

HPC シミュレーションに関する 海外動向調査報告書 【サマリー】

2017年10月

スーパーコンピューティング技術産業応用協議会（産応協/ICSCP）

目次

1. はじめに	1
1.1. 調査の背景と目的	1
1.2. 調査の概要	1
2. 調査先ごとの結果	3
2.1. OpenCFD	3
2.2. Altair	4
2.3. Fraunhofer ITWM	4
2.4. CEMEF	5
2.5. Science for Life Laboratory	5
2.6. SISSA	5
2.7. Max Planck Institute for Polymer Research	5
2.8. Barcelona Supercomputing Center	6
2.9. PRACE	6
3. まとめと考察	7
3.1. EUにおけるHPC利活用にむけた取組み	7
3.2. シミュレーションソフトウェア研究開発の動向	8
3.3. シミュレーションソフトウェア開発・普及等の体制	9
3.4. シミュレーションソフトウェアの大規模HPC・スーパーコンピュータ対応	10
4. 結論	11

1. はじめに

1.1. 調査の背景と目的

スーパーコンピューティング技術産業応用協議会（以下、産応協）は、産業界におけるスーパーコンピューティング技術の利活用を促進し、日本の産業競争力の強化を目指して 2005 年に設立されて以来、シミュレーションソフトウェアの研究開発成果の産業界への普及、産業界における人材の育成等の活動を行ってきた。また、HPCI (High Performance Computing Infrastructure) の産業界におけるユーザーコミュニティ代表として HPCI コンソーシアムに加盟し、幅広いエンドユーザーの視点で、HPC の利活用推進に向けての実態調査、意見取りまとめ、そして、関係省庁や関係機関へ、実態に裏打ちされた提言活動等を積極的に進めてきた。

産応協では、提言活動の一つとして、2016 年より産業界におけるシミュレーション・ロードマップの作成活動に本格的に取り組んでいる。本活動は、今後 10 年程度のスパンで産業界におけるシミュレーション活用の方向性とその効果を見据え、それを現実のものとするために必要な技術・環境等の要素を検討するものである。その検討のためには、シミュレーションソフトウェアに関する技術、利用普及の取組み、HPC 対応等の動向について、産業界の視点での調査が必要である。現在、産業界では欧米発のシミュレーションソフトウェアも広く利用されており、今回は、欧州を対象にシミュレーション・ロードマップ検討に必要な動向を知ることが目的に、海外調査を実施した。主な調査の項目は以下の 3 点である。

- ① 現在あるいは今後重要と考えるシミュレーションソフトウェアの技術動向・開発体制
- ② HPC とシミュレーションソフトウェアの利用促進・普及の取組み
- ③ シミュレーションソフトウェアの HPC プラットフォーム対応

上記目的に鑑み、調査対象としては、欧州におけるシミュレーションソフトウェアを開発している研究機関等の組織、シミュレーション技術に注力して産学連携に取り組んでいる組織、産業界に対してスーパーコンピュータの利用促進を行っている計算リソース提供機関を選定した。

調査結果は、産応協内で活用するだけでなく、産学連携の先進事例や課題等、HPCI コンソーシアムや国への提言に活かしていく。

本調査は、一般財団法人高度情報科学技術研究機構（以下、RIST）と協力して実施した。RIST では、スーパーコンピュータ「京」の登録施設利用促進機関業務および HPCI の運営に係る代表機関業務の一環として、産業界を含む多様な分野の利用者に対しシミュレーションソフトウェアの利用環境整備を進めており、整備に向けた海外動向調査が産応協の計画と重なるところが多く、合同で実施することとなった。訪問先とのアポイント取得を含めた旅程作成・移動等の段取り、調査内容の検討、プレゼン資料作成、現地でのプレゼン及び Q&A 対応、調査報告書のまとめ等において、多大なご協力をいただいた。ここに謝辞を記す。

1.2. 調査の概要

(1) 調査方法

調査実施にあたっては、シミュレーションソフトウェア開発元における開発プロジェクトのリーダーや、研究機関における代表者などのキーマンと直接議論し、意見を交わすことが重要であると考え、欧州における調査対象の拠点を訪問することとした。

面談においては、質問事項や議論したい内容を事前通知したうえで、最初に調査チームから背景や目的、日本における HPC の状況、参加企業におけるシミュレーションソフトウェアの活用状況のプレゼンテーションをした後、意見交換・ディスカッションを行った。

本報告書では、現地での調査記録や、調査対象から提供されたプレゼンテーション資料をもと

に、適宜、Web や文献からの情報を加え、調査結果としてまとめた。

(2) 調査期間

- 2016年12月1日、2017年1月29日～2月7日

(3) 調査対象選定

前述の通り、調査対象としては、シミュレーションソフトウェアの開発等を行っている組織と計算リソース提供機関を選定した(表 1)。前者については、業種によってシミュレーションの活用状況が大きく異なるため、機械・建設と化学・材料の2つの分野に分けて、以下のような観点で調査先を選定した。

