

2023 年 11 月 16 日

各 位

株式会社 JSOL
株式会社理研数理

「GENESIS on AWS」の商用利用をサポート ～「富岳」アプリケーションとして初の大規模商用利用が AWS のクラウド上で可能に～

株式会社 JSOL(以下、JSOL)のグループ会社である株式会社理研数理(以下、理研数理)は、グローバル規模でクラウドコンピューティングサービスを提供するアマゾン ウェブ サービス(以下、AWS)上での稼働が可能となったスーパーコンピュータ「富岳」のアプリケーションの一つである分子動力学ソフトウェア「GENESIS(ジェネシス)」について、民間企業などによる商用利用をサポートするサービスを 12 月 1 日から開始します。これは、「富岳」で開発されたアプリケーションとして、最初の大規模商用利用となります。

「GENESIS」とは、分子全体の動きをコンピュータ上に再現できるアプリケーションで、生命科学や創薬などの分野のほか、高分子材料などさまざまな材料開発にも利用されています。オープンソースソフトウェアとして公開されており、ワークステーションなどでも利用することが可能ですが膨大な計算時間が必要となり、「富岳」を利用することでそれを大幅に短縮することができます。

一方で、「富岳」の利用は「特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律」に基づき、利用促進業務を行う機関によって利用者選定の審査や報告書の提出が求められ、申請からアカウント発行までに、課題の種類によって数日から 3 カ月半程度の期間を要します。「GENESIS」を利用する企業にとっては、その利用目的が機密情報に当たるものが多く、またスピードも求められるため、特に企業競争力に直結するような秘匿性の高い開発において「富岳」利用には一部課題がありました。

こうした中、国立研究開発法人理化学研究所 計算科学研究センター(以下、R-CCS)は、「富岳」上で開発してきた研究成果であるシステムソフトウェアやアプリケーションを、クラウドサービスや他のスーパーコンピュータで誰もが直接利用できる環境を構築するといったクラウドの富岳化、いわゆる「バーチャル富岳」の実現に向けて取り組まれています。これにより、より多くの企業・研究機関に対して「富岳」を利用しやすい環境を整え、「富岳」ユーザーの拡大、技術の普及拡大、さらにこれらによる Society 5.0(※1)の実現を目指されています。

「GENESIS on AWS」は、「バーチャル富岳」の提供に先行して、R-CCS が開発した分子動力学ソフトウェア「GENESIS」の AWS 上での稼働を実現したものです。R-CCS では、高い秘匿性とスピードが求められる創薬・材料開発分野に対して、「バーチャル富岳」に先駆けて提供することは意義深いと判断し先行提供を決定、理研数理が、この「GENESIS on AWS」の商用利用をサポートしていきます。

理研数理は、企業・研究機関からのお申し込みから最短1週間で AWS インスタンスを提供するほか、操作方法についても併せてサポートします。お客さまは「GENESIS」をタイムリーに利用することが可能となるほか、利用内容を公開する必要がないため、スピードと高い秘匿性が求められる研究・開発業務において、これまでよりさらに利用しやすくなります。加えて、理研数理は理化学研究所をはじめとするアカデミアと長年にわたる信頼関係を有しており、お客さまの研究・開発業務の高度化に向けて、研究者などによる技術指導や共同研究をコーディネートすることも可能です。

JSOL および理研数理はこれまで、科学シミュレーション分野において知見や技術を提供してきました。また、JSOL は 2023 年 4 月、理化学研究所より『2023 年度 Society 5.0 の実現に向けた「富岳」活用推進にかかる支援業務』を受託、研究者が持つ高度な研究シーズと民間企業のビジネスニーズを掛け合わせることで、「Society 5.0」の実現を目指しています。これからも、グループの総合力を生かし、高度な研究技術を用いて社会課題の解決に取り組んでいきます。

※1 「Society 5.0」とは、サイバー空間（仮想空間）とフィジカル空間（現実空間）を高度に融合させたシステムにより、経済発展と社会的課題の解決を両立する、人間中心の社会のことで、2016 年に政府が「第 5 期科学技術基本計画」において日本が目指すべき未来社会の姿として初めて提唱されたもの。

参考)

株式会社理研数理は、国立研究開発法人理化学研究所、株式会社理研鼎業、株式会社 JSOL の共同出資により、2020 年 10 月 1 日に設立しました。産学による共創プラットフォームをコーディネートすることで、未来の DX バリューを発信していきます。

GENESIS

<https://www.riken-suuri.jp/solution/genesis.html>

GENESIS on AWS の商用利用サポート

<https://www.riken-suuri.jp/solution/genesis.html#menu5>

※本リリースに記載されている内容は予告無く変更することがあります。

※本リリースに記載されている製品名、会社名は各社の商標または登録商標です。

【お問い合わせ先】

株式会社 JSOL

一般のお客さま

株式会社 JSOL 未来共創デジタル本部

E-Mail: rfi@jsol.co.jp

報道関係者さま

株式会社 JSOL 経営企画本部 広報部

E-Mail: webinfo@jsol.co.jp

株式会社理研数理

株式会社理研数理 松崎

E-Mail: info@riken-suuri.jp