

## 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

矢島章夫 栗原恒弥  
日立製作所中央研究所

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システムS-GRAFの機能について報告する。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) 同じく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、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。半導体のシミュレーションにおける適用例についても示す。

## SCIENTIFIC VISUALIZATION SYSTEM S-GRAF

Akio Yajima Tsuneya Kurihara

Central Research Laboratory, Hitachi Ltd.  
Kokubunji, Tokyo 185, Japan

A visualization system for scientific simulation is presented. The system S-GRAF has the following features: 1) File organization that is suitable for accessing numerical data generated from various numerical simulations. 2) Graphic outputs for numerical data from simulation on three dimensional color displays. 3) High speed graphics operation using hardware in a supercomputer. 4) Video rate output channel through ES(Extended Storage) in S-820 supercomputer. Some results applied to semiconductors are discussed by using this system.

## 1. はじめに

スーパーコンピュータなどによる超高速数値計算技術の進歩にともない、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が重要化している[6]。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/画像による視覚化は、解析作業を効率的に進めるために、不可欠である。

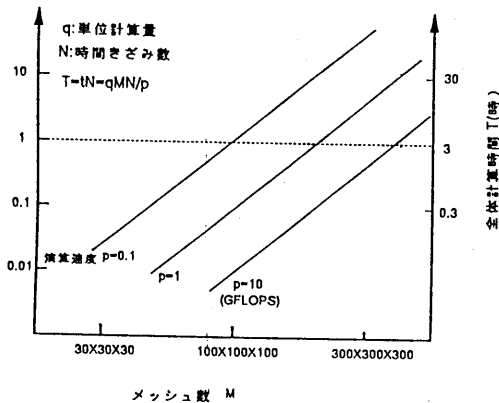


図1. 数値シミュレーションの出力量

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。この図の横軸は、数値計算に利用するメッシュの数を表す。この例では、3次元の差分法による離散化結果を縦、横、奥行の順にK×K×Kの表現でメッシュM数として表している。いま、1メッシュあ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解析時間あたりの演算時間tは、 $t = qM/p$ となり、全解析時間Tは、 $T = qMN/p$ となる。図1の左側縦軸にt、右側にTを示す。概略値として、 $q = 100$ 回、 $N = 10000$ ステップ回、 $p = 0.1$ 、 $1$ 、 $10$ GFLOPSとした時に、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分かる。

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S-GRAFを試作した[1]。S-GRAFは、スーパーコンピュータの環境下で、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。本報告では、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・ソフトウェアの拡張について報告する。

また表示例を半導体のシミュレーションにおける適用例で説明する[2][5]。

本システムの特徴は以下の通りであり、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、画像ユティリティ)。
- 4) アニメーション作成のために、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

図2に、S-GRAFのソフトウェア構成を示す。アプリケーションプログラムに各機能を持ったサブルーチンを結合して使用する。数値マスタファイルのアクセスルーチンによって、数値マスタファイルとの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、他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

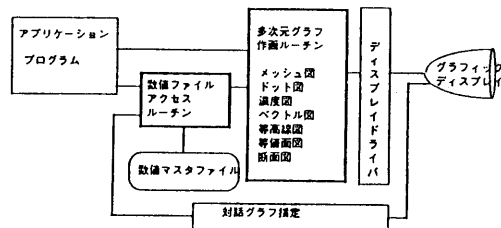


図2. S-GRAFのソフトウェア構成

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必要データを切りだし作画表示する2通りの使用方法がある。

また、スーパーコンピュータの性能を引き出すソフトウェアパッケージBLITS[4]を作画機能の一部に利用している。

## 2.2 ハードウェア構成

図3に、ハードウェア構成を示す。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、半導体記憶の拡張記憶装置を使用できる。拡張記憶装置は、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、動画像を直接リアルタイムで映像機器（VTR, TV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型のフルカラーディスプレイを使用するが、エラー伝播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Ethernet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、3次元表示が可能である。

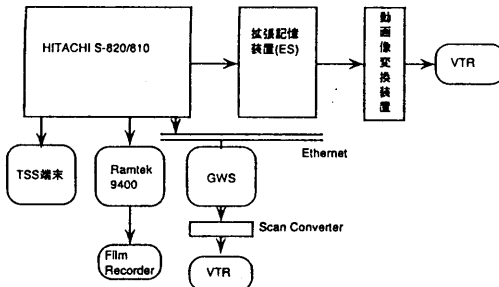


図3. S-GRAFのハードウェア構成

## 3. ファイル機能

シミュレーションから出力される結果は一回の実験結果に相当するから、個別の結果をまとめて管理できるようにしておく必要がある。

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データマトリクス (DM) と呼ぶ単位で取り扱う。数値マスタファイルは、複数個も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理する。

