

2024年5月24日

文部科学省 研究振興局
参事官（情報担当）
参事官（ナノテクノロジー・材料担当）

提言書の手交について

計算物質科学協議会 代表
大阪大学 エマージングサイエンスデザイン R³センター
森川 良忠

計算物質科学協議会(CMSF)は、我が国の最先端の計算物質科学技術を振興し、世界最高水準の成果創出と、シミュレーション技術、材料情報科学技術の社会実装を早期に実現するため、2020年5月に設立しました。CMSFは計算物質科学技術に関わる全ての方々に開かれており、2024年3月末時点で産学官の機関からの参加者118人(内企業他会員20人)、参画機関数52機関(大学・国研等:38機関、民間企業:14社)の会員で構成されています。運営は、物質科学分野向けのスーパーコンピュータ共同利用・共同研究拠点である、東北大学金属材料研究所、東京大学物性研究所、自然科学研究機構分子科学研究所と、教育拠点である大阪大学エマージングサイエンスデザイン R³センターの4機関が担っています。主な活動としては、我が国の学術振興と産業発展において、計算物質科学界が果たす役割と進むべき方向性について議論を重ねて意見集約を行い、国や関係諸機関への提言活動を実施しています。

この度、CMSFの2023-2024年度活動において提言書を作成しましたので、手交させていただきます。今回は、CMSF運営4機関より選出した各2名合計8名で提言書作成ワーキンググループを設置して検討を重ね、CMSFの有識者や一般会員に意見を伺った上でまとめました。前回の提言書の継続として計算物質科学関連の多様な国産ソフトウェアの開発状況を調査した結果、研究支援不足のため多くの国産ソフトウェアがGPUに代表される演算加速器を多用すると考えられる次世代計算機のアーキテクチャへの対応の遅れがより明確となり、十分にその対応が進んでいる海外ソフトの利用に流れてしまっている現状が確認できました。国家マテリアル戦略に支障をきたすこの状況を打破するため、研究開発と同時にプログラムの刷新に向けた分野振興や人材育成を業務に含めた拠点形成型のプロジェクトの実施が必須であることを提言させていただきます。本提言書が今後の国家プロジェクト立案の一助になれば幸いです。

次世代計算機対応計算物質科学ソフトウェア開発拠点の形成に関する提言書

要旨

(経緯)

「京」の活用をベースとしながら実施した「戦略プログラム」(2011-2015年度)と「ポスト「京」プロジェクト」(2014-2019年度)では、多様な物質材料の創製に向けた研究開発と同時に「京」向けの超並列計算ソフトウェア開発が実施された。「京」の性能をフル活用した研究で多くの成果を上げるとともに、超並列計算のノウハウをプロジェクト外の研究者にも伝える分野振興活動や人材育成活動を活発に推進した。その結果、「京」は多くの物質科学研究者や企業開発者に一般利用された。「京」を含めた HPCI には開発した 10 種を超える物質科学計算ソフトがプリインストールされ、現在の「富岳」を中核とする HPCI でも継続利用されている。

(課題)

2020 年度より開始された「富岳」成果創出加速プログラムでは、「戦略プログラム」「ポスト「京」プロジェクト」で開発してきたプログラムを活用し、パラメータ並列計算等の実施で実用に資する成果を上げている。しかし、プログラム開発や分野振興、人材育成の活動経費は配分されていない。2020 年度頃よりデータを活用した科学技術が急速に伸展し、計算機は GPU に代表される演算加速器を活用して性能向上させるアーキテクチャが主流となり、その流れは加速している。ユーザー数が多い海外製ソフトウェアは、演算加速器メーカーの強力な支援のもとプログラムを改変し、新アーキテクチャによる性能向上の恩恵を受けている。一方、「富岳」で利用している国産ソフトウェア群は最先端の演算加速器への対応がなされていないケースが多く、計算機の進歩の恩恵に預かれていない状況である。

この状況を放置すると、海外製ソフトウェアのユーザーが増えて寡占化が一層進む。すでにそれらソフトウェアのライセンス料は高騰しており、経済安全保障上の問題にもつながりかねない。日本で多様なマテリアル開発のニーズに応えるソフトウェアの多様性を担保しなければ、日本の強みであるマテリアル関連産業の衰退にもつながることが懸念される。

(対策)

