

10-MD05

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

大学等で開発、公開されているアプリケーションおよび計算機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 化を行う。北大、東大、名古屋大、京大、大阪大学に共同研究者の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）のアプリを整備し、マルチパラメータサーベイ型シミュレーションの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）を駆使したシステムの試行版を構築し、テスト運用を開始した。WebServiceWorkflow 化を通じて、さまざまなアプリで容易に再解析が可能となり、再現性、類似処理性が格段に向上した。

1. 研究の目的と意義

1.1 本共同研究の背景

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、表 1 に示すように、研究者に様々な課題が待ち受けている。15～20 年前には、これら課題の一つ一つのハードルが高く、限られたコンピュータの専門家を除きシミュレーションの実施が困難であった。また、計算機性能も現在の 100 万分の 1 程度であり、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に必要な大容量データの生成はあり得ず、研究のボトルネックは専ら計算時間であり、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問題とならない状況であった。

表 1 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における課題

1	メッシュ生成等のプリプロセス
2	高速、省メモリ、かつ高精度なアルゴリズム
3	汎用的シミュレーションのための詳細機能
4	ポスト処理用のフォーマット変換
5	高速な I/O を実現する入出力形式
6	単一シミュレーションの結果から定性的傾向把握を行うための可視化、定量的評価のためのグラフ化
7	複数シミュレーションの結果を比較するための差分、

	重ね合わせ処理、統計処理（相関、学習、分類等）
8	リスト出力からプレゼン用図表、動画の生成
9	商用アプリを使う場合、その利用方法の熟知
10	商用アプリにおける GUI 操作のスクリプト batch 化
11	各種結果データの派生関係、再現に必要な情報の管理
12	上記処理の自動化
13	各処理でコンピュータが異なる場合のファイル移動
14	各種結果データのメタデータの検索可能化（データベース化）
15	共同研究者等の第三者とのデータ、情報の共有方法
16	アプリや各種処理プログラムの Version 管理と結果との紐付け

一方、表 2 に示すように、昨今は様々なレベルでコンピュータ、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。これらをどのように生かすかが肝要と言える。

表 2 シミュレーション環境の充実化

1	コンピュータ性能の向上
2	ネットワーク性能、機能の向上
3	プログラム開発環境の高度化
4	計算科学分野の各専門領域の細分化と成熟化
5	計算科学分野の各専門領域の人材層の厚さ
6	WebService、データベース化技術の高度化

しかしながら、現在の計算機環境の能力を最大限生かしきったシミュレーションを想定した場合、表1の1~16の各プロセスにおいて、一つ一つのハードルは依然として高く、限られたコンピュータの専門家にしか対応できない状態にある。例えば、最適化シミュレーションや因果関係分析を伴うシミュレーションでは、従来型の統計的手法だけでなく、最新のデータマイニング手法やクラスタリング手法が必要とされる。また、大規模なシミュレーションでは、その結果の可視化だけでも並列化やマッパーやレンダリング自体に最新の技術の導入が不可欠となってくる。このように、一人の研究者が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行おうとした場合、より多くの分野への専門性が要求されている。

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上がるが、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。また、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られる。

1.2 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拠り所は、コンピュータの計算能力の向上とネットワーク能力、機能の向上およびWebService、データベース化技術の高度化である。「必要とする研究者が実際に十分利用できていない」のは、実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をセットアップする方式から、WebServiceにより、Internet側でアプリを準備し、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アーカイブを検索できる仕組みがあることである。これは、XMLデータベースを基盤に置いたWebServiceミドルウェアでは容易に実現可能である。

最後に、表1に列挙した処理をWebServiceとして登録し、それら各WebServiceを逐次的につないだWebServiceのflowがあたかも、一つのWebServiceかのように振る舞う仕組みを構築すればよい。グリッド技術はここで大きく生きてくる。

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。

1.3 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ー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

