

三菱ケミカルにおける Open OnDemandへの 取り組み

2023年10月11日
三菱ケミカル株式会社
Science & Innovation Center
Materials Design Laboratory
杉山肇



研究開発の現場におけるマテリアルズインフォマティクスやAI、ディープラーニング利用の普及から、従来シミュレーションを専門とせず、HPCを利用していなかった層も、GPUや並列処理を活用した高度な計算を求める声が多くなってきました。

これらの利用者が普段利用してるPCと同程度の操作感で、HPCを利用できるようにするためOpen OnDemandの試験導入を進めています。今回は当社におけるOpen OnDemandへの期待、取り組み状況をご紹介します。

会社紹介: 概要

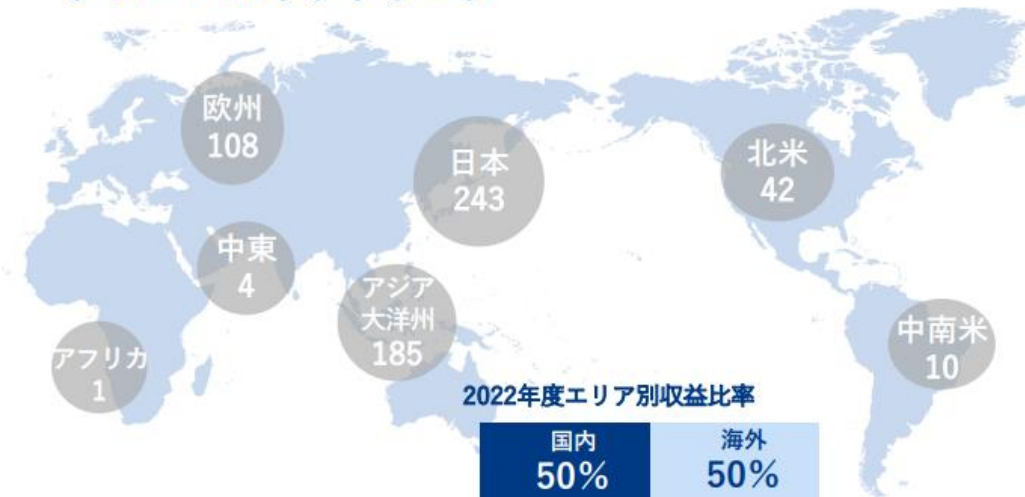
会社概要

商号	三菱ケミカルグループ株式会社
代表者	代表執行役社長 Jean-Marc Gilson
資本金	500億円
従業員数	68,639名 (連結)
関係会社数	593社
決算期	3月31日

※ 2023年3月31日現在



グローバルネットワーク



三菱ケミカルグループ株式会社 会社説明会 <https://www.irwebcasting.com/20230621/4/b7378a95ad/mov/main/index.html>

