

スーパーコンピュータと サイエンティフィック ビジュアライゼーション

Supercomputers and Scientific Visualization

スーパーコンピュータによる数値計算結果を視覚化するビジュアライゼーションシステムの適用が広がりつつある。日立製作所は、(1) 数値シミュレーション方法に適合した構成の数値マスタファイルの構成とそのアクセス方法、(2) シミュレーションの出力形式に適した多様なグラフ作画機能、(3) スーパーコンピュータのハードウェア機能を利用した高速画像・図形処理機能、(4) アニメーション作成のために、ES(拡張記憶装置)経由で動画像を直接VTRに出力する変換機構の利用、などに特徴があるシステムを開発した。また、数値シミュレーショングラフ作成プログラムSGRAF E2(Simulation Graphic Facilities Extended Version2)を、本システムの機能を基礎にプログラムプロダクトとして開発した。

矢島章夫* Akio Yajima
栗原恒弥* Tsuneya Kurihara
安生健一** Ken'ichi Anjō
河辺 峻*** Shun Kawabe
青山明夫**** Akio Aoyama

1 緒 言

スーパーコンピュータによる超高速数値計算技術の進歩に伴い、数値シミュレーションの対象範囲が拡大し、この計算結果を迅速に整理分析することの重要性が増している¹⁾。一方、半導体技術の進歩によるLSIの高集積化と低価格化によって、高性能かつ高機能なディスプレイ装置が分散環境で利用可能になってきた。このようなディスプレイ装置やワークステーションを利用して、数値シミュレーションから出力される多次元数値データの図形および画像による視覚化(サイエンティフィック ビジュアライゼーション)は、解析作業を効率的に進めるために不可欠である。

スーパーコンピュータの能力と数値計算出力量の関係を図1に示す。同図の横軸は、数値計算に利用するメッシュの個数を表す。この例では、三次元の差分法による離散化結果を縦、横、奥行き順に $K \times K \times K$ の表現でメッシュ数 M として表している。いま、1メッシュ当たりの浮動小数点演算量を q 回とすると、全メッシュでは qM 回になる。時間軸についても離散化し、 N ステップ計算した場合、全演算量は qMN 回になる。処理する計算機の能力を p (GFLOPS)とすると、1時間ステップ当たりの演算時間 t は、 $t=qM/p$ となり、全計算時間 T は、 $T=qMN/p$ となる。同図の左側縦軸に t 、右側に T を示す。概略値として、 $q=100$ 回、 $N=1$ 万ステップ、 $p=0.1, 1, 10$ GFLOPSとしたときに、 M に対する処理時間のグラフを表示している。計算機性能の向上とともに、実用的時間内に計

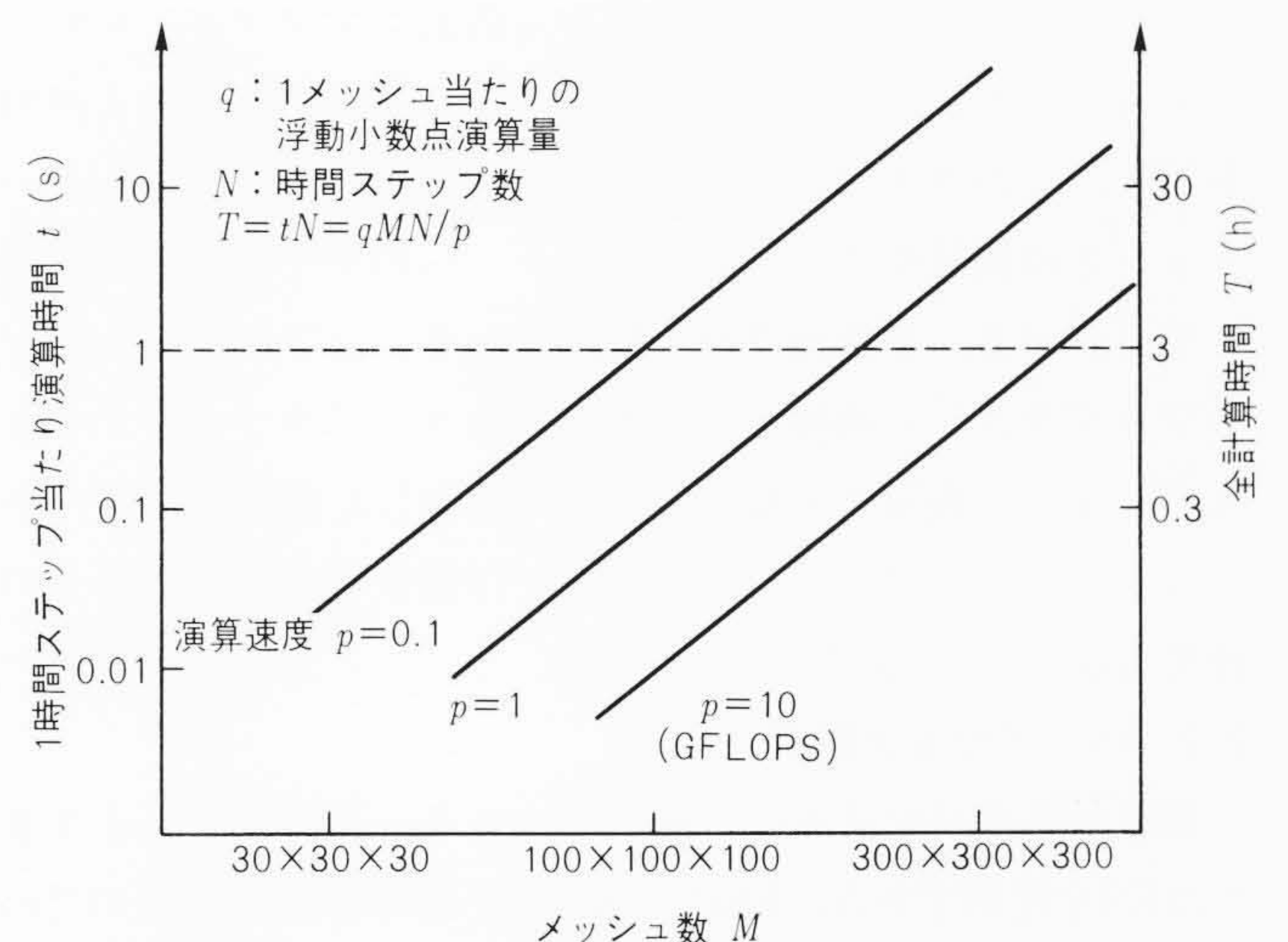


図1 スーパーコンピュータの能力と数値計算量 スーパーコンピュータの高性能化とともに計算可能メッシュ数が増加する。本図は、 $q=100$ 回、 $N=1$ 万ステップの場合の例である。

算できるメッシュ数が増大し、 10^6 メッシュ以上を扱うことが必要になることがわかる。

このような数値シミュレーション技術の進歩を背景として、
(1) 数値シミュレーション結果の視覚化
(2) 複数の数値シミュレーション間の接続の効率化
を目的に、サイエンティフィック ビジュアライゼーション システムを試作した²⁾。このシステムは、スーパーコンピュータ

* 日立製作所 中央研究所 ** 日立製作所 日立研究所 *** 日立製作所 神奈川工場 **** 日立製作所 ソフトウェア工場

の環境下で、各種シミュレーション間での共用が可能な数値マスタファイルとその格納・検索機能、および数値データの多次元グラフ化機能を提供する。これらの機能、システム構成およびスーパーコンピュータをコンピュータグラフィックスに利用した場合のハードウェアとソフトウェアの利用方法について述べる。また、表示例を最近のコンピュータグラフィックス技術も交えながら示す。

本システムの特徴は以下のとおりであり、この順に報告する。

- (1) 数値シミュレーション方法の特性に適合した構成の数値マスタファイルの構成とそのアクセス方法
- (2) 数値シミュレーションの出力構成形式に適したグラフ作画
- (3) スーパーコンピュータのハードウェア機能を利用した画像・図形処理機能(スキャンライン変換, 画像ユーティリティ)
- (4) アニメーション作成のために、ES(拡張記憶装置)経由で動画像を直接VTRに出力する変換機構の利用

2 システムの概要

2.1 ソフトウェア構成

アプリケーションプログラムから数値マスタファイルのアクセスルーチンによって、シミュレーションデータの入出力を行う。このマスタファイル経由で、ほかの数値シミュレーションとの接続やグラフ表示ルーチンへのデータ供給を可能とする。一方、多次元グラフ作画ルーチンはアプリケーションプログラムから直接データを受け取り、グラフィックディスプレイ上に表示する場合と、先に出力した数値マスタファイルから、対話グラフ指定によって作画表示する二通りの使用方法がある(図2)。

