

CFD にまつわるあれこれ (その2)

1. 並列化

前回並列計算機について紹介し、主にハードウェア構成の違いに起因する二種類の並列化手法、プロセス並列とスレッド並列について言及しました。ここではこれら二種類の並列化手法についてもう少し詳しく説明します。

プロセス並列は並列化の単位がプロセスと呼ばれる実行単位で、各プロセスはそれぞれ独自のメモリ空間を持っており、互いに他プロセスのメモリ空間へのアクセスは自由にはできません(図1を参照)。他プロセスのメモリ空間へアクセスする場合は、データ転送と呼ばれる手続を明示的に行なう必要があります。例えば富士通のXPFortran (VPP-Fortran の後継) では配列を各プロセスに分割しますが、その時に袖(overlap)と呼ばれるオプションを設定することで、それぞれ分割された配列に対して、隣の配列の値を持つための袖と呼ばれる重複領域を持たせることができます。その上でプログラム中において明示的に overlapfix 関数を呼び出すことで袖部のデータ更新、つまりデータ転送を行ないます。また、より一般的なデータ転送機能も用意されています。並列化ライブラリである MPI ではもっと直接的に MPI_send、MPI_recv といったデータ転送用の関数を用いてユーザーが明示的にデータ転送を行なう必要があります。

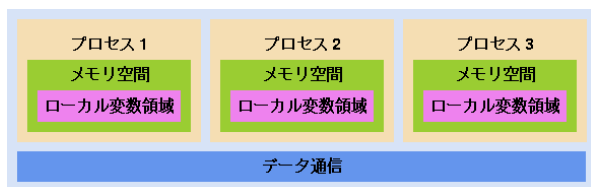


図1. プロセス並列

一方スレッド並列は並列の単位がプロセスの中のスレッドという単位になります。スレッドはプロセスの中に複数生成され、プロセス内のメモリ空間を共有することができます。そのためスレッド並列の場合、各スレッドは単一のメモリ空間に自由にアクセスすることができるためスレッドが担当するメモリ空間、それによって考慮しなくてはならないデータ転送といった事を考える必要はありません。勿論必要に応じ

て各スレッドにローカルなメモリ空間を利用することもできます。例えば Do ループをスレッド分割(並列)する場合は、ループ変数(イタレータ)はローカル変数、つまりそれぞれのスレッドで別の値を持たせないとループが正常に廻らなくなります。

スレッド並列の特長としてプログラムの一部分だけの並列化が可能です。このため既存プログラムの並列化を行なう際に、実行負荷が高いところから順次スレッド並列化を行なうことができ、そういった並列化の途中でもプログラムの実行が可能です。そのためある意味並列化作業がやりやすいと言えます。プロセス並列ではこういった芸当は非常に難しく、特に HPF や XPFortran といったデータ、手続分割型である並列 Fortran を用いた場合、プログラム全体の並列化が一通り完了するまではプログラムを実行させることはできません。つまり、実行させな

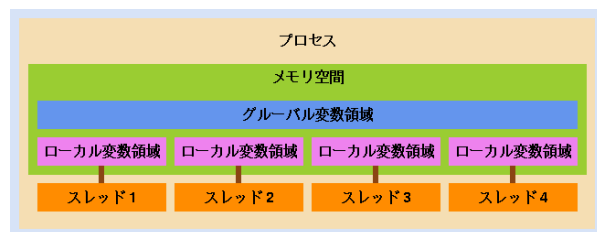


図2. スレッド並列

がらの並列化が不可能ということになります。

以上をまとめると表1 のようになります。こ

表1. プロセス並列とスレッド並列の比較

項目	プロセス	スレッド
メモリ空間	独立	共有
変数	ローカル	ローカル グローバル
マシン	分散メモリ 共有メモリ	共有メモリ
プログラムの並列化	全体	一部でも可
データ転送	明示的	無
言語	並列 Fortran (コンパイラ) MPI (ライブラリ)	自動並列 (コンパイラ) OpenMP (コンパイラ)

[裏へ続く]

