

CMSI（「京」、HPCI）現状と課題

東大物性研¹、東大院理² 常行真司^{1,2}

計算物質科学イニシアティブ（Computational Materials Science Initiative, 以下 CMSI）は、スーパーコンピュータ「京（けい）」の戦略利用と計算物質科学の分野振興を目的として、東京大学物性研究所、自然科学研究機構分子科学研究所、東北大学金属材料研究所を中心に作られたネットワーク型組織である[1]。

CMSI には物性科学、分子科学、材料科学の研究者が数多く参加し、「新量子相・新物質の基礎科学」「次世代先端デバイス科学」「分子機能と物質変換」「エネルギー変換」「マルチスケール材料科学」の 5 領域で、京を利用した 7 つの課題研究を実施している。また計算科学に関する研究会、実験家や企業研究者を交えた研究会、若手人材育成のための遠隔講義、並列計算技術やソフトウェアの講習会、ソフトウェア開発支援など、分野振興に向けた様々な試みを行っている。

元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>に関しては、プロジェクト開始前から WG を立ち上げ、計算科学が果たすべき役割についての検討を続けてきた。現在は CMSI 関連研究者が 4 拠点に数多く参加しているほか、4 拠点に共通する計算物質科学の基盤的シミュレーション手法の検討と普及活動を行っている。

わかりやすい活動の例としては、計算物質科学のアプリケーションソフトのポータルサイト **MateriApps** を 2013 年に開設し、無償、有償を問わず、ソフトウェアの情報を集積している。そこでは新規参加者や実験研究者、企業研究者など幅広いユーザの利活用を助けるため、計算目的からソフトウェアを検索する機能を充実させ、あわせて国内開発のいくつかのソフトウェアについて、開発者と利用者のコミュニケーションを図るためのフォーラムを提供している。材料開発には今までに無い様々な新手法の開発が必要である。小さな研究グループ内の利用のみにとどまっていたソフトウェアが広く活用されることで、そういった新手法のソフトウェア開発が容易になること、元素戦略のニーズに合わせたソフトウェア開発が加速されること、また若いソフトウェア開発者の評価につながることも期待され、この趣旨に賛同した研究者が新たにソフトウェアのソースコード無償公開に踏み切った例も出始めている。

文献

[1] CMSI ホームページ <http://cms-initiative.jp/>

[2] MateriApps ホームページ <http://ma.cms-initiative.jp/>