



研究技術ノート

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

菅原章博, 岸本泰明

(京都大学大学院エネルギー科学研究科)

(原稿受付: 2007年5月22日 / 原稿受理: 2007年12月6日)

計算科学に基づく大規模シミュレーションは、理論・実験と並ぶ第三の手法として様々な科学・技術分野で積極的に活用され、従来の理論や実験手法では解明が困難な複雑現象解明の新しいアプローチとして期待されている。ここでは、地域的あるいは分野的に分散した複数の共同研究者が関与する大規模シミュレーション研究を効率的に推進するため、SIMulation MONitoring (SIMON) と総称した遠隔共同研究システムを提案する。本システムの中核をなす機能として、スーパーコンピュータ上で起動しているシミュレーション (クライアント) から外部ワークステーション (サーバ) に向けて様々の作業依頼を送信する「トリガー手法」に基づく「クライアント・サーバコントロールシステム」を提案・開発した。外部サーバは、データ転送や解析、あるいは画像処理などの依頼情報のみをシミュレーションから受け取り、その内容に従って独立にそれらの作業を行う。また、サーバはこれらの最新情報や更新結果をシミュレーションに関与する共同研究者が時間と場所を問わずモニターできるように Web に逐次配信する。本手法は、シミュレーション後に様々の解析を行う従来の「ポストプロセス (Post-process) 処理」に対して、シミュレーション実行中に随時解析を行う「アップデート (Up-date) 処理」の新提案として位置づけられる。本システムをプラズマシミュレーション研究に適用し、これが大規模シミュレーションを中心に据えた共同研究の共通のプラットフォームとして有用に機能することを確認した。

Keywords:

large scale simulation, remote collaboration, remote visualization analysis, simulation monitoring, trigger method, client-server control, post-processing, up-date processing

1. はじめに

近年、多くの科学・技術分野のプロジェクト研究や基礎研究において、実験とともに、現象を高い精度で予測し、研究の迅速性や方向性を効率的に探る計算機シミュレーションが重要な役割を果たしている。将来のエネルギー源をめざした核融合研究においても、磁場方式では国際熱核融合実験炉 (ITER) [1] が、レーザー (慣性) 方式では米国の国立点火施設 (NIF) [2] が燃焼プラズマを実現しようとしているが、これらを予測するためのシミュレーション研究が国内外で精力的に進められており、今や核融合研究のメインストリームの一つになりつつある [3, 4]。これらは、荷電粒子多体系であるプラズマを支配する基本方程式を、スーパーコンピュータを用いて直接解くことにより、プラズマが創り出す複雑現象を計算機上に再現し、その背後にある物理機構を解明しようとするものである。特に、散逸の微小な高温プラズマ現象は時空間スケールが何桁も異なる物理過程が複合的かつ階層的に相互作用することによって創り出される「多階層・複合系」としての特性を有していることから、そのような現象にアプローチする方法論にも新たな展開が求められている [5]。これら計算科学に基づく研究手法は、核融合研究に限らず多くの科学・技術分

野において今や理論と実験と並ぶ「第三の科学」として位置づけられている。

一方、昨今のハードウェアとしての計算機の発展は日進月歩であり、それとともに数値アルゴリズムや並列計算手法などのソフトウェアの進展も著しい。実際、これまで現実的でなかった規模のシミュレーションが可能になり、階層間の相互作用や連結といった概念も浸透しつつある [3-5]。しかし、計算機の性能向上や計算手法の進展だけがシミュレーション研究を成功に導くものではない。シミュレーションは大規模になればなるほど実験に近くなり、膨大なデータの中から目的とする現象を見出すのは研究者や研究グループの総合的な能力にゆだねられる。大規模なシミュレーションは行ったが問題の解決に結びつかないケースも少なくない。大型装置を用いたプロジェクト実験では、計画の立案から実験の実施、データの解析や検討、現象の同定や論文化まで、多くの研究者や技術者が様々の役割分担のもとに研究に参画することによって目標が達成される。シミュレーション研究においても、コードを実験装置と考えれば、初期条件の設定やシミュレーションの実行・監視、シミュレーション後のデータ処理や解析などは基本的には実験研究と同じであり、それらすべてを一人の

Remote Collaboration System Based on Large Scale Simulation

SUGAHARA Akihiro and KISHIMOTO Yasuaki

authors' e-mail: sugahara@center.iae.kyoto-u.ac.jp, kishimoto@energy.kyoto-u.ac.jp

本研究は、著者の一人 (岸本) が日本原子力研究開発機構那珂研究所在籍時に同研究所の数値トカマク実験 (NEXT) 研究の一環として菅原と共同で行ったものを発展させたものである。

研究者が行うことは困難になりつつある。解明すべき問題が複雑になればなるほど専門分野の異なる多くの研究者の関与が不可欠となり、“グループ”としての取り組みがシミュレーション研究における課題解決能力や競争力を左右することになる。

一方、実験研究においても、ネットワークをはじめ情報伝達手段の発展を背景に、実験装置や計測器を遠隔地から操作するリモート研究が近年急速に進展している。例えば、上記のITER計画では、装置本体はフランスに建設されることになったが、日本からの遠隔実験参加が規定路線として位置づけられている。同様のことがシミュレーションにおいても言えよう。多くの研究分野において、情報の収集や配信、交換や共有といったソフトウェア的な取り組みによって得られるメリットは実験装置などのハードウェアと同等に重要であり、それらの取り組みに比例して課題解決能力も向上する。ネットワークを介して共同研究者間でシミュレーションを共有することはそれだけでも研究を推し進める要因になるとともに、それらを効率的な情報伝達システムや解析システムと組み合わせることができればさらに大きな発展が期待できよう。近年、計算機能力が格段に向上したとはいえ、数TFLOPSレベルのスーパーコンピュータを使用できる環境は限られている。また、そのような大規模シミュレーションでは生成されるデータ量も膨大になり、解析も複雑かつ高度になることから、共同研究者との迅速な情報の交換や共有は必須である。

本稿では、スーパーコンピュータを用いた大規模シミュレーションを中心に据え、誰でも入手可能で標準的な可視化技術やインターネット技術を駆使することにより、多くの共同研究者が時間と場所を選ばず密接に連携を図りながらシミュレーションに直接参加できるシステムを提案する。本システムは、大規模シミュレーションに要する時間と研究者が現象を解析したり理解したりするのに要する時間の差異を利用したシミュレーションの擬似的な「参照・監視（以下、モニタリング）」を基本とする。

シミュレーションのモニタリングは、これまでもシミュレーションの途中経過を実時間で直接表示するなどの試みがなされてきた[6]。しかし、特定の計算コードや計算システムに特化したものが多く、場合によっては大幅なコードの書き換えやシミュレーション本体に相当の負荷を与えるものであった。また、大規模シミュレーションの多くはスーパーコンピュータを用いたとしても数10時間から数日、場合によっては数週間から数ヶ月を費やすことも珍しくない。そのため、上記のような実時間でのモニタリングを大規模シミュレーションに適合させることは一般的に難しい。これらのことを踏まえ、ここでは、長時間でかつ大量のデータを扱う大規模シミュレーションを前提にしながら、コードの大きな変更やシミュレーション本体に大きな負担を与えることなく効率的にシミュレーションのモニタリングやさらには様々の解析を行うための情報伝達手法（トリガー送信手法）を考案した。また、これをインターネットが有する情報伝達の利便性や双方向性と結合させることにより、シミュレーションと研究者、さらには研究者

間や研究グループ間の連携を促進するシステムを提案する。ここでは、これらの機能を含んだシステムを総称してSIMON (Simulation MONitoring system) と呼ぶことにする。

