

[26]全国共同利用研究成果報告

<https://doi.org/10.15017/6796417>

出版情報：全国共同利用研究成果報告. 26, 2023-03. Research Institute for Applied Mechanics,
Kyushu University

バージョン：

権利関係：



特定研究 2【分野融合】

計測・シミュレーション・モデリングを組み合わせた統合診断

Synthetic diagnostics combining measurement, simulation and modeling

統括責任者：糟谷 直宏（核融合力学分野）

研究対象を計測することが対象理解の第一歩であるのはどの分野でも共通です。実験計測を行い、その信号の物理的意味を明らかにするうえで、様々なデータ駆動科学の手法やシミュレーションが利用されています。統合診断はシミュレーションデータを用いて計測結果を再現し、定量的解釈を提供するものです。例えばプラズマ乱流の大域的シミュレーションデータを用いたイメージングがあります。AI 技法との親和性が高く、また、理論解析が巨大なデータ空間内での道標となります。

本特定研究では、様々な分野で行われている実験計測、複合シミュレーション、データ駆動モデリングを組み合わせた統合的診断手法の共通性や応用性を探ることで、液体・気体・プラズマのミクロ・マクロ的様相を理解するためのさらなる手法の進展を目指します。

非平衡開放システムにおける時空間ダイナミクスの研究

日本大学生産工学部 佐々木真

背景と研究目標

実験室プラズマをはじめ惑星大気や海洋現象など、エネルギーや粒子の流入・流出のある開放システムには、普遍的に揺らぎや乱流等の「時空間ダイナミクス」が存在する。そして、時空間ダイナミクスに起因する輸送によってそれぞれの系の発展が支配されている。このようなシステムの発展を予測・制御することは現代物理学の最先端の課題であり、それぞれの系における詳細な研究が精力的に進められている。

本研究では、「時空間ダイナミクス」を共通の視点として、プラズマ・惑星大気・海洋現象の非線形現象を系統的に整理することを目指す。対象は、磁化プラズマにおける乱流・惑星大気における乱流と構造形成・海洋乱流現象に渡る。これらのマルチスケールな時空間ダイナミクスに対し、観測データに特異値分解や動的モード分解等のデータ駆動科学的手法を適用する事で、共通の視点から諸現象を整理する。

今年度は(1)プラズマ乱流における乱流・構造形成相互作用を波動運動論の枠組みで解析を進め、大域電場による帯状流の捕捉現象を発見した。また、(2)特異値分解による異種物理量間の特徴を抽出する手法を開発した。さらに、(3)深層学習を用いて、計測困難物理量の時空間構造推定手法の構築を行った。以下でそれぞれについて概説する。

研究成果

(1) プラズマ乱流における乱流・構造形成相互作用の理論研究

近年、JET 等の大型装置において H-mode における径電場 well に帯状流が存在することが報告されている[Hillesheim, PRL '16]。流体モデルにおける対流微分を介した相互作用を考えると、径電場と帯状流は直接相互作用がない。このような帯状流と径電場の空間存在位置の関係を理論的に説明するべく、波動運動論に基づき乱流との相互作用を介した相互作用過程を考えた。

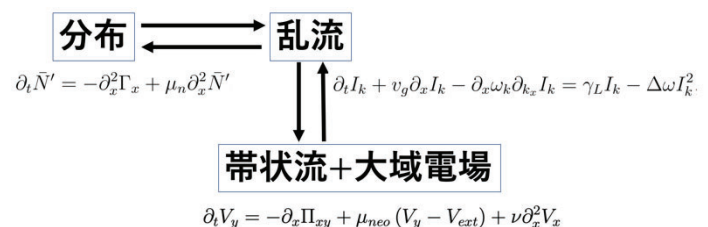


図 1: 帯状流・径電場相互作用モデル

図 1 に示すようなプラズマ分布・乱流・帯状流・径電場の相互作用を取り入れた波動運動論シミュレーションを行なった。帯状流と径電場はポロイダル流の発展方程式によりその発展を考える。帯状流は乱流応力による駆動力を、径電場については新古典粘性をモデル化した形で、外部駆動流れを導入した。本モデルには、波数・実空間における位相空間での乱流塊の捕捉機構が考慮されている。この乱流捕捉は、帯状流や計電場による乱流渦のストレッチングによる波数変化を介した分散関係の変化を考慮したものであり[Kaw, PPCF '03]、乱流の実空間構造に本質的な役割をするものである[Sasaki, Sci. Rep., '17, PoP '18, '21]。

上記モデルのシミュレーションを行なった。初期条件としては、乱流が空間一様に分布した条件から、

外部駆動の計電場を導入し、その後の発展を計算した。大域電場が形成されると、まず乱流が径電場に捕捉される。捕捉された乱流がさらに帯状流を駆動する事がわかった。このような機構により、径電場 well 内に帯状流が”捕捉”されたような空間構造が実現する。本成果は、近日中に論文投稿予定である。

(2) 特異値分解による異種物理量間の共通構造の抽出

非平衡開放系の発展は、システム内に発生する揺動による粒子・熱・運動量輸送が支配する。揺動駆動の輸送の性質は、粒子密度や温度揺動と流れ場揺動間の相関の理解が鍵となる。このような異種物理量間の共通構造を系統的に抽出する方法として、特異値分解を応用した解析手法を開発した。本手法は multi-field SVD と呼ぶ。

解析対象のデータには、直線磁化プラズマ装置 PANTA における乱流観測データを用いた。本データは、イオン飽和電流から電子密度揺動を浮遊電位分布から径方向流れ場揺動を評価することが可能である。同時計測されたこれら 2 種の物理量を時間方向に揃えて並べた巨大行列に対し、同時に特異値分解を行う。すると、密度揺動と径方向流れ場揺動の共通の時間発展とそれに対応するそれぞれの空間構造を得ることができる。密度・径方向流れ場揺動は類似の空間構造を持ち、周方向に位相遅れを有している事を確認した。本手法によって、系統的に異種物理量の位相関係や共通時間発展を抽出することが可能である。さらに、特異値分解されたモード毎は、互いに直交するため、同モードの組み合わせのみが輸送に寄与する (図 2)。そのため、従来手法に比べ圧倒的に少数自由度に落とした形で輸送の性質を議論することが可能となる。本成果は、近日中に論文投稿予定である。

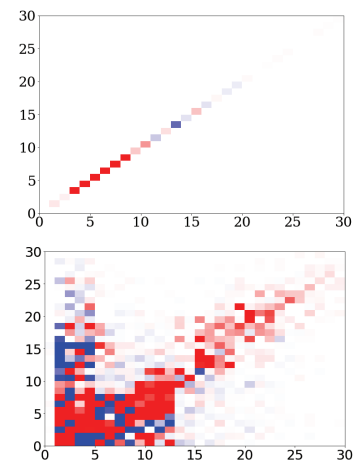


図 2: Multi-field SVD による輸送解析
上図: 本提案・下図: 従来手法

(3) 深層学習を用いた計測困難物理量の推定

核融合プラズマにおいて静電ポテンシャル揺動の計測は、チャレンジングである。現在では、重イオンプローブのような超大規模な装置を用いたり、ラングミュアプローブに複数の大きな仮定を課して計測したりと、汎用的に静電ポテンシャル揺動を計測・推定する手法構築が喫緊の課題となっている。

そこで、本研究では図 3 のようなマルチスケール深層学習を用いて[Ishikawa, '22]、密度揺動からポテンシャル揺動の推定を行なった。対象としたデータは、3 次元大域流体シミュレーションによる抵抗性ドリフト波の非線形飽和状態である。推定結果は図 4 に示すように、相関係数が 0.98 と良好な推定が可能であることが分かった。さらに、推定したポテンシャル揺動から粒子輸送の定量的評価も可能である事も示した。本成果は近日中に論文投稿予定である。

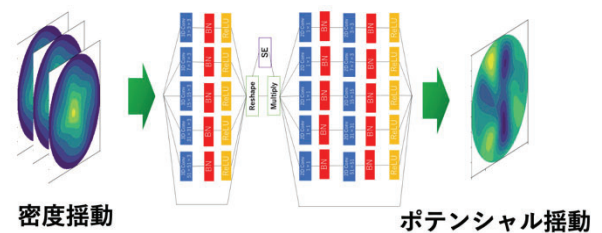


図 3: 深層学習によるポテンシャル推定

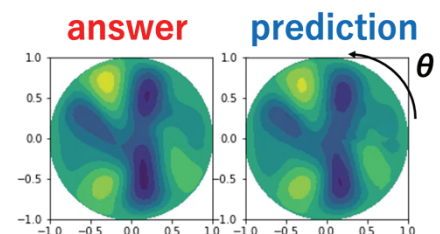


図 4: ポテンシャル推定結果。正解(右図)と推定結果(左図)の比較。

第一原理シミュレーションとデータ科学、数値計測による プラズマ分布形成の定量的理解に向けた基盤開発

核融合科学研究所 ヘリカル研究部
沼波 政倫

研究の目的

磁場閉じ込め核融合研究における最重要課題として、プラズマの熱輸送や粒子輸送の物理解と其の定量予測が挙げられる。近年の計算機の性能向上により、位相空間上の分布関数発展を第一原理的に扱えるようになり、強力な解析手段としてシミュレーション研究の重要性が増している。計算結果に対する要求レベルはさらに高まっており、数値計測手法などのシミュレーション結果に対する定量的な評価手法の開発は、その要求に応えるものの一つとして進められている。一方で、運動論に基づく第一原理シミュレーションでは、定量的な計算結果を得るために、巨大な計算資源を要することが課題になっている。本課題では、多くの分野で応用が進むデータ科学的手法を利用することで、第一原理シミュレーションと数値計測手法を融合し、プラズマの分布形成等を定量的に理解し得る解析手法の基盤開発を行う。プラズマ輸送シミュレーションをデータ科学手法により効率的に実行し、得られるデータに対する数値計測を実施することで、プラズマ分布形成と輸送現象の定量的な理解を目指す。

研究方法

本課題では、プラズマ輸送現象の第一原理シミュレーション結果を対象とするため、ジャイロ運動論コード GKV とドリフト運動論コード FORTEC-3D を用いた解析を進める。前者のコードは、磁力線に沿った局所フラックスチューブ領域において、ジャイロ運動論方程式に基づいて 5 次元位相空間上の分布関数の時間発展を解く。磁力線垂直方向の乱流を高精度で計算することができ、実際のプラズマ実験配位に対応させて、輸送フラックスや乱流スペクトルを定量的に再現することに成功している。後者は、ドリフト運動論方程式に基づいて大域的な新古典輸送現象を粒子法によって解き進めるコードである。最近では、多粒子種プラズマにおける解析が進展し、大型ヘリカル装置(LHD)における不純物ホールと呼ばれる特異な密度分布構造に対する新古典輸送からの説明に成功している。これらのコードによるシミュレーションおよび得られる計算結果に対して、データ科学的手法および数値計測手法を適用し、下記の解析を進める。

データ科学的手法による効率的な運動論シミュレーション

巨大な計算コストを要するジャイロ運動論シミュレーションについて、簡約輸送モデルとこれまでのシミュレーションデータベースから必要とする入力パラメータ領域を推定し、GKV コードを用いて効率的にシミュレーションを実行する。その結果を再度、輸送モデルの最適化に用いて、対象プラズマに特化した輸送モデルを構築する。

