

[24]全国共同利用研究成果報告

<https://doi.org/10.15017/4763148>

出版情報：全国共同利用研究成果報告. 24, 2021-03. Research Institute for Applied Mechanics,
Kyushu University

バージョン：

権利関係：



時系列データに見られる短期的な不規則変動の分析

サブテーマ代表者：兵庫県立大学大学院 シミュレーション学研究科 中村 知道

1 研究目的

超高温で磁場によって閉じ込められているプラズマの中では、密度と温度の勾配が普遍的に存在し、それによって乱流が形成される。プラズマを安定して閉じ込めるためには、この乱流の物理的性質を理解することが必要不可欠である。乱流は、プラズマ流体の密度、温度、電位等の物理諸量の不規則な振動として観測される。そのため、プラズマ流体が持つ性質を詳細に理解するためには、観測によって得られる時系列データを詳しく調べる必要がある。本研究課題代表者（中村 知道）は、時系列データの特徴を統計的に分析する手法を開発し、実データへ応用を行っている。本研究の目的は、研究課題代表者によって開発された方法を磁場閉じ込めプラズマ中のドリフト波乱流の大容量時系列データに応用し、新たな知見を得ることである。

2 現在までの研究結果

本研究では、中村によって開発されたデータの隠れた情報を統計的に分析する small-shuffle surrogate (SSS) 法 [1] を、直線プラズマ装置におけるプラズマ乱流の実験データ解析に適用する。これにより、プラズマ現象の未知の部分をあぶり出し、得られる結果の物理的意味を理解しながら、プラズマ現象のより深い理解につなげていくものである。この SSS 法は、データに中・長期的なトレンドがあったとしても、そのデータに含まれる短期的な不規則な変動に相関構造が存在するかどうかについて分析を行うことができる。本年度も昨年度に引き続き end-plate biasing 実験で観察されたプラズマ密度とプラズマ電位データを用いて、2つの分析を行った。1つは、プラズマ密度とプラズマ電位の間に高周波な結合 (high frequency coupling) が存在するかどうかについて調査した。その結果、印加電圧が低いときも高いときも、プラズマ密度とプラズマ電位の間には、高周波な結合が示唆された。もう1つは、プラズマ密度のマイクロ乱流が存在する周波数範囲に関する調査を行った。現在、本検討に関する論文を査読付き論文へ投稿準備中である。

本研究は単なる既存手法の適用ではなく、マイクロ乱流についての理解も必要となるため、応用力学研究所のスタッフと議論を重ねながら、更なる分析を進めていく予定である。

3 今後の研究の方向について

マイクロ乱流はプラズマ乱流スペクトルの高周波成分に主に対応すると考えられているが、マイクロ乱流の振る舞いはインコヒーレントであると考えられているため、プラズマ乱流のスペクトルからマイクロ乱流の特徴を知ることは容易ではない。SSS 法は、データの順番を局所的に入れ替えることで、元のデータが持つ相関構造とは異なる人工的なデータ（サロゲートデータ）を生成する。データを入れ替える範囲は、大きくすることも小さくすることも可能である。SSS 法はデータの周波数の特徴を直接操作する方法ではないが、データを入れ替える範囲を大きくすれば、より広い高周波成分が変わることになり、データを入れ替える範囲を小さくすれば、より狭い高周波成分が変わることになる。このようにデータを入れ替える範囲を調整することで、調査する周波数範囲を変えることが出来る。このような詳細なマイクロ乱流の分析を行うことで、マイクロ乱流の理解が深まると共に、新しい知見を得ることが出来ると思われる。

4 研究成果発表

- 中村 知道, “プラズマ密度のマイクロ乱流に関する分析”, MHD 理論関連の研究会 (プラズマの複雑現象を対象としたデータマイニングの活用)、2020 年 11 月 4 日 (水)、5 日 (木)、核融合科学研究所、Microsoft Teams オンライン会議 (口頭発表)
- 中村 知道、稲垣 滋 “プラズマ密度とプラズマ電位間のマイクロ乱流の相関構造に関する検証”, 第 37 回 プラズマ・核融合学会 年会、2020 年 12 月 1 日 (火) ~4 日 (金)、オンライン会議 (口頭発表)
- 中村 知道, “局所定常自己回帰モデルを用いたプラズマデータの分析”, プラズマインフォマティクス研究会、2021 年 1 月 29 日 (金)、ZOOM オンライン会議 (口頭発表)

5 研究組織

研究代表者 兵庫県立大学大学院 シミュレーション学研究科 中村 知道

所内世話人 九州大学 応用力学研究所 稲垣 滋

参考文献

- [1] Tomomichi Nakamura and Michael Small: “Testing for correlation structures in short-term variabilities with long-term trends of multivariate time series,” Physical Review E, Vol. 74, 041114 (2006).

2020 S1-2

統計モデルと複雑ネットワークの手法を融合した プラズマ乱流時系列データの新しい解析手法の開発

サブテーマ代表者：高知工業高等専門学校ソーシャルデザイン工学科 谷澤俊弘

1 研究目的

超高温のプラズマを安定して閉じ込めるためには、プラズマが生み出す膨大な時系列データを解析し、その物理的性質を理解しなければならない。本研究は、磁場によって閉じ込められたプラズマ中のドリフト波乱流が生み出す大容量時系列データを、統計モデル化し、さらにそれをネットワークとして視覚化することによって、膨大な多次元時系列データから物理的情報を抽出し、直観的に理解する新しい手法を開発することを目的とする。解析対象は、九州大学応用力学研究所の直線磁化プラズマ実験装置（PANTA）内の周方向 64 チャンネルプローブアレーによって計測されたプラズマ乱流が生成する時系列データである。

2 現在までの研究結果のまとめ

2.1 縮約された自己回帰モデル (Reduced Auto-Regressive model, RAR model)

この手法では、縮約された自己回帰モデル（RAR model）を用いる。この統計モデルでは、時刻 t における時系列データ $x(t)$ をその時刻以前のいくつかの時間遅れ項 $x(t-1)$, $x(t-2)$, ... とランダムノイズ $\varepsilon(t)$ を用いて

$$x(t) = a_0 + a_1x(t-l_1) + a_2x(t-l_2) + \cdots + a_wx(t-l_w) + \varepsilon(t) \quad (1)$$

と線形モデル化する。ここで、パラメータ $a_0, a_1, \dots, a_w$ は実際に観測された時系列データと線形モデルによって生成されるデータ間の誤差の二乗平均を最小化し、さらにモデルの最適化基準として情報量基準を合わせて用いることにより、時間遅れ項 1 から最大時間遅れまでのすべての時間遅れ項から最適な部分集合を選び出すものとして決められる。

2.2 1 チャンネルデータの統計モデリング

まず、注目するチャンネルの時間遅れ項のみを用いた RAR model を構築する [1]。例として、第 5 チャンネルを RAR モデルによりモデル化した結果を示す。時間遅れの単位は $10[\mu\text{s}]$ であり、最大時間遅れを 150 として、モデル化を行った結果は

$$\begin{aligned} x(t) = & 0.00344 + 2.58x(t-1) - 2.49x(t-2) + 0.913x(t-3) - 0.0513x(t-6) + 0.004x(t-33) \\ & - 0.005x(t-47) - 0.0067x(t-55) - 0.0035x(t-61) + 0.0055x(t-115) + \varepsilon(t) \end{aligned} \quad (2)$$

となる。この RAR モデルには直近の時間遅れ（1～6）の他に、非自明な時間遅れ 33, 47, 55, 61, 115 が含まれることがわかる。図 1 は、全 64 チャンネルの時系列データを RAR モデル化して得られた時間遅れ項の度数分布である。非自明な時間遅れとして顕著なものは、31, 50, 110, 120 で、これらは実時間に直すとそれぞれ、 $310[\mu]$, $500[\mu\text{s}]$, $1100[\mu\text{s}]$, $1200[\mu\text{s}]$ に対応し、この時間周期を振動数に直すとそれぞれ、 $3.2[\text{kHz}]$, $2.00[\text{kHz}]$, $0.909[\text{kHz}]$, $0.833[\text{kHz}]$ となる。

2.3 多チャンネルデータの統計モデリング

この RAR モデリングは時間遅れ項を注目するチャンネル以外に広げることで多変数の時系列データにも適用可能である [2]。この多変数 RAR モデリングの方法を全 64 チャンネルのプラズマ乱流データに適用し解析を行った。まず 64 チャンネル中の一つのチャンネルに注目し、ターゲットチャンネルとする。そのターゲットチャンネルを中心とする両側 15 チャンネルずつ、合計 31 チャンネルを探索範囲とし、最大ラグを 25 として多次元 RAR モデルを構築した。ここでも時間遅れの

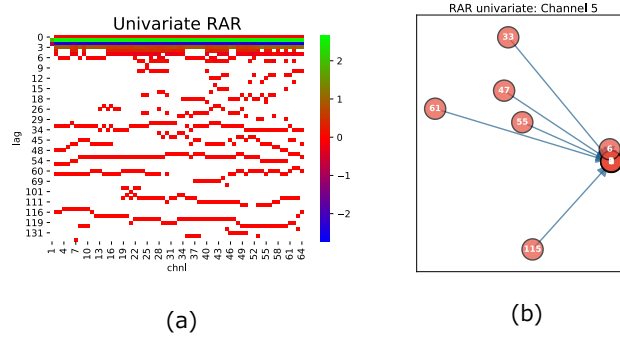


図1 (a) 全 64 チャンネルそれぞれ (横軸) の一変数 RAR モデルに表われる時間遅れ項 (縦軸) のパラメータ値を色分けしたものの。このプロットで横方向に並ぶ項がどのモデルにも現れる時間遅れ項となる。大まかに言って、31, 50, 110, 120 のあたりに全 64 チャンネルを横切る項の並びが見られる。(b) 第 5 チャンネルの一変数 RAR モデルのグラフ。右端中央に現時刻 (t) の項を表わすノードを置き、真上方向 (時間遅れ 0) から反時計回り方向を取って真下方向 (時間遅れ 150) として、各項のパラメータの絶対値が大きい場合には近く、小さい場合には遠く配置している。ノード内の数値が時間遅れである。

単位は $10[\mu\text{s}]$ である。例として、第 20 チャンネルの RAR モデルは以下の通りとなる。

$$\begin{aligned}
 x_{20}(t) = & 0.00364x_{10}(t-1) + 0.248x_{20}(t-1) - 0.2x_{20}(t-2) \\
 & + 1.16x_{21}(t-1) - 0.556x_{21}(t-2) + 0.176x_{21}(t-4) - 0.0318x_{21}(t-6) \\
 & + 0.879x_{22}(t-1) - 0.454x_{22}(t-2) - 0.122x_{22}(t-3) \\
 & + 0.23x_{23}(t-1) - 0.36x_{23}(t-2) - 0.182x_{23}(t-3) + 0.288x_{23}(t-4) \\
 & - 0.0968x_{24}(t-2) + 0.085x_{25}(t-5) - 0.0514x_{25}(t-7) + 0.00584x_{32}(t-1)
 \end{aligned} \tag{3}$$

ここで、各項の添字はチャンネル番号である。この結果を見ると、ターゲットチャンネルのデータは、大まかに言って、そのターゲットよりも番号が大きいチャンネルのデータによって予測されており、図 2 に示されるように、番号の大きいチャンネルから小さいチャンネルに向かって、反時計回りにその影響が伝播することがわかる。

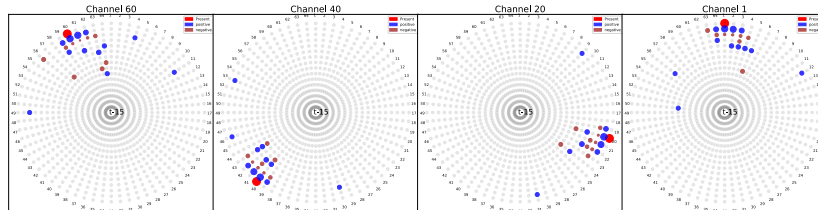


図2 多変数 RAR モデルによる解析結果を図示したもの。代表例として、第 1 チャンネル、第 20 チャンネル、第 40 チャンネル、第 60 チャンネルの例を挙げる。時計回りがチャンネル番号の増加方向であり、一番外側が現時刻、内側に向かって一つずつ時間遅れが増す。赤がターゲットノードで、青および茶色のノードはモデル中の時間遅れ項を表わす。赤に対して時計回り方向のノードが多いことから、ターゲットノードに対して、反時計回り方向の影響がわかる。

参考文献

- [1] Tomomichi Nakamura and Toshihiro Tanizawa: “Networks with time structure from time series,” Physica A, Vol. 391, 4704-4710 (2012).
- [2] Toshihiro Tanizawa, Tomomichi Nakamura, Fumihiko Taya and Michael Small, “Constructing directed networks from multivariate time series using linear modelling technique,” Physica A, Vol. 512, 437-455 (2018).

