

兵庫県立大学
データ計算科学連携センター
2024 年度 利用報告書集

Annual Report
Center for Cooperative Work on
Data science and Computational science
April 2024 - March 2025



兵庫県立大学
University of Hyogo

SCALE-SDM 開発支援業務：x2ri と y2rj の整理

高橋 伸吉

株式会社マーブル エリア統括本部 神戸支社 第1システム部

(世話人：島 伸一郎 教授)

島教授が中心となって開発した、「超水滴法(Super-Droplet Method, SDM)」とは、大気中の雲・エアロゾル・降水粒子の運動と変化を、確率的な粒子法を使って統一的に計算する方法である。

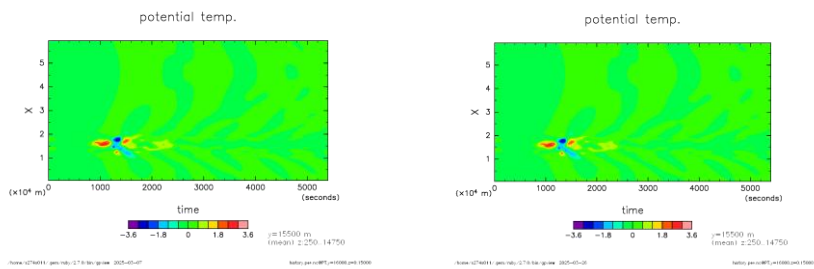
超水滴法の特徴として、原理的な物理法則に基づいて粒子群の状態変化を計算することが出来、また、同等の精度を持つ既存の手法に比べ速く計算できる事が理論的に示唆されている。

今回は、最先端の手法である超水滴法を、次世代の大型計算機で性能が出る SCALE ライブラリの力学コア上に実装したプログラムである「SCALE-SDM」の処理の効率化を行い、数値計算速度の改善を図るために、以下の各作業を実施した。

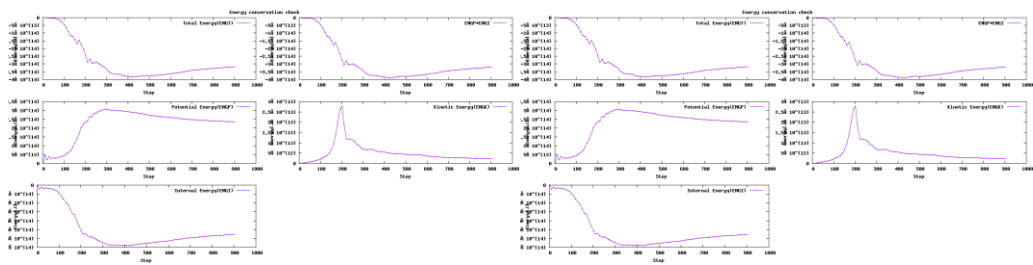
1. 超水滴の位置を表すための座標を、実座標 x, y を用いた (x, y, rk) ではなく、格子空間座標 (ri, rj, rk) を予報変数とし、超水滴の実座標 (x, y, z) は必要な時だけ格子空間座標 (ri, rj, rk) より変換して求めるようコードを書き換え、処理全体の効率化を図った。
2. 改修したソースコードをコンパイルして Warm-bubble(100m, 3D) の数値実験を実施し、ソースコードの書き換え前後で数値実験結果がほぼ変わらないことを確認した。
3. 改修したソースコードでリポジトリを更新した。

