並列計算入門

降旗 大介

大阪大学サイバーメディアセンター

2014.11.11

はじめに

この講習の対象者

- 普段は Windows, Mac を使っていて，Unix についてはあまり…
- 研究対象についてはよく知っている.
- 普通にプログラミングは出来る.
- 計算対象がやや大規模になりそうだ.
- 少しでも計算が速いと有難い.
- 並列計算に興味はあるが，まず全体像がよくわからない．どのような技術があるのか？難しいのか簡単なのか？ 高価につくのか？

0437-J

構成

Part I

Unix 入門

- GUI と CUI: Unix, Windows, Mac OS の同じところと違うところ
- ごく簡単な入門

Part II

並列計算入門

- 原理的に並列計算でどれくらい高速化が可能か
- そもそも高速化の手法には何があるのか
- 各種並列計算の紹介

0437-J

詳しく知りたくなったら？

ぜひ，それぞれのソフトウェアの講習会 (下記: 2014 年度後期) へ！

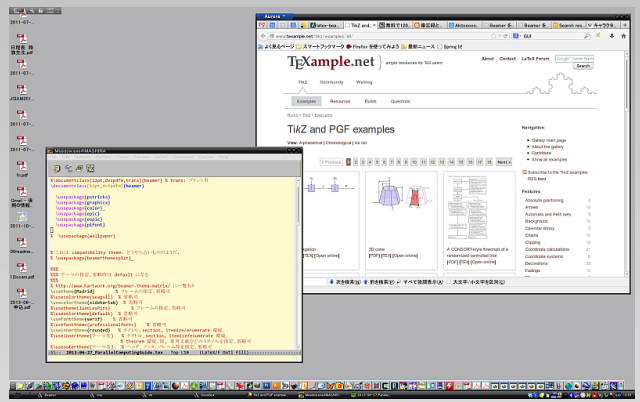
11 月 11 日　並列計算入門 (本日)
12 月〜2 月　スーパーコンピュータ概要とスーパーコンピュータ利用入門
12 月〜2 月　スーパーコンピュータと並列コンピュータの高速化技法の基礎
12 月〜2 月　MPI プログラミング入門
12 月〜2 月　HPF プログラミング入門

0437-J

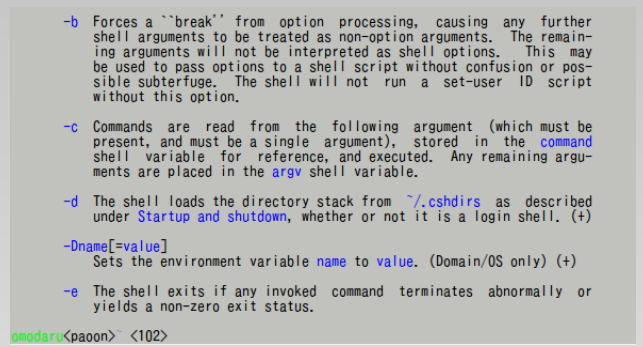
Part I: UNIX 入門

コマンドで操作する CUI とは

GUI と CUI, OS の関係



GUI



CUI

- 今の OS (Windows, MacOS X, Unix) の GUI (Graphical User Interface) の見かけはあまり変わらない.
- CUI (Character User Interface)/ CLI (Command Line Interface) の充実度は OS によって異なる.
- Unix は CUI/CLI が非常に充実，かつ，**Unix の強みはそこに.**
- **Unix がよくわからない = CUI/CLI がよくわからない.**

GUI と CUI

GUI

- 俯瞰的．同時並行表示．情報量多し．
- 直感的に使える．
- 環境・状況依存性高し．
- 自動化しにくい．
- ソフトウェア間の連携しにくい．

CUI

- 局所的．表示情報は原則 1 度に 1 つ．情報はミニマム．
- 理論的な操作．
- 環境・状況依存性低し．
- 自動化しやすい．
- ソフトウェア間の連携しやすい．

CUI を理解するコツ I

GUI は「地図」で，**CUI は 「写真」 である！**

GUI = 地図

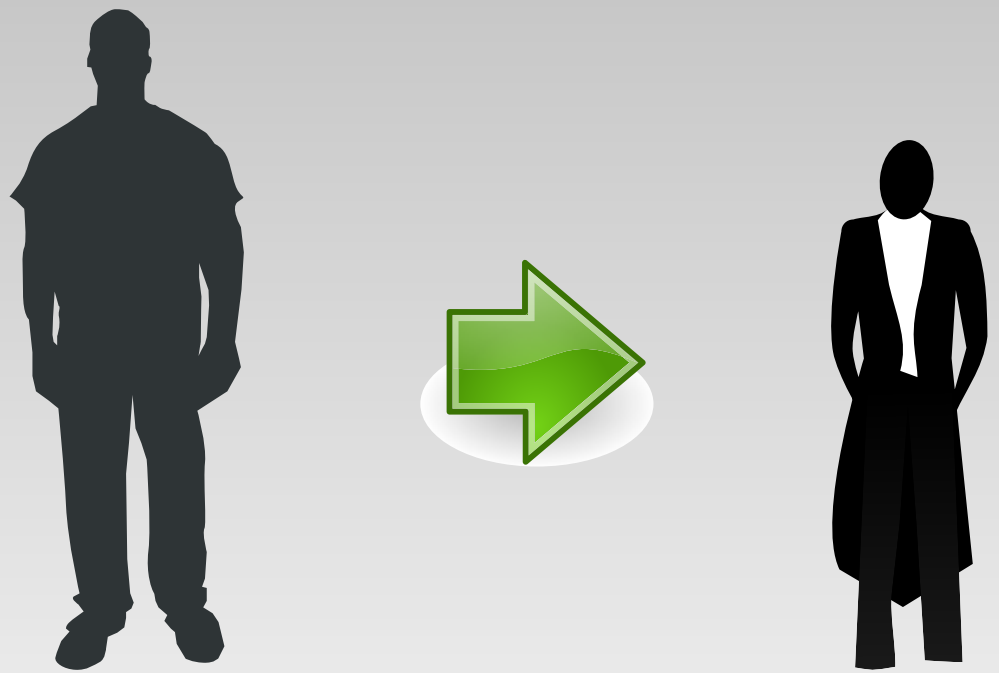
CUI = 写真

CUI では「今何処にいるか」が重要.
見たいもの (ファイル等) があったらそこまで移動しないといけない.

0438-J

CUI を理解するコツ II

CUI の操作 = 執事 (shell) への命令 である.



CUI 操作 = シェルとよばれるソフトウェアへの命令.
付き合いにくいシェルもいるので，好みで変えよう!

CUI を理解するコツ III

CUI は遠隔操作でよく使われる

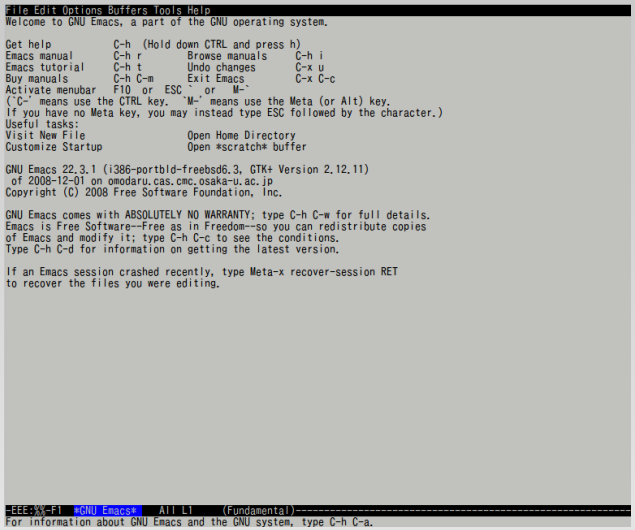
手元の端末　　ネットワーク　　Unix サーバ

遠隔操作はネットワークに負荷がかかるので，普通は CUI で．
通常は ssh というプロトコルが使われる．

0438-J

CUI を理解するコツ IV

CUI で使われるエディタは事実上 Emacs か vi に限られている



Emacs

vi

普通は (まだ) とっつきやすい emacs がお勧め.
管理人は vi が使えないと困るよ.

