

成果論文

HPCアプリケーション技術の概要

Outline of HPC Application Technology

武井利文*
Toshifumi Takei亀山 隆*
Takashi Kameyama岩田直樹*
Naoki Iwata久保克維*
Yoshiyuki Kubo小久保達信*
Tatsunobu Kokubo中野英一*
Eiichi Nakano

要旨

スーパーコンピュータの普及に伴い、科学技術計算ソフトウェアへの要望も、高速でロバストな数値計算技術の追求とともに、大規模計算/データ処理結果の効率的把握、ネットワーク分散環境の活用、高いユーザビリティなど、多様化しつつあります。本稿では、このような要望に対応するソリューションとして、NECが開発した数学ライブラリ、分子科学、計算結果可視化、HPCの利便性向上のためのソフトウェアの概要を紹介します。

With the evolution of supercomputers, there are growing demands for not only the pursuit of high performance computing capabilities but also the network-enabling computing as well as the efficient processing of large-scale data resulting from number crunching. To provide solutions that meet such diversified demands, NEC has been developing application software in such areas as mathematical library, computational chemistry, scientific visualization and other tools for usability improvement. This paper gives an outline of each application software.

1. はじめに

スーパーコンピュータやPCクラスタを利用したHPC (High Performance Computing) は、企業や研究機関における設計・製造・研究開発上のツールにとどまらず、今や日常生活の世界にも浸透しており、社会基盤の一部を形成しつつあります。HPCの性能向上は、これまで困難であった大規模シミュレーションの高速実行を可能にし、設計・研究開発の効率化を促進するとともに、新たな科学的知見の形成に寄与し、新たな科学の地平を広げる上で、大きな役割を担っているといえます。

一方で、HPCの領域において、ハードウェア、OS、ミドルウェアなどと並んで、アプリケーション・ソフトウェアの果たす役割は多様化しており、以下のような期待が拡大しています。

- ① ハードウェア性能を最大限活用した高速数値計算
 - ② 大規模計算/データ解析結果の効率的な把握手段
 - ③ 分散環境資源を利用する際のユーザビリティの向上
- NECでは、以下のアプリケーション・ソフトウェアのサポートを通して、このようなニーズに応えています。
- ・数学ライブラリ MathKeisan, ASLシリーズ
 - ・計算結果/データ解析結果の可視化ソフトウェア：
ネットワーク対応型 Gaussian, プリポストシステム MolStudio, リアルタイム可視化システム RVSLIB
 - ・HPCのユーザビリティ向上のためのソフトウェア：
WSCE (Web Super Computing Environment), 解析データベースシステム
- 以下の各章では、各アプリケーションについて概説します。

2. 数学ライブラリ

数学ライブラリは科学技術計算プログラムを構築するための必須ライブラリの1つです。ハードウェアの能力向上に伴い、科学技術計算分野で扱われる問題の規模は大型化する傾向にあります。そのため、計算を高速処理する技術の重要性も増大し、数学ライブラリとしてもハードウェアに適合した高速なものが要求されています。

スーパーコンピュータSX-8用の数学ライブラリとして、ASLシリーズ (ASL, ASLSTAT) およびMathKeisanが用意されています。どちらもSX-8のハードウェア性能を引き出すようにベクトル化、並列化を意識して高度に最適化されています。ユーザは、これらのライブラリをリンクするだけで、容易に利用者コードを高速に実行することができます。

ASLシリーズは、NECで独自に開発された製品で、数値

* HPC販売推進本部
HPC Marketing Promotion Division

ASL (数値計算)	数値積分
行列行列積	近似・補間
最小二乗法	スプライン関数
固有値・固有ベクトル	特殊関数
連立1次方程式	乱数
FFT	ソート・順位付け
微分方程式	方程式の根
数値微分	極値問題・最適化
ASLSTAT (統計計算)	ノンパラメトリック検定
確率分布	多変量解析
基礎統計量	近似・回帰分析
推定と検定	分散分析・実験計画

図1 ASL シリーズの機能一覧
Fig.1 Functions of ASL Series.

計算ライブラリ ASL と統計計算ライブラリ ASLSTAT から構成されます。機能として図1に示すように、線形代数系演算（固有値問題、連立一次方程式）やFFTに加えて、特殊関数、スプライン関数、多変量解析、乱数など幅広い領域に対応しています。言語としてはFORTRAN のほかに C, C++ にも対応しています。

一方、MathKeisan は表に示すように、BLAS, LAPACK, ScaLAPACK, ARPACK, METIS などのパブリックドメインソフトウェアを基盤とした、流通アプリケーションへの組み込みの容易さをより強く指向したライブラリです。実際にBLAS/LAPACKは、いくつかの流通アプリケーションに組み込まれています。線形代数系演算を中心とした構成になっており、NECで開発したFFT (Fast Fourier Transform), 直接法による疎行列ソルバなども含まれています。

並列処理対応機能としては、ASL, MathKeisan ともに共有メモリ並列に対応しています。さらに、MathKeisan

表 MathKeisan に含まれるライブラリ一覧
Table Libraries list included in MathKeisan.

