

[JHPCN シンポジウム]

2026 年度 JHPCN 採択課題ポスター紹介

2026 年度学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠における当センター利用課題のポスター7 件をご紹介します。

- ・ jh260001 「FMO プログラム ABINIT-MP の次世代化」
研究代表者 望月祐志（立教大学）
- ・ jh260033 「リアル粒子シミュレーションによるプラズマ科学の展開」 EX
研究代表者 大谷寛明（核融合科学研究所）
- ・ jh260034 「HPC アプリケーションの継続的多拠点開発基盤」
研究代表者 中村宜文（RIKEN R-CCS）
- ・ jh260084 「薄い界面を含む工学問題に対する非定常流体解析手法の構築」
研究代表者 佐々木大輔（大阪公立大学）
- ・ EX26202 「部位特異的コアフシコル化のメカニズム解明を目指した分子動力学計算」
研究代表者 大野詩歩（東北医科薬科大学）
- ・ EX26205 「TDDFT によるフッ素終端した窒化ガリウムにおけるホールダイナミクス の解明」
研究代表者 屋山巴（工学院大学）
- ・ EX26207 「リカレント型ビット計算による流体・構造体統一解析手法の開発」
研究代表者 松岡浩（技術士事務所 AI コンピューティングラボ）

「FMOプログラムABINIT-MPの次世代化」 代表：望月祐志(立教大学) jh260001課題 (jh250002継続)

25年度概要

本課題では、**計算化学**の専門家と**HPC**の専門家との**異分野間コラボレーション**によって、FMO計算の自主開発プログラムの改良を中心に活動を行っています。

① FMO関係では、多岐にわたる項目を実施しています。先ず**ABINIT-MP**関係では、(I) 超大规模系に対応した**Version 12**の取り纏め(2026年3月)、(II) HFとMP2エネルギー計算の**GPU化**と性能評価、(III) SX-Aurora TSUBASA向けの**ベクトル化**の推進、(IV) 開殻系のスピン制限付きHF計算(**ROHF**)の収束性向上、(V) 多参照系に対する基本近似である**CASSCF**のプロトタイプ化の完了、(VI) 多参照系の2次摂動論**NEVPT2**の数式セットの導出完了、の6項目があります。また、「**富岳NEXT**」での運用を意識した新規開発のFMOプログラム**FMO-X**については、(VII) 2電子積分の恒等分解(RI)近似に基づくHFとMP2の基本動作をプロトタイプで確保、を達成しました。**AI for Science (AI4S)**関係では、(VIII) 3-21G基底で6-31G(d)やcc-pVDZ基底の相互作用エネルギーを予測する**サロゲートモデル**の試行、(IX) ペプチド結合の>C=O部の残基帰属の自動検出ツール**SARASA**の開発、の2項目があります。

② タンパク質の立体構造をアミノ酸配列から予測できる**AlphaFold2/3**を名古屋大学と九州大学のGPU搭載機で一般公開ライブラリとして整備しました。

25年度特記成果

ここでは、jh250002課題で達成した項目の中で**ABINIT-MP**と**FMO-X**に関する特記項目を挙げます。

- ABINIT-MP: Miyabi-G上で複数の系でGPU化**FMO-HF/6-31Gジョブ**をテストし、HIVプロテアーゼでは16ノード基準で128ノードで5倍の加速を得ました(図1)。
- ABINIT-MP: GPUでのMP2の**積分変換をバッチ**で行う(図2)新モジュールを作成しました。Aquarius上のテストでは、1CPUに対し+8GPUで7.5倍の加速です。
- FMO-X: **RI積分ベース**でDGEMMによるMP2処理(図3)を行えるプロトタイプモジュールを確保しました。

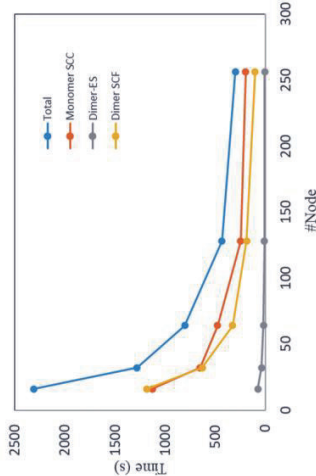


図1: FMO-HF/6-31GジョブのMiyabi-Gでのタイミング例

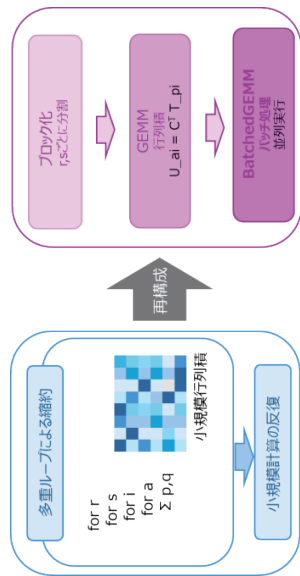


図2: MP2でのGEMM処理のGPU向けのバッチ化

MP2 correlation energy (E^{MP2}) ($pq|rs\rangle \approx \sum_i L_{ip} L_{iq} L_{rs}$)

