

HPC向けISVアプリケーションへの 取組み

Activities for HPC ISV Applications

あらまし

大学・研究機関、産業界では、研究開発のために、計算機シミュレーションが広く行われている。これらシミュレーションには、HPC (High Performance Computing) プラットフォームが使用されることが多く、また国内外の様々なISV (Independent Software Vendor) アプリケーションが利用されている。このため、富士通は、富士通のHPCプラットフォームでISVアプリケーションを利用するお客様のために、国内外に5箇所のISVアプリケーション対応拠点を設け、グローバルな体制で、富士通のHPCプラットフォームへのイネープリング推進と高速化、およびISVアプリケーション利用時のトラブル解決支援を行っている。

本稿では、富士通のHPCプラットフォームおよびHPC向けISVアプリケーションの性能特性、利用時の支援内容、支援体制について具体的に紹介する。

Abstract

Computer simulations for research and development are performed widely in universities, institutes and industries. For these simulations, High Performance Computing (HPC) platforms are often used and various overseas and domestic Independent Software Vendor (ISV) applications are also used. Therefore, Fujitsu promotes enabling and optimization of ISV applications for Fujitsu's HPC platforms and provides troubleshooting support for customers who use ISV applications on Fujitsu's HPC Platforms, and by arranging five ISV application support bases, Fujitsu has given such support with a global support formation.

This paper introduces Fujitsu's HPC platforms as well as the performance characteristics of HPC ISV applications, the details of customer support and the support formation for HPC ISV applications.



福永隆志 (ふくなが たかし)
計算科学ソリューション統括部
所属
現在、HPC向けISVアプリケーションの整備、利用支援に従事。

ま え が き

富士通では、1982年のベクトルプロセッサ FACOM VP-100/FACOM VP-200の発表以来、HPC (High Performance Computing) 向けのプラットフォームを提供している。これらプラットフォームは構造解析、流体解析、衝突解析をはじめとする科学技術分野のシミュレーションに使用されてきた。近年のプラットフォームの性能向上とシミュレーション技術の発展によって、現在シミュレーションは研究開発の強力なツールとして幅広く活用されている。これらのシミュレーションでは国内外の様々なISV (Independent Software Vendor) アプリケーションが多数使用されている。このような状況において、富士通はHPC向けの高性能なプラットフォームを提供するとともに、お客様のISVアプリケーションの利用に関してグローバルな体制で支援を行っている。

以下では、富士通のHPC向けISVアプリケーションへの取組みについて紹介する。

富士通のHPCプラットフォーム

現在、富士通はHPCプラットフォームとしてPC クラスタシステムおよび大規模SMP (Symmetric Multi Processing) システムを提供している。また、ハイエンドテクニカルコンピューティング向けの専用サーバとして、SPARC64プロセッサを搭載した“FX1”も提供している。

PCクラスタシステムは価格性能比が高く、また高い拡張性を備える。一方、大規模SMPシステムは大容量メモリの搭載が可能であり、またI/Oスループットも高いため、大容量メモリ、高速I/Oを必要とするアプリケーションに適している。

以下に富士通のPCクラスタシステムと大規模SMPシステムについて簡単に紹介する。

(1) PCクラスタシステム^①

高性能・高信頼なPCサーバ“PRIMERGY”、高性能テクニカルコンピューティングサーバ“HX600”を計算ノードとし、高速インタコネクで接続した高性能なクラスタシステム。

- ・CPU: Intel Xeonプロセッサ (PRIMERGY)
AMD Opteronプロセッサ (HX600)
- ・OS: Red Hat Enterprise Linux

・インタコネク: InfiniBandなど

(2) 大規模SMPシステム

大規模SMPシステムとしては、世界最強のオープンサーバである基幹IAサーバ“PRIMEQUEST”とグローバルスタンダードUNIXサーバである“SPARC Enterprise”がある。

・PRIMEQUEST

CPU: Intel Itaniumプロセッサ

OS: Red Hat Enterprise Linux

・SPARC Enterprise

CPU: SPARC64プロセッサ

OS: Solaris

“PRIMEQUEST”、“SPARC Enterprise”は、InfiniBandなどを利用してクラスタ構成を取るとも可能である。

PCクラスタシステム、大規模SMPシステム向けのミドルウェアに“Parallelnavi”がある。“Parallelnavi”は富士通のスーパーコンピュータ“VPPシリーズ”、“PRIMEPOWER HPC2500”での豊富な実績を継承・発展させた、HPCプログラム開発・実行環境である。以下に機能を示す。

