

QST-R-29



令和4年度
スーパーコンピュータシステム(HPE SGI8600)
利用による研究成果報告集

令和5年12月
量子科学技術研究開発機構
情報基盤部 IT 運用・学術情報課
(スパコン利用検討委員会事務局)

本研究開発報告集は国立研究開発法人量子科学技術研究開発機構が不定期に発行する、JAEA 設置のスーパーコンピュータシステム HPE SGI8600 を利用した研究成果の報告書です。
本研究成果報告集の全文電子データ (pdf) は国立研究開発法人量子科学技術研究開発機構ホームページ (<https://www.qst.go.jp/site/archives/1109.html>) より発信されています。

国立研究開発法人量子科学技術研究開発機構
情報基盤部 IT 運用・学術情報課
(スパコン利用検討委員会事務局)

内容

大口利用課題 研究成果報告.....	4
量子生命・医学部門.....	5
大型生体高分子の構造、ダイナミクス解析のためのシミュレーション技術の開発とその実行.....	6
放射線影響に対処する大型生体高分子の機能発現メカニズム解析.....	9
重粒子線による DNA 損傷の物理過程シミュレーション研究.....	12
量子ビーム科学部門.....	16
二次電子制動輻射測定による治療用粒子線モニタリング手法の開発.....	17
量子メス入射器開発におけるレーザー加速器シミュレーションの高精度化.....	21
Polarization Effects in Ultra-high Intensity Laser Thin Target Interactions.....	24
極短パルスレーザーと物質の相互作用シミュレーション.....	26
数ジュールのレーザーパルスにより生成される層状イオンビーム.....	32
第一原理分子動力学法に基づいた材料解析手法の開発.....	35
量子エネルギー部門.....	37
ジャイロ運動論に基づく乱流輸送モデルの拡張.....	38
ダイバータプラズマ中の不純物輸送制御に関する研究.....	41
R5F2 コードを用いた核燃焼プラズマの粒子制御に向けたシミュレーション研究.....	44
ダイバータ熱負荷の予想確度向上に向けた 2.5 次元ダイバータ輸送コードの開発.....	49
磁気流体力学に対する先進的アルゴリズム開発とその実証実験.....	52
コード高速化・最適化研究成果.....	56
R5F の GPU 最適化作業.....	57
一般利用者研究成果一覧.....	59

大口利用課題 研究成果報告

量子生命・医学部門

大型生体高分子の構造、ダイナミクス解析のためのシミュレーション技術の開発とその実行

河野 秀俊、櫻庭 俊、Kumar Amarjeet, Chan Wai Soon, Chan Yao Chong Maud
量子生命・医学部門・量子生命科学研究所

(1) 利用目的:

量子化学、古典力学にもとづいたシミュレーションを用いて、タンパク質や核酸の分子機能発現メカニズムを調べる。本年度は、ヌクレオソームと HP1 の複合体、ヌクレオソームとパイオニア因子の複合体、アミロイド形成ペプチドの 3 つについてシミュレーションを行い、それぞれの機能発現のメカニズムについて調べる。

(2) 利用内容・結果:

i) HP1 タンパク質の構造

HP1 タンパク質は、2 量体を形成してヌクレオソームに結合する。HP1 が結合したヌクレオソームは凝集し、遺伝子発現の不活発なヘテロクロマチンを形成する。しかし、HP1 は多様な構造をとることが知られており、未だにヌクレオソームとどのような相互作用をするのかよくわかっていない。また、従来はクロモシャードメインの helix-helix 相互作用によって 2 量体を形成すると考えられていたが、ヘリックスを形成している部位とは反対側の面を使って strand-strand 相互作用によって 2 量体を形成する可能性があることが分かってきた

(unpublished data)。そこで、拡張サンプリング法を用いて、それぞれの面で 2 量体を形成したモデル構造を作り、構造安定性を調べた。結果、どちらの面で 2 量体を形成しても、シミュレーション中に 2 量体が壊れることはなく、またその構造揺らぎは小さいことが分かった(図 1 左と中央)。この結果は、どちらの面でも 2 量体を形成しうることを示唆している。また、ヘリックスの Ile 残基を Glu 酸残基に置換すると、2 量体が大きく不安定化することが分かった(図 1 右)。このことから、十分な構造サンプリングができていると考えている。

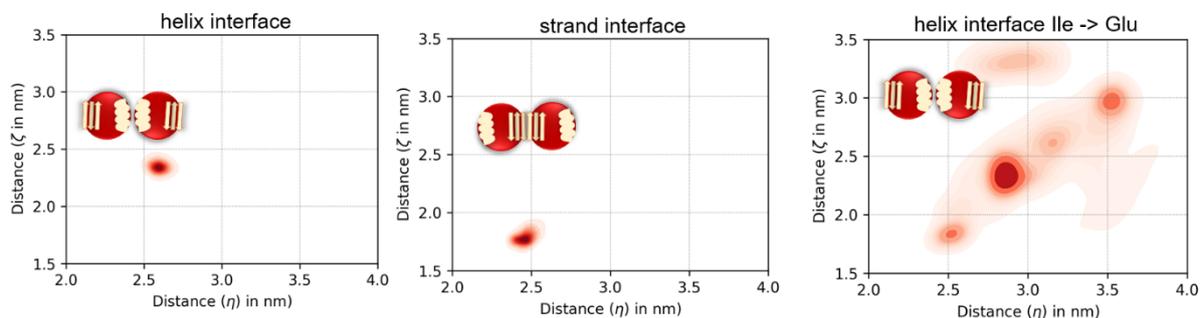


図 1. 相互作用面の構造揺らぎ。2つの軸に対する揺らぎを表示。

ii) ヌクレオソームとパイオニア因子の複合体

遺伝子の発現制御を担う転写因子は、ヌクレオソーム状態の DNA には結合できない。しかし、

パイオニア因子と呼ばれる一群の転写因子は、ヌクレオソーム状態の DNA に結合することができる。生化学実験により、パイオニア因子はヌクレオソームの構造を変化させることが示唆されているが、結合によってどんな変化が起こるのかその詳細は依然としてよくわかっていない。そこで、クライオ電子顕微鏡構造解析及び X 線溶液散乱データにもとづいて、パイオニア因子の一つ GATA3 タンパク質とヌクレオソーム

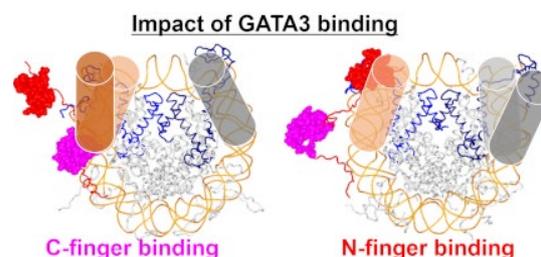


図 2. GATA3 の結合による DNA の構造変化。N-finger が結合すると、結合していない側の DNA が解離する。

の立体構造モデルを構築し、分子動力学シミュレーションを行った。その結果、GATA3 が 2 つの DNA 末端の片方に結合すると、結合していない DNA 末端がヒストンから解離する傾向が強まることが分かった。一方、結合した DNA 末端はヒストンに強く巻き付いている。自由エネルギーの観点から考えると次のように考えることができる。GATA3 が結合した側の DNA はエンタルピー的に安定化したものの、エントロピー的には不安定化する。しかし、その不安定化分は、GATA3 の結合していないもう片側の DNA がヒストンから解離することにより補償される。結果的に、全体として安定化すると考えられる。この成果は、*J. Mol. Biol.* 誌に投稿した (Ishida & Kono)。

iii) アミロイド形成ペプチド

アミロイドを形成するペプチドは、単独では特定の安定な構造をとらない(天然変性状態)が、凝集するとアミロイド線維化することが知られている。分子動力学シミュレーションに用いられている分子力場は、安定な立体構造を形成するタンパク質に対して開発され精密化されている。そのような分子力場は、天然変性状態を適切に表現できないことが指摘され、改良した分子力場が提案されている。しかし、それらの力場の優劣はよく調べられていない。そこで、3 つの同じペプチドを入れた系に対して、現在までに提案されている 13 種類の分子力場を評価した。評価は、変性状態とアミロイド線維構造をそれぞれ適切に表現できるかという観点で点数をつけることを行った。結果、CHARMM36m 力場がどちらの状態も最もバランスよく表現することが分かった(Chan et al. *Scientific Reports*, 2023)。今後は、この力場を用いてアミロイド形成ペプチドのシミュレーションを行う。

(3) 今後の利用予定:

引き続き、シミュレーションによって、HP1 とヌクレオソームの相互作用の様式やアミロイド形成ペプチドの構造安定性を調べ、ヘテロクロマチン形成やアミロイド線維形成のメカニズムを明らかにすることを目指す。

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) NSD2 酵素のメチル基付加機構と翻訳後修飾のヌクレオソームに与える影響, 河野 秀俊, 第 45 回日本分子生物学会年会, 千葉, 2022 (Oral)
- 2) Structure and dynamics of nucleosomes, the fundamental structural unit of chromatin, Kono, H., Joint Meeting of the 20th KIAS Conference on Protein Structure and Function and The 7th Korean-Polish Conference on "Protein Folding: Theoretical and Experimental Approaches, Seoul, Korea, 2022.9 (Oral)
- 3) Impact of torque and TF-binding on nucleosome investigated by molecular dynamics simulation and SAXS, Kono, H., (6th) Telluride Workshop on Chromatin Structure and Dynamics, Colorado, USA, 2022.6 (Oral)

学術論文

- 4) Fly casting with ligand sliding and orientational selection supporting complex formation of a GPCR and a middle sized flexible molecule, Higo, J., Kasahara, K., Bekker, G.-J., Ma, B., Sakuraba, S., Iida, S., Kamiya, N., Fukuda, I., Kono, H. Fukunishi, Y. and Nakamura, H., Scientific Reports, vol.12, 13892, 2022.8
- 5) RNAPII driven post-translational modifications of nucleosomal histones, Chan, J., Kumar, A., Kono, H., Trends in Genetics, vol.38, 1076-1095, 2022.1
- 6) Free Energy Landscape of H2A-H2B Displacement From Nucleosome, Ishida, H., Kono, H., J Mol Biol, vol.434, 167707, 2022.8

放射線影響に対処する大型生体高分子の機能発現メカニズム解析

石田 恒、松本 淳

量子生命・医学部門 量子生命科学研究所・生体分子シミュレーション

(1) 利用目的:

生体中では、紫外線などの放射線により DNA は常に損傷を受けている。DNA は、2本の DNA 鎖を構成するアデニンとチミン、グアニンとシトシンがそれぞれ塩基対となり、水素結合した二重らせん構造をとる。DNA 構造を認識する様々な分子は、遺伝子の機能発現の調節などに関与する。特に、平面芳香族分子が DNA 二重らせん構造の塩基対間に平行に入り込む現象はインターカレーションと呼ばれる。DNA を特異的に認識し、インターカレーションを引き起こすインターカレーターにはエチジウムブロマイドのように発癌性をもつものもあれば、アドリアマイシンのように抗癌剤に利用されるものもある。しかしながら、様々なインターカレーターと DNA の複合体構造・ダイナミクスについてはよくわかっていない。本研究課題では、DNA 染色試薬 SYBR (Sybr Gold dye) および YOYO (YOYO-1 dye) がインターカレーションした DNA における伸長過程の自由エネルギー地形解析について主に報告する。

(2) 利用内容・結果:

本研究モデルの系は、インターカレーションを引き起こす SYBR および YOYO と 18 塩基対 DNA からなる複合体である(図1)。SYBR と YOYO についての力場は、経験的手法である AM1-BCC 法による力場を用いた。予備的計算により、インターカレーターは DNA の両端にスタックして安定化することが頻繁に起こることがわかった。そこで、DNA の周りに4つのインターカレーターを配置することで少なくとも2つのインターカレーターは DNA 上を探索できるようにした。溶質の周りには、水分子と Na⁺イオンと Cl⁻イオンを塩濃度 150mM となるように配置した。系の大きさは、周期境界条件の 105 Å × 105 Å × 105 Å の正方形セルとした(総原子数:約 11 万原子)。

光ピンセットによる単一分子実験における DNA 伸長をミミックしてインターカレーションを促進するために、ABMD 法を用いて徐々に DNA の両端を伸ばした。ABMD 法はメタダイナミクス法の一つで、シミュレーション中の反応座標値にガウス型の局所的エネルギーを累積して生成されるバイアスポテンシャルを通常の原子間相互作用ポテンシャルに追加して実行する分子動力学シミュレーション法である。反応座標には、DNA 末端間距離を用いた。ABMD 法により、インターカレーション状態を生成することに成功した(図2)。インターカレーション状態の DNA 両端間距離は、SYBR 1 分子あたり約 3 Å、YOYO 1 分子あたり約 6 Å 伸びた(インターカレーションなしの状態での DNA 両端間距離は 57Å)。更に、インターカレーション状態の DNA とインターカレーションをおこしたインターカレーター(インターカレーションをおこさなかったインターカレーターは除く)について、アンブレラサンプリング計算法を用いた網羅的な構造サンプリングを実施した。これにより、SYBR、YOYO のインターカレーション状態の DNA が DNA 両端間距離 74 Å まで伸長するのに必要な自由エネルギーは約 10 から 15 kcal/mol で、伸長に必要な力

は約 20 から 40 pN と見積もられた。

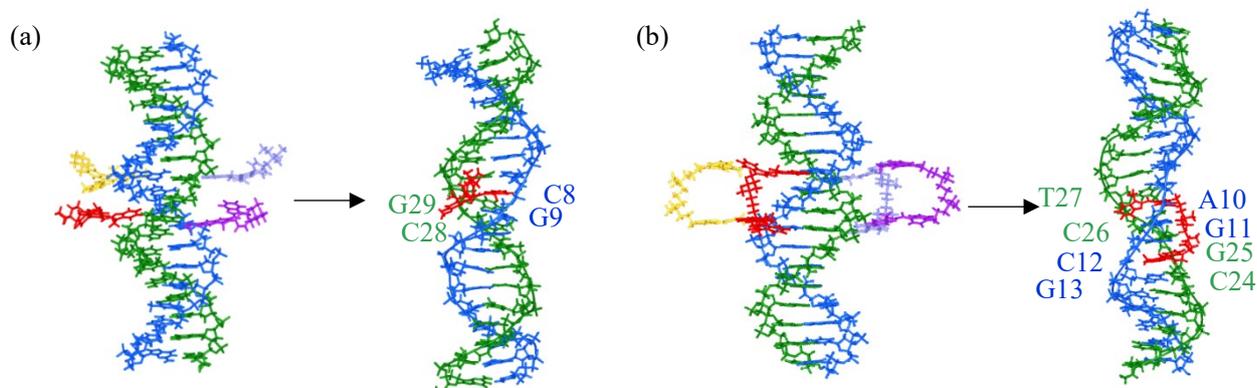


図 1 : SYBR および YOYO (空間充填モデル) がインターカレーションした DNA (球棒モデル) の例

(a) 4つの SYBR を配置した初期構造から、塩基対ステップ G8-G29 / G9-C28 の Minor groove にインターカレーションした DNA (他の 3つの SYBR は表示していない)。SYBR については $d(5'-TGAACGAACGAACGC-3')^2$ の 18 塩基対 DNA を用いた。

(b) 4つの YOYO を配置した初期構造から、A10-T27 / G11-C26 と C12-G25 / G13-C24 の Major groove にインターカレーションした DNA (他の 3つの YOYO は表示していない)。YOYO については、 $d(5'-GCGCGCGCTAGCGCGCGC-3')^2$ の 18 塩基対 DNA を用いた。

以上、分子動力学シミュレーションによりインターカレーターが DNA にインターカレーションする過程を観測することに成功した。また、インターカレーション状態の DNA 構造変化の自由エネルギー地形を解析した結果、DNA に作用する力が約 20 から 40pN と見積もられた。この値は実験値とよく一致していた。このことから、シミュレーションで観察された DNA 構造変化が妥当であると考えられる。

そのほか、抗体タンパク質の構造安定性を解析するための分子動力学シミュレーションを実施した。本研究の目的は、抗体医薬品製造過程において一時的に表れる変性構造を明らかにすることであり、それにより製薬の効率化に貢献できると考えられる。本研究では、計算機手法により非常に多くの様々な変形構造を生成し、その中から溶液散乱データを再現する構造群を選択した後、さらにその中から水溶液中で安定に存在するものを、分子動力学シミュレーションにより絞り込んだ。

(3) 今後の利用予定:

今後は、インターカレーターの力場には、量子化学計算を用いた力場を作成・採用することで、より精度のよい分子動力学シミュレーションを実行する。更に、抗がん剤でもあるインターカレーター-Doxorubicin とヌクレオソームの複合体について分子動力学シミュレーションを実施

する。そして、インターカレーション状態の DNA およびヌクレオソームの動的構造を調べることで、放射線影響に対処する生体分子の機能発現メカニズムを明らかにしていく。

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) Deep learning of computer-generated electron microscopy images to identify biomolecules, 松本 淳, 第 60 回日本生物物理学会年会, 函館, 2022.9 (Poster)

重粒子線による DNA 損傷の物理過程シミュレーション研究

森林 健悟

量子生命・医学部門 量子生命科学研究所・DNA 損傷化学研究チーム

(1) 利用目的:

重粒子線がん治療は他の放射線治療に比べて少ない線量で治療ができるため、体に優しい治療法と言われ世界中に普及している。しかしながら、何故、少ない線量で治療できるのかは、よくわかっていない。その理由の1つとして重粒子線照射で生じるプラズマの影響を注目した。このプラズマは、入射粒子線の軌道付近の局所領域の線量を大きくするというモデルがある。さらに、大きな線量の場合、細胞を殺傷する割合を大幅に増加させるという LQ モデルもあるが、プラズマの影響による線量の増大を考慮した LQ モデルは、重粒子線照射による細胞の生存率の観測の再現に成功し、放医研（現 QST 病院）での重粒子線がん治療の治療計画に導入された。しかしながら、このような実用的な医療応用があるにもかかわらず、このプラズマは大雑把な理論研究しか行われておらず、プラズマの生成機構や細胞に与える影響など不明な点が多い。そこで、このプラズマ生成過程をシミュレーションで模擬し、細胞に与える影響等を解明することを目指した研究を行っている。このシミュレーションでは、従来のモデルで考慮されている二次電子の運動に加えて、重粒子線衝突電離で生じる分子イオンを考慮し、この分子イオンが局所的に高密度に生成するので、これらのイオンが作る合成電場が二次電子の運動に影響し、プラズマ生成に繋がるのではないかと考えた[1]。その結果、シミュレーションでは知る限り、世界で初めて重粒子線照射でプラズマを生成させることに成功した。さらに、このシミュレーションは、この影響の大きいことを示唆した観測例の傾向を再現することに成功し、シミュレーションモデルの妥当性が確認できた[1]。

