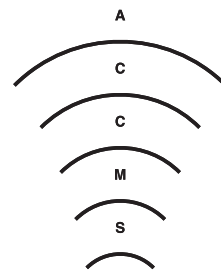


京都大学学術情報メディアセンター

Academic Center for Computing and Media Studies, Kyoto University

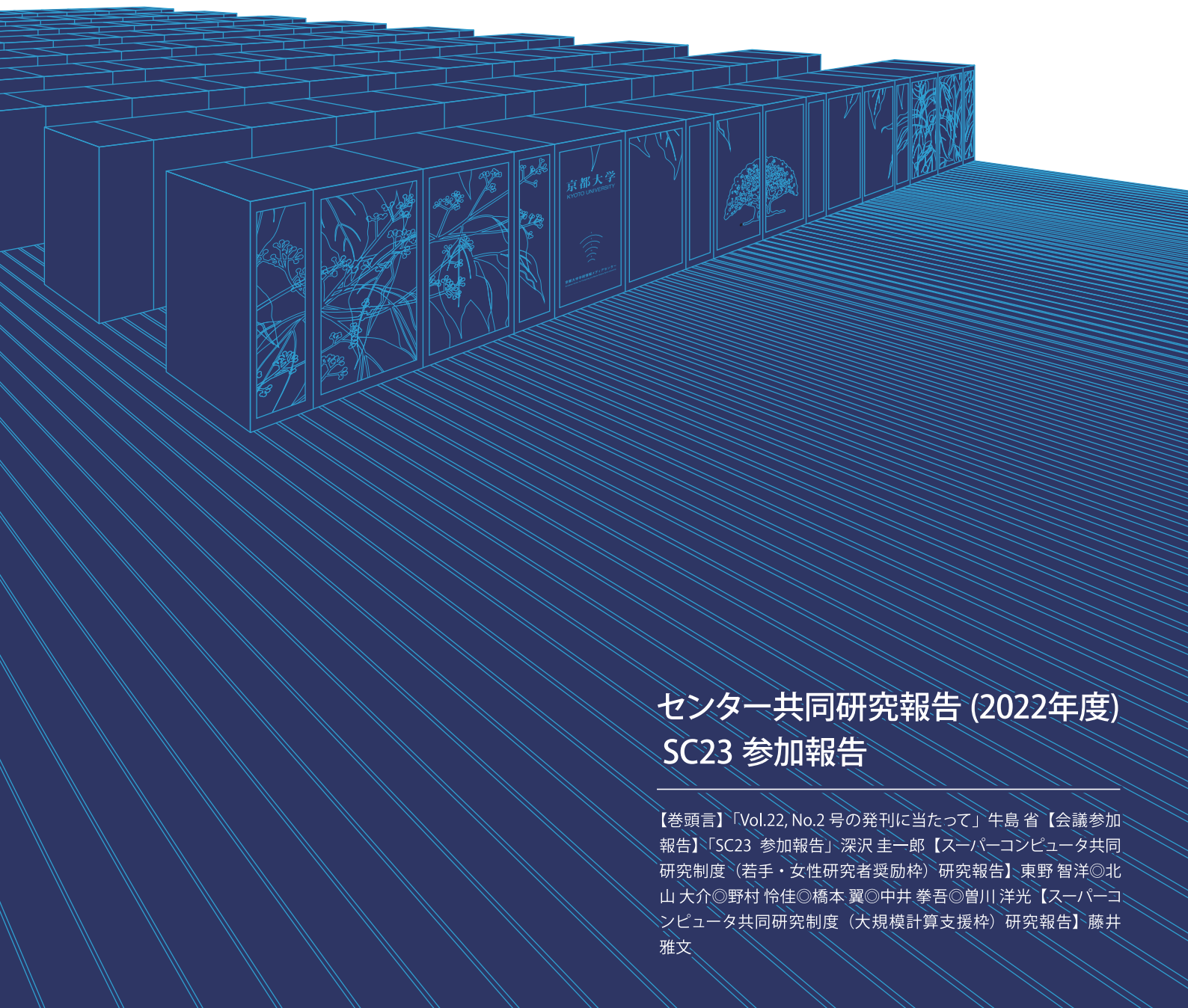


# 広報

全国共同利用版

Vol.22, No.2 2023

ISSN 1347-3581



## センター共同研究報告 (2022年度) SC23 参加報告

【巻頭言】「Vol.22, No.2 号の発刊に当たって」牛島 省【会議参加報告】「SC23 参加報告」深沢 圭一郎【スーパーコンピュータ共同研究制度（若手・女性研究者奨励枠）研究報告】東野 智洋◎北山大介◎野村 怜佳◎橋本 翼◎中井 拳吾◎曾川 洋光【スーパーコンピュータ共同研究制度（大規模計算支援枠）研究報告】藤井 雅文

Vol.22, No.2 号の発刊に当たって

京都大学学術情報メディアセンター 牛島 省

本号では、京都大学学術情報メディアセンターにおいて実施された 2022 年度の共同研究報告について特集いたします。また、Top500 などが発表される HPC 分野の主要な国際会議である SC23 の参加報告も紹介いたします。

2022 年度は、スーパーコンピュータシステムのリプレイスが行われる時期と重なり、7 月末以降システム停止期間が数ヶ月続いたこと、また新システムの納入が遅れたため、年度末の約 3ヶ月間は代替システム等での運用となり、例年とは異なる変則的な共同研究の実施とならざるを得なかったことをお詫び申し上げます。

新システムの稼働が遅れる見込みとなったため、2022 年度は、同システムを利用する「プログラム高度化共同研究」は実施しないこととしました。また、「大規模計算支援枠」は旧システムを利用して、4 月から 6 月の間に実施頂くことを想定して募集を行いました。一方、「若手・女性研究者奨励枠」は、(1) 旧システムが稼働する年度当初から 7 月末まで、(2) 希望があれば年度後半（予定では 1 月から 3 月）に納入されるシステムでも継続利用可能、という期間設定で募集を行うこととしました。応募課題の採否は、スーパーコンピュータ共同研究企画委員会にて審査しました。

上記のような募集を行った結果、2022 年度は、1 件の「大規模計算支援枠」と、6 件の「若手・女性研究者奨励枠」が採択され、これらの共同研究が実施されました。

「大規模計算支援枠」は、一定規模の計算資源を 2 週間程度占有できる共同研究制度で、利用負担金は本センターが全額負担するものです。2022 年度は、地震前兆時に観測される地表面プラズマ波の特性を解明するために FDTD 法による大規模計算が行われました。旧システムの Laurel2 (System B) の 64 ノードを利用する大規模計算を複数の地点を対象として行い、観測結果と計算結果の比較から、今後の精度向上により地震発生地点を予測できる可能性が示されました。

一方、「若手・女性研究者奨励枠」の応募資格は、(1) 40 歳未満の若手研究者（学生を含む、性別は問わない）、あるいは、(2) 女性研究者（年齢は問わない）、としています。この「若手・女性研究者奨励枠」では、スーパーコンピュータを利用することで学術的にインパクトがある成果を創出できる課題に対して、計算機利用負担金の全額または一部を本センターが負担しています。さらに、「若手・女性研究者奨励枠」は、JHPCN（学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点）の活動の一環と位置づけられており、優れた課題は、JHPCN の萌芽型共同研究へ推薦されます。推薦された課題は、JHPCN シンポジウムにてポスター発表を行うことが可能となるなどの特典があります。

本号に掲載された 6 件の「若手・女性研究者奨励枠」の研究報告では、計算化学アプリケーション Gaussian を利用する光機能性分子や飛石型共役系高分子構造に関する研究、また、津波リスク評価のための教師なし学習の利用、惑星間空間磁場の不連続による磁気圏構造の変化、構造不安定な力学系を対象とする機械学習モデルの利用、といった広い分野にわたる研究が行われました。JHPCN の萌芽型共同研究には 3 件の課題を推薦し、それらが採択されました。

なお、「プログラム高度化共同研究」では、京都大学のスーパーコンピュータをグループコースまたは専用クラスターコースでご利用の研究者（JHPCN および HPCI にて京都大学のスーパーコンピュータを利用する研究者も含む）を対象に、プログラムの制御構造・データ構造の改良による性能チューニングや並列化手法の改良、問題分割・負荷分散方式などの改良による大規模計算プログラムの高度化・高性能化などを支援しています。

2024 年度は、新スーパーコンピュータシステムを利用する上記すべての研究支援事業を実施する予定ですのでご期待下さい。本共同研究制度への応募方法や申込み時期等の詳細につきましては、<http://www.iimc.kyoto-u.ac.jp/ja/services/comp/support/kyodo/>にてご確認ください。

今後も皆様の研究、教育にご活用いただけるようにセンター教職員も尽力していきますので、ご利用・ご支援のほど、よろしく願い申し上げます。

## SC23 参加報告

深沢 圭一郎

京都大学学術情報メディアセンター

### 1 SC とは

SC とは、The International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage, and Analysis が正式名称である世界最大の HPC の会議です。年二回発表されるスパコンランキングである Top500 もここで発表されます。今回は 2023 年 11 月 12 日—17 日にアメリカのデンバーで開催されました。SC は 1998 年に始まり今回で 35 年目となりました[1]。今年の参加人数は、過去最大で 14,295 人となり、新型コロナウイルスによる影響から復活した回となりました[2]。また、この会議では研究発表だけでなく、HPC 関連企業や大学などの研究期間がブースを出展するエキシビションがあります。今回のブースの出展数は 438 となり、こちらも過去最高の数字となりました[2]。

### 2 京都大学ブース

京都大学学術情報メディアセンターでは、これまでにこのエキシビションにブースを出展してきており、今回も小さいながらブースの出展を行いました。日本の学術機関からのブースは大学のスーパーコンピュータセンターや理研や JAXA、JAMSTEC などの大きなスーパーコンピュータを持つ研究所、いくつかの大学がブースを出しています。

ブースを出す場合、前年度の SC 期間中に (SC23 のブース出展であれば、SC22 期間中) どこにブースを出展するのかの Selection が行われます。これは過去に出展したブースの広さから積算計算されるポイントによって選ぶ順番が決まるシステムとなっており、企業に比べてブースサイズの小さい大学はなかなか良い立地が選べません。今回は比較的良好な場所にブースを出すことができ (図 1 参照)、HPCI 資源提供機関のスタンプラリーを RIST が行

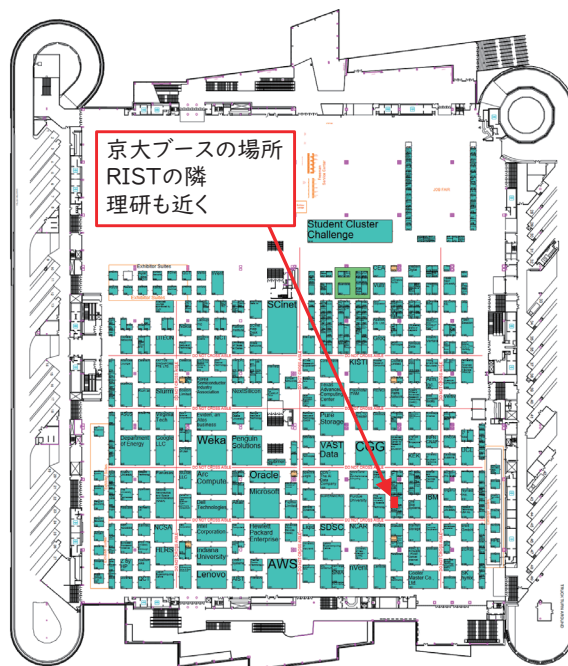


図 1 SC23 エキシビションフロアマップ

っていたこともあり、例年より多くの訪問者がありました。

京都大学のブースサイズは例年 10ft×20ft となっており、最低ブースサイズ (10ft×10ft) の 2 倍です。このようにそこまで大きくないため、ほとんど手作りブースデザインとなっています。図 2 に実際のブースの様子を載せていますが、京都大学学術情報メディアセンターの新しいスパコンの紹介、HPC に関連する研究紹介、JHPCN や HPCI の紹介をパネルで行い、ディスプレイでセンターの研究紹介を行っています。

### 3 新システムの Top500 ランク

Top500 は HPL ベンチマークによるスパコンの性能ランキングです。ベンチマークの性質上、スパ



図2 京都大学ブース

コンの演算性能が評価されます。SC23 で報告されるランキングに登録するには2023年10月22日までに、測定結果を報告する必要があり、2023年10月から稼働を開始した新スパコンのメインシステムであるCamphor3の登録を行いました。

Top500はSC23期間中の11月13日(現地時間)に発表があり、Camphor3は114位(国内12位)となりました[3]。新スパコンに関しては、この広報誌でも紹介してきましたが、半導体不足や円安の影響を強く受け、システムのノード数が想定より少なくなっています。その結果、理論性能ではCamphor3はCamphor2から約1.4倍の向上となっていました。一方でTop500に登録された性能はCamphor2から2.2倍の向上となっています。HPLベンチマークはメモリバンドが性能にほとんど影響を与えないため、ここでの性能向上分はCamphor2のXeon Phi KNLの演算性能の活用自体が難しいことに依っています。ユーザの皆さんが利用されるアプリは高いメモリバンドによる性能向上も期待されるため、3-4倍の性能向上を感じることができると思います。

