

EUのHPCアプリケーション・ソフトウェア戦略に関する調査報告 －「京」を中核とするHPCIにおける アプリケーション・ソフトウェア利用環境整備に向けて－ Study of the European Union's strategy for HPC application software: Towards application software provisioning in HPCI

一般財団法人高度情報科学技術研究機構
奥田 基、宮内 敦、太田 幸宏、役 誠雄

RISTは、スーパーコンピュータ「京」を中核としたHigh Performance Computing Infrastructure (以下「HPCI」と略す)¹の利用支援業務を行っている。このより一層の充実と、国の重要なアプリケーション・ソフトウェア (以下「アプリソフト」と略す) 資産の普及・活用とスパコンの新しい応用分野の開拓を目指して、HPCIにおいて利用されるアプリソフトの利用環境整備²を推進している。この実施計画立案にあたり、利用頻度が高くまた利用者からの要望も多い欧州発のオープンソース・ソフトウェア (以下「OSS」と略す)³を中心に、2016年12月～2017年2月の間に、国内でのヒアリング及び欧州6カ国の訪問により、欧州の9機関において、今後の開発計画、技術動向、保守体制、普及戦略、産業界との関わり等についての調査を行った。本稿では、これらの調査結果について概説する。

1. はじめに

RISTは、スーパーコンピュータ「京」を中核としたHPCIの利用支援業務を行っているが、このより一層の充実を図るため、HPCIにおいて利用されるアプリソフトの利用環境整備 (移植/移植支援、実行環境準備、最適化、利用支援体制構築、等) を推進中である。ポスト「京」も見据えて、これまで個々の利用者からの要請に応じて実施されてきた利用環境整備を先行的に行い、また国の資産として重要なアプリソフトとスパコン分野の新規ア

プリソフトの利用環境を先行的・継続的に整備することで、利用成果の早期の最大化、HPCI資源の効率的利用、支援の効率化、資産アプリソフトの活用・普及、そしてスパコンの新しい応用の開拓等を目指している。

このアプリソフト利用環境整備を行うにあたり、HPCIにおけるアプリソフト利用分析や利用者へのアンケート調査等を行った結果、OSSへの関心やこれに対する整備・最適化・利用支援に対する要望が高いことが明らかとなった。また、HPCIコンソーシアム⁴、

- 1 「京」及び大学、国の研究所の大規模計算機システムを広く研究者が公募で利用できる仕組み。
<http://www.hpci-office.jp>を参照。
- 2 移植/移植支援、実行環境準備、最適化、利用支援体制構築 等
- 3 ソースコードが公開され、無償で利用でき、また変更したソースコードを自由に配布できるものである。正式な定義はThe Open Source Initiative Definition (<http://opensource.org/osd>)を参照。
- 4 HPCIコンソーシアム提言書 : http://www.hpci-c.jp/file/170607_HPCIC_teigen.pdf

スーパーコンピューティング技術産業応用協議会⁵（以下「スパコン産応協」と略す）からも同様な要望が出されている。

HPCIで利用頻度が高いOSSの多くは海外、特に欧州を中心に開発されたものが多いことから、アプリソフト利用環境整備の一環として、欧州におけるOSSの現状と今後の開発計画・動向、開発拠点の取組み（開発計画、保守体制、普及戦略）等についての調査、及びEUにおける産学官連携によるアプリソフトの開発・利用状況・普及戦略に関する調査を実施し、実施計画立案に反映することとした。

本稿ではこれらの調査結果とともに、今後の我が国のアプリソフト開発プロジェクト立案にとって示唆に富んだEUにおけるアプリソフト開発・普及戦略について述べる。

本調査はスパコン産応協と合同で実施した。スパコン産応協では、今後10年程度を見越し、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、技術・環境等の要素を検討するシミュレーション・ロードマップの作成活動に取り組んでおり、その一環としての海外調査を予定していた。調査内容がRISTの計画と重なるところが多く、またHPCIの産業利用の観点からアプリソフト利用環境整備への有用なコメントが得られると期待されるため、連携して調査を実施することとした。

