

航空宇宙技術研究所における HPC 研究開発の推進

High Performance Computing Research and Development at National Aerospace Laboratory of Japan

松尾裕一* , 岩宮敏幸*

* 航空宇宙技術研究所

Yuichi Matsuo and Toshiyuki Iwamiya

* National Aerospace Laboratory of Japan

E-mail: matsuo@nal.go.jp

1 はじめに

航空宇宙技術研究所（以下、「航技研」）における高度計算科学（High Performance Computing; HPC）の研究開発活動の特徴づけるアイテムとして、航空宇宙への係わり方と計算機システムを挙げることができよう。前者については、最近、独立行政法人への移行のタイミングを捉え、HPC 研究開発の将来の在り方／方向性についての展望を行ったところであり、後者については、次期システムへのリプレースを間近に控え、HPC 用システムの今後の在り方についての検討を行っている。本稿では、このような状況を踏まえ、この2つの切り口から航技研における HPC 研究開発活動について言及してみたい。

2 HPC の航空宇宙への係わり方について

航技研では、ここ数年にわたり、独立法人化を睨んで HPC 技術を航空宇宙分野において「何に使うか」、「どう使うか」等について幅広く検討してきた。ここではそのような活動の一端を紹介する。

2.1 航技研の HPC 将来構想（NAL 計算科学ビジョン 21）

航技研は、計算流体力学（Computational Fluid Dynamics; CFD）を中心とした HPC 技術の研究開発を国内の他の機関にさきがけて進めてきた。その結果、CFD 技術の中心はポテンシャル解析からオイラーやナビエ・ストークス解析へと移り、エンジン付き全機形態の流れやエンジン内部非定常流等の大規模複雑計算が昨今では可能になった。しかしその一方で、CFD を取り巻く状況は大きく変化してきており、要求要件、目的意識、研究開発の在り方について見直す時期に来ているとの認識から、航技研内の HPC 技術等に関する検討委員会で、今後 10 年程度先を見据えた技術ロードマップの検討を行い、「NAL 計算科学ビジョン 21」報告書[1]としてまとめた。その中で、航技研が果たすべき役割は、1)先駆的 CFD 技術研究開発への挑戦、2)実用設計に耐えうる CFD 解析技術の確立、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、であると規定し（図1）今後取り組むべ

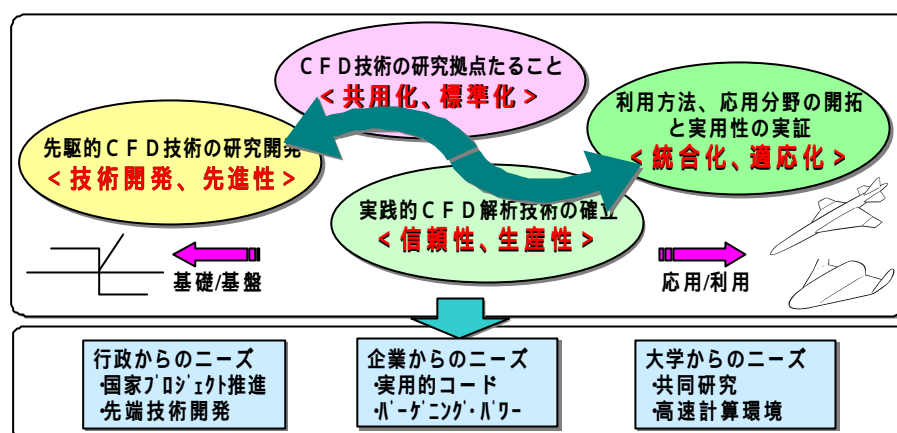


図1 CFD研究における航技研の果たすべき役割

き重点課題として、ボトルネック技術課題への挑戦と克服、信頼性の高い標準解析ツールの整備、次世代統合シミュレーション技術の構築、の3領域を掲げた。現在、我が国で進められている小型超音速実験機計画や再使用宇宙往還機開発などのプロジェクトにおいては、CFD技術を様々な形で利用して実験回数を極力減らす種々の試みがなされている。また、メーカーの開発現場からの要請としての開発期間の短縮と開発コストの削減のために、今後この方向をますます加速させる必要がある。HPC技術としてはより現実に近い複雑形状を対象にすると同時にターンアラウンド時間（TAT）の高速化が求められる。そのために、現在ボトルネックとなっている各種モデリング、並列プログラミング、格子生成、計算結果の評価等のプロセスを根本的に見直し効率化する。と同時に、プログラム等の共用化や標準化、計算結果の信頼性の確保により利用環境整備を進める。さらに、従来の要素ごとのシミュレーション技術を統合して、より精度の高い性能評価や最適化設計を行うための多分野統合シミュレーション技術や多分野統合最適設計技術の確立を図る。将来的には、打ち上げから回収までを計算機の中で行う仮想飛行実験評価システム、航空機等の空力設計を計算機の中で自動的に行うデジタル空力設計システム、現実の風洞試験では不可能な条件での試験までも可能にする未来型数値風洞などの実現を成果目標として考えている。（図2）

