

宇宙地球フロンティア実地研修 報告書

Report for Onsite Training in Earth-Space Frontier Science

氏名/Name	坂井 郁哉 SAKAI Fumiya		
所属部局/ Affiliation	理学系研究科 地球惑星科学専攻 Department of Earth and Planetary Science, Graduate School of Science		
研究機関・企業名 /Hosting Institution	Institut de physique du globe de Paris (IPGP)		
期間/Period	2024 年 9 月 2 日 09/ 02/ 2024	～	2024 年 12 月 1 日 12/ 01/ 2024
			* 西暦で記入 mm/dd /yyyy

私はこのたび、フランス・パリにある Institut de physique du globe de Paris (IPGP) の Razvan Caracas 先生の研究グループを訪問し、機械学習ポテンシャルを用いた分子動力学(MD)シミュレーションについての指導を受けました。私は東大では高圧実験を専門としていますが、MD シミュレーションを組み合わせることで、実験が困難な条件においても研究を進めることが可能となります。特に近年では、機械学習を用いた MD シミュレーション(MLMD)によって、従来困難であった大規模な系における長時間の計算が可能となっています。そこで私は高圧下における第一原理計算を専門とする Caracas 先生を訪ね、ご指導いただくことにしました。此度の訪問では MLMD に関する研究指導の他にも、IPGP のセミナー等にも参加させていただきました。

本実施研修を通じて異なる研究分野における研究の進め方について肌で感じることができました。また海外の研究機関での研究との向き合い方は非常に勉強になりました。最後になりますが、訪問を受け入れてくださった **Caracas** 先生の研究グループの皆様、そして渡航にあたりご支援いただきました理学系研究科大学院生国際派遣プログラム(GRASP)の関係者の皆様に御礼申し上げます。

I visited the research group of Razvan Caracas at the Institut de physique du globe de Paris (IPGP) in Paris, France, where I received instruction on molecular dynamics (MD) using machine learning potentials. My primary focus at UTokyo is on high-pressure experiments, which differ from MD simulations. By combining MD simulations with my experimental work, it would be possible to advance my research even under conditions that are difficult to achieve experimentally. In recent years, machine learning-based molecular dynamics simulations (MLMD) have made it possible to perform large-scale and long-time calculations that were previously challenging. For these reasons, I visited Razvan Caracas, a leading expert in *ab initio* molecular dynamics under high-pressure conditions to have his instruction. During my visit, I could also participate in a group meeting at IPGP, in addition to my research.

Through this onsite training program, I was able to experience research that are completely different from what I had been doing at UTokyo. This gave me a new insight into my focus. I was also able to experience how overseas researchers are conducting research. They were more strongly connected and cooperated with each other to face problems that they did in Japan. It was a nice opportunity for me to reconsider how I should do my research.

Finally, I would like to thank Razvan and my colleagues at IGP for their hospitality, and the Graduate Research Abroad in Science Program (GRASP) for supporting my visit.



写真：IPGP の入り口