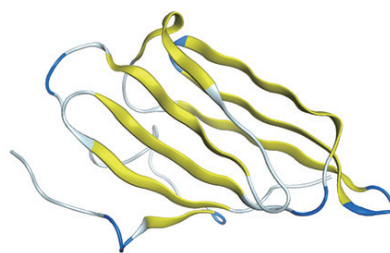


計 算 工 学 ナ ビ

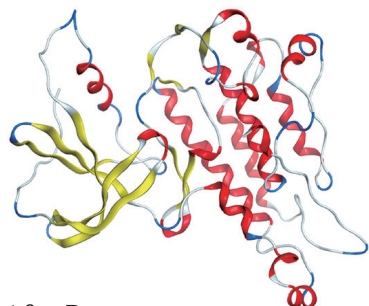
計算工学ナビ・ニュースレター2025年春号



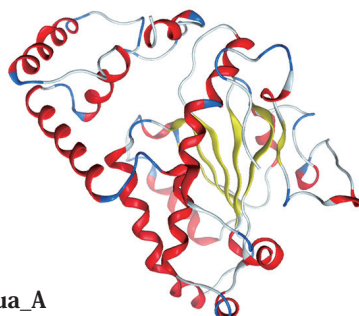
5jxc_D SynGAP Coiled-coil trimer



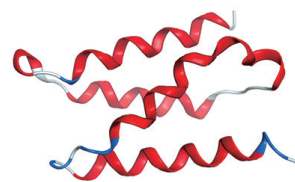
1ejf_A Human Co-chaperone P23



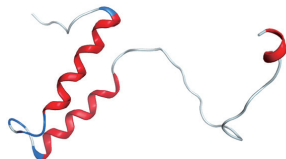
1fvr_B Protein Kinase



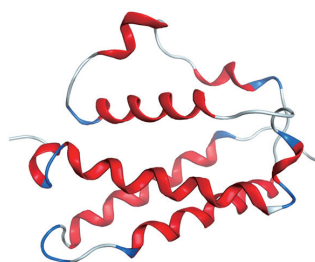
1aua_A
Phosphatidylinositol
Transfer Protein Sec14p



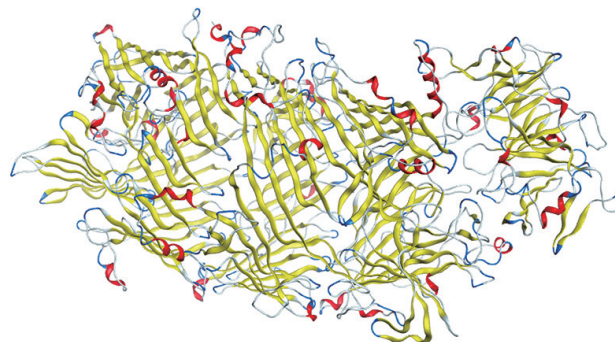
1z9e_A HIV integrase-binding domain



1u97_A cox17-like



1ngk_A
Mycobacterium tuberculosis
Hemoglobin O



4o9x_A TcdB2-Tccc3

■計算工学ナビ・レポート

「富岳」を中核とするHPCIシステム利用研究課題「HPCIを活用したFMO創薬プラットフォームの構築」

フラグメント分子軌道法に基づく構造生命科学と産学官連携による創薬への取り組み 大阪大学大学院薬学研究科 福澤 薫

「富岳」成果創出加速プログラム「『富岳』を活用した革新的光エネルギー変換材料の実現」

量子力学に基づいた新たな光エネルギー変換材料設計を実現し社会実装をめざす 理化学研究所計算科学研究センター 中嶋 隆人

■レポート 「『富岳』成果創出加速プログラム」「AIの活用によるHPCの産業応用の飛躍的な拡大と次世代計算基盤の構築」の最新成果概要紹介

研究テーマ②「スマート in-situ 可視化基盤の構築」

スマート in-situ 可視化基盤の開発状況 神戸大学大学院システム情報学研究科 坂本 尚久

研究テーマ④「自動車の空力騒音予測と空力騒音低減手法の確立」

FFX (FrontFlow/X) の開発状況および適用例 豊橋技術科学大学工学部 飯田 明由

「富岳」を中核とする HPCI システム利用研究課題「HPCI を活用した FMO 創薬プラットフォームの構築」

フラグメント分子軌道法に基づく構造生命科学と産学官連携による創薬への取り組み

スーパーコンピュータ「富岳」を中核とする HPCI(革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ)システムは、幅広い HPC ユーザ層が、全国の HPC リソースを効率よく利用できる体制と仕組みを整備し、全国規模でニーズとリソースのマッチングを可能にすることで利用を加速するとともに、計算科学コミュニティを醸成・拡大し、成果の社会還元に資することをめざしています。「富岳」をはじめ HPCI システムを最大限に活用して成果を挙げることが求められる HPCI システム利用研究課題に選定され、「第11回 HPCI システム利用研究課題優秀成果賞」を受賞した研究課題「HPCI を活用した FMO 創薬プラットフォームの構築」の代表者である大阪大学大学院薬学研究科の福澤 薫教授に、研究のねらいや取り組みなどについてお話をいただきました。



大阪大学大学院薬学研究科
量子生命情報薬学分野

福澤 薫 教授

インシリコ創薬とフラグメント分子軌道 (FMO) 法

新薬の開発に HPC や AI 技術を活用したインシリコ創薬・製剤への期待が高まっています。そのために福澤先生が取り組んでおられるのが、日本発の量子化学計算法「フラグメント分子軌道 (FMO) 法」の創薬・製剤への応用ですね。

計算機を活用した高精度・高効率なインシリコ創薬は、薬剤開発の新たな手法として注目されています。新薬の開発は、薬のターゲットとなるタンパク質などの物質を定め、それに作用するヒット・リード化合物の探索から、リード化合物をもとに薬効・安全性・体内動態が最適となる化合物をデザインするリード最適化、臨床試験などを経て、新薬の申請までには10~15年といった長い年月がかかります。また、製剤化までには万単位の化合物の合成が必要です。そのため、インシリコ創薬による開発期間の短縮、費用や労力の軽減などが期待されています。