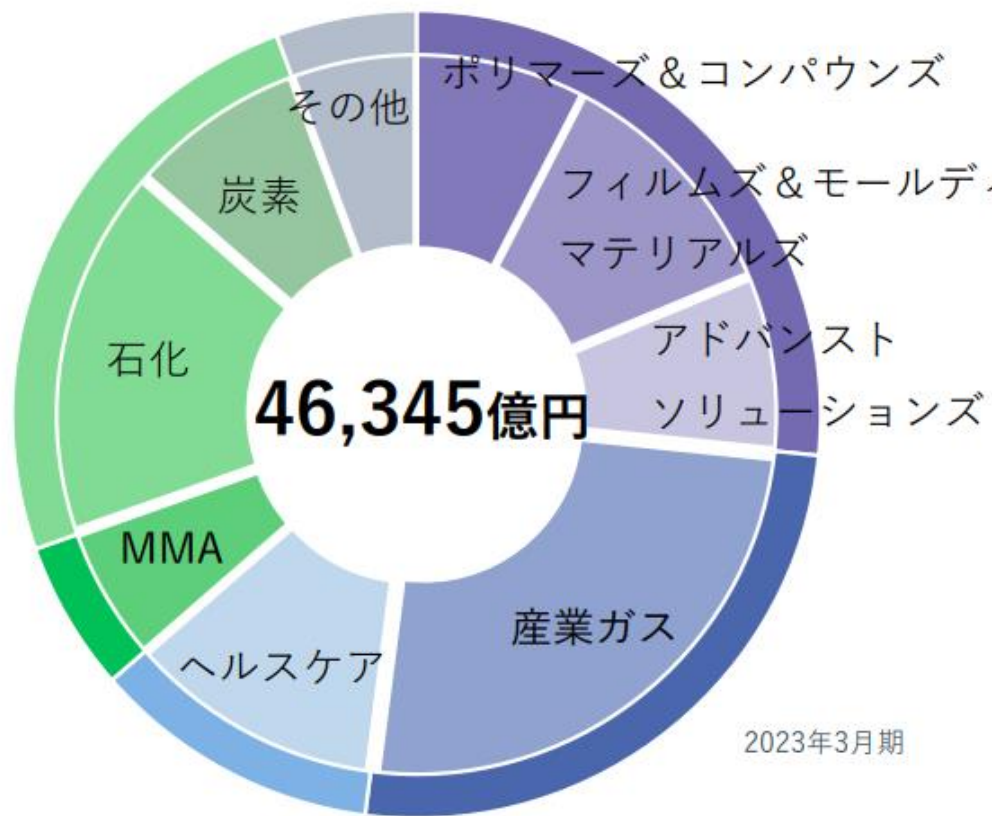
ベーシックマテリアルズ



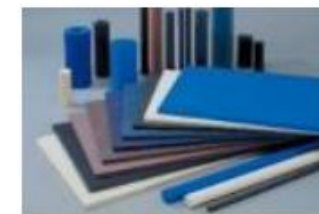
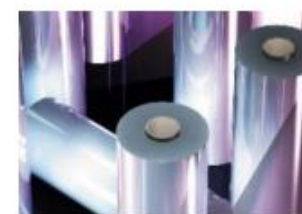
MMA



ヘルスケア



スペシャルティマテリアルズ



産業ガス



会社紹介: スペシャルティマテリアルズ

半導体関連材料

高純度薬品や半導体製造装置部品洗浄サービスを幅広い地域で展開



電池材料

主に電気自動車用途にグローバルに展開



ディスプレイ用部材

グローバルに展開
光学用ポリエステルフィルムの世界シェア約20%。トップシェア。



食品包装材

EVOHは世界シェア40%以上



食品機能材

乳化剤のシュガーエステルは世界トップシェア



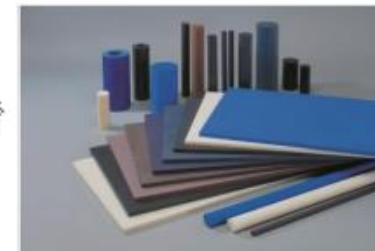
食品包装用フィルム

バリア性など高機能な製品を食品市場へ提供



高機能エンジニアリングプラスチック

グローバルリーダーとして、産業機械、自動車、医療、半導体など幅広い分野で展開



機能性樹脂

自動車用途を中心に幅広い分野で展開
エアバックカバー用途で世界シェア40-50%



MMA

幅広い用途展開

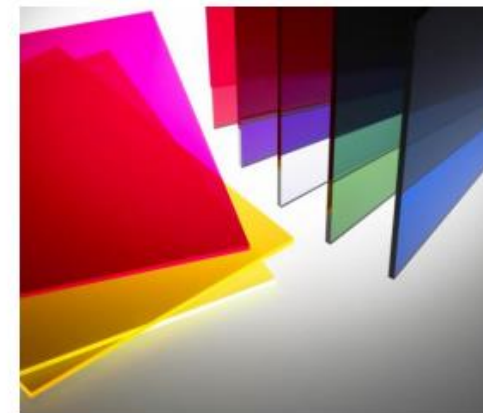
自動車のランプカバー、店舗の看板標識、照明器具、液晶導光板、水族館の水槽、接着剤、塗料など

世界シェア約30%のNo.1サプライヤー

世界で唯一3製法を保有し、高い競争優位性

世界供給ネットワークの構築

製造拠点の立地環境に最も適した製法を選択し、効率的に事業を展開



産業ガス

産業ガス市場においてグローバルシェア4位、国内シェア1位



石化

石化原料、基礎化学品、ポリオレフィン



炭素

コークス、炭素材、カーボンブラックなど



中枢神経

米国で約20年ぶりの新薬となる筋萎縮性側索硬化症(ALS)治療薬「ラジカヴァ」を発売 (2017/8)
経口剤を米国(2022/6)、カナダ(2023/2)、日本(2023/4)で発売