Loop over i # Parallelized

$$X_{ipq} = \sum_i L_{ip} C_{ri} \quad \# \text{ DGEMM}$$
$$B_{i,aa} = \sum_i X_{i,al} C_{qa} \quad \# \text{ DGEMM}$$

End of loop over i

Loop over ij # Canonical ij pair

$$(ia|b) = \sum_i B_{i,aa} B_{i,bb} \quad \# \text{ DGEMM (partial sum of 1)}$$

ALLREDUCE (ia, j, b)

$$E^{\text{MP2}} = E^{\text{MP2}} + \frac{(2-\delta_{ij})(2(ia|b) - (ib|a))(ia|b)}{\epsilon_i - \epsilon_a + \epsilon_j - \epsilon_b}$$

End of loop over ij

図3: RI近似積分によるMP2エネルギー計算

継続となる26年度、①では下記に列挙する項目の実施を予定しています。

- ABINIT-MP: 開殻系の**ROHF**と2次摂動(RMP2)の(FMO2, FMO3, MFMO)スキームでの実装、並びに多参照系の**CASSCF**のMFMOスキームでの本実装。
 - ABINIT-MP: **NEVPT2**のプロトタイプ動作確保、テンソル縮約ループの**AIジョブ**による最適化。
 - ABINIT-MP: FMO-MP2エネルギーまでのGPU化の徹底、それを受けての**Version 2 Revision 16**の2027年3月までの取り纏め。
 - FMO-X: RI積分生成のGPU高速化、**環境静電ポテンシャル**のRI近似でのGPU化と各種の近似導入。
 - AI4S: **サロゲートモデリング**の精度向上、FMO計算結果の物理化学的セマンティックに対応した**自動解釈ツール**のプロトタイプ化。
- また、②では下記を想定します。
- AlphaFoldの更新版の「**玄界**」等のNISでの**ライブラリ整備**の継続。

26年度予定

用語解説

- フラグメント分子軌道 (FMO) 法: タンパク質などの巨大生体分子をフラグメント(アミノ酸単位等)に分割して、静電的な埋め込み条件の下、並列処理を駆使して高速に処理できる手法です。計算結果として、フラグメント間の相互作用エネルギー (FIE/PIEDA) が得られるため、生物物理学や理論創薬で重用されています。
- MP2: ハートリーフック(HF)の後、2次摂動論で電子相関を取り込んで定量的な相互作用エネルギー解析を行える計算レベルで、FMOでは最もよく使われています。
- RI近似: 2電子積分を近似的な恒等分解 (Resolution-of-identity) によって3階のテンソル化して行列積指向の処理を可能とする手法です。
- 開殻・多参照系: 鼓イオンなどを中心に持つ金属酵素が該当し、その扱いのための計算法 (CASSCF/NEVPT2) の実装は通常の閉殻系に比べて難度が上がりやすい。

学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点公募型共同研究 2026年度採択課題

18th Symposium

jh260033

Joint Usage / Research Center for Interdisciplinary Large-scale Information Infrastructures

大谷寛明(核融合科学研究所)

リアル粒子シミュレーションによるプラズマ科学の展開



参加者: 長谷川裕記^{1,2} (副代表), 宇佐見俊介¹, 樋田美栄子^{1,2}, 石黒静児^{1,2}, 堀内利得^{1,2}, 小谷 翼³, 大野暢亮⁴, 川原慎太郎⁵, 滝沢寛之⁶, 片桐孝洋⁷, 曾我 隆⁸
¹核融合研, ²総研大, ³京大, ⁴兵庫県立大, ⁵JAMSTEC, ⁶東北大, ⁷名大, ⁸阪大

1. 研究目的

プラズマ: 宇宙の典型的な物質状態 (地球惑星科学、宇宙科学、核融合科学、材料プロセス工学など様々な分野で研究対象) → 多様な現象
 各分野でのプラズマパラメータは異なる → プラズマパラメータを特徴的なスケールで規格化
 → 共通の現象として議論 学際的な研究 (例: プラズマ実験と太陽風-地球磁気圏-電離層でのプラズマ現象のアナロジー)
 プラズマ科学: 膨大な数の荷電粒子の集団から構成される巨視的な系であり、電磁場を介して多様な複雑な集団現象が研究対象
 粒子シミュレーション (1960年代初期に最初に考案されたシミュレーションモデルの一つ)。荷電粒子と電磁場のダイナミクスを自己無撞着に解く。
 利点: 粒子運動という微視的ダイナミクスの追跡 + 粒子-波相互作用や粒子運動論の効果の正確な追跡
 難点: メモリ量や計算速度の制限 → 実験装置サイズのような巨視的な系全体の計算が非常に困難 (イオン・電子のスケール差: 時間で 10^3 、空間で 10^2 程度)
 最適化の困難 → 粒子に働く力の計算や電荷密度・電流密度の計算でメモリへのランダムアクセス発生。
 並列化の困難 → 均等な領域分割による並列化で偏った粒子密度分布が発生すると、並列負荷分散に偏りが発生
 素過程の物理モデル (粒子間衝突や荷電交換、イオン再結合) は粒子間相互作用なので、粒子数 N に対して計算コストが N^2
 プラズマ実験や太陽・地球磁気圏プラズマを模擬する境界条件や実験装置のジオメトリや境界条件の設定

