

スーパーコンピュータ「京」への期待

-製薬業界の産業利用ニーズと今後の展望-

坂田恒昭(NPO法人バイオグリッドセンター関西 理事(大阪大学大学院基礎工学研究科))

志水隆一(NPO法人バイオグリッドセンター関西 理事(公益財団法人都市活力研究所))

2011年10月19日

1



本日の話の流れ

- 「京」などHPCIの利用
- 利用アンケート結果
- 利用促進活動
- 意見交換

2



「京」を含めたHPCIの産業利用

(HPCI準備段階コンソーシアム中間報告(2011/7/5)より)

<http://hpcic.riken.jp/> 新着情報2011. 7.14

1 産業利用できる計算資源とネットワーク

計算資源

「京」と大学の情報基盤センター等の計算機資源

具体的には、北大、東北大、東京大、名古屋大、京都大、大阪大、九州大の情報基盤センター及び東工大学術国際情報センター、筑波大計算科学研究センターを想定

ネットワーク

当面SINET4を活用(商用サービスからのSINETへの接続も認める)

2 運用の仕組み

HPCIシステム構成機関とユーザコミュニティを繋ぐ全国的なワンストップ・サービスの仕組みを実現

ID連携によるシングルサインオンの機能を提供

認証局の設置、運用(NIIで担当予定)

3 産業利用のあり方(P20)

HPCIが果たすべき役割はHPCを駆使した高並列計算の産業上の効果を産業界ユーザーが手軽に実証(検証)できる環境を提供すること。

4 利用環境(P22)

アクセスポイント

- ・各社からネット経由でアクセス(商用ネット→SINET4)
- ・HPCIシステム構成機関、登録機関、計算科学振興財団からアクセス
- ・ローカルアクセスポイント(大阪・梅田などの利便性の高い拠点)からアクセス

データ宅配 HDDの宅配サービスを提供(有償)

商用ソフトウェア

利用者がライセンスをベンダーと契約し、ソフトの搭載はセンターが行う。

5 支援内容(P24)

産業界の利用者がHPCIを利用する上で必要とする支援内容は

- ①コンシェルジュ的相談窓口
- ②ソフトウェア移植・チューニング支援
- ③情報の一元的提供
- ④技術相談窓口
- ⑤プリ・ポスト処理

②～④に関してはコンソで実現予定、①⑤は要望段階

6 課題選定

(P26: HPCI 産業利用促進検討WGで以下の内容で検討中)

- 産業利用枠を設定
- HPCIは公的な計算資源であることから、これを産業界における高並列計算の効果を“実証する場”と位置づけ、同時により実証しやすい利用枠(トライアルユース枠)を設定することにより、産業界自らが先端的なHPC技術を利用・推進・普及することによって我が国の産業競争力強化と新産業創出などを目的とする。
 - ① 自社内では実施し得ない規模ないしは品質の課題であること
 - ② 産業応用の出口戦略が明確な課題であること
 - ③ 産業利用の開拓に向けた波及効果が十分期待できる課題であることの視点から課題を選定

7 成果の公開

(P27: HPCI 産業利用促進検討WGで以下の内容で検討中)

- 成果は実施者帰属。
- 産業界も含めてオールジャパン体制でHPCIの発展並びに普及促進を行うためには、産業界ユーザーといえども、それに資するような情報を提供してもらうべきであり、その観点から、成果は公開を原則とすべきである。ただし、産業競争力維持のために、公開内容に関しては慎重に検討すべきであり、場合によっては延期措置や限定公開にとどめる措置が必要となる。以下のCASEを検討している。

CASE1

実証利用枠(無償枠)での成果は公開。成果報告書には利用者名、利用目的、成果概要、実施期間等を簡潔に記載。この成果に基づく特許、論文発表、学会発表については実績リストを添付。

CASE2

トライアルユースにおいては秘匿性の高い課題を持ち込んで、評価する可能性があるため、利用者の機密性には十分配慮すると同時に、ソフトウェアの利用情報については公開。とくに期待した成果が得られなかった場合はその理由をくわしく報告し公開する(他の利用者にとって有益な情報となるため)。必要に応じてこのような情報がHPCIシステム構成機関ないしはHPCIの運用の改善に活用されることが望ましい。

