

CYBERMEDIA HPC JOURNAL

Cybermedia Center, Osaka University
No. 13



September, 2023.

モード
セイバーアイアセントラル
大日本大学サイバーナンバーズ
No.13 2023.9

目 次

特 集：メタバースプラットフォームと科学的可視化	1
デジタルツインプラットフォーム NVIDIA Omniverse による可視化 安福 健祐	3
大規模計算機システム利用者研究報告	7
メガテスラ磁気再結合による極超高エネルギー粒子加速の3次元シミュレーション 村上 匡且	9
大規模比較ゲノム解析による病原細菌の進化と病態発症機構の解明 大野 誠之、山口 雅也	13
大阪大学 大学院歯学研究科	
原子核密度汎関数法を用いたエキゾチック原子核における 集団励起モードの系統的記述:回転運動を中心として 吉田 賢市	17
大阪大学 核物理研究センター(RCNP)	
ストリングから生成されるアクション暗黒物質のスペクトルの解析 齋川 賢一	21
金沢大学 理工研究域 数物科学系	
薬用低分子構造に着目したインスリン解離における共溶媒和自由エネルギー解析 肥喜里 志門	27
大阪大学 大学院基礎工学研究科	
Development of the data buffer holding time-series data across multiple applications Jingde Zhou	31
Graduate School of Informatics, Kyoto University	
磁気流体シミュレーションによる原始星への質量・磁場降着過程の研究 高棹 真介	37
大阪大学 大学院理学研究科	
瀬戸内海における外洋起源有機物の動態解析 中谷 祐介	41
大阪大学 大学院工学研究科 地球総合工学専攻	
Ab Initio Study of Intramolecular Magnetic Interaction in Photoexcited Rare-earth-based Macrocycle Complexes Anas Santria	45
Graduate School of Science, Osaka University	
心臓大血管手術における術前評価や術者トレーニングに応用可能な3次元臓器形状を得るためのディープラーニングを用いた医療画像セグメンテーションの可能性 白川 岳	51
吹田徳洲会病院 心臓血管外科 大阪大学大学院医学系研究科外科学講座心臓血管外科	
深層学習を用いたスーパーコンポジット電気絶縁材料の創成 嶋川 肇	55
東京大学 大学院工学系研究科	

環状分子と線状高分子から成るポリロタキサンの分子ダイナミクス	59
眞弓 眩一	東京大学 物性研究所
キャビテーション乱流の CFD データベースを用いた データ駆動型キャビテーションモデルの開発に関する研究	63
岡林 希依	大阪大学 大学院工学研究科
表面濡れ性パターンを駆動力とするフラクタル開放型マイクロ流路に おける、液滴輸送・収集の構造機能相関の系統的理	67
甲斐 洋行	東京理科大学 理学部第一部応用物理学科
大規模 CT データ及び読影レポートを用いた疾患異常検出モデルの開発	71
佐藤 淳哉	大阪大学 大学院医学系研究科
The Elucidation of Non-equilibrium States of Heterogenous Catalysis by Data-driven Multiscale Simulation: A Case Study of Methanol Synthesis	75
Harry H. Halim, Ryo Ueda, Yamada Yuki, and Yoshitada Morikawa	
大阪大学 大学院工学研究科	
深層学習による物理モデリング・シミュレーションフレームワークの展開	79
谷口 隆晴	神戸大学 大学院システム情報学研究科 計算科学専攻
進化的アルゴリズムとガウス過程回帰による Ag(111)表面上シリセンの構造探索	83
濱本 雄治	大阪大学 大学院工学研究科 物理学系専攻
センター報告	87
・2022 年度大規模計算機システム利用による研究成果・論文一覧	89
・SC 22 出展報告	107
・第 28 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2022)報告および 第 29 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2023)告知	113
・大規模計算機システム利用者講習会等の紹介	115
・2023 年度大規模計算機システム利用講習会	117
・2022 年度大規模計算機システム利用講習会アンケート集計結果	118
・2023 年度「HPCI(High Performance Computing Infrastructure)利用」の活動状況	126
・2023 年度「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点」の活動状況	127
・2022 年度大規模計算機システム公募型利用制度（追加募集）の活動状況	129
・2023 年度大規模計算機システム公募型利用制度の活動状況	130
・大規模計算機システム Q&A	132

利用規程等	135
・規程関係	137
大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用規程	137
大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用負担額一覧	139
大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム試用制度利用内規	141
・附表	142
大規模計算機システム ホスト一覧	142
スーパーコンピュータSQUID、OCTOPUSのジョブクラス一覧	142
2022年度大規模計算機システム稼働状況	145
募集	147
・大規模計算機システムを利用して行った研究・開発等の記事の募集について	149
・大規模計算機システム利用案内（サービス内容・サービス時間等）	150

—メタバースプラットフォームと科学的可視化—

特 集

デジタルツインプラットフォーム NVIDIA Omniverse による可視化 3
安福 健祐 大阪大学 サイバーメディアセンター

デジタルツインプラットフォーム NVIDIA Omniverse による可視化

安福 健祐

大阪大学 サイバーメディアセンター

1. はじめに

近年、デジタルツインというコンセプトが注目を集めている。デジタルツインは一般的にサイバーフィジカルシステム（CPS）の一つの形態とされ、高度な計測・観測によりフィジカル空間から収集したデジタルデータを基に、物理的な製品やサービスをサイバー空間上で仮想的に複製する。これによって、将来起こり得る様々な事象の予測が可能となり、その活用範囲は、製造業分野、都市・エネルギー分野での DX、自然災害や気候変動のモデリング等に拡大している。

デジタルツインの構成要素は、データ、モデル、インターフェースの 3 つあるといわれる。これらの要素によって、フィジカル空間における状態や動作をサイバー空間においてシミュレーション、予測することが可能となり、フィジカル空間に対して最適解を提供することができる。データの大規模化、モデルの複雑化に対応するためには、高性能計算（HPC）の活用が必須となり、デジタルツインを支える基盤となっている。インターフェースは、デジタルツインとアプリケーション間の接続と相互作用を可能にするもので、可視化が大きな役割を果たす。このようなプラットフォームの一つとして、NVIDIA 社が開発している NVIDIA Omniverse（以下、Omniverse）が挙げられる。Omniverse は、主に産業用のデジタルツインプラットフォームとして利用されており、サイバー空間上でのリアルタイムのデータ共有、フォトリアルな可視化機能をベースに仮想コラボレーションが実現され、その応用範囲は HPC にも及んでいる。

本稿では、デジタルツインプラットフォームとしての Omniverse の解説と HPC への応用、導入について紹介する。

2. Omniverse のシステム構成

Omniverse のシステム構成としては、データ管理を行うための「NVIDIA Omniverse Nucleus（以下、Nucleus）」、サイバー空間で同時編集が可能な「NVIDIA Omniverse USD Composer」（以下、USD Composer）、サイバー空間を閲覧する「NVIDIA Omniverse USD Presenter」（以下、USD Presenter）などのコンポーネントがある（図 1 参照）。なお、Omniverse で遠隔コラボレーションを行うためには Enterprise 版のライセンスが必要となる。

2.1 Nucleus と USD

Nucleus は、多様な形式のデータが扱われるアプリケーション間でシームレスにデータ共有を実現するためのデータベースおよびコラボレーションエンジンである。その中核となる要素として、USD（Universal Scene Description）と呼ばれるデータ形式が挙げられる。USD によって、シミュレーションデータ、可視化用のメッシュデータ、その他のグラフィックスデータ等を一元的に管理することができる。USD は、元々 Pixar Animation Studio という CG アニメーション制作会社が開発したものであり、現在はオープンソースとなっている。

USD のデータ形式は他の汎用の 3D グラフィックスデータフォーマット（例えば、obj や fbx）にはない特長を持つ。一つ目の特長は、様々な種類のデータを一元的に管理し、柔軟に組み合わせてシーンを作ることができる点である。非破壊編集が可能なレイヤーコンポジションシステムによって、3D モデルの形状、色、テクスチャ、アニメーション、シミュレーション結果を組み合わせてシーンが構成される。これにより、レイヤーごとに分かれているファイルに対して異なるユーザーが同時に編集することを可能にする。

二つ目の特長は、スケーラビリティと相互互換性である。USD は CG アニメーション映画のような大規模プロジェクトのデータパイプラインに採用されており、高い効率性と信頼性の実績がある。また多様な 3D-CAD/CG ソフトウェアとも相互互換性を持つため、異なるソフトウェアで作成されたデータを一元的に管理することが可能である。

そして三つ目の特長は、そのパフォーマンスと拡張性である。USD はマルチスレッド処理を活用し、大量のデータを効率的に扱うことができる。また、ユーザーのニーズに合わせてカスタムできる構造を持っており、ファイルフォーマットプラグイン、アセットトリヅルバ、カスタムスキーマなど自由に拡張することができる。

以上のように、USD は大規模なデータを扱う際の一元管理、スケーラビリティ、相互互換性、そして高パフォーマンスと拡張性を持つことから、Omniverse 上での大規模なプロジェクトでのコラボレーションを可能にする。そして、Nucleus は、USD フォーマットのデータを管理するための Omniverse の中核をなすコンポーネントであり、各種の 3D データ、シミュレーションデータ、その他のメタデータを複数のユーザーとアプリケーション間でリアルタイムに同期してバージョン管理までを行う。

2.2 USD Composer と USD Presenter

Omniverse は、USD Composer、USD Presenter と呼ばれるコンポーネントによって、サイバー空間

でリアルタイムにオブジェクトを編集し、フォトリアリストイックなリアルタイムレンダリングを行う。

USD Composer は、主に 3D コンテンツの作成と編集を目的としている。オブジェクトのモデリングと配置から素材（マテリアル）の割り当て、ライティングやカメラの設定など、フィジカル空間に対応したサイバー空間を構築する機能がサポートされる。このとき、USD 形式のデータを Nucleus から直接読み込み、編集し、書き出すことができる。

USD Presenter は、サイバー空間の可視化とその体験の共有を目的としている。NVIDIA の高性能 GPU を最大限に活用することで、大規模なデータセットに対しても、リアルタイムにフォトリアリストイックなレンダリング画像を生成し、ユーザーはサイバー空間を自由に探索することができる。さらに VR 機能にも対応しており、VR ヘッドセットによってサイバー空間を没入体験することで、リアルスケールによるデータの直感的な理解を促す。

USD Composer と USD Presenter によって、複数のユーザーがインタラクティブな操作により、シミュレーション結果や 3D モデルの共同レビューを行い、ステークホルダーとクライアントから、具体的で有益なフィードバックを得て、研究のサイクルを加速させることができると期待される。また、USD Presenter が生成するフォトリアルな画像は AI の学習にも活用されはじめている。

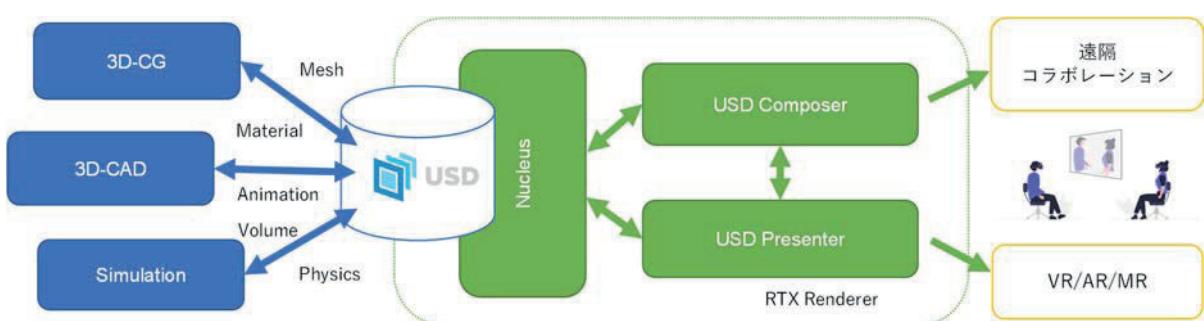


図 1:Omniverse のイメージ

3. Omniverse の HPC 分野への応用

HPC 分野における大規模シミュレーション結果の可視化には、データ量の膨大さと多様性に対応したソフトウェアが求められており、ParaView と呼ばれるオープンソースの可視化ソフトウェアが広く利用されている。Omniverse には、ParaView Connector というプラグインが提供されており、Omniverse と ParaView を連携させることで、既存の ParaView のデータ資産を有効に活用することができる。ParaView Connector によって、ParaView のデータは USD に変換され、Nucleus サーバー上で可視化に必要となるデータの細分化、最適化が行われる。その結果、ParaView よりも大規模なデータセットを高速に可視化することができるとともに、データフォーマットを USD に統一することで、効率的なデータ集約を行うことができる。

USD Composer を利用し、シミュレーションの対象である物体や環境をフォトリアルに構築し、USD Presenter でその結果を 3D アニメーションさせることに加えて、2D の流線やコンターを重ね合わせることで、シミュレーション結果に対する経験的な理解と直感的な把握をサポートする。

ParaView などの可視化ソフトウェアにおいても同様の描写は可能だが、Omniverse の特長である USD によるデータの最適化と、GPU に最適化されたレンダラーにより、大規模データに対しても、インタラクティブ性とフォトリアリスティックな表現を両立できる（図 2 参照）。

さらに、Omniverse は Nucleus サーバーを通じて、地理的に分散した研究者が同じデータにアクセスし、それを可視化、分析、変更することを可能にする。この機能によって、リアルタイムでの遠隔コラボレーションが可能となり、様々な分野の専門家が協働してシミュレーション結果を解釈・分析する作業を効率化するのに役立つ。

以上のように、Omniverse を大規模シミュレーション結果の可視化に活用することで、USD フォーマットによるデータの統一と最適化、GPU を効率的に利用するリアルタイムレンダリングによる直観的な可視化、高度なインタラクティビティ、そしてリアルタイムのコラボレーションなど多くの効果がもたらされる。これらを通じて、Omniverse は大規模シミュレーションデータのより深い理解と広範な共有を実現することが期待される。



図 2 : NVIDIA Omniverse によるシミュレーションデータワークフロー

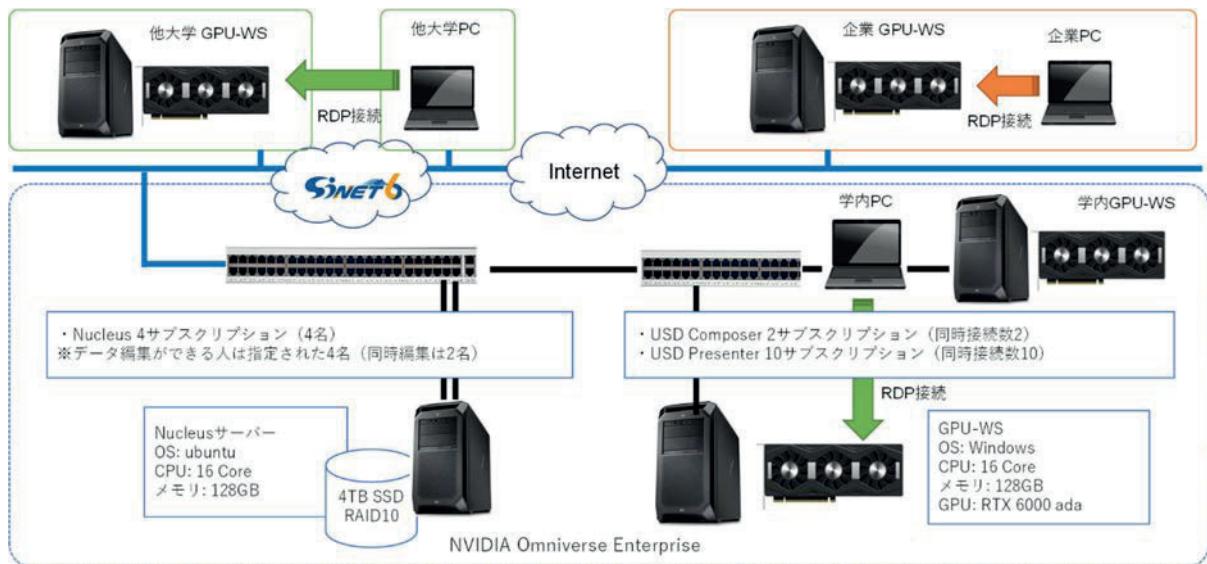


図3：Omniverseのシステム構成

4. 大阪大学サイバーメディアセンターにおけるOmniverseの試験導入

大阪大学のサイバーメディアセンター（以下、CMC）は、「Digital Twin Living Lab. Service の創出」を OU マスタープラン実現加速事業の一部として推進しており、これに関連して、Omniverse システムの試験的な導入を計画している。そのシステム構成を図 3 に示している。システムは主に、Nucleus サーバーと GPU を搭載したワークステーション（GPU-WS）の 2 台で構成されている。

Nucleus サーバーは、3D モデルやシミュレーション結果などの多様なデータを格納するための中心的な要素であり、可視化に必要なすべてのデータをこのサーバー上に集約する。データ管理を一元化し、10GbE への接続により、データへの迅速なアクセスを可能にしている。一方、GPU-WS には、USD Composer と USD Presenter という 2 つのアプリケーションがインストールされており、Nucleus サーバー上のデータの編集や可視化を行うことができる。最新の NVIDIA 製 GPU 「RTX 6000 ada」を使用することで、大量のデータ処理と複雑な 3D モデルのリアルタイムレンダリングが可能である。

また、当システムは学内ネットワークに接続された他の GPU-WS からも、Nucleus サーバーに接続できる。これにより、複数のワークステーション

から同時に編集を行うことが可能である。さらに、GPU を搭載していない PC からでも、リモートデスクトップ接続を通じて GPU-WS にアクセスし、データの編集や閲覧が可能である。これにより、ハードウェアの制約を受けずに、多様な環境からデータにアクセスし活用することが可能となる。今後は、他の大学や企業からのアクセスについても検討を進めていく予定である。

5. おわりに

近年 HPC 分野においても注目されているデジタルツインについて、その可視化プラットフォームとしての Omniverse について解説を行い、CMC で新たに導入予定であるシステムの概要を紹介した。HPC を活用したデジタルツインの可視化について理解する一助となれば幸いである。

最後に、本解説記事の執筆にあたり、プロメテック・ソフトウェア株式会社の皆様の貴重な情報提供に深く感謝する。

参考文献

- (1) 国立研究開発法人科学技術振興機構研究開発戦略センター, “調査報告書デジタルツインに関する国内外の研究開発動向” (2022).
- (2) NVIDIA Omniverse : <https://www.nvidia.com/ja-jp/omniverse/>

大規模計算機システム利用者
研究報告

※「研究報告」では、利用者様が大阪大学サイバーメディアセンターの大規模計算機システムを、どのように利用しているのか報告いただいている。ここでは、大規模計算機システム公募型利用制度採択者からの研究報告を掲載します。

メガテスラ磁気再結合による極超高エネルギー粒子加速の3次元シミュレーション	9
村上 匠且	大阪大学 レーザー科学研究所
大規模比較ゲノム解析による病原細菌の進化と病態発症機構の解明	13
大野 誠之、山口 雅也	大阪大学 大学院歯学研究科
原子核密度汎関数法を用いたエキゾチック原子核における 集団励起モードの系統的記述:回転運動を中心として	17
吉田 賢市	大阪大学 核物理研究センター(RCNP)
ストリングから生成されるアクション暗黒物質のスペクトルの解析	21
齋川 賢一	金沢大学 理工研究域 数物科学系
薬用低分子構造に着目したインスリン解離における共溶媒和自由エネルギー解析	27
肥喜里 志門	大阪大学 大学院基礎工学研究科
Development of the data buffer holding time-series data across multiple applications	31
Jingde Zhou	Graduate School of Informatics, Kyoto University
磁気流体シミュレーションによる原始星への質量・磁場降着過程の研究	37
高棹 真介	大阪大学 大学院理学研究科
瀬戸内海における外洋起源有機物の動態解析	41
中谷 祐介	大阪大学 大学院工学研究科 地球総合工学専攻

Ab Initio Study of Intramolecular Magnetic Interaction in Photoexcited Rare-earth-based Macrocycle Complexes	45
Anas Santria	Graduate School of Science, Osaka University	
心臓大血管手術における術前評価や術者トレーニングに応用可能な3次元臓器形状を得るためのディープラーニングを用いた医療画像セグメンテーションの可能性	51
白川 岳	吹田徳洲会病院 心臓血管外科	
	大阪大学大学院医学系研究科外科学講座心臓血管外科	
深層学習を用いたスーパーコンポジット電気絶縁材料の創成	55
嶋川 肇	東京大学 大学院工学系研究科	
環状分子と線状高分子から成るポリロタキサンの分子ダイナミクス	59
眞弓 翔一	東京大学 物性研究所	
キャビテーション乱流のCFDデータベースを用いた データ駆動型キャビテーションモデルの開発に関する研究	63
岡林 希依	大阪大学 大学院工学研究科	
表面濡れ性パターンを駆動力とするフラクタル開放型マイクロ流路に おける、液滴輸送・収集の構造機能相関の系統的理解	67
甲斐 洋行	東京理科大学 理学部第一部応用物理学科	
大規模CTデータ及び読影レポートを用いた疾患異常検出モデルの開発	71
佐藤 淳哉	大阪大学 大学院医学系研究科	
The Elucidation of Non-equilibrium States of Heterogenous Catalysis by Data-driven Multiscale Simulation: A Case Study of Methanol Synthesis	75
Harry H. Halim, Ryo Ueda, Yamada Yuki, and Yoshitada Morikawa	大阪大学 大学院工学研究科	
深層学習による物理モデリング・シミュレーションフレームワークの展開	79
谷口 隆晴	神戸大学 大学院システム情報学研究科 計算科学専攻	
進化的アルゴリズムとガウス過程回帰によるAg(111)表面上シリセンの構造探索	83
濱本 雄治	大阪大学 大学院工学研究科 物理学系専攻	

メガテスラ磁気再結合による極超高エネルギー 粒子加速の3次元シミュレーション

村上 匡且
大阪大学 レーザー科学研究所

1. はじめに

磁場は近代物理学における最も基本的な概念の一つであると同時に、常に科学技術の最先端を切り開いてきた物理要素でもある。身近な例で磁場強度を比較すると、地磁気は0.3~0.5ガウス、磁気ネックレスは0.1テスラ(=1千ガウス)、病院で使われる磁気断層写真(MRI)やリニアモーターカーでは約1テスラ(=1万ガウス)、将来のエネルギー源である磁場核融合ではキロテスラ(=1千万ガウス)が必要とされる。こうして、高強度磁場を生成させることで医療・エネルギー・産業といった様々な応用が我々の実生活に寄与してきた。過去半世紀以上に渡って様々な方式を使った磁場強度の増強が追求されてきたが、これまで人類が地上で実現した最大の磁場強度は1~2キロテスラでありこの壁を未だ超えるに至っていない。仮に、キロテスラ(kT)を更に2~3桁上回るメガテスラ(MT)の磁場が実証されれば、これまで議論の俎上にさえ載らなかったような量子論効果や宇宙物理の未開拓領域において、実験室での能動的な基礎研究が展開できることになり、基礎科学に及ぼすインパクトは計り知れない。そうした未開拓物理の一つが「磁気リコネクションと粒子加速」であり、本研究における主題でもある。本研究は(1)メガテスラ磁場の生成、(2)磁気リコネクションによる高エネルギー粒子加速、という2つの構成要素からなる。

2. メガテスラ磁場の生成原理

最近提案されたマイクロチューブ爆縮[1]と呼ばれる新たな方法でメガテスラ磁場を生成することができる。直径10ミクロン程度の円筒中空構造の外側からピコ秒程度の短パルス長を持つ

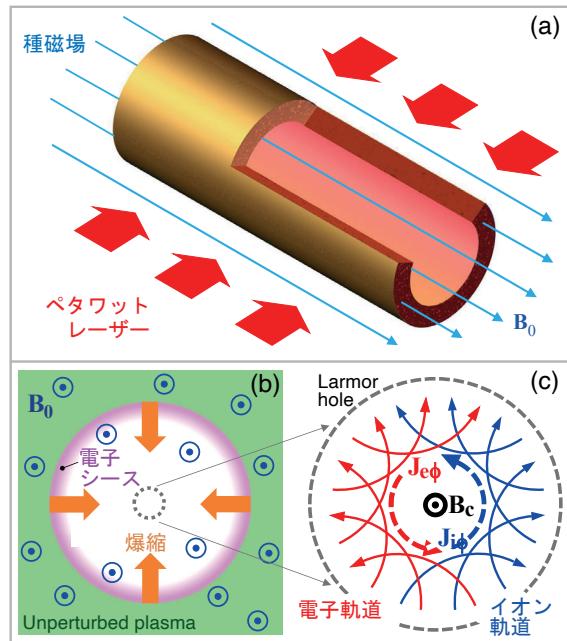


図1：マイクロチューブ爆縮の原理図

超高強度のペタワットレーザーを照射し5~10 MeV程度の高温電子を発生させる。ただし事前にkT程度の種磁場をターゲット内部に染み込ませておく。チューブ内表面のイオンは電子雲と共に円筒軸方向に加速・膨張を開始する。これらのイオン・電子は、ローレンツ力により各々時計方向・反時計方向に偏向を受け、中心部で半時計方向の強力なスピンドラムを形成する。電子はイオンと反対方向の回転運動をするが、互いに逆の符号の電荷を持つため、結局、イオンと電子は「協働」して種磁場を增幅する形で超高強磁場を生成し、中心軸上に生成される磁場はメガテスラのオーダーとなる。

3. 磁気リコネクションによる粒子加速

磁気リコネクション(Magnetic Reconnection)は、磁力線のトポロジカルな変化によって、磁場から

プラズマ内の荷電粒子へのエネルギー変換を可能にする [2]。コロナ質量放出 [3]、太陽フレア [4]、惑星磁気圏の閉鎖 [5]、 γ 線バースト [6]、パルサー風 [7] などのさまざまな天体物理学的プロセスは磁気リコネクションに関連しており、現在、磁気リコネクションは、主に宇宙プラズマにおける荷電粒子の加速メカニズムを説明する物理機構であると考えられている[8]。特に、最近の研究から、相対論的磁気リコネクションによる電子加速が注目されている。

近年、高出力レーザーは、レーザーとプラズマの相互作用を介して相対論的磁気リコネクションを調べるユニークなツールとなっている。CPA 技術 [9] の発明以来、大きな進歩が達成され、最先端のレーザー強度は 10^{22} W/cm^2 を超える [10]。数値シミュレーションは、約 100MG の電界強度を予測し、最近の実験結果では約 10MG が得られている。

一般にレーザー強度と共に磁場強度と荷電粒子エネルギーは増加し相対論的条件に近づく。このような場合、局所磁場の変動は、電子速度の相対論的制約により飽和した電流では維持できなくなる。変位電流からの寄与が重要になり、対応する誘導電界が磁気リコネクション電流シート内の荷電粒子を大幅に加速する。このことは、抵抗 MHD 近似と一般化されたオームの法則を再考する必要があることも意味する。このような磁場の動的消散は、最近の数値的および理論的研究で明確に示されている。これらの研究では、磁場は主に、レーザー場または航跡場によって加速された高エネルギー電子ビームによって形成される。したがって、対応する電流シートは、レーザーの伝播と一緒に移動している。磁気振幅はギガガウスと高いが、荷電粒子と電流シートの対流運動により、磁気リコネクションによって局所プラズマを効率的に加熱することは容易ではない。

4. ペイズリーターゲット

本研究では、無衝突相対論的な磁気リコネクションの配位の生成に、一対のペイズリーターゲッ

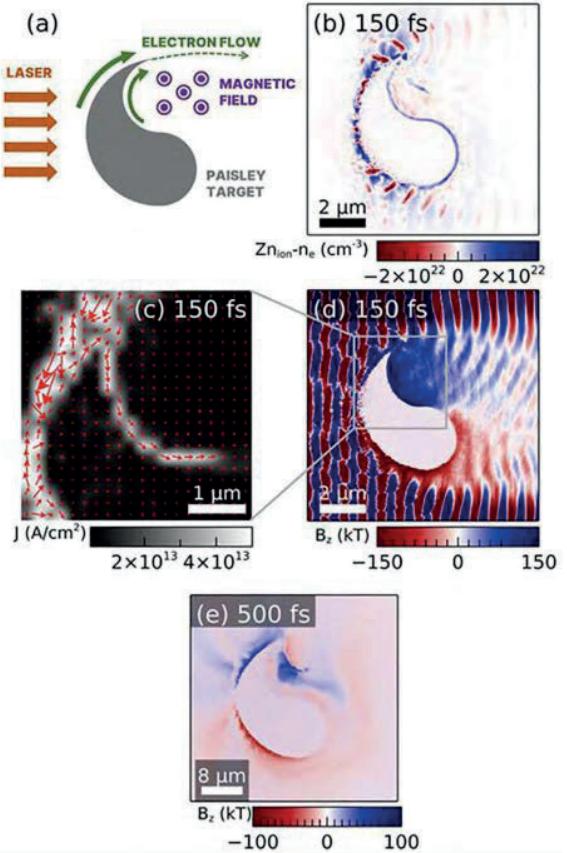


図 2 : ペイズリーターゲットによる強磁場生成

ト[11]とペタワットレーザーの相互作用を利用している。まず単体としてのペイズリーターゲットのパフォーマンスを見てみよう。図 2 に示されるように、表面電流がターゲットの凹面側に磁場を生成し、磁場に簡単にアクセスできるのが特徴である。このオープンスペースにより、系に入ってくる粒子が磁場と相互作用しやすくなる。さらに、後で見るように、2つ以上のペイズリーターゲットをモジュラー方式で接続でき、生成された磁場が互いに相互作用できるようになる。したがって、ペイズリーターゲットは2つ以上の磁場源の相互作用を必要とする実験に適しており、結果として磁気リコネクション、磁気ミラー、およびその他の実験室での天体物理学実験などの磁場現象を研究するための、さまざまな配置設計が可能となるのである。

5. ダブルペイズリーによる磁気リコネクション

図 3 には、対称的に配置した一対のペイズリーターゲットを使うと磁気リコネクションが生成

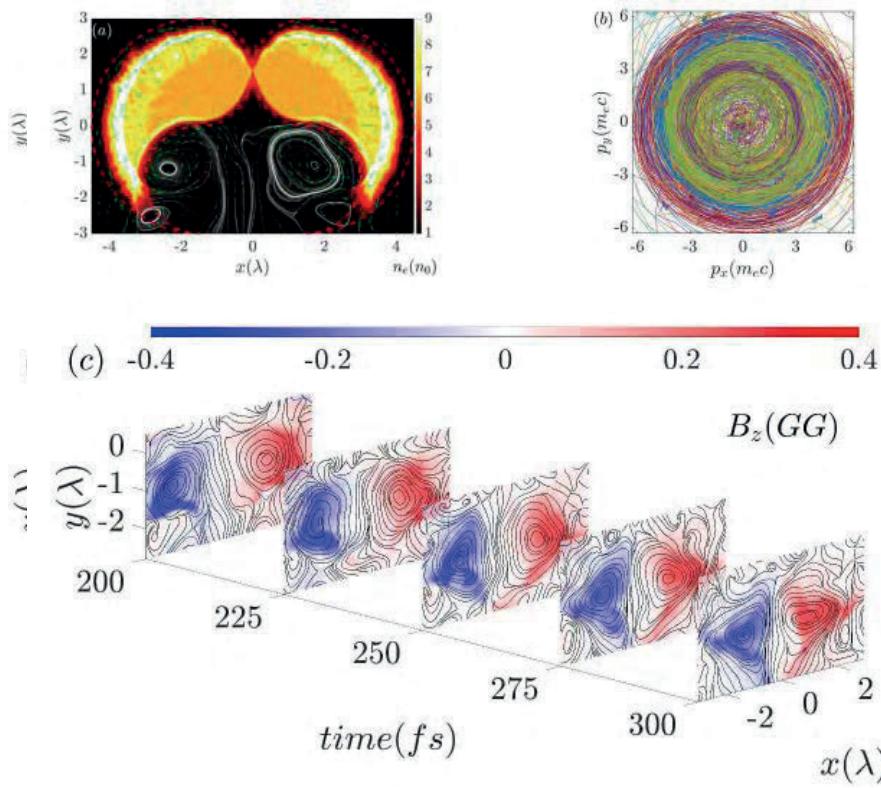


図 3：ダブルペイズリーターゲットによる磁気リコネクション

される状況が示されている。ペイズリーターゲットのそれぞれの裏側に、高強度のレーザーパルスが照射されると、電子の渦度運動により安定した磁場が生成される。レーザーで照射されることにより、ペイズリーターゲットの尾部（厚さが薄くなっている箇所）にある電子は急速に真空に射出される一方で、慣性が大きいために相対的にゆっくりと移動するイオンによって正電荷領域が出現する。この結果、ペイズリーターゲット表面を流れる電流が形成され、2つのペイズリーターゲットで挟まれた空間内に、特に強い静磁場が形成されることになる。

高エネルギーの電子ビームによって発生する磁場とは異なり、ここでは磁場は渦のドリフト速度でゆっくりと移動しているのが観測される。一対のペイズリーパターンのターゲットが向かい合っているため、生成された逆極性の磁場は、磁気圧力と密度勾配によって押されて互いに接近することになる。磁場エネルギーは、再結合プロセスを介して 2 つの渦の中間に圧縮された荷電粒子を加速するために消散する。粒子シミュレーションで得られた結果は、電流シートで加熱され

た電子が 2 つの温度を持つことを示している。これらのシミュレーション結果を解析した結果、低温電子は Sweet-Parker モデルに従って加熱され、高温電子は主に変位電流から成長する誘導電場によって加速されることがわかった。

上記の粒子シミュレーション結果は相対論的粒子コード EPOCH を使って得られた。使用したペイズリーターゲットは、初期の炭素イオン密度は $n_0 = 3 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ 、電離電荷 $Z = +6$ および原子質量数 $A = 12$ である。2 つの直線偏光レーザーパルスが正および負の x 境界から入射し、ターゲットの裏側に照射されている。それぞれのピーク強度は 10^{21} W/cm^2 で、パルス持続時間は 50 fs である。この時の正規化された振幅は $a_0 = eE_L/m_e \omega c \approx 27$ である。ただし、 E_L と ω はレーザー電界強度と周波数、 e と m_e はそれぞれ電子の電荷と質量を表す。また、 c は真空中の光速であり、レーザー波長は $\lambda_L = 1 \mu\text{m}$ を採用した。ターゲットの横方向のサイズは $6 \mu\text{m}$ 未満であるため、ここではレーザースポットは平面波であると想定することができる。シミュレーションボックスのサイズは $10\lambda \times 10\lambda$ 、メッシュ

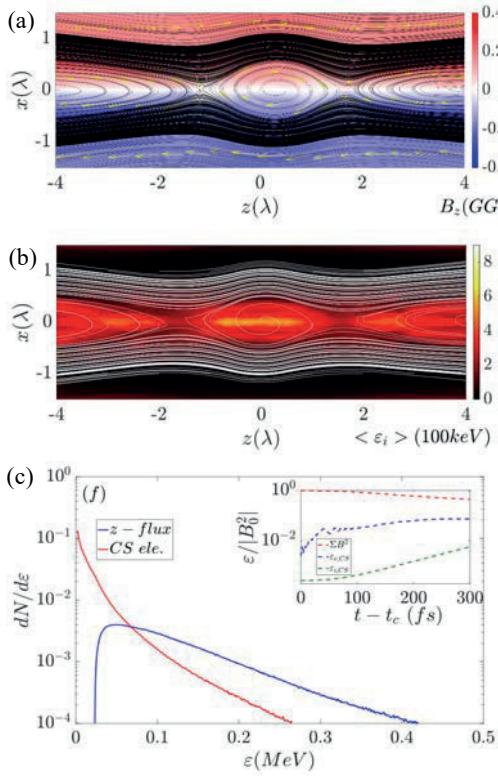


図 4 : 磁気リコネクションによる粒子加速

サイズは $\delta x = \delta y = \lambda / 100$ とした。すべての仮想粒子（セルあたり 370 個）は、初期において静止状態にあり、粒子と場の両方に開放境界条件を適用した。図 4 は磁気リコネクションのダイナミクスを表したもので、(a) はレーザーピーク時の磁場強度分布を、(b) はイオンの運動エネルギー分布を表している。また、(c) は加速電子のエネルギースペクトルを表し、同図内に入れ子状に組み込まれた図表は、磁場と粒子（イオン、電子）のエネルギーの時間発展を表している。

6. おわりに

本報告は、メガテスラ級の超高電磁場をレーザーを使った実験で生成し磁気リコネクションに関する実験提案を行うべく、粒子シミュレーションを使った研究成果をまとめたものである。システムの持つ磁気極性は、ペイズリーターゲットの非対称構造に由来する逆らせん電子渦によって生成されていることがわかった。また、密度勾配と磁気圧力によって、磁気双極子が消滅し、磁力線が中央領域で再結合することもシミュレー

ションから明らかとなった。ここでは、強力な磁場強度と小規模な長さ内での集中的な変動のために、リコネクションプロセスはもはや準定常的にはないものと推察される。ペイズリーターゲットに関して言うと、その形状が正確にペイズリー形状そのものである必要はないことを付記しておく。明らかに非対称な分布を持つ同様のターゲットも、ペイズリーとほぼ同様の磁場を生成することがわかつており、これは換言すると、同ターゲットの安定性を意味している。今回得られた結果は、高出力レーザー施設が相対論的磁気リコネクションの研究において独自の方法を、しかも高いポテンシャルを持って提供できることを示している。これにより、天体物理的観点から系をスケールアップする際に、重要な強磁場中での磁気リコネクションの動的プロセスを、さらに深く理解することが期待される。

参考文献

- (1) M. Murakami et al., *Sci. Rep.* **10**, 16653 (2020).
- (2) V.S. Berezinsky, et al., *Astrophysics of cosmic rays* (North Holland, Amsterdam, Netherlands, 1990)..
- (3) Q. Jiong et al., *Astrophys. J.* **604**, 900 (2004).
- (4) E.N. Parker et al., *J. Geophys. Res.* **62**, 509 (1957).
- (5) B. Coppi et al., *Phys. Rev. Lett.* **16**, 1207 (1966).
- (6) D. Giannios, *Mon. Not. R. Astron. Soc. Lett.* **408**, L46 (2010).
- (7) Y. Lyubarsky et al., *Astrophys. J.* **547**, 437 (2001).
- (8) M. Melzani et al., *Astron. Astrophys.* **570**, A111 (2014).
- (9) D. Strickland et al., *Opt. Commun.* **56**, 219 (1985).
- (10) V. Yanovsky et al., *Opt. Express* **16**, 2109 (2008).
- (11) M-A. H. Zosa et al., *Appl. Phys. Lett.* **120**, 132403 (2022).

大規模比較ゲノム解析による病原細菌の進化と病態発症機構の解明

大野 誠之、山口 雅也

大阪大学 大学院歯学研究科

1. はじめに

化膿レンサ球菌 (*Streptococcus pyogenes*) は健康な小児および成人の上気道や皮膚などに存在する細菌である。咽頭炎や膿痂疹（とびひ）などの非侵襲性感染症の原因菌である、いわゆる溶血性レンサ球菌（溶連菌）である。一方で、壊死性筋膜炎やレンサ球菌性毒素性ショック症候群などの致死的な侵襲性感染症を引き起こし、「人喰いバクテリア」とも呼ばれる。侵襲性感染症の致死率は 23~81%に及ぶことが報告されており、近年日本を含む先進国では侵襲性感染症患者が増加している [1]。しかしながら、ワクチンなど効果的な予防手段が存在しないのが現状である。

化膿レンサ球菌の分類には、病因子である M タンパクをコードする遺伝子の配列に基づく *emm* 分類がなされている。近年、特に *emm89* 型化膿レンサ球菌が侵襲性感染症患者から分離される頻度が高まっている。世界的に侵襲性感染症由来の *emm89* 型株の大部分には、莢膜ヒアルロン酸合成遺伝子群 *hasABC* の欠失と、病因子 NADase およびストレプトトリジン O の発現増加をもたらす *nga-ifs-slo* オペロンのプロモーター領域に生じた変異が検出されている。しかし、少なくとも日本において近年分離された非侵襲性感染症由来株でも同様の変異を有する株の割合が高く、侵襲性感染症特異的な変異ではないことが示唆されている [2]。そこで、侵襲性感染症の発症に関する因子およびワクチン抗原の同定が急務となっている。本研究では、侵襲性感染症の発症機構の解明を目的として、*emm89* 型化膿レンサ球菌の全ゲノム情報から病態に相関する細菌因子の遺伝統計学的探索を行った。

2. 計算方法

2.1 化膿レンサ球菌の全ゲノム情報の収集

国立感染症研究所および全国の公衆衛生研究所等から、日本で 2016 年から 2021 年にかけて分離された *emm89* 型化膿レンサ球菌株など 207 株の分与を受け、次世代シーケンサーにて全ゲノム情報の解読を行った。さらに、すでに NCBI データベース上に公開されている全世界の *emm89* 型化膿レンサ球菌のゲノムデータを、プログラム fasterq-dump v.2.9.6 により SQUID 上にダウンロードした。

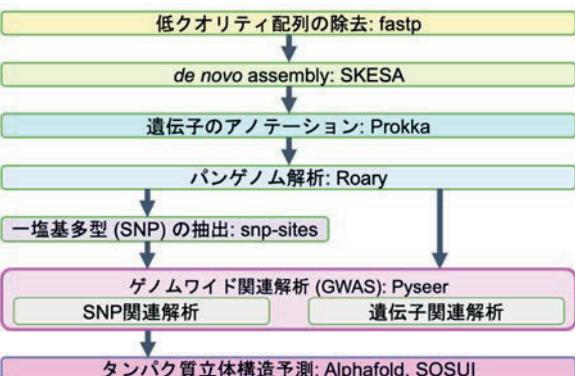


図 1：全ゲノム解析のパイプライン

2.2 パンゲノム解析

全ゲノム解析のために我々が構築したパイプラインを示す (図 1)。収集したすべてのシーケンスデータについて、プログラム fastp v.0.20.1 を用いて低クオリティ配列の除去を行った。本研究で収集した 2016 年から 2021 年にかけて日本で分離された 207 株について、プログラム emm-typing-tool v.0.0.1 を用いて *emm* 型を決定した。*emm89* 型株のシーケンスデータについて、プログラム SKESA v.2.4.0 による *de novo assembly* を実施した。遺伝子のアノテーションは Prokka v.1.14.5 を用いて行った。Prokka による解析で得られた GFF

ファイルに対して、Roary v.3.12.0 を用いてパンゲノム解析を実施した [3]。パンゲノムとは、細菌集団の中に存在する全ての遺伝子を指し、ほぼ全ての株に保存されているコア遺伝子と、一部の集団もしくは菌株特異的に存在するアクセサリ遺伝子に大別される。コア遺伝子群には生存に必須な遺伝子群が含まれている可能性が高く、また全株間で配列比較が可能であるため一塩基多型(SNP)を抽出できる。対してアクセサリ遺伝子には外来遺伝子などが含まれており、遺伝子の存在自体が病態に関連する可能性が考えられる。Roaryによる解析のオプションとして、プログラムMAFFTを用いたコア遺伝子アライメントの出力(-e -mafft)、99%以上の株が保有する遺伝子をコア遺伝子と定義(-cd 99)、および76スレッドの使用(-p 76)をそれぞれ指定して計算を実施した。Roaryを用いたパンゲノム解析によりコア遺伝子群を連結するとともに、全株について多重配列整列させたコア遺伝子アライメントと、全遺伝子の各株における分布を示した行列を得た。さらにコア遺伝子アライメントから、プログラムsnp-sites v.2.5.1およびbcftools v.1.9にて挿入・欠失を含む一塩基多型(single nucleotide polymorphism; SNP)の抽出を行った。

2.3 ゲノムワイド関連解析(GWAS)

侵襲性感染症であるか否かのフェノタイプとジエノタイプとの関連を、ゲノムワイド関連解析(GWAS)により遺伝統計学的に検討した。プログラムPyseer v.1.3.4を用い、SNPもしくは遺伝子の有無をバリアントとしたGWASを実施した[4]。計算にはSNPの情報または遺伝子の分布を示した行列に加えて、各株のフェノタイプの情報、および遺伝学的距離行列の固有値を指定した。固有値は系統によるバイアスの除去のために共変数として追加した。結果はそれぞれR v.4.0.3およびパッケージggplot2を用いて描画した。

2.4 タンパク質立体構造予測

GWASにて有意にフェノタイプと相關する変

異のうち、構造遺伝子領域に存在しアミノ酸の非同義置換を生じる変異を、EMBOSS transeq v.6.6.0.0により検索した。変異がタンパク質の機能に影響するかを検討するため、プログラムAlphaFold v.2.2.2を用いてタンパク質立体構造予測モデルを作製した[5]。複合体の形成が既に報告されている分子、あるいはUniProtによる検索にてそのタンパク質自身の多量体もしくは他のタンパク質との複合体を形成することが予想される分子については複合体の構造予測を行った。各モデルとも5回計算を実行し、最終的にトポロジーの正確度の指標であるipTM+pTMの最大値をとるモデルを採用した。さらに、ウェブツールSOSUIを用いて膜タンパク質であるかの判定および膜貫通領域の予測を実施した。立体構造の描画はソフトウェアPyMOL v.2.5(Schrödinger, LLC., NY, USA)にて行った。

3. 結果

3.1 化膿レンサ球菌の全ゲノム情報の解読

収集した207株の臨床分離株のうち、emm遺伝子型を決定した結果150株がemm89型と判定された。公開されているデータと合わせて、emm89型株では侵襲性感染症由来株が420株、非侵襲性感染症由来株が246株の合計666株の全ゲノム情報が収集された。

3.2 パンゲノム解析

パンゲノム解析の結果、666株のemm89型株より合計4,743遺伝子が検出され、うち1,327遺伝子が99%以上の株が保有するコア遺伝子であった。

3.3 GWAS

GWASの結果、コア遺伝子の90箇所に存在するSNPが有意にフェノタイプと相關した(図2)。RNAメチルトランスフェラーゼをコードすることが推定される遺伝子group_589にはもっとも多い15箇所のSNPが集積していた。また、covS遺伝子には8箇所のSNPがそれぞれ集積していた。

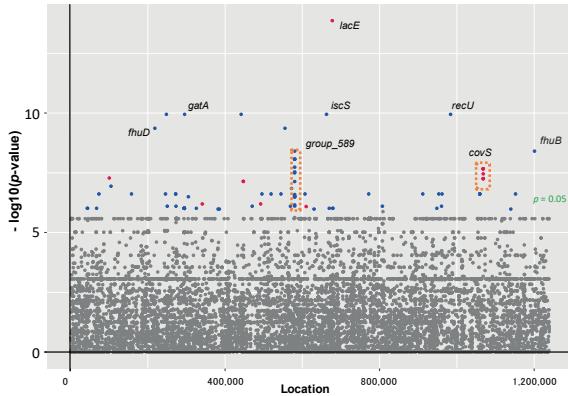


図 2 : SNP に関する GWAS の結果

SNP の集積する遺伝子領域の多くはその塩基配列の多様性が高く、欠失や挿入が存在していた。もっとも p 値が低い SNP は *lacE* 遺伝子に存在した。*lacE* 遺伝子はラクトースやガラクトース代謝に関するホスホリボシルトランスフェラーゼシステム (PTS) を構成する、EIICB コンポーネントをコードする。この SNP により LacE タンパクの 554 番目のアミノ酸がグリシンからバリンに置換される。効果量は 3.47 と正の値を示し、侵襲性により相関することが示唆された。またこの変異は主にアメリカ合衆国で分離された株に認められた (図 2)。

Fe^{3+} -フェリクローム複合体結合タンパク質をコードする *fhuD* 遺伝子およびシデロフォア輸送ペーミアーゼをコードする *fhuB* 遺伝子において有意にフェノタイプと相關した SNP は、それぞれ日本株においてのみ認められる変異であった。各変異により FhuD の 180 番目のアミノ酸がバリンからイソロイシンへ、FhuB の 73 番目のバリンがアラニンに置換された。それぞれ効果量は負の値を示し、両 SNP の存在は非侵襲性に関連することが示された。

侵襲性感染症の発症に関与する遺伝子を特定するため、検出された全 4,743 遺伝子をバリアントとした GWAS を実施した。その結果、140 遺伝子の存在が有意に病態と相關し、そのすべてがコア遺伝子に含まれないアクセサリ遺伝子であった (図 3)。140 遺伝子中、トランスポーターやリコンビナーゼなど可動性遺伝因子に関連する遺伝子群は 14 遺伝子、ファージタンパク質をコードする遺伝子は 25 遺伝子が検出された。

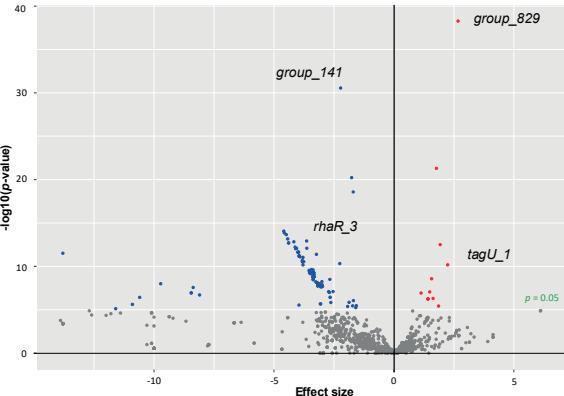


図 3 : 遺伝子に関する GWAS の結果

3.4 タンパク質立体構造解析

fhuB 遺伝子および *fhuD* 遺伝子に存在する SNP は日本においてのみ認められる変異であり、それぞれアミノ酸の置換を起こすことが示唆されたため、AlphaFold による立体構造予測により変異による機能への影響を検討した。

fhuB 遺伝子における SNP である T218C は、FhuB タンパクにおける 73 番目のバリンをアラニンに置換する。FhuADBG は、シデロフォアの一種であり、 Fe^{3+} と錯体を形成してその運搬を担うフェリクロームの取り込みに関与する ATP-binding cassette トランスポーターシステムである [6, 7]。FhuB は細胞膜上に局在し、FhuG とヘテロ二量体を形成してチャネルを構成する。細胞外ではフェリクロームと結合するタンパク質 FhuD からフェリクロームを受け取り、細胞内では ATP 結合活性を有するタンパク質 FhuA と結合する。SOSUI と AlphaFold により、膜貫通領域と立体構造の予測を行ったところ、FhuB および FhuG はそれぞれ 9 回膜貫通型タンパク質であることが示唆された (図 4A)。一般的な ABC トランスポーターでは、FhuA のような ATP 結合タンパク質は 2 分子が会合しているため、FhuA が 2 分子、および FhuD、FhuB、FhuG がそれぞれ 1 分子の五量体として立体構造予測モデルを構築した。その結果、FhuB の 73 番目のアミノ酸残基は細胞外の FhuD と隣接する領域に存在することが示唆された (図 4B、赤矢頭)。SNP によるバリンからアラニンへの置換によって疎水性側鎖が短縮し、分子周囲の疎水性が低下することで FhuD との相互作用が変化する可能性がある。

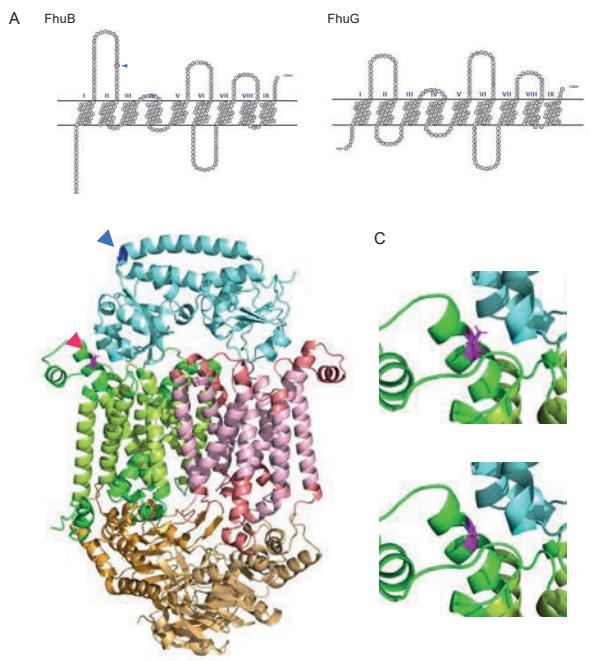


図4：AlphaFoldによるFhuAABDG複合体の立体構造予測

作用が変化し、鉄輸送機能に影響を及ぼす可能性が示された(図4C)。

一方で、*fhuD*遺伝子におけるSNPであるG1661Aは、FhuDタンパクにおける554番目のアミノ酸残基をバリンからイソロイシンに置換する。AlphaFoldによる構造予測から、554番目のアミノ酸残基は活性部位やFhuBとの相互作用が行われる可能性のある部位とは離れたα-ヘリックス中に存在することが示唆された(図4B、青矢頭)。バリンとイソロイシンのいずれも炭化水素側鎖を持つ疎水性アミノ酸であり、変異によるFhuDの構造や機能への影響は極めて小さいものと考えられた。

4. おわりに

本研究では、侵襲性および非侵襲性感染症由来の化膿レンサ球菌の全ゲノム情報を666株分解読・収集し、侵襲性感染症の発症に関与する細菌因子の探索を行った。その結果、コア遺伝子群に存在する90箇所のSNPおよび140遺伝子の存在が病態と有意に関連した。なかでも、日本で分離された株においてのみ存在する*fhuB*遺伝子におけるSNPはアミノ酸の置換を生じ、立体構造予測の結果から鉄輸送機能に影響することが示唆

された。

さらに我々はGWASで得られた病態と相關する変異を導入した、遺伝子変異株の作製を行っており、分子生物学的実験を通して病原性の証明および治療標的としての可能性の検討を行っている。*fhuB*遺伝子におけるSNPを導入した遺伝子変異株は、ヒト血液中における増殖が減弱し、変異と病原性との関連が証明された。今後は他の因子についても同様の解析を実施する予定である。

参考文献

- (1) Walker, M.J. et al., Disease manifestations and pathogenic mechanisms of Group A *Streptococcus*. *Clin Microbiol Rev*, 2014. **27**(2): p. 264-301.
- (2) Hirose, Y. et al., Genetic Characterization of *Streptococcus pyogenes* *emm89* Strains Isolated in Japan. *Infectious Microbes & Diseases*, 2020. **2**(4): p. 160-166.
- (3) Page, A.J. et al., Roary: rapid large-scale prokaryote pan genome analysis. *Bioinformatics*, 2015. **31**(22): p. 3691-3.
- (4) Lees, J.A. et al., pyseer: A comprehensive tool for microbial pangenome-wide association studies. *Bioinformatics*, 2018. **34**(24): p. 4310-4312.
- (5) Jumper, J. et al., Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold. *Nature* 2021 **596**:7873, 2021. **596**(7873): p. 583-589.
- (6) Hanks, T.S. et al., Differential regulation of iron- and manganese-specific MtsABC and heme-specific HtsABC transporters by the metalloregulator MtsR of group A *Streptococcus*. *Infect Immun*, 2006. **74**(9): p. 5132-9.
- (7) Hanks, T.S. et al., ABC transporter FtsABCD of *Streptococcus pyogenes* mediates uptake of ferric ferrichrome. *BMC Microbiology*, 2005. **5**: p. 62-62.

