

新型コロナウイルスを含む感染症対応 HPCI 臨時公募課題について

令和3年4月7日より、昨年度に引き続き、HPCI^(*)共用計算資源を利用し、新型コロナウイルス対応の研究開発を支援する臨時公募課題の募集を開始しました。

令和3年度は対象とする研究の範囲を拡大し、新型コロナウイルスのみならず感染症対策全般に関する研究を対象とし「新型コロナウイルス対応を含む感染症対応 HPCI 臨時公募課題」を募集し、スーパーコンピュータを活用した感染症対策の推進を支援します。

高度情報科学技術研究機構(理事長 田島保英)は、文部科学省委託事業「HPCIの運営」代表機関として、関連機関の協力を得て「富岳」を除くHPCI共用計算資源を用いた「新型コロナウイルスを含む感染症対応 HPCI 臨時課題」の随時募集を令和3年4月7日(水)より開始しました。

なお、「富岳」を利用する研究課題については、令和3年度B期募集において一般課題の重点分野に「感染症対策に資する研究開発」を設定し、同様の課題を募集しています。

新型コロナウイルス感染症(COVID-19)対策においては、「治療」「防疫」「創薬」「感染拡大に関わる分析・予測」など広範な研究が急務であり、スーパーコンピュータの持つ高速な計算能力、大規模なデータ処理能力の活用が期待されています。

HPCIシステムでは、令和2年度より学术界、産業界を問わず、新型コロナウイルス対策に資する研究のために「富岳」を除くHPCI共用計算資源を利用する課題を募集して参りました。令和2年度は16件の応募があり、添付1に示す14件の課題が採択され、緊急性の高い研究で成果があげられています。令和3年度も引き続き各機関のご協力を得て、多様なスーパーコンピュータ資源を無償で提供する臨時の公募を行います。これにより新型コロナウイルスを含む感染症対策の推進に貢献します。

募集の概要、スケジュールは以下の通りです。募集に関する詳細は、HPCIポータルサイトの募集ページ(https://www.hpci-office.jp/pages/hpci_infect)をご覧ください。

<課題募集の概要>

募集名称	: 新型コロナウイルスを含む感染症対応 HPCI 臨時課題募集
募集対象	: 新型コロナウイルスを含む感染症に関する研究・対策に資する活動で計算資源を必要とする課題
計算資源	: 下表「利用可能な HPCI 共用計算資源」参照
募集開始	: 令和3年4月7日
申請受付開始	: 令和3年4月14日、以降随時受付
利用期間	: 令和4年3月末までの最長1年間
利用料金	: 無償
利用回数	: 同一テーマによる複数回の利用不可
審査結果	: 審査は迅速に行い速やかに結果をお知らせ(申請受付後、1ヶ月程度)
利用報告書	: 課題終了後60日以内に利用報告書を提出、HPCIポータルサイトで公開
成果公開	: 査読付き論文等による成果公開を義務としないが、課題の性質上、得られた成果を速やかに論文やプレスリリース等で発表することを期待

<利用可能な HPCI 共用計算資源>

	協力機関(資源提供機関)	計算資源
1	北海道大学 情報基盤センター	Grand Chariot / Polaire
2	東北大学 サイバーサイエンスセンター	AOBA-A(SX-Aurora TSUBASA) / AOBA-B(LX406Rz-2)
3	筑波大学 計算科学研究センター	Cygnus
4	最先端共同 HPC 基盤施設 (JCAHPC)	Oakforest-PACS
5	東京大学 情報基盤センター	Oakbridge-CX / Wisteria-O (Odyssey)
6	東京工業大学 学術国際情報センター	TSUBAME3.0
7	名古屋大学 情報基盤センター	不老 Type I サブシステム (FX1000) / 不老 Type II サブシステム CX2570
8	京都大学 学術情報メディアセンター	システム A (Cray XC40)
9	大阪大学 サイバーメディアセンター	SQUID / OCTOPUS
10	九州大学 情報基盤研究開発センター	スーパーコンピュータシステム ITO
11	海洋研究開発機構 地球情報基盤センター	地球シミュレータ (ES4)
12	産業技術総合研究所 柏センター	AI 橋渡しクラウド ABCI
13	東京大学 情報基盤センター (東拠点) / 理化学研究所 計算科学研究センター (R-CCS) (西拠点)	HPCI 共用ストレージ

(*) HPCI(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)

文部科学省が整備した日本が誇る強力な研究基盤。理化学研究所に設置されている「富岳」を始め、国立大学・国立研究開発法人に設置されているスーパーコンピュータ(「HPCI 共用計算資源」という)等を高速ネットワークで結び、多様なユーザーニーズに応える革新的な共用計算環境を提供している。詳細は、HPCI ポータルサイト (<https://www.hpci-office.jp/>)をご覧ください。

