

2025年6月6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）

計算物質科学ソフトウェア開発の拠点形成に関する提言

計算物質科学協議会 代表
東京大学 物性研究所
尾崎泰助

概要

計算物質科学におけるソフトウェアは、研究の基盤を支える重要な要素であり、近年の計算機アーキテクチャの進化に適応するためには、継続的な開発と最適化が不可欠である。しかしながら、日本国内のソフトウェア開発は、予算・人材の確保が困難であり、多くのプロジェクトが持続的な開発体制を維持できない状況にある。その結果、国内ソフトウェアの競争力が低下し、海外製ソフトウェアへの依存が進み、日本の研究者が最新技術を自由に活用できない問題が顕在化する恐れがある。現在、Google や Microsoft をはじめとして、世界中の企業がマテリアルズ・インフォマティクスに積極的に参入しつつある。このような企業の動向は気象・流体・宇宙といった他の学術分野と比較しても際立っており、材料開発分野が今後大きな産業発展が見込まれることを示している。中でも、計算物質科学はマテリアルズ・インフォマティクスの中核をなしており、その学術的・産業的影響力は極めて広範である¹。しかしながら、現時点では計算物質科学の研究の多くは汎用的なソフトウェアを用いた解析が主体であり、実際の産業応用に際しては、多種多様な物質や物性に特化したファインチューニングが求められる。このニーズに応えるためには、独自のソフトウェア開発の重要性がますます重要になると予想される。本提言は、このような課題に対応し、国産ソフトウェアの開発・維持・普及を促進するための戦略的な支援体制を構築することを目的としている。

ソフトウェア開発の現状を明確に把握するため、本年度、計算物質科学分野におけるソフトウェア開発および利用の実態調査として、アンケートを開発者と利用者の双方を対象に実施した。利用者アンケートでは、使用ソフトウェアの継続理由や改善の要望、使用停止の要因を分析し、特にライセンス問題が大きな障壁となっていることが判明した。一方、開発者アンケートでは、開発支

援の不足、人的リソースの確保の困難さ、開発の停滞が明らかになり、多くのソフトウェアが持続可能な開発体制を維持できていないことが確認された。

本提言では、こうした調査結果を踏まえ、個々のソフトウェアチームへの支援ではなく、開発拠点を設立し、長期的な開発支援を統括することで、安定した開発環境を確立することを提案する。具体的には、(1) 限られた開発リソースを戦略的に最適化し、重要なプロジェクトへの支援を強化する、(2) 開発者の人材育成を推進し、AI を活用した持続可能な開発体制を構築する、(3) バグ修正・新機能追加・ユーザーサポートを充実させ、ソフトウェアの維持・普及を促進する、(4) 産業界・国際機関と連携し、資金調達や技術基盤の強化を図る、といった取り組みを実施する。これにより、日本の計算物質科学分野の研究力を維持・向上させ、国際的な競争力を確保することを目指す。

1. 実際、Stanford 大学による研究分野横断的なインパクト評価において、第一原理計算ソフトウェア VASP の開発者である Kresse 博士は、全研究分野を通じて 4 位にランクされており [<https://doi.org/10.17632/btchxktzyw.7>]、計算物質科学が多様な科学技術領域にわたって基盤的役割を果たしていることが示されている。

目次

1. ソフトウェア開発・利用の現状の把握
2. 問題点の整理
3. 提言
 - 3.1 開発拠点の形成と統括の重要性
 - 3.2 まとめと出口戦略

付録 1. ソフトウェア利用に関するアンケートの送付先

付録 2. ソフトウェア利用に関するアンケートの質問項目

付録 3. 開発者向けアンケートを送付したソフトウェア一覧

付録 4. 開発者向けアンケートの質問項目

付録 5. 国外の主な計算物質科学のソフトウェアの支援状況

1. ソフトウェア開発・利用の現状の把握

計算物質科学分野におけるソフトウェア開発および利用支援の充実を求める本年度の提言書を作成するにあたり、現状を把握するためのアンケート調査を実施した。この調査は、昨年度の提言書に対する文部科学省からのコメントの一つである「利用支援の現状把握の必要性」を受けて実施したものである。

