

大規模データの 可視化に向けた取り組み

日本電気株式会社
吉田 有宏

はじめに

背景

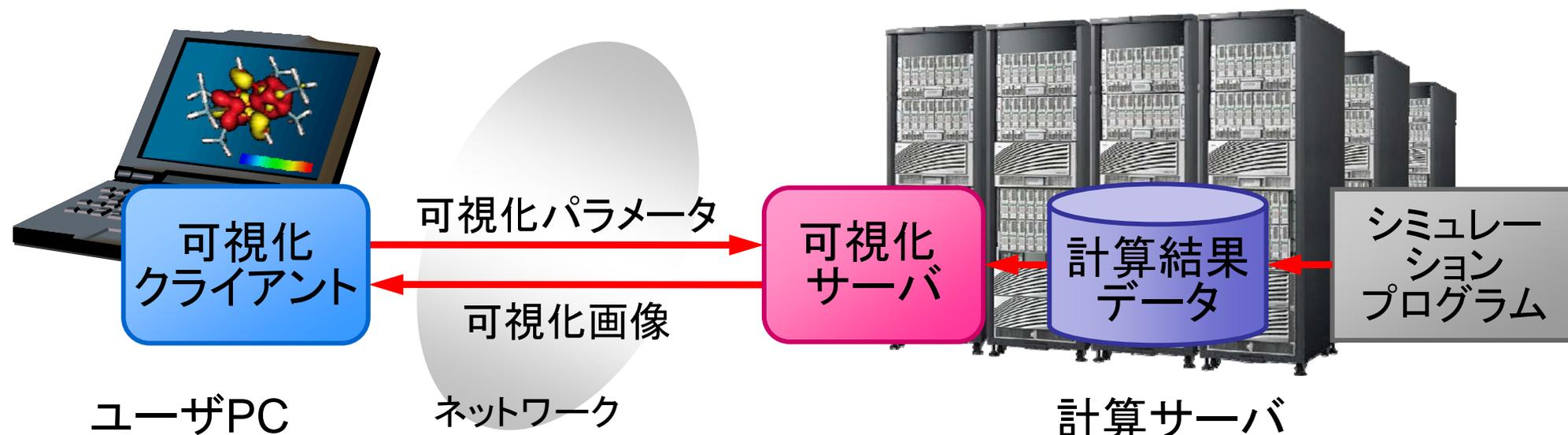
- **計算機シミュレーションにおける可視化の重要性**
 - 計算結果は人間による解釈が事実上不可能な膨大な数値の羅列.
 - シミュレーションは計算結果が人間に解釈されてはじめてその目的が達成される. 可視化により初めて研究者は目に見える形で計算結果を観察, 分析できる.
- **リモート分散環境上の大規模データを扱う難しさ**
 - 計算結果データの規模はますます増大.
 - 計算サーバの数が増大し計算結果データは遠隔のそれらに散在.この条件下, 一般的な可視化ソフトでは簡単かつ効率的な可視化が困難.

目的

- **分散配置された大規模データの可視化**
 - 遠隔の複数計算サーバ上に分散されて保存された巨大な計算結果データを, 複雑な操作や煩わしい待ち時間なしに, 研究者のPCより遠隔から可視化できるシステムを提供.

画像送信によるリモート可視化 ~1/2~

- 従来の可視化との違い
 - 計算結果データをユーザのPC上ではなく、リモートの計算サーバ上で可視化。
 - ユーザはPC上で起動したクライアントGUIによって、計算サーバ上の可視化を制御でき、そこで生成された画像を見ることができる。



画像送信によるリモート可視化 ~2/2~

■ 利点

- 高速CPU, 大容量メモリ, 大容量HDDを備えたハイエンドPCは不要.
- 大規模な計算結果データをPCにダウンロード不要.
- マルチサイト連成/並列計算の場合でも大規模な計算結果データのサイト間転送は不要(後述).
- マルチサイト連成/並列計算の場合でも大規模な計算結果データ自身の事前合成処理は不要(後述).
- ネットワーク性能や処理性能や容量の制限のために, わざわざ低解像度データにリダクション不要.
- ネットワーク負荷が軽減.
- 原則どこからでもユーザのPCから可視化可能.

