

PLAINセンターニュース

Center for PLAnning and INformation Systems

航技研共用計算機「数値シミュレータⅢ」について

1. はじめに

航空宇宙技術研究所（以下、航技研）のスパコンと言えば、皆さんは「数値風洞（Numerical Wind Tunnel; NWT）」を思い浮かべられるであろう。数値風洞は故三好甫部長がリーダーシップをとって富士通と開発したマシンであり、世界的に見て画期的な性能を持つマシンであった。このため、1993年に導入されて以来9年間にわたって活躍してきたが、2002年10月に新たなスパコンに置き換えることとなった。これにより、航技研の共用計算機システム群は、「数値シミュレータⅢ」として生まれ変わることとなった。ここでは、「数値シミュレータⅢ」のシステム概要を解説する。

2. 数値シミュレータ計画

1970年代の後半から1980年代にかけて計算流体力学（Computational Fluid Dynamics; CFD）はいわゆる TVD スキームの発見に代表されるようにアルゴリズムの面で飛躍的な進歩を遂げた。それと機を一にして発展を開始したのが、科学技術計算用高性能計算機いわゆるスーパーコンピュータである。航技研では1960年代から計算機を運用し、データ処理やアルゴリズム開発に利用してきたが、数値シミュレーションを本格的に実行するには、これらの汎用計算機では、あまりにも非力であった。スパコンを導入して、計算流体力学に代表される数値シミュレーション技術を発展させ、理論、実験と並ぶ新たな道具を獲得し、航空機、宇宙機の開発に関する国際競争力強化を目指して計画されたものが航技研の数値シミュレータ計画である。

1987年に実現した第1期数値シミュレータ NS I では、中核マシンとして富士通製のスパコン VP400 が採用された（図1）。VP400 は、1GFLOPS

（Giga Floating-Point Operations Per Second、FLOPS は、1秒間に1回の浮動小数点演算を行う処理性能のこと。）の演算性能を持っており、三次元翼の粘性解析や全機形態の非粘性解析がはじめて可能となった。その先のシミュレーションを可能にするために考えられた計算機が NWT である。NWT は、ナビエ・ストークス方程式をベースとする粘性解析技術の実機開発への展開を目指し、クリーン全機のパラメータ解析を行うのに 1M (=100 万) 格子点の計算を 10 分で行うことを念頭に実効性能で VP400 の 100 倍以上というのをターゲットに開発された。このためにベクトル型スパコンをクロスバ・スイッチで結合する分散主記憶型並列ベクトル計算機というアーキテクチャが採用された。第2期数値シミュレータ NS II は、1993 年の「数値風洞; NWT」の導入により始動した。最終的な NWT の仕様は、1台当たり 1.6GFLOPS の要素計算機（Processing Element）166 台から構成され、ピーク性能 280GFLOPS、主記憶容量 44.5GB である。NWT の導入により、航技研は 100GFLOPS 級の計算パワーを武器に本格的に並列シミュレーションを行う時代へと突入した。NWT の処理性能は当時としては破格であり、90 年代中盤から後半にかけての我が国における CFD の研究開発活動をリードし、粘性解析を定着させ、宇宙往還機 HOPE のための技術実証プロジェクトでは広範なパラメトリック・スタディが行われた。また、次世代超音速機技術の実証機「ロケット実験機」の空力設計は遷移予測技術と CFD 逆問題設計技術を用いて設計されている。NWT を利用した主な成果は CD-R にまとめているので関心のある方は連絡ください。