なお、今回の募集では「富岳」を除く HPCI 共用計算資源が対象です。

◆問い合わせ先

一般財団法人高度情報科学技術研究機構 神戸センター 広報部 内山、三村

〒650-0047 神戸市中央区港島南町 1-5-2

TEL: 078-599-9511 FAX: 078-599-9513

E-mail: koho@hpci-office.jp

ヘルプデスク:

TEL: 078-940-5795 FAX: 078-304-4959 E-mail: helpdesk@hpci-office.jp

添付 1: 新型コロナウイルス感染症対応 HPCI 臨時課題募集 選定課題一覧(令和 2 年度)

課題番号	利用研究課題名	研究課題代表者名	所属機関名	国名	利用計算機施設名		配分ノード時間数
hp200142	COVID-19 ウイルスの RNA ポリメラーゼと阻害薬候補の分子動力学シミュレーション	奥村 久士	自然科学研究機構・分子科学研究所	日本	東京工業大学 学術国際情報センター	クラウド型ビッグデータグリーンスーパーコンピュータ「TSUBAME3.0」	18,000 ノード時間
hp200145	COVID19 ナノポアシーケンスデータを用いた RNA 塩基修飾の詳細解析	上田 宏生	東京大学先端科学技術研究センター	日本	産業技術総合研究所	AI橋渡しクラウドインフラストラクチャ「ABC」	14,000 ノード時間
hp200146	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	望月 祐志	立教大学理学部化学科	日本	最先端共同 HPC 基盤施設(JCAHPC)	Oakforest-PACS	100,000 ノード時間
hp200147	新型コロナウイルスのスパイクタンパク質に関するフラグメント分子軌道計算	望月 祐志	立教大学理学部化学科	日本	九州大学 情報基盤研究開発センター	ITO サブシステム A <ノード固定>	75,000 ノード時間
hp200148	計算機解析による SARS-CoV-2 増殖阻害化合物の探索	星野 忠次	千葉大学・薬学研究院	日本	東京大学 情報基盤センター	Oakbridge-CX	34,560 ノード時間
hp200149	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	久田 俊明	株式会社 UT-Heart 研究所	日本	最先端共同 HPC 基盤施設(JCAHPC)	Oakforest-PACS	336,000 ノード時間
hp200151	SARS-CoV-2 関連タンパク質の高精度立体構造モデリング	石田 貴士	東京工業大学大学院情報理工学研究所	日本	東京工業大学 学術国際情報センター	クラウド型ビッグデータグリーンスーパーコンピュータ「TSUBAME3.0」	3,000 ノード時間
hp200152	COVID-19 エンドリボヌクレアーゼのオリゴマー化阻害剤開発	北尾 彰朗	東京工業大学生命工学院	日本	東京工業大学 学術国際情報センター	クラウド型ビッグデータグリーンスーパーコンピュータ「TSUBAME3.0」	18,000 ノード時間
hp200153	新型コロナウイルス表面のタンパク質動的構造予測	杉田 有治	理化学研究所・杉田理論分子科学研究室	日本	最先端共同 HPC 基盤施設(JCAHPC)	Oakforest-PACS	350,000 ノード時間
hp200154	室内環境におけるウイルス飛沫感染の予測とその対策: 富岳大規模解析に向けたケーススタディ	坪倉 誠	神戸大学大学院システム情報学研究科	日本	東京大学 情報基盤センター	Oakbridge-CX	172,800 ノード時間
hp200155	分子動力学計算に基づく新規作用機序を示す COVID-19 治療薬の同定	奥野 恭史	京都大学・医学研究科	日本	筑波大学 計算科学研究センター	Cygnus	47,000 ノード時間
hp200156	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	重田 育照	筑波大学計算科学研究センター	日本	筑波大学 計算科学研究センター	Cygnus	16,000 ノード時間
hp200157	Spreading of polydisperse droplets in a turbulent puff of saturated exhaled air	Marco Edoardo Rosti	Okinawa Institute of Science and Technology Graduate University	日本	東京大学 情報基盤センター	Oakbridge-CX	110,400 ノード時間
hp200158	マルチエージェントシミュレーションを用いたウイルス伝播に対する感染率低減効果と移動制限効果の網羅的分析	大西 正輝	産業技術総合研究所・人工知能研究センター	日本	産業技術総合研究所	AI橋渡しクラウドインフラストラクチャ「ABC」	30,000 ノード時間