2.2 ハードウェア構成

数値マスタファイルは、磁気ディスク、半導体ファイルまたはESを使用できる。ESは、後述する動画像変換装置のための出力画像バッファとしても利用する。これによって、スーパーコンピュータからの画像データの転送ネックを解消し、動画像を直接ビデオレートで映像機器(VTR, テレビジョンモニタ)に出力できる。

グラフィックディスプレイは、チャンネル直結形のフルカラーディスプレイを使用するが、エラー伝搬法による中間調表示によるTSS端末への表示と、数値データをイーサネットを介してグラフィックワークステーションに転送した後、三次元表示が可能である(図3)。

2.3 ファイル機能

シミュレーションによって出力される解析データの全体をDM(データマトリックス)と呼ぶ単位で取り扱う。数値マスタファイルは、複数のDMから成り立ち、これらのDM間の関係は、DM名称の階層構造によって、数値実験のデータ群を管

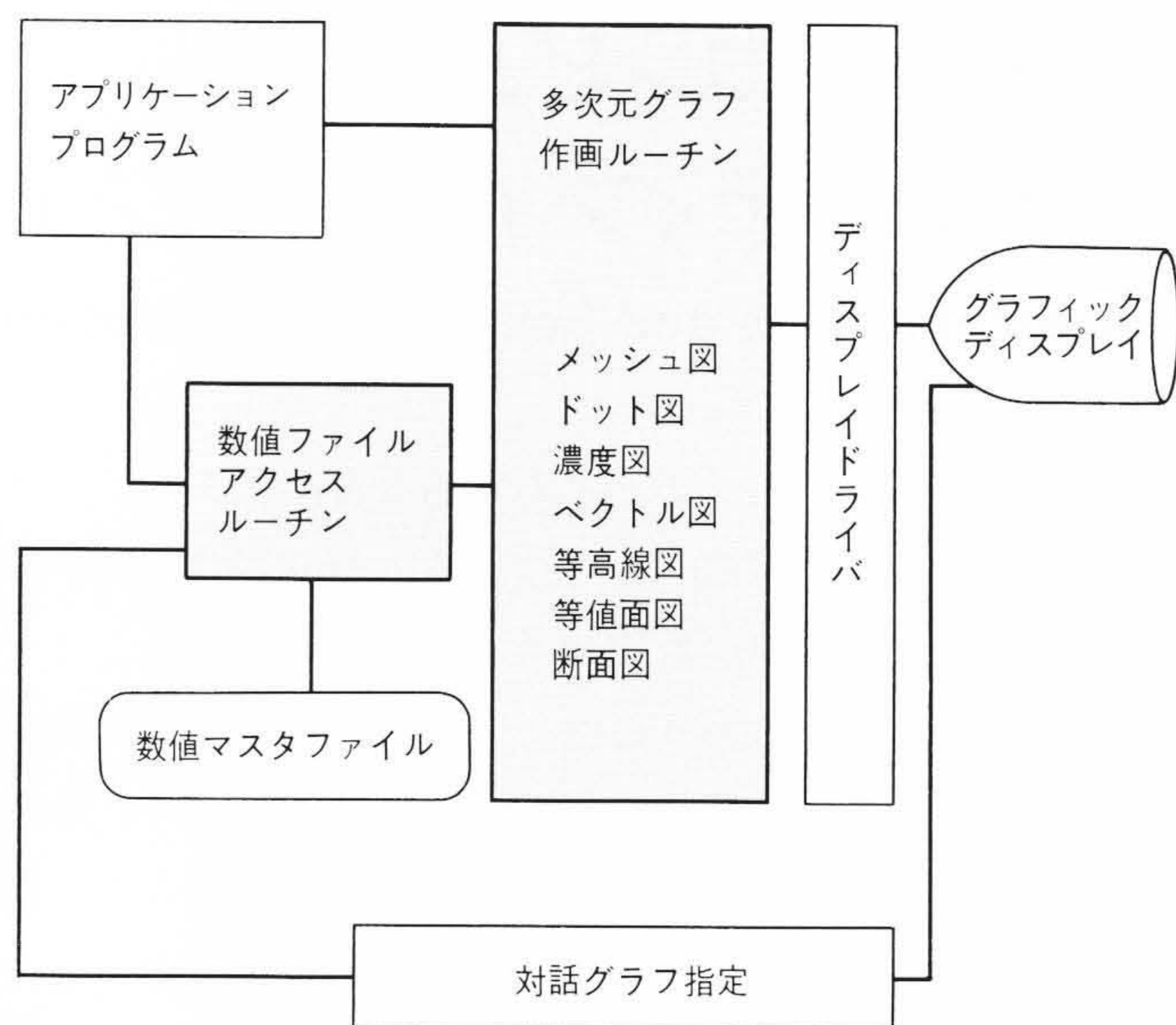
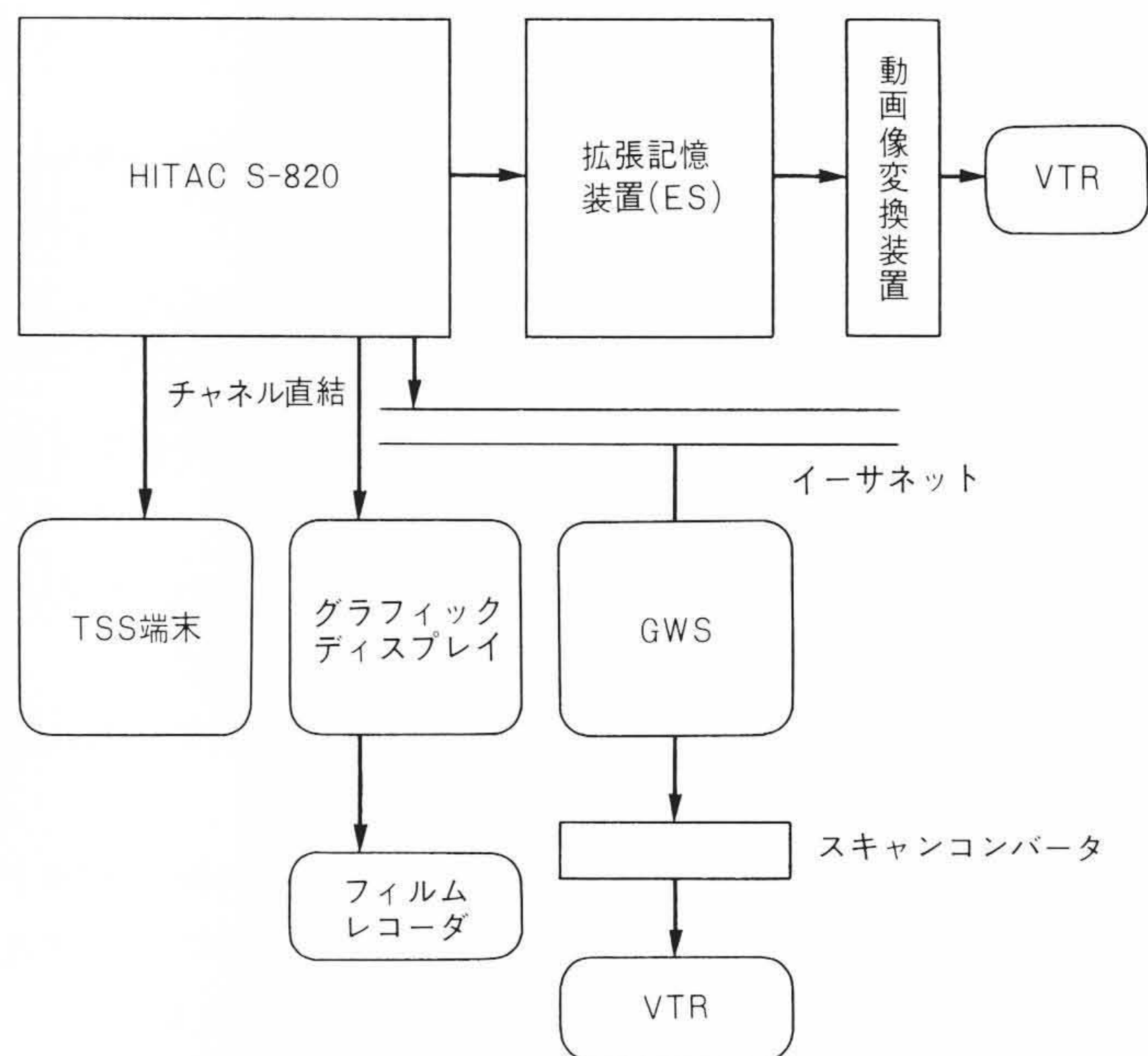


