



スーパーコンピューティング・ジャパン2024

「富岳」利活用コンシェルジュサービス
および「バーチャル富岳」on AWS
への取り組みの紹介



2024年3月13日
株式会社理研数理



RIKEN SUURI
CORPORATION

自己紹介

松崎 健一 (まつざき けんいち)

株式会社理研数理 取締役

兼 株式会社JSOL 未来共創デジタル本部 シニアスペシャリスト

兵庫県尼崎市出身、西宮市在住、東京都単身赴任

<専門分野>

アカデミア連携

新規事業企画・推進

生産管理・SCM・需要予測・CRMのシステム企画・導入

<業務略歴>

1993～ 住友金属工業で生産管理・需要予測

2001～ 日本総研で生産管理・SCMのコンサル

2009～ JSOLでSAP・グローバル

2015～ Salesforceビジネスの立上げ

2019～ DX・AI・IoT、イノベーション、アカデミア連携

2020.10～ 理研数理で常勤取締役



1. 理研数理の活動紹介
2. 「富岳」利活用コンシェルジュサービスの紹介
3. 「バーチャル富岳」on AWSへの取り組み、
展開される先行サービスの紹介



1. 理研数理の活動紹介



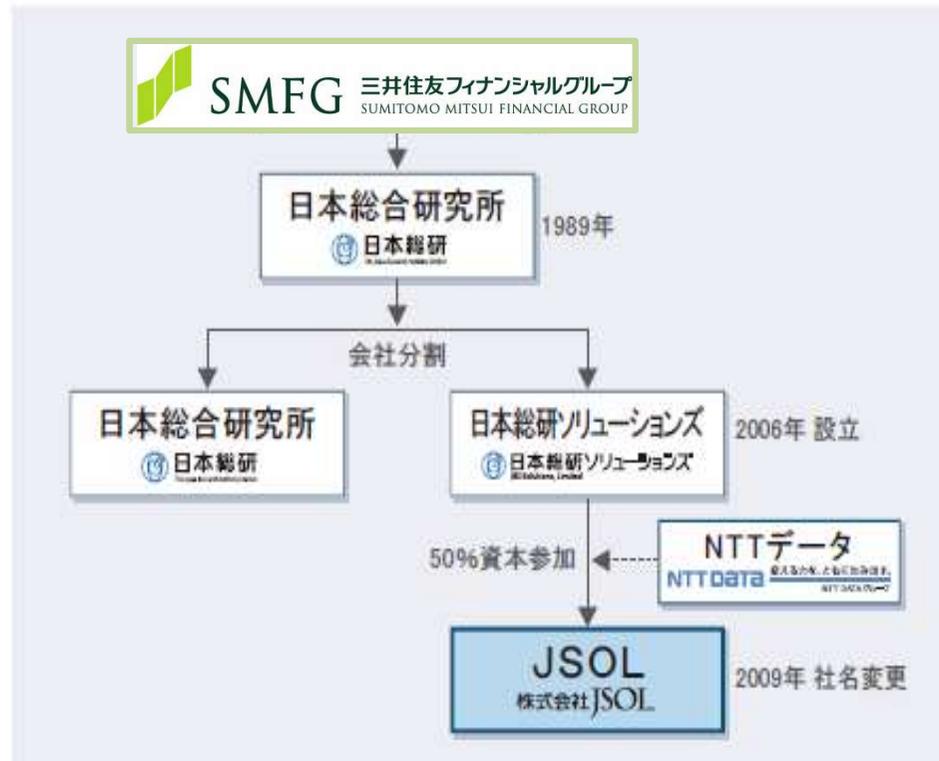
理研数理の資本関係について

理研数理は、2020年10月に、理化学研究所グループから50%、JSOLから50%の出資を受けて、産学連携・事業化を目的にしたベンチャー企業として設立されました。



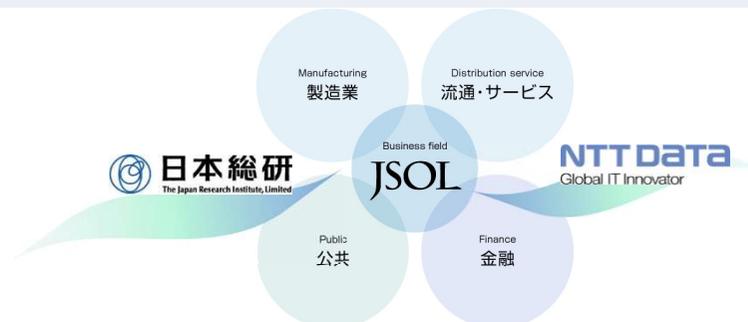
JSOLのご紹介

沿革



名 称：株式会社JSOL
設 立：2006年7月
資 本 金：50億円
従 業 員：1,300名
株 主：株式会社エヌ・ティ・ティ・データ（50%）
株式会社日本総合研究所（50%）
所 在 地：【東京本社】東京都中央区晴海2-5-24
【大阪本社】大阪市西区土佐堀2-2-4
【名古屋支社】名古屋市中区丸の内2-18-25