理論研究では、重粒子線の軌道付近で生成する正電荷によるクーロン力(F_{ei})のみが考慮されたが、それに加えて本シミュレーションでは、二次電子間のクーロン相互作用(F_{ee})も考慮している。 F_{ee} の役割は、(i)デバイ遮蔽の形成、及び(ii)二次電子の熱平衡を引き起こすことであることが考えられる。デバイ遮蔽とは、プラズマ中に加えられた電磁ポテンシャルを打ち消してしまう効果のことであるが、ここでは、重粒子線の軌道付近に捕獲された電子が分子イオンの電場を弱める働きをする。前回の研究[2]では、 F_{ee} を考慮した場合と無視した場合の二次電子が入射イオンの軌道付近から脱出できる確率(P_{es})を入射イオン衝突電離に対する平均自由行程(λ)の関数として計算した。 P_{es} の計算結果は F_{ee} を考慮した場合、無視した場合で、それぞれ $\sqrt{\tau}$ 、 τ に比例すること、すなわち、 F_{ee} は P_{es} を増加させる働きがあり、プラズマ生成に重要な役割を演じる可能性があることを示した。ここで、 τ は重粒子衝突電離の平均自由行程である[2]。

本研究では、重粒子線衝突電離直後に生じる初期二次電子エネルギー分布と二次電子の熱平衡及びプラズマ生成との関係を求める。そこで、初期二次電子のエネルギー分布と熱平衡状態になる時間、及びプラズマ生成の関係を調べるため、いくつかの疑似的な二次電子の初期分布関数を用いて、電子エネルギー分布の時間変化及び P_{es} を計算した[3]。 P_{es} はプラズマ生成に関連する。

(2) 利用内容・結果:

図1に擬似的な初期電子エネルギー分布 $f_1(E_e) = -aE_e^2 + 1$ (分布1)、 $f_2(E_e) = \exp(-cE_e)$ (分布2)、照射後 1, 2, 10 fs での入射イオンの軌道からの距離 (r) が 5 nm 以内に存在する二次電子に対する電子エネルギー分布を示す。二次電子の初期分布関数のエネルギーの平均値をイオンエネルギー (E_i) が 500 keV/u の場合とほぼ同じ (~ 30 eV) になるように関数を決めて、また、イオン衝突電離断面積 (σ) を 10^{-15}cm^2 とした。1 fs 後は、分布1では熱平衡状態になっていないが、分布2では、熱平衡状態に近づいていることがわかった。この違いは、分布2の形状がマクスウェル分布により近いため起きたと考えられる。2 fs 後では2つの分布関数ともに電子温度 8 eV の熱平衡状態になっていることがわかった。さらに、10 fs 後には、2つの分布関数ともに電子温度が約 3.2 eV まで小さくなっていることがわかった。電子温度の減少は、高エネルギー電子が $r = 5$ nm から脱出し、低エネルギー電子のみが残ったこと、及び、二次電子の標的中の分子と衝突してエネルギーを損失したことが原因と考えられる[3]。

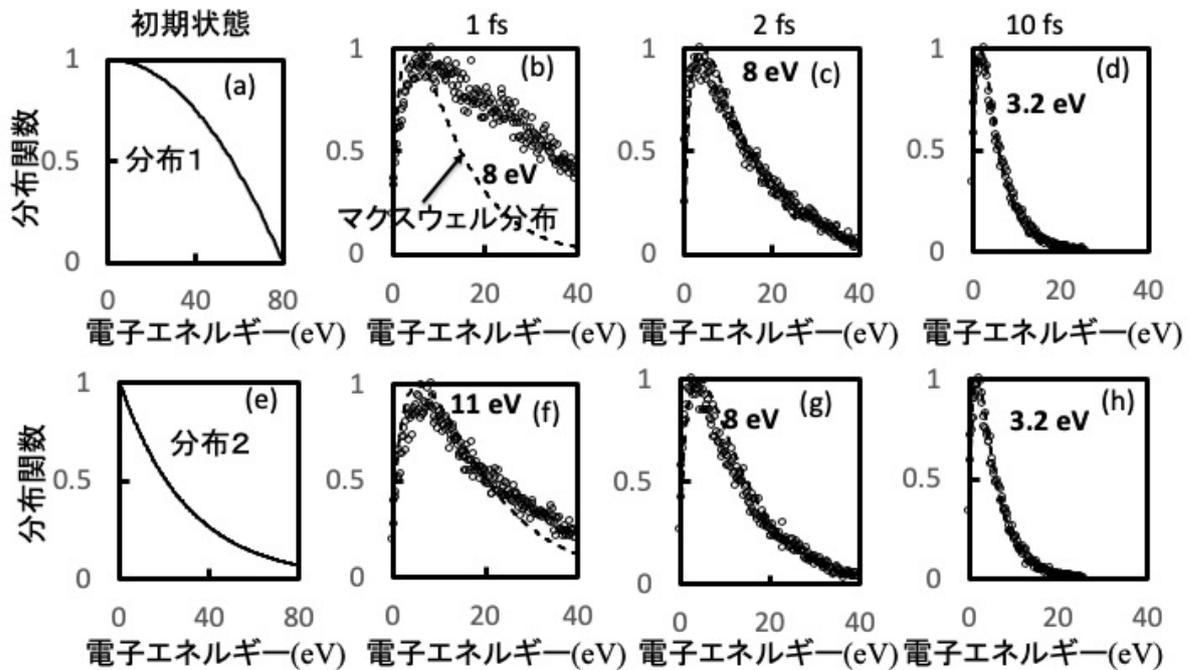


図1(a-d)、(e-f)初期分布関数として分布1、分布2を使用したとき、それぞれの二次電子のエネルギー分布の時間発展: (a,e) 初期分布、(b,f)1 fs 後、(c, g) 2 fs 後; (d,h)10 fs 後。鎖線: 図中に書かれた電子温度(eV)のマクスウェル分布。

図2に図1で示した2つの分布関数、及び、イオンエネルギーが 500 keV の場合の重イオンと水分子の衝突から生じる二次電子の観測を基に算出した分布関数を使用した場合の P_{es} と τ の関係を示した。 P_{es} は分布関数に関係なく、ほぼ同じになることがわかった。このことは、脱出する前に、すなわち、プラズマが安定な状態になる前に熱平衡状態になることを示唆している[3]。

(3) 今後の利用予定:

本研究では前述のように二次電子の初期エネルギーの平均値をイオンエネルギー(E_i)が 500 keV/u の場合とほぼ同じ(~ 30 eV)になるように初期分布関数を決めた。しかしながら、 E_i が変わると、この平均値も変わることが予測できる。また、標的は、生体分子の主成分である水としたが、重粒子線照射では細胞膜等、細胞中の他の組織の損傷も起こるが、その損傷が細胞の死滅に影響する可能性があり、そのとき、初期エネルギー分布の平均値も変わると考えられる。そこで、初期分布関数のエネルギーの平均値が異なる擬似的な二次電子の初期エネルギー分布を作り、図 1,2 と同じシミュレーションを行い、この平均値が熱平衡になる時間、電子温度の時間変化、 P_{es} にどのように影響するかを明らかにする。

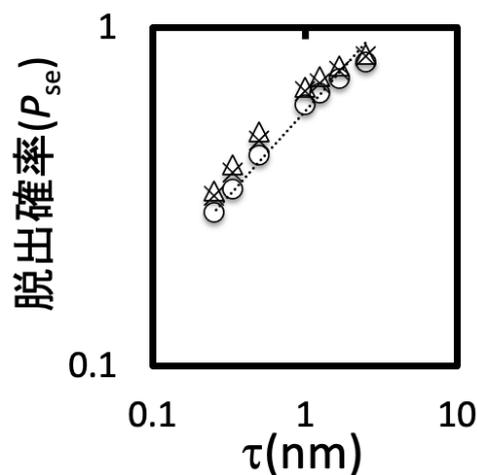


図 2 P_{es} と τ , との関係。 Δ : 分布 1、 \times : 分布 2、 \circ : 観測データ、波線: $(\tau)^{1/2}$ の関数。

参考文献

- [1] K.Moribayashi, Jpn. J. Applied Phys. **59** SH0801 (2020)
- [2] K.Moribayashi, Journal of Physics: Conference Series, **2207** 012020 (2022)
- [3] K. Moribayashi, Radiat. Phys. Chem., **208** 110870 (2023)

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) Theory and simulations for plasma created by swift heavy ions, Kengo Moribayashi, 11th international symposium on swift heavy ions in matter (SHIM 2022), Online, 2022.06 (Poster)
- 2) Simulation study to aim to elucidate biological effect due to fast highly-charged ion irradiation, Kengo Moribayashi, 20th International Conference on Physics of Highly Charged Ion (国際学会), Matsue, Japan, 2022.8 (Poster)
- 3) 重イオン照射で生成する二次電子の運動の熱平衡化, 森林 健悟, 日本物理学会 2022 年秋季大会, 東京, 2022.9 (Oral)
- 4) Application of heavy ion plasma to understand treatment mechanism of heavy ion cancer therapy, Kengo Moribayashi, ICRP-11/GEC2022, Sendai, Japan, 2022.10 (Poster)

- 5) Effect of the thermalization of secondary electrons on plasma formation during the irradiation of heavy ions, 森林 健悟, 第 23 回「イオンビームによる表面・界面の解析と改質」特別研究会, 福井県, 2022.12 (Oral)
- 6) 重イオンビーム照射における二次電子の初期エネルギー分布の影響, 森林 健悟, 日本物理学会 2023 年春季大会, オンライン, 2023.3 (Oral)

学術論文

- 7) Effect of closeness between a few atoms forming a cluster ion passing through water on the motion of secondary electrons and radial dose, Kengo Moribayashi, Radiation Physics and Chemistry, vol.208, 110870/1-7, 2023.7
- 8) Effect of the thermalization of secondary electron energies on plasma formation during the irradiation of heavy ions, Kengo Moribayashi, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, vol.537, 129-132, 2023.4

量子ビーム科学部門

二次電子制動輻射測定による治療用粒子線モニタリング手法の開発

山口 充孝

量子ビーム科学部門・高崎量子応用研究所

量子バイオ基盤研究部 プロジェクト「RI イメージング研究」

(1) 利用目的:

粒子線の体内軌跡や到達位置、体内線量分布をリアルタイムで測定できれば、位置ずれが生じた瞬間に粒子線を修正できるようになる。これにより、医師がより効果的で効率的な治療に踏み込めるようになり、結果として、人体の正常組織への影響を最小限に抑え治療効果を最大限に引き出すことが可能になる。利用者等は二次電子制動放射線を情報源とした粒子線の可視化研究を行っている。二次電子制動放射線は連続的なエネルギー分布を持つ硬 X 線領域 (30~100 keV) の光子で、エネルギーが低いため測定が容易であり、さらに、発生量も格段に大きく感度の高いイメージング装置を実現できる。また、即発性であるため血流などによる発生源移動の問題も原理的に生じない。これまでに、二次電子制動放射線の測定によって単純形状の標的 (水槽) に入射した粒子線を、ピンホール型 X 線カメラを用いて撮影することに成功している。

今年度は、二次電子制動放射線による炭素イオンビームのイメージング手法の臨床応用可能性の検討を目的とし、イメージングプレート (IP) を検出器として用いたカメラについてのシミュレーションによる評価を実施した。

(2) 利用内容・結果:

申請時の計画では、標的として人体頭部ファントムを想定したが、複雑形状標的に対応したシミュレーションソフトウェアの改変が難航したため、標的を直方体形状の亚克力標的に変更したうえで、IP を検出器としたカメラについてのシミュレーションスタディを実施した。シミュレーションにおけるジオメトリーは、過去に実施した実験 (津田路子, 他, *RADIOISOTOPES*, **71** (2022) 109–114, 論文奨励賞受賞 (doi: 10.3769/radioisotopes.71.109)) を再現するよう作成した。

まず、亚克力標的に、水中飛程が 2 cm ずつ異なる 3 種類の炭素イオンビームを入射し、標的の側面に配置した X 線カメラにより到達深さの違いを識別可能かどうか、PHITS を用いたモンテカルロシミュレーションによって評価した。横断方向のビーム強度分布はガウス分布とし、分布の半値幅は実測実験において予定している値と一致させた。カメラは鉛とタングステンによる放射線遮蔽体と IP から構成した。エネルギー弁別が不可能である IP でのエネルギー付与を正確に計算するため、電子輸送計算の下限値をこれまでの 30 keV から 1 keV に低下させて計算を行った。また、より細かな飛程変化として 1 mm の飛程変化の検出可能性について調査した。シミュレーションでは IP に 1 keV 以上のエネルギー付与を起こしたイベントを 2 次元ヒストグラムとして記録し、シミュレーション後にエネルギー積分した 2 次元ヒストグラムを座標原点に位置する視野平面に逆投影することでビームイメージを作成した。得られた結果から 2 cm の飛程の違いを明確に識別できることが明らかとなり、本結果をまとめた成果が査読付き論文誌に掲載された (Michiko Tsuda, et al., *Journal of Instrumentation*, **18** (2023) C01071 (doi:

10.1088/1748-0221/18/01/C01071))。

(3) 今後の利用予定:

現在、1 mm の飛程変化についてのシミュレーション結果について解析を行っている。得られた結果は学会等で報告し、査読付き論文等に提出する予定である。さらに、標的を人体頭部ファントムに変更したシミュレーションスタディを実施する予定である。

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) 陽子線照射即発 X 線と即発ガンマ線同時測定, 山本 誠一, 山下 智弘, 小橋 佑介, 矢部 卓也, 山口 充孝, 河地 有木, 鎌田 圭, 吉川 彰, 赤城 卓, 片岡 淳, 第 70 回応用物理学会春季学術講演会, 東京, 2023.3 (Oral)
- 2) 粒子線治療に用いる拡大ブラッグピークビームの二次電子制動放射測定による飛程変化の検出, 津田 路子, 山口 充孝, 矢部 卓也, 豊川 秀訓, 酒井 真理, 長尾 悠人, 河地 有木, 渡部 浩司, 加田 渉, 神谷 富裕, 第 70 回応用物理学会春季学術講演会, 東京, 2023.3 (Oral)
- 3) 粒子線治療ビームの 2 次電子制動放射線計測による可視化, 津田 路子, 山口 充孝, 矢部 卓也, 長尾 悠人, 河地 有木, 渡部 浩司, 酒井 真理, 加田 渉, 神谷 富裕, 第 36 回 PIXE シンポジウム, 奈良, 2022.11 (Oral)
- 4) 粒子線治療における治療ビーム画像化のシミュレーションスタディ, 津田 路子, 山口 充孝, 矢部 卓也, 長尾 悠人, 河地 有木, 渡部 浩司, 酒井 真理, 加田 渉, 神谷 富裕, 第 3 回標的アイソトープ治療線量評価研究会大会, 千葉, 2022.10 (Oral)
- 5) 放射線治療中イメージングにおける時間変化画像収集と利用, 山本 誠一, 矢部 卓也, 山口 充孝, 河地 有木, 鎌田 圭, 吉川 彰, 奥平 訓康, 永田 珠羅, 喜多野 真紀, 余語 克紀, 赤城 卓, 片岡 淳, 第 83 回応用物理学会秋季学術講演会, 宮城, 2022.9 (Oral)
- 6) Prompt X-ray imaging using list-mode data acquisition system during irradiation with carbon-ions, Seiichi Yamamoto, Maki Kitano, Takuya Yabe, Takashi Akagi, Mitsutaka Yamaguchi, Naoki Kawachi, Kei Kamada, Akira Yoshikawa, Jun Kataoka, 2022 IEEE Nuclear Science Symposium and Medical Imaging Conference, Milano, Italy, 2022.11 (Poster)

- 7) Secondary-electron-bremsstrahlung x-rays imaging using CdTe semiconductor detector for range verification in carbon-ion radiotherapy, Takuya Yabe, Michiko Tsuda, Mitsutaka Yamaguchi, Hidenori Toyokawa, Wataru Kada, Tomihiro Kamiya, Makoto Sakai, Yuto Nagao, Naoki Kawachi, 2022 IEEE Nuclear Science Symposium and Medical Imaging Conference, Milano, Italy, 2022.11 (Poster)
- 8) A time-of-flight based neutron background reduction for imaging of proton-induced secondary-electron-bremsstrahlung x-rays: a Monte Carlo study, Takuya Yabe, Mitsutaka Yamaguchi, Michiko Tsuda, Yuto Nagao, Naoki Kawachi, 23rd International Workshop on Radiation Imaging Detectors (iWoRiD 2022), Riva del Garda, Italy, 2022.6 (Poster)
- 9) Particle beam imaging by measuring secondary electron bremsstrahlung using CdTe imager, Michiko Tsuda, Mitsutaka Yamaguchi, Hidenori Toyokawa, Ryota Satori, Wataru Kada, Tomihiro Kamiya, Makoto Sakai, Yuto Nagao, Takuya Yabe, Naoki Kawachi, 23rd International Workshop on Radiation Imaging Detectors (iWoRiD 2022), Riva del Garda, Italy, 2022.6 (Poster)
- 10) Simulation study on carbon-ion beam imaging by measuring secondary electron bremsstrahlung using imaging plate, Mitsutaka Yamaguchi, Michiko Tsuda, Wataru Kada, Tomihiro Kamiya, Makoto Sakai, Yuto Nagao, Takuya Yabe, Naoki Kawachi, 23rd International Workshop on Radiation Imaging Detectors (iWoRiD 2022), Riva del Garda, Italy, 2022.6 (Poster)

学術論文

- 11) Time-of-flight based neutron background reduction in secondary-electron-bremsstrahlung imaging for in-vivo range verification of proton therapy: a Monte Carlo study, T. Yabe, M. Yamaguchi, M. Tsuda, Y. Nagao, N. Kawachi, Journal of Instrumentation (JINST), vol.18, C02041, 2023.2
- 12) Simulation study on carbon-ion beam imaging by measuring secondary electron bremsstrahlung using imaging plate, M. Tsuda, M. Yamaguchi, W. Kada, T. Kamiya, M. Sakai, H. Watabe, Y. Nagao, T. Yabe, N. Kawachi, Journal of Instrumentation (JINST), vol.18, C01071, 2023.1

- 13) Advantages of using larger-diameter pinhole collimator for prompt X-ray imaging during irradiation with carbon ions, Seiichi Yamamoto, Takuya Yabe, Takashi Akag, Mitsutaka Yamaguchi, Naoki Kawachi, Kei Kamada, Akira Yoshikawa, Jun Kataoka, Journal of Instrumentation (JINST), vol.17, P09006, 2022.9

- 14) Deep learning-based in vivo dose verification from proton-induced secondary-electron-bremsstrahlung images with various count level, Takuya Yabe, Mitsutaka Yamaguchi, Chih-Chieh Liu, Toshiyuki Toshito, Naoki Kawachi, Seiichi Yamamoto, Physica Medica, vol.99, 130-139, 2022.6

- 15) イメージングプレートを用いた粒子線の可視化, 津田 路子, 山口 充孝, 佐鳥 凌太, 加田 渉, 神谷 富裕, 酒井 真理, 長尾 悠人, 河地 有木, Radioisotopes, vol.71, 109-114, 2022.4