ライブラリ名	機能概要
BLAS	ベクトル、行列の基本演算
LAPACK	高性能コンピュータ用連立一次方程式、固有値解析
ScaLAPACK	連立一次方程式、固有値解析 (MPIによる並列版, PBLAS を含む)
BLACS	ベクトル、行列の基本演算のためのメッセージパッシングライブラリ (MPIによる並列版)
PARBLAS	共有メモリ用の並列版BLAS
CBLAS	BLASのCインターフェース
SBLAS	スパースBLAS (ACM Algorithm 692参照)
FFT	HP VECLIB並びにSGI/CRAY LIBSCI 3.1のインターフェースを持つFFT
PARFFT	HP VECLIB並びにSGI/CRAY LIBSCI 3.1のインターフェースを持つ共有メモリ用の並列版FFT
METIS	行列、グラフの並べ替え、分割ライブラリ
ParMETIS	行列、グラフの並べ替え、分割の並列版ライブラリ (MPIによる並列版)
SOLVER	対称疎行列線形問題の直接法ソルバ
ARPACK	大規模固有値解析

にはMPIを使った分散メモリ用の並列版も用意されています (BLACS, ScaLAPACK, ParMETIS ライブラリ)。

図2はASLの線形計算の結果で、1CPUでの高いベクトル性能を表すグラフです。図3はASLの3次元複素数FFTの並列実行の結果で、CPU数に対するスケーラビリティを表すグラフです。図4はMathKeisan BLAS (DGEMM) の性能を表すグラフです。図5はMathKeisan LAPACKの高い実効性能を表すグラフです。

3. ネットワーク対応型 Gaussian プリポストシステム MolStudio

分子設計・材料設計においては、目的機能物質をいち早

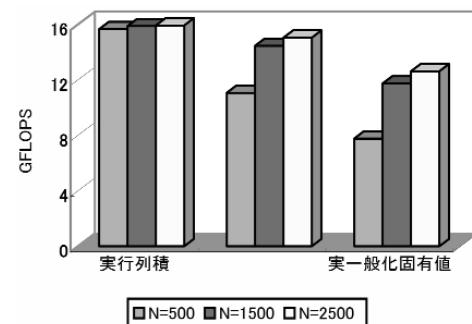


図2 ASL の線形計算の SX-8 1CPU (最大性能 16GFLOPS) での性能

Fig.2 Performance of ASL linear equations on SX-8.

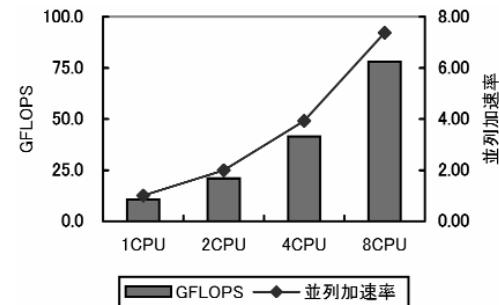


図3 ASL R21.0 3DFFT の SX-8 での並列性能
Fig.3 Performance of parallelized 3D-FFT of ASL on SX-8.

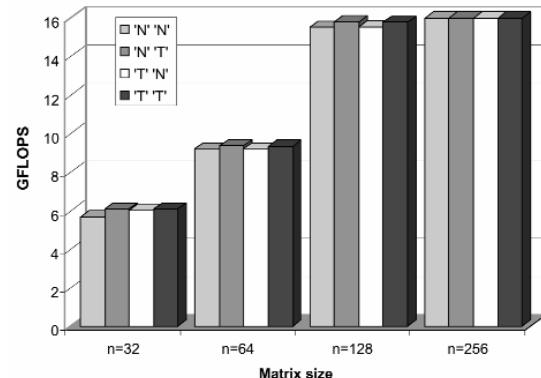


図4 BLAS (DGEMM) の SX-8 での性能

Fig.4 Performance of BLAS (DGEMM) on SX-8.

