

全体討論意見集計にあたって



- 本資料は、第1回統合ワークショップ(量子バイオ)全体討論において、「量子バイオシミュレーションソフトウェア普及に向けた産学官連携」のテーマのもと、パネリストと会場の皆様との間で交わされた意見を集計したものです。様々な視点から展開された議論は、どれも大変示唆に富むものでした。意図的な意見集約を極力防ぐため、発言のあった順番に、その内容を箇条書きしました。全体を通しての読みやすさが多少犠牲になりましたことをご了承のうえ、討論の臨場感を味わっていただければ幸いです。ー参加者一同
- なお、討論に先立ち、趣旨説明として以下の説明を行いました。
 - 国内外で各種先端的ソフトウェア、次世代ハードウェア開発プロジェクトが同時に推進されている
 - 高精度・高信頼だが大量の計算資源を要求するシミュレーションによる産業イノベーションが定着するチャンス&分岐点
 - 円滑な遂行のための、大所高所からの議論が始まっている
 - 個々のソフトウェアの特徴に特化した議論は少ない
 - バイオ分野に限っても広大
 - 個々のソフトウェア単位では、普及することが最も大きな推進力である
 - 量子バイオシミュレーションソフトウェアも、基本機能や実用的な計算事例が整備され、普及を現実的なレベルで議論できるフェーズに
 - 忌憚のない意見を産学から募り、今後の活動に反映
- 同様に、本討論を進める上で掲げたテーマと討論の約束事として以下の説明を行いました。
 - 主なテーマ
 - 既存バイオシミュレーションソフトウェアの問題点と量子バイオ・イノベーション基盤ソフトウェアへの期待・要望
→ 既存ソフトと本ソフトの上手な共存・使い分け方を探りたい
 - 先端的量子バイオシミュレーションソフトウェアの利用・開発に関する人材育成
→ 普及という観点を中心に今何をすべきか議論を展開したい
 - PJ後も視野に入れた量子バイオシミュレーションソフトウェアの将来像・夢
→ より長期的なゴールを共有したい
 - 討論の進め方
 - パネリストによる意見開陳と会場との議論
 - 最後に討論された意見を無記名集約し、意見集として公開

既存バイオシミュレーションソフトウェアの問題点と 量子バイオ・イノベーション基盤ソフトウェアへの期待・要望



■ 既存バイオシミュレーションソフトウェアの問題点

■ 適用限界、機能限界

- 分子間相互作用の定量的解析が困難
タンパク質-低分子化合物、タンパク質-タンパク質、電荷移動、 π 電子、...
- 分子の立体構造安定性解析が困難
複数のX線解析構造、ホモロジーモデリング構造、複合体構造、
- 独自デザインの多様な化合物が扱えない
- 金属イオン等が不得手(精度が?)

■ その他

- 使いにくい!! 初心者には不親切、入力がすべてコマンド
解説書が膨大で英文、初心者は解読困難、くじけてしまう
- 習熟が必要
- 初心者にも使いやすいものあり、しかし高額. サポート不親切
- 他のソフトとの互換性ない。(データ読み込めない.)
- 解説書、できないこと、してはいけないこと、の記述・説明が無い
- ハードウェアを購入するとき、ソフトウェアがどのハードウェアで動くのか、OS, CPU, Memory, HDDどの程度必要か?なかなか情報が得られない。
ハードウェア屋さんはソフトウェアに詳しくない。(逆に質問される。いったい何をやりたいのですか?)

既存バイオシミュレーションソフトウェアの問題点と 量子バイオ・イノベーション基盤ソフトウェアへの期待・要望



どのような計算を行うのか(創薬研究)

タンパク質立体構造<無>構造活性相関、構造物性相関、重ね合わせ、・・・
<有>ドッキングシミュレーション、in Silico screening, ホモロジーモデリング、・・・
様々なシミュレーション、解析の組み合わせ⇒ソフトウェアを繋げてWork Flowを作る

■ 量子バイオ・イノベーション基盤ソフトウェアへの期待や要望

■ 機能、操作性

- 分子間相互作用、分子立体構造安定性の定量的解析
- 多様な化合物、金属イオン等の取り扱い
- 酵素触媒反応、遷移状態計算
- 他のソフトウェアとの互換性⇒組み合わせによるWork Flow

■ その他

- より正確に、より速く、より簡単に(1回の計算で数種の物理量を得る)
- 実験研究家の利用が広がると更に意味あり
- 様々なOSで動くことよい. 簡単にインストールでき、手持ちのPCで試せる
- シームレス化必要
最初はベンゼン1分子; PC1台. その後小型タンパク質; PCクラスタ. そして、複合体; ES.
大学、センターのハイエンドマシン(スパコン)は公開(審査、共同研究)されている

既存バイオシミュレーションソフトウェアの問題点と 量子バイオ・イノベーション基盤ソフトウェアへの期待・要望



- 市販・in-house・イノベーション基盤の各ソフトウェアを共存・使い分けるコツ
 - ユーザ
 - 様々なソフトウェアを繋げてWork Flowを作る(⇒互換性必要)
どのソフトウェア使っているかを意識せずに使う
 - 各ソフトウェアが何を解析できるのか熟知する
 - 自分が何を解析するのか明確にする
 - イノベーション基盤ソフト
 - 互換性確保のため、読み込み寛容に、書き出し厳密に
 - 使いやすさの追及、時間をかけて改良
 - 現時点では他のモデリングソフト必要
⇒独自のモデリングソフトを開発したい. 可変電荷力場、精度の検証必要