量子メス入射器開発におけるレーザー加速器シミュレーションの高精度化

畑 昌育

量子ビーム科学部門・X線レーザー研究グループ

(1) 利用目的:

平成 28 年 12 月に平野理事長（当時）の下、国立研究開発法人量子科学技術研究開発機構（量研）が中心になって株式会社東芝、株式会社日立製作所、住友重機械工業株式会社、三菱電機株式会社（現在は撤退）の 5 者間で包括協定を結び、第 5 世代重粒子線がん治療器（平野前理事長から「量子メス」と命名された）の開発が始まった。10 年間で、超電導技術とレーザー加速技術を利用して現在の重粒子線がん治療装置を飛躍的に小型化、低価格化することで「がん死ゼロ社会」の実現に貢献することが目標になっている。

この包括協定発足にも関連し、平成 29 年度には、文部科学省の未来社会創造事業大規模プロジェクト型として「レーザー駆動による量子ビーム加速器の開発と実証」が採択された。本プロジェクトはレーザーによる荷電粒子加速器の実用化を目指すもので、パワーレーザーの開発やレーザー電子加速器の開発に加え、出口として量子メスの入射器開発を想定したレーザー駆動イオン加速器開発を含んでいる。レーザー駆動イオン加速器の開発は量研・放射線医学研究所（放医研）（現在は量子医科学研究所）の物理工学部と量研・関西光科学研究所（関西研）（現在は関西光量子科学研究所）・木津のチームが連携し、明確な目標を設定し概念実証を目指している。目標スペックは放医研（当時）との議論により明確化されており、2 秒間に 4 MeV/u の炭素イオンが 1 %バンド幅で 10^9 個、後段に設置予定の超伝導シンクロトロン加速器に入射できることである。既に関西研・木津の J-KAREN-P レーザーを用いて 10^6 個/msr の炭素線の発生を確認したものの、これまでに行ってきた実験的研究は最大加速エネルギーを引き上げることに主眼を置いたものであって、今回は、むしろ、これまで得られた知見をフルに活用し、如何に多くの炭素線をより狭い立体角に、しかもより少ない励起レーザーエネルギーで実現するかを、可及的速やかに明確にする必要がある。

この研究開発を実験だけで行うことは、時間的及び労力的に困難であり、コンピュータシミュレーションにより、適切な条件を事前に得ておくことが非常に重要である。本研究開発では、決められた目標スペックを現実的なレーザー装置で実現しなければいけないため、ある程度コンピュータシミュレーションで予測し、実験でその可能性を確かめた上で、概念実証のための実験装置を相補的に構築していくことが求められる。これにより量子メス開発プロジェクトの推進を大幅に加速できる。

本研究に関連する研究課題は平成 30 年 10 月より開始され、令和 3 年度まで実施された。ここまでの研究で、求められる性能を満たすイオン生成は可能であることと、それに必要なレーザーのエネルギーをシミュレーションで示した。また、使用レーザーの条件である、集光径とパルス幅の違いによる生成イオン特性の違いと、レーザー入射角度の違いの検討結果を示した。

令和 4 年度からは、本研究課題代表者（畑昌育）を主担当者として新しく研究課題を設定し直し、関連研究において考慮されていなかった衝突・電離過程を含んだシミュレーションを行い、

シミュレーション予測の高精度化を図る。これまでのシミュレーションでは、十分に高強度のレーザーを想定していたために、ターゲットとしては完全電離の炭素イオンを仮定していた。また、十分に薄い炭素ターゲットを採用していたことから、無衝突プラズマを仮定していた。しかし、レーザー加速器の実機作成においては、取り扱い易さ、連続運用での安定性等の理由から比較的厚い薄膜ターゲットを用いることも考えられている。さらに、炭素薄膜だけでなく、金属に炭素を付着させたターゲットの検討も予定されている。このような背景から、

- ・サブミクロンから十数ミクロンまでの厚みの炭素ターゲット
- ・金属に炭素を付着させたミクロンオーダーのターゲット

といった、衝突過程が影響を与える可能性のある厚いターゲット、完全電離しない金属を含むターゲットについて加速イオンの予測を行い、レーザー条件の検討を行う必要がある。そこで、これらのターゲットを想定して、衝突・電離過程を含んだシミュレーションを実施する。

(2) 利用内容・結果:

令和4年度は、炭素ターゲットを想定して、衝突過程・電離過程を含んだ二次元相対論的電磁粒子シミュレーションを実施した。本研究課題で対象としているレーザーイオン加速では、Target Normal Sheath Acceleration (TNSA)による加速を想定している。TNSA加速では、高強度レーザーとターゲットとの相互作用によって発生する高エネルギー電子がターゲット裏面を突き抜ける際に生成される垂直電場、すなわちシース電場によって、ターゲット裏面のイオンを電離・加速する。したがって六価炭素イオンを生成するためには、この裏面シース電場を十分強くすることが必要となる。そこで、二次元シミュレーションによるパラメータランによって裏面シース電場のレーザー強度およびターゲット厚とレーザースポット径の比 (d/r_L) に対する依存性 (図1) を調べた。図1は、背景色がシース電場の理論的な見積もり (レーザーから電子へのエネルギー変換効率 50%および高エネルギー電子の発散角 45度を仮定) を示しており、凡例の内部色がシミュレーションで得られた最大シース電場の値を示している。凡例は、逆三角、丸、四角がそれぞれ準一次元、二次元、三次元のシミュレーション結果である。シミュレーション結果は概ね理論的な見積もりと一致していることがわかる。有限スポット径の二次元シミュレーション結果 ($d/r_L \sim 10$) が、理論的な見積もりに比べて大きな値を示しているが、これは理論的な見積もりが三次元に基いたものであり、高エネルギー電子の発散の効果が二次元シミュレーションでは小さくなるためであった。これらの結果から、理論的な見積もりは仮定がいくつか入っているものの、おおよその見積もりとしては十分に使えることがわかった。また、図1に記載の実線は、イオン化ポテンシャルのサイズを $\sim 1 \text{ \AA}$ と仮定して求めたイオン化閾値電場を示している。イオン化閾値電場は大雑把な見積もりではあるが、電離過程を含んだ二次元シミュレーションの結果をみると、イオン化閾値電場を超えるレーザーおよびターゲット条件で六価炭素イオンが生成、加速されている様子を確認できた。図1を使うことで、六価炭素イオン生成に必要なシース電場を達成するためのレーザーおよびターゲット条件を見積もることができる。なるべく小さなレーザーエネルギーで六価炭素イオンを生成したいため、レーザースポット径もなるべく小さくする必要があり、回折限界であるミクロン程度となる。ターゲット厚は、なるべく薄くしたいが、薄すぎるとTNSA加速ではなくなるため、こちらもまたミクロン程度になる。よって、ター

ゲット厚とスポット径の比 (d/r_L) は1程度となることがわかる。図1を使って、この条件で六価炭素イオンを生成するレーザー強度を求めると 10^{20} W/cm² 程度以上が必要であることがわかった。

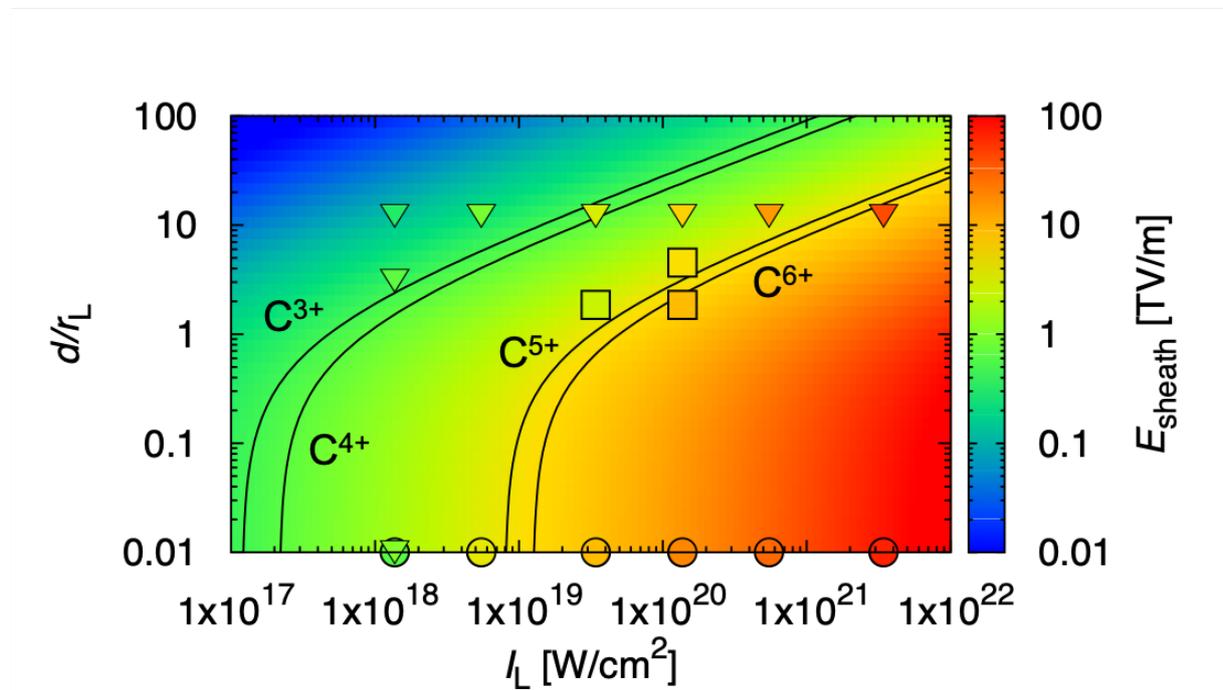


図1. 裏面シース電場 (E_{sheath}) のレーザー強度およびターゲット厚とスポット径の比 (d/r_L) に対する依存性. 丸、逆三角、四角の凡例はそれぞれ準一次元、二次元、三次元シミュレーションの結果で、背景色は理論的な見積もりを、凡例の内部色はシミュレーションの値を示す。

(3) 今後の利用予定:

これまでの研究によって、六価炭素イオンを生成するのに必要なレーザーおよびターゲットの条件を求めることができた。今後は、4 MeV/u の六価炭素イオンを十分な量生成するための条件を明らかにするとともに、純粋な炭素ターゲットだけでなく化合物や金属ターゲットの場合に条件がどう変わるかについても調べていく予定である。特に、炭素イオン数の定量評価は本質的に三次元計算でないと見積もることができないため、大量の計算資源が必要になる見込みである。

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) 量子メス開発に向けたレーザー加速イオンの特性評価, 畑 昌育, 第39回プラズマ・核融合学会年会, 富山, 2022.11 (Oral)
- 2) 量子メス開発におけるレーザー加速イオン入射器シミュレーションの進展, 畑 昌育, レーザー学会学術講演会第43回年次大会, 名古屋, 2023.1 (Oral)

Polarization Effects in Ultra-high Intensity Laser Thin Target Interactions

Koga James、西内 満美子

量子ビーム科学研究部門 関西光科学研究所 光量子科学研究部

(1) 利用目的:

The goal of this research is to determine the mechanisms by which the polarization of ultra-high intensity lasers interacting with ultrathin solid targets is modified. Experiments have shown that this occurs, however, the processes by which this occurs is not clear. We will perform 3D particle-in-cell (PIC) simulations of the interaction to determine the cause of the polarization change seen in experiments.

(2) 利用内容・結果:

We performed 3D PIC simulations using the code EPOCH [1,2] of the interaction of an ultra-high intensity laser pulse with parameters comparable to the J-KAREN-P laser interacting with an ultrathin Silver target. Based on the expected ionization level of the target the laser was found to reflect off the target. However, when reducing the target density to take into account the target

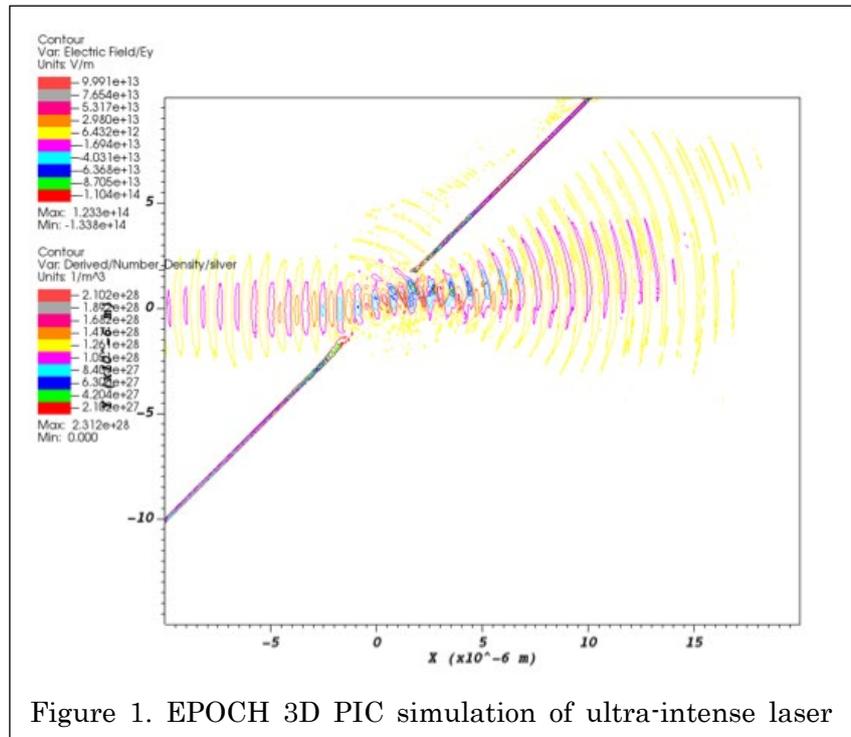


Figure 1. EPOCH 3D PIC simulation of ultra-intense laser

expansion, the laser was found to pass through the target. Figure 1 shows the interaction of a laser of intensity 4×10^{21} W/cm² and duration of 45 fs with a 120 nm thick Silver target at an inclination of 45 degrees in the x-y plane at the center of the simulation box in z where the laser is propagating from the left to the right in the x-direction. The laser has propagated through the target and bent in the +y direction. Bending is also seen in the x-z plane in the -z direction (Figure 2).

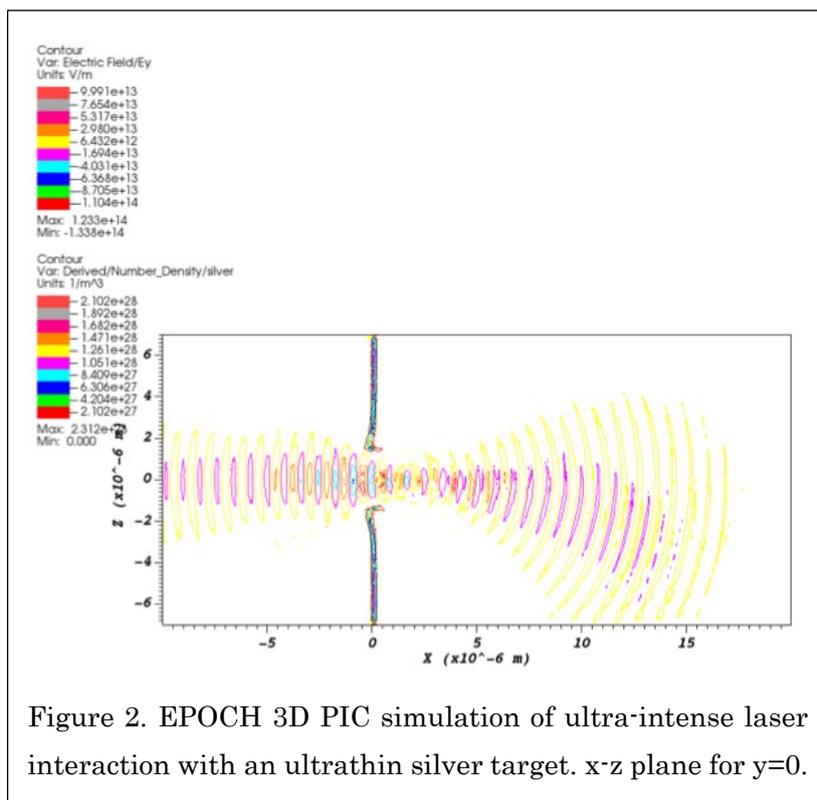


Figure 2. EPOCH 3D PIC simulation of ultra-intense laser interaction with an ultrathin silver target. x-z plane for y=0.

Fusion, 57 (2015) 113001.

[2] <https://epochpic.github.io>

(3) 今後の利用予定:

In the next stage of this project we plan to examine the electron collisional ionization dynamics of the target, since the density of the target is a key factor in determining whether the laser passes through it or not.

