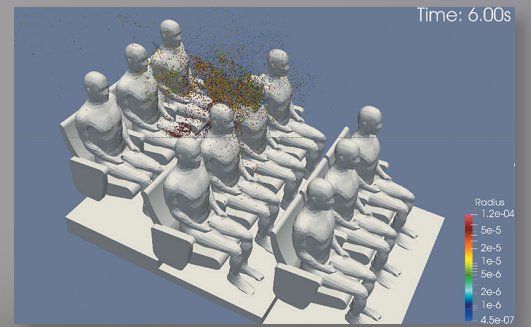
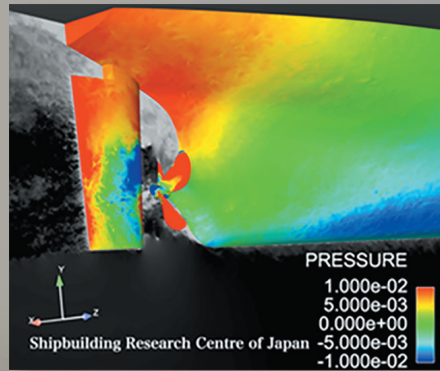
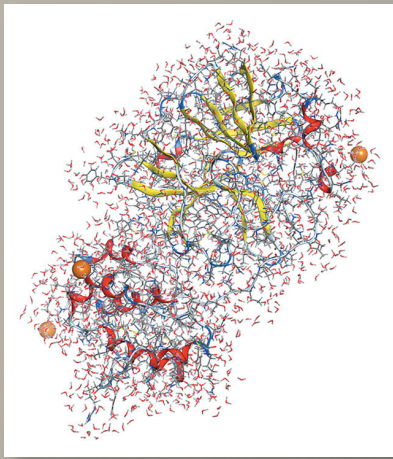


# 計 算 工 学 ナ ビ

計算工学ナビ・ニュースレター2020年秋号



©RIKEN

- 特集「富岳」** 本格運用前にHPC性能ランキング世界一を獲得した「富岳」  
新たな運用手法を開発し“使いやすさ”でHPCの裾野を広げていきたい ..... 理化学研究所計算科学研究センター 山本 啓二
- 特集「富岳」** 本格運用に向けて準備が進むフラッグシップ計算機「富岳」への期待  
科学技術の発展や産業競争力強化に「富岳」を役立てたい ..... 東京大学生産技術研究所 加藤 千幸
- 特集「富岳」** 「富岳」成果創出加速プログラム 「富岳」を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発  
流体解析システム「FFB」の「富岳」における性能評価とさらなる性能向上への取り組み ..... みずほ情報総研/東京大学生産技術研究所 山出 吉伸  
日本造船技術センター/東京大学生産技術研究所 西川 達雄
- 特集「富岳」** 新型コロナウイルス対策を目的としたスーパーコンピュータ「富岳」の優先的な試行的利用  
・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 ..... 立教大学 望月 祐志  
・室内環境におけるウイルス飛沫感染の予測とその対策 ..... 神戸大学大学院/理化学研究所計算科学研究センター 坪倉 誠

# 新たな運用手法を開発し“使いやすさ”で HPC の裾野を広げていきたい

6月にオンラインで開催されたHPCに関する国際会議「ISC2020」。ここで発表された世界のHPCの性能ランキングで、理化学研究所と富士通が共同で開発する「富岳」は、世界一を獲得しました。計算速度ランキング「TOP500」をはじめ、実際のアプリケーションでの処理性能を競う「HPCG」、ビッグデータ解析などに活用される大規模グラフの探索性能を評価する「Graph500」、さらに今回から採用された深層学習などのAI処理に用いられる低精度計算の性能を計測する「HPL-AI」の4冠を達成したことで、「富岳」はまさに世界最高性能のHPCとして認められたといえます。しかし、実は「富岳」の価値は計算性能だけにとどまりません。その真価は実用性、つまり“使いやすさ”にあるといわれます。今号では、「富岳」の本当の実力ともいえる“使いやすさ”について、理化学研究所計算科学研究センター(R-CCS)で「富岳」を含むデータセンター全体を高度に運用するための研究開発に取り組む先端運用技術ユニットの山本啓二さんにお話をうかがいました。

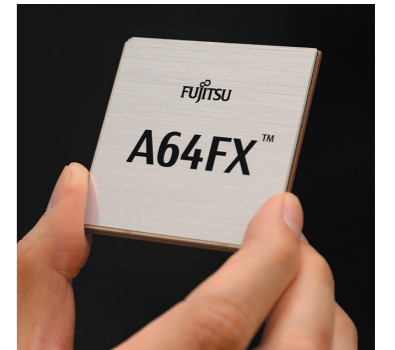


理化学研究所 計算科学研究センター  
先端運用技術ユニット

**山本 啓二 ユニットリーダー**



©RIKEN



©Fujitsu

▲「富岳」に搭載されたCPU「A64FX」のパッケージ

## 「富岳」がめざしたのは実用性だった

山本さんがリーダーを務める先端運用技術ユニットは、どのような研究開発を行っているのですか。

先端運用技術ユニットは、昨年(2019年)12月に新たに設置されたユニットです。「富岳」の稼働に伴い、スーパーコンピュータの運用技術について研究し、その成果を「富岳」の実運用に反映させることをめざしています。具体的には、「富岳」および電源や冷却設備、ネットワークなどのインフラを含むデータセンター全体を高度に運用するための研究開発を行います。また、仮想化やクラウドコンピューティングといったスーパーコンピュータの新たな活用について研究し「富岳」での実現をめざしています。