運動論シミュレーションデータに対する数値計測

FORTEC-3D による新古典輸送の計算結果を HIBP 計測ツールに渡し、揺動分布や静電ポテンシャルの数値計測を行い、プラズマ分布の定量評価を行う。

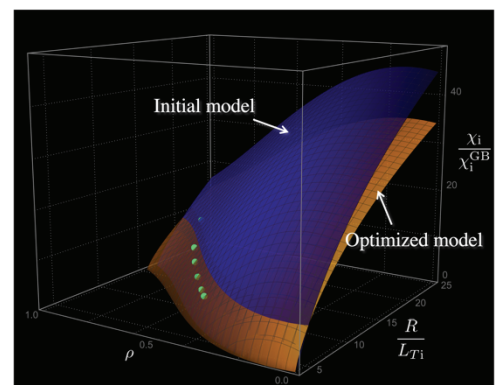


Fig. 1 新しい輸送予測手法を用いて構築された最適化輸送モデル(橙面)と従来の簡約モデル(青面)の比較。緑点は最適化輸送モデルの構築の際に実行したジャイロ運動論シミュレーションの結果。

研究成果

データ科学的手法と第一原理計算の融合による新しいプラズマ輸送予測手法の開発

定量的な輸送予測が可能な第一原理シミュレーションの最大の弱点である膨大な要求計算コストの問題を解決するため、入力パラメータをデータ科学的手法により予測する第一原理計算の手法を開発した。ここでは、まず簡約輸送モデル[1]を用いて対象となるプラズマの輸送フラックスに対応し得る温度勾配などの入力パラメータを推測する。その値を用いて少数回だけジャイロ運動論シミュレーションを実行し、その結果を用いて簡約モデルを再度、最適化する。この方法で求められた最適化簡約モデルを用いると、幅広い温度勾配領域で実行したジャイロ運動論シミュレーションの結果を高精度で予測できることが明らかになった(Fig. 1)。本手法で構築した輸送モデルは、プラズマ温度の分布発展計算にも応用され、随時ジャイロ運動論シミュレーションを実行した場合と同精度で、分布形成の発展計算が実現できた[2]。

LHD プラズマの新古典輸送シミュレーションと HIBP 計測模擬

大型ヘリカル装置(LHD)における新古典プラズマ輸送シミュレーションを FORTEC-3D を用いて実行し、その結果に対して、重イオンビームプローブ(HIBP)による計測を数値的に模擬した(Fig. 2)。解析対象としたデータは、磁気面上で非一様な静電ポテンシャル Φ_1 を評価したものである[3]。プローブイオン入射条件は、1 価の金イオンを 5.5MeV のエネルギーで入射した。実際の計測と同様に、入射角を掃引することにより計測点の位置が空間的に変化するため、空間分布の計測が可能になる。計測結果における電位データ局所値との比較から、有限幅メッシュを用いる計算誤差は入射エネルギーの 0.001%以下に抑えられていることが分かった[4, 5]。

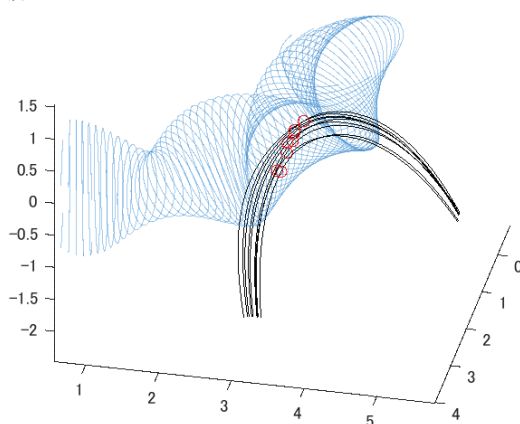


Fig. 2 LHD 磁場配位におけるビーム軌道シミュレーション。重イオンの入射角を掃引した複数の軌道を表示している。

まとめ

近年、データ科学に基づく解析手法の開発研究が様々な分野で精力的に進められている。本課題では、このようなデータ科学的手法と数値シミュレーションにより、新しい数値研究の展開を図るため、第一原理シミュレーションの効率的な実行と計算結果に対する定量的なデータ解析の実現を目指した。特に巨大な計算資源を要求する第一原理プラズマシミュレーションに対して、可能な限り計算量を削減してこれまでと同精度の輸送予測が可能となる新しい解析手法を開発した。さらに、シミュレーションデータに対して実験計測を模擬する計測手法を適用し、複雑な3次元プラズマにおけるHIBP数値計測による基盤開発を進めた。今後は、効率的な第一原理シミュレーションの実行と定量的なデータ解析手法を融合した手法に発展させ、より現実的なシミュレーション条件におけるプラズマ分布形成に対する定量的な解析を進める。

- [1] M. Nunami, et al., “A reduced model for ion temperature gradient turbulent transport in helical plasmas”, *Physics of Plasmas* **20**, 092307 (2013).
- [2] M. Nunami, et al., “Improved prediction scheme for ion heat turbulent transport”, *Physics of Plasmas* **29**, 102505 (2022).
- [3] K. Fujita, et al., “Study on impurity hole plasmas by global neoclassical simulation”, *Nucl. Fusion* **61**, 086025 (2021).
- [4] 吉原稜, “重イオンビームプローブを用いたトーラスプラズマにおける3次元揺動計測の模擬”, 第39回プラズマ・核融合学会年会、富山国際会議場.
- [5] N. Kasuya, “Global Structure and Its Diagnostic Simulation in Magnetized Plasma”, 20th International Congress on Plasma Physics, Gyeongju, Korea.

計測との比較に向けた不純物輸送の統合モデリング

京都大学大学院工学研究科 本多充

目的

近年、核融合プラズマの輸送・閉じ込め研究領域において、不純物が着目されている。これまでの輸送研究では、粒子・熱輸送のいかに関わらず、電子やバルクイオンである重水素の輸送に注目が集まっていた。プラズマを構成する粒子の大半をそれらが占めることや、ソースの評価が比較的容易であることが理由として挙げられる。一方、不純物は主に壁やダイバータから侵入し、周辺プラズマを経て輸送によってコアへと運ばれることから、本質的にソースの種類やその分布が異なること、粒子輸送に関しては向きがバルクイオンと異なることに加え、2 価以上の価数を持っていることから、放射による熱損失を生じさせることなど、電子やバルクイオンと大きく異なった特性を持つ。一方で、通常、核融合プラズマ中に入射した中性粒子ビームと完全電離不純物イオンとの荷電交換反応に続く発光のドップラー広がりからイオン温度を、ドップラーシフトからプラズマ回転速度を計測するなど、計測分野において不純物は必要とされる存在になっている。計測される不純物イオンの代表は炭素であり、JT-60U をはじめ多くの装置では炭素の発光を計測している。実験解析においては炭素とバルクイオンの温度が等しい仮定し、また炭素の回転速度はバルクイオンのそれと等しいとして回転速度を求めることが多いが、前者はともかく後者の仮定は妥当であるとは言いがたい。炭素は価数、質量数共にバルクイオンの代表格である重水素と隔たりがあり、そのためイオンが感じる衝突周波数は異なっている。ゆえに両者の間で新古典輸送特性が異なるため、トロイダル回転、トロイダル回転共に、常に重水素と炭素の間には差が生じる。とりわけ、イオン温度勾配が急峻となる領域では、その差は無視できるものでは到底ないことが、理論、シミュレーション、実験解析から分かっている。このことから、シミュレーションと実験計測との比較を行う上で、バルクイオンとは異なる不純物の挙動を十分良く模擬できるモデリングが求められている。

これまでの課題

トラスプラズマ中の物理量の発展をシミュレーションできる流体型輸送コード TASK/TX は、プラズマの粒子輸送、熱輸送、運動量輸送を自己無撞着に扱い、密度、温度、回転の分布を計算することができる。これまでの拡張で電子と重水素に加えて完全電離炭素を扱えるようになっていた。炭素は壁、ダイバータなどから中性粒子の状態でたたき出される。それらがプラズマ中に混入することにより、電離、荷電交換によってイオン化し、炭素イオンになる。炭素イオンは完全電離状態で 6 価であるため、プラズマ中には 0 価から 6 価までの、計 7 種類の価数状態を持つ。完全電離炭素がいきなりプラズマ中に現れるわけではないので、完全電離炭素のみを扱うだけでは炭素の挙動をよく模擬できたとは言えず、中性から完全電離までの炭素を物理的に妥当な手法で扱わなくてはならない。 TASK/TX では、1 つの価数状態の粒子種を増やすごとに、方程式が 8 つ増えることになるため、中性粒子を除いて 6 つの価数状態を持つ炭素を全価数状態に対して全て同等に扱ったとすれば、48 本も方程式が増えてしまうことになる。行列計算上のコストは無視できないほど増大する上、一般的な核融合プラズマの温度帯では炭素は概ねすぐに完全電離するため、1 価から 5 価までの炭素密度は極めて低く、それらを個別に扱うことは数値安定性上の懸念も残る。6 価の炭素イオンの供給源として 0-5 価までの炭素不純物を扱うという目的に照らせば、0-5 価までの炭素不純物を妥当な手法で束ね、1 つの粒子種として扱うことができるのではないかと考えた。

スーパーステージモデルによる不純物輸送モデリング

複数価数のイオンを束ね(バンドルし)あたかも 1 つの粒子種として扱うことをスーパーステージと呼び、各価数状態間は準静的電離平衡にあると仮定する。現在の取り組みにおいては、中性炭素によるソース効果を適切に取り入れることが重要であったため、0-5 価までの炭素を束ね、擬中性炭素として扱うことにした。電離や再結合の断面積データは OpenADAS から取得しており、電子温度の関数となっている。

0-5 価を束ねることの妥当性検証のために、中性炭素を 200eV の電子温度のプラズマに置いた際に、価数

ごとの炭素密度の時間発展を、0-5 価まで束ねた場合と、全価数に対して割合方程式(rate equations)を解いた場合で比較した。すると、概ね 1ms 程度で両者の割合は一致した。すなわち、1ms 程度よりも長い時間スケールの現象を扱う上では、全価数を正確に取り扱う事と、0-5 価の擬中性炭素と 6 価の炭素イオンとして扱うことに差はほとんど無い、ということを意味する。

擬中性炭素の密度方程式には、5 価から 6 価への実効電離と擬中性炭素と 5 価の炭素の比を表す関数の積がシンク項として、6 価から 5 価への実効再結合がソース項として働くことになる。6 価の完全電離炭素の密度方程式には、それらが逆符号で含まれることになる。0-5 価を束ねた擬中性炭素を扱うということは、0-5 価までの各価数の密度比を知ることができないということを意味しない。擬中性炭素の密度から、それに対する各価数の比率を準静的電離平衡の仮定に基づき算出できるため、各価数の密度は計算することができる。

炭素源モデリング

TASK/TX は擬似的に SOL 領域を扱うことができる。2 次元モデリングとの対比として、TASK/TX の SOL 領域は径方向に 2 次元モデリングにおけるフラックスチューブに分割され、各フラックスチューブは SOL 上流領域、ダイバータプラズマ領域、ダイバータ板を含む。ダイバータ板で生成し、ダイバータプラズマ領域を経て SOL 上流に戻る中性炭素をソースとして扱うため、ダイバータプラズマ領域で生じる物理過程を係数としてモデル化する必要がある。ダイバータ板に流入したフラックスにスパッタリング率が掛けられたものが、戻ってくる中性粒子フラックスとなる。一部はそのまま SOL 上流へ向い、一部はポンプによって排気され、一部は再びダイバータ板へと戻り再堆積する。炭素の叩き出しは、重水素イオンフラックスのみならず炭素フラックスによっても生じる。物理スパッタリングのみならず、炭素フラックスであれば反射を、重水素フラックスであれば化学スパッタリングによる収率も考慮しなくてはならない。それらの物理過程を全て考慮して係数に落とし込み、SOL 領域における炭素源モデリングを完成させた。

