

JAERI-Review  
2001-025



JP0150721



計算科学技術専門部会評価結果報告書  
(平成12年度事後評価)

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

計算科学技術専門部会評価結果報告書  
(平成 12 年度事後評価)

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、計算科学技術専門部会を設置し、計算科学技術推進センターの平成 7 年度から平成 11 年度にわたる 5 年間の研究開発実績について、事後評価を実施した。同専門部会は、7 名の外部専門家で構成された。

計算科学技術専門部会は、平成 12 年 12 月から平成 13 年 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 12 年 12 月 27 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。

Report of the Evaluation by the Ad Hoc Review Committee  
on Computational Science and Engineering  
(Result 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 Computational Science and Engineering 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 R&D accomplishments achieved for five years from Fiscal Year 1995 to Fiscal Year 1999 at Center for Promotion of Computational Science and Engineering of JAERI. The Ad Hoc Review Committee consisted of seven specialists from outside of JAERI.

The Ad Hoc Review Committee conducted its activities from December 2000 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 December 27, 2000, 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 Computational Science and Engineering.

Keywords: Evaluation of Research and Development, Result Evaluation,  
Computational Science and Engineering

## 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の平成 7 年度から平成 11 年度にわたる 5 年間の研究開発実績について事後評価を実施するために、「計算科学技術専門部会」を平成 12 年 12 月 4 日に設置した。

計算科学技術専門部会は、7 名の外部専門家で構成され（部会長：小林敏雄・東京大学教授）、平成 12 年 12 月 27 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後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 5 日に「計算科学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計算科学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)

**計算科学技術専門部会評価結果報告書**  
**(平成 12 年度事後評価)**

平成 13 年 3 月

日本原子力研究所

研究評価委員会

計算科学技術専門部会

## 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 事後評価対象研究開発課題	1
2.3 専門部会開催	1
2.4 評価項目及び評価基準	2
3. 計算科学技術推進センターの実績の概要	3
3.1 主要課題領域の構成、当初の達成目標及び得られた成果	3
3.2 所内外の研究協力	7
3.3 研究資源の実績	8
4. 事後評価結果	9
4.1 項目別評価	9
4.2 その他の全般的な所見	14



## 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 Result Evaluation .....	1
2.3 Ad Hoc Review Committee Meeting .....	1
2.4 Items and Criteria for the Evaluation .....	2
3. R&D Achievements at Center for Promotion of Computational Science and Engineering .....	3
3.1 Objectives and Achievements of R&D Subjects .....	3
3.2 Cooperation with Organizations inside and outside JAERI .....	7
3.3 Allocated Resources .....	8
4. Result of the Evaluation .....	9
4.1 Item-wise Evaluation .....	9
4.2 Other Comments .....	14

## はじめに

研究評価委員会計算科学技術専門部会は、計算科学技術推進センターの平成7年度からの5カ年の研究開発実績を事後評価するため、平成12年12月から平成13年3月にかけて評価活動を実施した。

原研の高度計算科学研究分野については、平成10年度に当研究評価委員会の総括的中間評価を受けている。今回の事後評価対象期間は、平成7年度から平成11年度である。事後評価の視点とは、研究評価委員会の本専門部会実施要領にあるように、①当初計画で予定した課題の目標の量的、質的な達成度、②研究実施に係わる管理・運営の適切性、③得られた成果の公表や利用の状況の適切性、④事前評価を受けた現在の研究開発の継続、展開の妥当性、などである。当専門部会としては、昨年度に平成12年度～16年度の研究開発計画の詳細についての事前評価を行っているので、研究開発が全体としては過去の活動と成果・知見が現在及び今後の活動として継続、発展しているとの認識の下に、今回の事後評価に臨んだ。

本専門部会の審議においては、研究開発担当部署より提出された事後評価用資料に基づき実施責任者による研究開発経過と結果の内容について説明を受け、更に追加の質疑を行い、その後、それに基づく各委員による個別評価を得た。ついで、上記の事後評価の視点に沿ってそれらを集約し、研究開発課題に対する全体的な評価結果としてまとめた。報告書本文には、多様な意見、提言をできるだけ取り入れている。

本専門部会としては、この事後評価の結果が、現在取り組まれている高度計算科学研究分野の研究活動の運営に反映し、お役に立てていただくことを願っている。

おわりに、専門部会委員各位には短期間に集中した活動へのご協力対しここに深甚なる謝意を表したい。

平成13年3月5日  
計算科学技術専門部会  
部会長 小林 敏雄

## 総合所見

### 1. 計算科学技術推進センターの研究開発の実績の概要

#### 1) センターの役割と主要研究開発領域の構成

センターでは研究・業務を4主要課題領域、(1) 並列処理基盤技術の研究開発 (2) 応用分野の並列計算手法の開発、(3) 地球シミュレータ用ソフトウェア開発 (平成9年度に開始)、(4) 情報システムの運用・管理とOA化の推進、として実施した。

各課題領域の研究・業務課題における研究開発の主要な成果は、以下の通りである。

#### 2) 主要課題領域の研究実績

##### (1) 並列処理基盤技術の研究開発

- ・並列処理基本システムの研究開発 (S T A基本ソフト第1版を平成9年度に、第2版を10年度に完成させ、国内外の13研究機関に配布し、実装。一部の商品化を準備。メタコンピューティング技術開発研究を実施。)
- ・並列処理支援技術の開発 (異機種並列計算機性能評価法モデルを開発。実時間可視化並列コンピュータ利用支援ツールを開発し、9研究機関に販売済み。分散メモリ型並列計算機用大規模メッシュ生成システムを開発し、商品化を協議中)
- ・並列処理技術推進計画の管理 (ソフトウェア研究開発公募制度を平成9年度から実施し、3年間で39公募研究を支援。ドイツ情報処理研究所 (GDM) 等と国際協力を推進、及び並列計算機の利用技術の普及として、講習会を実施 (延べ受講者数190名))

##### (2) 応用分野における並列計算手法の研究開発

- ・並列計算法の研究開発 (①並列数値計算ライブラリ PARCEL を完成し、公開し、国内外の39機関にて使用中。②直接シミュレーションモンテカルロ法、分子動力学法等の応用プログラムにおいて並列化手法の開発及び並列性能評価を実施)
- ・原子力分野における計算科学の研究 (「原子力基盤クロスオーバ研究第2期と同第3期」を含む) (粒子系シミュレーションでは、レイリー・ベナール遷移過程に直接シミュレーションモンテカルロ法を用い、熱伝導・熱対流遷移点、3次元熱対流パターンを予測。連続系シミュレーションでは、第2種超伝導体の磁束ダイナミクスを予測する手法を確立し、また流体乱流でのシート状渦の巻き上がり、渦の合体等渦の発生と成長の過程を解明。)

##### (3) 地球シミュレータ用ソフトウェア開発 (平成9年度から開始)

- ・地球シミュレータ用応用ソフトウェアの開発 (酸性雨モデル STEM(アイオワ大学開発)の大気化学反応モデルをベクトル並列化により高速化。また、放出源の短時間推定を実証。大気と海洋の相互作用を考慮するネットワーク計算に着手。)
- ・地球シミュレータ用支援技術の開発 (ポスト可視化システム、メッシュ生成システム、数値計算ライブラリの一部二次元版等を開発。)

