スパコンの概要と CMCのスパコンの紹介

大阪大学サイバーメディアセンター 講師
木戸　善之

2015/6/16

Cybermedia Center
Osaka University

目次

1. スパコンの略歴
2. 計算機の概要
3. 並列計算
4. CMCのスパコン

計算機ってなんだ？

- 計算機
  - 計算に用いる機械（デジタル大辞泉）
  - 計算のための機械、器具のこと。コンピュータや電卓を指すことが多い（Wikipedia）
  - 人が不得意な、正確な演算やルーチンワークを肩代わりするための道具

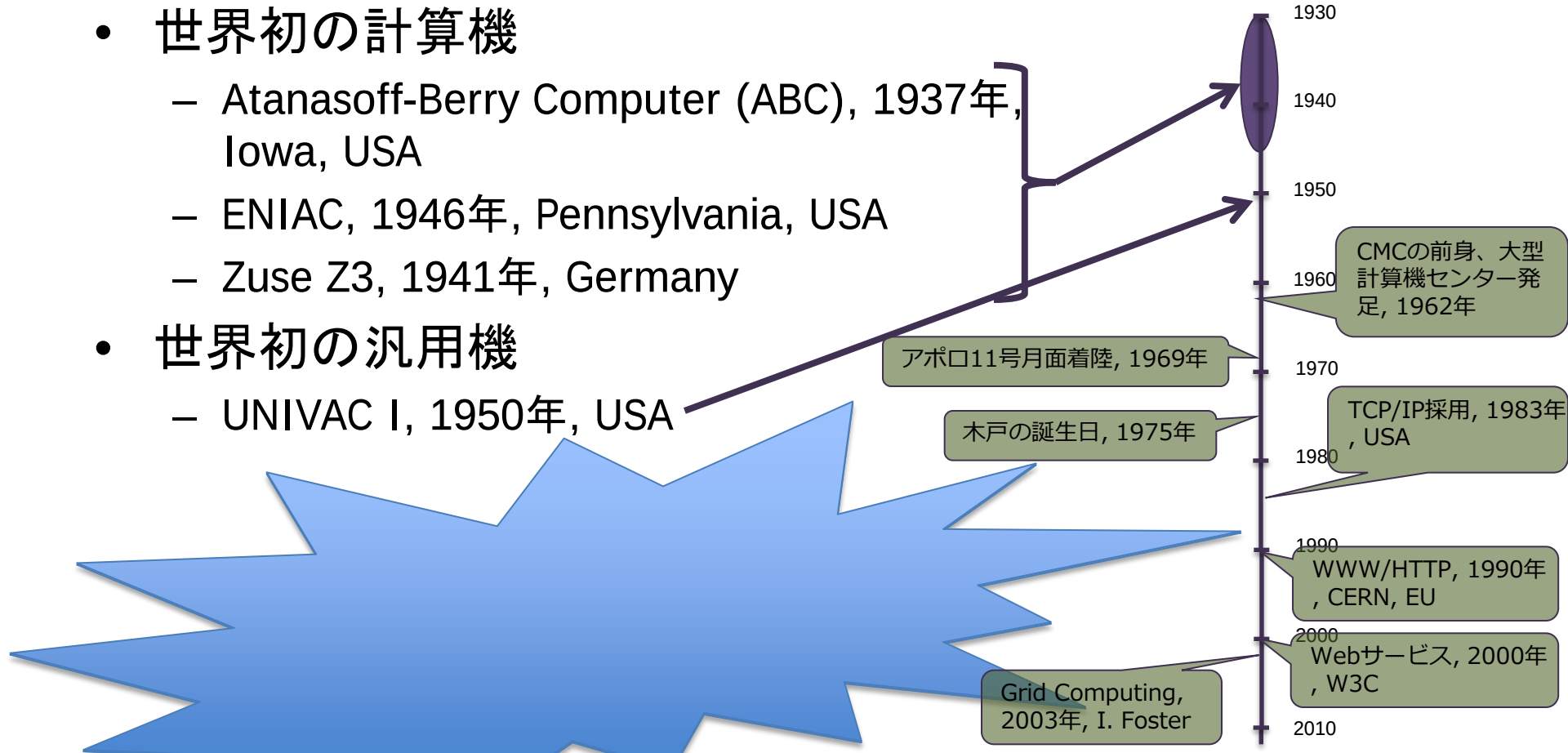
計算機にも様々な種類が

- パーソナルコンピュータ
  - 主に個人で使用するために作られたコンピューター。パソコン、PC
- 汎用機（メインフレーム）
  - 企業の基幹業務に利用される大規模なコンピュータ
- スーパーコンピュータ
  - 高度な数値計算（量子物理、流体解析、ケモ・バイオインフォマティクス、天文地学…etc）のためのコンピュータ

- 数値だけでなく画像、文書など様々な入力に対し処理を行い出力する装置

計算機は気安く触れられるものではなかった

- 世界初の計算機
  - Atanasoff-Berry Computer (ABC), 1937年, Iowa, USA
  - ENIAC, 1946年, Pennsylvania, USA
  - Zuse Z3, 1941年, Germany
- 世界初の汎用機
  - UNIVAC I, 1950年, USA