CASE3

個別利用枠(有償枠)での具体的な成果内容については非公開であるが、利用者名、課題名、システム情報に関する成果については公開。

注釈: トライアルユースないし実証利用枠での成果に関しては、利用者間での情報共有を目的とした成果報告会等で情報を共有化することが望ましい。

8 利用料

(P28:HPCI 産業利用促進検討WGで以下の内容で検討中)

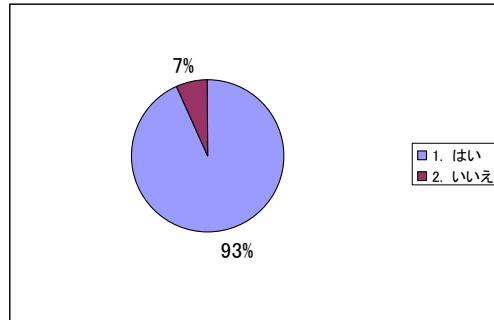
- ・成果公開枠での利用は無償。
- ・成果非公開枠での利用は有償。ただし高並列計算での成果創出がHPCIの主眼であるので、高並列ジョブ・に関しては課金率を下げるといった優遇措置も考慮すべき。
- ・課金率が高い優先ジョブクラスを設定し、TAT保証(リソース確保)することも産業利用推進の観点から検討すべき。
- ・利用者支援は無償であるが、高速化ないしは並列化のための大規模なソフトウェアの書き換え作業等は有償とするべき。

「京」やHPCIの利用方法

- HPCIコンソの「産業利用枠」で課題を申請し利用枠を確保
 - トライアルユース枠(無償)
 - 実証利用枠(無償)
 - 個別利用枠(有償)
- 「次世代スパコンの創薬産業利用促進研究会」の活動の一環としてトライアルユースを申請
- 理研 グランドチャレンジプロジェクトとの共同研究を実施

製薬企業へのアンケート調査結果

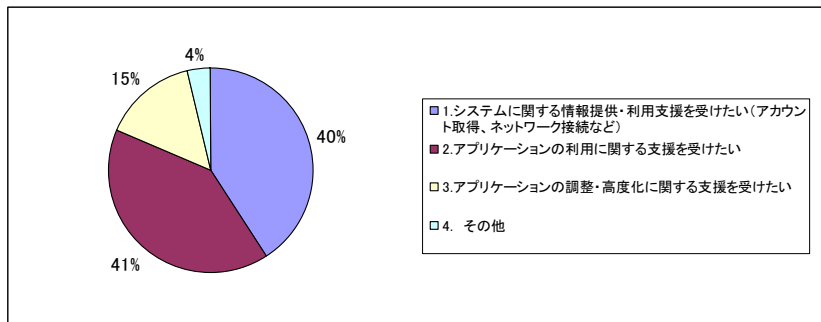
- 「次世代スパコンの創薬産業利用促進研究会」に登録の製薬企業 12社 15名から回答(大手が中心)
- Q1 「京」を含むHPCIが産業利用できることをご存知でしたか？



11



Q2-1 HPCI利用時に希望する技術支援について

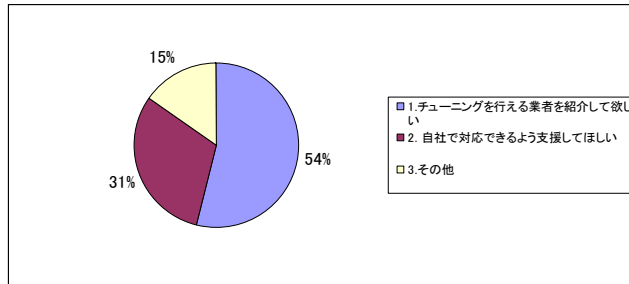


- ・スパコンなどの共同利用施設の使用経験があまりないので、その点の支援を受けたい。
- ・アプリケーションの開発やチューニングまで行うつもりはない。こういった点は、できるだけ作成者側をお願いしたい。
- ・良いマニュアル もしくは直接の支援がなければきちんと使いこなすことはできません。アカデミアのソフトだとマニュアルはあまり期待できないのでトラブル時に質問できる体制が必要になるのでは。
- ・ハードウェアリソースとアプリケーションをワンパッケージとしたクラウドサービスとして利用できるのが理想と考えます。ライセンスの問題が比較的少ないと思われるアカデミアで開発されたアプリケーションにつきましては、少なくとも最初の1年間は開発者の先生との共同研究を行い、ノウハウの取得や実用性向上 の仕様変更などが必要と考えています。