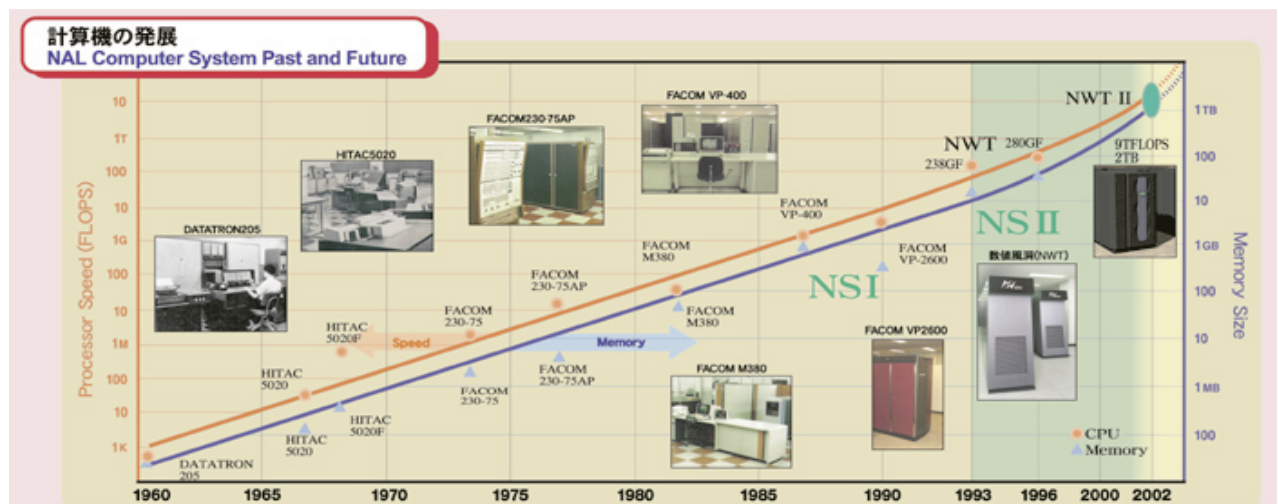


図1 航技研数値シミュレータの変遷

[裏へ続く]

3. 数値シミュレータⅢの概要

航技研では、次世代の CFD として何をを目指すか、次のスパコンとしてどの程度の性能のものが必要か等について調査検討し、「NAL 計算科学ビジョン21」報告書として纏めた。その中で、航技研が果たすべき役割を、1) 先駆的 CFD 技術研究開発への挑戦、2) 実用に耐える CFD 技術の確立、3) CFD 技術の研究拠点たること、4) 利用方法、応用分野の開拓と実用性の実証、であるとした上で、今後取り組むべき重点課題として、① ボトルネック技術課題への挑戦と克服、② 信頼性の高い標準設計解析ツールの整備、③ 次世代統合シミュレーション技術の構築、の3分野を掲げている。第3世代数値シミュレータ NSⅢの主なシステム要求項目は、このような調査検討の結果、「30M点 (1M点=100万点) の多分野統合解析を1日に10ケース処理する」、「1G点の燃焼の直接シミュレーション (DNS) を行う」こと等を目標に設定されたものである。

3. 1 ハードウェア

数値シミュレータⅢのハードウェアとしては、計算システム、大容量ストレージシステム、可視化システム、ネットワークシステムの4システムから成る。(図2)

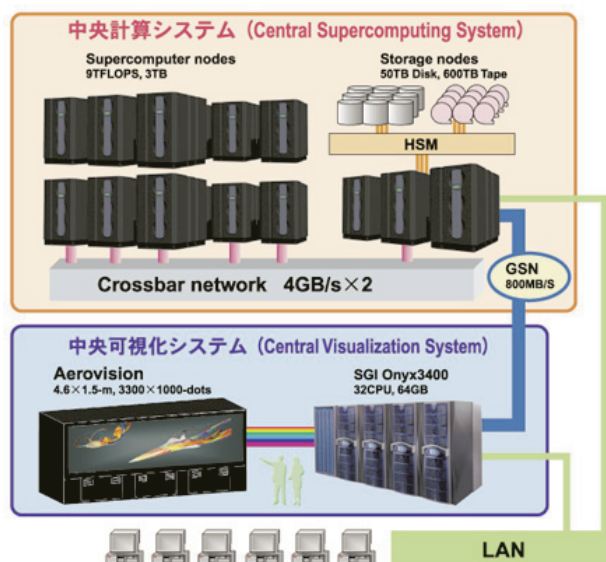


図2 数値シミュレータⅢのハードウェア構成

計算システムは、中央 NS システム (Central NS System; CeNSS、富士通製 PRIMEPOWER HPC 2500) と呼ばれており、14の筐体がクロスバ・スイッチで結合されている。1筐体には、128個のCPUが積まれており、256GBのメモリを共有している。運用上の自由度を増すために、1筐体は32CPUあるいは64CPUの固まりに分割でき、それを計算ノードと呼ぶ。その結果、32CPU、64CPU、128CPUのノードは、それぞれが64GB、128GB、256GBの共有メモリを持つ対称型マルチプロセッサ (SMP) 構成となる。CPUは、SPARC64 V チップで、クロックは1.3GHzで、プリフェッチ、out-of-order 実行、浮動小数点演算の4命令同時実行などのスカラー高速化技術を取り入れられている。従って、筐体あたりのピーク処理性能はトータルで665.6GFLOPSであり、システム全体として9.3TFLOPSの処理性能、3TBの

