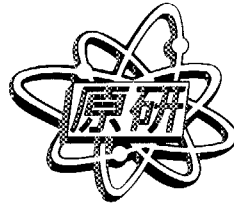


JAERI-Review
2001-026



JP0150722



情報技術専門部会評価結果報告書
(平成12年度事前評価)

2001年6月

研究評価委員会

日本原子力研究所
Japan Atomic Energy Research Institute

本レポートは、日本原子力研究所が不定期に公刊している研究報告書です。
入手の問い合わせは、日本原子力研究所研究情報部研究情報課（〒319-1195 茨城県那珂郡東海村）あて、お申し越してください。なお、このほかに財団法人原子力弘済会資料センター（〒319-1195 茨城県那珂郡東海村日本原子力研究所内）で複写による実費頒布をおこなっております。

This report is issued irregularly.

Inquiries about availability of the reports should be addressed to Research Information Division, Department of Intellectual Resources, Japan Atomic Energy Research Institute, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken, 319-1195, Japan.

© Japan Atomic Energy Research Institute, 2001

編集兼発行 日本原子力研究所

情報技術専門部会評価結果報告書
(平成 12 年度事前評価)

日本原子力研究所
研究評価委員会

(2001 年 5 月 24 日受理)

研究評価委員会は、「日本原子力研究所における研究開発評価の基本指針」及び「研究所評価委員会及び研究評価委員会規程」に基づき、情報技術専門部会を設置し、計算科学技術推進センター及び環境科学研究部が実施する「ITBL (IT-Based Laboratory) の構築及び活用」に係る研究開発課題について、平成 13 年度からの 5 年間の計画の事前評価を実施した。同専門部会は、8 名の外部専門家で構成された。

情報技術専門部会は、平成 13 年 2 月から 3 月にかけて、当該部門の研究評価活動を実施した。評価は、事前に提出された評価用資料及び専門部会（平成 13 年 2 月 9 日開催）における被評価者の説明に基づき、研究評価委員会によって定められた評価項目、評価の視点、評価の基準に従って行われた。

同専門部会が取りまとめた評価結果報告書は、研究評価委員会に提出され平成 13 年 3 月 16 日に審議された。審議の結果、研究評価委員会は、この評価結果を妥当と判断した。本報告書は、その評価結果である。

JAERI-Review 2001-026

Report of the Evaluation by the Ad Hoc Review Committee
on Information Technology
(In-advance Evaluation in Fiscal Year 2000)

Research Evaluation Committee

Japan Atomic Energy Research Institute
Uchisaiwai-cho, Chiyoda-ku, Tokyo

(Received May 24, 2001)

The Research Evaluation Committee, which consisted of 14 members from outside of the Japan Atomic Energy Research Institute (JAERI), set up an Ad Hoc Review Committee on Information Technology in accordance with the "Fundamental Guideline for the Evaluation of Research and Development (R&D) at JAERI" and its subsidiary regulations in order to evaluate the adequacy of the R&D programs pertaining to the establishment and utilization of the Information Technology Based Laboratory (ITBL) to be implemented for five years starting in Fiscal Year 2001 at Center for Promotion of Computational Science and Engineering and Department of Environmental Sciences of JAERI. The Ad Hoc Review Committee consisted of eight specialists from outside of JAERI.

The Ad Hoc Review Committee conducted its activities from February to March 2001. The evaluation was performed on the basis of the materials submitted in advance and of the oral presentations made at the Ad Hoc Review Committee meeting which was held on February 9, 2001, in line with the items, viewpoints, and criteria for the evaluation specified by the Research Evaluation Committee.

The result of the evaluation by the Ad Hoc Review Committee was submitted to the Research Evaluation Committee, and was judged to be appropriate at its meeting held on March 16, 2001.

This report describes the result of the evaluation by the Ad Hoc Review Committee on Information Technology.

Keywords: Evaluation of Research and Development, In-advance Evaluation, Information Technology

評価の経緯について

研究評価委員会事務局
(企画室・研究評価推進室)

研究評価委員会（委員長：西澤潤一・岩手県立大学長）は、「日本原子力研究所における研究開発評価の基本指針」（平成 10 年 4 月策定）及び「研究所評価委員会及び研究評価委員会規程」（平成 10 年 4 月策定、平成 11 年 4 月改正）に基づき、計算科学技術推進センター及び環境科学研究部の「ITBL (IT-Based Laboratory) の構築及び活用」に係る研究開発課題について、平成 13 年度からの 5 年間の計画の事前評価を実施するために、「情報技術専門部会」を平成 13 年 2 月 8 日に設置した。

情報技術専門部会は、8 名の外部専門家で構成され（部会長：土居範久・慶応義塾大学教授）、平成 13 年 2 月 9 日に開催された。同専門部会による評価は、研究評価委員会によって定められた事前評価の方法に従って行われた。同専門部会は評価結果を取りまとめ、平成 13 年 3 月 16 日に「情報技術専門部会評価結果報告書」を研究評価委員会委員長に提出した。

研究評価委員会は、平成 13 年 3 月 16 日に第 6 回研究評価委員会を開催し、同専門部会部会長から情報技術専門部会評価結果報告書の説明を受け、審議を行った。その結果、研究評価委員会は、同専門部会の評価結果が妥当なものと判断し、研究評価委員会委員長は、同報告書を平成 13 年 3 月 30 日付けにて日本原子力研究所理事長に答申した。

平成 12 年度研究評価委員会委員(13 名)

- | | |
|-----------------|--|
| 西澤 潤一
(委員長) | 岩手県立大学長
(財)半導体研究振興会半導体研究所長
(半導体工学) |
| 秋山 守
(委員長代理) | (財)エネルギー総合工学研究所理事長
埼玉工業大学長
(原子炉熱設計、熱流体工学、安全工学、エネルギー変換) |
| 秋元 勇巳 | 三菱マテリアル(株)取締役会長
(物理化学、核化学) |
| 石樽 顕吉 | 埼玉工業大学先端科学研究所教授
(原子炉化学、放射線化学) |
| 井上 信 | 京都大学原子炉実験所長
(加速器科学、原子核物理学) |
| 岡田 雅年 | 金属材料技術研究所長
(金属材料・工学、金属科学、原子炉材料) |
| 菊田 惺志 | (財)高輝度光科学研究センター理事、放射光研究所副所長
(X線光学、X線量子光学) |
| 草間 朋子 | 大分県立看護科学大学長
(放射線防護、胎児の放射線影響) |
| 小林 敏雄 | 東京大学生産技術研究所教授
計算科学、原子力工学(構造設計) |
| 友野 勝也 | 東京電力株式会社フェロー
(原子力発電) |
| 藤原 正巳 | 核融合科学研究所長
(プラズマ物理、核融合) |
| 宮 健三 | 東京大学大学院工学系研究科教授
(核融合工学、電磁現象工学) |
| 山崎 敏光 | 東京大学名誉教授
(原子核物理学、素粒子ビーム科学) |

情報技術専門部会評価結果報告書
(平成 12 年度事前評価)

平成 13 年 3 月

日本原子力研究所
研究評価委員会
情報技術専門部会

This is a blank page.

目 次

はじめに

総合所見

1. 専門部会の目的	1
2. 評価方法	1
2.1 専門部会の構成	1
2.2 事前評価対象研究開発課題	1
2.3 専門部会の開催	1
2.4 評価項目及び評価基準	2
3. 「ITBL の構築及び活用」に係わる研究開発課題の計画の概要	3
3.1 研究開発の基本方針	3
3.2 主要課題領域毎の計画	3
3.3 研究実施の推進体制	9
3.4 研究資源計画	10
3.5 原研内外との協力連携	10
4. 事前評価の結果	12
4.1 項目別評価	12
4.2 その他の全般的コメント	18
参考資料 「ITBL の構築と活用」に関わる研究開発課題（事前評価）	21

Contents

Introduction

Executive Summary

1. Purpose of the Ad Hoc Review Committee	1
2. Evaluation Method	1
2.1 Organization of the Ad Hoc Review Committee	1
2.2 R&D Subjects for In-advance Evaluation	1
2.3 Ad Hoc Review Committee Meeting	1
2.4 Items and Criteria for the Evaluation	2
3. Outline of the R&D Programs concerning the Establishment and Utilization of the ITBL	3
3.1 Fundamental Policy for R&D	3
3.2 Major R&D Plans	3
3.3 Approach for R&D Implementation	9
3.4 Resource Planning	10
3.5 Cooperation with Organizations inside and outside JAERI	10
4. Results of the Evaluation	12
4.1 Item-wise Evaluation	12
4.2 Other Comments	18
Appendix: R&D Subjects concerning the Establishment and Utilization of the ITBL for In-advance Evaluation	21

はじめに

研究評価委員会情報技術専門部会は、計算科学技術推進センター及び環境科学研究部が実施する「ITBL (IT-Based Laboratory) の構築及び活用」に係わる平成 13 年度からの 5 年間の研究開発計画を事前評価するために研究評価委員会により設置されたものであり、同委員会の定めた基本的要領に則って平成 13 年 2 月から平成 13 年 3 月にかけてこの研究評価活動を実施した。

原研の計算科学技術推進センターは、平成 7 年度より旧科学技術庁の施策に基づき高度計算科学技術研究、特に並列処理技術の開発と普及に係わる主導的役割を果たしてきた。今回の「ITBL の構築及び活用」、すなわち、広域分散処理技術による全国規模のグローバル・コンピューティング環境 (ITBL) の実現とその活用は、先端的科学技術開発の新たな発展を可能にするばかりでなく、我が国の産業競争力全体のレベルアップを先導する効果を創出しようとする国の施策の一環として位置づけられる。

今回の研究開発課題の事前評価の対象である原研が実施する研究開発は、ITBL 環境構築と基盤技術の開発、ITBL 技術の開発整備と利用普及、ITBL 活用の応用ソフトウェア開発・整備に係わるものである。これらの研究開発・業務は、既存のものに付加するものと、業務の遂行に向けて新たに組織を設置するものから構成されている。なお、既存のものは、平成 11 年度に研究評価委員会計算科学技術専門部会及び環境科学・保健物理専門部会において、それぞれ計算科学技術推進センター及び環境科学研究部の現行の 5 年研究計画 (平成 12 年度～16 年度) として事前評価が終了している。

今回の研究計画の評価は、研究開発担当部署から提出された事前評価用資料に基づき、専門部会において実施責任者から説明を受け、質疑を行った後、各委員による個別評価を得ることで行った。次いで、その評価意見等についての補足説明も受け、評価結果を集約整理して全体的にまとめ報告書案とし、さらにそれを委員全員のレビューを経て報告書として完成させた。

情報技術専門部会に与えられた評価活動期間は極めて短く、時間を尽くしての万全を期したとは言えず、それがやや厳しい評価コメントとなっている要因とも考えられる。しかしながら、それだけに本専門部会の種々の意見等が、今後の情報技術関連分野の研究活動の運営にお役に立てば幸いである。

終わりに、専門部会委員各位には機敏で熱意溢れるご協力を賜ったことに深甚なる謝意を表したい。

平成 13 年 3 月 12 日
情報技術専門部会
部会長 土居 範久

総合所見

1. 「ITBL の構築及び活用」計画の目標と研究開発課題

原研の計算科学技術推進センターは旧科学技術庁の高度計算科学技術施策の中核機関として発足し、並列処理基盤技術の確立を目指した研究開発、原子力分野の計算科学研究を行うとともに、研究所全般の研究開発、業務のための大型計算機の運用を担っている。

仮想研究環境 (ITBL: IT-Based Laboratory) の基本目標は、国内に散在するスーパーコンピュータ、データベースを大容量ネットワーク上に共有し、研究者が障壁を感じることなく効率的な研究開発活動を行うことを可能とすることである。

今回の事前評価の対象である、平成 13 年度から 17 年度の 5 カ年計画で実施する「ITBL の構築及び活用」に係わる研究開発計画では、現在センターが実施している 5 カ年研究開発計画の枠組みを拡大して、ITBL 基盤技術を開発し、ITBL 環境の利用・普及を推進するとともに、この環境を活用することによって、特有の応用ソフトウェアを、これまで開発した並列計算手法等を活用して開発すること、を課題目標としている。

本計画は、旧文部省の Super-SInet 計画、すなわち全国の国立大学を結ぶ SInet の増強計画とのジョイント計画であり、旧科学技術庁情報科学技術推進室 (現在の文部科学省、研究振興局情報課情報技術推進室) の IT 施策として、旧科学技術庁傘下の 6 機関 (日本原子力研究所、理化学研究所、航空宇宙技術研究所、物質・材料研究機構、防災科学技術研究所、科学技術振興事業団) によって、平成 12 年度 (補正予算) ~17 年度の 6 年にわたって実施するものである。

新たな研究開発課題は以下の 5 つである。

- 1) 並列処理基盤技術の研究開発
 - a. 並列処理基本システムの研究開発として、ITBL 環境構築と基盤技術の開発
 - b. 並列処理支援技術の開発として、ITBL 適合型可視化システムの開発
- 2) 応用分野における並列計算手法の研究開発
 - a. 並列計算法の研究開発として、ITBL 活用の並列応用プログラム整備
- 3) ITBL を活用した生命情報解析 (新規)
- 4) ITBL を活用した数値環境システムの開発 (環境科学研究部の現行計画に追加)、
- 5) 情報システムの運用・管理と OA 化の推進
 - a. 情報システムの運用として、ITBL 計算機システムの導入、整備、運用管理
 - b. ITBL 技術の開発整備と利用普及 (新規)

2. 「ITBL の構築及び活用」計画全般の評価

1) 全体計画の実施における参加機関との協力と連携

前項に記した目標・意義を有する「ITBL 環境の構築と利用」計画は、国の方針、社会的ニーズにも適合しており全体目標は概ね妥当である。研究開発課題の構成と計画の段階的展開の基本方針も、これまでに原研が中心となって進めている並列処理技術の開発とその計算科学的応用の実績と成果に基づいていることから妥当と判断する。

現状においては研究計画全体は、その骨格的組み立てが一応整った段階と理解する。そこで、今後の計画の実施に当たって最も重要なことは、全国的なジョイント計画としての参加機関の研究開発分担課題に即して実施計画の内容を明確化し、スケジュールの節目毎に再点検して、進めていくことである。先ずは、当面の目標である ITBL システム α 版の構築は 6 機関での協調を重視し進めるとしているのは良い。その第 1 段階及び次の段階への展開を考えると、旧科技庁傘下 6 機関の連携に加えて、新たに設置が予定されている Sinet 関係機関を含む ITBL 連絡調整会議（仮称）での実効ある連携を期待したい。

