

Title	北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告2020
Author(s)	本郷, 研太; 宮下, 夏苗; 辻, 誠樹; 井口, 寧
Citation	Technical memorandum (School of Information Science, Graduate School of Advanced Science and Technology, Japan Advanced Institute of Science and Technology), IS-TM-2021-001: 1-59
Issue Date	2021-09-17
Type	Others
Text version	publisher
URL	<a href="http://hdl.handle.net/10119/17496">http://hdl.handle.net/10119/17496</a>
Rights	
Description	テクニカルメモランダム(北陸先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科情報科学系)

北陸先端科学技術大学院大学  
共有計算サーバ使用成果報告 2020

本郷 研太, 宮下 夏苗, 辻 誠樹, 井口 寧 編  
2021年9月17日  
IS-TM-2021-001

北陸先端科学技術大学院大学  
情報社会基盤研究センター  
〒923-1292 石川県能美市旭台 1-1

# 目次

## 1. JAIST における共有計算サーバー環境 1

## 2. 情報科学分野の計算サーバー利用研究 8

物質科学シミュレーションとマテリアルズ・インフォマティクス

本郷研太

Role of substituted elements Co, Mn, and Al in Ni-rich  $\text{LiNi}_{1-x-y-z}\text{Co}_x\text{Mn}_y\text{Al}_z\text{O}_2$

Takahiro Toma

第一原理量子モンテカルロ法によるフォノン分散計算

中野晃佑

Electronic structure investigation of doped  $\text{TiO}_2$  systems using density functional theory

Abhishek Raghav

Diffusion Monte Carlo study of hydrogen adsorption on silicon carbide nanotube

Genki Imam Prayogo

FDTD 法による音響シミュレーションのためのストリーム計算ハードウェアの設計と評価

多田大希

Program verification for cautions of microcontrollers

NGUYEN Thi Thuy

Information-scientific structure search for ternary hydride high-temperature superconductors

SONG PENG

2020 年度共有計算サーバー使用成果報告

霜坂 秀一

Large dependence of DMC bandgap on semicore contribution: GAN study

Nikaido Yutaka

Content generation and serious game implementation for security awareness training

ZENG Youmeizi

相変化材料を用いた光スイッチの相変化状態制御に関する研究

佐野陽之、水谷五郎

へロナミド類の抗真菌作用メカニズムの解明のための計算分子設計技術の開発

齋藤大明

高性能計算とデータ科学を利用した物質探索支援システムに関する研究

林亮子

Structural and electronic properties of Cu doped ZnO nanowire

Mohaddeseh Abbasnejad

Electronic and optical study of thermochromic W-doped VO<sub>2</sub> using ab-Initio method

Mayank Dotiyal

Understanding the phase stability of oxides in the context of fine tuning their functional properties including role of plasmonic properties of nitrides - a combinatorial approach based on computations and experiments.

Niraja Moharana

Surface defects and their impact on the electronic structure of SnS using density functional theory

Rohit Sanjay Dahule

MPI 環境下での動的マルチキャストのための配信アルゴリズム自動チューニングに関する研究

山田竜輝、森眞一郎、井口寧

### 3. マテリアルサイエンス分野の計算サーバー利用研究

42

Single-molecule imaging of a polymer and all-atom MD simulations

篠原健一

自発的な分子集合体の形成とその外場応答

下川直史、樋口祐次、伊藤弘明

Band structure calculation in commensurately encapsulated ABA-stacked trilayer graphene

Kareekunnan Afsal

Diffusion Monte Carlo evaluation of disiloxane Linearization Barrier

Adie Tri Hanindriyo

Ab initio simulations of a new mixed-anion compound

Gewinner Senderanto Sinaga

機械学習による Ziegler-Natta 触媒一次粒子の非経験的構造決定と構造性能相関解明

高棹玄德、谷池俊明

ナノ触媒の非経験的構造決定を目的とした機械学習ポテンシャルの構築

筑間弘樹

Ab initio evaluation of complexation energies for cyclodextrin drug-inclusion complexes

Kenji Oqmhula

Cr/SiO<sub>2</sub> 触媒のマルチサイト性に関する計算科学的検討

八木勇太

#### 4. 知識科学分野の計算サーバー利用研究

56

---

A study on domain adaptation for Named entity Recognition.

Katsuhiko UTSUBO

Research regarding esports topics via LDA model

Huynh Lab, YU Yang

#### 5. 謝辞

59

---

## 1. JAIST における共有計算サーバ環境

### 1.1 概要

北陸先端科学技術大学院大学(JAIST)は、最先端の教育研究活動を支える研究基盤として全学共同利用な計算サーバ群を提供している。各ユーザの研究活動に応じて、その目的達成に資するためには、柔軟な運用形態が求められる。情報社会基盤研究センター(以下情報センター)はソフト・ハード両面の保守業務を担っているが、ユーザー目線での運用を実現するために、情報センターとは独立な組織として「MPC グループ」と「MPC 管理グループ」が存在し、三者の親密な連携の上に運用されている。MPC グループは共有計算サーバのユーザーから構成され、MPC 管理グループはその有志から構成される。MPC グループの登録ユーザーは、mpc メーリングリストを通じて、「計算機リソースやキュークラスに関する要望」や「各種共用ソフトウェアの利用に関する質問」など計算機利用に関する質問・要望を広く発言できる。MPC 管理グループは、ユーザの質問・要請に応え、キュークラス設定やリソース配分の具体案を提案し、ユーザー間の調整を行う。その提案に従い、情報センターが随時、設定を更新していく。情報センターと MPC グループ・MPC 管理グループの詳細は文献[9,10]を参照されたい。

### 1.2 既設・新規導入・更新システム

JAIST 共有計算サーバ環境は、超並列計算機と汎用 PC クラスタ計算機から構成される。前者は主に科学技術計算などの HPC(High Performance Computing)での利用を想定し、後者は計算機を利用した教育研究の多様化に応じて、標準的な CPU 計算機だけではカバーしきれないニーズにも対応できるように、PC クラスタの一部では大規模メモリや GPU を搭載している。これら 2020 年度の計算サーバの概要を表 1 に示す。

2020 年の超並列計算機(Cray XC40)のユニーク利用者数(月別)は図 1 に示す通りである。4 月及び 10-12 月の講習会時の一時的ユーザを除いた定常的な利用者数は昨年度と同程度の 50-70 名程度であるが、2017 年度に大きく増加したユーザ数を維持している。これに汎用 PC クラスタ計算機群の利用者を含めた全体の利用状況としては、研究利用(学内)55 名、教育利用(学内)211 名、学外利用(共同研究等)10 名であった。

今年度のハードウェアに関する変更点として、2021 年 2 月に、超並列計算機システム(Cray XC40)がリースアップとなった。Cray XC40 の更新システムとして、2021 年 3 月、HPC System “KAGAYAKI”(DELL PowerEdge R6525; 1.48PFLOPS; 280node/560cpu/35,840core; 143.3TB; Infiniband HDR Fat-Tree Topology Interconnect)が導入された(図 2)。当該システムは、旧システムと比較して、理論演算性能は約 2.24 倍、CPU コア数は約 1.8 倍、総メモリ容量は約 2 倍となり、本学における計算機資源の需要に応えられる構成になったと期待される。

表 1. JAIST で利用可能な計算サーバ(2020)

超並列計算機(分散メモリ型)	
ノード種類(ホスト名)	主な仕様
大規模並列計算ノード (xc40)	分散メモリ・スカラー型システム(548-node/19728-core): Cray XC40 総理論演算性能: 662.8TFLOPS 作業用データ領域: 200TB (Lustre) ノード構成 CPU: Intel Xeon E5-2695v4 2.1GHz (18-core×2) Memory: 128GB (16GB DDR4-2133 ECC×8) 開発環境(Fortran/C/C++/Python) GNU/PGI/Cray Compiler, Intel Parallel Studio XE, Anaconda Python 運用期間 2016年3月1日～2020年2月29日
大規模並列計算ノード (kagayaki)	分散メモリ・スカラー型システム(280-node/35840-core): Dell PowerEdge R6525 総理論演算性能: 1.48PFLOPS 作業用データ領域: 200TB (Lustre) ノード構成 CPU: AMD EPYC 7H12 2.6GHz (64-core×2) Memory: 512GB (32GB DDR4/3200 SDRAM×16) 開発環境(Fortran/C/C++) GNU/Intel OpenAPI/AOCC 運用期間 2021年3月1日～2026年2月28日(予定)
汎用 PC クラスタ計算機	
ノード種類(ホスト名)	主な仕様
大容量メモリノード (mpcc)	Large Memory Node-S (1-node/144-core): HPE Superdome Flex CPU: Intel Xeon G-6240M 2.6GHz (18-core)×8 Memory: 12TB Large Memory Node-l (1-node/72-core): HPE ProLiant DL560 CPU: Intel Xeon G-6140 2.6GHz (18-core)×4 Memory: 6TB Large Memory Cluster (30-node/1920-core): HPE ProLiant DL560 CPU: Intel Xeon G-6242 2.8GHz (16-core)×4 Memory: 1.5TB 開発環境(Fortran/C/C++) GNU/PGI Compiler/Intel Parallel Studio XE 運用期間 2019年3月1日～2023年2月28日(予定)
汎用クラウドノード (vpcc)	PC クラスタ(48-node/1536-core): Fujitsu Primergy CX2560 M4 CPU: Intel Xeon Gold 6130 2.10GHz (16-core)×2 Memory: 64GB 開発環境(Fortran/C/C++/Python) GNU/PGI Compiler, Intel Parallel Studio XE, Anaconda Python 運用期間 2018年3月1日～2022年2月28日(予定)
GPGPU クラウドノード (vpcc)	GPU ノード(8-node/16-GPU): Fujitsu Primergy CX2570 M4 CPU: Intel Xeon Gold 6130 2.1GHz (16-core)×2 GPU: NVIDIA Tesla P100×2 開発環境(Fortran/C/C++/Python) GNU/PGI Compiler, Intel Parallel Studio XE, CUDA, Anaconda Python 運用期間 2018年3月1日～2022年2月28日(予定)

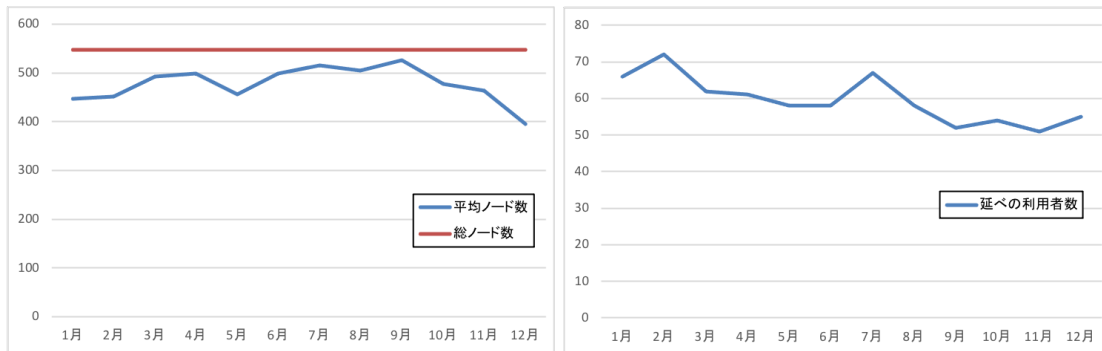


図 1. XC40 月別最大同時利用ノード数平均(左), XC40 月別固有用者数(右)



図 2. HPC System "KAGAYAKI"

### 1.3 アプリケーションソフトウェア

上記プラットフォームに対して、利用可能なアプリケーションソフトウェアを表 2 に示す。マテリアルサイエンス系の科学技術計算ソフトウェアとしては、Gaussian16/GaussView、及び Materials Studio の商用ソフトウェアを利用することができる。これらのソフトウェアは CPU 計算機上で並列計算として実行することができる。データ科学・機械学習などのソフトウェアとしては、商用ソフトウェアとしては MATLAB が利用可能であり、深層学習のためのコンテナ環境として、Tensorflow、Caffe、及び Chainer を利用することができる。深層学習は、CPU・GPU 両計算機上で実行することができる。



表 2. 各種コンパイラ・ソフトウェアとプラットフォームの対応表(2020)

ソフトウェア	概略	kagayaki	lmcc	vpcc(CPU)	vpcc(GPU)
Gaussian 16	Gaussian 社製の 量子化学計算パッケージ	—	○	○	—
GaussView	Gaussian 社製の Gaussian 専用可視化ソフト	—	○	○	—
Materials Studio	BIOVIA 社製の材料開発統合 シミュレーションソフトウェア	—	—	○	—
MATLAB	MathWorks 社製の 数値解析ソフトウェア	—	—	○	○
Tensorflow (コンテナ環境)	Google 社製の機械学習 ソフトウェアライブラリ	○	—	○	○
Caffe (コンテナ環境)	UCB 開発の 深層学習フレームワーク	—	—	○	○
Chainer (コンテナ環境)	Preferred Networks 開発の 深層学習フレームワーク	—	—	○	○

#### 1.4 2020 年度の活動

2020 年度の JAIST 共有計算サーバ環境に関連する主な活動について述べる。例年、各種計算機の新規利用者開拓(オリエンテーション)、各種計算機利用者の技術レベルの向上、理解の促進を目的とし、各システム、ソフトウェアに関する利用者講習会(各種初級者講習会)を企画している。今年度は、新型コロナウイルス感染予防のために、全ての活動をオンラインで実施した。

今年度開催した講習会の一覧を表 3 に示す。オリエンテーションでは、新入生や新規利用者を対象として、本学共有計算機の構成や初歩的な利用方法を解説した後に、ハンズオントレーニングを実施している。ハンズオントレーニングは、GUI 環境しか利用経験のないユーザーに対して、CLI 環境利用への心理的障壁を多少なりとも緩和し、本学での研究活動に向けて各種計算機の円滑利用を目的としている。そこで、Linux コマンド操作から始めて、ファイル編集、プログラムコンパイル、ジョブ投入といった計算機上での一連の作業を体験し、また本学で利用可能な科学技術計算ソフトウェアについても簡単な実習を含めた講習内容となっている。

システム毎の講習会では、ログインからジョブ投入など初心者向けの内容から、MPI の理論と実行など中級者向けの内容まで、利用者のレベルに応じたテーマを用意している。2020 年度は、前半に初級者向けの基本事項を提供し、その上で、後半に Singularity コンテナを用いた実践的な利用方法を提供した。特に GPU は一般的にドライバやライブラリ、ソフトウェアのバージョンアップに応じて実行環境を頻繁に構築しなおさなくてはならない状況が発生しやすく、コンテナの利用がこのような状況に対する有効な解決策として期待される。コンテナを利用した上で複数ノードのリソースを MPI 経由で使用する手法は、簡易な手順で実行パフォーマンスを底上げできる利便性の高いものと考えられる。今後も、利用状況と利便性の向上に向けた各種講習会を企画することで、新規利用者の拡大と効率的利用に取り組んでいく。

表 3. 2020 年度に開催した講習会

開催月	講習会
2020 年 6 月 15 日	並列計算機利用者オリエンテーション
2020 年 6 月 18 日	初級並列機講習会 - PC クラスタを使ってみよう!
2020 年 6 月 19 日	HPE 共有メモリ型計算機並列化プログラミング講習会
2020 年 6 月 30 日	Cray XC40 初級者講習会
2020 年 7 月 1 日	URIKA-XC (Deep Learning Tools) 講習会
2020 年 10 月 14 日	並列機利用オリエンテーション
2020 年 10 月 19 日	計算機講習会 PC Cluster～コンテナ初級編～
2020 年 10 月 27 日	Cray XC40 初級者講習会 ～MPI/OpenMP 並列プログラミング初級者講習会 on Cray XC40
2020 年 10 月 29 日	Large Memory PC Cluster 計算機講習会 ～機械学習/画像検出のコンテナ実装～

### 1.5 まとめと今後の導入計画

本報告「北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告 2020」は 2020 年度に情報センター提供の共有計算サーバを利用した研究の概要とその成果を報告している。mpc メーリングリストを通じて、MPC 管理グループと情報センターから本報告への寄稿依頼を行い、各著者のご厚意により、情報科学分野から 19 件、材料科学分野から 9 件、知識科学分野から 2 件と多彩な報告書を提出いただいた。ここに深く感謝申し上げる。

現在、これまで計算機とあまり縁のなかった研究分野でも計算機実験が容易に実施できるようになり、最先端の教育研究活動を開拓、実施、展開していく上での強力な研究基盤として、計算機の重要性は激増している。システム利用状況の把握は、これまで実績のある研究分野に対するサポート強化だけではなく、新規利用実績のある研究分野を見出すことで、本学における新しい教育研究展開の潮流を知ることができる。こうした教育研究展開の把握は、将来的には、次期計算サーバ導入時の重要な策定指針となり、より充実した計算機環境の構築に繋がるものと期待される。寄稿報告を俯瞰すれば、共有計算サーバは本学の教育研究インフラとして幅広い研究分野で利活用されている様子が見て取れる。共有計算サーバは、本学の先端的な教育研究活動をこれまで以上に躍進させる必須の教育研究基盤として、今後益々、その重要性が増していくものと期待される。

近年の AI・機械学習系研究の隆盛を背景に、本学でも GPU 計算機資源に対する需要が急増している。本学での CPU 計算機の利用状況を鑑みると、今年度更新・導入した KAGAYAKI システムによって CPU 計算機資源は充足されると期待されるため、来年度予定されている PC クラスタ及び GPU ノードの更新では、GPU 計算機の大幅な拡充を計画している。GPU 計算機の拡充が、本学における AI・機械学習系研究発展の大きな原動力になることを期待している。

## 参考文献

- [1] 佐藤 理史(編),”JAIST における超並列関連研究 : 1992 年度-1993 年度”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム,IS-TM-94-0001, (1994).
- [2] 佐藤 理史(編),”JAIST における超並列関連研究 : 1994 年度-1996 年度”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム,IS-TM-97-3, (1997).
- [3] 佐藤 理史(編),”JAIST における超並列関連研究(1997 年度)”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム,IS-TM-98-1, (1998).
- [4] 林 亮子(編),”JAIST における並列計算機および計算サーバ利用研究(1998 年度-2000 年度)”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム,IS-TM-2002-003, (2002).
- [5] 林 亮子(編),”JAIST における並列計算機および計算サーバ利用研究(2001 年度)”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム,IS-TM-2002-004, (2002).
- [6] 林 亮子(編),”JAIST における並列計算機および計算サーバ利用研究(2002 年度)”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム,IS-TM-2003-001, (2003).
- [7] 林 亮子(編),”JAIST における並列計算機および計算サーバ利用研究(2003 年度)”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム,IS-TM-2004-002, (2004).
- [8] 林 亮子(編),”JAIST における並列計算機および計算サーバ利用研究(2004 年度)”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム,IS-TM-2005-001, (2005).
- [9] 太田理, 尾崎 泰助, 佐藤 幸紀(編), ”北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告 2007”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム, IS-TM-2008-002, (2008).
- [10] 太田理, 尾崎 泰助, 佐藤 幸紀(編), ”北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告 2008”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム, IS-TM-2009-001, (2009).
- [11] 太田理, 尾崎 泰助, 佐藤 幸紀(編), ”北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告 2009”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム, IS-TM-2010-001, (2010).
- [12] 尾崎 泰助, 佐藤 幸紀(編), ”北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告 2010”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム, IS-TM-2011-001, (2011).
- [13] 佐藤 幸紀, 尾崎 泰助 (編), ”北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告 2011”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム, IS-TM-

2012-001, (2012).

