

数値シミュレーションの可視化・後処理の今後

村田 健史 [1]

[1] 愛大・メディアセンター

Techniques of visualization and post-processing for numerical simulations

Ken T. Murata[1]

[1] CITE, Ehime University

Visualization, post-processing, high-speed network technologies and other techniques for high-performance computing, including the peta-scale computer, will be discussed.

2011年のペタスケールコンピュータの登場まであと数年となった。宇宙プラズマシミュレーションも、ペタスケール計算での新しい知見の獲得が期待される研究分野の一つである。本発表では、ペタコンで結果・成果を挙げるために、可視化やポスト処理に関する提案を行う。ペタコンプロジェクトで成果を挙げるためには、コード開発からデータ処理・可視化までのプロセスの流れに一箇所でもボトルネックがあってはならない。たった一ヶ所のボトルネックが、研究テーマの成功を妨げることもある。

ペタコンスケールのシミュレーションでは、巨大な計算データが出力されるが、その多くは3次元データである。これらのデータを解析できる環境が重要となる。3次元可視化環境を充実するとともに、バーチャルリアリティー等の立体的データ可視化環境の充実が必要である。これらはダウンサイジングが必要となるため、安価でかつ有効性の高いVRシステムなどの普及が重要である。近年、国内外で安価な3次元可視化システムやVRシステムの販売が進んでいる。

これまでの多くのスパコンでは、利用者は計算出力データ(数値データ)を各研究機関に持ち帰り、ポスト処理を行う必要があった。ジョブ結果をすぐに確かめることができないため、次のジョブを打つまでの間が開くなどの問題が生じた。ポスト処理(特に一次処理)をペタコンセンターで行う環境を整備する。汎用性の高い3次元可視化ツール、大規模なデータを処理できる数学ライブラリなどの充実が必要である。各研究チームがそれまでに利用してきた環境を有効に活用するために、それらのライブラリはC言語、フォートラン言語、C++言語、Java言語をはじめとする、主要な言語に対応していることが重要となる。同時に、Linuxだけではなく、UNIX、Windows、Macなどの複数のOS上での利用が可能であることも必須となる。ポスト処理を、既存の(過去に開発した)計算機環境で行いたいユーザは多い。独自のポスト処理用計算機をセンター内に持ち込むサービスを実現する。もちろんこの場合にはセキュリティ対策が必要となるが、データ転送の制限やポートの制限を行うなどの対応を立てることで実現する。

ペタコン利用者を多く抱える大学・研究所は、旧帝大・準帝大を除くとごく少数である。特に地方大学ではペタコン(ES)を利用するユーザが1,2名ということが多くある。これら少数ユーザのため、10G以上のネットワークインフラに投資できる大学は少数である。ほとんどの教職員・学生は100M~1G程度の生活回線ですら十分なのである。しかし、生活回線レベルの低速ネットワークでペタコンデータを転送することは不可能である。たとえば、地球シミュレータの場合、愛媛大学までのデータ転送は(ネットワーク回線速度が低速であるため)実用的ではなかった。ペタコンで出力されるデータサイズはその10~1000倍程度に増大すると予想されるが、出力データの転送については対策が必要である。SINET3ではバックボーンで10~40Gなどの高速ネットワークが実現しているが、これは次の点で実用上は不十分である。(1) 10Gノード校であっても10G回線を学内に引き込んでいるわけではない。(2) 現在、国内大学のほとんどがSINETを生活回線として利用しているが、そのためにセキュリティ対策が重要となっている。ほとんどの大学でネットワークの入り口にFWを導入しており、その結果、実行スピードはFWで100M~1G程度に低下してしまうと予想される。これらを改善して、End to Endでの高速データ転送が1Gを超える環境を整える必要がある。たとえば、現在のデータ転送実効速度を10MB/secと考えると、1TBのデータ転送に10万秒(~1日)が必要となる。ペタコンではシミュレーションの1ステップに1TB程度の出力は十分に予想されるが、この場合100ステップのシミュレーションデータ転送に100日かかってしまうことになる。データ転送環境整備と並行して、データを大学・研究所に転送せずに利用できる分散ネットワークサービスの基礎実験を開始するべきである。たとえば、GRIDミドルウェアを使ったデータファイルの仮想共有システムでは、可視化処理などをスパコンサイドにおいて行い、可視化出力データ(オリジナルデータよりも十分に小さい)のみをダウンサイズする。必要であればデータファイルの一部(または全部)を取得することができる。また、後述のSINET3のMPLSパスによるデータ伝送環境なども有効であろう。