



法政大学
HOSEI University

計算科学技術およびVRソフトウェア技術に 関する研究報告

発表者：数納 広哉 (すのう ひろや)

法政大学情報メディア教育研究センター

情報メディア教育研究センターシンポジウム2026

「生成AIが変える大学・企業と学びのかたち」

2026年 3月 3日

本発表の内容

- 2025年度の研究プロジェクト
 1. 計算科学シミュレーションソフトウェアの基盤開発
 2. プログラム高度化支援研究
 3. 人工知能・高性能計算技術開発
 4. xR・AI技術を活用した教育支援ツールの開発
 5. 計算科学・可視化共同研究
- 以下の2つの研究内容に分けて活動報告を行う：
 - 計算科学技術開発
 - VRソフトウェア技術開発

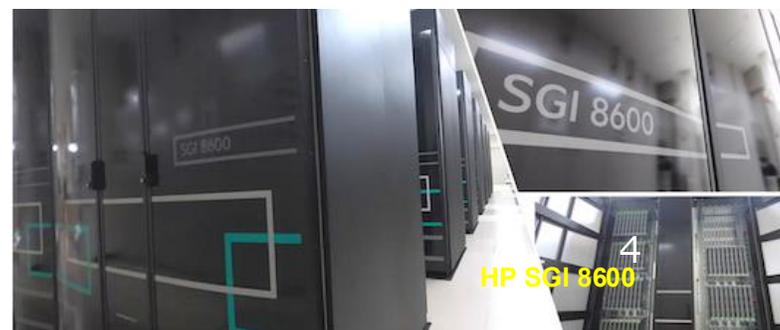
計算科学技術開発

計算科学とは？

- コンピュータを用いて自然現象や社会現象を数理的に解析・予測する学問分野
- コンピュータ・シミュレーションとほぼ同義
- 理論・実験に続く「第三の科学」とも呼ばれる(計算による科学)。
- 研究の流れ：
 1. 現象を数式で表現
 2. 数値計算できる形に変換(離散化)
 3. コンピュータで数値解を得る
 4. 結果を解析・可視化する
- スーパーコンピュータ・HPC(高性能計算)が主要な技術
 - 法政大学のラボラトリシステムで利用可能(学内利用課題を募集中)

スーパーコンピュータ・HPC計算サーバ

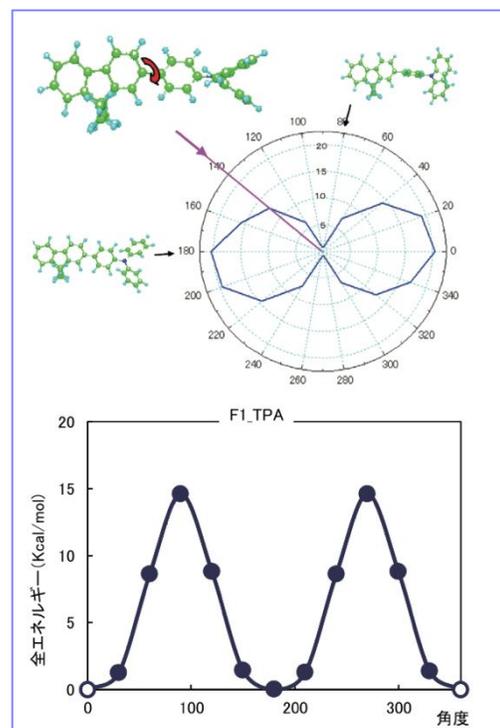
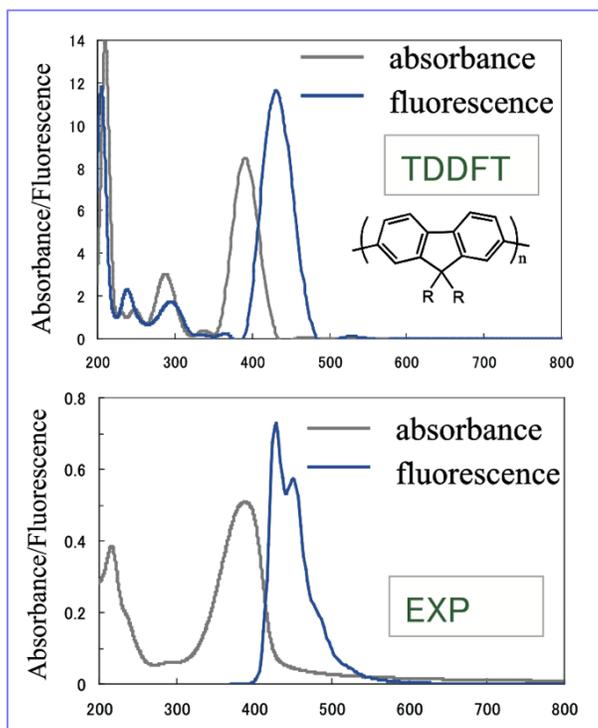
- NEC地球シミュレータ(海洋機構)：ベクトル型スパコン, 世界最速を記録
- SGI Altix(海洋機構)：スカラー型スパコン
- 富士通「京」コンピュータ（理研）：スカラー型スパコン, 世界最速を記録
- SGI ICEX→HPE SGI8600（原子力機構）：CPU+GPGPUスパコン
- Dell ラボラトリシステムlab2022（法政大）：CPU+GPGPU計算システム
- HPE 教育用シミュレーションシステム（兵県大）：CPU+GPGPU+ベクトル加速マルチアーキテクチャスパコン