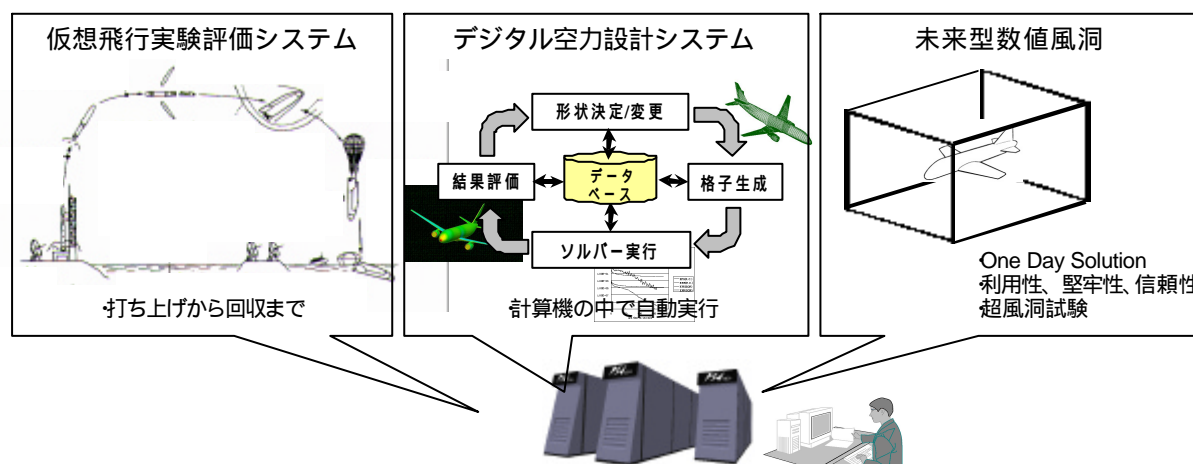


図2 航技研の CFD 技術研究の将来の成果目標例

2.2 HPC 技術研究開発計画 (CFD-MESSE 計画)

独立行政法人においては、3～5年の期間の中期目標を設定し、それに基づいて中期計画を立案し実施することになっており、HPC 技術に関しては大学、メーカー等との意見交換の結果を踏まえて研究開発計画を作成した[2]。それによれば、今後の航空宇宙機開発における多分野統合解析や多分野統合最適化の利用を視野に入れ、4年間の中期計画期間中に、CFD を中核とした多分野統合シミュレーション技術開発を進める。すなわち、CFD を中核とした異種分野のシミュレーションを統合的に実施可能なソフトウェア及び計算環境基盤を整備する。例えば図3に示したプロジェクトや機体・エンジン開発における具体的課題が解けるようにする。併せて、計算プログラムやライブラリの標準化・共用化を推進するとともに、コード検証の技術確立を行い高品質のプログラムを開発することとしている。(CFD-Oriented Multidisciplinary Engineering Simulation System and Environment; CFD-MESSE、図4)

