昨年までの調査研究事業の先を見据え、体制を一新して始まりました。本活動は、調査研究事業をフラグシップマシンに向けた取り組みのみならず、本センターのマシンを含む HPCI 全体の将来を継続的に検討する場として位置付けています。

一方、本センターでは、2028 年度に新スーパーコンピュータの導入が想定され、要素技術についての調査・検討を始めています。現在、スーパーコンピュータの調達に係わる外部状況は、為替レートの問題、世界的な半導体需要の高まりなど、極めて厳しい状況となっています。一方、現行のシステムのハードウェアやソフトウェアについては、ライフタイムがあり、それを超えて運用することはできず、一定の年限でリプレースを検討しなければなりません。スーパーコンピュータを構成する各種デバイスやコンポーネントのロードマップや開発状況、市況の動向、現行システムの稼働率などを総合的に勘案して、なるべく適切なタイミングでよりよいシステムが導入されるように努めていきたいと考えています。冒頭で述べましたように、本広報は不定期刊行となりますが、いずれ次期システムについて本広報でよい報告ができればと考えています。

データ駆動型研究を支援するエッジコンピューティング基盤の導入

小谷 大祐 *

*京都大学学術情報メディアセンター

1 はじめに

京都大学学術情報メディアセンター（以下本センターという）では、全国共同利用サービスとしてスーパーコンピュータを利用した大規模計算サービスを提供しており、本学を含む全国の研究者の皆様へ、大規模なシミュレーションや可視化のアプリケーション等、大規模計算を必要とする幅広い用途でご利用いただいています。一方、データ駆動型研究においては、実験機器・センサーや Web ページ等からのデータの収集と集積・管理、収集したデータの解析、データセットとしての公開等、スーパーコンピュータによる大規模計算サービスではカバーできない多様な処理が必要とされます。また、データの性質によっては隔離された環境での分析が必要になる等、従来のスーパーコンピュータが利用できないケースも想定されます。

データ駆動型研究で必要となるこれらの多様な処理を実行する基盤として、これまで、本センターでは、仮想サーバホスティングサービスや、データ活用社会創成プラットフォーム協働事業体を通じた学術向けの IaaS 型のクラウドサービスである mdx を提供してきました。また、大規模解析にはスーパーコンピュータをも利用できます。さらに、利用者の皆様の所属機関で提供されている研究データ用ストレージの利用も考えられます。実際にはこれら複数のシステムを組み合わせる利用することが想定されますが、組み合わせる上で重要であるシステム間の橋渡しの処理に利用しやすいサービスはありませんでした。

そこで本センターでは、システム間の橋渡しの処理を支援するため、本学の「研究 DX を創発する横断

型データ駆動のためのデータ運用支援基盤センターの創設」事業（2023 年度-2027 年度、情報環境機構・学術情報メディアセンター・図書館機構）とその関連プロジェクト「mdx 連携・データ駆動基盤」の一環として、2024 年度末にエッジコンピューティング基盤を導入しました。

エッジコンピューティング基盤は、昨今利用が広がっているコンテナの実行環境を提供します。コンテナは、コンテナイメージという形でアプリケーションとその実行に必要なファイルをまとめることにより、可搬性の高いソフトウェア実行環境を実現する技術です。コンテナイメージが広く公開されているソフトウェアは多数あり、そのようなソフトウェアを利用するケースでは、仮想マシンの利用時は必要であったソフトウェアのセットアップの手間を省くことができると期待されます。また、コンテナの実行形態として、常時実行や定期実行、一回のみの実行など、多様な実行形態をサポートします。

エッジコンピューティング基盤は、コンテナオーケストレーションツールとして事実上の標準である Kubernetes を採用し、利用者の皆様に Kubernetes の API へのアクセスを提供します。そのため、橋渡しの処理に限らず一般的なコンテナの実行環境として利用することが可能です。また、利用にあたり、Web 上にある多くのノウハウが利用できると期待されます。

エッジコンピューティング基盤は本学のキャンパスネットワーク KUINS に 200Gbps で接続しており、エッジコンピューティング基盤上で動作するコンテナは他のシステムに高速にアクセスすることができます。さらに、SINET L2VPN や KUINS の VLAN を引き込むことで、研究機器やセンサーが接続され

ている隔離されたネットワークと通信することが可能な設計になっています。加えて、本システムは停電の影響を受けないよう無停電電源装置及び発電機で電源をバックアップしており、メンテナンス及び障害時を除き 24 時間 365 日の運用を予定しています。

本稿では、本センターに導入したエッジコンピューティング基盤の構成の概要と、想定される利用方法の例を紹介します。

2 提供予定のサービス

エッジコンピューティング基盤では、コンテナを実行するための基盤を提供します。利用のイメージを図 1 に示します。

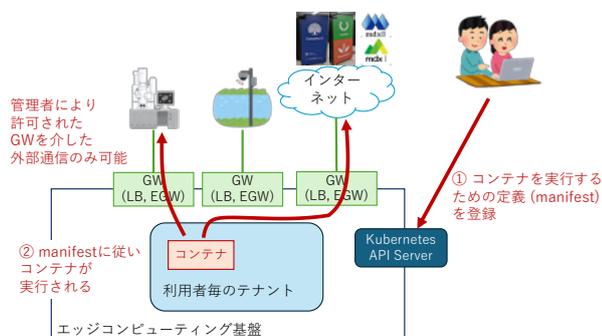


図 1: 利用方法の概要

エッジコンピューティング基盤では、利用者の皆様にはコンテナを実行するための「テナント」を提供します。「テナント」は複数の Namespace (Kubernetes においてリソースを分離する単位)¹ および外部との通信に利用する複数のゲートウェイ (外部からの通信を受け付けるための Load Balancer および外部への通信を中継する Egress Gateway からなります) から構成されます。

ゲートウェイはエッジコンピューティング基盤に引き込まれているネットワークに対応して提供されます。標準ではインターネットに接続するためのゲートウェイが提供される予定です。SINET L2VPN や KUINS の VLAN を引き込む場合は、個々の L2VPN や VLAN に対応するゲートウェイがテナントに対して提供されます。

コンテナを実行するには、エッジコンピューティング基盤の Kubernetes API Server に対して、コン

¹<https://kubernetes.io/docs/concepts/overview/working-with-objects/namespaces/>

テナの実行に必要な情報を記述したマニフェストを送信します。マニフェストの例を図 2 に示します。このマニフェストは、user-01-default という Namespace の中で、repo/user/jupyter:latest というコンテナイメージを実行することを指定しています。また、egress-policy ラベルを用いて、user-01 という Egress Gateway を通じて外部と通信することを指定しています。

```
apiVersion: v1
kind: Pod
metadata:
  name: jupyter
  namespace: user-01-default
  labels:
    egress-policy: "user-01"
spec:
  containers:
    - name: jupyter
      image: repo/user/jupyter:latest
```

図 2: マニフェストの例 (スペースの都合により一部省略)

エッジコンピューティング基盤は受け取ったマニフェストを元にコンテナを実行します。コンテナと外部との通信はマニフェストに記述されたラベルに基づいて適切なゲートウェイを経由して行われます。

エッジコンピューティング基盤では、広く公開されているコンテナイメージや利用者の皆様が自身で作成したコンテナイメージ等、任意のコンテナイメージを利用いただくことが可能です。また、Kubernetes がサポートする多様なコンテナの実行形態をサポートします。例えば、Deployment リソースを利用した常時実行、CronJob リソースを利用した定期実行、Job リソースを利用した一回のみの実行などが可能です。なお、エッジコンピューティング基盤はシステム間の橋渡しの処理を支援することを主な目的としているため、研究データの保存のための永続的なストレージの提供は予定しておりません。必要に応じて、他のサービスと併用してご利用ください。

2.1 想定される利用例

本センターでは、エッジコンピューティング基盤の主な利用例として以下の 3 つを想定し、サービス提供に向けた準備を進めています。

2.1.1 データ転送環境としての利用

大規模なデータの転送には長時間を要しますが、時間を短縮できれば、データ分析等の処理を早く始めることができます。例えば、外部のオブジェクトストレージ等からスーパーコンピュータのストレージにデータを転送し、スーパーコンピュータを利用して大規模なデータ解析を行うようなケースが考えられます。また、外部のオブジェクトストレージ等に保存されている情報の一部に機微なデータを含む場合、機微なデータを削除した上でスーパーコンピュータのストレージに格納することも考えられます。

一般的なファイル転送においては、rsync²やrclone³等のソフトウェアが広く利用されています。これらのコンテナイメージは広く公開されており、エッジコンピューティング基盤上で実行することが可能です。また、これらのソフトウェアを組み合わせたスクリプトを実行して転送する場合においても、既存のコンテナイメージを利用して新たにコンテナイメージを作成することにより、コンテナイメージの作成の手間が軽減されると考えられます。加えて、本システムの演算ノードは100Gbpsで接続されており、研究室等の計算機を利用して転送する場合より高速にデータを転送できることが期待されます。

2.1.2 データ収集環境としての利用

実験機器等から自動的にデータをストレージにアップロードし閲覧できるようにしたり、アップロードされたデータに対して前処理をした上でスーパーコンピュータ等で大規模な解析の処理を自動的に実行したりするような、自動化の処理の一部を実行するシステムとしての利用が考えられます。

データを収集する方式には、大きく分けて、実験機器等が能動的にデータをアップロードするpush型と、実験機器等から定期的にデータを取得するpull型があります。

push型のデータ収集においては、実験機器等が自動的にデータを送信する先となるサーバを立てる必要がありますが、必要なサーバの種類は機器により異なります。例えば、一部のデジタル一眼レフカメラやスキャナ機能をもつ複合機はFTPサーバへの自動アップロード機能を持っていることがありますが、そ

のためにはFTPサーバが必要です。また、Windowsのファイル共有機能を利用してデータをアップロードする場合は、SMB/CIFSサーバが必要です。一方で、共有の大規模ストレージシステムの多くはAmazon S3互換のインターフェイスを持つオブジェクトストレージであり、FTPサーバやSMB/CIFSサーバの機能を持たないことが多く、実験機器等から直接アップロードすることは困難です。

そこで、エッジコンピューティング基盤上で、アップロードされたデータを自動的にオブジェクトストレージに保存するFTPサーバやSMB/CIFSサーバを実行することで、大規模なオブジェクトストレージへの自動アップロードを実現できます。このような機能を持つソフトウェア(rclone等)を実行するコンテナイメージは広く配布されており、エッジコンピューティング基盤上でそれらを実行することで、サーバをセットアップする煩雑な手間をかけることなく、データを効率的に収集するシステムが実現できると想定されます。加えて、エッジコンピューティング基盤にSINET L2VPNやKUINSのVLANを引き込み、そのネットワークに接続されたサーバを立てることにより、隔離ネットワーク内の実験機器等からデータを収集することも可能です。

pull型のデータ収集についても、エッジコンピューティング基盤においてCronJobオブジェクトを利用してコンテナを定期的に行うことにより実現できます。

エッジコンピューティング基盤は電源がバックアップされており、メンテナンス及び障害時を除き24時間365日の運用を予定しています。従来のスーパーコンピュータやmdxのように保守作業のため数日間停止することは、システムの都合上 unavoidable 場合を除き極力行わない方針です。また、エッジコンピューティング基盤が保守作業のため停止する場合においても、コンテナの可搬性を生かし、コンテナイメージとマニフェストを他のシステムで実行できるようにしておくことで、データ収集の継続が可能です。そのため、安定的にデータを収集する基盤を運用することができると期待されます。

2.1.3 データ分析環境としての利用

大規模なデータセットを用いたデータ分析を行うには大容量で高速なストレージが必要であり、構築・

²<https://rsync.samba.org/>

³<https://rclone.org/>

運用に高度な技術的な知識が必要になることから、それらが考慮されて設計されている共用のストレージシステムを利用することにより計算機管理の手間が軽減されます。そのような共用のストレージシステムに保存されたデータを分析するには、データ分析環境がストレージシステムに高速にアクセスできることが望ましいと考えられます。

データ分析やソフトウェアの開発においては、多様なソフトウェアを利用することが多く、しばしば共用の計算機システムでは利用できないソフトウェアが必要になる場合があります。例えば、広く利用されているソフトウェアとして JupyterHub⁴や Coder⁵がありますが、加えて、研究分野で標準的に利用されているライブラリやプラグインが必要になる場合があります。

JupyterHub や Coder 等広く利用されているソフトウェアの多くはコンテナイメージが公開されていることから、これらのコンテナイメージをベースにし、必要なプラグインやライブラリを追加したコンテナイメージを作成することにより、必要なソフトウェア環境を構築することが可能です。既にコンテナを活用されておられる研究者の皆様は、CPU のアーキテクチャ等の条件が揃えば、利用されているコンテナイメージを持ち込むことも可能です。エッジコンピューティング基盤上でそれらのデータ分析環境のコンテナを動作させることにより、外部のストレージに高速にアクセス可能な環境でデータ分析を行うことができると期待されます。

3 システム構成

3.1 ハードウェア

ハードウェア構成を図3に示します。演算ノードとして、AMD EPYC 9734 (2.2GHz, 112 コア) を2基、メモリを512GiB搭載したサーバを14台、ストレージシステムとして、15.36TBのSSDを18台搭載した実効容量205TBのストレージアプライアンスを1台有しています。ネットワークは100Gbit Ethernetを採用しており、各演算ノードは100Gbpsで、ストレージシステムは200Gbpsで、京都大学学術情報ネットワークシステム(KUINS)には200Gbps

⁴<https://jupyter.org/hub>

⁵<https://coder.com/>

で接続しており、本センターのスーパーコンピュータシステム等の大型の計算機システムと高速な通信が可能です。また、演算ノードのうち11台、ストレージシステム、ネットワークスイッチの電源を無停電電源装置及び発電機でバックアップしています。

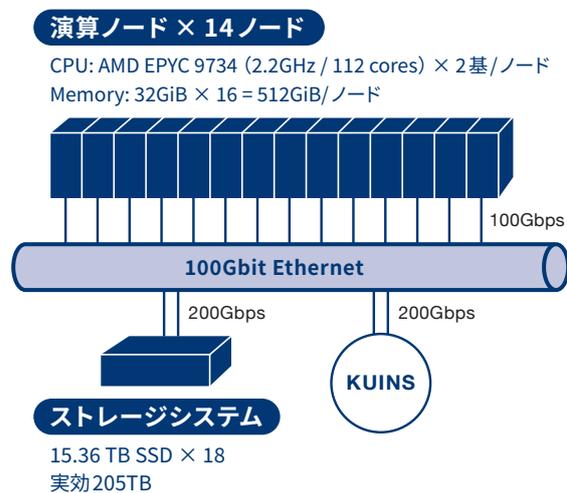


図3: ハードウェア構成

3.2 ソフトウェア

システムのソフトウェア構成を図4に示します。サーバ仮想化基盤としてProxmox VE⁶を導入し、その上にKubernetesで利用者の皆様のコンテナが実行されるWorkerノードが仮想マシンとして動作しています。また、KubernetesのControl Planeを構成する制御用ノードは本学情報環境機構が提供するVMホスティングサービスを利用した仮想マシン上に構築されています。コンテナ基盤はRancher⁷により管理されるKubernetesクラスタであり、アドオンとして、Namespaceベースのマルチテナントを実現するCapsule⁸およびオブジェクトに対する細かなポリシーの制御を行うKyverno⁹、ネットワークの設定および制御を行うCilium¹⁰、外部への接続に際し経由するノードを強制するEgress Gateway機能を提供するegressgateway¹¹、および外部からの接続

⁶<https://www.proxmox.com/>

⁷<https://www.rancher.com/>

⁸<https://projectcapsule.dev/>

⁹<https://kyverno.io/>

¹⁰<https://cilium.io/>

¹¹<https://spidernet-io.github.io/egressgateway/>

を受け付けるための Load Balancer 機能を提供する MetalLB¹²を導入しています。

加えて、利用者の皆様自身によるテナントの管理のために、利用者ポータルを提供します。利用者ポータルは、Kubernetes API Server にアクセスするための認証情報等を含む kubeconfig のダウンロード機能、API へのアクセスの閲覧機能、Pod の動作状況を閲覧する機能、テナントの管理者によるテナントの利用者の追加・削除等の管理機能等を有しています。利用者ポータルの認証は本学スーパーコンピュータシステムの認証基盤と認証連携しており、利用者ポータルにアクセスする全ての利用者は本学スーパーコンピュータシステムの利用者番号を有することを前提としています。

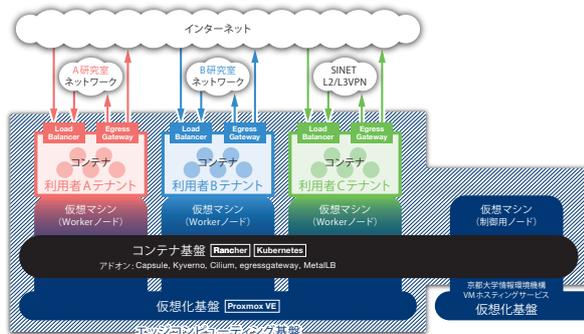


図 4: ソフトウェア構成

3.2.1 マルチテナントを構成するための設定

本項で述べる設定は、今後ソフトウェアのアップデートおよび構成変更に伴い変更される可能性があります。

3.2.2 コンテナを制御するためのラベルおよびアノテーション

本システムの要件を満たすマルチテナント構成を実現するため、Kubernetes の一部のオブジェクトにラベルを付与し、ラベルを用いて制御しています。本システムで独自に利用しているラベルをまとめたものが表 1 です。

また、Load Balancer において外部からの接続を受け付ける IP アドレスを指定するために、Service

¹²<https://metallb.io/>

リソースに付与する metallb.io/loadBalancerIPs アノテーションも利用しています。

これらのラベルを用いて、以下を実現しています。**テナント毎のコンテナ実行環境の分離** コンテナは OS を共有して実行されるため、悪意のあるコンテナが実行されホスト OS が制御されてしまう場合、その影響は複数のテナントに及ぶ可能性があります。この問題の影響を緩和するため、エッジコンピューティング基盤では、テナント毎にコンテナを実行するノードを分離しています。具体的には、テナント毎に「edge.kudpc.kyoto-u.ac.jp/node_テナント名」ラベルを持つノードでのみコンテナを実行するよう制御しています。加えて、テナント間の通信は、ネットワークポリシーを用いて原則遮断しています。

テナント毎に異なる複数の外部ネットワークとの接続 外部ネットワーク毎に Egress Gateway を作成し、その Egress Gateway を利用できるテナントをラベルを用いたポリシーにより制限しています。また、Load Balancer も同様に、外部ネットワーク毎に Load Balancer を作成するとともに、その Load Balancer を利用できるテナントをラベルを用いたポリシーにより制限しています。

Egress Gateway および Load Balancer は NATP を利用することを前提としています。コンテナ環境は IP アドレスを大量に利用することが想定されますが、これにより、既存の研究室等のプライベートネットワークで利用されている IP アドレス空間への影響を抑え、また、Kubernetes が有するコンテナのオートスケーリング等の機能が利用しやすくなると期待されます。

4 最後に

本稿では、本センターが 2024 年度末に導入したエッジコンピューティング基盤の概要と、想定される使い方を紹介しました。今後、サービスの提供準備が終わり次第、試行サービスを開始するとともに、利用者の皆様が簡単に使ってみていただけるよう、利用例に応じたマニフェストのサンプルの公開等も予定しています。ぜひ、ご利用をご検討いただけますと幸いです。

また、エッジコンピューティング基盤は本センターにとって新しい形態での計算資源の提供の試みであり、利用者の皆様のご意見やご要望を取り入れてよ

ラベル名	付与対象	用途
edge.kudpc.kyoto-u.ac.jp/lb_テナント名	Node	「テナント名」のテナント用の Load Balancer を有するノードを示す
edge.kudpc.kyoto-u.ac.jp/eg_テナント名	Node	「テナント名」のテナント用の EgressGateway を有するノードを示す
edge.kudpc.kyoto-u.ac.jp/node_テナント名	Node	「テナント名」のテナントのコンテナを実行するノードを示す
edge.kudpc.kyoto-u.ac.jp/egress-policy	Pod	外向きの通信の際に特定の Egress Gateway の利用を強制するポリシーを適用することを示す

表 1: 制御に利用するために本システムで独自に付与するラベル

りよいサービスに育てていきたいと考えておりますので、忌憚のないご意見をお寄せいただけますと幸いです。

学術情報メディアセンターブログの立ち上げ

首藤 一幸

京都大学 学術情報メディアセンター

これまで全国共同利用版[広報]に掲載してきた記事や、それに限らず学術情報メディアセンターに係る記事を掲載する媒体として、学術情報メディアセンターブログを立ち上げつつある。これに伴い、編集の労力が重複する全国共同利用版[広報]は、今後は不定期発行とすることとした。本稿で、ブログ立ち上げの背景や狙い、設計を述べる。

1 背景

2024年度、本センターではエッジコンピューティング基盤を構築した。これは、データ駆動型研究のためのデータ収集・処理を行うための計算資源であり、計算機資源としてはCPU、オールフラッシュの高速ストレージを備え、コンテナホスティングサービスを提供する。これをもって、スーパーコンピュータやmdxといった学内外の計算資源、本学の学術情報ネットワーク(KUINS)、認証基盤などを密に連携させる。運営は、エッジコンピューティング基盤(以下、エッジ基盤)ワーキンググループが担い、首藤が主査を務める。現在は、全国共同利用に供するための準備を進めている。

エッジ基盤は前例のないシステムであるため、利用者の幅を広げ、人数を増やしていくためには、ユースケースといった情報を広報、共有していくことが必要だろう。この役割は、スーパーコンピュータにおいては本広報誌、全国共同利用版[広報]が担ってきた。現在、この目的のためには、紙媒体である本広報誌より、ウェブ媒体、特にブログを立ち上げることが合理的だろうと考えた。少なくとも、以下のメリットがある。

- 機動性
数ヶ月に一度という発行タイミングに縛られず、記事を公開できる。
- 軽量の提供・アクセス
紙媒体(やPDFファイル)と比較して、読

者にとってアクセスの敷居が低く、提供側にとっても記事(URL)を渡しやすい。



図1 学術情報メディアセンター ブログ：
note のクリエイターページ
https://note.com/accms_kyotou

2 設計

本ブログが掲載する記事は、全国共同利用に関するものに限定せず、本センターに関する内容全般とした。記事候補は多い方がいい。また、複数の記事をまとめて1つの号を発行するのではなく、記事ごとに公開する方針とした。紙媒体の場合、印刷・配布費用を合理的な範囲に収めるために号としてまとめる必要があったが、ウェブ媒体ではその必要はない。機動的な発行や、編集の労力削減を優先した。

ブログの名称は、単純に「学術情報メディアセンター ブログ」とした。他の名詞を用いると、それだけ、この媒体が何なのかを認識することが難

しくなる。名称を決めてはみたものの、ブログプラットフォームとして **note** を採用したため（後述）、この名称を用いる局面はなく、どこにも現れていない。

編集委員会を、企画・広報委員会の傘下に設けることとした。編集委員会は、定期的に会合を持つなどして、当面の編集方針を委員間で共有する。例えば、年度の初めに会合を持って、年間の想定記事をリストアップすることになるだろう。

編集委員会の委員として、全国共同利用に供しているスーパーコンピュータの関係者である、スーパーコンピューティング研究分野の教員（安戸准教授）を、同じく全国共同利用に供する予定のエッジ基盤の関係者である、エッジ基盤ワーキンググループの教員（首藤、小谷准教授、廣中助教）を据えた。また、企画・広報委員会とのリエゾンとして企画・広報委員会の委員（首藤）も委員とする。本ブログは本センターの活動全般をカバーするため、デジタルコンテンツ研究部門からも委員を出して頂けるよう、依頼中である。

