

NEWS RELEASE

2008年9月26日
HPCシステムズ株式会社

HPCシステムズ、文部科学省・先端研究施設共用イノベーション創出事業に採択

ソフトウェア Web 利用サービス「@SIM」の利便性向上を目指す

HPCシステムズ株式会社(本社:東京都江東区青海2-45 タイム24ビル10F北、代表取締役:小野 鉄平、以下HPCシステムズ)は、このほど、ソフトウェア Web 利用サービス「@SIM」のサービス品質向上のための研究開発プロジェクトが、文部科学省が推進する「先端研究施設共用イノベーション創出事業 1」のひとつである平成20年度第2期「先端的大規模計算シミュレーションプログラム利用サービス」に採択されました。

「先端的大規模計算シミュレーションプログラム利用サービス」は、全国共同利用施設であるスーパーコンピュータを有する7大学(北海道大学、東北大学、東京大学、名古屋大学、京都大学、大阪大学、九州大学)が、社会貢献の一環として、大学で開発された応用ソフトウェアとスーパーコンピュータの演算サービスを民間企業へ提供しているものです。7大学が有するスーパーコンピュータの総計算能力(理論性能値)は、平成20年度には約330TFlopsになっています。

弊社ではクラウドコンピューティング技術を利用したソフトウェア Web 利用サービス「@SIM」を本年7月から開始し、第一弾として量子化学計算アプリケーション Gaussian 2 を Web ブラウザ経由で利用できる WebMO 3 + Gaussian の提供を始めました。

これにより誰でも簡単に量子化学計算プログラムの入力データの作成から結果の解析まで Web ブラウザ経由で行えるとともに、急な計算需要が発生した際に計算機システムの納品を待つことなく、量子化学計算を行うことが出来ます。

一方で、量子化学計算では入力として与える分子データ・基底関数系・計算手法によって大きく計算時間、必要なメモリ量・ディスク量が変化します。量子化学計算を始めたばかりの方や、新しい計算手法を試し始めたばかりの方には事前にこれらの計算資源量要求を見積もることは困難です。メモリ要求量が分からない場合を例に示しますと、メモリを最初は適当な値を指定して、指定量が足りなくてジョブが失敗に終わったら、メモリ量を増やしてみることを計算が正常に終了するまで繰り返すこととなります。無駄な計算を繰り返すことで、時間もエネルギーも浪費してしまいます。

本開発テーマでは、様々な量子化学計算手法、分子の種類、基底関数の種類を用意して、計算結果をサンプリングしておき、それをもとに計算資源量を予測し、利用者が指定メモリ量が少なかったり、計算時間が予想以上にかかったり、計算資源の制限に達してジョブが中断することを回避するシステムの確立を目指します。さらに計算ジョブの内容に応じて、性能の異なる計算資源から適切な計算機を選択し割り当てるシステムの実現も目指します。

弊社の開発テーマが「先端的大規模計算シミュレーションプログラム利用サービス」に採択されたことにより、クラウドコンピューティング技術を利用したソフトウェア Web 利用サービス「@SIM」の計算資源として、弊社内のコンピュータ資源と7大学が提供するスーパーコンピュータ資源を効率よく利用することが可能となります。また革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発(RSS21)で開発されたソフトウェア、非経験的フラグメント分子軌道法による相互作用解析(ABINIT-MP)をソフトウェア Web 利用サービス「@SIM」で利用可能にする技術開発に挑戦していきます。

1 先端研究施設共用イノベーション創出事業

「先端研究施設共用イノベーション創出事業」は、大学、独立行政法人等の研究機関が有する 先端的な研究施設・機器について、広範な分野における幅広い利用（共用）を促進し、イノベーションにつながる成果を創出するために、平成 19 年度から文部科学省が新たに 開始した委託事業です。

当事業を通じて、産学官の研究者による戦略的かつ効率的な研究開発や、研究機関・研究分野を 越えた横断的な研究開発活動を推進することにより、継続的に産学官の知の融合による イノベーションを加速していくことを目指しています。

2 Gaussian

米国 Gaussian Inc. が開発、提供している量子化学計算をプログラムです。源流となるプログラムは、実験データから導き出される経験的パラメータを一切用いない非経験的分子軌道法の普及の功績により 1998 年にノーベル賞を受賞した J.A.Pople らによって開発されました。量子化学計算プログラムの分野では過半数を超える圧倒的な利用シェアを占めています。弊社では Gaussian のキーワードの日本語版を作成する等、Gaussian 社との連携を図り、@SIM のサービス向上を行っています。

3 WebMO

米国 WebMO LLC が開発した主要な計算化学プログラムを Web ブラウザから利用可能にしたプログラムです。Windows、Macintosh、UNIX/Linux 上ウェブ・ブラウザから統一したインターフェースで分子の構築、計算の実行、結果表示・可視化が可能になります。

関連リンク

「クラウドコンピューティングサービス @SIM」
<http://atsim.hpc.co.jp/>

お問い合わせ

HPC システムズ株式会社 新規事業企画室
〒135-8073 東京都江東区青海 2-45 タイム 24 ビル 10F 北
URL: <http://www.hpc.co.jp> / newbusiness_sales@hpc.co.jp
TEL : 03-3599-3651 / FAX : 03-3599-3655