

## インターネット適応型分子シミュレーションGUIの開発 (その2)

デモ - 5

山本 章紀 岡本 直樹 半田 享 高田 俊和\*

( NEC 情報システムズ \* NEC ラボラトリーズ)

## 1. はじめに

近年、インターネット技術の発展と普及はめざましく、計算化学の分野でも使い易い計算環境を目指して様々な試みがなされている。我々はこれまで、ネットワーク時代にふさわしい計算環境について検討し、インターネット適応型の分子軌道計算システム「バーチャルマイクロスコプ」[1]の開発に取り組んできた。本稿では、「バーチャルマイクロスコプ」をさらに改良し、計算しながら研究者同士会話が可能なコミュニケーションシステムを開発しここに報告する。なお、本稿は「インタラクション 2001」での発表の続編[2]である。本システムは、JST(科学技術振興事業団) 計算科学技術活用型特定研究開発推進事業「グローバルコンピューティング環境による汎用 MCSCF ソルバーの開発」の一環で開発されている。

## 2. 分子シミュレーション

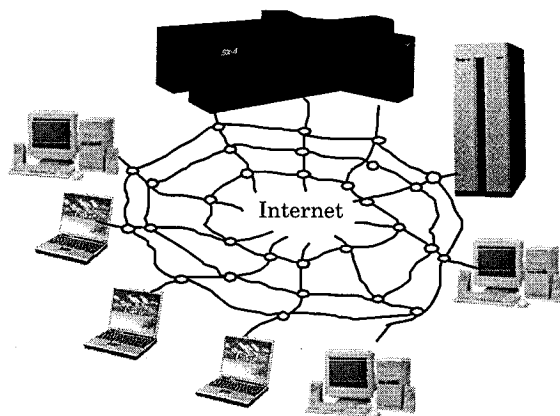
スーパーコンピュータにおける計算性能の著しい向上により、マテリアルサイエンスの分野においても、シミュレーションで物質の性質を予測したり、その反応機構を解析したりする試みが盛んになってきている。このような分子シミュレーションの最大の特長は、汎用性が高く高速に計算できるソルバーと使い勝手の良いユーザーインターフェースが整備されれば、研究者の考えついたアイデアの正当性を短い時間で素早く検証できる。今後数年程度でスーパーコンピュータの演算速度は、分子シミュレーションを実用的な水準に高める程に成熟すると期待されるので、このような分子シミュレーションシステムを開発することは、化学的手法による物の生産の本格化に向けて意義がある。

## 3. システム概要

化学反応を可視化することは、量子化学の専門家が研究開発をする上で非常に重要なことである。本システムは、分子軌道法、分子動力学、分子グラフィックス[3]、オンラインシミュレーション技術の結合により、WEB ブラウザ上でオンラインシミュレーションを実現するためのシステムである。量子化学の専門家はリアルタイムに、あたかも化

学反応を顕微鏡で覗いているかのように反応を観察することができる。しかも、顕微鏡と異なり回転、拡大等も自由にでき、任意の角度、大きさで観察することが可能となっている。また、ネットワーク上の複数のコンピュータにおいて同一画面を観察でき、且つ音声システムを組み込むことにより研究者同士がディスカッションしながら計算結果を解析することが可能となっている。さらに、これまでスーパーコンピュータや並列コンピュータ等を使うには、UNIX の知識が必要であったが、本システムは WEB ブラウザ上から入力データの作成～実行～解析まで行うため、UNIX の知識は全く不要であり、実験の専門家にとって有用である。

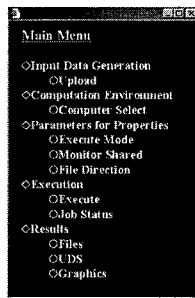
下記に本システムの構成を示す。インターネット上に計算サーバ、分子グラフィックサーバ、クライアント PC が繋がっており、ある 1 台が親となりシミュレーションを開始する。その他の PC が子となり、親 PC と同一の画面を見ることが可能である。回転、拡大等の操作は親子全ての PC から可能となっている。また、親子間で音声によるコミュニケーションも可能である。



分子シミュレーション構成図

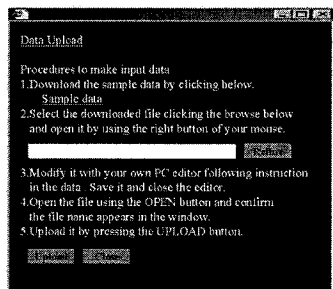
## 4. システムの操作イメージ

### (1) メインメニュー



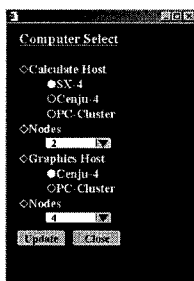
研究者はこの画面から入力データの雛型のダウンロード→入力データ作成→各種パラメータ設定→実行→解析を行う。以降それぞれの操作イメージを順次説明する。

### (2) 入力データの作成、アップロード



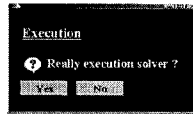
初めて使用する人のためにあらかじめ入力データの雛型が用意されており、研究者はそれをダウンロードする。研究者はこれを PC のエディタで編集し WEB サーバへデータをアップロードする。

### (3) コンピュータ、CPU 数の選択



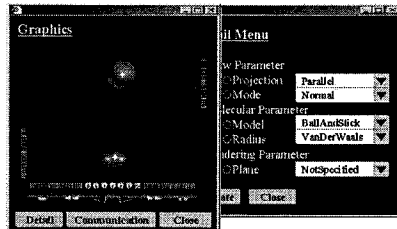
ソルバーを実行するホスト、CG を作成するホスト及びそれぞれの CPU 数を選択する。将来的には、自動的に必要な計算リソースを見積もり、かつ計算サーバの負荷状態を判断し最適な計算サーバへのジョブ投入を可能とするためのエージェント機能を持たせる。

### (4) ソルバーの実行



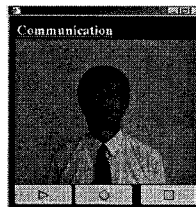
設定した各種パラメータを元に計算を開始する。

### (5) 結果表示



結果データを Java アプレットおよび分子グラフィックスプログラムによって、複数の研究者に対し同時に閲覧が可能である。また同じ画像を見ている研究者同士、言葉だけでは実際どの個所のことを話しているのかわかりづらいところがあるので、マーカ表示機能によりコミュニケーションの充実を図っている。

### (6) 音声コミュニケーション



分子シミュレーションをおこなう研究者と複数の閲覧者との対話システムを実現しており、計算中の結果を同時に閲覧するだけでなく、音声によるコミュニケーションも可能である。

## 5. おわりに

本稿では、研究者同士がインターネットを介し分子グラフィックスや、音声によりコミュニケーションをとり、情報の共有を図るシステムについて提案した。今後も、グローバルコンピューティング環境を活用したシステムの発展に向けて継続的に努力して行きたい。最後に、本システム開発に支援して頂いた、科学技術振興事業団(JST)に感謝します。

## 6. 参考文献

- [1] 山本/岡本他,分子構造総合討論会(1998),講演予稿集,P168
- [2] 岡本/山本他,インタラクシオン 2001(2001),講演論文集,P161
- [3] 半田/高田他,分子構造総合討論会(1996),講演予稿集,P780