



2016年9月2日

京×産業 シンポジウム

～つながりが未来をひらく～

報告書



コンソーシアム型産業利用課題が生み出す
シミュレーションの価値



理化学研究所 計算科学研究機構
RIKEN Advanced Institute for Computational Science

京×産業シンポジウム ～つながりが未来をひらく～

日時:2016年9月2日(金)13:00~17:00

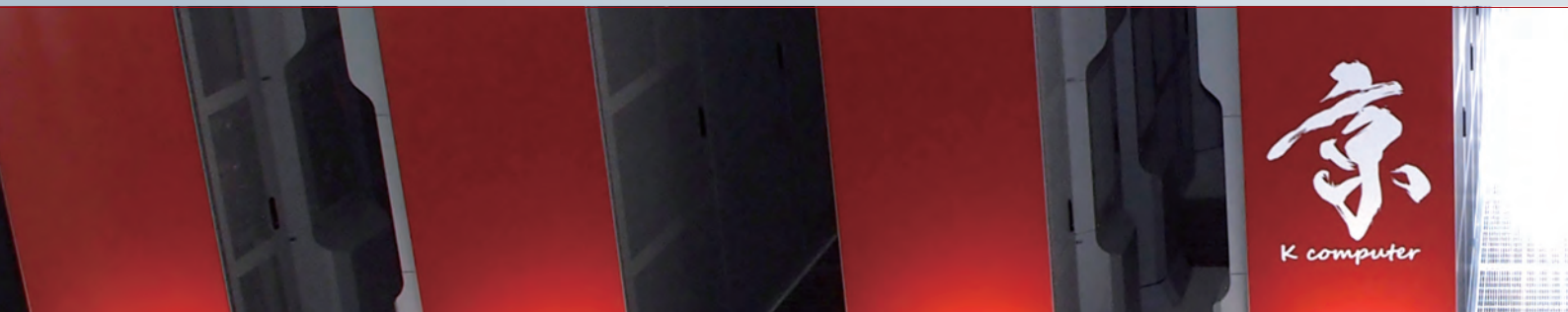
場所:秋葉原 UDXカンファレンス 6階ルームA+B+C(東京都千代田区外神田4-14-1)

主催:理化学研究所計算科学研究機構、高度情報科学技術研究機構

後援:文部科学省、日本経済団体連合会、経済同友会、日本商工会議所、HPCIコンソーシアム、
スーパーコンピューティング技術産業応用協議会、計算科学振興財団

参加費:無料

参加者数:150人



CONTENTS



エグゼクティブサマリー ————— 03

主催者あいさつ ————— 04

講演会報告

バイオグリッドスパコン創薬コンソーシアム
前田 能崇 ————— 05

HPC自動車コンソーシアム
農沢 隆秀 ————— 07

建築CFDコンソーシアム
近藤 宏二 ————— 09

FMO 創薬コンソーシアム
小沢 知永 ————— 11

自動車工業会
梅谷 浩之 ————— 13

パネルディスカッション ————— 15
つながりが未来をひらく

まとめ ————— 19



エグゼクティブサマリー

Executive Summary

スーパーコンピュータ「京」の本格運用は2012年秋に始まり、それからの5年間に、産業利用課題の割合は次第に増えてきました。その中には、同業種（さらには異業種）の企業が集まってコンソーシアムを結成し、課題に取り組むものもありました。高い計算性能をもつ「京」を使いこなすためのソフトウェア開発にはかなりの努力が必要なため、各社が競争するよりも、協力してソフトウェアを開発し、業界の共通基盤として利用しようという機運が生まれたのです。そこで、2015年度から「コンソーシアム型課題」という利用枠が設けられ、一企業で行う課題よりも多くの計算資源を使えるようになりました。

本シンポジウムは、コンソーシアム型産業利用課題の成果とその価値を広く一般の方にお伝えするとともに、さまざまな業界の方々にも、コンソーシアム型産業利用課題への理解を深めていただくことを目的として開催されました。

まず、現在進行中の5件の課題の成果が、各コンソーシアムのメンバーの代表から発表されました。

製薬企業をおもなメンバーとする「バイオグリッドスパコン創薬コンソーシアム」と「FMO創薬コンソーシアム」は、創薬の最初のステップである「病気の原因タンパク質に結合する化合物の探索」のために、「京」を利用したシミュレーションの技術開発に取り組んでいます。用いている手法は異なりますが、どちらも、技術開発の成果を共有した上で各社が薬を開発することで、開発費・開発期間の削減が可能になると期待されています。

自動車メーカーをメンバーとする「HPC自動車コンソーシアム」は、自動車のまわりの空気の流れを詳細

に解析する技術を開発し、これまで知られていなかった車体構造と空気の流れの関係を明らかにするなど、数々の成果をあげてきました。また、「自動車工業会」の課題では、これまでに各社が使ってきた市販ソフトウェアを「京」に移植し、より大規模なシミュレーションを行うための開発を行っています。これらの成果は、自動車設計におけるシミュレーションの位置づけが今後大きく変貌することを予想させるものです。大手建設会社が参加する「建築CFDコンソーシアム」では、実際の市街地上や、複雑な形状の建築物のまわりなど、風洞実験ではデータが得にくい風の流れのシミュレーションに取り組んでいます。また、コンソーシアムならではの研究として、シミュレーションのデータを高層建築物等の性能評価に利用できるようにするための法整備に向けての検討も行っています。

各講演では、1社だけではハードルが高い課題にコンソーシアムで取り組むことができ、有用な成果が得られたこと、企業間、産学間の交流が深まったことなどの利点が報告された一方で、コンソーシアムに参加する企業間の温度差や、基礎研究を共同で行った後、どのようにコンソーシアムで研究を展開していくかといった問題点も指摘されました。

講演の後のパネルディスカッションでは、利点と問題点に加え、ポスト「京」への期待や、今後のコンソーシアムのあり方を巡って会場参加者も加わって議論が交わされました。議論では、「京」がオープンイノベーションのプラットフォームとしての役割を果たしつつあることが確認された一方、ジョブの集中を避ける工夫や、市販ソフトウェアの「京」への移植の支援など、運用上の要望も提出されました。

主催者あいさつ

「京」による

「実験に先行する計算科学」への パラダイム変換

「京」は、この9月末で運用開始からちょうど4年を迎えます。「京」は、さまざまな分野で本当に素晴らしい成果をあげており、計算科学研究機構の外部評価でも、世界の著名な方々から大変に高い評価をいただいています。

「京」は我が国の計算科学を大きく変えました。非常に大規模な計算はもちろん、アンサンブルシミュレーションや多次元空間での最適化などが可能になり、「京」がなければ得られなかった成果がたくさん出ています。

21世紀初頭、スパコンの世界ではベクトル型から超並列のスカラー型マシンへというパラダイム変換が起きました。我が国はそれにちょっと乗り遅れた感がありましたが、「京」が一気に解決し、同時に、超並列マシンに対応するソフトウェアも数多く開発されました。特に、文部科学省の5年間の戦略プログラムが大きな成果をあげ、我が国の計算科学のレベルを一気に引き上げました。我が国は遅れを完全に取り戻して世界に追いつき、今や追い越していると思います。

「京」の出現で、産業界のスパコン利用も大いに変わりました。すでに150社にのぼる企業に「京」を利用させていただいており、全ユーザーの3割が産業界の方です。産学連携も進んでいます。

また、以前は個々のメーカーが独立にスパコンを利用して互いに競い合っていました。が、「京」は大手メーカーのスパコンの100倍以上の性能をもち、専用のソフトウェアの開発も大変なため、互いに協力し合って研究開発を進めようという機運が生まれました。「京」がまさに企業間連携を促しているのです。

実際、自動車、建築CFD、創薬などのコンソーシアムが生まれ、企業が互いに連携を取って基盤研究を行い、新しい価値を創造しようとしています。今日は、その成果を発表していただけたこと、私も楽しみにしています。

最先端のスパコンは国の競争力を左右します。このため、国はポスト「京」の開発に取り組んでおり、理研が開発主体に指定されています。ポスト「京」は、産業界やモノづくりの場でも、さらに高度なシミュレーションを可能にすると思います。

シミュレーションは未来を科学的に予測する手段であり、「経験に追随していた計算科学」から「実験に先行する計算科学」へのパラダイム変換が着実に起きています。「京」の運用とポスト「京」の開発に取り組む計算科学研究機構に対し、今後ともご支援をよろしく申し上げます。



理化学研究所計算科学研究機構
機構長

平尾 公彦



講演会報告



「京」が拓く新しい薬づくり

バイオグリッドスパコン創薬コンソーシアム

前田 能崇 持田製薬株式会社 研究企画推進部 研究IT マネジャー

■ 研究の背景

製薬企業の使命は、優れた医薬品を開発・供給することにより世界の人々の福祉と医療の向上に貢献し、健康で質の高い生活の実現に寄与することです。これを実現すべく、私たち製薬企業は日々研究を進めていますが、最近、新薬の開発にかかる期間や費用が著しく増大しており、薬づくりが難しくなっています。

薬づくりの最初の工程は基礎研究です。期間は2～3年で、数千個の医薬品の卵から先に進めるのはわずか1個、残り途中中止になります。その中止も含めた開発費用は数百億円もかかることがあります。その後、前臨床試験、臨床試験、厚生労働省への承認申請、そして承認取得と続き、全体では、11～15年の歳月がかかり、成功確率は数万分の1程度で、開発費用は数千億円にのぼる場合もあります。

多額な開発費用は製薬企業の経営を圧迫し、製薬企業は、①新しい薬づくりに対する投資がしにくい、②希少疾患薬の開発に踏み出しにくい、③医薬品の価格を下げにくいといった問題を抱えるようになりました。

それらの問題に対し、新たな一筋の光明を与えてくれたのが「京」です。薬づくりに「京」を活用することで、今まで不可能だと思われていた計算が可能となり、より速くより正確により安く、優れた薬品を開発できるようになると期待されています。