本論文の2章では、大規模シミュレーション研究の特徴を整理するとともに、これに基づいて開発するシステムに求められる機能を議論する。3章では、本システムに取り入れた機能を中心に提案システムの概要を説明する。4章では、3次元電磁粒子コードによるシミュレーションを対象に本システムを光量子研究に適用した事例について報告する。5章では、まとめとともに本システムの課題について論じる。

2. シミュレーション研究における情報の収集・配信および交換・共有

本章では、2.1節において大規模シミュレーション研究の特徴を整理・検討するとともに、2.2節では、それに基づいてシミュレーション研究を効率的に進めるための方策とシミュレーションのモニタリングやデータ処理のあり方について論じる。

2.1 大規模シミュレーション研究の特徴

図1は、シミュレーション研究の流れを模式的に示したものである。ここでは、このようなシミュレーション研究の過程を以下のように形式的に分類する。

- (1) これまでの研究や計算結果に基づいてコードの改良や計測プログラムを整備し、目的とする物理現象を再現するための初期値の設定やディスクの確保など、シミュレーションを行うための環境を設定する（数日～数週間）。
- (2) シミュレーションを実行するとともに、シミュレーションの正常動作や実行状況を継続的に監視・管理する（数10時間～数日～数週間）。
- (3) 得られた数値データを解析・評価し、目的とする物理現象を抽出するとともに、共同研究者との議論を通して物理機構を解明する（数日～数週間）。
- (4) 研究の公表や論文を作成する（数週間～数ヶ月）。

ここで、括弧内は必要とされるおよその時間や日数などを目安として示したものである。大規模シミュレーションでは、物理量の数値そのものや一次元的なグラフに加えて、数値データを様々な角度から可視化することによって現象を把握することが多い。これは、大規模シミュレーションの多くが微細な構造やその動的変化を問題とするような複雑現象を対象としていることによる。この場合は、シミュレーション結果が正しく物理結果を反映しているかどうかについても、系全体のエネルギーや運動量などの物理量の推移に加えて、定期的なシミュレーション時刻（スナップ時間）における二次元や三次元の画像を用いて結果の妥当性を判断することになる。特に、外部とのエネルギーの授受を含んだ開放系としてのシミュレーションの場合は保存量が設定できない場合もあり、そのときには画像から得ら

れる物理的なイメージや直感から正常動作を判断しないといけない場合もある。

これまで、シミュレーション結果の解析や可視化作業はシミュレーションの終了後にポスト処理として行うことが多い[図1参照]。しかし、シミュレーションが大規模になり、費やす時間が長くなればなるほど単純な初期値の設定ミスやモデルの適用範囲の逸脱による誤った現象の現出などが計算資源や研究時間の大きな浪費につながるため、これらをなるべくシミュレーションの早い段階に察知することが重要になる。したがって、計算途中でも定期的にデータ処理や可視化を行い、それらに基づいて共同研究者と早期に解析や議論を始めることができれば大幅な時間の短縮につながる可能性がある。このためには、シミュレーションの実行状況や途中経過を効率的に「モニタリング」するとともに、これらを共同研究者間で共有するシステムが必要になる。

2.2 大規模シミュレーションにおける実時間性とモニタリングシステム

これまででもシミュレーションの途中経過を参照するためのモニタリングが計算科学の重要課題の一つとして取り上げられてきた。その中で単純なものは、本体プログラムに画像処理プログラムなどを直接組み込み、それを「実時間(リアルタイム)」で表示させるなどして常時監視する方法である[6]。しかし、シミュレーションの課題や種類によって要する時間はまちまちであり、個人が保有する計算機などでは計算状況の把握は比較的容易であるが、不特定多数

のユーザが使用する汎用計算機ではシミュレーションの経過時間は計算機の使用状況や運用形態によって大きく変化する。したがって、そのような汎用計算機による大規模シミュレーションにおいてリアルタイム性を重視してモニタリングする意味は薄い。むしろ、モニタリングは、シミュレーションを行う研究者にとっての「適切な時間間隔」で最新情報が更新され、しかも特定のソフトやハードに拘束されることなくそれらの情報を時と場所に制限されず多くの共同研究者が簡便に入手できることが重要であろう。また、モニタリングすべきデータの種類も単純な一次元データの場合(系全体のエネルギーや運動量などの推移[2.1参照])もあれば、複雑な構造変化を伴うシミュレーションなどでは二次元や三次元画像によって現象を把握しておくことが必要な場合も多い。モニタリングすべき間隔もシミュレーションの種類に依存し、5分ごとが適切な場合もあれば(例えば、特定な物理量の推移など)、数時間あるいは数10時間毎で十分な場合もある(二次元・三次元画像など)。このように、シミュレーション研究において望まれる「実時間性」は相対的であり、また10時間で終わるシミュレーションと、10時間あるいは100時間かかるシミュレーションでは一般的に異なる。

このため本稿では、この「実時間処理」を「人が最低限実時間と認識する時間(1秒から長くても数秒)以下のデータ交換や変換」として便宜的に定義することにする。例えば、遠隔地間でのテレビ会議などでは、音声や映像などの様々なデータを高速で変換・転送して人に伝える必要があ

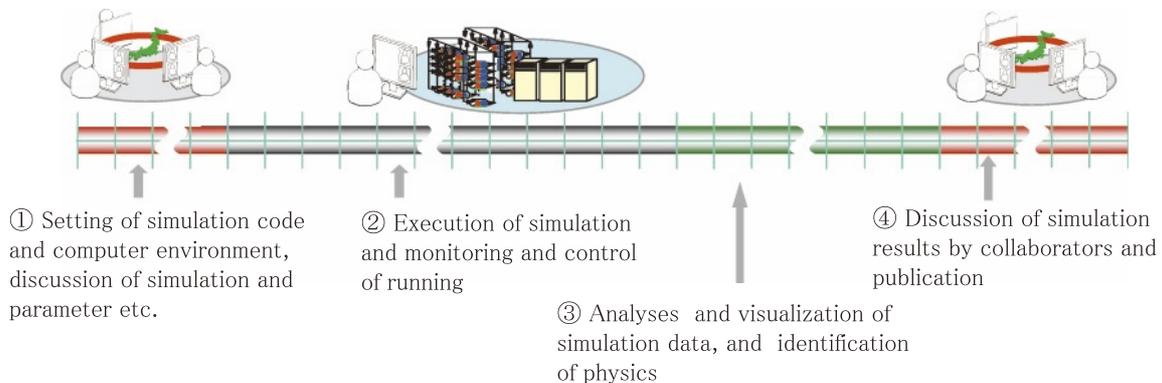


図1 大規模シミュレーションによる研究過程の概略図。異なった時間を要する4つの研究過程①シミュレーションコードの整備と計算機環境の設定、物理課題やパラメータの設定などの議論、②シミュレーションの実行と正常動作の監視・管理、③シミュレーションデータの解析・可視化作業と物理の同定、④共同研究者による結果の議論と公表、に分類されている。