ブログプラットフォームとしては、**note** を選んだ。**note** でなければならぬというほどではないにせよ、非常に広く使われており、可用性やアクセス継続性、利便性を期待できるためである。

note を操作する作業、つまりは記事のアップロード、修正、削除などは、プラットフォーム担当の委員 1 名（2025 年度は首藤）が行うこととした。作業は複数人で分担したいところだが、しかし、**note** アカウントの共有は避けるべきという判断をした。

記事の掲載・公開、更新にあたっては、プラットフォーム担当委員に加えて、もう 1 名の委員がレイアウト済み記事を確認して承認することとした。事故・トラブルは防ぎつつも、軽量に機動的に運営するための設計である。

3 これまでの活動

2025 年 5 月の教員会議にて、企画・広報委員会 委員長 首藤から、「ブログの立ち上げ および全国共同利用版広報の不定期発行への移行」という提案を行った。ここでは、ブログを立ち上げること、記事の内容は本センターの活動全般とすること、編集委員会を企画・広報委員会の傘下に設

けることなどを提案し、承認された。

その後、首藤が「学術情報メディアセンターブログの運営について」という文書を作成した。内容は、編集委員会の委員構成、ブログプラットフォームとして **note** を用いること、記事の掲載・公開・更新、また、公開停止のプロセスなどである。Slack 上で意見を頂きつつこれを修整し、2025 年 10 月 28 日(火)、企画・広報委員会にて承認して頂いた。

11 月、編集委員会の編成を始め、委員長は当初は首藤自身が務めることとした。12 月、編集委員会で相談した結果、首藤がプラットフォーム担当委員も務めることとした。

その後、**note** のアカウントを作成し、**note** のクリエイターページを整えた(図 1)。12 月 24 日(水)、1 つ目の記事公開に至った。

4 全国共同利用版[広報] からの移行

これまで、ユースケースなどの利用者向け情報の共有という役割は、本広報誌が担ってきた（1 章）。今後は、本ブログがこの役割を担う。本広報誌は不定期発行に移行する。代わりに本ブログをご覧頂きたい。

5 今後

現時点で予定している記事は、エッジ基盤自体の紹介記事やユースケースの紹介記事である。例年、全国共同利用版[広報]に掲載してきた国際会議 SC 参加報告も、本ブログに載せることになるだろう。また、本センターの各分野（研究室）で開催したイベントの報告記事なども執筆を依頼していく。

本ブログの目的は、1 章 背景で述べた通り、最小限は、全国共同利用に供する計算資源についての広報や情報共有である。アクセス数や閲覧者数を増やすことは、(少なくとも現時点では) 目的とはしていない。そうは言っても、1 年間記事ゼロ、といったことになると、媒体として「死んだ」ように見えてしまい、ブログを持っていることがマイナスともなりかねない。これを機会に、どういった記事を発信可能か、編集委員会 委員を中心に考えていきたい。

SC25 参加報告

鈴木 謙吾*

*京都大学 学術情報メディアセンター

1 SC25 について

2025 年 11 月 16 日～21 日に米国セントルイスで開催された国際会議 SC25 に参加しました。京都大学学術情報メディアセンター（以下、弊センター）の活動紹介（図 1）を行うとともに、自身の研究成果について発表しましたので、ご報告いたします。

SC は、正式名称を The International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis といい、高性能計算（High Performance Computing, HPC）に関する世界最大規模の国際会議になります。HPC に関連する分野を幅広く対象としており、ハードウェアからソフトウェアまで、計算機の性能をいかに向上させ、またその性能を最大限に引き出すか、という観点から、多様な研究発表が行われます。近年では、HPC と AI・機械学習、量子計算との関連領域に関するセッションなども活発化しており、益々の盛り上がりを見せています。

また、研究発表のセッションに加え、初学者向けの技術講習や学生を対象としたキャリア指導など、多様な HPC 関連イベントが開催される点も SC の大きな特徴です。これらは、HPC 分野への新規参画を後押しする場として、重要な役割を果たしています。他にも、計算科学分野における優れた研究成果に贈られる Gordon Bell 賞や、スーパーコンピュータの性能ランキングの一つである TOP 500 リストの発表など、多くのイベントがあります。中でも特に印象的なのが、大規模なエキシビションです。世界各国の企業や研究機関がブースを構え、最新の計算機システムやソフトウェア、研究成果を紹介します。SC25 では 559 団体が出展し、過去最多の展示数を記録しました。来場者数も 16,000 人を超え、AI 技術の進展などを背景に、HPC 分野に対する関心が高まって



図 1: ブース展示の様子。参加者の動線を考え、モニターを斜めに配置した。

いることがうかがえます。会期中の様子は SC25 公式のフォトギャラリー [1] にも掲載されています。こちらをご覧くださいれば、現地の盛り上がりを感じていただけたと思います。

2 活動紹介・成果発表

ブース展示 前述の通り、SC では各国の企業、大学、研究機関が参加する大規模なエキシビションが開催されます。日本からも多くの出展があり、SC25 では、弊センターを含む大学のスパコンセンターなどのブースが並びました。

弊センターのブースの様子は図 1 のようになります。ポスターやモニターを利用し、研究成果や、弊センターが運用するスパコン [2]、データ駆動型研究の支援を目的としたエッジコンピューティング基盤（2026 年度にサービス開始予定） [3] について紹介しました。外側の通路に面した立地であったため、来場者の関心を引く展示物の配置には工夫を要しました



図 2: 研究発表の様子

が、昨年に引き続き多くの来訪者がありました。また、RIST が主催するステッカーハントにも協力し、弊センターを含む HPCI 資源提供機関に関する広報活動も行いました。景品として配布された扇子などの日本的なノベルティは人気なようで、こちらも多くの方に参加いただきました。

SC には世界各国から HPC 分野の関係者が集い、特にエキシビションには多くの人が参加します。ブース展示により研究成果を紹介することで、思いがけないところから他の研究者との交流が生まれる点も、SC に参加する大きな魅力の一つだと感じました。

成果発表 SC25 では、ブース展示に加え、私自身の研究成果の発表も行いました。発表題目は「A Nested Krylov Method Using Half-Precision Arithmetic」で、線形ソルバにおける低精度浮動小数点演算の活用に関する成果を紹介しました [4]。

本研究は、理工学分野の数値シミュレーションなどに登場する連立一次方程式の求解を対象とし、その高性能化に貢献します。線形ソルバではデータ量の削減（少数ビットからなるデータ型の利用）が性能向上に直結すること、また、近年の AI 向け演算デバイスでは低精度演算が重視されていることなどを背景として、低精度演算を効果的に利用可能な新しいアルゴリズムを提案しました。論文はオープンアクセスで公開されていますので、興味がある方はご覧いただければ幸いです。

3 研究発表・BoFセッションの動向

SC では、Paper や Poster による研究発表や、Birds of a Feather (BoF) セッションも多数開催されます。BoF セッションでは、特定のテーマについての議論だけでなく、関連する先駆的な研究や実験的な取り組みが紹介されることも多く、最先端から萌芽的研究まで幅広い内容に触れることができます。SC25 でも多くの研究発表が行われましたが、特に印象に残ったテーマの一つが、「現代のスパコンの利用性をいかに高めるか」という点です。ここでは、その内容について簡単に紹介します。

富岳 NEXT においても GPU の搭載が計画されているように、現在のスパコンでは、CPU に加え、GPU などのアクセラレータを搭載するヘテロジニアスな構成が主流になっています。一方で、このようなアーキテクチャの多様化により、十分に性能を引き出すために、システム毎に大規模なプログラムの書き換えが必要になるなど、スパコンの利活用のハードルが高まっているという課題があります。例えば、GPU では並列性の活用が不可欠であるため、CPU から GPU への移植では、アルゴリズムや実装の見直しが必要ということも少なくありません。こうした背景から、システムの差異を意識せず、誰もが容易にスパコンの性能を引き出せるプログラミング環境が注目されています。

このような流れの中で、並列処理構造を抽象化し、複数の計算環境において良好な性能を実現することを目的とした研究が多く見られました。例えば、Julia のパッケージである JACC に関する研究発表 [5] や、Python に似た記法で同様の目的を達成する Majo の活用に関する発表 [6] がありました。実行時コンパイラを活用することで、C++ のテンプレートなどでは煩雑になりがちな、メタプログラミングによる最適化を比較的容易に行える点が注目を集めているようです。コミュニティの成熟度など課題は残りますが、これから科学技術計算を始める方には有力な選択肢の一つになる可能性を感じました。

一方で、C++26 に関する BoF セッションも開催されました。C++17 以降、C++ コミュニティにおいても、並列実行ポリシーの標準化など、HPC の利用性向上に向けた取り組みが進められています。C++26 では、タスク並列のためのフレームワークや、データ並列を表現するための SIMD クラスの標準化が予

定されているようです。また、より高レイヤーでは、BLAS 互換のアルゴリズムなど線形代数の基本アルゴリズムの追加も計画されているようです。実際の性能は、標準ライブラリやコンパイラの実装に依存しますが、これらの機能が ISO 標準として提供される点は、少数の個人や団体に依存する他の取り組みに対する大きな強みであると感じました。

HPC の利用性を高める取り組みは今後ますます重要になると考えられます。こうした研究の発展に期待するとともに、私自身も研究などを通じて貢献していきたいと思いました。

4 SC26のご案内

今回の SC26 は、2026 年 11 月 15 日～20 日に米国シカゴで開催されます。前述の通り、SC では研究発表やブース展示を通じて、学術機関や企業による最先端の研究成果や技術に触れることができます。HPC 分野に少しでも関心や関連がある方には、強く参加をお勧めします。SC26 においても多くのブース展示が計画されており、弊センターも出展を予定しています (図 3)。繰り返しになりますが、エキシビジョンには多数の参加者が訪れるため、既存の研究成果の拡散や、国内外の研究者や技術者との繋がりを広げる貴重な機会となります。スパコンユーザーの皆さんの研究成果も展示可能ですので、ご興味のある方は、ぜひ鈴木までお問い合わせください。

参考文献

- [1] URL: <https://scconferencephotos.pixieset.com/sc25stlouisconferencephotos> (visited on 12/19/2025).
- [2] URL: <https://www.iimc.kyoto-u.ac.jp/ja/services/comp/supercomputer/system/specification> (visited on 12/19/2025).
- [3] URL: <https://www.iimc.kyoto-u.ac.jp/ja/info/20251209184430> (visited on 12/19/2025).
- [4] Kengo Suzuki et al. “A Nested Krylov Method Using Half-Precision Arithmetic”. In: *Proceedings of the International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC25)*. 2025, pp. 711–727.



図 3: SC26 展示フロアマップ。赤丸内部のブースにて、弊センターを含む日本の多くの学術機関の展示が予定されている [7]。

- [5] William F Godoy et al. “JACC: Easy CPU/GPU Performance Portability for Scientific Applications in Julia” (2025).
- [6] Tatiana Melnichenko et al. “Mojo: Python-like MLIR-based GPU portable science kernels” (2025).
- [7] URL: <https://hallerickson.ungerboeck.com/prod/app85.cshtml?aat=337677594373777a4156615838445849366d7042356245527458414a394c7755685656754c6770492b31773d> (visited on 12/27/2025).

高効率有機系太陽電池の実現に向けた光機能性分子の構造と

電子物性の相関解明

東野智洋

京都大学大学院工学研究科 分子工学専攻

1 緒言

色素増感太陽電池は、多孔性酸化チタン電極とルテニウム色素を用いた系でエネルギー変換効率 PCE = 10~12% という高い値が Grätzel らによって報告されており、次世代のエネルギー源として期待されている。しかし、ルテニウムには資源制約があり高価でもあるため、より安価で高い変換効率を示す有機色素の開発が求められている。

有機色素の中でも、ポルフィリンは 400~450 nm に Soret 帯と呼ばれる強い吸収と 550~600 nm に Q 帯と呼ばれる中程度の吸収をもち、増感色素として有望である。特に、ポルフィリンにドナー・アクセプターを導入したプッシュプル型色素は長波長領域での光捕集能の改善に伴って光電変換効率が向上し、10%を超える PCE が達成されている^[1]。また、ポルフィリンに芳香環を縮環させて π 共役系を拡張することでも光捕集性能を向上させることができ、我々はメチレン炭素架橋してチオフェン環を縮環させた色素を用いて高い PCE を実現することに成功している^[2]。さらなる PCE の向上を実現するには、電解液中のレドックス対が酸化チタン表面に接近することを抑制し、酸化チタン-レドックス対間の逆電子移動を抑制することが必須である。そこで本研究では、ポルフィリンに対しチエノチオフェン骨格を縮環させてより直線型に近い分子構造とし、末端に嵩高い置換基を導入すれば、レドックス対が酸化チタン表面に接近することを効果的に抑制できると期待し、チエノチオフェン骨格を縮環させ、*m*-テルフェニル基をもつポルフィリン色素 **TT-Ph**、および末端に *t*-ブチル基を導入した **TT-*t*BuPh** を設計・合成した

(Figure 1) ^[3]。

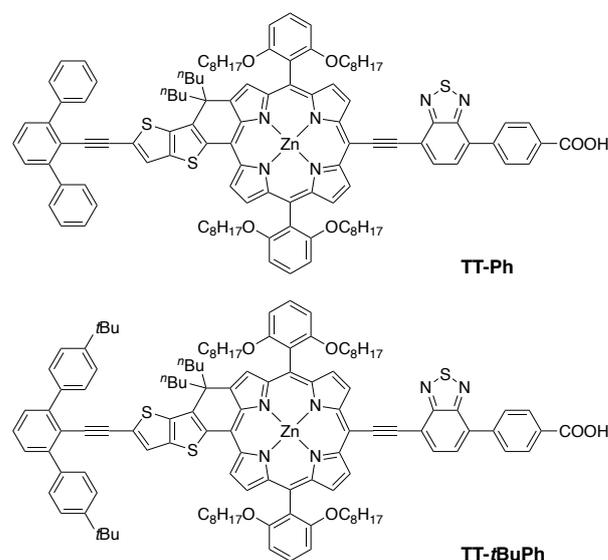


Figure 1. Molecular structures of porphyrin dyes.

2 結果と考察

2.1 ポルフィリン色素の物性と太陽電池性能評価

ポルフィリン色素 **TT-Ph**、**TT-*t*BuPh** の THF 中での吸収スペクトルを Figure 2 に示す。これら 2 つの色素間にはほとんど差がなく、色素末端に導入した置換基の嵩高さは光捕集特性に影響を与えないことがわかった。次に、これらの色素を用いて色素増感太陽電池セル作製条件の最適化を行った結果、**TT-Ph** を用いたセルでの光電変換効率は 9.97% となり、参照ポルフィリン色素 **GY50** を用いた場合の光電変換効率 (10.3%) とほぼ同等であった。これに対し、**TT-*t*BuPh** を用いた場合の光電変換効率は 11.0% となり、**GY50** の場合よりも高くなった。また、外部量子効率 (IPCE) の値

も **TT-*t*BuPh** を用いたセルのほうが大きくなることがわかった。これは、*m*-テルフェニル基の末端に導入した *t*-ブチル基の嵩高さによって、電解液中のレドックス対の接近を抑制できているだけでなく、酸化チタン表面に吸着した色素同士での会合も抑制できているためであると考えられる。

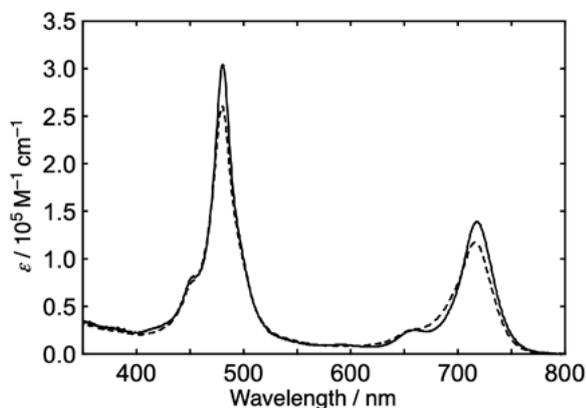


Figure 2. UV/vis absorption spectra of **TT-Ph** (dashed line) and **TT-*t*BuPh** (solid line) in THF.

2.2 理論計算

ポルフィリン色素の最安定化構造およびそのフロンティア軌道の電子構造について知見を得るために、Gaussian16 プログラムを用いて密度汎関数法 (DFT) による理論計算を行った (B3LYP/6-31G(d))。最適化構造より、チエノチオフェン骨格を縮環させることで、より直線型に近い分子構造を実現できることがわかった。また *m*-テルフェニル基の両端のベンゼン環は中央のベンゼン環に対して約 50°ねじれており、末端に導入したフェニル基や *t*-ブチルフェニル基にはほとんど HOMO や LUMO の分布が見られなかった (Figure 3)。このため、ポルフィリン色素 **TT-Ph**, **TT-*t*BuPh** の HOMO、LUMO の準位はほぼ同じであり、末端のフェニル基や *t*-ブチルフェニル基にはほとんど HOMO や LUMO の分布が見られず、光捕集特性に違いが見られなかったと考えられる。

一方、**TT-*t*BuPh** の *t*-ブチルフェニル基は **TT-Ph** におけるフェニル基より明確に嵩高く、ポルフィリン色素の横幅と同程度にまで張り出していることがわかる。そのため、*t*-ブチル基によってポルフィリン色素同士の会合を防いでいるだけでなく、酸化チタン上に吸着している色素の隙間を通してレドックス対が酸化チタン表面に近づくことを抑

制できると考えられる。その結果、酸化チタン-レドックス対間での逆電子移動を抑制でき、**TT-*t*BuPh** を用いた場合に太陽電池性能の向上に繋がったと考えられる。このように、本計算結果は実験結果の理論的解釈の一助となった点で意義がある。

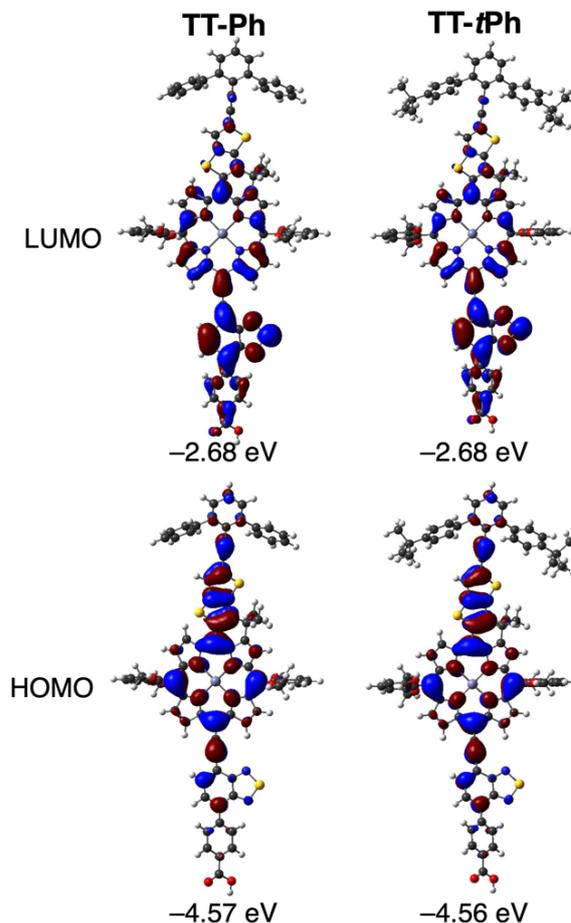


Figure 3. Selected Kohn–Sham orbitals for **TT-Ph** and **TT-*t*BuPh** obtained by DFT calculations with the B3LYP/6-31G(d) level. To save the calculation cost, butyl groups on the methylene bridges were replaced with methyl groups and octyloxy groups on the *meso*-aryl groups were replaced with the methoxy groups.

3 参考文献

- [1] A. Yella, C.-L. Mai, S. M. Zakeeruddin, S.-N. Chang, C.-H. Hsieh, C.-Y. Yeh, M. Grätzel, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2014**, *53*, 2973–2977.
- [2] Y. Kurumisawa, T. Higashino, S. Nimura, Y. Tsuji, H. Iiyama, H. Imahori, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 9910–9919.
- [3] Y. Zhang, T. Higashino, I. Nishimura, H. Imahori, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2024**, *16*, 67761–67770.