昨年度の提言書では、国内で開発された多様なソフトウェアが GPGPU などの次世代計算機アーキテクチャへの対応の遅れにより十分に活用されておらず、その結果、組織的に開発が進められている海外製ソフトウェアの利用が拡大し、国内ソフトウェアの競争力低下が懸念される状況が指摘された。また、計算機ハードウェアの進化に伴い、ソフトウェアの継続的な開発・最適化が求められる一方で、それを支える分野振興や人材育成の支援が不足している点も課題として挙げられた。

これらの課題をより明確にするため、本調査ではソフトウェア開発者および利用者の双方を対象とし、それぞれの視点から開発環境の現状、直面している課題、今後のニーズを明らかにすることを目的とした。利用者向けのアンケートでは、使用ソフトウェアの種類、使い勝手、機能面での要望を調査し、求められるニーズを整理した。一方、開発者向けのアンケートでは、開発資源の確保状況、計算機アーキテクチャへの対応、持続可能な開発体制の確立に関する課題について意見を収集した。

以下に、本アンケートの結果を示す。

(ア) 利用者向けアンケート

利用者向けアンケートは2024年11月から12月にかけて計算物質科学協議会のメンバーを通じて様々なメーリングリストなどにアンケート依頼を送付して、幅広い層からの意見を収集した。送付を行ったメーリングリストとしては、cmp-ml、日本物理学会メーリングリスト(領域3, 7, 8, 9, 11, 12)、理論化学会、分子科学会などが挙げられる(送付を行ったメーリングリスト一覧は付録1に記載)。全体として、168件の意見を頂いた。設問の一覧は末尾の付録2に収録してある。ここでは、主な設問の回答結果について報告する。

まず、「ソフトウェアの使用を続けている理由」として、「使いやすい」、「サポートがしっかりしている」、「使いたい機能が実装されている」が特に多く挙げられた。ソフトウェアを継続的に開発する体制が整っていることがユーザーを獲得するには重要な要素であることが再認識された。

また、「(ソフトウェアに求めている)改善点」としては、「新機能追加」、「バグ修正の早期対応」、「サポート体制の改善」、「ユーザーインターフェースの改善」が挙げられた。これもまた、ユーザー獲得にはソフトウェア開発体制の整備が不可欠であることを強く示唆している。

利用者アンケートでは使用を続けているソフトウェアだけではなくて、使用を停止したソフトウェアについての調査も行った。その結果、使用を停止した場合の主な理由としては「代替ソフトウェアが見つかった」、「パフォーマンスの低下」、「ライセンス問題」が多く挙げられた。この中でもとくに、ライセンス問題が一番多かったのが特徴的である。このライセンス問題は、おもにライセンス使用料が高額なため、支払うことができず使用を停止したということであった。アンケート結果のうち価格問題に言及しているのは28件あり、そのうちの約1/3の9件が価格問題で使用を停止したという意見であった。

(イ) 開発者向けアンケート

開発者向けアンケートは、国産で開発が進められている33個のソフトウェアを協議会で議論を行って選出した(付録3にソフトウェア名を記載)。それぞれのソフトウェアの代表的な開発者にアンケート依頼を送付した。合計で36件の回答がえられた。ソフトウェア数より回答数が多いのは代表的な開発者が複数人いることがあるためである。設問については末尾の付録4にまとめてある。ここでは、主な設問に対する回答結果について報告する。

まず、「過去10年間のソフトウェア開発にどの程度の支援」があったかについては、「十分な支援があった」は10%程度で、「ほとんどまた全く支援がなかった」は40%であり、「ある程度支援があった」は50%であった。これから、十分な支援を受けたソフトウェアは10%程度であり、約半数のソフトウェアは十分な支援を受けられていなかつことがわかつた。

「この10年間で支援の状況はどのように変化しましたか?」という設問に對しては、「増加」が約8%、「変わらない」が約42%、「減少」が50%となっている。支援が増加しているソフトウェアは10%以下であり、約半数のソフトウェアは支援がこの10年間で減少しているがわかつた。