#### 4 SC24

次回のSC24は、アメリカのアトランタで開催されます。京都大学学術情報メディアセンターでは、SC24でもブースを出展します。図2の写真からも分かりますが、ブースに空きがありますので次回は10ft×10ftでSC23と同様の展示を行う予定です。スパコンユーザの皆さんの研究成果やセンターと

の共同研究成果も展示可能ですので、ご興味があれば深沢までお問い合わせください。また、最先端のHPCの研究やスパコンに関連する機器に触れることができますので、ご参加をおすすめします。

#### 参考文献

- [1] <https://supercomputing.org/conference-history/>
- [2] <https://sc23.supercomputing.org/2023/12/a-record-breaking-confluence-of-innovation-inspiration-and-inclusivity-at-sc23/>
- [3] <https://www.top500.org/lists/top500/2023/11/>

# 高効率有機系太陽電池の実現に向けた光機能性分子の構造と 電子物性の相関説明

東野 智洋

京都大学大学院工学研究科 分子工学専攻

## 1 緒言

n 型半導体である酸化チタン電極を用いた n 型色素増感太陽電池は、エネルギー変換効率 PCE = 10~15%という高い値が報告されており、次世代のエネルギー源として期待されている<sup>[1]</sup>。また最近では、タンデム型色素増感太陽電池が注目を集めるようになってきており、p 型半導体である酸化ニッケル電極を用いた p 型色素増感太陽電池がタンデム太陽電池の構成要素として研究されている<sup>[2]</sup>。しかし p 型色素増感太陽電池のエネルギー変換効率は未だ2%程度と低い値に留まっており、p 型色素増感太陽電池においては、高性能な色素の開発が望まれている。

一方、増感色素のアクセプター部位として高い電子受容性を有する骨格を導入することにより、

酸化ニッケルと増感色素間での電荷再結合を抑制でき、長寿命の電荷分離状態が生成するために太陽電池性能が向上することが知られている<sup>[3]</sup>。また、ポルフィリン-フラレン連結分子では長寿命の電荷分離状態を実現できることから<sup>[4]</sup>、フラレンをアクセプターとして用いた増感色素では電荷分離状態の長寿命化と p 型色素増感太陽電池性能の向上が可能であると期待した。

そこで本研究では、ドナー- $\pi$ -アクセプター (D- $\pi$ -A) 構造を有するポルフィリン色素 **ZnP2** およびポルフィリン-フラレン連結分子 **ZnPC2** を設計・合成し、これらの色素を用いた p 型色素増感太陽電池の性能評価を行った。(Figure 1)。

## 2 結果と考察

### 2.1 ポルフィリン色素の物性と太陽電池性能評価

ポルフィリン色素 **ZnP2** およびポルフィリン-フラレン連結分子 **ZnPC2** を吸着させた酸化ニッケル電極の吸収スペクトル測定を行ったところ、これら2つの色素間にはほとんど差がなく、フラレン骨格の有無は光捕集特性に影響を与えないことがわかった。次に、p 型色素増感太陽電池を作製しセル性能評価を行ったところ、**ZnPC2** を用いたセルでのエネルギー変換効率 (0.012%) は **ZnP2** を用いた場合 (0.004%) よりも高くなった (Figure 2a)。このエネルギー変換効率の向上は主に短絡電流密度の向上によるものといえ、実際に外部量子効率 (IPCE) も **ZnPC2** を用いたセルのほうが大きくなっていることがわかった (Figure 2b)。どちらの色素もほぼ同じ光捕集特性を有して

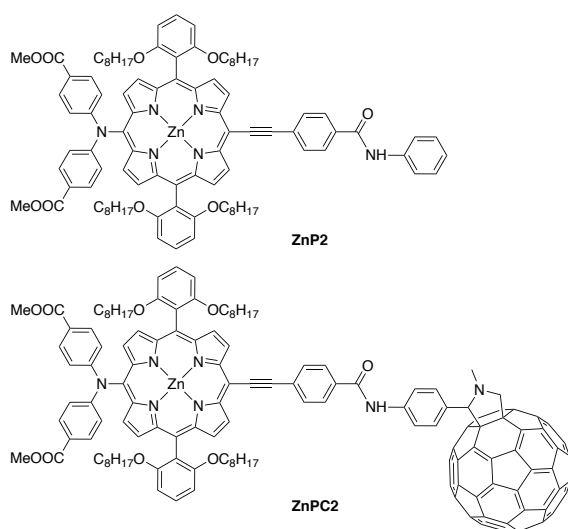


Figure 1. Molecular structures of porphyrin and porphyrin-fluorene dyes.

いることから、外部量子効率の向上は電荷再結合を抑制できたためと考えられる。また、過渡吸収測定によりフラレーン骨格の導入により長寿命の電荷分離状態が生成していることを確認した。すなわち、フラレーン骨格の導入により長寿命の電荷分離状態を実現し、電荷再結合を抑制できたことが、エネルギー変換効率の向上に繋がったといえる。したがって、ポルフィリン色素にフラレーン骨格を導入するという分子設計指針により、p型色素増感太陽電池のさらなる性能向上が期待できる。

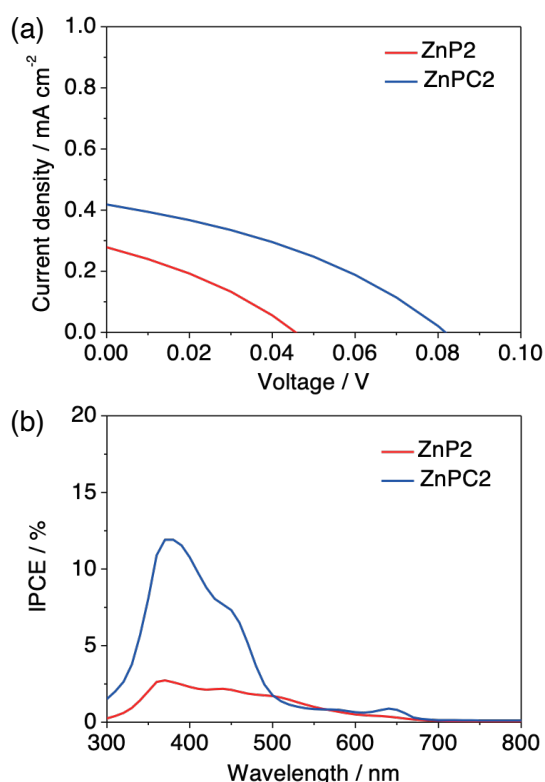


Figure 2. (a) Photocurrent-voltage characteristics and (b) photocurrent action spectra of p-DSSCs with **ZnPC2** (blue) and **ZnP2** (red).

## 2.2 理論計算

ポルフィリン色素の最安定化構造およびそのフロンティア軌道の電子構造について知見を得るために、Gaussian09 プログラムを用いて密度汎関数法 (DFT) による理論計算を行った (B3LYP/6-31G(d))。ZnP2 では HOMO/LUMO のどちらもポルフィリン骨格に分布しているが、ZnPC2 では HOMO がポルフィリン骨格に分布している一方、LUMO はフラレーン骨格に局在化していた。また、

HOMO のエネルギー準位は **ZnP2** と **ZnPC2** でほぼ同じであり、フラレーン骨格の導入によってポルフィリン色素部分の電子構造にはほとんど変化がないことがわかった。したがって、ポルフィリン色素による光吸収・酸化ニッケルからの電子移動過程に影響を与えることなく、フラレーン骨格の導入によって長寿命の電荷分離状態を実現したことが、太陽電池性能の向上に繋がったと考えられる。このように、本計算結果は実験結果の理論的解釈の一助となった点で意義がある。

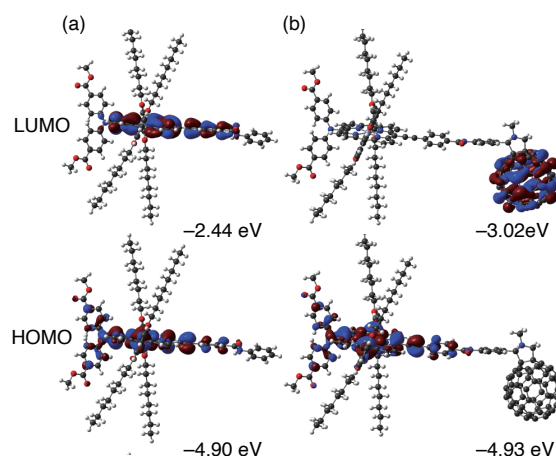


Figure 3. Selected Kohn-Sham orbitals for (a) **ZnP2** and (b) **ZnPC2** obtained by DFT calculations with the B3LYP/6-31G(d) level.

## 3 参考文献

- [1] Y. Ren, D. Zhang, J. Suo, Y. Cao, F. T. Eickemeyer, N. Vlachopoulos, S. M. Zakeeruddin, A. Hagfeldt, M. Grätzel, *Nature* **2023**, 613, 60.
- [2] I. R. Perera, T. Daeneke, S. Makuta, Z. Yu, Y. Tachibana, A. Mishra, P. Bäuerle, C. A. Ohlin, U. Bach, L. Spiccia, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2015**, 54, 3758.
- [3] L. Zhang, L. Favereau, Y. Farre, A. Maufroy, Y. Pellegrin, E. Blart, M. Hissler, D. Jacquemin, F. Odobel and L. Hammarström, *RSC Adv.* **2016**, 6, 77184.
- [4] H. Imahori, Y. Kobori and H. Kaji, *Accounts Mater. Res.* **2021**, 2, 501.

# 計算化学的手法による飛石型共役系高分子の電子輸送能力の解明

北山大介\*

\*関西大学化学生命工学部

未許諾のため本文は非公開

未許諾のため本文は非公開



# 津波シミュレーションと教師なし学習の融合による リアルタイム最尤津波リスク評価手法の開発

野村怜佳\*

\*東北大学災害科学国際研究所

未許諾のため本文は非公開

未許諾のため本文は非公開

# 大規模数値計算による惑星間空間磁場の南北不連続面に伴う磁気圏構造変化の解明

橋本 翼

九州大学大学院理学府地球惑星科学専攻

## 1 はじめに

地球には常時、太陽から惑星間空間磁場 (Interplanetary Magnetic Field; IMF) が吹き続けており、地球の磁場と相互作用を起こしている。その相互作用の一つに磁力線つなぎ代わり現象 (リコネクション) があり、これにより太陽の磁場と地球の磁場が接続されることで、地球に太陽のエネルギーが流れ始める。電離圏や磁気圏での諸現象はリコネクションを契機に発動するため、IMF の状況に応じたリコネクションの発生有無やそれにとまなうプラズマ構造変化の理解は、この分野の基盤となり学術の進展に貢献する。

本研究は、特に IMF の向きが北向きから南向きに不連続に変化した際の状況をシミュレーションで再現している。先行研究では、この不連続面がバウショックに到達したとき、IMF 同士でリコネクションを起こすことが分かっており、磁気圏の磁場構造やプラズマ分布を大きく変化させることを明らかにしている (Maynard et al., 2002[1]; Samsonov et al., 2018[2])。そこで現状の課題としては、IMF 同士のリコネクションにより発動する磁気圏への影響を定量的調査すると同時に、その状況時の観測データとシミュレーション結果を比較することにより、IMF 同士のリコネクションが現実的に発生している事を検証する必要がある。

数値シミュレーションは地球周辺の宇宙環境 (太陽風—磁気圏—電離圏) を複合的に計算および再現が可能であるが、各物理量をグリッドごとに短いタイムスケールで計算するためには大規模な計算処理能力が必要になる。そのため、スーパーコンピュータを利用し研究を実施した。

## 2 研究手法

本研究では、非構造格子 3 次元シミュレーション

コード、REProduce Plasma Universe (REPPU) コード (Tanaka, 2015[3]) を用いた。磁気圏は電磁流体力学 (MHD: MagnetoHydroDynamics) 基本方程式で計算され、解像度は約  $300 \times 300 \times 300$ 、物理量は 50 種類の計算を行っている。さらに、ハイブリッド並列を組み高速化を図りながら、スーパーコンピュータを用い計算を行った。

## 3 研究結果

リコネクションにより発動する磁気圏への影響の定量的調査について、リコネクションが発生すると、磁力線が大きく曲げられ曲率を持つため、それが元に戻ろうとするときに発生するアンペール力 (磁気張力部分) がプラズマを加速させる。シミュレーションでは、この磁気張力により加速された、周囲より  $25 \text{ km/s}$  ほど早いプラズマを再現することができた (図 1)。また人工衛星 (GEOTAIL) の観測データでも、IMF が北向きから南向きに不連続に変化した際に、 $75 \text{ km/s}$  ほど加速されているプラズマを確認できた (図 2)。これらの結果から、シミュレーションで再現された IMF 不連続面におけるリコネクションは現実でも発生していることを明らかにした。

また本研究では、IMF リコネクションの発生頻度が少ないことも明らかにした。上記の結果より、IMF 同士のリコネクションでは数十  $\text{ km/s}$  ほどの速度上昇が確認されたが、この値は IMF と地球磁力線のリコネクションに比べると 1-2 オーダー小さい値である。これは IMF リコネクションが発生する磁気シース領域の磁場強度が弱いことに由来し、磁力線に垂直なプラズマ速度をシミュレーションで再現すると、この IMF リコネクションが間欠的に生じていることが明らかになった (図 3)。