免疫炎症

関節リウマチやクローン病、潰瘍性大腸炎などを適応症とするバイオ3剤「レミケード」「シンポニー」「ステラーラ」でシェアNo.1



糖尿病・腎

持続性GIP/GLP-1受容体作動薬「マンジャロ」を発売 (2023/4)
自社創製の2型糖尿病治療剤「テネリア」「カナグル」「カナリア」、腎性貧血治療剤「バフセオ」等、糖尿病治療に貢献

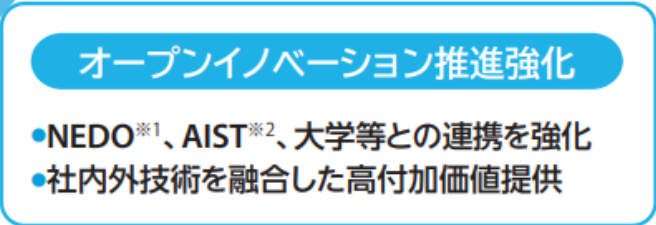
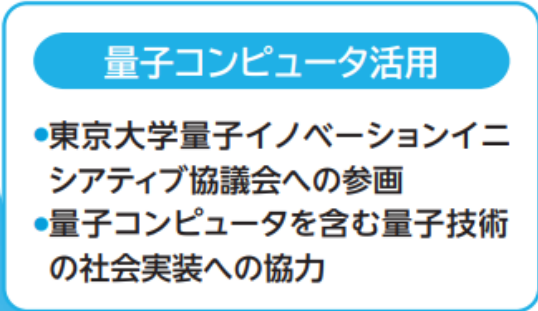
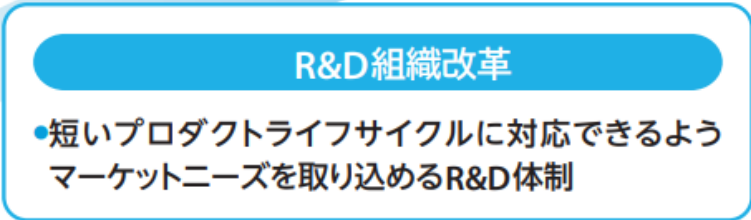
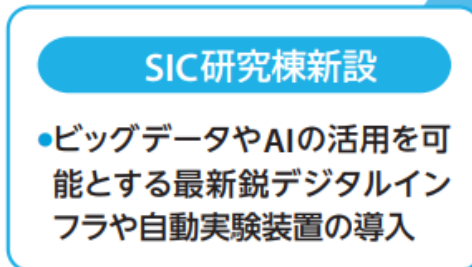
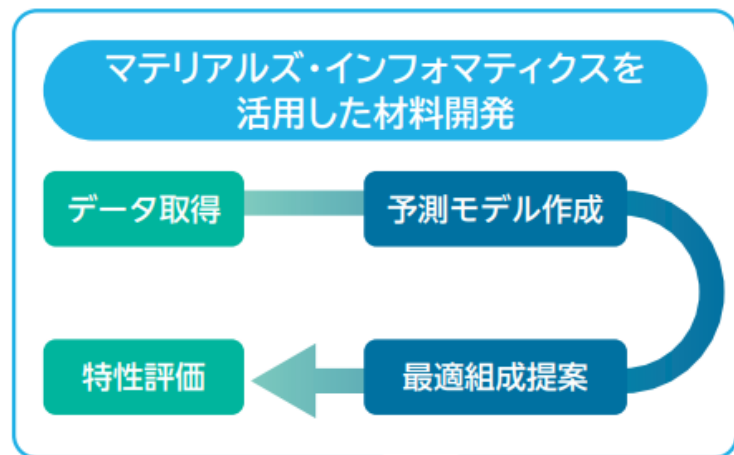


がん

MT-2111(抗CD19抗体薬物複合体):P1/2 (日本)