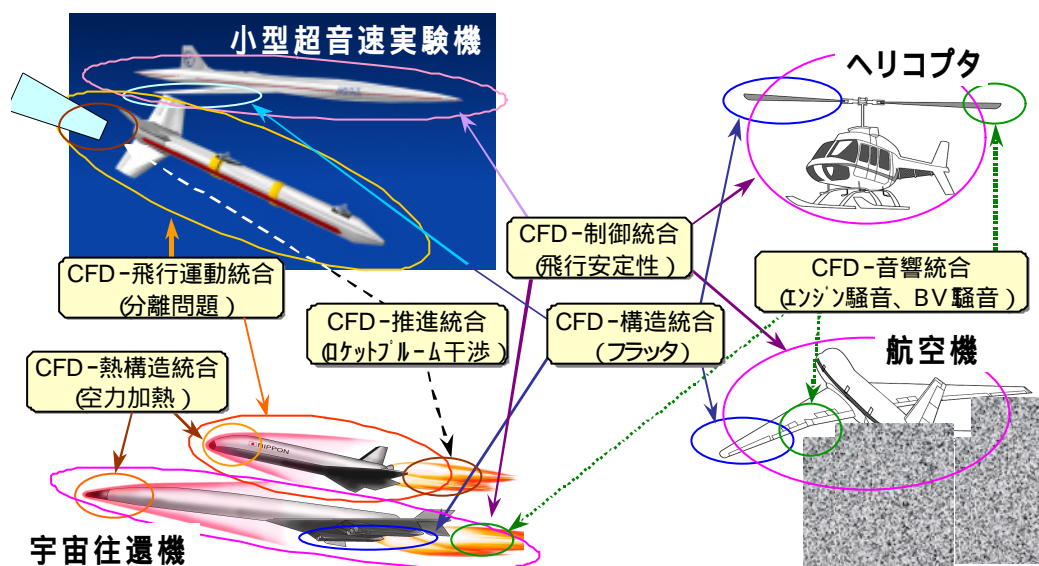


図3 多分野統合シミュレーションの適用例

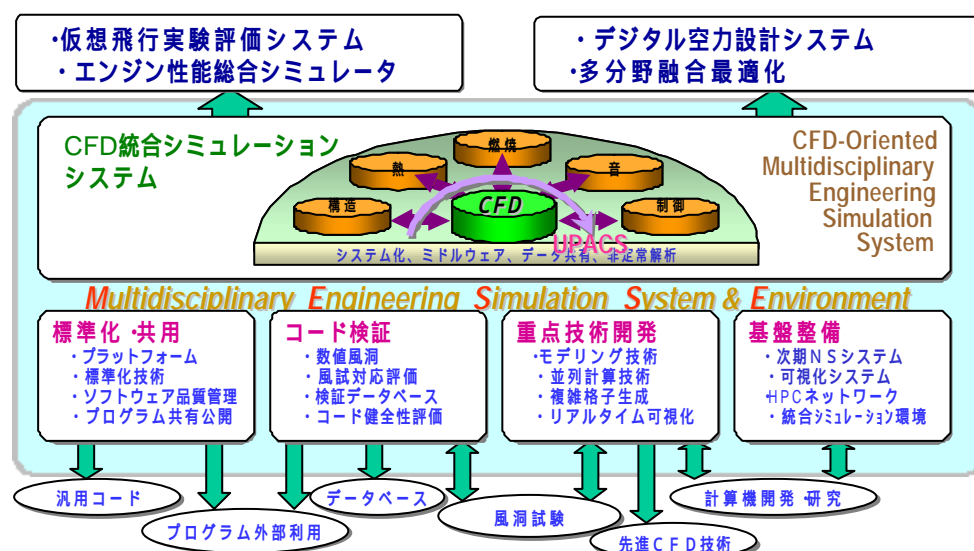


図4 HPC に係わる航技研中期研究計画の概要

2.3 CFD 共通基盤プログラム UPACS の開発

上記計画において中核の一つとなるのが、CFD 共通基盤プログラム UPACS の開発である [3]。UPACS (Unified Platform for Aerospace Computational Simulation) は、CFD 解析の複雑化に対応して研究者の効率的協業による大規模並列計算コード開発を可能にする共通基盤的プログラムを開発することを目的とする。これを土台として、より複雑な解析を実現するとともに系統的な検証作業や HPC 技術の共有化をねらっている。UPACS では、多数の研究者が協力して開発を進められるように、1) オブジェクト指向によるカプセル化、2) 並列計算とソルバーの分離、3) パラメータ管理モジュールの概念・手法を導入した。並列計算法には、CFD 計算に適用しやすい空間領域分割法を採用した。並列計算のデータ通信部は、ソルバー部の詳細に立ち入ることなく独立拡張可能なことから、図 5 左のような 3 階層の基本構造を持たせている。中間層がデータ通信を受け持ち、ソルバー開発者は一種のライブラリのようにブラックボックス的に扱うことができる。一方、ソルバー部は、単純な CFD のプログラミングで済み、複数のソルバーを上層で切り替えることで、複雑な多分野統合解析への対応が可能と考えている。これまでの進展で、データ通信に MPI、プログラミング言語に FORTRAN90 を使用した複雑形状まわりの圧縮性完全気体流れ用並列計算プログラム UPACS ver.1.0 が整備され、平成 12 年 10 月から条件付でソースプログラムが無償配布されている。UPACS ver.1.0 では、図 5 右の計算例のように、圧縮性完全気体流れのマルチブロック構造格子法による解析が可能になっている。現在、ターボ機械流れ、重合格子法、物体内部の熱伝導解析との連成解析、Adjoint 法による最適化問題への拡張を並行して進めており、数年内に非構造格子法、低マッハ数流れ、反応流・燃焼流への拡張を行う予定である。

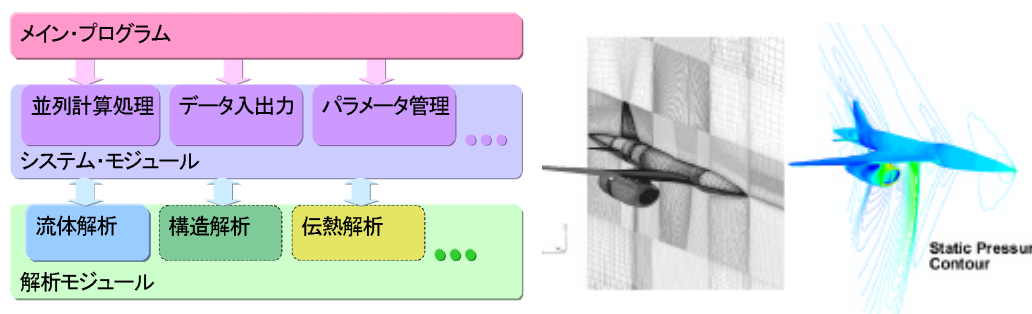


図 5 CFD 共通基盤プログラム UPACS の構成と計算例

2.4 ITBL 環境の活用

現在、文部科学省が研究用ネットワークとして省際ネットワーク (InterMinistrial Network; IMnet) を運用し、傘下の研究所・法人等を結んでいるが、このバックボーン・ネットワークを強化するとともに、その上で結ばれているスーパーコンピュータ及び研究・技術情報を共有化して仮想研究環境 (IT-Based Laboratory; ITBL) を構築する計画が施行されている [4]。そこでは、ネットワーク技術やセキュリティ技術等の共通基盤技術の開発と併せて、提供されるコンテンツとしてのアプリケーションの開発が予定されている。この中で航技研は、CFD-MESSE 計画の成果をベースに、航空機・宇宙機の各飛行フェーズに対応する解析やエンジン性能評価ができる仮想実験システムを提供することを計画している。