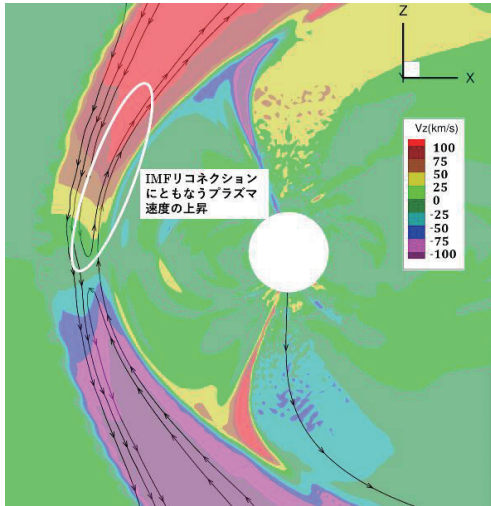


図1: IMF 同士のリコネクションにともなうプラズマ加速の可視化。ラインは磁力線を示し、背景の色は北向きのプラズマ速度を示す。

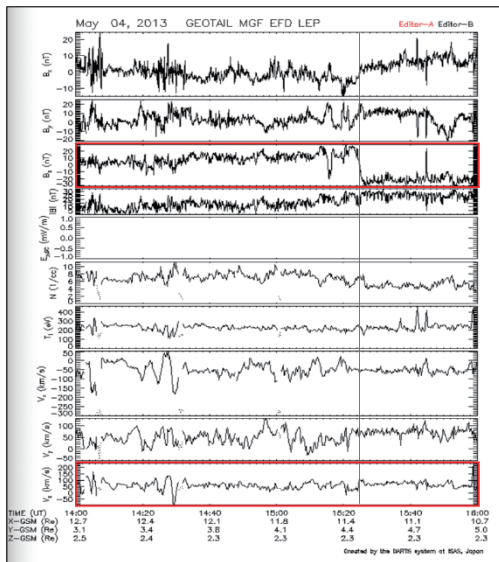


図2: 2013年5月4日、IMFの方向不連続がGEOTAIL衛星を通過した際の観測データ。15:24:00-15:25:00の間に磁場の方向が反転し、同時にプラズマ速度が上昇している。

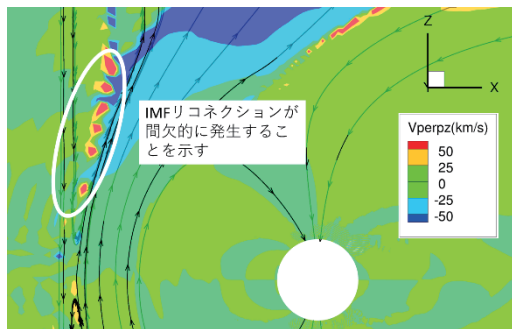


図3: ラインは磁力線を示し、背景の色は磁場に垂直でz方向のプラズマ速度を示す。IMFリコネクションにともなう間欠的な速度分布が現れている。

## 4 おわりに

本研究では、IMFが北向きから南向きに不連続に変化したときに生じるIMFリコネクションについて、大きく二つのことを明らかにした。一つは、シミュレーション結果と人工衛星観測データの比較により、加速されたプラズマ速度が概ね一致し、現実的にも発生している現象だと示した。また、このIMFリコネクションは間欠的に生じ、シミュレーションでその構造を再現することができた。今後は、IMFリコネクションが電離圏などの地球に近い環境において発動する局所的ダイナミクスの可視化を行い、宇宙環境（太陽風—磁気圏—電離圏）の結合研究として発展させていく。

## 5 謝辞

本研究の計算の一部は、京都大学のスーパーコンピュータ共同研究制度（若手・女性奨励枠）に基づくものであり、ここに感謝の意を表す。

## 6 参考文献

- [1] Maynard, N. C., Sonnerup, B. U. Ö, Siscoe, G. L., Weimer, D. R., Siebert, K. D., Erickson, G. M., et al. (2002). *Journal of Geophysical Research*, 107(A12), 1456.
- [2] Samsonov, A.A., Sibeck, D.G., Dmitrieva, N.P., Semenov, *Geophys. Res. Lett.* (2017)
- [3] Tanaka, T. (2015). In *Auroral Dynamics and Space Weather* (pp. 177–190). Hoboken, NJ: John Wiley & Sons, Inc.

# Coupled logistic map の機械学習と解析

中井 拳吾 \*

\*岡山大学学術研究院 環境生命自然科学学域

本稿は小林 幹氏 (立正大学経済学部)、齊木 吉隆氏 (一橋大学経営管理研究科) との共同研究に基づくものである。

## 1 はじめに

近年、機械学習の一種で時系列データの学習に特化したリザーバーコンピューティング [1, 2] という機械学習手法が時系列予測に有効であることが報告されている。我々はこの機械学習手法を流体のエネルギー変数に適用し、時間発展の予想等を成功させている [3, 4]。さらに不動点、周期点のような力学系の不変集合といった各種力学系的性質が再現することも明らかにしている [5]。本研究では、流体気象などの実際の現象でしばしば見られる、微小の変化で大きな構造変化をもたらす構造不安定な力学系構造の再現性の考察に向けて、見たい構造不安定な力学系構造をもつ力学系の機械学習モデルの構築を行う。

## 2 リザーバーコンピューティング

$d\phi/dt = \mathbf{f}(\phi)$  で表される力学系の変数、 $\mathbf{u} = \mathbf{h}(\phi) \in \mathbb{R}^M$  について考える。ある時刻までの時系列データを用いて、入力  $\mathbf{u}(t)$  に対して出力が  $\mathbf{u}(t + \Delta t)$  となるような時間発展モデルを機械学習によって構築する。リザーバーコンピューティングの特徴の一つはニューラルネットワークの内部変数を学習しないことであり圧倒的に計算量が少なく済む点である。その代わりにニューラルネットワークの次元を大きくすることで高性能なモデリングを可能にしている (詳細は [5])。このことによりダイナミクスが複雑なふるまいを示すとしても、それが決定論的である場合にはこの種の学習方法が有効である。

## 3 モデルの設定と結果

### 3.1 設定

次の Coupled logistic map を考える:

$$\begin{cases} X_{n+1} = (1 - \epsilon)r_1 X_n(1 - X_n) + \epsilon r_1 Y_n(1 - Y_n) \\ Y_{n+1} = (1 - \epsilon)r_2 Y_n(1 - Y_n) + \epsilon r_2 X_n(1 - X_n) \end{cases}$$

ただし、 $(r_1, r_2, \epsilon) = (3.99, 3.9, 0.2)$  の場合を考える。このアトラクタは不安定次元が 1 の周期軌道と不安定次元が 2 の周期軌道のいずれもが稠密に埋め込まれているヘテロカオス [7] であると考えられている。

この写像の時間発展により得られた変数  $(X_n, Y_n)$  とその時間遅れの時系列データを  $\{\mathbf{u}\}$  としてリザーバーコンピューティングにより学習させて、得られた時間発展モデルがどの程度もとの力学系を再現するか解明する。

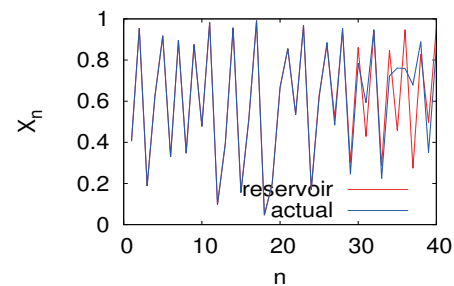


図 1: 時系列データ予測. ある時刻  $n = 0$  から構成した機械学習モデルによって予測された変数  $X_n$  の時系列データ (赤色) と対応する Coupled logistic map の時間発展により得られた変数  $X_n$  の時系列データ (青色) を書き出した。

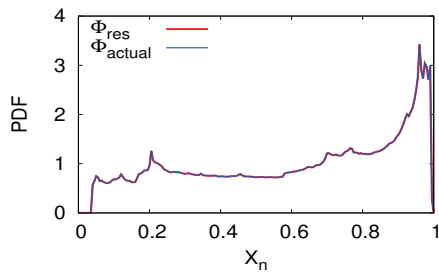


図 2: 変数の滞在時間分布. 構成した機械学習モデルによって予測された変数  $X_n$  の時系列データからその滞在時間分布を計算しプロットした (赤色). また、対応する正解として、Coupled logistic map の時間発展により得られた変数  $X_n$  の時系列データから滞在時間分布も計算し合わせてプロットした (青色).

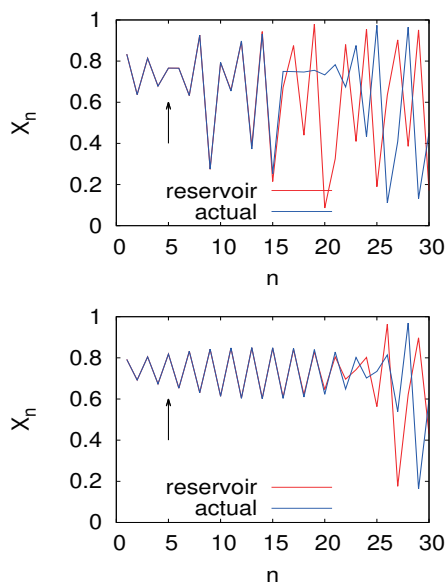


図 3: 不安定次元が切り替わる時刻での時系列予測. 上図の時刻 5 (矢印の時刻) では不安定次元が 1 から 2 に切り替わり、下図の時刻 5 では不安定次元が 2 から 1 に切り替わる. この次元の切り変わりの 5 ステップ前から機械学習モデルにより予測を開始した時系列データを書き出した.

### 3.2 結果

得られた機械学習モデルによって短時間予測ができていたことが確認された (図 1). カオス性などに

より長時間の時系列データ予測の誤差拡大を避けることは不可能であるが、 $x_n$  変数の長時間発展の滞在密度分布は正解の Coupled logistic map の滞在密度分布を再現することも確認された (図 2).

Coupled logistic map の不安定次元が切り替わる 5 ステップ前から時系列予測を行った (図 3). 不安定次元が切り替わる前後で極端に予測性能が落ちることは確認されなかった. また、他のいくつかの時系列や、予測の開始時刻を 1 から 10 ステップ前に変更しても同様に、極端な予測性能の低下は確認されなかった.

## 4 まとめ

構造不安定な力学系構造の典型例の一つのヘテロカオス性のある Coupled logistic map について、時系列データのみ学習によって機械学習時間発展モデルの構築を行った. その特徴の一つである次元が切り替わる時刻周辺も機械学習モデルで再現可能であることが明らかになった.

## 5 謝辞

本研究でおこなった計算の一部は京都大学のスーパーコンピュータ共同研究制度 (若手・女性奨励枠) に基づく. また、中井は JSPS 科研費 22K17965 の助成を受けたものである. ここに感謝の意を表す.

## 参考文献

- [1] H. Jaeger, and H. Haas, *Science*, 304, (2004), 78-80.
- [2] Z. Lu, J. Pathak, B. Hunt, M. Girvan, R. Brockett, and E. Ott, *Chaos* 27, (2017), 041102.
- [3] K. Nakai, and Y. Saiki, *Physical Review E* 98, (2018), 023111:1-6.
- [4] K. Nakai, and Y. Saiki, *Discrete and Continuous Dynamical Systems Series S*, (2021), 14:1079-1092.
- [5] M. Kobayashi, K. Nakai, Y. Saiki, and N. Tsutsumi, *Physical Review E* 104, (2021), 044215:1-7.
- [6] E. Lorenz, and K. Emanuel. *Journal of the Atmospheric Sciences* 45, (1998), 399-414.
- [7] Y. Saiki, H. Takahasi, and J. A. Yorke, *Nonlinearity* 34, (2021), 5744.
- [8] Y. Saiki, M. A. F. Sanjuán, and J. A. Yorke. *Chaos* 28, (2018), 103110.

# 計算化学的手法による含白金ポリウレタンのメカノクロミズム挙動の解明

菅川 洋光

関西大学化学生命工学部

## 1 緒言

白金 (Pt) は d 軌道や f 軌道に基づく多様な錯体形成能, 光電気特性を示す。近年, 申請者らは反応性アルコールを置換した (bpy)Pt-acetylide 錯体を合成し, これをモノマーに用いた含 Pt ポリウレタンを得ている<sup>1)</sup>。(bpy)Pt-acetylide 錯体 (**1**) および得られたポリウレタン (**P1**) はいずれもすり潰すことによって蛍光挙動が変化するメカノクロミック挙動を示した (図 1)。一方で, **1** と **P1** が示す吸収波長や発光波長には違いが観測されたことから, 本申請研究では, これらの違いを計算化学的アプローチで明らかにすることを目的とした。

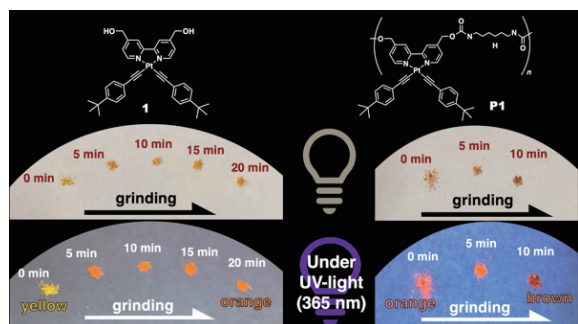


Figure 1. Mechanochromic behavior of **1** and **P1**.