図2 ソフトウェア構成 数値ファイルアクセスルーチンと多次元グラフ作画ルーチンによって、ビジュアライゼーションを容易にする。



注：略語説明
GWS (Graphics Workstation)

図3 ハードウェア構成 各種のグラフィック出力装置に表示可能である。

理する。このため、数値マスタファイルは、名称管理ファイルと数値データファイルとで構成する。名称管理ファイルによってDM名称の階層関係を管理する。数値データファイルは以下のようにシミュレーション手法に適した構造を持っている。

(1) FDM(差分法)データ

格子座標 X, Y, Z , 時刻変数 T などを独立変数とし、関数値ベクトル F を $F_n = F_n(x, y, z, t, c)$ で表す。ただし、 x ,

y などは、 X 、 Y などの要素である。また、 c は数値実験で独立に変数としたい物理定数などの要素である。各要素は離散化され、添字によって順序づけられているので、各関数の要素は n 組の関数値から構成される。

(2) 有限要素法データ

有限要素法のメッシュと節点のデータから構成される。

(3) BFM(バウンダリーフィット法)データ

BFMは、解析対象となる領域を複数のブロックに分割し、各ブロックごとに境界上に格子点を設定し、座標変換によって長方形または直方体にマッピングする方法である。写像された空間側を直交メッシュで分割し、これを実空間に逆写像して、境界に沿った滑らかなメッシュを発生する。有限要素法と同様に接点番号で座標データを管理する。ブロック間の接続は共有される節点番号を記憶する。

(4) SER(シリアル)データ

順序立てられた数値群を格納する。グラフ表現のデータや粒子系のシミュレーションに利用する。

3 作画機能

3.1 表示グラフの種類と内容

ワイヤフレームで表示するメッシュ図、表面に関数値を色などでマッピングする濃度図、ベクトル、円、球などで空間内の関数値を表すベクトル図、ドット図がある。また、数値マスタファイルから得られたデータを加工し、断面図、等高線図および等値面図を作成する。表示に関しては、通常のレンダリング手法を採用しているが、スーパーコンピュータの能力を利用した高速化を、座標変換、図形発生、スキャンライン変換、レイトレーシング処理などで行っている。

3.2 スーパーコンピュータによる表示処理

(1) スキャンライン変換

スキャンライン変換については、多角形を長方形で被覆し、内部のピクセルをすべてベクトル化して処理する方法を採用し、スカラー処理比5から15倍の高速化を実現している^{3),4)}。

(2) ソフトウェアパッケージBLITS

画像・図形処理に必要な機能を、ベクトル処理プロセッサの機械語命令を直接使用したサブルーチン群BLITS(Bitmap and Layered Image Editing Subroutines)を作成し、高速化を図っている。画像データのパック・アンパック処理に、図4のような処理を行い、S-820で、660メガ画素/秒の処理速度を得た⁵⁾。