■ 研究の概要

ヒトの体は多くの細胞からできています。細胞内にはさまざまなタンパク質が存在し、我々の生命活動を維持するために働いています。その働きが悪くなったり、過剰だったり

すると、病気になることがあります。薬づくりとは、このような病気の原因タンパク質を見つけ出し、そのタンパク質に結合して機能を制御する新しい化合物をつくることです。

このため、薬づくりではまず、原因タンパク質のポケットにしっかりと結合する化合物を探します。この仕事はなかなか難しいものです。その理由は大きく3つ挙げられます。

1つ目は、薬の候補となる化合物の形が無数にあることです。その中からポケットにはまる形の化合物を探すのは、人の目では不可能ですし、普通のコンピュータでも時間がかかり過ぎて無理です。しかし、高い計算能力を有する「京」ならそれが可能となります。

2つ目は、我々の体の中には莫大な数の水分子が存在し、その中でタンパク質は激しく動いていて形がどんどん変わることです。我々はコンピュータの中でタンパク質の3次元構造を発生させ、化合物1個1個も3次元化して、ポケットにはまるかどうかを形と性質の両面から見ていきます。その際に、「京」を使用しないと水分子を計算に含めることは難しく、予測正答率は5%くらいです。

しかし、「京」なら、水分子を計算に含めて、タンパク質と化合物の動きを観測することができ、正答率が50%まで向上することが我々のコンソーシアムで確認されています。さらに、タンパク質と数百個の化合物の結合を正確に計算するのに、普通のコンピュータでは10年以上かかりますが、「京」を全部使って計算すると1週間で完了します。

3つ目は、細胞の中には、化合物、原因タンパク質、水分子以外にも、別のタンパク質やDNAなどがあり、それらが複雑に絡み合っていることです。薬づくりに、そういう周辺環境も考慮する必要がありますが、これも「京」の計算能力をもってすれば、可能となります。

このように、「京」を活用すれば薬づくりの成功確率が



上がると期待されますが、製薬企業各社にはノウハウも計算技術ありません。そこで、各社が協力してノウハウや計算技術を蓄積し、「京」を使えるようになったうえで薬づくりを進めようという考えが生まれ、2012年秋に京都大学の奥野恭史先生を中心にバイオグリッドスパコン創薬コンソーシアムが設立されました。現在、製薬企業の参加は22社で、「京」を用いた計算を実施し、その結果に関して議論を深め、活用を進めています。

■ 今後の展開

我々のコンソーシアムが目指すのは創薬イノベーションです。「京」を用いることで、薬づくりの成功確率を上げ、1品目当たり数年間の開発期間の短縮と、数百億円の費用削減を目指したいと考えています。

さらに、「京」では、タンパク質と化合物の動きを10万分の1秒間しか計算できなかったのですが、ポスト「京」では1000分の1秒間まで計算可能となります。これにより、タンパク質に結合する化合物の正答率は、70%、80%、さらにそれ以上を目指せるようになる予想しています。また、より多くのタンパク質と化合物の組み合わせを計算できるようになることで、化合物の未知の作用や副作用を予測できる可能性にも期待しています。

「京」、さらにはポスト「京」を活用することで、今まで開発が困難であったがん、認知症、精神疾患などの薬づくりに新たな道が開かれ、また、個々の患者さんに最適な

薬を選択できるようになることを目指して、これからも私たちは研究を進めます。

■ 会場からの質問

Q:「京」の利用で薬づくりのコストや期間が短くなるとのお話でしたが、その数字はどうやって予測されたのですか。

A:直接的には、化合物がタンパク質に結合するかの予測正答率が5%から50%になることで、次のステージに進む成功率としては5倍程度向上すると期待しています。それにより、ハズレに費やす労力や期間が少なくなるので、コストも減ると計算しています。さらに、間接的には、副作用が少ないなど最初により候補をつかめれば、最後まで行く確率が高くなると考えて、その効果も加えております。

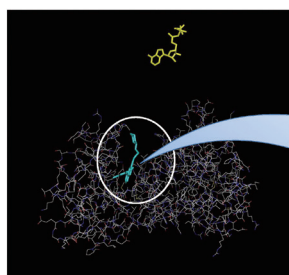
Q:臨床試験の期間は、臨床のルールなどが変わらない限り短くならないということですね。

A:そうです。我々のやっている基礎研究の段階では、その先で落ちないものをつくれるというところまでで、後の期間に関してはルールに縛られる部分が多々あります。

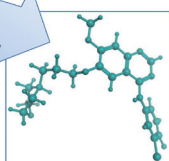
Q:「UT-Heartを用いると心臓に対する副作用があるものを除外できる」といった効果はここには入っていないのですか。

A:入っていません。それを加えるとさらに薬づくりの成功確率は上がってくると思います。

薬づくりのポイント



薬づくりのポイントは、病気の原因タンパク質のポケットにしっかりと結合する化合物をつくること



MOCHIDA PHARMACEUTICAL CO.,LTD. DISCOVERY RESEARCH "Joy Science" We create future innovative drugs. 11

図1 細胞増殖を促すタンパク質のポケットにATP(黄色)が結合すると、細胞が異常増殖する(がんになる)。この抗がん剤(緑)は、ポケットに結合してATPが結合できないようにする。

薬づくりに「京」がもたらす効果

1. 薬の候補となる化合物の形は無数にある
→「京」なら、**より網羅的に**、薬を探せる
2. タンパク質は動いていて、形がコロコロかわる
→「京」なら、**より効率的に**、薬を探せる
3. タンパク質は一種類だけで働いていない
→「京」なら、**より合理的に**、薬を探せる

MOCHIDA PHARMACEUTICAL CO.,LTD. DISCOVERY RESEARCH "Joy Science" We create future innovative drugs. 25

図2 ポケットに結合する化合物を探すのは難しいが、「京」がその困難を解決してくれる。



講演会報告



「京」が拓いた産学連携体制による 次世代自動車空力シミュレーションの開発

HPC自動車コンソーシアム

農沢 隆秀 マツダ株式会社 技術研究所 技監

■ 研究の背景

HPC自動車コンソーシアムは、2011年に、現在、神戸大学にいる坪倉誠教授の呼びかけで発足した日本で初めての自動車関連コンソーシアムです。日本のすべての自動車メーカーと主要サプライヤー、自動車空力研究を行っている大学が集まっています。

設立の動機の1つは、自動車空力CAE (Computer Aided Engineering) 技術の向上です。自動車開発においてCAEはすでに必須のツールとなっており、現状では、メーカー各社がおもに市販のソフトウェアとハードウェアを使っています。しかし、10年後、各社が今の数百倍の性能のスパコンを所有するようになったとき、CAEも大きく変わるはず。そこで、どんなブレークスルーが可能か、みんなで検討する必要が出てきたのです。

もう1つの動機は、各社の交流の場をつくりたいということでした。欧州では、通常は競争関係にある各社の交流がさかんで、深い議論も行われていますが、日本では、なかなかそのような議論がありません。それが、「京」を活用したCAE技術研究をきっかけに、コンソーシアムという形で実現できました。

■ 研究の概要

自動車の空力では、走行中の車体回りの空気の流れを解析します。空力性能だけを考えるのであれば、車体を流線型にすればよいのですが、魅力的で運転者への認知・判断・操作の負担が少ない車をつくるにはデザインの自由度が求められます。従って、空力性能とデザイン性を両立させるには、詳細な流れ構造の解明と、流れをコント

ロールする新技術が必要です。我々は、シミュレーションにより、そこにブレークスルーをもたらしたいのです。

空力解析は、風洞装置内に自動車を置き、一定方向からの風を当てて行われます。しかし、リアルワールドでは、隣の車線をトラックが走ったり、横風が吹いたりするため、車体回りの空気の流れは風洞内の定常状態とは異なります。この現実の空気の流れを捉えるのに、シミュレーションが有効です。

シミュレーションを行うには、まず、その計算単位となる格子を作成します。「京」を使うと、細かい格子で大規模な計算をすることが可能ですが、自動車は形状が複雑なため、手作業で格子をつくると、たいへんな手間がかかります。そこで私たちは、自動車の設計に用いたCADデータをもとに300億セルの計算格子を自動生成する方法を開発しました。

その上で、「京」を使って、さまざまな実走状態のシミュレーションを行いました。実走状態で、車の周りの空気の流れを測定することは困難ですが、シミュレーションなら詳しく計算することができ、これまで謎だった現象が解明されると期待されます。実際、いくつかの発見がありました。

1つは、車が風にあおられて走りが不安定になるとき、空気が車体後方へ回り込んでいるという事実です。加えて、この空気の後方への回り込みは、リヤピラーからの空気の渦を意図的につくれば防ぐことができることもわかってきました。車を安定させる新たな構造のヒントが得られそうです。

また、空気抵抗係数(C_D 値)増大の時間変動の原因も解明できました。タイヤ回りからの空気の流れが車の背面に回り込んで負圧をつくり、空気抵抗を増大させることがわかったのです。また、横風では、抵抗の変動が大き



くなることや、タイヤからの流れが床下を通り抵抗増大に影響するという意外な現象も明らかになり、床下の構造を変えることで、車体後方の流れを変えられる可能性も示されました。

■ 今後の展開

「京」により、車の新しい機能の開発につながる現象が次々に発見されています。次は、これを、自動車設計の変革へとつなげる段階です。しかし、そのためには各社が、今所有しているシステムをレベルアップして、「京」に匹敵するシミュレーションを行える環境を整えなくてはなりません。それは簡単ではありません。

また、実際の計算では、計算格子生成のさらなる高速化も必要です。一方で、格子が緻密すぎると、逆に計算がうまくいかない場合もあるため、リアルワールドを再現するには、計算を大規模化するだけでなく工夫も必要だと感じ始めています。

このような反省はあるものの、新しい機能を持った車の

開発にシミュレーションが役立つことは確信しており、ポスト「京」への期待も見えてきました。自動車には空力以外にも、様々な性能や機能が求められます。要求される性能を総合的に解析し、自動車を開発するのが理想です。そのためには、完成に近い図面の計算格子をつくって計算する前より、もっとやわらかい企画設計の段階で、ラフな設計を行い、各性能や機能の設計を最適化していくことが必要だと考えています。これはポスト「京」なら可能であり、車の開発プロセス自体を変えるのではないかと期待しています。