##### (4) 情報システムの運用・管理とOA化の推進

- ・情報システムの運用 (12大型計算機システム最新機種に交換、整備、ネットワークの高速化、接続機器の更新・整新、整備、西暦2000年問題に対処、等)

- ・ 計算機システムの技術開発（原子力コードの開発・改良・整備・高速化、等）
- ・ OA システムの整備・開発と運用（各種会計、資産管理等の作成、変更等、及び WWW による事務管理支援状況の整備、等）

### 3) 研究実施体制の実績

各主要課題の担当グループにおいてそれぞれ所外機関、所内組織との協力・連携を図った。特に、並列処理基盤技術の研究開発においては、STA 基本ソフトの外部機関での利用と普及のため、国内及び国外の国研、大学、民間研究機関等と協力した。

### 4) 研究資源の実績

- (1) 研究資金：平成 7～11 年度の総額は約 323 億円であるが、この内、全事業所の計算機システムの運転管理等約 299 億円、研究費は約 21 億円である。
- (2) 人員：職員が 5 年間で 200 人で、うち研究開発が 70 人、研究支援が 130 人である。研究開発での人員不足を業務内容の区分を考慮して外部委託を多数実施した。

## 2. 各主要課題領域の事後評価

### 1) 並列処理基盤技術の研究開発

STA 並列処理基本システム第 1 版（平成 8 年度）、第 2 版（平成 10 年度）を開発した。これらは、一部実用化されており、世界でも最高水準にあるソフトウェアと評価できる。平成 7 年度から専任担当者約 15 名での成果として、当初の目標を十分に達成している。

並列コンピュータ利用支援ツールに関しても、実時間可視化システム、分散メモリ型並列計算機用メッシュ生成ソフトウェア及び並列性能評価ツールを開発し、実用的にも利用されつつある。こうした業績は、科学技術計算分野における貢献度はきわめて高い。

研究運営・管理は全般的に優れていた点として、研究課題を段階的に展開し、また、研究者が少ない中で外注を使い、効率よく進めたこと、さらに国内外の研究機関（ドイツ情報処理研究所（GMD）との提携など）、大学との共同研究等も順調に進めたことが挙げられる。

並列科学技術環境と並列コンピュータ利用支援ツールに絞込み研究を実施したことは妥当である。現在の予算人員の中で次世代並列計算機概念設計にまで手を広げていたら研究全体が中途半端になった可能性が大きい。

### 2) 応用分野の並列計算手法の研究開発

本計画の初期としては非常にインパクトのある計画であり、並列基本ライブラリ「Parcel」を開発し公開し、日本のこの分野のレベルを挙げることに貢献したことは評価できる。ベクトル化と並列化の両方をサポートしている汎用ライブラリは地球シミュレータなど日本の HPC のために必要であり、その開発は意義が深い。応用コードでの性能評価はタイトバインディング分子動力学法のみであり、連立方程式、FFT等の並列ライブラリの機能は評価されていないが、当初の目的の基本的な点は達成されている。

限られた人員、予算内での研究運営、管理に苦心したようである。

応用コードによる性能評価および複雑現象の解明に関しては、どこに集中して研究を行うのか、当面の最終目標が何なのか、研究テーマの位置づけをより明確にする必要があっ

た。

### 3) 地球シミュレータ用ソフトウェア開発

平成9年度に開始されてから間もないので、現在の研究進捗状況は妥当であると言える。

並列計算機を利用し、酸性雨物質の大気化学反応モデルの高度化、放射性物質等の放射源推定機能の開発では、プログラムの大幅な速度向上を達成していることは評価できる

なお、地球シミュレータ用ソフトの開発は膨大なプロジェクトであり、本センターでの担当部分が全体の中でどう位置づけられるか、全体の中での進行経過などが分かりにくい。地球シミュレータ用ソフトの開発におけるセンターの実施内容と経過については、専門部会委員の理解が分かれている。いずれにしても今後、さらに連携・協力を強化する必要がある。

また、全体としては、開発目標に対し研究担当者の数が不十分である。

### 4) 情報システムの運用・管理とOA化の推進

多種の並列処理マシンの運転管理は非常に困難であるが、我が国最大の計算科学技術用計算機システムで効率的な利用促進を目指しよく努力されたと評価できる。また管理業務の合理化のため、IT技術の積極利用も高く評価できる。

研究協力、外注、講習会などを通じた計算科学技術関係の人材育成の効果は大きく、この点の貢献も地味ではあるが、過小評価すべきでない。

## 3. 計算科学技術推進センター全般についての今後の研究運営について

- 1) センターは平成11年度までは科学技術庁における高度計算技術推進の母体としての中核的役割を果たしてきた。これからは文部科学省のもとで、任務をどう位置付けるかは重要な課題である。今後は、自分だけが中核であるということではなく、他の国立研究所や大学等と密接な連携を持ちつつ、この分野の発展に寄与することが期待される。
- 2) センターが直面する最大の課題は、開発済みの優れたソフトウェアを広く普及することである。公的機関の研究成果を民間に技術移転することの重要性は科学技術基本計画で指摘されているところであり、計算科学技術分野でのモデルケースを作るべきである。
- 3) 国費を使つての研究開発の成果物は、我が国では「国家のもの」になるが、早急に欧米のように「国民のもの」とする必要がある。この点に関しては、次第に状況が変わりつつあることから、当研究所もその方向で動いていただきたい。

## 4. 研究評価（事後評価）について

- 1) 自己評価として研究活動成果を評価する際に、対象の広さ（応用範囲の広さ）を強調しているように見えるが、深さ、レベルの高さでの評価に欠けている印象を受けた。研究成果の位置づけとして、補足説明資料で多少修正されてはいるが、「世界一」とか「世界に類を見ない」というような自己評価が多すぎる。限られた人員で活動を担っているから、全てで世界一の成果が出るはずもなく、それを評価の基準にするわけでもない。自己評価においては、自分たちの成果の客観的な位置づけを把握するように努めるべきである。

2) 評価用資料の改善について何点か挙げる。

(1) 研究資源の妥当性の評価には組織図と氏名を含む人員表が提示されるべきで、それがないと全体像をつかみ難い。補足説明資料によって、本資料に比べて改善されたが、充分ではなかった。

(2) 業績・実績に対する客観的な評価のために、先ず、業績・実績として記述されていることが、論文などとして外部に発表された業績なのか、評価用本資料の本文中に文献を引用するなど、判別できるようにすべきである。

(3) また、業績・実績の内、内部の人がどこまで行い、外部にどこを委託したのか明確でない。また、文献でも著者が内部の人間なのか、外部の人間なのかが判別できない。

3) 一般論であるが、新原子力長期計画にうたわれているように、多数の研究者を集めて行うプロジェクト研究については、強いリーダーシップが求められている。研究評価の点から見ても、原研としてのプロジェクトリーダーを育成する必要がある。すなわちリーダーの資質の評価方法を考案すべき段階にあると思われる。

## 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、平成11年度に終了した計算科学技術推進センターの研究開発課題について、研究評価委員会計算科学技術専門部会において研究開発結果の事後評価を行った。

