

シミュレーションを行う際にはモデル化，境界条件の設定，結果の評価といった解析者自身の判断選択がもっとも重要となる。計算機には演算能力だけでなく，プリ・ポストプロセスに重要なグラフィックス能力も求められる。近年の計算機，特にパソコン (PC) やワークステーション (EWS) などの低価格機の高性能化には目をみはるものがあり，机の上の計算機でシミュレーション作業が完結できるようになってきた。その結果，多数のユーザが使用するソフトウェアの効率的な利用法，データの共有化，解析者の判断をサポートする解析ノウハウの共有化が求められてくる。一方，最先端の研究開発にはスーパーコンピュータ (SC) でしかできない解析が必要となり，ユーザ数は少ないが超高速計算機の需要が存在する。

When performing numerical simulation, the analyst is required to build a simulation model, set the appropriate boundary conditions, and accurately evaluate the numerical results. The computer used must therefore have not only high calculation capacity, but also graphics performance for pre- and post-processing.

With the remarkable progress of computer technology in recent years, especially in the areas of personal computers and engineering workstations, it has become possible to perform numerical simulation on the desktop. In these circumstances, efficient methods for the joint utilization of software, the common use of data, and the sharing of simulation know-how become a major issue. At the same time, demand exists for ultrahigh-performance computers for leading-edge research and development.

1 まえがき

シミュレーションは非常に広範囲な分野でその利用が行われている。機械工学の分野でもターボ機器，熱交換器，自動車関連から半導体関連まで多くの応用例があり，その利用はますます盛んになってきている。これにはコンピュータ技術の進展が大きく寄与しており，ここでは実際にシミュレーションを行う際の計算機環境について考えてみる。

2 シミュレーションの実際

シミュレーションの実際を図 1 に示す流体解析の手順を例に考える。現在行われているほとんどの流体解析では実際の流れをなんらかの形で近似しその流れのモデルに対して方程式化される。モデル化は計算を簡略化するために用いられるが，乱流モデルなどの完全に確立したとは言えない発展途上にあるモデルを使用する場合も多い。これを計算機で処理できるよう代数方程式の形にするため，差分法，有限要素法，境界積分法などさまざまな数値スキームが用いられる。さらに代数方程式を解くさまざまなアルゴリズムを用いてコンピュータ内で計算が実行される。出力された膨大な数値データでは流れ場などの結果を判断することが困難であり，CG (Computer Graphics) などを利用して，

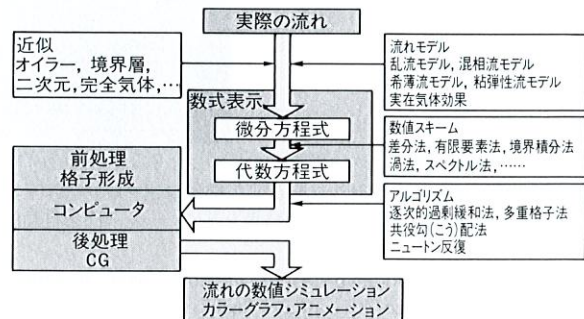


図 1. 数値流体解析の流れ⁽¹⁾ 流体解析で得られた解は実際の流れの解ではなく仮定した流れモデルの解であり，その結果を判断するには流れモデル，数値スキーム，アルゴリズム，CG に関する知識が必要となる。

Flow of computational fluid dynamics

結果を可視化する。どのような格子を用いて計算するかなどの前処理も流れ解析の重要な手順である。

シミュレーションにより得られる解は仮定したモデルの解であるため，その実行には解析対象のモデル化，結果の解釈がもっとも重要である。コンピュータに対しても単純な演算性能だけでなく，モデル化や結果の理解の助けとなる GUI (Graphical User Interface) が求められ，プリ・ポストプロセスを含めた計算機システムが重要であることがわかる。

3 現在の計算機的能力

数値シミュレーションがさまざまな研究開発に適応されてきている背景にはコンピュータの演算能力の目覚ましい向上があることに異論はない。実際の大規模問題を現実的な時間内で解くことができる高速演算能力が手に入っているからである。また、この計算機的能力向上、小型化はかつては大型計算機でしか不可能であった計算が手元のPC、EWSでも可能になっていることも意味する。科学技術計算での高性能計算機は使い勝手の面（プログラミングモデル）の観点から大きく四つに分類できる。

- (1) 分散メモリ型並列計算機 (MPP)
- (2) 共有メモリ型ベクトル計算機 (VECTOR)
- (3) 並列 PC/EWS サーバ (SERVER)
- (4) 手元の PC/EWS (PC/EWS)

