

スーパーコンピュータ「富岳」



理化学研究所 計算科学研究センター センター長 松岡 聡

2020年5月15日





スーパーコンピュータ「富岳」の基本性能



- 総ノード数:158,976ノード
 - 384 ノード x 396 ラック = 152,064
 - 192 ノード x 36 ラック = 6,912

(参考) 「京」 88,128 ノード

通常モード (CPU動作クロック周波数 2GHz)

- 倍精度理論最高値(64bit) 488 ペタフロップス
- 単精度理論最高値(32bit) 977 ペタフロップス
- 半精度(AI学習)理論最高値(16bit) 1.95 エクサフロップス
- 整数(AI推論)理論最高値(8bit) 3.90 エクサオップス

ブーストモード (CPU動作クロック周波数 2.2GHz)

- 倍精度理論最高値(64bit) 537 ペタフロップス
- 単精度理論最高値(32bit) 1070ペタフロップス
- 半精度(AI学習)理論最高値(16bit) 2.15 エクサフロップス
- 整数(AI推論)理論最高値(8bit) 4.30 エクサオップス

Shelf 89-2台 CPUx2 I つのCPUは48個の計算コア、4個(または2 個)のOS用コア、4個のメモリ(HBM: High Bandwidth Memory)、通信インターフェースなどからなる。 CMU(CPU Memory Unit) 2/ード 2/ード 2/ード 2/ード

(参考) 単位

- ペタ(Peta)=10の15乗 エクサ(Exa)= 10の18乗
- フロップス(FLOPS: Floating Operations Per Second) 一秒あたりの(浮動)小数演算性能
- オップス (OPS: (Integer) Operations Per Second) 一秒あたりの整数演算性能
- (参考)「京」との比較(「富岳」ブーストモード)
 - 倍精度理論最高值(64bit) 48倍
 - 単精度理論最高値(32bit) 95倍
 - 半精度(AI学習)理論最高値(16bit) 190倍※「京」は、いずれの精度でも11.28 ペタフロップス
 - 整数(AI推論)理論最高値(8bit) 1,500倍以上 ※「京」は、2.82 ペタオップス(64bit)
- 理論総合メモリバンド幅 29倍 ※「京」は5.64ペタバイト/秒

理論総合メモリバンド幅 163ペタバイト/秒

注釈)ここで示した数値は理論最高値であり、実際の速度は各種ベンチマークや、実アプリケーションによって測定される。

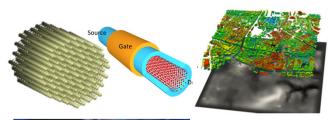


コデザインで進められた「富岳」の開発

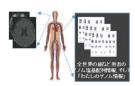


「計算の科学」

「富岳」を用いて重点的に取り組むべき、 社会的・科学的課題(9重点課題)に向 けたアプリケーション開発を実施。







GENESIS	タンパク質の動きを計算
Genomon	ゲノム解析
GAMERA	地殼・都市の地震を計算
NICAM+LETKF	観測データを融合した地球大気のシミュレーション
NTChem	分子の構造を解明
ADVENTURE	大規模システムのシミュレーション
RSDFT	物質の特性を解明
FrontFlow/blue	乱れのある流れや音響を計算
LQCD	素粒子の振る舞いを計算