また、「開発スピードは他の類似ソフトウェアに比べてどうですか?」という設問に對しては、「非常に遅い」約17%、「遅い」約61%、「速いまた同程度」21%、「不明」約11%であった。約8割のソフトウェアの開発スピードが他の類似ソフトウェアにくらべて遅いことがわかつた。

さらに、「予算や支援不足により開発の遅れや停滞が発生した場合はその事例をお教えください」という設問に對しては、「バグ修正の遅れ」、「新機能追加の遅延」、「ユーザーサポートの低下」、「開発メンバーの離脱」が意見として挙げられた。

2. 問題点の整理

利用者アンケートの結果から、現在も広く使用されているソフトウェアとして、以下の特徴が共通点として挙げられた。

①利用者が継続的に使用するソフトウェアは、バグ修正が迅速に行われ、新機能の追加が継続的に実施されている。

②ドキュメントが整備され、問い合わせに対する適切な対応が提供されるなど、サポート体制が充実しているものが多い。

こうした特徴を維持するためには開発が継続的に行われることが不可欠であり、そのための開発体制が十分でない場合にはソフトウェアの競争力は大きく低下することを意味する。また、開発資源の確保手段として商用化が進められるケースもあるが、その結果としてライセンス料が高額になり、一部の研究者が利用できなくなる事例も報告された。

上記の課題を踏まえると、競争力のある各分野の基幹となるソフトウェアの開発体制を国内で整えて、国内の研究者が最新のソフトウェアを手軽に利用できるようになることが研究力の維持・発展において重要であることが示唆されている。また、ソフトウェアの持続的な発展と競争力の維持には、長期的な開発支援の確立が不可欠である。特に、バグ修正や新機能追加の継続、ユーザーサポートの充実を実現するためには、安定した開発体制を整えることが求められる。特に、国外の主要ソフトウェアでは安定した開発体制が構築されており、日本のソフトウェア開発も競争力を高める必要がある。

一方で、開発者アンケートの結果からは、こうした継続的な開発体制の維持が困難であるという現状が浮き彫りとなった。特に、この10年間で国産ソフトウェアの開発支援は十分におこなわれておらず、予算や支援の不足により開発者を安定的に雇用する体制が整っていないことが、開発の停滞を引き起こしていることが挙げられた。

この影響は、利用者アンケートで指摘された課題とも深く関連している。バグ修正の遅れ、新機能追加の遅延、ユーザーサポートの低下といった問題の多くは、開発リソースの確保が困難であることが主な要因となっている。開発者の人的リソースが不足すれば、ソフトウェアの維持・改良が後回しになり、結果として競争力の低下につながる。また、開発メンバーの離脱も深刻な問題として挙げられる。アカデミアにおいては、ソフトウェア開発が研究活動として十分に評価される環境が整っておらず、開発者が安定した職を得ることが難しい状況にある。そのため、有能な開発者がアカデミアを離れ、ソフトウェア開発の継続が困難になるケースが多発している。国外の支援状況と比較すると、日本の支援の少なさが際立つ。例えば、欧米などでは国際プロジェクトや政府の長期的な資金援助に

より、多くのソフトウェアが持続的な開発体制を維持している[付録5を参照]。日本国内でもこうした支援の強化が急務である。

このように、ソフトウェアの継続的な開発・改良を可能にするためには、開発者の雇用環境の改善と、長期的な支援体制の確立が不可欠である。特に、新機能追加や最先端の計算環境への対応を迅速に行える体制を維持するためには、開発資源の安定的な確保が必要であり、それに向けた政策的支援が求められる。

また、ソフトウェア開発の停滞は、単なる技術的な問題にとどまらず、計算物質科学をはじめとする多くの科学分野の発展に深刻な影響を及ぼす。現在、最先端の科学研究では、実験・理論・計算の三本柱が相互に補完し合いながら新たな知見を生み出している。特に、スーパーコンピュータや GPGPU などのアクセラレーターを搭載した計算機、さらには量子コンピュータなどの先端的な計算環境が整備される中で、それらを最大限に活用するためのソフトウェア開発は不可欠となっている。とりわけ、次世代のフラグシップ計算機として計画されている「ポスト富岳」ではアクセラレーターの搭載が予定されており、その計算機資源を最大限に活用した成果を得るために既存のソフトウェアに対する大幅な修正や最適化が求められる。しかし、現状ではこのような開発をおこなうための基盤は整っておらず、ソフトウェア開発が遅れることが懸念される。国内における基盤ソフトウェアの開発が停滞すると、研究者は必然的に海外製のソフトウェアに依存せざるを得なくなり、結果として以下のような不利な状況に直面する。