- ・運用管理 (ジョブスケジューラ, 高性能実行基盤, HPCクラスタ運用基盤)
- ・プログラム開発環境 (コンパイラ, ライブラリ, 開発ツール)
- ・高性能分散ファイルシステム (SRFS: Shared Rapid File System)

HPC向けISVアプリケーション

HPC向けISVアプリケーションは、構造解析、流体解析、衝突解析で多く利用されているが、今後は、ナノテク分野、ライフサイエンス分野における計算化学アプリケーションの利用^②が拡大していくと考えられる。

HPC向けISVアプリケーションの実行には高速性が求められる。このため、アプリケーションの性能特性に応じて適切なハードウェアを選択することが重要である。以下では、ISVアプリケーションの実行性能に影響を与えるハードウェア要因について述べる。

(1) アプリケーション性能とハードウェア

アプリケーションの計算速度に影響を与える要因としては、CPU性能のみでなく、メモリ性能、I/O

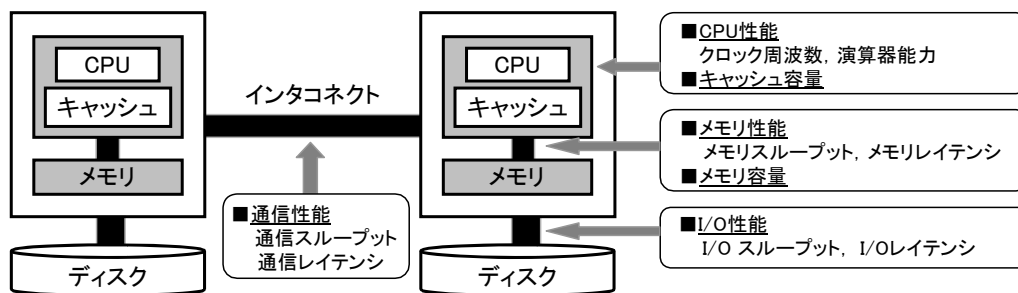


図-1 アプリケーション性能に影響を与えるハードウェアの主な要因
Fig.1-Main hardware factors which influence application performance.

性能、インタコネクの通信性能などが挙げられる。アプリケーションの実行性能に影響を与える要因を図-1に示すとともに、それぞれの要因に必要とされる事柄を示す。

・CPU

CPUのクロック周波数、SIMD (Single Instruction, Multiple Data) 機構や演算器パイプラインなどの演算器能力が重要である。また、CPUのキャッシュ容量も性能に影響を与える。

・メモリ

メモリからCPUまでのデータ転送性能であるメモリスループット、メモリアクセスの際の遅延時間であるメモリレイテンシが重要である。また、アプリケーションによっては、大容量のI/Oが発生する場合があります。その際メモリをI/Oキャッシュとして使用するため、搭載メモリ容量が実行性能の向上に重要な影響を及ぼす場合もある。

・I/O

ディスク装置へのデータ転送性能であるI/Oスループットやディスクアクセスの遅延時間であるI/Oレイテンシが重要である。

・インタコネク

ノード間のデータ転送性能である通信スループット、ノード間通信の遅延時間である通信レイテンシが重要である。クラスタ構成の場合、計算ノード数が増加すると、計算時間と比較して通信時間が相対的に大きくなり、通信性能がより重要となる。このため、高速インタコネクが必須となる。現在、高速インタコネクとしてはInfiniBandが広く使用されており、富士通のHPCプラットフォームでも使用可能である。

(2) アプリケーションの性能特性

主要な解析分野のアプリケーション特性およびそ

れぞれの解析分野に適した富士通のHPCプラットフォームを表-1に示す。

構造解析分野のアプリケーションについては、流体解析、衝突解析分野のアプリケーションと比較してI/O負荷が高く、並列効果が小さいことが特徴として挙げられる。このため、構造解析分野のアプリケーションの実行には、大規模SMPシステムが適していると考えられる。一方、流体解析、衝突解析といった分野のアプリケーションは、並列効果が大きく、かつI/O負荷も小さいため、価格性能比を考慮するとPCクラスが適していると考えられる。