## 2 実験

メカノクロミック挙動を示すポリウレタンのモノマーとして用いる (bpy)Pt-acetylide 型ジオール (**1**), 及び得られるポリウレタンのモデル化合物である (bpy)Pt-acetylide 型ジカルバメート (**1'**) の DFT 計算 ( $\omega$ B97XD/6-31G\*) を実施した (図 2)。Pt 部分には lan12z 関数を用いた。得られた最適化構造に対し, TD-DFT 計算を実施し, UV-vis スペクトルシミュレ

ーションならびに蛍光スペクトルシミュレーションを実施した。

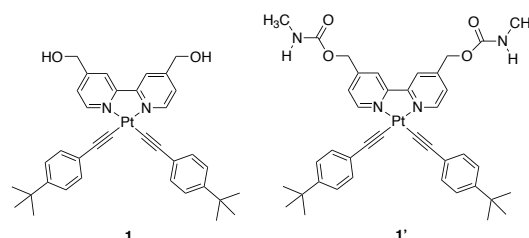
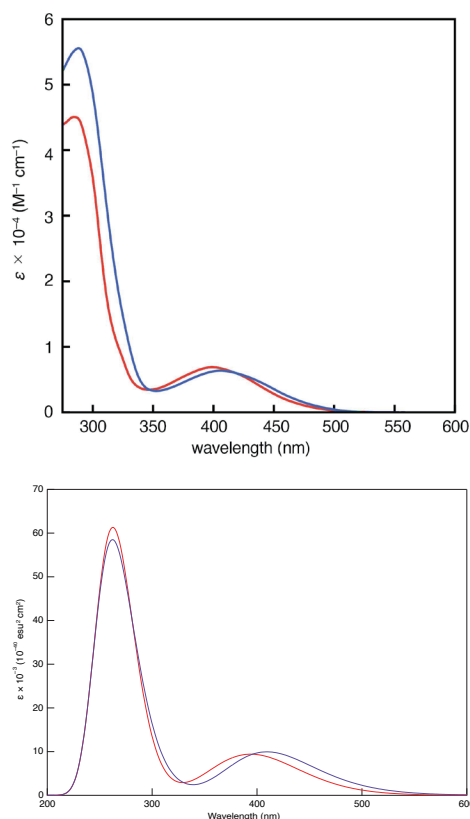


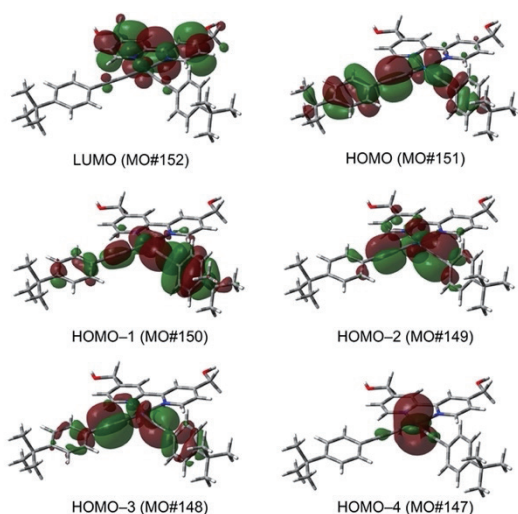
Figure 2. Chemical structure of **1** and **1'**

## 3 結果・考察

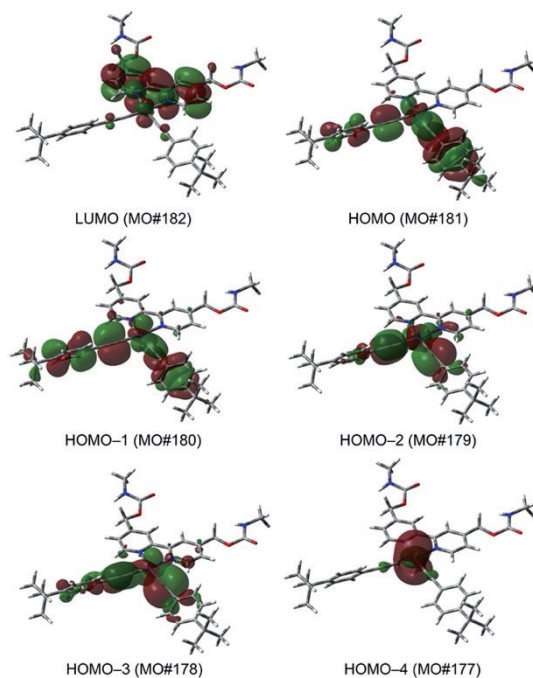
構造最適化された **1** および **1'** の TD-DFT 計算より求められた理論 UV-vis 吸収スペクトルを, DMF 溶媒中で測定した **1** と **P1** の実測値とともに図 3 に示す。TD-DFT 計算より算出した理論スペクトルは実測の傾向と良く一致し, 280 nm 付近に観測される吸収はほぼ同じであるにもかかわらず, 400 nm 付近の MLCT 遷移に由来する吸収領域では **1'** ないし **P1** (青線) が **1** (赤線) よりも長波長側に吸収を示した。図 4 および図 5 には, **1** および **1'** の HOMO/LUMO を含むいくつかの分子軌道を示す。**1** では 400 nm 付近の吸収は HOMO-2  $\rightarrow$  LUMO への遷移の寄与が強かった。**1'** では, これに加えて, HOMO-1  $\rightarrow$  LUMO への遷移もその吸収に大きく寄与していた。いずれの分子軌道においても **1'** のカルバメート部分への非局在化は見受けられなかったが, この置換基を導入することにより, HOMO-1 で特にアセチド配位子側の非局在化が大きくなり, 吸収が長波長側へシフトしたものと考えられる。次いで, **1** および **1'** の理論蛍光スペクトルを比較したが, 実測で観測されたような有意な蛍光色の差は見受けられなかった。



**Figure 3.** UV-vis absorption spectra of **1** (red) and **P1** (blue) measured in DMF ( $c = 0.03$  mM) (top), and **1** (red) and **1'** (blue) simulated by the TD-DFT method [ $\omega$ B97XD/6-31G\* (H, C, N, O)-LANL2DZ (Pt)],  $n_{\text{states}} = 40$ , plotted with peak half-width at half height = 0.2 eV using GaussView 6 (bottom).



**Figure 4.** Shapes of LUMO, HOMO, HOMO-1, HOMO-2, HOMO-3 and HOMO-4 of **1** obtained by the DFT calculation [ $\omega$ B97XD/6-31G\* (C, H, N, O), LANL2DZ (Pt)].



**Figure 5.** Shapes of LUMO, HOMO, HOMO-1, HOMO-2, HOMO-3 and HOMO-4 of **1'** obtained by the DFT calculation [ $\omega$ B97XD/6-31G\* (C, H, N, O), LANL2DZ (Pt)].

## 4 まとめと今後の展望

本研究では、メカノクロミック挙動を示す(bpy)Pt-acetylide 錯体とそれから得られるポリウレタンの構造と吸収/蛍光スペクトルの相関を計算科学的手法から検討した。UV-vis 吸収スペクトルについては、実測と良く一致した傾向が得られ、その分子軌道を比較することで、置換基の寄与に関する情報が得られた。今後、蛍光スペクトルについてもその汎関数/基底関数を検討することで、実測と一致した傾向のものが得られると期待される。これは、今後の分子設計の指針としても、大いに役立つと考えられる。

## 5 謝辞

本共同研究制度(若手奨励枠)を活用させて頂きましたことを、この場を借りて感謝致します。

## 6 引用文献

1. H. Sogawa, M. Abe, R. Shintani, T. Sotani, K. Tabaru, T. Watanabe, Y. Obora, F. Sanda, *Polym. J.* **2023**, doi: 10.1038/s41428-023-00822-4.



# 地震前兆時における地表面プラズマ波による山岳異常回折の観測結果の検証

藤井 雅文 \*

\*富山大学 大学院理工学研究部 工学領域

## 1 はじめに

地震は突発的に発生し、従来の方法ではその事前予測は困難であるとされてきた。しかし、地震の発生前に地殻の状態変化により電磁氣的現象が生じ、これを捉えることにより短期地震予測が可能であることが近年明らかになってきた [1, 2, 3, 5, 6]。これは地震活動前後の地殻応力変動により地殻内部から電荷が放出されるためであることが示唆されている。こうして地上に出現した電荷は付近を伝搬する電波と相互作用し、地表面プラズモンが誘起され地表面に沿って伝搬し、さらに地表面付近を伝搬する電波が異常な回折を受ける電磁波異常回折現象として観測されることが推察されている。これまで筆者は理論、数値シミュレーション、および実験観測によりこのことを検証してきた。このような電磁氣的な地震前兆現象の検出により、地震発生を数日から数時間前に推定可能となり、その事態に備え被害を低減することが可能となりつつある。これまでは地震が突然発生し、不意を突かれる不安と災害が大きかったが、数時間前の予測が可能になれば心理的あるいは社会的安全の確保や減災の効果は極めて高いと考えられる。

## 2 研究手法及び数値解析

筆者は図 1 に示す日本の複数の地点（富山、静岡等）において、その他の地域から伝搬する電波を常時観測している。これらの信号は非常に微弱であり、超高周波（VHF）帯の電波ノイズを低減するために急峻な周波数選択性をもつ超狭帯域阻止フィルターを開発し、これを用いて都市部においても低ノイズ

かつ高感度な電波観測が可能な装置を製作し、複数の観測拠点をネットワークで結び、各地の観測データをリアルタイムで解析できるシステムを構築している。

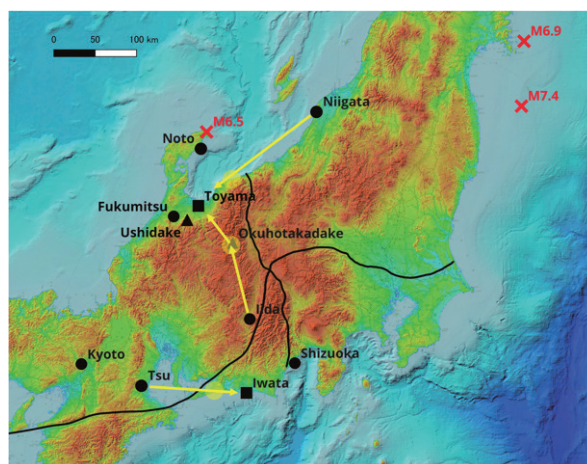
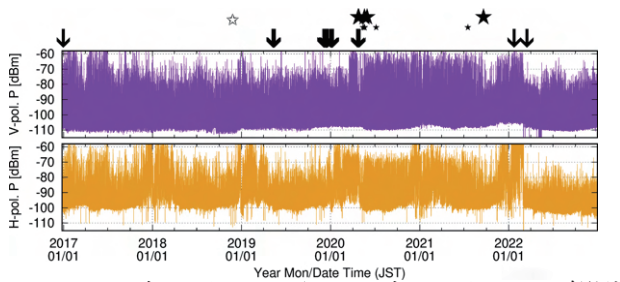
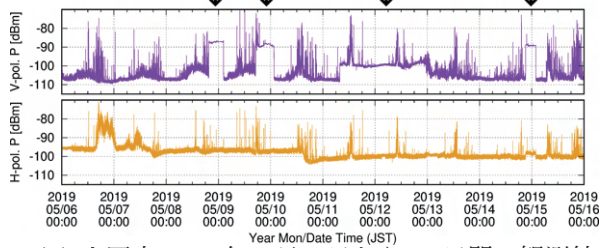


図 1: 電波経路と観測地点および能登半島地震（2023年5月5日 M6.5）と太平洋側で発生した地震（宮城沖 2021年3月20日 M6.9、福島沖 2022年3月16日 M7.4）の震源。黄色矢印は主な電波経路、黄色の円形領域は異常回折が生じると推察される地点、黒曲線は中央構造線および糸魚川-静岡構造線を示す。

本研究では、地震に関連する可能性のある異常な電波伝搬の発現機構を明らかにするため、デジタル国土地形データを用いて有限差分時間領域法（FDTD法）による大規模数値シミュレーションを超並列スーパーコンピュータ上でを行い、山地、河川、海岸などの地形が地表面プラズマ波の伝搬に及ぼす影響を解析した。使用した計算機は Cray CS400 Type B、



(a) 2017年1月1日から2022年12月31日の観測結果



(b) 上図中2019年5月6日から10日間の観測結果拡大図

図2: (a) 2017年から2022年末、(b) 代表的な区間の10日間の、ともに飯田から富山までの88.3MHzの電磁波異常観測結果。矢印は矩形パルス状の異常信号観測時点、星印はマグニチュード5程度（気象庁）以上の主な地震発生時刻。2020年4月と5月に群発地震が発生し、これらの地震発生以降は異常信号はほぼ観測されていない。(a)(b)ともに上段は垂直、下段は水平偏波の観測結果。

64ノード、2304CPUコア、必要メモリ容量は解析領域に応じて約3~5TB、1回の解析に要した時間は約5~20時間であった。

## 2.1 山岳地域（上高地・奥穂高）における電磁波現象

図1中央部の上高地または奥穂高岳付近では2020年4月から5月にかけてM5を超える地震が相次いで発生した。その約1年前から、図2に矢印で示すような様々な周期と高さの矩形パルス状の特異な信号を多数観測していた[7]。これらの信号は水平偏波にはほとんど現れず垂直偏波のみに観測され、人工的なノイズとしては説明困難であり自然由来の現象と推察される。

