



TotalView Case Study

ローレンス・リバモア国立研究所の開発者を支援 - IBM の Blue Gene スーパーコンピュータ上で アプリケーションのスケールリングを実行 -

ローレンス・リバモア国立研究所 (LLNL) は、応用科学研究所のトップで、DOE (エネルギー省) 内の NNSA (国家核安全保障庁) の一部です。発足当時より LLNL は、カリフォルニア大学によりアメリカ政府対応で管理されてきました。LLNL の任務は、核安全保障、国際および国内の安全保障、エネルギーおよび環境の安全保障という 3 つの分野で応用科学技術を通して国家の安全と安心を保証することです。

課題

LLNL の研究者は、世界最速のスーパーコンピュータである IBM の Blue Gene/L を使ってミッションクリティカルな「グランド・チャレンジ」アプリケーションを開発しています。IBM Blue Gene/L 用に使われたアプリケーションは、数千にもおよぶプロセッサを使い、ギガバイトのメモリを消費する、極めて複雑なものになります。そのような先進スーパーコンピュータ用に効率よくコードを開発することは、開発者にとって大きなチャレンジです。

背景

国家安全保障研究所である LLNL は、最先端の科学技術を駆使し、国の核兵器が安全、安心であるように研究を行っています。研究所は他にも特別な機能を持ち、核拡散やテロのような脅威に対抗、国土安全保障を強化、軍事力の向上といった、緊急の国家・国際安全保障ニーズに対応します。

LLNL が国家安全保障上で担う重要な役割を考えれば、研究所が世界最速のスーパーコンピュータである IBM Blue Gene シリーズをその基幹アプリケーションの開発に使用しているのは当然です。

LLNL に導入された Blue Gene/L は、ASCI (Accelerated Strategic Computing Initiative : 加速的戦略的コンピューティング・イニシアティブ) /LLNL 専用機能リソースで、大規模で高度に平行なジョブ (計算ノード数は 512 ~ 65,000) に使用されます。システムには、121,072 台の CPU (ノード当たり CPU 2 台) が搭載され、理論的な最高システム性能は、367 テラフロッップ / 秒になります。

LLNL にある Blue Gene/L は、「核管理計画」が直面している材料経年劣化問題に対応するために分子動力学アプリケーションを極めて高速で実行できるように最適化されています。Blue Gene/L はまた、設置面積と電力消費を最小限に抑えながら超高速を実現するために SoC 技術の可能性を追求するのにも使用されます。

アプリケーション開発上の課題

Blue Gene/L 上で開発されるアプリケーションは、「単純な」スケーラブル線形方程式解法ルーチンから、多言語のネットワーク通信パターンを使用する流体力学およびシミュレーションの大規模コードに至るまで多種多様です。

LLNL にいる開発者の一人はアプリケーションについて次のように述べています。「コード規模が大きく、移植性が高い流体力学コードです。C、C++、Fortran および Fortran 90 をミックスしたものです。最適化時 Blue Gene/L 上で 37MB の実行ファイルにコンパイルされます。各種のネットワーク通信パターンを含み、それは時間とともに変化します。多くのサードパーティのライブラリを内蔵しているので、たくさんのコーディングスタイルと各種の言語機能に対応しなければなりません。すぐに Blue Gene/L マシンの 12,800 台のプロセッサ上すべてで実行可能でなければなりません。」

この開発者にとって最大の課題は、たくさんのプロセッサにスケールリングされた時クラッシュしないようにコードをデバッグすることです。「いつでも 2048 台のプロセッサにスケールバックできる訳ではありません」と彼は言います。「一方デバッグは、実際の使用スケールでかなり高速で動作する必要があります。」

主に代数マルチグリッドの C 言語で書かれたスケーラブルな線形方程式解法ルーチンを開発しているプログラマーもいます。ルーチンは、大きなアプリケーションでの使用を前提とした短いプログラムから成っています。目標は、たくさんのプロセッサにまたがるスケーラビリティですが、これには、アルゴリズムが多くのプロセッサ間での大量の通信を必要とするので難しい課題です。

ソリューション

LLNL の開発者は、業界最先端のマルチスレッドデバッグツールである TotalView を使って、IBM Blue Gene/L 上でミッションクリティカルなアプリケーションの開発・デバッグを行いました。TotalView は、MPI や OpenMP のようなパラレルプログラミングモデルを理解する多くの先進機能を提供することにより、増大する複雑なパラレルアプリケーションを処理するよう設計されました。複雑なアプリケーションを作成する LLNL 開発者は TotalView を使うことにより、簡単に、しかも手早く行うことができました。

