

プレスリリース

報道関係者各位

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)

HPC システムズ、北海道大学大学院理学研究院と共同研究契約を締結

Global Reaction Route Mapping (GRRM)、人工力誘起反応(AFIR)法を スーパーコンピュータ「富岳」採用プロセッサ A64FX™へ

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、北海道大学大学院理学研究院化学部門理論化学研究室 前田 理 教授らが開発している化学反応経路自動探索プログラム「Global Reaction Route Mapping(以下 GRRM)」、人工力誘起反応法「Artificial Force Induced Reaction(以下 AFIR)法」を、スーパーコンピュータ「富岳」(以下「富岳」)で採用されている Armv8.2-A SVE 命令セットアーキテクチャプロセッサ「A64FX™」へ実装し(プログラムの開発及び調整)、大規模な化学反応経路自動探索の能力を向上させる可能性について共同研究を開始いたします。

当社は、国立研究開発法人理化学研究所が開発主体となって開発・整備を推進している「富岳」の計算資源を活用したクラウド的な利用サービスの試行に向けた共同研究プロジェクト(以下 本プロジェクト)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」の共同研究パートナーとして採択されております。本プロジェクトにおいても、GRRM・AFIR プログラムを「富岳」利用環境で高速かつ大規模に化学反応経路自動探索できるサイエンスクラウドサービスについての実証を行う予定です。

化学は、100 種類ほどの元素を素材にして、多種多様な物質を組み立てることのできる世界です。これまで人類が手にした化学物質の数は、1億 5 千 5 百万種以上(CAS REGISTRY)まで達し、毎年 500 万種もの割合で新化学物質が誕生しているといわれています。その化学物質同士を結ぶ化学反応は、私たちの身の回りの生活の至る所に存在し、医薬品や機能性

材料など様々な産業を支え、持続的可能な社会への鍵となっています。同共同研究により得られる知見から、大規模な化学反応経路自動探索の新たな可能性を導き出し、化学反応創成研究開発に役立てられることが期待されます。

共同研究の概要

| | |
|----------|--|
| 研究題目 | GRRM・AFIR 法を Arm®v8-A アーキテクチャー「A64FX™」およびスーパーコンピュータ「富岳」での実行可能性についての実証 |
| 研究目的及び内容 | FUJITSU PRIMHPC FX700 Arm®v8-A アーキテクチャー (Arm A64FX) および「富岳」の利用環境へ「人工力誘起反応 (AFIR) 法」を展開し、その効果を検証・評価する。 GRRM・AFIR を FUJITSU PRIMHPC FX700 および「富岳」の計算資源を利用できる環境を開発・構築し、その効果を検証・評価する。 |
| 研究期間 | 2020 年 7 月 1 日から 2021 年 3 月 31 日 |

「GRRM・AFIR 法」

GRRM は、 $H\Psi = E\Psi$ を解く量子化学計算法を利用して、化学反応経路を高性能コンピュータで網羅的に探索し、反応経路を追跡して遷移状態を自動的に発見することを可能にするアルゴリズムが搭載されているプログラムです。AFIR 法は、反応物を人工的に押し付けることで、互いに分離した状態から、たがいに接近して反応する過程をすばやく探索するプログラムです。

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、Society5.0 を見据えた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。2020 年 6 月、「International Supercomputing Conference (ISC 2020)」で発表されたスーパーコンピュータの世界ランキングにおいて、実行性能を指標とした「TOP500」、アプリケーション性能を評価する「HPCG(High Performance Conjugate Gradient)」、AI 処理能力評価を行なう「HPL-AI」、ビッグデータ分析などでの性能を示す「Graph500」の 4 部門において、世界 1 位を獲得しています。

商標について

記載されている製品名、プログラム名などの固有名詞は、各社、団体の商標または登録商標です。また、本リリースの情報は発表日現在のものです。最新の情報とは異なる場合がありますのでご了承ください。

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、創薬研究開発や素材・材料研究開発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 6 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/company_form/