この状況を改善するため、ポスト「富岳」プロジェクトでは、研究開発と同時に分野振興活動や人材育成活動を推進し、次世代計算機の性能を引き出す革新的なソフトウェアを開発する拠点形成型の事業を立ち上げることを提案する。計算科学者とともに計算機科学者、情報理工系の科学者等と、ソフトウェアの普及に関わる企業も交え、最先端の AI 技術も駆使した次世代計算機向けのソフトウェア開発手法や、クラウドサービス型のマテリアルデザイン統合シミュレータなどを研究開発する。そして、次世代計算機向けに革新した多様な物質科学系ソフトウェア群を、国内外、特に今後科学者が急増するアジアの研究機関を含めて分野振興や人材育成に関する活動を実施し、不足しているソフトウェア開発人材需要に

応え、ソフトウェアのユーザーも増やして継続性のあるグローバルなソフトウェアに発展させていく必要がある。

(効果)

新しいプログラミング手法を計算物質科学拠点として分野全体で開発し、その手法を各ソフトウェアに展開させることで、ポスト「富岳」をフル活用した科学的成果の創出が可能となる。また、拠点活動として今後のアーキテクチャの伸展に追随するソフトウェア開発を継続的に実施し、日本産業の根幹を支えるマテリアル開発戦略に貢献する。

1. 現状認識～問題点及び物質科学の特殊性～

1.1 分野振興・人材育成に対する支援減少

これまでのスーパーコンピュータのプロジェクトの経緯をみると、「京」や「富岳」を頂点とした HPCI を構築し、その上で動作させた計算科学のソフトウェアを活用して様々研究を推進するプロジェクトが進んできた。「京」の活用をベースとした戦略プログラムやポスト「京」プロジェクトでは、雇用した約半数の研究者が、「京」の上でのソフトウェアの超並列化を中心とした高度化の業務に従事した。物質科学以外の素粒子・原子核・宇宙、ものづくり、医療・創薬、気候変動、地震・津波などの異分野の研究者が密接に交流し、若手を中心とした人的交流や技術交流を盛んに行い、超並列技術の共有と継承のための人材育成の取り組みも実施した。開発したターゲットアプリをはじめとするいくつかのソフトウェアは HPCI 上で公開し、「京」及び現在の「富岳」でも利用されている。

「富岳」に関しても計算機科学と計算科学のコーデザインを標榜して研究推進を進めたが、「富岳」成果創出加速プログラムでは分野振興・人材育成の予算が無くなり、ソフトウェアの開発・更新などができなくなった。なぜなら、限られた予算はすでに開発済のソフトウェアの活用集中させる必要があり、ソフトウェアそのものを開発、改良する研究者が雇用継続できなかつたためである。ソフトウェアは継続的な更新を必要とする知的資産であるが、その開発や更新を継続して実施するシステムが日本には確立されていない。この状況が続くと国内で開発されているソフトウェアの資産が無駄になることが危惧される。このような状況が、次世代の主流のアーキテクチャである CPU+演算加速器に対応することができていない主な原因となっている。このままでは「ポスト富岳」の性能を活かした計算ができない状況になってしまう。プログラムを開発できる人材の育成については、いつも重要であると言われ続けてきているが、プログラム開発人材のアカデミックポジションとしての魅力ある具体的なキャリアパスを提示できていない。物質科学分野のプログラム開発業務は、高度な理論の実装だけでなく、ユーザー数の拡大に向けた丁寧なマニュアル整備が必要であり、膨大な時間を要する。さらに、ソフトウェア開発を学術的に評価する環境の整備が整っていないため、「ソフトウェア開発」は「論文発表」に比べて評価が低くなる傾向にある。このため、ソフトウェア開発は、若手研究者や学生に魅力のある仕事として捉えられていない状況にある。

1.2 海外製ソフトウェアへの高い依存性

計算物質科学分野だけでなく、他分野も含めて現在の事実上の世界標準的ソフトウェアはほとんど海外製である。国内研究者は非常に多くがそれらのソフトウェアを使用しており、依存性が高い。これは研究上の学術的独立性、国際競争力の点で問題であるだけでなく、ポスト「富岳」の性能を最大限引き出すためのソフトウェア改良が自由に実施できないということが大きな問題となる。また、経済安全保障上の大きな問題にも発展しうる。

国産のソフトウェアは、多様性に富んだものが多数開発されており、それらの性能は、海外製ソフトウェアと比べて遜色ない。それにもかかわらず、海外製に比べて国産ソフトウェアのユーザーが少ないのは、GUIなどのユーザーインターフェースや英語マニュアルの整備のようなユーザー支援が不足していることが主たる原因と考えられる。海外製ソフトウェアでは、ユーザビリティ向上に関しても、開発環境の整備・支援と合わせて国からの支援を受けているものが多く、最新の計算機やプログラミング言語、アルゴリズムの進展に対応している。一方、国産ソフトウェアは、国からの継続的な補助金は無く、ソフトウェア開発・整備、ユーザビリティ向上への対応が困難な状況が続いている。