全国規模の大容量ネットワークによる統合運用を最終目標として目指している研究開発課題の内容に関しては、上記の関係機関との連携にも係わるが、なお検討が必要と考えられる。これらの主なものは次に挙げられる。

- (1) 原研としての課題の目的、すなわち、ITBL 環境構築の新技术開発か、応用研究者の為のインフラ整備かの重点の置き方
- (2) ITBL 対応の基盤技術と ITBL 活用応用ソフトの開発における適合性・整合性
- (3) 計算機資源とともにソフトウェアとデータベース、特に大型実験設備との協調的利用の推進
- (4) ITBL を軸として地域性に基づく研究の特徴付け（例えば、光科学と生命科学の融合）

2) 資源配分、特に人員配分計画について

この計画では、ITBL 環境構築と基盤技術開発を早期に実現させ、その展開に対応して ITBL 技術を普及させるとともに、ITBL 対応の応用プログラムの新規開発を進めるとして、予算配分と人員配分計画が立案されている。特に、人員（/年）では、職員が約 20 人で、この内で新規の生命情報解析に約 9 人を配置し、その他の業務協力員や博士研究員など約 25 人を予定している。人員不足には外注業務により対処するとしている。それでも、一見して、人的資源に問題があると言わざるを得ない。

ITBL は長期にわたる重要な基盤技術になるもので、継続的な技術の開発が可能となるよう、専任の研究者を増やすべきである。また、研究スタッフの充実を優先することが必要である。原計画では、単にプロジェクト指向になり、技術の空洞化が進み、得られた知見が蓄積されない恐れがある。これは、一原研の問題というより、我が国の政府の研究開発の進め方の問題でもある。

3. 主要課題領域毎の評価

(1) 並列処理基盤技術の研究開発（ITBL の構築と基盤技術開発）

仮想研究環境用の基盤技術を実現することの意義は高いので、そのための研究目的は評価できるが、分散処理の新技术開発を目的と捉えた場合、国際的な標準化活動（GRID）との協調が不可欠である。また、応用研究のインフラ整備とした場合、ITBL が目標としている超大規模計算の真のニーズがどこにあるのか、より明確にすべきである。ITBL 環境の実現を期待したいが、重要なのはデータ（実験データ、計算データ）、ソフトウェア、大型実

験設備、可視化設備などの分散協調であり、そのための基盤技術の必要性を強調しておきたい。

課題の達成目標は概ね妥当といえる。計画では、第1段階の2年間で所内と6機関のスーパーコンピュータの結合、第2段階の4年後に国内の100台規模の共有、そして平成17年度に国内の大学・研究機関で本格運用を開始する年次計画で、それに対応する基盤技術開発を進めるとしている。しかし、本格運用を3年間で実現させる程度の早さが欲しい。開発を早めるためにも、STA基本システムの拡張可能性が係わっているが、もう少し目的を絞った計画にすべきである。

(2) 応用分野における並列計算手法の研究開発 (ITBL 活用の並列応用プログラムの整備)

原研内研究担当部署で使用されている大規模シミュレーションプログラム群について、ITBL環境での計算機パワーを活用するために整備し、更に外部利用を促進することを目的としている。地球シミュレータの有効利用、応用プログラムの並列化は意義が高い。生体の放射線影響、分子動力学法による材料亀裂進展などの大規模シミュレーションであるが、既存プログラムのITBL化とは、各分野での意義が具体的に何をさすのか個々につめて、進めることを期待したい。

当初目標は概ね妥当であり、ベクトル並列、スカラ並列計算機による分散処理の具体的発展を期待したい。但し、ここでの計画はすでに広く研究され競争になっているので、原研としての特徴を出す必要がある。また、社会的に波及効果の大きい問題に是非取り組んで欲しい。特に、生命情報科学と光科学について集中的な研究を行うことで目標達成が望まれる。

年次計画は十分とは言えない。今後の地球シミュレータ対象プログラムの調査、開発詳細調査の結果、計画の見直しも含め、臨機応変に対応することを期待する。また、並列応用プログラムの整備については、光科学、原子力・流体力学等でも並列計算手法の開発への要望が大きいので、分野ごとに具体的に有効性についての検討を進めること、ユーザとの議論の深化を図ることを期待したい。

(3) ITBL を活用した生命情報解析

本研究は中性子やX線解析によるタンパク質構造等のデータに基づく生命構造データの構築、及び生体分子機能の発現機構解明のためのシミュレーションを目的としている。原研の研究活動として、生体现象を対象とする広い領域の一つとして取り上げたことは意義が大きく、高く評価する。ただし、国内外でも精力的に研究を行っている機関が多数あるので、原研のイニシアティブを強調できる研究計画であるためには、中性子回折による構造解析を軸に構想することは適当であり、発展を期待したい。

2つの研究内容における課題の達成目標が多岐にわたっており、これらが全て実現するか否かは問題であるが、達成目標は概ね妥当である。一方、生命情報解析は、国内外の研究とどう差別化して行くか、オリジナリティや問題意識が、ポイントである。また、ITBLの活用に関して具体的な進め方を明確にする必要がある。

研究体制の面では、中性子実験グループとの統合や光科学等関連分野の活動との連携などが図られており（今後、量子構造生物学研究センターへの移行も含む）、当面は、研究の順調な進展が期待される。

(4) ITを利用した数値環境システムの開発

ITBL 活用のネットワーク接続された多くのスーパーコンピュータを利用して数値環境システムの技術開発を推進することは、大気・海洋・地表結合モデルの高精度化、高速化に対する効率的な構築・開発のために重要であり意義がある。開発目標とする数値環境システムは、日本としてアジアに貢献できる研究でもある。地球シミュレータの経験を生かした応用として、その成果を期待したい。また、原研がイニシアティブをとれるよう共同研究など外部との一層の協力が必要である。

年次計画は前半3年と後半2年で段階的に組み立てられている。地球シミュレータ開発計画と関連付けて、より具体的な計画を詰める必要がある。

(5) 情報システムの運用・管理とOA化の推進（ITBL 技術の開発整備と利用普及）

国内の多くの計算機パワーを有効利用するという目的は大きな意義がある。分散したシステムの運用管理は、全体計画の基盤であるので、地味であるが重要である。

業務計画は概ね妥当であるが、問題点の調査と対策については他の5機関との協調を図り実施することを期待する。例えば、大規模なデータサーバの設置場所の設定、適切なセキュリティ方策の構築などである。また、将来的には、国際的なネットワークへの接続や広く開放する場合に発生する問題への考慮が必要である。

利用者を含む共同利用運営協議会等の制度の整備を旨すとともに、人材育成の一環として ITBL 利用者に対する利用説明会等も適宜実施していく必要がある。

This is a blank page.

1. 専門部会の目的

「日本原子力研究所における研究開発評価の基本指針」及び「研究所評価委員会及び研究評価委員会規程」に基づき、計算科学技術推進センターにおいて平成13年度から開始する「ITBL (IT-Based Laboratory) の構築及び活用」計画に係わる研究開発課題の事前評価を行うため、平成13年2月8日、研究評価委員会の下に情報技術専門部会を設置した。

2. 評価方法

2.1 専門部会の構成

部会長：土居 範久 慶応義塾大学理工学部 教授
評価委員：小林 敏雄 東京大学生産技術研究所 教授
専門委員：小柳 義夫 東京大学大学院理学系研究科 教授
 笠原 博徳 早稲田大学理工学部電気電子情報工学科 教授
 島崎 眞昭 京都大学大学院工学研究科 教授
 中村 春木 大阪大学蛋白質研究所 教授
 三間 圀興 大阪大学レーザー核融合研究センター 教授
 村岡 洋一 早稲田大学理工学部 教授

2.2 事前評価対象研究開発課題

「ITBLの構築及び活用」に係わる研究開発課題は、平成13年度からの5カ年計画として、計算科学技術推進センターにおける現行研究計画（平成12年度～16年度、事前評価済）に付加して実施する研究であり、以下の主要課題領域を事前評価の対象とした。

- 1) 並列処理基盤技術の研究開発（主要課題領域1）
 - a. 並列処理基本システムの研究開発
 - b. 並列処理支援技術の開発
- 2) 応用分野における並列計算手法の研究開発（主要課題領域2）
 - a. 並列計算法の研究開発
 - b. ITBL を活用した生命情報解析（新規）
 - c. ITBL を活用した数値環境システムの開発（環境科学研究部の現計画に付加）
- 3) ITBL を活用した生命情報解析（主要課題領域3）
- 4) ITBL を活用した数値環境システムの開発（主要課題領域4）
- 5) 情報システムの運用・管理とOA化の推進（主要課題領域5、業務課題）
 - a. 情報システムの運用（現計画に一部追加）
 - b. ITBL 技術の開発整備と利用普及（新規）

2.3 専門部会の開催

日時：平成13年2月9日（金） 10:00～12:00

場所：富国生命ビル 21階 7号室

議事：1) 専門部会審議の進め方等について

- ・ 部会長挨拶
- ・ 委員紹介
- ・ 審議の進め方

2) 事前評価対象課題の説明、質疑

(説明：30分、質疑：40分)

(説明者：秋元計算科学技術推進センター長)

3) 審議のまとめ

- ・ 質疑討論のまとめ (各委員からの意見、感想等)
- ・ 今後の作業について

2.4 評価項目及び評価基準

事前に提出される評価用資料及び専門部会における説明に基づき、以下の評価項目、評価の視点、評価の基準に従って、評価を実施する。

2.4.1 評価項目

(1) 項目別評価

(a) 研究開発の基本方針

(b) 主要課題領域 (主要課題領域毎に(i)～(ii)を評価する。)

(i) 目的・意義

(ii) 研究展望及び達成目標

(iii) 進め方(含むテーマ構成と各テーマの位置付け)

(iv) 予想される成果の波及効果

なお、研究支援業務の評価については、上記(b)において、以下の評価項目及び評価の視点を考慮する。

(i) 主要業務内容、目的・目標等

(ii) 業務の進め方及びスケジュール

(iii) 他部門・分野への予想される貢献及び波及効果 (有れば)

(c) 資源配分

(d) 原研他部門との協力・連携

(e) 外部機関との協力・連携

(f) 人材養成の施策

(2) その他の全般的な所感、問題点、提言等

上記の項目別評価に拘わらず、当該研究開発に関する所感、問題点、提言等を記す。

2.4.2 評価の基準

上記の(1)項目別評価に対して、5段階評価を行う(5:極めて優れる、3:普通、1:劣る)。

3. 「ITBL の構築及び活用」に係わる研究開発課題の計画の概要

3.1 研究開発の基本方針

(理念)

広域分散処理技術により全国規模のグローバル・コンピューティング環境 (ITBL) を実現することにより、計算資源や知的資源の共有を可能とするばかりでなく、現有の最高能力を超えた計算能力が実現する。これを活用することによって研究者の「総合力」が引き出され、単一研究分野では実現できなかった先端的科学技術開発の新たな発展を可能にするばかりでなく、このような研究環境の構築と活用は、我が国の産業競争力全体のレベルアップを先導することに繋がる。

(大目標)

以上の理念の下に、ITBL 基盤技術の研究開発を進めつつ、ITBL 環境試作から実供用までの段階的構築、関連機関での利用普及を推進する。また、ITBL 環境を活用した応用ソフトウェアを開発し当該応用分野の研究開発の革新を図る。

本計画は、文部省 (旧) の Super-SInet 計画、すなわち全国の国立大学を結ぶ SInet の増強計画とのジョイント計画であり、科技庁 (旧) 情報科学技術推進室 (現在の文部科学省、研究振興局、情報課情報技術推進室) の IT 施策として、科技庁傘下の 6 機関 (日本原子力研究所、理化学研究所、航空宇宙技術研究所、物質・材料研究機構、防災科学技術研究所、科学技術振興事業団) によって、平成 12 年度 (補正予算) ~ 17 年度の 6 年に渡って実施するものである。

(センターの役割)

原研計算科学技術推進センターは、平成 7 年度から並列処理基盤技術の研究開発を実施し、所期の成果を収めてきたことから、原研計算科学技術推進センターが中心となり、参加 6 機関で協力して ITBL 構築とセキュリティ技術を含む基盤技術開発を進める。また、原研関西研究所木津地区に ITBL 棟を建設し、ITBL 用スパコン・システムを導入整備し、ITBL 技術の利用・普及を行う。このため、ITBL 利用推進室を平成 13 年 4 月に新規に設置する。さらに、ITBL 活用の応用ソフトウェア開発として、原研実施の研究開発を反映させ、地域数値環境システムの開発、生命機能情報解析システムの開発及びこれまで開発した並列計算手法等を活用して、既存応用プログラムを ITBL 活用の並列応用プログラムとして整備する。

3.2 主要課題領域毎の計画

3.2.1 並列処理基盤技術の研究開発 (ITBL 環境構築と基盤技術開発)

(1) ITBL 環境構築

研究内容／方法等

- ・原研 4 サイトに設置・運用されている並列計算機等をテストベッドにプロトタイプを開発、運用試験を実施した後、この運用試験を基礎に旧科技庁傘下機関を接続する α 版を開発。この運用経験を基に、全国展開の β 版の検討・開発を行う。

達成目標

- ・国内に散在するスーパーコンピュータ並びにデータベースを大容量ネットワーク上に共有し、原子力分野、その周辺分野及び異分野の研究者が障壁を感じることなく研究活動を遂行できる仮想研究環境構築用基盤の確立

(2) グリッド・コンピューティング技術の研究

研究内容／方法等

- ・第Ⅰ期研究計画で開発した STA 基本システムの高度化を図り、高速ネットワークで結合された並列計算機群を用いた分散並列計算システムの効率的実行環境の構築研究を実施する。

達成目標

- ・高速ネットワーク上に接続された異機種並列計算機の使用に関わり、実運用環境下での計算機の負荷変動などを意識することなく使用可能とする計算ジョブ／タスク自動管理機能、並びに計算ジョブ実行用ヒューマンインタフェースを開発する。

(3) 情報検索型エージェント／ロボット技術開発

研究内容／方法等

- ・ネットワークで接続された多数の計算機及びその上で使用可能な計算プログラム、データベースなどを対象に、ネットワーク上を巡回し、計算機資源の探索、情報の検索などを可能にするエージェント型ロボットの検討を実施する。

達成目標

- ・ITBL システム環境化で利用可能な計算資源探索・設定用エージェントロボット、並びに計算プログラム、データ検索用エージェントロボットを開発する。実用可能な技術については、ITBL システムへの実装を図る。