LIF を用いた直線装置 PANTA における高精度中性粒子およびイオン流速計測 九州大学 総理工学研究院 寺坂健一郎

背景と目的

本研究の目的は九州大学・応用力学研究所の直線装置 PANTA におけるプラズマ中のイオン速度や中性粒子速度を計測し、流れ場の構造形成における役割を検討することである。近年、プラズマの最終的な流れ場の分布を決めるためには、中性粒子流れとの相互作用を含めた解析が重要であることが指摘されている。乱流プラズマにおける流れ場構造形成において重要な役割を果たす、イオン流速と中性粒子流れをレーザー誘起蛍光法 (LIF) を用いて計測することを目指し、LIF 計測に実績のある HYPER-II 装置 (九大) との装置間比較実験を通して、PANTA における中性粒子計測に関する初期実験を行った。

結果

本年度は、昨年度までに構築したレーザー誘起計測システムを用いて実際に直線装置 PANTA における中性粒子計測を行った。波長可変半導体レーザーを 667.91 nm に調整することで準安定アルゴン原子 (Ar I) を励起し、脱励起の際に放出される 750.59 nm へ蛍光を観測する 3 準位系で LIF 計測を行った。しかし、自発的な発光は観測されたものの、有意な LIF 信号を検出することはできなかった。この原因は、PANTA のプラズマでは 667.91 nm の遷移を起こす $4s^2[3/2]_1^o$ 状態の数密度が低すぎることと起因すると考えられる。

そこで、PANTA における中性粒子計測を可能にするために、より自発光の強い準位 (励起: 772.63 nm, 蛍光: 826.68 nm) を用いた LIF 計測システムの再

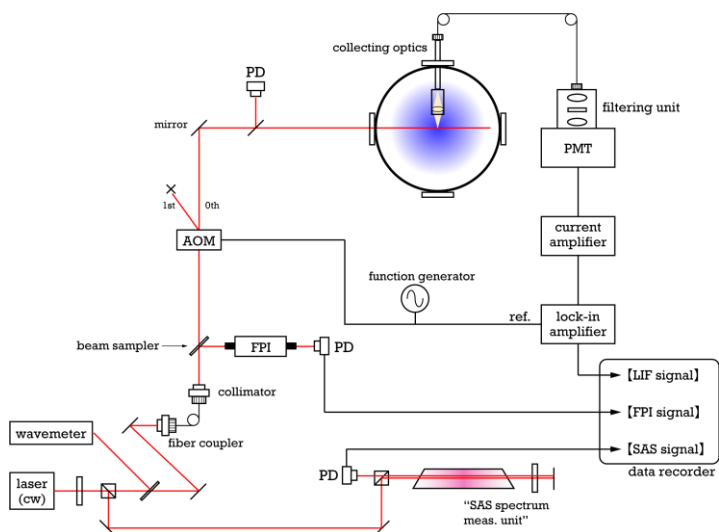


図 1. 中性粒子計測用 LIF 計測システム。

構築を行った(図 1). 新しいスキームを用いた計測の原理実証実験は, PANTA 装置と同程度のプラズマパラメータを再現できる HYPER-II 装置を用いて行った.

図 2 に 772.63 nm をもつスキームで計測された LIF スペクトルを示す. PANTA におけるパルス運転を考慮し, 条件付き平均化法を用いたスペクトルの再構成法を採用することで, 放電開始から定常状態

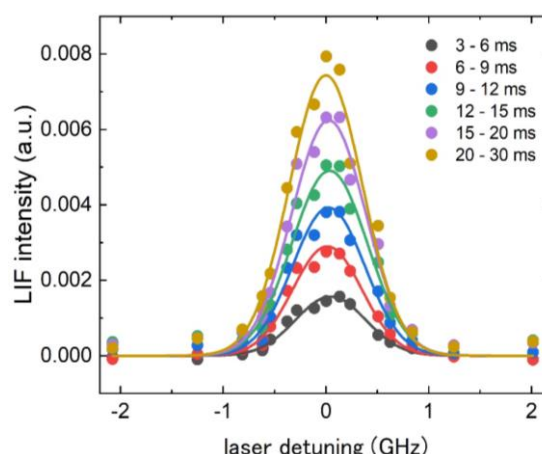


図 2. 772.63 nm を用いて計測した LIF スペクトル (1 mTorr, Ar).

に至る LIF スペクトルの時間発展を得ることに成功した. 本計測では, 図 1 に示すように和吸収スペクトルを参照スペクトルとして同時計測することで, 10 m/s 程度の流れまでを高精度に検出可能である. また, 1 mTorr から 10 mTorr までの広いガス圧力において計測が可能であることも確認できている. 本年度 HYPER-II 装置で開発した LIF システムを PANTA 装置へ組み込むことで, 乱流プラズマ中の中性粒子計測が可能になると期待される.

新しいスキームを用いた LIF 計測の原理実証実験の結果については, 主に国内の学会において, その成果を報告した[1-3]. また, 本システムの開発に関する研究の一部は, 九州大学・総合理工学府の修士論文としてまとめられており, 研究および大学教育の面において, 本共同研究は非常に有意義なものであった.

成果報告

- [1] 第 37 回プラズマ・核融合学会 年会, 松尾拓実, “中性粒子の動的振る舞いがもたらす部分電離プラズマの構造形成への影響” (ポスター).
- [2] 日本物理学会 第 75 回年次大会, 寺坂健一郎, “非定常現象に対する中性粒子効果検証のための時間分解 LIF 計測” (口頭).
- [3] V. Pigeon, N. Claire, C. Arnas, K. Terasaka, and S. Inagaki, “Plasma sheath material induced dependence due to secondary electron emission”, Phys. Plasmas **27**, 043505 (2020).

研究組織

代表者: 寺坂健一郎 (九大総理工)

所内世話人: 小菅佑輔

研究協力者: 稲垣滋 (九大応力研) 荒川弘之 (島根大学)

光捕捉微粒子を用いたプラズマ揺らぎの解析

九州大学大学院システム情報科学研究院 古閑一憲

背景・目的

多様なナノ構造形成や半導体デバイスの 3 次元集積化に伴い、プラズマプロセスの理解に基づいた超高精度ナノプロセスの創成が求められている[1]。特に、プラズマプロセス揺らぎの原因解明と制御が重要である。プロセス揺らぎはプラズマの時空間的な揺らぎや、プラズマと材料との相互作用に起因すると考えられているが、その機構の詳細は明確ではない[2, 3]。プラズマ揺らぎの新規評価法として、プラズマ中に導入した微粒子の挙動を解析する方法が報告されている[4-6]。筆者らはこれまでに、IR レーザーを用いた光ピンセット法[7, 8]によりプラズマ中微粒子を捕捉・移動に成功した。本稿では、微粒子挙動解析によるプラズマ中の電場強度とその揺らぎ計測の可能性を検討するため計測した電場の値を校正する目的で、水中での光捕捉微実験を行った結果を報告する。

校正実験

実験装置の概要を図 1 に示す。容器下部のサファイアガラスの上に設置したワッシャーに直径 5, 10, 20 及び 30 μm のアクリル微粒子(綜研化学株式会社製)を含む蒸留水を滴下し、蒸発を防ぐために、カバーガラスをのせた。この反応容器を落射型光学顕微鏡内に設置した。蒸留水中でアクリル微粒子は、浮力より大きい重力を受けることで容器底面に沈む。この微粒子に容器底面から IR レーザー($\lambda:1064\text{nm}$)を入射して光捕捉することで微粒子はレーザーから鉛直向きの力を受け浮遊する。微粒子は図 2 に示されるようにレーザーの焦点からの変位により受ける力が変化するため、レーザーの出力を調節し、微粒子の浮遊位置がレーザーの焦点と一致する位置、つまり、顕微鏡のピントに合うときのレーザーの制御値を記録した。レーザー制御値に対して出力されるレーザ

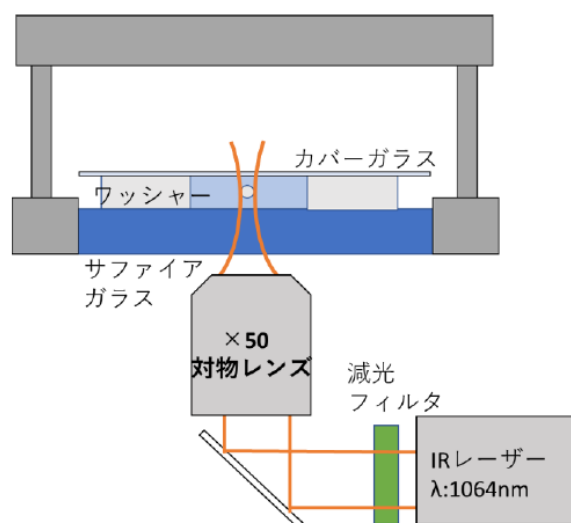
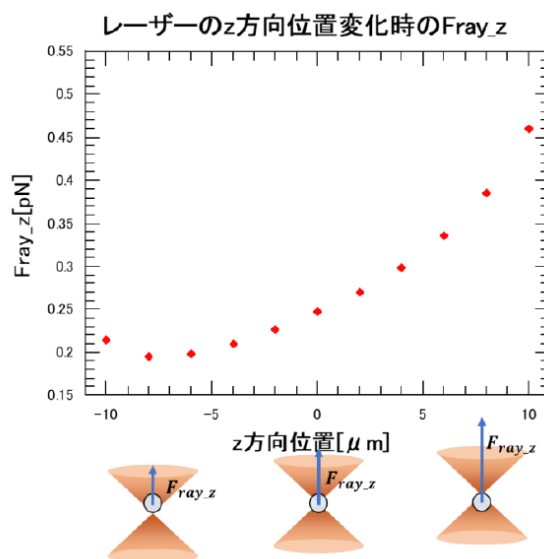


図 1 実験装置

図 2 光線光学モデルによる光(z)軸方向に作用する力 $F_{ray,z}$ 。

ーパワーを計測した結果を図 3 に示す。サファイアガラスを通したレーザー光のパワーを計測することで、微粒子に入射するレーザーパワーを測定した。

結果と考察

校正実験結果を図 4 に示す。図 4 は水中での光捕捉実験において、光線光学モデル[9]による計算により予測されるレーザーパワーと実際に実験で微粒子が浮遊した時のレーザーの制御値から求められたレーザーパワーの比である。この結果は、微粒子のサイズが小さくなるほど、理論値よりも大きなレーザーパワーが必要であることを示している。レーザーのスポットサイズよりも微粒子が小さい場合には、すべてのレーザー光が微粒子に入射しないためであると考えられる。

まとめ

本研究で評価した微粒子の浮遊に必要なレーザーパワーの予測値と実験値の比から、プラズマ中電場計測に光捕捉微粒子を用いる際には 30 μm 以上の微粒子を用いる、もしくは、微粒子に入射するレーザーパワーの補正を行うことが必要となることを明らかにした。

参考文献

- [1] M. Shiratani, et al., J. Phys. D **44** (2011) 174038.
- [2] M. Shiratani, J. Plasma Fusion Res. **90** (2014) 378.
- [3] K. Ono, et al., Thin Solid Films **518** (2010) 3461.
- [4] U. Konopka, et al., Phys. Rev. Lett. **84** (2000) 891.
- [5] J. Schablinski, et al., Phys. Plasma **22** (2015) 043703.
- [6] V. Schneider, H. Kersten, ISSN 1562-6016. BAHT. (2013) 83.
- [7] A. Ashkin, Biophys. J. **61** (1992) 569.
- [8] F. Wieben, et al., Phys. Plasmas **26** (2019) 033701.
- [9] W. H. Wright, et al., IEEE J. Quantum Electron. **26** (1990) 2148.

