

令和 6 年 6 月 13 日現在

機関番号：32689

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2021～2023

課題番号：21K04998

研究課題名（和文）精度保証を考慮したオンライン機械学習型軌道非依存密度汎関数理論の開発

研究課題名（英文）Development of online machine-learned orbital-free density functional theory with accuracy guarantees

研究代表者

清野 淳司 (Seino, Junji)

早稲田大学・理工学術院・准教授（任期付）

研究者番号：60580371

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,100,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、膨大な分子の密度情報データベースとインフォマティクス技術を融合することで、常に学習し、汎用性を向上し続けるオンライン機械学習型OF-DFTの確立を目指した研究を行った。また、機械学習は学習データに依存して精度が変動するため、学習の途中段階における未知分子に対する精度保証を与えるためのシステムを開発した。さらに、高い解釈性を有する明示的なDFT汎関数の開発に向けて、AI技術の解釈性および外挿的な予測性能の現状について検証した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

量子化学計算は電子状態を得るための一種の測定装置としての地位を築きつつある。また、近年では機械学習を導入することで、より高精度かつ高速な計算を実現する手法が開発されている。本研究では、量子化学計算の手法選択および機械学習を用いた手法における精度保証を与えるシステムを開発した。本システムにより、より信頼性の高い量子化学計算が実現される。また、効率的に未学習データを抽出することが可能になり、機械学習を導入した手法の発展に寄与する。さらに、解釈性や外挿性の高い人工知能技術の性能を検証することで、汎用性の高い明示的なDFT汎関数開発の実現可能性について示唆を与えた。

研究成果の概要（英文）：In this study, I aimed to establish an online machine learning-based OF-DFT that continuously learns and improves its versatility by integrating a vast molecular density information database with informatics technology. Additionally, because the accuracy of machine learning fluctuates depending on the training data, I developed systems to provide accuracy assurance for unknown molecules during intermediate stages of learning. Furthermore, I examined the current state of interpretability and extrapolative prediction performance of AI technology to develop explicit DFT functionals with high interpretability.

研究分野：理論化学、ケムインフォマティクス

キーワード：密度汎関数理論 オンライン機械学習 精度保証 シンボリック回帰 解釈可能な人工知能技術

1. 研究開始当初の背景

密度汎関数理論 (DFT) では、Hohenberg-Kohn の定理により、原子・分子のエネルギーが電子密度の汎関数により表現されることが保証されている。しかし、その成分である運動エネルギーや量子的な交換相関エネルギーは汎関数形が未知である。前者の運動エネルギーは、ビリアル定理により絶対値が全エネルギーとほぼ同じとなり寄与が大きい。これまでに様々な汎関数が提案されたが、特に原子・分子などの孤立系に対する計算精度が低く、分子構造などの基礎的な性質において定性的にも正しく表現することは困難であった。そのため現在の DFT 計算のほとんどは、運動エネルギーに対する汎関数を用いる代わりに、軌道の概念を導入した Kohn-Sham DFT (KS-DFT) が用いられる。しかし、軌道を用いずにあらわな運動エネルギー汎関数を用いる軌道非依存 DFT (OF-DFT) は、電子密度の情報のみを考慮することで自由度を $3N$ (N は軌道の数) から 3 へと削減でき、100 万原子規模の計算も可能であると推定されている。したがって、高精度な運動エネルギー汎関数を開発し、KS-DFT から OF-DFT へと移行することで、圧倒的に高速かつ大規模な電子状態計算が期待できる。一方、後者の交換相関エネルギーは、寄与が比較的小さいため、実用計算に耐えうる精度の様々な近似的汎関数が開発されてきた。しかし、すべての分子に対して定量的な議論ができる汎関数は未だない。

これらの汎関数形は一般的に、汎関数が満たすべき基礎物理条件を満足させる、または広範囲の分子系における様々な反応・物性を再現するように決定される。しかし、考慮すべき条件は無数にあり、人間の力だけで数多くの条件を満足した汎関数を構築することは限界になりつつある。実際に交換相関エネルギー汎関数に対する最大規模の条件数は高々 20 個程度である。また条件を考慮する代わりに、多数のパラメータを経験的に決定する汎関数構築では、エネルギーや電子密度などすべての性質を同時に高精度に再現することは難しく、正確な関数を目指す道から外れると言われている。このようにより精密な汎関数を構築するためには、汎関数が取りうる制約を考慮しつつ、人知を超えた手法を用いることが不可欠である。