### 3.1 ファイル構成

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から構成される。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。図4に示すように、名称の階層関係を保持し、木構造の上位を指定し、関連データを引き出すことができる。一方、数値解析法によって計算された結果は、その種類に従い、数値データファイルに保存する。

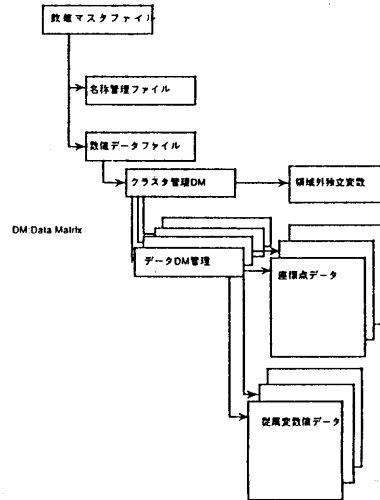


図4. ファイル構成

#### 3.1.1 差分法 (FDM) データ

格子点およびその上で定義された関数値群からなるデータである。

ここで、 $|V|$ はベクトル $V$ の要素数である。

格子座標  $X, Y, Z$  :  $|X|=I, |Y|=J,$   
 $|Z|=K$

時刻変数  $T$  :  $|T|=L$

物理条件  $C$  :  $|C|=M$

関数値  $F_n$  :  $|F_n|=I \cdot J \cdot K \cdot L \cdot M$   
 $(n=1, \dots, N)$

物理条件とは、格子座標、時刻変数以外に独立変数として扱いたい変数であり、物理定数値などを想定している。格子座標、時刻変数、物理条件は全て存在しなくても良く、例えば、一次元の差分法計算ならば、

Xのみ存在すれば良く、Y、Z、T、Cの全ては省力したファイル構造になる。

関数値ベクトルFは $F_n = F_n(x, y, t, c)$ で表わされる。ただし、x、yなどは、X、Y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、最終的には、各関数値は $f_{12} = f_{12}(i, j, k, l, m)$ のような形式で書けるN組の関数値から構成される。

### 3. 1. 2 有限要素法 (FEM) データ

有限要素法のメッシュと節点のデータを次の構造で定義する。

格子座標 X, Y, Z :  $|X|=I, |Y|=I,$   
 $|Z|=I$

時刻変数 T :  $|T|=L$

物理条件 C :  $|C|=M$

メッシュ構成テーブル (節点番号)

$V_1, V_2, \dots : |V_j|=J$

節点関数値  $F_n : |F_n|=I \cdot L \cdot M$   
 $(n=1, \dots, N)$

メッシュ関数値  $G_k : |G_k|=J \cdot L \cdot M$   
 $(k=1, \dots, K)$

ここで、Iが節点個数、Jがメッシュ個数である。メッシュ構成は、節点番号をVに格納しメッシュ構成テーブルの番号jで参照する。関数値Fは節点番号i上でN組定義され、 $F = F(x(i), y(i), z(i), t(1), c(m))$ である。また各メッシュに付随する関数Gは、 $G = G(v_1(j), v_2(j), v_3(j), t(1), c(m))$ のK組の値で定義される。各々F、Gは $f(i, l, m)$ 、 $g(j, l, m)$ の編成で構成する。

### 3. 1. 3 バウンダリフィット法 (BFM) データ

バウンダリフィット法は、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、座標変換によって矩形または立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(図5参照)。複雑な解析領域を表現するため、複数のブロックによって、領域を分割する。ブロック間の関係は、境界を介して行われるため、ブロック間接続を表現する必要がある。

格子座標 X, Y, Z :  $|X|=I, |Y|=I,$   
 $|Z|=I$

時刻変数 T :  $|T|=L$

物理条件 C :  $|C|=M$

ブロック間接続テーブル (節点番号)