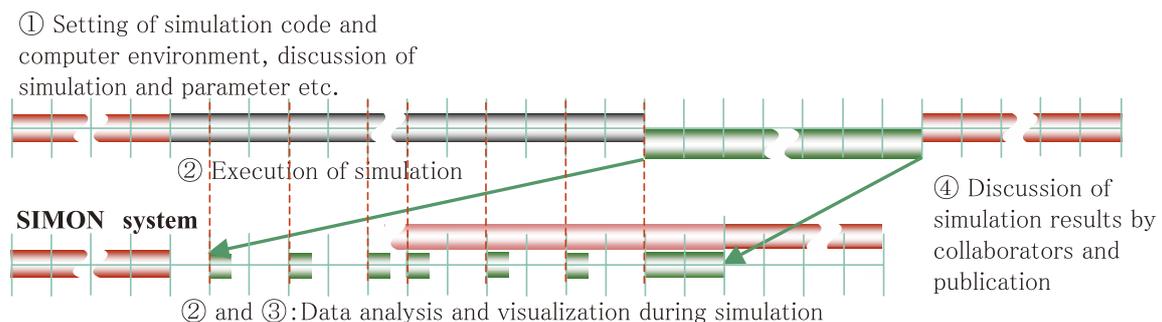


図2 SIMONシステムを導入した大規模シミュレーション研究課程の概略図。シミュレーションデータの解析および可視化作業は、シミュレーションと連動してシミュレーション実行中に行われることから、全体時間が短縮される。

ることから、最低数秒あるいはそれ以下の「実時間性」が必要とされる。これに対して、例えば10時間のCPU時間を要するシミュレーションであれば、モニタリングする更新データの間隔は、保存量などの単純な一次元データであれば比較的短い時間間隔(例えば5-10分程度)に、また、構造などを確認する詳細な画像データであれば比較的長い時間間隔(例えば1時間程度)にとれば十分であろう。また、動画(アニメーション)作成のためのデータであれば、計算途中でモニタリングをしない場合でも連続的な画像再生の観点から短い時間間隔でのデータ処理が必要になる[図5参照]。すなわち、大規模シミュレーション研究を行う環境下では前述の実時間処理とは違った処理形態が必要であり、実時間で常時監視するよりも、監視すべきデータ種に依存した適切な時間間隔で最新情報が更新される環境を作っておくことがより重要である。ここでは、このような研究者にとっての適切な時間間隔による処理方法を「アップデート処理」と呼ぶ。この処理方法の例が図2に模式的に示されている。長時間に及ぶシミュレーションの実行時間[2.1項目(2)参照]を利用して、その間に解析や可視化処理を行い、共同研究者間の議論を早期に始めようとするものである。

3. SIMON システムの概要と要素技術

ここでは、SIMON システムの概要を説明した後、SIMON の基本要素技術である「トリガー送信手法(3.2節)」、「マクロによる画像処理とフォーマティング(3.3節)」および「インターネットによる画像通信(3.4節)」について説明する。

3.1 SIMON システムの概要

SIMON システムの概要が図3(a)に示されている。ここでは、SIMON はシミュレーションを実行するスーパーコンピュータを「クライアント」、前章で説明したアップデート処理を行う外部のワークステーションを「サーバ」として、この両者の間で情報を交換する「クライアント・サーバコントロールシステム」によって構成される。図3(a)に沿って、SIMON を特徴づける三つの機能について以下に説明する。

- (1) スーパーコンピュータで実行される大規模シミュレーションの状況や様々のモニタリングの操作依頼をシミュレーションがタイミングを取りながら外部サーバに伝える情報送信の機能(以下「トリガー送信手法」と呼ぶ)(図3(a)の「Trigger」)
- (2) シミュレーションから送られた依頼に基づいて、外部サーバがスーパーコンピュータに対してデータ転送やモニタリングに必要な各種データ処理や画像処理などを自動的に行うフォーマッティングによるマクロ処理の機能(図3(a)の「Work station 1」における役割)
- (3) 生成されたモニタリングデータ(画像データ)をはじめ、シミュレーションに関わる情報をインターネット(WWW: World Wide Web)で配信する機能

(図3(a)のWWWのServerおよびClientの役割)

上記(1)-(3)に代表されるSIMON システムは、図3(a)からわかるように、シミュレーション(クライアント)は実行中にモニタリングを行うための情報のみを外部サーバに送信し、時間を要する様々なデータ処理や画像処理はシミュレーション本体から依頼を受けた外部サーバが行う仕組みになっている。スーパーコンピュータ側はこの外部サーバでの処理とは無関係にシミュレーションを実行しディスク上にデータを生成するが、データ転送のアクションを起こすのはシミュレーションから依頼を受けた外部サーバ側である。このとき外部サーバは異なった場所に複数であってもよい。この場合、シミュレーションはそれぞれのサーバに向けて異なった情報や依頼を送信し、処理を分業化することができる。さらにサーバはこれらの処理結果をインターネットで配信することができる。

この一連の操作によって共同研究者は世界中のあらゆる場所から進捗しつつあるシミュレーションの状況を把握することができる。また、本システムは、シミュレーションのモニタリング機能に加えて、それまで蓄積された計算結果や解析結果、共同研究者間の議論や関連した論文などをデータベース化することによりシミュレーションに関わる関連データを系統的に参照する機能を付加している。中核となるモニタリング機能に加えて、上記のような複数の機能を組み合わせることにより、「多くの研究者が関与する総合的なシミュレーション研究のプラットフォーム」を構築しようとするものである。これらの機能を有効に引き出すためには大規模シミュレーションと既存技術を有効に結びつけることが重要であり、次節では、このシステムの鍵となる要素技術について概説する。

3.2 トリガー送信手法

3.2.1 トリガー送信の背景と概要

大規模シミュレーションを実行することができるスーパーコンピュータの設置場所(あるいは設置機関)は限定されていることから、ここでは、シミュレーションに携わる研究者はスーパーコンピュータに直結した(基幹ネットワークを介する必要のない)ローカルなサイトにいない場合を一般的に想定する。その場合は、シミュレーションの終了後に必要な数値データをローカルなワークステーション(WS)に転送して解析や画像処理を行うことが多い。もちろん、これらの処理をスーパーコンピュータで行うことができればデータ転送の必要はないが、個々の研究者の要望に応じてスーパーコンピュータ上に様々なアプリケーションを導入したり、ソフトウェアの環境を設定したりするのは運用の観点からも困難であり、また好ましいともいえない。

一方、シミュレーションの大規模化は進み、テラフロップレベルのスーパーコンピュータを用いても長期にわたるシミュレーションを行うことも少なくない[2.1(1)-(4)参照]。その場合、一定の時間間隔で大量のデータがファイルとしてディスク上に出力されるが、これらを個々の研究者がすべてマニュアルで操作することは困難である。最近で

