

# 統合シミュレーション支援環境の提案

## The Proposal of Integrated Simulation Support Environment (ISSE)

長谷 佳明

Yoshiaki NAGAYA

**Abstract:** We propose an integrated simulation support environment (ISSE) for developing and executing a computer simulation in this paper. ISSE is considered as the interface which provides an experimenter with a web browser, and offers virtually the computer resource over between two or more computers as one computer system. By ISSE we can cut down the cost concerning losing a precious experiment result by unifying the injection of a simulation, data processing after a simulation, and management of data. So we describe the outline of an integrated simulation support environment.

### 1 はじめに

コンピュータシミュレーションというものを考えた場合、その作業は、複数のステップに分けることができる。一例を挙げると、シミュレーションコードの開発が行われ、そのシミュレーションコードへのパラメータ設定を行った後、シミュレーションコードの実行が行われる。そして、シミュレーションによって得られた結果データの蓄積、シミュレーションの結果データに対する可視化といった後処理、後処理によって得られるデータの蓄積と行われる一つの例が考えられる。これら処理は、各ユーザが必要なコンピュータ資源にアクセスし、操作することで実現されている。一方で、大規模なシミュレーションを行うためには、例えば以下のようなコンピュータ資源が必要となる。

1. シミュレーションを実行するための高速な演算機能を持った計算機及びソフトウェア
2. 膨大なデータを蓄積可能なストレージを持った計算機及び、それらを管理可能なソフトウェア
3. シミュレーションによって得られた結果データを実験者が理解しやすい形に変換を行うための計算機及びソフトウェア
4. 実験者がシミュレーションの命令を出すための計算機。つまりは、シミュレーション資源にアクセスするための計算機及びソフトウェア

このように、一つの例をとったとしても、これら資源は単一の計算機で実現することは非常に難しく、自ずと複数の計算機に跨ることとなる。この例を図示すると、Fig.1 のようになる。

資源が分散することによって、シミュレーションを行う実験者にとっては、単一の計算機と比較すると使い

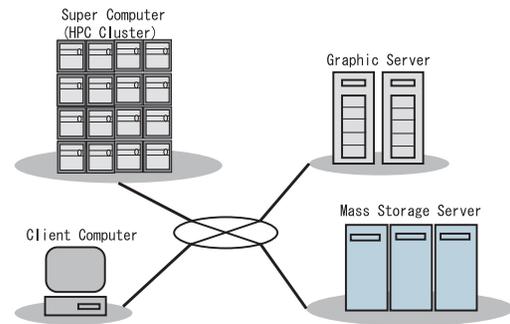


Fig. 1 An example of simulation resource

勝手が悪いものとなる。一方で一連の計算機資源を提供する管理者としてはユーザ管理、障害時のコンピュータシステムの切り離しなど、複数のコンピュータにコンピュータ資源が分散していることで多大な管理コストを生じることになる。

そこで、これら分散した資源をあたかも一つの巨大なコンピュータとして提供することで、実験者にとって計算機の使い勝手を向上させ、かつ同時に管理者のコストを削減を目指したものが統合シミュレーション支援環境 (Integrated Simulation Support Environment: ISSE) である。

## 2 統合シミュレーション支援環境提案の意義

### 2.1 問題解決環境 (Problem Solving Environment: PSE) との違い

統合シミュレーション支援環境の目的と似たものとして、以前から問題解決環境 (PSE) というものの研究、開発が行われてきた。PSEとは、シミュレーションのモデリング、シミュレーションの実行、シミュレーションデータの可視化までを一つのシステム内で実行することで、実験者をサポートするものである。例えば、データ解析、

可視化ソフトウェアである AVS/Express<sup>1</sup>は、PSE の一例とも考えることができる。PSE の目的の重きが、シミュレーションのそれ自体の円滑な実現を目指したものであり、問題の定式化など、シミュレーション作成そのものにおかれている。一方で我々の提案する ISSE は、シミュレーションの実行後のデータのハンドリング、結果として得られる膨大なデータのマネジメント、シミュレーション資源の統合にある。そのため、PSE と同じく、実験者の円滑なシミュレーションのサポートという目的は同一であるが、そのスタンスが異なるといえる。

