

スーパーコンピュータによるシミュレーションデータなどの可視化について

福田優子

大阪大学 レーザーエネルギー学研究センター

概要

大阪大学レーザーエネルギー学研究センター（以下、「本研究センター」と略す）では20年以上前から、シミュレーションデータや実験データの解析のために様々な可視化を利用している。最近、パーソナルコンピュータなどで様々なソフトウェアが流通しており、研究者や学生が自ら可視化でき、研究に役立てている。主に膨大なシミュレーションデータの可視化を、実際の研究でどのように行ってきたか、どのようなことに苦労してきたかなどを、さまざまな具体的事例を交えて紹介したい。

計算機、ネットワークだけでなく、可視化技術もここ10年ほどの間に急速に進展したために、基礎的な知識を持たずに研究室に配属されてくる学生が増えており、可視化についても気をつけて指導する必要があると感じている。

1 はじめに

1.1 カラーによる可視化の重要性と注意点

現在では、パーソナルコンピュータで様々なソフトウェアを使ってだれでも比較的簡単に見栄えのよい可視化を行うことができるが、カラーによる可視化がなかったころは、複雑なシミュレーションのデータを白黒で等高線表示させると、どこが高くどこが低いのかを見極めるのはかなり苦労することであった。複雑な地形の色のない地図を想像してもらおうとよい。本研究センターでは、1984年よりカラーグラフィックによるシミュレーション結果の可視化を本格的に利用するようになった。カラーになっただけで、情報量は飛躍的に増え、等高線では分かりにくい細かい凹凸が一目で分かるという利点がすぐ研究の役にたった。たとえば、レーリーテラー不安定性のシミュレーションデータを用いて、密度の様子をカラーで表示させ、カラーバーを調節して可視化してみると密度の低い部分と高い部分の形状が異なることが一目で分かり、十分に発達したレーリーテラー不安定性がフラクタルであることを世界で始めて明らかにするきっかけとなった。ただ、色のつけ方は実は非常に難しく、カラーバーを変化させるだけで、データが全く異なって見える場合があることに充分注意すべきであるということも大切な経験である。色の表示のさせ方により、細かい物理量のゆらぎが見えたり見えなかったりするなど、大きく見え方が変わる場合が多いということに注意すべきである。

1.2 画面で回転させることの重要性

3次元像をマウスなどの操作でインタラクティブに画面上で回転させることも、最近ではパーソナルコンピュータで簡単にできるが、回転させるということも非常に重要なことである。3次元のシミュレーションデータや、実験データの解析には、凹凸の激しい複雑な形状の認識が必要である。1987年に行った超低密度の中空プラスチック球に液体燃料を浸透させたフォームクライオターゲットと呼ばれる初期の実験において、レーザープラズマからのX線を5台のピンホールカメラで撮影し、当時のスーパーコンピュータを用いてCT処理した結果を3次元表示した。世界で始めて実験を行った直後で、ターゲットの表面もいびつであり、得

られた画像も複雑なものであった。3次元表示とは言っても、画面はあくまで2次元であり、見る人により、凹凸を逆に見たり、穴が開いているかいないかなど意見が分かれる状態であった。当時は画面で回転させることもできなかったため、視点を少しずつ回転させながら、1.3で示す駒撮りにより動画を作成して、図形を回転させることにより始めて形状を理解できた。現在でもデータが大きいと簡単に回転させることはできないが、計算機パワーとソフトウェアが充実したことにより、かなり複雑で大きなデータでも、まずフレームだけを回転させて視点を決めてから描画させるという手法で、インタラクティブに回転などの操作ができるのが当然になっている。

1.3 動画の重要性

動画の作成も、最近では市販のソフトウェアなどの利用によりパーソナルコンピュータを用いて簡単に行えるが、本研究センターでは、1987年よりグラフィックターミナルに表示された画像を16mmフィルムに一駒ずつ撮影するという、今からでは考えられないような原始的な方法を使って動画の作成を始めた。可視化用プログラムを作成し、データを画面に表示させ、それを1シーンずつ撮影することにより動画を作成した。画面の表示、撮影、現像に1週間もかかるという苦勞をしたが、非常に研究の進展に役立った。最初に、レーザー吸収の一様性のシミュレーションデータの時間発展を動画にしてみたが、レーザー吸収の強度を球関数展開したある特定の2つの次数のモードが時間的に振動していることが分かった。これは動画にすることにより、全く予期していなかった物理現象が見えた例である。数値データを眺めていたのでは、このように時間的に振動する全く予期していない現象を見つけることは不可能である。

