

スーパーコンピュータ

特集

「富岳」が拓く計算科学の未来

～シミュレーション科学、データ科学が社会を変える～

Focus カキとキウイフルーツの性決定のしくみを解明!

標本の世界 石灰岩洞穴からは今後も大発見が続く

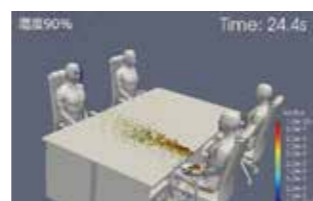
科学冒険隊 海岸の漂着物から海洋ごみ問題を考える!

真実を見抜く技術! 最前線の毒物分析で中毒事件に挑む

「milsil(ミルシル)」について
「milsil(ミルシル)」の「mil(ミル)」は「見てみる」「聞いてみる」「やってみる」の「ミル」。そのような「ミル」から、新たな、そして豊かな「sil(シル=知る)」が得られるでしょう。この雑誌とともに、皆様楽しい「ミルシル」体験をされることを願っています。

C O N T E N T S

- 3 【特集】「富岳」が拓く計算科学の未来
～シミュレーション科学、データ科学が社会を変える～
[全体監修] 佐藤 三久 (理化学研究所計算科学研究センター副センター長/筑波大学名誉教授)
- 4 スーパーコンピュータ「富岳」がめざすもの
佐藤 三久 (理化学研究所計算科学研究センター副センター長/筑波大学名誉教授)
- 5 「富岳」プロジェクトを振り返って
石川 裕 (理化学研究所計算科学研究センター「富岳」プロジェクトリーダー)
- 6 シミュレーションで探る新型コロナ対策
伊藤 伸泰 (理化学研究所計算科学研究センター離散現象シミュレーション研究チームリーダー)
- 9 プレジジョン・メディシンを加速する「創薬ビッグデータ統合システム」の推進
荒木 望嗣 (京大大学院医学研究科人間健康科学系専攻ビッグデータ医科学分野特定准教授)
鎌田 真由美 (京大大学院医学研究科人間健康科学系専攻ビッグデータ医科学分野准教授)
奥野 恭史 (京大大学院医学研究科人間健康科学系専攻ビッグデータ医科学分野教授)
- 12 サイバー空間を活用した革新的ものづくり
～その展望と新型コロナへの対応～
坪倉 誠 (理化学研究所計算科学研究センター複雑現象統一的解法研究チームリーダー/
神戸大学大学院システム情報学専攻教授)
- 15 世界最大規模のAI基盤をめざす「富岳」
佐藤 賢斗 (理化学研究所計算科学研究センター高性能ビッグデータ研究チームリーダー)
- 18 Focus 科学者の探究心にせまる
カキとキウイフルーツの性決定のしくみを解明!
果物の研究を通して植物の遺伝子研究をリードする
赤木 剛士 (岡山大学大学院環境生命科学研究科准教授)
- 22 標本の世界
石灰岩洞穴からは今後も大発見が続く
中村 良幸 (花巻市総合文化財センター文化財専門官)
- 24 親子で遊ぼう! 科学冒険隊
#77 海岸の漂着物から海洋ごみ問題を考える!
加藤 千明 (NPO 法人チームくじら号代表/元 海洋研究開発機構
海洋・極限環境生物圏領域上席研究員) 監修
- 28 真実を見抜く技術! 第11回
食品に混入した化合物は何か?
最前線の毒物分析で中毒事件に挑む
太田 彦人 (科学警察研究所法科学第三部化学第二研究室長) 取材協力
- 33 NEWS & TOPICS
世界の科学ニュース & おもしろニュース
- 34 milsil カフェ / 次号予告 / 定期購読のお知らせ / 編集後記



「富岳」でシミュレーションした、咳をした際の飛沫の様子。
提供: 理化学研究所・豊橋技術科学大学
協力: 京都工芸繊維大学・大阪大学



表紙写真

理化学研究所と富士通が共同で開発したスーパーコンピュータ「富岳」。2020年6月の高性能計算技術に関する国際会議「ISC2020」で発表された性能ランキングにおいて、「富岳」は「TOP500」をはじめ4つの指標で世界一に輝きました。日本のスーパーコンピュータが「TOP500」で1位になるのは、2011年11月の「京」以来8年半ぶりのことです。「富岳」は現在も開発・調整が進められており、2021年度より本格運用が始まる予定です。 画像提供: 理化学研究所

特集 「富岳」が拓く計算科学の未来

～シミュレーション科学、データ科学が社会を変える～

[全体監修] 佐藤 三久 (理化学研究所計算科学研究センター副センター長/筑波大学名誉教授)

Q: 「TOP500」で1位になったスーパーコンピュータ「富岳」の計算速度は、毎秒41京5530兆回(1京は1000兆の10倍)。どうしてこれほど速い計算性能が必要なのでしょう。