特定のタンパク質などをターゲットにして作用する薬は、分子標的薬とよばれています。例えば、アレルギー症状を抑える薬は、アレルギー物質よりも強く標的タンパク質に結合し、アレルギー物質の結合を妨げるわけです。インシリコ創薬では、計算機を使って標的タンパク質と候補化合物の結合エネルギーを計算し、それらの間の分子間相互作用を定量的に評価し、化合物のなかから標的タンパク質により強く結合する薬の候補を絞り込むことができます。こうした立体構造の解析に基づいて薬を設計する創薬手法を構造ベース創薬といいます。

タンパク質の結合エネルギーを計算するには、従来の経験パラメータに基づく古典力場計算 (MM: Molecular Mechanics) と、量子論に基づいて分子を電子状態から解析する量子化学計算 (QM: Quantum Mechanics) という2つの方法があります。量子力学を使うと、より高精度にエネルギー状態が予測できますが、タンパク質全体の量子化学計算は非常に複雑で、計算量も膨

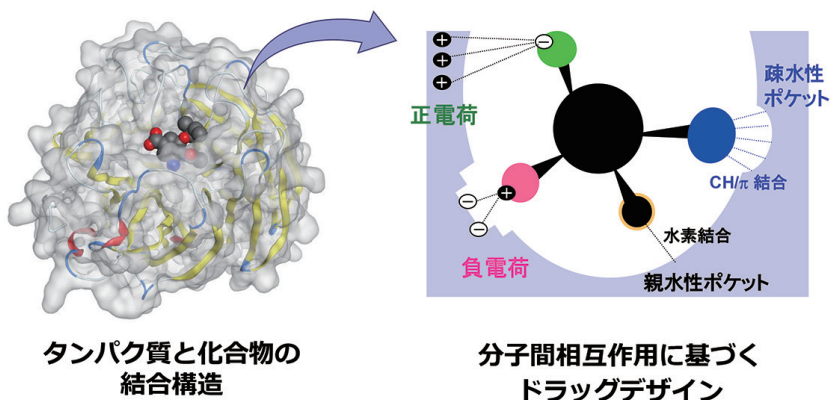
大であるため、限られた計算資源では大きな分子を扱うのが難しいという課題があります。それを解決するための効果的な手法が、1999年に大阪府立大学 (当時) の北浦和夫教授によって提案された「フラグメント分子軌道 (FMO) 法」です。FMO 法は、巨大分子を小さなフラグメント (断片) に分割して、フラグメントやフラグメントペアごとに量子化学計算を行って部分エネルギーを算出し、周囲の影響を取り入れながら全体を再構築します。そうすることで、電子状態計算を精密かつ高速に実施することを可能にしています。FMO 法は、フラグメント間の相互作用エネルギーも算出できるので、タンパク質などの巨大分子の部分構造と薬となる化合物の間の相互作用を定量的に理解することが可能なのです。FMO 法を簡単に説明すると、タンパク質のような大きな分子の量子化学計算はたいへんなので、小さく分割して計算し、その組み合わせで全体を表現しようということです。もちろん、分割といっても好きなところで切れるわけではありませんが、たとえば、タンパク質はアミノ酸が連なったもので、その切り方はほぼ決まっています。私たちが FMO 計算に活用

している純国産のソフトウェア ABINIT-MP では、分割処理はほぼ自動化されているので、初心者でも間違える心配はありません。非常にユーザーフレンドリーにつくられていますが、低分子は分子量が大きくなってくると分割しなければならないなど、ある程度のテクニックが必要です。

HPC を活用した FMO 創薬プラットフォームの構築

FMO 法のインシリコ創薬への活用を加速する目的で、2014年11月に「FMO 創薬コンソーシアム (FMODD)」が結成され、福澤先生は代表を務めておられますね。

FMO 法を実用的な創薬技術として発展させるためには、研究者が個別に取り組むだけでなく、産学官の連携に基づいて大規模計算資源を活用しながら研究を行っていくことが必要との考えから、アカデミアの研究者、企業の創薬研究者らが集まり、「FMO 創薬コンソーシアム」を設立しました。2015年度からは、スーパーコンピュー



▲図1 構造ベース創薬の例

FMO 法を構造ベース創薬に活用すると、薬の候補化合物 (右図の5つの丸とそれを繋ぐ棒) がタンパク質 (右図の薄紫の外側部分) のどのフラグメントとどの程度の強さで相互作用しているかを知ることができ、より強く結合する化合物を見つけ出すことができます。

タ「京」のコンソーシアム型の産業利用課題の申請を行い、全国の研究者が「京」を利用して数百から数千構造のタンパク質複合体などのFMO計算を実施し、創薬ターゲットに対する活性値の高精度予測をはじめ、ヒット化合物の最適化、新規化合物の提案、ターゲット選択性の評価などで成果を挙げてきました。「京」をはじめとするHPCIの利用が進んでからは、計算を増やして次々に解析していくフェーズになりました。コンソーシアムも、結成当初は30数名でしたが、今日では大学・研究所28機関、製薬企業14社、IT企業6社、メンバー数も約180名を数えるまでになりました（2024年度現在）。10年間にわたってHPCIという大規模な計算資源を継続的に使わせていただけたことが、コンソーシアムを続けるうえで非常に重要だったと考えています。コンソーシアムでHPCI資源を活用して実施した研究成果は公開が原則ですので、計算・解析手法のノウハウや計算結果データは共有されます。ご参加いただいている製薬企業では、HPCI利用では現場での創薬計算を想定した計算手法・結果に対する客観的な評価を行っていただき、データを公開できない研究は、自社の計算資源を利用してもらうかたちです。研究を推進するためのワーキンググループ（WG）は、当初は創薬ターゲットに着目した4つでしたが、現在は創薬手法を開発する3つのWGと製剤WGに加えて、20以上の創薬ターゲットのテーマが進行中です。それぞれのWGで得られた成果を持ち寄り、全体の議論を行っています。また、蓄積された膨大な計算結果は、「FMOデータベース（FMODB）」としてまとめられており、2019年2月からは、誰もがそのデータを利用できるよう一般公開されています。現在までにデータベースに登録された量子化学計算データの数37,478件に達し（2025年2月現在）、構造生物学データの解釈や医薬品設計など、さまざまな活用されています。