RVSLIB *Real-time Visual Simulation Library*

■ 沿革

- 1991年 研究着手
- 1992年 プロジェクト本格始動
- 1997年 R1.0リリース リアルタイム/リモート可視化の先駆け
- 2007年 R5.1リリース

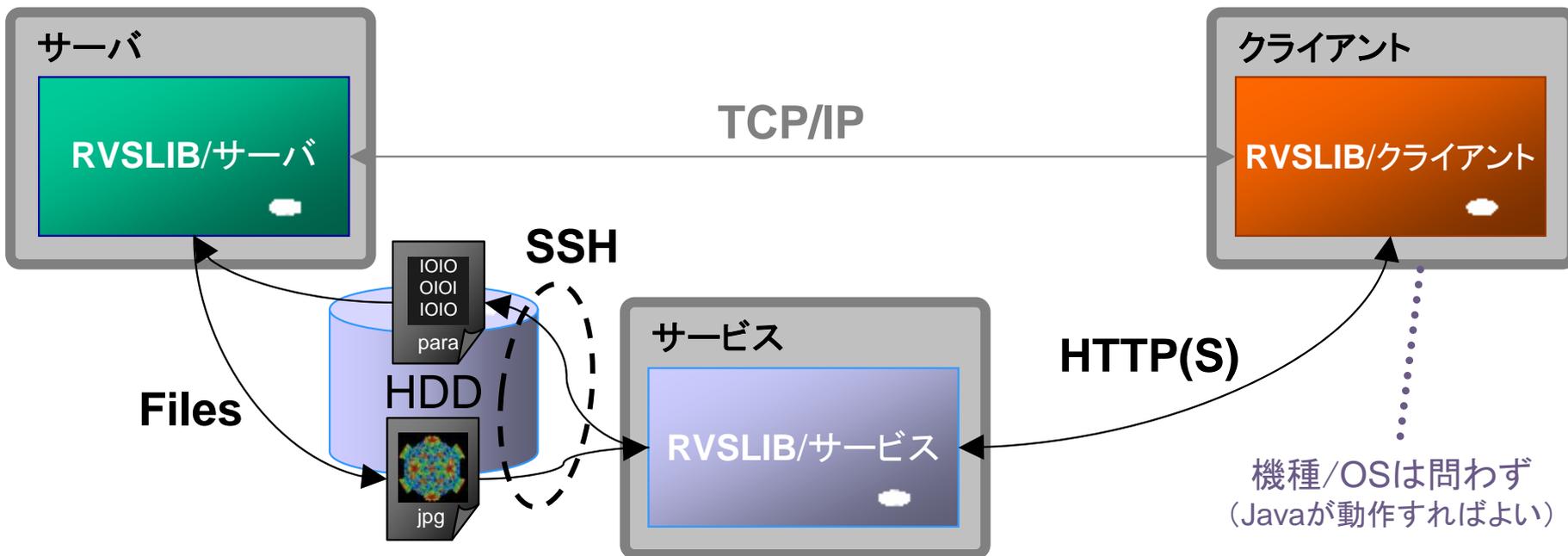
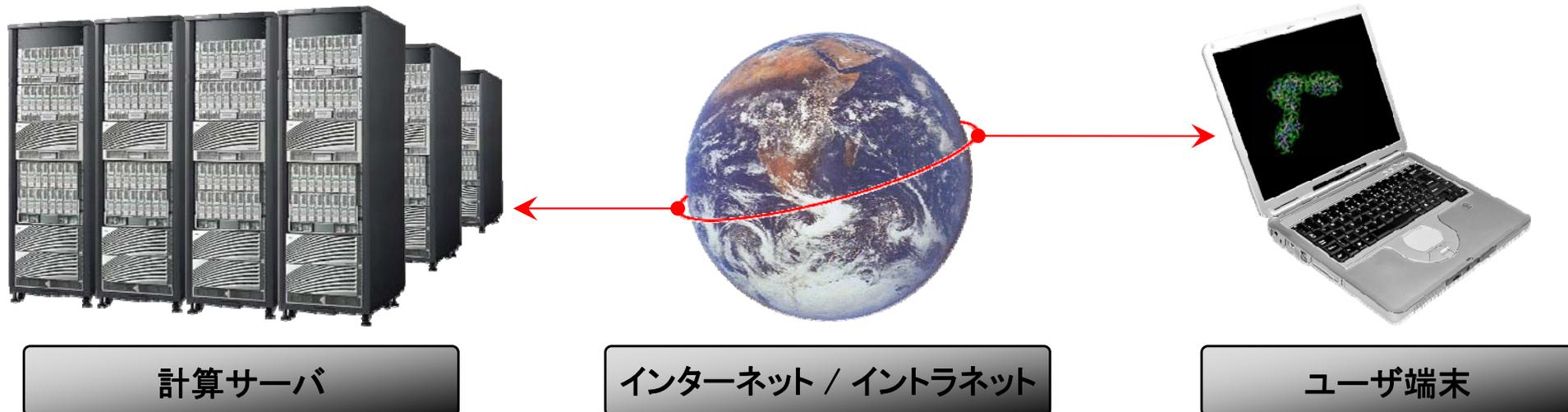
■ 特徴