の様にプロセス並列とスレッド並列はそれぞれ特長を有しています。更にはプロセス並列とスレッド並列を組み合わせたハイブリッド並列も可能であり、一般的には使用する計算機のハードウェアに依存するにしてもどの並列化手法を用いるのかは充分検討する必要があります。

2. 検証

前回、「1. CFD とは」の最後に言及した様に、数値シミュレーションでは、物理現象をモデル化して計算機を用いて計算結果を得るまでのそれぞれの段階で、様々な誤差が混入します。これらの誤差が本質的な影響を及ぼさなければ問題ないわけですが、流体の様な非線形性が強い現象ではそうはいきません。数値シミュレーションにおいては、計算して得られた結果が常に実際の物理現象と本質的に同じ現象を再現しているかという懸念がかならず付きまといます。そのため計算結果を理論解や実験 / 観測データと比較することで充分な検証を行なうことが非常に重要となります。検証には得られた計算結果が数値解として正しいか、つまり与えられた基礎方程式が正しく解けているかを確認する verification と、実際の物理現象として正しいか、言いかえると物理現象を正しくモデル化しているかを確認する validation とがあり、数値シミュレーションの計算結果の信頼性を確立する上ではこれら verification と validation の両方が非常に重要となります。

2.1 verification

CFD における verification としては、様々なものがありますが、最も一般的で重要なのは格子収束性です。本来連続な偏微分方程式の時空間分布を有限幅の計算格子、時間刻で離散化することによって計算を行なっています。素性の良い（言い換えれば consistent な）離散化手法を使っていれば、この有限幅を無限に小さくすることで元の連続な偏微分方程式に近づけることができます。つまり粗い格子（離散化の有限幅が大きい）の解よりも細かい格子の解の方がより元の偏微分方程式の解に近づくことになります。現実問題としては、計算機のメモリと処理速度、さらには結果を得るまでの時間といった制約から無限に細かな格子を使うことは不可能です。そのため、適当な粗さの格子で解析を行うことになるため、得られた結果がどの程度の近似になっているかは常に注意する必要があります。そのため、ある粗さの計算格子で得られた計算結果と、倍に細かくした（三次元だと x,y,z 方向にそれぞれ 2 倍で合計 8 倍）格子で得

られた計算結果を比較して、求めたい物理量に差がない、もしくは要求精度以下の差であることを確認するといった方法が良く行なわれます。

現実問題として流体の数値解析では、計算結果は計算格子に大きく影響を受けます。格子点数が違う場合はもとより、同じ格子点数でも格子の質の違いによって解が大きく異なることもあります。ここでいう格子の質とは直交性、隣接する格子点間隔の比、格子の曲率などで、定量的に評価することが難しく、経験的に判断されています。一般に良い計算格子というのは見た目が綺麗な格子と言われています。

2.2 validation

計算結果と実験 / 観測データとを比較することで計算結果が正しいかどうかを検証します。一昔前は計算結果と実験データ（例えば風洞の計測データ）と比較して、両者が合っていれば良として、差があれば計算の方に問題があると言われていました。しかしながら、最近の CFD 技術の進歩とともに CFD の信頼性も向上し、両者の比較に於いて一方的に計算に問題があるという状況から相互に問題点を検討する様になり、時には実験に問題があるという指摘を行なえるまでになってきました。勿論、CFD にもまだまだ課題（例えば、乱流、大剥離、層流から乱流への遷移など）が残されていますが、ある状況下では風洞と同じか、状況によっては風洞以上の信頼性を持つようになりました。と言うのも風洞もある意味知りたい現象を模擬しているため、何らかの誤差要因が存在することを免れないためです。風洞実験では模型であったり、実際なら存在しない風洞壁があったりと、実物の航空宇宙機の飛翔環境とは異った環境であり、本来計測したい現象とは異った条件でのデータを計測している事になります。ですから、風洞も CFD と同じように本来知りたい現象に対して少なからず誤差要因を抱えています。とは言うものの、風洞が実際に取扱っているのはあくまで現実の物理現象であるため、CFD と比べれば遥かに信頼できるものであることには変わりありません。そういった意味で風洞データが正しいとして計算結果の検証に使われて来ましたが、今や CFD も風洞も同程度の精度*を持つようになりました。そのため、従来の計算と実験といった相対する立場からの一方的な比較から、相互検証、更にはお互いのメリットを活かして相互補間することでお互いの信頼性向上と、風洞 / CFD 連携による新しい取組が試みられています。