HPCの性能というと、まず私たちは計算速度を思い浮かべますが、実は「富岳」がめざしたのは、速さだけではないそうですね。

計算性能もちろんですが、「富岳」の開発で何よりも重視したのは、“利用しやすさ”でした。これは先代の「京」の反省に基づいています。「京」では、世の中であまり使われていなかったSPARKというアーキテクチャをCPUに採用していました。コンピュータはハードウェアがどれほど優れていても、使えるソフトウェアが少なければ意味がありません。数多くのソフトウェアこそが資産なのです。残念

ながら、「京」のアーキテクチャはあまり世の中に広がらず、ユーザーも元々HPCのコミュニティに属していた人にとどまりました。小さなコミュニティ向けにはソフトウェアの移植作業も進まず、ソフトウェアが無いために新たにHPCを利用してみたい人の参入障壁は大きなものでした。そこで、「富岳」のCPU「A64FX」には、スマートフォン、ゲーム機をはじめデジタル機器市場で幅広く活用されているArmアーキテクチャが採用されました。Armアーキテクチャには、これまでライセンスを受けた多くの企業が製品化するプロセスのなかで積み重ねられてきた豊富な知見やソフトウェアがあります。OSやライブラリ、ミドルウェアなどソフトウェア開発に必要なコンポーネントもすでにArmアーキテクチャのコミュニティによって整備されています。そのArmアーキテクチャのエコシステムをHPC分野で利用していこうと考えたわけです。すでにArmを選択したことに対する好意的な反応を耳にする機会があります。例えば、「京」のときにはなかなか参入してくれなかったソフトウェアベンダーのなかに、早くも「富岳」に向けてソフトウェアの移植を進めようとする動きが出ています。

もう1つ、「富岳」開発の重要なポイントになったのが、さまざまな分野のアプリケーション開発者と協調設計(コデザイン)を実施しつつ、システム的设计・開発を進めたことです。性能評価の指標となるターゲットアプリケーションを、開発するマシン上で評価し、ハードとソフトの両面からボトルネックを見つけ出し、性能を改善してきました。富岳の性能目標は、最大で「京」の100倍のアプリケーション実効

性能ですが、現時点の見込みでもそれを達成しているようです。

## クラウド的利用サービスに向けた研究への取り組み

「富岳」が目標としてきた“利用しやすさ”は、運用技術にも大いに関係しますね。

これまで、HPCの評価は計算性能一辺倒だったといえます。研究開発が優先され、ユーザーにとっての利便性や実用性を高めるという視点はあまり重視されてきませんでした。「ISC2020」の4冠達成で、「富岳」の性能が世界に認められたため、今後は汎用マシンとして運用面でもより高い価値を加えることによって、ユーザーにとっての利便性や実用性を向上させていきたいと考えています。

運用手法に関するイノベーション的な研究開発をめざす先端運用技術ユニットで現在取り組んでいるのは、「富岳」のクラウド的な利用に関する研究です。HPCを利用したいと考える人々にとって現状のHPCは敷居が高く、「使いにくい」と感じている人も多いと思います。例えば、「京」を利用するためには多くの書類を揃えて課題募集に応募し、審査に通った人しか使うことができませんでした。しかも実際に利用できるのは応募してから半年先です。そこで「使いたい」と思う人が誰でもより手軽に、そしてすぐに「富岳」を使えるようにできないだろうか考えて準備しているのがクラウド的利用サービスです。「富岳」を

誰もが使えるようにする、その実現に向けて、複数のクラウドサービスプロバイダーと共同研究を実施しています。まずは多くの人たちに使ってもらうことが重要です。使ってみて、性能の高さや利用しやすさを実感してもらうことによって、ユーザーの裾野を広げていこうとしています。ユーザーが増えれば、使用できるソフトウェアが増えるなどの相乗効果も得られるはずです。もちろん、使っていくに従って新たな課題も出てくるでしょう。そのような課題を解決し、「富岳」の次世代スーパーコンピュータに反映させることにも取り組むつもりです。

ものづくり分野をはじめ産業界でHPCを使いたいと考えている人々にとって、「富岳」のクラウド的利用が可能になれば、参入するための格好の入り口になるかもしれませんね。

そうなってほしいと考えています。産業界の人々がHPCを使って大規模な計算をしてみたいと思ったときに、クラウド的に「富岳」が利用できれば、その計算力を容易に手にすることができます。“お試し”でもよいので、とにかく手軽に利用できる環境を用意することが、「富岳」利用者の裾野を広げることにつながると思います。一方で、産業界の人々が共用のHPCを利用する上で課題となるのは、自社の貴重なデータをHPC上に置いて大丈夫なのかというセキュリティの問題です。クラウド的な利用によって、物理的に1つのHPC資源を仮想的に複数台に区別して、部外者がのぞき込むことができない計算領域をつくり出すこ

とができますが、本来ならネットワークやストレージも仮想化してユーザーに提供することが必要となります。そこで今私たちのユニットで取り組んでいるのが、ネットワークの仮想化です。クラウドによって仮想化された「富岳」に、仮想化されたネットワークを繋ぎ込むことによって、セキュリティを重視する企業ユーザーにも安心して使ってもらえる環境を整えたいと考えています。さらにストレージの仮想化も将来的に実現させたい課題の1つです。

