

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 東証グロース)

問合せ先 取締役管理部長 下川 健司

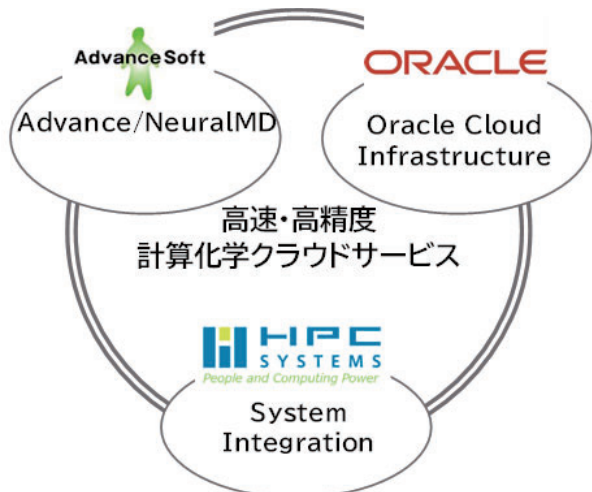
(電話番号: 03-5446-5530)

HPCシステムズ、アドバンスソフト社、Oracle Cloud Infrastructureを活用し 最大実行速度260倍、高精度な分子動力学法のクラウドサービスを開発

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）、アドバンスソフト株式会社（本社：東京都千代田区、代表取締役社長 松原 聖、以下アドバンスソフト社）は、オラクルが提供するOracle Cloud Infrastructure(OCI)の高性能コンピューティング（HPC）を活用し、それぞれの強みを掛け合わせることで、分子動力学シミュレーションの実行速度が最大で260倍^注になる高速・高精度クラウドサービスを開発しましたのでお知らせいたします。

同開発は、NVIDIA製GPU（Graphics Processing Unit）をベアメタル・インスタンス上で実行させ、複雑なAIモデルや機械学習システムなどを高速化するOCI HPC、GPU化したニューラルネットワークカ場を用いて分子動力学シミュレーションの高精度化を可能にしたアドバンスソフト社の分子動力学計算ソフトウェア「ニューラルネットワーク分子動力学システム Advance/NeuralMD」、そして双方の性能を最大限に引き出せるようHPCシステムズがシステムインテグレーション技術を駆使し最適化を施すことで完成しました。

このサービス環境は、電気自動車などに搭載される全固体リチウム二次電池をはじめとする多種多様な機能性素材・材料の研究開発に活用でき、近々にHPCシステムズのサイエンスクラウドサービスの一環として提供される予定です。



【従来の分子動力学法の課題】

近年の新素材・材料の研究開発では、原子や分子の物理的な動きを高性能コンピュータで計算し、力学的、熱的、電氣的、磁氣的、光学的などの物質固有の性質を予測することが盛んに行われています。こうしたコンピュータシミュレーション技術を活用することで、実験にかかる時間やコストを大幅に削減しながら、効率よく新素材・材料の研究開発を行うことができるようになりました。

特に、物質の原子レベルの物理的な動きを計算する手法として、分子動力学シミュレーションが広く用いられていますが、**従来の分子動力学シミュレーション**は、電子や原子核を考慮せずモデル化された近似式とパラメータを用いて原子同士に働く相互作用を計算するため、計算精度の点に課題が生じます。一方、**第一原理計算の結果から原子に働く力を計算する手法**は、高精度ながら計算に要する時間の点に難があります。

そこで、昨今**ニューラルネットワーク力場を用いて原子に働く力を計算する手法**が注目を集めています。ニューラルネットワーク力場は、第一原理計算で得た計算結果を機械学習させてAIを活用することで、第一原理計算よりも短い計算時間で、第一原理計算の計算結果を高精度に再現することができます。しかしながら、その計算速度には更なる改善の余地があります。