- リアルタイム可視化(シミュレーションの過程をモニタ可能)
- ステアリング(シミュレーションのパラメータを動的に操作可能)
- サーバはPCクラスタ, SXシリーズに対応
- 分散メモリ並列(MPI), ベクトル化による高速な描画
- 流体, 気象, 衝突解析等, 様々な分野に適用可能

製品HP <http://www.nec.co.jp/APSOFT/SX/rvslib>

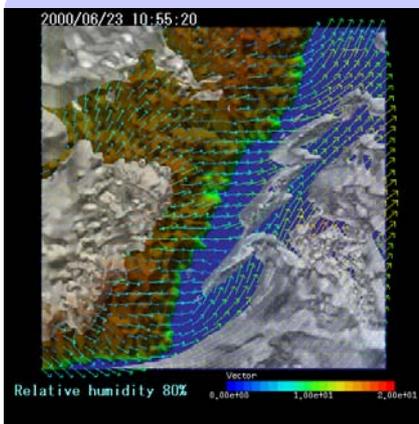
~ NEC RVSLIB ~

システム構成



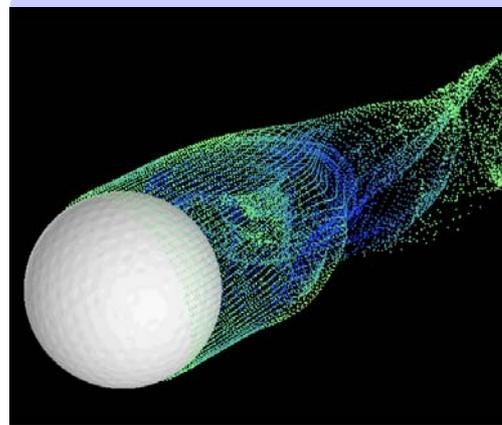
可視化適用事例

■ 気象

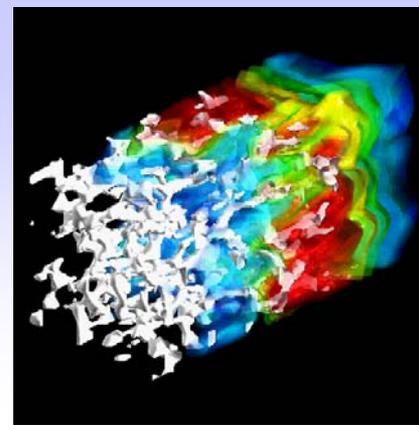


オーストラリア気象庁様

■ 流体

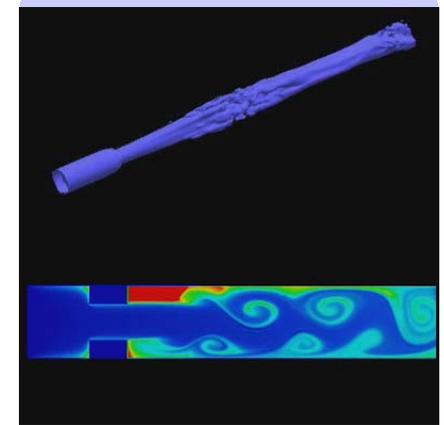


東北大学様



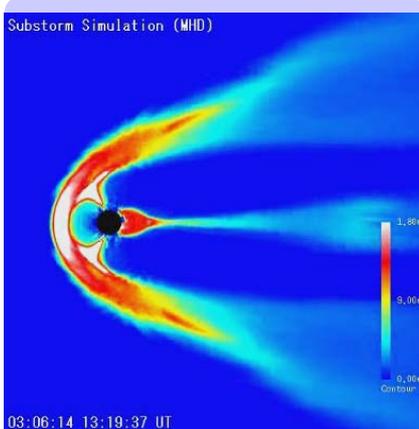
NEC

■ 医療



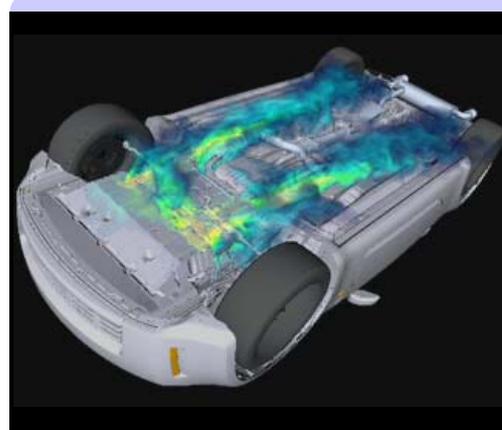
シェフィールド大学様

■ 宇宙



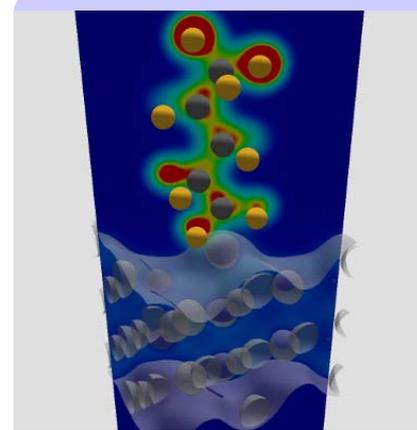
情報通信研究機構様

■ 製造

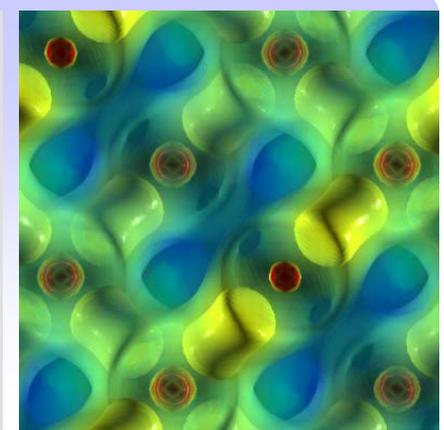


日産自動車様

■ ナノサイエンス



同志社大学様, けいはんな様



NEC

グリッド可視化システム:GVS

■ 沿革

- 文科省NAREGIプロジェクト*(2003～)にてNECが開発
- 2006年 β 版公開
- 2008年 V1.0公開予定

*NAREGIプロジェクト

正式名称「超高速コンピュータ網形成プロジェクト」.
科学技術計算向けグリッド環境の実現, 普及を目的.