取引社数：1,300社超
情報系有資格数：3,000超
働きがいのある会社：大企業部門18位※2021年



▶ 2022年度に改組し、一体化組織を創設 = 共創本

JSOLビジネスの特徴



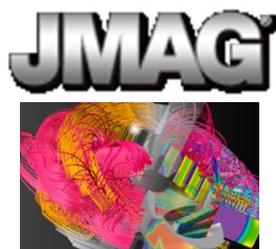
SI
System Integration

ERP導入において、日本有数の実績があります。
その他にも幅広い領域でSIサービスを提供しています。



CAE
Computer Aided Engineering

仮想空間における**シミュレーション**を用いた製品設計・開発



電磁界解析



材料・ライフサイエンス
マルチスケール解析



衝撃・構造解析

DX
Digital Transformation

AI等の先端技術を活用した独自のサービスやお客様独自のDXの推進をご支援しています。



企業成長予測



AI横断検索クラウド



商品情報管理クラウド



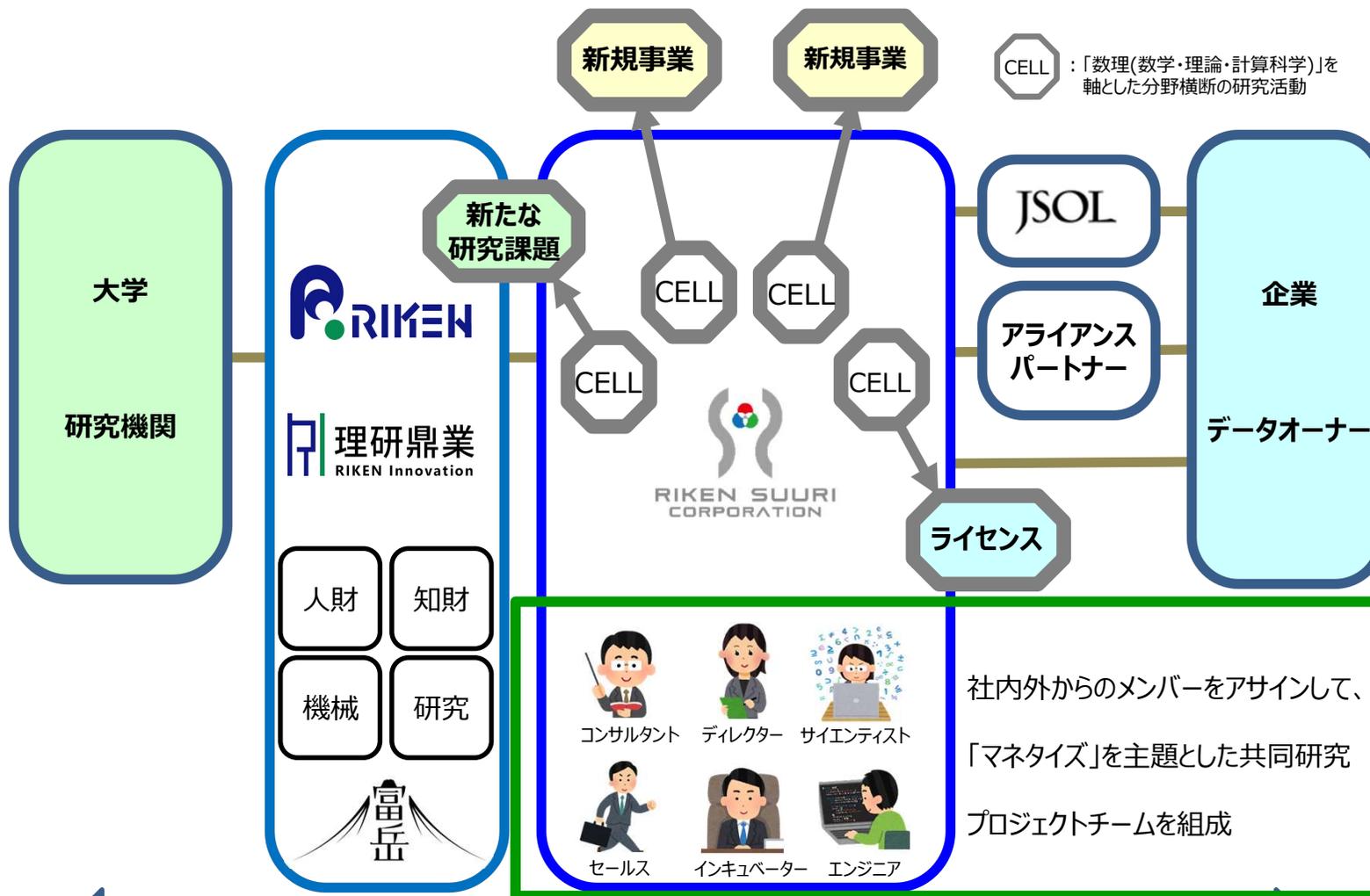
DX SUPPORT PROGRAM

DXコンサル

項目	内容
商号	株式会社 理研数理 (RIKEN SUURI CORPORATION)
所在地	東京都千代田区九段南1丁目6-5 (JSOL内)
設立日	2020年10月1日
資本金	3,000千円
株主構成	JSOL : 50% 理化学研究所 : 25% 理研鼎業 : 25%
会社区分	JSOLの連結子会社 (理研の持分法適用会社)
事業概要	<ul style="list-style-type: none"> ・数理モデルの研究開発受託/コンサルティング ・ソフトウェアプラットフォームサービスの販売 ・上記付随業務
代表取締役	江田哲也 (JSOL 常務執行役員)
取締役	松尾浩道 (理化学研究所 理事) 油谷好浩 (理研鼎業 代表取締役) 松崎健一 (JSOL 未来共創デジタル本部 シニアスペシャリスト)
監査役	筒井邦恵 (JSOL 法務知財部長)
他メンバー	Chief Science Advisor 初田哲男 (理化学研究所 iTHEMS プログラムディレクター) Chief Science Advisor 若山正人 (理化学研究所 iTHEMS 特別顧問) Chief Analytics Advisor 長瀧重博 (理化学研究所 iTHEMS 副プログラムディレクター)

理研数理のビジネスモデル

理研をはじめとしたアカデミアの研究シーズと、民間企業のニーズをマッチングさせ、共同研究を組成し、一定の成果を達成するだけでなく、新規事業の創出までを目標としています。



人財・知財・データ

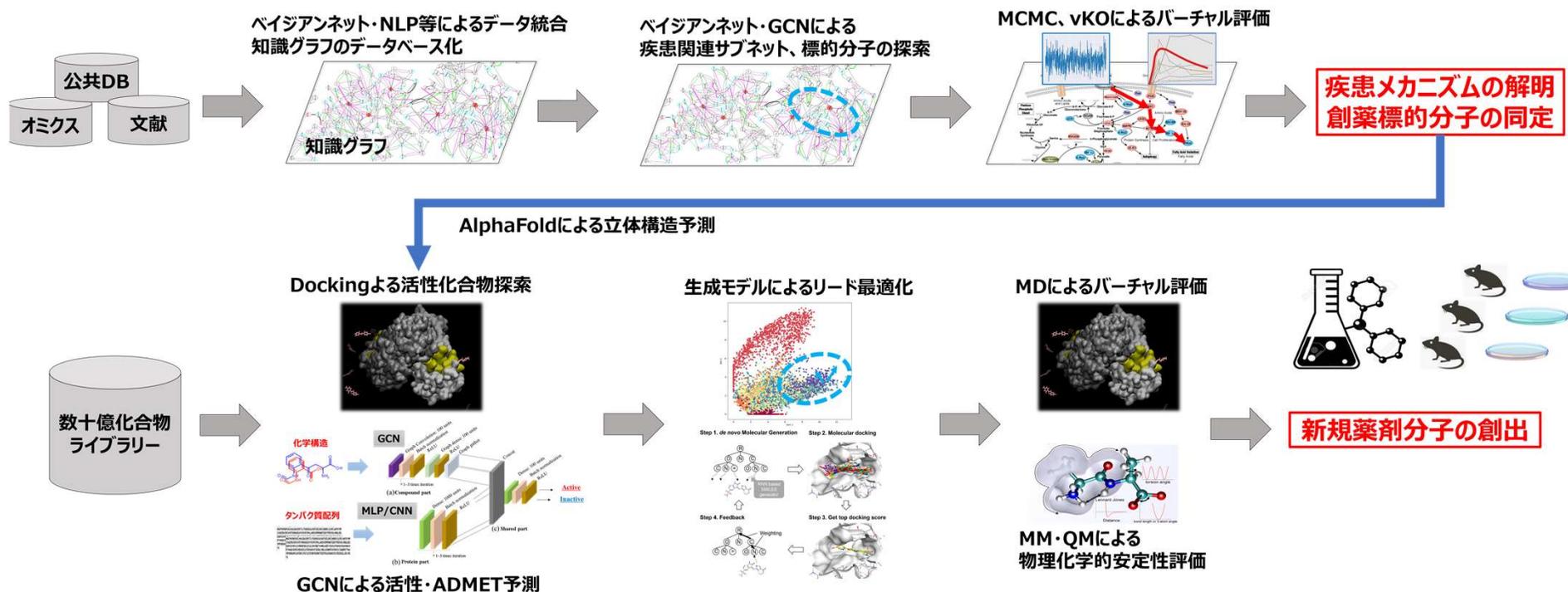
「富岳」創薬プラットフォーム（下記のHPC/AI 創薬プラットフォーム）の全体構想を理研数理が策定するなど、プラットフォーム構築を支援しています。

HPC/AI 創薬プラットフォーム

- ・「創薬ターゲット探索」⇒「リード化合物創出」に至るHPC/AIフローを構築
- ・「富岳」を中心に、HPC/AIフローの自動化を図ることで、創薬の超効率化を実現



