

1C18 量子化学グリッドの構築：知識と経験の共有・交換の仕組みの実現、 量子化学手法の普及に向けて

(産総研GTRC) ○西川 武志, 伊藤 智、長嶋 雲兵、関口 智嗣

【序】 Gaussian シリーズ、GAMESS、AMBER 等に代表されるパッケージプログラムの普及により、計算化学の専門研究グループであっても自前での開発を中止し、それらを利用したり自前の手法を追加機能として実装したりするようになってきている。計算化学の初心者や非専門家がパッケージプログラムをブラックボックスとして利用するのは当然の帰結と言える。極論すれば入力データの形式さえ整えば内容を全く理解していない利用者でもジョブを実行することが可能である。意味のあるシミュレーションを実行するためには十分な知識と経験が必要であり、現状では専門家との連携ができない場合は正しい結果を得ることが困難であり、それは単なる CPU 資源の浪費では収まらず、人的資源の浪費や欠陥生産物(論文、製品)を生み出しかねない。ところが計算化学の専門家は新しい手法の開発を優先しがちであり、計算化学を手段として用いる計算科学の非専門家で十分な経験を持つ先行者は自らのノウハウを他者に提供するのは倦厭しがちである。

これに対する解決策として我々は量子化学の専門知識と経験をグリッド技術を用いて広く共有する仕組みとして量子化学グリッドを構築してきている。これまでの実装では知識データベースに既存の専門家のノウハウを整理して蓄積し、計算資源の選択や計算条件の修正等に利用し、結果データベースには既存計算結果が蓄積され同様の計算依頼に対して直ちに結果を、再計算するより速く返す仕組みを実装してきている。これにより計算内容に対し適切な計算条件の設定と計算資源の選択を自動化し、計算資源の利用効率の向上が図れるようになった。

しかしながら既存の量子化学グリッドでは多数の専門家の知識や、量子化学グリッドの利用者の経験を直ちに知識データベースに反映する仕組みとはなっておらず、また知的財産権の保護と言う面でも不備がある。今回は新たな実装を提案し、計算化学の利用者から広く意見を募る所存である。

【目的】 計算科学の初心者や非専門家がシミュレーションを実行する際のコスト低減や適用範囲の拡大を図るため、知識や経験を提供者の先行者利益を守りつつ知識や経験の共有を図り、情報交換を促進する。

【目標】 目的達成に必要な情報共有交換の仕組みを開発するとともに既存の量子化学グリッドのアプリケーションサービスポータルに組み込み実証実験サイトを構築する。その実証実験の計算ノードとしては国内最大級のクラスタ計算資源 AIST スーパークラスタを用い、実証実験に参加する利用者は無償で計算資源を提供する代わりに計算結果や実行経験の提供を求める。

【実装・実証実験案】 知識や経験の共有を図る仕組みの量子化学グリッドに於ける実装としては以下のような機能を計画中である。

- ・ 情報提供、閲覧時に個人証明書を利用し個人の特特定を図りつつ匿名性を確保
- ・ 既存の結果の他者への提供に際し入力ファイルや結果ファイルの所有権を持つ者への利益を還元する仕組みの実装
- ・ 既存の結果の提供時には元の実行者や実行日時の情報隠蔽
- ・ 先行者利益を保持するために、特許の様に登録から一定期間は非開示の後に、開示する仕組みの実装
- ・ 入力ファイルや結果ファイルに対して第三者がコメントを付記機能の実装
- ・ 上記コメントを付記した者へ対価の支払いを可能にする仕組みの実装
- ・ 情報提供者の格付け、信頼情報を管理する仕組みの実装

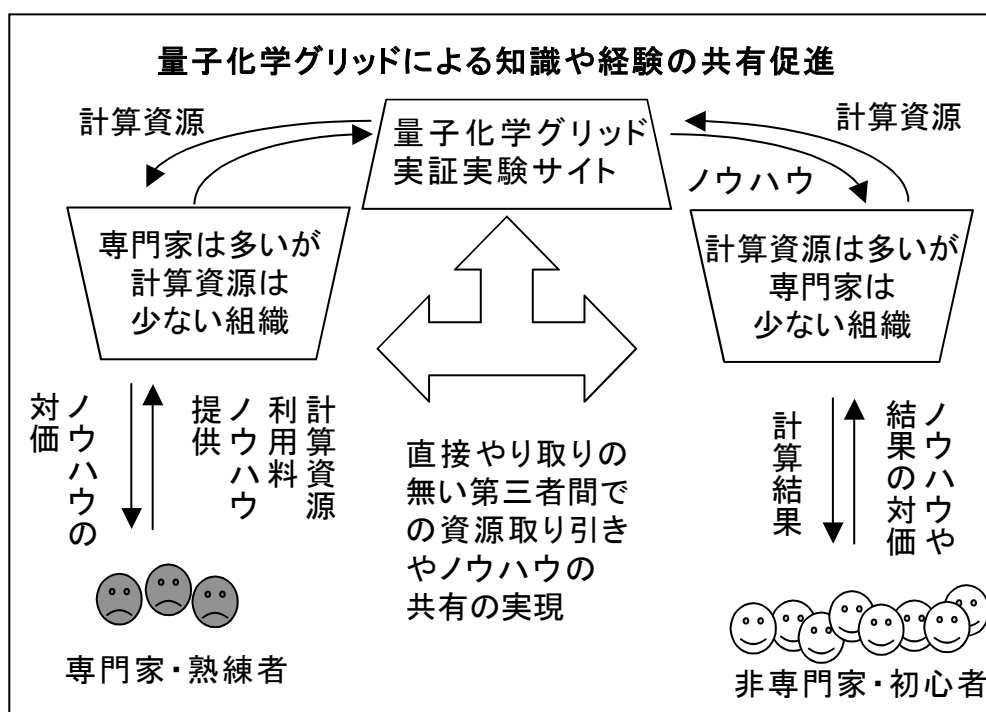


図1 量子化学グリッドによる知識や経験の共有促進概念図

【むすび】 以上で述べた機能を実装し実証実験サイトを運営する事で得られた量子化学の知識と経験を広く共有し量子化学計算の利便性向上を図る所存である。当日は活発な議論を期待する。

【参考文献】

西川武志、長嶋雲兵、関口智嗣、量子化学計算における計算資源予測機能の設計と実装、情報処理学会 ACS 論文誌、Vol.6、pp134-143 (2004)

Takeshi Nishikawa, Umpei Nagashima, and Satoshi Sekiguchi,

”Design and implementation of Intelligent Scheduler for Gaussian Portal on Quantum Chemistry Grid”, Lecture Notes in Computer Science (LNCS) ,2659, pp.244-253 (2003)