(4) セキュリティ技術の開発

研究内容／方法等

- ・計算科学技術に一般的な大容量データの通信環境下での計算機セキュリティの高度化を図るため、不正な侵入の検知、並びにこれからの防護方法と技術について検討するとともに、関連技術の開発を行う。また、万一、不正侵入の結果としてデータの破壊が行われた場合の復旧技術について検討する。

達成目標

- ・計算機セキュリティ確保のための統合型フレームワーク概念を確立し、Gbit 対応の Fire-wall の改良など関連技術の開発に資する。

(5) ITBL 適合型視化システムの研究開発

研究内容／方法等

- ・ITBL により実現される高速ネットワーク上に分散した計算機資源を構築・運用する技術を活用して、分散した研究機関等のネットワークを介したシステムの研究開発を行う。

達成目標

- ・異機種の計算サーバを同時に用いて実行されるマルチフィジックスシミュレーションの結果の可視化システムの開発、能動的可視化（データマイニング）システムの開発並び

に遠隔共同研究を支援する協調的可視化システムを開発する。

3.2.2 応用分野における並列計算手法の研究開発 (ITBL 活用の並列応用プログラムの整備)

(1) 単一並列計算機による大規模並列シミュレーション

研究内容/方法等

- ・以下に示す既存の応用プログラムを対象として、プログラム構造の解析を行い、地球シミュレータに適合するよう再構造化し、世界初の大規模シミュレーションを実現する。
- ・生体の放射線影響シミュレーション
- ・分子動力学法による材料亀裂進展シミュレーション
- ・2次元レーザー・プラズマ相互作用シミュレーション
- ・中性子科学核破碎ターゲット挙動シミュレーション
- ・第1原理トカマク・プラズマ輸送シミュレーション
- ・ハートリー・ホック法及び密度汎関数法による電子状態計算
- ・ナノテクノロジー関連シミュレーション (生体、材料等)

達成目標

- ・与えられたプログラムを、ノード間のデータ通信量が小さく、かつノード内ではメモリー・コンフリクト等を避けた分割法など地球シミュレータ上で効率を上げる並列化手法の一般化
- ・DNAと第1原理的扱いによる修復酵素との相互作用
- ・経験ポテンシャルを使用し、計算機で制限される最大許容粒子数での計算
- ・2次元マックスウェルと3次元荷電粒子相対論的運動方程式を、計算機許容の最大の幾何スケール計算
- ・3次元構造・熱流体連成 (衝撃解析) の多ケースのパラメータ計算を実現、設計評価に活用
- ・トカマク電磁場中のイオン・電子の運動方程式と静電揺動のポアソン方程式を、計算機許容の最大幾何スケール計算
- ・ハートリー・ホック法については、現在のSX-4計算の500倍程度の速度向上、密度汎関数法についても、VPP500計算の500倍程度の速度向上
- ・計算機許容の最大粒子数の計算、ピコ秒からミリ秒までの動的シミュレーション

(2) 多様な計算資源を活用した並列応用プログラムの整備

研究内容/方法等

- ・上記の分野の応用プログラムをベクトル及びスカラ超並列計算機などの多様なマシン環境での並列分散処理

達成目標

- ・シミュレーション対象の幾何スケール、時間スケールを有意に拡大

3.2.3 ITBL を活用した生命情報解析

(1) 生命情報データ解析

研究内容／方法等

- ・原研内外で得られるタンパク質立体構造情報並びに世界に散在する既存のデータベースを ITBL 上で使用可能な形に整備拡充し、複雑多量なデータの有機的結合により、アミノ酸配列からの構造・機能予測や分子設計など具体的な応用を可能にする。
- ・インターネット上で現在使用可能なタンパク質立体構造の解析用ソフトウェアを整備するとともに、新規の関連解析用ソフトウェアを開発し、インターネット上での利用に供する。
- ・タンパク質機能の統合データベースの構築を射程に入れ、当面 DNA 修復酵素を中心にデータの蓄積、データベースの構築方法を詳細に検討する。

達成目標

- ・タンパク質構造情報データベースのミラー化と新規データベースの構築。／立体構造情報のデータベース化と ITBL での公開
- ・タンパク質情報解析ツールの開発／インターネット上でインタラクティブに利用できるソフトウェア・ツールの開発
- ・DNA 修復酵素データベースの開発／修復酵素の立体構造情報を統合し、修復酵素の DNA 修復メカニズムを理解するためのデータベースを開発

(2) 生体分子機能シミュレーション

研究内容／方法等

- ・生体分子機能シミュレーションの前提になる分子シミュレーションシステムの開発を行う。開発は、段階的に行い、15年度には第1バージョン、16年度以降は、新しいモジュールの追加などによりシステムを更新する
- ・DNA 修復酵素等の核酸—タンパク質系の相互作用を中心に、生命現象の分子的仕組みを物理的なレベルで解明し、高度な生命情報の蓄積を目指す。研究開始当初は、分子シミュレーションシステムの開発と平行して予備的な計算を実施し、15年度には、本格的なシミュレーションを開始する。また、16年度以降は自由エネルギーの評価など詳細な解析並びに機能の仕組みを明らかにする。
- ・中性子散乱、X 線散乱、NMR、レーザー等の実験データの解析方法を開発し、原研内外で得られた実験データの解析を行う。第1段階として、中性子散乱のデータを中心にタンパク質の構造ゆらぎの情報を実験データから予測する方法などを開発し、機能と構造・ゆらぎの関係を明らかにする。
- ・これまで取り扱うことができなかったマクロレベルでの生命現象のメカニズムを解明するため、多数の生体高分子のモデル化を行う。モデル化に向け、実験データや分子シミュレーションを駆使し、構成要素の物性を明確にする。モデルの検討を通じて、最適なモデルを採用し、単純系からはじめて、複雑系への適用を行う。

達成目標

- ・分子シミュレーションシステム開発／最先端の計算技法を組み合わせたシステムの開発
- ・生体分子機能シミュレーション／分子シミュレーションを用いた生命現象の分子的仕組み

みの解明を通じて、DNA 修復酵素等の機能の仕組みを解明

- ・ 生体分子実験データ解析／実験データの解析法の開発とそれによる分子機能の解明に向け、中性子散乱データ等の実験データ解析法を開発する。
- ・ 生体超分子系シミュレーション法の開発／多数の生体高分子が複合して機能を発揮する系をシミュレーションするための方法確立する

3.2.4 ITを利用した数値環境システムの開発

(1) 大気・海洋・地表結合モデルの開発と検証（環境科学研究部研究事前評価済み）

研究内容／方法等

- ・ 大気・海洋・地表面モデルの境界を動的に結合した地域数値環境モデルを開発し、衛星データ等による精度検証を行う。また、最適な計算分解能や領域の検討を行う。

達成目標

- ・ 結合モデルの構築と、計算結果の実時間で公開。

(2) 計算モデルの高速化

研究内容／方法等

- ・ 大気・海洋・陸域個別モデルの並列化、境界データの動的交換のためのネットワーク計算機能の整備を行う。また、PC クラスタの利用を検討する。

達成目標

- ・ 高速化による環境状態のリアルタイムシミュレーションを達成。

(3) ITを利用したシステム化

研究内容／方法等

- ・ システム制御機能、実時間可視化機能、リアルタイムシミュレーションのためのスケジューリング機能等のシステム操作機能を整備する。また、ウェブからのシステム利用を可能にするシステム利用機能を整備する。

達成目標

- ・ 容易なシステム操作と利用。

3.2.5 情報システムの運用・管理とO A化の推進（ITBL 技術の開発整備と利用普及）

(1) ITBL コンテンツ整備・利用普及

業務内容

- ・ 研究者レベルで埋もれている応用ソフトウェア、データベース、ツールなどをサーベイし、有用なものについてはITBL環境で利用できるよう整備する。
- ・ 関西に研究ポテンシャルがある先端分野の応用プログラムを所内の研究者の協力や共同研究等により開発・整備する。
- ・ 可能な範囲で商用ソフトウェアの試食会などを仲介する。

達成目標

- ・ 整備したコンテンツの利用者数に目標をおいて、関西地区を中心に、全国への利用を徹底させる。

(2) ITBL 利用技術の開発・整備

業務内容

- ・ネットワーク上の多くのスーパーコンピュータ、データベース、応用プログラムを連携して高度な情報処理のための汎用的ツールや先端的ソフトウェアを整備する。

達成目標

- ・利用者へのインストラクションなどによりそれらを広く利用普及させる。
- ・普及状況を定量的に把握する。

(3) IT 分野の人材育成

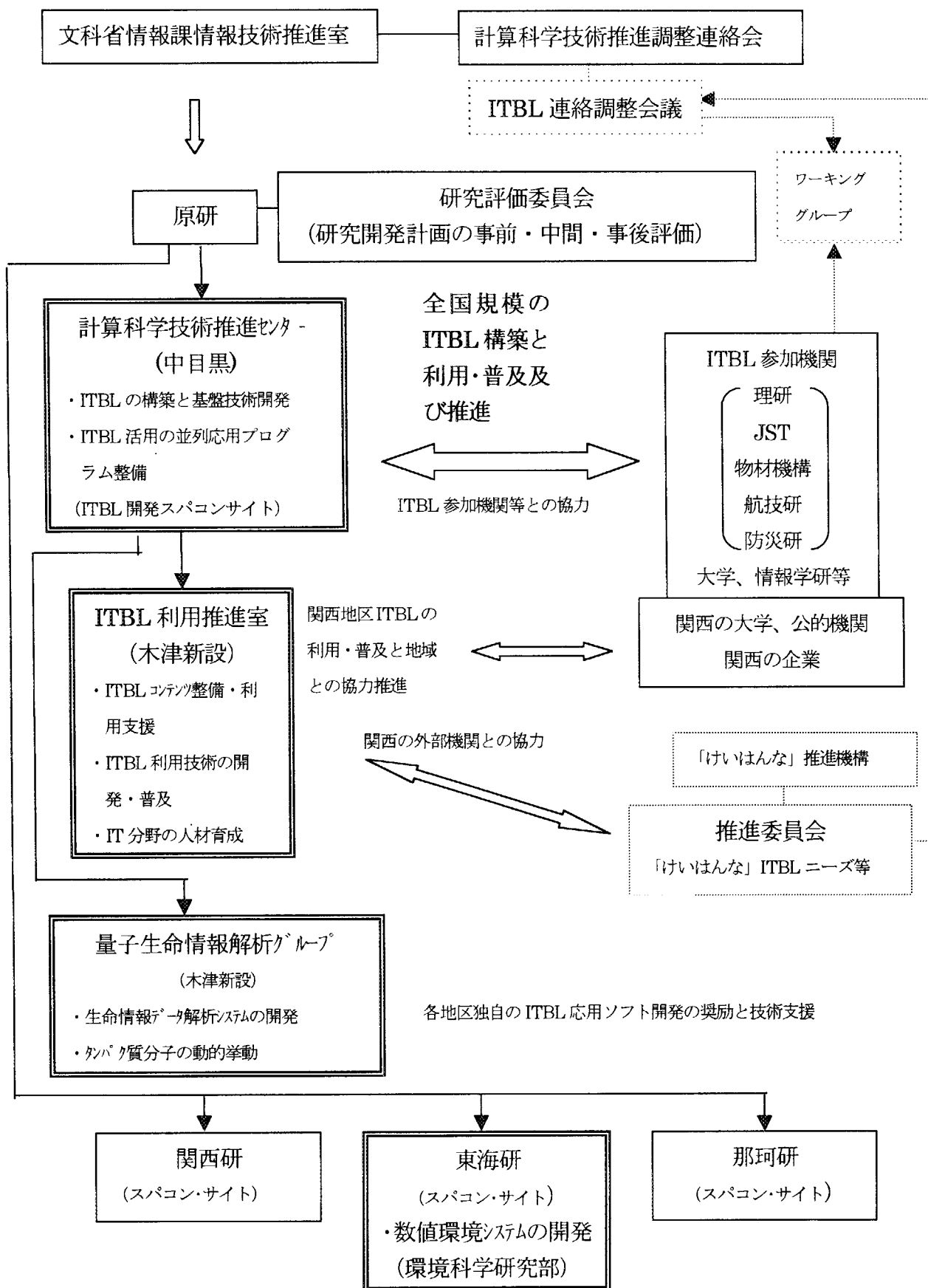
業務内容

- ・研究開発の革新をもたらすような情報技術に関連するセミナーを実施する。
- ・先端的シミュレーション、データベースを用いた研究開発の実施機関である原研を人材育成の場として活用し、情報科学分野の実践的人材の育成を図る。

達成目標

- ・セミナーや実践教育の効果、影響などを的確に（可能なら定量的に）把握し、絶えず有益な活動を展開する。

3.3 研究実施の推進体制



3.4 研究資源計画

ITBL に関する研究開発は、概略、1) ITBL 環境構築と基盤技術開発、2) ITBL 技術の開発整備と利用普及、3) ITBL 活用の応用ソフトウェア開発・整備から構成される。このうち、まず、環境構築と基盤技術開発を早期に実現させ、その展開に対応して ITBL 技術を普及させるとともに、ITBL 環境で具体的に利用する応用プログラムの新規開発を進める必要がある。したがって、計画初期では、環境構築に重点を置く。しかし、利用普及についても ITBL コンテンツの整備や人材育成プログラムの準備を初期から開始しておく必要がある。応用プログラムについては、既存プログラム、特に大規模シミュレーションプログラムについては、ITBL の活用により大きな成果が期待できることから、この整備作業についても早期に開始する。

新規に開始する ITBL 活用の応用研究として、生命情報解析については、研究成果のオリジナリティや有効性を適時示せるよう戦略を重視すべきであることから、投入予算額より従事する研究者を重視すべきである。すなわち、新規立ち上げの生命情報解析研究については、年次的に人員を充実して行くことが必要である。

環境科学研究部で実施する数値環境システムについては、研究員が少人数であり、且つ現在すでに継続実施している研究開発があることから、研究員は詳細設計やシステムの性能評価に当たり、実際のソフトウェア整備は外注で行う。また、計算機技術については、計算科学技術推進センターとの密接な協力関係を保つ。

	予算 (予定) (百万円/5年)	従事者 (予定) 職員 (人/年)	従事者 (予定) その他 (人/年)
(1) 並列処理基盤技術の開発 (ITBL 環境構築と基盤技術開発)	6,448 (H12 補正 864 含)	7	7(業)
(2) 応用分野における並列計算手法の研究開発 (ITBL 活用の並列応用プログラムの整備)	800	1	0
(3) ITBL を活用した生命情報解析研究	845	8.8	1(客) 5.8(博)
(4) ITBL を活用した数値環境システムの開発	350	2.5	2(業、外來) 2(博)
(6) 情報システムの管理・運用と OA 化の推進 (ITBL 技術の開発整備と利用普及)	8,450 (H12 補正 3,421 含)	4	6(業、外、博)