次のページの各画像は、改修前後の出力画像の結果の一例を示す（左が変更前・右が変更後）。

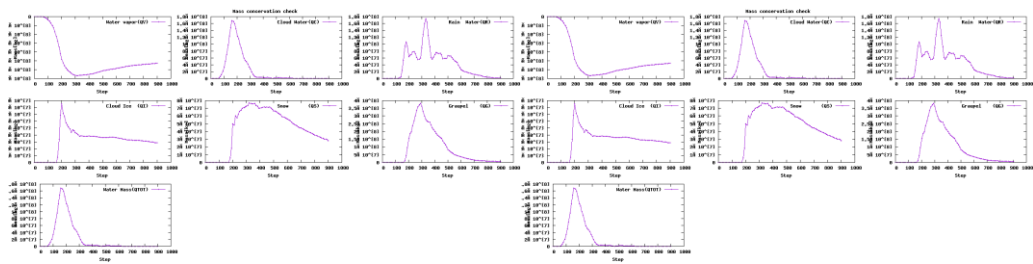
Column_PT.png



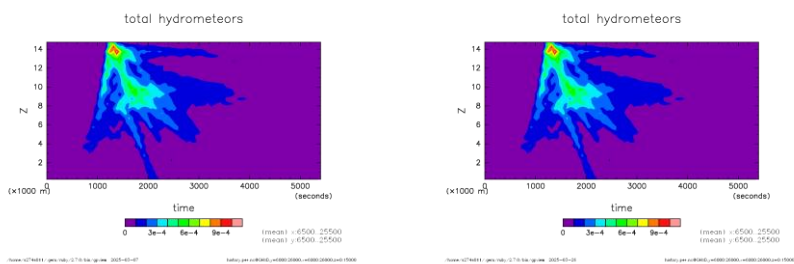
Energy.png



Mass_q.png



slice_QHMD.png



数値実験の所要時間は、変更前では 4 分 51 秒かかったのに対し、変更後では 4 分 43 秒となった。
変更後は変更前に比べて 2.7% の計算時間減となり、本改修の処理効率化の効果を示唆する結果となった。

量子力学に基づく数値シミュレーションと可視化に関する研究

数納 広哉, 白石 夏菜^A, 安田 菜穂^A, 大野 暢亮^B

法政大学情報メディア教育研究センター, 法政大学デザイン工学研究科^A,

兵庫県立大学データ計算科学連携センター^B

(世話人: 大野 暢亮)

本課題の目的は、量子力学的数値シミュレーションおよび可視化技法に関する研究を実施することである。今年度は昨年度に引き続き、「冷却原子の 3 体再結合」および「水素原子軌道可視化 VR アプリケーション開発」に取り組み、加えて SPH-DEM 連成手法のテスト計算を行った。

1. 冷却原子の 3 体再結合反応過程

相互作用する少数粒子系の性質や振る舞いを研究する「少数系物理」は、原子分子物理や原子核物理学における重要な課題である。特に、相互作用する 3 つの粒子を量子力学に従い数値的に解く「量子 3 体系問題」には高度な数値計算技術が必要となる。著者は 3 つのヘリウム原子が反応し、2 原子分子 1 つと原子 1 つが生成される 3 体再結合過程に注目した。3 原子系のシュレーディンガー方程式をハイパー球面座標系で表現し、R 行列法と呼ばれる数値計算手法を用いて $^4\text{He}+^4\text{He}+^4\text{He}$ 系を記述するプログラムを開発し、エネルギーの関数として 3 体再結合率の計算を実施した。

2. 水素原子軌道可視化 VR アプリケーション開発

物理学や化学では、3 次元可視化は重要な役割を果たしている。原子分子物理学では電子状態や分子構造の理解のためには、3 次元可視化が必須である。この 3 次元可視化においては仮想現実(Virtual Reality, VR)が有用な技術となりうると考えられる。この点に注目し、物理学・化学教育における VR の可能性を探求し、教育支援ツールの開発に取り組んできた。昨年度は水素原子軌道の確率密度を 3 次元空間で可視化したが、今年度はこれらの位相つき波動関数の可視化に取り組んだ。この可視化アプリケーションの開発には兵庫県立大学で開発されたゲームエンジン Unity 向けの科学技術計算の可視化ツール VOIR を利用した。VOIR の等値面可視化機能を用いることにより、これら原子軌道のパソコン上での可視化を行い(図 2)、VR ヘッドマウントディスプレイ Meta Quest3 での原子軌道の可視化にも成功した。

3. SPH-DEM 連成手法のテスト計算

平滑化粒子法流体力学(SPH)法と個別要素法(DEM)を連成した粒子シミュレーションを行う数値計算プログラムの動作確認および性能分析を行なった。

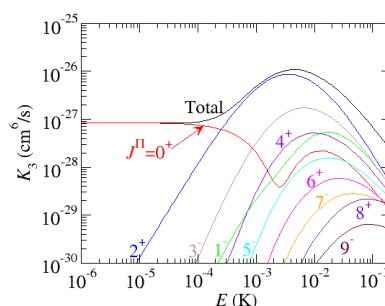


図 1. エネルギーの関数としての $^4\text{He}+^4\text{He}+^4\text{He}$ 系の 3 体再結合率。

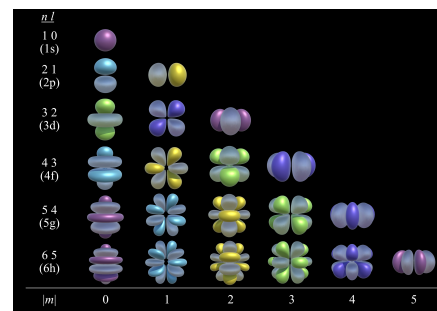


図 2. 水素原子の 1s 状態から 6h 状態までの原子軌道の可視化結果。

論文

Hiroya Suno, “Three-body recombination of helium atoms at cold collision energies”, **Journal of Physics B**, 58, p.075202-1~075202-9 (2025).