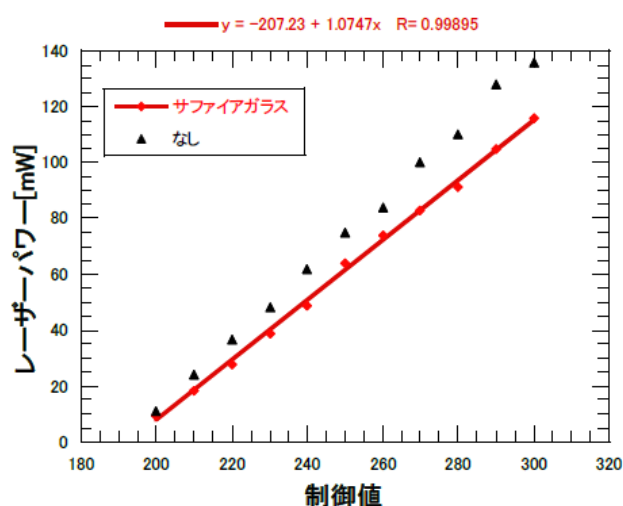


図 3 レーザーパワー測定結果.

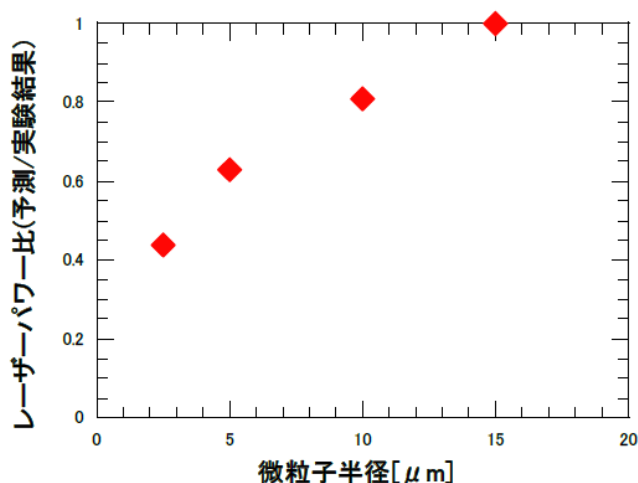


図 4 浮遊に必要なレーザーパワーの予測値と実験値の比の微粒子半径依存性.

医療用 CT・MRI 技術を応用したプラズマ乱流計測

島根大学学術研究院理工学系 荒川弘之

背景と研究目標

応用力学研究所直線磁化プラズマ発生装置 PANTA では、乱流の時空間構造を高速に測定することが必要とされ、近年では、乱流への摂動がない、CT(コンピューテッド・トモグラフィ)技術に応用した手法やレーザーによる乱流測定手法の開発が進められている。医療分野で急速に開発が進んでいる、少ない点から効率的に対象を測定可能な『圧縮センシング MRI』や『圧縮センシング CT』の手法を適用することで新たな乱流観測手法の開発が期待できる。本研究では、医療分野で開発が進められている圧縮センシングによる MRI・CT 手法を、レーザーによるプラズマ乱流計測に適用を行うための基礎的な検討を行う。

これまでの研究で、ベクトル CT 技術を用いることで、プラズマ流れの 2 次元流れ観測が可能であることがシミュレーションにより確認された。また、レーザー誘起蛍光法による平均流れベクトル測定を行った。

今年度は(i)乱流に同期した局所流れベクトル測定の試みと、(ii)シグナルノイズ比(S/N)改善のためのプラズマ励起準位変更の検討を行った。

方法と検討結果

(i) 乱流に同期した局所流れベクトル測定実験

周方向に設置したラングミュアプローブと半径方向に駆動するラングミュアプローブを用いて開発されたプラズマ二次元揺動再構成手法(H. Arakawa Sci. Rep. 2016)を応用した。半径方向に駆動するラングミュアプローブをレーザーに変更し、レーザー誘起蛍光を測定した。レーザーは、直径約10 cmの円柱プラズマを磁場に垂直に貫くように設置した。レーザー波長は、アルゴンイオンの $3d^4F_{7/2}$ 準位から $4p^4D_{5/2}$ 準位への励起の際の吸収波長である、668.6138 nmから ± 4 GHz とし、プラズマ放電中に数十Hzでスキャンする。通常のレーザー誘起蛍光法では、プラズマ中の局所的な蛍光を測定するが、本研究ではレーザーのプラズマを貫く線に沿った蛍光をまとめて集光する(線積分)ことにより、信号強度の増加を目指した。442.6 nmの蛍光を直径150cmのレンズ2枚及び直径75mmのレンズにより、1/2以下に縮小後、光ファイバーにより集光・伝送後、光電子増倍管により電流増幅・電圧変換した。その後、ロックインアンプにより予め強度変調したレーザーの200 kHzと同期した散乱光強度を検出した。レーザーは自動ステ

ージによりプラズマの半径方向に移動可能な形とした。一方向のみのレーザー照射を行い、ラングミュアプローブによる計測データと同時計測により、レーザー波長毎・半径方向の線積分データを得た。

得られたデータは、S/Nが十分ではなく、乱流揺動の局所計測には不適であることが分かった。問題点として、以下が考えられる。(1)散乱光強度が弱く集光効率向上を更に図る必要がある。(2)放電中にレーザー波長をスキャンしているが、レーザーの仕様で波長スキャンの応答が遅く、ラングミュアプローブと蛍光強度の測定値の同期が想定よりも悪い、ことが考えられる。

このため、今年度は集光効率の向上の一貫で、以下に示すプラズマ誘起蛍光の励起準位変更実験を行った。

(ii) S/N改善のための励起準位変更検討

レーザー波長は、これまでアルゴンイオンの $3d^4F_{7/2}$ 準位から $4p^4D_{5/2}$ 準位への励起の際の吸収波長である、668.6138 nmから ± 4 GHzとしていた。アルゴンイオンはこの波長以外にも多くの吸収波長があり、レーザー波長変更により蛍光強度を大きくすることでS/N改善の見込みがある。この調査の為、波長計によりプラズマからの蛍光強度を測定した。結果、レーザーの $3d^4F_{9/2}$ 準位から $4p^4D_{7/2}$ 準位への励起の際の吸収波長である、664.55 nmの蛍光強度が、これまでの準位の蛍光強度よりも倍以上大きいことが分かった。一方で、半径位置が3cm以上ではこれまでと同様、十分なS/Nが得られないことが分かった。

今後は、以下の点を行うことにより、ハードウェア及びソフトウェア両面から乱流揺動の局所計測を目指す。(1)集光効率の向上：真空中のレンズを入れること等によりさらに集光効率を上げる。(2)データ収集取り込みシステムの改良：放電中のレーザー波長は一定として、レーザー波長スキャンは、放電を多数の繰り返し測定することで行う。(3)再構成手法の改良：圧縮センシングを用いた再構成手法の適用・改良を行う。

成果報告：なし

分野融合研究会

応用力学研究所 稲垣 滋

本研究は「特定研究 1: 波・流れ・乱流のセンシング・マイニング・モデリング」における個別課題の成果の統合を議論する。

目的と背景

応用力学研究所は 3 つの研究分野から構成されている。そこで本研究所ならではの分野融合領域研究の開拓が求められている。プラズマ、大気海洋、新エネルギーに共通したキーワードとして流体力学が挙げられる。特に多くの流体（多成流、多相流、反応流を含む）で普遍的に観測され、エネルギーや物質の輸送に大きな影響を与える波・渦・流れに着目する。本研究では、それぞれの領域で発展してきたこの波・渦・流れ、を観測（センシング）、解析（データマイニング、可視化）、物理過程の抽出（モデリング）に関する情報交換及び議論を行う場を提供する事を目的とする。更には他分野で共通の手法となり得るデータサイエンスの導入についても議論する。そのため研究集会を開催し、特定研究 1 のサブテーマリーダー及び流体を扱う多方面からの研究者が一堂に会して議論する機会を設ける。個別のアプローチを統合することで、研究手法そのものに新たな展開がもたらされることが期待できる。

研究集会の開催

本研究会の趣旨としては一堂に会した on-site 研究集会がふさわしいと考えてコロナ禍の中、実施可能なタイミングを模索したが断念した。その代わりに個別テーマに関して他のサブテーマリーダーや学生が参加できる Zoom セミナーを開催した。

予算の執行

旅費としての共同研究予算使途を変更し、研究の消耗品購入に使用した。

Zoom セミナーのまとめ

2021.03.04 荒川宏之(島根大)

“ドローンによる風速推定“(予定)

2021.02.10 柴田欣秀(岐阜高専)

“感染症の時空間変化と捕食者—非捕食者モデリング”

感染症の拡大に関して、プラズマ乱流の研究で使われている捕食者—非捕食者モデリングと同様のモデルが使われている。発表者の持つ感染症の件別の患者数推移のデータにこれら数理モデルの適用を議論した。

2020.12.11 徳田 悟（九大汎オミックスセンター）

“ベイズ推定による不確実性定量化とモデル選択：プラズマ科学への展開に向けて”

ベイズ推定の基礎の入門からからプラズマ計測への適用までの応用についてまとめたセミナーであった。

2020.12.07 前山伸也（名古屋大学）

“三つ組み相互作用の対称化”

プラズマ乱流における3波結合は通常バースペクトル解析を行うが、前山氏は新たな可視化方法を考案し、PANTA 実験データに適用した。

2020.10.23 大貫陽平（九大応力研）

“変形領域における二次元乱流の統計力学”

プラズマ乱流と非常に類似性のある中性流体の二次元乱流について、その統計力学的性質を理論解析から導き議論した。

2020.10.16 山崎広太郎（九大応力研）

“高パワー放電時に見られる $m=1$ 揺動のねじれに関して”

PANTA の新たな実験領域で観測されたコヒーレントな構造についてトモグラフィー解析した結果について報告があった。

2020.09.09 荒川宏之（島根大）

“孤立渦により励起された波束の時空間構造抽出とエネルギー移送の評価”

スプラッシュと呼ばれる新たな乱流構造の同定と渦的、波動的乱流成分からスプラッシュへのエネルギー移送を評価した。

2020.08.07 小菅佑輔(九大応力研)

“Minimum enstrophy flows in drift wave turbulence with neutral particles”

中性ガスを考慮した場合、ドリフト波乱流にはエンストロフィ最小の構造が現れる。その中で最も低次のモード構造について議論した。

2020.07.31 川内裕一(九大応力研)

“PANTA における乱流中の非線形エネルギー移送の解析”

ケルビンヘルムホルツ型の揺動がドリフト波とゾーナル流と競合・共存する事が観測され、それら構造間のエネルギー移送を解析した。

2020.07.17 佐々木真(九大応力研)

“Evaluation of abrupt energy transfer among turbulent plasma structures using singular value decomposition”

乱流の粗視化に関して、SVD(Singular Value Decomposition)を用いた自由度低減法を開発した。数値直線装置シミュレーション結果に適用した例について議論した。

直線磁化プラズマにおける乱流構造の解析

九州大学 基幹教育院 山田 琢磨

九州大学の直線プラズマ装置 PANTA を用いて、プラズマ乱流中に発生するメゾスケール構造の一種であるストリーマー構造を観測し、その媒介波と搬送波の非線形結合を解析した。従来までの各モード数がマッチング条件を満たす組み合わせを抽出してからのバイスペクトル解析と異なり、ある時刻でのタイムスライス抜き出し、周方向空間でのバイスペクトル解析を行った。結果、周方向モード数内での非線形結合の詳細が明らかになり、周方向モード数の組み合わせによってはストリーマー構造の形成に寄与しないような成分があることが判明した。また直線プラズマ中の磁場を徐々に強くしていくことで、コヒーレントなモードから乱流状態への遷移を観測した。

