

RIST Activities

(財)高度情報科学技術研究機構
理事 星 薦 雄

まえがき

今年度は、日本原子力研究所において本格的に運用が開始されたITBL(IT-Based Laboratory)の運用支援、応用ソフトウェアの開発等の協力業務を本格的に進めた。とくに東京事業所においては、戦略的基盤ソフトウェアの開発としてシステムや機種に依存せずに大規模シミュレーションを可能とする環境/HPC - ミドルウェアの開発や、人・自然・地球共生プロジェクトの一環である高精度、高速、大規模な次世代気候モデル開発など新たな開発業務を開始した。

以下に平成14年度の事業概要を述べる。

東海事業所関連(原子力関連研究情報技術の開発)

(1) 原子力コード等の開発整備

原子力関連コードの開発では、今年度も原子力、核融合、光量子科学関連のコード開発、各種データベースの整備等を引き続き進めた。新たなものとしては、SPEEDIの開発経験をもとに、稲うんかの東南アジア領域における移行挙動予測システムの構築、原子力施設のデータベースの作成などを受注する他、ITBL関連業務としては、原研で整備を進めている各種データベース、応用ソフトウェアの整備を行なった。

原子力コードの収集・提供については、今年度は新規登録69件、提供427件を超え昨年比に大幅に増加した。また、「原子力コードセンター便り」で紹介のとおり、米国オークリッジ国立研究所・放射線安全情報計算センター(ORNL/RSICC)との協力も本格的に始動し、米国の最新コードの入手が可能であることから利用者が増大している。登録申込希望

者は、「原子力コードセンター便り」に記載した申込先に連絡下さい。

(2) 原子力百科事典[ATOMICA]

今年度も新規データ作成70件、データ更新250件、用語辞書作成50語を作成し、現在のデータ登録件数は2200件を超えた。最近の利用状況は15万件/月以上となっており、原子力・エネルギー関連の情報源として定着し、広く活用されている。

(3) 電子計算機利用技術の開発及び支援

日本原子力研究所の東海・那珂地区、東京地区、関西地区の並列計算機複合システムの運用支援業務を引き続き行うとともに、ITBLシステムの運用支援を本格的に開始した。

(4) 研究情報技術の普及

平成12年度より開始した若手原子力ソフトウェア技術者(大学及び大学院に在籍する学生)の国際会議への参加支援については、米

国での同時多発テロの影響で会議への参加取止めが生じ、今年度は1名となった。原子力コードの普及活動としては「QAD-CGGP2Rの理論と利用技術」(講師：日本原子力研究所坂本幸夫氏)に関するワークショップを開催した。

東京事業所関連(計算科学技術の開発)

(1) 計算地球科学の研究開発

平成10年度より開始した振興調整費研究「高精度の地球変動現象の予測のための並列ソフトウェア開発に関する研究」は、最終年度として、地球科学の専門家との応用シミュレーションを行うことを目的に、これまで研究開発した大気海洋、及び固体地球の並列ソフトウェア群を地球シミュレータにおいて駆動させ、その検証を行った。

このため、平成14年4月からの準備を経て、8月より本格的に地球シミュレータを利用した領域気象、気候モデル等について大規模シミュレーション計算を実施した。本作業では、並列計算環境を重視した並列フレームワークの高度化、微視的雲モデル及び領域気象モデルの導入、さらに海洋モデルの付加等を行い、多様な問題解決の環境を構築した。これら成果の公開として、非静力学領域気象モデルCReSSに関するセミナー講習会(9月)を開催したほか、第5回「高性能計算機資源に向けた次世代気候モデルに関する国際会議」(3月)をイタリア国立地球物理火山研究所において開催した。

一方、固体地球シミュレーションにおいては、地球シミュレータを用いて「固体地球シミュレーション・プラットフォームGeoFEM」による地球コア(外殻部分)の電磁気解析シミュレーション、日本列島域断層モデルの大規模運動計算、断層運動の非線形挙動シミュレーション等を実施し、これまでに地球シミュレータ向けに開発してきたコードの大規模シミュレーション特性を把握し