[14] 佐藤 幸紀, 尾崎 泰助 (編), ”北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告 2012”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム, IS-TM-2013-001, (2013).

[15] 佐藤 幸紀, 宮下 夏苗, 尾崎 泰助 (編), ”北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告 2013”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム, IS-TM-2014-001, (2013).

[16] 宮下 夏苗, 井口 寧 (編), ”北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告 2014”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科テクニカルメモランダム, IS-TM-2015-001, (2014).

[17] 井口 寧, 本郷 研太, 宮下 夏苗 (編), ”北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告 2015-2016”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科・情報科学系 テクニカルメモランダム, IS-TM-2018-001, (2018).

[18] 本郷 研太, 辻 誠樹, 宮下 夏苗, 井口 寧 (編), ”北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告 2017”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科・情報科学系 テクニカルメモランダム, IS-TM-2018-002, (2018).

[19] 本郷 研太, 辻 誠樹, 宮下 夏苗, 井口 寧 (編), ”北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告 2018”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科・情報科学系 テクニカルメモランダム, IS-TM-2019-001, (2019).

[20] 本郷 研太, 辻 誠樹, 宮下 夏苗, 井口 寧 (編), ”北陸先端科学技術大学院大学 共有計算サーバ使用成果報告 2019”, 北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科・情報科学系 テクニカルメモランダム, IS-TM-2020-001, (2020).

## 2. 情報科学分野の計算サーバ利用研究

今年度は、新学術領域「複合アニオンの創製」に関する共同研究プロジェクトで、4件の原著論文を報告している。層状ペロブスカイト構造や触媒材料を対象とした第一原理電子状態計算を実施し、当該物質系の機能発現機構を計算科学の観点から解明した。当該計算では、主として、vpcc/lmpcc にインストールされている CASTEP、及び、xc40 上にインストールされている VASP/Quantum Espresso を利用した。また、今年度は、第一原理計算だけではなく、マテリアルズ・インフォマティクス研究において、本学並列計算機群を利用した研究成果が得られている。

#### 研究業績(原著論文・査読あり)

- 1) K. Utimula, T. Ichibha, G. I Prayogo, K. Hongo, K. Nakano, R. Maezono, "A quantum annealing approach to ionic diffusion in solids", *Sci. Rep.* **2021**, *11*, 7261-7261.
- 2) A. Ghaffar, M.D. Ganeriwala, K. Hongo, R. Maezono, N.R. Mohapatra, "Insights into the Mechanical and Electrical Properties of a Metal-Phosphorene Interface: An Ab Initio Study with a Wide Range of Metals", *ACS Omega*, **2021**, *6*, 7795-7803.
- 3) Y. Nikaido, T. Ichibha, K. Nakano, K. Hongo, R. Maezono, "GaN bandgap bias caused by semi-core treatment in pseudopotentials analyzed by the diffusion Monte Carlo method", *AIP Adv.* **2021**, *11*, 025225:1-7.
- 4) T. Yoshida, R. Maezono, K. Hongo, "Exploring Heat-Shielding Nanoparticle-Based Materials via First-Principles Calculations and Transfer Learning", *ACS Appl. Nano Mater.* **2021**, *4*, 1932-1939.
- 5) S.P.K. Naik, Y. Iwasa, K. Kuramochi, Y. Ichihara, K. Kishio, K. Hongo, R. Maezono, T. Nishio, H. Ogino, "Synthesis, Electronic Structure, and Physical Properties of Layered Oxypnictides  $\text{Sr}_2\text{ScCrAsO}_3$  and  $\text{Ba}_3\text{Sc}_2\text{Cr}_2\text{As}_2\text{O}_5$ ", *Inorg. Chem.* **2021**, *60*, 1930-1936.
- 6) Z. Gu, Z. Cui, Z. Wang, K.S. Qin, Y. Asakura, T. Hasegawa, K. Hongo, R. Maezono, S. Yin, "Intrinsic carbon-doping induced synthesis of oxygen vacancies-mediated  $\text{TiO}_2$  nanocrystals: Enhanced photocatalytic NO removal performance and mechanism", *J. Catal.* **2021**, *393*, 179-189.
- 7) Z. Gu, Z. Cui, Z. Wang, K.S. Qin, Y. Asakura, T. Hasegawa, S. Tsukuda, K. Hongo, R. Maezono, S. Yin, "Carbon vacancies and hydroxyls in graphitic carbon nitride: Promoted photocatalytic NO removal activity and mechanism", *Appl. Catal. B* **2020**, *279*, 119376-119376.
- 8) A. Hermawan, A.T. Hanindriyo, E.R. Ramadhan, Y. Asakura, T. Hasegawa, K. Hongo, M. Inada, R. Maezono, S. Yin, "Octahedral morphology of NiO with (111) facet synthesized from the transformation of NiOHCl for the  $\text{NO}_x$  detection and degradation: experiment and DFT calculation", *Inorg. Chem. Front.* **2020**, *7*, 3431-3442.
- 9) K. Oqmhula, K. Hongo, R. Maezono, T. Ichibha, "Ab Initio Evaluation of Complexation Energies for Cyclodextrin-Drug Inclusion Complexes", *ACS Omega* **2020**, *5*, 19371-19376.

- 10) T. Hasegawa, A. Shigee, Y. Nishiwaki, M. Nagasako, A.T. Hanindriyo, K. Hongo, R. Maezono, T. Ueda, S. Yin, "New layered perovskite family built from [CeTa<sub>2</sub>O<sub>7</sub>]<sup>-</sup> layers: coloring mechanism from unique multi-transitions", *Chem. Commun.* **2020**, *56*, 8591-8594.
- 11) K. Utimula, R. Hunkao, M. Yano, H. Kimoto, K. Hongo, S. Kawaguchi, S. Suwanna, R. Maezono, "Machine - Learning Clustering Technique Applied to Powder X - Ray Diffraction Patterns to Distinguish Compositions of ThMn<sub>12</sub>-Type Alloys", *Adv. Theory Simul.* **2020**, *3*, 2000039:1-9.
- 12) T. Yoshida, R. Maezono, K. Hongo, "Synergy of Binary Substitutions for Improving the Cycle Performance in LiNiO<sub>2</sub> Revealed by Ab Initio Materials Informatics", *ACS Omega*, **2020**, *5*, 13403-13408.
- 13) T. Toma, R. Maezono, K. Hongo, "Electrochemical Properties and Crystal Structure of Li<sup>+</sup>/H<sup>+</sup> Cation-Exchanged LiNiO<sub>2</sub>", *ACS Appl. Energy Mater.* **2020**, *3*, 4078-4087.

#### 研究費獲得実績

- 1) 平成 28 年度新学術領域 (研究領域提案型)、「複合アニオン化合物の創製：物質合成と設計指針の確立 (研究分担/研究代表者：荻野拓/16H06439)」、H31 年度 2,700 千円 (H28 年 8 月～R3 年 3 月)。
- 2) 平成 31 年度新学術領域 (研究領域提案型)、「ハイエントロピー合金：元素の多様性と不均一性に基づく新しい材料の学理」、公募研究、「データ科学的構造モデリングを基盤とする第一原理熱力学アセスメント法の開発 (研究代表/ 19H05169)」、H31 年度 2,500 千円 (H31 年 10 月～R 3 年 3 月)
- 3) 平成 31 年度科研費・基盤研究 (C)、「分子理論・計算科学・データ科学の融合によるハマカー定数の自律型予測モデルの開発 (研究代表/19K05029)」、H31 年度 700 千円 (H31 年 4 月～R5 年 3 月)。

# ACTIVITY REPORT OF FY2020

## 1. PROJECT TITLE:

### ROLE OF SUBSTITUTED ELEMENTS Co, Mn, AND Al IN Ni-RICH $\text{LiNi}_{1-x-y-z}\text{Co}_x\text{Mn}_y\text{Al}_z\text{O}_2$

**PRINCIPAL INVESTIGATOR:** Takahiro Toma

**AFFILIATION:** Hongo Lab., JAIST, Nomi, Ishikawa, Japan

**WEBPAGE:** <http://www.jaist.ac.jp/is/labs/maezono-lab/homepage2019/index.html>

**MACHINE USED:** (XC40)

## 2. PROJECT DESCRIPTION:

リチウムイオン二次電池用正極材料の高エネルギー密度化、低コスト化の方策の1つとして、Ni 比率が 90at%を超える Ni-rich 材料が期待されている。しかしながら、代表的な材料である  $\text{LiNiO}_2$  はエネルギー密度以外の電池特性が実用レベルに達していない。そこで、 $\text{LiNiO}_2$  の Ni の一部を Co、Al、Mn で置換することで容量特性以外の諸特性の改善を試み、その特性発現機序の解明を目的とした研究を行った。具体的には  $\text{LiNiO}_2$  (LNO) の Ni を 4%刻みで Co、Al、Mn に置換した、 $\text{LiNi}_{0.92}\text{Co}_{0.08}\text{O}_2$  (LNCO)、 $\text{LiNi}_{0.92}\text{Al}_{0.08}\text{O}_2$  (LNAO)、 $\text{LiNi}_{0.92}\text{Mn}_{0.08}\text{O}_2$  (LNMO)、 $\text{LiNi}_{0.92}\text{Co}_{0.04}\text{Al}_{0.04}\text{O}_2$  (LNCAO)、 $\text{LiNi}_{0.92}\text{Co}_{0.04}\text{Mn}_{0.04}\text{O}_2$  (LNCMO)、 $\text{LiNi}_{0.92}\text{Al}_{0.04}\text{Mn}_{0.04}\text{O}_2$  (LNAMO) を合成し、容量特性、レート特性、サイクル特性、熱安定性を評価・解析した。解析結果の一例として、ここでは、レート特性に関する結果を示す。リチウムイオン二次電池における放電反応は、層状構造を成す正極活物質への  $\text{Li}^+$  のインサーション反応に対応する。レート特性とは急速放電時にどれだけ固体内  $\text{Li}^+$  拡散が追従するかという物理現象に関係するため、 $\text{Li}^+$  拡散係数はレート特性を考える上で重要な指標となる。実験による検証の結果、固体内 Li 濃度が高い領域において Li 拡散係数は急激に低下することが確認され (Fig. 1(a))、これは活性化エネルギーの増加に起因し、Co、Al、Mn、Ni の順に活性化エネルギーの増加が顕著であることが明らかとなった (Fig. 1(b))。この現象を考察するため、Li-O 層間距離、Li 拡散経路に隣接する Me イオン種、ホッピング拡散可能な空孔数、の 3 要素を考慮したモデルを用いて、Climbing Image Nudged Elastic Band (CI-NEB) 法により障壁エネルギーを求めた (Fig. 1(c))。シミュレーションの結果、Li-O 層間が狭く、かつホッピング空孔数が少ない条件、すなわち高 Li 濃度環境における障壁エネルギーは、Co、Ni、Al、Mn の順に大きくなった (Fig. 1(d)(e))。Ni のみ第一原理計算と実験結果の不一致が確認されたが、これはシミュレーションでは相転移の無い単相であるのに対し、実際には LNO(黒○)では特異的に  $\text{Li}^+$  拡散係数が低下する領域があり (Fig. 2(a))、構造相転移による二相共存状態であることに起因すると考えられる。この結果から、LNO 正極材料の課題である低いレート特性は、Ni 元素自体の効果ではなく、構造相転移による拡散係数の低下に起因することが示唆された。



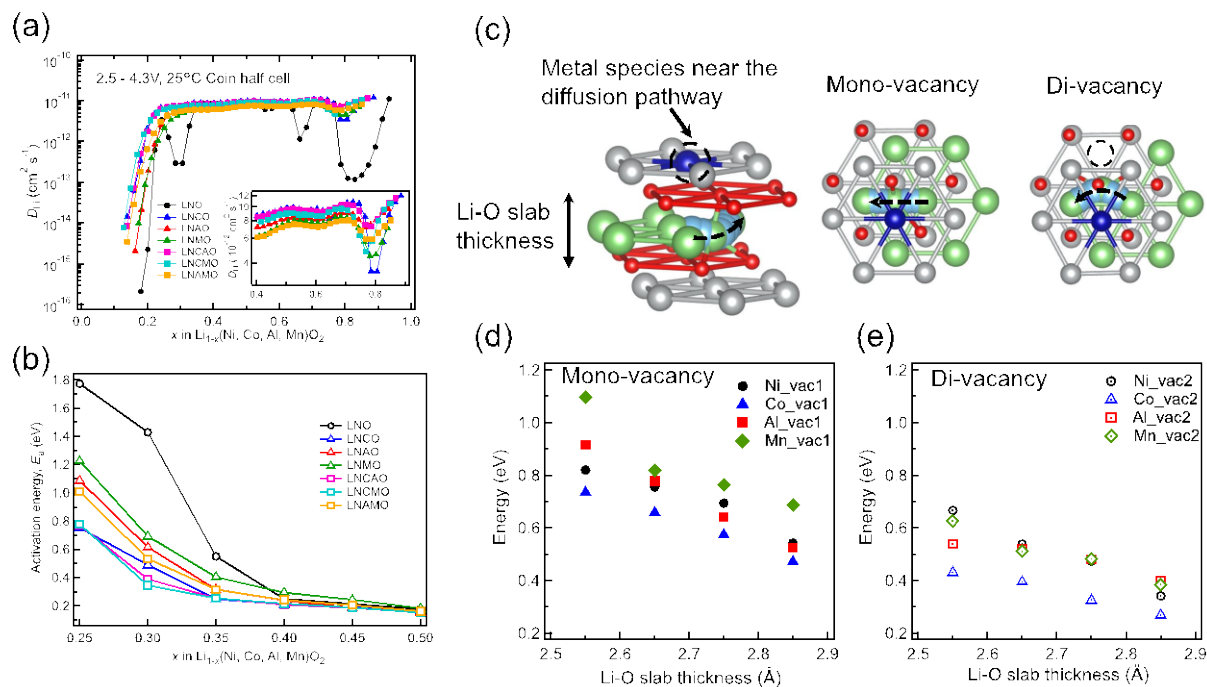


Fig1 (a) リチウム/プロトン交換した正極活物質の結晶構造、(b) Li - O 層厚 (Li 拡散経路幅)、(c) Li 拡散のエネルギープロファイル。リチウムと交換されたプロトンが近接する酸素原子を水素結合により誘引することで Li-O 層厚が収縮する。

### 3. NAME OF CO-AUTHORS IN JAIST

#### 3.1 LIST OF CO-AUTHORS

- Prof. Maezono Ryo / School of information science.
- Associate Prof. Hongo Kenta / School of information science

A/How many co-authored publication with JAIST faculties so far [1].

B/How many co-authored publication with JAIST faculties planned in future [at least 1].

### 4. PUBLICATION LIST DURING FY2020 USING JAIST FACILITIES

#### 5. CO-AUTHORING PROJECTS FOR FY2020 USING JAIST FACILITIES

Study on the Thermal Stability of Ni-rich layered Cathode Materials

#### 5.1 LIST OF PLANNED PUBLICATIONS

- [1] ' Role of substituted elements Co, Mn, and Al in Ni-rich  $LiNi_{1-x-y-z}Co_xMn_yAl_zO_2$  ', [Ryo Maezono, Kenta Hongo], [journal (temporary)].

# 第一原理量子モンテカルロ法によるフォノン分散計算

情報科学系, 環境・エネルギー領域

前園研究室 助教 中野 晃佑

使用計算機:XC40

## 概要

第一原理量子モンテカルロ法 (Ab-initio Quantum Monte Carlo: QMC)は, モンテカルロ積分を利用して多体シュレーディンガー方程式を数値的に解くことで物質の電子状態を解く方法であり, 現在の電子状態計算手法の中で最も厳密解に近い解が得られる手法である. SISSA(イタリア)を中心とする研究グループは, 第一原理量子モンテカルロ法を実装したTurboRVB<sup>[1]</sup>の開発を行っており, 筆者はその主開発の1人である. 第一原理量子モンテカルロ法において長年問題となっていた事項の1つとして, 厳密なエネルギー値は計算可能でも, その微分値 (e.g., 原子に働く力)の評価が容易ではないという問題があった. そのため, 材料開発研究において重要になる, 安定構造の探索 (i.e., 構造最適化)や, 格子振動 (i.e., フォノン), 自由エネルギー等の計算が出来ないことで, その応用範囲が限定されていた.

