

大規模シミュレーションを中心に据えた 遠隔研究システム：SIMON

Remote collaboration system based on large scale simulation

日本原子力研究所 那珂研究所

炉心プラズマ研究部 プラズマ理論研究室

菅原 章博、岸本 泰明

Abstract

多様化した最先端研究分野においてシミュレーションの果す役割は益々重要になって来ている。そこでは、超並列計算機を中心としたハードウェアと共に、複雑化した大規模シミュレーション結果の円滑な解析・評価や広範囲の学術分野・技術分野との迅速な討議・情報交換を行うシステムの存在が課題解決の鍵をにぎる。ここでは、大規模シミュレーションを中心に据え、インターネットを駆使することにより外国機関も含めた広範囲の研究者と迅速な情報交換や共同研究を行うことを目的としたシステム（SIMON）の開発について紹介する。

1 はじめに

原研においては、那珂研究所を中心に、“数値トカマク実験（NEXT）”と呼ばれる、トカマク型核融合プラズマで展開される多彩な物理現象を経験則に頼らず、プラズマの基本原則から計算科学手法を用いて解明しようとする試みが進められている[1-2]。また関西研究所を中心に、“光量子シミュレーション”と呼ばれる、パルス長がフェムト(10^{-15})秒オーダーまで圧縮され、出力がテラ(10^{12})ワットからペタ(10^{15})ワットに及ぶ極限レーザーと物質との相互作用により展開される新領域の物質科学を数値実験により探究しようとする試み精力的に進められている[3]。これらは共に、近年急速な進歩を見せている超並列計算機をベースにした大規模能計算に基づき、自然のおりなす多彩な複雑現象を計算機上で再現して、その背後にある物理過程や現象の予測、その定量的評価を行なおうとするものである。この計算科学に基づく研究手法

を、理論・実験と並び（それが正しく理解されているかどうかは別にして）“第三の科学”と称する人も少なくない。

このようにもてはやされる“第三の科学”であるが、“研究”というものを体験された方ならば、この研究手法にも大きな“壁”が立ちだかっていることに思いを募らせた方も少なくないのではなからうか？ 計算機の高速度は処理速度と言う観点から云えば、まさに日進月歩であり、これによって科学研究が受ける恩恵は大きい。実際、これまでは現実的でなかった規模のシミュレーションの実行が可能になって来ている。

だが、CPUの演算処理の向上だけがシミュレーションを利用する研究に寄与するものではない。確かに、CPUの演算処理能力の向上は歓迎すべきことである。しかし、そのような大規模のシミュレーションの中に新しい（未知の）現象を見出すのは我々“人間”である。従って、もとすれば、そのような高

性能計算機による研究手法と、“発見”をもたらす人間の直感的研究手法には大きな隔たりを生じることがある。計算は行ったが、それが問題の解決に結び付かないケースが多いのは、多くの研究者が知るところである。大規模シミュレーションの二次元・三次元の見事な可視化あるいはアニメーションを見せられることは多いが、多くのケースは、すでにわかっている現象を後に宣伝用に可視化・アニメーション化したものであり、可視化・アニメーションそのものから直接に導き出された現象の発見や解明は案外少ない。

核融合研究や光量子研究に代表される複雑現象の解明には、大規模シミュレーションを中心に据えた高度な解析手法の導入と、さらに広範囲の学問分野・技術分野の専門家の知識を集結したCOE (Center Of Excellence) としての新しい研究体制が不可欠である。また、それらが計算機をはじめとした高性能なハードウェアの存在と相まって最先端領域における課題解決能力の向上と、これらの分野での競争力を決定すると言える。

このため、大規模シミュレーションを中心に据えた最新可視化技術や通信技術を容易に導入できるシステムが必要不可欠となる。そのような考えに基づいて、ここではトリガー手法に基づく SIMulation MONitoring (SIMON) システムを開発した。