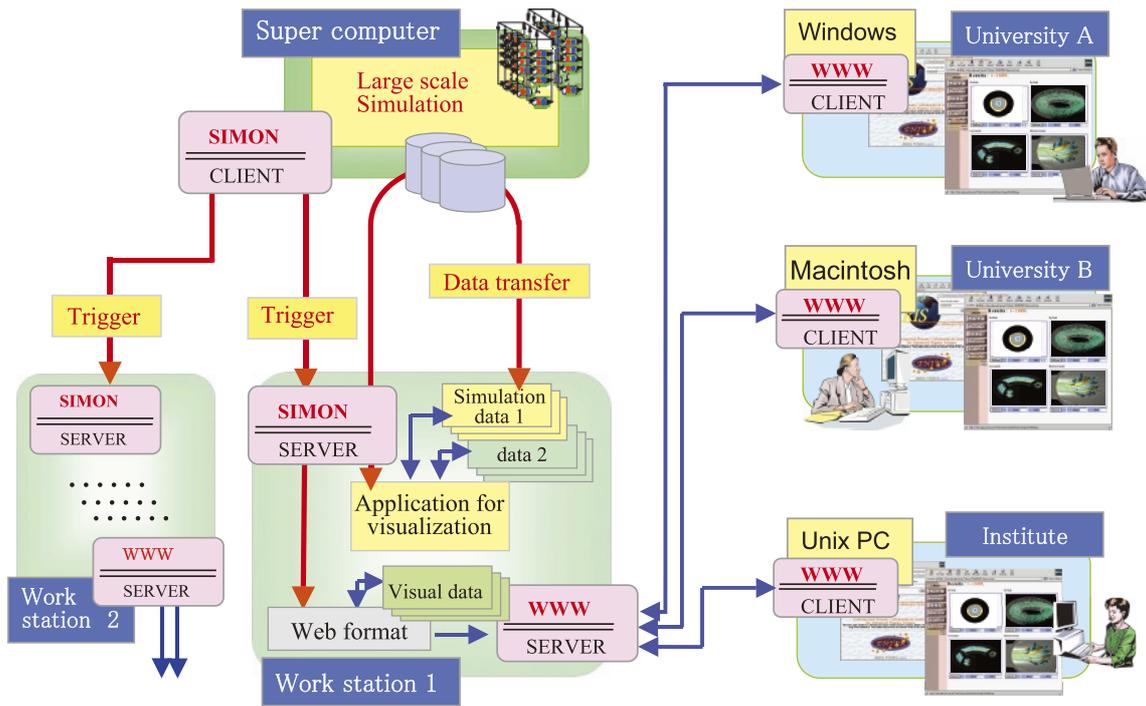
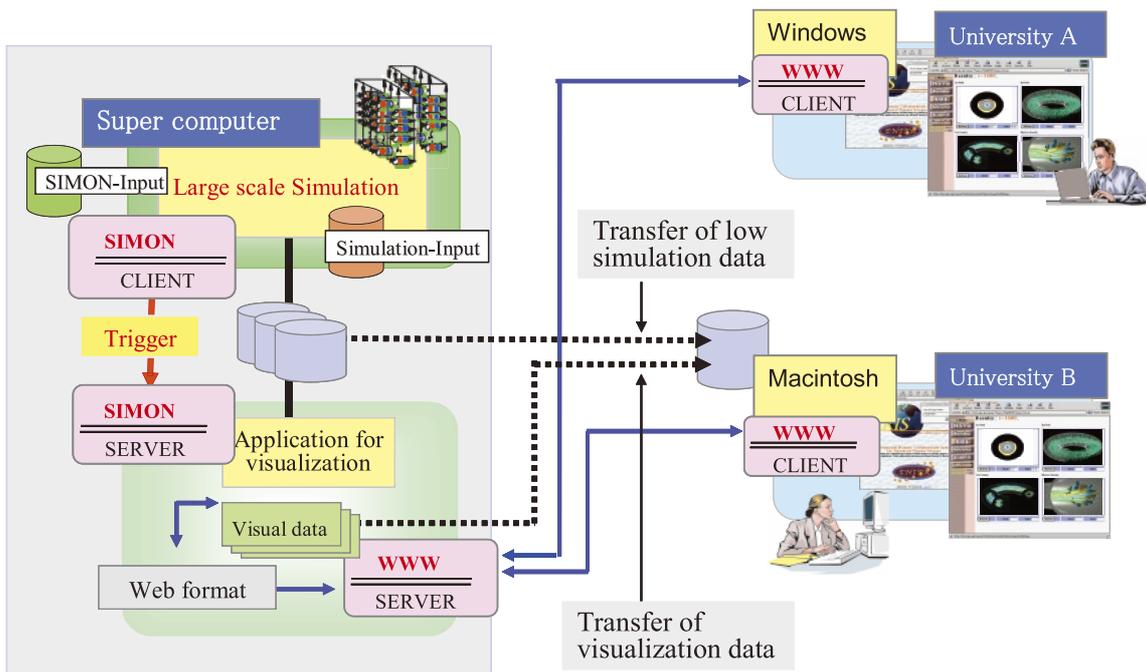


図3 (a) SIMON システムを導入した大規模シミュレーションと Web による遠隔共同研究の概略図。トリガー送信によってシミュレーションから依頼を受けたサーバはデータ転送や、サーバに用意されたアプリケーションを用いて解析や可視化作業をシミュレーション実行中に行い、インターネットを介して Web に送信する。



(b) スーパーコンピュータのディスクと画像処理装置のディスクが共有されたローカルな計算機システムに SIMON を提供した遠隔共同研究の概略図。SIMON はスーパーコンピュータと画像処理装置のローカルな環境下でトリガー送受信を行い、画像データは WWW に直接配信される。また、共同研究者の要請に従って、シミュレーションの生データや画像データがトリガーシステムによって研究者に転送される。

はこのような状況に対応するため、スーパーコンピュータの特定ノードを解析用に割り当てたり、ディスク環境を共有した解析・画像処理サーバを別途用意したりすることがある [図3 (b)]。この場合もデータ転送の必要はないことから処理工程の短縮にはつながるが、依然としてシミュレーションと可視化処理は独立であり、研究者がシミュ

レーションの状況を監視しながらマニュアルで解析を行わないといけないことに変わりはない。このような状況を背景に、ここでは2章で検討したシミュレーションの途中経過の「アップデート処理」を例に、シミュレーションの実行と可視化を含むポスト処理を一体化(もしくは自動化)することによりシミュレーション研究の効率化を図るシステ

ムの検討を行う。

シミュレーションの進展状況を察知してその途中経過をモニタリングするには以下の二つの方法が考えられる。

- (a) ディスク上に生成されるファイルあるいはファイルに更新される出力データを時計代わりに利用する「受動的的方法」(外部からスーパーコンピュータのファイルや出力データを定期的に監視するなど)
- (b) 実行中のシミュレーションに進行状況を知らせる何らかのアクションを起こさせる「能動的的方法」(シミュレーションから外部サーバに信号を送るなど)

前者はコードの変更を伴わないことから一見単純に見えるが、シミュレーションの実行状況をあらかじめ予測するなどして外部サーバからスーパーコンピュータに定期的にアクセスする必要がある。また、シミュレーションが長時間待ち状態にある場合などは不要なアクセスを多数繰り返すことになる。一方、後者は、シミュレーション自身が進展状況に応じてアクションを起こすことからタイミングを把握するための労力は発生しない。特に、長時間のCPUを要するシミュレーションではスーパーコンピュータの混み具合や運用によって進行が左右されることから、シミュレーション側が様々な解析処理や画像処理のタイミングを能動的に決定する方法は合理的であろう。しかし、アクションを起こさせるためのプログラムの変更が必要となるほか、シミュレーション本体から見れば二次的な操作であるモニタリングのためにシミュレーションの実行そのものが影響を受けることも予想される。

本研究では、シミュレーション側が様々なタイミングを決定する後者(b)の「能動的的方法」を選択するが、システム構築にあたっては以下の点に留意している。

- (1) シミュレーションコードの書き換えや変更は簡易的かつ最小限であり、プログラムの全体構成に変化や影響を与えないこと。
- (2) シミュレーションの実行時間の増大やアクションを起こすことによるシミュレーションの中断などをもたらさないこと、またネットワークトラブルなどの外的な要因にもシミュレーション本体は左右されないこと。
- (3) 特別なアプリケーションを利用することなく、既存技術の応用、もしくは、それらを組み合わせることで構築すること。

これらの要件を念頭において開発するシステムの具体的な内容について以下に説明する。図4は、上記(b)の能動的な方法を採用した場合のシミュレーションの流れを示している。従来のプログラムの流れ [図4(a)] に対して、図4(b)は、計算1の終了後に外部サーバにデータ転送を行い、その終了を待って次のデータ処理や画像処理を行うルーチンをシミュレーション内部に組み込んだ場合を示している。この方法ではシミュレーションの経過時間が長くなる