1. 目的

ストリーマーは近年注目を集めている構造であるゾーナルフローと同様に、プラズマ乱流中のマイクロスケール構造であるドリフト波が非線形結合することで発生するメゾスケール構造である。その存在は径方向輸送に大きな影響を与えるため、発生機構や制御・抑制を研究することは核融合プラズマの輸送を理解するうえで非常に重要である。

九州大学応用力学研究所の直線プラズマ実験装置 PANTA で用いられる直線プラズマはトロイダルプラズマに比べて低温で近接性に優れるため、乱流やメゾスケール構造の基礎的解析を行う点において有利である。PANTA ではその利点を活かしてストリーマーの構造解析が行われており、ストリーマー構造を形成するドリフト波乱流中の搬送波とストリーマーの媒介波の間の非線形結合を中心に解析が進められている。

ところがこれまでの解析方法では、時間方向と周方向の2次元計測を行った後、揺動を周方向のフーリエ変換によって周方向モード数に分解し、各モード数がマッチング条件を満たす組み合わせはその周方向モード間に非線形結合が当然あるものとみなして抽出し、周波数方向でのバイスペクトル解析のみを行っていた。そこで本研究では発想を変え、ある時刻でのタイムスライスを抽出し、その中での周方向モード数間の非線形結合を詳細に調べるために周方向のバイスペクトル解析を行った。一例として、媒介波とストリーマー構造の包絡線の位相差をバイフェーズ解析により求めた。

また直線プラズマ中の磁場を変化させることでプラズマ内に発生するモードがコヒーレントなモードから乱流状態へと遷移していく様子を観測した。状態変化の遷移を詳細に観測することで、ストリーマーなどの非線形結合によって発生する構造のメカニズムの解明の手掛かりとなる。

2. 実験方法

直線プラズマ実験装置 PANTA を用いてストリーマー実験を行い、多数のチャンネルを持つ静電プローブアレイでイオン飽和電流の揺動（電子密度揺動に相当）を計測することで、ストリーマー構造とその発生に重要な役割を果たす媒介波、またストリーマーを形成する搬送波（ドリフト波）を観測し、両者の間に存在する非線形結合を明らかにした。PANTA は軸方向の長さが $z = 4000$ mm、内径 $r = 450$ mm の直線装置である。ソース部に付けられた内径 95 mm のガラス管に RF アンテナで 3 kW/7 MHz の RF 波を印加し、ヘリコンプラズマを発生することで真空容器内部に直径が約 100 mm の直線プラズマが発生する。軸方向に 0.09 T の磁場を発生させ、内部に封入したアルゴンの圧力を 1.5 mTorr に調整することで、ドリフト波乱流内にストリーマー構造が形成される。このとき中心部の密度は 10^{19} m⁻³ 程度、電子温度は 3 ± 0.5 eV のおおよそ平坦な分布である。軸方向の磁場が 0.09 T より低い時は、プラズマ状態はコヒーレントなモードや、あるモードの高調波成分が乗った周期的な孤立波モードなどとなる。

軸方向 $z = 1885$ mm、半径 $r = 40$ mm の位置に周方向 64 チャンネル静電プローブが設置されている。

このプローブにより揺動を時間方向と周方向に詳細に観測し、特に精度の良い乱流の周方向モード数を観測するが可能である。ストリーマー構造は搬送波が周方向に自己収束した構造体であり、その包絡線は媒介波と位相関係を保持する。そのため、ストリーマーの位相構造を特定するためには、媒介波を参照波として、媒介波と2つの搬送波のバイスペクトル解析を行い、バイフェーズを計算すればよい。この時、バイフェーズが搬送波の包絡線（ストリーマー構造）と媒介波の間の位相差を表す。本研究では周方向での非線形結合を確認するため、ある時刻でのタイムスライス抜き出し、周方向空間での各モード数間のバイフェーズを計算する。隣り合うタイムスライスではバイフェーズの計算結果がほぼ似通ったものになるため、十分に時刻が離れたタイムスライスをいくつも抜き出し、その平均を取ることでバイフェーズの計算結果とした。

3. 実験結果と考察

PANTA のストリーマー発生放電（磁場 0.09 T、圧力 1.5 mTorr）で周方向 64 チャンネルプローブにより電子密度揺動を測定し、ストリーマーの包絡線構造、媒介波、搬送波を観測した。媒介波は周方向モード数 $m_1 = 1, f_1 = -1.2$ kHz で、最も振幅の大きく媒介波との結合が強い搬送波は、 $m_2 = 2, f_2 = 7.8$ kHz の波と $m_3 = 3, f_3 = 6.6$ kHz の波であった。密度揺動のタイムスライスを抜き出し、周方向モード数 $(1, m, m+1)$ 間のバイフェーズ値を計算した結果、 $(1, 1, 2)$ の結合のバイフェーズ値のみ他の結合と大きく異なる値となったが、他の $(1, 1, 2)$ 以外の結合はバイフェーズ値がほぼ変わらなかった。

この結果が妥当であるかを確認するために、密度揺動の時空間構造から媒介波成分を消去し、隣り合う周方向モード数のみを抜き出して重ね合わせた。すると、 $m = 1 \& 2$ 以外の重ね合わせの結果は媒介波の山の位置にほぼ揺動が収束して存在しストリーマー構造を形作っていることが確認できたが、 $m = 1 \& 2$ を重ね合わせた場合は、揺動の収束する位置が他と全く異なり、ストリーマー構造の形成をむしろ阻害していることが分かった。今後、この現象の詳細をさらに解析することで本研究を発展させる。

また図 1 のように、PANTA の軸方向の磁場の強度を変化させ、磁場が低い時は単一のモードのみのコヒーレントな状態であったのが、磁場が高くなるにつれて複数のモードが発生し、乱流状態となっていくことが確認できた。遷移の詳細を調べることでメゾスケール構造の解明にも繋がると期待される。

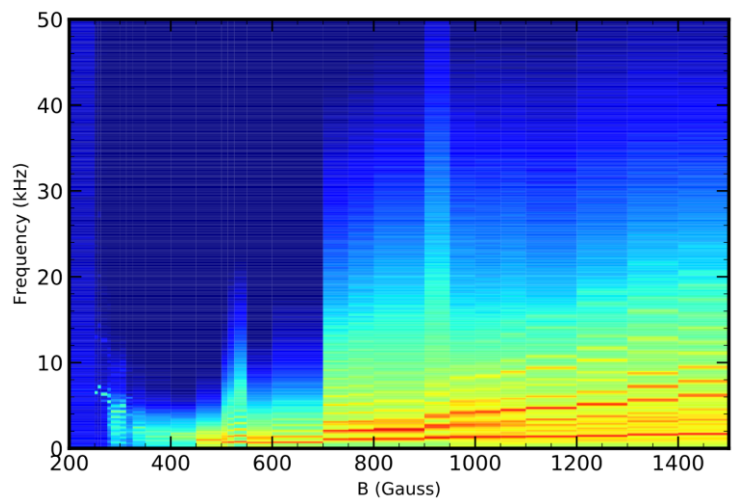


図 1. PANTA の軸方向の磁場を変化させたときのイオン飽和電流揺動（電子密度揺動に相当）の周波数成分。磁場が低い時はモードが単一のコヒーレントなモードであるが、磁場が高くなると複数の揺動成分が発生し、乱流状態となっていくことが分かる。

4. 研究成果報告

[1] 山田琢磨他, “PANTA における非線形現象の研究”, 日本物理学会 2020 年秋季大会, 9aB1-6, オンライン開催 (Sep 8-11, 2020).

5. 研究組織

研究代表者：山田琢磨（九大） 研究協力者：稲垣滋、佐々木真（九大）、小林達哉（核融合研）

流れベクトル量測定のためのマイクロ波センシング技術の開発

核融合科学研究所・ヘリカル研究部 徳沢季彦

1. 目的

乱流は、自然界において普遍的に観測される物理現象であるが、磁場閉じ込め核融合プラズマ研究においても種々の乱流による物理現象の理解は最重要研究課題の一つである。特に非平衡な状態、現象が時間的に変化しているような状況における乱流の時空間構造を調べることは、この物理現象を理解する上で非常に重要である。しかしながら、タングステンなどの重金属をも溶かしてしまう高温高密度プラズマ実験においては、その計測手段が非常に限られている。そこで我々は、マイクロ波を用いた新しい非接触な計測手法の開発を行い、乱流の高精度な時空間構造を観測することを目指している。今年度、九州大学の新しいトカマク実験装置 PLATO に開発を行っているドップラー反射計を適用する準備を進めた。今回、反射計測で測定位置情報を得るなど効率的な実験適用を行うため、先行してミリ波干渉計を整備・適用した。初期実験で得られたこのミリ波干渉計のデータやシステムについて、以下に報告する。

2. PLATO トカマク装置用ミリ波反射計

プラズマの線平均電子密度を計測する手法として、一般的なヘテロダインミリ波干渉計を PLATO 装置に適用した。干渉計システムの概略図を図 1 に示す。プラズマに入射する RF 発振器にはガン発振器(周波数 139GHz)を用い、ヘテロダイン検波のための局発波 (LO) は、138GHz を用いて、中間周波数 (IF) 1GHz を得るように設定した。なお、発振周波数はガン発振器のメカニカルチューニングに適切な周波数に設定が可能である。RF 発振器からの出力は、一部(10%)をヘテロダイン検出のために分配し、残りをプラズマへと伝送する。今回、伝送路には、口径 1.25 インチのコルゲート導波管を用いた(図 2)。ベンドも含めたトータルの伝送損失は・3db 程度である。本干渉計ではミリ波を PLATO プラズマ中を垂直方向に通して計測する。ポート付近での伝送距離は約 1.5~2 m となるため、当初オフセットパラボラ鏡を用いた集光光学系を検討した。焦点距離 100mm のパラボラ鏡に 140GHz のガウシアンビームを入射しビーム径を測定した結果を図 3 に示す。図の赤線のように期待したような集光性が得られておらず、今回はコルゲート導波管をポートに近づけることでビーム径の広がりを抑制して適用することとした。真空窓の有効径は $\phi 63\text{mm}$ であり、1.25 インチの導波管の場合約半分のパワーが通過していると考えられる。この点は、真空容器内にアンテナ

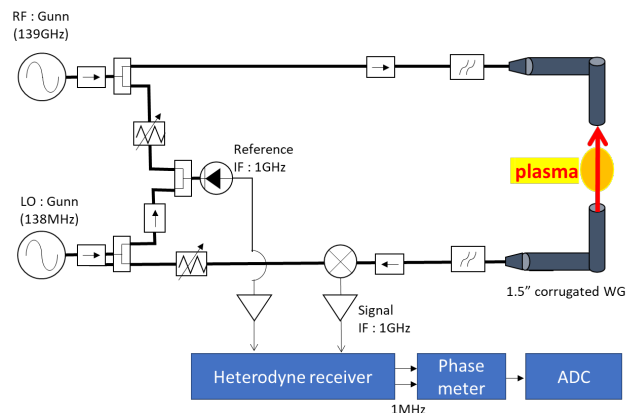


図 1：ミリ波干渉計の概略図。



図 2：コルゲート導波管伝送路と計測ラック

を設置する、より強い集光光学系を開発するなどで改良が見込める。プラズマを通過したミリ波はミキサで LO と混合し、IF 信号が得られる。ヘテロダインレシーバーでは、得られた 1GHz の IF 信号をダウンコンバートして、位相計で位相検出を行うための 1MHz のデジタル信号(図 4)に変換する。この信号を位相計に入力することで、プラズマの線平均電子密度に比例した電圧信号を得ることができる。