2. 調査概要

2.1. 調査方法

調査では、アプリソフト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へインタビューを行った。

質問事項や議論したい内容を事前通知したうえで、インタビューでは、調査チーム側から訪問の背景や目的、日本におけるHPCの状況、参加産応協企業におけるアプリソフトの

表1 訪問先一覧

調査先	主な調査対象	主な調査内容
SISSA ^{*1} (先端研究国際大学院大学) イタリア/トリエステ ^{*5}	Quantum ESPRESSO ^{*3} (第一原理電子状態計算)	第一原理電子状態シミュレーションのOSSとして著名なQuantum ESPRESSOの開発動向
OpenCFD ^{*2} イギリス/ブラックネル	OpenFOAM ^{*3} (流体解析)	流体解析のOSSとして著名なOpenFOAMの開発動向
Fraunhofer ITWM ^{*1} (技術・経済数学研究所) ドイツ/カイザーズラウテルン	流体解析・可視化処理	機械系アプリケーションの技術動向と産学連携に関する取組み
Max Planck Institute ^{*1} ドイツ/マインツ	VOTCA ^{*3} (マルチスケール材料特性解析)	分子動力学データや電子状態の解析アプリVOTCAの開発動向
Altair ^{*2} フランス/ソフィア・アンティボリ	RADIOSS ^{*4} (衝突解析)	衝突解析シミュレーションソフトの技術および開発動向
Science for Life Laboratory (SciLifeLab) ^{*1} スウェーデン/ストックホルム	GROMACS ^{*3} (分子動力学計算)	分子動力学シミュレーションのOSSとして著名なGROMACSの開発動向
CEMEF ^{*1} MINES ParisTech フランス/ソフィア・アンティボリ	FORGE ^{*4} (塑性加工解析)	機械系アプリケーションの技術動向と産学連携に関する取組み
Barcelona Supercomputing Center (BSC) ^{*1} スペイン/バルセロナ	NoMaD ^{*3} (材料インフォマティクス)	材料インフォマティクス等に関する取組み
PRACE ^{*1} ベルギー/ブリュッセル	HPCの産業利用	欧州における産業利用促進施策への取組み

*1: 公的機関、 *2: 民間企業
*3: OSS *4: 商用ソフト
*5: 開発者の訪日に合わせて日本でヒアリング実施

5 スパコン産応協提言書: <http://www.icscp.jp/teigen20170514/>

活用状況をプレゼンテーションした後、意見交換・ディスカッションを行った。

現地での調査記録や、相手側から提供された資料をもとに、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。

2.2. 調査期間

2016年12月1日（訪日した開発者へ日本でインタビューを実施）、2017年1月29日～2月7日（欧州の各機関を訪問）

2.3. 調査メンバー

調査は、事務局を含めRISTが5名、スパコン産協側が8名（機械系2名、素材系1名、化学系2名、IT系3名）、及びアドバイザー2名（理化学研究所、文部科学省）の体制で実施した。

2.4. 調査先

調査にあたっては、RIST内部の調査、スパコン産協内の調査、外部有識者のアドバイス等をもとに、アプリソフトを開発している研究機関、および計算リソース提供機関等を選定した。

アプリソフト開発元、研究機関については、以下の観点で調査先を選定した。

- ・HPCIとスパコン産協の会員企業におけるシミュレーション利用状況
- ・アプリソフトの将来的な発展性への期待
- ・アプリソフトの提供形態（OSS/商用ソフト）
- ・組織体制（民間企業/公的機関・組織）
- ・調査対象の多様性

計算リソース提供機関としては、EUを中心に24ヶ国が参加し、高性能計算機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支援している非営利組織PRACEを選定した。

