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



丘太 年日の日本

 上の日本

 し、23, No.1 2024

 LISSN 1347-3581



【巻頭言】「Vol.23, No.1号の発刊に当たって」森 信介【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◎田崎 拓海◎北村 勇吉◎廣中 詩織◎曽川 洋光◎中井 拳吾◎郭 玉婷,谷内太陽,岸本将史,岩井裕◎丹治 星河◎川上 航典 **Vol. 23, No.1**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 森信介

四半世紀前の学生プログラム相談員が4月からセ ンター長となっている。当時の組織名は大型計算 機センターであった。プログラム歴は10年少々 あったが、FORTRANは電気系学科の演習程度の 知識であった。大した相談はこなかったこともあ って、その程度で務まったようだ。何冊かの書籍 とスパコンの利用枠を頂いた。図はそのアカウン トでのプリンター出力の表紙である。当時の「上

y57839
File: 0001 0003 0005 0007 0009 0011 0013 0015 0017 0019 0021 0023 0025 Date: Mon Aug 23 11:11:12 JST 1993
Shinsuke MORI
Data Processing Center, Ryoto University

司」のデザインらしい。現在は情報環境機構の職員である。

当時のスパコンの用途は数値シミュレーションがほとんどであった。四半世紀を経て計算 機の用途は飛躍的に広がっている。あらゆる学術領域において無縁ではなくなっている。 当時言語処理の研究室の学生であったので、計算を言語などに適用するということは日常 的に行っていたが、データ量が少なくスパコンの出番はなかった。私のスパコンの利用枠 は、ほとんどプリンターの利用に使った。当時から現在までの間に World Wide Web やセ ンサーなどの普及により言語処理を含む様々な課題にスパコンやアクセラレーター付きの 計算機クラスタが使われるようになった。特に画像や音声などの生成課題においては大量 の実例があるのでなおさらである。学生プログラム相談員がセンター長になるなど大した 変化ではない。

最近は、自身の研究として人文情報学にも取り組んでいる。いわゆる汎用コンピューター は大活躍である。この分野はスパコンにはまだまだデータ不足という感もあるが、作家の 手稿はいうまでもなく、古地震に関する庶民の手記の画像などがどんどんデジタルアーカ イブに含まれていくのを目の当たりにしている。他には、いわゆるウェットラボの実験記 録もあろう。そのような in vitro あるいは in vivo のデータと、旧来のスパコン用途による in silico の結果とを統合して大規模に推論するところまで来ている。ハイパフォーマンスコ ンピューティングは遍在しつつある。

学術情報メディアセンターは、旧来の計算科学のみならず、各メディアの知的処理、ネットワークやデータベースを対象に研究・開発を進めている。部門・分野の数は限られており Omnipresent とはならず、また Omnipotent からも程遠いが、昨今の急速な需要の高まりに応えるべく教職員一同日々活動している。今後も皆様の研究教育活動に資するように尽力していく次第である。

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

京都大学大学院工学研究科 分子工学専攻

1 緒言

色素増感太陽電池は、多孔性酸化チタン電極と ルテニウム色素を用いた系で変換効率 PCE = 10~12%という高い値が Grätzel らによって報告さ れており、次世代のエネルギー源として期待され ている。しかし、ルテニウムには資源制約があり 高価でもあるため、より安価で高い変換効率を示 す有機色素の開発が求められている。

有機色素の中でも、ポルフィリンは400~450 nm に Soret 帯と呼ばれる強い吸収と 550~600 nm に Q 帯と呼ばれる中程度の吸収をもち、増感色素とし て有望である。特に、ポルフィリンにドナー・ア クセプターを導入したプッシュープル型色素は長 波長領域での光捕集能の改善に伴って光電変換効 率が向上し、10%を超える変換効率が達成されて いる印。一方で我々は最近、ポルフィリン類縁体 (ポルフィリノイド)の一種である金コロール錯 体 AuCor (Figure 1) を 増感 色素 として 用いたとこ ろ、4.2%の PCE を示すことを見出した^[2]。しかし ながら、AuCor は酸化チタン表面に対して平行と なる配向をとり、色素と酸化チタンが近接するた め、酸化チタンから色素ラジカルカチオンへの逆 電子移動が促進されてしまい、PCE が中程度に留 まった可能性がある。したがって、コロール色素 に電子ドナー骨格を導入し、ドナー骨格から色素 ラジカルカチオンへの分子内電子移動を起こすこ とにより、逆電子移動過程の抑制と PCE 向上が達 成できると考えられる。

そこで本研究では、ドナー骨格としてトリアリ ールアミン部位を導入した金コロール色素 TAA-AuCorを設計・合成した(Figure 1)^[3]。



Figure 1. Molecular structures of corrole dyes.

2 結果と考察

2.1 コロール色素の物性と太陽電池性能評価

ドナー骨格を持たないコロール色素 AuCor を 参照分子として用い、色素増感太陽電池セル作製 条件の最適化を行った結果、TAA-AuCor を用い たセルでの PCE は 4.6%となった。一方、ドナー 骨格をもたない AuCor を用いたセルでの PCE は 3.8%であり、ドナー骨格の導入により PCE が向上 することがわかった。これにより、酸化チタン表 面に対して平行な向きで吸着した平面状色素にお ける光電変換効率の最高値を更新することができ た^[2]。また、外部量子効率(IPCE)の値も TAA-AuCor を用いたセルのほうが大きくなるこ とがわかった。

さらに、コロール色素を吸着させた酸化チタン 膜を用い、過渡吸収分光測定を行うことにより、 酸化チタンに注入された電子の減衰を評価した。 その結果、ドナー骨格を持たないコロール色素 AuCor では19 ns の時定数での減衰が見られたの に対し、ドナー骨格を導入した TAA-AuCor では 減衰が見られなかった(Figure 2)。さらに、 TAA-AuCor では、電子注入によってコロール色 素ラジカルカチオンが生成した後、ドナー骨格で あるトリアリールアミンのラジカルカチオンが生 成していることも見出した。したがって、コロー ル色素のラジカルカチオンが、ドナー骨格からの 分子内電子移動によって還元され、トリアリール アミン骨格のラジカルカチオンが生じることによ り、酸化チタンに注入された電子とラジカルカチ オンの間での逆電子移動過程が抑制され、PCEの 向上につながったと考えられる。



Figure 2. Transient absorption profiles of **TAA-AuCor**/ TiO₂ (red) and AuCor/TiO₂ (blue) at 5000 nm.

2.2 理論計算

コロール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)(C,H,N,O)/LANL2DZ(Au)) 。 TAA-AuCor では、トリアリールアミン骨格がコロール色素の 上部に位置し、また HOMO がトリアリールアミ ン骨格上に局在化していることがわかった。一方、 LUMO と HOMO-1 はコロール色素上に局在して おり、それぞれ AuCor の LUMO と HOMO に対 応することも見出した。したがって、コロール色 素から酸化チタンへの電子注入によって生じた色 素のラジカルカチオンが、ドナー骨格からの分子 内電子移動によって還元され、トリアリールアミ ン骨格のラジカルカチオンが生じることを理論計 算により支持できた。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 AuCor and TAA-AuCor obtained by DFT calculations with the B3LYP/6-31G(d)(C,H,N,O)/LANL2DZ(Au) level.

3 謝辞

過渡吸収分光測定については、岡山大学の山方 啓教授との共同研究により行いました。この場を 借りて御礼申し上げます。

4 参考文献

 A. Yella, C.-L. Mai, S. M. Zakeeruddin, S.-N.
 Chang, C.-H. Hsieh, C.-Y. Yeh, M. Grätzel, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2014**, *53*, 2973–2977; Y. Kurumisawa, T.
 Higashino, S. Nimura, Y. Tsuji, H. Iiyama, H. Imahori, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 9910–9919.

[2] T. Higashino, Y. Kurumisawa, A. B. Alemayehu, R.
F. Einrem, D. Sahu, D. Packwood, K. Kato, A.
Yamakata, A. Ghosh, H. Imahori, *ACS Appl. Energy Mater*. 2020, *3*, 12460–12467.