デジタルR&D・オープンイノベーションを活用したR&D効率化推進

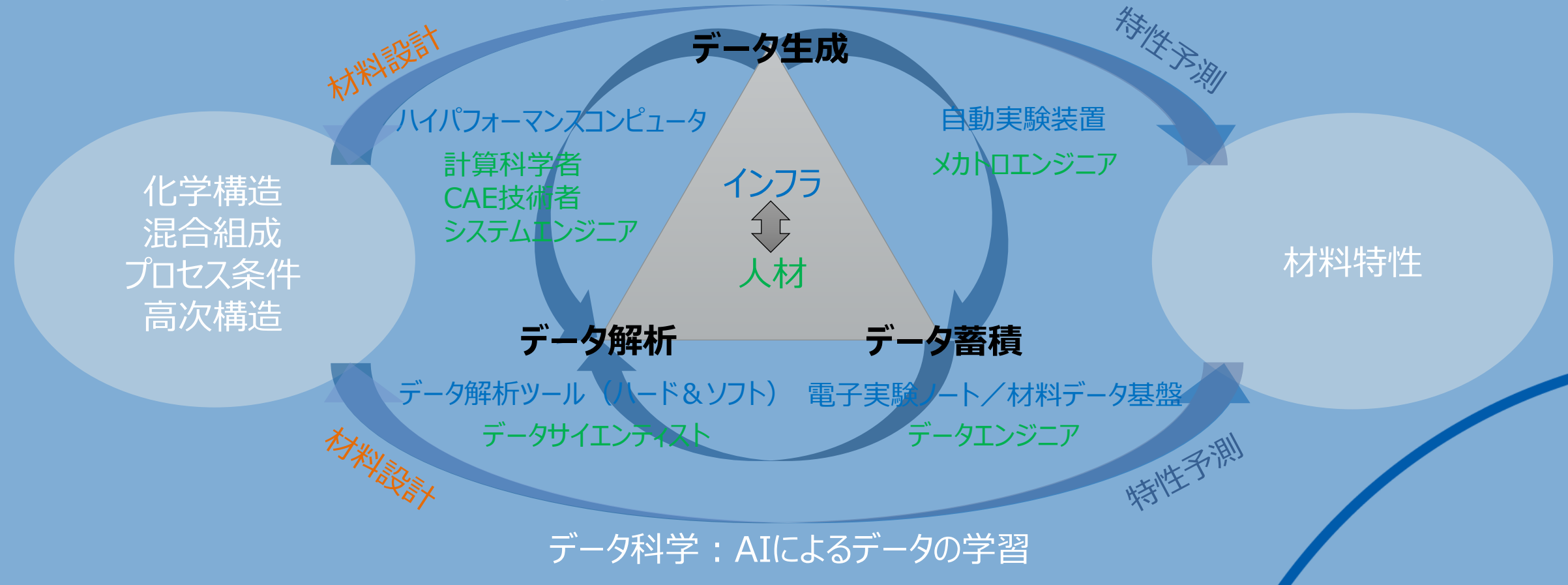
R&D強化に向けたさまざまな取り組み



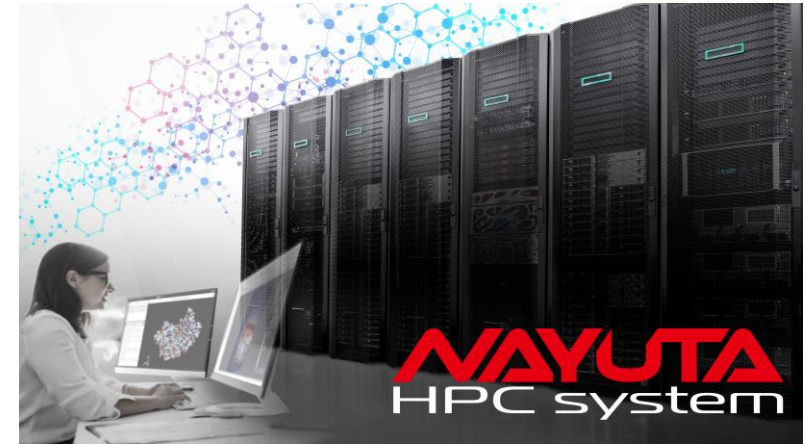
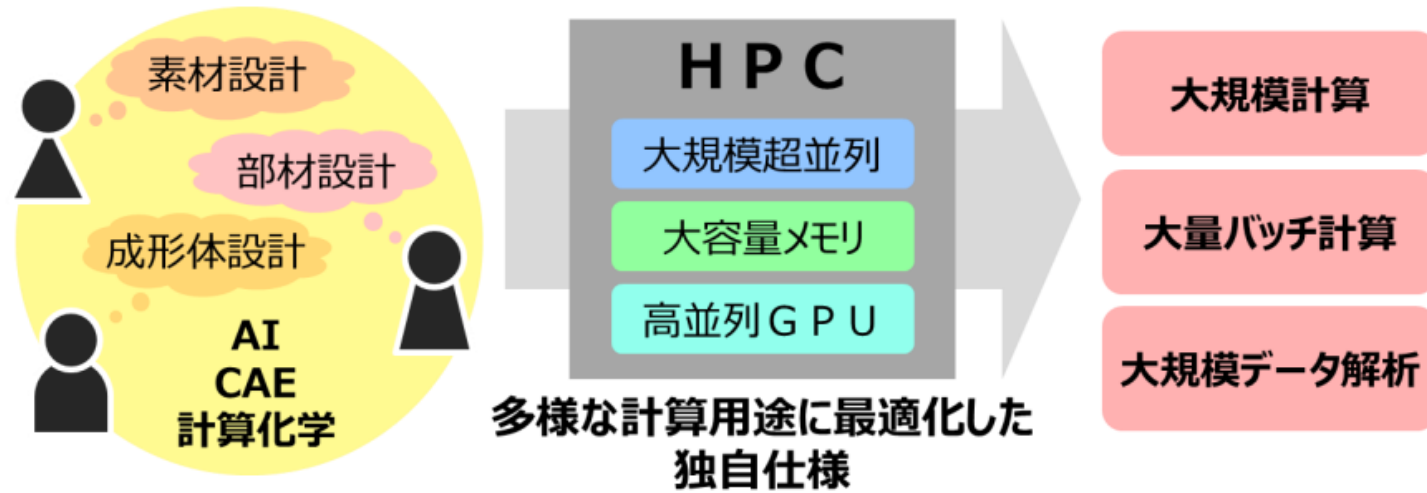
※1 国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構
※2 国立研究開発法人産業技術総合研究所(産総研)