創薬ターゲット探索： 疾患名・患者サンプルデータ等を入力して、疾患メカニズムや標的タンパクを推定するHPC/AIフロー



リード化合物創出： 標的タンパク質名を入力して、リード化合物を推定するHPC/AIフロー

AMED DAIIAプロジェクトの事業化コーディネーターとして理研数理が参画して、Federated Learning（連合学習）システムの構築・テスト・事業化を支援しています。

https://www.amed.go.jp/program/list/11/02/001_02-04.html

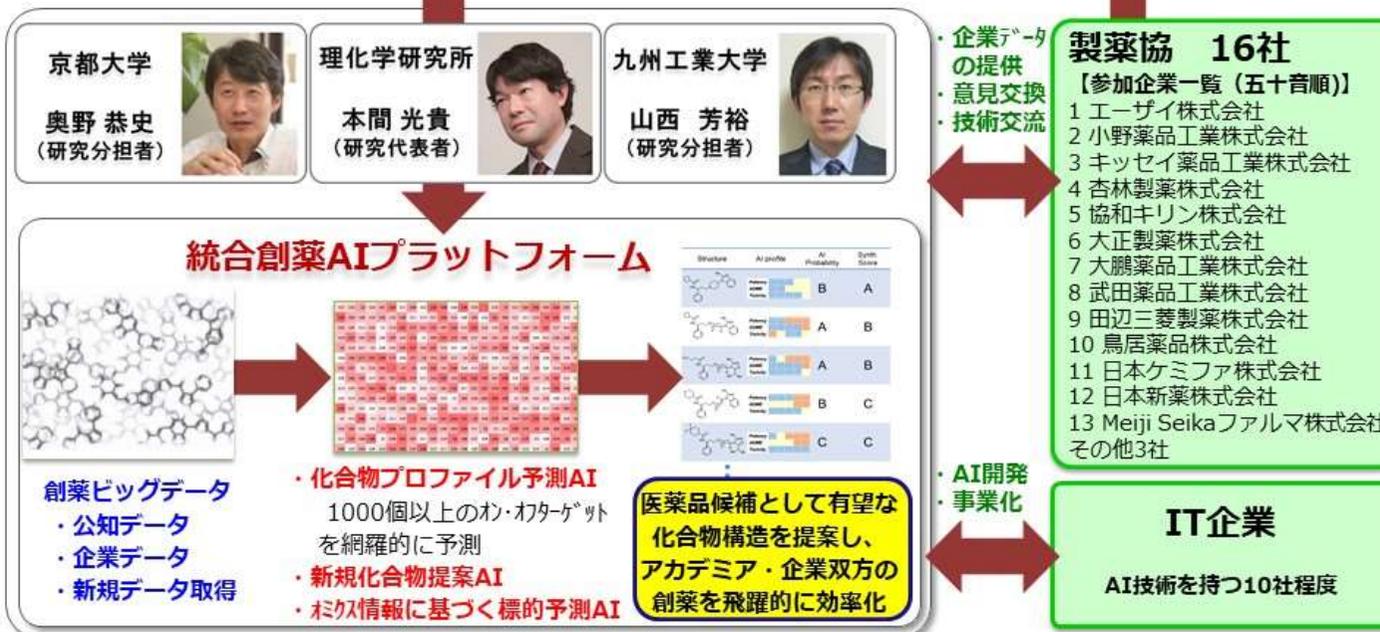


産学連携による次世代創薬AI開発 (DAIIA)

Development of a Next-generation Drug Discovery AI through Industry-academia Collaboration

日本の製薬企業、日本の創薬化学の強みと最先端AI技術の融合による
実用的かつ包括的な創薬AIプラットフォームの構築

AMED・創薬事業部（事務局・研究委託契約・企業連携） iD3

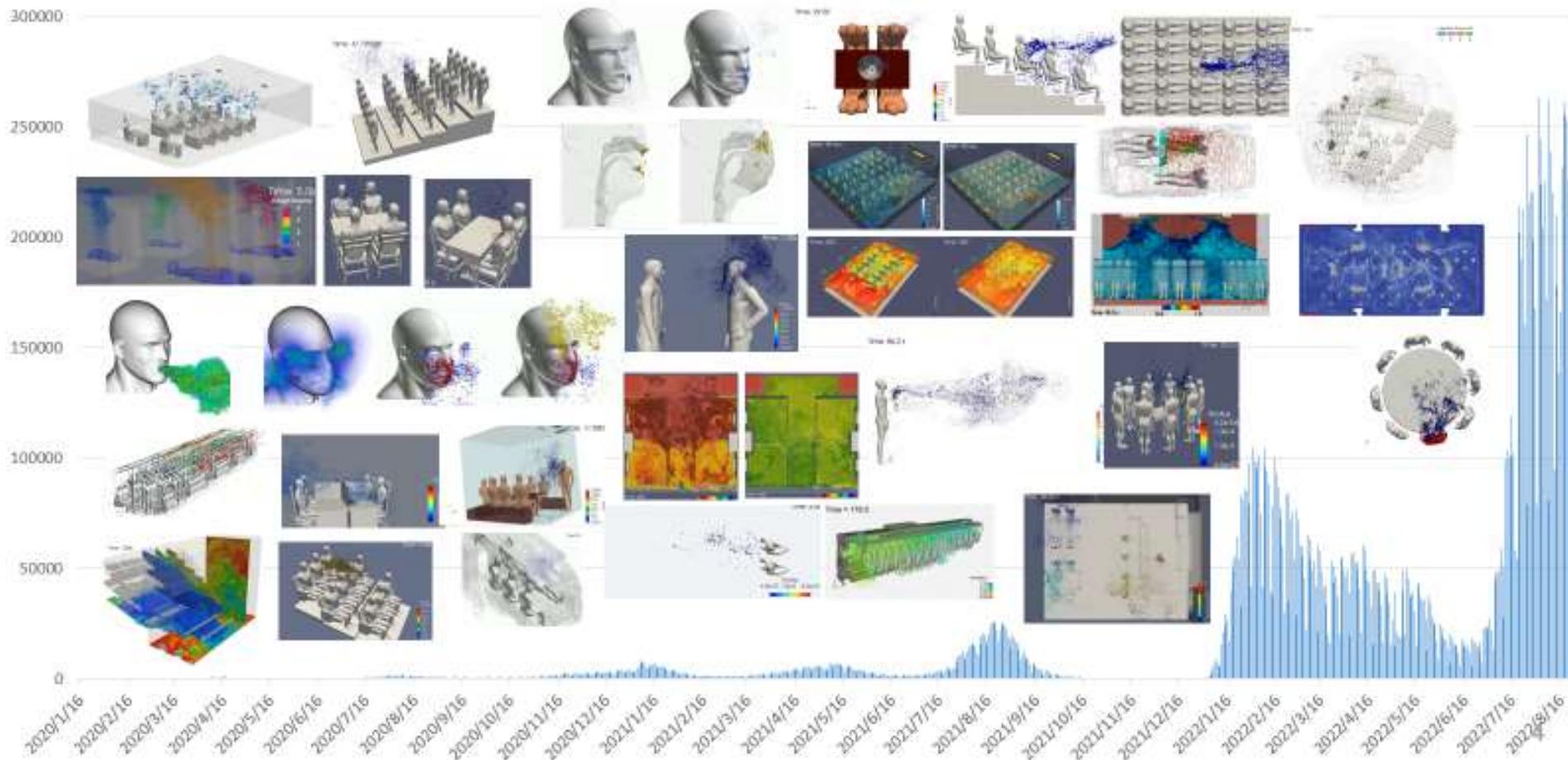




2年半に渡るスパコン「富岳」による新型コロナとの闘い



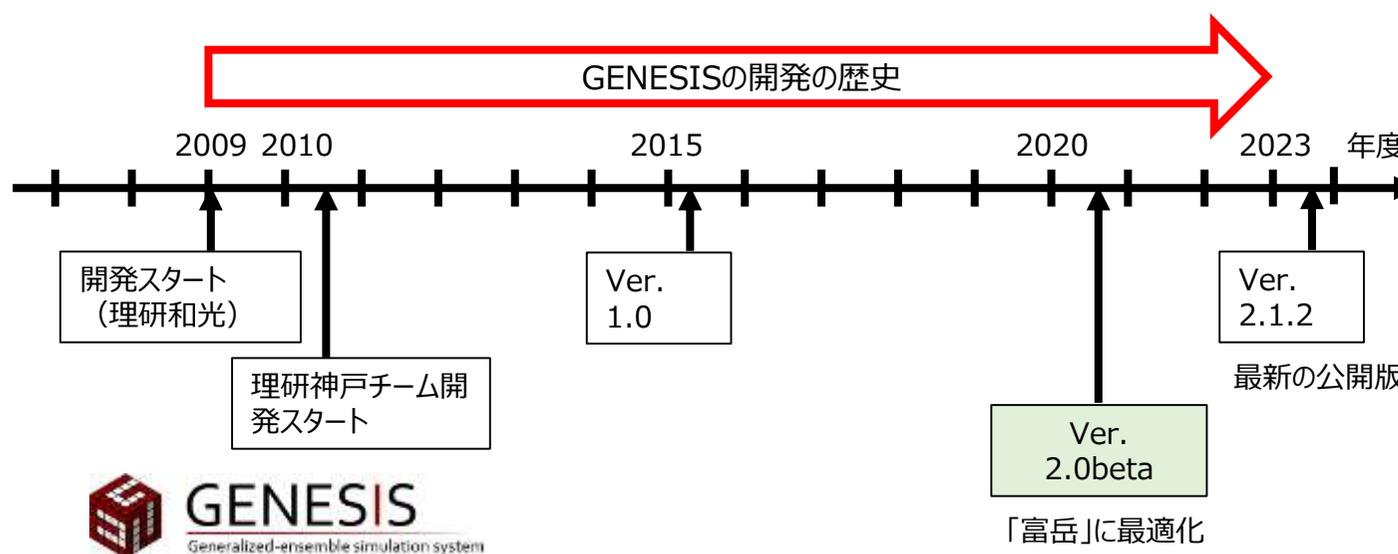
● シミュレーションにより70以上の感染シーンに対して1,500ケースを上回る飛沫感染リスク評価と対策の提案