Hiroya Suno, Nobuaki Ohno, “Virtual Hydrogen, a VR hydrogen atomic orbitals viewer in physics and chemistry”, **Procedia Computer Science**, 28th International Conference on Knowledge-Based and Intelligent Information & Engineering Systems (KES2024), 246, p.1710-1719 (2024).

Hiroya Suno, Nobuaki Ohno, “Virtual Hydrogen, virtual reality visualization of the atomic orbitals of the hydrogen atom”, **Proceedings of the 43rd JSST Annual Conference on Simulation Technology (JSST2024)**, p.489-493 (2024).

学会発表

Hiroya Suno, Nobuaki Ohno, “Virtual Hydrogen, virtual reality visualization of the atomic orbitals of the hydrogen atom”, The 43rd JSST Annual International Conference on Simulation Technology & The 23rd Asia Simulation Conference (JSST2024 and AsiaSim2024), 神戸, 9月17日-20日 (2024). [口頭発表]

Hiroya Suno, Nobuaki Ohno, “Virtual Hydrogen, a VR hydrogen atomic orbitals viewer in physics and chemistry”, 28th International Conference on Knowledge-Based and Intelligent Information and Engineering Systems (KES 2024), セビリア(スペイン), 9月11日-13日 (2024). [口頭発表]

その他

なし

領域気象モデル WRF のデータ同化環境の構築

三浦 裕亮, 田中 瞳^A

東京大学大学院理学系研究科, 地球惑星科学専攻^A

(世話人: 島 伸一郎)

近年、線状降水帯をはじめとする集中豪雨による気象災害が問題となっており、ときに甚大な被害を生ずる。2024 年には 9 月 21 日から 23 日にかけて石川県能登半島で豪雨災害が発生し、河川の氾濫や土砂災害が多発し、人的被害も生じた。近年、気候変化の影響によって集中豪雨の程度や、その発生地域の変化についての精度の高い情報が期待されている。しかし、現状の領域気象モデルでは過去に発生した集中豪雨の再現さえ十分ではなく、更なる改良が必要とされている。

弊研究室は主として理化学研究所が開発する雲解像モデルライブラリ SCALE-RM を雲の組織化研究に用いている。しかし、雲解像モデルが採用する力学過程（基礎方程式やその離散化手法）や物理過程（格子スケールで解像できない現象のくりこみ表現）に依存して雲の組織化や再現される平均場が大きく異なることが知られている。そのため、SCALE-RM とは異なる雲解像モデルを利用した比較実験を通して、再現される現象のモデル依存性を把握し、SCALE-RM が採用する力学過程・物理過程の特性を知ることは、今後の改良に有用である。そこで、本研究では領域気象モデルの事実上の世界的標準である Weather Research and Forecasting model (WRF) の環境構築を行った。現実の気象現象についての再現実験に取り組み、3 次元変分法やナッジング法を用いたデータ同化実験ができるようになった (図 1)。今後は、データ同化による降水分布の改善について定量化を進める。