実験や観測に即したシミュレーションモデルを構築・導入して、シミュレーションを実行する「リアル粒子シミュレーション」コードのための研究・開発

リアル粒子シミュレーション

- ・実験や観測など、現実世界に即した境界条件やジオメトリを含むシミュレーション
- ・マクロ現象とミクロ現象とが互いにフィードバックするシミュレーション
- ・素過程の物理現象を含むシミュレーション

2. 研究課題

○コードやモデルの研究開発

1. スカラ機及びベクトル機への対応など、様々なアーキテクチャにおいて実行可能なコード
2. 多くの計算機システムで導入されているGPUを活用したコード
3. 現実世界に即した境界条件やジオメトリのモデル化から、

マクロ現象とミクロ現象とが互いにフィードバックできるミクロ-マクロの結合モデル (Macro-Micro Interlocked (MMI) モデル) へ

○開発したコードの研究対象: プラズマ物理における微視的ダイナミクス研究

磁気リコネクション現象、周辺プラズマにおける輸送現象、高速粒子が励起する波動現象
 → 最適化・高速化・並列化の課題の洗い出し、コードの更なる高度化

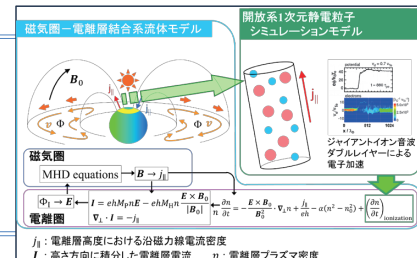
○粒子による運動論の効果などを理解するための効果的な可視化表現法の研究

MMI モデル

1. マクロシミュレーション実行・各格子点の状態監視 → ミクロ不安定性が発生する点を検知
2. 検知された点の局所マクロ状態をミクロコードの初期・境界条件として与え、ミクロシミュレーション実行
3. ミクロシミュレーションで十分に不安定性が成長 → 異常抵抗などの有効マクロ係数の算出
4. 有効マクロ係数をマクロ方程式に組み込み、マクロ的時間発展の更新

計算手法の異なるコードの結合 (流体系と粒子系)

→ 結合手法の難しさ・計算手法に適したアーキテクチャが異なる



3. 研究計画

○リアル粒子シミュレーションコード研究開発

・コードのGPU化 (OpenACC, OpenMPのオフロード機能によるGPU化): GPU化された開放系1次元静電粒子コードを参考に研究開発を推進

・オーロラMMIコードの研究開発:

地球磁気圏-電離層結合系を記述するMHDマクロコードと、マクロ系内で成長した沿磁力線電流による微視的不安定性を計算するミクロコードの結合コード
 コードに適したアーキテクチャが異なる → 異機種間連携によるオーロラMMIコードの実行

・フリーエ型のモード展開法及び、粒子の多重展開による場との結合を用いたプラズマ粒子コードの開発

○微視的ダイナミクス研究

・磁気リコネクション現象の研究:

球状トラス型・スフェロマック型装置での磁気リコネクション加熱を研究してきた。速度分布関数に基づくミクロ加熱機構の解明と高温プラズマ輸送過程の解析、最終緩和状態分岐の要因解明を進める。

・周辺プラズマにおける輸送現象の研究:

3次元静電粒子コードup3bdにより、周辺プラズマ輸送やフィラメント動態を研究してきた。大規模並列計算による形成過程解析と衝突・原子分子過程導入を進め、非接触時の径方向輸送増大機構を解明する。

・高速粒子が励起する波動現象の研究:

高速粒子励起波動のPIC研究を進め、低域混成波不安定性や背景粒子加速を解明してきた。高調波サイドバンド構造の解析、二次元・非一様系シミュレーション、非線形磁気音波による粒子加速研究を進める。

JHPCN

学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 第18回シンポジウム

Japan High Performance Computing and Networking plus Large-scale Data Analyzing and Information Systems

2026年7月9日、10日

東京コンファレンスセンター・品川

2026年度 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 公募型共同研究

HPCアプリケーションの 継続的多拠点開発基盤

課題番号 (jh260034)



中村宣文、小林千草、村井均、安藤和人、曾田繁利、大塚雄一、
山浦剛、似鳥啓吾、黒田明義、石附茂、吉田幸平
理化学研究所計算科学研究センター (RIKEN R-CCS)

研究概要

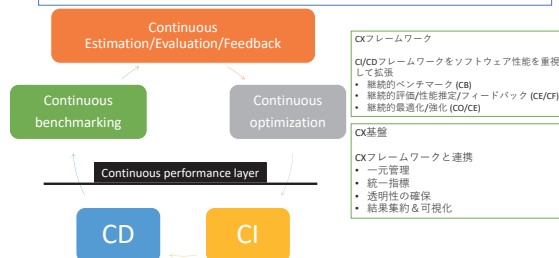
背景

- スパコン環境は拠点ごとに多様化 (CPU / GPU / ベクトル機)。一方アプリは長期保守され、拠点間の性能差と移植性が開発者の大きな負荷に。

目的・意義

- 複数拠点・複数アプリに対応する「継続的多拠点開発基盤」を構築する。
- CI/CDの仕組みを拡張し、各拠点の実行性能を自動かつ継続的に計測・解析する Continuous Benchmark を実現する。
- 開発・性能計測・解析・最適化を統合的に支援し、性能の継続監視/多拠点比較/性能退行の自動検出/ボトルネック可視化/横断的な知識共有を可能にする。
- 蓄積した性能データは、アルゴリズム改良・高効率実装指針・次世代システム設計、さらに生成AIによる性能予測・自動最適化の基盤データとして活用。