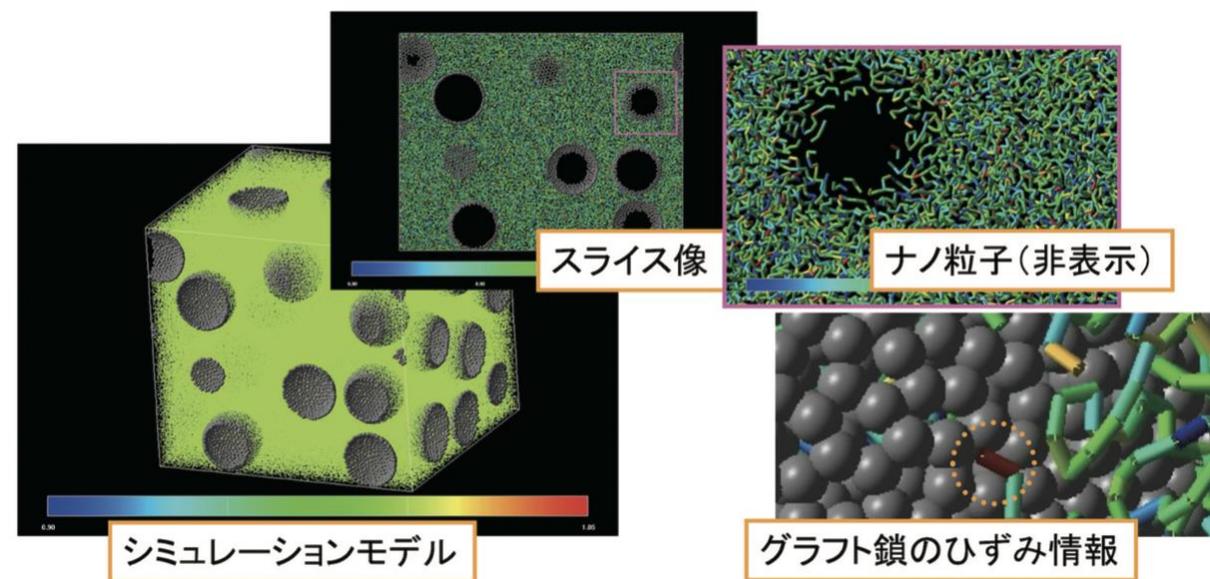
- OS : Linux系OS
- 言語 : Fortran、C/C++、Python
- 並列化 : MPI、OpenMP、自動並列化
- ベクトル化 : 自動ベクトル化(NEC SX)、SIMD組込関数
- GPUアクセラレーション : OpenACC、CUDA Fortran、OpenMP target offloading
- 数値計算基盤 : Intel oneMKL、CUDAライブラリ、NumPy、SciPy
- AIフレームワーク : Tensorflow、PyTorch
- プログラムの性能向上のため、**高度化**という作業が必要になる。

シミュレーションの例（高度化支援）

- 高効率有機発光材料の開発
(住友化学株式会社・本学情報科学部への高度化支援)



- ゴム中ナノ粒子ネットワーク構造のモデル構築による高性能タイヤの開発
(住友ゴム株式会社・防衛大学校への高度化支援)