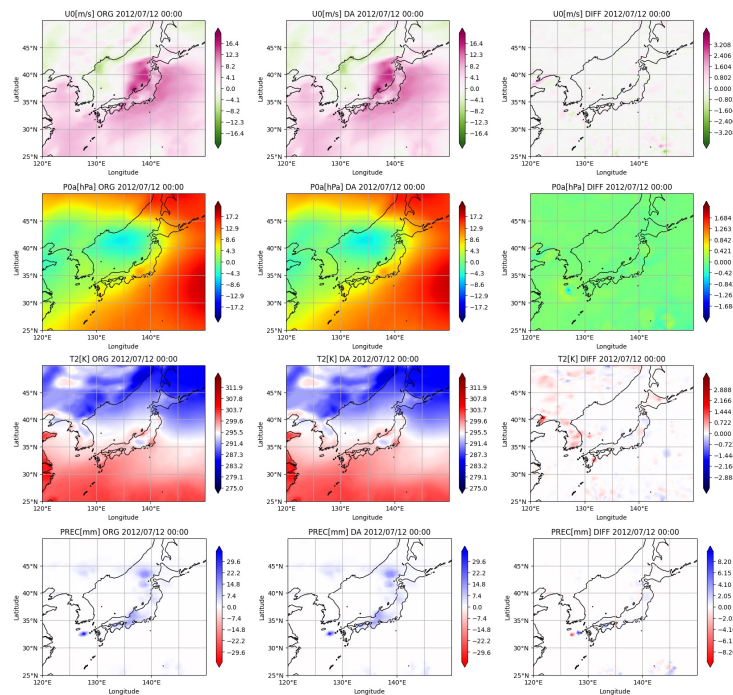


図 1: WRF による予測実験の結果。データ同化なし (左列)、3 次元変分法 (中列)、および、それらの差 (右列)。上から東西風、気圧偏差、気温、降水量。

天然ゴムと臭気成分の相互作用に関する研究

阿知良 浩人^A

兵庫県立工業技術センター^A

(世話人：鷺津 仁志)

天然ゴムはパラゴムノキの樹液から始まり、様々な処理工程を経てゴム製造業に輸送される。その臭気は独特であり、ゴム製造現場の環境を悪化させ、消費者にも軽減される。その中でも燻煙処理がなされた天然ゴム (Ribbed Smoked Sheet) ではフェノール臭が強いことが臭気分析で明らかとなった。本研究では、天然ゴムの主成分である *cis*-1,4-polyisoprene とフェノールである 2,6-dimethoxyphenol の相互作用について分子動力学シミュレーションによって評価する。

天然ゴムの分解物に由来する d-Limonene を挿入した系を作成し、シミュレーション条件を検討した。ゴム練りの条件でアニーリング処理 (300 K から 400 K まで温度上昇) および $P = 200$ atm の圧力下に固定する) による NPT アンサンブルシミュレーションを行うと、d-Limonene がゴム分子の内部から外れてしまったため、この状態では自由エネルギーを評価するのは難しいと考えた。条件を検討した結果、アニーリング処理をせず、常温常圧下 ($T = 300$ K, $P = 1$ atm) にすれば内部にとどまるということがわかった。今後はこの条件を基にして自由エネルギー計算を実施する方法を検討する。

その他

公益財団法人計算科学振興財団 主催 スーパーコンピュータ・ソリューションセミナー2024

事例講演：天然ゴム（RSS）の臭気を軽減する触媒の研究

2024年9月26日 神戸クリスタルホール

兵庫工業会 ものづくり技術懇話会

講演：スパコンの活用方法について

2024年11月28日 理化学研究所計算科学研究センター

兵庫ゴム工業会・兵庫県ゴム工業協同組合 主催 兵庫ゴム工業青年クラブ 研修会

講演：天然ゴム（RSS）の臭気を軽減する触媒の研究

2025年3月13日 神戸三宮東急 REI ホテル

超水滴法に依拠した階層的 Lagrangian 描像による降雨の研究

戸田 幹人

兵庫県立大学大学院情報科学研究科

(世話人：島 伸一郎)

本研究では、雲形成に適した計算法である「超水滴法」と、非線形力学における「概不変集合」の理論の結合によって、雲形成と降雨の物理的な素過程を解明し、降雨現象の予測精度・効率の向上に資することを目的とする。本年度は、超水滴の Lagrangian 的な軌道追跡に関して、島伸一郎氏および島氏の共同研究者である Chongzhi Yin 氏とともに、Yin 氏が開発したアルゴリズムの検討を進めた。

数値流体・暗号制御に関する研究

佐藤 孝雄^A

兵庫県立大学大学院工学研究科^A

(世話人：沼田 龍介)

流体の制御および暗号制御に関する研究が近年注目されている。本研究では計算の高速化によりこれらの研究遂行を加速することを目的としている。今後は実際に計算機資源を利用した設計及び実装について検討を進めたい。

文献

- 永尾 賢太, 川口 夏樹, 佐藤 孝雄, 暗号化制御系の閉ループデータに基づく制御器設計, システム制御情報学会論文誌, 2024, 37 巻, 7 号, pp.195-202
- 石川 雄翔, 本田 逸郎, 佐藤 孝雄, 圧力勾配を用いた ON-OFF 制御による円柱後方のカルマン渦抑制, 日本機械学会論文集, 2025, 91 巻, 941 号, 24-00195