■ 会場からの質問

Q: プロジェクトで取得したデータのサイズと、そのアップロードとダウンロードにかかった時間はどのくらいだったのでしょうか。データを持ち帰ったのか教えてください。

A: 持ち帰って解析したいとは思いましたが、持ち帰れるサイズではありませんでした。その点は、実用上の課題だと感じます。

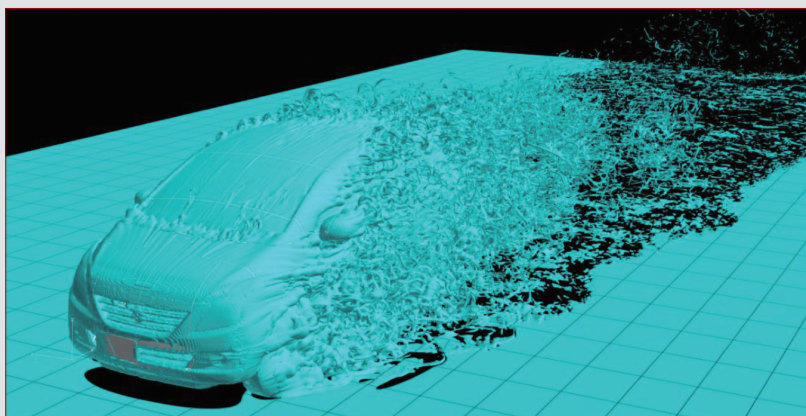


図1 300億セルを用いた空力解析の結果。渦度の等値面を描くことで、乱流場の渦構造を可視化している。本解析では、ドアミラー、タイヤハウスといった車体外部形状を再現しているだけでなく、エンジンルーム内も忠実に再現している。

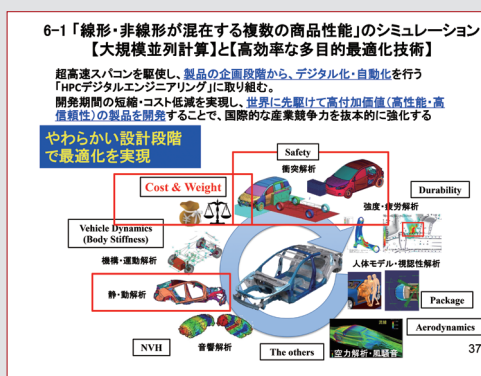
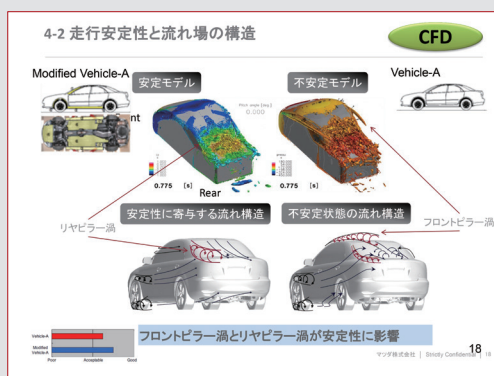


図2(左) 高速での走行時、風にあおられて不安定になる車体と、安定走行できる車体の違い。

図3(右) ポスト「京」への期待。やわらかい設計段階での最適化を実現し、自動車の機能を総合的に評価する。



講演会報告



風の流れのシミュレーション解析による 建築物の快適性・機能性・安全性向上への取組み —建築CFDコンソーシアムの活動—

建築CFDコンソーシアム

近藤 宏二 鹿島建設株式会社 技術研究所 プリンシパル・リサーチャー

■ 研究の背景

風は建築物の安全性、機能性、快適性に関わる重要な因子です。建築物の構造骨組や外装材に加わる風荷重は、その安全性に影響します。また、風によって起こる騒音（風切り音）や扉の開閉障害は、建築物の機能性を損ないます。快適性という点では、建築物が建った結果、ビル風が発生したり、逆に風が通りにくくなったりして、建設地の風環境が大きく変わることもありますし、人間が感じる温熱環境に影響することもあります。こうした問題を未然に防ぐため、対風設計が必要となります。

建築物の設計は一般的に、企画、概略設計、基本計画、基本設計、実施計画の5段階で進められ、各段階で風洞実験や数値流体計算（CFD：Computational Fluid Dynamics）による風の検討が行われます。

CFDが優れている点は、台風や竜巻などの気象スケールから、建築部材まわりの小さなスケールまでを計算モデルに取り入れられること、風洞実験に比べて高解像度の時系列データが得られることです。一方、課題の1つは、対象となる風向数が増えると計算時間が増えるためハード面、ソフト面でのさらなる発展が望まれることです。また、風洞実験が適切な装置と実験方法に従えば、物理的に正しい答えが得られるのに対して、不慣れな人がCFDを行った場合、非物理的な解を出す恐れがあるので、実施者には解の適切さを判断する技量が求められます。このため、その判断基準となるガイドラインが重要となります。

■ 研究の概要

このような課題があるとはいえ、CFDの発展は著しく、これを対風設計に活用しようという機運が高まっています。そのための法整備に向けて、国土交通省の建築基準整備促進事業（基整促）において「S18. 風圧力、耐風設計等の基準への数値流体計算の導入に関する検討」という課題を採択していただき、その実施主体として、東京工業大学の田村哲郎教授を中心に建設各社が集まり、建築CFDコンソーシアムが設立されました。

コンソーシアム形式にしたことで、適正な企業間の競争を維持しつつ、基盤技術の共有と認証制度・法改正への協働がうまく進められています。大学・研究機関がシーズを、企業側がニーズを提供するという仕組みもうまく機能しています。また、業界企業の多くが参画することで業界全体のレベルアップを実現できること、自然のインパクトに対する都市や建築の持続性・脆弱性の共通認識を醸成することにも役立っています。

「京」を利用したシミュレーションでは、精緻な風洞実験で得られたマンションバルコニー部や、オフィスの屋上の目隠し壁にかかる圧力などの詳細が明らかになりました。いずれも風洞実験の結果とシミュレーションの結果がよく一致しており、これをチャンピオンデータとして公開し、実際に建築物の設計に当たる実務者に活用してもらう予定です。

基整促の課題以外でも、各建設会社が「京」などのハイパフォーマンスコンピュータを使ってCFDを行っており、市街地上空に発達する乱流境界層や風に対する地形の影響などをシミュレーションして安全性を検討するなど、成果をあげています。



■ 今後の展開

設計上の要望としては、基本計画段階における建築物の形状や配置の検討をCFDで実施すること、基本設計段階で実施する風荷重評価(36~72の風向について10分間相当のデータを5個以上取得)を風洞実験より短期間かつ低コストで実施できることが挙げられます。

また、CFDでは、風洞実験では実施困難な広域市街地や大規模地形における気流や、建築物細部における気流や圧力の把握も可能になります。さらに、3次元デジタルモデリングとCFDを連動させた新しい設計プロセスへの展望も開けると思います。これにより、風洞実験の弱点を補い、建築物の安全性、デザインの豊かさ、美しさに貢献することが期待されます。

そのためには、高速で使い勝手のよい公開ソフトが開発されるとともに、コンピュータの性能の向上と低コスト化が実現なくてはなりません。性能が現在の100倍ぐらいいなることを期待しています。

■ 会場からの質問

Q:車の場合は実スケールの模型で風洞実験ができますが、建築物は縮小した模型を使うと思います。その結果を実スケールに適用するために、何か工夫をしますか？

A:流体の相似則にレイノルズ数がありますが、縮小した模型を用いた風洞実験では、レイノルズ数を実スケールの建築物と一致させるのは困難です。流れの剥離点が角部に固定される角張った建築物では、レイノルズ数の影響はありませんが、曲面を持つ建築物の場合は、模型の表面に粗さをつけて流れの剥離点をコントロールするといった工夫をします。一方、CFDのメリットは、レイノルズ数を一致させた実スケールのシミュレーションが可能なことですが、現状のコンピュータ性能では難しく、さらに高性能な計算機が必要となります。このため、現在は、風洞実験スケールでシミュレーションを行うのが一般的です。

数値流体計算が対象とする建築分野の業務

数値流体計算(CFD)は、安全性・快適性・機能性の検討に関して様々に活用されている。

- **風荷重(安全性)**
 - 構造骨組や外装材の風荷重評価
- **風環境(快適性)**
 - ビル建設後の風環境評価
- **温熱環境(快適性)**
 - 人体の温熱快適性評価
- **物質拡散(快適性)**
 - 排気、臭気、粉じん等の拡散性状評価
- **空気質(快適性・機能性)**
 - クリーンルームや工場等の空気質評価
- **風切り音(機能性)**
 - 建築部材からの発音評価

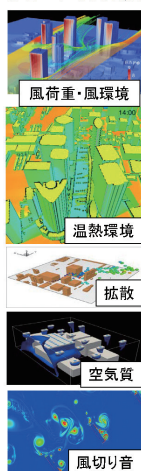


図1 建築分野での数値流体計算

冠壁の風力係数(オフィス棟65°) 基整促「京」利用

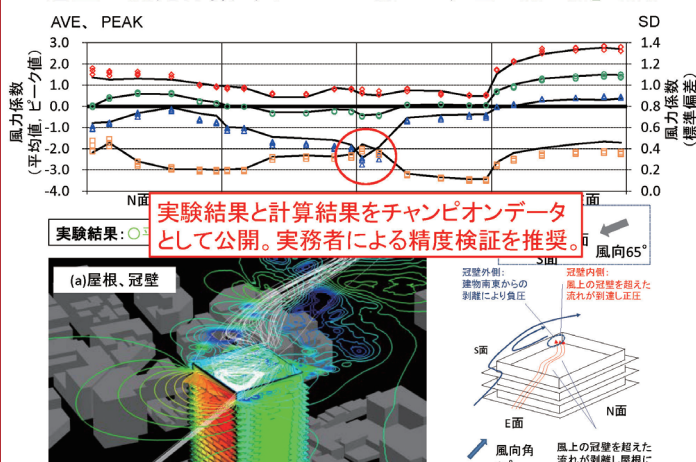


図2 オフィス屋上の目隠し壁にかかる圧力。風洞を使った実験結果のプロットと、シミュレーションの結果を示す実線とが一致しており、シミュレーションの有用性が示された。