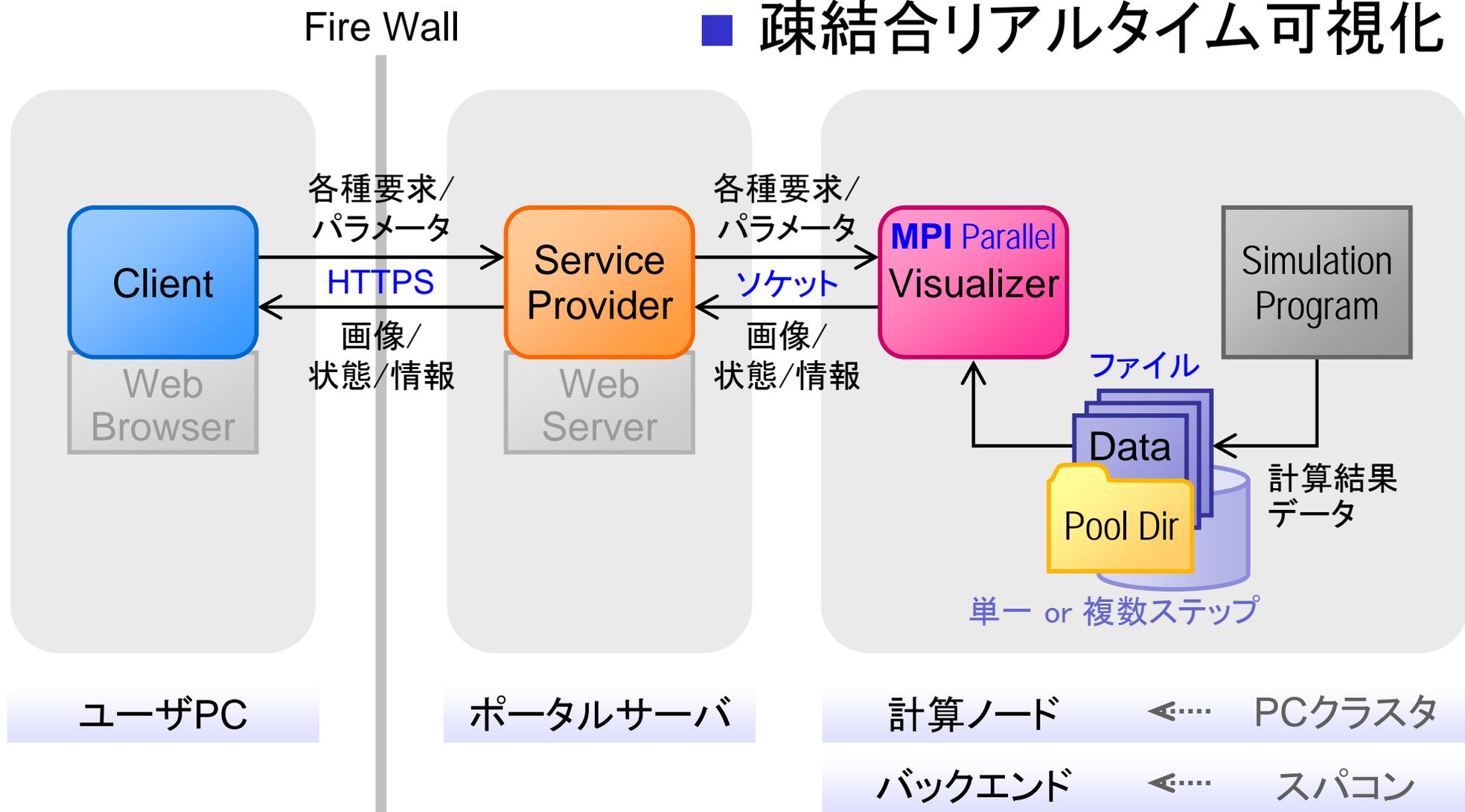
■ 特徴

- オープンソース
- 分散/連成シミュレーションにも対応
- ライブラリ組込み不要のリアルタイム可視化も可能
- HTTPストリーミングによるインタラクティブ性向上
- ナノ分野向けを手始めに機能を開発