2. 研究の目的

本研究では、膨大な分子の密度情報データベースとインフォマティクス技術を融合することで、常に学習し、汎用性を向上し続けるオンライン機械学習型 OF-DFT の確立を目指した研究を行った。さらに、機械学習は学習データに依存して精度が変動するため、学習の途中段階における未知分子に対する精度保証を与えるためのシステムを開発した。これによりどの段階においても信頼性を担保されるため、得られた汎関数はいつでも公開可能となる。

3. 研究の方法

本研究では、未知分子に対する精度保証を与えるための 2 種類のシステムを開発・導入した。一つ目は機械学習による周辺環境を考慮した分類と量子化学計算手法の精度推定、二つ目はモデル適用領域を導入した精度保証である。前者は人間が分子構造を見て未知分子のおおよその誤差を判断できるものであり、後者は学習データを基にコンピュータが未知分子に適用できるかを判断するものである。また後者により、オンライン機械学習における予測精度を向上するための効率的なデータ生成を実現する。さらに本研究では、物理的な解釈ができ、かつ外挿性の高いホワイトボックス型 DFT 汎関数の構築の可能性について、解釈可能な人工知能 (AI) 技術の一つであるシンボリック回帰を用いて検証を行った。

4. 研究成果

(1) 機械学習による周辺環境を考慮した分類と量子化学計算手法の精度推定

DFT 汎関数や機械学習モデル/ポテンシャルなどを利用する場合、所望の精度を満たす計算の可否の判断は参照データや対象分子に依存し、一般に簡単ではない。そのため、これまでに様々なデータセットを用いて、統計的に計算精度を検証してきた。このような検証において、官能基などの人間が解釈可能な基準を用いて、計算精度を統一的に評価・推定できれば、計算精度の事前判断に加えて、既存の DFT 汎関数や機械学習モデル/ポテンシャルの改善へのヒントとなる。そこで本研究では、分子内の構成原子について、周辺環境を考慮して、人間が解釈可能なレベルで複数のクラスターに自動的に分類した。そしてクラスター毎にエネルギーや分子物性の計算精度を推定することで、所望の分子の計算精度を事前に推定可能な手法を開発した。

数値検証において、有機分子を構成する炭素原子のみに着目した。対象原子は、データセット QM9 からランダムに選択した 5,000 分子を構成する 30,782 原子である。記述子は、周辺原子との距離・角度やクーロン相互作用を表す構造的記述子と DFT 計算に基づく原子の電子状態を表す電子的記述子から、特徴量削減により 4 個の記述子を用いた。クラスタリング手法として、ノイズを自動検出し、密度でクラスターを決める DBSCAN を用いた。その結果、ヘテロ原子の隣接の有無などの化学的性質を反映した 36 のクラスターを得た (表 1)。

本手法における精度推定は原理上、量子化学計算における任意のエネルギー・物性に適用可能である。その一例として、68 の汎関数における NMR 化学シフト計算の精度を、上記のクラスターに基づいて比較した。基底関数は 6-31G(d) を用い、参照値は MP2/cc-pVTZ により算出した。図 1 に二乗平均平方根誤差 (RMSE) が小さい 10 種の汎関数による計算結果をクラスター毎に示す。この結果、同じ汎関数でもクラスター毎に誤差が異なることを確認した。この結果を基準として、計算対象に含まれる炭素原子の属するクラスターの計算精度が高い汎関数を選択する