弾道計算のシミュレーション
真空中の放物運動

- ただの放物運動
  - 初期角度：θ_0　初期速度：v_0　重力加速度：g
    時間：t

t秒後の速度

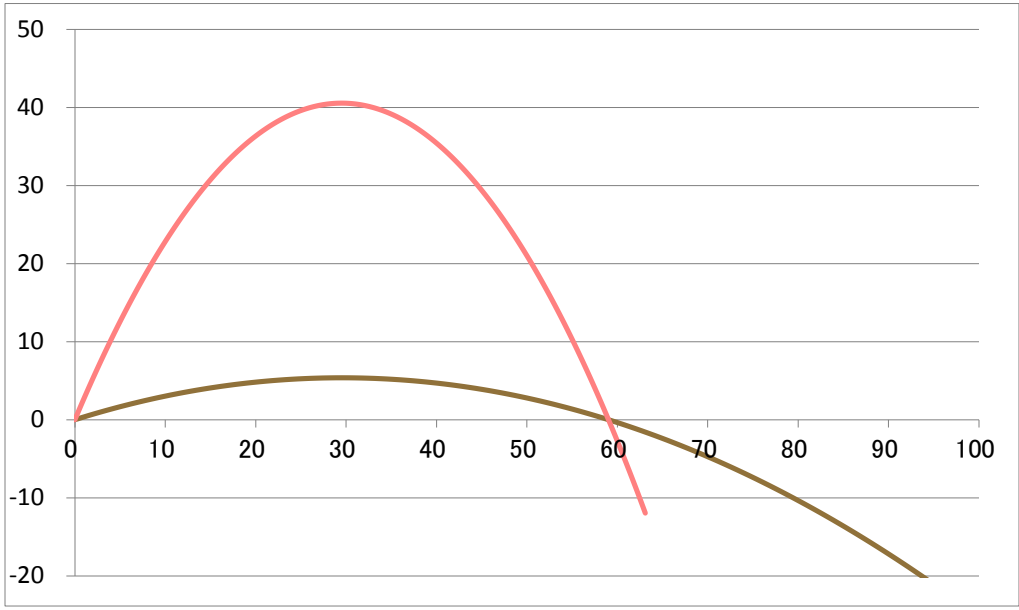
$$v_x = v_0 \cos\theta_0$$

$$v_y = v_0 \sin\theta_0 - gt$$

t秒後の座標

$$x = v_0 \cos\theta_0 t$$

$$y = v_0 \sin\theta_0 t - \frac{1}{2} g t^2$$



弾道計算のシミュレーション 空気抵抗を入れてみよう

- 速度に比例する空気抵抗を持つ放物運動
  - 初期角度：θ_0　初期速度：v_0　重力加速度：g　時間：t
  - 空気抵抗：k　物体の質量：m

t秒後の速度

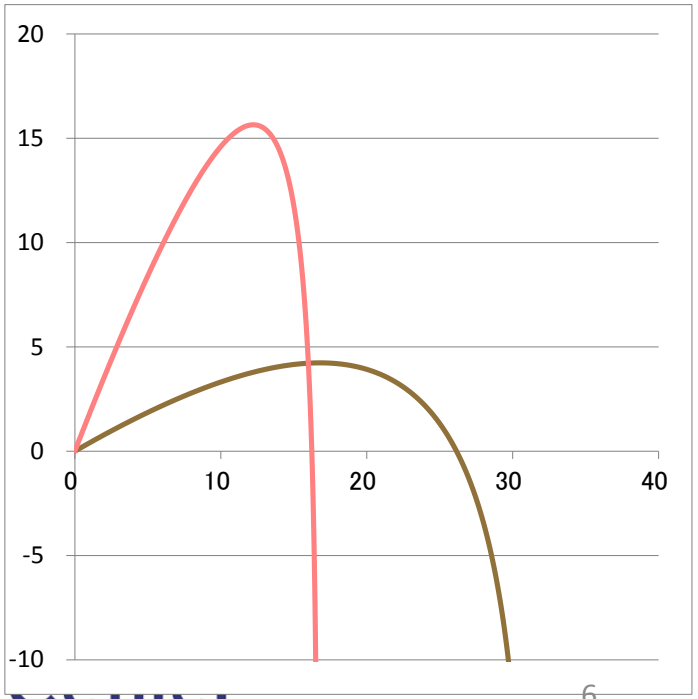
$$v_x = v_0 e^{-\frac{k}{m}t} \cos\theta_0$$

$$v_y = (v_0 \sin\theta_0 + \frac{m}{k}g)e^{-\frac{k}{m}t} - \frac{m}{k}g$$

t秒後の座標

$$x = \frac{mv_0}{k}\cos\theta_0(1-e^{-\frac{k}{m}t})$$

$$y = \frac{m}{k}\{(v_0 \sin\theta_0 - \frac{m}{k}g)(1-e^{-\frac{k}{m}t}) - gt\}$$



弾道計算シミュレーション
様々な要因と応用

- 発射された物体を正確に標的に当てるため
- 最初は軍事目的

- ゴルフ、野球などスポーツ科学
- 人工衛星、スペースシャトルの打ち上げ
- フライトシミュレータ
- ３Dゲームなどのレンダリング物理演算
- 分子動力学によるポリマー合成、ドラッグデザイン
- 天気予報

- 要素
  - 初速
  - 仰角
  - 空気抵抗（湿度、気温、気圧により密度が変わり空気抵抗が変化）
  - 弾丸の前面投影面積、表面の摩擦係数、質量
  - 風力、風向き
  - コリオリの力、重力加速度
  - 物体の自転（スピン）による揚力

シミュレーション
現実世界での現象を単純化、簡略化した数理モデル（又は模型）を用いて検証を行う模擬実験

Cyberm
Osaka University

世界初の○○計算機

- 世界初の計算機
  - ENIAC, 1946年, Pennsylvania, USA
- 世界初の汎用機
  - UNIVAC I, 1950年, USA
- 世界初の電卓
  - Anita Mark8, 1963年, UK
- 世界初のパーソナルコンピュータ
  - Altair 8800, 1975年, USA

商業・業務利用に特化
可用性を追求

科学技術計算に特化
計算性能を追求

- 世界初？のスーパーコンピュータ
  - CDC 6600, 1964年, Lawrence Livermore National Lab., USA.

