2008 年度下期【未踏ユース】「スーパークリエータ」

2008 年度下期は 67 件の応募から 13 件を採択して事業を実施し、このうち下記の 4 名について担当プロジェクトマネージャー（PM）から「スーパークリエータ」の評価を得ました。

１．スーパークリエータ認定者（敬称略、50 音順）

・郷原　浩之　（竹内　郁雄 PM）
・杉浦　裕太　（安村　通晃 PM）
・村田　雄一　（筧　　捷彦 PM）
・山岸　純也　（竹内　郁雄 PM）

２．2008 年度未踏ユースプロジェクトマネージャー（敬称略）

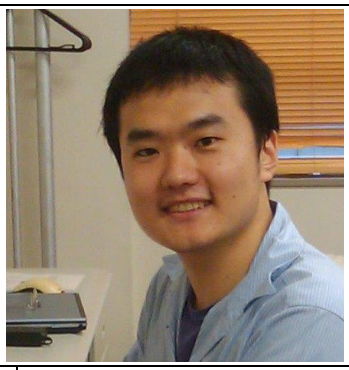
竹内　郁雄　　：東京大学大学院　情報理工学系研究科　創造情報学専攻　教授
筧　　捷彦　　：早稲田大学　理工学部 コンピュータ・ネットワーク工学科　教授
安村　通晃　　：慶應義塾大学　環境情報学部　教授

（注１）PM の所属・役職は、2008 年度の事業修了時点での所属・役職です。
（注２）竹内　郁雄 PM、筧　捷彦 PM、安村　通晃 PM の 3 名は 2007 年度から継続の PM です。

※ 以下に記載した各採択者の所属・役職は、事業修了時点の情報を基本とし、その後変更が確認されたものは更新してあります。

（1）郷原　浩之　氏（東京大学大学院工学系研究科システム創成学専攻修士 2 年）

テーマ名	オープンかつポータブルなデータベースガーベジコレクション

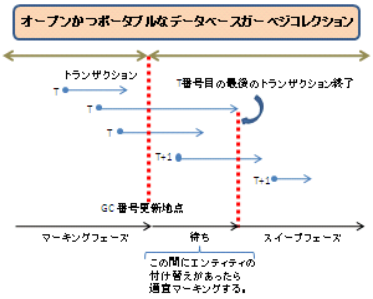


略歴

1985 年　神奈川県生まれ
2009 年　東京大学工学部システム創成学科　卒業
2009 年　東京大学大学院工学系研究科　システム創成学専攻　入学

テーマ概要

本プロジェクトではデータベース内に存在する不要なデータを自動的に削除するシステムを開発した。
本システムはリアルタイム性が実現されているためユーザープログラムを実行させながら同時に動作させることが可能である。
また、本システムはオペレーティングシステムとデータベースに依存しないポータブルなシステムであり、Apache ライセンスを適用したオープンソースで公開する。



拡張した湯淺のアルゴリズムを用いることで、DB負荷の少ない時にスイープ実行が可能。

竹内　郁雄ＰＭからの評価

竹内は、一応 GC のプロと自負していたものである。しかし、SQL でマーキングを行なうという郷原君の提案を知って驚いた。私の知るかぎり、前代未聞である。それと同時にこれはうまいと思った。SQL を使うかぎり、最初から通常のデータベース操作と並行して GC を行なうことがいとも容易だからである（ただし、実際の消去・メモリ回収を行なうためには、データベースの完全性制約に関する注意が必要）。データベースを止めないサービスをしてこそデータベースなのだから、並行あるいは並列に GC が行なえることは極めて重要な条件である。

関係データベースのままでは、実は上のような芸当はできないが、オブジェクト指向データベースと関係データベースの写像を定める ORM を利用すると、通常の GC でいう到達可能性がうまく検出できる。これもアイデアである。

大枠ではこれはうまく行きそうだと思ったのであるが、案の定いろいろな伏兵が潜んでいた。プロジェクト期間中、郷原君はこれらや思わぬシステムバグに悩まされながらも、予想以上に早く実用的な形になるところまで仕上げてくれた。竹内も昔取った杵柄で、ときどき一緒に考えさせてもらい、（多分、有用だったはずの）アドバイスもした。そういう意味で、竹内の血も少し湧き上がった。昔を思い出させてくれた郷原君に感謝したい。