## 2. 評価方法

### 2.1 専門部会の構成

部会長：小林 敏雄 東京大学生産技術研究所 教授  
専門委員：岩崎 洋一 筑波大学 副学長  
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  
小池 秀耀 (株)富士総合研究所計算科学技術研究センター所長・理事  
島崎 眞昭 京都大学大学院工学研究科 教授  
土居 範久 慶応義塾大学理工学部 教授

### 2.2 事後評価対象研究開発課題

事後評価対象研究開発課題は計算科学技術推進センターの全ての研究開発課題である。この研究開発は以下の4つの主要課題領域から成る。

- 1) 並列処理基盤技術の研究開発
  - ・ 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）
  - ・ 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）
  - ・ 並列処理技術推進計画の管理（並列処理計画管理室）
- 2) 応用分野における並列計算手法の研究開発
  - ・ 並列計算法の研究開発（並列計算法開発グループ）
  - ・ 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）
- 3) 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）
- 4) 情報システムの運用・管理とOA化の推進
  - ・ 情報システムの運用（情報システム管理室）
  - ・ 計算機システムの技術開発（同上）
  - ・ OAシステムの整備・開発と運用（OA化推進室）

### 2.3 専門部会開催

- 1) 開催月日 : 平成12年12月27日（水）
- 2) 開催場所 : 富国生命ビル 28階 中会議室

### 3) 議事次第

- (1) 専門部会の審議について
  - ・ 部会長挨拶
  - ・ 審議の進め方
- (2) 計算科学技術推進センターの研究開発課題（説明及び質疑）  
（説明者：秋元計算科学技術推進センター長）
- (3) 専門部会打ち合わせ
  - ・ 説明結果について
  - ・ 今後のとりまとめについて

## 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、下記の評価項目、評価の視点、評価の基準に従って、評価を実施した。

### 1) 項目別評価

- (1) 評価項目及び評価の視点（「 」は評価の視点）
  - (a) 研究開発課題の目的達成度  
（「当初の達成目標に対する充足度」）
  - (b) 研究開発実施経過の妥当性  
（「研究の展開、研究資源の活用、原研内外との連携・協力の実施等」、あるいは、必要に応じて、「研究開発の成功・不成功の要因の分析、把握」）
  - (c) 成果の波及効果の把握・普及  
（「成果の公開・発表状況、プロジェクト等への直接的な貢献、他の科学技術分野への貢献、波及効果の有無」）
  - (d) 将来への研究開発の展開  
（「次期5ヶ年研究開発計画の立案への効果、一般科学技術的な意義、効果等」）
- (2) 評価の基準

上記の1)の項目別評価に対して5段階評価を行う。

なお、5段階評価は、5点満点で、5点が「優れている」、4点が「やや優れている」、3点が「普通」、2点が「やや劣っている」及び1点が「劣っている」の評価を意味する。

### 2) 全体的な所感、問題点、提言等



### 3. 計算科学技術推進センターの実績の概要

#### 3.1 主要課題領域の構成、当初の達成目標及び得られた成果

計算科学技術推進センターでは、平成7年度から平成11年度において次の4つの主要課題領域における研究・業務を実施した。

- 1) 並列処理基盤技術の研究開発
- 2) 応用分野における並列計算手法の研究開発
- 3) 地球シミュレータ用ソフトウェア開発（平成9年度から開始）
- 4) 情報システムの運用・管理とOA化の推進

これらの主要課題領域毎の当初の達成目標及び得られた成果を以下に記す。

#### 1) 並列処理基盤技術の研究開発

##### 達成目標

##### 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）

単一の並列計算機から複合並列計算機環境において、言語表現から計算結果に至るまで実時間で任意に利用者が介入し、並列プログラムを実時間で変更修正可能なシステムを開発することにより、並列計算機利用者の「途切れの無い思考」を支援する。

##### 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）

各種並列計算機の性能評価を行うとともにその有効利用に必要なソフトウェアツールの開発を行い、並列処理の普及を目指す。また、次世代並列計算機の概念設計を行う（本課題は平成10年度からの地球シミュレータ開発に移行）。

##### c) 並列処理技術推進計画の管理（並列処理計画管理室）

科学技術庁傘下の関連機関及び法人等外部機関と並列処理共通基盤技術開発に係る連携を図りつつ、並列処理技術開発推進計画の業務調整と管理を行う。また、並列処理技術のための複合並列計算機を運用する。

##### 得られた成果

##### a) 並列処理基本システムの研究開発

##### (1) STA基本ソフトの開発と並列計算機への実装：STA基本ソフトの開発

①平成8年度：第1版の完成と評価。②平成9・10年度：第2版の完成（複数並列計算機のネットワークを介した連携への拡張を含む）。③国内外13研究機関へのSTA基本ソフトの配布と実装。STA基本ソフトの一部は商品化の予定。

(2)メタ・コンピューティング技術の開発：異機種間通信ライブラリ基盤のメタ・コンピューティング技術開発研究の展開、ITBL構想の技術的基盤を提供。

##### b) 並列処理支援技術の開発

##### (1)並列性能評価法の研究・開発：

①異機種並列計算機性能評価のための評価モデルの考案し、分子動力学等各分野の代表的なコードからなるベンチマークシステムを整備し、同種コードの並列

- 計算機選定データとして Web にて公開。
- ②並列コンピュータ利用支援ツールの開発
- (2)並列コンピュータ利用支援ツールの開発：
- ①実時間可視化システムを開発し。本システムについては、メーカーの製品化を支援し、現在までに、9 機関に販売。
- ②分散メモリ型並列計算機を使用するメッシュ生成システム (SR2201/64PE で 240 万節点・1400 万自由度) を開発。現在、商品化を協議中。
- ③異機種に移植可能な性能評価用ツール KMtool を開発するとともに、利用インタフェースの標準化仕様を提案し、既に 4 社の並列計算機に採用。
- (3)次世代コンピュータの概念設計：量子計算専用機の実現可能性について検討。
- c) 並列処理技術推進計画の管理
- (1)ソフトウェア研究開発公募制度の運営：公募研究 39 件の採択と実施。  
平成 9 年度 13 件、平成 10 年度 12 件 (新規：3 件、継続：9 件)、平成 11 年度 14 件 (新規：6 件、継続：8 件)、特許出願 1 件。
- (2)計算科学分野における国際協力の推進：ドイツ情報処理研究所 (GDM) と研究協力を実施。
- (3)並列計算機の利用技術の普及：利用向け講習会を実施 (延べ受講者数 190 名)。

## 2) 応用分野における並列計算手法の研究開発

### 達成目標

- a) 並列計算法の研究開発 (並列計算法開発グループ)
- 代表的な応用プログラムに頻繁に出てくるルーチンに対する並列化プログラムを作成し、並列数値計算ライブラリを構築し、公開する。また、構築した並列ライブラリを実際の応用コードで性能評価し、高度化を図る。
- 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)
- 粒子及び連続体モデルによる複雑現象の解明として、粒子系シミュレーションでは、ミクロな立場からマクロレベルの現象論的法則の説明、連続系シミュレーションでは、ナビエ・ストークス方程式などの基本方程式による直接数値シミュレーションによる複雑現象の再現を目指す。

### 得られた成果

- a) 並列計算法の研究開発
- ①多機種計算機用並列数値計算ライブラリ PARCEL を完成し、公開。国内外の延べ 39 の研究機関にて使用中。
- ②直接シミュレーションモンテカルロ法、分子動力学法、格子ボルツマン法、差分法等の応用プログラムにおいて並列化手法の開発及び並列性能を評価。特に、タイトバインディング分子動力学計算において PARCEL の利用により使用粒子数のオーダーの計算量減少を確認。
- b) 原子力分野における計算科学の研究(複雑現象の解明)