表1に訪問先、図1に調査のスケジュール

をまとめる。

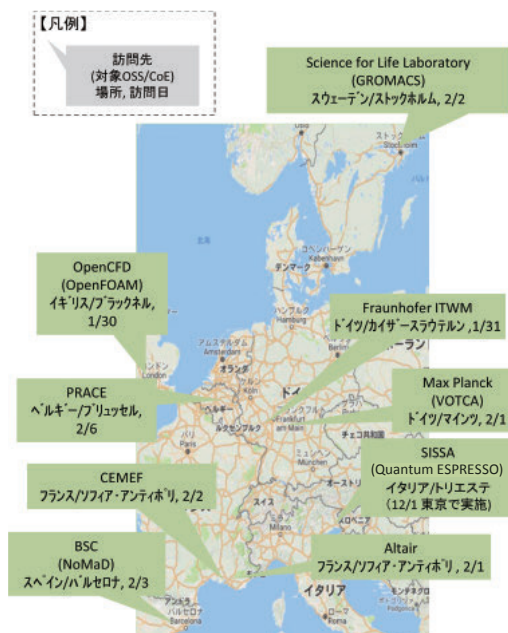


図1 調査スケジュール

3. 主な調査結果

訪問した機関毎に得られた主な情報を以下にまとめる。

3.1. OpenCFD社

流体解析のOSSとして広く普及しHPCIでも利用が多いOpenFOAMについて技術動向、開発戦略等を調査するためにOpenCFD社⁶からヒアリングを行った（図2）。



図2 OpenCFD社との打ち合わせ

6 <http://www.openfoam.com>

OpenFOAMは、英国Imperial CollageのDavid Gosmanの研究室で開発されたCFD (Computational Fluid Dynamics) コードであり、1999年にFOAM (Field Operation And Manipulation) という名称で商用ソフトとして販売が開始されたが、2004年にOSSとなり、OpenFOAMという名称に変更された。2004年以降、配布管理を行う非営利団体OpenFOAM Foundationと開発の中核となるOpenCFD社が連携し、開発・普及が進められている。

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いる。OpenCFD社では、OSSの特徴である外部の開発リソースを活用して小規模な開発体制(コアメンバー15名程度)を取り、OpenFOAM関連のサービスに注力することで継続的なビジネスモデルを実現している。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おり、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、定期的にリリースしている。一般的な産業界向けOSSよりも徹底したテストによって品質を確保している。また最近、CPUアーキテクチャのメニーコア化を意識して、並列スケラビリティの向上にも取り組んでいる。

3.2. Altair Engineering社

自動車会社等で利用が盛んなCAE系アプリを開発しているアプリソフトベンダーAltair Engineering社(以下、Altair社)⁷を技術動向、開発戦略等を調査するために訪問した(図3)。



図3 Altair社との打ち合わせ

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CAE系アプリソフトを連携させ、先進的な連成解析の実用化を推進している。ユーザーである自動車会社や計算機ベンダーと連携して、今後のメニーコア時代に向けたソフト開発(特にハイブリッド並列計算(OpenMP+MPI)に注力)を行っている。また、大規模HPCにおいては、使用コア数に準じた契約ではライセンス料が高騰することが特に産業界において課題であることを認識しており、ノード数に応じたライセンス料など、見直しを行っている。

3.3. Fraunhofer ITWM

EUにおける公的研究機関の中におけるアプリソフトの開発、産業界との関わり、HPCへの対応の調査のためにFraunhofer ITWMのHPC部門⁸を訪問した(図4)。

Fraunhofer ITWM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、ディープラーニング等多岐に渡っている。

委託研究で発生した知的財産を保有したまま、スピンオフ企業を通じてその知的財産に基づくアプリソフトを商用化(OSS有償サポート、ライセンス販売等)することにより得ら

7 <http://www.altair.com/>

8 <https://www.itwm.fraunhofer.de/en/departments/hpc.html>

れた収益を、研究資金に還元させるといったビジネスモデルを進めている。商用化により、様々なユーザーからの幅広いニーズをアプリソフトに反映しつつ、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。

HPC向けのシステムソフトとしては、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等の開発に注力している。

人材育成については、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仕組みにより、ここで培われた知識が産業界に移転されていくというモデルを進めている。



図4 Fraunhofer ITWMとの打ち合わせ

3.4. CEMEF

CEMEF⁹はフランス国立研究機関でありCAE系の研究を進めている。この分野の技術動向、企業との連携に関する調査のために訪問した（図5）。

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アプリソフト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。