それはともかく、このデータベース GC（DBGC）はいろいろな意味で面白い。基本的にディスクの中のデータの GC なので、GC のためのディスクアクセスを減らすことが重要である。そうしないと、通常のデータベースアクセスの性能を大幅に落してしまう可能性がある。当初、郷原君はそのためにエンティティ関係の構造分析にえらく力を入れていた。ところが計画段階で採用予定だった Dijkstra の On-the-fly は、その努力を帳消しにしかねないものであった。こっちのほうで無駄な SQL が大量に発行されてしまう。早い段階で湯淺の方式に変更したのは大正解である。

プロジェクトが終盤に差しかかったころ、マーキング世代番号のアイデアが打ち出されてきた。一瞬、世代別 GC のことかと思ったが違った。これも面白いアイデアだ。データベースなのでマーキングのために、十分な大きさのコラムを使ってもいい。だから、こういうアイデアも十分にありなのだ。私も郷原君と一緒にこのアイデアの正当性について考えさせてもらった。うーむ、血が湧く。この方法だと、回収（スイープ）はマーキングと、なんと並列に実行できるのだ。これまた前代未聞である。空いているときに、いつでもゆっくりと回収することができる。また、ゴミはゴミと明示して残しておくことも可能である。これは意外に実用的だ。それでいいというユーザも多そうだ。また、2 年以上前にゴミになったものだけを回収するといったことも可能だ。

上にも述べたように、このプロジェクトは当初実はかなり心配していたのであるが、プロジェクト期間の終わりまで 2 ヵ月ほど余して、急に仕上りが見えてきた。素晴らしいことである。その余裕もあって、お約束通り、わかりやすいドキュメントも出来上がってきた。このソフトを実際に本物のデータベースで使えるようになるためには、慎重なうえにも慎重な検証を重ねる必要がある。しかし、基本ができたので、あとは時間と労力の問題であろう。この DBGC のアイデアは、郷原君がアルバイトをしている中で、いたずらに脹れ上がるデータベースをどうしようかという問題からニーズが出てきたものである。つまり、机上の議論から出てきたソフトではない。

郷原君は、このソフトを近日中に Apache ライセンスで公開する。それも重要だが、この成果にしっかりとした性能評価を加え、さらに若干の理論的考察を行なって、国際的な場で発表すべきだと思う。GC 好きの竹内としては太鼓判を押したい。

以上、データベース GC に関する斬新かつ実用的な基礎となるソフトを築き上げた郷原君にスーパークリエータの称号を与えたい。

開発者からのメッセージ

未踏期間内に残った Hibernate のマッピングに関わるバグの修正が大方終了した。コレクションについて、当初は最も基本的な Set のみをサポートするつもりでいたが、実用上の要望から List などのサポートも強化した。信頼性の根拠となる運用実績を獲得するために PostgreSQL 上で複雑なテーブル構造を持つ 10G 程度のデータベースに対して試験を行っている。特に、巨大なデータベース上でもサービスに影響を与えることなく動作をするように SQL の改良を行っている。未踏期間内に課題として残った MySQL の完全なサポートは依然として取り組んでいる。

現在は本システムの普及を意図して、ポータブル性と信頼性の向上に尽力している。
Hibernate がサポートする任意の RDBMS 上で本システムが動作する完全なポータブル性を実現するために HQL を各 SQL 方言に変換する HQL コンパイラのハックを行っている。
また、データベースを破壊する可能性を潜在的に有するシステムの性質上、信頼性を高めることは必須であるため、未踏期間内では実現できなかった巨大かつ複雑なデータベース上での試験実績を積み重ねている。さらに安心して使用できるシステムであるために、システムの設定方法や特定のデータベースに対する詳細な設定などを記述したドキュメントの整備を進めている。