フェニルアラニン誘導体の単結晶が示す異方的な熱膨張現象の理論的解析

森竹 将之, 津江 広人

京都大学 大学院人間・環境学研究科 関連環境学専攻

1 緒言

有機結晶の熱膨張は、分子の形状、分子配列、熱振動、分子間相互作用といった因子が複合的に関与する現象である。我々は、特に、分子間相互作用と有機結晶の熱膨張との関係について着目し研究を行った。

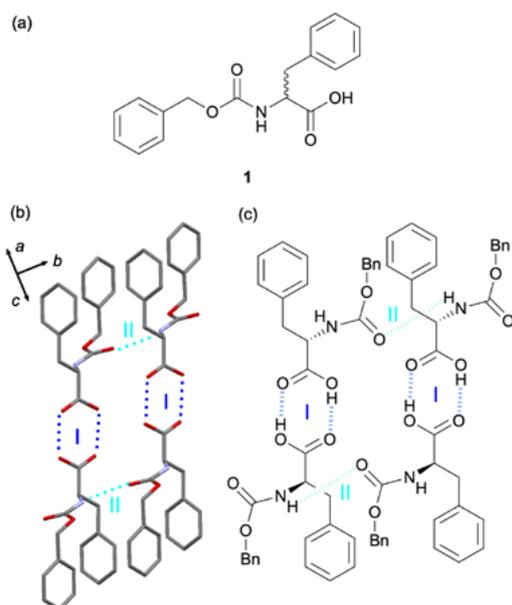


図 1 (a) フェニルアラニン誘導体 1 の分子構造。(b)、(c) 1 の結晶中の一次元水素結合ネットワーク。青点線が OH/O 水素結合 (I) を、水色点線が NH/O 水素結合 (II) を表す。

フェニルアラニン誘導体 1 (図 1 a) は、結晶中でカルボキシ基同士の OH/O 水素結合 (図 1 b, c の I) とアミド結合間の NH/O 水素結合 (図 1 b, c の II) により一次元の水素結合ネットワークを形成する。前者の水素結合は *R* 体と *S* 体の間で働くヘテロキラル

な相互作用であり、これによりカルボン酸の二量体が形成される。後者の水素結合は、*R* 体同士もしくは *S* 体同士に働くホモキラルな相互作用であり、これによりカルボン酸の二量体が一方方向に積層する。

同一の結晶中で働く二種類の水素結合について、その結合距離の温度変化と分子間相互作用との関係を明らかにすることは、分子間相互作用が有機結晶の熱膨張に与える影響を検討する上で意義深い。そこで我々は、化合物 1 の結晶中での分子間相互作用の解析を行った。

2 実験

化合物 1 の単結晶を調製し、100 K から 300 K の温度範囲を 20 K ごとに単結晶 X 線構造解析を行った。

実験的に決定された 100 K と 300 K の結晶構造について、計算化学アプリケーション Materials Studio を用いて、DFT-D 法により水素原子の位置の最適化を行った。この最適化を行った結晶構造から分子の座標を抽出し、Gaussian 16 にて MP2/aug-cc-pVDZ レベルでの分子間相互作用の解析を行った。その際、基底関数重なり誤差を counterpoise 法で補正した。さらに Gaussian 16 にて計算した単量体の電子密度から、Distributed multipole analysis [1] を用いてエネルギー分割計算を行った。

本研究での Gaussian 16 を用いた計算は、京都大学スーパーコンピュータシステムを用いて実施した。

表 1 100 K と 300 K における OH/O と NH/O 水素結合の分子間相互作用 (kcal mol^{-1})

	全相互作用	静電力	誘起力	交換反発力	分散力
OH/O (100 K)	-17.17	-22.86	-19.41	27.35	-2.24
OH/O (300 K)	-20.63	-22.89	-22.15	26.65	-2.24
NH/O (100 K)	-19.20	-8.24	-5.19	14.15	-19.91
NH/O (300 K)	-19.16	-6.80	-3.77	9.25	-17.84

3 結果

水素結合 I と II の結合距離である O \cdots O 間距離と N \cdots O 間距離を測定し、その温度変化を図 2 に示した。水素結合 I と II の線膨張係数は、それぞれ $-2(4) \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ と $43(3) \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ であった。水素結合 I は結合長にほぼ変化が無い一方、II は正の熱膨張を示した。

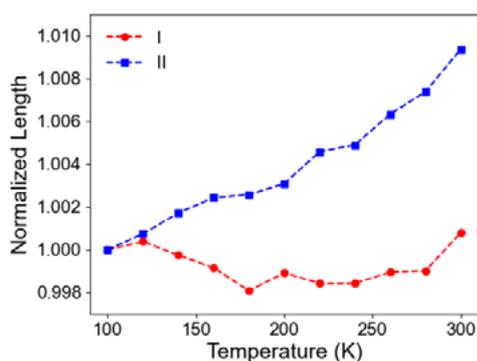


図 2 水素結合 I と II の結合距離の温度依存性

表 1 に分子間相互作用の計算結果を示す。100 K における全相互作用は、水素結合 I と II がそれぞれ $-17.17 \text{ kcal mol}^{-1}$ と $-19.20 \text{ kcal mol}^{-1}$ と近い値を示した。しかし、I では静電力の寄与が大きいものに対して、II では分散力の寄与が大きく、それぞれの分子間相互作用の起源が異なっていた。

水素結合 I は、100 K から 300 K への温度上昇に伴って、全相互作用が $-3.44 \text{ kcal mol}^{-1}$ だけ安定化した。これは、温度上昇により誘起力が強くなったためである。一方、水素結合 II は温度上昇に伴う全相互作用の変化が $0.04 \text{ kcal mol}^{-1}$ と僅かであった。これは、引力が弱くなることによる不安定化を、斥力である交換反発力が弱くなることで打ち消したためである。

4 考察

エネルギー分割計算で得られた各分子間相互作用は、電荷間の距離 r に対する依存性が異なる。電荷間の静電力は r^{-1} 、電荷に対する誘起力は r^{-4} 、分散力は r^{-6} 、交換反発力は $e^{-\alpha r}$ (α : 定数) に比例する。したがって、 r が小さいときには交換反発力の変化が最も大きい。水素結合 I は静電力の寄与が大きい一方で、II は分散力の寄与が大きい。それぞれの分子間相互作用の起源の違いが熱膨張率の違いに寄与したものと考えられる。

5 結言

化合物 1 の結晶中の二種類の水素結合について、分子間相互作用の解析を行い、水素結合の結合距離と温度の相関について検討した。水素結合 I と II は、その全相互作用の大きさが近いものにも関わらず、I の結合距離は温度に対してほぼ変化が無い一方、II は正の熱膨張を示した。本研究でのエネルギー分割計算から、水素結合 I では静電力が、II では分散力が主な安定化の要因であり、熱膨張率の違いは分子間相互作用の起源の違いが寄与したものと考えられる。

謝辞

本研究は、日本科学協会の笹川科学研究助成、京都大学スーパーコンピュータ共同研究制度(若手・女性研究者奨励枠)の支援を受けた。

参考文献

- [1] A. J. Stone, *J. Chem. Theory Comput.*, 2005, **1**, 1128–1132.

編み込み繊維束内含浸過程における粘性流体流動様相とマクロ・ミクロポイド形成に関する数値解析

稲川 昌樹

東京理科大学 創域理工学研究科 機械航空宇宙工学専攻

1 序論

多孔質媒体における動的濡れや含浸は、土壌工学、燃料電池、生体材料、複合材料製造など幅広い分野で重要である。液体が微細構造をもつ媒体へ浸透する際、毛管圧、濡れ性、粘性抵抗、幾何構造が複雑に影響し、界面形状や進展様相に多様な挙動が現れる。これらの理解は媒体設計やプロセス制御の最適化に直結する。

特に繊維強化複合材料の成形法では、Resin Transfer Moulding (RTM) や Vacuum Assisted RTM (VARTM) が代表例である。RTMは高圧注入で迅速かつ均一な含浸を実現し、VARTMは真空を利用して装置を簡素化し、大型・複雑形状に対応する。しかし、いずれも含浸不良によるポイド形成が機械的特性を著しく低下させるため [1, 2]、発生機構の把握が重要である。従来は繊維束を透水性媒質とみなし Darcy の法則に基づくモデル構築が主流であるが [3, 4]、界面物理に起因する局所的流動の再現には限界がある。本研究では、平行平板間の単層編み込み繊維束を明示的に幾何学モデルとして構築し、VOF 法と CSF 法による非定常混相流動解析でマクロポイド形成過程を力学的に解明することを目的とする。

2 手法

解析対象とした領域を図 1 に示す。計算領域は平行平板間に配置された単層の編み込み繊維束である。実際の繊維の空間スケールを計算領域内で再現するのは困難であるため、空隙率を実験条件に合わせ、比較的大きな繊維径を用いている。繊維表面および上下壁には滑りなし条件、側壁には対

称面境界条件を適用した。入口には一様一定速度条件、出口には対流境界条件を与えた。液体と気体の物性値はそれぞれ、350-cSt シリコンオイルおよび空気のものを用いた。解析は無重力下で行い、キャピラリー数 $Ca = \mu_1 U_{in} / \gamma$ を支配因子として定義した。ここで、 μ_1 は液体の密度、 U_{in} は入口速度、 γ は表面張力を表す。気液界面の追跡には VOF 法を、界面張力の取り扱いには CSF 法を用い、OpenFOAM ver.9 の `interFoam` ソルバにより解析を行った。

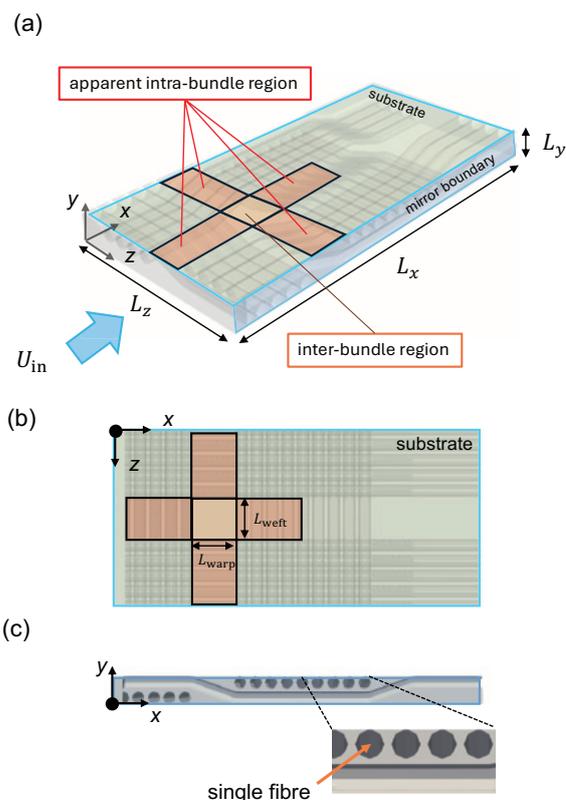


図 1 : 計算領域 : (a) 鳥瞰図, (b) 上面図, (c) 側面図

3 結果

図2に、含浸液体内の主流方向速度分布を示す。各速度は入口速度で正規化している。 $t = 37.40$ [s] において、繊維束内の含浸液体は優先的に含浸し、繊維束間領域で遅れることで、リードラグ挙動が発生する、 $t = 44.25$ [s] において、繊維束内の含浸液体はギャップ下流側の緯糸方向に先行し、2つのフローフロントが gap 下流の見かけ上の緯糸束内領域で合流しマクロボイドを形成する [5]。 $t = 44.25$ [s] 時点の速度場より、マクロボイドの上流側では負の速度成分、下流側では正の成分が界面付近に分布し、スパン方向からの液体供給が確認される。このとき局所的にせん断応力が増加しており、異なる曲率を持つ界面間に働く毛管圧差により、フローフロントの移動および内部流動に影響を与えている。

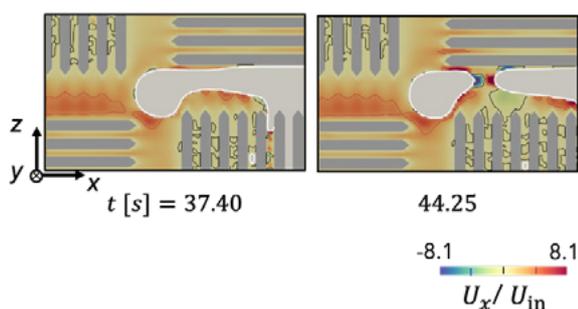


図2：マクロボイド形成過程の下壁面付近 ($y = 50 \mu\text{m}$) の含浸液体内の主流方向速度分布。数値条件は、 $\text{Ca} = 0.001$, $\theta_f = 20^\circ$, $\theta_w = 20^\circ$

4 結論

本解析により、キャピラリー圧に起因するフローフロント間の合流が、局所的な速度場に大きな変化をもたらし、マクロボイドの形成を引き起こすことが明らかとなった。これは、繊維束内・間の局所的な界面の変形・移動・合体がボイド形成に果たす役割を強調するものであり、従来の Darcy スケールに基づく流動モデルでは捉えきれなかった物理的メカニズムを補完する成果である。

今後は、濡れ性や幾何学構造に着目し、それらがボイドの生成や抑制に及ぼす定量的影響を明ら

かにすることで、複合材料成形におけるボイド制御のための指針を提供するのみならず、毛細管支配の非定常混相流——たとえば、燃料電池・水電解における流体管理、あるいは軌道上における気液分離技術の設計——など、多様な応用領域への展開可能性を有している。

5 謝辞

本研究で行なった計算の一部は京都大学のスーパーコンピュータ共同研究制度（若手・女性奨励枠）に基づく。また、JSPS 科研費 (Grant No.: 24K00824) の助成を受けたものである。ここに感謝の意を表す。

6 参考文献

- [1] J. Varna, R. Joffe, L.A. Berglund, T.S. Lundström, Effect of voids on failure mechanisms in RTM laminates, *Compos. Sci. Technol.* 53 (1995) 241–249.
- [2] L.F. Nielsen, *Composite Materials: Properties as Influenced by Phase Geometry*, Springer, 2005.
- [3] G.W. Lee, K.J. Lee, Mechanism of void formation in composite processing with woven fabrics, *Polym. Compos.* 11 (2003) 563–572.
- [4] E. Ruiz, V. Achim, S. Soukane, F. Trochu, J. Bréard, Optimization of injection flow rate to minimize micro/macro-voids formation in resin transfer molded composites, *Compos. Sci. Technol.* 66 (2006) 475–486.
- [5] K. Yoshihara, Y. Kamei, A. Mizuno, H. Ohgaki, T. Hori, I. Ueno, Effect of wettability on viscous fluid impregnation in single-layer woven-fibre bundles driven by pressure difference, *Compos. Part A Appl. Sci. Manuf.* 138 (2020) 106049.

高温電解セルスタック・電解装置の開発

水素発生極の共電解シミュレーション検討

郭 玉婷, 谷内 太陽, 岸本 将史, 岩井 裕

京都大学

固体酸化物形電解セル (SOEC) を用いた水蒸気・二酸化炭素 ($\text{H}_2\text{O}/\text{CO}_2$) 共電解が注目されている。 $\text{H}_2\text{O}/\text{CO}_2$ 共電解の電解効率向上のためには分子レベルでの現象理解が重要であるが、高温条件下の実験による分析は困難である。そこで本研究では、SOEC のカソード材料として広く用いられる Ni-YSZ 混合多孔質と $\text{H}_2\text{O}/\text{CO}_2/\text{H}_2/\text{CO}$ ガスの間に生じる相互作用を分子動力学により再現し、ガス分子の吸着・表面拡散現象について解析した。

1 緒言

近年、固体酸化物形電解セル (SOEC) を利用したエネルギーキャリア生成手法が注目されている。SOEC は高温 (600~850°C) で作動し、エネルギー変換効率が高いデバイスとして知られている。また、水蒸気と二酸化炭素を同時に電解すること ($\text{H}_2\text{O}/\text{CO}_2$ 共電解) が可能である。 $\text{H}_2\text{O}/\text{CO}_2$ 共電解では、水素と一酸化炭素を含む合成ガスが生成し、この合成ガスを起点としてメタンなどの有用な炭化水素化合物を合成することも可能である。

$\text{H}_2\text{O}/\text{CO}_2$ 共電解において、水蒸気や二酸化炭素の電解反応は SOEC の多孔質カソード内部で生じる。反応を詳細に見ると、水蒸気や二酸化炭素がカソード表面へ吸着したのち、表面拡散によって、気相、電子伝導体、イオン伝導体の界面である三相界面 (TPB) に到達すると考えられる。したがって、TPB 近傍での吸着や表面拡散といった素過程を調べるのが重要である。SOEC カソード材料として、ニッケル (Ni) とイットリア安定化ジルコニア (YSZ) の混合多孔質 (Ni-YSZ) が広く用いられる。

本研究では、 $\text{H}_2\text{O}/\text{CO}_2$ 共電解時における Ni および YSZ 表面でのガス吸着および表面拡散現象を解析することを目的とした。高温条件下における表面とガス分子の相互作用を分子動力学 (MD) を用いて再現し、実験的には観測が困難な素反応の理解に資する知見を得ることができた。

2 計算手法

H_2O 分子には TIP4P/2005 モデル[1], CO_2 分子には TraPPE モデル[2], H_2 分子には Darkrim らのモデル[3], CO 分子には Sirjoosingh らのモデル[4] を用いた。Ni には Morse ポテンシャル[5]を、YSZ には Coulomb-Buckingham ポテンシャル[6]を用いた。異種物質間相互作用にはクーロンポテンシャルと Lennard-Jones (LJ)ポテンシャルを用い、パラメータは Universal Force Field (UFF) [7]に Lorentz-Berthelot 則を適用することにより算出した。

図1のような固気界面系を構築した。NVT アンサンブル下で 3 ns 間の計算を行い、吸着平衡を達成したのち、NVT アンサンブル下で 3ns 間の計算を行い解析を行なった。時間ステップは 2 fs, 温度は 1000 K とし、xyz 方向の周期境界条件を課した。Morse ポテンシャル及び Buckingham ポテンシャルのカットオフ距離は 10 Å, LJ ポテンシャルのカットオフ距離は 15 Å とし、PPPM 法により長距離力の計算を行った。

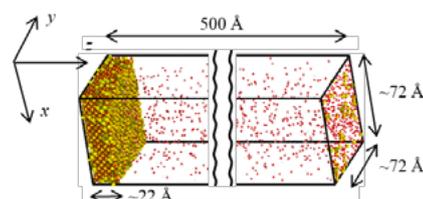


Fig. 1. Schematic picture of simulation system.

3 結果

3.1 吸着解析

H₂O/CO₂/H₂/CO ガスの Ni(001)および YSZ(001) 表面への吸着を評価するため、約 4~5 atm の気相圧力で単一ガス雰囲気下での z 方向のガス質量密度分布を計算した。(ただし、YSZ 表面と H₂O からなる系については吸着の度合いが顕著であったため、気相圧力 1 atm で計算している。) 図 1(a)は Ni 表面の結果を、(b)は YSZ 表面の結果を示す。ここで、気相領域の密度は、バルク領域 ($40 \leq z \leq 460 \text{ \AA}$) の密度で除することによる規格化を行った。図 1(a)より Ni(001)表面では反応で生じるいずれのガス種についても吸着が見られない一方で、図 1(b)より、YSZ(001)表面では H₂O の非常に強い吸着と CO₂ の弱い吸着が見られることがわかった。また、混合ガス雰囲気下でも YSZ への H₂O 吸着が他のガス種の吸着を抑制する競争吸着現象も観察された。

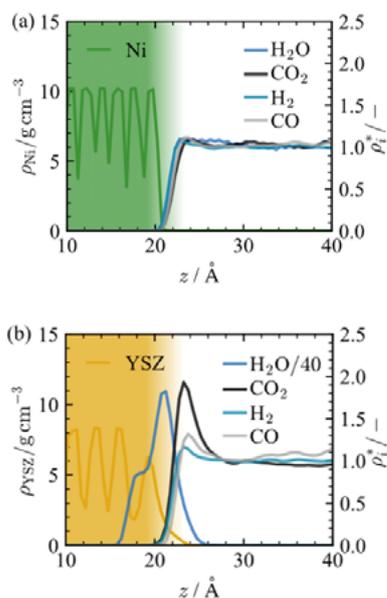


Fig. 2. Normalized mass density distribution of H₂O/CO₂/H₂/CO in z direction.

3.2 表面拡散解析

吸着が特に顕著であった YSZ(001)表面への H₂O に関して表面拡散を調べた。この際、H₂O の気相分圧を変えて拡散係数の吸着量 (θ_{total}) 依存性を評価した。結果を図 3 に示す。ここで、YSZ 表面の H₂O は最表面の内部 (inside) と外部 (outside) の両方に吸着層を形成したため、それぞれの領域とそれら

の合計領域における拡散係数、 D_{inside} , D_{outside} , D_{total} を示している。図 3 より、表面との相互作用が比較的弱く、動きやすい outside 領域の拡散が顕著であることが分かる。さらに、 $\theta_{\text{total}} \sim 0.15 \text{ \AA}^{-2}$ 付近で outside 領域の拡散が急激に増加している。この現象を詳しく調べるため、吸着構造の分類や吸着種間に働く力の解析を行なった。その結果、 $\theta_{\text{total}} \sim 0.15 \text{ \AA}^{-2}$ 付近で、表面拡散が生じにくい (吸着の強い) サイトが飽和し、吸着の弱いサイトへの吸着が進行したことや、吸着種間の平均距離が減少し、斥力が増大したことが一因となっていることが示された。

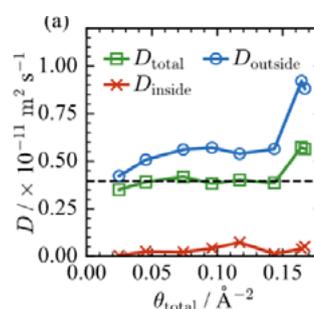


Fig. 3. H₂O adsorption amount dependence of H₂O surface diffusion coefficient on the YSZ(001).

4 結言

本研究により、SOEC 共電解における主たる反応経路に関する知見が得られた。H₂O 分子は YSZ 表面に吸着し、その表面上を輸送される一方で、CO₂ は YSZ への吸着が弱く表面輸送は比較的少ない。さらに、YSZ 上における H₂O の表面輸送は、吸着量によって劇的に向上する可能性が示唆された。

5 参考文献

- [1] Abascal, J. L., et al., *J. Chem. Phys.*, 123(23). 2005.
- [2] Potoff, J. J., et al., *AIChE J.*, 47(7). 2001.
- [3] Darkrim, F., et al., *J. Chem. Phys.*, 109. 1998.
- [4] Sirjoosingh, A., et al., *J. Chem. Phys.*, 114. 2010.
- [5] Girifalco, L. A., et al., *Phys. Rev.*, 114. 1959.
- [6] Brinkman, H. W., et al., *Chem. Phys. Lett.*, 247(4-6). 1995.
- [7] Rappe, A. K., et al., *J. Am. Chem. Soc.*, 114. 1992.

外核上部安定成層の表皮効果に基づく新たな惑星ダイナモ領域推定

八木 優人

京都大学大学院理学研究科地球惑星科学専攻

1 はじめに

「軸対称な定常惑星ダイナモは存在しない」ことが Cowling (1934) によって証明されているが、水星の固有磁場は非常に強い軸対称双極子磁場が支配的なことが観測から分かっている。この一見矛盾した観測事実を説明する一つの仮説として、外核上部には安定成層が存在し、その層によってコア外部で観測される固有磁場が軸対称化されると考えられている。外核下部の対流によって生じる磁場が高周波数成分ほど大きく減衰する表皮効果を受ける（例えば、Christensen, 2006）、あるいは安定成層内で速度による磁場の変換（例えば、Stevenson, 1982）によって軸対称双極子磁場が観測される。安定成層の存在は惑星コアの中で磁場を発生させる電流領域を推定することで存在を示唆することが可能ではあるが、これまでに提案された磁場による惑星内部の電流領域推定手法では安定成層の存在が考慮されておらず、安定成層に内包される対流層の存在領域を正確に推定することが困難である。また磁場の軸対称化について上記の効果がどれくらい効いているのかについても明らかになっていない。そこで本研究における課題は、水星を想定した内部構造の惑星ダイナモ計算を用いて、これらの課題について解析を行うことである。

2 研究手法

惑星コアの磁気流体力学ダイナモは非線形かつ三次元問題であるため、大規模な計算資源を必要とする。本共同研究制度によるスーパーコンピュータの利用によって、水星コア流体のダイナミクスについて数値実験を行うことができた。Takahashi

(2012,2014)のMHDダイナモ計算コードを利用し、Takahashi et al. (2019) を参考にして初期条件や境界条件、無次元パラメータなどを設定し計算を行った。

3 結果

まず計算の概要を示す。図1には磁場と速度を表すものであり、速度のグラフより動径方向の速度が安定成層で抑制されている様子が確認され、これは安定成層の効果が効いていることを表している。磁場のグラフからは、対流層での磁場は非軸対称成分が多く含んでいるものに対して安定成層内では磁場が軸対称化している様子が確認できる。

Gastine et al. (2020) では安定成層が完全に静止流体かつ球形形状を無視するとすると、磁場は表皮効果によって、 $\exp(\sqrt{\omega})r$ に比例して減衰することを用いてMHDダイナモ計算の結果の解釈を行った（ここで、 ω は時間周波数、 r は原点からの距離を表す）。本研究では、この方法に基づいて解釈を行うために時間周波数の推定を行なった。磁場の典型的なタイムスケールについては、ガウス係数とその一回微分のパワースペクトルの比を用いた表式を採用し計算を行なった。結果は図2の通りであり、高次数磁場のタイムスケールほど短い傾向が見られた。Christensen and Tilgner (2004) によれば磁場のタイムスケールは次数に対して反比例することが示唆されているので、今回の結果にフィッティングを行ったところおよそタイムスケールの逆数に相当する時間周波数は高いことから、高次の磁場の方がより表皮効果を受けて減衰が起きていることを示唆する結果が得られた。

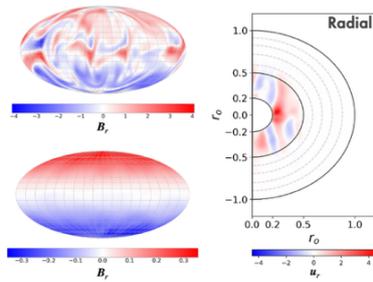


図 1 ダイナモ計算で得られた磁場と速度。左上が対流層と安定成層の境界、左下が安定成層の間における磁場の動径方向成分であり、速度は経度方向に平均した動径方向成分を描いている。

