

11-MD04

マルチパラメータサーベイ型シミュレーションを支えるシステム化技術に関する研究

奥田洋司（東京大学）

概要

本年度は、拠点を昨年度の 5 大学からへ東北大学、東京工業大学、九州大学の 3 つの拠点を増やし、合計 8 拠点での活動とし、実利用の展開を図った。実利用を推進するために、システム運用系のマニュアル、チュートリアル、および利用者用のマニュアル、チュートリアルを整備し、実際に 5 拠点で延べ 40 名以上に対して、講習会を開いた。また、講習会ごとにマニュアル、チュートリアルの改善を図った。また、拠点間を跨ぐ実利用拡大に伴い、改善すべき幾つかの問題ができてきたので、その状況調査をし、その問題の解消を図り、システムの利活用の推進を図った。

1. 研究の目的と意義

本共同研究の背景

15～20 年前は、シミュレーションの専門家は少なく、計算機性能も現在の 100 万分の 1 程度であり、研究のボトルネックは専ら計算時間であった。そのため、大規模シミュレーションや広域パラメータサーベイシミュレーション研究のような大容量データの生成はあり得なかったし、可視化や統計処理など各種データ処理を切り離して手動的に行っても処理時間や処理プロセスの記録も問題とならない状況であった。

しかしながら、計算機の性能向上とともにシミュレーションは、大規模化、精緻化が進み、研究のボトルネックが計算時間ではなくなってきた。その結果、シミュレーションの大規模化、精緻化が実際の研究・解析業務を全体としてみた場合に、高度化、効率化をもたらしたかさえ危ういのが現状ではないだろうか？

3 次元の時系列シミュレーションを例に考えてみよう。当然、昔は、時系列はおろか、1, 2 次元でしか計算ができなかったので、メッシュ生成やその後の可視化処理なども X-Y plot 程度で十分であり、出力結果を紙に印刷して、それを目で読み、グラフを作っても研究の進展に大きな遅れがない状況だった。また、「紙に印刷して、それを目で読み」など、一見して無駄な作業をしている間に、重大なミスを見つれたり、新たな発見があったりしたこともあるだろう。

しかし、3 次元の時系列シミュレーションの場合はどうだろうか？メッシュ生成は、格段に難しくなり、精緻な構造に対する計算の場合は、それこそ研究全時間の殆どを費やさなければならなくなる。また、定常問題であれば、渦のできる場所を細かく切るなど、ある程度の答えが分かっている状況において、メッシュを作成したが、時系列となると、メッシュ自体を動的に変動させる手法やその張替の誤差評価など新たな問題も出てくる。可視化処理においても、4 次元の情報をどう可視化すると、現象を正しく把握できるか？という根本的な問題にぶち当たる。これらに伴い、メッシュを作ったり、何か知りたい情報を得るために昔と比べて、比べ物にならないぐらい、たくさんのツールや理論を使いこなし、多段の処理を行わなければ、ならなくなってしまう。また、精緻なシミュレーションであればある程、今まで無視していた情報をシミュレーションに取り入れなければ、ならなくなってくる。例えば、初期値や境界条件、物性値、物性値のばらつきは、従来理想的な条件で計算をしていたかもしれないが、計算精度より影響度が大きくなっていくのであれば、それらの情報を入手し、シミュレーションに反映させなければならなくなる。そうしなければ、結局精緻な計算をしたといっても、現実問題では他のドミナントな現象にかき消され、無意味な計算、および、結論を導き出すことになってしまうのである。そういう問題を回避しようとするれば、現場

に赴き、初期値や物性値のばらつきデータをもたらされてきたり、ひょっとすると計測から始めないといけないかもしれない。

ここまでの背景としての話を総括しておく。現状の大規模シミュレーション、広域パラメータサーベイシミュレーション研究では、様々なツールの開発、利用習熟、多くの分野の知識、結果の処理プロセス、パラメータ把握などの様々な課題が研究者に突き付けられている。そして、それらをよく扱えない場合、現状のシミュレーションは、研究・解析業務に高度化、効率化をもたらすとは、限らず、多くの時間を消費したあげく、誤った結論を導き出してしまう可能性が高いのである。