原子核密度汎関数法を用いたエキゾチック原子核における 集団励起モードの系統的記述：回転運動を中心として

吉田 賢市
大阪大学 核物理研究センター(RCNP)

1. はじめに

世界各地で建設中あるいは更新中の Rare Isotopes (RI) ビーム加速器が稼働を開始すると、これまで小さな質量数に限られていた不安定核の実験的研究は質量数の大きな不安定核へと拡大する。特に理研 RI Beam Factory (RIBF) のアップグレードにより質量数 100 以上の中重不安定核に対する実験データが飛躍的に増大する。理論的には、これら広い質量数領域にある 1000–2000 種類の原子核の構造・励起モードを系統的に記述すること、実験を説明するためにモデルの改良を行い原子核に対するより深い理解を得ること、さらに超重核を含む未知の原子核の性質を高信頼度で予言することが求められる。信頼性を高めるためには、核子の自由度を元にした量子多体計算が必要である。数 100 体系のシユレーディンガー方程式を厳密に解くことは未だ不可能であるが、電子系で開発された密度汎関数理論を応用・発展させることで原子核の様々な性質が記述できるようになってきた。

著者らは時間依存原子核密度汎関数法に基づいて集団的な励起モードを記述するための計算手法を開発してきた。中重不安定核の振動モードを記述するためには、弱束縛中性子の空間的広がり・非束縛状態も含めた核子超流動性・核変形の 3 要素を考慮に入れた線型応答計算が必要である。世界に先駆けてそのような計算を遂行し[1]、中性子ドリップ線近傍核に現れる新しい励起モードを予言した[2]。また、大規模並列計算により重い原子核にも適用できることを示した[3]。「京」コンピュータや京大基研・筑波大計算科学センターのスパコンを用いて系統的

計算を遂行することで、阪大 RCNP や理研 RIBF などの実験データの解釈を行ない、原子核の深い理解に大きく貢献してきた[4,5,6,7]。

これまで世界的にも振動型の励起モードが盛んに研究されており、重い不安定核の回転励起モードはほぼ手付かずであった。その理由は、回転運動を記述するためには、空間 3 次元の計算が必要であり、計算コストが高いためである。そこで本研究課題では、空間並列化した基礎方程式を解くことで、世界に先駆けて超重核を含む重い不安定核の回転運動を記述する。

2. 集団回転運動の記述

ここでは、まず密度汎関数理論に基づいて原子核の集団的な回転運動を記述する手法を概説する。

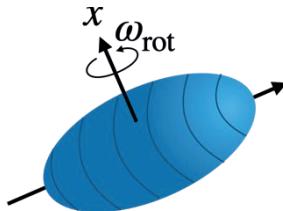


図 1：変形した原子核の集団的な回転運動

超流動状態になることも考慮に入れて、粒子密度とペア密度の汎関数で書かれたエネルギー密度汎関数 $E[\rho, \tilde{\rho}, \tilde{\rho}^*]$ が与えられたとき、それぞれの密度を変分して得られる Kohn-Sham-Bogoliubov-de Gennes (KSBDG) 方程式を解くことで、基底状態を記述する。また、角振動数 ω_{rot} で一様回転する座標系に乗ると、集団的に回転した原子核は止まっているように見える。そこで、有限の核スピン $\langle J_x \rangle$ を持つ拘束条件付きの

KSBdG 方程式を解くことで回転運動を記述する。これは、クランキングの処方として広く用いられてきた回転平均場モデルの密度汎関数法への拡張である。

3. 三次元大規模並列計算

3.1 空間並列対角化

中性子ドリップ線に近い原子核では、弱く束縛された中性子の波動関数は空間的に広がりやすい。さらに、非束縛状態にある中性子も含めた対相関を考慮する必要がある。したがって、従来の調和振動子基底では、不安定核に特有な現象を記述できない可能性がある。そこで、著者は3次元格子上で一粒子（あるいは一準粒子）軌道を表現する座標表示で KSBdG 方程式を解くコードを開発した[8]。座標表示では、KSBdG 方程式を解くことは対称行列の対角化問題に落とし込むことができる。そこで、ScaLAPACK の DSYEVX サブルーチンを使って対角化する。

回転の慣性モーメントは核子の超流動性に敏感であることが知られている。そこで、中性子過剰核も含めて大局的に原子核の対相関を記述できるように開発された YSN 型の pairing エネルギー汎関数[9]を用いる。また、particle-hole チャネルには、原子核変形の記述能力の高い SkM* 汎関数[10]を用いる。

3.2 慣性モーメント

不安定核も含めて、偶々核（中性子数、陽子数ともに偶数の原子核）の 2^+ 状態のエネルギーが精力的に測定されている。核スピン I をもった状態の回転エネルギーは $I(I+1)/2J$ であるから、 2^+ 状態が回転励起によるものであるとすると、慣性モーメントは $J = 3/E(2^+)$ と見積もることができる。またクランキング近似の元では、慣性モーメントは $\lim_{\omega_{\text{rot}} \rightarrow 0} \langle J_x \rangle / \omega_{\text{rot}}$ のように評価できる。

これまで実験的には 657 個の偶々核の 2^+ 状態のエネルギーが測定されている。原子番号が小さい原子核では集団的なモードが現れにくいので、今回の解析では $Z < 10$ の軽い原子核 22 個を除く。

また、球形の原子核では回転運動は起こり得ない。そこで計算された慣性モーメントが 0.1 MeV^{-1} より小さい 273 個の原子核も除くことにする。図 2 には残り 362 個の原子核に対して、計算値と実験値の比を取ったものを分布として示す。多くの原子核に対して、励起 2^+ 状態は一樣回転する集団的回転バンドのメンバーであることがわかる。

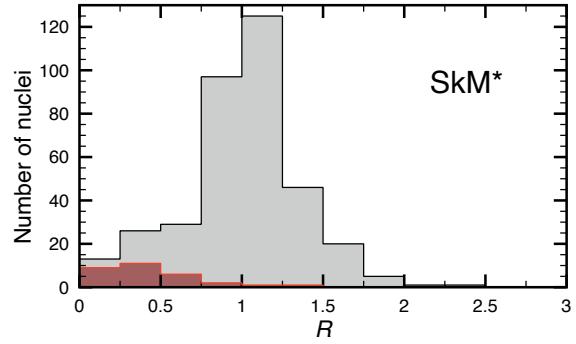


図 2：エネルギー汎関数 SkM*+YSN を用いて得られた慣性モーメントと実験値(362 個)との比

$$R = J_{\text{th}}/J_{\text{exp}}$$

さらに、変形の度合いが小さいとき（長軸が短軸よりも 10% 以下程度長い場合で図 2 中では赤色の部分）では、計算は実験をあまり良く再現しないことがわかった。これは、変形の度合いが強くなるほど回転の描像がよく成り立つことを示している。また実験的にも知られている、変形度とサイズ（質量数）が大きいほど、慣性モーメントも大きくなることが計算で確かめられた。

4. 系統的な計算により予言される不安定核での特異な性質

3 章で述べたように、原子核密度汎関数法の枠組みでのクランキング近似は、ある程度変形の発達した中重原子核に対しては実験データをよく再現することがわかった。そこで、この手法を未知の不安定核に適用し、安定核では見えない新しい性質が現れるかどうかをシミュレーションする。

そこで、陽子ドリップ線から中性子ドリップ線にわたる原子番号 120、中性子数 184 までのおよそ 1700 個の偶々核に対して計算を遂行した。

図 3 に実験値とともにその結果を示す。この図からも、魔法数を持つ原子核およびその周辺では変形が弱いため実験値を過小評価していることが読み取れる。このような変形の弱い原子核では振動的な励起モードが低励起状態として現れるため、クランキングの描像が成り立たない。一方、中性子数 100 程度のランタノイドなど魔法数から離れた開殻の原子核では、計算値は実験値をよく再現していることもみてとれる。

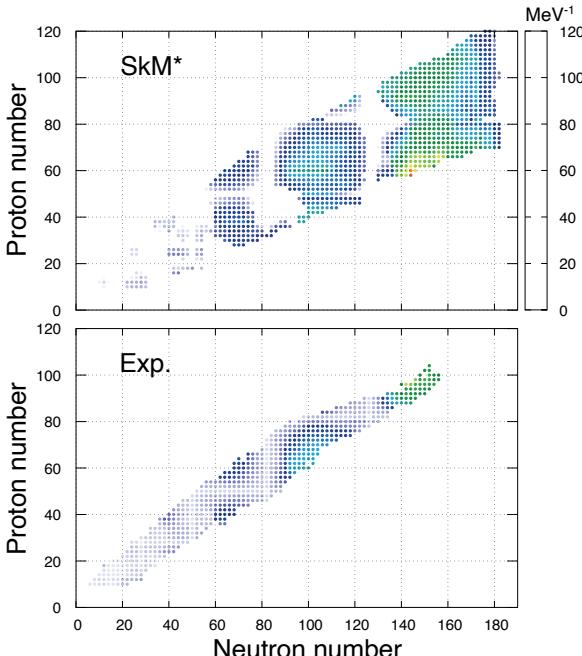


図 3 : 慣性モーメントの計算値と実験値

この計算結果から見られる特徴は、中性子ドリップ線に近いランタノイド原子核の慣性モーメントはアクチノイド原子核のそれと同程度に大きいことである。変形の大きさはどちらも同程度であるが、系のサイズはランタノイドの方がずっと小さい。したがって、中性子過剰なランタノイド核がアクチノイド核と同程度の慣性モーメントを持つことはこれまでの常識、すなわち 3 章で確かめられた安定核に対する回転モードの性質に反する。分析から分かったことは、これら中性子過剰核では対相関が弱くなっていることである。超流動体は回転に寄与すること

ができないため、その成分が高いほど慣性モーメントは古典的な値に比べて減少する。Pairing エネルギー汎関数に含まれるアイソベクトル密度依存性: $\rho_1 = \rho_n - \rho_p$ および変形の殻構造が相乗的に効いて、ドリップ線近傍のランタノイド核では対相関が弱まっていることが分かった。

対照として、アイソベクトル密度依存性を含まない単純な pairing エネルギー汎関数を用いた場合には、中性子ドリップ線近傍では対相関が強いまま、慣性モーメントは大きくならないという結果が得られた。

5. おわりに

一様回転する原子核という描像のもとで密度汎関数法を拡張し、集団的な回転運動が記述できる枠組みを構築した。魔法数近傍の球形および弱く変形した原子核を除いては、慣性モーメントの実験値をよく再現することが示された。また、中性子過剰核や超重核を含む系統的な計算を行ったところ、対相関のアイソスピン依存性や殻構造の効果で、慣性モーメントに特異な振る舞いが現れることが予言された。なお、本課題の詳細は文献[11]で公表されている。

参考文献

- (1) K. Yoshida and N. V. Giai, Phys. Rev. C **78**, 064316 (2008).
- (2) K. Yoshida, Phys. Rev. C **80**, 044324 (2009).
- (3) K. Yoshida and T. Nakatsukasa, Phys. Rev. C **83**, 021304R (2011).
- (4) Y. K. Gupta, et al., Phys. Lett. B **748**, 343 (2015).
- (5) H. Watanabe, et al., Phys. Lett. B **760**, 641 (2016).
- (6) H. Fujita, et al., Phys. Rev. C **100**, 034618 (2019).
- (7) A. Yagi, et al., Phys. Rev. C **105**, 044325 (2022).
- (8) K. Yoshida, Phys. Rev. C **105**, 024313 (2022).
- (9) M. Yamagami, et al., Phys. Rev. C **80**, 064301 (2009).
- (10) J. Bartel, et al., Nucl. Phys. A **386**, 79 (1982).
- (11) K. Yoshida, Phys. Lett. B **834**, 137458 (2022).

ストリングから生成されるアクション暗黒物質のスペクトルの解析

齋川 賢一

金沢大学 理工研究域 数物科学系

1. はじめに

アクションは強い相互作用を記述する量子色力学(QCD)の理論的問題に関連して存在が予言されている素粒子であり、宇宙における暗黒物質の有力候補として近年注目を集めている。アクションは通常の物質と非常に弱くしか相互作用しないため、長年その検出は困難とされてきたが、近年の技術的進歩により、近い将来に実際に検出されることも現実的だと見なされるようになってきている(最近の理論・実験双方の進展を含むアクション研究の総合的レビューとしては、例えば文献[1]に詳しくまとめられている)。

アクション模型では、宇宙初期において Peccei-Quinn 対称性と呼ばれる大域的対称性の自発的破れが起こり、それに伴いストリングと呼ばれるひも状にエネルギーの高い領域が分布するような場の配位が形成されることが知られている。特に、インフレーションと呼ばれる宇宙初期の加速膨張期の後に対称性の破れが起った場合、大量のストリングが生成され、それらから放出されたアクションが現在の宇宙における暗黒物質の主要な成分となる可能性がある。この可能性は 1986 年頃に初めて指摘[2]されて以来、様々なグループにより研究されてきたが、最終的にどの程度の量のアクションがストリングから放出されるかという点についてのコンセンサスは未だに得られておらず、深刻な未解決問題となっている。

アクション暗黒物質の残存量は理論の未知パラメーターであるアクションの質量の関数として書けるので、アクションが現在観測されている暗黒物質の 100%を占めていると仮定すれば、残存量の理論計算の結果と照らし合わせることにより、暗黒物質を説明するのに必要なアクションの

質量を推定することができる。したがって、上記の暗黒物質残存量についての不定性は、アクションの質量予言の不定性に対応づけることができる。図 1 に、最近 10 年程度の間に発表された研究におけるアクション質量の予言値を示す。図に見られるように、予言値はおよそ $10 \mu\text{eV}$ から $10^3 \mu\text{eV}$ の間の値をとるが、より精密な予言を与えるにあたっては研究グループごとに数値計算結果の解釈が食い違っており、これらの論争の解決が喫緊の課題となっている。

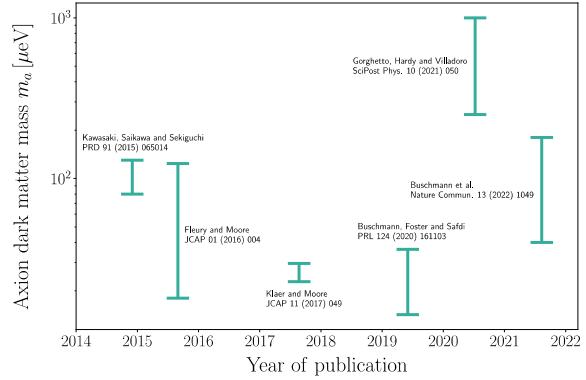


図 1：近年出版された論文[3-5]におけるアクション暗黒物質の質量予言値の推移

このような問題を解決困難にしている要因として、系の発展を正しく記述するにはストリングコアの厚さに対応する極めて微小なスケールと、宇宙の地平線半径(またはストリングの典型的な長さ)に対応する巨大なスケールという 2 つの極端に異なるスケールの物理を同時に考慮しなければならないことが挙げられる。特に、ストリングの「張力」(単位長さあたりのエネルギー)はこれらの 2 つのスケール比の対数に比例することが知られている。現実的な状況ではこれらの比は 10^{30} 程度の数になり、その(自然)対数は 70

程度となるので、現実的なストリングは素朴な見積りに比べて 70 倍程度「重い」ということになる。数値計算では 10^{30} もの大きなスケール比を実現することは不可能なため、小さなスケール比で得られた（非物理的な）結果を大きな対数の場合に外挿しなければならない。このような莫大なスケールにわたる外挿を行う必要があるため、計算結果の僅かな解釈の違いが最終結果に大きな影響を及ぼし得るのである。（以下では簡単のため、このスケール比の対数を「log」と表記する。宇宙の地平線半径は時間と共に増加するので、log の値も時間と共に増加することに注意されたい。）

この問題の解決は容易ではないが、本研究はそのための第一歩として、現時点で利用できる計算資源を最大限に活用したブルートフォースの計算を実施することにより、ストリングから放出されるアクションのスペクトルを特徴づける量の log 依存性を正確に計算し、外挿に伴う不定性がどの程度存在するかを明らかにすることを目的としている。

2. アクションのスペクトル

暗黒物質残存量の計算において最も重要なのは、以下に定義する量（瞬間のエネルギー密度放出率）の形である[6]。

$$\mathcal{F}(x) = \frac{1}{(f_a H)^2} \frac{1}{R^3} \frac{\partial}{\partial t} \left(R^4 \frac{\partial \rho_a}{\partial k} \right)$$

ここで、 ρ_a はアクションのエネルギー密度、 k は共動運動量、 R は宇宙のスケール因子、 t は時間、 H はハップルパラメーター、 f_a は対称性の破れのスケールを表す。この量は物理的な運動量とハップルパラメーターの比 $x = k/(RH)$ の関数であり、単位時間あたり x でラベルされる運動量のモードがどの程度放出されるかを表すものである（典型的なスケール $(f_a H)^2$ で割ることにより無次元量に換算している）。

先行研究[4-6]において、 $\mathcal{F}(x)$ は地平線半径に相当するスケール $k \sim RH$ とストリングコアに相当するスケール $k \sim R f_a$ にそれぞれ赤外/紫外

カットオフを持ち、それらの間では単純な幕乗則 $\mathcal{F} \propto x^{-q}$ で良く記述できることが示されている。ここで q は幕を表す正の実数である。図 2 に、幕乗則を用いて解析的に求めたストリング起源のアクションの数密度 n_a を q の関数としてプロットしたものを示す。図 2 に見られるように、 $q = 1$ を境としてアクション生成量が大きく変わっている。 $q > 1$ はスペクトルが赤外側に傾き、エネルギーの低いアクションが大量に生成される状況に対応し、逆に $q < 1$ は高エネルギーのアクションが多く生成されるためアクションの総数自体は少なくなる状況に対応する。このように、スペクトルの傾き q はアクション生成量の見積りに大きな影響を与える重要な測定量であり、大きな log へ数値計算結果を外挿した時に q がどのような値をとるかという点を注意深く調べる必要がある。

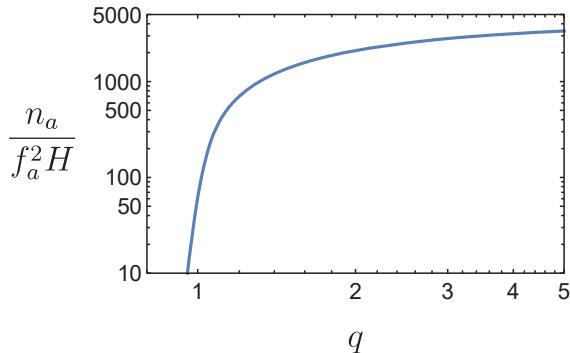


図 2 : $\log = 70$ におけるアクションの数密度（と典型的な値 $f_a^2 H$ との比）のアクション放出率の幕 q に対する依存性

3. シミュレーションとスペクトルの解析

初期宇宙におけるストリングの発展及びアクション放出は、対称性の破れを担う複素スカラーフィールド（Peccei-Quinn 場） ϕ の古典的運動方程式

$$\partial_\tau^2 \phi - \nabla^2 \phi + \lambda \phi (|\phi|^2 - \tau^2) = 0$$

を解くことにより調べられる。ここで τ は共形時間、 λ は結合定数である。本研究では、3 次元空間を有限の間隔を持った格子に分け、格子上に場の値を定義することにより、上記の運動方程式

を数値的に解く手法を用いる。実際の計算では最大で 256 ノードを利用した MPI 並列計算を行うことにより格子点数 11264^3 での大規模シミュレーションを実現し、 $\log = 9$ 程度までスペクトルの時間発展を測定した。

複素スカラー場を $\phi = \rho e^{i\theta}$ と書いたとき、アクション場はその位相方向の自由度 θ に対応する。シミュレーションでは各時間ステップ毎に $\phi(x)$ とその時間微分の空間配位の情報が得られるので、そこから θ の時間微分に相当する量を構成し、そのフーリエ変換からアクションのスペクトルを以下のように計算することができる。

$$\frac{1}{f_a^2} \frac{\partial \rho_a}{\partial k} = \frac{k^2}{2\pi^2 L^3} \int \frac{d\Omega_k}{4\pi} |\tilde{\theta}(k)|^2$$

ここで、 L^3 はシミュレーションボックスの共動座標系での体積、 $\int d\Omega_k$ はフーリエ空間における立体角積分を表す。シミュレーションを実行すると上記の手続きによって適当な時間ステップ毎にアクションのスペクトルが計算され、1 次元配列データとして出力される。そうして得られたスペクトルのデータの時間微分を計算することにより $\mathcal{F}(x)$ を求め、それを幂乗則 x^{-q} にフィットすることにより、 q が \log に対してどのように変化していくかを調べた。

図 3 に、エネルギー密度放出率 $\mathcal{F}(x)$ の計算結果を示す。図に見られるように、 \log を大きくしていくと $\mathcal{F}(x)$ はより右肩下がりになっていく、 q に増加傾向があることが確認できる。ただし、 \log が大きいところでは離散化エラーの影響が無視できないように見える。例えば図 3 の $\log = 7, 8, 9$ でのプロットを見ると、スペクトルの右端に別の鋭いピークが現れている。これらは、 \log の大きなところでストリングの分解能が悪くなるために起こる非物理的なノイズであると考えられる。

ストリングの分解能は、格子間隔 a とストリングコアの厚さ m_r^{-1} との比 $m_r a$ で表すことができる ($m_r = \sqrt{2\lambda} f_a$ は場 ϕ の動径方向の自由度の質量に相当する)。物理的な格子間隔は宇

宙膨張と共にスケール因子に比例して大きくなるので、 $m_r a$ は時間と共に増加する量であることに注意が必要である。すなわち、格子間隔は時間と共に大きくなるのに対し、ストリングコ

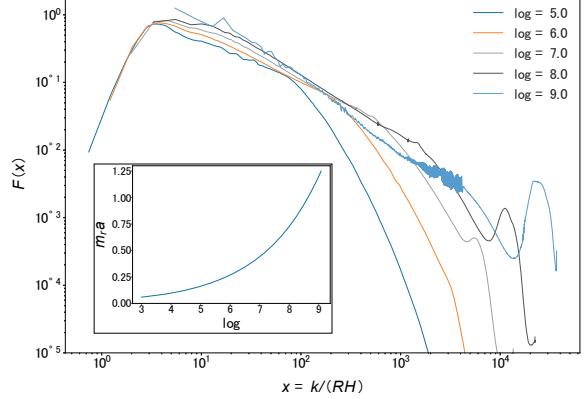


図 3：様々な \log で計算されたアクションのエネルギー密度放出率、およびシミュレーションにおけるストリングの分解能 $m_r a$ の時間変化

アの物理的な厚さは一定なので、シミュレーションを進めるとストリングの分解能は次第に悪くなっていく。図 3 には、 $m_r a$ を \log の関数としてプロットしたものも示してある。 $\log = 7$ 以下では $m_r a < 0.5$ となりストリングコアの厚さは格子 2 個以上で良くフォローされているが、シミュレーションの最後の $\log = 9$ 付近では $m_r a$ が 1 を超えており、コアの分解能が悪く離散化エラーの影響が大きいと考えられる。

図 3 に見られるように、離散化エラーの影響はスペクトルを歪ませ、本来低波数のアクションとして放出されるべきものが極めて高い波数のものとして放出されている。このため、 \log の大きいところではスペクトルの傾き q が過大評価されている可能性がある。この影響を詳しく見るため、格子点数 3072^3 で m_r に相当するパラメターを変えながら低分解能のストリングのシミュレーションを実行し、計算結果を比較した。その結果得られた q の \log 依存性のプロットを図 4 に示す。図に示されたように、低分解能のシミュレーションでは離散化エラーの影響がさらに大きく、 $m_r a$ が大きいところで q が非常に大きな値

をとっている。

離散化による影響を取り除くため、 q の測定値を以下のようなモデル関数でフィットした。

$$q = q_{\text{model}}(\log) + q_{\text{disc}}(\log, m_r, a)$$

ここで、 q_{model} は連続極限のモデル (\log の任意関数)、 q_{disc} は離散化の影響を表す項で \log の他に m_r, a に依り、 $m_r a$ が大きいほど値が大きくなり、 $m_r a \rightarrow 0$ の極限でゼロになるような関数を選んである。そのような関数でデータをフィットした後、 q_{disc} を除いた部分をプロットしたもののが図 4 に示す。このようにして離散化の影響を除くと、 $\log = 9$ における q の値は $q \approx 1$ またはそれよりやや小さい値となった。

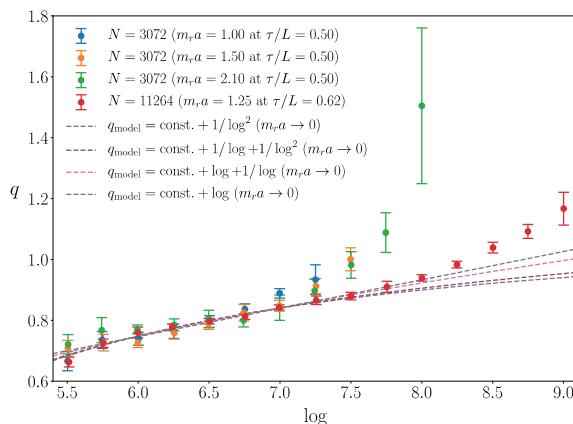


図 4 : q の測定値と連続極限のモデル

最後に、フィットしたモデル関数を用いて \log の大きい場合への外挿を行った。データに良くフィットしたモデルとしては、 q が \log に比例して単調増加するものと、 \log 依存性が $1/\log^2$ のように消えていく定数に漸近するものの 2 通りがあった。図 4 に示した範囲では両者の違いは僅かだが、 \log が大きくなるとそれらの違いが大きく現れてくると予想できる。 $\log = 70$ へ外挿した場合、モデルの違いにより q のとり得る範囲は $1 \leq q \leq 7$ となった。この範囲を暗黒物質残存量の不定性に換算し、それを観測された暗黒物質の存在量と比較すれば、現時点でのアクションの質量予言の不定性を算出することができる。そのような質量予言値の最終結果は、上記の解析内容の

詳細と合わせて、近いうちに論文として発表し、プレプリントサーバー (arXiv) に公開する予定である。

4. おわりに

本研究では、大規模計算を用いて $\log = 9$ 程度までアクション放出率の幕指数 q を測定したが、 $\log = 8-9$ 付近では離散化エラーの影響が大きく、 q が過大評価され得ることがわかった。このため、暗黒物質残存量の見積もりには依然として数値計算結果の外挿に伴う不定性が存在すると言える。一方、奇しくも現在の計算資源で到達可能な \log の範囲において、 q の値は図 2 に示した暗黒物質残存量の見積りを大きく変えるか否かのクリティカルな値である $q = 1$ 付近の値を示している。現時点では $q \approx 1$ 付近に漸近する可能性と $q > 1$ へ増加し続ける可能性の両方が残されているので、今後はよりストリングの分解能を上げて離散化エラーを抑えるようなシミュレーションを行い、これらを峻別していくことが重要である。限られた計算資源の中でそのような計算を行うためには、本研究で用いた一様一定な格子による方法に代わり、ストリングコアの周辺のみ動的に格子を細かく配置する[5]などの新しいシミュレーション手法を取り入れていく必要があると考えられる。

参考文献

- (1) L. Di Luzio, et al., *Phys. Rept.* **870** (2020) 1
[arXiv:2003.01100].
- (2) R. L. Davis, *Phys. Lett. B* **180** (1986) 225.
- (3) M. Kawasaki, K. Saikawa and T. Sekiguchi, *Phys. Rev. D* **91** (2015) 065014
[arXiv:1412.0789]; L. Fleury and G. D. Moore, *JCAP* **01** (2016) 004 [arXiv:1509.00026]; V. B. Klaer and G. D. Moore, *JCAP* **11** (2017) 049
[arXiv:1708.07521]; M. Buschmann, J. W. Foster and B. R. Safdi, *Phys. Rev. Lett.* **124** (2020) 161103 [arXiv:1906.00967].

- (4) M. Gorgetto, E. Hardy and G. Villadoro,
SciPost Phys. **10** (2021) no.2, 050
[arXiv:2007.04990].
- (5) M. Buschmann, *et al.*, *Nature Commun.* **13**
(2022) no.1, 1049 [arXiv:2108.05368].
- (6) M. Gorgetto, E. Hardy and G. Villadoro, *JHEP*
07 (2018) 151 [arXiv:1806.04677].

薬用低分子構造に着目したインスリン解離における 共溶媒和自由エネルギー解析

肥喜里 志門

大阪大学 大学院基礎工学研究科 (現所属: 立命館大学生命科学部生命情報学科)

1. はじめに

生体分子の自己組織化過程(タンパク質の折り畳み、会合、凝集及びタンパク質による低分子認識等)を理論的に解析する方法が求められている。特にタンパク質-リガンド結合に伴う自由エネルギー変化(結合自由エネルギー)は、結合親和性の指標であり、創薬の現場でも用いられ、重要な熱力学量である事は論を俟たない。系を全原子レベルで取り扱った分子動力学シミュレーション(以降 MD とする)を用いてこの熱力学量を計算する際、着目する分子(水溶性タンパク質、膜タンパク質及びこれらに結合する低分子等)の周りを囲む溶媒として、水分子や脂質二重膜分子のみが考慮されることが多い[1]。一方で、生体内(または試験管内)は多種多様な分子が入り乱れる空間であり、水分子や脂質二重膜以外の分子(共溶媒分子)も自己組織化過程に影響を与える[2]。

実験における創薬研究の一例として、インスリン速効化のために、添加分子に着目した超速効化インスリン製剤の開発が試みられている[3]。一方で、この様な添加剤によるインスリン解離への理論的な知識の蓄積が少ないので現状であり、共溶媒添加効果を取り入れた結合自由エネルギー計算が求められる。

本研究では生体分子の自己組織化過程の内、ペプチド解離に着目し、具体的な対象としてインスリン2量体の解離を取り扱った。自由エネルギー計算を実施し、共溶媒分子添加による影響及びその物理起源を求める目的とした。共溶媒分子添加前後で異なるのは溶媒環境であり、重要な鍵を握るのは溶媒和自由エネルギー(SFE)である。純水中における SFE 計算であれば、積分方程式理論と形態熱力学的アプローチを駆使した高速かつ正確な計算法がある[4]。しかしながら、この手法は水以外の溶媒分子を取り扱うのが難しいため、他の SFE 計算法を必要とした。よって現実的な時間で共溶媒分子存在下での正確な SFE 計算を可能とするエネルギー表示法(ER 法)[5]を採用した。

2. 計算方法

インスリン2量体(PDB ID: 2JV1)及び単体(PDB ID: 5BTS)の構造サンプリング MD 計算を水分子 40000 個からなる純水中にて実行した。水モデルには SPC/E を使用し、インスリンの力場には AMBER99SB を使用した。GROMACS 2019.5 を用いて、系のエネルギーミニマイズの後、温度 298.15 K 及び圧力 1.0 bar の NPT 条件下で平衡化 MD を実行し、その後 100ns のプロダクション MD を行い 2 ns 毎の溶質構造(構造数 50)をサンプリングした。

次に ER 法[5]における SFE 計算を実施した。この計算において、溶媒のみの系(Refs 系)及び溶質と溶媒からなる系(Soln 系)の溶媒構造の MD サンプリングが必要である。この MD はいずれも NVT 条件下で 5 ns 実施した。Refs 系は純水系及び濃度 1M の共溶媒水溶液系についての MD 計算、Soln 系においてはインスリン2量体及び単量体の構造サンプリング MD 計算により得た溶質構造を固定し、溶媒分子のみを動かす MD を実施した。対象とする共溶媒分子は小さく基本的な構造を持つメタノール、エタノール、フェノール、エチレングリコール、尿素、トリメチルアミン-N-オキシド、薬用低分子構造を持つベンゾニトリル、ベンズアミド、アセトアミノフェン及びサリチルアミドを検討対象とした。これらの共溶媒分子の力場には GAFF を適用した。MD 計算により得た Soln 系及び Ref 系の MD トラジェクトリーを用いて SFE 計算を行った。この SFE 計算では MD を用いるため溶媒分子の初期配置依存性が生じることから、1 溶質構造に対して 4 回実施した。純水中及び 1M 共溶媒での溶質構造を固定して SFE 計算を実施している。よって両溶媒中での溶質構造が共通であるため、結合に伴う溶質の構造エネルギーや膨大なサンプリング MD を必要とする溶質構造エントロピー[6]の変化の差がゼロとなる。よって、両者の溶媒中での結合自由エネルギーの差を、結合に伴う SFE 変化(ΔSFE)の差($\Delta \Delta SFE$)により評価した。

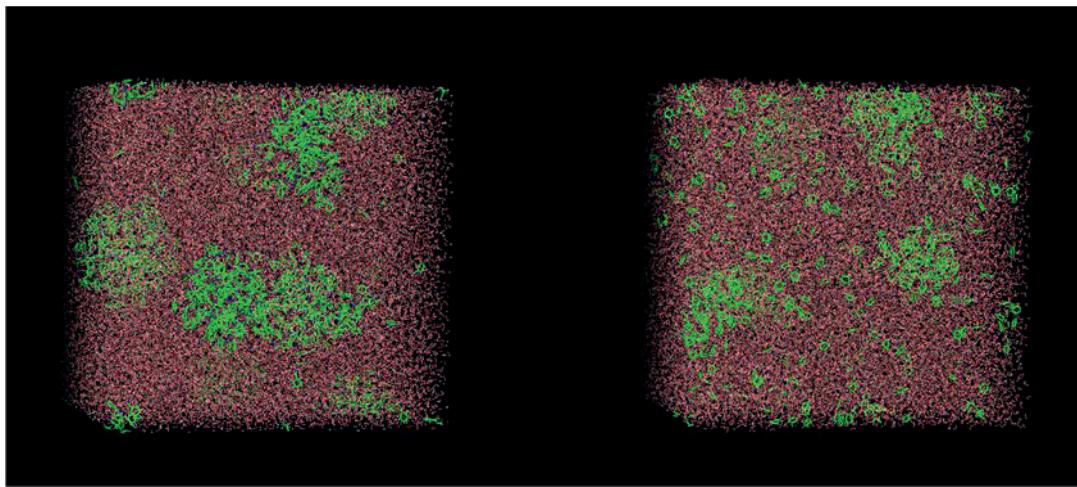


図1. 水分子-1M共溶媒分子系における共溶媒分子の凝集度合い。構造はいずれも5ns後のMD構造である。左がベンゾニトリルの場合であり、右がフェノールにおける溶媒構造。アセトアミノフェンにおいては強い凝集が存在、フェノールにおいても部分的に凝集構造が存在するが分散している分子も存在。

3. 計算結果

今回検討した共溶媒水溶液の内、メタノール、エタノール、フェノール、エチレングリコール、尿素、トリメチルアミン-N-オキシドについてSFE計算までの計算を実施し、薬用低分子構造を持つベンゾニトリル、ベンズアミド、アセトアミノフェン及びサリチルアミドについてはRefs系のMD計算5nsまでを行い、SFE計算を実施しなかった。その理由は図1に示す通り、これら薬用低分子は水中で強く凝集してしまうため、SFE計算における溶媒構造の依存性が強く生じると判断されたためである。よって、メタノール、エタノール、フェノール(ただし部分的な凝集は存在(図1))、エチレングリコール、

表1. インスリン二量体と単量体のSFE及び $\Delta\Delta SFE$ の計算値。単位はいずれもkcal/mol。UREA, MOH, EOH, PHE, EGL及びTMAOはそれぞれ尿素、メタノール、エタノール、フェノール、エチレングリコール、トリメチルアミン-N-オキシドを意味する。

	SFE二量体	SFE単体	$\Delta\Delta SFE$
純水中	-879.01±1.78	-582.74±2.02	
UREA	-878.23±1.77	-585.80±2.04	6.89±0.48
MOH	-889.68±1.78	-587.95±2.01	-0.24±0.44
EOH	-902.33±1.79	-593.84±2.02	-1.11±0.47
PHE	-960.97±1.83	-622.42±2.03	-2.59±0.684
EGL	-911.18±1.78	-600.48±2.03	3.31±0.45
TMAO	-909.33±1.77	-599.19±2.03	2.58±0.46

尿素、トリメチルアミン-N-オキシドについての結果について示す。

SFE計算値の95%誤差が二量体及び单量体において、5kcal/molを下回っており、どの共溶媒分子においても、概ね収束した値が得られている(表1)。また、 $\Delta\Delta SFE$ 計算の結果、尿素、エチレングリコール及びトリメチルアミン-N-オキシド水溶液中においてインスリン解離が促進され、エタノール及びフェノールにおいて解離阻害されることが示唆された(表1)。メタノールに関しては計算誤差の観点から純水中と解離の程度は変わらないと判断される。解離の促進及び阻害の起源を求めるため、駆動及び阻害力を特定するため、SFEを溶質-溶媒相互作用項(SFE_{UV})と溶媒再配向項(SFE_{VV})に分割し、結合に伴

表2. $\Delta\Delta SFE$, $\Delta\Delta SFE_{UV}$ 及び $\Delta\Delta SFE_{VV}$ の計算値。単位はいずれもkcal/mol。UREA, MOH, EOH, PHE, EGL及びTMAOはそれぞれ尿素、メタノール、エタノール、フェノール、エチレングリコール、トリメチルアミン-N-オキシドを意味する。

	$\Delta\Delta SFE$	$\Delta\Delta SFE_{UV}$	$\Delta\Delta SFE_{VV}$
UREA	6.89±0.48	16.82±0.85	-9.92±0.58
MOH	-0.24±0.44	-0.22±0.70	-0.01±0.45
EOH	-1.11±0.47	-1.85±0.72	0.73±0.48
PHE	-2.59±0.684	-5.44±1.20	2.85±0.79
EGL	3.31±0.45	5.66±0.19	-2.34±0.47
TMAO	2.58±0.46	1.57±0.70	1.00±0.59

うこれらの変化の純水中からの差($\Delta\Delta SFE_{UV}$ 及び $\Delta\Delta SFE_{VV}$)を求めた(表 2)。全体として $\Delta\Delta SFE$ の符号と $\Delta\Delta SFE_{UV}$ が同じで強い相関であり、対する $\Delta\Delta SFE_{UV}$ では逆である傾向である傾向が強く、各共溶媒の特徴的な効果を弱めることが示唆される。さらに、 $\Delta\Delta SFE_{UV}$ を静電項($\Delta\Delta SFE_{UV,elec}$)及び非静電項($\Delta\Delta SFE_{UV,noelec}$)へと分割すると(表 3)、どの共溶媒に関しても非静電項が解離促進、静電項が解離阻害に寄与しており、その打ち消し合いの程度により共溶媒添加効果の特徴が生まれていることが示された。

表 3. $\Delta\Delta SFE_{UV}$, $\Delta\Delta SFE_{UV,noelec}$ 及び $\Delta\Delta SFE_{UV,elec}$ の計算値。単位はいずれも kcal/mol.UREA, MOH, EOH, PHE, EGL 及び TMAO はそれぞれ尿素, メタノール, エタノール, フェノール, エチレンジリコール, トリメチルアミン-N-オキシドを意味する。

	$\Delta\Delta SFE_{UV}$	$\Delta\Delta SFE_{UV,noelec}$	$\Delta\Delta SFE_{UV,elec}$
UREA	16.82±0.85	17.97±0.88	-1.14±0.72
MOH	-0.22±0.70	4.10±0.34	-4.33±0.83
EOH	-1.85±0.72	8.51±0.50	-10.36±0.96
PHE	-5.44±1.20	30.01±1.21	-35.46±1.97
EGL	5.66±0.19	10.40±0.59	-4.74±0.73
TMAO	1.57±0.70	8.59±0.53	-7.01±0.84

4. 今後の展望

本課題研究において、小さく基本的な構造を持つ低分子及び薬用低分子の構造を持つものを共溶媒分子としてインスリン2量体解離における共溶媒和自由エネルギー解析を実施した。前者の低分子群においては、解析を実施することで共通の物理起源を得ることができた。その一方で後者の低分子群においては凝集が起こることから SFE 計算における溶媒構造の依存性が強く生じることが示唆された。今回は共溶媒分子の濃度を 1M に固定して検討をおこなっており、今後より低濃度の共溶媒条件下での検討を行うことで、凝集の問題が解決されると期待される。

参考文献

- [1]: T. Yamada, T. Hayashi, S. Hikiri, N. Kobayashi, H. Yanagawa, M. Ikeguchi, M. Katahira, T. Nagata and M. Kinoshita *J. Chem. Inf. Model.*, **59**, 8, 3533–3544, (2019).
- [2]: L. Stepanian, I. Son, and T. V. Chalikian *Biophys. Chem.*, **231**, 15–19, (2017).
- [3]: Mann *et al.*, *Sci. Transl. Med.*, **12**, eaba6676 (2020).
- [4]: S. Hikiri, T. Hayashi, M. Inoue, T. Ekimoto, M. Ikeguchi, M. Kinoshita. *J. Chem. Phys.*, **150**, 175101, (2019).
- [5]: S. Sakuraba; Matubayasi *J. Comput. Chem.*, **35**, 1592–1608, (2014).
- [6]: S. Hikiri, T. Yoshidome and M. Ikeguchi *J. Chem. Theory Comput.*, 12, 5990–6000, (2016).

Development of the data buffer holding time-series data across multiple applications

Jingde Zhou

Graduate School of Informatics, Kyoto University

1. Introduction

Cross-reference simulation is a calculation model combining multiple parallel simulation codes when some simulation codes need to read the data calculated by other simulation codes to do their own calculation. The data communication between different simulation codes is the most important part of a cross-reference simulation. In many research fields, cross-reference simulation is used to study complicated phenomena involving multiple simulations which may have substantial differences in the spatial and temporal scales.

To execute cross-reference simulation efficiently, a cross-reference simulation framework called Code-To-Code-Adapter (CoToCoA)^[1] is being developed based on Message Passing Interface (MPI)^[2]. CoToCoA is a framework to connect a requester application to multiple worker applications through a coupler application. CoToCoA can be used to execute cross-reference simulation in an efficient and smooth way called strong cross-reference simulation. Different from other cross-reference simulation frameworks like preCICE^[3], CoToCoA mainly focuses on the data communication between different simulation codes. The user only needs to add minimal modifications to the simulation codes to implement the data communication when other couplers may require several sophisticated settings. Therefore, CoToCoA users can easily couple the simulation

codes which are developed by other developers.

There is one main simulation code in many cross-reference simulations. To keep the efficiency and stability of the whole cross-reference simulation, the main simulation code's overhead brought by data communication should be as little as possible. One-sided communication is a technology that allows one process to read or write the memory of another process without its response. In CoToCoA, MPI Remote Memory Access (RMA) is used to implement one-sided communication. With MPI RMA, other simulation codes (usually executed as the workers) can directly read the data calculated by the main simulation code (usually executed as the requester). Then the main simulation code's overhead comes to a minimal level.

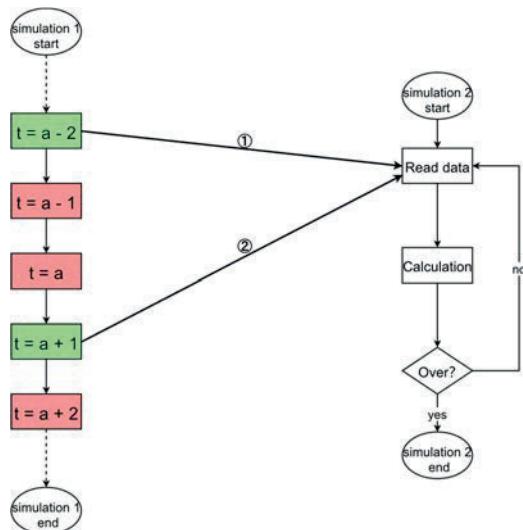


Fig. 1 The communication loss in continual MPI RMA calls

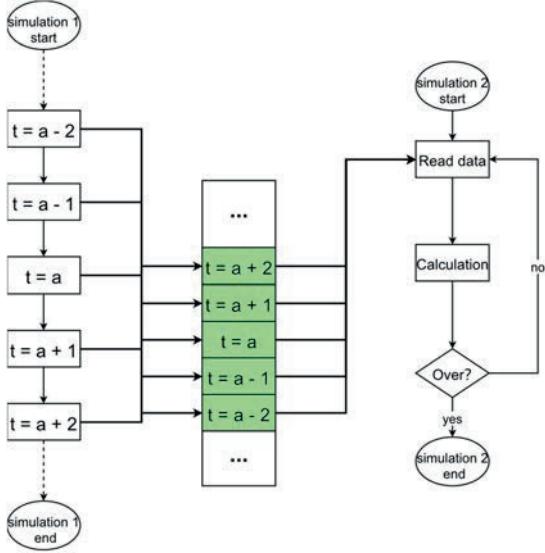


Fig. 2 The utilization of data buffer can avoid the communication loss in continual MPI RMA calls

When one-sided communication is utilized as the communication method in CoToCoA, a large amount of data may be lost due to the different execution speeds. An example is shown in **Fig. 1**. At some point, simulation 2 reads the data from simulation 1 when the timestamp of simulation 1 is $a - 2$. to do its calculation. Next time, simulation 2 reads the data when the timestamp of simulation 1 is $a + 1$. The data at time stamp $a - 1$ and time stamp a are lost unavoidably.

2. Data buffer holding time-series data across multiple applications

2.1 Create the specific data buffer

This paper develops a new CoToCoA function utilizing a specific data buffer to avoid frequent communication loss. Meanwhile, each process of each worker can read a particular part of a n -dimension data when CoToCoA user specifies the start position and end position of the data. In addition, each process of each worker reads multiple time steps data instead of only one time step data in one communication call. The working

principle of this function is shown in **Fig. 2**. A specific data buffer temporarily saves the calculated data, then the data will not be overwritten in the next timestep. The workers read data from the data buffer. Then no data will be lost as long as the data buffer is not full.

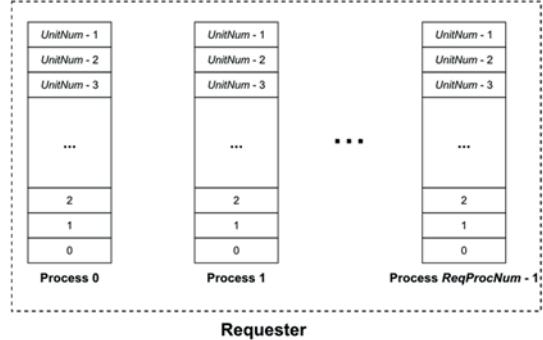


Fig. 3 Construction of the specific data buffer

In the new function, a specific data buffer is created in the memory of each process of the requester and read by the workers. Each unit of this data buffer saves the data calculated in each timestep.

Fig. 3 shows the construction of the data buffer, $UnitNum$ is the number of buffer units, $ReqProcNum$ indicates the number of processes of the requester. The value of $UnitNum$ is determined by the user-specified buffer size and the size of data at each time step. The requester sequentially saves calculated data in the data buffer after it does its calculation in each time step. If the data buffer is full, the new data will overwrite the oldest data.

2.2 Create derived datatype

In this new function, the non-contiguous data communication is implemented by MPI's derived datatype. Two derived datatype array is created in each process of the workers. $Datatype_{req,ij}$ denotes the layout of data in the data buffer for the data communication between the requester's

process i and this worker's process j . $Datatype_{wrk_{ij}}$ denotes the layout of data in the receive buffer for requester's process i and worker's process j .

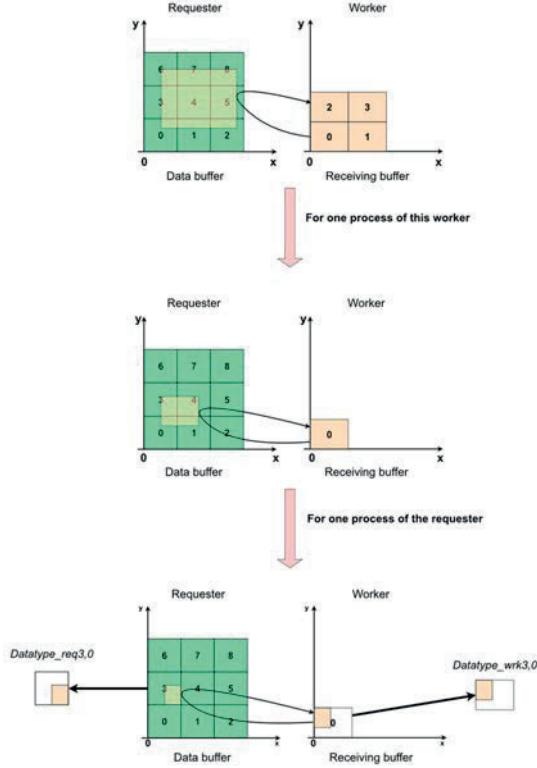


Fig. 4 The use of MPI's derived datatype

Fig.4 is an example illustrating the layout of the derived datatype. In this example, there is only one worker. There are nine processes of the requester and four processes of the worker. Each process of the requester is in charge of one part of the calculation. For each process of the worker, it needs to read different layouts of data from different process of the requester. For example, the process 0 of the worker reads $Datatype_{req3,0}$ layout of data from the data buffer in process 3 of the requester, and saves it with $Datatype_{wrk3,0}$ layout of data in its receiving buffer.

2.3 Read data from requester

To minimize the data communication

overhead of the workers, the number of communication calls should be reduced as much as possible. In the new function, the workers can read data across multiple time steps by only one (sometimes two) communication call.

There are two Execution Mode in the new function. In Execution Mode 1, the requester will not suspend when the data buffer is full. The requester only needs to copy the calculated data to the data buffer at the price of communication loss (Communication loss still happens when the data buffer is full). In Execution Mode 2, the requester will wait for the workers when the data buffer is full. No communication loss will happen but the requester may sometimes suspend.

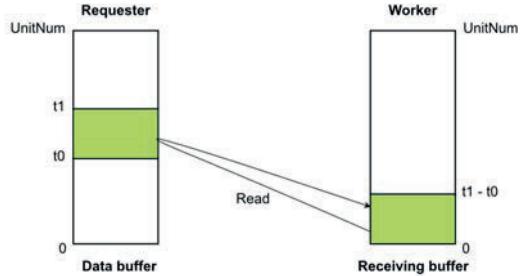


Fig. 5 Worker reads data from the data buffer
(situation 1)

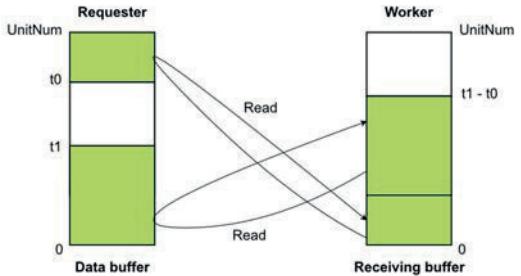


Fig. 6 Worker reads data from the data buffer
(situation 2)

Both in Execution Mode 1 and 2:

In general, workers read data from the data buffer by only one time as shown in **Fig. 5**.

When a worker's process reads data across the boundary of the data buffer, it needs to read two times. An example is shown in **Fig. 6**.

Extra issue only in Execution Mode 2:

In Execution Mode 2, some data may not be read by the workers because of the imbalanced execution speed. A CoToCoA routine *CTCAW_get_timestep* is provided to get the exact time step of current data.

The workers may read the data mixed with different time steps due to the overwriting. An example is as shown in **Fig. 7**. During the data communication, The timestamp of the requester is increased from t_{l_old} to t_{l_new} . The received data from 0 to $t_{l_new} - t_0$, which is the yellow part in the figure, may be mixed with different time steps data unavoidably. Though overwriting is inevitable, CoToCoA users can use *CTCAW_get_overwrite_flag* to distinguish if the current timestamp data is mixed or not.

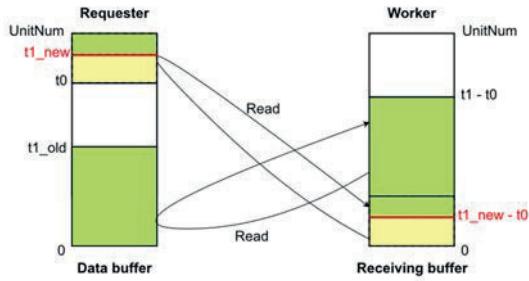


Fig. 7 Worker reads data from the data buffer
(situation 3)

3. Evaluation result

An evaluation is implemented to measure the performance of three different data communication methods on the Vector Engine (VE) of SQUID. They are traditional two-sided communication, ordinary one-sided communication without data buffer and the new function. In this evaluation,

data communication is between two processes distributed in different VEs. The Size of the data buffer is 4GB. The total timestep is $100N$. Process 1 calculates $900 * 900$ 2-dimension integer data array in each timestep. Meanwhile, Process 2 reads $600 * 600$ 2-dimension integer data array from Coordinates (150, 150) to Coordinates (750, 750) in the data buffer until there is no useful data in the data buffer. This program is executed in Execution Mode 1.

The evaluation result on VE of SQUID is as shown in **Fig. 8**. According to the evaluation result, when $N < 7$, the new function is 12.6% faster than ordinary one-sided communication without data buffer. However, when $N \geq 7$, one-sided communication with data buffer is 4.5% slower than one-sided communication without data buffer. The performance of the new function decreased rapidly. The reason may be that there is a limitation that will be broken through when $N \geq 7$ in one one-sided communication call. Then the data communication is carried out in an implicit and inefficient way.

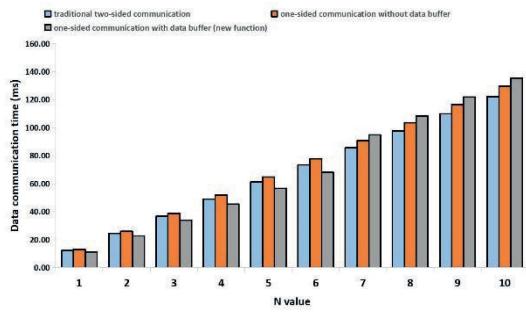


Fig. 8 Data communication time in the evaluation

References

- [1] Keiichiro Fukazawa, Yuto Katoh, Takeshi Nanri, and Yohei Miyake. Application of cross-reference framework cotocoa to macro- and micro-scale simulations of planetary

- magnetospheres. In *2019 Seventh International Symposium on Computing and Networking Workshops (CANDARW)*, pages 121–124, 2019
- [2] Message Passing Interface Forum. *MPI: A Message-Passing Interface Standard Version 4.0*, June 2022.
- [3] Hans-Joachim Bungartz, Florian Lindner, Bernhard Gatzhammer, Miriam Mehl, Klaudius Scheufele, Alexander Shukaev, and Benjamin Uekermann. precice—a fully parallel library for multi-physics surface coupling. *Computers & Fluids*, 141:250–258, 2016.