1. 研究の独自性と競争力の低下

多くの研究者が共通の海外製ソフトウェアを利用することで、研究の方向性が画一化し、独自の解析手法の開発が困難となる。特に、国内で特定の物質群や計算手法に最適化されたソフトウェアが存在しない場合、研究の自由度が大きく制限される。

2. ポスト処理ツール開発の遅れ

基盤ソフトウェアの上にポスト処理ツールが構築されるケースが多いため、国内で基盤ソフトウェアが整備されていないと、結果的にポスト処理の段階でも海外ソフトウェアに依存することになる。これにより、独自性の高い解析手法を開発することが困難になり、国内の研究成果の発展に遅れが生じる。

3. 研究能力の低下

基盤ソフトウェアの開発が行われなくなることは、計算物質科学の根幹を支える基本的な技術の継承が途絶えることを意味し、これまでに蓄積されてきた重要な知見が失われるおそれがある。それに伴い、当該分野を担う人材の育成や確保も困難となり、我が国の計算物質科学・材料科学の基盤

そのものが危うくなることが懸念される。このような状況が続ければ、日本全体として学問の停滞を招き、さらに国際的な競争の中で他国と肩を並べることも困難となる。

国内研究者の不利な環境

海外製ソフトウェアは、開発国の研究ニーズを優先して設計されているため、日本の研究環境に適した機能が十分に提供されるとは限らない。また、ライセンス費用や利用制限の問題により、特定の研究機関や企業のみが最新のソフトウェアを利用できる状況が生じる可能性がある。これにより、国内の研究者が最新の技術を活用しにくくなり、国際競争力の低下につながる。

これらの課題を解決するためには、国内において基盤ソフトウェアの開発と維持を戦略的に推進し、持続可能な開発体制を構築することが不可欠である。特に、ポスト処理ツールを含めたエコシステム全体を整備し、国内研究者が独自の解析環境を構築できるよう支援する必要がある。また、研究機関・産業界・政府が連携し、国内開発ソフトウェアの競争力を高めるための長期的な支援策を講じることが求められる。

3. 提言

3.1 開発拠点の形成と統括の重要性

2で挙げられた課題を解決するためには、個々のソフトウェアチーム単位ではなく、開発拠点を形成し、戦略的に支援を統括することが重要であると考えられる(開発拠点の概念図を図1に記載した)。拠点形成の主な利点は以下の4点に集約される。