0438-J

Unix コマンド入門
これだけ知っていれば戦える

Unix コマンド: ディレクトリ操作

- `pwd`　今何処のディレクトリに居るかを表示.
- `cd ..`　上階層ディレクトリへ移動.
- `cd hoge`　hoge ディレクトリへ移動.
- `mkdir hoge`　ここに hoge ディレクトリを作る.
- `rmdir hoge`　ここの hoge ディレクトリを削除.
- `mv hoge poko`　ここの hoge ディレクトリを poko ディレクトリに移動 or 名前変更.

  - poko ディレクトリが既に有るならその中へ移動,
  - 無いならその名前に変更.

0438-J

Unix コマンド: ファイル操作

- `ls`　今のディレクトリに有るファイルのリスト表示.
- `touch hoge`　hoge というファイルを作る.
- `rm hoge`　hoge というファイルを削除.
- `mv hoge poko`　hoge というファイルを poko ディレクトリに移動 or 名前変更.

  - poko ディレクトリが既に有るならその中へ移動,
  - 無いならその名前に変更.

0438-J

Unix コマンド: ファイル中身 操作

- `less hoge`　hoge というファイルの中身を表示.
  ほぼ同様の動作をするコマンド： `more`, `cat`

- `grep kore *`　このディレクトリで kore という文字列を含むファイルを表示.

0438-J

Unix エディタ (ファイル編集)： Emacs

- `emacs hoge`　hoge というファイルを読み込んで起動.

  (以下，emacs 中で.
  C- は Ctrl キー同時押し，M- は Esc キーを押してから．)

- `C-x C-s`　保存.
- `C-x C-c`　**終了**.
- `C-g`　emacs がしていることを止める．困ったらこれ.
- `C-s hoge`　hoge という文字列を探す.
- `C-`スペースキー　選択開始.
- `M-w`　コピー.
- `C-w`　カット (削除).
- `C-y`　ペースト (貼付け).

Unix エディタ (ファイル編集)： vi

- `vi hoge`　hoge というファイルを読み込んで起動.

  (以下，vi 中.
  文字挿入モードと，コマンドモードを切り替えて使う．)

- `i`　文字挿入モードへ切替え.
- `Esc` キー　コマンドモードへ切替え.

  (以下，コマンドモードで．)

- `h,j,k,l`　左，下，上，右へ移動.
- `:wq`　**保存して終了.**
- `:q!`　保存せず終了.
- `x`，`dd`　1 文字, 1 行カット (削除).
- `yy`　1 行コピー.
- `p`　ペースト (貼付け).

Unix 入門のまとめ

- **Unix がわからない = CUI に慣れてない**というだけのことが多い.
- CUI を理解するにはいくつかコツが有る.
  - CUI はその性質が「写真」 によく似ている.
  - CUI の操作 = 執事 (shell) への命令.
  - CUI は遠隔操作でよく使われる.
  - CUI で使われるエディタは事実上 Emacs か vi に限られている.
- コマンドは沢山あるが，今回紹介したものがわかれば充分戦える.
- 薄いものでいいので Unix の本を買って持っておこう.

0438-J

Part II: 並列計算入門

この Part の構成

話すこと

- スーパーコンピュータの歴史
- 高速化の仕組み，手法
- 原理的に，並列計算でどれくらい速くなるのか？
- どんなハードウェアとソフトウェアの組み合わせが？

話さないこと

- 各種ソフトウェアのプログラミングの詳細
  → **それぞれの講習会へ GO！**
- 並列計算のチューニング等

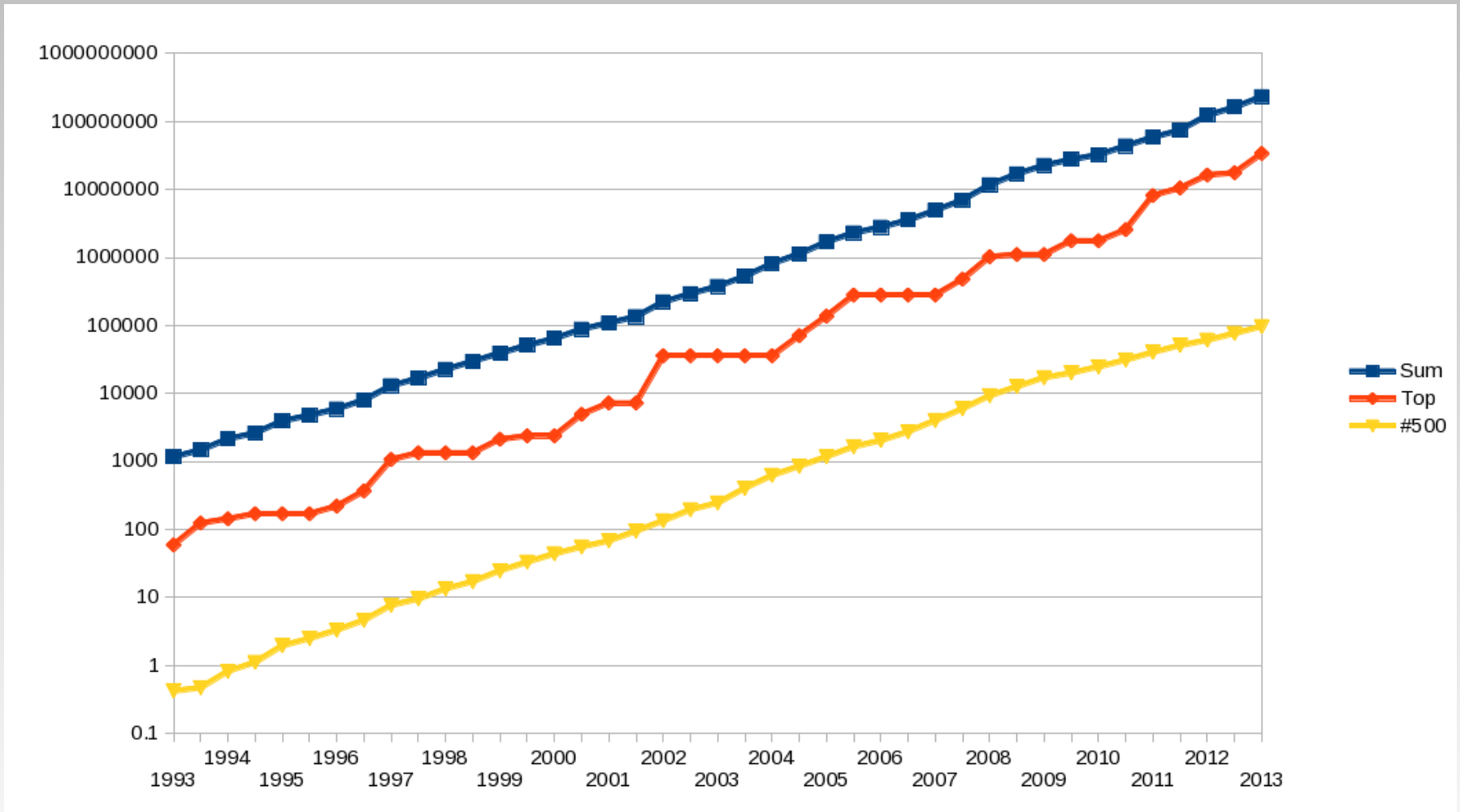
0434-J

スーパーコンピュータについて

スーパーコンピュータとは

- 科学技術計算を主目的とする大規模コンピュータのこと.
- **大規模，超並列処理**
  - ベクトル演算 (SIMD): 1 クロックで数百の演算を同時実行
    - SX-9 (NEC) は 1 チップ 1 コアプロセッサで 100GFlops 以上 (2007 年当時世界最高速).
  - 数百万規模のプロセッサコア
    - 京 (Top500 1 位: 2011.06-12): コア数 705,024.
    - 天河 2 号 (中国, Top500 1 位: 2013.06-): コア数 3,120,000
- **巨大メモリ**
  - 京: 1.26 P バイト, PrimeHPC FX10(京の商用版) は spec 上 6Pbyte 積める
- **大電力** (… 困るが)
  - 京は 12,659KW, 天河 2 号は 17,808 KW．淀川水系にある 30 の水力発電所のうちでも 10,000 KW を越えるものはたった 3 つ.

