



スパコン「富岳」による ウイルス飛沫・エアロゾルの シミュレーション

坪倉 誠 | 理化学研究所計算科学研究センター／
神戸大学大学院システム情報学研究科



世界中で急速に感染拡大した新型コロナウイルスは、我々の生活を一変させた。この未知のウイルスはどのような経路から人に感染し、広がっていくのか？ さまざまな情報が錯綜する中、我々はマスコミから入ってくるニュースと行政機関の方針に基づいて行動するしかなかった。当初はWHO（世界保健機関）さえマスクの感染予防効果については懐疑的であったのは記憶に新しい。こんなに身近なマスクでさえ、科学的根拠に基づく情報が不足していたのである。このようなコロナ禍の中、スーパーコンピュータ富岳は感染に対する細心の注意をはらって理化学研究所計算科学研究センターへの設置が進められ、2020年5月13日にすべての筐体の搬入が完了した。それに先立つ4月7日、理研と文部科学省は連携して、富岳の計算資源の一部を新型コロナウイルスの対策に貢献する研究に供出することを発表した。このニュースを聞いた研究メンバの一人が、「我々も何かできないか？」とSlackに投げかけたのが、活動のきっかけである。我々は京や富岳といったハイエンドスパコンの能力を有効活用して、熱・流体・構造変形に関する複雑・複合現象を高精度かつ高速にシミュレーションする技術の研究とその産業展開を進めてきた。何ができるか？ 早速Slack上で議論が進み、すぐに飛沫シミュレーションが思いついた。ただ、治療薬候補同定やたんぱく質動的

構造予測といったすでに採択されている課題と比較すると、飛沫の研究はなんとも地味に思え、提案しても採択されるのか？ 貴重な富岳の資源を用いて結果を公表した際、批判をされないか？ さまざまな不安が胸をよぎった。しかし盲目的な恐れや根拠のない侮りが社会に蔓延するのを見たとき、アカデミックなインパクトは薄くても、飛沫を目に見える形にして社会に発信するだけでも、感染拡大の防止に向けた啓発につながると思い直した。Slackで最初に議論してから数日後にはテレビ会議が開催され、産学連携の研究チームが発足した。

飛沫の解析をする場合、飛沫の液相とその周りの気相を連成させたシミュレーションを行う必要がある。我々のフレームワーク（基本的な構造）では、飛沫の周りの空気についてはナビエストークス方程式を空間に固定したオイラーメッシュで離散化し、解析を行う。データ構造としては、新たなコンピュータアーキテクチャや超並列環境（数万を超えるような演算器が並列に動作する環境）でのチューニングが容易であること、産業界で見られる複雑形状に対して柔軟かつ高速に計算モデルが構築できることを考慮して、Building Cube Methodと呼ばれる階層直交格子を採用している。現在までに短期間に数多くの解析対象とケースについて迅速に対応できたのは、これによるところが大きい。一方、飛沫

については、粒子の一つひとつに対して運動方程式を立ててラグランジュ的に解析する。ここでは飛沫の飛散における空気抵抗はもちろんのこと、周囲空気との相互作用に伴う液滴の蒸発や、固体壁面近傍での液滴の反射や付着といった現象をモデル化して組み込んでいる。これはもともと自動車エンジンのシミュレーション用に開発したものであった。

富岳は、2020年6月のISC^{☆1}でTOP500において1位を獲得したほか、HPCG, HPL-AI, Graph500でも1位を獲得し、四冠を達成した後、11月のSC^{☆2}においても引き続き2期連続の四冠を達成している。流体シミュレーションは、さまざまなアプリケーションの中でメモリアクセス数と演算数の比(B/F比)が相対的に高く、CPU単体性能が引き出しにくいアルゴリズムである。我々のシミュレーションフレームワークCUBEも現在は単体ピーク性能比(CPU単体での性能)7%程度にとどまっており、これについては現在もチューニング中である。一方、並列性能については、ウィークスケーリング^{☆3}で27,648個のCPUを用いて90%強、217億セル(計算格子)規模で4.5PFLOPSと高い性能を示している。このアプリケーション性能をもってすれば、マスクの繊維の一つひとつを再現してマスク内での飛沫の分裂も考慮したケーパビリティコンピューティング^{☆4}が可能である。ただし我々はあえてその方向には向かわなかった。社会に求められているのは、さまざまなシチュエーションで飛沫感染リスクを評価し、その対策に資する科学