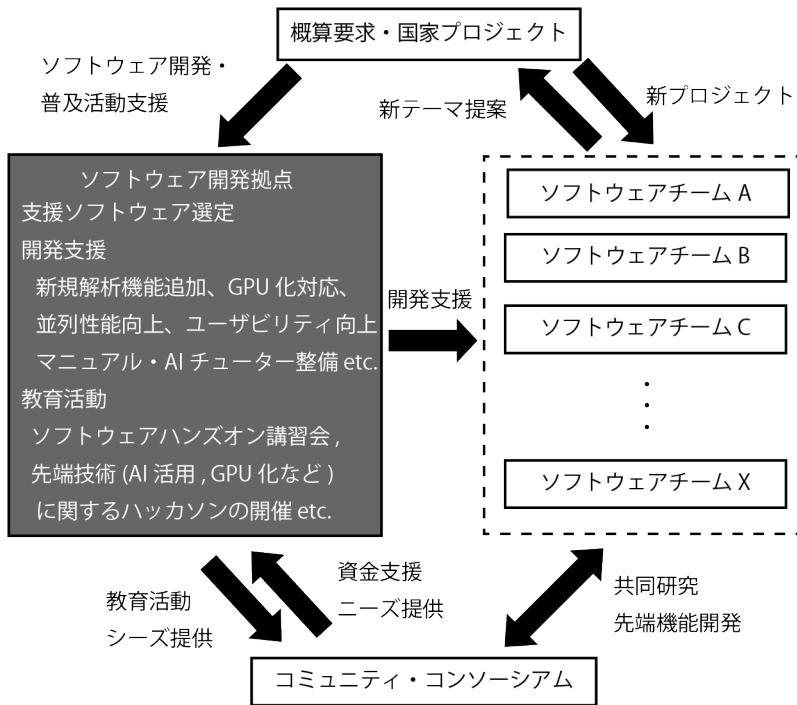


図1 開発拠点に関する概念図

① 開発リソースの最適化と戦略的選定

限られた財政・人的資源を各ソフトウェアチームに分散するのではなく、拠点で統括することで開発リソースを効率的に配分できる。特に、どのソフトウェアを優先的に支援すべきかを、ユーザーのニーズや国際競争力の観点から戦略的に選定することが開発拠点の重要な役割である。開発拠点が一元的に評価・判断し、重要なプロジェクトへの資源投入を最適化することで、国内外の計算物質科学分野での競争力を強化できる。また、共通する計算手法やデータ構造の開発を拠点が担うことで、技術基盤の統一化を進め、各ソフトウェアの開発効率や互換性の向上を促進する。こうした取り組みにより、現在喫緊の課題となっている基盤ソフトウェアのGPGPU対応も効率的に進めることができ、ひいては最先端の計算環境を最大限に活用することが可能となる。これにより、学術分野だけでな

く産業分野においても新たなイノベーションの創出につながることが期待できる。さらに、将来的には量子計算機などの新たな計算基盤の活用も、同様に効率的に行えるようことが期待できる。

② 人材育成

開発拠点が主体となり、講習会やワークショップを開催し、ソフトウェア開発の人材育成を推進する。特に、計算物質科学分野では高度な専門性が求められるため、継続的な教育プログラムの提供が不可欠である。また、開発者の雇用環境を安定化させ、ソフトウェア開発が研究業績として正当に評価される仕組みを構築することで、アカデミアからの開発者流出を防ぐ。

③ AI を活用した効率的な開発体制の確立

今後のソフトウェア開発では、AI を活用したコード整備が不可欠となる。コードの可読性向上や自動文書化を進めることで、AI がコードの構造を理解しやすくなり、バグ検出や機能追加の効率化が期待される。拠点は、AI 対応のコーディング規約やドキュメント生成の標準化を策定し、開発コミュニティに普及させることで、技術基盤の高度化を推進する。さらに、整備されたドキュメントやコードを基盤として専門知識を学習させた AI コンシェルジュを構築することで、コードの構造や機能に基づいた技術的説明や、新規機能実装の支援を自動的に行える環境が整備される。これにより、研究開発者の流出に伴う技術基盤の喪失リスクを低減し、ソフトウェア開発の持続可能性を高めるとともに、技術継承と計算物質科学の継続的な発展に資する体制の確立が期待される。

④ ソフトウェアの保守・普及活動の強化

開発拠点がバグ修正や新機能追加の優先度を管理し、メンテナンスの効率化を図る。特に、持続的な資金確保の仕組みを整備し、長期的な視点でソフトウェアの維持・発展を支援することで、短期的な資金不足による開発の停滞を防ぐことが重要である。また、開発拠点が AI を活用した情報整理やチューリアルの最適化を進めることで、研究者の学習コストを低減し、普及を加速する。

⑤ 産業界・国際機関との連携強化

計算物質科学のソフトウェア開発を持続可能なものとするためには、産業界との連携による資金確保と開発支援、および国際機関との協力による研究基盤の強化が不可欠である。開発拠点が産業界や国際機関との橋渡し役となり、コ

ンソーシアムの設立などを通し協力体制を構築する必要がある。こうした体制の構築により、開発者の雇用安定化を図るとともに、ソフトウェアの長期的な維持・発展を促進できる。また、特定のソフトウェアにおいて産業界との連携が十分整い、産業応用の可能性が明確となった場合には、当該ソフトウェア独自のコンソーシアム設立を積極的に支援する。このようなソフトウェア個別のコンソーシアムを通じて資金を確保し、各ソフトウェアチームの開発体制を一層充実させることが可能となる。