References

- [1] T. D. Arber et al. 'Contemporary particle-in-cell approach to laser-plasma modeling' Plasma Physics & Controlled

極短パルスレーザーと物質の相互作用シミュレーション

乙部 智仁、山田 俊介、Hahsmi Arqum

量子ビーム科学部門・超高速光物性研究グループ

(1) 利用目的:

第一原理計算の手法を用いて薄膜材料の非線形相互作用を解析し、光・電子・スピンドバイス材料としての特性を明らかにする。

長らく、光と物質の応答は連続的光による線形応答から 2,3 次の定次非線型現象の観測と理解を中心に発展してきた。しかし近年、フェムト(10^{-15})秒領域のパルス幅で最大強度 1×10^{12} - 1×10^{20} W/cm² という高強度極短パルスレーザーが可能となり物質の高速かつ非線型な現象を捉え利用する事が可能となってきた一方、物質科学の分野でも特異な特性を持つ物質（例えば 2 次元物質やトポロジカル物質）が発見され次世代材料としても盛んに研究されている。また、近年ではフェムト秒レーザーによる高精度非熱加工が注目を浴びており物質と光の非線形な相互作用の重要性は増している。我々は電子ダイナミクスの第一原理計算手法である時間依存密度汎関数理論 (TDDFT) の計算対象を気体から固体に拡張し、更に Maxwell 方程式と融合することで非相対論領域での高強度極短パルスレーザーの相互作用を計算できるようにした。このプログラムは SALMON として公開され当該分野でのスタンダードになりつつある。

本研究では SALMON を駆使することで高強度レーザー場中での電子ダイナミクスを高精度にシミュレートし、新しい物理過程及び制御機構の発見を目指す。

(2) 利用内容・結果:

達成目標: Bi₂Se₃ 薄膜の基底状態の計算を行う。光学関数を計算し、ギャップより小さい光子エネルギーのレーザーによる高次高調波スペクトルを取得する。

結果: パラメータ依存性などのテスト計算を行なったが、計算量が当初予想より大幅に増大することが明らかとなった。幸い富岳の CPU 時間が取得できたためプロダクションランは富岳で行なった。その結果を図 1 に示した。バルク (青線) と 3 層 (赤線) の Bi₂Se₃ に高強度レーザーを照射した際の高次高調波の偏光方向角度依存性を示している。偏光方向は各パネルの右上に示した矢印で示している。SGI8600 ではこの計算のための基礎的データ (スピン軌道相互作用部分の動作確認、K サンプリングテストの一部、荒い空間メッシュでのテスト) の取得を行なった。この結果から偏光方向を選ぶことで表面状態の効果が高次高調波に現れることが分かった。

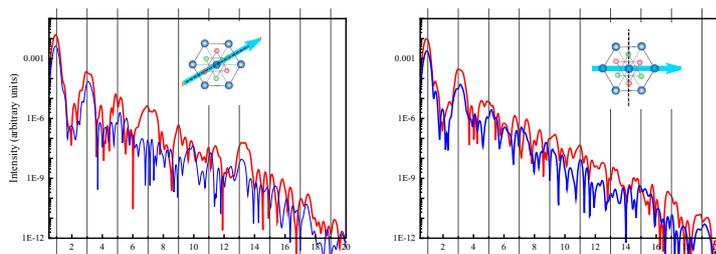


図 1 Bi₂Se₃ からの高次高調波発生時の偏光方向依存性

達成目標：TMD-Gr の構造と基底状態計算の収束確認。バンド分解スピン流計算コード作成。線形応答計算の実行。

結果：まず単層の WSe_2 及びグラフェンの構造からいくつかのユニットセルの候補を選び基底状

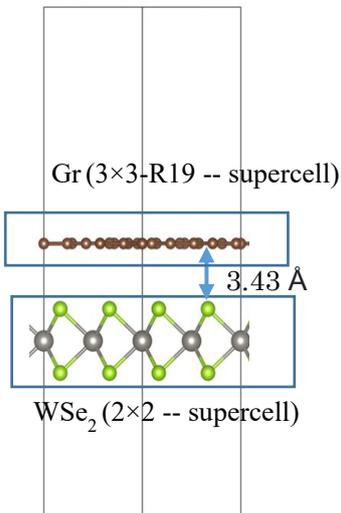


図 2 単層 WSe_2 とグラフェンのヘテロ構造

態計算を行なった。さらに全体にかかる力を計算し安定な構造を選定した。そのうちの一つを図 2 に示した。二つの薄膜間の距離は 3.43 Å でそれぞれのユニットセル 3x3 構造と 2x2 構造を重ねる事で比較的安定な構造となることが分かった。本物質は応答を計算するには規模が大きすぎる事が分かり、富岳での計算にこれ以降は切り替えた。

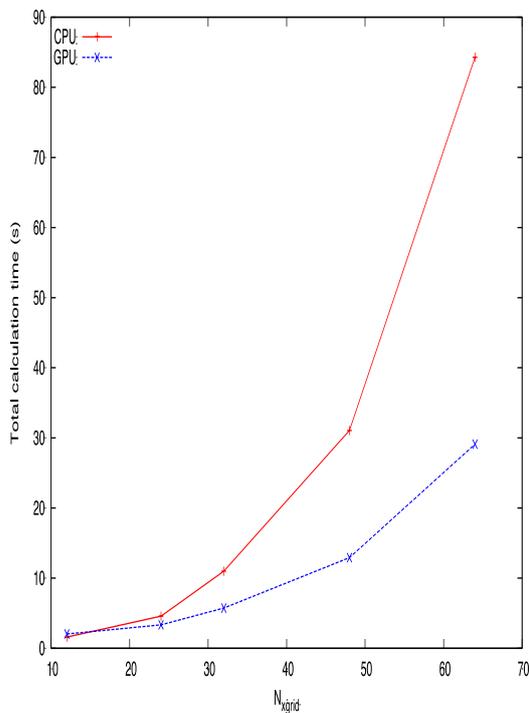


図 3 シリコンの計算時間の空間メッシュ量依存性の CPU と GPU の比較

達成目標：SALMON の SOI 部分の GPU ノードでの正常動作の確認。

結果：まず SALMON の GPGPU での計算が可能なループの候補を選定し、OpenACC 化した。少なくとも SGI8600 のコンパイラバージョンでは動作する事が確認できた。しかし筑波大学の GPU 搭載スパコンではコンパイラのバージョンが新しく動作時にエラーが出ることも判明した。GPU 対応のためには細かなコンパイラ対応が必要でありプログラム維持の困難さが垣間見えた。また、当初のプログラムでは実行効率が著しく低くなる事が分かった。そこで、ジョブ実行時に GPGPU におけるループ処理を指定したスクリプトを使う事で大幅に効率を向上させることに成功した。図 3 に CPU 2 ノードの場合 (赤) と GPGPU 1 ノード(青)による計算速度の計算サイズ依存性を示した。計算は時間発展 100 ステップとした。CPU は MPI 4 並列 OpenMP 20 並列のハイブリッド、GPU は MPI 16 並列とした。材料はシリコン 8 原子を含むユニットセルであり、横軸はユニットセルの一軸方向のメッシュ数、縦軸に実行時間を示した。総メッシュ数は横軸 N の 3 乗となる。メッシュが荒く、波動関数配列が小さい場合は CPU がわずかに早い、 $N=64$ では GPU は CPU の 3 倍弱の計算速度となっており非常に高い計算能力を発揮できる事が分かった。そのため、内殻励起など非常に細かなメッシュが必要な計算に適していると考えシリコンの内殻励起の計算を行なったが、ノードあたりのメモリ量が不足し意味のある計算を流すことができなかった。このような GPU の特性を踏まえ、全く新しい計算設定を考える必要があるという結論に至った。以上から最適な課題を考案できるまでしばらく GPU の利用を控えることとする。

(3) 今後の利用予定:

単層遷移金属ダイカルコゲナイトのヘテロ構造 (2 層でのワイル状態またはグラフェンとのヘテロ構造) の計算を進める。またレーザー加工シミュレーションや高次高調波発生など非線形性の高い現象の解析にもチャレンジしていく。具体的には、非線形励起過程における熱影響や欠陥状態の影響。高次高調波における電子再散乱過程とバルク電流の強度比関係とそのターゲットの厚み依存性などを考えている。

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) Weak and strong field optical response in ultrathin films of topological insulator, Arqum Hashmi, Yamada Shunsuke, Yabana Kazuhiro, Otake Tomohito, 70th JSAP Spring Meeting 2023, Japanese society of applied physics, 2023-03-15 (Oral)
- 2) Excitation dynamics in silicon using two-dimensional Three Temperature Model, Prachi Venkat, Otake Tomohito, The 70th JSAP Spring meeting 2023, The Japan Society of Applied Physics, 2023-03-15 (Oral)
- 3) Ab initio TDDFT study of high-harmonic generation from dielectric thin films, Yamada Shunsuke, Otake Tomohito, YITP Workshop Fundamentals in density functional theory (DFT2022), 京都大学基礎物理学研究所, 2022-12-12 (Oral)

- 4) Parametric dependence of laser induced damage threshold in silicon, Prachi Venkat, Otobe Tomohito, The 83rd JSAP autumn meeting 2022, The Japan Society of Applied Physics, 2022-09-20 (Oral)
- 5) 単層 TMD における円偏光動的 Franz-Keldysh 効果によるバレー分極制御の第一原理計算, 山田 俊介, 乙部 智仁, 日本物理学会 2022 年秋季大会(物性), 日本物理学会, 2022-09-13 (Oral)
- 6) Three-temperature model for laser processing of silicon and its dependence on laser parameters, Prachi Venkat, Otobe Tomohito, The 4th Smart Laser Processing Conference (SLPC-OPIC 2022), Japan Laser Processing Society (JLPS), 2022-04-19 (Oral)
- 7) Optical Field Control of Electron Dynamics in WSe2 monolayer, Arqum Hashmi, Shunsuke Yamada, Atsushi Yamada, Yabana Kazuhiro, Otobe Tomohito, 15th Pacific Rim Conference on Lasers and Electro-Optics (CLEO-PR2022), Japanese society of applied physics/IEEE photonics society, 2022.8.1 (Oral)
- 8) Sub-cycle control of valley polarization in WSe2 monolayer, Arqum Hashmi, Shunsuke Yamada, Atsushi Yamada, Yabana Kazuhiro, Otobe Tomohito, 8th International Conference on Attosecond Science and Technology in Physics, ATTO VIII, Springer Nature, 2022-07-11 (Oral)
- 9) Linear and nonlinear optical response of WSe2 monolayer by chiral resonant pulses, Arqum Hashmi, Shunsuke Yamada, Atsushi Yamada, Yabana Kazuhiro, Otobe Tomohito, OPIC 2022, OPTICS & PHOTONICS International Congress 2022, 2022-04-20 (Oral)
- 10) Weak and strong field control of valley polarization in WSe2 monolayer, Arqum Hashmi, Shunsuke Yamada, Atsushi Yamada, Yabana Kazuhiro, Otobe Tomohito, CLEO-2022, IEEE photonics society, 2021-11-30 (Oral)
- 11) Three-temperature model for laser processing of Silicon, Prachi Venkat, Otobe Tomohito, 16th International Conference on Laser Ablation (COLA 2021/2022), COLA 2021/2022 Organization Committee, 2022-04-24 (Oral)
- 12) 極限的パルス光とナノ物質の相互作用に対する第一原理計算, 山田 俊介, 乙部 智仁, 第 9 回 HPCI システム利用研究課題成果報告会, 高度情報科学技術研究機構, 2022-10-28 (Poster)

- 13) Development of first-principles computational methods for light-matter interaction in nano-scale thin films and magnetic systems, Yamada Shunsuke, Otake Tomohito, The 30th Anniversary Symposium of the Center for Computational Sciences at the University of Tsukuba, 筑波大学, 2022-10-14 (Poster)
- 14) Valley polarization in WSe₂ monolayer: CEP control of ω and $\omega+2\omega$ Pulses, Arqum Hashmi, Yamada Shunsuke, Yabana Kazuhiro, Otake Tomohito, 9th Time-Dependent Density-Functional Theory: Prospects and Applications, Centro de Ciencias de Benasque Pedro Pascual, 2022-10-26 (Poster)
- 15) Study of laser excitation and damage in silicon using Three-Temperature model, Prachi Venkat, Otake Tomohito, OPTO2022 Symposium, KPSI (QST), University of Osaka, 2022-06-28 (Poster)
- 16) Single-cycle two-color light-induced valley polarization in WSe₂ monolayer, Arqum Hashmi, Yamada Shunsuke, Otake Tomohito, Yabana Kazuhiro, OPTO Symposium on Photon and Beam Science 2022, QST-KPSI and ILE Osaka univ. , 2022-06-28 (Poster)
- 17) Numerical study of laser excitation in Silicon using Three-temperature model, Prachi Venkat, Otake Tomohito, Conference on Lasers and Electro-Optics (CLEO), OPTICA, 2022-05-15 (Poster)

招待発表

- 18) SALMON によるマルチスケール電子・光ダイナミクスシミュレーション, 乙部 智仁, マテリアルイノベーションを実現する先進的計算物質科学, JST CRDS, 2023-02-04
- 19) レーザー加工過程の学理：マイクロマクロシミュレーションによる解析, 乙部 智仁, 第 70 回応用物理学会春季学術講演会, 応用物理学会, 2023-03-16
- 20) Semi-classical approach for laser-metal interaction, Otake Tomohito 6th Asia-Pacific Conference on Plasma Physics, AAPPs-DPP, 2022-10-11
- 21) Semiclassical approach for laser-metal interaction, Otake Tomohito, AAPPs-DPP, AAPPs, 2022-12-11
- 22) 非線形レーザー物質相互作用の理論及び数値計算による研究, 乙部 智仁, OPTO2022, QST, 大阪大学, 2022-06-28

- 23) 電子・電磁場ダイナミクス融合シミュレーション SALMON の開発と発, 乙部 智仁,
CRDS 俯瞰ワークショップ「新しい計算物質科学の潮流」, JST CRDS, 2022-04-11

学術論文

- 24) Propagation effects in high-harmonic generation from dielectric thin films, Yamada Shunsuke, Otake Tomohito, David Freeman, Anatoli Kheifets, Kazuhiro Yabana, Physical Review B, 107(3), 035132, 2023-01, DOI:10.1103/PhysRevB.107.035132
- 25) Wavelength dependence of laser-induced excitation dynamics in silicon, Prachi Venkat, Otake Tomohito, Applied Physics A, 128, 810, 2022-08, DOI:10.1007/s00339-022-05928-9
- 26) High-order harmonic generation in semiconductors driven at near- and mid-infrared wavelengths, David Freeman, Yamada Shunsuke, Yamada Atsushi, Yabana Kazuhiro, Anatoli Kheifets, Physical Review B, 106, 075202, 2022-08, DOI:10.1103/PhysRevB.106.075202

外部資金調達

- 27) 2022 年度 Q-LEAP フラッグシッププログラム 先端レーザーイノベーション拠点「次世代アト秒レーザー光源と先端計測技術の開発」, 板倉 隆二, 石井 順久, 永島 圭介, 坪内 雅明, 圓山 桃子, 遠藤 友随, 今坂 光太郎, 乙部 智仁

数ジュールのレーザーパルスにより生成される層状イオンビーム

守田 利昌

量子ビーム科学部門 高強度レーザー科学研究グループ

(1) 利用目的:

レーザーイオン加速研究には、現在2つの道がある。1つは、より高エネルギー（200 MeV/u 程度）なイオンを生成する条件を研究（高強度レーザー開発を含む）する道であり、他の1つは、現在得られているエネルギーのイオンで実応用を目指す研究の道である。前者では、最大エネルギー付近のイオンに着目した研究となるが、一般にエネルギーが高いイオンほど生成個数は少なく、最大エネルギー付近のイオンの個数はかなり少なくなる。多くの実応用例では十分な個数のイオンが必要とされるため、この相反する2つの要求を満たす必要がある。本研究では、後者の道を取る。広く市販されているレーザー（比較的到低エネルギー）を用い、低エネルギーなイオン（10 MeV/u 程度以下）ではあるが、十分な個数を有するイオンビームの生成とその特性をコンピュータシミュレーションで明らかにし、その実応用を推進することを目的としている。

(2) 利用内容・結果:

シミュレーションは、レーザー粒子加速分野において代表的な手法である PIC（Particle In Cell）法で実施した。ターゲットは、作成と取り扱いが容易な薄膜とし、実応用例の一つである重粒子線治療では炭素イオンが用いられていることから、炭素薄膜ターゲットとした。また、薄膜厚は実現可能な極力薄い厚として $1.0\ \mu\text{m}$ とした。レーザーには、広く市販されているレーザーシステムの性能（エネルギー=2.5 J、スポット径=5.0 μm 、パルス幅=50 fs）を用い、斜め45度入射とした。計算における空間分割は $4000 \times 3456 \times 2500$ であり、用いた粒子数は 2×10^{11} 個である。

計算結果を図1に示す。図1(a)には、各時刻におけるレーザーとターゲット（生成炭素イオンの分布）を斜めから見た3次元の図が示されている。粒子分布は全体が、レーザーパルスは断面を表示するため $z > 0$ の領域を切り取った状態が表示されている。炭素イオンはそのエネルギー

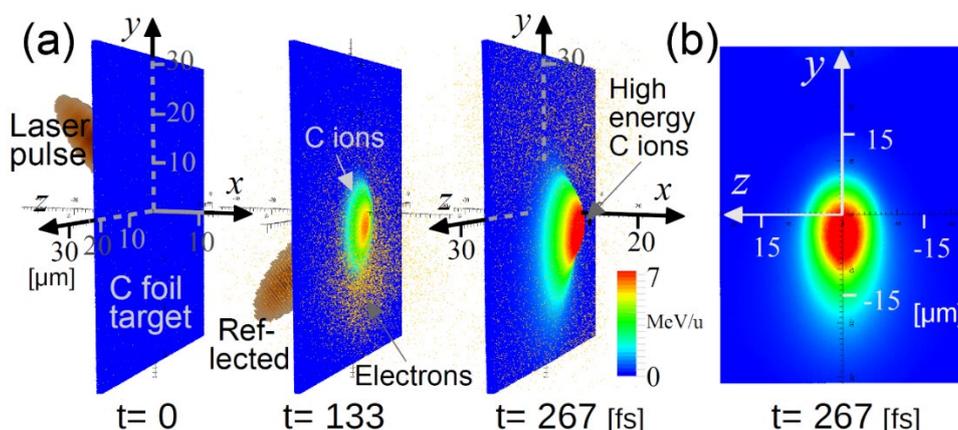


図1 各時刻におけるイオンの空間分布とレーザーパルス

の値で色分けされており、赤い部分は高エネルギーであることを示している。t=0 が初期状態であり、レーザーパルスはターゲットの-x側に定義され、斜め下方向に進行している。t=133 fsにおいて、レーザーパルスの一部はターゲットで反射し、レーザー照射部では加速イオンが生じている。t=267 fsにおいて、レーザーパルスとターゲットの相互作用は終了し、イオンの加速もほぼ終了している。この時の炭素イオンの最大エネルギーは約 9 MeV/u であり、レーザー照射面の反対側に生じている。レーザー強度が低いため、加速機構はクーロン爆発が主となっている。最大エネルギーのイオンは、イオンクラウドの+x側の先端に生じており、そこから-x方向へ行くに従い徐々にエネルギーは低下している。すなわち、イオンクラウド中のイオンは、+x側先端から、最大エネルギー、その次に高いエネルギー、その次、と順にエネルギー毎に層状に分布している。図 1(b)は、t=267 fsの結果を正面(x軸上)から見た図である。斜めレーザー入射においては、ターゲット上のレーザー照射面は縦長の楕円となるため、生成イオンの分布は縦長の楕円状となっている。また、最大エネルギーのイオンは、下方向(-y方向)へシフトした位置に生じている。

図 2 は、+x 方向へ加速されたイオンのエネルギースペクトル図である。+x 方向としているのは、生成イオンは一般に後方に設置された装置で受けて利用されるからである。生成イオン個数は、そのエネルギーに対して単調減少している。黒色実線はシミュレーション結果であり、赤色実線は理論考察から導かれた次式の値である。

$$N(\mathcal{E}) = \frac{n_0 \pi \ell \mathcal{E}_{\max} - \mathcal{E}}{a \mathcal{E}^2}$$

ここで、 n_0 はターゲット中のイオン個数密度、 ℓ は加速される領域のターゲット表面からの深さを示す値、 a はレーザーパルスの径方向(r 方向)の分布形状を電場で示した式 $E(r)=E(0)e^{-ar^2}$ の a 、 \mathcal{E}_{\max} は最大イオンエネルギーである。シミュレーション結果と理論式の値は良く一致している。 $\mathcal{E} < 1.5$ MeV/u においては、理論値はシミュレーション結果より大きな値を示している。