事実上の標準である海外製ソフトウェアのほとんどは、演算加速器の代表である GPU への対応が済んでおり、多くのユーザー、特に産業界のユーザーはそちらに移行している。特に、NVIDIA 製の GPU が支配的である。NVIDIA は、ユーザーの多い海外製ソフトウェアの GPU を用いた高速化を自ら行っている。この状況で「ポスト富岳」が開発された場合、既に GPU 対応済みの海外製ソフトウェアへの依存がますます深刻化する恐れがある。もはやソフトウェアのアーキテクチャへの最適化や性能向上の作業は、ソフトウェア開発者が実施できる内容ではなくなっている。「ポスト富岳」は CPU+演算加速器となる方向性が示されており、現時点では GPU に対応するソフトウェアの改良が必要と言われているが、その対応は遅れている。

1.3 多様な現象を取り扱う物質科学の特殊性と技術開発要素

物質科学で取り扱う現象や対象は非常に多様であり、分子、固体、それらが組み合わさった複合材料など幅広い物質について、その電子的・光学的・熱的・磁氣的・誘電的・力学的性質、さらには化学反応性など、幅広い現象について取り扱う。そのため、計算物質科学において使用されるプログラムも非常に多様になる。これは他の分野とは異なった計算物質科学の特殊な事情である。幅広い現象を理論的にモデル化して計算式に記述し、それらをプログラムに記述してソフトウェア化するという基盤的な研究が日本のマテリアル関連産業の根幹を支えており、この分野で開発するソフトウェアを少数に絞り込むことは国際的な競争力を落としかねない。また、各種のソフトウェアに対しての計算機の最適なアーキテクチャはそれぞれであり、一つに絞ることができないのも特殊な事情である。

上述した通り、この分野は物質・エネルギーの産業界につながっており、事実上の海外の標準ソフトウェアへの依存性はそれらの産業界のリスクに直結し、国産ソフトウェアの衰退はこの産業界に多大な影響を及ぼす。事実上の海外の標準ソフトウェアを使うだけでは物質科学の複雑な問題には不十分であり、学術的な研究力低下だけでなく、物質・材料系の産業界の衰退及びマテリアル戦略の根幹を揺るがす懸念がある。

現状の計算物質科学では、取り扱いが難しい現象はまだ存在し、今後新たな理論に基づいたプログラム開発も必要になってくる。例えば、マイクロなスケールでの精密な電子状態計算手法と、マクロな現実系との間には時間的・空間的スケールのギャップがある。それら

をつなぐマルチスケールシミュレーションの研究も進められているが、まだ発展途上である。また、最も精度が高い第一原理計算においても、電子相関、励起状態、ファンデルワールス力など重要かつ発展途上の問題が残されている。さらに、現在進行中のビッグデータ解析や量子計算機との連携なども課題となっている。これらの様々な技術を組み合わせた多様な研究開発の継続こそが、わが国のマテリアル戦略そのものである。

2. これからの計算物質科学に対する提言

2.1 ソフトウェアの開発・維持・普及、分野振興・人材育成を実施する体制の構築

前章で取り上げた問題点を解決するためには、計算物質科学全体の発展を考へて、科学技術ソフトウェア開発を継続的に、効率的に進められる拠点形成とそれを担える人材育成、人材確保が必要である。

計算機を取り巻く状況は、ハードウェアとソフトウェアの両面で日々進歩しているため、大きな計算機を作るときだけ実現可能性調査をするのではなく、常日頃から世界のアーキテクチャや周辺技術の動向調査し、ソフトウェア開発の方向性を常に考へているべきである。このような調査を計算物質科学全体として行って、その情報を分野全体で共有し、新しい計算機に対するテストができる環境の整備をしておくべきである。

また、HPCI上にプリインストールしたソフトウェアを中核とした各分野のソフトウェアの開発・維持・普及を継続的に行うべきである。なぜなら、調査に基づいて最新アーキテクチャに対応したソフトウェアを常に提供してこそ多くのユーザーを獲得することができるからである。