<9つのターゲットアプリケーション>



「京」と比較して100倍以上の性能向上を目指した「ターゲットアプリケーション」を選定し、性能を最適化。

計算科学で使用 するアプリケー ションの特性を 踏まえた上で、 スパコン性能を 最適化するシス テム設計を実施。

「計算による科学」

Armエコシステム・オープンソース等 による高性能・省電力・汎用化を推進。



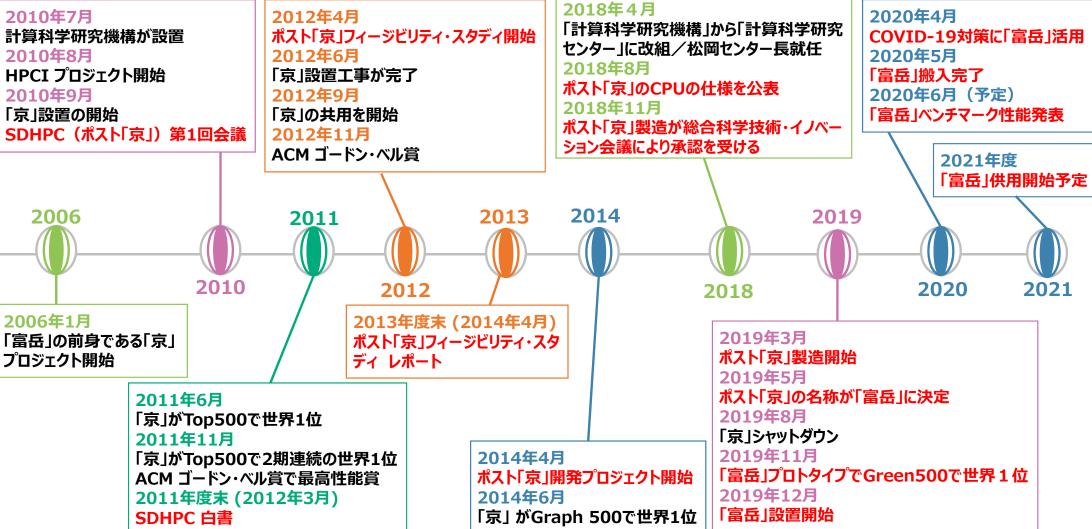


		Fugaku	К	
	CPU Architecture	A64FX (Armv8.2-A SVE +Fujitsu Extension)	SPARC64 VIIIfx	
	Cores	48	8	
2	Peak DP performance	3.0720 TF (3.3792 TF)	0.128 TF	
Node	Main Memory	32 GiB	16 GiB	
	Peak Memory Bandwidth	1024 GB/s	64 GB/s	
	Peak Network Performance	40.8 GB/s	20 GB/s	
D. 1	Nodes	384	102	
Rack	Peak DP performance	1.2/1.3 PF	< 0.013PF	
	Process Technology	7 nm FinFET	45 nm	



理化学研究所における「富岳」開発のあゆみ







スーパーコンピュータ「富岳」の設置・調整状況



- スーパーコンピュータ「富岳」は、富士通ITプロダクツ(石川県かほく市)にて製造。
- 2019年12月3日から理化学研究所 計算科学研究センター(神戸市)への搬入、設置・調整が始まり、2020年5月13日にすべての筐体の搬入を終了(大型10トン トラック 72台分)。
- ・ 現在、2021年度の共用開始に向けてシステムの調整中。なお、一部の計算資源(ノード)については、試験や調整作業の合間に利用することが可能であることから、試行的利用として、既に新型コロナウイルス対策利用や、成果創出加速プログラムに採択された研究へ提供。
- 併せて、Society5.0に対応したAIやビッグデータ処理、クラウド的利用に関するソフトウェア開発や環境整備を実施中。











米国の最先端CPUを3倍凌駕した半導体設計(性能・効率)

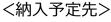


スパコンの省エネ性能を示す「Green500」で世界1位を獲得(2019年11月、プロトタイプ)

- TOP500内のHPCで電力効率の良い高性能計算の実現を評価するランキング(他の性質の違うアプリでも同様の結果を確認)
- Green500は、これまでGPU搭載や特殊マシンが上位を独占していたが、 富岳は汎用CPU搭載で世界1位獲得
- 汎用CPUとして、同条件のIntel機と比べて3倍強の省電力性能
- チップあたりの絶対性能でも2~4倍の性能⇒AIでは更なる性能差

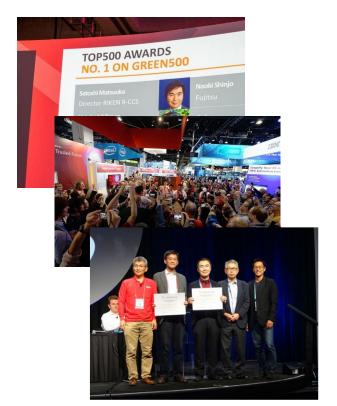
米HPE/Cray社は、「富岳」に実装されているArmA64FXプロセッサを自社スパコンに採用(米国製プロセッサ以外では史上初)

2020年度以降、世界市場で販売



- ・米国口スアラモス国立研究所
- ・米国オークリッジ国立研究所
- ・米国ストーニーブルック大学
- ・英国ブリストル大学 等





日本の半導体産業の復興へ

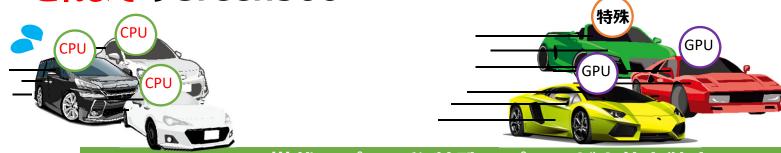
国家プロジェクトならではの成果 民間だけでは達成できなかった



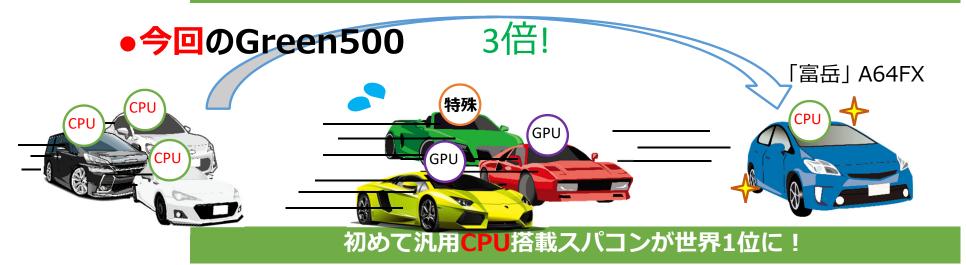
Green500試作機1位獲得の意義







GPU搭載スパコンや特殊スパコンが上位を独占





富岳をスマートフォンやサーバと比較すると…?