第2章では、大規模シミュレーションで要求される可視化手法とは何か、第3章では、要求される通信手法とは何か等、将来あるべき研究スタイルを考慮しつつ、要求される事項をまとめる。第4章では、2章・3章を受けて、開発したトリガー手法、及びこの手法を拡張し、研究の効率化・迅速化を目指した階層的解析手法の開発について記述する。第5章では、那珂研究所で開発を行った3次元電磁粒子コード (EM3D) [4] を本システムに適用した事例について報告する。第6章では、SIMON システムで今後開発が期待さ

れる項目について述べ、第7章でこれらの内容をまとめる。

2 大規模シミュレーションでの可視化手法

計算機によって数値シミュレーションを行う解析手法には、以下の2つが考えられる。

- (1) 数値結果を直接参照する
- (2) 数値結果を可視化処理し参照する。

しかし、シミュレーションの大規模化・複雑化により、(2)に対する重みが増しているのが現状である。これは、シミュレーション結果の全体像を把握する必要性が高まっていることによるものである [5]。

この可視化手法には、シミュレーションコードに適応した専用ポストプロセッサを利用する方法と、商用の汎用可視化アプリケーションを利用する方法がある。専用ポストプロセッサをコードに組み込む場合、可視化に伴う実行時間がさらに長くなり、コードの改良やチューニングが困難になることが予測される。商用の汎用可視化アプリケーションでは、インタラクティブに付加機能を利用できる反面、データの入力形式を合わせる必要がある。また、その汎用可視化アプリケーション特有の専門的知識を必要とする場合が多い。そして何より、現状の汎用可視化アプリケーションでは、可視化を行う計算機にもよるが、大量のデータ処理には不向きな場合が多々見られる。

我々も従来この二つの要素のいずれかを選択するか、あるいは組み合わせる事で数値シミュレーションの可視化処理に対応して来た。しかし、最近になって、一部の商用アプリケーションやネットワーク上で流通するフリーウェアの中に「インタラクティブに利用できる」(従来の汎用可視化アプリケーションの特徴)と同時に、「手続きをマクロ化し処理を一括して行える」(プログラム化できると言

う意味では専用のポストプロセッサプログラムの特徴)ものが現れ、これらが実際の使用に耐え得るレベルになりつつある。

複雑かつ大規模な可視化を行うアプリケーションとして、並列可視化処理が可能な EnSight Gold [6] を例にとると、インタラクティブに行った手順を、各状況に応じたマクロ (コマンドファイル、コンテキストファイル、アーカイブファイル) として保存する機能が標準で利用できる。このため、ユーザによるマクロの作成についても比較的容易に行うことが出来る。これらの「マクロ処理可能な汎用可視化アプリケーション」を効率良く利用する事で (専用のポストプロセッサ程度の)、複雑なプログラムを作成すること無く可視化処理を行うことができるようになり、同時に従来の可視化専用アプリケーションの柔軟性や機能性を同時に取り込む事が可能となった。

実際、この EnSight Gold は、データ読み込み、マッピング、レンダリング等、並列処理が可能な数少ないアプリケーションの一つとして挙げられ、大量のデータ処理にも対応している。また、クライアント・サーバ機能として構成されているため、複数のクライアント間で同期をとるといったコラボレーション機能を持ち合わせていることも重要な要素の一つである [7]。

3 通信手法を駆使した遠隔共同研究

一方、大規模シミュレーションを基礎に置いた研究は、一研究者の枠を越え、物理的に離れた遠隔地の研究所あるいは研究者間で互いの情報を共有しながら行うことが近年多くなってきている。このような遠隔地での情報伝達手法として、電話でのアナログ回線利用のほかに、Eメールをはじめとするデジタル通信を駆使した情報網は広く利用されており、研究環境でも例外なくその能力を発揮している。

