

## 東京大学、計算資源を国際社会に提供し、新型コロナウイルス構造を計算

東京大学素粒子物理国際研究センター(ICEPP)が運用する「ATLAS 地域解析センター」は CERN & LHC Computing チーム(CERN チームのメンバーとして Folding@home プロジェクトに参加し、計算資源を提供しています。

Folding@home は、新型コロナウイルス感染症の治療法を確立する手がかりを発見するために分子動力学シミュレーションによるタンパク質のフォールディング(折りたたみ)の解析を行うボランティア・分散コンピューティングプロジェクトです。

Folding@home への計算資源の提供は、国際協力により行われています。ICEPP が参加している ATLAS 実験のコンピューティンググループは、素粒子・原子核実験のために開発された Worldwide LHC コンピューティンググリッド環境を用いることで大規模な計算資源をスムーズに提供することを可能にしました。

CERN で行われている国際的な素粒子・原子核実験グループの多数の計算機センターが、学術研究に用いている計算資源の一部を提供することで、本来の研究を行いながら、同時に新型コロナウイルス感染症対策にも CERN チーム全体としてスーパーコンピュータに匹敵する計算能力を提供しました。

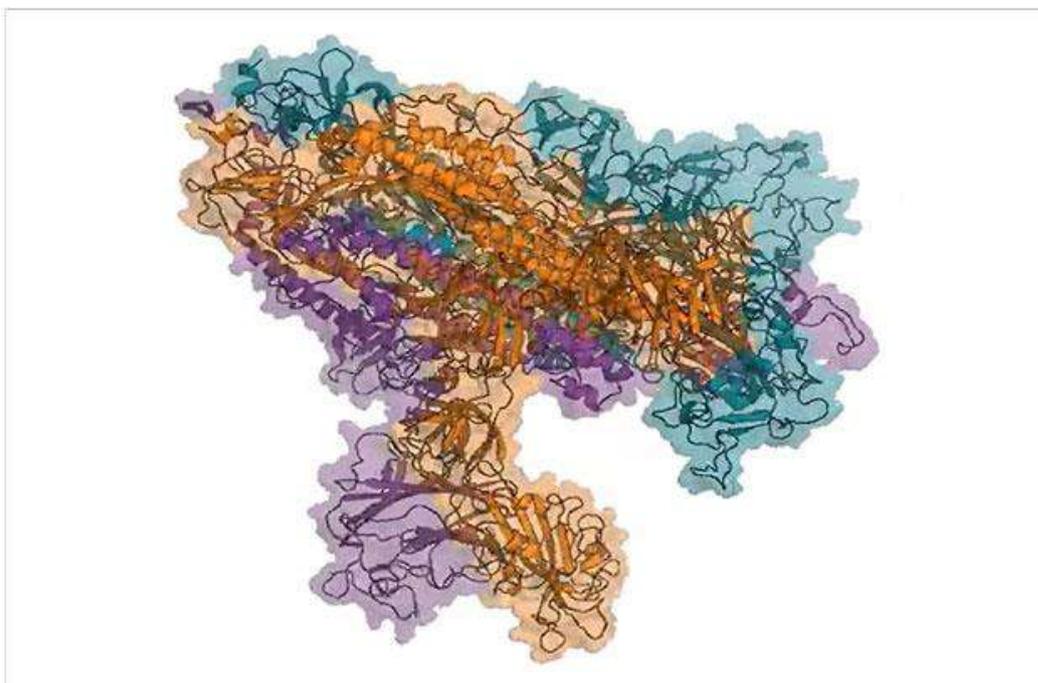


図1 Folding@home でシミュレーションした COVID-19 の原因となるウイルスの

## スパイクとよばれる突起状のたんぱく質の分子構造 (CERN 提供)

新型コロナウイルス感染症の治療法を確立するうえで、ウィルスの基本的な性質を理解することが重要です。世界中で、生化学的な手法、化学的な手法で治療法の発見に迫っています。物理化学的な手法として、分子動力学シミュレーションによりタンパク質のフォールディングを解析する(図1)ために、ICEPPは東京大学大学院理学系研究科のメンバーとともにCERNチームの一員として、4月10日からFolding@homeに参加し、新型コロナウイルスのタンパク質解析に貢献しています。

Folding@homeは分子動力学シミュレーションによりタンパク質のフォールディングを解析するためのボランティア・分散コンピューティングプロジェクトです。新型コロナウイルスは、他のウィルスと同様に、宿主細胞の免疫に抵抗したり、宿主細胞の中で増殖するためのタンパク質を持っています。Folding@homeでは、世界中から提供される計算資源を使ってコンピュータシミュレーションを行い、これらのタンパク質の構造をよりよく理解するための解析を行っています。これは新薬開発のための重要なステップです。

Folding@homeの計算能力は、4月14日時点で約2.4エクサフロップスに達しています。これは、世界のスーパーコンピュータの上位500の計算能力の合計(注6)を上回るものです。CERNとLHC実験のための世界各地の計算機センター(図2)は計算能力の一部をFolding@homeに常時提供し、CERNチームとして6月15日の時点で10番目に大きな貢献をしています。ICEPPの「ATLAS地域解析センター」はATLAS実験グループとしてこのチームに計算能力を提供しています。ATLAS実験グループはピーク時に合計約8万CPUコアを提供(図3)し、CERNチームの約30%の貢献をしています。ICEPPはCERNチームの約1%の貢献を行っています。