HPCIシステム利用研究課題でスーパーコンピュータ「富岳」が利用できるようになったのは、2021年からです。私たちが取り組んでいるタンパク質の量子化学計算は、多くの計算ノードを

長時間使用する大規模計算とは違い、大勢の研究者がノードを少しずつ使ってパラレルに流すというやり方ですので、「富岳」が使えるようになったことで、計算処理スピードはおよそ100倍に向上し、構造生物学、合成化学、タンパク質工学などの実験研究との融合など、これまで以上に幅広い分野の多様なターゲットに対する研究テーマを進めていくことが可能になりました。

生体内の揺らぎを再現するなど 新たな手法の構築

「富岳」の共用開始のように計算資源が充実することによって、「研究の量」だけでなく、「質」も変わっていったのでしょうか。

たとえば、静的な解析から動的な解析への移行もそうした進化の一例といえるかもしれませんね。「FMOデータベース」が動き出す少し前、私たちは構造の計算を数百から数千個達成することを大目標に研究を進めていたのですが、それは“止まった構造の計算”でした。しかし実際の生体のなかで、構造は揺らいでいるわけです。その揺らぎを扱えなければ、ダイナミックな相互作用を正しく理解することは難しいという課題がありました。ちょうど「京」の最後のころでしたが、その解決策として、FMO法と古典分子動力学（MD）法を組み合わせるという手法に取りかかりました。MD法は、分子や原子1つ1つに対してニュートンの運動方程式を解き、構造とエネルギーの時間変化などをシミュレーションする手法です。このMD法でタンパク質と化合物が揺らいでいる状態を再現し、一定の間隔でたくさんのスナップショットをサンプリングして、それらの構造のFMO計算を行い、結果を平均化するわけです。これにより、揺らぎがある場合の相互作用を明らかにすることができます。ただし、当時は計算がなかなか思うように進まず、「京」の運用が終わるまでに間に合わず、東京工業大学（現・東京科学大学）の

「TSUBAME3.0」や最先端共同HPC基盤施設の「Oakforest-PACKS」などを使わせていただいて、ようやく達成することができました。この手法は今は「富岳」を活用して多くの成果を挙げています。驚かされたのは、「富岳」の計算パワーです。「京」で3カ月かかった計算が、「富岳」では1日で終わってしまうのです。「富岳」の時代になって、それまでの“止まった構造の計算”からMD法とFMO法の融合による“動いている構造の計算”がどんどんできるようになり、さまざまなバリエーションへの対応も可能になり、さらには実験結果の解釈や実験に先駆けた予測などにも手を伸ばせるまでになっています。

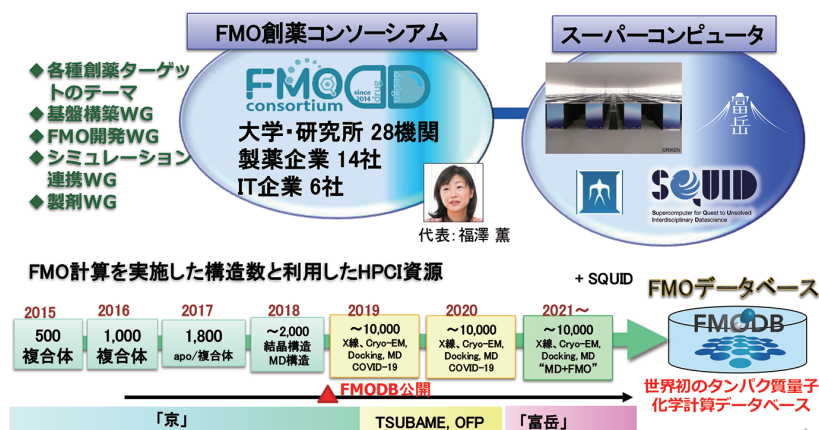
創薬とともに生命現象の解明に 取り組む

現在では、インシリコスクリーニングやAIを活用した構造生成でもFMO法を使って研究を効率化するなど、FMO創薬の研究はさらに進化したつづきありますが、福澤先生ご自身は、これらどのようなことをめざされるのですか。

FMO創薬コンソーシアムとしては、インシリコ創薬の基盤となるデータの蓄積や新たな手法の開発、そして、これからの人材を育てていくなどの活動を続けていくことによって、飛躍的に精度の高い信頼性と有効性をもった論理的創薬に繋げて行きたいと考えています。膨大な化合物ライブラリーのなかから薬の候補となる化合物を選別するインシリコスクリーニングや、これまでの知見からAIを活用して最適な薬物候補を創り出すといった創薬のための研究において、FMO法をどのように活用すると、どれくらい効率になるか、よりよくなるかという事例を、どんどん出していこうとしています。一方で、私自身としては、さまざまな生命現象を量子論による科学的な研究によって理解し、その上で応用として創薬などに役立てていきたいという思いがあります。まずは生命現象を解明するという研究に取り組んでいきたいのです。

その成果の1つが、昨年、理化学研究所をはじめとする国際共同研究グループが科学雑誌『Nature Communications』で発表した、抗がん活性を示す小分子化合物「DMDA-PatA」の作用メカニズムを解明した研究でした。DMDA-PatAは、遺伝子発現のうち翻訳のプロセスを阻害することが報告されていましたが、その分子的な作用機序は未解明でした。この研究で、DMDA-PatAは標的であるRNA結合タンパク質eIF4AおよびDDX3に新たなRNA配列特異性を与える化合物であることが分かり、毒性の低い新たな抗がん剤設計に役立つと考えられます。私たちは、この研究でFMO計算によってタンパク質との間でどのような相互作用が起きているかを明らかにし、それを実験で確認することができました。この研究成果は、FMO法が生命現象の理解に役立った事例といえます。