【ニューラルネットワーク分子動力学システム Advance/NeuralMD】

従来の分子動力学シミュレーション手法が抱える様々な課題は、GPU化したニューラルネットワーク力場を用いることで、分子動力学シミュレーションの高速化・高精度化を可能にしたアドバンスソフト社の**ニューラルネットワーク分子動力学システムAdvance/NeuralMD**で解決できます。

その特長は次の通りです。

- 第一原理計算よりも高速、かつ、既存の分子動力学計算よりも高精度
- 未知の材料、未知の添加元素 など、既存の力場が無い系も取り扱い可能
- 研究者の勘や経験に依存しない、システムティックなシミュレーションを実現

分子動力学シミュレーション手法	計算速度	計算精度
従来の分子動力学シミュレーション	△	×
第一原理計算の結果から原子に働く力を計算する手法	×	△
ニューラルネットワーク力場を用いて原子に働く力を計算する手法	○	○
ニューラルネットワーク分子動力学システム Advance/NeuralMD	◎	◎

【Oracle Cloud Infrastructure】

Oracle Cloud Infrastructure (以下、OCI) は、オラクルが提供する優れた可用性・拡張性・安全性を有するクラウド・インフラストラクチャ・プラットフォームです。スモールスタートで始められる仮想マシン環境から、高い性能を必要とするシステムに向けたベアメタル環境まで、あらゆるビジネス要件を満たすインフラ機能セットを備えています。

- 迅速な立ち上げと拡張性に優れたコンピューティング
- 多彩なデータ保管のニーズに優れたコストパフォーマンスで応えるストレージ
- より高速でより安全・堅牢なセキュリティを両立するネットワーク
- データベース、セキュリティ、分析、AIなどの高度な運用・管理サービス



OCIサービス体系図

また、NVIDIA製GPU (Graphics Processing Unit) をベアメタル・インスタンス上で実行し、複雑なAIモデルや機械学習システムの高速化を実現。例えば、新薬の試験や開発、安全な航空機的设计、天然資源の迅速な調達などのモデリングやシミュレーションのように膨大なデータを多用する複雑なハイパフォーマンス・アプリケーションも、高速・効率的・低コストで実行できます。

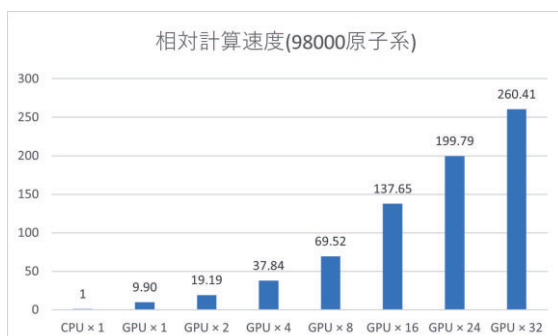
【HPCシステムズのインテグレーション技術による最適化】

硫化物系リチウム固体電解質Li₁₀GeP₂S₁₂(以下、LGPS)は、高いリチウムイオン伝導率を有することから、電気自動車などに搭載される全固体リチウム二次電池の固体電解質として注目を集めている材料です。実用上で十分な出力を有する全固体リチウム二次電池を作成するためには、高いリチウムイオン伝導率を持つ固体電解質が必要であり、そのような物質を探索するために分子動力学シミュレーションによるリチウムイオン伝導率の計算が広く行われています。

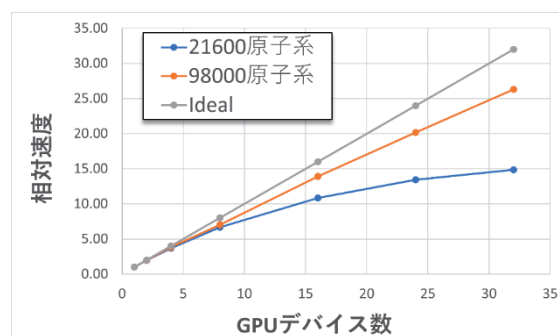
このLGPSを対象に、32個のGPUを搭載したOCI上で、Advance/NeuralMDのGPU化されたニューラルネットワークカ場が使用できるよう、**HPCシステムズのシステムインテグレーション技術で最適化を図り、OCIおよびAdvance/NeuralMDの性能を最大限に引き出し、計算を実行しました。**