今回、筆者らは、第一原理量子モンテカルロ法における、固体周期系での原子に働く力の評価値が持つ統計誤差発散の問題が、利用する基底関数の重なり行列の条件数、つまり、基底関数同士の線形従属性に起因することを発見し、その基底関数の重なりをうまく排除してやることで、これまで問題となっていた統計誤差の発散を劇的に抑えることに成功した(図 1)。さらに、その開発した手法を、参照系として典型的な物質であるダイヤモンドに適用し、実験値と一致するフォノン分散が得られることを確認した(図 1)。今回の成果は、これまで限定されてきた第一原理量子モンテカルロ計算の応用範囲の裾野を大きく広げる成果であり、これまで計算材料科学が取り扱いに難渋してきた物質に対しても精度の高い格子物性計算を可能にする、画期的な成果である<sup>[2]</sup>。

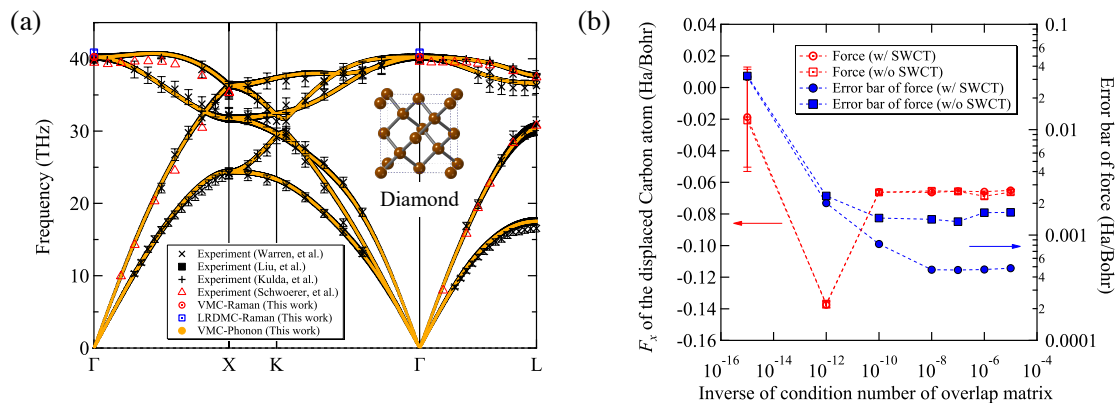


図 1 (a) TurboRVB により計算されたダイヤモンドのフォノン分散。実験結果とよく一致しており、また、これまで利用されてきた密度汎関数計算の結果を有意に改善する。(b) 周期系における原子に働く力の評価値が持つ統計誤差が、利用する基底関数の重なり行列の条件数に依存することを示した図。

## 発表論文

[1] K. Nakano, et al. *J. Chem. Phys.* **152**, 204121 (2020). [2] K. Nakano, et al. *Phys. Rev. B*, **103** L121110 (2021)

# ACTIVITY REPORT OF FY2020

## 1. PROJECT TITLE:

### ELECTRONIC STRUCTURE INVESTIGATION OF DOPED TiO<sub>2</sub> SYSTEMS USING DENSITY FUNCTIONAL THEORY

**PRINCIPAL INVESTIGATOR:** Abhishek Raghav

**AFFILIATION:** Doctoral student (D2), Maezono Lab

**MACHINE USED:** XC40

## 2. PROJECT DESCRIPTION:

In this work an overall electronic structure including the position and formation energies of various intrinsic defects are computed for anatase using Density Functional Theory aided by Hubbard correction (DFT+U). The intrinsic point defects considered here are, oxygen vacancy ( $V_O$ ), oxygen interstitial ( $O_i$ ), titanium vacancy ( $V_{Ti}$ ) and titanium interstitial ( $Ti_i$ ). Out of all the intrinsic defects considered here,  $V_{Ti}$  and  $Ti_i$  are found to be most stable under equilibrium condition. Whereas, conduction band in anatase is consisted of mainly Ti 3d with a minor component of O 2p states, valence band is found to be mainly composed of O 2p with a minor contribution from Ti 3d states.  $V_O$  and  $Ti_i$  are found to form localized states in the band gap. Moreover, anisotropy in the effective mass is seen. Finally, an alignment of band diagrams for all the intrinsic defect states is performed using vacuum potential from slab-supercell calculation as reference. This first principle study would help in the understanding of defect-induced insulating to conducting transition in anatase, which would have significant impact in the photocatalytic and optoelectronic area.

## 3. NAME OF CO-AUTHORS IN JAIST

### 3.1 LIST OF CO-AUTHORS

- Adie Tri Hanindriyo/School of Material science
- Keishu Utimula/School of Material science
- Prof. Ryo Maezono/School of Information science.

A/How many co-authored publication with JAIST faculties so far [01].

B/How many co-authored publication with JAIST faculties planed in future [02].

## 4. PUBLICATION LIST DURING FY2020 USING JAIST FACILITIES

- [1] A. Raghav, A.T. Hanindriyo, K. Utimula, M. Abbasnejad, R. Maezono, and E. Panda. "Intrinsic electronic defect states of anatase using density functional theory". *Comp. Mat. Sci.* **184** 109925 (2020)

## 5. CO-AUTHORING PROJECTS FOR FY2021 USING JAIST FACILITIES

### INVESTIGATING DOPANT INDUCED CHANGE IN THE BAND STRUCTURE AND HENCE THE EFFECTIVE MASS OF CHARGE CARRIERS FOR VARIOUS DOPED TiO<sub>2</sub> SYSTEMS.

TiO<sub>2</sub> is a very important material in the field of photocatalysts and optoelectronics. It can be readily doped with various dopants to make it suitable for specific purposes like as a photocatalyst or as a transparent conductor. In this project, we are investigating how dopants effect the band curvatures

and hence the effective mass of the charge carriers in  $\text{TiO}_2$ , which ultimately effects the material properties. We are examining several dopants including Nb, Ta, V, W, Cu, Co, Ce, La. How the concentration of dopants affects effective masses and band structures is also investigated. This will help in predicting appropriate dopant systems for optoelectronic and photocatalytic applications.

### **BENCHMARK ALL-ELECTRON AB INITIO QUANTUM MONTE CARLO CALCULATIONS WITH PFAFFIAN ANSATZ FOR G2-SET MOLECULES**

In this work, very accurate binding energy calculations for small molecules (like  $\text{CH}_4$ ,  $\text{NH}_3$  etc.) will be performed using the Quantum Monte Carlo code, TurboRVB. This code allows very flexible starting wave functions like the Pfaffian (Pf) and the Antisymmetrized Geminal Power (AGP). As a result, it includes correlation effects which are beyond traditional ansatz like Slater Determinant, used in other QMC codes. It also supports optimization of Jastrow as well as the nodal surfaces at the VMC level. We hope that these would lead to more accurate calculation of the binding energy within the chemical accuracy (1 kcal/mol) for small molecules in the standard "G2 set". This work would show the effectiveness of these more flexible ansatz in TurboRVB code for binding energy and other calculations.

#### **5.1 LIST OF PLANNED PUBLICATIONS**

- [1] 'Effective mass investigation of doped  $\text{TiO}_2$  systems (temporary)', [Abhishek Raghav, Emila Panda, Kenta Hongo, and Ryo Maezono], [Journal (temporary)].
- [2] 'Benchmark all-electron ab initio quantum Monte Carlo calculations with Pfaffian ansatz for G2-set Molecules (temporary)', [Abhishek Raghav, Ryo Maezono, Sandro Sorella, Kousuke Nakano], [Journal (temporary)].

# ACTIVITY REPORT OF FY2020

## 1. PROJECT TITLE:

### DIFFUSION MONTE CARLO STUDY OF HYDROGEN ADSORPTION ON SILICON CARBIDE NANOTUBE

**PRINCIPAL INVESTIGATOR:** Genki Imam Prayogo

**AFFILIATION:** Doctoral Student (D2), Maezono Lab.

**MACHINE USED:** XC40

## 2. PROJECT DESCRIPTION:

Hydrogen is one of the candidate for environmentally friendly energy carriers. Although it has a very high energy density per unit weight, its volumetric energy density is rather low, making its storage in a compact manner difficult. This is important in applications where storage volume is paramount, such as in automobile and aviation. Physisorption of hydrogen molecules on materials with high surface area to volume ratio like nanotubes is one of the strategies to increase this volumetric efficiency. Along with carbon nanotube (CNT) and boron nitride nanotube (BNNT), silicon carbide nanotube (SiCNT) is one of the candidate material considered for this use. Although has yet to be experimentally synthesized in single-walled form, larger silicon carbide nanotube has shown promising gain with respect to carbon nanotube in terms of storage capacity and lack of sorption hysteresis. Theoretical studies points to the stronger binding energies and existence of point charges naturally occurring on alternating Si-C surface, but lack of experimental evidence renders this conclusion unclear. We present the first attempt to use Diffusion Monte Carlo (DMC) in studying the adsorption of molecular hydrogen on single walled SiCNT surface. DMC is a stochastic method to directly solve many-body Schrödinger equation, which is capable of describing non-covalent interactions as is prominent in such physisorptive system. Several exchange-correlation functionals used in previous density functional studies are benchmarked against DMC in order to establish their accuracy in this specific system, and assess previous conclusions regarding the suggested improvement of binding characteristics on SiCNT.

## 3. NAME OF CO-AUTHORS IN JAIST

### 3.1 LIST OF CO-AUTHORS

- Prof. Kenta Hongo / School of Information Science
- Prof. Ryo Maezono / School of Information Science
- Dr. Kousuke Nakano / School of Information Science

A/How many co-authored publication with JAIST faculties so far [4].

B/How many co-authored publication with JAIST faculties planed in future [2].

## 4. PUBLICATION LIST DURING FY2020 USING JAIST FACILITIES

- [1] G. I. Prayogo, H. Shin, A. Benali, R. Maezono, K. Hongo. "Importance of van der Waals interaction in hydrogen adsorption on silicon-carbide nanotube revisited with vdW-DFT and QMC". (under review).
- [2] K. Utimula, T. Ichibha, G. I. Prayogo, K. Hongo, K. Nakano, R. Maezono. "A quantum annealing approach to ionic diffusion in solids". *Sci. Rep.* **11**, 7261 (2021)

[3] K. Utimula, G. I. Prayogo, K. Nakano, K. Hongo, R. Maezono. “*Stochastic Estimations of the Total Number of Classes for a Clustering having Extremely Large Samples to be Included in the Clustering Engine*”. *Adv. Theory Simul.* **4**, 2000301 (2021)

## **5. CO-AUTHORING PROJECTS FOR FY2021 USING JAIST FACILITIES**

### **5.1 LIST OF PLANNED PUBLICATIONS**

[1] ‘Ground state determination of  $\text{LiVX}_2$  system using Diffusion Monte Carlo (temporary)’, [K. Nakano, K. Hongo, R. Maezono], [journal (temporary)].

[2] ‘SHRY: A Suite for High-throughput generation of models with atomic substitutions implemented by python (temporary)’, [K. Nakano, K. Hongo, R. Maezono], [Computer Physics Communications (temporary)].

# FDTD法による音響シミュレーションのためのストリーム計算ハードウェアの設計と評価

井口研究室  
s1910143  
多田大希

2021年2月17日

## 1 研究概要

FDTD(Finite Difference Time Domain)法は、電磁界解析や音響シミュレーションなどに広く使用されている数値解析手法である。そのFDTD法はタイムステップ毎で細かく離散化された音響空間内の音圧と音速を更新する計算手法であるため、演算量が高い。そのため、アクセラレータを用いた並列処理による高速化の研究が活発に行われている。

そこで本研究では、Yee-FDTD法[1][2]の高速化のためのストリーム計算ハードウェアをFPGA(Stratix10)上に実装した。さらに、理化学研究所 計算機科学研究センターのプロセッサ研究チームが開発しているFPGAクラスタであるESSPERを使用して、本研究のハードウェアの拡張性の評価を行った。また、このハードウェアの演算性能を評価するため、本学の並列計算機であるSuperDomeとの演算性能の比較を行った。

結果として、本研究で実装したハードウェアは単一のFPGAでも136[GFLOPS]を達成した。また、Multi-FPGAによる評価では4個のFPGAを使用して359[GFLOPS]の演算性能を達成した。なお、FPGAクラスタESSPERには、最大で16個のFPGAが搭載されている。もし、16個のFPGAを使用した場合、最大で1.24[TFLOPS]を達成する可能性がある。また、SuperDomeとの演算性能の比較実験では、単一のFPGAでもSuperDomeの主計算ノードと同等の演算性能を達成し、4個のFPGAを使用した場合は2倍の演算性能を達成した。

## 2 使用計算機とその用途

本研究では、FPGA上に実装したハードウェアの性能評価のために、SuperDome(lmpcc)との比較実験を行った。なお、本書で示す成果は4章で示す対外発表の一部である。

### 2.1 実験条件

FPGAクラスタESSPERの構成は図1の通りとなっている[4]。ESSPERには、16個のFPGAボード(Intel PAC D5005)が搭載されており、それらが8つのGatewayサーバーに二つずつPCI-Expressを介して接続されている。Gatewayサーバーの構成を表1で示す。本研究の評価実験では、このGatewayサーバー上でホストプログラムとFPGAへのタスクオフローディングを実行する。また、16個のFPGAではQSFP28を介した高速なシリアル通信が可能となっている。このネットワークの帯域幅は12.5GB/sである。なお、実行帯域は11.5GB/sであった。

実験で使用した音響空間の仕様を図2で示す。5m×5m×5mのサイズの音響空間に対して、空間離散化幅0.05で離散化し、100×100×100の音響空間を生成した。この音響空間内では障害物を設置し

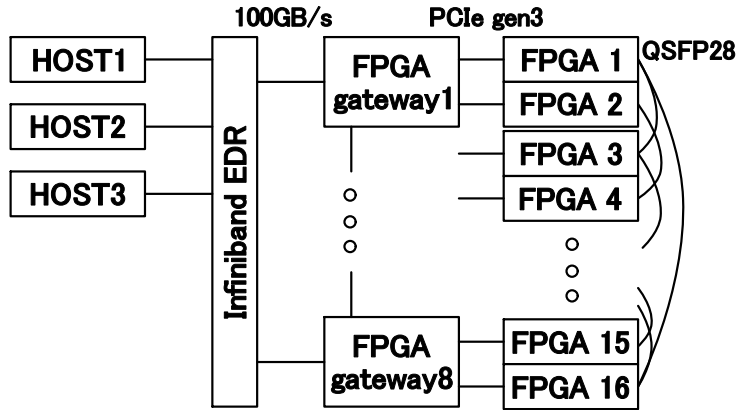


図 1: FPGA クラスタ ESSPER の構成

表 1: ゲートウェイサーバーの構成

CPU	Intel Xeon Gold-5122(8Core, 3.6GHz)
Memory	DDR4-2666(8GB) ×12
FPGA	Intel PAC D5005 ×2

ておらず、PML 層がないことを前提としている。その音響空間に対して、400 タイムステップの音場シミュレーションを実行する。

SuperDome との演算性能比較実験で使用されるプログラムは、文献 [1] を基に実装されており、音速の更新と音圧の更新のループを OpenMP を用いて並列化している。この時の Thread 数は 72 に設定した。これは、実験で最も高い演算性能を発揮した Thread 数である。時間計測は、FDTD 法の演算部分のみで計測した。FPGA ではホストコンピュータのメモリから FPGA のオンボードメモリにデータ書き込み、それを FPGA のチップが読み取り、演算した結果をホストコンピュータに書き戻すまでの時間を計測した。なお、FPGA の実装では表 2 で示すパラメータを基にハードウェアを変更して、演算性能の評価を行っている。

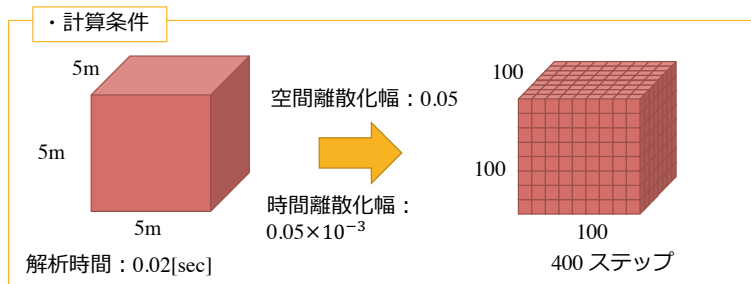


図 2: 実験対象の音響空間



表 2: 実験パラメータ

Parameter	Value	Detail
Cascade	1, 5, 10, 16	時間並列度
PEX	1, 2, 4, 5	空間的並列度
FPGA	1, 2, 4	使用する FPGA の数

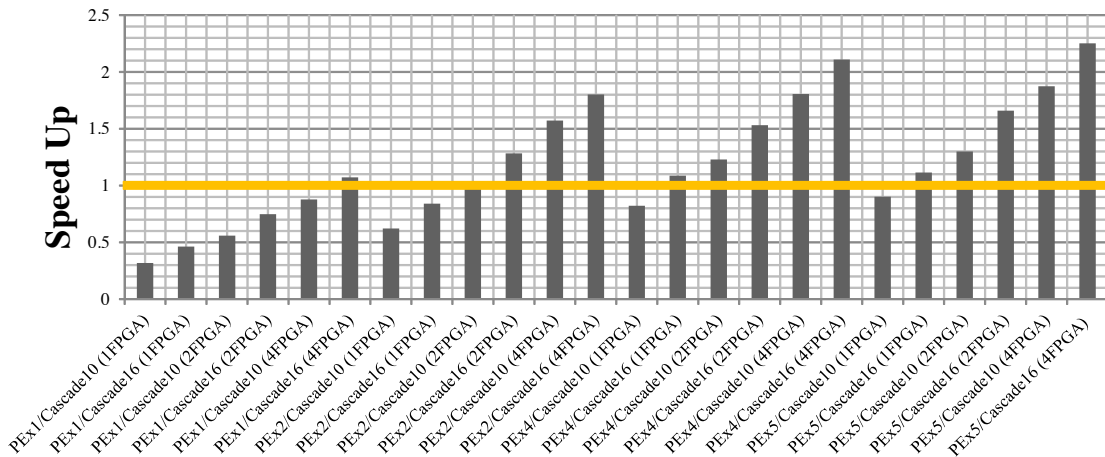


図 3: SuperDome の主計算ノードとの演算性能の比較

### 3 実験結果

#### 3.1 SuperDome との比較

図 3 では、本研究で実装したハードウェアと SuperDome の主計算ノードとの演算性能の比較を示す。この図では、実装したハードウェアの SuperDome に対する高速化率を各パラメータ毎で示している。この結果から、単一の FPGA(1FPGA と表記している) でも SuperDome と同等の演算性能を達成している。さらに、4つの FPGA を使用すると、SuperDome の 2 倍の性能を達成することが判明した。

### 4 研究発表

- 多田大希, 上野知洋, 小柴篤史, 佐野健太郎, 河野隆太, 井口寧, ”FDTD 法による音響シミュレーションのためのストリーム計算ハードウェアの設計と評価”, 信学技報, vol. 120, no. 339, RECONF2020-60, pp. 13-18, 2021 年 1 月.

### 参考文献

- [1] 豊田政弘, ”音響サイエンスシリーズ 14 FDTD 法で見る音の世界”, コロナ社, 2015.
- [2] K.S.Yee, ”Numerical solution of initial boundary value problems involving maxwell’s equations in isotropic media” , IEEE IEEE Transactions on Antennas and Propagation, Vol.14, 1966.
- [3] Kentaro Sano, ”DSL-based Design Space Exploration for Temporal and Spatial Parallelism of Custom Stream Computing”, Processing of the Second International Workshop on FPGAs for Software Programmers (FSP2015), arXiv:1509.00040, 2015.

- [4] 小柴篤史, 上野知洋, 佐野健太郎, ”Stratix10 FPGA クラスタにおける格子ボルツマン法のパイプライン並列化と性能評価”, 電子情報通信学会リconfigラブルシステム研究会, Vol.120, No.168, pp.7-12, 2020.

□ **Program verification for cautions of microcontrollers**

School of Information Science, Aoki Lab

NGUYEN Thi Thuy

Machine: Impcc

*Abstract:* Handling hardware-dependent properties at a low level is usually required in developing microcontroller-based applications. One of these hardware-dependent properties is cautions, which are described in microcontrollers hardware manuals. The process of verifying these cautions is performed manually, as there is currently no single tool that can directly handle this task. This research aims at automating the verification of these cautions. To obtain the typical cautions of microcontrollers, we investigate two sections which have a considerable number of required cautions in the hardware manual of a popular microcontroller. Subsequently, we analyze these cautions and categorize them into several groups. Based on this analysis, we propose a semi-automatic approach for verifying the cautions which integrates two static program analysis techniques (i.e., pattern matching and abstract interpretation).

