





## CYBERMEDIA HPC JOURNAL

Cybermedia Center, Osaka University No. 14













目 次

ミNVIDIA Modulusを利用	したPINNsについて	1
AICCALを建張させるFII 柴田 良一	岐阜工業高等専門学校 建築学科	Z
見模計算機システム利用者研	F究報告	9
クォークが重い領域のQC	CDにおける臨界点探索	10
金谷 和至	筑波大学 数理物質系 宇宙史研究センター	
マクロ系の摩擦則の包括	的な解明	14
岩下 航	大阪大学 大学院基礎工学研究科	
Al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	19
河口 真一	大阪大学 大学院生命機能研究科	
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	23
大四止人、温見海	<u></u> ≠一郎 <sup></sup> 東京大学 <sup>1</sup> 機械工学専攻、 <sup>2</sup> 工学系研究科総合研究機構	
Generation of ultrahigh r	nagnetic fields and micro-scale particle accelerator	27
M. Murakami and I	D. Balusu Institute of Laser Engineering, Osaka University	
Machine learning study	of single-atom platinum supported on graphene nanostructures (SAC Pt-G)	31
Beatriz Andrea C.	Osaka University Graduate School of Engineering	
Development of Graph N	leural Network Interatomic Potential to Investigate Diamond Oxidation and Graphitization	35
John Isaac G. Enric	uez and Yoshitada Morikawa	
	Osaka University Graduate School of Engineering	
原子吸着に伴うトポロジ	カル絶縁体表面に於けるスピン構造転移の研究	39
湯川龍	東北大学 国際放射光イノベーション・スマート研究センター(SRIS)	
深層生成モデルを用いた	ヒト脳活動からの動的体験再構成	43
高木 優	大阪大学 大学院生命機能研究科	
Exploring the magnetic i	nteraction in the photoexcited of	47
po	orphyrin-lanthanide 1:1 complexes with different capping ligands	
Anas Santria, <sup>1,2</sup> an	d Naoto Ishikawa <sup>1</sup>	
	<sup>1</sup> Graduate School of Science, Osaka University	
	<sup>2</sup> Research Center for Chemistry, National Research and Innovation Agency	
データ駆動型キャビテー	ションモデルと その学習データセットの構築に関する研究	53
岡林 希依	大阪大学 大学院工学研究科	
Inter-subunit coupling in	PvrR pyrimidine synthase attenuator protein oligomers	57
Sandhva P. Tiwari	Institute for Protein Research. Osaka University	51

松原 崇	充見する―ユーフル常做分力性式	59
1=0051 051	大阪大学 大学院基礎工学研究科	
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	63
金鋼	大阪大学 大学院基礎工学研究科	
致い生まして、レポーキ		6.6
酸化物糸入上ンナノス素	ナにわりるトナー火陥手動の弟一原理理論解析	66
膝平 召也	入败入学 入子阮基碇工子研究科	
ディープラーニング毛注	を用いた一細胞エンハンサー検出注の開発	70
ノイ ノノ ニノノナム 村上 堅	大阪大学 落白皙研究所	10
11 - 2		
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	74
後藤頌太	大阪大学 大学院基礎工学研究科 物質創成専攻 化学工学領域	
BERTを用いたT細胞受容	体の機能解明	79
安水 良明	大阪大学 大学院医学系研究科	
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	80
三宅 冬馬	北海道大学 大学院工学院 機械宇宙工学専攻	
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	85
南條 舜	総合研究大学院大学 複合科学研究科	
Modeling Drug Release	of Phosphoramidate-based Antibody-drug Conjugates using Machine Learning Metadynamics	89
Rizka Nur Fadilla a	nd Yoshitada Morikawa	
	大阪大学 大学院工学研究科	
Theoretical Investigation	n of Hydrogen Desorption Process in Hydrogen Boride sheet for Catalytic Applications	93
Kurt Irvin M. Rojas	<sup>1</sup> , Yoshitada Morikawa <sup>1,2,</sup> and Ikutaro Hamada <sup>1</sup>	
	<sup>1</sup> Department of Precision Engineering, Graduate School of Engineering, Osaka University	
	<sup>2</sup> Research Center for Precision Engineering, Graduate School of Engineering, Osaka University	,
	<sup>2</sup> Research Center for Precision Engineering, Graduate School of Engineering, Osaka University	1
Modeling diffuse signatu	<sup>2</sup> Research Center for Precision Engineering, Graduate School of Engineering, Osaka University	, 98
Modeling diffuse signatu Ellis R. Owen	<sup>2</sup> Research Center for Precision Engineering, Graduate School of Engineering, Osaka University ures of cosmic ray processes in galaxies: extra-galactic gamma-ray background radiation 大阪大学 大学院理学研究科	, 98
Modeling diffuse signatu Ellis R. Owen	<sup>2</sup> Research Center for Precision Engineering, Graduate School of Engineering, Osaka University ures of cosmic ray processes in galaxies: extra-galactic gamma-ray background radiation 大阪大学 大学院理学研究科	, 98
Modeling diffuse signatu Ellis R. Owen 粒子法による大規模摩擦	<sup>2</sup> Research Center for Precision Engineering, Graduate School of Engineering, Osaka University ures of cosmic ray processes in galaxies: extra-galactic gamma-ray background radiation 大阪大学 大学院理学研究科 焼付きシミュレーション	, 98 103
Modeling diffuse signatu Ellis R. Owen 粒子法による大規模摩擦 杉村 奈都子	<sup>2</sup> Research Center for Precision Engineering, Graduate School of Engineering, Osaka University ures of cosmic ray processes in galaxies: extra-galactic gamma-ray background radiation 大阪大学 大学院理学研究科 焼付きシミュレーション 鹿児島工業高等専門学校 機械工学科	98 98
Modeling diffuse signatu Ellis R. Owen 粒子法による大規模摩擦 杉村 奈都子	<sup>2</sup> Research Center for Precision Engineering, Graduate School of Engineering, Osaka University ures of cosmic ray processes in galaxies: extra-galactic gamma-ray background radiation 大阪大学 大学院理学研究科 焼付きシミュレーション 鹿児島工業高等専門学校 機械工学科	98 98
Modeling diffuse signatu Ellis R. Owen 粒子法による大規模摩擦 杉村 奈都子 フラグメント分子軌道法	<sup>2</sup> Research Center for Precision Engineering, Graduate School of Engineering, Osaka University ures of cosmic ray processes in galaxies: extra-galactic gamma-ray background radiation 大阪大学 大学院理学研究科 焼付きシミュレーション 鹿児島工業高等専門学校 機械工学科 による量子生命情報基盤の構築 ~タンパク質基本フォールドと生体分子動的挙動の解析~	, 98 103 109
Modeling diffuse signatu Ellis R. Owen 粒子法による大規模摩擦 杉村 奈都子 フラグメント分子軌道法 福澤 薫	<ul> <li><sup>2</sup>Research Center for Precision Engineering, Graduate School of Engineering, Osaka University</li> <li>ures of cosmic ray processes in galaxies: extra-galactic gamma-ray background radiation 大阪大学 大学院理学研究科</li> <li>焼付きシミュレーション 鹿児島工業高等専門学校 機械工学科</li> <li>による量子生命情報基盤の構築 ~タンパク質基本フォールドと生体分子動的挙動の解析~ 大阪大学 大学院薬学研究科</li> </ul>	, 98 103 109
Modeling diffuse signatu Ellis R. Owen 粒子法による大規模摩擦 杉村 奈都子 フラグメント分子軌道法 福澤 薫	<sup>2</sup> Research Center for Precision Engineering, Graduate School of Engineering, Osaka University ures of cosmic ray processes in galaxies: extra-galactic gamma-ray background radiation 大阪大学 大学院理学研究科 焼付きシミュレーション 鹿児島工業高等専門学校 機械工学科 による量子生命情報基盤の構築 ~タンパク質基本フォールドと生体分子動的挙動の解析~ 大阪大学 大学院薬学研究科	98 103 109
Modeling diffuse signatu Ellis R. Owen 粒子法による大規模摩擦 杉村 奈都子 フラグメント分子軌道法 福澤 薫 柔軟エアロシェルを有す	<sup>2</sup> Research Center for Precision Engineering, Graduate School of Engineering, Osaka University ures of cosmic ray processes in galaxies: extra-galactic gamma-ray background radiation 大阪大学 大学院理学研究科 焼付きシミュレーション 鹿児島工業高等専門学校 機械工学科 による量子生命情報基盤の構築 ~タンパク質基本フォールドと生体分子動的挙動の解析~ 大阪大学 大学院薬学研究科 る大気突入機の流体構造連成解析	98 103 109 113
Modeling diffuse signatu Ellis R. Owen 粒子法による大規模摩擦 杉村 奈都子 フラグメント分子軌道法 福澤 薫 柔軟エアロシェルを有す F	<ul> <li><sup>2</sup>Research Center for Precision Engineering, Graduate School of Engineering, Osaka University</li> <li>ures of cosmic ray processes in galaxies: extra-galactic gamma-ray background radiation 大阪大学 大学院理学研究科</li> <li>焼付きシミュレーション 鹿児島工業高等専門学校 機械工学科</li> <li>による量子生命情報基盤の構築 ~タンパク質基本フォールドと生体分子動的挙動の解析~ 大阪大学 大学院薬学研究科</li> <li>る大気突入機の流体構造連成解析</li> <li>uid-structure interaction analysis for atmospheric-entry vehicle with inflatable aeroshell</li> </ul>	98 103 109 113
Modeling diffuse signatu Ellis R. Owen 粒子法による大規模摩擦 杉村 奈都子 フラグメント分子軌道法 福澤 薫 柔軟エアロシェルを有す F サンジョイ・クマ-	<sup>2</sup> Research Center for Precision Engineering, Graduate School of Engineering, Osaka University ures of cosmic ray processes in galaxies: extra-galactic gamma-ray background radiation 大阪大学 大学院理学研究科 焼付きシミュレーション 鹿児島工業高等専門学校 機械工学科 による量子生命情報基盤の構築 ~タンパク質基本フォールドと生体分子動的挙動の解析~ 大阪大学 大学院薬学研究科 る大気突入機の流体構造連成解析 uid-structure interaction analysis for atmospheric-entry vehicle with inflatable aeroshell -・サハ、高橋裕介	98 103 109 113
Modeling diffuse signatu Ellis R. Owen 粒子法による大規模摩擦 杉村 奈都子 フラグメント分子軌道法 福澤 薫 柔軟エアロシェルを有す Fl サンジョイ・クマー	<ul> <li><sup>2</sup>Research Center for Precision Engineering, Graduate School of Engineering, Osaka University ures of cosmic ray processes in galaxies: extra-galactic gamma-ray background radiation 大阪大学 大学院理学研究科</li> <li>焼付きシミュレーション 鹿児島工業高等専門学校 機械工学科</li> <li>による量子生命情報基盤の構築 ~タンパク質基本フォールドと生体分子動的挙動の解析~ 大阪大学 大学院薬学研究科</li> <li>る大気突入機の流体構造連成解析</li> <li>uid-structure interaction analysis for atmospheric-entry vehicle with inflatable aeroshell</li> <li>・サハ、高橋裕介 北海道大学 大学院工学研究院</li> </ul>	98 103 109 113
Modeling diffuse signatu Ellis R. Owen 粒子法による大規模摩擦 杉村 奈都子 フラグメント分子軌道法 福澤 薫 柔軟エアロシェルを有す F サンジョイ・クマー	<sup>2</sup> Research Center for Precision Engineering, Graduate School of Engineering, Osaka University ures of cosmic ray processes in galaxies: extra-galactic gamma-ray background radiation 大阪大学 大学院理学研究科 焼付きシミュレーション 鹿児島工業高等専門学校 機械工学科 による量子生命情報基盤の構築 ~タンパク質基本フォールドと生体分子動的挙動の解析~ 大阪大学 大学院薬学研究科 る大気突入機の流体構造連成解析 uid-structure interaction analysis for atmospheric-entry vehicle with inflatable aeroshell -・サハ、高橋裕介 北海道大学 大学院工学研究院	98 103 109 113
Modeling diffuse signatu Ellis R. Owen 粒子法による大規模摩擦 杉村 奈都子 フラグメント分子軌道法 福澤 薫 柔軟エアロシェルを有す Fi サンジョイ・クマー The Investigation of Self	<sup>2</sup> Research Center for Precision Engineering, Graduate School of Engineering, Osaka University ures of cosmic ray processes in galaxies: extra-galactic gamma-ray background radiation 大阪大学 大学院理学研究科 焼付きシミュレーション 鹿児島工業高等専門学校 機械工学科 による量子生命情報基盤の構築 ~タンパク質基本フォールドと生体分子動的挙動の解析~ 大阪大学 大学院薬学研究科 る大気突入機の流体構造連成解析 uid-structure interaction analysis for atmospheric-entry vehicle with inflatable aeroshell -・サハ、高橋裕介 北海道大学 大学院工学研究院	98 103 109 113 120
Modeling diffuse signatu Ellis R. Owen 粒子法による大規模摩擦 杉村 奈都子 フラグメント分子軌道法 福澤 薫 柔軟エアロシェルを有す Fi サンジョイ・クマー The Investigation of Self	<sup>2</sup> Research Center for Precision Engineering, Graduate School of Engineering, Osaka University ures of cosmic ray processes in galaxies: extra-galactic gamma-ray background radiation 大阪大学 大学院理学研究科 焼付きシミュレーション 鹿児島工業高等専門学校 機械工学科 による量子生命情報基盤の構築 ~タンパク質基本フォールドと生体分子動的挙動の解析~ 大阪大学 大学院薬学研究科 る大気突入機の流体構造連成解析 uid-structure interaction analysis for atmospheric-entry vehicle with inflatable aeroshell -・サハ、高橋裕介 北海道大学 大学院工学研究院	98 103 109 113 120
Modeling diffuse signatu Ellis R. Owen 粒子法による大規模摩擦 杉村 奈都子 フラグメント分子軌道法 福澤 薫 柔軟エアロシェルを有す F サンジョイ・クマー The Investigation of Self In Harry H. Halim, Yu	<sup>2</sup> Research Center for Precision Engineering, Graduate School of Engineering, Osaka University ures of cosmic ray processes in galaxies: extra-galactic gamma-ray background radiation 大阪大学 大学院理学研究科 焼付きシミュレーション 鹿児島工業高等専門学校 機械工学科 による量子生命情報基盤の構築 ~タンパク質基本フォールドと生体分子動的挙動の解析~ 大阪大学 大学院薬学研究科 る大気突入機の流体構造連成解析 uid-structure interaction analysis for atmospheric-entry vehicle with inflatable aeroshell -・サハ、高橋裕介 北海道大学 大学院工学研究院	98 103 109 113 120
Modeling diffuse signatu Ellis R. Owen 粒子法による大規模摩擦 杉村 奈都子 フラグメント分子軌道法 福澤 薫 柔軟エアロシェルを有す ド サンジョイ・クマー The Investigation of Self In Harry H. Halim, Yu	<sup>2</sup> Research Center for Precision Engineering, Graduate School of Engineering, Osaka University ures of cosmic ray processes in galaxies: extra-galactic gamma-ray background radiation 大阪大学 大学院理学研究科 焼付きシミュレーション 鹿児島工業高等専門学校 機械工学科 による量子生命情報基盤の構築 ~タンパク質基本フォールドと生体分子動的挙動の解析~ 大阪大学 大学院薬学研究科 る大気突入機の流体構造連成解析 uid-structure interaction analysis for atmospheric-entry vehicle with inflatable aeroshell -・サハ、高橋裕介 北海道大学 大学院工学研究院	98 103 109 113 120
Modeling diffuse signatu Ellis R. Owen 粒子法による大規模摩擦 杉村 奈都子 フラグメント分子軌道法 福澤 薫 柔軟エアロシェルを有す F サンジョイ・クマー The Investigation of Self In Harry H. Halim, Yu	<sup>2</sup> Research Center for Precision Engineering, Graduate School of Engineering, Osaka University ures of cosmic ray processes in galaxies: extra-galactic gamma-ray background radiation 大阪大学 大学院理学研究科 焼付きシミュレーション 鹿児島工業高等専門学校 機械工学科 による量子生命情報基盤の構築 ~タンパク質基本フォールドと生体分子動的挙動の解析~ 大阪大学 大学院薬学研究科 る大気突入機の流体構造連成解析 uid-structure interaction analysis for atmospheric-entry vehicle with inflatable aeroshell -・サハ、高橋裕介 北海道大学 大学院工学研究院	98 103 109 113 120
Modeling diffuse signatu Ellis R. Owen 粒子法による大規模摩擦 杉村 奈都子 フラグメント分子軌道法 福澤 薫 柔軟エアロシェルを有す Fl サンジョイ・クマー The Investigation of Self In Harry H. Halim, Yu 動運動論的レーザー吸収	<sup>2</sup> Research Center for Precision Engineering, Graduate School of Engineering, Osaka University ures of cosmic ray processes in galaxies: extra-galactic gamma-ray background radiation 大阪大学 大学院理学研究科 焼付きシミュレーション 鹿児島工業高等専門学校 機械工学科 による量子生命情報基盤の構築 ~タンパク質基本フォールドと生体分子動的挙動の解析~ 大阪大学 大学院薬学研究科 る大気突入機の流体構造連成解析 uid-structure interaction analysis for atmospheric-entry vehicle with inflatable aeroshell -・サハ、高橋裕介 北海道大学 大学院工学研究院 <sup>5</sup> Optimization of Active Sites by Reaction termediates during Non-Equilibrium States of CO <sub>2</sub> Hydrogenation to Methanol ki Yamada, M. Fadhlan Anshor, Pongpan Sitiputa, and Yoshitada Morikawa 大阪大学 大学院工学研究科	98 103 109 113 120
Modeling diffuse signatu Ellis R. Owen 粒子法による大規模摩擦 杉村 奈都子 フラグメント分子軌道法 福澤 薫 柔軟エアロシェルを有す F サンジョイ・クマー The Investigation of Self In Harry H. Halim, Yu 動運動論的レーザー吸収 高木 悠司	<ul> <li><sup>2</sup>Research Center for Precision Engineering, Graduate School of Engineering, Osaka University ures of cosmic ray processes in galaxies: extra-galactic gamma-ray background radiation 大阪大学 大学院理学研究科</li> <li>焼付きシミュレーション 鹿児島工業高等専門学校 機械工学科</li> <li>による量子生命情報基盤の構築 ~タンパク質基本フォールドと生体分子動的挙動の解析~ 大阪大学 大学院薬学研究科</li> <li>る大気突入機の流体構造連成解析</li> <li>uid-structure interaction analysis for atmospheric-entry vehicle with inflatable aeroshell</li> <li>・サハ、高橋裕介 北海道大学 大学院工学研究院</li> <li>Optimization of Active Sites by Reaction</li> <li>termediates during Non-Equilibrium States of CO<sub>2</sub> Hydrogenation to Methanol</li> <li>ki Yamada, M. Fadhlan Anshor, Pongpan Sitiputa, and Yoshitada Morikawa 大阪大学 大学院工学研究科</li> <li>で発生する高速電子特性の解析 大阪大学 大学院理学研究科、レーザー科学研究所</li> </ul>	98 103 109 113 120 124

センター報告	128
・2023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	129
・SC23出展報告	148
・第29回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2023)報告および	155
第30回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2024	4)告知
・大規模計算機システム利用者講習会等の紹介	157
・2024年度大規模計算機システム利用講習会	159
・2023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	160
・2024年度「HPCI利用」の活動状況	168
・2024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	169
・2023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	170
・2024年度大規模計算機システム公募型利用制度の活動状況	171
・大規模計算機システムQ&A	173
利用規程等	175
・規程関係	176
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	176
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	178
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	179
<ul> <li>・附表</li> </ul>	180
大規模計算機システム ホスト一覧	180
スーパーコンピュータSQUIDのジョブクラス一覧	180
2023年度大規模計算機システム稼働状況	182
募  集	183
・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	184
・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)	185

- NVIDIA Modulus を利用した PINNs について -

## 特集

### AI と CAE を連携させる PINNs の実装「NVIDIA Modulus」のご紹介

柴田 良一 岐阜工業高等専門学校 建築学科

### 1. ものづくりでの PINNs の可能性と期待

ものづくりにおいては、「開発・設計・生産・ 管理」の様々な場面で、問題解決や意思決定が必 要とされます。この4つの場面を実現する手法は、 目的や条件によって適切な選択が不可欠です。現 時点では「ものづくりにおける問題解決手法」を 大きく分類すると、4つの手法があり、これらは 中央大学 AI・データサイエンスセンター所長: 樋口知之先生の資料を参考にすると、「演繹的と 帰納的」の2つの側面で分類できます。

この考え方をもとに、著者が問題解決手法を図 解した結果である図1を用いて説明します。今後 が期待される「これからの問題解決」では、最も 基本的な手法である「従来の問題解決」から始ま り、様々な技術発展を取り込みながら展開して、 今後は人工知能で対象とする情報、つまりデータ を中心とした「データ指向・データ同化」が重要 になってくると考えています。



図1:ものづくりにおける問題解決手法の展開

まず、第1段階は、右下[1]の「実験(測定)」 です。現実の対象物や模型などに条件を設定した 実験を行い、その挙動を測定することで必要とす る知見を得ようとする手法です。最も確実といえ ますが、想定外の影響が結果を支配することもあ り、様々な誤差もあることに注意が必要です。 次に、第2段階は、左下[2]の「理論(公式)」 です。実験や観察から得られた知見をもとに、数 学的な記述を基本としながら、理論的に法則性を 見つけ出し公式としてまとめることです。固有の 現象から汎用な法則を導くことにより、広範囲の 問題解決が可能ですが、適用範囲を意識する必要 があります。

さらに第3段階は、左上[3]の「解析 CAE (シ ミュレーション)」です。「Computer Aided Engineering」は、コンピュータ支援による工学解 析として、問題対象の数式によるモデル化を、コ ンピュータ内でプログラミングすることにより、 膨大な計算を処理することが可能です。これによ り現実的で複雑な問題を対象にできますが、実際 は計算コストが制限となってきます。

最後の第4段階は、右上[4]の「情報 AI/IoT (ビ ッグデータ)」です。これまでの3つの段階で得 られる「測定結果・物理法則・解析結果」などを 前提に、新しいコンピュータの活用方法である人 工知能により問題を解決することができます。こ の手法は現在最も注目され、試行錯誤の段階です。

この図をみると、右側が情報を中心とした「帰 納的問題解決」で左側が理論を中心とした「演繹 的問題解決」となっています。解析手段は時代の 進展とともに、右下の[1]から時計回りに展開し ていき、段階的にパラダイムシフトを進めている ことがわかります。

これらの問題解決手段は、4つの手法が置換さ れるのではなく、それぞれが高度化しながら目的 の条件によって適材適所で選択されるものです が、これらの多面的な手段によって、幅広い問題 解決が可能となっています。ここで、現時点で最 も注目を集めるのは、[4]の情報を対象とした人 工知能技術を用いた問題解決手段です。他の3つ の手段と連携することで、新しい可能性が日進月 歩で開発されています。

現状の CAE に対する課題を解決するために、 人工知能技術の1つである機械学習と連携して、 ニューラルネットワークの活用による様々な研 究が始まっています。この中で、特に下記の2つ 「最適化設計・原因分析」は、ものづくりにおい て実現が期待される大きな目的です。

【目的1:最適化設計:パラメトリックな解析】 ものづくりにおける設計過程においては、製品の 目的を満足するための設計変数の決定が必要で す。この場合には、膨大な数のパラメータの組合 せケースに対して、1ケースずつ設計評価を行う 数値解析を繰返して実行する必要があります。

【目的2:原因分析:逆問題による要因の特定】 製品の活用において、想定外の条件により破損な どが生じた場合は、その要因を明確にして、期待 する目的を満足するために、設計変数の値を逆に 推定する必要もあります。このような処理は、逆 問題で実現可能であり、安全な製品設計を目指す ものづくりでの活用が期待されています。

このような課題に対して、ニューラルネットワ ークを活用する場合、これまでは「データ中心の 問題解決」が行われており、特に学習データにお いてビッグデータを前提として膨大な情報の準 備が必要となっていました。確かに問題解決手段 [1]の「実験(測定)」とニューラルネットワーク との連携であれば、センサーによる大量のデータ を準備することは容易です。しかし問題解決手段 [3]の「解析 CAE(シミュレーション)」とニュー ラルネットワーク(用語の記述では「NN」と省 略)との連携の場合には、学習データの確保が不 可欠です。従来の手法では、数値解析により多数 の学習データを事前に準備する必要があり、膨大 な計算時間がこの「CAE と NN との連携」の実用 化において、大きな課題となっています。

この「CAE と NN との連携」において、残され た可能性として問題解決手段[2]の「理論(公式)」 に注目します。つまり、CAEの基礎となっている 理論(方程式)に注目することで、従来のニュー ラルネットワークの前提であった膨大な学習デ ータのみを活用するだけでなく、新しいニューラ ルネットワークの可能性が期待されます。

これが「PINNs (Physics Informed Neural Networks:物理法則を活用したニューラルネット ワーク)」です。具体的には、ニューラルネット ワークの学習においてデータのみではなく、対象 となる現象を記述する微分方程式や境界条件を 活用することにより、データに依存しないニュー ラルネットワークの学習を実現しています。

この研究手法からみると、従来の学習データの みのニューラルネットワークの学習では、入力条 件と出力結果の関係性のみを対象とするために、 物理現象を規定する微分方程式や境界条件を、厳 密に満足する保証がないという問題がありまし た。この問題に対して PINNs では、これらの物理 的な法則や条件をニューラルネットワークの学 習に組み込んでいるため、より合理的な出力結果 が得られる特徴があります。

### 2. NVIDIA Modulus の仕組みと特徴

この PINNs の実装の1つとして、NVIDIA 社が 開発し、2021 年より公開され現在はオープンソ ーツとなっている「Modulus:モデュラス」(参考 文献1)についてご紹介します。

NVIDIA Modulus の本質は、次のように説明で きます。「偏微分形式の支配方程式や境界条件で 定義された物理法則の情報を、ニューラルネット ワークの学習用データと統合することで、高い表 現能力を持ちながらパラメータによる問題定義 を可能にした、深層学習によるニューラルネット ワークを用いたサロゲートモデルの構築を可能 にするツールです。」

この Modulus を、問題解決の基盤(プラット ホーム)として用いることにより、様々な分野で 応用できるニューラルネットワークによる問題 解決を実現することが可能になります。具体的に は、ニューラルネットワークの学習処理における 複雑さを軽減し、効率的な実装を実現しています。 これにより、対象とする問題の挙動に関する物理 現象の知識(物理法則)を、ニューラルネットワ ークモデルの学習に反映させて有効活用できま す。結果的に、「CAE と NN との連携」の1つの 可能性として、効率的に高性能な PINNs の構築 を可能にします。

Modulus は、物理法則を活用した機械学習によ るサロゲートモデルの開発に対して、各種機能を 実現する Python のクラスや関数を提供していま す。これらの高度な機能を提供するプログラミン グ支援機能により、PINNsの実装における学習や 推論の複雑な処理を効率化することができます。 このため、異なる問題領域や活用対象に対して容 易に拡張可能となっており、ものづくりをはじめ 工学や科学での応用において、人工知能技術の革 新的な応用を可能にする有益なソフトウエア・プ ラットフォームです。

さらに Modulus は、NVIDIA の人工知能用の階 層的ソフトウエア群の1つとして設計され、 NVIDIA Omniverse などの外部ツールとの連携が 考慮されています。対象問題の規模としては、単 純で例題的な問題から複雑な現実世界の問題ま でを容易に拡張可能であり、対応するハードウエ アとしては、単一の GPU 利用から複数ノードの GPU 利用まで、制限のない GPU 拡張に対応して います。これにより、複雑な問題において多数の パラメータで表現された物理法則を対象として、 機械学習によるサロゲートモデルの構築を可能 にしています。この処理能力を活用して、対象と する物理現象の設計変数や設計空間を統合化し てモデルを作成することで、利用者が複数の設計 点や挙動の変化を、ほぼリアルタイムに推測する ことができます。

このような高度な GPU 活用の動作環境により、 事前に一度だけ学習を行い PINNs によるサロゲ ートモデルを構築できれば、あとは何度でもリア ルタイム(短い処理時間で入力に対して すぐに 結果を得る)で予測を行うことができます。つま り、従来のシミュレーションと比較して、桁違い の高速化を達成しています。

Modulus のプログラミングにおいては、Python 言語を用いています。プログラミングにおいては、 高度な処理を実現する API を用いることで、対 象とする問題の高度な抽象化を可能にして、それ ぞれの問題領域の専門知識の活用を容易にして います。つまり、本書で解説する例題は、新しい 問題に対しての既存解法を拡張するための重要 な出発点になり、対象領域の支配法則の Python クラスを定義するために、既存の同様な支配法則 の Python クラスを拡張することができます。

著者が想定する Modulus の利用者としては、下 記の方々が考えられます。

・工学や科学でのシミュレーション技術を対象
 とし、新しい可能性を開拓すべく、従来の問題解
 決手法を改善するために、新しい人工知能ベース
 の手法を開発する研究者

・ものづくりのエンジニアリングと科学的シミ ュレーションを統合し、革新的な機能を持つ解析 技術の実現のために、ニューラルネットワーク活 用手法を実現する開発者

・本書が目標とする「CAE と NN との連携」を目 指して、問題解決手法として最適化設計や逆問題 解析を実現するような、デジタルツインアプリケ ーションを展開する技術者

産業分野としては、Modulus は自動車、航空宇 宙、機械製造、石油ガス、医療医薬、電子製品な どの幅広い業界を対象としています。これらの分 野で必要となる問題解決技術として、流体解析、 熱伝導解析、構造解析、電磁界解析などや、これ らが連成したマルチフィジックスシミュレーシ ョンで使用することができます。

Modulus の解析機能の範囲をまとめた図2を みると、Modulus が実装する機械学習やニューラ ルネットワークの対応範囲は、概略的には、従来 の「Category I:物理法則による数値解析による順 問題解法(Forward Solution)」、「Category III:物

4

理法則は使わずデータのみを基本とするデータ 指向解法(Data-Driven Solution)」に対して、新し い「Category II:物理法則とデータ同化の両方を 含むようなハイブリッド解法(Inverse Solution / Data Assimilation)」、の3つのカテゴリーに分類 することができます。Modulusの特徴であるハイ ブリッド解法としては、具体的には「逆問題解法 とデータ同化」といえます。



図2: Modulus の対応範囲

次に、Modulus のソフトウエア構成の概要を、 図3を用いて簡単に説明します。Modulus は、物 理法則を用いた学習で用いる対象形状の生成や 入力のための Python 用 API を提供しているだけ でなく、先の Category III:データ志向のニューラ ルネットワーク学習で用いる効果的なデータ導 入を実現するための、いくつかのツールも用意し ています。

例えば、効率的なニューラルネットワーク処理 を実現するために、人工知能研究分野で開発され た標準的で多彩なニューラルネットワーク構成 に対応して、これらを実現するソフトウエア機能 を実装しています。さらには、対象となる問題の 物理法則の偏微分方程式を効率的に定義するた め、参照可能な基盤となる方程式なども提供して います。

Modulus は実際のニューラルネットワーク処 理において、学習対象や制約条件として定義され る複雑な問題に対して、最適化された計算処理手 順を生成する機能を実装し、これらを効果的に制 御することを可能にしています。なお、データ指 向の手法を採用せずに、物理法則で記述されたモ デルによる Category I の処理も同様に、これらの 最適化手法が適用されます。

最後に、対象とするデータの可視化の側面から も柔軟な機能を提供しており、利用者は Modulus の処理モデルを用いた操作において、Omniverse、 TensorBoard、ParaView などのツールを連携して 利用することができます。



図3: Modulus のシステム構成

図4は、Modulusで開発を行う場合の標準的な 処理手順を示しています。全ての PINNs の問題 が、完全にこの処理手順どおりに実行するとは限 りませんが、ここでは Modulus に関する標準的な 情報として、この図を用います。



図4: Modulus で開発を行う時に用いる標準的な 処理手順

この処理の重要な手順は以下の通りです。 ・Load Hydra (ハイドラの読込) YAML 形式の設定ファイルを読み込むための、 Modulus のメインオブジェクトのデコレーター を用いてハイドラを初期化します。 ・Load Datasets (データセットの読込) 処理において必要なデータを読み込みます。 ・Define Geometry (形状の定義) 必要な対象システムの形状を定義します。 ・Create Nodes(ノードの生成) 要求された任意のノードを生成し、ニューラルネ ットワークのモデルで利用されます。

・Create Domain(処理手続の生成)

学習用処理手続のオブジェクトを生成します。

Create Constraint と Add Constraint to Domain
 (制約条件生成と処理手続への制約条件追加)

各制約条件を順番に生成して、処理手続に対して これを追加します。

・Create Solver (ソルバーの生成)

学習処理手続としてデータが設定されたソルバ ーを初期化します。

・Run Solver (ソルバーの実行)

準備したソルバーを実行します。学習処理の結果 として、物理現象の問題を解くためのニューラル ネットワークを最適化します。

### 3. NVIDIA Modulus で提供される例題の紹介

最初に、工学的な問題解決における Modulus の 特徴や、それらの特徴が Modulus の持つ機能にど う関連しているかをまとめておきます。

微分方程式で定義された物理シミュレーショ ンを解析するためには、問題の解析空間に関する 情報と、対象となる物理現象の支配方程式や境界 条件の定義が必要となります。これらの情報と定 義を活用することで、目的とする結果を得るため の解析空間に対応する支配方程式を設定し、これ を解く Modulus のソルバーを選択することがで きます。さらに Modulus では、このような問題の 定義や解法だけでなく、処理経過の確認(モニタ リング)や結果の可視化(ポストプロセス)など を実行する各段階に対して、有用となる機能や関 数が提供されています。

対象となる解析空間の定義では、Modulus が持 つ統合可能なソリッド形状生成の機能モジュー ル、STLファイルによる形状定義の機能モジュー ル、または CSV/NumPy/HDF5 などの配列形式に よるデータファイル、外部ツールの標準的な形式 のデータファイルなどの利用が可能です。 Modulus の PINNs の処理においては、この形状 または点群(ポイントクラウド)が定義できれば、 境界条件を定義するための境界上の点を部分的 に指定することが可能になります。さらに、物理 法則を記述した偏微分方程式や常微分方程式は、 対象とする内部領域において誤差を最小化する ように解法が定義されます。

ここでは、Modulus を活用した基本的な例題と して、「2 次元矩形空間でのキャビティ流れの確 認」を取り上げます。

この例題演習では、NVIDIA Modulus を活用し て、上部壁駆動によるキャビティ(以下 LDC と 略記)流れを対象として、2次元流れ解析の PINNs による問題解決の手順を段階的に説明し ます。具体的には、次の5ステップで問題解決を 進めます。

1. 形状モジュールで2次元形状を生成する

- 2. 境界条件を設定する
- 3. 解析対象となる流れの支配方程式を選択する
- 4. 残差ロスを評価して PINNs を学習する

5. 基本的な結果の可視化を実行する

解析空間であるキャビティの形状を、図5に示 しています。これは正方形の空間で、その辺長は 縦横0.1mの長さとします。空間の正方形の中心 を、直交座標系の原点として定義して、x方向は 右に向かって増加する座標で、y方向は上に向か って増加する座標としています。矩形の空間を囲 む4つの壁は、左と右と下の辺は静止した壁で、 上部の壁は x 方向に1 m/s の速度で移動する設 定です。



図5:上部壁駆動によるキャビティの形状

処理結果の例として、関数 add\_validator()を用 いて、問題空間に定義された点群上で学習処理さ れたデータを可視化してみます。この比較検討に 用いる問題空間は、参照解と比較してデータを評 価するために必要な定義です。この比較用の結果 データは、拡張子.vtp や.npz 形式のファイルにな っています。この拡張子.vtp ファイルは、ParaView のような可視化ツールを用いて確認できます。こ のファイルを含む validators ディレクトリにある 拡張子.vtp と.npz ファイルは、選択された点群に おける予測として、正解値(検証用データ)、予 測値(モデルの推論)などの値を提示しています。

例えば、ファイル./validators/validator.vtp は、正 解値とネットワークによる予測値の変数として "u", "v" と "p"に対応するように、true\_u, true\_v, true\_p, と pred\_u, pred\_v, pred\_p などの変数の値 を保存しています。図6は、このような変数に関 して正解値と Modulus の予測値との比較検討を 示しています。



図6: OpenFOAM の結果との比較検討

Modulus の学習処理においては、その収束過程 を把握するために、ニューラルネットワークの学 習過程の可視化ツール TensorBoard は、機械学習 の検証の可視化においてとても有用です。 Modulus による PINNs の実行の過程で得られる 情報(学習や評価の損失など)を可視化するため に、図7に示すように TensorBoard を利用できま す。



図7:可視化用の TensorBoard インターフェス

この TensorBoard に接続したブラウザでは、学 習過程の各ステップにおける、様々な損失を表示 します。このグラフの中で、1段目にある AdamOptimizer 損失は、ネットワークで計算され る全てのロスを表わしています。さらに、2段目 の左から3つの loss\_continuity, loss\_momentum\_x と loss\_momentum\_y は、質量保存式とナビエ・ ストークス方程式の x 軸と y 軸のそれぞれの方 向に関する L2損失を表示しています。また、2 段目の右から2つの loss\_u と loss\_v は、境界条 件がどれぐらい正しく満足しているかを示す L2 損失を表示しています。

### 4. おわりに

本紹介記事は、AI と CAE を融合した新しい問 題解決技術である「Physics-informed Machine Learning (Physics-ML)」の中で、特に「Physics Informed Neural Networks (PINNs)」に興味を持っ た技術者の方が NVIDIA Modulus を活用するため の概要を提供することを目的としています。

対象とする利用者としては、AI と CAE に関心 があり、Ubuntu のコマンドライン操作に対応で きて、Python の基礎的な知識があれば、NVIDIA Modulus による PINNs を実行できるようになり ます。皆さんの問題解決において、AI+CAE の最 先端技術である NVIDIA Modulus が役立つことを 期待しています。

### 参考文献

 はじめての NVIDIA Modulus: Physics-ML 物 理に基づいた機械学習による工学シミュレ ーション,工学社,(2023).
 (本原稿は、上記自著から引用しています)

### 謝辞

本原稿中の図版の引用に関しては、NVIDIA さ まのご協力ご許可を得ましたことに、感謝申し上 げます。

## <sup>大規模計算機システム利用者</sup> 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ます。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。

### クォークが重い領域の QCD における臨界点探索

### 金谷 和至<sup>†</sup> 筑波大学 数理物質系 宇宙史研究センター

### 1. はじめに

クォークは、通常は陽子・中性子などのハドロ ンの中に閉じ込められるが、1兆度以上の超高温 では、ハドロンから溶け出してクォーク・グルオ ン・プラズマ状態に相転移すると考えられている。 この高温クォーク・ハドロン物質の相転移と熱力 学特性を、クォークの基礎理論である QCD から 直接解明することは、宇宙の初期進化、中性子星 の内部構造、高エネルギー重イオン衝突実験の理 解などにおいて極めて重要である。

OCD の相構造は、相転移次数がクォーク質量 でどう変わるかをまとめた「コロンビア・プロッ ト」により議論される。図1に、最新の格子研究 結果を踏まえた、密度ゼロの場合のコロンビア・ プロットを示す。横軸は u,d クォーク質量で、縦 軸はsクォーク質量。右上の端は、全てのクォー クが質量無限大でデカップルした SU(3)純ゲージ 理論(クエンチ近似 QCD)で、相転移次数はここ では1次である。クォークが重い極限からクォー ク質量を下げると、相転移次数は1次からクロス オーバーに変化する。両者の境界(図1右上の緑 の曲線)が、重クォーク領域における QCD 臨界 点である。図の上端は、sクォークだけがデカッ プルした2フレーバーQCD で、ud クォークが軽 い極限 (カイラル極限) で相転移は O(4)ユニバー サリティー・クラスに属する2次転移となる。赤 い星印が物理点で、ここでは連続的なクロスオー バーである。以前は左下の端(3フレーバーのカ イラル極限) 近傍にも1次相転移領域が拡がって いると考えられていたが、近年の格子シミュレー ションにより、臨界点がカイラル極限まで後退し ていることが強く示唆されている。他方、重クォ

ーク領域の臨界点の位置については、空間サイズ 依存性や格子間隔依存性があり、確定していない。



図1: QCD の有限温度相転移次数

現実のクォーク質量(物理点)での QCD 相転 移は連続的なクロスオーバーだが、そこでの熱力 学的性質が近傍の臨界点による臨界スケーリン グの影響を受けている可能性がある。特に、カイ ラル極限側の臨界点が以前考えられていたより 遠いので、クォークが重い側の臨界点の解明が重 要になっている。

熱力学極限(格子サイズ無限大極限)における 臨界点を決定する上で最も強力な方法は、Binder cumulant *B*<sub>4</sub> を用いた有限サイズスケーリング (FSS)だが、空間サイズが十分大きい必要がある。 我々は、クォークが重い QCD を、空間サイズを 先行研究より大きく拡大したシミュレーション を実行し、臨界点を研究した[1-5]。

†課題メンバー:江尻信司(新潟大),北澤正清(京大基研),菅原寛人(新潟大),鈴木博(九州大)

### 2. 重クォーク QCD シミュレーション

大きな格子サイズで高統計シミュレーション を実現するために、我々は、重いクォークの効果 をホッピングパラメータ展開(HPE)で取り入れる 方法を開発した[5,6]。ホッピングパラメータκは クォーク質量の逆数に比例し、HPE は重クォーク 展開である。

論文[6]では、HPE の基本的性質を、収束性が最 も悪い場合について半解析的に研究し、HPE がカ イラル極限まで必ず収束することを示した。また、 HPE を有限次数で切った場合の誤差の上限を  $\kappa$ の関数として評価して、温度軸方向の格子サイズ が  $N_t = 4$  の場合の臨界点 $\kappa_c$ 近傍までなら最低次 (LO)で十分だが、連続極限に向けて  $N_t$ を大きく すると  $\kappa_c$  も大きくなるので、 $N_t = 6$ では  $\kappa_c$  近 傍でその次の次数(NLO)まで必要で、 $N_t = 8$ では さらに高次項まで取り入れる必要があることを 示した。



図 2: HPE のゼロ次(純ゲージ理論)、最低次 (LO)、その次の次数(NLO)における有効作用。

LO 重クォーク QCD のシミュレーション・コ ードは、クエンチ QCD と同様にベクトル化・並 列化可能で、計算時間をフル QCD シミュレーシ ョンより 2 桁以上削減できる[5]。 $N_t$ =4 の場合を 研究した論文[5]では、LO 重クォーク QCD でシ ミュレーションを実行し、NLO の効果を reweighting 法で取り入れ、NLO の影響が小さい ことを確認した。

HPE 高次項の数値的評価は次数とともに急速 に難しくなる。 $N_i \ge 8$  で直面するこの問題を解決 するために、論文[6]ではさらに、HPE の高次項 を LO や NLO の重クォーク QCD に有効的に取 り入れる手法を開発した。

 $B_4$ の解析では、 $\kappa$  などの結合パラメータを連続 的に変化させることも重要である。そのために、 我々は、multi-point reweighting 法[7-9]による解析 を実行した。

### 3. 重クォーク QCD の臨界点

### 3.1 $N_t = 4$

以下では、特に断らない限り、2フレーバー QCDの結果を示す。図3に $N_t$ =4 格子でのポリ アコフ・ループの $B_4$ を示す[5]。系の空間サイズ はアスペクト比 $LT = N_s/N_t$ でコントロールする (臨界点探索では温度 $T = 1 / (aN_t)$  が臨界温度 近傍でほぼ一定なので、LTは空間サイズ $L = aN_s$ に比例する。ここで $N_s, N_t$ は空間方向、温度軸方 向の格子サイズで、a は格子間隔)。図2より、 $B_4$ が1点で交差するためには、先行研究では到達で きていない $LT \ge 9$ の大格子が必要であることが わかる。 $LT = 9 \sim 12$ を使った FSS フィットによ り、臨界指数が期待されるZ(2)ユニバーサリティ ーと矛盾しないことを確認し、その交点から $\kappa_c$ を高精度に決定した。



図 3:  $N_t$ =4における重クォーク QCD の Binder cumulant のクォーク質量依存性[5]。 $\lambda$ =48 $N_f N_t \kappa^4$ はクォークが軽くなると大きくなるパラメー タ。縦横の誤差棒が付いた十字のデータ点は、 FSS フィットによる交点の評価結果。

### 3.2 $N_t = 6$

図4に*N<sub>t</sub>*=6の中間結果を示す[1]。 *N<sub>t</sub>*=4の場合と定性的に似た振る舞いだが、格子間隔が小

さくなると空間サイズが小さい格子での FSS か らのずれが大きくなる傾向が見て取れ、 $N_t = 6$  で は FSS を実現するために  $N_t = 4$  より大きな  $LT \ge$ 10 が必要である。 $LT = 10 \sim 15$  で FSS フィット し、さらに[6]の方法で HPE の 22 次まで取り入れ て、 $\kappa_c$ の精密な評価に成功した。



図4: N<sub>t</sub>=6における Binder cumulant の中間結 果[1]。赤い十字はLT=10~15、青はLT=9~15 を用いた FSS フィットによる交点の結果。

### 4. 今後の展開

 $N_t=8$  でもシミュレーションを進めている。まだ解析途中だが、 $N_t=4,6$ と同様の中間結果を得ている。さらに連続極限に近づけた $N_t=10$ のシミュレーションも計画している。

 $N_t$ を増やして連続極限を議論する場合、 $\kappa_c$ の変 化を物理量の変化に翻訳する必要がある。そこで、  $\kappa_c$ におけるゼロ温度での擬スカラーメソンと相 転移温度の比  $m_{PS}/T_c$ を計算したところ、 $N_t = 4$ , 6,8 でそれぞれ  $m_{PS}/T_c = 16.30(3)$ , 18.04(4), 17.2(2) という暫定的結果を得た。これによると  $N_t$ 依存性(格子間隔依存性)は小さいと思われる が、もう一点違う  $N_t$ の結果があれば連続極限が 明らかになると期待される。

以上では、2フレーバーQCD の場合における 臨界点の結果について説明してきたが、HPE に基 づく我々の方法は、任意のフレーバー数で、また クォーク質量が縮退していない場合でも、臨界点 を求めることができる[6,7]。 さらに、我々の方法は有限密度にも容易に拡張 できることを論文[2]で議論した。フル QCD では 非常にコストがかかるクォーク行列式の複素位 相の計算も、HPE による方法では簡単に評価で き、少なくとも我々が解析した N<sub>t</sub> の重クォーク 領域の臨界点付近では符号問題が深刻でなく、再 重み付け法により有限密度での臨界点を求めら れることが分かった。その結果、図5に示すよう に、重クォーク QCD の一次相転移領域が、密度 が高くなるにつれて小さくなることを定量的に 示した[2]。有限密度 QCD のさらなる解析を進め ている。



図 5: N<sub>t</sub>=6 で計算した 2+1 フレーバー有 限密度 QCD の各µ/Tでの(κ<sub>ud</sub>, κ<sub>s</sub>)平面に おける一次相転移の境界線 [2]。

### 参考文献

- M. Kitazawa, R. Ashikawa, S. Ejiri, K. Kanaya, H. Sugawara, "Critical point in heavy-quark region of QCD on fine lattices," PoS (LATTICE 2023), 190 (2024), DOI:10.22323/1.453.0190
- (2) S. Ejiri, K. Kanaya, M. Kitazawa, "Chemical potential dependence of the endpoint of firstorder phase transition in heavy-quark region of finite-temperature lattice QCD," PoS (LATTICE 2023), 174 (2024), DOI:10.22323/1.453.0174
- (3) K. Kanaya, R. Ashikawa, S. Ejiri, M. Kitazawa,H. Suzuki, N. Wakabayashi, "Phase structure

and critical point in heavy-quark QCD," PoS (LATTICE 2022), 177 (2023), DOI:10.22323/1.430.0177

- (4) K. Kanaya, M. Shirogane, S. Ejiri, R. Iwami, M. Kitazawa, H. Suzuki, Y. Taniguchi, T. Umeda, "Latent heat and pressure gap at the first-order deconfining phase transition of SU(3) Yang-Mills theory using the small flow-time expansion method," PoS (LATTICE 2021) 064 (2022), DOI:10.22323/1.396.0064
- (5) A. Kiyohara, M. Kitazawa, S. Ejiri, and K. Kanaya, "Finite-size scaling around the critical point in the heavy quark region of QCD," Phys. Rev. D 104, 1144509 (2021), DOI:10.1103/PhysRevD.104.114509
- (6) N. Wakabayashi, S. Ejiri, K. Kanaya, and M. Kitazawa, "Scope and convergence of the hopping parameter expansion in finite temperature QCD with heavy quarks around the critical point," Prog. Theor. Exp. Phys. 2022, 033B05 (2022), DOI:10.1093/ptep/ptac019
- S. Ejiri, S. Itagaki, R. Iwami, K. Kanaya, M. Kitazawa, A. Kiyohara, M. Shirogane, T. Umeda, "End point of the first-order phase transition of QCD in the heavy quark region by reweighting from quenched QCD," Phys. Rev. D 101, 054505 (2020), DOI:10.1103/PhysRevD.101.054505
- (8) R. Iwami, S. Ejiri, K. Kanaya, Y. Nakagawa, D. Yamamoto, T. Umeda, "Multipoint reweighting method and its applications to lattice QCD," Phys. Rev. D 92, 094507 (2015), DOI:10.1103/PhysRevD.92.094507
- (9) H. Saito, S. Ejiri, S. Aoki, K. Kanaya, Y. Nakagawa, H. Ohno, K. Okuno, T. Umeda, "Histograms in heavy-quark QCD at finite temperature and density," Phys. Rev. D 89, 034507 (2014), DOI:10.1103/PhysRevD.89.034507

### マクロ系の摩擦則の包括的な解明



### 1. はじめに

摩擦は最も身近な物理現象の1つである。靴 底と地面の接触面、機械のブレーキや軸受、地震 が発生する大陸プレートなど、様々な場面で摩擦 が発生する。そのため、摩擦現象の解明は科学技 術の発展のために重要である。近年の計算機性能 の著しい向上により、従来はできなかった数値計 算でのアプローチの研究が可能になってきた。

固体間摩擦についてはアモントン-クーロン則 と呼ばれる摩擦係数が圧力や系の形状、速度によ らないことを意味する法則が経験的に古くから 知られている。しかしながら、これは準静的な外 力のかかったミクロな系で成立する空間一様性 を暗に仮定しており、応力場などの非一様性が顕 著となるマクロな系ではアモントン-クーロン則 が破れることもある[1-5]。

これまでの我々の研究では、基板に接する直方 体ブロックにおいて、圧力、系のサイズ・アスペ クト比に対する静止摩擦の依存性が示されてき た[3]。しかしながら、現実的には、圧力、系のサ イズ・アスペクトが固定しながら摩擦を制御する 必要がある状況も想定されるが、その方法は示さ れていない。さらには、有限速度下での摩擦、摩 擦がある多体系のふるまいについても未解明で ある。したがって、本研究では、物体の溝の設計 による静止摩擦の制御、粘弾性体の有限速度の接 触で生じるヒステリシス摩擦、摩擦のある多体系 の典型例である粉体のふるまいを、大規模な数値 解析によって調べた。

### 2. 溝付き物体の静止摩擦

2.1 手法

有限要素法を用いた数値シミュレーションに



図1: 基板上の溝付きブロック [6]

よって、図1に示すような剛体基板上の溝付き粘 弾性ブロックの滑り運動を調べた[6]。ここで、 粘弾性モデルは、一般に固体の計算で用いられる、 弾性要素と粘性要素が並列に接続された Kelvin-Voigt モデルを用いた。本解析は、50万節点、数 十億タイムステップの大規模な計算を要する。こ れには、In-house の Fortran プログラムコードを Intel コンパイラでコンパイルして、1,700MPI プ ロセスを用いた空間分割による並列計算で、50時 間程度かかる。

摩擦力は局所でアモントン-クーロン則が成り 立つと仮定して与える。そこでは、局所の摩擦応 力と局所の圧力の比を局所摩擦係数と定義し、局 所摩擦係数を局所滑り速度の関数として与える。 ここで、局所の静摩擦係数と動摩擦係数をそれぞ れ $\mu_{s}$ と $\mu_{K}$ 、特性速度を $v_{c}$ とする。静止状態の場合、 局所摩擦係数は $\mu_{s}$ 以下で静止状態を保つように 与えられる。滑り状態の場合、局所摩擦係数は、 局所滑り速度が $v_{c}$ 以下で、局所滑り速度の増加に よって $\mu_{s}$ から $\mu_{K}$ に減少し、滑り速度が $v_{c}$ 以上で、  $\mu_{K}$ となる。

粘弾性体は側面または上面を準静的に駆動さ

せる。このとき、粘弾性体は、静止状態と勢い良 く滑る状態を交互に繰り返す、周期的なスティッ クスリップ運動をする。勢いよく滑る状態の直前 に系全体の摩擦力は最大値を取り、その値と垂直 抗力の比をマクロな静摩擦係数μωと定義する。 溝の深さdと溝の幅に比例する摩擦面の面積減少 率φの2つの溝のパラメータを変化させたときの 静止摩擦係数μωの挙動を調べた。

### 2.2 側面を駆動する系

本節では、図1のような、物体の側面を剛体プ レートによって押したときの結果 [5]を示す。図 2に、様々な摩擦面の減少率 $\phi$ での溝の深さdに対 する静止摩擦係数 $\mu_M$ の結果を示す。 $\mu_M$ は、 $\phi$ とdの減少関数であることが明らかになった。

また、図3に示すように、系全体が滑る前に発 生する準静的に伝搬する局所滑りが確認された。 局所滑りは臨界長さに達すると、急速に伝搬し系 全体の滑りが発生する。この臨界長さが静止摩擦 係数μ<sub>M</sub>と正の相関があることが示された。

我々は、これらのシミュレーション結果から、



図 2:様々な摩擦面の減少率**φ**での溝の深さ**d**に 対する静止摩擦係数μ<sub>M</sub> [6]



図 3: 摩擦面における滑りの空間分布 [6]。青が 静止状態、黄緑が滑り状態を表す。

理論モデルを構築して解析を行った。その結果、 局所滑りの臨界長さが粘性の増加関数となるこ とが示された。溝を形成することによって、系の 剛性が減少し、実効的な粘性も減少するため、臨 界長さが減少する。さらに、静止摩擦係数μ<sub>M</sub>が臨 界長さの増加関数となるため、図3のように、μ<sub>M</sub> が溝のサイズの減少関数となる。

#### 2.3 上面を駆動する系

2.2 節では、側面駆動によって、せん断応力の 非一様性が発生するため、局所滑りが発生してい た。そのため、その結果が、一般的な上面駆動さ せた一様せん断の系に適応できるかは不明であ る。そこで、図 4a のような、x,y方向に周期境 界条件を持つ物体について上面を駆動させたと きの摩擦を調べた [7]。ここでは、2.2 節と同様の 溝に加えて、一様せん断系で局所滑りを発生させ るために、図 4b のように、摩擦面のうねりを取 り入れ、その最大振幅Aを物体形状のパラメータ の1つとした。

図 5a, b にそれぞれ、 $\phi = 0.5$ での様々なAに対 する規格化した圧力分布と静止摩擦係数 $\mu_M$ の結 果を示す。圧力分布の最小値と $\mu_M$ はAの減少関数 となる。圧力分布の最小値が小さいほど、局所滑 りの開始と成長が早く、臨界値に早く到達するた め、 $\mu_M$ が減少する。

図 5d に、異なる摩擦面の減少率 $\phi$ で、規格化した圧力の空間分布が同じになるようにAを設定した場合の静止摩擦係数 $\mu_M$ を示す。 $\mu_M$ は $\phi$ の減少関数となっており、これは 2.2 節の結果と同様である。溝のサイズが大きいほど、局所滑りの臨界面積が減少するため、 $\mu_M$ も減少する。



図4:上面駆動の系の設定 [7]。(a) 剛体基板上 の移動するプレートによって駆動される粘弾 性ブロック。(b) z方向に拡大した摩擦界面。



図 5:規格化した圧力の空間分布と静止摩擦係 数 $\mu_M$  [7]。 $\phi = 0.5$ での様々なうねりの振幅Aに 対する (a) 規格化した圧力の空間分布と (b) 静止摩擦係数 $\mu_M$ 。異なる $\phi$ で、(c) 規格化した圧 力の空間分布が同じになるようにAを設定した 場合の (d) 静止摩擦係数 $\mu_M$ 。

以上の結果より、上面駆動の系での摩擦制御の ための指針が得られた。溝の有無に依らず、うね りの振幅を小さくすることで、大きい静止摩擦係 数が得られ、大きなサイズの溝とある程度の大き さの振幅のうねりを設定することで、小さい静止 摩擦係数が得られる。

#### 3. 有限速度下での摩擦

### 3.1 手法

有限要素法を用いた数値シミュレーションに よって、図 6a に示すように、移動する 2 次元の Kelvin-Voigt モデルの粘弾性体 (密度ρ、ヤング率 E、粘性係数η、高さH) と接触する剛体圧子にか かる抵抗力を調べた。粘弾性体は周期境界を持ち、 境界の影響がない程度に十分に大きな周期の長 さを設定した。本解析は、50万節点、数億タイム ステップの大規模な計算を要する。これには、Inhouse の Fortran プログラムコードを Intel コンパ イラでコンパイルして、1,000MPI プロセスを用 いた空間分割による並列計算で、10 時間程度か かる。

粘弾性体と剛体圧子の間には、凝着摩擦を入れ ずに、圧力のみがかかる設定とした。物体間に相 対速度を与えて滑りを発生させると、物体の局所 的な粘弾性緩和の影響で接触面の前後に圧力差 が生じ、それが一種の摩擦抵抗力として働く。こ の粘弾性による由来する摩擦力はヒステリシス 摩擦と呼ばれている。本研究では、特にヒステリ シス摩擦の駆動速度Vに対する依存性を調べた [8]。

## 3.2 ヒステリシス摩擦の速度と粘性に対する依存性

圧子にかかる水平方向の力と鉛直方向の力の 比で表される摩擦係数μが、図 6b のように、ある 速度でピークを持ち、そのピークの位置が粘性係 数ηによって変化することを確認した。この結果 は、駆動速度Vと粘性係数ηに応じた粘弾性体の 変形が摩擦係数μを変化させたと解釈できる。

ピークの位置の粘性係数ηによる変化は、同様 の系での低次元のモデルを用いた先行研究と一 致している [5]。一方で、Vが弾性波速度を超えた



図 6:(a) 移動する粘弾性体に接触する剛体圧子と(b) 摩擦係数µの駆動速度Vに対する依存性[8]

領域で、粘性係数ηが異なる摩擦係数μの結果と 近づく現象は、弾性波の影響が考慮されない先行 研究のモデルでは確認されておらず、連続体特有 の現象であることが示唆される。

また、同様の系でのゲルを用いた実験とは摩擦 係数µや変形状態の駆動速度Vに対する依存性が 異なる [4]ため、今後は異なる粘弾性モデルの採 用も検討する。

### 4. 多体系(粉体)の摩擦

### 4.1 粉体を移動する物体の抵抗則

離散要素法を用いた数値シミュレーションに よって、図7に示すような粒子間に摩擦のある粉 体中を移動する物体の抵抗を調べた [9]。本解析 は、4万粒子の大規模な計算を、In-houseのFortran プログラムコードをIntel コンパイラでコンパイ ルして、MPI 空間分割による並列計算で行った。

物体のサイズ、移動速度・方向、粉体の圧力に 対する物体にかかる抵抗力の依存性を調べた。物 体の移動に伴う粒子の移動や応力場の解析に よって、抵抗則の理論を示した。



図7:粉体中を移動する直径Dの物体 [9]

### 4.2 平板間の粉体の流れ

離散要素法を用いた数値シミュレーションに よって、図8に示すような平板間の粒子間に摩擦 のある粉体の流れを調べた [10]。本解析は、2千 程度の粒子数の計算を、In-house の Fortran プロ グラムコードを Intel コンパイラでコンパイルし て行った。シミュレーションと理論解析によって、 外力に対する流れ場や流量の依存性を解明した。



図8: 平板間の粉体の流れ [10]

### 5. おわりに

2節では、静止摩擦係数の界面の溝形状やうね り形状に対する依存性が、大規模シミュレーショ ンと理論解析によって示された。この結果は、摩 擦制御のための物体形状設計の指針となり、工学 的な応用も期待される。3節では、ヒステリシス 摩擦の速度と粘性に対する依存性が示された。特 に弾性波速度付近の高速で滑る物体間の摩擦の 解析の例は少なく、その新たな知見を得るために も、本研究の発展が期待される。4節では、粉体 内を移動する物体の抵抗則と平板間の粉体の流 れを調べた。この他にも、粉体の偏析現象や粉体 の圧縮時の抵抗力の解析用のシミュレーション も開発した。このような摩擦を持つ物体が多体に なったときに見られる数多くの興味深い現象の 理論も今後の研究で明らかにしていく。

### 謝辞

課題全般について、大阪大学大学院基礎工学研 究科の大槻道夫准教授にご指導いただいた。4節 の多体系の摩擦の内容は、谷岡寛也氏、林健太氏、 織田晃登氏、佐伯宏大氏が、プログラムの開発・ 実行・解析を担当した。2.2節の内容は、青山学 院大学の松川宏教授との共同研究である。2.3節 の内容は、Young Researchers Exchange Programme between Japan and Switzerland で行った、ETH Zurich の D.S. Kammer 助教との共同研究によっ て得られた成果である。本研究は、JSPS 特別研 究員奨励費 JP22KJ2190 の助成を受けた。

### 参考文献

- M. Otsuki and H. Matsukawa, Sci. Rep., 3, 1586, (2013).
- (2) Y. Katano, et al., Sci. Rep., 4, 6324, (2014).
- (3) W. Iwashita, et al., Sci. Rep., **13**, 2511, (2023).
- (4) T Yashiki, et al., Phys. Rev. Lett. 124, 238001 (2020).
- (5) T. Watanabe, et al., Tribol. Online 18, 406 (2023).
- (6) W. Iwashita, et al., Tribol. Lett., **72**, 25, (2024).
- (7) W. Iwashita, et al., The 26th International Congress of Theoretical and Applied Mechanics, (2024) accepted.
- (8) 岩下航,大槻道夫,日本物理学会 2024 年春 季大会,19aL3-2,(2024).
- (9) 谷岡寛也, 大槻道夫, 日本物理学会 2024 年 春季大会, 19aL3-4, (2024).
- (10) 林健太, 大槻道夫, 日本物理学会 2024 年春季大会, 19aL3-5, (2024).