シミュレーション

実装したモデルで TASK/TX シミュレーションを実施し、モデルの妥当性を検証した。実施する上で大事な点は、現状のモデリングによってプラズマが系として時間と共に発散せず、炭素の収支が落ち着く定常状態に到達するかどうかを確認することである。シミュレーションの結果、定常状態には到達したものの、炭素イオンの生成量が実験観測されるレベルよりも遙かに大きいことがわかった。そこで、数値因子を導入し、概ね妥当と思われる定常状態に到達するためのパラメータを探索したところ、0.05 程度で典型的な大型トカマク実験で観測される程度の実効電荷数に落ち着いた。

準中性の度合い、両極性の破れによって生じる自発トルクなどの指標を見ても、定常に至るまでおかしい挙動は示していない。このことは、現状では数値因子の調整が必要ではあるものの、スーパーステージモデリングや炭素源モデリングそのものは本質的に成功したことを裏打ちしている。

考察

炭素生成過程における各種係数を見直し、数値因子を極力 1 に近づけなければならない。2 次元のモデリングを 1 次元に落とし込むため、次元縮減に際しての仮定が複数導入されていることから、その点を中心に係数を見直し、必要に応じて追加のモデリングを行い、モデルの向上に努める。

成果報告

本多充、松山顕之、中間裕貴、“スーパーステージモデルを用いた TASK/TX における炭素不純物モデリング”、プラズマ核融合学会 第 39 回年会、富山国際会議場、2022 年 11 月

トロイダルプラズマにおける MHD 不安定性の非線形構造のシミュレーションデータ解析

核融合科学研究所 ヘリカル研究部 佐藤雅彦

本研究では、トロイダルプラズマを対象として、磁気流体力学(MHD)不安定性が形成する3次元構造形成のメカニズムを非線形シミュレーションにより解析することを目的とする。これまでに、PLATO トカマクにおける内部キンクモード、および、バルーニングモードの非線形シミュレーションを実施し、モード間相互作用の詳細な解析のため動的モード分解の導入を行なってきた[1,2]。本年度においては、LHD プラズマに対する MHD シミュレーション結果に対して動的モード分解を適用することを行なった。

本研究では、HINT コードにより高ベータ LHD プラズマの MHD 平衡を構築し、非線形 MHD シミュレーションコードである MIPS コード[3]を用いて MHD 不安定性の時間発展の解析を行った。MIPS コードは、MHD 方程式を円柱座標系のもとで4次精度の有限差分法を用いて空間方向を離散化し、4次精度のルンゲクッタ法により時間積分を行う初期値コードである。図1に MHD 平衡の縦長ポロイダル断面における磁力線のポアンカレ分布、及び、同断面における $Z=0$ での圧力分布を示す。この平衡では、圧力分布形状を放物型、中心ベータ値を約 10.7%と仮定している。高ベータ LHD プラズマでは、図1(a)が示すように、緑で示された最外殻磁気面の外側に磁力線がストキャスティックとなる領域が存在する。図1(b)において、縦の緑の破線は最外殻磁気面の位置を示しており、ストキャスティック領域においても有限の圧力勾配が存在していることを示している。

これまでの[3, 4]等の MIPS コードを用いた LHD プラズマに対する MHD シミュレーション研究においては、Boozer 座標系のもとでのフーリエモード解析が行われてきた。図1で示した MHD 平衡に対して MIPS コードによりシミュレーションを行うと、複数のトロイダルモードが線形不安定となる。その中で、最も不安定なトロイダルモードのモード構造を図2に示す。図2は、Boozer 座標系においてフーリエモード分解されたデータであり、トロイダルモード数 n は、 $n=6$ である。横軸の ρ_ψ は規格化された小半径であり、規格化されたトロイダルフラックス(s)の平方根の値($\rho_\psi = s^{1/2}$)で定義され、 $\rho_\psi=1$ は最外殻磁気面の位置に対応する。 $\rho_\psi=1$ においてもモードの振幅は有限であり、モードがストキャスティック領域に染み込んでいることを示している。しかしながら、Boozer 座標系は入子状の磁気面が存在する領域においてのみ構築されているため、ストキャスティック領域でのモード分解が実行できていない。そのため、Boozer 座標系によるモード分解では、ストキャスティック領域を含めたプラズマ全体でのモードの分離が行えない。

この問題に対して、動的モード分解を適用して、ストキャスティック領域も含めてプラズマ全体をモード分解することを試みた。図3に、圧力の時系列データに対する動的モード分解より得られたモード構造を示す。ここでは、主要な3つの線形不安定モ

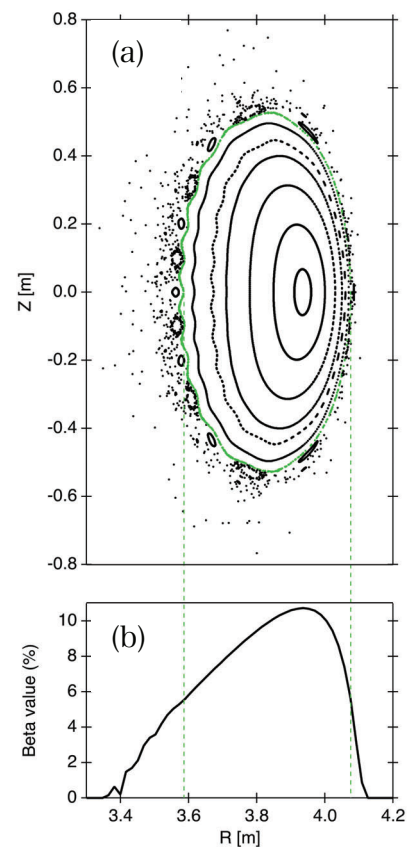


図1. 解析に用いた MHD 平衡の (a) 縦長断面における磁力線のポアンカレプロット。緑の磁気面が最外殻磁気面に相当する。(b) 同断面の $Z=0$ における圧力分布。縦の緑の破線が最外殻磁気面の位置を示している。

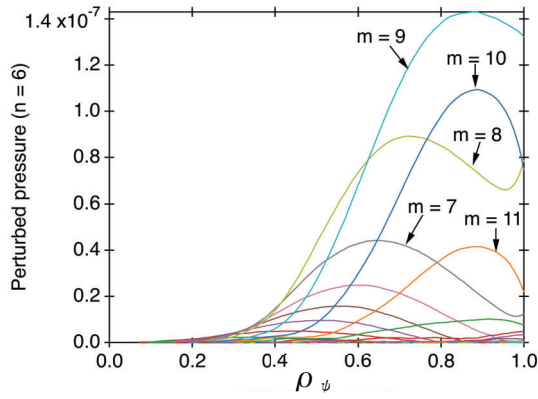


図 2. Boozer 座標系のもとでフーリエモード分解により得られた、 $n=6$ モードの圧力揺動のモード構造。ここで、 m はトロイダルモード数を表す。また、 $\rho_\psi=1$ は、最外殻磁気面の位置に対応する。

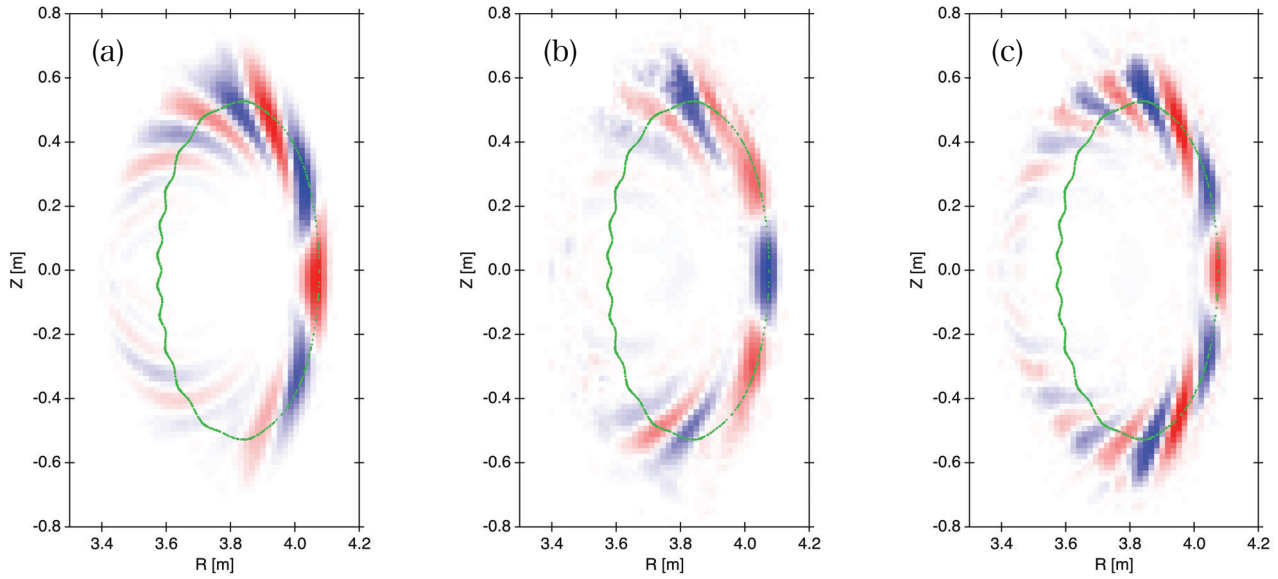


図 3. 揺動圧力時系列データに対する動的モード分解より得られた、主要な 3 つの線形不安定モードの縦長ポロイダル断面におけるモード構造。赤の領域は揺動の値が正、青の領域は揺動の値が負の場所を示している。また、緑の線は最外殻磁気面を表している。

ードの縦長断面での圧力揺動分布を示した。これらのモード数の異なるバルーニングモードは、緑で表された最外殻磁気面の外側の領域、すなわち、ストキャスティック領域にも広がっている。以上の解析から、ストキャスティック領域を含む LHD プラズマにおける MHD シミュレーションにおいても動的モード分解の動作確認を行うことができた。今後は動的モード分解により得られたデータを用いてモード間相互作用の解析を進めていく予定である。

- [1] S. Tomimatsu, et al., Plasma Fusion Res. **15** (2020) 1403052.
- [2] 黒田他、プラズマ・核融合学会九州・沖縄・山口支部第 25 回支部大会 (2021/12/18-12/19) 18pA03
- [3] Y. Todo, et al., Plasma Fusion Res. **5** (2010) S2062.
- [4] M. Sato et al., Nucl. Fusion **57** (2017) 126023.