4 アニメーションの作成

4.1 従来の作成方法

アニメーションを作成するためには、フィルムレコードに付属したシネカメラによるコマ撮り、またはスキャンコンバータを接続したディスプレイやフレームバッファから映像信

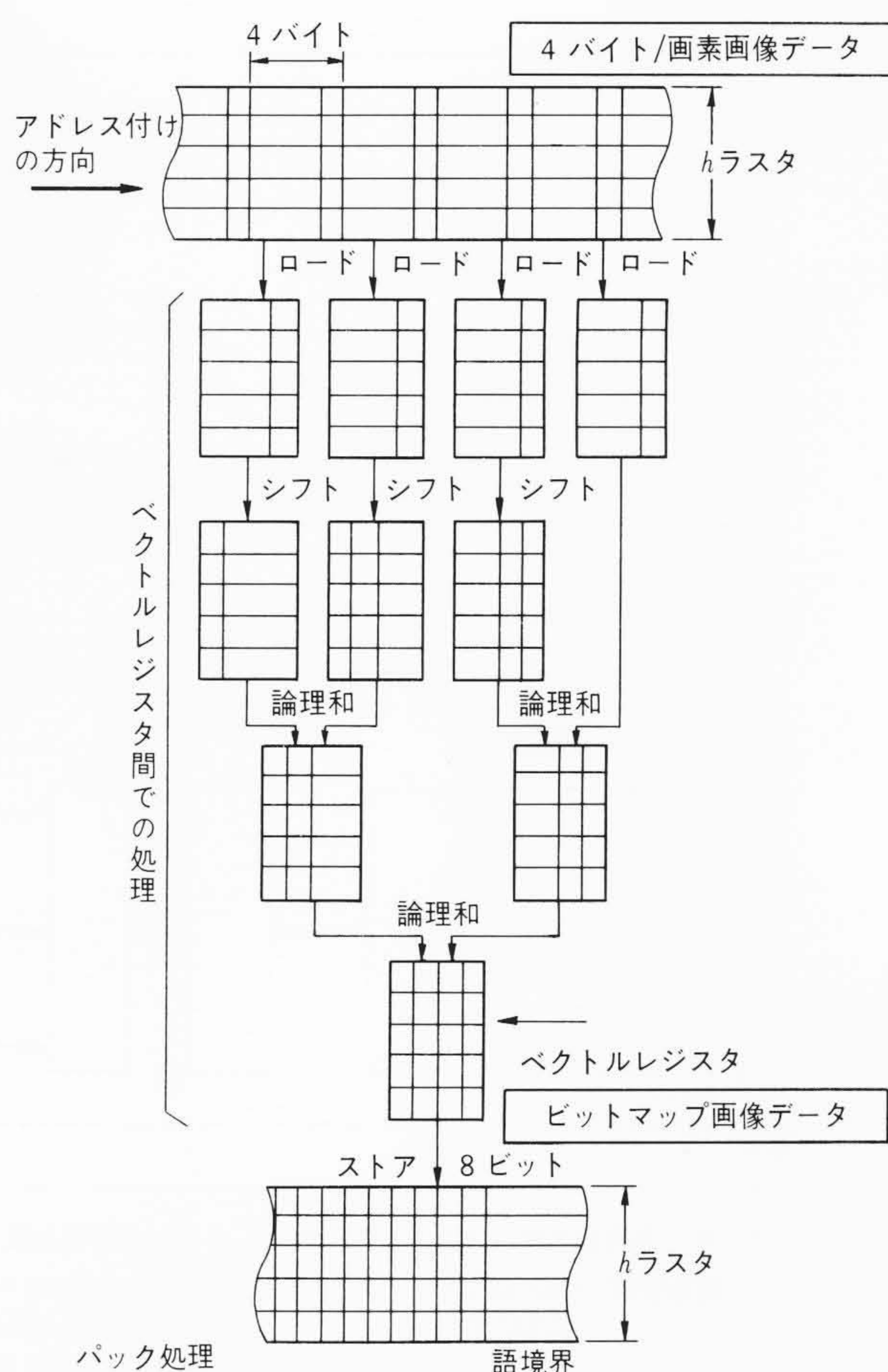


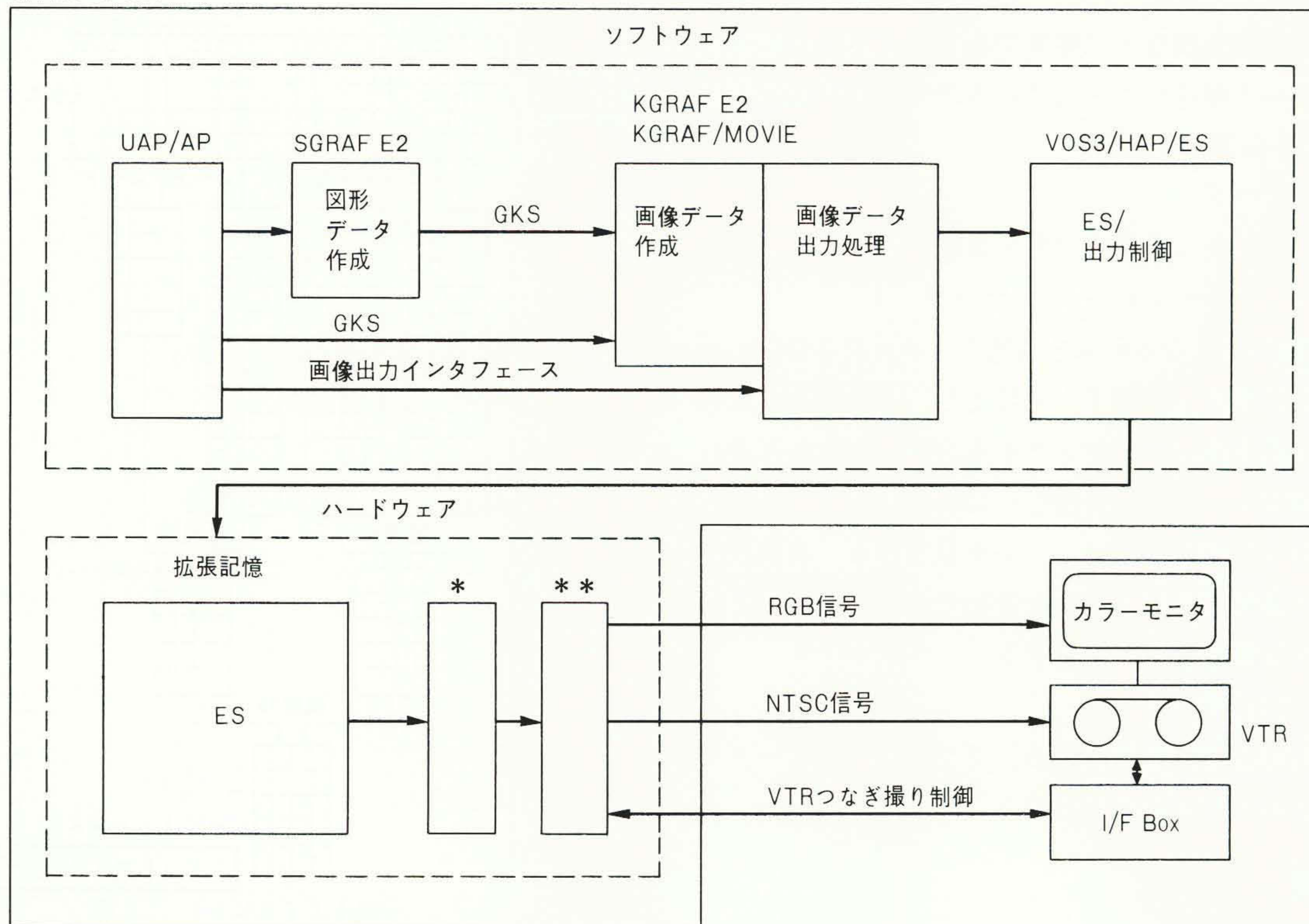
図4 ベクトル演算機能によるパック処理 上方の画像データを下方の詰め合わせ(パック)形式画像データに、ベクトルレジスタを利用して高速に変換する。

号を取り出しVTRに接続している。前者の方法では、実際に撮影された結果がその場ではすぐにわからず、また現像処理を伴うためターンアラウンドタイムが長いという問題点があった。さらに、時期が異なった撮影の場合には、色調整が難しいという欠点もある。VTRで撮影する場合には、シネカメラによる場合に比較し、上記の問題点は改善されるが、コマ撮りする場合には、VTRのスタートアップ時間などオーバーヘッドが大きい。このため、各コマがビデオレート速度で表示できる場合だけ映像信号レートでの動画(毎秒30コマ)作成が可能である。

4.2 動画像変換装置

アニメーションの作成の問題点は、動画用データを大量に格納する領域の用意と画像データを高速に転送する入出力装置の確保とがある。前者ではギガバイトオーダの記憶装置、後者では数十メガビット/秒の転送速度が必要である。スーパーコンピュータではこれらの資源は、外部記憶装置であるESが最も近い形態を保持している。S-820では、ESに拡張装置を付加した動画像出力システムが利用できる。このシステムの構成を図5に示す。ソフトウェアは、グラフィックデータを

HITAC S-820



注：* 動画像処理システム接続機構 ** 動画像処理システム付加機構

略語説明：UAP/AP (User Application Program / Application Program)
 SGRAF E2 (Simulation Graphic Facilities Extended Version 2)
 KGRAF E2 (Kernel Graphic Functions Extended Version 2)
 KGRAF/MOVIE (KGRAF / Movie Facility)
 VOS3/HAP/ES (Virtual-storage Operation System 3 / HAP / Extended System Product)
 NTSC (National Television System Committee)
 I/F Box (Interface Box), GKS (Graphical Kernel System)

図5 動画像出力システム S-820のES(拡張記憶装置)からビデオレートで画像記録表示装置に出力できる。

生成する部分とそれをラスタデータに変換する部分、およびラスタデータをESに転送する部分から成り立つ。ハードウェアはESからのラスタデータを家庭用テレビジョン信号であるNTSC(National Television System Committee)信号に変換する装置、およびVTRとその制御機構(I/F BOX: Interface Box)から成り立つ。

一画面は最大650ドット×484ドットで、各ドット(画素)当たりRGB各8ビットであり、これを毎秒30コマまで出力できる。一コマ当たり約1.7Mバイトのデータ量であるから、ESの最大容量12Gバイトを使用すれば約4分のアニメーションが一括して録画可能である。

なお、本ビジュアライゼーションシステムの機能をもとに、プログラムプロダクトSGRAF E2(Simulation Graphic Facilities Extended Version 2)が開発されている。また、動画像出力システムは、同様にプログラムプロダクトSGRAF E2, KGRAF E2(Kernel Graphic Functions Extended Version 2), KGRAF/MOVIE(KGRAF/Movie Facility)を使用して利用できる。