継続的なアプリソフト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、開発したアプリソフトを商用化し、関連企業のTransvalor等を経由して販売している。これまでにFORGEをはじめとする7つのアプリソフトを商用化した。特にFORGEは、研究機関で開発されたアプリソフトでありながら、世界40ヵ国でユーザーを獲得しているとのことである。これは委託研究によって集約した市場のニーズを研究開発に反映できているためと考えられる。

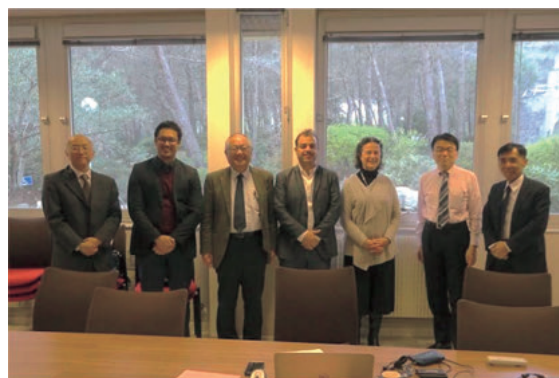


図5 CEMEFとの打ち合わせ

3.5. Science for Life Laboratory

分子動力学分野で著名でHPCIにおける利用も盛んなOSSであるGROMACSの技術動向・普及戦略等を調査するために開発元である Science for Life Laboratory（以下、SciLifeLab）¹⁰を訪問した（図6）。

9 <http://www.cemef.mines-paristech.fr/>

10 <https://www.scilifelab.se/researchers/erik-lindahl/>



図6 SciLifeLabとの打ち合わせ

SciLifeLabではGROMACSの方法論の研究チームとEUのCentres of Excellence（以下、CoEと略す）の一つである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両チームによるコラボレーションが非常に有効に機能している。方法論開発においては計算速度向上だけでは解決が難しいとされる長大な時間スケールが関わる現象の取り扱いについて、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。BioExcelでは、その主要アプリソフトである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に向けた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。これらを統合した体制でアプリソフトのエコシステム¹¹を構築している。

3.6. SISSA

第一原理電子状態計算ソフトとして著名なOSSであるQuantum ESPRESSO（以下、QE）の技術動向・普及戦略等を調査するために、日本を訪問中の開発者¹²にヒアリングを行った。

開発においてはアプリソフトのモジュール化とインターフェイスの明確化、これらの公開を強く進めており、これにより、新機能の容易な開発・外部からのノウハウの取り込み、外部ソフトとの連携を容易とする開発・普及戦略をとっている。

QEの利用普及に向けてはQE Foundationを設立しており、EUのCoEであるMaXとも連携して、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のGUIの商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進めている。

3.7. Max Planck Institute for Polymer Research

産業界から関心の高い、高分子シミュレーションのプロジェクトを進めている、Max Planck Institute for Polymer Research（以下、MPIP）¹³を訪問して、調査を行った（図7）。



図7 MPIPとの打ち合わせ

11 生物とその環境の構成要素を1つのシステムとしてとらえる「生態系」を意味する科学用語。経済・マーケティング・IT分野等においては「自然界の生態系のように循環の中で効率的に収益を上げる構造」や、「複数の企業や登場人物、モノが有機的に結びつき、循環しながら広く共存共栄していく仕組み」を意味する。

12 <http://stefano.baroni.me/>

13 http://www.mpip-mainz.mpg.de/polymer_theory

MPIPでは、第一原理計算や全原子分子動力学では扱うことが困難な時間/空間スケールの課題に取り組む上で有効とされるアプローチを中心に据えたアプリソフト、ESPreSo++およびVOTCAの開発が進められている。

MPIPは、純粋な理学的研究のツールとしてアプリソフト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との考えである。また、VOTCAでは、ユーザビリティの要であるGUIを外部のCOSMOlogic社が開発する可能性があるとのことであった。

HPC対応においては、アプリソフト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アプリソフト開発が強い機関と連携して実施している。