- HPCI および産応協の会員企業におけるシミュレーション活用状況の観点
- シミュレーションソフトウェアの将来的な発展性への期待の観点
- シミュレーションソフトウェアの提供形態の観点(オープンソースソフトウェア(以下、OSS)か、商用ソフトウェアか)
- 組織としての成り立ちの観点(民間企業か、EU における Centres of Excellence¹ (以下、CoE)等の公的資金を資金源とする公的研究機関か)
- 調査対象の多様性の観点

計算リソース提供機関として、EU を中心に 24 ヶ国が参加し、高性能計算リソースを産学に無償提供することで、世界トップレベルの研究開発を推進している非営利組織 PRACE を選定した。

表 1：調査対象一覧

分類	訪問先	主な シミュレーション ソフトウェア	選定の観点				訪問日
			活用 状況	将来へ の期待	提供 形態	組織の 成り立ち	
機械 建設	OpenCFD ² イギリス ブラックネル	OpenFOAM [流体解析]	✓		OSS	民間 企業	2017年 1月30日
	Altair ³ フランス ソフィア アンティポリ	RADIOSS [衝突解析]	✓		商用	民間 企業	2017年 2月1日
	Fraunhofer ITWM ⁴ ドイツ カイザースラウテルン	流体解析 可視化処理 等		✓	OSS	公的 研究機関	2017年 1月31日
	CEMEF ⁵ フランス ソフィア アンティポリ	FORGE [塑性加工解析]	✓		商用	公的 研究機関	2017年 2月2日

¹ <https://ec.europa.eu/programmes/horizon2020/en/news/overview-eu-funded-centres-excellence-computing-applications>

² 正式名称 OpenCFD Ltd.

³ 正式名称 Altair Engineering, Inc.

⁴ 正式名称 Fraunhofer-Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik

⁵ 正式名称 Centre de Mise en Forme des matériaux

化学 材料	Science for Life Laboratory スウェーデン ストックホルム	GROMACS [分子動力学計算]	✓		OSS	公的 研究機関	2017年 2月2日
	SISSA ⁶ イタリア トリエステ ⁷	Quantum ESPRESSO [第一原理電子 状態計算]	✓		OSS	公的 研究機関	2016年 12月1日
	Max Planck Institute for Polymer Research ドイツ マインツ	ESPResSo++ [粗視化分子 動力学計算]	✓		OSS	公的 研究機関	2017年 2月1日
		VOTCA [マルチスケール 材料特性計算]					
Barcelona Supercomputing Center スペイン バルセロナ	NoMaD ⁸ [マテリアルズイン フォマティクス]	✓		OSS	公的 研究機関	2017年 2月3日	
リソース 提供機関	PRACE ⁹ ベルギー ブリュッセル	—			—		2017年 2月6日

2. 調査先ごとの結果

各調査先における調査にて分かった主な事実を、シミュレーションソフトウェアの①技術動向・開発体制、②利用促進・普及の取組み、③HPCプラットフォーム対応、④その他特記事項に整理してまとめた。

2.1. OpenCFD

- ① OpenFOAM はOSSでありながら、多様な課題を解決するための幅広い機能を備えており、日本の産業界でも広く使われているが、OpenCFD社では、小規模な開発体制(コアメンバー15名程度)で、開発資金や新技術を提供できるユーザーからの要望を優先して開発に取り組んでいる。開発事例として、日本の企業と連携した大規模解析のためのHPC対応の取組みが紹介された。
- ② OpenFOAMをさらに産業界へ浸透させることを目指して、OpenCFD社では、ユーザーコミュニティによって開発された機能と、ユーザー要望にもとづいて自社開発した機能を集約し、一般的なOSSよりも徹底したテストによって品質を確保しつつ、定期的なリリースを実施している。
- ③ HPC対応については、CPUアーキテクチャのメニーコア化を意識して、並列スケーラビリティ

⁶ 正式名称 Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati

⁷ 開発プロジェクトリーダー来日の際に調査実施

⁸ NoMaDはCoEのプロジェクト名であり、個別のソフトウェアについてはNoMaD laboratory (<https://www.nomad-coe.eu/>)を参照のこと

⁹ 正式名称 Partnership for Advanced Computing in Europe

ティの向上に取り組んでいる。また、メニーコア CPU の一つとして ARM への関心も示している。今後、さらなる流体解析シミュレーションの大規模化・複雑化へのニーズに対応するには、CPU の演算性能だけでなく、メモリバンド幅、メモリ容量も重要であると認識している。

- ④ OpenCFD 社は OpenFOAM 関連のサービス提供が利益の源泉であり、集約されたリソースで効率的な研究開発・サービスを行うことで、継続性のあるビジネスを確立していることが特徴的である。

