



理研の博士に聞いてみよう！

世界一使いやすいスパコン

「富岳」をつくりました。



何に使うの？

新型コロナウイルス対策など、
世の中のいろいろな問題の解決に
役立てます。

石川 裕 博士

計算科学研究センター
フラッグシップ2020プロジェクト
プロジェクトリーダー

●「富岳」を使いマスクの効果を一いち早く発表

2020年、新型コロナウイルスの感染が世界中で拡大しました。新型コロナウイルスは、せきやくしゃみ、話をするとき口から出る小さな水の粒「飛まつ」に混じって、ほかの人へ感染します。理研の坪倉 誠 博士たちは、大学や企業の人たちと協力して、飛まつを防ぐマスクの効果や、オフィスや教室の中で飛まつが広がるようすを、スーパーコンピュータ「富岳」で予測した動画をつくりました。マスクの効果を実測した動画を見たことはありませんか？ その動画を見た人は、きちんとマスクを着けなければと、あらためて気を付けるようになったことでしょうか。

飛まつが広がる方を予測するのは、そんなに難しいことなの？ と思うかもしれませんが、飛まつが広がる部屋の大きさや形、その中にある物の配置、空気の流れや乾燥ぐあいなど、いろいろなことが飛まつが広がる方に影響を与えます。とても複雑な現象なので、いろいろな場面でそれを正確に予測するには、

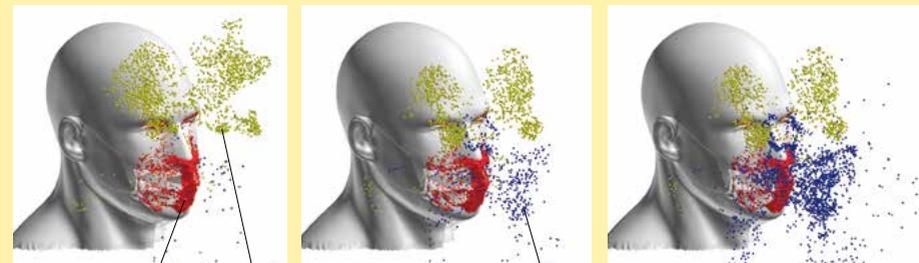
「富岳」で予測したマスクの効果

いずれのマスクでも、マスクを顔とすき間なくきちんと着けることで、大部分の飛まつを捕まえることができる。

不織布マスク

手づくりマスク
(ポリエステル相当の素材)

手づくりマスク (綿相当の素材)



赤：マスクと顔に付いた飛まつ
黄：すき間から出た飛まつ
青：マスクを通り抜けた飛まつ

提供：理研、豊橋技術科学大学、神戸大学 協力：京都工芸繊維大学、大阪大学、大王製紙株式会社

ものすごく大量の計算が必要になります。坪倉博士たちは「富岳」で計算を始めてから2カ月足らずで、最初の動画を発表しました。緊急事態宣言が解除されて学校が再開されたところに発表して、みなさんが感染しないためにどのようなことに気を付ければよいのか、参考にしてもらうことをめざしたのです。それができた大きな理由の一つは、計算スピードが世界一の「富岳」で、大量の計算を短い期間で行うことができたからです。

●「富岳」の速さの秘密は、 約16万個の計算装置に仕事を分担させること

「富岳」は完成前の2020年6月に1秒間に41京回以上、同じ年の11月に44京回以上の計算をできることを示して、計算速度が世界1位であることが認められました。1秒間に44京（44万×1兆）回以上の速さ、といわれても、想像できませんよね。日本に住む1億2,000万人の全員が、1秒間に1回、24時間寝ないで計算を続けたとしても100年以上かかる量の計算を、「富岳」はたった1秒でできるのです。

その高速計算の秘密は仕事の分担です。たくさんの荷物を運ぶ仕事でも、多くの人で分担すればすぐに終わらせることができますよね。同じように、「富岳」では大量の計算を約16万個の小さなCPU（中央演算処理装置）という計算装置に分担させることで、高速に計算ができるのです。