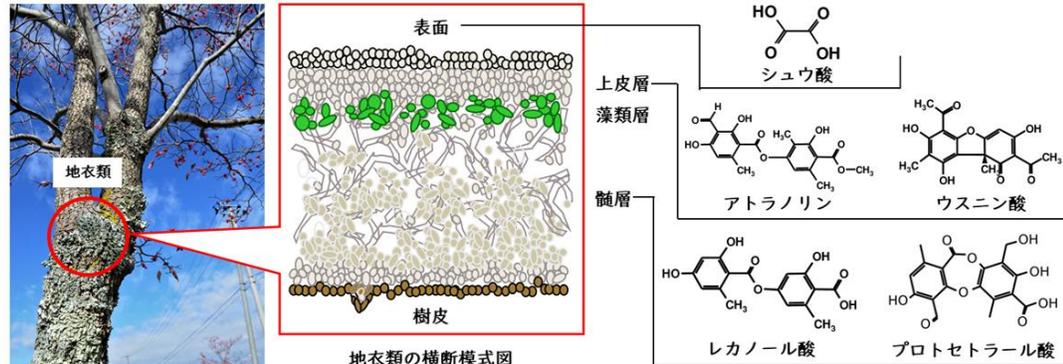


量子力学に基づく密度汎関数理論(DFT)計算による、有機分子の発光スペクトル計算

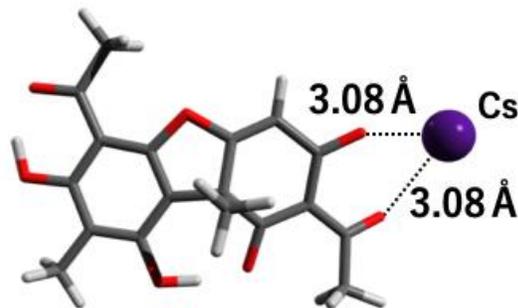
古典力学に基づく粗視化分子動力学法による、タイヤゴムのナノ粒子の再現

シミュレーションの例（共同研究・高度化支援）

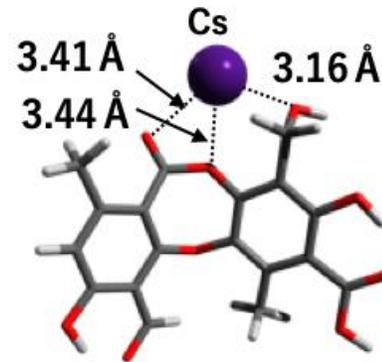
- 森林生体における放射性セシウム蓄積機構の解明（原子力機構との共同研究）



ウスニン酸

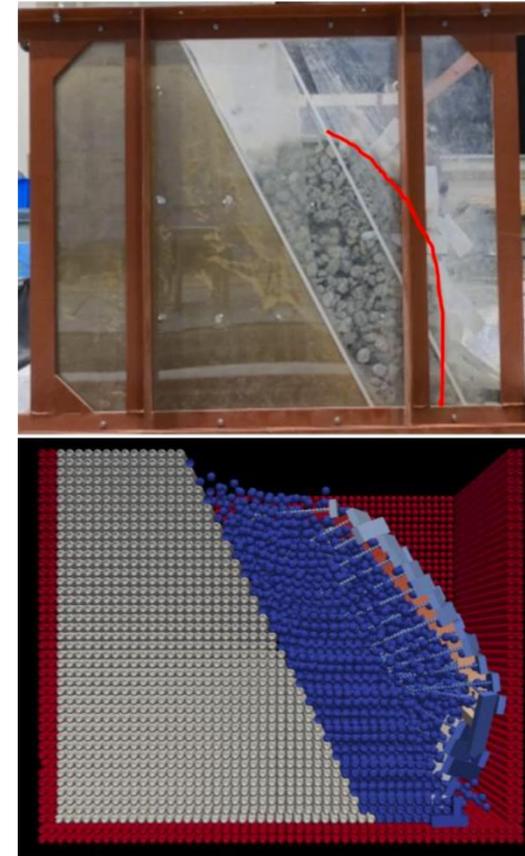


プロトセトラール酸



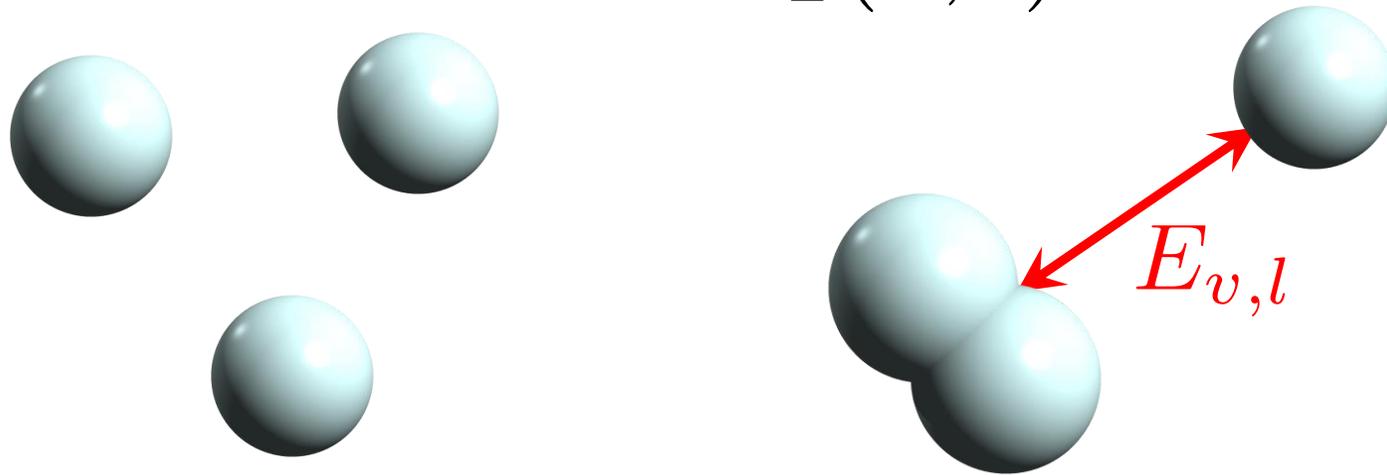
量子力学に基づく密度汎関数理論(DFT)計算による、
生体分子-セシウム間の錯体形成力の見積もり

- 地震時の斜面の信頼性手法に関する研究（本学デザイン工学科への高度化支援）



古典力学に基づくSPH-DEM法による
地震時の斜面のシミュレーション

量子少数体問題のシミュレーション研究： 3体再結合(Three-body recombination)



- 物理学や化学において重要な化学反応。
- 原子・分子レベルでのミクロスケールでは量子論的性質が現れる。
- 量子力学の基礎方程式であるシュレーディンガー方程式に従ってシミュレーションを行う。