継続的多拠点開発基盤 (CXフレームワークの多拠点展開)



研究計画

段階的展開

- 性能評価フレームワーク benchmark と benchmark を相補的に活用し、多拠点展開と統合を段階的に進める。

第1
段階

**Gitlab-runner & Jacamar-CIを全拠点へ導入し、
benchmark CI/CDを全システムを対象に整備**

理研が開発する軽量 Bash ベース基盤。既存のビルド/実行手順を大きく変えず多拠点で性能計測・結果集約。開発者が参加しやすい入口を確立。

完了
公開

<https://github.com/RIKEN-RCCS/benchmark>

第2
段階

**benchmarkを各拠点へ配備
(DOE-MEXT連携/LLNL主導)**

内部でHPC向けパッケージマネージャー Spack を使い依存込みの完全ビルド情報を取得 → 再現性の高い評価・バージョン管理・性能退行検出。

整備中
公開

<https://github.com/RIKEN-RCCS/benchmark>

第3
段階

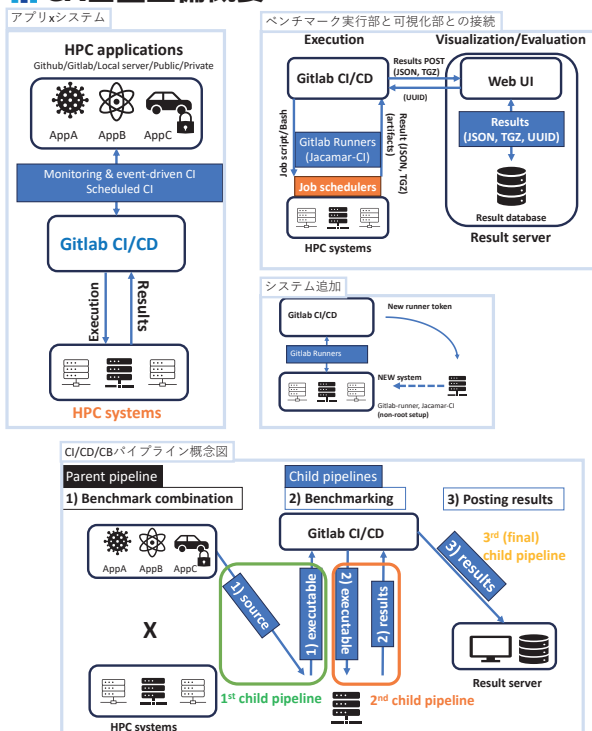
統合基盤の構築

ベンチマークの結果集約・可視化。アプリ性能とシステム性能を横断的に扱い、低い参加障壁での多拠点ベンチマーク・知識共有・生成AI解析へ展開。

公開前強化中
2026年夏公開予定

<https://fncx.r-ccs.riken.jp/>

CX基盤整備概要



開発・準備状況

- benchmark (OSS, BSD-3 / shell-first) と結果ポータル CX portal の整備が進行中。公開前の品質・セキュリティ強化を継続。
- 日々監視：ドキュメント & コード品質、セキュリティCVE対応
- CI自動テスト：ベンチマーク (Bash)、サーバ (python)
- 対応済みシステム：富岳, AI4Sスパコン(正式名称未発表), R-CCS Cloud, Grand Chariot 2, AOBA-AB/S, Miyabi-G/C, Odyssey, Aquarius, Tsubame 4.0, Pegasus, Sirius, Camphor3, Squid, Octopus, 玄海
- 対応予定システム：不老・式 (2026年10月以降)
- 格子QCD用ライブラリで全システム動作確認済
- 複数のプロキシアプリ x 複数システムでCI/CD/CB検証・整備中

参加・拡張方法 (開発者向け)

- アプリ開発者の参加方法 (add-app) : Fork → サンプル qws を複製 (programs / <code>/) → list.csv・build.sh・run.sh を作成 → ローカル/バッチ実行で確認 → PR。app 担当は build / run / 結果出力 (FOM) / 推定首肯を担当。既存のビルド・実行手順を大きく変えずに参加できる。
<https://github.com/RIKEN-RCCS/benchmark/blob/develop/docs/guides/add-app.md>
- 拠点システム追加方法の概要 (add-site) : GitLab Runner + Jacamar-CI をユーザ権限で導入。scripts/site/setup_runner.sh で取得〜ビルド〜登録〜systemd 常駐まで一括。preflight_runner.sh で事前疎通確認。登録は config/system.csv・queue.csv・system_info.csv へ追記。
<https://github.com/RIKEN-RCCS/benchmark/blob/develop/docs/guides/add-site.md>
- 推定パッケージ開発者向け機能 (estimation) : top-level package と section/overlap package を分離 (scripts/estimation/)。metadata・適用可否判定・信頼度・fallback / not_applicable を提供。最小導入は weakscaling。詳細推定の参照実装は qws。Estimate JSON 組立・要求/適用/パッケージ記録・portal 表示は共通層が吸収。
<https://github.com/RIKEN-RCCS/benchmark/blob/develop/docs/guides/add-estimation-package.md>