## 2.2 Globus Toolkit との関係

シミュレーションの大規模化によるより大きな計算性能、そして複雑化に伴う専用計算機の要求という実験者からのニーズ。そして、急速なコンピュータネットワークの高性能化によって、世界中に点在する計算資源を結び巨大なコンピュータシステムとして利用しようという Grid コンピューティングという考え方が一般紙にも登場するほどに急速に一般化した。これら Grid コンピューティングを実現するツールとして、Globus Toolkit<sup>1)</sup> が開発されている。Globus Toolkit 開発による Grid コンピューティングへのアプローチは、いわばツール整備から上位の実システム構築というボトムアップの方式といえることができる。一方で、我々の提案する ISSE は、現在のシミュレーションの資源といういわば個々のシステム、プログラムを統合することで、コンピュータ資源の統合によるユーザビリティの向上を目指しているため、いわばトップダウンのアプローチといえる。

システム設計の考え方として、試作システム(プロトタイプ)を作成することで、設計の初期の段階でシステムの要求を明確に分析する方法がある。本提案システムは、Globus Toolkit のためのプロトタイプシステムとして考えることもできる。つまり、本提案を実装したシステムを構築することで、Globus Toolkit など各種ツール開発のための有益な情報提供という側面から考えることもできる。

## 2.3 シミュレーション支援システムのスケルトンとしての役割

我々は、ISSE を提案すると同時に、提案の際に得られたソフトウェアシステムをシミュレーション支援システムのスケルトンとして提供することを考えている。その構築の意義としては以下に示す 2 点が挙げられる。

1. 物理学をはじめ、設計工学、化学など他のシミュレーションコードでも実験者をサポートするシステムの需要はあるということ

<sup>1</sup>Advanced Visual Systems の製品 [http://www.avsc.com/software/soft\\_b/avsxprs/avsxps.html](http://www.avsc.com/software/soft_b/avsxprs/avsxps.html)

2. シミュレーションを支援するシステムをゼロから開発した場合、その開発は時間、費用ともかなりのものがかかってしまうという点からも、再利用可能なシステムが望まれている

シミュレーション支援システムのスケルトンとしての利用を実現するため、本提案を実装したシステムでは、できうる限り、プログラムをモジュール化し、再利用可能なプログラムモジュールとして実装を行っている。システムを固有部、共通部として分割することで、本システムを用いて他のシミュレーションに対し、共通部のモジュールを利用することで、開発時のコストを低くすることが可能となる。

## 3 シミュレーション資源の統合

### 3.1 シミュレーション資源統合のためのアーキテクチャ

シミュレーションの資源を一つの仮想的な計算機として提供するにあたっては、オペレーティングシステム(OS)を意識した仕組みを持たせることとした。つまり、OS の提供するものには、ユーザがコンピュータに対して対話的な処理が実現可能となるユーザインタフェース、データを記憶しておくためのファイルシステム、演算機能、そしてこれらを統括するカーネルとなるコントロールシステムである。OS の機能に照らし合わせて、ISSE の持つ機能について、以下にまとめる。

**ユーザインタフェース** 実験者がシミュレーションをコントロールし、結果データを解析するために用いるインタフェースを指す。Web サーバ、そしてアプリケーションサーバを組み合わせた Web ブラウザを通じての提供。実験者が操作に使用する窓口は Web ブラウザとなる。

**ファイルシステム** シミュレーションの結果得られるデータの保存管理のための方法を指す。データベースによるファイルのインデックス管理とストレージを組み合わせたもので実現する。

**シミュレーション演算** 高速な数値計算が可能な Super Computer もしくは HPC Cluster。

**シミュレーションコントローラ** 実験者の行うシミュレーションへの指示に基づき、実際に使用する資源へのアクセスと同時に、各コンピュータへ命令を発行する役目を果たす。OS の上に常駐することで他の機能を制御するデーモンプログラムとして実装する。

### 3.2 ユーザインタフェース

実験者が、直接操作することとなるユーザインタフェースは、実験者にとってわかり易く、かつ操作性の高いも

のなくてはならない。そこで、使い易く違和感なく実験者が使用可能で、様々なフォーマットの画像表示機能を持つ GUI ベースの Web ブラウザをインタフェースとして用いることとした。Web ブラウザをインタフェースとして用いる利点を以下にまとめる。