分子動力学ソフトウェアGENESIS

- 理研を中心に開発している超並列分子動力学ソフトウェア
- 「京」、「富岳」など様々な計算機で利用可能
- フリーソフトウェアとして公開中 <https://www.r-ccs.riken.jp/labs/cbrt/>
- 「富岳」のターゲットアプリとしてコデザイン



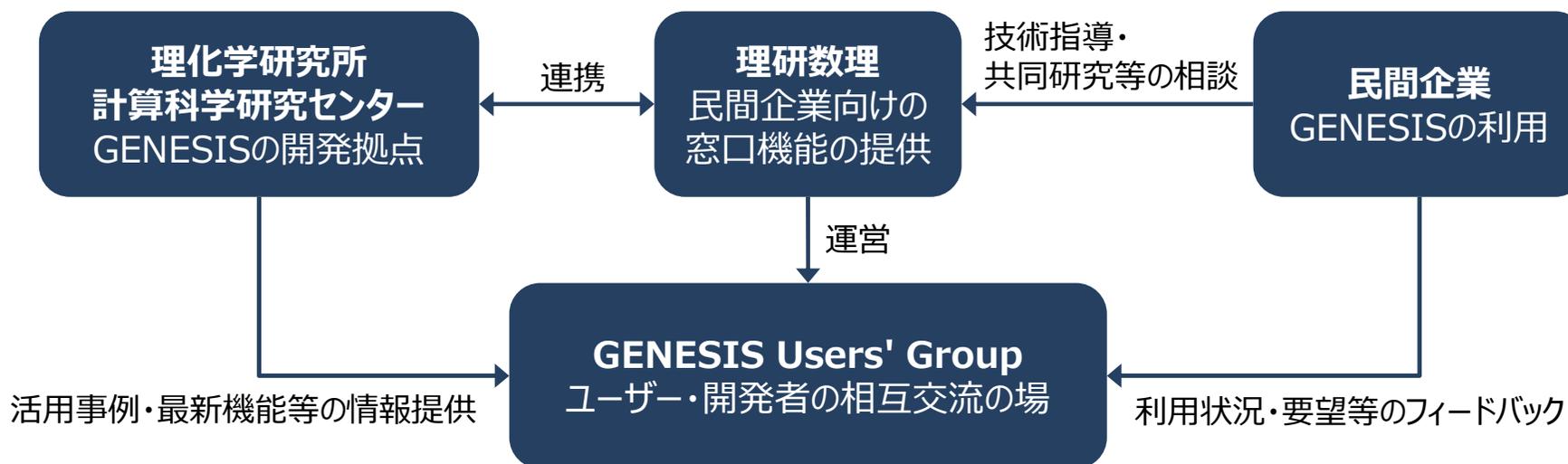
GENESISの開発者



理研数理による民間企業向けサポート

理研数理が民間企業向け窓口機能を提供

- ユーザー・開発者の相互交流の場であるGENESIS Users' Groupを運営
- 民間企業が希望する技術指導・共同研究等をサポート
- JSOLとの協業によりGENESISプリポスト機能を提供





内閣府が主催する日本オープンイノベーション大賞（第6回）に、 理化学研究所・杉田チームリーダーが主導、JSOL・理研数理が共同推進した 「分子動力学ソフトウェアGENESISの開発と社会実装」が 文部科学大臣賞を受賞しました。

本取り組みは、理化学研究所 計算科学研究センター 杉田チームリーダーが研究・主導する分子動力学ソフトウェア「GENESIS」をフリーで公開され、さらに産業界への活用を促進するため、理研数理にて「GENESIS」ユーザ会の企画・運営や、JSOLが保有する材料シミュレーションソフトウェア「J-OCTA」とのインターフェース開発・機能追加を行い、産業界向けに普及促進しました。アカデミックの研究から生まれた最先端科学技術の社会実装を実現したことが評価されました。

(2024/2/14 授賞式)



左から 松崎健一（(株)理研数理 取締役）、杉田有治（理化学研究所 計算科学研究センター チームリーダー）
李秀栄（医薬基盤・健康・栄養研究所 主任研究員）、小沢拓（(株)JSOL エンジニアリング事業本部 部長）

日本オープンイノベーション大賞について
日本のオープンイノベーションをさらに推進するために、オープンイノベーションの取組で、模範となるようなもの、社会インパクトの大きいもの、持続可能性のあるものについて、担当分野ごとの大臣賞、長官賞、経済団体、学術団体の会長賞等の表彰をするとともに、各賞の中で最も優れたものを内閣総理大臣賞として表彰。

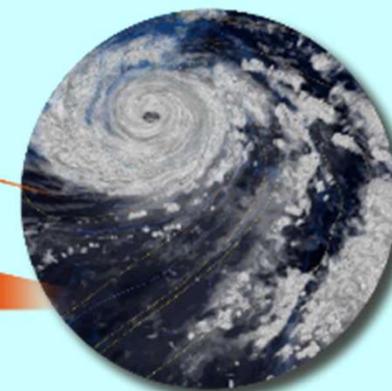
観測・実験データ

シミュレーション



データ同化

Data Assimilation



データ同化は、シミュレーションと現実世界を結びつけ、相乗効果を生み出す。

双方の情報を最大限に抽出

理研数理の事業化の取り組み例（5/6）

理研 三好先生との協業：理研データ同化スクール（2/2）

- 2021年は基礎編（オンライン）、2022年は応用編（オンライン）を開催。2023年は基礎編を合宿形式で初開催し、5名の受講生（いずれも企業の研究者）が参加した。
- 2023年9月25日(月)～9月29日(金)に4回の講義、4回のチュータリングを完了。
- 技術指導契約・共同研究契約への誘引を目的にフォロー予定。
- 最終日に記念撮影、修了証をサプライズ表彰。



ホテルからの景色



講義風景



ボーリング大会



夕飯（日々豪華でした）



懇親会（カラオケも）



最終日

科学道 データ活用と大規模計算による研究加速

Transformative Research Innovation Platform of RIKEN platforms

TRIP (令和5年度新規施策)

新型計算機と予測アルゴリズム、データ整備を連携させ、
未来の予測制御の科学を開拓



2. 「富岳」利活用コンシェルジュサービスの紹介





理研は、「富岳」運用者の立場から対応するべく、計算科学研究センターに、
『「富岳」Society5.0推進拠点』を新設（2021年4月、於：東京日本橋）

- ・センター全体での「デジタルツインのシミュレーション」「シミュレーション・データ・A Iの連携」の研究開発の強力な推進にあわせ、
- ・**産業界など幅広い主体との連携を創出・発展させる。**
- ・そのため、FOCUS、富士通と、さらには**JSOL／理研数理**との協働体制