医療用 CT・MRI 技術を応用したプラズマ乱流計測

九州大学医学研究院保健学部門 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・トモグラフィー)技術を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。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 次元観測が可能であることをシミュレーションにより確認した(荒川弘之他、2019 年度第 36 回 プラズマ・核融合学会 年会、01Ap07)。加えて、PANTA において初期的な原理実証実験による平均流計測、プラズマ装置改造に伴うレーザー伝送系の光ファイバー化を行った。今年度は、ベクトル CT 計測実験を PANTA 装置で行い、プラズマ中心部付近における局所的なイオン流れベクトルの 2 次元再構成を行った。

方法

下図(a)に、PANTA 装置及び実験の様子を示す。プラズマ発生装置は、九州大学直線磁化プラズマ発生装置 PANTA を利用した。円柱軸方向磁場強度 900G を印加し、アルゴンガス圧約 0.1 Pa 条件において、直径約 10cm、長さ 4.05 m の円柱状アルゴンプラズマを生成している。1 回のプラズマの生成時間は 0.5 秒で、繰り返し生成を行った。プラズマ密度は約 $1 \times 10^{18} \text{ m}^{-3}$ 、プラズマ中心の電子温度は約 3 eV である。このプラズマ条件においては、プラズマ中の主な揺動モード($m = 1$)が約 1 kHz で伝搬している。

ベクトル CT を用いたプラズマ流れ計測では、既存のレーザー誘起蛍光計測システムとラングミュアプローブ(半径位置 $r = 4 \text{ cm}$)を用いた。レーザー誘起蛍光システムにおいては、レーザーを電気光学変調器(EOM)を用いて 100 kHz で強度変調させた。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。レーザーはプラズマ中心から $\pm 5 \text{ cm}$ の範囲を移動させた。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 $\pm 5 \text{ GHz}$ とした。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

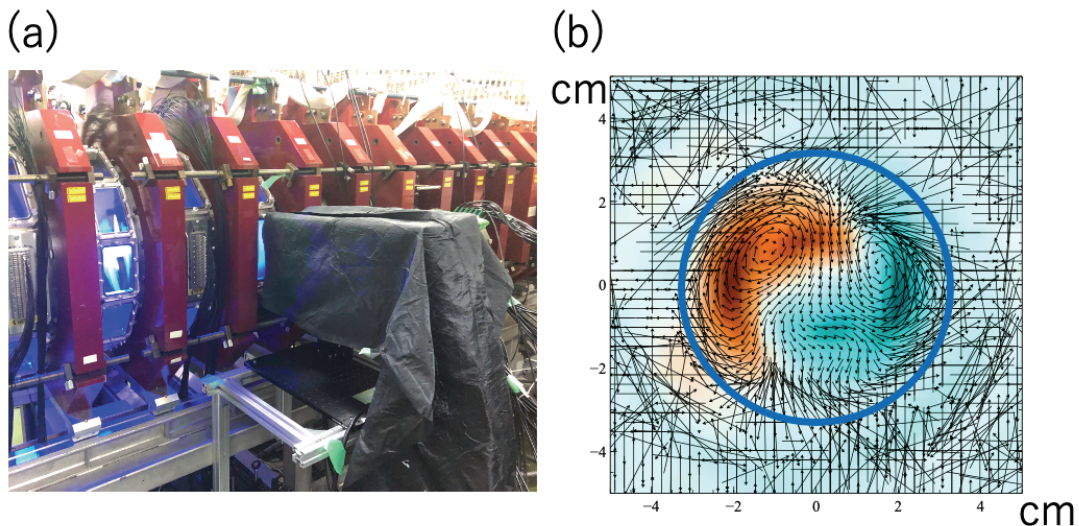
(線積分)。このため、442.6 nm の蛍光を直径 150cm のレンズ 2 枚により、1/2 以下に縮小後、光ファイバにより集光・伝送後、光電子増倍管により電流増幅・電圧変換した。

ラングミュアプローブではイオン飽和電流によりプラズマ中の密度揺動($m = 1$)を計測した。今回の実験では、プラズマ中の流れ構造が変化することなく、一定に回転していると仮定した。このため、プラズマ中の揺動をヒルベルト変換し、回転する構造の位相を再構成した。

以上により、プラズマ流れ構造の回転位置 ϕ 、プラズマへのレーザー入射位置、レーザー波長、それぞれにおける蛍光強度を条件付き平均することで、ベクトルトモグラフィの再構成条件を得た。

結果

結果を以下の図(b)に示す。図では、流れの周方向平均流れを差し引いた揺動成分を示している。今回の解析では、 $r > 3$ cm のプラズマ密度が低い部分ではノイズの影響により流れが発散して、意味ある結果とならなかった。一方で、 $r < 3$ cm においては、密度揺動の変動に沿う形でイオン流れが観測された。これは、これまでのプラズマ中の揺動観測実験と矛盾しない。今後は精度検証や、圧縮センシングを用いて $r > 3$ cm での流れ再構成を行う予定である。



図：(a)実験の様子。青白い光がアルゴンプラズマ。図右下の暗幕内に励起光の集光光学系を構築している。(b)ベクトルトモグラフィによるイオン流れ計測の初期結果。塗りつぶし等高線は密度揺動を示し、矢印はイオンの流れを示す。

成果報告：なし

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

1. 目的

プラズマ乱流の研究分野において、閉じ込めを改善する効果のあるゾーナルフローは近年広く研究されている。ゾーナルフローと同様にメゾスケールの一種であるストリーマーもまた閉じ込めを悪化させる存在ではあるが、大きな注目を集めている。ストリーマー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となる。

九州大学応用力学研究所の直線プラズマ実験装置 PANTA では、放電条件を調整することでプラズマ乱流中のミクロスケール構造であるドリフト波が非線形結合をし、乱流の塊であるストリーマー構造が発生する。この時、非線形結合により乱流の塊を形成するドリフト波を搬送波と呼び、搬送波と非線形結合をし、乱流の塊の包絡線と同じ構造を持ち位相関係がロックされている波を媒介波と呼ぶ。PANTA ではこの媒介波と搬送波が非線形結合をしてストリーマー構造を形成する様子が世界で初めて観測され、その詳細が研究されてきたが、これは直線プラズマがトロイダルプラズマに比べて低温で近接性に優れることを活かし、トロイダルプラズマでは不可能な多チャンネルプローブ計測を積極的に行ってきた結果から得られたものである。またバイスペクトル解析という非線形結合の詳細を解析できる手法を多チャンネル計測結果に適用して、時空間的に非線形結合を調査してきたことも大きい。

ここでメゾスケール構造の発生と機構は理論・シミュレーション研究においては、ブラソフ方程式やジャイロ運動論と同じ数理構造を持つ波動運動論を元に導き出されるが、このモデルは実空間と波数空間からなる位相空間上において計算されている。しかし実験によって得られる情報は実空間における測定点が足りない、あるいは測定点が十分でもスペクトル解析によって波数は空間的に積分・平均化されてしまうことが多く、位相空間上で波動運動論モデルと比較することは困難である。そこで本研究では実験的に乱流の位相空間解析を行うことを目指して、波数の局所空間情報を求めることを試みた。そのためにまずは周方向に数値フィルターをかけてから波数スペクトルを計算するという解析を行った。

2. 実験方法

九州大学の直線プラズマ実験装置 PANTA を用いてストリーマーが発生する実験を行い、多数のチャンネルを持つ周方向静電プローブアレー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作る搬送波（ドリフト波）を観測し、両者の間に存在する非線形結合について複数のバイスペクトル解析を用いて詳細を明らかにした。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、周波数 7 MHz の RF 波を印加し、ヘリコンプラズマを発生させ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。ストリーマー構造は、放電条件を調整することで発生する。具体的には、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、ある発達したモードの高調波成分が乗った周期的な孤立波（ソリタリー）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。このプローブは精密に周方向にプローブが配置されているため、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。このバイフェーズが、搬

送波が作り出す乱流の塊の包絡線（ストリーマー構造）と媒介波の間の位相差を表す。

本研究ではさらに周方向波数の局所空間情報を計測することを目指し、周方向に並んだデータに数値フィルターをかけてから周方向波数スペクトルの計算を行った。まずは周方向 64 チャンネルのうちおよそ半分の領域を通過させ、反対側の領域を遮断し、境界はなだらかな関数で繋ぐようなフィルターを適用させた。フィルター適用後に周方向にフーリエ変換を行い、各周方向モードの強度の時間発展を求めた。求めた周方向波数は概ねフィルタリングされた領域の情報となり、フィルターの幅を調整することでさらに局所的な情報も取得可能となることが期待される。またフィルターの通過領域をずらすことで周方向モードの空間依存性についても調査した。

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 $(m_1, f_1) = (1, -1.2 \text{ kHz})$ で、最も振幅が大きく媒介波との結合が強かった搬送波は、 $(m_2, f_2) = (2, 7.8 \text{ kHz})$ や $(m_3, f_3) = (3, 6.6 \text{ kHz})$ の波であった。

周方向のおよそ半分の領域のみを通すフィルターを適用してから周方向にフーリエ解析を行い、各周方向モードの時間発展を調べた。図 1 は搬送波である周方向モード数 $m=3$ の強度の時間発展である。一番上の図に対してフィルターを適用した周方向角度をそれぞれ $-\pi/2$, $-\pi$, $-3\pi/2$ ずらした結果も並べた。図を見ると、 $m=3$ の強度が大きい領域がストリーマーと同じ周波数、つまり -1.2 kHz で周方向に伝播しているのが分かり、ストリーマーの乱流の塊が各フィルターを通過していく様子が見えてくる。さらに通過中に細かい強度の増減も見られ、ライフタイムの短い現象が起きていることが示唆される。

今後も、波数の局所情報の詳細を求めることを目指し、乱流の位相空間解析を進めていく。

4. 研究成果報告

[1] 山田琢磨他, “直線プラズマにおける非線形現象の位相空間解析”, 日本物理学会 2022 年秋季大会, 14pW621-1, 東京工業大学 (Sep 9-15, 2022).

5. 研究組織

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

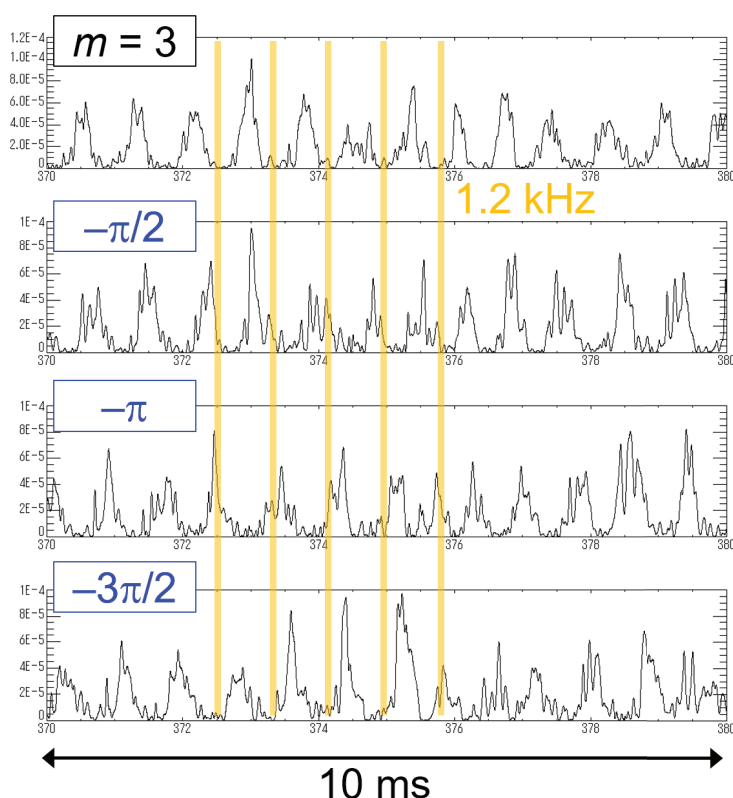


図 1. PANTA のストリーマー発生時に周方向にフィルターをかけてから求めた周方向モード数 $m=3$ （搬送波）の強度の時間発展。一番上の図に対して下図はフィルター適用位置をそれぞれ $-\pi/2$, $-\pi$, $-3\pi/2$ ずらした結果である。