Q. Guo, T. Higashino, R. Adachi, C.
 Wechwithayakhlung, D. Packwood, A. Yamakata, H.
 Imahori, *ChemSusChem* 2024, *17*, e202301661.

粒子法型固液混相流モデルを用いた大規模三次元解析による 波打ち帯砂漣形成機構の解明

田崎 拓海*

*京都大学工学研究科社会基盤工学専攻

1 はじめに

海岸構造物の設置や海浜侵食の対策による将来の 海浜変形を予測するために海浜変形解析が行われる. 海底の形状は境界条件として,波浪場・海浜流・漂 砂量・海浜地形に時間発展的に影響するため,水理 条件と海浜形状の関係を理解し,海浜形状を適切に 予測する必要がある.

沖波帯や波打ち帯などの比較的底面せん断力の小 さい領域で形成される微小な海底の凹凸は砂漣と呼 ばれる.これまで,沖波帯の砂漣形状の定式化や発 達過程の検討が行われてきたが,計測が困難な波打 ち帯の砂漣に関する知識の蓄積は浅い.砂粒の転動 を契機に生じる砂漣の初期発達機構の理解には,波 浪下の個々の底質粒子(砂粒)を追跡する固液混相流 モデルが有効であるが,VOF法などの水面捕捉法で は砕波後の遡上波の再現が容易ではなく,粒子法解 析は計算負荷に問題を抱えていた.

本研究では,水面の追跡に長けた粒子法を用いて 遡上波の三次元並列計算を行い,波打ち帯における 砂漣の形成過程を検討した.

2 解析手法

2.1 波浪場解析

砕波による水面の大変形を伴う波浪場の解析には, 空間に固定されない計算点で液相を離散化する粒子 法が有効である.本研究では,高精度 MPS 法 [1] を 用いて,局所平均化された Navier-Stokes 式 [2]

$$\frac{\mathrm{D}}{\mathrm{D}t}(\varepsilon\rho) + \rho\varepsilon\nabla\cdot\boldsymbol{u}_l = 0 \tag{1}$$

$$\varepsilon \rho \frac{\mathrm{D} \boldsymbol{u}_l}{\mathrm{D} t} = -\varepsilon \nabla p + \varepsilon \mu \nabla^2 \boldsymbol{u}_l + \varepsilon \rho \boldsymbol{g} - \varepsilon \boldsymbol{f}_{\mathrm{drag}}$$
 (2)

を解いた.ここで、 ε :間隙率、 ρ :液相密度、 u_l :流速、p: 圧力、 μ :粘性係数、g:重力加速度ベクトル、 f_{drag} : 固相液相間作用力である.また、汀線付近における液相の体積保存性を向上させるため、間隙率に応じて計算点体積を変化させた.

2.2 移動床解析

海岸過程を素過程から理解するため,移動床を構 成する個々の底質要素 (密度 σ,体積 v_p)を球形の計 算要素で模擬し,並進と回転の運動方程式を解いた.

$$\sigma v_p \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_p}{\mathrm{d}t} = \delta_{ls} \left(\boldsymbol{F}_{\mathrm{drag}} - v_p \nabla p \right) + \sigma v_p \boldsymbol{g} + \boldsymbol{F}_p \quad (3)$$
$$I_p \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\omega}_p}{\mathrm{d}t} = \boldsymbol{T}_p \quad (4)$$

 u_p :移動速度, I_p :慣性モーメント, ω_p :角速度である. 底質要素間の接触力 F_p とトルク T_p は個別要素法 [3] により計算し,高精度 MPS 法との連成により水中の底質に作用する流体抗力 F_{drag} を計算した.

2.3 並列計算

本研究では、京都大学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 B (Laurel3) を 2 ノード (224 コア)使用し、並列計算を行った. これ まで実施されてきた粒子法型固液混相流モデルによ る漂砂解析は、100 万オーダーまでの計算点に限定 されたきたが、並列計算により計算点数 1000 万オー ダーの大規模計算が可能となった.



3 遡上波下漂砂過程の三次元解析

本研究では、O'Donoghue et al. [4] が行った水理 実験の再現解析を行い、波打ち帯における砂漣の形 成を確認した.計算領域は奥行き 0.394 m の水路で あり、長さ 1.0 m、高さ 0.6 m の水柱がゲートの開放 とともに一定水深 0.062 m の水平部に放出され、遡 上波が 1/10 勾配の礫浜に入射する (図 1(a)). 礫浜 は比重 $\sigma/\rho = 2.65$ 、粒径 $d_p = 8.4$ mm の球により模 擬し、液相の基準解像度は 5 mm とした.

図 1(b) に代表時刻 (ゲート開放から 6.5 s 後 (t = 6.5 s)) における移動床高さ z_s/d_p の空間分布を同時 刻の水面 (青色) と併せて示す.表示時刻は入射した 波が遡上端 ($x \approx 2.6$ m) に到達した後の引き波時で ある.遡上端付近の x = 2.4, 2.6 m に沿岸方向に連 なって堆積した礫が示され,礫径程度の微小な凹凸 (砂漣) が形成されていることが確認できる.

4 波打ち帯における砂漣形成機構

図 2 に代表 4 時刻の移動床高さの岸沖分布を示す. t = 3.1s では平坦な移動床に, 3.6 < t < 4.0s に波 長 0.2 m 程度の砂漣が形成されることが示される.

移動床表面の砂漣の形成に伴い水面にも凹凸が生 じ, 砂漣や水面形状により礫の輸送量 q_s にも岸沖方向 の変化が生じると予想される.本研究では, 砂漣形状 z_s , 水位 h, 礫輸送量 q_s の間の岸沖方向の空間位相差 に注目した.表1に代表3時刻における砂漣形状と 土砂輸送, 水位それぞれの位相差 $\varphi_{z_sq_s}$, φ_{z_sh} を示す. 例えば, $\varphi_{z_sq_s} > 0$ は礫輸送量 q_s に対して砂漣形状 z_s の位相が進んでいることを示す.t = 3.6, 3.8 sでは,

表 1: 岸沖方向の位相差 $\varphi_{z_sq_s}, \varphi_{z_sh}$

t	$3.6 \mathrm{~s}$	$3.8 \mathrm{~s}$	$4.0 \mathrm{~s}$
$\varphi_{z_sq_s}$ (rad)	1.66	-0.01	-2.07
φ_{z_sh} (rad)	1.75	-0.86	-0.50

それぞれ砂漣の谷と峰で活発な礫輸送が生じ, 砂漣が 発達することがわかる. $|\varphi_{z_sh}|$ は時間の経過とともに ゼロに近づいており, 砂漣が発達する 3.6 < t < 4.0s の間に水面と砂漣形状の空間位相差が解消されてい ることがわかる.

5 おわりに

本研究では、スーパーコンピュータ システム B (Laurel3)を使用し、dam break による遡上波下の砂 漣形成機構の三次元並列計算を実施した.波浪場解 析への高精度 MPS 法の採用と個々の礫の追跡によ り、海岸過程を礫径スケールから解析し、並列計算 により従来よりも大規模な解析を可能にした.遡上 端付近に礫径程度の微小凹凸(砂漣)が形成されるこ とを確認し、水面と砂漣形状の空間位相差が解消さ れる過程で砂漣が発達することを示した.

今後は,海岸素過程の解明だけではなく,本モデ ルの他分野への適用にも取り組みたい.

謝辞

研究の遂行にあたり,京都大学大学院工学研究科 社会基盤工学専攻後藤仁志教授および同専攻原田 英治教授にご助言を賜った.ここに記して謝意を表 したい.

参考文献

- 後藤仁志: 粒子法 連続体・混相流・粒状体のための 計算力学,森北出版, 289p., 2018.
- [2] Anderson, T. B. and Jackson, R. A: Fluid mechanical description of fluidized beds, *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, 6(4), 527-539, 1967.
- [3] Cundall, P. A., Strack, O. D. L.: A distinct element model for granular assemblies. *Geotechnique*, 29(1), 47-65, 1979.
- [4] O'Donoghue, T., Kikkert, G. A., Pokrajac, D., Dodd, N. and Briganti, R.: Intra-swash hydrodynamics and sediment flux for dambreak swash on coarse grained beaches, *Coast. Eng.*, 112, 113-130, 2016.