磁気流体シミュレーションによる原始星への質量・磁場降着過程の研究

高棹 真介

大阪大学 大学院理学研究科

1. はじめに

星は約1万au程度の大きさのガス雲が重力収縮することで形成される(1auは現在の地球と太陽の距離)。ガス雲を構成するガスは一般に有限の角運動量を持っているため、収縮中に遠心力の影響で多くは中心に直接落下することができず、回転円盤を形成する。つまり星の赤子に対応する原始星は、周囲に回転ガス円盤を持つ。ガス雲から星スケールまでの構造の概要については、図1を参照されたい。原始星は太陽質量の1%程度の非常に小さい質量を持って誕生し、周囲の回転ガス円盤(以下では降着円盤とも呼ぶ)から質量・角運動量・熱・磁場を受け取りながら約100万年かけて成長・進化する。したがって、星形成過程を明らかにするには、円盤ガスと星の接続領域で何が起きているかを解明する必要がある。

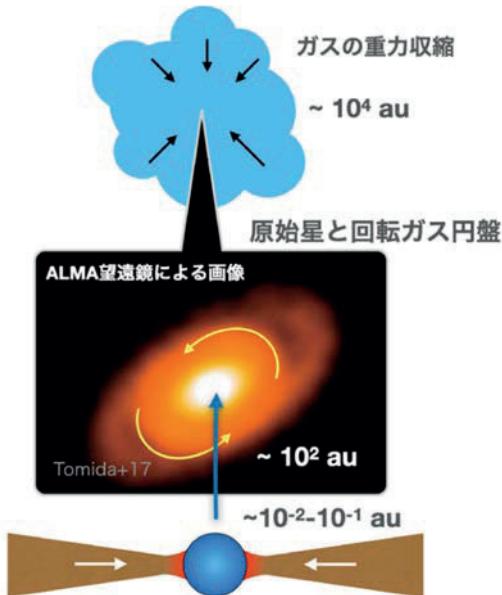


図1：星形成領域の構造に関する概要図

円盤からのガス降着過程はガスの降着率によって大きく様相を変え、原始星の進化経路を決定

すると考えられている。図2に、質量降着率(単位時間あたりに星に集積するガスの量)の異なる2ケースに対する星半径スケールの概念図を示している。降着率が低い場合、星表面に到達した円盤ガスは星表面に即座に取り込まれるため、降着ガスは星表面のごく一部しか覆わないであろう。しかし降着率が十分高いと降着ガスが星表面の大部分を覆ってしまうことが予想されている[1]。原始星がどの程度覆われているのかは重要で、例えば星表面の大部分が覆われていると星に熱がこもり、星半径の大きい状態が維持されやすくなる。その結果、星の年齢と明るさの関係が変わるために、観測の解釈にまで影響が及ぶ。このような背景から、原始星へのガス降着過程の理解は星形成論の完成にとって極めて重要な課題となっている。

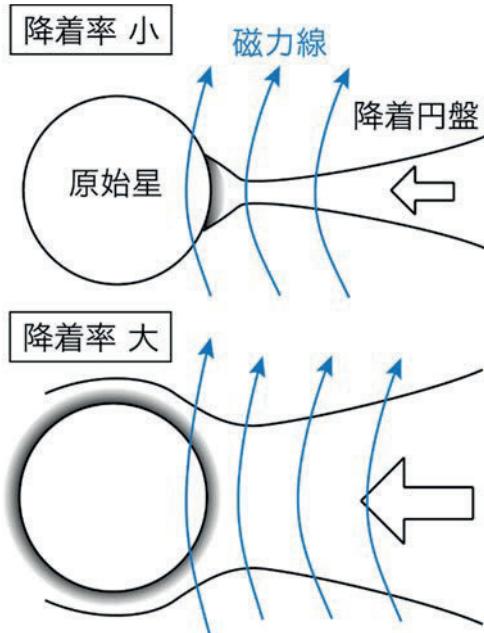


図2：原始星と降着円盤の構造の概念図。星と円盤の自転軸に平行な面での断面図で、円盤の回転速度は奥行き方向を向いている。

回転ガス円盤中のガスが中心に落下するためには角運動量の輸送が必要であるが、星近傍での角運動量輸送の担い手は磁場である。ある程度電離したガス（プラズマ）はローレンツ力を介して磁場とカップルするため、その振る舞いは主に流体力学方程式と Maxwell 方程式を組み合わせた磁気流体方程式に基づいて決定される。さらに、回転円盤中に磁場があると円盤は乱流化し、その乱流が実効的な粘性を生じてガス降着を駆動することも知られている。したがって、第一原理的に原始星の成長過程を解き明かすには、磁気流体方程式を土台にした方程式を解いて、円盤乱流と星表面の構造を詳細に捉えるようなシミュレーションが求められる。

2. 計算の困難さと過去の研究について

原始星表面へのガス降着の理解が重要であるにもかかわらず、これまで多くの困難によりシミュレーション研究が阻まれてきた。原始星近傍にはガスの集積に伴って磁場も集められるが、磁気流体シミュレーションでは磁場が強くなると数値的に負の圧力が生じるなど、様々な数値不安定性が起きやすくなる。また磁場が強くなると、磁場に沿った情報伝達速度である Alfvén 速度が増大し、シミュレーションの時間刻み幅が小さくなつて長時間計算が困難になる。

このような背景から、計算が困難な領域を計算領域に含めないモデルで星・円盤相互作用の研究が進められてきた。たとえば原始星と円盤の接続領域は高解像度で解くものの、低密度で負の圧力が生じやすいような円盤上層大気は計算領域に含めないようなモデルがある（円盤赤道面だけに注目したモデル）[2, 3]。しかしこのモデルには鉛直方向の物質・角運動量輸送を議論することができない問題がある。円盤上層大気や星の周囲も計算領域に含めたモデルも提案されていたが、そこでは星表面が内側境界として計算されていた [4, 5]。我々も星表面を内側境界とした 3 次元星・円盤モデルを独自に発展させながら、新たな降着モ

ードを明らかにしてきた[5, 6]。しかし星表面が計算領域に含まれていないので、原始星の成長・進化を決定づける原始星へのガス降着過程の最終段階が解かれていないので現状である。

3. 本研究のアプローチ

原始星へのガス降着の最終過程を解くため、我々は原始星表面と円盤の相互作用領域を直接解くグローバル 3 次元磁気流体シミュレーションを初めて実行した。その結果に基づき、原始星周りの降着ガスの分布や磁場の持ち込み過程を調査した。図 3 に初期条件の概要を示す。カートезィアン座標を用い、中心に原始星であるガス球を置く。原始星の質量や半径は、原始星進化計算コード[7]の計算結果に基づき値を決めている。本研究で用いた原始星の質量は 0.5 太陽質量となっており、太陽型星のケースに対応する。原始星周囲には回転ガス円盤を置く。また、星形成時に持ち込まれた磁場を模して、円盤を貫く磁場も初期条件に設定している。計算開始後、この磁場が円盤乱流を発生させ、円盤内にガス降着を駆動することになる。

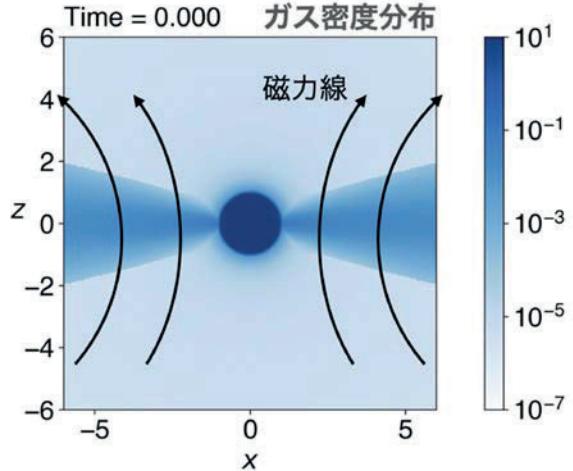


図 3：初期条件の密度分布と
およびその磁場構造

基礎方程式は放射冷却や磁気拡散を考慮した磁気流体方程式であり、数値計算には公開磁気流体コード Athena++[8]に必要な機能を追加したも

のを用いている。また計算スキームの空間補間精度と時間積分の精度はそれぞれ 4, 3 次となっている。

本計算を実行するにはいくつかの困難を緩和する必要があり、具体的には数値不安定性の抑制、極めて小さい時間刻み幅の緩和、そして大規模計算を可能にする計算資源の節約である。これらの数値的困難を緩和するために、我々は以下のような取り組みを行ってきた。

まず磁場強度の増加とともに時間刻みが小さくなり計算が進まなくなる問題に対しては、運動方程式を一部変更することで対応した。相対論的流体では Alfvén 速度が光速に近づくと変位電流由来の慣性が働き、Alfvén 速度の増大が抑えられる。原始星環境のような非相対論的流体だと変位電流は無視されるのだが、人為的に小さめの光速を設定したまま変位電流の項を残すことで、人工的に Alfvén 速度の最大値を制限することができる。この手法は Boris correction として古くから用いられている。近年我々は、Boris correction を HLLD 法[9]と呼ばれる磁気流体計算で広く使われている衝撃波捕獲法に導入するスキームを開発し、その有用性を示してきた [10]。本研究では、このスキームを用いて計算を行っている。Alfvén 速度が非常に大きくなつて方程式の修正項が重要なのは計算領域のごく一部であるため、このような修正は計算結果を大きく変えない。

他の取り組みとしては、磁場が強い領域で負の圧力が生じないようにする工夫[6]や、計算量を極力抑えるようなグリッド配置などが挙げられる。Athena++は解像度を上げたい領域でグリッドを細かく張ることができる入れ子格子をサポートしており、その機能を活用して星近傍で解像度を上げるように格子構造を設定した。

4. 結果

4.1 降着ガスの分布

まだ解析の初期段階であるが、結果の概要について述べる。図 4 は数値計算から得られた円盤と

原始星の断面図である。円盤が乱流的になっているが、これは磁气回転不安定性と呼ばれる磁場が駆動する不安定性の結果である。この乱流により円盤ガスは角運動量を外側へ輸送し、星に向かうガスの流れを生じている。磁気乱流化した円盤が原始星表面と相互作用する様子を計算した、初のグローバル計算である。

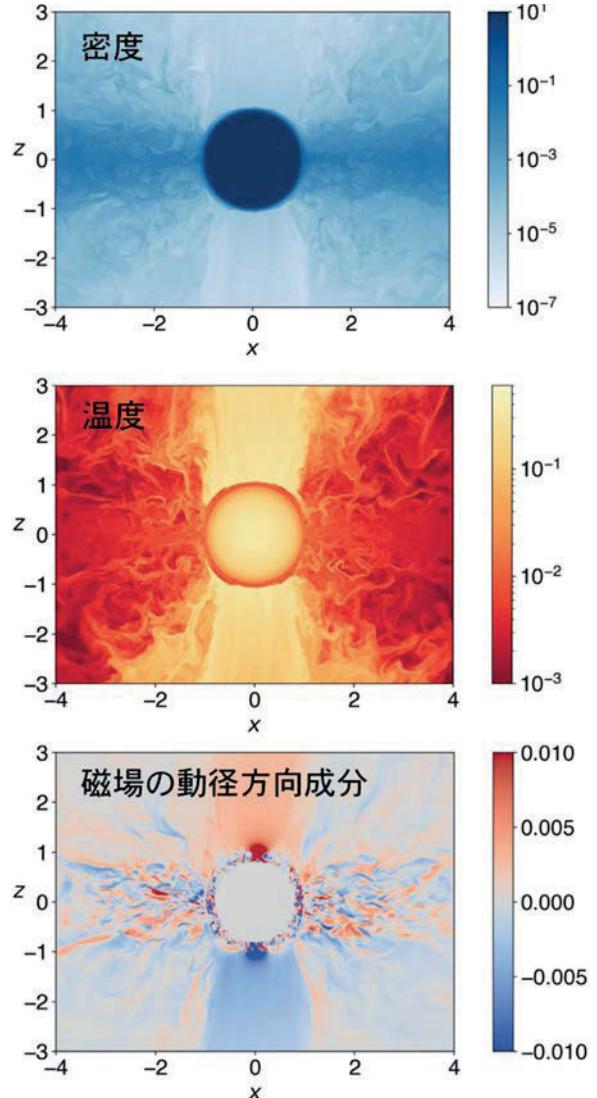


図 4：上から密度、温度、磁場の動径方向成分

密度分布をみると、星の南北極域で密度が低く保たれていることがわかる。その理由は、星の極域には降着してきたガスと一緒に運ばれてきた磁場が溜まっており、その磁場が降着ガスの侵入を妨げているからである。このことから、原始星の表面がどれだけ降着ガスで覆われるのかを決める要素として、磁場も本質的に重要であること

が明らかとなった。

4.2 巨大黒点の形成

降着ガスは磁場も原始星へと持ち込むため、星表面に磁場が溜まることとなる。現在考えている原始星は表面が対流的であるが、その対流のため磁場が星の極域に効率的に集まった。その結果、図 4 下で示すように極域に巨大黒点が形成された（極域に見える磁場が集中している領域）。前節で極域の低密度領域について説明したが、巨大黒点の磁場が低密度領域を形成していたのである。

5. おわりに

本研究では原始星と円盤の相互作用領域を直接解くグローバル 3 次元磁気流体シミュレーションの初期成果について紹介した。赤道面のみならず星の極域まで含めたグローバル計算を実行することで、極域に溜め込まれた磁場の役割を見出すことができた。今後は原始星への角運動量注入過程についても考察していく。詳細な輻射輸送計算も導入することで、モデルのアップデートも進めたい。

参考文献

- (1) W. Kley & D. N. C. Lin, *The Astrophysical Journal*, 461, 933 (1996)
- (2) P. Armitage, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 330, 895 (2002)
- (3) M. A. Belyaev, et al., *The Astrophysical Journal*, 770, 68 (2013)
- (4) M. M. Romanova, et al., *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 421, 63 (2012)
- (5) S. Takasao et al., *The Astrophysical Journal Letters*, 878L, 10 (2019)
- (6) S. Takasao et al., *The Astrophysical Journal*, 941, 73 (2022)
- (7) T. Hosokawa, et al., *The Astrophysical Journal*, 721, 478 (2010)
- (8) J.M. Stone, et al., *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 249, 4 (2022)
- (9) T. Miyoshi and K. Kusano, *Journal of Computational Physics*, 208, 315 (2005)
- (10) T. Matsumoto, et al., *The Astrophysical Journal*, 874, 37 (2019)

瀬戸内海における外洋起源有機物の動態解析

中谷 祐介

大阪大学 大学院工学研究科 地球総合工学専攻

1. はじめに

瀬戸内海では、高度経済成長以降に過剰な汚濁負荷が流入した結果、富栄養化が進行し、赤潮や貧酸素水塊などの水質問題が深刻化した。これに対し、1979年度から水質総量削減が開始され、陸域から流入する化学的酸素要求量 COD（有機汚濁指標）、全窒素 TN・全リン TP（富栄養指標）の負荷量が削減された結果、TN と TP については瀬戸内海のほぼすべての湾灘で環境基準を達成した。しかしながら、近年、COD に関しては横ばい、あるいは一部海域では微増傾向にあり¹⁾、環境基準の達成率は 70%台にとどまっている。

陸域負荷の削減施策が進められてきたにも拘わらず、瀬戸内海の COD が当初の予想ほど低下しない原因は複数挙げられるが、その一つとして、太平洋から流入する外洋起源の有機物が影響している可能性がある。瀬戸内海の水質や密度構造は、太平洋を流れる黒潮流路によって大きく変化することが報告されており²⁾、瀬戸内海内の水質を管理する上で外洋の影響を無視することはできない。外洋の中低層に存在する有機物は、一次生産による生成から数十年～数百年が経過し、易分解成分は既に微生物分解されているため、大半は難分解性の溶存有機物である³⁾。瀬戸内海に存在する有機物のうち、難分解性の外洋起源有機物が相当の量を占めているのであれば、環境基準値を下回ることは将来不可能である可能性が高い。その場合には、外洋起源有機物をバックグラウンド値として考慮し、現行の環境基準値の設定を見直す必要もある。

外洋起源の COD に関する既往研究は少なく、瀬戸内海と外洋域の COD の長期変動について統計的相関を調べた程度にとどまり⁴⁾、因果関係や機構は明らかにされていない。

本研究では、瀬戸内海 - 太平洋領域を対象に、三次元流動モデルを用いた流動シミュレーションを行い、瀬戸内海における外洋起源有機物の時空間分布を明らかにした。まず流動・密度構造についてモデルの再現性を検証した後に、外洋起源有機物に見立てた保存性トレーサーの移流拡散計算を行い、瀬戸内海における外洋起源有機物の存在量とその変動を解析した。

2. 方法

2.1 流動モデルと計算条件

三次元流動モデルには SCHISM (Semi-Implicit Cross-scale Hydroscience Integrated System Model)⁵⁾ を用いた。支配方程式は Reynolds 方程式、連続式、水温・塩分の輸送方程式、密度の状態方程式であり、静水圧近似と Boussinesq 近似を仮定している。水平粘性には Laplacian 型の Shapiro フィルター、乱流モデルには Mellor-Yamada 2.5 レベルを採用した。

計算領域は瀬戸内海から太平洋の黒潮流路を含む東西南北約 700 km の領域とした（図 1）。水平方向の格子サイズは瀬戸内海領域では 150 m～1.5 km 程度とし、太平洋領域は約 5 km とした。

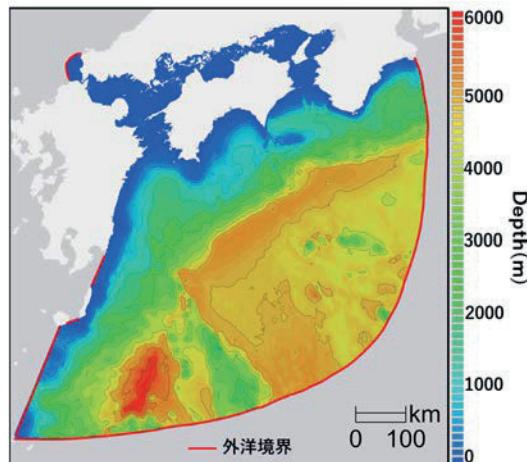


図1：対象領域

鉛直方向には多重σ座標系 LSC² (Localized Sigma Coordinatates with Shaved Cell)を採用し、最大 84 層に分割した。計算期間は 2008 年 1 月 1 日から 2018 年 12 月 31 日の 11 年間とし、差分時間間隔は 120 s とした。

初期条件および外洋境界条件には MOVE/MRI.COM-JPN⁶⁾による海面高度、水温、塩分、流速の出力値（時間解像度 1 d、空間解像度 2 km）を与えた。外洋境界にはグローバル潮汐モデル FES2014 による主要 28 分潮の潮位・潮流振動も加えた。太平洋領域においては、密度場の再現性を向上させるために、MOVE の三次元水温・塩分データを用いてナッジングした。

流入境界には一級水系 27 河川、中小河川 86 河川の計 113 河川を考慮した。淡水流入量には、分布型流出モデル（時間解像度 1 d、空間解像度 500 m）を瀬戸内海とその周辺海域の集水域に適用し、解析雨量を入力とした水文流出計算⁷⁾により得られた値を与えた。一級河川の計算値を観測値と比較し、Nash-Sutcliffe 係数の平均値は 0.7 以上を示すなど、モデルによる流量再現性は十分に高いことを確認した。

水面の熱収支には短波放射、長波放射、顯熱、潜熱を考慮した。降水量と短波放射には、AMeDAS の沿岸測候所の毎時観測値を補間して与えた。長波放射には米国環境予測センター NCEP が公開している全球モデル出力値を用い、2008 年 1 月～2011 年 3 月については NCEP-CFSR（時間解像度 1 h、空間解像度 0.3125°）、2011 年 4 月以降については NCEP-CFSv2（時間解像度 1 h、空間解像度 0.2°）を与えた。顯熱、潜熱はバルク式より求め、気温・気圧・比湿・風向・風速には気象庁メソ数値予報値 GPV-MSM（時間解像度 1 h、空間解像度 0.05°×0.0625°）を与えた。

2.2 外洋起源有機物の挙動解析

外洋水に含まれる有機物は、大部分が難分解性溶存有機物であるため、外洋性の溶存態有機炭素 DOC を保存性のパッシブトレーサーとして移流拡散計算を行い、瀬戸内海における外洋起源有機

物の挙動を解析した。

外洋境界条件の設定に際し、Global Ocean Data Analysis Project Version 2.2021 より収集した DOC の観測データの解析を行った。図 2 に外洋域における DOC 濃度の鉛直分布を示す。DOC 濃度 (mol/L) の鉛直分布には水深に依存する傾向が認められ、水深 Depth (m) の関数として近似可能であった。

$$DOC = 27.8 \times e^{-0.025 \times Depth} + 37.3 \quad (1)$$

外洋性の DOC は、分解速度に基づいて準易分解性溶存態有機物 SLDOC と難分解性溶存態有機物 RDOC の 2 種類に大きく分類される。このうち RDOC は数千年という非常に長い時間スケールで分解され、水深帯に依らず鉛直一様に存在することから、近似式(1)の切片である 37.3 mol/L を RDOC 濃度とし、鉛直一様に外洋境界に与えた。SLDOC 濃度については、近似式(1)より求めた DOC 濃度から RDOC 濃度 (=37.3 mol/L) を差し引くことで求め、鉛直方向に濃度分布を与えた（図 2）。

RDOC の分解速度は数千年という時間スケールで非常に小さく、今回の計算期間では分解過程は無視できるため、保存性物質として扱った。一方、SLDOC の分解速度は数日もしくは数週間から数年であり、分解にかかる日数に幅があるため、分解速度を一定値に設定することは難しい。そのため、SLDOC の分解速度が小さく全く分解されない場合と、分解速度が大きく瀬戸内海に進入す

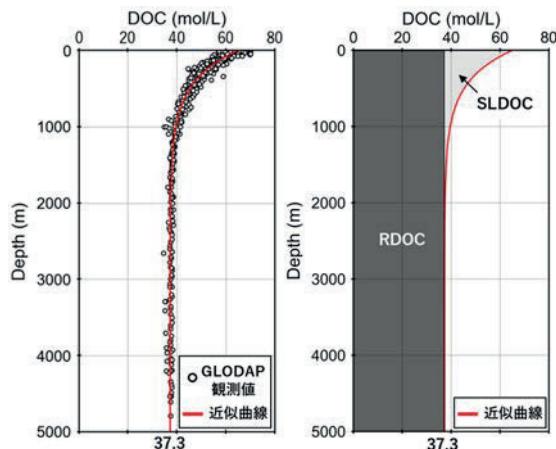


図2：外洋域におけるDOC濃度分布（左：観測値と近似曲線、右：RDOCとSLDOCの分類）

る前に完全に分解される場合を仮定することで、外洋起源有機物濃度の最大値と最小値を求めた。

3. 結果・考察

3.1 モデル再現性

潮汐の再現性を検証するために、19箇所の検潮所の潮位データについて調和解析を行い、主要8分潮の振幅と位相を求めた。観測値と計算値の比較を図3に示す。振幅、位相ともに相関係数Rが0.99を上回り、計算された潮汐場が高い精度を有していることが確認された。

また、広域総合水質調査の全測定地点のデータを用いて、水温・塩分の再現性の検証を行った結果を図4に示す。出水時における河川水の拡がりをやや弱く表現する傾向があるものの、観測値と計算値のRMSEを求めるとき、表層と底層の水温ではそれぞれ 1.14°C 、 1.19°C 、塩分では0.65、

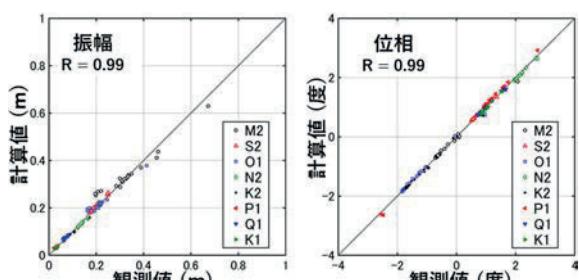
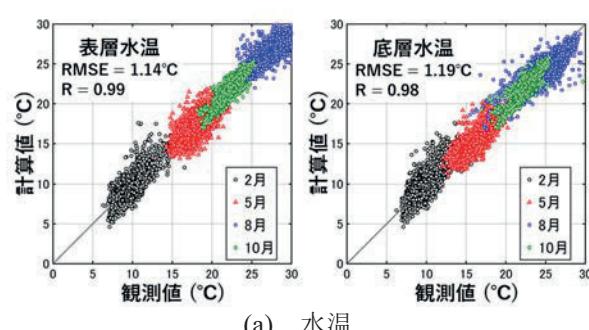
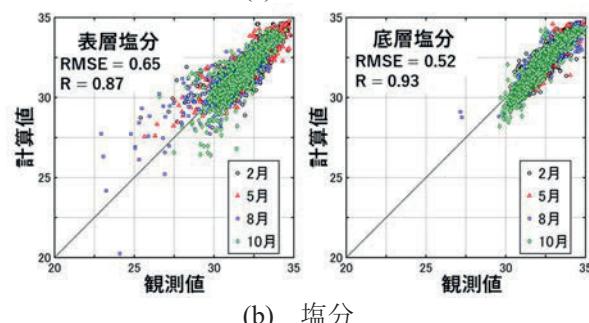


図3：主要8分潮の再現性



(a) 水温



(b) 塩分

図4：水温・塩分の再現性

0.52と良好であった。紙面の都合上図示はしないが、太平洋領域の水温・塩分についても鉛直分布を比較し、良好に再現していることを確認した。

3.2 外洋起源有機物の挙動

一例として、2018年7月における外洋起源DOCの空間分布を図5に示す。河口付近では河川水による希釈が生じているが、外洋起源DOCは瀬戸内海全域でほぼ一様に分布しており、最大(SLDOC+RDOC)の場合で約55 mol/L (=0.66 mg/L)、最小(RDOC)の場合で約35 mol/L (=0.42 mg/L)の濃度範囲にあった。

図6に紀伊水道の外洋起源DOC濃度の全水深平均値の年変動を示す。計算開始から約3年間は初期条件の影響で濃度上昇がみられるが、それ以降は変動が小さくほぼ一定値を推移した。その他の中瀬でも同様の結果となり、外洋起源有機物は瀬戸内海全域において時空間的にほぼ均一に存在する結果が得られた。

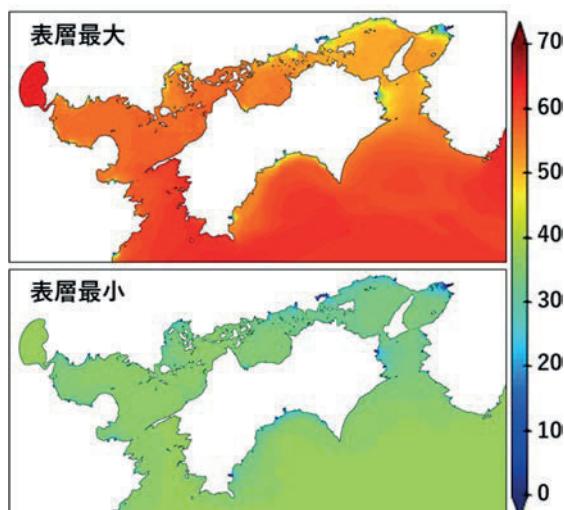


図5：外洋起源DOC (mol/L)の表層分布

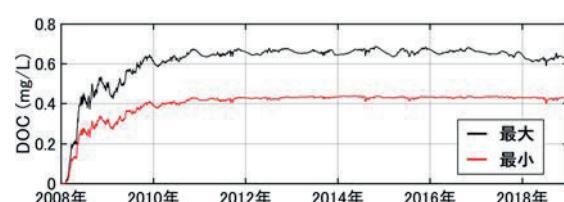


図6：紀伊水道の外洋起源DOC濃度の変動

3.3 海域 COD に占める外洋起源有機物の割合

各湾灘における外洋起源 COD の濃度(計算値)と、海域の COD 濃度(観測値)に占める外洋起源割合を図 7、表 1 に示す。観測値には、広域総合水質調査により 2011 年～2018 年に年 4 回測定された COD 濃度を平均し、さらに各湾灘における全測定地点間で空間平均した値を示している。図-11 に示すように、外洋起源 COD 濃度は全湾灘でほぼ同程度であり、0.42～0.67 mg/L の範囲を示した。流入負荷量や内部生産量が多い大阪湾などでは、相対的に外洋起源の占める割合が 18.7～28.5% と低い一方で、豊後水道や紀伊水道では割合が高く、最大(SLDOC+RDOC) で 60.8%にも及んでいる。また、最小(RDOC)の場合でも、外洋起源が 18.7～39.9% を占める結果が得られた。

4. おわりに

本研究では瀬戸内海 - 太平洋領域を対象に大規模な三次元流動シミュレーションを行い、外洋起源有機物の挙動解析を行った。その結果、瀬戸内海では人為的に制御不可能な外洋起源 COD が最大で 6 割、少なくとも 2 割程度存在していることが明らかになった。瀬戸内海の水質管理において決して無視できない量であり、環境基準の検討においては、外洋起源有機物量をバックグラウンド値として考慮することが重要であると考える。

謝辞

本研究は「2022 年度公募型利用制度(若手・女性研究者支援萌芽枠)」を受けて実施したもので

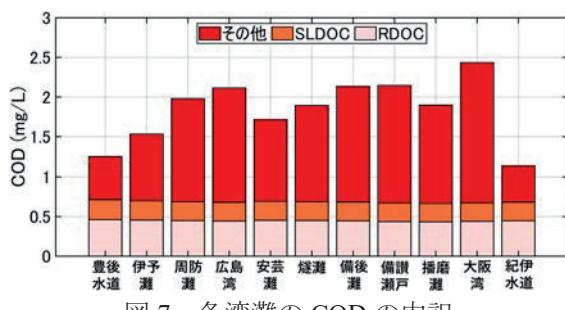


図 7 : 各湾灘の COD の内訳

表1 : 各湾灘の COD に占める外洋起源割合 (%) (2011 年から 2018 年の平均)

	豊後水道	伊予灘	周防灘	広島湾	安芸灘	燐灘	備後灘	備讃瀬戸	播磨灘	大阪湾	紀伊水道
最大	60.3	47.6	35.9	32.6	40.7	34.6	31.9	31.3	35.4	28.5	60.8
最小	39.1	31.0	23.3	21.3	26.5	22.6	20.7	20.4	23.1	18.7	39.9

あり、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点の支援(課題番号: EX22707)を受け、大阪大学サイバーメディアセンターの大規模計算機システム SQUID を利用した。GPV-MSM データは京都大学生存圏研究所が運営する生存圏データベースより、また気象研究所が提供する MOVE/MRI.COM-JPN Dataset はデータ統合解析システム DIAS より収集した。本研究の一部は JSPS 科研費(21K04273)を受けて実施した。あわせてここに記し、深く感謝の意を表します。

参考文献

- (1) 藤原建紀ら:窒素・リン削減が海域の有機物量(COD および TOC)に及ぼす影響, 水環境学会誌, **41(5)**, 135-148, (2021).
- (2) 駒井克昭ら:黒潮の蛇行・直進が瀬戸内海の流れに及ぼす影響, 土木学会論文集 B, **64(3)**, 165-179, (2008).
- (3) 濱健夫, 和田茂樹:海洋溶存態有機物の生産と難分解化過程, 水環境学会誌, **34(5)**, 134-138, (2011).
- (4) 矢吹芳教ら:日本近海の太平洋側外洋水の COD の長期変動と瀬戸内海の COD の変動に及ぼす影響, 水環境学会誌, **40(5)**, 189-197, (2017).
- (5) Zhang, Y., et al.: Seamless cross-scale modeling with SCHISM, Ocean Modelling, **102**, 64-81, (2016).
- (6) 広瀬成章ら:日本沿岸海況監視予測システム 10 年再解析値(JPN Atlas 2020), 気象研究所技術報告, **83**, (2020).
- (7) 山根成陽ら:過去 30 年の降雨パターンと土地利用の変化が瀬戸内海への淡水流入量に及ぼす影響, 土木学会論文集 G, **78(6)**, II_89-II_97, (2022).

Ab Initio Study of Intramolecular Magnetic Interaction in Photoexcited Rare-earth-based Macrocyclic Complexes

Anas Santria

Graduate School of Science, Osaka University

1. Introduction

Rare-earth-based complexes with delocalized electrons in macrocyclic ligands have significant importance in various fields of research. Their magnetic, optical, and electronic properties have been studied intensively to fulfill the high demand for ultrahigh-density data storage, magnetic sensor, and quantum computing applications. Despite numerous studies, an essential innovation is still needed to control their quantum states. So far, two methods have been used to control their quantum states: a magnetic field and an electric current. The magnetic field is not suitable for controlling a few molecules because the other molecules in large areas can be affected. Another technique, using an electric current, is a technique that is often used. This effort is through the use of scanning tunneling microscopy (STM) probes onto those that have previously deposited on metallic substrates such as gold (Au), lead (Pb), and other conductances. Unfortunately, this effort is limited to the cases where STM is involved.

A new type of electronic interaction was observed in the excited state of the molecular compounds having large magnetic anisotropies, bisphthalocyaninato lanthanide(III) complexes, Pc_2Ln^- [1]. In these compounds, the interaction occurs between the total angular momentum (\mathbf{J}) of the lanthanide ion and the orbital angular momentum (\mathbf{L}) of cyclic π system (phthalocyaninato), as shown in Figure 1. It was found that the interaction, referred to as “ \mathbf{J} – \mathbf{L} interaction”, can be in a ferromagnetic-type or an

antiferromagnetic-type manner. Since the interaction can change the energy ordering of the sublevel structure in the ground state via photogeneration of L , the quantum state of molecular magnets is expected can be controlled by this interaction through the excitation–deexcitation process.

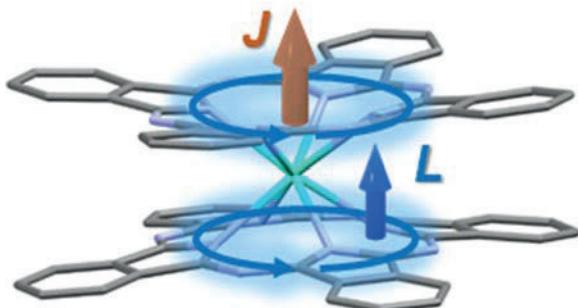


Figure 1 : \mathbf{J} – \mathbf{L} interaction in Pc_2Ln^-

This paper uses a computational chemistry approach to report how the \mathbf{J} – \mathbf{L} interaction occurs in various rare-earth-based macrocyclic complexes. Two questions are set as follows. First, how to determine the \mathbf{J} – \mathbf{L} interaction in lanthanide complexes with porphyrin as aromatic ligand? Second, does changing rare-earth-metal ion has any effect on the \mathbf{J} – \mathbf{L} interaction? To answer these questions, we chose several lanthanide ions such as Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb ions as the metal center and a non-aromatic macrocyclic cyclen compound as the second ligand.

2. Computational Methods

The initial geometries of $[\text{Ln}(\text{TPP})(\text{cyclen})]^+$ ($\text{Ln} = \text{Tb}, \text{Dy}, \text{Ho}, \text{Er}, \text{Tm}$, and Yb ; $\text{TPP} = 5,10,15,20$ -

tetraphenylporphyrinato; cyclen = 1,4,7,10-tetraazadodecane) were obtained from experimental structures [2]. These structures were then modified using the Avogadro program [3] to ensure appropriate bond lengths, angles, orientation, and molecular symmetry. Subsequently, geometry optimization process was conducted using *Gaussian 16*, revision C.01 [4] at the B3LYP level of theory. The basis set 6-31G(d,p) was used for C, H, N, and O atoms [5], while Stuttgart RSC 1997 basis sets were employed for metal ion [6]. To obtain electronic structures, spin-orbit states, and oscillator strength of the optimized geometries, the complete active space self-consistent field (CASSCF)/restricted active space state interaction (RASSI)/SingleAniso calculations were performed in OpenMolcas version 22.06 [7].

3. Results and Discussion

3.1 Ground-States

The ground-state electronic structure of $[\text{Ln}(\text{TPP})(\text{cyclen})]^+$ complexes was determined using self-consistent field (SCF) calculations followed by the CASSCF method. In CASSCF calculations, the seven 4f orbitals with varying electron occupancy, specifically n ($n = 8(\text{Tb})$, $9(\text{Dy})$, $10(\text{Ho})$, $11(\text{Er})$, $12(\text{Tm})$, $13(\text{Yb})$) electrons were successfully placed in between the typical occupied π and two degenerate unoccupied π orbitals (π^*) of porphyrin. Because the molecule structures were designated to have C_2 symmetry, those 4f orbitals are distributed into irreducible representations (irrep) A and B, i.e., irrep A for $4f_{2+}$, $4f_{2-}$, and $4f_0$ orbitals, while irrep B for $4f_{3+}$, $4f_{3-}$, $4f_{1+}$, and $4f_{1-}$ orbitals, as shown in Table 1. Furthermore, the typical highest occupied molecular orbital (HOMO) of the porphyrin was found to belong to irrep A, while the lowest unoccupied molecular orbital (LUMO) belonged to irrep B.

Table 1. Molecular orbitals of $[\text{Ln}(\text{TPP})(\text{cyclen})]^+$ under C_2 symmetry viewed along z-axis.

Lanthanide		
Irrep A		
	$4f_{2-}$	$4f_{2+}$
Irrep B		
	$4f_0$	
Irrep B		
	$4f_{3-}$	$4f_{3+}$
Irrep B		
	$4f_{1-}$	$4f_{1+}$
Porphyrin		
Irrep A		
	$\text{HOMO-1}(\pi)$	$\text{HOMO}(\pi)$
Irrep B		
	$\text{LUMO}(\pi^*)$	$\text{LUMO+1}(\pi^*)$

To obtain the multilevel ground-state electronic structures of six lanthanide ions in $[\text{Ln}(\text{TPP})(\text{cyclen})]^+$, further calculations such as RASSI and Single Aniso were then carried out. For each lanthanide complex, a total of $2J+1$ substates were obtained, where J is the total angular momentum. Specifically, there are 13 substates for Tb, 16 substates for Dy, 17 substates for

Ho, 16 substates for Er, 13 substates for Tm, and 8 substates for Yb. These substates arise from the $J = 6$ (Tb), $J=15/2$ (Dy), $J=8$ (Ho), $J=15/2$ (Er), $J=6$ (Tm), and $J=7/2$ (Yb), as shown in Figure 2.

In addition to determining the number of substates, the composition of wave functions for each substates was also determined. In the cases of Tb, Ho, and Tm, the lowest substates were found to be composed of a mixture of $+J_z$ and $-J_z$ (J_z represents the z component of J). Sequentially, the lowest substate for Tb, Ho, and Tm is mainly composed of $|\pm 6\rangle$, $|\pm 4\rangle$, and $|\pm 6\rangle$. For Tb, the second lowest substate is separated by a very small energy gap (less than 1 cm^{-1}) from the lowest substate, whereas for Ho and Tm, there is a significant energy gap between the two lowest substates. On the other hand, Dy, Er, and Yb complexes exhibit doubly degenerate $+J_z$ and $-J_z$ substates. The lowest substates for these lanthanide complexes are $|-11/2\rangle$ and $|+11/2\rangle$ for Dy, $|-1/2\rangle$ and $|+1/2\rangle$ for Er, and $|-5/2\rangle$ and $|+5/2\rangle$ for Yb. These findings are consistent with previous experimental report [8], validating the accuracy of the computational approach. In this stage, the primary objective is to provide information regarding the wavefunctions pertaining to the the lowest substates of the ground state. This crucial information serves as the fundamental basis for determining the **J-L** interaction.

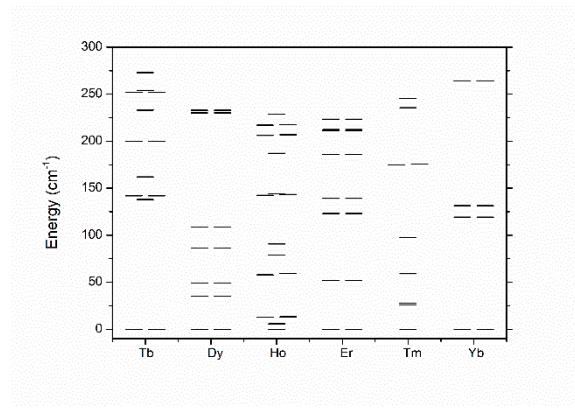


Figure 2 : Multilevel ground-state structure of $[\text{Ln}(\text{TPP})(\text{cyclen})]^+$.

3.2 Excited-states

Using the results from the ground-state calculations as an initial guess, the CASSCF calculations for the excited states were carried out. Two highest-occupied π orbitals (HOMOs) and two lowest-unoccupied π orbitals (LUMOs) were added to the active space so that the total electrons and orbitals become $n+4$ and 11, respectively. In addition, RASSI and Single Aniso modules with the specific keyword for generating spin-orbit (SO) states, dipole transition strengths, and other physical properties were then executed.

For $[\text{Tb}(\text{TPP})(\text{cyclen})]^+$, with a spin multiplicity of 7 and 119 CIROOTs, a total of 833 SO states were generated. Among these states, two excited doublets associated with the Q-band were identified, as depicted in Figure 3. The lower- and higher excited doublet SO states are separated by $26,929\text{ cm}^{-1}$ and $26,938\text{ cm}^{-1}$ from the lowest ground state, respectively. At the lowest ground state, the L_z is equal to 2.94 and S_z is 2.96. These values indicate that J_z is equal to 5.9, consistent with the ground-state calculation. Notably, the sum of L_z and S_z for the excited doublet SO states deviates from that of the ground state, i.e., 10.21 and 1.72 for the lower- and higher-excited doublet SO states, respectively. These deviations correspond to the orbital angular value of the porphyrin system (L_π) at the Q-band, as previously reported [9]. At the lower excited doublet SO state, L_π demonstrates positive sign, while at the higher excited doublet SO state, it exhibits a negative sign. Since L_π has the same sign as J_z at the lower excited doublet SO states (more stable), the interaction is interpreted as a ferromagnetic-type manner (see Figure 3). For the magnitude of the interaction, represented as Δ_{JL} , can be determined by calculating half of the energy between the lower- and higher-excited doublet SO states. In this case, Δ_{JL} was obtained to be approximately 4.5 cm^{-1} .

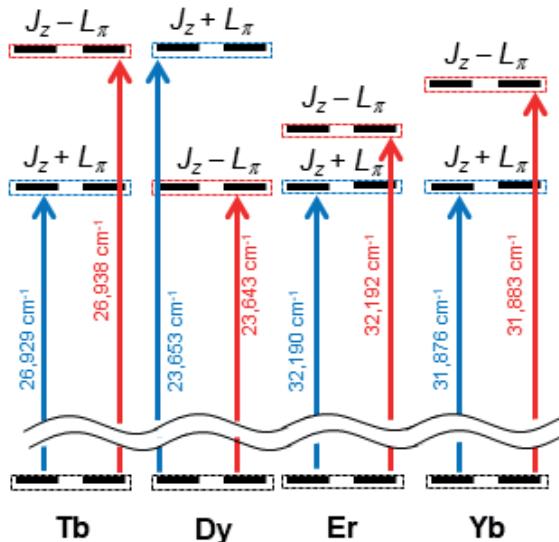


Figure 3 : Schematic energy diagram of the spin-orbit states associated with the Q-band of $[\text{Ln}(\text{TPP})(\text{cyclen})]^+$ ($\text{Ln} = \text{Tb}, \text{Dy}, \text{Er}$ and Yb).

In the case of $[\text{Dy}(\text{TPP})(\text{cyclen})]^+$ complex, a combination of spin multiplicity 6 and 189 CIROOTs results 1134 SO states. Among these states, the lowest doublet SO state exhibits $L_z = 3.43$ and $S_z = 1.75$, which yields $J_z = 5.18$, consistent with the values obtained in the ground state calculation. For the excited doublet SO states associated with the Q-band, the sum of L_z and S_z amounts to 1.28 for the lower excited doublet state and 9.38 for the higher excited doublet states. This indicates that the L_π has the opposite sign to J_z at the lower energy state, as shown in Figure 3. Consequently, in this complex, the coupling between **J** and **L** in of an antiferromagnetic-type nature. Furthermore, the lower- and higher excited doublet states are separated by $23,643 \text{ cm}^{-1}$ and $23,653 \text{ cm}^{-1}$, respectively, from the lowest SO state. As a result, Δ_{JL} was estimated to be approximately 5.0 cm^{-1} .

A total of 1260 SO states were obtained for $[\text{Er}(\text{TPP})(\text{cyclen})]^+$ by combining a spin multiplicity of 4 with 315 CIROOTs. The lowest doublet SO state exhibits $L_z = 0.38$ and $S_z = 0.11$. The doublet states

associated with the Q-band are separated by $32,190 \text{ cm}^{-1}$ and $32,192 \text{ cm}^{-1}$, respectively, from the lowest doublet state. At the lower doublet excited SO state, the sum of L_z and S_z is only 0.11 larger than that of the ground-state (0.49). The difference, which was previously expected to be attributed to L_π , is significantly smaller compare to the cases of $[\text{Tb}(\text{TPP})(\text{cyclen})]^+$ and $[\text{Dy}(\text{TPP})(\text{cyclen})]^+$. Additionally, the Δ_{JL} value obtained is very small, approximately 1.0 cm^{-1} . Interestingly, this small difference was observed in a compound with a small J_z . Therefore, the small J_z may contribute to the small value of L_π that interact with J_z in the $[\text{Er}(\text{TPP})(\text{cyclen})]^+$. To further investigate this observation, it is necessary to perform calculation on $[\text{Yb}(\text{TPP})(\text{cyclen})]^+$ based on its electronic ground state. $[\text{Yb}(\text{TPP})(\text{cyclen})]^+$ possesses a primary $J_z = |\pm 5/2\rangle$ at the lowest ground state, which lies between the lowest J_z values of $[\text{Dy}(\text{TPP})(\text{cyclen})]^+$ ($|\pm 11/2\rangle$) and $[\text{Er}(\text{TPP})(\text{cyclen})]^+$ ($|\pm 1/2\rangle$).

The calculation on $[\text{Yb}(\text{TPP})(\text{cyclen})]^+$ was performed using the same methodology as the other lanthanine(III) complexes. Setting the spin multiplicity to 2 with 119 CIROOTs resulted in 238 SO states. The analysis focused on the lowest doublet ground state and two doublet excited SO states associated with Q-band. At the lowest doublet ground SO state, the value of J_z was determined to be approximately 1.61, obtained from the sum of $L_z = 1.37$ and $S_z = 0.24$. The L_z value was then found to undergo changes at the two doublet excited SO states (lower doublet excited SO state = $31,876 \text{ cm}^{-1}$, higher doublet excited SO state = $31,883 \text{ cm}^{-1}$). The L_z is increased by approximately 3.9 at the lower excited SO states, while it reduced by approximately 4.18 at the higher excited SO state (Note: The S_z sign in the doublet excited SO states is kept positive as well as that in the lowest ground SO state). As discussed previously, the changes in L_z are attributed to the

presence of L_{π} . In this case, it was found that L_{π} aligns in a similar direction as J_z at the lowest doublet, as shown in Figure 3. This indicates a ferromagnetic-type interaction between J_z and L_{π} . Additionally, Δ_{JL} was determined to be approximately 3.5 cm^{-1} . These findings further support the previous hypothesis that L_{π} and Δ_{JL} are closely related to the size of J_z .

Efforts have been made to determine the **J-L** interaction in $[\text{Ho}(\text{TPP})(\text{cyclen})]^+$ and $[\text{Tm}(\text{TPP})(\text{cyclen})]^+$ using various spin multiplicity and numbers of CIROOT in the calculations. However, despite successfully exciting electrons from π orbitals to π^* orbitals, the identification of SO states associated with the $\pi-\pi^*$ transition remains challenging. This difficulty arise because degenerate doublet excited SO states were not found in these complexes. Additionally, as depicted in Figure 2, the two lowest substates of the ground state do not exhibit degeneracy, leading to a lack of degeneracy in the excited states related to these substates as well. To overcome these challenges, a different computational approach or analysis method is required. Further investigations and refinements are needed to accurately determine the **J-L** interaction and understand the properties of the excited states in $[\text{Ho}(\text{TPP})(\text{cyclen})]^+$ and $[\text{Tm}(\text{TPP})(\text{cyclen})]^+$.

5. Conclusion

Through *ab initio* calculations, the interaction between **J** and **L**, referred to as “**J-L** interaction”, has been determined in $[\text{Ln}(\text{TPP})(\text{cyclen})]^+$. This interaction can manifest in two ways: ferromagnetic-type and antiferromagnetic-type interaction. Thus far, the ferromagnetic-type interaction has been observed in $[\text{Tb}(\text{TPP})(\text{cyclen})]^+$, $[\text{Er}(\text{TPP})(\text{cyclen})]^+$, and $[\text{Yb}(\text{TPP})(\text{cyclen})]^+$, while the antiferromagnetic-type interaction has been observed in $[\text{Dy}(\text{TPP})(\text{cyclen})]^+$. The magnitude of this interaction is obtained by calculating the half-energy separation between the two doublet excited spin-orbit states. It is important to note

that the magnitude of the J_z of the lanthanide ion can influence the strength of this interaction.

Acknowledgements

All calculations have been done using supercomputer system SQUID at the Cybermedia Center, Osaka University.

References

- (1) K. Kizaki, et al., *Chem. Commun.*, **53**, 6168-6171, (2017); T. Fukuda, et al., *Chem. Eur. J.*, **23**, 16357-16363, (2017).
- (2) A. Santria, et al., *Inorg. Chem.*, **56**, 10625-10632 (2017).
- (3) Avogadro: an open-source molecular builder and visualization tool. Version 1.1.1 ; M.D. Hanwell, et al., *journal of Cheminformatics*, **4**, 1-17 (2012)
- (4) M. J. Frisch, et al., Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2019.
- (5) G. A. Petersson, et al., *J. Chem. Phys.*, **94**, 6081-6090, (1991).
- (6) M. Dolg, et al., *J. Chem. Phys.*, **90**, 1730-1734, (1989).
- (7) I. F. Galvan, et al., *J. Chem. Theory Comput.*, **15**, 5925-5964, (2019); P. A. Malmqvist, et al., *J. Phys. Chem.*, **94**, 5477-5482, (1990); P. A. Malmqvist, et al., *Chem. Phys. Lett.*, **357**, 230-240, (2002).
- (8) A. Santria, et al., *Dalton Trans.*, **48**, 7685-7692 (2019)
- (9) A. Santria, et al., *Inorg. Chem.*, **59**, 14326-14336 (2020).

心臓大血管手術における

術前評価や術者トレーニングに応用可能な3次元臓器形状を得るための ディープラーニングを用いた医療画像セグメンテーションの可能性

白川 岳

吹田徳洲会病院 心臓血管外科

大阪大学 大学院医学系研究科 外科学講座 心臓血管外科

1. はじめに

心臓や血管は生存に直結する血液循環のポンプであり流路である。弁膜症や冠動脈狭窄症、大動脈瘤、心奇形などの心血管疾患は、主に形態異常に起因する機能不全であり、手術では形状の修復による機能の改善が目的となる。

一方で心臓大血管手術は危険度が高いことがあり、術者には十分な知識とトレーニングが要求される。近年では、心臓血管外科専門医認定機構により Off the Job Training (ブタ心臓や 3D モデルによるトレーニング) が専門医の認定要件として導入され始めている^[1]。

我々は心臓大血管の 3D モデルや 3D データが

次世代的心臓血管外科手術に必須であると考えた。しかし、形状の自動抽出機能を持つソフトウェアも外科医が要求する精密さには及ばず、症例ごとに数百枚の CT 画像から手作業によるセグメンテーションが必要であった。

これに対し、我々はディープラーニングを用いて形状をニューラルネットワークに学習させ、短時間で正確に 3D データを構築する方法を試みてきた (図 1)^[2-6]。本報告では、膨大な枚数の CT 画像の学習に大型計算機を用い、学習したモデルを実症例の CT セグメンテーションに活用した経験を報告し、有用性と問題点を検討する。

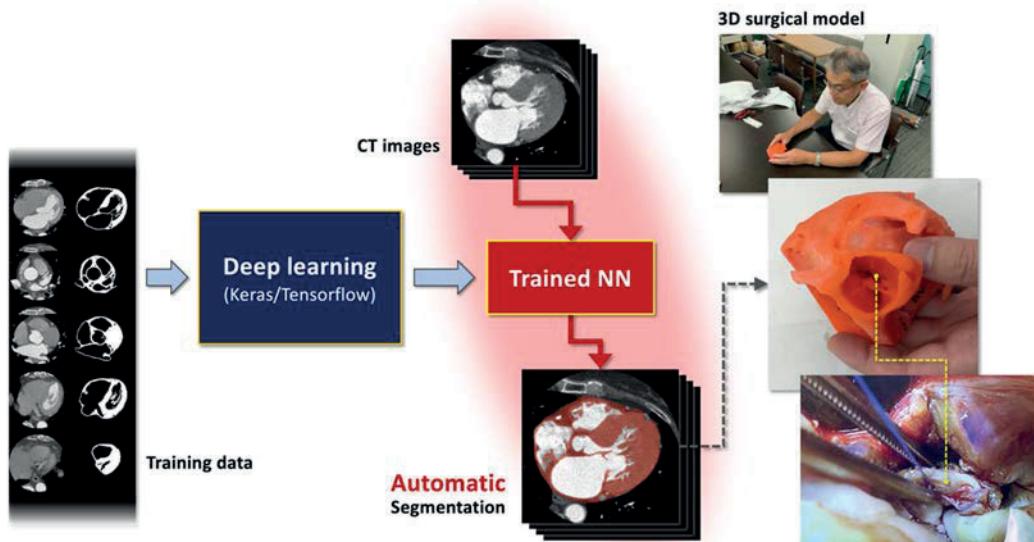


図 1：全体図^[6]

ニューラルネットワークに CT 画像を学習させ、手術症例の CT 画像を自動的にセグメンテーションし、術前評価に必要な 3 次元の形状データを迅速に得る。

2. 症例

心臓と大動脈内腔の形状をセグメンテーションすべき学習対象とした。学習用データは全て心臓血管外科の学会認定専門医が作成・監修し、医学的・解剖学的な正確性を担保した。心臓形状の学習には、左心耳から心尖部までの画像範囲で、匿名化した 24 症例の心電図同期造影 CT 画像をデータ拡張 (Data augmentation) によって 22,045 枚まで拡張して用いた (図 2A)。大動脈内腔には、大動脈弓部三分枝から総腸骨動脈までの範囲で、29 症例の造影 CT 画像を 775,584 枚まで拡張して用いた (図 2B)。

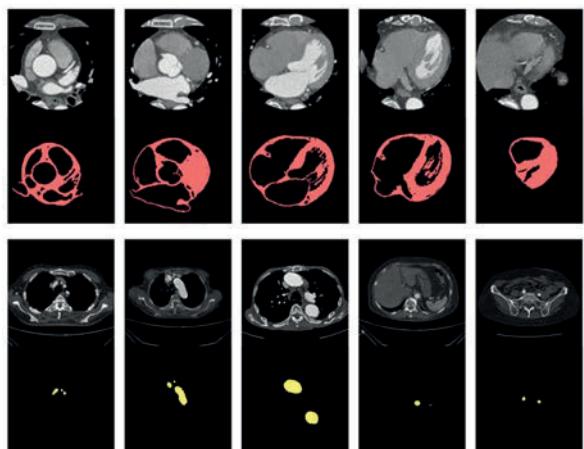


図 2 : CT 画像と形状マスク

上段が心臓 (A)、下段が大動脈内腔 (B) の画像の例。左から右に頭側から尾側の向き。

3. 手法

3.1 ディープラーニング

フレームワークには TensorFlow version 2.5 あるいは 2.7 (Google 社) を採用した。ニューラルネットワークモデルには U-net 型の層を持つオリジナルモデルを採用し、学習を複数回繰り返した。表 1 に計算の詳細を示す。計算機は大阪大学サイバーメディアセンターの公募型利用制度によりスーパーコンピュータ SQUID の GPU ノードをリモートで利用した。

3.2 臨床症例での試用

心臓あるいは大動脈の形状を学習させたモデルからそれぞれ最も Dice 値がよかったものを選

び、パーソナルコンピュータ上の医療画像ビューア OsiriX MD (Pixmeo 社) に実装した。

学習用の症例とは別で、臨床上の必要性で CT 撮影を行った 3 症例の匿名化した心電図同期造影 CT 画像に対して、学習済みモデルによる自動セグメンテーションの結果を心臓血管外科の指導医が構造物ごとに評価した (表 2)。

表 1 : 計算手法と設定値

ソフトウェア	Python 3 TensorFlow version 2.5/2.7
入力データ	造影 CT 画像と形状マスク画像 512×512 pixel 8 bit per pixel
ニューラルネットワーク	オリジナル (U-net 型) パラメータ数 : 37,375,331
設定値	エポック数 : 40 - 200 バッチサイズ : 36 for 1 GPU オプティマイザ : SGD 初期学習率 : 0.005 ロス値 : オリジナル

表 2 : セグメンテーション評価

(A) 心臓

構造	分類	名称
大きく厚い	心筋	左右心室 乳頭筋
大きいが薄い	大血管	バルサルバ洞 上行大動脈 肺動脈
	心房	左心房・左心耳 右心房・右心耳
薄い細い	弁膜	大動脈弁・僧帽弁 肺動脈弁・三尖弁
	腱索	左室腱索
細い血管	冠動脈	冠動脈 冠静脈洞

(B) 大動脈

分類	名称
本幹	胸部 (上行、弓部、下行) 腹部
分枝	頸部分枝 腹部分枝
末梢	腸骨動脈

4. 結果

4.1 学習モデルの性能と計算時間

心臓でもっとも良い学習結果は Dice 値 0.893 であった。複数回の学習で延べ計算時間は 967 時間、全エポック数は 2995 であった。大動脈でもっとも良い学習結果は Dice 値 0.947 であった。複数回の学習で延べ計算時間は 708 時間、全エポック数は 124 であった。

4.2 臨床症例のセグメンテーション

心臓では、比較的大きな構造物である心室や乳頭筋、大血管、心房のセグメンテーションが、心臓血管外科医が期待するものにはほぼ沿っていた。あるいはそれほど大きな修正を要しないセグメンテーションであった。一方で弁膜や腱索、冠動脈などの微細な構造物は途切れていることが多く、人手による修正が必須であった（図 3）。

大動脈では、太い本幹から末梢の腸骨動脈までのセグメンテーションはほぼ満足すべきものであった。しかし細い分枝の付近で本幹のセグメンテーションが乱れていたり、分枝自体がセグメンテーションできていないなど修正が必要であった。

本報告で使用したノートパソコンでは 1,000 枚

ほどの CT 画像の自動セグメンテーションは数分で完了した。

5. 考察

大型計算機を利用できたため、複数プロセスを並列させることができ最も良い学習結果を短時間で選択できた。一方でリモートでの操作のため計算過程が確認しづらく、ローカルシステムで十分にデバッグするか、あるいは適宜ファイル出力して確認するなどの工夫が必要であった。大型計算機に合わせた学習コードの修正が必要であり、外部ライブラリーのバージョンも合わせる必要があった。学習量が増える見込みがある場合は当初より大型計算機を視野に入れたコーディングを検討すべきかもしれない。

学習させたモデルを臨床症例に応用する際、その性能の評価は難しい。適用した症例ごとに人間が正解のマスク画像を作って比較すれば定量評価ができるが、本報告ではそこまでの処理を行う人手と時間が確保できなかった。そのため構造物ごとの主観的な評価となったが、しかし必ずしも「Dice 値や IoU 値の高いセグメンテーション」と「心臓血管外科医として見た良いセグメンテーション」が一致しないことを作業中に感じること

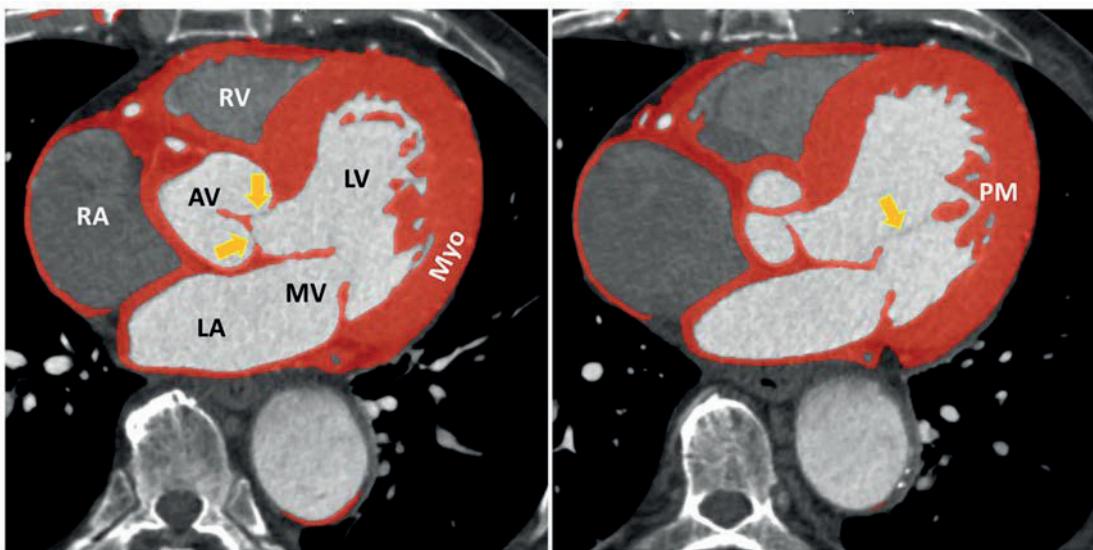


図 3：臨床症例のセグメンテーション

弁膜や腱索などの微細な構造物は途切れていることが多かった。

AV、大動脈弁；LA、左心房；LV、左心室；Myo、心筋；PM、乳頭筋；RA、右心房；RV、右心

はあった。そのことを考えると、臨床症例での評価は専門家による主觀に留めて、人手などのリソースは学習症例の増強などに振り分けたほうが最終的に良いシステムができるかもしれない。

試みで自動セグメンテーションさせた結果を修正せずに 3D 形状に変換したところ、過不足はあるものの全体像の把握や、基本的な解剖の学習には問題ないように見えた（図 4）。Augmented Reality 画像などに変換して医学生や医療スタッフの学習に活用できる可能性が考えられた。さらに、心臓や大動脈瘤の流動解析する際の計算格子データとして応用する、あるいは 3D モデルを造形して流動や変形の実験をすることも可能となるのではないかと考えられた。

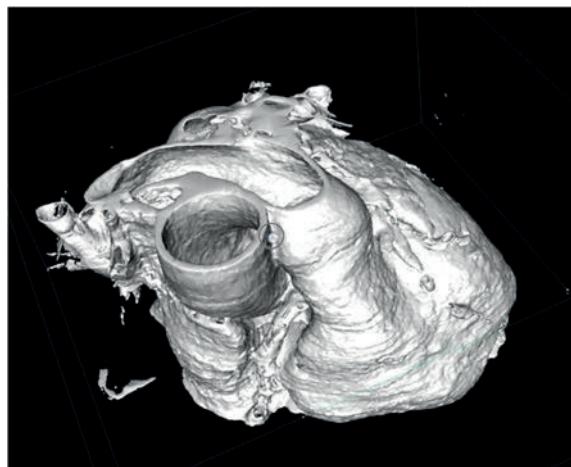


図 4：3 次元形状

6. おわりに

本報告での手法の精度をさらに上げていけば、日常診療での CT 画像から心臓や大血管の正確な 3 次元構造データを短時間で構築できるようになる。症例ごとに正確な術前評価や術式の検討が可能となり、より安全で最適な外科治療を提供できるようになるだろう。また手術トレーニングに利用する 3D モデルの造形に要する時間やコストを削減できるようになる可能性がある。

謝辞

本報告では、大阪大学サイバーメディアセンターの公募型利用制度（人工知能研究特設支援枠）

の支援によりスーパーコンピュータ SQUID の計算資源を利用しました。また CT撮影には吹田徳洲会病院放射線科撮影室より様々な助言を頂きました。これらの支援に心より感謝を申し上げます。

参考文献

- (1) 心臓血管外科専門医認定機構 - Off the Job Training <<http://cvs.umin.jp/security/ojt.html>>
- (2) Takashi Shirakawa, et al. 3D-Printed Aortic Stenosis Model with Fragile and Crushable Calcifications for Off-the-Job Training and Surgical Simulation. Multimedia Manual of Cardiothoracic Surgery. 2018 May 14;2018. doi: 10.1510/mmcts.2018.018.
- (3) Takashi Shirakawa, et al. Off the Job Training of Sutureless Heart Valve with 3D Calcified Aortic Stenosis Model. IFAO annual meeting 2019 (International Federation for Artificial Organs) – invited speaker for a workshop. Nov. 2019, Osaka.
- (4) 白川岳. 心臓 3 次元モデルを用いた SHD の病態評価と学習・トレーニングへの活用. 第 84 回日本循環器学会学術集会シンポジウム：構造的心疾患(SHD)治療における画像支援 – 招聘講演. 2020 年 8 月, オンライン.
- (5) Takashi Shirakawa, et al. Automatic Heart Segmentation from Cardiac CT Images for 3D Surgical Model using Deep Learning. BMES annual meeting 2020 (Biomedical Engineering Society). Oct. 2020, online.
- (6) Takashi Shirakawa, et al. Automated Heart Segmentation using a Convolutional Neural Network Accelerates 3D Model Creation for Cardiac Surgery. Annual Meeting of European Association of Cardiovascular Imaging - Best of Imaging 2020. Dec. 2020, online.