2008.下 ユース

（２）杉浦　裕太　氏（慶應義塾大学大学院 メディアデザイン研究科 メディアデザイン専攻 修士課程）

テーマ名	インタラクティブ UI を用いた家庭用ロボット操作方法の開発	
	略歴	1986 年　神奈川県生まれ 2005 年　電気通信大学 電気通信学部 電子工学科 入学 2008 年　電気通信大学 電気通信学部 電子工学科 退学 2008 年－2009 年時点 慶應義塾大学大学院メディアデザイン研究科 メディアデザイン専攻 修士課程(飛び入学)
テーマ概要	ロボティクスやメカトロニクス技術の発展により、産業分野だけではなく家庭においてもロボットと呼ばれる自動機械が普及し始めている。しかし、これらの家庭用ロボットは、予め決められたアルゴリズムに従って動作するため、ときに自分の意志とはそぐわない行動をする。本プロジェクトの目的は、ロボットのインタフェースに注目し、ロボットを取り扱ったことがない人でもロボットに自分の家事の方法を教えることができるシステムを構築することである。具体的に、本開発では"洗濯物たたみ"と"料理"という家事に注目した。洗濯物たたみでは、ユーザは GUI 上でたたみ方をロボットに教えることができるシステムを開発した。料理では、ユーザは食材を投下するタイミング、鍋をかきまぜるタイミング、火加減を GUI で指示することができるシステムを開発した。これらの技術によって、家庭用ロボットに自分の家事方法を教えることができる。	
安村　通晃ＰＭからの評価	ロボットの研究開発は盛んではあるが、産業用を除くと、ペットロボットや、警備ロボット、介護ロボットなどが主流であり、一般家庭で使うロボットで実用的なロボットは、一部の掃除用ロボットなどを除き、あまり無かった。特に、人とロボットが協同しながら、ある目的を果たすという考え方は、非常に示唆に富む。さらに、GUI でロボットに指示を与えると言うのも、従来のコントローラや音声とはまた違う、新たな指示方法である。さらに、さまざまな機能が要求されるであろう家庭用ロボットに対して、プラットフォームとしてのロボットを作ったアプローチも非常に有効である。このように、家庭用ロボットの家庭用ロボットで、ここまで具体的に形と仕上げた例はあまりなく、その意味で杉浦君の今回のプロジェクトは、家庭用ロボットの新しい一歩を切り開いたと言え、まさに、未踏の領域の一歩を踏み出したものとして高く評価できる。以上述べた理由により、杉浦裕太君をスーパークリエータとして認定したい。	
開発者からのメッセージ	本技術は、ロボットのハードウェアが確立していないため、実用化には地道な努力と改良が必要です。しかし、数年、数十年後、ロボットは必ず私達の生活にかかさないものになると考えています。そのとき、現在浸透している家電がきちんとインタフェースがデザインされているように、ロボットにもインタフェースのデザインは必要不可欠になってきます。その必要性を本プロジェクトの成果を通して世に発信できればと考えています。今後は、本コンセプトを太くする他の応用例やアプリケーションを開発し、インタフェースの重要性をアピールしていければと考えています。 関連 URL：http://sugiur.com/index.html	

2008.下 ユース

（３）村田　雄一　氏（株式会社ディー・エヌ・エー）

テーマ名	インタラクティブ性を向上させる OHP 風プレゼンツール Shadowgraph の開発

略歴	1985 年　埼玉県生まれ 2009 年　筑波大学情報学類卒業 現在　筑波大学大学院システム情報工学研究科コンピュータサイエンス専攻 2011 年　株式会社 バッファロー

テーマ概要

本プロジェクトでは、電子プレゼンテーションが普及する以前に主流であった OHP を用いたプレゼンテーションの様な表現を、電子プレゼンテーション上で可能とさせる Shadowgraph の開発を行った。ペンの影をスライドに重畳描画する機能、順番を無視したスライドの提示機能、複数枚のスライドを同時に提示する機能、スライドを即興的に作成する機能に加えて、いくつかの発展的な機能の実装を行なった。

筧　捷彦ＰＭからの評価

コンピュータを使ったプレゼンテーションが、かつての OHP を使ったものに比べるとインタラクティブ性に関してかえって劣っているのを改めたい、という思いを展開したプロジェクトである。OHP では、スライド上のものを指し示すのにペンの陰を使い、不足に気づけばキャップを外して直ちに書き込めた。まずは、それを実現したい。ペンが宙に浮いていれば指示棒になり、スライドに接触していれば書き込みができるということを実現するのに電磁式ペンタブレットを用いた。また、OHP なら用意したスライドを好き勝手な順に表示することができた。そこでペン操作でその気分が出せる工夫を施そうとした。初期の準備作業で、電磁式タブレットの特性がそうした工夫を行うには性能的に不足することを見つけ出し、この部分の方式を 0 からやり直すことになったが、みごとにこれに対応してみせた。