研究代表者: 佐々木大輔(大阪公立大学)

代理発表者: 木村泰士(大阪公立大学)

JH260084

薄い界面を含む工学問題に対する非定常流体解析手法の構築

佐々木大輔, 川本裕樹, 木村泰士, 行光実桜, 井上翔太,
Loup Mael Agulles, 奥村連太郎
(大阪公立大学 大学院工学研究科 航空宇宙海洋系専攻)

滝沢寛之
(東北大学 サイバーサイエンスセンター)

小松一彦
(東北大学 グリーン未来創造機構 グリーンクロステック研究センター)



大阪公立大学



東北大学サイバーサイエンス
センター

・AOBA-S(ベクトル型)

大阪大学D3センター

・SQUID(GPUノード群)

研究背景と目的

様々な工学機器に対する流体の関わる設計・現象解明

- 狭い隙間や薄い物体
 - 気液界面
- 複雑な流れ

直交格子の利点と課題

- 移動物体問題への適用容易性
 - 物体定義の課題
 - 解析格子数の増大
- AMR法 + IB法

テーマ1「AMR法に対する高速化技術の研究」

- ①二相流に対するAMR法の導入と高速化
 - ・AMR法による単一気泡の上昇問題の実施
(自動式ヒートパイプの模擬)
 - ・並列化精度の調査
- ②AMR法のGPU化に向けた基礎検討
 - ・完全等間隔ソルバーに対するGPU化の実装

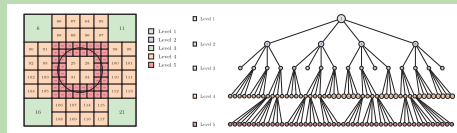
テーマ2「工学問題に対する非定常流体解析手法の研究」

- ①流体構造連成解析による薄い柔軟膜翼の現象解明
 - ・薄い柔軟膜翼に対する妥当性の検証
 - ・AMR法の導入検討
- ②突起を有するブレードの性能予測と改善
 - ・AMR法によるドローンブレードの解析

手法

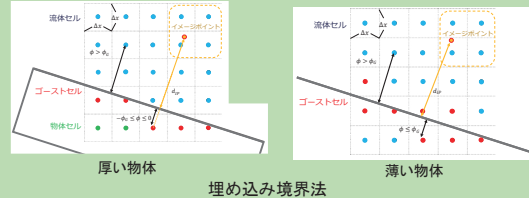
動的適合格子細分化法 (AMR法)

- ・直交格子法に基づく3次元非圧縮性流体解析手法
- ・ブロック単位で格子の細分化・粗大化判定を行うAMR法
- ・埋め込み境界法による物体表現
- ・Ghost Fluid法による気液相変化



極薄い物体に対する流体構造連成解析手法

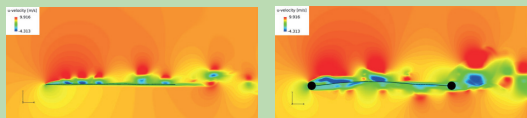
- ・2次元非圧縮性流体解析と多粒子系モデルによる構造解析を用いた流体構造連成解析手法
- ・完全等間隔直交格子
- ・格子幅よりも薄い物体を表す埋め込み境界法 (IB法)
- ・多粒子系モデルによる膜翼のモデル化



昨年度の結果および今年度の進捗

極薄い柔軟膜翼に対する流体構造連成解析 (Re:30000)

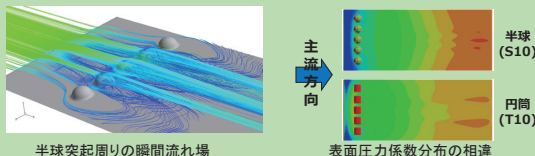
- ・予びずみを与えた厚みのない柔軟膜翼
- ・実験で使用する円柱状の支持装置の影響評価



支持装置の有無による瞬時速度場(極大値)の相違

突起を有する平板翼の空力性能向上 (Re:10000)

- ・突起による揚抗比変化: 平板翼 ≈ 半球(S10) > 円筒(T10)

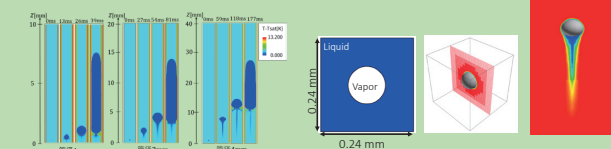


半球突起周りの瞬間流れ場

表面圧力係数分布の相違

ヒートパイプを模した円管内気泡の相変化を伴う上昇解析

- ・完全等間隔格子からAMR法への移行

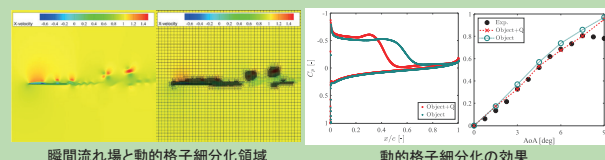


各管径における過熱度分布の時刻歴

AMR法による成長気泡の解析(重力あり)