また、流体解析分野については、メモリアクセス負荷が高く、メモリアクセス性能がボトルネックとなりやすいという特徴がある。

プラットフォームの選択においては、このようなアプリケーションの特性を考慮することが重要である。

ISVアプリケーションへの富士通の取組み

富士通では、富士通のHPCプラットフォームでISVアプリケーションを使用するお客様のために、富士通のHPCプラットフォームへのイネープリング推進と高速化、ISVアプリケーション利用時のトラブル解決支援をグローバルな体制を敷いて行っている。

(1) 富士通のHPCプラットフォームへのイネープリング推進と高速化

お客様からは、様々なISVアプリケーションの利用が要望される。この要望に応えるためには、富士通のHPCプラットフォームで利用可能なISVアプリケーションの取りそろえを充実させることが必要である。このため、国内外のISVと協力して、富士通のHPCプラットフォームへのイネープリングを推

表-1 各解析分野のアプリケーション特性

解析分野	アプリケーション特性★1				アプリケーション性能に影響するハードウェア要因	アプリケーションに適した富士通のプラットフォーム
	単一ノード内			並列効果		
	CPU負荷	メモリアクセス負荷	I/O負荷			
構造解析	大	中～大	中～大	小	CPU性能 メモリ性能 メモリ容量 I/O性能	PRIMEQUEST/ SPARC Enterprise
流体解析	中	大	小	大	CPU性能 メモリ性能 通信性能★2	PRIMERGY/HX600クラスタ +高速インタコネク (InfiniBand)
衝突解析	大	中	小	大	CPU性能 メモリ性能 通信性能★2	PRIMERGY/HX600クラスタ +高速インタコネク (InfiniBand)
電磁波解析	中	大	小～中	大	CPU性能 メモリ性能 通信性能★2	PRIMERGY/HX600クラスタ +高速インタコネク (InfiniBand)
計算化学 (分子軌道法)	中	小～中	小～大	小～中	CPU性能 I/O性能	PRIMEQUEST/ SPARC Enterprise

★1：アプリケーション特性は解析内容に依存するが、上表のような傾向がある。

★2：PCクラスタシステムの高並列実行時、通信性能が影響する。

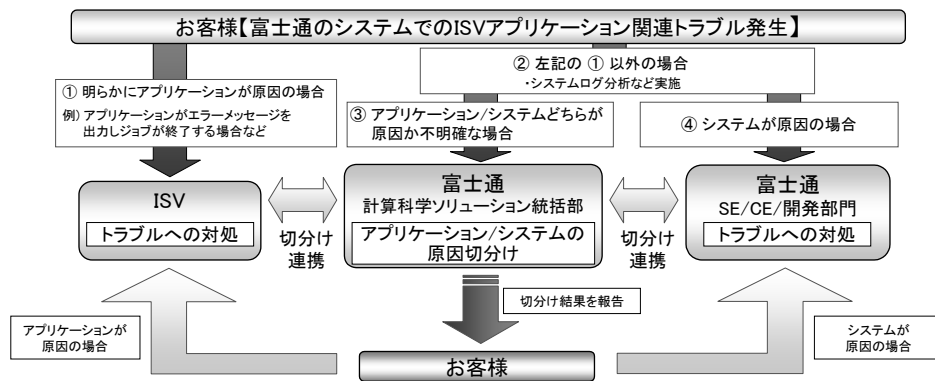


図-2 ISVアプリケーショントラブルに関するサポート体制
Fig.2-Support formation for ISV application trouble.

進している。

また、主要なISVアプリケーションについては、富士通のプラットフォーム上でCPU負荷、メモリアクセス負荷など性能に関するアプリケーション特性について分析を行い、富士通のHPCプラットフォームの更なる性能向上のために、分析結果をハードウェア、ソフトウェアの開発部門へフィードバックしている。

(2) ISVアプリケーション利用時のトラブル解決支援

富士通のシステムでISVアプリケーションに関連したトラブルが発生した場合、ISVと協力して問題の解決に当たっている。

ISVアプリケーションに関連するトラブル時の富士通の対応を図-2に示す。トラブルの原因が明らか

にアプリケーションにある場合はISVが直接対応を行う。トラブル原因がシステムにあることが明らかな場合は富士通で対応する。しかし、トラブルの原因がアプリケーション側かシステム側かのどちらにあるのか分からない場合が多い。この場合のトラブル原因の切分けにはISVアプリケーションとシステムの両方に関する知識が要求される。このため、問題の迅速な解決に向け、富士通ではISVアプリケーション支援グループが国内外のISVや富士通のハードウェア、ソフトウェア開発部門と密に連携しながら、原因の切分けを実施している。