クリエータは、この開発期間を通して、同じ研究室の中で、自らも使い、学生仲間にも使ってもらって、多くのコメント・注文を受けている。また、プレゼンテーションツール“ことだま”に Shadowgraph をアドオンしたものを専修大学の望月講師に実際に使ってもらって様々なコメントをもらい、システムの改良に努めている。

空スライドの上への書き込みは、手書きならではの生々しいプレゼンができるというものの、でき上がるスライドが読みにくいものになるという大きな欠陥がある。手書き文字認識を加えて読みやすくフォント表示に置き換えること、などもユーザからの希望項目にはあがったものの、このプロジェクトには取り入れることがなかった。Shadowgraph の特長−簡明なインタフェース−に注力するべきである、というクリエータの信念に基づく的を射た選択であった。　クリエータは、代わりに、Shadowgraph をより多くの人に使ってもらう工夫をいろいろと重ねた。その出来上がりはすばらしいものである。さらにタブレットを開発している企業と連携してより多くの人に使ってもらう算段を取る予定だという。的確な開発目標の設定と、適切なプロジェクト進捗とは、クリエータとしてすぐれた能力を示している。スーパークリエータに認定する。

開発者からのメッセージ

現在、ソフトウェアを Web 上にて公開しています。これから積極的な広報活動を行って、ソフトウェアの認知度向上と普及を目指していこうと考えています。

また、少数ではありますが、ソフウトウェアに対するフィードバックを頂いています。これらのフィードバックに対応しつつ、今後も精力的に改良を行って行きたいと考えています。

大学での研究を進める傍ら、未踏の成果物であるソフトウェアの改良を続けています。また、最近、コンピュータサイエンスを学ぶ学生や会計学を学ぶ学生を集めて、新しい Web サービスの企画を立ち上げました。未踏で得た経験を生かして独創的な事業の立ち上げができたらと思っています。

関連 URL：http://www.code-u.jp

（４）山岸　純也　氏（東京大学大学院 新領域創成科学研究科 情報生命科学専攻 博士後期課程）

テーマ名	GPGPU を用いた薬物親和性評価プログラムの開発

略歴

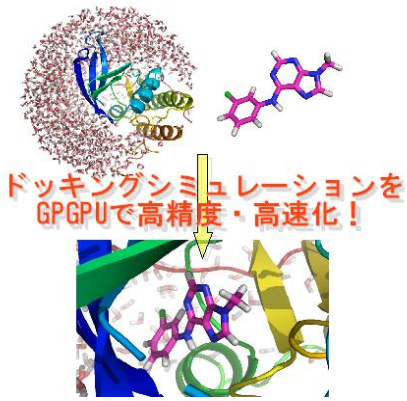
1986 年　千葉県生まれ
2009 年　千葉大学 薬学部 総合薬品科学科 卒業
2011 年　千葉大学大学院　医学薬学府 総合薬品科学専攻 修士課程 修了
2012 年時点　東京大学大学院 新領域創成科学研究科 情報生命科学専攻　博士後期課程 在学

【主な受賞と栄誉】
・2010 年　ポスター賞優秀賞、CBI 学会 2010 年大会
・2012 年　学生優秀発表賞、日本薬学会第 132 年会
・2012 年　大会長賞、第二十一回日本組織適合性学会大会

テーマ概要

創薬の際に用いられるスクリーニングソフトは計算時間・精度・費用といった様々な問題を抱えている。本プロジェクトでは GPGPU を用いることによって、スリーニングを高速にかつ高精度に行うソフトウェアを開発した。また GPGPU を用いることで家庭用の PC でも十分な実行速度で計算を行えるので、小さな研究室でも創薬環境を整えることができる。