同地域において、長野県飯田市から送信された電波が日本アルプスの標高の高い山岳地帯で回折し、

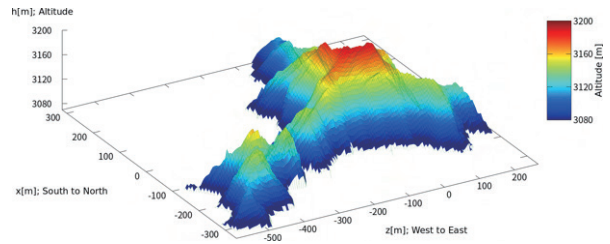


図3: 奥穂高岳山頂（標高3189.5m）の3次元解析モデル。水平面内座標原点は山頂位置。デジタル標高モデルは国土地理院による。

その電波が富山市へ到達している可能性が考えられる。この伝搬経路は明らかに見通し外伝搬であるが、山岳地形の頂上付近に電荷が出現した場合のような電波の散乱や回折が生じるかは不明で興味深い問題であった。そこで、図3に示す国土地理院発行の3次元デジタル標高モデル（Digital Elevation Model, DEM, グリッドサイズ5m）からFDTD解析モデル（グリッドサイズ0.2m）を生成し、この地表面に電荷がある場合とない場合の電波伝搬の様子を3次元FDTD法により解析した。解析手法の詳細は文献[3, 4]に記載している。ここでは偏波依存性を調べるため、入射波の偏波は実際の放送波と同じ水平偏波とし、電波の周波数は70MHzとした。

そのFDTD解析結果を図4に示す[8]。これらの比較により、地表面に電荷がある場合では電荷と電波の相互作用が生じ、電荷のない場合に比べて電波が強く散乱または回折している様子が明らかになった。この結果は上記の観測結果の偏波依存性をうまく説明することができ、地震前兆時の電磁波異常の物理機構を示唆していると考えられる。

## 2.2 太平洋沿岸（遠州灘・渥美半島）における電磁波現象

次に海岸部における電磁波の異常伝搬現象について検証する。図5に示すように、2022年3月16日に発生した福島沖地震（M7.4）の前日に、200km以上離れた2地点で極めて明瞭な前兆現象と推察される信号を検出した[7]。この事象では静岡県磐田観測点での信号が強く富山観測点での信号が弱かったため太平洋側での地震が予測され、実際にその通り、最大電波強度を観測した約5時間後に地震が発生した。

図1の下部に三重県津市から静岡県磐田市への電

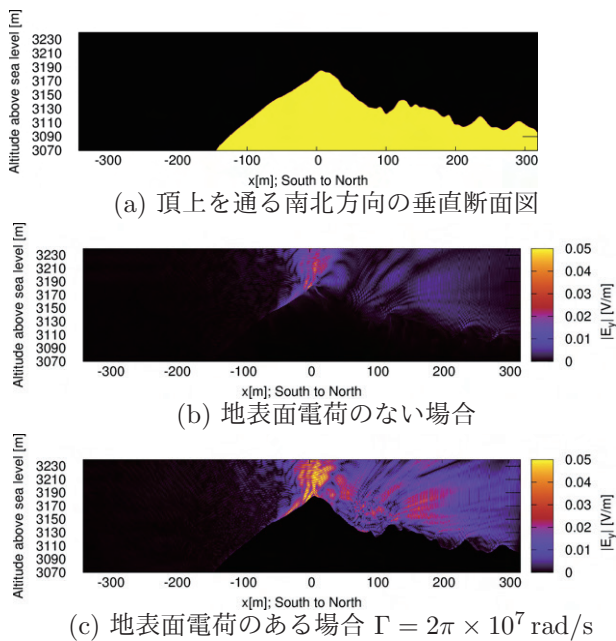


図 4: 奥穂高岳頂上における垂直成分  $|E_y|$  の FDTD 解析結果 (ピークを含む南から北への鉛直面上)。入射波は水平偏波  $E_z$ 。 $\Gamma$  は Drude 分散の減衰周波数 [5]。

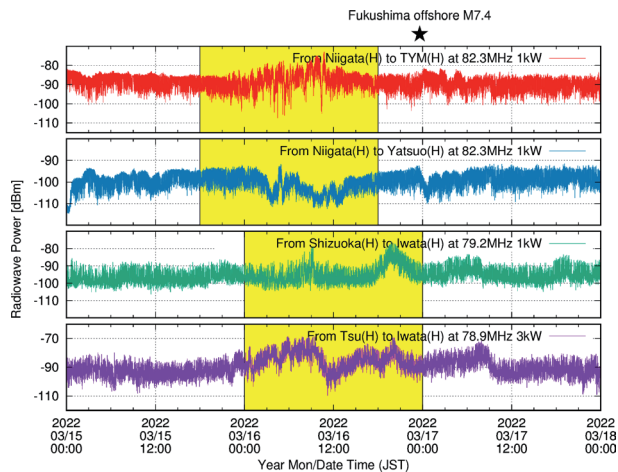


図 5: 2022 年 3 月福島県沖地震 ( $M7.4$ ) 前後に富山、八尾、磐田で観測された前兆信号比較。星印は地震発生時刻。上から新潟から富山市中心部、新潟から富山市八尾 (市中心部より約 20km 南)、静岡市から磐田市、三重県津市から磐田市への電波伝搬観測結果。

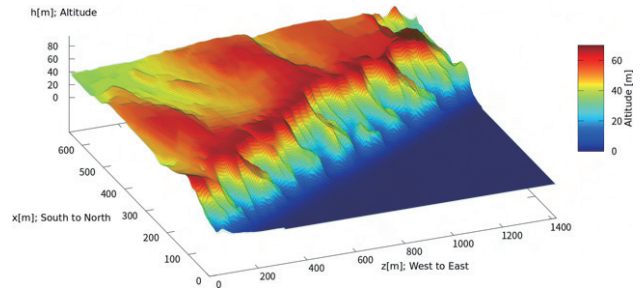


図 6: 渥美半島太平洋岸の 3 次元 FDTD 解析形状。標高  $h$  は  $y$  方向。

波が伝搬する際の地形の概要を示す。同伝搬経路上には渥美半島太平洋岸など、海岸の高低差のある崖など電波を回折する可能性のある地形が存在する。その海岸線の数十メートルの崖を含む数値解析モデルを図 6 に示す。同図の地形を解析した結果、地表面に電荷が出現した状況では、偏波依存する電磁波の異常回折が生じる可能性が判明した。その解析結果を図 7 に示す [8]。同地域の複雑な地形により付近を伝搬する電磁波が無数の細いビームを形成しランダムな方向へ散乱や回折および放射する様子が明らかになった。この結果からは地震の前兆現象として電波伝搬異常が生じる物理的機構を説明することが可能である。特に、太平洋岸に長距離にわたり高低差のある崖が存在し、その複雑な地形によって水平偏波が垂直偏波に比べて強く散乱および回折されることが推察される。

### 2.3 日本海沿岸 (新潟・富山・糸魚川付近) における電磁波現象

次に、図 1 の上部に位置する能登半島で 2023 年 5 月 5 日に比較的大きな地震 ( $M6.5$ ) が発生し、その直前に図 8 のように富山観測点において明瞭な前兆現象と推察される信号を検出した。ただし、この時には静岡観測点では同様の信号を観測しなかった。このような日本海側と太平洋側における観測信号の違いが地震発生地点に関する推測を可能とし、その通り最大電波強度が観測された約 3 時間後に能登半島地震 ( $M6.5$ ) が発生した。

富山観測地点では、新潟からの電波を観測しており、その電波経路はちょうど見通し内伝搬と見通し外伝搬の境界のような状況であり、中間地点の糸魚川付近において電波の回折に影響があればその効果

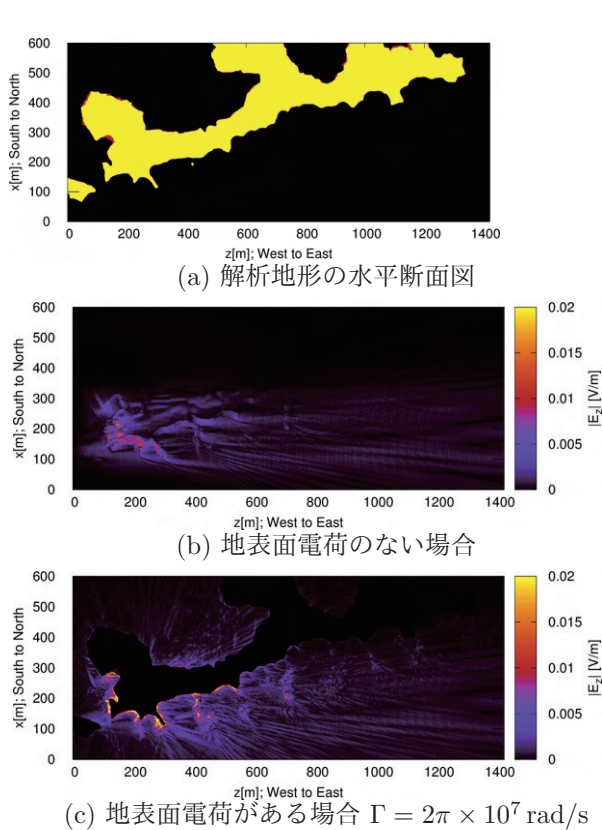


図 7: 渥美半島海岸部の FDTD 解析結果の電界強度分布を海拔 56 m の水平断面で表示した結果。入射波は西から東へ伝搬する水平偏波 ( $E_x$ ) であり、電界の水平成分 ( $E_z$ ) をプロットしている。 $\Gamma$  は Drude 分散の減衰周波数である。

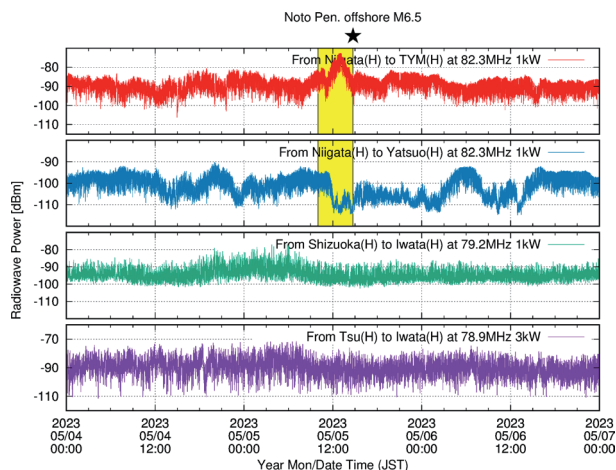


図 8: 2023 年 5 月 5 日能登半島地震 ( $M6.5$ ) 前後に富山、八尾、磐田で観測された前兆信号比較。星印は地震発生時刻。観測した電波は図 5 の表示と同様。

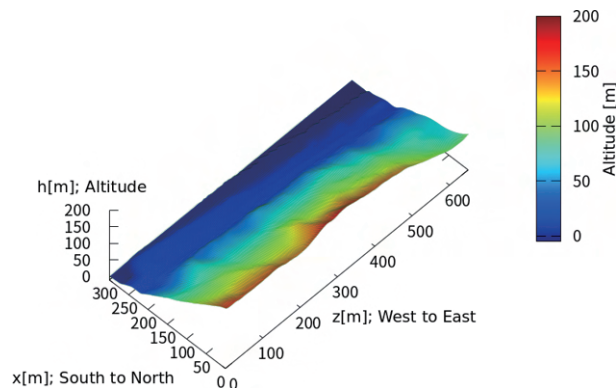


図 9: 糸魚川市付近の西海岸北部（日本海側）の海岸線の 3 次元 FDTD 解析形状。標高  $h$  は  $y$  方向。

が顕著に現れることが推察される。そして、糸魚川には糸魚川-静岡構造線が存在し電波がその構造線を横切る配置となっている。図 9 に糸魚川付近の地形を抽出した結果を示す。この地形における電波伝搬を解析した。解析領域の大きさは、西から東へ 650 m、南から北へ 300 m である。海面からの高さは 190 m であるが、仮に海水 2 m、海底 2 m を追加し、合計 194 m とした。材料パラメータは上記の例と同様であり、地上は  $\epsilon_\infty = 6$ ,  $\sigma = 1.0 \times 10^{-3} \text{ S/m}$ 、海水は  $\epsilon_\infty = 80$ ,  $\sigma = 4.0 \text{ S/m}$  としている。Drude 分散のパラメータ  $f_p' = 408 \text{ MHz}$  とし、帯電した地面の  $\Gamma = 2\pi \times 10^6 \text{ rad/s}$ ,  $2\pi \times 10^7 \text{ rad/s}$ ,  $2\pi \times 10^8 \text{ rad/s}$  の 3 つのケースをテストした。海水は常に通常の非 Drude 型、損失性導電媒体と仮定した。

糸魚川付近の地形の解析結果を図 10 に示す。入射波は、実際の新潟市の放送局からの電波を模擬した東から西へ伝搬する周波数 70 MHz の水平偏波（偏波成分は  $E_x$ ）とし、 $x = 30 \text{ m}$  から  $370 \text{ m}$ 、 $y = 112.4 \text{ m}$  から  $180.3 \text{ m}$  の矩形領域から励起した。