2.2. Altair

- ① Altair 社では、複雑・複合現象に対するニーズに応えるため、自社で開発している複数のシミュレーションソフトウェアを連携させ、先進的な連成解析の実用化を推進している。また、将来を見越した HPC 活用の高度化の取組みとして、Altair 社とユーザーである自動車大手の PSA 社、ハードウェアベンダーの Cray 社による三位一体の HPC シミュレーション技術開発を実施している。PSA 社が解析モデルの開発、Altair 社と Cray 社が高速化を担当しており、計算リソースは、PRACE または Cray 社からの提供を受け、HPC 最適化等の成果を出している。
- ② 大規模解析において、使用コア数の増加に応じてシミュレーションソフトウェアのライセンス料が高騰してしまうという課題を認識しており、シミュレーションソフトウェアの大規模解析利用促進に向け、ノード数に応じたライセンス料等、料金体系の見直しを行っている。
- ③ CPU 性能向上のペースが落ちていることから、シミュレーションソフトウェアにおける高速化の取組みが重要であるため、Altair 社では全社横断の高速化検討専門チームにより、ハイブリッド並列計算(OpenMP+MPD)に注力している。また、今後のさらなる CPU のメニーコア化にともない、メモリ性能も重要になると認識している。
- ④ 日本とのコラボレーションにも前向きであり、例えば、Altair 社のシミュレーションソフトウェアに対する ARM への移植検証等の取組みであれば、双方にメリットがあり、ハードウェアとソフトウェアの双方の最適化を目指すコデザインも可能である。

2.3. Fraunhofer ITWM

- ① Fraunhofer ITWM の HPC 部門では、企業からの委託研究が主な業務であり、対応分野はビッグデータ、資源探査、Software Defined Storage、大規模データ可視化、Deep Learning 等であり、産業界での実用化は未知数だが、様々な研究開発が行われている。
- ② 利用促進と普及に向けた取組みとして、委託研究で発生した知的財産を保有したまま、それにもとづいたソフトウェアをスピンオフ企業で商用化(OSS の有償サポート、ソフトウェアのライセンス販売等)することにより得られた収益を、研究資金に還元させるといった好循環を産み出している。商用化により、様々なユーザーからの幅広いニーズをソフトウェアに反映しつつ、継続的に開発できるため、委託研究元の企業にもメリットがある。
- ③ HPC 向けのシステムソフトウェアとして、スケーラブルなファイルシステムや仮想的に巨大なメモリ空間を実現するライブラリ、大規模並列に対応した可視化ソフトウェア等の開発に注力している。
- ④ 学位(PhD)を獲得した学生の半数以上が 3~5 年後に産業界に巣立っていくことにより、Fraunhofer ITWM で培われた知識が産業界に移転されていく仕組みが構築されている。

2.4. CEMEF

- ① CEMEF にはポリマー・複合材、表面過程、金属物理、計算力学の 4 つの研究部門があり、塑性加工や射出成形等の様々なシミュレーションソフトウェアの開発が行われている。また、企業との委託研究が盛んに行われており、それを通じて数値計算手法、アルゴリズム、最適化などのノウハウを蓄積している。
- ② 継続的なソフトウェアの開発と普及に向けた取組みとして、委託研究の成果として得られた知的財産等の権利を CEMEF に保有しつつ、これまでに FORGE をはじめとする 7 つのシミュレーションソフトウェアを商用化し、関連企業の Transvalor 等を経由して販売している。特に FORGE は、委託研究によって市場のニーズを集約することにより、研究機関発祥でありながら、世界 40 カ国でユーザーを獲得している。
- ③ HPC への取組みとしては、専門の担当者がシミュレーションソフトウェアの並列化を推進しているが、超大規模に注力するよりも中規模における信頼性や操作性を重視している。

2.5. Science for Life Laboratory

- ① Science for Life Laboratory (以下、SciLifeLab)では GROMACS の開発と高速化に加え、計算速度向上だけでは解決が難しいとされる時間スケールが長大な現象に対し、多数の分子動力学トラジェクトリをサンプリングすることで計算されるアンサンブル平均によるアプローチにも取り組んでいる。また、開発体制については、シミュレーションの方法論の研究チームとは別に、EU の CoE である BioExcel の支援のもと、HPC の専門家を中心としたチームが構成されており、HPC 最適化には両チームによるコラボレーションが非常に有効である。
- ② BioExcel では、その主要シミュレーションソフトウェアである GROMACS の開発のみならず、ユーザーによる応用研究の利便性向上も目的の一つであり、品質保証やユーザーへのサポート・トレーニング提供等に注力している。
- ③ HPC 対応については、HPC 最適化による計算速度向上を極限まで追求している。また、HPC プラットフォームについては、ARM を採用したポスト「京」への関心を示している。ただし、「京」の利用時に、コンパイルに難があったことを踏まえて、コンパイルが容易なポスト「京」のソフトウェア環境への要望があった。