マテリアルズ・インフォマティクス = 材料科学 × データ科学

材料科学：化学・物理学の知識

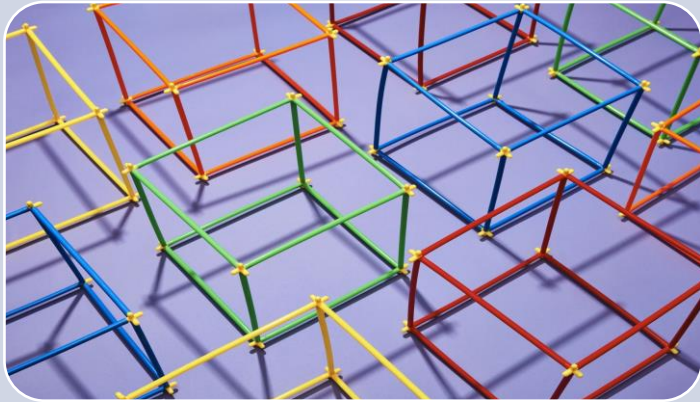


従来の計算科学者以外による、計算需要が増大



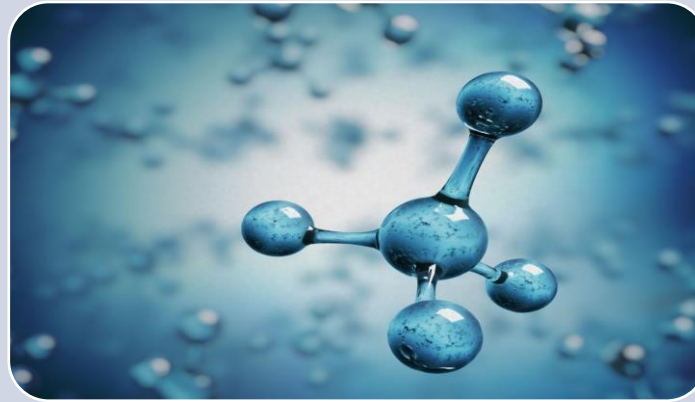
NAYUTA(那由他)は三菱ケミカル株式会社のHPCの愛称であり、製品やサービスの名称ではありません。当ビジュアルイメージの無断での転載、または複製することを固くお断りいたします。