3 MFLOPS

FLOP = Floating point number Operations Per Second

計算機の速さって？

- FLOPS (Floating-point Operations Per Second)
  - 一秒間に浮動小数点演算を何回できるか？
  - 京：約10Peta FLOPS（10^{16}回）

Y：ヨタ
Z：ゼタ
E：エクサ

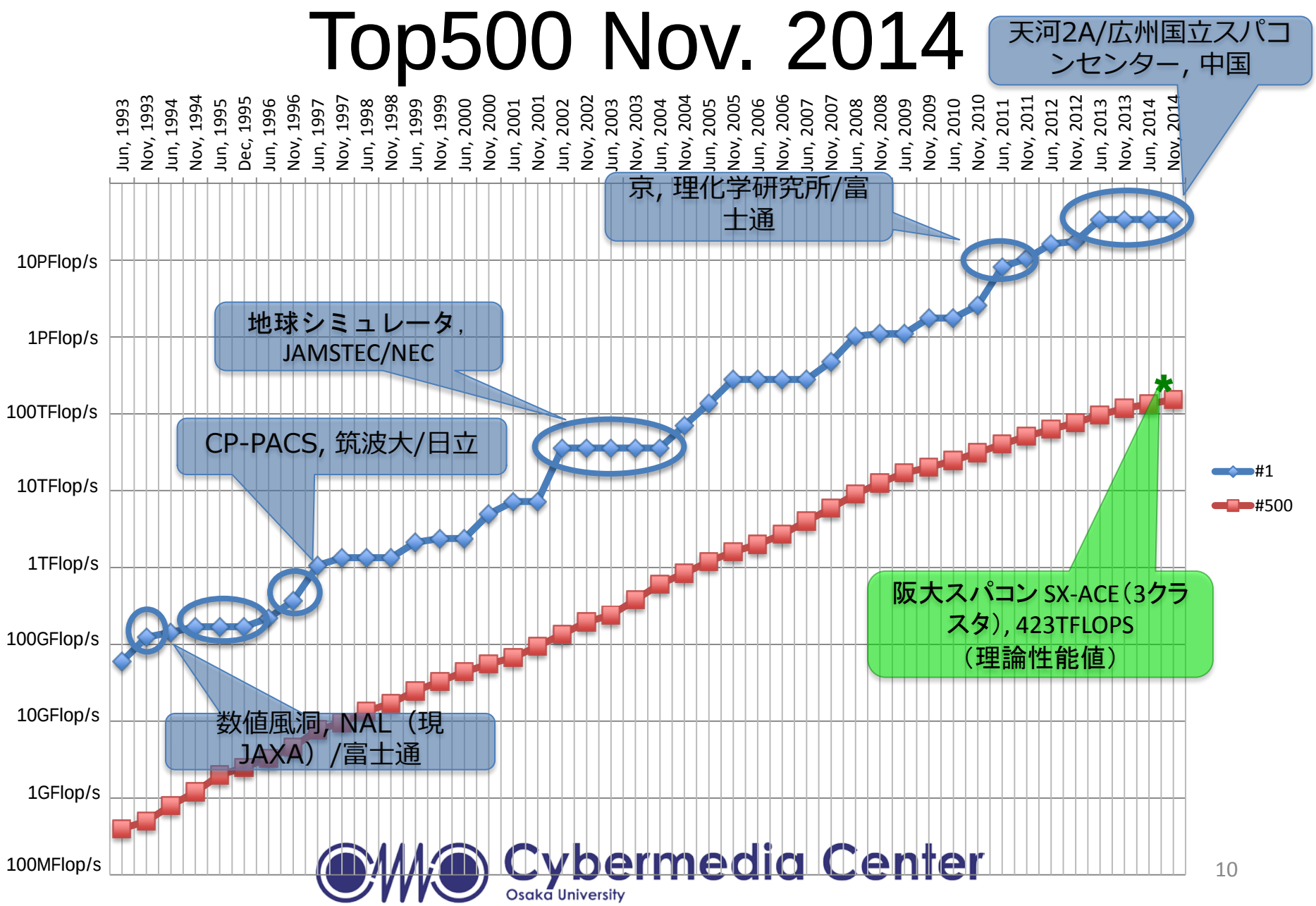
P：ペタ　T：テラ　G：ギガ　M：メガ　k：キロ

10,000,000,000,000,000

世界初のスパコン
CDC 6600

3,000,000

Cybermedia Center
Osaka University



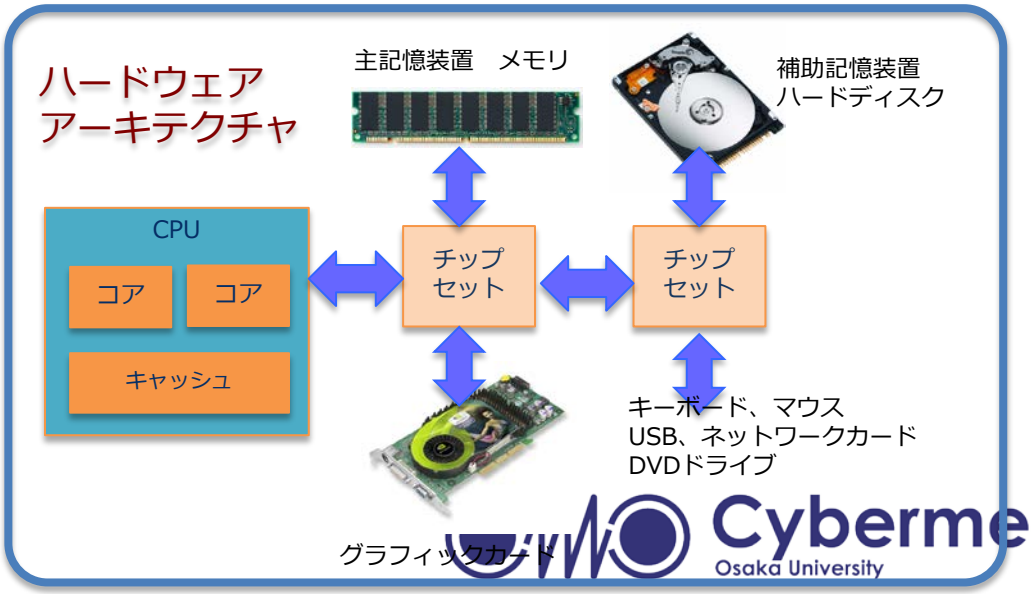
Cybermedia Center
Osaka University

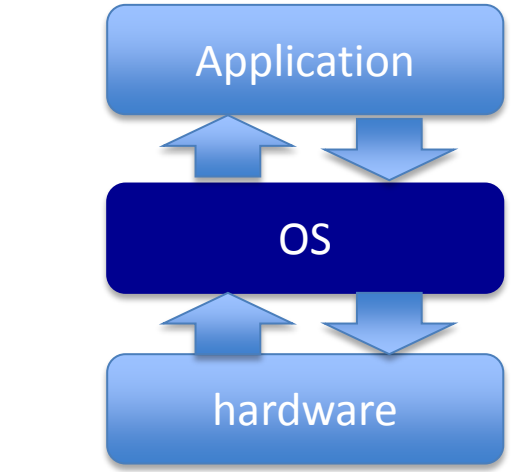
目次

1. スパコンの略歴
2. 計算機の概要
3. 並列計算
4. CMCのスパコン

計算機のアーキテクチャ

- 中央処理演算装置：CPU（プロセッサ）
  - 計算を行う頭脳
  - 命令により演算を行う
  - ベクタ部（SIMD）とスカラ部をあわせもつ
- 主記憶装置：メモリ