## さらに改善される「富岳」の利用環境

先端運用技術ユニットでは、ほかにどのような研究開発を行っているのですか。

R-CCSは、「富岳」の本格稼働に伴って巨大なデータセンターとしての役割を担うこととなります。そこでの運用を高度化していくには、ネットワークをはじめ、電気や熱をどう扱うかなどデータセンター設備全体について網羅的に手を付けていかなければなりません。日本には国立情報学研究所(NII)が構築・運用している学術情報通信ネットワーク(SINET5)があり、R-CCSはこのネットワークの大口ユーザーです。「富岳」が本格稼働すればこれまでの「京」よりも扱うデータ量は増えることが予想されます。今後、さらに速い回線の導入や多重化、「富岳」と他のデータセンターを直結するなどユーザーの利便性を向上させる新たなサービスを検討しています。データセンターで使用される電気や、発生する熱を削減するこ

とで効率的な運用を実現していくことも考えています。運用技術の高度化は、ある意味で省力化を進めることでもあります。やがてシステムがすべてを判断して対処し、運用そのものが人の手を離れて自動化される時代がやってくるかもしれません。

最後に、これから「富岳」を使ってみたいと考えている人たちにメッセージをお願いします。

はじめに紹介したように、協調設計によって幅広い研究分野のアプリケーション開発がすでに進んでいることに加え、Armアーキテクチャを採用したことにより、「富岳」へのさまざまなソフトウェアの移植も進みつつあります。つい最近では、AppleがMacプラットフォームのCPUをArmアーキテクチャに置き換えると発表しました。AmazonやGoogleといったクラウドサービス事業者もArmアーキテクチャを使ったサービスを提供しています。HPCベンダーとして有名な米国Cray社は富士通が開発したArmアーキテクチャのCPUを搭載したスーパーコンピュータを市場投入するなど、Armアーキテクチャにとって追い風となるニュースが相次いで発表されています。この先「富岳」のクラウド的な利用サービスが実現すれば、さらに手軽で使いやすい状況が整うことになります。一方で、これまでHPC利用は数値計算が中心でしたが、近年ではビッグデータ解析やAIやIoTなどHPC利用自体の裾野も広がりがつつあります。利用しやすい環境が整っただけでなく、HPCを使った研究を取り巻く環境も可能性に満ちて明るい未来を感じさせます。アカデミア・産業界を問わず、テスト的な利用から本格的な研究開発まで、広く「富岳」を活用していただきたいと願っています。

# 科学技術の発展や産業競争力強化に「富岳」を役立てたい

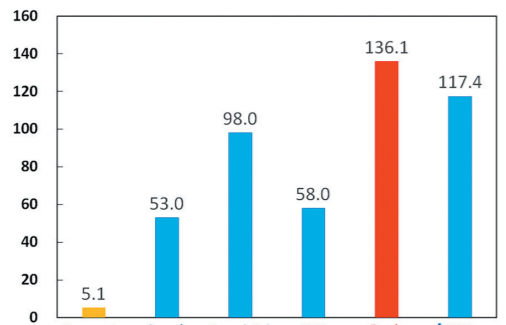
2021年度の本格運用開始に向けて開発・整備が進められている「富岳」に関しては「ポスト『京』」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発プロジェクトで得られた開発成果を最大限に活用し、いち早く世界最高水準の成果創出に結びつけることをめざして、2020年度から「『富岳』成果創出加速プログラム」が開始されています。今回は、同プログラムの「領域③産業競争力の強化」において研究課題責任者を務め、また2020年5月まで2年間にわたり、HPCIユーザーコミュニティを代表する機関であるHPCIコンソーシアムの理事長として、「富岳」の利用促進・運用・成果創出などに関する提言の取りまとめにも尽力してきた加藤千幸教授に、「富岳」への期待や産業利用の促進についてお話しいただきました。

## 「富岳」の“速さ”を最大限に活かして実証研究を推進

いうまでもなく、従来のHPCに比べて非常に高速な演算ができる、それが「富岳」の最大の特長です。「京」と比較すると、「京」の理論性能は約10PFLOPS、これに対して「富岳」は約500PFLOPSですから約50倍。もちろん、実アプリケーションで50倍の性能を出すのはそう簡単なことではありません。「富岳」が、具体的にどれくらい速いのかというと、私たちが開発した流体解析アプリケーション「FFB (FrontFlow/blue)」でCPUあたりの実行性能を「京」と比較すると、およそ27倍(図1)、「富岳」のノード数は約16万で「京」が約8万ですから、システム全体で約54倍ということになります。実際の研究開発に利用する場合、計算機が数倍速くなるだけでは大きなインパクトはありませんが、10倍を超えると、速さは大きな意味を持つようになります。この速さを活かして、日本のHPCI全体をけん引する、それがフラッグシップ計算機「富岳」の役割といえるでしょう。

これまで5年あまりにわたり「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・研究開発プロジェクト(重点課題)において、私たちは「近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発」を推進してきました。そして、「富岳」本格運用開始前の今年度から、「『富岳』成果創出加速プログラム」が開始されています。このプログラムでは「人類の普遍的課題への挑戦と未来開拓(基礎科学など)」、「国民の生命・財産を守る取組の強化(医療・防災など)」、「産業競争力の強化(ものづくり・エネルギーなど)」、「研究基盤(データ科学など)」の4領域から19課題が選定されており、私たちは、領域③「『富岳』

▶ 図1  
流体解析ソフトウェア「FFB」のCPUあたりの実行性能(2020年4月時点)



「富岳」成果創出加速プログラム「富岳」を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発」研究課題代表者