出典：理化学研究所 計算科学研究センター 「「富岳」Society 5.0推進拠点の始動と活動状況」
<https://www.r-ccs.riken.jp/wp/wp-content/uploads/2021/10/s5-office-211001.pdf>（一部加筆）



Society5.0へ向けた投資効果(RoI)の具体化・最大化



これら「富岳」デジタルツインでの胎動を大きなムーブメントへと発展

- 理研がハブとして貢献（「富岳」Society5.0推進拠点を2021年4月に設置。ノウハウある機関との協働、民間視点の導入。）
- 一つ一つの取組から技術的・制度的課題を抽出し、解決。あわせて取組事例を発信。取組が取組を呼ぶように。
- 「富岳」デジタルツインを政策を超えた産学官プラットフォームへ。日本IT団体連盟から2022年度政策要望の一つに。

出典：理化学研究所 計算科学研究センター 「富岳」Society 5.0 推進拠点について
<https://www.r-ccs.riken.jp/about/s5-office/>

Society5.0の実現

大規模スパコンたる「富岳」の優位性を最大限に活かし
複雑な社会問題の全体最適を解くことができるユーザやアプリを増やす

より大規模でより高度な
社会課題を全体最適で解く

自社プロジェクトや
自社の課題を解く

「富岳」を使ってみる



出典：理化学研究所 計算科学研究センター「ファーストタッチオプション・クイックスタートガイド」
<https://www.r-ccs.riken.jp/wp/wp-content/uploads/2022/08/first-touch-quick-guide.pdf>

「富岳」利活用コンシェルジュサービス（1/3）



お客様のニーズに合わせ必要なメニューを組み合わせでご提供します。

アセスメント

お客様のニーズをヒアリングさせていただき、研究・開発業務への具体的な「富岳」の利活用方法のご提案や、お客様に寄り添って、あらゆる観点から「富岳」利用を提案します。

課題申請の代行

「富岳」の利用に必要な課題申請書の作成や申請に関わる手続きを代行します。

環境構築

お客様が「富岳」で利用したいプログラムのインストールなど、実行環境構築をご提供します。

計算代行

お客様に代わって、入力データの加工、パラメータ設定、「富岳」用のジョブ設定およびジョブ実行、結果レポートの作成などをエキスパートが実施します。

利用報告書作成・提出の代行

「富岳」利用終了後、60日以内に提出が必要となる利用報告書の作成および提出を代行します。

伴走

「富岳」利用に関する質疑応答や、エラーが発生した際の対応方法の相談など、利用時に発生する疑問や課題に対して、エキスパートが丁寧にサポートします。

技術指導・共同研究

難易度の高い貴社の課題や研究・開発業務の高度化に向けて、理化学研究所の研究者などと協力して最適な解決策を提案します。

お客さまへの提供価値

- 「富岳」を活用した産学官連携の取り組みに参画した経験豊富なエンジニアが、お客さまの業務課題の解決に向けた「富岳」の利活用方法を提案します。
- 産業界向け「富岳」利用マニュアルを作成したコンサルタントが、お客さまのニーズに適した利用制度の提案や利用手続きを支援します。
- 理化学研究所をはじめとするアカデミアとの長年の信頼関係を生かし、お客さまの研究・開発業務の高度化に向けて、研究者による技術指導や共同研究をコーディネートします。

産業界における「富岳」の先進的利用の一例

産業界において「富岳」は、製品設計、材料開発、創薬などにおいて幅広く利用されています。また、その利用範囲を急速に広めつつあります。

- CAE解析結果を用いた機械学習モデルの検証
- 化学メーカーにおける材料の設計シミュレーション
- 精密化学メーカーにおける電解質の伝導メカニズム解析
- 医薬品分子の結晶構造予測
- 船舶の自航試験を代替するシミュレーション
- 建築物の耐風設計流体シミュレーション
- 住宅設備機の微細気泡および飛沫を含むシミュレーション
- 工作機械の切削加工シミュレーション

3. 「バーチャル富岳」on AWSへの取り組み、 展開される先行サービスの紹介 (GENESIS on AWS)



「富岳」のソフトウェア成果をまとめる「バーチャル富岳」

「富岳」の成果はハードウェアだけではなく、「計算による科学」を実現するための多くのアプリやシステムソフトウェアの研究開発が行われ、結果として世界トップクラスのスパコン利用環境を達成

その環境を仮想化・パッケージ化して、他のスパコンやクラウドにスパコンにおける「Windows」「iOS」のような標準利用ソフト環境提供（今まではスパコンによってソフトウェア環境はバラバラ）