ことで、期待する精度を満たすかどうかをあらかじめ知った上で計算を行うことができる。

表 1. 周辺環境を考慮した炭素原子のクラスタリングの結果

ID	クラスタ内容	ID	クラスタ内容	ID	クラスタ内容	ID	クラスタ内容
0	第一級炭素	10	Oと隣接した第二級炭素	20	2つのOと隣接したsp ² 炭素(置換基なし)	30	Fと隣接するsp ² 炭素
1	第二級炭素	11	Cのみと結合したsp ² 炭素	21	Oと隣接した第四級炭素	31	ギ酸エステルの構成炭素
2	Nと隣接した第一級炭素	12	Nと隣接したsp ² 炭素(置換基なし)	22	ニトリル基の構成炭素原子	32	3つのヘテロ原子と隣接するsp ² 炭素
3	Oと隣接した第一級炭素	13	Nと隣接した四員環を構成する第三級炭素	23	N, Oと隣接したsp ² 炭素	33	Nと隣接するカルボニル炭素
4	第三級炭素	14	エチニル基の根元のsp炭素	24	2つのOと隣接した第三級炭素	34	Oと隣接するカルボニル炭素
5	Nと隣接した第二級炭素	15	Nと隣接した第四級炭素	25	イミド基の構成炭素	35	N, Oと隣接するカルボニル炭素
6	sp ² 炭素	16	Oと隣接し環を構成する第三級炭素	26	ホルミル基の構成炭素原子		
7	多環式化合物中の第三級炭素	17	Nと隣接したsp ² 炭素(置換基あり)	27	2つ以上のヘテロ原子と隣接するsp ² 炭素		
8	エチニル基の末端のsp炭素	18	Nと隣接した環を構成する第四級炭素	28	アミド基の構成炭素		
9	第四級炭素	19	ヘテロ原子と隣接したsp ² 炭素(置換基なし)	29	カルボニル炭素		

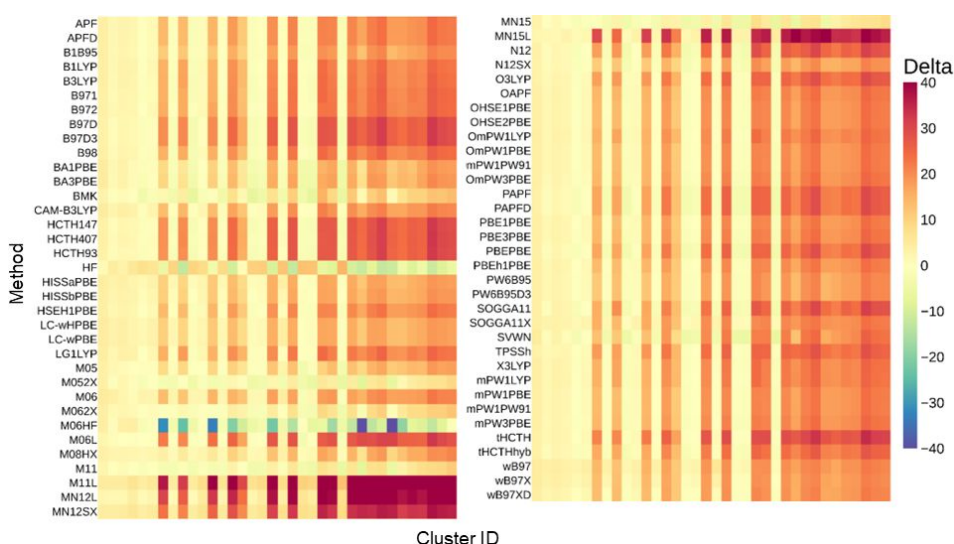


図 1. NMR 核磁気遮蔽定数における DFT 汎関数の各クラスタの誤差 (ppm)

(2) モデル適用領域を導入した精度保証システムの導入と機械学習モデルの改善

研究代表者らは、これまでに量子化学計算の Gold Standard な手法である CCSD(T)/CBS レベルの相関エネルギーの効率的な計算手法として、機械学習型電子相関 (ML-EC) モデルを開発してきた。このモデルは、電子密度などの情報と CCSD(T)/CBS レベルの相関エネルギー密度の関係を学習する。本研究では、モデルのテストデータへの適用の可否を判断する、適用領域 (AD) を決定するシステムを導入した。また、効率的にモデルの汎化性能を高めるため、AD 外のデータを含めた学習によりモデルの AD 拡大を図った。

AD 判定には、アンサンブル学習に基づく Jaggging 法を用い、学習に用いる記述子の組を変えてサブモデルを構築し、それらの予測値の標準偏差に基づいて AD を判定した。学習データとして、H, C, N, O, F, S, Cl を含む 30 種の小分子におけるグリッド点を用いた。4 種のテスト分子に対して、AD 外のデータの空間分布と AD 内・外のデータに対する平均絶対誤差 (MAE) を示す (図 2)。この結果、AD 内では MAE が 1.3 millihartree bohr⁻³ 以下と小さい誤差で予測できるが、AD 外では AD 内のデータよりも誤差が大きくなることが確認された。