深層学習を用いたスーパーコンポジット電気絶縁材料の創成

嶋川 肇

東京大学 大学院工学系研究科

1. はじめに

人工知能 (AI) や機械学習 (ML) の手法を取り入れたデータ駆動型の材料開発手法として、マテリアルズ・インフォマティクス (MI: Materials Informatics) が注目を集めている[1, 2]。物性予測と構造探索により得られた新規材料を実際に合成して性能評価まで行った例として、従来材料と比べて熱伝導率が約 80% 高いポリマー材料[3]の開発や、実験データの不完全性を考慮したスピンドル駆動型熱電材料[4]の開発などがある。

電力分野に目を向けると、再生可能エネルギー電源の大量導入が進められ、電力機器には今まで以上の環境適応、コンパクト化、耐候性向上などが求められている。要求が多様化・過酷化する一方、高分子絶縁材料の電気絶縁性と熱伝導性や、絶縁ガスの絶縁性と環境負荷のように、トレードオフの関係にあるため両立が困難な特性も多い。過酷化する複合要件のトレードオフの中で所望の機能を担保するには、大規模な組合せ最適化・新規材料の探索を視野に入れた、経験則に頼らない材料開発手法の構築が不可欠である。また、誘電絶縁材料を扱う電力分野は、放電・絶縁破壊を始めとする高電界現象や、誘電絶縁材料の構造自身の複雑さにより、理論ベースの演繹的な理解が難しい分野だと言える。以上のことから、誘電絶縁材料の創出に MI を活用することは大変意義深い試みと言える。

本研究では、MI 技術を活用した誘電絶縁材料の物性予測および構造探索を行う。特に本稿では、深層学習を用いたコンポジット型電気絶縁ポリマー材料の創成に向けて、プロセス条件を加味したコンポジット型ポリマー材料の熱物性・電気物性の予測、および絶縁ガス材料を題材とした深層学習による分子構造生成と大規模スクリーニング手法の検討を行ったので報告する。

2. コンポジット型ポリマー材料の熱・電気物性予測

2.1 背景

ポリマー材料の MI 技術はポリマーインフォマティクスと呼ばれ、いま急速に発展が進んでいる。PoLyInfo [5] や Polymer Genome [6] といったデータベースの構築を発端とし、13,000 種類以上のポリマーの 36 種類の物性データをもとに、複数の物性を同時に予測するマルチタスクの深層学習モデル[7]や、コンポジット材料のフィラー分散画像をもとに物性予測を行う畳み込みニューラルネットワーク (CNN) モデル [8] などが報告されている。また、コンポジット型を含めたポリマー材料の合成条件や各物性の測定条件といったプロセス条件を適切に抽出することが今後最も重要な点だと考えられている。今回はコンポジット型ポリマー材料の電気物性および熱物性を予測するなかで、それらの物性予測における特微量の重要性を検討した。

2.2 手法

予測対象はポリマー 14 種とフィラー 10 種からなるコンポジット材料の熱伝導率と電気伝導率である。複合条件を入力情報とする機械学習の予測結果をもとに特微量の重要性を評価した。データセットは PoLyInfo や POLYMER HANDBOOK などに掲載される熱伝導率 233 点と電気伝導率 1388 点の実験結果から成り、材料種だけでなくフィラーの体積充填率 (vol%) や測定温度、サンプル厚み、その他のプロセス条件を含む。ポリマー情報は DFT 計算により得られる電子数 Ne、垂直イオン化エネルギー Eiv、垂直電子親和力 Eav、ギブス自由エネルギー G で与え、フィラー情報はそれぞれのフィラータイプおよび [導電材料、半導電材料、炭素材料] のラベルを One-Hot 入力で与えた。また、プロセス条

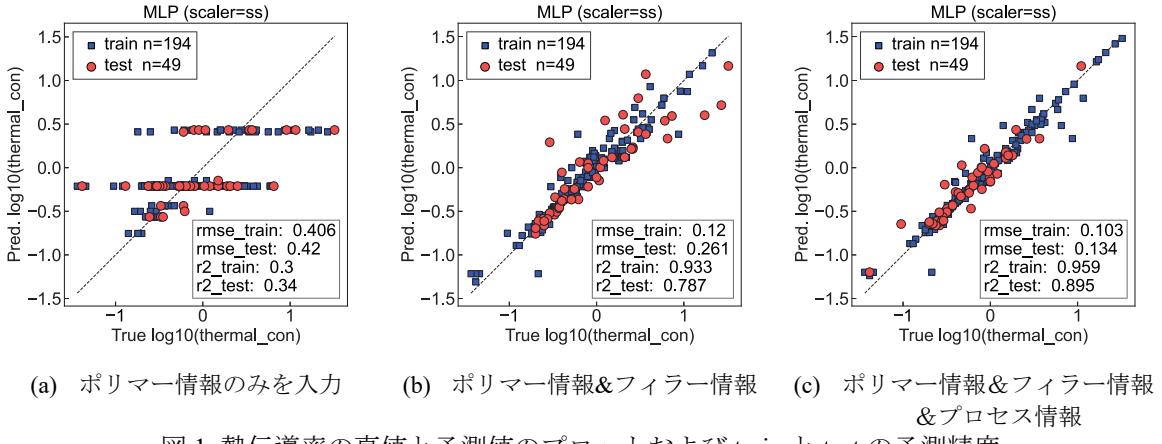


図 1 热伝導率の真値と予測値のプロットおよび train と test の予測精度

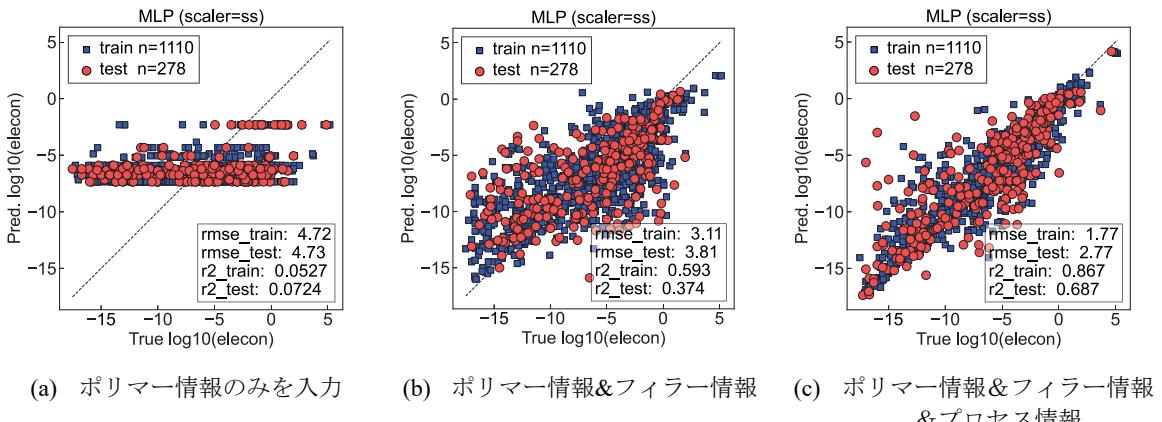


図 2 電気伝導率の真値と予測値のプロットおよび train と test の予測精度

件として体積充填率と測定温度、サンプル厚みは数値で与え、その他の情報は Bag-of-words により単語ごとの出現頻度を抽出して与えた。学習モデルには多層ペーセプトロン (MLP) を使用した。特徴量の重要度評価では、部分的最小二乗回帰 (PLS) による重要度分析と、MLP 学習において追加型特徴量選択および削除型特徴量選択を実施した。

2.3 結果

熱伝導率および電気伝導率の予測結果を図1、図2にそれぞれ示す。左から順に、ポリマー情報、フィラー情報および [vol%・測定温度・サンプル厚み]、プロセス条件を追加して学習した場合の真値と予測値の関係である。予測精度をテストデータの決定係数 R^2_{test} で評価すると、特徴量の追加ごとに精度の向上が見て取れる。予測精度が大きく上昇した点に着目すると、熱

伝導率はフィラー情報を追加したときであり、電気伝導率ではプロセス情報を追加したときであった。

各特徴量の重要度を PLS 回帰を用いて評価した結果、熱伝導率では vol% とフィラーリー種の重要度が高くなった一方、電気伝導率は PLS 回帰での予測精度が不十分であった。そこで MLP での特徴量選択により電気伝導率の特徴量重要度を評価した結果、ポリマー材料の導電性や使用特性を表すワード、サンプル形状、重合条件のワードを追加した場合に予測精度が向上することが分かった。

3. 深層学習による電気絶縁ガスの構造生成

MI 技術を活用した材料設計では、物性予測だけでなく既存データにはない分子構造の生成および探索が必要になる。本研究ではコンポジット

ポリマー材料の創成に向けた先行検討として、より構造が単純な電気絶縁ガスについて深層学習を用いた分子構造生成を行ってきた。

従来広く使用してきた電気絶縁ガスの SF₆は地球温暖化係数 (GWP) が CO₂ のおよそ 23、500 倍であり、環境負荷の高さが問題視されている[9]。そこで本研究では MI を用いて SF₆を代替する環境適合型の電気絶縁ガスの開発に向けて、分子構造のみから絶縁破壊強度、GWP、沸点を同時に予測する機械学習モデルを構築した。さらに深層学習を用いて既存データにはない分子構造を生成し、学習済みの物性予測モデルを用いて絶縁破壊強度、GWP、沸点の予測値を求めて、高絶縁かつ低 GWP となる電気絶縁ガスを探査した。

分子生成モデルは Grisoni らの SMILES 生成モデル[10]を利用した。RNN (Recurrent Neural Network) ベースで大量の分子データセットから SMILES 文字列の規則性を学習するモデルである。SMILES の中央付近の文字から左右双方向に学習を進める Bidirectional モデルであり、RNN の学習時に初期入力の情報欠落を抑制する効果がある。生成の場合はランダムに与えた一文字目から学習済みの規則性にしたがって SMILES 文字列が生成される。ランダムな原子や結合が選択されることで、学習用データに無い新たな分子構造を生成することができる。今回はガス分子の探索を行うため、学習に用いる沸点の低い分子の生成を行った。分子量の小さな分子を多数用意するため、PubChem に掲載されるおよそ 500 万分子のなかで任意の最大共通部分構造を抽出し、分子量が 200 以下の 16 万分子を生成した。ただし、16 万分子のほとんどは H, C, N, O のみで構成される。そこでガス分子の探索領域を拡大するために F, Cl を含む分子の生成を行った。具体的には、生成済みの 16 万分子から無作為に分子を選択し、分子中の H を F または Cl で無作為に置換することで新たに 30 万分子を生成した。ガス分子の探索ではこの 2 つのデータセットを別々に使用し、構成原子の違いによる物性の違いを評価した。

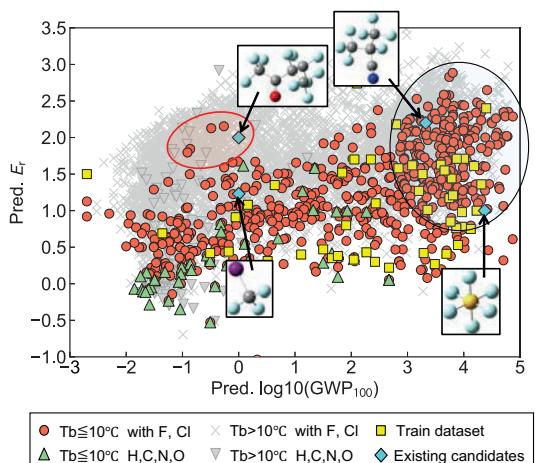


図 3. 生成分子の絶縁破壊電界と GWP の予測結果および既存分子の実験値のプロット

生成した分子のうち沸点が 10°C 以下のものについて、GWP を横軸、絶縁破壊電界を縦軸とした散布図を図 3 に示す。赤点と緑点が生成分子であり、黄色点と水色点が既存分子である。右上の領域は GWP が高いため、環境適合性が悪い分子である一方、左上の領域に高絶縁性かつ低 GWP である分子が得られた。獲得分子は左上の既存候補 C₅F₁₀O と近い分子構造をしていたが、C₅F₁₀O では沸点が 27°C と高いことが弱点となっていたのに対し、生成分子は沸点が低く、既存候補の弱点を克服する物性が得られた。以上のように、本手法によって、既存分子の弱点を克服し得る環境適合型の電気絶縁ガス候補が得られた。

4. おわりに

コンポジットポリマー材料の熱伝導率と電気伝導率の予測を行い、特徴量の重要度を評価した。熱伝導率ではフィラーの体積充填率が大きな影響を与える一方、電気伝導率ではフィラー情報のみでは十分な予測精度が得られず、プロセス条件を入力することが有効だと示された。SF₆ 代替ガスの探索では、分子構造のみから沸点、絶縁破壊電界、GWP を予測するモデルを構築し、高絶縁かつ低 GWP のガス分子を探査した。分子生成モデルと物性予測モデルを組み合わせてガス分子の探索を行ったところ、沸点 0°C 以下かつ GWP

が 1 以下で SF₆ の 2 倍の絶縁破壊強度をもつ分子構造が複数得られた。

参考文献

- (1) A. S. Alshehri, R. Gani, and F. You, *Comput. Chem. Eng.*, **141**, 107005 (2020)
- (2) K. Choudhary, et al., *npj Computational Materials*, **8**, 1, 1–26 (2022)
- (3) S. Wu, et al., *npj Computational Materials*, **5**, 1, 1–11 (2019)
- (4) Y. Iwasaki, et al., *npj Computational Materials*, **5**, 1, 1–6 (2019)
- (5) Polymer Database: PoLyInfo:
<https://polymer.nims.go.jp/PoLyInfo/cgi-bin/p-search.cgi>
- (6) Polymer Genome:
<https://www.polymergenome.org/>
- (7) C. Kuenneth et al., 2021, Patterns 2, 100238 (2021)
- (8) Y. Wang, et al., *Mol. Syst. Des. Eng.*, **5**, 5, 962–975 (2020)
- (9) S. Tian, et al., *AIP Adv.*, **10**, 5, 050702 (2020)
- (10) F. Grisoni, et al., *J. Chem. Inf. Model.*, **60**, 3, 1175–1183 (2020)

環状分子と線状高分子から成るポリロタキサンの分子ダイナミクス

眞弓 翔一

東京大学 物性研究所

1. はじめに

複数の分子を幾何学的な拘束によって連結したトポロジカル超分子は、構成要素間の相対的な運動自由度を有していることが最大の特徴であり、新規機能性材料への応用が試みられている。特に、環状分子を軸分子が貫通したロタキサンは、環状分子が軸分子上をスライド・回転することができ、この分子内運動自由度を利用した分子マシンの開発に対して2016年ノーベル化学賞が授与された [1]。ロタキサンの応用は分子スケールのデバイスにとどまらず、近年はマクロスケールの材料の機能化にも活用されている。特に、 α シクロデキストリン (α CD) を環状分子、ポリエチレングリコール (PEG) を軸分子とする超分子・ポリロタキサン (PR) は、水中の自己組織化による高収率な合成が可能であることから、グラムスケールでの合成が求められるマクロ材料開発によく用いられている（図1上）[2]。ポリロタキサンを用いたバルク材料の代表例としては、その環状分子間を連結してネットワーク化した環動ゲルが挙げられる（図1下）[3]。環動ゲルを変形させると、8の字の架橋点が軸高分子上をスライドすることでネットワーク構造が均一化され、応力集中が緩和される。その結果、環動高分子材料は、共有結合で直接高分子鎖が架橋された通常の高分子架橋材料と比べて優れた強靭性を示す[4]。特に、環状分子数を可能な限り少なくした包接率2%の低包接率ポリロタキサンからなる環動ゲルは、延伸すると均一に引き延ばされたPEG鎖が結晶化する（伸長誘起結晶化）ことで、高分子ゲルとして最高水準の強靭性を示すことが明らかとなっている [5]。このように、ロタキサン構造が生み出す特異な物性・機能は、ナノ

レベルにおける環状分子のスライド運動が生み出しているが、その分子ダイナミクスは十分に解明されてこなかった。ポリロタキサンの環状分子および軸高分子モノマーの並進運動については、中性子準弾性散乱法を用いて、実験的に観察されているが [6]、環状分子と高分子鎖の相対運動であるスライド運動は、実験的に観測することが極めて困難である。

そこで、我々はCDとPEGからなるポリロタキサンについて、溶液中の分子運動を全原子分子動力学 (MD) シミュレーションによって調べた [7]。特に、CDがPEG上でスライドする運動モードに着目し、スライド運動の支配因子について考察した。

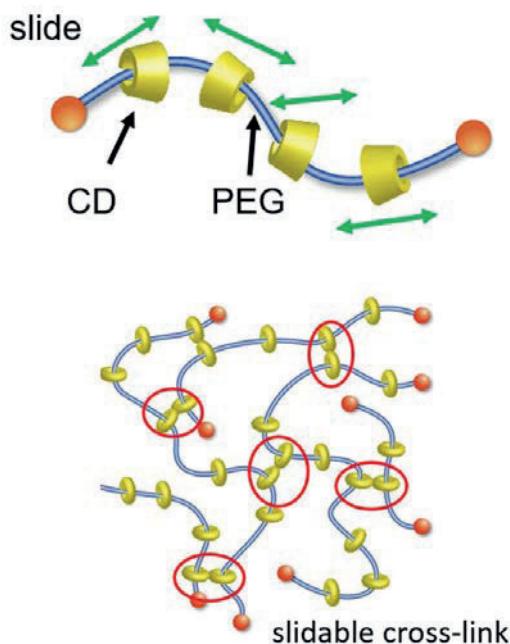


図1：(上) CDとPEGからなるポリロタキサンの模式図、(下) ポリロタキサンの環状分子間を架橋した環動ゲルの模式図

2. ポリロタキサン溶液の全原子 MD シミュレーション

PEG を主鎖とし、環状分子が α CD であるポリロタキサンについて、溶媒中での全原子分子動力学シミュレーションを行った。PEG 鎮の重合度は 80mer、PEG 上の α CD 数を 3 分子とすることで包接率を 7% のポリロタキサンを用意した。末端の水素原子の LJ 半径を十分大きく設定することで、CD が PEG から抜け出ないようにした。一辺 15nm の立方体セル内にポリロタキサンを 1 分子配置し、ボックス内に溶媒であるジメチルスルホキシド (DMSO) を満たすことで溶液中のポリロタキサンの運動を計算した。力場は CHARMM35r/36/36 を用い、実際の計算には GROMACS を利用した。

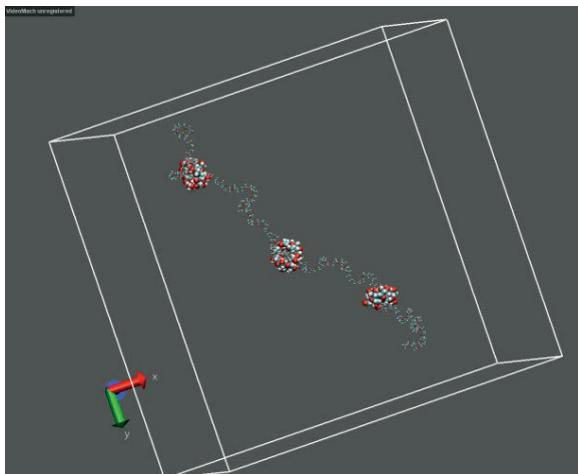


図 2 : α CD と PEG からなるポリロタキサンのスナップショット

まず、絶対座標における α CD および PEG モノマーの並進拡散係数を算出し、中性子準弾性散乱法 (QENS) による実験結果と比較した。表 1 に、PEG のみの溶液における PEG モノマーの拡散係数、 α CD のみの溶液における α CD の拡散係数、ポリロタキサン溶液中における α CD の拡散係数を示す (温度 : 300 K)。MD 計算によって見積もった拡散係数は、QENS 測定で実測した結果とほぼ整合しており、本研究で用いた分子モデルが、現実の分子ダイナミクスを再現していることが確認できた。

表 1 : QENS 測定および MD シミュレーションによって見積もった PEG のみの溶液における PEG モノマーの拡散係数、 α CD のみの溶液における α CD の拡散係数、ポリロタキサン溶液中における α CD の拡散係数 (温度 : 300 K)

Sample	Free PEG	Free CD	CD in PR
D^* (QENS) [$10^{-7} \text{ cm}^2/\text{s}$]	40	13	11
D (MD) [$10^{-7} \text{ cm}^2/\text{s}$]	27	12	8.6

次に、 α CD の PEG 上におけるスライド運動を定量した。 α CD が近接している PEG モノマーを追跡することで、PEG 鎮に沿った座標系における α CD の平均二乗変位を算出した。図 3 に示したように、 α CD のスライド運動に対応する平均二乗変位は時間に対して線形に増加し、この傾きがスライド拡散係数に対応する。また、温度を上げると、スライド拡散係数は大きくなった。温度 300 K におけるスライド拡散係数は $1.42 \text{ \AA}^2/\text{ns}$ であり、同じ温度における α CD の並進拡散係数 $8.6 \text{ \AA}^2/\text{ns}$ の 15% 程度であった。つまり、 α CD の PEG 上におけるスライド運動は、 α CD 自身の並進拡散よりも著しく遅いことが分かり、このことは、ポリロタキサンにおけるスライド運動が α CD・PEG 間の分子間相互作用によって抑制されていることを示唆している。

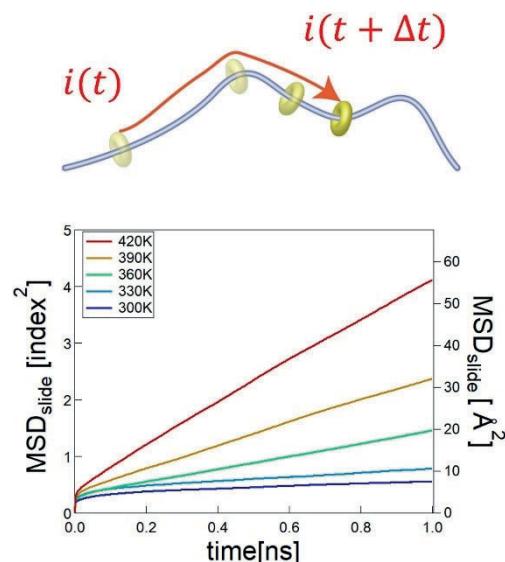


図 3 : α CD の PEG 上に沿った平均二乗変位の時間変化 [7]

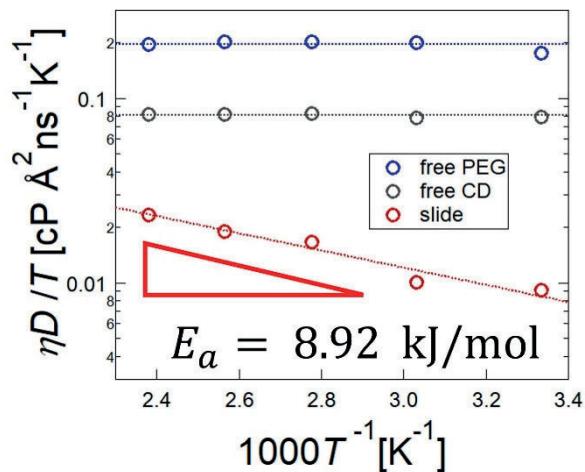


図 4： 温度および溶媒粘度で規格化した拡散係数の温度依存性（PEG のみの溶液における PEG モノマーの拡散係数、 α CD のみの溶液における α CD の拡散係数、ポリロタキサン溶液中におけるスライド拡散係数）[7]

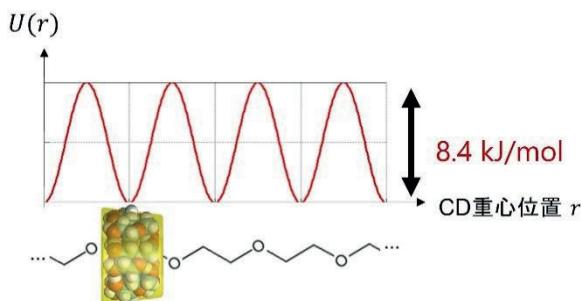


図 5： α CD の PEG 上におけるエネルギープロファイル [6]

図 4 にスライド拡散係数の温度依存性を整理した。溶媒の粘度 η および温度 T の影響を取り除くために、拡散係数を η と T で規格化している。図 4 には、PEG のみの溶液における PEG モノマーの並進拡散係数、 α CD のみの溶液における α CD の拡散係数の温度依存性も合わせて示している。PEG モノマーおよび α CD の規格化並進拡散係数は温度に対して一定であることから、両者の並進運動は Stokes-Einstein 式に従うブラウン運動であると理解することができる。一方で、規格化したスライド拡散係数は温度依存性を示すことから、 α CD の PEG 上におけるスライド運動はエ

ネルギー障壁のあるジャンプ拡散であることが分かった。規格化スライド拡散係数の温度依存性から、活性障壁は 8.92 kJ/mol と見積もられた。先行研究より、 α CD の PEG 上におけるエネルギープロファイルを算出すると、 α CD と PEG モノマーの位置関係によって 8.4 kJ/mol のエネルギー障壁があることが分かっており、スライド拡散係数から見積もった活性化エネルギーとよい一致を示している。

以上の結果より、 α CD と PEG からなるポリロタキサンにおいて、スライド運動は α CD の内壁と PEG 間の分子間相互作用に支配されたジャンプ拡散であることが分かった。ポリロタキサンのスライド拡散を加速させるには、CD の内孔を大きくして、PEG との相互作用を弱めすることが有効であると推察される。そこで、 α CD よりも大きな環状分子である β CD と PEG からなるポリロタキサンにおいても同様に全原子 MD シミュレーションを行い、環状分子の大きさがポリロタキサンのスライド拡散にどのような影響を及ぼすのかを調べた。図 6 に α CD および β CD の PEG 上における平均二乗変位を示す。 β CD の方が α CD よりも大きな平均二乗変位を示しており、内径の大きな β CD は、 α CD よりも速い速度で PEG 上をスライドすることが明らかとなった。

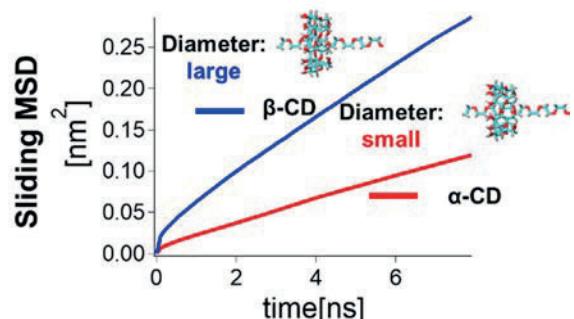


図 6： α CD および β CD の PEG 上に沿った平均二乗変位の時間変化

3. おわりに

本研究では、ポリロタキサンのスライド運動について全原子 MD シミュレーションによって調べた。環状分子である CD の内壁と軸分子である PEG モノマーとの相互作用によって、CD は PEG 上におけるエネルギー障壁を乗り越えてジャンプ拡散していることが分かった。このエネルギー障壁は、CD の環サイズを大きくすることが低減することができ、より大きな環状分子である β CD は、 α CD よりも速い速度で PEG 上をスライドすることが明らかとなった。これらの知見は、ポリロタキサンにおけるスライド運動を制御するための分子設計指針を与え、ポリロタキサンを基盤とした機能性デバイス・材料の開発に資するものである。

本研究は、東京大学大学院 新領域創成科学研究科 伊藤 耕三先生、横山 英明先生、保田 侑亮博士（現 産業技術総合研究所）、篠原 悠氏、名古屋大学 岡崎 進先生（現 東京大学）、藤本 和士先生（現 関西大学）との共同研究である。

Ito., J. Am. Chem. Soc., **141**, 9655–9663 (2019).

参考文献

- (1) C. J. Bruns, J. F. Stoddart, Acc. Chem. Res., **47**, 2186-2199 (2014).
- (2) K. Ito, K. Kato, K. Mayumi, “Polyrotaxane and slide-ring materials”, Royal Society of Chemistry, (2015).
- (3) Y. Okumura, K. Ito, Adv. Mater., **13**, 485–487 (2001).
- (4) C. Liu, H. Kadono, K. Mayumi, K. Kato, H. Yokoyama, K. Ito, ACS Macro Lett., **6**, 1409-1413 (2017).
- (5) C. Liu, N. Morimoto, L. Jiang, S. Kawahara, T. Noritomi, H. Yokoyama, K. Mayumi, K. Ito., Science, **372**, 1078-1081 (2021).
- (6) K. Mayumi, Polym. J., **53**, 581-586 (2021).
- (7) Y. Yasuda, Y. Hidaka, K. Mayumi, T. Yamada, K. Fujimoto, S. Okazaki, H. Yokoyama, and K.

キャビテーション乱流の CFD データベースを用いた データ駆動型キャビテーションモデルの開発に関する研究

岡林 希依
大阪大学 大学院工学研究科

1. はじめに

近年、数値流体力学（Computational Fluid Dynamics; CFD）の分野において、畳み込みニューラルネットワーク（convolutional neural networks; CNN. 以下、ニューラルネットワークを NN と略する）の画像認識機能を応用し、流れ場データを画像のピクセルデータと見なした教師あり学習の例が急増している。中でも、NN で従来の数理モデルを代替する、データ駆動型モデルが注目を集めている。また、近年の実験流体力学では、光学計測と画像処理を利用した計測法の発達により、センサ類から得られる点データだけでなく、流れ場全体や断面、物体表面などの二次元データを蓄積することができるため、このような計測データを CNN の学習データセットとして扱うことも可能になってきている。これらの手法はデータ駆動型モデルとしての側面の他にも、いわゆるデータ同化としての側面も持ち合わせており、計測データを援用することで、数理モデルによる現象のモデル化など CFD の不確定性を補正する役割が期待されている。

著者は、相変化を伴う気液二相流であるキャビテーション流れの数値シミュレーション研究 [1,2] の経験から、多様なキャビテーション現象とそれに付随する課題を統一的に表せる数理モデルが開発されるには至っていないこと、先行するキャビテーション流れの実験的研究によって高精度な計測データが多数取得されていることに着目した。そして、モデル開発のためのブレークスルーとして、NN が表す非線形関数により数理モデルよりも柔軟な表現が可能であり、かつ計測

データを用いることによるデータ同化の側面も持ち合わせたデータ駆動型キャビテーションモデルを開発するという着想に至った。本稿では、計測データを学習させる前の準備段階として、CFD データベースを学習データとしたデータ駆動型キャビテーションモデルの枠組みについて紹介する。また、その研究要素として、計測データを想定した二次元場から三次元場への拡張についても紹介する。

2. CFD データを学習させたデータ駆動型キャビテーションモデル

図 1 に CFD データ（数理モデルで計算した）を学習させた NN に基づくデータ駆動型キャビテーションモデルの概念図を示す。これは現ステップの気液密度、速度、圧力の各流れ場 $\rho_m^{(n)}$, $\mathbf{u}^{(n)}$, $p^{(n)}$ を入力とし、次ステップの気液密度場 $\rho_m^{(n+1)}$ を予測する回帰モデルの構築に帰着する。学習データセットは、数理モデルで計算した翼周りのキャビテーション流れであり、その中でもキャビティの初生、シートキャビティの発達、クラウドキャビティの放出などの一連の現象を周期的に繰り返す非定常性が比較的強い条件を採用する。図 1 の A priori テストにおける学習モードでは上記の二周期分のデータ（3000 枚の瞬時場）、テストモードでは約半周期分のデータ（1000 枚の瞬時場）を用いる。NN として、U-Net[3]を用いる。学習後、NN を流れのシミュレーションコードに実装した、図 1 の A posteriori テストにおいて、図 2 のように数理モデルとほぼ同じ流れ場が予測できた[4]。しかしながら、現時点では数周期のキャ

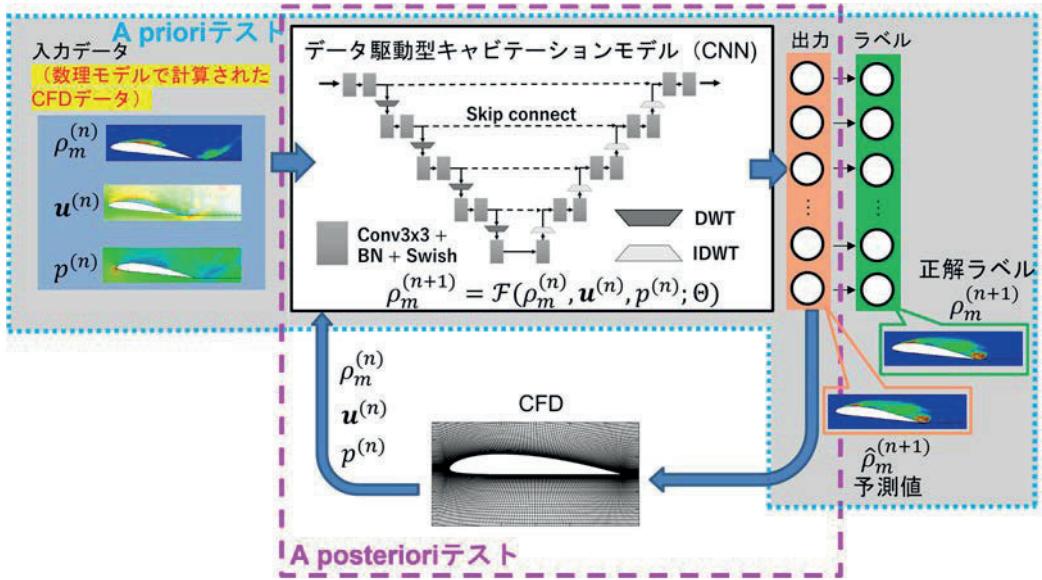
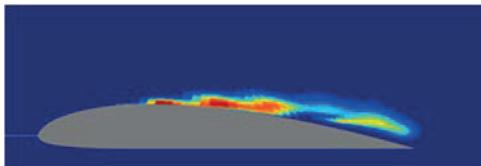
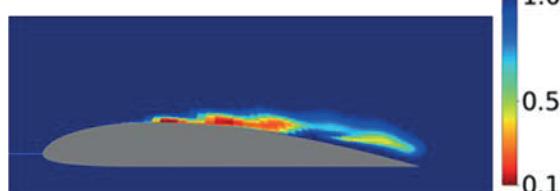


図 1 : CFD データを学習するデータ駆動型キャビテーションモデルの概念図



(a) データ駆動型モデル



(b) 数理モデル[4]

図 2 : 各モデルでの気液密度場

ビテーション現象をシミュレートしたのち計算が不安定化している。発散に至ったきっかけの計算セルでは、リエントラントジェットと称する翼後縁付近での逆流現象や、クラウドキャビティと翼端渦キャビティの干渉など、非定常性の強い現象が起こっており、NN がこれらの急激な変化を示す時間微分項を高精度で予測できていないことが不安定化の原因であることがわかっている。非定常現象の再現が困難であるのは、数理モデルによるシミュレーションにおいても共通している。時間微分項の誤差は翼端など非常に小さい領域で局所的に生じるため、そのような誤差が NN

で最小化すべき損失関数に反映されるような工夫が必要であることが示唆される。

3. 超解像 NN を用いた二次元→三次元データへの拡張

粒子画像流速計測 (PIV)、圧力センサ、高速度カメラなどの計測で得られる場は高々二次元 (物体にフラッシュマウントされた圧力センサでは特に一次元しかない) であり、そのまま三次元流れの学習に持ち込むことができない。そこで、計測データを想定した二次元流れ場を入力し、CFD データを援用して三次元流れ場を出力する機械学習モデルを開発する。NN には超解像 NN[5]を用いる。超解像機械学習とは、低解像度画像から高解像度画像を出力するパターンを機械学習で予測するものであり、一種の補間技術に相当する。これを二次元場から三次元場への高次元化に応用することを考える。

図 3 に二次元の CFD データの物理量を入力として、三次元流れ場を推定する超解像 NN の概念図を示す[6]。学習データには迎角 8 度、キャビテーション数 σ (飽和蒸気圧の無次元数であり、 σ が大きいほどキャビテーションが発生しにくい) が 1.2 の翼周りのキャビテーション流れにおける速度場、圧力場、気液密度場を採用する。この条件

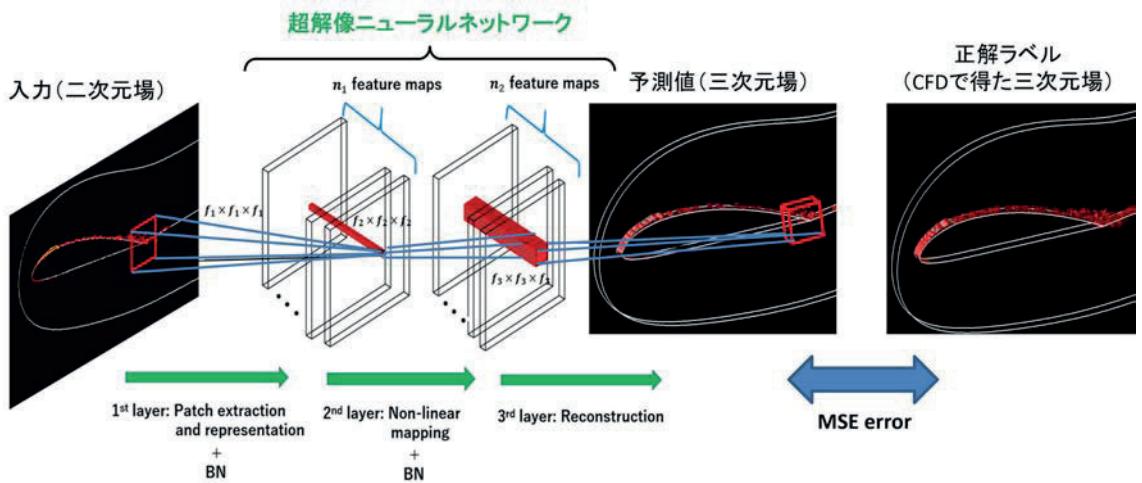


図3：超解像ニューラルネットワークを用いた流れ場の高次元化の模式図[6]

の流れ場は、シートキャビティ振動、クラウドキャビティの放出などの周期的で非定常なキャビテーション現象が起こる。この周期的な時系列の流れ場を約2周期分学習に用いる。物理量（速度三成分 u, v, w 、圧力、気液密度）ごとにNNを用意し、独立に学習させる。入力の二次元場としては、現時点では仮に教師ラベル三次元のCFDデータの翼スパン方向断面を用いる。ただし、スパン方向速度成分 w は二次元場には存在しないため、 w を予測するNNの入力は、断面に沿う成分の一つである v を代わりに用いる。また、テストデータ（予測性能の評価に用いる、学習したものとは異なるデータ）として、迎角8度、 $\sigma=2.0$ の時系列の流れ場を約1周期分用いる。 $\sigma=2.0$ の場合は、シートキャビティが定在し、学習に用いた $\sigma=1.2$ よりも非定常性の小さい流れ場である。

図4に時間平均・スパン方向平均した速度のテストデータ（正解）と、予測値をそれぞれ示す。図4から、断面に沿う速度成分 u, v は定性的には妥当に予測できていることがわかる。しかしながら、二次元場には存在しない w は妥当ではない結果が得られている。図3の模式図では、予測値の三次元場において、下流の縦渦が再現されていないことが、速度のスパン方向成分が妥当でないことを示している。図5に時間平均・スパン方向平均した翼面上の圧力係数(C_p)分布を示す。キャ

ビテーションが発生する領域は飽和蒸気圧に保たれ、 C_p 分布は $x/C=0\sim0.2$ のように平たんとなる。予測値から求めた C_p 分布も平たんな部分が $x/C=0\sim0.2$ に存在するが、値はテストデータから計算した C_p より小さい。 $\sigma=2.0$ の条件では $x/C=0\sim0.2$ にシートキャビティが定在する。一方、 $\sigma=1.2$ の条件ではシートキャビティ長さが振動し、 $x/C=0\sim0.2$ にキャビティが定在しないので、その流れ場を学習したNNが、シートキャビティが定在するときの圧力を予測できず、 C_p 分布の平たんな部分が小さくなつたと考えられる。

4. おわりに

キャビテーション流れの数値シミュレーションにおいて、数理モデルを代替する、データ駆動型キャビテーションモデルの枠組みを構築した。学習データセットには、簡易に取得・学習可能な二次元のCFDデータを用いた。また、将来的に学習データセットとする計測データは、高々二次元であることが多いため、超解像ニューラルネットワークを用いて、三次元の流れ場に拡張を試みた。その結果、概ね定的には妥当な三次元流れ場を得たが二次元で計測できない速度の成分については予測できなかった。Physics-informed NNなどの損失関数に物理的な特徴を含めるような工夫が必要と考えられる。

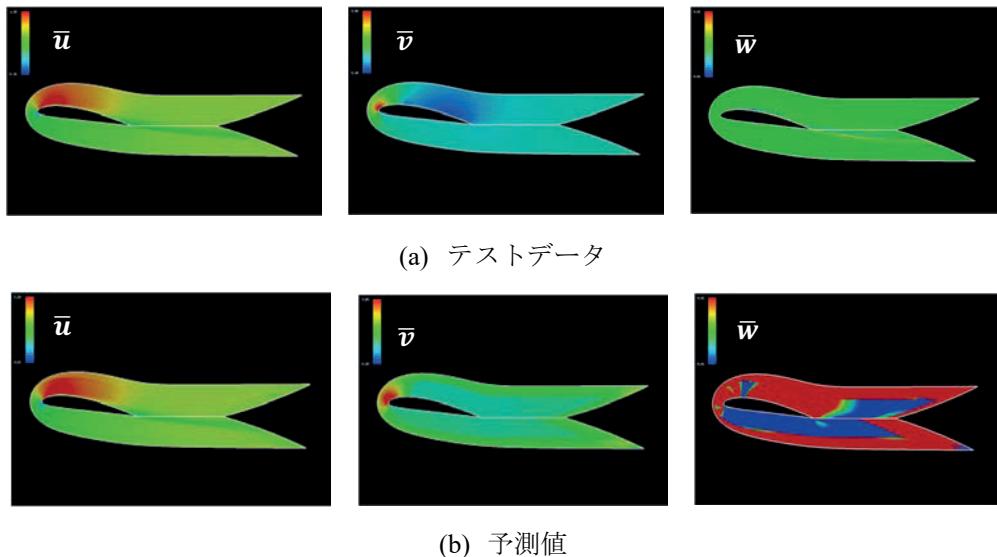


図 4 : 拡張された速度場の時間平均・スパン方向平均分布[6]

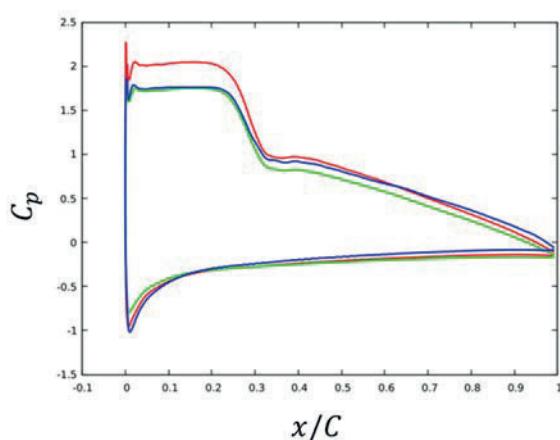


図 5 翼周りの圧力係数分布[6] (赤: テストデータ, 青・緑: 予測値 (青と緑はカーネルサイズが異なる))

参考文献

- (1) 岡村 俊吾, 岡林 希依, 混相流 (日本混相流学会誌論文特集 : 混相流研究の進展) 掲載予定, (2023).
- (2) 岡林 希依, ながれ (注目研究 in CFD36) **42**(2), 87-90, (2023).
- (3) O. Ronneberger et al., Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics), **9351**, 234-241, (2015).
- (4) 野田 隼司, 大阪大学修士論文, (2023).
- (5) C. Dong et al., IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell. **38**(2), 295-307, (2016).
- (6) 斎藤 有輝, 大阪大学卒業論文, (2023).

表面濡れ性パターンを駆動力とするフラクタル開放型マイクロ流路における、液滴輸送・収集の構造機能相関の系統的理解

甲斐 洋行

東京理科大学 理学部第一部応用物理学科

1. はじめに

微小水滴を基板表面で輸送・操作する開放型マイクロ流路 (open microfluidic channels) の研究が行われている[1,2]。通常のマイクロ流路においてはポンプなどの外部圧力によって管状構造の内部を流体が移動するのに対し、開放型マイクロ流路では、濡れ性の高い部分の幅に勾配をもたせることで、液滴の毛管力の不釣り合いを生じ、水滴が一方向に輸送される。筆者はこれまでに、水滴を一方向輸送する開放型マイクロ流路を階層的なフラクタル分岐を有する「空間充填木」構造で基板上の三角形の領域に敷き詰めた「フラクタル開放型マイクロ流路」(以下「フラクタル流路」)を開発し、液滴の輸送・融合を階層的に繰り返すことで高効率 (1秒以内、吹き付けた水滴総量の7割以上) に分岐の根元 (焦点) に水滴を収集できることを示した (図1) [3]。フラクタル流路は少数の形状パラメータ (充填領域、枝分かれ世代数、開き角など) から複雑な構造が一意に定まる。また、世代数を増加させると枝分かれの総数が指数関数的に増加して平面内が密に充填され効率的な水滴収集が可能になる。筆者らは、さまざまな流路構造を有するフラクタル開放型流路を設計した[4,5]。加えて、一般に効率的な輸送が困難な表面張力の小さい油滴の輸送・収集も実証した[6]。さらに流路上における液滴の融合を利用した物質合成といった研究も行っている[7]。

フラクタル開放型流路における液滴の輸送・収集挙動は、実際に流路デバイスを作製して液滴を吹き付けることによって実験的に検証しているが、数値解析によってさまざまなパラメータが与

える影響を系統的に理解することができれば、最適な流路構造の設計や液滴導入方法に関する指針が得られると期待される。

そこで本研究では、表面濡れ性を液滴輸送の駆動力とする開放型流路およびフラクタル流路における、流路の形状や液滴の物性などが液滴の輸送・収集に与える影響を、数値流体力学を用いて系統的に理解することを目指した。

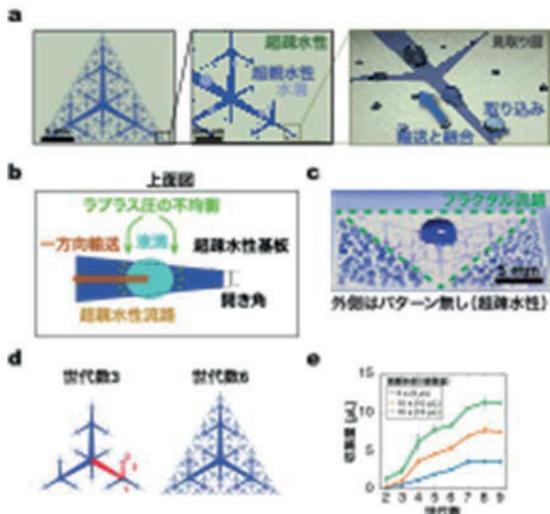


図1：フラクタル開放型流路 (a) 構造と輸送の概念図 (b) 親水性流路における水滴の一方向輸送(c) フラクタル流路に青い水滴を吹き付けた直後の様子 (d) 世代数 (分岐の繰り返し回数) の変化 (e) 世代数による水滴収集量の変化。世代数の増大で水滴収集効率が向上する。

2. 数値解析の手法

大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システムの SQUID において、OpenFOAM ソフトウェアを使用した volume of fluid (VoF) 法に

による混相流（空気・液体）の自由表面流れ解析を行った。VoF 法は、空間を多数のセルに分割して、セル内の液体の各相の体積分率の時間変化を追跡し、液相の体積分率 $\alpha = 0.5$ となるセルを表面として、液体の空間分布の時間変化を計算する手法である。

基板の面を親水性・疎水性の領域に分割した STL ファイルとして事前に生成し、OpenFOAM に付属している cfMesh ソフトウェアによりメッシュを作成した。球形の液滴の下端が基板に接触するように topoSet プログラムにより初期位置を設定したうえで、SQUID 上で interFoam プログラムを用いて液滴の位置・形状の時間変化を計算した。ParaView を用いて液滴の座標を可視化し、また、Python スクリプトを用いて液滴の重心の座標を追跡した（水相の体積分率 $\alpha \geq 0.01$ のセルを取り、重心を計算した）。

流路形状および液滴のサイズや物性を変化させて計算する前に、計算に用いる並列 CPU コア数の最適化を行った。分岐のない単一の流路を用意して、 2.28×10^5 個のメッシュに分割し、CPU コア数を変化させて、計算経過時間と解析中の時刻の関係をプロットした（図 2）。152 コア（2 ノード）程度で計算速度が飽和することが明らかとなつたため、以後の計算では主に 2 ノードを使用して計算を行つた。

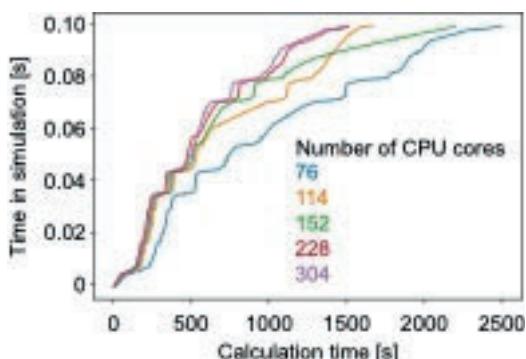


図 2 : CPU コア数を変化させた際の、計算経過時間と解析中の時刻の関係

流路形状としては、幅に勾配があり分岐のない単一の流路と、世代数 3 のフラクタル流路を用いた。単一の流路において、流路の濡れ性や形状（開き角）および液滴のサイズや物性を変化させて、液滴の輸送挙動を計算した。

3. 単一の流路上における液滴の輸送挙動

3.1 液滴の位置の時間変化の可視化

単一の流路上に、直径 1 mm の水滴を 2 個置き、水滴の位置の時間変化を計算、可視化した（図 3）。水滴が丸い形を保ちながら、時間とともに流路の幅の広い方に向かって移動し、また、2 個の水滴が融合する様子が観察された。実際の開放型流路における水滴の輸送を再現する結果であると考えられる。さらに、融合した水滴が流路の末端に到達すると、太い方の末端で流路の逆方向に若干バウンドする様子が見られた。

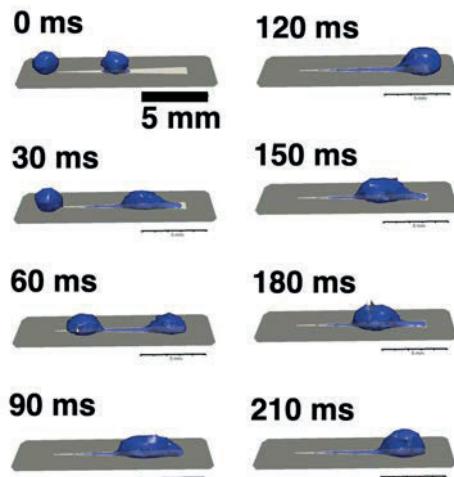


図 3 : 単一の開放型流路上における、2 個の水滴の輸送と融合の様子

3.2 水滴サイズおよび基板の形状による液滴の輸送挙動の変化

長さ 5 mm、開き角 3° の単一の開放型流路に、水滴を 1 個置いて輸送の挙動を計算した。水滴の直径を 0.4 mm, 0.6 mm, 0.8 mm と変化させて水滴の重心座標の時間変化を追跡した（図 4）。流路水滴の直径が大きくなると、水滴の輸送速度（水滴が末端に達するまでのグラフの傾き）が小さくな

り、また、流路の太い方の末端でより大きくバウンドすることが示された。

次に、水滴の直径を 0.8 mm に固定したうえで、流路の開き角を 1°, 3°, 5° と変化させて異なる形状を用意し、それらの流路上での水滴の動きを計算した(図 5)。流路の開き角が大きくなるほど水滴の輸送速度が大きくなつた。特に、開き角 1° では大幅に輸送が遅くなることが明らかとなつた。これは、実際の流路デバイスを用いた実験結果と一致する挙動であった。

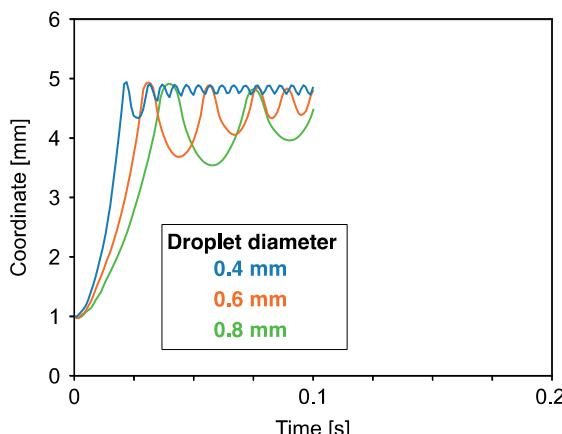


図 4：水滴の直径を変化させた際の、水滴の重心座標の時間変化への影響。水滴の直径：0.4 mm (青)、0.6 mm (橙)、0.8 mm (緑)。

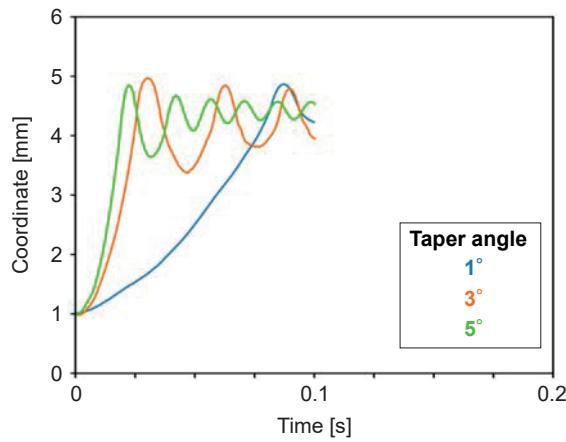


図 5：流路の開き角を変化させた際の、水滴の重心座標の時間変化への影響。流路の開き角：1° (青)、3° (橙)、5° (緑)。

3.3 液滴の物性および基板と流路の濡れ性による液滴の輸送挙動の変化

これまで、用いる液滴として水滴を用いていたが、開放型流路によって輸送する液体は水に限らず、表面張力の小さい液体（油など）も考えられる[7]。表面張力の小さい液体として、ヘキサデカンの液滴（以下、油滴）を用いた際の輸送挙動を計算した。水とヘキサデカンは密度、粘度、表面張力が異なる（表 1）ため、同じ濡れ性（接触角で表される）の基板表面であっても輸送挙動が異なると予想された。

表 1：水とヘキサデカンの物性

	水	ヘキサデカン
密度 [g/cm ³]	0.997	0.773
動粘度 [mm ² /s]	0.893	3.98
表面張力 [mN/m]	72	27.4

計算の結果を、形状と濡れ性と同じ流路においては、動粘度が小さく表面張力が大きい水滴のほうが、油滴よりも輸送速度が大きくなつた(図 6、青・橙)。また、油滴に対して濡れ性を増大させた（接触角を小さくした）流路を用いると、輸送速度が大きくなつた(図 6、緑)。これらの結果は、表面張力の大きい液体や粘度の高い液体の液滴を効率的に輸送するためには、流路の濡れ性を適切に制御する必要があることを示唆している。

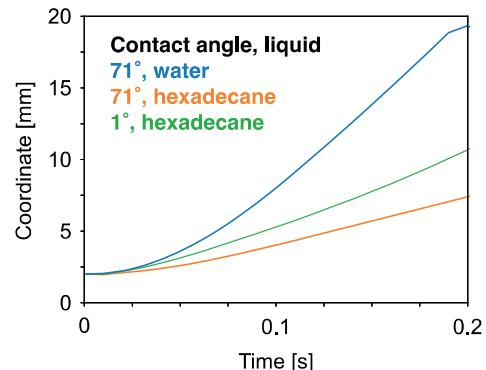


図 6：水滴と油滴の輸送。水滴・接触角 71° (青)、油滴・接触角 71° (オレンジ)、油滴・接触角 1° (緑)。

4. 分岐のある開放型流路における水滴の輸送・融合の挙動

階層的な分岐を有する開放型流路であるフラクタル流路における水滴の輸送挙動を計算した。分岐した流路の細い方の末端近くに 3 個の水滴を配置して、時間変化を追跡した(図 7)。水滴が分岐点で高速に(10 ms 程度)融合し、その後、融合した大きな水滴がゆっくりと(500 ms 程度)流路の太い方へと輸送される様子が観察された。この結果は実際のデバイスにおいて観察される様子と一致する。

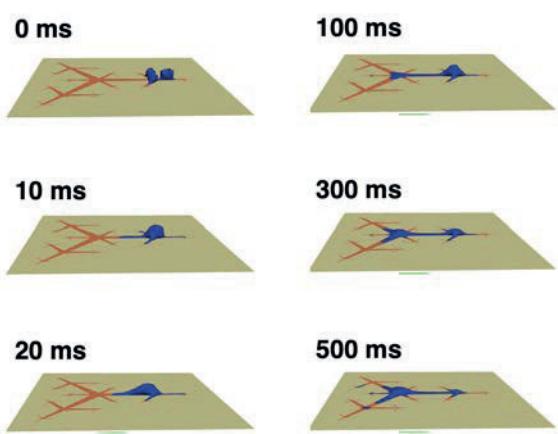


図 7：世代数 3 のフラクタル流路における水滴の輸送と融合の様子

5. おわりに

本研究では、濡れ性をパターニングしたフラクタル開放型流路における液滴の輸送・融合について数値解析を行った。水滴の輸送速度に影響を与えると考えられるパラメータとして、液滴のサイズ、液滴の表面張力・粘度、基板上の液滴の接触角(濡れ性)を検討した。その結果、これらのパラメータが液滴の輸送速度に与える影響に関して、数値解析により実際のデバイスの実験結果を半定量的に再現可能であることが示された。また、階層的な分岐を有する開放型流路上での水滴の輸送について検討したところ、液滴が分岐のところで融合し、さらに、中心に近い分岐点に向かって輸送されることが確認された。この計算結果も、実験的に確認された液滴輸送挙動と半定量的な

一致が見られるものであった。したがって本研究結果は、用いる液滴の物性の違いなどに応じて、フラクタル流路に適した濡れ性の材料を選択したり、形状の最適化を行ったりする際に、合理的な設計指針を与える基盤になると期待される。

なお、液滴の接触角が小さい基板を用いた場合に、計算時間が劇的に増加することが明らかとなつた。実際のデバイスでは、流路部分の液滴の接触角は 5° 以下と非常に小さいため、複雑なフラクタル流路を有する実際のデバイスにおける液滴輸送を数値計算で定量的に再現するためには、非常に多くの計算時間を要すると考えられる。今後、フラクタル流路の対称性を利用して計算するセルの数を削減することや、接触角がより大きいケースの結果から外挿することなどが対策として考えられる。

参考文献

- (1) A.Ghosh et al., *Lab Chip*, **14**, 1538 (2014).
- (2) P. S. Mahapatra et al., *Chem. Rev.*, **122**, 16752 (2022).
- (3) H. Kai et al., *RSC Adv.*, **8**, 15985 (2018).
- (4) H. Kai, *MicroTAS 2020* (2020).
- (5) S. Yamamoto and H. Kai, *Adv. Mater. Interfaces*, **9**, 2201736 (2022).
- (6) Y. Segawa et al., submitted.
- (7) H. Kai, *Transducers 2023* (2023).