  - 揮発性が高く電源を落とすと内容は破棄
- 補助記憶装置：ハードディスク
  - 不揮発性で電源を落としても内容を保持
- グラフィックカード
  - 出力装置につなぐデバイス
  - GPGPU：画像処理専用の補助演算装置
- 入力装置：キーボード、マウス

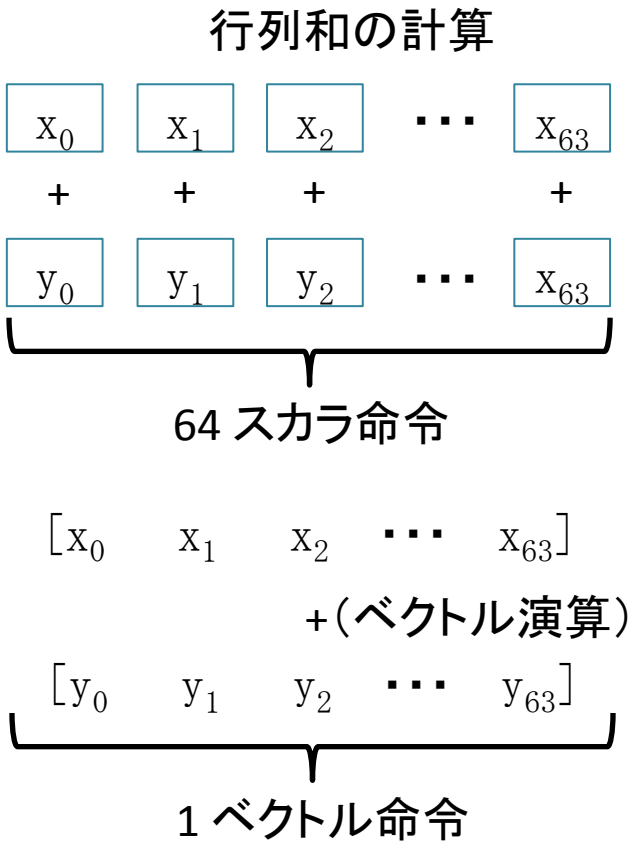




ベクタとスカラ
スパコン／プロセッサの種類

- スカラ
  - 計算機の命令を1つづつ実行
  - 逐次的に命令を実行
  - 高速化：パイプライン処理，スーパースカラ
  - 代表システム：京、Tsubame、etc.
  - 得意な計算：遺伝子相同性検索

- ベクタ
  - 複数の命令を一つにまとめて実行
  - 同じ命令（演算）に対し異なるデータ（項）で実行する場合、1つにまとめて実行することができる
  - 代表システム：阪大SX-ACE、地球シミュレータ
  - 得意な計算：気候シミュレーション、流体解析



計算機におけるOS

- ARPANETからいろいろなネットワークが接続されて超巨大なネットワーク → インターネットに変貌．The Internet

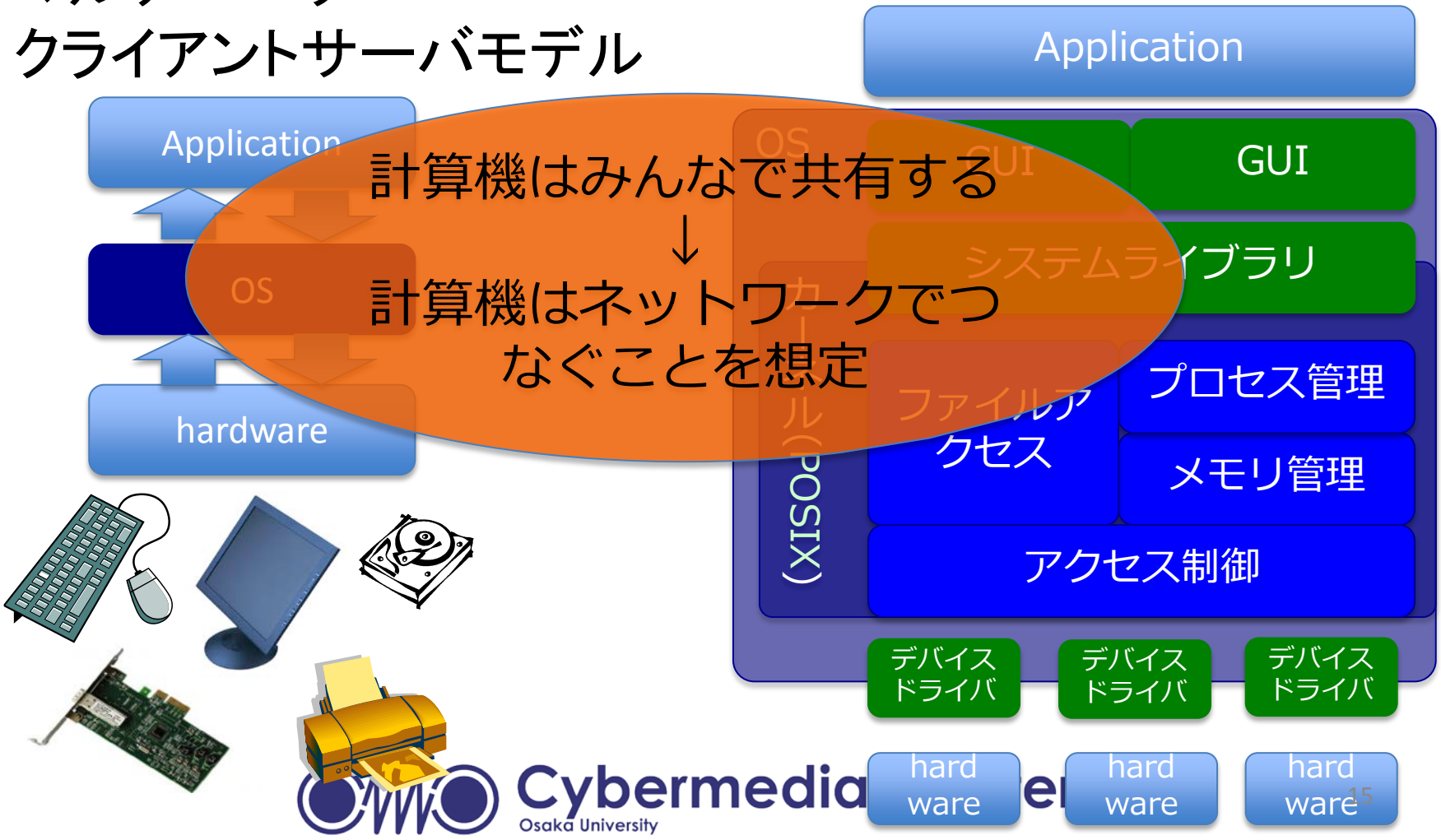
- ネットワークのモチベーション
  - データの共有
  - 大型計算機を複数のユーザで共有