目標 航空機 宇宙機の開発に必要な実験を計算機上で行う

仮想実験システムの構築

開発期間短縮・開発コスト低減

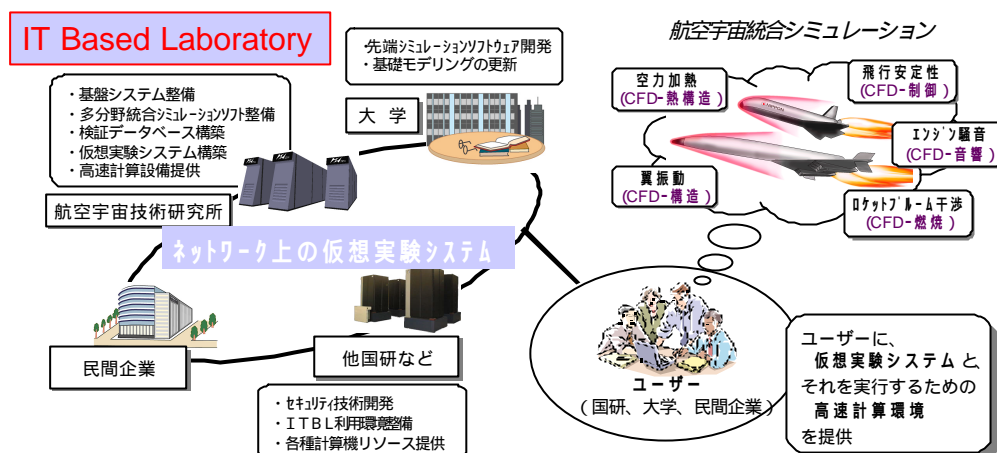


図6 ITBL 施策の概要

2.5 設備の共用及び外部との連携

また、従来から HPC 技術を集大成し、航技研の所有する風洞設備に対応した総合システムとしての「数値風洞」を開発することになっている。技術的には、適切な境界条件の設定、検証データベースによりデータ信頼性の確保、重合格子法等の利用による格子生成の負担軽減、データ生産性の向上等が課題である。これにより、風洞試験の事前評価を行い適切な実験計画策定を可能にするとともに実験結果の整理、解釈にも役立てることができると考えている。まず、遷音速数値風洞から取りかかり（平成 12 年度着手）、超音速数値風洞、極超音速数値風洞へと順次展開して行く。現在のところ、外部から航技研の設備を利用する方策として共同研究と設備貸付があるが、ハードウェア中心の利用であるので、ソフトウェアまで含めた利用については新たな制度を設ける予定である。

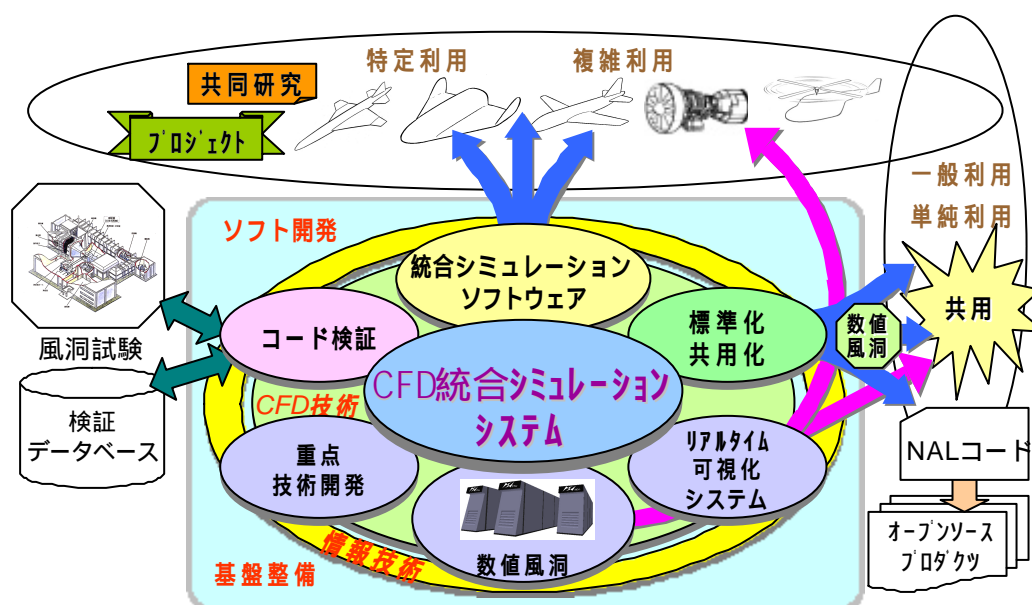


図7 設備共用、外部連携のイメージ

3 計算機システム

航技研では、HPC 技術を支えるハードウェアとして、現在稼働中のスーパーコンピュータ「数値風洞 (NWT)」に代表されるように、その時代の最先端の科学技術用計算機システムの開発に関わってきた。ここでは、そのような航技研の計算機システムの利用状況や課題について概観するとともに、上述の HPC の航空宇宙への係わり方を踏まえた航技研の次期計算機システムの構想や技術要件について展望する。

3.1 航技研 NS システム

CFD に代表される航技研の HPC 技術の発展は、計算機の性能向上ぬきに語ることは困難である。80 年代前半のポテンシャル方程式をベースとする CFD の発展を支えたのは我が国最初のベクトル計算機 FACOM 230-75AP (10MFLOPS 級) であったし、90 年代前半までのナビエ・ストークス (NS) 方程式をベースとした CFD の発展を支えたのは Fujitsu VP400 を中心とする GFLOPS 級の全盛時のベクトル計算機であった。こうした中で、昭和 62 年 (1987 年) VP400 の導入とともに第 1 世代数値シミュレータ (Numerical Simulator; NS) システムは始動した。90 年代後半は、100GFLOPS 級の並列計算機「数値風洞 (Numerical Wind Tunnel; NWT)」が HPC 発展の中核を担った。NWT は、第 2 世代 NS システムの中核サーバとして平成 5 年 (1993 年) に導入されたが、NS 方程式をベースとする CFD 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 格子点の計算を 10 分、10M 格子点の計算を 1 時間程度で行うことを念頭に VP400 の 100 倍の処理性能が目標とされた。