【計算結果および今後の見通し】

計算の結果、**分子動力学シミュレーションの実行速度を最大で約260倍^{注)}に高速化**することに成功、加えて、1ナノ秒の分子動力学シミュレーションをLGPSの98000原子系に対して実施した場合、**約15時間という実用的な時間で約10万原子の大きなモデルのイオン伝導率を計算**することができました。



98000原子系における相対計算速度



GPUデバイス数に対する相対計算速度のスケールアップ

この度、高性能な分子動力学法ソフトウェア、多機能なクラウド環境、高度なシステムインテグレーション技術が三位一体となったことで、膨大なナノ秒オーダーの分子動力学シミュレーションをわずか半日から数日程度の短時間で実行、更に精度の高い計算結果を導き出すことに成功しました。

このサービス環境は、多種多様な機能性素材・材料の研究開発に活用でき、近々にHPCシステムズのサイエンスクラウドサービスの一環として提供される予定です。

HPCシステムズは、今後もアドバンスソフト社、日本オラクルとの連携を強化して、分子動力学法の可能性を追求し、様々な分野の研究開発の効率化および加速化を実現することで、未来社会の創造に貢献してまいります。

サイエンスクラウドサービス

計算化学ソフトウェアを先端のHPC環境で利用可能なSaaSクラウドサービス

計算化学とHPCを熟知した当社が、ソフトとハードを最適化、動作確認済みのSaaS環境で提供

サイエンスクラウド
— 化学シミュレーションクラウド —



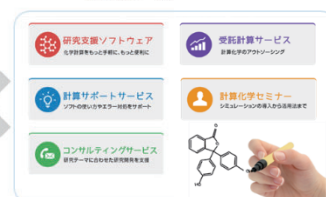
ソフトウェア
— 豊富な化学ソフトウェア群 —



HPCシステム
— 最新の高性能計算システム —



計算化学ソリューション
— 計算支援・受託計算・研究支援 —



サービスの特長：

- ✓ ライセンス取得・サーバー構築が不要！
- ✓ 独自の化学反応解析ソフトウェアや主要な化学ソフトウェアが利用可能
- ✓ 最新の高速計算可能なInfiniBandによるクラスタ環境を含むHPCシステム環境で提供
- ✓ 初心者でも安心できる、計算支援、受託計算、研究支援の計算化学ソリューションと組み合わせで支援

◆HPCシステムズのサイエンスクラウドサービス：<https://www.hpc.co.jp/science-cloud/>

注) Intel Xeon Platinum 72コアCPUによるLGPS 98000原子系の計算時間を基準とし、OCI環境でAdvance/NeuralMDマルチGPUによる相対計算速度を算出しました。

詳細は次のリンクをご参照下さい。

<http://case.advancesoft.jp/NeuralMD/Cloud-Benchmark/index.html>

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。

HPC事業では、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、マテリアルズ・インフォマティクスのプログラム開発・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をワンストップで提供しています。

また、CTO事業では、顧客の用途、課題をヒアリングしながら、価格・性能・品質・高低温・防塵・防水・静電対策・過酷な環境に対する高耐久性など多種多様の対応が求められる、工場生産設備・製造装置・検査装置、制御機器や交通インフラ、自動運転、リテール店舗などのコントローラーとしての産業用コンピュータやエッジコンピュータの仕様提案から開発、生産、保守サポート、長期安定供給を実現しています。

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 2億2,991万円(2023年3月31日時点)

代表者 代表取締役 小野 鉄平

プレスリリースに関するお問い合わせ

https://www.hpc.co.jp/contact/company_form/

Oracle、Java、MySQL及びNetSuiteは、Oracle Corporation、その子会社及び関連会社の米国及びその他の国における登録商標です。NetSuiteは、クラウド・コンピューティングの新時代を切り開いたクラウド・カンパニーです。