このようにして作成した動画の編集は、当初は文字通りフィルムの切り貼りで編集を行っていた。その後ビデオが導入されると、再生ボタンと録画ボタンを押すという方法で編集を行っていたが、1998年には当時の大阪大学大型計算機センター（現在のサイバーメディアセンター：以下「CMC」と略す）にノンリニア編集装置が導入され、デジタル編集により自由自在に動画の編集が行えるようになった。現在では家庭でもビデオの編集など簡単に行えるようになったが、ソフトウェアによっては、NTSC信号と呼ばれる一般のテレビやビデオで使用されている信号は扱いが容易だが、シミュレーションから画像を作成した場合には様々なサイズの画像となり、編集に苦勞することがあるので注意が必要である。

2 大容量データの可視化

2.1 2ギガバイトを超えるデータの可視化

一般にスーパーコンピュータは、シミュレーション実行は高速に行えるが、可視化は得意ではない。可視化が得意なマシンでは、スーパーコンピュータで高速に行えるような計算はできない。また主記憶容量が異なるため、工夫をしないと可視化できないという事態になる。現在のCMCのスーパーコンピュータシステムは、総合で1.28TFLOPSの演算性能、1TBの主記憶という大きなシステムであるが、1ノードあたりでも128GBの主記憶を有しており、MPIなどによる並列化を行わなくても利用者は数10GBの主記憶を利用した大規模なシミュレーションを行うことができる。IXSという高速のクロスバースイッチを用いた2ノード、4ノードの計算も可能であるが、その場合は1ジョブあたりのメモリ容量は200GB以上という巨大なものとなる。ところが、ワークステーションやパーソナルコンピュータの主記憶容量は大きくても2GBや数GBというのが一般的であり、そのままではとても全体を可視化することはできない。また、2GB以上のデータを扱うためには、OSもソフトウェアも64ビット対応でなければならない。図1は本研究センターの大久保聡君が2003年にCMCのSX5の2ノードを用いてシミュレーションし、CMCのCAVEシステムの可視化サーバー（SGI Onyx）上でIDLというソフトを用いて可視化したものである。当時は2ギガを越えたデータを可視

化するソフトウェアは他になく、スーパーコンピュータからのデータ転送にも非常に時間がかかり、かなり苦労して可視化したものである。

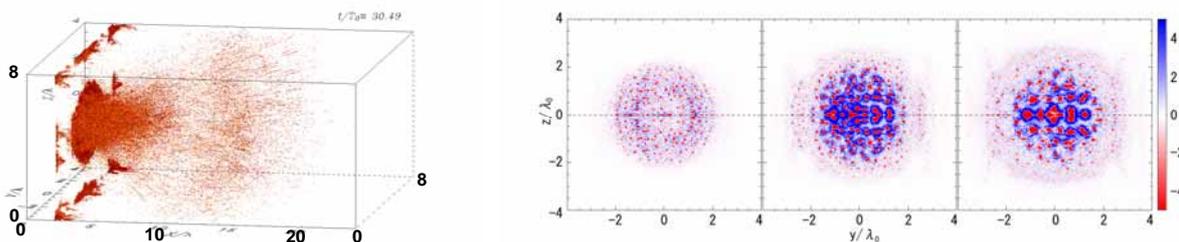


図1 プラズマへのレーザー照射による電子エネルギー輸送のシミュレーション結果
(レーザーエネルギー学研究中心 大久保聡)

2.2 没入型立体視システム

1.2でも述べたように、2次元である画面に3次元画像を表示するというにはやはり制限がある。最近ではパーソナル立体視のシステムも安価になってきており、実際の研究現場で多数の人が、立体視を利用できるようになるのもそう遠い未来ではないように感じる。私が、没入型立体視システムを始めて経験したのは、2001年に核融合科学研究所の理論・シミュレーション研究センター主催で実施されたVR可視化セミナーであった。CAVE装置と呼ばれるVR(バーチャルリアリティ)システムの一つで、部屋の内側に数値データを立体的に現実化させ、その中に没入してデータを観察することができるもので、ソフトウェアは核融合科学研究所で独自に開発されたツールを利用されていた。事前にAVS/Expressで表示したデータおよびAVS/Expressで表示させるときに用いたモジュールを組み合わせたネットワークを送付しておくだけで、当日自分のデータの内部に没入することができた。図2はそのときに表示させた画像である。やはり、立体的に表示されたデータの中に入れるというのは感激的なことであった。その後、2003年1月にはCMCにもCAVE装置が導入され、同じデータをすぐにCAVEに表示させることができた。私自身は操作になれないこともあり、船酔いのような症状になり、このような分野で実際に研究に利用するのは難しいと感じた。しかし、様々な分野で応用が試されており、埼玉大学やCMCではCAVE研究会が開催されている。教育分野など進展が期待できると感じている。