## ①粒子系シミュレーション

- イ) レイリー・ベナール遷移過程に直接シミュレーションモンテカルロ法を用い、熱伝導・熱対流遷移点、3次元熱対流パターンを予測。
- ロ) 3次元平衡分子動力学法を用いて固体アルゴンの熱伝導率の温度依存性を導出。

## ②連続系シミュレーション

- イ) 第2種超伝導体において、任意の磁場及び電流のもとで磁束ダイナミックスを時間依存ギンツブルグ・ランダウ方程式の直接シミュレーションにより予測する手法を確立。これにより層状等複雑な構造を持つ高温超伝導体中の磁束が階段状になること、磁束の欠陥によるピンニング機構を解明。
- ロ) ナビエ・ストークス方程式を大規模直接数値シミュレーションすることにより流体乱流においてシート状渦の巻き上がり、渦の合体等渦の発生と成長の過程を解明。

## 3) 地球シミュレータ用ソフトウェアの開発

達成目標

- a) 地球シミュレータ用応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）

大規模数値シミュレーションモデルによる高精度の環境汚染予測を、合理的な計算時間で可能にする。そのため、酸性雨物質の大気化学反応モデルの高速化、放射性物質等の放出源推定機能の開発、東アジア域の大気・海洋環境モデルの高速化を行う。

- b) 地球シミュレータ用支援技術の開発（同上グループ）

地球シミュレータ用支援技術の開発では、これまで当センターで開発した、基盤ソフト（メッシュ生成システム、実時間可視化システム、並列数値計算ライブラリ、STA 基本ソフトなど）を拡張、発展させ、大規模並列、大規模データ、超高速地球シミュレータ用に整備・開発を行う。

得られた成果

- a) 地球シミュレータ用応用ソフトウェアの開発

- ①酸性雨モデル STEM(アイオワ大学開発)の大気化学反応モデルをベクトル並列化し、従来の34倍の計算速度を達成。
- ②膨大な試行錯誤計算が必要となる放出源推定を、並列計算機を利用して短時間に達成。(例：27倍の計算速度)
- ③異機種で計算機上で大気モデルと海洋モデルを実行し、境界条件をネットワークで授受することで大気と海洋の相互作用を考慮するネットワーク計算に着手。

- b) 地球シミュレータ用支援技術の開発

- ①地球シミュレータ用ポスト可視化システムとして、並列画像生成モジュール、結果の動画ファイル出力モジュール、及びズーム用可視化シナリオ機能を開発。

- ②地球シミュレータ用メッシュ生成システムでは6面体要素生成機能、6面体を保持したまま密メッシュから粗メッシュに接合する機能、地盤構造解析コード（理研で開発）とのインターフェイス（入出力）機能等を開発。
- ③数値計算ライブラリの開発では反復法による連立一次方程式解法のプロトタイプ、高速フーリエ変換の二次元版まで完成。
- ④インタフェースソフトの開発では、並列プログラム GUI を開発するとともに、ネットワークを介してファイル管理システムへ大容量データを転送する高速通信ライブラリを実装。

#### 4) 情報システムの運用・管理と OA 化

##### 達成目標

##### a) 情報システムの運用（情報システム管理課）

研究所全体の原研計算機システム及びネットワークの整備・運用を技術革新に合わせて、効率的に実施する。また原研プログラム等を適切に管理するとともに効率的な利用促進策を検討する。

##### b) 計算機システムの技術開発（同上課）

原子力コードの開発整備支援、コンピュータ利用技術の開発・整備、及び計算機システムの性能評価を効率的に実施し、利用者の便宜に供する。

##### c) OA システムの整備・開発と運用（OA 化推進室）

所内 OA 化推進委員会に諮りつつ所内 OA 化推進に係わる各種計画を企画、立案、所内 OA システムの整備・開発及び運用・保守管理、及び OA 機器整備・利用者支援を行う。

##### 得られた成果

##### a) 情報システムの運用

- ①東海研、那珂研、東京（中目黒）関西研に設置されている現用 1 2 大型計算機システムを、計算負荷に適合した最新機種に交換、整備し、利用に供し、統一かつ簡易的に利用、運用ができる環境整備を実施。また、原研ネットワークに関して、高速化、接続機器の更新・整新、整備を実施。
- ②東京地区の複合並列計算機システム（スーパーコンピュータ 5 台）と関西研究所の超並列計算機システム（同 2 台）を導入・整備（平成 7 年度）し、また汎用計算機 3 台を従来型の汎用計算機 1 台、汎用計算サーバ 1 台及び那珂地区実験解析・DBサーバ 1 台に交換（平成 8 年度）し、それらの運用を実施。
- ③ネットワーク運用管理では、最新のセキュリティ、故障診断、Gigabit Ethernet 等の高速ネットワーク技術等を導入・評価し、原研の要求に応じて適用。
- ④西暦 2000 年問題について、企画室と連携し、所内各機器の問題点・対策についてのメーカ調査を実施し、かつ適切に対処。
- ⑤原研プログラム等の管理に関して第 1 種指定プログラム等 79 件、第 2 種指定プログラム等 53 件、一般プログラム等 714 件の合計 846 件を登録・運用。また、

原研プログラム等検索システム (PRODAS) の情報をインターネットアクセスを整備し、所内外に供用。

b) 情報システムの技術開発

- ①原子力コードの改良・整備等を年平均約39件行い、各部門の研究推進と大型計算機の効率的利用に貢献。また、画像サーバの導入整備を行うとともに、ステレオ画像の新しい処理方法を開発。
- ②大型計算機システム及びネットワークの利用を電子申請できるようにし、ユーザと運用担当者の省力化を実現。
- ③システム性能評価では導入機のベンチマークテストを実施し性能評価を実施。原研ホームページの整備・支援を実施。

c) OA化システムの整備・開発と運用

- ①OA化推進委員会で現状把握と計画の見直し（平成7、8年度）を行い、アドホック委員会で（9年度）具体化すべきOA化推進事項と業務分担を明確化。
- ②OAシステムの整備等では予算会計、企業会計、管理会計、契約・納期管理、固定資産、共同管理等の作成、変更等を実施。またグループウェアの導入、WWWによる事務管理支援状況の整備、意志決定支援における人事、予算などの経営資源情報を整備。
- ③OA機器等の整備では全事務部門に共用パソコンとプリンタ（7年度）を、全事務系職員にパソコン整備（8年度）を実施。また、これらの更新と12年度更新計画を立案。OAサポート講習を15講座に拡大し、5年間の延べ回数626回、延べ受講者2,276名。

## 3.2 所内外の研究協力

### 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では、特に、STA全体を（財）電力中央研究所へ提供し、STAの構成要素である異機種間通信ライブラリ Stampi を、大学へ2件、国立研究所へ2件、特殊法人へ1件、民間へ2件の国内合計8件、同じく国外へ5件（ドイツ情報処理研究所（GMD）等）提供した。
- b) 並列メッシュ生成ソフトの開発では、原子力コード研究委員会専門部会で各方面の専門家の助言を得るとともに、国研及び民間企業11機関との共同研究、7大学との協力研究のもとに開発を行った。多原理統合型シミュレーションに関しては、航技研との共同研究を進めつつ、異機種並列分散処理を実現した。並列実時間可視化ソフト、構造格子メッシュ生成ソフト、並列ベンチマークコード群は16機関と連携し、利用されている。