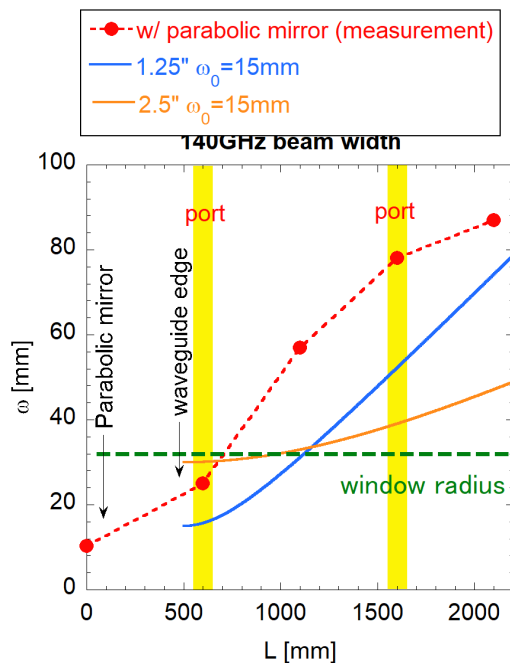


図 3: 140GHz ガウシアンビーム伝送でのビーム径。オフセットパラボラ鏡(赤点)、1.25 インチコルゲート導波管(青)の実測値、オレンジは 2.5 インチの場合の予測値。緑の点線が真空窓の有効径。

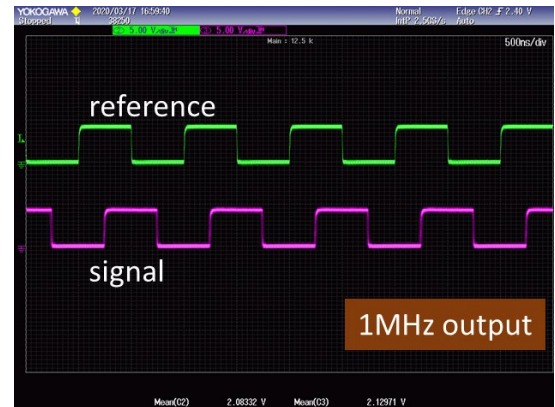


図 4: ヘテロダインレシーバー出力。1GHz の IF 信号を 1MHz のデジタル出力へと変換する

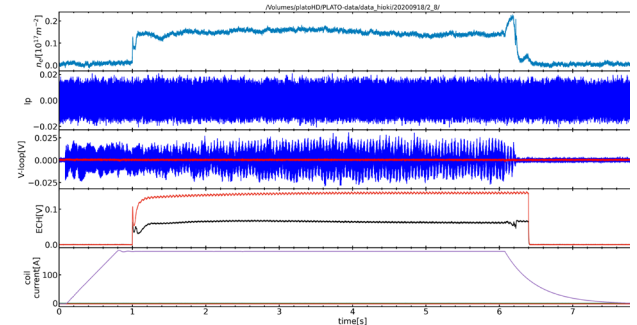


図 5: PLATO プラズマの放電波形例。線積分電子密度の時間は計(TOP)。

図 5 に PLATO プラズマ実験で得られた測定データを示す。この放電ではコイル通電開始 1 秒後からマイクロ波を約 5 秒間入射し、プラズマを生成・維持している。この時、線積分電子密度の時間変化は約 $1.5 \times 10^{16} \text{m}^{-2}$ で一定に維持できているという様子を本計測器データから取得することができた。

3. 論文と学会発表

次の学会にて発表を行った。

1. 徳沢 季彦, 江尻 晶, 稲垣 滋, 出射 浩, 田中 謙治, 他「JT-60SA へのマイクロ波ドップラー反射計適用に向けた詳細設計研究」日本物理学会 2020 年秋季大会、2020 年 9 月 8 日～11 日(8pB2-12)
2. T. Tokuzawa, K. Tanaka, H. Yamada, S. Inagaki, 他、「LHD 同位体比較実験におけるイオン・電子スケール 乱流揺動の比較研究」日本物理学会 2020 年秋季大会 2020.9.8-11 (9aB2-4)
3. T. Tokuzawa, K. Tanaka, K. Y. Watanabe, S. Kubo, A. Ejiri, S. Inagaki, 他 “Developments of Millimeter and Sub-Millimeter Wave Backscattering Systems for Fusion Plasma Turbulence Diagnostics”, 45th International Conference on Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves IRMMW-THz 2020, Nov. 8-13, 2020 Buffalo, New York, USA (P266)
4. T. Tokuzawa, K. Tanaka, T. Tsujimura, S. Kubo, M. Emoto, S. Inagaki, 他 “W-band millimeter-wave back-scattering system for high wave number turbulence measurements in LHD”, 23rd High-Temperature Plasma Diagnostics 2020, Dec. 14-17, 2020 Buffalo, New York, USA (P4.G1)

[2020 S2-1] 結晶表面荒さと微斜面マクロステップのダイナミクス：
分子スケールから表面張力に支配されるスケールへ

大阪電気通信大学工学部 阿久津典子

研究目的

低電力デバイスに利用される SiC や GaN といった半導体結晶について、不連続な表面張力に支配されるマクロステップのダイナミクスを、分子の着脱という量子力学現象と関連付けて制御することを目的とする。

研究方法

低電力デバイスに利用される SiC や GaN といった半導体結晶について、結晶表面における分子の着脱を寒川先生の第一原理計算で検討する。そこで得られた分子結合の値を基に格子模型を作成し、結晶育成温度付近におけるステップ諸量をランダムウォーク法で計算し、不連続な表面張力を申請者の統計力学計算手法、すなわち密度行列繰り込み群法とモンテカルロ法、でエントロピーも含めて計算する。不連続な表面張力に支配されるマクロステップのダイナミクスを分子の着脱という量子力学現象と関連付けて理解、および制御できるようにする。

共同研究 特別講演会の開催等

2020 年度は特定研究継続 2 年目であった。

Covid-19 の感染拡大により予定していた講演会を開催することができなかった。そのため、大阪電気通信大学エレクトロニクス基礎研究所の講演会は実施せず、(株)東京システムリサーチの永田 空比古(ながた そらひこ)氏による「人工知能の可能性とビジネス活用」という題目の授業内講演のみ 2020 年 7 月 30 日に遠隔で実施した。

考察

非平衡定常状態の傾いた結晶表面(微斜面)の荒さを調べ、Brezinskii-Kosterlitz-Thauleless (BKT) ラフな表面から Karder-Parisi-Zhang (KPZ) ラフな面へクロスオーバーすることをモンテカルロシミュレーションにより示した(N. Akutsu, Sci.Rep. **10**, 13047 (2020))。シミュレーションモデルの制限 solid-on-solid 模型(RSOS 模型)の特徴を生かして、1) 成長駆動力が小さい場合、および平衡状態では BKT ラフである；2) terrace—step—kink (TSK) 模型では大きい成長駆動力で KPZ ラフである；3) テラス面上の島状クラスター形成により成長駆動力が大きくとも BKT ラフな面になる、ことを示した。

結晶表面ステップ間に点型の引力が有る定常成長微斜面について、マクロステップがファセット化し 2 次元核形成機構で成長していても、モンテカルロシミュレーションによりラフな面になることを示した(N. Akutsu, Sci.Rep. **11**, 3711 (2021))。さらにマクロステップが分散する駆動力点で界面の幅が発散し、ラフネス指数=0.60 を得た。この値は KPZ ラフな面のラフネス指数の値 0.386 より格段に大きく、現実的に結晶成長で観測される値に近い。

成果報告

出版物

インタビュー記事

Noriko Akutsu, “Macrostep formation and step dynamics faceted by discontinuous surface tension”, Impact, November (2020), 25--27. doi.org/10.21820/23987073.2020.5.25.

学術会議「情報科学との融合による新化学創成」小委員会、提言「化学・情報科学による新化学創成に向けて」令和 2 年 7 月 7 日公表。http://www.scj.go.jp/ja/info/kohyo/division-15.html

発表論文(レフェリー有)

1. Noriko Akutsu, “Faceted-rough surface with disassembling of macrosteps in nucleation-limited crystal growth”, *Scientific Reports*, **11**, 3711 (2021). doi.org/10.1038/s41598-021-83227-8
2. Noriko Akutsu, “Crossover from BKT-Rough to KPZ-Rough Surfaces for Interface-Limited Crystal Growth/Recession”, *Scientific Reports*, **10**, 13057 (2020). doi.org/10.1038/s41598-020-70008-y

紀要等(レフェリー無)

1. 阿久津典子、川野潤、特集「固液を区別する秩序パラメタと界面との関係」、特集序文および編集後記。日本結晶成長学会誌 **47** No. 4, (2021).
2. 阿久津典子、安江常夫、湯口宜明、研究報告「複雑な系の表面張力精密計算とファセット化したマクロステップのダイナミクス」大阪電気通信大学エレクトロニクス基礎研究所 2019 年度紀要(FERI ACTIVITY REPORT 2014) **30**, 96-100 (2020).

口頭発表

1. Noriko Akutsu, “Roughness of Vicinal Surface: Crossover from Berezinskii-Kosterlitz-Thouless-Rough to Kardar-Parisi-Zhang-Rough Surfaces”, *CCS2020: The Conference on Complex Systems 2020*, (December 10, Web Conference, Greece). eBook of Abstracts p. 21, (2020).
2. 阿久津典子、「微斜面の表面荒さ:BKT ラフから KPZ ラフな面へのクロスオーバー現象」日本表面真空学会学術講演会ポスター発表(2020 年 11 月 19 日、オンライン開催)
3. 阿久津典子、杉岡良樹、村田直也、「環境相成分比の偏りによる 2 段差 4 段差ステップの割合とキンク密度変化:2 成分定比化合物における平衡状態微斜面」日本結晶成長国内会議(2020 年 11 月 9 日、オンライン開催)
4. 阿久津典子、「非平衡定常状態微斜面における BKT ラフな面から KPZ ラフな面へのクロスオーバー現象」日本結晶成長国内会議(2020 年 11 月 9 日、オンライン開催)
5. 阿久津典子、杉岡良樹、村田直也、「環境成分比偏りにより平衡状態でファセット化したマクロステップができるのか?:2 成分定比化合物」日本物理学会 2020 年秋季大会(2020 年 9 月、オンライン開催)
6. 阿久津典子、「制限 SOS 模型(19 頂点模型)微斜面における BKT ラフ表面と KPZ ラフ表面間のクロスオーバー現象 I:駆動力および温度依存性」日本物理学会 2020 年秋季大会(2020 年 9 月、オンライン開催)
7. 阿久津典子、「制限 SOS 模型(19 頂点模型)微斜面における BKT ラフ表面と KPZ ラフ表面間のクロスオーバー現象 II:傾斜依存性」日本物理学会 2020 年秋季大会(2020 年 9 月、オンライン開催)

機械学習を用いた相界面における相互作用の解析

学習院大学・計算機センター・教授 久保山 哲二

1. 研究目的

本研究では「マルチスケール物理現象のデータ統合・解析技術の研究開発」の一環として、相界面における非線形現象のデータ駆動解析を行う。特に、半導体材料プロセスにおける気体－固体相界面での物理現象や核融合プラズマ・実験室プラズマにおける電離気体(プラズマ)－固体相界面での物理現象に対して、それぞれの相互作用の主要因を読み解くことを目的としている。これまで、実験室プラズマにおいて計測された時空間データからの特徴的構造抽出に取り組んできた。本年度は、解析手法を改良し、より高精度な手法の確立を目指す。

2. 研究方法

近年、流体解析分野において提案された時空間データ解析手法の他分野への適用が広がりを見せている。動的モード分解 (Dynamic Mode Decomposition, DMD) は瞬時場間の線形的な遷移を仮定し、時空間データを一定の振動数と増幅／減衰率をもつ空間パターン (DMD モード) に分解する。一方、クープマンモード分解 (Koopman Mode Decomposition, KMD) は非線形発展する時空間データを解析するための強力な手法であり、DMD は KMD の特別な場合に相当する。非線形データを対象とするときは、DMD ではなく KMD の範囲で解析することで、より高精度なモード分解が可能となる。KMD アルゴリズムは、以下のような形式に元データ $\mathbf{z}(t)$ を分解する。

$$\mathbf{z}(t) = \sum_n \mathbf{v}_n \lambda_n^t$$

ここで、 $\mathbf{v}_n$ は Koopman モード、 λ_n は Koopman 固有値である。モード数 n が $\mathbf{z}(t)$ の空間次元数と等しいとき、このモード分解は DMD となる。本研究では任意のモード数に対して Koopman モードと Koopman 固有値を正確かつ効率的に推定する KMD アルゴリズムとして、ZZKMD を開発した。ZZKMD は上記展開式の誤差のフロベニウスノルム (RSS) の最適化問題を直接的に解くアルゴリズムで、逆行列によるモード推定と勾配法による固有値推定の繰り返し計算を行う。最適化の初期値として、解析的な近似解である LSVP 解を利用することで効率的に最適解を得る。さらに、数多くのモード数で展開したのちに有害なモードを除去することで、高精度なモード分解を実現できることを見出した。以上の手続きと同様の効果は、ハンケル動的モード分解 (Hankel DMD) とスパース動的モード分解 (SP-DMD) の組み合わせによっても得られる。