機械学習を用いたマイクロ波イメージング再構成手法の研究

兵庫県立大学大学院工学研究科 古賀麻由子

1. 目的

核融合プラズマの閉じ込めにおいて乱流は重要な影響を及ぼすことが知られている。乱流の物理を理解するためにはミクروسケールの擾乱からマクروسケールの乱流成長まで高分解能で計測する必要がある。本研究では、マイクロ波の散乱波や反射波を用いた複素振幅計測によるマイクロ波イメージング計測手法を開発することを目的としている。マイクロ波は可視光と違い、複素振幅の測定が容易であることを活用するもので、光学系を用いないレンズレスとし、データ処理により対象物画像を得ることで、計測スペースの制限なく高分解能な画像データが得られる可能性がある。

2. 画像再構成

図1にレンズレスマイクロ波ホログラフィの概念図を示す。入射マイクロ波が対象物体上の1点 P_t において反射率 $f(P_t)$ で反射され、観測点 P_d に至る。入射マイクロ波の関数と反射マイクロ波の関数を掛け合わせたものを行列 H で表したとすると、受信信号 $g(P_d)$ は $Hf(P_t)=g(P_d)$ となる。観測点で受信されるのは対象物体上の全ての点からの反射マイクロ波の総和となる。画像再構成とは、この受信信号 g から反射率 f を求めることである。既に、数理的に H の逆関数を求め再構成することには成功しているが、計算時間がかかることや信号にノイズが重畳すると再構成が困難になるなどの問題点がある。そのため、我々は画像再構成に機械学習を導入することを考えた。これまでの研究で、波打った対象物体や楕円の凹凸を持つ対象物体といったシンプルな対象物体に対して、機械学習による再構成が可能であることを明らかにしてきた。本研究では、より実際のプラズマに近いシミュレーションデータを用いた場合の画像再構成を試みている。

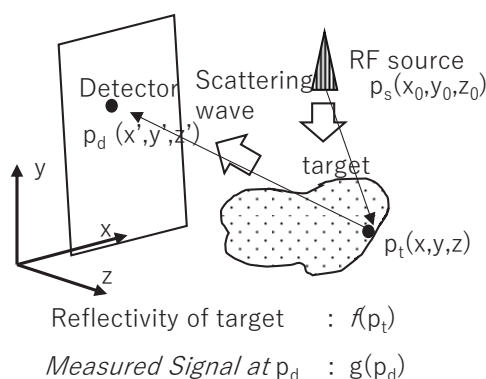


図1 レンズレスマイクロ波ホログラフィの概念図

3. 実験方法

図2に九州大学応用力学研究所糟谷直宏教授にご提供いただいた数値シミュレーションによるPANTA装置の乱流構造データ[1]とこれを用いた電磁界計算の設定を示す。PANTAプラズマのうち40mm四方の領域を対象物体とし、入射アンテナ・受信アンテナは対象領域から300mm離れた位置に設定した。入射マイクロ波の周波数は30GHzとした。受信アンテナアレイは10mm角サイズの受信器が 17×17 で構成されている。対象とする領域を少しずつ変更し、対象物画像と受信信号のセットを5000個用意し、学習データ

とした。機械学習は CNN(Convolutional Neural Network)を用いた。

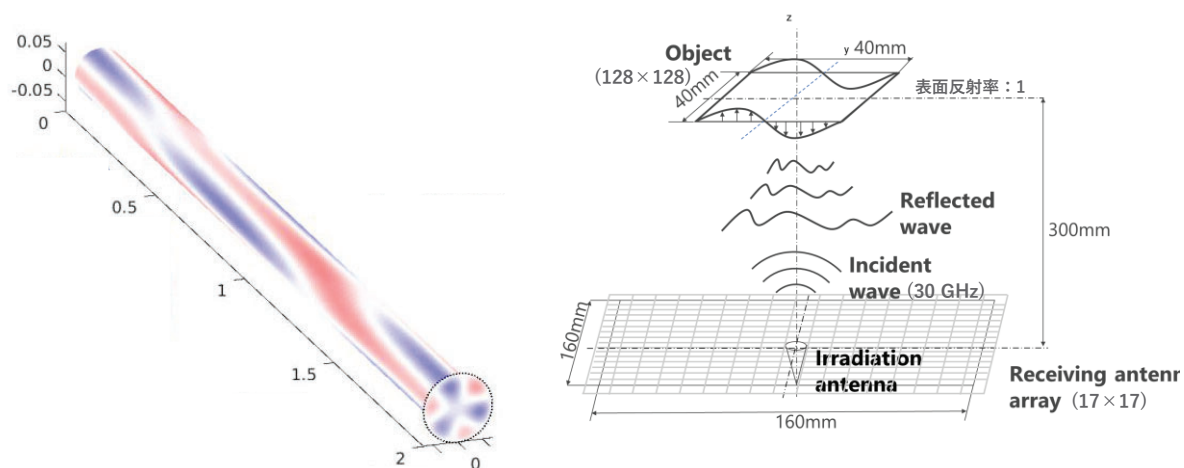


図2 乱流構造データ（左）と電磁界計算の設定（右）

4. 実験結果および考察

図3に学習結果の一例を示す。受信信号の色は信号強度を示す（黄色は強度大、紺色は強度弱）。対象物画像、予測画像の色は対象物体の奥行方向の表面位置を示す（黄色は手前、紺色は奥に対象物体が位置している）。畳み込み処理の層数は1、活性化関数は tanh 関数、全結合層はパーセプトロン数 50 のものを3つ使用した。受信信号は複素振幅データの実部と虚部を入力した。図から学習データ数が増えるにつれて対象物画像の表面位置の特徴を捉えて一致度が上がっていくことが分かる。このことから機械学習により PANTA プラズマのマイクロ波反射計測画像を再構成できる可能性が示唆された。今後は受信信号にノイズが重畳した場合や、プラズマがより細かい表面構造を持つ場合の再構成について調べていきたいと考えている。

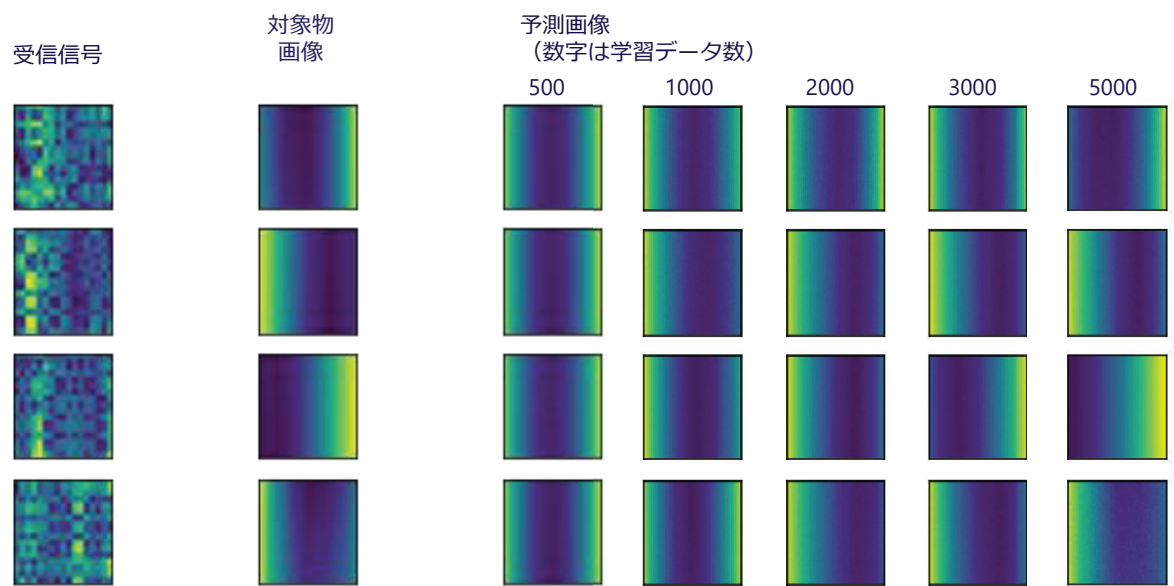


図3 学習結果の一例

[1] N. Kasuya and S. Sasaki, Plasma Fusion Res. 17, 1201053 (2022).

特定研究3【分野融合】

実験・計測科学と計算科学の融合による新しい研究分野の開拓

Developing new research fields by integrating experimental/measurement science
and computational science

統括責任者：弓本 桂也（地球環境力学分野）

小菅 佑輔（核融合力学分野）

寒川 義裕（新エネルギー力学分野）

これまでの科学研究では、研究対象を観測・計測し可視化する実験・計測科学と、物理・科学理論で構築された数値モデルで現象を再現・予測する計算科学がその発展に大きく寄与してきました。近年、機械学習や数理統計、データ同化の技術を用い両者を融合することで、おのおの単独では得られない知見の取得や、実験設定およびモデルパラメータの最適化が行われるようになっていきます。

本研究所は共同研究装置としてさまざまな実験・研究設備および大規模演算装置を有します。本特定研究では、これらの設備を利用しつつ、実験・計測および計算科学をベースとする研究者がコミュニケーションを取りつつ、両者を融合させた新しい研究分野の開拓を目指します。

結晶成長中微斜面におけるナノスケール表面荒さと メゾスケール・マクロステップのファセット化との関係

大阪電気通信大学工学部 阿久津 典子

研究目的

最近、ナノスケールにおいて結晶表面のステップ間にあるテラス幅分布が計測可能になった。その結果から SiC や GaN といった半導体結晶についてインシリコの模型計算により原子間の量子力学的相互作用の情報を得る方法を確立することが目的である。

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おいて、最近計測が可能になった表面テラス幅分布について、引力、反発力が有る場合の表面物理模型を構築する。その結晶表面模型を用いて、テラス幅分布をモンテカルロ・シミュレーションにより計算機実験として測る。その結果から量子力学的相互作用を予測する。

共同研究 特別講演会の開催等

特別講演「異常を検知するテクノロジー」を主催大阪電気通信大学エレクトロニクス基礎研究所、共催九州大学応用力学研究所、協賛日本結晶成長学会でハイブリッド開催した(<http://www.feri.osakac.ac.jp/lecture/lec20220720.html>)。

開催日時は 2022 年 7 月 20 日 (水) 17:00--18:30、開催場所は大阪電気通信大学寝屋川学舎 J 号館 J-503 教室であった。

講演題目及び講演者概要

1. 講演題目「製造装置の異常を検知して装置保全に利用」、講演者: 古屋 正 氏 (株式会社東京システムリサーチ)

概要: 食品製造の工場において製造装置の保全を計画的に行うことは、機会損失を最小にするためにも大変重要である。従来は装置の特性から規定された時間を基準にした計画や、保全係がセンサーデータを分析し状態を予測して計画していた。講演では昨今増えている AI を利用した保全に関する課題とその解決アプローチについて紹介した。

2. 講演題目「気象などの異常を検知して防災や危機管理に利用」、講演者: 矢口 裕介氏 (株式会社 Spectee)

概要: 近年、頻発、激甚化する災害に対して、より効果的・効率的に対応していくためには、新たなテクノロジーを積極的に活用していくことが重要となる。講演では Spectee が取り組む AI による防災・危機管理とはどのようなものなのか、また、これからの防災×テクノロジーはどのように発展していくのかについて紹介した。

