

2024 年 9 月 11 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)

HPC システムズ、ドイツで開催される 「GDCh Conference on Inorganic Chemistry 2024」に出展、 化学反応経路探索ソフトウェアのプロモーションを展開

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、2024 年 9 月 16 日～18 日にドイツ ミュンヘンで開催される「**GDCh Conference on Inorganic Chemistry 2024**」（以下「GDCh 無機化学会議」）に出展し、当社が提供する化学反応経路探索プログラム「**GRRM**」および「**Reaction plus**」の化学反応経路探索プログラムのプロモーションを行います。

当社は、2024 年 8 月に「**中期経営計画 Vision2027**」を発表しましたが、そのなかで 4 つの重点戦略のひとつとして「**グローバル戦略**」を掲げています。特に欧米をはじめとする**世界市場におけるソフトウェアライセンスビジネスの展開**は、当社にとって最重要な成長戦略の一つです。その前段として 2023 年夏以降、様々な国際学術会議に出展し、各国の研究者およびスーパーコンピューティングセンターとの関係構築・強化を進めています。この度の「GDCh 無機化学会議」への出展も、こうした海外展開を推進する施策の一環として実施します。

◆HPC システムズ「中期経営計画 Vision2027」URL

<https://contents.xj-storage.jp/xcontents/AS98099/6c0ad48b/a1e5/4ae7/b9d4/dc07be00ad0f/20240813141828725s.pdf>

【GDCh 無機化学会議でのプロモーション】

「GDCh 無機化学会議」では、ドイツ化学会における当社主力製品「**GRRM**」および「**Reaction plus**」のユーザーリサーチに加え、ドイツの計算機センターへのソフトウェア搭載を促すためにプロ

モーション活動を展開する計画です。化学反応探索機能に優れたこれら 2 つのプログラムを普及させることにより、「純国産の世界標準のシミュレーションソフトウェア」を目指しています。

また、2020 年 7 月から北海道大学大学院理学研究院および理化学研究所と共同で実施しました、スーパーコンピュータ「富岳」を活用した大規模化学反応経路探索の研究において大きな成果を挙げております。こうした富岳での実績を基に、中長期的にはドイツの計算機センターユーザーによる同ソフトウェアの利用促進と定着を図り、ユーザーネットワークの拡大を実現してまいります。

◆ GRRM

製品概要： **1 つの分子情報から生じる化学反応経路を網羅的に自動探索する先進的機能を備えた計算化学プログラム**。量子化学の高精度な計算を基に、未知の化合物の発見も可能にします。最新バージョンは「GRRM23」となっています。

日本語サイト URL : <https://www.hpc.co.jp/chem/software/grrm23/>

英語サイト URL : <https://global.hpc.co.jp/products/grrm23/>

◆ GRRM と富岳の取り組み

実績概要：スーパーコンピュータ「富岳」の計算リソースを活用し、GRRM プログラムで 93 万個もの膨大な量の化学反応経路と 120 万個の異性体を、わずか 50 日間で探索しました。

海外記事 URL : <https://global.hpc.co.jp/news/news03/>

◆ Reaction plus

製品概要：反応物と生成物を指定するだけで、量子化学計算により自動的に化学反応経路を求めることが可能な計算化学プログラムです。当社が独自に開発したもので、通常困難とされる反応機構の解析を高速かつ簡易的に行えるよう、ユーザーを支援します。最新バージョンの製品名は「Reaction plus Pro 2 / Express 2」です。

日本語サイト URL : <https://www.hpc.co.jp/chem/software/react2/>

英語サイト URL : <https://global.hpc.co.jp/products/reaction-plus-pro/>

【世界の化学反応速度論ソフトウェアの市場規模と成長可能性】

化学反応速度論ソフトウェア市場は、化学反応の理解と最適化が産業界でますます重要視され、2032 年までに市場規模が 13 億米ドルに達すると予測されています。化学反応の研究は、医薬品、石油化学、材料科学などの産業プロセスにおいて重要な役割を果たしており、化学反応速度論ソフトウェアは、研究者やエンジニアが複雑な反応を予測・解析するための重要なツールとして位置づけられています。

市場の成長を支える要因として、化学プロセスの複雑化、医薬品開発における需要の増加、環境に配慮した化学プロセスの関心の高まりが挙げられます。特に、製薬業界では、化学反応速度論ソフトウ