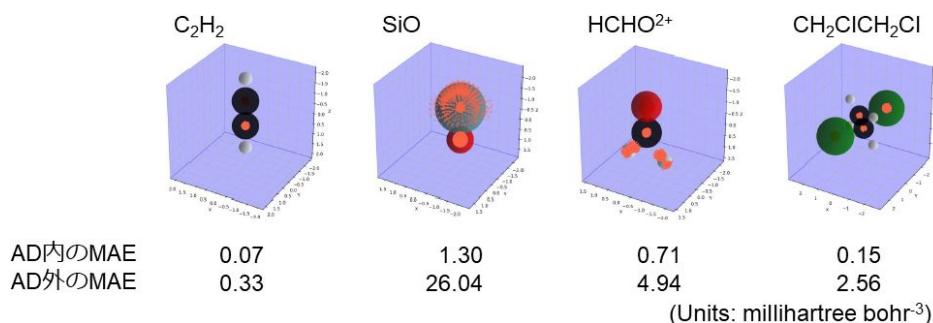


図 2. 未知分子に対する AD 外データの分布と MAE

また AD 外と判断されたデータを学習データに加えて、効率的に ML-EC モデルの改善が可能かを検証した。Li, B, Al, Si を含む 7 種の小分子の AD 外データを再学習し、それらの元素を含む 10 種のテスト分子に対する反応エネルギーの MAE を評価した。学習前では MAE が 115.01 kcal/mol であったが、学習後は 2.48 kcal/mol となり、予測モデルの大幅な改善が確認された。

(3) シンボリック回帰による明示的な DFT 汎関数構築の可能性に関する検証

機械学習により構築された DFT 汎関数は、複雑な構造と非常に多くのパラメータにより構築されるため、人間が解釈することが難しく、ブラックボックス的に用いられる。高い精度で予測するという目的で使用する場合は、非常に有用なツールである。一方、なぜそのように高い予測ができるのかを解釈し、説明できることも同様に非常に重要である。予測性能と解釈/説明可能性の両立は難しいため、これまでの多くの研究では前者にのみ着目し、後者が無視されてきた。機械学習の有効性が示された現在において、解釈/説明可能性に着目することで DFT 汎関数の物理的な意味を得ることも必要である。また機械学習による予測性能は、学習したデータ領域の周辺で高く、未学習の領域では低い。つまり、内挿性が高く、外挿性が低いことが知られている。そのため、研究項目(2)による、学習データ領域の拡張に加えて、外挿性の高い AI 技術の利用が重要となる。そこで本研究では、高い解釈/説明可能性を有する AI 技術の一つであるシンボリック回帰に着目し、AI 技術の解釈/説明可能性、および外挿的な予測性能の現状について検証した。

シンボリック回帰は、予測の過程を明示的な数理モデルとして表現する方法である。数理モデルは算術演算子、解析関数、定数などを組み合わせて、与えられたデータに対する最適な数式として表現される。そのため人間が解釈可能な数式の形で現象のモデリングが可能であり、獲得した数式に基づいて化学原理・法則の構築による知識の抽出ができる。本研究では、まず遺伝的プログラミング (GP) や機械学習などを利用した既存のシンボリック回帰 (再帰的 LASSO 型シンボリック回帰 (RLS) および AI-Feynman (AIF)) を、アトキンスの物理化学の教科書に記載されている、20 世紀前半以前に提案されたシンプルな化学における数理モデルに適用し、現状における表現能力を検証した (表 2・表 3)。この結果から、DFT 汎関数のような複雑な数理モデルを高速に構築するためには、より大きな関数空間の中から如何に効率的に最適な関数を探索するかが重要であることが示唆された。

表 2. 正しく化学原理を導出した割合 (%)

複雑度	法則の数	GP	RLS	AIF
0	10	70.0	70.0	90.0
1	15	53.3	93.3	86.7
2	23	0.0	39.1	69.6
3	4	0.0	25.0	75.0
All	52	28.8	59.6	78.8

表 3. 各手法の計算時間 (秒)

複雑度	GP	RLS	AIF
0	4.9	9.5	1472.4
1	6.3	13.2	2249.6
2	-	58.5	2313.3
3	-	133.0	7202.6