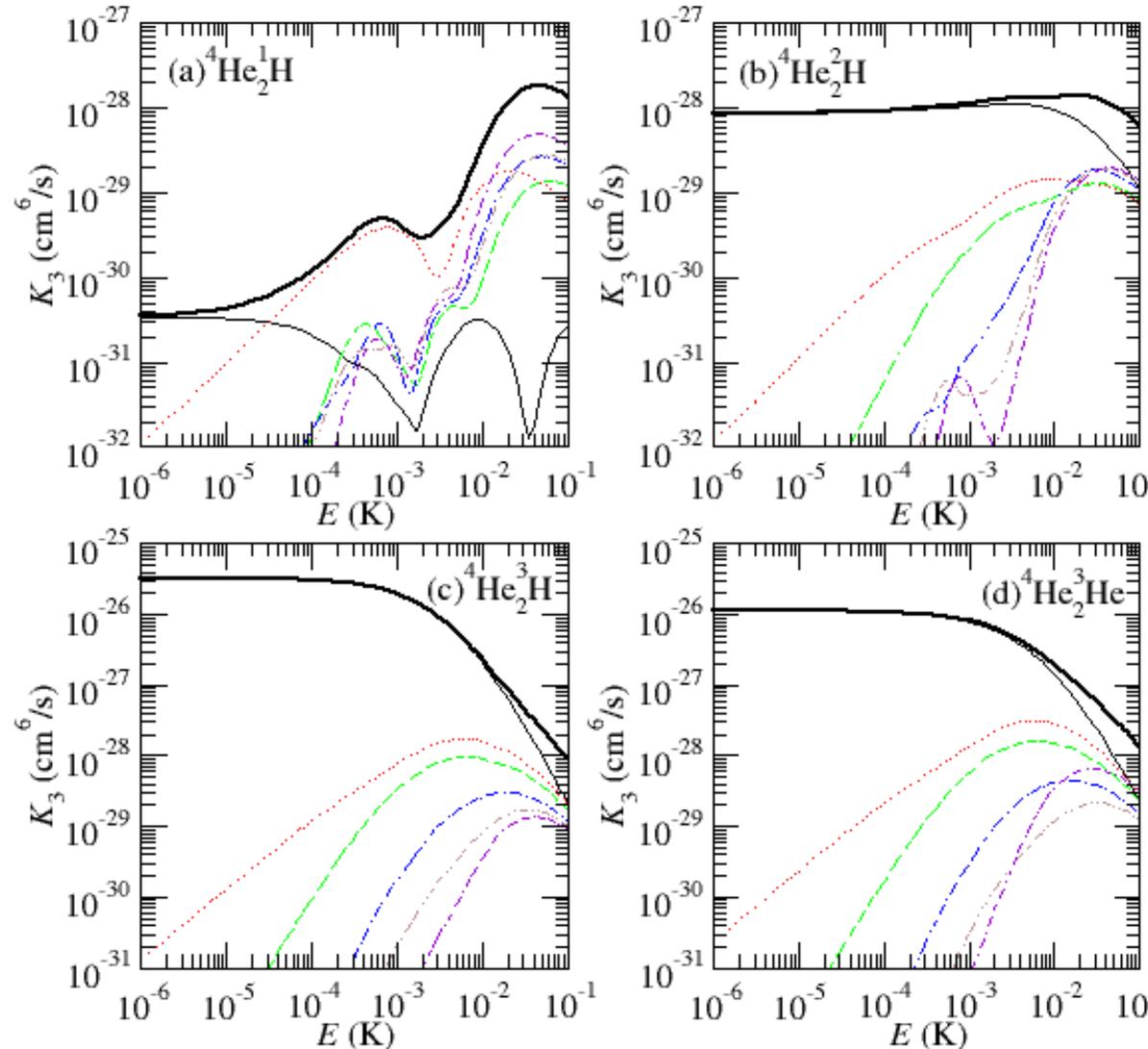
シュレーディンガー方程式

$$\left[-\frac{1}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{\Lambda^2 + 15/4}{2\mu R^2} + V(R, \theta, \varphi) \right] \psi_i(R, \Omega) = E \psi_i(R, \Omega)$$

$$\Lambda^2 = -\frac{4}{\sin 2\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin 2\theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{4}{\sin^2 \theta} \left(i \frac{\partial}{\partial \varphi} - \cos \theta \frac{J_z}{2} \right)^2 + \frac{2J_x^2}{1 - \sin \theta} + \frac{2J_y^2}{1 + \sin \theta} + J_z^2$$

- 自由度6を持つ偏微分方程式
- 数値的に離散化すると、大規模な行列の固有値問題に帰着される。
- その固有値問題をスーパーコンピュータ上で解くこと、数値解を求める。
- 数値解から物理量を計算する。

3体再結合レートの計算結果： ${}^4\text{He}+{}^4\text{He}+X\rightarrow{}^4\text{He}_2+X, X={}^1\text{H}, {}^2\text{H}, {}^3\text{H}, {}^3\text{He}$



Few-Body Syst (2025) 66:37
<https://doi.org/10.1007/s00601-025-02009-4>



RESEARCH

Hiroya Suno

Three-Body Recombination of Cold Helium and Hydrogen Atoms

Received: 24 June 2025 / Accepted: 9 September 2025
 © The Author(s), under exclusive licence to Springer-Verlag GmbH Austria, part of Springer Nature 2025

Abstract We investigate three-body recombination of helium and hydrogen atoms at cold collision energies, adopting the hyperspherical adiabatic formulation. By taking into account non-rotating ($J = 0$) and rotating ($J > 0$) states, we calculate the rates for the recombination processes ${}^4\text{He}+{}^4\text{He}+X\rightarrow{}^4\text{He}_2+X$ ($X={}^1\text{H}, {}^2\text{H}, {}^3\text{H}$ and ${}^3\text{He}$), up to 0.1 Kelvin. In addition, we compute the collision induced dissociation rates for the same three-body systems.