そのような環境を継続し発展させるために育成すべき人材には、科学技術ソフトウェアを開発する、フラッグシップシステムをはじめとして様々な計算機で科学技術ソフトウェアを使いこなす、異なる研究課題間でもソフトウェア上の共通課題を見出せる、ということが求められる。これまで「京」や「富岳」で培った高速化技術を継承してきた人材はこれらの要求に応えられる貴重な人材である。また、異なる分野の間を取り持つマネジメント業務を担う人材も、戦略的に育成していくことが重要である。プログラム開発やその更新などに関わる研究は論文が書きにくいいため、上述した業務を担う職種に対する評価が欧米に比べて日本は低いという指摘がある¹。そのため計算科学分野全体として、それら職種の役割を再認識し、評価を高めていく必要がある。そして、「この分野に飛び込んでがんばろう」と若手研究者や学生が思えるような人材育成戦略を実施していく必要がある。

このような人材育成を含めた国産ソフトウェア開発や産業界への展開によって産業競争

¹ 中田喜史、「日本のソフトウェア産業と技術者の現状を国際的に評価する」、EC Journal Vol.13 No.4 Mar.2018. <https://www.ipa.go.jp/archive/digital/secjournal/52.html>

力を強化するためのエコシステムについて学術会議で提言がなされており²、このような体制づくりを日本も構築していかなければならない。

2.2 計算物質科学で目指すべきデジタルツイン

シミュレーション技術の発展に伴って、現実世界での実験や製造の前に、仮想空間での実験や製造を行って、効率化や低コスト化、省エネルギーなどを目指す意味でもデジタルツインを実現することが期待されている。計算物質科学におけるデジタルツインの実現に対して、CRDS 研究開発戦略センターから提案されており³、産業界に重要な物質・材料開発に向けて非常に期待されている。海外動向の調査から⁴、物質・材料開発はこの分野の困難な問題もあり他分野よりも遅れているため、世界に先駆けて研究を開始し実現させるべきである。国産ソフトウェアと自国開発のスーパーコンピュータを合わせれば、他国に先駆けたシミュレータとして開発できる。

1.3 で述べたような技術開発要素が計算物質科学の大きな課題として残されており、現在はまだ発展途上である。デジタルツインの実現にも大きく関係するが、化学反応の研究については、機械学習と第一原理計算を組み合わせたマルチスケールシミュレーションにより、長時間の反応を予測する研究が進行しており、早急に取り組むべき分野である。CRDS の提案にあるリサーチセンターに求められる要素も、計算物質科学分野では付録 1 にあるように着実に築き上げられており、産業界とも強い連携の下に拠点形成による研究開発体制を構築すべきである。

2.3 海外展開

「京」の戦略プログラムのころから徐々に高度情報科学技術研究機構(RIST)⁵や計算科学振興財団(FOCUS)⁶などのユーザー支援体制が整いつつあるが、今後は、さらに経済発展の著しいアジア・アフリカ諸国をはじめとして海外のユーザー獲得を進めることが日本の戦略としてよいと考える。これについて、付録 1 にあるようにこれまでの実績をベースとした見通しが立ちつつある。今後はクラウドサービス事業がますます充実し、計算科学の技術指導や受託事業、コンサルティング事業などが顧客の問題解決型事業として展開できる可能性が高い。これまでのプロジェクトの蓄積を活用してクラウドビジネスを展開することで雇用が生まれ、それぞれの分野の学生や若手研究者のキャリアパスを生み出すことも可能となる。

² <https://www.scj.go.jp/ja/info/kohyo/kohyo-25-k230901-abstract.html>

³ <https://www.jst.go.jp/crds/report/CRDS-FY2023-SP-02.html>

⁴ <https://www.jst.go.jp/crds/report/CRDS-FY2021-RR-09.html>

⁵ <https://www.rist.or.jp/>

⁶ <https://www.j-focus.or.jp/>

雇用創出は人材育成活動の核心部分であり、CMSF からの提言書として新たにこの視点を加える。計算物質科学分野では、付録 1 の状況からすぐにでも新たな雇用創出に向けた活動を開始できる状況にある。日本が培ってきた多彩な物質科学ソフトウェア開発群を活用し、総合的なコンサルティング事業やソリューション事業を世界に展開していくための取り組みを早急に進めるべきである。ポスト「富岳」や HPCI を使いこなすための支援の充実が、この分野の人材育成及び分野振興及び顧客の問題解決型事業を軸としたビジネス展開の可能性を高め、マテリアル分野の発展と経済的好循環を生み出すポイントとなる。海外展開は、今後の日本において必須の事項である。