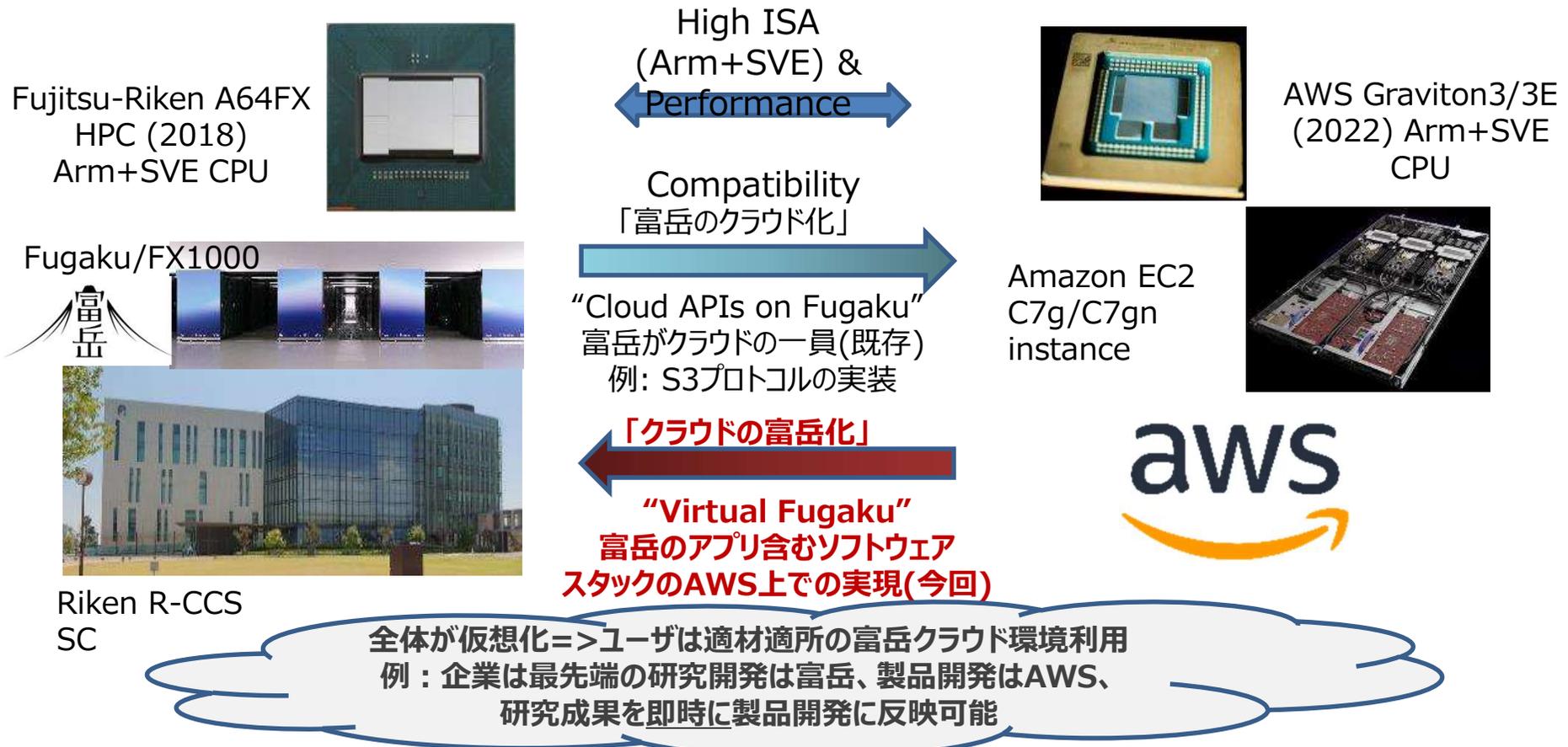
ハード以上にソフトが富岳プロジェクトの大きな持続的成果→社会実装・普及へ

- ケース1: 富岳ユーザー→バーチャル富岳(サテライト環境) on AWS
 - 企業が富岳を利用しR&D → 秘匿性の高い開発時に制限の無いAWSに移行
- ケース2: バーチャル富岳ユーザー(プライベート環境) on AWS → 富岳(リアル)
 - 裾野の広いユーザーが富岳環境をAWS上で試行し、ステップアップで富岳に移行
- ケース3: スパコンの環境統一によるユーザーの利便性
 - ユーザー: Windowsなどと同様、OpenOnDemandなどの統一環境を学べば、どのスパコンも同じ使い勝手、同じアプリ、同じノウハウ
 - ソフトウェア開発者(例: 成果創出など): 単一の整備されたソフトウェア環境のみを開発ターゲットとする事による質の向上と開発工数の削減→高度なサイエンスアプリの普及
 - 管理者、サポート企業: 単一環境のサポートによる迅速・正確な対応大幅な工数の削減



出典: 2023年8月24日 理化学研究所 計算科学研究センター 松岡センター長 講演資料
「バーチャル富岳」: 「富岳」の成果を広く流布し、スパコンの利用環境の革新・標準化を目指す」

(2023年MoU締結 AWS & R-CCS) クラウドを通じた富岳の成果の拡張



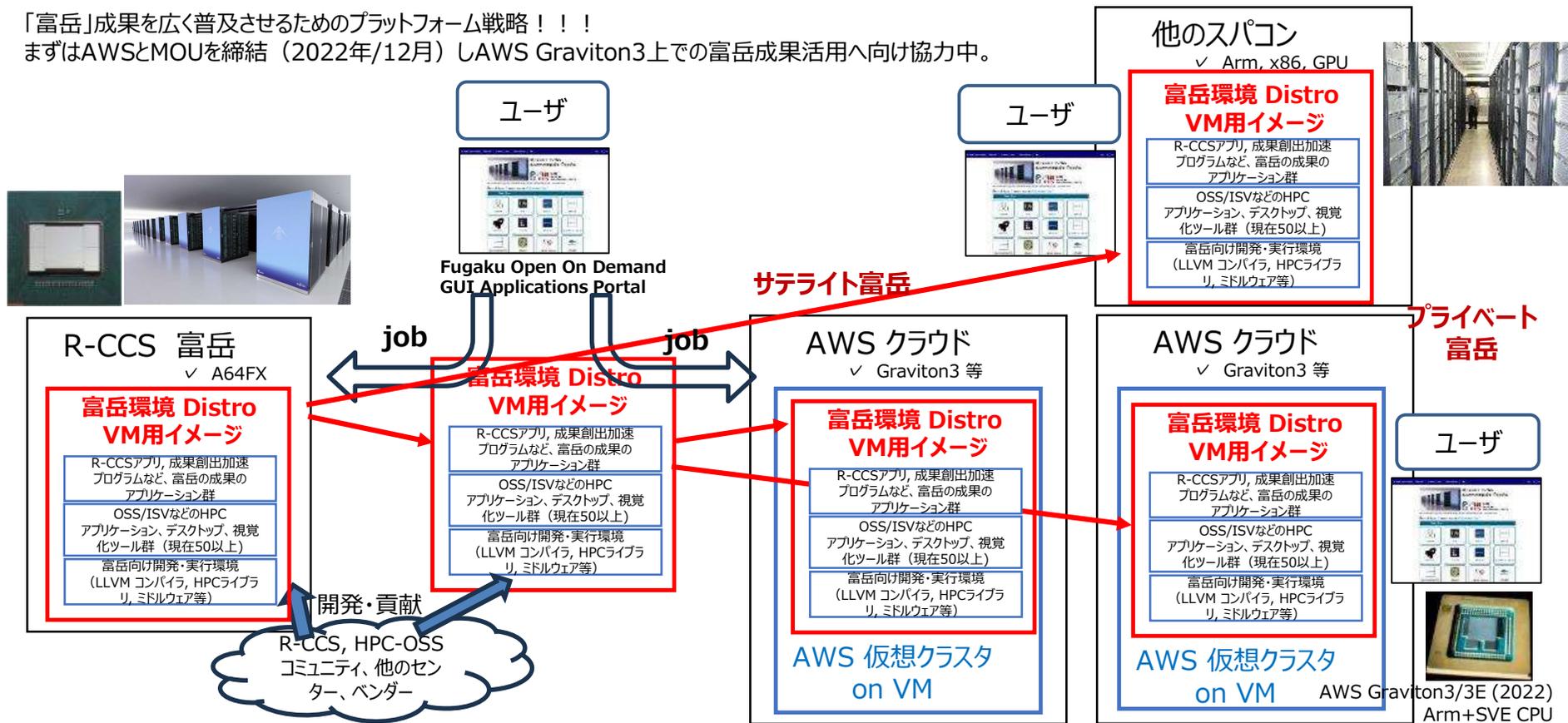
出典：2023年8月24日 理化学研究所 計算科学研究センター 松岡センター長 講演資料
「バーチャル富岳」：「富岳」の成果を広く流布し、スパコンの利用環境の革新・標準化を目指す」

R-CCSの「バーチャル富岳」への取り組み（3/4）

『富岳』単体から『バーチャル富岳』へ：スパコンソフト環境のデファクト化

他のスパコンや商用クラウド上でも『富岳』と同じ環境で開発・利用可能に！

「富岳」成果を広く普及させるためのプラットフォーム戦略！！
 まずはAWSとMOUを締結（2022年/12月）しAWS Graviton3上での富岳成果活用へ向け協力中。



出典：2023年8月24日 理化学研究所 計算科学研究センター 松岡センター長 講演資料
 「バーチャル富岳」：「富岳」の成果を広く流布し、スパコンの利用環境の革新・標準化を目指す」

Virtual Fugaku Timeline

- Towards Release by 4Q 2023

R&D Items		FY2022	FY2023	notes
Overall Schedule		① SW Stack Def (Exec Env.) May ② SW Stack Def (Dev Env.)	Aug ③ SaaS Prep ④ PaaS Prep Dec SaaS Test (R-CCS apps) PaaS Test (Apps TBD)	
		Beta release?		
①	Software Stack Def (Exec Env.)	Determine SW dependency of Fugaku SW Env by Apps in AWS porting Initial Eval(Simple Porting) NTChem, EigenExa, GENESIS, HPL-AI, Tuning & Other apps Analysis of SPACK logs for software stack assessment		Operational Division + AWS
	Fugaku SW Stack Assessment	AWS ops test	Determine detailed deployment Schedule	
②	(Dev Env.)	AWS Readiness of Fujitsu SW	OpenOnDemand Portal for Apps	Broaden Apps
③	SaaS Prep & Testing	Unified user view w/OpenOnDemand	Service Model Analysis	
④	PaaS Prep & Testing	Service Assessment	S5推進拠点	

出典：2023年8月24日 理化学研究所 計算科学研究センター 松岡センター長 講演資料
 「バーチャル富岳」：「富岳」の成果を広く流布し、スパコンの利用環境の革新・標準化を目指す」