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

加藤 千幸 教授・センター長



を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発」に取り組んでいます。具体的には、エネルギー産業の心臓部となる「ターボ機械」の設計・評価システムの研究開発、輸送産業の中核となる「自動車」の統合設計システムの研究開発を進めます。重点課題において開発してきた高性能・高機能アプリケーションを駆使して、「富岳」の性能を十二分に引き出しながら実証研究を推進し、これまでのものづくりのあり方を抜本的に変革することをめざしています(5ページに関連記事)。

## 高性能計算機のさらなる産業利用促進に向けて

「京」の反省点の1つは、産業利用が思ったほど進まなかったことでした。産業界において高性能計算機の利用を加速することは、日本の国際的な産業競争力を強化するために欠かせません。そのためにも、高性能計算機の利用環境を提供するハードルを下げて、産業界の利用を促進することが求められています。それには、課題選定の仕組みを改めることも重要といわれています。当然ながら、利用するためには申請書を準備するなど、それなりの手続きが必要で、そこで選ばれる課題は高い成果が期待されるものであるべきですが、選定のための制度などについて見直す動きも出ています。また、産業界の利用環境を改善していくためにはハードウェアだけでなく、ソフトウェアも含めて考えていく必要があります。「京」のプロセッサには、SPARCアーキテクチャが採用されていました。「京」は、汎用性・実行性能ともに優れ、数多くの成果を挙げてきました。しかし、一方では、特殊なアーキテクチャのため、産業界でよく利用されるパッケージソフトウェアがそのままでは動かないこともあり、産業界の利用はそれほど進みませんでした。その点、「富岳」にはヨー

ロッパを中心に幅広く活用されているArmアーキテクチャが採用されており、数多くのアプリケーションを活用できることが期待されます。また今後は「富岳」を含めたHPCIの利用を促進するため、市販アプリケーションやオープンソース・ソフトウェアの移植を推進し、アプリケーションを充実させることによって産業界の人が利用しやすい環境を提供する取り組みも行われています。

フラッグシップ計算機が「京」から「富岳」へと引き継がれようとするこの2年間、HPCIコンソーシアムの理事長として、今後のHPCIシステムの構築やその利用についての意見を集約し、議論を重ねるなかから提言を取りまとめる作業などにも関わってきました。そのなかで気になったのは、「京」のころに比べてユーザーコミュニティの勢いがあまり感じられないことでした。「京」では、行政刷新会議の「事業仕分け」によってプロジェクトそのものがとん挫しうになり、コミュニティ全体が日本の基盤技術として推進していこうという気持ちになって一致団結して前に進むことができました。「みんなで成果を生み出していこう」という気運が盛り上がりました。先日発表されたHPCの世界ランキング「TOP500」で、「富岳」は「京」以来8年半ぶりに1位に輝きました。それだけでなく、「HPCG」、「HPL-AI」、「Graph500」でも1位となりました。1つのマシンが同時に4冠を獲得するのは世界で初めてのことです。そんな「富岳」の共用がいよいよ始まろうとしています。「富岳」はどんな科学成果を生み出すのか、産業利用にどのように役立つのか、期待は大きく膨らみます。そして、再びユーザーコミュニティが一体となって、「富岳」の優れた性能を最大限に活かすことに取り組んでほしいと願っています。



▲性能ランキング4冠を達成した「富岳」

# 流体解析システム「FFB」の「富岳」における性能評価とさらなる性能向上への取り組み

## 乱流の準直接計算技術の実用化のための課題

「FFB」開発チームでは、乱流を高精度に予測することができるLarge Eddy Simulation (LES)に基づく流体解析システム「FrontFlow/blue (FFB)」をターボ機械、船舶、車両等の流れに適用することにより、乱流の準直接計算技術の有用性を世界に先駆けて実証してきました。例えば、水槽試験の代替を目的とした船体まわり流れ解析に関しては、スーパーコンピュータ「京」の運用が開始された2012年に、320億グリッドを用いた大規模LES解析により、水槽試験に匹敵する推進抵抗予測精度を実証しました。これにより、数値計算により水槽試験を代替しうることが実証されましたが、船体抵抗に予測のためには「京」24,576ノードを用いて約46時間の計算時間を要し、水槽試験の代替のためには計算時間の短縮が課題でありました。

## コデザインの成果

「近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発」プロジェクト(ポスト「京」重点課題プロジェクト)におけるサブ課題C「準直接計算技術を活用したターボ機械設計・評価システムの研究開発」では上記の課題を踏まえ、コデザインのもと理化学研究所との連携により「FFB」の高速化技術の開発を実施しました。「FFB」の要求B/F(演算あたりのロード・ストアバイト数)がおおよそ4.0であるのに対し計算機のB/Fは「京」で0.5、「富岳」で0.33しかないことより、「FFB」のボトルネックはメモリからのデータ転送でありこの効率を最大化することが必須でありました。コデザインでは、「FFB」のコアカーネルに対しメモリスループットを最大化するためのさまざまな改良を加えました。

ここでは代表的な改良内容として二つを紹介いたします。ひとつ目は節点の並べ替えによるリストアクセス変数の局在化です。節点の並べ替えにより一度アクセスしたデータの再利用率をあげ、L1、L2におけるキャッシュミス最小化することによりメモリスループットを向上させました。二つ目はストア処理の連続アクセス化です。「FFB」のコアカーネルでは、ストア処理はリストアクセスとなるループが存在しており、メモリスループットの向上が制限されていました。この問題を解消するため、コアカーネルにおけるループ構造を変更し、コアカーネルにおける全てのストア処理を連続アクセスに変更し高いメモリスループットを実現しました。「FFB」のコアカーネルは、①運動方程式の左辺・右辺の構成、②運動方程式マトリックスソルバーにおける行列ベクトル積(以下、AX計算)、③連続の式マトリッ