	スマートフォン		サーバ (クラウド含)		富岳		参考:京	
台数	2,000万台 (国内の年間出荷台数 の約2/3)	II	30万台 (国内の年間出荷台 数の約2/3)	П	1台		30~100台	
消費電力	10W×2,000万台= 200MW	-11	600-700W×30万台 = 200MW (冷却含)	^ ^	30MW		15MW	
CPU種別 基本ソフト	Arm iOS/ Android Linux		x86/Arm Linux (Red Hat等)/Win		Arm Linux (Red Hat等)		Sparc Linux(独自) 汎用性低い	
AI 対応	アプリに応じた 独自回路 推論のみ		GPUなどの汎用加 速チップ、CPUの 加速命令		汎用CPU SVE 加速機能		なし	





CSTI中間評価:Society5.0におけるポスト京を含むスパコン技術



- 全ての人とモノがつながり、今までにない新たな価値を生み出す超スマート社会の実現を目指す Society5.0において、シミュレーションによる社会的課題の解決や人工知能(AI)開発及び情報の流通・処理に関する技術開発を加速するためには、スーパーコンピュータ等の情報基盤技術が必要不可欠
- ・第5期科学技術基本計画(平成28年度~平成32年度)の柱である「超スマート社会」 (Society5.0)を世界に先駆けて実現するためには、新たな価値創造の基盤としてのスーパーコンピュータが必要不可欠
- ・〔1〕データ駆動型社会の共通インフラの整備
 - ③研究生産性の向上

産学官連携を支え、生産性の飛躍的向上の基盤となる 高速電子計算機施設等の先端的な研究施設・設備の 整備・共用やポスト「京」の開発を進める

(未来投資戦略2018(平成30年6月15日閣議決定))

このためには富岳におけるA64fxやソフトウェア・アプリのHPC技術が、富岳に留まらず、クラウドにも大幅に波及し、エッジと接続してシミュレーション・AIを駆動することが重要

(文部科学省 中間評価)



く超スマート社会における人々の生活>

(出典: JST/CRDS 曽根純一上席フェロー講演資料)

Society 5.0で実現する社会



経済発展と社会的課題の解決の両立

イノベーションで創出される新たな価値により、格差なくニーズに対応した モノやサービスを提供することで、**経済発展と社会的課題を解決**を両立



経済発展と社会的課題の解決を両立する「Society 5.0」へ

経済発展

- エネルギーの需要増加
- 食料の需要増加
- 寿命延伸、高齢化
- 国際的な競争の激化
- 富の集中や地域間の不平等

社会的課題の解決

- ●温室効果ガス (GHG) 排出削減
- ●食料の増産やロスの削減
- ●高齢化に伴う社会コストの抑制
- ●持続可能な産業化の推進
- ●富の再配分や地域間の格差是正

IoT、ロボット、人工知能(AI)、ビッグデータ等の先端技術をあらゆる産業や社会生活に取り入れ、格差なく、多様なニーズにきめ細かに対応したモノやサービスを提供

経済発展と社会的課題の解決を両立

[内閣府作成]

人がナビで

[内閣府作成]

検索して運転

サイバー空間とフィジカル空間の高度な融合

フィジカル(現実)空間から**センサ**ーと<mark>IoT</mark>を通じてあらゆる情報が集積(ビッグデータ) 人工知能(AI)がビックデータを解析し、高付加価値を<mark>現実空間にフィードバック</mark>

これまでの情報社会(4.0)

クラウド

人がアクセスして情報を入手・分析

人が情報を分析・提案

フィジカル空間

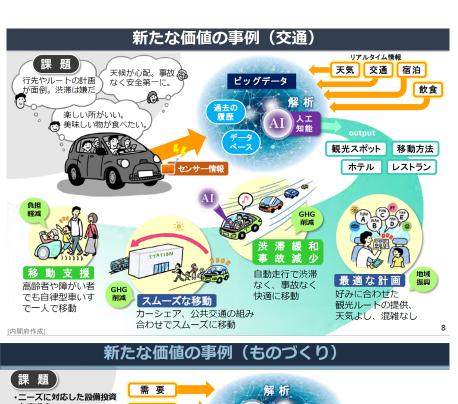
人の操作により

ロボットが生産

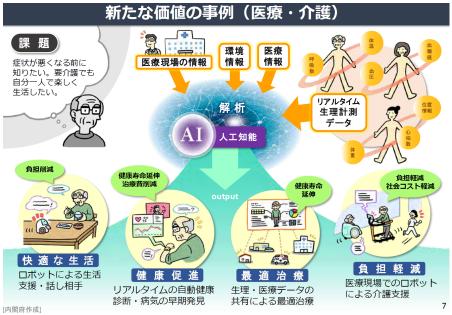
Society 5.0



11











Society5.0に対するR-CCS・富岳の取り組み



- 「富岳Arm」IoT主流のArmエコシステム・オープンソース
 - A64fx CPU: 世界最速の汎用プロセッサ(x86, Arm含)
 - HPC・クラウド・AI・IoT全て包括するオープンソース汎用ソフトウェアスタック
 - VM, コンテナ、Spack Package Managerなど、各種管理、デプロイ
- 「富岳AI」の開発
 - PyTorch, TensorFlow等の高速実装をDNNL for A64fx, Eigen等をベースに開発
 - 富士通・理研・Arm社等との産学連携による開発体制
 - その他各種HPCとAIの融合
- 「富岳クラウド」における複数のクラウドプロバイダとの連携
 - 2020年度クラウドサービスの実験を公募、複数クラウドプロバイダ
 - 2021年度本格運用へ
- 「富岳ライブストリーム」で多数のIoTストリームデータのアプリケーションへの提供
 - 種々の研究機関・企業と連携し、一定期間以上保存される観測データの格納・分析・学習・ 推論機構を提供