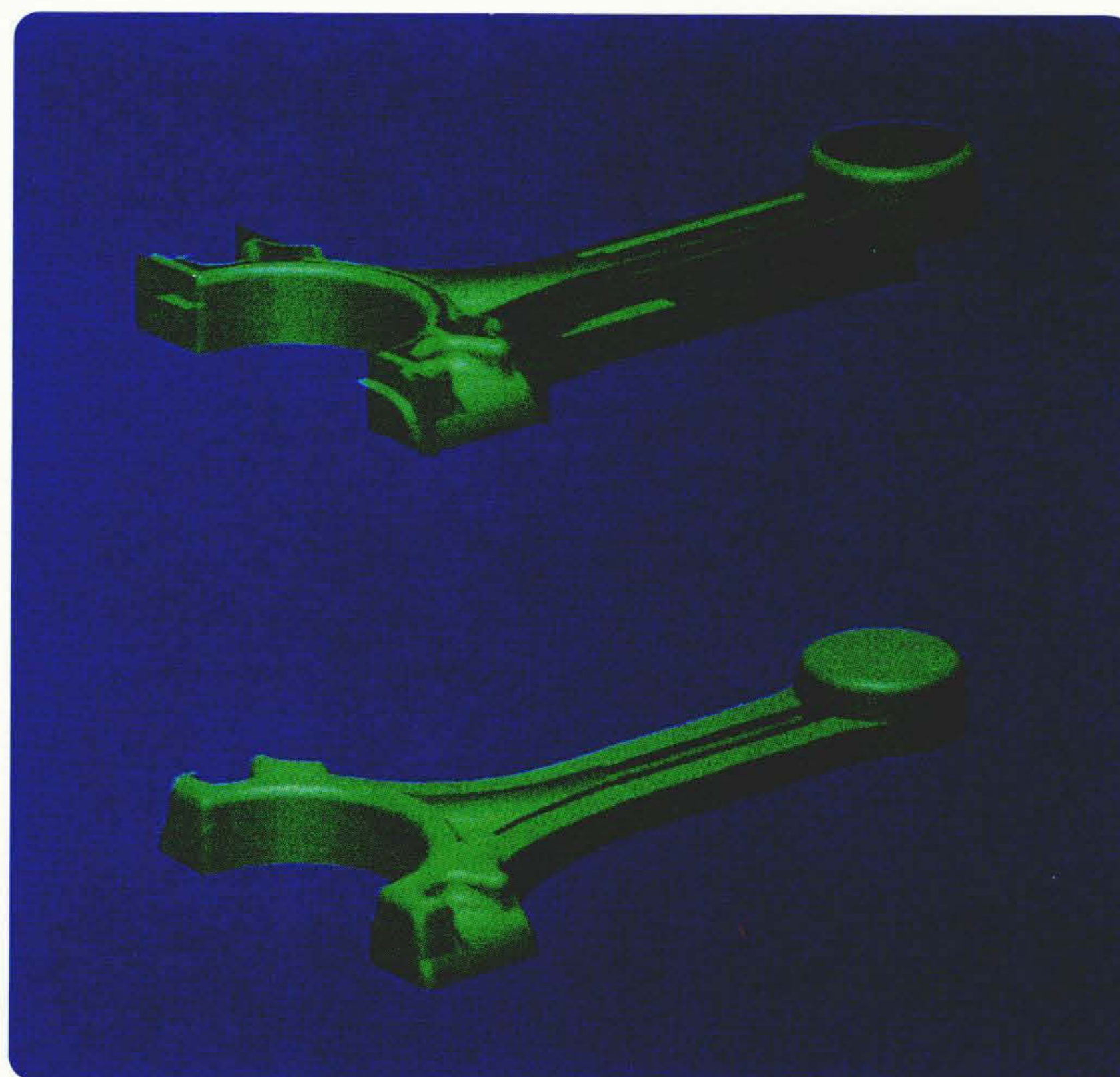


図6 エンジン部品CAD出力表示 剛体で表現される機械形状表示技術の例で、上段は領域演算処理前、下段は演算後完成した形状を示す。

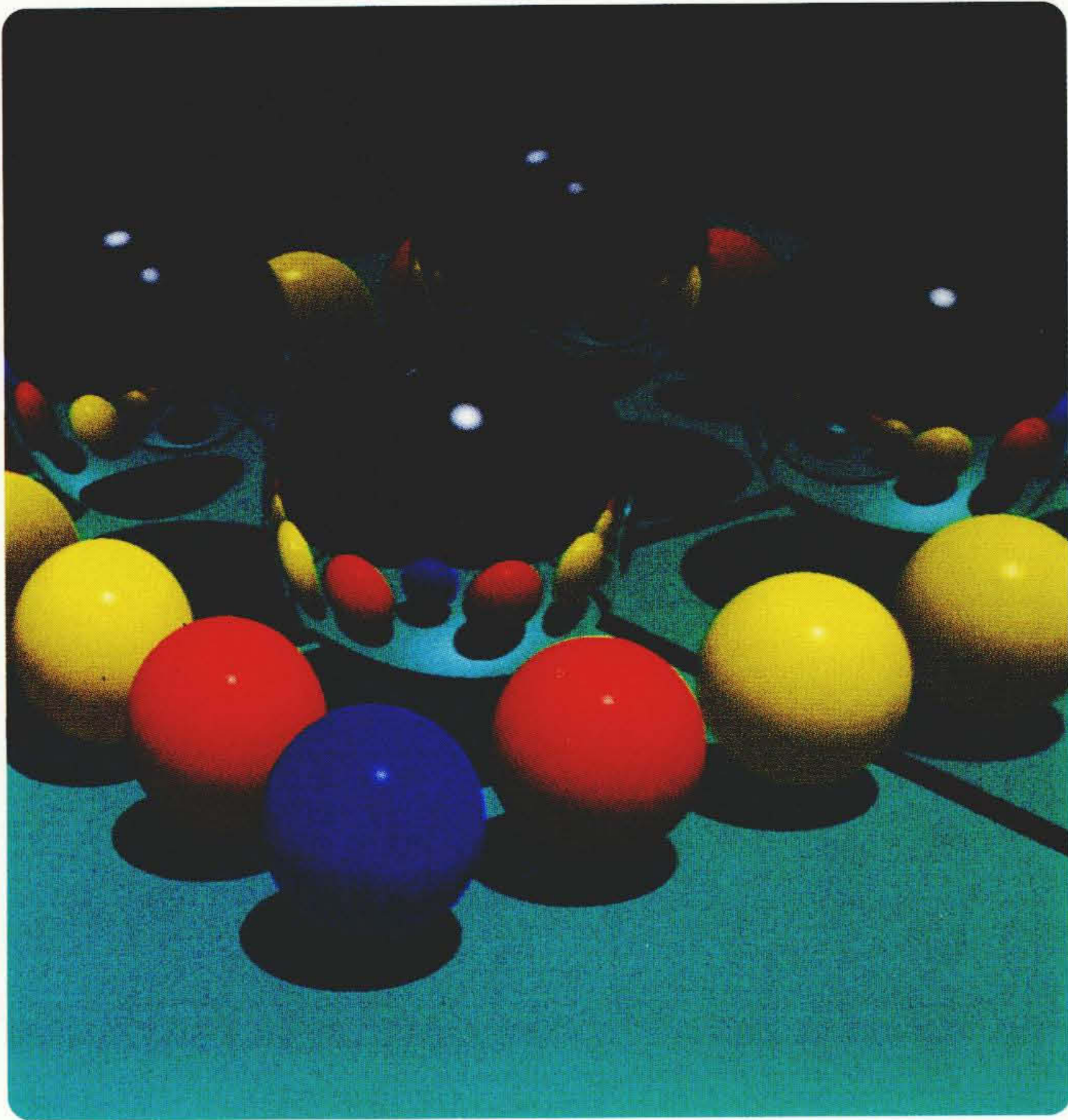


図7 レイトレーシング技術による表示 光線を一本一本追跡することによってリアルに表示する。直交した鏡面の前に球を置いて反射を計算した例である。

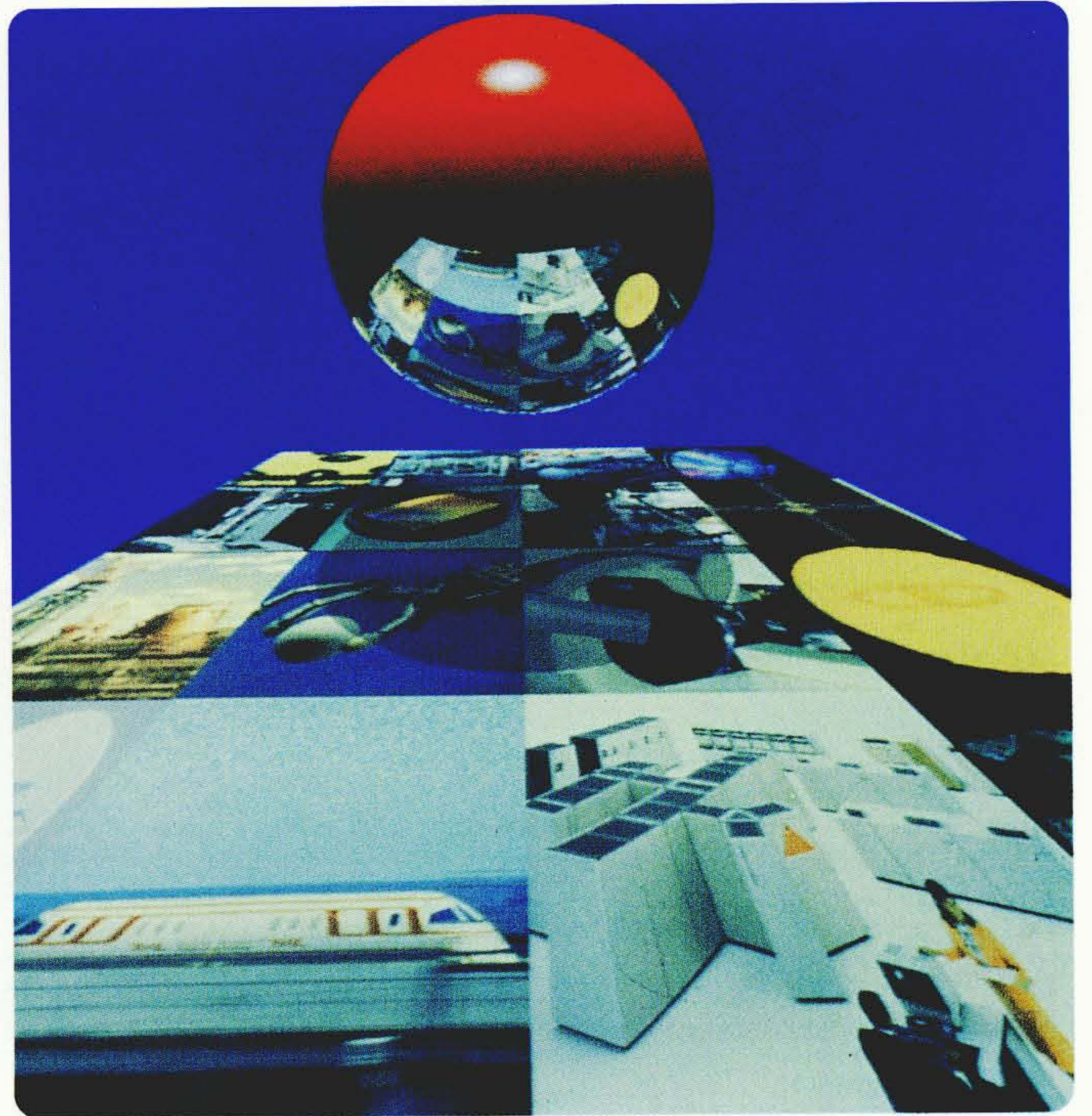


図8 画像マッピング技術による表示 二次元的な画像を三次元の形状に写像する。テクスチャマッピング技術で、日立製作所の技術を示す写真を三次元平面と球に写像している。