2.6. SISSA

- ① Quantum ESPRESSO (以下、QE)の開発のキーポイントは、シミュレーションソフトウェアのモジュール化である。モジュール化により、既存機能に手を入れることなく、新しいアルゴリズムやアイデアを導入した新機能開発に注力できることがメリットである。
- ② QE の利用普及に向けて QE Foundation を設立しており、ときには EU の CoE である MaX と連携して、開発者およびユーザーのコミュニティ活動や、トレーニング活動等への支援を積極的に推進している。また、Schrödinger 社とのコラボレーションにより、QE 向け GUI の実用化が行われているなど、利便性向上に向けた産学連携の取組みを実施している。
- ③ HPC に対する取組みとしては、MaX において、エクサスケールコンピューティングに向けた QE の HPC 最適化と、シミュレーションソフトウェアが連携するためのフレームワーク開発が行われている。

2.7. Max Planck Institute for Polymer Research

- ① Max Planck Institute for Polymer Research (以下、MPIP)で開発されている ESPResSo++

および VOTCA は、第一原理計算や全原子分子動力学シミュレーションでは扱うことが困難な、長い時間スケールの課題に取り組む上で有効である。

- ② MPIP は、純粋な理学的研究のツールとしてシミュレーションソフトウェアの開発に注力している。それらは OSS として公開しているが、その普及や産業利用推進については、MPIP のミッションではない。また、VOTCA では、ユーザビリティの要である GUI を COSMOlogic 社が開発する可能性がある。
- ③ HPC 対応においては、シミュレーションソフトウェアの最適化や負荷分散の平準化等を MPIP 内部で一部手掛けているものの、主に国内や欧州のコンピューターセンター等のシミュレーションソフトウェア開発において有力な機関と連携して実施している。
- ④ MPIP では、あくまで基礎科学の研究機関であるため、基本的に企業との委託研究は受け付けておらず、理学的な観点で研究価値のある課題が企業側より提供されれば、実施を検討するという方針である。

2.8. Barcelona Supercomputing Center

- ① Barcelona Supercomputing Center (以下、BSC)が拠点となっている CoE の NoMaD では、マテリアルズインフォマティクスの実用化に向けた方法論開発やデータベース整備を行っている。豊富なデータ数(半年で 300 万件のデータ登録)、分析機能(検索、機械学習、リモート可視化、VR)、Web ブラウザのみを利用したユーザーフレンドリーなインターフェイスが既に提供されている。
- ② シミュレーションの利用普及に向けた取組みとして、NoMaD では、産業界へのヒアリングやニーズ調査が遂行される仕組みが完成している。一方、同様に BSC が拠点となっている CoE の MaX では、産業応用への取組みはスタートしたばかりであるが、サービス提供の枠組みの検討が計画されている。
- ③ BSC により運営されている主要なスーパーコンピュータは、スペイン政府と IBM 社とで共同構築した MareNostrum 3 (1.1 PFLOPS) である。今後、2017 年 6 月までに MareNostrum 4 (13 PFLOPS)を導入予定であり、これはメイン部分に加え、将来のエクサスケールコンピューティングに対する研究に向けて、3 種のプロトタイプ(Intel Knight Landing/Knight Hill, Power with NVIDIA GPGPU、ARM)から構成される。

2.9. PRACE

- ① EU における HPC 推進は、PRACE(インフラ提供)、ETP4HPC(テクノロジー提言)、CoE(アプリケーション開発・普及)の「3 本柱」で成り立っている。その内、PRACE は成果公開型の研究開発を通じた最先端研究を推進し、アカデミアおよび産業界に高性能計算リソースおよび利用者支援を提供する役割を担っている。
- ② PRACE では、企業の HPC 利用拡大を通じた競争力向上に積極的に取り組んでおり、特に中小企業に対しては独自のプログラム(SHAPE)を設け、課題ごとに専任者がつき、ニーズ発掘からソリューション検討、人材育成まで総合的なサポートを実施している。今後のさらなる利用拡大に向け、PRACE では、HPC サービス企業と中小企業のマッチングを行う新たなプログラム(SHAPE+)を検討している。
- ③ 将来の大規模省電力システム調達に向け、PRACE では商用化前調達(PCP)を実施中とのことである。現在 PCP は、第 3 フェーズ(試作評価)まで移行しており、3 つの試作機がそれぞれ、CINECA(イタリア/Bull)、GENCI(フランス/E4)、FZJ(ドイツ/Maxeler)に設置され

ている。

3. まとめと考察

3.1. EUにおけるHPC利活用にむけた取組み

(1) CoEの構築¹⁰

HPCに関する欧州の研究開発戦略の概観を理解するために、CoEの取組みについて、訪問先からヒアリングした内容の他、文献等の内容を加えて整理する。EUでは2015年より、特定分野における社会的あるいは産業的課題の解決を目指し、組織横断的に対処するための拠点として、CoEの整備を進めている(表2)。各CoEは、HPCを利用し、アカデミア・産業界の双方における計算科学やビッグデータの活用を拡大すべく、HPCアプリケーションの主要分野におけるシミュレーションソフトウェア開発、最適化、検証、保守、および関連データの管理を行い、場合によっては中小企業を含む産業界に対するコンサルティング等を実施することもある。各CoEに対しては、投資対効果にも考慮した持続可能な運営モデルの確立が期待されている。後述する様に化学・材料分野のシミュレーションソフトウェアの開発普及にCoEが大きな役割を果たしており、日本の今後の公的資金のあり方を考える上で参考となるといえる。