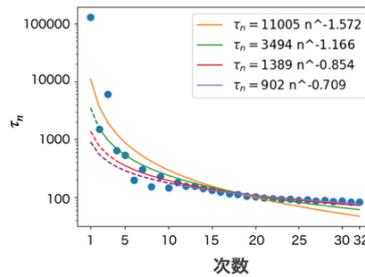


図 3 各次数の磁場のタイムスケール。曲線はそれぞれ、1~32 (橙) 2~32 (緑)、4~32 (赤)、11~32 (紫) の次数でフィッティングを行っている。

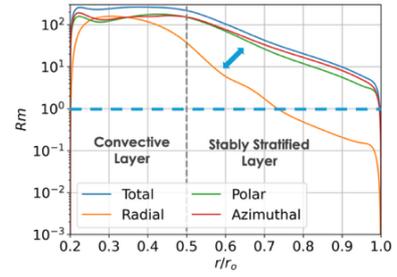


図 2 コア領域での磁気レイノルズ数。計算には速度の RMS 値を使用し、曲線はそれぞれ全成分(青)、動径方向成分(橙)、極角方向成分(緑)、方位角方向成分(赤)を計算に用いている。

4 議論

ここまで表皮効果に焦点を当てて研究を進めてきたが、磁場の誘導方程式に立ち返ると磁場の時間変化は表皮効果に相当する拡散項の他に、流れによって磁場が相互作用を受ける移流項による磁場変化も存在する。この二つの効果は磁気レイノルズ数と呼ばれる無次元数によってしばしば評価される。Miyakoshi and Kageyama (2015)によれば少なくとも磁気レイノルズ数が 10 以上の場合、磁場生成が積極的に起きていると考えられている。そこで本研究で得られたダイナモ計算結果から半径ごとの速度 RMS 値を計算し、半径の関数としての磁気レイノルズ数を求めた。結果は図 3 の通りで、対流層では 100 以上のダイナモ作用が十分起きており、安定成層においても、減少はしているものの大部分で 10 以上の値を取り、安定成層においても拡散項より移流項の方が十分大きなことが示唆される結果である。

5 まとめ

観測より水星固有磁場は非常に軸対称性が強いことがわかっている。数値計算で模擬実験を行い、その結果について解析した。安定成層中で磁場が軸対称化している様子が確認され、表皮効果での減少効果は時間変化を調べることで次数依存性を見つげることができた。ただし表皮効果に加えて速度による磁場変化も考慮する必要があることが示唆され、水星磁場の軸対称化の原因は表皮効果だけではな

く、速度との相互作用についてどのような速度がどのように相互作用を起こして磁場が軸対称化しているのかを丹念に調べる必要がある。

6 謝辞

本研究の遂行にあたり、指導教官として終始多大なご指導を賜った、京都大学大学院理学研究科の藤浩明准教授に深謝致します。また九州大学理学院の高橋太准教授には本研究で使用した研究コードを提供していただきました。ここに深謝の意を表します。

本研究の一部は京都大学学術情報メディアセンターのスーパーコンピュータ共同研究制度(若手・女性研究者奨励枠)によるものです。加えて本研究は、JST 次世代研究者挑戦的研究プログラム JPMJSP2110 の支援を受けたものです。

7 参考文献

- Christensen, U., and A. Tilgner (2004), Power requirement of the geodynamo from ohmic losses in numerical and laboratory dynamos, *NATURE*, 429, 169-171, doi:10.1038/nature02508.
- Christensen, U. R. (2006), A deep dynamo generating Mercury's magnetic field, *Nature*, 444(7122), 1056-1058, doi:10.1038/nature05342.
- Cowling, T. G. (1933), The magnetic field of sunspots, *Monthly Notices of the Royal*

Astronomical Society, 94(1), 0039-0048,
doi:10.1093/mnras/94.1.39.

Gastine, T., J. Aubert, and A. Fournier (2020),
Dynamo-based limit to the extent of a stable layer
atop Earth's core, *GEOPHYSICAL JOURNAL
INTERNATIONAL*, 222, 1433-1448,
doi:10.1093/gji/ggaa250.

Miyakoshi and Kageyama (2015) 3. Geodynamo
Simulation in the Past, Now, and Future *J.
Plasma Fusion Res.* Vol.91, No.10 6 7 6 - 6 8 2

Takahashi, F. (2012), Implementation of a high-
order combined compact difference scheme in
problems of thermally driven convection and
dynamo in rotating spherical shells, *Geophysical
and Astrophysical Fluid Dynamics*, 106(3), 231-
249, doi:10.1080/03091929.2011.565337.

Stevenson, D. J. (1982), Reducing the non-
axisymmetry of a planetary dynamo and an
application to Saturn, *Geophysical and
Astrophysical Fluid Dynamics*, 21(1-2), 113-127,
doi:10.1080/03091928208209008.

Takahashi, F. (2014), Double diffusive convection
in the Earth's core and the morphology of the
geomagnetic field, *Physics of the Earth and
Planetary Interiors*, 226, 83-87,
doi:10.1016/j.pepi.2013.11.006.

Takahashi, F., H. Shimizu, and H. Tsunakawa
(2019), Mercury's anomalous magnetic field
caused by a symmetry-breaking self-regulating
dynamo, *Nature Communications*, 10,
doi:10.1038/s41467-018-08213-7.

計算化学的アプローチによるアザトルキセン由来超分子の 秩序化と構造相関の解明

曾川 洋光

関西大学化学生命工学部

1 緒言

超分子は水素結合や π - π 相互作用といった非共有結合性の分子間相互作用を駆動力として集合構造を形成する。我々の研究室では、アミノ酸由来の光学活性点を導入した 1,3,5-tri(benzoimidazolyl)benzene (TBIB)誘導体が、分子間水素結合を駆動力として自己組織化超分子構造を形成することを、実験科学および計算化学的アプローチの両面から明らかにしてきた¹⁾。一方、TBIB 誘導体では、中央ベンゼン環に結合したベンゾイミダゾール骨格がいずれも単結合で連結されているため、自由回転が容易であり、構造の安定性が低下しやすいと考えられる。そこで本研究では、高い平面性を有するトリアザトルキセン (TAT) 骨格に着目し、これにアミノ酸由来の光学活性点を導入した分子を設計し、その集合体形成能を計算化学的アプローチにより検討することを目的とした (図 1)。

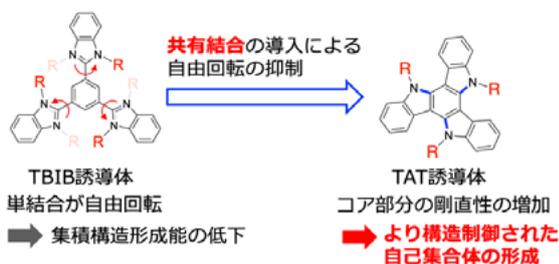


Figure 1. Chemical structures of TBIBs and TATs, and concept of present study.

2 実験

TAT-1 ならびに TAT-2 の単一分子に対し、DFT 計算を行なった。汎関数には長距離補正に優れた ω

B97XD を使用し、基底関数は 6-31G* とした。次に、得られた各分子の最適化構造を、適切な位置に複数分子 ($n=2-4$) 配置した後、再度構造最適化を行うことで、その集合体形成能を評価した。また、TD-DFT 計算により理論 CD および UV-vis スペクトルをシミュレーションし、これを実際の測定結果と比較した。

3 結果・考察

TAT-1 ならびに TAT-2 の化学構造式ならびに最適化された構造を図 2 に示す。*t*Bu 基で修飾した TAT コア分子を用いた場合、N 上に導入したバリン誘導体の長鎖アルキル基との立体障害により、より対称性の高い配座をとりやすいことが示唆された。さらに、最適化構造に基づいて CD および UV-vis スペクトルをシミュレーションした結果を図 3 に示す。いずれの化合物も 270 nm 付近に吸収極大を示し、こ

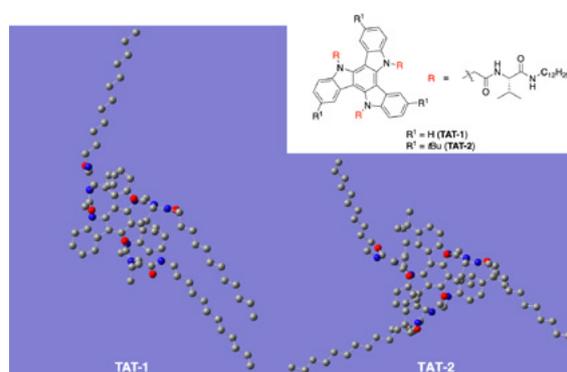


Figure 2. Chemical structures and optimized structures of TAT-1 and TAT-2.

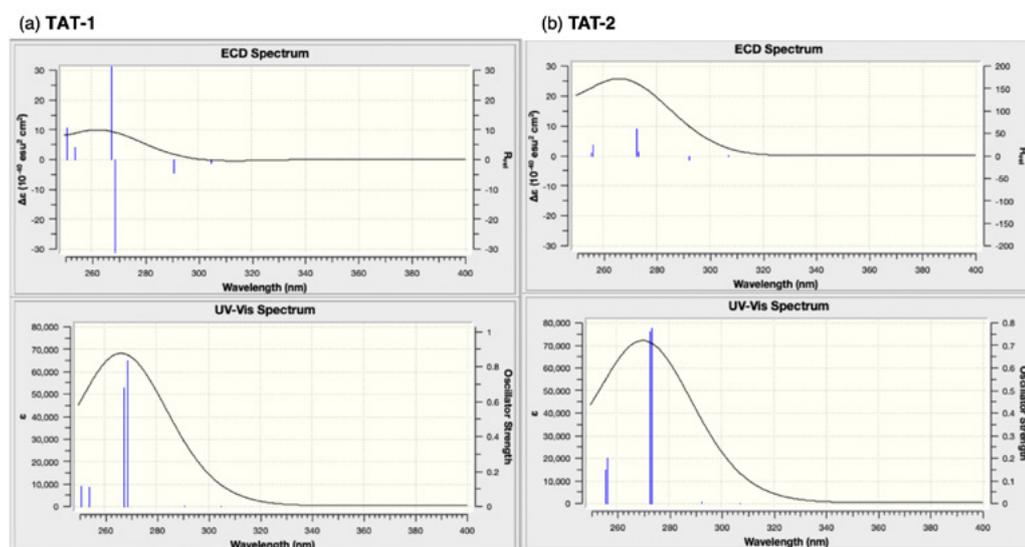


Figure 3. Solid black curves: CD and UV-vis absorption spectra of (a) **TAT-1** and (b) **TAT-2** simulated by the TD-DFT method (ω B97X-D/6-31G*), n -states = 20, plotted with peak half-width at half height = 0.2 eV. Vertical blue lines represent R_{vel} (CD) and oscillator strength (UV-vis).

これは実測値より 30 nm 程度短波長に位置していた。一方、**TAT-2** は **TAT-1** に比べて大きな CD 強度を示し、より規則的な周期構造を形成する可能性が示唆された。

4 まとめと今後の展望

本研究では、TAT 誘導体の会合構造形成能および各種スペクトルについて、計算科学的アプローチにより検討を行った。現段階では、高純度の **TAT-1** および **TAT-2** を得られていないため、実測値と計算結果を直接比較するには至っていない。しかしながら、計算結果からは、**TAT-2** がより規則的な周期構造を形成する可能性が示唆された。今後は合成的アプローチを進め、得られた実測データと計算結果との比較検討を行う予定である。加えて、プリミティブな結果ではあるが、**TAT-1** の粗生成物が固体中において吸収波長領域で負の CD シグナルを示すことが明らかになりつつある。観測されるスペクトルは、単分子や二分子会合体モデルから予測されたスペクトルとも異なっており、多分子からなる会合状態特有の効果が反映されている可能性がある。今後の研究の進展により、本系の会合構造の全容をより明らかにしていきたい。

5 謝辞

本共同研究制度（若手奨励枠）を活用させていただきまして、ここに心より御礼申し上げます。本制度には昨年度に限らず、長年にわたりご支援を賜り、多くの成果を得ることができました²⁻⁵。これまでのご支援に対し、改めて深く感謝申し上げます。

6 引用文献

1. T. Mizukoshi, H. Sogawa, F. Sanda, *Chem. Eur. J.* **2023**, *29*, e202203703.
2. M. Murakishi, S. Nakanishi, H. Sogawa, F. Sanda, *RSC Adv.* **2025**, *15*, 30865–30871.
3. H. Sogawa, Y. Kakita, M. Kanda, F. Sanda, *Macromol. Chem. Phys.* **2025**, doi: 10.1002/macp.202500199.
4. S. Inata, H. Sogawa, F. Sanda, *Polym. J.* **2023**, *55*, 785–795.
5. H. Sogawa, M. Abe, R. Shintani, T. Sotani, K. Tabaru, T. Watanabe, Y. Obora, F. Sanda, *Polym. J.* **2023**, *55*, 1119–1218.

大規模 M-I 結合シミュレーションにおける MHD 系流速ヤコビアン固有ベクトル抽出可視化実験

齊藤慎之介

九州大学大学院理学府地球惑星科学専攻

1 はじめに

地球磁気圏では太陽風との相互作用により多様な現象が発生しているが、その詳細なメカニズムはいまだ未解明な点が多い。本研究は、これらの理解を深める手がかりとして Alfvén 波に注目する。Alfvén 波とは、磁場とプラズマの相互作用により生じる電磁流体波であり、磁場に沿って情報やエネルギーを伝搬する基本的な波動モードである。磁気圏においては、擾乱が生じた際にその情報が Alfvén 波として伝わり、磁力線に沿ったエネルギー輸送や他の波動モードとの相互作用を通じて多様な現象を引き起こす。

本研究では、M-I 結合系シミュレーションである REPRODUCE PLASMA UNIVERSE (REPPU) コードを用いて Alfvén 波の可視化を行い、その伝搬過程を解析することで磁気圏現象の発生メカニズム解明を目指す。

2 研究手法

本研究は九州大学名誉教授の田中高史によって作成された REPPU コード[1]を用いて行われた。

REPPU コードは 12 面体分割三角格子を採用しており、その特徴的な格子により地磁気変動やオーロラ活動の詳細な再現を可能にしている。磁気圏領域では MHD 方程式を、電離圏領域では Hall・Pedersen 電流系を解いており、MHD 計算は有限体積法に基づき、TVD 補間と Roe 法[2]を用いたフラ

ックス計算により行われる。

特に Roe 法においては、保存方程式系を変数ベクトルと流速フラックスで記述し、そのフラックスを固有値分解することで得られる固有ベクトルが Alfvén 波モードに対応する。本研究では、この固有ベクトルをコード内部から抽出し、Alfvén 波を直接的に可視化することを試みた。

3 結果

今回はテストプロットとして準静穏磁気圏に南向き IMF を衝突させた際の Alfvén 波の伝搬の様子を観察した。

初期条件は準静穏磁気圏で、速度 350 km/s、密度 5cm^{-3} 、温度 200,000 K、 $B_y = -2.5\text{nT}$ 、 $B_z = 4.3\text{nT}$ の太陽風を 2 時間流して作成した。

その後 $B_z = -4.3\text{nT}$ として南向き IMF を流して地球磁気圏に衝突した際の様子を観察した。今回は、磁気圏のショック面での shear Alfvén 波の y 方向の伝搬の推移に注目した (図 1)。

その結果 Alfvén 波がショック面に沿って移動していく様子が見受けられた。これは shear Alfvén 波が磁力線に沿ってエネルギー輸送を行うという性質と合致している。現在は Alfvén 波の直感的な理解に沿っているという考察にとどまっているが、詳しい解析はこれから行っていきたい。

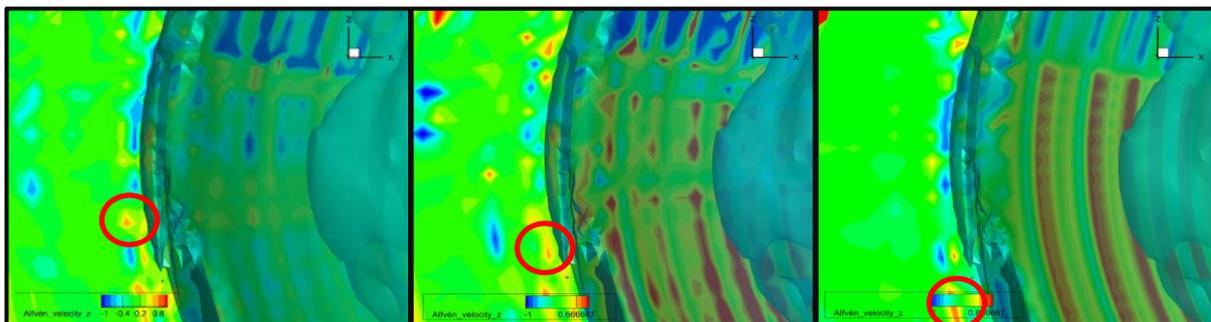


図 1. $T=133$ での $v_x = 0$ 面 (x は太陽から地球方向)。Alfvén 波が磁力線に沿って下に移動していることがわかる。

4 終わりに

本研究ではテストプロットとして磁気圏前面での Alfvén 波の伝搬の様子について確認した。今後はこのシミュレーションを用いて様々な現象での Alfvén 波の伝搬の様子を確認し、メカニズムの理解を目的とする研究を行う。

5 謝辞

本研究の計算は京都大学のスーパーコンピュータ共同研究制度(若手・女性奨励枠)を活用させていただきました。厚く御礼申し上げます。

6 参考文献

- [1] T. TANAKA,
JOURNAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS 111,
381-389 (1994)
- [2] M. BRIO AND C. C. WU (1998), JOURNAL
OF COMPUTATIONAL PHYSICS 75,
40&422(1988)

動的モード分解を用いた2次元ハバードモデルの光励起ダイナミクスの解析

時本 純*

*鶴岡工業高等専門学校 基盤教育グループ

1 はじめに

光物性物理学はその名前のとおり、物質に光（電磁波）を照射した場合に、物質中の電子状態がどのような状態になるかに注目する領域である。中でも、光照射をすることにより、特異な（新奇な）電子状態を作り出す試みが近年注目を集めている。

このような電子状態は量子力学に基づき、状態ベクトルとして記述され、また、その状態ベクトルは時間依存シュレディンガー方程式に従って時間発展する。このときに得られる時間発展解を、エネルギー固有モードの重ね合わせに分解（書き直す）し、個々のモードに対して相関関数等の物理量を計算することで、特異なモードを発見することができる。

行列の固有モード（ベクトル）への分解方法は様々あるが、本研究では、行列のサイズが大規模かつ疎ではないことを考慮して、動的モード分解 [1, 2] とばれる手法を用いた。この手法は、従来、流体の観測データの分析等に用いられてきた手法であり、大規模な行列においても比較的、容易かつ高速に分解処理できることが知られている。

本報告では、2次元ハバードモデルにおいて、光照射した時のダイナミクスについて、動的モード分解を施すことによりエネルギー固有モードに分解し、各モードにおいてスピン構造因子を計算することで、スピン配列に異方性があるモードの存在を示す。

2 手法

本研究では2次元ハバードモデル

$$H = H_t + H_U = \sum_{i,j,\sigma} t_{i,j} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \sum_i U c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} \quad (1)$$

を用いる。ここで、 t はホッピングパラメーター、 U はオンサイトクーロン相互作用パラメータである。第1項 H_t は電子の隣接サイトへの飛び移りを表し、第2項は（スピンの向きが違う）2つの電子が同一サイト上に存在する場合を表す。

このハミルトニアンを基に、まず、光照射した場合の状態ベクトルの時間発展を数値的に求める。ここで、光照射はパイエルズ位相としてハミルトニアンに取り込み、計算をした。すると i 番目の time-step における状態ベクトル

$$|\psi(i\Delta t)\rangle = \sum_\nu \tilde{c}_{\nu i} |\tilde{\phi}_\nu\rangle \quad (2)$$

が得られる。ここで Δt は離散時間幅である。

次に、時間発展の計算で得られた係数 \tilde{c} に対して、行列 A

$$A = \begin{pmatrix} \tilde{c}_{11} & \tilde{c}_{12} & \cdots & \tilde{c}_{1T-1} & \tilde{c}_{1T} \\ \tilde{c}_{21} & \tilde{c}_{22} & \cdots & \tilde{c}_{2T-1} & \tilde{c}_{2T} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \tilde{c}_{M-11} & \tilde{c}_{M-12} & \cdots & \tilde{c}_{M-1T-1} & \tilde{c}_{M-1T} \\ \tilde{c}_{M1} & \tilde{c}_{M2} & \cdots & \tilde{c}_{MT-1} & \tilde{c}_{MT} \end{pmatrix} \quad (3)$$

を定義する [3]。ここで M は初期基底数、 T は最大 time-step 数である。この行列 A に対して動的モード分解を施すと、状態ベクトル $|\psi(t)\rangle$ は

$$|\psi(t)\rangle = \sum_\nu C_\nu(t) |\phi_\nu\rangle \quad (4)$$

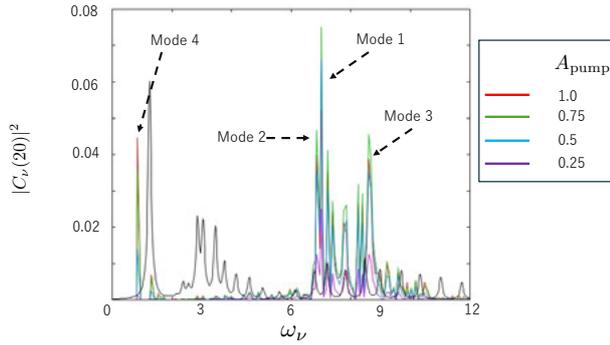


図 1: 振動数 (エネルギー) に対する時刻 $t = 20$ における重み。1つ1つのピークがエネルギー固有モードに対応する。

$$C_\nu = c_\nu \exp\{(i\omega_\nu + \sigma_\nu)t\} \quad (5)$$

と分解 (書き直し) される。ここで、 ω_ν は (角) 振動数、 σ_ν は増幅率を表すパラメータである。このとき、 $|\phi_\nu\rangle$ はエネルギー固有モード (動的モード) に対応し、 $|C_\nu(t)|^2$ は、各時刻において ν 番目のエネルギー固有モードが状態ベクトルに含まれる「重み」を表している。

最後に、動的モード分解によって得られたエネルギー固有モード $|\phi_\nu\rangle$ それぞれに対して、各種物理量を計算することで、各モードの物理的特徴を確認すると同時に、 $|C_\nu|^2$ の大きさを基に、そのモードがどの程度、物性に寄与するかを確認する。

3 結果

本稿では、システムサイズ $N = 16$ サイト、電子フィリングは 2 hole-dope (電子が 14 個存在)、離散時間幅 $\Delta t = 0.02$ 、計算タイムステップ数 $T = 5000$ 、 $U/t = 8$ 、照射光の振動数 $\omega_{\text{pump}} = 8.0$ 、照射光の振幅 $A_{\text{pump}} = 0.25, 0.5, 0.75, 1.0$ の結果を報告する。

図 1 に、振動数 (エネルギー) に対する、時刻が 20 (光照射が終わって十分に時間が経過したタイミング) の時の重み $C_\nu(20)$ を示す。ここで、複数のピークが見取れるが、この 1つ1つのピークが 1つのエネルギー固有モードに対応する。また、以後、図中に示す通り、代表的なピークにそれぞれ Mode1, 2, 3, 4 と名付ける。