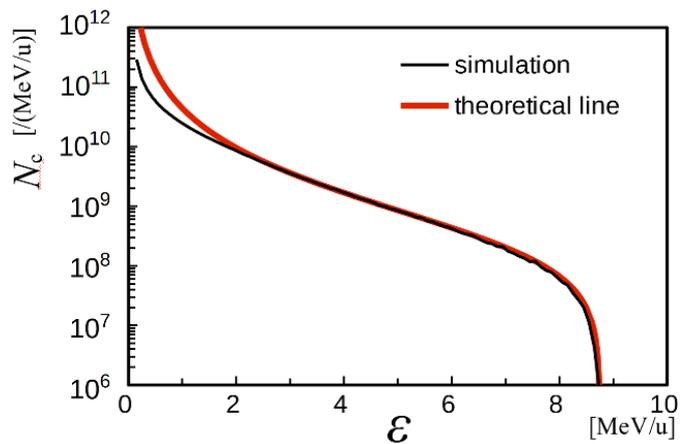


図 2 エネルギースペクトル図

(3) 今後の利用予定:

これまでの成果を生かし、イオンビーム生成条件とビーム特性評価の研究を進める。PIC シミュレーションにおいて、現象をより正確に解明し生成イオンビームの特性を正確に評価するには、3次元計算が必要となる。3次元計算では空間領域と用いる粒子数が著しく多くなるため必要とする計算機資源は増大し、高い計算能力を有する大型計算機が必要となる。よって、今後も大型計算機を用いて大規模計算を実施して行く予定である。

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学術論文

- 1) Characteristics of laminar ion beams accelerated via a few-joule laser pulse,
Toshimasa Morita, Physical Review Research, vol.4, 043020, 2022.10

第一原理分子動力学法に基づいた材料解析手法の開発

池田 隆司

量子ビーム科学部門 関西光科学研究所

放射光科学研究センター 量子シミュレーション研究グループ

(1) 利用目的:

実験データに頼らない第一原理シミュレーション手法は、高機能材料等の研究開発に計算科学からアプローチするために不可欠な基盤技術である。当課題では、新機能材料・物質の創製等に資するため、高精度密度汎関数電子状態計算法に基づいた第一原理分子動力学法と量子シミュレーション手法を融合し、シミュレーション技術の更なる高度化を図る。開発した手法を駆使して量子物性研究の観点から物質科学のフロンティアを開拓するとともに、新規材料の機能発現機構等の解明を目指す。令和4年度は、当課題で開発してきた第一原理リングポリマー分子動力学(FP-RPMD)コードの物質科学研究における有効性の実証を目標に研究開発を実施した。

(2) 利用内容・結果:

令和3年度に改良を施した FP-RPMD を水素クラスレート水ドレート C_1' 相に適用することにより開発した FP-RPMD コードの有効性を検証した。水素クラスレート水ドレート C_1' 相は、ごく最近、単結晶 X 線回折とラマン散乱実験に基づき 1.2 GPa, 298 K 付近に存在すると提案された新たな相であり、空間群 $R3c$ と $R\bar{3}c$ に属する 2 つの結晶構造が実験データに基づき提案されている [Y. Wang *et al.*, Phys. Rev. Lett. **125**, 255702 (2020)]。提案された 2 つの構造では水分子の水素原子位置に関するオーダーが異なり、前者では秩序化しているが後者では無秩序となっている。そこで、まず、提案されている結晶構造に対応する構造モデルの構築を行い、1.3 GPa, 300 K における定温定圧 FP-RPMD

シミュレーションを実行することによりそれぞれの構造における格子定数を求めた。次に、計算から得られた平均格子定数を用いて長時間の定温定積 FP-RPMD シミュレーションを実行し、得られたトラジェクトリを用いてラマンスペクトルを求めた。ラマンスペクトルの計算は、令和3年度に実施した課題において水素クラスレート水ドレート C_0 相、 C_1 相および C_2 相について良好な結果が得られた手続き [T. Ikeda, Chem. Phys. Lett. **792**,

シミュレーションを実行することによりそれぞれの構造における格子定数を求めた。次に、計算から得られた平均格子定数を用いて長時間の定温定積 FP-RPMD シミュレーションを実行し、得られたトラジェクトリを用いてラマンスペクトルを求めた。ラマンスペクトルの計算は、令和3年度に実施した課題において水素クラスレート水ドレート C_0 相、 C_1 相および C_2 相について良好な結果が得られた手続き [T. Ikeda, Chem. Phys. Lett. **792**,

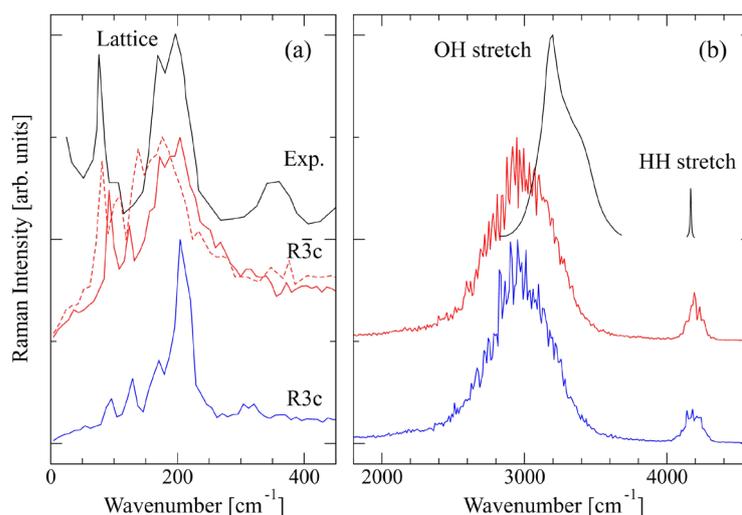


図 1 計算で求めた水素クラスレート水ドレート C_1' 相における (a) 格子振動領域と (b) 伸縮振動領域のラマンスペクトルと実験結果 (黒線) の比較。

139416 (2022)] に従って行った。計算により得られたラマンスペクトルと実験結果の比較を図 1 に示す。構築した 2 つの構造モデルは伸縮振動領域 (図 1(b)) についてはよく似たスペクトルを与えることがわかる。この結果は、伸縮振動領域のラマンスペクトルからどちらの構造が妥当であるか判別することは困難であることを示している。一方、格子振動領域 (図 1(a)) については $R\bar{3}c$ に属する構造によって実験スペクトルの特徴が良く再現されており、 $R\bar{3}c$ に属する水分子の水素原子位置が無秩序化した構造が C_i' 相の構造として妥当であることを明瞭に示している。比較のため、ファンデルワールス補正を考慮せずに一般化密度勾配近似 (GGA) レベルで実行した FP-RPMD シミュレーションから求めた格子振動領域のラマンスペクトルを図 1(a) に点線で示した。ファンデルワールス補正を無視するとピークが低振動数側にシフトし実験結果との一致が悪くなることがわかる。この結果はファンデルワールス補正を無視すると単位胞の体積が 9% 程度過大評価されることと整合しており、当課題で開発・改良した FP-RPMD が高精度で信頼性の高いシミュレーション手法であることを示すとともに、構築した構造モデルが妥当であることを示している。

(3) 今後の利用予定:

FP-RPMD コードの高速化等、第一原理経路積分分子動力学法に基づいた材料解析手法の開発を継続する。

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) 第一原理分子動力学に基づいた水素クラスレートハイドレートの分子振動スペクトルシミュレーション III, 池田 隆司, 日本物理学会 2022 年秋季大会, 東京, 2022.9 (Poster)
- 2) Ar 照射グラファイトにおける欠陥形成過程の第一原理分子動力学シミュレーション, 池田 隆司, 日本物理学会 2023 年春季大会, オンライン, 2023.3 (Poster)
- 3) Simulating Raman Spectra of H₂ Clathrate Hydrates from First Principles, T. Ikeda, The 6th QST International Symposium, Tokyo, Japan, Online, 2022.11 (Poster)

学術論文

- 4) First principles molecular dynamics study of proton disorder in C_i' phase of H₂ hydrate, T. Ikeda, Chemical Physics Letters, vol.811, 140252, 2023.1

量子エネルギー部門

ジャイロ運動論に基づく乱流輸送モデルの拡張

成田 絵美

量子エネルギー部門・先進プラズマモデリンググループ

(1) 利用目的:

核融合出力は密度と温度によって決定づけられる。トカマクプラズマでの輸送は乱流によって支配されるため、乱流粒子束・熱流束を算出し、密度と温度の分布予測に用いられる乱流輸送モデルが核融合出力の予測精度向上の鍵となる。乱流輸送モデルを統合型輸送コードに組み込むことで、乱流輸送以外の物理モデルと無矛盾に密度や温度を予測することが可能になる。従来はジャイロ運動論やジャイロ流体に基づく乱流輸送モデルが実験を良く再現するとして広く用いられてきたが、計算コストが高いために、統合型輸送コードを用いたシミュレーションの計算速度の低下の一因となり、多くの試行回数を要する運転シナリオの開発などへの適用は難しかった。そこで、機械学習モデルの一種であるニューラルネットワーク(NN)モデルを利用し、従来用いられてきた乱流輸送モデルを高速に模擬するモデルが開発されている。開発された機械学習乱流輸送モデルによる実験解析や運転シナリオ開発などの実用化も進んでいる。

申請者は NN モデルを利用した乱流輸送モデル DeKANIS の開発を進めてきた。他の NN 乱流輸送モデルは既存の輸送モデルを模擬する代理 NN モデルを構築しているが、DeKANIS の NN モデルは、ジャイロ運動論コードによる計算結果に基づいている。ジャイロ運動論コードによる輸送レベルの推定には、並列計算で 1,2 週間ほど掛かる非線形計算が必要であるため、その結果を用いて多数のデータ点で構成される訓練データを構築することは現実的ではない。そこで、本研究課題では、比較的計算時間が短いジャイロ運動論コードの線形計算から得られる支配的な不安定性の波数と線形成長率を訓練データとし、それを高速に算出する NN モデルを構築している。NN モデルから得られる波数及び線形成長率を飽和モデルに適用することで、輸送レベルを決定する。また、線形計算によって複数ある乱流輸送の駆動源ごとの寄与の大きさを評価できる。DeKANIS の NN モデルは駆動源ごとの寄与の大きさを決定する係数も算出するよう訓練されており、他の輸送モデルでは困難な輸送の駆動源の区別を実現している。

これまで DeKANIS を適用できるプラズマの主イオンは重水素のみであったため、令和 4 年度は同位体効果を導入するために SGI8600 を利用した。この拡張によって ITER の Pre-Fusion Power Operation 1 (PFPO-1)フェイズのプラズマを想定した輸送シミュレーションを軽水素仮定で行うことが実現した。

(2) 利用内容・結果:

DeKANIS は、電子の乱流粒子・熱流束を次のように表現する: $\bar{\Gamma}_e = \bar{D}(R/L_{n_e} + C_T R/L_{T_e} + C_P)$, $\bar{Q}_e = \bar{\chi}_e(R/L_{T_e} + C_N R/L_{n_e} + C_{HP})$ 。ここでは、準線形理論を仮定しており、 \bar{D} と $\bar{\chi}_e$ は規格化された粒子・熱拡散係数、 R/L_n と R/L_T は規格化された密度と温度の勾配値である。乱流粒子・熱流束は対角項と非対角項から構成され、 $C_{T,P,N,HP}$ は非拡散過程による流束の向きと大きさを表す係数である。非対角項の係数($C_{T,P,N,HP}$)と粒子・熱拡散係数(\bar{D} と $\bar{\chi}_e$)を求めることで、対角・非対角項を予測

できる。ただし、 $\bar{\Gamma}_e$ と \bar{Q}_e の対称性から $\bar{\chi}_e = \bar{D} (C_T + 1.5)/C_N$ が成り立つ。電子の粒子・熱流束に加え、イオンの熱流束を次のように表現する： $\bar{Q}_i = (\bar{\chi}_{i,\text{eff}}/\bar{\chi}_{e,\text{eff}})\bar{\chi}_{e,\text{eff}} R/L_{T_i} n_i/n_e T_i/T_e$ 。ここで、 $\bar{\chi}_{\text{eff}}$ は熱流束を対角項のみで表したときの熱拡散係数であり、 $\bar{\chi}_{i,\text{eff}}/\bar{\chi}_{e,\text{eff}}$ を求めることで、 \bar{Q}_e に基づいて \bar{Q}_i が算出される。

DeKANIS は NN モデルと乱流飽和モデルから構成されている。NN モデルはジャイロ運動論コード GKW の線形計算によって評価された $C_{T,P,N,HP}$, $\bar{\chi}_{i,\text{eff}}/\bar{\chi}_{e,\text{eff}}$, $\bar{k}_{\theta,\bar{\gamma}_{\text{max}}}$, $\bar{\gamma}_{\text{max}}$ を再現するよう訓練されている。ここで $\bar{k}_{\theta,\bar{\gamma}_{\text{max}}}$ はイオン温度勾配/捕捉電子モードが支配的な低波数領域において最大の線形成長率を持つ規格化波数であり、 $\bar{\gamma}_{\text{max}}$ はその規格化線形成長率である。混合長理論に基づく乱流飽和モデルは、NN から予測された $\bar{k}_{\theta,\bar{\gamma}_{\text{max}}}$ と $\bar{\gamma}_{\text{max}}$ を用いて \bar{D} を求める。

ジャイロ運動論コードを用いた同位体効果に関する理論研究の一つでは、衝突による乱流の減衰効果は主イオンの質量の増加に伴い強まることが指摘されている[M. Nakata, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **118** (2017) 165002]。この衝突の影響は線形計算から得られる準線形拡散係数 $\bar{\gamma}/\bar{k}_\theta^2$ を波数方向に積分した値 $\langle\bar{\gamma}/\bar{k}_\theta^2\rangle$ にも現れる[H. Urano and E. Narita, Plasma Phys. Control. Fusion **63** (2021) 084003]。図 1(a)は JT-60U のプラズマ変数を用いて GKW により $\bar{\gamma}/\bar{k}_\theta^2$ を求めた例である。主イオンの質量は重水素(D)又は軽水素(H)の値であり、その他の変数は二ケースで共通している。 $\langle\bar{\gamma}/\bar{k}_\theta^2\rangle$ は軽水素の方が高く、複数の実験装置で観測されている同位体効果の傾向と同様である。この傾向を DeKANIS で再現することを目標にするが、DeKANIS の NN モデルは低波数領域において最大の線形成長率 $\bar{\gamma}_{\text{max}}$ と対応する波数 $\bar{k}_{\theta,\bar{\gamma}_{\text{max}}}$ を算出しており、 $\bar{\gamma}_{\text{max}}/\bar{k}_{\theta,\bar{\gamma}_{\text{max}}}^2$ (図 1(a)中の丸で示す値)では同位体効果による $\langle\bar{\gamma}/\bar{k}_\theta^2\rangle$ の変化を捉えられない。そこで、波数の増加に伴う $\bar{\gamma}/\bar{k}_\theta^2$ の減少は $\bar{k}_{\theta,\bar{\gamma}_{\text{max}}}$ が高いほど緩やかになり $\langle\bar{\gamma}/\bar{k}_\theta^2\rangle$ は増加することを利用し、 $\langle\bar{\gamma}/\bar{k}_\theta^2\rangle$ を $\langle\bar{\gamma}/\bar{k}_\theta^2\rangle_{\text{model}} = c(\bar{\gamma}_{\text{max}}/\bar{k}_{\theta,\bar{\gamma}_{\text{max}}}^2) \times (\bar{k}_{\theta,\bar{\gamma}_{\text{max}}}/\bar{k}_{\theta,\text{lim}})^{\alpha}$ で表す。定数部は $c = 2.19, \alpha = 1.15$ であり、多ケースに対する $\langle\bar{\gamma}/\bar{k}_\theta^2\rangle$ を表現するように回帰から求めた。

$\bar{k}_{\theta,\text{lim}}$ は考慮する波数の上限値であり、1.2 としている。図 1(b)に示すように、重水素・軽水素の $\langle\bar{\gamma}/\bar{k}_\theta^2\rangle$ をモデルにより再現できる。得られたモデル $\langle\bar{\gamma}/\bar{k}_\theta^2\rangle_{\text{model}}$ を DeKANIS の乱流飽和モデルに導入する。

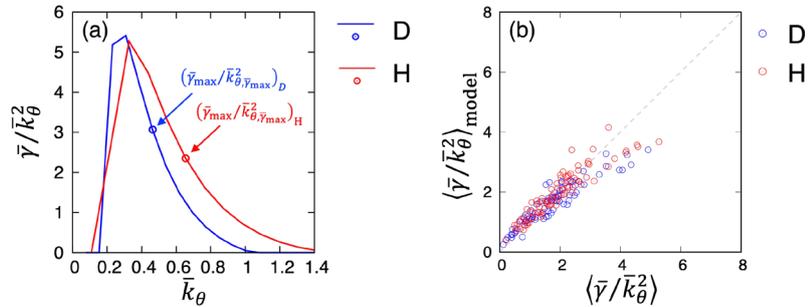


図 1: (a)準線形拡散係数 $\bar{\gamma}/\bar{k}_\theta^2$ の波数方向分布。線上の丸は $\bar{\gamma}$ が最大値を取る波数での $\bar{\gamma}/\bar{k}_\theta^2$ を示す。(b) $\langle\bar{\gamma}/\bar{k}_\theta^2\rangle$ とそれを表現するモデル $\langle\bar{\gamma}/\bar{k}_\theta^2\rangle_{\text{model}}$ の比較。

飽和モデルに加えて、飽和モデルに渡す $\bar{k}_{\theta,\bar{\gamma}_{\text{max}}}$ 及び $\bar{\gamma}_{\text{max}}$ を算出する NN モデルも改良する必要がある。これまでの NN モデルは主イオンが重水素であることを仮定した計算結果で構成された訓練データに基づいていたため、主イオンの粒子種を区別していなかった。そこで入力変数として主イオンの質量数を追加し、軽水素を主イオンとした計算を実施して訓練データに加えた。加えた軽水素のデータ数は 3,773 点であり、既存の重水素のデータ数(16,133 点)と比べると十分とは言えないが、軽水素と重水素の違いの傾向を捉えることが可能になった。

改良した飽和モデルと NN モデルを組み合わせ、ITER PFPO-1 フェイズを想定した温度・密度分布を統合コード TOPICS で予測した(図 2)。ここでは重水素・軽水素プラズマの二ケースを示す。プラズマ電流は 5MA、トロイダル磁場は 1.8T であり、電子サイクロトロンによる 20MW の加熱を与えている。規格化小半径 $\rho > 0.85$ の周辺部は、統合モデル GOTRESS+において EPED-1 を用いて評価した結果で固定している。 $\rho < 0.25$ の磁気軸付近は流束を外挿で求めているため、 $0.25 \leq \rho \leq 0.85$ に着目すると、電子の温度・密度は重水素の方が高く、重水素の方でより乱流が抑えられる効果が現れている。これは実験観測と同様の傾向である。イオン温度は軽水素の方が僅かに高く、これは衝突による電子・イオン間の熱緩和量は軽水素の方が大きいためであると考えられる。