大規模 CT データ及び読影レポートを用いた疾患異常検出モデルの開発

佐藤 淳哉

大阪大学 大学院医学系研究科

1. はじめに

CT 画像をくまなく検索し異常を検出・診断することは放射線科医にとって日常的に行われる業務である。CT は救急外来や手術後の経過観察等で頻繁に撮影され、特に本邦では他の先進国と比較しても撮影件数が多い[1]。それに伴い診断する医師の負担は増加傾向で、医師の見落としを防ぎ治療方針の決定に役立つコンピュータ診断支援システム (CAD) の需要が高まっている(図 1)。

深層学習の発展により多くの疾患で疾患検出精度の高い CAD が開発されているが、そのほとんどが単一の臓器、疾患に限られた手法である。くまなく異常を検出すべき状況では、広範囲を探索し網羅的に異常を拾い上げる CAD を開発する必要がある。

上記の背景の下、本研究では 3 施設で日常的に撮影されている腹部 CT 画像を収集し、多臓器の異常所見を検出する深層学習モデルの学習を試みた。複数臓器での疾患検出を行うために、まず大規模計算機で学習させた高精度セグメンテーションモデルを用いて腹部 CT 画像全体から各臓器領域の情報を取得する。その後、臓器の画像と疾患情報と対応させる学習を行う。医療画像における深層学習モデルは学習に用いる教師データ作成の負担が大きいことが課題であるが、本手法では CT 画像に付属する読影レポートを構造化し疾患情報を抽出し教師データとして利用する。これにより学習コストを低減し、大量のデータを用いた学習を試みる。

2. 大規模計算機での高精度セグメンテーション

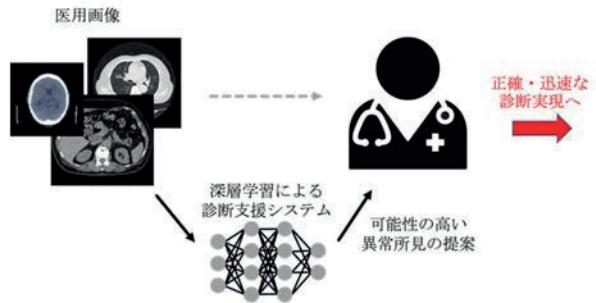


図 1：医用画像診断支援システムの概念

本節では、多臓器疾患検出モデルに不可欠な臓器セグメンテーション手法を紹介する。CT 画像は人体に多方向から X 線を照射し、減衰の程度を検出して作成される 3 次元断層画像である。そのため画像サイズが大きく、一般的な自然画像と比較し学習の際に計算機による制約(必要メモリや計算時間の増加)を強く受けている。特に臓器セグメンテーションでは、臓器と周囲との解剖学的位置関係を把握することが重要であるため、可能な限り大きな画像をモデルに入力することが望ましい。そこで本研究では生命科学画像セグメンテーションモデルの第一選択となっている nnUNet[2]に改良を加え、学習のパラメータである patch size (モデルに入力する画像領域)と batch size を通常より大きく設定し SQUID を用いた多ノード並列計算を実施した[3]。この手法は医療画像処理及びコンピュータ支援外科の分野の国際学会である MICCAI (Medical Image Computing and Computer Assisted Intervention) 主催の臓器セグメンテーションの精度を競う AMOS (Abdominal Multi-Organ Segmentation) challenge[4]で入賞し、大規模計算機を用いた本手法の有効性を示すことができた。

3. 読影レポート構造化モデル

本節では、画像検査に付随する読影レポートから臓器ごとに疾患情報を抽出する構造化モデルを紹介する。医療画像における教師データは作成に高い専門性が必要で、大量に用意することが困難である。深層学習による高い診断精度をもつモデルを作成するために、既存の医療資源から疾患情報を抽出し学習に用いる研究が活発に行われている[5]。

放射線画像読影レポートは CT や MRI などの画像検査に対して放射線科医が作成する検査報告書である。レポートには臓器ごとに異常があればその部位や性状、考えられる疾患が詳細に記述されている。本邦における読影レポートは特定の記入規則を持たない自由記述式が大半であり、教師データとして深層学習へ応用することは困難であった。そこで、杉本らは自由記述式のレポートを構造化し疾患に関する特定の情報を得るためにデータ構造（情報モデル）を提案した[6]。図 2 に構造化モデルで表現されたレポートの例を示す。画像から読み取った観察物及びその部位やサイズ、性状、経時的な変化などの情報、総合的に疑われる臨床所見を関連付けて表示することができる。本研究ではこのレポート構造化モデルを利用することで教師データ作成の負担を低減し、より多くの画像を使用可能とした。

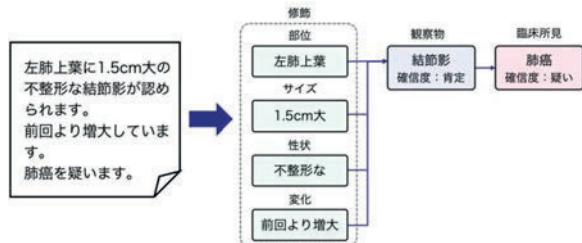


図 2：構造化モデルで表現されたレポートの例

4. 多臓器異常検出モデル

本節では、前節までで紹介した臓器セグメンテーションモデル及びレポート構造化モデルの結果を用いて異常所見モデルを学習させ、評価した結果を紹介する。

4.1 多臓器疾患検出モデル pipeline の概要

図 3 にモデルの概要を示す。CT 画像は前述の通り画像サイズが大きく全体像をそのまま入力することは不可能である。そこでまず、腹部 CT 画像から各臓器の領域を抽出し、また読影レポートから放射線科医による各臓器の解釈を抽出する。これにより、複数の臓器と疾患情報のセットを作成することができる。

4.2 使用データセット

学習に使用したデータセットは J-MID（日本医用画像データベース）を利用した。このデータベースにはビッグデータや人工知能等を利用した構造改革を推進することを目的に全国 10 施設の大学病院で日常的に撮影されている CT 及び MRI を収集したものである。初期検討のため、今回は 3 施設から 14116 症例、31449 シリーズの腹部 CT 画像を学習に用いた。

4.3 臓器画像と疾患情報の学習

本研究の異常検出モデルは、「異常あり」及び「異常なし」の 2 値分類器とした。臓器画像を人体の上下方向に 5 スライスごとに CNN (convolutional neural network) に入力し、得られた出力をさらに LSTM (long-short term memory) に入力、スライスごとの情報を統合させ最終的な出力を得た。損失関数は binary cross entropy を用いた。初期検討として、今年度は肝臓のみで学習した。

4.4 異常検出精度の比較

大量のデータを用いる本手法の有効性を評価するために、学習に使用するデータ数の割合を変化させ、精度に及ぼす影響を調べた。具体的には、用意した 31449 シリーズの画像全てを学習に用いたモデル (Full size) 及びランダムに選んだ 600、2000、3000、10000 シリーズを用いたモデル (Partial)、従来と同様に放射線医によって作成された教師データ 600 シリーズ (Human) で比較

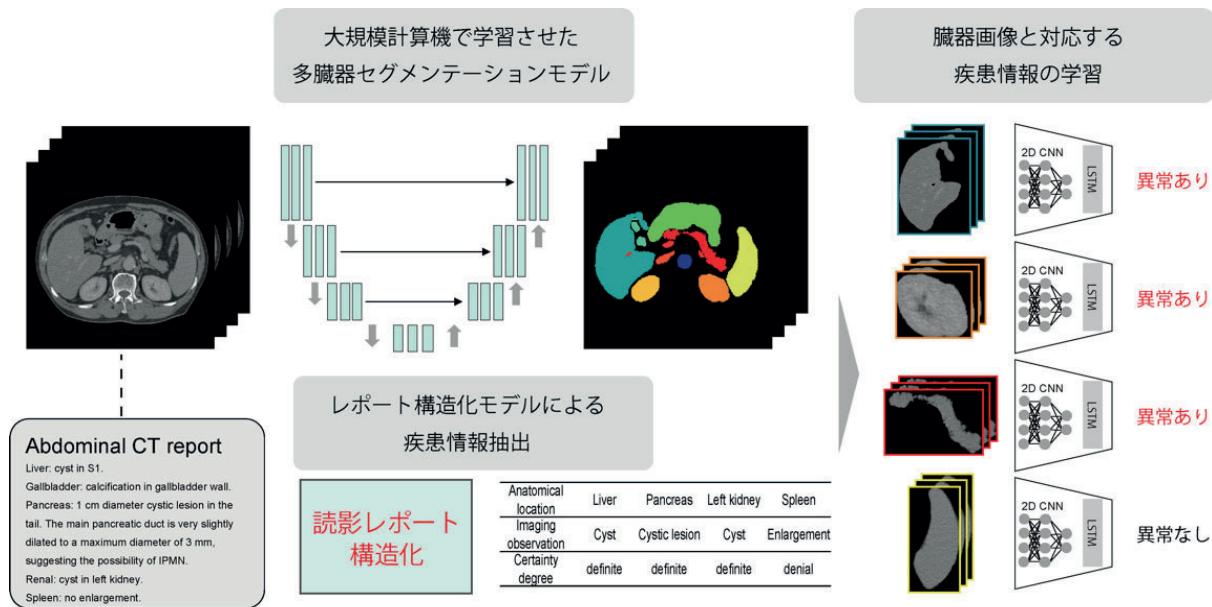


図 3：多臓器疾患検出モデルの pipeline

を行なった。評価指標は AUC (area under the curve) とした。図 4 に結果の ROC (receiver operating characteristic) 曲線及びそれらの AUC を示す。学習に使用した画像が多いほど、AUC が高くなる傾向があった。また画像数が同一の場合には、放射線科医により作られた教師データとレポート構造化モデルとの間に有意な差を認めなかつた。以上より、レポート構造化モデルを用い大量の画像を学習させる本手法の有用性を示すことができた。

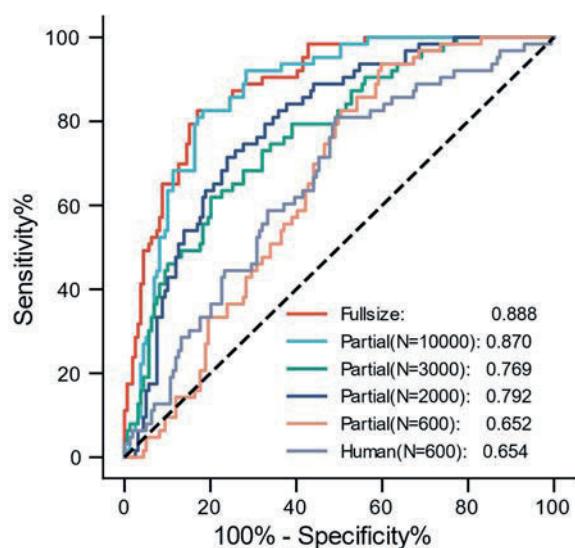


図 4：ROC (receiver operating characteristic) 曲線と AUC

5. セグメンテーションの所要時間

本研究で提案した臓器の疾患検出モデルの開発は 2 節でも述べた通り、大規模計算機によるセグメンテーションが不可欠である。事前に CT 画像を全てセグメンテーションする必要があり、データが大量になれば計算にかかる所要時間も増加する。本研究で nnUNet を用いて予測にかかる時間を計算したところ、SQUID 1 ノード (NVIDIA A100 GPU × 8) で 1 症例あたり約 4 分を要した。3 万件程度の予測には 1 ノードで約 3 ヶ月もの期間を要すると試算できる。さらに高い精度を達成するにはより多くの画像が必要になると推測されるため、多ノードでの並列計算が効率の良い予測に必要である。

6. おわりに

腹部 CT 画像の網羅的な異常所見検出のために、多臓器疾患検出モデルの開発を試みた。今回は資源の都合上肝臓のみを用いた初期検討を行なつたが、今後は他の施設からも画像を収集することでデータを増やし、肝臓以外の臓器でも同様の学習を実施する。また、疾患の有無の 2 値分類から発展させ、異常の種類ごとに多クラス分類学習も試みる。

CT 画像から病変を検出する CAD は医療において活発に深層学習が適用されている分野である。しかし学習データが少なく、施設も限られることから、臨床応用に足る精度に達しないことや多様な施設環境への適用できないことが問題となっている。国レベルでのデータの利用環境の整備が進む中で、本手法のような大規模データを最大限に活用できるシステムの需要は今後さらに高まっていくだろう。

謝辞

本手法の中核となる読影レポートの構造化に関して大阪大学医学系研究科医療情報学の杉本賢人氏に協力頂き、使用に関する助言を頂きました。深く感謝致します。本研究の一部は大阪大学次世代挑戦的研究者育成プロジェクト及び JSPS 科研費 21H03840

及びの助成を受けたものです。

また、大阪大学サイバーメディアセンターの公募利用による支援を受け SQUID 上で実施されました。

参考文献

- (1) OECD (2015), Health at a Glance 2015: OECD Indicators, OECD Publishing, Paris,
- (2) Isensee, Fabian, et al. 2021. Nature Methods 18 (2): 203–11.
- (3) Sato, Junya, and Shoji Kido. 2022. arXiv. <http://arxiv.org/abs/2210.13364>.
- (4) Ji, Yuanfeng, et al. 2022. arXiv. <http://arxiv.org/abs/2206.08023>.
- (5) Pons, Ewoud, et al. 2016. Radiology 279 (2): 329–43.
- (6) Sugimoto, Kento, et al. 2021. Journal of Biomedical Informatics 116 (April): 103729.

The Elucidation of Non-equilibrium States of Heterogenous Catalysis by Data-driven Multiscale Simulation: A Case Study of Methanol Synthesis

Harry H. Halim, Ryo Ueda, Yamada Yuki, and Yoshitada Morikawa

大阪大学 大学院工学研究科

1. Introduction

Global warming is world class problem that becomes more worrying over the years. A promising solution comes from the conversion of CO₂ (i.e., greenhouse gas) to higher-value chemical such as methanol which can be achieved by heterogenous catalysis. The advantage of this conversion is two-fold: reducing the amount of CO₂ in atmosphere and producing methanol which can be used to generate electricity through fuel cell [1]. Understanding the non-equilibrium states (i.e., states when the transformation occurs) of catalytic process of methanol synthesis is the key factor in designing the best catalyst. However, observing the non-equilibrium states is inaccessible in most experiments due to the atomistic size and time scale of the events.

Though computational approaches such as Density Functional Theory (DFT) and Molecular Dynamics (MD) can observe detail atomistic events, it suffers from huge tradeoff between speed and accuracy. For instance, DFT can be used to accurately describe the stability of the catalytic system by calculating the energy and the atomic forces. However, it is computationally expensive and typically applied only for models with small size and short observation time. On the other hand, MD method can be used to explicitly simulate the trajectory of thousands to ten thousand of atoms, enabling the direct observation to the non-equilibrium states with

observation time up to seconds. Despite the efficiency of MD for simulating large system, it has unreliable accuracy when dealing with chemical reactions, which are fundamental in the heterogenous catalysis. This originates from the inadequacy of the classical interatomic-potential (i.e., function governing atomic interactions) in MD to take into account the electronic structures of the system, which is eventually obtainable from DFT method.

In the emergence of data science, it is possible to accelerate the MD simulation while maintaining high accuracy at the DFT level. This can be achieved by constructing a machine-learning (ML) interatomic potential by learning the energy and forces of atomic structures defined in a set of DFT data. The ML then acts as a bridge for the low-scale but accurate DFT, and the high-scale but inaccurate MD, resulting in multiscale simulation. Armed with this framework, we conducted direct observation of non-equilibrium states of initial stage of methanol synthesis on Cu-based catalyst, including the three main reactants: CO₂, CO, and H₂. We note that in this project, these three reactants are still treated independently. Interacting all the reactants is much more complicated and becomes our project in the future.

2. Multiscale Simulation

The framework of the multiscale simulation is shown schematically in Fig. 1. There are four important building blocks, namely DFT, ML, MD, and the analysis tool that we called *elucidator*. Each of them is discussed in the following.

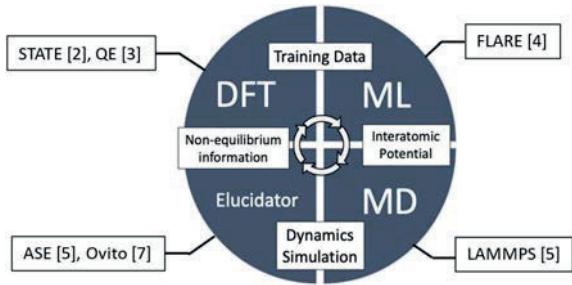


Fig. 1 : The framework of multiscale simulation

2.1 Density Functional Theory (DFT)

DFT is used to start the framework by generating the training data used as input in the ML algorithm. In this project, we tried two popular DFT software, namely STATE [2] and Quantum Espresso [3]. The STATE is used in the multiscale simulations of CO₂ and H₂ while Quantum Espresso is used for the simulations of CO. All of these reactants are interacted with Cu surface. The training data of Cu-H system, Cu-CO system, and Cu-CO₂-H₂ system consist of atomic environments within structures of the Cu surface interacting with various configurations molecules (both in gas and adsorbed states). The typical training structure of Cu-H, Cu-CO, and Cu-CO₂-H are depicted in Fig 2, Fig 3, and Fig 4, respectively. In practice, the DFT software can run using MPI and OMP parallelization and thus increase the efficiency of the calculations especially in large super computer. We note that the generation of database is the most time consuming considering the computational expense of DFT.

2.2 Machine-Learning (ML)

After the database was generated, we proceed to the construction of machine-learning interatomic potential. In this project we used ML algorithm called Gaussian Process Regression (GPR) which is implemented in FLARE software [4]. GPR is chosen since it can provide the uncertainty of prediction based on the database itself. This enables the learning scheme called *active* learning in which the high uncertainty value is used as the criterion for an atomic environment to be included in the database. This learning scheme thus ensures each data is sufficiently different from each other, resulting in a compact and low-correlated database. Further, *on-the-fly* learning scheme can be implemented by employing the force-field in dynamic simulation to generate more high-uncertainty data that can be used to improve the force-field continuously. The GPR that is implemented in FLARE can use OMP parallelization in a single node.

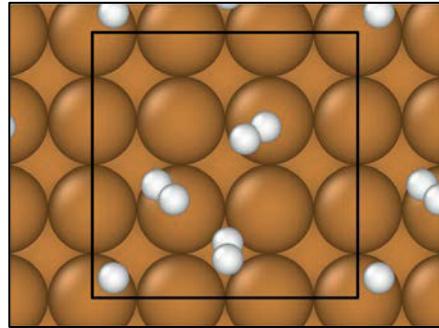


Fig. 2 : The Cu-H training structure

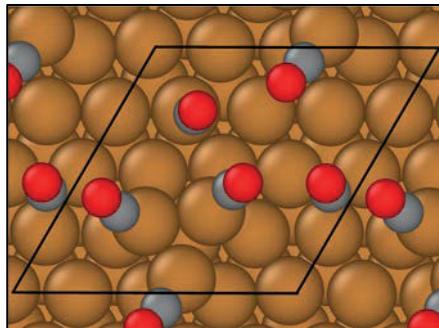


Fig. 3 : The Cu-CO training structure

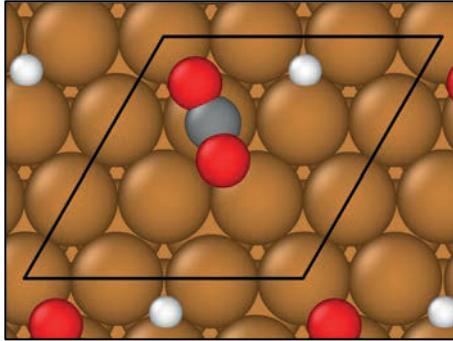


Fig. 4 : The Cu-CO₂-H training structure

2.3 Molecular Dynamics (MD)

The LAMMPS [5] software is used to perform large scale molecular dynamics in parallel both using MPI and OMP parallelization. The machine-learning interatomic potential is read by the software and the energy and forces are calculated at every timestep. The non-equilibrium states of the catalysis then can be obtained from the atomic trajectories of MD simulations.

2.4 Elucidator

Elucidator is a set of analysis tool that we used to analyze the trajectory of the MD simulation. This tool is Python-based program which relies on two libraries, namely ASE [6] and Ovito [7]. Tasks that are performed using this tool including: the analysis of splitting and recombination rate of hydrogen, the surface reconstruction of induced by CO, and the vibrational states of CO₂ hydrogenation.

3. Validation of Machine Learning Interatomic Potential

Before starting a production run of MD simulations, it is necessary to validate the accuracy of the interatomic potential produced by ML. The validations were done in terms of mean absolute error (MAE) of atomic forces (i.e., the difference between the forces calculated by DFT and the forces predicted by ML). All the results of

MAE for the Cu-H, Cu-C, and Cu-CO₂-H systems are shown in Fig 5, Fig 6, and Fig 7, respectively. We found that the MAEs are smaller than 50 meV/Å, which is reasonably good,

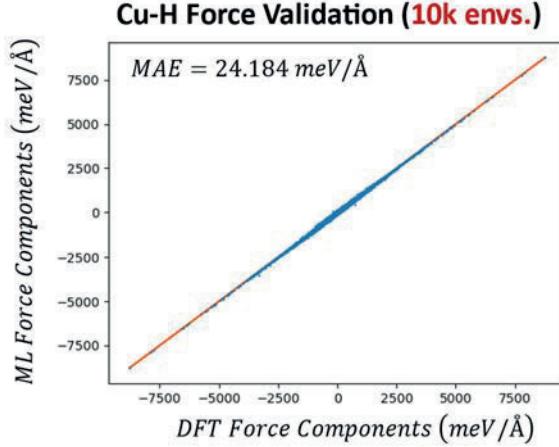


Fig. 5: Validation of atomic forces for Cu-H system

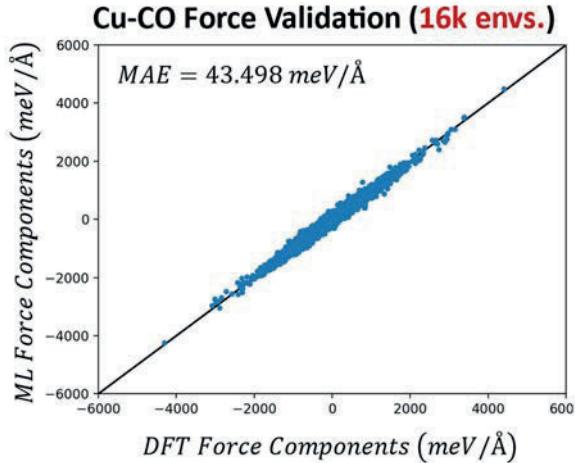


Fig. 6: Validation of atomic forces for Cu-CO system

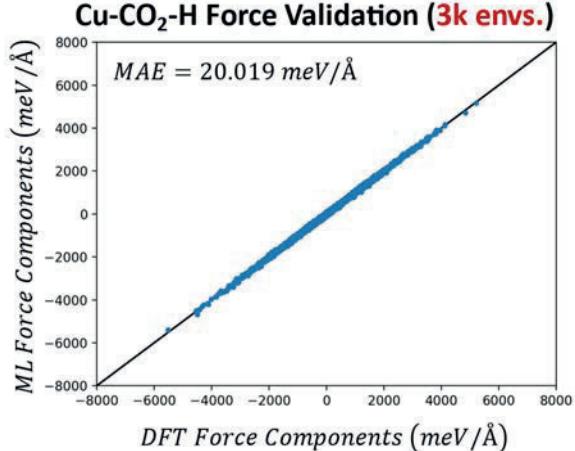


Fig. 7: Validation of atomic forces for Cu-CO₂-H system

4. Non-equilibrium states of H₂, CO, and

CO₂ interacting with Cu surface

After confirming the accuracy of the interatomic potential, the production run of MD simulations was performed. The resulting dynamics of H₂ interacting with Cu surface is shown in Fig.8. The figure shows the splitting of hydrogen molecules into two hydrogen atoms (shown in red color). The hydrogen atom is involved in almost every intermediate state of methanol synthesis. Fig 9 shows the snapshot of dynamics of Cu-CO system of which the CO co-adsorbed on the Cu surface. The analysis of the CO induced-surface reconstruction is ongoing. The snapshot depicting the hydrogenation process of CO₂ is shown in Fig 10. The current simulation has able to show successful and unsuccessful hydrogenation of CO₂.

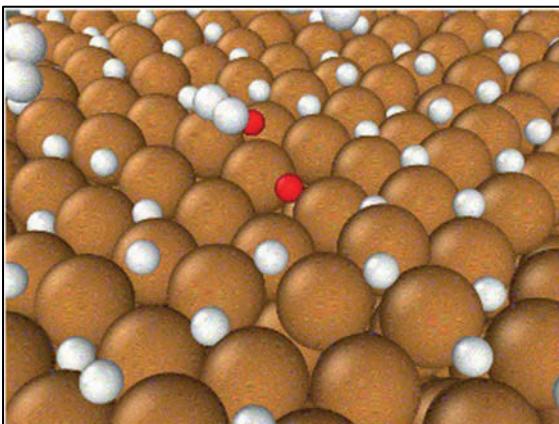


Fig. 8 : Snapshot of dynamics of Cu-H system

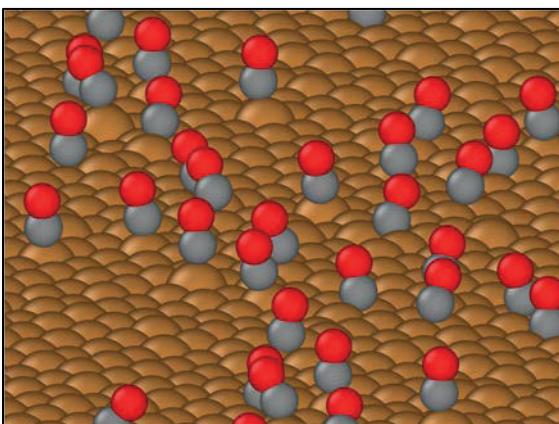


Fig. 9 : Snapshot of dynamics of Cu-CO system

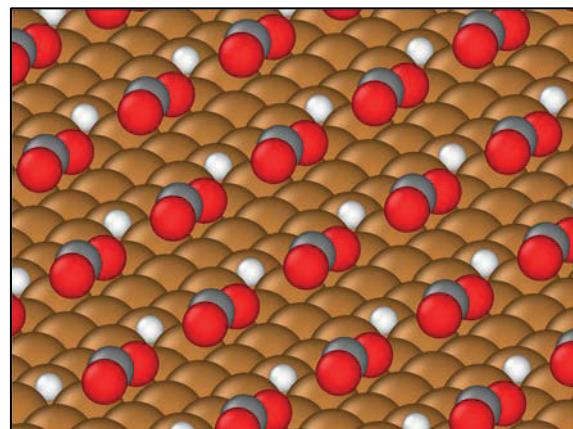


Fig. 10 : Snapshot of dynamics of Cu-CO₂-H system

5. Conclusion

Overall, we have been able to provide the direct observation to the dynamics of reactants in the methanol synthesis. The analysis of the resulting dynamics is being prepared and expected to be published in near future. When this research is successfully completed, detail knowledge of non-equilibrium states (the ‘missing link’ in experimental and computational studies) can be provided, which lead to more confident understanding of heterogenous catalysis.

Bibliography

- (1) M.H. de Sa, et al., Energies., **15**, 17, (2022).
- (2) Y. Morikawa., et.al., Appl. Sur. Sci., **11**, 169-170, (2001).
- (3) P. Giannozzi., et.al., J. Phys. Condens. Matter., **21**, 39550, (2009).
- (4) J. Vandermause., et.al., npj Comput Mater., **6**, 20, (2020).
- (5) A.P. Thompson, et.al., Comp Phys Comm, **271** 10817, (2022).
- (6) A. H. Larsen, et al., J. Phys.: Condens. Matter., **29**, 273002, (2017).
- (7) A. Stukowski., Modelling Simul. Mater. Sci. Eng., **18**, 015012 (2010).

深層学習による物理モデリング・ シミュレーションフレームワークの展開

谷口 隆晴

神戸大学 大学院システム情報学研究科 計算科学専攻

1.はじめに

近年、深層学習の物理モデリングや物理シミュレーションへの応用が注目されている。モデリングに関する研究としては、物理現象に対する観測データが与えられたときに、そのデータに適合するような運動方程式を推定することが行われている。このような研究の代表例としては、ハミルトニアンニューラルネットワーク⁽¹⁾やラグランジアンニューラルネットワーク⁽²⁾が知られている。これらは、データに適合するハミルトン方程式やオイラー・ラグランジュ方程式を、深層学習を用いて学習する手法である。これらの方法では、方程式そのものを推定するのではなく、ハミルトニアンやラグランジアンなどといった、系のもつエネルギー関数を推定する。それと解析力学の理論を組み合わせることで、物理法則を保ったモデルを導出する。この方法は、物理シミュレーションへも応用をもつ。実際、このような手法に対して、シミュレーション結果をデータとして利用することも可能であり、そのようなデータから上手く低次元の系としてモデル化することができれば、シミュレーションのためのモデル縮減が可能となる。物理シミュレーションに関するその他の手法としては、低解像度のシミュレーション結果を高解像度のものに変換する、超解像手法などが知られている。

本研究では、これまで、我々のグループで進めてきた、深層学習の物理モデリング・物理シミュレーションへの応用に関する研究をさらに発展させるものである。今年度は、非平衡熱力学系を記述する理論的なフレームワークである、GENERIC系に対するモデリング手法、ニューラ

ル作用素を用いた超解像手法、動画からの支配方程式の学習などについての研究を進めた。以下、これらについて、簡単に概要を説明する。

2. 深層学習による GENERIC 系に対するモデリング手法

GENERIC (general equation for the non-equilibrium reversible-irreversible coupling) 系は、エネルギーの保存則とエントロピー増大則を同時に満たすことが出来るようなシステムであり、非平衡熱力学系の記述などに用いられる。GENERIC 系の運動方程式は以下の通りである。

$$\frac{du}{dt} = L \frac{\partial E}{\partial u} + M \frac{\partial S}{\partial u} \quad (1)$$

ここで u は系の状態を表す変数であり、 E 、 S は系のエネルギーとエントロピーを表す u の関数である。また、 L は歪対称行列、 M は半正定値行列である。これらの行列は、一般に、状態 u に依存する。この方程式は、条件

$$L \frac{\partial S}{\partial u} = 0, M \frac{\partial E}{\partial u} = 0 \quad (2)$$

を満たすならば、エネルギー保存則、エントロピー増大則を満たす、すなわち、次の式が成り立つことが知られている。

$$\frac{dE}{dt} = 0, \quad \frac{dS}{dt} \geq 0 \quad (3)$$

このような系に対して、観測データから方程式を推定する、すなわち、与えられた u や du/dt のデータから、 E 、 S 、 L 、 M を推定する手法を考案したい。

既存研究としては、GFINNs⁽³⁾と呼ばれる手法が知られている。この方法では、 L 、 M を、それぞ

れ、歪対称行列、半正定値行列となるように

$$L \simeq A_{NN} - A_{NN}^T, \quad M \simeq B_{NN}B_{NN}^T$$

などとモデル化する。ここで、 A_{NN} や B_{NN} はニューラルネットワークである。また、エネルギーやエントロピーについても、同様にニューラルネットワークでモデル化する。また、条件(3)を成立させるために、学習時に、この項を、ペナルティ項として与える。

この手法は、確かに GENERIC 系を学習することが出来るが、ペナルティ項は完全にゼロになるとは限らず、そのため、条件(3)は完全に成り立つとは限らない。その結果、エネルギーの保存則やエントロピー増大則が完全には成り立たない可能性がある。そこで、これらが成り立つようにモデルを改善したい。改善のアイデアは以下のとおりである。まず、条件(3)は

$$\frac{\partial S}{\partial u} \in \text{Ker } L, \quad \frac{\partial E}{\partial u} \in \text{Ker } M$$

と書き換えられる。そのため、条件(3)を課すためには、行列 L 、 M をカーネルが分かるよう

に学習すれば良い。そこで、特に行列 M をカーネルが明らかになるような形で学習する。 M は半正定値行列であるが、特に、対称行列であるので、直交行列で対角化できる。直交行列の集合は Lie 群をなすことが知られており、特に、その Lie 代数は歪対称行列である。そこで、 M を

$$M = P \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_k, 0, \dots, 0) P^T,$$

$$P = \exp(C_{NN} - C_{NN}^T)$$

のようにモデル化する。ただし、 C_{NN} はニューラルネットワークでモデル化された行列である。また、 k は非ゼロの固有値の数であり、これはハイパーパラメータとする。これを用いて、 $\text{Im } M$ とその直交補空間への射影作用素 $\Pi_{\text{Im } M}$ 、 $\Pi_{(\text{Im } M)^T}$ を定める。これらの作用素を利用して、モデルを以下のように定める。

$$\frac{du}{dt} = L\Pi_{(\text{Im } M)^T} \frac{\partial E}{\partial u} + M\Pi_{\text{Im } M} \frac{\partial S}{\partial u}$$

ただし、行列 L については、単純に歪対称行列になるだけでなく、エントロピー項がない場合にはハミルトン系になることが保証されるように、シ

ンプレクティック形式に対応するように学習する。シンプレクティック形式の学習手法については、Chen et al.⁽⁴⁾を参照されたい。

このようにして定められたモデルは、残念ながら、学習された E や S に関するエネルギー保存則・エントロピー増大則をもたない。しかし、あるエネルギー関数 E とエントロピー関数 S が存在して、それらに対するエネルギー保存則・エントロピー増大則が成り立つことを証明することができる。そのため、系のダイナミクスが十分に真のダイナミクスに近ければ、この未知のエネルギー・エントロピーは真のエネルギー・エントロピーに近いことが期待され、その結果、このモデルは、真のエネルギー関数やエントロピー関数に対して、良い保存性・増大性をもつことが期待される。

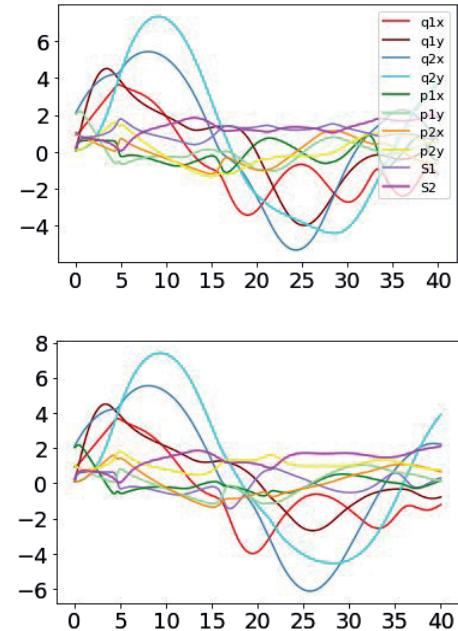


図 1 GENERIC 系の学習実験における真の軌道（上段）と提案モデルの予測結果（下段）の例の例。横軸は時刻を表す。

実際に学習した場合の結果の例を図 1 に示す。これは、熱弾性二重振り子の運動を表している。通常の二重振り子とは異なり、熱によって長さが変化するようなモデルである。詳細については

GFINNs⁽³⁾を参照されたい。予測結果は、真の軌道に十分に近いことが確認できる。

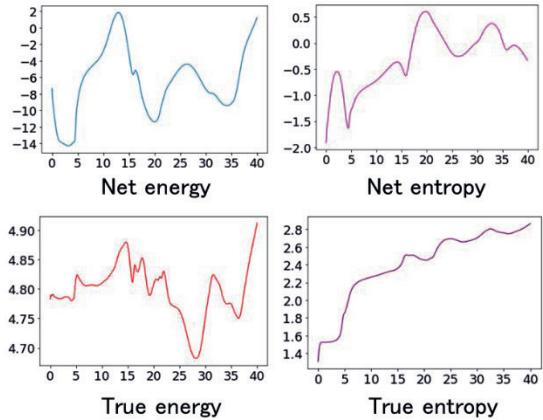


図 2 提案モデルにおける、ニューラルネットワークを用いて学習したエネルギー (net energy)・エントロピー (net entropy) と真のエネルギー (true energy)・真のエントロピー (true entropy) の変化の様子の例。横軸は時刻を表す。

また、学習したモデルのシミュレーション結果について、エネルギー・エントロピーの時間変化を計算したものを図 2 に示す。予想された通り、ニューラルネットワークでモデル化されたエネルギー・エントロピーについては、保存則や増大則が成り立たない。しかし、真のエネルギーや真のエントロピーについては、高い精度で保存則・増大則が成り立っていることが確認できる。

3. ニューラル作用素による超解像

ニューラルネットワークの応用の一つは画像などの超解像である。これは、低解像度の画像を高解像度の画像に変換する手法である。画像を物理シミュレーションのシミュレーション結果と読み替えると、この手法は、物理シミュレーションの高精度化に応用することができる。より具体的には、差分法などで離散化した偏微分方程式の数値解について、粗い格子で解いた数値解を低解像度画像、細かい格子で解いた数値解を高解像度画像とみなすことによって、超解像手法を適用する。しかし、通常の超解像手法では、低解像度・

高解像度のそれぞれについて、解像度は固定する必要がある。そのため、超解像された数値計算結果が、十分な解像度をもたず、さらに高解像度に変換したい場合には、モデルの学習をやり直す必要があった。

本研究では、これに対して、ニューラル作用素を利用した超解像手法を提案した。ニューラル作用素は、関数を関数に変換することが可能なように、通常のニューラルネットワークを拡張したものである。特に、出力が関数となるため、これを利用した超解像手法である提案手法では、自由に解像度を変化させることができる。

実際に、非線形橢円型偏微分方程式

$$u_{xx} = u^2 + f(x), u(0) = u(1) = 0 \quad (4)$$

に対して適用した場合の例を示す。ニューラル作用素としては、DeepONet⁽⁵⁾を利用した。データとしては、(4)を中心差分で離散化した場合の数値解を利用した。計算領域を 10 分割したものを粗い格子とし、1000 分割したものを細かい格子とした。また、外力項 $f(x)$ としては、ランダムな係数を与えた多項式を利用した。図 3 に超解像結果を、図 4 に与えた外力関数を示す。図 3 における青い点は粗い格子での数値計算結果である。また、オレンジの曲線は 1000 分割した格子での数値計算結果であり、青い曲線はモデルの出力結果である。出力結果は関数として与えられているため、任意の解像度で出力できるが、ここでは、学習データと同様、1000 分割したものを表示した。これらを見ると、モデルの出力は、細かい格子での計算結果に非常に近い結果を与えていることが分かる。

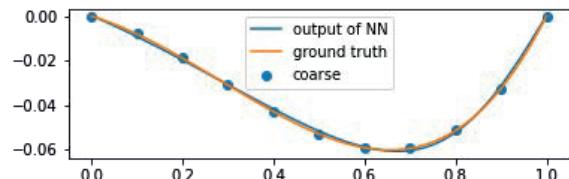


図 3 DeepONet による非線形橢円型方程式の数値解の超解像結果。横軸は空間座標を、縦軸は解の値を表す。

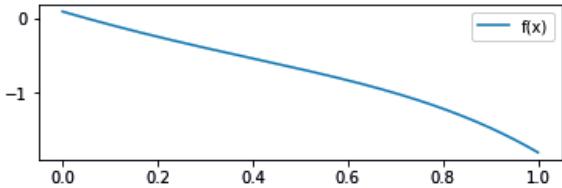


図 4 DeepONet による実験において利用した外力関数。横軸は空間座標を、縦軸は関数値を表す。

4. 動画像データからの運動方程式の学習手法

最後に、動画像データからの運動方程式の学習手法についても研究を進めた。基本的なアイデアは、オートエンコーダーなどを用いて、動画像を構成する各画像を表す潜在変数を抽出し、それが満たすハミルトン方程式を求めるというものである。これについては、特に、ニュートンの方程式では学習ができないであろうデータに対しても、なぜか、モデル化誤差が十分に下がり、一見、モデル化できてしまうということが起こった。そこで、このことについての理論的な解析を行った。その結果、このような潜在変数をデータから抽出する手法については、運動方程式として表すことができないデータについても、適当に補助変数を導入することで運動方程式として表すことが可能であることが分かった。

5. おわりに

近年、深層学習の物理モデリングや物理シミュレーションへの応用研究が盛んに行われるようになってきている。本研究では、特に、GENERIC 系の学習、DeepONet を用いた超解像手法の提案、動画像データからの学習における、見かけ上の運動方程式としての学習に関する理論的な研究などを行った。一方、どの研究も、適用例は、比較的小さなデータであるものが中心であった。今後は、より巨大なシミュレーションデータについても適用していきたい。

参考文献

- (1) S. Greydanus, M. Dzamba, J. Yosinski, Adv. Neural Inf. Process. Syst., 33, (2019).
- (2) M. Cranmer, S. Greydanus, S. Hoyer, P. Battaglia, D. Spergel, S. Ho, arXiv:2003.04630, (2020).
- (3) Z. Zhang, Y. Shin, G. Em Karniadakis, Philos. Trans. A Math. Phys. Eng. Sci. 380, 20210207, (2022).
- (4) Y. Chen, T. Matsubara, T. Yaguchi, Adv. Neural Inf. Process. Syst., 34, (2021).
- (5) L. Lu, P. Jin, G. Pang, Z. Zhang, G.E. Karniadakis, Nature Machine Intelligence. 3, 218–229, (2021).

進化的アルゴリズムとガウス過程回帰による Ag(111)表面上シリセンの構造探索

濱本 雄治

大阪大学 大学院工学研究科 物理学系専攻

1. はじめに

グラフェンが実験的に初めて単離された 2004 年以降、13~16 属元素からなる二次元物質の合成が相次いで報告されている。これらは特異な電子的・構造的性質を示すことから、エレクトロニクスなど様々な分野への応用が期待されている。特に Si 原子が蜂の巣格子状に並んだシリセンは量子スピン Hall 系の候補として基礎科学的観点からだけでなく、グラフェンより既存の半導体テクノロジーとの親和性が高いという応用的観点からも重要である。

密度汎関数理論 (DFT) に基づく第一原理計算によると自立型シリセンの蜂の巣格子は交互にバッカルした構造[1]を持つが、走査型トンネル顕微鏡 (STM) の観測結果によると基板上でエピタキシャル成長させたシリセンは非自明なバッカル構造[2]を持つことが判明した。特に Ag(111) 基板上でシリセンは表面の単位胞に対して $4 \times 4, \sqrt{13} \times \sqrt{13}, 2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ 等の超構造を生じ、これらは STM 像の輝点の模様に応じてさらに複数の相に分類される。ただし STM 像では異なる複数の相の共存が頻繁に観測されており、Ag(111) 上シリセンの物性の解明には最安定構造だけでなく準安定構造も考慮する必要があることが示唆される。しかし、これまで DFT 計算による Ag(111) 上シリセンの構造的安定性は主に実験的によく調べられた相に限られてきた。これは可能なバッカル構造の候補数が膨大になるため、計算コストの高い DFT 計算をすべての候補に適用することは困難だからである。

本研究では、DFT 計算による Ag(111) 上シリセンの網羅的な構造探索を実現するために、2020 年

にデンマーク・オーフス大学の Hammer グループで開発された GOFEE (Global Optimization with First-principles Energy Expression) アルゴリズム[3] を採用した。これまで GOFEE はグラフェン上の多環芳香族炭化水素[4]、Pt₃Sn(111)表面上の酸化超薄膜[5]、および CeO₂(111) 表面に担持された PtO_x クラスター[6] の構造探索に適用してきた。以下では、GOFEE の動作原理を説明するとともに、SQUID で Ag(111) 上シリセンの構造探索に GOFEE を適用して得られた結果を報告する。

2. GOFEE アルゴリズム

GOFEE では Gauss 過程と進化的アルゴリズムを用いて物質の最安定構造を求める。Gauss 過程は一般にデータから関数形を予測する統計モデルであり、物質構造の探索では N 個の構造を記述する特徴ベクトルの組 $X = (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)^T$ とエネルギーの組 $\mathbf{E} = (E(\mathbf{x}_1), \dots, E(\mathbf{x}_N))^T$ から、新しい構造に対するエネルギーを予測する。このとき Gauss 過程はエネルギーの期待値と共に分散

$$\mu(\mathbf{x}) = \langle E(\mathbf{x}) \rangle,$$

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \langle (E(\mathbf{x}) - \mu(\mathbf{x}))(E(\mathbf{x}') - \mu(\mathbf{x}')) \rangle$$

で特徴付けられ、新しい構造 \mathbf{x}_* に対するエネルギーの確率分布は期待値と共に分散

$$E_{\text{sur}}(\mathbf{x}_*) = \mathbf{k}_*^T K^{-1} (\mathbf{E} - \boldsymbol{\mu}) + \mu(\mathbf{x}_*),$$

$$\{\sigma_{\text{sur}}(\mathbf{x}_*)\}^2 = k(\mathbf{x}_*, \mathbf{x}_*) - \mathbf{k}_*^T K^{-1} \mathbf{k}_*$$

を持つ代替模型で与えられる。ここで $\mathbf{k}_* = k(X, \mathbf{x}_*)$, $K = k(X, X)$, $\boldsymbol{\mu} = (\mu(\mathbf{x}_1), \dots, \mu(\mathbf{x}_N))^T$ とおいた。構造とエネルギーのデータが多いほど代替模型の予測精度は向上するが、エネルギーの評価に必要な DFT 計算の回数は抑えたい。Bayes 最適化では、データの追加と代替模型の更新を繰り返

すことにより、比較的小数のデータでの大域的最適化を可能にする。すなわち E_{sur} と σ_{sur} から最安定構造 \mathbf{x}_{N+1} を予測して $E(\mathbf{x}_{N+1})$ を評価し、このデータを X に追加すると E_{sur} と σ_{sur} が更新され、新しい最安定構造の予測 \mathbf{x}_{N+2} が得られる。真の最安定構造は代替模型の期待値 $E_{\text{sur}}(\mathbf{x})$ が小さい領域に存在しそうであるが、データが少ない標準偏差 $\sigma_{\text{sur}}(\mathbf{x})$ の大きな領域にも存在する可能性がある。GOFEE では最安定構造を予測する獲得関数として信頼性下限

$$f(\mathbf{x}) = E_{\text{sur}}(\mathbf{x}) - \kappa \sigma_{\text{sur}}(\mathbf{x})$$

を採用する。ここで $\kappa > 0$ は大域的最適化における探索 (exploration) と活用 (exploitation) のバランスを制御するパラメータである。

通常の Bayes 最適化では $f(\mathbf{x})$ を最小化するように最安定構造を探索するが、GOFEE では一般に \mathbf{x} は高次元のベクトルであるため空間全体を探索するのは困難である。そこで安定構造の候補から進化的アルゴリズムによって得られた複数の構造のうち、 $f(\mathbf{x})$ が最小のものを最安定構造の予測とする。これまで進化的アルゴリズムは物質構造の探索に応用されてきたが、安定な構造が生成されるとは限らないため、高コストな DFT 計算で構造緩和させる必要があった。GOFEE では DFT 計算の代わりに Gauss 過程の代替模型の期待値 $E_{\text{sur}}(\mathbf{x})$ を用いて構造緩和を実行し、計算コストを削減する。得られた緩和構造のうち $f(\mathbf{x})$ が最小のものに対して DFT 一点計算によりエネルギーを評価し、データに追加することで代替模型を更新する。

以上のように、GOFEE ではガウス過程と進化的アルゴリズムを組み合わせることで大域的かつ効率的な構造探索を実現する。ガウス過程は深層学習と比較して少数のデータで訓練が可能なため、GOFEE による構造探索は小規模のプロジェクトに適している。ただし自由度の増加とともに安定構造に到達するまでの計算量が増加するため、より効率的な構造探索を実現するためには構造の自明な部分を固定して自由度を制限する必要がある。また構造探索の結果、準安定構造が

得られることもあるが、有限温度では最安定構造と共に存すると考えられるため、現実の系の物性を解析する際には有益である。

3. 計算手法

本研究の DFT 計算には GOFEE と同様に Python で実装された GPAW を採用した。交換相関エネルギーは Perdew-Burke-Ernzerhof 汎関数で近似し、スピニ-軌道相互作用や van der Waals 相互作用は考慮しなかった。Ag(111)上シリセンの構造探索を効率化するため、以下の 2 段階で計算を実行した。

まず、GOFEE を用いて Ag(111)上シリセンの安定構造を効率的に見積もるために、波動関数は計算コストの小さい double-zeta polarized 基底で展開し、固定した Ag(111) 単層スラブ上で複数の Si 原子の安定な配置を探査した。Si 原子を多数含む場合、自由度の増加によりシリセンの生成率が低下する可能性を考慮して、独立した GOFEE による構造探索を 50 回行った。

次に、GOFEE で生成された構造の安定性をより高精度に評価するために、波動関数をエネルギー一カットオフが 400 eV の平面波基底で展開し、Ag(111)の単層スラブを三層スラブで置き換えて Ag の下一層を除いて系全体を構造緩和させた。三層スラブでは fcc- と hcp-hollow サイトの区別が生じるが、構造緩和の結果、両者のエネルギーの差は無視できるほど小さいことが分かった。

4. 計算結果

GOFEE を用いて Ag(111)上シリセンの構造探索を行った結果、最安定構造に加えて複数の準安定構造が得られた。ここでは先行研究で最もよく調べられている 4×4 超構造の計算結果について詳しく述べる。

4.1 GOFEE による構造探索の経過

図 1 に GOFEE を用いた構造探索の例を示す。初期構造として、Ag(111) 単層スラブの 4×4 表面単位胞上に Si 原子 18 個をランダムに配置した状

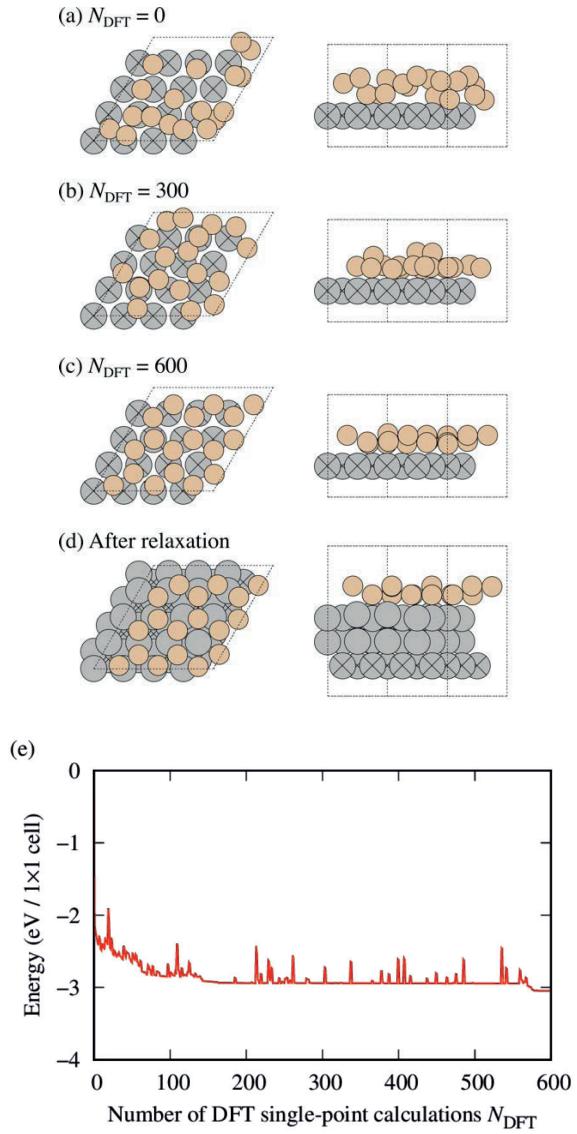


図 1:GOFEE による $\text{Ag}(111)$ 上シリセン 4×4 超構造の探索例。(a)初期構造、(b)DFT 一点計算を 300 回行った後の構造、(c)600 行った後の構造、(d)緩和後の構造、(e)初期構造からのエネルギー変化。

態から構造探索を開始した(図 1(a))。GOFEE で最も計算コストが大きいのは DFT 一点計算であるため、構造探索に要する計算量を DFT 一点計算の回数 N_{DFT} で表す。図 1(b)は、GOFEE の構造探索で DFT 一点計算を 300 回実行した後の構造である。図 1(a)と比較して、 $\text{Ag}(111)$ 表面上でシリセンが形成され始めている様子が確認できるが、六員環の他に五員環や七員環も含んでいる。DFT 一点計算をさらに 300 回実行すると(図 1(c))、蜂の巣格子の形成と共にシリセンに特徴的なバッカル構造が確認できる。この間のエネルギー変

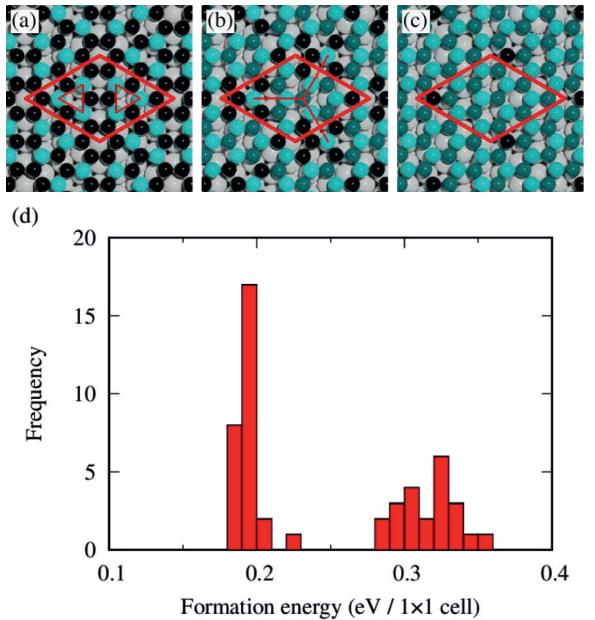


図 2:GOFEE で得られた $\text{Ag}(111)$ 上シリセン 4×4 超構造。(a)-(c)バッカル構造の模式図、(d)ヒストグラム。それぞれのバッカル構造で、最も高い Si 原子をシアン、最も低い Si 原子を黒、その他の Si 原子を中間の色で表した。

化を図 1(e)に示す。初期構造と比較して $N_{\text{DFT}} = 200$ 付近で $\text{Ag}(111)$ -1 × 1 単位胞当たり 3 eV 安定化し、 $N_{\text{DFT}} = 550$ 付近までエネルギーが一定値をとるが、その後 $N_{\text{DFT}} = 580$ 付近でさらに 0.1 eV 安定化した。これは進化的アルゴリズムにより図 1(b)の極小点から抜け出して図 1(c)の安定構造に至ったことを示している。この安定構造を $\text{Ag}(111)$ 三層スラブ上で緩和した結果を図 1(d)に示す。図 1(c)と比較して、シリセンは面内方向のより対称性の高い位置に変位し、バッカル構造もわずかに変化した。

4.2 $\text{Ag}(111)$ 上シリセン 4×4 超構造

図 2 に $0 \leq N_{\text{DFT}} \leq 600$ の範囲で得られた $\text{Ag}(111)$ 上シリセンの 4×4 超構造とヒストグラムを示す。 $\text{Ag}(111)$ 上シリセンの形成エネルギーは

$$E_{\text{form}} = \frac{1}{N_{\text{Ag}}} (E_{\text{Si/Ag}} - N_{\text{Si}} E_{\text{Si}} - E_{\text{Ag}})$$

で定義される。ここで $E_{\text{Si/Ag}}$ と E_{Ag} はそれぞれ $\text{Ag}(111)$ 上シリセンと $\text{Ag}(111)$ 表面の全エネルギー、 E_{Si} はバルク Si の 1 原子当りの全エネルギー、

N_{Si} は単位胞当りの Si 原子数、 N_{Ag} は最表面の Ag 原子数である。図 2(a)のシリセンは単位胞の 2 つの三角形の突起で特徴付けられ、 $E_{\text{form}} = 0.187$ -0.188 eV に分布する。一方、図 2(b)のシリセンはより複雑なバックル構造を持ち、 $E_{\text{form}} = 0.199$ -0.201 eV に分布する。これらの構造は STM で観測[2,7]されており、それぞれ 4×4 - α 相、 4×4 - β 相と呼ばれる。文献[7]では 4×4 - β 相に DFT 計算の結果[8]を対応付けているが、突起の対称性は図 2(b)の方がよく再現している。

図 2(c)のシリセンは単位胞当り Si 1 原子を除いて交互にバックルし、自立型シリセンに近い構造を持つが、 4×4 - α および β 相よりも高いエネルギー $-E_{\text{form}} = 0.228$ eV で見つかった。このようなシリセンのバンド構造はギャップの開いた Dirac コーンを持つと考えられ、実験的に存在の有無が盛んに議論されてきた Dirac コーン[2]との関連が示唆される。特に図 2(a)と(b)と比較して図 2(b)と(c)のエネルギー差の方が小さいため、 4×4 - β 相が形成される条件の下で図 2(c)もわずかに形成される可能性がある。

図 2(d)のヒストグラムのうち、 $E_{\text{form}} = 0.288$ -0.352 eV の範囲にも分布が見られるが、これらの構造は五員環や七員環を含む複雑な構造を持ち、図 1(b)の構造に対応する。いま $0 \leq N_{\text{DFT}} \leq 600$ で構造探索を行ったが、図 1(e)において五員環や七員環が $N_{\text{DFT}} = 550$ 付近で消失し蜂の巣格子が形成されたことを考慮すると、GOFEE による構造探索をより長く継続した場合、より多く蜂の巣格子が得られると予想される。

5. おわりに

本研究では、進化的アルゴリズムとガウス過程回帰に基づく構造探索手法 GOFEE を用いて Ag(111)表面上のシリセンの構造探索を行った。本稿では特に 4×4 超構造の探索結果を示し、GOFEE が最安定構造の再現だけでなく、準安定構造の生成も可能であることを実証した。ここで触れられなかった $\sqrt{13} \times \sqrt{13}$, $2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$ および $\sqrt{7} \times \sqrt{7}$ 超構造の結果は他の機会に報告する[8]。

参考文献

- (1) K. Takeda and K. Shiraishi, Phys. Rev. B **50**, 14916 (1994).
- (2) 例え P. Vogt et al., Phys. Rev. Lett. **108**, 155501 (2012).
- (3) M. Bisbo and B. Hammer, Phys. Rev. Lett. **124**, 086102 (2020).
- (4) Z. Tang and B. Hammer, J. Chem. Phys. **156**, 134703 (2022).
- (5) L. R. Merte et al., Angew. Chem. Int. Edit. **61**, e202204244 (2022).
- (6) J. E. Quinlivan Domínguez et al., J. Chem. Phys. **157**, 094709 (2022).
- (7) Z.-L. Liu et al., New. J. Phys. **16**, 075006 (2014).
- (8) Y. Hamamoto et al., in preparation.