スーパーコンピュータの歴史 I



スーパーコンピュータの性能の変遷

(creative commons -attribution, share alike 3.0 by A.I.Graphic)

スーパーコンピュータの歴史 II

- ILLIAC I, II, III (真空管 1952, トランジスタ 1962, SIMD 1966)
  スパコン黎明期．並列計算の概念，技術の基礎が登場.
- Cray-1 (商用スパコン，1976, 80-160MFLOPS).
  計 80 台以上が飛ぶように売れた.
- 地球シミュレータ (SX-5, 41 TFLOPS, 2002: SX-9, 131 TFLOPS, 2009)
  TOP500 1 位 2002.06-2004.06. 当時としては「化け物」. アメリカでは Japanese 'Computenik' 扱い.
- Blue Gene (2004)
  シンプルにコア数を増やす戦略．登場時で既に 32,768 コア, 2007 年には 212,992 コア.
- 京 (2011)
  10.62 PFLOPS の超並列機.
- 天河 2 号 (2013)
  intel CPU をとにかく数多く繋ぐ． 33.8 PFLOPS.

スーパーコンピュータの歴史 III

トップ性能のスーパーコンピュータに絡んでいる国は次の 3 つ.

- 中国： 速い商用 CPU を数多く使う戦略.
- アメリカ： CPU 数を多くというシンプルな戦略は同じ.
  Cray 社と IBM 社が強い.
  CPU を自国で開発できる強みあり.
- 日本： 今や世界で唯一のベクトル型スーパーコンピュータを作る国.
  NEC と富士通，日立が主なメーカー.
  CPU は自国開発ものと輸入物の混在.

0434-J

計算の高速化手法, 概要とハードウェア

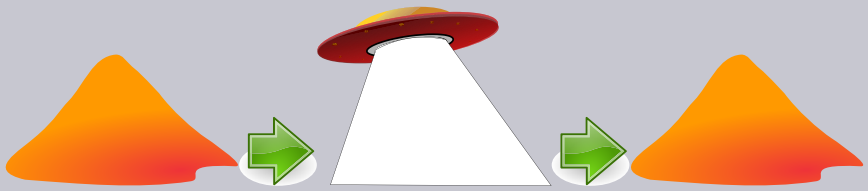
計算の高速化手法 I

そもそも計算とは

計算の高速化手法 II

アルゴリズムそのものの改善

(理想的) 「より速い」 or 「並列化により適している」アルゴリズムへ



例： $1+2+3+\cdots+100=5050$ に対して,

```
for i := 1 to 100 do result += i;
```

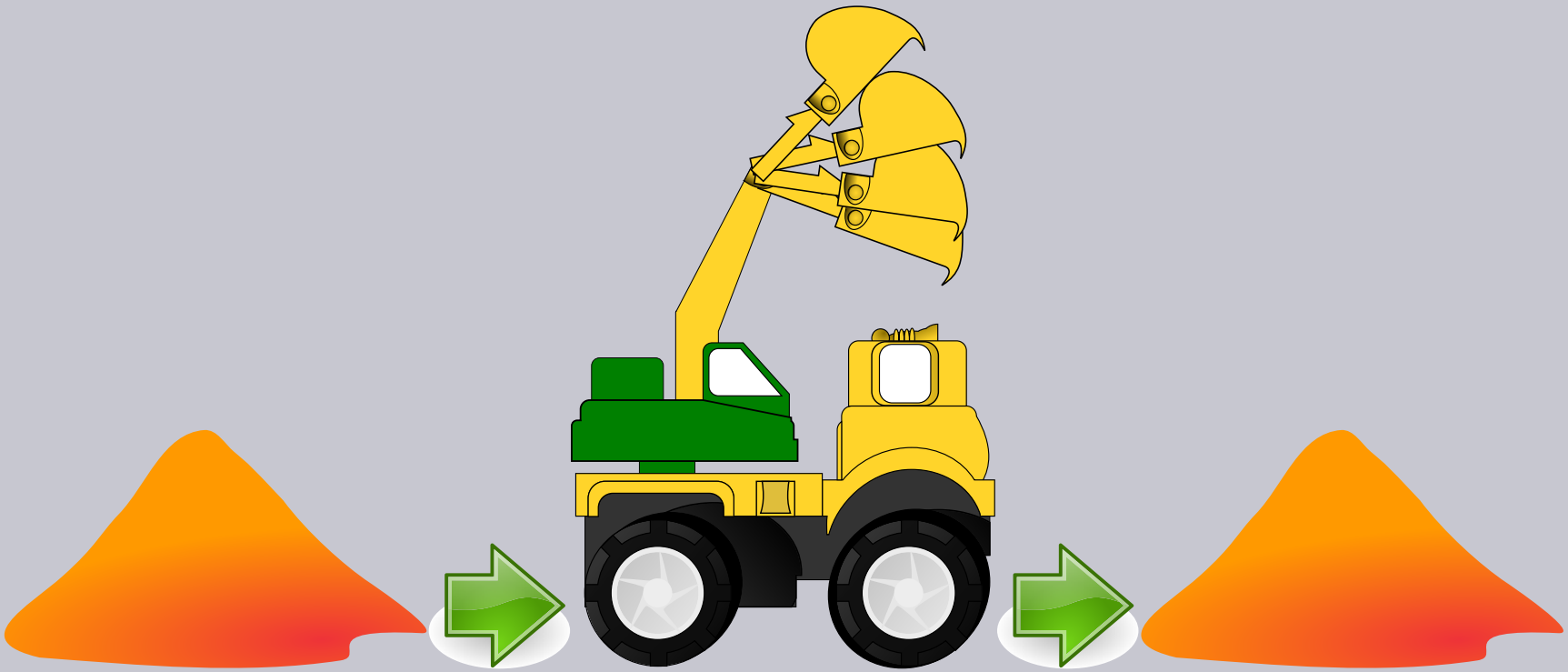
を改善して，次のように.

```
( 100 + 1 ) * 100 / 2
```