エアが医薬品開発プロセスの効率化とコスト削減において重要な役割を果たすことが期待されています。

化学反応速度論ソフトウェア市場は、多様な産業における化学反応のシミュレーションと分析のニーズに応えるため急速に成長しており、データから学習して反応結果をより正確に予測できる人工知能（AI）と機械学習（ML）の応用技術の進歩により、さらなる拡大が見込まれます。

【1つの化学反応が与える産業インパクト】

日本の化学者で、2010年にノーベル化学賞を受賞した鈴木章氏によって開発された鈴木カップリングは、芳香族化合物同士を結合させる重要な化学反応として、医薬品、農薬、有機電子材料などの幅広い分野の製造プロセスに広く利用されており、**1つの化学反応が与える産業インパクトは数兆円規模**とも言われています。この化学反応によって生み出されるビアリール構造を持つ化合物は、例えば血圧降下剤のロサルタン、野菜の殺菌剤ボスカリド、液晶テレビの液晶性化合物、有機EL材料などの製造に使われています。これらの化合物は、私たちの日常生活に欠かせず、豊かな暮らしを支えるために重要な役割を果たしています。

【HPC システムズの海外事業展開】

HPC システムズは、科学技術計算やディープラーニング、AI 向けスーパーコンピュータを最適に稼働させる「**HPC-AI 技術**」、量子化学や分子動力学などの高度な「**化学の知見**」、スーパーコンピュータ 富岳にも搭載され広範な産業分野にて高評価を得ている「GRRM」を筆頭に、多彩な「**シミュレーションソフトウェア**」を有しています。これらの固有の要素を組み合わせることで、幅広い研究開発の現場に最適な個別のシステムやサービスを提供しています。そして、HPC システムズのシステムやサービスを活用することで、研究開発にかかるコスト削減、期間短縮、困難な課題解決などが実現されます。

化学領域に強みを持つ HPC システムズのシステムやサービスは、国内市場のみならず、世界の巨大市場のニーズにも十分応えることができます。欧米を中心に、ソフトウェアを前面に押し出したプロモーション活動を継続的に展開し、HPC システムズの知名度向上やニーズの把握などを行うことで、**「中期経営計画 Vision2027」に掲げた「グローバル戦略」に基づき、本格的な海外事業展開に取り組んでまいります。**

【「GDCh 無機化学会議」】

GDCh 無機化学会議（GDCh Conference on Inorganic Chemistry）は、ドイツ化学会（Gesellschaft Deutscher Chemiker, GDCh）が主催する無機化学分野の国際会議です。無機化学に関する最先端の研究成果や進展を共有する場であり、数多くの無機化学に関連する研究者、学生、産業界の専門家が出席します。この会議は、化学分野における学術的な交流と協力を促進し、無機化学の未来の発展に寄与することを目的としています。

ドイツ化学会（GDCh）は、ドイツで最大の化学専門家の団体であり、その活動の一環としてこの無機化学会議を定期的に開催しています。無機化学の各分野（触媒、固体化学、金属錯体化学、材料化学など）における最新の研究成果や技術開発が講演やポスターセッションを通じて発表されるほか、ネットワーキングの機会も設けられています。参加者は世界中から集まり、知見を共有し、学術的な議論を深める場となっています。

「GDCh Conference on Inorganic Chemistry 2024」は、2024年9月16日から18日まで、ドイツ ミュンヘン工科大学で開催されます。

◆ GDCh Conference on Inorganic Chemistry 2024 ホームページ

URL : <https://veranstaltungen.gdch.de/microsite/index.cfm?l=11583&modus=>

【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。HPC 事業では、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、マテリアルズ・インフォマティクスのプログラム開発・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をワンストップで提供しています。

また、CTO 事業では、顧客の用途、課題をヒアリングしながら、価格・性能・品質・高低温・防塵・防水・静電対策・過酷な環境に対する高耐久性など多種多様の対応が求められる、工場生産設備・製造装置・検査装置、制御機器や交通インフラ、自動運転、リテール店舗などのコントローラーとしての産業用コンピュータやエッジコンピュータの仕様提案から開発、生産、保守サポート、長期安定供給を実現しています。

社名 HPC システムズ株式会社 <https://www.hpc.co.jp/>

所在地 東京都港区海岸 3 丁目 9 番 15 号 LOOP-X 8 階

設立 2006 年 7 月 3 日

資本金 2 億 3,014 万円 (2024 年 6 月 30 日時点)

代表者 代表取締役 小野 鉄平

プレスリリースに関するお問い合わせ

https://www.hpc.co.jp/contact/company_form/