3.5 原研内外との協力連携

ITBL 活用の並列応用プログラムの整備では、東海研、那珂研、関西研に所属している開発担当研究室と協力、連携して進める。

ITBL を活用した生命情報解析研究において開発したデータベースのインターネット上での公開及び分子シミュレーションシステムの並列化・高速化では、新設の ITBL 利用推進室と協力、連携して進める。

生体分子実験データ解析では高崎研究所と、実験データの解析では中性子構造生物学グループとの密接な協力の下に行う。

ITBL 環境構築と基盤技術開発では、文科省情報技術推進室の IT 施策としての ITBL の成否は、参加 6 機関との協力関係に大きく依存する。また、限られた人員の下での研究開発

には、民間の IT 技術を適切に活用して行く必要がある。

また、国際協力を活用した基盤技術開発も視野に入れて進める。すなわち、シュツットガルト大学がドイツ国家プロジェクトとして開発を進めているメタコンピューティングのためのソフトウェア環境“UNICORE”と情報交換を行い、ITBL 基盤技術開発を効率的に進める。

数値環境システムの開発に資するため、GMD ドイツ情報処理研究所との間で海洋・大気循環モデル連成計算に関する情報交換を行っていく。

ITBL を活用した生命情報解析研究においては、大学等の研究機関・民間企業と協力、連携して研究開発を進める。すなわち、開発したデータベースや分子シミュレーション・システムを外部機関に供用しつつ、データベース、分子シミュレーション・システムを応用した分子モデリング・プログラムの開発等で共同研究を進め、医薬開発等に資する分子モデリング・システムの開発を行う。

4. 事前評価の結果

4.1 項目別評価

(a) 研究開発の基本方針 (4.1 (5点満点の平均評価点、以下同じ))

広域分散処理技術による全国規模のグローバル・コンピューティング環境 (ITBL) の実現とその活用は、先端的科学技術開発の新たな発展を可能にするばかりでなく、我が国の産業競争力全体のレベルアップを先導する効果を創出するとする、国の施策の一環として位置付けられる。原研の本研究計画の全体目標は、ITBL 基盤技術の研究開発を進めつつ、ITBL 環境試作から実供用までの段階的構築、関連機関での利用普及を推進することである。また、ITBL 環境を活用した応用ソフトウェアを開発し当該応用分野の研究開発の革新を図ることである。

本計画は、旧文部省の Super-SInet 計画、すなわち全国の国立大学を結ぶ SInet の増強計画とのジョイント計画であり、旧科学技術庁情報科学技術推進室 (現在の文部科学省、研究振興局情報課情報技術推進室) の IT 施策として、科技庁傘下の 6 機関 (日本原子力研究所、理化学研究所、航空宇宙技術研究所、物質・材料研究機構、防災科学技術研究所、科学技術振興事業団) によって、平成 12 年度 (補正予算) ~17 年度の 6 年に渡って実施するものである。

上記の目的・意義を有する「ITBL 環境の構築と利用」計画は、国の方針、社会的ニーズにも適合しており全体目標は概ね妥当である。研究開発課題の構成と計画の段階的展開の基本方針も、これまでに原研が中心となって進めている並列処理技術の開発とその計算科学的応用の実績と成果に基づいていることから妥当と判断する。

しかしながら、今後の計画の実施に当たって最も重要なことは、全国的なジョイント計画としての参加機関の研究開発分担課題に即して実施計画の内容を明確化し、スケジュールの節目毎に再点検して、進めていくことである。先ずは、当面の目標である ITBL システム α 版の構築については 6 機関での協調を重視し進めるとしているのは良い。その第 1 段階及び次の段階への展開を考えると、旧科技庁傘下 6 機関の連携に加えて、新たに設置が予定されている SInet 関係機関を含む ITBL 連絡調整会議 (仮称) での実効ある連携を期待したい。

現状においては研究計画の骨格的組み立てが一応整った段階と理解する。全国規模の大容量ネットワークによる統合運用を最終目標として目指している研究開発課題の内容に関しては、上記の関係機関との連携にも係わるが、なお検討が必要と考えられる。これらの主なものは次に挙げられる。

- (1) 原研としての課題の目的、すなわち、ITBL 環境構築の新技術開発か、応用研究者の為のインフラ整備かの重点の置き方
- (2) ITBL 対応の基盤技術と ITBL 活用応用ソフトの開発における適合性・整合性
- (3) 計算機資源とともにソフトウェアとデータベース、特に大型実験設備との協調的利用の推進

(4) ITBL を軸として地域性に基づく研究の特徴付け (例えば、光科学と生命科学の融合)

(b) 資源配分 (3.5)

提案された計画では、ITBL 環境構築と基盤技術開発を早期に実現させ、その展開に対応して ITBL 技術を普及させるとともに、ITBL 対応の応用プログラムの新規開発を進めるとして、予算では5カ年で約150億円、この内の応用プログラム研究開発部分は約2億円)であり、また、人員(／年)では、職員が約20人で、この内で新規の生命情報解析に約9人を配置し、その他の業務協力員や博士研究員など約25人を予定している。人員不足には外注業務により対処するとしている。

一見して、外注業務で対処するとしても人的資源に問題があると言わざるを得ない。ITBL は長期にわたり IT の推進に関する重要な基盤技術になるもので、継続的な技術の開発が可能となるよう、専属の内部研究者が増えた方が良い。研究スタッフの充実を優先することが必要である。計画の考え方は、単にプロジェクト指向になり、技術の空洞化が進み、得られた知見が蓄積されない恐れがある。これは、一原研の問題というより、我が国の政府の研究開発の進め方の問題でもある。

(c) 原研内外との協力・連携 (3.6)

冒頭に述べたように、当面の6機関の協調体制も含め、外部との協力・連携体制の確立は、特に今後の計画の実施に当たって検討を要する事項である。リモートコンピューティング技術をすでに研究開発している機関は多いので、そこの協力は不可欠である。また、ITBL 活用応用ソフト開発において外部機関との協力・連携にもう一工夫欲しい。将来的には、私立大学・企業研究機関等との研究関係をさらに強化できるようにすべきである。大学との連携については、計画方式(指名方式)、公募方式を適宜組み合わせ、両方のメリットが出るようにすることが適当と考えられる。

(d) 人材養成の施策 (3.4)

人材養成の施策の妥当性については、提案からは十分には読みとれない。研究者に対する施策も重要であるが、研究支援業務が不十分にならないような配慮も望まれる。さらに、原研内外のユーザへの教育や支援は重要である。トレーニング対象者、方法等を明確にした上で、積極的な取り組みが必要である。

(e-1) 並列処理基盤技術の研究開発 (ITBL の構築と基盤技術開発)

(i) 目的・意義 (4.3)

仮想研究環境用の基盤技術を実現することの意義は高いので、そのための研究目的は評価できるが、分散処理の新技術開発を目的と捉えた場合、国際的な標準化活動(GRID)との協調が不可欠である。また、応用研究のインフラ整備とした場合、ITBL が目標としている超大規模計算の真のニーズがどこにあるのか、より明確にすべきである。ITBL 環境の実

現を期待したいが、重要なのはデータ（実験データ、計算データ）、ソフトウェア、大型実験設備、可視化設備などの分散協調であり、そのための基盤技術の必要性を強調しておきたい。

なお、提案では、グリッドの最終目標の一つである「どのコンピュータを使用しているかはユーザは意識せず大きなコンピュータパワーを得る」ことではなく、「ユーザがどのマシンで実行するかを決めリモートマシンで実行を可能とする技術」すなわちユーザ支援技術を目指しているように見えるので、研究課題名は「グリッドコンピューティング支援技術の研究開発」とした方が目標と計画が一致する。

(ロ) 研究展望及び達成目標 (3.8)

計画では、第1段階の2年間で所内と6機関のスパコンの結合、第2段階の4年後に国内の100台規模の共有、そして平成17年度に国内の大学・研究機関で本格運用を開始する年次計画で、それに対応する基盤技術開発を進めるとしている。

課題の達成目標は概ね妥当であるが、ITBLの構築と基盤技術開発は3年間で実現させる程度の早さが欲しい。STA基本システムの拡張可能性が達成の度合いを左右するが、開発を早めるためにも、もう少し目的を絞った計画にすべきである。可視化システムの開発においては、実ユーザーの使用、評価を通してのシステムの在り方の検討が重要であるが、AVSのような一般性がある利用法で、しかもXMLが利用されているようなイメージが望まれる。また、シームレスにすべきは計算資源だけでなく、データも重要であり、そのためには、裸のStampiだけでは不十分で、その上に意味を含むデータのシームレスなアクセスを可能にする機構を実現しなくてはならない。また、Task Mapping Editorのようなシステムも、素人のための完全自動化ではなく、ある程度経験のある利用者の支援となるようなものを目指すべきである。さらに、セキュリティのためのファイヤウォールとシームレスとは矛盾するので、そのための技術開発も重要である。

(ハ) 進め方 (3.6)

スケジュール及び開発手法は概ね妥当であるが、中間目標を設定しながら開発を進めることを望む。また、α版の後は商用化版の検討を行い、全国展開、普及の速度も早めるべきである。さらに、年次計画を見ると、スパコン資源の共有を軸に書かれているが、もっと広い計算機資源の共有を軸とすべきである。なお、この分野の研究ではすでに何歩か先をいっている他機関や大学等との研究協力をもっと重視すべきである。新技術開発が目的なら、国際的な活動と協調も必須である。その際には外部委託機関の選択は慎重に行う必要がある。

(ニ) 予想される成果の波及効果 (4.0)

Super-SInet構想に対応してITBLの構築ができれば、日本国内でのネットワークを通じた遠隔地からの(への)高速計算機利用が、より推進され、大きい波及効果が期待される。また、一般の実験室、研究室での資源管理にも有用な計算機環境が構築できれば、さらな

る波及効果が期待される。さらに、民間ミドルウェア開発の起爆剤となることも期待される。

(e-2) 応用分野における並列計算手法の研究開発 (ITBL 活用の並列応用プログラムの整備)

(イ) 目的・意義 (4.1)

原研内研究担当部署で使用されている大規模シミュレーションプログラム群について、ITBL 環境での計算機パワーを活用するために整備し、更に外部利用を促進することを目的としている。

達成目標としている地球シミュレータの有効利用、応用プログラムの並列化は意義が高い。生体の放射線影響、分子動力学法による材料亀裂進展などの大規模シミュレーションであるが、既存プログラムの ITBL 化とは、各分野での意義が具体的に何をさすのか個々につめて、進めることを期待したい。また、それぞれの課題を、地球シミュレータと分散処理との両方で開発する計画であるが、問題に応じてプラットフォームを選択し、そこに限定して応用プログラムを開発して行く方法もある。

(ロ) 研究展望及び達成目標 (3.6)

目標の達成は、地球シミュレータへの再構築化の成否にかかるが、当初目標は概ね妥当であり、ベクトル並列、スカラ並列計算機による分散処理の具体的発展を期待したい。但し、ここでの計画はすでに広く研究されて競争になっているので、原研としての特徴を出さないと単なる二番煎じになってしまう。社会的にこれでは解けないというような波及効果の大きい問題に是非取り組んで欲しい。特に、生命情報科学と光科学について集中的な研究での目標達成が望まれる。

(ハ) 進め方 (3.3)

年次計画は十分とは言えない。原研等で開発もしくは開発中の計算手法の活用を起点とし、対象プログラムの調査を行うことは妥当と考えられるが、詳細調査の結果、計画の見直しも含め、臨機応変に対応することを期待する。つまり、地球シミュレータ対象プログラムの調査、開発は、外部機関の研究者とも広く交流し、地球シミュレータが、今後の多くの計算機で用いられるアーキテクチャとなっていることを確認して、開発を行うことを望む。また、多様な計算資源を活用した並列応用プログラムの整備については、光科学、原子力・流体力学等でも並列計算手法の開発への要望が大きいので、分野ごとに具体的に有効性についての検討を進めること、ユーザとの議論の深化を図ることを期待したい。

(ニ) 予想される成果の波及効果 (4.1)

ITBL 利用大規模シミュレーションの成功例を示し、多くの研究者が利用できる環境が整えば、民間も含めて、大きい波及効果が期待される。多サイト、複数計算機による分散処理の形態はチャレンジングなもので、世界最速レベルの並列機を有効利用して各応用分野

の競争力アップを図るなど、その成果を期待したい。但し、アメリカに対して各分野の競争力を維持するためには地球シミュレータに続く高性能マシンの開発に取りかかる必要がある。もっとも、計算機パワーさえあればシミュレーションの成果が出るものではなく、その点で、波及効果の議論は不十分である。

(e-3) ITBL を活用した生命情報解析

(イ) 目的・意義 (4.5)

この研究は中性子やX線解析によるタンパク質構造等のデータに基づく生命構造データの構築、及び生体分子機能の発現機構解明のためのシミュレーションを目的としている。

原研の研究活動で、生体现象を対象とする広い領域の一つとして取り上げたことは意義が大きく、高く評価する。

後述するが、国内外でも精力的に研究を行っている機関が多数あるので、原研のイニシアティブを強調できる研究計画であるために、中性子回折による構造解析を軸に構想することは適当であり、発展を期待したい。

(ロ) 研究展望及び達成目標 (4.1)

2つの研究内容における課題の達成目標が多岐にわたっており、これらが全部実現するかは問題であるが、達成目標は概ね妥当である。

一方、生命情報解析は今世紀最も重要な研究テーマの1つと考えられるので積極的な推進が必要であるが、国内外でも精力的に研究を行っているところが多数あり、そこをどう差別化して行くか、オリジナリティーや問題意識が、ポイントである。文部科学省、経済産業省等として、バイオインフォーマティクス（生命情報科学）が各種プロジェクトで推進されようとしていることを十分に認識する必要がある。

(ハ) 進め方 (3.8)

生命情報解析研究自身のスケジュールは妥当であるが、ITBL(グリッドコンピューティング技術)の活用に関して具体的な進め方を明確にする必要がある。

研究体制の面では、中性子実験グループとの統合や光科学等関連分野の活動との連携などが図られており（今後、量子構造生物学研究センターへの移行も含む）、当面は、研究の順調な進展が期待される。

ただ、現実の人的資源なども配慮し、前述した動向からも研究課題の焦点を定めること、他機関との協力を図ることも重要である。

(ニ) 予想される成果の波及効果 (4.4)

計画している2つの研究内容の成果としての分子設計やDNAに基づく創薬は、プロジェクトとしての独自性はないが、社会的影響の極めて大きい研究であり、海外との競走に勝つべく研究開発が進展することを期待する。また、計算科学関連の成果としての生命情報解析システムは、広く利用される環境を整えていただくことを希望する。