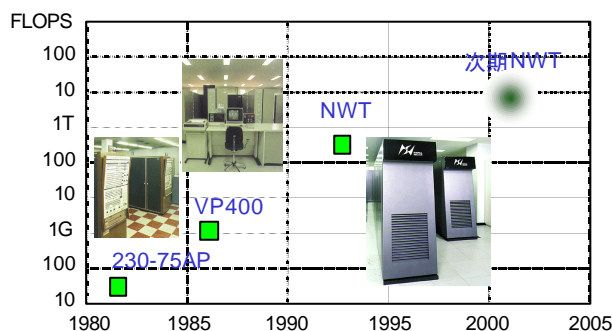


図8 航技研の計算機システムの変遷

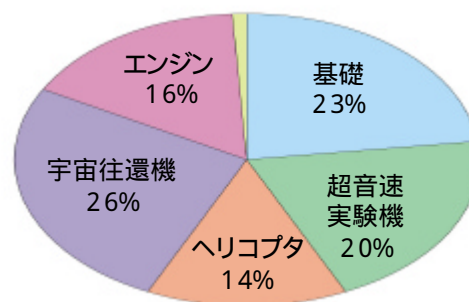


図9 NWT の分野別利用割合

NWT は、1 台当たり 1.6GFLOPS のベクトル要素計算機 (PE) 166 台から構成されるピーク性能 280GFLOPS、主記憶容量 44.5GB の分散主記憶型並列計算機である。図 9 は航技研における平成 12 年度の NWT の分野別利用割合を示したものであるが、基礎から各種応用に至るまでバランス良く利用されており、いろいろなユーザからの利用がまんべんなくある。表 1 は、航技研の所有する各種プログラムの性能実測値を示したものであるが、極めて高い実効処理性能値を示している。これは、これらのプログラムが十分にチューニングされていることもさることながら、CFD のアプリケーションが通信の負荷が大きくなく、ループ回転数が多いためベクトル計算機に向いていることに因るところが大きい。しかしながら、

UPACS に代表されるオブジェクト指向の記述・言語を使った最近の開発ものについては、必ずしも実効効率が上がらない、非定常解析のようなデータ入出力性能がボトルネックになる、といった場合も現出している。

表 1 NWT における各種プログラムの性能実測値

プログラム名	性能実測値	PE 数	実効効率	測定時期
NS3D	150.4GFLOPS	166	53.7%	平成 7 年 2 月
BIGCUBE	90.3GFLOPS	128	41.5%	平成 7 年 12 月
LINPACK	229.7GFLOPS	167	82.1%	平成 8 年 8 月
QCD	215.8GFLOPS	160	79.3%	平成 8 年 2 月
CMRSSH	111.0GFLOPS	160	40.8%	平成 8 年 9 月

航技研では、多くの研究者が自身でプログラムを開発しており、並列プログラミングについては、データパラレル系の言語として NWT-FORTRAN を、メッセージパッシング系の言語として MPI を用いている。並列解析 / デバッグ・ツールとして、昨今では Vampir、Totalview などを利用しているが、生産性の点でプログラミング環境に課題は多い。図 10 は、導入当初からの NWT の稼働実績をプロットしたものである。導入 3 年目以降、定常的に 90% という高稼働率を達成している。PE 利用時間からいうと、非並列ジョブ (1 台 PE) は年を追う毎に少なくなっている一方で、PE を多く使う (16 台以上) 多並列ジョブの割合が増えてきており、利用者が並列計算に徐々に馴染んできているのが見て取れる。しかし、稼働率 90% という状態が長期間続いており、計算機システムとしては次の世代に移行する時期に来ている。