産学官連携で日本発の実用的な高性能創薬技術を開発する



2024年末時点で37,478の構造(PDBID 7,783個)のFMO計算結果を公開中

▲図2 HPCIを活用したFMO創薬コンソーシアムの活動

「富岳」成果創出加速プログラム 「『富岳』を活用した革新的光エネルギー変換材料の実現」

量子力学に基づいた新たな光エネルギー変換材料設計を実現し社会実装をめざす

スーパーコンピュータ「富岳」の特性を十分に活用して科学的・社会的課題解決に直結する成果の早期創出を支援するために、文部科学省は2020年度から「『富岳』成果創出加速プログラム」を実施しています。現在は、AI・データ科学との融合・連携、社会実装に向けた産業界との連携、次世代を見据えたアプリケーションに繋がる取り組み、基礎科学の新たな展開など、新規成果の創出が期待される研究課題として「健康長寿社会の実現」、「産業競争力の強化」、「防災・減災、環境問題」、「基礎科学の発展、新領域」の4つの領域に20課題が挑戦しています。今回紹介する2021年度より実施されている「『富岳』を活用した革新的光エネルギー変換材料の実現」も、「産業競争力の強化」領域の課題の1つです。この課題の研究開発課題責任者である理化学研究所計算科学研究センター量子系分子科学研究チームの中嶋隆人チームリーダーに、課題の取り組みや進捗などについてお話をいただきました。



理化学研究所計算科学研究センター
量子系分子科学研究チーム

中嶋 隆人 チームリーダー

マテリアルズ・インフォマティクスで 新材料を探索

はじめに、研究課題「『富岳』を活用した光エネルギー変換材料の実現」の取り組みについてご説明ください。

2014年に始まった文部科学省「ポスト『京』」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発「重点課題⑤「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」において、私たちはスーパーコンピュータ「京」を利用して、高効率な材料スクリーニングに基づいたマテリアルズ・インフォマティクス手法（材料科学と情報科学を融合することで効率よく新規材料設計を実現する手法）を用いて、次世代太陽電池として期待される「ペロブスカイト太陽電池」の新たな材料候補を発見しました。このプロジェクトの流れを受けて、スーパーコンピュータ「富岳」の「富岳」成果創出加速プログラムにおいて、

太陽電池や光触媒など革新的光エネルギー変換材料の研究を実施することになりました。新たな技術を社会実装することで、アフター・コロナ、ウィズ・コロナの経済や生活の立て直しに貢献できるのではないかと考えたのです。研究項目として「革新的な水素製造光触媒の実現」、「感染症対策に向けた光触媒開発」、「高効率非鉛化ペロブスカイト太陽電池の新材料設計」の3つのサブテーマを設定しています（図1）。

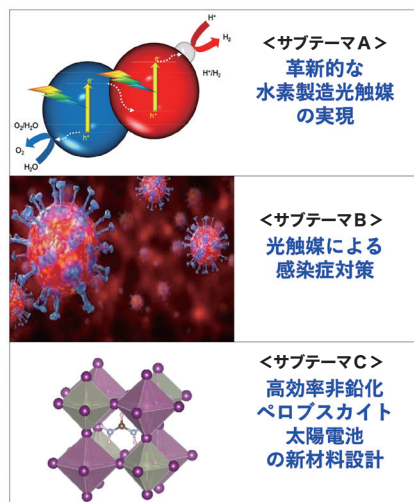
サブテーマAの「革新的な水素製造光触媒の実現」では、次世代のクリーンなエネルギーとして注目されている水素を大量かつ安価に製造する光触媒材料の探索を推進するため、「富岳」を活用した詳細な計算によって、革新的な光触媒の候補を見つけ出そうとしています。

サブテーマBの「感染症対策に向けた光触媒開発」では、光触媒の研究を応用して、ウイルスを不活性化する光触媒の開発を進めています。そのために、大規模量子化学計算により感染ウイルス不活性化のメカニズムおよび消毒用の過酸化水素選択的生成反応を明らかにするとともに、ウイルス不活性化光触媒の材料設計なども

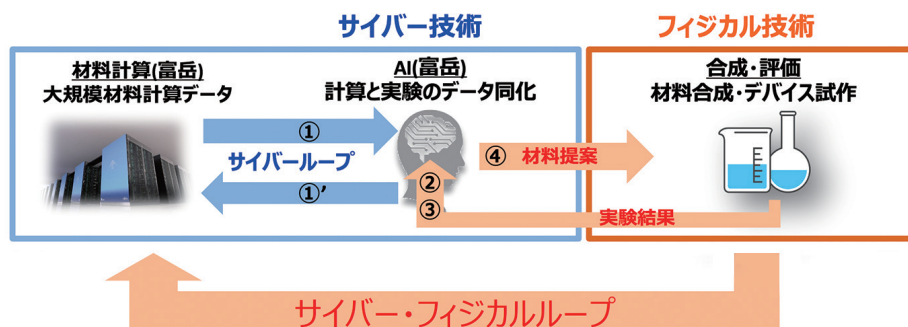
行っています。

サブテーマCの「高効率非鉛化ペロブスカイト太陽電池の新材料設計」では、これまでのシリコン系を凌駕し、しかも安全性を考慮した鉛を含まない非鉛化ペロブスカイトと呼ばれる分子構造の太陽電池の実用化をめざしています。およそ1千万種にも及ぶ非鉛化ペロブスカイト材料のハイスループット・シミュレーションによる太陽電池材料データベースを構築し、高効率で安全性の高い新材料の探索を行っています。

このプロジェクトで私たちが進めているのは、「富岳」を利用したハイパフォーマンスな材料シミュレーションと網羅的材料予測といったインフォマティクスですが、サイバー空間での材料探索だけでなく、産業界と密接に連携することにより、「シミュレーション-インフォマティクス-合成-計測」を「四位一体」としたサイバー・フィジカルシステムの構築にも力を入れてきました（図2）。関連する企業と連携し、フィジカルな実験の技術を活かして、私たちが材料提案したものを合成・測定してもらい、その結果が満足いくものでなければ、再度サイバーの方へもつ



▲図1 プロジェクトのサブテーマ



▲図2 「富岳」を活用した革新的光エネルギー変換技術の実現

サイバー空間での材料探索だけではなく、産業界と緊密に連携することで「シミュレーション-インフォマティクス-合成-計測」を四位一体としたサイバー・フィジカルシステムを構築して材料設計を実施する。