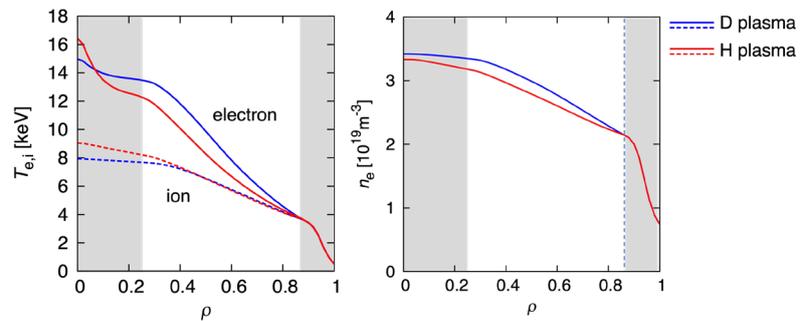


図 2: 温度・密度の半径方向分布予測の結果。

(3) 今後の利用予定:

今後も DeKANIS の改良を進め、令和 5 年度には三重水素まで扱えるように改良し、燃焼プラズマの予測を行う予定である。そのために現状では不十分な軽水素の訓練データ数を増加させるとともに、主イオンが三重水素であることを仮定したジャイロ運動論コードの線形計算を実施する。

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) 機械学習を利用した半経験乱流輸送モデルの拡張と汎用性の検証, 成田 絵美, 本多 充, 仲田 資季, 吉田 麻衣子, 林 伸彦, 中山 智成, 第 39 回プラズマ・核融合学会年会, 富山, 2022.11 (Oral)
- 2) 磁場閉じ込め核融合プラズマのデータ駆動型研究の進展, 成田 絵美, 第 70 回応用物理学会春季学術講演会, 東京, 2023.3 (Oral)
- 3) 水素同位体効果を考慮した準線形乱流輸送モデリングと温度・密度分布予測, 成田 絵美, 本多 充, 仲田 資季, 中山 智成, 林 伸彦, 日本物理学会 2023 年春季大会, オンライン, 2023.3 (Oral)

学術論文

- 4) Modification of a machine learning - based semi - empirical turbulent transport model for its versatility, E. Narita, M. Honda, M. Nakata, N. Hayashi, T. Nakayama, M. Yoshida, Contributions to Plasma Physics, e202200152, 2023.1

ダイバータプラズマ中の不純物輸送制御に関する研究

矢本 昌平

量子エネルギー部門・先進プラズマモデリンググループ

(1) 利用目的:

JT-60SA や ITER、原型炉においては、不純物入射によりダイバータへの熱負荷を低く保ちつつ、高性能炉心プラズマを維持する必要がある、周辺プラズマでの不純物の輸送制御手法の確立は必須の課題である。本プロジェクトでは、QST にて開発中の統合ダイバータコード SONIC を用いて、単一種だけでなく複数種の不純物入射を考え、(1)JT-60SA 及び ITER プラズマ予測計算、(2) 核融合反応により発生する He 灰も含めた原型炉プラズマ予測計算を行う。(1)(2)を通じてシミュレーションコードの物理モデルの妥当性検討、及びプラズマ-不純物間の複雑な相互作用とその特性を明らかにし、JT-60SA、ITER、原型炉の運転に向けた不純物輸送制御手法を確立することを目的とする。

(2) 利用内容・結果:

JT-60SA 計算では、Ar 入射時に達成目標であるセパトロクス電子密度及びダイバータ熱負荷の目標値を満たす燃料ガス及び不純物入射量等の運転条件を求めることができ、さらに炉心プラズマ輸送コードとの連携計算に必要な炉心端での各価数の不純物密度を評価することができた。また、図 1 に示す TOPICS-SONIC 統合コード近代化では現行バージョンの SONIC と TOPICS の不純物輸送計算部分の統合インターフェースの開発に成功し、さらにテスト計算によりコードの妥当性の確認ができた。原型炉計算では、日本及び欧州のそれぞれの配位における He 排気シミュレーションを実施した。

以上の成果から、アクションプランにおける、「ダイバータプラズマシミュレーション開発」、及び「ダイバータ SMC の重点開発・利用」を加速することができた。

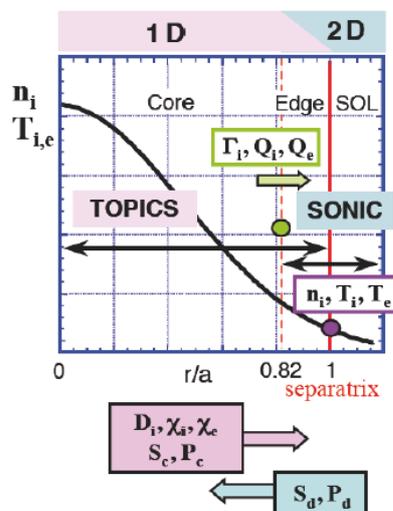


図 1 TOPICS-SONIC 計算の概略図。

(3) 今後の利用予定:

JT-60SA プラズマ予測計算では、JT-60SA の典型運転シナリオを対象とし、炭素壁、金属壁の場合それぞれの壁材不純物を考慮した上で、①Ar 入射、②Ne 入射、③Ar+Ne 混合の不純物入射ケースについて、ダイバータ熱負荷や炉心端密度から JT-60SA シナリオの成立性の調査を行う。さらに、それぞれの不純物種入射ケースにおける不純物輸送・放射特性及び炉心への不純物侵入量について系統的に評価を行う。また、ITER プラズマ予測計算では①N₂ 入射、②Ne 入射の不純物入射ケースの計算を行う。以上を通じて ITER や原型炉にも応用可能な不純物輸送制御手法の確立に寄与する。また、炉心プラズマと周辺プラズマの輸送を矛盾なく解く TOPICS-SONIC 統合コードのテスト計算を行うことで開発をサポートし、JT-60SA 実験解析のための基盤構築を推進する。

原型炉シミュレーションにおいては、He 灰排出シミュレーションや、SOL ダイバータ熱排出に適した不純物種検討、及び低衝突度環境の SOL プラズマで発生する熱伝導運動論効果の研究を行う。原型炉ではこれまで Ar 以外の希ガスを用いた熱放射・排出シナリオが十分検討されてこなかったため、Ne/Kr/Xe の放射シナリオ検討を行い、各不純物種の単体使用時に予想される SOL ダイバータプラズマ運転可能領域を評価する。また、ITER や原型炉 SOL では既存装置より衝突度が低下するため、適切な運動論効果補正をプラズマ流体モデルに施す必要がある。本課題ではイオン熱伝導効果の感度解析計算を行い、熱伝導運動論効果が原型炉クラスの SOL プラズマ形成に果たす役割と影響を明らかにすることを目指す。

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) Recent Development of Plasma Exhaust and Divertor Design for Tokamak DEMO Reactors, N. Asakura, 25th International Conference on Plasma Surface Interactions in Controlled Fusion Devices, Online, 2022.6 (Oral)
- 2) 環状プラズマシミュレーションの現状と展望：ダイバータシミュレーション, 星野 一生, 矢本 昌平, 本間 裕貴, 第 39 回プラズマ・核融合学会年会, 富山, 2022.11 (Oral)
- 3) BA 原型炉設計活動における SONIC シミュレーションによる EU 原型炉ダイバータ検討と SOLPS による評価との比較, 朝倉 伸幸, 星野 一生, 山本 龍人, Fabio Subba, Sven Weisen, 本間 裕貴, 坂本 宜照, 原型炉設計合同特別チーム, 第 39 回プラズマ・核融合学会年会, 富山, 2022.11 (Oral)

- 4) Simulation studies of He and particle exhaust in detached divertor for JA DEMO design, Nobuyuki Asakura, Kazuo Hoshino, Yuki Homma, Yoshiteru Sakamoto, Shinsuke Tokunaga and the Joint Special Design Team for Fusion DEMO, 4th Technical Meeting on Divertor Concepts IAEA Headquarters, Vienna, Austria, 2022.11 (Oral)
- 5) SONIC シミュレーションによる日本の原型炉ダイバータでの熱・ヘリウム排出の最近の進展, 朝倉 伸幸, 星野 一生, 本間 裕貴, 坂本 宜照, 原型炉設計合同特別チーム, 第 27 回 NEXT(数値トカマク)研究会, 京都, 2022.8 (Oral)
- 6) Progress of SONIC simulations for divertor detachment in EU DEMO and He exhaust in JA DEMO, Nobuyuki Asakura, K. Hoshino, Y. Homma, F. Subba, S. Wiesen, IFERC-CSC Workshop on JFRS-1 projects for FY2021, Online, 2022.5 (Oral)
- 7) 原型炉 SOL プラズマにおけるイオン熱伝導の運動論効果の研究と統合ダイバータシミュレーションへの応用, 本間 裕貴, プラズマシミュレータシンポジウム 2022 (PSS2022) 招待講演, オンライン, 2022.9 (Oral)
- 8) Improvements of impurity transport modelling by integrated divertor code SONIC and its application to predictive simulation of future devices, Yamoto Shohei, Hoshino Kazuo, Homma Yuuki, Nakano Tomohide, Sano Ryuichi, Hayashi Nobuhiko, 25th International Conference on Plasma Surface Interactions in Controlled Fusion Devices, Online, 2022.6 (Oral)

学術論文

- 9) Development and Application of SONIC Divertor Simulation Code to Power Exhaust Design of Japanese DEMO Divertor, N. Asakura, K. Hoshino, Y. Homma, Y. Sakamoto, Processes, vol.10, no.5, 872, 2022.4

研究開発報告書

- 10) ANNUAL REPORT 2022 Japanese Contributions to the IFERC DEMO Design Activity (DDA), Nobuyuki Asakura, IFERC2-DPA01JA.EU-Del-3, 2023.2

R5F2コードを用いた核燃焼プラズマの粒子制御に向けたシミュレーション研究

矢木 雅敏

量子エネルギー部門・プラズマ理論シミュレーショングループ

(1) 利用目的:

核融合炉において燃料粒子補給法の確立は、核燃焼制御のための重要課題である。しかし原型炉クラスの高温度プラズマでは、ペレットで燃料供給しても炉心外側(最外殻磁気面で規格化したプラズマ小半径の 80-90%程度)までしか到達せず、中心密度のピーキングは自発的な粒子ピンチに依存するため、信頼性のある予測が困難となっている。近年ジャイロ運動論による粒子輸送研究が精力的に行われているが、局所的モデルによる定常解析が主流であり、磁気島等 MHD の影響を考慮するために大域的モデルによる非定常解析を行うことが重要である。本研究では流体モデルを用いた大域的シミュレーションによりプラズマ乱流と MHD モードの相互作用を考慮し、粒子輸送の特性を明らかにする。

(2) 利用内容・結果:

本研究では、1次元領域分割法に基づく R5F コードと 2次元領域分割法に基づく R5F2 コードのベンチマークを進めた。2つのコードでベンチマーク結果が一致しないという問題があったが、これまでの作業により集団通信の実装に問題があることが判明し、その部分の修正を行ったところ、線形、非線形問題に対するベンチマークでよい一致を得た。このコードを用いて、局所ジャイロ運動論コード DFFEFI において以前得られていた反転密度勾配における内向きの粒子フラックスの生成機構に関して流体モデルにより詳細解析を行った。

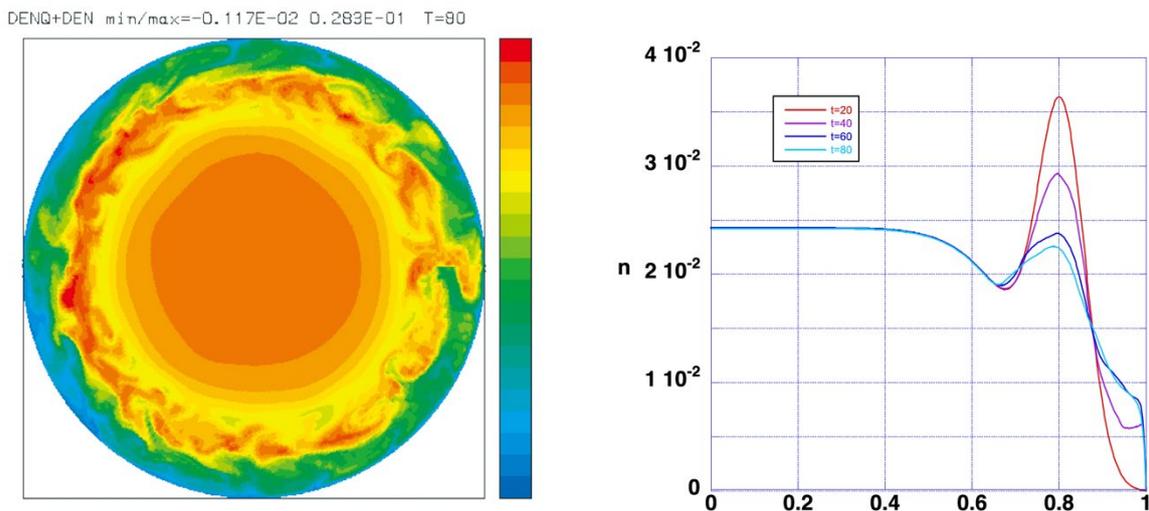


図 1 : $t=80$ (ポロイダルアルフヴェン時間) における密度揺動の等高線図 ($\zeta=0$ 断面、 ζ トロイダル角) (左図)、磁気面平均された全密度分布の時間発展 ($t=20, 40, 60, 80$)

この結果、初期に密度ハンプをもつ分布を与えてシミュレーションを行うと強い乱流が負の密度勾配をもつ部分($r>0.8$)で発達し (図 1 左図)、分布の緩和が起きることが明らかとなった (図 1 右図)。境界条件として $r=1$ でディリクレ境界条件を課しているが密度が境界付近に停留しており、SOL モデルとの接続等、モデルの拡張が必要であることが明らかとなった。次に、密度ソースを実装し、標準的な密度分布からハンプを持った密度が形成される過程において乱流がどのように発展するかを調べた。図 2 に密度揺動エネルギーの時間発展 (左図) 及びイオン温度揺動の等高線図 (右図) を示す。ここでは次元領域分割版 R6F コードを用いてシミュレーションを行った。これは渦方程式、一般化されたオームの法則、密度の発展方程式、イオンの磁力線方向の運動方程式、電子温度の発展方程式、イオン温度の発展方程式の 6 場から構成されるモデルであり、イオン温度勾配駆動ドリフト波不安定性 (以下「ITG」を呼ぶ) を記述できるモデルとなっている。

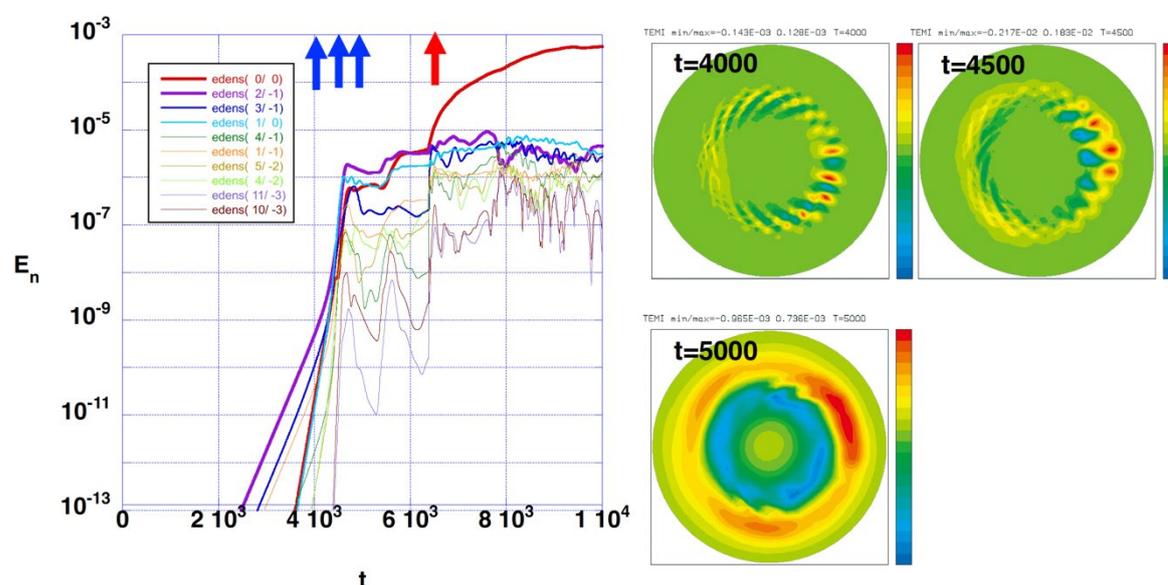


図 2 : 密度揺動エネルギーの時間発展 (左図)。支配的な MHD (長波長) フーリエモード (m,n) の時間発展を示した。飽和前後の時刻におけるイオン揺動の等高線図 ($\zeta=0$ 断面、 ζ トロイダル角) (右図)。

計算の手順としては、初期分布として ITG 不安定なイオン温度分布を与え、シミュレーションを行う。線形不安定な ITG が成長し、非線形飽和を起こし、イオン温度分布が緩和する。左図において青の矢印で示す時刻におけるイオン温度揺動の等高線図を右図に示す。 $t=4000$ において ITG の固有関数が形成され $t=5000$ では帯状のイオン温度揺動が発展し、その結果、イオン温度分布の緩和が起これ、ITG に対して中立安定な分布が形成される。時刻 $t=6400$ において密度ソースを印可しその後の分布の発展を追跡した。図 3 に密度ソース印可後の磁気面平均された全密度及び全電子温度分布の時間発展を示す。このシミュレーションではイオン温度と電子温度の初期分布は同じであり、揺動振幅もほとんど等価となって

いる。

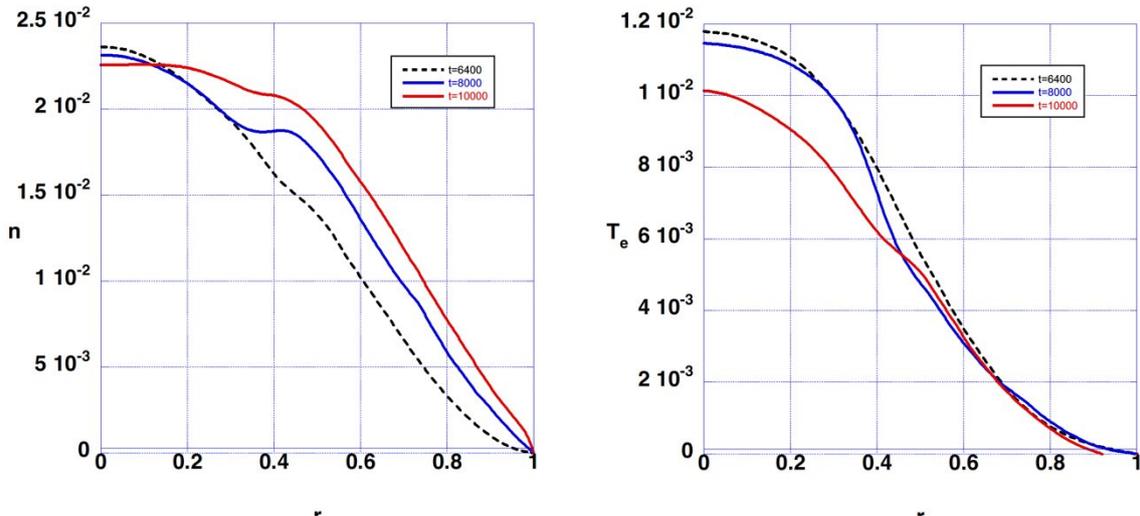


図3：密度ソース印可後の磁気面平均された全密度及び全電子温度分布の時間発展。

$r=0.5$ に(2,1)の磁気島が形成されており、全密度分布において $t=8000$ でその近傍で密度の平坦化が起こっているのはその影響と考えられる。一方、電子温度は時間とともに減少傾向にあるが磁気島は熱障壁となり $r=0.5$ 内部での熱拡散を抑制していることが判明した。図4に $t=10000$ におけるヘリカル関数、密度揺動、全密度、全電子温度の等高線図を示す。