富岳におけるオープンソースソフトウェアの整備



- 「京」コンピュータ
 - 特殊なアーキテクチャのため、オープンソースソフトウェアの活用が困難・・
- スーパーコンピュータ「富岳」
 - 既存のArm向けオープンソースソフトウェア普及の取り組みに参画
 - Arm HPC Users Group https://arm-hpc.gitlab.io/
 - Linaro https://www.linaro.org/
 - - 米Exascale Computing Project公式ソフトウェアパッケージマネージャ
 - R-CCS ソフトウェアセンター
 - ~ R-CCSにおけるソフトウェアの開発支援、及び公開、普及に向けた取り組みを推進
 - DL4Fugaku
 - ~ 「富岳」向け深層学習フレームワークの整備を目的としたR-CCSと富士通等との産学連携プロジェクト
 - ターゲット: PyTorch, TensorFlow, Chainer, 等







富岳におけるクラウド的利用にむけて

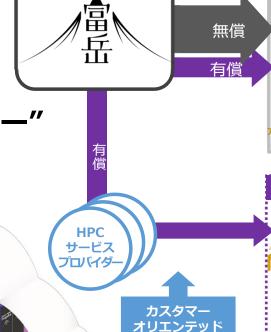


■「富岳」の利用拡大

利用者数、利用者層、利用分野の拡大

■「富岳」のプロジェクトで 培われた"Fugakuテクノロジー" の普及

HPCサービス、ハードウェア技術、 ソフトウェア技術、運用技術等 /



より幅広いニーズにより迅速に対応が可能

HPCユーザー

既存ユーザー

社会的課題の解決、学術的インパクト

フラッグシップマシンによる革新的な利用

ポテンシャルユーザー



HPCを直接利用できる 機会や技術を 持たない研究者・企業

Society5.0を担うビッグデータ・AI等を 活用する新規ユーザー等

2019年度から2020年度にかけ 複数のクラウドサービスプロバイダーと 試験研究を実施 裾野拡大



クラウド的利用 共同研究パートナー



















https://www.r-ccs.riken.jp/library/topics/200213.html

ミッション

- プロジェクト名とロゴの策定
- プロバイダーを通して「富岳」の計算資源をエンドユーザーへ提供する方法について幅広く試行
- それぞれの効果を可能な限り定量的に評価することで有効性を検証するとともに課題を整理
- 得られた知見は、「「富岳」のクラウド的な利用形態」の制度設計に反映



富岳:世界最大規模のAI基盤



日本がAIで劣勢を跳ね返すには

- 莫大な学習データの収集
 - ✓ 今後の日本の政策により、統計的に有意なサンプル数は収集可能
- 高性能AIインフラ
 - ✓ Deep learning世界トップレベルのABCIの15~20倍以上の性能
- 高度人材
 - ✓ 上記条件が揃えば世界から人材が集まる



GAFAに対抗し、追い越すことも可能

(ABCIでは既に富士通・ソニーが一部)

- ◆ 「富岳試作機評価環境の利用に関する覚書」を富士通と締結し、「富岳」上にAIフレームワークを創り 上げ「富岳」を中心とした世界トップクラスのAI学習・推論・利活用の計算機環境基盤を構築する。
- ◆ 大規模AIベンチマーク「HPL-AI」(2020年6月創設) に向け研究開発を推進中。世界一位獲得可能性大。



超高速なAIソフトウェアを「富岳」、商用機、クラウド等に展開しSociety5.0の中心的なインフラとする。



大規模深層学習を学連携により「富岳」実装へ



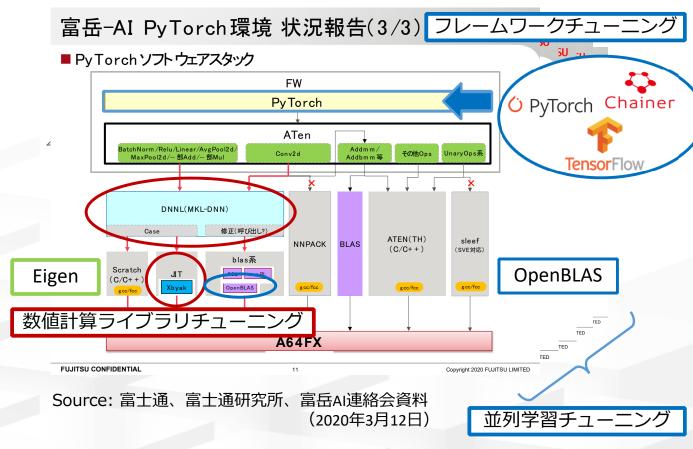
「富岳」の高いハードウェアスペック(高性能CPU/高メモリバンド幅/スケーラブルなTofuインターコネクトD)をフルに引き出し大規模深層学習ソフトウェアをチューニング

富士通と理研による覚書の締結

(2019年11月25日)



- Arm社を含め産学連携で推進
- AIのためのソフトウェア基盤の研究 開発を行うことで、「富岳」を中心と した世界トップクラスのAI学習・推 論・利活用の計算機環境基盤を構築
- あらゆるAIアプリケーションを加速 することが期待