本研究では、実験室プラズマ (直線乱流プラズマ) の計測から得られた時空間データに対して、LSVP/ZZKMD/Filtering および Hankel DMD/SP-DMD の適用を行った。データは 64ch の周方向プローブアレイにより $1\mu\text{s}$ 間隔で計測されたものである。

3. 結果と考察

前年度は 1ms の解析窓で SP-DMD 解析に成功していたが、より長時間の解析窓では著しくモード分解の精度が低下していた。今回新たに適用した上記 2 つアプローチでは、3ms の解析窓で高精度なモード分解に成功した。さらに、短時間予測にも取り組んでおり、定性的には良い結果が得られている。これらの結果は、線形的な遷移を仮定する標準的な DMD の枠組みを超えて、KMD の枠組みで解析を行ったことによるものと考えられる。

4. おわりに

本研究では、実験室プラズマの時空間データに独自のクープマンモード分解アルゴリズムを適用した。その結果、従来よりも長い時間区間の高精度なモード分解と短時間予測を行うことができた。高精度なモード分解を用いると、より有意な構成要素の議論が可能になる。今後は、半導体材料プロセスにおける相界面現象の時空間データ(ステップダイナミクス等)に対しても同手法の適用を進める。また、定量的な予測性能を有する解析手法の検討を進めていく。

5. 研究成果報告

発表論文

- [1] Long-Time Dynamic Mode Decomposition of Plasma Turbulence, Akira Kusaba, Tetsuji Kuboyama, Kilho Shin, Makoto Sasaki, Shigeru Inagaki, *Plasma and Fusion Research* (under review).

学会発表

- [2] Predictive Nonlinear Modeling by Koopman Mode Decomposition, Akira Kusaba, Kilho Shin, Dave Shepard, Tetsuji Kuboyama, *15th International Workshop on Spatial and Spatiotemporal Data Mining (SSTDM '20)* 2020 年 11 月 17 日.
- [3] Long-Time Dynamic Mode Decomposition of Plasma Turbulence, Akira Kusaba, Tetsuji Kuboyama, Kilho Shin, Shigeru Inagaki, *29th International Toki Conference on Plasma and Fusion Research (ITC-29)* 2020 年 10 月 29 日.

6. 研究組織

研究代表者	久保山 哲二	学習院大学・教授
研究協力者	草場 彰	応用力学研究所・助教
研究協力者	稲垣 滋	応用力学研究所・教授
所内世話人	寒川 義裕	応用力学研究所・教授

沿岸海洋循環場の予測にむけた高解像度数値モデルとデータ統合手法の開発

海洋研究開発機構・付加価値情報創生部門
情報エンジニアリングプログラム プログラム長
石川洋一

研究の目的

沿岸海洋における海洋循環は複雑な地形に支配された小さなスケールのローカルな変動から、海盆スケールの大きなスケールの影響をリモートに受けた変動までさまざまなスペクトルを持つことがよく知られている。このような重層的なスケールにまたがる変動を高精度で予測することは科学的に挑戦的な課題であるだけでなく、海運・水産など沿岸における活動へ有益な情報を提供することができるので社会的にも重要な課題の一つである。このような課題に対して本研究では、沿岸域を対象とした予測手法の確立を目的として、高解像度海洋大循環モデルの開発および観測データと組み合わせたデータ同化手法に関する研究開発を行う。九州大学応用力学研究所は沿岸域における主要な観測データである HF レーダーデータに関するデータベースを保有しているとともに、そのデータの活用や海洋大循環モデル RIAMOM を用いた海況予測に関する知見が豊富にあることから、沿岸域の予測にむけて数値モデル・データ同化に関して共同で研究開発を行いたい。

研究の方法

海洋研究開発機構で開発されている海洋大循環モデル MRI.COM などの高解像度化を行い、九州大学応用力学研究所で開発されている海洋大循環モデル RIAMOM で得られた知見や DREAMS データセットなどの比較を行うことにより、沿岸域における海洋変動の再現性の向上を目指す。また、HF レーダーなどの観測データを同化するために、観測データ・数値モデルそれぞれの特性をふまえた解析手法・同化手法の開発・改良を行う。

研究の結果

今年度は沿岸域の高解像度モデルの開発を中心に行い、日本沿岸における再現性の向上に関する改良の成果を評価した。高解像度のモデルの開発・改良は、2km 解像度の日本周辺モデルにおいて、潮汐モデルを導入するとともに、河川流出に関する淡水に関する外力を詳細化することで再現性の向上を図った。その結果、潮汐成分を陽に表現することにより、流速成分の再現性が向上するだけでなく、改善された流速によって引き起こされる水平・鉛直混合が水温・塩分場の構造も改善させることが明らかとなった。特に瀬戸内海においては複雑な地形の効果もあり、潮汐フロントが存在することが観測的にも知られているが、今回の改良に伴い豊後水道などにおける潮汐フロントがモデルによってよく再現で

きることが示された。

沿岸域でのさらなる高解像度化として 2km 解像度モデルからのネスティングを行い、500m 解像度、100m 解像度のモデルをいくつかの海域において開発を開始した。これにより中小の湾内の海洋構造を再現できる見込みであるが、比較可能な観測データが少ない場合が多く、検証の難しさが明らかとなった。

まとめと今後の課題

海洋大循環モデルの改良については RIAMOM でも行われてきており、その有効性はこれまで RIAMOM で得られたものを追認する形であり、日本周辺の沿岸域を対象としたモデルに普遍的に当てはまるものだと考えられる。

さらなるモデルの高解像度化にける検証データの少なさについては九州大学などのグループが行っているように漁船に観測データを集めてもらうなどの、これまで行われてこなかった手法によって解決していくことが重要であると考えられる。これらの新しい種類のデータは、従来の観測船によって得られたデータとは異なる前処理、精度検証が必要だと考えられるので、今後九州大学と共同で利用方法を検討し、利用実証につなげていきたい。

研究組織

石川洋一（代表） 情報エンジニアリングプログラム・プログラム長 レーダーデータの解析および研究のとりまとめ

佐々木英治 アプリケーションラボ・気候変動予測情報創生グループ・主任研究員
モデル計算および解析

小守信正 アプリケーションラボ・気候変動予測情報創生グループ・主任技術研究員
モデル計算および解析

小室芳樹 北極環境変動総合研究センター・北極域気候変動予測研究グループ・グループリーダー
モデル計算および解析

応用力学研究所共同研究成果報告

1. 課題番号：2020 S2-4
2. 課題名：静止衛星を用いた中緯度混合相雲の発生と発達過程の研究
3. 区 分：特定
4. 研究代表者

所属：BAERI/NASA Ames Research Center

氏名：篠塚陽平

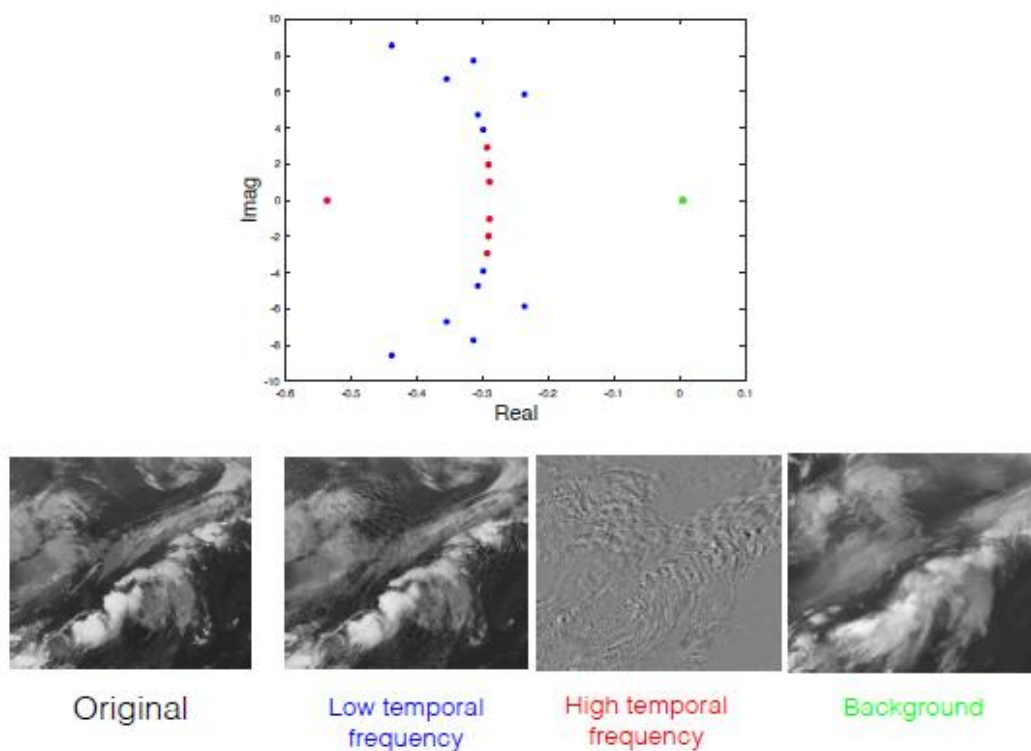
5. 所内世話人：弓本 桂也

予定していた篠塚の来所はコロナウイルスに関連する旅行の規制・自粛要請を鑑みて、残念ながら延期した。2020 年 4 月から数えて計 14 回のインターネット会議での話し合いと、ひまわり観測データの試験的な解析が、当共同研究の主な活動となった。参加したのは 6 月頃までは（敬称略）櫻井大督（汎オミクス計測・計算科学センター）・藤井彬人（システム情報科学府情報学専攻 1 年）・弓本桂也・篠塚陽平、その後は Israr Haq・河原吉伸（二人ともマス・フォア・インダストリ研究所）・永尾隆（東京大学大気海洋研究所）・櫻井・弓本・篠塚だった。

まず日本付近のひまわり画像の特定の波長を組み合わせたサンプル動画ファイルを作成・交換したり、一般的な冬の雲の性質やひまわり搭載のセンサーの特性の確認を行った。その後、雲の垂直方向の分布を導出する新しい手法を模索することに決めた。この研究方針の背景には、雲底の高さが宇宙からはなかなか観測しにくい現状と、雲底高度が今より少しでも正確に推定

できれば（当共同研究の大きな目標である）エアロゾルと雲の相互作用の理解が前進するだろうという期待がある。

Dynamic Mode Decomposition on satellite images



44

従来、雲の高さの判別は赤外域での雲頂温度の波長依存性に頼っており、時間に沿った変化は一般に考慮されてこなかった（観測された画像一つ一つ別々にアルゴリズムを走らせてきた）。これに対し、動的モード分解（Dynamic Mode Decomposition, DMD）と呼ばれる動画処理技術では、時系列データの時間発展に注目してモード分解を行うことで、固有モードとそれに対応する周波数を得ることができる。気象以外の分野では、例えば動画の中で歩いている人物を固定された背景から区別することに用いられてきた。雲の観測においては、特に最新の静止衛星による2.5分に1度という高い観測頻度のおかげで、衛星観測結果を動画のように扱うことができるようになった。雲は高さによって動く速さや方向が異なる特徴を持つため、動的モード分解が、高さの識別の一助となることが期待できる。