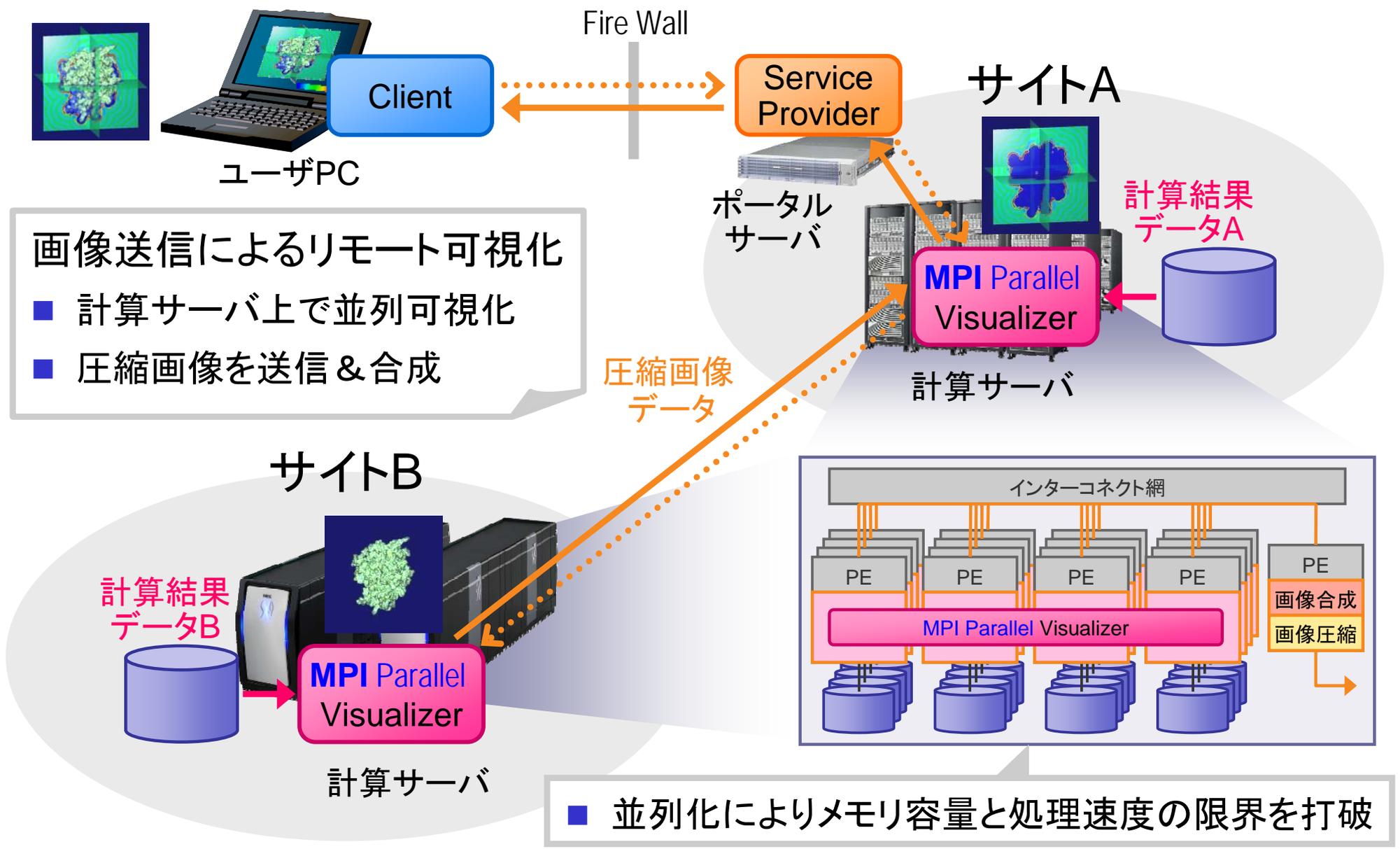
プロジェクトHP <http://www.naregi.org/>

基本構成(インタラクティブ可視化)