12

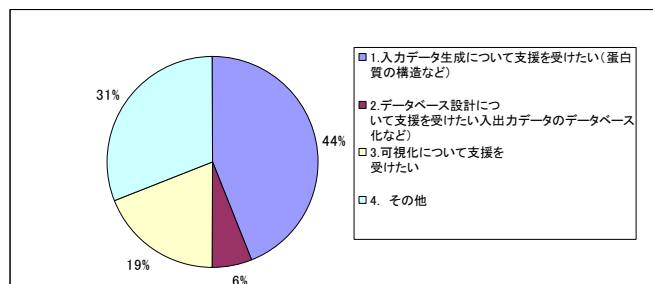


Q2-2 「京」については、登録機関がプログラムのプロファイリングを行い、チューニング方針を提示するまでは無償で行います。そこで、プログラムのチューニングや高度化(高並列化)についてどのような支援を受けたいでしょうか？



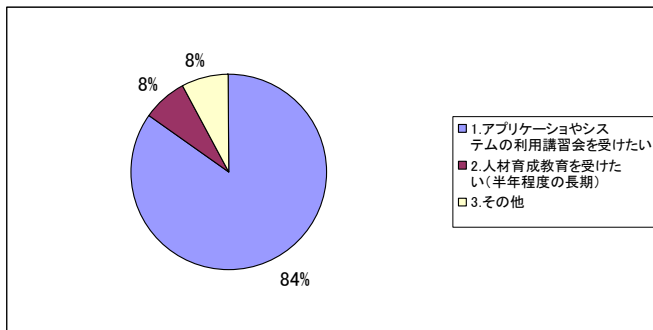
- TSUBAMEでAMBERが稼働しているように、商用のアプリケーションも利用できる様にはできないでしょうか。
- チューニングを自分でする必要があるようでは製薬企業はあまり使用しないと思う。
- 自社あるいは他社と共同開発したプログラムは別としてあくまでユーザーの立場にすぎないので、プログラムのチューニングや高度化を自社独自で実施することを想定しておりません。
- 特にプログラムの高速化がメインな仕事でないので業者に委託するのよい。

Q2-3 前処理、後処理における利用支援について



- 詳細は個別の利用アプリ毎に相談したい
- インハウスの計算機を使う場合とは異なる手法が必要であれば、必要な部分における支援を利用したい。
- 前後処理についても開発者との共同研究を通じたノウハウ取得や実用性向上の仕様変更などが必要と考えます。
- どのような形式でデータを入力すればいいのかわからないので支援が欲しい。