北海道大学、東京大学、名古屋大学、京都大学、大阪大学

(2) 共同研究分野

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

(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。

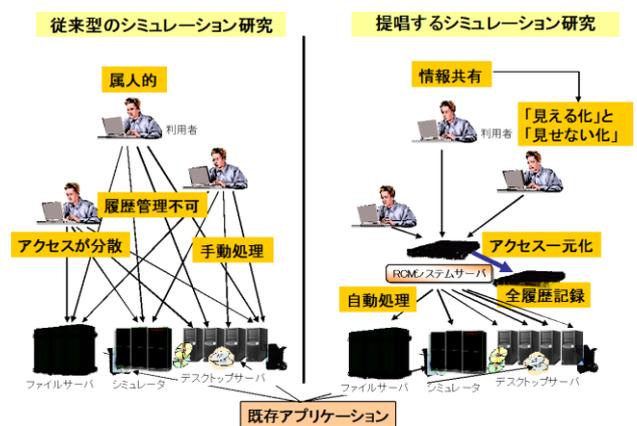


図1 シミュレーション統合クラウド環境

3. 研究成果の詳細

3.1 アプリケーションのWebService化

アプリケーションのWebService化とは、アプリを単にWeb越しに実行できるというだけではなく、入力値、出力特性値などを検索可能（データベース化）にするためにアプリの実行自由度（入力パラメータ数など）をある程度制限し、利用者に使いやすい雛型として専用のWebServiceにリパッケージすることである。本共同研究においては、このWebService化手続きを、雛型入力ファイルとアプリの起動スクリプトを準備すれば全自動で生成できるミドルウェアを導入している。以下、WebServiceにリパッケージしたものをWebServiceコンポーネントと呼び、それらWebServiceコンポーネントをつないで一連のプロセスフローを実現するWebServiceをWebServiceWorkflowと呼ぶ。

3.2 各拠点、拠点間のアプリWebService化

各拠点にて、表3および図2に示すアプリについてWebServiceコンポーネント化、およびWebServiceコンポーネントを接続したWebServiceWorkflowを作成し、それらを利用できるようにした。図3、図4にそれぞれ、WebServiceWorkflow、解析事例データベースのサンプル画面を示す。

本年度は、主に解析と可視化間における拠点間のアプリケーション連携のWebServiceWorkflow化を行ない、実際の研究での利用試行を行った。WebServiceWorkflowを利用したシミュレーションにより、従来、半年以上時間をかけながら地理的に離れた研究者同士が電話、メール、出張などを繰り返し、実現していたアプリ連携が、WebService化され、容易に利用でき、アーカイブされるようになった。その結果、地理的に離れた研究者同士の負担を極めて小さくし、研究を進展できることを確認した。従来は、一度連携した研究を行った経験があっても、一定の休止期間後に同様もしくは類似した連携処理を行おうとした場合に、経験者の記憶をたどりながら利用ツールや処理プロセ

スを思い出し、再検証をしながら進めるしかなく、現実には非常に大きな労力を要し、不完全な再現状況を得ることしかできなかった。しかしながら、本研究では、WebServiceWorkflow化しておくことで、期間を置いて再度同様の処理を行いたい場合にも、容易に再解析が可能となり、再現性、類似処理性が格段に向上した。

4. これまでの進捗状況と今後の展望

4.1 本年度の進捗状況

本年度は、ほぼ研究計画書の通りに進捗ができた。ただし、研究計画にも記載したように本研究の初年度であり、12月末現在で北大、東大、名大、京大、阪大に共同研究者の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）を駆使したソフトウェアを整備し、マルチパラメータサーベイ型シミュレーションの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）を駆使したシステムの試行版を構築し、テスト運用を開始した段階である。具体的には、以下のスケジュールで研究を進めた。

（2010年6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、7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。

（8月）各センターに今年度のテスト運用に必要なソフトウェアをインストールし、単体動作ができるように環境整備を開始、10月末までに動作テストを行った。

（9月）別途導入するRCMシステムソフトウェアを各計算センターに整備した。各アプリに付随するプリ、ポストを含めたユースケース分析を開始し、11月末までにシステム整備及びユースケース分析を終えた。

（10月）RCMシステムソフトウェアを用いて、各アプリの統合的Webポータル化、SaaS化を開始し、12月末までに本年度のテスト運用に必要なシステムを構築した。

（12月）システムのテスト運用を開始した。

12月末段階でのシステムは、各拠点間のシステ

ムが独立に動作する状況（ただし、どのシステムからもすべての拠点へ計算を投入することはできない）であるので、より効率的かつ重複の少ない運用のためシステム間連携機構を1月中に組み入れる。システム間連携機構を組み入れることにより、WebServiceコンポーネントを各システムに重複して登録する必要がなくなるとともに、データ転送などの局所化が実現でき、効率的なシステム利用が可能となる。今後は、テスト運用を継続しつつ、改善点など客観的な評価を行うとともに、拠点間の連携度をあげていく予定である。以下に今年度末までの予定を示す。

（2011年1月）システム間連携機構を実装し、システムの試用を拡大する。

（2月）システム改善点をまとめ、次年度計画を策定する。

4.2 今後の展望

次年度以降は、以下の計画である。

（2011年度）2010年度の改善点を反映させ、支援機能を強化する。2010年度のシステムに最適化エンジンやデータマイニング処理を試行的に組み込み、よりインテリジェンスなシステムに機能向上させる。また、東北大、東工大、九州大にも計算機リソースおよび共同研究者を拡大し、8拠点すべてを使ったシステムを構築する。また、2010年度に構築したシステムを利用し、各個別の研究テーマ（「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」など）を立案する。