乱流モデルのレファレンス作成のための直接数値計算

深川 宏樹^A

DeepFlow 株式会社^A

(世話人：芝 隼人)

産業応用を目的とする実用的なシミュレーションでは、高レイノルズ数流における乱流を忠実に再現することの困難さが、しばしば問題となる。細かいメッシュを用いた直接数値シミュレーション (Direct Numerical Simulation: DNS) は多大な計算コストを要する。そのため、実用上は粗いメッシュを用い、メッシュサイズ以下の現象を乱流モデルで扱う。本研究では細かいメッシュを用いて高レイノルズ数流の DNS を行うことで高精度なデータを取得し、これらを乱流モデルの参照データにすることで、将来的には乱流モデルの高性能化に貢献することを目標としている。

複雑な形状を扱う流体シミュレーションでは、非構造メッシュを用いた有限体積法が広く用いられる。しかし、この方法で陽的解法を用いて圧縮性流のシミュレーションを行うと、チェッカーボード不安定と呼ばれる非物理的な圧力振動が生じてしまう。そのため、有限体積法ではしばしば流体を密度変動のない非圧縮性流体として扱う。しかし、この方法はポアソン方程式を解く必要があり、その計算がボトルネックとなって並列計算性能が著しく低下するため、スーパーコンピュータを使った大規模な DNS には適しない。一方で、構造メッシュにおいては、スタaggered格子を用いることで圧縮性流体を安定的に、かつ高い並列計算性能を維持して解く方法が知られている。本研究では、離散微分形式を用いて、これを非構造メッシュにも適用可能な方法として拡張し、ソフトウェアを実装し、大規模な DNS を実施した。

空気を想定した大規模な DNS ではチェッカーボード不安定は抑制できたものの、高いレイノルズ数の流体ではナビエ・ストークス方程式の移流項の計算精度を改善する必要があることがわかった。そこで移流項の離散化誤差を低減するための工夫を施し、ソルバーに実装をした。移流項の計算精度の向上を確認した後に、バックステップ流れやキャビティ流れなどのシミュレーションを行った。

今後は、さらに大規模なモデルやより高いレイノルズ数でのシミュレーションを実行し、多様な条件での乱流シミュレーションデータを蓄積していく予定である。また、非構造メッシュを用いた大規模なシミュレーションも実施し、より複雑な実用形状に対応可能な参照データを取得していく予定である。

学会発表

- [1] 深川宏樹, "微分形式から見た物理場の離散化", 第 46 回計算数理工学フォーラム, 東京大学, 2024 年 9 月 27 日, 招待講演.
- [2] 深川宏樹, "離散微分形式による連続体力学", 幾何と数値解析 2024, 九州大学日本橋サテライト, 2024 年 10 月 26 日, 招待講演.
- [3] 深川宏樹, "微分形式による物理現象の記述と離散化", 研究集会「流体力学の現在知、そして水平線の向こうに」, 九州大学, 2025 年 3 月 6 日, 招待講演.

DFT および MD 計算による二次電池材料の探索

稲本 純一

兵庫県立大学大学院工学研究科

(世話人：安田 修悟)

近年、二次電池は電気自動車や定置用電源などの大型用途に使用の幅が広がっており、その性能向上や環境負荷への配慮、低コスト化は大きな課題となっている。我々の研究グループでは特に炭素材料の二次電池材料としての応用に重点をおいており、これまで炭素材料に対する様々なイオンの電気化学的挿入脱離反応を実験的に解析している。そこで、炭素材料への種々のイオンの挿入脱離反応について第一原理計算や分子動力学計算を実施することで、その反応機構の理論的考察を深めることを目標として研究を行っている。特に、我々のグループではこれまでに含酸素官能基を内包する炭素材料の層間にはナトリウムイオンが電気化学的に可逆に挿入脱離することを実験的に明らかにしている。含酸素官能基を含まない黒鉛ではこのような反応は起こらないことが知られており、その反応メカニズムにおいて含酸素官能基が大きな役割をもっていることが示唆されている。そこで本年度は昨年度に引き続き、ナトリウムイオン電池の負極反応として利用される炭素材料へのナトリウムイオン挿入脱離反応について、その反応電位に対する炭素材料の含酸素官能基の影響を DFT 計算により定量的に調べ、さらにその影響メカニズムについても調べた。