UNIXの登場

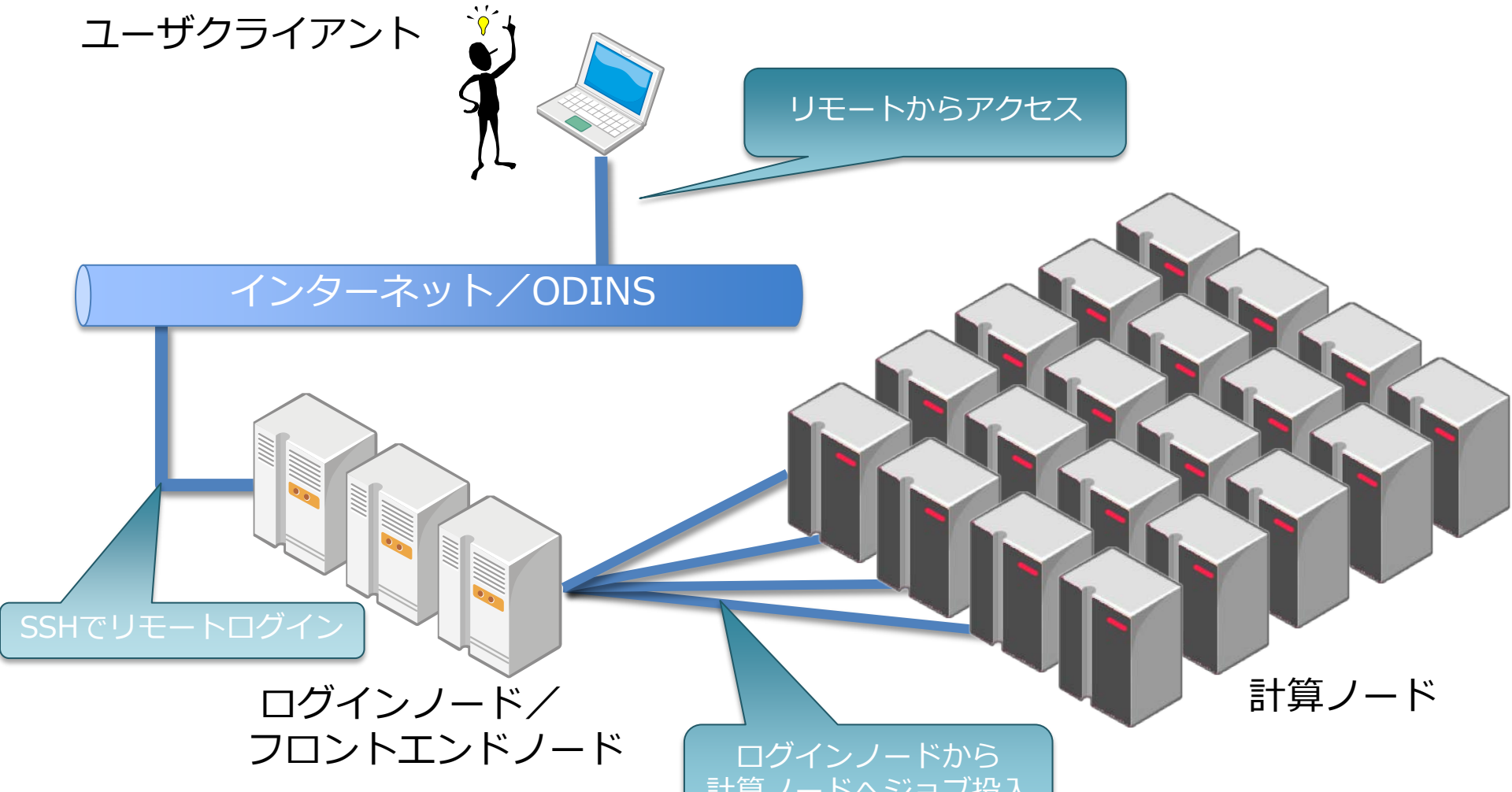
- Unics, 1969年 AT&T, USA
- Version 7 Unix, 1979年, AT&T, USA
- Linux, 1991年, GNU, USA
- Windows 3.1 1992年, Microsoft, USA
- Windows NT 3.5 1994年, Microsoft, USA
- Windows 95, 1995年, Microsoft, USA
- Mac OS X, 2001年, Apple, USA
- Windows XP, 2001年, Microsoft, USA
- Android, 2007年, Google, USA
- iOS, 2008年, Apple, USA