日本における公的大規模AI計算インフラ



		Deployed	Purpose	Al Processor	Inference Peak Perf.	Training Peak Perf.	HPL-AI Perf	Top500 Perf/Rank	Green500 Perf/Rank
	東工大 TSUBAME3	July 2017	HPC + AI Public	NVIDIA P100 x 2160	45.8 PF (FP16)	22.9 PF / 45.8PF (FP32/FP16)		8.125 PF #22	13.704 GF/W #8
推論 838.5PF 学習	東大 Reedbush-H/L	Apr. 2018 (update)	HPC + AI Public	NVIDIA P100 x 496	10.71 PF (FP16)	5.36 PF / 10.71PF (FP32/FP16)		(Unranked)	(unranked)
86.9 PF	九大 ITO-B	Oct. 2017	HPC + AI Public	NVIDIA P100 x 512	11.1 PF (FP16)	5.53 PF/11.1 PF (FP32/FP16)		(Unranked)	(Unranked)
米国 Summit比 推論1/4	産総研 AICC	Oct. 2017	Al Lab Only	NVIDIA P100 x 400	8.64 PF (FP16)	4.32 PF / 8.64PF (FP32/FP16)		(Unranked)	(Unranked)
学習1/5	理研AIP Raiden	Apr. 2018 (update)	AI Lab Only	NVIDIA V100 x 432	54.0 PF (FP16)	6.40 PF/54.0 PF (FP32/FP16)		1.213 PF #462	(Unranked)
	産総研 ABCI	Aug. 2018	Al Public	NVIDIA V100 x 4352	544.0 PF (FP16)	65.3 PF/544.0 PF (FP32/FP16)		19.88 PF #8	14.423 GF/W #6
	情報通信研 & Sakura Internet	Summer 2019	Al Lab Only	NVIDIA V100 x 1700	~210 PF (FP16)	~26 PF/~210 PF (FP32/FP16)		4.128 #51 3.712 #58	(Unranked)
HPL-AI(こで Summit比 2~4倍	メ国オーク リッジ研 Summit	Summer 2018	HPC + AI Public	NVIDIA V100 x 27,000	3,375 PF (FP16)	405 PF/3,375 PF (FP32/FP16)	445 PF (FP16)	143.5 PF #1	14.719 GF/W #5
(10万GPU 相当)	理研 R-CCS 富岳	2020 ~2021	HPC + AI Public	Fujitsu A64fx > x 150,000	> 4000 PO (Int8)	>1000PF/>2000PF (FP32/FP16)	>1000PF (FP16)	> 400PF	16.876 GF/W #1 (proto)

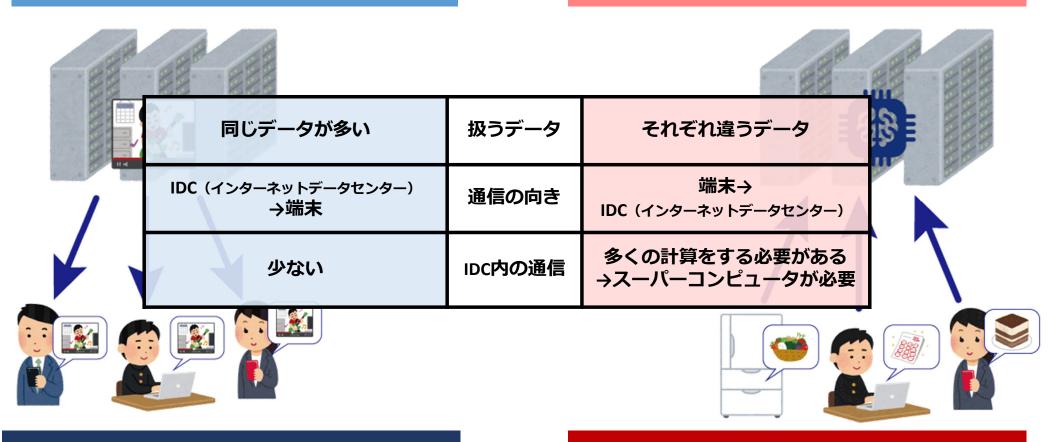


Society5.0でインターネットはどう変わるのか?