分子シミュレーションおよび時系列クラスタリング法によるヘモグロビンの

酸素運搬機能メカニズムの解明

北村 勇吉

静岡大学工学部化学バイオ工学科

ヘモグロビンタンパク質の酸素運搬機能を制御するエフェクターの中で、血中の CO_2 分圧や溶存リン酸などに よって変化する溶液 pH が体内での酸素運搬サイクルを制御するうえで重要となる。これまでは実験的にタン パク質表面に存在する 26 つのヒスチジン残基の寄与について議論されてきたが、微視的寄与の詳細なメカニ ズムについては不明な点があった。我々は、T 状態および R 状態ヘモグロビンの pH 依存性に寄与する 26 表 面ヒスチジン残基のプロトン化状態を pH に応じて変化させた分子シミュレーションを実行することで、R 状 態 Hb はその周辺で R2 や RR2 などの構造間の遷移挙動を調査し、局所構造およびエネルギー変化を詳細に解 析した。その結果、R 状態を起点として TR 状態や R2 状態への pH に依存した遷移率が、実験での結晶条件 の設定 pH の対応するシミュレーション結果が得られた。局所構造変化を比較することで、立体構造変化過程 に対する表面ヒスチジン残基の微視的寄与を明らかにできた。

1 序論

ヒト成人へモグロビン(HbA) (α262 グロビン鎖四 量体)は赤血球のなかに存在し、肺から全身へと酸素 を運搬する役割を担っており、その酸素運搬機能は、 酸素(O₂)分圧やエフェクター(H+, Cl-など)の濃度に 依存して調節されている。従来のX線構造解析から、 酸素親和性の異なる2状態(T状態とR状態)の詳 細な3次元立体構造が特定されていた。また、T、R 状態とは異なる複数の安定構造(R, R2, RR2, R3, RR3 状態)(図1)をとることも報告されており、これ らの状態間を動的に遷移することで O2 親和性の変 化を実現していると考えられている[1,2]。O2親和性 を調整するエフェクターのうち、水素イオン濃度依 存性はボーア効果と呼ばれ[3]、ヒスチジン(His)残基 の寄与が大きく、特に β His143 と β His146 の寄与 が大きいことが指摘されている[4]。しかし、これら の His 残基のプロトン化状態変化が、状態間遷移に どのように影響を及ぼし、O2親和性を調整するのか という詳細なメカニズムは未解明である。そこで本 研究では、ボーア効果の分子論的な発現機構の解明 を目指し、水素イオン指数(pH)に対応させて 26 表

面 His 残基のプロトン化状態を指定した条件下で分 子動力学(MD)シミュレーションを行うことで、これ らの残基側鎖のプロトン化状態変化が HbA の構造 的安定性に及ぼす影響について調査した。



図 1. HbA 遷移経路の模式図[1,2]

2 計算の詳細

ヘモグロビンは酸素運搬過程において、T 状態と R 状態のみならず、それらの中間的な立体構造(R2 や RR2)などを相互に遷移していると考えられてい る。そのために、多様な構造変化パターンを示すこ とが想定され、多数の異なる初期構造でからなる大 規模なトラジェクトリのサンプリングを得ること が必要となり、スーパーコンピュータの計算資源を 活用し実施した(Project ID: EX23603)。 ヒト成人ヘモグロビン(HbA)の R 状態, R2 状態, T 状態の X 線結晶構造(PDB ID:2DN3, 1BBB, 2DN2)を初期構造とし、NMR 測定から決定された 26 個の表面 His 残基の pKaに基づいて、異なる pH 条件下(pH 4.5~8.0)でのプロトン化状態を指定した モデル系を作成した。各モデル系に対し、Amber16 を用いた 100 ns MD シミュレーションを 30~50 本 実行した。平均二乗偏差(RMSD)と主成分分析 (PCA)を用いて、安定構造間の遷移を分析し、プロ トン化状態変化に伴う立体構造への影響を調査し た。

3 結果と考察

R 状態を初期構造としたトラジェクトリにおける R 状態からの遷移率(表 1)を比較すると、系 R^{5.5}, R^{6.0} (pH 5.5, 6.0)で R 状態を保持した割合が 74.0%, 80.2%へと低下しており、pH 低下(His 残基のプロ トン化)による R→TR 遷移(15.5, 6.4%)と R→RR2 →R2 遷移(5.8, 9.7%)の促進が観察された。R→RR2 →R2 遷移の促進は、β His143 とβ His146 のみを 変更したモデル系でも観察された[5]。一方で、R2 状 態を初期構造とした系においては、pH 変化による 影響は小さかった。系 R^{5.5}, R^{6.0}では、R 状態からの 遷移の増加とともに、βサブユニット重心間距離の 伸長が観察された。また、残基間接触の統計的解析 により、βサブユニット界面残基の接触の切断を示 す構造変化パターンが検出された。

これらの結果は、R 状態とT 状態からの遷移率に 対する pH 依存性は、ボーア効果における O₂ 親和 性の傾向と一致した。低 pH 環境においては R-R2 状態間の活性化エネルギーが低下することを示唆 し、プロトン化した β サブユニット界面 His 残基(β His143 と β His146 を含む)の静電反発が β サブユ ニット間距離を伸長させ、R 状態からの遷移を促進 することを示唆した(図2)。



図 2. pH 依存した四次構造変化の模式図[5]

4 結論

ヒト成人ヘモグロビン(HbA)におけるボーア効果 の微視的メカニズムについて分子シミュレーショ ン手法を用いて解析した。その結果、His 残基のプ ロトン化状態がコンフォメーション間の相対的な 安定性に影響を及ぼすことによってボーア効果を 引き起こすことを示唆した。

5 引用文献

[1] Safo, M. K., et al., Biochem., 2005, 44, 8347.

[2] Shibayama, N., et al. Chem. Soc., 2014, 136, 5097.

[3] Bohr, C., *et al.*, *Skandinavisches Archiv Fur Physiologie*, 1904, **16**.

[4] Ho, C., *et al.* In *Encyclopedia of Life Sciences*(Wiley), 2010.

[5] Yotsuya, H.; Tanaka, M.; Kitamura, Y.; Nagaoka, M. *J. Phys. Chem. B*, 2024, **128**, 2853.

表1.5 つの pH 条件における R 状態から他の状態(TR, RR2, R2, RR3 状態)への遷移率

系	nН	R	š [%]	R 保持率		
	P	TR	RR2, R2	RR2	RR3	
$\mathbb{R}^{5.5}$	5.5	15.5	5.8	1.3	2.9	74.0
${ m R}^{6.0}$	6.0	6.4	9.7	1.9	1.7	80.2
${ m R}^{6.5}$	6.5	1.3	0.2	0.4	0.7	97.3
$\mathbf{R}^{7.0}$	7.0	3.5	1.3	0.8	1.4	93.0
$\mathbf{R}^{7.5}$	7.5	2.2	1.7	1.2	0.9	93.8

ネットワーク特徴を用いたソーシャルメディアユーザの 利用目的についての国際比較

廣中 詩織*

*京都大学 学術情報メディアセンター

未許諾のため本文は非公開

未許諾のため本文は非公開

自己集合性キラル多置換ベンズイミダゾール誘導体の構造解析

曽川 洋光

関西大学化学生命工学部

1 緒言

超分子は水素結合や π-π 相互作用等の非共有結合 性の分子間相互作用を駆動力として集合構造を形 成する。当研究室では,アミノ酸由来の光学活性点 を導入した 1,3,5-Tri(benzoimidazolyl)benzene (TBIB) 誘導体が,分子間水素結合を駆動力とした自己組織 化した超分子構造を形成することを,実験科学的・ 計算科学的アプローチの双方向から明らかにして いる¹⁾。また,この置換基数を一つ減らした dibenzoimidazolylbenzene (DBIB)誘導体が,その置換 基の配向位置によって,超分子構造形成能が異なる ことを実験的に見出している (図 1)。そこで本研究 では,DBIB 誘導体の集合体形成能を,計算科学的 アプローチにより明らかとすることを目的とした。



Figure 1. Chemical structures and experimental results of *o*-DBIB, *m*-DBIB and *p*-DBIB.