表2: CoE一覧

CoE名称	分野	主な取組み
BioExcel	計算分子生物学	ライフサイエンス分野におけるソフトウェアエコシステムの構築
CoeGSS	グローバルシステム科学(GSS)	GSSのための社会統計データを生成するHPC基盤(HPDA基盤)の構築
CompBioMed	計算生医学	生医学モデリングへのHPC技術の適用を推進
E-CAM	研究支援基盤	材料、バイオ、薬品等のソフト開発・管理とこれを用いたアカデミアと産業界連携の支援、トレーニング
EoCoE	エネルギー	持続可能な低炭素エネルギー供給の実現を支援する計算基盤の構築
ESiWACE	気候・気象予測	HPCシステムに向けた気象・気候アプリの最適化
MaX	材料設計	エクサスケール向けソフトウェア開発、データ管理/ワークフロー・解析・ユーザー支援からなるエコシステムの構築
NoMaD	革新的材料探索	材料分野向け解析データリポジトリ基盤の構築
POP	計算科学	性能分析サービスやツール提供を通じた計算科学利用者支援

(2) 研究機関における産学連携

民間企業を除く訪問先の研究機関において、産学連携に対するそれぞれの役割や戦略は大きく3種類に分けることができる。

1. アカデミックな成果が見込める場合に限り共同研究を行う機関(MPIP)

運営資金のほとんどは、連邦・州政府からの公的資金で賄われており、民間からの資金獲得を求められていないため、企業からの委託研究は受け付けていない。ただし、共有できる高度なアカデミックな課題があれば共同研究を拒むものではない。

2. CoEを産学連携の場とする、もしくは自らCoE運営に参画する機関(SciLifeLab・BSC)

¹⁰ <https://exdci.eu/collaboration/coe>

例えば、SciLifeLab では GROMACS を開発しているが、あくまでその目的はサイエンスの推進である。産学を取り持つ役割は、BioExcel のような CoE に期待されている。

3. 企業からの委託研究を含め、積極的に産学連携に取り組む機関 (Fraunhofer ITWM・CEMEF)

これらの機関は、産業界の課題解決が主な設立の目的となっており、委託研究として多くの資金を民間から獲得している。委託研究を通じて開発した機械・建設系シミュレーションソフトウェアの権利は機関内に留保し、スピンオフ企業を経由して、販売・保守するなどの仕組みが構築されている。

特に、立ち上がったばかりであるが、BioExcel や MaX といった CoE の戦略や動向においては、ソフトウェアの利用普及や産業界へのサービス提供のための体制構築を視野に入れており、今後とも注視するべきである。

なお、日本企業との連携については、社員の派遣等も含め既に多くの機関で実績があり、さらなる連携が期待される。

(3) 人材育成・交流

日本において多くの場合、理論やシミュレーション手法に携わる基礎研究者がシミュレーションソフトウェア開発者を兼ねており、場合によってはサポートまで期待されかねない状況にある。欧州で調査したシミュレーションソフトウェアの開発体制は、基礎研究者と HPC 専門家が連携する体制となっており、さらに HPC 専門家に HPC センター教員等のポジションを用意し、キャリアパスが確立され、継続的な開発とそれを通じた人材育成が実現されている点は特筆すべきである。優秀な人材であれば国籍を問わず受け入れ、世界トップレベルの成果を挙げ、社会に還元していくという姿勢が徹底されているものと考えられる。

産業界との人材交流については、例えば Fraunhofer ITWM では、学位(PhD)を獲得した学生の半数以上が 3~5 年後に産業界に巣立っていくことで、研究所で培われた知識が産業界に移転されていく仕組みがある等、日本の参考になり得る優れた取組みが見られた。

シミュレーションに関わる人材の裾野を広げるための取組みとして、PRACE では、中小企業の HPC 活用を促進するプログラム(SHAPE)を提供しており、HPC リソース提供機関の専門家が応募企業ごとに割当てられ、企業内の人材育成まで含めた総合的な支援を実施している。また、さらなる支援の拡充に向けた新たなプログラム(SHAPE+)についても計画されている。日本の中小企業の HPC 活用促進には、産産協もセミナーや中小企業技術交流会等を通じて取組んできたが、さらなる促進のためには参考にするべき点が多い。

3.2. シミュレーションソフトウェア研究開発の動向

(1) 機械・建設系シミュレーションソフトウェア

機械・建設分野では、製品開発の現場で様々な形でシミュレーションが活用されている。それに加えて、複雑・複合現象のシミュレーション技術の実用化がより求められるようになってきている。