考察

ナノスケールにおける傾斜依存ファセティング・ダイヤグラムをテンソルネットワーク法で計算した。その結果を Si で観測されたファセット化相図と比較し、Si のステップ間引力エネルギーは近似的に -123 meV と求めた。これにより、GaAs 等の半導体について結晶表面のファセット化ステップの観測からステップ間引力エネルギーを近似的に求め第一原理計算結果と比較する道が開けた。

非平衡定常状態で、原子の荒さとマクロな熱力学的荒さの中間にナノスケールでファセット化荒れ面が存在することを示した。平衡状態では熱力学的荒さとファセット化にファセティング転移などで知られる確立された関係が知られている。非平衡状態では線形応答領域の外側にファセット化しているが熱力学的に荒い面が存在することをモンテカルロ計算法で示し、メゾスケールにおける成長速度の強い異方性発現に新たなシナリオを加えた。

成果報告

出版物

なし

発表論文(レフェリー有)

1. Noriko Akutsu, Yasuhiro Akutsu, "Slope--Temperature Faceting Diagram for Macrosteps at Equilibrium", Scientific Reports, **12** 17037 (2022). doi.org/10.1038/s41598-022-21309-x

紀要等(レフェリー無)

なし

口頭発表

1. Noriko Akutsu, (Invited) "Faceted-Rough Surface between Thermodynamically Rough and Atomically rough Surfaces", The 11th International Conference on Mathematical Modeling in Physical Sciences (IC-MSQUARE 2022), (On-line Conference, September 5--8, 2022).
2. Noriko Akutsu, "A Large Roughness Exponent and A Scaling Function for A Faceted-Rough Surface", 33rd IUPAP Conference on Computational Physics, (CCP2022), (Austin, Texas, USA, Virtual Only, The University of Texas at Austin, July 31--August 4, 2022).
3. 招待講演 阿久津典子, 「ファセット化ラフ面 ―原子スケール・ラフ面と熱力学的ラフ面の間―」九州大学 応用力学研究所 RIAM フォーラム 2022, (2022 年 7 月 28 日--29 日、ハイブリッド方式).
4. 阿久津典子, 「点型ステップ間引力が有る傾斜面の平衡状態近傍ステップダイナミクス:傾き依存ファセティング・ダイヤグラム」, 北大低温研ワークショップ「結晶表面・界面での相転移ダイナミクスに関する理論とその場観察」(2023 年 1 月 26 日--27 日、北海道大学低温研究所、ハイブリッド開催)
5. 阿久津典子, 「熱力学的ラフ面と原子的ラフ面の間のファセット化ラフ面」, 第 51 回日本結晶成長国内会議(2022 年 10 月 31 日--11 月 2 日、RCC 文化センター、広島県広島市)
6. 阿久津典子, 「マクロステップ形状維持のしくみの考察」, 日本物理学会 秋季大会(2022 年 9 月 12 日--15 日、東京工業大学、大岡山キャンパス)
7. 阿久津典子, 「多様な「荒れた表面」とファセット化ラフ面との関係」, 日本物理学会 第 77 回年次大会(2022 年 3 月 15 日--18 日、岡山大学津島キャンパス、オンライン開催)

時系列データに見られる不規則変動の分析

サブテーマ代表者：兵庫県立大学大学院 情報科学研究科 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の特徴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、様々な統計的な分析手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

2022 年度の研究では、統計的モデルである Redecued Auto-Regressive model[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した。この手法によって、プラズマ乱流が持つ複数の周期を正確に検出することが出来る。今回は、より正確に周期の検出を行うため、また、以前に行った分析の妥当性を検証するため、これまで用いていたよりもより幅広い周期の範囲に対して分析を行った。

その結果、調査に用いたプラズマデータは、高周波、中周波、低周波の 3 つの周波数帯から構成されることが示され、その結果も以前に行ったものとほぼ同じものであった。このことから、プラズマ乱流が持つ周波数の特徴を正確に検出できたと考える。

3 今後の研究の方向について

プラズマ乱流は、非線形波動、大小様々な渦によって構成され、その振る舞いも複雑である。複雑な振る舞いを見せる現象を理解するための第一歩は、その現象の基本的かつ本質的な特徴を正確に把握することである。今回は各チャンネルから得られたデータに対して分析を行ったが、プラズマ乱流の全体像を把握するには、64 チャンネル全てのデータを用いた分析が必要であると考え。あるチャンネルのある周期が、他のチャンネルの振る舞いに影響を与えているのかどうかを把握することが出来れば、プラズマ乱流の全体像を把握することに大きく貢献できると考える。

4 研究成果発表

- 中村 知道, “プラズマ乱流の周期検出と周期間に関する分析”, 第 2 回プラズマインフォマティクス研究会、2022 年 2 月 24 日（木）～25 日（金）ZOOM オンライン会議（口頭発表）
- Toshihiro Tanizawa and Tomomichi Nakamura, “Detecting the relationships among multivariate time series using reduced auto-regressive modeling”, Frontiers in Network Physiology, 2:943239, October 2022

5 研究組織

研究代表者 兵庫県立大学大学院 情報科学研究科 中村 知道

所内世話人 九州大学 応用力学研究所 西澤 敬之

参考文献

- [1] T. Nakamura, M. Small and T. Tanizawa: “Long-range correlation properties of stationary linear models with mixed periodicities”, *Physical Review E*, 99, 022128, 2019.

機械学習を活用した半導体 MBE 成長条件の最適条件推定

久留米工業高等専門学校 材料システム工学科 奥山 哲也

・目的

半導体ナノワイヤを利用した光・電子デバイスの高性能化・高機能化に関する研究が行われている。ナノワイヤにⅢ-V族化合物半導体を用いると、混晶比の異なる材料を積層したヘテロ構造も形成可能であり、これにより電子バンド構造の能動的な制御も可能になる。実際にデバイス応用を行う際には高品質なヘテロ構造形成が重要になる。ナノワイヤにおいては軸方向に異種の半導体を接合した一次元ヘテロ構造と、動径方向に接合したコア/シェル構造の2種類のヘテロ構造を利用することができる。特にコア/シェルナノワイヤは物性の調整や表面パッシベーションを可能にするため、単体の材料では実現困難な多様な高性能デバイスが実現可能になることが考えられ、盛んに研究されている。これら半導体ナノワイヤは各種の手法で成長されるが、本研究では分子線エピタキシー (Molecular Beam Epitaxy: MBE) 法を取り上げる。MBEでは 10^{-10} Torrほどの超高真空環境において、原料の入ったKセル(坩堝)を加熱し、蒸気を分子線として放出させ、対向する加熱基板表面に照射することで結晶を成長させる。MBEは超高真空環境で成長することから、基板表面への残留不純物の付着が非常に少なく高純度の結晶が得られる。また、各Kセルにある機械的なシャッターやセル温度を制御することで、結晶の混晶組成やドーピング不純物の濃度分布を高精度に制御した所望のヘテロ構造を成長させることができる。一方、研究室レベルのナノワイヤMBEでは、トライアル&エラーにより実験条件(基板温度、分子線量)の探索を行っている現状がある。本研究では、ナノワイヤのMBE成長条件と室温フォトルミネッセンス(PL)測定結果の関係を、データから統計的にモデル化し、新たな成長条件に対してPL発光を予測する。また、モデルは逆に解かれることで、発光機能を有することが期待される新たな成長条件の自動生成にも役立つ。

・実験方法

北海道大学石川研究室より提供されたⅢ-V族化合物半導体混晶ナノワイヤのMBE成長条件から特徴量設計を行い、室温PL測定結果と合わせて、データセットを作成する。そのデータセットの説明変数は高次元であるため、次元削減を行い可視化する。次に、次元削減によって得られた新たな変数と元の説明変数の相関を分析する。相関係数の大きさから、新たな変数が表している説明変数の主要な成分を調べる。次に、複数の機械学習アルゴリズムを用いて室温PL発光の有無を予測する分類タスクに取り組む。ここでは、訓練されたモデルは、次元削減により得られた2次元空間上で、室温PL発光を示すデータと示さないデータを分類する境界を引く。データセットは訓練データとテストデータに分け、決定係数を求めることで、汎化性能を調べる。

・実験結果および考察

実験研究者の知見を基に特徴量設計を行い、表形式のデータセットを作成した。説明変数は、MBE成長によるナノワイヤ作製条件を表す変数と、作製された半導体の物性を表す変数である。目的変数は、ナノワイヤがPL測定において発光を示すかどうかを表す2値変数である。データサイズは 452×80 で

あり、451 個の説明変数と 1 個の目的変数を記述したデータが 80 サンプル含まれる。説明変数は 451 次元であるため、t-SNE 法により 2 次元に削減することで可視化した。t-SNE 法を用いることで、PL 発光を示すサンプルと示さないサンプルを他の次元削減手法に比べ、よく分散させることができた。

次元削減された変数をそれぞれ dev1、dev2 とし、元の説明変数との相関解析を行ったところ、dev1 は主に 3 層目の体積（厚さ、長さ）、2 層目、3 層目における Ga と As の比率について表しており、dev2 は Step15～18 における基板温度と As ビームの強度を表していた。Step とは MBE におけるシーケンシャルな製造工程の区切りであり、1 つの Step で 1 層つくられるというわけではない。ステップ数が多いほど工程は多くなり、作製する層の数も多くなる。さらに、dev1 は層の数、dev2 は総ステップ数との相関が強いことから、新たな変数は、作製する層の数と層における GaAs の比率について説明していることがわかった。複数の機械学習アルゴリズムを用いて、次元削減後のデータセットからモデルの訓練を行った。決定係数と散布図によって各アルゴリズムを比較した。用いたアルゴリズムは、今回の様な分類タスクに適した SVM（サポートベクターマシーン）、KNN、勾配ブースティング、ランダムフォレストである。その結果、SVM with RBF を利用して作成したモデルが滑らかなフィッティングが見られ、訓練データに対する過学習が起こっておらず、汎化性能の良い境界を引くことができた。

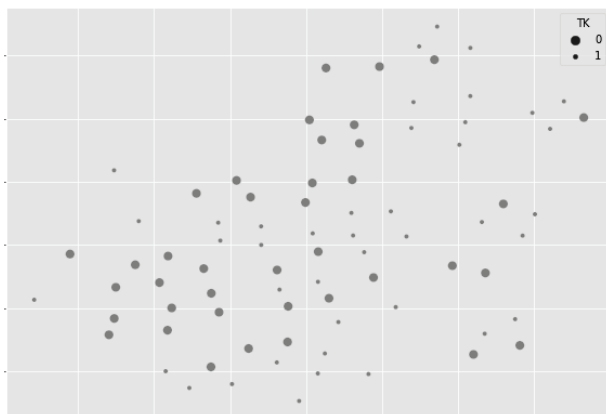


Fig.1 t-SNE による次元削減結果

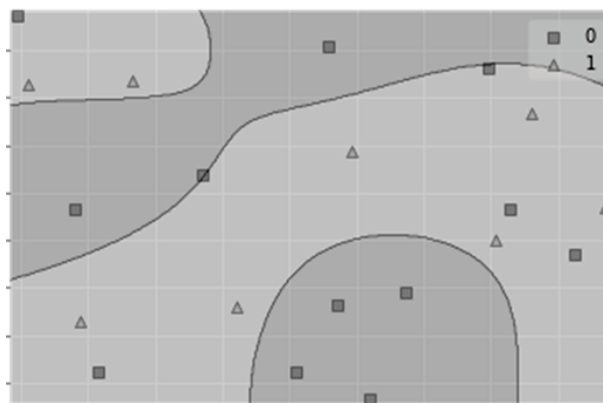


Fig.2 SVM with RBF モデルの決定境界

・研究成果報告

本研究では、MBE 法によって作製された半導体ナノワイヤの PL 測定結果、作製条件、物性値などからデータセットを作成し、t-SNE による次元削減を行い、SVM アルゴリズムにより、RBF カーネルを用いた非線形モデルの訓練を行った。訓練されたモデルはテストデータに対して 8 割ほどの決定係数を示し、滑らかな決定境界を引けており、過学習もなく高い汎化性能を示した。この予測モデルは PL 測定で発光を示す半導体ナノワイヤの MBE 成長条件の最適化に活用することができる。また、次元削減後の変数と元の説明変数との相関解析によって、層数と各層における GaAs 比率が重要であることがわかった。