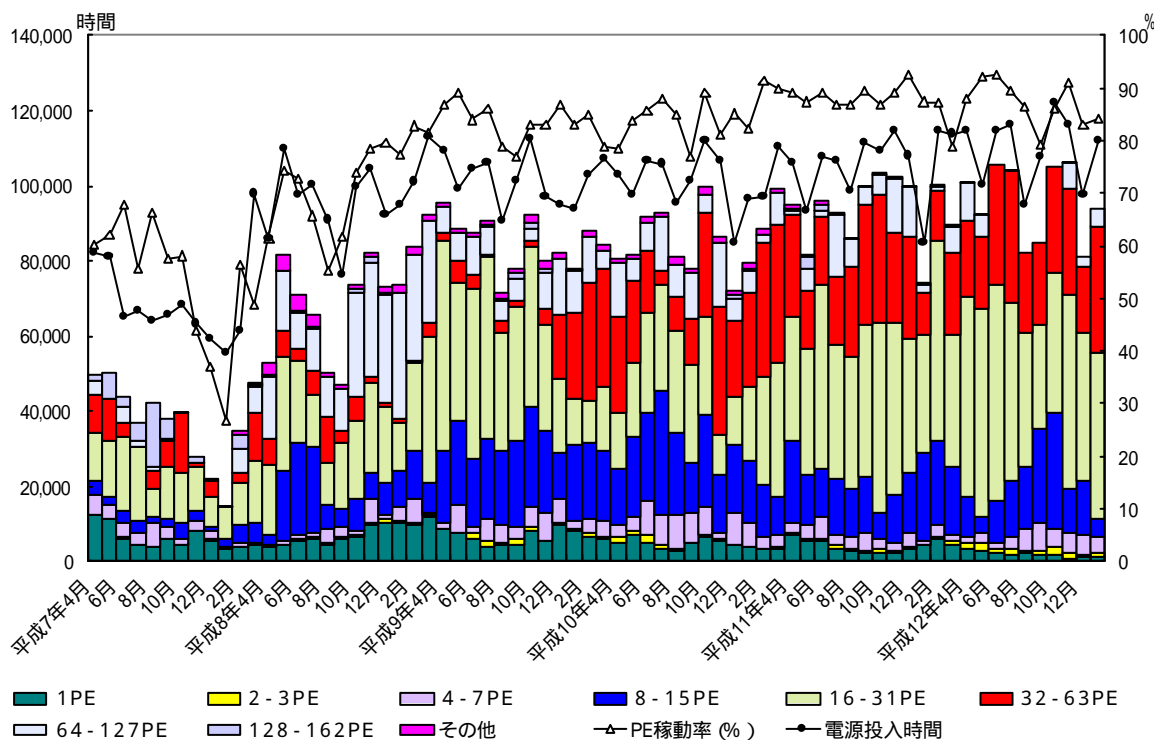


図 10 NWT の稼働実績と並列ジョブの変遷

3.2 設計・製造シミュレータ構想

図 9、10 で見たように、NWT は今日各応用方面から定常的に利用されており、利用者は HPC 技術を、1 から組み立てるというよりはそこにある道具を使うという意識で実際の「もの」の開発なり設計なりに活用し始めているという状況がうかがえる。そこには、第 1 世代 NS システム当時、数値シミュレーションに乗せられるものとはとにかく乗せようといった、どちらかといえば総花的利用観であったものが、第 2 世代に至って CFD という分野に重点化され（ただし、実用という意識は薄い）、ここに来て現実の問題に HPC 技術が実際に使われ始めた（実用化の方向が見え始めた）、というシナリオを想起することができる。問題なのは、それが今どう使われているかであり、それを分析することにより過去からの延長線上に航技研の次期（第 3 世代）NS システムのあるべき姿や方向性が見えてくるだろう。その文脈の中で、前節の航空宇宙への係わり方で述べたことは、HPC をどう使って行きたいか、という意向の集約と整理でき、方向性や持つべき機能がより明確になる。

HPC 技術を使うという観点で捉えたとき、これから重要になって来るキーワードの一つは「道具」ということであろう。「道具として使う」と言ったときの「道具（ツール）」という言葉には、計算機システムの重要な要素・考え方が含まれる。道具は、普通はそれを使うときに作るものではなく、使い方や較差、効果など予め決まっているものがそこにある必要がある。道具をインテグレートしたものが「（工作）機械」であり、決められた仕様で入力すれば所望の出力が得られる。多分野統合シミュレーションは基本の道具を使って新たな機能的な道具を創作することに相当し、それシステム化するということは機械に仕上げて行くことを意味する。また、標準化やコード検証は、その道具・機械を実用に供するための行為ということができる。第 3 世代 NS システムにこのような道具・機械としての性格を賦与することを要求要件としたとき、CFD 解析プロセス全体のスループット性能が重要になって来て、前後処理を含めた一連の処理全体の縦方向の統合化が必要になってくる。と同時に、適用限界、使いやすさ、標準化、対話性、移植性、メンテナンス性などの従来の HPC 技術と毛色の異なる物差しや価値観が入り込んで来る。また、ジョブ、資源、運転、ユーザなどの管理や交通整理を行うスケジューラの役割が従来にも増して大きくなる。道具・機械には、「もの」を作るときに使う種類と、「もの」の品質を検査するときに使う種類があり、性格も自ずと異なる。作るときの道具と考えると、できるだけいろいろな種類を用意しておくことが重要であり、一方、検査するときの道具は、数は少なくても良いがそれぞれがきちりでき上がっている必要がある。このことは、ソフトウェアやシステムを組み上げるときに適切な指針を与える。道具や機械を使いこなすためには、流れ作業ということが重要であり、流れ作業を可能にするには部品をストックしたり一時保管したりする場所が必要である。計算機システムに置き換えて考えればストレージがこれに当たる。そして、作業性を良くするには、大規模で機動力のあるストレージ（＝データサイロ）が必須になってくる。「もの」を作るときは、複数の人間が携わるのが普通であることの類型で、CFD 解析作業やソフトウェア開発にチーム作業的な仕組み・要素を取り入れるのも興味ある。さらに深く考えて行くと、システムの「道具 機械 製造ライン 工場」という進化の青写真が見えてくる。製造ラインは、製作するものによって決まっている。製造ラインに相当するものは米国 ASCI 計画でいうと

ころの問題解決環境(Problem Solving Environment; PSE)のようなものを想定すれば良い。この発想の行き着く先は工場であるから、工場と対比して連想すれば、我々のシステムの終着駅が見えてくる。

一方、機械や製造ラインを機能させるためには、各種小道具やこれぞという目玉機械がそろっていることが望ましい。そのような観点から HPC 技術を見直してみると、あるといいな、と思われるツールがかなり具体的に思い当たる。例えば、テンプレート自動格子生成ツール、自動バッチジョブ投入システム、リアルタイム可視化 GUI、障害診断アナライザなどがそれにあたり、航技研では実際にこのようなツールの作成に既に着手している。一方で、高級な道具を使いこなすには、しかるべき統合環境や雰囲気を整っている必要がある。UPACS の採っている考え方は、まさにそのような環境を整備することに対応する。

このような発想を突き詰めていくと、第 3 世代 NS システムは、設計や開発・製造のためのエンジン＝設計・製造シミュレータという姿が最も相応しいように思える(図 11)。ただし、何か特定のものができ上がって来るというものではないし、バーチャルファクトリのような生産工程を擬似的に実現するようなイメージでもない。ソフトウェアやコードを、道具や工作機械に見立てて何かをする・作る「場」を提供するといった感じである。何をするか、作るかは利用する側が決めるわけである。

以上、やや概念的な記述になってしまったが、「道具として使う」という発想から HPC 用システムに対する構想を展開してみた。ここで示したのは一つのビューであって、これではいけないというものではもとよりない。計算機の使い方、期待するものなどは、千差万別、個人依存である。ただ、設計・製造シミュレータの発想は、我々が HPC システムに必要と考えている性能・機能を克明かつ合理的に説明し、次期の NS システムの持つべき技術要件を鮮明に洗い出すことができると考えている。