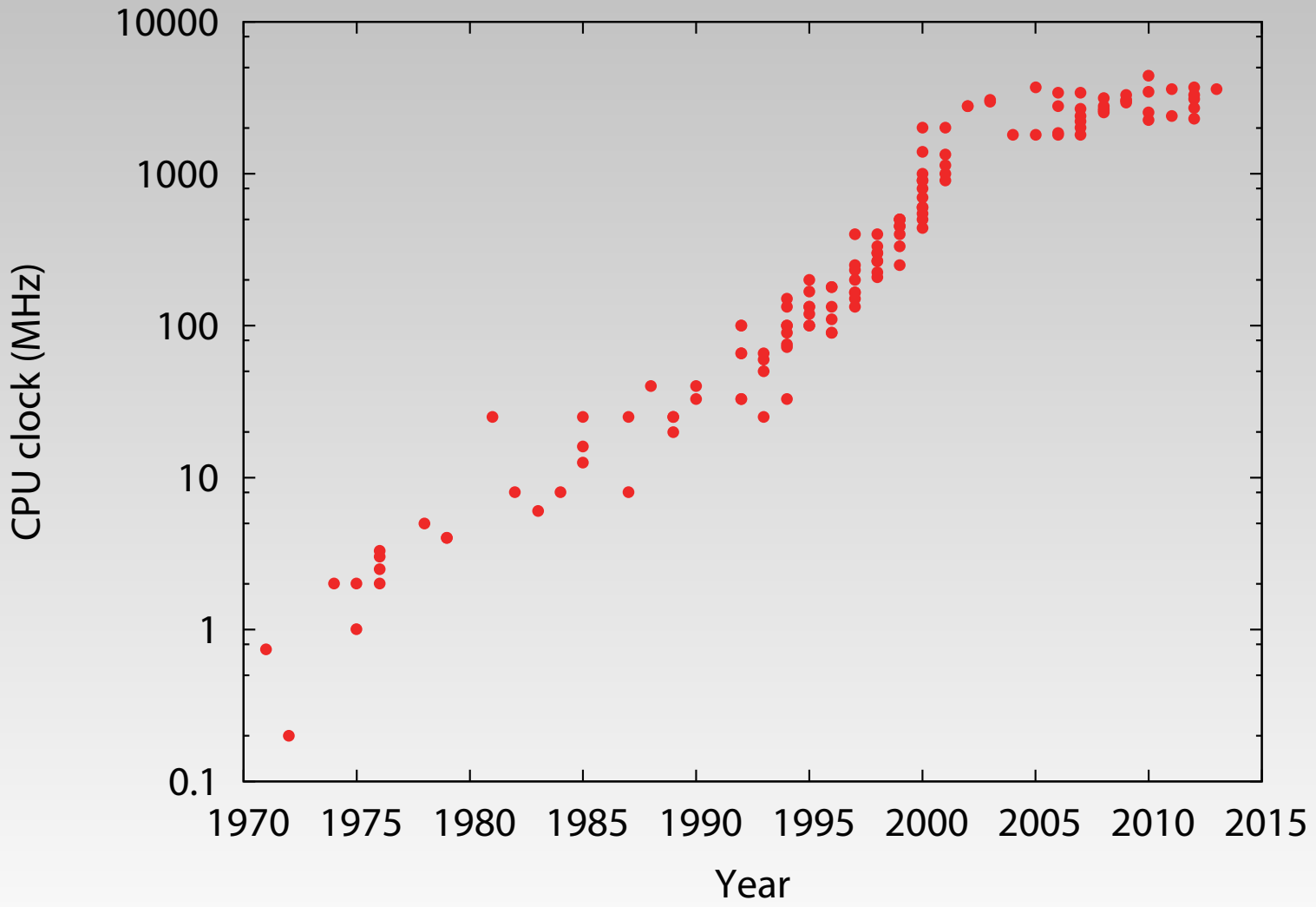
計算の高速化手法 III-1

速く回せ！

CPU, メモリ， HDD などのスピードを単純に上げる.



計算の高速化手法 III-2

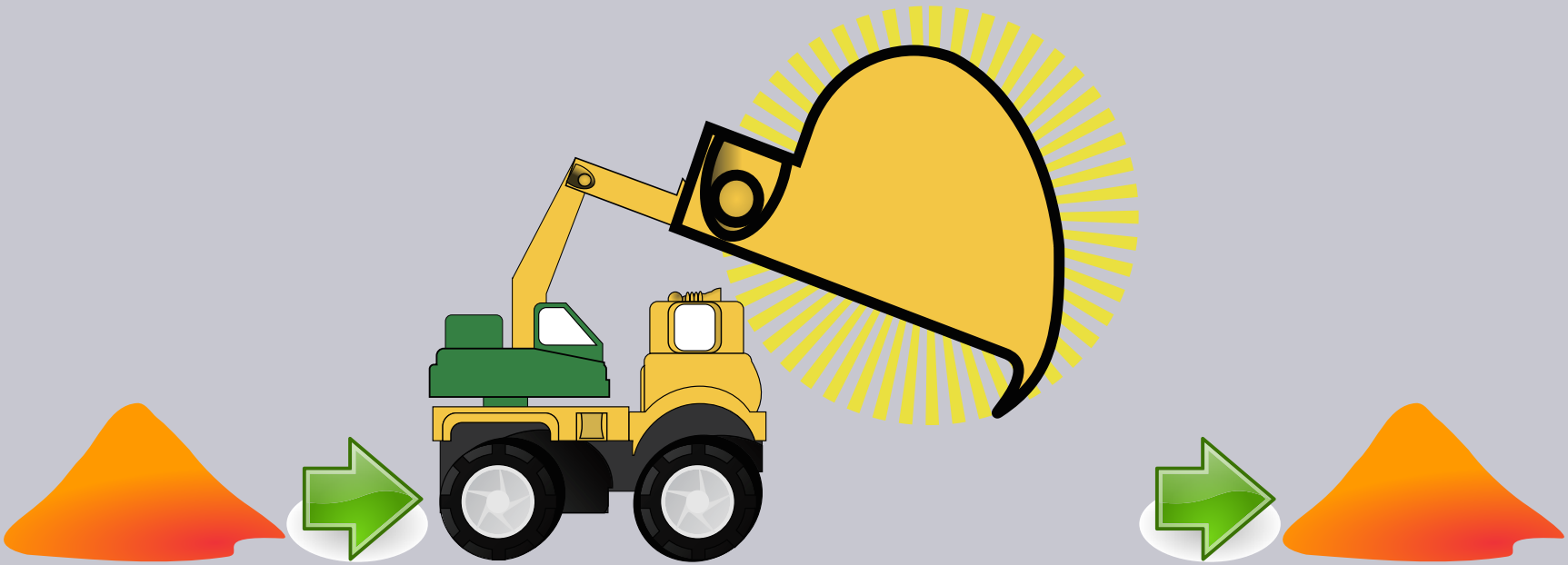


単純なスピードアップはそろそろ限界？

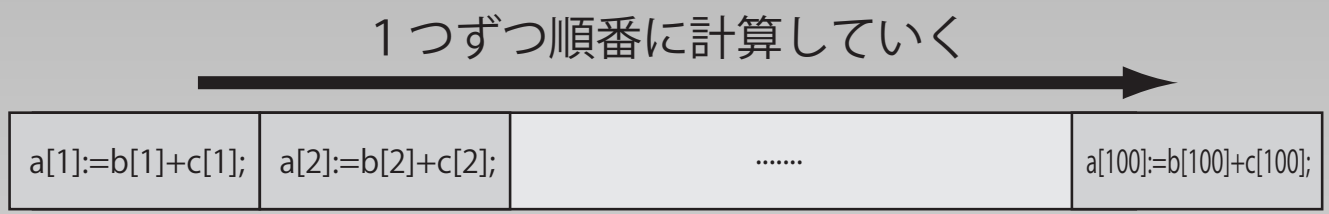
一度に沢山行え！

似たような処理をまとめて一度に行う.