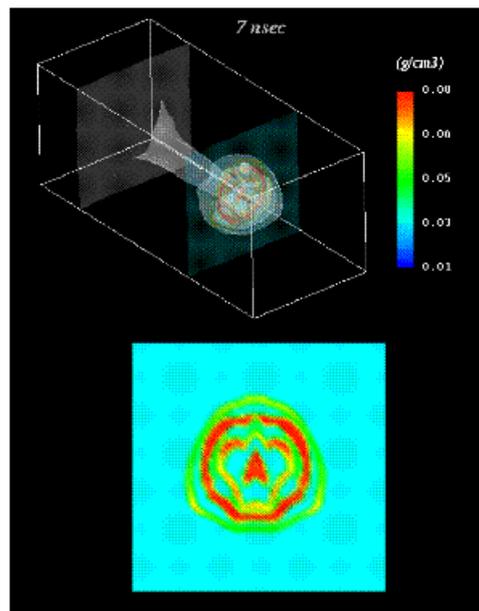


図2 Richtmyer-Meshkov不安定性のシミュレーション結果

2.3 データ圧縮、並列可視化、遠隔共同研究などの試み

スーパーコンピュータで大規模なシミュレーションを行うと、出力されるデータは一般に非常に膨大である。スーパーコンピュータで出力されるような大規模なデータに対応できるだけの可視化システムは現実には存在しないので、様々な工夫がなされている。シミュレーションの領域全てのデータを出力するのではな

く、興味のある領域のみのデータを出力する、空間的や時間的な変化量のみを保存する圧縮方式の利用、スーパーコンピュータにおけるシミュレーションは倍精度の実数型データ(64ビット:有効桁数10進約16桁)で行うのが一般的であるが、出力されたデータを可視化するだけであれば、有効桁数や保存ビット数を減らした整数型に変換するなどデータの保存そのものに工夫をこらし、データを極力保存しておきたいという研究者が多い。一方、シミュレーションに要する時間にもよるが、必要になれば再計算するという方針で、データの保存をあきらめ、可視化して小さくなった画像データのみを保存するという手法を選択する研究者もいる。大規模なデータについては、スーパーコンピュータそのもので可視化する試みがあるが、クラスタを用いてデータを分割して可視化するソフトも市販されるようになっており、今後はこのようなアプローチも考えている。

最近ではネットワークを利用した遠隔地にいる共同研究者と画像を共有して研究を進めるということも試されている。CMCに2003年に導入されたデータグリッドシステムには、OpenGL Vizserverというソフトウェアがインストールされ、ネットワーク経由で遠隔地よりCMCにあるサーバーを用いて可視化を行うことができる。導入されるとすぐに実環境でテストを行い、米国に出張している研究者にも依頼して遠隔地からのテストも行った。その結果、大学キャンパス内のように高速のネットワーク環境では充分利用できることを実証した。ネットワークの回線速度の遅い米国のような遠隔地からも、忍耐力があれば利用できることと、ソフトウェアや使い方の工夫でかなり改善できることも証明できた。このような利用形態も今後進展することが期待される。

2.4 利用者支援と教育

本研究センターでも、AVS、IDL、Fieldview、Tecplotなどの市販ソフトウェアや、フリーのソフトウェアなど多くの種類のソフトウェアを利用できる環境にあり、実際に研究に利用しているが、これがあれば完璧というソフトウェアは残念ながら存在しない。また、研究者が自分のデータにあった可視化ツールを利用することは実際には困難で、結局使い慣れたソフトウェアとハードウェア、特にOSを利用しているというのが実態である。限られた計算機資源、ソフトウェア、マンパワー、時間の中で研究を行わなくてはならないのだから当然のことであるが、最近は最初からあまりにも多様なシステムやソフトウェアが存在するため、基礎を理解できず戸惑う学生が増えているように思う。個別に相談に応じ、支援するように心がけているが、利用形態が多様になっているので、本研究センターのような規模でさえ、指導や技術的支援は容易でないと感じている。今後も、スーパーコンピュータなどのシミュレーション利用だけでなく、可視化についてもCMCと協力してテキスト作成や講習会、情報の共有を通じて基礎的な教育を充実したいと考えている。2.2と2.3で述べたCMCの装置については、「CAVE操作ガイド」「VizServer操作ガイド」として利用手引書を作成し、CMCのホームページに公開していただいている。このようなシステムに応じた操作ガイドは利用者にとって重要であると感じている。

3 終わりに

以上、今までの可視化の経験をまとめたが、様々な分野の方々の参考になると考えている。特に、パーソナルコンピュータなどで、手軽にしかも簡単に可視化できるようになっただけに、データの妥当性をよく考えるようにしてほしい。計算機を利用すると、きれいな結果やグラフが得られるので、ややもすると、そのデータについての考察が不十分である場合をよく見かける。可視化したデータが正しいかどうかという基本的な考察を充分するように指導することが重要であると感じている。最後に大阪大学サイバーメディアセンター、特にシステム管理掛の方々には大変お世話になっており、ここに感謝いたします。