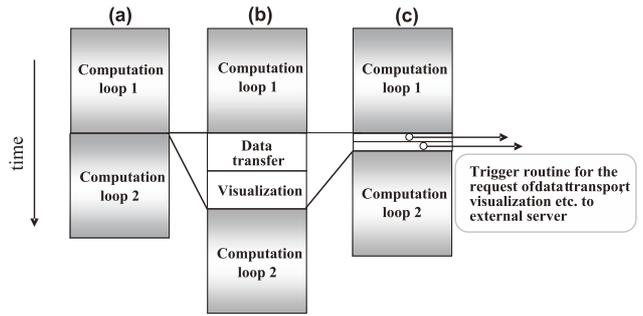


図4 シミュレーションのループとトリガーの役割。(a)付加的操作を含まない基本的なシミュレーションループ、(b)データ転送や可視化作業を含んだシミュレーションループ、(c)「トリガー送信」により外部サーバに対してデータ転送や可視化作業の依頼を行うシミュレーションループ。外部計算機で実際の処理を行う。ループの幅は動作時間を模式的に表す。

ことに加え、ネットワークトラブルなどで予想外の時間を要したり、シミュレーションが中断したりする場合も考えられる。また可視化過程で問題が発生すればシミュレーションが中断される可能性もある。アップデート処理は本来のシミュレーションの実行とは独立した処理であることから、データ転送や画像処理などの二次的な処理に伴うトラブルは大規模シミュレーションにとっては致命的になる。

これらを考慮して本稿では図4(c)の方法を提案する。これは、シミュレーション実行時にあらかじめ設定されたタイミング [図4(c)の場合は計算1の終了後] でアップデート処理を行う「依頼信号(情報)」だけをシミュレーション(クライアント)側から外部サーバに送信するもので、「外部サーバにアクション起こさせるための合図を送信する(サーバの引き金を引く)」意味から本論文ではこれを「トリガー送信手法」と呼ぶことにする。この手法では、シミュレーション本体から依頼を受けた外部サーバは依頼情報で指定された内容に従ってアップデート処理を開始する。このプロセスが図3に示されている。シミュレーション本体からトリガー送信により「データ転送」と「画像処理」の依頼を受けた外部サーバ(SIMON-Server)は、シミュレーションが実行されているスーパーコンピュータのディスクに自動的にアクセスし、依頼情報に指定されたデータファイルを外部サーバのディスクに転送した後、そのデータを用いて依頼された画像処理を順次行う。

3.2.2 トリガー送信手法の内容

トリガー送信手法の具体的な手法を記述する前に、本システムが想定している計算機環境について言及しておく。本システムの構築にあたっては、3.2.1の留意事項(3)を重要なガイドラインとして位置づけている。これは、システムの汎用性を高めるとともに、その時点での新しい技術を取り入れやすくするためである。また、現在ではシミュレーションを実行するスーパーコンピュータのOSはUNIXが一般的であることや、多くのシミュレーションコードはFOTRANもしくはC言語などによってモジュールが作成されていることに着目し、これらの計算機環境を想定し、その下で一般的に使用されているコマンド群を組み合わせることでトリガー送信手法の構築を試みた。具体

的には、以下の手順で行う。

- (1) シミュレーションコードにおいて、対象とする計算ステップ(データ出力なども含む)終了後、外部サーバ (SIMON-server) へ送信する依頼情報の作成と送信に関するルーチンを挿入する。コード内での呼び出しは主にCALL文となり、ルーチン内では、Character操作で依頼情報を作成した後、Remote Shell (現行バージョンは同様の機能をもつSSHを使用)でSIMON-Serverに情報の送信を行う。

注意： 依頼情報の作成については、あらかじめ用意されたSIMON専用のinputファイル[図3(a)参照]から情報を抽出する(通常のinputファイルとの併用も可能)。このSIMON-inputには、code名、run名等のデータベース情報と可視化などに用いられる各種数値情報が含まれる。また、依頼情報の送信に関してはwrite文後に行われる計算ノードからI/Oノードへの出力とファイル転送依頼の実行との同期を図るため、必要とした場合は、CALL flushによるデータ出力終了を待って情報の送信を行う。

- (2) 依頼情報を受け取るSIMON-Serverは、その情報を一度SIMON-Server用のQue-system (FIFO)にスタックし、シミュレーションに実行権を返す。SIMON-Serverは、シミュレーションの実行とは独立にスタックされた情報に基づいてアップデート処理を随時実行する。この処理は依頼情報が最初にスタックされると同時に起動され、以降、スタックされたデータがなくなるまで実行を続ける。

注意： この実行権を返す動作により、仮にネットワークトラブルなどによって依頼情報がサーバに届かなかった場合でもシミュレーションはそのまま継続される。また、依頼情報を一度Que-systemにスタックする動作は、一つのシミュレーションが異なった依頼情報を異なったタイミングで逐次的に発行することを想定したものであり、サーバにおいて一つの依頼に対するアップデート処理が終了するよりも早いタイミングで次の依頼情報が逐次送られてくる場合に対応するためのものである。

これは、一つのシミュレーションにはモニタリングする複数の物理量があり、モニタリングするタイミングはそれぞれ異なることによる。例えば、系全体で積分したエネルギーや運動量などはデータ量が少ない反面、短い時間間隔でデータを取得し、連続的な一次元図としてそれらの推移を監視するのが望ましい。一方、全体構造や限られた領域の微細構造はデータ量が多い反面、比較的長い時間間隔で監視すれば十分な場合が多い。このように、データの種類の依存してトリガー送信を行うタイミングを決定する様子が図5に示されている。これらは、同一の

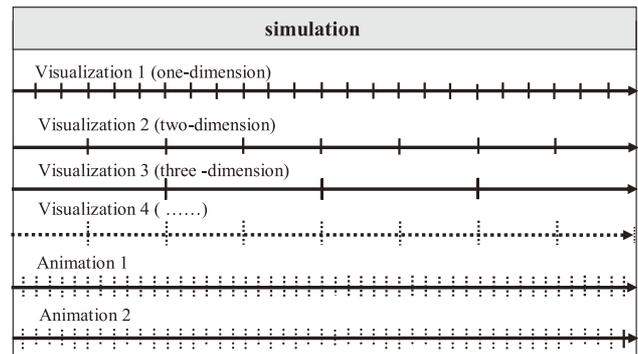


図5 外部からの監視・参照(モニタリング)の目的に依存した様々なアップデート処理のタイミング。一次元のグラフ作成の時間間隔は密である一方、二次元や三次元画像作成の時間間隔は粗である。アニメーションのデータ間隔がスムーズな動きを再現するため短い時間間隔で得る必要があることに注意のこと。

サーバで逐次的に処理する場合もあれば、図3(a)に示されるように、アップデート処理の内容に応じて異なった複数の外部サーバにトリガー送信を行い処理することも可能である。なお、仮にこれらのアップデート処理が異常終了したとしても、シミュレーションコードへの影響はないことを付記しておく。

このトリガー送信手法は、シミュレーションコードを「クライアント」と見なせば、クライアントからの依頼に対して外部ワークステーションであるサーバが受付(対応)を行う「クライアント・サーバコントロールシステム」と位置づけられる[3.1節参照]。図3(a)では、シミュレーションからの依頼としてデータ転送や画像処理を例題として考察したが、これらに限ることなく様々な依頼情報や実行命令を発行することができる。電子メールなどとリンクしたシミュレーションの開始や終了の合図、シミュレーションに問題が生じた場合の共同研究者への連絡や会議システムの起動など、シミュレーションのタイミングと連動した多様なイベントに関して能動的に環境を設定することができる。