- ベクトル計算
- SIMD (Single Instruction Multiple Data)

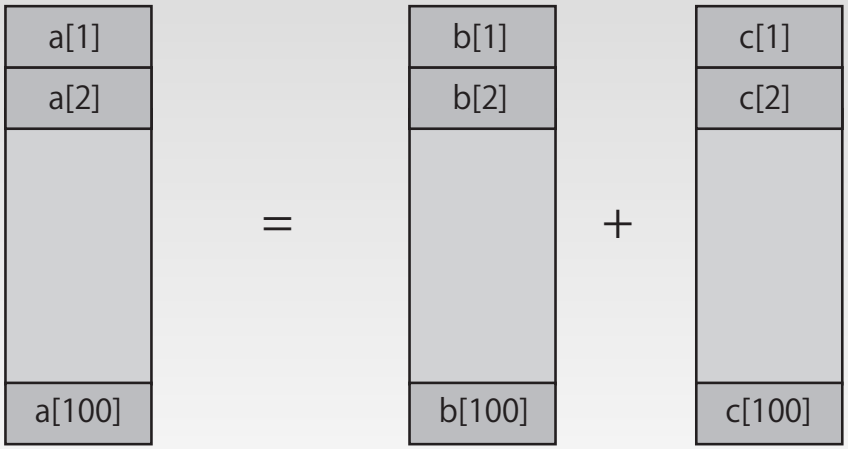


計算の高速化手法 IV-2



スカラー計算

一度に全部計算できる

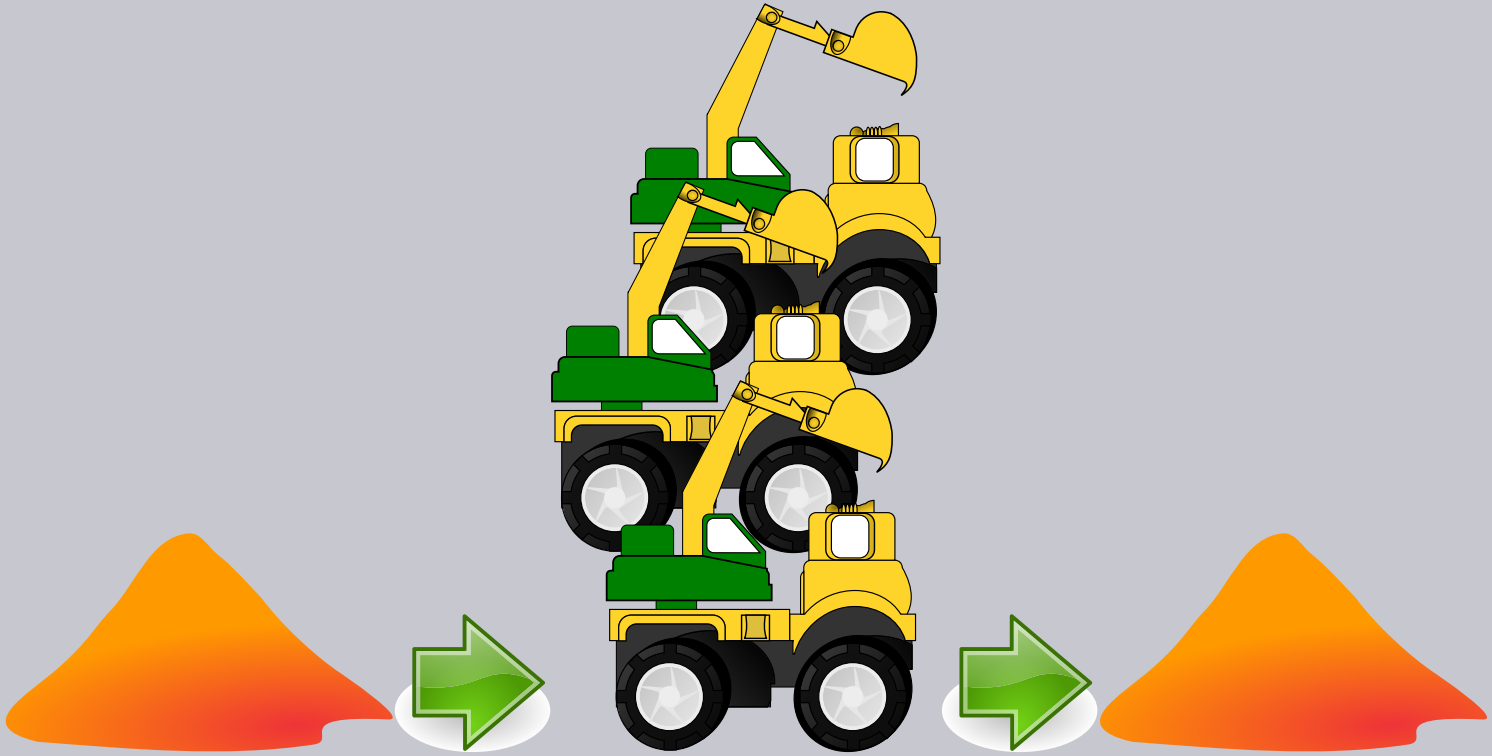


ベクトル計算

計算の高速化手法 V-1

皆でやれ！ メモリ共有型

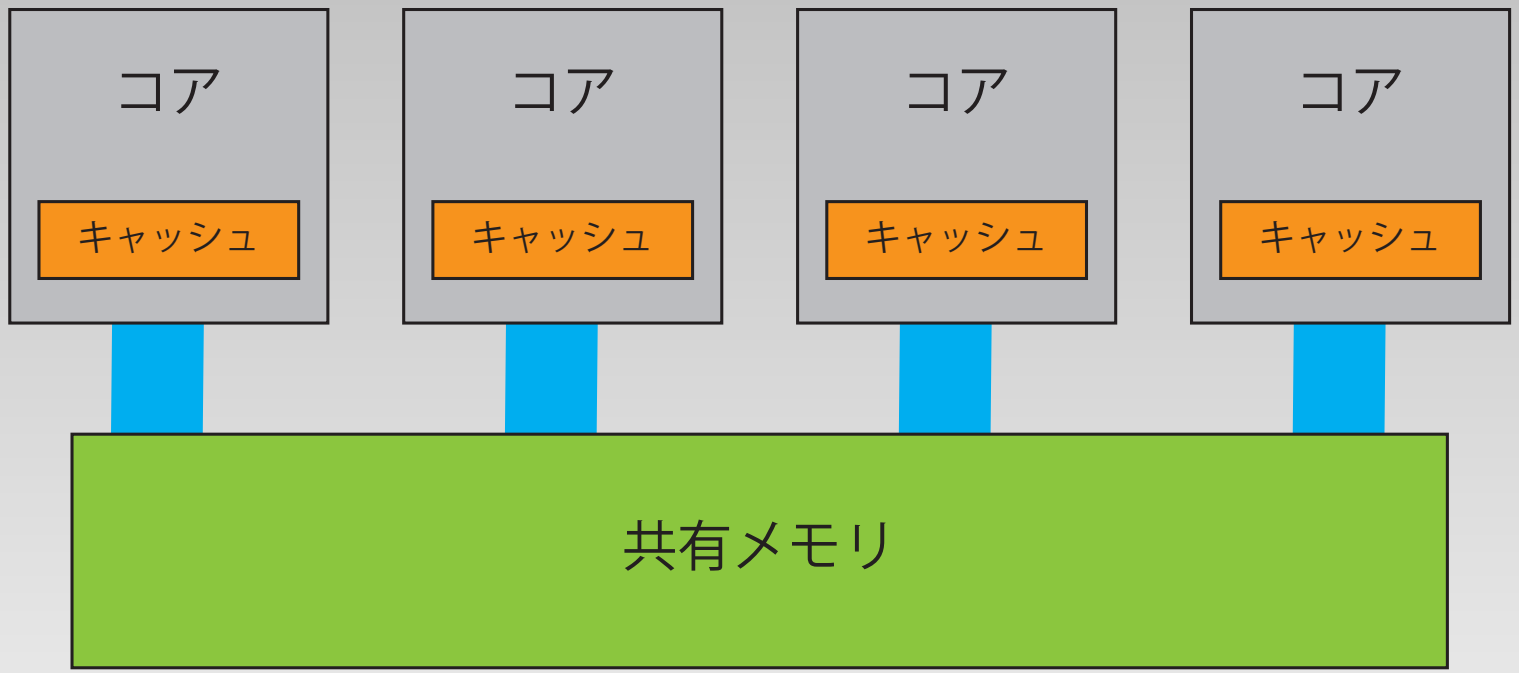
メモリ (データ) を共有した状態で，処理を並列化.