講演会報告



FMO 創薬コンソーシアムを通じたシミュレーションの実用展開と最新手法への取り組み加速

FMO 創薬コンソーシアム

小沢 知永 キッセイ薬品工業株式会社 創薬研究部 創薬基盤研究所 リード検索研究室 室長

■ 研究の背景

薬はタンパク質にしっかりくっつくことで働きます。薬がしっかり結合するには、形がぴったり合うことと、タンパク質と薬の表面のプラスとマイナスが引き合うことが重要です。それを考えて我々は薬をデザインし、それを合成研究者が何日間もかけて合成し、さらに、それを生物研究者が評価します。デザイン・合成・評価というサイクルを何十回も繰り返して、ようやく薬の候補が得られます。ですから、このサイクルの効率を上げ、回数を少なくするのがシミュレーションをやっている者のミッションなのです。

■ 研究の概要

我々のコンソーシアムでは、FMOを用いたシミュレーションを研究しています。FMOはフラグメント分子軌道法の略で、産業技術総合研究所におられた北浦和夫先生(現 京都大学 福井謙一研究センター)が開発されたものです。

コンソーシアムの立ち上げは2015年4月で、現在、大学・研究所8機関、製薬企業13社、IT企業1社が入っています。FMOの計算に用いるソフト(ABINIT-MP)を開発した東京大学生産技術研究所をはじめ、アカデミアの先生たちとも連携を取りながら、おもに「京」を使って計算を行っています。

FMOでは、タンパク質をアミノ酸単位に分け、周りのアミノ酸との相互作用を考慮して全体のエネルギーを計算します。さらに、アミノ酸とリガンド、あるいは、アミノ酸と薬の候補の相互作用(つまり、どのくらいの強さで結合しているか)も解析できます。これをもとに、薬の設計図が

描けるのです。パイオグリッドスパコン創薬コンソーシアムではタンパク質の動きを見ているのに対し、こちらは、瞬間を精密にとらえている感じです。

計算の出発点となるタンパク質の構造は、既存のデータを用います。PDBという公共のデータベースに、X線結晶解析やNMR(核磁気共鳴法)で観測された10万件ほどのデータがあります。コンソーシアムの1年目は、それらの前処理について検討しました。コンソーシアムをつくったことで、各社により前処理の「流儀」が違うことがわかったためです。具体的には、結晶水の扱いなど5つの観点から検証を行いました。1社でそこまでやるのはなかなか厳しいので、各社の競争の前の段階で前処理の条件をフィックスでき、その後のFMO計算が安心してできるようになったことは、地味ですが非常に大事な部分です。

現在は2年目で、解析を行っています。計算で求めた値と実験データに相関があるかどうかなどを検討し、より精度の高い計算手法や手順をつくり上げる予定です。

3年目以降は、その手法で計算したフラグメント間相互作用エネルギー(IFIE)のデータをタンパクごとにまとめてデータベース化しようと考えています。10万個のタンパク質についてIFIEのデータベースができると、シミュレーションする者と合成する者がそれを見て、薬のデザインをいっしょに考えられるようになるかと期待しています。

このコンソーシアムの特徴は、計算の対象とするタンパク質ごとにワーキンググループをつくっていることです。1社だけだと、自分の計算に汎用性があるのかが心配になりますが、コンソーシアムには、つくりたい薬も対象タンパク質も異なる各社が集まっているので、各社のニーズを満たすことで、タンパク質の個性を超えた計算の汎用性が確保できると考えています。



具体的には、キナーゼ、プロテアーゼ、核内受容体、タンパクタンパク相互作用 (PPI) のワーキンググループに分かれ、それぞれ計算値と実験値の相関解析や前処理の課題に取り組み、成果をあげています。来年度は、より詳しい検討を行う予定です。

また、先行事例ワーキンググループでは、ポスト「京」もにらんで自動化プロトコル(計算の手順)を作成し、計算値と実験値の相関に問題ないことを確認しています。一方、開発ワーキンググループでは、計算結果を実験研究者が薬の設計に生かすための実用的なツールの開発をめざしています。

■ 今後の展開

コンソーシアムを結成したことで、計算条件を試行錯誤する必要がなくなり、さまざまなタンパク質に関する情報が得られ、最新の解析技術を知ることができました。また、計算がうまくいかないときに第三者の意見やアイデアをもらえますし、同じ計算で苦しんだ他社の仲間との深い人脈ができたと思います。アカデミアの先生方に何かを提案するときのハードルも低くなりました。

FMO創薬コンソーシアムが目指すのは、予測精度の

向上により実験を削減し、生産性を向上させることです。そのために、将来はIFIEデータベースの検索ツールをつくり、データという情報を、「知恵」として使えるまでにしたいと思っています。その一方で、創薬においてはアイデアを生み出す創造性も必要です。この2つは相反することですが、「京」やポスト「京」を使いながら両立をめざしていきます。

■ 会場からの質問

Q:例えばある疾患の原因タンパク質に対して、各社が過去に検討したがうまくいかなかったというネガティブなデータもたくさんあると思うのですが、コンソーシアムでそういうデータを共有していますか？ もしそういうことができれば、データベースの構築にも、これからのスクリーニングにも非常に役に立つだろうと思います。

A: FMO創薬コンソーシアムではまだそこまでの話になっていませんが、他のコンソーシアムでは、よくなかった部分構造を共有しようという議論も出ています。私の個人的な感想ですが、失敗事例を共有しようという流れもだんだんできてきていると思います。

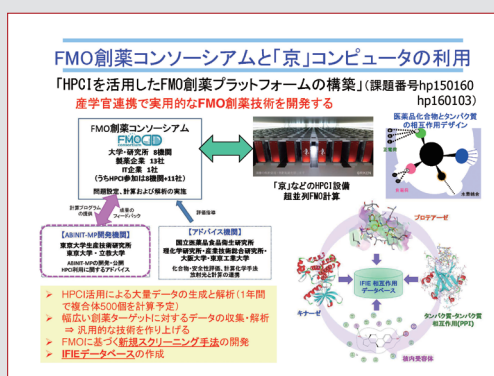
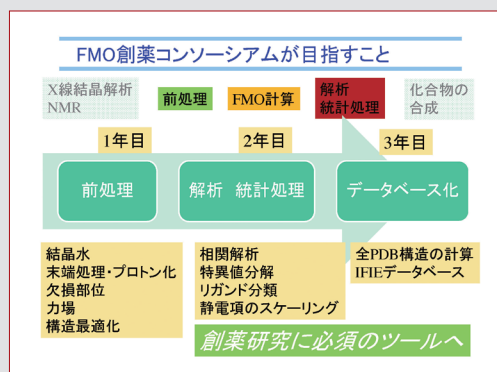


図1 FMO創薬コンソーシアムでは、産学共同によりタンパク質と薬の候補との相互作用を精密に計算し、予測精度を向上させることをめざしている。



2016年度 WG活動について

ワーキンググループ(WG) 福澤、田中、本間は全体的に参加します。

WG	アカデミア担当	企業担当
◆ キナーゼ	◎神戸大	◎持田、エーザイ、カルナバイオ、旭化成、日本新薬(中外、協和発酵、みずほ、MeijiSeika)
◆ 核内受容体	◎豊橋技科大	◎帝人、科研、協和発酵(中外、日本新薬、MeijiSeika)
◆ プロテアーゼ	◎岡山理大	(科研、日本新薬)
◆ PPI	◎阪大、順天堂大	◎キッセイ、カナカ、中外、ナード、MeijiSeika、田辺三菱(エーザイ、帝人、科研製薬、日本新薬、協和発酵、旭化成)
◆ 開発・先行事例	◎理研、神戸大、日大理工、熊本大	みずほ(MeijiSeika)

◎はリーダー/企業取りまとめ役、()はサブ参加のメンバー、緑はHPCI参加者

図2(左) コンソーシアムの1年目は前処理の検討を行った。今年度は2年目で、FMOによる計算値と実験値の相関解析などを行っている。3年目は計算で得られるIFIEのデータベースを構築する予定である。

図3(右) ワーキンググループの構成。



講演会報告



「京」を活用した自動車の 先端的シミュレーション手法の開発

自動車工業会 一般社団法人日本自動車工業会 電子情報委員会
梅谷 浩之 デジタルエンジニアリング部会 次世代スパコン検証WG主査

■ 研究の背景

日本自動車工業会(自工会)は、日本で自動車または自動車二輪車を製造している、全14社で構成される実業団体です。そのデジタルエンジニアリング部会は、IT領域における標準化や先端技術研究など、各社で解決するのが難しく業界全体として取り組むべき案件を扱っています。

2003年には、当時、最高性能を誇っていた地球シミュレータを使い、先端技術の開発を行いました。シミュレーションの精度を上げる方法を検討し、メッシュを細かくすればいいことを世界でいち早く見いだすなど、多くの成果を出しました。それから10年たった2013年頃には、各社が地球シミュレータ相当のコンピュータを保有するようになり、かつて私たちが最先端として研究していた技術を、実際の製品開発に活用するようになりました。

この経験を踏まえると、おそらく10年後には、「京」に相当する能力をもつコンピュータを、各社が保有するようになると予想されます。それを見越して、私たちは「京」を使った10年先取りした技術を開発しています。

国家プロジェクトである「京」に対して、自動車業界が協力していく体制として、自工会という枠組みはふさわしいと考えています。「京」を使うには、市販のソフトウェアを移植しなければなりません。これは1社で取り組むには困難な仕事だからです。また、自工会ならほかの業界への展開にも対応できます。