センター報告

2022 年度大規模計算機システム利用による研究成果・論文一覧

この一覧は、本センター大規模計算機システムを利用して 2022 年 4 月から 2023 年 3 月までに得られた研究成果について、利用者から報告されたものを掲載しています。

1 学術雑誌掲載論文

- [1] M. Imai, I. Tanabe, T. Sato and K. Fukui, "Local Structures and Dynamics of Interfacial Imidazolium-Based Ionic Liquid depending on the Electrode Potential using Electrochemical Attenuated Total Reflectance Ultraviolet Spectroscopy", *Spectrochim. Acta, Part A*, 273, 121040, 2022.
- [2] Akio Ishii, "Activation energy of homogeneous nucleation of Zr hydride: Density functional theory calculation", *Comput. Mater. Sci.*, 215, 111769, 2022.
- [3] Liu, T.; Ohashi, K.; Nagita, K.; Harada, T.; Nakanishi, S.; Kamiya, K., "A Tin Oxide-Coated Copper Foam Hybridized with a Gas Diffusion Electrode for Efficient CO (2) Reduction to Formate with a Current Density Exceeding 1 A cm (-2)", *Small*, Vol.18, No.50, December. 2022.
- [4] Shintaro Kato, Takuya Hashimoto, Kazuyuki Iwase, Takashi Harada, Shuji Nakanishi, Kazuhide Kamiya, "Selective and high-rate CO₂ electroreduction by metal-doped covalent triazine frameworks: a computational and experimental hybrid approach", *Chemical Science*, Vol.14, 613-620, Dec. 2022.
- [5] Aimi A. H. Tajuddin, Mitsuru Wakisaka, Tatsuhiko Ohto, Yue Yu, Haruki Fukushima, Hisanori Tanimoto, Xiaoguang Li, Yoshitatsu Misu, Samuel Jeong, Jun-ichi Fujita, Hirokazu Tada, Takeshi Fujita, Masaki Takeguchi, Kaori Takano, Koji Matsuoka, Yasushi Sato, and Yoshikazu Ito, "Corrosion-resistant and high-entropic non-noble-metal electrodes for oxygen evolution in acidic media", *Adv. Mater.*, 35, 2207466, 2023.
- [6] Li, Y., Du, J. P., Yu, P., Li, R., Shinzato, S., Peng, Q., & Ogata, S., "Chemical ordering effect on the radiation resistance of a CoNiCrFeMn high-entropy alloy", *Computational Materials Science*, 214, 111764, 2022.
- [7] Heting Liao, Hajime Kimizuka, Hiroshi Miyoshi, Shigenobu Ogata, "Origin of the nucleation preference of coherent and semicoherent nanoprecipitates in Al-Cu alloys based on atomistically informed classical nucleation theory", *Journal of Alloys and Compounds*, Vol. 938, 168559, Mar. 2023.
- [8] Takayuki Myo, Kiyoshi Kato, "Modeling the electric dipole strength of neutron-rich ⁸He: Prediction of multineutron collective excitations", *Physical Review , C* 106, L021302, 2022.
- [9] Takayuki Myo, Myagmarjav Odsuren, Kiyoshi Kato, "Soft dipole resonance in neutron-rich ⁸He", *Progress of Theoretical and Experimental Physics*, Volume 2022, 103D01, 2022.
- [10] Takayuki Myo, Kiyoshi Kato, "Possible interpretation of the complex expectation values associated with resonances", *Physical Review , C* 107, 14301, 2023.

- [11] Takayuki Myo, Kiyoshi Kato, "Soft dipole resonance in 8C and its isospin symmetry with 8He", Physical Review , C 107, 34305, 2023.
- [12] Kunichika Tsumoto, Takao Shimamoto, Yuma Aoji, Yuhichi Kuda, Mamoru Tanida, Akira Amano, Yasutaka Kurata, "Linking the early afterdepolarization in cardiomyocyte models of long QT syndrome type 2 to reentrant arrhythmia", Proceedings of the 39th Congress of The International Union of Physiological Sciences (IUPS2022), 436-436, May 2022.
- [13] Takuma Kikutsuji, Yusuke Mori, Kei-ichi Okazaki, Toshifumi Mori, Kang Kim, and Nobuyuki Matubayasi, "Explaining reaction coordinates of alanine dipeptide isomerization obtained from deep neural networks using Explainable Artificial Intelligence (XAI)", The Journal of Chemical Physics, Vol.156, No.154108, Apr. 2022.
- [14] Z. Jiang, M. Shibahara, "Molecular Dynamics Study on the Relationship between Density Depletion Length and Interfacial Thermal Resistance at Nanostructured Surface", Heat Transf. Res, 54, 77, 2023.
- [15] Y. Fujii, K. Fujiwara, S. Tsushima, M. Shibahara, "Molecular dynamics simulation of energy transfer in reaction process near supported nanoparticle catalyst", J. Therm. Sci. Tech, 18-1, 22-00384, 2023.
- [16] Y. Maeda, T. Hiejima, "An improved shock wave capturing method in high Mach numbers", Physics of Fluids, 34, 9, 096107(14 pages), 2022.
- [17] R. Muraoka, T. Hiejima, "Onset conditions for Mach disk formation in underexpanded jet flows", Physics of Fluids, 34, 11, 116125, (13 pages), 2022.
- [18] Tomomi Kawakami, Sota Tamaki, Satoru Shirase, Hayato Tsurugi, Kazushi Mashima, "Syntheses and Redox Properties of Carboxylate-ligated Hexanuclear Ce (IV) Clusters and Their Photo-induced Homolysis of the Ce (IV)-ligand Covalent Bond", Inorganic Chemistry, Vol. 61, No. 50, pp. 20461-20471, Dec. 2022.
- [19] Reiichi Sugihara, Yuki Kato, Tomoya Mori, and Yukio Kawahara, "Alignment of single-cell trajectory trees with CAPITAL", Nature Communications, vol. 13, 5972, Oct. 2022.
- [20] H. Morita and S. Fujioka, ""Generation, measurement, and modeling of strong magnetic fields generated by laser-driven micro coils"", Rev. Mod. Plasma Phys, vol. 7, no. 1, p. 13, 2023.
- [21] R. Takizawa, H. Morita, K. Matsuo, K. F. F. Law, C. Liu, Y. Arikawa, and S. Fujioka, "Experimental Investigation of Voltage Generation Mechanism of Laser-Driven Coil", J.Phys. Soc. Japan, 91, 064501, 2022.
- [22] "T. Johzaki, K. Yoshitake, T. Endo, W. Kim, S. Fujioka, H. Nagatomo, H. Morita, R. Takizawa, and M. Takemura", "Dependence of resistivity gradient guiding of laser-driven relativistic electron beams on laser intensity and duration", Phys. Plasmas, 29, 112707, 2022.
- [23] "T. Tamagawa, Y. Hironaka, K. Kawasaki, D. Tanaka, T. Idesaka, N. Ozaki, R. Kodama, R. Takizawa, S. Fujioka, A. Yogo, D. Batani, P. Nicolai, G. Cristoforetti, P. Koester, L. A. Gizzi, and K. Shigemori", "Development of an experimental platform for the investigation of laser-plasma interaction in conditions relevant to shock ignition regime", "Rev.Sci.Instrum.", 93, 932022.

- [24] Takashi Matsubara, Yuto Miyatake, and Takaharu Yaguchi, “The Symplectic Adjoint Method: Memory-Efficient Backpropagation of Neural-Network-Based Differential Equations”, IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems, 2023.
- [25] Yamaguchi Y, Shoda Y, Yoshizawa S, Imai T, Perwez U, Shimoda Y, Hayashi Y., “Feasibility assessment of net zero-energy transformation of building stock using integrated synthetic population, building stock, and power distribution network framework”, Applied Energy, 333, 120568, 2023.
- [26] K. Shitara, K. Yokota, M. Yoshiya, J. Umeda, K. Kondoh, “First-principles design and experimental validation of β -Ti alloys with high solid-solution strengthening and low elasticities”, Mater. Sci. Eng. A, 843, 143053., 2022.
- [27] Takashi Ohta, Yuta Onishi, and Yasuyuki Sakai, “Modulation of wall turbulence by propagating flame of premixed hydrogen-air combustion”, Combustion and Flame, Vol.241, pp.112132, 2022.
- [28] Takashi Ohta, Akihiro Hayashi, and Shogo Tsuzuki, “A novel LES method for predicting drag reduction in viscoelastic fluid based on the time period of turbulence structures”, Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, Vol.309, pp.104924, 2022.
- [29] Takashi Ohta, Ryota Hirata, and Yasuyuki Sakai, “DNS predictions of NO_x production in developing turbulent mixing layers with non-premixed hydrogen–air combustion”, Journal of Turbulence, Vol.23, No.11-12, pp.636-654, 2022.
- [30] Nicolas Jourdaine, Nobuyuki Tsuboi, A.Koichi Hayashi, “Investigation of liquid n-heptane/air spray detonation with an Eulerian-Eulerian model”, Combustion and Flame, 112278, 2022.
- [31] T. Ozaki, Y. Abe, Y. Arikawa, Y. Sentoku, J. Kawanaka, S. Tokita, N. Miyanaga, T. Jitsuno, Y. Nakata, K. Tsubakimoto, A. Sunahara, T. Johzaki, E. Miura, O. Komeda, A. Iwamoto, H. Sakagami, S. Okihara, K. Ishii, R. Hanayama, Y. Mori, and Y. Kitagawa, “Hot electron and ion spectra on blow-off plasma free target in GXII-LFEX direct fast ignition experiment”, Nuclear Fusion 63, 036009, 2023.
- [32] Jiahao Wang, Maki Kishimoto, Tomoyuki Johzaki, Tomohiro Kumeda, Takeshi Higashiguchi, Atsushi Sunahara, Hikari Ohiro, Kotaaro Yamasaki, and Shinichi Namba, “Water-window X-ray emission from laser-produced Au-plasma under the optimal target thickness and focus conditions”, Atoms 10, 150, 2022.
- [33] Yiming Pan, Kentaro Tomita, Yukihiko Yamagata, Atsushi Sunahara, and Katsunobu Nishihara, “Investigation of dynamics of laser-produced carbon plasma during the laser irradiation using Thomson scattering”, Journal of Physics D , 56, 25201, 15pp, 2022.
- [34] K. Hagita, T. Murashima, T. Ohkuma, H. Jinnai, “Ring-Filling Effect on Stress–Strain Curves of Randomly End-Linked Tetra-Arm Prepolymers”, Macromolecules 2022, 55, 6547-6571., 2022.
- [35] K. Hagita, T. Murashima, T. Kawakatsu, “Lamellar Domain Spacing of Symmetric Linear, Ring, and Four-Arm-Star Block Copolymer Blends”, Macromolecules 2022, 55, 8021-8031., 2022.
- [36] K. Hagita, T. Murashima, N. Sakata, K. Shimokawa, T. Deguchi, E. Uehara, S. Fujiwara, “Molecular Dynamics of Topological Barriers on the Crystallization Behavior of Ring Polyethylene Melts with Trefoil Knots”, Macromolecules 2023, 56, 15-27, 2023.

- [37] K. Hagita, T. Murashima, “Practical compatibility between self-consistent field theory and dissipative particle dynamics”, *Polymer* 2023, 269, 125733, 2023.
- [38] Ryusei Oketani, Hiroki Takahashi, Simon Clevers, Akira Oyamada, Ichiro Hisaki, Gérard Coquerel, Kazuaki Yamanaka, Hirohito Tsue, “Order–Disorder Phase Transition between High- and Low-Z' Crystal Structures of the P1 Space Group”, *Cryst. Growth Des*, 22, 2230-2238, 2022.
- [39] Mayu Kobayashi, Haruka Kubo, Ryusei Oketani, Ichiro Hisaki, “Quinoxaline-annelated Hexadehydro[12]annulene: Use of A New Building Block to Construct a Hydrogen-bonded Hexagonal Molecular Network”, *CrystEngComm*, 24, 5036-5040, 2022.
- [40] Taito Hashimoto, Ryusei Oketani, Masaki Nobuoka, Shu Seki, Ichiro Hisaki, “Single Crystalline, Non-stoichiometric Cocrystals of Hydrogen-Bonded Organic Frameworks”, *Angew. Chem. Int. Ed*, 62, e202215836, 2023.
- [41] Yuto Suzuki, Mao Yamaguchi, Ryusei Oketani, Ichiro Hisaki, “Isomeric Effect of Naphthyl Spacers on Structures and Properties of Isostructural Porous Crystalline Frameworks”, *Mater. Chem. Front*, 7, 106-116, 2023.
- [42] Y Lin, R Suyama, S Kawaguchi, T Iki, T Kai, “Tejas functions as a core component of nuage assembly and precursor processing in Drosophila piRNA biogenesis”, *bioRxiv* 2022, 07, 12, 499660, 2022 年.
- [43] Hiroyuki Nakashima and Hiroshi Nakatsuji, “Solving the Schrödinger equation of a planar model H4 molecule”, *Chem. Phys. Lett.*, 815, 140359, 2023.
- [44] T. Homma, T. Yamashita, R. Wada, K. Kawazu, K. Kurose, T. Tsukahara, and I. Ueno, “Multicellular structures in thin free liquid films induced by thermocapillary effect”, *Journal of Colloid and Interface Science*, Vol. 641, 187-196, 2023.
- [45] K. Nakagawa, T. Tsukahara, and T. Ishida, “DNS study on turbulent transition induced by an interaction between freestream turbulence and cylindrical roughness in swept flat-plate boundary layer”, *Aerospace*, Vol. 10, Issue 2, 128, 2023.
- [46] K. Kohyama, M. Sano, and T. Tsukahara, “Sidewall effect on turbulent band in subcritical transition of high-aspect-ratio duct flow”, *Physics of Fluids*, Vol. 34, 084112, 2022.
- [47] T. Kawata and T. Tsukahara, “Spectral analysis on dissimilarity between turbulent momentum and heat transfers in plane Couette turbulence”, *Physics of Fluids*, Vol. 34, 075135, 2022.
- [48] Y. Matsukawa and T. Tsukahara, “Subcritical transition of Taylor-Couette-Poiseuille flow at high radius ratio”, *Physics of Fluids*, Vol. 34, 074109, 2022.
- [49] T. Kawata and T. Tsukahara, “Spectral analysis on transport budgets of turbulent heat fluxes in plane Couette turbulence”, *Energies*, Vol. 15, Issue 14, 5258, 2022.
- [50] T. Nimura and T. Tsukahara, “Viscoelasticity-induced instability in plane Couette flow at very low Reynolds number”, *Fluids*, Vol. 7, Issue 7, 241, 2022.
- [51] Nitaro Shibata, Shin Inada, Kazuo Nakazawa, Takashi Ashihara, Naoki Tomii, Masatoshi Yamazaki, Haruo Honjo, Hiroshi Seno, Ichiro Sakuma, “Mechanism of ventricular fibrillation: Current status and problems”, *Advanced Biomedical Engineering*, Vol. 11, pp 117-135, 2022.

- [52] H. Yoshino, “From complex to simple: hierarchical free-energy landscape renormalized in deep neural networks”, SciPost Phys, Core 5, 2, 2020.
- [53] H. Yoshino, “Spatially heterogeneous learning by a deep student machine”, arXiv:2302.07419, 2023.
- [54] 中谷祐介, 稲垣翔太, 鹿島千尋, 秋山諭, 木村祐貴, “底曳網漁業による海底擾乱が大阪湾の水質と一次生産に及ぼす影響”, 土木学会論文集B2 (海岸工学) , Vol.78, No.2, pp.I_775-I_780, 2022.
- [55] 山根成陽, 鹿島千尋, 中谷祐介, “過去 30 年の降雨パターンと土地利用の変化が瀬戸内海への淡水流入量に及ぼす影響”, 土木学会論文集G (環境) , Vol.78, No.6, pp.II_89-II_97, 2022.
- [56] Yutaro Motoori, ChiKuen Wong, Susumu Goto, “Role of the hierarchy of coherent structures in the transport of heavy small particles in turbulent channel flow”, J. Fluid Mech, 942, A3, 2022.
- [57] Takahiro Otsuka and Yasuhiro Akutsu, “Residual Entropy of the Cubic Dimer Model: The Higher Order Tensor Renormalization Group Approach”, J. Phys. Soc., Jpn. 91, 055003, 2022.
- [58] S. Sugiki, T. Niide, Y. Toya, S. Shimizu, “Logistic Regression-Guided Identification of Cofactor Specificity-Contributing Residues in Enzyme with Sequence Datasets Partitioned by Catalytic Properties”, ACS Synthetic Biology, 11, 12, 3973–3985, 2022.

2. 国際会議会議録掲載論文

- [1] Xiang Li, Ryo Matsumoto and Hiroshi Utsunomiya, "Molecular Dynamic Study on Conversion of Plastic Work of Materials into Heat", the 17th Asia-Pacific Conference on Fracture and Strength and the 13th Conference on Structural Integrity and Failure, Adelaide, South Australia, Australia, Dec. 2022.
- [2] Arata Endo, Shinji Yoshida, Shuichi Gojuki, Hiroaki Kataoka, Yoshihiko Sato, Akihiro Musa, Susumu Date, "Consideration of a Supercomputing System with Cloud Bursting Functionality from an Operational Perspective", The 13th IEEE International Conference on Cloud Computing Technology and ScienceBangkok, Thailand, December 2022.
- [3] Satoshi Ikeda, Kie Okabayashi, Shintaro Takeuchi, "Direct numerical simulation of turbulent flow above riblets under adverse pressure gradient", Proc. 12th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena (TSFP12) Osaka, Japan, No. 355, Jul. 2022.
- [4] Riku Sato, Hiroki Kijima, Tomotaka Konayashi, Ken Naitoh, "Computation of laminar-turbulent flow transitions in a circular pipe with a bellmouth inlet", JSST2022, Sep. 2022.
- [5] T. Itasaka and M. Okuda, "Effects of incorporating a deep-unfolding framework into a deep neural network: implications for image restoration", 2022 Asia-Pacific Signal and Information Processing Association Annual Summit and Conference (APSIPA ASC), pp. 649–652, Nov. 2022.
- [6] Takehiro Aoshima and Takashi Matsubara, "Deep Curvilinear Editing: Commutative and Nonlinear Image Manipulation for Pretrained Deep Generative Model", Proc. of The IEEE/CVF Computer Vision and Pattern Recognition Conference 2023 (CVPR2023), Jun. 2023.
- [7] Takashi Matsubara and Takaharu Yaguchi, "FINDE: Neural Differential Equations for Finding and Preserving Invariant Quantities", Proc. of The Eleventh International Conference on Learning Representations (ICLR2023) Kigali, May 2023.
- [8] Yu Kashihara and Takashi Matsubara, "Inverse Heat Dissipation Model for Image Segmentation", RISP International Workshop on Nonlinear Circuits, Communications and Signal Processing (NCSP2023) Honolulu, Feb. 2023.
- [9] Takehiro Aoshima and Takashi Matsubara, "Learning Attribute Curvilinear Coordinates for Pre-trained Deep Generative Model", RISP International Workshop on Nonlinear Circuits, Communications and Signal Processing (NCSP2023) Honolulu, Feb. 2023.
- [10] Takehiro Aoshima and Takashi Matsubara, "Nonlinear and Commutative Editing in Pretrained GAN Latent Space", NeurIPS 2022 Workshop on NeurRepsNew Orleans, Nov. 2022.
- [11] Yu Kashihara, and Takashi Matsubara, "Application of Denoising Image Restoration to Anomaly Detection", Proc. of 2022 International Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications (NOLTA2022) Online, B2L-B-01, Dec. 2022.
- [12] Rousslan Fernand Julien Dossa, Takashi Matsubara, "Toward Human Cognition-inspired High-Level Decision Making For Hierarchical Reinforcement Learning Agents", ICML2022 Workshop on the Decision Awareness in Reinforcement LearningVirtual /Maryland, Jul. 2022.

- [13] R. Sakurai, T. Suzuki, S. Tsushima, "Numerical study of evaporation behavior of fluid in a porous medium by two-phase lattice Boltzmann method", The 12th TSME International Conference on Mechanical Engineering, 44896.
- [14] S. Okada, Y. Baba, H. Tsubata, T. Nishi, H. Miyaki, S. Kamiyama, and T. Okada, "Analysis of electric field on an aircraft model under a thundercloud using the FDTD method with triangular-prism cells", International Workshop on High Voltage Engineering (IWHV) Naha, Okinawa, no. EPP-22-100/SP-22-035/HV-22-081, 2022.
- [15] Takagi Y, Nishimoto S, "High-resolution image reconstruction with latent diffusion models from human brain activity", The IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR), 2023.
- [16] Takumi Ito, Nobuyuki Tsuboi, Kohei Ozawa, "3D Evaluation of Premixed Gas Injection Ports Number on Flow Field in Disk RDE", AIAA-2023-0577, AIAA SciTech 2023, 23-27 January 2023.
- [17] Tsutomu Uenohara, Makoto Yasuda, Kosei Yamamoto, Yasuhiro Mizutani, Yasuhiro Takaya, "LASER MICRO MACHINING USING AN OBLIQUE PHOTONIC NANOJET WITH FOCUSED LASER BEAM IRRADIATION", MSEC2022-82356, Jun. 2022.
- [18] Yutaka Oda, Masaharu Shimoda, Tomohiro Kasahara, Tatsuro Yamazaki, Ryosuke Matsumoto, "Measurements of Turbulent Wall Heat Transfer Using Temperature Sensitive Paint with Image Denoising by a Machine Learning Method", Proceedings of Twelfth International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena (TSFP12), Paper No. 394, Jul. 2022.
- [19] Atsushi Sunahara, "Pre-pulse-shape control for efficient laser ion acceleration", 6th Asia-Pacific Conference on Plasma Physics (Topical invited talk)on-line e-Conference, October 9-14, 2022.
- [20] Ken Murakami, Mariko Okada, "Detection of enhancer activity at the single-cell level by deep learning", Keystone symposia: Chromatin Architecture in Development and Human HealthPoster presentation, 2023.3.
- [21] Ken Murakami, Mariko Okada, "Enhancer detection at the single-cell level using the deep learning method", MBSJ2022 Poster presentation, 2022.12.
- [22] Ken Murakami, Mariko Okada, "Development of a super-enhancer-based cell clustering method for leukemia", The 81st Annual Meeting of the Japanese Cancer Association, 2022.9.
- [23] M. Ninomiya, Y. Hayashi, T. Tohei, A. Sakai, "First-Principles Analysis of Oxygen Vacancy Behavior in Rutile TiO₂ under External Electric Fields", 9th International Symposium on Control of Semiconductor Interfaces (ISCSI-IX) TuP2-5, Online, Sep. 5-8, 2022.
- [24] K. Fujimori, K. Tsujimoto, T. Shakouchi, T. Ando and M. Takahashi, "DNS Analysis of the Effect of Control Parameters on the Heat Transfer Performance of Intermittently Controlled Multiple Impinging Jets", Proc. 23rd Australasian Fluid Mechanics Conference, 8p, Dec. 2022.
- [25] 北井 孝紀, 吉崎 達, 水谷 晟吾, 崔 枫圭, 林 慶浩, 吉本 勇太, 塩見 淳一郎, "分子動力学シミュレーションを用いた高分子材料の誘電特性に関するデータセットの構築", 第 71 回高分子討論会札幌, Sep. 2022.

- [26] S. Okazaki, K. Nakagawa, T. Ishida, and T. Tsukahara, "Numerical study on development of a turbulent spot in the swept-flat-plate three-dimensional boundary layer", In: Proceedings of the 2022 Asia-Pacific International Symposium on Aerospace Technology (APISAT2022), Niigata, Japan, (Hybrid Event), S46-5, 5 pages, Oct. 12-14 (2022).
- [27] J. Hiraga, K. Nakagawa, T. Ishida, and T. Tsukahara, "Effect of distributed roughness on turbulent transition in the three-dimensional boundary layer", In: Proceedings of the 2022 Asia-Pacific International Symposium on Aerospace Technology (APISAT2022), Niigata, Japan, (Hybrid Event), S46-4, 4 pages, Oct. 12-14 (2022).
- [28] S. Shinkai, K. Nakagawa, T. Ishida, and T. Tsukahara, "Direct numerical simulation of turbulent transition in swept-flat-plate boundary layer over a cavity", In: Proceedings of the 2022 Asia-Pacific International Symposium on Aerospace Technology (APISAT2022), Niigata, Japan, (Hybrid Event), S46-3, 6 pages, Oct. 12-14 (2022).
- [29] K. Nakagawa, T. Ishida, and T. Tsukahara, "Transition process of crossflow vortices due to the cylindrical roughness and cavity in the three-dimensional boundary layer", In: Proceedings of the 2022 Asia-Pacific International Symposium on Aerospace Technology (APISAT2022), Niigata, Japan, (Hybrid Event), S46-1, 6 pages, Oct. 12-14 (2022).
- [30] T. Kurihara, T. Ishigami, and T. Tsukahara, "Inter- and extra-polations of source estimation by CNN to identify a scalar point source in turbulent channel flow", In: Proceedings of 9th Asian Joint Workshop on Thermophysics and Fluid Science (AJWTF2022), Utsunomiya, Japan, 4119, 7 pages, Nov. 27-30 (2022).
- [31] T. Takahashi, T. Nimura, and T. Tsukahara, "Flow pattern of rotating plane Couette flow at low Reynolds number with viscoelastic fluid", In: Proceedings of 9th Asian Joint Workshop on Thermophysics and Fluid Science (AJWTF2022), Utsunomiya, Japan, 4065, 6 pages, Nov. 27-30 (2022).
- [32] S. Someya, T. Ishigami, and T. Tsukahara, "CNN-based estimation of scalar diffusion source distance under grid-generated turbulence", In: Proceedings of 9th Asian Joint Workshop on Thermophysics and Fluid Science (AJWTF2022), Utsunomiya, Japan, 4054, 7 pages, Nov. 27-30 (2022).
- [33] Y. Matsukawa and T. Tsukahara, "Different transition processes of Taylor-Couette-Poiseuille flow based on modulated wavy Taylor vortex", In: Proceedings of 9th Asian Joint Workshop on Thermophysics and Fluid Science (AJWTF2022), Utsunomiya, Japan, 4028, 5 pages, Nov. 27-30 (2022).
- [34] M. Tashiro and T. Tsukahara, "Prediction of constitutive stress for viscoelastic fluid turbulence with LSTM", In: Proceedings of 9th Asian Joint Workshop on Thermophysics and Fluid Science (AJWTF2022), Utsunomiya, Japan, 4023, 5 pages, Nov. 27-30 (2022).
- [35] Y. Matsukawa, and T. Tsukahara, "Laminarization in subcritical Taylor-Couette-Poiseuille flow with increasing pressure gradient", In: Proceedings of Nineteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022), Sendai, Japan, pp. 732-735, Nov. 9-11 (2022).
- [36] M. Tashiro and T. Tsukahara, "DNS-CNN simulation of viscoelastic turbulent flow using U-Net", The 15th World Congress in Computational Mechanics & 8th Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (WCCM-APCOM 2022, Yokohama, Japan (Online), 1348, July 31 - Aug. 5 (2022).

- [37] K. Nakagawa, T. Ishida, and T. Tsukahara, “Freestream-turbulence independence of secondary instability of cross-flow vortices in swept-flat-plate boundary layer”, In: Proceedings of the 12th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena (TSFP12), Osaka, Japan (Online), 186, 6 pages, Jul. 19-22 (2022).
- [38] K. Kohyama, M. Sano, K. Tamai, and T. Tsukahara, “Directed percolation phenomena in subcritical transition of high-aspect-ratio duct flow”, In: Proceedings of the 12th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena (TSFP12), Osaka, Japan (Online), 312, 6 pages, Jul. 19-22 (2022).
- [39] Yutaro Motoori, Susumu Goto, “Role of the hierarchy of coherent structures in the transport of solid particles in turbulent channel flow at high reynolds numbers”, 12th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena (TSFP12), 340, 2022.

3. 国内研究会等発表論文

- [1] Yoshiaki Matsumoto, Ichiro Tanabe, Yoshitaka Morikawa, Ken-ichi Fukui, “Analysis of local structure of interfacial IL for Electric Double Layer Organic FET by MD calculation”, THE 22ND INTERNATIONAL VACUUM CONGRESS IVC-22, Sapporo, Japan, 2022.9.11-16 .
- [2] Tomonori Kakinoki, Ichiro Tanabe, Ken-ichi Oyaizu, Ken-ichi Fukui, “Spectroscopic Analysis of a Hydrogen Storing Polymer / Electrode Interface During the Electrochemical Storing by Attenuated Total Reflection Spectroscopy”, THE 22ND INTERNATIONAL VACUUM CONGRESS IVC-22, Sapporo, Japan, 2022.9.11-16.
- [3] Xiang Li, Ryo Matsumoto, Hiroshi Utsunomiya and Shigenobu Ogata, “Molecular Dynamic Study on Temperature Rise of FCC Metals by Plastic Deformation”, the Japan Institute of Metals and Materials Spring Meeting 2023, Tokyo, Japan, Mar. 2023.
- [4] 大橋圭太郎, 原田隆史, 中西周次, 神谷和秀, “Electrocatalytic reduction of carbon monoxide to multicarbon products on copper-single atom catalysts”, 日本化学会第 103 回春季年会, 東京理科大学野田キャンパス, Mar 2023.
- [5] 名木田海都, 濱本 雄治, 神谷 和秀, 中西 周次, 森川 良忠, “Cu100 面におけるCO水素化反応とO₂還元反応の競合反応に対する理論的研究”, 2022 年 電気化学秋季大会, 神奈川大学 みなとみらいキャンパス, Sep. 2022.
- [6] 山本泰暉, 栗原諒, 原田隆史, 中西周次, 神谷和秀, “金属銅電極上でのCO₂電解におけるCO二量化反応の第一原理分子動力学解析”, 2022 年 電気化学秋季大会, 神奈川大学 みなとみらいキャンパス, Sep. 2022.
- [7] 小松和暉, 小島駿, 松村武, “ハール・プリコーティングを用いる大規模スペクトル有効周波数分割多重と期待値伝播法に基づく並列干渉除去復調法の性能評価”, 信学技報, vol. 122 no. 235, RCS2022-141, 59-64, Oct.2022.

- [8] 南部 正裕, 奥野 充一, 仙北屋 圭, 大慶 則之, 小林 志保, “豪雨時における閉鎖性海域への淡水流入量の推定：石川県七尾湾におけるケーススタディ”, 日本地球惑星科学連合 2022 年大会, 幕張メッセ , 2022 年 5 月 25 日, 2022 年 6 月 2 日.
- [9] 津元国親, 島本貴生, 青地悠馬, 天野晃, 倉田康孝, “How early afterdepolarization triggers lethal arrhythmias in long QT syndrome type 2: a computational study”, 第 68 回日本不整脈心電学会学術集会, パシフィコ横浜 横浜市, Jun.2022.
- [10] 津元国親, 島本貴生, 青地悠馬, 九田裕一, 谷田守, 姫野友紀子, 天野晃, 倉田康孝, “不整脈トリガーは如何にして発生するのか：数理モデル解析からの予測”, 生理学研究所 心血管研究会 2022 「比較統合生理学的観点からの循環生理の解析」, 信州大学 松本市, Oct.2022.
- [11] 津元国親, 島本貴生, 青地悠馬, 九田裕一, 谷田守, 姫野友紀子, 天野晃, 倉田康孝, “EAD の発生を契機とする心室性不整脈の発生機序 : in silico 研究”, 第 69 回中部日本生理学会, 藤田医科大学 豊明市, Oct.2022.
- [12] 津元国親, 島本貴生, 青地悠馬, 九田裕一, 谷田守, 姫野友紀子, 天野晃, 倉田康孝, “Inhibition of transient outward K⁺ current: potential prevention of reentrant arrhythmia developments in long QT syndromes.”, 第 96 回日本薬理学会年会, パシフィコ横浜 横浜市, Dec.2022.
- [13] 津元国親, 青地悠馬, 島本貴生, 姫野友紀子, 天野晃, 九田裕一, 谷田守, 倉田康孝, “Mechanisms of ventricular arrhythmias triggered by the development of EAD: an in silico study.”, 日本生理学会 第 100 回記念大会, 国立京都国際会館 京都市, March.2023.
- [14] Tianyi Wei, Zhicheng Yuan, Abhishek L. Pillai, Ryoichi Kurose, “Numerical investigation of droplet splash on flat surfaces: Influence of surface wettability”, 第 59 回日本伝熱シンポジウム講演論文集, May.2022.
- [15] Tianyi Wei, Abhishek L. Pillai, Ryoichi Kurose, “Numerical Investigation Regarding Influence of Wettability on Inertia Dominated Droplet Splash”, 日本流体力学会 年会 2022 講演論文集, Sep. 2022.
- [16] Tianyi Wei, Abhishek L. Pillai, Ryoichi Kurose, “Influence of Ambient Pressure on Droplet Splash Behavior”, 日本機械学会第 100 期流体工学部門講演会 講演論文集, Nov. 2022.
- [17] 地内秀太, 河原伸幸, 小橋好充, ほか 3 名, “副室火花点火ガスエンジンにおける着火特性—副室ジェット点火のLES解析—”, 第 33 回内燃機関シンポジウム 講演番号 87, KFC Hall & Rooms 東京都, 2022 年 11 月 24 日.
- [18] 島 嘉輝, 小橋好充, 河原伸幸, “ノズル内キャビテーションを考慮したディーゼル噴霧のLES解析”, 第 31 回微粒化シンポジウム 講演番号 B123, 2022 年 12 月 15 日.
- [19] 藤井祐作, 藤原邦夫, 津島将司, 芝原正彦, “界面付着触媒ナノ粒子近傍の反応過程におけるエネルギー分配に関する分子シミュレーション”, 第 59 回日本伝熱シンポジウム講演論文集, H123, 2022.
- [20] 秋田翔太, 藤井健博, 岡林希依, 竹内伸太郎, “纖維群と流れの相互作用による集団的変形挙動の伝達機構”, 第 36 回数値流体力学シンポジウム, No. D03-5, Dec. 2022.
- [21] 橋本健人, 竹内伸太郎, “二次元正方形キャビティ内の熱伝導性固体粒子を含む自然対流における輻射伝熱の影響”, 第 36 回数値流体力学シンポジウム, No. D03-4, Dec. 2022.

- [22] 祝峻太郎, 竹内伸太郎, “界面垂直方向圧力分布を考慮した潤滑モデルを埋め込む粒子流れ解法”, 第 36 回数値流体力学シンポジウム, No. D04-4, Dec. 2022.
- [23] 嘉瀬 文哉, 内藤 健, 松野 龍生, 佐波 賢, 谷島 理来, 河野 慧大, “多重衝突パルス噴流圧縮に基づくダブルピストンエンジンの実験研究: 圧縮比が耐ノック性に与える影響”, 第 33 回内燃機関シンポジウム 予稿集, Nov.2022.
- [24] 河野 慧大, 内藤 健, 谷島 理来, 佐波 賢, 嘉瀬 文哉, 松野 龍生, 木嶋 洋貴, “多重衝突パルス噴流圧縮原理に基づくエンジの軸対称過給機の数値計算”, 第 33 回内燃機関シンポジウム 予稿集, Nov.2022.
- [25] 谷島 理来, 内藤 健, 小林 知嵩, 佐波 賢, 河野 慧大, 嘉瀬 文哉, 松野 龍生, “多重衝突パルス噴流圧縮に基づくシングルピストンエンジンの 3 次元数値解析研究”, 第 33 回内燃機関シンポジウム 予稿集, Nov.2022.
- [26] 岩林菜々香, 岡田祥吾, 比江島俊彦, “SR ストラットによる縦渦循環値が超音速燃焼に与える効果について”, 第 36 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, D01-4, 1-2, 2022.
- [27] 天野開, 比江島俊彦, “スクラムジェットエンジンのインレットにおけるゲルトラー渦による剥離抑制”, 第 36 回数値流体力学シンポジウム講演論文集 , C03-3, 1-2, 2022.
- [28] Tomomi Kawakami, Sota Tamaki, Hayato Tsurugi, Kazushi Mashima, “Blue-light Induced Reduction of Oxo-bridged Hexanuclear Cerium(IV) Clusters via Homolysis of a Cerium-Ligand Covalent Bond”, 第 72 回錯体化学討論会, 九州大学, 2022 年 9 月 26 日.
- [29] Takuya Akiyama, Yuya Kakiuchi, Ian A. Tonks, Hayato Tsurugi, Kazushi Mashima, “タングステン錯体を触媒とするペンタアリール化ピロールの短段階合成”, 第 51 回複素環化学討論会, 大阪大学, 2022 年 9 月 15 日.
- [30] Akira Yamamoto, Takuya Akiyama, Hayato Tsurugi, Kazushi Mashima, “タングステンビニルカルベン錯体と内部アルキンの反応による多置換シクロペンタジエンの合成”, 日本化学会第 103 回春季年会, 東京理科大, 2023 年 3 月 22 日.
- [31] Takuya Akiyama, Yuya Kakiuchi, Ian A. Tonks, Hayato Tsurugi, Kazushi Mashima, “[2+2+1]-Cycloaddition Reaction of Azobenzene and Diarylacetylenes Catalyzed by Early Transition Metal Imido Complexes”, 日本化学会第 103 回春季年会, 東京理科大, 2023 年 3 月 24 日.
- [32] 加藤 有己, “シングルセルデータを用いた細胞動態解析アルゴリズムの開発”, NGS EXPO 2022, 大阪府大阪市, Oct. 2022.
- [33] 杉原 礼一, 加藤 有己, 森 智弥, 河原 行郎, “1 細胞RNA-seqデータを用いた細胞状態遷移経路アラインメント法の開発”, RNA Frontier Meeting 2022 oral/poster, 大阪府吹田市, Oct. 2022.
- [34] King Fai Farley Law, 藤岡慎介, 大平豊, “無衝突衝撃波フット領域における不安定性のシミュレーション研究 ”, 日本物理学会 2022 年秋季大会 12pW621-3, 2022.
- [35] 前川珠貴, 澤田寛, 森田大樹, 瀧澤龍之介, Jinyuan Dun, Yubo Wang, 城崎知至, 岩田夏弥, 千徳靖彦, 有川安信, 藤岡慎介, “”捕捉電子のエネルギー分布計測によるレーザー照射ターゲット表面での電場強度の推定””, 日本物理学会 2022 年秋季大会 15aW621-9 , 2022.

- [36] 瀧澤龍之介, 長友英夫, 有川安信, 森田大樹, 敦近原, 前川珠, 片桐健登, 尾崎典雅, 弘中陽一郎, 重森啓介, 藤城淳平, 安部勇輝, 羽原英明, 蔵満康浩, 城崎知至, 坂上仁志, 中井光男, 白神宏之, 児玉了祐, 千徳靖彦, 藤岡慎介, “波形整形ビームを用いた中実球圧縮における流体不安定性の影響”, 日本物理学会 2022 年秋季大会 15aW621-3, 2022.
- [37] King Fai Farley Law, Jinyuan Dun, 安部勇輝, Alessio Morace, 有川安信, 尾崎哲, Philipp Korneev, Joao Jorge Santos, 藤岡慎介, “高強度レーザー駆動キロテスラ磁気リコネクションによる粒子加速”, 日本物理学会 2022 年次大会 23aB1-11, 2022.
- [38] 前川珠貴, 澤田寛, 城崎知至, 千徳靖彦, 瀧澤龍之介, DUN Jinyuan, 築道拓実, LAW Farley King Fai, 藤岡慎介, “硬X 線分光計測への機械学習の適用と妥当性の評価”, 日本物理学会 2022 年次大会 25aB1-7, 2022.
- [39] 築道拓実, 瀧澤龍之介, 森田大樹, 前川珠貴, LAW King Fai Farley, 敦近原, MORACE Alessio, 有川安信, 千徳靖彦, 城崎知至, 藤岡慎介, “高強度レーザーによるプラズマ加熱のレーザーパルス幅依存性”, 日本物理学会 2022 年次大会 25pB1-4, 2022.
- [40] 柏原悠, 松原崇, “逆熱拡散モデルによる医療画像セグメンテーション”, 電子情報通信学会技術研究報告 複雑コミュニケーションサイエンス研究会(CCS), 留寿都, vol. 122 no. 453 CCS2022-82, pp. 107-112, 2023 3月.
- [41] 青嶋雄大, 松原崇, “深層生成モデルの潜在空間における可換な属性ベクトル場の学習”, 電子情報通信学会技術研究報告 複雑コミュニケーションサイエンス研究会(CCS), 留寿都, vol. 122 no. 453 CCS2022-83, pp. 113-116, 2023 3月.
- [42] 青嶋雄大, 松原崇, “GANの潜在空間における非線形な属性座標系の学習”, 第 25 回情報論的学習理論ワークショップ (IBIS2022), つくば, 1-090, 2022 11月.
- [43] 松原崇, 谷口隆晴, “深層学習を用いてデータから力学系の第一積分を発見し保存するモデル化法”, 日本応用数理学会 2022 年度年会C1-5-3, 北海道, 2022 9月.
- [44] 青嶋雄大, 松原崇, “GANの意味空間における属性ベクトル場の学習”, 電子情報通信学会 情報論的学習理論と機械学習研究会(IBISML)沖縄, vol. 122, no. 90, pp. 94-99, 2022 6月.
- [45] 松原崇, 谷口隆晴, “射影法を用いて系の第一積分を発見し保存するNeural ODE”, 電子情報通信学会 情報論的学習理論と機械学習研究会(IBISML)沖縄, vol.122, no.90, pp.47-5, 2022 6月.
- [46] 丸茂英敬, 松原崇, “LiDAR点群のセグメンテーションのための距離同変置み込み”, 2022 年度 第 36 回人工知能学会全国大会(JSAI2022)京都, 4C1-GS-7-01, 2022 6月.
- [47] 吉田崇人, 谷口隆晴, 松原崇, “アンバランスを考慮した深層学習による物理系の学習, "2022 年度 第 36 回人工知能学会全国大会(JSAI2022), 京都, 6 月, 2022.", 2022 年度 第 36 回人工知能学会全国大会(JSAI2022)京都, 2D5-GS-2, 2022 6 月.
- [48] 柏原悠, 松原崇, “拡散モデルによる拡散を使用しない異常検知”, 2022 年度 第 36 回人工知能学会全国大会(JSAI2022)京都, 1F5-GS-10-01, 2022 6月.
- [49] 柏原悠, 松原崇, “拡散を使用しない拡散モデルによる異常検知”, 電子情報通信学会 NOLTAソサイエティ大会 大阪, B-16, 2022 6月.
- [50] 吉田崇人, 谷口隆晴, 松原崇, “Imbalance-aware lossを用いた深層学習による物理系の学習”, 電子情報通信学会 NOLTAソサイエティ大会 大阪, B-13, 2022 6月.

- [51] 丸茂英敬, 松原崇, “球面投射されたLiDAR点群のための距離同変畳み込み”, 電子情報通信学会 NOLTAソサイエティ大会 大阪, B-3, 2022 6月.
- [52] 櫻井亮太, 鈴木崇弘, 津島将司, “格子ボルツマン法を用いた多孔質内液相蒸発挙動の基礎的検討”, 热工学コンファレンス 2022 講演論文集, E135, Oct. 2022.
- [53] 都築 昇悟, 太田 貴士, “粘弹性流体乱流のためのミニマルフローユニットにおける時間スケーリングに基づくLESモデル”, 日本流体力学会 年会 2022, Sep. 2022.
- [54] 中澤 勇亮, 太田 貴士, “壁乱流の遷移時および遷移後に発生する空力騒音の観察”, 日本流体力学会 年会 2022, Sep. 2022.
- [55] 白畠 風太郎, 太田 貴士, “円柱に沿う流れの DNS による乱流構造の普遍的性質の検証”, 第 20 回日本流体力学会中部支部講演会, Dec. 2022.
- [56] 浅野 柚, 太田 貴士, “高解像度DNSによる渦キャビテーションの発生と乱流渦の変化の観察”, 流体工学シンポジウム 2022 (第 70 回北陸流体工学研究会) , Dec. 2022.
- [57] 上野 玄稀, 永井 優河, 太田 貴士, “壁乱流のDNSにおける水素予混合燃焼火炎伝播とNOx生成の予測”, 流体工学シンポジウム 2022 (第 70 回北陸流体工学研究会) , Dec. 2022.
- [58] 道坂 大介, 太田 貴士, “粘塑性流体乱流のDNSの実現と乱流構造の観察”, 日本機械学会 北陸信越支部 2023 年合同講演会, Mar. 2023.
- [59] 皆本 慧, 太田 貴士, “過冷却凝固しつつある液体における乱流構造と凝固要素の関係の解明”, 日本機械学会 北陸信越支部 2023 年合同講演会, Mar. 2023.
- [60] 黒田 陸真, 太田 貴士, “回転する円柱に沿う流れにおける乱流変調の予測”, 日本機械学会 北陸信越支部 2023 年合同講演会, Mar. 2023.
- [61] 中司智仁, 寺島洋史, 坪井伸幸, “超臨界圧直交極低温水素噴流の軌跡スケーリングについて”, 日本機械学会第 100 期流体工学部門講演会, OS03-47, 2022.
- [62] チャンジチン, アンシアンチン, 坪井伸幸, 小澤晃平, 丸祐介, 藤田和央, “数値解析によるウェーブライダー形状の空力特性評価 : Inverse Parabolic設計法による形状設計及びポートテールの効果”, 第 66 回宇宙科学技術連合講演会, 2022.
- [63] Muhammad Fakhrull Hadi Bin Abdull Rahman, 坪井伸幸, 小澤晃平, “NACA0012 翼型周りの流れ場の数値解析 : 乱流モデルの評価”, 日本機械学会九州支部九州学生会第 54 回学生員卒業研究発表講演会, 2023.
- [64] 井福剛司, 大倉毅, 坪井伸幸, 小澤晃平, 伊藤隆, 野中聰, “再使用型ロケット実験機RV-Xの空力特性における乱流モデルの影響に関する数値解析”, 第 66 回宇宙科学技術連合講演会, 2022.
- [65] 伊藤 拓海, 坪井 伸幸, 小澤 晃平, “3 次元数値解析による予混合噴射口数がDisk Rotating Detonation Engine内部流れ場に与える影響の評価”, 第 54 流体力学講演会, 1D01, 2022,6.
- [66] 植村 文哉, Jourdaine Nicolas, 坪井 伸幸, 唐 新猛, 小澤 晃平, 林 光一, “ブロックAMR法を用いた 2 次元水素酸素デトネーションの数値解析:計算領域の拡大と計算時間・格子点数への影響”, 日本航空宇宙学会西部支部講演会 (2022), JSASS-2022-S025, 2022,11.
- [67] 檜山瑞樹, 坪井伸幸, 林光一, 中森一郎, 富塚孝之, 高橋淳郎, 大西史倫, 小玉貴司, 玉内義一, “水素/空気予混合気における爆燃から爆轟への遷移過程の数値解析”, 日本機械学会九州学生会第 54 回学生員卒業研究発表講演会, 2023.3.

- [68] 小濱朱生, 坪井伸幸, 小澤幸平, 林光一, “詳細化学反応モデルを使用した爆轟の 2 次元非粘性詳細数値解析—アンモニア/水素/空気予混合気における爆轟特性—”, 2022 年度衝撃波シンポジウム, 2023 年 3 月.
- [69] 久保田大輝, 坪井伸幸, 小澤晃平, 林光一, “準詳細化学反応モデルを使用したジメチルエーテル/酸素予混合気の爆轟の詳細数値解析 -爆轟伝播特性における反応モデルの影響について-”, 2022 年度衝撃波シンポジウム, 2023.3.
- [70] Ryo Ueda, Harry H. Halim, Yoshitada Morikawa, “機械学習分子動力学法によるCO吸着したCuステップ表面の再構成の解析”, Spring Conference of JPS (The Physical Society of Japan), Mar. 2023.
- [71] Harry H. Halim, Yoshitada Morikawa, “Machine Learning Molecular Dynamics Simulation of CO₂ Hydrogenation to Formate on Cu (111) Surface”, Spring Conference of JPS (The Physical Society of Japan), Mar. 2023.
- [72] 山本紘生, 大森健史, “微視的な幾何学的不均一性のある固体面における流体力学的境界条件”, 数値流体力学シンポジウム, 2022.12.14.
- [73] 坂和洋一, 花野正浩, Alessio Morace, 佐野孝好, “臨界密度近傍の多成分プラズマ中のレーザー駆動無衝突電衝撃波”, 日本物理学会 2023 年春季大会, 23aB1-10, 2023 年 3 月.
- [74] 小田豊, 下田将治, 笠原友宙, 山崎龍朗, 松本亮介, “感温塗料による乱流熱伝達場の画像計測における機械学習を用いたノイズ低減”, 第 59 回日本伝熱シンポジウム, Paper No. F133, May 2022.
- [75] 河口 真一, 甲斐 歳恵, “AlphaFold2 プログラムを用いて, 生殖細胞特異的なヌアージュ構造体のタンパク質間相互作用を予測する”, 第 3 回有性生殖研究会, Mar. 2023.
- [76] 二宮雅輝, 林侑介, 藤平哲也, 酒井朗, “第一原理計算によるルチル型TiO₂ 中の剪断面構造及び酸素空孔挙動の解析”, 第 83 回応用物理学会秋季学術講演会(講演奨励賞受賞), 20a-B204-1, ハイブリッド開催, 2022 年 9 月 20-23 日 .
- [77] 二宮雅輝, 林侑介, 藤平哲也, 酒井朗, “ルチル型TiO₂ 中の剪断面構造及び酸素空孔挙動に関する第一原理計算”, 第 70 回応用物理学会春季学術講演会 (奨励賞受賞記念講演) , 17p-A408-1, ハイブリッド開催, 2023 年 3 月 15-18 日.
- [78] 藤森 航紀, 辻本 公一, 社河内 敏彦, 安藤 俊剛, 高橋 護, “DNSによる間欠制御された多重衝突噴流の周波数特性”, 日本機械学会 2022 年度年次大会講演論文集, 5p, Sep. 2022.
- [79] 坂野 友一, 辻本 公一, 社河内 敏彦, 安藤 俊剛, 高橋 護, “DNSによる傾斜・回転制御の周波数比が衝突噴流の流動特性に与える影響”, 日本機械学会 2022 年度年次大会講演論文集, 4p, Sep. 2022.
- [80] 藤森 航紀, 辻本 公一, 社河内 敏彦, 安藤 俊剛, 高橋 護, “傾斜角度を時間変化させた回転衝突噴流のDNS”, 第 99 期日本機械学会流体工学部門講演会講演論文集, 4p, Nov. 2022.
- [81] 岡田 陸, 辻本 公一, 社河内 敏彦, 安藤 俊剛, 高橋 護, “フェーズフィールド法による平面液体噴流の微粒化における密度比の影響”, 第 36 回数值流体力学シンポジウム講演論文集, 5p, Dec. 2022.
- [82] 坂野 友一, 辻本 公一, 社河内 敏彦, 安藤 俊剛, 高橋 護, “DNS による傾斜・回転制御の制御パラメータが伝熱特性に与える影響”, 日本機械学会東海支部第 72 期総会・講演会講演論文集, 1p, Mar. 2023.

- [83] 岡田 陸, 辻本 公一, 社河内 敏彦, 安藤 俊剛, 高橋 護, “液体噴流の微粒化における密度比が流動特性に与える影響の解析”, 日本機械学会東海支部第 72 期総会・講演会講演論文集, 1p, Mar. 2023.
- [84] 藤森 航紀, 辻本 公一, 社河内 敏彦, 安藤 俊剛, 高橋 護, “DNS による傾斜角度を時間変化させた回転衝突噴流の流動解析”, 日本機械学会東海支部第 72 期総会・講演会講演論文集, 1p, Mar. 2023.
- [85] 増田 竜海, 辻本 公一, “振動制御された多重衝突噴流の流動構造・伝熱特性”, 日本機械学会東海支部第 54 回学生会卒業研究発表講演会講演論文集, 2p, Mar. 2023.
- [86] 仁村 友洋, 河田 卓也, 塚原 隆裕, “平面クエット流れにおける粘弾性に起因する渦変調と不安定性に関する研究”, 第 38 回生研TSFDシンポジウム, 東京, 2 pages, 3 月 9 日 (2023).
- [87] 栗原 稔幸, 石神 隆寛, 塚原 隆裕, “チャネル乱流中のスカラーブラシュレーター拡散源位置に関するCNNを用いた回帰推定のDNS検証”, 日本機械学会 第 100 期 流体工学部門講演会 講演論文集, 熊本, OS04-15, 1 page, 11 月 12 日-13 日 (2022).
- [88] 田代 雅哉, 塚原 隆裕, “LSTMを用いた粘弾性チャネル乱流における構成応力の予測”, 日本流体力学会年会 2022 講演論文集, 京都, 3 pages, 9 月 27 日-29 日 (2022).
- [89] 高橋 拓海, 仁村 友洋, 塚原 隆裕, “低レイノルズ数回転平面クエット流れにおける粘弾性流体の不安定性”, 日本流体力学会年会 2022 講演論文集, 京都, 4 pages, 9 月 27 日-29 日 (2022).
- [90] 松川 裕樹, 塚原 隆裕, “Taylor-Couette-Poiseuille流における変調波状Taylor渦流から間欠乱流への亜臨界遷移現象”, 日本流体力学会年会 2022 講演論文集, 京都, 3 pages, 9 月 27 日-29 日 (2022).
- [91] 河田 卓也, 塚原 隆裕, “平面クエット乱流における多重スケール相互作用による乱流エネルギー輸送”, 日本流体力学会年会 2022 講演論文集, 京都, 6 pages, 9 月 27 日-29 日 (2022).
- [92] 松川 裕樹, 小野寺 駿, 塚原 隆裕, “水平圧力勾配を付加した鉛直平行平板間共存対流の亜臨界遷移パターン”, 第 59 回日本伝熱シンポジウム 講演論文集, 岐阜, BPA1432, 6 pages, 5 月 18 日-20 日 (2022).
- [93] 稲田慎, 岸田優作, 高山健志, 井尻敬, 芦原貴司, 大星直樹, 柴田仁太郎, 中沢一雄, “新たな心房細動治療法の開発を目的とした心房モデルの構築”, 第 61 回日本生体医工学会大会 口頭発表, 朱鷺メッセ (新潟コンベンションセンター) , 2022/6/28-30.
- [94] 岸田優作, 浦田智和, 橋本陸, 大星直樹, 芦原貴司, 井尻敬, 高山健志, 柴田仁太郎, 原良昭, 信太宗也, 稲田慎, 中沢一雄, “ヒトの 3 次元心房モデルに基づく心房細動興奮伝播シミュレーションと拡張現実での可視化”, 第 61 回日本生体医工学会大会 口頭発表, 朱鷺メッセ (新潟コンベンションセンター) , 2022/6/28-30.
- [95] 原口亮, 芦原貴司, 松山高明, 芳本潤, “WPW症候群副伝導路の順伝導と逆伝導における不応期の違いについて:シミュレーションによる検討”, 日本不整脈心電学会心電学関連春季大会 2022 口述(遠隔), ハイブリッド (パシフィコ横浜ノース) , 2022/4/9.
- [96] 中谷祐介, 鶴田脩, 出口博之, 鹿島千尋, 山根成陽, “栄養塩類増加措置による瀬戸内海東部の水質管理に関する数値シミュレーション”, 第 57 回日本水環境学会年会, 松山, 3-A-13-3, 2023 年.

- [97] 秋山諭, 木村祐貴, 中谷祐介, 稲垣翔太, 鹿島千尋, 新井勲, 山本龍悠, “大阪湾における底曳網漁業による水柱への栄養塩供給機能評価”, 令和4年度漁場環境保全関係研究開発推進会議 濑戸内海栄養塩環境研究会, 広島, 2023.
- [98] 中谷祐介, 出口博之, 鹿島千尋, “防波堤の開口が大阪湾北部港湾域の静穏性と水質に及ぼす影響”, 第69回海岸工学講演会, 横須賀, 2022.
- [99] 本告遊太郎, 後藤晋, “壁乱流中における固体粒子分布の秩序構造による記述”, 日本機械学会2022年度年次大会, 2022.9.11-14.
- [100] 本告遊太郎, 後藤晋, “乱流中の渦の階層とスケール間エネルギー輸送”, 日本流体力学会年会2022, 2022.9.27-29.
- [101] 本告遊太郎, 後藤晋, “粒子の添加による壁乱流の変調現象”, 日本機械学会第100期流体工学部門講演会, 2022.11.12-13.
- [102] 濱本雄治, T. N. Pham, 森川良忠, “機械学習によるAg(111)表面上シリセンの大域的構造探索”, 日本物理学会2023年春季大会, 24aJ1-6, 2023年3月.