一方、現在は、個人レベルを超えて、社会全体で考えると様々なコンピュータ、関連ツールや高度な開発環境が提供され、容易にプログラム開発やシミュレーションを実施できる環境が整いつつある。従来、シミュレーション研究を行う場合は、なんでもかんでも自分で作るしかなかった状況とは、明らかに異なっている。しかし、個人レベルで考えると他の人が作ったツールを使えたり、結果を参照できないのであれば、何も状況改善しておらず、結局、大規模化、精緻化した故の問題が増えただけで、個人への負担が大きく、シミュレーションの品質（ヒューマンエラーや操作方法間違い、適用限界を超えた適用など）は、かえって悪くなっていると考えられる。

大規模シミュレーション、広域パラメータサーベイシミュレーション研究を一人で遂行しようとする大きな困難が立ちはだかるが、計算科学分野の各専門領域で開発されたプログラムを活用し、各専門領域の専門家に相談をすることができれば困難性は大きく低減できる。実際、異分野連携や融合領域研究はそれを志向したものであり、多くの研究プロジェクトが精力的に進められている。しかしながら、双方の研究者に大きな負担が生じ、当初想定していた成果が得られないまま、競争的資金の終了とともに研究自体が終了してしまう場合も多い。実際には、研究の成果自体も離散し、大きな知的財産が喪失しまっている、つまり研究

結果の再現すら困難な場合が多いのである。

つまり、計算科学分野の各専門領域で開発されたプログラムと専門的知見という大きな知的財産があるにも関わらず、十分うまく活用できていない状況がある。かねてより、日本の学術会において多くのシミュレーションプログラムが開発され公開されている。それを使った研究実績も積み上げられている。しかしながら、必要とする研究者が実際にそれらのプログラムを十分利用できているかという面では疑問が残る。

こうした現状を解決するひとつの鍵は、2000 年前後から研究開発が進められ、現在、クラウドとして世間を席卷しているグリッド技術であると考ええる。

本共同研究の目的とアプローチ方法

各専門領域で開発されたプログラムと専門家との有効な連携を可能にする、つまり、「必要とする研究者が実際に十分利用できていない」のは、利用者環境へのプログラムの導入ハードルが高いことが大きな要因であることに注意しなければならない。現在、Googleをはじめ様々な IT 企業が各利用者環境にアプリケーションをセットアップする方式から、WebService により、Internet 側でアプリケーションを準備し、利用者はそれを利用する方式にシフトしている。この方式は、様々な利用者環境に対応する負担や維持コスト、アプリケーションの更新コストを大きく軽減することができる。既存の商用アプリケーションから学術会で開発されたプログラムまで、簡単に WebService 化が可能なミドルウェアもすでに存在し、運用実績もあり、本共同研究では、すでに運用実績のあるミドルウェアをベースに試行システムを開発する。

WebService 化の次に必要なことは、当該プログラムで計算した結果、結果評価のために行ったポスト処理、それら一連の処理、つまり処理プロセスおよびその入出力情報等の再現計算に必要な全情報が完全な形でアーカイブされ、さらに、研究者が行おうとする計算に類似した結果を検索できる仕組みがあることである。これは、WebService

を連携連動させる機構と各 WebService における設定情報および連携した WebService の情報データベース化できる仕組みがあれば実現可能である。

本共同研究は、多次元のパラメータ空間におけるマルチパラメータサーベイ型のシミュレーションにおける超大規模数値計算技術（可視化技術、数値計算アルゴリズム等）、超大規模データ処理技術（最適化技術、データマイニング技術等）、大規模情報システム関連技術（システム化技術、自動化技術、データベース化技術等）がどうあるべきかを明らかにし、その課題を解決するための機構（マルチパラメータサーベイ型シミュレーション用統合クラウドシステム）を開発、統合することを目的とする。

具体的には、上記システムを構築し、試験的運用を行うことで、上記仮説を検証するとともに、「地理的、専門的に分散した様々な分野の研究者が情報技術でスムーズにつながることで、研究の効率化と革新性が促進される」ことを確かめ、その有効性を評価することを目標とする。

本共同研究の意義

本共同研究では、不確実性を考慮した設計等の多次元のパラメータ空間におけるマルチパラメータサーベイ型のシミュレーションを実施する場合のデータハンドリングおよびそのシステム化（自動化、DB 化等）等の様々な課題を解決する機構を開発する。大学等で開発、公開されているシミュレーションプログラムおよび計算センターで導入されている市販アプリを中心にプリ、ポスト処理を含め統合的に Web ポータル化、SaaS 化を行い、これらアプリを利用する研究者が、環境設定や利用方法、利用手順を習熟しなくとも研究が遂行できる環境（マルチパラメータサーベイ型シミュレーション用統合クラウドシステム）構築を目指す。