1. 実験者が使いなれ違和感なく使用できるソフトウェアであること
2. 様々な Web サービスを Web サーバ側で提供することで対話的処理が可能であること
3. リンクといった形で分散する資源に対して HTML フォーマット、そして HTTP プロトコルを用いることでアクセスすることが可能であること

ここで、Web ブラウザを ISSE のインタフェースとして使用する様子を Fig.2 に示す。

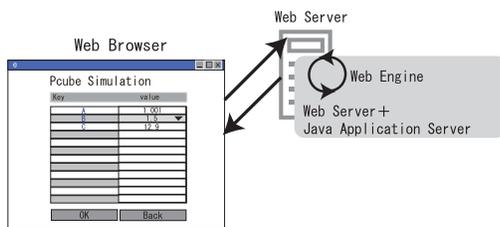


Fig. 2 An image of ISSE'S interface

Fig.2で挙げている Web エンジンにおいて、「Web サーバ+Java アプリケーションサーバ」というものがあるが、シミュレーションを支援するシステムを考えた場合、静的な HTML ファイルの提供だけでなく、刻々と変化するシミュレーションの状態、そして結果データに対応するためには動的な Web ページの生成が必要となる。この動的な web ページの生成には、Web サーバと Java アプリケーションサーバとを連携させることで実現することとした。

### 3.3 ファイルシステム

シミュレーションによって得られる結果データは、ファイルといった形で蓄積されることとなる。これらファイルデータを扱うにあたっては、以下の 2 点を重視した。

1. 保存したデータに対して高速な検索 (参照) が可能であること
2. 大容量のデータを保存に対してもできうる限り劣化することのない性能

この機能を実現するために、データベースに対して実データを含めた全てのデータ格納するという考え方を考えた場合、そのデータ量が増加するにつれ、データベ-

スの検索への応答性能は劣化する。しかし、単にデータをストレージに蓄積し、ストレージを管理する OS の機能を用いて検索を行っては、十分な検索性能を得ることはできない。そこで、実データと、その実データのインデックスを分けることで大容量で、高速な仮想的ストレージを実現することを考えた。この仮想ストレージは、実ファイルへのインデックスの保存、及びインデックスの高速な検索をデータベースを用いて行い、実ファイルは、ストレージデバイスへ保存する。そしてこれら処理をコントロールするのは、シミュレーションコントローラとして紹介したコントロールサーバデーモンである。シミュレーションによって得られた全データのハンドリングをコントロールサーバデーモンを通じて行うことで、データベースによるファイルインデックス管理が徹底される。それと同時に、コントロールデーモンは、このデータベースを用いて、ファイルのある所在を知り、データへのリンクを知ることで、データに対して、動的に Web ページを生成し実験者に Web ブラウザを通じてデータを提示することが可能となる。

ここで、ファイルシステムの概念図を Fig.3 に示す。

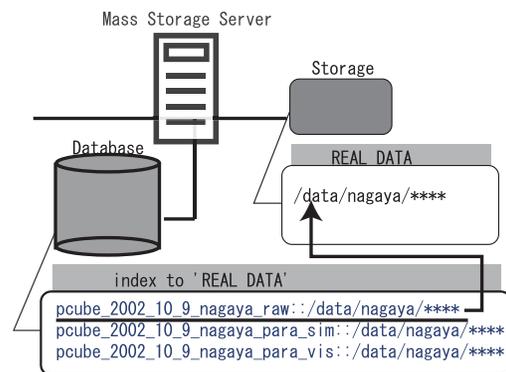


Fig. 3 An image of ISSE'S File System

### 3.4 シミュレーション演算機能とジョブスケジューリング

シミュレーションには、多種多様なものがあり、中には結果を得るために数日を要するような極めて計算量の大きなものが存在する。しかし、シミュレーション演算を提供する計算機の占有は難しく、複数のユーザが同時に使用することが常である。そのため、シミュレーションの演算を行う計算機のスケジューリングが必要となる。スケジューリングには二つのレベルを持たせることとした。それは以下に示す二つのレベルである。

1. 複数のシミュレーション演算機能を提供する計算機 (計算サイト)がある場合、より負荷の低いこと、より高度な演算性能を提供するコンピュータに対してシミュレーションを依頼するなどのシミュレーシ-