「バーチャル富岳」on AWSの先行サービス提供（1/2）

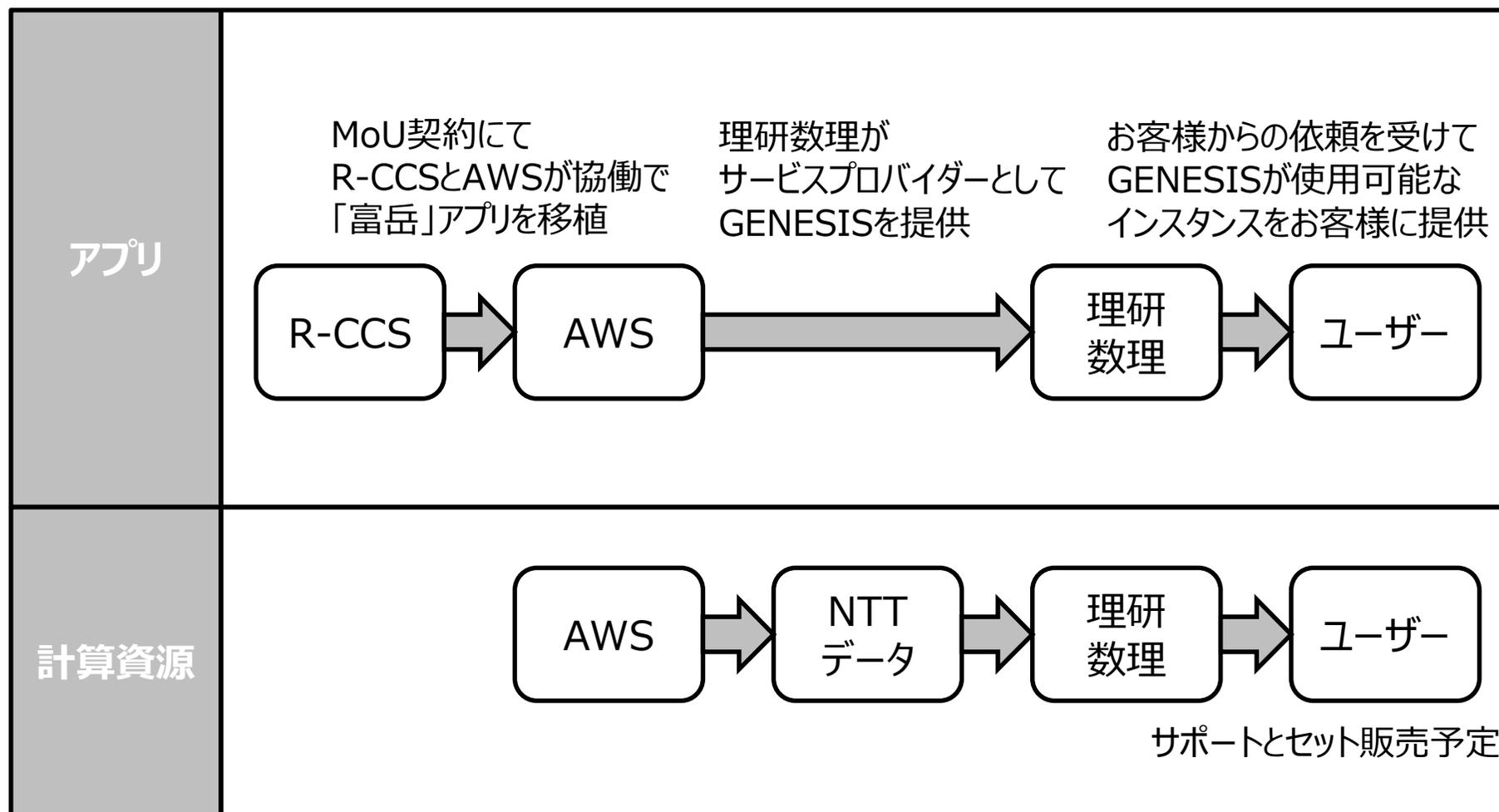
- 将来的に、理研数理が「バーチャル富岳」on AWSにて商用サービス提供を検討している「富岳」アプリは下記の通り。（R-CCS・理研数理が協調し、提供するアプリケーション・時期を都度協議中）
- 「バーチャル富岳」on AWSに先行した、GENESIS on AWSの商用サービスを秋口に提供開始予定。

No	アプリケーション	分野	想定ユーザー	備考
1	GENESIS (杉田先生)	①創薬 ②材料開発	①製薬メーカー ②化学メーカー	• 杉田先生と協業推進中 • 商用利用を準備済 • 製薬企業とPoC予定
2	CUBE (坪倉先生)	①室内環境設計 ②自動車空力デザイン ③都市・建築デザイン ④燃焼	①ゼネコン・空調メーカー ②完成車・部品メーカー ③ゼネコン ④重工メーカー	• 坪倉先生と協業推進中 • 商用利用を準備中
3	NTChem (中嶋先生)	①材料開発	①化学メーカー	• 中嶋先生と協業相談中
4	SCALE (富田先生)	①気象予測	①天気予報、気候変動 リスク分析、海運	• 企業・アカデミアでの有償 利用のニーズを確認中

- その他に、「富岳」上で稼働・利活用されているOSSについても、企業様からのニーズの高いものから、順次サービス提供することを検討中。（ニーズ調査中、ご要望受付中）

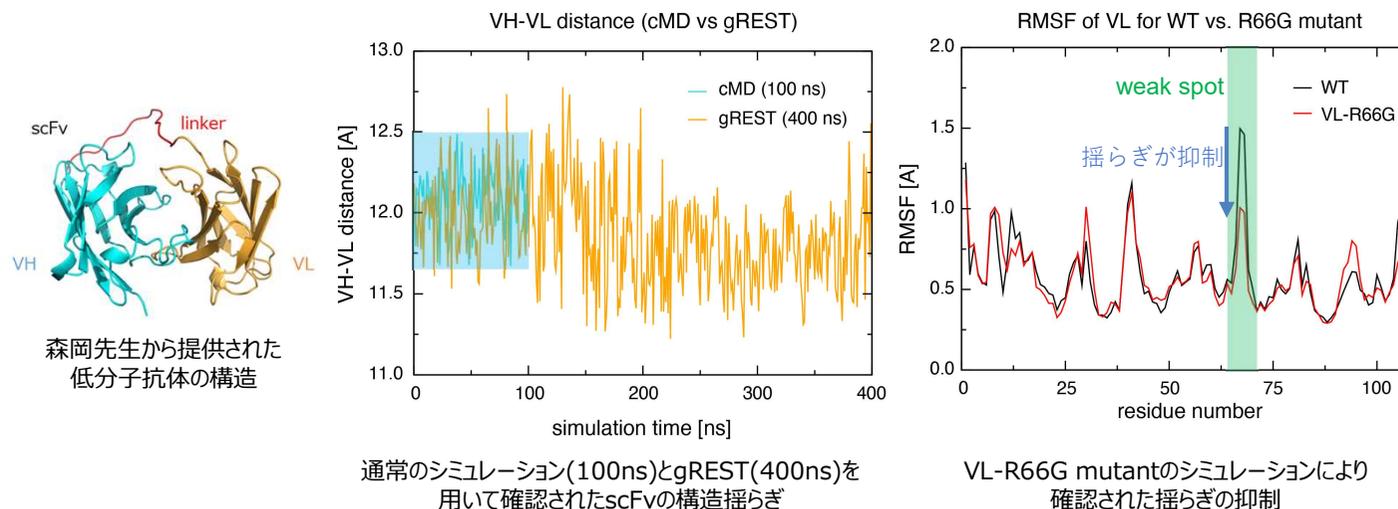
「バーチャル富岳」on AWSの先行サービス提供（2/2）

- 理研数理がお客様からの依頼を受けて、GENESISがインストール済のAWSのインスタンスを提供
- 計算資源はNTTデータ経由して理研数理が販売（AWSのサポートはNTTデータから提供）
- お客様向けに、アプリ費用（GENESISは無償）、アプリサポート費用、計算資源費用をセット販売