メモリを有する。クロスバ・スイッチとノードは、光ケーブルで結合され、往復それぞれ4GB/秒の転送性能を有する。

大容量ストレージシステムは、中央マストレージシステム (Central Mass Storage System; CeMSS) と呼ばれている。CeMSSは、57TBのRAID 5 ディスクが (富士通製 PW-D500B1) 80本のファイバチャネルで1つのIOノードに接続されている。一方、テープライブラリ (IBM製 IBM3584) は、40個のドライブを有し、40本のファイバチャネルでIOノードに接続され、総容量620TBを有する。テープ媒体としてLTOを採用し、ドライブあたり15MB/秒のピーク転送速度を有する。IOノードとディスク間の1GB/秒の実効バンド幅を実現するために、16本のファイバチャネルをストライピングしている。ディスクとテープ間については、階層管理 (Hierarchical Storage Management; HSM) を導入し、ユーザからはディスクとテープの区別なく利用できるようにしている。

可視化システムは、中央可視化システム (Central Visualization System; CeViS) と呼ばれている。可視化サーバ (SGI製 Onyx 3400) は、32個のCPU、64GBの共有メモリ、1.5TBのディスク容量を有している。4.6m x 1.5mの画面を持つ大型3次元表示装置 Aerovision は、通常のCRTの3倍の解像度とステレオ表示などの機能を有し、AVSやEnSightといった市販の可視化ソフトを利用できる。さらに、CeNSSの大規模計算データをメモリtoメモリで転送し、リアルタイム可視化を行えるように、GSN (Gigabyte System Network) を用いてIOノードと実効500MB/秒のバンド幅により接続 (GSNLink) されている。

3. 2 ソフトウェア

図3にNSⅢのソフトウェアの全体構成を示す。OSの上に3つの機能別のミドルウェアが存在し、その上にアプリケーションが載るという階層構造をなしている。

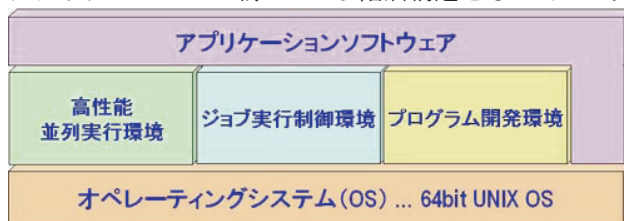


図3 数値シミュレータⅢのソフトウェア構成

OSには、Solaris 8を採用している。64ビットUNIXなので、大容量のメモリ及び2GB以上のファイルを扱える。また、OSとしての高セキュリティ機能及び各種ネットワーク機能を有する。また、各ノードがOSを持っているため、どれかのノードがダウンしても全システム停止に至ることはなく、障害に強いシステムを構築している。

高性能並列環境ミドルウェアは、大規模並列計算を実行するためのラージページと呼ばれるメモリを効率的に利用する環境や多数のプロセス資源をスケジューリングする環境を提供する。また、高速ネットワークファイルシステムを提供する。これにより、どのノードからも同一のファイルシステムを参照可能である。また、可視化システムとの高速インターフェースを提供する。

ジョブ実行制御環境ミドルウェアは、各種のジョブを効率的に実行する環境を提供する。NSⅢでは、通常のバッチジョブクラスの他に、インタラクティブジョブとして、パラメータを対話的に入力可能なジョブクラスや、可視化ジョブとして、メモリ to メモリで可視化システムにデータを送りリアルタイム可視化を実現するジョブクラスを順次提供して行く予定である。ジョブ実行のキューイングシステムはNQSを基本とするが、航技研独自開発のスケジューラを介して小さなジョブから大規模ジョブまで空いているCPUを極力少なくし計算リソースを有効活用する環境を構築している。

プログラム開発環境ミドルウェアは、コンパイラやツールを提供する。コンパイラとしては、FORTRAN、C、C++を提供する。NSⅢでは、並列プログラミングの雛型として、ノード内ではスレッド並列、ノード間ではプロセス並列というスタイルを想定している。スレッド並列は、共有メモリ計算機特有の並列化手法であり、並列化のオーバーヘッドが小さいので効率よく並列化できる。プロセス並列はノード内でも使用できる。並列プログラミング支援として、スレッド並列には自動並列と OpenMP、プロセス並列には MP I と XPFortran を使用する。このうち、XPFortran は NWT-FORTRAN と互換の並列化言語であり、NWT-FORTRAN で書かれた並列プログラムは、NSⅢでは再コンパイルのみで使用できる。