次に、シンボリック回帰における外挿性の基礎的な検証を行った。図 3 に $y = \sin(x^2)$ に対する結果を示す。本検証では、生成したデータセットを領域ごとに学習データとテストデータに分割し、学習データの領域を変えて、シンボリック回帰の RLS を適用した。その後、導出されたモデルを学習データ外の未学習領域のデータに適用し、精度を確認した。比較として、ランダムフォレスト (RF) 回帰、ガウス過程回帰 (GPR)、サポートベクターマシン回帰 (SVR) の 3 種の機械学習手法による結果も示す。黒線は正解の曲線である。この結果、学習領域 (赤線) が狭い場合はすべての手法で未学習領域を正しく予測することが難しいが、広い場合は RLS のみ正しく予測できることが確認された。これはデータの特徴を表現するために十分なデータがあれば、シンボリック回帰が関数の特徴を把握し、未学習領域も予測可能となることを示す。以上により、シンボリック回帰を用いて DFT 汎関数が構築できれば、様々な分子に対して適用可能な、外挿性/汎用性の高い予測が実現できる可能性があることが確認された。

— RLS — GPR — SVR — RF

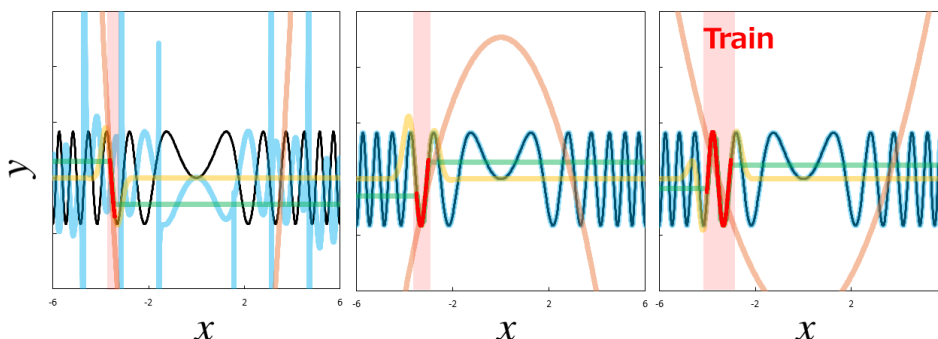


図 3. $y = \sin(x^2)$ 関数のシンボリック回帰 (RLS) および機械学習 (GPR, SVR, RF) の予測結果

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計5件（うち査読付論文 5件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 KUMAGAI Takumi, NAKAJIMA Yuya, SEINO Junji	4. 巻 22
2. 論文標題 量子化学計算と各種スペクトル情報を用いた化合物の自動同定手法の開発	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Computer Chemistry, Japan	6. 最初と最後の頁 12 ~ 14
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2477/jccj.2023-0029	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 ISODA Takuya, TAKAHASHI Shiori, NAKANO Masahiko, NAKAJIMA Yuya, SEINO Junji	4. 巻 22
2. 論文標題 Validation of Extrapolation in Symbolic Regression and Its Application to Perovskite Catalysts	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Computer Chemistry, Japan	6. 最初と最後の頁 37 ~ 40
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2477/jccj.2023-0028	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Nakajima Yuya, Ohmura Takuto, Seino Junji	4. 巻 -
2. 論文標題 Using atomic clustering based on structural and electronic descriptors that consider surrounding environment to evaluate local properties of <scp>DFT</scp> functionals	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Journal of Computational Chemistry	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jcc.27375	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 H. Nakai, M. Kobayashi, T. Yoshikawa, J. Seino, Y. Ikabata, Y. Nishimura	4. 巻 127
2. 論文標題 Divide-and-Conquer Linear-Scaling Quantum Chemical Computations	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 589-618
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.2c06965	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Takashima Chinami, Seino Junji, Nakai Hiromi	4. 巻 777
2. 論文標題 Database-assisted local unitary transformation method for two-electron integrals in two-component relativistic calculations	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemical Physics Letters	6. 最初と最後の頁 138691 ~ 138691
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cpllett.2021.138691	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計23件 (うち招待講演 6件 / うち国際学会 3件)