増大する計算需要へ対応するため、オンプレで導入
活用技術・ノウハウの蓄積も併せて目的とする。



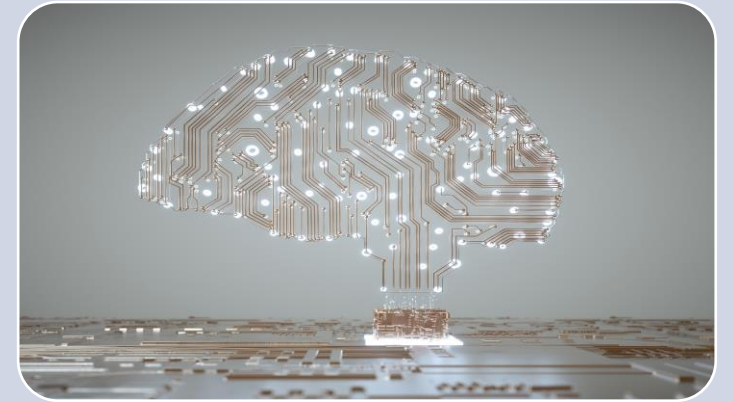
CAE

- ・ **WS (Windows)利用が従来主流、Linuxには慣れていない。**
- ・ ただし、多目的最適化・マルチスケールシミュレーションの普及により、HPC利用も増大。
- ・ ライセンスが高価、効率的な利用が必要
- ・ 大規模並列計算の需要はまだ少ない。



計算科学

- ・ 大規模計算と単ノード計算が混在
- ・ 大規模計算は多量のノードを同時に要求
- ・ 一方、単ノードの量子化学計算利用が最も利用者数が多い。
- ・ **計算科学者以外はLinuxのCLI操作に慣れていない。**



データ解析

- ・ 高価なGPUが必須
- ・ **ブラウザ経由の利用が多い。インタラクティブな処理を要求する。**
- ・ 一部アプリは、リスタートに対応していないため、長期間占有される。
- ・ 複数コンテナで構成されたワークフロー処理を要求される。従来のバッチ処理とは異なる。