この地域は特に急峻な山地が多く複雑な斜面が海に面している。通常、電波は山岳地形に遮られ観測点には直接届かない。しかし、地表面に電荷が存在すると、図 10(d)(e) に示すように、電波は斜面に沿って伝搬し一部は強く回折され富山観測点に到達する。なお、この解析領域の地形には急峻な変化が複数存在し、図では明瞭でないが、入射波の先頭部が解析領域の特定の位置に達したときに数値的不安定性を引き起こすことがあった。この問題は  $\Gamma$  値に依存しなかったが今後の研究課題である。

## 2.4 結果および考察

以上の観測結果と解析結果の比較により、地震に伴う電磁波異常伝搬現象を電波と電荷の相互作用によって説明できることを示した。現段階では、精密な電波観測によって比較的大規模な地震を数時間前に予測できることが示されている。また、複数の地点における電波観測結果を比較することにより、震源位置を太平洋側か日本海側かの程度で判別可能である。さらに、観測拠点を増設することにより地震の発生地点をより正確に予測することが今後の重要課題である。今後、これらの研究成果と理論に基づき電磁波観測を実施し、数百 km の範囲の地殻活動のモニタリングおよび地震の短期予測の精度を向上させることが重要である。このような予測は、これまで国内外において非常に困難とされてきたが、本研究における物理機構の解明と観測手法の改良、および大規模数値シミュレーションによる検証によって科学的な裏付けが与えられた。その社会的および学術的価値は小さくないと考えられる。

## 参考文献

- [1] Y. Kushida and R. Kushida, "On a possibility of earthquake forecast by radio observation in the VHF band", *Riken Rev.*, v.19, p.1-13, 1998.
- [2] F. Freund, "Charge generation and propagation in igneous rocks", *J. of Geodynamics*, v.33, p.543-570, 2002.
- [3] M. Fujii, "Theory of ground surface plasma wave associated with pre-earthquake electrical charges", *Radio Science*, v.48, pp.122-130, Mar. 2013.
- [4] M. Fujii, "Fundamental correction of Mie's scattering theory for the analysis of plasmonic resonance of a metal nanosphere", *Phys. Rev. A*, vol.89, no.3, 033805, Mar. 2014.
- [5] M. Fujii, "A new mode of radio wave diffraction via the terrestrial surface plasmon on mountain range", *Radio Science*, v.51, pp.1396-1412, doi:10.1002/2016RS006068, Sep. 2016.
- [6] L. Crane, "Earthquakes could funnel radio waves to dark zones in mountains", *American Geophysical Union Eos*, 97, doi:10.1029/2016EO059987, Sep. 2016.
- [7] M. Fujii, "Detection of Electromagnetic Precursors of Earthquakes Mediated by the Terrestrial Ground Surface Plasma Wave", *URSI GASS 2023*, Aug. 19-26, Sapporo, Japan, abstract ID.145, 2023.
- [8] M. Fujii, "Numerical Analysis of Polarized Anomalous Electromagnetic Diffraction via the Ground Surface Plasma Wave Associated with Earthquakes", *URSI GASS 2023*, Aug. 19-26, Sapporo, Japan, abstract ID.464, 2023.

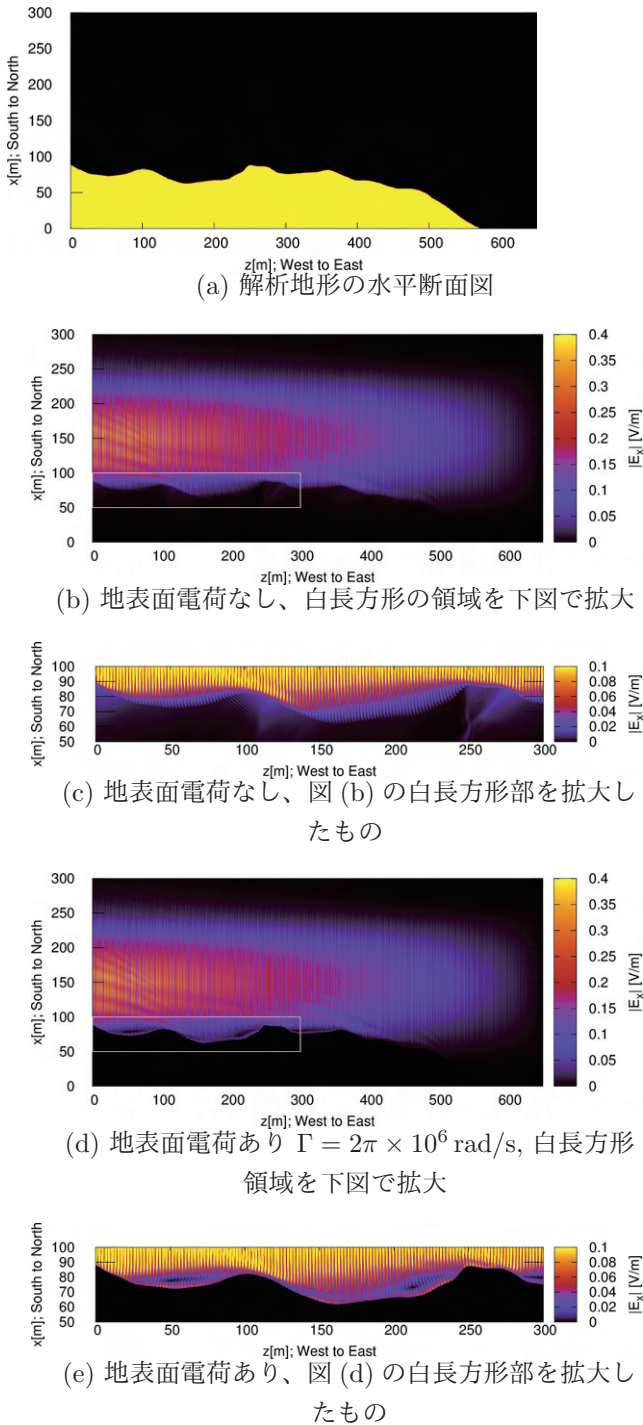


図 10: 日本海側 (糸魚川付近) の FDTD 解析結果の電界強度分布を海拔 112.4m の水平断面上でプロットした結果。電磁波は東から入射した水平偏波 ( $E_x$ ) であり、同じ水平偏波成分 ( $E_x$ ) をプロットした。

## システム B 運転状況 (2023 年 4 月 ~ 2023 年 9 月)

### 1) 保守作業に伴うサービス休止およびシステムダウン障害発生状況

保守作業に伴うサービス休止

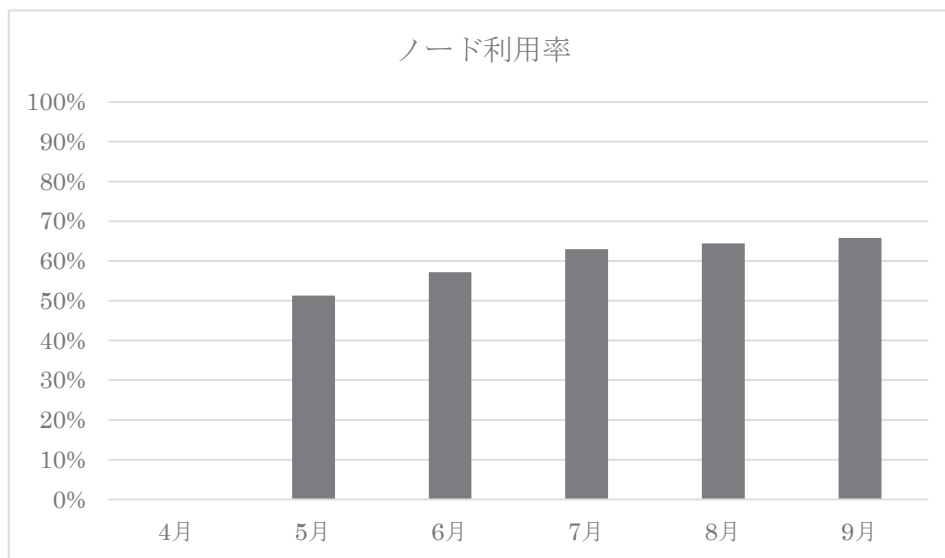
保守開始日時	サービス再開日時	保守時間[h]
2023/06/13 9:00	2023/06/15 13:00	52.0
2023/08/07 9:00	2023/08/09 13:00	52.0
2023/09/18 6:30	2023/09/21 13:00	78.5

システムダウン障害発生状況

障害発生日時	サービス再開日時	ダウン時間[h]
なし		

### 2) サービス状況

	サービス時間[h]	ジョブ					
		処理件数	経過時間[h]	占有時間[h]	CPU時間[h]	平均稼動ノード数	ノード利用率
4月	設備工事に伴う運転休止期間						
5月	744.00	126,366	224,171	28,254,645	10,787,952	360.3	51.3 %
6月	668.00	163,392	206,541	28,381,143	10,878,110	323.0	57.2 %
7月	744.00	182,529	323,568	36,235,505	14,718,778	290.8	63.0 %
8月	692.00	142,974	340,544	34,327,963	12,477,778	282.5	64.4 %
9月	641.50	137,635	334,790	33,169,809	11,634,026	310.2	65.8 %
計	3,490	752,896	1,429,613	160,369,065	60,496,644	313.4	60.3 %



- 占有時間 = 合計(経過時間×占有コア数)
- 平均稼動ノード数 = 電源 ON 状態のノード数の月平均 (10 分間隔のサンプリングデータより算出)
- ノード利用率 = 稼動ノードに対するジョブが実行されているノードの割合

# システムC 運転状況 (2023年4月 ~ 2023年9月)

## 1) 保守作業に伴うサービス休止およびシステムダウン障害発生状況

保守作業に伴うサービス休止

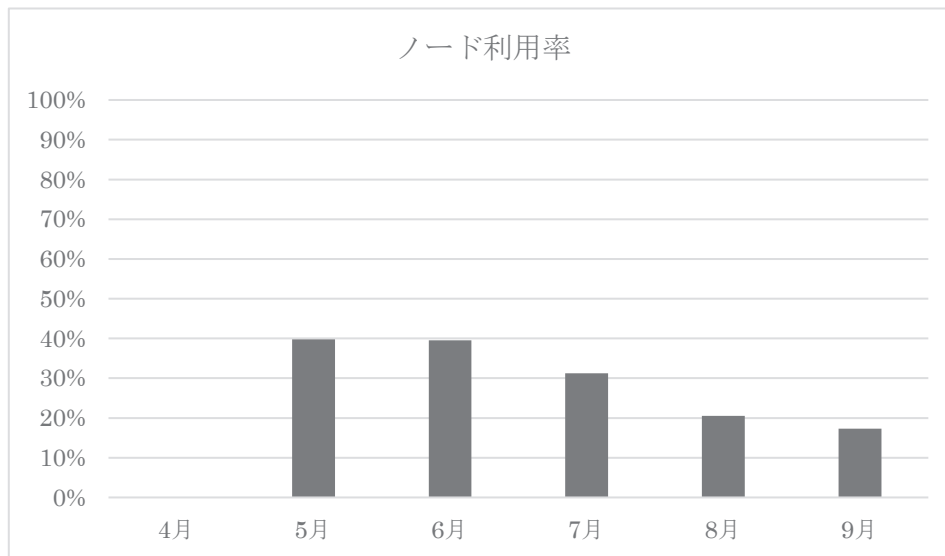
保守開始日時	サービス再開日時	保守時間[h]
2023/06/13 9:00	2023/06/15 13:00	52.0
2023/08/07 9:00	2023/08/09 13:00	52.0
2023/09/18 6:30	2023/09/21 13:00	78.5

システムダウン障害発生状況

障害発生日時	サービス再開日時	ダウン時間[h]
なし		

## 2) サービス状況

	サービス時間[h]	ジョブ					
		処理件数	経過時間[h]	占有時間[h]	CPU時間[h]	平均稼動ノード数	ノード利用率
4月	設備工事に伴う運転休止期間						
5月	744.00	751	13,848	727,732	27,753	16.0	39.8 %
6月	668.00	1,490	13,106	655,235	54,235	12.4	39.5 %
7月	744.00	1,199	16,739	494,672	88,434	10.0	31.2 %
8月	692.00	1,218	10,268	291,020	50,804	9.7	20.5 %
9月	641.50	565	9,604	249,744	34,692	11.5	17.3 %
計	3,490	5,223	63,566	2,418,403	255,918	11.9	29.7 %



- 占有時間 = 合計(経過時間×占有コア数)
- 平均稼動ノード数 = 電源 ON 状態のノード数の月平均 (10 分間隔のサンプリングデータより算出)
- ノード利用率 = 稼動ノードに対するジョブが実行されているノードの割合