ていって、もう1度やり直すということを何度も繰り返すサイバー・フィジカルループを構築することにより、思いもよらなかった元素の組み合わせや新規構造をもつ革新的な光エネルギー変換材料を実証しようとしているのです。さらに、よい成果が得られた材料については、プロジェクトが終了してからになると思いますが、社会実装を進めていきたいと考えています。

どのテーマも順調に進展し 成果を達成

研究期間は残り1年ほどとなりましたが、2024年度はどのような成果が得られたかについてご説明ください。

サブテーマAの「革新的な水素製造光触媒の実現」については、今年度は特に可視光応答型光触媒に着目して、その材料設計に向けてサイバー・フィジカルシステムの構築が完了しました。あわせて、第一原理シミュレーションを活用するプロセス・インフォマティクス技術も構築することができました。重要なのは、開発したプロセス・インフォマティクス技術が「富岳」による第一原理シミュレーションとプロセスシミュレーションを結びつけた技術であるということで、これは画期的な成果といえます。また、可視光応答型光触媒に適した材料をデータ同化AIにより推定し、提案した材料を実験的に実証することもできており、社会実装に向けた有望な技術になることが期待できるという意味で、今年度の大きな進展といえます。

サブテーマBの「感染症対策に向けた光触媒開発」については、感染症ウイルス不活性化に最適な光触媒としての酸化チタンの高効率化に向けて、ウイルス吸着特性の向上と正孔を有効に生成するための電荷分離効率の向上という観点から、最適光触媒露出面を探索してきました。つまり、いろいろな面の方位性があるため、どこが最も不活性に最適なかをシミュレーションで特定しようとしたわけです。その露出表面が特定できたことにより、ウイルス不活性の高効率化が期待できるとともに、ウイルス分解過程の機構解明に向けての方向性が得られました。現在、この成果を実験グループにフィードバック

し、高効率化を期待しているところです。また、感染症対策となる過酸化水素発生触媒の生成物制御機構も特定されています。

サブテーマCの「高効率非鉛化ペロブスカイト太陽電池の新材料設計」については、高効率かつ非鉛化の材料提案に向けて、これまで大規模ペロブスカイト太陽電池材料データベースの構築を進めてきましたが、今年度もその構築を継続してきました。通常のペロブスカイトは、比較的低コストで変換効率が高いけれど毒性のある鉛を用いています。私たちは、鉛を使用せずに高効率を実現できる太陽電池の材料設計を実現させたいと考えています。そのために「富岳」を有効活用していろいろな元素の組み合わせを行い、データベースをつくらうとしているわけです。今年度構築したデータベースのなかには、実験グループから要望のあったスズ (Sn) とゲルマニウム (Ge) からなる化合物も含まれています。そのなかから適切な化合物を提案して、実験グループで合成する計画も進んでいます。光誘起キャリア拡散定数の第一原理計算予測からも、高効率非鉛化ペロブスカイト太陽電池材料として高いポテンシャルを有する材料が見つかっており、高効率化に向けて今後はハイスループット計算データベースを用いた機械学習による材料最適化が進められるなど、大きな進展が得られています。私たちは、「京」のころからハイスループット・コンピューティングにより、11,025個の化合物をデータベース化し、そのなかから太陽電池として適切な材料の探索を行うというやり方を進めてきましたが、今回はその実績を基に「富岳」を活用して、より網羅的なハイスループット・シミュレーションにより大規模なデータベースの構築を推進しています。そして、「京」のころの1千倍、全部で1千万種くらいをデータベース化し、プロジェクトの終了後に公開したい考えです。

全体としては、「富岳」がやや混み合っていることがネックになって、多少の遅れが出るといった問題はありましたが、基本的にはどのテーマも順調に進んでいます。四位一体のサイバー・フィジカルシステムによる技術開発も概ね良好に進んでおり、水素製造光触媒、感染症対策光触媒、高効率太陽電池などの社会実装に向けて、すでに進捗率は80%に達しており、目標を達成できる見込みです。

量子化学計算ソフトウェア NTChem

プロジェクトでは、「富岳」を活用した大規模量子化学計算において、中嶋先生たちが開発してこられた量子化学計算ソフトウェア NTChem が活用されています。

NTChemは、一から自分たちで設計して開発した汎用の量子化学計算ソフトウェアです。よく知られた既存の量子化学計算ソフトウェアがもつ多くの計算機能をカバーしつつ、それらで

は用いることができない独自の量子化学理論に基づいた計算も行うことができます。また、高並列な計算機環境を有効に利用することが可能であり、大規模で複雑な分子系の化学反応や物性値を、高速・高精度にシミュレーションすることも大きな特長です。既存の量子化学計算ソフトウェアでは、「富岳」を使っても、1千原子程度の丸ごと密度汎関数理論 (DFT: Density Functional Theory) 計算が限界です。その理由の1つは、これらのソフトウェアでは計算に必要な全メモリをプロセスごとに分割 (分散メモリ化) できておらず、1プロセスに使えるメモリ量に計算規模が制限されるためです。もう1つの理由は、各プロセスが持つ異なったデータ構造により不規則な通信が問題になるためです。

NTChemでは、メモリの問題を解決するため、MPI/OpenMP並列により各プロセスにメモリ分割し、さらに高並列環境向け疎行列ライブラリ NTPoly を使って演算することで使用するメモリを削減することができます。また、通信の問題を解決するため、「富岳」で採用されている Tofu 高次元メッシュ/トラスネットワークアーキテクチャを有効に活用できるアルゴリズム設計により、高いパフォーマンスを実現しています。NTChemは「富岳」向けに開発されましたが、通常の計算機センターのスーパーコンピュータでも活用できるようにつくられており、幅広いユーザーに便利に使ってもらうことができます。NTChemが、計算分子科学のフロンティアを切り拓く必要不可欠なツールになることを願っています。