1. Single-chain Fv antibody (trastuzumab) のシミュレーション

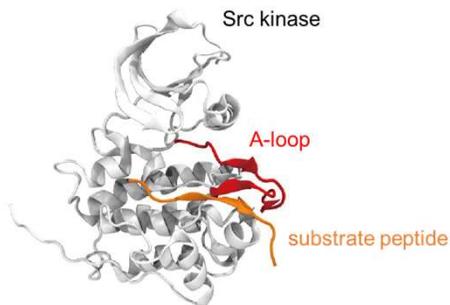
- 熊本大学 生命科学研究部 鄭先生が熊本大学 薬学部 森岡先生と連携して、低分子抗体の構造揺らぎの評価と、アミノ酸置換による構造揺らぎ抑制を評価
- Trastuzumab由来のsingle-chain Fv antibody (wild type) に対する通常のシミュレーション及びgREST、VL-R66G mutantに対する通常のシミュレーションの計3パターンを計算
- 通常のシミュレーション(100ns)により、scFvの構造揺らぎを確認できた。gREST(400ns)は、より効率的に構造サンプリングできるため、より大きな揺らぎを確認できた
- VL-R66G mutantのシミュレーションにより、揺らぎが抑制されていることが示された



2. Srcキナーゼと基質ペプチドのgRESTシミュレーション

- 基質ペプチドとの結合がSrcキナーゼの構造にどのような影響を与えるかをgRESTシミュレーション
- 熊本大学 生命科学研究部 鄭先生が「富岳」で実施済の計算と同じ計算。同じ64ノードで計算
- AWSが2倍速い ※「富岳」が48コア/ノード、AWSが64コア/ノードの差を要考慮

ベンチマーク：Srcキナーゼと基質ペプチドのgRESTシミュレーション

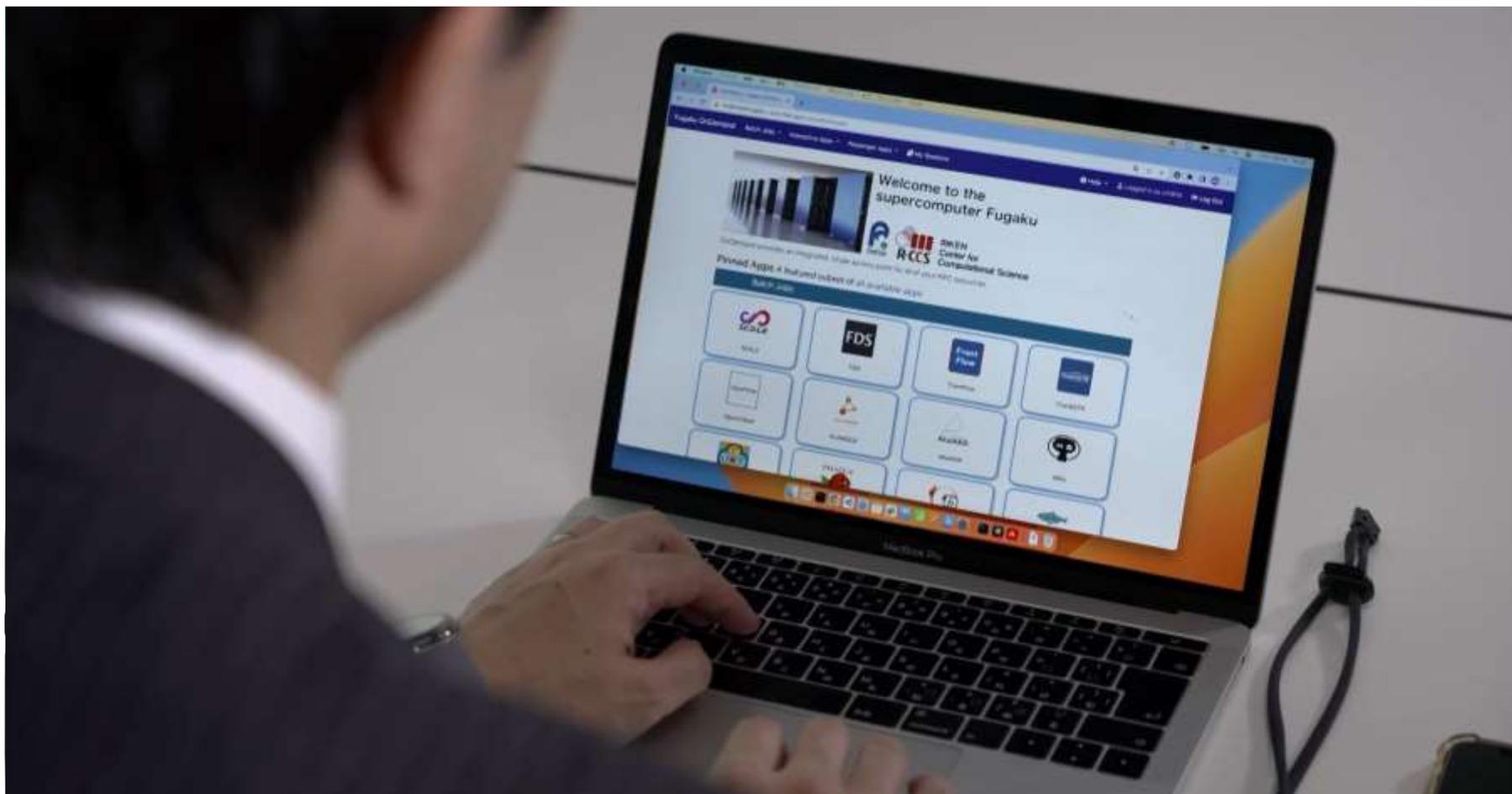


	Fugaku (48 CPU cores per node)	AWS (64 CPU cores per node)
Number of nodes	64	64
Number of MPI processes	512	512
MPI processes per node	8	8
Number of threads	6	8
Total number of CPU cores	3072	4096
Computational time (10 ns)	8805 sec	4495 sec

3. 計算資源料金の比較

- 今回のPoCの計算に使用したAWS資源量 : 3510NH (ノード時間)
- AWS (バーチャル富岳) の計算資源料金 : 86万円 (= 5,909US\$, 145US\$/円)
- 「富岳」で同じ計算を実施した場合の計算資源料金 : 46万円 ※AWSは「富岳」の1.87倍
「富岳」の計算時間が2倍掛かることを考慮し、「富岳」の利用料金65.76円 (利用報告書非公開、10万NH以下、定額制) により算出

Fugaku OnDemandからGENESIS on AWSを利用可能 (予定)



1. GENESISをAWS上で「富岳」上と同様に利活用可能

- 企業様が「富岳」上で創薬・材料開発のR&D → 秘匿性の高い開発時に制限の無いAWSに移行
- GENESISをAWS上で試用し、ステップアップで「富岳」に移行
- Fugaku OnDemand（統一的GUI環境）により、「富岳」もAWSも同じ使い勝手を実現

2. 必要な時に、必要な量だけ、利用可能

- 理研数理がお客様からの依頼を受けて、1週間後にAWSインスタンスを提供
- 使用した計算資源量に応じた従量課金制
- 利用報告書は不要

3. GENESIS・AWSのインストール・環境構築・サポートがセットで提供される

- GENESIS、Fugaku OnDemandがインストール・環境構築された、AWSインスタンスを提供
- GENESISとAWSの操作に関するサポートを理研数理がセットで提供
- ハイスキルのユーザーは、OSSのGENESISを自身でインストール・環境構築、計算資源を自身でAWSから直接購入した上で、AWS上でGENESISを利用することも可能（それを妨げない）
- 親会社のJSOLと協業し、必要なプリポスト機能の開発・提供を検討中

4. 企業課題解決のための提案も受けられる

- 難易度の高い企業課題の解決や、研究・開発業務の高度化に向けて、R-CCS杉田先生と連携して、最適な解決策（技術指導、共同研究、等）を提案
- GENESIS Users' Groupを通じて、GENESISの最新機能、利活用事例をタイムリーに共有



RIKEN SUURI CORPORATION

株式会社理研数理

松崎 健一

TEL:070-3526-9954

東京都千代田区九段南一丁目6番5号 九段会館テラス 〒102-0074

E-Mail:matsuzaki.kenichi@riken-suuri.jp <https://www.riken-suuri.jp/>