動的AMRによる平板翼周りの流体解析 (Re:10000)

- ・翼上面の層流剥離泡, 後流の渦放出に対する動的格子細分化



瞬間流れ場と動的格子細分化領域

動的格子細分化の効果

今後の展望

- ・AMR法の解析精度評価
- ・AMR法のGPU化に向けた検討
- ・極薄い物体に対する流体構造連成解析手法の拡張



大阪公立大学

大阪公立大学大学院工学研究科
航空宇宙海洋系専攻航空宇宙工学分野
教授 佐々木大輔

住所: 堺市中区学園町1-1

Email: daisuke.sasaki@omu.ac.jp

WEB: <https://www.omu.ac.jp/eng/sasaki/>



EX26205

TDDFT によるフッ素終端した窒化ガリウムにおける ホールダイナミクス の 解明

屋山 巴 (Tomoe YAYAMA)
工学院大学 先進工学部
応用物理学 宇宙理工学専攻

本研究の背景と目的：GaN中の窒素欠陥に対するフッ素終端とp型化の可能性

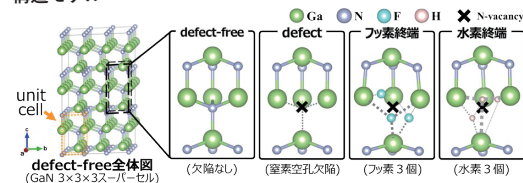
窒化ガリウム(GaN)は宇宙用機器への活用も期待される有力な半導体であるが、その実用化においてp型化が重要な課題である。GaNにおいて窒素(N)空孔が生じやすいが、N空孔はホールを補償することがGaNのp型化が困難な要因の1つとなっている。これに対し、本研究グループでは、フッ素(F)により窒素空孔により生じたダングリングボンドを終端することで著しく電子状態を改善できることを報告している。(Y. Fujishiro, TY, et al., J. Appl. Phys. 139, 085703 (2026).)

本研究では、時間依存密度汎関数理論(TDDFT)の枠組みの下で、F終端により電子状態が改善したGaNに対しMgドープによってホールを生じさせ、生じたホールの時間発展挙動を調べる。以下に示すこれまでの関連研究を効果的に組み合わせることにより、GaNのp型化に対する有力な知見が得られる。複数の不純物を有する系では大規模な計算資源を要するため、東北大学サイバーサイエンスセンターの大規模ベクトル型計算機 (AOBA-S) の使用により初めて実現可能となる。

これまでの関連研究：窒素欠陥状態に対するフッ素終端の有効性

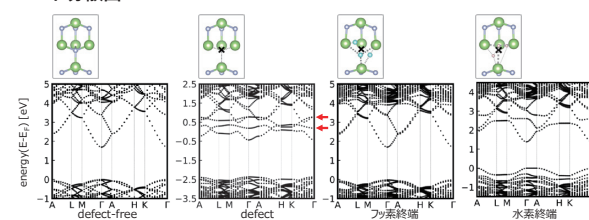
N空孔はGaNにおいてもっとも生じやすい欠陥の1つであり、伝導帯近傍の欠陥状態の生成や、ホールの補償を通じてp型化の妨げとなっていると考えられる。本研究グループでは、フッ素(F)の導入により、N空孔近傍のダングリングボンドが安定に終端され、欠陥準位を効果的に除去することを報告した。ここでは時間に依存しない通常の密度汎関数理論(DFT)の枠組みで研究を行った。

構造モデル



計算条件	
手法	平面波基底によるDFT
使用ソフトウェア	VASP
モデルサイズ	3×3×3スーパーセル (108原子)
Cut-off energy	800 eV
交換相関汎関数	PBE-GGA
k点数	4×4×4

バンド分散図



F原子の数や位置の異なるモデルのほか、水素終端についても検討を行った。熱力学的安定性および電子状態変化を調べたところ、1つのN空孔に対し、3つのフッ素が欠陥近傍に配置する構造が安定かつ効果的に電子状態を改善することが明らかになった。より一般的な水素終端については、構造的にもFより安定性が低く、結合状態が生じるものの、バンド端近傍に残留することから、フッ素終端の優位性が示された。[1]

[1] Y. Fujishiro, TY, et al., J. Appl. Phys. 139, 085703 (2026).