1. 発表者名 中嶋裕也、大村拓登、清野淳司
2. 発表標題 周辺環境を考慮した化学的性質に基づく原子のクラスタリングと精度検証への応用
3. 学会等名 第25回理論化学討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 熊谷拓海、中嶋裕也、清野淳司
2. 発表標題 複数のスペクトル情報と量子化学計算に基づく化合物の自動同定システムの開発
3. 学会等名 第25回理論化学討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 磯田拓哉、高橋菜、中野匡彦、中嶋裕也、清野淳司
2. 発表標題 シンボリック回帰の化学の諸問題への適用：外挿性の検証と反応速度論への応用
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2023春季年会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 熊谷拓海、中嶋裕也、清野淳司
2. 発表標題 量子化学計算と各種スペクトル情報を用いた化合物の自動同定手法の開発
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2023春季年会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yuya Nakajima, Takuto Ohmura, Junji Seino
2. 発表標題 Atomic clustering based on molecular properties considering surrounding environments and its application to accuracy verification
3. 学会等名 The 5th conference of Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Takuya Isoda, Masahiko Nakano, Yuya Nakajima, Junji Seino
2. 発表標題 A feasibility study of symbolic regression algorithms for chemical laws
3. 学会等名 The 5th conference of Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 磯田拓哉、高橋菜、中野匡彦、中嶋裕也、清野淳司
2. 発表標題 新規材料探索と速度論モデル構築に対するシンボリック回帰の応用研究
3. 学会等名 化学工学会 第54回秋季大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 熊谷拓海、中嶋裕也、清野淳司
2. 発表標題 機械学習・量子化学計算・各種スペクトルを利用した化合物自動同定システムの開発
3. 学会等名 第13回CSJ化学フェスタ
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 熊谷拓海、中嶋裕也、清野淳司
2. 発表標題 複数のスペクトル情報と量子化学計算を利用した機械学習による部分構造予測
3. 学会等名 第46回ケモインフォマティクス討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 清野淳司
2. 発表標題 ケム・インフォマティクスに基づく材料開発・化学反応速度の自動解析
3. 学会等名 反応駆動学公開シンポジウム「原子・分子ダイナミクスと反応駆動」(招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 清野淳司
2. 発表標題 ケム・インフォマティクスの実験・計算・理論化学への展開
3. 学会等名 セミナー「化学産業を改革する最新DX (AI・IoT) 技術」～製造, 開発, 研究, それぞれの工程におけるDX取り組み事例～(招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Junji Seino
2. 発表標題 Construction of Orbital-Free DFT Scheme and Its Evaluation by ML
3. 学会等名 The International Symposium on Machine Learning in Quantum Chemistry (SMLQC) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 藤澤遼、藤波美起登、清野淳司、中井浩巳
2. 発表標題 機械学習型電子相関モデルの開殻系への拡張
3. 学会等名 第24回理論化学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 清野淳司
2. 発表標題 ケム・インフォマティクスによる理論化学の DX
3. 学会等名 第24回理論化学討論会 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 磯田拓哉、中野匡彦、清野淳司
2. 発表標題 シンボリック回帰に基づいた化学における数理モデルの自動構築
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2022春季年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 磯田拓哉、中野匡彦、清野淳司
2. 発表標題 シンボリック回帰に基づいた化学における明示的な初等関数/微分方程式の自動導出
3. 学会等名 第12回CSJ化学フェスタ2022
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 磯田拓哉、中野匡彦、清野淳司
2. 発表標題 シンボリック回帰による初等関数/微分方程式型の化学法則の自動探索
3. 学会等名 第45回ケモインフォマティクス討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 清野淳司
2. 発表標題 量子化学計算と人工知能技術の融合
3. 学会等名 スーパーコンピュータワークショップ2022「複雑電子状態の理論・計算科学」(招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Ryo Fujisawa, Mikito Fujinami, Junji Seino, Yasuhiro Iwabata, Hiromi Nakai
2. 発表標題 Applicability domain for machine-learned electron correlation model
3. 学会等名 Asia-Pacific Association of Theoretical and Computational Chemists (APCTCC-10) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 大村拓登、中嶋裕也、清野淳司
2. 発表標題 機械学習による周辺環境を考慮した原子の分類とその解析
3. 学会等名 日本化学会第103回春季年会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 藤澤遼、五十幡康弘、藤波美起登、清野淳司、中井浩巳
2. 発表標題 k最近傍法とアンサンブル学習を用いた機械学習型電子相関モデルの適用領域判定手法
3. 学会等名 第23回理論化学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 J. Seino, M. Fujinami, Y. Ikabata, H. Nakai
2. 発表標題 AI-Assisted Orbital-Free Density Functional Theory Calculation
3. 学会等名 The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2021 (Pacifichem2021) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 磯田拓哉、中野匡彦、清野淳司
2. 発表標題 シンボリック回帰を用いた化学における数理モデルの自動構築
3. 学会等名 日本化学会第102回春季年会
4. 発表年 2022年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------