それらにより、大学等で開発、公開されているシミュレーションプログラムの普及が飛躍的に向上することが見込まれる。また、それらの結果が自動的にデータベース化される機構を開発することで、本人による過去の結果の再参照や他の人へ

の処理手続きや結果の公開により、研究開発の信頼性と継承性を高めることも期待される。

図 1 に本研究が提唱するシミュレーション環境の概念を示す。その結果、本共同研究者の本来研究テーマである「不確実性を考慮した構造設計」、「実風洞装置と同レベルのデータ生産性、品質を有する数値風洞」、「沸騰などの発生型気液混合流の動態予測」、「実生体の複雑な形状をそのまま取り入れた構造、流体等の物理計算」のように現在、困難を極めるようなシミュレーションが実用レベルに達することが見込まれる。

また、本共同研究は、公的研究機関のシミュレーション研究のみならず、実験研究、広くは民間における研究開発全般に影響を及ぼすものであり、日本の研究開発の競争力、信頼性、継承性の向上に大きく寄与するという意義がある。

2. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

(1) 共同研究を実施した大学名と研究体制

北海道大学、東京大学、名古屋大学、京都大学、大阪大学、東北大学、東京工業大学、九州大学、同志社大学、京都芸術造形大学、宇宙航空研究開発機構

(2) 共同研究分野

超大規模数値計算系応用分野、大規模データ処理系応用分野、大規模情報システム関連研究分野
以下、より具体的な分野
流体解析、構造解析、プラズマ物理、医工連携、並列有限要素法、並列可視化、最適化、データマイニング、DB 化、CAE システム化、IT 教育、マンガ

(3) 当公募型共同研究ならではの事項など

本研究は、その目標が「地理的、専門的に分散した様々な分野の研究者が情報技術でスムーズにつながる」ことを実現するためのシステムを開発し、従来研究者に大きな負担を強いていた「大規模シミュレーション、広域パラメータサーベイシミュレーション研究のハードルを下げ、研究の効率化と革新性を促進する」ことを実証することであり、その意味で、国内の

様々な拠点の計算資源、ソフトウェア資源を利用し、国内の様々な分野の研究者との連携から生まれる新しい研究のあり方を探る、という当公募型共同研究の目的と合致している。

り交ぜ全拠点を連携させ、様々な拠点の計算機、アプリケーションをシームレスに利用できることを確認した。

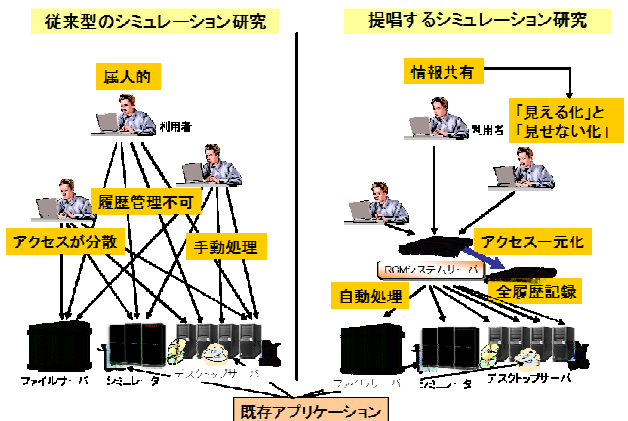


図 1 シミュレーション統合クラウド環境

3. 研究成果の詳細と当初計画の達成状況

(1) 研究成果の詳細について

全拠点の連携 WebService-Workflow 作成

昨年の 5 拠点に東北大学、東京工業大学、九州大学に加え、8 拠点にシステムを拡張、展開をした。

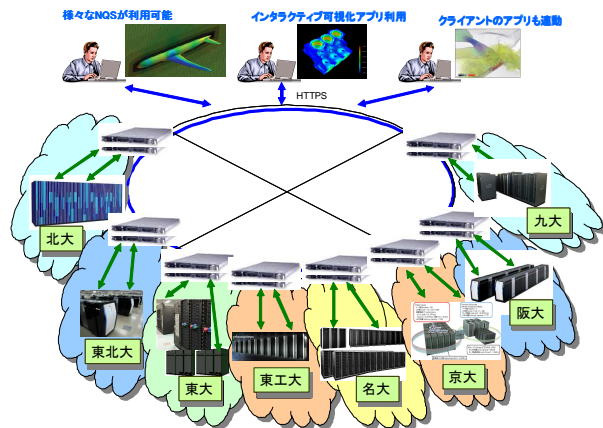


図 2 構築した実証システム

各拠点において幾つかの処理を WebService 化 (コンポーネント化) し、それら WebService コンポーネントをつなぎ、全拠点を跨ぐ WebService-Workflow を作成した。