Springer Nature社の学術誌
 Few-Body Systemsにて
 査読付き論文を発表

VRソフトウェア技術開発

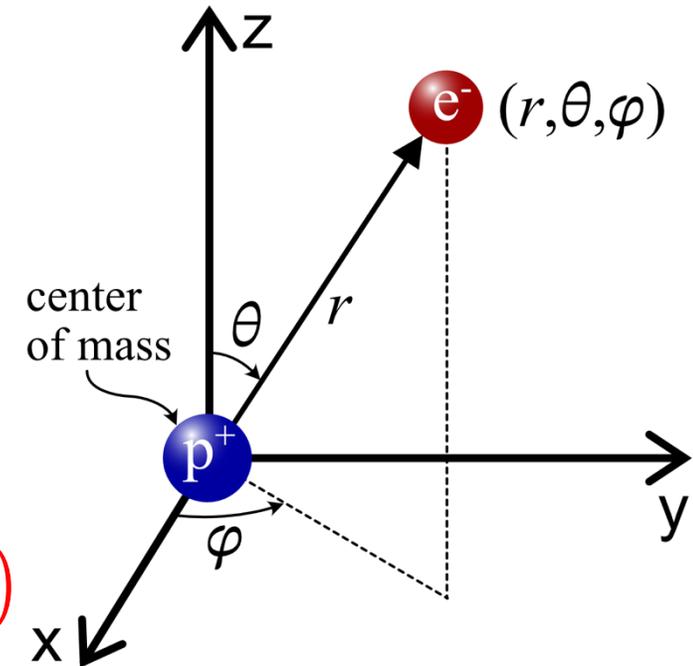
- 「水素原子軌道VR可視化アプリケーション開発」

水素原子軌道

- 物理学・化学の最も基礎的なテーマ
- 球面座標で表現される： (r, θ, φ)
- 3つの量子数
主量子数： n 、軌道量子数： l 、磁気量子数： m
- 波動関数(原子軌道)：

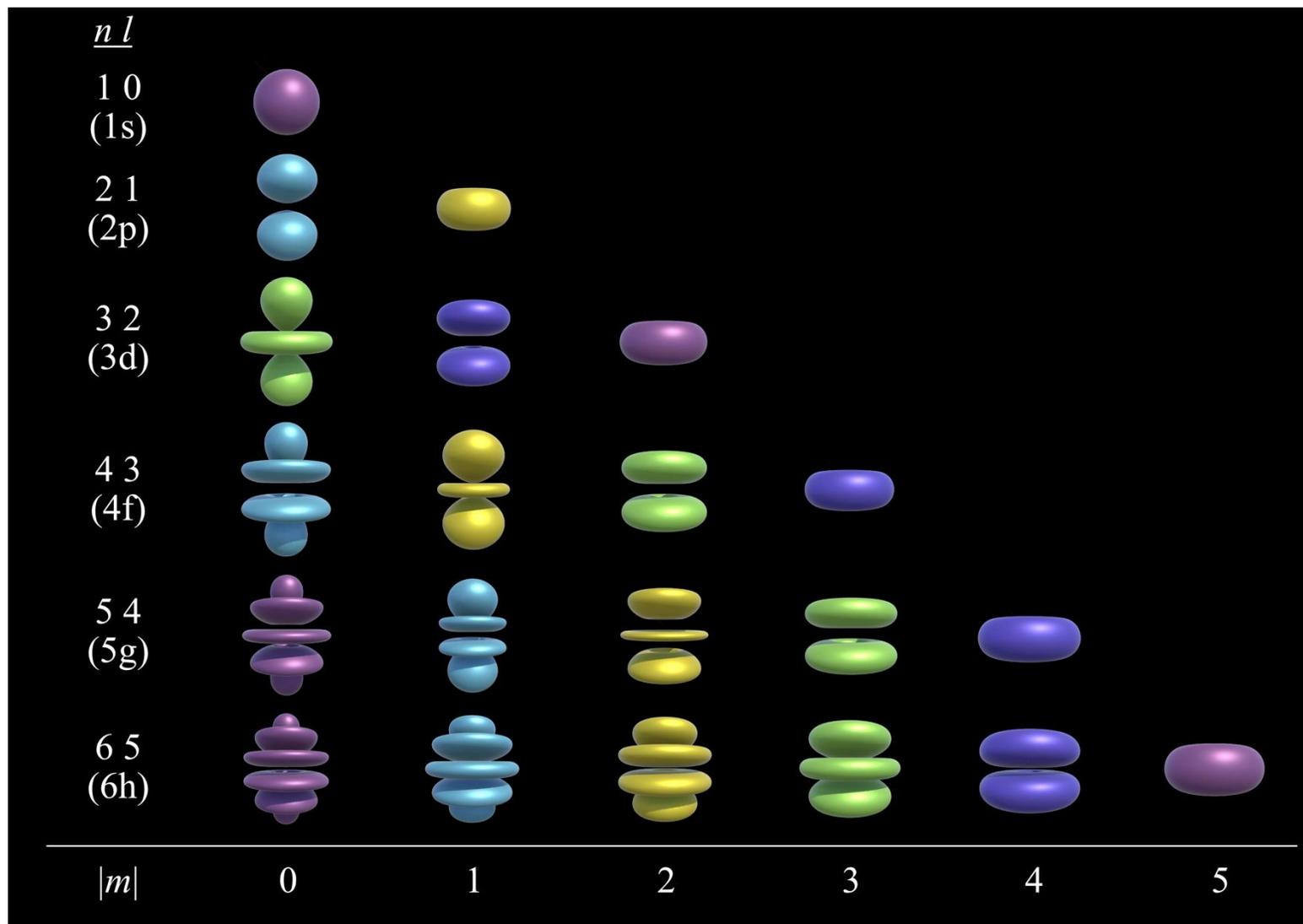
$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