(e-4) ITを利用した数値環境システムの開発**(イ) 目的・意義 (4.3)**

ITBL 活用のネットワーク接続された多くのスーパーコンピュータを利用して数値環境システムの技術開発を推進することは、大気・海洋・地表結合モデルの高精度化、高速化に対する効率的な構築・開発のために重要であり意義がある。開発目標とする数値環境システムは、日本としてアジアに貢献できる研究でもある。地球シミュレータの経験を生かした応用として、その成果を期待したい。また、原研がイニシアティブをとれるよう共同研究など外部との一層の協力が必要である。

(ロ) 研究展望及び達成目標 (4.0)

5 年計画では、国内及び東アジア地区での原子力事故、汚染物質の飛来などの大気・海洋での環境研究への基盤とし、時間スケールを数日から1年程度とした数値環境システムの高精度化、高速化を目標に掲げたことは概ね妥当である。国際的協調・研究体制の充実を図り、世界的にデファクトスタンダードとなり得る成果を期待したい。

(ハ) 進め方 (3.3)

年次計画は前半3年と後半2年で段階的に組み立てられている。地球シミュレータ開発計画と関連付けて、より具体的な計画を詰める必要がある。その際、Last One-mile を十分配慮し、小グループが出来るだけ多数ネットワークに参加できるように配慮する必要がある。

(ニ) 予想される成果の波及効果 (4.4)

アジア地域の環境汚染物質挙動研究に大きな波及効果が期待される。研究開発後は各種業務機関との連携が重要である。なお、本研究開発全体に言えることであるが、データの共有について解決策が必要である。

(e-5) 情報システムの運用・管理とOA化の推進 (ITBL 技術の開発整備と利用普及)**(イ) 目的・意義 (4.0)**

国内の多くの計算機パワーを有効利用するという目的は大きな意義がある。分散したシステムの運用管理は、全体計画の基盤であるので、地味であるが重要である。利用者を含む共同利用運営協議会等の制度の整備を目ざすことも必要である。

(ロ) 業務展望及び達成目標 (3.4)

日本各地のスーパーコンピュータをネットワークベースで使用できるようにする目標は概ね妥当であるが、国際的なネットワークへの接続への配慮や広く開放する場合に発生する問題への考慮が必要である。また、人材育成の一環として ITBL 利用者に対する利用説明会等も適宜実施していく必要がある。

(ハ) 進め方 (3.4)

業務計画は概ね妥当であるが、問題点の調査と対策、他の5機関との協調を図り実施することを期待する。大規模なデータサーバをどこか(複数)に設置する計画も必要である。

(ニ) 予想される成果の波及効果 (4.1)

成功すれば、日本国内における、新たな極めて巨大な計算機リソースが出現し、計算機科学の学問だけでなく、その応用による社会への還元は極めて大きいものがあり、波及効果が期待される。利用・普及の規模はセキュリティと密接に関係するので、適切なセキュリティ方策の構築は大いに期待したい。

4. 2. その他の全般的なコメント

上記以外の所感、問題点、提言等、各委員のコメントを以下に列記する。

○国の研究開発プロジェクトであることに関し4点の意見を述べる。

- (1) 人員体制としてプロジェクト指向が過度に進むことがないように、随時、国と折衝する努力をしていただきたい。
- (2) 成果物はフリーソフトウェア/パブリックドメインソフトウェアとしていただきたい。
- (3) だからといって、成果物の資産価値がゼロという訳ではない。国民の資産が増大することになり、国益に資することになるからである。
- (4) 国費を使った研究開発の成果を特定企業のものにすることは避けるべきである。

○一つは、全体的に他分野、異分野との共同を模索すべし。二つは、波及効果の評価は研究終了直後には困難であろう。波及効果の評価については別途行うシステムを作るべきである。もっとも、その評価をどのように活かすかの議論も当然必要である。

○既に述べたことであるが、計算(CPU)資源の分散共有についてはイメージが描けているが、応用分野で重要なのは、データ、可視化装置、実験施設(Spring8、加速器、JT60、電顕など)のシームレスな結合であり、その点でこの計画は十分煮詰められていないように思われる。将来は、実験装置のITBLを通しての遠隔運転・操作なども計画に入れるべきであろう。

もう一つ、どれだけのネットワーク容量が必要かが全然検討されていないように思われる。10Gb/sで十分なのか、不足なのか、利用形態にもよるので難しいが、評価すべきであった。

○我が国として推進すべき重要な分野であるので是非成功させ、我が国の競争力強化に貢

献していただきたい。その際には国家機関だけではなくより広い機関との連携も考慮されると良い。

○国の研究機関では、省庁再編、独立行政法人化後の体制調整により、より一層の発展ができれば望ましい。

○評価者が産業経済省の援助で平成 15 年度末までに開発する、蛋白質動的構造解析ソフトも、ITBL で利用できるように整備対象候補として考慮していただきたい。

また、大学での研究室が管理・運営している蛋白質立体構造データベースと、計画されている生命情報解析研究とが相互に協力できる体制も期待したい。

現在、大阪大学から IMnet へ入る際には、大阪にスイッチがないため、大阪の IMnet に繋がっている研究機関へ繋げる場合でも、一度、東京へ SInet で行ってから、また大阪へ戻ってくるという、全く無駄なことがなされている。Super-Inet でそれは解決されるとは思いますが、今すぐにでも、大阪にスイッチを設置し、IMnet と SInet とを結んでいただきたい。

最後に、本プロジェクトでは、計算機ハードそのものの開発が含まれていないように思われます。米国では、エネルギー省とコンパック、セレーラとが共同でペタ・フロップス・マシンを、今回計上されている金額の倍程度の額で、ゲノム・生命科学への応用を目指して発足させようとしている、とのことである。予算金額が低すぎるとは感じますが、とにかく、日本国内の計算機メーカーを巻き込んだ、ペタ・フロップス・マシンの開発が、この計画に入っていないのは、たいへん残念である。どこか他の国内のプロジェクトで、推進されているあるいは計画されているとしても、それらは、単にスピードだけを目指していて、本当の利用される速さとしてではないように感じる。文科省や経産省のプロジェクトでは金額が低いので、原研で、考慮していただくのが良いかと思います。

本プロジェクトの成果も、市販の高額の計算機を購入した、購入しているからできた、と言われるのでは、未来がないように感じるからです。本プロジェクトの真の波及効果は、高速計算の意味が社会に良く理解され、より速い高速計算機の需要が開発されることではないかとさえ、思っております。)

○関西地区においては、日本原子力研究所、理化学研究所、大阪大学、京都大学等において、放射光科学(SPring-8)、光量子科学(関西研・光量子科学研究センター)、レーザー核融合(阪大・レーザー研)、タンパク質・生体細胞工学(阪大・蛋白研等)など光科学や生命科学につきユニークな研究活動が展開されている。この様な関西地域における特徴的学術基盤を生かして、光科学、生命科学の計算・情報分野で、日本原子力研究所が主体的に活動し、世界に情報発振する研究拠点として機能することを期待する。そのためには、計算・先端情報共同利用センターと光量子科学研究センターの「スーパーシミュレーションセンター」が緊密な連携のもとに活動することが望ましい。すでに、光量子科学研究センターと関連して、並列計算手法やグリッドコンピューティングについての研究開発が予備

的に開始されており、その結果が有効活用されることを望む。

「ITBL の構築及び活用」計画に関する事前評価結果による評価項目別評価点数（全員の平均）を下表に示す。

「ITBL の構築及び活用」計画に関する事前評価結果

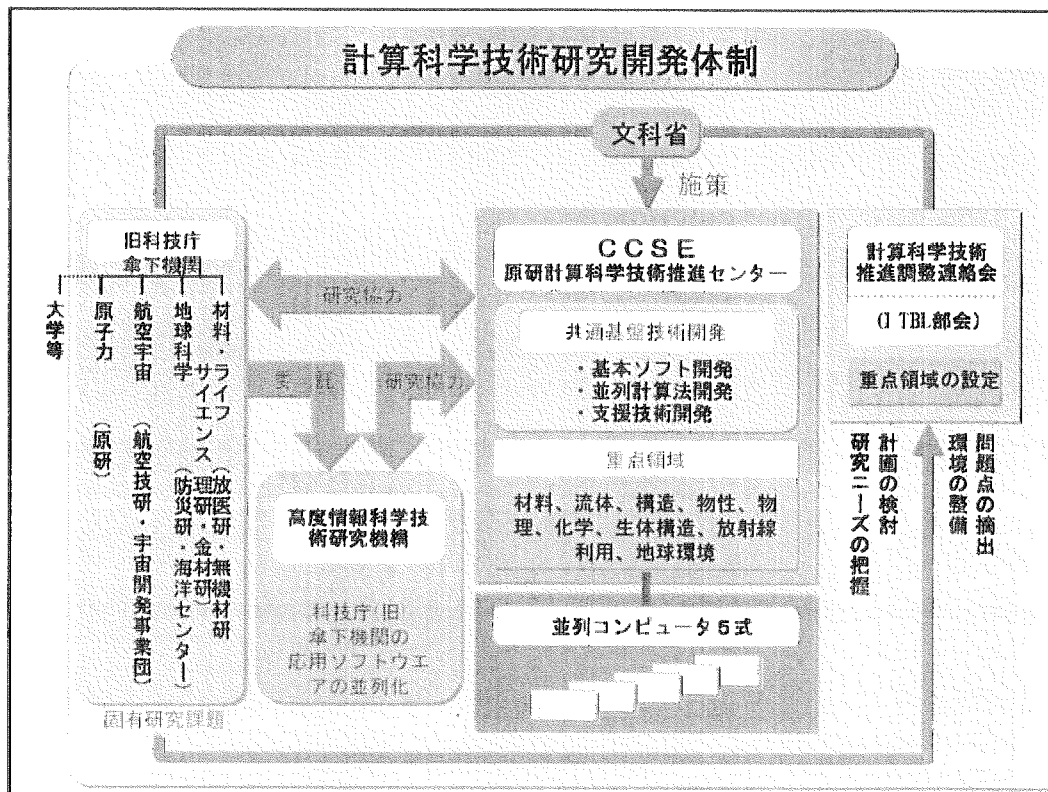
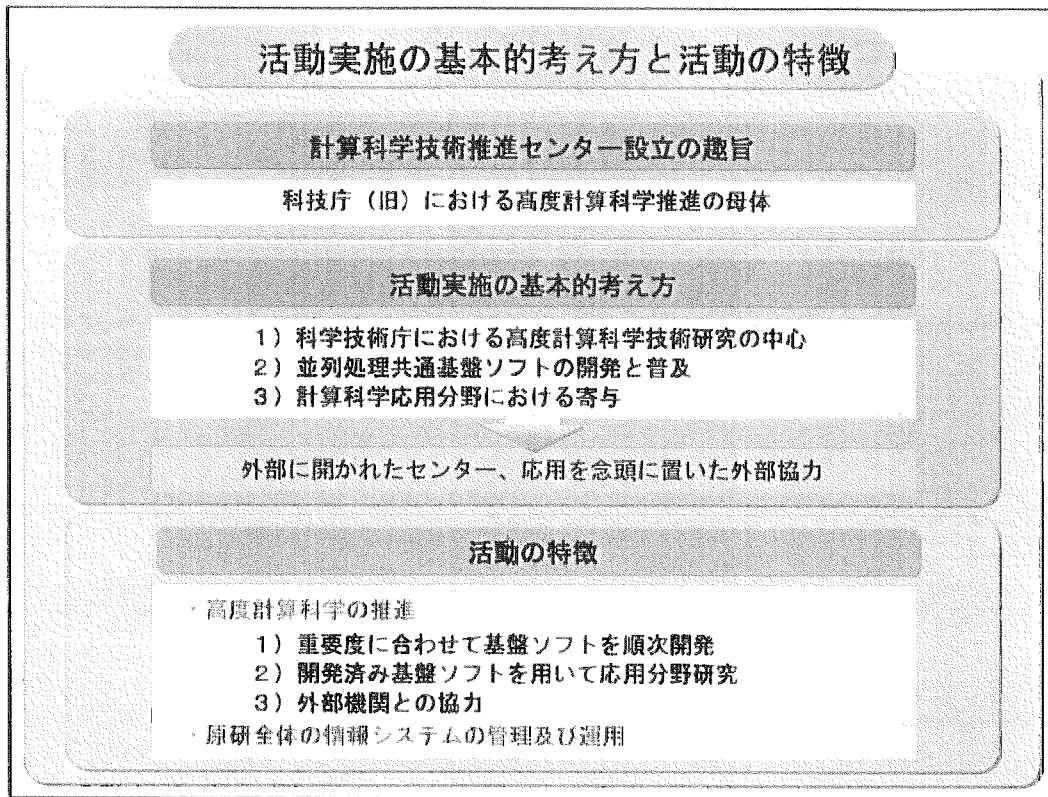
(a) 研究開発の基本方針		4.1
(b) 資源配分		3.5
(c) 原研内外との協力・連携		3.6
(d) 人材養成の施策		3.4
(e-1) 並列処理基盤技術の研究開発 (ITBL の構築と基盤技術開発)	(イ) 目的・意義	4.3
	(ロ) 研究展望及び達成目標	3.8
	(ハ) 進め方	3.6
	(ニ) 予想される成果の波及効果	4.0
(e-2) 応用分野における並列計算手法の研究開発(ITBL 活用の並列応用プログラムの整備)	(イ) 目的・意義	4.1
	(ロ) 研究展望及び達成目標	3.6
	(ハ) 進め方	3.3
	(ニ) 予想される成果の波及効果	4.1
(e-3) ITBL を活用した生命情報解析	(イ) 目的・意義	4.5
	(ロ) 研究展望及び達成目標	4.1
	(ハ) 進め方	3.8
	(ニ) 予想される成果の波及効果	4.4
(e-4) IT を利用した数値環境システムの開発	(イ) 目的・意義	4.3
	(ロ) 研究展望及び達成目標	4.0
	(ハ) 進め方	3.3
	(ニ) 予想される成果の波及効果	4.4
(e-5) 情報システムの運用・管理とOA化の推進(ITBL 技術の開発整備と利用普及)	(イ) 目的・意義	4.0
	(ロ) 業務展望及び達成目標	3.4
	(ハ) 進め方	3.4
	(ニ) 予想される成果の波及効果	4.1

