

## 第5回 スーパーコンピュータ「富岳」シンポジウム 富岳百景 質問回答一覧

2025年12月25日開催シンポジウムの講演内容へのご質問をありがとうございました

\*本一覧は2025年12月25日～2025年1月5日の質問受付期間に、

質問フォーム・zoomチャット(配信当日のみ)・SNS(X)投稿(指定タグ #富岳百景シンポ25)からお寄せいただいた質問の中から一部を選定し回答を公開するものです。

=質問と回答=

講演1：「富岳」が捉えた万博のゲリラ豪雨	1
講演2：生体分子の実験データをシミュレーションで「見える化」する	1
講演3：「富岳」とAIで挑む素粒子の謎～格子QCDシミュレーションによる未知の現象探索～	2
パネルディスカッション：「富岳」の最前線と未来予想図－研究者と語る1時間－	2～4
その他：スーパーコンピュータ「富岳」に関する質問	4

セッション1 「富岳」政策対応利用課題から

### 講演1：「富岳」が捉えた万博のゲリラ豪雨

(理化学研究所 R-CCS データ同化研究チーム チームプリンシパル 三好 建正 氏)

#### Q1 質問：

観測機器（レーダー）から「富岳」までデータ転送を3秒で済ませたとのことですが、データ転送を高速に行うために、どのような工夫をされましたか？

#### A1 回答：

東京オリンピック・パラリンピックの際に独自に開発したデータ転送を行うソフトウェア JIT-DT を改修しました。

今回は総務省のプロジェクトでデータを圧縮してデータ転送するシステムを新たに開発して運用しました。

(回答者：理化学研究所 R-CCS データ同化研究チーム チームプリンシパル 三好 建正 氏)

セッション2 「富岳」成果創出加速プログラム課題から

### 講演2：生体分子の実験データをシミュレーションで「見える化」する

(埼玉大学大学院 理工学研究科 准教授 松永 康佑 氏)

#### Q1 質問：

研究に使うAIは自分自身で作ったりするんですか？

#### A1 回答：

ご質問ありがとうございます。既存のAI(例えばAlphaFold)を使うこともありますし、なければ自身で手法開発を行ってAIモデルを自作することもあります。

自作する場合は、目的のタスク・データに対して、どのニューラルネットワークの構造が有効かを検討し、既存のネットワークを少し改良して使うことが多いかなと思います。

我々の分野の場合はプログラムを書くのも1つの専門技術ですので、日々そうやってコーディングしていることが多いです。

(回答者：埼玉大学大学院 理工学研究科 准教授 松永 康佑 氏)

**Q1 質問：**

計算の誤差が0.3%とお話しされたその少し後の内容で、素粒子の世界では精度が足りないように話しておられましたが、具体的に何がどの程度であるのがボーダーラインなのでしょうか。お教えいただけましたら幸いです。

**A1 回答：**

素粒子標準模型を超える物理現象の発見には、標準模型の予言値と、実験結果および格子QCD計算を組み合わせて求めた値の間に、確実なズレがあることを示すことが重要です。

素粒子物理学では、2つの量に確実なズレがあると判断する標準的な基準として、5標準偏差以上が採用されています。

5標準偏差以上の違いとは、2つの量の誤差をそれぞれ二乗して足したもの平方根で、2つの量の差を割った値が、5以上になることを指します。

私たちの誤差0.3%の結果を使った $|V_{us}|$ の場合、標準模型の予言値とのズレは2標準偏差程度なので、まだその基準に達しておらず、更なる結果の精度向上が重要となっています。

(回答者：筑波大学 数理物質系 准教授 山崎 剛 氏)

**Q1 質問：**

アミノ酸の配列からタンパク質の折りたたみの形が決まるのは、生物がそういう性質をもつタンパク質だけを利用しているからではないかと思うのですが如何でしょうか。もしもそうならば、勝手なランダムなアミノ酸配列を持つタンパク質はアルファフォールドでは上手く予測出来ないのでないかと思いますが、如何でしょうか