■ 研究の概要

我々は、ソフトウェアの移植と運用改善に取り組みました。

具体的に移植した市販ソフトウェアの種類には、衝突安全、実走行、車体強度を検証するもののほか、電気自動車の登場に伴い磁場解析が含まれています。

世界トップクラスの「京」への市販ソフトウェア移植は容易ではありませんでした。「京」は、演算器(コア)1個あたりの計算性能が高いわけではなく、膨大な数の演算器が高速で通信することで高い計算能力を発揮します。移植の際にはその点を考慮する必要がありました。ソフトウェアの書き換えはベンダーに依頼しましたが、依頼にあたり問題がソフトウェアにあるのか、それとも自分たちのやり方が悪いのかを見極めることが前提になります。合わせて、ソフトウェアの高速化のために、プロファイルを取り、地道に改善をしています。

運用に関しては、演算がスタートするまでの待ち時間が長い、データ量が膨大で移転がたいへんだといった問題について、「京」運用メンバーの協力を得て改善してきました。

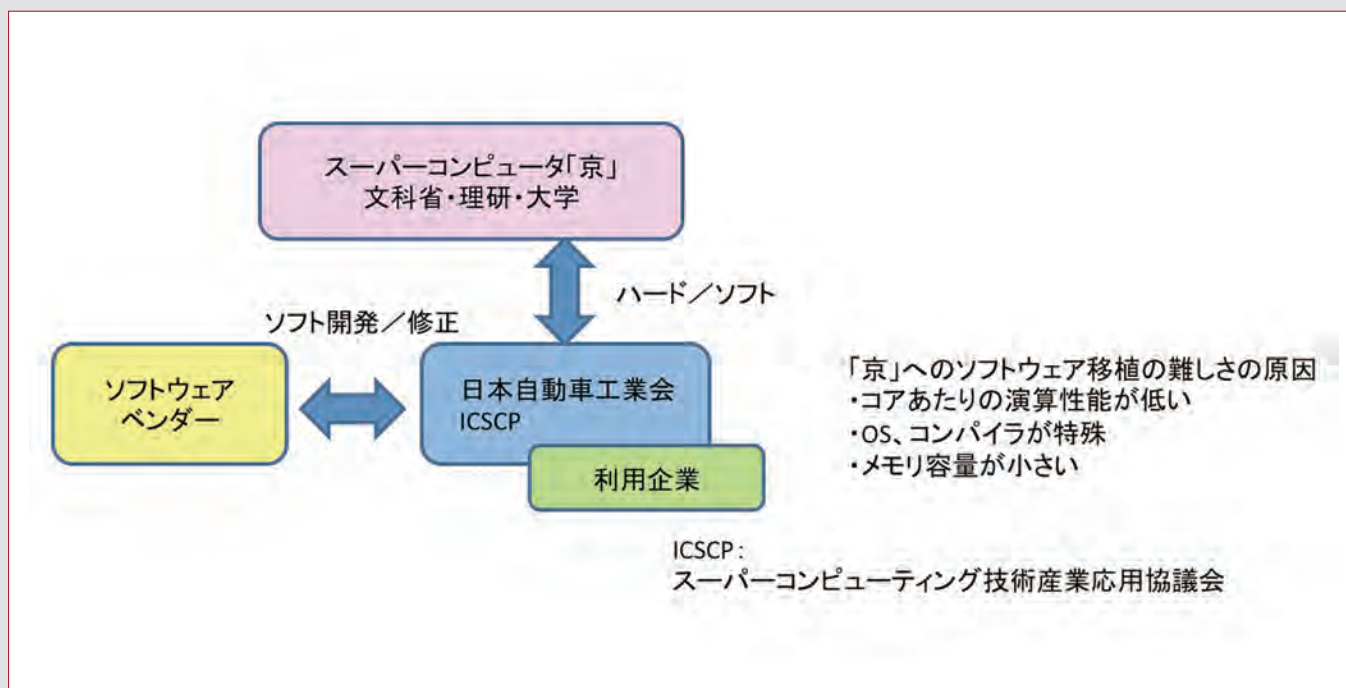
移植したソフトウェアを使って行った研究は、2014年度までで、衝突・安全、実走行強度、環境、製造に関するもの計8件、2015年度に安全と環境に関するもの計3件でした。2014年度に行ったリアルワールドのシミュレーションでは、自動車と自転車の衝突のメカニズムの解明を目指しました。また、水はね走行など、現在は実験中心で検証されている長時間現象をシミュレーション化することも検討しました。燃費や製造プロセスの省エネ化といった環境に関係するシミュレーションも行いました。



■ 今後の展開

シミュレーションについては、これまでおもに精度を追求してきましたが、今後はスピードも求めなければならないと思います。「リアルタイムシミュレーション」が目標です。さらに、背反する性能を設計に取り込むには、「自動車まるごとシミュレーション」が究極の目標となるでしょう。

これまで、シミュレーションは、設計を評価する仮想実験という位置づけでしたが、今後は、シミュレーション結果をもとに設計する「シミュレーションドリブン」の開発を目指すべきだろうと思います。それを実現するには、ポスト「京」でもコンピュータ性能は足りないかもしれません。コンピュータの制約がない状況で、自動車開発を進められる日が来ることを期待しています。



☒ 日本自動車工業会が果たす役割。各自動車会社が「京」を有効利用できるよう道筋をつける。また産業利用促進に貢献する。





パネルディスカッション

つながりが未来をひらく

- コンソーシアム型利用のよかった点、改善すべき点、自社だけではできなかったこと
- 「京」ではできなかったこと、ポスト「京」への期待
- 会場も含めての議論
- AICS(理化学研究所計算科学研究機構)と RIST(高度情報科学技術研究機構)の支援体制



京×産業シンポジウム
パネルディスカッション
「つながりが未来をひらく」



K computer



はじめに

加藤 「京」の産業利用は年を追って増えており、中でもコンソーシアム型にはリソースが多く配分されています(*1)。ここでは、コンソーシアム型利用のよかった点、逆にコンソーシアムで苦労した点を話していただき、会場の方々に両面を知っていただき、来年度のコンソーシアム型課題への応募を検討していただければと思っています。

さらに、「京」ではできなかったことを踏まえて、ポスト「京」の開発・運用に対して産業界として期待している点を議論し、要望をまとめたいと思います。

*1: コンソーシアム型利用の詳細は、「まとめ」参照。

コンソーシアム型利用のよかった点、改善すべき点、自社だけではできなかったこと

加藤 前田さんから順にお願いします。

前田 講演でも話したように、自社だけでは困難だった最新の計算技術の検証を、コンソーシアムの参加者間で議論を深めて高度なレベルで実施できたことが非常によかった点です。あとは、計算科学における産学ネットワークを構築できたことも良かったです。

加藤 成果の帰属でNDA(non-disclosure agreement、秘密保持契約)が問題になったりはしませんでしたか？

前田 我々は、技術開発と技術検証を目的として、参加企業がみんな手を動かしてやっているの、そのあたりは大丈夫です。ここで技術が確立したら、あとは個別利用で各社がやっていけばよいというスタンスです。

加藤 基本的には競争になる前の過程なので、あまりその点は問題にならないということですね。

前田 そうですね。それよりも、運用上の問題がありました。コンソーシアムで分担を決めると、各社が同時期に「京」を使って計算を開始するという状況になります。そのため「京」が混雑してしまって、なかなか計算結果が返ってこない。その結果、検証がどんどん後ろにずれていってしまいました。

加藤 そこは工夫が必要な点ですね。次に寺村さん、お願いします。

寺村 我々の成果の1つとして、実車風洞全体を「京」の中で再現し、その流れの非定常シミュレーションを行ったことがあります。農沢さんが講演で紹介された成果も含めて、5年後、10年後に実用化できそうなHPC(high-performance computing、高性能計算)技術へのチャレンジができたのかなと考えています。

加藤 しかし、それは個別に、例えば大学と組んでできた可能性もあるのでは？

寺村 成果自体はそうかもしれませんが、コンソーシアムでは、アカデミアとメーカーはもちろん、メーカーどうし、メーカーとサプライヤーの間でも交流が活発になりました。それが非常によかったと思います。また、その過程で、各社、各大学のカラーの違いもわかってきました。ただ、メーカーによって、取り組みに対する力の入れ具合が違うので、目的や目標のベクトル合わせ、最終的なゴールの設定が難しいと感じました。このような強み、弱みを総じて、オープンイノベーションへの礎ができたと感じています。

片岡 鹿島建設の近藤さんによる講演とは少し違う観点か



モデレータ

パネリスト



加藤 千幸

東京大学 生産技術
研究所 教授
革新的シミュレーション
研究センター長



前田 能崇

バイオグリッドスパコン
創薬コンソーシアム
持田製薬株式会社
研究企画推進部
研究IT マネジャー



寺村 実

HPC自動車コンソーシアム
株式会社 本田技術研究所
四輪R&Dセンター
第11技術開発室
第5ブロック 主任研究員



片岡 浩人

建築CFDコンソーシアム
大林組 技術研究所
環境技術研究部 部長



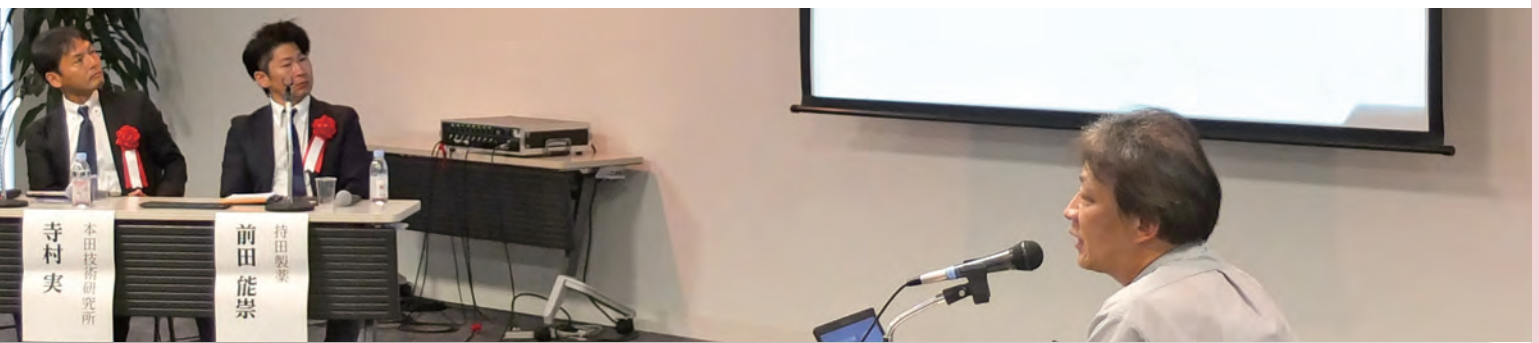
小沢 知永

FMO創薬コンソーシアム
キッセイ製薬工業株式会社
創薬研究部
創薬基盤研究所
リード検索研究室 室長



梅谷 浩之

自動車工業会
一般社団法人日本自動車
工業会 電子情報委員会
デジタルエンジニアリング部会
次世代スパコン検証WG 主査



ら話をしますが、建築の最大の機能は、自然の脅威から人々を守るシェルターととなることです。ですので、勢力の強い台風が増えるなどの気候変化、水素利用のような新技術の登場、テロの増加といった社会の変化に対応する必要があります。HPC技術を用いてこうした新しいリスクを解析し、技術の適用性の評価するのはコンソーシアムで、その結果をもとに、どういう設計、施工をするかを考えるのは各企業だと思います。