現在のインターネット

Society5.0時代のインターネット



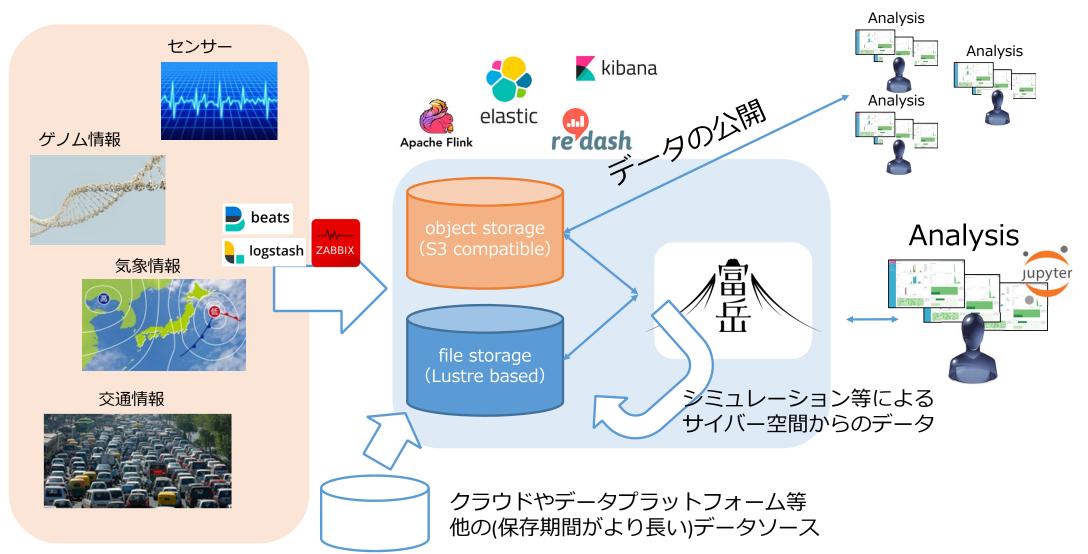
ビデオ配信が通信の90%

データ中心から計算中心の時代へ



ライブデータストリーム向けプラットホーム







応 シミュレーション x AI @ 富岳 全国規模の準リアルタイム災害状況把握



- シミュレーションによる大規模学習データの生成と大規模深層学習を可能とするために は世界最高水準の計算性能が必須
- 富岳で初めて全国規模の準リアルタイム災害状況把握が実現

全国規模の準リアルタイム災害状況把握







シミュレーション

演繹的順推論による 超大規模学習データの生成



ΑI

帰納的逆推論のための 深層学習モデルの学習

理化学研究所 革新知能統合研究センター作成資料より



富岳: Society5.0の中核プラットフォームへ



〈政策的位置づけ〉総合科学技術・イノベーション会議から文部科学省への指示(2018年11月22日)

- ・「富岳」を利用したSociety5.0実現のためには、ビッグデータの活用において国全体で進めていくことが重要。
- ・関係府省・機関との連携を取りながら、「富岳」利用の仕組みをつくること。

理研の取り組み ~内閣府、文科省の協力等をいただきつつ~

本格的な産学官協働体制

- ▶ 産学協働を産み出す機能を新設
 - ・潜在的ユーザーの掘り起こし
 - ・ユーザーが「富岳」を利活用できる 環境整備の実施
- > Society5.0への貢献に必須な経 団連レベルでの協働構築
 - (経団連、内閣府、文科省、理研に て相談開始)
- ▶ 個別研究者ネットワークに基づ く産学官協働 自動車用次世代 CAEコンソーシア ム(2017年設立)

科学的な成果に加え、Society5.0 に貢献する成果創出を実現)

戦略的国際連携

- ➤ 米国・エネルギー省(DOE)と、 ポストムーア、AI、量子コンピュー 夕に関する連携に向けて準備中
- ▶ 欧州と、富岳テクノロジーの汎用 性を活かした連携等を強化中
- ➤ ASEANのHPCネットワーク構想と日本の富岳中核HPCIとの連携に向けた「Asia-Hub 構想」の実現に向け、シンガポールの研究機関 A*STAR等と実務レベルでの協議を実施

世界的拠点化を目指す

人材育成など

- > Society5.0を支える人材育成 データ関連の創造的・高度人材 の産業界を含めた育成に貢献
- > 社会発信の強化
 - ・「富岳」のコロナ対策利用につい て、特設ページを設けた情報発信
 - ・記者勉強会を5月15日、6月17日 に開催
- ・6月22日開催のISC2020(バーチャル開催)におけるランキング発表について、国内メディアを通じて積極的に情報発信

イノベーションの基盤たる人材育成と、 「富岳」時代の社会発信を目指す

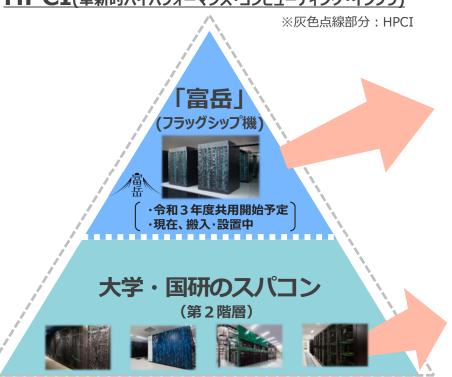


新型コロナウイルスに係る研究等へのスパコン利活用スキーム



スパコンは我が国の科学技術イノベーションの発展を支える重要な計算基盤であり、新型コロナウイルスの研究・対策についても同様 令和2年度から試行的利用を開始する「富岳」のほか、大学・国研が有する我が国の計算資源を同研究に対し、積極的に活用

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)



「富岳」

【4/7より課題実施】

- 現時点で提供可能な計算資源を活用
- 研究課題については、**設置・運用法人である理化学** 研究所と連携のうえ、文部科学省にて決定

(実施課題) ※課題追加に係る窓口を理研に設置

- ◆ 新型コロナウイルス治療薬候補同定
- ◆ 新型コロナウイルス表面のタンパク質動的構造予測
- ◆ パンデミック現象及び対策のシミュレーション解析 等

大学・国研のスパコン(「富岳」以外)