Input **Parallel** Operation Output

実装しやすいが，メモリアクセス競合が起きやすく，高速化しにくい.

計算の高速化手法 V-2



メモリ共有型計算機の概念図

0434-J

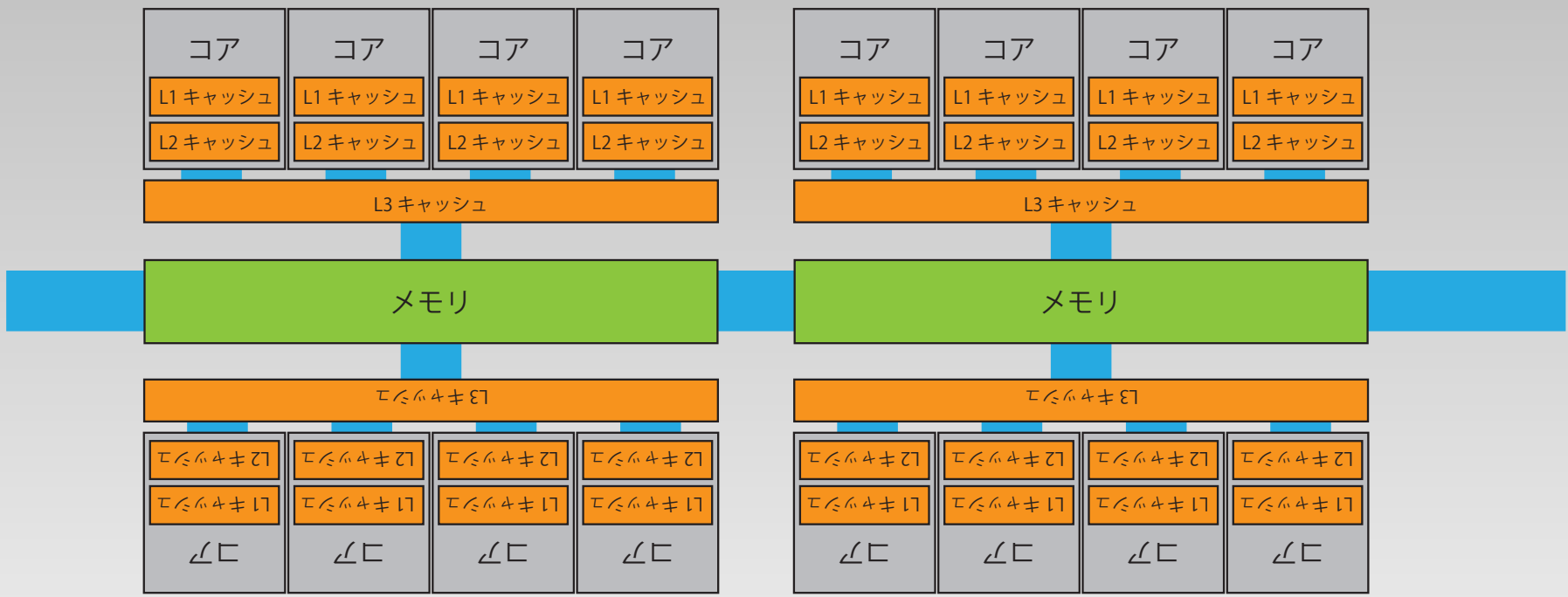
計算の高速化手法 VI-1

皆でやれ！ メモリ分散型

メモリ (データ) を分散して，処理を並列化.

メモリアクセス競合が起きにくく，うまくいけば高速化しやすい.

計算の高速化手法 VI-2



メモリ分散型計算機の概念図

0434-J

計算の高速化手法 VII

(ついでに) 平行化

プログラムを,「どういう順序で実行しても良いように分割する」ことを平行化などと言う.

- これができれば，並列化にとても役に立つ.
- 難しい.

0434-J

計算の高速化手法 VIII

現状は

- 「単純に速く」というのは段々困難に.
- ベクトル型スーパーコンピュータは今や NEC の SX シリーズぐらいか.
  PC のチップや，GPU 計算は SIMD をサポート.
- 多くのスーパーコンピュータは超並列 (つなぎ方がすごい！).
  メモリは，多段分散型，つまり，分散しているが近くとは共有のキャッシュがあるような多段構造が多い.