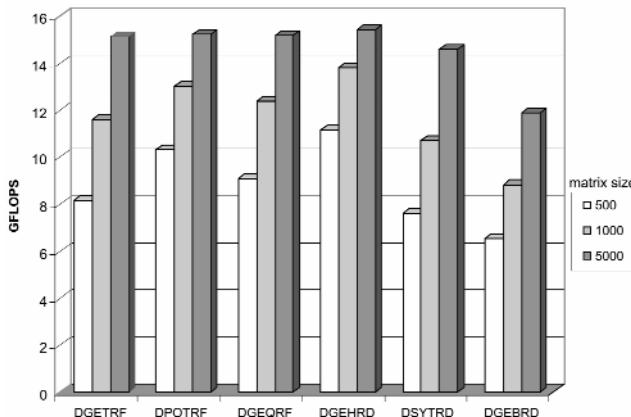


図5 LAPACKのSX-8 1CPU(最大性能16GFLOPS)での性能
Fig.5 Performance of LAPACK on SX-8.

く合成・分析することが重要視されています。特にバイオ分野では、取得特許が莫大な利益をもたらすため、この傾向が顕著です。最近の合成装置・分析装置の飛躍的な発展は、これを可能にしつつあります。

しかし、これに伴い、合成される分子も膨大な数となります。このため、合成対象の事前絞り込みや、実験では時間のかかる構造・特性解析について、数値シミュレーションが利用されています。迅速性の要請から、これらも効率的に行なうことが求められています。

MolStudioは、このような問題を解決すべく、世界的に著名な分子軌道計算プログラム Gaussian シリーズの計算化学ソフトウェアのプリポストシステムとして開発されました。Windows搭載のパソコンで動作し、入力データの作成、計算結果の可視化を3次元的に行なうことができます。Gaussianが動作するUNIXサーバに対して、入力データの転送、Gaussianの実行、計算結果の取得を行なうことができます。

一般に計算化学ソフトウェアでは、入力データとして分子の3次元座標を設定する必要があります。原子間の複雑な位置関係を指定しなければならないため、従来は時間のかかる作業でした。MolStudioでは、3次元座標エディタと数値編集エディタの2種類のエディタにより、これらの指定を短時間に行なうことができます。

また、分子の特性解析に必要な分子軌道関数値、電子密度値、静電ポテンシャルなどを3次元的に表示することができます。

最新版R4では、バイオ分野での利用を意識し、業界標準のタンパク質構造データベース Protein Data Bank のデータのインポート機能をサポートし、回転・拡大などの操作を高速化しました。タンパク質などの大規模分子を快適に操作できます。新たに電荷分布、軌道エネルギー準位図、反応経路などの表示機能がサポートされ、計算結果のより詳細な解析が可能になりました。また、ポートフォワーディングによるSSH対応や、データ送受信の詳細制御機能など実行制御機能も強化しています。

図6はHIVタンパク質分解酵素の活性部位と阻害剤の静

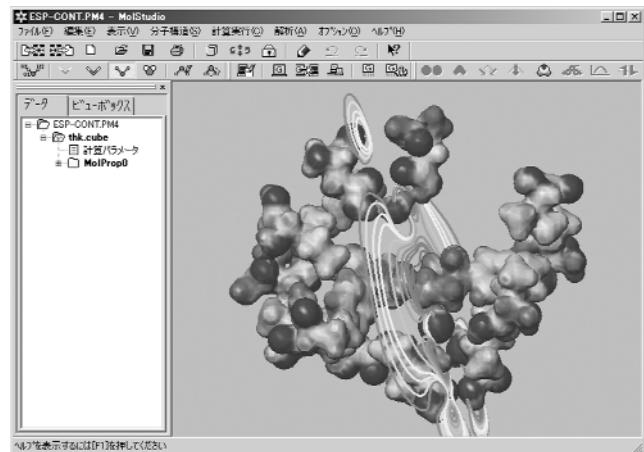


図6 HIVタンパク質分解酵素と阻害剤複合体の静電ポテンシャル
Fig.6 Electrostatic potential of inhibitor complexed with HIV protease.

電ポテンシャル図です。

4. リアルタイム可視化システム RVSLIB

シミュレーションの大規模化とともに、計算経過をリアルタイムかつ視覚的にモニタしたり（トラッキング）、さらに経過状況に基づいて計算条件をその場で制御（ステアリング）する技術への要請が高まっています。また、大規模データを間引くことなくそのまま可視化したいという要望や、Webなどを使ってインターネット経由で可視化作業を行ないたいという要望も増えてきています。特に最近では、広く使われつつあるPCクラスタの、各ノードに分散された大規模データの可視化をどうやって効率的に行なうか、ということが大きな課題となっています。