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。

3.8. Barcelona Supercomputing Center

材料インフォマティクスプロジェクトとして産業界からの関心も高いCoEのNoMaDの拠点の一つであるBarcelona Supercomputing Center (以下、BSC)¹⁴を訪問し、調査を行った(図8)。

NoMaDでは、材料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3百万件のデータ登録)、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。



図8 BSCとの打ち合わせ

普及に向けた取組みとしては、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。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。

BSCは後述するPRACEへ計算資源を提供するEUのTier 0(第一階層)センターである。アプリのターゲットプラットフォーム戦略にも関連するので、その動向を調査した。BSCは今後、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。

3.9. PRACE

EUにおける計算機資源の提供、特に産業界に向けての対応について調査するためにPRACE¹⁵を訪問した(図9)。

14 <https://www.bsc.es/>

15 <http://www.prace-ri.eu/>



図9 PRACEとの打ち合わせ

EUにおけるHPC推進は、PRACE（インフラ提供）、ETP4HPC¹⁶（テクノロジー研究開発に関わる提言）、CoE（アプリケーション開発・普及）の「3本柱」で成り立っており、PRACEは成果公開型の研究開発を通じた最先端研究の推進を支援するために、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。

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組んでおり、特に中小

企業に対しては独自のプログラム（SHAPE¹⁷）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。

4. 調査のまとめ

4.1. EUにおけるHPC利活用にむけた取組み

(1) CoEの構築¹⁸

訪問先からヒアリングした内容に加え、文献等の内容を加えて、EUのe-Infrastructuresの一環として2015年より進められているCentres of Excellence (CoEs) for computing applicationsの取組みを中心にHPCに関する欧州の研究開発戦略を概観する。

CoEはHPCを活用して、特定分野における社会的あるいは産業的課題の解決を組織横断的に対処するためのプログラムで複数の機関が連携して実施している（図10）。



図10 EUのCoE一覧

16 <http://www.etp4hpc.eu/>

17 <http://www.prace-ri.eu/hpc-access/shape-programme/>

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

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アプリソフト開発、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。

(2) 研究機関における産学連携

訪問先の（民間企業を除く）研究機関において、産学連携に対する姿勢は大きく3種類に分けることができた(括弧内は該当機関名)。

- ①CoEを実施する機関 (SciLifeLab, BSC)
公的資金でプロジェクトを推進し、CoEの仕組みで産官学を連携。例えば、SciLifeLabではサイエンスの推進のためにGROMACSを開発しており、産学を取り持つ役割は、BioExcelのようなCoEに期待されている。
- ②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)
運営資金の殆どは、連邦州政府からの公的資金で企業からの委託研究は受け付けていない。ただし、共有できるアカデミックな課題があれば共同研究を行っている。
- 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、産業界の課題解決を主な目的として設立されており、委託研究として多くの資金を民間から獲得している。これらを通じて開発したアプリソフトを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。

(3) 人材育成・交流

日本においては多くの場合、理論やシミュレーション手法に携わる基礎研究者がアプリ

ソフト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。今回の調査の対象となったアプリソフトの開発体制では、基礎研究者とHPC専門家が連携する体制となっている。さらにHPC専門家にはHPCセンター教員等のポジションを用意する等、キャリアパスが確立されており、継続的な開発とそれを通じた人材育成を実現していることは特筆すべきである。また、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。

人材交流については、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となっている。一方、人材の裾野を広げる観点では、PRACEにおいて中小企業のHPC活用を促進するプログラムが提供されており、人材育成まで含めた総合的な支援がなされている。

4.2. アプリソフト研究開発の動向 (機械・建設系アプリソフト)

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、商用ソフトベンダーと比べると十分ではない印象であった。また日本の産業界では、今のところ基本的な機能の利用にとどまる場合が多い。

Altair社では、機械・建設分野のシミュレーションの主要な領域をカバーした複数のCAEアプリソフトを開発しており、複雑・複合現象に対するニーズに応えるため、それらのアプリソフト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。

(化学・材料系アプリソフト)