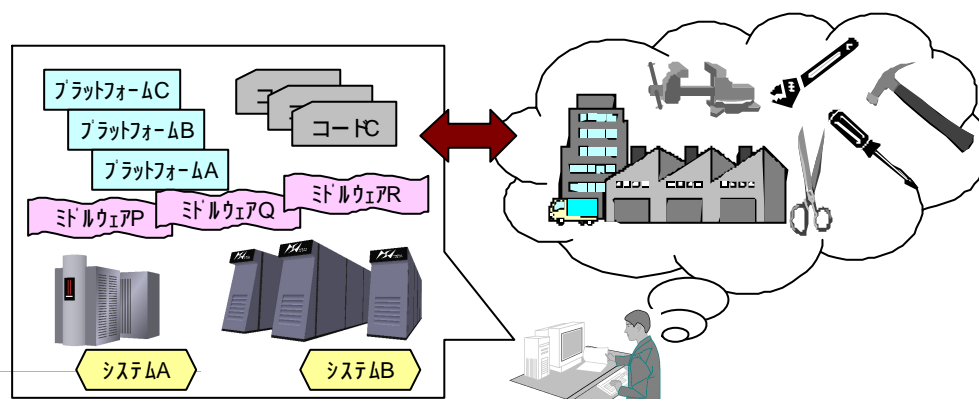


図 11 設計・製造シミュレータの概念

3.3 第 3 世代 NS システム

航技研では、平成 14 年内に現行 NWT を次期 NWT (とりあえず今はこう呼ぶ。) にリプレースする予定である。現行 NWT では、図 12 に例示したように数 1000 万点規模の対象物の CFD 解析に数 10 時間を要している。次期 NS システムにおいても CFD 解析が中心的な課題となるものの、今後は異分野のシミュレーションとの融合や連成(流体 - 構造、流体 -

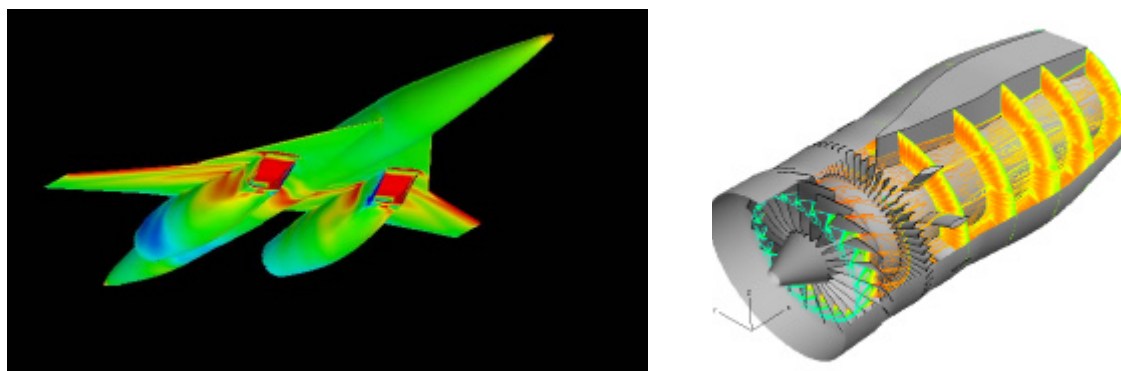


図 12 現行 NWT による大規模計算の例

制御など)や非定常的手法も取り入れて行く必要がある。その計算規模は、付属物の付いた完全全機(エンジン、操縦舵面等を考慮)まわりの流れの計算には 1 億点規模の格子点数が必要になり、テラバイト(TB)規模のユーザメモリが要求される。その規模の計算について現行の設計や開発の現場における「少なくとも次の日には答えがほしい:TAT = 1 日(10 時間以下)」という要件を満足させて行くためには、少なくとも現在の 30 倍程度の計算処理性能が要求される。また、シミュレーション結果の十分な検討時間を保障する容量を持ち、必要なデータを瞬時に引き出す検索機能を備えた数 100TB 規模のデータサイロが必要である。さらに、これら进行处理するためのデータの受渡しが全体の処理のボトルネックとならないよう、各システム間を結合する GB/秒クラスの超高速なバックボーンネットワーク及び高速の入出力機構が必要となる。また、ユーザが直接ログインし、計算のプリポスト処理や、開発プログラムのコンパイル・リンク、デバッグやチューニングを行うための多目的に利用可能なサーバ機能が必要である。構成的には、NWT の経験を踏まえ、クロスバーをノード間結合ネットワークとし、数 10 程度のノードから成る分散主記憶型の並列計算機が運用面からは望ましいと考えている。