3. まとめ

本提言書では、今後の計算物質科学のあり方について、海外製ソフトウェアへの高い依存性及び戦略プログラムやポスト「京」以降の分野振興・人材育成に対する支援縮小を現状の重要な問題点として取り上げ、その解決策として多様な国産ソフトウェアの重要性、ポスト「富岳」や HPCI 上での国産ソフトウェア開発・維持・普及、分野振興・人材育成を実施する拠点体制・組織の必要性、今後目指すべき方向としてデジタルツイン及び海外展開の必要性について述べた。日本のマテリアル戦略において、国産ソフトウェアの多様性が発展するポイントである。その維持・管理・普及を行う拠点の構築は急務かつ必須であり、それを土台に産官学が連携して分野振興・人材育成を実施し、海外に向けて積極的に展開することが重要である。計算物質科学におけるデジタルツインの推進をいち早く世界に先駆けて取り組み、日本の物質科学技術の優位性を維持させるマテリアル戦略を練る拠点を形成する必要がある。

【計算物質科学協議会・提言書作成ワーキンググループ】

下司雅章（阪大 R³センター）リーダー

中村和磨（九工大）

奥村久士（分子研）

小野頌太（東北大金研）

福田将大（東大物性研）

新里秀平（阪大基礎工）

白男川貴史（分子研）

福島省吾（東北大金研）

【計算物質科学協議会・運営委員/相談役】

（アドバイザー）

片桐孝洋（名大）

茂本勇（ダイキン）

常行真司（東大）

藤堂眞治（東大）

江原正博（分子研）

森川良忠（阪大）

古宇田光（東大）

【協力者】

青木尊之（東工大）

高木亮治（JAXA）

<参考資料>

物質科学分野以外の演算加速器対応の状況調査 勉強会

日時：2023年10月12日（木）13:00-16:00

場所：オンライン開催

<プログラム>

13:00-13:10 「趣旨説明など」

下司 雅章（大阪大学エマージングサイエンスデザイン R³センター）

13:10-13:50 「流体シミュレーションは GPU をどこまで使いこなしているか？」

青木 尊之（東京工業大学 学術国際情報センター）

13:50-14:30 「HPC コンソーシアムからの提言～分野振興・人材育成を中心に～」

高木 亮治（宇宙航空研究開発機構 宇宙科学研究所/HPCI コンソーシアム副理事長（2020年度－2021年度））

14:30-14:40 休憩

14:40-15:20 「計算科学ロードマップの最新版の状況」

藤堂 眞治（東京大学大学院理学系研究科物理学専攻）

15:20-16:00 総合討論

<要旨>

調査物質科学分野以外の状況を知るために、いち早く GPU 化が進められたと思われる流体の実際の状況を伺うために、流体分野がご専門の東京工業大学学術国際情報センターの青木尊之先生に、流体シミュレーションは GPU をどこまで使いこなしているかについてご紹介いただいた。また、分野振興・人材育成についての提言を既に提出されていた HPCI コンソーシアムの内容をご紹介いただくために、宇宙航空研究開発機構 宇宙科学研究所 (JAXA) で、HPCI コンソーシアム副理事長である高木亮治先生に、HPCI コンソーシアムからの提言の中から分野振興・人材育成を中心にご紹介いただいた。そして、計算科学全分野のロードマップを取りまとめておられる、東京大学大学院理学系研究科の藤堂眞治先生に、現在のロードマップの進捗状況をご紹介頂き、その中から GPU 対応についての概要をご紹介頂いた。

流体分野では様々な成功事例が多数あることをご紹介頂いたが、これらの多くは非圧縮性の流体であって、圧縮性流体についてはまだ発展途上の部分があること、独立系ソフトウェア (Independent Software Vendor: ISV) のアプリケーションソフトウェアの GPU 対応は進んでいないものがいくつもあり、オープンソースソフトウェア (OSS) でも未対応のも

のがいくつもあることもご紹介頂いた。各研究者で個別に開発されていたものがいくつもあったが、近年はそれらを少しずつ統合しながら分野全体での開発コストを低減する方向に進んでいるが、GPU化が進んでいるものは均一格子を扱うものが中心ということであった。

HPCI コンソーシアムでの提言書の中で、分野振興・人材育成について、HPCI 戦略プログラムからのこれらについての予算配分を示しながら、将来的なソフトウェアの研究開発能力の低下、計算科学のみならず基礎科学の衰退、世界に対する研究競争力、産業競争力の低下を招くと述べられている。我々の認識と非常に近いことを、詳しく論理的にまとめられていることをご紹介頂いた。また、運用のためのコストがかかるという事実を、決定権のある会議で十分議論されず、いろいろなところで不足している状況があるという指摘もあった。