3.2 まとめと出口戦略

具体的な戦略として、政府の財政支援を基盤とし、材料科学分野、物性物理分野、分子科学分野などの分野に対して、それぞれソフトウェア開発拠点を設立する。各開発拠点にはソフトウェアのプロジェクトをマネジメントする主開発者および研究支援要員を複数名配置し、各分野のソフトウェア開発・公開を支援する体制を整備し、上述の①～⑤の活動を実施する。また、将来的には産業界の賛助金を活用し、開発チームを拡充することで、研究と技術革新を加速させる。

本開発拠点は、国産ソフトウェアの開発・維持・普及を促進し、日本の計算物質科学の競争力を維持・向上させる「心臓部」として機能する。これにより、スーパーコンピュータを活用した次世代材料設計や量子シミュレーション分野において国産ソフトウェアの開発と活用を促進し、国家的な研究開発計画と整合性を持たせることで、持続的研究開発基盤としての確立を目指す。

また、拠点が戦略的な調整役を担い、国内の計算インフラと緊密に連携し、開発成果を迅速に社会実装へとつなげる体制を確立する。その一環として、研究成果を産業応用へと展開するための枠組みを整備し、国産ソフトウェアの開発と産業応用の橋渡しを担う仕組みを構築する。これにより、産業界との共同研究や実証実験を通じた技術検証が可能となり、研究成果の社会実装を促進し、技術移転や新規材料開発が加速する。また、これらの活動を通し、産業界との連携を深めることで、共同研究・賛助金・ライセンス提供を通じた開発資金の確保が可能となる。特に、企業向けの機能開発や適切なライセンス提供を通じて、持続的な収益基盤を確立し、安定した開発環境を整備する。加えて、アカデミアと企業の両方で活躍できるキャリアパスを整備し、開発者が安定して活動できる環境を実現する。

加えて、こうした拠点整備や標準化、産業界との連携による開発体制の構築とあわせて、AI 技術を活用した支援環境の高度化も重要な要素となる。将来的には、AI 技術の進展に伴い、本施策で導入・整備された高品質な AI コンシェルジュ同士が相互に連携し、分野ごとの知識や解析ノウハウを共有することが期待される。これにより、より複雑な物質現象や多段階の解析にも柔軟に対応できる

ようになると見込まれる。たとえば、ユーザーが入力した研究課題に対して、複数分野にまたがる解析手順や、目的に応じたソフトウェアの組み合わせを提示するなど、高度で統合的な支援環境の実現が期待される。このような仕組みが整えば、従来は専門家の知見に大きく依存していた解析作業を、より多くの研究者が自律的に行えるようになり、計算物質科学の裾野の拡大と利活用の高度化が進むと考えられる。また、拠点間でAIコンシェルジュが継続的に学習・更新し合うことで、分野横断的な知識の蓄積と技術継承が促進され、将来的な研究支援基盤の強化にもつながる。

こうした取り組みによって、研究室単位で閉じていた従来の開発・利用環境が打破され、オールジャパン体制での高精度かつ高品質なマテリアルズ・インフォマティクスの実現が期待される。さらに、これを基盤として、国際競争力の強化、技術基盤の持続的発展、そして日本発のイノベーション創出を可能とする体制が構築され、「勝ち筋」を確実に握る国家戦略の実現につながることが期待される。

【計算物質科学協議会・提言書作成ワーキンググループ】

三澤 貴宏(代表、東京大学)

吉見 一慶(副代表、東京大学)

寺田 弥生(東北大学)

清原 慎(東北大学)

大貫 隼(分子科学研究所)

甲田 信一(分子科学研究所)

濱本 雄治(大阪大学)

笠原 健人(大阪大学)

吉井 範行(信越化学工業株式会社)

奥野 幸洋(富士フィルム株式会社)

陣内 亮典(株式会社豊田中央研究所)

横山 智康(パナソニック ホールディングス株式会社)

大西 裕也(JSR株式会社)

吉澤 香奈子(高度情報科学技術 研究機構)