各拠点の様々な NQS (LSF, PBS, LoadLeveller 等) や batch, 対話処理などを織

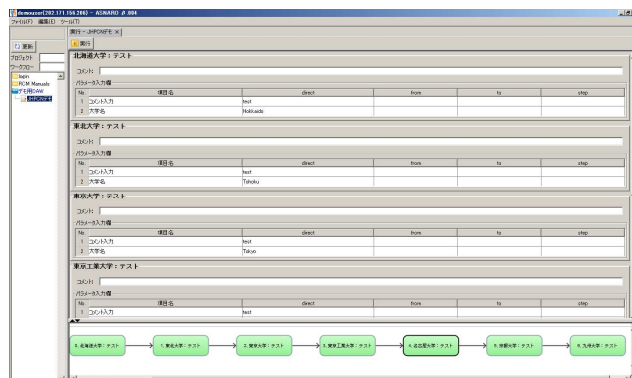


図 3 8 拠点をつないだ連携 WebService-Workflow

システム運用、利用用のドキュメント整備

システムを運用、利用を行うためのドキュメントの整備を行った。マニュアルベースのものと講習会や自習勉強で利用できるチュートリアルタイプのもの、また、それに伴ったサンプルコンポーネントの素材 (コンポーネント登録時に必要なファイル: 起動ファイル、入力ファイルなど) を準備した。 管理者講習会の資料を幾つか抜粋しておく。

ユーザ管理: ASNAROアカウントとリモートサーバアカウントの違いについて

- リモートサーバアカウント
 - 下図のような計算機資源にログインするためのアカウント
- ASNARO アカウント
 - ASNARO を利用するためのアカウント

各個人が使用するリモートサーバのユーザアカウントをあらかじめASNAROサーバに設定しておく、アカウント/パスワードを毎回入力なくてよい。⇒シングルサインオン機能