それぞれのモードに対して、スピン構造因子 S を計算したところ、結果として、Mode1 では $S(\pi/2, 0) =$

3.39、 $S(0, \pi/2) = 2.93$ 、 $S(\pi, 0) = 3.46$ 、 $S(0, \pi) = 2.77$ 、Mode2 では $S(\pi/2, 0) = 3.11$ 、 $S(0, \pi/2) = 3.22$ となり、両モードとも、スピン配列において対称性の破れた、異方的なモードであることがわかった。

一方で、Mode3、Mode4 に関しては、スピン構造因子に異方性は確認されなかった。

4 まとめ

本研究では、2次元ハバードモデルにおいて、光照射したときのダイナミクスについて研究した。時間発展する状態ベクトルのエネルギー固有モードへの分解には、動的モード分解を適用し、結果として、比較的高精度かつ、高速・安定的にモード分解を行えることがわかった。また、 $\omega = 8.0$ 近傍のエネルギー領域に、スピン構造因子が異方性を持つ複数のモードが存在することが確認された。

今後は、照射光の振動数 ω_{pump} やオンサイトクーロン相互作用パラメータ U を変化させた場合のシミュレーションをすることで、光照射により、「選択的」に異方性のあるモードを励起させる方法について検討していく必要があると考える。

5 謝辞

本研究の一部は、スーパーコンピュータ共同研究制度 (若手・女性奨励枠) により、京都大学学術情報メディアセンターのスーパーコンピュータを利用して実施した。また、本研究は遠山貴巳氏 (東京理科大学先進工学部教授) との共同研究を含む。ここに関係各位に対して感謝の意を表する。

参考文献

- [1] J. H. Tu, *et al.*, J. Comput. Dyn. **1**, 391 (2014).
- [2] 大道 勇哉, 五十嵐 康彦, 日本神経回路学会誌 **25**, 2 (2018).
- [3] J. Tokimoto, S. Ohmura, A. Takahashi, K. Iwano, and H. Okamoto, Phys. Rev. B **109**, 195150 (2024)

情報量に偏りや欠損がある時系列データを用いた 機械学習時間発展モデリング

中井 拳吾 *

*岡山大学学術研究院 環境生命自然科学学域

本稿は齊木 吉隆氏 (一橋大学経営管理研究科) との共同研究に基づくものである。

1 はじめに

時系列データに対する機械学習手法の一つであるリザーバーコンピューティング [1, 2] が時系列予測に有効であることがわかってきている。我々はこの機械学習手法を用いた流体変数 [3, 4] や実際の気象データ [5] の時系列予想を成功させている。また3次元のローレンツ系などの時系列データから構成した機械学習モデルが様々な力学系的性質を再現することも明らかにしている [6, 7]。

そこで学習に用いるデータがその学習によって得られる時間発展モデルに及ぼす影響を明らかにする。特に本研究では、学習に用いるデータの情報を恣意的に欠損させた場合にどの程度再現するかについて明らかにする。

2 リザーバーコンピューティング

力学系 $d\phi/dt = \mathbf{f}(\phi)$ の変数 $\mathbf{u} = \mathbf{h}(\phi) \in \mathbb{R}^M$ が観測できるとする。変数 \mathbf{u} の時系列データを用いて、 $\mathbf{u}(t)$ を入力したときに $\mathbf{u}(t+\Delta t)$ が出力となるように時間発展モデルをリザーバーコンピューティングにより構築する。この学習手法の特徴の一つはニューラルネットワークの各パラメータを学習しないことで学習にかかる計算量を減らしている点である。その分ニューラルネットワークの次元を大きくすることで高性能なモデリングを可能にしている。学習したいダイナミクスが決定論的である場合にはリザーバーコンピューティングは有効な学習手法である。リザーバーコンピューティングの詳細は [1, 2, 8] などを参考にされたい。

3 モデルの設定と結果

3.1 設定

次で記述されるローレンツ方程式 $\dot{x} = -10x + 10y, \dot{y} = -xz + 28x - y, \dot{z} = xy - 8z/3$ について考える。入力変数として $\mathbf{u}(t) = (x(t), y(t), z(t), x(t-\Delta\tau), y(t-\Delta\tau), z(t-\Delta\tau))$ を使用する。ここで $\Delta\tau$ は遅れ時間を意味する。なお、ローレンツ方程式の時系列データを学習する場合、そのカオス軌道を学習データとして用いることが通例である。しかし、リザーバーコンピューティングの場合、カオス軌道を用いた学習では欠損した情報を正確に把握する事が困難であるため、本研究ではアトラクターに埋め込まれた周期軌道を学習する時系列データとして用いる。

具体的には周期が9以下の周期軌道の中で、 (z_n, z_{n+1}) 平面上の特定の領域を通る周期軌道を削除したものをリザーバーコンピューティングによって学習する。ただし、 z_n は z 変数の n 番目の極大値を表す。

3.2 結果

周期が9以下の周期軌道の中で (z_n, z_{n+1}) 平面上の $(37, 39.2)$ を中心とする半径1の円を通る周期軌道を削除したものをリザーバーコンピューティングによって学習した。学習データを (z_n, z_{n+1}) 平面上に描いたものと、学習によって構成したりザーバーコンピューティングモデルを時間発展させて得た時系列データを (z_n, z_{n+1}) 平面上に描いたものを図1に示した。学習データには円内部の情報が欠損しているにもかかわらず、学習して得た機械学習モデルはその円の内部の情報を再現している事がわかる。

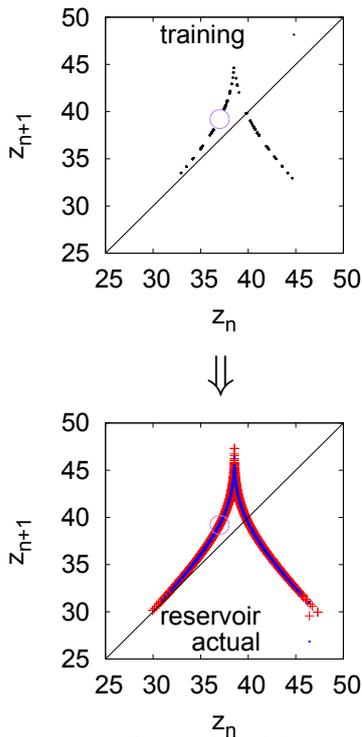


図 1: $(37, 39.2)$ を中心とする半径 1 の円を通る周期軌道を学習データから削除して学習した。上の図はその学習データを表し、円は $(37, 39.2)$ を中心とする半径 1 の円を表す。下の図は学習して構成した機械学習モデルから得た時系列データを赤色の点 (+) で表し、ローレンツ方程式を時間発展することで得られる時系列データを青色の点 (-) で表す。

同様に、 $(38, 46)$ を中心とする半径 4 の円を通る周期軌道を削除した場合のものを図 2 に示した。この場合も学習して得た機械学習モデルはその円の内部の情報を再現している事がわかる。

4 まとめ

学習に用いるデータの情報を恣意的に欠損させた場合にリザーバーコンピューティングがその情報を再現可能であることを明らかにした。本誌では 2 つの場合についてのみ図示しているが、この 2 つ以外にも様々な場所、大きさの円を用いて情報を欠損させた場合についても数値実験を行い、同様に再現可能であることを確認している。これはリザーバーコンピューティングが時系列データから背後にある構造を読みとる能力の高さの現れである。

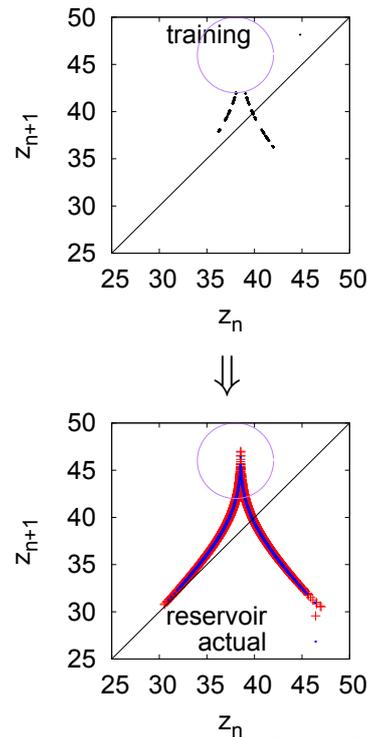


図 2: 図 1 と同様に $(38, 46)$ を中心とする半径 4 の円を通る周期軌道を学習データから削除して学習した。

5 謝辞

本研究でおこなった計算の一部は京都大学のスーパーコンピュータ共同研究制度 (若手・女性奨励枠) に基づく。また、中井は JSPS 科研費 22K17965 の助成を受けたものである。ここに感謝の意を表す。

参考文献

- [1] H. Jaeger, and H. Haas, *Science*, 304, (2004), 78-80.
- [2] Z. Lu, J. Pathak, B. Hunt, M. Girvan, R. Brouckett, and E. Ott, *Chaos* 27, (2017), 041102.
- [3] K. Nakai, and Y. Saiki, *Physical Review E* 98, (2018), 023111:1-6.
- [4] K. Nakai, and Y. Saiki, *Discrete and Continuous Dynamical Systems Series S*, (2021), 14:1079-1092.
- [5] T. Jinno, T. Mitsui, K. Nakai, Y. Saiki and T. Yoneda, *Chaos* 35, (2025), 053149.
- [6] M. Kobayashi, K. Nakai, Y. Saiki, and N. Tsutsumi, *Physical Review E* 104, (2021), 044215:1-7.
- [7] M. Kobayashi, K. Nakai, and Y. Saiki, *Journal of Physics: Complexity* 5, (2024), 025024.
- [8] A. Ohkubo and M. Inubushi, *Scientific Reports* 14, (2024), 30918.

ガラスの破壊挙動のシミュレーション

篠崎健二

大阪大学

1 研究

耐破壊設計に資するガラス材料のマイクロ破壊機構理解を目的に、アモルファス SiO_2 の引張下での応力応答とクラック形成過程を MD で解析する。さらに金属 (Cu) 介在時のブリッジング効果の有無と、応力指標の取り方が結果解釈に与える影響を整理する。

2 計算環境

計算資源は京都大学スパコン System B (Laurel 3) を用いた (ログインホスト: laurel.kudpc.kyoto-u.ac.jp)。OpenMP 並列を併用した。主要ソフトは LAMMPS (22 Dec 2022) および OVITO である。ReaxFF の実行にはffield.reax.cu_si_o[1]とlmp.control (制御ファイル) を用いた。

3 計算手法

本研究では、アモルファス SiO_2 モデル (約 4,500 原子) を構築し、平衡化後に一軸引張を課して応答を解析した。計算は主として ReaxFF (pair_style reax/c) を用い、電荷平衡は qeq/reax (収束条件の例として 1×10^{-6}) で実施した。単位系は real を用い、タイムステップは代表値として 0.25fs とした。変形は y 及び z 方向一軸引張とし、fix deform と temp/deform を組み合わせて変形誘起加熱の影響を抑制した。全体応力は compute pressure (基準温度を temp/deform に設定) を参照し、局所

応力は compute stress/atom を用いて可視化に供した。[2]

3.1 初期構造の作製

出発構造として結晶 SiO_2 (約 $26 \times 26 \times 78 \text{ \AA}^3$) を複製し、Vashishta ポテンシャル下で melt-quench (昇温・高温保持・室温へのクエンチ・緩和) を行うことでアモルファス化した。得られたアモルファス構造を ReaxFF 設定へ切り替え、後続の引張解析に用いた。Cu/ SiO_2 サンドイッチ構造は、上下にアモルファス SiO_2 を配置し、中央に Cu 層を挿入した後、界面アニーリングにより初期応力を低減した。

3.2 力場と電荷平行

応力破断現象の化学結合再編を捉えるため ReaxFF (reax/c) を採用し、電荷移動は qeq/reax で逐次求めた。比較参照として EAM+LJ を用いた事前アニーリングを適宜活用しつつ、引張試験自体は ReaxFF を主とした。

3.3 平衡化と変形条件

300 K 近傍での温度・体積緩和を経て、y 及び z 方向に一定の変形速度で一軸引張を付与した。変形時の見かけ温度上昇を抑えるため temp/deform を導入し、温度計算を変形に追従させた。

3.4 応力評価と可視化

全体ビリアル応力は compute pressure から取得し、初期体積・現在体積・有効断面のいずれで規格化するかを切り替え、評価指標の影響を検討

した。局所応力は `compute stress/atom` を出力して OVITO でマップ化し、クラック先端近傍の応力集中と結合切断の空間分布を確認した。

4 観察結果

4.1 SiO₂ 単体

応力-ひずみ曲線は弾性域後、ピークを示し、直後に急峻に低下。マイクロには Si-O ネットワークの切断に伴う脆性破断が進行。

4.2 Cu/SiO₂ サンドイッチ構造

クラック面に跨る Cu のブリッジング様相を可視化で確認。一方、全体応力の定義（分母の体積/断面）により、曲線形状が SiO₂ 単体と近づく場合がある。

4.3 評価指標の影響

破断後に空隙が増加する段階では、現在体積での規格化は見かけの応力低下を強調する傾向がある。初期体積による規格化や、有効断面（クラックを除いた領域）を用いた再評価により、曲線の解釈が安定化することを確認した。変形誘起加熱に対しては `temp/deform` の導入が有効であり、局所応力や配位・ボンドオーダーと組み合わせることで破壊機構の解像度が向上した。

5 まとめ

ReaxFF-MD に基づき、アモルファス SiO₂ の脆性破断挙動と Cu 介在時のブリッジング様相を確認し、応力規格化の取り方が曲線解釈に大きく影響することを示した。初期構造の作成から引張・可視化までの手順を確立し、評価指標の統一化により比較の頑健性が向上した。得られた知見は、ガラス系材料の耐破壊設計に向けたマイクロ機構理解の基盤となる。

6 参考文献

[1] Psofogiannakis, G. M.; McCleerey, J. F.;

Jaramillo, E.; Van Duin, A. C. T. ReaxFF Reactive Molecular Dynamics Simulation of the Hydration of Cu-SSZ-13 Zeolite and the Formation of Cu Dimers. *J. Phys. Chem. C* **2015**, *119* (12), 6678-6686

<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b00699>.
ACS Publications

[2] Urata, S.; Yoshino, H.; Ono, M.; Miyasaka, S.; Ando, R.; Hayashi, Y. Adhesion between Copper and Amorphous Silica: A Reactive Molecular Dynamics Study. *J. Phys. Chem. C* **2018**, *122* (49), 28204-28214.

<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b09990>.

REPPU コードレベル8の開発

トポロジーを取り込んだ複合系磁気圏物理学の創出

田中 高史

九州大大学名誉教授

REPPU コードレベル8の開発によって、より詳細な磁気圏トポロジーが再現可能になった。トポロジーは、観測では知ることが出来ない。REPPUによって、これまでのリコネクションだけに依存した磁気圏変動から、トポロジー変化を取り込んだ磁気圏変動に進化することができる。

1 導入

REPPU (REProduce Plasma Universe) コードは、太陽風の変動がどのようにして地球に伝えられるかを計算する、シミュレーションプログラムです。地球に伝えられた太陽風変動は、地磁気の変動、オーロラ現象などの地球電磁擾乱の原因になる。太陽風変動は太陽風に発し、磁気圏を通り、電離圏に達する。従って、地球での電磁的変動を再現するには、3つの領域と、それらの間の相互作用が考慮されなければならない。第1図にこれらの領域の概観を示す。磁気圏物理学では、X軸は太陽向き、Y軸は公転方向の反対側、Z軸は北向きに定義される。

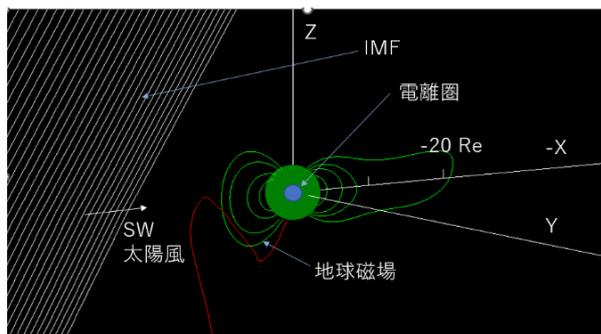
太陽風は高温のコロナプラズマが真空の惑星間空間に向かって熱膨張し、超音速となった磁化プラズマ流である。地球付近での平均的構造は、密度5AMU/cc、-X方向速度400km/sec、惑星間空間磁場(IMF)強度5nTである。

地球には地心の流体コアで生成される固有磁場が存在する。磁場の形状は、地表より上空では、双極子に近い。地球磁場の強度は、赤道地表で、30,000nTとなっている。太陽風、磁気圏領域では、凍結の原理が成立する。ここでは、電流は磁場の捻れ($\mathbf{J}=\text{rot}\mathbf{B}$)、電場は速度に等価($\mathbf{E}+\mathbf{V}\times\mathbf{B}=0$)となる。地球に到達した太陽風は、地磁気の閉じ込めに作用し、磁気圏が形成される。

電離圏は地球上層大気が太陽紫外線で電離した領域で、下からD、E、F層で構成される。F層ではまだ凍結の原理が成立するが、E層(高度100km)ではこれが破れ、伝導電流が形成される。伝導電流

は、沿磁力線電流(FAC)を介して磁気圏電流と接続され、磁気圏と電離圏には電磁的な結びつきが発生する。

太陽風、磁気圏、電離圏の間には、相互に結合がある。太陽風—磁気圏(S-M)相互作用では、まず磁気圏の閉じ込めに付随して、重要な構造の形成がある。超音速の太陽風は、地球前方のボーショックで亜音速となる。従って昼側地球磁気圏の周りは圧縮された亜音速太陽風流であり、この領域はマグネトシースである。マグネトシースと地球磁場の境界はマグネトポーズである。その生成場所は、地球前方で、10Reの距離になる。太陽風と磁気圏は、異なった起源を持つ磁化プラズマ同士の接触でもある。両者の境界面はセパラトリックスである。セパラトリックスは複数発生し、それらの交線をセパレーターと呼ぶ。セパレーターの両端にはヌルが存在し、此处ではプラズマの交換を伴うS-M相互作用が発生する。交換によって磁気圏に侵入したプラズマは電離圏プラズマと一部混合し、尾部赤道面(XY面Z=0)にプラズマシートを形成する。プラズマシートの南北高緯度側では、磁気圧がプラズマ圧より高く、ローブ



(第1図) 太陽風—磁気圏—電離圏系の概観

を形成する。ヌルーセパレーター構造とその上の S-M 相互作用は、IMF の向きに大きく依存する。

S-M 相互作用に伴い、磁気圏内では磁気圏対流が発生し、これに付随してダイナモ、FAC が形成される。この FAC が M-I 結合の主役である。

FAC は電離圏に供給され、衝突のある部分電離プラズマ中の伝導電流、Hall、Pedersen 電流系と接続される。これは電離圏対流の励起でもある。全体として対流の投影とも見えるが、FAC を省略し、単純に運動の投影とすると、磁気圏と電離圏のインピーダンスの違いを無視することになり、誤りに陥る。磁気圏と電離圏の間で発生するプラズマの交換では、磁気圏から電離圏にはプラズマの落下、その逆は極風がこれを荷う。地上からは（上向き）FAC はオーロラアークとして観測され、粒子落下は diffuse aurora として観測される。電離圏対流は単なる投影でない。磁気圏対流の境界条件であり、そのドライバーにもなり得る。

2 REPPU コードの構成

太陽風—磁気圏領域 (3~300 Re) は、MHD 方程式を適用する。これを数値的に解くスキームには、TVD スキームを用いる。FAC の計算精度を確保するため、MHD 方程式を双極子とそれからのずれに分離する。それでも TVD スキームを構成するための、固有ベクトルの解析解がある。MHD には磁気拡散モデルを導入する。しかし同時に数値拡散も存在し、この部分には不確実性が残る。

電離圏 (1Re) では、電流の保存則を適用する。1~3 Re は、双極子とする。解は共役残差法を適用し求める。ここで電気伝導度は圧力、温度、FAC の関数として与える。この関数系については、不確実性が残る。磁気拡散と電気伝導度は、MHD における 2 大不確実性であろう。

格子構造は 1 2 面体分割によって球面三角格子を作成し、これを高度方向に重ね、3 D 格子を作成する。1 2 面体の各面を 5 つの三角に分割したもの (60 三角) をレベル 1 とし、以下三角を 4 分割してレベルを一つずつ上げる。これで格子の集積点は発生しない。レベル 8 では、数値拡散は与えた拡散と同程度かそれ以下になると予想される。レベル 7, レベル 8 の格子数は、以下ようになる。総格子数は、revel7 では 71,271,560、revel8 では

383,387,160 となる。内部境界上の格子数、すなわち電離圏とカップルする格子数は、レベル 7 では 122,882、レベル 8 では 491,522 となる。またレベル 8 では、重ね合わせる球の数も、球面上で格子間隔が狭くなることに合わせ、増加させている。重ね合わせの際、中心をずらしながら、テイルの格子数を確保する。

MHD の内部境界条件(3 Re)は以下のように与える (Tanaka, 2000)。B 地表平行成分はノイマン条件、B 地表垂直成分は=0、V 磁場垂直成分は電離圏ポテンシャルから決定、V 磁場平行成分はノイマン条件、密度、圧力は V 磁場平行成分下向きの時ノイマン条件、上向きの時、極風で近似とする。極風の近似に際しては、極風の密度、圧力は given とし、磁場平行速度は、ノイマン条件から得られた圧力傾度を摩擦と釣り合わせて決める。電離圏ダイナミクスを解いていないので、極風の与え方は近似的となるが、REPPU コードで可能な範囲では、最良の方法であろう。これらの境界条件の内、B 地表平行成分が、FAC を与える。

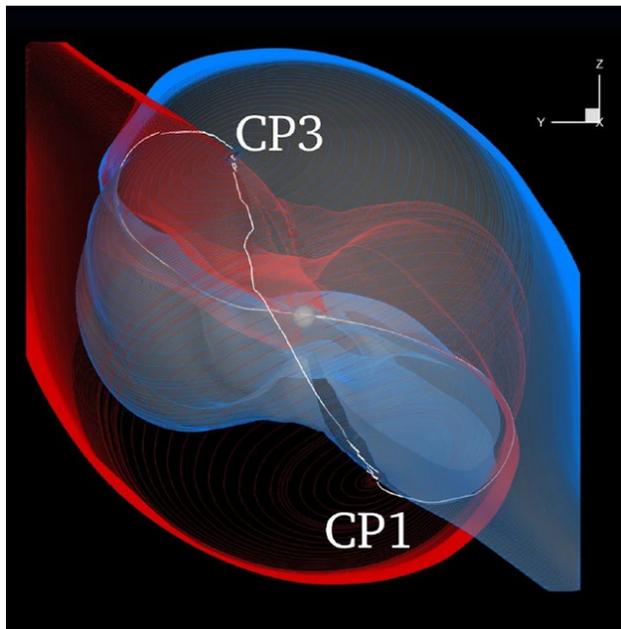
3 IMF 北の時の解

現在の REPPU コードでは、レベル 8 までが稼働している。このうちレベル 7 までは、おおむね完成していると言える。レベル 8 はチェックのための計算量が多くなり、まだ十分にモデルは確立していない。今回の応募ではこのレベル 8 の開発を進めた。その結果、北向き IMF の時の静穏な磁気圏については、レベル 8 でもある程度確立した解が得られるようになった。しかし南向きの時の解、特にサブストームについては、レベル 8 はまだ確立するには至っていない。レベル 8 では数値拡散が少なくなるので、この影響が如実に表れる。逆に見ればレベル 7 までのモデルで得られたサブストーム解は、数値拡散に大きく影響されていると言える。