- ポスト可視化
- 疎結合リアルタイム可視化

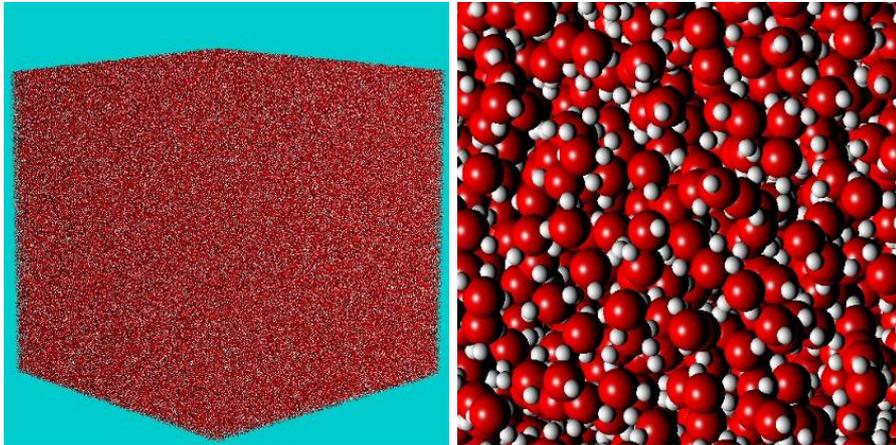


大規模分散リモート可視化の構成例



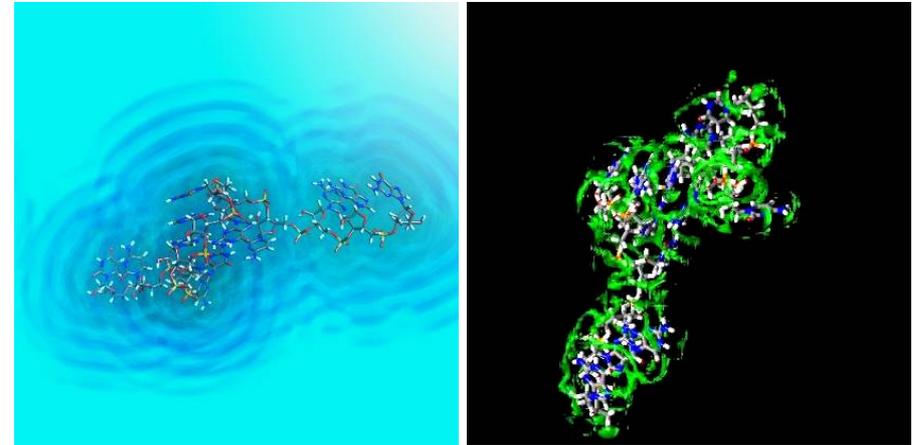
大規模/連成可視化事例 ～1/2～

■ MD(1000万原子)*



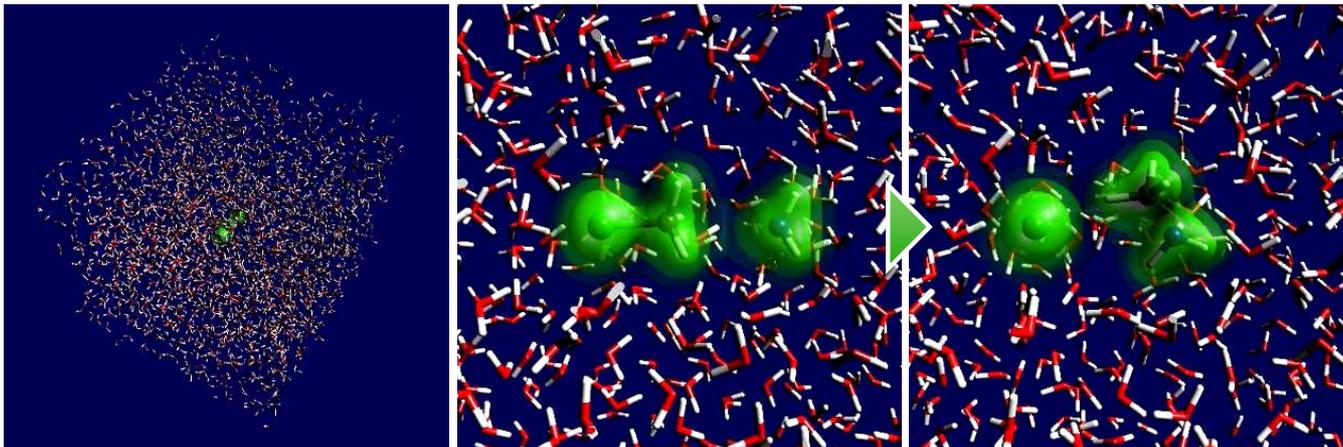
Dynamics of water molecules

■ レプリカ交換 MC-3D RISM*



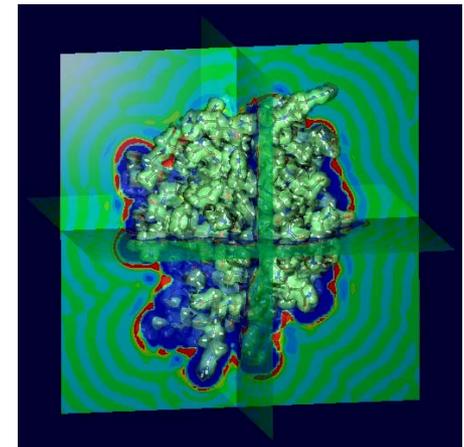
Molecular structure optimization of RNA in water