教育コストの低減

- Linux, CLI操作を習得しなくても特定のアプリであればHPCを利用できる。

ユーザビリティの改善

- ターミナルやFTPクライアント、RDPなどをブラウザに集約、利用開始までの工数削減と、GUIで操作性が向上する。

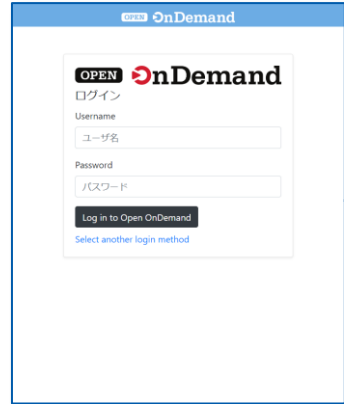
リサーチトランスフォーメーションの推進

- 多様な利用者が一つの環境で作業することで、シミュレーションデータの集約・共有・再活用、共同作業を促進する。

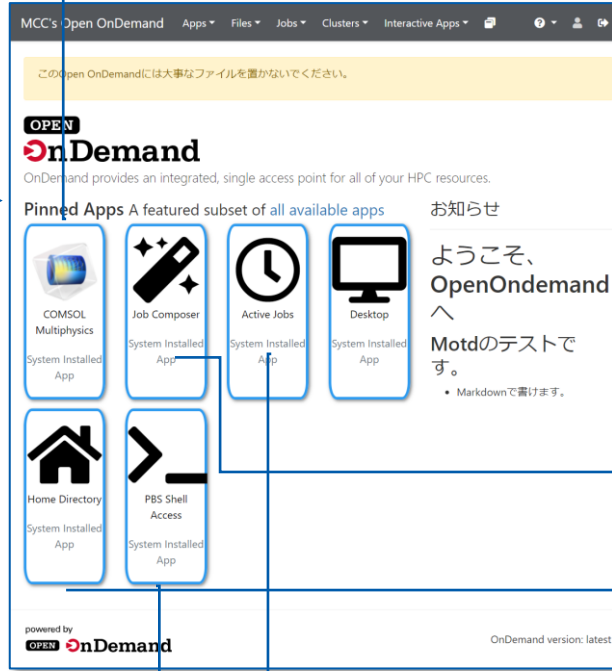
Open OnDemand構築状況

(株)計算科学様との共同研究

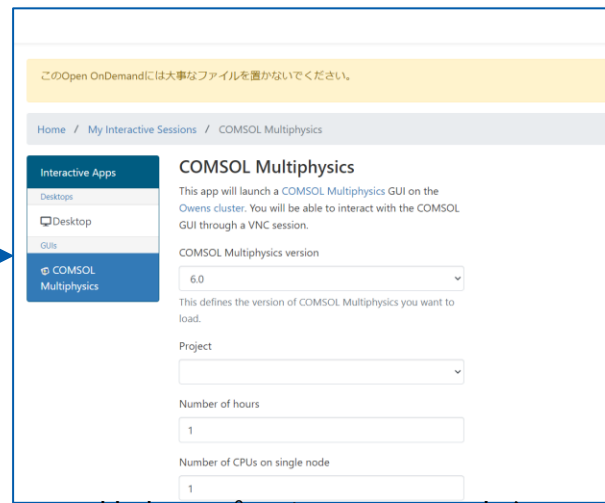
画面遷移の一部



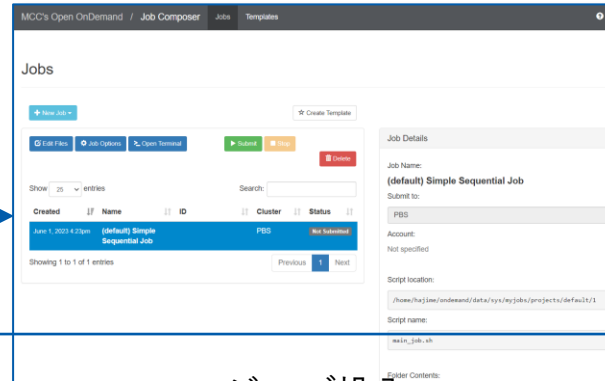
認証



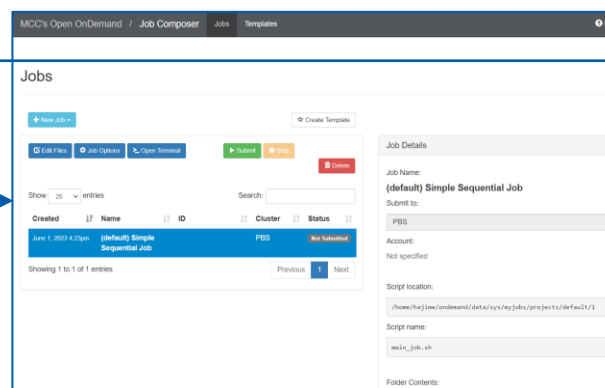
メニュー



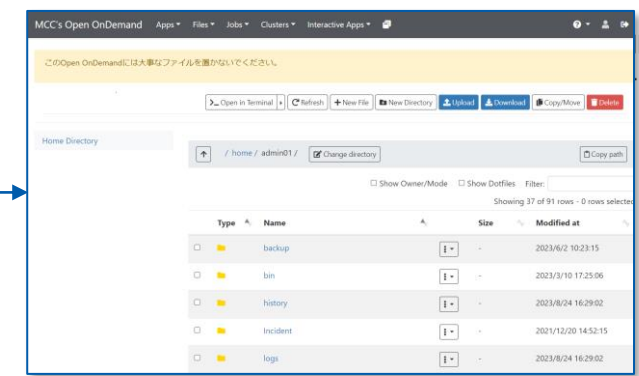
特定アプリケーション実行



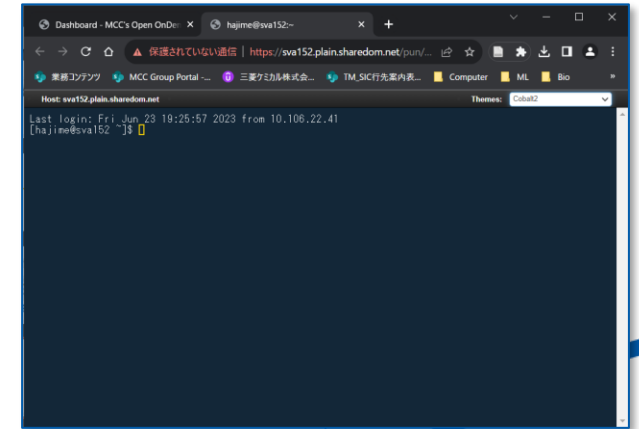
ジョブ投入



ジョブ確認



ファイル操作



シェル利用

画像内のアプリ名称の一部は他社商標です。

- ・ マテリアルズインフォマティクスの普及に伴い、Linux非経験者の計算需要が増大している。
- ・ HPCを利用のため、Linux非経験者がCLI操作を習得することは、学習コストが高い。
- ・ Open OnDemandはログインからジョブ実行までの一連のGUIを提供し、利用のための障壁を低減する。