5 最近のコンピュータグラフィックス技術と適用例

ビジュアリゼーションの基礎を成すコンピュータグラフィックス技術の進歩は急速であり、従来はCADデータの出力や単純形状に対する表示技術が主流であった。以下、従来試作していたシステムの出力例との比較で、コンピュータグラフ

ィックス技術の進歩を示す。CADシステムの出力であるエンジンの部品をレンダリングした例を図6に示す。また、レイトレーシング技術も図7のような球に対する手法が研究されていた。写真のような表現(フォトリアリズム)も図8のように、写真をスキャナなどで画像として読み込んでおき、テクスチャマッピングと呼ばれる画像変換技術で作成していた。



図9 確率過程による山岳形状の表示 少数のパラメータで複雑な自然形状を表現できる。山、雲、森を同一のアルゴリズムで生成している。



図10 草花の表示 自然形状の表現と右下方の半影表示技術の例を示す。



図11 パラメトリックボリュームによる樹木の変形 同一の枝ぶりの樹木を、周囲の空間を変形することによって多様な形状の表現が可能である。

これに対し、最近では自然形状のように複雑な画像を生成する技術が発達してきた。確率過程によって、山岳形状を発生し少ないパラメータで多様な表現が可能なることを図9では示している⁹⁾。また、草花のような形状に対しても、影を付加できることを図10では示し、パラメトリックボリュームと呼ぶ空間変形手法によって図11のような多様な樹木も同一データ

からの変形で生成できる。

このような技術的背景のもとで、サイエンティフィック ビジュアリゼーションでも、より複雑な表現が求められてきている。塩化ナトリウムの溶融状況の分子動力学シミュレーション結果を、図12では約500個の球データに対するレイトレーシング技術によって示している。また、球以外に円筒形状を