3.3 マクロによる画像処理とフォーマット

大規模シミュレーションでは、現在では二次元や三次元画像による解析が一般的になっている。これは、取り扱う現象が複雑化しているため、微細構造とともに全体構造を統一的あるいは直感的に把握する必要性が高まっていることによる。また、静止画だけでなく、動画(アニメーション)から発見される物理現象も多く、精緻かつ迅速な画像処理が要求されている。

可視化には、一般的に、(a)コードに適応した専用のポストプロセッサを利用する方法と、(b)商用の可視化アプリケーションを利用する方法がある。しかし、商用の可視化アプリケーションを利用する場合は、解析対象が複雑になるとともに利用方法も複雑になるため、アプリケーション特有の専門知識がしばしば必要になる。また、専用のポストプロセッサをコードに組み込むにはさらに高度な可視化

技術に関する知識が必要になったり、アプリケーションの導入に伴うコードの改良やチューニングを行ったりする必要がある。これまで多くの場合、可視化を行う際には上記(a)(b)のいずれかを選択するか、あるいは組み合わせることによって研究者が個人ベースで対応してきた。しかし、最近の一部の商用の可視化アプリケーションでは、従来の汎用可視化アプリケーションの特徴である双方向的（インタラクティブ）に利用できる機能と同時に、これらの手続きをマクロ化することにより可視処理を一括して行うことができるアプリケーションが市販されるようになり、実際の使用にも十分に耐え得るレベルになりつつある。

可視化アプリケーションである EnSight Gold[7]や AVS/Express MPE[8]を例にとると、これらはインタラクティブに行った可視化手順を状況に応じたマクロファイルとして保存する機能が標準的に装備されており、ユーザはマクロの作成についても比較的容易に行うことができる。これらマクロ処理が可能な汎用の可視化アプリケーションを利用することで、専門知識を要する専用のポストプロセッサを作成することなく可視化処理を比較的容易に行うことができるとともに、合わせて、従来の可視化専用アプリケーションの柔軟性や機動性を取り込むことも可能になってきている。実際、上記の可視化アプリケーションでは、 512^3 の三次元格子や30億個の粒子といった大規模データにも対応が可能であり、データの入出力対応の柔軟性や処理速度の高速性、操作の容易性などにも優れている[9]。また、可視化の表示方法は、二次元等高線や三次元等値面によるアニメーションに加え、多数の粒子を同時に追尾するアニメーションやボリュームレンダリング[10]、さらにVR (Virtual Reality) など、多様に存在する。研究者がこれらの画像を効率的に表示させるデータの「フォーマット（整形）」を行うことができればシミュレーションデータの多様な解析が可能になる。このフォーマットを行う手法として、本研究ではHTML (Hyper Text Markup Language)を利用する。HTMLは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質をもっている。このHTMLは、WWWでの利用を前提としており、文字、画像、動画などの異なるデータを「リンクする」という概念で一つに結合させることができる。

さらにインターネットの持つ双方向性の機能に着目し、本論文で行っている基本的なシミュレーションのモニタリングだけでなく、さらに踏み込んだ詳細な解析を行うことを目的に、シミュレーションをモニタリングする研究者がWeb Browserを通してインタラクティブにシミュレーションデータの解析や画像処理を行える機能を付加する研究を進めている。現在のSIMONでは、一次元図における縦軸や横軸、二次元等高線の色調や三次元等値面の等値変更など、解析状況に応じた再描画に関する機能が付加されている（実際、図6の例題ではこれらの機能が装備されており、Web Browserから、可視化アプリケーションが有するほとんどの機能を利用することができる）。詳細は次論文に譲るが、シミュレーションの解析手法や可視化手法も

そのレベルと機能によって階層化し、それらを組み合わせることによって、シミュレーション研究を行っている共同研究者のニーズに答えることができる。

具体的には、事前に用意された基本的なシミュレーションのモニタリング機能を「第一階層（基本解析階層）」、Web Browser上で様々な設定変更をインタラクティブに行う機能を「第二階層（Web解析階層）」、さらに、実データの転送・交換を含めて手元で直接解析や可視化を行う機能を「第三階層（詳細解析階層）」に分類して、それぞれに対応した機能の開発を行っている。

3.4 ネットワークセキュリティと画像転送

1章および2章で議論したように、大規模シミュレーションを中心に据えた研究では、地域的に分散した共同研究者間でシミュレーションに関する様々な最新情報を適切な時間間隔（アップデート時間）で共有する必要があるが、その際、ネットワークを介して転送する情報量やそれに有する時間、およびセキュリティが重要な要件となる。本節ではそれらについて考察する。

3.4.1 セキュリティ

近年、各機関ともネットワークのセキュリティ強化により、外部機関との接続は標準的なネットワーク接続を含めTCP/IP Serviceを停止する機関が多く見られる。すなわち、いずれの研究機関も他機関との連携を積極的に強調する一方、電子的な情報交換は極めて限られた手段に限定される傾向があり、研究活動の大きな足枷となりつつある。SIMONは、今後、様々の機関との連携を積極的に図って行く観点からSSL (Secure Socket Layer)を利用しており、トリガー送信にはSSH、可視化データの表示にはHTTPSを使用している。しかし、SSLだけのセキュア設定ではセキュリティ対策として不十分と判断される場合もある。その場合、SIMONは、ローカルエリアネットワーク環境下での利用を主とすることになり、グローバルエリアでの使用はSIMON-client（スーパーコンピュータ）およびSIMON-Serverを設置する研究機関のネットワーク規則に従った範囲内での使用に限られる。

3.4.2 データ伝送

昨今のネットワーク網の高速化によりデータ転送は確実に速くなっているが、それらがシミュレーションの数値データ群全体の転送に対応しているかどうかはシミュレーションの規模や研究形態に依存する。例えば、後述(4章)する3次元粒子コード (EPIC 3D)を例にとると、シミュレーションの規模が、空間の分点数 256^3 、速度空間の分点数 20^3 (1次元あたり 20 bin) の場合を考えると、全空間分点数の情報保持した速度分布関数 ($f(r, v, t)$) の容量は1スナップ時間あたり約1.9 TBとなる。この出力データを転送しようとする、一部の大学・研究機関ではSuper SINET[11]のような高速ネットワーク網 (10 Gb/s、ただし、中継基地から各研究機関までは1 Gb/s程度)を有しているものの端末部まで上記の転送速度を保持している環境は稀であることを考えると転送に長時間かかることが想定され、現実的ではない。この場合は、可視化や解析に必要な最低限のデータだけを取り出して転送することになる。

例えば、空間分点数を 256^3 の実空間情報に限定した場合、binary形式 (real*4) でデータ出力すると、1スナップショットあたり約67MBとなる。通常、1回の出力には複数の物理量(例えば、後述するEPIC 3Dでは、電子や価数別イオンの密度・温度分布、速度場などの実空間分布に対して約30種類)が含まれるため、1スナップショットで2GBを超えるデータ量になる。しかし、このデータサイズでの転送時間はおよそ35分程度であり(京都大学での計測(転送速度を約1Mb/s)に基づく)、2.2節および3.2.2で論じたように、共同研究者全体を対象とした画像データ配信の「適切な時間間隔」は比較的長くてよいことを考えれば(例えば、4章の例題では2時間)対応可能な範囲内である。

また、図3(b)に示されているように、スーパーコンピュータに画像処理機能が搭載されている場合やスーパーコンピュータのディスクと画像処理装置のディスクがローカルに共有されている場合は、SIMONのクライアント・サーバシステムをスーパーコンピュータと画像処理装置の間で組めばデータ転送の必要はなくなる[3.2.2参照]。この場合は、生成された画像データを3.3節の手順に従ってWebに配信するだけでなく共同研究者の要請に応じて転送することも可能である。実際、画像データをホームページでの表示に一般的に利用されるJoint Photographic Experts Group (JPEG) や Tagged Image File Format (TIFF) で保存した場合、サイズや色調の精度、あるいは圧縮方法にもよるが、600 dpiの画像データが5MBを超える場合は稀である。また、論文作成などに広く利用されるEncapsulated PostScript (EPS) データでも10MBを超えることは