### 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

#### 河口 真一

大阪大学 大学院生命機能研究科

### 1. はじめに

細胞内で生命現象の物理化学的反応を担って いるのは、多くの場合、タンパク質である。タン パク質は、20 種類のアミノ酸が連なったポリマ ーであり、アミノ酸配列に応じた立体構造に折り 畳まれる。生物のゲノム DNA にコードされてい るタンパク質の種類は、ヒトで約20,000程度、モ デル生物のショウジョウバエでも、約 12,000 種 類も存在する。世界中の研究者によって、各遺伝 子がコードするタンパク質の機能を調べる研究 が続けられており、多くの遺伝子について分子機 能が明らかにされてきた。しかし、未だに機能が 解明されていない遺伝子が 20%以上も残されて おり、分子生物学上の大きな謎となっている。こ れら機能未知な遺伝子の分子機能に関する手が かりを得る上で、直接的に相互作用する分子を同 定することは、極めて有用である。なぜなら、機 能がわかっているタンパク質との相互作用が明 らかになれば、機能未知遺伝子も、同じ経路、あ るいは関連する経路で働いている可能性が高い からである。相互作用するタンパク質を実験的に 同定する研究も広く行われているが<sup>1,2</sup>、時間と労 力が多くかかるため、迅速なスクリーニング手法 が望まれている。タンパク質間の相互作用は、各 タンパク質の立体構造表面の特性によって決ま る。そのため、タンパク質の立体構造情報を用い て、ドッキング法により結合を予測する試みも行 われてきたが、未だ信頼できる予測法は確立され ていない。

最近、DeepMind 社によって開発された AlphaFold2という AI プログラムは、アミノ酸配 列の共進化情報を利用して、タンパク質の立体構 造を高精度で予測できるとして注目されている<sup>3</sup>。 さらに、タンパク質の複合体構造も予測できるこ とが期待されている<sup>4</sup>。そこで本研究では、 AlphaFold2 を利用して、迅速なタンパク質複合体 のスクリーニングを行い、機能予測の一助とする ことを試みた。

### ALphaFold2 プログラムを用いたタンパク質 複合体構造予測

AlphaFold2 による立体構造予測は、主に2つの ステップに分けることができる。

1) アミノ酸配列の多重アライメント作成

2) 立体構造、及び複合体構造の予測

予測したいタンパク質のアミノ酸配列と類似 したアミノ酸配列を、数多くの生物種から収集し、 アライメントすることによって、互いに依存した 変化(共進化)が推測される部分を抽出する。共 進化している部分は、立体構造上、距離的に近接 すると仮定して、立体構造のモデルを構築する。 本研究では、ショウジョウバエのほぼ全てのタン パク質についての多重アライメントを作成・保存 し、それらを再利用することによって、大規模な 複合体予測に必要な時間を短縮させている。

AlphaFold2は、数多くの立体構造を学習し、予 測に用いるモデルパラメータを5パターン備え ている。オリジナルの計算フローでは、5つのパ ターンに対応する5つの構造を、1つのGPUで 逐一計算する仕様であったが、大阪大学サイバー メディアセンターのSQUIDでは、GPUを5つ用 いて並列に計算するように変更し、予測時間をさ

19

らに短縮している(NEC ソリューションイノベ ータ株式会社との共同研究)。これらの変更によ って、1日、1アカウントあたり、約150ペアの タンパク質複合体予測ができるようになり、通常 のコンピュータと比べて、約100倍速く計算す ることが可能になった。

### 3. 20種類のタンパク質間の複合体構造予測

### 3.1 信頼性スコアの分布

カン・パークを死

本研究では、ショウジョウバエの生殖細胞内に 存在するタンパク質集積体の1つであるヌアー ジュ構造に着目した<sup>5</sup>。ヌアージュでは、piRNA という小分子 RNA が産生されており、piRNA と 結合した PIWI ファミリータンパク質が、ゲノム DNA の損傷を引き起こすトランスポゾンの発現 を抑制している。ヌアージュに局在する18種類 のタンパク質と、機能的に関連するミトコンドリ ア局在タンパク質、2種類を合わせた合計20種 類のタンパク質について、1:1の総当たりで4 00ペアの結合予測を行った。

クノハク頁	戊基奴	向 仕	
vas	661	Nuage	DEAD
spn-E	1434	Nuage	DEAD
tej	559	Nuage	Lotus, Tudor
tapas	1222	Nuage	Lotus, Tudor
qin	1857	Nuage	RING, Tudor
Kots	892	Nuage	Tudor
krimp	746	Nuage	Tudor
squ	241	Nuage	
mael	462	Nuage	Meal
aub	866	Nuage	PAZ, Piwi
AGO3	867	Nuage	PAZ, Piwi
papi	576	Mitochondria	Tudor, KH
vret	691	Nuage	Tudor
bel	801	Nuage	DEAD
zuc	253	Mitochondria	PLD-like
cup	1117	Nuage	
tral	657	Nuage	Lsm
me31B	459	Nuage	DEAD
shu	455	Nuage	PPIase
BoYb	1059	Nuage	DEAD, Tudor

表1:本研究で用いた20種類のタンパク質

| 母甘粉 | 巳左



図1: AlphaFold2の予測スコア分布

AlphaFold2 は、各複合体の予測構造に対して、 タンパク質単体での構造と、複合体界面の構造を 評価し、信頼性スコアを出力する。スコアは、0 から1の範囲であり数値が大きいほど、信頼性が 高いことを意味する。総当たりで計算すると、同 じペアのタンパク質複合体を2回計算すること になる。1回目と2回目の信頼性スコアをプロッ トしたところ、スコアが低い(0.5以下)場合に は、スコアのばらつきが見られた。スコアが高い (0.6 以上)場合には、比較的再現性の良い結果 が得られたことから、スコア 0.6 以上のペアを複 合体形成の候補とした。

#### 3.2 実験的検証

このスクリーニングにおいて、スコアが 0.6 以 上のペアは、13種類見られた。そのうち、7つ については、既に結合が報告されているペアであ った。このことは、AlphaFold2 が複合体ペアを予 測できることを示唆している。残りの6ペアにつ いては、これまでに報告がない新規な結合候補で あった。その中で、Spn-E タンパク質と Squ タン パク質のペアに注目した。Spn-E は、RNA ヘリケ ースであり、ヌアージュにおける piRNA の産生 に重要であることが知られている<sup>5</sup>。一方で、Squ タンパク質は、機能を推測できるドメインもなく、 詳しい機能解析もされていない、機能未知タンパ ク質である。両者が複合体を形成するかどうか、 実験的検証を行った(図2)。



図2: AlphaFold2 が予測した SpnE-Squ 複合体と 共免疫沈降法による実験的検証

Myc タグ、Flag タグをそれぞれ付加した Spn-E と Squ を昆虫培養細胞内で発現させた。Flag タグ に特異的な抗体で免疫沈降を行い、Myc-Spn-Eの 結合を Myc 特異的抗体で検出した。その結果、 Squ タンパク質が共発現している場合にのみ、 Spn-Eが結合画分に検出され、2つのタンパク質 が結合し、複合体を形成することが明らかになっ た (図2下中央)。さらに、Squのα-ヘリックスの 1つが、SpnE 表面の溝に埋まっている構造が予 測されたことから、この部分が結合に寄与してい ると考えられた。実際に、このα-ヘリックスと Spn-Eとの間で塩橋を形成すると予測された残基 を変異させたところ、その変異 Squ は、Spn-E と の結合が損なわれていた(図2下右)。したがっ て、AlphaFold2 による予測構造は正しいことが示 唆された。これらの結果から AlphaFold2 を用い た複合体のスクリーニングが有効であると考え られる。機能未知である Squ の役割は、Spn-E に 結合することで、Spn-Eの安定性や活性を制御し ているか、あるいは、Spn-E が他の因子と相互作 用することを制御していると推察される。

### 4. 細胞内の全タンパク質をスクリーニング

AlphaFold2 による複合体スクリーニングを、細胞内の全タンパク質に対して適用することを試みた。ここでは、生殖細胞と体細胞の両方で、多様な機能が知られている Piwi タンパク質を用い

た。Piwi タンパク質は、piRNA と結合し、それと 相補的な配列をもつトランスポゾンの mRNA を 切断することによって、有害なトランスポゾンの 発現を抑制している。さらに、核内では染色体の ヘテロクロマチン化を誘導し、転写レベルで発現 を抑制することも知られている %。

ショウジョウバエのゲノムには、約 12,000 種 類のタンパク質がコードされている。Piwi タンパ ク質と全タンパク質との1:1結合スクリーニン グを行った。大阪大学サイバーメディアセンター の SQUID を用いて、1 日に約100ペアの構造 予測を行い、4ヶ月ほどで計算を終えることがで きた。その結果、大部分のペアについては、複合 体に対する信頼性スコアが 0.3 未満と低く、結合 していないと予測された。スコアが 0.6 以上のも のは、全体の約1%に相当する 177 個見つかって いる(図3)。



図3: Piwi との複合体予測におけるスコア分布

この中には、これまでに Piwi と結合すること が報告されている Arx タンパク質に加えて、いく つかの機能未知タンパク質も含まれていた。特に、 Piwi と CG33703 という機能未知タンパク質の複 合体については、高い信頼性スコア(0.82)をもっ て予測された。CG33703 遺伝子は、ゲノム上に多 数のコピーがあることが知られているが、その機 能については全く不明である。



図4:予測された Piwi と CG33703 との複合体 Piwi: 空間充填モデル CG33703: リボンモデル

今後、実験的検証を行い、新規な結合ペアを見 出すことによって、機能解析を展開できると期待 される。

### 5. おわりに

タンパク質のアミノ酸配列から立体構造を予 測する試みは、古くから行われてきた。その過程 で、2000年代に日本で行われたタンパク300 0プロジェクトが、タンパク質の構造パターンの 多くを明らかにしたことによって、ドメイン単位 での立体構造予測が可能となった。現在の AlphaFold2では、ドメイン間の配置もかなりの精 度で予測できるようになっている。

現在、AlphaFold2 のような AI プログラムの開 発が盛んに行われており、生命科学の発展に大き く貢献することが期待されている。しかし、その ような計算機科学と、それを利用する実験科学の 間には、まだ隔たりがあるのが実情である。両者 の隔たりを埋めて、最新の計算機科学を、実験科 学が迅速に取り込むことができる環境が望まれ る。今後は、癌化した細胞などで過剰発現が見ら れるタンパク質や、実験的に扱うのが困難な毒性 タンパク質の相互作用を in silico でスクリーニン グし、新規な結合候補を示すことによって、タン パク質の機能解析を進展できると期待される。

このプロジェクトを進めるにあたり、サイバー メディアセンター応用情報システム研究部門の 伊達進教授、高性能計算・データ分析融合基盤協 働研究所の曽我隆特任准教授(常勤)に大変お世 話になりました。感謝の意を表します。

### 参考文献

- Giot, L. *et al.* A protein interaction map of Drosophila melanogaster. *Science* **302**, 1727–1736 (2003).
- Guruharsha, K. G. *et al.* A protein complex network of Drosophila melanogaster. *Cell* 147, 690–703 (2011).
- Jumper, J. *et al.* Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold. *Nature* 596, 583–589 (2021).
- Evans, R. *et al.* Protein complex prediction with AlphaFold-Multimer. 2021.10.04.463034 Preprint at https://doi.org/10.1101/2021.10.04.463034 (2021).
- Lin, Y., Suyama, R., Kawaguchi, S., Iki, T. & Kai, T. Tejas functions as a core component in nuage assembly and precursor processing in Drosophila piRNA biogenesis. *J Cell Biol* 222, e202303125 (2023).
- Huang, X. & Wong, G. An old weapon with a new function: PIWI-interacting RNAs in neurodegenerative diseases. *Translational Neurodegeneration* 10, 9 (2021).

### 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

大西 正人<sup>1</sup>、塩見 淳一郎<sup>1,2</sup> 東京大学<sup>1</sup>機械工学専攻、<sup>2</sup>工学系研究科総合研究機構

### 1. はじめに

近年、マテリアルズ・インフォマティンクス (MI) 技術が急速に発達しており、情報科学と材 料科学を融合した様々な材料開発手法により、電 池、触媒、磁性材料などに関する物性において成 果が挙がっている。また無機材料のデータベース として Materials Project、AFLOW、AtomWork な どが開発され、情報科学的な手法の開発とともに データ量の増強も進んでいる。しかし、これらの データベースは主に電子物性(バンドギャップ、 電子バンド構造等)をまとめたものであり、熱機 能材料に関しては熱伝導率などのフォノン非調 和物性のデータが不足している。そこで申請者ら は世界中の共同研究者と協力して、非調和フォノ ン特性の解析プロセスの標準化とそれを組み込 んだ自動化計算ソフトウェアの開発、さらにそれ を利用した非調和フォノン特性データベース構 築を進めている。本年度の課題では、Materials Project に含まれる材料のうち非金属・非磁性の材 料に絞りデータベースを構築したので、その結果

を報告する。

### 2. 非調和フォノン解析の自動化

本課題では、図1に示すような第一原理計算を 用いた無機材料の非調和フォノン特性解析プロ セスを自動化した計算ソフトウェアを開発した。 第一原理計算とフォノン計算にはそれぞれ VASP [1]、ALAMODE [2]を用い、結晶構造の扱い に ASE [3]や Pymatgen [4]、結晶の対称性の扱い に Spglib [5]、VASP ジョブの投入やパラメータの 調整に Custodian [4] などの Python ライブラリを 用いた。また、現在は調和フォノン特性データベ ースである Phonondb(A. Togo)に含まれる材料 や Materials Project に含まれる材料のうち非金 属・非磁性材料の約2万材料をターゲットとし、



図1:非調和フォノン特性の計算プロセス



図 2:開発した自動計算ソフトウェア (auto-kappa)を用いて計算したシリコンのフォノン特性。(a) フ オノン分散と状態密度。(b) 熱伝導率温度依存性。マーカーがフォノンガスの寄与 ( $\kappa_p$ )、実線がコヒ ーレントの寄与 ( $\kappa_c$ )を合わせた全格子熱伝導率、色は熱伝導率を解く際の k メッシュを表している。 (c)、(d) 平均自由行程と周波数に対してのスペクトル・累積熱伝導率。(e) フォノン寿命。(f) それぞれ のステップにおける計算時間。

主に安定構造に対して 3 フォノン散乱のみを考 慮したプロセス(図1左側のプロセス)を用いて 自動計算を進めている。

### (HP) に表示する。HP は現在準備中であるた、 東大 mdx の利用を検討しており、2024 年度中に は論文の投稿と合わせて公開予定である。

3.2 熱伝導率温度依存性

### 3. 計算結果

### 3.1 非調和フォノン特性

開発した自動計算ソフトを用いることで、様々 な非調和フォノン特性を自動で計算することが 可能である。代表的な特性は図2に示すように可 視化することでデータベースのホームページ 本研究の計算は 2022 年度から本格的に開始し、 大阪大学大規模計算機システム OCTOPUS を用 いた本課題以外にも HPCIの富岳以外の大型計算 機(北海道大学 Grand-chariot、九州大学 ITO、東 京大学情報基盤センターOakbridge-CX)、東京大



図 3:格子熱伝導率の自動計算結果。(a) 全格子熱伝導率 ( $\kappa_{lat} = \kappa_p + \kappa_c$ )の温度依存性。(b) 室温 (300 K) における格子熱伝導率の分布。(c) パイエルス熱伝導率 ( $\kappa_p$ ) とコヒーレント熱伝導率 ( $\kappa_c$ )の比較。



図 4:4 フォノン散乱の考慮が必要な材料の例(BaZnCo<sub>3</sub>F<sub>2</sub>)。(a) 結晶構造:BaZnCo<sub>3</sub>F<sub>2</sub>。(b) フォノン 分散と状態密度。(c) フォノン寿命。(d) 熱伝導率温度依存性。

学物性研究所 Ohtaka、東北大学金属材料研究所 MASAMUNE-IMR なども利用して計算を進めて いる。これまでに図 3(a)に示すように 4500 以上 の材料の熱伝導率(非調和フォノン特性)と1万 材料以上の調和フォノン特性を計算した。機械学 習やデータ科学を用いた無機材料の熱伝導率に 関する既報の論文では、多くても100 材料前後の データを用いた議論であったことから、既に第一 原理計算に基づく無機材料非調和フォノン特性 データベースとしては類を見ない規模となって いる。

これまでの自動計算の結果、無機材料の熱伝導 率の平均値は約 3.0 Wm<sup>-1</sup>K<sup>-1</sup>、50%が 1.0~6.9 Wm<sup>-1</sup>K<sup>-1</sup>、95%が 0.15~44 Wm<sup>-1</sup>K<sup>-1</sup> であった。 一般的に無機材料の熱伝導率としては、1.0 Wm<sup>-1</sup>K<sup>-1</sup> 以下(100 Wm<sup>-1</sup>K<sup>-1</sup>以上)で低(高) 熱伝導とみなせるため、材料探索としては高熱伝 導材料の探索の方が難しいと予想される。

結晶材料において、フォノン波はフォノンガス (波束)を形成しボルツマン輸送方程式に従い熱 を輸送する。また、アモルファスのように原子配 置が不秩序な材料ではフォノン波同士がホッピ ングするような伝導、つまりコヒーレント輸送が 支配的になる。あらゆる材料でフォノンガスの寄 与(Peierls 熱伝導: $\kappa_p$ )とコヒーレント熱伝導( $\kappa_c$ ) は存在するが、結晶材料では一般的に Peierls 熱 伝導の方が大きくなり、特に結晶性の高い材料で はコヒーレント熱伝導は無視できることが多い。 図 3(c)は多くの材料では上記の通りになってい ることを示しているが、約 5%の材料で  $\kappa_c$  の方 が大きくなっていることを示している。詳細な物 理は今後解析する予定であるが、この結果は結晶 材料であっても熱輸送の物理はアモルファスの ような不秩序系に近い材料が存在することを示 している。

### 3.34フォノン散乱の考慮の必要性

図 3(a)から分かるように、これまでに計算した 材料の中には室温で 1000 Wm<sup>-1</sup>K<sup>-1</sup> を超える熱 伝導率をもつものが複数存在した。残念ながら、 これらの高い値は 4 フォノン散乱などの要因を 考慮していないことが原因であると考えられる。 図4に高熱伝導率が得られた例を示したが、750、 1100 cm<sup>-1</sup> 付近の群速度の低いフラットなフォノ ン分散上のフォノン(図4(b))が異常に大きなフ オノン寿命を持つことによって(図 4(c))、大き な熱伝導率となっている (図 4(d)) ことが分かる。 このように音響フォノンとエネルギーギャップ を隔ててフラットなバンドが存在する場合、4フ オノン散乱の影響が大きいことが知られてい る[6]。低熱伝導材料に関しては、4次の非調和 項を考慮することによって高温で熱伝導率が大 きくなることが知られているが、これまでの結果 からは低熱伝導率のデータの方が信頼性が高い と考えられる。

このことから、今後はフォノンギャップがある 材料や異常に高い熱伝導率を持つ材料に関して は 4 フォノン散乱の影響を考慮することも検討 している。また、構築したデータベースと機械学 習などを用いて熱機能性材料の探索を進める予 定であるが、まずは低熱伝導に着目し熱電変換材 料や断熱材などに利用可能な材料の探索が望ま

### 4. おわりに

2022, 2023 年度の約 2 年間で約 4500 の無機材 料の非調和フォノン特性を計算した。今後は構築 したデータベースと機械学習を用いて熱機能材 料の探索を行う。また、これまでは Materials Project に含まれる非金属・非磁性材料を計算して きたが、それに加え、金属材料や DeepMind によ り 2023 年末に発表された約 48000 の安定材料 [7] を対象とした計算や 4 次の非調和効果を考慮し た計算などを予定している。

### 参考文献

- G. Kresse and J. Furthmüller, Efficient Iterative Schemes for Ab Initio Total-Energy Calculations Using a Plane-Wave Basis Set, Phys. Rev. B 54, 11169 (1996).
- T. Tadano, Y. Gohda, and S. Tsuneyuki, Anharmonic Force Constants Extracted from First-Principles Molecular Dynamics: Applications to Heat Transfer Simulations, J. Phys.: Condens. Matter 26, 225402 (2014).
- H. Larsen et al., The Atomic Simulation Environment—a Python Library for Working with Atoms, J. Phys.: Condens. Matter 29, 273002 (2017).
- S. P. Ong, W. D. Richards, A. Jain, G. Hautier, M. Kocher, S. Cholia, D. Gunter, V. L. Chevrier, K. A. Persson, and G. Ceder, Python Materials Genomics (Pymatgen): A Robust, Open-Source Python Library for Materials Analysis, Comput. Mater. Sci. 68, 314 (2013).
- A. Togo and I. Tanaka, Spglib: A Software Library for Crystal Symmetry Search, ArXiv. 1808.01590 (2018).
- T. Feng, L. Lindsay, and X. Ruan, Four-Phonon Scattering Significantly Reduces Intrinsic Thermal Conductivity of Solids, Phys. Rev. B 96, 161201 (2017).

 N. J. Szymanski et al., An Autonomous Laboratory for the Accelerated Synthesis of Novel Materials, Nature 624, 86 (2023).

### Generation of ultrahigh magnetic fields and micro-scale particle accelerator

M. Murakami and D. Balusu

Institute of Laser Engineering, Osaka University

### 1. Introduction:

Laser plasma-based ion acceleration has drawn significant interest<sup>1,2</sup>, due to their unique properties such as high directionality and laminar flow<sup>3</sup>, spatial confinement on the order of micrometre ( $\approx \mu m$ ) and temporal compactness ( $\approx$  ps), containing up to 10<sup>13</sup> particles in a pulse duration, making them ideal for a wide range of applications including diagnostic tool in proton radiography experiments<sup>4,5</sup>, compact particle accelerators<sup>6,7</sup>, creation of high-energy density (HED) matter<sup>8</sup> and proton fast ignition<sup>9</sup>. In medical applications, proton beams can be used for radiation therapy<sup>10,11</sup>, as they deliver high dose of radiation to a particular depth (known as Bragg peak), resulting in less damage to healthy tissues unlike X-rays<sup>12</sup>. To attain high-quality and high-energy ion beams, various acceleration mechanism have been developed over the past few decades. These includes mechanisms such as target normal sheath acceleration (TNSA)<sup>13,14</sup>,  $(RPA)^{15-17}$ , radiation pressure acceleration collisionless shock acceleration (CSA)<sup>18,19</sup>, and coulomb exposition<sup>20-22</sup>. Among these mechanisms, TNSA stands out for its ease of implementation, leading to extensive studies through both simulations and experiments<sup>23,24</sup>.

However, much work has to be done in order to achieve protons with higher kinetic energy. To enhance the transfer of laser energy to ions, it is crucial to maximize the absorption of the laser pulse by electrons. An effective approach involves engineer foil targets with structured design in the primary laser interaction region, departing from the use of flat foils. The success of the structured targets in enhancing the conversion efficiency and temperature for the laser-driven electron is noteworthy, evident in both particle-in-cell (PIC) simulation and experimental results.

Here, we present a novel ion acceleration scheme known as Expanding Nozzle Acceleration (ENA), which is achieved through target structuring. ENA employs a micro-nozzle housing a hydrogen sphere. The micro-nozzle plays a crucial role in facilitating a two-stage ion acceleration process, generating an accelerating electric field (Ex) at different locations and focusing the incident laser pulse. Illuminating the system with a laser intensity of 3 x  $10^{21}$  W/cm<sup>2</sup>, remarkable results were observed, including a 6.25fold enhancement in laser intensity onto the hydrogen sphere and protons attaining an energy of 400 Mev. This signifies a three-fold increase in proton energy compared to a planer target and a two-fold increase compared to spherical target. Notably, the maximum proton energy scales with  $E_{max}\alpha I_0^{0.88}$ , where  $I_0$  is the laser intensity.



Fig. 1 : Laser and target configuration

#### 2. Target and simulations parameters

2D PIC simulations have been performed using EPOCH. The simulation parameters are set as follows: the simulation box size is  $26 \ \mu m \ x \ 26 \ \mu m$ , containing 2600 x 2600 cells. Each cell is filled with 100 pseudo particles for ions and 200 pseudo particles for electrons. A simulation time step of 10 fs was used.

ENA target is illustrated in the Fig.1. It comprises a hydrogen sphere with a 2  $\mu$ m diameter, positioned inside the aluminum micro-nozzle, at a distance of 3  $\mu$ m form the nozzle's entrance.

The nozzle has a thickness of 0.4  $\mu$ m and a length of 12  $\mu$ m, with an opening of 5  $\mu$ m at the entrance and 9  $\mu$ m at the exit. We assumed fully ionized states for the target materials, with Z = 13 for aluminum and Z = 1 for hydrogen. The number density of aluminum and hydrogen was assumed to be 35n<sub>c</sub> and 30n<sub>c</sub>, respectively, while for electron it is 472n<sub>c</sub>, where n<sub>c</sub> = (m<sub>e</sub> $\omega_0^2/4\pi e^2$ ) is the critical density. The target is irradiated with a p-polarized laser pulse with Gaussian profile both spatially and temporally, moving along the positive x-direction. The laser had a wavelength of 800 nm and a pulse duration of 100 fs (FWHM), focused to a spot size of 10  $\mu$ m with a peak intensity of 3 x 10<sup>21</sup> w/cm<sup>-2</sup>.

When the laser incident on the target, the center part of the laser get focused by the entrance cone like structure and hot electron are generated from the inner surface. With the laser intensity  $3 \times 10^{21}$  w/cm<sup>2</sup>, the amplitude of the electric field  $1.5 \times 10^{14}$  V/m has amplified to  $4 \times 10^{14}$  V/m, 2.5 x amplification in electric filed and corresponding 6.25 x enhancement in laser intensity. This intensity is focused on the hydrogen sphere. The first part of the ENA target helps in increasing the intensity of the incident laser and generation of hot electrons from the inner surface, which passes through the hydrogen sphere leading to charge separation and enhances the sheath electric file (Ex) developed on the surface of the sphere.

#### 3. Optimization of the micro-nozzle

The outer part of the laser falls on the exit arms of the target and hot elections are realized into the vacuum results is generation of electric field (Ex) at the exit arms due to the charge separation as the electron from the target moves into the vacuum, figure 3a to 3d shows the electric field (Ex) profile on the hydrogen sphere and at the exit arms of the target at different time steps. Initially, protons are accelerated by the sheath electric filed generated on the hydrogen sphere. These accelerated protons then enter into the electric field generated at the exit arms of the target and undergo further accelerates. Proton density profile of at different time steps is shown in the Fig. 2.



Fig. 2: Temporal evolution of the electric field.

For the effective proton acceleration, the position of the hydrogen sphere inside the micro-nozzle plays an important role. The protons that are accelerated from the electric field in the region-1, must be properly timed to undergo further acceleration from the electric filed generated in the region-2.



Fig. 3: Energy spectrum for the different positions.

Figure 3 shows the energy spectrum on the protons for different positions of the hydrogen sphere inside the micro-nozzle. Initially center of the hydrogen sphere is kept inside the nozzle at distance of 3  $\mu$ m from the entrance and shifted 1  $\mu$ m towards the nozzle exit, it was observed that kinetic energy of the protons is high when center of the hydrogen sphere at a distance of 4  $\mu$ m from the nozzle entrance

We have compared the ENA target with planar target and a hydrogen sphere without the micro-nozzle. It was observed that three-fold increase in the energy of the proton compared to planer target, and a two-fold increase in proton energy compared to hydrogen sphere without the outer micro-nozzle.

Figure 6a show the energy spectrum of proton for all the three cases at 400 fs and Fig.6b shows the evolution of proton energy over time. For the ENA target, the proton energy drastically increased from 100 fs to 250 fs, attributed to its two-stage acceleration that sets up electric field (Ex) at different locations. This provides an additional accelerating field for the initially accelerated proton from the hydrogen sphere. In contrast, for planer and spherical target, protons experience initial acceleration due to electric filed established by charge separation, but they lack a further driving force. As a result, kinetic energy of the protons saturates quickly. This marked difference highlights the crucial role of the micro-nozzle in driving ion acceleration.

To explore the intensity dependency across a broader spectrum, additional simulations were performed with seven different intensities. The outcome of these simulations was utilized to establish a preliminary intensity-scaling, as illustrated in the fig. Analysis of the data points reveals that the maximum proton energy scales with  $E_{max}\alpha I_0^{0.88}$  for intensities greater then 5 x  $10^{20}$  W/cm<sup>2</sup> and less then 5 x  $10^{21}$ W/cm<sup>2</sup>, and  $E_{max} \alpha I_0^{0.5}$  for intensities less then 5 x 10<sup>20</sup>  $W/cm^2$ . However, for intensities greater then 5 x  $10^{21}$ W/cm<sup>2</sup>, target distortion occurs due to the extremely high intensities, potentially leading to decreased performance. Consequently, parameters of the target are scaled up for such high intensities. Hence for the given parameters the ideal intensities for irradiating the ENA target is between 5 x  $10^{20}$  W/cm<sup>2</sup> to 5 x  $10^{21}$ W/cm<sup>2</sup>.

Comparing our finding to the intensity scaling of Target Normal Sheath Acceleration (TNSA) with  $E_{max}\alpha \ I_0^{0.5}$ , Expanding nozzle acceleration (ENA) performance demonstrates improvement with  $E_{max}\alpha \ I_0^{0.88}$  for higher intensities. However, at lower intensities, ENA performance aligns with TNSA.

### 4. Conclusion:

In this study, we have introduced a novel ion acceleration scheme, Expanding Nozzle Acceleration (ENA). With this scheme, protons undergo acceleration from the electric field generated at two different locations. The utilization of ENA reveals significantly higher proton energies compared to the conventional schemes, as demonstrated by 2dimensional PIC code EPOC. Specifically, ENA exhibits a two-fold enhancement in proton energy compared to spherical target and three-fold enhancement in proton energy compared to planer target. Moreover, the maximum proton energy in ENA scales with  $E_{max} \alpha I_0^{0.88}$ . This scheme still leaves further optimization for higher proton energy, but at the price the energy efficiency. A proof-of-principle experiment for ENA is expected to be demonstrated under a moderate laser condition.

### Reference

A. Macchi, M. Borghesi, and M. Passoni, Rev. Mod.
 Phys. 85(2), 751–793 (2013).

B.M. Hegelich, B.J. Albright, J. Cobble, K. Flippo,
 S. Letzring, and H. Ruhl, Nature 439(7075), 441–444 (2006).

3. T.E. Cowan, J. Fuchs, H. Ruhl, A. Kemp, E. Brambrink, A. Newkirk, H. Pépin, and N. Renard-LeGalloudec, Phys. Rev. Lett. **92**(20), 204801 (2004).

4. L. Romagnani, J. Fuchs, M. Borghesi, P. Antici, P. Audebert, F. Ceccherini, T. Cowan, T. Grismayer, S.

Kar, A. Macchi, A. Schiavi, T. Toncian, and O. Willi, Phys. Rev. Lett. **95**(19), 195001 (2005).

M. Borghesi, A. Schiavi, D.H. Campbell, M. Galimberti, L. Gizzi, R.J. Clarke, and S. Hawkes, Applied Physics Letters 82(10), 1529–1531 (2003).

6. K. Krushelnick, E.L. Clark, M. Zepf, J.R. Davies,
F.N. Beg, A. Machacek, M.I.K. Santala, M. Tatarakis,
I. Watts, P.A. Norreys, and A.E. Dangor, Physics of
Plasmas 7(5), 2055–2061 (2000).

7. A. Pukhov, "Three-Dimensional Simulations of Ion Acceleration from a Foil Irradiated by a Short-Pulse Laser," Phys. Rev. Lett. **86**(16), 3562–3565 (2001).

P. Patel, A. Mackinnon, M. Key, T. Cowan, M. Foord, M. Allen, D. Price, H. Ruhl, P. Springer, and R. Stephens, Phys. Rev. Lett. **91**(12), 125004 (2003).

M. Roth, T.E. Cowan, J. Johnson, F. Pegoraro, S.V.
 Bulanov, E.M. Campbell, M.D. Perry, and H. Powell,
 Phys. Rev. Lett. 86(3), 436–439 (2001).

 S.V. Bulanov, H. Daido, T.Z. Esirkepov, V.S. Khoroshkov, J. Koga, K. Nishihara, F. Pegoraro, T. Tajima, and M. Yamagiwa, (n.d.).

11. E. Fourkal, J.S. Li, M. Ding, T. Tajima, and C. -M.Ma, Medical Physics **30**(7), 1660–1670 (2003).

12. W.D. Newhauser, and R. Zhang, Phys. Med. Biol. 60(8), R155–R209 (2015).

R.A. Snavely, M.H. Key, S.P. Hatchett, T.E.
 Cowan, M. Roth, T.W. Phillips, A. MacKinnon, Phys.
 Rev. Lett. 85(14), 2945–2948 (2000).

S.C. Wilks, A.B. Langdon, T.E. Cowan, M. Roth,
 M. Singh, S. Hatchett, M.H. Key, D. Pennington, A.
 MacKinnon, and R.A. Snavely, Physics of Plasmas
 8(2), 542–549 (2001).

B. Qiao, M. Zepf, M. Borghesi, and M. Geissler,
 Phys. Rev. Lett. **102**(14), 145002 (2009).

A. Henig, S. Steinke, M. Schnürer, T. Sokollik, R.
 Hörlein, D. Kiefer, J. Meyer-ter-Vehn, T. Tajima, P.V.
 Nickles, W. Sandner, and D. Habs, Phys. Rev. Lett.
 103(24), 245003 (2009).

B. Gonzalez-Izquierdo, R. Capdessus, M. King, R. Gray, R. Wilson, R. Dance, J. McCreadie, N. Butler, S. Hawkes, J. Green, N. Booth, M. Borghesi, D. Neely, and P. McKenna, Applied Sciences 8(3), 336 (2018).

L.O. Silva, M. Marti, J.R. Davies, R.A. Fonseca,
 C. Ren, F.S. Tsung, and W.B. Mori, Phys. Rev. Lett.
 92(1), 015002 (2004).

19. F. Fiuza, A. Stockem, E. Boella, R.A. Fonseca, L.O. Silva, D. Haberberger, S. Tochitsky, C. Gong, and C. Joshi, Phys. Rev. Lett. **109**(21), 215001 (2012).

20. K. Nishihara, H. Amitani, M. Murakami, S.V. Bulanov, and T.Zh. Esirkepov, Nucl. Instruments and Methods in Physics Research Section A **464**(1–3), 98–102 (2001).

21. M. Murakami, and K. Mima, Phys. Plasmas **16**(10), 103108 (2009).

22. T. Nakamura, S.V. Bulanov, H. Daido, T. Esirkepov, T. Pikuz, A.S. Pirozhkov, M. Tampo, and A. Yogo, Phys. Plasmas **16** (10), 103108 (2009)..

23. F. Wagner, O. Deppert, C. Brabetz, A. Tebartz, B. Zielbauer, M. Roth, T. Stöhlker, and V. Bagnoud, Phys. Rev. Lett. **116**(20), 205002 (2016).

24. F. Wagner, S. Bedacht, V. Bagnoud, O. Deppert,
S. Geschwind, R. Jaeger, A. Ortner, A. Tebartz, B.
Zielbauer, D.H.H. Hoffmann, and M. Roth, Phys.
Plasmas 22(6), 063110 (2015).

# Machine learning study of single-atom platinum supported on graphene nanostructures (SAC Pt-G)

Beatriz Andrea C. Tan, Yuji Hamamoto, Yoshitada Morikawa Osaka University Graduate School of Engineering

### 1. Introduction

Platinum (Pt) supported on graphene is an established catalyst for CO oxidation, oxygen reduction, and other fuel cell reactions, but the cost and rarity of platinum necessitates further research into reducing Pt loading. The single-atom catalyst configuration stabilized on a support, namely, graphene, maximizes catalyst surface area and minimizes catalyst loading, but faces issues related to low reactivity and instability due to sintering or poisoning [1–3]. Single atom catalyst Pt on graphene (SAC Pt-G) has been successfully synthesized through various methods, and SAC Pt-G synthesized through atomic layer deposition has exhibited a reduced overpotential and resistance to catalyst deactivation compared to commercially available Pt-C [4,5].

SAC Pt-G favors edge adsorption, as Pt terminates dangling C bonds in vacancies and edges, based on the observed experimental structures and overlapping local density of states (LDOS) [6]. DFT studies by Wella et al. employed density functional theory (DFT) to determine Pt-SAC adsorption sites and stability on zigzag and graphene nanoribbons, also confirming the preferential edge adsorption of Pt, as opposed to vacancy substitution within the graphene plane [7]. Adsorption studies also show enhanced performance compared to pure Pt(111) [8].

However, single atoms tend to cluster or sinter in situ and Pt-SAC is difficult to stabilize, thus, we aim to identify viable structures for synthesis and factors that enhance the stability of these structures. While DFT-based computational approaches can accurately model the structural properties and adsorption behavior of SAC-Pt G, this is executed at great computational cost. To speed up the individual energy and force calculations in structural optimization, machine learning (ML) techniques can be implemented to reduce the number of first-principles (FP) calculations.

In particular, we use the GOFEE algorithm, or Global Optimization with First-principles Energy Expression [9,10] to identify stable and metastable structures of SAC Pt-G on the hydrogenated graphene edge of nanoflake graphene, armchair graphene nanoribbon (AGNR), and zigzag graphene nanoribbon (ZGNR) structures.

Additionally, we also investigate the effect of nitrogen doping on the stability and reactivity of SAC Pt-G and its reactivity. Experimental studies have shown that N adsorbed adjacent to SAC Pt increases the stability of Pt by increasing the population of the Pt 5d<sub>yz</sub> orbital, allowing for stronger Pt-C binding [11]. However, a more detailed analysis, assessing several possible atomic arrangements, is required to determine the dominant structures of N-doped SAC Pt-G and their behaviors in adsorption studies.

#### 2. Computational Details

#### 2.1. The GOFEE algorithm

To determine the structure with the lowest energy, known as the global minimum, GOFEE uses a combination of Gaussian process regression and FP calculations to train a surrogate model on the fly, rather than using a predetermined training database. The surrogate model speeds up the relaxation steps by using Gaussian process regression to relax new candidate structures instead of FP calculations. This is performed by executing several steps, where each step
consists of 1) mutating the population, 2) relaxing the system via a surrogate model, producing the surrogate energy  $(E_{sur})$ , 3) selecting the best candidate using f(x), 4) evaluating the candidate using FP, then 5) training the surrogate model to improve the accuracy of the structure search towards finding the GM. This training data is used to update the population and surrogate model. The acquisition function f(x) in Step 3 depends on minimizing the surrogate energy while encouraging exploration, determined by the parameter  $\kappa$  and the uncertainty  $\sigma_{sur}$ .

$$f(x) = E_{sur}(x) - \kappa \sigma_{sur}(x)$$
 Eq. 1

The candidate with the minimum f(x) is evaluated in Step 4 using two single-point FP calculations, one of which is slightly perturbed to calculate atomic forces.

For this study, 30 independent runs of 300 steps were performed, employing the Generalized Projector Augmented Wave (GPAW) method [12,13] to evaluate the total energy using the Linear Combination of Atomic Orbitals (LCAO) method with a Perdue-Burke-Erzerhof (PBE) atomic setup [14,15]

The ability of the structure search to identify the global minimum is quantified by the success curve, which is the fraction of independent runs that have identified the global minimum structure and energy as a function of the number of FP calculations. Candidates with a final success rate of at least 15% are selected from the search, then evaluated for stability and reactivity using DFT.

#### 2.2. Structure search

To evaluate graphene nanoribbon systems using GOFEE, armchair and zigzag nanoribbon starting scaffolds with monohydrogenated bottom edges were prepared according to Figure 1, and free C, H, N, and Pt atoms were allowed to move freely within the boundary indicated. For the armchair and zigzag nanoribbon structure searches, the set of free atoms contain combinations of 5-8 C atoms, 0-8 H atoms, and 1 Pt atom. However, the experimental graphene edge is more closely approximated by a flake graphene model containing both armchair and zigzag edges, as opposed to a nanoribbon. The starting scaffold approximates half of a coronene molecule ( $C_{10}H_6$ ) fixed in place, with additional 10-14 C, 5-8 H, and 1 Pt atoms allowed to move freely within the boundary indicated in Figure 1. In all cases, the effect of N doping was also investigated by adding 1-2 N atoms to the set of free atoms.



Figure 1. Scaffolds used in the SAC Pt-G structure search with boundaries outlined.

#### 2.3. Structure Evaluation

Selected candidates produced by the structure search were evaluated using FP DFT calculations to assess their stability and reactivity, indicated by the binding energy of Pt and the adsorption energy of reaction intermediates. Candidates with the lowest energy within 0.2 eV of the GM and a success rate of at least 15% were further optimized using DFT to accurately assess the stability. Geometric optimization was performed, employing ultrasoft pseudopotentials and rev-vdW-DF2 corrections in the Quantum Espresso 7.2 software package [16,17].

#### 3. Results

A comparison of sample ZGNR, AGNR, and flake structures alongside their success rates is presented in Figure 2 and Figure 3. The structure search easily identifies the GM at low degrees of freedom, but is still successful at identifying the GM even with many free C atoms. However, increasing H tends to decrease the success rate of the search on the same scaffold.



Figure 2. Global minimum and success rates of selected



SAC Pt-G structures.

Figure 3. Global minimum and success rate of selected N-doped SAC Pt-G structures.

The results confirm the preferential adsorption of Pt on the graphene edge, where Pt tends to be incorporated within 5- and 6-membered rings. Ndoped structures are more difficult to model versus their counterparts, exhibiting lower success rates due to the increased degree of freedom, but in agreement with prior findings, N tends to adsorb adjacent to Pt [11].

#### 4. Conclusion

The machine learning-based GOFEE algorithm was implemented to perform a structure search on SAC Pt-G systems, including armchair nanoribbons, zigzag nanoribbons, and flake graphene resembling coronene. The results exhibit a high success rate, indicating the successful identification of the global minima across different independent runs and confirm the preferential edge adsorption of Pt, forming 5- and 6-membered rings on the graphene edge.

Further improvements to the GOFEE code may be implemented to optimize the acquisition function for increased accuracy and lower computational cost. Future work on this study includes examining the adsorption of intermediates involved in oxygen reduction and carbon monoxide electrooxidation to assess the catalyst reactivity.

References

- (1) K. Jiang et al., CCS Chem 3, 241 (2021).
- (2) J. Liu et al., Nat Commun 8, 1 (2017).
- (3) J. Liu et al., Angewandte Chemie International Edition 58, 1163 (2019).
- (4) S. Sun et al., Sci Rep 3, 1775 (2013).
- (5) C. Tsounis et al., Adv Funct Materials 32, 2203067 (2022).
- (6) K. Yamazaki et al., The Journal of Physical Chemistry C 122, 27292 (2018).
- (7) S. A. Wella et al., Nanoscale Adv. 1, 1165 (2019).
- (8) S. A. Wella et al., J. Chem. Phys. 152, 104707 (2020).
- (9) M. K. Bisbo and B. Hammer, Phys. Rev. Lett. 124, 086102 (2020).
- (10) M. K. Bisbo and B. Hammer, Phys. Rev. B 105, 245404 (2022).
- (11) R. Sugimoto et al., J. Phys. Chem. C 125, 2900

(2021).

- (12) J. J. Mortensen et al., Phys. Rev. B 71, 035109(2005).
- (13) J. Enkovaara et al., J. Phys.: Condens. Matter 22, 253202 (2010).
- (14) A. H. Larsen et al., Phys. Rev. B 80, 195112 (2009).
- (15) J. P. Perdew et al., Phys. Rev. Lett. 77, 3865 (1996).
- (16) K. F. Garrity et al., Computational Materials Science 81, 446 (2014).
- (17) P. Giannozzi et al., J. Phys.: Condens. Matter 21, 395502 (2009).

# Development of Graph Neural Network Interatomic Potential to Investigate Diamond Oxidation and Graphitization

John Isaac G. Enriquez and Yoshitada Morikawa Osaka University Graduate School of Engineering

#### 1. Introduction

Synthetic diamond has been regarded as an ideal material for several new technologies, particularly in high-power electronics and quantum devices [1,2]. The device fabrication methods used in conventional materials such as silicon are ineffective for diamond because of diamond's extreme hardness and chemical inertness. Plasma and thermochemical etching are currently used to fabricate diamond devices, though these technologies are arguably still in their [3,4]. Understanding the infancy diamond's oxidation, thermal degradation, and wear will lead to insights that scientists and engineers could use to accelerate the development diamond device fabrication methods.

While ab-initio methods have been useful in elucidating the surface chemistry and engineering design of materials, the high computational cost limits its application to small and highly idealized models. Recently, machine learning molecular dynamics (MLMD) simulation method has been gaining popularity. In this method, an analytic expression of the potential energy surface and its derivatives as a function of atomic positions is obtained by fitting onto ab-initio calculation results to perform simulations. The fitting procedure is performed using several machine learning and neural network methods, among which includes Gaussian process regression, highdimensional neural network, and graph neural network. Successful construction of machine learning interatomic potentials (MLIP) will enable large scale and long timescale simulations with accuracies comparable to ab-initio molecular dynamics.

In this article, we discuss the method that we used in the construction of MLIP for the study of diamond oxidation, graphitization, and wear. In addition, we present some tools that we developed for the analysis of molecular dynamics simulation results.

#### 2. Computational Details

A database of structures with total energy and forces is built using spin polarized density functional theory calculations with generalized gradient approximation exchange correlation functional. Semi empirical van der Waals correction is implemented. The core electrons were treated with ultrasoft pseudopotentials. The wave functions and augmentation charge are expanded using plane wave basis with cutoffs of 36 Ry (490 eV) and 400 Ry (5442 eV), respectively. Special points for Brillouin-zone integration were generated using the Monkhorst-Pack scheme. The convergence threshold for energy minimization is  $1.0 \times 10^{-9}$  Ha/atom ( 2.72 ×  $10^{-8} \, \text{eV}/\text{atom}$  ). We perform geometry optimizations until the forces on each atom is less than  $1.0 \times 10^{-3} \text{ Ha}/a_0$  (5.14 × 10<sup>-2</sup> eV/Å). The number of k-points depends on the simulation cell size and were all tested for convergence. All calculations were performed using the STATE code package [5].

The graph neural network interatomic potential is constructed using the Neural Equivariant Interatomic Potential (NequIP) software package [6]. This method implements graph message passing algorithm analogous to the convolution filters used in image recognition neural network models to generate equivariant representations of atomic environment. The message passing captures many-body interactions between atomic species. Molecular dynamics simulations are performed on LAMMPS code using an NVT ensemble with Nose-Hoover thermostat [7].

#### 3. Results

# **3.1.** Graph Neural Network Interatomic Potential Construction, Fine-tuning, and Evaluation

An initial database is constructed which is composed of equilibrium structures of diamond, graphite, graphene, and diamond (111) and (100) surfaces and non-equilibrium structures generated using coordinate randomization and ab-initio molecular dynamics of the equilibrium structures. The initial database is used to construct an initial interatomic potential model which is then used to perform molecular dynamics simulations to generate additional non-equilibrium structures. The interatomic potential is improved though an active learning process by evaluating its performance based on (1) accuracy, (2) stability, and (3) reliability [8]. The accuracy is measured based on the energy and force mean square errors and root mean square errors with respect to the DFT calculations. On the other hand, the stability is monitored by checking for any exploding atoms or formation of unphysical structures. This can also be quantitatively checked by looking for any sharp changes in total energy and simulation temperature. Finally, the reliability is determined based on sufficiency of the atomic environment in the database. This will be discussed further in the next section.

The active learning process allows the addition of new structures with atomic environments that are not represented in the database. The fine-tuning and evaluation of the interatomic potential is continued until all the three criteria have been satisfied. These process is outlined in Fig. 1.



**Fig. 1.** Graph Neural Network interatomic potential construction, fine-tuning, and evaluation.

#### 3.2. Reliability Estimation

The reliability is estimated based on the presence or absence of atomic environment on the database similar to the atomic environments that appear during the molecular dynamics simulations. Machine learning of interatomic potential is a kind of regression modelling. Therefore, the predictions are more reliable in interpolating between datapoints and less reliable in extrapolating. We determine the extrapolated atomic environment based on the feature vectors calculated using graph message passing, where the aggregate function or convolution is calculated using the product of Bessel radial function  $R(r_{ij})$  and spherical harmonics  $Y_m^l(\hat{r}_{ij})$ :

AGGREGATE

$$= tanh\left(\sum_{i\neq j}^{N} R(r_{ij})f(r_{ij},r_c)Y_m^l(\hat{r}_{ij})\right)$$
(1)  
$$2\sin\left(\frac{b\pi}{r}r_{ij}\right)$$
(2)

$$R(r_{ij}) = \frac{2}{r_c} \frac{\sin(\frac{r_c}{r_c} r_{ij})}{r_{ij}} f(r_{ij}, r_c)$$
(2)

$$f(r_{ij}, r_c) = 1 - \frac{(p-1)(p+2)}{2} \left(\frac{r_{ij}}{r_c}\right)^r + p(p+2) \left(\frac{r_{ij}}{r_c}\right)^{p+1} \qquad (3)$$
$$- \frac{p(p+1)}{2} \left(\frac{r_{ij}}{r_c}\right)^{p+2}$$

Here,  $f(r_{ij}, r_c)$  is a polynomial cutoff function which ensures smooth the decay of the radial function at the cutoff radius  $r_c$ . The details of this method are discussed in our recent publication [8].

To illustrate this concept, we plot the 2dimensional projection of the feature vector of the entire database (black) using TSNE method in Fig. 2. Using the TSNE method, the feature vectors were clustered based on their similarities. Next, we plotted the feature vectors corresponding to the atoms in equilibrium and slightly perturbed equilibrium structures (SPES) of diamond bulk (blue), graphite (orange), and surface atoms of the C(100) (violet) and unreconstructed (green) and reconstructed (red)

C(111) surfaces. These structures occupy the clusters on the plot. In Figure 3a, we plotted the same feature vectors with the addition of the feature vectors corresponding to the sublayers of the C(100) and C(111) surfaces. We can see that most of the clusters of atomic environments have been identified. The remaining unidentified atomic environments shown by small clusters and cluster boundaries correspond to the reactive or transition state structures from one equilibrium state to another. The extrapolated atomic environment will appear on the plot as isolated dots or dots in between clusters. The lack of neighboring atomic environments means that energy and force predictions for the extrapolated atomic environments are likely unreliable. The extrapolated atomic environments are then added to the database and will be included in the training of the next version of the interatomic potential.



Fig. 2. Plot of feature vectors of the structures on the database projected in 2D space (black) with the feature vectors corresponding to diamond (blue), graphite (orange), and the surface atoms of the C(100) (violet), unreconstructed C(111) (green), and reconstructed C(111) (red) surfaces.



**Fig. 3.** (a) Plot of feature vectors of the structures on the database projected in 2D space (black) with the feature vectors corresponding to slightly perturbed equilibrium structures (SPES) (blue). (b) Regions containing atomic environments classified as reliable, less reliable, and non-reliable.

# 3.3. Hybridization Analysis Using Neural Network Binary Classifier Model

Molecular simulation data of covalent solids like diamond and silicon usually employs coordination analysis for structure identification and characterization. Using this method, 1- and 2coordinated atoms are classified as sp1 hybridized, and the 3- and 4-coordinated atoms are classified as sp<sup>2</sup> and sp<sup>3</sup> hybridized, respectively. However, sp<sup>3</sup>-hybridized atoms can also be 3-coordinated when there is a dangling bond. Since the properties of sp<sup>2</sup> and 3coordinated sp<sup>3</sup> atoms are not the same, it is necessary to distinguish between the two type of atoms. For this purpose, we constructed a supervised binary classifier neural network model where we used a database of slightly perturbed sp<sup>2</sup> and 3-coordinated sp<sup>3</sup> hybridized atoms from graphite and diamond surfaces, respectively, with the bond lengths and bond angles as learning representation. Figure 4 implements this analysis on the thermally degraded C(111) and C(100)surfaces [8]. The proportion of sp<sup>2</sup> and 3-coordinated  $sp^3$  atoms in the thermally degraded C(111) surface is almost similar. In comparison, the proportion of 3coordinated sp<sup>3</sup> atoms in the thermally degraded C(100) surface is significantly higher compared to the  $sp^2$  atoms. This analysis implies that the thermally degraded atoms on the C(111) and C(100) surface are expected to have different properties.



Fig. 4. Comparison of the hybridization of the thermally degraded atoms on the C(111) and C(100) surfaces [8].

## **3.4. Detection and Analysis of Chemical Reactions on the MD Simulation Using Feature Vectors**

Analysis of MD trajectory will generate new physical and chemical insights. However, isolating individual chemical reactions is very challenging, especially for large scale MD simulations. Here, we propose a method of detecting chemical reactions by monitoring the changes in atomic or chemical environments which in turn are represented by changes in feature vectors calculated by graph message passing. For instance, during a simulation where there is no ongoing chemical reaction, the feature vector has to be constant. When a chemical reaction happens, an inflection in the feature vector plot must occur. We illustrate this concept in Figure 5. We choose a central atom (grey sphere with red highlight) and plot the radial component of the feature vector. The plot from structures A-C shows the metastable adsorption of  $O_2$  on top of the C(100) surface, C-D shows the O2 metastable adsorption transforming to O<sub>2</sub> molecular adsorption, and D-E shows the O<sub>2</sub> dissociation and C-dimer bond breaking. The structures A, B, C, D, and E all coincide on the inflection points on the plot. The two inflection points between A and B are caused by the O<sub>2</sub> adsorption on the neighboring atoms of the central atom.

#### 4. Conclusion

We constructed a machine learning interatomic potential based on graph neural network model for the investigation of diamond surface oxidation and thermal degradation. In this paper, we presented the active learning method of database and interatomic potential construction and fine tuning. In this active learning method, we evaluated the interatomic potential based on accuracy, stability, and reliability. The reliability can be estimated by detecting extrapolated atomic environments that may arise during the MD simulation. We also presented the use of neural network binary classifier trained using bond lengths and bond angles as descriptors to differentiate between sp<sup>2</sup> and sp<sup>3</sup>-hybridized atoms in simulating diamond surfaces. These method gave insights that augment the conventional coordination analysis. Finally, we propose the use of feature vectors calculated using graph message passing in the detection and analysis of chemical reactions during MD simulations. The changes in the plot of feature vector component over time have been shown to indicate a change in chemical environment and the inflection points coincide with equilibrium and metastable structures.