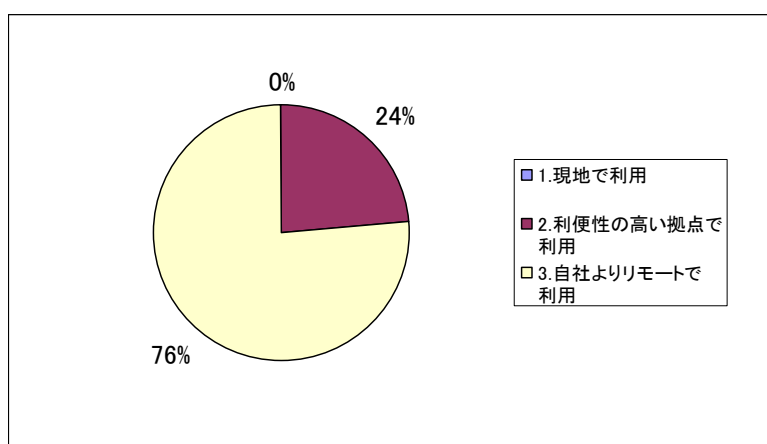
Q2-4 教育について



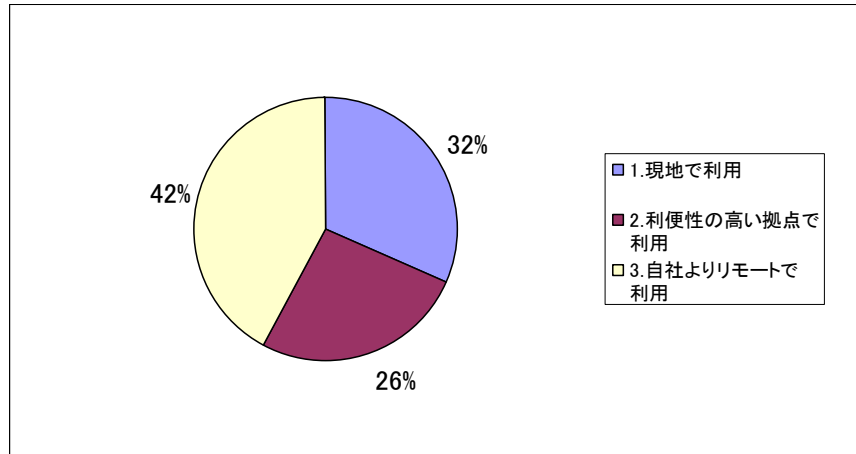
教育を希望する分野・項目

- 超並列化プログラミング(fortran)
- 各アプリケーションの利用法
- 実際に必要になった時点において、指導を希望
- タンパク構造のモデリング
- タンパクとリガンドとの相互作用解析
- 長時間MDによる蛋白質の動的共同の考察、量子力学計算による生体内における反応
- ゲノム情報解析、遺伝子ネットワーク解析
- 開発者との共同研究を通じたレクチャと人材育成を希望