2 実験

 1,2-位、1,3-位、1,4-位に置換基を有する二置換キラ ルベンズイミダゾール誘導体 (o-DBIB, m-DBIB, p-DBIB)の自己集合挙動を実験で得られた結果と比較 しながら解析した。まず各構造の単一分子に対し, DFT 計算を行なった。汎関数には長距離補正に優れ たのB97XD を使用し,基底関数は 6-31G*とした。 尚,計算コストを抑えるため,アルキル鎖は実分子 のドデシル基からメチル基に変更して計算を実施 した。次に,得られた各分子の最適化構造を,適切 な位置に複数分子 (n=2-4)配置した後,再度構造 最適化を行うことで,その会合体形成能を評価した。 また,TD-DFT 計算により理論 CD および UV-vis ス ペクトルをシミュレーションし,これを実際の測定 結果と比較した。

3 結果・考察

各化合物を一分子 (monomer), または二分子集積 化 (dimer)して構造最適化を行った。得られたエネル ギー値を表1に示す。いずれの化合物も二分子集積 化した際, 一分子あたりのエネルギーは安定化され る傾向にあり,その*ΔG*°のエネルギー差は*o*-DBIB,

 Table 1. Thermodynamic data of DBIB monomers and dimers^a

aammaaand	relative energy ^b (kJ/mol)					
compound —	total	∆H°	$\Delta G^{\circ c}$			
o-DBIB monomer	0.0	0.0	0.0			
o-DBIB dimer	-119.5	-114.7	-58.9			
<i>m</i> - DBIB monomer	0.0	0.0	0.0			
<i>m</i> -DBIB dimer	-122.8	-115.5	-61.4			
<i>p</i> -DBIB monomer	0.0	0.0	0.0			
p-DBIB dimer	-139.8	-133.9	-79.8			

^{*a*} Calculated by the DFT method (ωB97X-D/6-31G*). ^{*b*} Normalized based on the number of monomer unit(s). The values of simplified; *o*-**DBIB**, *m*-**DBIB** and *p*-**DBIB** monomers were used as standards, respectively. ^{*c*} At 298 K.



Figure 2. Solid black curves: CD and UV–vis absorption spectra of (a) *o*-**DBIB**, (b) *m*-**DBIB** and (c) *p*-**DBIB** simulated by the TD-DFT method (ω B97X-D/6-31G*), *n*-states = 20, plotted with peak half-width at half height = 0.2 eV. Vertical blue lines represent *R*_{vel} (CD) and oscillator strength (UV–vis).

m-DBIB,*p*-DBIB でそれぞれ 58.9,61.4,79.8 kJ/mol で あった。*p*-DBIB で集積化に伴い最も構造が安定化 されることが示唆され,これは実験結果と一致した 傾向であった。*o*-DBIB は,実験結果から部分的な会 合構造の形成が示唆されたが,DFT 計算より算出さ れた安定化の度合いは,会合構造の形成が確認され なかった *m*-DBIB を下回った。しかし,*o*-DBIB と *m*-DBIB の安定化エネルギーの計算値は,*AG*°で 2.5 kJ/mol の差しかなく,*o*-DBIB の会合体形成能が元 来それほど高くないことを考慮すると,概ね良好な 結果が得られたと考えられる。

図2には、各一分子の最適化構造を基に、TD-DFT 計算より求めた理論 CD および UV-vis 吸収スペク トルを示す。UV-vis 吸収スペクトルより、o-DBIB, *m*-DBIB, *p*-DBIB の吸収極大波長は、238,250,270 nm と予測され、いずれも 45 nm 程度短波長領域に 観測されたものの、長波長側にシフトする様子は実 測値と一致した傾向であった(実測値:o-DBIB = 283 nm, *m*-DBIB=299 nm, *p*-DBIB=314 nm)。また CD スペクトルにおいて、*p*-DBIB では正の方向に単 峰性のピークが観測され、これは実測値と一致した ものであった。実際のスペクトルでは、*p*-DBIB が複 数分子会合することで、その強度が増幅されたもの が観測されたと予想される。

最後に *p*-DBIB をより複数分子(三分子もしくは 四分子)集積化させ,その分子数の増加に伴う安定 化度の変化を予測しようと試みた。初期構造として, *p*-DBIB 各分子の中心ベンゼン環の分子間距離を 4-6 nm の範囲で変えて配置しながら検討を進めたが, 三分子以上積層させた系では、計算が正常に収束し なかった。TBIB 誘導体を三分子積層させた系では 同様の計算が完了し、実測値と一致した傾向を示し たことから¹⁾, *p*-DBIB の会合体形成能は、三置換型 の TBIB 誘導体のものより高くないと推測される。 これは置換基数の減少に伴い、分子間相互作用が起 こる箇所が少なくなることに起因していると考え られ、実際の実験結果を反映したものであった。

4 まとめと今後の展望

本研究では、DBIB 誘導体の会合構造形成能や各 種スペクトルを計算科学的アプローチにて検討し た。*p*-DBIB を集積化させた際、その安定化エネルギ ーの値が最も大きくなることが分かり、これは実際 の実験結果を反映したものであった。また、最適化 構造から理論 CD および UV-vis 吸収スペクトルを シミュレーションしたところ、実測と一致したもの が確認され、DBIB 誘導体の会合構造形成能やその 構造について、有益な情報が得られた。

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

 T. Mizukoshi, H. Sogawa, F. Sanda, *Chem. Eur. J.* 2023, 29, e202203703, doi: 10.1038/s41428-023-00822-4.

高次元ローレンツ系の機械学習モデルの力学系解析

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) 、斉木 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

時系列データに対する機械学習手法の一つである リザーバーコンピューティング [1, 2] が時系列予測 に有効であることがわかってきた。我々はこの機械 学習手法を用いることで流体変数 [3, 4] や実際の気 象データ [5] の時間発展の予想等を成功させている。 また3次元のローレンツ系の時系列データから構成 した機械学習モデルが各種力学系的性質を再現する ことも明らかにしている [6]。本研究では、実際の現 象でしばしば見られる、微小のパラメータ変化で大 きな構造変化をもたらす構造不安定な力学系構造の 再現性に注目する。このような不安定な構造は一見 すると繊細な扱いを必要とする可能性があり機械学 習によって学習可能か否かは非自明である。典型的 な構造不安定なものとして、異なる不安定次元が共 存するような場合の構造不安定な力学系構造 (ヘテ ロカオス性)の再現性を明らかにする。

2 リザーバーコンピューティング

力学系 $d\phi/dt = \mathbf{f}(\phi)$ の変数 $\mathbf{u} = \mathbf{h}(\phi) \in \mathbb{R}^{M}$ が 観測できるとする。変数 \mathbf{u} の時系列データを用い て、 $\mathbf{u}(t)$ を入力したときに $\mathbf{u}(t + \Delta t)$ が出力となる ように時間発展モデルをリザーバーコンピューティ ングにより構築する。この学習手法の特徴の一つは ニューラルネットワークの各変数を学習しないこと で学習にかかる計算量を減らしている点である。そ の分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。学習し たいダイナミクスが決定論的である場合にはリザー バーコンピューティングは有効な学習手法である。学 習手法の詳細は [1, 2] などを参考にされたい。

3 モデルの設定と結果

3.1 設定

次で記述される高次元ローレンツ系 [7] を考える:

$$\frac{dx_k}{dt} = x_{k-1}(x_{k+1} - x_{k-2}) - x_k + f,$$

for $k = 1, \dots, K,$ (1)

ただし、 $x_{-1} = x_{K-1}$ 、 $x_0 = x_K$ 、 $x_1 = x_{K+1}$ とする。fは外力変数とする。本研究では(K, f) = (8, 6)の場合のローレンツ系を考える。このとき高次元ローレンツ系には1次元不安定の周期軌道と2次元不安定の周期軌道が共存する。