計算科学ロードマップのこれまでのバージョンの更新毎の進展や対象分野の拡大などの変遷や、最新の取りまとめ状況をご紹介頂いた。また、計算科学ロードマップを取り巻く状況として、戦略プログラム以後分野の中心・代表が曖昧になってきている面があったが、いくつかの分野では取りまとめる母体となる組織の形成や学会としての取り組みが出てきていることも紹介された。しかし、戦略プログラムの時のような分野内外の横のつながりがなくなってしまうことによる弊害への危惧や、新しい人材の参加が乏しくて世代交代が進まない問題、つまりは分野振興・人材育成の予算がなくなったことによる弊害について指摘された。

以上の勉強会を通じて得た情報で、物質科学分野以外の状況が把握できた。ソフトウェアの多様性がある計算物質科学分野の状況とかなり類似した状況もあり、共通する問題意識もかなりあることも分かった。

<付録 1 >

これまでの計算物質科学における分野振興・人材育成の取り組み

計算科学の周辺技術や人材育成、分野振興、世界の計算機やその周辺技術の動向調査を行う組織を作ること考えるにあたり、これまでの計算物質科学分野で行ってきた分野振興・人材育成、海外展開の取り組みのいくつかを紹介する。

「京」の戦略プログラム時に始まり、現在まで東京大学物性研究所で運営されている MateriApps⁷という計算物質科学分野を中心とした世界のソフトウェアの情報を集約した HP の運営活動は、2019 年度の文部科学大臣表彰科学技術賞（科学技術振興部門）を受賞し、高く評価されている⁸。また、国産ソフトウェアの開発において先進的な取り組みを行っている「ソフトウェア開発・高度化プロジェクト」⁹も重要である。

計算物質科学分野では、「京」の戦略プログラムが終了と同時に人材育成・分野振興の事業を継続するために、東北大学金属材料研究所を代表機関として東京大学物性研究所、分子科学研究所、大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センター（現エマージングサイエンスデザイン R³センター）で「科学技術人材育成のコンソーシアムの構築事業（次世代研究者育成プログラム）計算物質科学人材育成コンソーシアム」（PCoMS）を立ち上げ、2023 年 3 月まで実施してきた¹⁰。この事業の事後評価は、**最高評価の S と評価された**。計算物質科学コミュニティでは、戦略プログラムの人材育成事業をできる限り PCoMS の中で継続し、新たにこの事業の中で人材を育成し、分野振興にも貢献してきた。PCoMS 終了後も連携は継続して活動している。

分子科学研究所では、これまで量子化学スクール¹¹が 13 回、分子シミュレーションスクール¹²が 17 回、スーパーコンピュータワークショップ¹³は計算科学研究センター創設以来毎年開催され、それぞれ 2-3 日間ハイブリッド形式で数百名規模の参加者を迎えて行われている。

大阪大学エマージングサイエンスデザイン R³センターでは、HPCI を使いこなせる人材を育成することを目指した配信講義「計算科学技術特論 A」「計算科学技術特論 B」を、「京」の戦略プログラムの事業の一環として 2013 年に開始し、それぞれを隔年で毎年継続して現

⁷ <https://ma.issp.u-tokyo.ac.jp/>

⁸ <https://ccms.issp.u-tokyo.ac.jp/1857>

⁹ <https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/>

¹⁰ <http://pcoms.imr.tohoku.ac.jp/>

¹¹ <https://ccportal.ims.ac.jp/qcs2023>

¹² <https://ccportal.ims.ac.jp/msschool2023>

¹³ <https://ccportal.ims.ac.jp/workshop2023>

在まで 11 年間実施し続けている¹⁴。これまでの参加延べ人数は 12,084 名で、ここ数年増加傾向にある。また、計算機マテリアルズデザイン(CMD[®])ワークショップで第一原理計算の実習を年 2 回 5 日間の日程で開催してきている中で、スーパーコンピュータコースを 2011 年の第 17 回から設置し、スーパーコンピュータを使って実習を行ってきている¹⁵。CMD[®]ワークショップの全参加者が第 44 回までで述べ 2,154 で、そのうちスーパーコンピュータコース受講生はこれまでの 28 回で 135 名が参加した。コロナ禍以降オンラインでの開催としているが、海外からの参加も認めている。そのなかで、ギリシャやモロッコからの参加者も受け入れている。ヨーロッパで有名ソフトウェアのワークショップがあり、大きな時差があるにも関わらずの参加から、日本式のやり方に興味を持たれていると考えられる。