的根拠となるデータを数多く迅速に生み出すこと、すなわちキャパシティコンピューティングであると感じた。

図-1はCUBEを用いて飛沫解析を行った一例であり、咳をして4.5秒後の飛沫の様子をサイズを色分けして示している。飛沫は5ミクロンより大きな飛沫とそれより小さなエアロゾルに分けることができ、前者は1メートル以内にほぼ落下してしまうが、後者は長時間空中をさまよう。大きくこの2つへの個別の対策が必要であり、万能な対策はあり得ない。後者に対しては外部空気の導入や高性能フィルタによる除去が必要であり、室内の換気性能を高精度に評価する必要がある。当初予定していなかったこのようなシミュレーションについては、室内環境の専門家の助言を受けてシミュレーション手法を急ぎよ構築した。図-2はこの手法を用いた旅客機キャビンの換気性能評価である。

当初は、迅速な成果創出による社会経済活動の早期回復への貢献を目標として、オフィス、病室、教室、通勤電車をまずはターゲットとして活動を開始した。5月初めのことで第1波が過ぎた後、社会では緊急事態宣言の解除が議論され始めたころである。こういった研究プロジェクトではあり得ないことであるが、ひと月後にはなんとしてでも中間成果をまとめ、解除後の人々の社会復帰に際して有用な情報を発信したかった。富岳の豊富な計算資源がこれを可能に

☆1 International Supercomputing Conference. 毎年初夏にヨーロッパで開催されているスーパーコンピューティングの会議。

☆2 Supercomputing Conference. AEM (Association for Computing Machinery) と IEEE Computer Society が主催しているスーパーコンピューティングの国際会議。年に一度、秋にアメリカ合衆国で開催される。

☆3 アプリケーション(ソフトウェア)の並列性能を評価する方法の一つ。1プロセッサで実行する問題規模を一定にして、並列数を増やすに従って問題規模を大きくして性能評価を行う。

☆4 科学計算の内容は大きく、キャパシティとケーパビリティに分類できる。キャパシティコンピューティング(多重ケース処理型計算)の場合、比較的小さな規模の計算を膨大に流す。ケーパビリティコンピューティング(大規模単一問題型計算)の場合、計算機のスペックをフルに使い、大規模な単一問題を扱う。

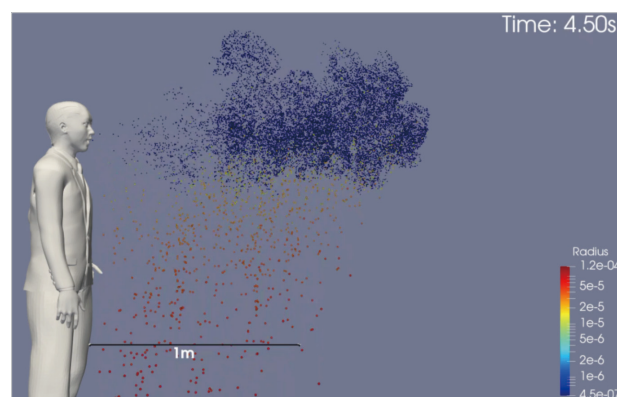


図-1 咳をして4.5秒後の飛沫飛散の様子

したことは言うまでもない。その後現在は、内閣府、国交省、文科省、神戸市とも連携して、ターゲットを多目的ホール、ライブハウス、カラオケボックス、

居酒屋、野外活動、タクシー、航空機、バス、救急車に拡張し、感染リスクの評価と対策提案を進めている。大きく制限された我々の活動を再開するとき、感染防止に向けたガイドラインの策定や改訂が必要となるが、そのためのデータを提供するのである。活動を進めるにあたって、現在、10以上の企業、7つの国内外の大学と連携を行っている。活動当初は、半年後の12月末には感染も収束し、我々のチームも解散と思っていたが、今日現在、第3波が猛威を振るっている。感染拡大が一日も早く終息することを願ってやまない。

(2020年11月29日受付)

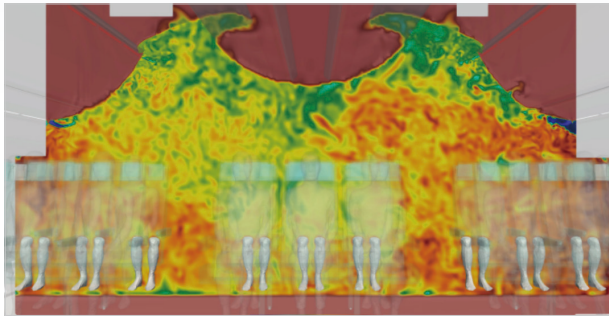


図-2 航空機内の換気評価（赤：汚染空気，青：清浄空気）。換気後30秒後と100秒後を可視化
(協力：日本航空，豊橋技科大，東工大)

坪倉 誠 tsubo@tiger.kobe-u.ac.jp

1997年東京大学大学院工学系研究科博士課程修了，博士（工学）。東京工業大学，電気通信大学，北海道大学を経て2015年より神戸大学教授。また，2012年より理化学研究所計算科学研究センターチームリーダーを兼務。