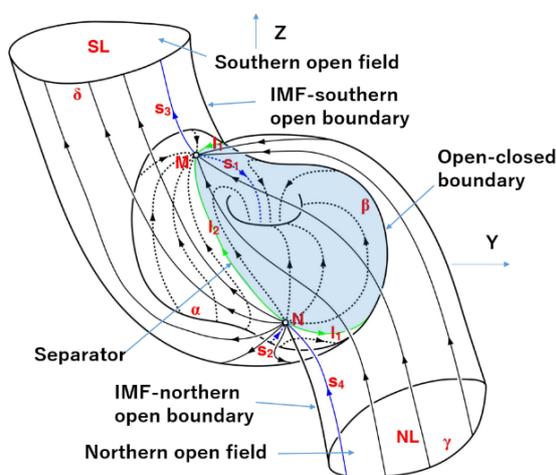
3.1 IMF 北の時の基本的なトポロジー

REPPU コードの主目的はサブストームの研究であるが、北向き IMF の時について、むしろ新しい解が多く得られている。北向き IMF の時に発生するオーロラには、sun-aligned arc (Tanaka et al.,

2017)、fan arc (tanaka et al., 2019)、theta aurora (Tanaka et al., 2022)があり、これらはREPPUコードレベル7で再現されている。中でもハイライトになるのが、テーターオーロラである。その説明のために、まず第2図に IMF 北の時レベル7で得られたヌルセパレーター構造を可視化した例を示す。ここでCP3とCP1の2つのヌルから生成されるセパレーターが、青面と赤面である。青面は北半球の太陽風-磁気圏境界と南半球尾ローブプラズマシート境界を形成し、南半球極冠境界につながる。赤面は同様に反対半球を形成する。これらはヌルから広がる Σ 面でもある。青面と赤面の交線が白で描かれているセパレーターである。



(第2図) IMF 北の時のヌルセパレーター構造



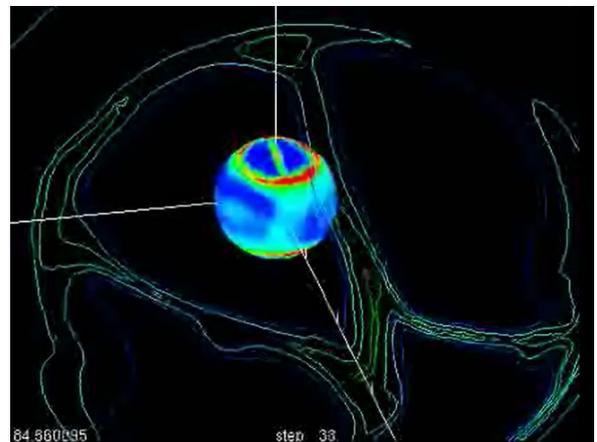
(第3図) ポテンシャル場の重ね合わせ

第3図に一樣な IMF と双極子磁場を重ね合わせ

た時に現れるトポロジーを示す(Dorelli et al., 2007)。このような簡単に作成された磁場構造に、基本的なトポロジー要素が全て現れるのは驚異的であろう。第3図MとNは第2図CP3とCP1に当たる。ここで、面上に磁力線が集まるヌルを+、発散するヌルを-とする。 $\alpha \sim \gamma$ はセパレーター、sはヌルに接続するspine、SLとNLは南北ローブである。昼側と夜側に、2つのセパレーター (I2, I1) が現れる。第2図のシミュレーションで再現したトポロジーは、この真空場のトポロジーと同一であることが分かる。

3.2 テーターオーロラのトポロジー

北向き IMF の時のトポロジーを示したが、このような思考が正しい決定的な証拠が、テーターオーロラである。テーターオーロラは地球規模で丁度ギリシャ文字の θ のような構造を示す、奇妙な非定常オーロラである。これは長い間ミステリーとして知られている現象であった。このオーロラの発生過程は、トポロジーから説明できる。

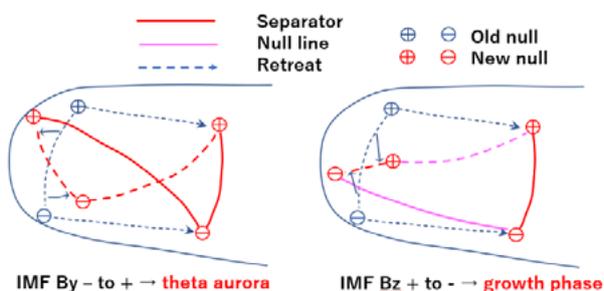


(第4図) 3 Re に投影したテーターオーロラ

IMFBy を切り替えることによって、テーターオーロラをシミュレーションで再現した例を第4図に示す。円環状の赤い部分はオーロラオーバルであり、これはプラズマシートの投影構造(粒子落下域)として、通常見られる構造である。定常状態では、極冠は開磁場で占められた単連結領域で、磁気圏ではローブ(第3図で β と γ の間の相当)に繋がる。IMFBy 切り替えを伴う第4図では、極冠(中央の青い部分)を貫くようにバーが出現して、全体が θ の形状を示している。テーターオーロラが(この場合

朝方から夕方) 移動して行く非定常構造として再現される。等高線は圧力分布の YZ 断面である。プラズマシートのキック構造が見られる。

シミュレーションから、第4図のテーターオーロラは、第5図(左)に示した IMF が-Y から+Y にスイッチした時のヌルのダイナミクスから説明されることが示される。この図で、ヌルは、旧 IMF に対応する後退ヌルと、新 IMF に対応する新規ヌルの4つになっており、それに対応してセパレーターとヌルが生成するセパレーターも4つになる。ここでセパレーターは異符号のヌル同士を結ぶことが出来る。それゆえ極冠も片半球2つ、合計で4つになり、バーの上空は閉磁場になって、テーターオーロラの形成に繋がる。



(第5図) IMF スイッチに伴うヌルの変動

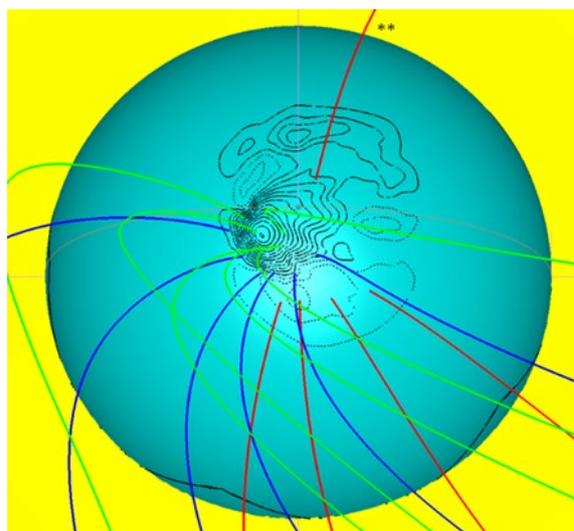
バーの移動を引き起こすのは、夜間セパレーター上でのセパレーターリコクションである。これによって旧極冠が縮小し、新極冠が拡大する。

3.3 レベル8によるトポロジーの高精度計算

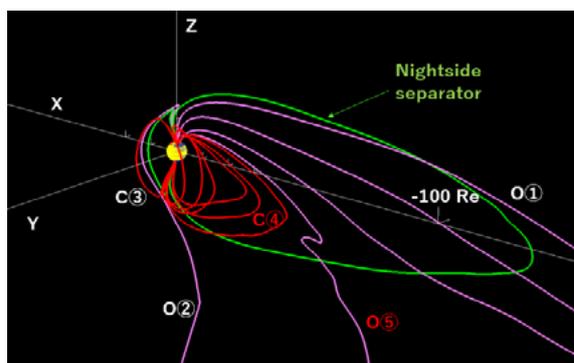
今回の応募研究では、レベル8により IMF 北の時の S-M-I 結合系の構造をさらに高精度で計算し、レベル8の有効性を追求した。第6図に3Reに投影した、北半球電離圏のポテンシャルを示す。ここで実線は正、破線は負のポテンシャル等高線であり、等高線は流線と見なせる。太陽方向は左である。この図には5つのセルが現れている。それらは夕方中央のローブ+round merging セル(実線)、それより小さい朝方の reciprocal セル(破線)、夜側の夜間セル(破線)、低緯度側の2ルの粘性セルである。このうち、ローブセルはローブ+round merging セルの中心部分で閉磁場のみから構成される。Merging セル縁の部分で、開磁場と閉磁場がある。夜間セルも

同様に開磁場と閉磁場がある。reciprocal セルと粘性セルは閉磁場のみから成り立つ(Watanabe et al., 2018)。

このように北向き IMF の時の電離圏対流は IMF 南の時の2セルより複雑である。この複雑さは磁気圏構造にも及ぶ。ローブセルがカスプリコネクションによって駆動されるのは良く知られているが、round-merging セルが interchange reconnection により駆動される過程は複雑であり、良く知られてはいない(Watanabe et al., 2018)。一般に北向き IMF の時は磁気圏、電離圏は静穏であるので、構造も単



(第6図) 北向き IMF の時の電離圏対流

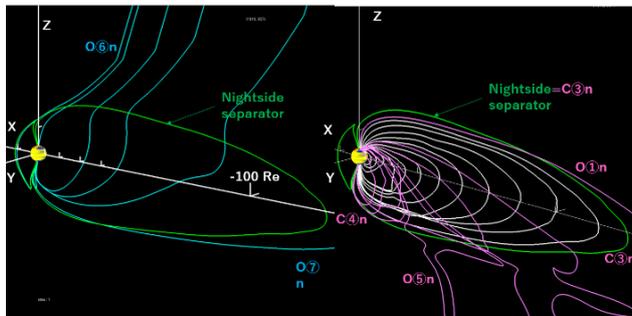


(第7図) round merging セルの励起メカニズム

純であろうと錯覚し易い。IMF 北向きの時の複雑性は、トポロジーの複雑性に起因している。第7図に、round merging セルの駆動機構を示す。IMF は北半球で O1とカスプリコネクションを経て、O2となる。これがさらに夜間の閉磁場 C4と interchange reconnection を経て、O5と C3になる。C3が C4に閉磁場対流で、O5が O1に開磁場対流で移動すれば、過不足ない対流ループが構成される。ここ

で赤い磁力線の南半球の足元が reciprocal セルである。

夜間セルはプラズマシートと結びついた対流であるが、これもかなりの複雑性を示す(Tanaka et al., 2024)。これらの構造はシミュレーションでのみ考察可能な構造であろう。第8図に夜間セルの駆動機



(第8図) 夜間セルの励起メカニズム

構を示す。O①n と O⑦n は夜間セパレーターリコネクションを起こす。できた閉磁力線はプラズマシート(白線)を通過して、C④nに達する。C④nとIMFとの南半球カスプリコネクションによって、O⑤nとO⑥nが生成される。このリコネクションは、ダンジェー型である。O⑤nはO①nにO⑥nはO⑦nに開磁場対流で移動する。

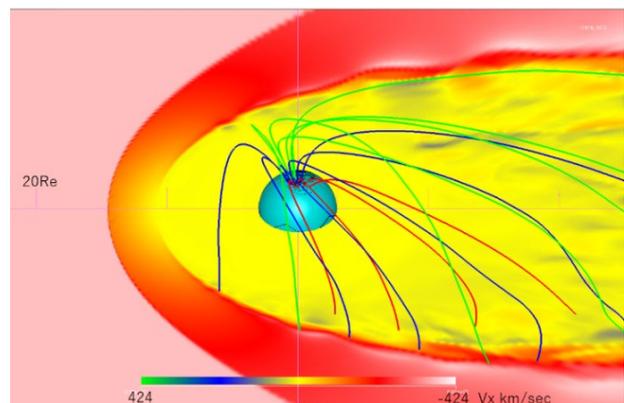
このように、北向きIMF下の対流では、リコネクションについても、カスプリコネクション、interchange リコネクション、セパレーターリコネクションなどが多様に作用している。

第6図にカラーで描かれた線は、磁力線である。これらを磁気圏赤道面に投影した様相を第9図に示す。第9図で shading は $-V_x$ を描いている。ピンクの部分が太陽風、赤の部分がマグネトシース、黄色の部分が磁気圏内である。テイルの地球に向かう流れ(青)は細い構造となっているが、これはBBF(Bursty bulk flow)と呼ばれる構造である。

第9図で太陽風と磁気圏の間に太陽風よりやや低速の薄い領域があるが、これはLLBL(低緯度境界層)である。第6図と比べると、LLBLはロープセルと round merging セルの反太陽向き流の投影であることが分かる。このうち緑は開磁場、青は閉磁場である。第6, 9図から、LLBLはロープ、round-merging セルの投影であることが分かる。従ってLLBLは反太陽向き対流の通り道である。LLBLについてはここではKH(Kelvin-Helmholtz)不安定がカスケードし、それによるプラズマ混合作

用によって、太陽風侵入領域を形成するという錯誤が広く出回っている。REPPUの結果では、LLBLは対流の通り道に過ぎない。観測にはこのような錯誤を訂正する能力がないことが、磁気圏物理学の限界を形成している。これは全体を見ずローカルを考えるからである。磁気圏物理学は要素の科学でなく複合系の科学であることが、錯誤の根本的要因である(Tanaka, 2007)。

粘性セルは赤の磁力線で分かるように磁気圏内部に投影される。旧来からこのセルはLLBL内の等価的粘性によって励起されると信じられてきた。呼称はこれを引き継いだものであるが、この報告では、励起機構そのものは粘性でない。LLBLには確かにKH波動が励起される。この波動は磁気圏内部まで深く浸透する。また波源は-X方向に移動する。これらの要因で、粘性セルが励起されると推定される。



(第9図) 北向きIMF時の赤道面流とセルの投影

4 IMF南の時の解

昔から今に至るまで、サブストームは磁気圏物理学の最重要課題である。全てのシミュレーションモデルにとって、サブストームの再現が最終目標である。ここで報告されるREPPUのサブストーム解についてはレベル7までの結果になるが、REPPUコードによって得られたサブストームは、これまで主流の理論とはかなり異なったものとなっている。

サブストームについては、レベル8はまだ確立するには至っていない。これはサブストームについて、レベル7の解の延長に位置するようなレベル8の解がまだ再現されていないということである。レベル8では数値拡散が少なくなるので、この効果が大きいと思われる。逆に見ればレベル7で得られたサブストーム解には、まだ数値拡散が影響している

ことになる。ただし数値拡散の効いた解を誤りと断定している訳ではない

4.1 成長相

サブストームオンセットは quiet arc の赤道側から始まる。Quiet arc (明るく輝くオーロラの前兆のような東西に長く薄いオーロラ) の理解なしでは、サブストームの理解もない。REPPU で再現される quiet arc は、上向き FAC からの置き換えであり、対流シアーと結合した quiet arc である。従ってこの quiet arc の発生には、成長相 (growth phase, オンセット前の準備期間のように見える) の対流の発展が不可欠である。第5図右 (IMF 南北成分の切り替えの場合) のトポロジーでは、ヌルの後退時に、成長相が再現できる。この時には、FAC を電離圏に接続するに必要なシアーも再現できる。quiet arc に対しては面状シアーが要求される (Tanaka et al., 2021a)。

一般に quiet arc は粒子散乱で発生すると思われるが、アークが散乱で発生するか? という疑問がある。quiet arc が内部磁気圏で粒子散乱によって発生するという思い込みは、その電離圏での発生位置が、内部磁気圏からの投影場所であるという観測的推定に基づく (+粒子異方性の解析)。ここでは成長相の進展における投影構造の変化は余り考えられていない。しかし、growth phase の thinning (プラズマシートが薄くなる) がもたらす投影の変化を軽視してはいけない。これは HD (ハラング不連続、成長相中に夕方で発生する特異な地磁気変動) の原因とも関連している。シミュレーションでは、quiet arc の equatorward shift、オンセットアークの poleward expansion に伴い、かなりドラスチックな投影構造の変化が起こることが示される。観測の解釈では、正確な磁力線トレースがなされているのかという点に疑問がある。

4.2 オンセット

サブストーム最大の謎は、オンセットの不連続性がなぜ生まれるかであろう。トポロジーは不変でも、磁気圏—電離圏対流によって磁気圏磁場は変形が進む。一定のトポロジー下では、変形は無限に可能

ではなく、トポロジー下の変形の限界が存在する場合もある。この時は成長相進展に伴い、トポロジーの変更が発生し、新ヌル (NENL) の発生、すなわちサブストームオンセットに至るとというのが REPPU シミュレーションの結果である (Tanaka et al., 2021a)。

一般にはオンセット FAC には CW (current wedge) が想定されるが、REPPU ではオンセット FAC の起源は、地球近傍ダイナモである。プラズマシート中を伝搬する DF (dipolarization front) に続いて地上でオンセットスポットが出現するというシーケンスを再現するシミュレーションは、今のところ REPPU だけであろう。これには REPPU での正確な M-I 結合が効果を上げている。特に V 磁場垂直成分が、電離圏から磁気圏まで数値キックなしに連続して伝搬することが必要である。オンセット FAC の電離圏接続には線状のシアーが必要である (Tanaka et al., 2021b)。これを REPPU で実現する理由は、CW に相当する電流 (=磁場変動) が、対流遷移と同期して発生するという、MHD の必然性による。HD の崩壊はこれに関連するであろう。しかし対流遷移の詳細は、未だに知られていない。特に線状シアーの発生過程は未解決であろう。テイルでの NENL の開始とともに、電離圏まで到達する局所的な運動変化が必要になる。リコネクションの再現だけなら、グローバル粒子モデルでも可能になってきているが、これでは電離圏の様相や quiet arc との相対関係までは、まだ再現されていない。

現在のサブストーム研究では、一般的にトポロジーの考察はなく、反平行リコネクションの発生がサブストームのオンセットとなっている。これに対して REPPU シミュレーションでは、対流システム全体の遷移がオンセットである。第5図右のサブストームを発生させるトポロジー変動では、4つのヌルをセパレーターのみでは結ばず、ヌルラインが必要となる。このため、第5図右を第5図左と比べた時、右ではテイルに新たなヌルが発生する可能性があるところが大きな相違である。対流の遷移、新たなヌル、オンセット FAC は同時に発生しなければならない。

レベル8でサブストームを再現することは、現在最大の目標である。これには、数値解析における散逸とその分布を理解することが必要であろう。

ここで問題にするサブストームは、あくまでも標

準的な IMF と太陽風でトポロジー変化によって励起される変動である。サブストームに対して似たような現象として地磁気嵐がある。地磁気嵐は強ドライバーの生み出す現象で、サブストームとは通点もあるが、別の研究対象と思われる。REPPU では強ドライバーに対する対応は余り考慮されていない。

5 結論

REPPU コードレベル8の開発を進めた。これから北向き IMF の時の磁気圏トポロジーについて、詳細な構造を再現することが出来た。電離圏では5つのセルが再現された。LLBL は round merging セルとローブセル上の、反太陽向き流が投影されている領域であることが分かった。粘性セルは、KH 不安定波の磁気圏内部への侵入によって励起される。IMF 南向きの時のサブストームの解については、レベル8ではまだ完全な解が得られていない。これには今後も挑戦していきたい。

参考文献

Dorelli, J. C., A. Bhattacharjee, and J. Raeder (2007), Separator reconnection at Earth's dayside magnetopause under generic northward interplanetary magnetic field conditions, *J. Geophys. Res.*, 112, A02202, doi:10.1029/2006JA011877.

Tanaka, T. (2000), The state transition model of the substorm onset, *J. Geophys. Res.*, 105, 21,081–21,096, doi:10.1029/2000JA900061.

Tanaka, T. (2007), Magnetosphere-ionosphere convection as a compound system, *Space Sci. Rev.*, 133, 1, doi:10.1007/s11214-007-9168-4.

Tanaka, T., T. Obara, M. Watanabe, S. Fujita, Y. Ebihara, and R. Kataoka (2017), Formation of the Sun-aligned arc region and the void (polar slot) under the null-separator structure, *J. Geophys. Res. Space Physics*, 122, doi:10.1002/2016JA023584.

Tanaka, T., Obara, T., Watanabe, M., Fujita, S., Ebihara, Y.,

Kataoka, R., & Den, M. (2019). Magnetosphere-ionosphere convection under the due northward IMF. *Journal of Geophysical Research: Space Physics*, 124. <https://doi.org/10.1029/2019JA026547>

Tanaka, T., Ebihara, Y., Watanabe, M., Den, M., Fujita, S., Kikuchi, T., et al. (2021a). Roles of the M-I coupling and plasma sheet dissipation on the growth-phase thinning and subsequent transition to the onset. *Journal of Geophysical Research: Space Physics*, 126, e2021JA029925. <https://doi.org/10.1029/2021JA029925>

Tanaka, T., Ebihara, Y., Watanabe, M., Den, M., Fujita, S., Kikuchi, T., et al. (2021b). Development of the substorm as a manifestation of convection transient. *Journal of Geophysical Research: Space Physics*, 126, e2020JA028942. <https://doi.org/10.1029/2020JA028942>

Tanaka, T., Ebihara, Y., Watanabe, M., Fujita, S., Nishitani, N., & Kataoka, R. (2022). Interpretation of the theta aurora based on the null-separator structure. *Journal of Geophysical Research: Space Physics*, 127, e2022JA030332. <https://doi.org/10.1029/2022JA030332>

Tanaka, T., Ebihara, Y., Watanabe, M., Fujita, S., & Kataoka, R. (2024). Multiple convection cells induced by in-front and off-front interactions between the obliquely northward IMF and the geomagnetic field. *Journal of Geophysical Research: Space Physics*, 129, e2023JA031994. <https://doi.org/10.1029/2023JA031994>

Watanabe, M., Fujita, S., Tanaka, T., Kubota, Y., Shinagawa, H., & Murata, K. T. (2018). A magnetohydrodynamic modeling of the interchange cycle for oblique northward interplanetary magnetic field. *Journal of Geophysical Research: Space Physics*, 123. <https://doi.org/10.1002/2017JA024468>

Camphor3 (システム A) 運転状況 (2024年10月～2025年9月)

1) 保守作業に伴うサービス休止およびシステムダウン障害発生状況

保守作業に伴うサービス休止

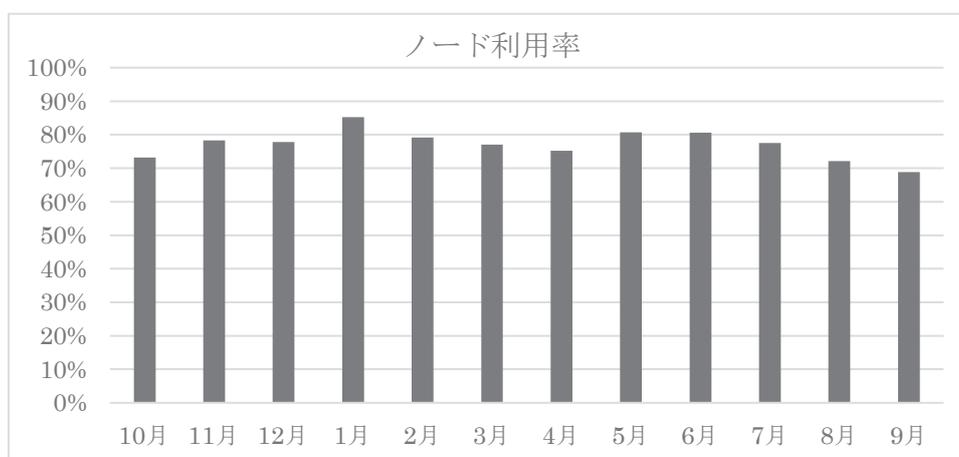
保守開始日時	サービス再開日時	保守時間[h]
2024/12/02 09:00	2024/12/05 10:00	73:00
2025/03/27 09:00	2025/04/03 10:00	169:00
2025/06/10 09:00	2025/06/13 09:00	72:00
2025/09/22 09:00	2025/09/26 10:00	97:00