「すべてのジョブをパラレル表示し、たくさんのプロセッサで同時に何が起きているかが分かって助かりました。また、条件付きブレークを設定できるのも良かった点です。」

「一番すばらしい点は、メモリ書き込みを特定の位置にトラップオンできることです。他のデバッグツールにはない機能で、やっかいなバグ取りの時間節約になります。」



USA 1 (800) 487-3217
FRANCE +33 01 46 93 94 20
GERMANY +49 6103 59340
UK +44 8450 549950
JAPAN +81 3 5211 7760
www.roguewave.com

Copyright © 1970-2015, Rogue Wave Software, Inc. All Rights Reserved. The Rogue Wave Software name and logo and TotalView are registered trademarks of Rogue Wave Software, Inc. or its subsidiaries in the US and other countries. All other company, product or brand names are the property of their respective owners.

LLNL において Blue Gene/L 上で開発されているアプリケーションとしては、C で書かれたマルチフィジックスの大規模コードがありますが、それは、各種プラットフォームで実行され、最大 12,000 台のプロセッサにスケーリングするのに使用されます。

TotalView の貢献

LLNL の開発者は、ローグウェーブソフトウェア社の TotalView を使い、Blue Gene/L 上でのアプリケーション開発の複雑さを理解し、対応しています。TotalView は、この種のデバッグツールの中でも最も実績がある、拡張性のあるデバッグツールで、1 台のプロセッサから数千台にもおよぶプロセッサに対応可能です。TotalView の先進デバッグ機能としては、スレッドの独立制御、マルチプラットフォームサポート、レジスタ / 命令レベルのデバッグ、内蔵メモリデバッガがありますが、これらの機能は分野によっては開発時間を 20 パーセント以上短縮できたことが証明されています。

スケーラブルな線形方程式解法ルーチンを開発する LLNL プログラマにとって、TotalView を使用するのには大きなメリットがありました。彼は言いました。「開発プロセスの一部としてバグを発見する上で TotalView は大変役に立ちました。すべてのジョブをパラレル表示し、たくさんのプロセッサで同時に何が起きているかが分かって助かりました。また、条件付きブレークを設定できるのも良かった点です。」

流体力学大規模コードを開発している開発者は、TotalView のブレークポイント管理機能を賞賛します。また、使いやすいながらも数千におよぶプロセッサやプロセスに透過にスケーリングできる能力に感心します。「プロセッサをまとまりとしてだけでなく個々のプロセスにもステップスルーできるので、助かります。またジョブ終了時ブレークポイントが保存されるのも助かります。TotalView は、C++ メソッドコールを理解している事も評価している点です」と彼はコメントしています。

もう一人の LLNL 開発者によると、「通常は 64 ~ 128 台のプロセッサのデバッグですが、プロセッサが 4,096 台になったときも TotalView は使いやすく、コードのスケーリングアップに使用できました。一番すばらしい点は、メモリ書き込みを特定の位置にトラップオンできることです。他のデバッグツールにはない機能で、やっかいなバグ取りの時間節約になります。」

ローグウェーブソフトウェアについて

ローグウェーブソフトウェアは、次世代 HPC アプリケーション開発のためのクロスプラットフォーム開発ツールと組み込みコンポーネントを提供する世界最大の独立系プロバイダーです。マルチコア、クラスタ、グリッド、GPGPU、スーパーコンピュータなどの HPC 環境における開発をサポートし、大規模並列アプリケーション開発に最適なツールとコンポーネントを提供しています。高性能アプリケーション開発におけるプロトタイプの実装、開発、デバッグ、最適化にかかる工数を削減し、生産性を向上させることができます。当社の製品は、大規模で複雑なアプリケーション開発を行う世界各国の大手企業、教育機関、官公庁、研究所で採用されています。詳細は、<http://www.roguewave.jp/> をご覧ください。

この文書は、Rogue Wave Software, Inc. によって作成され、ローグウェーブソフトウェア ジャパン株式会社が和訳/ローカライズして作成したものです。英語原文と日本語訳との間で相違がある場合には英語原文が優先されます。英語原文でお読みにになりたい方は、Rogue Wave Software, Inc. のホームページ <http://www.roguewave.com/> からダウンロードできます。