【4/15から公募開始】

- HPCI構成機関(大学・国研)に対し、計算資源の協力を 依頼
- 早急に**臨時公募**および<u>迅速な審査</u>を実施し、新型コロナウイルスに係る課題に対し、計算資源を活用
- 4/30、採択された課題(5課題)を発表

(採択課題) ※公募は継続中

- ◆ 新型コロナウイルスのRNA、タンパク質等に関する解析
- ◆ 新型コロナウイルス増殖阻害化合物の探索 等



「富岳」による新型コロナウイルスの治療薬候補同定



理化学研究所 / 京都大学 奥野 恭史



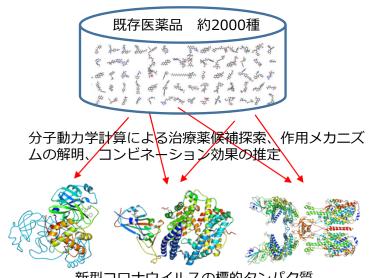
実施内容:

現在、既存治療薬の新型コロナウイルスへの効果を確認する臨床試験が国内外で進められている。こ れらの試験を通じて、一部、薬効を示したなどの報告もあるが、症例数が少ないなど、未だ効果的な 治療薬を特定するに至っていない。また、試験されている薬剤も数種類であり、どの薬剤も明確な効 果を示すことが見いだされない可能性もありうる。

そこで、本研究では、「富岳」を用いた分子動力学計算により、臨床試験で対象にされている既存の 抗ウイルス薬に限定せず、約2000種の既存医薬品の中から、新型コロナウイルスの標的タンパク質 (プロテアーゼなど) に高い親和性を示す治療薬候補を探索・同定する。

期待される成果:

- ・現在、国内外で実施されている臨床試験の抗ウイ ルス薬に限定せず、約2000種の既存医薬品の中から 候補探索を行うため、新たな治療薬候補の発見が期 待される。
- ・複数の薬剤のタンパク質への作用を同時に評価で きるため、複数の薬剤のコンビネーション効果を推 定できる可能性がある。
- ・分子動力学計算により、薬剤と標的タンパク質の 作用が分子レベルで明らかになることから、現在、 臨床試験がなされている抗ウイルス薬の作用メカニ ズムの知見を得られる。さらに、これらの知見によ り、既存医薬品を越える新規な薬剤開発の明確な方 針が得られる。



新型コロナウイルスの標的タンパク質



「富岳」を用いた新型コロナウィルス表面のタンパク質動的構造予測



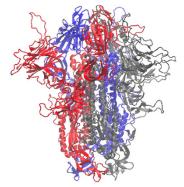
理化学研究所 杉田有治

実施内容:

新型コロナウィルスが細胞に侵入する際に、ウィルス表面に存在するタンパク質が細胞表面にあるレセプタータンパク質に認識される。このウィルス侵入の初期過程を阻害する薬剤を開発することは、新型コロナウィルスの治療に役立つと期待される。本研究では、クライオ電子顕微鏡によって解かれたウィルス表面タンパク質の立体構造を初期モデルとして、その立体構造の動きを「富岳」を用いた分子動力学計算で予測する。特に、理研で開発している分子動力学ソフトウェアGENESISは、「富岳」に最適化されており、「京」と比較して125倍のアプリケーション性能を持つ。さらに、タンパク質内で注目すべき一部分の運動を加速する手法(gREST法)を「富岳」の利点である並列計算として使うことで、他の手法では実現できない大きな構造変化を予測する。

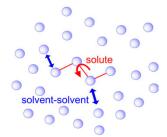
期待される成果:

- 実験的には得ることのできないウィルス の動的構造を予測することで、レセプ タータンパク質との結合状態を理解す る。
- 分子動力学計算で得られた立体構造を用いることで、レセプターとの結合を阻害する薬剤分子開発を促進すると期待される。



ウィルス表面のタンパク質



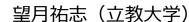


一部分の運動を加速 するgREST法



☆ 新型コロナウイルス関連タンパク質に対するフラグメント分子軌道計算 ?











■実施体制と目的

望月祐志(立教大学)が代表統括となり、理論創薬の専門家である田中成典(神戸大学) と福澤薫(星薬科大学)らと密接に連携する。自主開発してきたABINIT-MPプログラム を用い、新型コロナウイルス関連タンパク質に対するフラグメント分子軌道計算を 系統的に実施し、詳細な相互作用解析を行い、得られたデータを公開する。

■これまでのエビデンス

ABINIT-MPは理論創薬分野で解析ツールとして十数年に渡って使われており、「京」 の上では福澤が主催するFMO創薬コンソーシアム(FMODD)活動も展開された。今回 の件でも、主要プロテアーゼと阻害剤N3のPDBでの構造[右図参照]公表直後から、 名大FX100を用いた計算を行い、一連の解析とChemRxivでの論文公開を一ヶ月で 達成した。知見として、阻害剤と相互作用する重要残基群の特定(右下図参照)、 と阴害剤の改良指針が得られた。