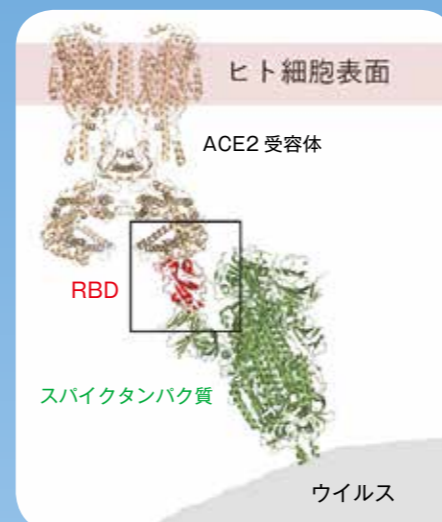
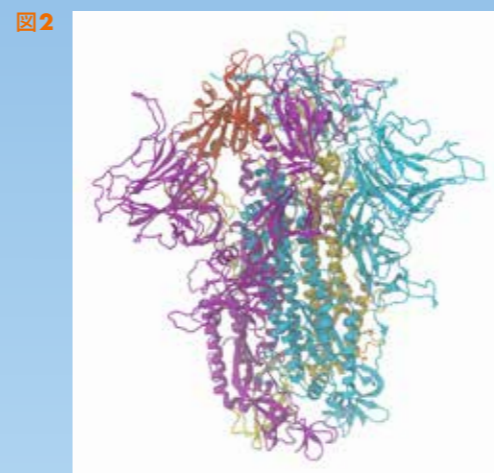


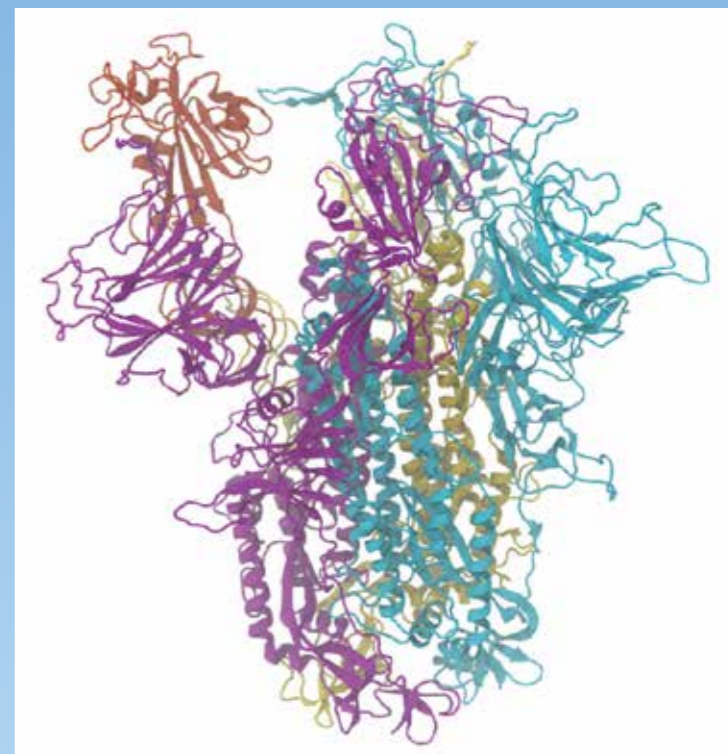
図1 ウイルス突起とヒト細胞受容体の結合モデル



結合前のスパイクタンパク質 (不活性型)



「富岳」を用いてシミュレーション



「富岳」で予測した構造変化 (活性型)

実験では観察することが難しい新型コロナウイルスのスパイクタンパク質が構造変化する様子を「富岳」を使って再現することができました。新型コロナウイルスがヒト細胞に侵入する際、ウイルス表面に存在するスパイクタンパク質が不活性型から活性型へと構造変化して、ヒト細胞表面にある受容体タンパク質と結合します(図1)。構造が変化する過程の立体構造の動きを「富岳」による数値シミュレーションで予測した結果、受容体との結合に向けて左上(RBD)部分が開く構造が確認されました(図2)。

A: スパイクタンパク質の構造変化再現では、「GENESIS」というソフトウェアを用いた分子動力学シミュレーションが行われました。これは、ニュートンの運動方程式を繰り返し解くことで分子の動きを計算機上に再現するもので、1000兆分の1秒という非常に短い時間刻みで連立方程式を繰り返し計算します。構造変化過程のおよそ100ナノ秒(100万分の1秒)の分子運動を再現するにも100万回の繰り返し計算を行う必要があります。こうした大規模な計算を実施するために、より高度な計算性能をもつスーパーコンピュータが必要とされるのです。得られた成果は、新型コロナウイルスと受容体の結合を阻害する薬剤の開発に役立つと期待されています。