みずほ情報総研  
サイエンスソリューション部  
東京大学生産技術研究所

山出 吉伸  
課長・協力研究員



日本造船技術センター  
技術開発部 技術企画課  
東京大学生産技術研究所

西川 達雄  
課長・協力研究員



クスソルバーにおけるAX計算の勾配計算、④連続の式マトリックスソルバーにおけるAX計算の発散計算の4カーネルから構成されます。コデザインにおける高速化の結果、これらのコアカーネルの「京」におけるメモリスループットは、それぞれ、①34 GB/sec、②48 GB/sec、③47 GB/sec、④43 GB/secを達成しました。比較的要求B/Fが低い①の運動方程式の左辺・右辺計算を除き、「京」の実行スループット(Steam Triadベンチマークテスト)である46.6 GB/secに近い値であり、ほぼ限界までチューニングされていることが確認できました。この結果、「京」におけるコード全体の演算性能は10 GLOPS(ピーク性能比8%)を達成し、コデザイン開始時の高速化前のコードに対し約2倍の高速化を実現しました。

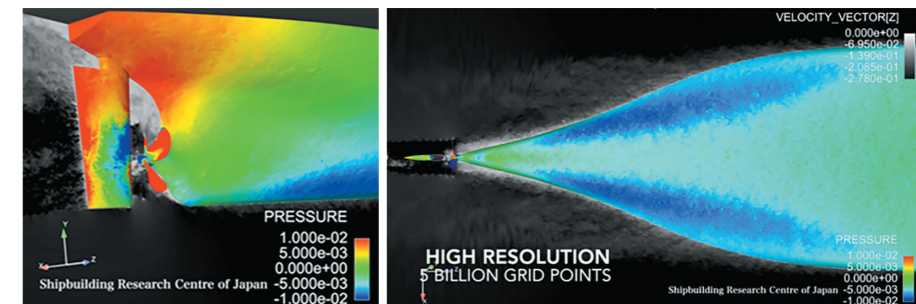
## 「富岳」の先行利用

「『富岳』成果創出加速プログラム」の「『富岳』を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発」プロジェクトでは、引き続き理化学研究所と連携し、上記コデザインで開発した「FFB」の「富岳」における性能の評価とさらなる性能向上に取り組んでおります。前述した4コアカーネルのメモリスループットは、①298 GB/sec、②727 GB/sec、③585 GB/sec、④502 GB/secであり、コデザイン前の「京」におけるスループットと比較して15倍~25倍を達成しています。ただし、「富岳」の実行スループット(Steam Triadベンチマークテスト)である820 GB/secと比較すると上記の性能は36%~89%であることより、コードの改良の余地が残っていることを示しています。コード全体の実行性能は136 GFLOPSであり、コデザイン開始時の高速化前のコードに対

し27倍のノード性能を達成しました。並列性能は、ノードあたり200万グリッドのweak scaleで最大27,648ノードまで評価し90%程度の並列性能を確認しています。「富岳」の全系(約16万ノード)の並列性能を達成できれば、高速化前のコードを用いた「京」の全系の性能と比較し、54倍の計算性能が達成される見込みです。上記の性能測定結果は2020年4月末までに測定されたものであり、この結果をまとめた論文を2020年ゴードンベル賞に投稿しファイナリストに選定されています。11月の最終選考に向け、単体性能・並列性能のさらなる改善および「富岳」全系を用いた性能の測定を進めています。

## 今後の展開

乱流の準直接計算技術の実用化の課題のひとつである計算時間の短縮のため、ポスト「京」プロジェクトコデザインでは「FFB」の高速化技術を開発しました。前述した通り、ここで開発したコードは、「富岳」で、高速化前の「京」の性能に対し27倍の性能が確認されています。上記したゴードンベル賞に向け、さらなる高速化を進めていますが、同時に「富岳」において「FFB」を活用することにより、「FFB」による実証解析は「京」の時代と比較して大幅に加速できることが期待されます。例えば、前述した水槽試験の代替計算は、「京」では24,576ノードを用いて46時間が必要でしたが、「富岳」50,000ノードを用いれば50分で計算できます。今後、船体まわり流れの解析に加え、ポンプ等のターボ機械内部流れ、風車まわり流れ、車外騒音等の解析を通じ、乱流の準直接計算の有用性を実証していきます。



▲KVLCC2船型の自航試験用のTBLによって計算された静圧と速度の瞬間分布

※本号の記事中で紹介する富岳共用前評価環境における評価結果は、スーパーコンピュータ「富岳」の共用開始時の性能・電力等の結果を保証するものではありません。

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

# 「富岳」を使った新型コロナウイルスの関連タンパク質のFMO計算



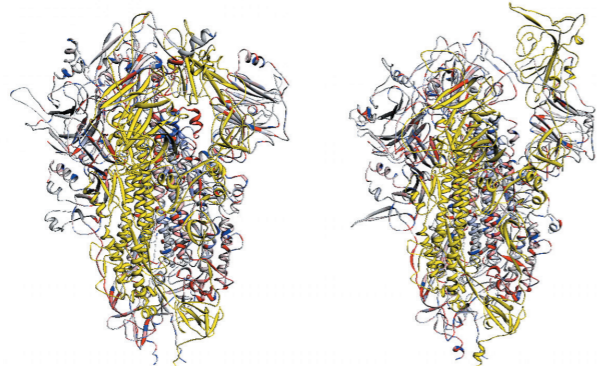
立教大学 理学部 化学科  
望月 祐志 教授

新型コロナウイルスの感染が世界的な脅威となっており、対応策に関する研究開発が盛んに行われています。こうしたなか、東京大学拠点で行われた幾多のソフトウェア開発プロジェクトを通じて私たちが長年整備してきたフラグメント分子軌道(FMO)プログラム「ABINIT-MP」<sup>[1]</sup>を使い、このウイルスの関連タンパク質に関する計算化学的な研究を「富岳」の「新型コロナウイルス対策を目的としたスーパーコンピュータ『富岳』の優先的な試行的利用」の枠<sup>[2]</sup>の中で展開しています。研究チームは望月の他、神戸大学大学院の田中成典先生、星薬科大学の福澤薫先生らと交え、助教諸氏と学生諸氏を含めて構成されています。