図 4 管理者講習会資料 1

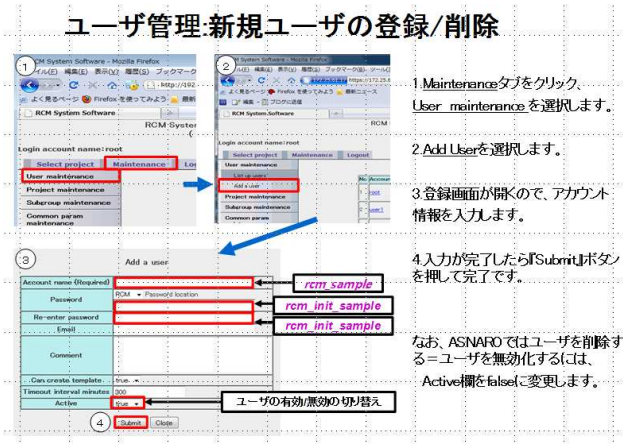


図 5 管理者講習会資料 2

ワークフローの実例:ワークフローの実行と実行結果の検索 2/7

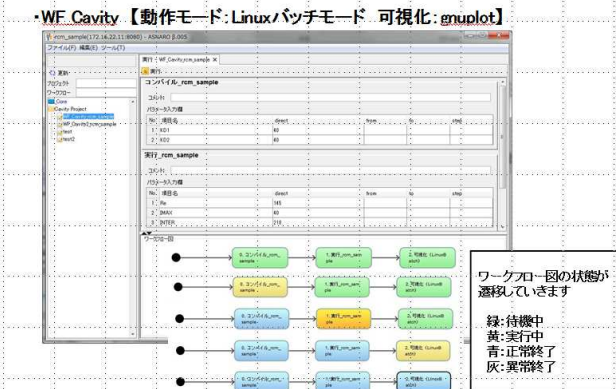


図 8 利用者講習会資料 2

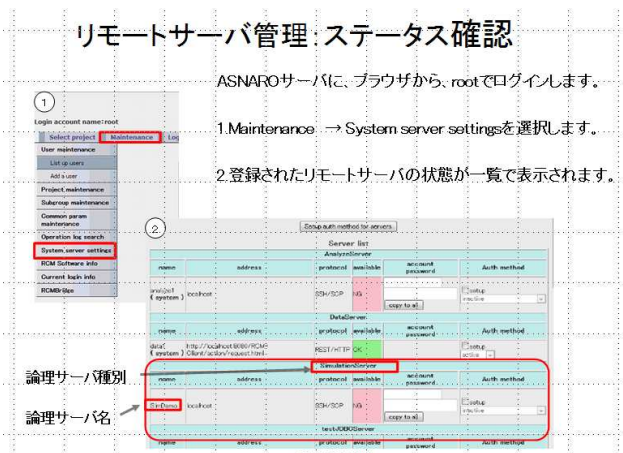


図 6 管理者講習会資料 3

ワークフローの実例:ワークフローの実行と実行結果の検索 4/7

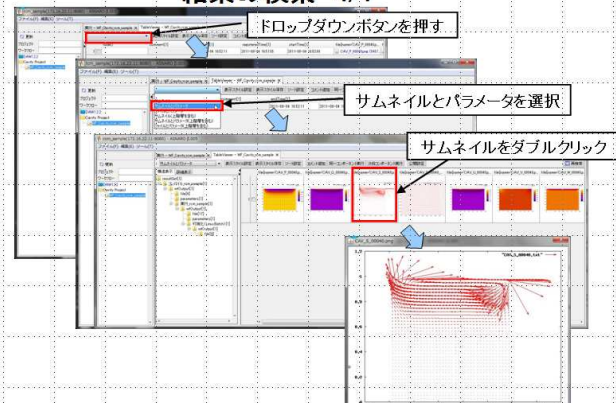


図 9 利用者講習会資料 3

利用者講習会の資料を幾つか抜粋しておく。

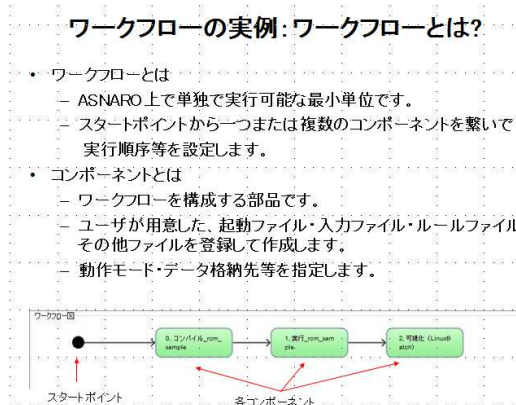


図 7 利用者講習会資料 1

講習会の実施

上記で説明したマニュアル、チュートリアルを使った講習会を北海道大学、東北大学、東京大学、大阪大学/京都大学、九州大学において実施、合計 5 回の講習会を開き、延べ 40 名以上に利用方法、運用方法を周知した。



図 10 講習会の様子 (於 北海道大学)

講習会ごとに問題点を分析し、システム側問題点は、ソフトウェア改善で対応し、講習会、講習会資料の問題点は、マニュアル、チュートリアルの改善を行った。

課題と課題の解決

評価を進めていくうえで、幾つかの課題が明らかになったので、主なものを以下であげておく。

- a) コンポーネントの出力ファイルが大きく、2つのコンポーネントが異なる拠点に登録されている場合、コンポーネント間の連携時にファイル転送時間が大きくなり、処理のトータルスループットが無視できないレベルで悪化する。
- b) 登録されたコンポーネントが対話アプリケーションの場合、クライアントとコンポーネントが実行される拠点間のネットワーク上の距離が大きくなると対話アプリケーションが実質利用できないレスポンス状態になってしまう。実際に幾つかの対話アプリケーションでは、メニューバーからのドロップダウン自体が表示できない状態になり、全く利用できない状況になった。
- c) KVS の Particle Based Volume Rendering View が、専用の GPU ハードウェア上でしか動作できなく、コンポーネント化ができなかった。
- d) 拠点のセキュリティレベルが高くなり、一時的にでも ID, Password 方式が許されない状況であり、システム上から SSH-public-key をリモートサーバへ送り込むことができなくなった。
- e) システムを展開拡張する場合に、仮想環境が動作環境として動作検証ができていないため、北海道大学のクラウドシステムなど環境準備のハードルが高い。
- f) クラウドシステム自体の整備、利用方法の知識がなく、システムをクラウド上へ展開