高次元ローレンツ系の時系列データをリザーバーコ ンピューティングによって学習し時間発展モデルを構 成する。入力変数として $\mathbf{u}(t) = (x_1(t), \dots, x_8(t), x_1(t-\Delta\tau), \dots, x_8(t-\Delta\tau), x_1(t-2\Delta\tau), \dots, x_8(t-2\Delta\tau))$ を使用する。ここで $\Delta\tau$ は遅れ時間を意味する。構 成した機械学習モデルによる短時間予測結果につい ては図1に図示した。正解の高次元ローレンツ系の 時系列とよく一致することが確認できる。



図 1: 時系列データ予測. 機械学習モデルにより時刻 0 から予測された変数 x₁ の時系列データを赤色の実 線で書いた。対応する高次元ローレンツ系の時間発 展により得られた変数 x₁ の時系列データを青色の 破線で書き出した。

3.2 結果

構成した機械学習モデルのリアプノフ指数を計算 した。最大と2番目のリアプノフ指数は1.03と0.09 であった。高次元ローレンツ系の最大と2番目のリ アプノフ指数は1.02と0.10であり、およそ再現し ていることがわかった。ただし、機械学習モデルも 高次元ローレンツ系も3番目のリアプノフ指数はゼ ロリアプノフ指数である。

次に不安定な周期軌道の再現性みる。図2に高次 元ローレンツ系の不安定次元が1と2の周期軌道で 周期が一番短いものを描いた。機械学習モデルもこ れを精度良く再現している様子が見て取れる。より 周期の長いものについても再現することも確認して いる。



図 2: 周期軌道の再現性. 高次元ローレンツ系の不安 定次元が1の短い周期の周期軌道 (上図) と不安定次 元が2の短い周期の周期軌道 (下図) を青色の実線で 書いた。これに対応する構成した機械学習モデルの 軌道を赤色の点線で書いた。両者はほとんど重なっ ていることがわかる。

4 まとめ

微小のパラメータ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典型的な構造をもつ高 次元ローレンツ系について、その時系列データのみ を用いて構成した機械学習モデルの力学系解析を行っ た。リアプノフ指数や異なる不安定次元の周期軌道 も再現することがわかった。これらのことから異な る不安定次元が共存するような力学系構造も学習可 能であることがわかる。なお本結果の一部は [8] とし て出版されている。

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, Scince, 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] T. Suematsu, K. Nakai, T. Yoneda, D. Takasuka, T. Jinno, Y. Saiki, and H. Miura, arXiv:2301.01254 (2023).
- [6] M. Kobayashi, K. Nakai, Y. Saiki, and N. Tsutsumi, Physical Review E 104, (2021), 044215:1-7.
- [7] E. Lorenz, and K. Emanuel. Journal of the Atmospheric Sciences 45, (1998), 399414.
- [8] M. Kobayashi, K. Nakai, and Y. Saiki, Journal of Physics: Complexity 5, (2024), 025024.

高温電解セルスタック・電解装置の開発

(水素発生極の共電解シミュレーション検討)

郭 玉婷, 谷内 太陽, 岸本 将史, 岩井 裕

京都大学

固体酸化物形電解セル(SOEC)を用いた水蒸気・二酸化炭素(H₂O/CO₂)共電解が注目され ている. H₂O/CO₂共電解の電解効率向上のためには分子レベルでの現象理解が重要であるが,高 温条件下の実験による分析は困難である.そこで本研究では,SOECのカソード材料として広く 用いられる Ni-YSZ 混合多孔質と H₂O/CO₂ ガスの間に生じる相互作用を分子動力学により再現 し、ガス分子の物理吸着・拡散現象について解析した.

1 緒言

近年,固体酸化物形電解セル(Solid Oxide Electrolysis Cell: SOEC)を利用したエネルギーキ ャリア生成手法が注目されている.SOEC は高温 (600~850°C)で作動し,発電効率が高い一方,水 蒸気と二酸化炭素を同時に電解すること(H₂O/CO₂ 共電解)が可能である.H₂O/CO₂共電解では,水素 と一酸化炭素を含む合成ガスが生成し,この合成ガ スを起点としてメタンなどの有用な炭化水素化合 物を合成することができる.

H₂O/CO₂共電解において、水蒸気や二酸化炭素の 電解反応は SOEC の多孔質カソード内部で生じる. 水蒸気や二酸化炭素がカソード表面へ吸着したの ち、表面拡散によって、気相、電子伝導体、イオン 伝導体の界面である三相界面(Triple-Phase Boundary: TPB)に到達する.したがって、TPB近 傍での吸着や表面拡散といった素過程を調べるこ とも重要である.SOEC カソード材料として、ニッ ケル(Ni)とイットリア安定化ジルコニア(YSZ) の混合多孔質(Ni-YSZ)が広く用いられる.本研究 では、H₂O/CO₂ 共電解時の Ni-YSZ 表面における ガス吸着・表面拡散現象を明らかにすることを目的 とした MD シミュレーションを行った.

2 計算手法

H₂O 分子には TIP4P/2005 モデル[1]を, CO₂ 分 子には TraPPE モデル[2]を用いた. また, Ni には Morse ポテンシャル[3]を, YSZ には Coulomb-Buckingham ポテンシャル[4]を用いた.

固体-気体界面系を図1のように構築した.その後, NVT アンサンブル下で1 ns 間の計算を行い,吸着 平衡を達成した.吸着平衡を達成した系について, さらに NVT アンサンブル下で1 ns 間の計算を行 い,この間のデータを用いて解析を行った.すべて の計算条件において,時間ステップは1 fs,温度は 1000 K とした.また Buckingham ポテンシャルの カットオフ距離は10 Å, LJ ポテンシャルおよび短 距離 Coulomb 力のカットオフ距離は15 Å とし, PPPM 法により長距離 Coulomb 力の計算を行った. さらに,計算領域には xyz 方向の周期境界条件を課 している.



Fig. 1. Schematic picture of simulation system.

3 結果

3.1 吸着量解析

H2O/CO₂ガスの Ni または YSZ 表面への吸着を調 べるため、約1 atm の気相圧力、H2O:CO₂=1:1 の組成での、z方向のガス質量密度分布を計算した. 結果を図2に示す.図より、Ni 表面へはH2O/CO₂ ともに吸着がほとんど生じない一方で、YSZ 表面へ H2O の強い吸着が生じ、CO₂の吸着がほとんど生じ ないことがわかる.これは、YSZ と H2O の間に生 じる強いクーロン力によるものと予想される.また、 YSZ 表面について H2O のピークが 2 つ見られた. 左から YSZ 内部へ侵入した H2O 分子、YSZ 最表面

へ吸着した H2O 分子を表している.



Fig. 2. Mass distribution of H₂O/CO₂ in z direction.

さらに、気相圧力約 1~10 atm の範囲で H₂O のみ の組成でシミュレーションを行った(各条件 3 回ず つ). H₂O の質量密度分布における第一ピークに対 応する H₂O 分子の侵入量と、第二ピークに対応す る最表面への吸着量の圧力依存を図 3 に示す. y軸 に関して、左側が単位面積(1 cm²)当たりの H₂O 分子の質量をとっており、右側に単位面積(1 Å²) 当たりの H₂O 分子の個数に換算した値を示してい る.図 3 から 1~10 atm において、YSZ 内部への侵 入量よりも YSZ 最表面への吸着量の方が多く、圧 力増加に伴う侵入量の増加は吸着量の増加よりも 大きいことがわかる.よって、YSZ 最表面への吸着 が先に飽和し、その後 YSZ 内部への侵入が進むこ とが示唆された.



Fig. 3. Pressure dependence on mass/number area density of H₂O on the YSZ surface.

3.2 表面拡散解析

YSZ 内部へ侵入した H₂O 分子と YSZ 最表面へ吸着した H₂O 分子の拡散係数の圧力依存を図 4 に示す. 1~10 atm において,酸化物イオン拡散, YSZ 内部へ侵入した H₂O 拡散, YSZ 表面へ吸着した H₂O 拡散の順に拡散が速いことがわかる.また, YSZ 内部へ侵入した H₂O 分子の拡散係数はほぼ一定である一方, YSZ 最表面へ吸着した H₂O 分子の拡散係数は, 一度極小値をとり再び増加する傾向がある.