OS：UNIXのアーキテクチャ

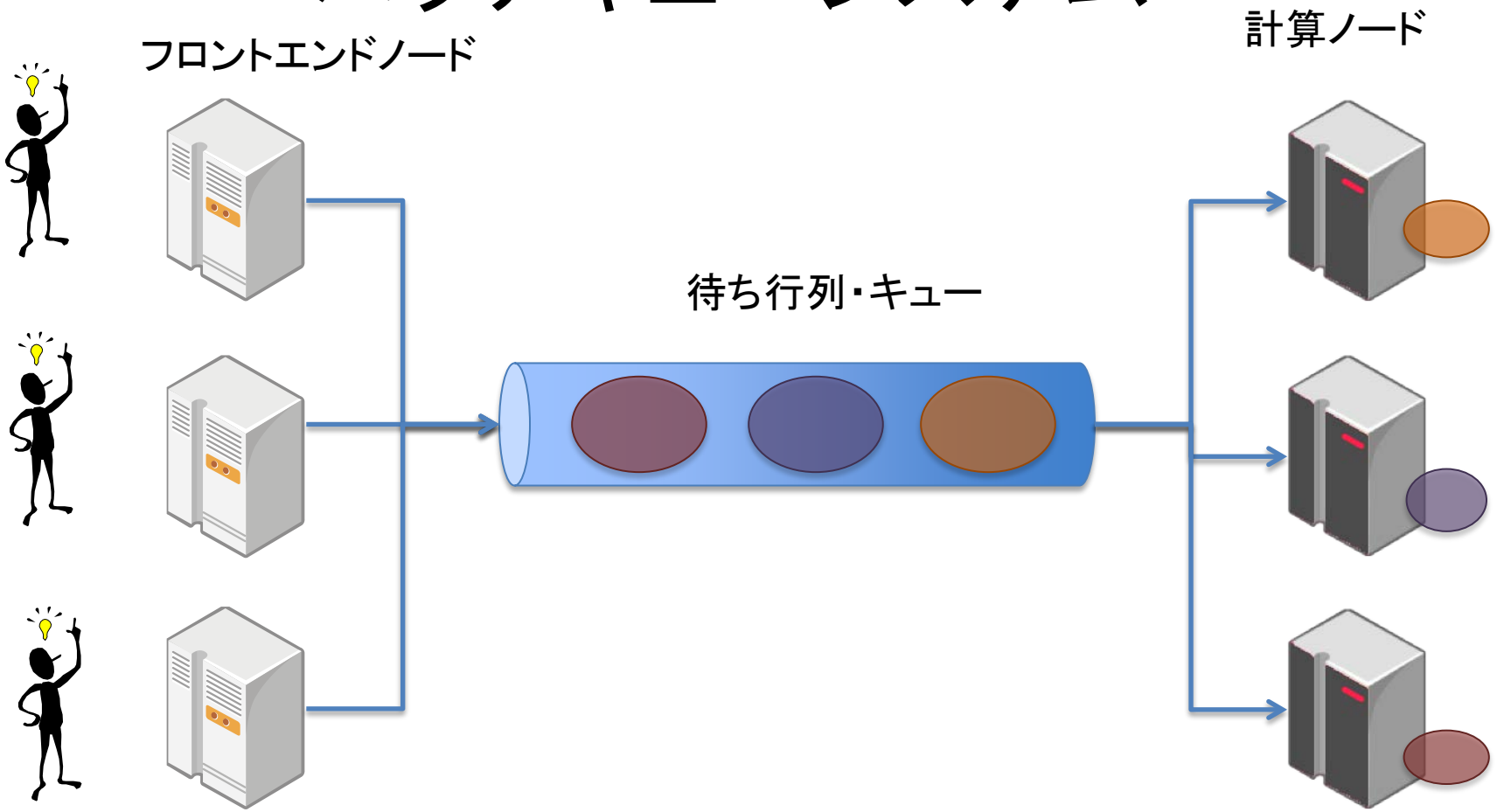
- マルチタスク（マルチプロセス）
- マルチユーザ
- クライアントサーバモデル



コンピュータ・クラスタ


ユーザクライアント
リモートからアクセス
インターネット／ODINS
SSHでリモートログイン
ログインノード／
フロントエンドノード
ログインノードから
計算ノードへジョブ投入
計算ノード

ジョブ投入
バッチキューシステム



qsubでジョブ投入

```
#!/bin/csh
#PBS -q ACE
#PBS -l elapstim_req=1:00:00,memsz_job=60GB
#PBS -v F_RSVTASK=4
setenv F_PROGINF DETAIL
cd $PBS_O_WORKDIR
./a.out
```

計算機環境の指定

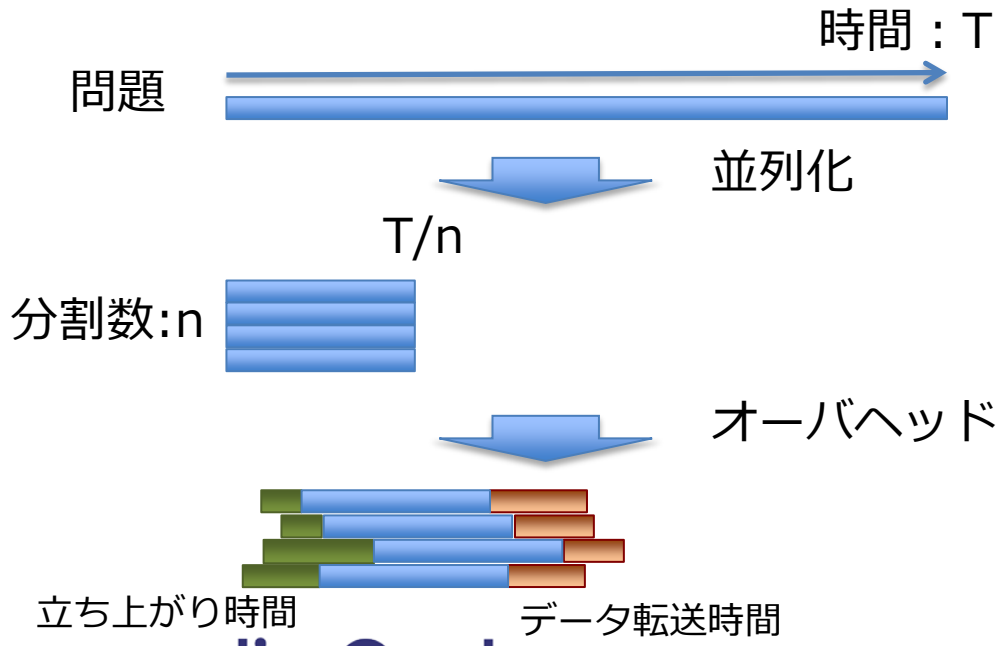
ジョブキューに登録

```
$ qsub a_batch.sh
Request 88156.cmc submitted to queue: ACE.
$
```