- 動径波動関数： $R_{nl}(r) = - \left[\left(\frac{2}{na_0} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \right]^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{r}{na_0}} \left(\frac{2r}{na_0} \right)^l L_{n+l}^{2l+1} \left(\frac{2r}{na_0} \right)$
- 角度波動関数 (球面調和関数)： $Y_{lm}(\theta, \varphi) = \left\{ \frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!} \right\}^{\frac{1}{2}} P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\varphi}$
- ボーア半径： $a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} = 5.29177210903 \times 10^{-11} \text{ m}$
- 本研究の目的：**水素原子軌道のVR可視化・分子軌道への発展**
- 原子軌道は複素数関数→複素数は可視化できない→**実数表現**が必須



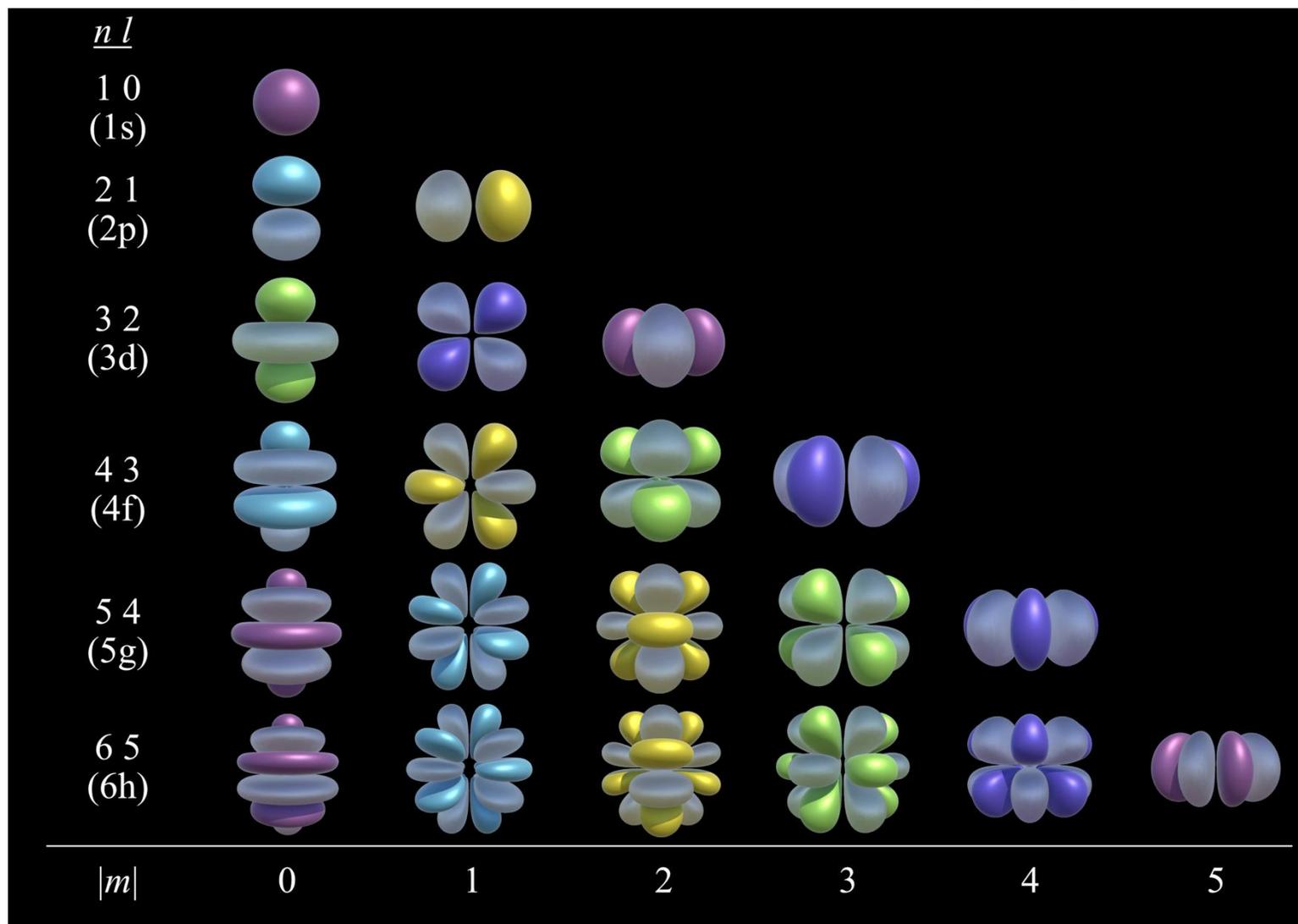
水素原子軌道の