(3) 支援体制

HPC向けISVアプリケーションは、海外のISVにより開発されたものが多い。このため、富士通では国内に加えて米国、ヨーロッパ、オーストラリアに

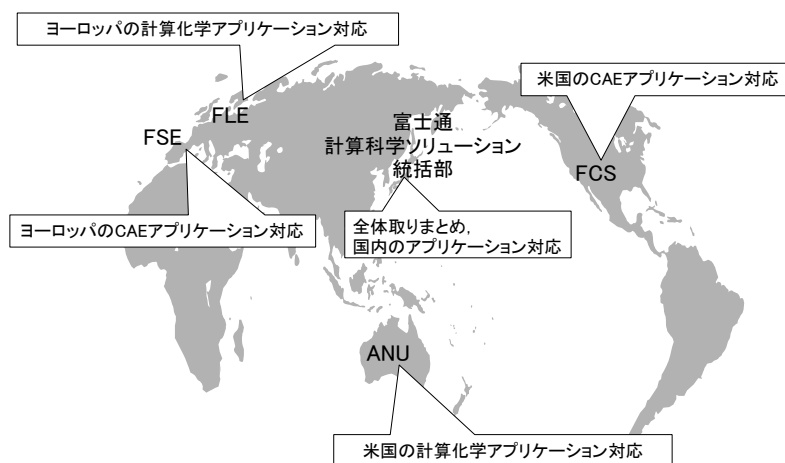


図-3 ISVアプリケーション対応拠点
Fig.3-Site for ISV application support.

支援拠点を置き、グローバルな支援体制を構築している。これにより、国内外のISVと密に連携して支援を行っている。具体的には以下の五つの拠点で支援を実施している（図-3）。

- ・国内（千葉）：富士通計算科学ソリューション統括部

HPC向けISVアプリケーション対応の全体取りまとめとSCRYU/Tetraなどの国内で開発されたISVアプリケーションの対応を行っている。

- ・米国（サンノゼ）：Fujitsu Computer Systems Corp. (FCS)

LS-DYNA, FLUENT, Nastranなど米国で開発されたCAEアプリケーションを中心に対応を行っている。

- ・フランス（ツールズ）：Fujitsu Systems Europe Ltd. (FSE)

PAM-CRASH, RADIOSS, STAR-CDなどヨーロッパで開発されたCAEアプリケーションを中心に対応を行っている。

- ・イギリス（ロンドン）：Fujitsu Laboratories of Europe Ltd. (FLE)

ヨーロッパで開発された計算化学アプリケーションに詳しく、Molpro, Molcasなどの計算化学アプリケーションの対応を行っている。また、イギリスの数学ライブラリNAGの対応も行っている。

- ・オーストラリア（キャンベラ）：The Australian National University (ANU)

計算化学に関する高い技術を保持しており、米国で開発されたAMBER, GAMESS-US, Gaussianな

どの計算化学アプリケーションの対応を行っている。また、近年大学のお客様を中心に計算化学アプリケーションの使用方法に関するセミナー開催の要望が高まっており、富士通ではANUの研究者と連携してセミナーを開催している。

む す び

本稿では、富士通のHPCプラットフォームおよびHPC向けISVアプリケーションの性能特性、HPC向けISVアプリケーションに関する富士通の支援内容、支援体制について紹介した。

お客様のHPC向けISVアプリケーションの利用に関する支援を行うために、富士通ではグローバルな体制を取り、富士通HPCプラットフォーム向けのISVアプリケーションの取りそろえの充実、高速化やトラブル解決支援を行っている。

今後は、ISVアプリケーションに関するお客様の多様なニーズに対応するために、新しいソリューション、サービスを開発・提供し、お客様の研究開発業務の円滑な推進に貢献していく所存である。

参 考 文 献

- (1) 井口祐次：Linux搭載PCクラスタによるHPCへの取組み。FUJITSU, Vol.56, No.3, p.264-269 (2005).
- (2) (社)日本経済団体連合会：産業競争力の強化に向けたバイオ・ナノシミュレーション技術の活用について。

<http://www.keidanren.or.jp/japanese/policy/2003/011.html>