「富岳」は「京」の100倍の計算能力があるとされていますが、私たちはこの力を2つの方向で使うことにしました。1つは、capacity computingの文脈で、生体内環境を想定した分子動力学(MD)シミュレーションによって生成される構造ゆらぎを含むタンパク質の構造セット多数をまとめて処理し、相互作用エネルギー解析を統計的に行うことです。コロナウイルスに関しては、増殖に関与するメインプロテアーゼ(Mpro)と阻害剤N3との複合系の水和構造(図を参照)のセット四千個を、電子相関の補正を2次(MP2)摂動で行うFMO-MP2/6-31G\*レベルで計算しました。1個あたりの計算時間は半ラック(192ノード)で僅か0.6時間、同時並行処理によって全FMO計算を約5時間で終えることができました。実は、メインプロテアーゼとN3の複合体の結晶構造に関するFMO計算は退役直前の名古屋大学のFX100で行っていた<sup>[3]</sup>のですが、構造揺らぎを含めると相互作用に関わる重要残基の寄与に顕著な差が出てくるようになりました。つまり、動的な揺らぎを含めることで相互作用描像をよりリアルに捉えることが可能になったわけです。成果の一部は、理化学研究所計算科学研究センター(R-CCS)の記者勉強会<sup>[4]</sup>で紹介していますが、メインプロテアーゼの阻害剤の分子構造の最適化に関する知見として有意義なものと考えています。福澤先生が展開されているFMO創薬コンソーシアム<sup>[5]</sup>の「京」を使った研究活動のなかで、タンパク質-リガンド複合体の単一構造でのFMO解析をルーチン的に

行うことはできていましたが、数百個単位の構造をベースにする統計的な評価は現実的ではありませんでした。「富岳」の時代では、構造揺らぎを含めた統計的な解析が一般化することは間違いないと考えています。

「富岳」の圧倒的な計算力を活かすもう1つの軸線は、capability computingです。FMOのフレームワーク内でも電子相関の摂動補正のレベルを2次(MP2)から3次(MP3)に上げると、テンソル量の縮約計算の複雑さが増してコストが上がります。さらにメモリ要求も大きくなります<sup>[6]</sup>。もちろん、MP3より摂動の次数を上げた(それ故コストもさらに大きい)結合クラスター展開(CCS(T))の扱いが望ましいのですが、簡便なスケールリングを行うことで実効的にCCSD(T)並の相互作用エネルギーの算定値が得られることが知られています<sup>[7]</sup>。従って、FMO-MP3計算が行えることは計算結果の信頼性を高める上で大きな意味があります。残念ながら、「京」ではノードあたりのコア数が8と少なく、また利用可能なメモリが限られていたために不可能でした。しかし、「富岳」ではノードあたりのコア数が48、しかもメモリも20GBほどが取れる上にノード数を積むことも容易ですので、FMO-MP3が実用的に使えるようになります。この立場から、コロナウイルスの膜表面に多数存在して細胞感染にコミットするスパイクタンパク質を計算してみました。この巨大タンパク質は1.1千個のアミノ酸残基の鎖が3つ結合して形成されますので、残基の総数は3.3千となります。基底関数を6-31G\*よりも記述性が高いcc-pVDZとし、8ラック(3072ノード)でFMO-MP3ジョブを流したところ、閉じた(closed)状態の構造では僅か3.4時間で完了させることができました。これは驚異的な速さで、現時点で世界最大の2次摂動を超えた(beyond MP2)レベルのFMO計算になっています。もう1つ、感染に関わる状態の開いた(open)構造も比較のために計算しました(時間は3.9時間)。図は、両構造でB鎖から見た相互作用エネルギーの可視化になっており、きわめて複雑な絡み合いの様



▲コロナウイルスのスパイクタンパク質内部の相互作用エネルギーの可視化例(赤が安定化、青が不安定化を示す)

▲コロナウイルスのメインプロテアーゼと阻害剤N3の複合体の水和モデル

子が視て取れます。相互作用エネルギーを鎖ごと、さらに細胞表面のアンジオテンシン転換酵素2(ACE2)と結合する領域(RBD)ごとに整理すると、タンパク質内部の安定化エネルギーが閉じた構造に比べて開いた構造では大きく減じ、特にB鎖のRBDでのエネルギーの減少が特徴的であることが分かりました<sup>[4]</sup>。この減損が、ACE2あるいは抗体との結合によって一部補填されるものと推定されます。さらに、データ科学手法の1つである特異値分解を導入し、鎖間の相互作用に重要なアミノ酸残基の同定も試みており、荷電性のアミノ酸残基群の寄与が浮かび上がってきています。