4. その他

- [1] 明孝之, 加藤幾芳, “8Heにおけるソフトダイポールモードの可能性”, 日本物理学会2022年秋季大会, Sep, 2022.
- [2] Takayuki Myo, “Soft dipole resonance in 8He”, 3rd Japan-France Workshop "Few-body problems in Physics - from atoms to quarks", Mar, 2023.
- [3] 明孝之, 加藤幾芳, “8Cにおけるソフトダイポール共鳴の可能性”, 日本物理学会2023年春季大会, Mar, 2023.
- [4] 小宮山佑樹, 大場春佳, 水野信也, “大規模閉鎖型BCMP待ち行列ネットワークの複数窓口への対応”, 日本ソーシャルデータサイエンスシンポジウム2023, Feb, 2023.
- [5] 南部恵理子、野崎一徳、福岡基彦、横野遼太郎、開発巳智子、古々本一馬、秋山茂久、村上秀明、花本博、村上旬平、中村昇太、阪本敬、関根伸一、山田朋美、林美加子, “歯科診療室の個室における実データを用いた汚染空気の滞留シミュレーション”, 第42回医療情報学連合大会（第23回日本医療情報学会学術大会）, 2022年11月.
- [6] 河野宏明, 柏浩司, 開田丈寛, “量子色力学におけるパーシステントホモロジーの応用”, 第128回日本物理学会九州支部例会（熊本大学）, 2022年12月3日.
- [7] M.SATO, N.BELMILOUD, Y.OKUNO, “LARGE SCALE EDDY SIMULATION OF A LIQUID FILM FLOWING OVER A ROTATING DISK: WAVES PATTERNS AND DYNAMICS”, The 17th OpenFOAM Workshop (Cambridge United Kingdom), July. 13, 2022.
- [8] 佐藤雅伸, “回転基板上の液膜のLESを使用した流体シミュレーション”, 応用物理学会界面ナノ電子化学研究会第7回ポスター展招待講演 (Tokyo Japan), Sep. 29, 2022.
- [9] Takuma Hattori, Pawel Krukowski, Ye Changqing, Yuji Hamamoto, Akira Saito, Yoshitada Morikawa, Hideji Osuga, Yuji Kuwahara, “Chiral recognition of thiaheterohelicene molecules studied by STM and TERS”, ギリシャにおける国際会議(ハイブリット開催), 2022年10月中嶋

- [10] S. Miyakoshi, T. Sugimoto, T. Shirakawa, S. Yunoki, H. Ueda, “Diamond-type quantum circuit for real-time dynamics in one-dimensional system”, The 1st young researcher's workshop of the Extreme Universe Collaboration (Nagoya), 2023/2/13-17 .
- [11] 宮腰祥平, 杉本貴則, 白川知功, 柚木清司, 上田宏, “量子回路エンコーダによる時間発展ダイナミクスと量子回路構造の研究”, 日本物理学会 2023 年春季大会, 2023/3/22-25.
- [12] 宮腰祥平, “ダイアモンド型量子回路を用いた一次元非平衡量子状態の研究”, 研究会:物性研究のための量子アルゴリズム最前線, 2023/3/28-29.
- [13] 竹本宏輝, 明孝之, 堀川昶, 土岐博, 井坂政裕, M. Lyu, Q. Zhao, N. Wan, “ ^{12}C における α 凝縮状態 (Hoyle 状態とその振動モード) ”, 一般社団法人 日本物理学会(オンライン), 2023 年 3 月 23 日.
- [14] 竹本宏輝, 明孝之, 堀川昶, 土岐博, 井坂政裕, M. Lyu, Q. Zhao, N. Wan, “核力の強い斥力芯を考慮しても ^{12}C の Hoyle 状態は存在するのか?”, 一般社団法人 日本物理学会 岡山理科大学岡山キャンパス, 2022 年 9 月 6 日.
- [15] 秋田健太, 森本有紀, 鶴野玲治, “キャラクタイラスト線画の顔を対象としたテクスチャ詳細が反映可能な自動着色”, VC + VCC 2022, 2022.
- [16] Hiroyuki Nakashima, “Solving the Schrödinger equations of small atoms and molecules with the free complement theory”, The 10th Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC-10), Quy Nhon, Vietnam. (Plenary lecture of Pople Medal)., February 19-23, 2023.
- [17] 塚原 隆裕, “乱流×機械学習”, 日本機械学会熱工学部門・流体工学部門・計算力学部門合同講習会 機械学習×熱・流体工学の最先端 (No.23-20) オンライン, 3 月 24 日 (2023).
- [18] 塚原 隆裕, “粘弹性流体や乱流拡散を対象とした深層学習”, 日本機械学会 2022 年度年次大会 EFD ワークショップ : 流体工学と AI (富山) W52-03, 9 月 11-14 日 (2022).
- [19] T. Tsukahara, “Subcritical transitions of channel flows: Patterning of localized turbulence”, IISc-TUS Joint Webinar (Online), Jun. 9 (2022) .
- [20] 塚原 隆裕, “粘弹性流体乱流に対する機械学習代理モデル”, 電子情報通信学会 情報論的学習理論と機械学習研究会 (IBISML) 第 45 回 IBISML 研究会 Zoom (online 開催), 3 月 9 日 (2022).
- [21] 中谷祐介, “瀬戸内海の栄養塩類管理に資する新たな低次生態系モデルの開発”, FOCUS スパコンと計算科学利用事例集 第 13 号 pp.14-15, 2023.
- [22] 中谷祐介, “瀬戸内海の栄養塩類はどこまで管理できるのか?”, 兵庫県漁協青壯年部連合会 研修会 [依頼講演] 明石, 2023 年 1 月 31 日.
- [23] 中谷祐介, “瀬戸内海の栄養塩類はどこまで管理できるのか?”, ひょうご豊かで美しい里海再生シンポジウム [依頼講演] 神戸, 2022 年 10 月 29 日.

SC22 出展報告

伊達 進^{1,2} 田主 英之² 原口 直大³

吉田 薫史^{4,1} 谷口 昂平^{4,1} 安田 成寿^{4,1} 阿部 洋丈¹ 下條 真司¹

応用情報システム研究部門¹

情報推進部情報基盤課³

高性能計算・データ分析融合基盤協働研究所²

大学院情報科学研究科⁴

2022 年 11 月に米国テキサス州 Dallas にて開催された国際会議／展示会 SC (通称 SC22) において、当センターの概要、研究内容、および事業内容を紹介するための展示ブースの出展を行った。本稿ではその展示内容や当日の様子等について報告する。

1. はじめに

大阪大学サイバーメディアセンターでは、例年、米国で開催される国際会議 SC において展示ブースを出展する活動を継続している。SC とは、*The International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage, and Analysis* という正式名称を持つ、IEEE Computer Society および ACM SIGARCH によって開催されている国際会議であり、ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) 分野におけるトップレベル会議の一つである。それと同時に、SC は HPC に関する最新機器や最先端技術の国際見本市でもある。そのため、北米を中心とした研究者や技術者に限らず、欧州、アジアの研究者や技術者が集う最大級の国際会議／展示会となっており、新型コロナウイルス感染症の拡大以前において登録者数は 1 万人を超える数字が記録されており、今年は 11,830 人 (対面 10,530 人、オンラインのみ 1,300 人) が参加したと発表されている。当センターによる展示ブースの出展は、新型コロナウイルス感染症の拡大のため 2020 年度、2021 年度の展示は叶わなかったが、2000 年の初出展から数え、今回で 21 回目となる。

SC22 は、米国テキサス州ダラス市にある Kay Bailey Hutchison Convention Center Dallas (以下、ダラスコンベンションセンター: 図 1) にて、11 月 13 日から 18 日までの期間に開催された。なお、ダラスでの SC の開催は 2000 年度、2018 年度に続いて 3 度目であり、本センターのダラスでの展示は 3 度目となる。ダラスはテキサス州の北部にあり、アメリカ合衆国南部で有数の大都市である。11 月のダラスの気候は平均 20°C 程度と比較的温暖で乾燥しているといわれている。しかし、展示員は展示ブースの準備のため現地時間 11 月 11 日に現地入りしたが、当日は日本よりも寒さが感じられる気候であり、SC の開催される週を通してコートが手放せなかった。



図 1：ダラスコンベンションセンター

初日こそ雨天で乾燥は感じられなかったが、その週を通じて乾燥は激しく、喉をやられたり、肌の乾燥に悩まされたりという状況となった。そのため、展示終了の段階では皆疲労困憊の状況であり、終わって良かったという思いと達成感が入り混じっていた。

SC22 の展示が行われたダラスコンベンションセンターはダラスのダウンタウンに位置しており、敷地面積は 2,000,000 平方フィートと米国でも有数の大規模なコンベンションセンターである。1,000,000 平方フィートある展示スペースには、3 つの ballroom、88 室の会議室、1,750 席のシアター、9,816 席のアリーナを備える。このような大規模な展示会場にて、391 もの企業、大学、研究所等がブースにて展示を行った。

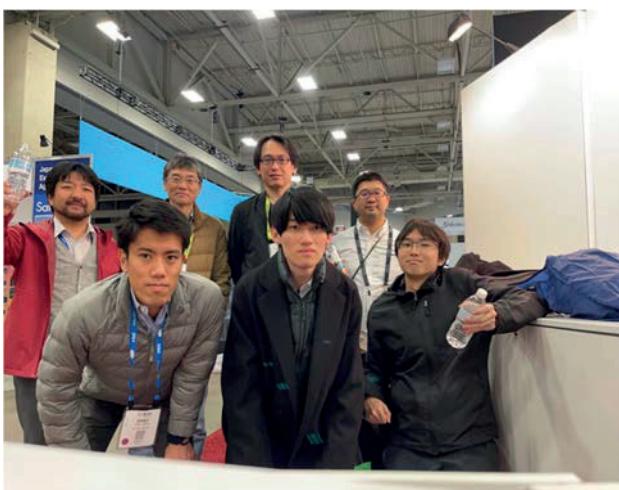


図 2: 展示終了、片付け直前に撮影した記念撮影

2. 展示内容

本年は、以下に紹介する当センターおよび情報推進部の教職員 5 名（招へい教員 1 名含む）、関連研究部門に配属されている大学院生 3 名の合計 8 名という構成で展示ブースの運営に臨んだ。展示者および周辺ブース関係者らとの記念撮影風景を図 3 に示す。



図 3: SC22 での記念撮影

応用情報システム研究部門	
スタッフ	下條 真司
	伊達 進
	阿部 洋丈（招へい准教授）
大学院生	吉田 薫史
	谷口 昂平
	安田 成寿
高性能計算・データ分析融合基盤協働研究所	
スタッフ	田主 英之
情報推進部情報基盤課	
技術職員	原口 直大

ブース展示は、11 月 14 日から 17 日までの 4 日間行われた。その間の当ブースへの来訪者数は、ID バッジの読み取り数で数えて 268 名であった。訪問者数は 2018 年度のダラス開催の 436 名を大きく下回った。この最大理由の 1 つとして、今年度コロナ以前の状態にむけ再開した SC ではあったものの、やはり新型コロナウイルスの拡大の影響を受け、現地での出席を見合せた方の影響があると考えられる。しかし、コロナ禍においても、268 名程度の方に対面にて本センターの概要、事業内容、研究活動について紹介・報告ができたことは良かったと思う。これまでオンラインでの機会しか与えられず、対面で行いたくてもできなかった 2 年超を思い返せば、その思いも大きい。なお、ブース来訪者によっては 10 分以上もブースに滞在され、ブース展示要員と話をしている方もおられたので、来訪者数だけでブース展示の効果・意義を図れるものではないが、全体を振り返り、今年度も SC でのアウトリーチ活動として良い結果を残せたと考えている。

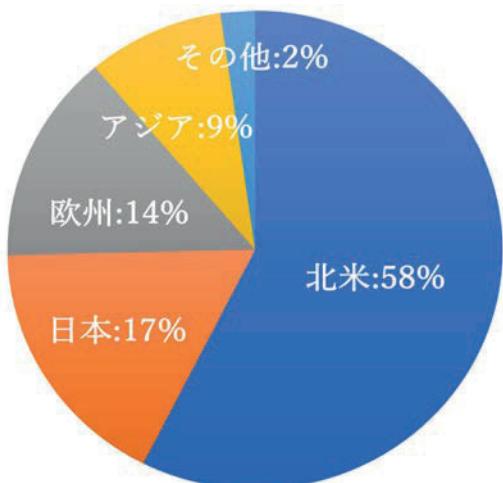


図 4: ブース来訪者 - 地域別分類

ブース来訪者の地域別分類(図4)を見ると、開催地の北米エリアからの来訪者が最大で全体の58%(154名)を占めている。続いて、日本からの来訪者が17%(46名)、欧州からの来訪者が14%(38名)、アジアからの来訪者が9%(24名)であった。その他(6名)の内訳には、南米、アフリカなどが含まれていた。残念ながら今回はオセアニア諸国からの来訪者が見られなかった。

その他注目する点は、ブース来訪者に中国からの来訪者が記録されていなかった事である。これまでの傾向から考えると中国からの来場者は大幅減であったのではないかと思われる。

新型コロナの影響からか全体的なブース会場への来場者の減少が見られた中で、今回はオセアニア、南極以外の大陸からの来訪者に対して、アウトリーチ活動を行うことができたと考えている。

以下、SC22にて大阪大学サイバーメディアセンターで行ったポスター展示の概要について説明する。(括弧内は担当者名。順不同、敬称略)。

(1) *About Us: Cybermedia Center, Osaka University*
(原口、阿部)

本ポスターでは、サイバーメディアセンターに関する紹介とITコア棟について紹介を行った。ブース来訪者からは、ITコア棟の冷却設備について、空冷であるか水冷であるかといったスーパーコンピュータに関連した内容が多かったが、キャンパス内の図書館はどのような方が使えるのか、電子ジャーナルは利用できるか、学外からアクセス可能か、といった、情報へのアクセスに関する質問を多くいただいた。また、キャンパスネットワークの回線速度についても興味を持つ方もおり、データ通信を伴う施設利用に興味を持つ方が多い印象であった。

(2) *Large-scale Computing Systems at the Cybermedia Center* (原口、阿部)

本ポスターでは、大規模計算機システムの構成や利用状況についての紹介を行った。今回はSC19以来の出展となるため、SQUID及びONIONを新サービスとして紹介した。

ブース来訪者からは、プロセッサ、ファイルシス

テム、アクセラレータ、利用可能なアプリケーションに関する質問に加え、ONIONを経由した情報連携について多くの興味をいただいた。AWS S3のAPI互換を持つCLOUDIANを利用していることや、WebインターフェースとしてNextCloudを利用していることを伝えると、SQUIDやONIONはどのような方が使えるか、と、利用に関する質問も多くいただけた。しかしながら、現状は直接的な利用は難しく、日本の研究機関の共同研究としての連携により、ONIONを介した利活用が可能であることを伝えると、残念そうな姿を見せた。そのほか、データ転送速度やネットワークの速度に関する質問も多くいただき、About Usでいただいた質問も含め、情報通信基盤整備と大規模計算機システムとの連携の重要度を再認識した。



図5: ポスター説明を行う原口

(3) *AI Assisted job scheduler/ Profile guided vector optimization* (安田、田主)

(4) *Provenance Recording System for Research Data Management* (安田、田主)

ポスター(3)(4)では、日本電気株式会社(NEC)との協働研究所で取り組んでいる次世代のクラウド連動型高性能計算と高性能データ分析の融合基盤の実現に向けた3つの研究テーマを紹介した。

ポスター(3)ではその内2つの研究について取り扱った。まずAI Assisted job schedulerでは、強化学

習を用いたジョブスケジューラを紹介した。提案システムの動作の詳細や、将来課題である Slurmとの統合について興味を持たれる方が多かった。また、ソースコードを公開しているかどうかや、実装に用いたフレームワークについての質問も多く頂き、実装面での関心も寄せて顶いた。研究として面白いというコメントも多く頂いたので、実用化に向けて拡張を進める必要があると強く感じた。

次に Profile guided vector optimization では、ソースコードをベクトルプロセッサでの計算に最適化したソースコードに自動変換するツールを紹介した。ベクトル化を知らない来訪者もいらっしゃり、そのような方にベクトル化について知って顶くきっかけにもなった。このツールによってベクトル化が容易になれば、ベクトルプロセッサの認知を広めることにも繋がるかもしれないと思った。



図 6: ポスター説明を行う大学院生（安田君）

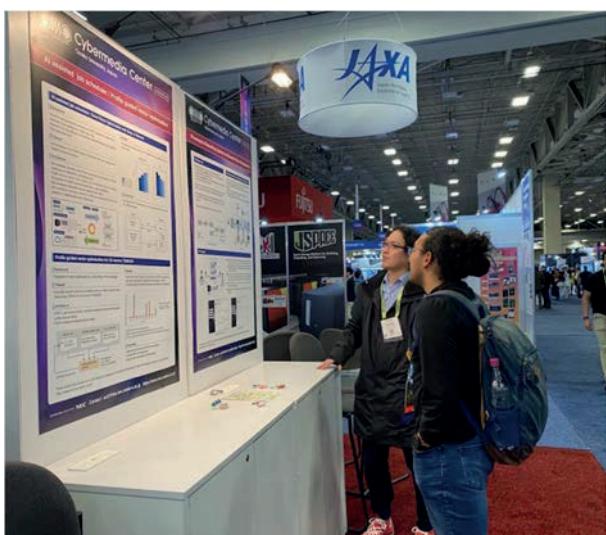


図 7: ポスター説明を行う田主

ポスター (4) では高性能計算機システムにおける来歴自動記録システム実現への取り組みを紹介した。研究データ管理における研究データの再現性向上、利活用促進のための来歴記録システムの重要性を説明し、ユースケースとプロトタイプを使い我々が目指す来歴記録システムの大まかな流れを紹介した。シミュレーションなどで大量のデータを生み出す高性能計算機システムで自動的に来歴を記録する必要性、そして低負荷でユーザが行うジョブの背後で来歴が自動的に記録される点、来歴データをユーザが直接編集できない事で研究データの透明性を確保する点には多くの来訪者が大きく傾いて関心を持って頂いた。また多くの来訪者からこの来歴システム及びプロトタイプがオープンソースとして提供されるのかどうか、という質問を頂いた。この点も踏まえて今後の来歴記録システム実現に向けて取り組んでいきたい。

(5) *ns-3-based Interconnect Simulator for Network Simulation with Job Scheduling* (谷口)

本ポスターでは、HPC システムのインターネットのシミュレーションに向けた、ジョブスケジューリング対応ネットワークシミュレータを紹介した。来訪者にジョブスケジューリングの必要性は理解していただけた。しかし、Infiniband への対応の有無や MPI のモデル化の方法など実際にインターネット設計に使う観点からの質問を多く頂いた。質問を受けてインターネット設計に用いるには更なる機能拡張を行う必要があると実感した。



図 8: ポスター説明を行う大学院生（谷口君）

(6) *Toward Practical Cloud Bursting Operation on SQUID* (吉田)

本センターでは、クラウドバースティング機能を備えたスーパーコンピュータ SQUID を構築した。しかし、スーパーコンピュータとクラウド間の性能差やコスト差が利用者のクラウド利用を妨げる恐れがある。本ポスターでは、性能、コスト、利用方法の 3 点から利用者にクラウド利用を促進する運用方針の研究を紹介した。

ポスター発表には、大学の研究者や学生、クラウドに関する企業の方など様々な方が来訪された。オンプレミスとクラウドの併用が注目される中、多くの来訪者はスーパーコンピュータ内のストレージを NFS でクラウドにマウントする点や課金方式が異なる 2 つのキーを用意した点に興味を持っていただけた。また、クラウドサービスの選択理由やスーパー コンピュータとクラウド間の通信遅延への対応について質問をいただいた。

本ブースでの展示では、クラウド事業者の方と議論するとともに、激励の言葉をいただいた。今回の経験を自身の研究活動に活かしていきたい。



図 9: ポスター説明を行う大学院生（吉田君）

3. おわりに

今年度の展示においても、大阪大学サイバーメディアセンターの大規模計算機および可視化事業をはじめとし、高性能計算・ネットワーキングに関する研究成果について欧米を中心とした 268 名強の来訪者にアウトリーチすることができた。来年度の SC の開催は米国コロラド州デンバー市で同時期に開催されるが、大阪大学サイバーメディアセンターのプレゼンス向上とともに、情報公開、アウトリーチ活動にも引き続き尽力していきたいと考える。

関係各位には更なるご支援とご協力をお願いしたい。

当日展示したポスターの PDF や、その他の写真など、ここで紹介しきれなかった内容については下記ウェブページに掲載されています。こちらもぜひご覧ください：

<http://sccmc.osaka-u.ac.jp/>

第 28 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2022) 報告および 第 29 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2023) 告知

大阪大学サイバーメディアセンター准教授 吉野 元

1. SuperCon2022

昨年 2021 年 8 月 22 日から 26 日までの 5 日間に高校生・高専生を対象とする「スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2022)」が行われました。本年も引き続きコロナ禍にありながらもオンラインにて本選を開催することができました。これに向けて予選が行われ、20 チームが予選を通過しました。その結果は下記 HP に掲載されております。通常は西日本の上位 10 チーム、東日本の上位 10 チームを選抜し、それぞれ大阪大学（阪大）と東京工業大学（東工大）の会場に集まって本選が開催されていました。しかし、オンライン開催であるため東西区別なく上位 20 チームが本選に参加する、ということになりました。

ここでは本選について説明いたします。このコンテストは、2 名又は 3 名を 1 チームとする高校生・高専生の参加者たちが、与えられた課題を解くプログラムを 3 日間に渡って作成し、最終日にスーパーコンピュータで実行して、解答の正確さや計算の速さを競うもので、そのレベルの高さから、別名「電脳甲子園」とも呼ばれています。過去の出場者が大学進学後に国際大学対抗プログラミングコンテストで活躍するなど、次世代の情報科学を担う若手育成にも貢献しており、2008 年度の文部科学大臣賞も受賞しています。

1995 年の第 1 回から 2005 年の第 11 回までは東京工業大学（東工大）学術国際情報センター(Global Scientific Information and Computing Center:GSIC)の単独主催でしたが、2006 年の第 12 回からは大阪大学（阪大）(Cybermedia Center:CMC)も共同主催しています。予選に参加したチームの中から、富士川以東 50Hz 地域からは 10 チームが、60Hz 地域からはやはり 10 チームが参加します。東工大と阪大の二つの会場で同時に開催した年は、wiki やポリコムなど

で相互に交流し、開会式・表彰式などもポリコムを使って二元中継で行ってきました。このコンテストは 5 日間にも渡る合宿型で、実際にスーパーコンピュータを高校生・高専生が使うことができるという、世界的にも大変ユニークなものです。原則として毎年交互に両大学のスーパーコンピュータを使います。2007、2011 年は阪大 CMC の SX-8R が、2009 年は SX-9 が、2015 年、2017 年は SX-ACE が使われました。2020 年の本選では SQUID が用いられる予定でしたが中止されました。その代わりに理化学研究所のスーパーコンピュータ富嶽を使った臨時イベント（富嶽チャレンジ）が開催されました。これを機に、理研もスーパーコンピューティングコンテストに参画することになり、2021 年また 2022 年も本選では富嶽が用いられました。これまでの wiki、ポリコムに代わって discord、slack が相互交流に使われ、開会式・表彰式、問題説明、チュートリアルなどでは zoom が用いされました。

2. 予選

2022 年の予選課題は 6 月 1 日に下記の SuperCon web に公表されました。この予選課題を解くプログラムを作成し、6 月 17 日正午までにプログラムを含む必要書類を添付してメールで申し込んでもらいました。予選問題は、スーパーコンピュータを使わなくても学校や家庭にある普通のパソコンでも解けるような課題が出題されます。2022 年の予選課題は、阪大の作成チームによる「ロボット追跡問題」というものでした。これは様々な色のタイルを敷き詰めた床の上を進むロボットが隨時報告する色の情報からロボットの軌跡を推定するという問題です。これを含め、過去の予選課題、本選課題は SuperCon web に全て掲載されています。また、参加者が 2 名以上集まらない人のために、希望者には「認定証」も発行

しています。予選課題を正確に解くプログラムが書けたら、「SuperCon 1 級」が認定されます。問題のレベルに応じて 2 級と 3 級もあります。

3. 本選

本選の初日は開会式で参加チームの紹介、本選課題の発表、攻略法の解説がありました。本選課題は東工大の作成チームによる「オートマトンで文字列を区別しよう」という問題でした。計算機科学分野のオートマトン理論におけるある有名な未解決問題にヒントを得た問題です。実際の本選では、課題に取り組む前に、富嶽スーパーコンピュータ、また OpenMP/MPI を用いた並列プログラミングに関するオリエンテーションと講義が行われ、チームごとに本選課題を解くためのプログラム設計に入りました。そして、本選 2 日目から 4 日目の午前中まではチームごとにプログラムを作成しました。大学生・大学院生、スタッフがチューターとしてバグ取りなどを手伝いましたが、課題そのものに関する助言はしません。最終日の成果発表会、表彰式の後にはオンライン懇親会も行われました。本高校生・高専生の参加者たちと、両大学の教員、学生チューターたちが、プログラミングや大学について語らう大切な時間となっています。

4. SuperCon 2023 の告知

2023 年は 8 月 21 日（月）から 25 日（金）までの 5 日間での開催を予定しています。新型コロナウィルス感染拡大予防のため、オンライン開催となります。予選課題は 5 月 31 日に公表、課題提出〆切は 6 月 16 日正午です。理化学研究所も主催者に加わり、使用するスーパーコンピュータは、理化学研究所の富岳の予定です。本年もチャレンジする高校生・高専生、引率の先生方など参加者の皆さんに喜んでいただけるよう様々な工夫を凝らそうと関係者一同考えています。本稿が皆様のお目に触れるときには既にスケジュールが進行しているかもしれません、もしも可能ならば皆様もお知り合いの高校生に SuperCon2023 というものがあり、大変に楽しい行事であることを呼びかけてください。また、来年以降、

すなわち SuperCon2024 以降への参加、お申し込みをご検討頂ければ幸いです。

5. Web

<http://www.gsic.titech.ac.jp/supercon/> がコンテストページです。ぜひ一度御覧ください。

大規模計算機システム利用者講習会等の紹介

大阪大学サイバーメディアセンター教授 降旗 大介

1. 概要

サイバーメディアセンターの教職員をはじめ、大阪大学の大規模計算機システムの運営、開発、支援に関わっている関係者は、システムをユーザにより有効に活用していただくために何が出来るかを日々考えています。たとえばその一端として、マニュアル・ドキュメント類を充実させること、ユーザからの質問をメールなどで受け付け適切に返答するための仕組みの構築と維持、それらを明文化するためのFAQの整備などの活動を行っています。

そうした活動の中でもわれわれが重要と考えているのが、ここで紹介する利用者講習会です。利用者講習会は計算機ユーザへ知識を伝える場だというだけでなく、その場での質問などを通じてユーザと直接やりとり出来る場でもあり、大変貴重な機会です。そのためしばしば、大規模計算機システムの運営・開発・管理・支援などを行っている関係者が立ち会います。

これら講習会の内容は、OSである Unix 環境、スーパーコンピュータのハードウェアについての概要説明といった入門的内容から、大規模計算を行う近年のユーザにとって重要な並列計算の基礎、OpenMP、MPI、OpenACCなどの並列計算通信プロトコルの概要からこれらや GPU を上手に使いこなすための各種プログラミング技法の詳細、intel コンパイラに関する詳しい解説、阪大の誇るスーパーコンピュータ SQUID に搭載されているベクトルプロセッサ SX-Aurora TSUBASA を用いての高速計算についての解説、昨今のデータ志向型研究へ対応可能な大阪大学のストレージシステム ONION の利用の仕方、スーパーコンピュータ上のコンテナ利用講習会、バッチシステムの講習会、そして KKR グリーン関数法を用いた第一原理計算プログラム AkaiKKR といった各方面の専門家用の特殊なソフトウェア等々、多岐にわたります。こうした内容は

ユーザの要望に沿って、計画されています。詳しくは次ページに掲載しております表に掲載しておりますが、大規模計算機の利用者だけではなく、学生、教員、研究者を幅広く対象とし、年に 20 回弱開催しております(2022 年度は 20 回開催いたしました)。また、より詳細な情報をサイバーメディアセンター大規模計算機システムの web において掲載しておりますので、ぜひご参照ください。

2. 多忙な方も参加しやすく

近年、学生も研究者も大変に多忙です。これをうけて、サイバーメディアセンターの講習会は原則として年に 2 回、ほぼ同じ内容の講習会を時期をずらして開催するように工夫しています。実際には、6 月後半と 9 月頭～12 月頃に開催しています。これは、「学期始まりや学期末の時期は外して欲しい」「あまり遅い時期では、学生の研究開始に間に合わない」などのユーザの声を反映したもので、なるべく多くのユーザが参加できるように、また、講習会の受講が意義あるものになるようにと配慮した結果です。また、これまで現場での開催のみだった講習会にも 2019 年よりその一部についてオンライン配信を開始し、ユーザがより参加しやすいような形へと拡張しています。このようにオンライン配信を導入していたため、コロナ禍の中ながら 2022 年も無事にすべての利用者講習会をオンラインにて実施することができました。

また、AkaiKKR などの研究者用専門ソフトウェアの講習会では講師を確保しにくいという問題がありますが、われわれは一般財団高度情報科学技術研究機構と協力して講師を確保するなどして、こうした専門家向けソフトウェアの講習会を開催しています。こうした努力の甲斐あってか、これまでに各講習会ともに一定数のユーザの参加をいただいていると講習会をユーザの皆様に役立てていただいていると

考えています。

3. 初学者にも優しく

未参加の方にとって、こうした講習会は敷居が高いと思われるがちです。しかし、先に述べたように初学者も講習会の対象で、2022 年の 20 回の講習会のうちおおよそ 1/4 ほどは初学者が対象の内容のものです。

具体的には、OS である Unix の簡単な操作方法の解説や、スーパーコンピュータのハードウェアの概要説明、細かい技法の説明の前に必要となる並列計算の概念の説明、バッチシステムの解説、そしてコンパイラの説明などからなります。スーパーコンピュータを使うユーザというと、こうした知識やプログラミング技法について通じた大変なプロフェッショナルばかりと想像されることもありますが、もちろんそれは違います。どなたも「最初は初心者」です。そして、細かい技術についてのマニュアルは豊富に見つかっても基礎的な概念や手法についてはなかなか良い資料・ドキュメント類が見つからないということは珍しくないです。

われわれサイバーメディアセンターでは、こうした点を補い、より広い分野・方面の方にユーザとしてシステムを使ってもらうべく、常に初学者に優しくありたいと考え、講習会をこのような構成しています。

4. プロフェッショナルな方も

もちろん、われわれは初学者ばかりでなくプロフェッショナルなユーザへの支援も怠っておりません。各種の専門的な内容について、多くの講習会を計画し、そして実施しています。

大阪大学の誇る大規模計算機である SQUID と OCTOPUS を利用しての講習会、近年の並列計算プログラミングに必須である OpenMP や MPI についての講習会、GPU プログラミングに必要な OpenACC の講習会や SQUID に搭載されているベクトルプロセッサ SX-Aurora TSUBASA の講習会、CPU ノードにおける高速化技法の講習会、近代型デ

ータストレージシステム ONION の講習会、そして、第一原理計算プログラム AkaiKKR の講習会も行っています。また、一部の講習会は、無料配布アカウントを用いて大規模計算機システムそのものを実際に使って行う実習形式をとっており、微細な部分に至るまで具体的な体験を得られ、現実的な議論を行うことが出来る機会としてもユーザーの皆様にご利用いただいております。

5. ぜひご参加され、そしてフィードバックを

講習会の情報については、われわれサイバーメディアセンターの web
http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/lecture_event/lecture/ にて常に公開しております。情報は随時更新しておりますので、ぜひ頻繁にご覧になり、ご興味のある講習会に積極的にご参加ください。皆様のご参加を常に歓迎いたします。

また、大規模計算機のハードウェア、ソフトウェア、そしてユーザの使い方といったものは日々変化していくものです。上記に述べたように様々な工夫や努力を通じて開催している講習会ではありますが、こうした変化に合わせ、講習会のありかたも変化、進歩していく必要があります。そして、それにはユーザの方々からいただく意見がなにより重要です。そのフィードバックの先により良い講習会の実現があるのです。ユーザの皆様におかれましては、遠慮をせずに、いつでも構いませんので、講習会についての要望をぜひサイバーメディアセンターまでお聞かせください。

2023 年度 大規模計算機システム利用講習会

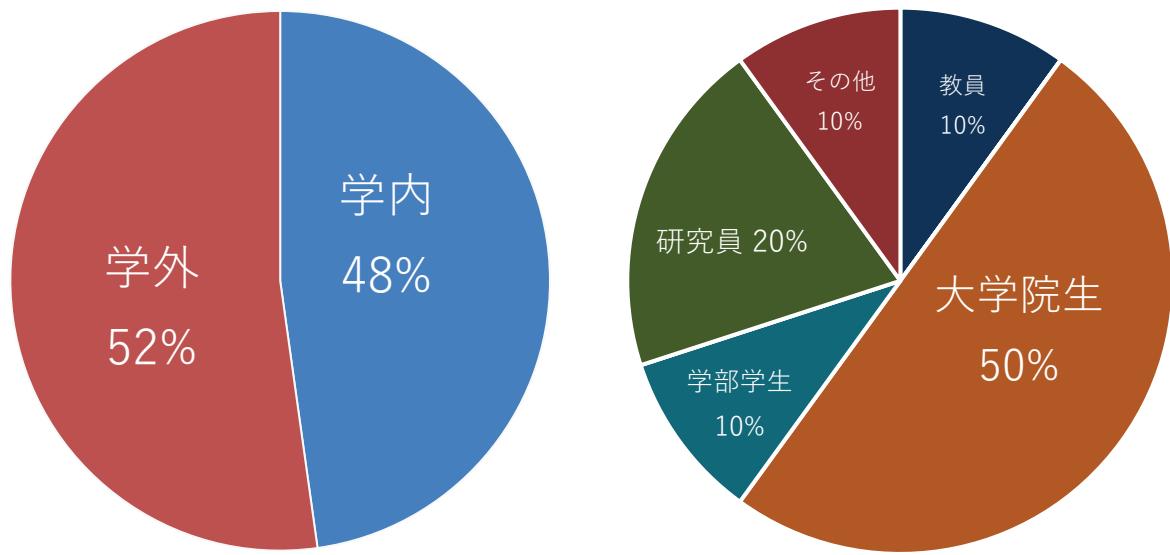
	講習会名	開催日時	講師	開催場所
1	スパコンに通じる並列プログラミングの基礎	5月31日 9月4日	サイバーメディアセンター 宮武 勇登 准教授	オンライン開催
2	初めてのスパコン	6月5日 9月1日	サイバーメディアセンター 木戸 善之 招へい教授 情報基盤課 技術職員	オンライン開催
3	OpenMP 入門	6月8日	サイバーメディアセンター 吉野 元 准教授	オンライン開催
4	スーパーコンピュータ バッチシステム入門 / 応用	6月14日 9月29日	日本電気(株)	オンライン開催
5	ONION 活用講習会	6月16日	日本電気(株)	オンライン開催
6	SX-Aurora TSUBASA 高速化技法の基礎	6月20日 9月19日	日本電気(株)	オンライン開催
7	汎用 CPU ノード 高速化技法の基礎 (Intel コンパイラ)	6月22日 9月27日	エクセルソフト(株)	オンライン開催
8	並列プログラミング入門 (OpenMP/MPI)	6月23日 9月25日	日本電気(株)	オンライン開催
9	GPU プログラミング入門 (OpenACC)	6月27日 10月3日	プロメテック・ ソフトウェア(株)	オンライン開催
10	GPU プログラミング実践 (OpenACC)	10月13日	プロメテック・ ソフトウェア(株)	オンライン開催
11	ONION-object 入門	9月20日	株式会社 科学情報システムズ	オンライン開催
12	コンテナ入門	9月22日	日本電気(株)	オンライン開催

2022 年度 大規模計算機システム利用講習会 アンケート集計結果

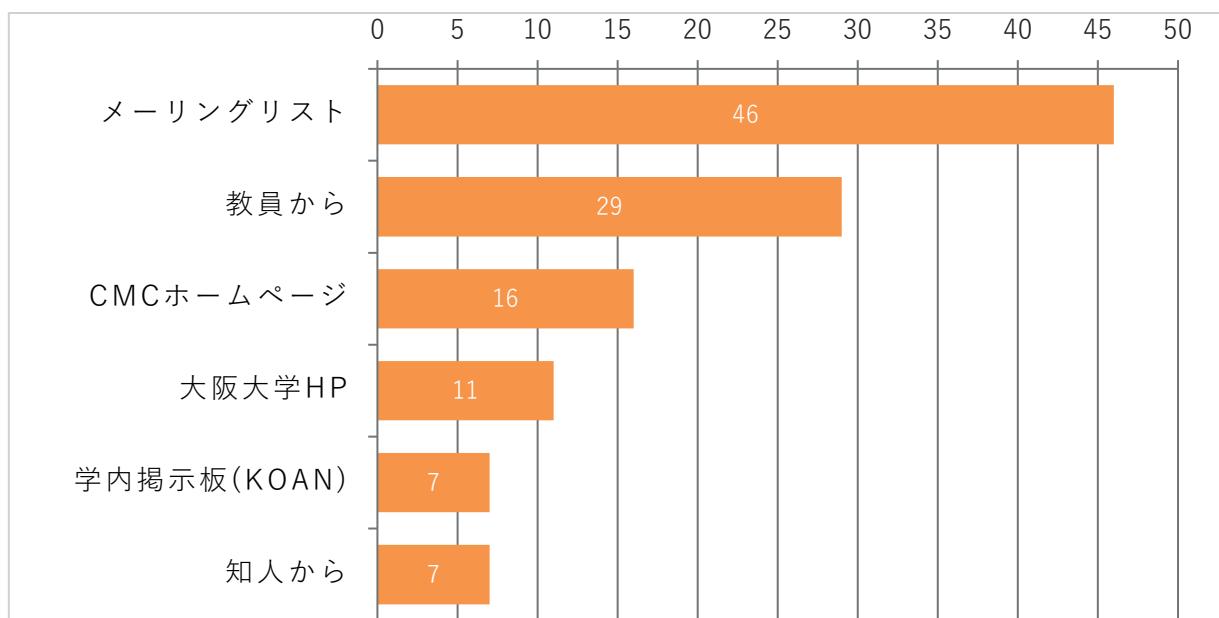
◆受講者数（すべてオンラインで開催）

講習会名	申込者数	受講者数
初めてのスパコン (5/23)	31	22
スパコンに通じる並列プログラミングの基礎 (5/30)	47	35
OpenMP 入門 (6/1)	18	12
並列プログラミング入門(OpenMP/MPI) (6/16)	15	13
スーパーコンピュータ バッチシステム入門 / 応用 (6/22)	8	6
ONION 活用講習会 (6/23)	9	8
SX-Aurora TSUBASA 高速化技法の基礎 (6/27)	8	4
汎用 CPU ノード 高速化技法の基礎 (Intel コンパイラ) (7/22)	23	23
スパコンに通じる並列プログラミングの基礎 (8/29)	14	12
GPU プログラミング入門 (OpenACC) (8/30)	13	9
初めてのスパコン (9/7)	27	26
SX-Aurora TSUBASA 高速化技法の基礎 (9/22)	6	3
汎用 CPU ノード 高速化技法の基礎 (Intel コンパイラ) (10/4)	2	0
並列プログラミング入門(OpenMP/MPI) (10/12)	7	2
スーパーコンピュータ バッチシステム入門 / 応用 (10/19)	26	12
GPU プログラミング入門 (OpenACC) (12/5)	13	9
GPU プログラミング実践 (OpenACC) (12/8)	6	4
コンテナ入門 (1/26)	16	10
ONION-object 入門 (3/17)	5	2
合計	294	212