ほとんどないことから、画像データの転送は十分短時間(1分以内)で行うことができる。このため、特に大規模のシミュレーションでは計算結果を実データとして転送するよりは画像データとして転送の方が効率的な場合もある。実際、数100TFLOPSレベルあるいは次期京速コンピュータ[12]のようなPFLOPS (10^{15} FLOPS) レベルのシミュレーションになれば画像転送が中心的な役割を果たすことが考えられ、スーパーコンピュータのシステム構成と連携してSIMONの構成 [図3(a)あるいは(b)など] を考える必要がある。

一方、そのような状況においても、共同研究者が様々な目的に応じた詳細な解析や可視化をフレキシブルに行うため、数値データを手元に保持する要請がなくなるわけではない。その場合は、例えば、トリガー情報として“転送を行う時間帯”などを設定(ネットワーク負荷の少ない夜間など)するなどの工夫も考えられる。SIMONシステムはこのような多様なニーズに系統的に対応することが可能である。

4. SIMON システムの適用例

ここでは、3章で概説したSIMONシステムを実際のシミュレーション研究に適用した例について紹介する。本適用例では、図3(b)のようにスーパーコンピュータのハードディスクとその解析を行うための画像サーバのハードディスクが共有されているシステム[13]を使用していることからデータ転送は必要はない。したがって、シミュレーションは、「画像処理」および「インターネット配信」を依

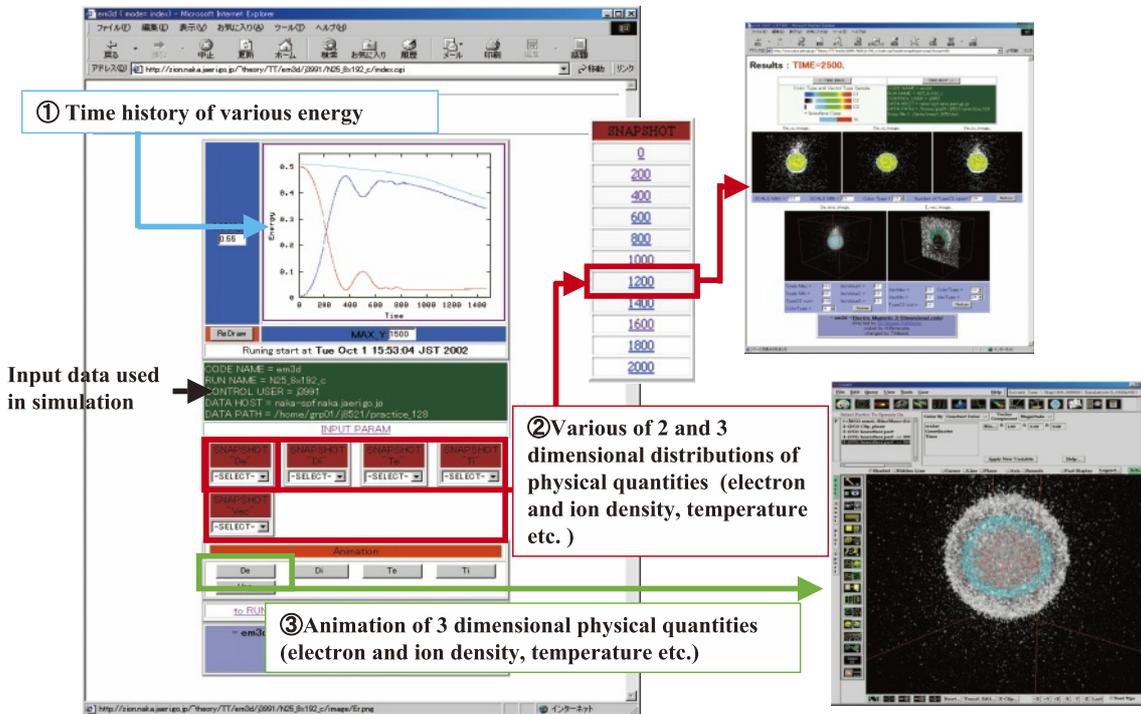


図6 SIMONシステムを用いてwebページ上に表示されたレーザークラスタ相互作用シミュレーションの様々な情報。①シミュレーションの全領域で積分された電磁場と各種粒子系のエネルギーの時間発展、②各々のスナップショット時間におけるxy,yz,xz平面の電子密度分布の二次元画像。それぞれのスナップ時間を選択して画像表示する。③ポリボリュームレンダリング法による3次元電子密度分布の動画。

頼するトリガー送信を外部 SIMON サーバに送信し、依頼を受けた SIMON サーバは出力データと画像サーバに用意されている可視化マクロを用いて画像データを作成する。作成された画像データは Web Server に転送され、同時に表示に必要な情報や HTML データを作成する [図 3 (b) 参照]。ここでは、高強度レーザーと物質との相互作用などを研究するための実空間三次元の相対論的粒子コード (EM 3D) [14] を使用し、高エネルギー粒子発生や高強度の X 線発生で新しいスキームとして期待されている高強度レーザーとクラスターと呼ばれる粒状物質 (組成はアルゴン) の相互作用に関する共同研究に適用した [15]。

図 6 は、パルス長 50 フェムト秒、最大強度 10^{18} W/cm² の高強度極短パルスレーザーを半径 24 ナノメートルのアルゴンクラスターに照射したときのクラスターの膨張 (クーロン爆発) 過程を EM3D によってシミュレーションした結果を示している。CPU 時間はおよそ 20 時間 (追跡する物理時間は 200 フェムト秒) である。ここでは時間間隔の異なる以下の 3 種類のトリガー送信を EM3D に組み込み、シミュレーションを行った。

- ① 電磁場のエネルギーやプラズマを構成する各イオン種および電子の運動エネルギー、システム全体のエネルギーなどの時間発展 ($N=200$, $\Delta T \sim$ 約 6 分)
- ② クラスターを構成する電子およびイオンの密度分布と温度分布の二次元・三次元静止画像 ($N=10$, $\Delta T \sim$ 約 120 分)
- ③ クラスターの電子およびイオンの密度分布、電子温度分布の三次元動画像 (アニメーション) ($N=100$, $\Delta T \sim$ 約 15 分)

ここで、 N はトリガー送信の全体回数、 ΔT はトリガー送信を発行するおおよその時間間隔を示している。SIMON サーバは、シミュレーション実行時に、トリガー送信と同じタイミングで出力される各種データと依頼内容に従って異なった可視化を順次行い、その結果を Web に配信させる。図 6 では、クラスター膨張時における電子密度の 3 方向からの分布、イオンの三次元ボリュームレンダリング画像、電場のベクトル場が表示されている。系全体で積分された電磁場や粒子のエネルギーはおおよそ 5 分ごとに更新され、表示される [図 6 ①]。各種物理量の二次元および三次元画像はおおよそ 2 時間毎に更新され、サーバに格納される [図 6 ②]。また、3.3 節で論じたように、本 SIMON システムには Web 上からインタラクティブに等高線や等高面の値を設定できる機能も付加されている。図 6 ③ は電子温度分布の三次元動画像 (ボリュームレンダリング) を示しており、シミュレーション実行時でも、その時間までに終了した結果の動画像を見ることができる。

ここでは粒子シミュレーションから得られる密度や温度、速度場などの物理量について示したが、サーバ上で様々な解析ソフトを起動させて解析を行い、その結果を表示させるのも基本的には同じ操作である。