建築CFDでは、新たなリスクの評価に挑戦でき、ビルディング・キューブ法という新たな解析方法に取り組み、業界全体のレベルアップにつながった点がよかったと思います。また、基整促(基準整備促進事業)のような法改正や認証に向けた動きは、一社ではできず、コンソーシアムならではのものです。

問題点としては、「京」では大きな計算をするのでプリ・ポストの処理とかデータハンドリングが煩雑になると感じています。

加藤 法改正や認証という新しい話が出てきました。製薬業界でもそういう話はあるのですか？

小沢 そこまではいきませんが、化合物の毒性の予測は実験だけでは難しいところがあるので、そのためのソフトを「京」で動かせればよいなということはありません。

よかった点は、一社で試行錯誤することなく、コンソーシアム型利用により参加企業が協力して検討することにより適切な計算条件が得られたことです。また、最新の解析法を知ることができ、専門家や第三者の意見をもらえるので、自分の解析が行き詰まったときにとても助かりました。アカデミアの先生方との考え方の違いをすり合わせる際にも、コンソーシアムはよかったです。

「京」は一社でも申請すれば使えますが、なんらかの成果が

出る前に、利用申請に対する社内の承認を得るのは難しいのは難しい。その点、コンソーシアムに入っていると、そのハードルが低くなるということもありました。また、我々のような小さな会社では、計算結果のデータベース化はできないので、それがコンソーシアムで実現しつつあることも利点だと思います。

加藤 なるほど。逆に苦労されたのはどんな点ですか？

小沢 寺村さんも言われたことですが、参加各社の間に温度差があることです。それで、我々のコンソーシアムではワーキンググループをつくって、興味のある対象だけにでも参加してもらおう形をとりました。

梅谷 正直なところ、個社の利用に比べてコンソーシアム型の利用のメリットはないのかなと思っています。そもそも先端技術研究は競争領域です。コンソーシアムでのプロジェクト推進は大変ですし、利用量の枠は大きいそうですが、複数テーマをやるので、1テーマあたりではそれほど大きくない感じがします。ただし、HPCのような新しいインフラ整備の段階では、どこかがやって他社に使わせないというわがままを防ぐためにコンソーシアムでやる必要があると思います。国プロはそもそも個社ではなく産業界で受けるべきだという議論もあります。また、市販ソフトを「京」に移植するためにソフトウェアベンダーに修正を依頼する際、交渉が結構タフなので、コンソーシアムのほうがやりやすいのは事実です。

加藤 皆さんの話を一通りうかがって、コンソーシアムにはもちろんネガティブな点もありますが、全体的には皆さん、このような利用形態に関してポジティブかなと思います。

小沢 そうですね。自動車業界という観点からいうと、農沢さんが言われたように、ドイツの3社は仲がよく、技術開発を



パネルディスカッション

いっしょにやったりしますが、日本にはそういう文化はありませんでした。坪倉先生のご尽力でHPC自動車コンソーシアムがつくれ、「京」を各社がいっしょに使うことがそういう文化をつくるきっかけになったと思います。その意味ではとてもよかったと思います。

加藤 「京」を使うコンソーシアムがあったからこそ、技術開発に産業界で共同して取り組むという新たな動きができたというわけですね。SPring-8など「京」以外の大型施設でも、おそらくこういう動きが出てきていると思います。大きな目で見ると、日本にもようやく名実ともにオープンイノベーションの素地ができつつあるということでしょう。

「京」ではできなかったこと、ポスト「京」への期待

前田 講演でも触れたように、「京」では、もっと長時間、もっと多くの種類の計算ができたらと思いました。また、創業に関しては、私が発表した分子動力学シミュレーション、小沢さんが発表されたFMO(フラグメント分子軌道法、詳細は小沢氏の講演参照)以外にもさまざまなプログラムがあるので、それらを「京」に載せられれば、さらにいろいろな解析ができたのにと感じました。そのあたりがポスト「京」で実現されたと期待しています。

寺村 「京」の利用で、最先端HPCの可能性は示しましたが、その実用化の道筋がまだ明確になっていないと考えています。ここまでは、各社はコンソーシアム型の利用に対してポジティブでしたが、ポスト「京」に進む際、どこにインセンティブをもっていくかは、みなで議論しなければいけないと感じています。

また、現在、非常に優れたソフトウェアをAICSやアカデミアから提供していただいているのですが、それを我々企業が利用するにあたってのサポート体制も、ポスト「京」では構築していただく必要があると思います。そして、農沢さんが講演で言われたように、リアルタイムシミュレーションと最適化に期待しています。

片岡 「京」でできなくてポスト「京」に期待することとしては、まず、竜巻のような気象の極端事象が東京都心で本当に発生した場合にはどういったことが起きるかというリスクの評価があります。次に、この先例えば100年後の気象はどうなっているかの予想をもとに建物への荷重を評価することもできたらと思います。建物はそのくらい先まで残るわけですから。もう1つは、長期間の解析による統計的な評価です。そのためには、ポスト「京」の次のスパコンが必要かもしれませんが。

小沢 「京」ではいろいろなFMO計算ができましたが、FMOはスナップショットなので、それをいくつもつないで動的効果をみたいと思っています。これは「京」では難しいので、ポスト「京」に期待しています。一方、ポスト「京」では、大規模計算を目指すだけでなく、数万化合物を一度に評価して有望なものを100個選ぶというような、小さい計算をたくさんやるという使い方も検討していただければと思います。

梅谷 ポスト「京」も含めて、ソフトウェアの移植には、民間

の力を使うべきではないかと考えています。移植という仕事は、ソフトウェアベンダーにとってビジネスモデルとして成り立つかどうか重要だからです。ベンダーは、移植自体に将来性があり、次の商売につながるということがわからないと、なかなかやってくれませんが、その説明ができるのは、実際にソフトを使う企業です。

また、「京」やポスト「京」で新しいことをやる場合、専用の動作検証モデルが必要ですし、移植の際にはトライ&エラーも必要です。そのための人とコンピュータのリソースをどうするかということも考えると、民間に任せたいほうが利用が進むのではと思っています。

加藤 ありがとうございます。寺村さんからは「実用化」というキーワードが出てきましたが、ポスト「京」への期待として皆さんが話されていたことはどちらかというと技術的な進歩だったと思います。コンソーシアムでの成果をどういうふう実用化するのか。例えば、産業界全体あるいは業界ごとに大きな計算機を保有し、各社が利用するのかといったことも、今後は考えていかなければならないと思います。

会場も含めての議論

加藤 コンソーシアム型利用の今後の方向性についてご意見があればお願いします。

来場者 製薬業界の場合、「京」の利用は医薬品の候補化合物の探索が主ですから、いまコンソーシアムに入っているのはおそらく各社の計算科学の専門家だと思いますが、ポスト「京」に向けては、薬理、生化学、薬剤設計など、幅広い部門でスパコンを使うことも必要だと思います。例えば、体内動態のシミュレーションから組織への移行性を見てドラッグデリバリーシステムの開発を加速するとか、ビッグデータを使ってバイオマーカーを選別し超早期診断に役立てていくというようなストーリーを、業界全体としてつくれるれば、国民からのポスト「京」への期待も、業界としてのメリット感も高まるのではないのでしょうか。

加藤 貴重なご意見をありがとうございます。創業に関しては、小沢さんから結合エネルギーのデータベースをつくるという話がありましたが、実際にそれを使って製品開発ということになると、利用する企業がどこまでお金を払って、どこまでを国プロでやるかという切り分けも明確にしておかないといけないですね。

来場者 質問です。1つは、コンソーシアムに日本国籍でない企業が入れるかどうかについて、規定があるかどうか。もう1つは、入りたいと言われるくらいのバリューをそれぞれのコンソーシアムは持っているかどうか。その2点を教えてください。

バイオグリッドスパコン創薬コンソーシアム 規約としては外国企業もお断りしていません。かつてアメリカのメガファーマから入りたいというお話をいただいたのですが、会議に毎回アメリカから来ていただけるかとお話ししたら、それはちょっと難しいということで、結局参加されませんでした。



HPC自動車コンソーシアム 各社が承認すればよいと思います。

AICS 日本の産業界の競争力を高めるということが「京」の大きな目的の1つになっていますので、完全に海外の企業が「京」の利用を申し込んでも許可されません。そういう意味では、積極的に受け入れるのはいかなものかと思います。

梅谷 自工会はそもそも日本のメーカーの団体です。海外の企業と協調したほうがメリットがあるとすれば協調するというところもあると思いますが、「京」の枠組みではあまり考えられないです。

片岡 「ノー」と言うルールはありませんが、実際にやっていくうえで顔の見える研究者でないというやりづらいので、ある程度バックグラウンドを知っている人でないと招き入れることは難しいと個人的には思います。