しかし、画像をはじめとした様々で精緻な情報を共有する必要があるシミュレーション研究では、情報伝達の高速度や協調性、あるいは操作性の観点からより高度なシステムが必要とされる。このためには、以下のような環境を整える必要がある。

- (1) 導入・運用が容易である
- (2) セキュリティが設定可能である
- (3) データ通信が高速である

これらの課題の実現にあたっては、新規での開発をなるべく避け、既に存在するソフトウェア資源を有効に活用することにより、開発に必要な時間や労力を極力排することが寛容である。

これらの理由から、遠隔研究を指向した可視化結果のフォーマット等については、HTML (Hyper Text Markup Language) を利用するのが理想により近いと考えた。HTML は俗にハイパーテキスト言語と呼ばれる高級言語であり、コンパイルなどを必要としないことからインタプリタ型言語としての性格をもっている。HTML は基本的に WWW (World Wide Web) での利用を前提とし、文字、画像、音声等の異なるデータを“リンク”という概念で一つに結合させることができる。従って、遠隔研究のシステム構築にあたっては WWW を利用するのが効率的である。そうすることで、多様なプラットフォームからネットワーク経由で複数の研究者が同時にシミュレーション実行時のモニタリング等を行うことができる。これは、情報の共有財産化、及びシミュレーションの擬似的モニタリングを実現するものである。ここで“擬似的”と述べたのは、純粋なリアルタイムでないことを意味している。純粋なリアルタイム性は、ランニングに長時間を要するシミュレーションにあまり必要ない。

本システムでは、更に WWW の利用を前

提とした機能・処理を追加することで、色々なレベルで階層的に計算結果を参照することを可能にしている。可視化の階層化については後ほど述べる。

4 トリガー送信手法と階層解析手法

本システムの構築にあたっては、既に存在するソフトウェア資源を有効に活用し、開発に必要な時間や労力を極力排除する。また、下記のようなシミュレーションコードの開発者や運用者からしばしば出される意見も反映する。

- (1) シミュレーションコードの変更は最小限に行うこと
- (2) 組み込まれたシステムは、シミュレーション実行そのものに決して影響しないこと
- (3) 組み込まれたシステムによってシミュレーション実行時間が増加しないこと

これらを考慮して、ここでは「トリガー送信手法」を考案した。これは、シミュレーションにおけるポスト処理の命令だけを外部に転送するものであり、これを「サーバに動作を合図する為の引き金」という意味で“トリガー (Trigger)”と呼んでいる。

依頼を受けたサーバは指定された内容に従ってサーバからポスト処理を行うが、この手法自体は、シミュレーション実行の負荷を上げる事は殆どないのが特徴である。また、ポスト処理がされているか否かに関わらず、計算機側では、ポスト処理依頼実行後、即座にシミュレーションの実行が継続される。すなわち、ポスト処理自体はあくまで二次的なものであるため、ポスト処理の結果や実行状態に関わらず、シミュレーションは本来の計算を継続することになる。この方法は単純であると同時に非常に効率的である。シミュレー

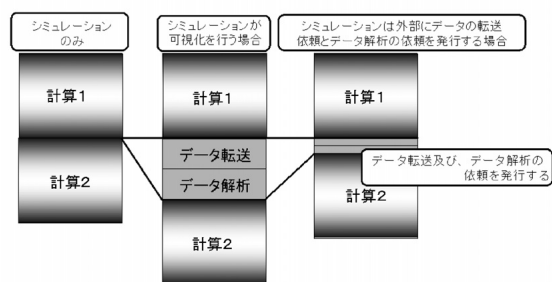


図1 トリガー送信手法

ションを実行する事で自動的に外部計算機においてポスト処理が実行されるため、研究時間の大幅な短縮につながる。

図1は、ポスト処理の一つである可視化処理を例に、トリガー送信手法の特徴を示したものである。通例データ転送や可視化実行を直接行う場合(図1中)、実行時間を増加させるばかりでなく、しばしば可視化過程において問題が発生し、シミュレーションの停止を引き起こすことがある。これらは、本来シミュレーションとは無関係の問題であり、コストのかかる大規模計算にとっては致命的である。