国研、大学、企業との研究協力を積極的に進め、特に、平成11年度には、電中研、電総研、金材研、理研、航技研、無機材研、その他9機関との共同研究を継続し、19大学との協力研究を実施するなどした。

## 2) 応用分野における並列計算手法の研究開発

- a) 並列数値計算ライブラリの開発では、平成7年度に原子力コード委員会専門部会で20名の専門委員の検討に基づいて開発を進めるとともに、ライブラリ利用技術に関し、国研、民間企業の5機関と共同研究、ライブラリ性能評価に関し5大学と協力研究を行った。並列数値ライブラリは、国内外の延べ39機関で利用されている。
- b) クロスオーバー研究(第II期)では、原研及び旧動燃、電総研と協力して研究を実施した。二相流に関し、(財)電中研、山形大学と研究研究を実施した。

## 3) 情報システムの運用・管理とOA化の推進

東海研、那珂研、東京(中目黒)関西研など研究所全体の大型計算機システム及びネットワークシステムの運用・管理を効率的に実施した。

### 3.3 研究資源の実績

予算(百万円)							人員(人)
年度	研究費	運転維持費	研究設備(建設費等)	その他	特別会計	合計	職員/5年
(1) 並列処理基盤技術の研究開発							
7年度~11年度	1,461					1,461	35
(2) 応用分野における並列計算法の研究開発							
7年度~11年度	286			241		527	24
(3) 地球シミュレータ用ソフトウェアの開発							
7年度~11年度	358					358	11
(4) 情報システムの運用・管理とOA化の推進(業務予算)							
7年度~11年度		21,551	6,392	2,032		29,974	130
総計	2,105	21,551	6,392	2,273		32,320	200

## 4. 事後評価結果

### 4.1 項目別評価

#### 1) 並列処理基盤技術の研究開発（主要課題領域 1）

##### (イ) 研究開発課題の目的達成度 (4.9)

高度な計算を実現するための最大の隘路はソフトウェア、データを並列計算機、ネットワーク上で有機的に統合化することである。このような統合化を実現する環境として並列科学技術計算環境（STA 並列処理基本システム）は自己評価どおり当初の目的は十分達成されている。

STA 並列処理基本システム第 1 版（平成 8 年度）、第 2 版（平成 10 年度）を開発した。この分野で世界最高水準のスペックのソフトウェアであり、かつ、一部実用化されており、世界的に群を抜いて優れているとまではいえないが、世界でも最高水準にあるソフトウェアと評価できる。特に、メタスケジューリングと異機種間通信ライブラリ Stampi の開発は評価できる。また、GRID などのメタコンピューティング技術を開発したことは評価できる。この陣容の成果として意味のあるものである。

並列コンピュータ利用支援ツールに関しても、実時間可視化システム、分散メモリ型並列計算機用メッシュ生成ソフトウェア及び並列性能評価ツールを開発している。これらのソフトウェアのスペックは世界最高水準であり、実用的にも利用されつつある。

こうした業績は、科学技術計算分野における貢献度はきわめて高く、達成された成果の科学技術的な価値は近い将来に評価されるであろう。

##### (ロ) 研究開発実施経過の妥当性 (4.4)

実用的レベルのソフトウェアを開発するには多大な費用と時間を必要とするが、5 年間で実用的レベルのソフトウェアを開発したことは高く評価できる。

研究運営・管理は全般的に優れていた点として、研究課題を段階的に展開し、また、研究者が少ない中で外注を使い、効率よく進めたこと、さらに国内外の研究機関（ドイツ情報処理研究所（GMD）との提携など）、大学との共同研究等も順調に進めたことが挙げられる。

特に、業務協力員等による民間機関との協力・連携が目標達成に寄与したと考えられる。我が国の高度計算科学における発展のためには、民間企業のレベルアップ、人材蓄積が不可欠であることを考えれば、民間機関との連携は高く評価される。

また、次世代並列計算機（量子計算専用機）概念設計は予算的に着手できなかったが、その後の計算科学技術の進展を考えると、並列科学技術環境と並列コンピュータ利用支援ツールに絞込み研究を実施したことは妥当である。現在の予算人員の中でこれらのテーマにまで手を広げていたら研究全体が中途半端になった可能性が大きい。並列科学技術環境と並列コンピュータ利用支援ツールに絞込み研究を実施したことは適切であった。

ソフトウェア研究開発公募制度による成果は計算科学分野のポテンシャルの向上を目

指したものであるが、この分野でどう生かされたのか明確ではない。

#### (ハ) 成果の公開・発表及び活用の実績の程度 (4.0)

平成 10 年度の間評価でも指摘されているように、開発されたソフトウェアが利用されるかが、最大の評価指標である。この点から考えると、STA、実時間可視化システム、メッシュ生成システム、並列ベンチマークテスト・システムを公開し、他の研究機関等で使用されていることは高く評価できる。さらに、一部のソフトウェアは商品化に至っている。これは、公的資金で開発された計算科学技術用ソフトウェアで実用的に広く普及したものがほとんどない我が国の現状からすると、成果の公開・発表及び活用という点できわめて高く評価できる。産業界への貢献、計算科学技術に関する波及効果は高い。当然のことながら、石川賞の受賞など社会的にも評価されている。

他方、このような実用的システムの開発は、開発期間がかかるものであり、多数の論文を発表できるものではない。現段階では、論文誌論文、国際学会等での発表は少ないが、今後を期待する。

#### (ニ) その後の研究開発への展開との関係の検討 (3.9)

Stampi 等の開発の研究成果をさらに高度化していくという次期研究計画は基本的には妥当である。新たに ITBL 計画への展開も図られており、整合性はある。

STA 等の実用的ソフトウェアを 5 年間で開発したことは重要な成果であるが、実際に重要なのはこれからである。この観点から次の 3 点を指摘しておきたい。

第 1 は、良く知られているように Global Computing の主目標はインターネット上の単一 MPI 空間の創生ではなく、地域分散した機関、研究者間の協力、共同作業の支援であると考えられる。次期の ITBL 構想など次期計画では、これまでやや比重の少なかったミドルウェアの開発も重要になるであろう。

第 2 は、この分野は急速に発展し競争相手も多いので、ある程度応用分野を特定して開発を進めるほうが有効であろう。

第 3 は、実用的なソフトウェアは広く普及し、資金的にも自立的に発展できるようにならないければ、成功とはいえない。我が国が実用的ソフトウェアに関して欧米に立ち遅れている原因は、この自立的な発展にまで持っていくサポートがないことによる。

高度計算科学技術分野における国の研究開発戦略として、米国における基礎研究から商品化までの一貫した戦略が参考になると考えられるので、以下に要点を記す。

すなわち、この計算科学技術ソフトウェア研究開発戦略は、ソフトウェア規模（小、中、大規模の 3 段階）とソフトウェア成熟度（開発フェーズ、コマーシャルベースの 2 段階）との関係で 3 段階研究開発が位置づけられる。第 1 段階の“基礎研究”は小規模のソフトウェアの開発フェーズである。第 2 段階の“実用的ソフトウェア開発”は中規模で開発フェーズからコマーシャルベースに該当する。最終段階は“戦略的マーケットでの実用化”である。我が国の場合には基礎研究に政策的な研究投資はなされているが、実用的ソフトウェア開発への投資が欠如しているのが実状である。こうした戦略的研究開発としての在