■ MD-DFT*



S_N2 reaction in water

■ RISM-FMO**



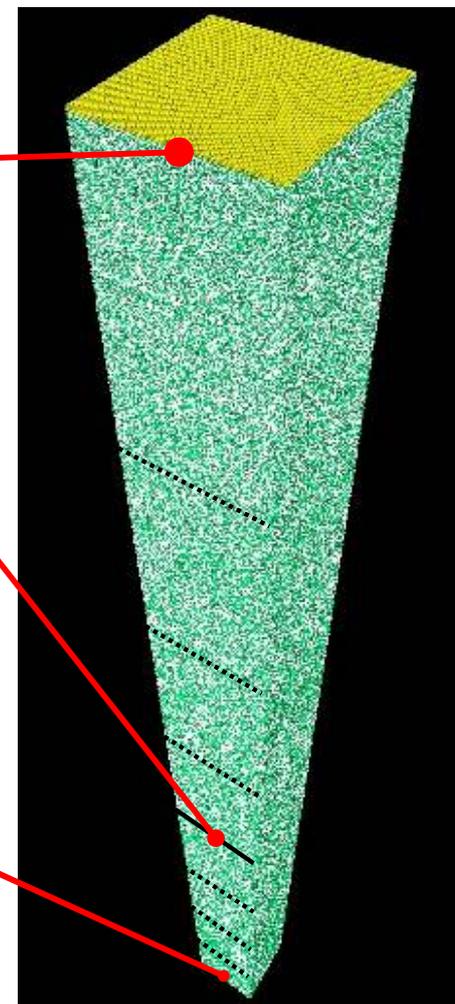
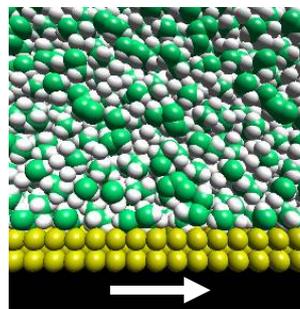
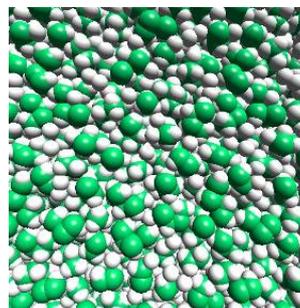
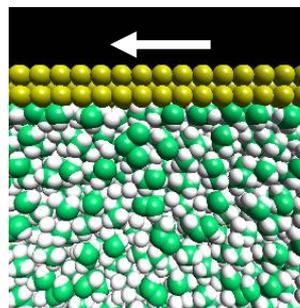
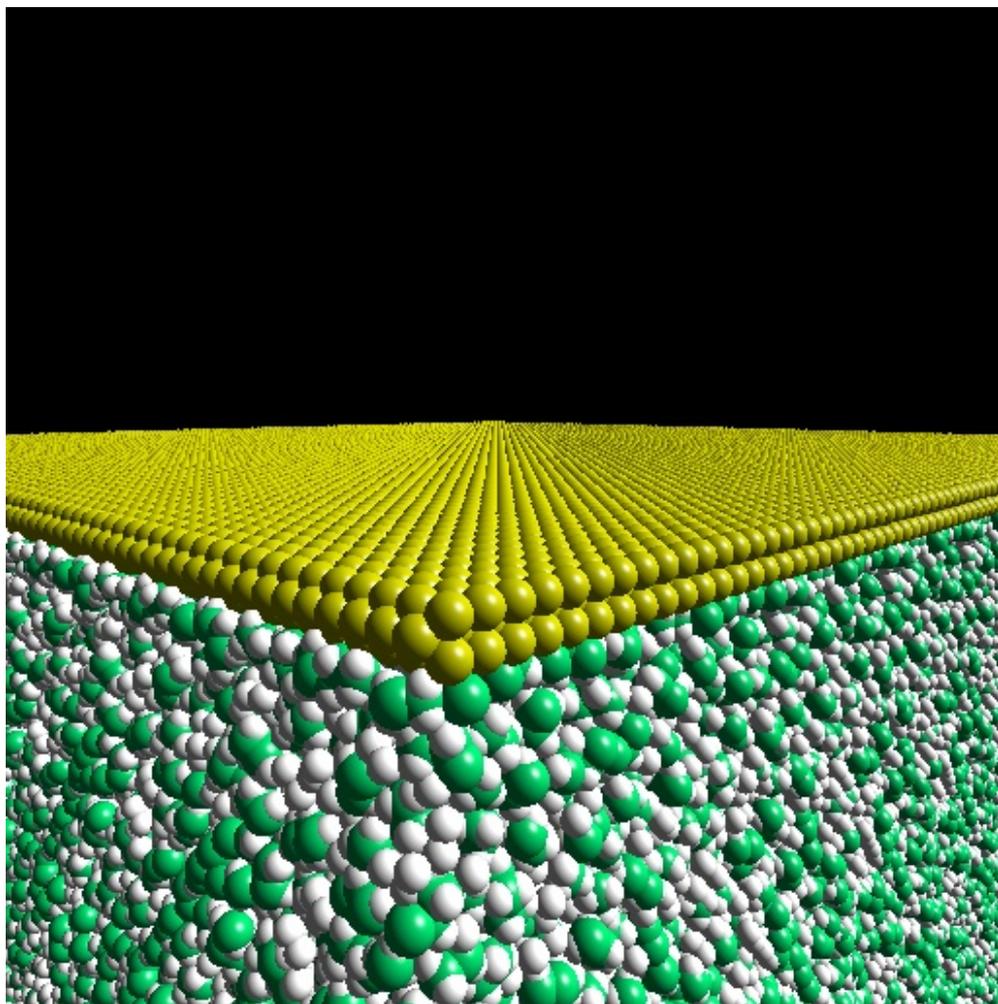
Electron and solvent structure of protein in water

データ提供: *分子科学研究所様, **九州大学様

大規模/連成可視化事例 ～2/2～

■ MD (2000万原子)

※ シミュレーション自身は50万原子
水平方向に仮想セルを追加して可視化



Dynamics of oil molecules between metal solids

データ提供: 豊田中央研究所様

まとめ

■ これまでの取り組み

□ 大規模データの可視化への挑戦

- 計算機の発展 → 計算の大規模化 → 可視化が益々困難に
- リモート可視化により計算機資源を可視化処理に活用,
分散メモリ並列処理により大規模対応と高速化を図る

□ RVSLIBとして10年前に製品化

- 近年ようやく当たり前になりつつあるリモート可視化をどこよりも先駆けて
- リアルタイム可視化ならびにステアリングの技術も先取り
- 分散メモリ並列処理によりスパコンのみならずPCクラスタでも性能享受

□ NAREGI等のプロジェクトにて可視化の分野で貢献

- 分散/連成シミュレーションに対応したグリッド可視化システムを開発

■ これからの取り組み

□ 先進的プロジェクトでの技術開発成果を順次製品に反映

□ PCクラスタのノード/ソケット/コア数増大に対応

- 並列処理スケーラビリティのさらなる向上, 柔軟なデータ分散等

Empowered by Innovation

NEC