Fig. 4. Pressure dependence on diffusion coefficients of H_2O on the YSZ surface.

4 結言

Ni/YSZ 表面への H_2O/CO_2 競争吸着と表面拡散を 分子動力学により解析した.その結果, YSZ 表面へ の H_2O 吸着が主に生じることがわかった.また, 1~10 atmにおいて,酸化物イオン拡散,YSZ 内部 へ侵入した H_2O 拡散,YSZ 表面へ吸着した H_2O 拡 散の順に拡散が速いことがわかった.

5 参考文献

Abascal, J. L., et al., J. Chem. Phys., 123(23).
 2005.

[2] Potoff, J. J., et al., AIChE J., 47(7). 2001.

[3] Xu, J., et al., J. Mater. Chem. A., 3(43). 2015.

[4] Brinkman, H. W., et al., *Chem. Phys. Lett.*, 247(4-6). 1995.

[5] Kilo, M., et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 5(11).2003.

建物配置が熱輸送に与える影響の推定

丹治 星河

京都大学防災研究所気候変動適応研究センター

1 はじめに

都市区域に配置されている建物は、人工排熱の熱 源であることに加え、風の流れに対する障害物でも ある。そのため、建物配置は、接地境界層内におけ る乱流の発達とそれに伴う熱輸送に影響を与える と考えられる。建物解像 Large-eddy simulation (LES)モデルは、建物まわりにおける風や物質輸送 を陽に解くことが可能である。先行研究では、この モデルを用いて、実都市における中立条件下の気流 の計算[1], [2]や、建物配置を理想化した粗度ブロッ ク群からの排熱による熱輸送の計算[3], [4]が行われ てきた。しかし、実都市における熱輸送の計算に関 する研究は少ない。そこで、本研究では、建物解像 LES モデルを用いて実都市の熱輸送をシミュレー ションし、建物配置の違いが接地境界層内の熱輸送 に与える影響について調べることを目的とする。本 研究では、都市における極端豪雨の原因の一つであ る、建物からの排熱に伴う上向き熱輸送に注目した。

2 手法

本研究では、建物解像 LES モデルとして PALM [5]を使用した。このモデルでは、非静力・非圧縮下 で、ブシネスク近似を施したナビエ・ストークス方 程式を解く。初期場を圧力傾度0.6×10⁻³Pam⁻²と することで西風を与えた。温位は300Kで一様であ る。モデルの水平格子間隔は2m、鉛直方向は最小 間隔2mであり、モデル下層からモデル上端491.7 mの間で変化させた 全82層である。はじめに、流 入出面を周期境界条件とした計算を6時間行い、乱 流生成を行った。その後、事前計算の風分布を初期 値とした本計算を1時間行った。これが解析時間で



図 1 計算対象領域の建物の高さを陰影で表す。(a) 大阪駅周辺 (OS)、(b) 京セラドーム大阪周辺 (KD)、 (c) 仮想領域 1 (V-OS1)、(d) 仮想領域 2 (V-OS2)。



図 2 それぞれの計算領域における建物高さの分布 と、最大建物高さ(H_{max})、平均建物高さ(H_{ave})、建物 高さのばらつき(σ)、建物密度(λ_p)を示す。 (a) 大阪 駅周辺 (OS)、(b) 京セラドーム大阪周辺 (KD)、(c) 仮想領域 1 (V-OS1)、(d) 仮想領域 2 (V-OS2)。

ある。計算対象の都市区域の大きさは500 m×500 mであり、乱流構造を維持するために粗度ブロック を周囲に配置した。計算対象とした実都市は阪急大 阪梅田駅周辺(OS)と京セラドーム大阪周辺(KD)の 2 か所である(図 1)。OS のほうが建物の平均高さが 2 倍以上高く、建物高さのばらつきと地表面に占め る建物密度の割合が大きいという特徴がある(図 2)。 加えて、OS 領域内の建物配置パラメータを変更し、 仮想領域 V-OS1、V-OS2 を作成した。V-OS1 は、建 物高さのばらつきの大きさを KD 等しくするために、 高さ 52 m 以上の建物を高さ 52 m に変更した。V-OS2 は、建物密度の大きさを KD にと等しくするた めに、一部領域の建物高さを 0 とした。以上 4 領域 について、すべての建物の表面から 0.02 K m s^{-1} の 熱が放出される実験を行い、結果を比較した。

3 結果

図3は、それぞれの領域における、時空間平均を 施した主風向の風速、運動量フラックス、上向き熱 フラックス、温位の鉛直プロファイルの結果を示し ている。実都市領域の主風向風速は、OS よりも KD のほうが高さ 50 m~200 m における風速が大きい ことがわかる。仮想領域の結果によると、建物高さ のばらつきが小さい V-OS1 が KD と同様の分布を 持っているため、建物高さのばらつきが大きい場合、 風速を効果的に弱める効果があると考えられる。運 動量フラックスの大きさは、建物高さのばらつきが 小さい KD と V-OS1 で顕著なピークがそれぞれ高 さ 75 m と 50 m 付近に現れている。実都市におけ る上向き熱フラックスを見ると、OS よりも KD の ほうがピークはより下方に存在し、上層においては OS のほうが熱フラックスの値が大きいことがわか る。この点に関して仮想領域では、建物高さのばら つきが小さい V-OS1 で高さ 50 m 付近に顕著なピー クが存在し、それ以上の高さでは急激に減少してい るという分布が、KD における結果と酷似している。 一方、建物密度を小さい V-OS2 にはこのような明確 なピークは見られず、上層まで値が大きい。これら の点はOSと似た分布である。温位については、高 さ50m以下では、OSとV-OS1、KDとV-OS2が それぞれ似た分布となった。しかし、V-OS1 におけ る温位は熱フラックスと同様に高さとともに急激 に減少し、高さ50m以上では、OSはV-OS2の分 布と近くなった。

以上の結果より、上向き熱輸送は、区域内の建物 高さのばらつきと建物密度の影響を強く受けるこ とが分かった。建物高さのばらつきが大きい場合、 風速を弱め、水平方向への熱輸送を抑制し、鉛直方 向への熱輸送を促進する。また、建物密度は建物か らの排熱の熱源の大きさを決める重要なパラメー タとなる。



図 3 時空間平均を施した(a) 主風向風速、(b) 運動 量フラックス、(c) 上向き熱フラックス、(d) 温位の 鉛直分布。オレンジ線が実都市(OS、KD)を表し、ピ ンク線が仮想都市(V-OS1、V-OS2)を表す。

4 まとめ

建物配置の特徴が異なる2つの実都市領域におい て乱流及び熱輸送の数値シミュレーションを行っ た。2 領域の結果を比べると、乱流及び熱輸送の鉛 直分布の特徴が異なることがわかった。加えて、建 物配置を変更した仮想領域においても同様のシミ ュレーションを行った。その結果、建物高さのばら つきや高高度における建物密度が大きいほど、都市 区域における上向き熱輸送量が大きくなることが 示された。

謝辞

本研究は、JST ムーンショット型研究開発事業グ ラント番号 JPMJMS2283、京都大学スーパーコン ピュータ共同研究制度(若手・女性研究者奨励枠)の 支援を受けた。

参考文献

 Yoshida, T., Takemi, T., Horiguchi, M., 2018, Bound-Layer Meteorol 168, 127–153.
 Kanda, M., Inagaki, A., Miyamoto, T., Gryschka, M., Raasch, S., 2013, Bound-Layer Meteorol 148, 357– 377.
 Park, S.B., Baik, J.J., 2013, J Appl Meteorol and Climatol 52(6), 1348–1365.
 Wang, W., Wang, X., Ng, E., 2021, Build and Environ 191, 107586.
 Maronga, B. et al., 2020, Geosci Model Dev 13, 1335–1372.

