

第3の科学，研究開発など雑感

技術・事業開発本部兼サイエンスソリューション部 業務推進役

池田 基久

1 半導体の進化と計算性能

「ムーアの法則」を以前ほど聞かなくなった。ムーアの法則は、1965年にゴードン・ムーアが発表した「半導体のトランジスタ集積率は18ヶ月で2倍になる」という法則である。半導体のトランジスタ集積率は、法則に則ったペースで進化していたが、2010年代後半になるとそのペースは鈍化し、同時にクロック周波数の鈍化も見られるようになった。

半導体の進化は、社会に大きな変化をもたらしている事は今更言うまでもないが、計算性能も飛躍的な進化を遂げ、科学計算をはじめとする多くのソフトウェアが高速に動作するという恩恵を受けてきた。

一方でGPUに代表される新たなデバイスの進化や量子コンピュータの出現により、計算機環境は新たな局面を迎えたようにも思える。

2 第3の科学の多様化と転換

我々は50年近く「第3の科学」と呼ばれる科学計算、数値シミュレーションなどの計算科学を生業としており、計算機の進化には非常に高い関心を持ち、省トランジスタを実現するプログラミングなどを駆使し、大規模化、複雑化するシミュレーションニーズに応えてきている。

ムーアの法則の鈍化に対応するため、省トランジスタを実現するシミュレーションソフトウェアの研究開発は益々重要になるであろうし、科学計算のみならずビジネス系のソフトウェアなども、省トランジスタを実現するため、アルゴリズムの見直し、工夫などによる変革が重要になるのではないだろうか。

我々が携わる計算科学は、国立研究開発法人、大学、民間企業の研究開発、設計製造に関するエンジニアリング領域など多岐に渡り、近年、特に複雑化、多様化が進んでおり、汎用アプリケーション（市販、OSS（Open Source Software））では対応ができず、独自の機能を研究開発、実装するといった傾向が強くなっている。

3 多様化するニーズへの対応

我々が会員である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）の2021年度提言¹において、専用機開発を要望する声がある。筆者は、提言取り纏めに携わったことから、提言書に至る過程でこの考え方に触れている。専用機と言う考え方は、以前より根強くあるが、近年のAI、機械学習の進展に伴う、専用機（専用チップ）開発が盛んなこともあり、スパコン「富岳」のような大規模並列を主とするものだけでは、流体、構造、AI・機械学習、分子計算や複合的な計算など多様化するニーズに対応できないのではないかとといった考え方がベースになっている。

大規模並列を主とするスパコンの他、専用機上で将来的なニーズを先取りしたアプリケーションを研究開発し、その成果を企業が利用することで産業競争力の強化を実現したいという考え方である。量子コンピュータもその延長線上にあるのではないかと考えられる。量子コンピュータも万能ではなく、得手、不得手がある。専用計算機を超高速ネットワークなどで結合することで、大規模並列、時間発展、AI・機械学習、量子コンピュータなど一大スパコン群をクラウドなどの利用形態で、計算機を意識せずに使える環境が望ましいと考えている。

4 研究開発の方向性

我々は、国策スパコン搭載のアプリケーション研究開発に長年携わっているが、これらは産業界の研究開発用として利用されるに留まり、製品などの設計・製造などに資するシミュレーションとは一線を画している印象である。企業は研究開発用と実務利用のシミュレーションは別物として考えているようにも思える。我々のように前者、後者に携わっていると、多様化するニーズに応えるには、その垣根を越えることが重要であることを強く実感する。実務で用いられるアプリケーションは海外製の市販あるいはOSSが大半であることから、経済安全保障の観点での危機感の声も聞こえ始めている。

また、我々は数年前より量子コンピュータの活用研究にも着手しており、幸いなことに学術的にも評価を受ける研究成果を得ている。これは金融市場予測などで用いられるシミュレーションで計算時間のボトルネックとなるモンテカルロ法について非常に効率的に少コストで高速に計算する方法であり、この成果は、欧米の金融機関や研究者から日本の金融グループからこのような研究成果が出るとは思っていなかったと驚きをもって賞賛のコメントを多数いただいている。

スパコン、PC クラスタ、GPU、量子コンピュータなどそれぞれの得意領域を活かしつつ、半導体に頼り過ぎないシミュレーションの研究開発はこれから非常に重要となってくる。

5 計算科学の重要性

計算科学は、気候変動予測、気象予測、災害予測、安全対策などの社会課題から、自動車、製薬、建設などほぼ全ての分野で使われており、なくてはならないものになっているが、一般的な認知度は低い。なぜなら、高度な数理的知識や計算科学、計算機科学に精通し、利用される場面の専門的な知識や背景まで理解する必要がある、簡単に認知できないが故である。我々が生活していく中で計算科学を意識することはほぼ無いが、製品や交通、電気、ガス、水道などのインフラなどが生活に届くまでには、数多くの計算科学が利用されている。

計算科学は、実験代替、実験不可な現象再現、現象理解など現実的な物理現象をコンピュータ上でバーチャルかつ低コストで実現することを主に、大気、海洋循環のようなマクロスケールから分子・原子のミクロスケール、危険を伴う現象、製造プロセスにおける実験・計測の簡素化など革新的な技術として利用されている。

近年のサステナビリティ (SX)、デジタルトランスフォーメーション (DX)、メタバース、デジタルツインと言った概念を実現するためには、計算科学による様々な予測あるいは現象理解、安全性評価など様々な場面で強力な推進技術として必ず必要とされることは言うまでもない。

6 研究開発の重要性

当社は、金融グループに属しているが、一般的に金

融グループにおける研究開発はあまり認知されており、それは前述の研究開発成果の反応にも表れており、欧米と国内の研究開発に対する考え方の差を強く実感する。世の中が大きく変化し、多様化、複雑化が進む中で、金融グループも研究開発を進め、世に発信し、研究開発成果を広く普及することが求められるようになるのではないだろうか。

欧米の金融機関などは IT 企業並みに変革していくことを重視しており、国内でも IT 人材を増やしていく方向性を打ち出す企業もある。IT 技術をはじめとする技術の研究開発を含めた革新に手を打つため舵を切り始めたと理解できる。今や業態を問わず、ビジネス革新、技術革新を実現するための研究開発は必須な状況になると考える。ただし、忘れてはならないのが技術は 1 日にして成らずということである。一般に研究開発の成果は数年から 10 年単位で得られることが知られている。しかし、短期間で成果を求め、道半ばで断念し、結果として他者に遅れをとる、競争力が低下するというような結果になることもある。

研究開発は、その過程で得られる副次的な成果や発見もあり、それらが思わぬ成果を導くこともある。技術や研究開発を適切に理解する社会環境、企業風土を醸成することが欧米などとの価値観の差を埋め、日本発のビジネス革新、技術革新が実現していくのではないだろうか。

7 おわりに

計算科学と計算機科学は一心同体と言っても過言ではなく、計算科学へのニーズは多様化、複雑化し、それを実現するためには、数値シミュレーションの研究開発が非常に重要となる。計算科学も計算機科学と同様、ニーズにマッチする技術革新が求められ、それらの研究開発成果が SX、DX の原動力となり、日本の国際競争力強化につながっていくものと確信しており、業態を問わず研究開発力の強化がそれらを支えていくと感じる今日この頃である。

引用文献

- 1) スーパーコンピューティング技術産業応用協議会:
<http://www.icscp.jp/wp-content/uploads/2022/06/f6a19c5521a82afc6b91c9e6c6b8e8427.pdf>