これまでの関連研究：時間依存密度汎関数理論に基づくMg、CドープGaNのホール緩和の計算

現時点において、GaNに対するp型ドーパントはマグネシウムのみであり、その他の元素ではホール活性を維持できないことが知られている。我々は時間依存密度汎関数理論(TDDFT)を用いることにより、励起状態における電子緩和のダイナミクスをあらわに求め、ドーパントおよび欠陥によるキャリア散乱過程の解明に取り組んできた。

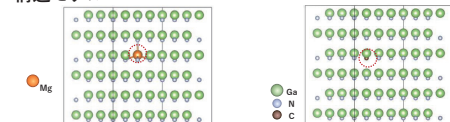
時間依存Kohn-Sham 方程式 [2]

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r},t)=\{H^{KS}+\Delta V(\mathbf{r},t)\}\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r},t)$$

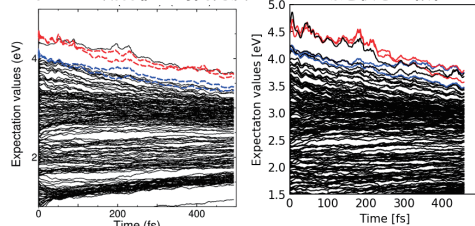
原子の熱運動と電子のダイナミクスを考慮し、⇔MDと連成
摂動論を超えた取り扱いにより自然に起こる電子遷移を再現する。

[2] Runge, E. & Gross, Phys. Rev. Lett. 52, (1984) 997-1000.

構造モデル



エネルギー期待値の時間発展：ホール励起状態の緩和



[3,4] O. Sugino and Y. Miyamoto, Phys. Rev. B, 59 (1999) 2579., Phys. Rev.B 66, 089901(E) (2002).
[5] FPSEID²¹ official site (<https://staff.aist.go.jp/yoshi-miyamoto/>)

GaをMgに置換したMgドープ(左)、NをCに置換したCドープ(右) GaN 4×4×3モデルにおいて、750Kでの熱平衡状態のもとでTDDFT計算を実行した。青、赤で示した状態はそれぞれ部分占有、占有状態であることを示し、エネルギーが低い位置に青い線があり、エネルギーが高い位置に赤い線があるときは、ホールが励起されていることを示している。ホールが緩和した場合、青と赤の線が交差し、部分占有状態が高いエネルギーレベルに変化する。Mgドープモデルでは、500fsの計算時間全体にわたって青、赤の線は交差することなく保たれていることから、ホールキャリアの寿命が500fs以上であることを確認した。Cドープモデルでは、約300fsで青と赤の線に重なりがみられ、これは緩和の始まりを示している。これはGaNのp型化が実験的にMgドープによってのみ達成されており、Cドープではp型化が実現されていないことと矛盾しない。

本研究では、これらの研究を進展させ、時間依存密度汎関数理論(TDDFT)の枠組みの下でF終端により電子状態が改善したGaNに対しMgドープによってホールを生じさせ、ホールの時間発展挙動を調べる。有限温度と励起状態を考慮したより現実的な条件下で、F終端の有効性とホールの挙動を明らかにすることができると考えられる。

JHPCN第18回シンポジウム (令和8年7月9 & 10日)

EX26207

リカレント型ビット演算による流体・構造体統一解析手法の開発

EX26207 (東北大学推薦課題: 萌芽型共同研究)

松岡 浩 (技術士事務所AIコンピューティングラボ)

目的と方法:

- 背景: 高精度なものづくり流体工学設計では、しばしば、流体と構造体の相互作用(FSI)を高解像度で数値シミュレーションしたいというニーズがある。(例: 浮体式洋上風力発電ファームの設計等)
- 目的: “高効率な並列計算”と“誤差の蓄積がない安定な時間発展乱流計算”を同時に実現できるという『ビット演算』の特徴を活かした“高効率なマルチスケールFSI解析手法”の開発を目指す。
- 方法: C. M. Teixeiraが考案した高精度な4次元面心超立方体格子による54速度モデルをFSI用に改良。

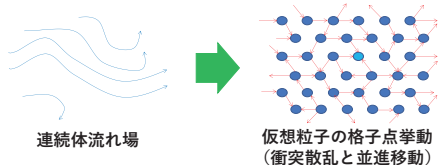
1. C. M. Teixeiraの格子ガスモデル (出発点)

ビット演算による長所:

- 誤差蓄積がない時間発展計算。
○1格子点1bit幅で超並列計算。
⇒激しい変動流でも安定に計算。

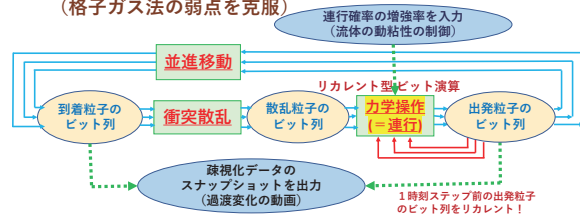
Teixeiraの4次元FCHC54速度モデル:

- マッハ数3次精度までNS式と一致。
○移流項は線型で平均値計算は正確。
⇒高精度な流体計算の実現。



2. “リカレント型ビット演算”による粘性制御法

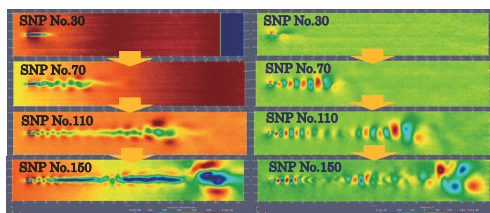
- 1時刻ステップ前の出発粒子の運動情報(1or0)をもとに、
「同じ向きに連続して出発する確率」=“**進行確率**”を制御:
⇒格子点数を増さずに低粘性流体挙動の模擬を可能にする。
(格子ガス法の弱点を克服)