オーロラ加速領域形成過程解明に向けた

衝突性 Hall MHD シミュレーションを用いた 3 次元電磁場構造解析

川上航典

九州大学大学院理学府地球惑星科学専攻

1 はじめに

オーロラ加速領域は、磁気圏電離圏結合系 (M-I 結合系) に存在する上向き静電場構造である。この 領域はオーロラが発生するために必要な降り込み 粒子を生成する役割を持ち、その形成・発展過程の 解明はオーロラ発展形態の全容解明の面からも重 要である。本研究ではオーロラ加速領域形成・発展 過程の中でも、特に初期形成過程解明を目的とし、 プラズマ流体中において情報を伝える役割を持つ Alfven 波の M-I 結合系における伝搬特性について 調査を行った。

今回は先行研究[1]で報告されている様に、電離圏 が単なる境界領域として波を反射させるだけでな く、プラズマと中性大気が衝突によって運動量交換 を行うことで新たに波を生成し系全体の発展に大 きく寄与することでオーロラの発生にも強い影響 を持つことから、M-I 結合系のなかでも特に電離圏 側の役割について注目するため、衝突性 Hall MHD 方程式系[2]を用いた数値実験を行った。この衝突性 Hall MHD 方程式系では、プラズマ流体と中性大気 間における衝突効果と、その結果生じる電流を考慮 することで、プラズマ流体のダイナミクスと電磁場 の発展を同時に記述することが可能である。また今 回の計算では、この方程式系を3次元 M-I 結合系に おいて計算することで、通常は薄層として近似され る電離圏を高度方向まで情報を持たせた。

この3 次元衝突性 Hall MHD 方程式をもとに数値 シミュレーションの開発、並びに M-I 結合系におけ る電磁場構造解析、すなわち Alfven 波の伝搬特性 解析を行った。

2 研究手法

数値シミュレーションに関しては、計算スキーム として Two Step Lax-Wendroff 法[3]を採用し、地 球 dipole 磁場の磁束管の一部に対応する 3 次元 M-I 結合系空間に対応する 200 × 50 × 50 のグリッ ドを持つ計算空間を用意した。

その上でエネルギー入力として Alfven 波を計算 空間の磁気圏から電離圏に伝播するよう入射した。 この設定のもとプラズマと中性大気との衝突効果 の影響を明らかにするため、衝突効果を考慮して高 度 80km を計算領域の下端とした場合と、衝突を無 視して高度 200km を下端とした場合の2つの場合 について計算を行い、その結果について解析・比較 を行った。

3 結果

現在の手法では Alfven 波が M-I 結合間を往復し 始め合成波を作るところ(実時間 2.8 秒)まで安定し た計算が可能であった。今回は特に Alfven 波に伴 う磁気張力方向電流成分 j_x の構造に注目した(図 1)。

その結果、高度が上昇するにつれ衝突効果を考慮 して計算した場合の方が電流の大きさが小さくな り、その影響が高度 3,000km 付近まで届くことが わかった。これは電離圏における衝突によるプラズ マの運動量損失が Alfven 波を介して磁気圏まで伝 搬したことによるものである。

また両方に共通する性質として wave packet のような構造が発生している。これは先行研究[4]でも報告されている、背景プラズマと地球磁場の空間勾配



(左) 高度 80km から衝突効果を考慮し計算した結果、(右) 高度 200km から衝突効果を無視し計算した結果

によって Alfven 波の位相速度が急激に変動するこ とで、Alfven 波自身が閉じ込められることで生じた 定在波構造である可能性がある。今回は確認できな かったが、この wave packet 構造下では非線形アン ペール力により背景プラズマが動かされ、低プラズ マ密度領域を形成し Alfven 波の伝搬特性をさらに 変化させうることが報告されており、オーロラ加速 領域形成過程において一つの鍵になると考えられ る。

4 おわりに

本研究では3次元衝突性 Hall MHD シミュレー ションを用いることで、磁気圏電離圏結合系(M-I 結 合系)において電離圏での中性大気とプラズマ間の 衝突効果を含んだダイナミクスが Alfven 波を介し て磁気圏側にまで影響を与えることを確認した。今 後はより長時間発展の計算を行うことで[1]で報告 されているM-I 結合系におけるオーロラ加速領形成 過程における電離圏の役割についてより詳細を調 査する。また、そのために Hall MHD 特有の振動を 抑えるための hyper resistivity[4]や、その他の数値 スキームの導入を予定している。

同時に、今回確認された Alfven 波の wave packet 構造についても、その構造内でのダイナミクス、並 びに背景物理量への影響についても調査を行なっ ていく。

5 謝辞

本研究の計算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)を活用させていた だきましたので、御礼申し上げます。

6 参考文献

- A. Yoshikawa, R. Fujii, vol. 235 (Wiley Online Library, New York, 2018), pp. 427– 443
- [2] Otto, A., & Zhu, H. (2003). In J. Büchner, M. Scholer, & C. T. Dum (Eds.), Space plasma simulation. Lecture notes in physics (Vol. 615, pp. 193–211).
- [3] Ogino, T., R. J. Walker, and M. Ashour-Abdalla (1992), IEEE Trans. Plasma Sci., 20, 817–828, doi:10.1109/27.199534.
- [4] Sydorenko, D., R. Rankin, and K. Kabin (2008), J. Geophys. Res., 113, A10206,
- [5] B. Srinivasan and U. Shumlak. PHYSICS OF PLASMAS 18, 092113 (2011)

システム A 運転状況 (2023 年 10 月 ~ 2024 年 3 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

システムダウン障害発生状況	ļ.
---------------	----

保守開始日時		サービス再得	保守時間[h]	
2023/12/04	07:00	2023/12/07	13:00	78:00
2024/03/27	09:00	2024/04/01	0:00	111:00

障害発生日時	サービス再開日時	ダウン時間[h]

	井一ビフ		ジョブ					
	りーレス 時間[h]	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 利用	ド 率
10月	744:00	321,589	265,187	58,679,906	21,692,761	796.1	37.4	%
11月	720:00	256,132	472,415	80,313,143	36,379,760	1058.8	47.2	%
12 月	666:00	194,031	350,618	102,961,684	36,660,059	1056.9	63.2	%
1月	744:00	141,039	334,529	124,893,222	41,351,349	1115.9	66.8	%
2月	696:00	163,300	328,730	82,636,814	31,130,057	1047.4	48.7	%
3月	633:00	98,196	272,212	72,158,641	31,553,568	817.8	40.3	%
計	4,203:00	1,174,287	2,023,691	521,643,410	198,767,554	982.2	50.6	%



- 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 B 運転状況 (2023 年 10 月 ~ 2024 年 3 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		サービス再得	保守時間[h]	
2023/12/04	07:00	2023/12/07	13:00	78:00
2024/03/27	09:00	2024/04/01	0:00	111:00

障害発生日時	サービス再開日時	ダウン時間[h]	
	なし		

	井二ビフ		ジョブ						
	り ー L へ 時間[h]	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 利用	ド 率	
10月	744:00	91,442	543,921	31,346,164	11,563,762	337.6	58.3	%	
11月	720:00	62,066	350,926	35,378,725	13,346,503	311.7	61.1	%	
12月	666:00	72,591	271,345	30,854,446	12,063,092	332.6	54.5	%	
1月	744:00	118,197	388,582	37,441,139	16,006,020	366.9	65.0	%	
2月	696:00	62,717	341,665	35,891,384	14,612,993	369.6	65.2	%	
3月	633:00	38,336	209,888	28,193,566	11,894,593	338.7	48.8	%	
計	4,203:00	445,349	2,106,327	199,105,424	79,486,963	342.9	58.8	%	



- 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 10 月 ~ 2024 年 3 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

システムダウン障害発生状	ジ況
マハノムノ ノマ 厚古 元 工 1	1/4

保守開始日時		サービス再得	保守時間[h]	
2023/12/04	07:00	2023/12/07	13:00	78:00
2024/03/27	09:00	2024/04/01	0:00	111:00

障害発生日時	サービス再開日時	ダウン時間[h]	
	なし		

	井一ビフ			ジョ	ゴ			
	り ーヒス 時間[h]	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 利用	ド 率
10月	744:00	15,697	60,694	608,977	148,464	14.9	36.1	%
11月	720:00	19,031	33,501	571,541	95,049	15.3	30.0	%
12 月	666:00	1,600	21,399	463,079	65,762	14.2	28.9	%
1月	744:00	817	26,867	634,490	51,171	16.0	36.2	%
2月	696:00	1,657	16,296	525,671	65,947	16.0	30.0	%
3月	633:00	713	12,254	341,603	69,335	14.2	22.4	%
計	4,203:00	39,515	171,011	3,145,361	495,728	15.1	30.6	%