小沢 規則としては大丈夫ですが、製薬の場合は海外企業の基礎研究所自体が日本にはないので、実質的にはあり得ないと思います。

加藤 ということ、まず前段の答えは、「入れない」という規則はないけれど、本当の意味でのギブ&テイクとか実効性が伴わない限りは現実的にはあまり起こり得ないのではないかといいことですね。後段は「海外から入りたいと言われるほどのことをやっているか」という質問に聞こえたのですが、これは皆さんやっているということですよ。その辺はいろいろと調査をやっているようですので、その調査の結果にも委ねたいと思います。

AICSとRISTの支援体制

加藤 さきほど梅谷さんから、市販のソフトを移植するためのビジネスモデルがないという指摘がありました。他のコンソーシアムはオープンソースとか国プロのソフトを使っていますが、AICSではもっと産業利用を増やすために市販ソフトを増やすことを検討されているそうですね。

AICS AICSでは超並列マシンで効率的に動くソフトを多数開発していますので、大いに活用していただきたいと思います。ただ、いま産業界でよく使われているソフトには移植しないといけないものもあると認識していますので、どれを移植すべきかをよく見極めて増やしていきたいと思っています。

また、プログラムはハードよりもライフタイムがずっと長いので、「京」でも、そのあとのポスト「京」でも、ずっとメンテナンスが必要になります。AICSでも、日本の知的資産としてソフトを大事にし、きちんとメンテナンスを続けていくための組織をもたないと、今後、国際的に対抗できないと思っています。まずは、AICSで開発したプログラムがメンテナンスの対象になりますが、既存のソフトもその範疇に入れていくべく努力をしたいと思っています。

RIST RISTでは、ソフトウェアベンダーさんとの共同研究のような形で、過去に6本ほどの市販ソフトを「京」用に移植しています。また、現在は日本自動車工業会とも共同研究をしています。このように、私どもでは移植に関する支援もできる

状況になっておりますので、もしご要望がありましたら遠慮なく言っていただければと思います。

加藤 どうもありがとうございました。梅谷さんからは、市販ソフトの移植のよいビジネスモデルがあれば、「京」やポスト「京」の産業利用が普及するのではないかというご提案がありましたので、平尾先生、関先生にもぜひお考えいただきたいと思っています。

コンソーシアムにはいろいろな利点がありますが、一言で言うと、各社が協働し、しかも大学や研究機関も入って何かをやるという新しい動きができたということが一番大きな成果だと思いました。

ただ、ポスト「京」に向けて、この先さらに技術開発を協働でやるにはもう少し強いバイディングフォースが必要だということも見えてきたかと思っています。その点はぜひ各コンソーシアムでお考えいただき、さらなる発展を目指していただければと思います。

今日はパネラーの方、会場の方に大変に貴重なご意見をいただき、どうもありがとうございました。

まとめ

■10年後の実用化を目指して、産学官が協力して最新の計算技術を検証するという新たな枠組みが構築でき、計算科学分野におけるオープンイノベーションの素地ができた成果は大きい。また、毒性評価、建築基準法などの認証・法改正に対してもコンソーシアム型産業利用課題の遂行は有効である。

■各企業や関連する大学等のベクトル合わせには苦勞が伴うが、各社・各大学のカラーを知ることは、今後の開発戦略等の検討に役立つものと思われる。また、成果の帰属やNDAに関連した問題は発生していない。現状の「京」の運用に関してもコンソ型課題から強い改善要望はない。

■長時間・動的計算(創薬)、リアルタイム連成評価(自動車)、極端気象現象のリスク評価(建築)など、ポスト「京」に対する期待は大きい。ポスト「京」に向けてコンソーシアム活動を続けるためには、バイディングフォースとなる共通課題の明確化が必要。

■一方、国プロとして推進するポスト「京」の開発(ハード・ソフト)と「京」で実施した成果の実用化は、関連はあるものの別のものであり、「京」の成果の実用化プロセスを明確にすることが求められる。

■ポスト「京」の運用に関しては、市販アプリも含めて、より多くの種類の最先端のアプリケーションが利用でき、また、その保守・管理体制と利用のサポート体制が充実していることを望む声強い。連携推進会議等で議論して具現化していくべき課題である。

■特に、産業界にとっては、実績のある市販アプリが「京」やポスト「京」で動くことが重要である。しかし、現状ではアプリベンダーが移植に対して明確なメリットを感じるビジネスモデルが無い。今後、自工会、AICS、RIST等の関連機関が協議していくとともに、他の業界とも連携して検討を進めるべきである。



まとめ

京×産業シンポジウム

つながりが未来をひらく

まとめ Summary

■ 「京」の産業利用について

「京」の本格運用は、2012年の秋に始まりました。「京」の計算資源は、2015(平成27)年度までは戦略プログラム、2016(平成28)年度はポスト「京」研究開発に重点的に配分され、それ以外は、一般利用枠として、課題を申請し採択された方に配分されてきました(図1)。

課題の種類は、誰でも申請できる「一般課題」、39歳以下の利用者が一人で行う「若手人材育成課題」などと、産業界を対象とする「産業利用課題」に分かれており、課題の募集・選定は、RISTが行っています。

産業利用課題への配分は、「京」の運用開始当初は全体の5%でしたが、2016年度には15%まで増えています。これに伴い、「京」を利用する企業数も着実に増えています(図2)。

図1 「京」の資源配分の変遷
RISTのHPより
http://www.hpci-office.jp/pages/toukei?parent_folder=13

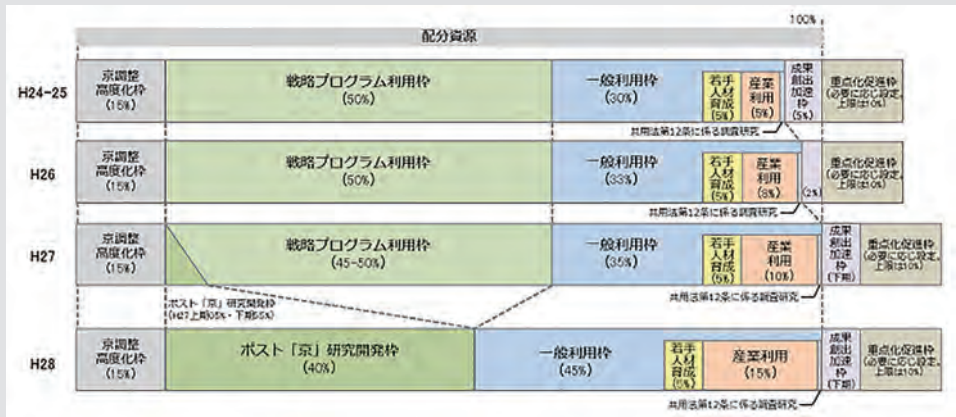
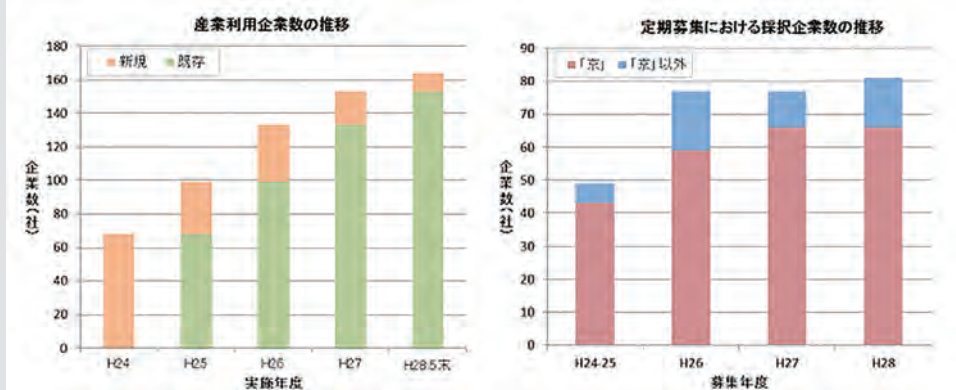


図2 参加企業数の推移
(2016年5月末現在)
RISTのHPより
http://www.hpci-office.jp/pages/toukei?parent_folder=13
産業利用企業数の推移には、戦略プログラム利用枠やポスト「京」研究開発枠等の重点的利用研究課題に参加した企業数を含む。



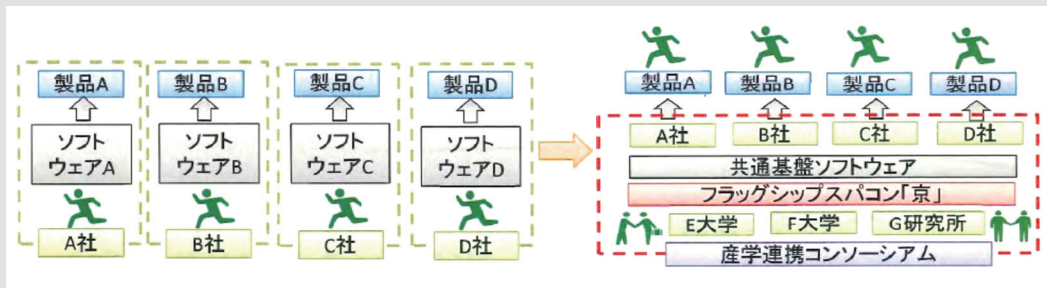


■ コンソーシアム型産業利用課題の誕生と現状

産業利用課題の中には、2012年度の運用開始当初から、同じ業界の(あるいは関連する他の業界からも)多数の企業が集まってコンソーシアムを結成し、「京」を利用するものがありました。1つは、京都大学の奥野恭史教授の呼びかけで製菓企業が集まって結成されたバイオグリッドスパコン創薬コンソーシアム、もう1つは、自動車メーカーの団体である自動車工業会です。

その背景には、「京」は、各社が保有するスパコンの数百倍から1000倍の性能をもち、「京」を使いこなすためのソフトウェア開発にはかなりの努力を要するということがあります。このため、各社が競争するよりも、協力してソフトウェアを開発し、業界の共通基盤として利用しようという機運が生まれたのです(図3)。