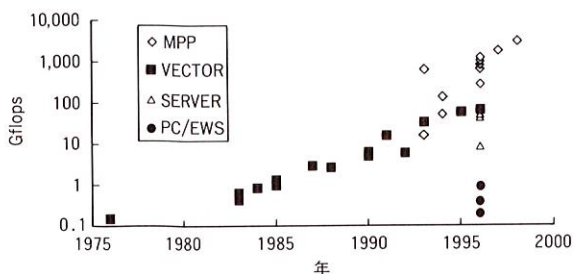


図2. 計算機の演算性能 各計算機の理論最大性能を示す。flopsは、1秒当たりの1浮動小数点計算処理に等しい。

Peak performance of computers

図2に1976年以降の理論最大性能（ギガフロップス（Gflops： 10^9 ））の推移を示す⁽²⁾。PC/EWS系については、1996年の比較的高速なものだけを示した。共有メモリ型ベクトル計算機は従来型のベクトル計算機で複数プロセッサまでを含めた。分散メモリ型並列計算機は物理的に分散メモリ構成となっている並列計算機をまとめた。並列PC/EWSサーバは複数プロセッササーバの代表的なものを示した。理論最大性能では分散メモリ型並列計算機は共有メモリ型ベクトル計算機より良くなっており、並列PC/EWSサーバは理論最大性能では共有メモリ型ベクトル計算機に追いついている。しかし、図2は理論最大性能であり、実行性能は各タイプで大きく異なる。共有メモリ型ベクトル計算機はアプリケーションによる実行性能が良く出るタイプである。実行性能が理論性能の50%程度出るアプリケーションも珍しくはない。分散メモリ型並列計算機や並列PC/EWSサーバで複数プロセッサで使用したときの実行性能はアプリケーションの性質に大きく依存し、実行性能が10%以下のアプリケーションも珍しくはない。

このような計算機環境では、問題に応じて各種の計算機をうまく使い分ける必要がある。線形の二次元問題までで

あれば、手元のPC/EWSで十分な結果を得ることが可能である。本格的な三次元問題では共有メモリ型ベクトル計算機や分散メモリ型並列計算機が必要になる。新材料の開発などの分野では、共有メモリ型ベクトル計算機や分散メモリ型並列計算機でも能力不足でより高性能の計算機の開発が望まれており、ペタフロップス（ 10^{15} ）計算機の可能性についての検討も始まっている。

4 計算機環境の事例

手元の計算機で実行した解析例としてガスタービン圧縮機翼列周りの二次元非定常流れ解析を図3に示す。separation bubbleと呼ばれる翼面上を沿って流れるはく離渦の挙動が詳細に再現されている。これにはPowerIndigo2^(注1)というEWSが用いられ現在の当社のセンタマシンであるCRAY C94D^(注2)の約1/4の演算性能（1CPU当たり）をもち、数年前のトップクラスのSCに匹敵している。このように二次元問題であれば詳細な解析であっても手元のマシンで実行可能になっている。ところが、材料科学や分子動力学、流体分野でも乱流のダイレクトシミュレーションなど、現在の最高の演算性能をもってしてもまだ解析が困難な分野もある。このようなこれまでは不可能であった分野に新たに取り組もうとしている動きもある。

日本原子力研究所の計算科学技術推進センター（CCSE）では5台のタイプの異なる高性能計算機を中心とした複合並列計算機システムをもっている。CCSEの今後10年の活動は2期に分かれ、第1期（5年）は並列処理に必要な共通基盤技術・手法を開発し、第2期（5年）には並列計算の次世代基盤技術を開発し、各研究分野・産業界における計算

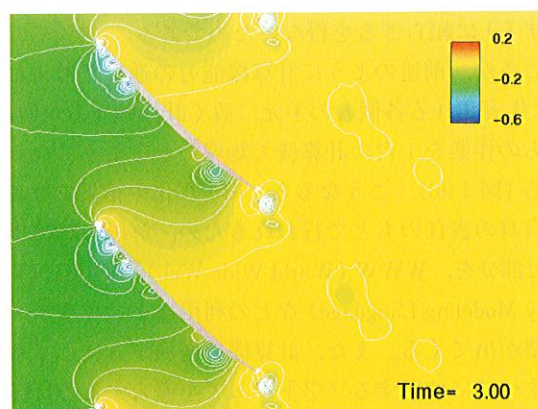


図3. 翼周りの流れ解析 翼面上を沿って流れるはく離渦が観察できる。二次元問題であれば、このような詳細な解析も手元の計算機で可能となっている。カラーバーは圧力の値を示す。