$B_1, B_2, \dots : |B|=J$

節点関数値  $F_n : |F_n|=I \cdot L \cdot M$   
 $(n=1, \dots, N)$

ここで、Iが節点個数で、FEM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。

### 3. 1. 4 シリアル (SER) 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。

関数値  $F_j : |F_j|=I$   
 $(j=1, \dots, J)$

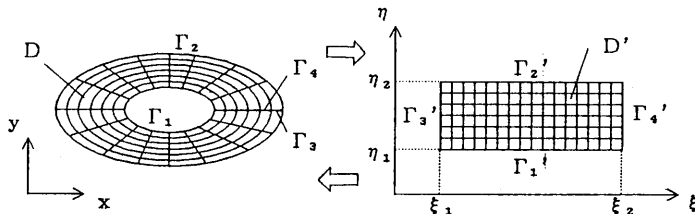


図5. バウンダリフィット法

### 3. 2 ファイルアクセス機能

数値マスタファイルアクセスするサブルーチンによって、データの入出力を行う。通常のファイルアクセスルーチンと同様に領域確保、初期化、オープン、クローズ、リード、ライト機能などから成り立つ。

主記憶に大量のデータを保持しなくても良いようにするため、図11に示すように、列・行のみや指定箇所別のアクセスが可能である。

名称管理については、階層構造の管理を可能にするアクセス機能を用意した。

### 4. 作画機能

#### 4. 1 作画機能の概要

数値マスタファイルで多次元のデータを取り扱えるようにしたため、グラフ作成時にもそのための考慮が必要である。このため、独立変数と従属変数の関係で整理し、表示できるグラフを決定した。

#### 4. 2 表示グラフの種類と内容

ワイヤーフレームで表示するメッシュ図、表面に関連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わすベクトル/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、等値面図を作成する。図6および図7に表示例を示す。

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等で行っている。

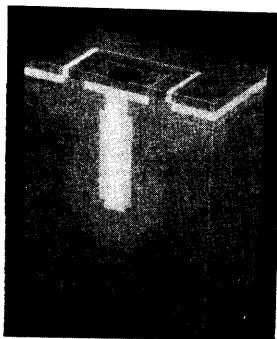


図 6. 適用例

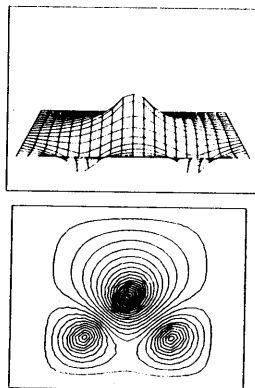


図 7. 適用例

### 4. 3 スーパーコンピュータによる表示処理

#### 4. 3. 1 スキャンライン変換

スキャンライン変換については、図8示すように、多角形を矩形で被覆し、内部のピクセルを全てベクトル化して処理する方法を採用している[3]。

#### 4. 3. 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、ベクトル計算の機械語命令を直接使用したサブルーチンを作成し、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9のような処理を行い、S-820で、660Mピクセル/秒の処理速度を得た。

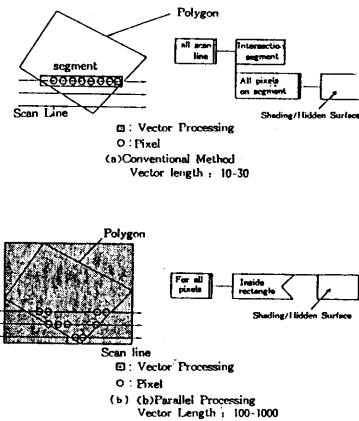
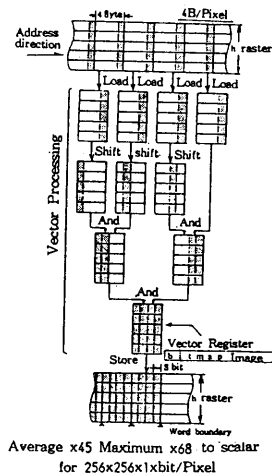


図 8. ベクトル化スキャンライン変換

#### Pack Operation



Average x45 Maximum x68 to scalar  
for 256x256x1xbit/Pixel

図 9. ベクトル化画像処理

## 5. アニメーションの作成

### 5.1 従来の作成方法

アニメーションを作成するためには、フィルムレコーダに付属したシネカメラによる駒撮りや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分からず、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、駒撮りする場合には、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、各コマが映像表示速度で表示できる場合のみ映像信号レートでの動画作成が可能である。

### 5.2 動画変換装置

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確保の問題と画像データを高速に転送するI/O装置の問題がある。前者ではGBオーダの記憶装置、後者では、数十MB/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拡張記憶装置(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出力システムが利用できる。このシステムの構成を図10に示す。ソフトウェアは、グラフィックデータを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