## ンジョブ投入時のスケジューリング

### 2. シミュレーション演算機能をつかさどる各計算機内のジョブのスケジューリング

前者に関しては、予め計算機の性能をベンチマークソフトウェアなどによって性能を得た上で静的な演算性能を得る。一方で、ジョブ投入時の計算機の負荷を知ることによってシミュレーションを処理する実パフォーマンスは変化する。そのため、シミュレーションジョブ投入前に各サイトの負荷の情報を得ることでコントロールサーバは適切なサイトを選択し処理を依頼するという形を取る。

スケジューリングに関しては、上に挙げた後者に対しては、計算機にジョブスケジューリングシステムが導入されていることを前提とし、そのサービスによるものとする。

### 3.5 シミュレーションコントローラ

シミュレーションコントローラとは、いわば実験者が Web インタフェースを通じて行う操作を理解し、そのバックグラウンドでシミュレーションの一連のコントロールをサポートする役目を果たすものである。仮想的にオペレーティングシステム (OS) の機能を模倣したものを実装することで、実験者は本統合シミュレーション支援環境をあたかも一つの OS のように操作する。つまり実験者は Web インタフェース、そしてその裏にあるシミュレーションコントローラを通じて分散する計算資源にアクセスし、目的とするシミュレーションの作業を行うことが可能となる。このような実験者のシミュレーションを支援するためには、以下のような機能をシミュレーションコントローラに持たせる必要がある。

- ユーザ認証機能—各実験者の発行するシミュレーションジョブを受け付ける機能
- シミュレーションの環境設定機能—シミュレーションを実行するための前処理の自動実行機能
- シミュレーション実行サイトの選択機能—シミュレーションの計算機へのジョブ投入機能
- シミュレーション状態管理機能—シミュレーションの状態及び管理機能
- 結果データのハンドリング機能—シミュレーションによって得られるデータの転送機能
- データ管理機能—シミュレーションによって得られるデータの管理
- エラー処理制御機能—シミュレーションにおけるエラー対策機能

- ユーザ提供コマンド代理機能—ユーザに提供するサービスコマンドの橋渡し機能

一方これら機能を持ったものは、あくまで仮想的な OS であり、シミュレーションコントローラの動作する OS 上に常駐するデーモンアプリケーションとして実装を行う。つまりは、メタ OS として機能させるものとする。つまり、シミュレーションに関するすべての操作がこのシミュレーションコントローラを介して操作させることで、シミュレーションの管理を実現する。

### 3.6 統合シミュレーション支援環境

統合シミュレーション支援環境は、シミュレーションコントローラ、ユーザインタフェース、ファイルシステム、シミュレーション演算などの複数のモジュールから構成されている。これらモジュールを組み合わせることで、実験者のシミュレーションを支援を実現する。統合シミュレーション環境の概念を Fig.4 に示す。

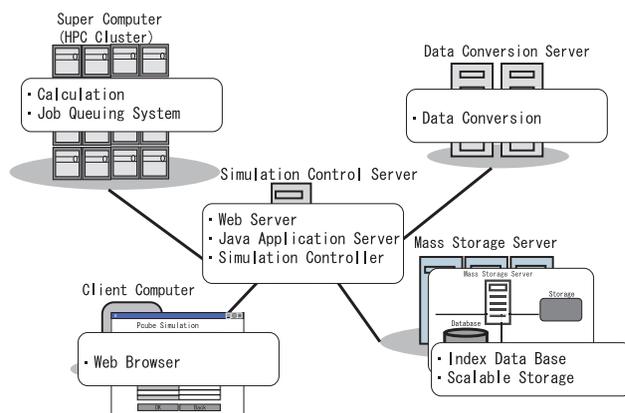


Fig. 4 An image of ISSE

## 4 まとめ

本発表では、コンピュータシミュレーションを行う実験者を支援し、シミュレーションの円滑な実行を可能とする統合シミュレーション支援環境の概念の提案を行った。本システムの目的は、複数のコンピュータにまたがる計算資源をまとめ、実験者にとって使いやすいシミュレーション実行、解析環境を提供することにある。本提案を実装したシステムを構築するにあたっては、日本原子力研究所で Pcube と呼ばれる物理系シミュレーションを支援することを目的に構築を行っている。

## 参考文献

- 1) The Globus Project, <http://www.globus.org/>