Visualization of flow around airfoil

(注1) PowerIndigo2は、Silicon Graphics社の商標。

(注2) CRAY C94Dは、CRAY Reserch社の商標。

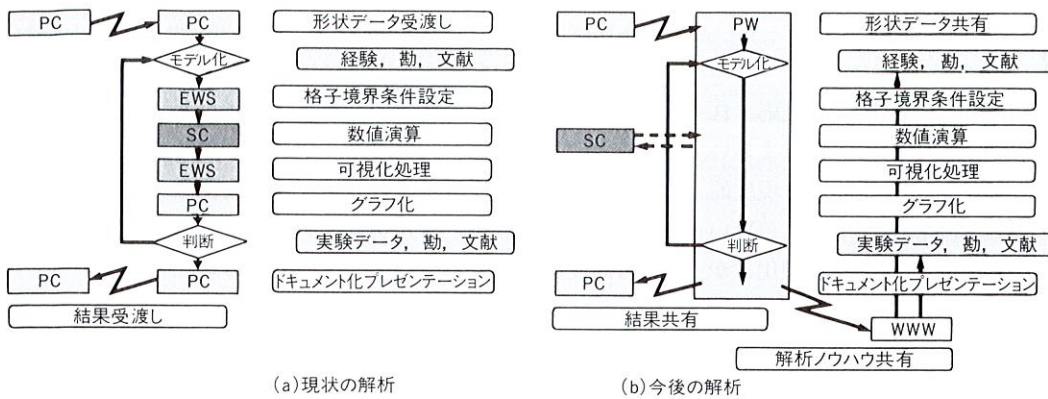


図4. 数値シミュレーションの流れ 図(b)のPWはPersonal Workstationで自分の机の上のコンピュータを意味する。OSはWindows[®](注3)、MacOS、UNIX^(注4)などなんでもよい。ただし、現状ではWindowsNT[®](注5)がもっとも実現性が高い。
Flow of numerical simulation

科学手法の広範な応用・普及を行う。これからも計算機としての演算能力の追求は並列プロセッサによる並列処理へと重心が移っていることがわかる。

5 今後の方向

図4(a)に示す現状のシミュレーション作業を追っていくと、実際の数値演算を行う前と後にもさまざまな作業がある。解析を始めるにあたってCADなどからのデータ取込みを含めたプリプロセス、実際の数値演算、解析結果の論文、報告書といった文書化やプレゼンテーションへの利用、これは単なる結果の可視化やグラフだけでなく、アニメーション、音声なども含まれてきている。これらの作業をそれに適したPC、EWS、SC間でデータのやりとりを頻繁に行っている。これは現状のPCではグラフィックス能力、演算応力が足りず、かといってEWSではユーザインタフェースが不満で、また高価で一般に使用されていない、また大規模解析では演算能力不足でSC(前述のMPP、VECTORに対応する)に頼らざるを得ないためである。

ところが、前述のように計算機能力の進歩を考えると、PCに代表される各個人の手元に置く計算機能力が増加し、これらの作業を1台の計算機で処理できるようになってきている(図4(b))。こうなると、モデル化や結果の評価は解析者自身の責任のもとで行われるため、解析の経験や勘といった部分を、WWW(World Wide Web)、VRML(Virtual Reality Modeling Language)などの利用によってサポートする必要が出てくる。また、計算機は増加するにしてもそれぞれすべてに使用するソフトウェアを導入するのは経済的にも使用頻度の面からも無駄のように思われる。そこで、フローティングライセンスなどによりうまくソフトウェア

を共用化する手段が必要となる。

一方、最先端の研究開発には最先端の高速計算機が不可欠であり、最高の演算能力が必要な研究者や設計者も人数は少ないが必ず存在する。例えば、モデル化からシステム全体解析といった大規模解析への移行、構造・電磁・流体などの連成解析、分子動力学などといった分野では、ある少人数で大型機を占有しその演算能力を最大限に生かしてはじめて解析が可能となる。このように大多数のユーザは手元のマシンで解析を完了し、ある特定の少ユーザが大型機を使うといった二極化が進み、また二極化を進めることが全体として計算機資源を有効に利用することになる。

6 あとがき

何を求めるかを決め、そのモデルを構築し、それに適した計算機を用い、そのモデルによる解を検討し実現現象に適應する。これがシミュレーションで、何を求めたいかの意志により計算機環境は決まる。近年の計算機の能力向上により、机の上でのシミュレーションにより解明できることが著しく増加している。

文献

- (1) 保原 充, 他: 数値流体力学, p.4, 東京大学出版会(1992)

(注3)、(注5) Windows、WindowsNTは、Microsoft社の商標。

(注4) UNIXは、X/Openカンパニーリミテッドがライセンスしている米国ならびに他の国における登録商標。



横野 泰之 Yasuyuki Yokono, D. Eng.

研究開発センター 機械・エネルギー研究所主任研究員, 工博。計算熱流体力学の研究に従事。日本機械学会, 日本伝熱学会, 可視化情報学会会員。
Energy & Mechanical Research Labs.



福井 義成 Yoshinari Fukui

情報システム部 技術システム開発部主査。数値ライブラリ, 連続系シミュレータの開発に従事。情報処理学会, 日本応用数理学会, 日本シミュレーション学会, IEEE 会員。
Information Systems Div.