り方を指向することを考えるべきである。

## 2) 応用分野における並列計算手法の研究開発（主要課題領域 2）

### (イ) 研究開発課題の目的達成度 (3.9)

並列計算法及び原子力分野における計算科学の研究という本計画の初期としては非常にインパクトのある計画であり、並列基本ライブラリ「Parcel」を開発し公開し、日本のこの分野のレベルを挙げることに貢献したことは評価できる。応用コードでの性能評価はタイトバインディング分子動力学法のみであり、連立方程式、FFT等の並列ライブラリの機能は評価されていないが、当初の目的の基本的な点は達成されている。ベクトル化と並列化の両方をサポートしている汎用ライブラリは地球シミュレータなど日本のHPCのために必要であり、その開発は意義が深い。

レイリーベナール遷移過程の解明に対する貢献は認められるが、複雑現象という観点から基礎的研究としてスタートできたことと評価する。複雑現象の解明という点で、大学等、他の研究機関の研究成果と比較して同レベルと評価される。

また、原子力分野の計算科学研究は、旧科技庁のクロスオーバー研究のため、個々には推進すべきものであることは認められるが、センターとしての整合的な計画性が分かりにくい。

### (ロ) 研究開発実施経過の妥当性 (3.6)

限られた人員、予算内での研究運営、管理に苦心したようである。

応用コードによる性能評価および複雑現象の解明に関しては、どこに集中して研究を行うのか、当面の最終目標が何なのか、研究テーマの位置づけをより明確にする必要があった。

また、並列数値計算ライブラリに関してGMDとの共同研究など内外の研究機関との提携、共同研究も行われた。ただし、電子技術総合研究所などの共同研究相手との連携が必ずしも十分でなく、研究交流委員会を構成する大学等の研究者のノウハウが十分に生かされたとは言えない。

### (ハ) 成果の公開・発表及び活用の実績の程度 (4.0)

並列数値計算ライブラリは汎用性があり、国内 39 機関で使われる等、社会への還元がかなりできていると評価できる。特定の応用への適用例などが出てくると更に意義が高まる。

国際会議等での発表も、積極的で、論文も数多く発表されている。

ただし、前述したように、原子力の応用の研究については興味深い個別研究結果が出ていることは評価されるが、個別的な研究の印象が強く、学会への影響、原子力分野への波及効果は十分とは言えない。

### (ニ) その後の研究開発への展開との関係の検討 (3.7)

平成 11 年度の事前評価結果における指摘事項を踏まえ、その対応として今回の事後評価の自己評価で述べられているように、次期計画では全体として重要な研究課題に焦点を絞った計画となっており適切である。今後の展開に期待する観点から次の 2 点を指摘する。

並列計算法開発グループの研究テーマは応用問題としても、また計算科学技術の点でも挑戦的な課題であり、優れた研究計画である。並列ライブラリも世の中にいろいろ出始めており、特徴のあるものを作っていく必要がある。

地球シミュレータ規模の計算機が 2 年後には完成するのであるから、その規模の計算のための並列ライブラリ（スケーラビリティの確保）の研究の重要性が高い。またそのような計算規模の拡大に関しては、丸め誤差、演算精度（浮動小数点ビット数の問題、4 倍精度問題）などの基礎的な検討も必要であろう。

さらに、数値実験技術開発グループの課題は計算科学技術の重要課題である。しかしながら、これらのテーマは原理的、根本的問題であり、これらの研究で短期間に画期的成果をあげることは困難を伴う。研究の実施段階で、集中化、目標の明確化を行うことが重要であろう。

### 3) 地球シミュレータ用ソフトウェアの開発（主要課題領域 3）

#### (イ) 研究開発課題の目的達成度 (3.8)

地球シミュレータ関連では、1) 大気、2) 海洋、3) 地殻、の 3 大分野がある。目標 a) 地球シミュレータ用応用ソフトウェアの開発は 1)、2) に関連し、目標 b) 地球シミュレータ用支援技術の開発のうち、メッシュ生成などは 3) に関連している。この研究開発は平成 9 年度に開始されてから間もないので、目標の達成は部分的である。但し、並列計算機を利用し、酸性雨物質の大気化学反応モデルの高度化、放射性物質等の放射源推定機能の開発では、プログラムの大幅な速度向上を達成していることは評価できる。

共有メモリのベクトル並列機（ノード）を結合した地球シミュレータへの最適マッピングは、今後の課題である。

また、地球シミュレータ用ソフトの開発は膨大なプロジェクトであり、本センターでの担当部分が全体の中でどう位置づけられるか、全体の中での進行経過などが分かりにくい。示されたテーマとその成果はそれなりに興味深いのが、地球シミュレータのようなきわめて超並列なマシンのためのソフトウェア開発としては余りにも計算機の規模が小さいのではないかと指摘しておきたい。

#### (ロ) 研究開発実施経過の妥当性 (3.3)

実質研究期間が短く、段階的に展開するのが困難な面があったと推測される。

地球シミュレータ用ソフトの開発におけるセンターの実施内容と経過については、専門部会委員の理解が分かっている。大方は前述のように、本センターでの担当部分が全体の中でどう位置づけられるか、全体の中での進行経過などが分かりにくい、としている。この立場では、地球シミュレータ用ソフト開発は、旧科学技術庁の科学振興調整費で大型のプロジェクトとして遂行された。それとの関連、全体の中での位置付けが必ずしもはつき

りしない、としている。例えば、メッシュ生成システムの開発については、RIST や大学で行なわれているものとの関係がわかりにくい、とする。

他方では、原研の研究テーマそのものはセンター独自のものであり、並列処理基盤技術等の研究成果を生かすものである。他機関との役割分担・連携については留意しているようであり、他の研究機関との役割分担は明確である。しかしながら、さらに連携・協力を強化する必要がある、としている。

全体としては、開発目標に対し、研究担当者の数が不十分である。センターとしてはソフト開発はルーチン的な業務を外注としているが、体制としてプロジェクト指向であった可能性がある。計画途中であるが、目標を完全に達成するには人的資源で無理があると言わざるをえない。

#### (ハ) 成果の公開・発表及び活用の実績の程度 (3.6)

研究の初期段階であり、成果が少ないことはやむを得ない。その中でも論文発表等は十分実施されている。ソフトウェア公開による学会産業界への影響、波及効果は大きいと考えられる。平成 12 年度に発表した三宅島噴火の放出源解析は目に見える成果の公表であった。

また、地球シミュレータへの社会の認知は進んだ。

#### (ニ) その後の研究開発への展開との関係の検討 (3.7)

前述のように、このプロジェクトで開発するソフトの地球シミュレータ用ソフト全体での位置付けをもっと明確にする必要がある。

地球シミュレータ・ハードウェアの完成と共に多くの成果を達成することを期待する。

### 4) 情報システムの運用・管理と O A 化の推進 (主要課題領域 4)

#### (イ) 運転管理業務の実績 (4.6)

多種の並列処理マシンの運転管理は非常に困難であるが、我が国最大の計算科学技術用計算機システムで効率的な利用促進を目指しよく努力されたと評価できる。また管理業務の合理化のため、IT 技術の積極利用も高く評価できる。