NSⅢでは、Parallelnavi Workbench と呼ばれる統合的なソフトウェア開発環境を提供されている。グラフィカルエディタ、デバッグ、プロファイラ、ソース解析などのツールを利用できる。また、数学ライブラリとして、SSLⅡ、C-SSLⅡ、BLAS、LAPACK、ScaLAPACK を利用できる。

3. 3 外部からの利用法とアプリケーション

インターネット等からのリモートアクセスに対応し、かつ、運用や構成の自由度を増すために、図4に示すようなNSⅢのセグメント NSnet をイントラネットから独立させたネットワーク構成を採用している。セキュリティを確保するために NSⅢでは、SSH サーバを導入し通信を暗号化している。SSH を利用するには、クライアントソフトが必要である。最初のアクセスの際にクライアントソフトのインストールと暗号通信路開設のための設定が必要であるが、以後はそのクライアント端末からはログイン認証のみで NSⅢにアクセスできる。従来は、ログインの度にワнтаムパスワードによる認証が必要だったが、そのような手続きは不要である。

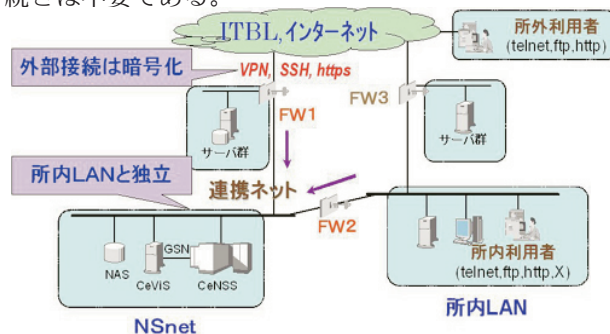


図4 ネットワーク構成

また、NSⅢでは、ウェブブラウザを利用してジョブ操作やファイル操作、簡易可視化を行うアクセスシステム WANS（Web Access to NSⅢ）を開発した。WANS では、サーバサイド Java 技術を用いてセッション管理やレスポンス保証を行っている。また、暗号化プロトコルの https を利用してセキュリティを強化している。WANS は、NSⅢのポータルサイト (<http://wans.nal.go.jp>) からの利用が可能である。機能は限られるが、ウェブブラウザがあれば、どの端末からでも NSⅢにアクセスできる。NSⅢでは、アクセスポイントの一元化を目指し、ポータルサイトから情報提供、利用申請、マニュアル参照、セッション開設などの利用に必要な全ての操作が行えるようにしている。

一方、もっとセキュアな利用が必要なメカ等からのアクセスを前提として、セキュア利用と呼ばれる環境を構築している。セキュア利用は、ジョブ、ファイルシステム等、一般利用とは切り離された状態で NSⅢを利用するものである。セキュア利用のためのノード＝セキュアノードを設けている。この場合、業務の内容はシステム管理者以外に見られることはない。航技研内部から利用する際には、外部から遮断されたセキュアルームを利用することでセキュアな利用を確保できる。インターネットからの利用においては、VPN を利用することでセキュアな環境が提供される。

NSⅢのアプリケーションとしては、業界標準の構造解析ソフトウェアである NASTRAN を導入した。また、OS に Solaris を採用しているため、GNU 等のオープンソースのツール類や各種画像ツールを利用できる。さらに、航技研で開発したマルチブロック構造格子法を用いた基盤ソフトウェア UPACS も利用可能である。

4. 今後の予定

数値シミュレータⅢが稼働を開始して約半年を経過した。世界的にも有数のシステムが整備できたと自負している。今後は、このシステムでなければできないような成果を出していくことが求められる。このため、戦略的に課題を設定し、優先的に実行することとしている。そのような課題を外部から募集することも検討している。ユーザへのサポートも充実していく必要がある。計算エンジン CeNSS はスカラマシンでハードウェアの性能を最大限引き出そうとするとこれまでのベクトルマシンとは異なったプログラミングスタイルを求められる。現在、ユーザへの情報提供、ユーザ間の情報交換の場として定期的にユーザフォーラムを開催している。また、主要なプログラムに対しては個別にプログラムチューニングを行っている。外部との連携も強化する予定である。現在、航技研は ITBL（Information-Technology-Based Laboratory）計画に参加しており、高速ネットワークを利用して大学、産業界といかなる連携が可能かを試行している。

数値シミュレータⅢが、所内外のユーザに有効に利用され、数値シミュレーション技術の発展と航空宇宙技術の研究開発の活性化に貢献することを期待している。（航空宇宙技術研究所 CFD 技術開発センター 岩宮 敏幸）