次世代分子理論を展開し、 理論分子科学の発展に貢献したい

NTChemの開発をはじめ、中嶋先生は理化学研究所計算科学研究センターにおいて、量子化学に基づく理論分子科学の研究を進めておられるのです。

従来の分子理論を越えた次世代分子理論を展開し、理論分子科学の発展に貢献していきたいと考えています。そのために、私たち量子系分子科学研究チームでは次の3つの達成目標を掲げています。1つ目は、「次世代分子理論をもとにした理論分子科学の革新」で、従来の分子理論が抱える問題点を克服し、ブレークスルーを達成することで大規模かつ複雑な分子を高精度に取り扱える次世代分子理論を構築しようとしています。2つ目は、「超並列環境に資する分子科学計算ソフトウェアの開発」で、「富岳」の能力を最大限に発揮できる理論分子科学の計算手法とそのための計算ソフトウェアであるNTChemを開発し、共用利用できるように整備、公開しています。3つ目は、「超並列環境でのマテリアルズ・インフォマティクスの確立」で、「富岳」によるハイスループット・シミュレーション技術や機械学習に基づいたマテリアルズ・インフォマティクス技術を確立するとともに、ユーザーを先導していきたい考えです。



▲図3 スーパーコンピュータ「富岳」
画像提供/理化学研究所

スマート in-situ 可視化基盤の開発状況



神戸大学大学院
システム情報学研究科
坂本 尚久 准教授

● スマート in-situ 可視化

近年では、HPC シミュレーションの実行中に可視化を行う in-situ 可視化手法に関する研究開発が活発に進められています。しかし、従来の in-situ 可視化では、シミュレーションと同時に可視化をするため、計算終了後にシミュレーションパラメータや可視化パラメータの探索をすることができないという問題がありました。このような問題に対して、われわれの研究グループでは、利用者が計算環境やデータの規模を意識することなく、HPC シミュレーション終了後に探索的なパラメータ調整や対話的な可視化およびデータ分析を可能にするスマート in-situ 可視化基盤に取り組んでいます。

スマート in-situ 可視化を実現するために、自律型コンピューティングの概念を in-situ 可視化処理に導入し、シミュレーション実行中にカメラが自律的に移動し、重要な物理現象を自動的に追従して可視化することができる技術を開発しました。ここでは、そのうち二つの重要な技術であるカメラ移動経路推定機能とカメラ注視点推定機能を紹介するとともに、機能の実装について説明します。

● カメラ移動経路推定機能

本機能では、in-situ 可視化において、可視化対象となるシミュレーションデータの周囲に配置された候補視点のなかから重要な現象を捉えていると期待される視点を推定します。そして、一定の時間間隔で推定される視点同士を接続するような経路を推定してその経路上で中間画像を出力することで、シミュレーション中の重要な現象を捉えた動画を生成する機能を開発しました（図1）。

この機能では、まず、シミュレーションデータを内包する球体を仮想的に設定し、球面上に複数の候補視点を配置して、その視点から可視化される画像を情報源とみなして情報エントロピーによって評価することで、重要な現象を捉えていると期待される視点を推定します。次に、計算された各視点でのエントロピー値を余緯度と経度を軸にして2次元平面上に並べて分布図を作成します。この分布図では、エントロピー値の大きさは青から赤の色で表現され、青い領域はエントロピー値が小さい領域であり、赤い

領域はエントロピー値が大きい領域です。この分布図上の最大エントロピー値を持つ位置を最適視点とみなすことができます。最後に、シミュレーション実行中に、一定の間隔でエントロピー分布図を作成し、最適視点間を滑らかに接続することでカメラ移動経路を推定します。そして、その経路上で連続的に可視化することで重要な物理現象を捉えた動画を自動生成することができます。

● カメラ注視点推定機能

本機能では、in-situ 可視化によって生成される可視化画像に対して、重要な変化が起きていると推測される部分領域を推定し、その領域にフォーカスした可視化画像を自動生成することができます。本機能は、視点移動経路推定機能と組み合わせて利用することで、興味領域に着目し続けた動画を生成することができ、重要現象の見逃しを防ぐ効果が期待できます。

この機能では、まず、最適視点から可視化された画像に対して、注目すべき画像上の部分領域を推定します。この推定のために、可視化画像をいくつかの小領域に分割し、その小領域ごとに情報エントロピーを計算することで重要度を評価します。次に、推定された可視化画像上の興味領域をもとに注視点を決定します。まず、興味領域の中心位置を仮の注視点とみなし、シミュレーション空間に逆投影します。一般に、この逆投影では、視線方向に対して一意に投影点を計算することはできませんが、興味領域内の奥行き値を参照することで、空間上の注視点を計算することができます。最後に、シミュレーション空間上の注視点を計算した後、その注視点が可視化画像の中心に位置するようにカメラパラメータを再設定します。このとき、視点と注視点を結ぶ線分上を、カメラを移動させながら可視化し、その可視化画像に対する情報エントロピーを計算することで、視線上のエントロピー分布を計算します。そして、エントロピー値が最大となる視線上の位置から可視化された

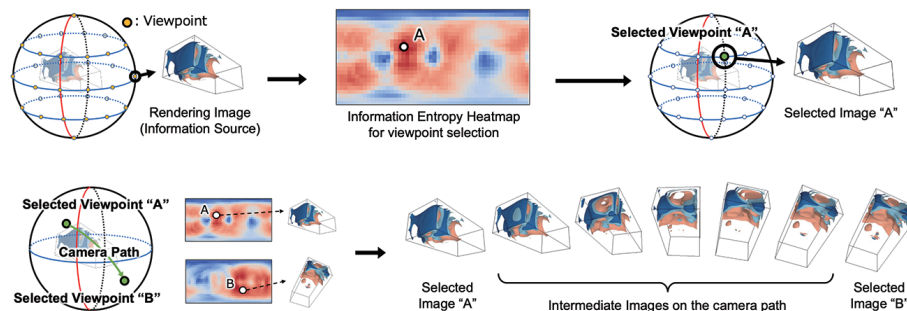
画像を最終的な可視化画像とすることで、興味領域拡大効果を実現します。

● システムの実装

スマート in-situ 可視化基盤システムの可視化機能の実装には、KVS (Kyoto Visualization System) を用いました。KVS では、領域分割されたシミュレーションデータに対して、領域ごとに可視化された部分画像を効率よく合成するため画像重畳技術が実装されています。現在開発中の基盤システムでは、シミュレーションコードから出力されるデータをメモリ上で可視化コードに直接受け渡し、画像重畳機能による並列可視化処理を組み込んでいます。また、GPU を搭載しない計算環境向けに、CPU での高速なレンダリングを実現するための Mesa が内包されており、x86 システムでは、LLVM をもとにして Intel によって開発された OpenSWR が選択され、スーパーコンピュータ「富岳」では LLVM と JIT (Just-in-Time) をもとにした高速ラスタライザーである LLVMpipe が選択されます。