また本ソフトウェアは分子力学計算を基礎にしているため、関連分野への応用が容易であると期待される。



竹内 郁雄ＰＭからの評価

本来グラフィックスのために開発された GPGPU を、高並列マシンとして、それ以外の分野の計算に応用しようという動きが盛り上がっている。nVidia が CUDA という GPGPU 用の言語を開発・公開したことでそれが一気に加速した。山岸君のプロジェクトは、これを in silico 創薬（コンピュータを利用して疾患ターゲットのタンパク質と候補化合物の親和性を評価して薬物を発見すること）に応用したものである。いまや、in silco 創薬の方法論に頼らない in vitro 創薬（実際に薬物を使って試験する方法）では、時間もコストもかかりすぎる。しかし、その in silico 創薬といえども、計算時間は膨大である。

まだ発展途上の CUDA を使いこなすのも容易ではないのに、分子間の親和性評価の基本的な方法を熟知して、真正面から正攻法でプログラムの並列化と高速化に取り組むためには薬学の専門家である以上の才能が必要である（山岸君は未踏期間中にちゃんと薬剤師国家試験をパスした）。親和性評価のプログラム（これによって実際に in vitro で試す薬物の候補を劇的に減らすという意味でスクリーニングプログラムとも呼ぶ）はすでにいくつかあるが、高価、遅い、精度が低いなどの問題がある。山岸君の挑戦は家庭用の PC に最新の GPGPU を組み込めば、フリーで使えるスクリーニングソフトを開発することである。これができれば大学等の研究機関には大きな朗報である。

真正面から正攻法というのが、実はこのプロジェクトの肝である。従来のスクリーニングソフトはあまりにも多い計算量を減らすために、かなり乱暴な近似を行なっている。山岸君の発想は、親和性評価のようにそれぞれの分子間の相互作用の計算の独立性の高いものは、GPGPU を使えば並列度が最大限に上がるはずだから、変な近似を行なわなくても、正攻法できちんと計算ができるはずだというものである。だから、分子力学の真っ当な式をそのままプログラムに組み込んだ。

GPGPU の使いこなしもすばらしかった。当初はまだ手に余しているところもあったが、ぐんぐん習熟し、最終的には CPU と GPGPU をうまく並列連携させて、そうでなかったときよりも 2 倍の速度向上を果たし、トータルで CPU 単独の 150～180 倍の計算速度を出した。一般的な応用プログラムでここまでの倍率を出したことは高く評価できる。特に CPU と GPGPU の並列連携は並みのプログラマではできないレベルのものである。CUDA のバージョンアップに対応して、今度は Mapped Memory も利用してさらなる高速化を図るとのこと。

極めて安価に、かつ高速な親和性評価の計算が行なえるところまでは行ったが、残念ながら精度については既存のソフトウェアをまだ超えていない。しかし、これはあくまでも未踏期間中ということであり、真正面から正攻法でアタックしているかぎり、精度が向上するのは時間の問題であろう。特に、すでに取り掛かっている水分子の影響や、標的タンパク質の変形まで考慮するという、まさに前人未踏の挑戦を、山岸君は行なっている。この方針が間違っているわけがない。もっとも、究極的に精度を上げなくても、数百万種の化合物をたとえば実質 1/10000 以下までにスクリーニングできれば、in silico 創薬としては十分とも言えるので、精度向上のための改良は近い将来に一件落着するのではないかと期待している。

以上、真正面から正攻法で薬物親和性評価のプログラムを GPGPU 上で実装し、正しくコンピュータ科学の技術を使って、150 倍以上の性能向上を果たした力量と馬力、そしてその学際的な貢献に対して、スーパークリエータの称号を送りたい。

開発者からのメッセージ

GPGPU を用いることで、従来の計算機の性能では難しかったタンパク質側の自由度を取り入れたドッキングや、水分子を顕在化させた状態でのドッキングを行うことができるようになる。現在はより良い評価関数を開発すべく、機能の実装・試験を行っている段階である。本プログラムを用いることで、従来より高精度のスクリーニングを短時間で行うことができると期待できる。　また、本プログラムの改良を進めていくと同時に、コンピュータを用いた創薬研究も行っていく。本プロジェクトのようなソフトウェアの開発だけではなく、ドッキングスタディ、分子動力学(MD)シミュレーションなども用いて総合的に創薬研究に携わる。