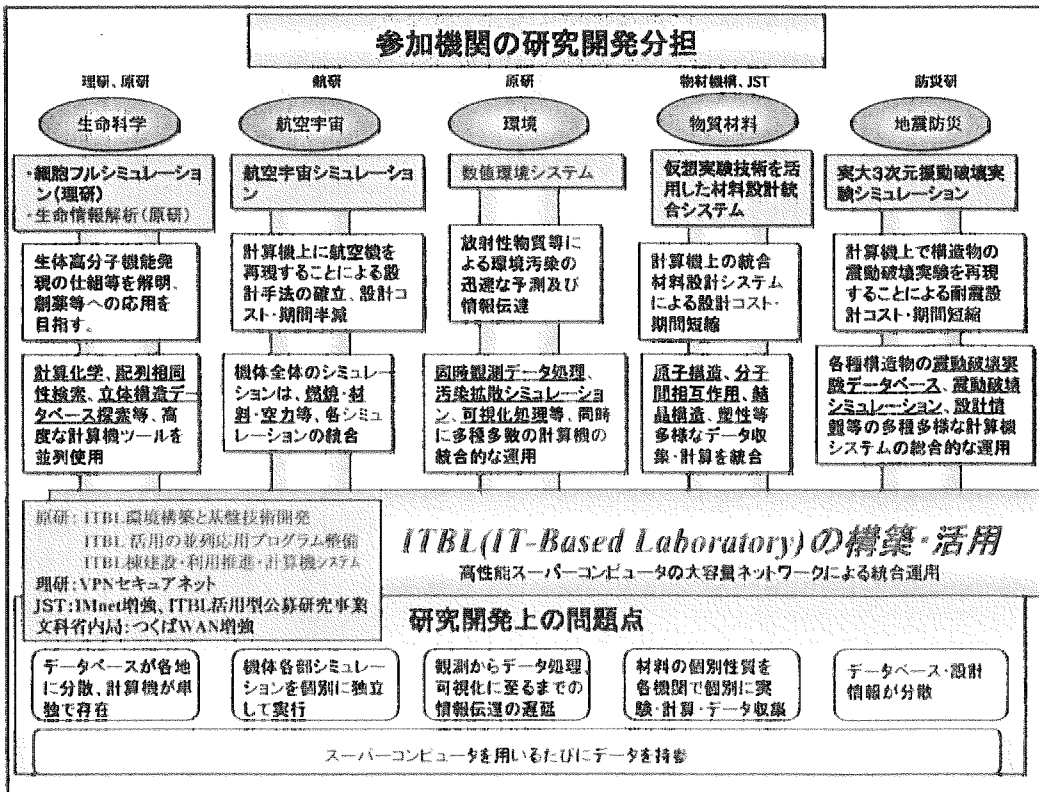
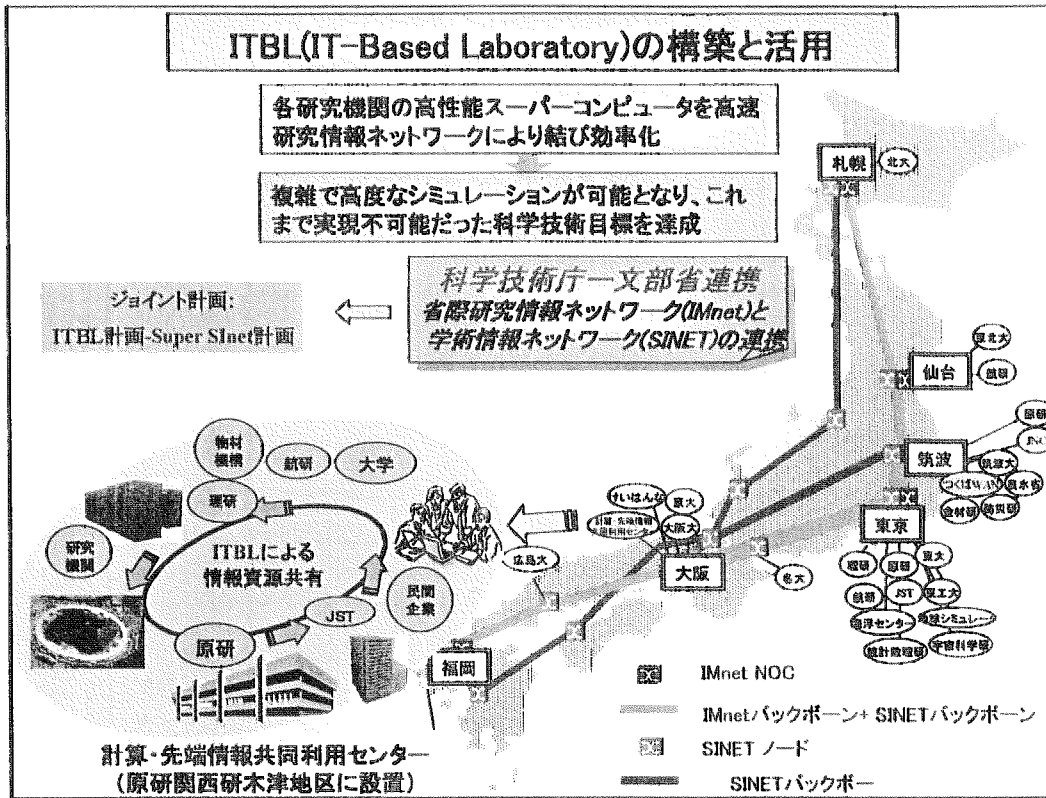
参考資料

「ITBL の構築と活用」に関わる研究開発課題（平成12年度事前評価）
 （被評価者側の説明用OHP資料を基に編集）

構 成

- ・活動実施の基本的考え方と活動の特徴
- ・計算科学技術研究開発体制
- ・ITBL (IT-Based Laboratory) の構築と活用
- ・参加機関の研究開発分担
- ・主要な研究開発課題の編成（1）
- ・主要な研究開発課題の編成（2）
- ・推進の組織・体制
- ・(ITBL の構築と活用) 年次計画
- ・並列処理基盤技術の研究開発（主要課題領域1）ITBL 環境構築と基盤技術開発
- ・研究目的と概要
- ・ITBL の環境の基本構成・機能
- ・ITBL 基盤ソフトの研究・開発年次計画
- ・応用分野における並列計算手法の研究開発（主要課題領域2）ITBL 活用の並列応用プログラムの整備
- ・研究目的と概要
- ・応用分野における並列計算手法の研究開発
- ・ITBL 活用の並列応用プログラムの整備と利用普及一進め方
- ・ITBL を活用した生命機能情報解析研究（主要課題領域3）
- ・研究目的
- ・研究概要（1）生命情報データ解析
- ・研究概要（2）生体分子機能シミュレーション
- ・ITBL を応用した生命情報解析研究の年次計画
- ・ITBL を活用した数値環境システムの開発（主要課題領域4）
- ・研究目的と概要
- ・ITBL 活用の意義
- ・IT を利用した数値環境システムの年次計画
- ・情報システムの運用・管理とOA化の推進（主要課題領域5）情報システムの運用、ITBL 技術の開発整備と利用普及
- ・「情報システムの運用」と「ITBL 技術の開発整備と利用普及」
- ・ITBL 計算機システムを含む原研大型計算機システムとネットワーク構成図
- ・「情報システムの運用」と「ITBL 技術の開発整備と利用普及」
- ・資源配分（予算と人員）
- ・ITBL が実現すれば・・・利用事業の展開



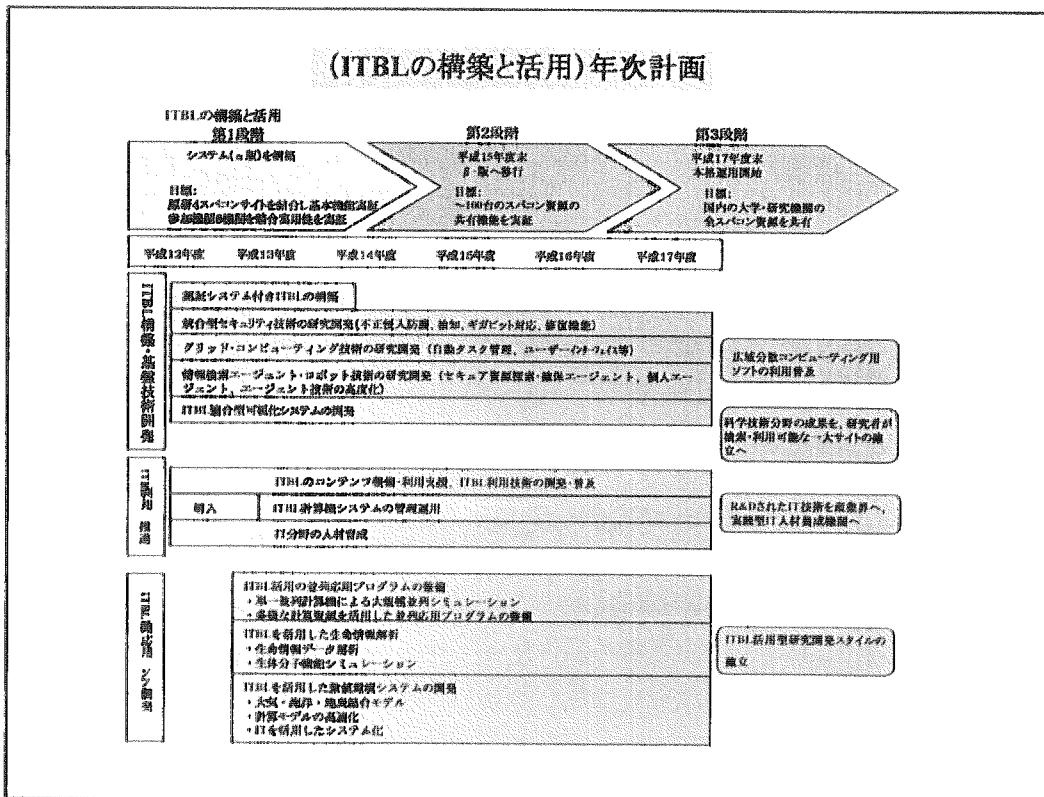
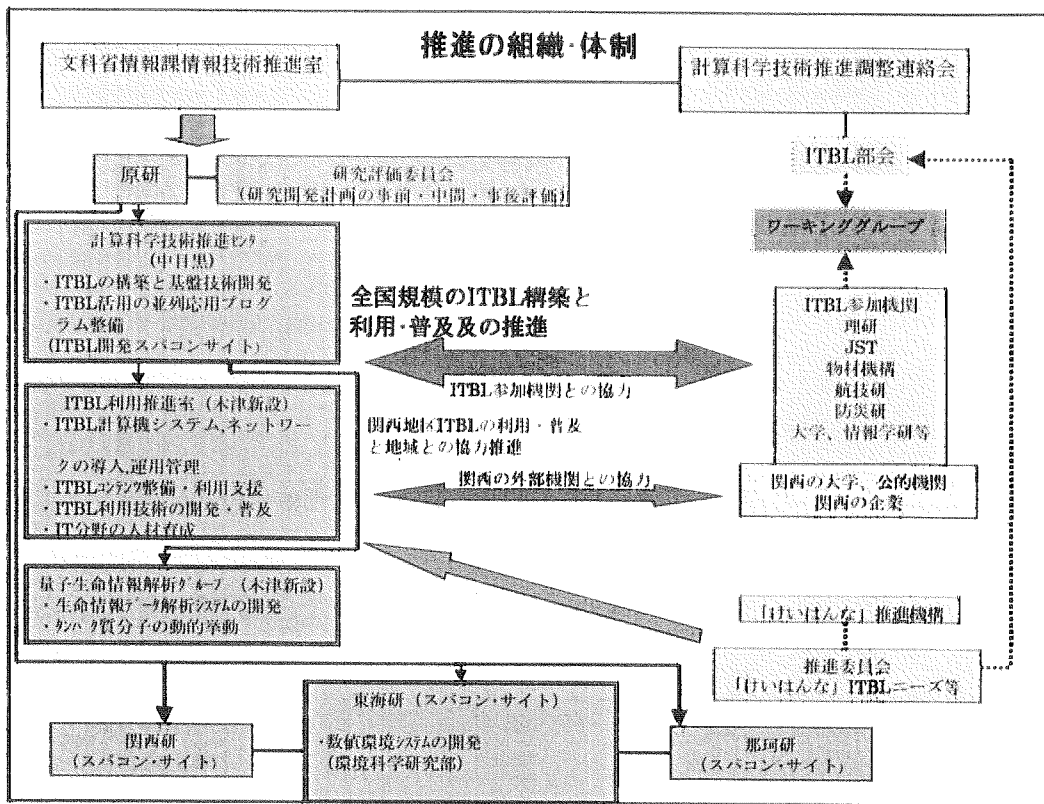


主用な研究開発課題の編成 (1)

(1) 並列処理基盤技術の研究開発	
a) 並列処理基本システムの研究開発 (並列処理基本システム開発グループ)	ITBL環境構築と基盤技術開発 ・ITBL環境構築 ・グリッド・コンピューティング技術の研究開発 ・情報検索エージェント・ロボットの研究開発 ・セキュリティ技術の開発
b) 並列処理支援技術の開発 (並列処理支援技術開発グループ)	・ITBL適合型可視化システムの開発
c) 並列処理技術推進計画の管理 (並列処理計画管理室)	変更なし。
(2) 応用分野における並列計算法の研究開発	
a) 並列計算法の研究開発 (並列計算法開発グループ)	・ITBL活用の並列応用プログラム整備
b) 原子力分野における計算科学 の研究 (数値実験技術開発グループ)	変更なし。
(3) ITBLを活用した生命情報解析研究	
ITBLを活用した生命情報解析 研究 (量子生命情報解析グループ 木津 に新設)	・生命情報データ解析 ・生体分子機能シミュレーション

主用な研究開発課題の編成 (2)

(4) ITBLを活用した数値環境システムの開発	
ITBLを活用した数値環境システ ムの開発 (環境科学研究部)	・大気・海洋・地表結合モデルの開発と検証 ・計算モデルの高度化 ・ITBLを利用したシステム化
(5) 地球シミュレータ用ソフトウェアの開発	
(地球シミュレータ用ソフトウェア開発グループ)	変更なし。
(6) 情報システムの運用・管理とOA化	
a) 情報システムの運用 (情報システム管理課)	・ITBL計算機システムの導入、ネットワーク整備 ・ITBL計算機システム、ネットワークの運用管理
b) 計算機システムの技術開発 (同上課)	変更なし。
c) OAシステムの整備・開発と運用 (OA化推進室)	変更なし。
d) ITBL技術の開発整備と利用普及 (ITBL利用推進室 木津に新設)	・ITBLコンテンツ整備・利用普及 ・ITBL利用技術の開発・普及 ・IT分野の人材育成