3. おわりに

CFD 技術の発達にともない、研究のための CFD からツールとしての CFD という性格が強く意識されるようになりました。基礎的な流体現象の解明にも使われますが、その多くは実際の物作りにおける設計、解析ツールとして幅広く活用されるようになりました。設計と言えば最近では最適化に関する研究が盛んに行なわれ

ています。最適化、数値シミュレーション、計算機という三種の神器がまさに最新の設計技術

* 実際問題どの程度の精度かと言うと、航空機の巡航状態での抵抗係数の推算では CFD も風洞も大体 10 カウント (1 カウント=0.0001) 程度の誤差があります。1 カウントは例えば大型の旅客機では抵抗係数の約 0.4 % に相当し、ペイロードに換算すると 450Kg 程度になります。

(高木 亮治)

新センターサービス紹介

メールサービスの更新について

このたび、従来提供していたメールサービスの後継として、ISAS ドメインメールサービス (以下、新サービスと記述) を開始しました。新サービスの概要は以下の通りです。

- メールアドレス: ****@isas.jaxa.jp のような形式でメールアドレスが発行されます。「****」の部分は申請時の希望をもとにして決定されます。旧来のメールアドレス (@pub.isas.jaxa.jp, @newslan.isas.jaxa.jp 等) を継続して使用する場合には、新サービスの申請時にその旨記載する必要があります。
- 提供サービス: 現在提供されているサービスは、POP3 および SMTP によるメールの送受信ですが、他のメール関連サービスについても準備が整い次第提供を開始します。

pub.isas.jaxa.jp, newslan.isas.jaxa.jp 各ドメインの旧メールサーバは 6 月末でサービスを終了します。7 月以降も継続してこれらのドメインのメールアドレスを使用される場合は、ISAS ドメインメールサービスのアカウント申請が必要となります。(申請のないメールアドレスは 6 月末にて消去されます。)

メールアカウントの利用にあたっては、各研究室やプロジェクト等、グループ毎にとりまとめた上でご申請下さい。また、今後は年度毎にメールアカウントの更新手続きが必要となります。

本件についての参照先:

<http://www.pub.isas.jaxa.jp/net/serv/mail/>
本件についての問い合わせ先:
system@cc.isas.jaxa.jp

センター計算機 (解析サーバ) の更新について

新計算機システムは、スーパーコンピュータと解析サーバの 2 種類に申請項目が分かれます。以下、「解析サーバ」についてご紹介します。

解析サーバとして使用できる計算機環境は以下のようになります。なお計算機リプレースに伴い、従来のセンター側 MSP 課題は廃止となりました。

- Solaris 環境 (SunFire V880)

CPU 性能 (1 CPU 当たり):

507 SPECint2000, 697 SPECfp2000

CPU 数: 8

主記憶容量: 16GB

- Linux 環境 (PRIMERGY P250)

CPU 性能 (1 CPU 当たり):

957 SPECint2000, 887 SPECfp2000

CPU 数: 2

主記憶容量: 2GB

課題登録料、計算機使用料共に無料となっています。解析サーバの利用にあたっては、各研究室やプロジェクト等、グループ毎にとりまとめた上でご申請下さい。また年度毎に課題更新手続きが必要となります。

本件についての参照先:

<http://www.pub.isas.jaxa.jp/cc/>

本件についての問い合わせ先:

system@cc.isas.jaxa.jp

(三浦 昭)

スーパーコンピュータの課題について

スーパーコンピュータとして使用できる計算機環境は以下ようになります。本計算機はベクトル並列型の計算機ですのでご注意ください。

- NEC SX6-128M16

CPU 性能 (1CPU 当たり): 9 Gflops

CPU 数: 128

主記憶容量: 1 TB

課題登録料、計算機使用料共に無料となっています。スーパーコンピュータの利用にあたっては、各研究室やプロジェクト等、グループ毎にとりまとめた上でご申請下さい。また年度毎に課題更新手続きが必要となります。また、共同利用研究として年に 2 回 (3 月と 9 月を予定)、スーパーコンピュータを利用する研究課題を募集します。