#### (ロ) 資源配分の実績 (3.8)

全般的には合理的に行なわれたと認められる。

全システムの運用管理部門がメーカ派遣の SE と派遣請負契約による人員で構成されている。日常の運転についてはこれでよいが、ユーザを教育し、ユーザに研究活動で得られた知見を普及していくためには、何らかの工夫が必要であろう。

また、先進的な管理、運用方式の導入の際は研究者の関与が必要であるが、定常化すれば研究者の必要性が無くなる。移行のタイミングは微妙であると考えられるが、研究者の負担が過重にならないように常に配慮する必要がある。

さらには、幾つかの計算機システムはすでに古くなっており、早急に最新の機器に更新

する必要がある。

#### (ハ) 人材育成及び担当者の士気確保の措置の実績 (3.7)

研究協力、外注、講習会などを通じた計算科学技術関係の人材育成の効果は大きく、この点の貢献も地味ではあるが、過小評価すべきでない。

管理システム、OA化システムの開発整備について担当部門として積極的に行っているようであるが、士気確保は大変困難な課題である。

なお、ペーパーレス化には上層部、役員の認識の深化が不可欠である。

#### (ニ) 科学技術の進展への寄与、成果の他分野への波及効果 (3.7)

我が国最大の計算科学技術用計算機システムを適切に運用しており、我が国の計算科学技術の発展に貢献している。

ただし、現在の体制では、各ユーザがセンターのマシンからサービスを受けることが主である。他の分野に寄与するとか波及効果を及ぼすとかの発想は少ないようである。

## 4.2 その他の全般的な所見

以下には、委員個別の所見を記した。

(1) 自己評価として研究活動成果を評価する際に、対象の広さ(応用範囲の広さ)を強調しているように見えるが、深さ、レベルの高さでの評価に欠けている印象を受けた。加えて、この間科学技術庁高度計算技術の中核的役割を果たしてきたかという問題については、今後の成果の発表数等で一層の改善が必要である。

(2) 先ず、評価用資料の改善について何点か挙げる。

①通常、このような評価の時の資料には組織図と氏名を含む人員表があるが、今回の資料にはそれが欠けている。このため、全体像をつかみ難い。補足説明資料によって、本資料に比べて改善されたが、十分とは思えない。人員、経費が適切に配分されているかの評価が難しい。

②業績・実績として記述されている事が、論文などとして外部に発表された業績なのかが判別できない。本文中に文献を引用するなどして対応させないと、業績・実績に対する客観的な評価が難しい。

③業績・実績の内、内部の人がどこまで行い、外部にどこを委託したのか明確でない。また、文献でも著者が内部の人間なのか、外部の人間なのかが判別できない。これからは、「評価と情報公開の時代」であるので、資料が誰の目から見ても客観的な事実に基づき、かつ分かり易いことが、これからますます求められる。

次に、これまでは「科学技術庁における高度計算科学推進の母体」との位置付けであっ

たが、文部科学省となった時点で、任務をどう位置付けるかは重要な課題であると思う。

(3) 本センターは、科学技術庁の高度計算科学技術の中核的役割を果たすことを求められたが、残念ながら一翼を担うに止まり、中核的役割には至らなかった。これは、そもそも最初の位置づけに無理があり、やむをえなかったものと思われる。今後は、自分だけが中核であるということではなく、他の国立研究所や大学等と密接な連携を持ちつつ、この分野の発展に寄与することが期待される。

本センターは研究所全体のリソースとして大きな役割を担っているが、現在のところサービスの提供という役割にとどまっており、所内各分野の研究者と共同研究を推進する体制になっていない。メインフレームやベクトル計算機が主力であった時代はそれで良かったかもしれないが、並列計算機の時代にはもっと密接な協力が必要である。

これは、センターをどう位置づけるかという根本問題であるが、中目黒を中心とした研究活動も推進されているのであるから、今やサービスセンターから「研究センター」へ発展変身させることも、一つの可能なモデルであり、考慮すべきであろう。

次に、事後評価の技術的なことであるが、センター全体の報告をセンター長一人で行うことには限界があり、やはり個々の分野の責任者の報告もあったほうがよかった。その後追加資料で多少修正されてはいるが、報告として「世界一」とか「世界に類を見ない」というような自己評価が多すぎる。限られた人員で活動を担っているのであるから、全てで世界一の成果が出るはずもなく、それを評価の基準にするわけでもない。自己評価においては、自分たちの成果の客観的な位置づけを把握するように努めていただきたい。

(4) ソフト、ネットワーク面で外注、外部からの出向研究者に依存していると思われる部分もあり、内部研究者の人数的充実育成により大きな力を注ぎ、継続的な研究開発力の維持・強化ができることさらに素晴らしい成果が出せるのではないだろうか。

並列処理を目的の1つとして研究開発を行っているので、専門化が多い情報処理学会、IEEE、ACM等の情報系の学会での論文発表・参加等を考えると研究をさらに加速できると思う。

(5) 全体的に、5年間でSTA等の実用的ソフトウェアを開発し、実際に利用される状態にまで発展させたことは高く評価できる。

今後、この成果を継続発展させ、これらのソフトウェアを自立発展できるようにしていくことが重要である。自立発展が可能となって初めて実用的ソフトウェアの評価が確立する。この観点から以下のことを述べる。

#### ①開発したソフトウェアの普及の必要性

すでに述べたように、計算科学技術推進センターが直面する最大の課題は、開発済みの優れたソフトウェアを広く普及することである。公的機関の研究成果を民間に技術移転することの重要性は科学技術基本計画で指摘されているところであり、計算科学技術分野でのモデルケースを作るべきである。このためには、以下の点が必要不可欠である。

l) 開発したソフトウェアを公開し、原則として我が国のソフトウェアベンダーに商品化の権限を無料で与える。(税金で開発したものは国民が自由に利用できるべきだとの考え)

o) ソフトウェア利用、商品化のライセンス提供は透明性を保持する。

h) 現在のソフトウェアは基礎研究から、実用化の初期段階であるから、これを商業化するまでの開発を継続する。この場合、商品化を視野に入れた開発が重要であり、開発委託等の民間機関とのパートナーシップによる研究開発が必要不可欠である。

## ②我が国の計算科学技術政策への提言の必要性

IT分野の技術的進歩は早いので、常に先端的研究開発にチャレンジしていく必要がある。例えば、米国ではIT<sup>2</sup>計画で計算科学技術の研究開発に国を挙げて取り組んでいる。この点、我が国は欧米に大きく遅れをとっている。この意味で、STAなどの計算科学技術推進センターの従来の研究を、一層、拡大強化することが我が国の計算科学技術にとって重要な課題となっている。例えば、STAをベースに複雑な現象をリアリスティックに解くためのコンピューティング環境(PSE: Problem Solving Environment)の開発に挑戦していくことが重要である。米国ではNASAのGRID、DOEのASCI計画などで、複雑現象をリアリスティックに解くためのコンピュータ環境の構築に大々的に取り組んでいる。この研究に取り組むためには、予算、人員等を飛躍的に増強する必要があり、計算科学技術推進センターの取り扱える範囲を超えると考えられるが、我が国の計算科学技術推進の中核的研究機関の一つとしては、我が国の計算科学技術全体の進め方について積極的に提言、予算要求等の働きかけをしていくことが望まれる。