Q3-1 秘密情報を含まない段階での利用形態は



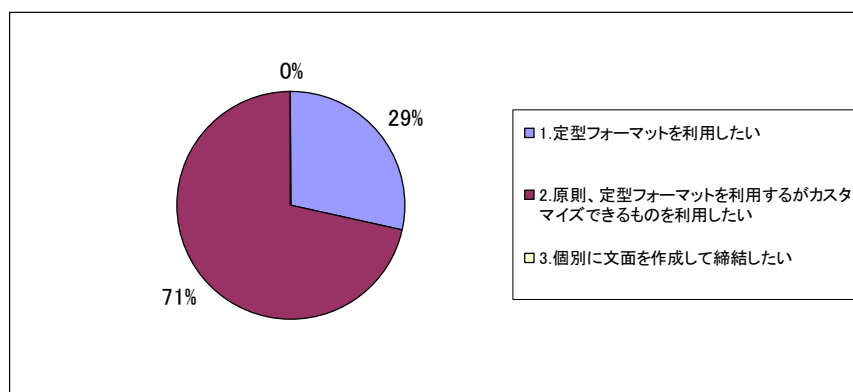
Q3-2 秘密情報取扱段階での利用形態は



17



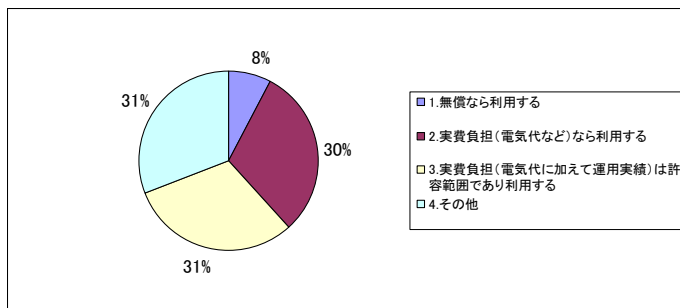
Q4 利用手続きについて



18



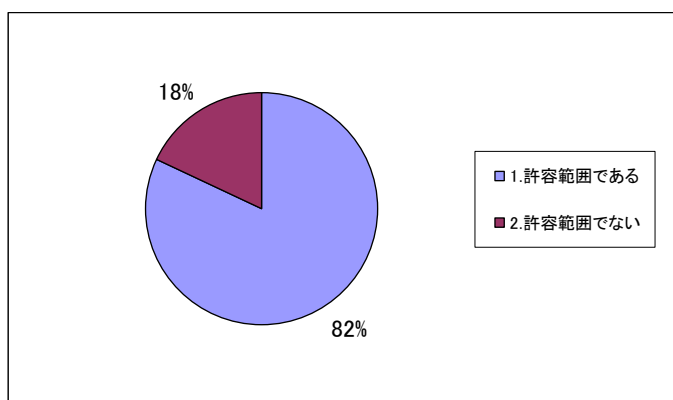
Q5 利用コストについて



- 成果非公開なら実費負担は当然と考えている。
- ある程度の費用負担で非公開の方が、利用しやすい。
- 実費レベルの負担は当然と考えるが、実際の額が不明のため明記できない。
- 民間の企業である以上費用の負担は致し方ないが、費用が高くなるほど社内の予算申請が通らない可能性がある。また、社内での予算申請のため、大まかで構わないので、できるだけ早く金額を決定して欲しい。
- 計算精度・速度とコストとのバランスが良ければ使用する。
- アプリケーションとワンセットになったクラウドサービスを期待しているので、実用的なサービスであれば実費以上を負担しても良いと考えます。逆に、利用するのに多大な労力が掛かるようであれば、たとえ無償でも利用は難しいと考えます。
- 実費となる電気代が非常に高額と聞いているので現実的には難しい。



Q6 成果公開の扱い



- 許容範囲ではあるが、社名の公表は控えてほしい
- 内容による。データベースの規模などは許容範囲を超える、など。
- 研究の内容が判らない形であれば大丈夫ではないかと思えます。
- 「〇〇製薬が創業研究目的に〇〇先生の開発したアプリケーションを〇〇コア用いて〇〇日間利用した」という程度であれば許容範囲と考えます。
- 「計算機リソース利用の目安となる情報の公開」の意味が不明なので判断不可



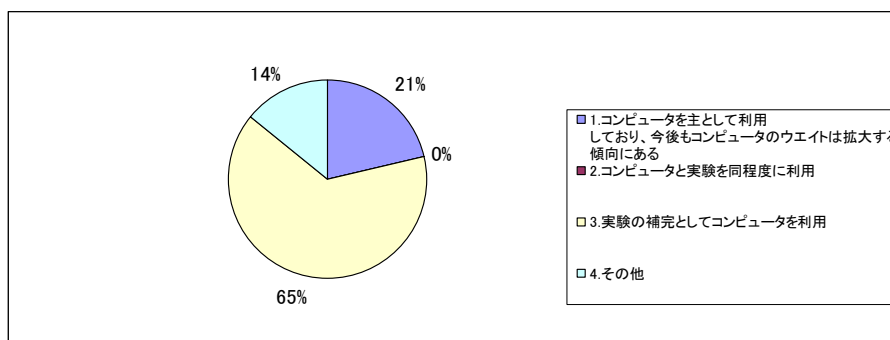
Q7 利用したいアプリケーション

- 蛋白質、リガンドの結合自由エネルギー計算
- 蛋白質のインシリコ分析・設計
- 阻害剤結合によるタンパク質の構造変化のシミュレーション
- 薬物設計
- 蛋白質構造の網羅的解析
- 自社開発化合物とターゲット蛋白質の相互作用解析
- 蛋白質-蛋白質相互作用の解析
- 蛋白質アロステリック作用の解析
- 蛋白質機能-構造変化の考察など
- 薬物の結合の自由エネルギーが精度良く短時間で(数時間以内で) 計算できるのであれば使いたい
- タンパク質の構造変化予測
- 膜蛋白(GPCR, イオンチャネル, トランスポーター)の構造変化予測や機能解析(アゴニスト, アンタゴニストなど)を基にした化合物デザイン
- 阻害剤の結合様式の探索
- 蛋白質機能-構造変化の考察
- など