To evaluate our approach, we conducted experiments with generated source code, benchmark source code, and industrial source code. The generated source code, which was created automatically based on several aspects of the C program, was used to evaluate the performance of the approach based on these aspects. The benchmark and the industrial source code, which were provided by Aisin Software Co., Ltd., were used to access the feasibility and applicability of the approach. As the size of the generated source code and industrial source code could be very large, the resource (time and memory) to analyze the source code was expected to be large. Hence, Impcc was employed to perform these experiments.

The result of these experiments shows that all expected violations in the benchmark source code were detected. Unexpected but real violations in the benchmark program were also detected. For the industrial source code, the approach successfully handled and detected most of the expected violations. These results show that the approach is promising in verifying the cautions.

Published papers:

1. T. Nguyen, T. Tomita, J. Endo, and T. Aoki, "Integrating Pattern Matching and Abstract Interpretation for Verifying Cautions of Microcontrollers", *Software Testing, Verification & Reliability* (under review)

# ACTIVITY REPORT OF FY2020

## 1. PROJECT TITLE:

### INFORMATION-SCIENTIFIC STRUCTURE SEARCH FOR TERNARY HYDRIDE HIGH-TEMPERATURE SUPERCONDUCTORS

**PRINCIPAL INVESTIGATOR:** SONG PENG

**AFFILIATION:** Doctoral student (D1), Maezono Lab

**MACHINE USED:** Impcc

## 2. PROJECT DESCRIPTION:

Recently, with the discovery of a new room temperature superconducting hydride in the carbonaceous sulfur hydride, ternary hydrides have shown great prospects in the research of high-temperature superconductivity. The traditional method of studying ternary hydrides has undergone three steps of structure predict search,  $T_c$  calculation, and experimental verification. Nevertheless, this method will counter the bottleneck of being unable to find a reasonable chemical composition in the first step. Many studies have shown that once the chemical composition of the hydride is determined, there is a potential relationship between the maximum value of  $T_c$  and its chemical properties. Here we introduce a simple machine learning model to studying this properties and guiding search potential ternary high temperature superconducting chemical composition. By this approach,  $YKH_{12}$  and  $LaKH_{12}$  are selected as candidates for structure search in the pressure range 100-300 GPa. The electron-phonon coupling calculations show that  $LaKH_{12}$  has a critical temperature of 87 K at 150 GPa, and  $YKH_{12}$  has a critical temperature of 143 K at 200 GPa. This results show a good correlation with machine learning prediction. Limited by data sets and descriptors, current machine learning cannot describe the behavior of superconducting hydrides very accurately. In future work, with the discovery of more elemental superconducting hydrides and the introduction of more precise descriptors, this method may lay the foundation for the search for atmospheric high-temperature superconducting hydrides.

## 3. NAME OF CO-AUTHORS IN JAIST

### 3.1 LIST OF CO-AUTHORS

-Kousuke Nakano/School of Information Science.

-Prof. Kenta Hongo/Research Center for Advanced Computing Infrastructure.

-Prof. Ryo Maezono/School of Information science.

A/How many co-authored publication with JAIST faculties so far [0].

B/How many co-authored publication with JAIST faculties planed in future [2].

## 4. PUBLICATION LIST DURING FY2020 USING JAIST FACILITIES

## 5. CO-AUTHORING PROJECTS FOR FY2021 USING JAIST FACILITIES

In the past five years, a large number of new high-temperature superconductors have been predicted and discovered through experiments in hydrogen-rich crystals, the pressure of which is too high to meet any practical application. At present, the high-temperature superconducting hydride with the lowest pressure is  $UH_7$  (54 K at 22 GPa). In addition, it has also been reported that the B-doped ternary hydride can remain stable at low pressure. In this project, I focused on the doping B into U-H, and

explored whether the pressure required for its stability can be further reduced through appropriate elements. The objective of this research is to search potential low-pressure or ambient pressure high-temperature superconductors.

### **5.1 LIST OF PLANNED PUBLICATIONS**

[1] ' High- $T_c$  ternary metal hydrides,  $YKH_{12}$  and  $LaKH_{12}$ , discovered by machine learning', [Kousuke Nakano, Kenta Hongo and Ryo Maezono], [journal (temporary)].

[2] ' Novel superconducting clathrate structures in  $LaYH_{12}$ ', [Kousuke Nakano, Kenta Hongo and Ryo Maezono], [journal (temporary)].

**研究成果：**

音楽情報科学における主要なテーマのひとつとして、楽器の判定処理が挙げられる。これは楽曲を録音したデジタル音源データを計算機上で処理し、曲中に用いられた楽器が何であるかを判定するものである。当研究では、楽器の判定にあたって計算機上で多数回の反復処理が発生することに着目し、並列プログラミングを活用した処理の高速化を目指した。北陸先端科学技術大学院大学の Large Memory Cluster を用いた実験では並列化を進めるにつれて処理時間が減少してゆき、当該計算機の 1 ノード最大コア数である 64 コアへの並列化を行なった場合、処理時間は 1 コア処理時と比較し 30 倍程度高速化することを確認した。楽器の判定を計算機上で実現することにより、音楽の自動分類技術や楽曲推薦技術の高度化につながるものと期待される。

**利用環境：**

使用計算機	Large Memory Cluster（北陸先端科学技術大学院大学運用）
使用ノード数	1 ノード
CPU	Intel Xeon G-6242 2.8GHz（16 Cores x4）
メモリ	1.5TB

**処理概要及びコア増加時の処理時間の変化：**

処理（秒）	1 Core	2 Cores	4 Cores	8 Cores	16 Cores	32 Cores	64 Cores
Step 1: サンプル音源データの読み込み	2.867	1.811	1.046	0.538	0.214	0.193	0.215
Step 2: 演奏音源データのパワースペクトル計算	10.191	5.376	2.959	1.806	1.652	1.339	0.946
Step 3: サンプル音源と演奏音源間の類似度計算および結果のファイル出力	183.282	91.223	42.572	24.366	16.48	11.154	5.253
合計時間	196.340	98.410	46.577	26.710	18.346	12.686	6.414

# ACTIVITY REPORT OF FY2020

## 1. PROJECT TITLE:

### **LARGE DEPENDENCE OF DMC BANDGAP ON SEMICORE CONTRIBUTION : GAN STUDY**

**PRINCIPAL INVESTIGATOR:** Nikaido Yutaka

**AFFILIATION:** JAIST

**MACHINE USED:** XC40, hster

## 2. PROJECT DESCRIPTION:

Gallium nitride (GaN) is widely used for electric device such as LED and transistor, taking its advantages of high mobility and thermal conductivity. While band gap of GaN is experimentally reported around 3.4 eV, density functional theory (DFT) underestimates the band gap. This is so-called the band gap problem, which originates from the insufficient cancelation of the self-interactions between the electrons in DFT. Diffusion quantum Monte Carlo (DMC), on the other hand, is a candidate for overcoming the band gap problem. In DMC, the ground state energy of many electrons system is calculated using wave function that undergoes imaginary time development. This formalism is ab initio calculation, hence the band gap problem cannot arise in DMC.

However, some other issues would affect the calculated band gap in DMC. Our focus is mainly on semicore d electrons of GaN. In the current project, we have investigated how prediction of the gallium nitride (GaN) band gap is affected by treating semi-core d-electrons as either valence or core states in the pseudopotentials, which correspond to small-core and large-core approximations, respectively. To distinguish the effect of semi-core treatment from another band gap problem recognized in density functional theory (DFT), that is, underestimation related to the self-interaction problem, we have performed diffusion Monte Carlo (DMC) evaluations under the fixed-node approximation and the optical gap scheme. A comparison to experimental measurements of band gap energies indicated that DMC predictions were overestimated, whereas DFT simulations, which were used as a guiding function (DFT→DMC), were typically underestimated. This agrees with the trend reported in previous DMC studies on band gap estimates. The large-core approximation has resulted in a greater overestimation than the small-core treatment in both DFT and DMC. The bias in the overestimation was approximately 30% for the DFT→DMC operation. Several possible causes of this bias were considered, such as pd-hybridization, core-polarization, and electronic screening effects. However, although these factors could qualitatively account for the overestimation caused by the large-core treatment, the estimated magnitude of the bias was too small to explain the evaluated difference between small-core and large-core approximations of the band gap.

## 3. NAME OF CO-AUTHORS IN JAIST

### 3.1 LIST OF CO-AUTHORS

- Prof. Maezono Ryo / School of information science.
- Associate Prof. Hongo Kenta / School of information science.
- Associate Prof. Nakano Kousuke / School of information science.

A/How many co-authored publication with JAIST faculties so far [1].

B/How many co-authored publication with JAIST faculties planed in future [at least 1].

#### **4. PUBLICATION LIST DURING FY2020 USING JAIST FACILITIES**

[1] "GaN bandgap bias caused by semi-core treatment in pseudopotentials analyzed by the diffusion Monte Carlo method", Y. Nikaido, T. Ichibha, K. Nakano, K. Hongo, R. Maezono, AIP Advances 2021, 11, 025225.

#### **5. CO-AUTHORING PROJECTS FOR FY2021 USING JAIST FACILITIES**

Diffusion Monte Carlo Study on Relative Stabilities of Boron Nitride Polymorphs.

##### **5.1 LIST OF PLANNED PUBLICATIONS**

[1] 'Diffusion Monte Carlo Study on Relative Stabilities of Boron Nitride Polymorphs' [K. Nakano], [journal (temporary)].



## Content Generation and Serious Game Implementation For Security Awareness Training

JAIST, Nomi, Ishikawa, Japan  
Beuran Lab, ZENG Youmeizi  
Machine: Cray XC40

With the growth of global informatization, the extensive application of information technology and the widespread use of intelligent terminals, the Internet has penetrated every aspect of our lives. However, while we use the Internet to communicate, do online shopping and so on, hence it brings infinite convenience to people, we cannot ignore the associated cybersecurity risks. To defend against cyberattacks, in addition to maintaining vulnerabilities, it is more important to train individuals on cybersecurity awareness.

There are many methods to conduct training on cybersecurity awareness. In traditional ways, we will learn in the classroom or through reading materials. However, those traditional learning strategies have not met the demand. We want to find a combined education and entertaining way to conduct cybersecurity awareness training and improve learning motivation. Moreover, like training, the impact of learning content on trainees is not ignored, and many quality materials are needed.

To quickly and efficiently obtain a large amount of customizable training content, this research proposed using Natural Language Generation to generate the content automatically. In particular, we used Naive Bayes models to generate cybersecurity training content for the platform presented. Training Naive Bayes models were carried out in Cray XC40, and each job used 4 nodes to improve the training speed.

After solving the problem of creating training content, we developed a web application, named CyATP (Cybersecurity Awareness Training Platform), to display the generated content as a convenient way to conduct security awareness training.

In the research, we propose a way to automatically generate cybersecurity training content using NLG technology. This method can quickly, easily and efficiently generate a large amount of training content, can meet users' needs. We develop and implement a cybersecurity awareness training platform CyATP. It provides a tool for everyone who wants to gain or expand their knowledge in cybersecurity awareness. We provide the source code of CyATP as an open-source project on GitHub that can be easily deployed by security educators and used for training content generation and as a training platform.

### List of Planned Publication:

- 1) Y. Zeng, "Content Generation and Serious Game Implementation for Security Awareness Training", Master's thesis, March 2021.

## 「相変化材料を用いた光スイッチの相変化状態制御に関する研究」

石川工業高等専門学校・佐野陽之

JAIST 応用物理学領域・水谷五郎

使用計算機：Cray XC40

### <目的>

相変化材料の自己保持性を利用した“高速で低消費電力な光スイッチ”（相変化光スイッチ）の開発が進められている。これまでの研究において、「相変化材料の相状態がよく分からず、予想される性能が出ない」「挿入損失が大きい」などの問題が生じている。そのため、本研究では、「光スイッチ動作の完全な理解」と「低損失な相変化材料の提案」を行う。

### <内容および研究成果（状況）>

#### ○相変化シミュレーション

相変化材料 GST ( $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ ) を用いた光スイッチ動作を完全に理解するため、光スイッチ動作の時間スケール（数 10～数 100ns）での実験結果を正しく再現できる「リアルな GST 相変化シミュレーションモデル」を作成した。GST の相状態は、結晶密度ベクトルが「結晶核生成」「結晶成長」「融解によるアモルファス化」の 3 つの機構によって時間変化するとして表現した。GST のリアルな物性を表すため、結晶化熱と融解熱を考慮し、熱伝導、電気伝導、誘電率などの物性変化を温度と結晶化度などの関数として考慮した。また、相変化の重要因子である「結晶核生成確率  $P_n$ 」と「結晶成長速度  $V_g$ 」について、Burr と Peng の 2 つのモデルを用いた計算を行い比較検討した。GST 薄膜のレーザー光加熱による結晶化実験（文献データ）のマルチフィジックス・シミュレーション（光伝搬、熱伝導、GST 相変化）を行ったところ、Burr モデルでは実験データに比べて著しく結晶化が早く起こるのに対し、Peng モデルはほぼ実験データを再現した。これにより、Peng の  $P_n$  と  $V_g$  を用いた GST 相変化モデルは実デバイスの相変化（特に結晶化）シミュレーションに使えることが確認できた。なお、急加熱・急冷によって GST のアモルファス化が起こるが、この時 GST の過冷却の効果が重要となる。今後は、過冷却の効果を相変化シミュレーションに組み込む予定である。

#### ○低損失な相変化材料の探索

GST に様々な不純物をドーピングすることにより、より低損失（光吸収の小さい）な物性を示すことが期待される。まずは、基礎となる GST 結晶の電子状態および光学応答を第一原理計算で求める。そのため、現在文献調査を行い、結晶構造及び計算パラメーター等の情報を収集している。

なお、この第一原理計算に関する研究は、JAIST 応用物理学領域の水谷教授との共同研究に基づいて実施している。

### <研究業績等> 本研究に関連する研究発表等を以下に示す。

#### 1) 佐野陽之、桑原正史、“GeSbTeのリアルな相変化シミュレーションモデルの開発”

応用物理学会 2021年3月18日（オンライン）18p-P01-3

### <関連取得研究費>

#### 1) 科研費基盤研究（C）「相変化光スイッチの相変化状態制御の理論解析と最適なデバイス構造・材料の探索」令和2年度～5年度、研究代表者：佐野陽之

## ヘロナミド類の抗真菌作用メカニズムの解明のための計算分子設計技術の開発

所属・氏名：北陸大学・齋藤大明

使用計算機: xc40

### 【序論・方法】

近年、化合物やペプチドを含む生体分子の膜会合の分子メカニズムの理解には、化合物やペプチドだけではなく、それを取り囲む脂質膜も含めた動的構造や相互作用特性の理解が重要であるとの研究が多数報告され、多くの注目を集めている[Meth. Enzymol. 294(1999)208]. 例えば、抗真菌活性を有するヘロナミド類は飽和型の脂質膜にはタイトに結合する一方で、不飽和型脂質膜には弱く結合することが報告されている[J. Am. Chem. Soc. 2014, 136, 5209.]. このようなヘロナミドの脂質膜への結合特性の違いは、ヘロナミドと脂質膜内における結合構造や相互作用特性の違いによるものと考えられる. すなわち、脂質膜は会合分子の機能発現のための「場」であり、化合物やペプチドは最適な膜溶媒環境下においてその機能を最大化させる「膜特異性」を有している. このような分子会合の膜特異性の理解には会合分子と脂質膜の動的構造や相互作用特性の評価が課題となるが、添加分子を含んだ混合脂質膜は実験観測の難しさのために、これら特性は未だ明らかではなく、分子シミュレーションによる解析が望まれている.

掛谷等の実験によると、ヘロナミド C は DMPC のような飽和型脂質膜にはタイトに結合する一方で、POPC や DOPC のような不飽和型脂質膜には弱く結合することが報告された. また一方でヘロナミド A はヘロナミド C に比べて脂質膜への結合特性が非常に弱いことも示されている. このようなヘロナミドの脂質膜への結合特異性の違いは、ヘロナミド C および A の脂質膜内における結合構造や相互作用特性の違いによるものと考えられるが、膜内分子構造の観測の難しさにより未だ明らかとされていない. 一方で、叶等は同様に細胞膜の抗菌活性を有する様々なヘロナミド類の合成研究を精力的に進めている.

本研究では、これら実験により合成・評価されているヘロナミド類の脂質膜における分子動力学 (MD) シミュレーションを実施し、ヘロナミド類の膜内結合特性を具体的に明らかにする. ヘロナミド C, や A 単体の脂質膜における MD 計算に加えて、叶等が合成したヘロナミド類の脂質膜における MD 計算を実施する. 各々の化合物の膜内における結合位置や分子配向の違いを詳細に解析し、その構造や相互作用特性の違いについて議論する. さらに、ヘロナミドの膜内濃度変化に対する膜構造や相互作用特性の変化についても言及する.

### 【結果】

8-deoxyheronamide C/DMPC heronamide C/DMPC heronamide A/DMPC heronamide B/DMPC

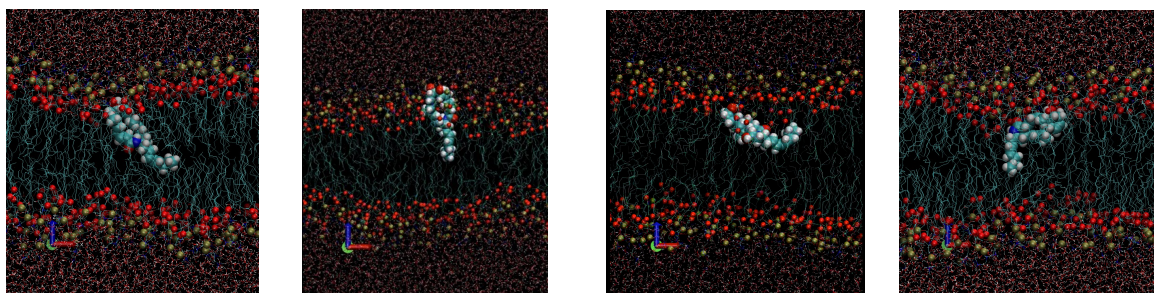


図 1. MD シミュレーションによる DMPC 二重層膜中におけるヘロナミドの分子配向の様子

図1に MD シミュレーションによる DMPC 二重層膜中におけるヘロナミドの分子配向の様子を示す。いずれの種類もヘロナミドにおいても、コレステロール等と同じように分子中の水酸基等を膜の水和層の方向に向くように配向する結果が示された。ヘロナミド C は、水酸基を膜の水和層領域に向けて配向し、水酸基は膜の極性基付近の領域に分布していることが示され、炭化水素鎖は二重層膜の中心部あたりに多く存在する結果となった解析の結果、ヘロナミド C はおよそ 20 度程度チルトした状態で存在する分布が最も多いことが示された。同様の結果は 8-deoxyheronamide C/DMPC の系にも見られた。

ヘロナミド A は、分子中の水酸基が分子の中位にも存在することからヘロナミド C に比べて膜厚方向に対して大きく傾いた形で配向することが示された。このような配向特性はヘロナミド A の膜厚方向に対する原子分布や角度分布の結果においても特徴的な分布形で示された。解析の結果、ヘロナミド A はおよそ 60 度程度チルトした状態で存在する分布が最も多いことが示された。同様な膜内における分子配向特性はヘロナミド B でも確認された。ヘロナミド B の場合、分子のリング部領域は大きく傾いた配向となるが、炭化水素鎖は膜圧方向に配向する結果となった。これら配向特性は分子内における水酸基が存在する場所の違いによるものと考えられ、それらが膜の極性・水和領域と相互作用することにより膜内での膜厚方向に対する原子分布や配向分布が変化するものと考えられる。

関連発表論文（査読あり）

- 1) Rina Saito, Kengo Hayashi, Haruna Nomoto, Misuzu Nakayama, Yousuke Takaoka, Hiroaki Saito, Souhei Yamagami, Toshiya Muto & Minoru Ueda, “Extended JAZ degron sequence for plant hormone binding in jasmonate co-receptor of tomato SICOI1-SlJAZ”, Scientific Reports volume 11, Article number: 13612 (2021).

