

第9回 JCAHPC セミナー（第4回 OFP 利活用報告会） 「人類と地球を護るスーパーコンピューティング」（オンライン）

中島 研吾

東京大学情報基盤センター

2020年10月15日（木）にオンラインで開催された第9回 JCAHPC セミナー¹の概要を報告する。

現在、人類と地球は新型コロナウイルス感染症（COVID-19）という未曾有の危機に直面している。問題解決に向けては「防疫」、「治療」、「創薬」など広範囲にわたり様々な手法による研究開発が急務であり、スーパーコンピュータの有する高速な計算能力、データ処理能力の貢献が期待されている。このような状況の下、HPCI²（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）においては、関係機関の協力のもと、関連する研究が必要とする計算資源を提供する臨時的課題募集「新型コロナウイルス感染症対応 HPCI 臨時公募課題³」がおこなわれている。

最先端共同 HPC 基盤施設（JCAHPC: Joint Center for Advanced High Performance Computing）⁴は筑波大学計算科学研究センターと東京大学情報基盤センターとが共同で設立した組織であり、国内最高クラスの性能を有する Oakforest-PACS システム（OFP）⁵を設計、導入、運用している。両センターは本施設を連携・協力して運営することにより、最先端の計算科学を推進し、我が国の学術及び科学技術の振興に寄与してきた。

筑波大学・東京大学の両センターと JCAHPC は、HPCI システム構成機関として「新型コロナウイルス感染症対応 HPCI 臨時公募課題」に計算資源を提供し、新型コロナウイルス感染症に関する研究を支援している。2021年1月1日現在、合計14課題が採択されているが、そのうち3課題が最先端共同 HPC 基盤施設（JCAHPC）の Oakforest-PACS を使用したものであり、2課題が筑波大学計算科学研究センターの Cygnus、3課題が東大情報基盤センターの Oakbridge-CX（OBCX）となっており、合計8課題、全体の6割近くが筑波大・東大関連のシステムを利用して実施されている。

JCAHPC では、2017年から毎年10月に「OFP 利活用報告会」として利用者、JCAHPC 教員により、OFP における研究開発事例の紹介を実施してきた。第4回目となる今回は「人類と地球を護るスーパーコンピューティング」として、「新型コロナウイルス感染症対応 HPCI 臨時公募課題」の事例の他、OFP によるゲリラ豪雨予測リアルタイム実証実験について紹介した。また、「新型コロナウイルス感染症対応 HPCI 臨時公募課題」については OFP だけでなく、Cygnus（筑波大、1件）、OBCX（東大、2件）を利用した課題についても紹介した。

今回は完全オンラインで開催され、合計97名の登録者があり、これまでで最大人数であった。なお、通常、メイン会場としている東大柏キャンパス第2総合研究棟の会議室は、最大収容人

¹ <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/jcahpc/09.php>

² <https://www.hpci-office.jp/>

³ https://www.hpci-office.jp/pages/adoptionlist2020_25

⁴ <http://jcahpc.jp/>

⁵ <http://www.cc.u-tokyo.ac.jp/system/ofp/>

数が 70 名程度である。

表 1：第 9 回 JCAHPC セミナー プログラム

時間帯	講演者・講演題目	利用システム	座長
13:00-13:15	中島研吾 (JCAHPC/東京大学) : Opening		
13:15-13:45	三好建正 (理化学研究所) : ゲリラ豪雨予測のリアルタイム実証実験	OFP	下川辺隆史 (JCAHPC/ 東京大学)
13:45-14:15	Marco Edoardo Rosti (OIST) : Spreading of polydisperse droplets in a turbulent puff of saturated exhaled air	OBCX	
14:15-14:45	岡田純一 (UT Heart 研究所) : COVID-19 治療の候補薬: chloroquine、hydroxychloroquine、azithromycin の催不整脈リスクの評価ならびにその低減策に関する研究	OFP	
14:45-15:00	(休憩)		
15:00-15:30	杉田有治 (理化学研究所) : 新型コロナウイルス表面のタンパク質動的構造予測	OFP	高橋大介 (JCAHPC/ 筑波大学)
15:30-16:00	望月祐志 (立教大学) : 新型コロナウイルスの主要プロテアーゼに関するフラグメント分子軌道計算	OFP	
16:00-16:30	重田育照 (筑波大学) : Covid-19 関連タンパクに対する統合的インシリコリポジショニング	Cygnus	
16:30-17:00	星野忠次 (千葉大学) : 計算機解析による SARS-CoV-2 増殖阻害化合物の探索	OBCX	
17:00-17:10	朴泰祐 (JCAHPC/筑波大学) : Closing		