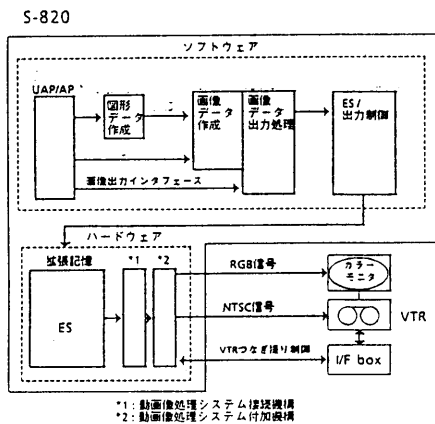


図10. 動画変換装置の構成

スタデータをNTSC信号に変換する装置およびVTRとその制御機構(I/F BOX)から成り立つ。

一画面は、最大650X484ドット画素あたりRGB各8ビットであり、これを毎秒30フレームで出力できる。1フレームあたり約1.7Mのデータ量であるから、ESの最大容量12GB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。

## 6. 適用例

### 6.1 ファイルアクセス

ファイルアクセス時間を2次元有限要素法の場合について、以下に例を示す。メッシュ数10000、接点数10201、2次元、節点に付加された従属変数10個の場合に、図11に示すような

- 1) 全領域における一従属変数全体のアクセス
  - 2) 指定の節点に対する、全従属変数のアクセス
  - 3) 指定の接点の指定の従属変数のアクセス
  - 4) 全領域における全従属変数のアクセス
- について計測例を示す(表1)。

経過時間は磁気ディスクの場合CPU時間の約10倍、半導体装置の場合2~3倍である。

### 6.2 半導体シミュレーションでの応用

半導体シミュレーションの例として、非晶質半導体の構造解析の例を示す。非晶質半導体(a-Si:H)は光導電材料として優れた特性を持つが、その基礎的

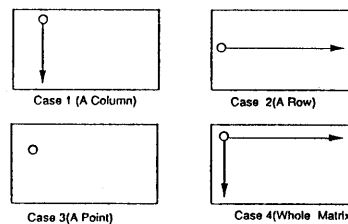


図11. アクセス方法

表1. FEMファイルのアクセス時間

	節点個数	従属変数個数	CPU時間
Case 1	10201	1	0.19
Case 2	1	10	0.03
Case 3	1	1	0.02
Case 4	10201	10	0.65

物性は必ずしも明確ではなく、基礎的物性を探索するため、電子密度分布を用いた構造解析が行われている。電子密度分布の計算には、擬ポテンシャル法を使用する。この計算結果は、直方体の格子に求められる。これから、等値面を追跡し、3次元等高面表示を行った。シミュレータからの出力データをS-GRAFファイルで受け取り、等高面作成処理によって、表示した。図12に適用例を示す。この例ではシミュレーション時間は $17 \times 17 \times 17$ のメッシュでS-820を利用し約12分であり、等高面の作成は、1.2秒/面であった。等高面は約4000個の多角形から構成されている。

#### 7. おわりに

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S-GRAFの概要を述べた。

S-GRAF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、以下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ィック作画。
- 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、画像ユティリティ）
- 4) アニメーション作成のために、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。

本報告では、これらの機能を利用した半導体シミュレーションの適用例についても報告した。

#### 謝辞

動画像変換システムの資料を提供頂いた社内関係者に感謝する。

#### 8. 参考文献

- 1) 大山ほか：科学技術計算結果表示システムの開発、情報処理学会 数値解析研究会資料16-2 (1986)
- 2) 上西ほか：半導体設計用ビジュアルシミュレーションシステム、電子通信学会 回路とシステム研究会資料、CAS86-83 (1986)
- 3) 栗原ほか：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 p p . 2119-

2120 (1988)

4) 栗原ほか：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、p p . 1715-1718 (1988)

5) 栗原ほか：3次元等高面表示とその非晶質半導体構造表示への応用、情報処理学会グラフィクスとCADシンポジウム予稿集 p p . 63-70 (1985)

6) "Special issue on Visualization in Scientific Computing,"Computer Graphics, Vol.21, No.6, (1987)

7) 栗原ほか：密度分布モデルの表示方法、情報処理学会全国大会予稿集、p p . 1893-1894 (1988)

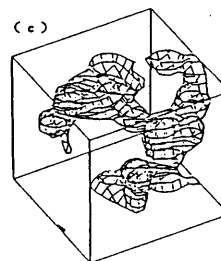
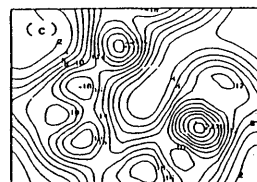


図12. 半導体シミュレーション適用例