(6) 平成11年度までは科学技術庁の関係の計算科学技術の推進であったが、省庁再編後の文部科学省での位置付け、他機関との協調、役割分担について、配慮が重要になると考えられる。特にネットワークやITBL関係では、情報科学研究所との役割分担などが重要と考えられる。計算科学、技術に焦点を絞ることが重要である。

(7) 国費を使つての研究開発の成果物は、我が国では「国家のもの」になるが、早急に欧米のように「国民のもの」とする必要がある。この点に関しては、次第に状況が変わりつつあることから、当研究所もその方向で動いていただきたい。

また、国費を使つてできた成果物の資産価値がゼロというとは何かということから、国費を使つて開発されたソフトをフリーソフトあるいはパブリックドメインソフトとすることが我が国においてはこれまで認められなかったが、この点においても状況が変わりつつあるので、まず、成果物はフリーにするかパブリックドメインに置くとかすることを始めていただきたい。デファクトスタンダードを目標とされるのなら、なおさらのことである。現在の原研の規約は、「使わせてやる」という感が強い。

## 計算科学技術推進センターの研究開発実績の事後評価結果

1) 並列処理基盤技術 の研究開発 (主要課題領域 1)	(イ)研究開発課題の目的達成度	4.9
	(ロ)研究開発実施経過の妥当性	4.4
	(ハ)成果の公開・発表及び活用の実績の程度	4.0
	(ニ)その後の研究開発への展開との関係の検討	3.9
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)	(イ)研究開発課題の目的達成度	3.9
	(ロ)研究開発実施経過の妥当性	3.6
	(ハ)成果の公開・発表及び活用の実績の程度	4.0
	(ニ)その後の研究開発への展開との関係の検討	3.7
3) 地球シミュレータ 用ソフトウェアの開 発 (主要課題領域 3)	(イ)研究開発課題の目的達成度	3.8
	(ロ)研究開発実施経過の妥当性	3.3
	(ハ)成果の公開・発表及び活用の実績の程度	3.6
	(ニ)その後の研究開発への展開との関係の検討	3.7
4) 情報システムの運 用・管理とOA化の推 進 (主要課題領域 4)	(イ)運転管理業務の実績	4.6
	(ロ)資源配分の実績	3.8
	(ハ)人材育成及び担当者の士気確保の措置の実績	3.7
	(ニ)科学技術の進展への寄与、成果の他分野への波及効果	3.7

# 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	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 <sup>-1</sup>
力	ニュートン	N	m·kg/s <sup>2</sup>
圧力, 応力	パスカル	Pa	N/m <sup>2</sup>
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	ジーメンズ	S	A/V
磁束	ウェーバ	Wb	V·s
磁束密度	テスラ	T	Wb/m <sup>2</sup>
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	°C
光度	ルーメン	lm	cd·sr
照射度	ルクス	lx	lm/m <sup>2</sup>
放射能	ベクレル	Bq	s <sup>-1</sup>
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<sup>-19</sup> J

1 u = 1.66054 × 10<sup>-27</sup> kg

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
バーン	b
バル	bar
ガリ	Gal
キュリー	Ci
レントゲン	R
ラ	rad
レム	rem

1 Å = 0.1 nm = 10<sup>-10</sup> m

1 b = 100 fm<sup>2</sup> = 10<sup>-28</sup> m<sup>2</sup>

1 bar = 0.1 MPa = 10<sup>5</sup> Pa

1 Gal = 1 cm/s<sup>2</sup> = 10<sup>-2</sup> m/s<sup>2</sup>

1 Ci = 3.7 × 10<sup>10</sup> Bq

1 R = 2.58 × 10<sup>-4</sup> C/kg

1 rad = 1 cGy = 10<sup>-2</sup> Gy

1 rem = 1 cSv = 10<sup>-2</sup> Sv

表5 SI接頭語

倍数	接頭語	記号
10 <sup>18</sup>	エクサ	E
10 <sup>15</sup>	ペタ	P
10 <sup>12</sup>	テラ	T
10 <sup>9</sup>	ギガ	G
10 <sup>6</sup>	メガ	M
10 <sup>3</sup>	キロ	k
10 <sup>2</sup>	ヘクト	h
10 <sup>1</sup>	デカ	da
10 <sup>-1</sup>	デシ	d
10 <sup>-2</sup>	センチ	c
10 <sup>-3</sup>	ミリ	m
10 <sup>-6</sup>	マイクロ	μ
10 <sup>-9</sup>	ナノ	n
10 <sup>-12</sup>	ピコ	p
10 <sup>-15</sup>	フェムト	f
10 <sup>-18</sup>	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、1 eVおよび1 u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のカテゴリに入れている。

## 換算表

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

粘度 1 Pa·s (= N·s/m<sup>2</sup>) = 10 P (ポアズ) (g/(cm·s))

動粘度 1 m<sup>2</sup>/s = 10<sup>3</sup> St (ストークス) (cm<sup>2</sup>/s)

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

エネルギー・仕事・熱量	J (=10 <sup>7</sup> erg)	kgf·m	kW·h	cal (計量法)	Btu	ft·lbf	eV
1	1	0.101972	2.77778 × 10 <sup>-7</sup>	0.238889	9.47813 × 10 <sup>-4</sup>	0.737562	6.24150 × 10 <sup>18</sup>
9.80665	1	1	2.72407 × 10 <sup>-6</sup>	2.34270	9.29487 × 10 <sup>-3</sup>	7.23301	6.12082 × 10 <sup>19</sup>
3.6 × 10 <sup>6</sup>	1	3.67098 × 10 <sup>7</sup>	1	8.59999 × 10 <sup>5</sup>	3412.13	2.65522 × 10 <sup>6</sup>	2.24694 × 10 <sup>23</sup>
4.18605	1	0.426858	1.16279 × 10 <sup>-6</sup>	1	3.96759 × 10 <sup>-3</sup>	3.08747	2.61272 × 10 <sup>19</sup>
1055.06	1	107.586	2.93072 × 10 <sup>-4</sup>	252.042	1	778.172	6.58515 × 10 <sup>21</sup>
1.35582	1	0.138255	3.76616 × 10 <sup>-7</sup>	0.323890	1.28506 × 10 <sup>-3</sup>	1	8.46233 × 10 <sup>18</sup>
1.60218 × 10 <sup>19</sup>	1	1.63377 × 10 <sup>20</sup>	4.45050 × 10 <sup>20</sup>	3.82743 × 10 <sup>20</sup>	1.51857 × 10 <sup>22</sup>	1.18171 × 10 <sup>19</sup>	1

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

放射能	Bq	Ci
1	1	2.70270 × 10 <sup>-11</sup>
3.7 × 10 <sup>10</sup>	1	1

吸収線量	Gy	rad
1	1	100
0.01	1	1

照射線量	C/kg	R
1	1	3876
2.58 × 10 <sup>-4</sup>	1	1

線量当量	Sv	rem
1	1	100
0.01	1	1



計算科学技術専門部会評価結果報告書(平成12年度事後評価)