OpenFOAM は OSS でありながら、化学反応等を含む複雑な流れの解析から、固体力学等との連成解析に至るまで、多様な課題を解決するための幅広い機能を備えているといわれているが、日本の産業界では、今のところ基本的な機能の利用にとどまる場合が多い。本調査では、先端的機能を産業界で実用化するための取組みに興味があったが、商用シミュレーションソフトウェアベンダーと比べると、その点は十分ではない印象である。一方で OpenCFD 社は OpenFOAM 関

連のサービス提供が利益の源泉となっており、普及に向けた品質向上とコンサルティング、カスタマイズを通じた、ユーザーの要望に沿った機能開発に注力していることが分かった。

Altair 社では、機械・建設分野のシミュレーションにおいて、主要な領域をカバーした複数の CAE シミュレーションソフトウェアを開発しており、複雑・複合現象に対するニーズに応えるため、それらのシミュレーションソフトウェアの連携によるマルチフィジックス解析に取り組んでいる。将来的には、ユーザーが商用シミュレーションソフトウェアベンダーの枠を超えて、シミュレーションソフトウェアを連携できるように、Altair 社をはじめとする商用シミュレーションソフトウェアベンダーに対し、連携のための規格や仕様の標準化をユーザー側からも強く求めている必要がある。

(2) 化学・材料系シミュレーションソフトウェア

原子・分子スケールの計算科学においては、HPC ハードウェア・ソフトウェアの普及によって、計算モデルの空間スケールに対する制限は大幅に緩和されつつある。一方、依然として困難な課題は、化学反応、レアイベントのサンプリング、巨大分子のグローバルな構造変化のような、時間スケールが長大な現象の扱いと考えられる。この課題に対して、本調査では大きく 3 つのアプローチで取組まれていることが確認でき、今後シミュレーション・ロードマップを検討するにあたって、注目すべき技術動向であると考えられる。

1. HPC 最適化によって計算速度向上を極限まで追求する方法 (GROMACS・QE)
2. 長時間現象を時間軸方向で記述する代わりに、反応座標に対する自由エネルギー面上の動力学として捉え直し、速度論的に解析する方法。時間平均をアンサンブル平均で置き換えることに相当する (GROMACS)
3. 現象の特徴を抽出した粗視化モデルを構築し、系の自由度を大幅に削減する方法 (ESPreSs++)

化学・材料分野では、AI やビッグデータ処理に関する要望が顕在化しつつある。Max Planck Society ではデータ量が非常に多いバイオ分野の課題が増え、その解析が HPC の大きなターゲットになっている。NoMaD では、固体材料を中心としたマテリアルズインフォマティクスの基盤整備が進行中であり、僅か半年で登録された 300 万件にもおよぶデータを対象に、検索、回帰分析、機械学習、リモート可視化、VR 等が提供されており、それらは Web ブラウザを介したユーザーインターフェイスによって利用可能である。それらに加えて、線形および非線形回帰の両方に対応した機械学習ツールが提供されている。今後の動向を、引き続き注視する必要がある。

3.3. シミュレーションソフトウェア開発・普及等の体制

(1) 機械・建設系シミュレーションソフトウェア

機械・建設分野において、OpenFOAM における OpenCFD 社等では、OSS についてのユーザーへのサポート等を民間企業が有償で提供するビジネスモデルが成り立っている。

OpenFOAM の開発チームのコアメンバーは 15 人程度であり、商用の流体解析シミュレーションソフトウェアベンダーよりも一桁程度少ない。総合的な開発力が弱いことは否めず、新機能は開発資金や新技術を提供できるユーザーからの要望を優先して対応している。

商用シミュレーションソフトウェアベンダーである Altair 社では、HPC 対応に対して積極的な取組みが行われており、複数のシミュレーションソフトウェアを横断的に対象とする、HPC 向け高速化対応チームがある等、OSS 開発元より開発力・技術力が格段に高い。その上、ソフトウェアの大規模 HPC 対応は、ハードウェアベンダー(またはリソース提供機関) およびユーザーと

の三位一体のコラボレーションにより取組まれており、実用化を見越した取組みになっている。

CEMEF および Fraunhofer ITWM においては、企業からの委託研究の成果の権利を研究所内に留保して、商用シミュレーションソフトウェアとして市場に投入している。特に、CEMEF は、鍛造・鋳造シミュレーションソフトウェアの FORGE を、関連企業の Transvalor 社を通じて販売している。産学連携で開発したシミュレーションソフトウェアの産業界向け実用化の成功事例として、日本においても参考になる点が多いと考えられる。

(2) 化学・材料系シミュレーションソフトウェア

QE、GROMACS というデファクトスタンダードのシミュレーションソフトウェアの開発拠点では、基礎科学としての研究(結果として核となるシミュレーションソフトウェアを創出)と、創出したシミュレーションソフトウェアの HPC 対応やユーザビリティ向上が明確に役割分担されており、後者には HPC 専門の研究者・技術者が参画している。「HPC シミュレーションソフトウェア開発は big science 化しつつある」という GROMACS 開発チームによる指摘は印象的であり、この指摘は、超並列アーキテクチャ上で十分なパフォーマンスを発揮する HPC シミュレーションソフトウェアには、さらに大規模な開発体制が必要となり、分野ごとに数本に収束する可能性に言及したものである。今後の HPC 利活用の方向性を考える上で考慮すべき点である。