Fig. 5. Plot of the radial component of the feature vector of central atom (grey sphere with red highlight) vs the simulation frame, showing the changes in chemical environment:

#### References

- [1] Wort and Balmer Materials Today 11, 1-2 (2008)
- [2] Prawer and Greentree Science 320, 5883 (2008)
- [3] Toros et al. Diam. and Rel. Mat. 108, 107839 (2020)
- [4] Nagai et al. Sci Rep 8, 1 (2018)
- [5] STATE Code, www-cp.prec.eng.osaka-u.ac.jp/puki\_state/
- [6] Batzner et al. Nat. Commun 13, 1 (2022)
- [7] Thompson et al. Comput. Phys. Commun. 271, 108171 (2022)

[8] Enriquez et al. Carbon (2024) In press. https://doi.org/10.1016/j.carbon.2024.119223

# 原子吸着に伴うトポロジカル絶縁体表面に於けるスピン構造転移の研究

#### 湯川 龍

東北大学 国際放射光イノベーション・スマート研究センター(SRIS)

#### 1. はじめに

電子デバイスの高効率化や高速化のため、従来 の手法とは異なる機構で駆動する電子デバイス の開発が重要となる。そのなかで、電流によるエ ネルギー消費を極限まで抑制しスピン流を情報 伝達へ用いるスピントロニクス材料の開発が期 待されている。特に結晶内は絶縁体であるが表面 のみにスピン流が存在するトポロジカル絶縁体 は高効率スピントロニクスデバイス材料の有力 候補である。トポロジカル絶縁体表面にはディラ ック・コーンと呼ばれるスピン偏極した質量ゼロ のバンド分散構造が存在することから、デバイス の高速化も期待されている。トポロジカル絶縁体 の表面状態に外部摂動を印加することで任意に スピン偏極した電子状態を作製することが可能 となれば、新奇量子物性の探索という観点からだ けでなくデバイスの高機能化にも繋がる。表面へ の異種原子吸着により表面スピン状態を制御す ることで散乱体となる不純物が試料内にドープ されないため、高い電子輸送効率を保ちながら外 部摂動でスピン状態を変調する機構となること が予想されている。しかしながら、こうした表面 のスピン流制御手法が確立されたとはまだ言え ない。主な理由として実験のみから詳細な電子構 造やスピン構造を決定することが困難であると いう点が挙げられる。角度分解光電子分光法 (ARPES)は表面電子状態を直接的に決定する強 力な実験手法として知られるが、本手法を用いて もスピン偏極した電子状態の詳細な電子構造や 深さ分布構造、さらにその起源を正確に決定する ことは困難である。特に、表面に異種原子を吸着 させることで光電子が結晶内部から真空へ移動 する際に非弾性散乱を受けやすくなるため、

ARPES スペクトルがブロードになりやすい。こ うした理由のため、表面の電子構造変化を正確に 捉えるには ARPES 測定に加えて、大規模計算機 システムを用いた高精度な電子構造計算が必要 となる。

そこで、本研究では放射光を用いた高精度な ARPES 測定と高精度計算とを組み合わせること で、トポロジカル絶縁体結晶表面に異種原子を吸 着させるという試料外部からの摂動により生じ る表面近傍の電子状態やスピン構造の変化を解 明することを目的として研究を実施した。このこ とで ARPES 測定のみでは解明しきれない電子状 態の変化も明らかにする。

具体的には、ARPES 測定では電荷の深さ分布 構造を決定できないが、密度汎関数理論に基づく 計算(DFT計算)ではスピン偏極した電子の局所 分布構造まで高精度で明らかにすることが可能 である。計測と計算の両者を比較することで深さ 分布の変化に関して新たな知見を得ることを目 的とした。

#### 2. 大規模計算機システムを用いた高精度計算

本研究では DFT 計算のパッケージ Quantum ESPRESSO<sup>1</sup>を用いてバンド構造やスピン構造の 大規模計算を行った。Quantum ESPRESSO は、第 一原理計算を行うためのオープンソースのソフ トウェアパッケージであり、特に、電子構造計算 や材料の物性を計算するために広く利用されて いる。密度汎関数理論に基づいており、様々な結 晶における電子状態を高精度で計算可能である。 本研究では周期構造を用いて表面状態を計算す るため、図1に示すような6ナノメートル以上 の結晶層と真空層の周期構造であるスラブ構造 を用いて計算した。また、本研究では、スピン軌 道相互作用を取り入れた計算手法を用いて、スピ ン偏極した表面状態の解析を行った。計算では、 一般化勾配近似(GGA)の Perdew-Burke-Ernzerhof(PBE)式交換相関関数<sup>2</sup>を使用した。各 電子状態の空間分布を計算するため、Kohn-Sham 軌道を逆空間から実空間へと変換するコードで あるwfck2r.x を用いた。公式サイトで提供されて いるこのコードには一部誤りがあったため、修正 して使用した。

計算はサイバーメディアセンターの大規模並 列計算システム OCTOPUS(Osaka university Cybermedia cenTer Over-Petascale Universal Supercomputer)を用いて実施した。異種原子吸着 量の少ない状態の電子構造も計算するため、深さ 方向だけでなく面内でも最大3×3の周期構造 を有する比較的大きいスラブ構造を用いた。その ため最大で 270 原子以上からなる周期構造で計 算した。各結晶モデルにおける計算で使用した大 凡の計算資源は以下の通りである。

CPU数:120

メモリ量:2TB

計算時間:240時間

ディスク容量:2TB

トポロジカル絶縁体表面に原子吸着を行った際に生じる電子状態を計算するため、p型のトポロジカル絶縁体である Antimony telluride (Sb<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>)を用いた。吸着原子としては Bi を用いた。



図1:計算に用いた Sb<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>のスラブ構造例。

#### 3. 放射光を用いた ARPES 測定

電子状態の決定に欠かせない放射光を用いた ARPES 測定は高エネルギー加速器研究機構 (KEK)の放射光実験施設、Photon Factoryのビーム ライン BL-2A で実施した。本ビームラインでは 真空紫外光から軟 X 線領域の広いエネルギー帯 域の放射光を利用して ARPES 測定を実施できる。 エンドステーションでは超高真空下で劈開した Sb<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>試料表面に対して Bi 吸着前後で ARPES 測 定を実施した。高分解測定を行うため、試料を 20 K 以下に冷却しながら測定を行った。Bi の吸着 量は水晶振動子膜厚計を用いて調整した。



図 2: 劈開した Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>上で測定した ARPES 測定 結果(a)と Bare 表面で計算された表面状態(b)。

図 2(a)に Sb<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 劈開面で測定した Γ 点におけ る ARPES 測定結果を示す。明瞭なバンド構造が 観測されることが分かった。それぞれの状態を明 らかにするため、スラブ構造を用いた DFT 計算 結果[図 2(b)]と比較した。ここではバルクバンド の射影を灰色で示し、表面第一層から深さ-1Å~ 10 Å の範囲で状態密度を積分した強度を丸の大 きさに対応させて表示している。また、y方向(Γ-Ī方向)のスピン偏極度を赤と青の色で示してい る。本 DFT 計算結果から、0 eV 付近にはスピン 偏極した直線的な電子状態、トポロジカル表面状 態(TSS)が存在し、-0.8 eV~-0.5 eV 付近にはスピ ン偏極したパラボリックな電子状態、Rashba 表 面状態(RSS)が存在することが分かった。ARPES 測定結果ではこれらの表面状態が明瞭に観測さ れている。DFT 計算では RSS がバルクバンド射 影に隣接しているという点も ARPES 測定と一致 している。また本試料では TSS が計算結果に対 して低結合エネルギー側に位置しているため、p 型となっていることも確認された。

本劈開試料に Bi を吸着後に測定した結果を図

3(b)に示す。明瞭な TSS や RSS が観測されてお り、全体的に高結合エネルギー側へシフトしてい る。このことは Bi 吸着により、表面へ電子ドー プされたことを示しており、Sb<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>表面に対して 吸着 Bi 原子が電子ドナーとして働くことがわか った。このエネルギーシフトは DFT 計算結果[図 3(c)~(e)]でも再現されている。一方、Bi吸着後の ARPES 測定結果[図 3(b)]をよく見ると、RSS の分 裂が消滅しているようにも見える。興味深いこと に、この分裂が消える様子も DFT 計算で再現さ れている[図 3(e)]。表面状態の深さ分布に関して 詳細な解析を行った結果、高結合エネルギー側の 分裂した RSS の深さ分布が大きく変化している ことが DFT 計算で明らかになった。本結果は同 じ起源を有するスピン分裂した表面状態におい ても、異種原子吸着(電子ドープ)で異なる変化 を引き起こすことを示している。



図 3: (a)劈開した Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>上で測定した ARPES 測 定結果[図 2(a)と同じ]と、(b)同じ表面において Bi 吸着後に測定した結果。清浄面(c)と Bi を 6 Å(d)、4 Å(e)隣接させたときの DFT 計算結果。

#### 5. おわりに

本研究では ARPES 測定のみでは分からない表 面電子状態の変化を DFT 計算を用いることで解 明することに成功した。こうした原子吸着による 表面状態の計算には多くの原子を有するスラブ 構造を用いる必要があり多くの CPU とメモリを 必要とする。そのため、様々なパターンにおいて 最適解を得るには、大規模計算機システムの利用 が非常に重要であった。

最後に、このような大規模計算の機会をいただ き、かつ計算に関して多くの助言をいただいたサ イバーメディアセンターの皆様に謝意を示した い。

#### 参考文献

- P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, G. L. Chiarotti, M. Cococcioni, I. Dabo, A. Dal Corso, S. de Gironcoli, S. Fabris, G. Fratesi, R. Gebauer, U. Gerstmann, C. Gougoussis, A. Kokalj, M. Lazzeri, L. Martin-Samos, N. Marzari, F. Mauri, R. Mazzarello, S. Paolini, A. Pasquarello, L. Paulatto, C. Sbraccia, S. Scandolo, G. Sclauzero, A. P. Seitsonen, A. Smogunov, P. Umari, and R. M. Wentzcovitch, J. Phys. Condens. Matter **21**, 395502 (2009).
- (2) J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. 77, 3865 (1996)

# 深層生成モデルを用いたヒト脳活動からの動的体験再構成

#### 高木 優

大阪大学 大学院生命機能研究科

#### 1. はじめに

ヒトの活動の多くは視覚的な体験を伴い、その 情報は幅広い脳領域で処理されている。ヒト脳内 の視覚情報処理を非侵襲的に探るために、これま での認知神経科学研究では主に機能的核磁気共 鳴画像法(fMRI)を用いてきた。具体的には、被験 者が fMRI 内で画像を観ている際に、機器から得 られた信号値を解析することで、脳のどこにどの ような視覚情報が表現されているかを明らかに してきた。一方で、fMRI を用いた先行研究では 静止画を視聴中の脳活動解析が主に行われてお り、より自然な動画像や音声を視聴中の脳活動を 用いた解析は行われてこなかった。

以上を踏まえ、本研究では、次の3つの課題 に取り組んだ:

- 深層拡散生成モデルを用いた脳活動からの 動画像再構成
- 深層生成モデルを用いた脳活動からの音楽
   再構成(Denk and Takagi et al., arXiv 2023)。
- 大規模言語モデルを用いた自然な動画視聴
   時の脳活動と意味内容との関係性調査

(Nakagi,..., and Takagi, bioRxiv 2024)。

まず、1.については、fMRI 脳活動からの動的画 像再構成は時間解像度やノイズの観点から難し く、静的な画像に比して大幅に精度が低い再構成 となることがわかった。特にボトルネックとなっ たのは、動画再構成に用いるための深層拡散生成 モデルでオープンソースかつ研究に用いること が可能なプレトレーニングをされたモデルが存 在しなかったことである。こうしたモデルのプレ トレーニングには通常数億円規模の計算資源が 必要となることから、今回の研究計画の範囲で行 うことは不可能であると判断した。そのため、本 計画では上記の条件が整っていた2.音楽および3. 意味的な内容を、自然な動的経験中のヒト脳活動 と生成 AI との関係性を検討した結果について報 告する。

2. 自然音楽視聴中の脳からの音楽再構 (Denk and Takagi et al., arXiv 2023)

2.1 背景

音楽は文化を超えた普遍的なコミュニケーシ ョン手段としての役割を担っており、脳内での音 楽表現は神経科学における主要な研究分野であ る。これまでの研究は、機能的磁気共鳴画像法 (fMRI)を用いて音楽を聴く際の脳活動を捉え、脳 内の音楽的特徴表現を明らかにしてきた。近年登 場した音楽生成モデルは、高精度な音楽の条件付 き生成が可能になっており、これによって言語的 理解と実際の音楽作成の間のギャップを埋める 新たな可能性が生まれている。一方で、これらの モデルの内部表現が、人間が音楽を処理する際の 脳内表現とどのように関連しているのかはわか っていない。本研究では、近年我々が提案した音 楽生成モデルである MusicLM と人間の脳活動と の関係性を探った。

#### 2.2 手法

本研究では、我々が過去に発表した music genre neuroimaging dataset を用いた。このデータセット では、GTZAN データセットの 10 ジャンルに属 する曲から、各ジャンルにランダムに 15 秒の音 楽クリップを抽出し、刺激として用いている。こ れらのデータにはキャプションが付与されてお り、ジャンル、楽器、リズム、ムードの観点から 音楽作品を記述している。 Mulan は BERT と ResNet-50 をベースとしたテ キスト/音楽埋め込みモデルであり、音楽とテキ ストについて 128 次元の埋め込み間のコントラ スト損失を最小限に抑えることを目的に学習さ れた。MusicLM は、Transformer を利用すること によって、Mulan 埋め込みをベースとして音楽を 生成する条件付き音楽生成モデルである。 MusicLM では、Mulan 埋め込みをより低次の音響 特徴量である w2vbert トークンへと変換した後、 Mulan 埋め込みへと変換し、デコーダーを使用し てオーディオへと変換される。

デコーディングとは、記録された脳活動に基づ いて、被験者がさらされた元の刺激を再構成する 試みを指す。具体的には fMRI データに基づいて 音楽埋め込みを予測し、その埋め込みに基づいて 音楽を生成する。まず、5人の参加者のそれぞれ に対して fMRI 応答から刺の音楽埋め込みを予測 する線型モデルを構築する。線形モデルの重みは トレーニングデータセット上で L2 正則化線形回 帰を使用して推定した。予測された Mulan 埋め込 みから元刺激を予測するために、既存の音楽コー パスから類似の音楽を抽出する方法と、MusicLM を用いて音楽を生成する方法の2 つのアプロー チを用いた。既存の音楽コーパスからの音楽抽出 のために、Free Music Archive(FMA)データセット を用いた。音楽抽出とは異なる再構成方法として、 予測された Mulan 埋め込みを用いて MusicLM モ デルから音楽を直接生成した。

MusicLM の内部表現を解釈するために、 MusicLM の内部表現と、fMRIにより記録された 脳活動との対応関係を調べた。具体的には、 MusicLM の異なる音楽埋め込み(Mulan と w2vbert)を用いて fMRI 信号を予測するために、 全脳ボクセルワイズエンコーディングモデルを 構築した。これにより、これら2種類の埋め込み が脳のどの部位と対応するかの違いを探ること ができる。エンコーディングモデリングでは、デ コーディングとは逆に、異なる埋め込みから fMRI 応答を予測する。予測モデルの重みは L2 正 則化線形回帰を用いて訓練データから推定し、その後テストデータに適用した。

#### 2.3 結果

図1は、fMRI デューディングの定量的な結果 を示している。本研究では、再構成された音楽と 元の刺激の類似性を評価するために、w2vbert と MuLan という異なる粒度の音楽埋め込み表現を 用いて精度を定量化した。我々のアプローチは、 いずれの指標でもチャンスレベルを有意に上回 る制度で音楽の再構成を行うことができた。また、 w2vbert に比べて MuLan の精度が高いことは、 MuLan によって捉えられる音楽に関する高レベ ルの意味的特徴に関して、再構成された音楽がよ り元の刺激と似ていることを示す。



図1:音楽再構成の定量的評価(N=5 被験者)。

図2は、MusicLM内の異なるレベルの音楽埋 め込み表現を用いた場合のエンコーディングモ デルの予測精度を示している。いずれの埋め込み 表現も、聴覚皮質を中心に高い精度で脳活動を予 測した。また、MuLan埋め込みはw2vbertよりも 側頭前皮質において高い予測パフォーマンスを 持つ傾向があり、MuLanが人間の脳で処理され る高次元の音楽情報を捉えていることを示唆し ている。さらに、低次(w2vbert)から高次(MuLan) の異なるレベルの音楽埋め込み表現が、聴覚皮質 内でかなり似た脳領域を予測していることがわ かった。



図 2:w2v-BERT と MuLan による脳活動予測。

# 3. 自然動画視聴中の大規模言語モデルと脳活動 との対応関係の検証 (Nakagi,..., and Takagi, bioRxiv 2024)

3.1 背景

近年、大規模コーパスから言語の統計的構造を 学習することで自然言語の意味を理解する大規 模言語モデル(LLM)が発展している。意味理解は 私たち人間の知能の基盤でもあることから、意味 理解に関するヒト脳活動と言語モデルの潜在表 現の対応関係が注目されてきた。最近の脳研究で は、言語モデルの潜在表現から特徴量を抽出し、 その特徴量から脳活動を予測する脳活動エンコ ーディングモデルを用いて、この対応関係が探ら れてきた。

しかし、既存研究は意味理解の一側面に焦点を 当てていた。私たちが自然な動的体験中に扱う自 然言語の意味理解には、会話内容、視覚的内容、 場所や時間、会話の文脈などの複数のレベルが存 在する。そのため、意味理解について本来はより 多くの側面を持つヒト脳と言語モデルとの対応 関係を包括的に理解する上では不明な点が多く 残されている。そこで本研究では、自然な動的体 験中に異なるレベルでの意味理解が脳内でどの ように表象されているかを、LLM と脳活動を用 いて包括的に調べた。

#### 3.2 手法

健常な日本人の被験者 6 名が 9 本の映画やド ラマの DVD(10 エピソード、合計 8.3 時間)を 3 テスラの fMRI 内で自由視視聴しているときの 脳活動データを集めた。本実験は、事前に実験内 容を説明した上で全被験者から実験参加の書面 同意を得た。実験はNICTの倫理・安全委員会か ら承認を得た。fMRI データの前処理には、運動 補正と解像度補正とトレンド除去を行った。

刺激動画として、複数の詳細な言語アノテーシ ョン付きの9本の映画やドラマのDVD(10エピ ソード、合計8.3時間)を刺激動画として使用し た。映画とドラマは様々なジャンルを含んでおり、 8本が海外の映画またはドラマ、1本が日本のア ニメーションである。言語アノテーションデータ は、音声内容の書き起こし(Speech)、シーンごと の物体情報(Object)、シーンごとの物語内容 (Story)、物語のあらすじ(Summary)、および時間と 場所の情報(TimePlace)の5種類から成る。それぞ れの意味内容は自然言語によって刺激動画を説 明するアノテーションであるが、その説明内容の 性質やアノテーションのタイムスパンが異なっ ている。具体的には、Speech は発話ごとに、Object は1秒ごとに、Story は5秒ごとに、Summary は 1~2 分ごとに、TimePlace は画面展開ごとにアノ テーションされている。各意味内容が持つ潜在的 な表現を刺激特徴量として抽出するために、我々 は各言語アノテーションを入力として 5 種類の 言語モデルの単語埋め込みまたは潜在表現を取 得した。

異なるレベルの意味内容がヒト脳においてど のように表現されているのかを調べるために、5 種類の意味内容に関する言語モデルの潜在表現 から脳活動を予測する脳活動エンコーディング モデルを構築した。モデルの構築方法は音楽生成 AIの研究と同様である。モデルの重み推定には、 訓練データに対してL2正則化付き線形回帰を使 用し、その後テストデータに適用した。

#### 3.3 結果

図3に、異なるレベルの意味内容から抽出した それぞれの特徴量が脳活動をどのように説明す るのかを調べた結果を示す。図3より、Speech、 Object、Storyの意味内容に関する特徴量からの予 測精度は、Summary、TimePlace の意味内容に関 する特徴量からの予測精度より高いことがわか った。また、Speech、Object、Story について、従 来型言語モデルの Word2Vec と比較して、より大 規模な LLMs (特に Llama2)の方が高い予測精度 を持つことが被験者間共通で確認された。この結 果は、特に Story において顕著であった。

図4は、5種類の意味内容について Llama2の 潜在表現から脳活動を同時に並列して予測した 時の大脳皮質における予測精度である。図3より、 構築したエンコーディングモデルは大脳皮質上 の幅広い領域(視覚・聴覚に関わる脳領域~より 高次の脳領域)の脳活動を予測できていることが 確認できた。



図3:5種類の意味内容に関する言語モデルの潜 在表現からの脳活動予測精度。



図4:5種類の意味内容に関するLlama2の潜在 表現から脳活動を同時に予測したときの予測精 度を大脳皮質上にマッピングした結果。

#### 4. おわりに

本研究では、自然な動的体験中のヒト脳活動と 生成 AI の潜在表現との対応関係を調査した。

まず、音楽生成 AI を用いた研究では、人間の 脳活動から音楽を再構成するために、fMRI デー タから予測された音楽埋め込みに MusicLM を条 件付けることにより、意味レベルで元の音楽刺激 に似た音楽を生成することができた。また、エン コーディングモデルを構築することにより、テキ スト音楽先生モデルと人間の脳との関係を定量 的に評価した。具体的には、音楽の高次元の意味 情報と低次元の音響特徴が人間の脳でどこに、ど の程度表現されているかを評価した。テキストか ら音楽へのモデルは急速に発展しているが、その 内部プロセスはまだ十分に理解されていない。本 研究で使用された音楽生成モデルが、これまでの ディープラーニングモデルと比べて脳にインス パイアされたものではないにもかかわらず、この ような脳との対応関係が生じたことは興味深い。

次に、LLM を用いた研究では、異なる意味内 容に関する LLMs の潜在表現とヒト脳活動の対 応関係を定量的に比較した。結果、従来型の言語 モデルと比較して、LLMs の潜在表現は、特に高 次の言語表現を持つ物語内容に関する脳活動を よく説明することがわかった。加えて、異なる意 味内容に関する LLMs の潜在表現は、それぞれ異 なる脳領域の脳活動を固有に説明することもわ かった。

#### 参考文献

- (1) Denk et al., arXiv, (2024).
- (2) Nakagi, et al., bioRxiv., (2024).

# Exploring the magnetic interaction in the photoexcited of porphyrin-lanthanide 1:1 complexes with different capping

# ligands

Anas Santria,<sup>1,2</sup> and Naoto Ishikawa<sup>1</sup> <sup>1</sup>Graduate School of Science, Osaka University <sup>2</sup>Research Center for Chemistry, National Research and Innovation Agency

#### 1. Introduction

In the field of electronic interactions, an intriguing phenomenon has emerged—an interaction between two angular momenta: the total angular momentum arising from the f system (**J**) and the orbital angular momentum originating from the photoexcited cyclic  $\pi$  electronic system (**L**). This interaction, termed **J**-**L** interaction, has been observed experimentally in the paramagnetic phthalocyaninato/ porphyrinato lanthanide complex. Our group's research is devoted to uncovering the intricacies of this interaction.

Our work has focused on investigating the J-L doublesingle-decker interaction in and phthalocyaninato/ porphyrinato complexes, featuring lanthanide ions with 4f<sup>8</sup> and 4f<sup>9</sup> configurations. [1] We have investigated the interaction through careful experimental analysis using magnetic circular dichroism (MCD). In our prior investigations, we explored the interaction in single-decker compounds encompassing various lanthanide ions ranging from terbium to ytterbium. Furthermore, our investigation has integrated computational chemistry methods to deepen our understanding. Ab initio calculations have revealed two manifestations of the interaction: ferromagnetic-type and antiferromagnetic-type interactions. To date, we have observed the ferromagnetic-type interaction in terbium, erbium, and ytterbium complexes, whereas the antiferromagnetictype interaction has been observed in dysprosium complex.[2]

Building upon this groundwork, using computational chemistry, our study explores the electronic structure of lanthanide-monoporphyrin complexes with different capping ligands, such as 1,4,7,10-tetraazadodecane (L1), 4,10-diaza-12-crown-4 ether (L2), 1-aza-12-crown-4 ether (L3), and 12crown-4 ether (L4), as illustrated in Figure 1. We argue that the choice of capping ligand influences the **J-L** interaction.

Through this examination, our objective is to elucidate the interplay between angular momenta and the impact of ligand restraint on electronic structure, thereby enriching our understanding of the J-L interaction.





#### 2. Computational Methods

The geometry structures of  $[Dy(Por)(L)]^+$  (Por = porphyrine; L = 1,4,7,10-tetraazadodecane (L1), 4,10diaza-12-crown-4 ether (L2), and 1-aza-12-crown-4 ether (L3), 12-crown-4 ether (L4) were constructed using the Avogadro program.[3] Subsequently, the geometry optimization process was carried out employing *Gaussian 16*, revision C.01 [4] at the B3LYP level of theory. The basis set 6-31G(d,p) was utilized for C, H, N, and O atoms [5], while Stuttgart RSC 1997 basis sets were employed for metal ion [6].

For the determination of electronic structures, spinorbit states (SO), and oscillator strength of the optimized geometries, a series of computational methods were employed. Initially, completed active space self-consistent field (CASSCF) were performed, followed by restricted active space state interaction (RASSI) and Single\_Aniso modules, using OpenMolcas version 23.10. [7] In these calculations, the basis set ANO-RCC-VQZP and ANO-RCC-VDZP was applied for Dy and the donor atoms (N and O), respectively, while ANO-RCC-MB was employed for the remaining atoms (C, H, N).

#### 3. Results and Discussion

The calculations initially focused on the states associated with the 4f<sup>9</sup> electronic configuration, eferred to as the ground states. Following this, utilizing these findings as a starting point, the computations for the  $\pi$ - $\pi$ \* excited states were carried out. This involved considering the two highest occupied molecular orbitals (HOMOs) and the two lowest unoccupied molecular orbitals (LUMOs) of the porphyrin  $\pi$  system, thus broadening the active space for analysis.

#### 3.1 Ground Multiplet States

To obtain the ground multiplet states of the  $[Dy(Por)(L)]^+$  complexes, we employed a CASSCF module with 9 electrons distributed in 7 orbitals, denoted as CAS(9,7). This calculation involved 21 configurational interaction (CI) roots, yielding a total

of 21 electron configurations representing the nine electrons within the seven 4f orbitals. The positioning of these seven 4f orbitals was identified between two occupied  $\pi$  and two unoccupied  $\pi$  orbitals. Given the successful arrangement of these 4f and pi orbitals, this configuration was chosen as the foundational setup for subsequent analyses.

Table 1 displays the eight lowest doublet spin-orbit states corresponding to the ground multiplet states of the  $[Dy(Por)(L)]^+$  complexes. The change of nitrogen with oxygen at the capping ligand significantly altered the sublevel structure of the complexes. The lowest substate in  $[Dy(Por)(L1)]^+$ ,  $[Dy(Por)(L2)]^+$ , and [Dy(Por)(L4)]<sup>+</sup> predominantly comprises more than 90%  $|\pm 11/2\rangle$ , with negligible contributions below 10% for other  $J_z$  values. These results are consistent with our previous findings.[2,8] For [Dy(Por)(L3)]<sup>+</sup>, the lowest substate primarily consists of 75%  $|\pm 15/2\rangle$  and  $16\% \pm 11/2$ , with insignificant contributions below 10% for other  $J_z$  values. This signifies a notable shift in the dominant  $J_z$  value from  $|\pm 11/2\rangle$  in  $[Dy(Por)(L1)]^+$ ,  $[Dy(Por)(L2)]^+$ , and  $[Dy(Por)(L4)]^+$ to  $|\pm 15/2\rangle$  in  $[Dy(Por)(L3)]^+$ . The second lowest substates in all complexes are predominantly  $|\pm 13/2\rangle$ . They are separated by around 8 cm<sup>-1</sup>, 22 cm<sup>-1</sup>, 38 cm<sup>-1</sup> <sup>1</sup>, and 45 cm<sup>-1</sup>, respectively, from the lowest ground state. This illustrates that the energy separation between the lowest and second lowest substates increases as the number of nitrogen donor atoms decreases. Considering the composition of the lowest substate, [Dy(Por)(L3)]<sup>+</sup> lacks a prominent dominance of component  $|\pm 13/2\rangle$  over other components in the second lowest substate. Consequently, it is not prudent to conclude that  $|\pm 13/2\rangle$  represents the  $|J_z\rangle$  for the second lowest substate. Furthermore, beyond the two lowest substates, the degree of mixing is noticeably more pronounced in the higher substates, particularly for complexes with L2 and L3 capping ligands, rendering the determination of  $J_z$  for the remaining substates considerably more intricate.

Table 1. Energy level of the dysprosium complexes extracted from CASSCF/RASSI/ SINGLE\_ANISO calculations.

[Dy(P	or)(L1)]+	$[Dy(Por)(L2)]^+$		
Energy (cm <sup>-1</sup> )	States	Energy (cm <sup>-1</sup> )	States	
0	0.99 ±11/2>	0	0.96 ±11/2>	
8	0.98 ±13/2>	22	0.88 ±13/2>	
121	0.90 ±9/2>	100	0.68 ±9/2⟩ 0.14 ±1/2⟩	
217	0.78 ±7/2> 0.16 ±1/2>	158	0.36 ±7/2) 0.20 ±3/2) 0.17 ±5/2) 0.13 ±9/2) 0.13 ±1/2)	
242	0.54 ±5/2> 0.40 ±3/2>	200	0.30 ±7/2> 0.29 ±5/2> 0.25 ±3/2>	
343	0.77 ±1/2> 0.19 ±7/2>	269	0.41 ±1/2> 0.20 ±5/2> 0.19 ±3/2> 0.18 ±7/2>	
355	0.57 ±3/2⟩ 0.43 ±5/2⟩	323	0.32 ±3/2) 0.28 ±5/2) 0.25 ±1/2) 0.11 ±7/2)	
502	$1.00 \pm 15/2\rangle$	517	$1.00 \pm 15/2\rangle$	

$[Dy(Por)(L3)]^+$		$[Dy(Por)(L4)]^+$		
Energy (cm <sup>-1</sup> )	States	Energy (cm <sup>-1</sup> )	States	
0	0.75 ±15/2⟩ 0.16 ±11/2⟩	0	0.93 ±11/2>	
38	0.57 ±13/2> 0.23 ±9/2> 0.10 ±7/2>	45	0.95 ±13/2)	
84	0.24 ±11/2> 0.24 ±5/2> 0.16 ±7/2> 0.10 ±3/2>	56	0.52 ±9/2> 0.35 ±1/2> 0.12 ±7/2>	
119	0.28 ±1/2> 0.26 ±3/2> 0.13 ±11/2> 0.11 ±7/2>	102	0.47 ±3/2⟩ 0.44 ±5/2⟩	
144	0.39 ±1/2) 0.18 ±3/2) 0.14 ±5/2) 0.11 ±11/2)	123	0.45 ±7/2> 0.41 ±9/2> 0.14 ±1/2>	
215	0.24 ±9/2) 0.21 ±3/2) 0.14 ±7/2) 0.14 ±11/2) 0.11 ±5/2)	223	0.50 ±1/2> 0.43 ±7/2>	
225	0.28 ±5/2) 0.21 ±1/2) 0.20 ±7/2) 0.16 ±3/2)	231	0.51 ±5/2) 0.46 ±3/2)	

353	0.27 ±9/2>	532	1.00 ±15/2>
	$0.25 \pm 7/2\rangle$		
	0.18 ±11/2>		
	0.14 ±5/2>		

In addition to the change in  $J_z$ , the orientation of the main magnetic axis in  $[Dy(Por)(L3)]^+$  exhibits a significant deviation from that of other complexes as shown in Figure 2. Unlike  $[Dy(Por)(L1)]^+$ ,  $[Dy(Por)(L2)]^+$ , and  $[Dy(Por)(L4)]^+$ , where the main magnetic axis aligns with the z-axis (perpendicular to the porphyrin plane),  $[Dy(Por)(L3)]^+$  demonstrates an inclination of 52 degrees towards the amine of the L3 ligand. This inclination becomes even more pronounced for the main magnetic axis in the second lowest substate, reaching approximately 69 degrees from the z-axis. This observation underscores that even a slight alteration of one atom in the ligand can induce a change in symmetry, thereby impacting the orientation of the main magnetic axis of the compound.



Figure 2: The main magnetic axis of the lowest  $J_z$  of  $[Dy(Por)(L)]^+$  complexes ((a)  $[Dy(Por)(L1)]^+$ , (b)  $[Dy(Por)(L2)]^+$ , (c)  $[Dy(Por)(L3)]^+$ , and (d)  $[Dy(Por)(L4)]^+$ ).

#### 3.2 Excited-states

In calculating excited states, we expanded the active space utilized for the CASSCF method to include 11 orbitals, designated as CAS(13,11). The active space encompassed the seven 4f9 orbitals of Dy(III), along with the two highest doubly occupied  $\pi$  orbitals and the two lowest unoccupied  $\pi$  orbitals. The initial orbitals were derived from one of the 21 CI roots generated in preceding ground state calculations. To streamline the report, we will focus solely on the calculation results of  $[Dy(Por)(L3)]^+$ and  $[Dy(Por)(L4)]^+$ , which exhibit significant differences in the main magnetic axis in the ground state.

Utilizing a total of 195 CI roots, each with a spin multiplicity of 6, in this CASSCF calculation resulted in 1170 spin-orbit states (585 doublets). Among this extensive array of SO transitions, we focused on identifying  $\pi \rightarrow \pi *$  transitions associated with the Q and B bands, considering the oscillator strength of each transition. Additionally, employing the SINGLE\_ANISO module, we determined the angular momenta for each SO state, as detailed in Tables 2-3.

Table 2. Selected transition energy and angular momenta of  $[Dy(Por)(L4)]^+$  extracted from CASSCF/RASSI/SINGLE\_ANISO calculations.

Doublet	Energy	Osc. Strength	Lz	Sz	Jz  =
	(cm <sup>-1</sup> )	(initial doublet			Lz +
		$\rightarrow$ final			Sz
		doublet)			
1	0		2.91	1.48	4.39
2	17		1.27	0.62	1.89
3	47		1.83	0.96	2.79
4	66		0.32	0.17	0.49
5	79		2.41	1.25	3.66
6	204		0.06	0.01	0.07
7	218		0.07	0.02	0.09
8	340		4.98	2.50	7.48
137	31697	0.015 (8→137)	9.53	2.50	12.03
138	31708	0.015(8→138)	0.41	2.49	2.90
139	31724	0.008(3→139)	0.29	2.14	1.85
140	31733	0.008(3→140)	8.84	2.14	10.98
141	31769	0.014(1→141)	1.06	1.72	0.66
142	31781	0.014(1→142)	8.07	1.74	9.81
143	31812	0.014(2→143)	2.29	1.10	1.20
144	31817	0.014(2→144)	6.76	1.09	7.85
145	31883	0.014(4→145)	3.39	0.51	2.88
146	31884	0.014(4→146)	5.86	0.62	6.48
147	31912	0.008(5→147)	4.07	0.18	3.89

$\begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$	$\frac{1}{3}$ $\frac{7}{2}$ $\frac{2}{4}$ $1$
$\begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$	3 7 2 2 4 1
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	7 2 2 4
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	2 2 4 1
$\begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$	2 4 1
407         47288 $2.84(1 \rightarrow 407)$ $2.64$ $1.40$ $4.0$ 409         47299 $2.44(1 \rightarrow 409)$ $1.20$ $0.61$ $1.8$ 412         47291 $1.20$ $0.61$ $1.8$	4
$\begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	1
	1
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	5
413 47323 $2.98(2 \rightarrow 413)$ 3.88 1.92 5.8	0
$\begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$	6
411 47310 $1.79(3 \rightarrow 411)$ 1.89 0.97 2.8	6
414 47362 $2.71(4 \rightarrow 414)$ 2.25 1.16 3.4	1
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	0
416 47371 $2.62(5 \rightarrow 416)$ 2.49 1.27 3.7	6
417 47373 $2.73(5 \rightarrow 417)$ 2.76 1.41 4.1	7
418 47451 $3.02(6 \rightarrow 418)$ 5.08 2.48 7.5	6
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	8
420 47507 $2.98(7 \rightarrow 420)$ 0.09 0.02 0.1	1
421 47509 $2.97(7 \rightarrow 421)$ 0.11 0.07 0.1	8
422	6
423 47512 $2.99(8 \rightarrow 423)$ 0.04 0.02 0.0	

The selected doublet SO states of  $[Dy(Por)(L4)]^+$ are listed in Table 2. Two pairs of degenerate SO states associated with the  $\pi \rightarrow \pi^*$  transition at the Q-band of  $[Dy(Por)(L4)]^+$  were identified. The doublet states numbered 141 and 142 will be henceforth referred to as the lower and higher excited doublet SO states, respectively. The lower excited doublet SO state is distinguished by its separation of 31770 cm<sup>-1</sup> from the ground SO state. Along the z-axis, the spin angular momentum (S<sub>Z</sub>) was determined to be 1.72  $\hbar$ , with an absolute value of the orbital angular momentum  $(|L_Z|)$ at 1.06  $\hbar$  for this doublet state. Since  $S_Z$  is proximate to that of the ground doublet SO state (1.48  $\hbar$ ), it is reasonable to infer that  $S_Z$  in the lower excited doublet SO state corresponds to the spin angular momentum of the dysprosium ion  $(S_Z(f))$ . However, in comparison to the ground doublet SO state, the  $|L_Z|$  in this doublet has significantly decreased by 3.97 h. This reduction is attributed to the orbital angular momentum of the  $\pi$ system ( $L_Z(\pi)$ ), as previously reported.[9]

For the higher excited doublet SO state, which sits about 31781 cm<sup>-1</sup> above the ground doublet SO state, the  $S_Z$  remains nearly unchanged compared to that of the ground state (1.48  $\hbar$ ). However, the  $|L_Z|$  value in this state notably increases to around 8.07  $\hbar$ . Once again, the disparity in  $|L_Z|$  values indicates the presence of  $L_Z(\pi)$  in the excited state of  $[Dy(Por)(L4)]^+$ , aligning with previous finding. [9] Considering the decrease in the  $L_Z$  value in the lower excited doublet SO state, indicating an opposite orientation or antiparallel between  $L_Z(\pi)$  and  $L_Z(f)$ , it can be inferred that an antiferromagnetic-type interaction exists between  $L_Z(\pi)$  and  $L_Z(f)$  in this compound.

Concerning the interaction magnitude ( $\Delta_{JL}$ ), we turn to our previous studies,[9] where this value was defined as half the energy gap between the lower and higher pairs of the excited SO doublet. In the Q band of [Dy(Por)(L4)]<sup>+</sup>, the  $\Delta_{JL}$  value was determined to be around 6 cm<sup>-1</sup>, which overestimates the experimental result ( $\Delta_{JL} = 0.39$  cm<sup>-1</sup>). [10] Despite the discrepancy, it is significant to note that the opposing orientation between  $L_Z(\pi)$  and  $L_Z(f)$  aligns well with the experimental observations, providing further evidence for the presence of an antiferromagnetic-type J-L interaction in [Dy(Por)(L4)]<sup>+</sup>.

Table 3. Selected transition energy and angular momenta of  $[Dy(Por)(L3)]^+$  extracted from CASSCF/RASSI/SINGLE\_ANISO calculations.

Doublet	Energy	Osc. Strength	Lz	Sz	Jz  =
	(cm <sup>-1</sup> )	(initial doublet			Lz +
		$\rightarrow$ final			Sz
		doublet)			
1	0		4.52	2.28	6.80
2	34		3.59	1.80	5.39
3	78		2.93	1.46	4.39
4	118		0.60	0.30	0.90
5	137		3.34	1.70	5.04
6	250		4.66	2.34	7.00
7	272		4.61	2.31	6.92
8	296		4.81	2.41	7.22
133	31568	0.003(1→133)	4.33	2.22	6.55
142	31723	0.005(1→142)	4.57	2.24	6.81
136	31601	0.002(2→136)	3.23	1.44	4.67
143	31754	0.006(2→143)	3.67	1.83	5.50
138	31648	0.003(3→138)	3.00	1.47	4.47
144	31801	0.004(3→144)	2.96	1.49	4.45
140	31688	0.003(4→140)	0.87	0.44	1.31
147	31844	0.003(4→147)	2.70	1.37	4.07
141	31712	0.003(5→141)	3.34	1.81	5.15
148	31865	0.006(5→148)	3.77	1.82	5.59
145	31821	0.003(6→145)	4.64	2.30	6.94
150	31973	0.007(6→150)	4.74	2.40	7.14
146	31838	0.002(7→146)	3.31	1.67	4.98
151	31997	0.001(7→151)	4.69	2.35	7.04
149	31872	0.003(8→149)	4.99	2.34	7.33
152	32025	0.007(8→152)	4.51	2.42	6.93

403	46815	$2.11(1 \rightarrow 403)$	4.48	2.26	6.74
410	47091	$1.90(1 \rightarrow 410)$	4.30	2.17	6.47
404	46846	$2.90(2 \rightarrow 404)$	3.70	1.86	5.56
411	47120	$1.42(2 \rightarrow 411)$	3.45	1.73	5.18
405	46895	$2.33(3 \rightarrow 405)$	3.01	1.49	4.50
413	47169	$2.34(3 \rightarrow 413)$	2.96	1.47	4.43
406	46935	$2.19(4 \rightarrow 406)$	2.22	1.10	3.32
414	47208	$2.01(4 \rightarrow 414)$	0.94	0.47	1.41
407	46961	$2.83(5 \rightarrow 407)$	3.50	1.79	5.29
416	47234	$2.90(5 \rightarrow 416)$	3.63	1.86	5.49
408	47068	$2.99(6 \rightarrow 408)$	4.74	2.38	7.12
420	47340	$3.04(6 \rightarrow 420)$	4.78	2.40	7.18
409	47087	$2.80(7 \rightarrow 409)$	4.54	2.28	6.82
422	47363	$3.07(7 \rightarrow 422)$	4.72	2.37	7.09
411	47120	$1.53(8 \rightarrow 411)$	3.45	1.73	5.18
423	47395	$3.08(8 \rightarrow 423)$	4.85	2.44	7.29

Similar to the computations conducted for  $[Dy(Por)(L4)]^+$ , those for  $[Dy(Por)(L3)]^+$  also yield a pair of doublet SO states associated with  $\pi \to \pi^*$  transitions. These doublet SO states are separated by 31568 cm<sup>-1</sup> (doublet 133) and 31723 cm<sup>-1</sup> (doublet 142) from the lowest doublet SO state, as shown in Table 3. However, unlike  $[Dy(Por)(L4)]^+$ , where the higher-energy doublet is merely one level above the lower-energy doublet, in  $[Dy(Por)(L3)]^+$ , eight other doublet SO states separate the two doublets.

In doublet 133, the  $L_Z$  value undergoes a reduction of approximately 0.2, while  $S_Z$  remains relatively unchanged (2.22), yielding a  $J_Z$  value of 6.55. Conversely, in the higher doublet (doublet 142), the  $L_Z$ experiences a slight increase of 0.05, resulting in a  $J_Z$ value 0.26 larger than that in doublet 133. From this data, it can be deduced that the **J-L** interaction in  $[Dy(Por)(L3)]^+$  has the same type with that in  $[Dy(Por)(L4)]^+$ , consistent with findings from experiments using MCD data. [10]

However, a significant contrast between  $[Dy(Por)(L3)]^+$  and  $[Dy(Por)(L4)]^+$  is in the magnitude of change in  $L_Z$  observed within the pair of doublet SO states of  $[Dy(Por)(L3)]^+$ . This change is much smaller, approximately 18 times smaller, than the observed change in  $[Dy(Por)(L4)]^+$ . This suggests that the change of the second ligand influences  $L_Z(\pi)$ , consequently leading to a different interaction with **J**. Ground state calculations indicate that the main magnetic axis of Jz in  $[Dy(Por)(L3)]^+$  is not

perpendicular to the porphyrin part, potentially contributing to this effect.

Furthermore, the presence of multiple energy levels between doublets 133 and 142 in  $[Dy(Por)(L3)]^+$  poses challenges for determining the  $\Delta_{JL}$  value via half-energy separation, a method previously employed in other studies. Despite this limitation, the current calculation provides a qualitative assessment of the **J-L** interaction, which was previously beyond reach.

In addition, we have successfully identified, for the first time, the SO states associated with  $\pi \rightarrow \pi^*$ transitions in the B band. These states are separated by 47288 cm<sup>-1</sup> and 47299 cm<sup>-1</sup> for [Dy(Por)(L4)]<sup>+</sup> and at 46815 cm<sup>-1</sup> and 47091 cm<sup>-1</sup> for [Dy(Por)(L3)]<sup>+</sup> from their ground states. Notably, these SO states exhibit significantly high oscillator strength and are confidently assigned to the B band, as shown in Tables 2 and 3. This substantial oscillator strength aligns with the characteristic behavior of the B band in porphyrin/metalloporphyrin compounds. Regarding changes in angular momentum, the disparity in angular momentum between their doublet excited SO states and their lowest doublet SO states are marginal (<0.1). These results correspond with computational findings on  $[Y(Por)(L4)]^+$  and  $[Y(Por)(L3)]^+$  ( $L_Z(\pi)$  Q $\approx$ 4.0,  $L_Z(\pi)$  B $\approx$ 0.1). Additionally, their doublet excited SO states demonstrate negative changes in angular momentum compared to their lowest doublet SO state, indicating an antiferromagnetic-type J-L interaction in the B band. Furthermore, these computational outcomes qualitatively support our experimental findings.

#### 4. Conclusion

The study explores the electronic structures of  $[Dy(Por)(L)]^+$  complexes in both ground and excitedstates using the CASSCF method. Results revealed significant changes in sublevel structure upon replacing nitrogen with oxygen in the capping ligand, leading to variations in the energy separation between

the lowest and second lowest substates. Particularly,  $[Dy(Por)(L3)]^+$  exhibits a deviation in the main magnetic axis orientation compared to other complexes, underlining ligand sensitivity in symmetry. Additionally, the study identifies SO states associated with  $\pi \rightarrow \pi *$  transitions in the Q and B bands. Furthermore, it confirms the presence of an antiferromagnetic-type **J-L** interaction between the orbital angular momentum generated by  $\pi$  and the total angular momentum of the dysprosium ion in  $[Dy(Por)(L3)]^+$  and  $[Dy(Por)(L4)]^+$  complexes.

#### Acknowledgements

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

#### References

- K. Kizaki, et al., *Chem. Commun.*, **53**, 6168-6171, (2017); T. Fukuda, et al., *Chem. Eur. J.*, **23**, 16357-16363, (2017).
- (2) A. Santria, サイバーメディア HPC ジャーナ
   ル. 2023, 13, p. 45-49
- (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).
- (8) A. Santria, et al., *Dalton Trans.*, 48, 7685-7692 (2019).
- (9) A. Santria, et al., *Inorg. Chem.*, **59**, 14326-14336 (2020).
- (10) L.C. Adi, et al., *Dalton Trans.*, **53**, 628-639(2024)

# データ駆動型キャビテーションモデルと

# その学習データセットの構築に関する研究

# 岡林 希依 大阪大学 大学院工学研究科

#### 1. はじめに

近年の画像認識技術の成功に、畳み込みニュー ラルネットワーク(convolutional neural networks; CNN)の存在がある。CNN は畳み込み演算を行 う畳み込み層を複数含む構造を持ち、効率的に大 規模・高次元データから特徴量を抽出できる特徴 がある。そのため、高次元のデータを扱う顔認証 や画像のセグメンテーション等に適用されてい る。この流れを受け、CFD の分野でも、CNN を 取り込んだ研究が盛んに行われている。現象を記 述する支配方程式や数理モデルを機械学習モデ ルで代替する「データ駆動型モデル」はその一つ である。しかし、解析対象の多くは単相流であり、 気液二相流を始めとした混相流に焦点を当てた ものはまだ少ない。

気液二相流の一種であるキャビテーション流 れは、相変化を伴う、時空間にマルチスケールな 現象であり、また強い非定常性を持つ。多様で複 雑なキャビテーション流れの数値計算手法には 様々な手法が存在し、全てのキャビテーション現 象を統一的に表現できるモデルは今のところ存 在しない。著者ら[1]はキャビテーションモデル 構築のブレークスルーとして、計測データを訓練 データとして教師あり学習させた「データ駆動型 キャビテーションモデル」の開発を目標とした研 究を行っており、CFD データを訓練データセッ トとしてその枠組みを示した。図1にその模式図 を示す。

将来的に訓練データセット(図1の入力デー タと正解ラベル)となる計測データとして、現 在キャビテーション流れの粒子画像流速測定法

(particle image velocimetry; PIV) により得られ た速度場、高速度カメラ画像、壁面マウントさ れた圧力センサデータなどを想定しているが、 境界層付近やキャビティ内部のデータの欠損、 ノイズや観測誤差、数値計算と組み合わせる際 の保存性など、機械学習モデルの訓練データと してそのまま利用できる計測データの獲得は困 難である。そこで本研究では、二次元翼周りの キャビテーション流れにアンサンブルカルマン フィルタを用いたデータ同化を適用すること で、現在取得可能な計測データに基づいた流れ 場を再現し、欠損データの補完、保存性の評価 など、データ駆動型モデルの訓練データを構築 する手法としての適用可能性を調査する。本稿 では、双子実験によりデータ同化システムの構 築と定性的な検証を行った結果を紹介する。

#### 2. 問題設定

本研究の最終的な目標は、未だ再現精度が十 分でない既存の数理モデルを用いた計算に計測 データを同化することで、実現象に基づいた流 れ場を表現することである。本研究では、この 状況と類似した問題設定として、疑似計測デー タに沖田・梶島による湧き出し型の均質流体モ デル[2]の計算結果、データ同化における時間発 展計算に Chen & Heister による湧き出し型の均 質流体モデル[3]を用いる双子実験を行う。

#### 3. 数値計算の概要

Large-eddy simulation (LES) のフィルターを施 した流れ場( $\bar{u}_i, \bar{p}$ )の支配方程式を用いる。これ以



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[1] 降、すべての変数は翼弦長C、主流流速 $U_m$ および +分遠方における液相密度ρ<sub>L</sub> で無次元化して 表され、均質流体の密度pは、液相体積率f<sub>L</sub>と液 相密度 $\rho_L$ により $\rho \approx \rho_L f_L$ と近似される。

#### 3.1 支配方程式

キャビテーションの体積変動に伴う液相の圧 縮性を考慮するために低マッハ数近似解法[4]を 用いた液相の質量保存式は次式で表される。

$$\frac{Df_L}{Dt} + f_L \left( M^2 \frac{D\bar{p}}{Dt} + \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} \right) = 0$$
(1)

式(1)中のマッハ数 $M = U_{\infty}/c$ (cは音速)は計算領 域全体で一様に与えられる定数である。フィルタ ーをかけた液相の運動方程式は次式で表される。

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{f_L} \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \bar{p} + \frac{2}{3} f_L k_{SGS} \right) \\ + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ 2 \left( \nu_{SGS} + \frac{1}{\text{Re}} \right) \bar{S}_{ij} \right] \quad (2)$$

ここで、式(2)のS<sub>ii</sub>はひずみ速度テンソルである。 乱流エネルギーk<sub>scs</sub>、渦動粘性係数v<sub>scs</sub>を与える 乱流モデルとして一方程式型ダイナミック SGS モデル[5]を用いる。数値計算法の詳細は文献[6, 7]を参照されたい。

以上より、システムモデルの状態ベクトルは以 下のように定義される。

 $\mathbf{x} = [\overline{\boldsymbol{u}} \quad \overline{\boldsymbol{v}} \quad \overline{\boldsymbol{w}} \quad \overline{\boldsymbol{U}} \quad \overline{\boldsymbol{V}} \quad \overline{\boldsymbol{W}} \quad \overline{\boldsymbol{p}} \quad \boldsymbol{f}_L \quad \boldsymbol{k}_{SGS}]^{\mathrm{T}} \quad (3)$ 式(3)はすべての計算格子上の値で定義され、 **Ū**, **V**, **W**は式(1), (2)をコロケート格子で計算する

ことに伴って現れる速度の反変成分である。

#### 3.2 キャビテーションモデル

非定常なキャビテーション現象を再現するた め、液相体積率の変化を湧き出し型の均質流体モ デルで表現する。本研究では、疑似計測データに 沖田・梶島による均質流体モデル[2]

$$\frac{Df_L}{Dt} = [C_g(1 - f_L) + C_l f_L](p - p_v)$$
(4)

(以下、OKモデル)を、データ同化システムに おける液相体積率の時間発展に Chen & Heister に よる均質流体モデル[3]

$$\frac{Df_L}{Dt} = C_{\rm CH}(p - p_v) \tag{5}$$

(以下、CHモデル)を用いる。 $p_n$ は飽和蒸気圧 であり、キャビテーション数σで設定される。OK モデルは、線形化された Rayleigh-Plesset 方程式 を元に CH モデルを改善した数理モデルであり、 シートキャビティ界面の波打ちや三次元性など、 複雑な現象を再現することができる(第5節に後 述)。一方、CHモデルでは、そのような現象はほ とんど再現されないところが大きく異なる。

#### 3.3 計算条件

解析対象は、信頼できる実験データ[8,9]が得ら れている Clark-Y11.7% 翼周りの流れである。実験 条件[9]に合わせて、流体は13℃の水とし、各物性 値もこれに従って設定する。 迎角およびキャビテ ーション数 $\sigma$ は CH モデルと OK モデルで再現さ れる現象が大きく異なる2°および $\sigma = 0.5$ を採用 する。

#### 3.4 疑似計測値の設定

疑似計測データとして、Tomographic PIV (TPIV) により取得する翼周りの三次元速度場と、間接的 に得られる液相体積率分布を仮定する。本双子実 験では、簡単のため計測位置を格子位置に対応さ せており、翼スパン方向に1格子おきに計測値を 与える。このときの翼型近傍の格子配置、及び瞬 時の計測領域(赤点の位置に該当)の一例を図2 に示す。キャビティの内部のデータは粒子が入ら ないために欠損しているものとし、計測値を与え ない。したがって、計測領域は計測データを取得 する時間ごとのキャビティ形状に応じて変化す る。キャビティの界面は、翼周りの時間平均的な 液相体積率分布と PIV の生データの比較[10] に より $f_{I}^{\text{interface}} = 0.75$ (黄色曲線)とする。液相体 積率f,の計測は非常に困難だが、TPIV で粒子が 存在する領域が液相であることを考えると、キャ ビティ界面と液相領域は間接的に推定すること ができる。したがって本研究では、f<sub>L</sub>の疑似計測 値として、TPIVの計測領域の境界部に $f_L$ =  $f_L^{\text{interface}}$ 、計測領域全体に完全な液相として $f_L$  = 1を与える。サンプリング周波数は 5000Hz であ り、これは本計算において 4000 タイムステップ 間隔に相当する。以上より、観測ベクトルyoを次 式のように設定する。

 $\mathbf{y}^{o} = [u^{o} \quad v^{o} \quad w^{o} \quad f_{L}^{o}]^{T}$  (4) 添え字o (observation) は図 2 の赤点あるいは黄色 曲線上で定義された値を示す。

#### 4. データ同化手法

逐次型データ同化手法であるアンサンブルカ ルマンフィルタ (ensemble Kalman filter; EnKF)を 基礎としたデータ同化を行う。本手法では、最小 誤差分散推定を原理とし、時系列観測ベクトル**y**<sup>o</sup>



図2:疑似計測データの領域

に基づいて状態ベクトルxが逐次的に修正される。 誤差分散は正規分布に基づくと仮定され、m個の アンサンブルメンバーにより近似される。本研究 では、局所アンサンブル変換カルマンフィルタ (Local Ensemble Transform Kalman Filter; LETKF) [11]により数値計算と観測値の統合を行う。 LETKF は、EnKF に局所化のアルゴリズムを取り 入れ、さらにアンサンブル変換カルマンフィルタ (ensemble transform Kalman filter; ETKF) [12]の アンサンブルアップデート手法を組み込んだ手 法であり、大規模な誤差共分散行列を現実的に計 算化可能なサイズに削減し、計算効率を高めたもの である。通常の LETKF では、格子点に基づいた直 方体で構成する local patch を用いて局所化が行わ れる。しかし本計算では、境界付近で格子を密に詰 めているために、翼近傍に近づくほど局所化のスケ ールが小さくなり観測が十分に同化できなくなる。本 研究では、local patch を持たない LETKF[13]を用 い、実質的な距離に基づいた局所化を行う。

初期アンサンブル摂動は、タイムラグアンサン ブルにより、CHモデルで計算されたシート・ク ラウドキャビテーション1周期の流れをアンサ ンブルメンバー数だけ等間隔にずらして作成す る。本研究では、局所化の効果と計算効率を考え、 アンサンブルメンバー数はm = 10とする。

#### 5. 計算結果と考察

CH モデルのみのケース、OK モデルのみのケ ース、同化を行ったケースの比較を図 3 に示す。 OK モデルのみのケースは、第 3.4 節の疑似計測 値を切り出した計算結果に相当する。同化により、 参照データである OK モデルの流れ場が定性的



(c) CH model + DA

図3:(a)データ同化なし,(c)データ同化ありの各ケースと,(b)疑似計測データに対応する参照デー タとの比較.