目次

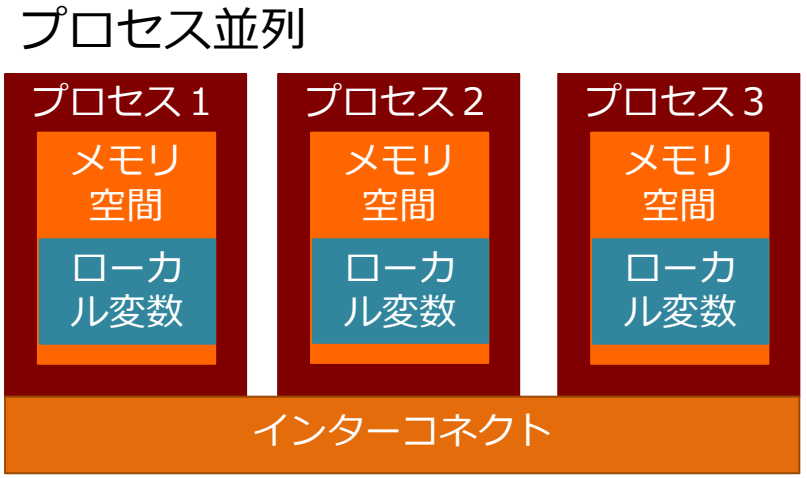
並列プログラミングとは

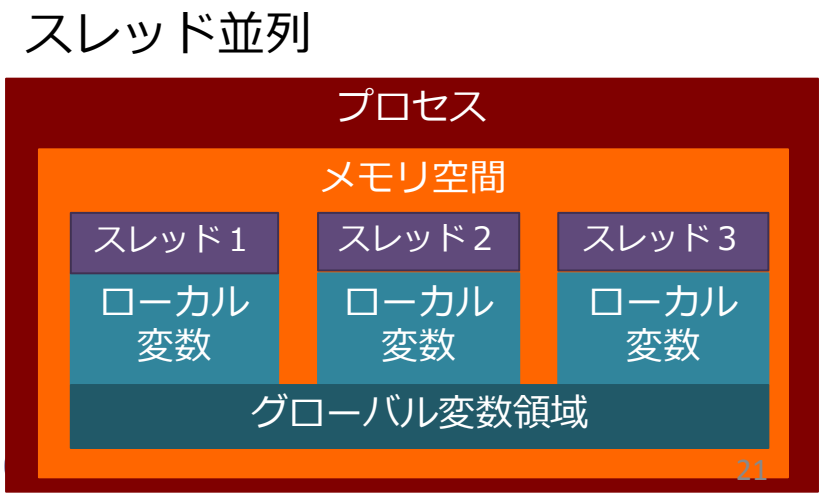
- 逐次処理の問題，プログラム（実行時間：T）をnに分割し、n台のプロセッサ（or 計算機）でT/n時間にする
- プロセッサに割り当てられるタスクは独立
- 並列化できる問題はデータに依存性のない問題のみに限られる
- 通信によるオーバヘッド
  - 立ち上がり時間
  - データ転送時間



プロセス並列とスレッド並列

- プロセス並列
  - メモリ空間は独立
  - 並列タスク間でのデータ通信は必要に応じて
  - 例：Message Passing Interface (MPI)
- スレッド並列
  - メモリ空間を共有
  - データ通信の必要性なし
  - 例：OpenMP





Message Passing Interface (MPI)

- メッセージパッシング／プロセス間通信の規格
- 分散メモリ型並列計算機での並列実行に向く
- 大規模計算が可能に
- スケーラビリティ、性能は高

- 主要な実装例
  - MPICH
  - LAM
  - OpenMPI（C言語，C++，Fortran）

- 略語
  - Processor Element:プロセスの単位．MPIプロセスを指す．
  - Rank:PEの識別番号のこと．MPI_Comm_rank関数で設定されるランクID

MPIでHello, World.

```
#include <mpi.h>
#include <stdio.h>
#include <string.h>

int main(int argc, char **argv) {
 char msg[20];
    int myrank, num, i;
    MPI_Status status;
    MPI_Init(&argc, &argv);
    MPI_Comm_rank( MPI_COMM_WORLD, &myrank);
    MPI_Comm_size( MPI_COMM_WORLD, &num);
    if ( myrank == 0 ) {
        strcpy(msg, "Hello, World.");
        for (i = 1; i < num; i++) {
            MPI_Send(msg, strlen(msg) + 1, MPI_CHAR, i, 99, MPI_COMM_WORLD);
        }
        printf("rank %d send: %s¥n", myrank, msg);
    } else {
        MPI_Recv(msg, 20, MPI_CHAR, 0, 99, MPI_COMM_WORLD, &status);
        printf("rank %d receive: %s¥n", myrank, msg);
    }
    MPI_Barrier(MPI_COMM_WORLD);
    MPI_Finalize();
    return 0;
}
```

Rank 0は送信側

その他のRankは受信側

```
$ mpicc hello_mpi.c -o m.out
$ mpirun -n 4 ./m.out
rank 0 send: Hello, World.
rank 1 receive: Hello, World.
rank 2 receive: Hello, World.
rank 3 receive: Hello, World.
$
```

OpenMPによるスレッド並列

- MPI
  - プログラマが並列化を意識してコードを書く必要がある
- OpenMP
  - 1ノードの中で閉じた並列処理
  - コンパイラが自動的に並列化（並列化効率はコンパイラに依存）
  - ソースコード中にOpenMPディレクティブを挿入し、OpenMP環境下では有効になり，それ以外では無効になる
  - 並列化と非並列では同じソースコードとなる

```
#ifdef _OPENMP
    //OpenMPを使う
#else
    //OpenMPを使わない
#endif
```

```
#pragma omp parallel for
    for (i = 0; i < 1000; i++ ) {
        // 並列処理させたいコード
    }
```

OpenMPでHello, World.