4 つの機関の中でも大阪大学エマージングサイエンスデザイン R³ センターでは、教育機関として社会人及び大学院生の人材育成の実績を築いてきた。文部科学省の「職業実践力育成プログラム (BP)」に認定されている「ナノサイエンス・ナノテクノロジー高度学際教育研究プログラム」(ナノプログラム)を 20 年以上に渡って実施し¹⁶、その中で計算科学についての教育も実施しており、20 年間で 281 名が修了している。企業コンソーシアムを通じて計算科学の普及や啓蒙活動、企業との共同研究部門の設置なども行ってきて、計算科学の社会実装についての実績もある。産業界との連携を推進し、今後期待されるデジタルツインを実現する取り組みも進めていくにあたり、産官学の連携を強化すべきであるが、その土台は築かれている。

大阪大学では、上で述べた CMD[®]ワークショップのアジアでの展開を 2008 年から行っており、毎年数回フィリピン、インドネシア、ベトナム、マレーシア、タイなどで開催している。オンラインでも開催できる現在では、予算を最小限に抑えて持続可能な方式で実施できている。現地には大阪大学で学位を取った卒業生もおり、現地でサポートできる体制も整ってきている。このように長年行ってきた経験から、アジア諸国の計算科学への期待は大きく、日本の研究者が貢献できることは多い。

¹⁴ 2023 年度は <https://www.r-ccs.riken.jp/outreach/schools/20230413-1/>を参照。

¹⁵ <https://cmdworkshop.sakura.ne.jp/index.html>

¹⁶ <https://www.insd.osaka-u.ac.jp/nano/index.html>

<付録 2>

これまでの計算物質科学を取り巻く環境の概観

アーキテクチャの変遷と改良の難しさの増加

1990年代はベクトル機全盛で、ベクトル化プログラミングはベクトル長をできるだけ長くするという比較的単純な指針で行え、しかもその効果は非常に大きかったので、各自で十分取り組めた。2000年前後からは並列計算機が主流となり、MPI や OpenMP など並列化プログラミングを行うようになったが、ノード及びノード内のコア数の急激な増加は、プログラミングの困難さを増大させた。Top500 ランキングの上位のスーパーコンピュータは、数百万コアから一千万コアを超えるものもある。並列化効率の指標の一つである強スケーリングの基礎となるアムダールの法則から分かるように、そのようなコア数では並列化効率が 99%以上でないと全システムを有効に使えない。それを目指したソフトウェアの開発は、その労力に見合う成果が得られるかどうか微妙な場合が少なくない。さらに、SIMD 化を高度なレベルで行わないと期待したほどの高速化ができない。メインメモリも L1/L2/L3 キャッシュと多階層になっており、これにレジスタも含めて複雑化した記憶媒体を有効に活用するプログラミングが、高速化に極めて重要になっている。これは計算物質科学の研究者だけでできるレベルをはるかに超えている場合も多い。特に「京」の初期の時代は並列化効率が厳しく要求され、計算資源を有効に使えるソフトウェアしか利用できなかった。つまり、高い並列化効率を出すことが最重要となって、科学的成果を出すことが二の次になっていた。この開発に 1 年や 2 年を費やすこともあり、各研究者の負担は非常に大きかった。

「富岳」では、「京」での改良ができていれば、その延長でますますの性能が出ることが期待され、そうであったソフトウェアもあったが、中には満足いく速度が出ず、「富岳」用の改良が少なからず必要になる場合もあった。「富岳」の時代になったころから、機械学習や AI、データ科学が注目されるようになり、並列化効率を極限まで高めるよりも、ある程度の性能でデータを大量にとる方向にシフトした。

演算加速器への対応

次のフラッグシップシステムのアーキテクチャも、CPU+演算加速器になる可能性が高いと言われているが、演算加速器としては多くの人が GPU を思い浮かべるとされる。このようなアーキテクチャで、計算物質科学のソフトウェアでは性能が出るものと出ないもので大きな違いがある。古典分子動力学法やフェーズフィールド法は、GPU で大きな性能向上が得られており、既に主要な海外製ソフトウェアは改良が済んでいる状態である。

一方、第一原理計算など量子力学に基づいた計算では十分な開発が進んでいるとは言え

ない。海外製のいくつかは既に NVIDIA が改良済みであり、Exact Exchange に関しては 20 倍以上の高速化が可能であるが、通常よく使用されている一般化勾配近似では数倍程度の加速しか得られず、上で述べた方法のような大きな性能向上が得られないと認識されている。このことは、国産ソフトウェアの開発としても目指す一つの目安にはなるが、一方開発を大きく妨げてもある。なぜなら、開発によって 10 倍かそれに近い速度向上が期待できるならば十分開発コストを回収できると見込めるが、数倍程度ではなかなか取り組むのに躊躇するという状況がある。しかも、それを担当できる人材も限られている。

