

HP Cシステムズの計算科学事業は、材料探索、化学反応解析、マルチスケール連成、データサイエンスの4領域を柱とし、研究開発に対するシミュレーションやAI（人工知能）の活用を後押ししている。

え、今年からは外部機関として初めて正式なサポートサービスも提供している。有償で研究課題への対応を支援するほか、実習形式の入門セミナーもすでに実施中だ。

GRRM26の新機能とし

コア技術に化学反応解析

MI材料探索でも実績増

とくに、化学反応解析はオリジナリティを發揮できるコア技術として10年以上取り組んでおり、北海道大学・化学反応創成研究拠点と協力して化学反応経路自動探索プログラム「GRRM」を製品化。最新版「GRRM26」の独占販売に加

ては、高精度量子力学計算の代わりに半経験的手法や機械学習ポテンシャルを用いた場合にも、反応経路の探索性能を最適化できる機能が追加された。全体の処理時間を大きく短縮できる。

一方、望みの物性を持つ

・伊藤理彩准教授の研究室と共同研究を行っている。河川汚染リスクの高い有害化学物質を予言・探索しようというもの。

この事例も含め、MIEVOの活用を推進しているのが、新しいHP C利用環境を提供する「オープンオ

分子を探索する逆問題解析用MI（マテリアルズ・インフォマティクス）ツール「MIEVO」の評価が高まっている。POC（概念実証）プロジェクトがいくつか進行しているが、最新の事例では北九州市立大学

ンデマンド（OOD）である。Linuxコマンドなどを必要とせず、ウェブブラウザからのマウス操作でHP Cクラスターを利用することが可能。MIEVOでの活用だけでなく、HP C専門ベンダーとしてハード・ソフトを合わせたさまざまなOODへの要望に応えている。