に再現されている。特に、赤矩形で囲んだ翼面上 の逆流領域 (図 3(b)(c)左、濃い青)、 $f_L = f_L^{\text{interface}}$ の付近を移流するバロクリニックトルクに起因 する横渦[6,7] (図 3(b)(c)中央)、波打つようなキ ャビテーション形状(図 3(b)(c)右)などの特徴的 な現象が再現されている。キャビティ内部の計測 値を与えていないにも関わらず界面の波打ちが 再現されたのは、計測領域境界に $f_L = f_L^{\text{interface}} の$ 疑似計測値を与えたことに加え、横渦とそれに誘 起される形状の波打ちの相互作用が再現された ためである。さらに、CH モデルで発生していた 大規模なクラウドキャビティ(図3(a)右、黄矩形) も同化によりほぼ消滅し、参照データ(OK モデ ルのみ)と同程度となっている。これは PIV の観 測領域全体に $f_L = 1$ を計測値として与えた効果 であり、直接的観測が困難なflを、間接的に観測 情報として取り込んだことを示している。

#### 6. おわりに

二次元翼周りのキャビテーション流れを対象 として、現在のキャビテーション流れ計測で取得 可能なシートキャビティなどの気泡群や境界層 にデータの欠損がある PIV データと、PIV から間 接的に取得される液相体積率分布を想定した疑 似計測値を数値シミュレーションに同化させる 双子実験を行った。その結果、データ同化により 疑似計測値に対応する参照データの特徴的な現 象を再現することを示した。今後は構築したデー タ同化システムがキャビテーションの実計測値 に対しても機能するか検証する予定である。

#### 参考文献

- (1) 野田, 岡林, 混相流, 37-1 (2023), 94-102.
- (2) 沖田, 梶島, 日本機械学会論文集 B 編, 68-667 (2002) 637-644.
- (3) Chen, Y. and Heister, S. D., J. Fluids Eng., 116-3 (1994) 613-618.
- (4) 稲垣ら、日本機械学会論文集 B 編, 6-649(2000) 2274-2281.
- (5) 梶島,野町,日本機械学会論文集 B 編, 69-685 (2003) 1996-2001.
- (6) 岡林ら,日本機械学会論文集,85-876 (2019) 19-00124.
- (7) Okabayashi, K. et al., J. Fluids Eng., 145-4 (2023) 041204.
- (8) 沼地ら,東北大学高速力学研究所報告,1-1(1949) 1-16.
- (9) 渡邉ら, ターボ機械, 41-7 (2013) 440-446.
- (10) Ilyushin, B. B. et al., Int. J. Heat Fluid Flow, 103(2023) 109197.
- (11) Hunt, B. R. et al, Physica D, 230 (2007) 112–126.
- (12) Bishop, C. H. et al., Mon. Wea. Rev., 129 (2001) 420–436.
- (13) Miyoshi, T. et al., SOLA, 3 (2007) 89-92.

# Inter-subunit coupling in PyrR pyrimidine synthase attenuator

protein oligomers

Sandhya P. Tiwari Institute for Protein Research, Osaka University

#### 1. Introduction

Many proteins form oligomers under physiological conditions, which can confer thermal stability, greater complexity in structural and functional activity. Understanding the mechanisms of assembly provide insight into protein evolution, providing a framework for how protein structures adapt to gain new function. Previously, due to computational limits, intrinsic dynamics, or vibrational signatures, have typically been modelled implicitly by considering the conformation of a participating protein subunit in isolation. Generally, it is assumed the isolated subunit is in a conformation which captures the implicit effect of the binding partner on the intrinsic dynamics, suggesting the influence of a partnering subunit is already integrated. However, this description lacks detailed information on the influence of critical contacts at the protein-protein interface. Since the binding of many proteins to their protein partners is tightly regulated via control of their relative intrinsic dynamics, investigation of the intrinsic dynamics of proteins is necessary for the comprehensive understanding of function. In this study, we examine the case of a protein family, pyrimidine synthesis attenuator PyrR<sup>1</sup>, to understand the effect of the binding partners in the stability of the tetramer vs. the dimer, and to uncover signals that link to their modulation via allostery. By partitioning the covariance matrices from elastic network models to obtain normal modes<sup>2</sup>, we found that explicitly modelling the partnering subunits revealed the

influence of perturbations that extend from the tetrameric interface, that is not captured by modelling the subunits in isolation. We want to confirm this effect with greater detail with molecular dynamics (MD) simulations.

#### 2. Simulation preparation

Table 1 Systems prepare for MD simulations, 5GP -Guanosine-5'-Monophosphate

PDB ID.	Monomer	Dimer	Tetramer
4p82	No 5GP	No 5GP	N.A.
	5GP	5GP	5GP
4p86	without	without	without
	5GP	5GP	5GP

Initial structures were obtained from the PDB for PyrR dimer (4p82) and PyrR tetramer (4p86 with 5GP). Missing residues were modeled using Modeller<sup>3</sup>, and the subunits were extracted as monomer (4p82, 4p86) and dimer (4p86) with and without allosteric ligands, 5GP. Explicit solvent MD simulations were prepared using the Amber99sb-ildn-ions forcefield<sup>4</sup>, in GROMACS<sup>5</sup> v2021 on the local computing cluster before performing the production run for 300 ns on SQUID GPUs, for four replicas per system.

# 3. Overall rigidity of 4p86 dimer without 5GP vs.4p82 dimer with no 5GP

Preliminary analysis shows the persistence of lower root mean squared fluctuations in the dimer from the 4p86 tetramer X-ray crystal structure, despite the removal of the allosteric ligand, 5GP. In Figure 1, we see that the regions with larger RMSF differences tend to be closer to the dimeric interface. When selecting residues that interact with 5GP in the initial PDB file (4p86) shows an asymmetry in the number of residues within 5Å between chains. More residues in chain B are in contact with the ligand, and this affects the apparent rigidity of chain B in the Dimer from 4p86, even when the ligand is removed.



Figure 1: Root-mean-square fluctuations of Dimer from PDB 4p82 (with no 5GP) in orange vs. Dimer (with 5GP removed) from PDB 4p86 in blue. The residues that interact with 5GP in the initial structure are marked in green panels.

#### 4. Future direction

As part of our investigation, we will be exploring the pairwise correlation within each protein system to understand the changes in dynamics conferred by allosteric ligand-binding and the influence of coupling from partnering protein subunits. We will differentiate the stabilizing effects of allosteric ligand-binding via a systematic comparison with the ligand-free structure, at different orders of oligomerization.

#### 5. Conclusion

Our results show that the MD simulations were effective in capturing crucial changes to the flexibility of PyrR from different starting conformations. With our analysis of coupling using the MD simulations trajectories, we expect to uncover the interplay between allosteric ligand-binding and oligomerization on the stability of the PyrR protein.

#### References

- Perica, T., et al. Evolution of oligomeric state through allosteric pathways that mimic ligand binding. Science, 346, 6216 (2014).
- (2) Dasgupta, B., Tiwari, S.P. Explicit versus implicit consideration of binding partners in protein–protein complex to elucidate intrinsic dynamics. Biophys Rev 14, 1379–1392 (2022).
- (3) Eswar N, et al. (2006) Comparative Protein Structure Modeling Using Modeller. Current Protocols in Bioinform. [Internet] 15.
- (4) Lindorff-Larsen K., et al. (2010) Improved Side-Chain Torsion Potentials for the Amber ff99SB Protein Force Field. Proteins 78:1950– 1958.
- (5) Abraham MJ, et al. (2015) GROMACS: High performance molecular simulations through multi-level parallelism from laptops to supercomputers. SoftwareX 1–2:19–25.

# 射影法を用いて保存則を発見するニューラル常微分方程式

# 松原 崇 大阪大学 大学院基礎工学研究科

#### 1. はじめに

ニューラルネットワークは画像や自然言語の 処理で目覚ましい成果を上げているが、力学系の モデル化にも盛んに研究されている。対象となる のは、物理シミュレーションにおける化学的ダイ ナミクス、気候変動予測や天気予報のための気候 ダイナミクス、自動車やロボットの物理的ダイナ ミクスなどがある。その歴史は少なくとも 1990 年代に遡り、多くのアプローチが提案されてきた。 近年提案された、ニューラル常微分方程式 (NODE)は、連続時間ダイナミクスのためのニュ ーラルネットワークを再定義した。対象となるシ ステムはシステムの状態を用いた常微分方程式 (ODE)で記述できる。NODE はベクトル場をニュ ーラルネットワークに置き換え、数値積分を用い て解を求める。

実世界のほとんどのシステムには、時間の経過 とともに変化しない量である「保存量」が存在す る。あるシステムが保存量を持つとき、初期値に 対して、解は保存量の等高線に留まる。これまで、 保存量に関する事前知識を取り入れることで、対 象システムを正確に学習することが試みられて きた。Greydanus らは、ハミルトン方程式をニュ ーラルネットワークで近似し、ハミルトニアンと 呼ばれるシステムのエネルギーを保存するハミ ルトニアンニューラルネットワーク(HNN)を提 案した(1)。Finzi らはグラフニューラルネットワ ーク等を利用して線形運動量と角運動量を保存 するアーキテクチャを提案し(2)、また HNN を拡 張してホロノミック制約を持つシステムを扱え るようにした(3)。松原らは、離散化された偏微分 方程式(PDE)の質量を保存するモデルを提案した (4)。これらの研究によって、ニューラルネットワ ークは対象システムの保存量に関する事前知識 をより取り入れることで、ダイナミクスをより正 確にモデル化できることが証明された。

これまでの研究では、主に既知の保存量を保存 することが目的であった。しかし、ニューラルネ ットワークが未知の対象システムを学習する状 況では、対象システムの保存量も未知であること が予想され、上記のどの手法が有効であるかは明 らかでない。そこで本稿では、データから保存量 を発見し保存する手法を提案する。この手法は、 データから様々な種類の保存量を同じ枠組みで 発見し、保存しつつ予測できる。また、HNNの ような既知の保存量を保存するように設計され たニューラルネットワークと組み合わせること が可能である。

#### 2. 手法

#### 2.1 準備

システム $\frac{d}{dt} = f(u)$ を考える。 $u \in \mathbb{R}^{N}$ はN次元 の状態、fはベクトル場である。ある量V(u)が 補zン料であるとは、任意の解u(t)についてそ の値が一定であることである。つまり $\frac{d}{dt}V(u) =$ 0である。システムが少なくともK個の局所的に 線形独立な保存量 $V_1, \dots, V_K$ を持つとき、初期値  $u_0$ から得られる解u(t)は(N - K)部分多様体

 $\mathcal{M} = \{ u \in \mathbb{R}^N : V_k(u) = V_k(u_0) \text{ for } k = 1, ..., K \}$ 上に存在する。よって、点uにおいて、ベクトル 場fはこの部分多様体の接空間

 $T_u \mathcal{M} = \{ w \in \mathbb{R}^N : \nabla V_k(u)^\top w = 0 \text{ for } k = 1, ..., K \}$ 上にある。このとき

 $\frac{d}{dt}V_{k}(u) = \nabla V_{k}(u)^{\mathsf{T}}\frac{d}{dt}u = \nabla V_{k}(u)^{\mathsf{T}}f(u) = 0$ なので、量 $V_{k}$ が保存されることがわかる。

NODE や HNN のような、ニューラルネット ワーク等で実装された基盤となるモデル $\frac{d}{dt}u =$ g(u)を想定する。対象システム $\frac{d}{dt} = f(u)の観測$ 

対象システム	ダイナミクスの分類	次元数N	保存量
重力二体問題	正準形式のハミルトン系	8	エネルギー、線形運動量、角運動量
二重振り子	ポアソン系	8	エネルギー、ホロノミック制約
フィッツフュー=南雲モデル	ディラック構造	4	キルヒホッフの法則

表1:検証データセット

データを用いて、この基盤となるモデルを訓 練し、数理モデルを得ることが可能である。し かし、その結果は常にモデル化誤差を含む。 NODE は一切の保存量を仮定しておらず、HNN もエネルギー保存則しか仮定していない。よっ て、実際に予測に使うと、モデル化誤差が蓄積 し、短期間で全く異なる無意味な結果を導いて しまう。

#### 2.2 提案手法

そこで、ニューラルネットワークによって、 データから保存量を同定し、それを保存しつつ 予測を行うことを考える。なお、簡単禍のため 2.1節と同じ変数を用いるが、ここからは対象シ ステムではなくニューラルネットワークについ て議論することに注意されたい。

K個の出力を持つニューラルネットワークを 導入し、各出力が1つの保存量 $V_k : \mathbb{R}^N \rightarrow$  $\mathbb{R}$  (k = 1, ..., K)を学習すると想定する。保存量 の集まりをベクトル

 $V(u) = (V_1(u), V_2(u), ..., V_K(u))^{\dagger}$ で表現する。提案手法が作るベクトル場をfとする。 $V_k$ は保存量なので、 $M(u) = \frac{\partial V(u)}{\partial u}$ とすると

 $\mathbf{0} = \frac{d}{dt} V(u(t)) = M(u) \frac{d}{dt} u(t) = M(u) f(u)$ が拘束条件となる。また、f(u) dg(u)に近いこ とが望ましい。つまり

```
\min_f \|f(u) - g(u)\|^2
```

$$s.t.\ M(u)f(u)=0$$

なる最適化問題を解きたい。ラグランジュの未 定乗数 $\lambda \in \mathbb{R}^{K}$ を用いて

$$\frac{\partial}{\partial f}(\|f(u) - g(u)\|^2 + \lambda^{\mathsf{T}} M(u) f(u)) = 0$$

より、

$$f(u) = g(u) - M(u)^{\intercal} \lambda$$
であり、これを解くと $f(u) = P(u)g(u).$ 

 $P(u) = I - M(u)^{T}(M(u)M(u)^{T})^{-1}M(u)$ を得る。これは一種の射影法であり、ベクトル 場を射影することで保存量が保存されることを 保証する。

基盤となるモデルgの訓練と同じように、提 案手法fを訓練できる。fはgとVの組み合わせで できているため、2つのニューラルネットワー クを同時に訓練すると考えることができる。も しくは、fという非常に特殊な構造をした1つの ニューラルネットワークを訓練すると考えても よい。いずれにせよ、自動微分を用いることで 簡単に勾配を計算することができ、確率的勾配 降下法によって訓練できる。

無論、学習された保存量*V*<sub>k</sub>が対象システムの 真の保存量と一致するとは限らず、少なくとも モデル化誤差を含む。しかし、保存量が存在す るという仮定によって、より精度の高いモデル 化が可能であると予想される。

#### 3. 実験

#### 3.1 実験設定

表1にある保存量を持つシステムを用いて、 提案手法と基盤となるモデルの比較評価を行っ た.2次元配置空間上の重力二体問題は、正準 形式の典型的なハミルトン系である。全エネル ギーに加えて、空間の対称性に関係する保存 量、つまりx方向とy方向の線形運動量と角運動 量を持っている。二重振り子は、極座標におい てハミルトン系である。しかし、それを直交座 標に変換すると、ハミルトン系ではなくポアソ ン系になる。二本の振り子の長さと二つの重り の移動方向がホロノミック制約となり、それぞ れが対応する保存量を持つ。エネルギーを含め て5つの保存量がある。フィッツフュー=南雲 モデルは、生物の神経細胞を電気回路としてモ

		重力二体問題		二重振り	二重振り子		フィッツフュー=南雲モデル	
	К	MSE	VPT	MSE	VPT	MSE	VPT	
基盤	0	5.17	0.362	0.82	0.110	73.66	0.236	
提案手法	1	7.10	0.374	0.75	0.156	54.18	0.127	
	2	7.78	0.450	0.73	0.198	37.03	0.437	
	3	>1000	0.147	0.69	0.411	>1000000	0.007	
	4	>1000	0.101	0.77	0.395			
	5	>1000	0.080	0.80	0.585			
	6	>1000	0.070	12.53	0.005			

表 2: 実験結果

デル化したもので、スパイクと呼ばれる急激な 電圧変化を示す。電気回路はその回路のトポロ ジーとキルヒホッフの電流・電圧則によって拘 束されたシステムとみなすことができる。イン ダクタとコンデンサに流れる電流と印加される 電圧を状態とすると、4つの状態に対して2つ の拘束があり、二つの保存量がある。抵抗器に おけるエネルギー散逸のため、ポアソン系では なく、ディラック構造を持つとみなされる。た だ、ページ数の都合で詳細は省略する。

数値積分は Dormand-Prince 法(dopri5)を用い た。保存量V、NODE、HNN を隠れ層二層の全 結合ニューラルネットワークで実装した。各隠 れ層は200ユニットで構成され、tanh 関数を活 性化関数として持つ。重みは直交行列として初 期化した。二重振り子は二次の常微分方程式で あり、位置の時間微分は状態の一部である速度 として既知であるため、加速度のみをニューラ ルネットワークの出力として扱った。

また、最小化する損失関数として、1ステッ プ誤差を用いた。具体的には、真の状態と前の ステップから予測した状態の平均二乗誤差 (MSE)である。学習には Adam を用い、バッチ サイズ 200、学習率は10<sup>-3</sup>に初期化し、コサイ ン波に従ってゼロまで減衰させた(5)。

評価指標として、損失関数と同じ1ステップ 誤差を用いた。まとめる際に見やすいよう 10<sup>9</sup> 倍した。状態やエネルギーの予測誤差は、状態 が発散した場合に非常に大きくなってしまった り、位相のずれに鈍感であったりするので、代 わりに valid prediction time (VPT)を用いた(6)。こ れは初期値問題において、予測状態の MSE が閾 値を初めて超えるまでの時間を、時系列長 *S* で 割ったものである。VPT を求める前に、状態の 各要素を学習用データセットで平均 0、分散 1 となるように正規化し, 閾値を 0.01 とした。

#### 3.2 ハミルトン系からの学習

基盤となるモデルとして HNN を用い、提案 手法を二体問題データセットからの学習で評価 した。予備実験で、提案手法は HNN のハミル トニアンHを保存量 $V_k$ の一つとして扱わない方 が良い性能を得られることがわかった。5回の 試行の中央値と標準偏差を表2左端にまとめ た。提案手法は*K* = 1~2で単なる HNN より優 れた VPT を達成し、K = 3で急に性能が低下し た。提案手法が、HNN のハミルトニアンHに加 え、2つの保存量を発見したことを示唆してい る。二体問題はハミルトン系であり、HNN で学 習可能なはずであるが、ハミルトニアンH以外 の保存量が存在するという事前知識が、より良 い学習を導くことが分かる。提案手法を用いる と1ステップ誤差が悪化したことから、提案手 法を用いない HNN は短期的な変化に過適合し

ており、長期的なダイナミクスを予測すること が困難であることが示唆される。

#### 3.3 未知のシステムからの学習

その他のデータセットに対し、基盤となるモ デルを NODE とした結果も表 2 にまとめた。二 重振り子データセットにおいて、提案手法はK= 1から5の範囲で1ステップ誤差と VPT を改善し た。特に、*K* = 5では、VPT がベースラインの5 倍以上となった。二重振り子では、システムエ ネルギーに加えて、位置に2つのホロノミック 制約があり、速度を含む2つの制約を導く。従 って、提案手法がK = 5で最良の VPT を得、 K>5で破綻するのは理に適っている。フィッツ フュー=南雲モデルはエネルギー保存系ではな いが、キルヒホッフの電流・電圧則が状態を拘 束し、二つの保存量を導く。K = 2で1ステップ 誤差と VPT が非常に良くなった。二重振り子の 場合はK = 5、フィッツフュー=南雲の場合は K=2と、提案手法はすべての保存量を見つける ことができたと言える。

#### 4. まとめ

本稿では、ニューラルネットワークを用いて 対象システムの保存量を同定し、それを用いる ことでより良いモデル化と予測を実現する手法 について紹介した。提案手法は、ニューラルネ ットワークが保存量を学習すると仮定し、時間 発展を定義した部分多様体に射影することで、 データから保存量を発見し保存できる。適切な 数の保存量の存在を仮定すると、基盤となるモ デルよりもはるかに長い時間、将来の状態を正 確に予測できる。提案手法は、システムのエネ ルギー、運動量、制約に関する保存量を全く同 じアプローチで発見し保存できる。そのため、 提案手法は未知の力学系の性質を明らかにし、 科学的な発見に貢献することが期待される。

#### 参考文献

- S. Greydanus, M. Dzamba, and J. Yosinski, "Hamiltonian Neural Networks," Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS), 2019.
- (2) M. Finzi, S. Stanton, P. Izmailov, and A.G. Wilson, "Generalizing Convolutional Neural Networks for Equivariance to Lie Groups on Arbitrary Continuous Data," International Conference on Machine Learning (ICML), pp. 3146–3157, 2020.
- M. Finzi, K.A. Wang, and A.G. Wilson,
   "Simplifying Hamiltonian and Lagrangian Neural Networks via Explicit Constraints," Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS), 2020.
- (4) T. Matsubara, A. Ishikawa, and T. Yaguchi,
   "Deep Energy-Based Modeling of Discrete-Time Physics," Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS), 2020.
- (5) D.P. Kingma and J. Ba, "Adam: A Method for Stochastic Optimization," International Conference on Learning Representations (ICLR), 2015.
- (6) P.R. Vlachas, J. Pathak, B.R. Hunt, T.P. Sapsis, M. Girvan, E. Ott, and P. Koumoutsakos, "Backpropagation algorithms and Reservoir Computing in Recurrent Neural Networks for the forecasting of complex spatiotemporal dynamics," Neural Networks, vol.126, pp.191– 217, 2020.

# 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

# 金 鋼 大阪大学 大学院基礎工学研究科

#### 1. はじめに

多数の分子が集合した複雑分子系、柔らかな分 子系、ソフトマターなどと称される物質は高分 子・液晶・ガラスなどを含みさらに水そのものや 生体膜まで対象を拡大したものを総称しており 物理、化学、生物、工学を幅広く跨る学際領域を 形成している。特に、分子が凝縮することによっ てガラス転移で見られる遅いダイナミクスを示 す共通性質に着目し、遅いダイナミクスの本質を 理解することを基礎的問題として捉え、ソフトマ ターにおける協調運動や自己組織化の統合的な 解明に注力している。そこで、ガラスの遅いダイ ナミクスに対する分子動力学(MD)シミュレーシ ョンによる研究をおこない深層学習の融合研究 を実施した。

#### 2. 研究内容

#### 2.1 説明可能な深層学習による反応座標探索

タンパク質の構造変化などの複雑分子系において、安定状態をつなぐ遷移経路を特徴づけることは遅いダイナミクスの時定数を特定する上で重要課題である。そのため原子位置に関する高次元の配置座標から決まる集団変数Qに関する確率分布関数P(Q)をサンプリングし、その対数を取ることで平均力ポテンシャル(potential of mean force; PMF) $F(Q) = -k_BT \ln P(Q)$ が計算される。 PMF は自由エネルギー地形とも呼ばれ、安定状態は鞍点により区別され、さらに実際の経路が鞍点を通過するとき、変数Qは構造変化を特徴付ける反応座標といえる。本研究ではアラニンジペプチドの立体配座が変化する異性化過程に着目する。真空中ではエネルギー的に安定な2状態であ



Fig 1. (a) Alanine dipeptide molecule and number of each atom. (b) PMF with dihedral angles  $\phi, \psi$  as variables. Committor  $p_B$  is widely distributed and the dividing line is not clear.

る β シート構造(状態 A)と α ヘリックス構造(状 態 B)が存在することが知られ、遷移状態(TS)を特 徴付ける候補変数として二面角(φ, ψ)が重要視さ れてきた(Fig. 1)。先行研究では MD 計算と機械 学習を用いた二面角の系統だった探索方法が提 案されている。さらに原子間距離も集団変数とな り得ることを考慮すると、異性化過程のより精緻 な記述が期待できる。そこで、原子間距離を候補 変数として説明可能な深層学習を行うことでど の原子間距離が適切な反応座標となり得るかを 明らかにすることを目的とした。

# 2.2 深層学習によるガラス形成液体の温度変化 に伴う構造変化の解明



Fig 2. Particle configurations and corresponding graph structure.

液体を冷却しても結晶化が阻害されると、融点 以下の液体状態が維持されガラスになる。ガラス 形成液体の構造緩和時間は温度の低下とともに 急激に遅くなりガラス転移温度で非晶質構造が 凍結する。このガラス転移現象をもたらす何らか の特徴的な静的構造があるかという点について は多くの研究がされている。近年、機械学習を用 いてガラス形成液体の構造における特徴量を抽 出する研究が多数報告されている。注目すべきは、 畳み込みニューラルネットワーク(CNN)やグラ フニューラルネットワーク(GNN)といった最新 の深層学習技術が応用されていることである。例 えば、GNN を用いればガラス形成液体の構造と 動力学を学習し、従来の機械学習手法より高い性 能予測を示すことが報告されている。さらに CNN による画像認識を応用すると、ガラスと液 体の構造分類とその分類根拠となる特徴的構造 が抽出されることも報告された。本研究では GNN によって異なる2つ温度のガラス形成液体 の構造を分類することを目指した。

#### 3. 計算手法

#### 3.1 説明可能な深層学習による反応座標探索

真空中のアラニンジペプチドの異性化過程に ついて MD 計算を行い、TS 近傍の分子構造 2000 点をサンプリングした。それぞれを初期状態とし 1 ps の MD 計算を 100 回実施し、状態 A に辿り 着く前に状態 B に遷移する確率をコミッターp<sub>B</sub> として定量化した。入力変数として初期状態の化 学結合を除いた原子間距離を用い、コミッター $p_B$ を出力変数として、シグモイド関数 $p_B(q) = [1 + tanh(q)]/2$ に回帰することで適切な反応座標 qの学習を行った。なお用いたニューラルネットワークは5つの隠れ層から構成され、奇数層、偶数層それぞれが 400 ノード、200 ノードを持っている。

# 3.2 深層学習によるガラス形成液体の温度変化 に伴う構造変化の解明

ガラス形成液体のモデルとして 3 次元 2 成分 soft-sphere モデルを採用し、MD シミュレーショ ンをおこなった。GNN はグラフを扱うための深 層学習手法であり、グラフとは、要素をノード、 要素間の関係をエッジとして構成されたデータ 構造である。GNN はグラフデータを入力とする ことを活かし、入力グラフのノードとエッジの情 報の更新を繰り返し、自ら特徴量を作り出すこと ができる。得られた粒子配置について、粒子をノ ード、第一配位圏以下の粒子間のつながりをエッ ジとしてモデル化したグラフ構造を構築した (Fig. 2)。粒子の種類と粒子間の相対座標をグラフ に符号化することで、異なる 2 つの温度の構造分 類(二値分類)をおこなった。

#### 4. 結果

#### 4.1 説明可能な深層学習による反応座標探索

深層学習による $p_B$ のシグモイド関数への回帰 結果を Fig. 3(a)に示す。相関係数 0.903 となり、 反応座標qを獲得できたことを意味する。ただし 深層学習モデルにおいて複数回の非線形結合が 行われていることから、入力変数のqへの寄与を 直接的に求めることは困難である。そこで深層学 習に対して解釈性を与えることのできる「説明可 能な AI」(XAI)の一手法である LIME(local interpretable model-agnostic explanations)を適用し た。その結果、最も寄与の大きい入力変数として 原子 6 –10 間の距離  $r_{6-10}$ 、二番目に寄与が大き い入力変数として $r_{6-11}$ が得られた。特定された 2 つの変数を用いて PMF を描画すると、遷移状態 をあらわす*p<sub>B</sub>*~0.5が状態 A と状態 B を適切に区 別する分割線をなすことがわかった(Fig. 3(b)) [1]。



Fig 3. (a) Regression results from deep learning (b) PMF of interatomic distance  $r_{6-10}$ ,  $r_{6-11}$  indicated by XAI. We can distinguish between states A and B and see that the saddle point is bounded by a structure in the transition state  $p_B \sim 0.5$ .

## 4.2 深層学習によるガラス形成液体の温度変化 に伴う構造変化の解明

GNN は、ガラス転移温度近傍の構造と温度の 高い液体構造の違いを 100 %識別できることが わかった。ただし、一方で高温の液体構造同士は 識別できないことがわかった。このことは温度の 変化にしたがって、ガラスと液体とで微細な構造 変化を GNN は学習していることを示唆する。ま た Attention により算出された粒子間の重要度に ついて高温では粒子間の重要度にばらつきが見 られ、低温になるにつれてその重要度が概ね均一 になることがわかった。さらに Attention により 抽出された寄与度が高い粒子は、ボンド秩序変数  $Q_6$ が小さい傾向にあることを見出した。以上のこ とから、GNN はガラス形成液体の温度の違いを *Q*6 が小さく局所的に結晶秩序の度合いが小さい 粒子を根拠に分類していると考えられる [2]。

#### 5. おわりに

本研究課題では、ソフトマターに対する MD シ ミュレーションに深層学習を応用する融合研究 を展開した。それぞれの研究テーマは個別的であ るが、MD シミュレーションによる時間変化する 原子配置データセットから次元削減による物性 の説明を目指す高度化された研究になりえるも のと考えている。

#### 参考文献

- K. Okada, *et al.* Unveiling interatomic distances influencing the reaction coordinates in alanine dipeptide isomerization: An explainable deep learning. http://arxiv.org/abs/2402.08448 (2024).
- (2) K. Yano, et al., in preparation.

# 酸化物系人エ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

# 藤平 哲也 大阪大学 大学院基礎工学研究科

#### 1. はじめに

近年、ニューラルネットワークのソフトウェア 実装にもとづく人工知能 (AI) 技術が著しい進展 を見せる一方で、脳の構造と機能を直接的に模倣 したニューロモルフィックコンピューティング・ ハードウェアの開発が期待されている。その基幹 素子 (人工シナプス)として、印加電圧の履歴に 応じて不揮発的な抵抗変化を示す新規の受動素 子であるメモリスタが注目されている<sup>(1)</sup>。

当グループでは、電界誘起の局所酸化還元にも とづく抵抗変化現象を示す酸化チタンに着目し、 ルチル型 TiO2 単結晶基板上に独自の平面 4 端子 型素子を作製して、酸素空孔分布状態と抵抗変化 特性の相関を評価してきた。この系において、還 元 TiO2-x 結晶中の酸素空孔が n 形ドーパント(ド ナー)として機能し、その挙動が不揮発抵抗変化 の発現に本質的な役割を果たす。これまでに酸素 空孔の再分布や抵抗変化の挙動が顕著な結晶方 位依存性を示すことや(図1)、酸素空孔が凝集し て形成される剪断面(面欠陥)が、不可逆性の原 因となり電気特性に影響することを見出してき た(2)。抵抗変化の素過程はドナー欠陥である酸素 空孔の電界下でのドリフト・拡散による再分布で あり、そのメカニズムを理解することが高機能の メモリスタ (人工シナプス)素子を設計する上で 不可欠である。特にメモリスタの動作環境である 外部電場下における酸素空孔の挙動を把握する ことが重要である。我々はバイアス印加その場透 過電子顕微鏡 (TEM) 観察などにより抵抗変化と その起源となる微細構造をリアルタイムで解析 する実験を行ってきているが、酸素空孔の原子ス ケールでの挙動を知ることは困難である。一方、 第一原理計算を用いることで原子スケールでの 酸素空孔の挙動を解析することが可能となる。し

かし、剪断面を再現した大規模モデルを取り扱う 計算コストや外部電場存在下での電子状態を計 算する技術的な困難から、剪断面近傍での酸素空 孔挙動や外部電場下における酸素空孔の挙動は これまで理論的に明らかになっていない。

本研究では、TiO<sub>2-x</sub>系人工シナプス素子のドナ 一欠陥である酸素空孔の形成および移動の挙動 に関して、外部電場の効果を含めた第一原理計算 により理論的な解析を行うことを目的とした。ス ラブモデルを用いた dipole-sheet 法を用いること により外部電場を再現し、ルチル型 TiO<sub>2</sub>の表面 と酸素空孔に対する外部電場の影響を評価した。 また、酸素空孔の集積により生じる拡張欠陥であ る剪断面構造を包含するスーパーセルモデルを 構築し、剪断面の近傍サイトにおける酸素空孔の 挙動を調べた。これらの第一原理計算の結果とル チル型 TiO<sub>2-x</sub>系メモリスタ素子の実験結果を合 わせて、ドナー欠陥である酸素空孔の挙動と抵抗 変化特性の関連を議論した。



図1:TiO<sub>2-x</sub>平面4端子型メモリスタにお ける酸素空孔分布(着色領域)の面方位依 存性<sup>(2)</sup>.

#### 2. スーパーセルモデルおよび計算方法

ルチル型 TiO2の(001)および(100)表面を有する スーパーセルモデルを作成し、次節で述べる dipole-sheet 法を用いて表面エネルギーと酸素空 孔形成エネルギーの外部電場依存性を評価した。 さらに、酸素空孔の規則的集積により形成される 拡張欠陥である剪断面構造を含むスーパーセル モデルを構築し(詳細は4節で記述)、剪断面近 傍における酸素空孔エネルギーのサイト依存性 を評価した。構造最適化および全エネルギーの計 算は平面波基底 PAW 法にもとづく VASP code<sup>(3)</sup> を用いて行なった。交換相関ポテンシャルは一般 化勾配近似(GGA-PBE)を用い、平面波基底のカッ トオフエネルギーは 400 eV に設定した。k 点は Monkhorst-Pack の方法にもとづいて逆格子空間 での間隔が 0.4 Å-1 以下となるようサンプリング した。これらの計算条件により、全エネルギーの 値が 1meV/atom 以下の精度で収束していること を確認した。

# 3. TiO2表面および酸素空孔エネルギーの外部 電場依存性

本研究では外部電界の効果を導入する方法と して、Feibelman らによって提案された dipolesheet 法<sup>(4)</sup>を用いた。この方法では真空層の中央に ダイポールシートを配置することで、スラブに垂 直な方向に一様な電場を導入する(図 2)。このモ デルの真空領域の電位分布はポアソン方程式を 用いて導ける。

$$\nabla^2 \phi = -\frac{\rho}{\varepsilon_0} \tag{3.1}$$

$$F = -\nabla\phi \tag{3.2}$$

$$F_{surface} = -\frac{\sigma}{\varepsilon_0} \tag{3.3}$$

ここで、φは電位、ρは電荷密度、ε₀は真空中の 誘電率、Fは電場、Fsurfaceは表面における電場の 値、σは表面電荷密度である。外部電場の方向は 下向きを正としている。印加された外部電場によ りエネルギー準位が分裂する現象をシュタルク 効果と呼ぶ。シュタルク効果による系の全エネル ギーは次のように表される。



図 2: Dipole-sheet 法による外部電場印 加の模式図.



図 3:(100)および(001)表面モデルのエネ ルギーの電場依存性.

$$E(F) = E(0) - \mu F - \frac{1}{2}\alpha F^2 + O(F^3)$$
(3.4)

ここでµは双極子モーメント、αは分極率である。 図3に、ルチル型TiO2の(100)および(001)表面 モデルにおけるエネルギーの外部電場依存性の 計算結果を示す(零電場におけるエネルギーを0 とする)。各表面のエネルギーの電場依存性は、 零電場付近を頂点とする二次関数的な傾向を示 しており、シュタルク効果を再現している。また、 (100)面のエネルギー曲線は対称に近いが、(001) 面では非対称性が大きくなっている。シュタルク 効果の式(3.4)を用いてエネルギーをフィッティ ングすることにより、(100)および(001)表面モデ
ルの双極子モーメント μ と分極率 α はそれぞれ 5.6×10<sup>-4</sup>, 3.6×10<sup>-3</sup> (eÅ/atom) および 5.7×10<sup>-2</sup>, 5.6×10<sup>-2</sup> (eÅ<sup>2</sup>/V· atom)と算出された。分極率の差 は僅かである一方、双極子モーメントの値は (001) 面が(100) 面と比べて大きくなっている。双 極子モーメントはシュタルク効果の式(3.4)にお ける電場の一次の係数であり、大きな双極子モー メントが(001)面のエネルギー曲線の非対称性の 要因になっていると考えられる。双極子モーメン トの違いは結晶構造に由来していると考えられ、 ルチル型 TiO2 の(001)の表面構造が不安定である ことが関係していると考えられる。構造最適化に より得られた表面モデルの最表面の酸素原子のz 座標の変位量を調べると、(001)面で酸素原子が 外部電場の影響を大きく受けていることが分か った。つまり電場下での原子変位量の違いが、こ れらの面方位によるダイポールモーメントの違 いに関係していると考えられる。

図4にTiO2表面近傍サイトにおける酸素空孔 形成エネルギーの電場依存性の計算結果を示す。 縦軸は外部電場の値が-0.4 eV のときのエネルギ ーを基準とした相対エネルギーとした。(100)と (001)いずれの面方位においても、表面下部の s2s4 サイトの酸素空孔と比べて、表面の s1 サイト で大きな電場依存性が見られた。この結果から、 TiO<sub>2</sub>の最表面の酸素空孔は電場により形成エネ ルギーが変化しやすい傾向があることが示唆さ れた。つまり、電界の印加により表面近傍の酸素 空孔濃度が変化しやすい可能性がある。また、 (100)面と(001)面を比較すると、(100)面の酸素空 孔形成エネルギーは電界に対する依存性が大き いことが分かった。実験的には、図1に示すTiO2 メモリスタの光学顕微鏡像のように、(100)面デ バイスは(001)面デバイスよりも電圧印加による 酸素空孔のコントラスト (濃度)変化が強いこと が観測されている。これは、(100)面の酸素空孔形 成の電界依存性が大きいことが関係している可 能性がある。本解析では表面近傍サイトの酸素空 孔の移動過程の計算も行い、一部の不安定な酸素 空孔サイトで電場により移動エネルギー障壁が



図 4:(a)(100)および (b)(001)表面近傍サイトにおける酸素空孔エネルギーの外部電場依存性.

変化することが観察されたが、全体として顕著な 電界の効果は見られなかった。酸素空孔を含むモ デルへの適切な外部電場の印加方法に関して、引 き続き検討が必要であると考えている。

# 9. 剪断面構造のモデリングと近傍サイト酸素空 孔挙動の評価

酸素空孔の集積により生じる剪断面構造近傍 での空孔挙動を解析するため、ルチル型 TiO<sub>2</sub>の ユニットセルに対する剪断面ベクトル<sup>(5)</sup>を用い た操作にもとづき酸素欠損を有するマグネリ相 Ti<sub>n</sub>O<sub>2n-1</sub>の構造を作成し、剪断面を包含するスー パーセルモデルを構築した。以下に(121)剪断面 (n=4)の場合についてその詳細を示す。まず、 以下の式を用いてルチル型 TiO<sub>2</sub>のユニットセル を変形し、(121)剪断面に平行な構造に分割する。

$$\begin{bmatrix} a_M^{(n)} \\ b_M^{(n)} \\ c_M^{(n)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 2n-1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_r \\ b_r \\ c_r \end{bmatrix}$$
(4.1)

ここで、 $a_M^{(n)}$ 、 $b_M^{(n)}$ 、 $c_M^{(n)}$ はマグネリ相 Ti<sub>4</sub>O<sub>7</sub>の

ユニットセルベクトル、*a*<sub>r</sub>, *b*<sub>r</sub>, *c*<sub>r</sub>はルチル型 TiO<sub>2</sub> のユニットセルベクトルである。 (121)剪断面 モデルはすべり面とすべり方向の関係性から次 のように表記される。

## $(121)\frac{1}{2}[0\bar{1}1]$

(4.1)の操作で母体構造が(121)剪断面によりn面 ごとに周期的なブロックに分割されており(す なわちnが剪断面間の距離を調整)、続いてブロ ックを剪断ベクトル1/2[011]に平行に移動させ る。最後に重なり合った原子を取り除くことで 剪断面構造モデルが得られる(図5)。本研究で は、TiO2四端子型メモリスタのバイアス印加実 験で観察された(121)および(132)面剪断面構造に ついてスーパーセルモデルを構築し、第一原理 計算による解析を行った。剪断面近傍サイトの 酸素空孔形成エネルギーの計算結果から、剪断 面近傍では空孔形成エネルギーが増大し、酸素 空孔は不安定であることが示された(図5)。ま た、酸素空孔移動過程の計算の結果から、(121) 剪断面に沿う方向の酸素空孔の移動エネルギー



図 5:酸化チタン(121)剪断面構造のスーパ ーセルモデルと剪断面近傍サイトの酸素 空孔エネルギーの計算結果.

は非常に大きく、酸素空孔が移動しにくいこと が分かった。一方で、(132)剪断面近傍では移動 エネルギー障壁が小さく、酸素空孔が移動しや すいことが示唆された。これらの結果はバイア ス印加その場 TEM 実験による剪断面生成・成長 の観察結果と整合する部分もあり、剪断面の種 類によりその近傍での酸素空孔の形成と移動の 挙動が異なり、剪断面の伸縮や不可逆性に対し て異なる影響を与える可能性が示唆された。

#### 5. おわりに

本研究では人工シナプス素子として期待され るルチル型 TiO2系メモリスタのドナー欠陥であ る酸素空孔の挙動に関して、特に外部電場およ び剪断面構造の効果に着目して第一原理計算に よる解析を行った。計算により得られた酸素空 孔の形成エネルギーは、ルチル型 TiO2メモリス タ素子のバイアス印加実験の結果と整合する傾 向がみられた。今後、外部電場印加の方法を再 検討し、剪断面構造モデルに関する系統的な計 算を進めると共に、有限要素法等と連携したマ ルチスケールシミュレーションにより、デバイ ス特性のより直接的な議論を行っていきたいと 考えている。本研究の遂行にあたっては大阪大 学サイバーメディアセンター大規模計算機シス テムのご支援と、大阪大学の酒井朗先生、大学 院生の二宮雅輝さん、小泉優紀さんのご協力を 頂きました。ここに深く感謝申し上げます。

#### 参考文献

- (1) D. B. Strukov et al., Nature. 453, 80 (2008).
- (2) S.Takeuchi et al., Sci. Rep. 9, 2601 (2019).
- (3) G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B, 47, 558 (1993).
- (4) J. P. Feibelman et al., Phys. Rev. B 64, 125403 (2001).
- (5) G. J. Woodet et al., Proc. R. Soc. A 375, 105 (1981).

## 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

### 村上 賢 大阪大学 蛋白質研究所

#### 1. はじめに

ゲノムには約2万種類の蛋白質を記録する遺伝子 領域と、その遺伝子の発現量を調節する約90万のシ ス調節領域(cRE)が含まれている。この二つはどち らも同じ4種類の塩基で構成されている。しかし、 遺伝子領域の3塩基ずつのコドンがアミノ酸配列を 決定するという明確なルールとは対照的に、cRE が 含まれる Non-coding 領域とよばれるゲノム領域は 非常に複雑なルールでコントロールされている。一 つの遺伝子の遺伝子発現の制御には複数の cRE が関 与することが多いが、これらの領域は常に転写因子 などの蛋白質がアクセス可能なわけではなく、状況 によりクロマチン状態が変化することで、蛋白質が アクセス可能なアクティブな状態と、クロマチンが 折りたたまれ、転写因子などが認識できないインア クティブな状態を遷移する。つまり、細胞はコンテ クストによりノンコーディング領域のアクティブな ゲノム配列そのものを変化させることにより、細胞 は遺伝子の発現を調節している。さらにこのクロマ チン状態は確率的に変動しているため、アクティブ なゲノム配列には可塑性がある。そのため、細胞集 団は常に不均一な細胞状態を含んでおり、ワディン トンランドスケープに代表されるように(1)、このよ うな不均一性が細胞種の遷移では重要な役割を持つ。 さらに病理的な状況では腫瘍細胞が持つエピジェネ ティックな不均一性が腫瘍の治療抵抗性などと関わ ることが知られている(2)。このような理由からヒト ゲノムのDNA配列が明らかになり数十年が経過し ていても、細胞がどのように遺伝子発現を調節して いるかをゲノム配列から読み取ることはいまだ困難 である。そこで、細胞集団内において、それぞれの 細胞のアクティブなゲノム配列を決定し、それぞれ のアクティブな領域がどのように遺伝子発現に関与 するか、つまり cRE として活性を持つかを一細胞レ ベルで決定することが、細胞の遺伝子発現制御を理

解する上で重要である。

近年このような複雑な規則により決定される現象 に対して、人間が明示的なルールを与えずに予測を 得る方法として、ディープニューラルネットワーク が広く用いられるようになっている。中でも、 Attention 機構と呼ばれる技術は、入力されるデー タの順序などに依存せず柔軟に学習ができる手法と して自然言語処理などで目覚ましい成果をあげてい る(3)。そこで我々はこの論文でAttention 機構を用 いて塩基配列情報、距離情報、クロマチンアクセシ ビリティ情報を柔軟に統合し、遺伝子ディープニュ ーラルネットワークを用いて、単一モデルで cRE 活 性を一細胞レベルで決定する手法を提案する。

#### 2. フレームワークの概要

一細胞レベルで cRE の活性を決定するために我々 は scRNA-seg と scATAC-seg を同時に取得可能な scATAC-seq+GEX データを用いた。活性化 cRE はクロ マチンがオープン状態になることが知られている。 そのため活性化した cRE は scATAC-seq のピーク領 域に含まれていると考えられる。しかし scATAC-seq で検出されるピーク領域のすべてが cRE ではない。 そこで scATAC-seq で検出されるピーク領域のうち どれが cRE でどれがそうではないのかを見分ける必 要がある。そこで cRE は遺伝子発現を制御する領域 なので、cRE の活性が変化するとターゲット遺伝子 の遺伝子発現が変化するという性質を用いた。さら に cRE の活性とクロマチンアクセシビリティは一般 に正に相関することが知られている(4)。そのため、 cRE の活性が細胞間で変化する際、クロマチンアク セシビリティとターゲットとなる遺伝子発現は同時 に変化する。これらのことから、cRE 領域のクロマ チンアクセシビリティ情報と遺伝子発現の相関の強 さからある領域が cRE として機能しているかどうか が予測可能であると考えられる。さらに、我々は cRE

の予測精度をあげるため二つの情報を加えた。一つ は塩基配列情報を用いた。一般に cRE には転写因子 などの蛋白質が特異的な塩基配列を認識して結合し 転写複合体を形成することで、転写を促進する。そ のためそれぞれの細胞種ごとに cRE には塩基配列の 特徴があることが知られており、塩基配列情報から エンハンサー活性やクロマチンアクセシビリティが 予測可能であることが知られている(5)。それだけで はなく、エンハンサーの活性はエンハンサーそれ自 身の塩基配列だけではなく、ターゲットとなる遺伝 子のプロモーターの性質にも影響されることが報告 されている(6)。そのため、cRE の塩基配列とターゲ ット遺伝子のプロモーターの塩基配列の組み合わせ 情報を用いることが、それぞれの遺伝子を制御する cRE 領域を予測するのに重要であると考えられる。 最後の要素として遺伝子と cRE 領域の距離も重要で ある。cRE と遺伝子プロモーターとの相互作用はゲ ノムの 3D 構造が変化し cRE と遺伝子プロモーター が近接することが重要であると報告されている(7)。 そのため、遺伝子と相互作用する cRE 領域はターゲ ット遺伝子に近い領域により多く存在する可能性が 高い。

これらの情報を柔軟に統合して cRE 領域を決定す るために我々はディープラーニング手法を用いた。 まず、cRE が一般的に遺伝子を制御可能な遺伝子近 傍領域の ATAC-seq ピーク領域のクロマチンアクセ シビリティ、ピーク領域の塩基配列、ピークから遺 伝子 TSS までの距離情報を用いて遺伝子発現を一細 胞レベルで予測するようなニューラルネットワーク を構築する。そしてこのニューラルネットワーク を構築する。そしてこのニューラルネットワークを 覚習させたのちに、それぞれのピーク領域の遺伝子 発現への寄与度を計算し、先行研究と同様に、寄与 度が高い領域をエンハンサー領域として決定した。 遺伝子発現への寄与度が高いほどエンハンサー活性 が高い傾向があることは過去の研究でも報告されて いる傾向である(8)。

我々はこのフレームワークは1回分の scATACseq+GEX データからこのデータに含まれる細胞集団 で機能する cRE 領域を決定する。まず一般的なQC を行ったのち、プロモーターピークを持つ遺伝子の みを抽出する。プロモーターピークは遺伝子のTSS ±500bp以内にあるATACピークを定義される。そ してプロモーターピークを持つすべての遺伝子に関 して、遺伝子近傍領域(TSS±3\*10<sup>5</sup>)を定義し、 この領域に含まれるすべてのATAC-seqピーク領域 がそれぞれの遺伝子のcRE候補領域となる。1つの 学習データは、1つの遺伝子からなり、プロモータ ーの塩基配列、cRE候補領域の塩基配列、TSSから の距離、プロモーター・cRE候補領域の一細胞ごと



図 1:モデル構造図

の ATAC-seq カウントがネットワークに対する入力 となり、これらの情報から一細胞ごとの遺伝子発現 を予測する。われわれが構築したニューラルネット ワークは二つの部分からなっている(図1)。一つ が DNA シークエンスエンコーダで、もう一つがアテ ンションブロックである。ニューラルネットワーク の処理はまず DNA シークエンスエンコーダが塩基配 列情報を処理するところからはじめる。DNA シーク エンスエンコーダは8層からなる CNN である(図 2)。このネットワークは1つのピークの1350塩基 の塩基配列情報を入力として受け取り、それを32 次元の特徴ベクトルに圧縮する。まずこのフレーム ワークでは遺伝子周囲の cRE 候補領域と、プロモー ター領域の塩基配列を、ピーク1つずつ DNA シーク エンスエンコーダに入力し32 次元に圧縮する。



図 2:DNA エンコーダの構造

アテンションブロックは入力として、cRE 候補領 域、プロモーター領域の 32 次元の塩基配列圧縮表 現、それぞれの cRE 候補領域と TSS との距離、一細 胞ごとの scATAC-seq データを入力として受け取る。 cRE 候補領域の数は遺伝子ごとに異なるため、入力 のデータ次元は遺伝子ごとに異なる。そこで我々は cRE 候補領域数が少ない場合は、パディングにより 入力データを保管し、アテンションを計算した。

アテンションブロックでは、どの cRE 候補領域が 遺伝子発現の予測に重要であり、どの領域がそうで はないのかを取捨選択する。この cRE 領域のターゲ ット遺伝子の選択性はプロモーターと cRE 候補領域 の塩基配列と組み合わせと、距離によって決定され ることが既存研究として報告されている。そこで、 我々はプロモーター領域の塩基配列と、cRE 候補領 域の塩基配列・距離との間でクロスアテンションを 計算することによって重要な領域を抽出した。この 重要度はアテンションマトリクスとして計算される。 そしてこの重みづけ (アテンションマトリクス) に 基づいて、ATAC-seqの情報を足し算する。このよう にして得られた ATAC-seq から抽出された特徴量か ら、遺伝子発現を予測する。モデルの学習は学習を 安定させるため、遺伝子発現値の代わりに PCA 圧縮 座標を用いて行われる。ニューラルネットワークモ デルの学習が終了したのち、我々のフレームワーク は Contribution score を計算することで cRE の活 性を一細胞レベルで出力する。cRE の活性の計算の ために我々は DEEPLift スコアを用いる。DEEPLift スコアはニューラルネットワークの Contribution スコアを計算するためのツールとして開発されてい る手法である。

#### 3. 性能評価

我々はまず 10x 社から公開されている健常ドナーの顆粒球除去後ヒト末梢血細胞(PBMC)をベンチマーク用のデータセットとして用い、cRE の予測精度を評価した。低発現遺伝子のフィルタリングと、プロモーターピークを持たない遺伝子の除外を行ったのち、我々は 6853 個の遺伝子を解析に用いた。代表的な遺伝子の cRE 活性予測結果を示す。CD3D は T 細胞特異的な発現を持つ遺伝子であるが、興味深いことに、個々の cRE 活性でみると CD4 T 細胞特異的な cRE や CD8 T 細胞特異的な cRE が存在し、細胞種によっ

て活性化される cRE-遺伝子ペアが異なることがわかった(図3)。



## エンハンサー活性

次に我々は、cRE 予測精度の定量的なベンチマー クを行った。ここでは FANTOM5 database (CAGE-seq) (9)と PCHiC-seq(10)の二つの指標を用いて予測を おこなった。そしてモデルが予測する cRE の活性値 が、どの程度 CAGE-seq や PCHiC-seq の予測と合致 しているかを評価した。そして我々のフレームワー クの精度を、同一条件でトレーニングした既存手法 (8,11,12,13)と比較した。結果として我々の手法は CAGE-seq の予測タスクでも PCHiC-seq の予測タスク でも既存手法より高い AUROC で cRE を予測すること が可能であった(図 4、5)。



図 4:CAGE-seq データによる性能評価



図 5:PCHiC データによる性能評価



次に我々は予測された cRE 領域がどの程度正確で あるかをさらに検証するために eQTL がどの程度予 測領域に濃縮するかを用いて検証を行った。ここで は GTEx portal(14)に登録されている PBMC の eQTL データを用いてそれぞれのツールで予測された cRE 領域に eQTL がどの程度濃縮するか計算した。結果と して我々のモデルは既存モデルよりも有意に eQTL を含む領域を cRE として検出する傾向があった(図 6)。興味深いことに、我々のモデルが予測した cRE 領域は、FANTOM5 データベースや、PCHiC で予測され た cRE 領域と比較しても eQTL の濃縮率が高いこと がわかった。

#### 4. おわりに

本研究で我々は、Attention 機構を組み込んだデ ィープラーニング手法により、cRE の塩基配列、距 離情報、クロマチンアクセシビリティ、遺伝子発現 データを用いて一細胞レベルでエンハンサーの活性 を決定する手法を構築した。我々の手法は遺伝子間 で共通のモデルを用いて転写制御のルールを学習す ることを特徴としており、既存手法よりも高い精度 で cRE の活性を決定することが可能であった。本手 法は一検体のシングルセルデータで学習可能である ように設計されているため、臨床検体を用いたエン ハンサー活性の解析に適していると考えられる。

#### 5. 参考文献

 C Waddington The Strategy of the Genes Allen &Unwin, London, (1957).