・研究組織

奥山 哲也¹⁾，寒川 義裕²⁾，石川 史太郎³⁾，原 太一¹⁾，草場 彰²⁾

¹⁾久留米工業高等専門学校，

²⁾九州大学応用力学研究所，

³⁾北海道大学量子集積エレクトロニクス研究センター

実験と第一原理データの同化による物質探索に関する研究

奈良先端科学技術大学院大学 先端科学技術研究科 原嶋 庸介

目的

新物質を探索する上で重要な課題の一つとして、探索空間の多次元化がある。物質探索では通常、研究者の経験則に基づく候補物質の絞り込みによって探索空間は低次元に制限される。この制限のせいで膨大な数の物質が見落とされており、その中には未発見の高性能物質が含まれている可能性がある。今後の物質化学の発展には、この制限を外して、多次元探索空間への拡張が必要である。この多次元化によって候補物質の組み合わせが指数関数的に増大するため、探索は困難になる。実際に収集できるサンプルデータの数には限界があるため、少ないデータでも物性値を高精度に予測することができる方法と、効率の良いサンプル収集方法が求められる。データ同化はそのような少ないデータでもシミュレーションデータを組み合わせることで、高精度予測を実現することができる手法である。この物性値予測を元に最適な化学組成を選択していくことで、網羅的な探索より少ない試行回数で目標の物性に到達すると考えられる。申請者の先行研究では、物質科学にデータ同化を適用するためのアルゴリズムを提案し、欠測データの取り扱いと外挿が可能になることが示されている。これを実際の物質探索に適用するには、さらに予測モデルの逐次的データ同化アルゴリズムや最適な合成条件の導出アルゴリズムが求められる。

データ同化の研究には、実際のデータを使用することが重要である。本研究ではデータ同化手法を用いて p 型半導体の探索を行う。p 型半導体はパワー半導体デバイスの重要な構成要素である。パワーデバイスの候補物質として酸化物がよく研究されているが、酸素欠陥が生じやすく、酸素欠陥はドナーになりやすい。p 型半導体は、この n 型化傾向を抑えた上で、十分なバンドギャップを確保することが重要となる。

上記を踏まえて本研究では、データ同化の手法開発に加えて p 型半導体の探索を行う。

方法

先行研究で開発したデータ同化手法では最尤推定によりモデルを決定したため、データが新しく追加された際に全データを使用する必要があった。本研究では

先行研究で開発したデータ同化アルゴリズムにベイズ推定を導入し、逐次的なデータの追加を可能にする。ベイズ推定はベイズの定理に基づいた推定を意味しており、データが与えられた場合にモデルパラメータの分布を与えることができる。一方、申請者の開発したデータ同化アルゴリズムでは多変数ガウス分布を利用してデータの同化を実現している。多変数ガウス分布を用いていることにより、ベイズの定理を適用してモデルパラメータの分布を定式化することが容易になると考えられ、数値積分などの計算コストのかかる手順を省略できることが期待できる。実装された同化アルゴリズムは擬似的に生成したテストデータによって性能の検証を行う。

p 型半導体候補物質のバンドギャップ予測では、九州大学応用力学研究所の寒川義裕教授と草場彰助教と共同研究を行う。探索は酸化物のカチオン元素を周期表から選び、バンドギャップ値を網羅的に予測する。

結果および考察

データ同化手法については python で実装およびデバッグが完了し、現在、ベンチマークと微調整を行なっている。尤度の最大値を与えるパラメータから、事後分布の最大値を与えるパラメータに変更し、先行研究で行なったテスト計算と一致する結果が得られている。本研究ではさらに事後分布を使って獲得関数を計算し、データサンプリングの候補点の選択を行えるようにした。今後はテスト計算の事例を増やし、動作の把握ができれば論文にして報告予定である。

p 型半導体探索については今後の方針を定めた。まず化学量論的な化合物からバンドギャップが十分広いものを探す。そのための第一原理計算と実験の実施を準備中である。

研究成果報告

[1] 招待講演, 「実験と計算科学の融合とデータ同化」, 原嶋 庸介, 第 24 回理論化学討論会, 産学連携セッション, 2022 年 5 月 19 日.

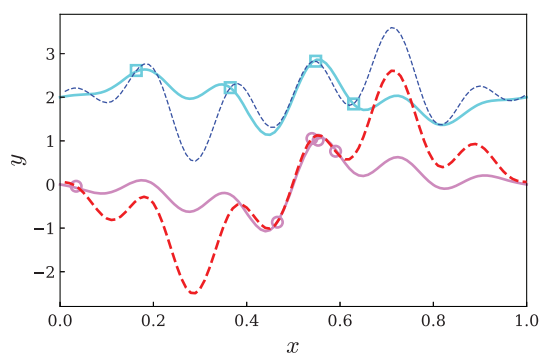


図 1 データ同化のデモンストレーション。実線（紫、水色）が真のモデル、破線（赤、青）がデータ同化モデル。サンプルデータの近くでは予測できており、遠くでは予測が外れていることがわかる。

[2021 S3-4] らせん転位配列を有するカーボンナノチューブの変形メカニズムの解明

福井大学・学術研究院工学系部門 雷霄雯

研究目的

転位配列を有するカーボンナノチューブ(Carbon Nanotube: CNT)は機械的特性の変化に加え、円筒形状からの複雑な曲面の変化を及ぼす。特にらせん状の転位配列の変形メカニズムの解明を行い、CNTの曲率と転位配列との関係を明らかにすることで、欠陥を利用したエンジニアリングへの応用を目的とする。

研究方法

分子動力学(Molecular Dynamics : MD)法を用いて、転位配列を有する CNT を作成し、転位配列と変形の関連性を考察する。また、複数の変形に対して微分幾何学の計算式から得られる平均曲率、ガウス曲率を用いて曲面の調査を行い、複雑な曲面を有する CNT の新規な評価方法を提案する。

考察

- (1) CNT に転位配列を導入することで複雑な面外変形が発生した。
- (2) CNT の軸方向の転位配列では円筒形状から折れ曲がるような変形が発生し、転位の数が増加するにしたがって折れ曲がり具合が増加した。
- (3) 折れ曲がりに対する力の関係を調査するため、ひずみエネルギーと曲率半径の関係を表したところ、CNT を円柱と仮定した外力を加えて曲げた理論式に近い関係を示した。
- (4) 転位配列を有する CNT において、微分幾何学を用いて導出した平均曲率とポテンシャルエネルギーとの関係を示したところ、平均曲率の2乗値とポテンシャルエネルギーには線形関係が得られた。
- (5) 平均曲率の2乗値とポテンシャルエネルギーから得られる直線の傾きは、流体膜などに用いられる式において曲げ剛性率という膜を曲げた際の弾性率に近似できる可能性が得られた。転位配列を有する CNT において、曲げ剛性率を比較したところ、折れ曲がり具合が大きくなるにしたがって曲げ剛性率は増加傾向を示すことが分かった。

口頭発表

1. 雷霄雯、永井敦士、格子欠陥を有するグラフェンシートの変形解析、「位相幾何・微分幾何及びその周辺分野への特異点論の応用」研究集会、オンライン、2022.6.16-18.
2. 國廣侑志、LEI Xiao-Wen、格子欠陥を起因する低次元ナノ炭素材料の変形メカニズムに関する研究、材料シンポジウム「若手学生研究発表会（学生・企業研究交流会）」、京都、2022.10.11-12.
3. 永井敦士、LEI Xiao-Wen、転位配列を有するカーボンナノチューブの変形メカニズムの解明、日本機械学会第35回計算力学講演会(CMD2022)、オンライン、2022.11.16-18
4. 雷霄雯、低次元ナノ炭素材料の変形特性解析、材料フォーラム福井2022、福井、2022.12.9.

学術論文

1. Mengying Li, Xiao-Wen Lei, Molecular dynamics studies on mechanical properties and deformation mechanism of graphene/aluminum composites, *Computational Materials Science*, 2022, 211, 111487.

乱流プラズマの輸送特性計測のためのマイクロ波センシング

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。高温のプラズマ内部の非等方なプラズマ流の情報は、この乱流物理現象を理解する上で非常に重要である。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、高精度な時空間構造を観測し、乱流がプラズマの輸送にどのような影響を与えているのかを調べることを目指している。

乱流の速度を観測する手法として、マイクロ波を用いたドップラーレーダーがある。本研究では、このドップラーレーダーを高性能化するため、フェーズドアレイアンテナの適用を試みる。フェーズドアレイアンテナは、アンテナ自体は動かないまま、任意の方向にマイクロ波ビームを放射することができる。一般的なフェーズドアレイアンテナは周波数を固定して、アンテナ素子間に一定の位相差を与えることで、放射方向を制御するが、本研究では周波数を走査することで放射方向を制御するという手法、すなわち周波数走査型フェーズドアレイを開発した。今回、このアンテナを九州大学の直線型プラズマ実験装置 PANTA に設置して、プラズマ計測の実証を試みた結果について、以下に報告する。

2. PANTA 装置におけるプラズマ計測実証

Ku-band (12-18GHz) 仕様のフェーズドアレイアンテナを PANTA 装置の水平位置にレーザー墨出し器を用いて鉛直方向には 2mm 以下の精度で設置し、鉛直方向にビームをスキャンできるようにした。したがって、ドップラー反射計として周方向速度を観測する配位となる。マイクロ波システムはヘテロダインとして、RF 光源には、マイクロ波発振器（アンリツ:MG3692C）の出力（+18dBm）をサーキュレータを通してアンテナから放射し、受信も同じアンテナの同じポートを利用し、サーキュレータからミキサーの RF ポートへ導く。LO は、ビートがちょうど 1MHz となるように調整した信号を +12dBm 出力で印加し、IF 信号をオシロスコープで収集した。オシロへのトリガとして、 $t=0$ の信号を TTL で受けプラズマ放電毎にデータ（サンプリングレート：25MS/s、データ点数：10MSample）を保存した。

アルゴンガスを燃料としたプラズマ放電において、Ku-band 内でさらに 3 つの周波数帯（13, 15, 17GHz）に分けて、データを取得した。得られた周波数スペクトルの例を図 2 に示す。中心の約 1MHz のピークがキャリアのビート成分であり、