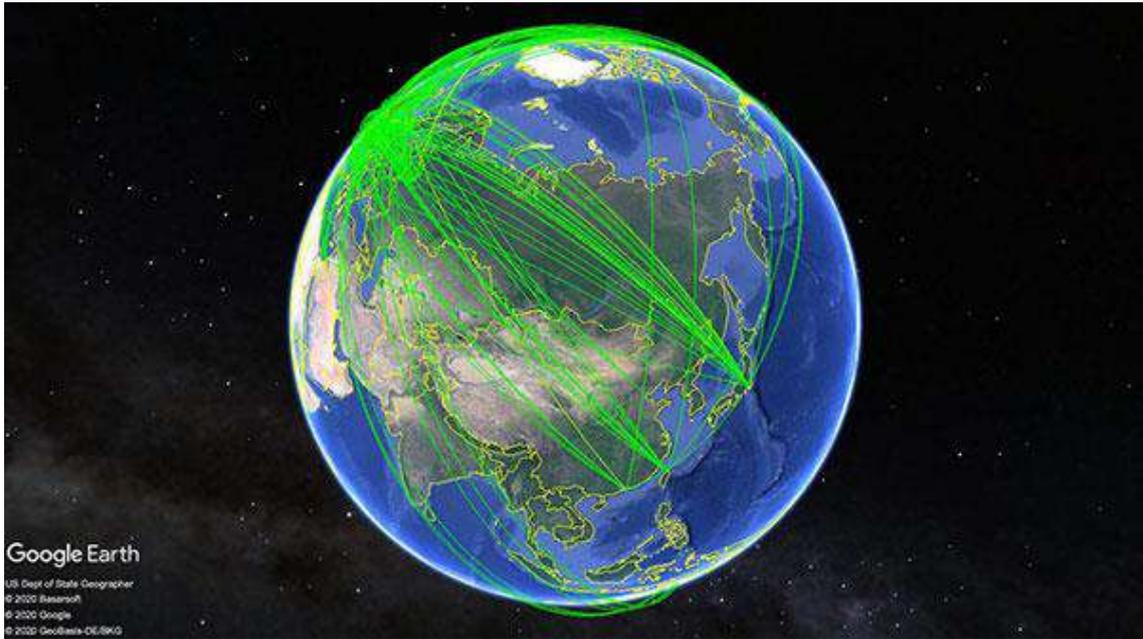


図2 Google Earth を用いた ATLAS 実験の Worldwide LHC Computing モニター。世界規模で分散した計算資源を接続して仮想的な大規模なひとつの計算機として稼働している。緑色の線はデータのやりとりを示す。本センター(東京)もグリッドの中で LHC データ解析を行っている。

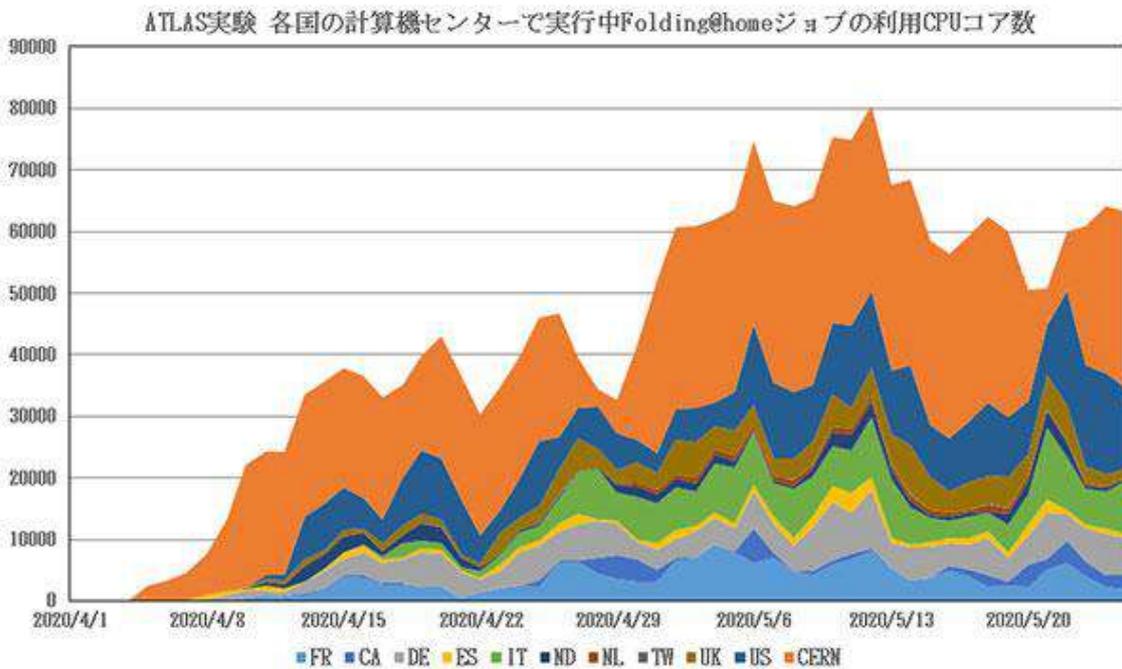


図3 各国の ATLAS 実験に参加する計算機センターが Folding@home ジョブのために利用した CPU コアの数。Folding@home プロジェクトへは 4 月初旬に参加し

始めた。本センターは FR グループに所属している。CERN チームとしてはこの約 3 倍の計算資源を提供している。

英語原文

CERN contributes computers to combatting COVID-19

<https://home.cern/news/news/cern/cern-contributes-computers-combatting-covid-19>

日本語原文

<http://www.icepp.s.u-tokyo.ac.jp/information/20200617.html>

文 JST 客観日本編集部