このため、ここでは上記のトリガー送信手法を用いてデータ転送・可視化処理の“依頼”だけを外部のワークステーションに発行する。依頼をした後、シミュレーションは次の計算ループに直ちに入るため、これによる実行時間の増加はわずかである(図1右)。また、ポスト処理自身は外部のワークステーションで行われるため、ポスト処理に問題が発生したとしても、シミュレーション自身に影響することはない。

トリガー送信手法は、クライアント(シミュレーションコード)からの依頼に対してサーバ(外部計算機)が対応する形のクライアント・サーバコントロールである。このトリガー送信手法を拡張することで、シミュレーションから外部へ色々な実行命令を発行することができる。すなわち、この手法を応用す

ることで、可視化処理を含めたシミュレーション研究におけるポスト処理（画像フォーマットや HTML 表示等）を自動化することができる。

さらに、ここでは、シミュレーション研究における可視化作業の重要性を考慮し、より“インタラクティブ”に近い環境として「Web による階層的な可視化手法」を導入する。この手法は、以下の三種類の階層に分けている。

- ① 第一階層（基本解析階層）：シミュレーションから与えられた情報を基に可視化を行い表示する。
- ② 第二階層（Web 解析階層）：Web 上で、可能な限り、グラフ等の変更を行うようにシステムを構築する。変更箇所は等高線の最大値、最小値、及びその色調等である。等値面の場合、その等値の値選択、色調等である。
- ③ 第三階層（詳細解析階層）：①、②の方法だけでは、十分なインタラクティブ性を得たとは言えない。そこで可視化アプリケーションそのもの、もしくは簡易的可視化アプリケーションを手元（常に目前でみる PC を指す）で起動し、例えば三次元データを回転・拡大縮小・移動と言った専門的かつ詳細な解析を行うことが出来るようにする。

上記の手法を状況に応じて使い分けることで、より効率的な遠隔共同システムを確立することが出来る。

5 三次元電磁輸送コードへの導入

第4章で述べた“トリガー送信手法”、及び“階層的な可視化手法”を実際に3次元電磁粒子コード（EM3D）[4]に導入し、その検証を行った。

図2は、現在那珂研究所の超並列大型計算機における計算環境の下で、EM3Dを

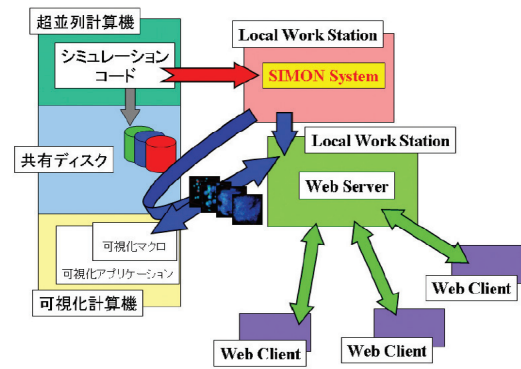


図2 SIMONシステム導入例

SIMON システムに導入したときの動作事例を図式にしたものである。トリガー送信（シミュレーションコードから SIMON System に向かった矢印）により、シミュレーションは、ポスト処理に関する依頼をサーバ（ワークステーション）に行う。これを受けた SIMON システムは、シミュレーションコードから出力されたデータと、既に用意されている可視化マクロを使用して可視化作業を行う。その後、可視化済みデータを Web Server に転送する。同時に、表示のために必要な情報の転送及び、HTML の作成を行う。また、Web Clientからは、表示の確認を行うと同時に、階層的な可視化手法を用いて Web Server への再可視化を行うことが出来る。この再可視化は SIMON システムが使用した可視化マクロと同様のものを使用する。これらの作業は、シミュレーションの実行と同時に終われ、Web 上に表示される。