# 高性能計算とデータ科学を利用した物質探索支援システムに関する研究

金沢工業大学工学部情報工学科・林 亮子

使用計算機: KAGAYAKI

## 概要

本研究では、自動的あるいは半自動的に物質・材料科学シミュレーションを行い、新規物質の探索を支援するシステムの開発を目的とする。さらに、現在マテリアルインフォマティクスで問題となっているデータ不足の問題を解決するため、実験データとシミュレーション結果データの関係に基づき、実際には実験データが存在しない条件についてもデータを予測して新規物質発見を支援することを目指す。この考えの背景にあるのは、計算科学においてシミュレーションをピンポイント的かつ静的に行うこれまでの研究手法から、結果データを自動処理しながらシミュレーションを粗放的かつ動的に行う研究手法へのパラダイムシフトである。

シミュレーションを用いたこれまでの材料設計では、研究プロセスに研究者が介在することが多い。しかし人間の処理能力には限界があるために研究者が研究プロセスのボトルネックになってしまう。またデータを人間が理解するためには、シミュレーションの結果得られた情報を削減する必要があるために、本来得られた計算結果が活用できない。そこで本課題では、研究プロセスに含まれる定型業務を自動化し、シミュレーション結果得られる情報をそのまま利用することを目標とする。

本研究課題は導電性分子ワイヤの探索を実問題として扱うが、導電性分子ワイヤの類例物質で、強い力で結合した導電性高分子がすでに実用化段階にあって、実験データが蓄積されている。構造もよく調べられており、計算データも作成可能である。そこで、導電性高分子の導電性発現に関して、計算科学によって実験的知見を再現できるかどうかを検討する。次に、導電性高分子で得られた知見に基づいて分子ワイヤ物質候補を提案し、計算科学を活用して導電性分子ワイヤ物質の実現可能性を検討する。この過程で導電性高分子の知見で得た計算データと実験データの関係に関するルールを活用する。本研究で採用するのは「順問題」的手法ではあるが、自動化により人間が行う作業を減らすことで物質探索の支援を目指す。

現在は通常のデスクトップ機上で基礎調査と基礎的な開発を行っており、大規模サーバを利用する準備ができたのち、貴学のシステム上で試験実行を経て利用させて戴く予定である。また、現段階では KAGAYAKI を利用させて戴くことを想定しているが、計算の性質上大規模メモリを必要とする場合は LMPCC, GPU 利用が効果的な場合は VPCC を利用させて戴く可能性がある。

## 関連取得研究費

- 1) 科学研究費補助金「データ科学と計算科学の協働に基づく物質探索システム」、基盤研究(C)、課題番号 19K12007, 2019~2021 年度。

# ACTIVITY REPORT OF FY2020

## 1. PROJECT TITLE:

### Structural And Electronic Properties Of Cu Doped ZnO Nanowire

**PRINCIPAL INVESTIGATOR:** Mohaddeseh Abbasnejad

**AFFILIATION:** Shahid Bahonar university of Kerman, Kerman, Iran

**ADDRESS:** Dep. of Physics, Shahid Bahonar university, Pajooheh Sq., Kerman 76169-14111 Iran

**PHONE:** +989177317514

**EMAIL:** m.abbasnejad@gmail.com

**WEBPAGE:** [https://physics.uk.ac.ir/en/~m\\_abbasnejad](https://physics.uk.ac.ir/en/~m_abbasnejad)

**MACHINE USED:** (XC40/Altix/hster/Linux cluster) hster, XC40

## 2. PROJECT DESCRIPTION:

In the recent years, there has been increased interest in zinc oxide (ZnO) in terms of its potential applications because of its particular electric and optical properties. Owing to its large direct band gap (3.4 eV) and exciton binding energy (60meV), the compound is suggested as a material for opto-electronic devices, such as light emitting diodes, and lasers. Moreover, its piezoelectric and pyroelectric properties make ZnO a promising candidate for sensors, actuators and energy generators. Piezoelectric effect is unique in a way that couples mechanical stimulation with electronic output. Recently two-dimensional (2D) materials have sparked interest for piezoelectric applications because of their high crystallinity and ability to withstand enormous strain. The two-dimensional layered phase of ZnO was firstly predicted by Freeman that ZnO film prefers a graphitic-like structure when the number of ZnO(0001) layers is reduced due to the depolarization of the surface.

In the current project, we desire to investigate the piezoelectric properties of ZnO monolayer in the framework of density functional theory as implemented in ABINIT package. Moreover, since native defects may also affect the properties of pristine ZnO monolayer, these properties will also study for defected structure.

## 3. NAME OF CO-AUTHORS IN JAIST

### 3.1 LIST OF CO-AUTHORS

- Prof. Ryo Maezono/School of information science.

A/How many co-authored publication with JAIST faculties so far [4].

B/How many co-authored publication with JAIST faculties planed in future [at least 2].

## 4. PUBLICATION LIST DURING FY2020 USING JAIST FACILITIES

- [1] "Magnetic ordering of Ti-doped single ZnO monolayer", O. Jowhari Shirazi, M. Abbasnejad, R. Fathi, R. Maezono, submitted to Physica E Low Dimens. Syst. Nanostruct.
- [2] "Electronic and magnetic properties of pure and Cu doped ZnO non-polar surface", E. Irandegani, R. Maezono, M. Abbasnejad, under preparation.
- [3] "Structural and electronic properties of Cu doped ZnO nanowire", E. Irandegani, F. Badpa, R. Maezono, M. Abbasnejad, under preparation.

## 5. CO-AUTHORING PROJECTS FOR FY2021 USING JAIST FACILITIES

Study of Piezoelectricity of ZnO monolayer using ab initio calculations.

## **5.1 LIST OF PLANNED PUBLICATIONS**

[1] "Piezoelectric properties of ZnO monolayer via first principle calculations", [Ryo Maezono], [Journal of Applied Physics].

## ACTIVITY REPORT OF FY2020

### 1. PROJECT TITLE:

#### ELECTRONIC AND OPTICAL STUDY OF THERMOCHROMIC W-DOPED VO<sub>2</sub> USING AB-INITIO METHOD

**PRINCIPAL INVESTIGATOR:** Mayank Dotiyal (under the supervision of Dr Emila Panda)

**AFFILIATION:** PhD research scholar, Materials engineering

**ADDRESS:** IIT Gandhinagar, India

**PHONE:** +918196035988

**EMAIL:** mayankd@iitgn.ac.in

**WEBPAGE:** -

**MACHINE USED:** hster cluster

### 2. PROJECT DESCRIPTION:

Vanadium dioxide (VO<sub>2</sub>) shows an interesting thermochromism property, in which it acts a semiconductor at any temperature below the Transition temperature (T<sub>c</sub>= 68°C) and metallic above the T<sub>c</sub>. The aim of our experiment is to calculate the electronic and optical properties of W-doped VO<sub>2</sub> using the ab-initio approach. The obtained results would, then, be correlated with the experimentally obtained results. The future plans include the interfacial, infrared emissivity and defect studies of the same.

### 3. NAME OF CO-AUTHORS IN JAIST

#### 3.1 LIST OF CO-AUTHORS

-Prof. Ryo Maezono /School of Information science

-Prof. Kenta Hongo /School of Information science

A/How many co-authored publication with JAIST faculties so far [0].

B/How many co-authored publication with JAIST faculties planed in future [1].

### 4. PUBLICATION LIST DURING FY2020 USING JAIST FACILITIES

### 5. CO-AUTHORING PROJECTS FOR FY2021 USING JAIST FACILITIES

I would be using VASP (Vienna ab-initio Simulation Package) software for the first-principles calculations of the W-doped VO<sub>2</sub>. Other doping elements would be chosen subsequently based on the desirable value of the transition temperature.

#### 5.1 LIST OF PLANNED PUBLICATIONS

[1] 'First-principles and experimental investigation of electronic and optical properties of W-doped VO<sub>2</sub>', [Ryo Maezono and Kenta Hongo], [Applied Surface Science]



# ACTIVITY REPORT OF FY2020

## 1. PROJECT TITLE:

Understanding the phase stability of oxides in the context of fine tuning their functional properties including role of plasmonic properties of nitrides - a combinatorial approach based on computations and experiments.

**PRINCIPAL INVESTIGATOR:** Niraja Moharana

**AFFILIATION:** Doctoral student, IIT Madras, India

**ADDRESS:** Department of Metallurgical and Materials Engineering, IIT Madras, Chennai – 600036, India

**PHONE:** +91-8763318358

**EMAIL:** niraja.moharana.moharana@gmail.com

**WEBPAGE:** NA

**MACHINE USED:** XC40

## 2. PROJECT DESCRIPTION:

Plasmonic nanocrystals of transition metal nitrides (for eg: TiN) crystallized insitu in a Si-O-C-N ceramic matrix have been synthesized via precursor approach which are referred to as polymer derived ceramics (PDCs). It is possible to control the size and volume fraction of the nanocrystals by appropriate heat-treatment. The idea is to explore and establish the precise role of crystallite size on the plasmonic response of such nitrides-nanocomposites both experimentally and computationally. Experimentally, UV-visible spectroscopy was used to confirm the plasmonic behavior of these nanocomposites so that one could establish the crystallite size dependence of plasmonic behavior as well as the plasmonic peak shifts which could be a consequence of strain effects imposed by the matrix on the nitride crystallites.

To establish the plasmonic peak computationally, dielectric (imaginary part) needs to be plotted as a function of energy (optical absorption spectra). It will be useful to replicate the experimental absorption spectra i.e., plasmonic peak measured by UV-visible spectroscopy. Time dependent density functional theory (TDDFT) can be used for this purpose. It calculates the evolution of electrons under the effect of oscillating electric field associated with the presence of photon. It is based on Runge-Gross theorem which states that “for a given initial state, the time evolving one body density tells you everything about the time evolving interacting electronic system exactly”.

VASP uses Bath Salpeter equation (BSE) to solve the TDDFT. It determines optical response function (frequency dependent dielectric function) including excitonic effect. A preceding GW step is needed to determine the screened coulomb kernel. GW method, which is a post DFT step, takes into account the coulombic interaction of the system (W). It provides the access to the spectral properties of the system by determining the energies of the quasiparticles of the system using a screened exchange like contribution to the self-energy. A significant number of empty bands are needed for this approach. Hence, the approach is very time consuming and need more memory even for a simple compound (ex-TiN).

Another approach, Quantum espresso uses time dependent density functional perturbation theory (TDDFT) to calculate the optical spectra. Liouville-Lanczos method is used to calculate the full optical

spectrum for the wide energy range. This method avoids using large number of empty bands. Instead, it uses a projector operator on to the occupied states. Hence, it uses less time and memory.

### **3. NAME OF CO-AUTHORS IN JAIST**

#### **3.1 LIST OF CO-AUTHORS**

- Prof. Ryo Maezono/School of Material science

A/How many co-authored publications with JAIST faculties so far [00].

B/How many co-authored publications with JAIST faculties planed in future [01].

### **4. PUBLICATION LIST DURING FY2020 USING JAIST FACILITIES**

NA

### **5. CO-AUTHORING PROJECTS FOR FY2021 USING JAIST FACILITIES**

Same project as above.

#### **5.1 LIST OF PLANNED PUBLICATIONS**

[1] 'Plasmonic property of transition metal nitrides in a Si-O-C-N matrix : experiments and computational validation (temporary)', [Niraja Moharana, Ryo Maezono, N.V.Ravi Kumar, K.C.Hari Kumar], [Temporary].

# ACTIVITY REPORT OF FY2020

## 1. PROJECT TITLE:

### **SURFACE DEFECTS AND THEIR IMPACT ON THE ELECTRONIC STRUCTURE OF SNS USING DENSITY FUNCTIONAL THEORY**

**PRINCIPAL INVESTIGATOR:** Rohit Sanjay Dahule (supervised by Dr Emila Panda)

**AFFILIATION:** Discipline of Materials Engineering, Indian Institute of Technology, Gandhinagar

**ADDRESS:** D- 465, Duven Hostel, IIT Gandhinagar, village Palaj, Gandhinagar, Gujrat (INDIA)- 382355

**PHONE:** +91 8007871307

**EMAIL:** rohit.dahule@iitgn.ac.in

**WEBPAGE:** If available

**MACHINE USED:** hster cluster

## 2. PROJECT DESCRIPTION:

SnS is a promising photovoltaic absorber material because of its low cost and less toxicity. However, various types of point defects exist in this material, affecting the electronic defect states and thereby its electrical properties. In this work, the density functional theory (DFT) calculations were performed using the Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP) to calculate the bulk and surface electronic properties of SnS along with the intrinsic surface defect states. In this study, an orthorhombic crystal structure with 8 atoms (i.e.,  $\text{Sn}_4\text{S}_4$ ) in its supercell was considered for computing the bulk electronic properties of SnS. Moreover, the surface properties of the SnS (111) surface were calculated using a surface supercell. The SnS surface supercell was constructed with three slabs and the thickness of each slab was  $5.909 \text{ \AA}$  with a vacuum thickness of  $15 \text{ \AA}$ . Here, Generalized Gradient Approximation (GGA) Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) was adopted for the exchange-correlation potential. Here the electronic properties were calculated using electronic band structure as well as partial density of states (PDOS). The bulk SnS structure predicted an indirect bandgap of  $0.8102 \text{ eV}$  and the SnS (111) surface supercell showed a direct bandgap of  $0.248 \text{ eV}$ . Here, surface defects vacancies ( $V_{\text{Sn}}$  and  $V_{\text{S}}$ ), interstitial ( $\text{Sn}_i$  and  $\text{S}_i$ ) and antisites ( $\text{Sn}_s$  and  $\text{S}_{\text{Sn}}$ ) were formed on SnS (111) surface. Further, the formation energy determined to estimate the stability of surface defects. Here, sulphur vacancy ( $V_{\text{S}}$ ) was found to be more stable as compared to other defect states in Sn-rich condition and sulphur antisite ( $\text{S}_{\text{Sn}}$ ) was found to be more stable as compared to its other defect states in S-rich condition due to its lower defect formation energy and hence were likely to form. Furthermore, the electronic structure for the SnS surface supercell with  $V_{\text{Sn}}$  showed small unoccupied states above the Fermi level and the band structure showed the bandgap of  $0.38 \text{ eV}$ . Here, the PDOS of surface configurations for  $V_{\text{S}}$ ,  $\text{Sn}_i$ ,  $\text{S}_i$  and  $\text{Sn}_s$  surface defect showed the direct bandgap of  $0.228$ ,  $0.389$ ,  $0.218$  and  $0.3414 \text{ eV}$  respectively. Whereas, the PDOS for SnS (111) surface supercell with  $\text{Sn}_s$  was found to have an overlap of the valence and conduction band edges at the Fermi level. As a result, this surface configuration would exhibit a metallic characteristic. The understanding developed through this work can be in designing efficient photovoltaic devices.

### **3. NAME OF CO-AUTHORS IN JAIST**

#### **3.1 LIST OF CO-AUTHORS**

- Prof. Ryo Maezono /School of Information science.
- Prof. Kenta Hongo/ School of Information science.

A/How many co-authored publication with JAIST faculties so far [01].

B/How many co-authored publication with JAIST faculties planed in future [01].

### **4. PUBLICATION LIST DURING FY2020 USING JAIST FACILITIES**

[1] 'Surface Study of  $\text{Cu}_2\text{SnS}_3$  Using First - Principles Density Functional Theory' Rohit Dahule; Abhishek Raghav, Adie Tri Hanindriyo, Kenta Hongo, Ryo Maezono, Emila Panda, Adv. Theory Simul. 2000315.

### **5. CO-AUTHORING PROJECTS FOR FY2021 USING JAIST FACILITIES**

In FY 2021, I am continuing the project of research on Tin-Sulphide (SnS) material. I am planning to do the first-principles calculation to do the study of the electronic structure of n-type semiconductor materials such as Zn(O,S), ZnO and CdS. Furthermore, the interface study of SnS (p-type material) and n-type materials for the application of thin-film solar cells.

#### **5.1 LIST OF PLANNED PUBLICATIONS**

[1] 'Surface defects and their impact on the electronic structure of SnS using density functional theory', [Ryo Maezono and Kenta Hongo], [Applied Surface Science].