並列処理基盤技術の研究開発

(主要課題領域1)

ITBL環境構築と基盤技術開発

- ・ITBL環境構築
- ・グリッド・コンピューティング技術の研究開発
- ・情報検索エージェント・ロボットの研究開発
- ・セキュリティ技術の開発
- ・ITBL適合型可視化システムの開発

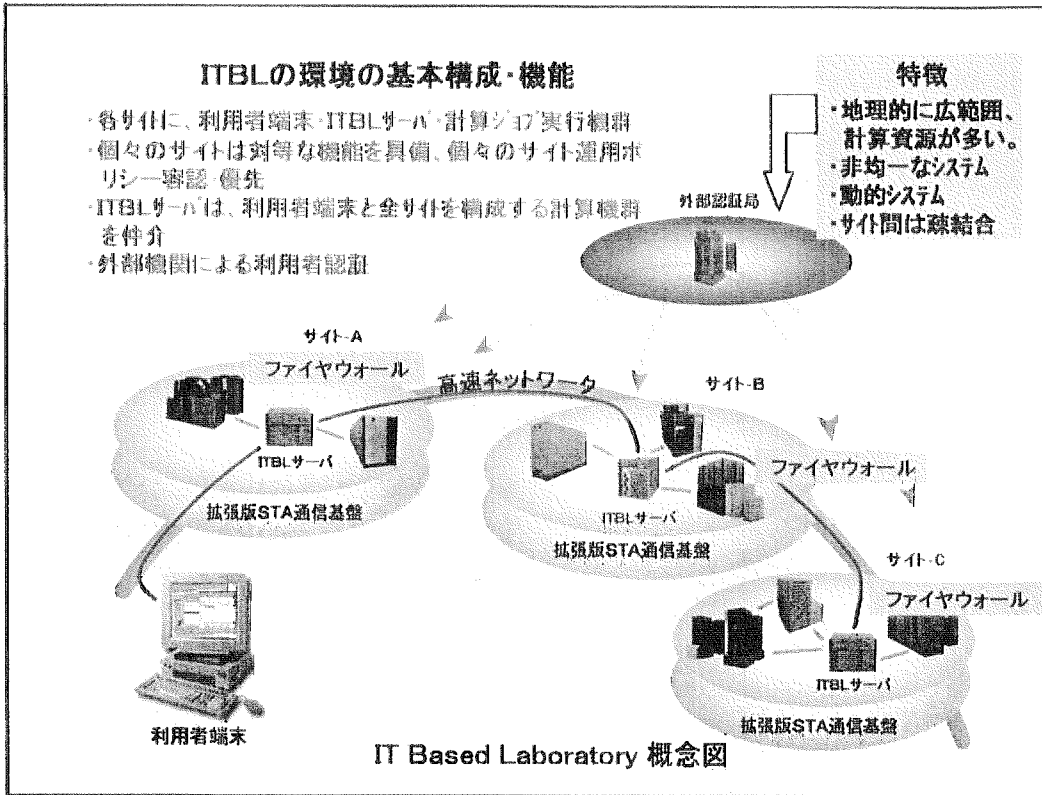
研究目的と概要

研究目的

国内に散在するスパコン、データベース等を大容量ネットワーク上に共有し、研究者が障壁を感じることなく効率的な研究開発活動ができる仮想研究環境を構築する。このための基盤技術を開発しつつ、試作から実供用まで段階的に構築し、その有効性を実証する。

研究概要

グリッドコンピューティング技術(STAの機能拡張等)、情報検索エージェント・ロボット技術、セキュリティ技術の研究開発、ITBL適合型可視化システムの開発の基盤技術開発を進めつつ、ITBL環境構築を3段階、i)旧科技厅6機関結合(α 版)、ii)つくばWANの統合(β 版)、iii)全国展開で進める。



ITBL基盤ソフトの研究・開発年次計画

年度(平成)	12	13	14	15	16	17
(1)ITBL環境構築 ・α版の開発(旧科技厅機関) ・β版の開発(全国展開)	<原研サイト>		<旧科技厅機関>		<筑波WAN>	
						<全国展開>
(2)グリッド・コンピューティング技術の研究・開発	→					
(3)情報検索型エージェント/ロボット技術の開発	→					
(4)セキュリティ技術の開発	→					
(5)ITBL適合型可視化システムの開発	→					

応用分野における並列計算手法の研究開発
(主要課題領域2)
ITBL活用の並列応用プログラムの整備

- ・単一並列計算機による大規模並列シミュレーション
- ・多様な計算資源を活用した並列応用プログラムの整備

研究目的と概要

研究目的・意義

単一サイト・単一計算機から多サイト・複数計算機など多様な計算資源の活用により、また規模、質、効率など研究開発の競争力強化の観点から、革新的な研究開発スタイルを実現

研究の概要

大規模シミュレーションが重要な、i)バイオ、ii)材料、iii)光量子、iv)中性子科学、v)環境等の分野における既存応用プログラムのITBL化

応用分野における並列計算手法の研究開発

(ITBL活用の並列応用プログラムの整備)

研究項目	研究内容／方法等	目標
1) 単一の並列計算機による大規模シミュレーション	<ul style="list-style-type: none"> 地球シミュレータ用に既存アプリケーション最適並列化 対象アプリケーションは、計算機パワーが制限で困難であった大規模シミュレーション 	<ul style="list-style-type: none"> 並列化手法の一般化 計算時間の大幅な短縮 計算対象の幾何スケール、時間スケールを有意に拡大
2) 多様な計算資源を活用した並列応用プログラムの整備	<ul style="list-style-type: none"> 種々のアーキテクチャの並列計算機を組み合わせた並列分散処理 対象アプリケーションは、計算機パワーが制限で困難であった大規模シミュレーション 	<ul style="list-style-type: none"> 分散処理手法の一般化 計算時間の大幅な短縮 計算対象の幾何スケール、時間スケールを有意に拡大

ITBL活用の並列応用プログラムの整備と利用普及-進め方-

業務課題	13年度	14	15	16	17
1) 単一並列計算機による大規模並列シミュレーション ● 生体の放射線影響シミュレーション ● 分子動力学法による材料亀裂進展シミュレーション ● 2次元レーザー・プラズマ相互作用シミュレーション ● 中性子科学核破砕ターゲット挙動シミュレーション ● 第1原理トカマク・プラズマ輸送シミュレーション ● ハートリー・ホック法及び密度汎関数法による電子状態計算 ● ナノテクノロジー関連シミュレーション(生体、材料等)			地球シミュレータ用に並列化、最適化、チューニング、シミュレーション実施		
			対象プログラム調査		
2) 多様な計算資源を活用した並列応用プログラムの整備 ● 生体の放射線影響シミュレーション ● 分子動力学法による材料亀裂進展シミュレーション ● 2次元レーザー・プラズマ相互作用シミュレーション ● 中性子科学核破砕ターゲット挙動シミュレーション ● 第1原理トカマク・プラズマ輸送シミュレーション ● ハートリー・ホック法及び密度汎関数法による電子状態計算 ● ナノテクノロジー関連シミュレーション(生体、材料等)			ベクトル並列及びスカラ並列計算機による分散処理		

ITBLを活用した生命機能情報解析研究
(主要課題領域3)

- ・生命情報データ解析
- ・生体分子機能シミュレーション

① 研究目的

- 1) 既存の各種データベースから重要な情報を引き出せる新しい生命機能構造データベースを再構築する。
- 2) 分子動力学の手法によりタンパク質や核酸等の機能発現を解明する分子シミュレーション手法を開発する。
- 3) 以上の手法及び他の実験手法等(特に中性子構造生物)で得られるデータと組合わせて、創薬や農学等への応用につなげる。

② 研究概要(1)

生命情報データ解析

既存のデータベース群

- ① DNA塩基配列情報データベース
- ② タンパク質の立体構造データベース(PDB)
- ③ その他、1000以上あるデータベース

- I) 既存のデータベース群の中から特に重要なものを、原研コンピュータ内に再構築する(ミラーサイト化)
- II) 再構築データ(場合によっては既存データベース群)から更に新しい情報を引き出すためのソフトウェア開発・公開

ex)

- 相同配列解析
一定の塩基配列から機能推定
- 立体構造解析
類似立体構造の分類
相互作用の比較分類
- 機能の比較・分類

③ 研究概要(2)

生体分子機能シミュレーション

生命系(タンパク質,核酸,水,生体膜等)をコンピュータ内に構築

↓ ← 分子動力学

各分子のリアルな振舞として観測

- I) シミュレーションシステム(計算技法)の開発
- II) 重要な生命機能素過程の分子レベルでの解明
- III) 中性子構造生物学で得られる情報(水素,水和,ダイナミクス)に基づく生物学的機能の解明

ex) DNA修復メカニズムの解明 他

⑥ ITBLを応用した生命情報解析研究の年次計画

研究項目	平 13	平 14	平 15	平 16	平 17
タンパク質構造情報データベースのミラー化と新規データベースの構築 ・データベースのミラーリング・統合データベースの構築 ・独自データベースの公開運用 ・データベースの維持・拡充		→		→	→
タンパク質情報解析ツールの開発 ・既存ツールの調査・試験的開発 ・新しい解析法の開発・公開運用 ・ツールの拡充		→		→	→
DNA修復酵素データベースの開発 ・統合データベースの開発 ・修復メカニズムの解析		→		→	→
分子シミュレーションシステム開発 ・システム開発並列化・最適化システムの公開 ・モジュールの追加・アップデート			→	→	→
生体分子機能シミュレーション ・核酸・蛋白質複合体シミュレーションの実行 ・機能メカニズム解析			→	→	→
生体分子実験データ解析 ・解析法・モデルの確立 ・実験データ解析		→		→	→
生体超分子系シミュレーション法の開発 ・シミュレーション法の開発・テスト ・シミュレーションの応用				→	→

(平成14年度から15年度にかけて中性子構造生物学グループと当グループを統合し、新たな組織とすることを計画中)

ITBLを活用した数値環境システムの開発
(主要課題領域4)

- ・大気・海洋・地表結合モデルの開発と検証
- ・計算モデルの高度化
- ・ITBLを利用したシステム化

研究目的と概要

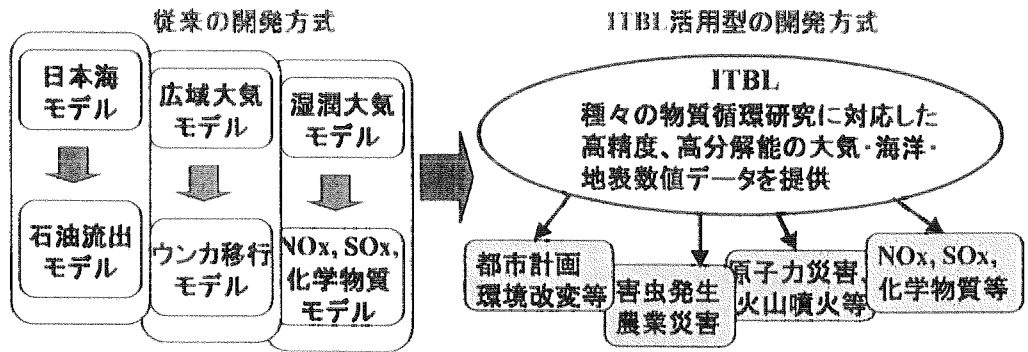
研究目的

大気・海洋・地表環境における物質循環を総合的に扱うことのできる「数値環境システム(研究事前評価済み)」を、最新のIT技術を活用してレベルアップする。

研究の概要

東アジア規模の高精度・高分解能の気象・海洋数値予測を高速計算により達成する数値環境システムを構築し、これに接続した研究機関等による任意地域の災害の即時予測や環境研究、迅速な予測結果の検索を可能にする。

ITBL 活用の意義



ITBL利用	利用の効果
大規模シミュレーションの高速化	東アジアから日本まで、高精度、高分解能の高速計算
大量データの分散保存	大気・海洋・地表面の大量データの効率的な保存
地球規模データのオンライン利用	より高精度の予測計算と効率的検証
Webベースのデータ提供	効率的な研究環境を実現

ITを利用した数値環境システムの年次計画

研究開発課題	平13	平14	平15	平16	平17
① 大気・海洋・地表結合モデル ・モデル結合 ・検証 ・利用検討			→		
				→	→
					→
② 計算モデルの高速化 ・並列化 ・ネットワーク ・PCクラスター			→		
			→		→
					→
③ ITを利用したシステム化 ・設計 ・システム操作機能 ・システム利用機能	→				
		→			
					→

情報システムの運用・管理とOA化の推進

(主要課題領域6)