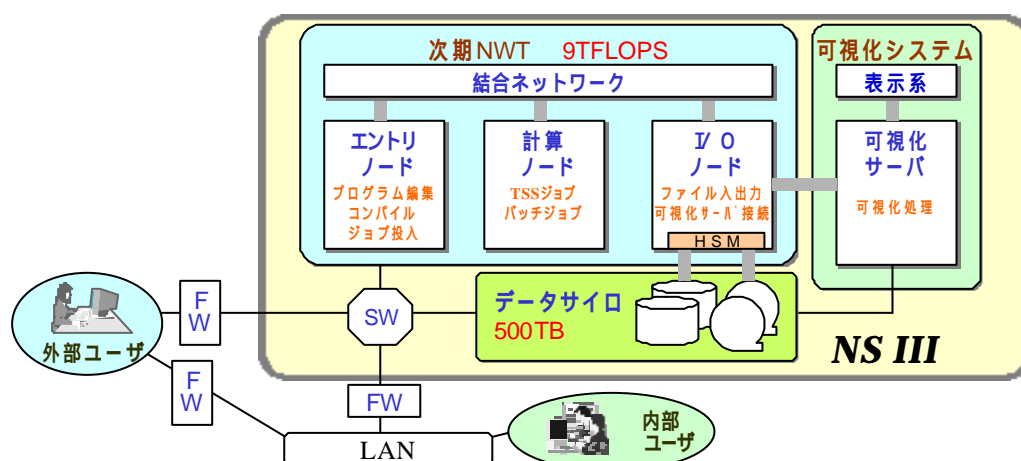


図 13 航技研第 3 世代 NS システムの構成イメージ

3.4 シームレス可視化

航技研では、第 3 世代 NS システム整備の一貫として、平成 12 年度、大規模可視化システムを中央可視化システム（**Central Visualization System; CeViS**）として先行導入した。当システムは、次期 NWT システムの大規模データをリアルタイムに可視化する装置として位置づけられており、高速画像処理サーバ（SGI Onyx3400；32CPU 64GB メモリ 6 パイプ）、大型 3 次元表示装置、グラフィックス端末などから成る。大型 3 次元表示装置は、4.6m×1.5m の大画面、3300 ドット×1000 ドットの解像度があり、大規模複雑な統合シミュレーションの結果を表示する能力を具備する。今後、スパコンと GSN（**Gigabyte System Network**）で連結し、500MB/秒以上の実効転送性能を実現する予定である。そしてリアルタイム可視化や情報の可視化を行うシームレスな可視化環境を実現して行く。

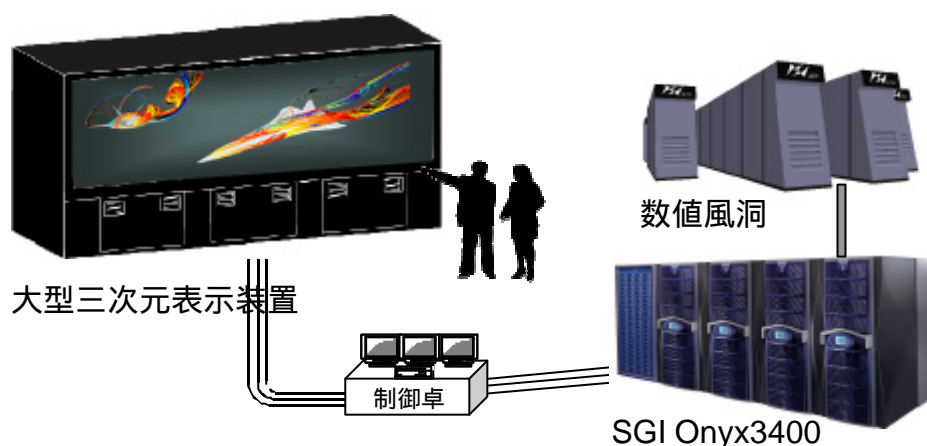


図 14 新中央可視化システム（CeViS）の構成概要

3.5 ネットワーク時代の HPC システムの在り方

ITBL にしてもそうだが、イントラネットやインターネットといったネットワークを通じてのシステム利用という考え方が当たり前になって来ている。そのとき留意しなければならないのは、標準化やオープン化への対応、運用性・操作性の統一、信頼性・レスポンスの保証、セキュリティの確保などである。これらは、従前の HPC システムにはなかった要件であり、

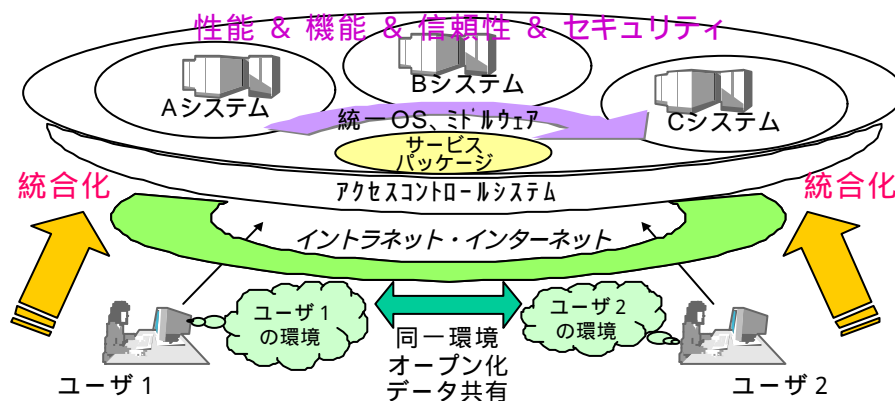


図 15 ネットワーク HPC システム

これからの HPC システムは単なる計算エンジンとしてだけではなく広範なサーバ機能を併せ持つ必要がある。航技研では、ウェブブラウザを利用してジョブ操作や簡易可視化を行うアクセスシステム WANS (Web Access to Numerical Simulator) の開発に着手している。

4 おわりに

CFD 技術は基本的な計算技術が確立され、如何に応用分野、実用分野で活用していくかが課題となっている。また、熱、構造、飛行、制御といった多分野との融合化やプラットフォーム・ミドルウェアの整備を通じた横方向の統合化、解析のスループットの向上やコンカレント化によるプロセス・ワークフローの縦方向の統合化を通じて、設計や性能評価により有効なツールとして磨いていく必要がある。関係機関との意見交換を通じて、この方向性については共通認識であることを確認した。独立行政法人航空宇宙技術研究所は平成 13 年度から CFD 技術開発センターを中心に関連機関の協力を得つつ、上記の CFD を中核とした多分野統合シミュレーション技術開発計画を着実に推進して行く予定である。

参考文献

- [1] “NAL 計算科学ビジョン 21 ”、航空宇宙技術研究所、(2001)
- [2] <http://www.nal.go.jp/jpn/info/010.html>
- [3] 山根他 “CFD コード共通化プロジェクト UPACS の現状 ”、航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム 2000 論文集、(2000) 45-50
- [4] <http://www.jaeri.go.jp/>