# MPI 環境下での動的マルチキャストのための配信アルゴリズム 自動チューニングに関する研究

福井大学大学院工学研究科知識社会基礎工学専攻（情報工学コース） 山田竜輝 森眞一郎  
北陸先端科学技術大学院大学 情報社会基盤研究センター 井口 寧  
使用計算機: Cray XC40 使用ソフト Cray MPICH

## 1 概要

本研究では、MPI を用いたマスタ・スレーブ型の大規模並列処理環境下で、実行時の動的かつ頻繁なグループ変更に対応可能な動的マルチキャストで使用する配信アルゴリズムの追加および実行環境下に対応した配信アルゴリズムの自動チューニングした。そして、北陸先端科学技術大学院大学の共有計算サーバを用いて有効性の検証を行った。新たに追加検討を行った配信アルゴリズム hybrid d の有効性を確認し、実行環境下での最適な配信アルゴリズムへの切り替えに近づけることができた。

## 2 研究背景

### 2.1 動的マルチキャスト

MPI 通信ライブラリには、並列処理を行う全ノードグループのサブセットとなるグループを定義したのち、当該グループ内の全ノードに対してブロードキャストを行うことでマルチキャストを実現することが可能である。しかしながら、この手法ではグループに分割する際にグループの分割に関係ないノードも含め全ノードでの同期処理が必要である。そこで、先行研究 [1] によりビットマップを用いた手法により実行時の動的かつ頻繁なグループ変更に対応可能な動的マルチキャストの実装がなされた。ビットマップとは、マルチキャストに参画するノードを 0/1 で表現したビットデータである。実装の内容としては、アルゴリズムに従ってメッセージ送信前にビットマップの送信を行う。ビットマップを受け取ったノードは、自身が属するグループとそのグループ内での役割をビットマップにより確認し、グループ内で定義された配信アルゴリズムに従って、分散配信を行うことで動的マルチキャストを実装している。

### 2.2 配信アルゴリズム

これまでに、先行研究 [1] では動的マルチキャストの配信アルゴリズムとして binomial-tree(以下, bino と呼ぶ) と binomial-tree scatter ring allgather(以下, ring と呼ぶ) の 2 種のアルゴリズムを状況に応じて切り替えて使用していた。この 2 種のアルゴリズムを含めて、新たに文献 [2] などを参考に binomial-tree scatter doubling allgather(以下, doubling と呼ぶ)、および broadcast hybrid d(以下, hybrid d と呼ぶ) を加えた 4 つのアルゴリズムについての調査を行った。ここで、hybrid d はメッセージ分割数  $d$  の値を変更することにより、アルゴリズムの挙動を変更可能である。この性質により、hybrid 1 は bino と等価なアルゴリズムとなり、hybrid p は doubling と等価なアルゴリズムとなるため、以下では ring と hybrid d についてのみ議論を行う。

調査にあたり議論で必要となる数学的定義での通信コストについて表 1 に示す。相互通信する上で 1sec あたりに送信できるデータ数を  $S$ [byte/sec], MPI の起動コストを含むノード間の遅延を  $S$ [sec], 集団通信に参加するノード数を  $p$ , 送信するメッセージ長を  $n$ [byte], hybrid d でのメッセージ分割数を  $d$  ( $d \leq p$ ,  $d$  は 2 のべき乗) とする。木の高さや通信ステップの回数を stage と表現する。表 1 は配信アルゴリズムとそれぞれの通信コストについてをまとめたものである。

表 1: 配信アルゴリズムとその通信コスト

ring	$\frac{2(p-1)}{p} \frac{n}{S} + \{\log_2 p + (p-1)\}L$
hybrid d	$(\frac{2(d-1)}{d} + \frac{1}{d} \log_2 \frac{p}{d}) \frac{n}{S} + (\log_2 d + \log_2 p)L$

## 3 環境依存パラメータを考慮した通信コストのモデリング

様々な配信アルゴリズムは、プラットフォーム、メッセージサイズ、プロセス数などに応じて、優れたパフォーマンスを発揮する。本研究では、表 1 に示した通信コストに対して、実装コード、システム特性などを考慮した修正を行い、状況に応じたアルゴリズムの選択精度向上を目指す。

修正した通信コストを表 2 に示す。相互通信する上で 1sec あたりに送信できるデータ数を  $S_1$ (単方向),  $S_2$ (双方向)[byte/sec], MPI 関数の起動コストを含むノード間の遅延を  $L_1$ (単方向),  $L_2$ (双方向)[sec], メッセージサイズ  $n$ ,  $n/2$ ,  $n/4$  に対して 3 段階まで速度のパラメータを導入、それぞれ  $S_{1,2}(n)$ ,  $S_{1,2}(n/2)$ ,  $S_{1,2}(n/4)$  とする。

表 2: 配信アルゴリズムとその通信コスト

ring	$(\frac{1}{2S_1(n/2)} + \frac{5p-6}{2pS_1(n/4)})n + \{2\log_2 p + 2(p-1)\}L_1$
hybrid 1	$(\frac{n}{S_1(n)} + 2L_1)\log_2 p$
hybrid 2	$(\frac{\log_2 p}{S_1(n/2)} + \frac{1}{2S_2(n/2)})n + 2L_1\log_2 p + L_2$
hybrid d ( $d > 2$ )	$\{\frac{1}{2S_1(n/2)} + \frac{1}{2S_2(n/2)} + (\frac{d-2}{2d} + \frac{1}{d} \log_2 \frac{p}{d}) \frac{1}{2S_1(n/4)} + \frac{d-2}{2dS_2(n/4)}\}n + 2L_1\log_2 p + L_2\log_2 d$

## 4 評価実験

### 4.1 実験環境

北陸先端科学技術大学院大学が有する並列計算機 Cray XC40(Intel Xeon E5-2695v4 2.1GHz × 256 ノード, CRAY Dragonfly Topology ネットワーク, icc 17.0.7+cray-mpich) を用いて評価実験を行った。起動時のノード数は4~256ノードの2のべき乗ずつ用意し、各ノードに1プロセスを割り当て1ノードが有するメッセージを全起動ノードに送信されるまでの時間を計測する。ring, hybrid  $2^m$  ( $0 \leq m \leq 8$ ) のアルゴリズムを対象として、1[Kbyte] から 1[Gbyte] まで2倍間隔でメッセージサイズを変化させて計測を行った。各実行毎に500回の計測を行い、上位下位それぞれ10%を除いたトリム平均を行った値を実行時間とした。

### 4.2 通信コスト予測モデルによるアルゴリズムの切り替えの可能性検討

マルチキャストする際の最速なアルゴリズムは、実行環境等の様々な要因で変化する。そこで、表1,2の通信コストを予測モデル式として計算し、実行時に最も速いアルゴリズムの推定を行う。各アルゴリズムの実行結果と予測モデル式を比較し評価を行う。表1,2を基にしたモデル式をそれぞれ予測モデル式1, 2とする。パラメータSとLは、実行環境依存のパラメータである。モデル式1では、機器のカタログ性能(ハードウェアレベルの最速値[3])を用いたものであるのに対し、モデル式2ではあらかじめping-pongプログラムの実行結果をもとにSおよびLを導出し、モデル式の計算を行う。

### 4.3 実験結果と考察

送信先ノード数、メッセージサイズごとの最も速かった配信アルゴリズムを図1に示す。今回の結果では、ringが速くなることはなく hybrid d の d の値を切り替えることで最適化が可能であることが分かった。図1,2,3では条件下での最速であった hybrid d の d の値を示したものである。図1,2,3を比較することで、予測モデル式2の方が予測モデル式1に対して切り替えのタイミングに改善がみられた。特に4K 64K[byte] にかけての逆転現象(最速な配信アルゴリズムが再度切り替わる)の再現に近づいた。

今回の測定結果で予測モデル式2を参考にして切り替えた結果、最適ではないがある程度速度は保証できた。予測ミス最大は、43%におよぶ箇所がみられたが、グラフの傾向が切り替わる付近であることや計測のゆらぎの影響が大きかったものとする。予測モデル式2はまだ改善できる箇所が残されていると考えるが、計測のゆらぎなどを含めた実際の計測結果を踏まえると現状以上の精密さが必要となるかどうかを検討する必要がある。

	4	8	16	32	64	128	256
1K	1	1	1	1	1	1	1
2K	1	1	1	1	1	1	1
4K	1	1	1	1	1	2	2
8K	1	1	2	2	2	2	4
16K	1	2	2	4	4	4	4
32K	2	2	4	4	8	8	8
64K	2	4	4	8	8	16	16
128K	2	4	8	8	16	16	32
256K	2	4	8	16	16	32	32
512K	2	4	8	16	32	32	64
1M	2	4	8	16	32	64	64
2M	2	4	8	16	32	64	128
4M	2	4	8	16	32	64	128
8M	2	4	8	16	32	64	128
16M	2	4	8	16	32	64	128
32M	2	4	8	16	32	64	128
64M	2	4	8	16	32	64	128
128M	2	4	8	16	32	64	128
256M	2	4	8	16	32	64	128
512M	2	4	8	16	32	64	128
1G	2	4	8	16	32	64	128

図1: 実行結果

	4	8	16	32	64	128	256
1K	1	1	1	1	1	1	1
2K	1	1	1	1	1	1	1
4K	1	1	2	2	2	2	2
8K	2	2	2	4	4	4	4
16K	1	1	4	4	8	8	8
32K	1	2	2	2	8	16	16
64K	1	1	4	8	16	16	16
128K	1	2	2	8	16	16	32
256K	1	2	8	8	16	32	32
512K	2	2	8	16	16	32	32
1M	2	4	8	16	32	32	64
2M	2	4	8	16	32	64	64
4M	2	4	8	16	32	64	128
8M	2	4	8	16	32	64	128
16M	2	4	8	16	32	64	128
32M	2	4	8	16	32	64	128
64M	2	4	8	16	32	64	128
128M	2	4	8	16	32	64	128
256M	2	4	8	16	32	64	128
512M	2	4	8	16	32	64	128
1G	2	4	8	16	32	64	128

図2: 予測モデル式1

	4	8	16	32	64	128	256
1K	1	1	1	2	1	1	1
2K	1	1	1	1	1	1	1
4K	1	1	2	2	4	4	2
8K	2	2	2	2	4	2	4
16K	1	1	4	8	4	4	8
32K	1	1	1	2	8	8	8
64K	1	1	2	4	4	4	16
128K	1	2	2	4	4	8	64
256K	1	4	4	4	8	8	64
512K	2	4	4	8	16	16	16
1M	2	4	8	8	16	16	64
2M	2	4	8	8	16	32	64
4M	2	4	8	8	16	64	64
8M	4	4	8	16	16	64	32
16M	4	4	8	8	32	32	64
32M	4	4	8	16	64	64	32
64M	2	4	8	16	64	128	128
128M	2	4	8	16	64	64	64
256M	2	4	8	16	64	128	64
512M	2	4	8	16	64	128	64
1G	2	4	8	16	64	128	128

図3: 予測モデル式2

## 5 まとめ

先行研究[1]の動的マルチキャストで使用されていた複数のアルゴリズムを包括する hybrid d を用いた動的マルチキャストを実装し、有効性を確認した。ならびにアルゴリズムとしての hybrid d の有用性が確認できた。

実験に基づく予測モデルを用いた d の自動選択の可能性についても一定の成果が得られた。 hybrid d の切り替えのタイミングは表2でも十分に利用可能であるが、より良い精度を求めるにはさらに要因となる部分を考慮し、通信コストに含めることで精度の向上が見込める。

## 6 謝辞

本研究の機会を与えて頂いた情報社会基盤研究センターの井口寧教授に感謝いたします。

### 関連発表論文

- 1) 長嶺祐輔:”投機的手法を用いたインタラクティブシミュレーションシステムの多重投機拡張と動的マルチキャストの応用”, 福井大学工学部情報・メディア工学科修士論文,2017
- 2) Mike Barnett, Satya Gupta, David G. Payne, Lance Shuler, Robert van de Geijn, Jerrel Watts:”Building a High-Performance Collective Communication Library”, Proceedings of the 1994 ACM/IEEE conference on Supercomputing Pages 107-116
- 3) 山田竜輝:”MPI 環境下での動的マルチキャストのための配信アルゴリズムのパラメータ最適化”, 2020-HPC-175(10), 1-9(2020-07-23), 2188-8841

### 関連取得研究費

- 1) 令和2年度北陸地区国立大学学術研究連携支援事業「AI時代を支えるアルゴリズムとハードウェアの高度人材育成」(福井大学 福間慎治, 金沢大学 深山正幸, 北陸先端大学院大学 田中清史) [各大学代表]
- 2) 科学研究費補助金 基盤研究(C) (R02~R04), 「頑強な弱連携分散協調型高性能エッジコンピューティング環境の構築」, 福井大学 森真一郎

### 3. マテリアルサイエンス分野の計算サーバ利用研究

# Single-Molecule Imaging of a Polymer and All-atom MD Simulations

マテリアルサイエンス系  
篠原 健一

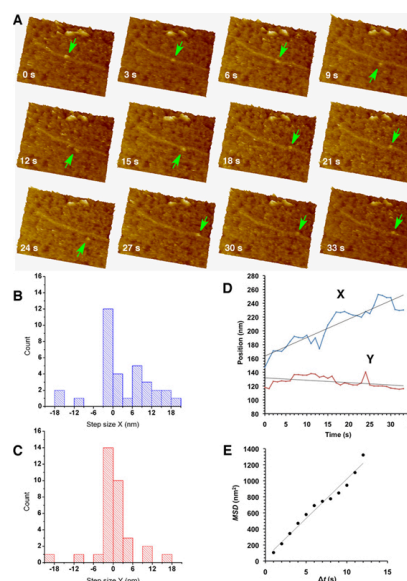
使用計算機 : vpsc

使用ソフト : BIOVIA Materials Studio (Forcite, Amorphous Cell)

## 1. らせん高分子鎖に沿った分子歩行運動の一方方向性の証明

既に我々は、キラルらせん高分子鎖一本の上を短鎖分子が歩行する分子モーター機能を報告している<sup>1)</sup>。今回、高速原子間力顕微鏡（高速AFM）で観測された短鎖分子の運動を統計解析した結果、分子運動が一方方向に優位に偏っていることが証明された。らせん高分子鎖と短鎖分子が相互作用する動態を全原子分子動力学計算によってシミュレーションした。

**Figure 1.** Unidirectional processive movement of a short chain along a chiral helical polymer chain. **(A)** A short chain walking observed by AFM video imaging. The walking short chain was indicated by green arrow in snapshots of AFM movie. XY: 300 nm x 225 nm (192 pixel x 144 pixel), Rate: 1.0 fps. The origin (0,0) is the upper left in the AFM image. **(B)** Distribution of the step size of X ( $\Delta X$ ) of walking molecule between frames ( $\Delta X = X_{n+1} - X_n$ ). **(C)** Distribution of the step size of Y ( $\Delta Y$ ) of walking molecule between frames ( $\Delta Y = Y_{n+1} - Y_n$ ). **(D)** Time course of the walking molecule position as the X and Y coordinates. Unidirectional movement was confirmed. **(E)** MSD plots based on the trajectories data of (D).  $D = 24.6 \text{ nm}^2/\text{s}$ .



## 2. 変性SBR鎖と無機材料表面の定着性ダイナミクスのイメージング

既に我々は、変性SBRおよび非変性SBRポリマー鎖一本の構造とダイナミクスのイメージングに成功し、従来法では不可能であった、変性基の分子内位置および定着機能の直接解析を達成している。今回、官能基を有する開始剤を用いて重合したSBRを高分子反応で鎖中に平均4個のカルボキシル基を導入したポリマー (A-X-SBR) のマイカ基板上における動態を室温の*n*-オクチルベンゼン中で高速AFMイメージングした。その結果、両末端の拡散係数に明確な違いが見られ、低い拡散係数 ( $D_1 = 2.00 \text{ nm}^2/\text{s}$ ,  $D_3 = 0.63 \text{ nm}^2/\text{s}$ ) を有する末端は官能基化されているものと考察された。一方、高い拡散係数 ( $D_2 = 9.75 \text{ nm}^2/\text{s}$ ,  $D_4 = 6.32 \text{ nm}^2/\text{s}$ ) を有する末端は非変性部位と考察された。すなわち、高分子鎖末端を官能基化することで、非変性末端に比べて拡散係数を1/5以下にすることができ、自動車タイヤのゴム特性におけるエネルギーロスの原因を抑制できる（燃費性能が向上する）。合わせて、変性SBR鎖の液中ダイナミクスを全原子分子動力学計算によってシミュレーションした。

### 研究業績

学会発表

1. Ken-ichi Shinohara, Yuu Makida, *Polym. Prepr., Japan* **69** (1), 2Pf110 (2020).
2. Ken-ichi Shinohara, Yuu Makida, *Polym. Prepr., Japan* **69** (2), 1112 (2020).



## 自発的な分子集合体の形成とその外場応答

マテリアルサイエンス系 講師 下川 直史

東京大学 物性研究所 物質設計評価施設 助教 樋口 祐次

千葉大学大学院 理学研究院 物理学研究部門 助教 伊藤 弘明

使用計算機 : Cray XC40, Large Memory PC Cluster -superdome-

### 【研究背景】

高分子・液晶・コロイド・両親媒性分子・生体物質などの物質群はソフトマターと呼ばれ、熱揺らぎ程度での容易な変形、高い内部自由度、実時間で観測可能なほどの遅いダイナミクス（長い緩和時間）、階層的な秩序構造といった性質を有している。ソフトマターの平衡・非平衡での秩序形成の理解は工業的な応用だけに留まらず、生物・医学の発展にも寄与している。

ソフトマターの構成単位は巨大なマクロ分子であったり、分子集合体であったりと非常に大きい。さらに、変形や相分離といった多数の分子が共同的に動く現象がターゲットとなる。計算機シミュレーションによりこれらマクロな現象を記述することは有用であるが、全原子計算などは計算コストがかかりすぎ現実的ではない。そこで、構成分子を“粗視化”することで、計算コストを落とし、長時間で多数の分子が引き起こす現象の記述に取り組んだ。

### 【研究成果】

#### 1. 低張液中の荷電脂質二成分膜での三相分離構造

荷電脂質 DOPS と中性脂質 DPPC の二成分から成る脂質膜ベシクルを低張液に浸すと、二成分であるにも関わらず、三相に相分離する現象を実験的に見出した。この三相分離構造の安定性を理解するために、粗視化分子動力学シミュレーションを行った。

電離し負電荷を有した DOPS(-)、電離せずに電氣的に中性な状態である DOPS(N)、電氣的に中性な DPPC の三成分を 1000:1000:3000 の比率で混ぜたベシクルの相分離を計算した。DOPS(N)に富む領域（赤色）を DOPS(-)に富む領域（緑色）が取り囲み、その外側に DPPC に富む領域（黒色）が現れるという空間配置が得られ、実験結果と一致することがわかった(Fig.1)。

これは、電荷を有した DOPS(-)が一次元的な帯状のドメインを形成し、荷電脂質に乏しい DOPS(N)と DPPC に富む相と接触することで、静電相互作用を大きく低下させることができるためであることがわかった。これらの結果は論文としてまとめ、現在投稿中である。

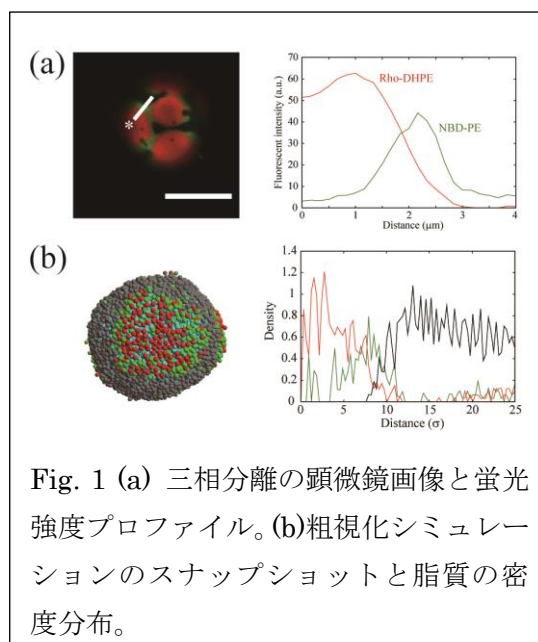


Fig. 1 (a) 三相分離の顕微鏡画像と蛍光強度プロファイル。(b)粗視化シミュレーションのスナップショットと脂質の密度分布。

## 2. 電場下における荷電脂質膜の相分離と変形挙動

生体膜のモデル系や薬剤送達の器として、人工脂質二重膜小胞（リポソーム）が用いられている。本研究では生体膜に荷電脂質が含まれることに注目し、粗視化分子動力学シミュレーションを用いて荷電脂質を含むリポソームの静電相互作用と構造の関係を調べている。