情報システムの運用

ITBL技術の開発整備と利用普及

情報システムの運用

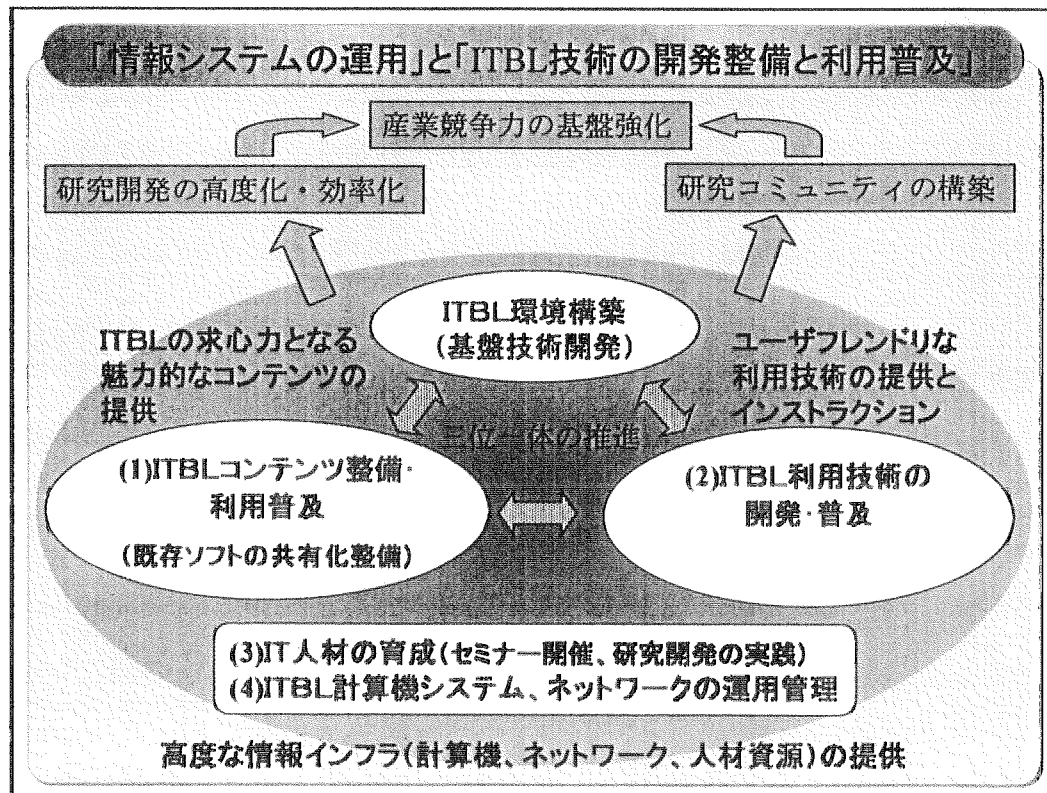
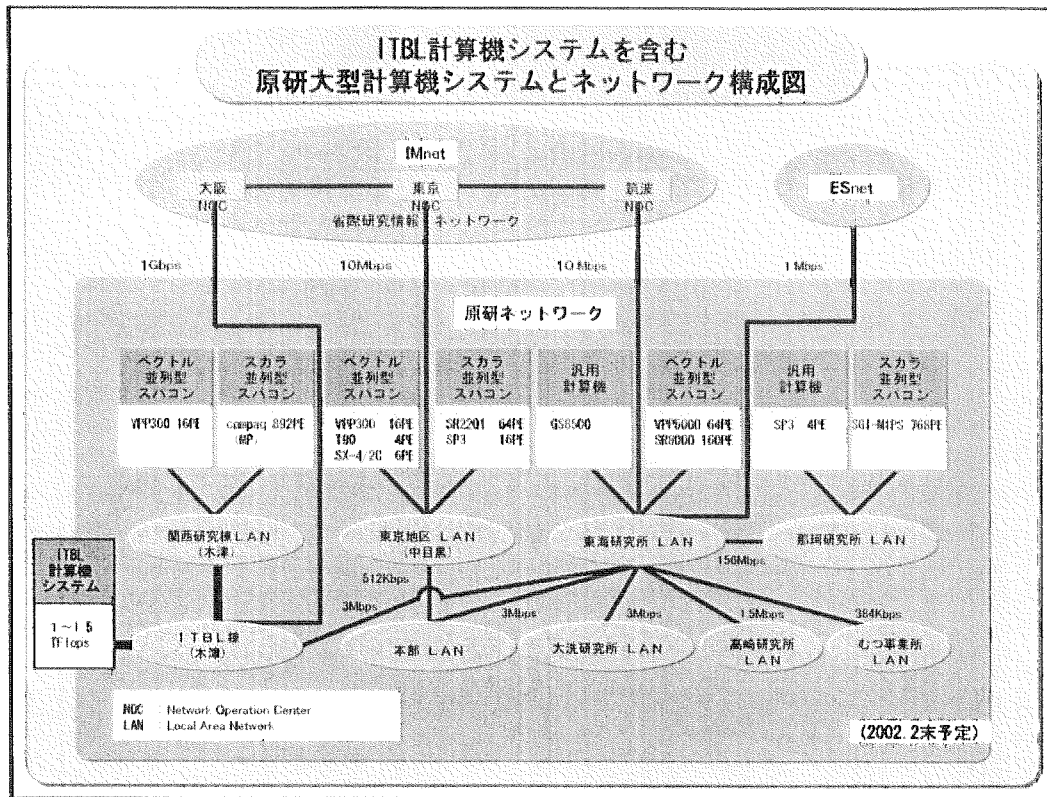
- ・ITBL計算機システムの導入、ネットワーク整備
- ・ITBL計算機システム、ネットワークの運用管理

ITBL技術の開発整備と利用普及

- ・ITBLコンテンツ整備・利用普及
- ・ITBL利用技術の開発・普及
- ・IT分野の人材育成

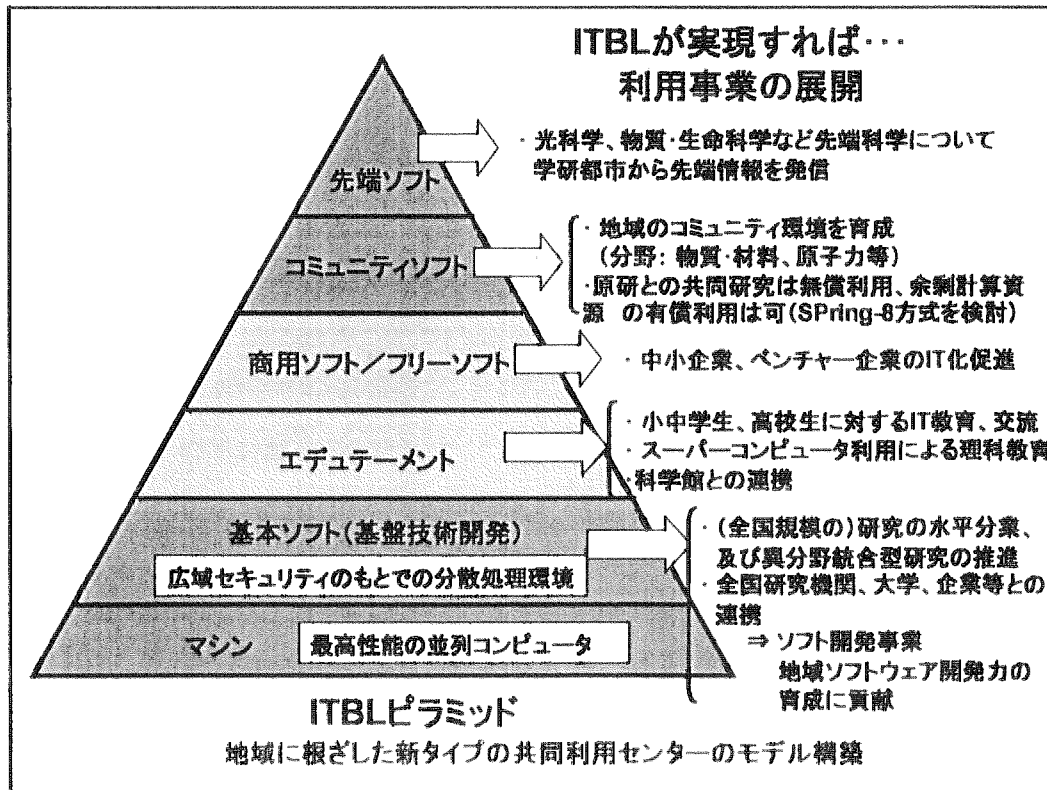
「情報システムの運用」と「ITBL技術の開発整備と利用普及」

項目	現状認識	事業内容	展望・目標	H12	H13	H14	H15	H16	H17
(1)ITBLコンテンツ整備・利用普及	これまでの研究の結果、有用なソフトが埋もれている	既存ソフトのうち有用なものをITBLで利用できるよう整備	・整備済コンテンツの利用者数に目標を置いて、関西、全国への利用	調査			共有化整備 (先端ソフト、コミュニケーションソフト)		
(2)ITBL利用技術の開発・普及	ITBLの普及には、利用支援体制が重要	・ITBL利用支援ツール整備 ・利用支援要員の配備	・利用者インストラクション ・普及状況の定量的把握				利用支援ツール整備 利用支援要員配備		
(3)IT人材の育成	研究者、研究支援者ともIT人材が手薄	・セミナー開催 ・研究開発の実践による人材育成	・効果、影響の的確な把握、有益な活動	調査			セミナー開催 研究開発の実践		
(4)ITBL計算機システム、ネットワークの運用管理	各機関のスパコン資源は、各機関固有のニーズで一杯	ITBL計算機システム及びネットワークの導入・運用管理	最高性能の並列コンピュータを設置	導入			運用管理		



資源配分（予算と人員）

	予算（予定） （百万円／5年）	従事者（予定） 職員 （人／年）	従事者（予定） その他 （人／年）
(1) 並列処理基盤技術開発 (ITBL環境構築と基盤技術開発)	6,448 (H12補正884含)	7	7(兼)
(2) 応用分野における並列計算手法 の開発 (ITBL活用の並列プログラムの整備)	800	1	0
(3) ITBLを活用した生命情報解析研 究	845	8.8	1(客) 6.8(博)
(4) ITBL活用した数値環境システム の開発	350	2.5	2(兼、外来) 2(博士)
(6) 情報システムの管理・運用とOA 化の推進 (ITBL技術の開発整備と利用普及)	8,450 (H12補正3,421含)	4	6(兼、外、博)



This is a blank page.

国際単位系 (SI) と換算表

表1 SI基本単位および補助単位

量	名称	記号
長さ	メートル	m
質量	キログラム	kg
時間	秒	s
電流	アンペア	A
熱力学温度	ケルビン	K
物質質量	モル	mol
光度	カンデラ	cd
平面角	ラジアン	rad
立体角	ステラジアン	sr

表3 固有の名称をもつSI組立単位

量	名称	記号	他のSI単位による表現
周波数	ヘルツ	Hz	s ⁻¹
力	ニュートン	N	m·kg/s ²
圧力, 応力	パスカル	Pa	N/m ²
エネルギー, 仕事, 熱量	ジュール	J	N·m
工率, 放射束	ワット	W	J/s
電気量, 電荷	クーロン	C	A·s
電位, 電圧, 起電力	ボルト	V	W/A
静電容量	ファラド	F	C/V
電気抵抗	オーム	Ω	V/A
コンダクタンス	ジーメン	S	A/V
磁束	ウェーバ	Wb	V·s
磁束密度	テスラ	T	Wb/m ²
インダクタンス	ヘンリー	H	Wb/A
セルシウス温度	セルシウス度	°C	
光束	ルーメン	lm	cd·sr
照度	ルクス	lx	lm/m ²
放射線量	ベクレル	Bq	s ⁻¹
吸収線量	グレイ	Gy	J/kg
線量等量	シーベルト	Sv	J/kg

表2 SIと併用される単位

名称	記号
分, 時, 日	min, h, d
度, 分, 秒	°, ', "
リットル	l, L
トン	t
電子ボルト	eV
原子質量単位	u

1 eV=1.60218×10⁻¹⁹J
1 u=1.66054×10⁻²⁷kg

表4 SIと共に暫定的に維持される単位

名称	記号
オングストローム	Å
バ	b
バール	bar
ガリ	Gal
キュリー	Ci
レントゲン	R
ラド	rad
レム	rem

1 Å=0.1nm=10⁻¹⁰m
1 b=100fm²=10⁻²⁸m²
1 bar=0.1MPa=10⁵Pa
1 Gal=1cm/s²=10⁻²m/s²
1 Ci=3.7×10¹⁰Bq
1 R=2.58×10⁻⁴C/kg
1 rad=1cGy=10⁻²Gy
1 rem=1cSv=10⁻²Sv

表5 SI接頭語

倍数	接頭語	記号
10 ¹⁸	エクサ	E
10 ¹⁵	ペタ	P
10 ¹²	テラ	T
10 ⁹	ギガ	G
10 ⁶	メガ	M
10 ³	キロ	k
10 ²	ヘクト	h
10 ¹	デカ	da
10 ⁻¹	デシ	d
10 ⁻²	センチ	c
10 ⁻³	ミリ	m
10 ⁻⁶	マイクロ	μ
10 ⁻⁹	ナノ	n
10 ⁻¹²	ピコ	p
10 ⁻¹⁵	フェムト	f
10 ⁻¹⁸	アト	a

(注)

- 表1-5は「国際単位系」第5版, 国際度量衡局1985年刊行による。ただし, 1eVおよび1uの値はCODATAの1986年推奨値によった。
- 表4には海里, ノット, アール, ヘクタールも含まれているが日常の単位なのでここでは省略した。
- barは, JISでは流体の圧力を表わす場合に限り表2のカテゴリーに分類されている。
- EC閣僚理事会指令では bar, barnおよび「血圧の単位」mmHgを表2のカテゴリーに入れている。

換 算 表

力	N(=10 ⁵ dyn)	kgf	lbf
	1	0.101972	0.224809
	9.80665	1	2.20462
	4.44822	0.453592	1

粘 度 1Pa·s(N·s/m²)=10P(ポアズ)(g/(cm·s))

動粘度 1m²/s=10⁴St(ストークス)(cm²/s)

圧	MPa(=10bar)	kgf/cm ²	atm	mmHg(Torr)	lbf/in ² (psi)
	1	10.1972	9.86923	7.50062×10 ³	145.038
力	0.0980665	1	0.967841	735.559	14.2233
	0.101325	1.03323	1	760	14.6959
	1.33322×10 ⁻⁴	1.35951×10 ⁻³	1.31579×10 ⁻³	1	1.93368×10 ⁻²
	6.89476×10 ⁻³	7.03070×10 ⁻²	6.80460×10 ⁻²	51.7149	1

エネルギー・仕事・熱量	J(=10 ⁷ erg)	kgf·m	kW·h	cal(計量法)	Btu	ft·lbf	eV
	1	0.101972	2.77778×10 ⁻⁷	0.238889	9.47813×10 ⁻⁴	0.737562	6.24150×10 ¹⁸
	9.80665	1	2.72407×10 ⁻⁶	2.34270	9.29487×10 ⁻³	7.23301	6.12082×10 ¹⁹
	3.6×10 ⁶	3.67098×10 ⁵	1	8.59999×10 ⁵	3412.13	2.65522×10 ⁶	2.24694×10 ²⁵
	4.18605	0.426858	1.16279×10 ⁻⁶	1	3.96759×10 ⁻³	3.08747	2.61272×10 ¹⁹
	1055.06	107.586	2.93072×10 ⁻⁴	252.042	1	778.172	6.58515×10 ²¹
	1.35582	0.138255	3.76616×10 ⁻⁷	0.323890	1.28506×10 ⁻³	1	8.46233×10 ¹⁸
	1.60218×10 ¹⁹	1.63377×10 ²⁰	4.45050×10 ⁻²⁶	3.82743×10 ²⁰	1.51857×10 ⁻²²	1.18171×10 ⁻¹⁹	1

1 cal= 4.18605J (計量法)
= 4.184J (熱化学)
= 4.1855J (15°C)
= 4.1868J (国際蒸気表)
仕事率 1 PS(馬力)
= 75 kgf·m/s
= 735.499W

放射能	Bq	Ci
	1	2.70270×10 ⁻¹¹
	3.7×10 ¹⁰	1

吸収線量	Gy	rad
	1	100
	0.01	1

照射線量	C/kg	R
	1	3876
	2.58×10 ⁻¹	1

線量当量	Sv	rem
	1	100
	0.01	1

情報技術専門部会評価結果報告書（平成12年度事前評価）