図 1: フェーズドアレイアンテナを PANTA 装置に設置

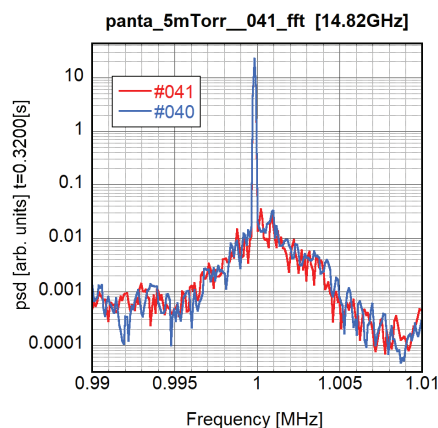


図 2: IF 信号の周波数スペクトルの例。

これを中心に高周波数側へ少しシフトしかつ広がったスペクトルの形状が観測された。ドップラーシフト周波数は、この周波数スペクトルの重心から推定する。今回は、生データ 2^{18} 点ごとに FFT 処理(周波数分解能：95Hz)し、放電時間中の平均値から、ドップラーシフトを求めた。図 3 に 15GHz 帯で観測したドップラー周波数を示す。入射周波数の増大(入射波数の増大)に従って、ドップラーシフトが符号を反転させながら減少している。周波数によって放射角度が異なり、それぞれの観測位置は図 4 のようになると考えられる。プラズマへの入射角度 α が変化することにより、観測位置における入射波の波数 $k_{\perp} = -2 \cdot k_0 \sin(\alpha)$ が変化し、結果としてドップラーシフト周波数 $2\pi f_D = v \cdot k \approx v_{\perp} k_{\perp}$ が変化すると予想され、この傾向を明瞭に示す観測結果が得られた。

3. 論文と学会発表

次の学会にて発表を行った。

1. T. Tokuzawa, T. Tsujimura, M. Nishiura, H. Igami, S. Inagaki, T. Nasu, K. Ida, T. Kobayashi, M. Yoshinuma, K. Tanaka, Y. Takemura, I. Yamada, and LHD Experiment Group, “Edge turbulence excitation experiments in LHD”, 18th International Workshop on H-mode Physics and Transport Barriers (H-mode Workshop). September 20 -23, 2022.
2. T. Tokuzawa, T. Nasu, S. Inagaki, C. Moon, T. Ido, H. Idei, A. Ejiri, R. Imazawa, M. Yoshida, N. Oyama, K. Tanaka, and K. Ida, “Characteristics of 3D metal powder additive manufacturing waveguides and antenna for microwave Doppler reflectometry and trial experiments at PANTA”, 15th International Reflectometry Workshop, June 7-10, 2022.
3. 徳沢季彦, 後藤勇樹, 桑原大介, 矢内亮馬, 西浦正樹, 稲垣滋, LHD 実験グループ, “ECE および ECEI 計測による LHD プラズマの電子温度揺動”, 日本物理学会 2022 年秋季大会, 2022 年 9 月 12～15 日.

論文発表

1. T. Tokuzawa, T. Nasu, S. Inagaki, C. Moon, T. Ido, H. Idei, A. Ejiri, R. Imazawa, M. Yoshida, N. Oyama, K. Tanaka, and K. Ida, “3D metal powder additive manufacturing phased array antenna for multichannel Doppler reflectometer”, Rev. Sci. Instrum. **93**, 113535 (2022); doi: 10.1063/5.0101723.
2. T. Nasu, T. Tokuzawa, T. I. Tsujimura, K. Ida, M. Yoshinuma, T. Kobayashi, K. Tanaka, M. Emoto, S. Inagaki, A. Ejiri, and J. Kohagura, “Receiver circuit improvement of dual frequency-comb ka-band Doppler backscattering system in the large helical device (LHD)”, Rev. Sci. Instrum. **93**, 113518 (2022); <https://doi.org/10.1063/5.0101588>.
3. T. Tokuzawa, S. Inagaki, M. Inomoto, A. Ejiri, T. Nasu, T. Ii Tsujimura, and K. Ida, “Application of Dual Frequency Comb Method as an Approach to Improve the Performance of Multi-Frequency Simultaneous Radiation Doppler Radar for High Temperature Plasma Diagnostics”, Appl. Sci. 2022, **12**(9), 4744; <https://doi.org/10.3390/app12094744>.

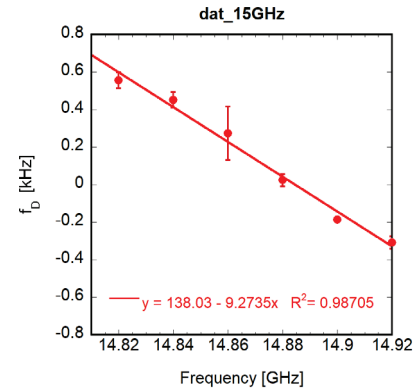


図 3：15GHz 帯のドップラーシフト周波数 (5mTorr 実験時)

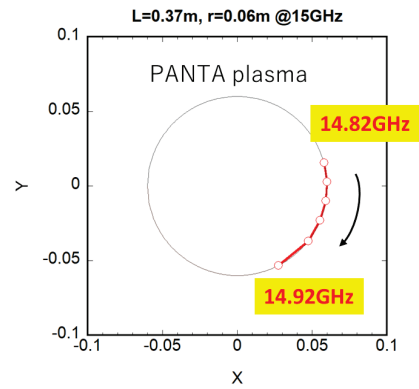


図 4：プラズマ中心軸が PANTA の装置軸と一致していて、カットオフ層は $r=60\text{mm}$ にあると想定した場合の入射周波数に対応する、観測位置。

パターン形成を応用した工学分野における新しい揺らぎの制御手法の考察

広島大学大学院先進理工系科学研究科 鈴木康浩

目的

擾乱としての揺らぎは、工学・理学分野の至る所に現れる。例えば、流体中の変動成分としての乱流や不安定性、閉じた循環系における渋滞現象などがあげられる。揺らぎは、システムの不安定化やエネルギー損失をもたらすために、通常はフィードバックにより制御・安定化される。一方、揺らぎを「機能」として注目した場合、揺らぎの高次成分による流体の攪拌、熱伝導の増幅・減衰などを活用した、革新的な制御技術への展開が期待される。しかし、これまで用いられてきたフィードバック制御は、揺らぎを駆動する乱流や不安定性を完全に抑え込むことを目指した制御方法である。したがって、揺らぎの高次成分を生かしつつ、揺らぎそのものも制御するためには、これまでと全く異なる制御手法を新しく検討する必要がある。

自然界には一見乱雑に見える現象でも、よく調べるとある種の規則性、つまりパターンが見つかることがある。もし、パターン形成の仕組みを理解でき、かつ制御することが可能であれば、工学的に重要な揺らぎを直接制御することが可能になるかもしれない。そこで、本共同研究では、パターン形成のメカニズムを数值的・実験的に考察し、制御された揺らぎを定常発達できるかどうか考察する。

本年度の成果

まず、本年度は揺らぎの中に生まれるパターン形成について、様々な事象の中から抽出し、数理モデル化の検討を行った。

核融合プラズマ中には、不安定性により駆動される様々な揺らぎが存在する。しかし、何らかの理由により、乱流状態にある揺らぎから周波数の低い、定常的な波の状態に遷移する場合がある。本年度は、そのような揺らぎの遷移に関する事象の内、核融合プラズマの周辺部に存在する低温領域で現れる、揺らぎの状態からの安定した状態への遷移を対象とした。図1に、前述した揺らぎの状態から安定した状態への遷移の一例を示す。

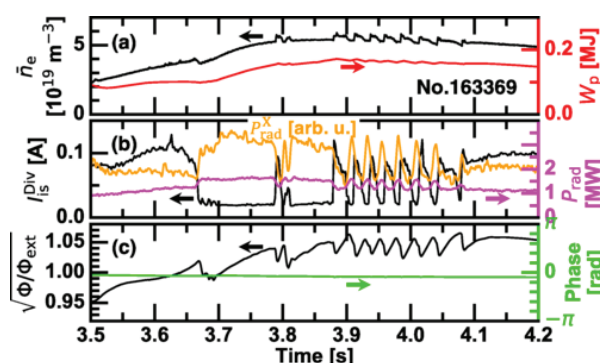


図1 核融合プラズマ周辺部で観測された揺らぎ状態 ($t=3.5\text{--}3.88\text{ s}$) から安定な状態 ($t=3.88\text{--}4.2\text{ s}$) への遷移。無秩序な揺らぎから、低い周波数を持った定常的な振動へ遷移している。(b)のオレンジ線はプラズマの輻射損失を示し、揺らぎによりプラズマのエネルギーが損失している状態を示す。

図 1(b)のオレンジ線はプラズマの輻射損失を示し、揺らぎによりプラズマのエネルギーが損失している状態を示す。しかし、 $t=3.88$ s 後には、無秩序な揺らぎの状態から、低い周波数をもつ定常的な振動に変化していることが分かる。これは、リミットサイクル振動（LCO: Limit Cycle Oscillation）と呼ばれる現象に酷似している。そこで、リミットサイクル振動を説明し数理モデルの一つとして、捕食-被食関係の説明に用いられる、Lotka-Volterra 方程式を用いてこの遷移現象を考察した。

Lotka-Volterra 方程式配下のように表される非線形方程式である。

$$\frac{dx}{dt} = \alpha x - \beta xy \quad (1)$$

$$\frac{dy}{dt} = \delta xy - \gamma y \quad (2)$$

ここで、 x は被食者、 y は捕食者、 α 、 β 、 δ 、 γ は正の定数である。このとき、プラズマのダイナミクスにこの方程式系を当てはめると x は駆動エネルギー、 y は散逸エネルギーに相当する。この方程式系で表される状態を考える上で重要な事は、式(1)で駆動エネルギーが増大した場合、右辺第2項の影響で、必ず散逸エネルギーも増大すること。同様に、式(2)で散逸エネルギーが増大すると、右辺第1項の影響で、必ず駆動エネルギーが増大することである。図 2 に、Lotka-Volterra 方程式に基づいて、この現象を解析した結果を示す。図 2(b)は、 W/δ が散逸エネルギー、 j_{BS} が駆動エネルギーを表す。散逸と駆動の両エネルギーの振動が、ある位相だけずれていることが分かる。このときのリサージュ図形を図 2(c)に示す。リサージュ図形より、安定な振動が発現し、ある種のパターン形成が現れていることが分かった。

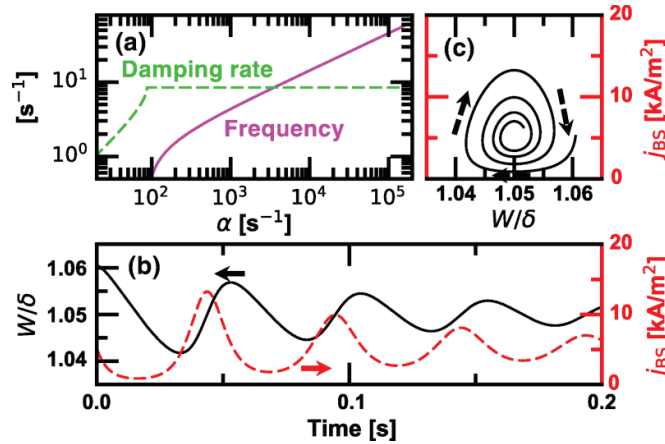


図 2 Lotka-Volterra 方程式に基づいて、乱流状態にある揺らぎから周波数の低い、定常的な波の状態に遷移する場合を解析した結果。

まとめと今後の展望

本年度は、揺らぎの中から自発的に現れるパターン形成に注目し、数理モデルを当てはめることで、パターン形成に至るダイナミクスを解析した。Lotka-Volterra 方程式によると、駆動エネルギーと散逸エネルギーの振動がある位相でずれると、リミットサイクル振動が生まれる。このダイナミクスを応用することで、揺らぎに能動的に摂動を加えることで、パターン形成とそれに伴う揺らぎの制御が可能となるかもしれない結果を得た。