相分離ドメインの位置やダイナミクスを制御を目的として、外場として直流電場  $E$  を与えた。荷電脂質を 10%含むベシクルの粗視化分子動力学シミュレーションを行ったところ、与えた電場の向きに相分離ドメインが形成され、さらに電場の向きを反転させることで、荷電ドメインの位置も反転し、実験での報告[1]を粗視化シミュレーションで再現することができた(Fig. 2)。また、個々の脂質分子のダイナミクスの解析から、このドメインの反転プロセスでは荷電ドメインが周囲の中性脂質の中を"泳動"して生じることがわかっている。このことを考慮してドメイン移動について理論的な解析を行い、ドメイン反転時のドメイン位置の時間発展を解析的に書き下した(Fig. 3)。この電場強度依存性は粗視化分子動力学シミュレーション結果ともよく一致した。以上の結果をまとめた論文原稿を現在執筆中である。

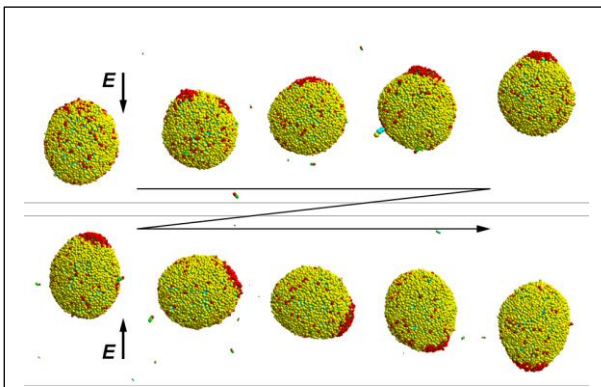


Fig. 2 電場の反転と荷電ドメイン(赤)の応答。

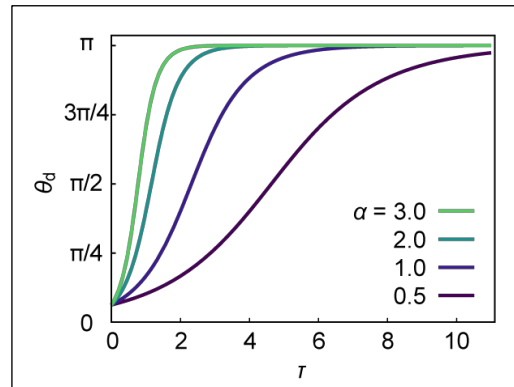


Fig. 3 ドメイン位置の時間発展。

## 3. インプット・アウトプットファイル変換用プログラム

最近では、多機能で解説サイトも多く存在することから、分子動力学シミュレーションプログラム LAMMPS[2]がよく使用されている。これまでに独自で開発してきたシミュレータで得られた研究データとの連携を円滑に行うために、インプット・アウトプットファイルの変換プログラムを作成した。今後は、LAMMPS と独自開発したシミュレータを併用して研究を進めていく。

### 【参考文献】

[1] F. J. Zendejas *et al.*, *Chem. Comm.*, **47**, 7320-7322 (2011).

[2] S. Plimpton, *J Comp Phys.*, **117**, 1-19 (1995).

<https://lammps.sandia.gov/>

### 【関連業績】

#### 発表論文

1. Three-phase coexistence in binary charged lipid membranes in hypotonic solution  
Jingyu Guo, Hiroaki Ito, Yuji Higuchi, Klemen Bohinc, Naofumi Shimokawa,  
Masahiro Takagi, arXiv:2012.10698 (2020). (査読無し)

#### 学会発表

1. 直流電場に駆動される荷電脂質ベシクルの相分離ドメイン  
伊藤弘明、下川直史、樋口祐次、日本物理学会第 76 回年次大会、オンライン、(2021  
年 3 月 12 日～15 日)

#### 外部資金

1. 日本学術振興会 二国間交流事業共同研究 (スロベニア) (代表: 伊藤弘明)  
「荷電脂質膜の相分離と秩序構造: 電解質価数の効果」  
(令和 3 度～令和 4 年度)

# Band structure calculation in commensurately encapsulated ABA-stacked trilayer graphene

Kareekunnan Afsal  
Mizuta Lab  
School of Materials Science  
Machine Used: XC40  
Program Code: SIESTA

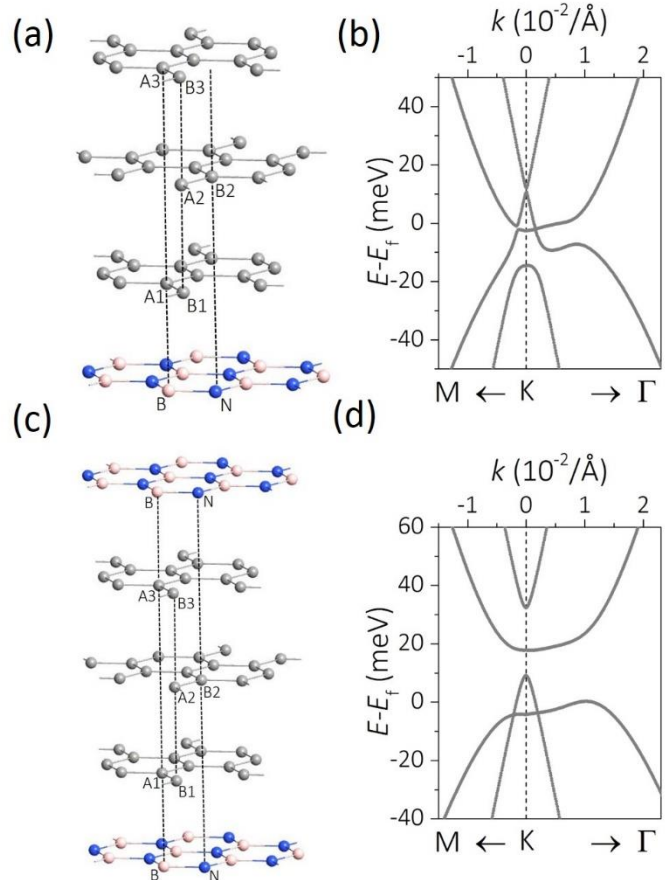
Trilayer graphene exhibits two stacking configurations, ABA and ABC. While ABC-stacked trilayer graphene opens a band gap under external electric field, predominantly existing ABA-stacked trilayer graphene is a semi-metal which does not open a band gap even under the application of an out-of-plane electric field. This limits the use of trilayer graphene in potential device applications as it necessitates the opening of a band gap. In this study, we show that commensurately encapsulating ABA-stacked trilayer graphene with hBN where the top and bottom hBN are in-phase with each other, opens a band gap of 10 meV. We also show that the key in opening a band gap in ABA-stacked trilayer graphene is to increase the potential of the middle layer while keeping the potential of the outer layers the same.

*Ab initio* calculations are performed using QUANTUM ESPRESSO [1] which uses plane wave basis. PBE exchange-correlation functional [2] which employs Generalized Gradient Approximation (GGA) is used in all the calculations. A norm-conserving pseudo-potential with kinetic energy cutoff for wave functions of 60 Ry is used. In order to procure optimum interlayer distance between the two graphene layers, semi-empirical Grimme's DFTD2 [3] van der Waals correction is employed. A fine Monkhorst-Pack grid of  $36 \times 36 \times 1$  is used in all the calculations. The atomic positions are optimized until the force on each atom is less than  $0.01 \text{ eV/\AA}$ .

Figure 1: (a) Schematic diagram showing the BN/ABA heterostructure. The Boron atom comes below the A1 (and A3) Carbon atom and the Nitrogen atom comes below B2 Carbon atom. (b) Band structure of the BN/ABA heterostructure at K high symmetry point around the Fermi level. The large potential difference between the outer graphene layers leads to the hybridization of the monolayer- and bilayer-like bands. (c) Schematic diagram showing the encapsulated ABA trilayer heterostructure. The top hBN is placed in-phase with the bottom hBN. (d) Band structure of the encapsulated heterostructure (BN/ABA/BN) at K high symmetry point around the Fermi level. A band gap of 10 meV is opened between the monolayer like valence band maximum and the bilayer like conduction band minimum.

## References:

- [1] Paolo Giannozzi *et. al.*, J. Phys.: Condens. Matter **21**, 395502 (2009).
- [2] John P. Perdew *et. al.*, Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).
- [3] Stefan Grimme *et. al.*, J. Comp. Chem. **27**, 1787 (2006).



# ACTIVITY REPORT OF FY2020

## 1. PROJECT TITLE:

### DIFFUSION MONTE CARLO EVALUATION OF DISILOXANE LINEARIZATION BARRIER

**PRINCIPAL INVESTIGATOR:** Adie Tri Hanindriyo

**AFFILIATION:** Japan Advanced Institute of Science and Technology (JAIST)

**MACHINE USED:** XC40

## 2. PROJECT DESCRIPTION:

The disiloxane molecule is a prime example of silicate compounds containing the Si-O-Si bridge. The molecule is of significant interest within the field of quantum chemistry, owing to the difficulty in theoretically predicting its properties. Herein, the linearisation barrier of disiloxane is investigated using a fixed-node diffusion Monte Carlo (FNDMC) approach, which is currently the most reliable *ab initio* method in accounting for electronic correlation. Calculations utilizing the density functional theory (DFT) and the coupled cluster method with single and double substitutions, including noniterative triples (CCSD(T)) are carried out alongside FNDMC for comparison. Two families of basis sets are used to investigate the disiloxane linearisation barrier - Dunning's correlation-consistent basis sets cc-pVxZ ( $x = D, T, \text{ and } Q$ ) and their core-valence correlated counterparts, cc-pCVxZ. It is concluded that FNDMC successfully predicts the disiloxane linearisation barrier and does not depend on the completeness of the basis sets as much as DFT or CCSD(T), thus establishing its suitability.

## 3. NAME OF CO-AUTHORS IN JAIST

### 3.1 LIST OF CO-AUTHORS

- Prof. Ryo Maezono/School of Materials Science.
- Prof. Kenta Hongo/ School of Information Science.

A/How many co-authored publication with JAIST faculties so far [5].

B/How many co-authored publication with JAIST faculties planed in future [1].

## 4. PUBLICATION LIST DURING FY2020 USING JAIST FACILITIES

- [1] A.T. Hanindriyo, S. Sridar, K.C. Hari Kumar, K. Hongo, and R. Maezono. "Ab initio thermodynamic properties of certain compounds in Nd-Fe-B system". *Comp. Mat. Sci.* **180** 109696 (2020)
- [2] A. Hermawan, A.T. Hanindriyo, E.R. Ramadhan, Y. Asakura, T. Hasegawa, K. Hongo, M. Inada, R. Maezono, and S. Yin. "Octahedral morphology of NiO with (111) facet synthesized from the transformation of NiOHCl for the NO<sub>x</sub> detection and degradation: experiment and DFT calculation". *Inorg. Chem. Front.* **7** 3431-3442 (2020)
- [3] T. Hasegawa, A. Shigee, Y. Nishiwaki, M. Nagasako, A.T. Hanindriyo, K. Hongo, R. Maezono, T. Ueda, and S. Yin. "New layered perovskite family built from [CeTa<sub>2</sub>O<sub>7</sub>]<sup>-</sup> layers: coloring mechanism from unique multi-transitions". *Chem. Commun.* **56** 8591-8594 (2020)
- [4] A. Raghav, A.T. Hanindriyo, K. Utimula, M. Abbasnejad, R. Maezono, and E. Panda. "Intrinsic electronic defect states of anatase using density functional theory". *Comp. Mat. Sci.* **184** 109925 (2020)

## 5. CO-AUTHORING PROJECTS FOR FY2021 USING JAIST FACILITIES

[1] *Ab initio* investigation of multiferroic iron chalcogenides  $\text{BaFe}_2\text{S}_3$  and  $\text{BaFe}_2\text{Se}_3$

### 5.1 LIST OF PLANNED PUBLICATIONS

[1] 'Diffusion Monte Carlo evaluation of disiloxane linearization barrier', [Ryo Maezono, Kenta Hongo], [Physical Chemistry Chemical Physics]

# ACTIVITY REPORT OF FY2020

## 1. PROJECT TITLE:

### AB INITIO SIMULATIONS OF A NEW MIXED-ANION COMPOUND

**PRINCIPAL INVESTIGATOR:** Gewinner Senderanto Sinaga

**AFFILIATION:** Maezono Lab.

**MACHINE USED:** XC40, VPCC

## 2. PROJECT DESCRIPTION:

Since a perovskite oxide,  $\text{BaCeO}_3$ , is stable, new oxyhydrides based on  $\text{BaCeO}_3$  have been expected to exist, but such oxyhydrides have yet to be synthesized experimentally. Topotactic reactions of  $\text{BaCeO}_3$  can be a promising choice of synthesizing the oxyhydrides compounds, where  $\text{CaH}_2$  works as a reduction reagent of substituting oxygen atoms with hydrogen atoms. To investigate the synthesizability, we have performed electronic structure simulations based on density functional theory (DFT) and phonon simulations combined with DFT for the  $\text{BaCeO}_2\text{H}$  compound. Our computational study revealed that the O atoms are regularly removed and substituted by the H atoms favoring the apical sites. The DFT band structure calculation showed that  $\text{BaCeO}_2\text{H}$  has a direct bandgap of 2.8 eV, where the valence band consists of a hybridization of the Ce-4f orbitals with O-2p and Ce-5d orbitals, whereas a Ce-4f mainly contributes to the conduction band. The phonon simulation demonstrated that  $\text{BaCeO}_2\text{H}$  has no imaginary frequency at any high symmetry points, and hence confirmed that  $\text{BaCeO}_2\text{H}$  is dynamically stable as its ground-state structure. This implies that  $\text{BaCeO}_2\text{H}$  should be synthesized experimentally.

## 3. NAME OF CO-AUTHORS IN JAIST

### 3.1 LIST OF CO-AUTHORS

- Prof. Kenta Hongo / Research Center for Advanced Computing Infrastructure
- Prof. Ryo Maezono / School of Information Science
- Dr. Kousuke Nakano / School of Information Science

A/How many co-authored publication with JAIST faculties so far [1].

B/How many co-authored publication with JAIST faculties planed in future [1].

## 4. PUBLICATION LIST DURING FY2020 USING JAIST FACILITIES

[1] G. S. Sinaga, S. Song, K. Utimula, K. Hongo, R. Maezono, K. Nakano. "Discovery of novel BCS-type superconductors in  $\text{ThCr}_2\text{Si}_2$ -type crystals via *ab-initio* and machine-learning techniques". (under review).

## 5. CO-AUTHORING PROJECTS FOR FY2021 USING JAIST FACILITIES

### 5.1 LIST OF PLANNED PUBLICATIONS

[1] 'Ab initio structural identification of a new perovskite oxyhydride  $\text{BaCeO}_2\text{H}$  and its electronic and thermal properties (temporary)', [K. Nakano, R. Maezono, K. Hongo], [Inorg. Chem. (temporary)].

# 機械学習による Ziegler-Natta 触媒一次粒子の非経験的構造決定と構造性能相関解明

所属・氏名 高棹玄徳, 谷池俊明

使用計算機: VPCC, LMPCC

工業的なポリオレフィン製造の主流を占める Ziegler-Natta 触媒の重要な性質の一つに、マルチサイト性、すなわち得られるポリマーの構造分布がある。しかし、その起源については未だ十分に明らかにされていない。このような基礎理解は触媒の体系的な設計に貢献すると期待されている。本研究課題における令和 2 年度の研究実績を以下に示す。

## 1. $MgCl_2/TiCl_4$ 系の非経験的構造決定と分布の解析

多様なサイズと組成の  $TiCl_4$  終端  $MgCl_2$  ナノプレートに対し機械学習を用いた構造決定を実施し、その過程で得られた 100 万に及ぶ構造から本触媒の活性種前駆体である  $TiCl_4$  に対し構造・電子的分布の分析を行った。これは、Ziegler-Natta 触媒のマルチサイト性が  $MgCl_2/TiCl_4$  系の本質的な特性に起源を持つものであるという新たな仮説をもたらした。本内容は、査読付き国際論文誌の Journal of Catalysis に掲載された。(Figure 1) また、構造決定の過程で得られた  $xMgCl_2/yTiCl_4$  安定構造群の座標データセットを Elsevier 社のデータジャーナルである Data in Brief に提供した。

## 2. $MgCl_2/TiCl_4/donor$ 系の構造決定プログラム開発と構造決定

前年度までに開発した  $MgCl_2/TiCl_4$  系に対する非経験的構造決定プログラムに、有機ドナー分子への拡張を実施した。現在は工業的に用いられる 9,9-ビス(メトキシメチル)フルオレンを導入した触媒ナノ粒子の構造決定を実施中である。

## 3. ニューラルネットワークポテンシャル (NNP) による構造決定の高速化

DFT 計算の遺伝的アルゴリズムによる反復は多大な計算コストを要する。これを解決するため、機械学習の一種である人工ニューラルネットワーク (ANN) によって DFT 計算結果を再現する NNP の構築を実施中である。

本研究課題の中核を為す非経験的構造決定における反復的な DFT 計算は多大な計算量を要求するものであり、遂行にあたっては本学の計算機環境が必要不可欠であった。

本研究課題は令和 2 年度 日本学術振興会特別研究員 DC2 に採択され科研費の交付を受けた。

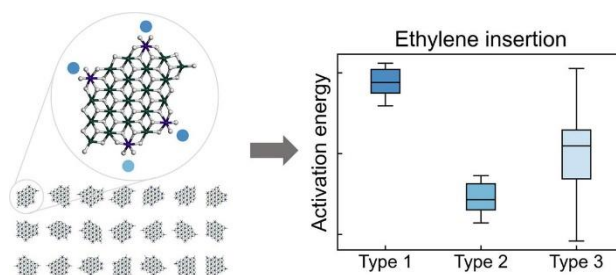


Figure 1. Structural distribution of  $TiCl_4$  on  $MgCl_2$  and the activation energy of ethylene insertion.