（2012年度）本研究の最終年度であり、2011年であげられた改善点および最適化エンジン、データマイニング処理を統合的に組み込み最終的な機能FIXを行う。また、多くの利用者による同時使用などを通じた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。また、2011年度に構築したシステムを利用し、各個別の研究テーマの深化を進め、実用段階のためのハードルを技

術面でクリアすることを目指す。

本共同研究で目指す「様々な領域のプログラムと専門家という大きな知的財産が、必要とする研究者が必要な時に必要なだけ利用可能となる」環境は、まさしく、JHPCNが目指す各拠点の有機的連携、活用を理想的に実現するための基盤になり得るものと考えている。本研究では、シミュレーションのみに焦点を当てているが、このフレームワークは、実験データの処理や社会科学データの処理等にも適用が可能である。

本共同研究は、計算資源、プログラム資源、人的資源などを完全な再現性とともに見つけ可能な状態でアーカイブして維持、運用、サービスしていくこと、つまり、知的財産の継承、活用促進、新たな知的財産の創成を支援することが、ITでより効率的、効果的に実現できることの可能性をテストするものである。本共同研究が成功すれば、過去に図書館が果たしたような大学の根幹的役割を情報基盤センターがITベースに果たすことにも通じると考えられる。

5. 研究成果リスト

12月末現在で北大、東大、名大、京大、阪大に共同研究者の超大規模数値計算、マルチパラメータサーベイ型シミュレーションの大規模情報システム関連技術、システムの試行版を構築しテスト運用を開始した段階であり、それらを用いた成果の発表は未だない。2011年5月に開催される日本計算工学会にて口頭発表を2件予定している。

表3 各拠点におけるアプリケーションのWebServiceコンポーネント化

拠点	計算資源	登録コンポーネント数	登録Workflow数	対応アプリケーション
北海道大学	情報基盤センタースパコン	46	9	T-GRID
				GAMBIT
				MSC.PATRAN
				MSC.MENTAT
				MSC.NASTRAN
				MSC.MARC
				ANSYS
				Fluent
				ANSYS-CFX
東京大学	情報基盤センタースパコン 奥田研究室POクラスタ	20	4	RevoCap Prepost
				HexaGrid
				Front-ISTR
				FaSTAR
				MicroAVS
				AVS/Express
				HECMW-vis
				KVS
				ParaView
				ICEM/CFD
名古屋大学	情報基盤センタースパコン	17	8	HexaGrid
				ABAQUS
				LS-DYNA
				STAR-CCM
				FaSTAR
				Isprepost
				ParaView
				VR-ParticleGenerator
京都大学	情報基盤センタースパコン 小山田研究室可視化サーバ	8	5	KVS
				AVS/Express
				HECMW-vis
				MicroAVS
				GRIDGEN
大阪大学	サイバーメディアセンター MEIセンターPOクラスタ	20	2	FrontFlowBlue
				FieldView
				KVS