本件についての参照先:

<http://www.isas.jaxa.jp/home/plain/cpis/index.html>

本件についての問い合わせ先:

isas-hpc@plain.isas.jaxa.jp

(篠原 育)

中国出張報告

2004 年 5 月 24 ～ 28 日に中国北京にて開催された、"The 12-th United Nations / European Space Agency Workshop on Basic Space Science" というワークショップに参加しましたのでご報告します。

もともとは 2003 年 5 月に開催される予定だったのですが、SARS の影響を受けて 1 年延期となっていたものです。Chairperson の H. Haubold 氏 (国連) と話したところによると、このワークショップでは全員発表を基本にしているので、人数をあまり増やせない (増やしたくない) という意図があり、途上国から約 30 人、先進国から約 20 人、ホスト国から 2-30 人という割合を保つように努力している、とのことでした。途上国参加者のほとんどは招待で、旅費・滞在費等は UN/ESA 持ちのようです。途上国参加国はアジア、中東、アフリカの一部、南米といったところではばまんべんなく散らばっています。日本からは、国立天文台から北村名誉教授と磯部先生、筑波大から阿部氏が参加されていました。

私は、"Data Archive and Transfer System on JAXA/ISAS" というタイトルで DARTS システムについて発表しました。現在のサービス内容の紹介と、ASTRO-E2 や ASTRO-F など踏まえた共通基盤整備を進めていること、今後は JVO との連携を進めること、などを紹介しました。Virtual Observatory についてはワークショップの柱のひとつでしたが、AstroGrid や AVO などの先進的取り組みが紹介される一方で、天文データセンター的な捉え方をしている国もあり (中国/ロシアなど)、捉え方にかなりばらつきがあるような感じです。ただいずれにせよ、途上国であっても電子メール程度のネットワークインフラは既に存在しますし、中長期的には VO の利用者層は途上国に広まっていくものと期待されるのか、参加者の関心は高いように思えました。

別の日のセッションでは NASA/JPL の Team-X というコンカレントエンジニアリングシステムのオンラインデモ (JPL との TV 会議) も行われたのですが、ある途上国参加者からは「その技

術がどのように途上国にフィードバックされるのか」という質問が飛んでいました。言葉は悪いですが、単に「うらやましがらせる」だけのシステムであるように見えたようです。そういった観点からすれば、VO はより機会平等的に映るようです (実際には帯域の壁は大きいですが)。

また、中小口径望遠鏡を用いた天文学の推進もワークショップのひとつの柱でした。北村先生は日本の ODA (政府開発援助) 事業で、途上国に小望遠鏡 (口径 50cm 程度) を贈呈する活動に携わっておられます。これらを連携させて、近接連星系の変光観測などのサイエンスを発展させていきたいとのことでした。また、中東には 2m クラスの中口径望遠鏡が続々と競い合うように建設されているようです。

ところで、申し込み段階ではポスター発表か口頭発表を選択可能だったのですが、いざ会場に着いてみるとポスター会場は設置されておらず、壁に張り付けるという体たらくでした。このままではいかにも決まりが悪く、発表は初日夕方でしたので、初日午前中の VIP の長たらしい挨拶の間に PowerPoint 資料を急遽作成し、むりやり口頭発表に間に合わせたという次第です。また、会議のレセプションは釣魚台国賓館で開かれました。VIP 気分食べた北京ダックはめちゃウマで感激でした。

最後に、今回の出張には PLAIN センターから旅費等の援助を頂いております。長瀬先生をはじめとする PLAIN センタースタッフの皆様に感謝します。



(早稲田大学教育学部 教育情報化推進委員会
馬場 肇)

大型計算機に関するお知らせ

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) 迄、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 (RN 1261・内線 8073) 迄お願いします。

(三浦 昭)