5. まとめと今後の課題

本稿では、昨今の科学・技術研究において重要性を高めているシミュレーション研究を効率化に進めるため、大規模シミュレーションを中心に据え、地理的および分野的に分散した多くの共同研究者が参加できる新しいシミュレーション環境 (SIMON システム) の提案を行った。このシステムは、長時間の CPU 時間を必要とする大規模シミュレーションの特性を利用するものであり、シミュレーション自身が実行中にタイミングをとりながら外部サーバに対してデータ転送や画像処理などの様々な解析処理を依頼するトリガー送信手法を導入することにより、シミュレーションに関わる様々の最新情報を共同研究者間で共有しようとするものである。本手法は、シミュレーション後に様々な解析を行う従来の「ポストプロセス (Post-process) 処理」に対して、シミュレーション実行中に随時解析を行う「アップデート (Up-date) 処理」として位置づけられる。このトリガー送信手法はシミュレーションの実行を最優先に考えたシステムであり、ネットワークのトラブルなどで依頼内容が外部サーバに伝達されなかった場合でもシミュレーション本体に影響を及ぼすことはない。また、本 SIMON システムは、汎用性を高める観点から、特別のハードウェアやソフトウェアを使用することなく一般的に取得可能な既存技術もしくはそれらを組み合わせることによって構築した。実際、トリガー送信を発行するクライアント部は C 言語もしくは Fortran 言語によって書かれたライブラリであり、依頼に沿って実行するサーバ部は、Shell プログラムおよび Perl 言語プログラムで構成されている。

本研究では、開発した SIMON システムを核融合研究や光量子研究などで用いる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や有用性を検証した。その結果、基本的には 3.2.1 における (1)~(3) の要件を満たし、4 章の導入例で示したように実際の研究活動に十分に役立てることができるレベルであることがわかった。しかし、合わせて様々な課題も明らかになった。

その一つはシミュレーションコードや計算結果のデータベース化とそれらデータの検索・削除・保存といったデータベースの履歴管理面の問題である。本システムでは、Code, Host, User, Run などで分類されたメタファイル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が、シミュレーションの実行回数が少ない段階では上記のような識別方法でも十分な検索能力があった。しかし、実行回数が増えていくに従って識別に時間を費やすことがわかった。このため、検索能力の向上は不可欠である。改善の手法としては、上記の内容を含んだメタファイル以外に、シミュレーション結果の画像 (等高線の色調割合など) による新たな検索手法などが考えられる。また、ハードディスクなどの資源の制約と関係して、データの圧縮や削除の選択など、データマネージメントに関連するシステムの開発も望まれる。

さらに、セキュリティも重要な課題である。本システムでは、トリガー送信手法および、Web によるシミュレーション結果の配信についてそれぞれ OpenSSH、および

HTTPSを使用している。しかし、トリガー送信手法における現在の認証方法は、RSA公開鍵暗号方式とアクセス制限を設定した手法を採用している。この手法は、パスワードなしの設定で依頼情報の送信を行っていることからセキュリティ面においての課題を残しているが、Remote Shellと同様の機能（パスワード不要なアクセス権）を持たせる必要があったため、現在はこの設定でトリガー送信手法を行っている。一方で、ssh-agentの利用も考えられるが、SIMON-Client側（大型計算機）での設定を必要とすることから大型計算機の運用方針への関与を余儀なくされるため、ここではこれを除外した。したがって、今後のセキュアに対する課題として、通常下では未使用のPORTを利用し、かつバッファオーバーフロー攻撃に対応するような「セキュア対応型トリガー送信システム」を構築する必要があると考えている。

機能拡張については、遠隔共同研究の観点から、共同研究者間での画像の共有システムが考えられる。例えば、EnSight Goldなどの可視化アプリケーション[7]では、複数のクライアント間で同期をとるコラボレーション機能を有しているが、本システムでも、Web browserを通して画像の実時間同期をとるようなコラボレーション機能を付加したいと考えている。また、本システムはトリガー送信手法によってどのようなアプリケーションに対しても実行依頼を行えることから、Virtual Reality (VR)などの先進画像表示システムへの実行命令や、テレビ会議システムとの連携など、様々な側面から考慮された遠隔共同研究環境を提供することも視野に入れている。また、シミュレーションコードの実行を主体とした共同研究だけでなく、シミュレーションコード自身の改良や計測ルーチンの付加など、シミュレーションコードの開発に関わる共同研究なども今後視野に入れる必要がある。

本論文では割愛したが、SIMONシステムと並行して「Internet based Remote Intercommunication System (IRIS)」と命名しているシミュレーションを中心に据えた総合的な遠隔共同システムの開発を進めている。これは上記のようなシミュレーションの共同研究に関わる多様な要請に答えるため、様々なソフトを研究支援用に改良したコミュニティ群から形成されており、本SIMONシステムはその中心的な要素に位置づけられている。IRISシステムの全容については他論文で紹介する予定である。

謝 辞

本稿におけるシステム開発に関して貢献および有益な助言をいただいた川野辺満氏、正木知宏氏、宮戸直亮博士(日

本原子力研究開発機構)に感謝いたします。本文4章の導入例は、福田祐二博士等との共同研究(日本原子力研究開発機構)によるものである。また、本研究に支援をいただいた日本原子力研究開発機構那珂研究所および同研究機構の菊池満博士および二宮博正博士に感謝いたします。

参考文献

- [1] 国際熱核融合実験炉ホームページ: <http://www.naka.jaea.go.jp/ITER/>, 岸本浩, 下村安夫: 日本物理学会誌 **57**, 383 (2002), および, 若谷誠宏, 田中知: 日本物理学会誌 **57**, 399 (2002) など.
- [2] 国立点火施設ホームページ: <http://www.llnl.gov/nif/>
- [3] 岸本泰明: 小特集「プラズマ・核融合シミュレーションの発展と将来への期待-磁場閉じ込め核融合の観点から-」, プラズマ・核融合学会誌 **80**, 372-405 (2004).
- [4] 坂上仁志, 岸本泰明, 千徳靖彦, 田口俊弘: 「特集/レーザー核融合とレーザープラズマ応用の発展: 粒子コードによるレーザープラズマ相互作用シミュレーションの発展」 プラズマ・核融合学会誌 **81**, Supplement, 64-75 (2005).
- [5] 岸本泰明: 小特集「異なった時空間スケールが関与する多階層シミュレーション研究」, プラズマ・核融合学会誌 **79**, 460 (2003).
- [6] リアルタイム可視化システム VisLink: <http://www.kudpc.kyoto-u.ac.jp/Service/Application/AVS/vislink.html>
- [7] YBERNET SYSTEMS EnSight Gold ホームページ: <http://www.cybernet.co.jp/ensight/>
- [8] 株式会社ケイ・ジー・ティーホームページ: <http://www.kgt.co.jp/product/avs/express/mpe>
- [9] 鈴木喜雄, 岸本泰明, NEXTグループ: “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).
- [10] 小山田耕二: “サイエンティフィックビジュアルライゼーションの最新動向” Information Processing Society of Japan **42**, 1 (2001).
- [11] Super SINET ホームページ: http://www.sinet.ad.jp/s_sinet/index.html
- [12] http://www.nsc.riken.jp/index_j.html
- [13] 井戸村泰宏, 足立将昌, 五来一夫, 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).
- [14] Y. Kishimoto, Annual Report of the Earth Simulator Center **04**, 199 (2004).
- [15] Y. Fukuda, Y. Kishimoto, T. Masaki and N.K. Yamakawa, Phys. Rev. A **73**, 031201(R) (1-4) (2006).