

1P12

量子化学グリッドASP実証実験

-量子化学に於ける知識と経験の共有-

○ 西川武志・横川三津夫・伊藤智・長嶋雲兵・関口智嗣

産業技術総合研究所グリッド研究センター

【緒言】 Gaussian, GAMESS等のプログラムを利用すれば誰でも量子化学計算を実行できるようになった。しかし計算に必要なメモリ割当という問題を一例に挙げても、ドキュメントには情報が乏しく、何度かは割当メモリ不足で計算に失敗しないとならない状況である。このように所望の結果を正しく、効率良く得るには計算機や量子化学プログラムに対し知識と十分な経験を持つことが必要であり初心者や非専門家には難しい。

【方法】 量子化学グリッドASP実証実験ではGaussianを対象として、我々が開発した専門知識と経験に基づいて計算条件と計算資源を自動的に選び初心者や非専門家が適切に量子化学計算を実行できるシステム、Gaussian Portalと、専門家の知識や利用者の経験を共有する為のシステム、Expertise Portalの実用性を実証することを目指している。実証実験を通じて得られた知見からシステムを改良する事も目指す。

【実証実験詳細】 実証実験に於いて計算資源は日本最大級のAIST Super Cluster ([Itanium 2 1.3GHz/3MB 4CPU-SMP 16GB RAM]×132ノード、[Opteron 2.0GHz/1MB 2CPU-SMP 6GB RAM]×1072ノード)の一部(4分の1以上)を用いる。Gaussianのライセンス上、産総研との共同研究契約の締結を必要とする。実証実験の結果の一般公開に賛同する参加者には、前述計算資源が無償で利用できる。Gaussianの入出力ファイルの非公開を求める参加者であっても、ジョブの利用計算資源の統計情報を公開する事に同意すれば、無償で利用可能である。Phase1:Gaussianを対象として実証実験を行う(参加募集:2005年3月～2005年6月、実施:2005年7月～2006年6月)。Phase2:Gaussian以外にも対象を広げて実証実験を行う(参加募集:2006年3月～2006年6月、実施:2006年7月～2007年3月)。

URL <http://WWW.QCGRID.JP/>

本研究はNEDO平成16年度産業技術研究助成事業として実施されている。