黒鉛に対して、一部をケトンやラクトン、エーテルなどの含酸素官能基で置換したモデル、さらにそれらのモデルの酸素を水素で置換したモデルを用意し、それらに対して DFT 計算により構造最適化を行った。その結果、含酸素官能基の導入により炭素六角網面間の距離が大きくなることが明らかとなった。この結果は実験的に得られた傾向と合致していた。またこれらのモデルにナトリウムイオンを挿入する電位を DFT 計算結果から算出したところ、特にケトンやラクトンなどの含酸素官能基を導入したモデルにおいて電位の大きな上昇が認められた。この要因を DFT 計算結果から詳細に検討したところ、特にこれらのモデルにおいては炭素材料のフェルミ準位付近の電子状態が変化し、フェルミ準位よりもやや高エネルギー側の領域にバンドが出現したことがわかった。これにより、材料の電子受容性が上がりナトリウムイオンをより高電位から挿入できることが明らかとなった。

さらに、炭素材料とナトリウムイオンの間の相互作用の強さを計算結果から評価したところ、炭素材料中に存在する含酸素官能基はやや負に帯電しており、これによりナトリウムイオンと静電的に相互作用することで炭素層間に存在するナトリウムイオンが安定化されたことも明らかとなった。これらの複数の効果により、ケトンやラクトンなどの含酸素官能基を含む炭素材料にはナトリウムイオンの可逆な挿入脱離反応が可能となることが明らかとなった。

論文

Junichi Inamoto, Akane, Inoo, Rika Matsumoto, and Yoshiaki Matsuo, “Role of Oxygen Functional Groups in Electrochemical Sodium Ion Intercalation into Oxygen-Functionalized Graphitic Carbon Materials,” *Electrochemistry*, in press (2025).

全球モデルでの超水滴法の利用を見据えた、全球ラグランジュ的輸送モデルの開発

松嶋 俊樹^A

神戸大学 惑星科学研究センター^A

(世話人：島伸一郎)

雲・エアロゾルのような粒子状物質の輸送を理解することは、信頼できる気候シミュレーションにより地球・惑星の気候を理解するために重要である。雲・エアロゾルの状態の表現には、バルク的な量だけでなく、より詳細な情報（粒子の起源、エアロゾルの溶解量）があると良いが、それらのとり得る同時分布をビン法で表現しようとする、属性の数とともにデータ・計算量が指数的に大きくなる。問題を回避する方法として、仮想的な粒子をラグランジュ的に追い、それと格子場の連成系を解く方法（Particle-in-Cell 法）が有望である。その一例は、世話人である島伸一郎氏らの開発した超水滴法（Shima et al., 2009）がある。超水滴法は、従来のバルク法に比べて 30 倍以上多くの計算コストが必要だったが、Matsushima et al. (2023) は、その計算コストをバルク法に匹敵する程度にまで下げる方法を提案した。しかしながら、そこで提案した手法は、直交座標系かつ等間隔格子を前提としたものであり、球面上のより広い領域を扱うことはできない。そこで、本研究課題では、その適用範囲を大きく広げることが目標に、HEALPix (Górski et al., 2005) を採用した、二次元球面上における Particle-in-Cell 法に基づくトレーサー移流スキームを新たに開発した。今後、全球領域における超水滴法の利用も一つの目標として、複数環境での評価を行う計画である。

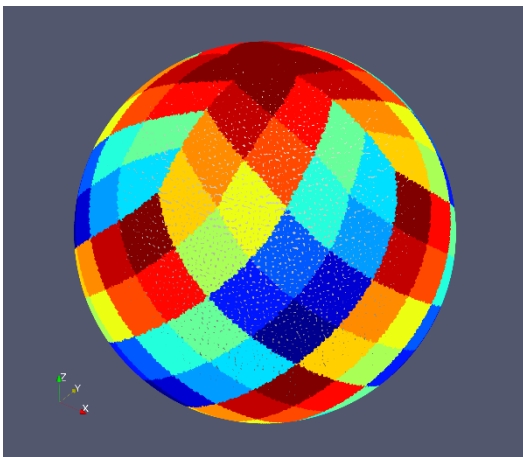


図 1：HEALPix の各面を 4x4 のブロックに分割し、その中からそれぞれ 512 個の粒子をサンプリングした例

学会発表

松嶋 俊樹, 西澤 誠也, 島 伸一郎 ”二次元球面上での Particle-in-Cell 法に基づくトレーサー移流”, 気象学会, つくば国際会議場, 11 月 12 日 (2024 年). [口頭]