科学技術ソフトウェア開発者にとっての性能最適化

科学技術ソフトウェア開発は、基礎理論に基づいてプログラミングをする段階と、それをアーキテクチャに合わせて高速化、最適化する段階がある。計算科学の研究者にとって前者は計算科学の研究そのものと言えるが、後者は数値解析やプログラミング技術など性能最適化の要素が強い。計算科学の研究者にとって、後者の性能最適化が最終目的である場合はほとんどない。性能最適化は、科学的研究成果を早く得るために必要なので取り組むのであり、それを請け負ってくれるサービスがあれば、そのほうが良い場合がほとんどである。これまで物質科学の研究者としてソフトウェアの性能最適化が高く評価されることは少なく、そのような作業は極力避けたいのが実際である。なので、若手研究者がこの作業に従事するとその後のキャリア形成に大きな影響が出ることも事実である。

GPU の状況

GPU が科学技術計算に利用されるようになって 15 年から 20 年くらい経つが、GPU の改良も非常に進み、それを利用するためのプログラミング環境である NVIDIA の CUDA の開発、OpenMP と非常に似たディレクティブ形式で GPU を使用できる OpenACC の普及、また OpenMP で GPU が利用できる仕組みの開発など、利用しやすい環境が整ってきている。その中でソフトウェアを GPU 向けに改良するのは、個々の開発者の努力もさることながら、NVIDIA の積極的な活動が非常に大きく、各分野の事実上の標準ソフトウェアのほとんどは Docker などのコンテナイメージとしてダウンロードできる状況になっている。

GPU も長らく NVIDIA 製のみであったが、最近 AMD や Intel も製品化されてきている。しかし、それらはごく最近まで日本では入手できず、全く情報がなかった。もしフラッグシップシステムに GPU が搭載されるようになった場合、それと NVIDIA の GPU の違いはどうか、同じ性能が出るのか、このようなことが調査できる状況にもない中では、分野として望ましいアーキテクチャの提案を出すこと自体も困難であった。密度汎関数理論に基づいた第一原理計算では、演算加速器による加速がどこまで可能なのか、それが計算原理やアルゴリズムのための限界なのか、単なる性能最適化の工夫が十分突き詰められていないせい

なのか、それとも重要だけれども古い形式のルーチンが多数あるといったソフトウェア独自の特徴のためなのか、このあたりもはっきりしているとは言えない。

第2階層システムの多様性とその運用

第2階層に多様なアーキテクチャがあることは、分野によって望まれるアーキテクチャが異なることからよいことである。一方、それぞれに対して最適な性能最適化のコストが必要となる。これをユーザーそれぞれのニーズに対応することは現実的に難しいため、コンテナを利用する事は、ユーザーあるいは開発者の環境を移植でき、運用側での対応が不要ということではメリットが大きい。既にコンテナの一つである Singularity がほとんどの HPCI のシステムで利用可能になっている。

しかし、機械学習などの分野では比較的周知されて利用されているようだが、それ以外では周知が不十分であり、計算物質科学分野でこれに対応した事例は非常に少ない。そのため、高性能計算で最も重要視されるコンテナを利用した場合のソフトウェアの性能についての調査がほとんど行われていない。一部の事例では、これまでのようにコンパイルしてインストールした場合よりも、性能が出ないということが起こっている。しかし、この原因を明確にするほどの事例がなく、未解決といってよい。NVIDIA が有名なソフトウェアのコンテナイメージを公開しているが、日本メーカーではそのような対応はなされていない。

長期的展望に立ったソフトウェア開発への支援の不足

日本の計算物質科学は世界的にみてもかなりレベルが高く、それに伴っていくつもの優れた計算プログラムが作成されてきている。しかしながら、プログラムの普及に関しては、欧米に対して相当差をつけられているのが現状である。2024年2月8日の日本経済新聞で、日本の国際収支の中でデジタル関連のサービスに支払う赤字が年間5兆円であることが報じられ、「ネット広告の配信でシェアの大きなグーグルやメタなど外資テック企業のサービスを使わない選択肢はありえない」、「日本企業のクラウドやソフトウェアへの海外依存度は大きい」といった現状分析がなされていた。これは、日本の計算科学における海外製ソフトウェアへの依存と全く同じ状況であり、ハードウェアには大きな投資をするものの、形として目に見えないソフトウェアには高い価値があるものとは考えてこなかった日本社会の価値観に根ざすものと考えられる。海外のソフトウェアへの過度の依存は、基礎科学的に深くインパクトの大きい研究が出にくくなる懸念があるのみならず、今後の産業界における計算科学の寄与がますます大きくなることを考えると、国家安全保障上、経済安全保障上の観点からも危惧されるべきことである。

以上