21



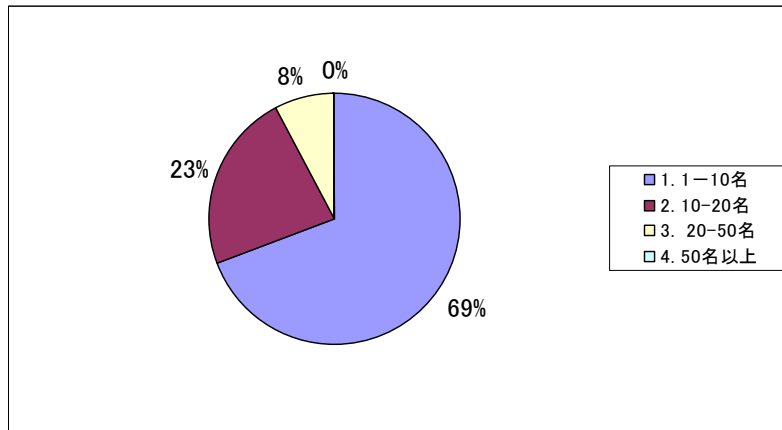
Q8 創薬におけるコンピュータの利用の程度



22



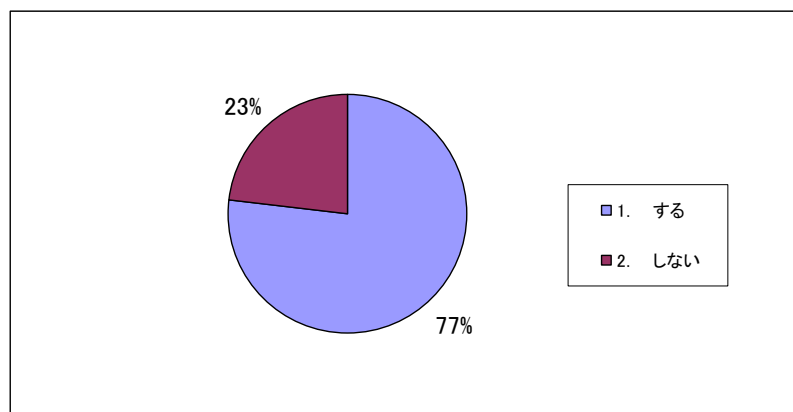
Q9 インシリコ創薬担当者数(ドッキングやMDなどの計算による研究開発に携わっている方)



23



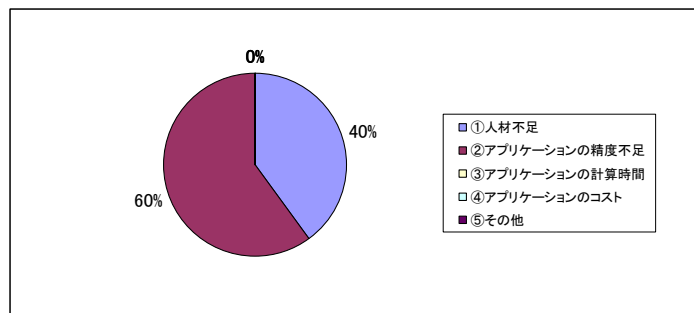
Q10 今後、コンピュータを用いた創薬研究を積極的に展開されますか？



24



コンピュータ創薬研究を積極的に展開しない理由



- 積極的に展開したいが、現時点では、アプリケーションの精度や計算時間が不明。
- 有効性、利用価値を示すことができれば、積極的に展開する。
- ある程度の精度で実験の代替ができるのであれば積極展開も考えるが、「創薬」をキーワードにした場合、現在の計算レベルでは実験を代替できないと考えている。
- コンピュータを利用した創薬は積極的に推進するが、それだけで創薬が可能な状況ではなく、実験との効率的な併用が前提。

25



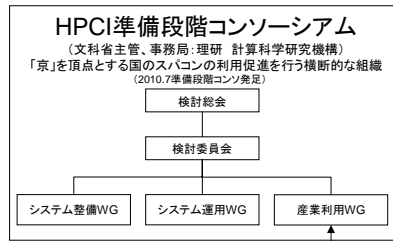
「京」や我が国のスパコンを取り巻く利用促進活動

- HPCIコンソーシアム(2012年4月)
- 理化学研究所
 - 計算科学研究機構(ハード整備、利用促進)
 - グランドチャレンジ(アプリ開発)
 - 戦略プログラム(アプリの開発とその利用促進)
- 産応協(ユーザコミュニティー)
- 計算科学振興財団(ユーザコミュニティー)
- バイオグリッドセンター関西(ユーザコミュニティー)
 - 事務局:公益財団法人都市活力研究所