2021 年 2 月の時点では、この技術を既存のひまわりのデータへの適用作業を、Haq が中心とな
って行っている。ひまわりのどの波長の観測データを用いるか、結果をどの独立したデータを
比較するかなどの検討を行っている。

窒化物半導体材料における形状および物性のマルチスケールデータ解析手法の構築

三重大学大学院工学研究科 秋山亨

1. 研究目的

GaN に代表される窒化物半導体材料は省エネルギー社会の実現に寄与する光デバイスおよび電子デバイスに用いられており、混晶や超格子を作製することでそのバンドギャップ等の物性制御が行われている。しかしながら、これらの材料の組成や構造の自由度は膨大であり、実験的に検証することは困難である。本研究課題では、これらの系に対して、所望の物性を得るための条件を高スループットで抽出することが出来るデータ解析手法の構築を目指す。また、窒化物半導体デバイスの作製において出現するナノ(マイクロ)スケールでの形状制御に対して、量子論にもとづくナノスケールでのデータをもとにマイクロ～ミリスケールでの材料形状予測を行うための解析手法の構築も行う。上記研究を遂行するために、寒川教授と共同研究を行うことで、同教授の研究室の持つマルチフィジックス・マルチスケール結晶成長シミュレーション技術のノウハウを本研究課題に対して適用させる。さらに得られた結果をもとに、窒化物半導体における物性制御および結晶成長に向けた諸現象の統合的理解を目指す。

2. 計算方法

本研究課題では以下の 2 つの研究項目に対する計算データの蓄積および解析手法の構築を行う。

1. 物性制御のためのデータ解析(担当：河村・中村・寒川)

三重大学で得られた量子論にもとづく計算(第一原理計算)データをもとに、三重大学および九州大学においてデータ解析手法の構築を行う。特に窒化物半導体デバイスにおいて重要となるバンドギャップ値に対して機械学習を行うことで、効良く行うための手法の構築を行う。得られた成果に対して九州大学において研究打ち合わせを行い、その妥当性の検証を行う。

2. 形状制御のためのデータ解析(担当：秋山・寒川)

三重大学で得られた半導体表面および各種欠陥のエネルギーデータをもとに、マイクロ～ミリスケールでの結晶形状予測を行う。各種エネルギーにデータに対して機械学習による予測を行うとともに、これらのデータを用いた形状予測手法の構築を行う。得られた成果に対して九州大学において研究打ち合わせを行い、その妥当性の検証を行う。

本年度は計算データの蓄積に関する研究を実行するとともに、これまでの計算データを用いて機械学習を用いた解析も行い、以下に記すような研究成果を得ている。なお計算は、密度汎関数理論に基づく全エネルギー電子状態計算によって実行し、計算コードとして Tokyo Ab-initio Program Package (TAPP) に本計算用に改良を施したプログラムによって実行した。また第一原理計算プログラムパッケージとして Quantum Espresso を利用した。これらの電子状態計算に加え全電子 FLAPW 法による全電子計算も実施した。

3. 研究成果

3.1 物性制御のためのデータ解析

窒化物半導体における物性制御に関する研究として、これまでの得られた InN/AlN および InN/GaN 超格子における計算結果を用いて、バンドギャップ

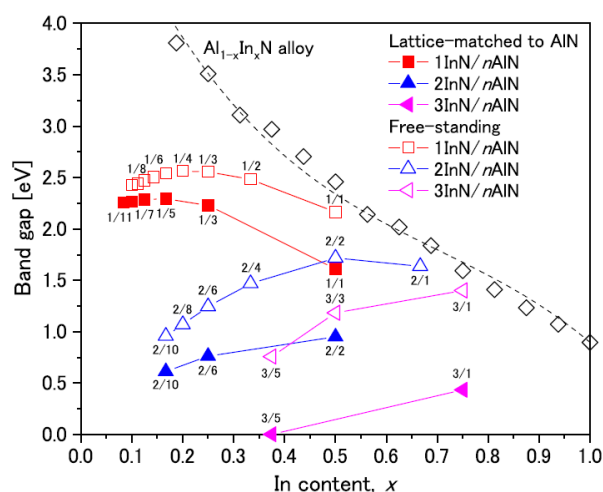


図 1. AlN 基板を想定した場合での $\text{Al}_{1-x}\text{In}_x\text{N}$ 混晶および $m\text{InN}/n\text{AlN}$ 超格子の計算モデルおよびバンドギャップ値の In 組成 x 依存性。

ブア値に対して機械学習を用いた解析を行った。図 1 は第一原理計算を用いて計算した AlN 基板を想定した場合での $m\text{InN}/n\text{AlN}$ 超格子におけるバンドギャップの In 組成 x に対する変化を示したものであり、 $m\text{InN}/n\text{AlN}$ 超格子において m および n はそれぞれ InN および AlN の層数を示している。この計算により得られた各種パラメータ(格子定数、組成、超格子周期等)を入力として、決定木分析によるバンドギャップの予測を試みたところ、再現性のよいデータ範囲もあったが、機械学習は一般的に外挿が難しいため著しく再現性の低いデータ範囲もあった。これらの改善が今後の課題である。

3.2 形状制御のためのデータ解析

ナノ構造エピタキシャル成長機構に関する研究として、これまでの平衡状態におけるナノ構造形状の解析に加え、成長プロセスに対する検討を行った。具体的には、GaN におけるシヤル成長時の気相からの原子および分子の表面への吸着および脱離過程、これら原子および分子の表面での (マイグレーション等の) 挙動を明らかにした。図 2 に示すような異なる面方位からなる表面(複合ファセット)において有機金属エピタキシャル成長でのキャリアガス依存性に対する検討を行い、成長温度および圧力に依存性して変化する表面構造に起因して、これらの挙動が大きく変化することを見出した。また、これら挙動の違いにより GaN において形成するナノワイヤの成長様式が大きく変化することを見出した。これらの計算結果は実験結果とも定性的に一致している。

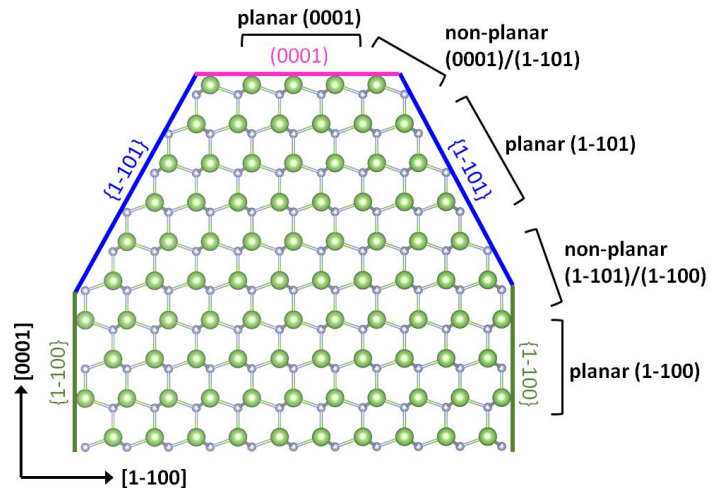


図 2. GaN における異なる面方位からなる表面(複合ファセット)の模式図。緑色、青色、および桃色の領域はそれぞれ $\{1-100\}$ 、 $\{1-101\}$ および $\{0001\}$ 面を示す。これら複合ファセットおよび各面における計算モデルを構築して、そこでの原子および分子の挙動に対する第一原理計算を行う。

4. 研究業績

1. “Roles of growth kinetics on GaN non-planar facets under metalorganic vapor phase epitaxy condition”, Y. Seta, A.-M. Pradipto, T. Akiyama, K. Nakamura, T. Ito, Applied Physics Express 13, 065505 (2020).
2. “Effect of step edges on adsorption behavior for GaN(0001) surfaces during metalorganic vapor phase epitaxy: an *ab initio* study”, T. Ohka, T. Akiyama, A. -M. Pradipto, K. Nakamura, T. Ito, Cryst. Growth & Des. 20, 4358 (2020).
3. “Absolute surface energies of oxygen-adsorbed GaN surfaces”, T. Kawamura, T. Akiyama, A. Kitamoto, M. Imanishi, M. Yoshimura, Y. Mori, Y. Morikawa, Y. Kangawa, K. Kakimoto, J. Cryst. Growth 549, 125868 (2020).
4. “A simple approach to growth mode of InN and InGaIn thin films on GaN (0001) substrate”, K. Nagai, T. Akiyama, K. Nakamura, T. Ito, ECS Transactions 98, 155 (2020).
5. “Computational discovery of stable phases of graphene and h-BN van der Waals heterostructures composed of group III-V binary compounds”, T. Akiyama, T. Kawamura, and T. Ito, Applied Phys. Lett. 118, 023101 (2021).
6. “GaN(0001)基板上における InN および InGaIn 薄膜の成長様式に関する理論的検討”, 永井勝也, 秋山亨, 中村浩次, 伊藤智徳, 第 49 回結晶成長国内会議 10p-P07, (2020 年 11 月 9-11 日).
7. “Recent progress in computational materials science for III-nitride epitaxial growth: effects of growth kinetics on surface morphologies and nanostructures”, T. Akiyama, Y. Seta, T. Ohka, T. Ito, International Symposium on Wide Gap Semiconductor Growth, Process and Device Simulation 2021 (2021 年 1 月 19-21 日).
8. “Change of the effective bandgaps of InN/AlN superlattices due to lattice distortion”, T. Kawamura, A. Korei, K. Basaki, T. Akiyama, Y. Kangawa, I. Gorczyca, T. Suski, M. Wierzbowska, S. Krukowski, International Symposium on Wide Gap Semiconductor Growth, Process and Device Simulation 2021 (2021 年 1 月 19-21 日).

5. 研究組織

研究代表者 秋山亨 (三重大学大学院工学研究科・准教授)
 所内世話人 寒川義裕 (九州大学応用力学研究所・教授)
 共同研究者 河村貴宏 (三重大学大学院工学研究科・助教)
 共同研究者 中村浩次 (三重大学大学院工学研究科・教授)

応用力学研究所共同研究成果報告書

1. 課題番号：2020 S2-6

2. 課題名：東アジア縁辺海が暖候期における集中豪雨に及ぼす影響

3. 区分：特定

4. 研究組織

所属：三重大学大学院生物資源学研究科

氏名：万田敦昌（研究代表）

所属：海洋研究開発機構

氏名：趙寧

所属：九州大学応用力学研究所

氏名：広瀬直毅（所内世話人）

6. 研究背景・目的

昨年発生した令和2年7月豪雨は、九州地方の甚大な被害を及ぼした。この豪雨においては、平年に比べ多量の水蒸気が九州地方に流入したことが発生要因の一つとして指摘されている。水蒸気フラックスの分布からは、熱帯インド洋と熱帯太平洋からの水蒸気輸送が示唆されているが、その実態は明らかにされていない。そこで、豪雨発生時の水蒸気の起源を明らかにすることを目的とした数値シミュレーションを行った。

7. 手法

領域気象モデル Weather Research and Forecasting Model (WRF) の version 4.1.5 を使用した。計算領域は、ベンガル湾の一部から太平洋西部までを含む範囲とし（おおよそ 10°N - 45°N , 110°E - 150°E ），水平格子間隔は 9 km，鉛直層数は 60 層とした。サブグリッドスケールのパラメタリゼーションとして，WSM6 microphysics scheme, Yonsei University PBL scheme, Revised MM5 surface layer scheme, United Noah Land Surface Model (Tewari et al., 2004), the RRTMG Shortwave and Longwave Schemes, and Grell-Freitas Ensemble cumulus scheme を使用した。初期・境界条件のためのデータとして，NCEP Final Analysis, OISST を使用した。計算は2020年6月27日00:00から7月5日00:00 (UTC)まで行い，6月28日以降のデータを解析に使用した。得られた流れ場を用いて，仮想気塊を用いた後方流跡線解析を行った。降水と蒸発のデータを用いて，気塊の水蒸気変化を見積もった。