スーパーコンピュータ「富岳」

● スパコンをつくる人とアプリをつくる人が いっしょになって使いやすい「富岳」を開発

私たちが「富岳」について考え始めたのは2010年。理研で「富岳」の前のスパコン「京」がつくられていたところです。「京」の次はどんなスパコンをつくるべきか議論を重ねました。そして、計算速度が速いだけでなく、世の中のさまざまな問題の解決に役立つ、使いやすいスパコンをめざすことにしました。それには、いろいろな種類のアプリを使えるようにしなければなりません。

スパコンをゲーム機に例えてみましょう。ゲームといっても格闘やレース、冒険やパズルなど、いろいろな種類がありますね。格闘のような激しい動きのあるゲームには、高い計算能力と画像を動かす優れた能力が求められます。そのためゲーム機の価格は高くなり、消費電力も増えてしまいます。一方、パズルなど激しい動きがあまりないゲームは、高い計算能力も画像を動かす能力もそれほど必要ありません。ゲーム機をつくる人たちは、価格と消費電力をできるだけ抑えようと、格闘からパズルまで幅広いゲームアプリを使えるようにゲーム機を設計する。一方、アプリをつくる人たちは、計算能力をあまり使わなくても激しい動きを描けるようにゲームアプリを設計する。そのような形でゲーム機をつくる人とアプリをつくる人が相談しながら設計を進めれば、きっといいものができます。

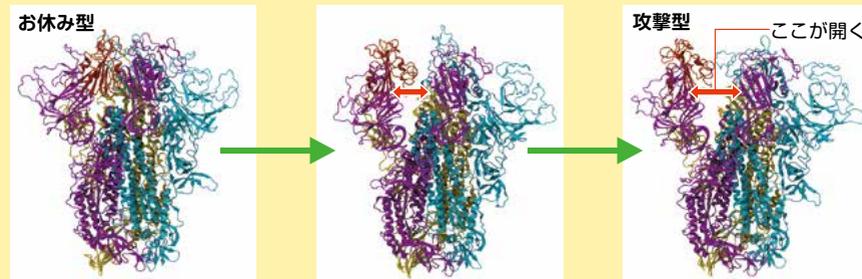
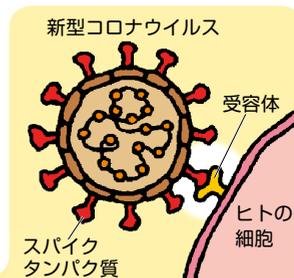
さらに実際にゲームを楽しむ人たちの意見をよく聞いて、これからどんなゲームが求められるのかを予想しながら、ゲーム機をつくる人たちとさまざまな種類のゲームアプリをつくる人たちがいっしょになって開発を進めれば、みんなが使いやすいゲーム機になるにちがいません。

私たちは、スパコンをつくる人とスパコンで動かすアプリをつくる人がいっしょになって「富岳」を開発してきました。実際に「富岳」をつくる計画が始まったのは2014年。20以上のグループに分かれて、理研の研究者や実際にスパコンの機械をつくるメーカーの人たちが月に何回も集まって話し合いながらいっしょに設計を進めました。「富岳」計画のリーダーを務める私は、20以上のグループの会議のすべてに出席して、全体をまとめていきました。来る日も来る日も会議という生活を何年も重ねていったのです。そしていろいろな問題を解決するためのアプリを「富岳」ですぐに使えるように準備を進めました。

その「富岳」を使って、坪倉博士たちは飛まつの広がり方を目に見える形にした動画をいち早く発表したのです。「富岳」が実際に課題の解決に役立つことを、多くの人たちに示すことができました。

● タンパク質の動きを計算して薬づくりに役立つ

「富岳」で使えるように準備していたアプリの一つは、タンパク質などの動きを計算するものです。理研の杉田有治博士たちは、そのアプリを使って新型コロナウイルス感染症の治療薬の開発に役立つ計算を行っています。新型コロナウイルスの表面には「スパイクタンパク質」という突起があり、それがヒトの細胞の表面にあるタンパク質（受容体）にくっついて、ウイルスが細胞の中へ入りこんでいきます。そしてヒトの細胞の中でどんどん増えて細胞の外へ飛び出し、別の細胞にも入りこんでさらに増えていきます。