実は、今回の「新型コロナウイルス対策を目的としたスーパーコンピュータ『富岳』の優先的な試行的利用」でのFMO計算プロジェクトは、4月頭にお申し越しを理研R-CCSから頂き、急遽始まったものでした。そこから短期間で幾つかの改良を行い、上述した本計算を進められるようになりました。このことは、結果としてABINIT-MPの高いポテンシャルの証左になっています。2021年度からの「富岳」の本格運用の中でも、ABINIT-MPがライブラリプログラムとして広く使われることを期待しています。

[1] ([http://www.cenav.org/abinit-mp-open\\_ver-1-rev-22/](http://www.cenav.org/abinit-mp-open_ver-1-rev-22/)).  
 [2] (<https://www.r-ccs.riken.jp/post-k/corona/>).  
 [3] R. Hatada et al., J. Chem. Inform. Model., 60 (2020) 3593.  
 [4] (<https://www.r-ccs.riken.jp/outreach/formedia/200617.html>).  
 [5] (<https://fmodd.jp/>).  
 [6] Y. Mochizuki et al., Chem. Phys. Lett., 493 (2010) 346.  
 [7] M. Pitonak et al., ChemPhysChem, 10 (2009) 282.

室内環境におけるウイルス飛沫感染の予測とその対策

# 大規模シミュレーションによる室内環境におけるウイルス飛沫・エアロゾル感染の予測とその対策提案



理化学研究所  
計算科学研究センター  
複雑現象統一解析研究チーム  
神戸大学大学院  
システム情報学研究所  
坪倉 誠  
チームリーダー・教授

我々のグループでは、4月に公募が始まった理研と文科省の連携による「新型コロナウイルス対策を目的としたスパコン『富岳』の優先的な試行的利用」の機会を得て、現在、ウイルス飛沫やエアロゾルの飛散予測を行っています。

ウイルス感染のうち、くしゃみ、咳、発話等で発生する飛沫による感染では、感染の飛散経路が空気の流れや湿度等に大きく依存します。また新型コロナウイルスでは、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(一般的には5ミクロン以下)での感染の可能性も示唆されています。エアロゾルは長時間空気を漂うことから、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、周囲流れが感染にどのような影響を与えているのかを正しく推定した上で、飛沫の飛散経路を正しく予測する必要があります。本課題では、室内環境において空気と飛沫の連成シミュレーションを行い、飛沫感染リスクの定量的評価を行うとともに、マスクやフェースガード、パーティション、さらには窓の開閉や空調の効果的運転条件といった気流を制御することによる感染リスク低減策を具体的かつ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ことを目的としています。また、ウイルス飛沫を“見える化”して社会に発信することで、正しい感染に関する理解とその予防の啓発を行います。研究開発体制として、理研、神戸大、京都工芸繊維大、豊橋技科大、大阪大の他、鹿島建設、ダイキン工業が産学連携することでプロジェクトを進めています。シミュレーションには、理研が開発し、「富岳」に実装を進めている複雑現象統一解析フレームワーク「CUBE」を用いて、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っています。理研チームではプロジェクト応募にあたって既に「富岳」でのプログラムチューニングを進めており、現在、ノード性能216GFLOPS(ピーク性能比6.4%)、メモリスループット172GB/s、並列性能4.58PFLOPS(27,648ノード)を得ています。

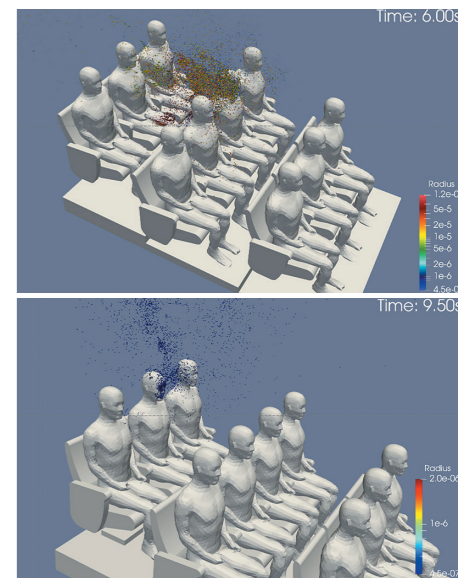
例えば人が咳をした場合には、1回につき数千から1万個の飛沫が発生すると言われており、そ

の粒径は1ミクロン以下から数百ミクロンまでの広範囲にわたります。数としては数マイクロメートルのエアロゾルが支配的で、このサイズの飛沫は急速に蒸発し、長時間空気中を浮遊します。一方、10マイクロメートル以上の大きな飛沫は質量としては支配的ですが、全ての飛沫は2メートル以内に落下します。そこでシミュレーションの実施に当たっては、主に飛沫感染リスクを対象とした近距離飛沫シミュレーションと、エアロゾル感染リスクを対象とした通勤電車、オフィス、教室、病室等における大空間感染リスクシミュレーションに分けて実施しています。