0434-J

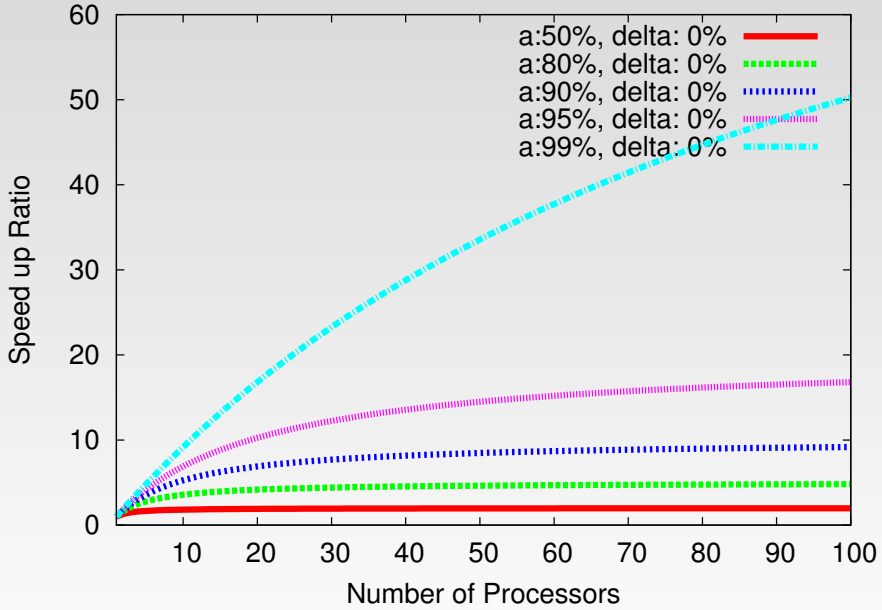
並列計算の効率**限界**

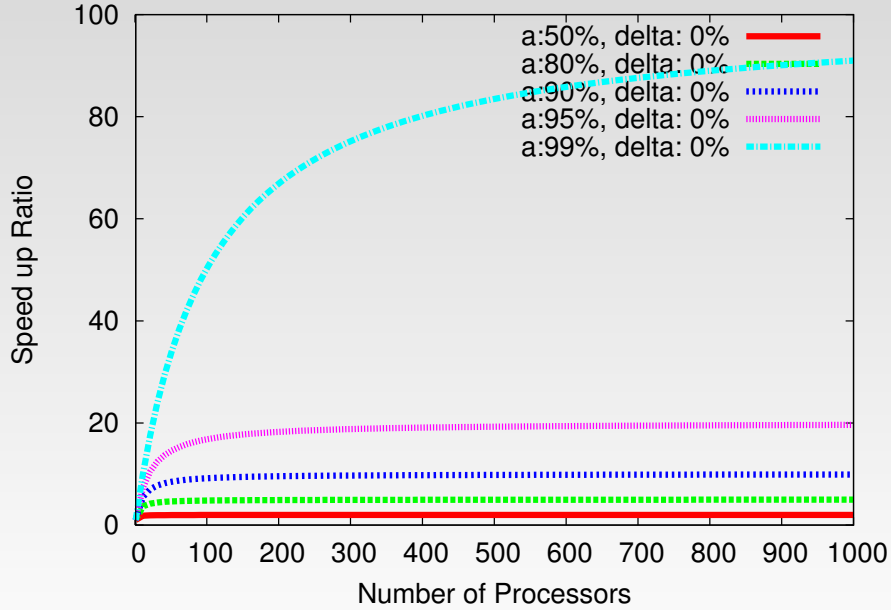
並列計算でどれくらい速くなるのか: アムダール則 I

プログラム中，割合 a の部分を n 個のプロセッサで並列化し，残り $1-a$ の部分を並列化しない場合，全体は

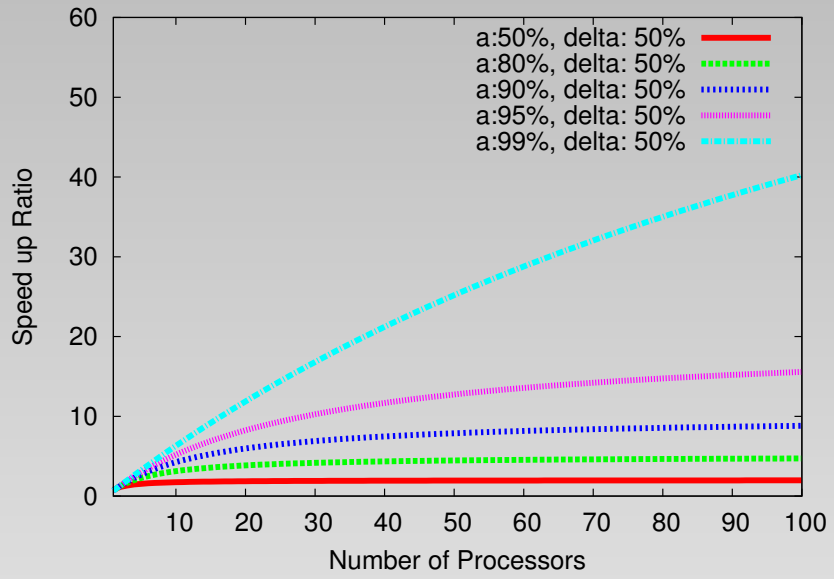
$$\frac{1}{(1+\delta)\frac{a}{n}+(1-a)} \text{ 倍}$$

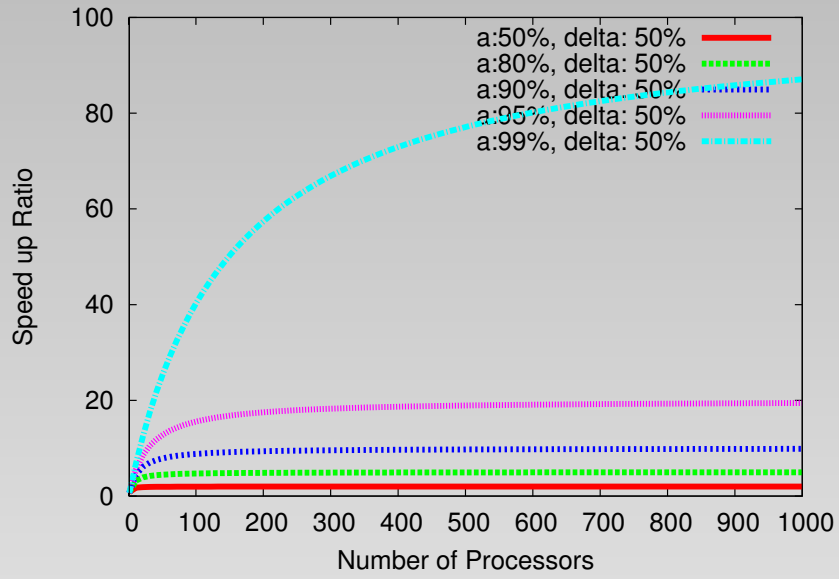
に高速化される．δ は並列化に伴って発生する通信等による遅延率.

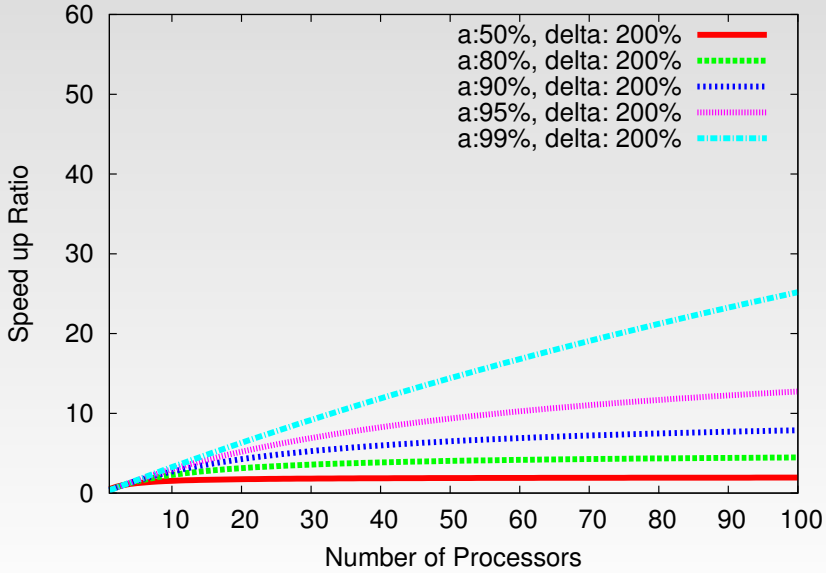


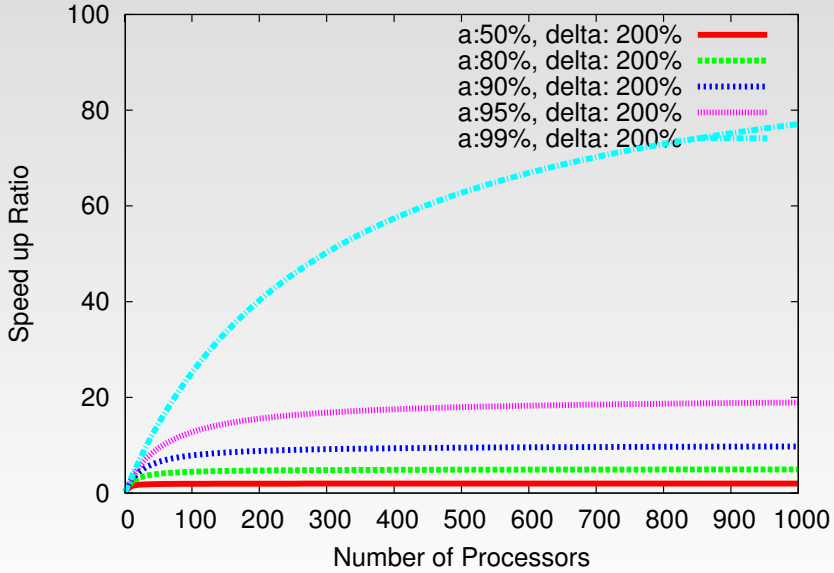


並列計算でどれくらい速くなるのか II









並列計算でどれくらい速くなるのか III

結局…

- 並列化できない箇所が**「信じられないぐらい足を引っ張る」**.
- 並列化に伴う通信等で遅延があると，全体をじわじわと遅くする.
- ただ並列化するだけでは効率は悪いかも…

0434-J

どのようなソフトウェアを使うべきか

ハードウェアとソフトウェアの組み合わせ

ハードウェア的な結合度の緩い方から並べると…

結合方法	メモリ	ソフトウェア等
マシン間並列	分散	MPI (Message Passing Interface)
CPU 間並列	共有	OpenMP (Multi Processing)
CPU 内並列	共有	OpenMP, 他沢山
SIMD	共有	各種ライブラリ, CUDA 等

一般的に，下のほうがプログラミングは容易.
ハードウェアは上のほうがスケールしやすい.