することができない。

上記課題に開始し、解決方法を模索し、実際にシステムを改善し、その後、実地検証を行った。

- A) 異なる拠点間のコンポーネントを連動して、動作させる場合は、次段の処理で不要なファイルを削除したり、必要なファイルも圧縮したり、間引いたりするコンポーネントをあらかじめ登録しておくようにした。異なる拠点間のコンポーネントの間に当該コンポーネントを割り込ませるように Workflow を作成することで、処理のトータルスループットの劣化を抑えられた。
- B) コンポーネントが X11 をベースにしたものであったので、VNC をベースにしたものに置き換えることでレスポンス状態の改善を図った。また、VNC の場合は、クライアントを同定する機構をリモートサーバ側に作っておく必要があり、合わせて実装をした。

表 1 X11 と VNC の速度比較

	処理時間(秒)
Local (GPU性能は低いもの)	131
X11 (batch処理)	123
VNC (batch処理)	115
Ssh over X11 (東京-京都:通常Internet)	1570
Ssh over VNC (東京-京都:通常Internet)	116

3次元 object の対話可視化アプリケーションの場合は、X-Window の Server アプリケーションに OpenGL モードがあれば、そのモードでコンポーネントを作成するのが、VNC よりレスポンス性がよくなる (OpenGL モードであれば、最初にポリゴンをクライアントに送りこんでしまえば、その後は、クライアント内のみで処理が行われるため)。ただし、可視化アプリケーションには、

OpenGL モードで動作しなかったり、正しく動作しないものがあるので注意が必要である。例えば、FIELDVIEW は、OpenGL モードでは動作できない。

- C) KVS の Particle Based Volume Rendering View を batch 化およびソフトウェア動作できるように改良し、X-window および VNC で対話画面をリモートへ飛ばすことができるようにした。

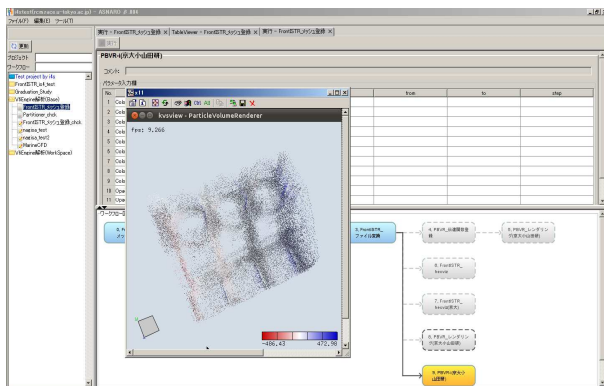


図 11 Particle Based Volume Rendering View

- D) SSH-public-key をシステムからクライアントへダウンロードする機構を実装し、リモートサーバへ任意の方法で送り込むことができるようにした。
- E) 北海道大学のクラウドシステムに本システムをインストールし、一連の動作を確認し、その環境をイメージとして保存した。このことで、北海道大学のクラウドシステムと同じクラウド基盤環境 (Cloudstack) では、イメージをロードするだけ (MAC アドレス変更によるライセンスの再発行と、各サーバの IP アドレス変更は必要である) で、環境構築が迅速にできるようになった。
- F) 北海道大学のクラウドシステムの利用方法注意点が明確になった。
- 1) DVD の ISO イメージは利用できない。
 - 2) OS のインストーラが GUI モードで起動できない。
 - 3) 一度サーバを立ち上げてしまうと同じサーバでイメージの変更はできなく、新規

サーバの申請が必要である。

- 4) 年度更新などで、イメージをシステム外に保存しておく必要がある。(ネットワーク回線が遅く、現実的には、北海道大学内で保存する場所を確保する必要がある)

(2) 当初計画の達成状況について

本年度も、ほぼ研究計画書の通りに進捗ができた。研究計画にも記載したように本年度は、東北大学、東京工業大学、九州大学の 3 つの拠点を増やし、合計 8 拠点での活動とした。

また、試行システムを 8 拠点に拡大させるとともに、その利用方法等をまとめ、マニュアル化、チュートリアル化を行った。また、そのマニュアル、チュートリアルを使った講習会を北海道大学、東北大学、東京大学、大阪大学/京都大学、九州大学において実施、合計 5 回の講習会を開くことで、利用方法、運用方法を周知するとともに、マニュアル、チュートリアルの改善を図った。