図3 「京」が促す企業間連携
2016年8月29日
スパコン推進議員連盟総会での坪倉先生発表資料より

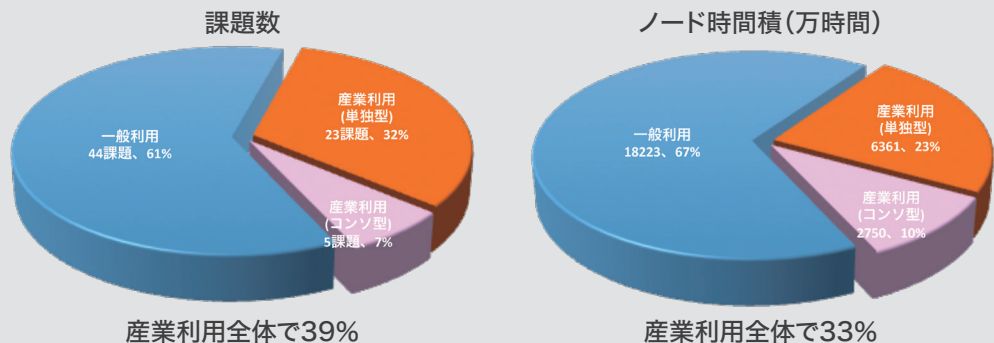


その後、「多くの企業が集まり、コンソーシアムとして『京』を利用するのに、通常の1社利用分の計算資源しか割り当てられないのはおかしい」との声があり、2015年度からコンソーシアム型課題の募集が開始されました。コンソーシアム型課題では、単一企業での利用よりも60%多く計算資源を利用することができ、またジョブも多く投入することができます。

これを受けて、先に挙げた2つのコンソーシアムに加え、FMO創薬コンソーシアムが2015年度から、HPC自動車コンソーシアムと建築CFDコンソーシアムが2016年度から、コンソーシアム型課題を申請、採択されて実施しています。

2016年度は、一般利用枠の総課題数72件中、産業利用課題は28件、うち5件がコンソーシアム型となっています(図4)。また、一般利用枠に配分された計算資源(ノード時間積)のうち、産業利用課題への配分割合は33%で、そのうちの10%分が、コンソーシアム型課題に配分されています。

図4 一般利用枠に占める産業利用課題の割合(2016年度)



コンソーシアム型課題の大きな特徴は、課題代表者がアカデミアの研究者である場合が多く、企業間だけでなく、産学間の連携も含めたコンソーシアムとなっている点です。これにより、「京」の利用はおおむね順調に進んでおり、基礎研究や研究の手法についてはコンソーシアム型課題で研究し、製品化に近い研究はそれぞれ自社のスパコンで実施するという形が定着しつつあります。



まとめ

■ 本シンポジウムの意義

本シンポジウムでは、現在行われているコンソーシアム型産業利用課題5課題の成果を、各コンソーシアムの参加企業の方から報告していただきました。成果を広く一般の方に伝えるとともに、さまざまな業界の企業みなさんに、コンソーシアム型産業利用課題への理解を深めていただき、課題申請を検討していただくことが大きな目的でした。

各講演では、1社だけではハードルが高い課題にコンソーシアムで取り組むことができ、有用な成果が得られたこと、企業間、産学間の交流が深まったことなどの利点が報告された一方で、コンソーシアムに参加する企業間の温度差や、基礎研究を共同で行った後、どのようにコンソーシアムで研究を展開していくかといった問題点も指摘されました。

また、パネルディスカッションでは、利点と問題点に加え、ポスト「京」への期待や、今後のコンソーシアムのあり方を巡って会場参加者も加わって議論が交わされました。ジョブの集中を避ける工夫や、市販ソフトウェアの「京」への移植の支援など、運用上の要望も提出されました。

■ シミュレーションの価値

「京」やポスト「京」のより有効な利用のためには、「京」やポスト「京」を使って行うシミュレーションに、どんな価値があるのかを深く考える必要があります。そこで理化学研究所計算科学研究推進室では、ポスト「京」の重点課題の広報責任者とともにワーキンググループをつくり、研究者に話を聞いて「シミュレーションの価値」を明文化する試みを行っています(図5)。

図5 研究者が考えるシミュレーションの価値
産業利用という観点では、7は「製品やサービスの立案、設計、認証に利用できる」とすべきである。

シミュレーションの価値

A. 世の中の仕組みがわかる

1. 自然現象・社会現象のメカニズムが解明できる。
2. 現象の本質が理解できる。
3. 原因と結果だけでなく、途中経過がわかる。
4. 自然災害や社会の安全を脅かす事象を仮想的に起こすことができる。
5. 可視化できるため、情報の共有化がしやすい。

B. 実験・観測、理論との知的共創により科学の進歩が加速する

6. 実験や観測での抜けを埋めることができる。
7. 実験・観測計画の立案、設計に利用できる。
8. 自然界にない物や極端な状態を作ることができる。
9. これまでにない理論・法則に気付ける。新たな創造。

C. 未来の予測ができる

10. 定量的な予測ができる。
11. 研究の確度を高め、余分な労力・時間やお金をかけずに済む。



(C) 理研AICS 2017「コンピュータ・シミュレーション説明PPT」

コンソーシアム型産業利用課題は、どんな「シミュレーションの価値」を生み出したのでしょうか？ここでは、5つの課題の成果の内容を、シミュレーションの価値という観点から考えてみます。



■ バイオグリッドスパコン創薬コンソーシアム「新薬開発を加速する「京」インシリコ創薬基盤の構築」(1,3,6,7,11)

創薬の最初のステップは、病気の原因タンパク質に結合する化合物を探索することです。そのために、分子動力学(MD)法により、タンパク質と化合物の動きをシミュレーションするという方法があります。この課題では、タンパク質の周囲の水分子もMD法の計算対象に含め、従来よりはるかに長い時間の動きをシミュレーションすることにより、タンパク質に結合する化合物の予測精度を高められることを明らかにしました。また、多くの化合物を網羅的に調べることにより、新たな薬効や副作用も、シミュレーションで発見できる可能性を示しました。これにより、業界全体として、薬の開発費・開発期間の削減が可能になると期待されます。

■ FMO創薬コンソーシアム「HPCを活用したFMO創薬プラットフォームの構築」(1,6,7,11)

バイオグリッドスパコン創薬コンソーシアムの課題と同様、病気の原因タンパク質に結合する化合物を探索する手法の確立をめざすものです。この課題では、フラグメント分子軌道(FMO)法により、タンパク質と化合物が結合したときに、どれだけエネルギーが低く(安定に)なるかによって、結合する化合物を予測します。MD法が動きをシミュレーションするのに対し、FMO法はスナップショットを得るものです。タンパク質と化合物の部分ごとに結合エネルギーを計算した網羅的なデータベースをつくっておくことで、薬の設計がやりやすくなり、薬の開発費・開発期間の削減に貢献すると期待されます。

■ HPC自動車コンソーシアム「HPCによる自動車用次世代空力・熱設計システムの研究開発」(1,2,5,6,7,10,11)

自動車の周りの空気の流れは、走行安定性や燃費に大きく影響するため、自動車の設計では、風洞実験を行って流れを解析することが必須となっています。しかし、風洞実験には莫大なコストがかかります。そこで、この課題では、「京」の中に風洞をつくり、風洞実験を再現するシミュレーションを可能にしました。また、風洞実験では、決まった向きの風しか得られず、実際の走行時の空気の流れを解明することはできません。そこで、この課題では、「京」を用いて、さまざまな走行状態での非定常な空気の流れをシミュレーションし、これまで知られていなかった車体構造と空気の流れの関係を明らかにしました。また、車体表面の空気の流れから、車体の振動、さらには車室内の騒音を定量的に予測することにも成功しました。こうしたシミュレーション手法の確立は、安全、快適で燃費に優れた自動車を、短期間・低コストで開発するための道を開くものです。

■ 自動車工業会「京コンピュータを活用した自動車先端CAEの開発」(1,4,7,10,11)

HPC自動車コンソーシアムの課題が、空力をおもな対象としているのに対し、この課題は、これまでに各社が使ってきた市販ソフトウェアを「京」に移植し、より大規模なシミュレーションを行っています。10年後、「京」クラスのスパコンを各社が保有するようになったとき、必要になる技術を開発するのが目的です。ソフトウェアの種類は幅広く、衝突・安全、実走行強度、環境、製造など多岐にわたります。特に、衝突事故のように、実験ができず、ダミーでは正確なデータが得られない事象のシミュレーションは、現象の理解に役立ち、安全な自動車の設計につながると期待されます。ほかにも、多くのソフトウェアの高度化が図られており、シミュレーションは、設計を評価する仮想実験から、自動車の設計の基礎へと変貌することが予想されます。

■ 建築CFDコンソーシアム「強風・弱風下の都市・建築物の快適性・機能性・安全性に関するCFD設計と実務への展開」(1,4,7,10,11)

空気の流れは建築物の安全性や快適性に深く関わるため、風洞実験は建築物の設計に欠かせません。しかし、建築物にかかわる空気の流れは、台風のような大規模なものから、小さな建築部材のまわりまでスケールがさまざまなため、それをすべて風洞実験で再現するのは困難であり、また、空間的に高解像度の時系列データを得るのが困難です。このため、この課題では、実際の市街地上の乱流境界層や、複雑な形状の建築物のまわりの空気の流れをシミュレーションすることに取り組んでいます。また、風洞実験に代えてシミュレーションのデータを高層建築物等の性能評価に利用できるようにするための法整備に向けて、風洞実験とシミュレーションの比較検討も行っています。法整備への取り組みは、コンソーシアムならでのものです。

■ 終わりに

以上のように、本シンポジウムでは、「京」の産業利用のうちコンソーシアム型課題の成果を紹介すると同時に、ポスト「京」を含め、将来のコンソーシアム型課題の方向を探りました。各課題の成果は、シミュレーションのさまざまな価値を生み出すものでした。



2017年1月発行

編集協力: サイテック・コミュニケーションズ

理化学研究所計算科学研究機構

兵庫県神戸市中央区港島南町7-1-26

E-mail : aics-koho@riken.jp

ホームページ : <http://www.aics.riken.jp/>

無断での転載・複写を禁じます。