シミュレーションソフトウェア開発の基本方針として、モジュール化が意識されていることは特筆に値する。この方針を特に徹底しているのが QE である。QE の実体は、中核となる電子状態エンジン(PWscf、CP)と付加機能モジュールから構成されるシミュレーションソフトウェア群である。共通 API が定義されていることで、材料特性計算モジュールの開発者は、整備済みの電子状態ソルバーから得られる波動関数等の基本情報を読み込んで各種特性を計算する機能だけを開発・結合すればよい。開発者は自分が興味ある機能モジュールの開発と保守に集中でき、さらに開発モジュールを QE というブランド名に載せてユーザーコミュニティに流通させることができる。モジュール化戦略は開発者コミュニティに新たな参加者を呼び込む上でも、極めて重要な役割を果たしていると考えられる。

シミュレーションソフトウェア普及のために、公的支援によるユーザサポートの充実と、そのための予算および要員の確保が重視されていることも強調したい。EU の CoE では、シミュレーションソフトウェア本体の開発のみならず、品質保証やユーザーへのサポート・トレーニング提供など、応用研究における利便性を向上すべきことがミッションとして明確に宣言されている。

化学・材料系シミュレーションソフトウェアにおいては、今のところ民間企業等が参入し、収益を得るビジネスモデルが十分に確立されていないため、公的資金が普及拡大のため戦略的に投入されている。広く利用されており、デファクトスタンダードといえる一部のシミュレーションソフトウェアについては、民間企業による GUI 等の関連する商用ソフトウェアの開発・販売への参入が始まりつつある(QE と Schrödinger 社の例等)。日本においても同様の取組みが有効であるかは未知数だが、参考にすべき点あるといえる。

3.4. シミュレーションソフトウェアの大規模 HPC・スーパーコンピュータ対応

(1) 計算機アーキテクチャの多様化への対応

今後も進化あるいは変化していく CPU アーキテクチャに対するシミュレーションソフトウェアの対応について、多くの開発プロジェクトでは前向きに取り組んでいる。MPI と OpenMP によるハイブリッド並列の促進等により、Xeon Phi や ARM 等のマルチコア、メニーコア CPU に向けた検討が始まっている。一方で GPGPU については、移植の労力に対して効果が低く、今回の

訪問先においては、ほとんどのシミュレーションソフトウェアの主要ターゲットとはされていない。

また、計算機アーキテクチャに関しては、CPUの演算性能のみではなく、メモリバンド幅、メモリ容量も重要である。特にOpenCFD社、Altair社等の流体/構造解析系では、メモリバンド幅が律速段階となりがちなため、メモリへのニーズはより鮮明である。

新規アーキテクチャの面では、日本のポスト「京」への関心も示された(GROMACS等)。ただし、「京」のソフトウェア環境については、標準的なLinuxとは違って見えることから生じた移植時の困難についても指摘を受けた。このことは、新規アーキテクチャにおけるシミュレーションソフトウェアの移植性向上に関する課題の重要性を示唆する。

ポスト「京」は、欧州発の技術であるARMアーキテクチャに基づくメニーコアCPUを採用したシステムとして、多くの訪問先において期待の高まりを感じた。

(2) 高並列化へのアプローチ

半導体集積度の向上や消費電力抑制に関する技術的限界もあって、CPU単体での演算性能向上は望めない状況となりつつあるという認識は共通している。大規模並列への対応には、前述のAltair社のように、ソフトウェアベンダーとハードウェアベンダー（またはリソース提供機関）、ユーザーとのコラボレーションにより取組まれている。ポスト「京」等に向けて、シミュレーションソフトウェアのHPC対応のために、このような取組みを促進・支援する施策が期待される。

(3) 大規模シミュレーションソフトウェア開発のための計算リソース

多くのシミュレーションソフトウェア開発プロジェクトで、大規模並列化の促進等のため、PRACE等を通じて、公的機関のスーパーコンピュータが有効に活用されている。

機械・建設分野では、Altair社などの商用シミュレーションソフトウェアベンダーでも単独での大規模計算リソースの保有は難しいことから、PRACEシステムの計算リソースを利用している(PRACEへの利用申請が却下された場合、ハードウェアベンダーから提供を受けるケースもあった)。CEMEFでは、外部計算資源としてPRACE Tier-0システムであるJuqueen（ドイツ）、Curie-Jade（フランス）等を利用しつつ、クラウド環境も併用している。