- 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10月~2024年3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	保守時間[h]	
202	3/12/04	07:00	2023/12/07	13:00	78:00
202	4/03/27	09:00	2024/04/01	0:00	111:00

障害発生日時	サービス再開日時	ダウン時間[h]
	なし	

	井一ビフ			ブ				
	り ーヒス 時間[h]	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 利用	ド 率
10月	744:00	560	5,876	364,449	23,761	15.5	28.0	%
11月	720:00	1,018	3,392	279,151	6,853	16.0	22.5	%
12 月	666:00	3,073	11,662	482,954	33,810	15.1	40.8	%
1月	744:00	2,629	8,141	548,177	22,986	15.9	42.5	%
2月	696:00	2,215	7,349	733,184	21,846	15.8	60.3	%
3 月	633:00	1,828	9,272	844,587	41,582	13.9	61.0	%
計	4,203:00	11,323	45,692	3,252,502	150,838	15.4	42.5	%



- 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

	区分			提供サービス					
コース	タイプ	セット	利用負担額	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	В	共有	最大0.5ノード相当((112コア、512GBメモリ)×0.5)	1	0.2	-
	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	-
11° 11±11	タイプB	基本	100,000円/年	В	共有	最大2ノード相当((112コア、512GBメモリ)×2)	168	8.0	-
N-9770	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	-
	タイプAO	最小/追加	72,000円/年		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	180,000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	108,000円/年	A	準優先	1ノード((112コア、128GB高速メモリ)×1)	336	9.6	3
	タイプA3	最小/追加	270,000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BO	最小/追加	80,000円/年		準々優先	1ノード((112コア、512GBメモリ)×1)	168	6.4	2
ガループ	タイプB1	最小/追加	200,000円/年	р	優先	1ノード((112コア、512GBメモリ)×1)	336	16.0	4
570-5	タイプB2	最小/追加	120,000円/年	D	準優先	1ノード((112コア、512GBメモリ)×1)	336	9.6	3
	タイプB3	最小/追加	300,000円/年		占有	1ノード((112コア、512GBメモリ)×1)	336	16.0	4
	タイプCO	最小/追加	88,000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	220,000円/年	C	優先	1ノード((112コア、2048GBメモリ)×1)	336	16.0	4
	タイプGO	最小/追加	58,000円/年	C	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	290,000円/年	u	優先	2GPU((16コア、128GBメモリ+1GPU)×2)	336	32.0	8
	タイプ	最小	72,000 円/週(7日)	٨	上右	8ノード((112コア、128GB高速メモリ)×8)	160	-	-
十月描ジョブ	J-1 JA	追加単位	18,000 円/週(7日)	A	D.H	2ノード((112コア、128GB高速メモリ)×2)	100	-	-
八尻候ノヨノ	クィー ^の	最小	80,000 円/週(7日)	D	⊦≠	8ノード((112コア、512GBメモリ)×8)	140	-	-
	91.70	追加単位	20,000 円/週(7日)	D	口伯	2ノード((112コア、512GBメモリ)×2)	100	-	-
東田クラフタ	クィー ^の	最小	600,000円/年	D		2ノード((112コア、512GBメモリ)×2)		32.0	8
専用クラスタ	91.70	追加単位	300,000円/年	□ - 1ノード((112コア、512GBメモリ)×1)		_	16.0	4	
	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					
ストレージ	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	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・	センスサーヒ	<u></u> ごス	20,000円/年						

別表1 スーパーコンピュータシステム

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タ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。

- 2. 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
 - 1)
 - 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 2)
- 3. 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利用には、エントリコース、パーソナルコース、 グループコース又は専用クラスタコースの利用者であることが必要である。
- 4. 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。

5. 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。

- 6. 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。
- 7. グループコース及び専用クラスタ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。

8.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を利用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。

9. 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	15,300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	18,100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、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. 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。
- 1仮想サーバに割当てるシステム資源は、CPU:2コア、メモリ:4GB、ディスク:100GBである。
 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、 ディスクを増量することができる。なお、負担額の算定及び算出方法は、備考1に準ずるものとする。

		·
区分	利用負担額	単位
CPU增量	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)
ディスク増量	7,200円/年	100GBにつき(最大1,000GBまで)

|--|

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
	2ノード((112コア、128GB高速メモリ)×2)	336	19.2	6	864,000 円/年
A	3ノード((112コア、128GB高速メモリ)×3)	336	28.8	9	1,296,000 円/年
	4ノード((112コア、128GB高速メモリ)×4)	336	38.4	12	1,728,000 円/年
	2ノード((112コア、512GBメモリ)×2)	336	19.2	6	960,000 円/年
В	3ノード((112コア、512GBメモリ)×3)	336	28.8	9	1,440,000 円/年
	4ノード((112コア、512GBメモリ)×4)	336	38.4	12	1,920,000 円/年

備考

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。

全国共同利用版広報·Vol.22(2023)総目次

[巻頭言]

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

[新スーパーコンピュータサービス開始]

新スーパーコンピュータシステムの性能	(1)		1-	2
--------------------	-----	--	----	----------

[会議参加報告]

SC23 参加報告

[研究プロジェクト報告]

京都大学研究支援 SPIRITS プログラム 2021-2022 年度「 プラズマ粒子シミュレーション	の
応用による野生ウマの行動数値実験 モデルの確立」研究報告	1-7

[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	2-4
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	2-6
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	2-8
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	2-10
Coupled logistic map の機械学習と解析	2-12
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	2-14

[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]

[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	(2022年4月~2022年9月)	1-11
スーパーコンピュータシステムの稼働状況	(2022年10月~2023年3月)	1-14
スーパーコンピュータシステムの稼働状況		2-21
センター利用による研究成果(2021年度)		1-17
センター利用による研究成果(2022年度)		2-24

[資料]

大型計算機システム利用負担金	別表	1-23,2-27
サービス利用のための資料一覧.		1-26,2-30

― 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
 https://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 https://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: https://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: https://www.iimc.kyoto-u.ac.jp/ja/services/comp/other/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. 23, No. 1

2024年 10月 25 日発行

編集者	京都大学学術情報メディアセンター	深沢 圭一郎 (部会長)
	全国共同利用版広報編集部会	廣中 詩織(副部会長)
発行者	〒606-8501 京都市左京区吉田本町	當山 達也
	京都大学学術情報メディアセンター	熊谷 真由美
	Academic Center for Computing and Media Studies	
	Kyoto University	
	https://www.media.kyoto-u.ac.jp/	表紙デザイン:中山 豊
印刷所	〒615-0823 京都府京都市右京区西京極前田町 23 番地	(中山商店
	株式会社エヌジーピー	

広報編集部会

Vol.23, No.1 2024

目次

【巻頭言】

Vol. 23, No.1号の発刊に当たって	森	信介	1
【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	2
粒子法型固液混相流モデルを用いた大規模三次元解析による波打ち帯砂漣形成機構の解明	田﨑	拓海	4
分子シミュレーションおよび			
時系列クラスタリング法によるヘモグロビンの酸素運搬機能メカニズムの解明	北村	勇吉	6
ネットワーク特徴を用いたソーシャルメディアユーザの利用目的についての国際比較	廣中	詩織	8
自己集合性キラル多置換ベンズイミダゾール誘導体の構造解析	曽川	洋光	10
高次元ローレンツ系の機械学習モデルの力学系解析	中井	拳吾	12
高温電解セルスタック・電解装置の開発(水素発生極の共電解シミュレーション検討)			
郭 玉婷, 谷内 太陽, 岸本 彩	§史,岩	井裕	14
建物配置が熱輸送に与える影響の推定	丹治	星河	17
オーロラ加速領域形成過程解明に向けた			
衝突性 Hall MHD シミュレーションを用いた 3 次元電磁場構造解析	川上	航典	19
【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
【資料】			
大型計算機システム利用負担金 別表			25
全国共同利用版広報・Vol.22 (2023)総目次			28