# システム G 運転状況 (2023 年 4 月 ~ 2023 年 9 月)

## 1) 保守作業に伴うサービス休止およびシステムダウン障害発生状況

保守作業に伴うサービス休止

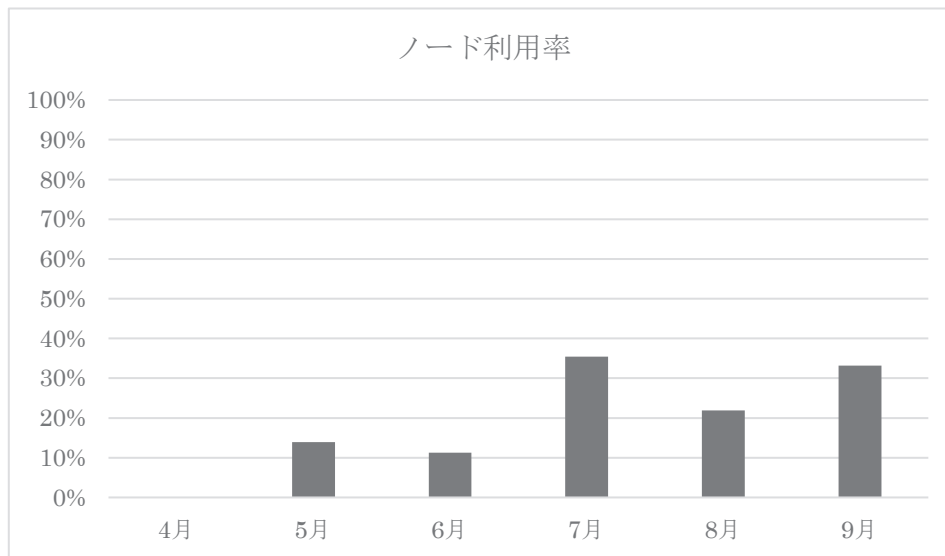
保守開始日時	サービス再開日時	保守時間[h]
2023/06/13 9:00	2023/06/15 13:00	52.0
2023/08/07 9:00	2023/08/09 13:00	52.0
2023/09/18 6:30	2023/09/21 13:00	78.5

システムダウン障害発生状況

障害発生日時	サービス再開日時	ダウン時間[h]
なし		

## 2) サービス状況

	サービス時間[h]	ジョブ					
		処理件数	経過時間[h]	占有時間[h]	CPU時間[h]	平均稼動ノード数	ノード利用率
4月	設備工事に伴う運転休止期間						
5月	744.00	1,896	6,733	297,807	25,247	16.0	13.9 %
6月	668.00	732	1,971	106,235	4,998	11.4	11.3 %
7月	744.00	787	11,346	449,106	12,786	8.0	35.4 %
8月	692.00	411	3,952	271,495	19,087	8.3	21.9 %
9月	641.50	924	4,408	360,040	10,784	11.7	33.2 %
計	3,490	4,750	28,409	1,484,683	72,902	11.1	23.1 %



- 占有時間 = 合計(経過時間×占有コア数)
- 平均稼動ノード数 = 電源 ON 状態のノード数の月平均 (10 分間隔のサンプリングデータより算出)
- ノード利用率 = 稼動ノードに対するジョブが実行されているノードの割合



## センター利用による研究成果

—2022年度計算機利用結果報告書から—

- 【1001 情報学基礎】
1. Hidetomo Nabeshima, Tsubasa Fukiage, Yuto Obitsu, Xiao-Nan Lu, Katsumi Inoue : DPS: A Framework for Deterministic Parallel SAT Solvers : The 13th Pragmatics of SAT International Workshop, pp.1 - 15, 2022
- 【4103 数学一般 (含確率論・統計数学)】
2. N. Tsutsumi and K. Nakai and Y. Saiki : Constructing differential equations using only a scalar time-series about continuous time chaotic dynamics : Chaos, Vol.32, pp.091101 -, 2022
- 【4305 原子・分子・量子エレクトロニクス・プラズマ】
3. Takuya Majima, Yuki Mizunami, Takahiro Teramoto, Hidetsugu Tsuchida, Manabu Saito : Fast Heavy-Ion-Induced Anion - Molecule Reactions on the Methanol Droplet Surface : The Journal of Physical Chemistry A, Vol.126, pp.8988 - 8996, 2022
- 【4306 生物物理・化学物理】
4. Aya Okuda, Masahiro Shimizu, Rintaro Inoue, Reiko Urade, Masaaki Sugiyama : Efficient Multiple Domain Ligation for Proteins using Asparaginyl Endopeptidase by Selection of Appropriate Ligation Sites Based on Steric Hindrance : Angewandte Chemie - International Edition, Vol.62, No.1, pp.e202214412 -, 2022
  5. Youwei Lin, Shun Sakuraba, Chandirasegaran Massilamany, Jayagopala Reddy, Yoshimasa Tanaka, Sachiko Miyake, Takashi Yamamura : Harnessing autoimmunity with dominant self-peptide: Modulating the sustainability of tissue-preferential antigen-specific Tregs by governing the binding stability via peptide flanking residues : Journal of Autoimmunity, Vol.140, pp.103094 -,
- 【4403 超高層物理学】
6. Sakata, R., Seki, K., Sakai, S., Terada, N., Shinagawa, H., & Tanaka, T. : Multispecies MHD study of ion escape at ancient Mars: Effects of an intrinsic magnetic field and solar XUV radiation : Journal of Geophysical Research: Space Physics, Vol.127, No.e2022JA030427, 2022
  7. Ibuki Fukasawa, Yohei Miyake, Hideyuki Usui, Koshiro Kusachi, Satoshi Kurita, and Hirotugu Kojima : Particle-in-Cell Simulations on Interferometry Technique by a Single Spacecraft : URSI RADIO SCIENCE LETTERS, Vol.4, 2022
- 【4601 物理化学】
8. Chihiro Tabata, Hirohito Watanabe, Kenji Shirasaki, Ayaki Sunaga, Takamitsu Fukuda, Dexin Li, Tomoo Yamamura : Crystallographic and/or magnetic properties of neutral and cationic uranium(IV) sandwiched phthalocyanine complexes : Journal of Molecular Structure, Vol.1277, pp.134870 -, 2023
  9. Kenneth G. Dyall, Paweł Tecmer, Ayaki Sunaga : Diffuse Basis Functions for Relativistic s and d Block Gaussian Basis Sets : Journal of Chemical Theory and Computation, Vol.19, No.1, pp.198 - 210, 2023
  10. Ayaki Sunaga, Chihiro Tabata, Tomoo Yamamura : Linearity and Chemical Bond of UO<sub>2</sub>(2+) Revisited: A Comparison Study with UN<sub>2</sub> and UE<sub>2</sub>(2+) (E = S, Se, and Te) Based on Relativistic Calculations : The Journal of Physical Chemistry A, Vol.126, No.46, pp.8606

- 8617, 2022

11. Ayaki Sunaga, Maen Salman, Trond Saue : 4 component relativistic Hamiltonian with effective QED potentials for molecular calculations : The Journal of Chemical Physics, Vol.157, No.16, pp.164101 -, 2022
- 【5001 機械材料・材料力学】
12. 土木材料・施工・建設マネジメント : Peridynamics 理論と有限要素解析による複合材料積層板の衝撃損傷のモデル化 : 第 13 回日本複合材料会議 (JCCM-13) 講演論文集, 2022
13. M. Nishikawa, R. Shinohara, A. Ito, N. Matsuda and M. Hojo : Multiphysics Modeling for CFRP Flammability Using FDS-FEM : US-Japan and Euro-Japan Joint Conference on Composite Materials (口頭発表) , 2022
14. Togo Mizuta, Masaaki Nishikawa, Masato Nishi, Naoki Matsuda, Masaki Hojo : Coupled structural thermal analysis of the defect formation process during CFRP tape layup : Proc. 37th Annual Technical Conference of American Society for Composites(ASC), 2022
- 【5004 流体力学】
15. Jun Nagao, Abhishek Lakshman Pillai, Takeshi Shoji, Shigeru Tachibana, Takeshi Yokomori, Ryoichi Kurose : Numerical investigation of wall effects on combustion noise from a lean-premixed hydrogen/air low-swirl flame : Physics of Fluids, Vol.35, No.14109, 2023
16. Abhishek Lakshman Pillai, Shimpei Inoue, Takeshi Shoji, Shigeru Tachibana, Takeshi Yokomori, Ryoichi Kurose : Investigation of combustion noise generated by an open lean-premixed H<sub>2</sub>/air low-swirl flame using the hybrid LES/APE-RF framework : Combustion and Flame, Vol.245, No.112360, 2022
17. Hiroki Muramatsu, Abhishek L. Pillai, Kenya Kitada, Ryoichi Kurose : Numerical simulation of bi-component fuel droplet evaporation using Level Set method : Fuel, Vol.318, No.123331, 2022
18. Jun NAGAO, Abhishek L. PILLAI, Ryoichi KUROSE : Investigation of temporal variation of combustion instability intensity in a back step combustor using LES : Journal of Thermal Science and Technology, Vol.15, No.3, 2020
19. Reo Kai, Abhishek Lakshman Pillai, Umair Ahmed, Nilanjan Chakraborty, and Ryoichi Kurose : Analysis of the Evolution of the Surface Density Function During Premixed V-Shaped Flame-Wall Interaction in a Turbulent Channel Flow at  $Re \tau = 395$  : Combustion Science and Technology, 2022
20. Abhishek Pillai, Reo Kai, Jing Li, Ryoichi Kurose : Assessment of LES for Investigating Spray Flame Impinging on a Wall under Compression-Ignition Engine-like Environment : International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems (ICLASS), 2021
21. A. A. Zaidi, T. Tsuji & T. Tanaka : A new relation of drag force for high Stokes number monodisperse spheres by direct numerical simulation : Advanced Powder Technology, Vol.25, pp.1860 - 1871, 2014
22. A. A. Zaidi, T. Tsuji & T. Tanaka : Direct numerical simulation of finite sized particles settling for high Reynolds number and dilute suspension : International Journal of Heat and Fluid Flow, Vol.50, No., pp.330 - 341, 2014
23. M. Kobayakawa, S. Miyai, T. Tsuji & T. Tanaka : Local dilation and compaction of granular materials induced by plate drag : PHYSICAL REVIEW E, Vol.98, pp.052907 -, 2018
24. M. Kobayakawa, S. Miyai, T. Tsuji & T. Tanaka : Interaction between dry granular materials and an inclined plate (comparison between large-scale DEM simulation and three-dimensional wedge model) : Journal of Terramechanics, Vol.90, No., pp.3 - 10, 2019
25. Z. Jiang, T. Tsuji, K. Washino & T. Tanaka : Influence of model particle size and spatial resolution in coarse-graining DEM-CFD simulation : Advanced Powder Technology, Vol.32, pp.3525 - 3539, 2021

26. T. Tsuji, A. Penn, T. Hattori, K. P. Pruessmann, C. R. Müller, J. Oshitani, K. Washino & T. Tanaka : Mechanism of anomalous sinking of an intruder in a granular packing close to incipient fluidization : *Physical Review Fluids*, Vol.6, pp.064305 -, 2021
27. Z. Jiang, T. Tsuji, J. Oshitani, K. Washino & T. Tanaka : Reverse to forward density segregation depending on gas inflow velocity in vibrated fluidized beds : *Physics of Fluids*, Vol.35, pp.033313 -, 2023
- 【5102 電子・電気材料工学】
28. Kosuke O. Hara : Designing limiting-efficiency BaSi<sub>2</sub> solar cells by device simulation and computational material screening: *Solar Energy*, Vol.245, pp.136 - 145, 2022
- 【5104 通信・ネットワーク工学】
29. Y. Takano, H. -J. Su, Y. Shiraishi and M. Morii : A Cache-Aided Power Optimization Technique for Adaptive Secure Transmission Systems : *IEEE PIMRC 2022*, 2022
30. Y. -T. Hou, H. -J. Su and Y. Takano : Blind Channel Estimation for Millimeter Wave Uplink Systems with Unknown Number of Users : *IEEE PIMRC 2022*, 2022
31. Y. -C. Liu, H. -J. Su and Y. Takano : Enhanced Multiple Angles-of-Arrival Detection Using Non-uniform Sub-connection in Hybrid Beamforming Systems : *IEEE GLOBECOM Workshop 2022*, 2023
- 【5201 土木材料・施工・建設マネジメント】
32. 小沢拓弥, 田中良樹, 古賀裕久, 上仙靖 : 道路橋 コンクリート床版の上面補修界面における開口挙動: *コンクリート工学年次論文集*, Vol.44, No.2, pp.295 - 300, 2022
- 【5202 構造工学・地震工学・維持管理工学】
33. Naotoshi Yasuda : Hammering sound of concrete with defects and spalling risk : *Tunnelling and Underground Space Technology*, Vol.131, pp.104789 - 104789, 2023
- 【5402 無機材料・物性】
34. S. Kiyohara, D. Mora-Fonz, A. Shluger, Y. Kumagai, and F. Oba : Unique atomic and electronic structures of oxygen vacancies in amorphous SnO<sub>2</sub> from first principles and informatics : *J. Phys. Chem. C*, Vol.126, No.44, pp.18833 - 18838, 2022
35. T. Gake, Y. Kumagai, A. Takahashi, H. Hiramatsu, and F. Oba : Defect formation and carrier compensation in layered oxychalcogenide La<sub>2</sub>CdO<sub>2</sub>Se<sub>2</sub>: An insight from first principles : *J. Mater. Chem. C*, Vol.10, pp.16828 - 16837, 2022
36. 我毛智哉, 熊谷悠, 高橋亮, 大場史康 : La<sub>2</sub>CdO<sub>2</sub>Se<sub>2</sub> 中の固有点欠陥に関する理論的検討 : *日本セラミックス協会第 35 回秋季シンポジウム*, 2022
37. 大場史康 : 第一原理計算による窒化物・酸化物半導体の設計と探索 : *日本金属学会 2022 年秋期講演大会*, 2022
38. 大場史康 : 第一原理計算による窒化物・酸化物半導体の設計と新材料開拓 : *第 48 回ニューセラミックスセミナー*, 2023
39. 大場史康 : 計算科学に立脚した窒化物・酸化物半導体の設計・探索 : *日本セラミックス協会 2023 年年会*, 2023
40. Y. Mochizuki, H.-J. Sung, T. Gake, and F. Oba : Chemical trends of surface reconstruction and band positions of nonmetallic perovskite oxides from first principles : *Chem. Mater.*, Vol.35, No.5, pp.2047 - 2057, 2023