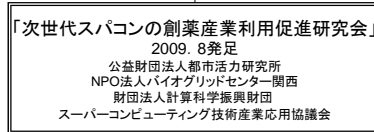
26



「京」や我が国のスパコンを取り巻く利用促進活動



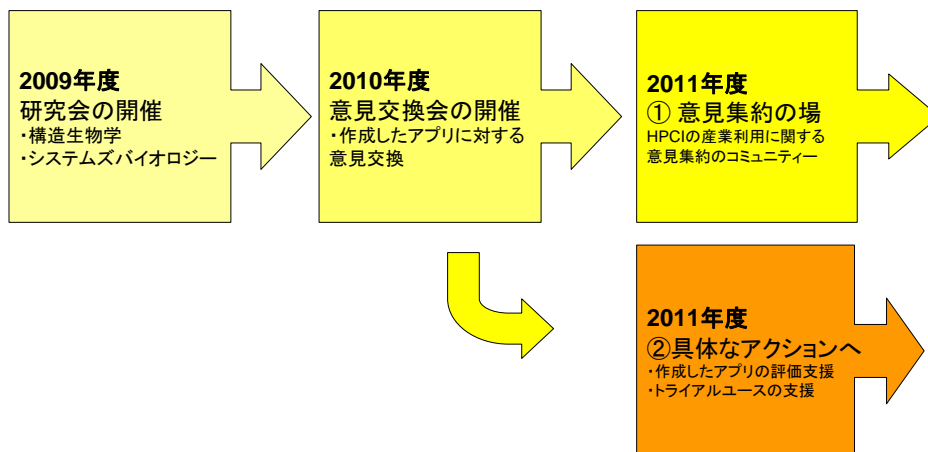
NPO法人バイオグリッドセンター関西
 スーパーコンピューティング技術産業応用協議会
 財団法人計算科学振興財団
 はコンソーシアムのメンバーであり、
 「産業利用WG」にも委員として参画



独立行政法人理化学研究所
 ・次世代計算科学研究開発プログラム(グランドチャレンジ:ライフ分野のアプリケーション開発 2006年度-2012年度)
 ・HPCI計算生命科学推進プログラム(戦略プログラム 分野1:アプリの開発と普及・啓蒙、人材育成 2011.4-2016.3)
 ・計算科学研究機構(「京」の利用促進 2010.7-)



「次世代スパコンの創薬産業利用促進研究会」 の活動と今後の展開



「次世代スパコンの創薬産業利用促進研究会」の活動

①意見集約のためのコミュニティ

- HPCIなどに対する製薬産業の意見を収集する場、コミュニティとしての機能



- 定期的な報告会・意見交換会を開催
- ニーズや要望に関するアンケート調査

29



「次世代スパコンの創薬産業利用促進研究会」の活動

②具体的なアクション

- 製薬企業からの課題を計算することによる性能評価の支援
- トライアルユース実施の支援
- アプリの実用性向上のための共同研究支援

30



「次世代スパコンの創薬産業利用促進研究会」のスケジュール(案)

	2011年度	2012年度	2013年度	2014年度
関連事項		11月 「京」共用開始	3-4月頃 うめきた開業	
意見集約	7月 研究会再組成の案内を送付 8/29-8/31 ・研究会の趣旨説明 ・HPCI産業利用WGの 内容を報告 ・デモ計算について説明 9月 アンケート実施	←————→ 定期的にHPCIの内容を報告、 デモ計算、トライアルユースの 結果を報告(4回程度/年) 3月 デモ計算評価 アンケート	3月 トライアル計算評価 アンケート	
デモ計算とトライアルユース	12/21-22 成果報告会(奥大) 12月-3月 デモ計算実施 計算結果評価	←————→ トライアルユース実施		
普及・啓蒙活動 (分野1との協力)	シンポジウム 10/19大阪 1/25東京	シンポジウム ●大阪 ●東京	シンポジウム ●大阪 ●東京	シンポジウム ●大阪 ●東京