並列計算ソフトウェア I

小規模もしくは，使いやすい方から紹介する．

ベクトル化，SIMD

- ハードウェア，ソフトウェア，ライブラリの「準備」をしさえすれば…
- プログラミング的な意味での特殊なテクニックはほぼ不要．
  「ここはベクトル化する, しない」という強制的なディレクティブ (必須ではない) を入れたりするぐらい．
- アムダールの法則があるので，
  ベクトル化率を高めるための変更は必要かつ重要．

例えば，

```
for i:=1 to 10000 do a[i] := 2*i;
```

というコードはコンパイルするだけで 1 クロックで実行される．

0434-J

並列計算ソフトウェア II-1

CPU 内 / 間 並列化: メモリ共有

- プログラミングは比較的容易.
  「ここからここまで並列」というディレクティブをプログラムに書き入れるぐらいで済む.
- 移植性は高い.
- 解説書多し.
- やや高速化しにくい.
- ソフトウェアとしては
  - OpenMP
  - OS や言語の用意するライブラリ
    - Grand Central Dispatch (MacOS X 10.6, FreeBSD),
    - intel TBB など.

0434-J

並列計算ソフトウェア II-2

OpenMP

Fortran の例:

```
program hello
   ⋮
   !$omp parallel
   並列化したい計算部分
   !$omp end parallel
   ⋮
   end
```

上のように，並列化したいところをディレクティブで挟むのが基本.
並列度等はコンパイラや環境変数で指定.

並列計算ソフトウェア III-1

マシン間並列化: 分散メモリ

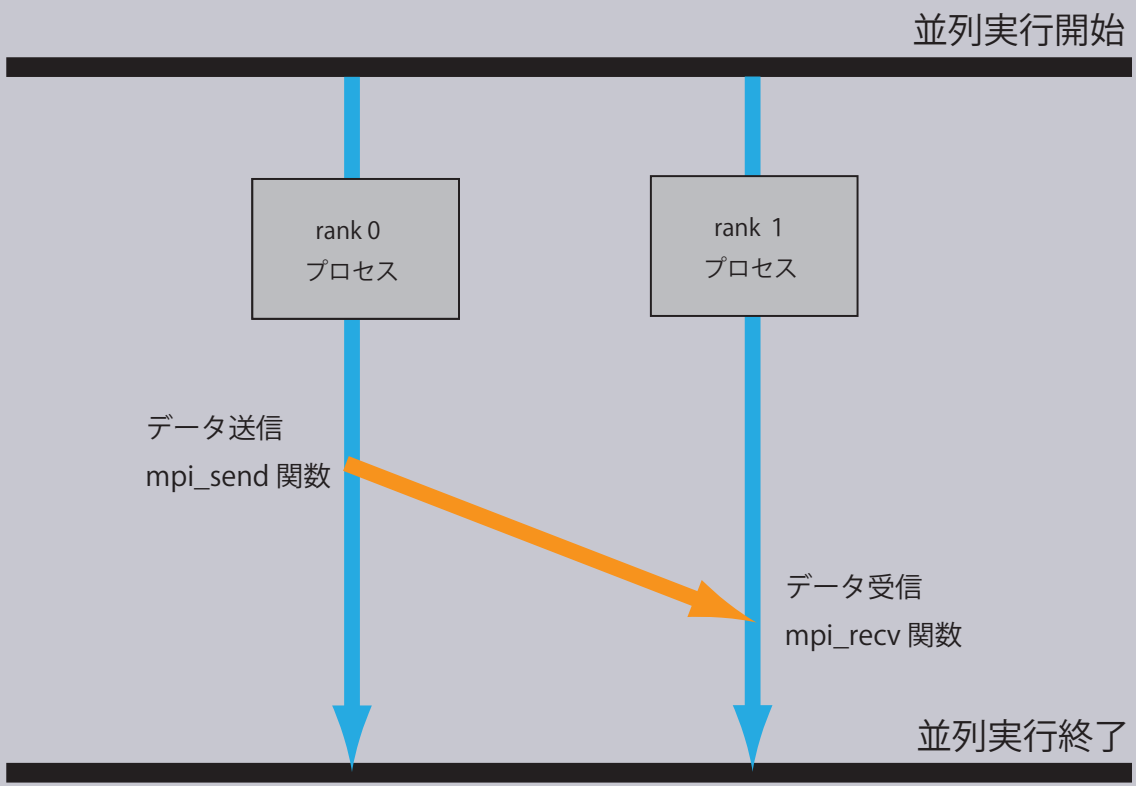
- 並列して動く各部分同士の情報のやりとりを 通信 (Message) という形で行う.
- プログラムの動作を並列化用に設計する必要あり.
- プログラムは面倒.
- ハードウェアへの依存性はやや高い. そのため, 移植性はやや低い.
- 解説書多し.
- スーパーコンピュータはほぼこれ (NEC 除く).
- ソフトウェアは MPI (Message Passing Interface) という共通規格に沿った言語, ライブラリを利用.

0434-J

並列計算ソフトウェア III-2

MPI

- データは分散しており，他プロセスのデータに触れない.
- データはお互いに「明示的に」通信する必要がある.



並列計算のまとめ

- ハードウェアによって並列化の方法が異なるので，ソフトウェアもそれに合わせて選択する.
- 他のソフトウェアに比較すると， MPI はプログラムを書く人が並列化を考えねばならず，やや敷居が高い.
- 阪大のスーパーコンピュータ (SX-9) はベクトル型なので，プログラムテクニック的には難しいことはない．ベクトル化率を高める為の工夫はまた別に必要だが.
- 実は普通の PC でも 4 コア持っていたりするので，4 倍ぐらいまでの並列化は容易にできたりする.
- ベクトル化，MPI についてはサイバーで講習会あり.
  興味のある方はぜひそちらへ.

0434-J

無料, web 等で手に入る資料 I

UNIX

- (F) “応用数理学 7”, 降旗 大介.
- (K)§1 “UNIX の復習”, 中村 匡秀.

並列化について

- (K)§3 “並列計算とは”, 山本 有作.

ベクトル化

- “ベクトル型計算機のためのベクトル計算”, 菊池 誠 (阪大 サイバーメディアセンター), スパコン 2011 配布資料.
- “パソコン & スーパーコンピュータで計算するためのベクトル & 並列入門”, 福田 優子 (阪大 レーザー研).

無料, web 等で手に入る資料 II

OpenMP

- (K)§4 “OpenMP を用いた並列計算”, 谷口 隆晴.
- (T) “科学技術計算のためのマルチコアプログラミング入門”, 中島 研吾.

MPI

- (K)§5 “MPI を用いた並列計算”, 山本 有作.
- (T) “MPI 基礎: 並列プログラミング初級入門”, 片桐 孝洋.

その他

- (O) “大規模計算機システムガイドブック”.
- (O) “パソコン＆スーパーコンピュータで計算するための基礎知識”, 福田 優子 (阪大 レーザー研).
- (O) “スーパーコンピュータ利用入門（講習会入門編資料）”.

無料, web 等で手に入る資料 III

F: (降旗) 応用数理学 7 授業用 web.
`http://www.cas.cmc.osaka-u.ac.jp/ paoon/Lectures/2012-7Semester-AppliedMath7/`

K: 神戸大学大学院システム情報学研究科・計算科学専攻の計算科学演習用 web.
`http://exp.cs.kobe-u.ac.jp/wiki/comp_practice/index.php?%B7%D7%BB%BB%B2%CA%B3%D8%B1%E9%BD%AC`

O: 大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム
`http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/index.html`

T: 東京大学情報基盤センタースーパーコンピューティング部門講習会資料
`http://www.cc.u-tokyo.ac.jp/support/kosyu/schedule_kosyu.html`

0434-J

Thank You!

0434-J