存在確率密度を可視化： $D_{nlm} = |\psi_{nlm}|^2$



水素原子軌道の複素共役線形結合を

可視化： $\psi_{nlm}^+ = (\psi_{nlm} + \psi_{nl(-m)})/\sqrt{2}$



実数表現法を探究(教育目的)・分子軌道への発展

- 同じ n 、同じ l 、異なる m で縮退している水素原子軌道の線型結合を作り、デカルト座標 (x, y, z) と半径 r で表現する。

- 2p軌道の場合：

$$2p_x = -\frac{1}{\sqrt{2}}(2p_{+1} - 2p_{-1}) \sim R_{2p}(R) \frac{x}{r}, \quad 2p_y = \frac{i}{\sqrt{2}}(2p_{+1} + 2p_{-1}) \sim R_{2p}(R) \frac{y}{r},$$

$$2p_z = 2p_0 \sim R_{2p}(R) \frac{z}{r}$$

- 3d軌道の場合：

$$3d_0 \sim R_{3p}(r)(3\cos^2\theta - 1) \sim R_{3p}(r) \frac{1}{r^2}(3z^2 - r^2) \sim d_{3z^2-r^2},$$

$$3d_{x^2-y^2}, 3d_{xy}, 3d_{yz}, 3d_{xz}$$

- 炭素原子の混成軌道も加えた

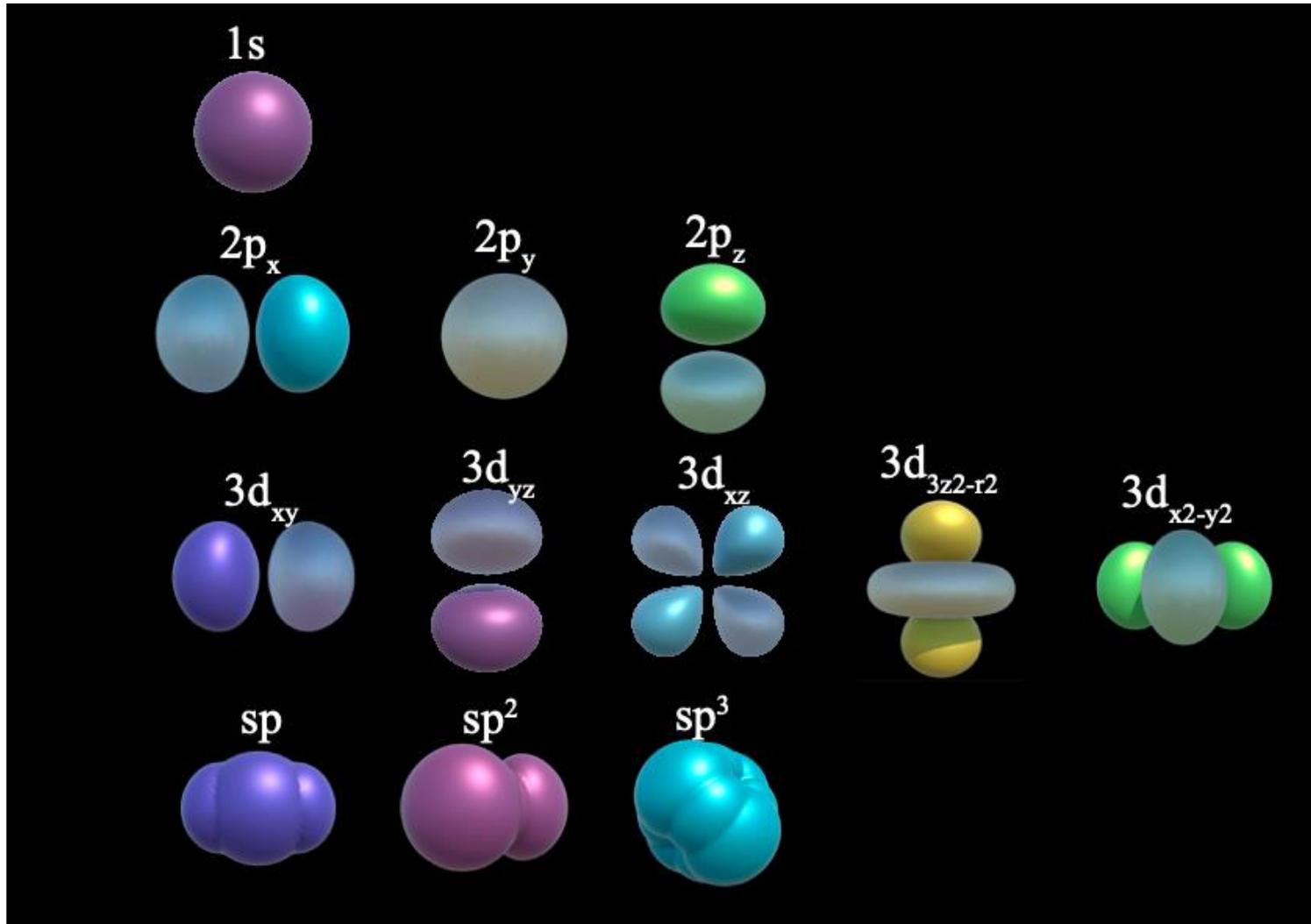
$$sp: \psi_1 = s + p_x, \psi_2 = s - p_x$$