- (2) M Bi et al. Nature Cell Biology 22 701–715 (2020)
- (3) A Vaswani et al. arXiv:1706.03762 (2017)
- (4) Christoph Neumayr et al. Nature 606 406–413 (2022)
- (5) Žiga Avsec et al. Nature Methods 18 1196–1203(2021)
- (6) D Bergman et al. Nature. 607 176-184 (2022)
- (7) Gil Ron et al. Nature Communications 8 2237 (2017)
- (8) C González-Blas et al. Nature Methods 20 1355– 1367 (2023)
- (9) R Andersson et al. Nature 507 455–461 (2014)
- (10) Biola M. Javierre Cell. 167 1369-1384 (2016)
- (11) L Zhang et al.Sci Adv. 22 eabl7393 (2022)
- (12) Jeffrey M Granja et al. Nat Genet. 53 403-411 (2021)
- (13) H Pliner et al. Mol Cell. 71 858-871 (2018)
- (14) The GTEx Consortium Nat Genet. **45** 580–585 (2013)

## 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

#### 後藤 頌太

#### 大阪大学 大学院基礎工学研究科 物質創成専攻 化学工学領域

#### 1. はじめに

高分子はその化学組成だけでなく、鎖長や大域 的構造(トポロジー)といった鎖1本の構造特性 によっても物性を大きく変化させる材料物質で ある。特に、トポロジーに由来する絡み合いや、 もつれのような相互作用をトポロジー制約と呼 び、その動的性質との関係性に注目が集まってい る。最もよく知られているトポロジー制約は直線 状の高分子集合系における「絡み合い」であり、 確立した理論が存在し、これは実験事実と矛盾の ない結果を与える。これは、周囲の多数の直鎖状 高分子どうしの絡み合いを菅の中への閉じ込め として平均場近似し、その中での一次元拡散を考 えることで動的性質を説明する。この描像では直 鎖状高分子の末端の運動によって拡散するため、 末端の存在しない環状高分子には適用できない。 そこで、直鎖状高分子の「絡み合い」に対して、 環状高分子では一方の「穴」を他方が貫通するよ うな構造が重要なトポロジー制約と考えられて いる。しかしながら、このような環状高分子のト ポロジー制約やその動的性質との関係性に関す る理論はまだ十分に確立されておらず、計算機シ ミュレーションによる解析が重要となっている。

Michieletto らは直鎖状高分子と環状高分子の 集合系それぞれにおいて、割合 c の高分子を凍 結させ、残りの (1-c) の高分子のみ時間発展さ せるピン留め分子動力学シミュレーションを行 った[1]。その結果、環状高分子のみがガラスのよ うに拡散が完全に凍結することを報告した。この ことから、環状高分子のトポロジー制約は直鎖状 高分子のそれと本質的に異なるものであり、ガラ ス形成物質との類似性に注目が集まっている。た だし、平衡状態の分子動力学シミュレーションで は、拡散の凍結は観測されておらず、ガラス形成 物質との類似性も仮説の域をでない。

そこで本研究では、動的不均一性によって環状 高分子の動的性質を特徴づけることを目指した。 特に、鎖の硬さを変化させ、生成される「穴」が 動的性質に与える影響を明らかにすること目的 とした。ここで動的不均一性とは、ガラス形成物 質の遅いダイナミクスを特徴づける中心的な概 念であり、動きやすい粒子と動きづらい粒子の空 間的に不均一な分布を意味する。

#### 2. 計算条件

Kremer–Grest バネ・ビーズモデルを用いて環 状高分子の粗視化分子動力学シミュレーション を行った[2]。高分子の繰り返し単位である単量 体をビーズとして粗視化し、その質量と直径をそ れぞれmとσとする。ビーズ間には Lennard-Jones ポテンシャル

$$U_{\rm LJ}(r) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{6} \right]$$

における $r < r_c = 2^{1/6} \sigma$ の斥力部分がはたらく。 さらに隣接ビーズ間には伸び切り長を考慮した 結合ポテンシャル

$$U_{\text{bond}}(r) = -\frac{1}{2}KR_0^2 \ln\left[1 - \left(\frac{r}{R_0}\right)^2\right]$$

 $が r < R_0 の範囲ではたらく。ここで<math>K = 30 \varepsilon / \sigma^2 b$   $R_0 = 1.5 \sigma b \cup \tau v a$ 。 $U_{LJ}(r) b U_{bond}(r) b b b b d$   $\tau$  finitely extensible nonlinear elastic(FENE)ポテ  $ンシャル b 呼ばれる。 さらに連続する 3 つのビ
<math>
 - ズで定義される結合角<math>\theta$ に対して曲げ弾性ポテ ンシャル



図1:分子動力学シミュレーションの結果から抽出した柔軟な環状高分子(左)と硬い環状高分子(右)の典型的な構造。柔軟な鎖は小さく丸まった糸まり状の構造をとり、貫通構造を形成しない。それに対して、硬い環状高分子は大きく拡がってできた「穴」を互いに貫通する。

$$U_{\text{bend}}(\theta) = \varepsilon_{\theta}(1 - \cos \theta)$$

を課した。エネルギースケールを $\epsilon_{\theta}/\epsilon = 1.5,5$ と変化させ、鎖の硬さを変化させた。以降では、それぞれ柔軟な鎖および硬い鎖と呼ぶ。図1に示すように、柔軟な鎖はくしゃくしゃに丸まった球状の構造をとり、貫通構造を形成するだけの「穴」を持たない。一方、硬い鎖は大きく拡がって貫通構造を形成する。

以下、ビーズ質量*m*、ビーズ直径 $\sigma$ 、Lennard-Jones エネルギースケール $\epsilon$ を用いた単位系で無 次元化して示す。 鎖長 *N* = 400 とし、*M* = 100 本の鎖からなる 4 万ビーズ系とし、数密度 $\rho$  = 0.1,0.3,0.4,0.5,0.55 と変化させて、それぞれで 温度を*T* = 1.0とした定温定積のシミュレーシ ョンを実施した。さらに $\epsilon_{\theta}$  = 1.5において、柔軟 な直鎖状および環状高分子集合系における一般 的な設定であるより濃厚な $\rho$  = 0.85でも計算し た。

分子動力学シミュレーションには、Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) を使用した[3]。SQUID において 64 コアを用いた MPI 並列計算で平衡化および本計 算に、それぞれ 190 時間を要した。

#### 3. 結果

#### 3.1 重心の並進運動と変位分布

平均 2 乗変位 (Mean Square Displacement, MSD)

は粒子の拡散特性を特徴づけるのによく用いら れる物理量である。高分子の重心を $r_i$ とすると、 その MSD は、

 $\langle \Delta r^2(t) \rangle = \langle [r_i(t+t_0) - r_i(t_0)]^2 \rangle$ で定義される。ここで、それぞれ to は初期時刻、 tは時刻差、(·) はアンサンブル平均を表す。短時 間領域ではビーズが弾道運動しているため、 MSD はt<sup>2</sup>に比例し、長時間領域では自由拡散に 至りtに比例することが知られる。長時間領域に おける傾きから拡散係数Dが得られる。図2(a,b) に、それぞれ柔軟な環状高分子と硬い環状高分子 の MSD を示した。いずれの硬さにおいても、中 間時間領域に sub-diffusion が見られた。このこと は、硬さによらず高分子間に拡散を阻害する絡み 合いのような相互作用が存在することを示唆す る。また、柔軟な環状高分子は密度が最も高い  $\rho = 0.85$ でその傾きがおよそ 3/4 になっている のに対して、硬い環状高分子はより小さな傾きを 持ち、より強い相互作用を持つと考えられる。実 際にこのことは、挿入図に示した拡散係数 D の 密度依存性にも矛盾しない。

さらに、重心の変位分布の非ガウス性を特徴づ ける non-Gaussian parameter (NGP)

$$\alpha_2(t) = \frac{3\langle \Delta r^4(t) \rangle}{5\langle \Delta r^2(t) \rangle^2} - 1$$

を計算した。NGPは、変位分布がガウシアンに従う自由拡散領域で0となり、その値が大きいほど

非ガウス性が大きいことを表す。ガラス形成物質 においてパッキング効果により生じる空間不均 ーなダイナミクスを定量化する典型的な物理量 として知られるが、高分子の絡み合い効果の定量 化にも用いられている[4,5]。図2(c,d) に示した NGP の結果によると、柔軟な環状高分子では非 ガウス性が極めて小さく、平均場的な相互作用を していることを示唆している。それに対して硬い 環状高分子は密度と共に NGP のピークが大きく なり、直鎖状高分子の「絡み合い」やガラス形成 物質のパッキングと同様の振る舞いを示してい る。図2(a, b)の MSD の結果は硬さによらず高 分子間相互作用の存在を指し示すものであった ことから、鎖の硬さによって、環状高分子間相互 作用が本質的に変化することが示唆される。

#### 3.2 重心間の仮想結合とその切断ダイナミクス

環状高分子の硬さによる相互作用の変化と構造との関係を明らかにするため、重心間に仮想的な結合を定義し、その切断ダイナミクスを解析した[6]。環状高分子iとjの重心間距離r<sub>ii</sub>が

## $r_{ij} < \left< R_g^2 \right>^{0.5}$

のとき、仮想的に結合状態にあると定義する。図 3に仮想結合ネットワークの可視化図を示す。柔 軟な環状高分子の場合、疎に結合が分布している のに対して、硬い環状高分子は密でパーコレート したネットワーク構造が見られた。

また、*t* = 0において結合状態にあった(*i*,*j*)ペ アが、時刻*t* において、

#### $r_{ij}(t) > A \left\langle R_g^2 \right\rangle^{0.5}$

であれば、その結合が切断されたとする。ここで、



図 2:重心の平均 2 乗変位 (MSD) 〈 $\Delta r^2(t)$ 〉と non-Gaussian parameter (NGP)  $\alpha_2(t)$ の密度依存性。MSD は平均 2 乗慣性半径( $R_g^2(\rho)$ )で規格化している。それぞれ、(a, c)が $\epsilon_{\theta} = 1.5$ の柔軟な環状高分子、(b, d)が $\epsilon_{\theta} = 5$ の硬い環状高分子の結果。(a, b)では、弾道運動、sub-diffusion、自由拡散領域を示すため、〈 $\Delta r^2(t)$ 〉~ $t^{\alpha}$ を黒の実線でプロットした。それぞれ、 $\alpha = 2,3/4,1$ である。また、(a, b)の挿入図は拡散係数Dの密度依存性の片対数プロットである。 $\rho = 0.85$ は $\epsilon_{\theta} = 1.5$ でのみ計算している。

揺らぎによる瞬間的な結合破断を排除するため A = 1.2 とした。このとき、時刻差tにおける仮 想結合の切断本数 $B_i$ の空間的な不均一性は、結合 切断の動的感受率 $\chi_b(t)$ によって特徴づけられる。

$$\chi_b(t) = \frac{1}{M} \langle \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M \delta B_i(t) \delta B_j(t) \rangle$$

ここで、 $\delta B_i(t) = B_i(t)/2 - \langle B(t) \rangle$ は切断された 結合の平均本数からの揺らぎを表す。図4に動的 感受率 $\chi_b(t)$ の結果を示す。柔軟な環状高分子の 動的感受率 $\chi_b(t)$ はどの時間領域においても比較 的小さな値しか取らず、動的不均一性が小さいこ とがわかる。一方で、硬い環状高分子の場合、動 的感受率 $\chi_b(t)$ のピークは密度の増加とともに大 きくなる。これらの結果は、図2に示した NGP の結果と整合しており、環状高分子間の相互作用 が慣性半径によって本質的に変化しうることを 示唆する。

#### 4. おわりに

本課題では、Kremer-Grest バネ・ビーズモデル を用いて環状高分子集合系の粗視化分子動力学 シミュレーションに基づいた解析を行った。特に、 しばしば指摘されていた環状高分子間相互作用 のガラス形成物質との類似性について、動的不均 一性の観点から検証を行った。その結果、鎖が比 較的硬く、大きく広がって「穴」を形成するよう な環状鎖はガラス形成物質とよく似た遅いダイ ナミクスを示すのに対して、鎖が十分に柔らかく、 球状に丸まった糸まりのような構造をとる環状 高分子の場合には動的不均一性や非ガウス性が 極めて小さいにも関わらず、sub-diffusion など遅 いダイナミクスを示すことがわかった。このこと から、環状高分子は鎖が硬くなることで大きく広 がり、それに伴って「穴」を生成することで相互 作用が本質的に変化すると考えられる[7]。





図 3: それぞれ、(左図)  $\epsilon_{\theta} = 1.5$ ,  $\rho = 0.5$ の柔軟な環状高分子、(右図)  $\epsilon_{\theta} = 5$ ,  $\rho = 0.5$ の硬 い環状高分子における仮想結合ネットワークの可視化図。青色の球は重心を、オレンジ色の 線は結合を表す。



図 4:  $\varepsilon_{\theta} = 1.5$ および $\varepsilon_{\theta} = 5$ の環状高分子の仮想結合切断数の動的感受率 $\chi_{b}(t)$ の密度 $\rho$ 依存性。

#### 参考文献

- D. Michieletto, and M. S. Turner, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 113, 5195–5200 (2016).
- (2) K. Kremer, and G. S. Grest, The Journal of Chemical Physics, 92, 5057 (1998).
- (3) S. Plimpton, J. Comput. Phys., 117,1-19 (1995).
- (4) D. Pan and Z.-Y. Sun, Chin. J. Polym. Sci., 36, 1187–1194 (2018).
- (5) S. Goto, K. Kim, and N. Matubayasi, J. Chem. Phys. 155, 124901 (2021).
- (6) H. Shiba, T. Kawasaki, and A. Onuki, Phys. Rev. E 86, 041504 (2012).
- (7) S. Goto, K. Kim, and N. Matubayasi, ACS Polym. Au 3, 437 (2023).

## BERTを用いたT細胞受容体の機能解明

#### 安水 良明

大阪大学 大学院医学系研究科

#### 1. はじめに

CD4<sup>+</sup>T 細胞は免疫の中心的役割を果たしてお り、その異常は自己免疫疾患・腫瘍など、様々な 疾患の原因となる。申請者等は自己免疫疾患にお ける CD4<sup>+</sup>T 細胞の関わりを調べるため、シング ルセル解析と呼ばれる 1 細胞から遺伝子発現や T 細胞受容体(TCR)配列を検出実験手法を用いた 解析をおこない、Treg らしさや細胞傷害性など、 CD4<sup>+</sup>T 細胞を形作る 12 個の特徴量を定義するこ とに成功している。

抗原認識を行う TCR は DNA 再構成により 2x10<sup>19</sup> 種類にも及ぶ多様性を有しており、疾患に おける意義が重要視されてきた一方で、T 細胞受 容体配列の持つ意義はほぼ明らかになっていな かった。そこで本研究では、シングルセルデータ を元に、TCR 配列の特徴のみから CD4<sup>+</sup>T 細胞を 形作る 12 個の特徴量の予測を行い、どの CD4+T 細胞特徴が TCR によって形成されるかを明らか にすることを目的とした(図 1)。



図 1:TCR を用いた CD4<sup>+</sup>T 細胞特徴量の予測 2.手法

本研究では、CD4<sup>+</sup>T 細胞の持つ TCR 配列につ いて BERT の事前学習をおこない、CD4+T 細胞 で事前学習を行った BERT モデルで分散表現抽 出を行った後、全結合層や勾配ブースティングな どによる学習モデルの構築を行った。同モデルを 用いて、T 細胞特徴の予測を行った。

#### 3. 結果

はじめに、Bulk TCRseq による 500 万 TCR 配 列をもちいて Tregらしさの予測を行ったところ、 線形モデルを用いた既報に比べ良好な予測に成 功した。次に、CD4<sup>+</sup>T 細胞特徴の予測を行うため、
 遺伝子発現量と TCR 配列がわかっている 86,634
 細胞で学習器 (TCR-BERT + lightGBM)を作成、新たに用意した 10,412 細胞を用いて評価を行った。
 その結果、memory らしさ、Naïve らしさ、細胞障
 害性が TCR により説明できることが明らかになった(図 2)。



図2:予測結果

#### 4. おわりに

本研究では TCR-BERT をもちいた TCR 特徴解 析は既存の線形手法に比べて有用であることを 明らかにした。更に T 細胞極性 (Treg, Tfh, Th1 な ど)にくらべて、メモリーらしさ、細胞障害性、 ナイーブらしさなど、大区分的な形質のほうが TCR による影響を受けていることを明らかにし た。

本研究では TCR 特徴の持つポテンシャルを明 らかにすることが出来た。今後は患者検体を用い た大規模データ構築、実験的検証などを組み合わ せてよりヒト疾患に即した研究を行うことで、社 会実装につなげることが期待される。

#### 参考文献

 Yoshiaki Yasumizu *et al.*, "Single-cell transcriptome landscape of circulating CD4+ T cell populations in autoimmune diseases" *Cell Genomics*, 2024, 4, 2, 100473, 2024.

### :移動エントロピー法による流れ場の因果解析

#### 三宅 冬馬

北海道大学 大学院工学院 機械宇宙工学専攻

#### 1. はじめに

航空機の飛行時には、翼に作用する空気力と翼 の慣性力、弾性力が連成することで、図1に示す ような発散的な振動現象が生じることがある。こ の現象はフラッターと呼ばれ、翼の破壊など航空 機に対して致命的なダメージを与えるため、航空 機設計において重要な現象となっている。また、 航空機が巡行する遷音速域では、翼面上に生じる 衝撃波により、フラッターが発生しやすくなるこ とが知られており、この領域を遷音速ディップと 呼ぶ[1]。従って遷音速域におけるフラッター現 象が航空機設計上クリティカルとなる。亜音速域 ではポテンシャル方程式に基づく線形解析によ り高精度にフラッター発生速度を予測すること が可能であるが、遷音速域では衝撃波や境界層は く離など流体の非線形性が顕著となる。従って、 非線形方程式に基づく数値計算が必須となる。

Isogai[2、3]は、対称翼型を用いた2次元遷音速 フラッター解析および強制振動翼解析を行い、翼 面上での衝撃波振動により空気力の位相遅れが 生じ、系が不安定になることを明らかにした。こ れが遷音速ディップ発生の主な原因となる。一方、 現在高速旅客機で用いられている超臨界翼型は 翼面上のフラットな形状および翼後縁で正キャ ンバーを有し、これまで多くの解析が行われてき た対称翼型と比べ形状が大きく異なる。そのため、 遷音速域におけるフラッター特性も変化すると 考えられる。

Persoon ら[4]は、超臨界翼型を用いた遷音速フ ラッター試験を行い、特定の迎え角において2つ の遷音速ディップ(ダブル遷音速ディップ) が生じることを示した。従来の対称翼型の場合、 フラッター境界における遷音速ディップは単一 であり、2つのディップは超臨界翼型特有のもの と考えられる。しかし、これまでダブル遷音速デ ィップ現象について調査した研究例はほとんど 見られず、その発生メカニズムは未解明といえる。

本研究では、超臨界翼型を用いた2自由度系の 遷音速フラッター解析を行い、ダブル遷音速ディ ップの有無およびその発生メカニズムを明らか にすることを目的とした。



図1:フラッター現象の概略図

#### 2. 数値計算法

#### 2.1 流体方程式の数値解法

流体の支配方程式としてレイノルズ平均された2次元圧縮性Navier-Stokes方程式を用いた。 非粘性流束の評価にはSHUS[5]を用い、MUSCL法により高次精度化を行った。時間積分にはLU-SGS陰解法[6]を用いた。乱流モデルは1方程式 モデルであるSAモデル[7]を適用した。

#### 2.2 構造方程式の数値解法

図2に後退翼の一断面をモデル化した構造モ デルを示す。構造モデルの自由度は上下変位h(下 向きが正)、回転変位α(頭上げが正)の2自由度 である。無次元化された支配方程式は次式のよう になる[2]。

$$[M]{\ddot{q}} + [K]{q} = \{Q\}$$
(2)

ここで、

$$[M] = \begin{bmatrix} 1 & x_{\alpha} \\ x_{\alpha} & r_{\alpha}^{2} \end{bmatrix}, \qquad [K] = \begin{bmatrix} (\omega_{h}/\omega_{\alpha})^{2} & 0 \\ 0 & r_{\alpha}^{2} \end{bmatrix}$$

$$\{q\} = \{\overline{h} \\ \alpha \}, \qquad \{Q\} = \frac{V_{*}^{2}}{\pi} \{\frac{-C_{l}}{2C_{m}}\}$$
(3)

である。本研究では構造減衰は考えず $c_h = c_a = 0$ とした。 $x_a \ge r_a^2$ は静的質量不均衡と慣性能率である。また式(3)において、

$$V_* = \frac{U_{\infty}}{b\omega_{\alpha}\sqrt{\mu}}, \qquad \mu = \frac{m}{\rho_{\infty}b^2\pi}$$
(4)

である。ここで $V_*$ は Speed index(フラッター速度) と呼ばれ、フラッター境界の判断に使うパラメー タである。 $U_{\infty}$ 、 $\rho_{\infty}$ 、 $\mu$ はそれぞれ一様流速度、密 度、質量比を表す。

構造方程式の時間積分法として 4 段階 Runge-Kutta 法を用いた。ただし、各段階での空気力 $C_l$  と $C_m$ は一定であるとした。

#### 2.3 連成手法

流体構造連成には、時間方向に各方程式を交互 に解き進める Weakly Coupling 手法を用いた。ま た、流体側と構造側の無次元量が異なるため、以 下に示す物理量の変換が必要になる。

$$h_{\text{structure}} = 2H_{\text{fluid}}$$
$$\Delta \tau_{\text{structure}} = \frac{2M_{\infty}}{V_*\sqrt{\mu}} \Delta t_{\text{fluid}}$$
(5)

となる。ここでH<sub>fluid</sub>は流体方程式における座標 系から見た、翼の変位である。

#### 2.4 計算条件

本研究では、超臨界翼型として SC2-0610 翼型、 比較のため対称翼型として NACA64A010 翼型を 用いた。図3に SC2-0610 翼型の計算格子を示す。 格子点数は SC2-0610 翼型では1204×250、 NACA64A010 翼型では1355×250とし、計算格 子には O 型格子を用いた。翼面法線方向の最小 格子幅は2.0×10<sup>-6</sup>であり、これは翼面法線方向 の第1格子点において $y^+ < 1$ を満たす。外部境界 範囲はコード長の 50 倍とした。流体計算におけ る無次元時間刻み幅は $\Delta t = 10^{-4}$ とし、各計算ス テップにおいて内部反復を2回行っている。フラ ッター計算では、翼の変位に合わせて時間ステッ プごとに格子を移動させる必要がある。本計算で は、Melville ら[8]の手法を用いて格子を移動させ た。

式(3)と図 2 における構造パラメータは両翼型 に対して、 $x_{\alpha} = 1.8$ 、 $r_{\alpha}^2 = 3.48$ 、a = -2.0、 $\mu = 60$ 、 $\omega_h = \omega_{\alpha} = 100$  rad/sとした[2]。本研究で用 いた構造モデルで固有値解析を行うと、固有振動 数は 1 次(曲げ)モードで 11.35 Hz、2 次(捩り) モードで 84.95 Hz となる。

超臨界翼型では翼型の上下面非対称性から、定 常状態で翼に揚力とモーメントが働く。そのため 連成計算を行うと、空気力と構造力がつり合う位 置まで翼型が変位し、任意の迎角を基準としたフ





図3:計算格子

ラッター計算を行うことができない。従って、本 計算では式(2)の右辺に定常状態での揚力係数  $C_{l,0}$ 、ピッチングモーメント係数 $C_{m,0}$ を付加し、  $\{Q\}$ を新たに

$$\{Q\} = \frac{V_*^2}{\pi} \begin{cases} -\left(C_l - C_{l,0}\right) \\ 2\left(C_m - C_{m,0}\right) \end{cases}$$
(6)

と定義する。これによって、任意の平均迎角 $\alpha_m$ を 基準としたフラッター計算を行うことができる。 本計算では $\alpha_m = 0$  deg とした。

#### 3. 結果と考察

#### 3.1 SC2-0610 翼型のフラッター特性

図4にSC2-0610翼型のフラッター速度とフラ ッター周波数をNACA64A010翼型の結果ととも に示す。ここで、翼の変位の振動振幅が一定とな るときのV<sub>\*</sub>をフラッター速度、そのときの周波数 をフラッター周波数と定義した。

まずNACA64A010翼型に着目すると、マッハ 数の増大に伴いフラッター速度は低下し、M<sub>∞</sub> = 0.825において最小となることが分かる。また、 周波数も同様に低下し1次の曲げモードが支配的 となる。さらにマッハ数を大きくすると、フラッ ター速度が急激に増大し、曲げ-捩じりの連成振 動が生じる。これらの挙動は典型的な遷音速ディ ップ特性[2、3]を示している。

一方、超臨界翼型である SC2-0610 翼型を用い た解析では、2 つの遷音速ディップの発生がと らえられた。フラッター境界線の形状は、実験 で報告された結果[4]と似ており、2<sup>nd</sup>-dip は 1<sup>st</sup>dip に比べより深いディップとなった。また、両 ディップの底では 1 次の曲げモードが支配的で ある。

図5に1<sup>st</sup>-dipまわりでのマッハ数分布を示す。 マッハ数分布より、 $M_{\infty} = 0.775$ では翼上面にお いて衝撃波が発生しており、また衝撃波背後で のはく離は生じていないことが分かる。衝撃波 背後においてはく離がない場合の衝撃波振動は 系に対して負減衰であることが先行研究[9]にお いて分かっている。マッハ数を大きくしたM<sub>∞</sub> = 0.8では衝撃波背後ではく離が生じ、それに伴い フラッター速度が急激に増大する。以上の衝撃波 発生によるフラッター速度の低下および衝撃波 背後でのはく離によるフラッター速度の急激な 上昇は従来の対称翼と同様の傾向であるため、 1<sup>st</sup>-dip は典型的な遷音速ディップであることが 分かる。

図6に2<sup>nd</sup>-dipまわりでのマッハ数分布を示す。 翼上面に着目すると、3つすべてのマッハ数条 件において衝撃波背後ではく離が生じており、 流れ場構造はよく似ていることが分かる。一方、 翼下面では衝撃波の発生やその背後でのはく離





(b) フラッター周波数

図 4:SC2-0610 翼型と NACA64A010 翼型にお けるフラッター特性の比較







等、マッハ数条件によって流れ場に違いが見ら れることから、翼下面の流れ場構造、特に衝撃 波が 2<sup>nd</sup>-dip における不安定性を誘起しているこ とが示唆される。

#### 3.2 エネルギー収支による安定性の評価

Dierz ら[10]が導入した局所的なエネルギー収 支を用いて、非定常空気力の安定性の寄与につ いて評価した。

図7に、2<sup>nd</sup>-dip周りでの正規化された局所エ ネルギー分布 $c_w/c_{wmax}$ を示す。ここで、 $c_w$ の値 が正の場合、流体が構造にエネルギーを与えてい ることを表す。これは、空気力が系に対して負減 衰であることを意味する。逆に $c_w$ の値が負の場合、 空気力が系に対して正減衰であることを意味す る。 $M_{\infty} = 0.855$ および $M_{\infty} = 0.875$ では翼下面(青 線)において負のピークが生じており、翼下面の 衝撃波振動が正減衰として働くことが分かる。前 節では、翼下面の流れ場(衝撃波)が不安定性を 誘起していると考察したが、実際には翼下面衝撃 波は系を安定にしていることが分かった。従って、 次に翼上面(赤線)の局所エネルギー分布に着目 する。

図6に示したように、翼上面では3つのマッ ハ数条件すべてにおいて衝撃波背後で流れがは



図7:2<sup>nd</sup>-dip 周辺における局所エネルギー分布

く離している。この状態では通常、衝撃波振動 は正減衰となる[9]。図7の局所エネルギー分布 を見ると、 $M_{\infty} = 0.825$ および $M_{\infty} = 0.875$ では翼 上面に負のピークが生じており、衝撃波振動が正 減衰であることが分かる。しかし、 $M_{\infty} = 0.855$ で は正のピークであり、これは衝撃波振動が負減衰 として働くことを示している。本節で行った解析 により、 $2^{nd}$ -dipの発生原因は、 $M_{\infty} = 0.855$ での翼 上面における衝撃波振動であると結論付けられ る。

#### 4. おわりに

本研究では超臨界翼型を用いた遷音速フラッ ター解析を行い、ダブル遷音速ディップの発生メ カニズムについて調査した。その結果、1<sup>st</sup>-dip は 翼上面衝撃波振動に起因するもので、従来の対称 翼と同様な典型的な遷音速ディップであること が分かった。また 2<sup>nd</sup>-dip では衝撃波背後で境界 層はく離が生じているものの、衝撃波振動が負減 衰となっており、そのため系が不安定となってい ることが分かった。

先行研究[9]から、衝撃波背後で流れがはく離 する場合、衝撃波振動は系に対して正減衰である ことが示されているが、2<sup>nd</sup>-dipにおいては負減衰 となっている。これは翼下面流れ場との相互作用 によるものであることが分かっているが、本稿で は紙面の都合上、詳細な説明は省略した。詳細に ついては文献[11]を参照されたい。また本課題申 請時点では、翼上面衝撃波の位相特性について移 動エントロピー法を用いた因果解析を行う予定 であった。しかし、はく離域の変化などから翼上 下面での相互作用のメカニズムを説明できたた め、本流れ場への適用は行わなかった。

#### 参考文献

 Mykytow, W. J. "A Brief Overview of Transonic Flutter Problems," Unsteady Airloads in Separated and Transonic Flow, AGARD-CP-226, April 1977, pp. 11-1-11-11.

- Isogai, K. "On the Transonic-Dip Mechanism of Flutter of a Sweptback Wing." *AIAA Journal*, Vol. 17, No. 7, 1979, pp. 793–795.
- Isogai, K. "Transonic Dip Mechanism of Flutter of a Sweptback Wing: Part II." *AIAA Journal*, Vol. 19, No. 9, 1981, pp. 1240–1242.
- (4) Persoon, A. J. et al. "Measurement of Transonic Dips in the Flutter Boundaries of a Supercritical Wing in a Wind Tunnel." *Journal of aircraft*, Vol. 21, No. 11, 1984, pp. 906–912.
- (5) Shima, E., and Jounouchi, T. "Role of CFD in Aeronautical Engineering (No. 14). AUSM Type Upwind Schemes," NAL SP-34, Japan, 1997.
- (6) Yoon, S., and Jameson, A. "Lower-Upper Symmetric-Gauss-Seidel Method for the Euler and Navier-Stokes Equations." *AIAA Journal*, Vol. 26, No. 9, 1988, pp. 1025–1026.
- (7) Spalart, P. R., and Allmaras, S. R. "One-Equation Turbulence Model for Aerodynamic Flows." AIAA Paper 1992-0439, 1002.
- Melville, R. B. et al. "Implementation of a Fully-Implicit, Aeroelastic Navier-Stokes Solver." AIAA Paper 1997-2039, 1997.
- (9) Oyeniran, N. D. et al. "Unsteady Aerodynamics Around a Pitching Airfoil with Shock and Shock-Induced Boundary-Layer Separation." *AIAA Journal*, Vol. 60, No. 12, 2022, pp. 1–9.
- (10) Dietz, G., Schewe, G., and Mai, H.
  "Amplification and Amplitude Limitation of Heave/Pitch Limit-Cycle Oscillations Close to the Transonic Dip." *Journal of Fluids and Structures*, Vol. 22, No. 4, 2006, pp. 505–527.
- (11) Miyake, T., and Terashima, H. "Numerical Investigation of Double Transonic Dip Behaviors in Supercritical Airfoil Flutter." *AIAA Journal*, Vol. 61, No. 12, 2023, pp. 5365–5376

## 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

#### 南條 舜

総合研究大学院大学 複合科学研究科

#### 1. はじめに

材料設計のパラメータ空間は広大である。マテ リアルズインフォマティクス (Materials Informatics: MI)の目的は、材料データとデータ 科学の先進技術を活用し、広大な探索空間から革 新的特性を持つ新材料を発見することである。

データ駆動型材料研究における最も大きな壁 は、体系的且つ包括的なデータの不足である。特 に、高分子材料のデータ資源の乏しさは際立って いる。現在の高分子物性データベースはいずれも データの量が非常に少なく、たとえば既存のデー タベース PoLyInfo[1]に物性値が公開されている ホモポリマーの数は 18,000 程度である。その中 で、同一の実験条件で測定された特定の物性値の データに限定した場合、わずか 100 データにも満 たない例も存在する[2]。

また、我々が目指す"革新的な材料"の周辺に はそもそもデータが存在しない。したがって、限 られたデータの壁を乗り越えるデータ科学の方 法論が MIの基本問題の解決につながる。

機械学習のモデルは一般的に内挿的であり、デ ータの存在しない領域の予測性能が大きく低下 する。一方、物理法則に基づく分子シミュレーシ ョンは、未踏領域の材料特性をある程度予測でき ることが期待される。そこで、データの不足を補 う手段の一つとして、材料研究では機械学習と分 子シミュレーションの融合が重要な役割を担う と考えられる。

本研究では高分子材料に目標を定め、データ駆 動型材料研究における機械学習と分子シミュレ ーションの融合技術を創出し、高分子科学の研究 者らと共同で概念実証を行うことを目指した。

#### 2. 手法

はじめに、ベイズ最適化[3]・能動学習[4]等の 適応的実験計画法を用いて機械学習と分子シミ ュレーションによる計算機実験を系統的に循環 させるワークフローを実装した。図1に示すよ うに、現在観測済みの分子シミュレーション結 果を訓練データとしてサロゲートモデルを訓練 し、獲得関数に基づき次に分子シミュレーショ ンを行う候補を選定する。そして、選定された 候補の分子シミュレーションを実施し、結果を 訓練データに追加する、というサイクルを繰り 返す。



## 図1:適応的実験計画法と 分子シミュレーションの融合ワークフロー

本ワークフローにより、現時点でデータが存 在しない外挿領域に分子シミュレーションの新 しいデータを作り出す。そして、このデータを 含めてモデルを訓練することで外挿的予測性能 を獲得し、モデルの適応範囲が徐々に拡大する ことが期待される。

関連する研究として、低分子化合物や単結晶 においては第一原理計算と機械学習を融合した 物質探索の方法論やソフトウェアが既に確立さ れている[5-6]。しかしながら、高分子材料系で は分子シミュレーションによる物性評価の自動 化・高速化が技術的な障壁となり、研究が進ん でいない。そこで、近年公開された高分子物性 計算の全自動化ライブラリ RadonPy[7]を組み合 わせることにより問題解決を図った。RadonPy は全原子古典分子動力学(Molecular Dynamics: MD) シミュレーションによる高分子物性計算を 全自動化するオープンソースソフトウェアであ り、高分子の繰り返し単位を構成する分子構 造、重合度、温度等の計算条件を入力とし、熱 物性や光学特性などの17種類の物性を自動計算 するアルゴリズムが実装されている。そこで、 図1のワークフローをスーパーコンピュータ SQUID 上で実装することにより、物性計算の自 動化・高速化が可能となり、前述の技術的な壁 を打ち破ることができた。

#### 3. 実験

実装したワークフローの性能評価の一例とし て、光学用高分子の探索を実施した。光学用高 分子はメガネやカメラレンズ等の様々な製品に 用いられる材料であり、その主な要求特性は高 屈折率・高アッベ数である。しかしながら、両 物性の間には経験的な限界線が知られており、 限界線を越える高分子はほとんど存在しないこ とが知られている[8]。ここで、RadonPyを用い た屈折率・アッベ数の分子シミュレーション結 果が文献値を良く再現できることを事前に確認 できたので、実装したワークフローを用いたプ ール型のベイズ最適化を実施することにより、 経験的な限界線を越える高分子の発掘を目指し た。

本実験では、サロゲートモデルに通常のガウ ス過程回帰モデルを使用し、モデルの訓練に用 いる入力xは物性計算(分子シミュレーショ ン)のパラメータをカーネル平均埋め込み[9]に より固定長化した170次元のベクトルを使用し た。また、仮想高分子のプールについては確率 的言語モデルにより生成された仮想高分子1万 構造を用いた。さらに、獲得関数については期 待超体積改善量[10]を用いた。期待超体積改善 量は、予測分布からのサンプルが与えられた際 のパレート超体積増加量の期待値であり、本実 験のように目的変数が二変数の場合は式(1)から 解析的に計算可能である。

$$A(x) = \iint \Delta \text{HVI} \cdot p(y_1|x) \cdot p(y_2|x) dy_2 dy_1 \quad (1)$$

なお、ベイズ最適化の一回のサイクルにつき、 獲得関数の上位 10 個の高分子の分子シミュレー ションを実施した。

#### 4. 結果

図2に実装したワークフローを用いて収集さ れた高分子の屈折率およびアッベ数の分子シミ ュレーション結果の推移を示す。ベイズ最適化 のサイクルを繰り返すにつれて、経験的な限界 線を越える高分子の数が徐々に増える様子を確 認できた。ここで、経験的な限界線を越える高 分子の構造パターンを解析した結果、約4割が 部分構造に硫黄原子を含むことが明らかとなっ た。さらに、その中でスルホニル基(-SO<sub>2</sub>-)を 含む構造が複数確認された。過去の合成実験の 知見[11-12]によるとスルホニル基の分子屈折と 分子分散の比が大きいことから、高分子の部分 構造にスルホニル基を導入することにより屈折 率とアッベ数をともに向上できることが実証さ れている。そのため、今回の実験で発掘された スルホニル基を有する高分子を実際に合成した 場合においても、経験的な限界線を越えること が期待される。以上、材料科学の事前知識を活 用しないデータ駆動型手法により、実験結果が ほとんど存在しない領域に存在する高分子の候 補を発掘することができた。



図2:ベイズ最適化のサイクルをN回繰り返す ことにより収集された高分子の分子シミュレー ション結果。上段はN=5、中段はN=10、下段は N=20の場合を表す。点線は文献[8]に記載され た屈折率とアッベ数の経験的な限界線を表す。

#### 5. おわりに

本研究では、データ駆動型高分子材料研究に おける問題点を解決するための一つの方法とし て、機械学習と分子シミュレーションの融合ワ ークフローを実装した。今回の報告では屈折率 とアッベ数を対象とした計算機実験結果に焦点 を絞ったが、RadonPyを用いて計算可能な17物 性、もしくはRadonPyの計算結果から転移可能 な物性であれば適用できるため、本研究の学術 的価値としては汎用性が高いことが考えられ る。

今後は高分子科学の研究者らと協同し、今回 の実験において発掘された高分子、もしくはそ の類似高分子が現実世界においても経験的な限 界線を越えることを実証したいと考えている。

#### 参考文献

- S. Othuka, et al., International Conference on Emerging Intelligent Data and Web Technologies., 22-29, (2011).
- W. Stephen, et al., Npj Computational Materials., 5, 66, (2019).
- (3) E. Brochu, et al., arXiv preprint arXiv:1012.2599 (2010).
- (4) DA. Cohn, et al., Journal of artificial intelligence research, 4, 129-145 (1996).
- (5) S. Ju, et al., Physical Review X, 7, 021024 (2017).
- (6) G. Agarwal, et al., Chemistry of Materials, 33, 8133-8144, (2021).
- (7) Y. Hayashi, et al., Npj Computational Materials., 8, 222, (2022).
- (8) S. Ando, et al., Japanese journal of optics, 44, 298-303, (2015).
- (9) K. Muandet, et al., Foundations and Trends<sup>®</sup> in Machine Learning, **10**, 1-141 (2017).
- (10) K. Yang, et al., Journal of Global Optimization, 75, 3-34 (2019).
- (11) R. Okutsu, et al., Macromolecules, 41, 6165-

6168 (2008).

(12) Y. Suzuki, et al., Macromolecules, 45, 3402-3408 (2012).

## Modeling Drug Release of Phosphoramidate-based Antibody-drug

## Conjugates using Machine Learning Metadynamics

Rizka Nur Fadilla and Yoshitada Morikawa 大阪大学 大学院工学研究科

#### 1. Introduction

Antibody-drug conjugates (ADCs) are a type of biopharmaceutical drug designed to deliver cytotoxic payloads (chemotherapy drugs) specifically to cancer cells. The goal is to kill cancer cells while minimizing harm to healthy cells, a common challenge in conventional cancer chemotherapy. The goal is achieved by linking the payload to an antibody that can precisely locate cancer cells via a suitable linker. The success of ADCs depends on the antibody's specificity, the linker's cleavage selectivity (remaining intact outside but readily cleaved inside cancer cells), and the potency of the payload [1].

One of the most critical challenges in ADC development is the instability of the linker. This issue can lead to the premature release of the payload, for instance, in the bloodstream, before it reaches the targeted cancer cells. Such premature release can cause toxicities, as demonstrated by the withdrawal of Mylotarg from the market in 2010 [3], after its FDA approval in 2000. Understanding and overcoming these challenges is crucial for the successful development of ADCs.

The phosphoramidate-based linker (see Fig. 1) is one of several proposed linkers that potentially tackle the linker instability challenge. It exhibits stability at neutral pH (representing the environment outside cancer cells), with a controllable rapid release in low pH (representing the environment inside cancer cells). The linker has shown its potency in carrying a diverse payload, which could significantly enhance the efficacy of ADCs [4-6]. Despite these encouraging results. no approved ADC utilizing this linker has been reported yet. One possible explanation is the lack of a clear mechanistic understanding of how the payload release is controlled.

Exploring the potential energy surface (PES) of the involved chemical reactions is essential to gaining insight into the payload release mechanism from а phosphoramidate-based linker. This PES can represented using be an interatomic potential model. Achieving an accurate representation of the PES involves solving the Schrödinger equation, which can be approximated through density-functional theory (DFT). However. the high computational cost of DFT often limits its use for statistical sampling, such as in metadynamics simulations [7].

Recently, machine learning techniques have shown promise in accurately representing the PES when trained with data generated from DFT-based calculations. Here, we have developed a machine learning interatomic potential for phosphoramidate in aqueous solution. Subsequently, we utilized this developed potential to explore the PES associated with the payload release from a phosphoramidate-based linker.

#### 2. Computational Method

#### 2.1 Deep Potential

We utilize the Deep Potential (DP) scheme learning [8] to develop а machine interatomic potential. Within the DP scheme, the potential energy of atomic configurations is represented as the sum of atomic energies. The local environment of the atom within a specified cutoff radius determines each atomic energy. The process begins by establishing the local coordinate information of each atom while preserving translational, rotational, and permutational symmetries. Subsequently, this local coordinate information is used as input for a deep neural network, generating atomic energies as the output. The DP scheme implementation is carried out using the DeePMD-kit [9].



Fig. 1: Components of antibody-drug conjugates with phosphoramidate-based linker. Symbols  $R_1$ ,  $R_2$ , and  $R_3$  denote the substituent of the linker.

#### 2.2 Density-functional Theory (DFT)

Density-functional theory (DFT) is a computational method based on quantum mechanics that accurately investigates the electronic structure of atoms, molecules, and solids. This study employs DFT to generate training data for input into the DP network. We utilized the CP2K software [10] to calculate the system's energy and atomic forces. The training data comprises two systems: pure bulk water and the phosphoramidate in aqueous solution. Fig. 2 and 3 illustrate the typical training structures used in this context.



Fig. 2: Pure bulk water. The red and white colors denote oxygen and hydrogen atoms, respectively.



Fig. 3: Phosphoramidate-based ADC in aqueous solution. The red, white, green, blue, and brass colors denote oxygen, hydrogen, carbon, nitrogen, and phosphor atoms.

#### 2.3 Metadynamics

Metadynamics is a simulation technique employed to investigate the PES and accelerate the sampling of rare events by periodically introducing bias potential. This bias potential is incorporated into the space of selected collective variables (CVs) that characterize the chemical reaction. In our study, we have chosen two CVs: the P-N coordination number (reflecting the P-N bond cleavage) and the P-O coordination number (representing the P-O bond formation). To conduct the metadynamics simulation, we utilized Plumed [11] patched with LAMMPS [12].

#### 3. Validation of Deep Potential

To validate the accuracy of the developed potential, we compare the machine learning (ML) potential's prediction on energy and atomic forces to the DFT results (Section 3.1). We also calculate both quantities' root mean square errors (RMSE). We further use the ML potential to simulate the behavior of liquid water and compute the oxygenoxygen radial distribution function (Section 3.2).

#### 3.1 DFT vs Deep Potential

Parity plots of the energy and atomic forces, DFT vs ML, over 805 test data, are shown in Fig. 4. The test data are not included in the training process. They consist of pure bulk water and phosphoramidate in aqueous solution. The RMSE of energy and atomic forces are smaller than one meV/atom and 100 meV/Å, which indicates a good quality of potential.

#### 3.2 Radial Distribution Function

The performance of ML potential is further validated through the oxygen-oxygen radial distribution function (RDF) of pure bulk water, as shown in Fig. 5. The discrepancy RDF predicted between the and the experimental one is not significant. The ML potential predicted the water molecules to be slightly more localized than the experimental results. This result and the parity plot indicate that the ML potential is reasonably good.







Fig. 4: Parity plot of (a) energy and(b) atomic forces.



Fig. 5: Oxygen-oxygen radial distribution function of water.

#### 4. Tautomerization

ML metadynamics is performed to simulate the payload release for clarifying the

detailed mechanism. Prior to payload release, we observed tautomerization occurred in the simulation. The tautomerization changes the molecule from having single nitrogenprotonated to double nitrogen-protonated, as shown in Fig. 6 (a) and (b), respectively. ML metadynamics simulation is performed to simulate the payload release to clarify the detail mechanism. Prior to payload release, observed tautomerization in we the simulation. The tautomerization changes the molecule from having one hydrogen bonded to nitrogen to two hydrogen, as shown in Fig. 6. Further simulation and analysis to clarify the reaction mechanism are ongoing.





#### (b)

Fig. 6: (a) Initial and (b) final state of tautomerization.

#### 5. Conclusion

We have developed a machine learning potential using the Deep Potential scheme,

which can represent the interatomic interactions of phosphoramidate in aqueous solution. When coupled with metadynamics simulation, this machine learning potential emerges as a promising tool for exploring the potential energy surface, especially in the presence of rare events. Once this work is completed, we expect to be able to clarify the payload release mechanism in detail.

#### Bibliography

- R. V. J. Chari, et al., Angewandte Reviews, 53, 3751-4005 (2014).
- (2) A. Samantasinghar, et al., Biomedicine & Pharmacotherapy, 113308 (2023).
- (3) A. D. Ricart, Clinical Cancer Research, 17, 6417-6472 (2011).
- (4) C. J. Choy, et al., Bioconjugate Chemistry, 27, 824-830 (2016).
- (5) C. J. Choy, et al., Bioconjugate Chemistry, 27, 2206-2213 (2016).
- (6) F. P. Olatunji, et al., Bioconjugate Chemistry, 32, 2386-2396 (2021).
- (7) A. Barducci, et al., Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science, 1, 826-843 (2011).
- (8) L. Zhang, et al., Physical Review Letters, 120, 143001 (2018).
- (9) H. Wang, et al., Computer Physics Communications, **228**, 178-184 (2018).
- (10) T. Kühne, et al., Journal of Chemical Physics, 152, 194103 (2020).
- (11) G. A. Tiberllo, et al., Computer Physics Communications, 185, 604 (2014).
- (12) A. P. Thompson, et al., Computer Physics Communications, **271**, 10817 (2022).

## Theoretical Investigation of Hydrogen Desorption Process in

Hydrogen Boride sheet for Catalytic Applications

Kurt Irvin M. Rojas<sup>1</sup>, Yoshitada Morikawa<sup>1,2</sup>, and Ikutaro Hamada<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Department of Precision Engineering, Graduate School of Engineering, Osaka University <sup>2</sup>Research Center for Precision Engineering, Graduate School of Engineering, Osaka University

#### 1. INTRODUCTION

New classes of 2D materials are the subject of recent research efforts for a variety of applications (e.g. electronics, energy storage, catalyst). The high surface density of these 2D materials makes them ideal for  $H_2$ storage and catalysis. In particular, the newly synthesized hydrogen boride (HB) sheets are a promising material for  $H_2$  storage due to their inherent high hydrogen composition. This HB sheet can be reliably synthesized from MgB<sub>2</sub> with a yield of 42%.[1]

Recent studies have shown that H<sub>2</sub> extraction is possible by using heat treatment or photon irradiation which can extract about 94% of the total hydrogen composition.[2] The noteworthy storage and extraction yield is a significant advantage over bulk metals and alloy based H<sub>2</sub> storages. We also found in our previous study that it is remarkably stable against water,[3] a common substance in ambient condition and fuel cell technologies, making HB sheets a promising material for hydrogen storage applications. To further investigate its viability, there is a need to study the cyclic hydrogen discharge-recharge process. In particular, the effect on the stability and structure of hydrogen deficiency is unclear.

In addition, HB sheets have been shown to be a promising catalyst for ethanol reforming and carbon dioxide conversion.[4] However, in the experimental process, the HB sheets are subjected to heat pretreatment that induces hydrogen desorption and releases about 33-50% of the hydrogen composition, meaning the experimental condition of the HB sheets are in a hydrogen deficient state.

In both hydrogen storage and catalyst applications, the condition of the hydrogen deficient HB sheet is important to understand. For simulation studies, to effectively study the reaction processes, an accurate representation of the hydrogen deficient HB sheet structure is required.

In this study, we investigate the structure of the hydrogen deficient HB sheet at varying levels of hydrogen vacancy saturations using a workflow involving machine learning assisted structure search with a density functional based tight binding (DFTB) method as a target potential. This is followed up by accurate optimization using the density functional theory (DFT) method. Finally, we obtain a set of the most energetically favored structures with varying hydrogen content.

#### 2. METHODOLOGY

In the pursuit of exploring novel structures, particularly in complex scenarios like highdimensional structure searches where local optimization falls short, the demand for a robust and efficient global optimization (GO) algorithm is imperative. This study employs GOFEE (global optimization with first-principles energy expression) algorithm, integrated within the AGOX package,[5] as the GO algorithm of choice. Conventional GO



Figure 1. Workflow diagram.

methods typically entail resource-intensive computations for energy and force evaluations, compounded by entirely random structure propagation, diminishing the likelihood of converging to the global minimum (GM). GOFEE introduces two pivotal innovations. First, it mitigates computational burdens by employing a Gaussian process regression (GPR) model, iteratively train on-the-fly using the target potential - here, Density Functional Tight Binding (DFTB) method as implemented in the DFTB+ package [6] - to handle energy and force evaluations during local optimization steps. Secondly, rather than relying on random structure propagation, a genetic algorithm is adopted. This approach entails generating subsequent structures for evaluation by iteratively applying mutations to preceding structures.

In the following discussion, we explain the workflow of the structure search as described in Fig. 1. The first step is initializing four sets comprising 30 independent instances of GOFEE calculations. This entails seeding each calculation differently, making the initial state of the search distinct from each other. For a more comprehensive search, we included two variations of GOFEE calculation: template and  $\kappa$ 



Figure 2. Graphical model of the with-template and no-template initial state.

parameter. In the template variation, we considered two starting structures, a no-template (NT) and a withtemplate (WT) setup (refer to Fig. 3). The NT configuration allows GOFEE complete freedom to place all hydrogen and boron atoms while the WT initializes with a 2D boron sheet that creates a bias towards a sheet-like structure and only allows GOFEE to place the hydrogen component. The  $\kappa$  governs the exploratory-exploitative tendency of the search and was varied to values of 2 and 3. The lower  $\kappa$  value nudges the balance towards a more exploitative direction. The combination of these two variations results in four sets of GOFEE calculations that are distinctly initialized. The mutations applied are random and rattle mutations with a 6:14 ratio in the 20 samples. A dual-point evaluation was also performed with the second point a small nudge towards the force direction. With 500 iterations, a cumulative total of 120,000 structures are evaluated, resulting in the identification of the GM structure and its corresponding energy.

Subsequently, the second step involves a reduction in the number of structures by eliminating those exceeding 3eV from the GM energy. Following this, the third step entails duplicate removal. Here, we employ a group strategy for atomic structures utilizing the eigenvalues of the distance-based Laplacian matrix, implemented within AGOX. This comparison method exhibits insensitivity to minor fluctuations in bond



Figure 3. Workflow results on pristine HB sheet. (a) shows the success rate on finding and converging to a global minimum shown in (b). In (c), a graphical representation of the sampling strategy is shown. Lastly, (d) shows the 3 best DFT-optimized structures.

lengths, thereby effectively clustering structures with similar eigenvalues. Within each group, we opt for the energetically most favorable structure. In the fourth step, a further reduction in the number of structures is achieved through a simple sampling technique. Specifically, we select the 10 lowest energy structures and choose 20 structures by stratified sampling from the remaining unselected structures, resulting in a total of 30 structures.

Continuing with the fifth step, we proceed to further optimize all 30 structures until the forces are below 10-<sup>4</sup> Ry/Bohr. This optimization is conducted using DFT, implemented within the Quantum Espresso package.[7] Herein, a k-point mesh of 6x6x1 is employed, alongside a tight self-consistency threshold of 10<sup>-9</sup>, and wavefunction (charge) cutoff energy of 60 (480). The exchange-correlation functional was approximated using rev-vdW-DF2 to effectively account for the vdW interactions.[8] The pseudopotentials generated using the Perdew-Burke-Ernzerhof formulation of the generalized gradient approximation were adopted from the GBRV ultrasoft pseudopotential library.[9] Finally, the duplicate removal step is reapplied to yield the final set of structures, wherein the true GM manifests as the most energetically favored configurations within the set.

# **3. RESULTS AND DISCUSSION** 3. 1 PRISTINE HB SHEET

As a preliminary benchmark, we initially subject a pristine HB sheet to the workflow. Figure 3 provides a summary of the results obtained from the workflow steps. Notably, in terms of success rates (Fig. 3a) converging on the GOFEE GM structure (Fig. 3b), the WT approach demonstrates a high success rate of approx. 70%. Conversely, the NT approach encounters challenges in locating the GM, likely due ot the increased complexity inherent in the initial unbaised state, necessitating more iterations copared to the WT approach. Figure 3c illustrates the graphical representation of the sampling strategy, which entails selecting the top 10 structures along with the 20 stratified structure samples. Subsequently, all 30 structures undergo optimization using the DFT method, and the top three structures showcased in Figure 3d. It is noteworthy that the optimal structure postoptimization is identical with the GM identified in the preceding GOFEE calculation.

#### 3.2 HYDROGEN-DEFICIENT HB SHEET

To emulate the experimental condition, a few models corresponding to 11, 22, 33, and 44 at% hydrogen deficiencies were used. The summary of the structure search findings is presented in Figure 4. In all cases the GOFEE calculation successfully obtained the GM within the iteration span. Interestingly, the higher hydrogen deficiency (e.g. 44 at%) converges much faster compared to lower hydrogen deficiency. The GMs found by deficiency 22 at% and greater show a more complex configuration of the bridge hydrogen. It seems the desorption process does not simply remove



Figure 4. Summary of the structure search workflow on hydrogen-deficient HB sheet at varying level of deficiency.



Figure 5. Relative energy of the hydrogen deficient structures.

the hydrogen atoms but instead also induces reconfiguration on the remaining hydrogen atoms. In the post-processing steps, duplicate removal on 11 at% deficiency has significant effects but as the deficiency increases, the impact reduces due to the increasing complexity of the system. This complexity stems from the lack of enough atoms to form a periodic and symmetric structure making a tendency to form more "chaotic" structures. This is also why the NT has increased rates at high deficiency – because the GM found by WT was more chaos and close to NT performance. The best DFT structure are also presented. In all cases, the best structure is not identical to the GOFEE GM found, meaning that the final DFT optimization is a better and more accurate approach in obtaining true GM. Lastly, the best DFT structure was artificially expanded along its periodic direction for a clearer visualization of the holes created in the desorption process.

Finally, we describe the relative energies of the discovered structures. In all deficient cases, the relative energy shows that the structure is less stable than the pristine structure. Interestingly, the largest energy step increase is in the step from pristine to 11 at%. The succeeding increase in deficiency saturation

did further destabilize the structure but not to the same magnitude as the first step. This means that the desorption process bottleneck happens in the initial hydrogen desorption step, and succeeding hydrogen desorption will be easier. Additional calculations on energy barriers are still required to further investigate this aspect.

#### 4. CONCLUSION

In conclusion, our study explores the structure and stability of hydrogen deficient HB sheets. Leveraging a machine-learning-assisted structure search workflow, we elucidate the effect of varying levels of hydrogen deficiency on the structural configuration and stability of HB sheets.

The structure at varying levels of hydrogen deficiency is described in detail. These set of structures can be a baseline model for future calculations that needs a more accurate HB sheet environment in high temperature conditions. As observed, the increase in hydrogen deficiency also increasingly destabilizes the structure. The largest destabilization happens at the first step – from pristine to 11 at% deficiency.

#### REFERNCES

- Nishino, H. et al., J. Am. Chem. Soc. 139, 13761–13769 (2017).
- (2) Kawamura, R. et al., Nat. Commun. 10, 4880 (2019).
- (3) Rojas, K. I. M. et al., Commun. Mater. 2, 81 (2021).
- (4) Goto, T. et al., Commun. Chem. 5, (2022).
- (5) Christiansen, M. P. V., et al., J. Chem. Phys. 157, (2022).
- (6) Hourahine, B. et al., J. Chem. Phys. 152, (2020).
- (7) Giannozzi, P. et al., J. Phys. Condens. Matter 21, 395502 (2009).
- (8) Hamada, I., Phys. Rev. B Condens. Matter Mater. Phys. 89, 121103 (2014).

(9) Garrity, K. F., et al., Comput. Mater. Sci. 81, 446–452 (2014).

## Modeling diffuse signatures of cosmic ray processes in galaxies:

extra-galactic gamma-ray background radiation

Ellis R. Owen 大阪大学 大学院理学研究科

#### 1. Introduction

Cosmic rays are energetic, relativistic particles. Within our Galaxy, they contain a non-negligible fraction of the energy budget, with their total energy density being around 1 eV/cm<sup>3</sup> at the solar circle (this is comparable to thermal, turbulent, and magnetic energy densities; see e.g. 1). Cosmic rays are believed to originate from violent astrophysical environments, such as supernova remnants and young massive stellar clusters (2, 3), where strong shocks can boost charged particles to highly relativistic energies through diffusive acceleration processes (4). External galaxies undergoing intensive episodes of star-formation (starbursts) will have an abundance of these accelerator environments, so it is expected they will be rich in cosmic rays. It has been shown that the high abundance of cosmic rays in starbursts is able to modify their thermal and hydrodynamical properties (5), and drive significant high energy non-thermal emission, ranging from radio wavelengths to gammarays (6, 7).

Cosmic rays are therefore a potentially important physical component within galaxy ecosystems which can control their development. However, they are rarely included in detailed galaxy evolution models. While sophisticated treatments of mechanical and radiation physics are often included in these models (8, 9, 10), current approaches do not fully capture the observed evolutionary properties in populations of galaxies. In particular, model predictions for the abundance, halo-to-stellar mass ratios and starforming histories of some galaxy types show particularly severe discrepancies from observations (e.g. very massive and intensively star-forming or primordial galaxies). As such, there are now renewed efforts to search for hidden agents shaping galaxy evolution, with cosmic rays being one clear candidate.

The non-thermal emission from populations of galaxies can be a useful way to test models of cosmic ray effects in galaxy evolution. One possibility is to use their gamma-ray emission. While gamma-rays have now been detected from a small number of spatially resolved nearby galaxies (7), extending these detections to large populations of distant galaxies is beyond the capability of current and near-future instruments, and is also subject to physical horizons.

Instead, it is possible to use the unresolved gamma-ray emission from background large populations of distant galaxies to probe cosmic ray activities. In this project, the contribution to this background emission was modelled using a novel MPI galaxy gamma-ray emission prototype code. This code post-processed outputs from galaxy formation and evolution simulations (11) and computed the expected gamma-ray background emission they contribute, as observed from Earth. The precise methodological setup for this code is described in Ref (12). Developing these reliable models for the galaxy contribution to the gamma-ray background is essential to understand the physical information that can be obtained from future measurements, and to inform observational strategies and analysis techniques for up-coming facilities (e.g. the Cherenkov Telescope Array; see Ref. 13).

# 2. A new prototype model for cosmic ray containment in galaxies

In previous studies, it has been challenging to properly quantify precisely how well galaxies can contain their cosmic rays. Determining a correct treatment is essential to model the gamma-ray background intensity and spectral shape reliably. Earlier studies simply adopted a fiducial value to quantify the containment (or 'calorimetry') of cosmic rays in these galaxies (see 12). The physics governing cosmic ray calorimetry in galaxies is a combination of attenuation by the interactions they undergo in the interstellar gases of their host system (so-called hadronic pp interactions - see Ref. 14), and cosmic ray transport effects. Existing models provide a relatively thorough treatment of the attenuation effect. However, the escape of cosmic rays by advection in bulk plasma flows out of a galaxy has received less attention.

#### 2.1 Cosmic ray transport

Charged cosmic rays propagate through galactic ecosystems by diffusion and advection. The former dominates within a galaxy where turbulent magnetic fields suffuse interstellar gases, while the latter can be important for mid-energy cosmic rays entrained in fast, bulk flows. Such flows can arise from the confluence of energy and matter injection by concentrated starforming activity in galaxies. They can be driven by thermal pressure gradients associated with gas heated by the processes associated with concentrated starformation, or they can be driven by non-thermal pressure gradients associated with cosmic rays (15, 16). Thus, cosmic rays operate to drive large scale flows while also being redistributed by them.

#### 2.2 Cosmic ray containment

To model an outflow driven by thermal gas pressure and cosmic rays, a two-fluid prescription was adopted. The first fluid is a thermal gas, while the second is a non-thermal cosmic ray fluid. This does not capture the energy spectrum of the cosmic rays, but it is sufficient for the purposes of this work, as it broadly incorporates the dynamical impacts of the total cosmic ray pressure gradients on the outflow and the spatial distribution of the cosmic ray energy density entrained in the flow. This allows the redistributive effects of an outflow on the cosmic rays in a galaxy halo to be modeled.



Figure 1 : The containment fraction of cosmic rays in a galaxy subject to an advective outflow. The strongest parameter dependency is on total galaxy halo mass. For most galaxies able to sustain an outflow, between 60-80 per cent of its cosmic rays are lost.

The energy, matter and cosmic ray injection rate at the base of an outflow can be parameterized by the star-formation rate of a galaxy. By solving the 1dimensional (isotropic) fluid equations around a galaxy of a given mass, and coupling to the cosmic ray transport equation with fiducial parameters to capture cosmic ray diffusion in the magnetic fields of the flow (see 17 for details), the resulting distribution of cosmic rays can be obtained. To model the time evolution of the system, a numerical approach is required in solving the fluid and coupled cosmic ray transport equations. The Eulerian grid-based code FLASH4 (18) was used to do this, allowing the dependency of the flow properties and resulting cosmic ray distribution on model parameters to be explored. Cosmic ray transport physics is currently theoretically unsettled at the microphysical level (e.g. 19), and only fiducial,

canonical transport parameters can currently be adopted. However, the exact choices for these (e.g. for the cosmic ray diffusion coefficient) do not strongly impact the results obtained in this work.