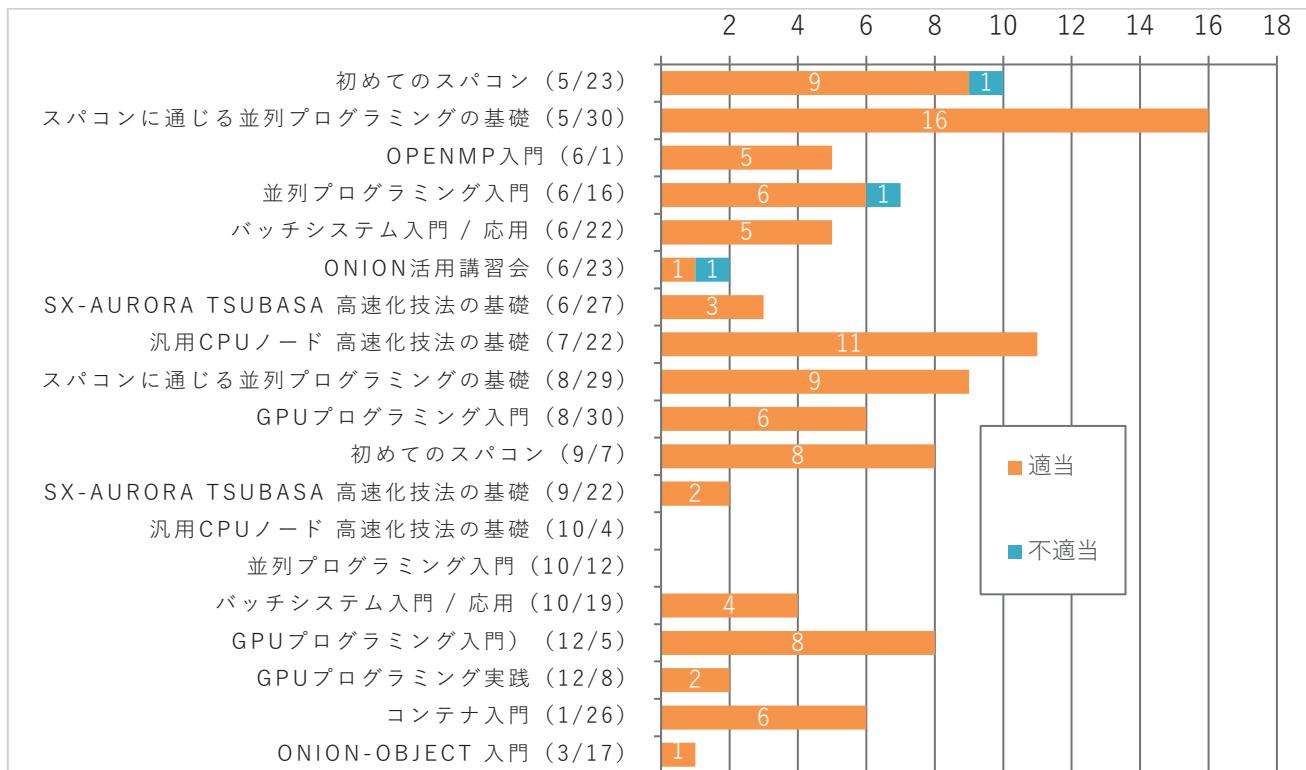
◆受講者の内訳



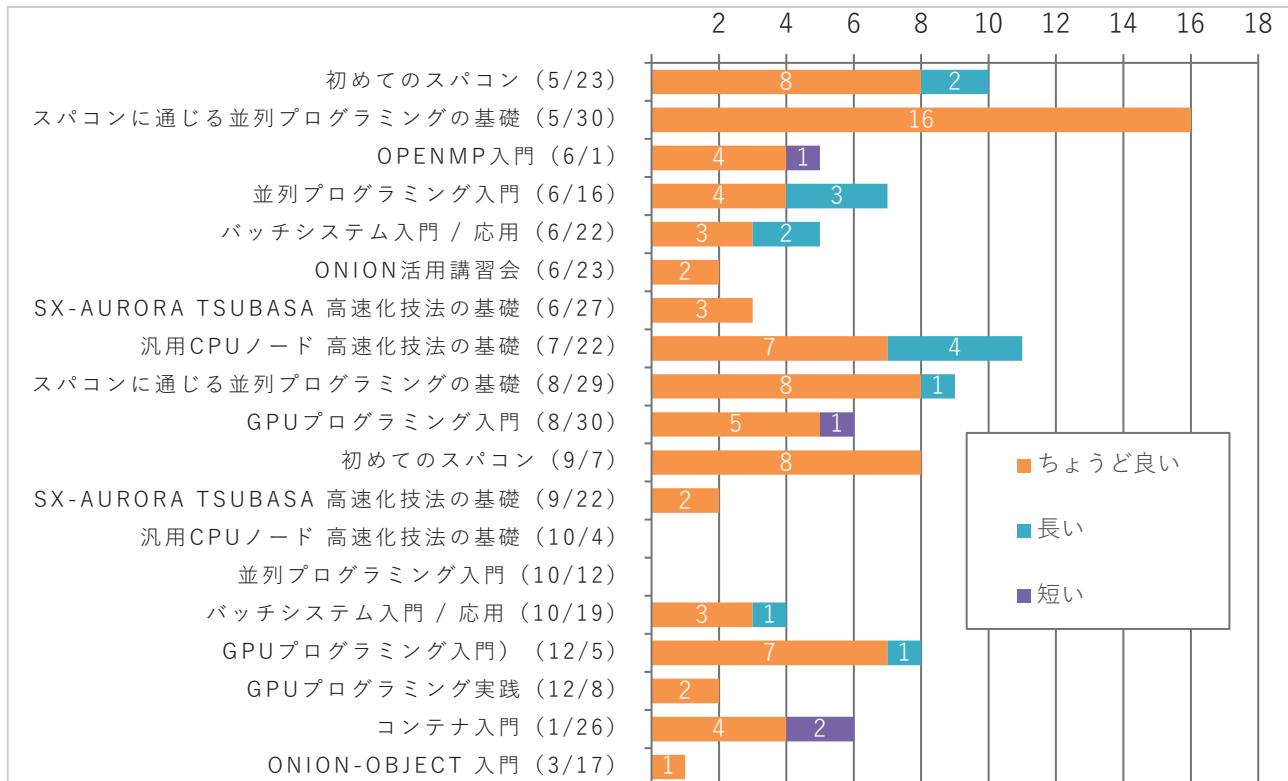
◆講習会についてどのようにお知りになりましたか。（複数回答可）



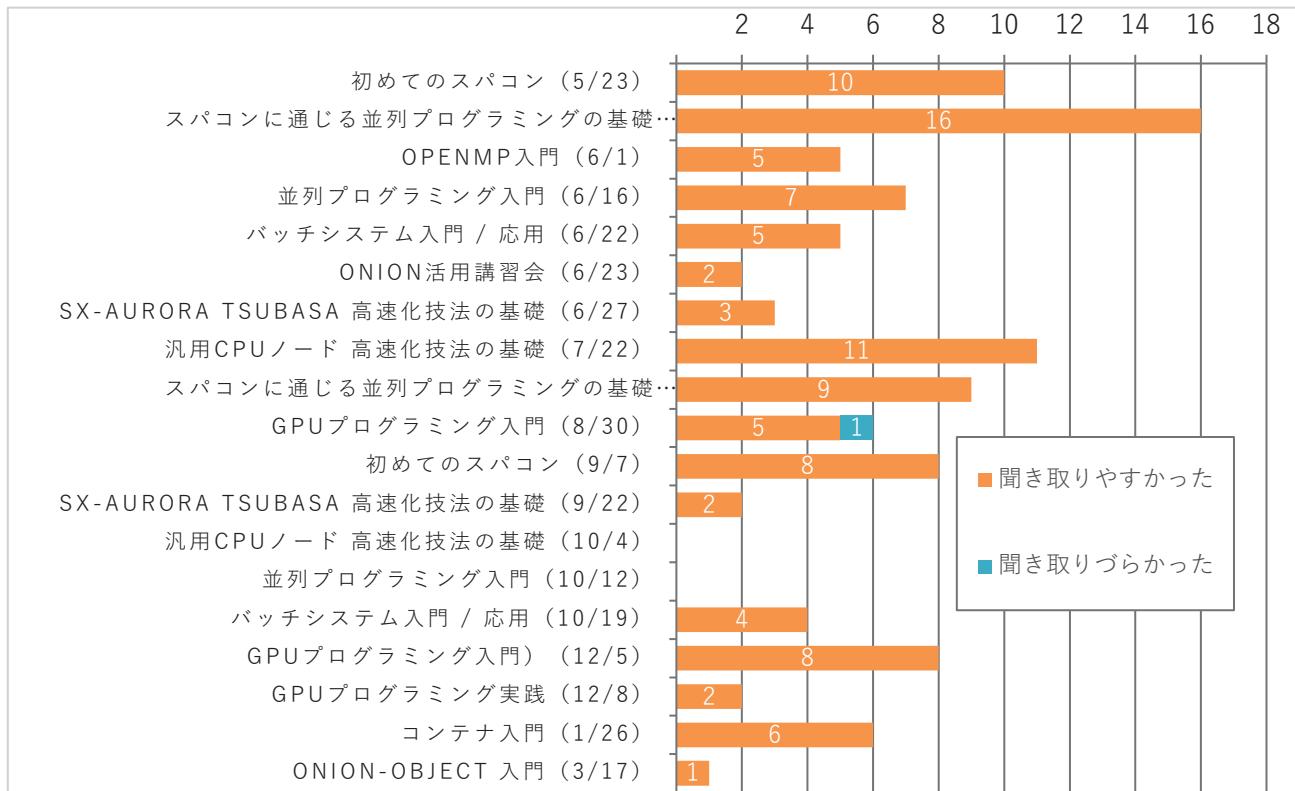
◆開催日は適当でしたか。



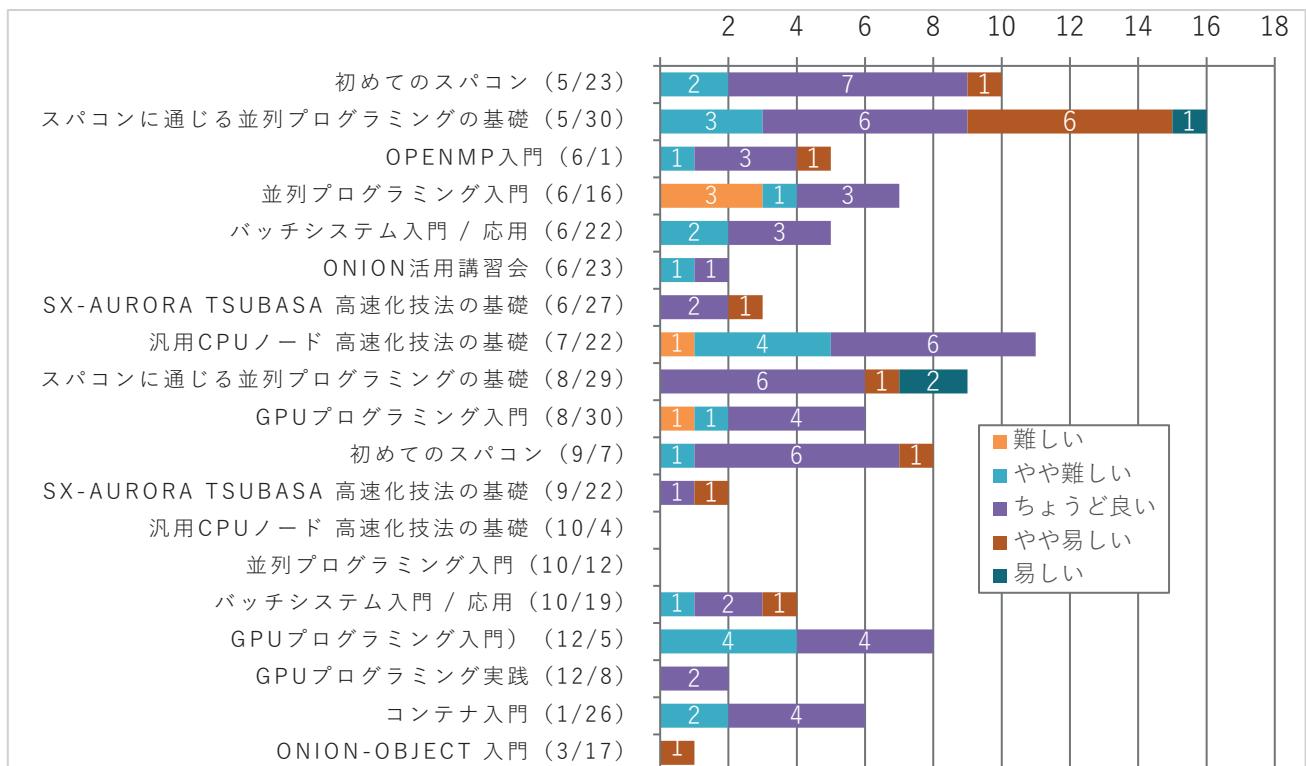
◆講習会の時間は適当でしたか。



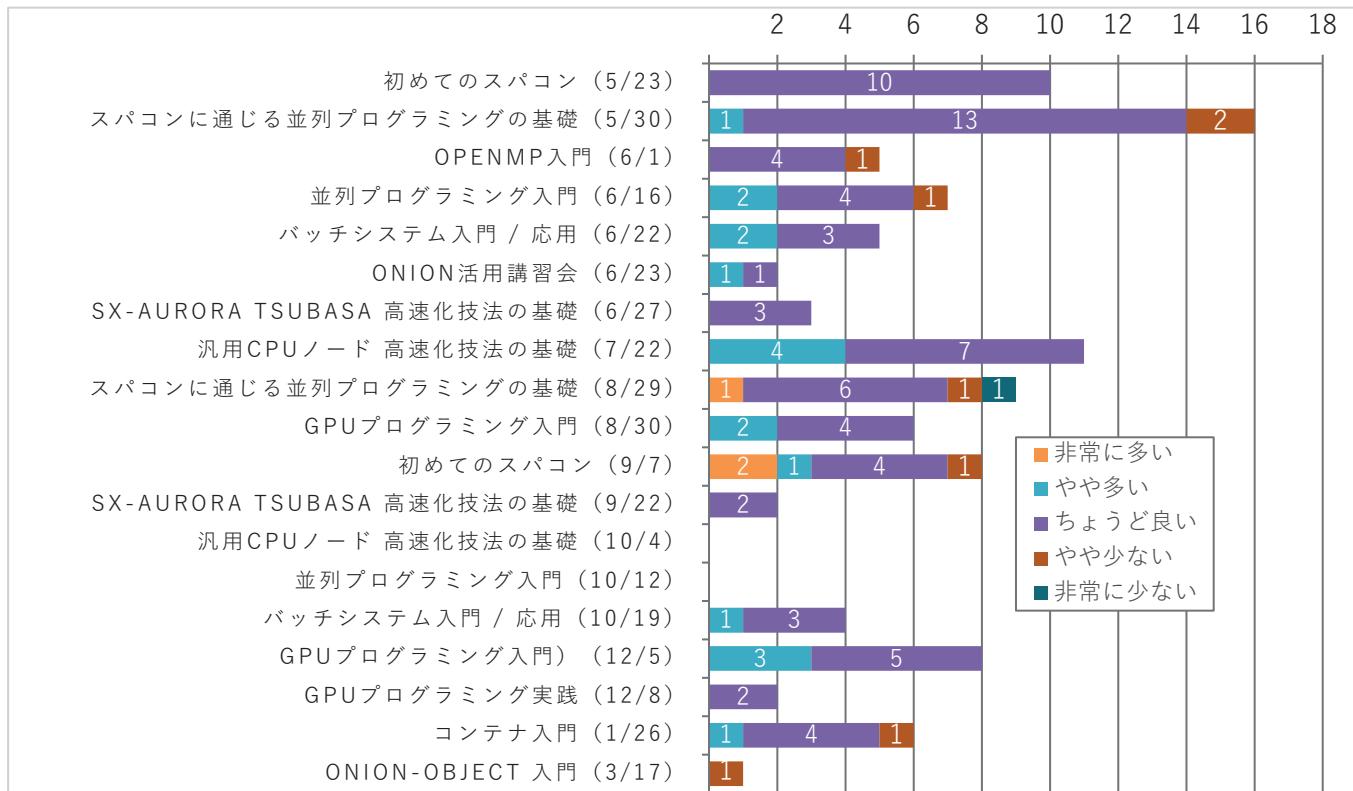
◆今回の講習会の音声はいいかがでしたか。



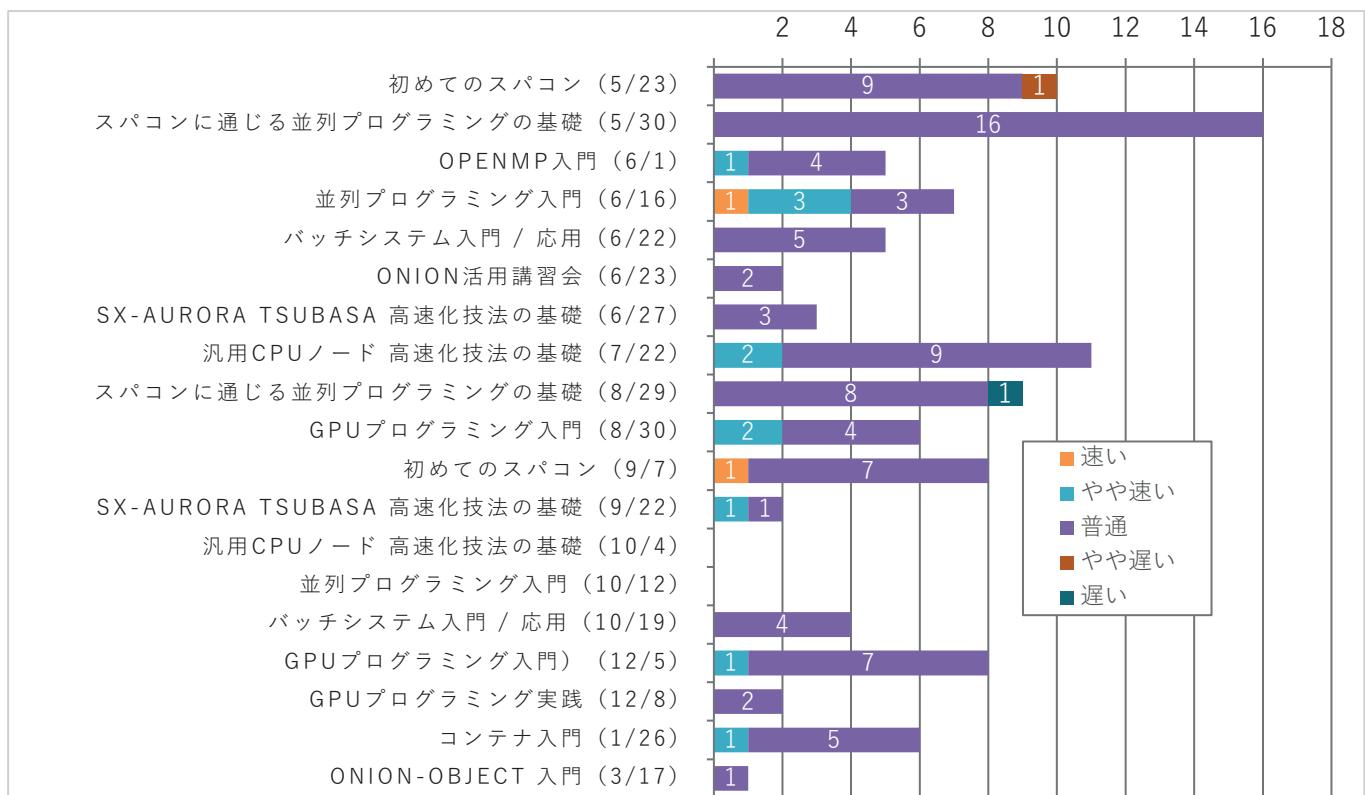
◆講習会の内容はどうでしたか。



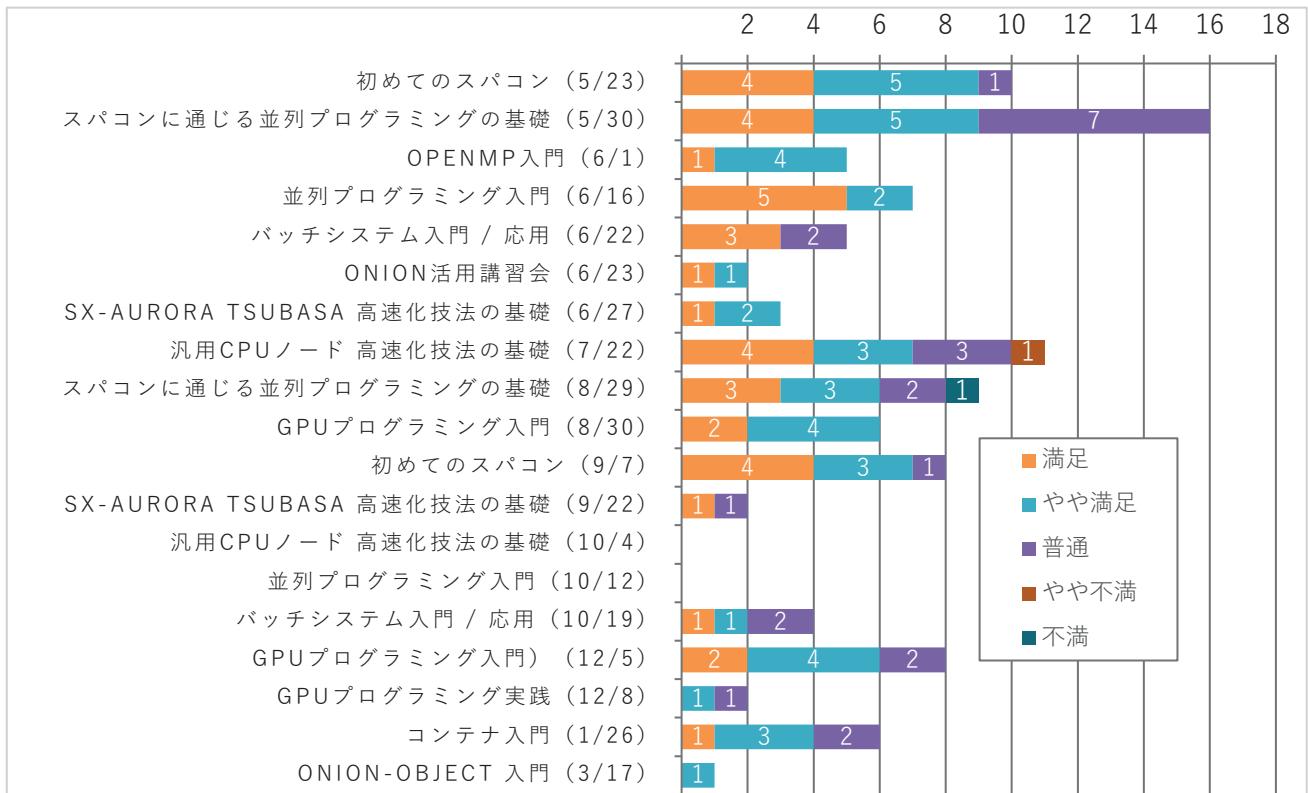
◆講習会で取り扱った内容量はどうでしたか。



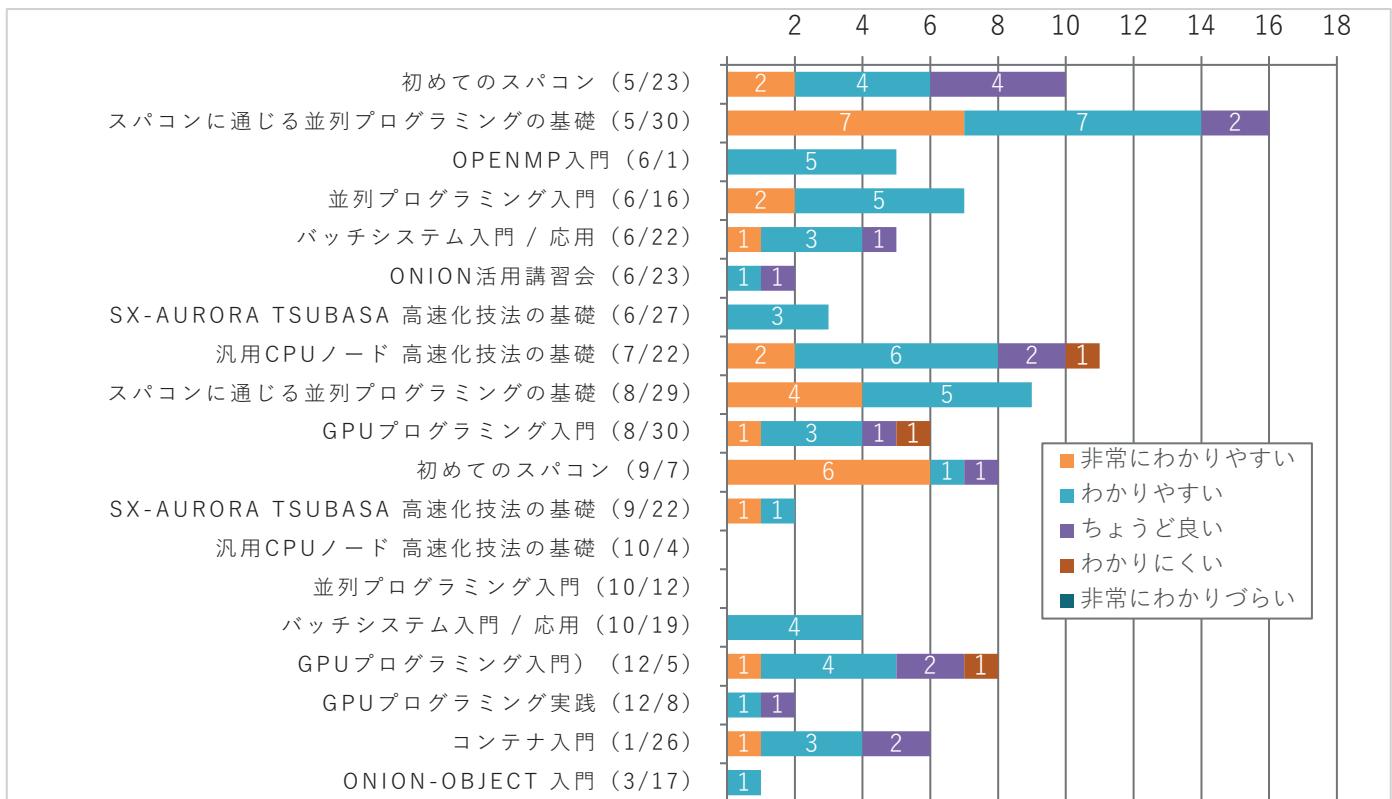
◆講師の進め方はどうでしたか。



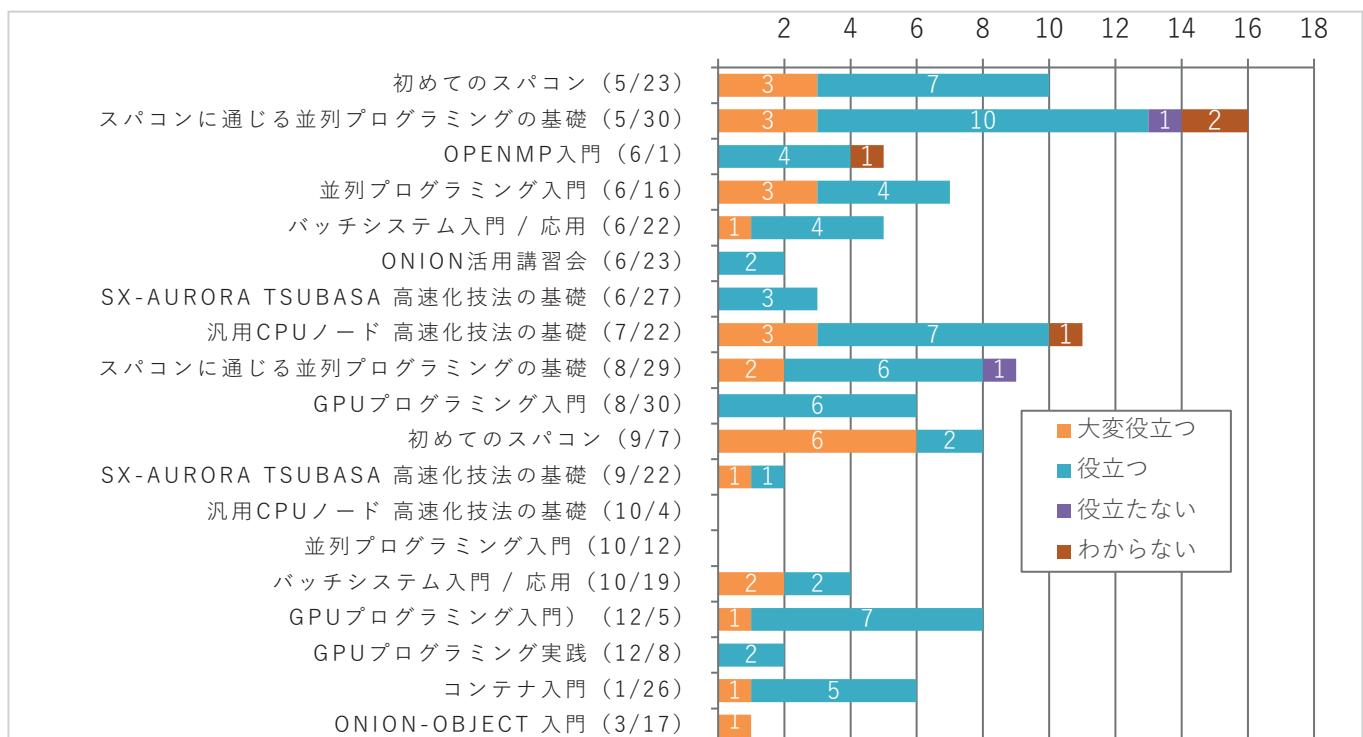
◆満足度は？



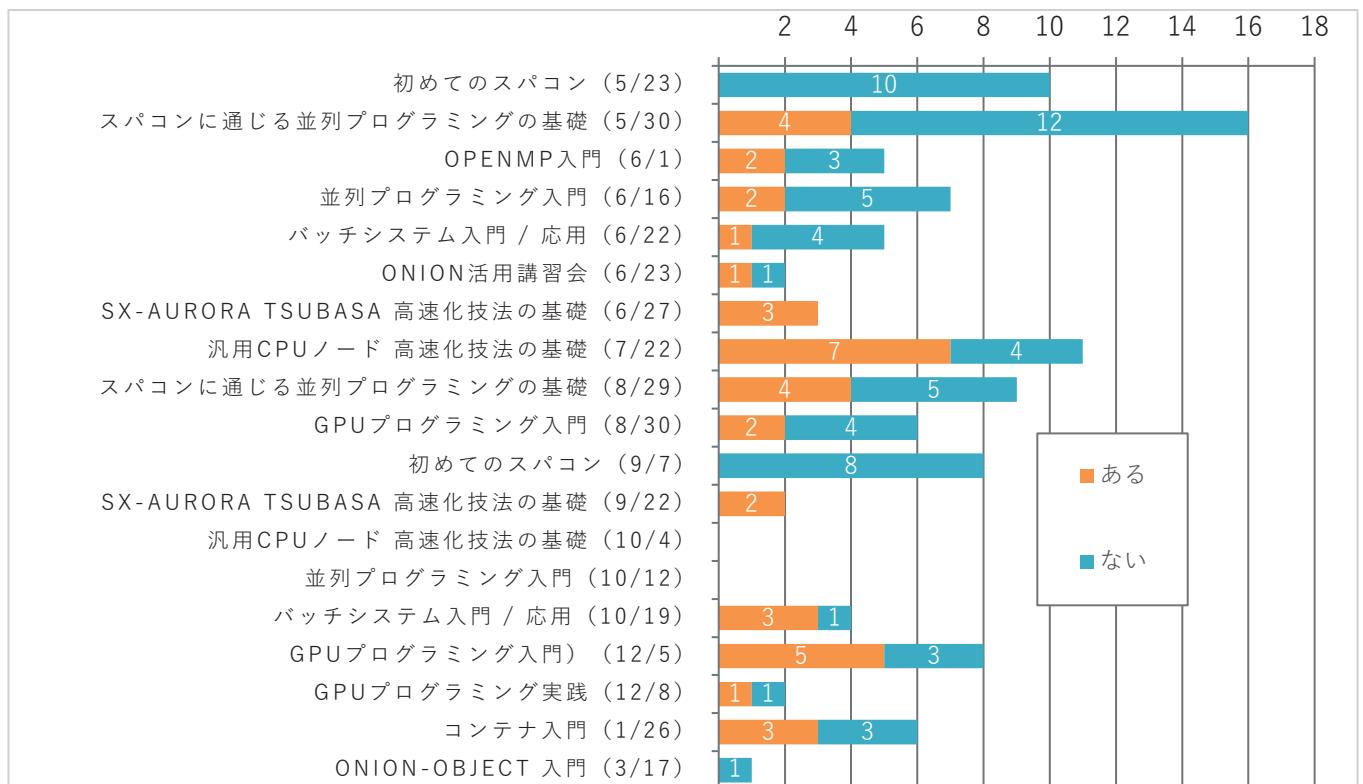
◆講習会の資料はどうでしたか。



◆皆さんの今後の研究・業務・勉学に役立つと思いますか。



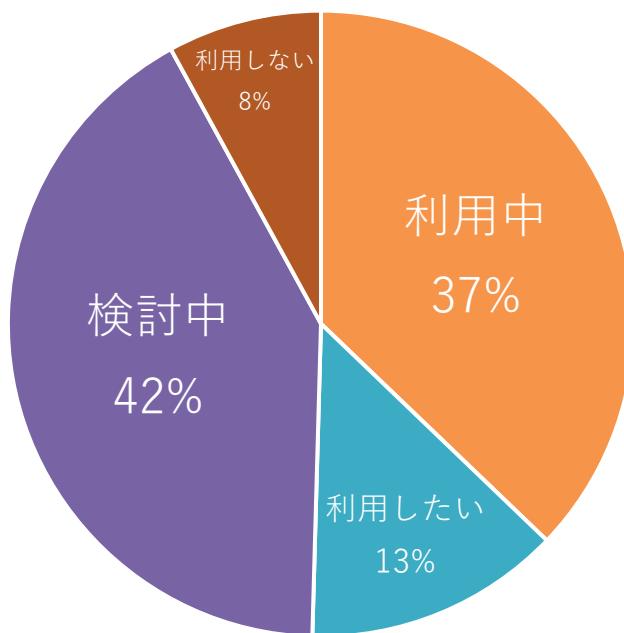
◆他の情報基盤センター等も含め、これまでにスーパーコンピュータを利用したことがありますか。



◆「ある」と回答された方の利用方法



◆サイバーメディアセンターの大規模計算機システムの利用を希望されますか。



2023 年度「HPCI (High Performance Computing Infrastructure) 利用」の活動状況

HPCI(High Performance Computing Infrastructure)システムは、個別の計算資源提供機関ごとに分断されがちな全国の幅広いハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) ユーザ層が全国の HPC リソースを効率よく利用できる体制と仕組みを整備し提供することを目的として構築され、2012 年 10 月より運用開始しました。北海道大学、東北大学、筑波大学、東京大学、東京工業大学、名古屋大学、京都大学、大阪大学、九州大学の各情報基盤センター、及び理化学研究所、海洋研究開発機構、統計数理研究所が資源提供機関となり、計算機資源や、共有ストレージ、ネットワーク、認証基盤、可視化装置等といったシステムを、中立・公正で科学的・技術的・社会的根拠に基づき配分・提供しています。

本センターの計算機資源を利用する 2023 年度 HPCI 採択課題一覧

利用枠	利用資源	研究課題名
一般課題	OCTOPUS	包接化合物系ソフトマテリアルの網羅的探索と材料設計への展開
一般課題	OCTOPUS	低摩擦材料・条件探索に向けたジルコニアおよび DLC におけるトライボ化学反応と摩擦特性の分子論的メカニズムの解明
一般課題	SQUID	可搬小型水素ガスタービン開発のための燃焼器シミュレーション
一般課題	SQUID	行列模型を用いたラージ N ゲージ理論の数値的研究
一般課題	SQUID	星形成と惑星形成分野を横断する大規模数値シミュレーション
一般課題	SQUID	大規模 QM/MM 分子動力学計算に基づく酵素反応機構の解明
一般課題	SQUID	タンパク質の機能改良の「省データ」化にむけた機械学習と分子シミュレーションの融合
一般課題	SQUID	原子核密度汎関数法によるエキゾチック原子核の集団振動・回転励起モードの系統的記述
一般課題	SQUID	すばる PFS 時代の宇宙論的流体シミュレーション
一般課題	SQUID	高圧水素噴流の浮き上がり火炎現象の大規模数値解析
「富岳」 一般課題	SQUID	シュレーディンガー厳密解法による原子・分子の精密量子化学計算
若手課題	OCTOPUS	機械学習を導入した新規自由エネルギー計算手法の構築
若手課題	SQUID	船舶抵抗低減を目的とした高ウェーバー数の大型気泡群流れの直接数値解析
若手課題	SQUID	Direct numerical simulations of elastoviscoplastic jets
若手課題	SQUID	大規模多施設 CT データ及び読影所見文を用いた疾患検出モデル構築
若手課題	SQUID	アクション模型におけるドメインウォールの大規模数値シミュレーション
若手課題	SQUID	溶液成分調整によるポリマー表面へのペプチド吸着抑制
産業課題	SQUID	複数精神疾患の診断・治療に向けた 4D 脳機能画像 Deep Learning 解析

2023 年度「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点」の活動状況

「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点」は、北海道大学、東北大学、東京大学、東京工業大学、名古屋大学、京都大学、大阪大学、九州大学にそれぞれ附置するスーパーコンピュータを持つ 8 つの共同利用の施設を構成拠点とし、東京大学情報基盤センターがその中核拠点として機能する「ネットワーク型」共同利用・共同研究拠点として、文部科学省の認可を受け、平成 22 年 4 月より本格的に活動を開始しました。

本ネットワーク型拠点の目的は、超大規模計算機と大容量のストレージおよびネットワークなどの情報基盤を用いて、地球環境、エネルギー、物質材料、ゲノム情報、Web データ、学術情報、センサーネットワークからの時系列データ、映像データ、プログラム解析、その他情報処理一般の分野における、これまでに解決や解明が極めて困難とされてきた、いわゆるグランドチャレンジ的な問題について、学際的な共同利用・共同研究を実施することにより、我が国の学術・研究基盤の更なる高度化と恒常的な発展に資することにあります。本ネットワーク型拠点には上記の分野における多数の先導的研究者が在籍しており、これらの研究者との共同研究によって、研究テーマの一層の発展が期待できます。

2023 年度の課題募集には合計 68 課題が採択されました。このうち以下の 15 課題が本センターの計算機資源を利用することになっています。

課題代表者	研究課題名
村田 忠彦 様 (関西大学)	合成人口プロジェクト：2020 年度国勢調査に基づく 合成人口データの合成
松崎 義孝 様 (海上・港湾・航空技術研究所)	水環境総合評価システムによる水環境評価のための 標準化プラットフォーム構築
森田 邦 様 (大阪大学 産業科学研究所)	CT 画像と深層学習を用いた骨格標本上の形態学的変異の 可視化と発見
萩田 克美 様 (防衛大学校)	GPU 並列計算による高分子材料系シミュレーションの 高速化技法の検討
塙 敏博 様 (東京大学)	次世代演算加速装置とそのファイル IO に関する研究
閔口 宗男 様 (国士館大学)	格子 QCD による複合スカラー粒子の質量生成機構の研究
Anas Santria 様 (大阪大学 理学研究科)	Investigation of intramolecular magnetic interaction in rare-earth-based molecular magnets
山口 雅也 様 (大阪大学 歯学研究科)	大規模比較ゲノム解析による病原細菌の進化と病態発症機構の解明
下川辺 隆史 様 (東京大学)	大規模アプリケーションの高性能な実用的アクセラレータ対応手法
三宅 洋平 様 (神戸大学)	マルチスケール宇宙プラズマ連成シミュレーションの研究
下川辺 隆史 様 (東京大学)	時間発展する流体シミュレーションを予測する代理モデルの開発
高棹 真介 様 (大阪大学 理学研究科)	現実的な原始惑星系円盤のガス散逸シナリオ構築に向けた 多角的アプローチ

佐藤 正寛 様 (東京大学)	環境循環型社会の実現に向けたポリマーインフォマティクスの データ基盤構築
John Molina 様 (京都大学)	Machine Learning for Soft-Matter Flows
塙見 淳一郎 様 (東京大学)	非調和フォノンデータベースの構築とデータ駆動型熱機能材料開発

2022 年度 大規模計算機システム公募型利用制度 (追加募集) の活動状況

大阪大学サイバーメディアセンターでは、大規模計算機システムを活用する研究開発の育成・高度化支援の観点から、本センターが参画する「ネットワーク型」学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 (JHPCN) や革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ (HPCI) の目的を踏まえつつ、今後の発展が見込まれる萌芽的な研究課題や本センターの大規模計算機システムを最大限活用することで成果が見込まれる研究課題を公募しています。2022 年度は通常の募集に加えて追加募集を行い、以下の 8 課題を採択しました。

若手・女性研究者支援萌芽枠 採択課題

代表者名	研究課題名
嶋川 肇 様 (東京大学 工学系研究科)	深層学習を用いたスーパーコンポジット電気絶縁材料の創成
眞弓 皓一 様 (東京大学 物性研究所)	ポリロタキサンにおける環状分子のスライドダイナミクス解析
岡林 希依 様 (大阪大学 工学研究科)	キャビテーション乱流の CFD データベースを用いたデータ駆動型キャビテーションモデルの開発に関する研究
甲斐 洋行 様 (東京理科大学)	表面濡れ性パターンを駆動力とするフラクタル開放型マイクロ流路における、液滴輸送・収集の構造機能相関の系統的理

人工知能研究特設支援枠 採択課題

代表者名	研究課題名
佐藤 淳哉 様 (大阪大学 医学系研究科)	大規模胸部 CT データセット及び読影レポートを用いた Radiomics 解析
Harry Handoko Halim 様 (大阪大学 工学研究科)	The Elucidation of Non-equilibrium States of Heterogenous Catalysis by Data-driven Multiscale Simulation: A Case Study of Methanol Synthesis
谷口 隆晴 様 (神戸大学 システム情報学研究科)	深層学習による物理モデリング・シミュレーションフレームワークの展開
濱本 雄治 様 (大阪大学 工学研究科)	進化的アルゴリズムとガウス過程回帰

2023 年度 大規模計算機システム公募型利用制度の活動状況

2023 年度も引き続き研究課題の公募を行い、以下の 22 課題を採択しました。2023 年度はこれまで特設枠となっていた人工知能研究支援枠を常設枠として設置しました。また、わが国の学術研究を担う次世代の研究者育成の視点から、本センター大規模計算機システムの利用資格を有する、一人又は比較的少数の学生が学位取得（修士、博士）を目標として行う研究課題を対象とする「世界と伍する学生育成特設枠」を設置しました。

若手・女性研究者支援萌芽枠 採択課題

代表者名	研究課題名
湯川 龍 様 (大阪大学 工学研究科)	原子吸着に伴うトポロジカル絶縁体表面に於けるスピノ構造転移の研究
高木 優 様 (大阪大学 生命機能研究科)	深層拡散生成モデルを用いたヒト脳活動からの動画再構成
Anas Santria 様 (大阪大学 理学研究科)	Exploring the ground and excited states structure of rare-earth-based molecular magnets
岡林 希依 様 (大阪大学 工学研究科)	データ駆動型キャビテーション乱流モデルの開発とデータ同化を用いた学習データセットの構築に関する研究
Tiwari Sandhya Premnath 様 (大阪大学 蛋白質研究所)	Uncovering the role of protein-protein interactions on allostery and stability in oligomeric assembly via molecular dynamics simulations

大規模 HPC 支援枠 採択課題

代表者名	研究課題名
金谷 和至 様 (筑波大学 宇宙史研究センター)	クォークが重い領域の QCD における臨界点探査
岩下 航 様 (大阪大学 基礎工学研究科)	マクロ系の摩擦則の包括的な解明
河口 真一 様 (大阪大学 生命機能研究科)	AI を用いたタンパク質間複合体予測から、機能未知遺伝子の機能を推察する
塩見 淳一郎 様 (東京大学 工学系研究科)	第一原理計算に基づくフォノン非調和物性データベースの構築
村上 匡且 様 (大阪大学 レーザー科学研究所)	相対論的電子渦流による極超高磁場生成と超コンパクト粒子加速器の理論的研究
Beatrix Andrea Choi Tan 様 (大阪大学 工学研究科)	Machine learning study of single-atom platinum supported on graphene nanostructures for oxygen reduction reaction catalysis
Enriquez John Isaac Guinto 様 (大阪大学 工学研究科)	Development of Graph Neural Network Interatomic Potential to Investigate Diamond Oxidation, Graphitization, and Wear

人工知能研究支援枠 採択課題

代表者名	研究課題名
松原 崇 様 (大阪大学 基礎工学研究科)	深層力学系による高効率シミュレーションの開発
金 鋼 様 (大阪大学 基礎工学研究科)	深層学習を活用したガラスの構造緩和を決定する特徴量を抽出する技術の開発
藤平 哲也 様 (大阪大学 基礎工学研究科)	酸化物系人工シナプス素子におけるドナー欠陥挙動の第一原理理論解析

世界と伍する学生育成特設枠 採択課題

代表者名	研究課題名
村上 賢 様 (大阪大学 蛋白質研究所)	ディープラーニング手法を用いた一細胞エンハンサー検出法の開発
後藤 頌太 様 (大阪大学 基礎工学研究科)	高分子のトポロジーに由来する特異な動的相関に関する理論・シミュレーション研究
安水 良明 様 (大阪大学 免疫学フロンティア研究センター)	BERT を用いた T 細胞受容体の機能解明
三宅 冬馬 様 (北海道大学)	超臨界翼におけるダブル遷音速ディップ発生メカニズムの解明：移動エントロピー法による流れ場の因果解析
南條 舜 様 (総合研究大学院大学 複合科学研究科)	データ駆動型高分子材料研究における統計的機械学習と分子シミュレーションの融合
Rizka Nur Fadilla 様 (大阪大学 工学研究科)	Multiscale Modeling of Phosphoramidate-based Antibody-drug Conjugates Hydrolysis in Cancer Treatment Case
ROJAS Kurt Irvin Medina 様 (大阪大学 工学研究科)	Theoretical design of catalytic reaction process for hydrogen storage using hydrogen boride sheets: a density functional theory study with machine learning global optimization algorithm

大規模計算機システム Q&A

当センターに寄せられた質問を掲載しております。

同じ内容を以下の Web ページでも閲覧いただけます。

<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/faq/>

Q. 年度途中で計算資源やストレージ容量の追加は可能でしょうか？

A. はい。可能です。資源追加の申請につきましては、以下の利用者管理 WEB システムから申請頂いております。

利用者管理システム（要認証）

<https://manage.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/saibed/>

申請手順につきましては、以下のページにまとめておりませんので、ご参照ください。

一般利用（学術利用）資源追加申請

http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/service/basic_resourceadd/

Q. 年度途中で利用負担金の支払い費目や支払い時期を変更できますか？

A. WEB システムからは変更できませんので、下記までご連絡ください。

大阪大学 情報推進部 情報基盤課 研究系システム班

Mail: system@cmc.osaka-u.ac.jp

TEL: 06-6879-8808

Q. ディスク容量を追加した場合、利用期限はいつまでですか？

A. 年度途中に申し込まれた場合でも、利用期限は年度末までとなります。翌年度にディスク容量を追加しない場合は、データの整理を 3 月中にお願いいたします。やむを得ない事情がある場合や、間に合わない場合は、ご連絡くださいませ。原則として、事前連絡無しにこちらでデータを削除することはできません。

Q. ユーザ間でファイルを転送することは可能でしょうか？

A. scp コマンドを使用することで可能です。

例えば、カレントディレクトリ下の abc ディレクトリの中のファイル sample.c を、b61234 のホームディレクトリに転送する場合は以下のようなコマンドとなります。

scp ./abc/sample.c b61234@localhost:

Q. 一度に大量のジョブを投入し、ジョブごとに入力ファイル/実行ファイルを変更したい

- A. ファイル名に連続した数値が含まれている場合、パラメトリックジョブという投入方法で、一度に大量のジョブを投入できます。

パラメトリックジョブでは、ジョブスクリプト内の"\$PBS_SUBREQNO"環境変数に、-t で指定した数値(下記の例では 1 から 5 までの数値)が格納されます。qsub すると同時に 5 本のジョブが投入され、a.out に対してそれぞれ異なる入力ファイル（下記の例では input1 から input5）が設定されます。

ジョブスクリプト例(jobscript.sh)

```
#PBS -q OCTOPUS
#PBS -l elapstim_req=0:30:00,cpunum_job=24
cd $PBS_O_WORKDIR
./a.out input$PBS_SUBREQNO
```

投入方法

```
qsub -t 1-5 jobscript.sh
```

qstat の表示例:パラメトリックジョブの場合、1 回の qsub につき 1 件分の表示となります

RequestID	ReqName	UserName	Queue	Pri	STT	S	Memory	CPU	Elapse	R	H	M	Jobs
123456[1].oct	nqs	username	OC1C	0	QUE	-	-	-	-	Y	Y	Y	1

sstat の表示例:-t で指定した数値分だけ表示されます

RequestID	ReqName	UserName	Queue	Pri	STT	PlannedStartTime
123456[1].oct	nqs	username	OC1C	0.5002/	0.5002	QUE -
123456[2].oct	nqs	username	OC1C	0.5002/	0.5002	QUE -
123456[3].oct	nqs	username	OC1C	0.5002/	0.5002	QUE -
123456[4].oct	nqs	username	OC1C	0.5002/	0.5002	QUE -
123456[5].oct	nqs	username	OC1C	0.5002/	0.5002	QUE -

Q. 機種変更/紛失/何らかの問題で SQUID の 2 段階認証ができなくなった

- A. 2 段階認証のリセットには管理者の操作が必要となりますので、お問い合わせフォームからお知らせください。その際、氏名、利用者番号、メールアドレスは登録時のものを記入してください。2 段階認証のリセット時にパスワードもあわせて初期化いたしますので、予めご了承ください。

お問い合わせフォーム

http://www.hpccmc.osaka-u.ac.jp/support/contact/auto_form/

利用規程等

・規程関係

大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用規程

第1条 この規程は、大阪大学サイバーメディアセンター(以下「センター」という。)が管理・運用する全国共同利用のスーパーコンピュータシステム及びワークステーションシステム(以下「大規模計算機システム」という。)の利用に関し必要な事項を定めるものとする。

第2条 大規模計算機システムは、学術研究及び教育等のために利用することができるものとする。

第3条 大規模計算機システムを利用することのできる者は、次の各号のいずれかに該当する者とする。

- (1) 大学、短期大学、高等専門学校又は大学共同利用機関の教員(非常勤講師を含む。)及びこれに準ずる者
- (2) 大学院の学生及びこれに準ずる者
- (3) 学術研究及び学術振興を目的とする国又は地方公共団体が所轄する機関に所属し、専ら研究に従事する者
- (4) 学術研究及び学術振興を目的とする機関(前号に該当する機関を除く。)で、センターの長(以下「センター長」という。)が認めた機関に所属し、専ら研究に従事する者
- (5) 科学研究費補助金の交付を受けて学術研究を行う者
- (6) 第1号、第3号又は第4号の者が所属する機関との共同研究に参画している民間企業等に所属し、専から研究に従事する者
- (7) 日本国に法人格を有する民間企業等に所属する者(前号に該当する者を除く。)で、別に定める審査に基づきセンター長が認めた者
- (8) 前各号のほか、特にセンター長が適当と認めた者

第4条 大規模計算機システムを利用しようとする者は、所定の申請を行い、センター長の承認を受けなければならない。ただし、前条第6条の者は、この限りでない。

2 前項の申請は、大規模計算機システム利用の成果が公開できるものでなければならない。

第5条 センター長は、前条第1項による申請を受理し、適当と認めたときは、これを承認し、利用者番号を与えるものとする。

2 前項の利用者番号の有効期間は、1年以内とする。ただし、当該会計年度を超えることはできない。

第6条 大規模計算機システムの利用につき承認された者(以下「利用者」という。)は、申請書の記載内容に変更を生じた場合は、速やかに所定の手続きを行わなければならない。

第7条 利用者は、第5条第1項に規定する利用者番号を当該申請に係る目的以外に使用し、又は他人に使用させてはならない。

第8条 利用者は、当該申請に係る利用を終了又は中止したときは、速やかにその旨をセンター長に届け出るとともに、そ

の利用の結果又は経過を所定の報告書によりセンター長に報告しなければならない。

- 2 前項の規定にかかわらず、センター長が必要と認めた場合は、報告書の提出を求めることができる。
- 3 提出された報告書は、原則として公開とし、センターの広報等の用に供することができるものとする。ただし、利用者があらかじめ申し出たときは、3年を超えない範囲で公開の延期を認めることがある。

第9条 利用者は、研究の成果を論文等により公表するときは、当該論文等に大規模計算機システムを利用した旨を明記しなければならない。

第10条 利用者は、当該利用に係る経費の一部を負担しなければならない。

第11条 前条の利用経費の負担額は、国立大学法人大阪大学諸料金規則に定めるところによる。

第12条 前条の規定にかかわらず、次の各号に掲げる場合については、利用経費の負担を要しない。

- (1) センターの責に帰すべき誤計算があったとき。
- (2) センターが必要とする研究開発等のため、センター長が特に承認したとき。

第13条 利用経費の負担は、次の各号に掲げる方法によるものとする。

- (1) 学内経費(科学研究費補助金を除く。)の場合にあっては、当該予算の振替による。
- (2) 前号以外の場合にあっては、本学が発する請求書の指定する銀行口座への振込による。

第14条 センターは、利用者が大規模計算機システムを利用したことにより被った損害その他の大規模計算機システムに関連して被った損害について、一切の責任及び負担を負わない。

第15条 センターは、大規模計算機システムの障害その他やむを得ない事情があるときは、利用者への予告なしに大規模計算機システムを停止することができる。

第16条 センター長は、この規程又はこの規程に基づく定めに違反した者その他大規模計算機システムの運営に重大な障害を生じさせた者があるときは、利用の承認を取り消し、又は一定期間大規模計算機システムの利用を停止させることがある。

第17条 この規程に定めるもののほか、大規模計算機システムの利用に関し必要な事項は、センター長が定める。

附 則

- 1 この規程は、平成12年4月1日から施行する。
- 2 大阪大学大型計算機センターの利用に関する暫定措置を定める規程(昭和43年9月18日制定)は、廃止する。
- 3 この規程施行前に大阪大学大型計算機センターの利用に関する暫定措置を定める規程に基づき、平成12年度の利用承

認を受けた利用者にあっては、この規程に基づき利用の登録
があつたものとみなす。

附 則
この改正は、平成13年1月6日から施行する。

附 則
この改正は、平成13年4月1日から施行する。

附 則
この改正は、平成14年4月1日から施行する。

附 則
この改正は、平成14年6月19日から施行し、
平成14年4月1日から適用する。

附 則
この改正は、平成15年4月1日から施行する。

附 則
この改正は、平成16年4月1日から施行する。

附 則
この改正は、平成18年2月15日から施行する。

附 則
この改正は、平成19年9月28日から施行する。

附 則
この改正は、平成20年4月16日から施行する。

附 則
この改正は、平成23年4月1日から施行する。

附 則
この改正は、平成24年5月10日から施行する。

大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用負担額一覧

国立大学法人大阪大学諸料金規則 別表第17

大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用規程第11条の規定に基づく負担額

(1) OCTOPUSの負担額

(A) 占有

基本負担額	占有ノード数
382,000 円／年	汎用CPUノード群 1ノード
1,586,000 円／年	GPUノード群 1ノード
308,000 円／年	XeonPhiノード群 1ノード

(B) 共有

コース	基本負担額	OCTOPUSポイント
	10万円	1,000 ポイント
50万円		5,250 ポイント
100万円		11,000 ポイント
300万円		34,500 ポイント
500万円		60,000 ポイント

(C) ディスク容量追加

基本負担額	提供単位
2,000円／年	1TB

備考

- 1 負担額は上記負担額で算出した合計額に、消費税(10%)を加えて得た額とする。
ただし、産業利用 成果非公開型の負担額は、上記負担額で算出した合計額に5を乗じ、消費税(10%)を加えて得た額とする。
- 2 登録時の利用期限または年度を越えて利用はできない。
- 3 ディスク容量は1申請単位で3TBを割り当てる。ただし、他のディスク容量と合算できない。
- 4 (A)は占有ノード数を追加する場合のみ変更申請を受け付ける。
- 5 (A)の2ノード以上の基本負担額は、1ノードを基準に比例するものとする。
- 6 (A)は資源提供状況により10ノード以上3か月単位の申請を受け付ける場合がある。
その場合の月額の負担額は、1ノード年の基本負担額の1/10とする。
- 7 (B)は年度の途中でコースの変更はできない。新たにコースを追加する場合は申請を受け付ける。
- 8 計算ノードの利用に使用するOCTOPUSポイントは、使用したノード時間に対して以下の消費係数、季節係数および燃料係数を乗じたものとする。季節係数は前年の利用状況等を鑑み、0を超える1以下の値を設定する。燃料係数は、直近の電気料金を鑑み、設定する。

ノード群	消費係数	季節係数	燃料係数
汎用CPUノード群	0.1040	大規模計算機システム WEBページに記載	大規模計算機システム WEBページに記載
GPUノード群	0.4346		
XeonPhiノード群	0.0836		
大容量主記憶搭載ノード群	0.7406		

- 9 (C)は年度の途中は追加申請のみ受け付ける。
- 10 (C)は1つの申請グループにつき、500TBの追加を上限とする。

(2) SQUIDの負担額

(A) 占有

基本負担額	占有ノード数
1,150,000 円／年	汎用CPUノード群 1ノード
7,032,000 円／年	GPUノード群 1ノード
4,336,000 円／年	ベクトルノード群 1ノード

(B) 共有

コース	基本負担額	SQUIDポイント
	10万円	1,000 ポイント
50万円		5,250 ポイント
100万円		11,000 ポイント
300万円		34,500 ポイント
500万円		60,000 ポイント

(C)ストレージ容量追加

基本負担額	提供単位
2,000円／年	HDD 1TB
5,000円／年	SSD 1TB

備考

- 1 負担額は上記負担額で算出した合計額に、消費税(10%)を加えて得た額とする。
ただし、産業利用 成果非公開型の負担額は、上記負担額で算出した合計額に5を乗じ、消費税(10%)を加えて得た額とする。
- 2 登録時の利用期限または年度を越えて利用はできない。
- 3 ストレージ容量は1申請単位でHDD 5TBを割り当てる。ただし、他のストレージ容量と合算できない。
- 4 (A)は占有ノード数を追加する場合のみ変更申請を受け付ける。
- 5 (A)の2ノード以上的基本負担額は、1ノードを基準に比例するものとする。
- 6 (A)は資源提供状況により3か月単位の申請を受け付ける場合がある。
その場合の月額の負担額は、1ノード年の基本負担額の1/10とする。
- 7 (B)は年度の途中でコースの変更はできない。新たにコースを追加する場合は申請を受け付ける。
- 8 計算ノードの利用に使用するSQUIDポイントは、使用したノード時間に対して以下の消費係数、季節係数および燃料係数を乗じたものとする。季節係数は前年の利用状況等を鑑み、0を超える1以下の値を設定する。燃料係数は、直近の電気料金を鑑み、設定する。

ノード群	消費係数			季節係数	燃料係数
	高優先度	通常優先度	シェア		
汎用CPUノード群	0.3746	0.2998	0.2248	大規模計算機システム WEBページに記載	大規模計算機システム WEBページに記載
GPUノード群	2.2934	1.8348	1.3762		
ベクトルノード群	1.4140	1.1312	0.8484		

- 9 (C)は年度の途中は追加申請のみ受け付ける。
- 10 (C)は1つの申請グループにつき、HDD 500TB、SSD 10TBの追加を上限とする。

(3)ONION(オブジェクトストレージ)の負担額

基本負担額	提供単位
12,000 円／年	1TB

備考

- 1 年度の途中は追加申請のみ受け付ける。
- 2 負担額は上記負担額で算出した合計額に、消費税(10%)を加えて得た額とする。

大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム試用制度利用内規

第1条 この内規は、大阪大学サイバーメディアセンター（以下「センター」という。）が管理運用する全国共同利用のスーパーコンピュータシステム（以下「大規模計算機システム」という。）の試用制度を利用するための必要な事項を定める。

第2条 試用制度は、初めてセンターの大規模計算機システムを利用する者（以下「利用者」という。）に一定の期間利用させることによって、利用者の研究活動における大規模計算機システムの有用性を確認できるようにすることを目的とする。

第3条 試用制度を利用することができる者は、大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用規程第3条に該当する者とする。

第4条 利用者は所定の申請手続きを行い、センター長の承認を得なければならない。

第5条 センター長は、前条の申請について適當と認めた場合は、利用者番号を与えて承認するものとする。

第6条 利用者の有効期間は初めて利用する計算機資源毎に3ヶ月間とする。ただし、当該会計年度を超えることはできないものとする。

2 利用有効期間内は別に定める資源量上限まで計算機資源毎に利用できるものとする。資源量上限を超えた場合は、利用を停止するものとする。

3 利用有効期間を超えた場合は、利用を停止するものとする。

第7条 利用者は、第5条に規定する利用者番号を当該申請に係る目的以外に使用し、又は他人に使用させてはならない。

第8条 センター長は、この内規に違反した場合、もしくは氏名等を偽り利用した場合、その他大規模計算機システムの運営に重大な支障を生ぜしめた場合には、当該利用の承認を取り消すことがある。

附 則

この内規は、平成12年11月30日から施行し、平成12年4月1日から適用する。

附 則

この改正は、平成13年1月6日から施行する。

附 則

この改正は、平成14年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成16年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成18年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成19年1月5日から施行する。

附 則

この改正は、平成19年9月28日から施行する。

附 則

この改正は、平成24年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成28年4月1日から施行する。

附 則

この改正は、平成30年11月1日から施行し、平成30年4月1日から適用する。

附 則

この改正は、令和3年8月1日から施行する。

・附表

大規模計算機システム ホスト一覧

サーバ名	ホスト名
ログインサーバ (SQUID)	squidhpc.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp
ログインサーバ (OCTOPUS)	octopus.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp

※スーパーコンピュータなどの演算システムへは、ログインサーバ経由での接続となります。
(ホスト一覧表には明記していません)

スーパーコンピュータ SQUID のジョブクラスター一覧

汎用 CPU ノード群

利用方法	ジョブ クラス	利用可能 経過時間	利用可能 最大 Core 数	利用可能メモリ	同時利用 可能ノード数	備考
共有利用	SQUID	120 時間	38,912 Core (76Core×512 ノード)	124 TB (248GB×512 ノード)	512 ノード	
	SQUID-R	120 時間	38,912 Core (76Core×512 ノード)	124 TB (248GB×512 ノード)	512 ノード	※1
	SQUID-H	120 時間	38,912 Core (76Core×512 ノード)	124 TB (248GB×512 ノード)	512 ノード	※2
	SQUID-S	120 時間	38 Core (76Core×0.5 ノード)	124 GB (248GB×0.5 ノード)	0.5 ノード	※3
	DBG	10 分	152 Core (76Core×2 ノード)	496 GB (248GB×2 ノード)	2 ノード	
	INTC	10 分	152 Core (76Core×2 ノード)	496 GB (248GB×2 ノード)	2 ノード	
占有利用	mySQUID	無制限	76Core×占有ノード数	248GB×占有ノード数	占有ノード数	

※1. クラスタを跨ぐ（相互接続網の帯域が狭い経路の）割当を許容するキュー。実行待ち時間が短縮される場合がある。

※2. 高優先度のため実行待ち時間が短縮されるが、ポイントの消費が大きくなる。

※3. 他のジョブとの 1 ノード内での資源共有を許容するキュー。ポイント消費が小さくなるが、他のジョブの影響を受ける可能性がある。

GPU ノード群

利用方法	ジョブクラス	利用可能経過時間	利用可能最大Core数	利用可能メモリ	同時利用可能ノード数	備考
共有利用	SQUID	120 時間	2,432 Core (76Core×32 ノード)	15.75 TB (504GB×32 ノード)	32 ノード	
	SQUID-H	120 時間	2,432 Core (76Core×32 ノード)	15.75 TB (504GB×32 ノード)	32 ノード	※1
	SQUID-S	120 時間	38 Core (76Core×0.5 ノード)	252 GB (504GB×0.5 ノード)	0.5 ノード	※2
	DBG	10 分	152 Core (76Core×2 ノード)	1,008 GB (504GB×2 ノード)	2 ノード	
	INTG	10 分	152 Core (76Core×2 ノード)	1,008 GB (504GB×2 ノード)	2 ノード	
占有利用	mySQUID	無制限	76Core×占有ノード数	504GB×占有ノード数	占有ノード数	

※1. 高優先度のため実行待ち時間が短縮されるが、ポイントの消費が大きくなる。

※2. 他のジョブとの1ノード内での資源共有を許容するキュー。ポイント消費が小さくなるが、他のジョブの影響を受ける可能性がある。

ベクトルノード群

利用方法	ジョブクラス	利用可能経過時間	利用可能最大Core数	利用可能メモリ	同時利用可能VE数	備考
共有利用	SQUID	120 時間	2,560 Core (10Core×256VE)	12 TB (48GB×256VE)	256VE	
	SQUID-H	120 時間	2,560 Core (10Core×256VE)	12 TB (48GB×256VE)	256VE	※1
	SQUID-S	120 時間	40 Core (10Core×4VE)	192 GB (48GB×4VE)	4VE	※2
	DBG	10 分	40 Core (10Core×4VE)	192 GB (48GB×4VE)	4VE	
	INTV	10 分	40 Core (10Core×4VE)	192 GB (48GB×4VE)	4VE	
占有利用	mySQUID	無制限	10Core×占有 VE 数	48GB×占有 VE 数	占有 VE 数	

※1. 高優先度のため実行待ち時間が短縮されるが、ポイントの消費が大きくなる。

※2. 他のジョブとの1ノード内での資源共有を許容するキュー。ポイント消費が小さくなるが、他のジョブの影響を受ける可能性がある。

OCTOPUS のジョブクラス一覧

汎用 CPU ノード群

利用方法	ジョブクラス	利用可能 経過時間	利用可能 最大 Core 数	利用可能 最大メモリ	同時利用 可能ノード数
共有利用	OCTOPUS	120 時間	3,072 Core (24Core×128 ノード)	23,680 GB (185GB×128 ノード)	128 ノード
	DBG	10 分	24 Core	185 GB	1 ノード
占有利用	myOCTOPUS	無制限	24Core×占有ノード数	185GB×占有ノード数	占有ノード数

GPU ノード群

利用方法	ジョブクラス	利用可能 経過時間	利用可能 最大 Core 数	利用可能メモリ	同時利用 可能ノード数
共有利用	OCTOPUS	120 時間	768 Core (24Core×32 ノード)	6,080 GB (185GB×32 ノード)	32 ノード
	DBG	10 分	24 Core	185 GB	1 ノード
占有利用	myOCTOPUS	無制限	24Core×占有ノード数	185GB×占有ノード数	占有ノード数

Xeon Phi ノード群

利用方法	ジョブクラス	利用可能 経過時間	利用可能 最大 Core 数	利用可能メモリ	同時利用 可能ノード数
共有利用	OCTPHI	120 時間	2,048 Core (64Core×32 ノード)	6,080 GB (185GB×32 ノード)	32 ノード
占有利用	myOCTPHI	無制限	64Core×占有ノード数	185GB×占有ノード数	占有ノード数

大容量主記憶搭載ノード群

利用方法	ジョブクラス	利用可能 経過時間	利用可能 最大 Core 数	利用可能メモリ	同時利用 可能ノード数
共有利用	OCTMEM	120 時間	256 Core (128Core×2 ノード)	12TB (6TB×2 ノード)	2 ノード

2022 年度大規模計算機システム稼働状況

稼働状況

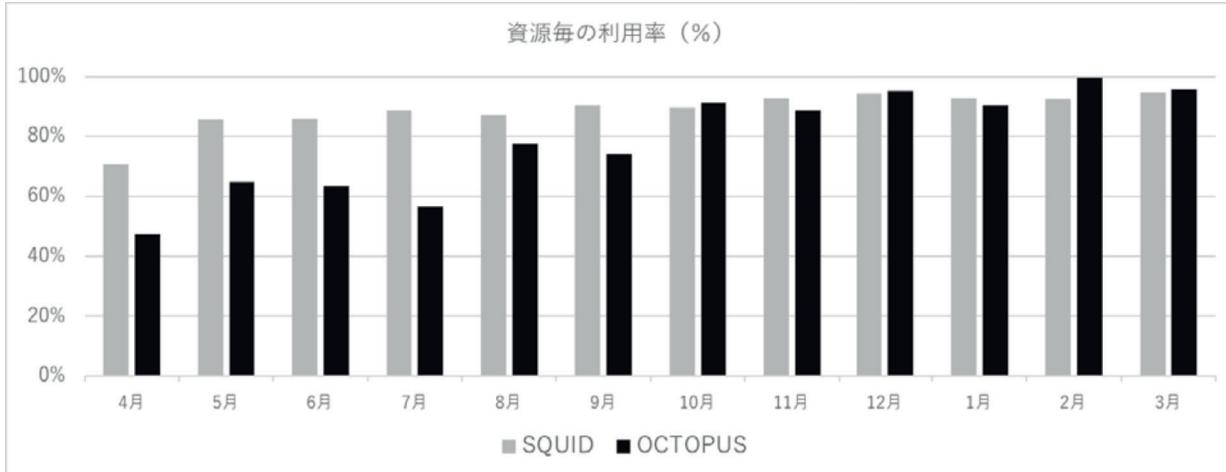
事 項	月	(単位:時間)													
		4	5	6	7	8	9	10	11	12	1	2	3	合計	月平均
稼 動 時 間	計算サービス時間 (A1)	588:00	744:00	720:00	744:00	744:00	713:00	744:00	720:00	744:00	692:00	696:00	737:00	8586:00	715:30
	初期化・後処理時間 (A2)	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00
	業 務 時 間 (A3)	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00
	(A) 小 計	588:00	744:00	720:00	744:00	744:00	713:00	744:00	720:00	744:00	692:00	696:00	737:00	8586:00	715:30
保 守 時 間 (B)	132:00	0:00	0:00	0:00	0:00	7:00	0:00	0:00	0:00	52:00	0:00	7:00	198:00	16:30	
故 障 時 間 (C)	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	
その他の時間 (D)	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	
運転時間 (A+B+C+D)	720:00	744:00	720:00	744:00	744:00	720:00	744:00	720:00	744:00	744:00	696:00	744:00	8784:00	732:00	
稼動率 (A/(A+B+C+D)%)	81.67	100.00	100.00	100.00	100.00	99.03	100.00	100.00	100.00	93.01	100.00	99.06	---	97.73	
運 転 日 数 (E)	30	31	30	31	31	30	31	30	31	31	28	31	365	30	
一日平均稼動時間 (A/E)	19:36	24:00	24:00	24:00	24:00	23:46	24:00	24:00	24:00	22:19	24:51	23:46	---	23:31	

処理状況

処理月	SQUID				OCTOPUS			
	共有利用		占有利用 CPU時間(時)	利用率(%)	共有利用		利用率(%)	
	ジョブ件数	CPU時間(時)			ジョブ件数	CPU時間(時)		
4月	86,071	58,043	2,352	70.6%	13,489	141,761	47.4%	
5月	27,689	80,860	4,001	85.5%	7,031	153,694	64.8%	
6月	28,301	412,696	4,278	86.0%	13,489	141,761	63.4%	
7月	35,080	376,847	4,464	88.5%	9,156	115,442	56.5%	
8月	127,831	418,143	4,463	87.2%	18,199	144,189	77.4%	
9月	223,704	474,754	4,172	90.3%	12,475	99,508	73.9%	
10月	185,066	481,642	4,406	89.6%	10,891	187,437	91.1%	
11月	91,308	659,095	4,320	92.6%	16,889	146,149	88.5%	
12月	36,560	673,930	4,464	94.3%	18,220	145,446	95.2%	
1月	33,497	729,646	4,155	92.7%	11,949	133,456	90.4%	
2月	60,756	801,324	4,032	92.4%	24,678	157,374	99.6%	
3月	111,450	949,773	4,422	94.6%	17,212	112,309	95.6%	
合計	1,047,313	6,116,754	49,529		173,678	1,678,526		

(注) 利用率は、次の計算式により算出している。

$$\begin{aligned} \text{SQUID の利用率} &= (\text{SQUID の ノード時間積} / \text{稼働中ノードの合計サービス時間}) * 100 \\ \text{OCTOPUS の利用率} &= (\text{OCTOPUS の ノード時間積} / \text{稼働中ノードの合計サービス時間}) * 100 \end{aligned}$$



募 集

大規模計算機システムを利用して行った研究・開発等の記事の募集について

（センターでは、大規模計算機システムを利用して研究したことを主体とする内容の広報誌「サイバーメディア HPC ジャーナル」を発行しています。この広報誌に掲載する次の内容の記事を募集しますので、皆さんのご投稿をお待ちしています。）

1. 隨筆
2. 大規模計算機システムを利用して行った研究・開発の紹介
3. プログラムの実例と解説
4. その他、広報誌に掲載するにふさわしいもの

*投稿いただいた方には、掲載した広報誌 5 部を進呈いたします。

【原稿の執筆および提出方法】

1. 原稿の執筆は、以下の書式設定で作成をお願いします。
 - ・ページ設定 (Microsoft Word2010 の設定です。)
 - ・用紙サイズ A4 縦
 - ・1 ページの文字数と行数：行数 40、行送り 18.2 pt、1 頁 2 段書き
 - ・フォント 本文 MS 明朝 10 pt
題名 MS ゴシック 14 pt、半角英数 Times New Roman
執筆者氏名 MS 明朝 10 pt、なお、姓と名の間及び機関と研究科と専攻名の間は半角スペースを入れる。
 - ・余白 上 20mm、下 20mm、左右 20mm、印刷形式：標準
 - ・その他 セクションの開始位置：次のページから開始
用紙の端からの距離：ヘッダ 15mm、フッタ 17.5mm
垂直方向の配置：上寄せ
 - ・文字等の設定
 - ・年は西暦で記述する。
 - ・数字、英字は半角（書式：Times New Roman）、数字英字を括弧で閉じる場合は、括弧も同様に半角
 - ・文字、漢字は全角、文字漢字を括弧で閉じる場合は、括弧も同様に全角
 - ・日本語文中の句読点は半角の“、”“、”を使用せず、全て全角の“、”“、”とする。
 2. Microsoft Word 以外の日本語ワープロソフト及び、その他の文書作成ソフトで作成された原稿を投稿される場合は、PDF ファイルに変換してください。
 3. 原稿は、電子メールにて以下のアドレスにお送りください。
zyosui-kikaku-soumu@office.osaka-u.ac.jp
なお、送信の際、件名を「HPC ジャーナル原稿」と入力くださるよう、お願いします。
 4. 電子メールの容量が 35MB を超える場合は、CD-R 等の電子媒体に記録のうえ、以下の送付先にお送りください。
- 【原稿の送付先】
〒567-0047
大阪府茨木市美穂ヶ丘 5-1 大阪大学情報推進部情報企画課総務係

【注意事項】

1. お送りいただいた原稿を掲載する際、原稿の修正をお願いすることがありますのでご了承ください。
2. 提出いただいた原稿は、サイバーメディアセンターのホームページにて公開いたしますので、ご了承ください。

大規模計算機システム利用案内（サービス内容・サービス時間等）

・サービス内容

主なサービス内容	係・連絡先等	開館時間	
		月～金	土・日・祝休日
センター見学の申込、広報	情報推進部情報企画課 総務係（本館1F） 電話 06-6879-8804 zyosui-kikaku-soumu@office.osaka-u.ac.jp	8:30～12:00 13:00～17:15	閉 館
利用負担金に係る会計事務（請求及び収納）	情報推進部情報企画課 会計係（本館1F） 電話 06-6879-8980,8981 zyosui-kikaku-kaikei@office.osaka-u.ac.jp		
利用案内、受付 利用案内、利用申請、利用負担金、 利用講習会受付、 計算機マニュアルの閲覧	情報推進部情報基盤課 研究系システム班（本館1F） 電話 06-6879-8808,8812 system@cmc.osaka-u.ac.jp		
利用方法の問い合わせ スーパーコンピュータ、PCクラスタ等の 利用方法	情報推進部情報基盤課 研究系システム班（本館1F） 電話 06-6879-8812,8813 system@cmc.osaka-u.ac.jp		

・サービス時間

スーパーコンピュータ、PCクラスタ等	オンラインサービス 24時間365日（注）
--------------------	-----------------------

(注) 障害の発生等により、予告なしにサービスを中止することがあります。
計画停電・定期保守によりサービスを停止する場合は、ホームページでお知らせします。

・大規模計算機システムURL

大規模計算機システムホームページ	http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/
大規模計算機システムポータル (スーパーコンピュータ等についての情報を 提供しています。マニュアルの閲覧、稼働 状況の表示、利用実績の確認等が行えます。)	OCTOPUS https://portal.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/portal/ SQUID https://squidportal.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/portal/

・利用相談

プログラム、センターの利用に関する質問・相談	利用相談を電子メールで受け付けます。 E-mail: system@cmc.osaka-u.ac.jp に質問・相談をお寄せください。 ※お問い合わせの際には、利用者番号をお申し出ください。
------------------------	--

(お願い)

サイバーメディア HPC ジャーナルは、本センター利用者（利用登録者）の皆様に配布しています。お近くの研究者・大学院生の方にも、本冊子をご回覧くださるようお願い申し上げます。

大阪大学サイバーメディア HPC ジャーナル No.13
2023 年 9 月発行

編集： 大阪大学サイバーメディアセンター

発行： 大阪府茨木市美穂ヶ丘 5-1 (〒567-0047)

大阪大学サイバーメディアセンター

Cybermedia Center, Osaka University

Tel: 06-6879-8805

URL: <https://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/>

表紙デザイン：阿部 浩和（大阪大学）

No. 13 2023. 9

ISSN 2186-473X

大阪大学サイバーメディアHPCジャーナル
High Performance Computer Journal

大規模計算機システムホームページ <http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/>