さらに、前節で述べたように実際の運営を進めながら、システムおよびアプリケーションの改善を進めた。具体的には、以下のスケジュールで研究を進めた。

- (4 月) 各拠点の計算機センターにアカウント申請を行い、ハードウェア、ソフトウェア資源の利用テストを開始し、5 月末までに全資源でのアカウント申請、利用確認を行った。
- (6 月) 東北大学、東京工業大学、九州大学にシステムを拡大させ、WebService-Workflow を作成し、動作できる状態を整えた。また、年度の切り替わりで認証方式が変わった拠点や昨年度の登録ファイルがなくなった部分があったので、正常に動作できるように対応をした。
- (7 月) シンポジウムの準備を行った。8 月から行う講習会の為にマニュアル、チュートリアルを作成した。講習会ごとに逐次マニュアル、チュートリアルの改善及び、

システムの課題を解決するための開発を行った。

- (8 月) 東京大学で講習会を開いた。
- (9 月) 北海道大学、大阪大学/京都大学の 2 ヶ所で講習会を開いた。
- (10 月) 東北大学、九州大学の 2 ヶ所で講習会を開いた。
- (11 月) 本年度運用して、課題点を解決するためのシステム改善を行った。
- (1 月) 北海道大学のクラウド環境の調査を行った。
- (3 月) 北海道大学のクラウド環境において、システムをセットアップし、動作確認を行った。

4. 今後の展望

2012 年度は、本研究の最終年度であり、2011 年度で指摘された機能改善及び多くの利用者による同時使用などを通じ負荷テストを実施し、マルチパラメータサーベイ型シミュレーションを支えるシステム化技術としてのまとめを行う。

これまでに、異分野および拠点間連携により、以下の成果が上がっており、最終年度としてさらに研究を深化させる。

- 『不確実性を考慮した構造設計』
- 『溶鋼温度制御における不確実性の評価』
- 『実生体の複雑形状を考慮した流体、構造計算』
- 『航空機設計システムの CFD 教育への展開』

さらに、Octa を使った高分子系のシミュレーションシステムを用いた企業との共同研究の企画など、初期に想定をしていなかった研究連携活動の創発事例もでてきており、更なる展開を図る。

5. 研究成果リスト

- (1) 奥田洋司, 飯田陽一郎, 小山田耕二, 坂本尚久, 上島豊, 石原典雄, 前田茂樹, 犬飼貴史, 広域分散計算機リソース利用の並列 FEM/可視化クラウド, 第 16 回計算工学講演会, 2011/5
- (2) 上島豊, 前田茂樹, 犬飼貴史, 江口和宏, 石

原典雄, PaaS-CAE 基盤技術に関する研究開発, 第 16 回計算工学講演会, 2011/5

- (3) 上島豊, 超高性能電卓から Simpedia へ, オープン CAE シンポジウム 2011, 2011/12
- (4) 上島豊, シミュレーションクラウドサービス, 神戸 IT フェスティバル 2011, 2011/4
- (5) 上島豊, 『RCM System Software』の実習と講演, 第 32 回関西 CAE 懇話会, 2011/5
- (6) Y. Yamamoto and T. Kunugi, Discussion on heat transfer correlation inturbulent channel flow imposed wall-normal magnetic field, FusionEngineering and Design, FUSENGDES-D-10-00759(in press)
- (7) Y. Yamamoto and T. Kunugi, Direct Numerical Simulation of Turbulent Channel Flow with Deformed Bubbles, Progress in Nuclear Science and Technology, PNST10142(in press).
- (8) Y. Yamamoto and T. Kunugi, Direct Numerical Simulation of MHD Turbulent Flows with High-Pr Heat Transfer, Progress in Nuclear Science and Technology, PNST10144(in press).
- (9) 山本義暢, 功刀資彰, 辻義之, 高プラントル数乱流熱伝達の直接数値計算における適切な空間解像度に関する考察(Pr=5 の場合), Thermal Science and Engineering(2011), Vol.19 No. 3, pp.59-70.
- (10) Y. Yamamoto and T. Kunugi, Prandtl number effect on heat transfer degradation in MHD turbulent shear flows by means of high-resolution DNS, Heat Transfer / Book 1", ISBN 978-953-307-317-0(in press)
- (11) Y. Yamamoto and T. Kunugi, High Performance Computing for MHD Turbulent Flows with high-Pr Heat Transfer, Green Energy and Technology, Zero-Carbon Energy Kyoto 2010, pp.222-229.