Figure 2 : Outflows evolve to a steady or unsteady state after their initial eruption. The starburst episode driving the flow is considered to persist for 10s of Myr. The flow evolution profile is affected strongly by the properties of the host galaxy, modifying the distribution and escape of cosmic rays through the halo. The top panel shows a less intensively star-forming galaxy in a strong gravitational potential, which can be compared with the bottom panel, showing a more intensively star-forming galaxy in a weak gravitational potential that is able to drive a faster, stronger outflow.

The dependency of the cosmic ray distribution in a flow on the most important galaxy parameters (found to be galaxy halo mass and star-formation rate) is shown in Figure 1, with corresponding examples of the development of a galaxy outflow over time shown in Figure 2. These results show that galactic outflows can reach a steady-scenario relatively quickly (a few Myr compared to the 100 Myr evolutionary timescale of the system), and tend to attain a cosmic ray containment fraction of around 20-40 per cent.

# 2.3 Post-processing model and gamma-ray background

To obtain an overall determination of the galaxy contribution to the extra-galactic gamma-ray background, a prototype model was constructed. This uses information about the star-formation rate, mass, redshift and effective size of a galaxy to determine the steady-state cosmic ray distribution therein, corrected for the effects of outflows (see section 2.3). By adopting appropriate cross sections for the production of gamma-rays via hadronic pp collisions between cosmic rays and interstellar gas (provided by Ref. 14), corresponding gamma-ray spectrum can be а calculated for a broad range of galaxy types. A full description of the prototype model adopted is available in Ref. (12). By interfacing this prototype model with the distribution of galaxy sizes, masses, star-formation rates and over redshift from the outputs of the EAGLE simulations (described in Ref. 11), the overall galaxy extra-galactic contribution to the gamma-ray background could be estimated.

In computing the gamma-ray background flux received on Earth, a co-variant radiative transport formulation was adopted that ensures the conservation of photon number and phase space volume during cosmological transport, and accounts self-consistently for gamma-gamma pair creation and the subsequent inverse-Compton scattering of high energy photons with soft background radiation fields from galaxies.

#### 3. Results

The total contribution from star-formation in galaxies to the gamma-ray background is shown in Figure 3. This indicates a contribution ranging from 10-50 per cent of the flux, depending on energy. By splitting the contribution according to the star-formation intensity of the contributing galaxies, it was

found that more than 95 per cent of the emission is contributed by rare galaxies undergoing very intensive starburst episodes.



Figure 3 : Total gamma-ray background contribution at z=0, predicted by this work (line 1), compared to other studies and observational constraints.



Figure 4 : Gamma-ray background contributions, showing the originating redshift of the received flux at z=0, segregated according to galaxy mass.

Figure 4 separates the total contribution according to galaxy mass and redshift. This shows that much of the emission originates from low mass galaxies, residing around redshift 2-2.5. This represents an epoch where many galaxies were growing and building up their stellar mass.

#### 4. Discussion and conclusions

This work has shown that a significant portion of the unresolved extra-galactic gamma-ray background can be attributed to populations of star-forming galaxies. Most of the emission originates from low-mass galaxies undergoing very intensive star-formation activities, meaning gamma-ray background radiation is a biased tracer of cosmic ray feedback activities, and is particularly sensitive to cosmic rays in young galaxies building-up their stellar masses for the first time. Such galaxies are relatively rare in the Universe, which indicates new considerations may be required to establish robust statistical methods able to differentiate between contributions from various source populations, as the relative dominance of the shot noise (often used to make such distinctions) may be smaller than generally expected.

#### References

- R. Beck, Space Science Reviews, 99, 243-260, (2001).
- (2) C. Cesarsky & T. Montmerle, Space Science Reviews, 36, 173-193 (1983).
- (3) R. Lingenfelter, Advances in Space Research,62 (10), 2750-2763 (2018).
- (4) P. Blasi, The Astronomy and Astrophysics Review, 21, 70 (2013).
- (5) E. Owen et al., Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 481, 666-687 (2018).
- (6) P. Kornecki et al. Astronomy & Astrophysics, 657, A49 (2022).
- (7) M. Ajello et al. The Astrophysical Journal, 894, 88 (2020).
- (8) P. Hopkins et al., Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, **491**, 3702-3729 (2019).
- (9) H. Yajima et al., The Astrophysical Journal, 846, 30 (2017).
- (10) Y. Oku et al., The Astrophysical Journal Supplement Series, 262, 9 (2022).
- (11) J. Schaye et al., Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 446, 521-554 (2015).
- (12) E. Owen et al. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, **513**, 2335-2348 (2022).
- (13) CTA Consortium. Science with the Cherenkov Telescope Array. World Scientific Publishing:

Singapore (2019).

- (14) E. Kafexhiu et al., Physical Review D, 90 (12), 123014 (2014).
- (15) D. Zhang, Galaxies, 6, 114 (2018).
- (16) B. Yu et al., Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, **492**, 3179-3193 (2020).
- (17) E. Owen et al., Proceedings of Science, ICRC2023, 554 (2023).
- (18) B. Fryxell et al., The Astrophysical Journal Supplement Series, 131, 273.
- (19) P. Hopkins et al., Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, **501**, 3663-3669 (2021).

## 粒子法による大規模摩擦焼付きシミュレーション

## 杉村 奈都子 鹿児島工業高等専門学校 機械工学科

#### 1. はじめに

摩擦で生じる深刻な摩耗や焼付きをどうすれ ば回避できるのか、という工学上の切実な問いに 答えるために、摩擦部材の材質、界面性状、外場、 摩擦被膜の生成能と安定性に着目して、さまざま なスケールの試験による焼付き機構の探索がな されている。たとえばマイクロ~ミリメートルス ケールのピンオンディスク試験によって、塑性流 動、移着、発熱の繰り返しが焼付きの前段である ことが、明確に指摘された[1]。これにヒントを 得て我々は、マイクロメートルスケールというマ クロとミクロの中間の系に着目し、連続体(マク ロ視点)としての弾塑性変形と、ナノミクロ相互 作用(ミクロ視点)から繰り込んだ界面相互作用 を構成式の基本に据えた、Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) 法 による大規模並列化メ ソスケール焼付きシミュレーションモデルを構 築した[2]。これは、摩擦の種々仮定理論を置か ず、摩擦の根源であるマルチスケールなエネルギ ー散逸機構を表現し得るモデルという点で、他モ デルと一線を画すものである。また、粒子法には 界面の大変形表現とマルチスケールなポテンシ ャル繰り込みが容易であるというメリットや、大 規模多粒子間相互作用シミュレーションのため のコード並列化フレームワーク FDPS[3]をコーデ ィングに利用できるという利便性がある。このモ デルの基本コードに対しては、定常摩擦を対象と してスティックスリップ現象[4]、分子動力学法 に基づいたせん断界面分子間相互作用の同定と その粒子間相互作用への繰り込みによる酸化被 膜摩擦低減効果 [5] などを再現した。また、せん 断方向と荷重負荷方向の解像度を大幅に変えて 広範なせん断面を表現するための非等方モデル も揃えた[6]。その結果、本題の境界潤滑摩擦焼

付きシミュレーションにおいて、発熱と塑性流動 と凝着の進展が並行して進む様子を再現できる ようになった[7]。これらの改良を経て、高解像 度、高荷重負荷(鉛直方向のシステム厚みが必要)、 長時間の計算のために、本格的に HPCI の利用を 開始した[8]。これにより、低弾性の軟質状態を 仮定した場合、凸凹の衝突に端を発してせん断面 周辺で塑性流動と摩耗と発熱が繰り返され、凸凹 の凝着がせん断面全体に一気に広がる様子が再 現された[9,10]。そこで今回、実際の金属材料を 対象として、本焼付きモデルにおいて以下を明ら かにする研究を行った。

①摩擦部材の表面性状(凸凹サイズ)と構成元 素の違いによるせん断時のフラッシュ(閃光)温 度と温度分布の特徴 ②弾性接触問題の計算精 度の精査

なお、金属摩擦によって生じる固体間摩耗凝着 の要因や機序については議論がなされて久しい が[11]、本件では界面相互作用、塑性流動、発熱 のスキームを備えることにより、結果的に界面間 溶融あるいは界面間結晶成長などとみなせる事 象が生じることとなる。

#### 2. 方法および結果

SPH法は、連続体を粒子の集合体とみなして離 散化し、連続体の挙動を粒子の Lagrange 的な運 動により表現する、粒子法の代表的な一手法であ る。本件でも、せん断固体の運動方程式とエネル ギーの方程式(熱伝導、発熱)を、SPH 粒子に関 する各方程式として離散化して計算する。せん断 界面については、界面分子間のミクロ相互作用を 界面上の SPH 粒子間相互作用に繰り込む粗視化 を行うが、今回は界面分子間ポテンシャルを Lennard-Johns ポテンシャルで近似し、そのサイ
ズスケーリングがほぼ成り立つことを Monte Carlo シミュレーションにより確認ののち、SPH 粒子間相互作用と置いた。なお、②の弾性接触シ ミュレーションでは界面相互作用を0とした。

## ① 表面性状(凸凹サイズ)、構成元素とフラッシュ温度[12]

焼付きは多くの場合、急激な温度上昇を伴う。 そのため今回、フラッシュ温度(摩擦時に瞬間的 に計測される高温)、すなわち、摩擦面で計測さ れる時々刻々の最高温度に着目をした。

界面に、円錐形凸凹を規則的に同数だけ配した 3µm×3µm×高さ約1µm 立方の弾塑性固体を 用意し、向かい合わせて荷重下における摺動試験 を行った。円錐高さを固定し円錐傾斜角を変えて (Rz:0.170µm, Ra:0.0125µm(小),0.0567µm (大)/円錐傾斜角逆数に比例)接触開始から数 ナノセカンドの間の温度上昇を比較した。ただし、 界面反応エネルギーに加え、塑性変形時にひずみ エネルギーの9割が熱として解放されると仮定 している[13]。また、解像度については粒子直径 0.033µm、総粒子数はそれぞれ Ra(小) 424240, Ra(大)463792 である。

固体を純アルミニウム(A1)とし摺動速度を 50~210m/sと増加させると、円錐傾斜角が緩く 接触断面積の大きいもの(Ra(大))でより温度 が上昇する傾向があり、また、摺動速度の増加と フラッシュ温度の上昇には正の相関が見られた。 温度や応力の増大域も、円錐傾斜角が緩く接触断 面積の大きいもの(Ra(大))でより大きくなっ た(Fig.1)。

A1 に加え、純ニッケル(Ni)、純鉄(Fe) につい ても同様にシミュレーションを実施した。その結 果、Ni、Fe においても摺動速度の増加とフラッシ ュ温度の上昇の間に傾向として正の相関が確認 されたが、A1 とは異なり、フラッシュ温度の激し い上下動が観測された。また、とりわけ円錐傾斜 角が緩く接触断面積の大きいもの(Ra(大))の 場合に A1<Fe<Ni とフラッシュ温度が大きく増大 した(Fig. 2)。



Fig.1 グラフは Ra(小)、Ra(大)における各摺動速度での Al フ ラッシュ温度の時間変化。下は摺動速度 150m/s における摺動 面の温度分布ならびに相当応力分布の時間変化。



Fig.2 Ra(大)における各摺動速度での Al, Ni, Fe のフラッシュ 温度の時間変化。Al については Fig.1 の左図と重複。

### ② 弾性接触問題の計算精度[14]

本メソスケール焼付きシミュレーションモデ ルはマルチスケール化を見据えている。そのため、 マクロスケールの運動を表す弾塑性スキームの 計算精度評価は重要である。小荷重における数百 µmスケールのヘルツ弾性接触試験は、解析シミ ュレーションでは解を得やすいが、時々刻々のシ ミュレーションでは接触点の嵌入や計算収束ま での膨大な計算時間など、難しさが指摘されてい る。今回、本モデルにおいて解析解の再現性につ いて、その精度評価に着手した。

半径 225µm の純鉄(Fe)半球を 585µm× 585µm×高さ287µm の純鉄(Fe)直方体直上に 配置し、半球上面1層の粒子に定荷重(6.1e-8~3.0e-4N)を負荷する弾性接触試験を行った (Fig.3)。解像度については粒子直径5.62µm, 総粒子数 702631(半球 129331,直方体 573300) である。垂直応力、相当応力の時間経過を観察す ると、負荷荷重が増すほど接触圧力は増し、どの 負荷荷重においても、接触部では圧縮が進んで相 当応力が増大し、しばらくするとそれが緩むとい う応力の振動が観測され(Fig. 4)、その振動数は 荷重の大きさに関わらず約1MHzであった。接触 点直下領域(24μm×24μm×高さ33μm)の平均 垂直応力、平均接近量に着目すれば、負荷荷重 3.0e-4Nの場合、その垂直応力の大きさは 197.8MPaであり、接近量は123.9nmとなった。



Fig.4 荷重負荷試験(4.2e-7N)における垂直応力σzz の、接触点を含む断面における時間変化。荷重を変え てもその値以外、様子は変わらない。

### 3. 考察

## ① 表面性状 (凸凹サイズ)、構成元素とフラッシュ温度 に関して

フラッシュ温度**0**に関しては、次の式(1)が提唱 されている[15]。

$$\theta = \alpha \frac{Q}{\pi r \kappa} \frac{1}{\kappa} e^{-P_e} [I_o(P_e) + I_1(P_e)] \qquad (1)$$

ここでQ発熱量, r真実接触面積半径,  $\kappa$ 熱伝導 度,  $I_n$ 第一種変形ベッセル関数,  $P_e$ ペクレ数,  $\alpha$ 熱 分配率である。これは、マクロの摩擦試験でフラ ッシュ温度が想像以上に高温になる現象を、真実 接触面積がせん断面積よりもはるかに小さいこ とで説明する根拠となっている。このとき、発熱 量Qは摩擦係数とpv(p圧力v摺動速度)の積とさ れた。一方で、ミクロの観点からこの発熱量Qに 着目すれば、これは界面のエネルギー流速qに真 実接触面積 $\pi r^2$ を掛けたものと定義でき、結果的 に式(1)は式(2)と表現できる。

$$\theta = \alpha \frac{qr}{\kappa} e^{-P_e} [I_o(P_e) + I_1(P_e)] \qquad (2)$$

ここで、界面のエネルギー流速qは単位面積あた りの界面相互作用力q'と摺動速度vの積であり、 本シミュレーションではこの q'が界面の SPH 粒 子間相互作用力 f に比例する。そのため式(2)は 式(3)とも表現される。

$$\theta \propto \frac{fvr}{\kappa}$$
 (3)

以上から、Ra(小)に比べて Ra(大)でより温度 が上昇すること(rに着目)、摺動速度(v)の増加 とフラッシュ温度の上昇の間に正の相関が見ら れることは、この理論式で説明できる現象とい える。また、発熱温度がA1に比べて Fe,Ni で上 昇することも、熱伝導度 $\kappa$ がA1に比べて Fe,Ni で低いことにより、上式を用いて説明できる。 また、界面の SPH 粒子間に設定した Lennard – Jones 型ポテンシャルの深さ (fの係数)が A1<<Fe<Ni (Al: 8.90e – 24J, Fe: 4.52e –

15J, Ni: 4.03e – 14J) であることから、フラッシ ュ温度の上昇のグラフ形状が Al と Fe, Ni で異な ること、温度が Fe<Ni であることは、上式より 類推ないし説明ができる。

ただし、Fe, Ni で見られる温度の上下動には、 用いた界面相互作用力の斥力項が大きく寄与し ていると見られ、界面の形状変化を含めて更なる 検証が必要であると考えている。また、定量的な 比較についても、現在検討を進めているところで ある。

### 弾性接触問題の計算精度に関して

結果を解析解と並べて Fig.5 ならびに Table1 にまとめる。負荷荷重3.0e – 4Nで観測された垂 直応力の大きさ197.8MHzは、Hertzの接触理論に よる最大接触圧力と平均接触圧力の中間値 (204.7MHz)に近い値であるとみなすことができ る。また、応力や接近量の振動数は負荷荷重に依 存せず 1MHz 程度であり、このことから、この 振動は計算手法により人為的に生じたものでは なく固有振動であるとみなすことができる。そこ で解析的に直方体の固有振動数(支持—支持弾性 梁り曲げと仮定)を求めると、その値は1.95 MHz となる。これはシミュレーションの結果の2倍弱 であるが、オーダーレベルでは一致している。

一方で、接近量については Hertz の接触理論解 2.59nmより 2 オーダー大きく、これについては 現在検討を進めている。ちなみに、接触部におけ る粒子嵌入を回避する目的で XSPH 法を採用した が、段階的荷重負荷試験(ステップロード試験) において XSPH 法では通常の SPH 法よりも大きな 接近量を示す傾向が確認された。



**Fig.5** 荷重負荷試験(3.0e-4N)における接触点直下の von Mises 相当応力(上)、接近量 Dz(下,黄緑)、 垂直応力*σ*<sub>zz</sub>(下,青)の時間変化。

 Table 1 Fig.5 をフーリエ変換して求めた振動数、応力、接近量。

定負荷荷重 3.0e-4N	Dz	$\sigma_{zz}$	vM Stress	Contact Theory of Hertz	Natural frequency
Frequency	<u>0.99</u> MHz	<u>0.99</u> MHz	0.95 MHz		<mark>1.95</mark> MHz
Max. Amp. of Stress		<u>197.8</u> M Pa	119.3 MPa	245.7 MPa(max.) 163.8 MPa(ave.)	
Max. Amp. of Dz	<u>123.9</u> nm			2.59 nm	

### 4. SQUID 資源の利用状況

今回、計算には SQUID の汎用 CPU ノード群を用 いた。並列計算は、OpenMP によるスレッド並列と MPI 並列のハイブリッド並列とした。具体的には、 1ノード76 コアを4プロセス(19 スレッド並列) として、19 ノードあるいは 76 ノードを用いて、 ジョブ時間 24 時間~72 時間の計算実施を基本と した。長時間の計算が必要な場合には、リスター トを繰り返して対応した。100 ノードを超える並 列計算は通常、ジョブ実行までの待ち時間が長く なることから、比較的空いている時期に実施した。 なお、4 プロセスで実行する場合、76 コアをフル に用いた 19 スレッド並列とするか、0S 処理分の 余裕を勘案して 72 コアを用いた 18 スレッドと するかについてテスト計算を行ったが、19 スレ ッド並列の方が計算にかかる時間が少なくて済 むことを確認し、これより 76 コアをフルに用い てスレッド並列することとした(Fig.6)。



Fig.6 プロセスあたりのスレッド数比較。19 スレッドの場合の方がグラフの傾きが小さく、処理が速いことがわかる。

### 5. まとめ

Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) 法 に よる大規模並列化メソスケール焼付きシミュレ ーションモデルを構築し、これまでに焼付きの進 展に関わる塑性流動、発熱、凝着の同時並行的な 進展を、極軟質な材料を仮定してシミュレーショ ンで再現することに成功していた。本年度はこの モデルを実金属材料に対して適用し、以下を明ら かにする研究を行った。

①表面性状(凸凹サイズ)と構成元素の違い
 (A1, Fe, Ni)によるせん断時のフラッシュ(閃光)
 温度と温度分布の特徴

②弾性接触問題の計算精度の精査

①では接触面積が小さい Ra(小)と大きい Ra(大)について結果を比較した。摺動速度の増加 とフラッシュ温度の上昇には正の相関が見られ、 Ra(小)に比べて Ra(大)ではより温度が上昇す る傾向があった。これらの現象は、フラッシュ温 度について提唱される理論式から説明すること ができる。また、Ra(大)の場合に Al<Fe<Ni と フラッシュ温度が大きく増大した。一方、Al とは 異なり、Fe, Ni ではフラッシュ温度の激しい上下 動が観測された。発熱温度が Al に比べて Fe, Ni で上昇することは、熱伝導度 κ の大小により理 論式で説明ができる。界面相互作用力の大きさが Al<<Fe<Ni であることから、Al と Fe, Ni で温度上 昇の時間変化の傾向が異なること、温度が Fe<Ni であることも説明できる。ただし、定量的な議論 については更なる検証が必要である。

②について、Fe 半球を Fe 直方体に微小荷重で 押し付ける弾性接触試験を実施した。時々刻々の シミュレーションでは接触点の嵌入や計算収束 までの膨大な計算時間など、難しさが指摘される 試験である。さらに、①に対して解像度、スケー ルともに100倍程度大きく、マクロスケールスキ ームの精度評価を目的としている。垂直応力、相 当応力の時間経過を観察すると、負荷荷重が増す ほど接触圧力は増し、また、どの負荷荷重であっ ても接触部での応力の振動数はほぼ一定であっ た。この振動数を弾性曲げの固有振動数と比較す ると、オーダーレベルでの一致が確認された。ま た、接触点直下の垂直応力は Hertz の接触理論に 基づく解析値にほぼ一致した。ただし、接近量は 過大評価であり、これについてはXSPH法の利用 によるとも考えられるが、検証を進めている。

今回の実金属材料による試験は、本大規模並列 化メソスケール焼付きシミュレーションモデル の開発において、マルチスケール化を目指す上で 重要な位置を占めている(Fig.7)。この実現は、 SQUIDの利用なくしては叶わなかった。



Fig.7 本メソスケール焼付きモデルの完成イメージ

### 謝辞

本研究の実施に際し、SQUID を利用させていた だきましたことに深謝いたします。

### 参考文献

- Y. Matsuzaki, K. Yagi, J. Sugimura, Wear, 386-387, 165 (2017)
- (2) 科研費 基盤研究(C)「境界潤滑摩擦の摩
   耗発熱焼き付き機構解明を目指したメソス ケール計算モデルの開発」杉村奈都子,杉
   村剛(20K04245)
   https://kaken.nii.ac.jp/ja/file/KAKENHI PROJECT-20K04245/20K04245seika.pdf
   (2020~2022)
- M. Iwasawa, A. Tanikawa, N. Hosono, K.
   Nitadori, T. Muranushi, J. Makino, PASJ, 68, 54-1 (2016)
- (4) L.V. Sang, A.Yano, S.Fujii, N.Sugimura, H.Washizu, EPL,122,26004 (2018)
- (5) L.V.Sang, A.Yano, A. Isohashi, N.Sugimura,H.Washizu, Tribol. Int., 135, 296 (2019)
- (6) Natsuko N Sugimura, Le Van Sang, Yuji
   Mihara, Hitoshi Washizu; Development of the simulation model about dry asperity friction and wear by SPH method with disk-like particles, International Tribology Conference Sendai
   2019(ITCSendai2019),19-H-6 (2019)
- (7) N.Sugimura, L.V.Sang, Y.Mihara, H.Washizu, J Comput Sci, submitted
- (8) 富岳・一般課題「メソスケールの境界潤 滑摩擦における実界面性状焼付きシミュ レーションモデルの開発とその高速化」 hp210071 (hp200214 継続) 杉村奈都子,鷲 津仁志,三原雄司(2021)
- (9) 杉村奈都子, Le Van Sang, 三原雄司, 鷲津仁志, トライボロジー会議 2021 秋 松江,予稿集 162\_L0101.pdf (2021)
- (10) N.Sugimura, Y.Mihara, H.Washizu; 2022 JSME-IIP/ASME-ISPS Joint International Conference on Micromechatronics for Information and Precision Equipment (MIPE2022),C1-4-02 (2022)
- (11) A.M. Kovalchenkoa, P.J. Blaub, J. Qub, S. Danyluka, Wear 271, 2998-3006 (2011)

- (12) M.Era, N.Sugimura, Hitoshi Washizu, 9th International Tribology Conference (ITC), Fukuoka 2023, 28-PO-29 (2023)
- (13) P. Ulysse, International Journal of Machine Tools & Manufacture 42, 1549-1557 (2002)
- (14) N.Sugimura, M.Era, R.Tsuda, K.Nitta, Y.Mihara, H
  Washizu, 9th International Tribology
  Conference (ITC), Fukuoka 2023, 28-J-05
  (2023)
- (15) 山本雄二, Journal of Japan Society of Lubrication Engineers, 27, pp789-793 (1982)

### フラグメント分子軌道法による量子生命情報基盤の構築

### ~タンパク質基本フォールドと生体分子動的挙動の解析~

### 福澤 薫

大阪大学 大学院薬学研究科

### 1. はじめに

日本発の理論手法であるフラグメント分子軌 道(FMO)法は、タンパク質や核酸などの生体高分 子の全電子計算を高速に実施できる世界最先端 の手法である。さらに生体内の分子認識の要であ る分子内・分子間相互作用を量子化学的に解析で きるため、構造生物学者や創薬化学者の化学的直 観にも沿う理論解析手法として国際的にも高く 評価されている [1,2]。 我々は、 FMO 法を実用的 なインシリコ創薬技術として発展させ、今までに ない高精度な論理的創薬を実現させることを目 指して、2015年度から現在に至るまで、産学官連 携の FMO 創薬コンソーシアムを母体にして、 HPCI を活用した研究開発を行っている。また、 その成果を用いて FMO 創薬のための情報基盤を 構築するために、世界初のタンパク質の量子化学 計算データベースである「FMO データベース (FMODB)」を開発し、2019 年から一般公開して いる [3, 4]。FMODB では、構造生物学者や創薬 化学者が利用しやすいように、web インターフェ イスを整え、現在までに約37.000構造のFMO計 算結果を公開している。

FMODB が世界最大のタンパク質量子化学計 算データを保持している一方で、世界中の研究者 が利活用している生体高分子の構造データベー スである Protein Data Bank (PDB)では、本申請時 点で約 22 万エントリーの構造が公開されている。 FMODB で公開されている FMO データのうち、 独立した PDB 番号(PDBID)を持つものは約 7,700 構造であり、実験的に構造解析されている多様な タンパク質の計算を網羅しているとは言い難い。 そこで本研究では、PDB の網羅的 FMO 計算向け た第1歩として、代表となるタンパク質フォール ド(立体構造のパターン)を持つ薬 6,000 の PDB データに対する FMO 計算を実施し、構造生物学 の新たなインシリコ基盤となるデータベースを 構築する。

また、FMO 法によるタンパク質の量子化学計 算の現状は、エネルギー計算は実用レベルに達し ているものの、エネルギー微分を用いた構造最適 化 [5,6] や ab initio MD (FMO-MD) [7] は膨大な 計算資源を要するために殆ど実施例がない。しか しながら、タンパク質構造の精密化やドラッグデ ザイン、酵素反応等の解析のためにはこれらの実 用化が必須であるため、本研究では SQUID 上で の実行を試みた。

### 2. フラグメント分子軌道法

FMO 法では、生体高分子を残基単位などの「フ ラグメント」に分割し、フラグメントごとの量子 化学計算を実行する。その際には、各フラグメン トは他の全てのフラグメントからの環境静電ポ テンシャルの存在下にあるとする。これを、全て のフラグメント(モノマー)だけでなく、そのペ ア(ダイマー)についても計算する。式の詳細は 省略するが、全エネルギーは、以下の式で表すこ とができる。

$$E_{total} = \sum E'_{I} + \sum \Delta \tilde{E}_{IJ}$$

(1)

 $E'_{I}$  は環境静電ポテンシャルの寄与を除いたモノ マーのエネルギー、 $\Delta \tilde{E}_{IJ}$  はフラグメント間の相 互作用エネルギー (Inter-Fragment Interaction Energy; IFIE) である。IFIE は網羅的に算出され、 それだけでも解析に用いることができるが、さら に、PIEDA (Pair Interaction Energy Decomposition Analysis)法によって、4つのエネルギー成分(静 電項 (ES)、交換反発項(EX)、電荷移動項 (CT+mix)、分散項 (DI))に分割することができる [8]。

 $\Delta \tilde{E}_{IJ} = \Delta \tilde{E}_{IJ}^{ES} + \Delta \tilde{E}_{IJ}^{EX} + \Delta \tilde{E}_{IJ}^{CT+mix} + \Delta \tilde{E}_{IJ}^{DI}$ (2)

PIEDA を用いることで、分子間相互作用の物理 化学的な解釈が可能となる。例えば水素結合では、 主要成分の静電項に加えて電荷移動項が関与す る。CH/ $\pi$ や $\pi$ - $\pi$ 相互作用では、分散項が主な成 分となる。また交換反発項からは、立体障害が検 出できる。

本研究でのフラグメント分割は、タンパク質は アミノ酸単位、RNA は主鎖/塩基単位で行い、 低分子化合物や水分子は単一フラグメントとし て扱った。なお、FMO 計算プログラムは ABINIT-MP を用いた。

### 3. タンパク質のフォールド代表構造の網羅的解 析

PDB に登録されているタンパク質の立体構造 は、X 線結晶構造解析やクライオ電子顕微鏡、 NMR などの実験手法を用いて長い年月をかけて 解析されてきた。近年の AlphaFold2 に代表され るタンパク質立体構造予測手法の精度の飛躍的 向上により、実験構造未知の静的な立体構造予測 も可能となった。今後は構造情報に対して構造生 物学上有用な情報の付加が求められており、 FMODB への期待は大きい。そこで本研究項目で は、フォールドデータベースである SCOP 2.0 に 登録されているファミリーから代表となる 5,9366 構造を選定し、FMO 計算結果を実施した。

PDB に登録されている実験構造は、欠損ルー プや欠損原子などを含んでいるものが多い。また、 X 線結晶構造解析やクライオ電子顕微鏡では水 素原子の位置が通常は特定できない。そのため、 FMO 計算を実施するための自動モデリング機能 (Automatic complementation)を開発し、タンパク 質構造の前処理を行った(図1)。



図1 タンパク質基本フォールドの網羅的 計算の流れ

SCOP2.0 からの 5,936 構造のうち、重複を除いた 5,352 構造を処理した結果、5,332 構造の自動処理 に成功し、MP2/6-31G\*レベルの FMO 計算を実施 した。用いたタンパク質には、例えば図 2 に示す ような様々なフォールドが含まれる。



図 2 SCOP2.0 に登録されている代表構造の例

得られた FMO 計算結果から、各フォールドの タンパク質における残基間相互作用エネルギー を取り出すことができる。例えば N 残基からな るタンパク質には、N(N-1)/2 個の残基ペアが内在 しており、それらの全てに対して IFIE および PIEDA の相互作用エネルギーが得られる。全計 算結果を統計的に解析すると、中性残基間と荷電 性残基間の相互作用のエネルギー分布は図 3 の ようになっていた。中性残基間の相互作用(図 3A) では、最近接原子間の距離が、1.6~2.0 Å のとこ ろでのエネルギー的に安定な相互作用(-15~-20 kcal/mol)をしているペアが多く、これらは主に 水素結合によるものであると考えられる。一方で、 荷電性残基間の相互作用ペアのエネルギーは、同 程度の距離で-120 kcal/mol 程度であり、これらの 残基間では塩橋を形成しているため大きく安定 化する(図 3B)。今後、残基の種類ごとに分類し た同様の解析を進め、タンパク質に内在する残基 間相互作用の分布を明らかにする予定である。ま た、これらのデータは FMODB にも順次登録し、 公開する予定である。



図3 残基間の距離 (Å) と相互作用エネルギー (kcal/mol)の関係。(A) 中性残基間、(B) 荷電 性残基間(酸性-塩基性アミノ酸残基)の組み 合わせ。

### 4. 量子化学計算による生体高分子の動的挙動の 解明

ABINIT-MP プログラムによる FMO 計算では、 結晶構造や古典 MD からのサンプリング構造に 対するエネルギーの一点計算は既に実用レベル に達しており、アカデミアのみならず製薬企業等 の研究現場でも用いられている。しかしエネルギ 一微分を用いた構造最適化や ab initio MD (FMO-MD) は膨大な計算資源を要するために未だ実用 化されていない。実験的な分解能の低い PDB デ ータの精密化や精密なドラッグデザイン、さらに は酵素反応や DNA/RNA などの新規創薬モダリ ティの解析において、構造最適化の実用化は必須 である。特に構造決定の難しい RNA や環状ペプ チドに対しては、力場が十分に整備されていない ことから、その構造解析や創薬応用への期待が高 まっている。

構造最適化では、タンパク質―リガンド系の結 合サイトの部分構造最適化を Frozen Domain (FMO/FD)法 [5]を用いてHF/6-31G\*レベルで 実施した。核内受容体、キナーゼ、アンジオテン シン II 受容体などの典型例に対して、リガンド と周辺数残基の構造最適化が実施できることを 確認できた。さらに、FMO 最適化構造を用いた リガンド結合性の評価では、分子力場や QM/MM 法による最適化構造を用いるよりも阻害活性値 をよく再現できることが示された[9]。



図 4 リガンド周辺の水素結合ネットワーク構造 の最適化

次に、FMO-MD 計算の例として、バルジ RNA と 低分子リガンドの複合体(5塩基対モデル)の計 算を実施した。計算レベルは HF/6-31G\*、



図 5 RNA-低分子複合体の FMO-MD 計算 タイムステップを 0.5 fs とし、8 ノードを用いて 約 26 日で 1.5 ps まで進行した。今後、古典 MD との揺らぎ構造の違いや相互作用の変化などの 評価・検討を実施する予定である。

### 5. おわりに

本研究の実施によって、世界に類を見ない、タ ンパク質基本フォールドを網羅した、量子化学計 算データベースを構築することが可能となった。 本研究で得られた膨大かつ網羅的なデータを基 にした IFIE/PIEDA の分布を新標準として、例え ば PDB 構造(実験構造)の妥当性を評価する手 法の開発などの活用が期待される。量子化学的な 観点から、現在結晶構造のモデルのクオリティ評 価に用いられている結合長、結合角、二面角等の 情報とは重複しない新たな視点を提供できる。ま た、SCOP 登録構造はフォールディング的に独立 性が高い事から、機械学習によるモデル構築のた めのデータセットとして期待でき、さらに創薬応 用分野で課題となっているデータ不足問題を解 決可能である。今後は、PDB 構造の網羅に向けて さらにデータ数を増やすとともに、応用例として は、FMO-AI 力場及び、相互作用予測 AI の 2 つ の AI モデル構築等へも展開する予定である。加 えて、本研究による網羅的なデータの拡充によっ て、FMODB 公開データが広く2次利用されるこ とになると期待できる。

また、本研究によって、構造精密化や酵素反応 解析の基盤となる構造最適化の実利用がスター トし、生体高分子の *ab initio* MD 計算の実現可能 性が示された。今後多くの生体分子の機能解明に 貢献することが期待される。

### 謝辞

本研究は、大阪大学薬学研究科/薬学部 量子 生命情報薬学分野の高谷大輔講師、田雨時助教、 奥脇弘次研究員、大野修氏、宮岸澄真氏、田中蒼 大氏、半田佑磨氏、理化学研究所の渡邉千鶴博士、 九州大学の加藤幸一郎博士の協力の下で進めら れた。また、構造最適化計算は、中野達也博士(国 立医薬品食品衛生研究所)および中山尚史博士 (コンフレックス社)、FMO-MD 計算は古明地勇

### 参考文献

- K. Kitaura, et al., Chem. Phys. Lett., 313, 701-706 (1999).
- Y. Mochizuki, S. Tanaka, K. Fukuzawa, ed.
   "Recent Advances of the Fragment Molecular Orbital Method: Enhanced Performance and Applicability", Springer, Singapore, (2021).
- (3) D. Takaya D, et al., J. Chem. Inf. Model. 61, 777-794 (2021).
- (4) C. Watanabe, et al., Chem-Bio Info. J., 19, 5-18 (2019).
- (5) D. G. Fedorov, et. al., Geometry Optimization of the Active Site of a Large System with the Fragment Molecular Orbital Method, J. Phys. Chem. Lett. 2, 282-288 (2011).
- (6) T. Tsukamoto et al., Partial geometry optimization with FMO-MP2 gradient: Application to TrpCage, Chem. Phys. Lett., 535, 157-162 (2012).
- Y. Komeiji, et al., Fragment molecular orbital method: application to molecular dynamics simulation, 'ab initio FMO-MD' Chem. Phys. Lett., 372, 342-347 (2003).
- (8) D. G. Fedorov, K. Kitaura, Pair interaction energy decomposition analysis. J. Comput. Chem. 28, 222-237 (2006).
- (9) K. Okuwaki, et al., Geometry Optimization using the Frozen Domain and Partial Dimer Approach with the Fragment Molecular Orbital Method: Implementation, Benchmark, and Application for Ligand-Binding Site of Proteins, in preparation.

### 柔軟エアロシェルを有する大気突入機の流体構造連成解析

## Fluid-structure interaction analysis for atmospheric-entry vehicle with inflatable aeroshell

サンジョイ・クマー・サハ、高橋裕介

北海道大学 大学院工学研究院 SAHA Sanjoy Kumar and TAKAHASHI Yusuke Faculty of Engineering, Hokkaido University, Japan

### 1. Introduction

In recent years, there has been considerable research attention on inflatable aeroshell technology, which offers distinct advantages compared to traditional rigid heat shields. In Japan, the development of an inflatable aeroshell system known as the Membrane Aeroshell for Atmospheric-Entry Capsule (MAAC) has been a focal point [1-2]. This innovative aeroshell comprises a rigid capsule, a thin, flexible membrane, and an inflatable torus pressurized with gas to maintain its shape, as depicted in Fig. 1. The Japan Aerospace Exploration Agency (JAXA) has undertaken numerous flight experiments employing scientific balloons and rockets to assess the viability of utilizing a membrane aeroshell for deceleration purposes. A flight test conducted in 2012 revealed challenges associated with operating the aeroshell at low Mach numbers, where instability in attitude and significant aerodynamic forces, coupled with fluctuations in inflation pressure, were identified as potential factors contributing to aeroshell collapse [3].



Fig. 1: Flare type inflatable membrane aeroshell

The deformation of the membrane surface under the peak freestream dynamic pressure resulted in a change in the flare angle, which could not regain its original shape thereafter. Furthermore, the drag coefficient profile observed during flight tests differed from that obtained in wind tunnel experiments [4]. The flexible nature of the membrane makes it susceptible to deformation, leading to potential instabilities and increased thermal loads due to turbulence effects. At transonic speeds, aerodynamic stresses on the aeroshell are very intense, resulting in frequent structural failures owing to aeroelastic interactions [5]. However, a thorough understanding of the underlying processes causing such failures remains inadequate. To effectively forecast the behavior of reentry vehicles, coupled studies must be conducted that account for the feedback impact of structural deformation. Coupled analyses, by definition, entail unsteady behavior, such as limit-cycle oscillations, which make understanding difficult. Dynamic Mode Decomposition (DMD) is among the reduced-order models that decompose large-scale spatiotemporal data into distinct spatial and temporal modes, extracting patterns with characteristic frequencies. Keeping this background in mind, this study aims to elucidate the deformation behavior of the deployable aeroshell using a coupled model and to unveil its spatial patterns and temporal behavior through modal decomposition under the transonic flow regime.

### 2. Numerical Methods

### 2.1 Coupled Analysis Model

The aerodynamic behavior of the aeroshell in transonic fluid flow is described by the threedimensional compressible Navier-Stokes equation and the equation of state. To solve these equations, we employ a vertex-centered finite volume method implemented in the open-source unstructured mesh fluid flow solver SU2 [6]. To approximate the viscous terms, the mean of flow property gradients across adjacent cells is computed, utilizing the Green-Gauss approach to obtain spatial gradients. The viscosity coefficient is determined using Sutherland's formula. The Jameson-Schmidt-Turkel (JST) method [7] is employed as the advection scheme with second-order dual time-stepping. Matrix solutions are obtained using the FGMRES method, and the research excludes turbulence models. Domain decomposition and MPI are utilized for parallel computation of the extensive problem.

The governing equation of structural dynamics is based on the principle of virtual work and discretized with respect to microelements. It consists of the displacement field within each element, an element stiffness matrix, an element load vector, and an element mass matrix. The load vector, stiffness matrix, and mass matrix are computed for each element. The α-method is employed with Gauss-Legendre quadrature integration to solve the overall stiffness equation. However, the current approach does not account for the nonlinearity of material characteristics. CalculiX [8] is used to examine the nonlinear dynamics of a membrane aeroshell coupled with the help of an adapter. The nonlinear structural behavior under dynamic stress is evaluated using implicit integration of equations of motion, considering it as a three-dimensional continuum with constant temperature during analysis.

The partitioned coupling strategy is selected for this application. preCICE [9] is utilized as a coupling

library to couple the flow solver SU2 to the structural solver CalculiX. During analysis, an adapter is included for each solver. The coupling process assumes that the continuity and equilibrium conditions are consistently fulfilled on the coupled interface. The fluid solver transmits the aerodynamic forces to the coupled interface while receiving displacement information from the structural solver. The nearestneighbor data mapping algorithms is incorporated to facilitate the data exchange between non-matching grids. TCP/IP sockets have been used to allow for efficient data flow between the solvers. To meet the continuity and equilibrium conditions, the parallelimplicit coupling technique is adopted with the Interface Quasi-Newton convergence acceleration scheme in the iterations. Adopting these schemes increased the computational cost significantly. However, the stability of the coupling process increased.

### 2.2 Dynamic Mode Decomposition

The data-driven technique namely DMD, originally invented by Schmid [10], is used to extract coherent patterns and dynamic behavior from complex, highdimensional datasets, offering insights into underlying system dynamics, modes, and frequencies. Utilizing a time-series matrix **D** comprised of flow field data matrices u captured at distinct spatial points and time instances, shown as Eq. (1), it is possible to capture the temporal evolution of the entire system through the application of a time transition matrix **A**.

$$\boldsymbol{D} = [\boldsymbol{u}_0, \boldsymbol{u}_1, \cdots, \boldsymbol{u}_{n+1}] \tag{1}$$

$$\boldsymbol{X} = [\boldsymbol{u}_0, \boldsymbol{u}_1, \cdots, \boldsymbol{u}_n], \quad \boldsymbol{Y} = [\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_{n+1}]$$

$$\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{A} \boldsymbol{X}$$
(2)

$$A\Phi = \Phi\Lambda \Rightarrow A = \Phi\Lambda\Phi^{\dagger}$$
(3)

$$\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{X} = \boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{\Phi}^{\dagger}\boldsymbol{X} \tag{4}$$

$$\boldsymbol{u}(t) = \boldsymbol{\Phi} \boldsymbol{\Lambda}^{t/\Delta t} \boldsymbol{\Phi}^{\dagger} \boldsymbol{u}(0)$$
 (5)

Two matrix X and Y can be defined by Eq. (2).

From the result of the singular value decomposition of X, we can obtain the result of the eigenvalue decomposition of A. Using the eigenvalue matrix  $\Lambda$ , eigenvector matrix  $\phi$  and coefficient matrix vector  $\Phi^{\dagger}$ , we can reconstruct u(t). Due to the increasing computational intricacy associated with eigenvalue decomposition for sizable A matrices, we implement the Exact Dynamic Mode Decomposition (Exact DMD) [11] method. We decompose matrix X into singular values, selectively employing pertinent modes. Subsequently, matrix A is projected, followed by eigenvalue decomposition. The eigenvector matrix  $\phi$  represents the dynamic modes, each contributing uniquely to the system, while the eigenvalue matrix  $\Lambda$ , a complex structure, characterizes system changes (magnitude and amplitude).





(a) SU2 grids (b) CalculiX mesh Fig. 2: Grids for fluid and structural analysis

### 3. Analysis Conditions

The numerical analyses are conducted on a scaled model of the membrane aeroshell, constructed with high-strength Zylon fabric for both the membrane surface and inflatable torus. The model dimensions include a diameter of 80 mm for the aeroshell, a membrane thickness of 0.15 mm, and a flare angle of 70°. The diameter of the inflatable torus is 6 mm, and for simplification purposes, the actual inflation mechanism is omitted from this study. The aeroshell is subjected to a uniform flow environment. This study selected specific Mach number of 0.9 while maintaining a constant angle of attack of 0° and a uniform flow dynamic pressure of 7.95, 4.49 and 0.19 kPa. The free stream Reynolds number is on the order of 10<sup>5</sup>. The membrane surface is assumed to be fixed at a temperature of 300 K, with a no-slip condition and no pressure gradient in the normal direction. The computational domain for the fluid flow analysis consisted of 5,231,960 unstructured tetrahedral nodes, as illustrated in Fig. 2(a). A separate computational mesh having triangular shell elements is used for the structural simulation, as shown in Fig. 2(b). The capsule and the rear sting are treated as fixed boundaries, while the rest are designated as free boundaries and coupled interfaces. As the mechanical properties of Zylon, Young's modulus was set as 70 MPa, Poisson's ratio of 0.3, and density of 900 kg/m<sup>3</sup>.

#### 4. Results

### 4.1 Aerodynamics and Elastic Deformation

The instantaneous distributions of the Mach number are shown in Fig. 3.



Fig. 3: Mach distributions for different cases

No shock wave appeared in any of the cases. The incoming high-speed flow stagnated in front of the

capsule, so a high-pressure region appeared in front, and a low-pressure region was formed at the rear side of the aeroshell. Flow separation occurred near the torus, accompanied by the expansion waves. In the large recirculation region formed behind the aeroshell, alternating vortices and thin shear layers were formed. The continuous generation and shedding of the wake vortex induced oscillation of the aeroshell.

The substantial membrane surface area of the inflatable aeroshell leads to flow stagnation, causing a pressure disparity between its front and rear regions. An adverse pressure gradient prompts flow separation from the inflatable torus, triggering the formation of vortex pairs. This dynamic process of wake vortex shedding generation and induces unsteady aerodynamics, manifesting as fluctuations and oscillations in the behavior of the aeroshell. Employing the probe technique, we tracked the positional variations of the inflatable torus across distinct positions. For evaluating displacement data along the three axes, two probe points were



(a) Torus displacement



(b) FFT of torus displacement Fig. 4: Displacement and frequency plots

strategically positioned within the structural mesh, encompassing the upper and lower portions of the aeroshell. Figure 4 illustrates the instantaneous timeseries data reflecting the torus displacement in flow directions and their frequency plots for all cases.

It is self-explanatory from Fig. 4(a) that the oscillation amplitude increases with higher dynamic pressure of the freestream. To obtain the frequency of such oscillation, Fast Fourier Transform (FFT) has been applied to the displacement data in x direction. From the frequency domain plot of the torus displacement, as shown in Fig. 4(b), it is evident that the peak frequency of oscillation is 179 Hz for each dynamic pressure cases even though the amplitudes are different.

### 4.2 Dynamic Mode Decomposition

The dynamic mode decomposition approach is used on the structural displacement data obtained from the coupled analysis. The frequency distributions and corresponding amplitudes of the DMD modes are shown in Fig. 5. Several closely spaced modes with various frequencies up to 1000 Hz exist in the displacement spatiotemporal data. Notably, the high and mid-range dynamic pressure case exhibits peak frequencies around the same as obtained from the frequency plot of torus displacement (179 Hz). However, the low dynamic pressure case shows multitude of closely spaced frequencies, indicating a higher degree of oscillation and higher frequency that the other cases. To identify the physically important modes from the DMD modes with low computational cost, a greedy approach for compressive sensing has been adopted for this work [12]. Based on the greedy algorithm, two distinct frequency groups are identified for the primary and secondary modes.

For the high and mid-range dynamic pressure cases, the primary mode group exhibits a frequency of 169 -179 Hz, while the secondary mode group exhibits a frequency of 560 Hz. These two frequencies closely







correspond to the frequency obtained by the FFT method. In contrast, for the low dynamic pressure case, the primary mode group frequency is 552 Hz, and the secondary mode group frequency is 420 Hz.

The primary mode of the displacement for high and mid-range dynamic pressure cases are the membrane deformation, and the secondary mode is the oscillatory swinging motion, as shown in Fig. 6 and 7. On the other hand, for low dynamic pressure case, pitching oscillations are the dominant primary and secondary modes rather than membrane deformation, as shown in Fig. 8. The contribution of each DMD modes to the aerodynamics and the combined oscillation is still under investigation at this point.

For the high and mid-range dynamic pressure cases, time evolution of the primary and secondary modes indicates that the DMD modes are purely oscillatory rather than exhibiting neither growth nor decay characteristics, shown in Fig. 9(a) and (b). However, the low dynamic pressure case exhibits increasing amplitude tendency with time. This observation indicates the inherent unsteady oscillatory behavior of the analyzed transonic dynamic pressure cases, shown in Fig. 9(c).



(a) primary mode(b) secondary mode(552 Hz)(420 Hz)





(a)  $q_{\infty} = 7.95 \text{ kPa}$ 



(b) 
$$q_{\infty} = 4.49 \text{ kPa}$$



(c)  $q_{\infty} = 0.19 \text{ kPa}$ 



### 5. Conclusions

This research explored the unsteady fluid-structure

interaction behavior of a deployable aeroshell in

transonic flow, considering variations in freestream dynamic pressure. Additionally, dynamic mode decomposition (DMD) is employed to analyze coherent patterns within the system. Using the greedy compressive sensing algorithm, the dominant membrane deformation structures are identified. The results revealed that the dominant pattern of deformation is the combination of axial deformation and swing oscillation. The frequency of oscillation of the aeroshell is almost independent of the dynamic pressure. However, the amplitude of such oscillation is higher in the case of increasing dynamic pressure. The time evolution revealed that these dominant modes are purely oscillating with time rather than increasing or decreasing characteristics except the low dynamic pressure case. This study offered valuable insights into the complicated oscillation behavior of the deployable membrane aeroshell by decomposing structural deformation, enhancing the understanding of the complex dynamics involved in reentry processes.

#### Acknowledgement

This work was achieved through the use of SQUID at the Cybermedia Center, Osaka University.

### References

- Yamada, Kazuhiko, et al. 21st AIAA aerodynamic decelerator systems technology conference, (2011).
- (2) Yamada, Kazuhiko. 28th ISTS, Okinawa, (2011).
- (3) Takahashi, Yusuke, et al., Aerospace Science and Technology, 92 (2019): 858-868.
- (4) Yamada, Kazuhiko, et al. Journal of Spacecraft and Rockets 52.1 (2015): 275-284.
- (5) Saha, et al., AIAA SCITECH 2023 Forum. (2023).
- (6) Economon, Thomas D., et al. AIAA Journal 54.3(2016): 828-846.
- (7) Jameson, Antony et al., AIAA Journal 55.5

(2017): 1487-1510.

- (8) Dhondt, G., & Wittig, K. (1998). A free software three-dimensional structural finite element program.
- (9) Bungartz, Hans-Joachim, et al., Computers & Fluids 141 (2016): 250-258.
- (10) Schmid, Peter J., Journal of fluid mechanics 656(2010): 5-28.
- (11) Tu, Jonathan H. Dynamic mode decomposition: Theory and applications. Diss. Princeton University, 2013.
- (12) Ohmichi, Yuya., et al., AIP Advances 7.7 (2017).

## The Investigation of Self Optimization of Active Sites by

### Reaction Intermediates during Non-Equilibrium States of

CO<sub>2</sub> Hydrogenation to Methanol

Harry H. Halim, Yuki Yamada, M. Fadhlan Anshor, Pongpan Sitiputa, and Yoshitada Morikawa 大阪大学 大学院工学研究科

### 1. Introduction

Heterogenous catalysts plays critical roles in the human civilization by facilitating the synthesis of essential compounds. Given in-depth understanding of interactions between catalysts and chemicals, enhancing the performance can be achieved by tuning the morphology of the catalyst, especially the structure of the active sites. However, elucidating the active sites is non-trivial due to the dynamic of the catalyst during operating condition (i.e., non-equilibrium states) which might reconstruct the active sites far from the as-prepared condition.

In this study, we aim to elucidate the active sites at non-equilibrium states by taking CO2 hydrogenation to methanol as a case study. The utilization of greenhouse gas CO2 to methanol and the application of methanol in a fuel-cell are appealing solutions to tackle the global warming, but development beyond the conventional catalyst (i.e., Cu/ZnO/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> or CZA) is hindered by the controversy in the active sites. Industrially, methanol is synthesized from the mixture of CO2/CO/H2 gas and there is a strong possibility that the adsorbates and intermediates existed during the reaction might induced surface transformation, thereby form the new active sites. We regard this phenomenon as "self-optimization of the catalyst" since the origin of the new active sites come from the system itself without any additional surface engineering.

In the raise of computing power, simulation of

catalysis is highly promising to unbiasedly elucidate the catalyst reconstruction by providing explicit atomistic picture of catalytic events. In general, the simulation requires the *interatomic potential*, from which the energy and forces of atoms that govern the dynamic of the system can be derived. Accurate potential can come from a very computationallyexpensive method called Density Functional Theory (DFT). Fortunately, given the rapid progress in machine-learning (ML) technique, DFT results can be accurately predicted by an ML model after learning from adequate database. This framework results in faster and more efficient method called machinelearning molecular dynamics (MLMD) [1].

In this article, we highlight our application of MLMD to uncover atomic-level phenomena in the self-optimization of active sites, first focusing on the formation of small clusters on Cu surfaces induced by CO. This study, which has been published in reference [2], has been conducted utilizing the SQUID super computer of Osaka University.

### 2. Machine Learning Molecular Dynamics

In practice, we apply the MLMD by integrating four frameworks including DFT, ML, MD, and the analysis tool that we called *elucidator*. The schematic is shown in Fig.1 and each of them is discussed in the following.



### Fig. 1 : The framework of MLMD

### 2.1 Density Functional Theory (DFT)

We employed DFT software Quantum Espresso [3] to provide the energy and atomic forces for each training data that consist of atomic environments of the Cu surface interacting with various configurations of CO molecules (both in gas and adsorbed states). Some snapshots of the training data are shown in Fig 2.



Fig. 2 : Some snapshots of training data: (a) CO on the flat Cu(111) surface, (b, c) CO with some Cu clusters, and (d) CO on Cu step surface.

### 2.2 Machine-Learning (ML)

After generating the database with the corresponding target values (i.e., energy and atomic forces), we proceeded with constructing a machinelearning interatomic potential. In this study, we employed the Gaussian Process Regression (GPR) machine-learning algorithm, implemented within the FLARE software [4]. GPR was selected due to its capability to provide prediction uncertainty based on the database, facilitating the active learning approach. This method utilizes high uncertainty values as criteria for including atomic environments in the database, ensuring each data point is sufficiently distinct, resulting in a compact and minimally correlated database. To ensure the reliability of the potential, the atomic force of each atom is evaluated. All the Mean Absolute Error (MAE) is below 0.1 eV/Å. The result of the validation is shown in Fig. 3.



Fig. 3 : The parity plots showing the validation of the atomic forces of each element: (a) Cu with MAE of 0.04 eV/Å, (b) C with MAE of 0.08 eV/Å, and O with MAE of 0.06 eV/Å.

### 2.3 Molecular Dynamics (MD)

The LAMMPS [5] package is utilized to conduct MD simulations employing both MPI and OMP parallelization techniques. This software reads the ML potential and computes energy and forces of the system at each time step, resulting in dynamics of the atoms.

### 2.4 Elucidator

Elucidator is a set of analysis tool that we used to post-process the trajectory of the MD simulations. This tool is Python-based program which relies on two libraries, namely ASE [6] and Ovito [7]. Tasks that are performed includes: the visualization of the dynamics, identification of the size and shape of the clusters, as well as analyzing the mechanism of the cluster formations.

## 3. The formation of Cu nano-clusters on Cu surface induced by CO adsorptions

With the help of MLMD, we succeeded in capturing the atomic level events of the formation of active sites in the form of small nano-clusters. Such formation is induced by the interaction of Cu surface with CO adsorbates as no similar behavior is observed when the Cu surface is not exposed with the CO. The snapshot of the Cu surface at 550 K without and with CO exposure are shown in Fig. 4 and Fig. 5, respectively.



Fig. 4 : Snapshot (top-view) of Cu island (yellow) deposited on Cu(111) surface (green atoms).



Fig. 5 : Snapshot (top-view) of Cu island (yellow atoms) deposited on Cu(111) surface (green atoms). The island is decomposed to small clusters due to the interaction with the CO adsorbates.

With the help of elucidator, the shapes and sizes of the nano-clusters formed during the simulation can be identified. As shown in Fig.6, the size of the clusters is ranged from dimer (consists of 2 atoms) to heptamer (consists of 7 atoms). In all cases, the CO is adsorbed on the edge of the cluster, which is consistent with the DFT calculations that suggest that CO is favorably adsorbed on low-coordinated atoms.



Fig. 6 : Snapshots of the clusters formed during the simulation of CO interacting with Cu surface: (a) dimer, (b) trimer, (c) tetramer, (d), pentamer, (e) hexamer, and (g) heptamer. The CO in the gas phase is drawn in semi-transparent color.

Further, the mechanism of the cluster formation can be clarified from the results of MD simulations. We found that the clusters are mainly formed by the agglomeration of the Cu-CO complex(s) which then grow bigger over the time. Such process is typically initiated by the detachment of monomers from the island. The time evolution of this mechanism in the scale of ns is shown in Fig. 7.



Fig. 7 : The mechanism of the formation of Cu clusters induced by CO adsorptions. The event is initiated by detachment of the monomer from the island, followed by subsequent agglomerations that form bigger cluster over the time.

We attribute the origin of the surface transformation due to the lowering of the detachment barrier of the Cu adatoms from the step edge when the CO adsorbs on the Cu atoms. The DFT calculated barriers shown in Fig. 8. clearly shows that the more CO adsorb on the step edge, the lower the detachment barrier of the Cu atom. For instance, without the CO adsorbate, the adsorption of detachment barrier for a single Cu adatom is as high as 0.72 eV but when the Cu step edge is fully occupied with CO the barrier reduces to 0.12 eV. Interestingly, the high coverage of CO also slightly increases the re-attachment barrier of the adatoms which further favor the stability of the small clusters over the island.



Fig. 8 : The detachment barrier of Cu adatom from the step edge given different number of adsorbed CO.

#### 4. Conclusion

Overall, we apply molecular dynamics accelerated with machine learning to provide the direct observation to the influence of CO adsorption upon the formation of Cu clusters on the Cu(111). This Cu clusters might become the new active sites for further reaction in the methanol synthesis. The clusters, ranging from dimer to heptamer, are formed indirectly by agglomeration of smaller clusters. The main origin of the cluster formation is attributed to the reduction in the detachment barrier of Cu adatom when the CO adsorbs on top of it.

### Bibliography

- V. L. Deringer, et al., Chem. Rev., 121, 10073–10141, (2021).
- (2) H. H. Halim et.al., Journal of Physics: Condensed Matter, 35. 495001, (2023)
- (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).

