

2024年7月18日

プレスリリース

報道関係者各位

HPC システムズ株式会社

代表取締役 小野 鉄平

(コード番号：6597 東証グロース)

問合せ先 取締役管理部長 下川 健司

(電話番号：03-5446-5530)

QunaSys と HPC システムズ、MI 向けのプラットフォーム提供で連携

株式会社 QunaSys（本社：東京都文京区、代表取締役 楊 天任、以下 QunaSys）と HPC システムズ株式会社（本社：東京都港区、代表取締役 小野 鉄平、以下 HPC システムズ）は、この度、化学業界の DX 推進に向けて、マテリアルズ・インフォマティクス（以下 MI）向けプラットフォーム提供で連携することで合意致しました。

QunaSys が開発する実験データ管理プラットフォーム MIQAN と、HPC システムズが開発する高機能材料設計支援ソフトウェア M-EVO をセット提供することにより、MI を活用する上で必要不可欠なデータベース整備から所望の化学構造の提案までを一気通貫でカバーし、顧客の材料開発を加速することを目指します。

QunaSys と HPC システムズは、2022 年 3 月 28 日量子コンピュータ向け化学計算プログラムの事業展開加速に向けて、資本業務提携を行いました。当該資本業務提携のもと、化学コミュニティに対する計算ソリューションの製品開発・提供で、これまでも連携を行って参りました。

今回の MI 向けプラットフォーム提供での連携により、両者のコア領域である計算ソリューションにとどまらず、材料開発を進める上で不可欠な実験データ活用・材料設計支援においても価値提供を図り、化学業界の DX 推進においてなくてはならない存在となることを目指します。

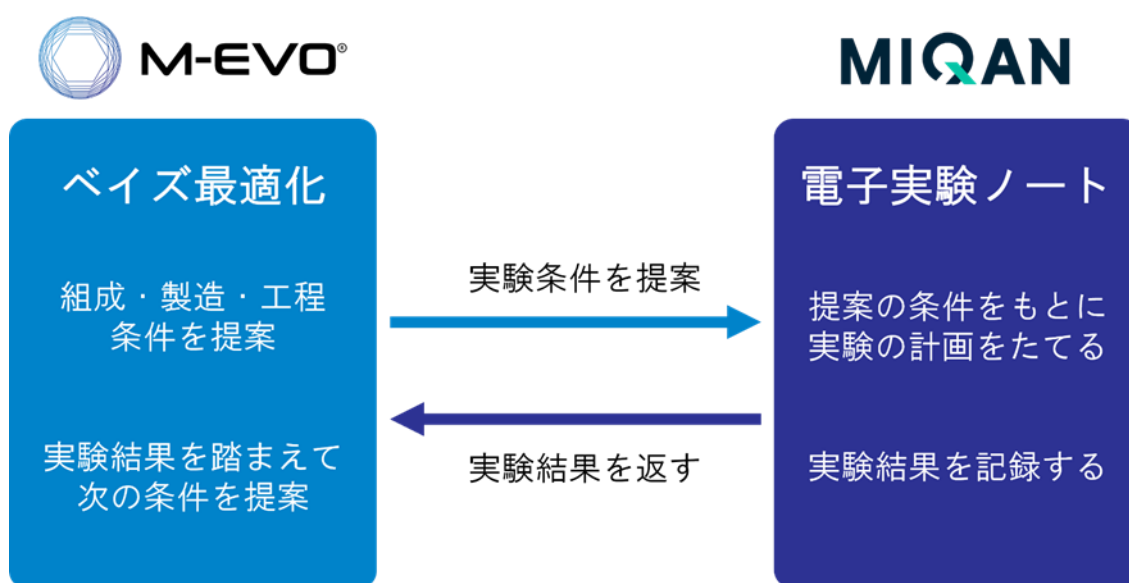
【具体的なソリューションに関して】

QunaSys が提供する MIQAN は、材料開発の実験と計算をつなぐプラットフォームです。実験ノート感覚でデータを記録でき、画像や動画、分子構造など多様な形式のデータを柔軟に管理・共有することができます。

HPC システムズが提供する M-EVO は、AI×分子科学の融合により新規高機能材料開発を加速するソフトウェアです。所望の物性を有する分子構造を探索し、実験・計算・データサイエンスを1つのツールでカバーします。データベースを使わずに多様な分子構造を探索可能で、機械学習による高速な分子構造探索やベイズ最適化を用いた実験による絞り込みなどの機能を備えています。

両プラットフォームが連携することで、M-EVO で算定した実験計画を MIQAN に取り込む、MIQAN に記録した実験結果を M-EVO に取り込む、実験サイクルをスムーズに効率化します。

M-EVO <> MIQAN 連携のイメージ



【QunaSys について】

QunaSys は、量子コンピュータの産業への応用を早期に実現すべく 2018 年に設立されました。量子アルゴリズムの専門知識なしに量子化学計算を行えるクラウドソフトウェア「QURI™」や量子ソフトウェア SDK「QURI Parts™」を提供するとともに、企業コンソーシアム「QPARC™」を通じて、産業界におけるユースケース探索の促進、産業界やアカデミア、政府の研究機関との連携を進めています。

【HPC システムズについて】

HPC システムズは、ハイパフォーマンスコンピューティング（HPC）分野のニッチトップ企業です。科学技術計算用高性能コンピュータとシミュレーションソフトウェア販売、科学技術計算やディープラーニング（深層学習）環境を構築するシステムインテグレーションサービス、シミュレーションソフトウェアプログラムの並列化・高速化サービス、計算化学ソフトウェアプログラム開発・販売、受託計算サービス・科学技術研究開発支援、創薬研究開発や素材・材料研究 開発分野向けサイエンスクラウドサービスまでをワンストップで提供しています。