## 関連発表論文

- 1) "Insight into Structural Distribution of Heterogeneous Ziegler-Natta Catalyst from Non-empirical Structure Determination", Gentoku Takasao, Toru Wada, Ashutosh Thakur, Patchanee Chammingkwan, Minoru Terano, Toshiaki Taniike, Journal of Catalysis, Elsevier, 2020 年.
- 2) "Dataset of energetically accessible structures of  $MgCl_2/TiCl_4$  clusters for Ziegler-Natta catalysts", Gentoku Takasao, Toru Wada, Ashutosh Thakur, Patchanee Chammingkwan, Minoru Terano, Toshiaki Taniike, Data in Brief, Elsevier, 2020 年.
- 3) "Revisiting the Identity of  $\delta$ - $MgCl_2$ : Part I. Structural Disorder Studied by Synchrotron X-Ray Total Scattering", Toru Wada, Gentoku Takasao, Alessandro Piovano, Maddalena D'Amore, Ashutosh Thakur, Patchanee Chammingkwan, Paolo Cleto Bruzzese, Minoru Terano, Bartolomeo Civalleri, Silvia Bordiga, Elena Groppo, Toshiaki Taniike, Journal of Catalysis, Elsevier, 2020 年.
- 4) "Revisiting the Identity of  $\delta$ - $MgCl_2$ : Part II. Morphology and Exposed Surfaces Studied by Vibrational Spectroscopies and DFT Calculation.", Alessandro Piovano, Maddalena D'Amore, Toru Wada, Paolo Cleto Bruzzese, Gentoku Takasao, Ashutosh Thakur, Patchanee Chammingkwan, Minoru Terano, Bartolomeo Civalleri, Silvia Bordiga, Toshiaki Taniike, Elena Groppo, Journal of Catalysis, Elsevier, 2020 年.

## 関連取得研究費

- 1) JSPS 科研費 20J15042 (令和 2 年度 特別研究員 DC2 特別研究員奨励費)



## ナノ触媒の非経験的構造決定を目的とした機械学習ポテンシャルの構築

所属・氏名 先端科学技術研究科 谷池研究室・筑間弘樹

使用計算機: pcc, lmpcc, xc40

ナノ触媒の構造決定は、触媒の動的挙動と動作原理の理解に貢献できると考えられている。当研究室では、第一原理計算と遺伝的アルゴリズムの組み合わせによる Ziegler-Natta 一次粒子の非経験的構造決定に成功した<sup>1</sup>。しかし、第一原理計算による構造のエネルギー評価には膨大な時間を要するため、実際の一次粒子径 (2.4nm~4.0nm) に満たない 1.1nm~2.0nm 程度の大きさの粒子に対する実施に留まっている。本研究では大規模な系の非経験的構造決定を行うために、ニューラルネットワークポテンシャル (NNP) を用いたエネルギー計算の高速化を図る。これは、分子モデルと第一原理計算の結果の対応関係を再現するようなモデル (ポテンシャル) を NN によって構築する試みである。本研究では、過去に蓄積された Ziegler-Natta 触媒一次粒子の第一原理計算結果をデータセットとして利用し、それを高速かつ高精度に再現可能な NNP を構築することを目標とする。

本年度の検証では NN アーキテクチャ、NN 訓練条件、分子モデルを NN の入力として適した形に変換する関数 (記述子) のパラメータといったハイパーパラメータを模索するため、複数の NN 訓練を行った。記述子のパラメータ決定のためには構造決定の過程で計算された数万構造以上の分子モデルを含む巨大なデータセットの分析が不可欠であること、NNP 構築のためにはその巨大なデータセットを用いた NN の訓練が必要であることから、本学の共有計算サーバーを利用した。NNP 構築には RuNNer を用いた。構築した NNP で最も精度が良かったモデルのエネルギー予測結果を Figure 1 に示す。データセットには 19MgCl<sub>2</sub>/4TiCl<sub>4</sub> の構造決定の過程で計算された分子モデルを用いた。平均平方二乗誤差 (RMSE) は 0.74 kcal/mol 程度であり、ハイパーパラメータの調整により、比較的高精度かつ第一原理計算に比べ非常に低い計算コストで構造のエネルギーを予測できる NNP 構築に成功した。現在は n2p2 の LAMMPS NNP interface を用いた NNP による構造最適化の再現を検証している。

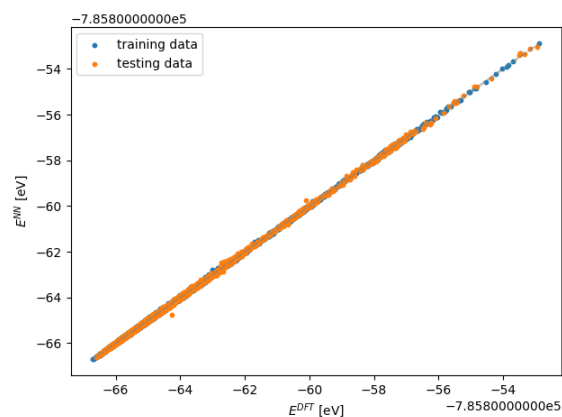


Figure 1. Predicted energy for structures in our dataset.

### 参考文献

- (1) G. Takasao, T. Wada, A. Thakur, P. Chammingkwan, M. Terano, T. Taniike, *ACS Catal.* **2019**, *9*, 2599–2609.
- (2) J. Behler, M. Parrinello, *Phys. Rev. Lett.* **2007**, *98*, 146401.

※本学の計算サーバから得られた成果は、申請者の修士論文に利用される予定である。

# ACTIVITY REPORT OF FY2020

## 1. PROJECT TITLE:

### AB INITIO EVALUATION OF COMPLEXATION ENERGIES FOR CYCLODEXTRIN DRUG-INCLUSION COMPLEXES

**PRINCIPAL INVESTIGATOR:** Kenji Oqmhula

**AFFILIATION:** Hongo Lab. JAIST, Nomi, Ishikawa, Japan

**MACHINE USED:** (xc40/Linux cluster)

## 2. PROJECT DESCRIPTION:

ドラッグデリバリーシステムにおけるホスト材料開発には、ホスト-ゲスト間の結合エネルギー制御が重要となる。実験で測定困難な結合エネルギーを評価できる密度汎関数法(DFT)は、分子設計指標を与えるツールとして期待されている。しかし、交換相関(XC)汎関数による予見齟齬と分散力記述の難しさが課題となっている。そこで、本研究では、大気中での失活が報告されているプルンバギンをゲスト分子として、典型的なホスト分子である $\beta$ -シクロデキストリン誘導体(BCD, MBCD, 2-O-HPBCD)からなるホスト-ゲスト系の結合エネルギー算定に対する XC 汎関数の性能評価を行った。B3LYP 汎関数をベースとして分散力補正の D3 補正、長距離交換補正の CAM 補正の各スキームを付与した手法の算定値と、高コストであるが、分子間相互作用を精密に評価する量子拡散モンテカルロ法(DMC)により得た参照値を比較することで、性能評価を行った。より実用的な水溶液中での結合エネルギー評価のため、連続誘電体モデル(PCM)による溶媒効果の寄与についても検討した。分散力の D3 補正が無い B3LYP では、図 1 に示すように結合エネルギーを殆ど再現しないが、補正を加えた B3LYP-D3、CAM-B3LYP-D3 は結合安定化を再現した。また、B3LYP-D3 では DMC 参照値よりも結合エネルギーを過大評価しているが、CAM-B3LYP-D3 は DMC 参照値に非常に近い結合エネルギーを与えた。CAM 補正によって長距離における交換斥力を評価されたためだと考えられる。分散力と長距離交換の評価が結合エネルギー算定に重要であると結論付けた。また、BCD ホスト系で PCM/真空中での安定配座の逆転が生じることから、ホスト-ゲスト系の結合エネルギー算定には、溶媒効果の考慮が必要であると結論付けられる。

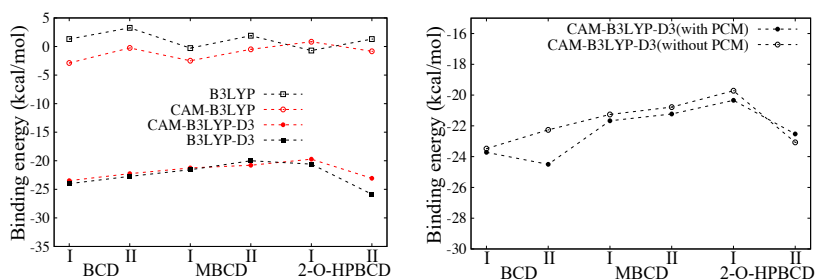


図 1 (左)PBG-BCDs 系の DFT 算定、(中) PBG/2-O-HPBCD 系に対する DMC/DFT 算定、(右) CAM-B3LYP-D3 による PBG-BCDs 系の溶媒効果。図中の縦軸で負値となる結果は安定な包接体状態を意味している。左図と右図の横軸に現れる I と II は PGB 配向の異なる配座を示している。

## 3. NAME OF CO-AUTHORS IN JAIST

### 3.1 LIST OF CO-AUTHORS

- Prof. Maezono Ryo /School of information science.

- Associate Prof. Hongo Kenta/ School of information science.

A/How many co-authored publication with JAIST faculties so far [3].

B/How many co-authored publication with JAIST faculties planed in future [2].

#### **4. PUBLICATION LIST DURING FY2020 USING JAIST FACILITIES**

- [1] "Ab initio evaluation of complexation energies for cyclodextrin drug-inclusion complexes", K. Oqmhula, K. Hongo, R. Maezono, T. Ichibha, ACS Omega 5, 19371-19376 (2020)
- [2] "Light Absorption Properties and Electronic Band Structures of Lead-Vanadium-Oxyhalide Apatites", M. Nakamura, K. Oqmhula, K. Utimula, M. Eguchi, K. Oka, K. Hongo, R. Maezono and K. Maeda, Chem. Asian J. 15, 540-545 (2020)
- [3] "Two-Dimensional Perovskite Oxynitride  $K_2LaTa_2O_6N$  with an  $H^+/K^+$  Exchangeability in Aqueous Solution to Form Stable Photocatalyst for Visible-Light  $H_2$  Evolution", T. Oshima, T. Ichibha, K. Oqmhula, K. Hibino, H. Mogi, S. Yamashita, K. Fujii, Y. Miseki, K. Hongo, D. Lu, R. Maezono, K. Sayama, M. Yashima, K. Kimoto, H. Kato, M. Kakihana, H. Kageyama and K. Maeda, Angew. Chem. Int. Ed. 59, 2-10 (2020)

#### **5. CO-AUTHORING PROJECTS FOR FY2020 USING JAIST FACILITIES**

Study on thermal conductive polymer crystal

Study on the structure robustness for electrochemical reaction of cobalt hydroxide

##### **5.1 LIST OF PLANNED PUBLICATIONS**

- [1] "High throughput exploration of high thermal conductive polymer crystal", [Ryo Maezono, Kenta. Hongo], [journal (temporary)].
- [2] "Structure robustness for electrochemical reaction of cobalt hydroxide", [Ryo Maezono, Kenta. Hongo], [journal (temporary)].

## Cr/SiO<sub>2</sub> 触媒のマルチサイト性に関する計算科学的検討

谷池研究室・八木 勇太

使用計算機: PCC, LMPCC

### 概要

高密度ポリエチレン製造に用いられる Phillips 触媒は、アモルファス SiO<sub>2</sub> 表面上に Cr 活性種が担持された構造を持つ。Cr 種周囲の不均一な配位環境が、得られるポリエチレンの分子量分布に寄与していると考えられているが、異なる配位環境を実験的に単離する事は困難である。本研究では反応場分子動力学計算によって構築したアモルファス SiO<sub>2</sub> を用いて Phillips 触媒表面をモデリングし、Cr 種の構造の分布を計算化学的に明らかにすることを試みた。

反応場分子動力学計算を用いて担体であるアモルファス SiO<sub>2</sub> モデルを構築した。反応場分子動力学計算とは、従来の古典分子動力学計算では不可能だった結合の破壊や生成を可能とした計算手法である。ソフトウェアには LAMMPS を使い、石英からアモルファス SiO<sub>2</sub> の構造を得るために以下のような熱処理 (NVT, ステップ時間: 0.5 fs) を行った。まず加熱処理 (4000 K, 2 万ステップ) を行った後、アニールと冷却を繰り返し (4000 $\approx$ 300 K, 昇温速度 $\infty$  K/ps, 降温速度 25 K/ps) 行った。この際、冷却終了時の構造を抽出することで構造の異なるアモルファス SiO<sub>2</sub> のバルクモデルを 5 つ生成した。これらのバルクモデルから厚さ約 8 Å の層を切り出し、OH ないしは H でキャッピング処理をすることで表面がヒドロキシ化されたアモルファス SiO<sub>2</sub> のスラブモデルを得た。その後、各スラブモデルのシラノールペアそれぞれに対して単核のクロメート種を担持させ、計 70 個の Cr 種のモデルを生成した。また、これらのモデルから休止状態と  $\pi$  錯体のモデルを作成した。全てのモデルは、DNP/ECP を基底セットとし、かつ GGA-PBE を交換相関汎関数とした DFT 計算により構造最適化した。Cr 種の形成エンタルピー及びエチレンの吸着エネルギーを求め、構造的特徴の関係を解析した。

その結果、活性 Cr 種の形成は担持されるシラノールペアの構造的特徴に大きく依存すること、形成しうる活性 Cr 種の反応性はシラノールペアの構造的特徴には依存せず、周囲に存在する第三配位子の影響を受けて分布が生じることが分かった。実際のアモルファス SiO<sub>2</sub> 表面を模擬した状態で分布があることを明らかにした。

本研究では、生成された多数の構造群に対し DFT 計算による構造最適化を行う必要があり、その計算資源として本学の PC Cluster 及び Large Memory PC Cluster が必要不可欠であった。

### 関連学会発表

- 1) “Phillips 触媒における SiO<sub>2</sub> 表面上の Cr 種の構造分布に関する計算化学的検討”, 八木 勇太, 和田 透, 谷池 俊明, 第 50 回石油・石油化学討論会, オンライン, 2020 年 11 月 12 日, 口頭発表

※本学の計算サーバから得られた成果は、申請者の修士論文に利用された。

#### 4. 知識科学分野の計算サーバ利用研究

# A study on domain adaptation for Named entity Recognition.

School of Knowledge Science, Dam Lab, Katsuhiko UTSUBO  
Machine:: PC Cluster vpcc

## Introduction

A vast number of papers have been published in the biomedical field. Since it is difficult to read all of these, it is possible to obtain the required paper using Named Entity Recognition. Machine learning requires a large amount of labeled training data; it is difficult to collect a large amount of them only in the medical field. Therefore, we get labeled training data from the non-biomedical domain and predict named entities from papers in biomedical fields using Domain Adaptation.

## Models

We created the models by transfer learning using BERT and evaluated them to perform the Named Entity Recognition task required in the biomedical field. We used the BioNLP 2016 dataset<sup>1</sup>. In the Named Entity Recognition task, sentences were used as input, and words were labeled with bacterial names, habitats, and regions. For these models, sentences were embedded in BERT or ALBERT, and labels were classified using Feedforward Neural Network(FFN).

For comparison, a model created by randomly initialized embedding and simple FFN was used. We also created a model in which FFN word embedding was initialized with a Glove word vector<sup>2</sup>. Besides, instead of the classification model by the softmax layer, we created models of the transition probability of the labels. By using input words that were embedded and encoded by Bi-LSTM, we obtain the label's transition probability by CRFs. Using this transition probability, we labeled the input words by the Viterbi algorithm. Therefore, we created a total of eight models using four types of simple FFN, Glove pre-trained, BERT, or ALBERT for word embedding, and two types of the softmax layer or label transition probability by simple FFN for label classification.

## Result

The test results are shown in Table 1. The model with the highest f1 score was the ALBERT and simple FFN classification model, and its score was 0.959. In the model for classifying labels by the label transition probability and the Viterbi algorithm, the f1 score was lower than that in the model classified by the softmax layer. It can be said that this means that the Bi-LSTM encoding input to the CRFs did not extract the features well. It was also found that the pre-learning of GloVe embedding has the effect of shortening the training time compared to the random initialization.

However, in the model using BERT and ALBERT, learning was saturated by learning several epochs, so it can be said that the pre-training and transfer model by BERT or ALBERT was more effective than the simple FFN model. It was found that pre-training and transfer learning using BERT is effective for the Named Entity Recognition task in the biomedical field.

Table 1: The result of the named entity recognition of the bioNLP2016 test dataset.

model	Recall	Precision	F1-score
1.WE+FNN(BaseLine)	0.855	0.811	0.861
2.WE+BiLSTM+CRF	0.725	0.707	0.774
3.GloVe WE+FNN	0.861	0.884	0.862
4.GloVe WE+BiLSTM+CRF	0.748	0.805	0.720
5.BERT WE+FNN	0.942	0.944	0.941
6.BERT WE+BiLSTM+CRF	0.875	0.896	0.860
7.ALBERT WE+FNN	0.959	0.960	0.959
8.ALBERT WE+BiLSTM+CRF	0.880	0.905	0.858

<sup>1</sup><http://2016.bionlp-st.org/>

<sup>2</sup><https://nlp.stanford.edu/projects/glove/>

## Research regarding esports topics via LDA model

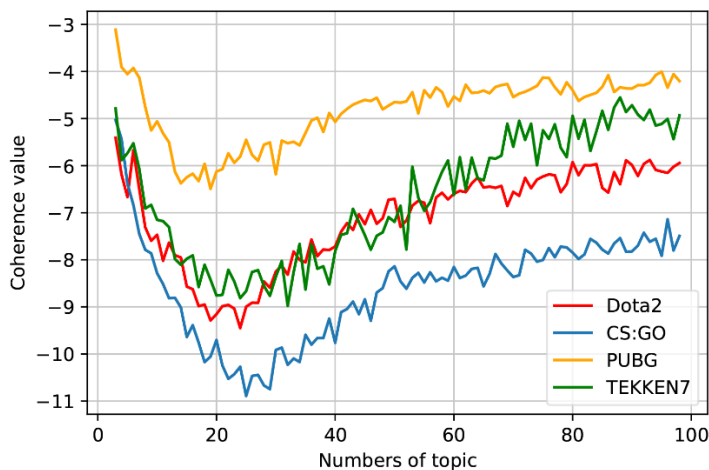
Knowledge School, Huynh Lab, YU Yang

Machine: vpcc, Impcc

### Abstract

Reviews from players regarding different characteristics of an esports game are one of the worthiest sources for the developers to enhance their services or adjust operating strategy. However, little research has been conducted on detecting esports players' favorite topics dealing with topic modeling. Thus, this paper aims to use a data mining approach to analyze community data in the games domain available on STEAM. We collected more than 1.2 million English reviews from four esports games up to August 2020 on STEAM. Our contributions in this paper are: (i) we manually build a dataset by filtering out high-quality esports game reviews, (ii) we then infer and group reviews into 3 groups with 19 topics, and (iii) we add more contributions to finding the emerging opinions of esports players towards the different topics of esports game reviews, which might benefit further research on understanding esports reviews.

You can include figures.



Published papers:

- 1) **Discovering Topics of interest on Esports Communities using LDA approach**
- 2)

Obtained budget (If you got.)

- 1)

## 5. 謝辞

JAIST の並列計算機利用者メーリングリストである MPC メーリングリストを通じて各計算機利用者へ報告書の作成を依頼し，これに応じて頂いた各著者のご厚意によって，本報告書を取りまとめることができました。

ご多忙のところ，報告書の作成にご協力を頂いた著者各位に心から感謝いたします。