システムダウン障害発生状況

障害発生日時	サービス再開日時	ダウン時間[h]
なし		

2) サービス状況

	サービス時間[h]	ジョブ					
		処理件数	経過時間[h]	占有時間[h]	CPU時間[h]	平均稼動ノード数	ノード利用率
10月	744:00	237,728	540,633	131,199,475	54,570,985	1123.3	73.2 %
11月	720:00	344,864	1,019,548	133,835,403	53,525,680	1123.5	78.3 %
12月	671:00	318,242	745,200	117,406,880	46,836,819	1082.9	77.8 %
1月	744:00	432,407	707,354	148,482,352	58,448,475	1124.7	85.2 %
2月	672:00	246,506	640,423	132,205,199	50,024,286	1127.1	79.2 %
3月	633:00	109,469	511,320	120,491,426	46,770,627	970.0	77.0 %
4月	662:00	84,340	319,596	77,511,847	30,931,413	721.3	75.2 %
5月	744:00	107,046	435,686	105,010,413	45,304,516	825.8	80.7 %
6月	648:00	81,035	442,683	106,709,243	47,304,525	893.8	80.6 %
7月	744:00	211,411	580,466	121,696,866	52,135,508	995.2	77.5 %
8月	744:00	196,066	676,712	128,057,858	55,807,817	1091.1	72.1 %
9月	623:00	277,096	686,048	96,135,714	38,278,914	1072.7	68.8 %
計	8349:00	2,646,210	7,305,669	1,418,742,676	48,328,297	1,012.6	77.1 %



- 占有時間 = 合計(経過時間×占有コア数)
- 平均稼動ノード数 = 電源 ON 状態のノード数の月平均 (10 分間隔のサンプリングデータより算出)
- ノード利用率 = 稼動ノードに対するジョブが実行されているノードの割合

LaurelB (システム B) 運転状況 (2024 年 10 月 ~ 2025 年 9 月)

1) 保守作業に伴うサービス休止およびシステムダウン障害発生状況

保守作業に伴うサービス休止

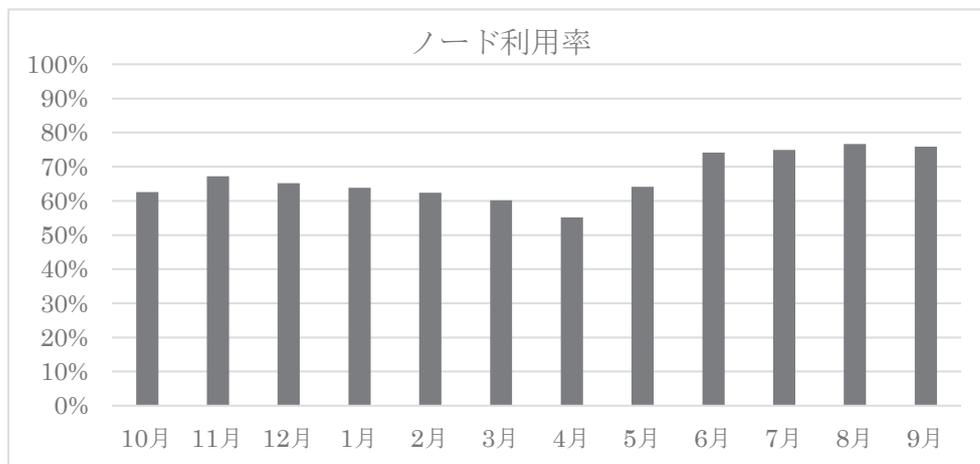
保守開始日時		サービス再開日時		保守時間[h]
2024/12/02	09:00	2024/12/05	10:00	73:00
2025/03/27	09:00	2025/04/03	10:00	169:00
2025/06/10	09:00	2025/06/13	09:00	72:00
2025/09/22	09:00	2025/09/26	10:00	97:00

システムダウン障害発生状況

障害発生日時	サービス再開日時	ダウン時間[h]
なし		

2) サービス状況

	サービス時間[h]	ジョブ					
		処理件数	経過時間[h]	占有時間[h]	CPU時間[h]	平均稼動ノード数	ノード利用率
10月	744:00	103,021	753,186	34,769,706	14,870,414	369.1	62.6 %
11月	720:00	915,992	600,861	36,084,691	15,325,138	373.3	67.2 %
12月	671:00	186,576	482,169	31,454,350	13,530,642	359.8	65.2 %
1月	744:00	272,043	634,511	36,389,841	16,248,605	372.6	63.8 %
2月	672:00	130,040	616,976	31,813,767	13,744,219	373.0	62.4 %
3月	633:00	124,930	517,980	28,885,223	11,815,933	320.2	60.2 %
4月	662:00	126,894	379,057	21,544,813	8,783,999	302.0	55.2 %
5月	744:00	171,840	518,972	28,560,409	11,893,319	293.2	64.1 %
6月	648:00	552,195	499,804	31,608,564	14,156,410	306.9	74.1 %
7月	744:00	506,088	867,878	41,899,397	18,042,975	366.5	74.9 %
8月	744:00	659,863	1,147,729	42,256,993	18,345,644	367.8	76.7 %
9月	623:00	683,177	608,286	34,825,793	14,637,847	351.2	75.9 %
計	8349:00	4,432,659	7,627,409	400,093,547	171,395,145	346.3	66.9 %



- 占有時間 = 合計(経過時間×占有コア数)
- 平均稼動ノード数 = 電源 ON 状態のノード数の月平均 (10 分間隔のサンプリングデータより算出)
- ノード利用率 = 稼動ノードに対するジョブが実行されているノードの割合

Cinnamon3 (システム C) 運転状況 (2024 年 10 月 ~ 2025 年 9 月)

1) 保守作業に伴うサービス休止およびシステムダウン障害発生状況

保守作業に伴うサービス休止

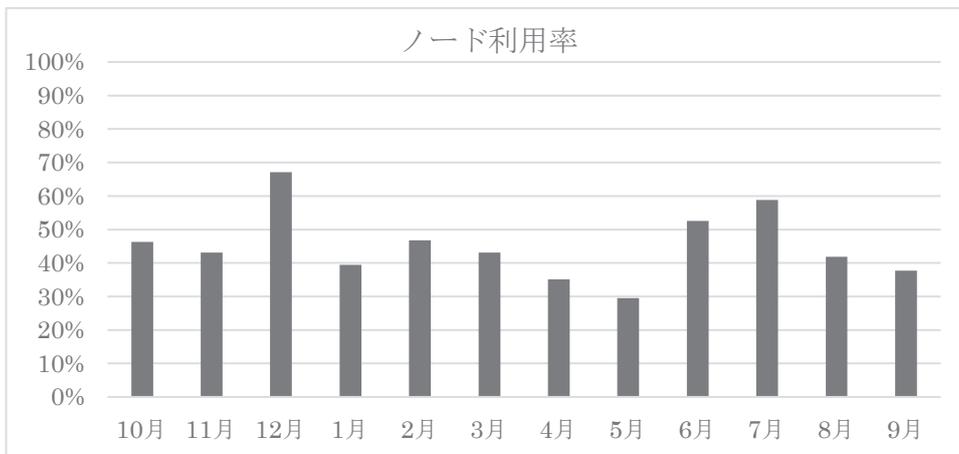
保守開始日時	サービス再開日時	保守時間[h]
2024/12/02 09:00	2024/12/05 10:00	73:00
2025/03/27 09:00	2025/04/03 10:00	169:00
2025/06/10 09:00	2025/06/13 09:00	72:00
2025/09/22 09:00	2025/09/26 10:00	97:00

システムダウン障害発生状況

障害発生日時	サービス再開日時	ダウン時間[h]
なし		

2) サービス状況

	サービス時間[h]	ジョブ					
		処理件数	経過時間[h]	占有時間[h]	CPU時間[h]	平均稼動ノード数	ノード利用率
10月	744:00	3,249	16,146	879,757	254,237	16.0	46.3 %
11月	720:00	5,953	39,803	793,284	203,525	16.0	43.1 %
12月	671:00	7,449	75,470	1,214,620	463,297	15.5	67.1 %
1月	744:00	6,025	50,799	785,263	194,099	16.0	39.4 %
2月	672:00	6,286	68,704	738,394	184,203	15.8	46.8 %
3月	633:00	5,126	79,794	769,859	248,010	13.7	43.1 %
4月	662:00	1,630	13,486	489,412	120,194	13.4	35.1 %
5月	744:00	11,045	15,615	468,563	180,797	13.9	29.5 %
6月	648:00	1,273	50,949	727,648	188,153	13.3	52.6 %
7月	744:00	14,797	114,277	1,204,308	225,493	16.0	58.8 %
8月	744:00	3,585	33,947	807,019	187,872	16.0	41.9 %
9月	623:00	1,367	9,376	572,305	139,398	15.4	37.7 %
計	8349:00	67,785	568,366	9,450,432	2,589,278	15.1	45.1 %



- 占有時間 = 合計(経過時間×占有コア数)
- 平均稼動ノード数 = 電源 ON 状態のノード数の月平均 (10 分間隔のサンプリングデータより算出)
- ノード利用率 = 稼動ノードに対するジョブが実行されているノードの割合

Gardenia (システム G) 運転状況 (2024 年 10 月 ~ 2025 年 9 月)

1) 保守作業に伴うサービス休止およびシステムダウン障害発生状況

保守作業に伴うサービス休止

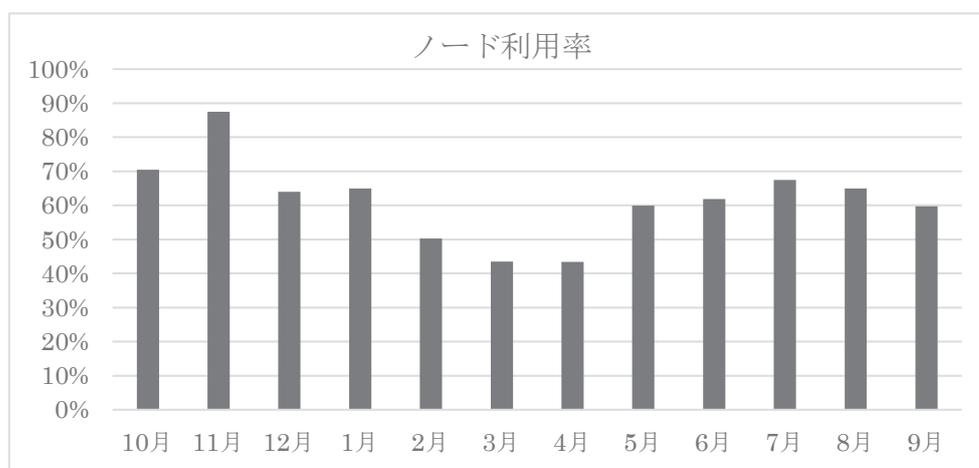
保守開始日時		サービス再開日時		保守時間[h]
2024/12/02	09:00	2024/12/05	10:00	73:00
2025/03/27	09:00	2025/04/03	10:00	169:00
2025/06/10	09:00	2025/06/13	09:00	72:00
2025/09/22	09:00	2025/09/26	10:00	97:00

システムダウン障害発生状況

障害発生日時	サービス再開日時	ダウン時間[h]
なし		

2) サービス状況

	サービス時間[h]	ジョブ					
		処理件数	経過時間[h]	占有時間[h]	CPU時間[h]	平均稼動ノード数	ノード利用率
10月	744:00	6,046	21,775	878,530	65,644	15.6	70.5 %
11月	720:00	7,510	25,652	1,057,354	83,055	16.0	87.5 %
12月	671:00	20,840	17,840	710,279	56,945	15.0	64.0 %
1月	744:00	6,137	19,396	860,558	92,036	16.0	65.0 %
2月	672:00	3,462	15,317	571,753	69,664	15.9	50.3 %
3月	633:00	3,109	13,529	445,108	57,982	13.8	43.5 %
4月	662:00	3,659	13,975	457,358	55,239	15.2	43.4 %
5月	744:00	5,062	17,253	757,966	109,210	15.7	59.9 %
6月	648:00	4,946	12,403	658,745	51,331	14.7	61.9 %
7月	744:00	7,683	16,160	892,912	54,622	16.0	67.5 %
8月	744:00	3,914	16,171	873,024	51,509	16.0	65.0 %
9月	623:00	3,310	15,868	630,079	33,478	15.4	59.7 %
計	8349:00	75,678	205,339	8,793,666	780,715	15.4	61.5 %



- 占有時間 = 合計(経過時間×占有コア数)
- 平均稼動ノード数 = 電源 ON 状態のノード数の月平均 (10 分間隔のサンプリングデータより算出)
- ノード利用率 = 稼動ノードに対するジョブが実行されているノードの割合

センター利用による研究成果

—2024 年度計算機利用結果報告書から—

【1005 知能情報学】

1. Takashi Morita : Positional Encoding Helps Recurrent Neural Networks Handle a Large Vocabulary : Transactions on Machine Learning Research, pp.PtnwXd13SF -, 2024
2. Shiori Hironaka, Mitsuo Yoshida, Kazuyuki Shudo : Comparing User Activity on X and Mastodon : 2024 IEEE International Conference on Big Data, pp.2967 - 2972, 2024

【2201 社会システム工学・安全システム】

3. M. Fujii : Observation and Analysis of Anomalous Terrestrial Diffraction as a Mechanism of Electromagnetic Precursors of Earthquakes : Radio Science, Vol.59, No.e2023RS007888, 2024

【2202 自然災害科学】

4. Anatoly Petukhin, Percy Galvez, Paul Somerville, Jean-Paul Ampuero, P. Martin Mai, Arben Pitarka, Kunikazu Yoshida, and Kojiro Irikura : Insights into Slip-Rate Time Functions, Rupture Parameter Correlations, and Ground Motions from Validated Multicycle Earthquake Ruptures : Bulletin of the Seismological Society of America, 2025
5. Asano, K and T. Iwata : Source Rupture Process of the MW 6.2 Earthquake in the Noto Peninsula, central Japan, on May 5, 2023 : Earth, Planets and Space, Vol.77, No.54, pp.1 - 15, 2025

【4103 数学一般(含確率論・統計数学)】

6. Kengo Nakai : Data-driven modeling from biased small training data using periodic orbits : Differential Equations for Data Science 2025, 2025
7. Natsuki Tsutsumi, Kengo Nakai, and Yoshitaka Saiki : Data-driven ODE modeling of the high-frequency complex dynamics via a low-frequency dynamics model : Physical Review E, Vol.111, No.1, pp.014212:1~6, 2025

【4305 原子・分子・量子エレクトロニクス・プラズマ】

8. Yoshiro Takahashi : Precision measurement with ultracold ytterbium atoms in an optical lattice for new boson search : The 28th International Conference on Atomic Physics (ICAP2024) , 2024
9. Yoshiro Takahashi : High-resolution laser spectroscopy of ultracold atoms in an optical lattice for quantum simulation and quantum sensor for new physics : 26th International Conference on Spectral Line Shapes (ICSLS 2024), 2024
10. T. Ishiyama, H. Kawase, K. Ono, T. Takano, A. Sunaga, Y. Takahashi : Precision Spectroscopy of an Inner-Shell Orbital Clock Transition in Neutral Ytterbium Atoms : International Symposium on Creation of Advanced Photonic and Electronic Devices, 2024
11. 石山泰樹, 川瀬北斗, 小野滉貴, 高野哲至, 砂賀彩光, 山本康裕, 田中実, 高橋義朗 : イッテルビウム原子の新時計遷移の精密同位体シフト測定による新粒子探索 : 日本物理学会 第79回年次大会 (2024年), 2024
12. Taiki Ishiyama, Hokuto Kawase, Koki Ono, Tetsushi Takano, Ayaki Sunaga, Yasuhiro Yamamoto, Minoru Tanaka, Yoshiro Takahashi : Precise isotope shift measurement of a new clock transition in ytterbium atoms for new boson search : WE-Heraeus-Seminar 'Precision Atomic Physics Experiments to Probe for New Physics', 2024
13. 石山泰樹, 川瀬北斗, 小野滉貴, 高野哲至, 高橋義朗 : 光格子中原子の精密同位体シフト周波数計測による新物理探索 : 京都大学卓越ワークショップ 2024, 2024
14. 石山泰樹, 川瀬北斗, 小野滉貴, 高野哲至, 高橋義朗 : 新たな時計遷移を用いた量子センサー〜極低温原子で基礎物理の謎に迫る〜 : e-卓越カフェ, 2025

15. T. Ishiyama, H. Kawase, K. Ono, T. Takano, Y. Takahashi : Investigation of Basic Properties of an Inner-shell Orbital Clock Transition in Neutral Ytterbium Atoms : International Symposium on Creation of Advanced Photonic and Electronic Devices 2025, 2025
 16. Taiki Ishiyama, Koki Ono, Hokuto Kawase, Tetsushi Takano, Reiji Asano, Ayaki Sunaga, Yasuhiro Yamamoto, Minoru Tanaka, Yoshiro Takahashi : Orders-of-magnitude improved precision spectroscopy of an inner-shell orbital clock transition in neutral ytterbium : arXiv:2505.04154 (2025), 2025
- 【4401 固体地球惑星物理学】
17. 小濱瑞希・風間卓仁 : 有限要素法を用いた地上重力変化の数値計算 : 2015 年桜島ダイク貫入イベントを例に : 日本測地学会講演要旨集, 2024
 18. 小濱瑞希・風間卓仁・西山竜一 : Lagrange 形式に基づく地上重力変化の数値計算 : 球状圧力源変動を例に : 日本地球惑星科学連合大会予稿集, 2024
 19. 西上直志、風間卓仁 : 2011 年東北地方太平洋沖地震の余効変動に伴う地上重力変化のモデル計算: 予備的解析: 日本地球惑星科学連合 2024 年大会予稿, 2024
 20. 西上直志、風間卓仁 : 粘弾性変形の時間変化における自己重力の効果 : 日本測地学会第 142 回講演会要旨集, 2024
 21. 八木優人、藤浩明、高橋太 : Stably Stratified Layer in Mercury' s Outer Core: Insights from Axial Symmetry of its Intrinsic Magnetic Field and the Lowes Radius : 日本地球惑星科学連合 2024 年大会, 2024
 22. 八木優人、藤浩明、高橋太 : 表皮効果が水星固有磁場に与える影響 : ダイナモシミュレーションによる解析 : 地球電磁気・地球惑星圏学会, 2024
 23. 西上直志、風間卓仁 : 粘弾性変形の時間発展における万有引力の効果 : 日本地球惑星科学連合 2025 年大会予稿, 2025
- 【4402 気象・海洋物理・陸水学】
24. Seika Tanji, Tetsuya Takemi, Guangdong Dua : Impacts of building modifications on the turbulent flow and heat transfer in urban surface boundary layers : J. Wind Eng. Ind. Aerod., Vol.254, No.105906, 2024
 25. Seika Tanji, Tetsuya Takemi, Guangdong Dua : Impacts of building modifications on the turbulent flow and heat transfer in urban surface boundary layers : AGU fall meeting 2023, 2023
 26. Seika Tanji : Estimating the effect of snowdrift formation on turbulent airflow and subsequent snowdrift around three types of fences : J. Wind Eng. Ind. Aerod., Vol.261, No.106089, 2025
 27. Seika Tanji : Estimating the effect of pre-existing snowdrift on turbulent airflow and subsequent snowdrift in the numerical simulation : EGU General Assembly 2025, 2025
- 【4601 物理化学】
28. Ravindra Krushnaji Raut, Satoshi Matsutani, Fuxing Shi, Shuta Kataoka, Margareta Poje, Benjamin Mitschke, Satoshi Maeda, Nobuya Tsuji, Benjamin List : Catalytic asymmetric fragmentation of cyclopropanes : Science, Vol.386, No.6718, pp.225 - 230, 2024
 29. Lily M. Hunnisett et al. : The seventh blind test of crystal structure prediction: structure generation methods : Acta Cryst., Vol.B80, pp.517 - 547, 2024
 30. Lily M. Hunnisett et al. : The seventh blind test of crystal structure prediction: structure ranking methods : Acta Cryst., Vol.B80, pp.548 - 574, 2024
 31. 大澤弘和, 北村勇吉, 鳥居肇 : 水溶性高分子ポリビニルアルコールにおける非晶部のモデル構築と相転移の分子論的探究 : 第 38 回分子シミュレーション討論会講演要旨集, 2024
 32. 大澤弘和, 北村勇吉, 鳥居肇 : 水溶性高分子ポリビニルアルコールの相転移挙動と添加剤効果の分子論的解析 : 第 47 回ケモインフォマティクス討論会講演要旨集, 2024
 33. Takefumi Yamashita, Naoaki Miyamura, and Shinnosuke Kawai : Classification of the HCN isomerization reaction dynamics in Ar buffer

- gas via machine learning : The Journal of Chemical Physics, Vol.159, No.12, pp.124116 -, 2023
34. Shinya Kimura, Kurea Adachi, Yoshiki Ishii, Tomoki Komiyama, Takuho Saito, Naofumi Nakayama, Masashi Yokoya, Hikaru Takaya, Shiki Yagai, Shinnosuke Kawai, Takayuki Uchihashi, and Masamichi Yamanaka : Molecular-level insights into the supramolecular gelation mechanism of urea derivative : Nature Communications, Vol.16, No., pp.3758 -, 2025
35. Shinnosuke Kawai, Mikako Kuni, and Kazunori Sugiyasu : Regression Analysis for Nucleation–Elongation Model of Supramolecular Assembly: How To Determine Nucleus Size : The Journal of Physical Chemistry B, Vol.122, No.41, pp.9592 - 9604, 2018
- 【4602 有機化学】
36. Yamanaka, K.; Moritake, M.; Takahashi, H.; Tsue, H. : Streamlined In Situ X-ray Crystallography of Gas Sorption State as Realized through the De Novo Development of a Novel Crystal Mount : Cryst. Growth Des., Vol.24, pp.9433 - 9439, 2024
37. 山中壱朗, 森竹 将之, 高橋 弘樹, 津江 広人 : 気体吸着状態のその場観察を簡便化する新規結晶マウントの独自開発 : 第 32 回有機結晶シンポジウム, 2024
- 【4702 合成化学】
38. 阿野勇介・高橋大地・山田裕貴・楊和宗・長棟瞭介・茶谷直人:パラジウム触媒を用いたシクロブタノンの開環をとまなう変換 : 2024 年日本化学会中国四国支部大会 岡山大会, 2024
- 【4704 機能物質化学】
39. Guoqing Cheng and Naoki Komatsu : Diameter-selective extraction of single-walled carbon nanotubes by interlocking with Cu-tethered square nanobrackets : Beilstein Journal of Organic Chemistry, 2024
40. Kota Tanaka, Guoqing Cheng, Tomoteru Nakamura, Ken Hiraoka, Hiroshi Tabata, Osamu Kubo, Naoki Komatsu, Mitsuhiro Katayama : NH₃ Gas Sensors Based on Single-Walled Carbon Nanotubes Interlocked with Metal-Tethered Tetragonal Nanobrackets : ACS Applied Nano Materials, Vol.7, No.11, pp.13417 - 13425, 2024
41. Mitsuaki Hirose, Keigo Tashiro, Naoya Tajima, Futa Sugiura, Shuhei Shimoda, Yoshiumi Kohno, Yasumasa Tomita, Kiichiro Totani : Stepwise self-organization of hydrogen-bonded fibers in a minimalist glucose-pyrene system via CH- π -stabilized “iotamaers” : Chem Commun, No.61, pp.11939–11942., 2025
- 【4801 機能材料・デバイス】
42. Yuzhe Zhang, Tomohiro Higashino, Issei Nishimura, Hiroshi Imahori : Umbrella-Shaped m-Terphenyls for Highly π -Extended Planar Dyes toward High-Performance Dye-Sensitized Solar Cells : ACS Applied Materials & Interfaces, Vol.16, No.49, pp.67761~67770, 2024
- 【4802 有機工業材料】
43. Y. Wada, T. Maruchi, R. Ishii, and Y. Sunada : Visible Light Responsive Dinuclear Zinc Complex Consisting of Proximally Arranged Two d10-Zinc Centers : Angew. Chem. Int. Ed., Vol.62, pp.e202310571 -, 2023
44. Y. Wada, E. Matsuo, and Y. Sunada : Effects of Heavier Congeners on the Structural and Photophysical Properties of Visible-Light-Absorbing Dinuclear Complexes of Group-12 Elements : Eur. J. Inorg. Chem., Vol.28, pp.e202400666 -, 2025
45. R. Ishii, Y. Wada, and Y. Sunada : Silyl- and Germyl-bridged neutral square-planar Ag₄ cluster with short Ag-Ag distances exhibiting red emission : Chem. Commun., Vol.61, pp.4391 - 4394, 2025
- 【4902 薄膜・表面界面物性】
46. Oda, A.; Sawabe, K.; Satsuma, A. : Reversible Multi-Complexation of CO₂ to Alkaline Earth Metal Ion-Pair at 400 Ppm and 298 K : Angew. Chem. Int. Ed., Vol.e202411969, No.doi.org/10.1002/anie.202411969, pp.1 - 7, 2024