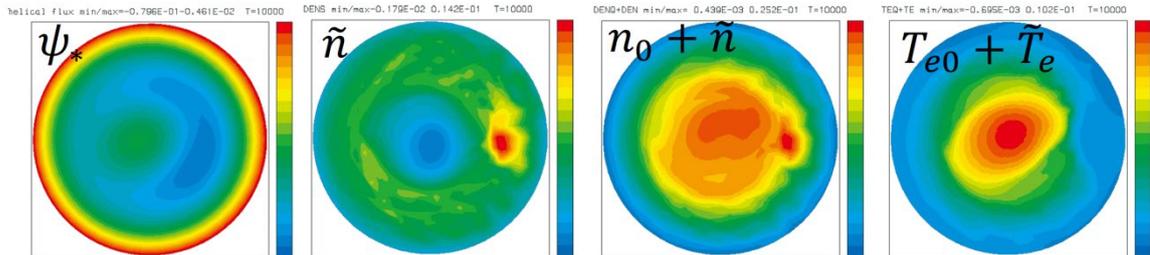


図4： $t=10000$ におけるヘリカル関数、密度揺動、全密度、全電子温度の等高線図 ($\zeta=0$ 断面、 ζ トロイダル角)。

このシミュレーションでは密度ソースに起因する密度揺動は均一に内側へ拡散せず、磁気島構造を回り込むような伝搬が起こることなど、興味深い結果が得られた。

(3) 今後の利用予定：

今回のシミュレーションでは乱流の発展は観測できなかった。その理由として1) 十分長い時間を追跡できておらず、乱流が発達するには不十分であった、2) 温度ソースを考慮しておらず、乱流を駆動する源が微弱であった等が考えられる。今後の課題としてシミュレーション研究を継続する予定がある。

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) Particle Transport in Fusion Plasmas, Yagi Masatoshi, 20th Burning Plasma Simulation Initiative (BPSI) Meeting, Research Institute for Applied Mechanics(RIAM), Kyushu University, 2023-01-05
- 2) Energy-selective confinement of alpha particles during benign sawtooth crashes in a large tokamak, Andreas Bierwage, Shinohara Koji, Yevgen O. Kazakov, Vasily G. Kiptily, Philipp Lauber, Massimo Nocente, Ziga Stancar, Sumida Shuhei, Yagi Masatoshi, Jeronimo Garcia, Ide Shunsuke, 2023 年度 NIFS 一般共同研究「MHD 及び高エネルギー粒子が核融合炉心プラズマに与える影響に関する研究会」共催 "核融合エネルギーフォーラムのプラズマ物理クラスターMHD 安定性・高エネルギー粒子サブクラスター会合", 自然科学研究機構 核融合科学研究所(NIFS) + 核融合エネルギーフォーラム(FEFJ), 2022-12-15
- 3) Development of reduced 6-field MHD code for particle transport, Yagi Masatoshi, Modeling and Simulation of Magnetic Fusion Plasma に関する日韓ワークショップ, QST, 2022-11-18

招待発表

- 4) A BOUT++ extension for full annular tokamak edge MHD and turbulence simulations, Seto Haruki, Yagi Masatoshi, Xueqiao Xu, Benjamin D. Dudson, 2023 BOUT++ workshop, Lawrence Livermore National Laboratory, 2023-01-09
- 5) A BOUT++ extension for full annular tokamak edge MHD and turbulence simulations, Haruki Seto, Yagi Masatoshi, Xueqiao Xu, Benjamin D. Dudson, 20th International Congress on Plasma Physics (ICPP2022), KFE and UNIST, 2022-12-01
- 6) Particle Transport in Fusion Plasmas, Yagi Masatoshi, 20th International Congress on Plasma Physics, 現地実行委員会, 2022-12-01
- 7) Energy-selective confinement of fusion-born alpha particles during internal relaxations in a tokamak plasma, Andreas Bierwage, Shinohara Koji, Yevgen O. Kazakov, Vasily G. Kiptily, Philipp Lauber, Massimo Nocente, Ziga Stancar, Sumida Shuhei, Yagi Masatoshi, Jeronimo Garcia, Ide Shunsuke, JET Contributors, 20th International Congress on Plasma Physics (ICPP2022) , KFE, UNIST, 2022-11-28

学術論文

- 8) A charge-momentum-energy-conserving 1D3V hybrid Lagrangian-Eulerian method for Vlasov-Maxwell system, Shiroto Takashi, Matsuyama Akinobu, Yagi Masatoshi, *Journal of Computational Physics*, 469, 111522, 2022-08, DOI:10.1016/j.jcp.2022.111522
- 9) A BOUT++ extension for full annular tokamak edge MHD and turbulence simulations, Seto Haruki, Dudson, Benjamin D. , Xu, Xue-Qiao, Yagi Masatoshi, *Computer Physics Communications*, 283, 108568, 2022-10, DOI:10.1016/j.cpc.2022.108568
- 10) Global gyro-kinetic study of magnetic shaping effects on linear trapped electron mode instability in normal/reversed magnetic shear plasmas, Wei Wang, Kenji Imadera, Seto Haruki, Yagi Masatoshi, *Nuclear Fusion*, 62(11), 112006, 2022-09, DOI:10.1088/1741-4326/ac6818
- 11) Energy-selective confinement of fusion-born alpha particles during internal relaxations in a tokamak plasma, Andreas Bierwage, Shinohara Koji, Yevgen O. Kazakov, Vasily G. Kiptily, Philipp Lauber, Massimo Nocente, Ziga Stancar, Sumida Shuhei, Yagi Masatoshi, Jeronimo Garcia, Ide Shunsuke, JET Contributors, *Nature Communications*, 13, 3941-1 - 3941-10, 2022-07, DOI:10.1038/s41467-022-31589-6

ダイバータ熱負荷の予想確度向上に向けた 2.5 次元ダイバータ輸送コードの開発

瀬戸 春樹

量子エネルギー部門・プラズマ理論シミュレーショングループ

(1) 利用目的:

エネルギー増倍率 $Q=10$ を目標とした ITER 運転シナリオ(ITER- $Q=10$ シナリオ)や原型炉では H モード放電が標準運転モードであるが、ダイバータ構造材の工学的要請からダイバータ上の最大熱負荷を $10\text{MW}/\text{m}^2$ 以下に設計する必要がある。一方で、ITER- $Q=10$ シナリオでは 100MW 程度、日本の原型炉設計 (JA-DEMO) では 250MW 程度の熱がコア領域から磁力線がダイバータ板へと接続する周辺領域へと放出されるため、周辺領域における熱輸送予測の確度を向上させることは核融合発電の実現に向けた重要課題の一つである。本課題では周辺 MHD・乱流コード BOUT++を用いて、低計算負荷の二次元輸送コードと三次元周辺 MHD 乱流コードを結合した 2.5 次元の統合ダイバータ輸送コードを開発する。電子系とイオン系の熱輸送チャンネルを考慮した統合ダイバータ輸送シミュレーションを行い、既存装置の Eich 則の外挿性、電子・イオン熱輸送チャンネルがダイバータ熱負荷の内外非対称性に与える影響、ドリフト輸送や乱流輸送 (異常拡散) が周辺熱輸送分布に与える影響等を検証する。これらによって周辺統合輸送コード開発の高度化に貢献する。

(2) 利用内容・結果:

令和 3 年度の成果報告書で報告した周辺 MHD 乱流コード BOUT++でトーラス大円全周を計算領域に採用してトーラス大円方向に大きい構造と微細な乱流構造を同時に整合良く解く手法の詳細を取りまとめた論文を Computational Physics Communications 誌から出版するとともに、本成果に基づき International Congress on Plasma Physics 2022 の招待講演を行うなど成果の発信を行なった。

また、上記の論文では、トーラスの大円全周を計算して不安定性の相互作用を整合よく取り入れた短波長の周辺局在化モード (ELM) の大規模数値シミュレーションにおいて、ELM 発生初期のエネルギー放出は緩やかだが、その後に急峻なエネルギー放出が起こるという二段階の熱放出過程が得られることを報告したが、その物理機構の詳細は明らかにならなかった。

そこで、令和 4 年度はトーラスの大円方向に課す対称性 ($N=1, 2, 4$) を変化させて短波長の不安定性 ($n\sim 32$, n はトロイダルモード数) から駆動される ELM の数値シミュレーションを行い、エネルギー放出を駆動するプラズマ圧力揺動とプラズマを閉じ込める磁力線の空間構造を解析した。ここで、各計算ではカットオフモード数 ($n=80$) 以下のトロイダルモード数が N 飛ばし ($n=0, N, 2N, \dots, 80$) で計算される。

トーラスの大円全周 ($N=1$) を計算した ELM シミュレーションでは短波長モードが飽和すると非線形結合により、磁力線の繋ぎ変わりが起こり、孤立した島構造を持つ $m/n=2/1$ の磁気島 (m はポロイダルモード数) が形成されること、磁気島が存在する領域では揺動の成長

が阻害されエネルギー放出が穏やかになるが、さらに非線形発展が進み磁気島が消失すると揺動が広い領域で発達できるようになるため放出量の増加が急峻となることが明らかとなった。また、トロイダル方向に N 回の対称性を課すと磁気島の構造が微細化 ($m/n=2N/N$) して磁気島が消滅するまでの時間が早まるため、大きな対称性を課すほど磁気島の形成によるエネルギー放出の抑制効果が小さくなることが明らかとなった。この結果は、短波長 ELM の非線形結合から大域的な長波長の磁気島が形成されてエネルギーの放出が抑制されるが、同効果を整合よく評価するためにはトーラス大円の全領域を対象として全てのトロイダルモード間の非線形結合を計算する必要があることを示している。

現在は、物理解析を取りまとめた論文の執筆を行うとともに、開発した手法の実験解析への適用に向けてダイバータ配位で長波長と短波長の成分を同時に解く三次元乱流計算コードの整備を進めている。三次元乱流コードはまず ELM 熱負荷計算に適用してコードの妥当性を検証したのち、二次元輸送コードと結合した統合コードへと拡張する予定である。

(3) 今後の利用予定:

令和 5 年度は開発した手法の実験解析への適用に向けてダイバータ配位で長波長と短波長の成分を同時に解く三次元乱流計算コードの整備を進めている。令和 6 年度以降は、別大型計算機で実施しているシミュレーション課題に本課題を統合することを検討しているため、現時点で利用予定はない。

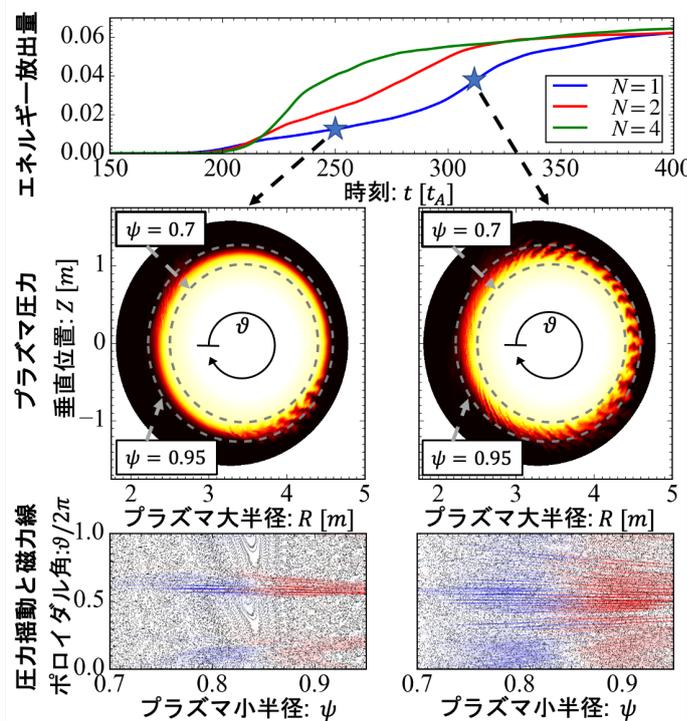


図: ELM 計算時に課すトロイダル対称性 N に対するエネルギー放出量の時間発展 (上)、フルトーラス ($N=1$) 計算におけるエネルギー放出量の増加が緩やかな時刻 ($t=250t_A$) と急激な時刻 ($t=313t_A$) におけるプラズマ圧力のポロイダル断面 (中)、圧力揺動 (赤青) と磁力線 (黒) のポアンカレ図 (下)。エネルギー放出が緩やかな時刻では非線形過程から磁気島 ($m/n=2/1$) が形成されて揺動の発達が磁気島のない領域に制限されるため放出量の増加が緩やかになるが、非線形発展が進み磁気島が消失すると揺動が広域で発達できるようになり放出量の増加が急峻となる。

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

招待発表

- 1) A BOUT++ extension for full annular tokamak edge MHD and turbulence simulations, H. Seto, B.D. Dudson, X.Q. Xu, M. Yagi, 20th International Congress on Plasma Physics (ICPP2022), HICO(GYEONGJU Hwabaek International Convention Center), Gyeongju, Korea, 2022.12.1
- 2) A BOUT++ extension for full annular tokamak edge MHD and turbulence simulations, H. Seto, B.D. Dudson, X.Q. Xu, M. Yagi, 2023 BOUT++ workshop, High Performance Computer Innovation Center (HPCIC), Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, California, USA, 2023.1.9

学術論文

- 3) A BOUT++ extension for full annular tokamak edge MHD and turbulence simulations, H. Seto, B.D. Dudson, X.Q. Xu, M. Yagi, Comput. Phys. Commun. 283 (2023) 108568

外部資金獲得

- 4) 科学研究費助成事業(学術研究助成基金助成金), 原型炉に向けた 2.5 次元統合輸送コードによるダイバータ熱負荷評価の研究, 瀬戸 春樹

磁気流体力学に対する先進的アルゴリズム開発とその実証実験

白戸 高志

量子エネルギー部門・プラズマ理論シミュレーショングループ

(1) 利用目的:

トカマク型核融合装置の実形状を考慮した磁気流体シミュレーションの実現を目指して、非構造格子を用いた3次元シミュレーションコードの開発が各国で行われている。核融合炉で観測される固有モードでは様々な運動論的及び2流体的效果が重要となるため、これらのコードは抵抗性・拡張磁気流体方程式に基づいて開発されており、主に高精度な無散逸スキームと陰解法を組み合わせることにより計算の安定化を図っている。その結果、シミュレーションの数値安定性は物理的な散逸係数に大きく依存することになり、解の安定性を保証することが難しくなってしまう。本研究では、運動論・2流体効果を加えない理想磁気流体方程式に対する安定な数値技法を開発することにより数値安定性の高いコードを開発し、それに対して運動論・2流体効果を加える方が望ましいと考えた。

理想磁気流体方程式は双曲型連立偏微分方程式であるため、線形化を行うと磁気音波やアルヴェン波に代表される特性波の移流方程式に帰着させることができる。したがって、特性波の進行方向を考慮して風上法を適用することにより、物理散逸に依存することなく数値安定性を保証することが可能となる。そこで本研究では、非構造格子と風上法の一つである近似 Riemann 解法を組み合わせることが可能な不連続 Galerkin 法を用いて3次元非線形磁気流体コード MUSES の開発に取り組んでいる。開発したコードの妥当性を検証するために、理想磁気流体力学的な固有モードである理想内部キンクモードと比較を行うことを目的とするが、モード構造が特定の有理面近傍に局在することから、単純な線形計算であったとしても大きな計算資源が必要となる。そこで、SGI8600 を活用することにより MUSES コード開発を加速することを目的とする。

(2) 利用内容・結果:

MUSES コードの妥当性を評価するために、理想内部キンクモードによる数値実験を行った。初期平衡は近年提案された解析平衡 [L. Guazzotto and J.P. Freidberg, *J. Plasma Phys.* (2021)] を使用し、図1の中程に示す安全係数分布に従って各物理量の分布を与えた。それに対してランダムな揺動を与えることにより最も不安定なモードが支配的となり、固有関数や成長率を線形理論と比較することが可能となる。本研究では、線形理論との比較を目的として、線形磁気流体コード MINERVA [N. Aiba et al., *Comput. Phys. Commun.* (2009)] との比較を行った。

図1は磁気軸における安全係数をパラメータとして理想内部キンクモードの成長率をスキャンした結果を表す。MINERVA による線形成長率の予測は放物型の曲線であり成長率にピークを持つような関数形であるが、MUSES はそのピークの存在を正しく再現できていることが確認できる。また、最も成長率の高いケースにおいては、成長率の誤差は1%を下回る高い精度を達成することを確認した。従来までのコードでは物理的な散逸係数が小さいと計算が不安定となっていたため、理想磁気流体力学の極限を定量的に再現することが困難であった。本研究では、非構造

格子を用いた際に計算精度と数値安定性を両立することが可能な不連続 Galerkin 法を用いるとともに、磁気流体力学特有の数値不安定現象を抑制するために数値モデルに工夫を加えることで、世界的に見ても類が無い研究成果を創出することに成功した。

図 2 は理想内部キンクモードが非線形段階に移行した後の圧力分布の等値面を表す。キンクモードが卓越することで流速が無視できないほど大きくなると、速度シアによりケルビン・ヘルムホルツ不安定性が二次的に誘発され、図 2 のような渦構造の発現に繋がると考えられる。

なお、図 2 に示すような非線形崩壊まで計算を行うためには、1 ケースあたり 128 ノードで 96 時間程度の計算資源が必要となる。成長率の線形理論とのベンチマークが目的であるにもかかわらず、非常に大きな計算資源が必要となるため、大型計算機の活用なくして達成し得ない研究成果であると言える。

(3) 今後の利用予定:

令和 5 年度は使用しない。

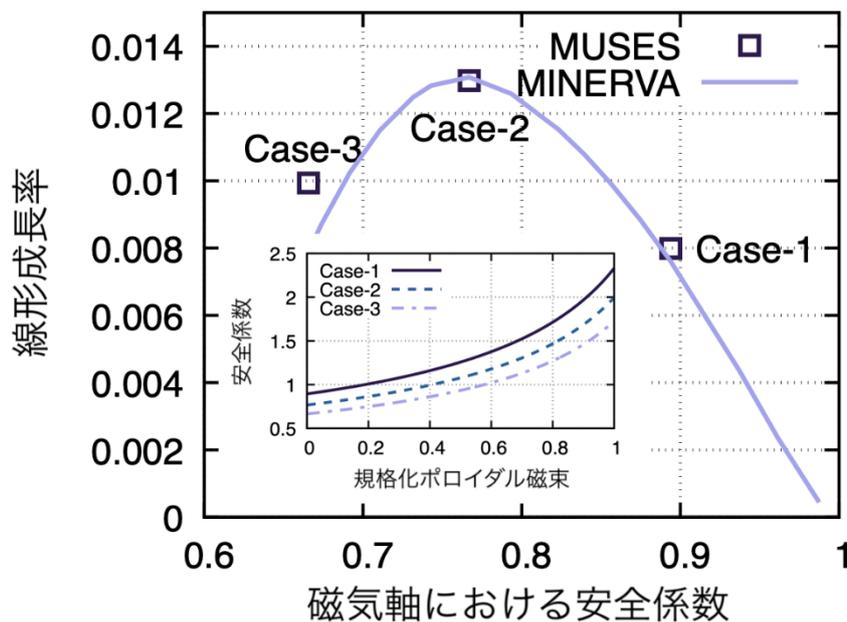


図 1: 磁気軸における安全係数に対する理想内部キンクモードの成長率の依存性。非線形コード MUSES と線形コード MINERVA の比較。中の図は各ケースにおける安全係数分布。

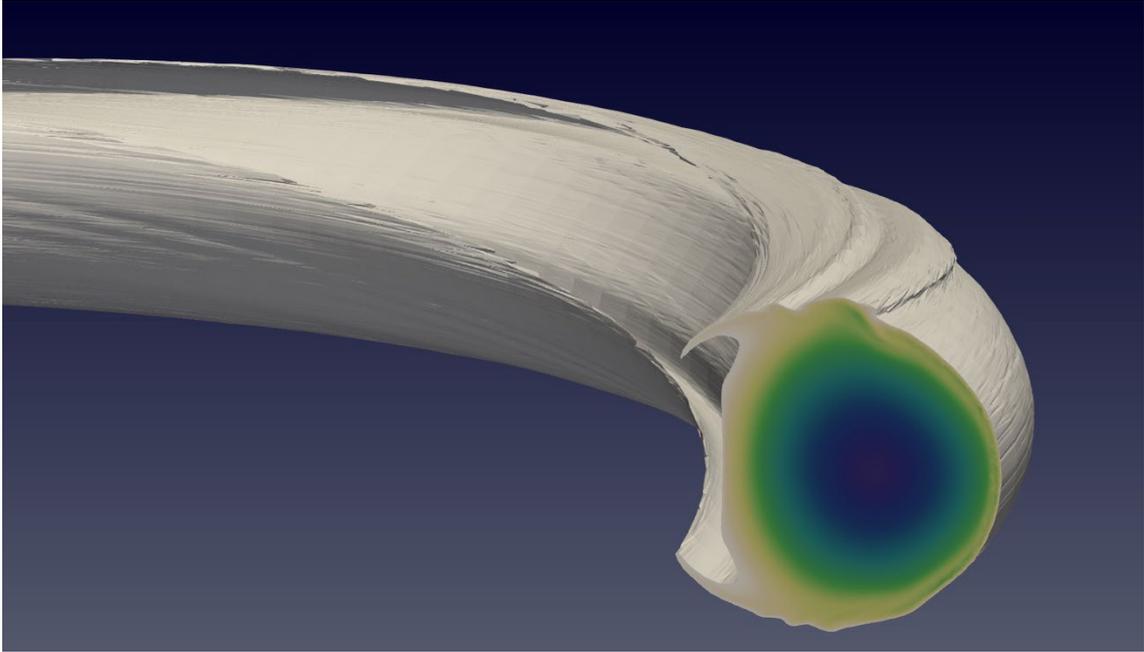


図 2 : 非線形段階移行後の圧力分布の等値面。ケルビン・ヘルムホルツ不安定性に起因する渦が発生している。

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) 不連続 Galerkin 法によるトカマクプラズマの数値シミュレーション, 白戸 高志, 松山 顕之, 相羽 信行, 日本物理学会 2023 年春季大会, 日本物理学会, 2023-03-22 (Oral)
- 2) Nonlinear full-MHD simulation based on discontinuous Galerkin method, Shiroto Takashi, Matsuyama Akinobu, Aiba Nobuyuki, FY'22 US-Japan MHD workshop, 核融合科学研究所, 2023-03-08 (Oral)
- 3) 不連続 Galerkin 法による磁気流体シミュレーション, 白戸 高志, 核融合計算科学サブクラスター会合, 核融合エネルギーフォーラム, 2023-02-10 (Oral)
- 4) 古典電磁気学における修正された Darwin 近似の提案, 白戸 高志, 日本物理学会 2022 年秋季大会, 日本物理学会, 2022-09-07 (Oral)
- 5) The Structure and Structure-Preserving Discontinuous Galerkin Scheme for the multispecies Rosenbluth-Fokker-Planck equation, Shiroto Takashi, The 27th International Conference on Numerical Simulation of Plasmas, Nagoya University, 2022-08-30 (Oral)

- 6) 非線形磁気流体方程式に対する平衡保持スキーム, 白戸 高志, 松山 顕之, 相羽 信行, 第 39 回プラズマ・核融合学会年会, プラズマ・核融合学会, 2022-11-23 (Poster)
- 7) Locally divergence-free discontinuous Galerkin method in generalized curvilinear coordinates, Shiroto Takashi, Matsuyama Akinobu, Aiba Nobuyuki, 31st International Toki Conference, National Institute for Fusion Science, 2022-11-09 (Poster)
- 8) 条件分岐を含む陰的離散式に対する Newton-Raphson 法の近似的実装法, 白戸 高志, 松山 顕之, 相羽 信行, 第 14 回核融合エネルギー連合講演会, 第 14 回核融合エネルギー連合講演会事務局, 2022-07-07 (Poster)

招待発表

- 9) Development of MUSES code for nonlinear MHD simulations with locally divergence-free discontinuous Galerkin method, Shiroto Takashi, 6th Asia Pacific Conference on Plasma Physics, Division of Plasma Physics, Association of Asia-Pacific Physical Societies, 2022-10-14
- 10) 静かな磁気流体现象の再現に向けた先進的アルゴリズムの開発, 白戸 高志, プラズマシミュレータシンポジウム, 核融合科学研究所, 2022-09-29

学術論文

- 11) A charge-momentum-energy-conserving 1D3V hybrid Lagrangian-Eulerian method for Vlasov-Maxwell system, Shiroto Takashi, Matsuyama Akinobu, Yagi Masatoshi, Journal of Computational Physics, 469, 111522, 2022-08, DOI:10.1016/j.jcp.2022.111522

コード高速化・最適化研究成果

R5F の GPU 最適化作業

矢木 雅敏

量子エネルギー部門・プラズマ理論シミュレーショングループ

(1) 利用目的:

核融合炉において異常輸送の研究はプラズマの閉じ込めを制御する上で重要な研究課題である。近年、ジャイロ運動論モデルに基づくシミュレーション研究が精力的に行われているが、MHD モードとのマルチスケール相互作用による閉じ込めの影響を調べる上で、簡約化ドリフト MHD モデルによる大域的シミュレーションが重要な役割を果たす。量研ではこれまで簡約化ドリフト MHD モデルに対し、1次元領域分割や2次元領域分割法を適応し、MPI と OpenMP によるハイブリッド並列によるコードの高速化を行ってきた。一方で、GPU 化対応は遅れており、その技術的基盤も確立していなかった。本研究においてはこれまで CPU で高速化してきた簡約化ドリフト MHD コード R5F（一次元領域分割版）を GPU に移植し、コードの高速化を図ることを目的とする。

(2) 利用内容・結果:

R5F コードの計算のフローチャートを図 1 に示す。

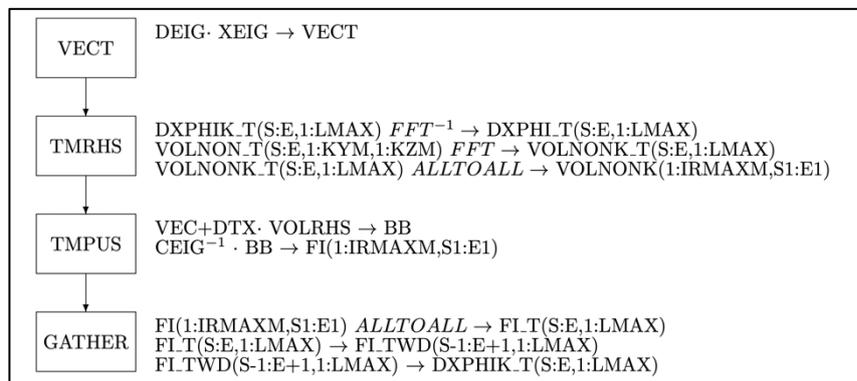


図 1 : R5F コードの計算のフローチャート。TMRHS サブルーチンでは擬スペクトル法により対流微分項を評価する。このため高速フーリエ変換 FFT を用いている。

図 2 にプロファイラを用いた R5F コードの各サブルーチンのコスト評価を示す。ここではフラット MPI の場合を検討した。TMRHS サブルーチンのコストが高いことが判明したので第一ステップとして FFTW を NVIDIA が提供する cuFFT に置き換えることを検討した。単純に FFTW を cuFFT に置き換えるだけでは CPU と GPU 間の転送による時間により実行時間が CPU の場合より遅くなることが判明した。一方で cuFFT 自体は FFTW に比較し 40 倍以上高速であ

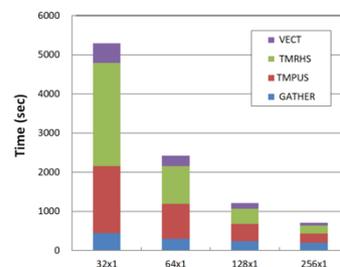


図 2 : プロファイラを用いた R5F コードの各サブルーチンのコスト評価

ることが判明した。このため、GPU 側の変数を定義し、cuFFT を GPU 側の引数を用いてコールし、CPU と GPU 間のコピーを行わない工夫をほどこした。

図 3 に GPU による高速化の範囲を示す。非構造データを用い、コードを GPU 側に常駐させることで CPU と GPU 間の不要なコピーを抑制することが可能となる。図 4 にコードチューニング後の TMRHS サブルーチン実行時間内訳を示す。4 GPU へ拡張した場合の結果(GPU tune)もあわせて示す。1GPU を用いた場合、コードのチューニングにより CPU に比べ約 1.81 倍の高速化が得られている(GPU 常駐範囲拡大)。一方、4GPU の場合は 3.91 倍の高速化が得られた。最適化実装をまとめると TRMHS サブルーチンの実行時間は CPU の 16.96 秒に対して 4.34 秒になり、3.91 倍の性能改善がされた。GPU 最適化により時間の増減があった GATHER と TMRHS の合計は CPU が 20.79 秒に対して GPU 最適後が 10.47 秒となり GPU 最適化により 1.99 倍の性能改善が達成できた。

```

main
|--call STMAIN
|--call ARRAY_SIZE, ARRAY_ALLOGC
|--call STINT
|--call ARRAY_ALLOC
|--call EQUIL
|--call GATHER
|--call TRNS1_NEW
|--MPI SENDRECV
|--call calc_eta(0)
|--call TMMAIN
|--call TMENR(0)
  |--do i=1,100,000,000
    |--FIRST STEP
    |--call calc_eta(1)
    |--call MATRIX
    |--call VECT
    |--call TMRHS
    |--call TRNS2_NEW
    |--CALL MPI_ALLGATHER
    |--call TMPUS
    |--call GATHER
    |--SECOND STEP
    |--call VECT
    |--call TMRHS
    |--call TMPUS
    |--call GATHER
    |--call CLEARM
  
```

① enter data, exit data directive
 ② update directive
 ③ kernels directive

図 3 : GPU による高速化の範囲。非構造データを用い、コードを GPU 側に常駐させることにより不要な通信を抑制。

(3) 今後の利用予定:

今後の課題として将来さらなる最適化を進めるにあたって必要となる改善案を示す。

- TMRHS サブルーチンの GPU Direct を利用した MPI 通信の最適化
- GATHER サブルーチンの演算部分の GPU による最適化
- GATHER サブルーチンの GPU Direct を利用した MPI 通信の最適化

TMRHS サブルーチン、GATHER サブルーチンともに GPU Direct を利用した MPI 通信の最適化は、ノード内通信は GPU Direct を利用して NVLink 経由での MPI 通信を行うことで MPI 通信が改善される可能性があると考えられる。また、TMRHS サブルーチンでは、現在は MPI 通信に必要なデータはいったん GPU から CPU に転送を行っているが、ノード内通信に関してはこの転送も削減することによる改善の可能性も考えられる。これらの最適化を進め、実際のプロダクトランが現実的なコストで実行可能となれば GPU 計算資源を有効利用したシミュレーション研究が期待できる。コードの GPU 最適化技術の基盤構築を引き続き進め、2次元領域分割版コード G5F2, G6F2 の GPU 化も今後検討していく予定である。

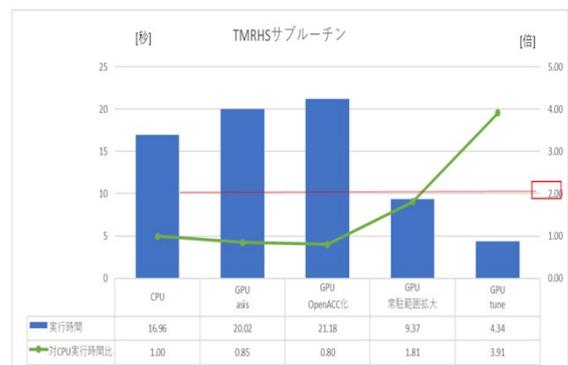


図 4 : コードチューニング後の TMRHS サブルーチン実行時間内訳

一般利用者研究成果一覽

1. 量子生命・医学部門

学会発表

- 1) NORM 濃度評価研究への AI 活用, 岩岡 和輝, 細田 正洋, 床次 眞司, 盛武 敬, 第 4 回日本放射線安全管理学会・日本保健物理学会合同大会, 福岡県, 2022.11 (Poster)
- 2) Monte Carlo calculations of chamber-specific perturbation correction factors for several ionization chamber types in carbon-ion beams, Y. Urago, M. Sakama, T. Katayose, D. Sakata, W. Chang, The 2nd International Conference on Radiological Physics and Technology, Kanagawa, Japan, 2023.4 (Oral)
- 3) Evaluation of beam quality correction factor and chamber-specific perturbation effect for proton, helium-, carbon-, and neon-ion beams, Y. Urago, M. Sakama, T. Katayose, D. Sakata, W. Chang, AAPM 65th Annual Meeting & Exhibition, Houston TX, U.S.A., 2023.7 (Poster)
- 4) 有機シンチレータの重粒子線によるクエンチング効果のシミュレーションモデルの改良, 上木 智也, 第 124 回日本医学物理学会学術大会, 長崎県, 2022.9 (Poster)
- 5) 電子状態計算と時間分解分光による P3HT/PCBM の電荷分離の解析, 藤田 貴敏, 第 83 回応用物理学会 秋季学術講演会, 東北, 2022.9 (Poster)
- 6) 大規模電子状態計算を用いた有機半導体材料の光電子物性, 藤田 貴敏, スーパーコンピュータワークショップ 2022 「複雑電子状態の理論・計算科学」, 愛知県, 2023.1 (Oral)
- 7) 光電変換過程の量子ダイナミクスと時間分解分光, 藤田 貴敏, 計算物質科学人材育成コンソーシアム (PCoMS) シンポジウム&計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業報告会, 東北, 2023.2 (Oral)
- 8) P3HT/PCBM における電荷分離ダイナミクスと分光シグナルの理論解析, 藤田 貴敏, 第 70 回応用物理学会 春季学術講演会, 東京都, 2023.3 (Oral)

学術論文

- 9) Monte Carlo-calculated beam quality and perturbation correction factors validated against experiments for Farmer and Markus type ionization chambers in therapeutic carbon-ion beams, Y. Urago, M. Sakama, D. Sakata, S. Fukuda, T. Katayose, W. Chang, *Physics in Medicine & Biology*, Volume 68, Number 18, 2023.9

研究開発報告書等

- 10) 有機シンチレータの重粒子線によるクエンチング効果のシミュレーションモデルの改良, 上木 智也, 千葉大学大学院融合理工学部 修士論文, 2023.3

2. 量子ビーム科学研究部門

学会発表

- 1) PHITS を用いたガス制動放射線の圧力依存性の研究, 松田 洋樹, 萩原 雅之, 竹内 章博, 糸賀 俊朗, 小西 啓之, 日本原子力学会 2022 年秋の大会, 茨城県, 2022.9 (Oral)
- 2) 次世代放射光施設ノテラスの蓄積リングにおける制動放射線の遮蔽設計, 松田 洋樹, 萩原 雅之, 竹内 章博, 糸賀 俊朗, 小西 啓之, 日本原子力学会 2023 年春の年会, 東京都, 2023.3 (Oral)

学術論文

- 3) Exciton-assisted low-energy magnetic excitations in a photoexcited Mott insulator on a square lattice, K. Tsutsui, K. Shinjo, S. Sota, T. Tohyama, Communications physics, vol.6, 41, 2023.3
- 4) Exciton quantum dynamics in the molecular logic gates for quantum computing, Y. Yonetani, Chemical Physics, vol. 570, 111860, 2023.6
- 5) Strange layer structure of dipolar spins formed on the spin-ice lattice, Y. Yonetani, Chemical Physics Letters, vol. 817, 140406, 2023.4

3. 量子エネルギー部門

学会発表

- 1) Study on A-FNS Shielding Analysis with Variance Reduction Parameter Generation Code, M. Ohta, S. Kwon, S. Sato, S. Iwai, F. Nobuhara, 32nd Symposium on Fusion Technology, Dubrovnik, Croatia/オンライン, 2022.9 (Poster)
- 2) LIPAc の現状と課題: 大電力ビームダンプ, 熊谷 公紀, 第 8 回 IFMIF 研究会, 青森県, 2023.2 (Poster)
- 3) A-FNS 遮蔽設計のための最新核データライブラリベンチマークテスト, 権 セロム, 今野 力, 太田 雅之, 佐藤 聡, 2022 年日本原子力学会秋の大会, 茨城県, 2022.9 (Oral)

発行年月 2023年12月

編集発行 国立研究開発法人 量子科学技術研究開発機構

連絡先 〒263-8555

千葉県千葉市稲毛区穴川4-9-1

情報基盤部 IT運用・学術情報課

(スパコン利用検討委員会事務局)

TEL : 043-206-3485 Fax : 043-290-1112

Email : super_comp_jimu@qst.go.jp

URL : <https://www.qst.go.jp/>

©2023 国立研究開発法人 量子科学技術研究開発機構