化学・材料分野についてみると、例えばMPIPでは、物理学的研究は自己の組織で実施しつつ、一方で計算機センターなどシミュレーションソフトウェア開発を手掛ける機関との共同で、シミュレーションソフトウェア性能最適化を実施している。またNoMaDでは、PRACE Tier-0システムを擁するBSCを計算機リソース活用の拠点としつつ、Leibniz Supercomputing Center（ドイツ）、Max Planck Computing and Data Facility（ドイツ）等との連携を確立している。

(4) 先進的技術(AI、ビッグデータ等)への対応

AI技術などの適用について、今回の調査の範囲では、化学・材料分野でのビッグデータ処理において萌芽的な動きが見られた。設計探索などの産業応用については、調査範囲を拡げて深掘する価値がある。

4. 結論

今回の海外動向調査では、産応協のシミュレーションを利活用する企業を代表するメンバーおよびRISTにおいて「京」を中核とするHPCIのアプリケーション利用環境整備を推進しているメンバーが、周到な準備のもと、9ヶ所の調査先を訪問し、各大学・企業・機関・グループ等を

代表するリーダーの方々と直接議論し意見を交わすことで、今後の活用に繋がる有意義な調査結果が得られた。

(1) 機械・建設系シミュレーションソフトウェア

機械・建設分野のシミュレーションソフトウェアに関しては、複雑・複合現象の解析へと向かっている産業界のシミュレーションニーズの動向を踏まえて、各社・各研究機関において、それぞれ特徴ある取組みがなされている。特に、コミュニティを活用して、スリムな開発体制で、普及に向けた品質向上と広く使われる機能の実装を重視する OpenCFD 社の取組みと、複数のシミュレーションソフトウェアの HPC 対応および連成によって、先端的シミュレーションニーズに応えることを目指す Altair 社の取組みは、一口に民間企業といっても対照的である。少なくとも半分が公的資金で運営されている応用研究機関の Fraunhofer ITWM と CEMEF も含め、各社・各機関の特徴を考慮したうえで、日本の産業界のニーズの受け皿としての連携が可能であり、効果が期待できるとの感触が得られた。

(2) 化学・材料系シミュレーションソフトウェア

化学・材料分野のシミュレーションソフトウェアに関しては、時間スケールが長大な現象の取扱いに対し、HPC による計算速度向上を追求するアプローチと共に、計算速度向上だけでは解決が難しいような長い時間スケールが本質的となる課題(例：化学反応、タンパク質構造のグローバルな変動)に対し、アンサンブル平均や、粗視化モデル等の方法論を開発するアプローチがなされている。今後、産業界におけるシミュレーション・ロードマップを検討するにあたって、注目すべき技術動向であると考ええる。

日本の産業界でも広く利活用されている QE 等の開発プロジェクトでは、デファクトスタンダードの獲得を強く意識して、核となる主要シミュレーションソフトウェアの機能・計算速度等を徹底的に磨き上げると共に、モジュール化や API 定義等を推進している。それらの取組みにより、他プロジェクトや企業との連携が容易となり、多くの研究機関・研究者の参加による応用研究と応用ソフトウェア開発を促し、多くの成果創出と普及に繋げていることが分かった。

また、シミュレーションソフトウェアの開発・普及に対して、EU の HPC 研究開発戦略の 1 つの柱である CoE の公的資金が重要な役割を果たしている。調査した CoE では、シミュレーションソフトウェアに関する研究開発だけでなく利用普及や産業界へのサービス提供のための体制構築までがスコープとなっている。この分野の日本の公的資金の役割を考える上で、考慮すべき事実だと考える。

(3) シミュレーションソフトウェアの HPC 対応

シミュレーションの大規模化・高速化等のニーズを背景に、ほとんどの開発元では、HPC 専門家やハードウェアベンダー等と協力して、シミュレーションソフトウェアの特性を踏まえた HPC 対応に取り組んでいる。多くの場合は、マルチコア汎用 CPU のメニーコア化の動向を踏まえて、並列スケーラビリティの向上に最も注力している。また、日本のポスト「京」に対しても、欧州発の技術である ARM アーキテクチャに基づくメニーコア CPU を採用したシステムとして、期待が高まりつつある。

ポスト「京」の、産業界による利活用の促進に向けては、利用可能なシミュレーションソフトウェアの拡充が重要であり、日本の産業界で広く利用されている欧州発のシミュレーションソフトウェアを含めて、ポスト「京」への移植や最適化を支援・促進するための方策が必要だと考え

る。

(4) 今後に向けて

本調査によって得られた成果であるシミュレーションソフトウェアと HPC に関する技術動向および公的資金や研究機関の産学連携の成功事例等は、産業界におけるシミュレーション・ロードマップの検討と提言活動に活用する予定である。

さらに、本調査によって明らかになった欧州の取組みは、日本の産業界で広く利用されている欧州発のシミュレーションソフトウェアの成功の一因となっているものであり、日本の産学官の取組みに大いに参考になるといえる。調査主体である産応協内の活用だけでなく、国や大学・研究機関等のシミュレーションに関わる多くの方々の参考となることを期待している。