基盤システムにおいて、シミュレーションコードと可視化コードを効率よく接続するためのアダプターモジュールを実装しています。最適視点推定などのスマート in-situ 可視化基本機能は、このアダプターモジュールを継承して実装しています。本基盤は、C++ 言語を使って実装されていますが、Fortran 言語で実装されたシミュレーションコード向けのインターフェースモジュールを提供することで、C++ コードおよび Fortran コードの両方に対応しています。

現在、このスマート in-situ 可視化基盤システムを「富岳」上で構築し、CUBE、OpenFOAM および独自のテスト用 Fortran ソルバ向けに適用して評価実験を行っています。今後、HPC シミュレーションを使ったさまざまな物理現象の解析に本システムを適用し、その有効性を検証する予定です。また、得られた成果は論文やソフトウェアとして、広く一般に公開していく予定です。



▲図1 カメラ移動経路推定機能

研究テーマ④「自動車の空力騒音予測と空力騒音低減手法の確立」

FFX (FrontFlow/X) の開発状況および適用例



豊橋技術科学大学
工学部機械工学系
飯田 明由 教授

「富岳」成果創出加速プログラム「AIの活用によるHPCの産業応用の飛躍的な拡大と次世代計算基盤の構築」の研究テーマ④「自動車の空力騒音予測と空力騒音低減手法の確立」では、自動車空力騒音の予測に関する研究開発を進めています。本課題は、産学連携「HPCを活用した自動車用次世代CAE（Computer Aided Engineering）コンソーシアム」の活動の一環として行われています。

ソフトウェアとしては、東京大学生産技術研究所革新的シミュレーション研究センターで加藤千幸教授（現・日本大学上席研究員）により開発された格子ボルツマン法（Lattice Boltzmann Method、以下LBM）による空力音響解析ソフトウェアFFX（FrontFlow/X）と理化学研究所計算科学研究センターで坪倉誠チームリーダーにより開発が進められている複雑現象統一解法フレームワークCUBEを使用しています。この記事ではFFXの開発状況について紹介します。

自動車の空力開発では、計算リソースや解析時間の削減が重要な課題となっています。解析に必要な時間のなかでも解析格子の生成にかかる時間は人的リソースも必要となることから最も削減したい対象となります。一方、車両の形状を細部まで再現するため、実際のCAD（Computer Aided Design）をそのまま解析に利用したいという要望もあります。設計・製造用のCADをそのまま利用できれば、数値解析用の専用CADデータを作成する手間とコストの削減も可能となります。この要望に応えるため、多くのCFD（Computational Fluid Dynamics）解析ソフトで直交格子のデータ構造と物体表面を埋め込み境界法でモデル化したアプリケーションが開発されています。LBMは、このような要望に応えるアルゴリズムであり、並列化が容易なこと、メモリ容量を小さくできること、移流拡散項の誤差が少ないことの利点があることからFFXの開発に適用されることになりました。LBMは密度場を直接計算することから空力音の解析も可能であると考えられていることも自動車の空力解析に適していると考えられます。

FFXでは、STL（Stereolithography）データを読み込むだけで自動的に解析格子を生成することが可能です。物体近傍の格子を再分割し、物体近傍の格子解像度を大きくする機能も

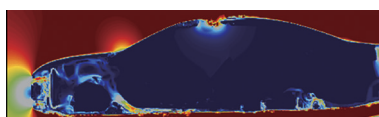
備えているため、ユーザーは解析空間の指定と物体の位置座標を指定するだけで解析の準備が可能となります。流体解析用の車両モデルであれば1時間程度、エンジンなどの細かい部品を含む詳細STLでも5時間程度で領域分割を含めた解析用のデータを自動生成することが可能です。STLデータの不整合や小さな穴、くぼみなどのいわゆるダーティCADに対するラッピングなどの処理も不要です。実際の計算では、これらの部位の計算が不安定になることがあります。LBMでは、仮想粒子を複数の速度方向に離散化（FFXでは15または27）して計算しますが、小さなくぼみに計算格子が配置された場合、ほとんどの粒子速度の方向が壁面内に埋まってしまうので、少数の速度データで格子内の密度と運動量を計算することになるため、この部分で連続の式を満たすことが難しくなり、計算が不安定になる場合があります。FFXではこの問題を避けるため、物体近傍の格子において有効に作用する速度方向の数を調べ、有効な速度方向が極端に少ない格子を壁面と認識させることにより解析を安定化させ、自動車メーカーからの要望であるラッピングやCADの修正を行わないで解析を自動的に行えるようにしています。この処理を行う前は、解析が安定化しませんでした。現在は物体形状の複雑さはほとんど問題になっていません。

LBMは、解析アルゴリズムが簡単でメモリ使用量が非圧縮性有限要素法流体解析と比べて少ないため、スーパーコンピュータ「富岳」を使うことにより1,000億格子程度の解析が簡単に