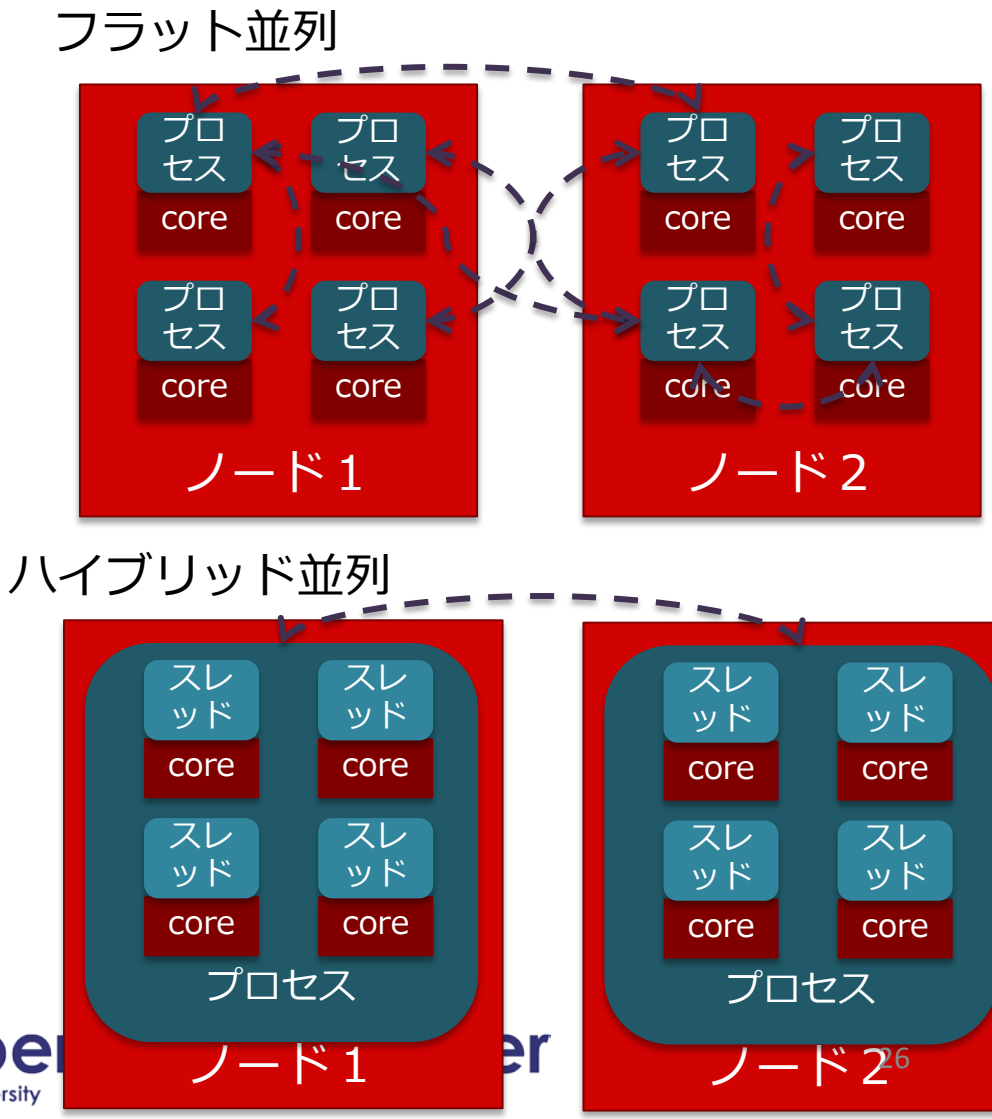
```
#include <omp.h>
#include <stdio.h>

int main(int argc, char **argv) {
   #pragma omp parallel num_threads(4)
   {
      printf("Thread %d, Hello, world¥n", omp_get_thread_num());
   }
   return 0;
}
```

4つのスレッド並列

```
$ gcc -fopenmp hello_omp.c -o o.out
$ ./o.out
Thread 3, Hello, world
Thread 0, Hello, world
Thread 1, Hello, world
Thread 2, Hello, world
$
```

ハイブリッド並列

- フラット並列モデル
  - プロセス並列のみ
  - コアごとにプロセス
  - 通信がプロセス間ごとに発生
- ハイブリッド並列モデル
  - プロセス並列（ノード間）＋スレッド並列（ノード内）
  - コア数が増えてもプロセス数は増加せず
  - 通信が混雑しない

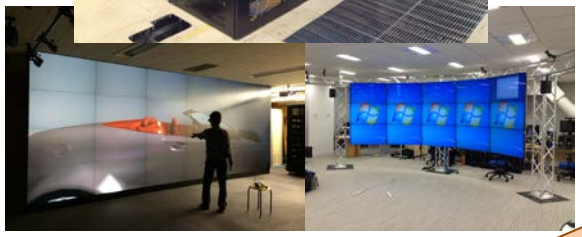


CMC大規模計算機システムサービス

スカラープロセッサ

汎用コンクラスタ
（HCC）

大規模可視化対応PCクラスタ
（VCC）



ベクタープロセッサ

スーパーコンピュータ
“SX-ACE”

更新

スーパーコンピュータ
“SX-8”, “SX-9”

変わりました！

CMC大規模計算機システムの利用方法