原子・分子スケールの計算科学においては、HPCハード・ソフトの普及により、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ているが、化学反応、レアイベントのサンプリング、あるいは巨大分子のグローバルな構造変化等の、時間スケールが長大な現象の扱いが課題であると考えられる。これに対しては、計算機向けの最適化の追求(GROMACS、QE)や、モデル・アルゴリズムの改良による対応が行われている¹⁹。

また、この分野では、AIやビッグデータ処理に関する要望が顕在化しつつあり、Max Planck Societyではデータ量が非常に多いバイオ分野の解析が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材料インフォマティクスの基盤整備が進行中で、半年で3百万件におよぶデータ登録数を対象に、分析ユーザーインターフェイスが提供されている。また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。今後もこれらの動向を注目していく必要がある。

4.3. アプリソフト開発・普及戦略 (機械・建設系アプリソフト)

OSSを開発するOpenCFD社は、一般のアプリソフト開発ベンダーに比べると小規模な体制(1/10から1/20程度)で効率的な開発を行っている。総合的な開発力が弱いことは否めないが、OSSの特徴をいかした外部リソースの活用や有償サービスの提供(顧客の要望に合わせた機能やアプリケーションの開発、GUIの提供、アプリソフト利用のトレーニング等)でビジネスモデルの構築している。

産業界の利用者は、必要な機能やサービスのみをOpenCFD社に有償で依頼することにより、商用ソフトに比べ少ない費用で多様な課題に対応でき、アカデミアユーザは、無償で高機能なアプリソフトを利用することが可能である。また、他のサービスベンダーに対しても参入障壁が低いビジネスチャンスを提供している。関係者全員にOpenFOAMへの貢献の意識が醸成されるとともに、Win-Winとなるエコシステムが構築されており、その普及が進んでいるものと考えられる(図11参照)。

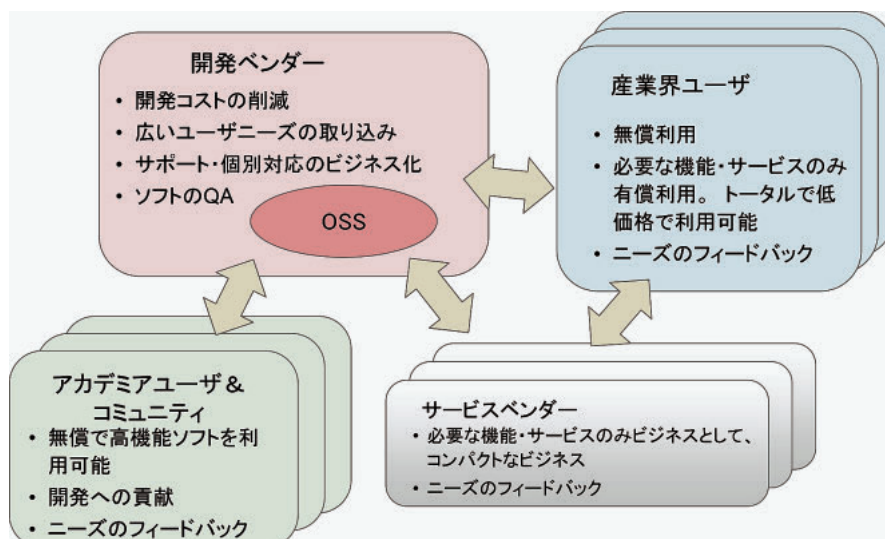


図11 OpenFOAMにおけるエコシステム構築

19 GROMACSの時間平均をアンサンブル平均により評価するアプローチやESPResSo++での粗視化モデルを構築し、系の自由度を大幅に削減するアプローチなど。

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、商用アプリソフトとして市場に投入している。特に、CEMEFは、鍛造・鋳造アプリソフトの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アプリソフト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。ここではOSS型のアプローチは取られていないが、アプリソフトの目的が限定され市場規模も限られることから、コミュニティの広がりが見込めず結果としてビジネスモデルが成り立ちにくい事その理由として考えられる。

(化学・材料系アプリソフト)