H14年度 宇宙科学企画情報解析センター運営委員会報告

上記委員会を平成15年3月20日に宇宙研新A棟2階B会議室において開催した。この会議には星野真弘(東大理)、近田義広(国立天文台)、松方純(情報研)、荻野竜樹(名大STE研)長瀬文昭、向井利典、橋本正之、藤井孝蔵、山田隆弘、笠羽康正、篠原育、三浦昭、高橋静次(宇宙研)(以上委員)、田村隆幸、馬場肇、本田秀之(宇宙研)が出席した。当日はPLAINセンターの平成14年度の運営・事業・開発研究に関する報告と平成15年度の事業計画等の審議が行われた。

報告

1. 計算機・ネットワーク運用状況
2. 計算機共同利用
3. スーパー SINET 及び専用回線運用状況
4. 平成15年度導入計算機リプレースの進捗状況
-リプレースに伴う所内システムの変更について
5. 3機関統合に伴う機構内情報システムの構築
-ドメイン名について
-新機構の情報システム体制について
-機構内ネットワーク、所内ネットワークについて
6. 平成14年度シンポジウム報告

議題

1. 平成15年度事業計画概要
2. 計算機共同利用申請状況と審査員選定
-計算機共同利用支援方法の見直しについて
3. 平成15年度シンポジウム計画

報告の中では、大型計算機運用とその共同利用は順調に進められた事、平成14年度には国立情報学研究所のスーパー SINET 事業の一環として新規に阪大、東工大、北大、九大と宇宙研の間に MPLS 方式による専用回線が接続された事、次年度の計算機のリプレースに向けて現在調達日程に従って作業を進めている事、平成15年度10月に予定されている3機関統合に向けて統合ネットワークシステムの設置と LAN の整備が計画中である事などが報告された。

議題1で今年度は(1)スーパー SINET と所内 LAN ギガイーサーネットの接続・運用とこれのプロジェクトでの活用および科学研究への応用、(2)科学衛星運用支援・データ処理システム及びスパコンコンピューターシステムのリプレースを行い、稼動開始すること、(3)3機関統合後も大学共同利用機関の性格を堅持しデータベースやスパコンコンピューターの全国大学共同利用を促進すること、を今年度の主要事業として確認した。議題2では大型計算機共同利用の公募結果と審査のあり方を議論し、大型計算機共同利用応募書類の審査委員を決定した。なお従来の計算機利用の支援経費のうち、各大学の計算機の使用料を宇宙研が負担していた分については、新機構への移行に伴いこれを廃止することとした。また、議題3について来年度はマルチメディア関連のテーマでシンポジウムを開催する事となった。(長瀬 文昭)

大型計算機に関するお知らせ

1. 大型計算機の4月・5月の保守作業予定

ホスト名	4/21 (月) 8:00~13:00	5/19 (月) 8:00~13:00
AlphaServer	M	
GS8300/10N		M

M: システムメンテナンス

2. 大型計算機4月・5月連休の運転予定

ホスト名	4/25 金	26 土	27 日	28~5/2 月 金	3~5 土 月	6 火
VPP800/12	連続	自動	自動	連続	自動	連続
GS8300/10N	連続	自動	自動	連続	自動	連続
その他のサーバ	連続					

自動: 自動運転 連続: 連続運転

3. 大型計算機のリプレースについて

今年夏の計算機リプレースに、以下の計算機・端末等が含まれています。これらの装置上で使われているプログラム等は、リプレースまでに他のプラットホームへの移植作業等が必要となります。

- ・センター側 MSP 計算機(GS8300):撤去となります。後継機は予定されていません。

- ・高機能端末(FMV):上記MSP計算機の撤去に伴い、高機能端末も全て撤去となります。買い取りは出来ません。(本体、ディスプレイ等に「fmv99」で始まるラベルが貼られた装置が該当します)
- ・Alpha サーバ: 後継機は他のプラットホームに変更予定です。

4. 大型計算機関係の相談窓口について

大型計算機利用上の質問・トラブルなどは高橋氏・林氏(内線8391)、ネットワーク関係の質問・トラブルなどはPLAINセンター本田秀之(RN1261・内線8073)までお願いします。

5. 大型計算機の登録予算及び端末台数の確認について

大型計算機の課題登録・更新処理にご協力いただき大変ありがとうございました。おかげさまで年度末処理も無事実行できました。各研究室等の計算機使用料および端末使用料の今年度分移算につきましては、夏のセンター計算機リプレースおよび10月の統合を鑑み、減額もしくは停止の方向で調整しております。詳細が確定次第ご案内致しますので、よろしくお願い致します。(三浦 昭)