別表1 スーパーコンピュータシステム

区分			利用負担額	提供サービス					
コース	タイプ	セット		システム	バッチ	システム資源	経過時間 (時間)	ストレージ (TB)	無料 利用者数
エントリ	-	基本	12,600 円/年	B	共有	最大0.5ノード相当((112コア、512GBメモリ)×0.5)	1	0.2	-
パーソナル	タイプA	基本	100,000 円/年	A	共有	最大2ノード相当((112コア、128GB高速メモリ)×2)	168	8.0	-
	タイプB	基本	100,000 円/年	B	共有	最大2ノード相当((112コア、512GBメモリ)×2)	168	8.0	-
	タイプC	基本	100,000 円/年	C	共有	最大1ノード相当((112コア、2048GBメモリ)×1)	168	8.0	-
	タイプG	基本	100,000 円/年	G	共有	最大1GPU相当((16コア、128GBメモリ+1GPU)×1)	168	8.0	-
グループ	タイプA0	最小/追加	110,000 円/年	A	準々優先	1ノード((112コア、128GB高速メモリ)×1)	168	6.4	2
	タイプA1	最小/追加	275,000 円/年		優先	1ノード((112コア、128GB高速メモリ)×1)	336	16.0	4
	タイプA2	最小/追加	330,000 円/年		準優先	2ノード((112コア、128GB高速メモリ)×2)	336	19.2	6
	タイプA3	最小/追加	412,500 円/年		占有	1ノード((112コア、128GB高速メモリ)×1)	336	16.0	4
	タイプB0	最小/追加	120,000 円/年	B	準々優先	1ノード((112コア、512GBメモリ)×1)	168	6.4	2
	タイプB1	最小/追加	300,000 円/年		優先	1ノード((112コア、512GBメモリ)×1)	336	16.0	4
	タイプB2	最小/追加	360,000 円/年		準優先	2ノード((112コア、512GBメモリ)×2)	336	19.2	6
	タイプB3	最小/追加	450,000 円/年		占有	1ノード((112コア、512GBメモリ)×1)	336	16.0	4
	タイプC0	最小/追加	132,000 円/年	C	準々優先	1ノード((112コア、2048GBメモリ)×1)	168	6.4	2
	タイプC1	最小/追加	330,000 円/年		優先	1ノード((112コア、2048GBメモリ)×1)	336	16.0	4
	タイプG0	最小/追加	86,000 円/年	G	準々優先	1GPU((16コア、128GBメモリ+1GPU)×1)	168	6.4	2
	タイプG1	最小/追加	430,000 円/年		優先	2GPU((16コア、128GBメモリ+1GPU)×2)	336	32.0	8
大規模ジョブ	タイプA	最小	110,000 円/週(7日)	A	占有	8ノード((112コア、128GB高速メモリ)×8)	168	-	-
		追加単位	27,500 円/週(7日)			2ノード((112コア、128GB高速メモリ)×2)		-	-
	タイプB	最小	120,000 円/週(7日)	B	占有	8ノード((112コア、512GBメモリ)×8)	168	-	-
		追加単位	30,000 円/週(7日)			2ノード((112コア、512GBメモリ)×2)		-	-
専用クラス	タイプB	最小	900,000 円/年	B	-	2ノード((112コア、512GBメモリ)×2)	-	32.0	8
		追加単位	450,000 円/年			1ノード((112コア、512GBメモリ)×1)		16.0	4
ストレージ	大容量ストレージ		10,000 円/年	大容量ストレージ容量10TBの追加につき					
	高速ストレージ		10,000 円/年	高速ストレージ容量2TBの追加につき					
	ネットワークストレージ		5,000 円/年	ネットワークストレージ容量1TBの追加につき					
ライセンスサービス			20,000 円/年	可視化ソフトおよびブリポストアウェアの1ライセンスにつき					

## 備考

- 利用負担額は、年度単位（大規模ジョブコースは週単位）で算定している。また、総額表示である。パーソナルコース、グループコース又は専用クラスコースを年度途中から利用を開始する場合及び年度途中で利用を終了する場合の利用負担額は、上記表中の利用負担額を12で除した後、利用月数を乗じて算出するものとし、100円未満に端数が出た場合は、10円単位を四捨五入するものとする。  
なお、月途中から利用を開始する場合及び月途中で利用を終了する場合は、それぞれ1月の利用とする。
- 大型計算機システムの全ての利用者は、上記表のサービスの他、次のサービスを受けることができる。
  - 大判プリンタサービス
  - その他、大型計算機システムが提供するサービス、機器の利用
- 上記表の大規模ジョブコース、ストレージコース、ライセンスサービスの申請には、スーパーコンピュータシステムの利用者であることが必要である。
- 上記表のバッチの種類は、次のとおりとする。  
「共有」：当該カテゴリのユーザ間で一定の計算資源を共有するベストエフォートのスケジューリングを行う。  
「準々優先」：定常稼働状況において記載値の計算資源が確保されるようにベストエフォートのスケジューリングを行う。  
「準優先」：定常稼働状況において記載値（以上）の計算資源が確保されるように準優先スケジューリングを行う。  
また、稼働状況によらず記載値の1/4の計算資源が確保されることを保証する。  
「優先」：定常稼働状況において記載値（以上）の計算資源が確保されるように優先スケジューリングを行う。  
また、稼働状況によらず記載値の1/2の計算資源が確保されることを保証する。  
「占有」：稼働状況によらず記載値の計算資源が確保されることを保証する。
- システム障害、電力不足又は電気代の高騰に伴う節電、天災等の要因により、定常稼働が困難な状況においては、上記表に規定するバッチにかかわらず、ベストエフォートのスケジューリングを行う。
- ストレージ容量はバックアップ領域（最大で総容量の1/2）を含む。
- グループコース及び専用クラスコースの利用者番号は、利用者あたり年額5,000円を負担することで追加できる。
- 機関・部局定額制度  
他機関又は学内における部局（『国立大学法人京都大学の組織に関する規程』第3章第2節から第11節で定める組織をいう。）の組織が、その組織単位でグループコースサービスを利用申請する場合の利用負担額は、別表1に規定する1.5倍の額とする。  
なお、利用負担額が年額150万円未満の場合は100人、年額150万円を超える場合は、150万円毎に100人までの利用者を認める。  
ストレージは、1.5倍の容量とする。
- スパコン連携サービス  
学術情報メディアセンターのスーパーコンピュータシステムと密な連携により、学内における部局の組織が計算サーバ等を設置する場合下記の負担額を支払うものとする。

区分	冷却方式	利用負担額	利用負担額算定単位
スパコン連携サービス	水冷	23,200 円/月	水冷冷却方式の計算サーバ等の定格電力 1kWにつき
	空冷	27,500 円/月	空冷冷却方式の計算サーバ等の定格電力 1kWにつき

## 別表2 アカデミッククラウドシステム

区 分	利用負担額	単 位
仮想サーバ ホスティングサービス	38,400円/年	1仮想サーバにつき

### 備考

1. 利用負担額は、総額表示である。
2. 上記表の仮想サーバホスティングサービスを利用するには、スーパーコンピュータシステムの利用者であること。
3. 1仮想サーバに割当ててるシステム資源は、CPU：2コア、メモリ：4GB、ストレージ：100GBである。
4. 仮想サーバホスティングサービスにおいて、下記の負担額を支払うことによりCPU、メモリ、ストレージを増量することができる。

区 分	利用負担額	単 位
CPU増量	3,600円/年	2コアにつき(最大8コアまで)
メモリ増量	3,600円/年	4GBにつき(最大64GBまで)
ストレージ増量	7,200円/年	100GBにつき(最大1,000GBまで)

5. 利用負担額は、当該年度(4月から翌年3月まで)の利用に対して年額として算定するが、年度途中から利用を開始する場合及び申請時において年度途中で利用を終了することが明らかな場合には月数に応じて減額する。

別表3 スーパーコンピュータシステム（民間機関利用）

システム	システム資源	経過時間 (時間)	ストレージ (TB)	無料 利用者数	利用負担額
A	2ノード((112コア、128GB高速メモリ)×2)	336	19.2	6	1,320,000 円/年
	3ノード((112コア、128GB高速メモリ)×3)	336	28.8	9	1,980,000 円/年
	4ノード((112コア、128GB高速メモリ)×4)	336	38.4	12	2,640,000 円/年
B	2ノード((112コア、512GBメモリ)×2)	336	19.2	6	1,440,000 円/年
	3ノード((112コア、512GBメモリ)×3)	336	28.8	9	2,160,000 円/年
	4ノード((112コア、512GBメモリ)×4)	336	38.4	12	2,880,000 円/年

**備考**

1. 利用負担額は、年度単位で算定している。また、総額表示である。  
 年度途中から利用を開始する場合及び年度途中で利用を終了する場合の利用負担額は、上記表中の利用負担額を12で除した後、利用月数を乗じて算出するものとし、100円未満に端数が出た場合は、10円単位を四捨五入するものとする。  
 なお、月途中から利用を開始する場合及び月途中で利用を終了する場合は、それぞれ1月の利用とする。
2. ストレージ容量はバックアップ領域（最大で総容量の1/2）を含む。

## — サービス利用のための資料一覧 —

### 1. スーパーコンピュータシステム・ホスト一覧

- システム A (Camphor3) : camphor.kudpc.kyoto-u.ac.jp
- システム B (Laurel3) : laurel.kudpc.kyoto-u.ac.jp
- システム C (Cinnamon3) : cinnamon.kudpc.kyoto-u.ac.jp
- システム G (Gardenia) : gardenia.kudpc.kyoto-u.ac.jp
- アプリケーションサーバ : app.kudpc.kyoto-u.ac.jp
- ファイル転送サーバ : hpcfs.kudpc.kyoto-u.ac.jp

※ ホストへの接続は SSH(Secure SHell) 鍵認証のみ、パスワード認証は不可

### 2. 問い合わせ先 & リンク集

- 情報環境機構のホームページ  
<http://www.iimc.kyoto-u.ac.jp/>
- 学術情報メディアセンターのホームページ  
<http://www.media.kyoto-u.ac.jp/>
- 利用申請などに関する問い合わせ先  
【情報環境支援センター】  
E-mail : zenkoku-kyo@media.kyoto-u.ac.jp / Tel : 075-753-7424  
URL: <http://www.iimc.kyoto-u.ac.jp/ja/services/comp/>
- システムの利用など技術的な問い合わせ先  
【スーパーコンピューティング掛】  
E-mail : consult@kudpc.kyoto-u.ac.jp  
URL: <http://www.iimc.kyoto-u.ac.jp/ja/services/comp/contact.html>





京都大学学術情報メディアセンター全国共同利用版広報 Vol. 22, No. 2

2024年 2月 16日 発行

編集者 京都大学学術情報メディアセンター  
全国共同利用版広報編集部会  
発行者 〒606-8501 京都市左京区吉田本町  
京都大学学術情報メディアセンター  
Academic Center for Computing and Media Studies  
Kyoto University  
<https://www.media.kyoto-u.ac.jp/>  
印刷所 〒615-0823 京都府京都市右京区西京極前田町 23 番地  
株式会社エヌジーピー

広報編集部会

深沢 圭一郎 (部会長)  
廣中 詩織 (副部会長)  
當山 達也  
熊谷 真由美

表紙デザイン：中山 豊  
(中山商店)

# 目次

## 【巻頭言】

- ・ Vol.22, No.2 号の発刊に当たって ..... 牛島 省 ..... 1

## 【会議参加報告】

- ・ SC23 参加報告 ..... 深沢 圭一郎 ..... 2

## 【スーパーコンピュータ共同研究制度(若手・女性研究者奨励枠)研究報告】

- ・ 高効率有機系太陽電池の実現に向けた光機能性分子の構造と電子物性の相関解明 ..... 東野 智洋 ..... 4
- ・ 計算化学的手法による飛石型共役系高分子の電子輸送能力の解明 ..... 北山 大介 ..... 6
- ・ 津波シミュレーションと教師なし学習の融合によるリアルタイム最尤津波リスク評価手法の開発 ..... 野村 怜佳 ..... 8
- ・ 大規模数値計算による惑星間空間磁場の南北不連続面に伴う磁気圏構造変化の解明 ..... 橋本 翼 ..... 10
- ・ Coupled logistic map の機械学習と解析 ..... 中井 拳吾 ..... 12
- ・ 計算化学的手法による含白金ポリウレタンのメカノクロミズム挙動の解明 ..... 曾川 洋光 ..... 14

## 【スーパーコンピュータ共同研究制度(大規模計算支援枠)研究報告】

- ・ 地震前兆時における地表面プラズマ波による山岳異常回折の観測結果の検証 ..... 藤井 雅文 ..... 16

## 【サービスの記録・報告】

- ・ スーパーコンピュータシステムの稼働状況 ..... 21
- ・ センター利用による研究成果(2022年度) ..... 24

## 【資料】

- ・ 大型計算機システム利用負担金 別表 ..... 27
- ・ サービス利用のための資料一覧 ..... 30