

# 量子化学グリッドの構築

グリッドは大規模シミュレーションと大規模データ処理の融合を可能とする次世代情報基盤技術である。当研究センターでは、高性能計算システムとデータベースを連携させたグリッド上に科学技術アプリケーションのポータルを構築するための研究開発を行っている。

量子化学グリッドは、量子化学や高性能計算の専門家の知識と高性能計算システムを連携させて大規模量子化学計算環境を提供する。その特徴は 1) 計算資源の仮想化による計算サービスの普遍的提供の実現、2) 計算内容に則した資源配分により多数の計算機による高速処理の実現、3) 新規の計算依頼に対し、結果データベースを参照し合致結果が存在した場合には計算するより速く結果を提供する機能の実現、4) グループや組織単位毎の柔軟な課金、既存結果や仮想化した計算資源取引のためのアカウント機能の実現、5) Web 技術を用いたユーザーフレンドリなインターフェースを構築、等である。これらの特徴は量子化学計算に限らず、一般のアプリケーションサービスプロバイダとして必要

な機能ともなっている (図 1)。

量子化学グリッドの第一弾として、市販分子軌道計算プログラムで最大シェアをもつ Gaussian の利用環境を提供するポータルを開発し、2002年2月から産総研先端情報計算センター (TACC) で「分子軌道計算ポータル」として公開運用している (図 2)。また、理論化学の著名な国際会議の一つ WATOC 2002 (スイス 8月)、e-Science と仮想研究所のグリッドテストベッドイベント iGrid2002 (オランダ 9月)、高性能計算・高性能ネットワークの世界最大規模の国際会議「SC 2002」(米国 11月) で発表とデモ展示を行い高い関心を得た。完成度をより高めるために、当研究センターで開発中の GridLib を用いた強力なセキュリティ確保を実現するように改良中である。また配布とインストールを容易にするパッケージ化も計画中である。今後国内の複数機関に試験導入し実績を積み、科学技術計算プログラム利用環境のデファクトスタンダードとして世界で広く利用されることを目指して研究開発を進めていく。

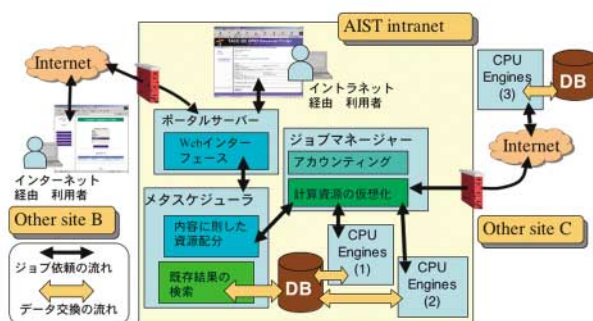


図 1 量子化学グリッドの概要

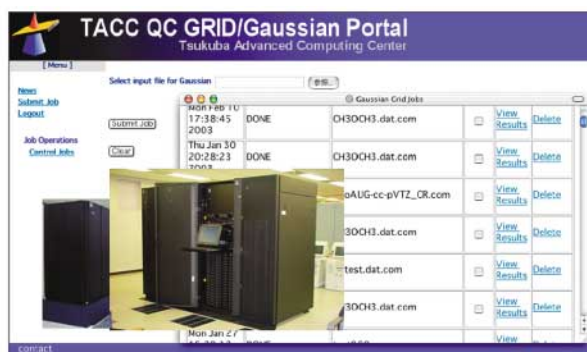


図2 「分子軌道計算ポータル」システム全景と Gaussian Portal インターフェース  
2002年2月から産総研先端情報計算センターにて運用中



にしかわたけし  
西川武志  
t.nishikawa@aist.go.jp  
グリッド研究センター

## 関連情報

- 共同研究者：長嶋雲兵，関口智嗣
- 西川武志，長嶋雲兵，関口智嗣，情報処理学会研究報告，HPC-90-8，43-48 (2002).
- 西川武志，長嶋雲兵，関口智嗣，情報処理学会研究報告，HPC-92-8，43-48 (2002).
- 量子化学グリッド概要 <http://unit.aist.go.jp/grid/QCgrid/>
- 分子軌道計算ポータルマニュアル <http://taccwww.aist.go.jp/hpc/qcportal/>