**A1 回答：**

素晴らしいご指摘ありがとうございます。まさにその通りで、天然に存在するタンパク質は、長い進化の歴史の中で「きちんと特定の形に折りたまれるもの」が選りすぐられています。

実際、適当にランダムな配列を作っても、多くは決まった形にならず、グチャグチャの状態や、変な塊（凝集）になってしまします。AlphaFoldは優秀なので、そういう配列に対しては「これは決まった形をとりません（信頼度が低い）」という結果を返してきます。つまり、「形が定まらない」ことを見抜く力がある程度あります。

ただ、ここからが面白いところで、最近の研究では「あえて決まった形を持たず、ゆらゆらと動いている」天然のタンパク質もたくさんあり、それが生命にとって重要だと分かってきました。AlphaFoldは「ひとつの形」を出すのは得意ですが、そういう「動き回る構造の集まり（構造集団）」を捉えるのは苦手です。

それをシミュレーションと実験で明らかにするのが、我々が「富岳」で行っている研究の一つとなります。

(回答者：埼玉大学大学院 理工学研究科 准教授 松永 康佑 氏)

## Q2 質問：

タンパク質の結合の種類とかでどのくらい運動したらちぎれるとか、働く力でヘミアセタール構造のような変質もシミュレートできるのでしょうか？

## A2 回答：

鋭い質問をありがとうございます。今回、お見せした一般的な分子動力学シミュレーションでは、古典力学の範疇で計算しているため、原子と原子は「バネ」のようなもので繋がっていると仮定していて、どれだけ強く引っ張っても、基本的には「ちぎれない」設定になっています。あくまで分子全体の形がどう歪むかを見るのが得意な手法となっています。

しかし、ご質問にあるヘミアセタールのような「化学反応」が起こる瞬間や、力がかかってブチッとちぎれる瞬間を見たい場合は、量子化学計算という、電子の動きまで計算するより精密な手法を使います。ただ、この計算はものすごいパワーが必要になります。そのような場合にもやはり「富岳」のようなスパコンをすることで、単に形が動くだけでなく、そういった化学反応の瞬間も含めた、よりリアルな生命現象の解明に挑むことができるようになると期待されます。

また、最近では量子化学計算を近似的に模倣する AI 手法も登場しており、近似計算が劇的に速く行えるようになっており、こちらの進展も重要です。

(回答者：埼玉大学大学院 理工学研究科 准教授 松永 康佑 氏)

## Q3 質問：

過去のスパコンから「富岳」に変わって感じた違いが気になります。

## A3 回答：

私が専門とする材料の摩擦に関する学問分野においては、スパコンを活用しない場合には、摩擦係数などの材料の物性値を求める研究が限度でした。

これに対して、「富岳」以前のスパコンを活用することで大規模な計算ができるようになり、材料の物性推算のみならず、材料の劣化や破壊に結びつく「摩耗現象」の研究ができるようになりました。

さらに、より大規模計算が可能な「富岳」を活用することによって、腐食摩耗という「腐食現象」と「摩耗現象」が複雑に絡み合ったより難解な現象を研究することが可能になりました。

つまり、過去のスパコンから「富岳」に発展したことで、多様な現象が複雑に絡み合った、より難解な現象の材料シミュレーションが実現できるようになりました。

(回答者：東北大学 金属材料研究所 教授 久保 百司 氏)

#### Q4 質問：

計算結果はでたが、人間が理解できないという事態になったら、どうしますか？

#### A4 回答：

本質を突いた素晴らしいご質問をありがとうございます。本質問は、まさに現在の学術研究におけるホットトピックの一つです。研究者はご指摘のような課題に日々直面しながら、研究を進めています。