8. 結果

一般に梅雨期豪雨においては熱帯からの水蒸気供給が重要であると考えられているが、本事例では熱帯から流入した水蒸気の大半は九州に向かう途中で降水として消費されてしまい、豪雨に直接関与したのは日本近海（沖縄・南西諸島周辺の西太平洋・東シナ海）における水蒸気供給であることが明らかになった。さらに、海上での浅い対流による対流圏中層への水蒸気供給が、海面からの蒸発による対流圏下層への水蒸気供給と同程度に重要であることが明らかになった。集中豪雨を引き起こすような線上降水帯の形成において、対流圏中層が湿潤であることの重要性が指摘されている。熱帯域の対流システムの発達に関して、浅い対流による対流圏中層の湿潤化の重要性を指摘する研究事例があるが、本研究では、中緯度の線上降水帯という熱帯とは異なる降水システムに関して、日本近海における浅い対流の重要性を初めて指摘した。

9. 公表論文

Zhao, N., Manda, A., Guo, X., Kikuchi, K., Nasuno, T., Nakano, M., Zhang, Y., Wang, B. (2021). A Lagrangian view of moisture transport related to the heavy rainfall of July 2020 in Japan: Importance of the moistening over the subtropical regions. *Geophysical Research Letters*, 48. <https://doi.org/10.1029/2020GL091441>

複数ドローンによる大気流れ構造観測手法の開発

島根大学学術研究院理工学系 荒川弘之

背景と研究目標

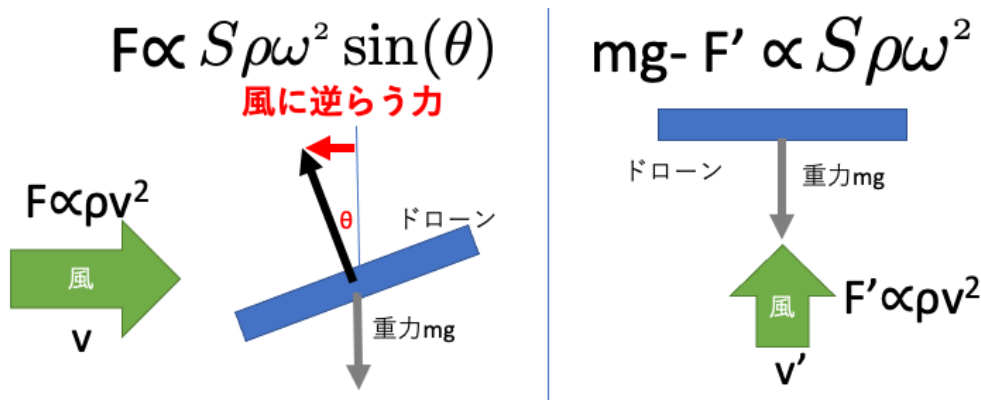
乱流は、大気・海洋・宇宙・プラズマ等、自然の中でありふれた現象であり、様々な時間・空間スケールを伴うマルチスケール物理現象である。申請者らは、これまで磁化プラズマ中の乱流構造測定により、乱流中の輸送及び構造形成機構の解明に向けた物理、及びこれを目的とした計測・シミュレーション手法の開発を行ってきた(H. Arakawa et. al. Sci. Rep. 2016 他)。本研究では、これまでのプラズマ乱流観測で培ってきた多点計測・解析手法を踏まえ、乱流現象の観測・解析手法の普遍化を目指すため、新たに大気乱流を対象とし、新しい流れ構造観測手法の開発を目指す。観測ツールとして、大気乱流をオイラー的及びラグランジュ的に共に観測可能(P. Neumann et. al. Sensors and Actuators A 235 (2015) 300-310)なマルチコプターに代表されるドローンを複数利用する。

本研究の直接的な応用として、これまでシミュレーションや少数点の測定しかできなかった、地・海表面近傍(100m以下)の三次元的な風速構造の直接測定が可能になると考えられる。具体的には、風力発電装置周辺やビル間の風の流れ、海表面近傍の大気乱流構造の直接計測が見込まれる。

今年度は、ドローンによる正確な風速を測定するため、(i)九州大学応用力学研究所研究所の風洞施設を利用した校正実験を行った。加えて(ii)野外での校正の初期実験および、(iii)風力発電施設周辺におけるウエイク流れ構造観測・解析手法の検討を行った。

原理

ドローンには、GNSS やアクティブソナー、オプティカルフローセンサー等を用いてホバリング状態(空間中に静止)を維持する機能を持つものがある。ドローンが横方向の風を受けた際、ホバリング状態を維持するためには、ドローン自身が傾き、風の向く方向へ逆らって力を加える必要がある。また縦方向の風を受けた場合、位置を維持するためには、上昇流の場合は、プロペラの回転数を弱め、下昇流の場合は、逆に強める必要がある。このため、ドローンのプロペラ回転数、傾きセンサ等は、風速の向き・強さに影響を受ける。本研究ではこれらのデータから逆算して、ドローンが受ける局所的な速度場を求める。風速測定における簡単な概念図を以下に示す。



図：ドローンがホバリングを行う際に、風速(v)によるドローンへの力(F)とドローンの推力(左図：横方向、右図：鉛直方向)との関係。 ρ は空気密度。 S はドローンのプロペラ面積。 F' はホバリング状態でのドローン推力。

実験と結果

本研究では、DJI 社製 Mavic mini 及び Parrot 社製 ANAFI を用いた。

(i)九州大学応用力学研究所の大型風洞施設を用いた校正実験を行った。1m/s から 10m/s まで 1m/s ごとに一定の風によりドローン(Mavic mini)におけるプロペラの回転数、傾きの関係を得た。機体間依存性や方向依存性も得た。

(ii)風洞では高精度な校正が可能であるが、鉛直方向の校正ができず、またより簡便な校正手法の開発のため、野外での風速校正法の初期的検討を行った(Mavic mini 及び ANAFI)。ドローンの移動速度が一定条件における、プロペラの回転数と傾きは、ホバリング状態でその風速の風を受ける状態と同じとなることに着目し、校正を行った。ドローンの移動速度は全球測位衛星システム(GNSS)により得た。

(iii)風力発電施設は、周辺の風の影響を受け、また風車の後方には風車ウエイクと呼ばれるゆらぎが生じる。この構造は風車のプロペラの動きに同期して生じる為、複数ドローンを用いた2次元速度分布の再構成手法の考案を行った。本手法はプラズマにおける2次元時空間再構成手法(H. Arakawa et. al. Sci. Rep. 2016)を応用するものである。

今後の方針

今後は、野外におけるドローン風速校正手法について、風洞実験との比較を行うことで論文化を目指す。また、風車ウエイク計測方法を実際の風車周りで適用し、2次元ウエイク構造観測手法として論文化を目指す。

成果報告：なし

プロセス・インフォマティクスに対する情報学的データ解析の応用

国立研究開発法人 産業技術総合研究所 安藤 康伸

各種の分析過程で得られるスペクトルデータは、材料探索・材料開発における最も一般的なデータ形式のひとつであり、スペクトルデータを解析することで材料の構造や機能の同定に役立てることができる。しかしながらスペクトルデータの解析には課題が多い。例えば、非線形最小二乗法を用いたモデルフィッティングを行う際、初期値依存性の問題から解析に試行錯誤を要して時間がかかり、またパラメータ推定の自動化が困難となるケースがある。またスペクトルの成分数が不明である場合に、解析に用いた成分数が妥当であるかどうかを客観的に評価できないケースも多い。これらの課題、すなわちスペクトルデータ解析の効率化・自動化・客観化に取り組むためにインフォマティクスが活用されている。ここではスペクトルデータに対するインフォマティクスの活用事例として特にスペクトルデータ解析への応用事例を中心に報告する。

スペクトルデータのフィッティングを自動化する意義は、単に研究者の労力を削減することにと留まらない。それは処理できるスペクトルの絶対量に差が生じるためである。いかに熟練の研究者であっても、100本を超えるスペクトルを常に処理し続けることは容易ではない。さらに現在の放射光施設やハイスループット計測装置などハードウェアの進展からスペクトルデータの生産性は日進月歩で増加しており、時に10000本以上のスペクトルがひとつの実

験系で得られることもある。これをマニュアルで処理するのは現実的ではない。大量のスペクトルデータを漏れなく処理して最大限活用するためにも、MI の活用は不可欠である。

スペクトルデータ解析の自動化は、様々な角度から検討されている。例えば、動的シャーリー法では、シャーリー法によるバックグラウンドの除去とスペクトルフィッティングを交互に行うことで、バックグラウンドを決定するパラメータを含めた形で最適化を自動で行うことができる[1,2]。スペクトルフィッティングの初期値は、スムージングした曲線の微分を評価することで推定して最小二乗法の失敗を避けている。

非線形最小二乗法を用いないような自動フィッティング手法として、EM アルゴリズム（期待値最大化法）によるモデルの最尤推定も挙げられる[3]。最尤推定は統計的機械学習の基本として用いられ、ある確率分布を仮定したとき取得されたデータが得られる確率（尤度）を最大化することで確率分布のパラメータを推定する手法である。複数の成分を持つ多峰的なスペクトルを解析する場合には、混合ガウス分布に対する EM アルゴリズムを用いることで高速にモデルパラメータを推定することができる。

期待値最大化法のメリットとして、初期値に対するロバスト性が挙げられる。EM アルゴリズムは初期値を設定したのちに E ステップと M ステップと呼ばれるプロセスを交互に繰り返すことでモデルの尤度を単調に増加させることができる。そのため、初期値が大きく外れているような場合でも数値的に安定なモデル推定を行うことができる。初期値依存性があり局所解に陥ることに注意が必要だが、スペクトル 1 本あたり 1 秒未満でのモデル最適化が

可能である。初期パラメータのマニュアル設定やアルゴリズムとしてハイパーパラメータを必要としていないことから自動化も容易である。

またスペクトルデータは一般に複数成分から構成されており、観測データからこれらの成分を分解する作業はスペクトル解析の重要な目的のひとつに挙げられる。しかしながら、スペクトルの成分数を決定することは物理的な制約等がない限り困難であり、研究者によって仮定が置かれること、またスムージングしたデータの微分値などから推定することが一般的であり、主観的な判断が解析を主導してしまうケースがある。今後の課題として、現在開発しているスペクトルデータ解析技術をベイズ推論の枠組に拡張することが挙げられる。

スペクトルの成分数をデータから決定する手法のひとつがベイズ推論である。ベイズ推論は、モデルパラメータを確率変数として取得したデータに基づき、モデルパラメータに対する確率分布である事後分布を推定する枠組みである。実際の計算では、尤度とパラメータに対する事前分布からベイズの定理に基づき事後分布を計算する。また事後分布の規格化因子を周辺尤度とよび、モデルの妥当性を統計的に評価する指標に用いることができる。スペクトル解析ではピーク本数を客観的に決定する指標となる。

永田らはこのベイズ推論の枠組で、レプリカ交換モンテカルロ法を用いたピーク本数推定の結果を報告している[4]。この手法は統計力学研究にも広く用いられ、通常のマルコフ連鎖モンテカルロ法に加えて温度の異なるレプリカを用意し、温度交換も実施しながらサンプリングを実施する手法である。レプリカ交換モンテカルロ法の利点は、局所解を避け、大域

解を発見できる点、またサンプリング結果を用いることで陽に多次元積分を実施することなく、周辺尤度を計算できる点にある。一方で、計算コストが高い、技術的に難度が高いなどの課題はあるものの、最も高精度にモデル評価を行える手法に位置づけられる。これらの知見を生かした方法論開発が今後望まれる。

参考文献

- [1] 松本凌, 西澤侑吾, 片岡範行, 田中博美, 吉川英樹, 田沼繁夫, 吉原一紘, *Journal of Surface Analysis* 22, 155 (2016).
- [2] A. Herrera-Gomez, M. Bravo-Sanchez, O. Ceballos-Sanchez, and M. O. Vazquez-Lepe, *Surface and Interface Analysis* 46, 897 (2014).
- [3] T. Matsumura, N. Nagamura, S. Akaho, K. Nagata, and Y. Ando, *Sci. Tech. Adv. Mater.* 20, 733 (2019).
- [4] K. Nagata, S. Sugita, and M. Okada, *Neural Networks* 28, 82 (2012).