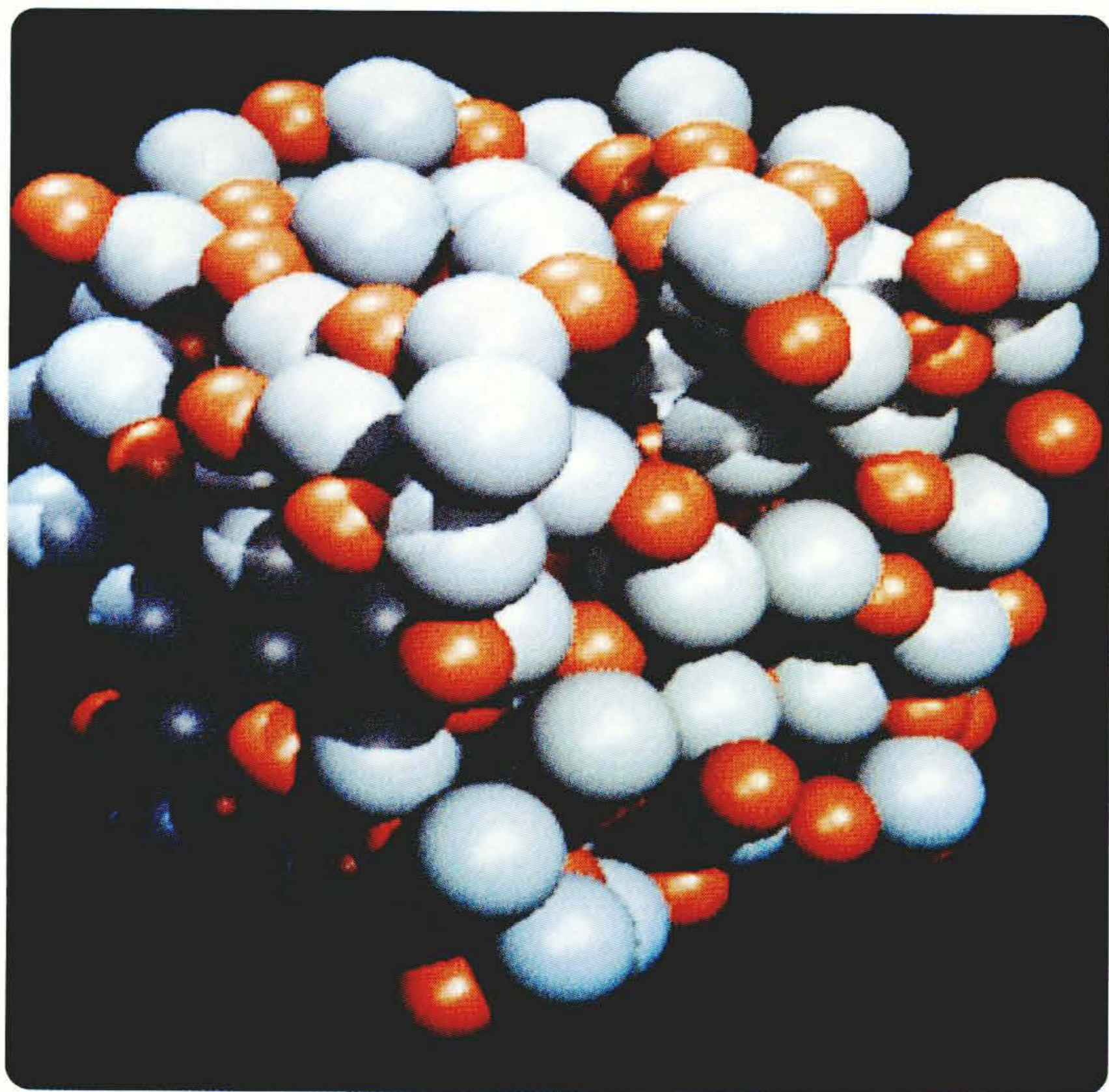


図12 NaClの溶融シミュレーション 約500個の球に対するレイトレーシング表示を示す。赤がナトリウム原子、水色が塩素原子である。

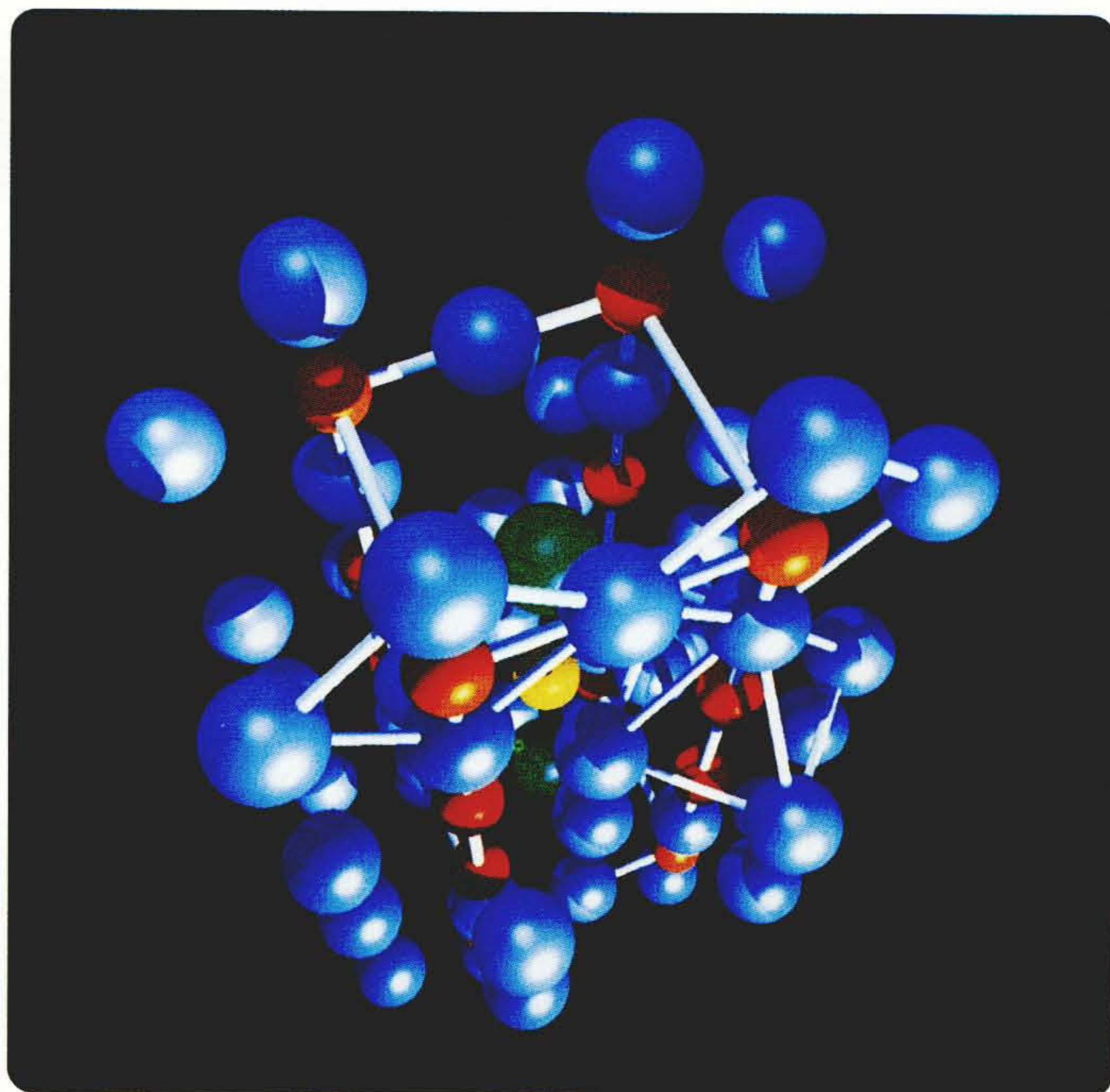


図13 高温超電導物質の構造表示 球と円筒形状のレイトレーシング表示を示す。

含めたレイトレーシング技術を用いた高温超電導体の構造図を図13に示す。半導体分野の応用例では、トレンチ構造のメモリセルのバウンダリー フィット メッシュ分割図を図14に示す。そのようにして作成した半導体の電気特性を求めるデバイスシミュレーション結果で、アルファ線による電荷の反

転現象であるソフトエラーの解析結果⁷⁾を図15に、薄膜トランジスタの内部ポテンシャルの断面表示を図16に示す。また、材料シミュレーションでも、水素分子の周囲の電子密度の表示が、図17、18のように断面を組み合わせて、理解しやすいように示している。