QE、GROMACSというデファクトスタンダードとなっているアプリソフトの開発拠点では、基礎科学としての研究、アプリソフトのHPC対応やユーザビリティ向上のために、基礎研究者に加えてHPC専門の研究者・技術者、商業サービスベンダーが参画した大きなプロジェクトとなっている。「HPCアプリソフト開発はビッグサイエンス化しつつある」

というGROMACS開発チームによる指摘は印象的であり、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アプリソフトは、周辺のソフトを加えるとさらに大規模な開発体制が必要となり、結果的に各分野における主要アプリソフトは数本に淘汰される可能性がある。

EUのCoEでは、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そのための予算も確保されている。

ただし、これらの活動を全てプロジェクト内で実施するのではなく、外部の商用リソースの活用、得られた成果からのフィードバックも加えて、持続的な開発や普及・利用促進、人材育成・活用を目指してエコシステムを構築している点には注目すべきである。この概念図を図12に示す。

エコシステムは、役割分担が明確化された3レイヤーから構成されている。研究者らが中心となってカーネルやアルゴリズム開発を行う「理論&ソルバーレイヤー」を中核とし

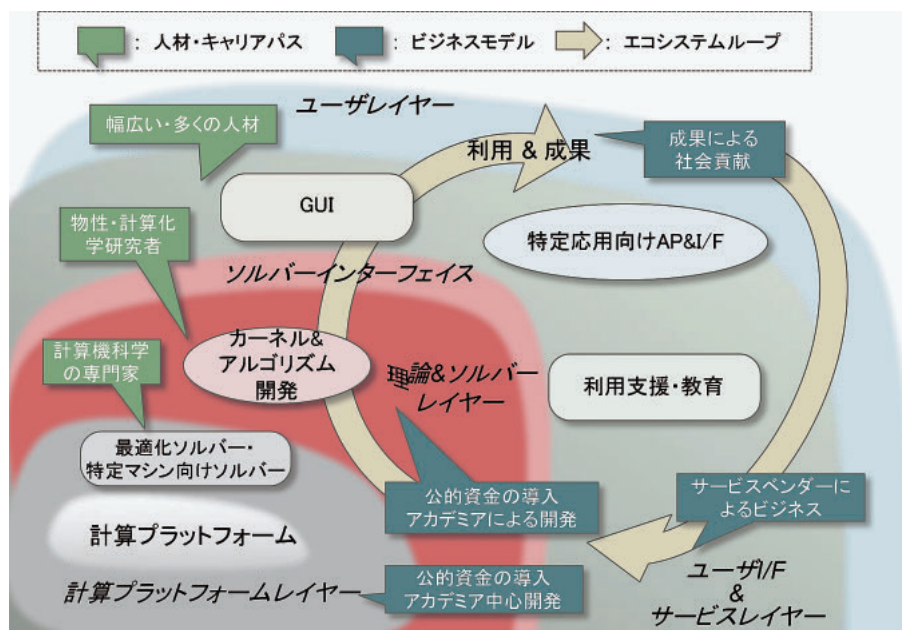


図12 計算化学アプリにおけるエコシステム構築

て、計算機科学者らがソルバーの最適化や特定マシン向けの開発を行う「計算プラットフォームレイヤー」、ITベンチャー企業等の幅広い多くの人材がアプリソフトの利用者向けにGUIや利用支援等を有償サービスとして行う「ユーザー I/F & サービスレイヤー」、さらにこのソフトを利用する利用者レイヤーから成っている。エコシステム構築の背景には、「ソースコードはオープン、サービスは有償」という共通の基本的考え方がある。

アプリソフト開発では、機能単位のモジュール化、共通APIの定義が基本方針として徹底されており、それらのモジュール群からなるアプリケーションプラットフォームが構築されている。

例として、MaXの主力アプリソフトであるQEが挙げられる。QE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アプリソフト群であり、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。また、共通APIの定義が明確化されているため、周辺のアプリソフトを開発するベンダーの参入が容易であり、ビジネス機会創出の場となっている。ビジネスが創出されることにより、市場規模が拡大し、アプリソフトの更なる競争力強化へとつながっている。