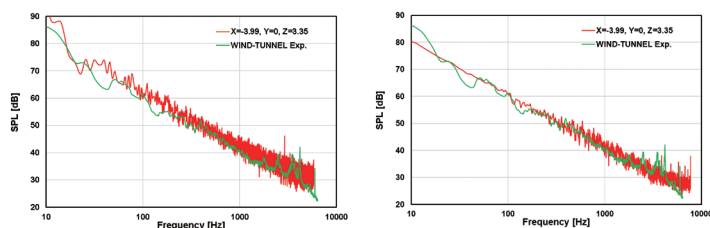
実施できます。プロジェクトで実施されている解析では、15億格子程度の小規模解析からスタートし、120億、960億と計算格子を拡張して詳細な解析を行っています。計算格子のRefineも自動で行うことができます。小規模の解析で流れを発達させることにより計算時間も短縮することが可能です。図1は、FFXを用いて解析したサンルーフ付きの車両の解析結果の一例です。エンジンルーム内や車室内を含めてCADを修正せずに解析を行うことが可能です。サンルーフ部分にできた渦により空力音が発生し、その空力音が渦を誘起する空力自励音の発生も確認することができました。図2は、サンルーフ無しの車両から放射される空力音の計算結果と風洞実験の比較結果です。格子解像度が2.0 mm程度の粗い解析でも空力音スペクトルを高い精度で予測できることがわかります。解像度2.0 mmの解析は格子点数が15億と小規模（従来のNavier-Stokes方程式解析の場合1億格子程度の解析規模）であり、設計開発現場でも適用可能な規模の解析で空力音の予測ができることを確認しました。

図3に示すように、直交系解析の利点を活かして多数の風車の配置を変えた解析（洋上風車解析）や、ファンなどの回転体の空力音解析への活用も進められています。

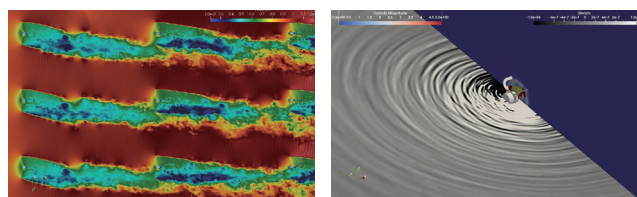
機械学習や生成AIでは、多数のデータが必要となりますが、FFXの格子生成負荷が小さい利点を活かして、数百ケースの解析を実施することで機械学習用のデータを提供し、流体解析をAIに活用する取り組みも進められています。



▲図1 FFXを用いた自動車周りの空力音響解析結果（左：瞬時速度場、右：空力音響場）。協力：（株）本田技術研究所

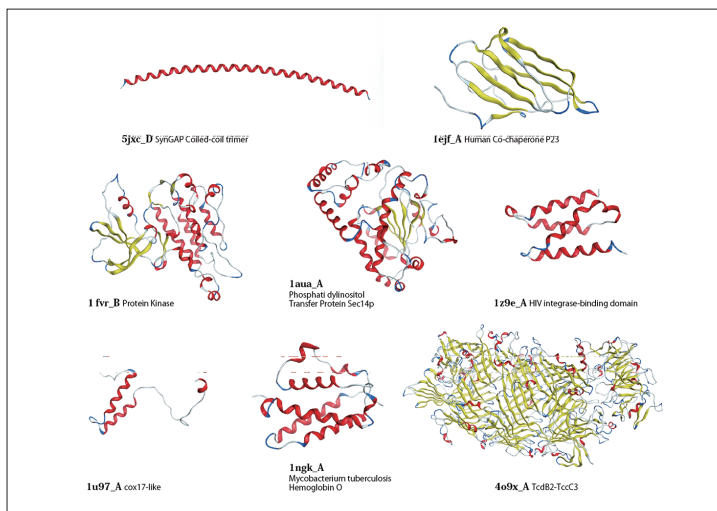


▲図2 車両から放射される空力音スペクトルの予測結果（左：格子解像度2.0 mm、右：格子解像度0.5 mm）協力：（株）本田技術研究所



▲図3 FFXを用いた解析事例（左：洋上風車周りの流れ場解析、右：ファン周りの空力音解析）

* STLデータ…3D CADソフト用のファイル形式のひとつ。



今号の表紙

タンパク質の代表的な形に対する 網羅的なフラグメント分子軌道(FMO)法による量子化学計算を実施

タンパク質の代表的な「形」を網羅したフラグメント分子軌道 (FMO) 法による量子化学計算結果のデータセットを世界で初めて公開しました*。研究グループではSCOP2分類というPDB (Protein Data Bank) に登録されている約6,000の基本的なフォールドの代表 (表紙図) に対し、網羅的にFMO計算を実施して、電子状態に基づく残基間相互作用のデータを取得しました。量子化学計算はABINIT-MPプログラムを使用し、網羅的な計算は大阪大学D3センターの大型計算機「SQUID」を用いて実施されました。革新的な創薬に向けたAIを構築するためには、自由に利用できるデータの国際的な共有が不可欠であり、本データセットは、創薬に役立つ革新的なAIの構築などへの応用が期待されます。

(https://resou.osaka-u.ac.jp/ja/research/2024/20241108_2 プレスリリース「タンパク質の代表的な『形』を網羅したFMOデータセットを公開」より)

大阪大学大学院薬学研究科量子生命情報薬学分野 教授 **福澤 薫**

*Takaya, D. et al. *Sci Data* 11, 1164 (2024).

編集後記

2021年に本格稼働したスーパーコンピュータ「富岳」は、さまざまなプロジェクトで利用され、世界最大級の計算資源として学術・産業の幅広い分野の研究開発に貢献しています。「富岳」を中核とする HPCI システムを活用して成果を挙げることが期待される「『富岳』を中核とする HPCI システム利用研究課題」を利用して推進されているプロジェクトや、「富岳」の特性を十分に活用して科学的・社会的課題解決に直結する成果の早期創出を支援する事業である「文部科学省『富岳』成果創出加速プログラム」のプロジェクトがその例で、こうしたプロジェクトから次世代を切り拓く研究成果が次々に生まれています。今号では、これらのなかから、優れた成果を創出しているプロジェクトを紹介します。



計算工学ナビ オフィシャルサイト

本誌のPDF版やソフトウェアライブラリ、ニュースなどのコンテンツを提供しているWebサイトは下記のURLからアクセスできます

<http://www.cenav.org/>



計算工学ナビ Vol.28

発行日：2025年3月10日

発行：東京大学生産技術研究所

革新的シミュレーション研究センター

〒153-8505 東京都目黒区駒場4-6-1

office@ciss.iis.u-tokyo.ac.jp