47. 沢邊 恭一, 築山 卓生, 織田 晃, 薩摩 篤 : 多重共線性を考慮した特徴量選択法と CO 吸着エネルギーの機械学習予測への応用 : 第 18 回分子科学討論会, pp.1 - 2, 2024
48. Kazuya Kobayashi, Naoya Nishi, Tetsuo Sakka : Effect of Ion-Specific Hydration Forces on the Stability of Water Films on Calcite Surfaces : Langmuir, 2025
【5001 機械材料・材料力学】
49. M. Nishikawa, K. Yamada : Theoretical analysis of CFRP composite laminates under compression with small ply angle change using Thin-Ply composites : Proc. American Society for Composites 39th Annual Technical Conference (The 20th US-Japan Conference on Composite Materials), 2024
【5004 流体力学】
50. Masaki Inagawa, Toru Miyoshi, Tomoki Ito, Kizuku Kurose, Ichiro Ueno, : IMPREGNATION OF VISCOUS FLUID INTO WOVEN FIBER BUNDLES CONFINED BETWEEN PARALLEL PLATES : 45th COSPAR Scientific Assembly 2024 (international conference), 2024
【5005 熱工学】
51. Ryuto Yamasaki, Yuki Matsunaga, Yuki Akura, Masaki Shimofuri, Amit Banerjee, Toshiyuki Tsuchiya, Jun Hirofumi : Flexible 3ω sensors on submicron-thick parylene substrates for thermal conductivity measurements of liquids and soft materials : Applied Physics Letters, Vol.126, No.1, 2025
52. T. Taniuchi, Y. Guo, M. Kishimoto, H. Iwai : MOLECULAR DYNAMICS STUDY OF H₂O/CO₂ CO-ELECTROLYSIS USING SOEC: SURFACE DIFFUSION AND ADSORPTION IN Ni-YSZ COMPOSITE CATHODE : the Third Asian Conference on Thermal Sciences (ACTS 3rd), 2024
53. 谷内 太陽, 郭 玉婷, 岸本 将史, 岩井 裕 : 共電解 SOEC カソード表面における反応・生成ガスの吸着・拡散現象に関する分子論的解析 : 第 33 回 SOFC 研究発表会, 2024
54. Yuting Guo, Taiyo Taniuchi, Sora Nozaki, Masashi Kishimoto, Hiroshi Iwai : Experimental and molecular dynamics study on the reaction characteristics of methane-ammonia mixed fuel on SOFC anodes : International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol.244, pp.126947, 2025
【5202 構造工学・地震工学・維持管理工学】
55. Riichi Sugai, Reika Nomura, Shuji Moriguchi, Kenjiro Terada : Extended B-spline-based mixed material point method stabilized by the variational multiscale method for compressible and nearly incompressible hyperelastic materials : Advances in Computational Science and Engineering, Vol.4, pp.85 - 118, 2025
【5204 水工水理学】
56. 田崎拓海, 原田英治, 後藤仁志 : 砕波に伴う縦渦列が誘起する漂砂機構の DEM-MPS 法による検討 : 土木学会論文集 特集号(海岸工学), Vol.80, No.17, 2024
57. Tazaki, T., Harada, H., Gotoh, H : Dynamics of bedload transport under run-up wave by gravel resolved scheme based on 3D DEM-MPS coupling : Advances in Water Resources, Vol.193, 2024
58. Tazaki, T., Harada, H., Gotoh, H : Coherent turbulent flow structure under plunging breaker on movable grain bed simulated by 3D DEM-MPS method : Coastal Engineering Journal, Vol.66, No.4, 2024
【5401 金属物性】
59. Teruya Nagafuji, Koshiro Osuna, Kota Hanzawa, Tomoya Gake, Soungmin Bae, Zhongxu Hu, Takayoshi Katase, Akira Takahashi, Hidenori Hiramatsu, and Fumiyasu Oba : Carrier generation and compensation mechanism in La₂SnO₂S₃ : J. Mater. Chem. C, Vol.12, No.31, pp.12015 - 12025, 2024
60. Nobuya Sato, Akira Takahashi, Shin Kiyohara, Kei Terayama, Ryo Tamura, and Fumiyasu Oba : Target material property-dependent cluster analysis of inorganic compounds : Adv. Intell. Syst., Vol.6, No.12, pp.2400253-1 -

- 2400253-10, 2024
61. Hiroki Ishii, Teruya Nagafuji, Akira Takahashi, and Fumiyasu Oba : First-principles study of high carrier density doping in wide-gap oxides : The Fourteenth International Conference on the Science and Technology for Advanced Ceramics, 2024
 62. Takanori Ishii, Akira Takahashi, Teruya Nagafuji, and Fumiyasu Oba : Systematic analysis of point defects in α -(Al_xGa_{1-x})₂O₃ alloys using first-principles calculations : The Fourteenth International Conference on the Science and Technology for Advanced Ceramics, 2024
 63. Teruya Nagafuji, Koshiro Osuna, Kota Hanzawa, Tomoya Gake, Soungmin Bae, Zhongxu Hu, Takayoshi Katase, Akira Takahashi, Hidenori Hiramatsu, and Fumiyasu Oba : Point defects and self-trapped electrons in La₂SnO₂S₃ : The Fourteenth International Conference on the Science and Technology for Advanced Ceramics, 2024
 64. Ryosuke Nakagawa, Akira Takahashi, and Fumiyasu Oba : Statistical evaluation of relationship between local structure and physical properties in Bi-based oxides : The Fourteenth International Conference on the Science and Technology for Advanced Ceramics, 2024
 65. Teruya Nagafuji, Tomoya Gake, Soungmin Bae, Akira Takahashi, and Fumiyasu Oba : Point defects and carrier generation in La₂SnO₂S₃ from first principles : The 8th International Conference on Electronic Materials and Nanotechnology for Green Environment, 2024
 66. 石井裕貴、長藤瑛哉、高橋亮、大場史康 : n 型透明導電性酸化物へのキャリアドーピングの理論的検討 : 日本セラミックス協会 第 44 回電子材料研究討論会, 2024
 67. 中川亮祐、高橋亮、大場史康 : Bi 系酸化物における局所構造-物性相関の統計解析 : 日本セラミックス協会 第 44 回電子材料研究討論会, 2024
 68. 石井孝憲、高橋亮、長藤瑛哉、大場史康 : α -(Al_xGa_{1-x})₂O₃ 固溶体の点欠陥の第一原理計算 : 第 34 回日本 MRS 年次大会, 2024
 69. 中川亮祐、高橋亮、大場史康 : Bi 系酸化物における局所構造-物性相関の統計的解析 : 第 34 回日本 MRS 年次大会, 2024
 70. 石井裕貴、長藤瑛哉、高橋亮、大場史康 : n 型透明導電性酸化物のキャリアドーピングの理論的検討 : 第 34 回日本 MRS 年次大会, 2024
- 【5501 化工物性・移動操作・単位操作】
71. Takuya Yamamoto : Mass transfer of chemical specie in acoustic cavitation bubble : Chemical Engineering Science, Vol.287, pp.119739 -, 2024
 72. Takuya Yamamoto : Effect of ultrasonic frequency on mass transfer of acoustic cavitation bubble : Chemical Engineering Science, Vol.300, pp.120654 -, 2024
 73. Takuya Yamamoto : Bubble shape instability of acoustic cavitation in molten metal used in ultrasonic casting : Ultrasonics Sonochemistry, Vol.111, pp.107064 -, 2024
- 【5807 進化生物学】
74. Takeshi Yamasaki & Yutaka Kobayashi : Evolving dispersal ability causes rapid adaptive radiation : Scientific Reports, Vol.14, No.15734, 2024
- 【6104 生物生産化学・生物有機化学】
75. Kota Seki, Tomoya Tanaka, Emiko Shimoda, Shinji Tanio, Ryo C Yanagita, Tsugumi Miyazaki, Kento Tokumoto, Toshiaki Tazawa, Kumiko Osaki-Oka, Atsushi Ishihara : Identification of sesquiterpene aldehydes as volatile antifungal compounds in *Phaeolepiota aurea* culture filtrate : Bioscience, Biotechnology, and Biochemistry, Vol.88, No.12, pp.1395 - 1402, 2024
 76. Enrico M. Cabutaje, Kota Seki, Motoichiro Kodama, Tsutomu Arie, Kotomi Ueno, Thomas Edison E. dela Cruz, Atsushi Ishihara : Coprinolide, a novel antifungal tricyclic polyketide with a rare furanone-fused chromene skeleton isolated from the mushroom *Coprinus comatus* : Journal of Pesticide Science, Vol.49, No.4, pp.243 - 254, 2024

別表1 スーパーコンピュータシステム

区分			利用負担額	提供サービス					
コース	タイプ	セット		システム	バッチ	システム資源	経過時間(時間)	ストレージ(TB)	無料利用者数
エントリ	-	基本	12,600 円/年	B	共有	最大0.5ノード相当((112コア、512GBメモリ)×0.5)	1	0.2	-
パーソナル	タイプA	基本	100,000 円/年	A	共有	最大2ノード相当((112コア、128GB高速メモリ)×2)	168	8.0	-
	タイプB	基本	100,000 円/年	B	共有	最大2ノード相当((112コア、512GBメモリ)×2)	168	8.0	-
	タイプC	基本	100,000 円/年	C	共有	最大1ノード相当((112コア、2048GBメモリ)×1)	168	8.0	-
	タイプG	基本	100,000 円/年	G	共有	最大1GPU相当((16コア、128GBメモリ+1GPU)×1)	168	8.0	-
グループ	タイプA0	最小/追加	72,000 円/年	A	準々優先	1ノード((112コア、128GB高速メモリ)×1)	168	6.4	2
	タイプA1	最小/追加	180,000 円/年		優先	1ノード((112コア、128GB高速メモリ)×1)	336	16.0	4
	タイプA2	最小/追加	108,000 円/年		準優先	1ノード((112コア、128GB高速メモリ)×1)	336	9.6	3
	タイプA3	最小/追加	270,000 円/年		占有	1ノード((112コア、128GB高速メモリ)×1)	336	16.0	4
	タイプB0	最小/追加	80,000 円/年	B	準々優先	1ノード((112コア、512GBメモリ)×1)	168	6.4	2
	タイプB1	最小/追加	200,000 円/年		優先	1ノード((112コア、512GBメモリ)×1)	336	16.0	4
	タイプB2	最小/追加	120,000 円/年		準優先	1ノード((112コア、512GBメモリ)×1)	336	9.6	3
	タイプB3	最小/追加	300,000 円/年		占有	1ノード((112コア、512GBメモリ)×1)	336	16.0	4
	タイプC0	最小/追加	88,000 円/年	C	準々優先	1ノード((112コア、2048GBメモリ)×1)	168	6.4	2
	タイプC1	最小/追加	220,000 円/年		優先	1ノード((112コア、2048GBメモリ)×1)	336	16.0	4
	タイプG0	最小/追加	58,000 円/年	G	準々優先	1GPU((16コア、128GBメモリ+1GPU)×1)	168	6.4	2
	タイプG1	最小/追加	290,000 円/年		優先	2GPU((16コア、128GBメモリ+1GPU)×2)	336	32.0	8
大規模ジョブ	タイプA	最小	72,000 円/週(7日)	A	占有	8ノード((112コア、128GB高速メモリ)×8)	168	-	-
		追加単位	18,000 円/週(7日)			2ノード((112コア、128GB高速メモリ)×2)		-	-
	タイプB	最小	80,000 円/週(7日)	B	占有	8ノード((112コア、512GBメモリ)×8)	168	-	-
		追加単位	20,000 円/週(7日)			2ノード((112コア、512GBメモリ)×2)		-	-
専用クラス	タイプB	最小	600,000 円/年	B	-	2ノード((112コア、512GBメモリ)×2)	-	32.0	8
		追加単位	300,000 円/年			1ノード((112コア、512GBメモリ)×1)		16.0	4
ストレージ	大容量ストレージ		10,000 円/年	大容量ストレージ容量10TBの追加につき					
	高速ストレージ		10,000 円/年	高速ストレージ容量2TBの追加につき					
	ネットワークストレージ		5,000 円/年	ネットワークストレージ容量1TBの追加につき					
ライセンスサービス			20,000 円/年	可視化ソフトおよびプリポストウェアの1ライセンスにつき					

備考

- 利用負担額は、年度単位（大規模ジョブコースは週単位）で算定している。また、総額表示である。パーソナルコース、グループコース又は専用クラスコースを年度途中から利用を開始する場合及び年度途中で利用を終了する場合の利用負担額は、上記表中の利用負担額を12で除した後、利用月数を乗じて算出するものとし、100円未満に端数が出た場合は、10円単位を四捨五入するものとする。なお、月途中から利用を開始する場合及び月途中で利用を終了する場合は、それぞれ1月の利用とする。
- 大型計算機システムの全ての利用者は、上記表のサービスの他、次のサービスを受けることができる。
 - 大判プリンタサービス
 - その他、大型計算機システムが提供するサービス、機器の利用
- 上記表の大規模ジョブコース、ストレージコース、ライセンスサービスの利用には、エントリコース、パーソナルコース、グループコース又は専用クラスコースの利用者であることが必要である。
- 上記表のバッチの種類は、次のとおりとする。

「共有」：当該カテゴリのユーザ間で一定の計算資源を共有するベストエフォートのスケジューリングを行う。

「準々優先」：定常稼働状況において記載値の計算資源が確保されるようにベストエフォートのスケジューリングを行う。

「準優先」：定常稼働状況において記載値（以上）の計算資源が確保されるように準優先スケジューリングを行う。

また、稼働状況によらず記載値の1/4の計算資源が確保されることを保証する。

「優先」：定常稼働状況において記載値（以上）の計算資源が確保されるように優先スケジューリングを行う。

また、稼働状況によらず記載値の1/2の計算資源が確保されることを保証する。

「占有」：稼働状況によらず記載値の計算資源が確保されることを保証する。
- システム障害、電力不足又は電気代の高騰に伴う節電、天災等の要因により、定常稼働が困難な状況においては、上記表に規定するバッチにかかわらず、ベストエフォートのスケジューリングを行う。
- ストレージ容量はバックアップ領域（最大で総容量の1/2）を含む。
- グループコース及び専用クラスコースの利用者番号は、利用者あたり年額5,000円を負担することで追加できる。
- 機関・部局定額制度
他機関又は学内における部局（『国立大学法人京都大学の組織に関する規程』第3章第2節から第11節で定める組織をいう。）の組織が、その組織単位でグループコースを利用する場合の利用負担額は、別表1に規定する1.5倍の額とする。なお、利用負担額が年額150万円未満の場合は100人、年額150万円を超える場合は、150万円毎に100人までの利用者を認める。ストレージは、1.5倍の容量とする。
- スパコン連携サービス
学術情報メディアセンターのスーパーコンピュータシステムと密な連携により、学内における部局の組織が計算サーバ等を設置する場合、下記の負担額を支払うものとする。

区分	冷却方式	利用負担額	利用負担額算定単位
スパコン連携サービス	水冷	15,300 円/月	水冷冷却方式の計算サーバ等の定格電力 1kWにつき
	空冷	18,100 円/月	空冷冷却方式の計算サーバ等の定格電力 1kWにつき

別表2 アカデミッククラウドシステム

区 分	利用負担額	単 位
仮想サーバ ホスティングサービス	38,400円/年	1仮想サーバにつき

備考

1. 利用負担額は、年度単位で算定している。また、総額表示である。
年度途中から利用を開始する場合及び年度途中で利用を終了する場合の利用負担額は、上記表中の利用負担額を12で除した後、利用月数を乗じて算出するものとし、100円未満に端数が出た場合は、10円単位を四捨五入するものとする。
なお、月途中から利用を開始する場合及び月途中で利用を終了する場合は、それぞれ1月の利用とする。
2. 上記表の仮想サーバホスティングサービスを利用するには、スーパーコンピュータシステムの利用者であること。
3. 1仮想サーバに割当ててるシステム資源は、CPU：2コア、メモリ：4GB、ディスク：100GBである。
4. 仮想サーバホスティングサービスにおいて、下記の負担額を支払うことによりCPU、メモリ、ディスクを増量することができる。なお、負担額の算定及び算出方法は、備考1に準ずるものとする。

区 分	利用負担額	単 位
CPU増量	3,600円/年	2コアにつき(最大8コアまで)
メモリ増量	3,600円/年	4GBにつき(最大64GBまで)
ディスク増量	7,200円/年	100GBにつき(最大1,000GBまで)

別表3 スーパーコンピュータシステム（民間機関利用）

システム	システム資源	経過時間 (時間)	ストレージ (TB)	無料 利用者数	利用負担額
A	2ノード((112コア、128GB高速メモリ)×2)	336	19.2	6	864,000 円/年
	3ノード((112コア、128GB高速メモリ)×3)	336	28.8	9	1,296,000 円/年
	4ノード((112コア、128GB高速メモリ)×4)	336	38.4	12	1,728,000 円/年
B	2ノード((112コア、512GBメモリ)×2)	336	19.2	6	960,000 円/年
	3ノード((112コア、512GBメモリ)×3)	336	28.8	9	1,440,000 円/年
	4ノード((112コア、512GBメモリ)×4)	336	38.4	12	1,920,000 円/年

備考

1. 利用負担額は、年度単位で算定している。また、総額表示である。
 年度途中から利用を開始する場合及び年度途中で利用を終了する場合の利用負担額は、上記表中の利用負担額を12で除した後、利用月数を乗じて算出するものとし、100円未満に端数が出た場合は、10円単位を四捨五入するものとする。
 なお、月途中から利用を開始する場合及び月途中で利用を終了する場合は、それぞれ1月の利用とする。
2. ストレージ容量はバックアップ領域（最大で総容量の1/2）を含む。

— サービス利用のための資料一覧 —

1. スーパーコンピュータシステム・ホスト一覧

- システム A (Camphor3) : camphor.kudpc.kyoto-u.ac.jp
- システム B (Laurel3) : laurel.kudpc.kyoto-u.ac.jp
- システム C (Cinnamon3) : cinnamon.kudpc.kyoto-u.ac.jp
- システム G (Gardenia) : gardenia.kudpc.kyoto-u.ac.jp
- アプリケーションサーバ : app.kudpc.kyoto-u.ac.jp
- ファイル転送サーバ : hpcfs.kudpc.kyoto-u.ac.jp

※ ホストへの接続はSSH(Secure SHell) 鍵認証のみ、パスワード認証は不可

2. 問い合わせ先 & リンク集

- 情報環境機構のホームページ
<https://www.iimc.kyoto-u.ac.jp/>
- 学術情報メディアセンターのホームページ
<https://www.media.kyoto-u.ac.jp/>
- 利用申請などに関する問い合わせ先
【IT サービスデスク】
E-mail : zenkoku-kyo@media.kyoto-u.ac.jp / Tel : 075-753-7424
URL: <https://www.iimc.kyoto-u.ac.jp/ja/services/comp/>
- システムの利用など技術的な問い合わせ先
【スーパーコンピューティング掛】
E-mail : consult@kudpc.kyoto-u.ac.jp
URL: <https://www.iimc.kyoto-u.ac.jp/ja/services/comp/other/contact.html>

京都大学学術情報メディアセンター全国共同利用版広報 Vol. 24, No. 1

2026年 1月 30日発行

編集者 京都大学学術情報メディアセンター
全国共同利用版広報編集委員会
発行者 〒606-8501 京都市左京区吉田本町
京都大学学術情報メディアセンター
Academic Center for Computing and Media Studies
Kyoto University
<https://www.media.kyoto-u.ac.jp/>
印刷所 〒615-8021 京都市西京区桂浅原町226
株式会社エヌジーピー

広報編集委員会
岩下 武史 (部会長)
廣中 詩織 (副部会長)

表紙デザイン：中山 豊
(中山商店)

目次

【巻頭言】

Vol. 24, No.1 号の発刊にあたって 岩下 武史 1

【特集】

データ駆動型研究を支援するエッジコンピューティング基盤の導入 小谷 大祐 2

学術情報メディアセンターブログの立ち上げ 首藤 一幸 8

SC25 参加報告 鈴木 謙吾 10

【スーパーコンピュータ共同研究制度(若手・女性研究者奨励枠) 研究報告】

高効率有機系太陽電池の実現に向けた光機能性分子の構造と電子物性の相関解明 東野 智洋 13

フェニルアラニン誘導体の単結晶が示す異方的な熱膨張現象の理論的解析 森竹 将之, 津江 広人 15

編み込み繊維束内含浸過程における粘性流体流動様相とマクロ・マイクロポイド形成に関する数値解析 .. 稲川 昌樹 17

高温電解セルスタック・電解装置の開発 郭 玉婷, 谷内 太陽, 岸本 将史, 岩井 裕 19

外核上部安定成層の表皮効果に基づく新たな惑星ダイナモ領域推定 八木 優人 21

計算化学的アプローチによるアザトルキセン由来超分子の秩序化と構造相関の解明 曾川 洋光 24

大規模M-I結合シミュレーションにおけるMHD系流速ヤコビアン固有ベクトル抽出可視化実験 齊藤 慎之介 26

動的モード分解を用いた2次元ノバードモデルの光励起ダイナミクスの解析 時本 純 28

情報量に偏りや欠損がある時系列データを用いた機械学習時間発展モデリング 中井 拳吾 30

ガラスの破壊挙動のシミュレーション 篠崎 健二 32

【スーパーコンピュータ共同研究制度(大規模計算支援枠) 研究報告】

REPPUコードレベル8の開発 - トポロジーを取り込んだ複合系磁気圏物理学の創出 - 田中 高史 34

【サービスの記録・報告】

スーパーコンピュータシステムの稼働状況 41

センター利用による研究成果(2024年度) 45

【資料】

大型計算機システム利用負担金 別表 50

サービス利用のための資料一覧 53