$$sp^2: \psi_1 = \left(\frac{1}{3}\right)^{1/2}s + \left(\frac{2}{3}\right)^{1/2}p_x, \psi_2 = \left(\frac{1}{3}\right)^{1/2}s - \left(\frac{1}{6}\right)^{1/2}p_x + \left(\frac{1}{2}\right)^{1/2}p_y, \dots$$

$$sp^3: \psi_1 = \frac{s+p_x+p_y+p_z}{2}, \psi_2 = \frac{s-p_x-p_y+p_z}{2}, \psi_3 = \frac{s+p_x-p_y-p_z}{2}, \dots$$

- 水素原子軌道から原子分子軌道へと発展させた。

原子軌道・分子軌道の可視化結果

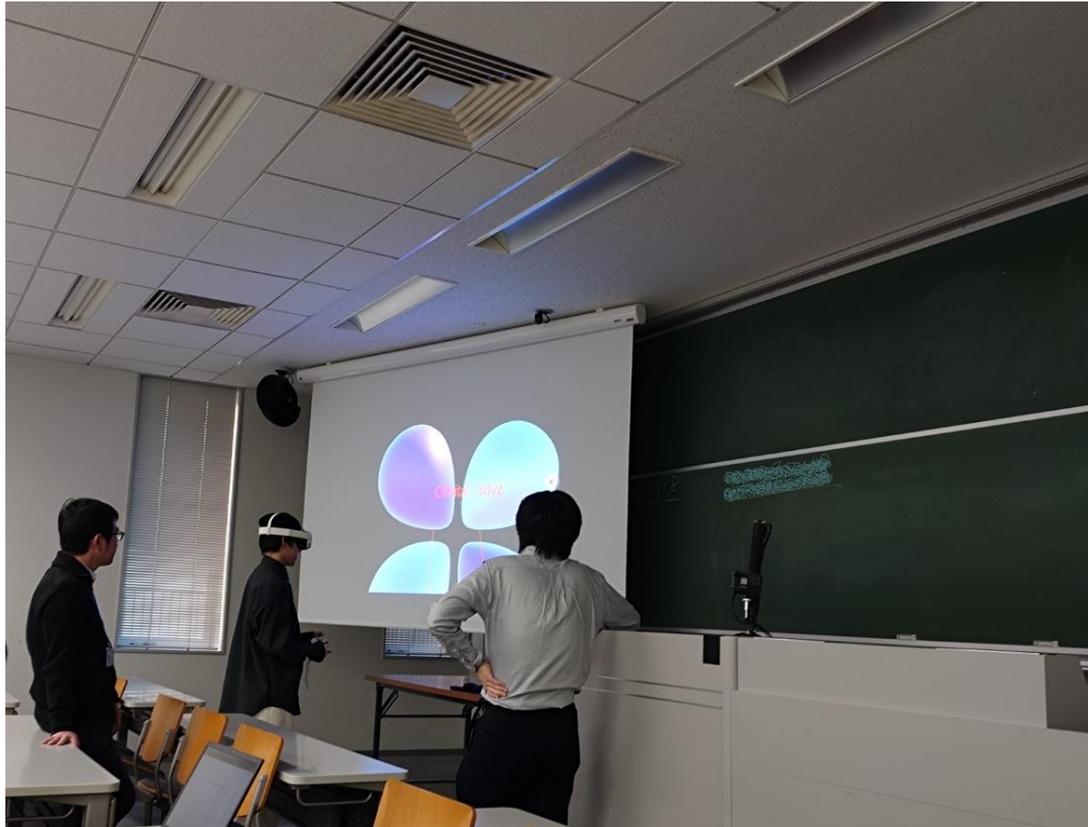


Quest 3での原子分子軌道VRアプリの動作確認



法政大学理工学部電気電子工学科 「応用物理学」授業での実演

- 学生に体験してもらった。
- 先生からは改善すべき点をアドバイスしていただいた。



まとめ

- 以下の2つの研究分野についての成果報告を行なった。
 - 計算科学技術開発
 - VRソフトウェア技術開発
- 論文発表
 - HS, “Three-Body Recombination of Cold Helium and Hydrogen Atoms”, Few-Body Systems, Vol. 66, (2025), pp.1~10.
 - HS, Nobuaki Ohno, “Virtual Hydrogen, a virtual reality hydrogen visualization tool: from atomic to molecular orbitals”, Procedia Computer Science, 29th International Conference on Knowledge-Based and Intelligent Information & Engineering Systems (KES2025), Vol.270, (2025), pp. 4505~4513.
 - HS, Nobuaki Ohno, “Virtual Hydrogen, an application for visualizing hydrogen atomic orbitals in virtual reality”, Proceedings of the 44th JSST Annual Conference on Simulation Technology (JSST2025), (2025), pp.273~277.
- 情報メディア教育研究センター報告：2報
- 国際会議口頭発表：2件
- 国内ワークショップ口頭発表：2件