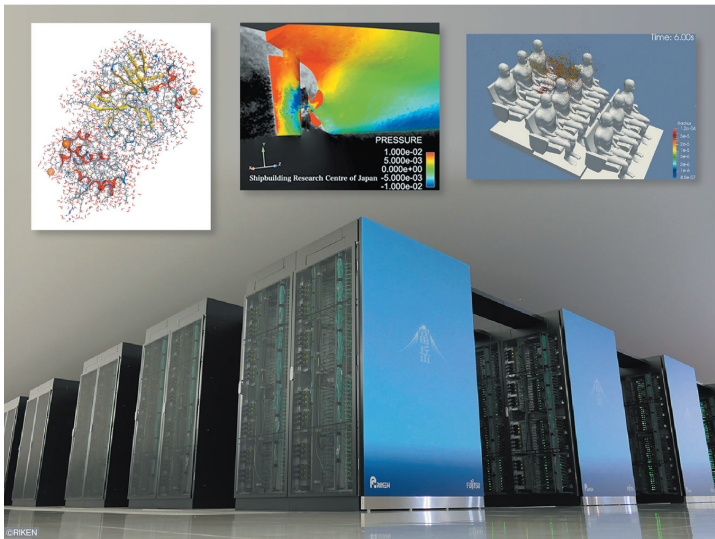
近距離飛沫シミュレーションでは、口から発生する数万の飛沫を全てラグランジュ的に追跡し、オイラー的にナビエ-ストークス方程式を解析する流れ場解析との連成シミュレーションを行いました。飛沫粒子のラグランジュ解析には、「CUBE」に実装済みの自動車内燃エンジンの解析のための燃料噴霧モデルを用いています。具体的な解析対象としては、不織布マスクの飛沫抑制効果と布マスク等の材質の影響、フェースガードの効果、パーティションの効果と高さの最適化等を行っています。これらの結果から、マスクをつけた場合には90%以上の飛沫は抑えられる一方、マスクと顔との隙間がある場合には、エアロゾルに対しては50%以上が漏れてしまうことや、目が隠れる程度のパーティションを付けた場合には、2m先の人に届く飛沫量はパーティションが無い場合と比較して10分の1程度に抑制されること等を明らかにしました。図は、内閣官房の要請を受けて「屋内イベントの開催のあり方に関する検討会」に参画し、ガイドライン作成に向けて参考資料として提出したコンサートホール内での飛沫飛散の予測をしたシミュレーション結果です。強い咳を2回した場合はマスク有り無しの結果を比較しています。マスクをしていないケースでは、前列の左右の人に大小多くの飛沫が到達しているのがわかります。一方、マスクをした場合は、発生する飛沫は5ミクロン以下のエアロゾルに限定され、さらにマスクの気流抑制効果により、主に人の体温による自然対流効果と床からのエアコン吹き出しによる上昇気流によって上方に飛散し、感染リスクは咳をした人の左右の人に限定されることがわかります。

エアロゾル感染リスク評価としては、仮想スカラーをオイラー的に輸送させ、換気量を定量的に予測しています(いわゆる空気齢)。通勤列車内シミュレーションでは、山手線を対象とした車両1両に対して、窓開け換気の効果について検討を行いました。ここでは実際に車両を時速80

キロで走行させ、列車内外の気流を連成させて解析を行いました。また、160名定員に対して実際に人を229人配置した混雑時と18名配置した閑散時を対象としました。混雑時の窓閉め状態では、一人当たりの換気量はエアコンの外気換気性能で決まってしまう、混雑時には過密状態となりますが、4つの窓を20cm開放することで換気量は2~3倍に向上し、一人当たり一般オフィスに近い換気量(20m<sup>3</sup>/h)まで回復することがわかりました。一方、窓開けによる換気は、立っている人の頭より上で促進されますが、身体より下は限定的で、換気に大きなむらが生じることもわかりました。エアロゾル感染リスクの低減の意味ではやはり密な状態をさけることが一番でしょう。その他、オフィスのシミュレーションでは床からの高さが160cmを超える高いパーティションは、飛沫感染リスクの低減には効果的ですが、エアロゾル感染リスクの観点からは通勤電車と同様、換気のむらが増長される傾向にあり、飛沫とエアロゾルの感染リスク低減にはトレードオフがあることもわかってきました。さらに教室や病室に対しても結果が出ており、窓開けやサーキュレーターの併用による即効的なエアロゾル感染リスク低減策の提案を行っています。今後は、夏以降のさまざまなイベント再開に向けた各種業界ガイドライン策定に貢献できる結果を提供するほか、ポストコロナに向けた新たな生活様式を提案できるようより長期的な対策についても提案していきたい考えです。



▲コンサートホール客席における飛沫・エアロゾル飛散シミュレーション。粒子の色は飛沫のサイズ(m)を表している。上はマスクをせずに咳をした場合、下はマスクをして咳をした場合



## 今号の表紙

### 日本のフラッグシップ計算機「富岳」

2021年の本格運用に向けて開発・整備が進む「富岳」ですが、その高度な計算資源をいち早く成果に結びつけることをめざして、『富岳』成果創出加速プログラムや「新型コロナウイルス対策を目的としたスーパーコンピュータ『富岳』の優先的な試行的利用」が先行して推進されています。表紙の画像は、そのなかの「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」(左)、『富岳』を利用した革新的流体性能予測技術の研究開発(中)、「室内環境におけるウイルス飛沫感染の予測とその対策」(右)において得られた成果画像(それぞれの研究開発については、本文記事をお読みください)。

## 編集後記

今号の編集作業を進めている間に、うれしいニュースが報じられました。オンラインで開催された「ISC2020」において、「富岳」が「TOP500」、「HPCG」、「HPL-AI」、「Graph500」で世界第1位を獲得し、総合的な高い性能を実証しました。日本の計算機が「TOP500」で1位に輝くのは2011年11月以来、実に8年半ぶりとなります。すでに米国や中国がエクサ級の計算機を開発中といわれ、長く1位の座を守ることは難しいかもしれませんが、まずは1位奪還を喜びたいと思います。さて、今号ではそんな「富岳」を特集しました。すでに「富岳」を活用した研究は始まっていますが、来年度の共用開始によって、数多くの成果が得られることに期待しています。



## 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.19

発行日：2020年9月3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