このような要請に対応して、リアルタイム可視化システム RVSLIB では、以下を実現しています。

- 1) 大規模計算の効率的可視化、MPIを利用した並列可視化にも対応し、分散された大規模データの可視化も可能
- 2) シミュレーションと可視化の同時実行/制御による試行錯誤計算の効率化
- 3) ネットワーク負荷の低減、Web技術の利用によるリモート可視化

RVSLIBでは、SXシリーズなどの高速計算サーバ上において、計算と同時に結果を可視化し、画像にまで変換して、表示端末（ワークステーションやパソコンなど）に圧縮転送します。これによって、大規模データの端末への転送が必要な従来型のシステムと比較して、ネットワーク負荷を大幅に軽減します。近年ではこのRVSLIBの機能を、お客様のご要望に応じて様々なカスタマイズしたシステムも提供しています（図7）。

5. WSCE/解析データベースシステム

シミュレーションの大規模化、処理データの大容量化に



図7 空調による車室内の温度分布（日産自動車との共同研究）

Fig.7 Temperature distribution in cabin.

Data courtesy: NISSAN Motor Co., Ltd.

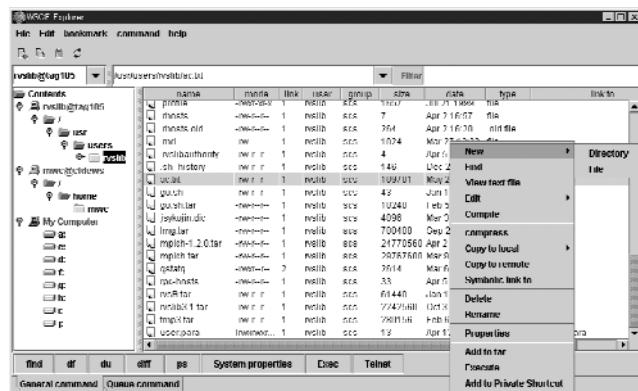


図8 WSCE のファイル操作画面

Fig.8 Sample display of Web Super Computing Environment.

伴い、計算結果などのシミュレーションに関するデータを効率的かつ効果的に管理する要請が高まっています。またスーパーコンピュータを含む分散環境下に存在する UNIX, Windowsなどの異質なOS, マシンやアプリケーションへのアクセスにおけるバリア低減、シームレスな利用環境実現が、いっそう要求されています。

NECでは、以下のような要求を充足するアプリケーション利用環境として、WSCE (Web Super Computing Environment), 解析データベースシステムというシステムを用意し、科学技術計算を活用した設計・研究開発の効率化、コスト削減を可能としています（図8）。

- ・スーパーコンピュータを含む分散環境上のアプリケーションやデータへの透過的アクセス
- ・ネットワーク上のアプリケーションに対する、GUIなどによる容易な起動やアプリケーション間データ連携
- ・数値シミュレーションにおける入出力データや計算結果の効率的な管理/データ共有。通常のデータベースでは対応できない大規模ファイルの管理も可能

6. むすび

NECでは、数学ライブラリを基盤に培われた、ベクトル/並列計算機向けのアプリケーション性能最適化技術とともに、アプリケーションを効果的に活用するためのプリ・ポストや、可視化、HPC環境全体の利用性向上のための技術を開発し、効率的なアプリケーションソフトウェアを提供しています。また、これらのソフトウェアを軸として、ユーザへの最適なソリューションの提供も行っています。

* Gaussianは、Gaussian, Inc.の登録商標です。

* Windowsは、米国 Microsoft Corporation の米国およびその他の国における登録商標です。

* UNIXは、The Open Group の登録商標です。

筆者紹介



Toshifumi Takei

たけい としふみ
武井 利文 1987年、NEC入社。現在、第一コンピュータ事業本部HPC販売推進本部グループマネージャー。情報処理学会会員。



Naoki Iwata

いわた なおき
岩田 直樹 1987年、NEC入社。現在、第一コンピュータ事業本部HPC販売推進本部HPCアプリケーションマネージャー。



Tatsunobu Kokubo

こく ばたつのぶ
小久保達信 1990年、NEC入社。現在、第一コンピュータ事業本部HPC販売推進本部HPCソリューションマネージャー。



Takashi Kameyama

かめやま たかし
亀山 隆 1988年、NEC入社。現在、第一コンピュータ事業本部HPC販売推進本部HPCソリューションマネージャー。情報処理学会、日本化学会、日本計算工学会各会員。



Yoshiyuki Kubo

くはく よしゆき
久保 克維 1992年、NEC入社。現在、第一コンピュータ事業本部HPC販売推進本部HPCソリューションマネージャー。



Eiichi Nakano

なかの えいいち
中野 英一 1992年、NEC入社。現在、第一コンピュータ事業本部HPC販売推進本部エキスパート。情報処理学会会員。