CODE	CLIENT_HOST	USER	RUN	DATE
em3d	naka-sof.naka.jaeri.go.jp	8321	A20_8x21_cluster	Fri Nov 20 20:09:11 JST 2003
		7421	A01_1_cluster	Wed Oct 16 10:14:51 JST 2003
		3901	Ha01_4100_v128_rml	Thu Apr 24 14:48:43 JST 2003
		3981	Ha01_4100_v128_rml_2-1	Fri Nov 25 14:36:59 JST 2003
		3981	PC_cmt_s1_v31_r201_52	Fri Jan 17 15:11:55 JST 2003
		3981	PC_4100_s1_51_r201_12	Thu Jan 23 15:49:29 JST 2003
		8521	Sp_E025_T100_0225_342	Mon Mar 24 20:48:18 JST 2003
		8521	Sp_E025_T100_0225_343	Thu Mar 27 20:27:45 JST 2003
		8521	Sp_E025_T100_0225_344	Mon Mar 31 19:07:55 JST 2003
	vpp.tokai.jaeri.go.jp	3991	v20_cls_01	Fri Oct 11 13:08:41 JST 2002
isp	naka-sof.naka.jaeri.go.jp	7421	Pr203_N600	Tue Oct 11 16:42:10 JST 2002
STARTCode	STARTHosts	STARTUser	STARTTrn	Wed Feb 12 15:55:22 JST 2003

図3 SIMON-Web Topシーン

図3は、各種ランニングによってトリガを送信を実行したWebのTopシーンを示している。ここでは、Code、Host、User、Run、Dateといった、各シミュレーションの実行を識別する情報を判別しやすく表示している。これは、今後のシミュレーション結果のデータベース化を意識したものであり、この他に、入力データや出力データ等の検索機能を持たせることで、大規模化、大容量化が進む様々なシミュレーションに対応させることができる。

図4～6は、Web上に表示されたシミュレーション結果を示したものである。EM3Dでは、各種エネルギーの時間発展、電子密度、イオン密度、電子温度、イオン温度、電場等の出力結果を二次元グラフ、等高線、

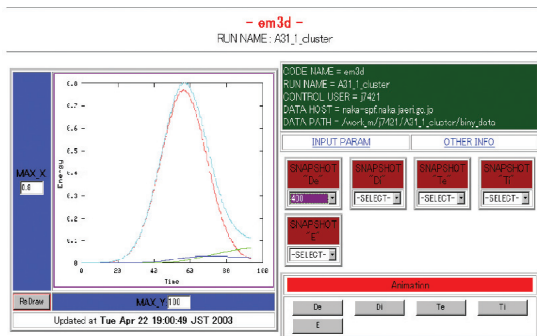


図4 シミュレーション結果、及び二次元グラフ

Results : TIME=700.

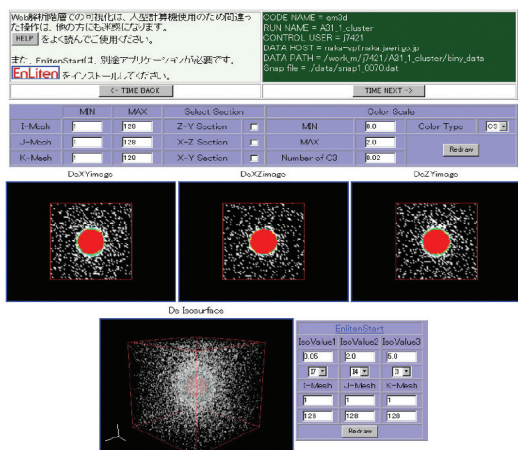


図5 等高線結果、及び等値面結果

Results : TIME=700.