GROMACS、QE両プロジェクトでは研究開発レイヤーだけでなく、ユーザー I/F や サービスレイヤーも含めて研究者・技術者のポ

ストが確保され、キャリアパスが構築されている点を強調していた。CoEとしては人材育成、キャリアパス構築が普遍的な課題と捉えられていると考えられ、これへの対応には日本も注目すべきである。

各CoEでは競合力のあるアプリソフト開発、利用支援、利用成果、ビジネス創出と人材育成・活用などのエコシステム全体が評価され、計算プラットフォームレイヤー、理論 & ソルバーレイヤーに対して公的資金が継続的に投入されており、更なる発展へとつながる好循環システムが構築されている。これはCoEにおけるアプリソフト開発に共通する基本的概念となっているようである。

エコシステム間での連携(例えば、QEとLAMMPS²⁰)も推進されつつあり、更なる強固な仕組みを生み出そうとしている。

各分野でアプリソフトのデファクトとなるべく、強い意志をもって開発・普及に取り組んでいる点は注目に値する。

この様なエコシステム構築までを目指したアプリソフト開発は日本ではほとんど実現していない。前述の様に、今後HPCのアプリソフト開発は開発規模の拡大、応用範囲の拡大などによりビッグサイエンス化するとも言われている。ソルバー開発だけでなく、プリポスト処理(データ作成、結果データ処理、結果の可視化等)の機能をアプリソフト毎に開発することはコスト的にも無駄であり、また開発者への負担も大きい。OSS化したアプリソフトのソルバーやプリポスト処理のI/Fを統一・公開して開発を共通化、また、外部リソースを積極的に活用し、ソルバー開発においても多くの開発者の成果を取り込み、高機能化を短期間で実現するEUのアプリソフトエコシステム構築の考え方はこれから大きな流れとなっていくと考えられる。

20 GROMACSと並び、分子動力学分野でデファクトとされるOSSのアプリソフト。

<http://lammps.sandia.gov/>

日本のプロジェクトがこのようなエコシステム構築までを目指すのか、それとも一部のスキルを生かしてこれらの既存のエコシステムへ参加していくのか、など、戦略的な検討が今後必要になると考えられる。

RISTとしてはエコシステム構築を目指す日本のプロジェクトに対し、計算プラットフォームレイヤーではソルバーの最適化・高並列化、サービスレイヤーでは利用支援、シンポジウム・ワークショップ開催等の普及活動、また、事務局・コーディネータ機能の実施等の持つスキルを生かした支援が可能と考えている。

5. おわりに

今回の海外動向調査では、RISTおよびスパコン産協のメンバーが9か所の調査対象において、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ができた。

この結果、各アプリソフトの最新の状況、将来計画等に関する情報を入手するとともに、CoE、OSSコミュニティとの情報交換チャンネルを構築でき今後のアプリソフトの移植・高度化に対してより迅速な対応が可能となった。また、日本で実施した移植や高度化等の結果をフィードバックすることにより、

関係諸機関と相互に貢献し合えるWin-Winの関係が構築できると考えている。

また、今回確認できた、アプリソフトのエコシステム構築の考え方は、日本でも大いに参考にすべき点である。EUでの状況を鑑みるに、今後、日本においてもこれまでのシミュレーションソフト分野だけでなく、データサイエンス等の新たな分野においてもアプリソフトのエコシステムを構築すべきケースが出現する可能性があると思われる。日本発アプリソフトのエコシステム構築にあたってのRISTとしての支援の在り方を検討する上で大いに参考となった。

今回の調査により、今後のアプリソフト利用環境整備に繋がる有意義な調査結果を得ることができた。

謝辞

多忙な中、インタビューを受諾いただいた欧州の各機関の方々、積極的なご協力を頂いたスパコン産協のメンバー各位、アドバイザーとして調査に同行いただいた理化学研究所、姫野龍太郎博士、調査先選定にあたってのアドバイスやインタビューの調整をしていただいた、東京大学理学部の常行真司教授、東京大学生産技術研究所の加藤千幸教授に御礼を申し上げる。