高忠実に支配方程式を再現する数値シミュレーションでは、あらゆる時空間におけるあらゆる物理量を取得することが可能です。様々な基礎研究の積み重ねに加え、「富岳」に代表されるスーパーコンピュータの登場により、従来は取得が困難であったケースにおいても、高忠実なデータが得られるようになりつつあります。これは計算科学のフロンティアを大きく拡張する、極めて重要な研究成果です。

一方で、特に流体現象は高次元かつ複雑な非線形現象であり（本日の講演で触れた「ノートとペンだけでは方程式を解けない」という点に起因します）、得られた結果の物理的理 解や解釈が容易でない場合も少なくありません。すなわち、ご質問でご指摘いただいた点そのものが、計算科学研究の最前線における大きな学術的課題となっています。

本日の講演では、この点に関する研究内容を紹介することはできませんでしたが、高次元かつ複雑な非線形現象をいかに理解・解釈するかという課題に対して、データ駆動科学（AI・機械学習を含む）の研究が、我々を含め世界中で活発に進められています。研究者としては、ご質問にあるような「理解ができない」事態を回避すべく、こうした手法を用いた新たな理解・解釈の枠組みを構築したいと考えています。なにしろ、支配方程式を高忠実に再現した、あらゆる時空間のデータにアクセスできる状況が、すでに整いつつあるのですから。

（回答者：東北大学大学院 工学研究科 航空宇宙工学専攻 教授 河合 宗司 氏）

#### その他

#### スーパーコンピュータ「富岳」に関する質問

#### Q1 質問：

「富岳」活用では各研究テーマが計算リソースを共有されていますが、リソースの割り当てでご研究者同士が工夫されていることがあるのでしょうか？

#### A1 回答：

計算リソースの活用は大きな問題です。

計算時間は水のように貯めておくことができないので、使いそこなった時間は永久に戻ってきません。

また「富岳」や「京」のような超並列計算機では、ジョブごとに必要なノード数が違うので、空いているノード数が足りないと、順番が来ても計算を始められません。各課題には厳正な審査により計算資源がノード時間（ノード数×使用時間）で配分されており、その範囲でジョブを投入します。「富岳」の運用システムは、多くのユーザの要求に基づいて最適な計画を自動的に立てて実行しています。「富岳」のノード利用率は85%にも達しています。

（回答者：一般財団法人 高度情報科学技術研究機構 サイエンスアドバイザー 小柳 義夫 氏）

## Q2 質問：

「富岳」の規模感とか性能って我々が普段使う一般的なコンピュータの何倍くらいあるんですか？

## A2 回答：

最新のノートパソコンの性能は 100～300 GFlops 程度です。

浮動小数演算を 1 秒間に 1000 憶～3000 憶回実行できる性能で、パソコンでも、初代のスーパーコンピュータと言われる Cray-1 (クレイワン、1976 年) の 1000 倍を超えてます。

「富岳」の性能は 400～500PFlops で、1 秒間に 40 京～50 京回の演算ができるので、ノートパソコンのざっと百万倍というところでしょう。Cray-1 から見れば 10 億倍以上です。

(回答者：一般財団法人 高度情報科学技術研究機構 サイエンスアドバイザー 小柳 義夫 氏)

## Q3 質問：

三人寄れば文殊の知恵と言うけど、何万人くらい動員すれば「富岳」と張り合えるのだろうか

## A3 回答：

「富岳」の 1 回の浮動小数演算とは、14 行もの数の加減乗除です。

私など、加算はともかく乗算など 1 日掛けても正しい答えが出るかどうか自信がありません。

でも仮に 1 秒で出来るとしましょう。前の質問の回答にもあるように、「富岳」は 1 秒間にそういう計算を 40 京回 (1 億回の 40 億倍) 実行できます。全世界の人口を 80 億人として、その 5 千万倍です。宇宙人を動員しても「富岳」とは張り合えません。

AI の発展により今後は分かりませんが、今のところ創造力や直観力では人間の方が上です。

(回答者：一般財団法人 高度情報科学技術研究機構 サイエンスアドバイザー 小柳 義夫 氏)

以上