### 動運動論的レーザー吸収で発生する高速電子特性の解析

高木 悠司 大阪大学 大学院理学研究科 大阪大学 レーザー科学研究所

### 1. はじめに

### 1.1 高強度レーザー生成プラズマ

出力が PW (ペタワット) 級の高強度レーザー を用いて物質を加熱・圧縮することで、温度が数 千万度、圧力が数百億気圧に達する高温高密度状 態を実現できる (図 1)。これは星内部や活動銀河 核周辺の状態に相当し、高圧物性研究・核融合研 究等のプラットフォームになると共に、高エネル ギー粒子源等への応用も期待されている。現在こ のような高エネルギー密度プラズマを実験室内 で作り出せるのは高強度レーザーだけである。

高強度レーザーとプラズマとのレーザープラ ズマ相互作用(Laser plasma interaction: LPI)は、レ ーザー強度・パルス長・プリパルス形状等のレー ザー照射条件にターゲットの形状・材質等の条件 も組み合わさった、多数のパラメーターが関与す る複雑な物理過程であり、解明しきれていない部 分が存在する。特に、レーザー強度が10<sup>17</sup> W/cm<sup>2</sup> 以上の運動論的・相対論的強度領域と10<sup>13</sup> W/cm<sup>2</sup> 以下の流体的強度領域との中間に位置する10<sup>14</sup> <sup>16</sup> W/cm<sup>2</sup> 程度の強度領域でのLPI は、熱的平衡 にある流体的プラズマと粒子(運動論)的非線形 過程で発生する非熱的高速粒子とが混在する非 平衡状態にあるため、流体モデルや粒子(運動論) モデルでの解析が難しく理解が進んでいない。

### 1.2 中間的強度でのレーザープラズマ相互作用

強度が 10<sup>14-16</sup> W/cm<sup>2</sup> 程度の中間的強度領域で の LPI では、誘導ラマン散乱(Stimulated Raman scattering: SRS)・誘導ブリルアン散乱(Stimulated Brillouin scattering: SBS)・二電子波崩壊不安定性 (Two plasmon decay: TPD)等の粒子的過程による レーザー光の吸収・散乱が起こる(図 2)。これら



図1:レーザー光と物質との相互作用の模式図。

の過程はピコ秒スケールで成長し、発生する周囲 のプラズマより一桁以上エネルギーの高い非熱 的高速電子は高密度プラズマ内にエネルギーを 輸送し、衝撃波等のナノ秒スケールのプラズマ流 体現象に影響を与える。

Particle in cell (PIC)法等を用いた運動論的コードは微小時間スケールでの LPI のシミュレーションを得意とし、中間的領域での粒子的過程による非線形な高速電子発生をシミュレートできるが、プラズマの流体運動のような大きな時空間スケールの計算は数値誤差の点から困難である。流



図 2:レーザー強度が 10<sup>15-16</sup> W/cm<sup>2</sup> 程度の領域で起こる レーザープラズマ相互作用の模式図。

体コードは大きな時空間スケールの LPI をシミ ュレートできるが、粒子的な高速電子発生過程を 考慮できない。よって中間的領域のシミュレーシ ョンは難しく、これまで実験においても避けられ てきた強度領域であることから総合的な理解が 進んでいない。

しかし近年では、衝撃点火と呼ばれる中間的領 域での LPI で発生する高速電子を積極的に利用 する新たなレーザー核融合手法の提案がなされ たり[1]、ピーク強度が 10<sup>18</sup> W/cm<sup>2</sup> 以上の超高強 度レーザーにおいてメインパルスに先駆する中 間的レーザー強度のプリパルス・ペデスタルによ る LPI がその後のメインパルスによる LPI に影 響を及ぼすことが分かってきた。このように中間 的領域での LPI の理解深化が重要となってきて いる。

### 2. 高速電子発生過程のシミュレーション

中間的領域でのLPIの難しさは粒子的・流体的 2つの時空間スケールが含まれる点にある。よっ て本研究では両者を切り分け、高速電子発生のみ に焦点を当て PIC 法による運動論的シミュレー ションからその発生過程を調べた。

### 2.1 シミュレーションの設定

PIC 法では格子状に分割したシミュレーショ ン空間内にプラズマを模した荷電粒子を配置す る。空間内での荷電粒子の運動に伴い発生する電 磁場及び外部電磁場(レーザー場)を各空間格子 上でマクスウェル方程式に従って求める。荷電粒 子の運動は自分の位置する格子上の電磁場から 運動方程式に従って計算される。

まず1次元シミュレーションを行った。PIC コ ードは PICLS コード[2]を使用した。図3にシミ ュレーションのセットアップを示す。1次元シミ ュレーション空間 x 軸上に陽子と電子からなる 水素プラズマを配置し、左(x 軸負方向)からレ ーザーを照射した。レーザーはp 偏光(電場はy 方向、磁場はz 方向に振動する)を用い、レーザ ー波長  $\lambda$  は 1  $\mu$ m、レーザー強度は 10<sup>14</sup> から 10<sup>16</sup> W/cm<sup>2</sup>の間で変化させた。シミュレーション中レ

ーザーは常に照射し続ける。空間格子サイズは 1/20 μm(レーザー波長λを 20 分割)に設定した。 PICLS のアルゴリズムの都合上、空間格子のサイ ズを設定するとシミュレーションのタイムステ ップは~ 0.17 fs (レーザー周期を 20 分割)に自動 的に決定される。水素プラズマの密度 n の初期設 定は、最大密度をレーザー遮断密度 n<sub>c</sub>(~10<sup>21</sup> /cm<sup>3</sup>)の1.2倍、最小密度を1.2/e<sup>4</sup> ~ 0.02倍に固 定し、指数関数的な密度勾配を仮定した。密度勾 配のスケール長 L は 50~800 µm の間で変化させ た (n x e<sup>-x/L</sup>)。よってプラズマの量及びシミュレ ーション空間の大きさはスケール長によって変 化する。陽子と電子はそれぞれ一空間格子につき 70 個ずつ配置し、初期温度がそれぞれ 1 keV と5 keV となる様に初期運動量分布を持たせた。シミ ュレーション空間は1次元だがプラズマの運動 量空間は3次元でシミュレーションを行なって いる。プラズマの左(レーザー照射)側に 1000 μm、右側に 500 μm の真空領域を設け、左右の境 界から 600 µm にダンピング(減速)領域を設定 した。それぞれのダンピング領域内を境界に向か って進むプラズマ粒子は初期温度程度まで減速 を受ける。これは発生した高速電子がいつまでも シミュレーション空間内に残り続ける事を防ぐ ためであり、実際のレーザープラズマ相互作用に おいて高速電子が高密度プラズマ中に抜け電荷 中性保持のため帰還熱電子流が発生することを 模擬している。大きな真空領域は両境界付近に減 速されたプラズマ粒子が溜まりレーザー入射等



を阻害するのを防ぐ目的である。

### 2.2 ゲートを用いた高速電子の測定

シミュレーション空間内にフラックスゲート を設置し、ゲートを左から右へ通過する電子のエ ネルギースペクトルを測定した(図4)。エネルギ ースペクトルの測定は1ps間ごとの間隔で100 psまで行った。レーザー強度が10<sup>15</sup>W/cm<sup>2</sup>以上 の時、測定されたスペクトルは平均エネルギーが 数10 keVと数100 keVの二成分からなることが 分かった。Maxwell分布を用いたフィッティング から両者を分け、数100 keVの平均エネルギーを 持つ成分に関して平均エネルギーとエネルギー フラックスの時間発展を調べた。どちらもおよそ 30 ps以降定常な値を記録し、その大きさは入射 レーザーの強度に大きく依存することが分かっ た。



図4:フラックスゲートで観測された高速電子のエ ネルギースペクトル。平均エネルギーが数10 keV (青色十字)と数100 keV(赤色十字)の二成分か らなる。Maxwell 分布を用いたフィッティングを行 なっている(灰色実線)。

#### 3. 高速電子の加速機構の解明

### 3.1 電子軌道の解析

平均エネルギーが数 100 keV の成分の加速機 構を明らかにするために、特定の電子の位置・運 動量・受けた電磁場の大きさを毎タイムステップ ごとに出力する機能を PICLS コードに追加し、 電子の軌道を調べた。図5は時刻22 psにフラッ クスゲートに平均エネルギー程度のエネルギー を持って到達した電子の6 個の軌道を例示して いる。この加速の履歴から電子は、SRS, SBS 等 の LPI が作りだす密度揺動により発生する x 方 向の揺動的な電場  $E_x$ によって統計的な加速過程 を経て数 100 keV までエネルギーを増加させる ことが分かった。密度揺動は数 10 ps かけて成長 し準定常的な状態に落ち着く。これに呼応して定 在波様の揺動電場  $E_x$ が発生する。 $E_x$ の平均的な 大きさとサイズから見積もられる一回の  $E_x$  との 相互作用による電子のエネルギー変化は1 keV 程 度である。この縦電場中を通り抜ける間に電子は 確率的にエネルギー増加(加速)も減少(減速) も受けるが、運の良い電子は多くの加速機会を得 て数 100 keV まで加速される。全体の平均エネル ギーは、相互作用回数を N として  $N^{1/2}$ に比例する 拡散的な加速過程であることが分かった。



### 3.2 キャビティー間での電子の捕捉

SRS は低密度プラズマ中に密度揺動を作り出 すが、特にキャビティーと呼ばれるスパイク状の 低密度構造を発生させる。このキャビティー内に は電磁場が捕捉され、レーザー場より数倍大きい ソリトン様の振動電磁場を形成する。この振動電 磁場が常にプラズマをキャビティーから追い出 す方向にローレンツ力を発生させることにより キャビティーは長い時間その構造を保ち続ける。 よってキャビティーは常に電子を跳ね返すため、 キャビティー間を往復し続ける電子のトラップ 運動が起こることを発見した。粒子間衝突による 散乱がない場合、キャビティーはおおよそx方向 の運動量 $p_x$ が 1.5  $m_ec$  程度までの電子を捕捉する。 ここで $m_e$ は電子質量、cは光速である。このトラ ップ運動は電子の $p_x$ を変更するが、加速すなわ ち $p_x$ の増加にはあまり寄与しないことも判明し た。

### 4. 大規模 2 次元 PIC シミュレーション

多次元の場合でも、1次元シミュレーションか ら判明した電子の加速及びキャビティー間での トラップ運動が同様に発生するかを調べるため に、2次元 PIC シミュレーションを行った。1次 元シミュレーションを y 方向に 5 μm 拡張させ、 典型例としてレーザー強度が1016W/cm2、プラズ マスケール長が 100 µm の場合でシミュレーショ ンを行った。y方向の境界条件は周期境界に設定 した。多次元シミュレーションの場合1次元より も高い空間解像度が求められるため、空間格子サ イズは1次元の場合の半分の1/40 µm に設定し た。その分計算資源削減のためにプラズマの左側 の真空領域を 500 µm、右側の真空領域を 200 µm にそれぞれ減らし、一格子内のプラズマ粒子数も 30 個に削減した。図6に2次元シミュレーショ ンの様子を示す。

### 4.1 キャビティーの構造変化と電子加速

2次元シミュレーションの場合、キャビティー は y 方向の密度揺動による共鳴吸収により 1 次 元の場合よりも構造を保ち続けることが難しい。 従ってキャビティーは十分成長できず発生する ローレンツ力も小さくなる。これにより 2 次元シ



図6: 2次元シミュレーションでの電子密度揺動の様子。

ミュレーションの場合、トラップできる電子の*px* は 0.3 *m<sub>e</sub>c* まで減少した。一方で*E<sub>x</sub>*の大きさは1 次元シミュレーションの場合とさほど変わらず、 ゲートで観測された高速電子の平均エネルギー も 1 次元シミュレーションの場合と同程度であ った。この結果はキャビティーによる電子のトラ ップ運動は電子の加速にはあまり寄与しないと いう 1 次元シミュレーションの解析結果と整合 する。

### 5. おわりに

強度が10<sup>15-16</sup> W/cm<sup>2</sup>のレーザーとプラズマとの 相互作用における高速電子発生過程について大 規模1次元及び2次元 PIC シミュレーションを 用いてその詳細を明らかにした。高速電子の内数 100 keV の平均エネルギーを持つ成分について、 改良した PIC コードを用いて1次元シミュレー ションから電子の軌道を調べた。電子は密度揺動 に起因して発生するレーザー伝搬方向の電場中 での統計的な加速により数 100 keV まで加速さ れることが分かった。また、この強度領域でのLPI に起因した密度構造による特異な電子のトラッ プ運動も発見した。2次元シミュレーションから 多次元性がトラップ運動を弱める方向に働く一 方で、電子の平均加速エネルギーには影響を与え ないことが明らかになった。

### 参考文献

- (1) D. Batani et al., Nucl. Fusion **54** 054009 (2014).
- (2) Y. Sentoku and A. J. Kemp, J. Comput. Phys. 227, 6846-6861 (2008).

# センター報告

### 2023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 2023 年 4 月から 2024 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

- Akio Ishii, "Ab initio prediction of temperature-dependent stability of heterogeneous B19' phase in TiNi alloy using atomistically informed Eshelby's ellipsoidal inclusion", Mater. Today comm, 35, 105861, 2023.
- [2] Hungu Kang, Jiung Jang, Gyu Don Kong, Sangmin Jung, Tatsuhiko Ohto and Hyo Jae Yoon, "Deposition Condition Impacts Charge Tunneling and Thermoelectric Properties of N-Heterocyclic Carbene Monolayers", J. Mater. Chem.A, 11, 16233, 2023.
- [3] Gyu Don Kong, Jiung Jang, Suin Choi, Gayoung Lim, In Soo Kim, Tatsuhiko Ohto, Seiya Maeda, Hirokazu Tada, and Hyo Jae Yoon, "Dynamic Variation of Rectification Observed in Supramolecular Mixed Mercaptoalkanoic Acid", Small, 20, 2305997, 2024.
- [4] Zhiwen Jiang & Masahiko Shibahara, "Molecular dynamics investigation of the effects of thin periodic defective graphene on the interfacial thermal resistance at liquid–solid interfaces", Numerical Heat Transfer, Part A: Applications, DOI: 10.1080/10407782.2023.2300355, 2024.
- [5] 鹿島千尋,中谷祐介,"地形改変による瀬戸内海の流動変化",土木学会論文集特集号(海岸工学), Vol.79.DOI:doi.org/10.2208/jscejj.23-17055, No.17, 23-17055, 2023.
- [6] 出口博之, 鹿島千尋, 中谷祐介, "大阪湾奥部の溶存酸素濃度の短期変動に及ぼす波浪の影響", 土 木学会論文集特集号(海岸工学), Vol.79.DOI:/doi.org/10.2208/jscejj.23-17138, No.17, 23-17138, 2023.
- [7] Kokoro Shikata, Takuma Kikutsuji, Nobuhiro Yasoshima, Kang Kim, and Nobuyuki Matubayasi,
   "Revealing the hidden dynamics of confined water in acrylate polymers: Insights from hydrogenbond lifetime analysis", Journal of Chemical Physics, Vol.158, No.174901, (10pages), May (2023).
- [8] Hiroaki Tatsumi\*, C.R. Kao, Hiroshi Nishikawa, "Impact of crystalline orientation on Cu-Cu solidstate bonding behavior by molecular dynamics simulations", Scientific Reports, 13, 23030, 2023.
- [9] Kunichika Tsumoto, Takao Shimamoto, Yuma Aoji, Yukiko Himeno, Yuhichi Kuda, Mamoru Tanida, Akira Amano, Yasutaka Kurata, "Theoretical prediction of early afterdepolarization-evoked triggered activity formation initiating ventricular arrhythmias", Computer methods and programs in biomedicine, vol.240.Doi:10.1016/j.cmpb.2023.107722, 107722, Mar 2023.
- [10] Hidetaka Marumo and Takashi Matsubara, "Scale-Equivariant Convolution for Semantic Segmentation of Depth Image", Nonlinear Theory and Its Applications IEICE, vol. 15, no. 1, pp. 36-53, 2024.

- [11] Yu Kashihara and Takashi Matsubara, "Inverse Heat Dissipation Model for Medical Image Segmentation", IEICE Transactions on Information and Systems, vol. E106-D, no. 11, pp. 1930-1934, 2023.
- [12] Ohashi, K.; Nagita, K.; Yamamoto, H.; Nakanishi, S.; Kamiya, K., "C-C Coupling in CO2 Electroreduction on Single Cu-Modified Covalent Triazine Frameworks: A Static and Dynamic Density Functional Theory Study", ChemElectroChem, Vol.11, No.6, e202300693, Jan. 2024.
- [13] Nagita, K.; Kamiya, K.; Nakanishi, S.; Hamamoto, Y.; Morikawa, Y., "CO Hydrogenation Promoted by Oxygen Atoms Adsorbed onto Cu(100)", J. Phys. Chem. C, Vol.128, No.11, pp.4607-4615, Mar. 2024.
- [14] Kenta Akita, Yuki Morimoto, Reiji Tsuruno, "Hand-drawn anime line drawing colorization of faces with texture details", computer animation & virtual worlds, Volume 35, Issue 1, e2198, 27 July 2023.
- [15] S. Goto, K. Kim, and N. Matubayasi, "Unraveling the Glass-like Dynamic Heterogeneity in Ring Polymer Melts: From Semiflexible to Stiff Chain", ACS Polymers Au 3(6), (査読つき), 437–446, 2023.
- [16] Suzuki, S.; Sakai T.; Takagi, S.; Naota, T., "On-Demand Control of Short-Wave Infrared Light Transparency Based on Stimuli-Responsive Association of Tetrathiafulvalene Radical Cation", Angew. Chem., Int. Ed., Vol.62 DOI: 10.1002/anie.202308570, e202308570, 2023.
- [17] Suzuki, S.; Shu, R.; Shiomi, D.; Naota, T., "Temperature-dependent Modulation of Short-waveinfrared Light Transparency Based on Associated Structures of a Liquescent Nickel(III) Complex", Small, Vol.20 DOI: 10.1002/smll.202305668, 2305668, 2024.
- [18] Shu, R.; Naota, T.; Suzuki, S., "Needlestick-Stimulation-Induced Conversion of Short-Wave Infrared-Light Transparency Using a Liquescent Radical Anion", Small in press, DOI: 10.1002/smll.202311557.
- [19] T. Hiejima, "Streamwise vortex breakdown due to the interaction with crossed shock waves", Journal of Fluid Mechanics, 973 [10], A41, 31 pages, 2023.
- [20] N. Iwabayashi, K. Matsushita, S. Okada, T. Hiejima, "Shock-induced supersonic combustion with a streamwise vortex", Physics of Fluids, 36 [3], 036117, 18 pages, 2024.
- [21] Yukihiko Okumura, "Development of ammonia burner and elucidation of fundamental heat transfer in boiler", Journal of Japan Boiler Association, 442, ISSN 0387-0162., pp. 21-26, 2023.12.
- [22] Enriquez, J.I.G., Yamasaki, T., Michiuchi, M., Inagaki, K., Geshi, M., Hamada, I., Morikawa, Y., "Origin of the Surface Facet Dependence in the Oxidative Etching of the Diamond (111) and (100) Surfaces from First-Principles Calculations", The Journal of Physical Chemistry, Accepted 25 March 2024.
- [23] Enriquez, J.I.G., Halim, H. H., Yamasaki, T., Michiuchi, M., Inagaki, K., Geshi, M., Hamada, I., Morikawa, Y., "Origin of the Surface Facet Dependence in the Thermal Degradation of the Diamond (111) and (100) Surfaces in Vacuum Investigated by Machine Learning Molecular Dynamics Simulations", Under Review Preprint, http://dx.doi.org/10.2139/ssrn.4731456.
- [24] Akihiro Kimura, Hirotaka Kitoh-Nishioka, Toru Kondo, Hirozo Oh-oka, Shigeru Itoh, and Chihiro

Azai, "Experimental and Theoretical Mutation of Exciton States on the Smallest Type-I Photosynthetic Reaction Center Complex of a Green Sulfur Bacterium Chlorobaclum tepidum", The Journal of Physical Chemistry B, Vol.128, No.3, pp. 731-743, Jan 2024.

- [25] 鬼頭宏任, 梅垣俊仁, 西山陽大, 田中成典, "量子開放系に対する準古典マッピング動力学シミュレ ーション", 理論化学会誌「フロンティア」, Vol.5, No.4, pp.261-269, Oct 2023.
- [26] H. Gao, G. He, Q. Li, Y. Li, W. Hu, S. Zhou, F. Liu, J. Yi, Y. Zhang, Z. Cai, S. Ogata, L. Qiao and L. Gao., "Diffusion bonding of high entropy alloy and stainless steel at a relative lower temperature via surface nano-crystallization treatment", Journal of Materials Research and Technology, 24, 475-487, 2023.
- [27] Shihao Zhang, Fanshun Meng, Rong Fu, Shigenobu Ogata, "Highly efficient and transferable interatomic potentials for α-iron and α-iron/hydrogen binary systems using deep neural networks", Computational Materials Science, Vol.215, pp.112843, 2024.
- [28] Jinyu Zhang, Gaël Huynh, Fuzhi Dai, Tristan Albaret, Shihao Zhang, Shigenobu Ogata, David Rodney, "A deep-neural network potential to study transformation-induced plasticity in zirconia", Journal of the European Ceramic Society, Vol.44, Issure 1, pp.4243-4254, 2024.
- [29] Sho Kimura, Takuma Hattori, Changqing Ye, Masaki Okada, Satoshi Kondo, Yui Sakurama, Akira Saito, Pawel Krukowski, Hideji Osuga and Yuji Kuwahara, "STM/TERS observation of (M)-type diphenyl[7]thiaheterohelicene on Ag(111)", Phys. Chem. Chem., Phys. 26, 7658, 2024.
- [30] Ryusei Oketani, Koki Shiohara, Ichiro Hisaki, "Overcoming a Solid Solution System on Chiral Resolution Combining Crystallization and Enantioselective Dissolution", Chem. Commun, 59, 6175-6178, 2023.
- [31] Yuna Yamaguchi, Kouki Kasuya, Ryusei Oketani, Ichiro Hisaki, "Construction of Hydrogen-bonded Crystalline Frameworks Using Tetrakis(carboxyphenyl)dimethyl-dihydropyrene Derivative", Chem. Lett, 52, 542-545, 2023.
- [32] Taito Hashimoto, Ryusei Oketani, Asato Inoue, Kohei Okubo, Kouki Oka, Norimitsu Tohnai, Kazuhide Kamiya, Shuji Nakanishi, Ichiro Hisaki, "Single Crystalline, Statically and Dynamically Flexible Hydrogen-bonded Frameworks Based on 4,5,9,10-Tetrakis(4-carboxyphenyl)pyrene", Chem. Commun, 59, 7224-7227, 2023.
- [33] Mao Yamaguchi, Mario de la Hoz Tomás, Ayano Fujiwara, Ryusei Oketani, Kohei Okubo, Kouki Oka, Norimitsu Tohnai, Abderrazzak Douhal, Ichiro Hisaki, "An Expanded Hydrogen-bonded Organic Framework Formed by A Tetrakis(terphenyl)ethene Derivative", Bull. Chem. Soc. J., 97, uoae004, 2024.
- [34] Yinan Yang, Tsukasa Hori, Shinya Sawada, Fumiteru Akamatsu, "Numerical investigation on the effects of air-staged strategy and ammonia co-firing ratios on NO emission characteristics using the Conjugate heat transfer method", Fuel, 368, 1311591, 2024.
- [35] Yinan Yang, Tsukasa Hori, Shinya Sawada, Fumiteru Akamatsu, "Development of a Chemistry Dynamic Load Balancing Solver with Sparse Analytical Jacobian Approach for Rapid and Accurate Reactive Flow Simulations", arXiv, preprint arXiv:2311.14941, 2023.

- [36] Takuma Kobayashi, Takayoshi Shimura, Heiji Watanabe, "Oxygen-vacancy defect in 4H-SiC as a near-infrared emitter: An ab initio study", Journal of Applied Physics, Vol.134, No.14, pp. 145701-1-145701-9, 2023.
- [37] Yoshiaki Yasumizu et al, "Single-cell transcriptome landscape of circulating CD4+ T cell populations in autoimmune diseases", Cell Genomics 2024, Volume 4, Issue 2, 100473, 2024.
- [38] Hajime Yoshino, "Spatially heterogeneous learning by a deep student machine", Phys. Rev. Research 5, 033068, 2023.
- [39] K. RANI, N. OZAKI, Y. HIRONAKA, K. HASHIMOTO, R.KODAMA, K. MUKAI, H. NAKA-MURA, S. TAKAI, AND H.NAGATOMO, "Prediction of the superimposed laser shot number for copper using a deep convolutional neural network", Optics Express (査読付論文), Vol. 31, No. 15, 24045, 17 Jul 2023.
- [40] Belmiloud, Naser, Masanobu Sato, and Yasutoshi Okuno, "Fluid Simulation over a Rotating Disk: Momentum and Mass Transfer across the Wafer Boundary", Solid State Phenomena, DOI:https://doi.org/10.4028/p-7hsyuj., August 14, 2023.
- [41] Yuko Nakagi, Takua Matsuyama, Naoko Koide-Majima, Hiroto Yamaguchi, Rieko Kubo, Shinji Nishimoto, Yu Takagi, "The Brain Tells a Story: Unveiling Distinct Representations of Semantic Content in Speech, Objects, and Stories in the Human Brain with Large Language Models", bioRxiv, 2024.
- [42] Timo I. Denk, Yu Takagi, Takuya Matsuyama, Andrea Agostinelli, Tomoya Nakai, Christian Frank, Shinji Nishimoto, "Brain2Music: Reconstructing Music from Human Brain Activity", arXiv, 2023.
- [43] Susumu Goto, Yutaro Motoori, "Hierarchy of coherent vortices in developed turbulence", Rev. Mod. Plasma Phys. (in print).
- [44] Yutaro Fujiki, Hideto Awai, Yutaro Motoori, Susumu Goto, "Attraction of neutrally buoyant deformable particles towards a vortex", Phys. Rev. Fluids 9, 014301, 2024.
- [45] Jun Fujino, Yutaro Motoori, Susumu Goto, "Hierarchy of coherent vortices in turbulence behind a cylinder", J. Fluid Mech, 975, A13, 2023.
- [46] Yutaro Motoori, Susumu Goto, "Multiscale clustering of heavy and light small particles in turbulent channel flow at high Reynolds numbers", Int. J. Heat Fluid Flow, 102, 109166, 2023.
- [47] Kurt Irvin M. Rojas, Yoshitada Morikawa, and Ikutaro Hamada, "Structures of hydrogen boride sheets with increasing hydrogen vacancy concentration", (in-preparation), 2024.
- [48] Daisuke Yamamoto and Katsuhiro Morita, "Engineering of a Low-Entropy Quantum Simulator for Strongly Correlated Electrons Using SU(N)-Symmetric Cold Atom Mixtures", arXiv, 2311.08014 (accepted for publication in Physical Review Letters).
- [49] Bumjoon Kim, Yohei Yamaguchi, Yoshiyuki Shimoda, "Physics-based modeling of electricity load profile of commercial building stock considering building system composition and occupancy profile", Energy&Buildings, 304 https://doi.org/10.1016/j.enbuild.2023.113813., 113813, 2024.
- [50] Perwez U, Shono K, Yamaguchi Y, Shimoda Y, "Multi-scale UBEM-BIPV coupled approach for the assessment of carbon neutrality of commercial building stock", Energy and Buildings, 291

https://doi.org/10.1016/J.ENBUILD.2023.113086., 113086, 2023.

- [51] K. Hagita, T. Murashima, T. Miyata, H. Jinnai, "Model Based on the River Meander Curve for Simulating the Adhesion of Cross-Linked Polymers to Rough Surfaces", Macromolecules, https://doi.org/10.1021/acs.macromol.3c02660, 発行年月 2024.3.
- [52] Xiangrui Li, Wentao Chen, Gyoko Nagayama, "Interfacial thermal resonance in an SiC-SiC nanogap with various atomic surface terminations", Nanoscale, Vol.15, No.19, pp. 8603-8610, Apr. 2023.
- [53] H. Yoshino, "Spatially heterogeneous learning by a deep student machine", arXiv, 2302.07419, 2023.
- [54] Atsushi Sunahara, Ahmed Hassanein, Kentaro Tomita, Shinichi Namba, and Takeshi Higashiguchi, "Optimization of Extreme Ultra-Violet light emitted from the CO2 laser-irradiated tin plasmas using 2D radiation hydrodynamic simulations", Optics Express, 31, 20, 31780-31795, 2023.
- [55] Y. Pan, K. Tomita, A. Sunahara, A. Sasaki, and K. Nishihara, "Joint measurement of electron density, temperature, and emission spectrum of Nd:YAG laser-produced tin plasma", Applied Physics Letters, 123, 204103, 2023.
- [56] Takeru Niinuma, Tsukusa Sugiura, Masaki Kume, Yuto Nakayama, Hiroki Morita, Atsushi Sunahara, Shinichi Namba, and Takeshi Higashiguchi, "Evaluationof suprathermal ions in a laser producd plasma beyond-EUV source ", Proceedings, Volume 12915 https//doi.org/10.1117/12.2687366, Photomask Japan 2023: XXIX Symposium on Photomask and Next-Generation Lithography Mask Technology;, 129150L, 2023.
- [57] Yuichiro Yoshida, Wataru Mizukami, and Norio Yoshida, "Solvent Distribution Effects on Quantum Chemical Calculations with Quantum Computers", J. Chem. Theory Comput, Vol. 20, pp.1962– 1971, Feb. 2024.
- [58] Tomoya Shiota, Kenji Ishihara, Wataru Mizukami, "Universal neural network potentials as descriptors: Towards scalable chemical property prediction using quantum and classical computers", arXiv, 2402.18433, Feb. 2024.
- 2 国際会議会議録掲載論文
- Kashima, C. and Nakatani, Y., "The selection of ocean boundary conditions on coastal hydrodynamic simulations", Proceedings of the 40th IAHR Congress, DOI: doi.org/10.3850/978-90-833476-1-5\_iahr40wc-p0785-cd, August, 2023.
- [2] Kashima, C. and Nakatani, Y., "Behavior analysis of open ocean water in the Seto Inland Sea by using particle tracking", Proceedings of the 34th International Ocean and Polar Engineering Conference, 2024(accepted).
- [3] Y. Baba, and X. LU, "Analysis of Lightning-induced Surges Inside a High-rise Condominium Building Struck by Lightning", The 17th International Symposium on EMC and Transients in Infrastructures / International Student Session (ISET/ISS), 2023.
- [4] Tianyi Wei, Abhishek Lakshman Pillai, Ryoichi Kurose, "Numerical investigation of high-speed droplet impact on flat surfaces with different wettability", ICMF2023, Kobe Japan, Apr. 2023.

- [5] Tatsuki Itasaka and Masahiro Okuda, "Zero-Shot Hyperspectral Image Denoising With Self-Completion with Patterned Masks", 2023 IEEE International Conference on Image Processing (ICIP). IEEE, Oct 8, 2023.
- [6] Haruhi Matsuyama, Takehiro Fujii, Suguru Miyauchi, and Shintaro Takeuchi, "Computational simulation of the intracellular pressure response to action potentials using the permeation flux model for multicomponent electrolyte solutions", American Physical Society (APS) 76th Annual Meeting of the Division of Fluid Dynamics (DFD) at Washington D.C, Abstract ID: 1687276, November 19-21, 2023.
- [7] Kento Hashimoto and Shintaro Takeuchi, "Heat transfer in natural convection with conductive particles considering radiative heat transfer", Turbulence, Heat and Mass Transfer 10 (THMT23) at Rome, Italy, September 11-15, 2023.
- [8] Haruhi Matsuyama, Suguru Miyauchi, Shintaro Takeuchi, "Study of the Mechanical Effects of Solvents Acting on Neuronal Membranes Using the Permeation Flux Model of Multicomponent Electrolyte Solutions", Abstract of ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2023 (AJK FED2023) at Osaka, Japan, Paper ID: 1-11-3-02, July 9-13, 2023.
- [9] Kento Hashimoto, Shintaro Takeuchi, "Heat transfer in particle-laden flow considering temperature gradient within the particles and radiative heat transfer", Abstract of ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2023 (AJK FED2023) at Osaka, Japan, Paper ID: 1-11-3-02, July 9-13, 2023.
- [10] Owen, E. R., Kong, A. K. H., Pan, K.-C., "Cosmic ray calorimetry in star-forming galaxy populations and implications for their contribution to the extra-galactic γ -ray background. In: Proceedings of Science", 38th International Cosmic Ray Conference, in Nagoya, Japan, id. 554., 26 July -3 August 2023.
- [11] Kota Sueyoshi and Takashi Matsubara, "Predicated Diffusion: Predicate Logic-Based Attention Guidance for Text-to-Image Diffusion Models", Proc. of The IEEE/CVF Computer Vision and Pattern Recognition Conference 2024 (CVPR2024), Seattle, arXiv, Jun. 2024.
- [12] Keigo Tsutsui, Phuoc Thanh Tran-Ngoc, Hirotaka Sato, and Takashi Matsubara ", "Deep-Learning-Based Time-Series Analysis of Insect Behavior, Proc. of 2023 International Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications (NOLTA2023), Catania, Sep. 2023.
- [13] Hidetaka Marumo and Takashi Matsubara, "Scale-Equivariant Convolution for Projection-based Point Cloud Segmentation", Proc. of 2023 International Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications (NOLTA2023), Catania, Sep. 2023.
- [14] Kota Sueyoshi and Takashi Matsubara, "Concept Composition by Energy-Based Model using Order Embedding", Proc. of 2023 International Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications (NOLTA2023), Catania, Sep. 2023.
- [15] Takashi Matsubara and Takaharu Yaguchi, "Good Lattice Accelerates Physics-Informed Neural Networks", Proc. of ICML2023 Workshop on the Synergy of Scientific and Machine Learning Modeling (SynS and ML), Honolulu, Jun. 2023.

- [16] Yudai Kotani, Hiori Kino, Satoshi Hamaguchi, "Development of machine-learning-based interatomic potentials for sputtering simulation of silicon and silicon dioxide", Okinawa Japan, April 2023.
- [17] Yudai Kotani, Hiori Kino, Satoshi Hamaguchi, "Development of machine-learning-based interatomic potentials for sputtering simulation of silicon", Aix-en-Provence, June 2023.
- [18] Yudai Kotani, Hiori Kino, Satoshi Hamaguchi, "Towards Accurate Sputtering Simulations: Developing Machine Learning-Based Interatomic Potentials for Silicon", Antibes French Riviera, September 2023.
- [19] Keichi Takahashi, Soya Fujimoto, Satoru Nagase, Yoko Isobe, Yoichi Shimomura, Ryusuke Egawa, Hiroyuki Takizawa, "Performance Evaluation of a Next-Generation SX-Aurora TSUBASA Vector Supercomputer", ISC High Performance 2023, May 2023.
- [20] Yukihiko Okumura, "Flame structure and reaction analysis for ammonia turbulent burner", Proc.
   7th International Workshop on Heat-Mass Transfer Advances for Energy Conservation and Pollution Control (IWHT2023), Paper II -10, 9 pages, 2023.8.
- [21] Yukihiko Okumura, Tomohiro Tsubota, Kenta Kikuchi, Noritoshi Yagawa, Tomohiro Matsunami, "Combustion characteristic of NH3/H2/N2 premixed flame", Proc. 33rd International Symposium on Transport Phenomena (ISTP2023), Paper-ID Combustion and Reacting Flows 1 -25, 5 pages, 2023.9.
- [22] Sheila Langa and Yusuke Takahashi, "Nonlinear Transonic Aeroelastic Analysis of a Cropped Delta Wing using Fluid-Structure Interaction and Dynamic Mode Decomposition", 4th SU2 conference, Varenna/Italy and Virtual, October 23-25, 2023.
- [23] Sanjoy Kumar Saha and Yusuke Takahashi, "Strongly Coupled Aeroelastic Modeling of Deployable Aerodynamic Decelerator at Transonic Speed", 4th SU2 conference, Varenna/Italy and Virtual, October 23-25, 2023.
- [24] Yang Yinan, Zhiren Bai, Tsukasa Hori, Shinya Sawada, Fumiteru Akamatsu, "Towards Accurate Simulation on a Three-dimensional Turbulent Partially Premixed Flame with Detailed Chemistry and Radiative Heat Transfer", Proceedings of 14th Asia-Pacific Conference on Combustion (ASPACC 2023)., 2023.
- [25] Kalash Dixit, Ritu Raj Kumar, Nagabhushana Rao Vadlamani, Nobuyuki Tsuboi, "Effects of Reynolds Number and Ramp Angle on Gortler Vortices over a Compression Ramp", The 34th International Symposium on Shock Waves, Daegu Korea, 16-21 July 2023.
- [26] Tsuyoshi Ifuku, Tsuyoshi Okura, Nobuyuki Tsuboi, Kohei Ozawa, Satoshi Nonaka, Takashi Ito, "Numerical Simulation on Aerodynamic Characteristics of Reusable Vehicle Experiment RV-X : Effect of Turbulence Model", The 34th International Symposium on Space Technology and Science, Kurume Japan, June 2023.
- [27] Shui Kohama, Nobuyuki Tsuboi, Kouhei Ozawa, Koichi A Hayashi, "Two-Dimensional Detailed Numerical Simulation on Ammonia/Hydrogen/Air Detonation : Stability of Cellular Structure", ICDERS2023, 176 SNU Siheung Korea, July 2023.
- [28] Kubota Daiki, Tsuboi Nobuyuki, Ozawa Kohei, Hayashi A. Koichi, "Detailed Numerical Simulation

on Dimethyl Ether/Oxygen Premixture Detonation Using Reduced Chemical Reaction Model -Disturbance of Cellular Structure-", The 29th The International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS2023), 193 Siheung, South Korea, July 2023.

- [29] 田中栄次、津嘉田敬章、大橋泰裕, "APPLICABILITY OF LARGE-SCALE SEISMIC RESPONSE ANALYSIS TO NUCLEAR POWER BUILDING BASED ON FINITE ELEMENT MODELING", SMiRT 27 (27th International Conference of Structural Mechanics in Reactor Technology), Division V, 2024 年 3 月.
- [30] H. NAGATOMO, T. JOHZAKI, R. TAKIZAWA, S. FUJIOKA, "FORMATION OF HIGH AREAL DENSITY FUEL CORE USING AN EFFICIENT AND ROBUST IMPLOSION METHOD FOR FAST IGNITION", IAEA/Fusion Energy Conference, London, IAEA-CN-316/IFE-P4-4, October 18, 2023.
- [31] K. Tsujimoto, Y. Banno, T. Ando and M. Takahashi, "Flow and heat transfer characteristics of impinging jets controlled with rotating inclined jet using direct numerical simulation", Proc. the 10th Int. Symp. Turbulence, Heat and Mass Transfer, 12p, Sep. 2023.
- [32] R. OKADA, K. TSUJIMOTO, T. ANDO, M. TAKAHASHI, "Analysis of the effect of density ratio on flow characteristics in atomization of liquid jets", Proc. 33rd Int. Sym.Transport Phenomena, 5p, Sep. 2023.
- [33] Y. Koizumi, R. Miyake, Y. Hayashi, T. Tohei, A. Sakai, "Finite element analysis of Oxygen Vacancy Behavior in Rutile TiO2 under External Electric Fields", 2023 International Conference on Solid State Devices and Materials(SSDM2023), Nagoya, PS-2-13, Sep. 7.2023.
- [34] Yutaro Motoori, Susumu Goto, "Hierarchy of coherent vortices and energy cascade in turbulence behind a cylinder", Oral presentation, European Turbulence Conference 18 (ETC18), Valencia Spain.
- [35] Momona Tamagawa, Haruka Ohba, Shinya Mizuno, "Optimizing Facilities by Adjusting Node and Server Numbers in a Closed BCMP Queueing Network", Program & Abstract Proceedings Book The 7th Asian Conference of Management Science and Applications, pp.43-43, Dec. 2023.
- [36] Wentao Chen, Gyoko Nagayama, "Local Heat Flux of Resonant Layers at Solid-liquid Interface", Proceedings of 14th International Conference on Computational Heat and Mass Transfer, Sep. 2023.
- [37] Xiangrui Li, Wentao Chen, Gyoko Nagayama, "Spectral Analysis of Phonon Transport across an SiC–SiC Nanogap", Proceedings of 14th International Conference on Computational Heat and Mass Transfer, Sep. 2023.
- [38] Atsushi Sunahara, "Radiation hydrodynamic simulation study of efficient extreme ultraviolet light emission from laser-produced tin plasmas ", 12th Advanced Lasers and Photon Sources (ALPS), PACIFICO Yokohama Japan, April 18-21 2023.

- 3 国内研究会等発表論文
- [1] 星野聖奈,小椋優,横井達矢,松永克志,"リン化ガリウムにおける転位コア量子構造に関するDFT 解析",新学術領域研究「機能コアの材料科学」若手の会・領域全体会議 合同会議,東京大学,ポ スター,2023 年 7 月.
- [2] 星野聖奈,小椋優,横井達矢,松永克志,"GaPにおける転位コア量子構造に関するDFT計算",日本金属学会 2023 年秋期(第 173 回)講演大会,富山大学,口頭,2023 年 9 月.
- [3] 中谷祐介, 懸樋洸大, 岩岡慶晃, 鹿島千尋, "定点カメラ観測システムと粒子追跡モデルを用いた 河川スカムの挙動解析", 第 58 回日本水環境学会年会, 福岡, P-A-22, 2024 年 3 月.
- [4] 鹿島千尋,中谷祐介,"地形改変が瀬戸内海の流動に及ぼす影響の数値解析",第 30 回瀬戸内海研 究フォーラムin山口,山口,2023 年 8 月.
- [5] 出口博之, 鹿島千尋, 中谷祐介, "流動 水質 波浪カップリングモデルを用いた底層DOに及ぼす 波浪の影響解析", 第 30 回瀬戸内海研究フォーラムin山口, 山口, 2023 年 8 月.
- [6] Tianyi Wei, Kenya Kitada, Abhishek Lakshman Pillai, Ryoichi Kurose, "Numerical Investigation on Influence of Surface Wettability on Thin Liquid Film Ejection During Droplet Impingement", 37th CFD Symposium, Nagoya, Japan, Dec. 2023.
- [7] 南條 舜, アリ フィン, 林 慶浩, 吉田 亮, "逐次実験計画法と高分子物性自動計算の融合に基づ く光学用高分子の探索", 統計関連学会連合大会講演報告集, pp.297, Sep. 2023.
- [8] 南條 舜, アリ フィン, 林 慶浩, 吉田 亮, "逐次実験計画法と高分子物性自動計算の融合:高屈折 率・高アッベ数高分子の探索", 高分子学会予稿集, 72 巻, 2 号, Sep. 2023.
- [9] Kunichika Tsumoto, Takao Shimamoto, Yuma Aoji, Yukiko Himeno, Akira Amano, Yasutaka Kurata, "Possible anisotropy-based directivity in EAD-induced triggered activity that leads to reentrant tachyarrhythmias", 第 69 回日本不整脈心電学会学術集会, 札幌コンベンションセンター, 札幌市, July 2023.
- [10] 津元国親、島本貴生、青地悠馬、九田裕一、谷田守、天野晃、倉田康孝, "心室性不整脈発症に関与 する撃発活動形成の理論的機序: in silico研究", 第 32 回日本病態生理学会大会, ベルサール西新 宿, 新宿区, Aug 2023.
- [11] 津元国親、島本貴生、青地悠馬、九田裕一、谷田守、天野晃、倉田康孝."心室不整脈の起点としてのEAD誘発撃発活動形成の指向性, "炎症・免疫系と心血管系の相互作用から切り拓く循環生理機能の解析", 2023 年度生理学研究所心血管研究会, 自然科学研究機構, 岡崎市, Oct 2023.
- [12] 津元国親、島本貴生、青地悠馬、天野晃、倉田康孝, "第III群抗不整脈薬の催不整脈作用による致 死的不整脈の起点としてのEAD誘発撃発活動形成の指向性", 第 97 回日本薬理学会年会, 神戸国 際会議場・神戸国際展示場2号館, 神戸市, Dec.2023.
- [13] 津元国親、倉田康孝, "医工・情報学から明かされる心臓不整脈の発生メカニズム",第101回日本 生理学会大会,北九州国際会議場・西日本総合展示場,北九州市, Mar 2024.
- [14] 末吉耕大,松原崇,"述語論理を用いた拡散モデルによるテキストに忠実な画像生成",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)東広島, vol. 123, no. 410 IBISML2023-41, pp. 6-13, 3 月 2024.

- [15] 丸茂英敬, 松原崇, "2 次元投射を用いたLiDAR点群のセグメンテーションのためのスケール同変 畳み込み", 第 26 回情報論的学習理論ワークショップ (IBIS2023), 2-046, 福岡, 10 月 2023.
- [16] 筒井奎剛, Phuoc Thanh Tran-Ngoc, Hirotaka Sato, 松原崇, "深層学習を用いた昆虫行動の時系列 解析", 第 26 回情報論的学習理論ワークショップ(IBIS2023), 1-049, 福岡, 10 月 2023.
- [17] 吉田崇人,谷口隆晴,松原崇,"物理システムにおける深層学習のための損失関数",2023 年度 第 37回 人工知能学会全国大会 (JSAI2023), 2M6-GS-10-06, 熊本,6月 2023.
- [18] 青嶋雄大, 松原崇, "深層生成モデルのための可換かつ非線形な画像編集", 2023 年度 第 37 回 人 工知能学会全国大会 (JSAI2023) (人工知能学会 全国大会優秀賞 受賞), 1O4-GS-7-02, 熊本, 6 月 2023.
- [19] 末吉耕大, 松原崇, "順序埋めこみを用いたエネルギーベースモデルによる概念合成", 2023 年度 第 37 回 人工知能学会全国大会 (JSAI2023), 1O4-GS-7-01, 熊本, 6 月 2023.
- [20] 松原崇, "数学的構造を保存する深層学習の圏論的解釈について", 2023 年度 第 37 回 人工知能学 会全国大会 (JSAI2023), 1G3-GS-1-04, 熊本, 6 月 2023.
- [21] 松原崇, "圏としての幾何学的深層学習による構造保存", 第 67 回 システム制御情報学会 研究発 表講演会 (SCI'23), 京都, 5 月 2023.
- [22] 筒井奎剛, 松原崇, "データ駆動型降水量予測のための評価関数の設計", 第 67 回 システム制御情報学会 研究発表講演会 (SCI'23), 京都,5月 2023.
- [23] 丸茂英敬, 松原崇, "距離情報を含む画像のセグメンテーションのための距離同変畳み込み", 第67 回 システム制御情報学会 研究発表講演会 (SCI'23), 京都, 5月 2023.
- [24] 樽井 章太, 森川 良忠, 福井 賢一, "イオン液体/グラファイト電極界面に生じる電気二重層にお けるLi+イオンの電位に応じた挙動のMD計算による解析", 第 17 回分子化学討論会, 大阪, 2023 年9月.
- [25] 高橋慧智,藤本壮也,長瀬悟,磯部洋子,下村陽一,江川隆輔,滝沢寛之,"ベクトル型スーパーコ ンピュータ「AOBA-S」の性能評価",研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC), 2023-HPC-191(1), 2023 年 9 月.
- [26] 鈴木 優太,内藤 健,小林 知嵩,中川 竜輝,松村 咲音,佐藤 理久,鳥羽 雄大,小島 健人,山 田 創太,"Tri-octagon型噴流衝突圧縮機構を有する航空宇宙用エンジンの流動数値解析",第67回 宇宙科学技術連合講演会,Oct.2023.
- [27] 花野正浩, 佐野孝好, Alessio Morace, 坂和洋一, "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静電衝撃波:レーザー偏光方向依存性", 日本物理学会 2023 年年次大会, 18pA105-8, 2023 年9月.
- [28] 坂和洋一,花野正浩, Alessio Morace,佐野孝好,"臨界密度近傍プラズマ中のプラズマ磁気圧駆動 無衝突静電衝撃波",プラズマ核融合学会 2023 年第 40 回年会, 29cA05, 2023 年 11 月.
- [29] 坂和洋一,花野正浩, Alessio Morace,佐野孝好,"臨界密度プラズマ中のプラズマ磁気圧駆動無衝 突静電衝撃波イオン加速",レーザー学会 第44回年次大会,C05-19a-VII-02C,2024年1月.
- [30] 坂和洋一, "高強度レーザー駆動無衝突静電衝撃波によるイオン加速", 「宇宙プラズマとレーザー 生成プラズマにおける粒子加速・加熱」研究会, 2024 年 3 月.
- [31] 塩山悠大,河原伸幸,小橋好充,ほか3名,"水素予混合乱流火炎の火炎伝播速度に及ぼす選択拡

散の影響", 第 34 回内燃機関シンポジウム, 講演番号 69, 2023 年 12 月 7 日.

- [32] 新宮寛康, 河原伸幸, 小橋好充, "軽油着火式二元燃料ガスエンジンにおけるPREMIER燃焼〜当量 比のエンドガス自着火に及ぼす影響〜", 日本機械学会中国四国支部第 62 期講演会, 講演番号 06b2, 2024 年 3 月 8 日.
- [33] 天野開,水野賢吾,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 発生を利用した剥離抑制",第 60 回日本航空宇宙学会関西・中部支部合同秋期大会講演論文集, A05, pp.1-2, 2023.
- [34] 松下啓,岩林菜々香,比江島俊彦, "超音速燃焼におけるSRストラットの燃料噴射位置の効果について",第 37 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, 3-01, pp.1-2, 2023.
- [35] 守山宗和,松山力生,土岐紘大,比江島俊彦, "超音速ジェット流におけるマッハ波と剪断渦の関係について",第 37 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, 3001-04-04, pp.1-2, 2023.
- [36] 杉原 礼一,加藤 有己,河原 行郎,"グラフ埋め込みと最適輸送を用いた空間的遺伝子発現情報の アラインメント",第 77 回情報処理学会バイオ情報学研究会 情報処理学会研究報告,2024-BIO-77 (21),石川県能美市, Mar 2024.
- [37] 奥村 幸彦, 坪田 知大, 松田 直也, 堀 司, 赤松 史光, "水素保炎型アンモニア拡散バーナーの火 炎構造と反応解析", 第 61 回 燃焼シンポジウム講演論文集電子版(日本燃焼学会), 講演番号: A311, 4 pages, 2023.11.
- [38] 楠 直也, 竹原 裕貴, 奥村 幸彦, "旋回 絞り構造バーナーによるバイオシンガスの高負荷燃焼機構", 第 60 回日本伝熱シンポジウム講演論文集電子版(日本伝熱学会), 講演番号: F222, 6 pages, 2023.5.
- [39] Xinpeng Liu, Hiroaki Santo, Yosuke Toda, Fumio Okura, "TreeFormer: Hard-constrained Imageto-graph Generation", 画像の認識・理解シンポジウム, 2023 年 7 月.
- [40] 松本 優作(大阪大学),堀司(大阪大学),河本 祐作(中外炉工業株式会社),田口 脩平(中外 炉工業株式会社),仲井 和成(中外炉工業株式会社),尾松 大輔(中外炉工業株式会社),大倉 莉 奈(中外炉工業株式会社),中塚記章(大阪大学),澤田 晋也(大阪大学),赤松 史光(大阪大学), "流体固体熱連成を考慮したラジアントチューブバーナの数値解析",第61回燃焼シンポジウム前 刷講演論文集,第61回燃焼シンポジウム,C112,2023.
- [41] 松元 開(大阪大学),吉原 東吾(大阪大学),堀 司(大阪大学),中塚 記章(大阪大学),澤田 晋也(大阪大学),赤松 史光(大阪大学),"酸素水素火炎の燃焼器を対象とした燃焼流と固体の 熱連成解析",第62回燃焼シンポジウム前刷講演論文集,第61回燃焼シンポジウム,B212,2023.
- [42] Yinan Yang (Osaka University), Tomoya Nakai (Osaka University), Tsukasa Hori (Osaka University), Shinya Sawada (Osaka University), Fumiteru Akamatsu (Osaka University), "Numerical Analysis of NO Emission Characteristics in a 10-kW Class Combustion Furnace with Ammonia Co-Firing", 第 62 回燃焼シンポジウム前刷講演論文集,第 61 回燃焼シンポジウム, D121, 2023.
- [43] 香川 麟太郎(阪大), 堀 司, 赤松 史光, 澤田 晋也, "粒子を伴う燃焼器を対象とした数値解析手法の開発", 日本機械学会関西支部 2023 年度関西学生会卒業研究発表講演会, 11PM2-3, 2024.
- [44] 野々村 昂大(阪大), 堀 司, 赤松 史光, "素反応を考慮した RANS 燃焼解析手法の検討", 日本機 械学会関西支部 2023 年度関西学生会卒業研究発表講演会, 12PM1-2, 2024.
- [45] 寺田雄亮, 升本順夫, "東太平洋における赤道中層海流の駆動メカニズム", 「微細規模から惑星規 模にかけての海洋力学過程と規模間相互作用の研究」研究集会, 大分, Oct. 2023.
- [46] Yusuke Terada, Yukio Masumoto, "Interannual modulation of the intraseasonal variability at 1000m depth in the eastern tropical Pacific Ocean", International workshop on Ocean-Atmosphere Coupling, Tokyo, Nov. 2023.
- [47] 寺田雄亮,升本順夫, "東太平洋における赤道中層海流の駆動メカニズム", 研究集会:海洋の統合的 理解に向けた新時代の力学理論の構築, 札幌, Nov. 2023.
- [48] Yusuke Terada, Yukio Masumoto, "Generation of the Equatorial Intermediate Current in the eastern Pacific Ocean", 6th ISEE Symposium, Nagoya, Dec. 2023.
- [49] 立浪 祐貴, 瀧 雅人, "物体検出のためのバックボーンとしての再帰ニューラルネットワーク", 情報処理学会 第 86 回全国大会, Mar. 2024.
- [50] 本田悠一郎, 坪井伸幸, 寺島洋史, 荒木天秀, "多成分超臨界・遷臨界流体に対するエネルギー保存 /圧力発展方程式ハイブリッド法の改善と検証", 2023 年度機械学会九州支部卒論発表会, 2024,3
- [51] 帆足真尋, 荒木天秀, 寺島洋史, 坪井伸幸, "超臨界圧下における極低温水素の熱力学物性値に関 する数値解析:状態方程式が数値計算に与える影響", 日本機械学会九州支部 九州学生会第 55 回学生員卒業研究発表講演会, 琉球大学工学部, 2024.3.7
- [52] 鹿釜由衣, 坪井伸幸, "翼型の遷音速空力解析における空力特性:乱流モデルの影響評価", 2023 年 度衝撃波シンポジウム, 2024.3.
- [53] 岩見彩花, 坪井伸幸, 小澤晃平, 丸 祐介, 藤田 和央, "数値計算による簡易ウェーブライダー形 状の空力特性評価: 乱流モデルの影響 ", 2023 年度衝撃波シンポジウム, 2024.3.
- [54] 二本松良祐, 伊藤拓海, 坪井伸幸, 小澤晃平, 林光一, "2 次元数値解析による水素/空気非予混合 噴射条件下におけるRDEの性能評価:噴射口数が与える影響", 2023 年度衝撃波シンポジウム, 2024.3.
- [55] 奥田響,伊藤拓海,坪井伸幸,小澤晃平,林光一,"水素/空気デトネーションの2次元非定常数値 解析:対流項の高次精度化及び数値流束項の影響",2023年度衝撃波シンポジウム,2024.3.
- [56] 笠友介、植村文哉、坪井伸幸、小澤晃平、林光一, "水素酸素デトネーションにおける解適合格子 を用いたDDTの数値解析", 2023 年度衝撃波シンポジウム, 2024.3.
- [57] 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, "Artificial Thickening Flame法を用いた障害物を有する管内での爆轟遷移に関する数値解 析:RUT22 について", 第 55 回流体力学講演会/第 41 回ANSS, 2023.7.
- [58] 伊藤拓海,吉富啓介,坪井伸幸,小澤晃平,林光一,"回転デトネーションエンジンにおける水素/ 空気を用いた予混合及び非予混合気下の2次元数値解析:流れ場と推進パラメータに及ぼす影響 の比較",第55回流体力学講演会/第41回ANSS,1B11,2023年6月.
- [59] 伊藤拓海, 坪井伸幸, 小澤晃平, 林光一, "3 次元数値解析による水素空気予混合気多孔噴射を用いたディスク型RDE の性能評価 噴射口数が伝播特性に与える影響 -", 第 61 回燃焼シンポジウム, C221, 2023 年 11 月.
- [60] 伊藤拓海, 坪井伸幸, 小澤晃平, 林光一, "3 次元数値解析による水酸素予混合気多孔噴射を用いた ディスク型RDE の性能評価 -格子解像度の影響-", 日本航空宇宙学会西部支部講演会(2023),

JSASS-2023-S007, 2023年12月.