先端的量子バイオシミュレーションソフトウェアの利用・開発に関する人材育成



- 一般シミュレーションソフトウェアの利用・開発、人材教育の取り組み
 - 利用・開発
 - 多様なソフトウェアを使う
 - ニーズに応じて機能修正、機能追加を行う
 - シミュレーションは専任者、その後、合成者とディスカッション. 何度も繰り返す
 - 大企業は、実用化している. 中小企業は、まだ何に役立つのかもわかっていない(現)状況
 - 人材・教育
 - 求められる内容は年々多様化、多岐にわたる機能を使える人材の育成必要
 - 創薬全体を俯瞰できる人材、創薬テーマの流れをよく読める人材必要
適切なシミュレーション、解析の選択と実施
 - 実験研究者、理論研究者、IT技術者、誰がシミュレーションを行うのが良いか？
 - 大学の機械工学で、バイオソフトウェア開発者のコース立ち上げ
 - シミュレーションは学際、今までにはない教育が必要
「生命科学シミュレーション」という講義と演習を実施
 - 地域企業へコンピュータシミュレーション技術の普及
解析支援ネットOKAYAMA(流体、構造、及び、分子解析. 分子解析は特に難しい)

先端的量子バイオシミュレーションソフトウェアの利用・開発に関する人材育成



- 量子バイオシミュレーションソフトウェアの人材育成教育と産学官連携
 - 普及
 - ソフトウェアと実証はセット
 - どの場面で有用なのか事例が必要(わかりやすい、実感できる)。しかし、研究の公表までには長い時間がかかる
 - ハードウェアの壁は低くなった
 - 初めての計算に、現在のマルチコアPCは有用
 - GPUの利用、今後のサポート必要(倍精度で性能が出れば、継続あり)。ECCのようなチェック機能も必要。ビットエラーあり
 - ソフトウェアの壁はまだ高い
 - Windowsは使いこなしている。LINUXはまだ。コマンド使えない
 - ソフトウェアの速度も必要。モデリング技術も必要
 - ステップバイステップの実践的な事例集の充実が必要
 - Wikipediaの利用。みんなで寄って集って書く。早くできる可能性あり
 - Gaussianのチュートリアルは良くできている。フォーマットが固まったから
 - 慣れ、洗脳(?)、情報交換／公開、必要
 - 計算は、簡単そうに見える。でも、絶対やりたいと思わない。という人多い
 - 従来の方法では解決できない。そのとき、計算に入った
 - シミュレーションは学際。バックグラウンドが異なり、言葉が違う
 - 産学官連携
 - ノウハウを共有できる場をつくる(バイオWG)
 - 人材育成教育
 - シミュレーション高度化、複雑化、知識経験必要。"Computational Medicinal Chemist"育成
 - 講師の育成、講師の生活も考えて、お金も必要
 - "講師300人計画" 教育者の育成のための予算、国が出さない場合、どうするか？

PJ後も視野に入れた量子バイオシミュレーション ソフトウェアの将来像・夢



- 5～10年後を視野に入れた量子バイオシミュレーションソフトウェアの理想・希望
 - 機能・性能
 - Windows OSで(グリッド?)並列計算
 - 様々な並列計算に対応
大規模(ES,サーバ)、中規模(1000コア、研究室レベル)、小規模(デスクトップPC)
 - HDDからSSD (Solid State Drive、高速な半導体ディスク)移行に対応
安価で高速計算可能
 - 古典MDの適用できない領域に量子バイオシミュレーション適用
 - 有機合成のための化学反応経路探索用の量子シミュレーションソフトウェアの開発
 - 量子MDは、古典MDより数万倍遅いが、小規模系であれば可能
自由エネルギー計算に踏み込む
 - ABINIT-MP vs. GAMESS/FMO 解析ツールで差別化
 - 相互作用エネルギーの精度向上
変性タンパク質の電子状態
活性値予測(タンパク質-低分子化合物、タンパク質-タンパク質、...)
 - FMOでも周期的境界条件を可能にする。
FMOのポテンシャルを100%引き出せるプログラムを開発

PJ後も視野に入れた量子バイオシミュレーション ソフトウェアの将来像・夢



- 5～10年後を視野に入れた量子バイオシミュレーションソフトウェアの理想・希望
 - サポート
 - 継続的な開発、サポート体制必要
 - 互換性必須
様々な既存ソフトウェアを統合した“統合量子バイオシミュレーション計算システム”
 - 企業独自のプラットフォームから自在に計算できる環境
 - 初心者、実験研究者が、コンピュータ、ソフトウェアに関する基礎知識を得るための補助
 - 計算に適したコンピュータの調達等. 相談できる場所が必要
 - 産学連携
 - 先ず、多くの事例収集が必要. その先に独自ノウハウ
 - 開発主体は学、改良、応用は産. という棲み分け
 - 参加者が目的、理念を良く理解する
 - ナノ分野のソフトウェア、周期的境界での計算等も視野に入れる