た。これらの成果は、APEC地震シミュレーション情報交換協力機構によるACES会議(ハワイ、5月)固体地球シミュレーション成果シンポジウム(東京、3月)で発表した。また、GeoFEMは並列有限要素法コードとして産業界等への応用が期待されるため、Version5までを公開し、その利用に関するセミナーを開催した。

(2) 戦略的基盤ソフトウェアの開発

戦略的基盤ソフトウェア開発研究として、東京大学生産技術研究所の委託事業として連携し、次世代の科学技術ソフトウェアを計算機システムや機種に依存せずに大規模シミュレーションを可能とするソフトウェア環境/HPC-ミドルウェアの開発を開始した。今年度は、有限要素法についてハードウェアの相違を隠蔽したプログラム記述法を開発し、次年度以降のミドルウェア作成に備えた。

(3) 人・自然・地球共生プロジェクト

今年度から、地球温暖化に関する研究として、東京大学気候システム研究センターの委託事業として連携し、地球シミュレータ利用を前提とした高精度、高速、大規模な次世代気候モデル開発に着手した。今年度は、改良した物理過程モデル及び非静力学に基づく領域気象モデルを取入れた全球気候モデルを地球シミュレータ向けに最適化し、シミュレーション実験を行った。

(4) ITBLソフトウェア・地球シミュレータ用 応用ソフトウェアの整備・開発

平成13年度から国のIT施策として開始したITBL計画、即ち運用形態の異なる複数サイトのスーパーコンピュータを接続した広域分散処理により大規模シミュレーション、知的情報共有などを可能にする本計画において、ITBL基盤ソフトウェアの開発を継続実施した。具体的には、昨年度開発したネットワー

ク・コンピューティングに必要な基盤ソフトウェアの実供用に向けて、デモ環境の作成、インストール確認ツール、運用支援ソフトウェア等の開発を行った。

また、ITBL環境及び地球シミュレータを利用した並列応用ソフトウェアの整備・開発として、地球シミュレータ用固有値求解プログラム作成、大強度加速器の水銀ターゲットを対象とした流体構造連成解析プログラム作成、短距離相互作用分子動力学プログラムのベクトル化等を行った。

さらに、ネットワーク接続を活用し、東アジア規模で汚染物質の挙動予測を迅速に行う「数値環境システムの開発」に関して、昨年度開発したポリウム・カップリング・プログラムを、大気・海洋・汚染モデルへ実装した。

(5) その他

科学技術振興事業団よりの受託調査研究「次世代計算科学の戦略に関する研究」では、次世代計算科学におけるインターパラダイムシミュレーションの戦略性について調査研究を実施した。これに関連し8月に「DEMの21世紀」シンポジウムを開催した。また、次世代計算科学の対象としてきたナノサイエンス

&テクノロジーに関する計算科学の有効性の実証として、大規模並列、高速シミュレーションを行い、その結果を米国ナノテクノロジー2002年会議（ボストン）に発表、好評を博した。さらに、地球シミュレータ利用課題公募に「カーボンナノチューブの特性に関する大規模シミュレーションに関する研究」が認可され、8月に大規模シミュレーション計算を開始、10月には多粒子の分子動力学計算で世界最高性能5テラフロップス記録し、カーボンナノチューブの基本特性を明らかにした。本成果は地球シミュレータ利用成果発表会で報告した。なお、本研究においては、我が国の一流のカーボンナノチューブ専門家と計算科学の専門家が協力して平成14年7月に「カーボンナノチューブ・シミュレーション研究会」を結成し、大規模シミュレーション研究を進めるとともに、計算科学の有用性の相互理解に務めている。

あとがき

当財団では、今後も情報科学技術に係る調査、研究等を推進し、科学技術の発展に寄与するよう引き続き努力する所存ですので、関係各位のさらなるご指導、ご支援をお願いいたします。