

Press Release

各位

HPCシステムズ株式会社
代表取締役 小野 鉄平
(コード番号:6597 東証マザーズ)
問合せ先 取締役管理部長 下川 健司
(電話番号:03-5446-5530)

ABINIT-MP フラグメント分子軌道(FMO)計算ソフトウェアの実装支援

スーパーコンピュータ「富岳」へ ABINIT-MP を用い 新型コロナウイルス関連タンパク質に対する解析環境の構築に貢献

ハイパフォーマンスコンピューティング分野のニッチトップ企業である HPC システムズ株式会社(本社:東京都港区、代表取締役 小野 鉄平、以下 HPC システムズ)は、立教大学望月祐志教授らの研究グループにより開発され、長年に渡って理論創薬分野で解析ツールとして使用されてきた ABINIT-MP フラグメント分子軌道(FMO)計算ソフトウェア「以下 ABINIT-MP」を用いた新型コロナウイルス関連タンパク質に対する相互作用解析等をスーパーコンピュータ「富岳(ふがく)」(以下「富岳」)に実装できるようにプログラムの移植、開発及び最適化、性能評価の研究開発支援を開始いたしました。

当社は、2016 年から現在まで、立教大学望月祐志教授研究室の研究支援という立場で ABINIT-MP に対して、各種 Linux/Windows 向けに ABINIT-MP のバイナリを調製し、コンパイル最適化を施し、性能ベンチマーク取得を行って、多用な OS・コンパイラ環境に適応できるように、ABINIT-MP ビルド用スクリプトの更新、精密なバージョン管理と複数版の統合に携わってきました。これらの知見をもとに迅速に、ABINIT-MP を「富岳」へ実装できるようにコンパイルや実行に関する技術的支援、チューニングや実行条件設定の高度な最適化を支援していく予定です。

当社は、「富岳」のクラウド的利用に向けた共同研究プロジェクトにおいて、「大規模化学計算を富岳で高速かつ簡便に実行可能なサイエンスクラウドの実証」の共同研究として採択されておりますが、今後、同プロジェクトにおいても、ABINIT-MP の実装に加え、当社のサイエンスクラウドサービスで提供することを検討してまいります。

ABINIT-MP フラグメント分子軌道(FMO 法)

ABINIT-MP は立教大学望月祐志教授らの研究グループにより開発されたフラグメント分子軌

道法(FMO 法)を実装したシミュレーションプログラムです。創薬研究を意識した生体分子関係、例えばタンパク質、DNA、低分子化合物などの複合体を対象として、分子間相互作用を分子軌道(MO)計算に基づいて解析することができます。ABINIT-MP は FMO 法に基づき、複合体をフラグメントと呼ばれる原子団に分割して MO 計算を並列処理することで高速・高精度計算を実現しています。

新型コロナウイルス対策を目的としたスーパーコンピュータ「富岳」の優先的な試行的利用では、ABINIT-MP プログラムを用い、新型コロナウイルス(SARS-CoV-2/COVID-19)に関連するタンパク質と阻害剤候補群に対する探索的計算と解析(構造ゆらぎ等も考慮)、②類縁の SARS ウイルス関係のタンパク質に対する同計算・解析、③重要な計算結果データの FMO DB(FMO データベース)での公開の実施を予定しております。

<https://www.r-ccs.riken.jp/wp-content/uploads/2020/04/20200407mochizuki.pdf>

スーパーコンピュータ「富岳(ふがく)」

「富岳」は、「特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律」により特定高速電子計算機施設として定められた、スーパーコンピュータ「京(けい)」に続く後継機として位置付けられています。「京」は世界最高水準の科学技術インフラとして利用され多くの成果を生み出してきましたが、「富岳」では Society5.0 を見据えた更なる利用分野の拡大による成果創出の最大化を目指しており、そのための利便性の向上を特に重要な課題と位置付けて取り組みを加速しています。

HPC システムズについて

HPC システムズは、ハイパフォーマンスコンピューティング(HPC)分野のニッチトップ企業です。科学技術計算用高性能コンピュータとシミュレーションソフトウェア販売、科学技術計算やディープラーニング(深層学習)環境を構築するシステムインテグレーションサービス、シミュレーションソフトウェアプログラムの並列化・高速化サービス、計算化学ソフトウェアプログラム開発・販売、受託計算 サービス・科学技術研究開発支援、創薬研究開発などのライフサイエンス分野や素材・材料研究 開発のマテリアルサイエンス分野向けサイエンスクラウドサービスまでをワンストップで提供しています。

社名 HPC システムズ株式会社 <https://www.hpc.co.jp/>

所在地 東京都港区海岸 3 丁目 9 番 15 号 LOOP-X 8 階

設立 2006 年 7 月 3 日

資本金 1 億 9,877 万円 (2020 年 3 月末現在)

代表者 代表取締役 小野 鉄平

お問い合わせ

HPC システムズ株式会社

<https://www.hpc.co.jp/contact/>