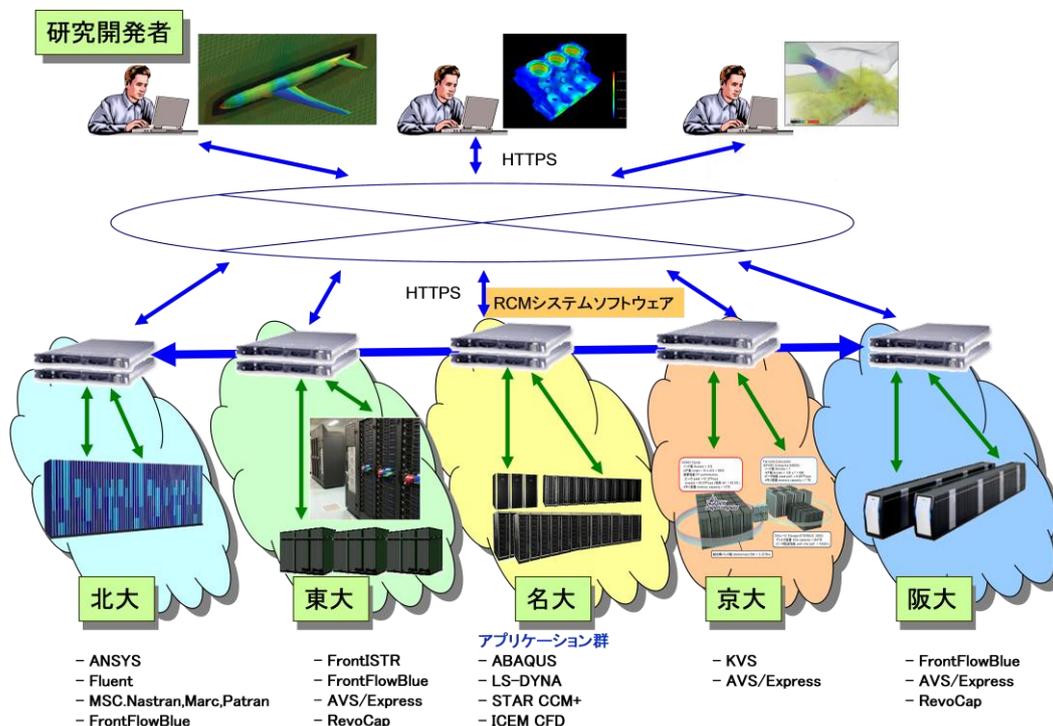


図2 各拠点におけるアプリケーションの統合クラウド化

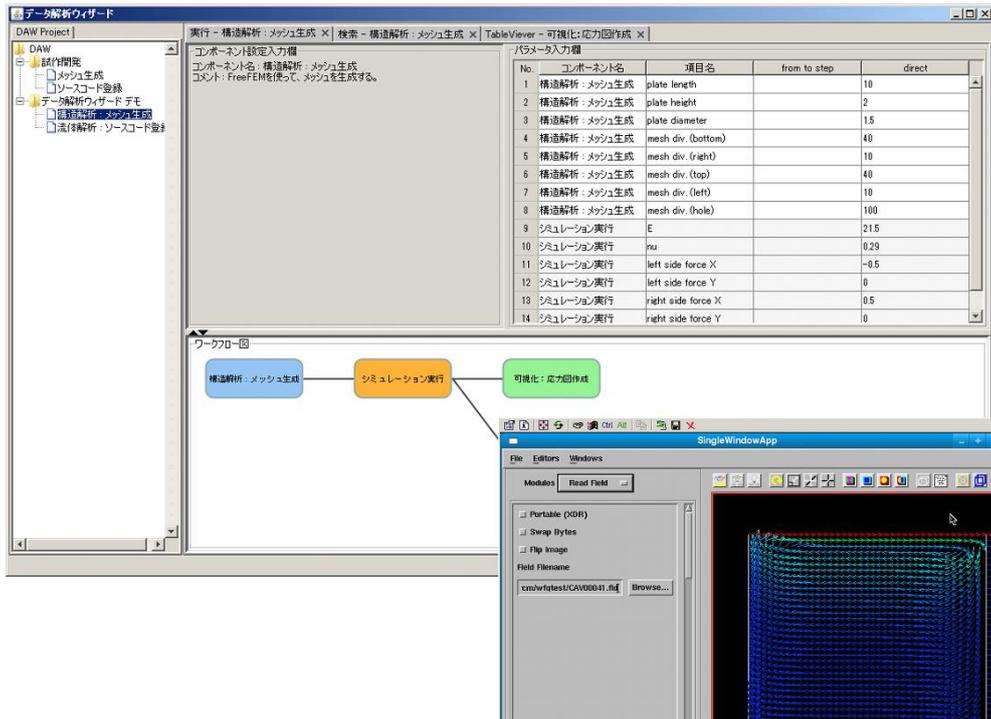


図3 WebserviceWorkflowのサンプル画面

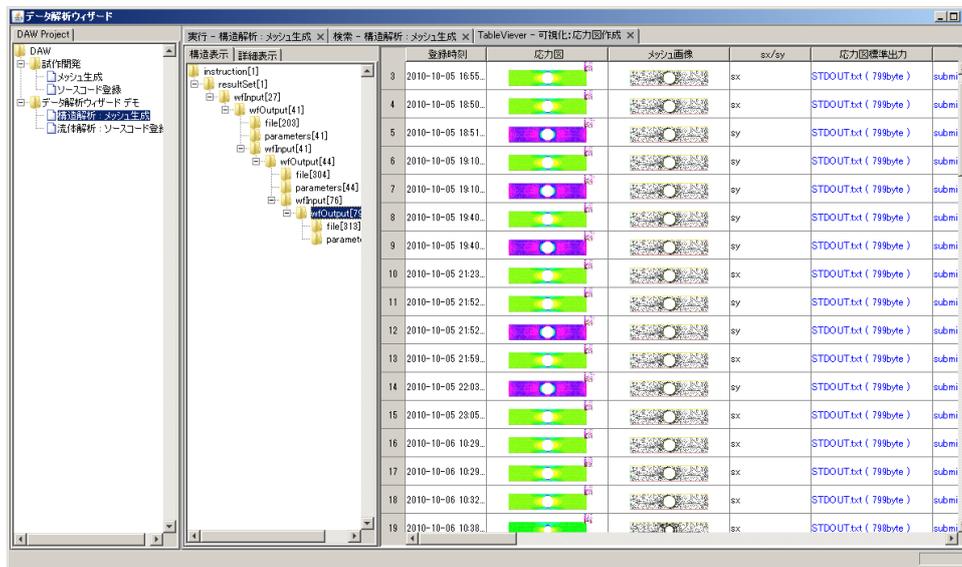


図4 解析事例データベースのサンプル画面