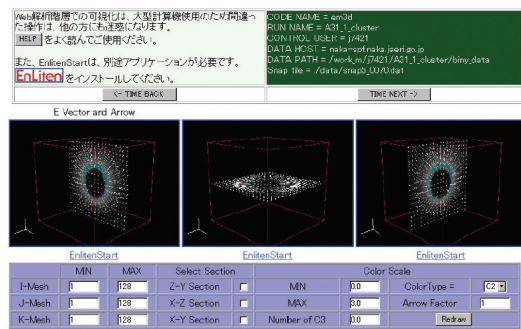


図6 電磁場速度ベクトル (ベクトル表示)

等値面、ベクトル等で表示する必要がある。画像データは、第4章で述べた階層的可視化手法に従い、二次元グラフの場合はX、Y軸の最大値が、等高線や等値面の場合は部分抽出や色調の最大値・最小値等がWeb上から自在に変更することができる。

図4のエネルギーの時間発展は、シミュレーションの実行開始と同時に作成され、時々刻々送られてくる出力データを基にグラフを作成し続け、シミュレーション終了時にグラフが完成する。このグラフは、後の解析資料となるばかりでなく、シミュレーション実行時においては状態を監視する役割を果たす。つまり、エネルギー保存性の破れ等、シミュレーションの異常を早期に発見し、シミュレーションの再実行等の処置を迅速に行うことが可能になる。

図5、及び図6は、シミュレーション実行時における様々な物理量を、ある一定間隔でスナップショット的に可視化したものである。さらに、このスナップデータより細かい間隔で画像データを集積しておき、シミュレーションの最後に動画表示を行うことも可能である。シミュレーションの終了と同時にアニメーションが即座に見られるのは、解析の迅速性からも重要である。

図4から図7までのグラフは、共にWeb上から確認できるが、より詳細な解析を行う場合は、これらの簡易的な情報(画像)のみ

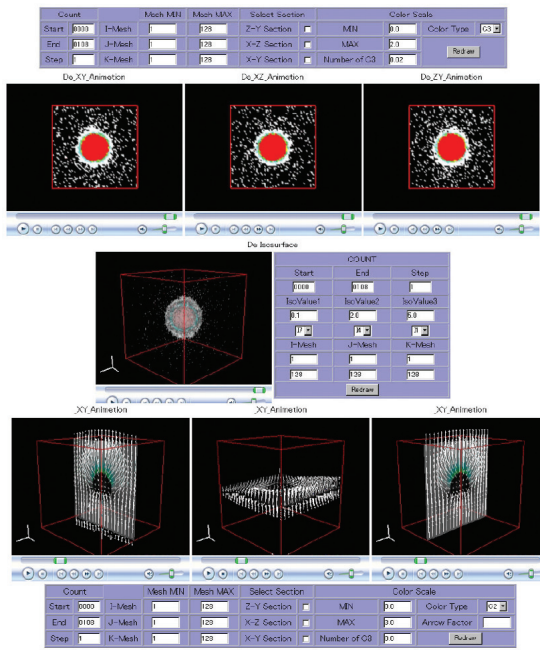


図7 アニメーション表示

では十分な解析が行えないことがある。このような場合を想定して、上記の可視化を行った可視化アプリケーション、もしくは、それに付随した簡易版可視化アプリケーションを遠隔地から起動し、詳細解析を行う機能も開発している。今回は、EnSight Gold を可視化アプリケーションとして使用する。この他に、Enliten と呼ばれる EnSight Gold データ表示機能を有したアプリケーション等が有

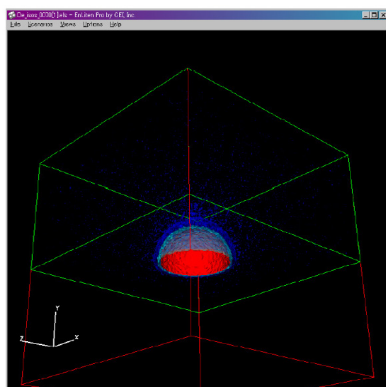


図8 結果の部分摘出と詳細解析階層の起動

用である。これを“階層的可視化手法”の詳細解析階層にあて、Web Client=PC で起動できるように設定した。

図8は、Web 解析階層の部分摘出と詳細解析階層の可視化アプリケーション (Enlien) を組み合わせたものである。このように、条件を揃えることで、各個人の PC 上にこれらのシミュレーション解析環境を自在に作ることが出来る。