3. ビット演算による角柱後流のカルマン渦列崩壊と再配列計算

(四角柱の遠方後流におけるカルマン渦列の崩壊と再配列を再現)

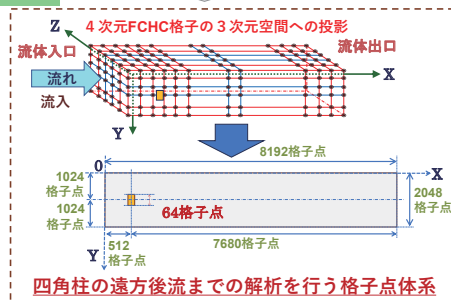
アスペクト比0.125の四角柱を静止流体中に置き、
左から急に流体を一定速度で流入した場合の後流の
流速(下図左側)とそのY成分速度(下図右側)の過渡変
化を計算。⇒先行研究(例: 種子田)の知見と定性的に整合。



四角柱の後流における流速(左)とY成分速度(右)の過渡変化

- 体系の格子点配置は、
X方向 8192 × Y方向 2048
× Z方向 16 ≃ 2.68億個。
○256ステップごとに1画面
を出力し150画面までの計算。
○四角柱の中心軸の中央を
垂直に切る平面上の流体速度
を可視化。
○4 × 4 × 4個の格子点領域
ごとに疎視化。
○ParaViewで動画観察。

○東北大学サイバーサイエンスセン
ターのAOBA-Sで計算。1ケース
あたり [16ベクトルコア/CPU × 8
CPU] の128MPI並列で3時間20分。
⇒ベクトル化率: 約98.8%。
ベクトル長: 約220



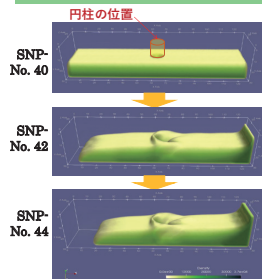
四角柱の遠方後流までの解析を行う格子点体系

【3つの力学操作をすべて使う】

- ①進行操作: 流体粘性を低下させるために行う
同じ向きへの粒子の連続出発確率の増加操作
②逆進操作: 固定剛体構造体の表面で流体粒子
をバウンスバックさせる粒子速度の反転操作
③加速操作: 重力や人為的なある向きへの力を
模擬するため行う粒子速度の強制的変更操作

4. ビット演算による円柱に衝突する気液界面の挙動計算

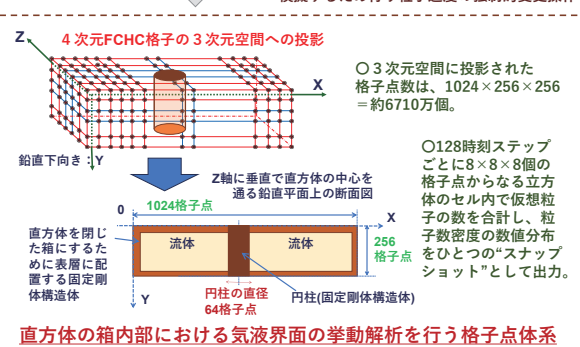
(重力で分離した気液2相流が円柱に衝突して生じる界面挙動を再現)



直方体の箱内部で気液相に
分離した全ての仮想粒子に
右向きの“加速操作”を行っ
た時の気液界面の過渡変化

- 時刻0で、各格子点に存在できる仮想粒
子の最大数の20%の数の仮想粒子をランダム
な速度分布で配置し、スナップショット
1~39までの間、+Y向き(鉛直下向き)
に仮想粒子を加速する。
⇒仮想粒子の数が高い下層=“液相”、
数が低い上層=“気相”が生成する。
○スナップショット41から44までの間、
右壁向きにすべての気液2相流体粒子を
強制加速して、円柱と右壁に衝突させる。

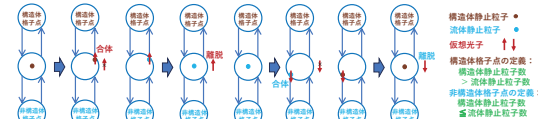
○東北大学サイバーサイエンスセン
ターのAOBA-Sで、128時刻ステップ×100 Snap-shot
の計算を128MPI並列で約26分。
⇒ベクトル化率: 約97.2%。
ベクトル長: 約217
○ParaViewで動画観察。粒子数密度が低い“気
相”と解釈できる領域の“不透明度”をゼロに
見えなくし、“液相”と解釈した領域の表面を
直接することで気液界面を直接観察する。



直方体の箱内部における気液界面の挙動解析を行う格子点体系

5. ビット演算によるFSI界面の自動生成 (試算中)

○流体と構造体の界面における仮想粒子の静止粒子への合体・離脱モデル



【謝辞】

- 本研究の実施にあたり、高性能ベクトルスパコンの利用環境とユーザ支援
を常時提供してくださった東北大学サイバーサイエンスセンターの関係者
の方々に深く感謝します。今後とも、サイバーサイエンスセンターとNEC
の方々が、ユーザ利用を第一に考えたSXシリーズの開発と運用を続けられ、
常に最先端の利用環境を提供してくださることを希望します。
○ポスター発表の機会をくださったJHPCN関係者に深く感謝いたします。