「富岳」で予測したスパイクタンパク質が攻撃型に変わる動き

スパイクタンパク質に結合してヒトの細胞に入りこまないようにする薬ができれば、感染を防ぐことができます。タンパク質は常に形を変えています。スパイクタンパク質は「お休み型（不活性型）」から「攻撃型（活性型）」へ形が変わることでヒトの細胞に入りこみます。お休み型と攻撃型のそれぞれの形は、特殊な顕微鏡を使った実験ですでに調べられています。でもそれは、動きが止まった写真です。薬をつくるには、タンパク質が形を変えるようすをとらえた動画が役立ちます。しかしとても小さなタンパク質のすばやい変化を動画で撮影することは難しいのです。

そこで杉田博士たちは、スパイクタンパク質がお休み型から攻撃型へ変わる動画を「富岳」を使ってつくることにしました。そのための計算に使う式は、高校で習う「ニュートンの運動方程式」です。タンパク質をふくむすべての物質は原子という小さな粒からできています。タンパク質をつくる1個1個の原子に働く力をニュートンの運動方程式で計算すれば、タンパク質の動きを予測することができるのです。ただし、その動きを正確に計算するには、1,000兆分の1秒ごとに、タンパク質をつくる何十万個もの原子それぞれに働く力を1個1個計算する必要があり、計算量は膨大です。

杉田博士たちは、その大量の計算をたくさんのCPUに振り分けて、「京」で効率よく計算するアプリを開発してきました。そして、そのアプリを「富岳」でも動かせるように、私たちといっしょに準備を進めてきたのです。そして、お休み型が攻撃型へ変わる動画をつくることに成功しました。

スパイクタンパク質の計算以外にも、ほかの病気で使われている薬が新型コロナウイルスに効果があるかどうか、「富岳」を使って調べられています。さらに、重症化と遺伝子の関係や、感染拡大が社会や経済に与える影響の予測なども、「富岳」を使って行われています。

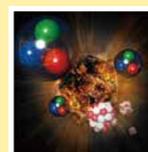
●「富岳」の次は、君たちの出番だ！

「富岳」はまもなく完成し、さまざまな分野の人たちに本格的に利用してもらう予定です。新型コロナウイルスの感染拡大を防ぐために「富岳」が利用されているように、経済やエネルギー、地球環境など、社会のさまざまな課題を解決するために「富岳」は役立てられます。

私たちの暮らしが続くかぎり、そうした課題は次々と出てくるでしょう。



防災・地球環境問題



宇宙の謎



エネルギー問題



ものづくり



健康で長生きできる社会



みんなで作った「富岳」をあらゆる分野で役立てる

きっと将来は「富岳」よりも、もっとすごいスパコンが必要になります。「富岳」の開発を進めてきた人たちは、10年後のスパコンについてもすでに考え始めています。「富岳」は約16万個のCPUで計算を分担しています。CPUの数をもっともっと増やせば、もっともっとすごいスパコンになると思うでしょう。ところが、そううまくはいきません。CPUの数を増やすにはCPUを小さくする必要がありますが、CPUを今以上に小さくすると、電線の幅が原子数個分と狭くなりすぎて電気が設計どおりに流れなくなり、うまく計算ができなくなるからです。10年後のスパコンには、たくさんのCPUに分担させるのとは別の方法で、さまざまな計算を高速で行うことができる、新しい方式が求められているのです。

私は子どものころからコンピュータに興味を持ち、高校生のころには「チェスの名人に勝てるコンピュータをつくりたい」と友だちに言っていました。40年以上も前のことです。当時は、それが未来の夢だったのです。今では、チェスだけでなく将棋や囲碁の名人もコンピュータに勝てなくなりました。

みなさんは、どんなスパコンがあればいいと思いますか？ 未来のスパコンをつくるのは君たちです！