- [61] 植村文哉, 坪井伸幸, 小澤晃平, 唐新猛, 林光一, "ブロックAMR法を用いた 2 次元水素/酸素爆轟の数値解析:計算の妥当性と構造格子の比較・検討", 第 55 回流体力学講演会/第 41 回ANSS, 1B04, 2023 年 6 月.
- [62] 植村文哉, 坪井伸幸, 小澤晃平, 唐新猛, 林光一, "ブロック AMR 法を用いた水素/酸素デトネー ションの DDT に関する 2 次元数値解析- 細分化条件及び AMR レベルによる解析結果の比較 検討- ", 第 61 回燃焼シンポジウム, E311, 2023 年 11 月.
- [63] 椎名 峻平,田浦 健次朗, "分散タスク並列処理系Itoyoriにおける局所性に配慮した大域アドレス 空間およびスケジューリング",研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング(HPC),2023-HPC-190, July 2023.
- [64] Xiang Li, Ryo Matsumoto, Hiroshi Utsunomiya and Shigenobu Ogata, "The energy dissipation of the slip of edge dislocations of pure Aluminum", the Japan Institute of Metals and Materials Autumn Meeting 2023, Toyama Japan, Sept. 2023.
- [65] 長友英夫, "3次元レーザープラズマシミュレーションコードにおける光線追跡コードの開発と数 値解析", 第 40 回 プラズマ・核融合学会年会, 盛岡市, 2023 年 11 月 28 日.
- [66] 富吉良徳, "任意のトポロジー構造を持つブロック共重合体に対する密度汎関数法",第72回高分子討論会,香川大学幸町キャンパス,2023年9月26日.
- [67] 岡田陸, 辻本公一, 安藤俊剛, 高橋護, "DIM による気液密度比が液体噴流の微粒化初期過程に与える影響の解析", 日本混相流学会混相流シンポジウム 2023 講演論文集, 2p, Aug. 2023.
- [68] 増田竜海, 辻本 公一, 安藤 俊剛, 高橋 護, "DNSによる衝突面を振動制御させた多重衝突噴流の 伝熱特性", 日本機械学会 2023 年度年次大会講演論文集, 5p., Sep. 2023., "DNSによる衝突面を振 動制御させた多重衝突噴流の伝熱特性", 日本機械学会 2023 年度年次大会講演論文集, 5p, Sep. 2023.
- [69] 村井 詳悟,田ノ上飛翔,辻本 公一,安藤 俊剛,高橋 護, "DNS による脈動を付与された多重噴 流の流動特性",第 37 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, 6p, Dec. 2023.
- [70] 岡田 陸, 辻本 公一, 社河内 敏彦, 安藤 俊剛, 高橋 護, "分割制御された平面液体噴流の微粒化 における密度比の影響", 第 37 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, 5p, Dec. 2023.
- [71] 村井詳悟,田ノ上飛翔,辻本 公一,安藤 俊剛,高橋 護,"脈動ならびに間欠制御された多重噴流のDNS",日本機械学会東海支部第73 期総会・講演会講演論文集,1p, Mar. 2024.
- [72] 増田竜海, 辻本 公一, 安藤 俊剛, 高橋 護, "噴出角度を周期的に変化させた衝突噴流のDNS", 日本機械学会東海支部第 73 期総会・講演会講演論文集, 1p, Mar. 2024.
- [73] 岡田 陸, 辻本 公一, 安藤 俊剛, 高橋 護, "分割制御された液体噴流における密度比が流動特性 に与える影響", 日本機械学会東海支部第 73 期総会・講演会講演論文集, 1p, Mar. 2024.
- [74] 藤森 航紀, 辻本 公一, 安藤 俊剛, 高橋 護, "間欠制御された多重衝突噴流の位相平均場", 日本 機械学会東海支部第 73 期総会・講演会講演論文集, 1p, Mar. 2024.
- [75] 都築 昇悟,太田 貴士, "粘弾性流体乱流のためのLESモデルの開発とその適用範囲の検証",日本 機械学会 2023 年度 年次大会, Sep. 2023.
- [76] 皆本 慧, 太田 貴士, "過冷却液体の乱流のDNSにおける凝固組織構造の形成メカニズムの解明",

日本機械学会 第36回計算力学講演会, Oct. 2023.

- [77] 上野 玄稀, 太田 貴士, "水素予混合燃焼を伴う壁乱流DNSにおける火炎構造とNOx生成の関係の 解析", 第 21 回日本流体力学会中部支部講演会, Nov. 2023.
- [78] 浅野 柚, 太田 貴士, "キャビテーションが発生する乱流クエット流れのDNSにおける非定常渦キャビテーションの維持メカニズム", 第 37 回数値流体力学シンポジウム, Dec. 2023
- [79] 永井 智也, 太田 貴士, "一様に溶融する壁面に沿う乱流境界層における乱流変調のメカニズムの 解明", 流体工学シンポジウム(第72回北陸流体工学研究会), Dec. 2023.
- [80] 道坂 大介,太田 貴士, "粘塑性流体乱流における組織的構造の特徴の解明", 流体工学シンポジウム(第72回北陸流体工学研究会), Dec. 2023.
- [81] 黒田 陸真, 太田 貴士, "回転する円柱の表面に沿う乱流の抵抗低減条件の導出", 流体工学シンポ ジウム(第72回北陸流体工学研究会), Dec. 2023.
- [82] 法邑 拓真, 太田 貴士, 中澤 勇亮, "乱流境界層の非定常構造の影響による固体壁振動の解析", 日本機械学会 北陸信越支部 2024 年合同講演会, Mar. 2024.
- [83] 野呂 覚, 太田 貴士, 上野 玄稀, "数値シミュレーションによる水素-空気予混合燃焼を伴う壁乱 流の予測の検証", 日本機械学会 北陸信越支部 2024 年合同講演会, Mar. 2024.
- [84] 浪井 稀羽, 太田 貴士, 浅野 柚, "渦キャビテーションの発生を伴う乱流せん断層のDNSにおける 乱流変調の観察", 日本機械学会 北陸信越支部 2024 年合同講演会, Mar. 2024.
- [85] 増山 遼大, 太田 貴士, 皆本 慧, "異なる数値シミュレーション方法による粗面に沿う乱流の予測 結果の比較", 日本機械学会 北陸信越支部 2024 年合同講演会, Mar. 2024.
- [86] 小泉優紀、三宅亮太郎、林侑介、藤平哲也、酒井朗, "4 端子平面型TiO2-xメモリスタにおける酸素空孔挙動の有限要素法解析",第84回応用物理学会秋季学術講演会,21a-A307-6,熊本,2023年9月21日.
- [87] 本告遊太郎,後藤晋,"粒子の添加による壁乱流の低減および乱流構造の変化",混相流シンポジウム 2023,北海道,2023.08.24-26.
- [88] 本告遊太郎, 後藤晋, "粒子による壁乱流中の秩序構造の低減", 日本流体力学会年会 2023, 東京, 2023.09.20-22.
- [89] 山本大輔, "SU(N)磁性と冷却原子量子シミュレータ",極限宇宙ワークショップ~実験と理論の協奏に向けて:固体物質系から量子・冷却気体系まで(招待講演),東大駒場キャンパス東京,2023 年5月16日.
- [90] 荻本 和彦, 岩船 由美子, 竹内 知哉, 瀬川 周平, 東 仁, 井上 智弘, 黒沢 厚志, 加藤 悦史, 山口 容平, 内田 英明, 太田 豊, 下田 吉之, "ソフトリンクによる 2050 年のエネルギー需給分析: (2) 民生需要変化の電力需給への影響評価", エネルギー・資源学会論文誌, 44 巻, 5 号, p. 245-254, 2023 年 (https://doi.org/10.24778/jjser.44.5\_245).
- [91] 井上 智弘, 黒沢 厚志, 加藤 悦史, 荻本 和彦, 岩船 由美子, 山口 容平, 内田 英明, 太田 豊, 下 田 吉之, "ソフトリンクによる 2050 年のエネルギー需給分析: (1) 民生需要変化を考慮したシ ナリオとその評価", エネルギー・資源学会論文誌(https://doi.org/10.24778/jjser.44.5\_234), 44 巻, 5 号, p. 234-244, 2023 年.
- [92] 山本紘生, 大森健史, "固液境界における流体力学的境界条件の周波数依存性", 日本伝熱シンポジ

ウム, 2023.5.25.

- [93] 庄野竜生,畑中健太,Yohei Sato,矢吹智英,"数値計算による水のプール沸騰熱伝達メカニズムの 研究",第 60 回日本伝熱シンポジウム, 2023.5.
- [94] 庄野竜生,畑中健太,Yohei Sato,矢吹智英,"数値計算による発泡点を制御した水のプール沸騰に おける対流熱伝達メカニズムの研究",日本機械学会熱工学コンファレンス 2023, 2023.10.
- [95] 中沢一雄,稲田慎,岸田優作,柴田仁太郎,富井直輝,高山健志,井尻敬,山口豪,芦原貴司,"心 房細動患者を想定した 3 次元心房形状モデルの構築による興奮伝播ダイナミクスの可視化",第 43 回医療情報学連合大会,神戸ファッションマート,口頭発表,2023/11/22-25.
- [96] 中沢一雄,稲田慎,岸田優作,柴田仁太郎,富井直輝,高山健志,井尻敬,芦原貴司,"心房細動興 奮伝播様式の再現を目指した大規模電気生理学的シミュレーションと可視化",第 62 回日本生体 医工学会大会,名古屋国際会議場,口頭発表,2023/5/18-20.
- [97] 玉川 桃菜, 大場 春佳, 水野 信也, "閉鎖型 BCMP 待ち行列ネットワークにおける拠点・窓口数 同時最適化モデルの構築", 日本経営工学会秋季大会予稿集, Oct. 2023.
- [98] 小宮山 佑樹, 大場 春佳, 富樫 敦, 水野 信也, "閉鎖型BCMP待ち行列ネットワークにおける複数窓口に注目した最適拠点配置の実施", 日本経営工学会春季大会予稿集, June. 2023.
- [99] 陳文涛, 長山暁子, "固液界面における熱輸送のスケール効果に関する分子動力学的研究", 日本機 械学会熱工学コンファレンス 2023, Oct. 2023.
- [100] 李祥瑞, 陳文涛, 長山暁子, "印加電場がSiC-SiC+ノギャップを介したフォノン熱輸送に及ぼす影響", 日本機械学会熱工学コンファレンス 2023, Oct. 2023.
- [101] 木村優太, 長山暁子, "多成分系の気液界面における蒸発・凝縮の分子動力学解析", 日本機械学会 熱工学コンファレンス 2023, Oct. 2023.
- [102] 諸見里柊, 長山暁子, "接触角の液滴サイズ依存性に関する分子動力学解析", 日本機械学会熱工 学コンファレンス 2023, Oct. 2023.
- [103] 小田 豊, 古川 泰成, 松本亮介, "一様発熱面の熱容量を考慮したチャネル乱流伝熱場の直接数値 計算", 第 60 回日本伝熱シンポジウム, Paper No. C132, May 2023.
- [104] 古川泰成,小田豊,松本亮介,香月正司,"一様発熱面の熱容量を考慮したチャネル脈動乱流場の DNS",日本機械学会熱工学コンファレンス 2023, Paper No. B134, Oct. 2023.
- [105] 寺西 勇裕, 平岡 昇真, 水上 渉, 置田 真生, 伊野 文彦, "状態ベクトルに基づく並列量子回路 シミュレーションにおける量子ビット交換の削減のための演算スケジューリング", SWoPP2023, Aug. 2023.
- 4 その他
- [1] 中谷祐介, "外洋起源有機物の動態が瀬戸内海の COD 濃度に及ぼす影響", 国立環境研究所 地方 環境研共同研究全体会合[依頼講演].大阪, 2024 年 2 月 20 日.
- [2] 中谷祐介, "スパコンを活用した瀬戸内海の水環境シミュレーション", スパコンセミナー「のぞい てみようスパコンの世界 - 『富岳』を見て, 聞いて, 知って - [依頼講演].神戸, 2023 年 10 月 14
   日.
- [3] 中谷祐介, "AI を活用した河川浮遊ごみのモニタリングと挙動解析", 国立環境研究所セミナー[依

頼講演].オンライン, 2023 年7月6日.

- [4] 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?", 兵庫県漁協青壮年部連合会研修会 [依頼講演].洲本, 2023 年 5 月 26 日.
- [5] Takehiro Aoshima and Takashi Matsubara, "Semantic Images Editing by Operations on Latent Space of Deep Generative Models", 日本画像学会誌, vol. 62, no. 6, pp.579-587, 2023 年.
- [6] 松原崇, 陳鈺涵, 谷口隆晴, "幾何学的深層学習による力学系のグレーボックスモデル化", 人工知能, vol. 38, no. 3, pp. 308-317, 2023 年.
- [7] 青嶋雄大, 松原崇, "潜在空間で画像編集一大きさ・色・形, 思いどおりに画像を編集!", in コン ピュータビジョン最前線 Winter 2023, 共立出版, 2023 年.
- [8] 大橋圭太郎,原田隆史,中西周次,神谷和秀,"銅担持共有結合性有機構造体による一酸化炭素電解 還元反応とそのメカニズム解析",2023 電気化学秋季大会,九州大学伊都キャンパス,Sep.2023.
- [9] 名木田海都, 濱本雄治, 神谷和秀, 中西周次, 森川良忠, "銅(100)表面上での CO2 電解還元に対し て吸着酸素原子が与える影響の第一原理解析", 電気化学会第 91 回大会, 名古屋大学東山キャン パス, Mar. 2024.
- [10] 石原菜々子,田畑裕,西島弘晃,近谷元大,向山義治,長谷陽子,向田志保,中西周次,"糖の人工 光合成系の設計におけるデータ駆動型アプローチ と生成 AI の活用",第13回 CSJ 化学フェスタ 2023,タワーホール船堀,(優秀ポスター発表賞), Oct. 2023.
- [11] 石原菜々子,田畑裕,西島弘晃,近谷元大,向山義治,長谷陽子,向田志保,中西周次,"Datadriven Exploration of Chemical Stabilizers of Life-sustaining Sugars",第46回ケモインフォマティ クス討論会,中央大学後楽園キャンパス, Nov. 2023.
- [12] S. Koshimura, E. Mas, B. Adriano, A. Musa, "Tsunami Digital Twin A new paradigm for tsunami disaster resilience", the 28th General Assembly of the International Union of Geodesy and Geophysics, July 11-20, 2023.
- [13] 鍬守 直樹、撫佐 昭裕、金城 潤子、瀧川 陽平、佐藤 佳彦、越村 俊一, "MAS SAMANEZ ERICK ARTURO、災害評価装置、災害評価方法、及びプログラム",日本電気株式会社、国立大学法人東 北大学、特願 2024-044648, 2024 年 3 月 21 日出願.
- [14] 竹本宏輝,明孝之,堀川昶,井坂政裕, M. Lyu, Q. Zhao, N. Wan, "複素スケーリングされた生成 座標法で得られた Bloch--Brink 波動関数による 8Be の共鳴の解析",一般社団法人 日本物理学会 オンライン, 2024 年 3 月 20 日.
- [15] 宮下竜、高橋裕介, "低速領域における柔軟エアロシェルの流体構造連成モデリングと再構築手法 について", 令和5年度宇宙 航行の力学シンポジウム 神奈川, 12/11-12, 2023.
- [16] 高橋裕介、Sanjoy Kumar Saha, "柔軟構造エアロシェルの流体構造連成解析と動的モード分解による主要モード抽出の進捗 ついて", OpenCAE シンポジウム 2023 A-09 神奈川, 12/8-9, 2023.
- [17] 高橋裕介, "動的モード分解を用いた流体構造連成挙動の解析", 第 36 回計算力学講演会 (CMD2023)OS-0603 豊橋, 10/25-27, 2023.
- [18] Sanjoy Kumar Saha and Yusuke Takahashi, "Dynamics of Coherent Patterns Around Deployable Aeroshell Using Dynamic Mode Decomposition", 第 67 回宇宙科学技術連合講演会 2H13 富山, 10 月 17-20 日, 2023.

- [19] Sanjoy Kumar Saha and Yusuke Takahashi, "Aeroelastic Behavior of Deployable Aeroshell in Subsonic and Transonic Flow", 第 55 回流体力学講演会/第 41 回航空宇宙数値シミュレーション技術 シンポジウム 2B07 東京, 7 月 12-14 日, 2023.
- [20] Y. Kuwahara, T. Hattori, P. Krukowski, C. Ye, A. Saito, Y. Hamamoto, Y. Morikawa, and H. Osuga, "Stereochemical Recognition of thiaheterohelicene derivatives Investigated by STM and Raman Scattering Spectroscopy", 国際会議発表 ポーランド (ウッジ Lodz), 2023 年 8 月.
- [21] 楊 軼楠, 中井 智哉, 堀 司, 澤田 晋也, 赤松 史光, "共役熱伝達を考慮した数値解析による二段 燃焼を適用した 10kW 級アンモニア燃焼炉における NO 排出予測", 熱工学コンファレンス 2023, E122, 2023.
- [22] 松元 開(阪大), 堀 司, 中塚 記章, 澤田 晋也, 赤松 史光, "流体固体熱連成解析によるフィルム 冷却を適用した酸素水素燃焼器ライナーの壁温度の予測", 第 99 期定時総会講演会 20201., 2024.
- [23] 松本優作(阪大), 堀 司, 河本 祐作(中外炉工業), 田口 脩平, 仲井 和成, 尾松 大輔, 大倉 莉奈, 中塚 記章(阪大), 赤松 史光, "流体固体熱連成を考慮したラジアントチューブバーナ炉の数値解 析", 第 99 期定時総会講演会 10203., 2024.
- [24] 寺田雄亮,升本順夫, "東部太平洋赤道域の深さ 1000m における季節内変動の経年変化", 月刊海洋, 56, 10-16., 2024.
- [25] Takuma Kobayashi, Takayoshi Shimura, Heiji Watanabe, "Ab initio study of oxygen-vacancy defect in 4H-SiC: A potential qubit", International Conference on Silicon Carbide and Related Materials (ICSCRM 2023), Sorrento, Italy, Sep. 2023.
- [26] 岩本 蒼典, 志村 考功, 渡部 平司, 小林 拓真, "第一原理計算に基づく 4H-SiC 中酸素関連欠陥 の系統的調査", 第 71 回応用物理学会春季学術講演会 東京 日本, 2024 年 3 月.
- [27] 織戸悠輔, 吉野元, "画像データを用いた深層学習における隠れ層のレプリカ相関", 日本物理学会 第 78 回年次大会 東北大学, 2023 年 9 月.
- [28] 織戸悠輔, 吉野元, "画像データを用いた深層学習における長時間ダイナミクス", 日本物理学会 2024 年春季大会 オンライン, 2024 年 3 月.
- [29] 竹内雄人, 竹内潤一郎, 藤原正幸, "キャピラリ数が吸水過程に与える影響について", 令和 5 年度 応用水理研究部会講演会 東京大学., 2023 年 12 月 2 日.
- [30] Shinsuke Takasao, "Impacts on stellar scale processes on disk evolution", Tohoku University, Mar. 19, 2024.
- [31] 萩田克美,村島隆浩,"ブロックコポリマーの相分離構造を自発的に形成する Kremer-Grest 粗視化
   MD モデルの検討",日本物理学会 2024年春季大会 オンライン,発表年月 2024.3.
- [32] Katsumi Hagita, "Systematic analysis of adhesion and delamination mechanisms at polymer-inorganic interfaces via coarse-grained molecular dynamics", CREST-NIST joint mini-symposium ワ シントン,発表年月 2024.3.
- [33] T. Sano, "MHD simulation and laser experiment", Athena++ Workshop (Invited) New York USA, May 8-12, 2023.
- [34] T. Sano, "Mitigation of shock-driven interfacial instability", 6th International Conference on Matter

and Radiation at Extremes (Invited) Zhuhai China, Jun 5-9, 2023.

- [35] T. Sano, "Relativistic wave-particle interaction under a strong magnetic field", Torino International Conference on Fundamental Plasma Physics (Invited) Torino Italy, Jun 21-23, 2023.
- [36] T. Sano, "Laser astrophysics experiment on the amplification of magnetic fields by shock-induced interfacial instabilities", Protostars and Planets VII (Poster) Kyoto Japan, Apr 10-15, 2023.
- [37] T. Sano, S. Isayama, K. Takahashi, and S. Matsukiyo, "Relativistic two-wave resonant acceleration of electrons at large-amplitude standing whistler waves during laserplasma interaction", International Conference on High Energy Density Sciences (HEDS2023) (Poster) Yokohama Japan, Apr 18-21, 2023.
- [38] T. Sano, "Richtmyer-Meshkov instability in magnetized plasmas", 7th Asia-Pacific Conference on Plasma Physics (AAPPS-DPP) (Invited) Nagoya Japan, Nov 12-17, 2023.
- [39] T. Sano, S. Isayama, K. Takahashi, and S. Matsukiyo, "Relativistic two-wave resonant acceleration of electrons at large-amplitude standing whistler waves during laser-plasma interaction", 65th Annual Meeting of the APS Division of Plasma Physics (APS-DPP) (Oral) Denver USA, Oct 30-Nov 3, 2023.
- [40] T. Sano, S. Isayama, S. Matsukiyo, K. Sugimoto, and Y. Sentoku, "Acceleration of relativistic particles and gamma-ray emission in standing Alfven waves", 65th Annual Meeting of the APS Division of Plasma Physics (APS-DPP) (Poster) Denver USA, Oct 30-Nov 3, 2023.
- [41] M. N. Ly, T. Sano, Y. Sakawa, and Y. Sentoku, "The impacts of downstream heating on ion reflection for collisionless electrostatic shock", 65th Annual Meeting of the APS Division of Plasma Physics (APS-DPP) (Poster) Denver USA, Oct 30-Nov 3, 2023.
- [42] M. N. Ly, T. Sano, Y. Sakawa, and Y. Sentoku, "Conditions of structural transition from collisionless electrostatic shock to double-layer structure", 65th Annual Meeting of the APS Division of Plasma Physics (APS-DPP) (Poster) Denver USA, Oct 30-Nov 3, 2023.
- [43] T. Sano et al., "A novel scheme of laser-driven proton-boron fusion under an ultra-strong magnetic field", 29th IAEA Fusion Energy Conference (FEC 2023) (Poster) London UK, Oct 16-21, 2023.
- [44] T. Sano, "Richtmyer-Meshkov instability in magnetized plasmas", International school and workshop on Matter in Extreme Conditions for Magnetized PLAsmas (MECMATPLA) Montgenèvre France, Feb 5-9, 2024.
- [45] 佐野孝好, "強磁場中でのレーザープラズマ相互作用とその応用", レーザー学会学術講演会第 44 回年次大会(口頭)東京, 2024/1/16-19.
- [46] 佐野孝好, 諌山翔伍, 松清修一, "実験室および天体プラズマにおける大振幅ホイッスラー波の伝播特性", 第 40 回 プラズマ・核融合学会 年会(口頭) 盛岡, 2023/11/26-30.
- [47] 佐野孝好, "大振幅ホイッスラー波の伝播特性に対するイオン質量の依存性",日本物理学会 2023 年第 78 回年次大会(ロ頭)仙台, 2023/9/16-19.
- [48] Minh Nhat Ly, T. Sano, Y. Sakawa, and Y. Sentoku, "The impact of downstream heating on ion acceleration for collisionless electrostatic shock", 日本物理学会 2023 年第 78 回年次大会(口頭, 学生優秀発表賞受賞) 仙台, 2023/9/16-19.

- [49] 佐野孝好, "強磁場中の相対論的波動粒子相互作用", ISEE 研究会「宇宙プラズマとレーザー生成プ ラズマにおける粒子加速・加熱」(ロ頭)名古屋 2024/3/4-5.
- [50] Yusuke Yasuda, Hiroshi Morita, "Coarse-Grained Model of Dynamic Bond Elastomers with Tunable Binding Entropy and Energy", The 13th SPSJ International Polymer Conference, Jul.2023.
- [51] Yusuke Yasuda, Hiroshi Morita, "Mechanical and Structural Analysis of Dynamic Bond Elastomer via Coarse-grained Molecular Dynamics Simulation Techniques", 9IDMRCS (9th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems), Aug.2023.
- [52] Yusuke Yasuda, Hiroshi Morita, "Dynamics and Mechanical Simulations of Entropy-Driven and Enthalpy-Driven Dynamic Bond Elastomers via Coarse-grained Molecular Dynamics Techniques", MRM2023/IUMRS-ICA2023, Dec.2023.
- [53] Yusuke Yasuda, Shintaro Nakagawa, Hirohiko Houjou, Naoko Yoshie, Hiroshi Morita, "Coarsegrained molecular dynamics simulations on mechanical properties of dynamic bond elastomers with entropy/enthalpy-driven mechanisms", ACS Spring 2023, Mar.2024.

# SC23 出展報告

伊達進<sup>1,2</sup> 速水智教<sup>1</sup> Kundjanasith Thonglek<sup>1</sup> 谷口 昂平<sup>1,5</sup> 曽我 隆<sup>2</sup>
 田主英之<sup>2</sup> 細見 岳生<sup>2</sup> 並木 悠太<sup>2,3</sup> 上野 雅矢<sup>4</sup> 高嶋 和貴<sup>5</sup> 村田 忠彦<sup>1</sup>
 <sup>1</sup>応用情報システム研究部門 <sup>2</sup>高性能計算・データ分析融合基盤協働研究所 <sup>3</sup>日本電気株式会社
 <sup>4</sup>情報推進部情報基盤課 <sup>5</sup>大学院情報科学研究科

2023 年 11 月に米国コロラド州 Denver にて開催さ れた国際会議/展示会 SC(通称 SC23)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いた が、今年は過去最高の14,295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22回目となる。

2023 年の SC (通称 SC23) は、米国コロラド州デ ンバー市にある Colorado Convention Center (図 1) にて、11 月 12 日から 17 日までの期間に開催された。 なお、デンバーでの SC の開催は、2001、2013、2017、 2019年度に続いて5度目となり、本センターのデン バーでの展示も5度目となる。デンバーはコロラド 州の州都であり、別名マイル・ハイシティ (Mile High City) とよばれる。このマイル・ハイという名の由 来は、デンバー市は標高1マイル(1,609m)にある ことによる。そのため、空気が希薄であり、お酒に は酔いやすいという高地ならではの特徴もある。ま た、デンバーは1年を通して空気が乾燥している。 そのため、毎回体調を崩す者がいるが、今回の展示 においても本調子ではなく風邪をひく者も多くいた。 また、今回最も厳しかったのは、歴史的な円安(1 USD = 150 JPY) であった。クレジットカードで決済 すると1ドル154.4円程度となっており、全ての物 が高く感じられた。さらに、今回の展示では、持参 したポスター筒が空港で紛失(おそらく盗難)する というアクシデントに見舞われた。そのため、急遽 電子版から現地でポスター印刷を行うという緊急対 応を行なった。

そのような中、本センターの展示に携わった皆全 てが責任感を持って、自身の対象となる展示を行い、 結果として、400 名超の来訪者に説明を行うことが



I: Colorado Convention Center



図 2:参加スタッフ記念撮影その1



図 3: 参加スタッフ記念撮影その2

できた。なお、この数字は概ねコロナ禍前の数字と 同等である。センターの概要・ミッション・事業・ 研究活動、およびそれらの成果について報告・発表 に責任感をもって対応でき、サイバーメディアセン ターの国際的なプレゼンス向上、本センターの研究 開発成果の紹介、大規模計算機システム事業の広報 という点でのよきアウトリーチ活動となったと考え ている。

### 2. 展示内容

SC23 では、11 名の教職員(2 名の招へい教員含む)、 1 名の高性能計算・データ分析融合基盤協働研究所 所属の NEC 研究員、1 名の大学院生の合計 13 名 (表 1)が大阪大学サイバーメディアセンターの出展する 展示ブースにおいて、下記6テーマでのポスター展 示を中心に本センターの概要、事業概要、および、 本センターを中心とした研究紹介、成果報告・発表 を行なった(図 2、3)。

表 1:参加スタッフ一覧

応用情報システム研	究部「	IJ
スタッフ	伊達	進
:	村田	忠彦
:	速水	智教
	Kund	janasith Thonglek
:	谷口	昂平
	阿部	洋丈 (招へい准教授)
	片岡	小百合
大学院生	高嶋	和貴
高性能計算・データ	分析層	融合基盤協働研究所
スタッフ	曽我	隆
	田主	英之
j	細見	岳生 (招へい准教授)
	並木	悠太(NEC 研究員)
情報推進部情報基盤	課	
技術職員	上野	雅矢

- (1) "Large-scale Computing Systems at the Cybermedia Center"
- (2) "Development of AI models for analyzing dental panoramic radiographs" & "MPI communication logging module with BlueField-2 Data Processing Unit"
- (3) "Provenance Management Framework for HPC Systems"
- (4) "High-speed Data Transmission" & "Information Infrastructure Integration"
- (5) "Cloud-Edge Continuum Computing Platform: An Application Platform in Post-5G Era"
- (6) "Synthetic Population for Real-Scale Social Simulations"

ブース展示は、11月13日から16日までの4日間 行われた。IDバッジの読み取りデータをもとにブー ス来訪者の統計情報の一部をまとめた。その間の当 ブースへの来訪者数は431名であった。訪問者数は コロナ禍前の2019年度の423名と比較すると微増と いう結果となり、コロナ禍前の水準まで回復した。

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 59.2 %を占めている。続いて、日本からの来訪者が 16.2 %、欧州からの来訪者が 13.5 %、アジアから



図 4: ブース来訪者 - 地域分類別

の来訪者が 7.9 %であった。北米、アジア、欧州で 全体の 96 %以上を占め、その他には中南米、中東、 アフリカ、オセアニアの来訪者が含まれており、南 極を除く全て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言える。

平均すると1日で107.75人の来訪者があった。展 示初日の11月13日はGrand Opening Gala Reception で午後7時から9時までの2時間の開催であったが、 100人近い来訪者があった。

以下、SC23 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)。

# "Large-scale Computing Systems at the Cybermedia Center" (上野)

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(図 5)。ブース来 訪者からは主に、「どのような分野のユーザが使用し ているのか?」、「OCTOPUS、SQUID それぞれ、ど のようなアプリケーションが使えるのか?」といっ た質問があった。また、OCTOPUS のサービスを終 了する旨紹介した際は、「次に導入するシステムはど のような構成になるのか?」といった質問があった。



図 5: ポスター説明を行う上野(技術職員)

また、次期システムの名称について興味を持たれる 方もいた。SQUID、ONION ともに他のスパコンと比 較すると名称が印象的なので、本学を知らない来訪 者にも興味を持ってもらうことができ、そこから 様々な話を伺うことができた。

# (2) "Development of AI models for analyzing dental panoramic radiographs" & "MPI communication logging module with BlueField-2 Data Processing Unit"(速水、高嶋)

本ポスターでは2つの研究テーマについての発表 を行った。ポスター前半では、歯科医療における人 工知能(AI)の応用として、歯科用パノラマエック ス線画像から歯式(歯の番号)を抽出・分類するた めの AI システムについて紹介した(図 6)。実際の 医療現場で採取されるパノラマエックス線画像の特 徴を踏まえ、歯科医師の判断の仕方をプロセスに取 り入れることで歯式を精度良く判別するための工夫 について説明した。



図 6: ポスター説明を行う速水(特任助教)

来訪者からは、そもそもなぜ歯に番号を付ける必 要があるのか、どのように付けるのかといったもの から、使用した AI モデルの構成やデータの種類に ついて、さらに他の医療機関との連携の有無や将来 の展望について質問があった。歯の治療記録を管理 するために必要な歯式を正確に検出することが、治 療対象となる歯の取り違え等の医療ミスを防止する うえでも有用である。こうした意義は専門分野外の 方にも大いに共感いただけた。

ポスター後半では、MPI アプリケーション実行時 のプロセス間の通信ログを取得するためのモジュー ルを提案した(図7)。MPI プロセス間の通信ログを 取得することでMPI アプリケーションのデバッグや 性能チューニングに活用することができる。しかし、 通信ログの取得処理を CPU 上で実行する場合、MPI アプリケーションで利用できたはずの計算資源が消 費される。この問題を解消するために、我々は通信 処理を CPU からオフロードすることが可能なアク セラレータデバイスである Data Processing Unit (DPU)の活用に着目した。本研究では、CPU 使用率 を増加させないことを目的として、通信ログの取得 処理を DPU 上で実行する MPI 通信ロギングモ ジュールを開発した。

来訪者からは、MPI アプリケーションのチューニ ングを行うツールの必要性についての共感を得るこ とができた。一方、本研究の提案モジュールの性能 については課題があるという指摘があった。特に提 案モジュールによる通信遅延時間のオーバヘッドは、 最新の InfiniBand ネットワーク環境においては無視 できないものであるとの指摘があった。また、DPU の利用が効果的なユースケースについて知りたいと いう質問が多く寄せられた。GPU や FPGA といった 他のアクセラレータデバイスと比較して、DPU はそ のユースケースが少ない状況である。本会議のプレ ゼンテーションセッションやポスターセッションで、 DPU についての研究発表が複数件見られたことか らも、DPU の活用方法について注目が集められてい ることが確認できた。



図 7: ポスター説明を行う高嶋(大学院生)

# (3) "Provenance Management Framework for HPC Systems" (並木)

本ポスターでは研究データ管理の一環として、 HPC システムにおいて生み出されるデータの来歴 を記録、管理するためのフレームワークを提案した (図 8)。

提案の背景には世界的に広がりつつあるオープン サイエンスの潮流における、研究データを再現可能 な形で管理することへの要求がある。来歴は結果 データを得るために実行すべきプログラムとそれに 与える入力ファイルを列挙したものであり、再現可 能性を高める情報のひとつである。しかし、来歴を 研究者が手作業で正確に記録することは現実的では ない。我々の提案は既存のプログラムなどの資産に 変更を加えることなく、自動的に来歴を記録、管理 するための手法である。



図 8: ポスター説明を行う並木(NEC 研究員)

来訪者のうち、特に大学や国立研究所(主に米国) の関係者からは来歴の必要性に共感してもらうこと ができた。「再現しようとしても試行錯誤の過程で同 じようなファイルが大量にあり、必要な版のファイ ルを探し出すのに苦労した」というまさに本手法が 解決しようとしている問題の実体験を聞くこともで きた。また、テラバイト級の大容量データへの対応、 分散した拠点に跨った計算機の利用への対応、様々 なアプリケーションの挙動が記録できるのか、と いった点に関して質問が寄せられた。議論では具体 的な事例や質問が多く、日本国内と比較して研究 データ管理への取り組みが進んでいることが窺えた。

# (4) "High-speed Data Transmission" & "Information Infrastructure Integration" (細見、田主)

本ポスターでは、研究データ管理基盤の領域での 研究成果として、高速データ転送と、集約基盤と公 開基盤の連携について展示を行った(図 9)。高速 データ転送は、大学キャンパス内において研究デー タを高速に転送可能とする Red-ONION を実現する 要素技術である。各研究部門で生成される大量の研 究データを、100 Gbpsの速度で高速に集約基盤に転 送、また研究部門間で共有可能とすることを目指し ている。本ポスターでは、複数のデータ転送技術の 性能評価を SC23 に設置したサーバと大阪大学に設 置したサーバとで実施することを説明した。また、 集約基盤と公開基盤の連携は、現在サイバーメディ アセンターが試験運用している集約基盤 ONION と 大阪大学附属図書館が運用している公開基盤OUKA との連携を実現した方式について説明を行った。こ



図 9: ポスター説明を行う田主(特任研究員)

れにより、研究部門からの研究データの集約、そし て公開までの一連のフローを実現できることを示し た。

来訪者からは、高速データ転送についてこのよう な技術が求められている背景の確認、同様の問題意 識の共有、実験でどのような性能が出たのかの質問 があった。また、研究データの集約、そして公開に 関しては、来訪者の中でオープンリサーチデータに 対する認知度が低く、まずはオープンリサーチデー タの背景、必要性の説明から行った。「研究データ管 理における研究者の負担を減らす」という目的に共 感が得られ、ワンクリックでデータ公開申請を行え るその手法に関心が寄せられた。

# (5) "Cloud-Edge Continuum Computing Platform: An Application Platform in Post-5G Era" (Thonglek、谷口)

「ポスト 5G 情報通信システム基盤強化研究開発 事業/ポスト 5G 情報通信システムの開発」プロジェ クトの概要と研究予定についてのポスター発表を 行った(図 10、11)。本プロジェクトの目標は、ク ラウド、エッジ、デバイスを含む IT インフラを安価 に提供するアプリケーションプラットフォームの実 現である。この目標に向けて、我々は資源を必要な 量・時間だけ切り分けて提供するリソーススケ ジューラの研究開発、ネットワーク資源をより細か な時間単位で管理・提供するための研究開発の2点 に取り組む。

プロジェクトの初年度ということもあり、聴衆か らはさまざまな観点からの質問をいただいた。ユー



図 10: ポスター説明を行う Thonglek (特任助教)



図 11: ポスター説明を行う谷口(特任研究員)

ザの観点からは、どのようなアプリケーションを実 行できるのか?プラットフォームの外にあるサービ スと連携できるか?といった質問をいただいた。技 術的な観点からは、デバイスや計算機などの性能差 をどう扱うのか?データ転送およびリソースを切り 替えた際のセキュリティ対策はどうするのか?と いった質問をいただいた。ポスター発表を通じて、 今年度の目標である要件定義に向けた実りのある議 論ができた。

# (6) "Synthetic Population for Real-Scale Social Simulations" (村田)

本ポスターでは、2019 年度から毎年継続的に実施 している JHPCN の合成人口プロジェクトと HPCI 共用ストレージ、2020 年度から 2027 年度までを予 定している JST 未来社会創造事業における合成人口 データを用いたシミュレーション事例についての報 告を行った(図 12)。合成人口プロジェクトでは、 大阪大学サイバーメディアセンターの OCTOPUS を 用いて、日本の全世帯の仮想個票を合成するととも に、北海道大学情報基盤センターのハイバフォーマ ンスインタークラウドを用いてデータベースを構築 し、東京大学情報基盤センターと理化学研究所計算 科学研究センターの HPCI 共用ストレージを用いて バックアップを確保している。

聴衆からは、合成する人口の規模についての質問 が寄せられ、日本の全人口1億2000万人の全世帯を 2000年、2005年、2010年、2015年の国勢調査に基 づいて合成し、各年度100セットずつ合成している ことを伝えると、大規模計算の必要性を感じてもら うことができた。また、計算の高速化の可能性につ いての質問も寄せられ、都道府県別の統計であるこ とから、47 都道府県それぞれで分散の計算はできる こと、最大は東京都の全市区町村の同時合成で、最 適化の精度をもっとも高めた場合には、4 ヶ月程度



図 12: ポスター説明を行う村田(教授)

かかることを伝えることができた。質疑を通して、 仮想的な個票データの必要性やそれを用いたシミュ レーションの意義についてディスカッションするこ とができた。

### 情報通信機構 NICT での展示

さらに本年度は、情報通信機構 NICT の研究展示 ブースにおいても、ポスター(4)に関連した Red-ONION 実演を行った(図 13)。また本内容につ いて、NRE シアターで展示内容の発表を行った(図 14)。



図 13: 情報通信機構 NICT でのデモの様子 NICT 展示者としてデモ実演を担当した片岡洋介氏 (NEC) デモでは、NICT のブースに設置したサーバと大 阪大学に設置したサーバを、NICT が提供する日米 間の 100 Gbps のネットワーク回線を用いて接続し た環境でデータ転送実験を行っている様子を示した。 サーバのハードウェア構成としては、多数の NVMe ストレージと 100 Gbps の NIC を搭載した。これに より、100 Gbps を超えるディスクアクセスと 100 Gbps での通信を可能とした。サーバには、高速デー タ転送ツールとして、HPC 分野におけるデータ転送 ツールとして広く用いられている GridFTP、XRootD、 Archaea の 3 つをインストールし、それらのツール を用いて転送実験を行った。



図 14: NRE シアターで展示内容を発表する細見 (招へい准教授)

実験の結果、GridFTP と Archaea のツールを用い て複数ファイルの同時転送で約 40Gbps の性能を観 測することができた。また、単一ファイルの転送に おいてはさらに低く約 20 Gbps にとどまっており、 課題があることも確認できた。本原因を解析するた めにディスクを用いないメモリ間転送で測定を行っ たところ、両ツールにて 100 Gbps の速度を観測する ことができた。このことからファイル I/O に課題が あることも確認できた。なお、XRootD については 設定トラブルによって評価が実施できなかった。

NRE シアターでの発表は、本デモの内容と上記実験の途中結果を報告した。

展示ブースやシアターの来訪者からは、測定方法 や、単一ファイル転送にて性能が出ない理由につい て質問があり、議論を行った。また、データ転送技 術を開発している Northwestern 大学の Jim Chen 氏や、 同じ NICT ブースにて展示を行っていた KDDI の担 当者と情報交換を実施し課題の共有をおこなった。

# 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・AI・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 431 名の 来訪者にアウトリーチすることができた。来年度の SC の開催は米国ジョージア州アトランタ市で同時 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

国际省位には更なるこ又仮とこ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://sc. cmc.osaka-u.ac.jp/

# 第 29 回スーパーコンピューティングコンテスト (SuperCon2023) 報告および 第 30 回スーパーコンピューティングコンテスト (SuperCon2024) 告知

大阪大学サイバーメディアセンター教授 吉野 元

### 1. SuperCon2023

昨年 2023 年 8 月 21 日から 25 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(SuperCon2023)」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、18 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 18 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、2022年また2023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 が用いられました。

### 2. 予選

2023年の予選課題は5月31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16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。2023年の予選課題は、 阪大の作成チームによる「地形推定問題」というも のでした。これはでこぼこの地形をあるルールに従 って進む複数のハイカーのスタートおよびゴール地 点の情報が与えられ、それから逆に地形を推定する 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「最近点対探索」という 問題でした。2次元空間に分布した点の中で最も距 離の近いペアを見つけるという問題で、様々な実際 の科学技術計算で遭遇する問題です。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 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 2024 の告知

2024年は8月19日(月)から23日(金)までの 5日間での開催を予定しています。今年度もオンラ イン開催となります。新型コロナなどのパンデミッ クは現時点で起こっておりませんが、オンライン開 催の方が全国の高校生にとって参加しやすいなどの メリットが大きいことが昨年度までの実施経験から わかりオンライン開催とした次第です。予選課題は 5月19日に公表、課題提出が切は6月14日正午で す。今回は、阪大 CMC のスパコン、SQUIDを使用 する予定です。しばらく理研の富嶽を用いる年が続 いておりましたので阪大 CMC のスパコンを使用す るのは久しぶりとなります。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 ませんが、もしも可能ならば皆様もお知り合いの高 校生に SuperCon2024 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 SuperCon2025 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 降籏 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 web にける 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 web 等による利用者への情 報提供(システムの紹介や利用の手引等)と利用者講 習会です。Web による情報提供は場所も時間も制限 しませんのでユーザの皆様にいつでも使っていただ け、非常に有益であると思います。そして、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。 そのため利用者講習会にはしばしば、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。本稿ではこの利用者講習 会について皆様にご紹介いたしましょう。

これら講習会の内容は、スーパーコンピュータの OS である Unix 環境やプログラム投入のためのバ ッチシステム、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 などの並列計算通信プロトコルの概要から SQUID が誇る特有のハードウェアであるベクトルプロセッ サ SX-Aurora TSUBASA を用いる高速化技法、GPU を使いこなすための OpenACC についてのプログ ラミング技法の詳細、intel コンパイラに関する詳し い解説、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、 KKR グリーン関数法を用いた第一原理計算プログ ラム AkaiKKR、密度汎関数法に基づくアプリケー ションである PHASE/0 といった専門家用の特殊な 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 回程 度開催しております (2023 年度は 21 回開催いたし ました)。これらについては、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、一部の講習会は年に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、5月から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、2023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、PHASE/0 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、株式会社アカデメイア様、PHASE システム研究会、国立研究開発法人物質・材料研究 機構、株式会社アスムス様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 加をいただいており、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、2023年の 21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のです。

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にして 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 エ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 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 や密度汎関数法に基づく PHASE/0 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。

# 2024 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
1	スパコンに通じる 並列プログラミングの基礎	6月3日 9月開催予定	サイバーメディアセンター 宮武 勇登 准教授
2	初めてのスパコン	6月6日 9月開催予定	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
3	OpenMP 入門	6月12日	サイバーメディアセンター 吉野 元 教授
4	並列プログラミング入門 (OpenMP/MPI)	6月17日	日本電気株式会社
5	スーパーコンピュータ バッチシステム入門 / 応用	6月18日	日本電気株式会社
6	SX-Aurora TSUBASA 高速化技法の基礎	6月24日	日本電気株式会社
7	ONION 活用講習会	6月26日	日本電気株式会社
8	コンテナ入門	6月28日	日本電気株式会社
9	汎用 CPU ノード高速化技法の 基礎(Intel コンパイラ)	7月9日	エクセルソフト株式会社(予定)
10	GPU プログラミング入門 (OpenACC)	調整中	プロメテック・ソフトウェア株式会社 (予定)
11	GPU プログラミング実践 (OpenACC)	調整中	プロメテック・ソフトウェア株式会社 (予定)

※全てオンラインでの開催

# 2023 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
スパコンに通じる並列プログラミングの基礎(5/31)	44	38
初めてのスパコン (6/5)	31	27
OpenMP入門 (6/8)	16	14
スーパーコンピュータ バッチシステム入門・応用(6/14)	9	5
ONION 活用講習会(6/16)	8	7
汎用 CPU ノード 高速化技法の基礎(6/22)	10	4
並列プログラミング入門(OpenMP・MPI) (6/23)	9	5
GPU プログラミング入門(OpenACC)(6/27)	17	16
初めてのスパコン (9/1)	22	19
スパコンに通じる並列プログラミングの基礎(9/4)	18	10
SX-Aurora TSUBASA 高速化技法の基礎(9/19)	7	6
ONION-object 入門(9/20)	3	3
コンテナ入門 (9/22)	12	11
並列プログラミング入門(OpenMP・MPI) (9/25)	5	3
汎用 CPU ノード 高速化技法の基礎(9/27)	8	6
スーパーコンピュータ バッチシステム入門・応用 (9/29)	12	10
GPU プログラミング入門(OpenACC)(10/3)	13	11
GPU プログラミング実践(OpenACC)(10/13)	7	4
合計	251	199





◆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。



#### 2 4 6 8 10 12 14 16 18 20 スパコンに通じる並列プログラミングの基礎(5/31) 初めてのスパコン (6/5) 1 OPENMP入門 (6/8) バッチシステム入門・応用(6/14) ONION活用講習会(6/16) 汎用CPUノード 高速化技法の基礎 (6/22) 並列プログラミング入門(OPENMP・MPI)(6/23) GPUプログラミング入門 (OPENACC) (6/27) 初めてのスパコン (9/1) スパコンに通じる並列プログラミングの基礎 (9/4) SX-AURORA TSUBASA 高速化技法の基礎 (9/19) ■難しい ONION-OBJECT入門 (9/20) ■やや難しい コンテナ入門 (9/22) ■ちょうど良い 並列プログラミング入門(OPENMP・MPI) (9/25) ■やや易しい ■易しい 汎用CPUノード 高速化技法の基礎 (9/27) バッチシステム入門・応用(9/29) GPUプログラミング入門 (OPENACC) (10/3) GPUプログラミング実践(OPENACC)(10/13) 1

### ◆講習会の内容はどうでしたか。





◆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。



# 2024 年度「HPCI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。

利用枠	研究課題名
一般課題	柔軟構造大気突入機の流体構造連成解析と動的モード分解
一般課題	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	内部自由度に富んだ格子理論に対するテンソルネットワーク法の開発と応用
一般課題	量子スキルミオンの非平衡ダイナミクス
一般課題	水中高分子ゲルネットワークのナノ力学分子論の機械学習援用解析
一般課題	一般化数理モデルに基づく乱流燃焼 LES による実機ガスタービン燃焼器シミュレーション の実証解析
一般課題	超高速 QM/MM 計算の開発と生体化学反応の自由エネルギー計算への応用
一般課題	機能性タンパク質デザインの「省データ」化にむけたタンパク質言語モデルと分子シミュ レーションの融合
一般課題	大規模並列計算による微小系気体中の非平衡輸送の分子気体力学的研究
一般課題	疾患関連タンパク質のインタラクトームを予測し、発症のメカニズムを探る
一般課題	潤滑油中の添加剤および増稠剤の自己組織化解析
一般課題	フラグメント分子軌道法による構造生物学と量子化学の連携基盤の構築
一般課題	アモルファスカーボンの表面構造とトライボロジー特性の相関に関する研究
一般課題	クリーン燃料の燃焼に対する詳細化学反応モデルを使用した爆轟特性の詳細数値解析
一般課題	宇宙論的流体シミュレーションデータベースの構築と観測的宇宙論
一般課題	カーボンニュートラル実現に向けた革新的ナノコンポジット材料の創成技術
一般課題	第一原理計算を用いた非調和フォノン特性データベースの構築
若手課題	Turbulent mixing enhancement in flexible canopy flows
若手課題	溶液成分調整によるポリマー表面への小タンパク質吸着抑制
産業課題	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

# 本センターの計算機資源を利用する 2024 年度 HPCI 採択課題一覧

# 2024 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。

2024 年度の課題募集には合計 77 課題が採択されました。このうち以下の 13 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
山口 雅也 様	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
(大阪大学 大学院歯学研究科)	解明
髙田 滋 様 (京都大学)	分子気体力学解析コードの GPU 実装と相分離現象シミュレーション
村上 匡且 様	マイクロトロイダルによるプロトン・ボロン磁場核融合の3次元
(大阪大学 レーザー科学研究所)	シミュレーション
松崎 義孝 様	流動生態系シミュレーションシステムによる水環境評価のため
(海上・港湾・航空技術研究所)	の標準化プラットフォーム構築
森田 直樹 様	グラフ構造で一般化された静的負荷分散フレームワークに基づ
(筑波大学)	くマルチスケールシミュレータの開発
関口 宗男 様 (国士舘大学)	2(+1)フレーバー格子 QCD による複合粒子の質量生成機構の研究
高棹 真介 様	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
(大阪大学 大学院理学研究科)	的アプローチ
森川 良忠 様	The Elucidation of Non-equilibrium States of Catalysis by
(大阪大学 大学院工学研究科)	Machine Learning Aided Atomic Simulations
南里 豪志 様 (九州大学)	Study on the real effect of non-blocking collective communications
佐藤 正寛 様	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
(東京大学)	データ基盤構築
村田 忠彦 様 (大阪大学 サイバーメディアセンター)	合成人口プロジェクト:合成人口データへの従業地属性の追加
芝 隼人 様	グラフニューラルネットワークと生成モデルを用いた非晶質系
(兵庫県立大学)	動力学予測システム開発
塙 敏博 様 (東京大学)	Energy Efficient Operation for Supercomputer Systems

# 2023 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。2023年度は通常の募集に加えて追加募集を行い、以下の6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
高橋 裕介 様 (北海道大学 工学研究院)	柔軟エアロシェルを有する大気突入機の流体構造連成解析

# 大規模 HPC 支援枠 採択課題

代表者名	研究課題名
Ellis Richard Owen 様 (大阪大学 理学研究科)	Simulating the macroscopic impacts of cosmic ray microphysics in diffuse jet-remnant structures around galaxies
杉村 奈都子 様 (鹿児島工業高等専門学校 機械工学科)	粒子法による大規模摩擦焼付きシミュレーション
福澤 薫 様 (大阪大学 薬学研究科)	フラグメント分子軌道法による量子生命情報基盤の構築 〜タンパク質基本フォールドと生体分子動的挙動の解析〜

# 人工知能研究支援枠 採択課題

代表者名	研究課題名
Harry Handoko Halim 様 (大阪大学 工学研究科)	The Investigation of Self Optimization of Active Sites by Reaction Intermediates during Non-Equilibrium States of CO2 Hydrogenation to Methanol

# 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
高木 悠司 様 (大阪大学 理学研究科)	運動論的レーザー吸収で発生する高速電子特性の解析

# 2024 年度 大規模計算機システム公募型利用制度の活動状況

2024年度も引き続き研究課題の公募を行い、以下の16課題を採択しました。

若手・	女性研究者支援萌芽枠	採択割	果題
	A		

代表者名	研究課題名
Anas Santria 様	Investigating Magnetic Interaction in the Photo-excited State of a Series
(大阪大学 理学研究科)	of Triple-Decker Phthalocyaninato Lanthanide (III) Complexes
緒方 奨 様	超臨界地熱発電を志向した超臨界地熱環境下での人工地熱貯留層
(大阪大学 工学研究科)	造成シミュレーション
鵜沢 浩太朗 様 (京都大学 理学研究科)	生成座標法に基づく核分裂の微視的記述

# 大規模 HPC 支援枠 採択課題

代表者名	研究課題名
村上 匡且 様 (大阪大学 レーザー科学研究所)	マイクロトロイダルによるプロトン・ボロン磁場核融合の3次元シ ミュレーション
河口 真一 様 (大阪大学 生命機能研究科)	In silico スクリーニングを用いて、毒性ウィルスタンパク質と宿主 タンパク質との相互作用を予測する
佐野 孝好様 (大阪大学 レーザー科学研究所)	ホイッスラー波を利用した新奇なレーザー核融合デザインの探索
大西 正人 様 (東京大学)	第一原理計算を用いた非調和フォノン特性データベースの構築

# 人工知能研究支援枠 採択課題

代表者名	研究課題名
小野 寛太 様	大規模シミュレーションと機械学習を活用したデータ駆動型磁性
(大阪大学 工学研究科)	材料開発

# 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
荒金 究 様	大規模言語モデルを用いた文献からの知識抽出と細胞内ネットワ
(大阪大学 蛋白質研究所)	ークの数理モデルのデータ駆動的な構築
寺田 雄亮 様	太平洋赤道上の深い循環を駆動するエネルギー供給プロセスの解
(東京大学 理学研究科)	明
Rizka Nur Fadilla 様	Machine Learning Metadynamics for Modelling Phosphoramidate-based
(大阪大学 工学研究科)	Antibody-drug Conjugates in Cancer Treatment
水谷 耕介 様	連星系における共通外層期の軌道進化を対象とする3次元磁気流
(大阪大学 理学研究科)	体計算
李 響 様 (大阪大学 工学研究科)	塑性変形におけるエネルギー散逸に関する分子動力学的研究
片瀬 大祐 様 (東京大学 工学研究科)	電荷注入現象の解明を目的とした金属 ポリマー界面モデリング
浅野 弘斗 様	医薬品有害事象プラットフォームへの言語生成 AI の搭載による安
(大阪大学 薬学研究科)	全性情報の収集・分析の効率化
三宅 冬馬 様	高忠実流体構造連成モデルによる3次元超臨界翼の遷音速フラッ
(北海道大学)	ター解析:特異なフラッター境界形成メカニズムの解明

# 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すので、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: <u>system@cmc.osaka-u.ac.jp</u>
 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ありません。

### 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 SQUID
#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

sstat の表示例:-t で指定した数値分だけ表示されます

RequestID	ReqN	lame UserNan	ne Queue	Pri	STT PlannedStartTime	
123456[1].sqd	nqs	username	OC1C	0.5002/	0.5002 QUE -	
123456[2].sqd	nqs	username	OC1C	0.5002/	0.5002 QUE -	
123456[3].sqd	nqs	username	OC1C	0.5002/	0.5002 QUE -	
123456[4].sqd	nqs	username	OC1C	0.5002/	0.5002 QUE -	
123456[5].sqd	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.hpc.cmc.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)日本国内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支 障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 があったものとみなす。 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。

#### 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)SQUIDの負担額 上右

(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

	基本負担額	SQUIDポイント
7. 7	10万円	1,000 ポイント
	50万円	5,250 ポイント
7-7	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

- 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。
- (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。 4
- (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。 5
- 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。 計算ノードの利用に使用するSQUIDホイントは、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 8 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。

ノード発		消費係数		禾的权粉	做 彩 依 粉		
ノート相手	高優先度	通常優先度	シェア	子即休致	旅行行示数		
汎用CPUノード群	0.3746	0.2998	0.2248	十相ば計管機システム	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	WEB、 Chu 載			

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。

#### (2) ONION(オブジェクトストレージ)の負担額

1	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。

<sup>1</sup> 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。

### 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当と認めた場合 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 ホストー覧

サーバ名	ホスト名
ログインサーバ (SQUID)	squidhpc.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。 (ホストー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
廿左利田	SQUID	120 時間	38,912 Core (76Core×512 ノード)	912 Core $124 \text{ TB}$ $\times 512 \ / - \ )$ $(248 \text{GB} \times 512 \ / - \ )$		
	SQUID-R	120 時間	38,912 Core (76Core×512 ノード)	124 TB (248GB×512 ノード)	512 ノード	<b>※</b> 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	<b>※</b> 2
V 13 1 3/13	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
	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	<b>※</b> 1
共有利用	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
	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	<b>※</b> 1
共有利用	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。

# 2023 年度大規模計算機システム稼働状況

稼働状況

																	(単位:時間)
事	. 項		月	4	5	6	7	8	9	10	11	12	1	2	3	合計	月平均
稼動	計算サーは	ごス時間	(A1)	511:00	744:00	720:00	744:00	744:00	720:00	744:00	720:00	744:00	672:00	696:00	733:00	8492:00	707:40
時間	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
[H]	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		511:00	744:00	720:00	744:00	744:00	720:00	744:00	720:00	744:00	672:00	696:00	733:00	8492:00	707:40
保	: 守 時 🖡	ij	(B)	209:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	0:00	72:00	0:00	11:00	292:00	24:20
故	に障時 🎙	罰	(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	1	(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
移	動率	(A/(A+B+	-C+D)%)	70.97	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	90.32	100.00	98.52		96.65
運	転日券	汝	(E)	30	31	30	31	31	30	31	30	31	31	28	31	365	30
	·日平均稼動	访時間	(A/E)	17:02	24:00	24:00	24:00	24:00	24:00	24:00	24:00	24:00	21:40	24:51	23:38		23:15

### 処理状況

		SQU	JID	OCTOPUS			
	共有	肓利用	占有利用		共石	和田卒(0/)	
処理月	ジョブ件数	CPU時間(時)	CPU時間(時)	利用平(%)	ジョブ件数	CPU時間(時)	杓用平(%)
4月	12,839	202,731	1,440	85.7%	2,642	156,818	95.7%
5月	40,657	380,104	4,464	88.1%	3,199	145,442	96.0%
6月	44,883	490,667	4,320	92.6%	2,642	156,818	95.4%
7月	51,199	602,243	2,961	93.4%	8,676	193,552	98.6%
8月	78,616	621,910	3,720	92.3%	14,604	176,133	92.9%
9月	48,522	635,307	3,600	97.4%	19,752	191,290	99.2%
10月	149,313	607,629	3,105	95.0%	38,988	187,688	96.8%
11月	284,713	807,641	2,985	92.8%	27,201	164,679	89.1%
12月	80,406	825,891	3,720	91.8%	10,223	188,847	96.2%
1月	199,173	801,433	3,361	91.6%	3,808	176,842	93.1%
2月	100,483	930,476	3,480	92.3%	4,937	195,738	98.5%
3月	122,824	950,028	2,921	87.8%	4,277	153,382	99.1%
合計	1,213,628	7,856,060	40,077		140,949	2,087,229	

(注)利用率は、次の計算式により算出している。
 SQUIDの利用率 = (SQUID の ノード時間積/稼働中ノードの合計サービス時間)\*100
 OCTOPUSの利用率 = (OCTOPUS のノード時間積/稼働中ノードの合計サービス時間)\*100



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. 随筆
- 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

### 【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】

 $\mp 567 - 0047$ 

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

ナカサービッカウ	<i>版</i> , <b>声</b> 效 出 竺	開館	時間
主なサーレス的谷	体・理裕元寺	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		
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	8:30~12:00	閉
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	13:00~17:15	館
利用方法の問い合わせ スーパーコンピュータの利用方法	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	オンラインサービス	24時間365日(注	主)
			±/

(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	https://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。)	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。

### 大阪大学サイバーメディア HPC ジャーナル No. 14 2024 年 7 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. 14 2024. 7