6 SIMON システムの技術面と今後の開発

本 SIMON システムによって実現した解析環境は、技術的には特段新しいことを行なっている訳ではない。実際、SIMON 自身も、UNIX では一般的なクライアント・サーバコントロールシステムとして開発されている。しかし、各研究分野における研究者が必ずしも可視化アプリケーションの詳細を把握しているとは限らないことを前提に、そのような研究者でも容易に利用できるように設計されている。SIMON システムの特徴を簡単に挙げると以下のようにまとめられる。

- ① トリガー送信手法によるシミュレーションへの負荷の軽減
- ② シミュレーション結果の可視化、及び解析手法における階層化

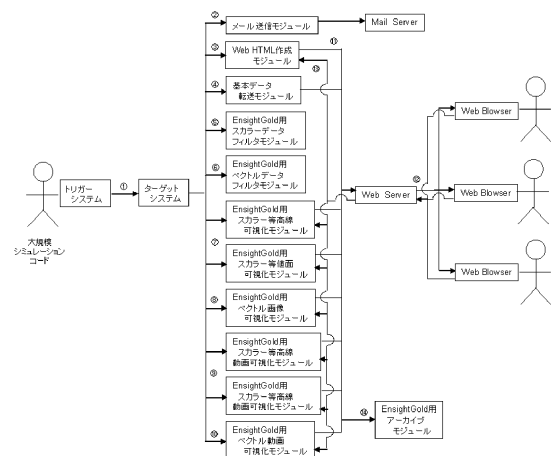


図9 SIMONシステム構成図

- ③ 商用等のライセンス制限されたソフトウェア利用時におけるコマンドライン利用によるライセンス数の軽減
- ④ HTML 利用によるシミュレーション出力データのネットワーク利用のための支援向上
- ⑤ 利用者を考慮したクライアント部の組み込み作業の複雑さの回避
- ⑥ ソフトウェアの小型化、移植性の高さ

SIMON システムでは、図9に示したように、指示を与えるクライアント部（シミュレーションコード内に組み込むライブラリ）と、指示を受けその内容に沿って実行するサーバ部（Shellプログラム）で構成されている。これまでのSIMONの運用経験から様々な問題点や拡張すべき点が浮かび上がって来ている。問題点としては、データの検索・削除・保存といったデータ管理が挙げられる。第5章でも述べたように、SIMON システムでは、Code、Host、User、Run 等によって異なったシミュレーションの実行を識別している。シミュレーションの実行回数が少ない内は問題がなかったが、ランニングの種類が増えて行くに従って識別に時間を費やすようになる。実際、この問題は表面化しており、このための検索能力の向上は不可欠となって来ている。また、ディスク等の資源の制約と関係し、必要でないデータの削除、あるいは保存の選択を迫られる状況も生まれる。これらはデータ管理に関する問題であり、今後、データベース化することによって解決の糸口を見出したいと考えている。

機能拡張については、現在、普及しつつある Virtual Reality (VR) 等の先進画像表示システムへの移植等が考えられる。また、遠隔共同研究の視点と相まって、遠隔地間で画像を共有するコラボレーション機能の導入も必要性がある。遠隔共同研究支援の一環としては、テレビ会議システムとの共有で、より

良い遠隔共同研究環境を提供できると考えている。

7 まとめ

本稿で解説した SIMON システムは、その初期 Version が完成し、現在、数値トカマク研究や光量子シミュレーション研究等の主要なシミュレーションコードに適用し、実際の研究活動を通してその機動性と有用性を検証している。