図14 メモリセルのメッシュ分割図 バウンダリーフィット法による分割技術によって、電流密度の高くなる部分に集中して滑らかなメッシュを生成している。



図15 メモリセルのアルファ線ソフトエラー解析 カラーの濃淡によって、垂直入射したアルファ線により生成された電子密度を表示している。

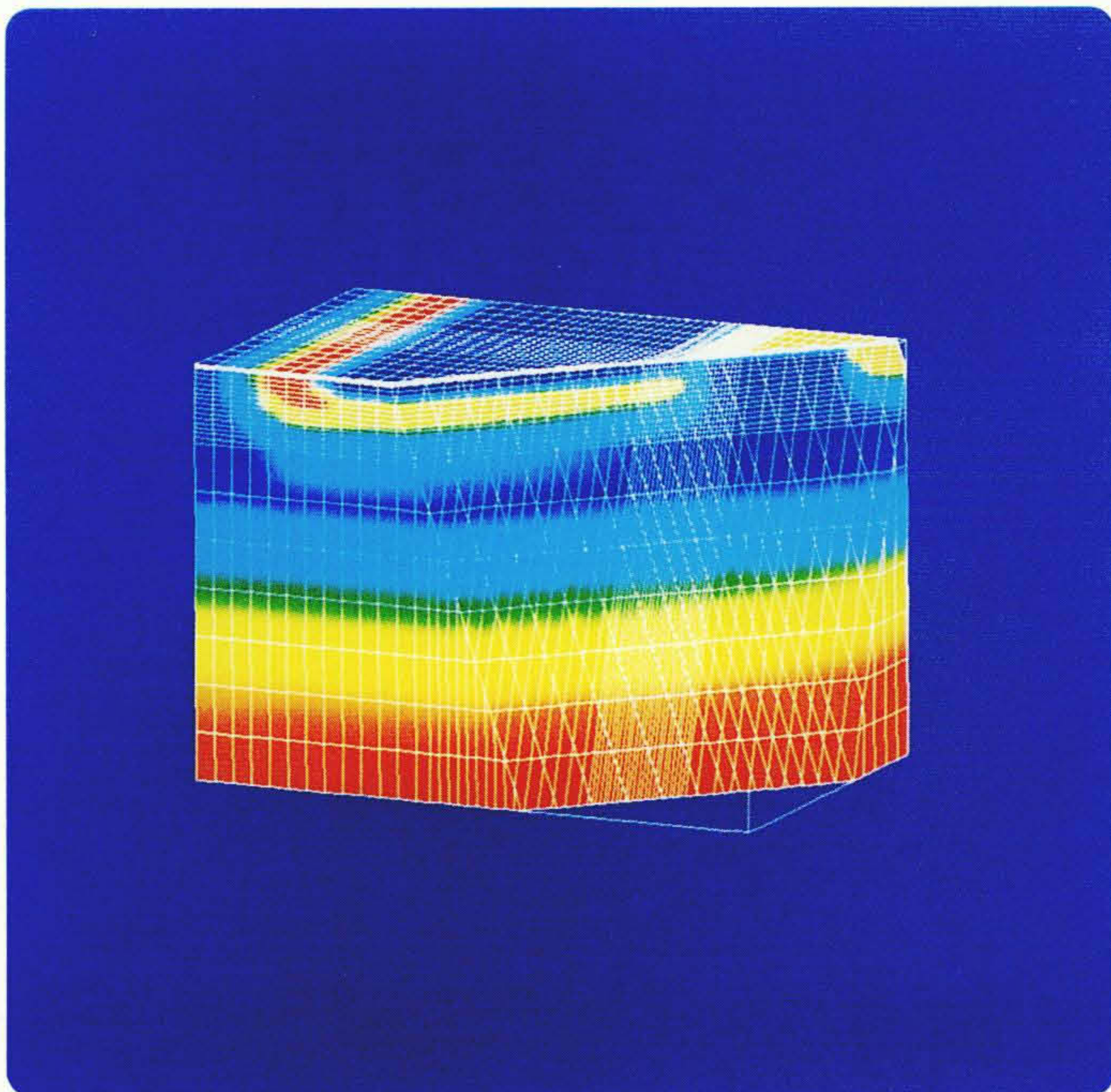


図16 薄膜トランジスタの内部ポテンシャル 断面表示によって、内部状態の表示が可能である。赤、黄、緑、水色、青の順にポテンシャルが減少している。

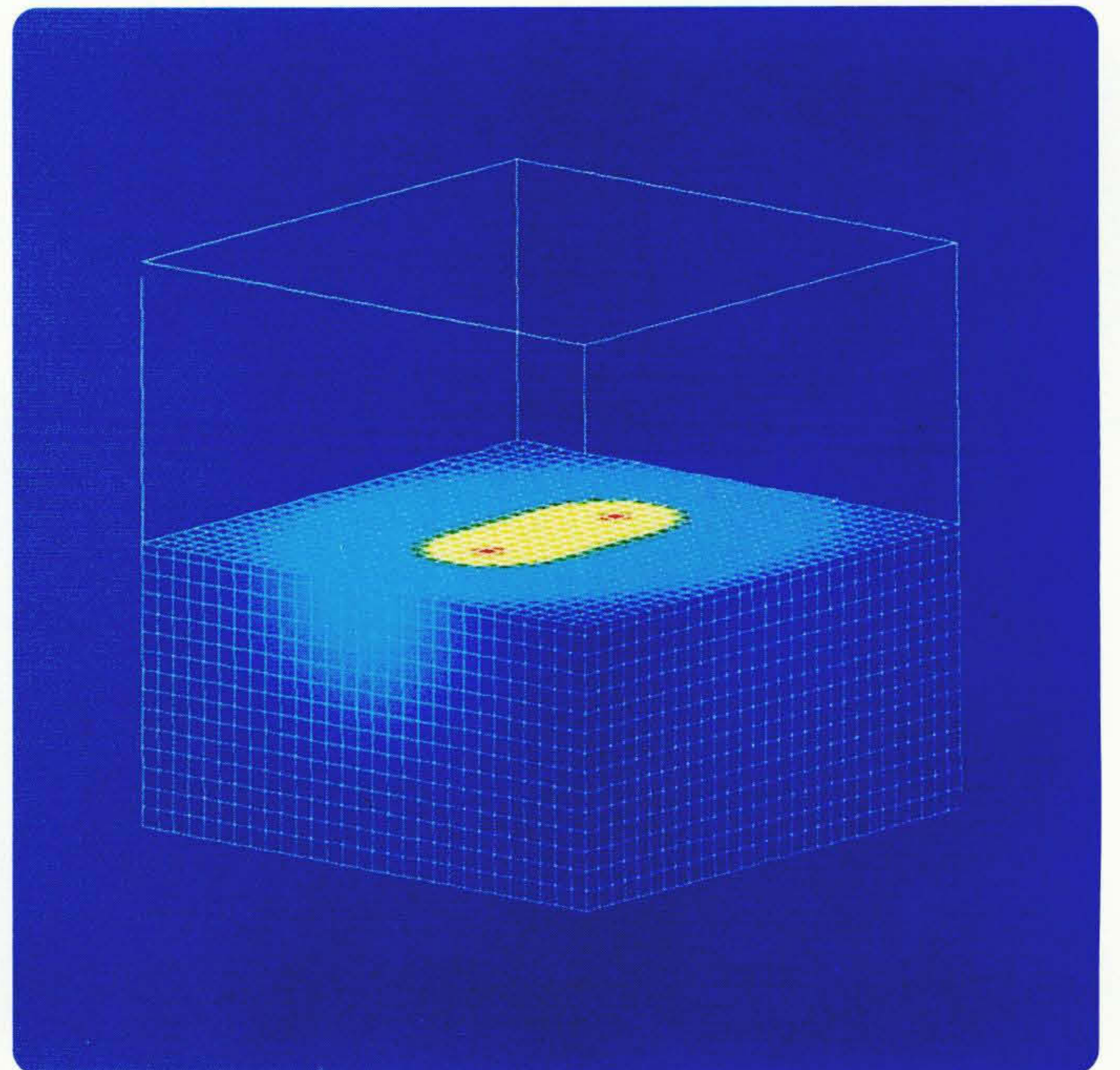


図17 水素分子周囲の電子密度表示 一平面による断面図を示す。赤色の部分に電子が存在している。

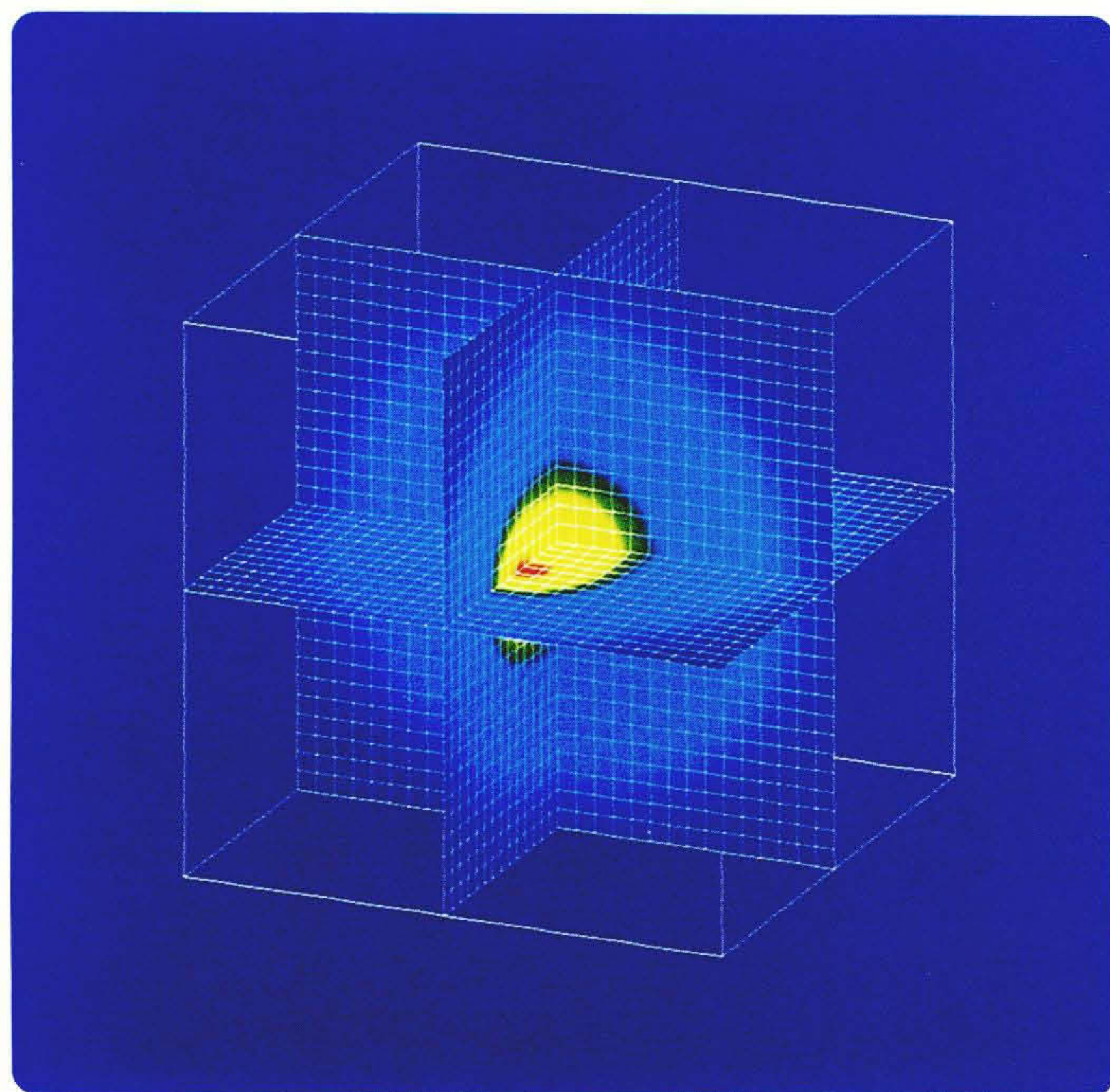


図18 水素分子周囲の電子密度表示 三平面による断面図を示す。

6 結 言

スーパーコンピュータとサイエンティフィック ビジュアライゼーション システムについて、試作したシステムのソフトウェア、ハードウェア構成および適用例を述べた。

本システムは、スーパーコンピュータの環境下で、数値シミュレーション結果の解析を効率的に行うことを目的とし、次の機能を具備している。

- (1) 数値シミュレーション方法の特性に適合した構成の数値マスタファイルの構成とそのアクセス方法
- (2) 数値シミュレーションの出力構成形式に適したグラフ作画
- (3) スーパーコンピュータのハードウェア機能を利用した画像・図形処理機能(スキャンライン変換, 画像ユーティリティ)
- (4) アニメーション作成のために、ES経由で動画像を直接VTRに出力する変換機構の利用

今後、さらに作画機能を充実し使いやすいシステムにしていく計画である。

参考文献

- 1) “Special issue on Visualization in Scientific Computing” Computer Graphics, Vol.21, No.6(1987)
- 2) 矢島, 外: サイエンティフィック・ビジュアライゼーションシステムS-GRAF, 情報処理学会グラフィクスとCAD研究会資料 39-5(1989)
- 3) 栗原, 外: 画像生成におけるスーパーコンピュータの応用例, 日立評論, 69, 12, 1139~1144(昭62-12)
- 4) 栗原, 外: スーパーコンピュータによる高速画像生成, 情報処理学会全国大会予稿集, pp.2119~2120(昭63)
- 5) 栗原, 外: スーパーコンピュータS-810用画像編集処理パッケージBlitsの開発, 情報処理学会全国大会予稿集, pp.1715~1718(昭63)
- 6) K. Anjo: A Simple Spectral Approach to Stochastic Modeling for Natural Objects, Proc. of Eurographics '88, 285~296(1988)
- 7) 矢島, 外: 半導体設計におけるスーパーコンピュータの利用, 日立評論, 69, 12, 1169~1176(昭62-12)