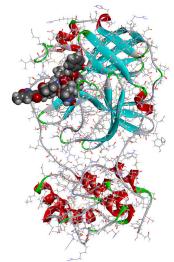


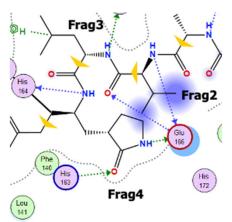
■実施予定内容

①上記のプロテアーゼ等、新型コロナウイルス(SARS-CoV-2/COVID-19)に関連 するタンパク質と阻害剤候補群に対する探索的計算と解析(構造ゆらぎ等も 考慮)、②類縁のSARSウイルス関係のタンパク質に対する同計算・解析、③重 要な計算結果データのFMODB(FMOデータベース)での公開

■期待される成果

①阻害剤と残基群の相互作用情報に基づく候補選別に関する補助情報の取得、 ②新規阻害剤開発に資する基礎情報の演繹、③機械学習等のデータ科学的解析 への情報提供







パンデミック現象および対策のシミュレーション解析



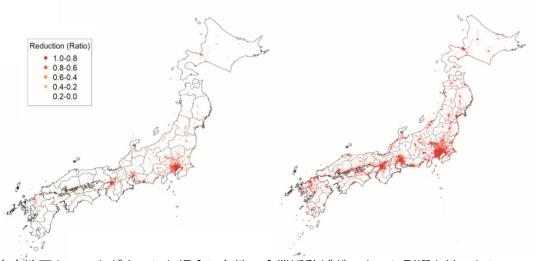
理化学研究所 伊藤 伸泰

実施内容:

今回の新型コロナウイルスの感染伝播に伴い、社会経済への影響が広がっている。その様子を可視化し、影響を分析するビッグデータマイニングが試みられている。これらに加えて本研究では、「富岳」はじめとするスーパーコンピュータを活用し、今後生じうる社会経済活動への影響を評価し、収束シナリオとその実現方法を探る。あわせてウイルスの変異などにより感染・発病の経過が変化した場合に起こりうる事象への対応を立案する。そのために、感染シミュレーション・SNSテキストマイニング・企業活動シミュレーションを、産業技術総合研究所・筑波大学・東京工業大学・京都大学・兵庫県立大学・琉球大学とともに進める。

期待される成果:

- ・今後の感染、社会・企業活動、 マクロ経済への影響を左右する行動・施策を探り、悪化を招く因子 および改善に導く因子の候補を明 らかとすることが期待される。
- ・首都圏・関西圏など、地域ごと の感染・社会経済の状況を反映し、 複合的な効果を考慮した施策の立 案に助することが期待される。
- ・今回の新型コロナウイルスの感染伝播に限らず、大規模な災害・ 事故とその影響の伝搬を制御し、 被害を抑える施策にもつながる。



東京地区をロックダウンした場合に各地の企業活動がどのような影響を被るかについて、予備的なシミュレーション結果。左が1日目、右が14日目の様子。井上(兵庫県立大)による。本研究では、「富岳」を使って全面的なロックアップに限らず、部分的な制約を多様に探索する。



室内環境におけるウイルス飛沫感染の予測とその対策



理化学研究所/神戸大学 坪倉 誠









実施内容:

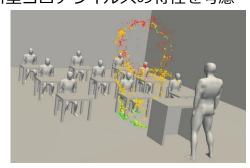
ウイルス感染の内、くしゃみ、せき、発話等で発生する飛沫による感染は、飛沫の飛散経路が感染者と非感染者の間の空気の流れや湿度、温度等に大きく依存する。また新型コロナウイルスについては、通常の飛沫感染に加えて飛沫が空気中で微小化したエアロゾルでの感染の可能性も示唆されている。微小飛沫であるエアロゾルはより長時間空気中を漂うことから、飛沫感染リスクの評価と感染予防対策の提言のためには、飛沫の飛散経路を正しく予測し、周囲流れの影響が感染にどのような影響を与えるのかを正しく推定する必要がある。本課題では、通勤列車内、オフィス、教室、病室といった室内環境において、新型コロナウイルスの特性を考慮

した飛沫の飛散シミュレーションを行い、様々な条件下での感染リスク評価 を行った上で、空調、換気、パーティション等を活用した感染リスク低減対 策の提案を行う。

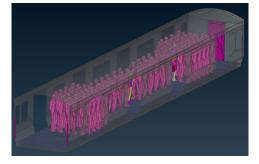
本課題は、理研、京都工芸繊維大、神戸大、大阪大、豊橋技科大、鹿島建設が連携する. 理研が開発し「富岳」に実装を進めている超大規模熱流体解析ソフトCUBEを主に用いて、既存の飛沫計算では難しかった, 高精度かつ大規模な系でのシミュレーションを行う。

期待される成果:

室内環境における感染リスクの定量的評価を行うと共に、窓の開閉や空調の効果的運転条件、さらにはパーティションの配置等による感染リスク低減策を具体的・定量的に示すことで、ウイルス飛沫感染に対してより安全・安心な生活環境を実現する。また、シミュレーション結果を動画とすることで、具体的に飛沫や飛沫核がどの程度の速度でどこまで飛散するのかを視覚的に理解することができ、感染防止に向けた認識や理解を広く普及させることができる。これをもって、我が国の社会経済活動の早期復活に寄与できると期待される。



教室における飛沫飛散シミュレーションの例 (京都工芸繊維大学 山川提供)



通勤列車モデル