この SIMON システムの開発にあたり、我々は以下の事項を必要不可欠な条件として課した。

- (1) シミュレーションコードの書き換え等は最小限にとどめ、またユーザが採用していたプログラムの実行形態(実行手法・データの書き出し手法等)にも変更を与えないこと(ユーザの負担は最小限度に押える。)
- (2) シミュレーションコードの実行は SIMON システムに阻害されず(即ち SIMON のトラブルがコードの実行に影響を与えない)、また特定の機種やアプリケーションにも依存しないこと。
- (3) 最先端の現場で大規模シミュレーション研究を行う研究者の“精神的要因”まで含めた総合的なパフォーマンスにより、研究を支援する人間中心型の研究者にやさしいシステムであること。

項目3は、特に重要であり、項目(1)・(2)は(3)の帰結と言ってもよい。本来の“研究”以外に多くの時間を費やした経験をもつ研究者の願いがまさに SIMON システムの出発点であり、本稿で概説した“トリガー送信手法”もこのような要請から生まれたものである。シミュレーションの異状実行について早期発見・再実行に至る過程や、自動可視化・可視化操作の容易性については、更に追及してい

く必要がある。

また、既に存在する利用可能なソフトウェア資源を最大限に利用すると同時に、多くの研究者が国内外を問わず交流できるサロンのようなシステムの導入も“研究”を主体と考える遠隔共同研究には重要な要素である。また、先にも述べた“情報の共有化”も重要な検討課題である。

このようなシステムの多くは、作ったが、使われないケースが多いのも事実である。このような状況を避けるためにも、現場での研究者と密接なフィードバックをかけながら開発を進めることが鉄則であろう。

謝辞

本稿におけるシステム開発に関して有益な助言をいただいた Yahoo Japan 川野辺満氏、那珂研究所 八木洋氏、宮戸直亮博士に感謝いたします。EnSight Gold 導入におきましては、有益な助言をいただきました WAVE FRONT 宮川哲氏に感謝いたします。また、3次元電磁輸送コード導入時には、高度情報科学技術研究機構 (RIST) 正木知宏氏に、ご支援ご協力いただきましたことに感謝いたします。本研究は、日本原子力研究所・那珂研究所の数値トカマク実験 (NEXT) プロジェクトの一環として行われたものである。本研究を支援していただいた日本原子力研究所・那珂研究所・炉心プラズマ研究部の菊池満次長・二宮博正部長に感謝いたします。

[参考文献]

- [1] 日本原子力研究所那珂研究所 JT-60 Project NEXT ホームページ：<http://www-jt60.naka.jaeri.go.jp/f4-J.html>
- [2] 岸本泰明 “数値トカマク実験 (NEXT) 研究—多階層・複合系プラズマ研究の展開—”：シミュレーション (日本シミュレーション学会誌) 22, 2, 9 (2003)
- [3] 日本原子力研究所関西研究所ホームページ：http://wwwapr.apr.jaeri.go.jp/top/aprc_j/index.html
- [4] Y. Kishimoto, T. Masaki, and T. Tagima “High energy ions and nuclear fusion in laser-cluster interaction” : *phy. plasmas* 9, 2, 589 (2002)
- [5] 鈴木喜雄, 岸本泰明, NEXTグループ “大規模シミュレーションに要求される画像解析システム”：プラズマ・核融合学会誌 78, 59 (2002).
- [6] CYBERNET SYSTEMS EnSight Gold ホームページ：<http://www.cybernet.co.jp/ensight/>
- [7] 井戸村泰宏, 足立将昌, 五來一夫, 鈴木喜雄, WANG Xin “日本原子力研究所 Origin3800システムにおける大規模核融合プラズマシミュレーションおよびストレージグリッドの開発”：プラズマ・核融合学会誌 78, 172 (2003)