

初めてのスパコン

大阪大学サイバーメディアセンター 講師

木戸 善之

2021/6/18

目次

1. スパコンの概要
2. 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ー
- 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、天文学...etc)のためのコンピューター
- 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？
 - 富岳：400Peta FLOPS over (4×10^{17} 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

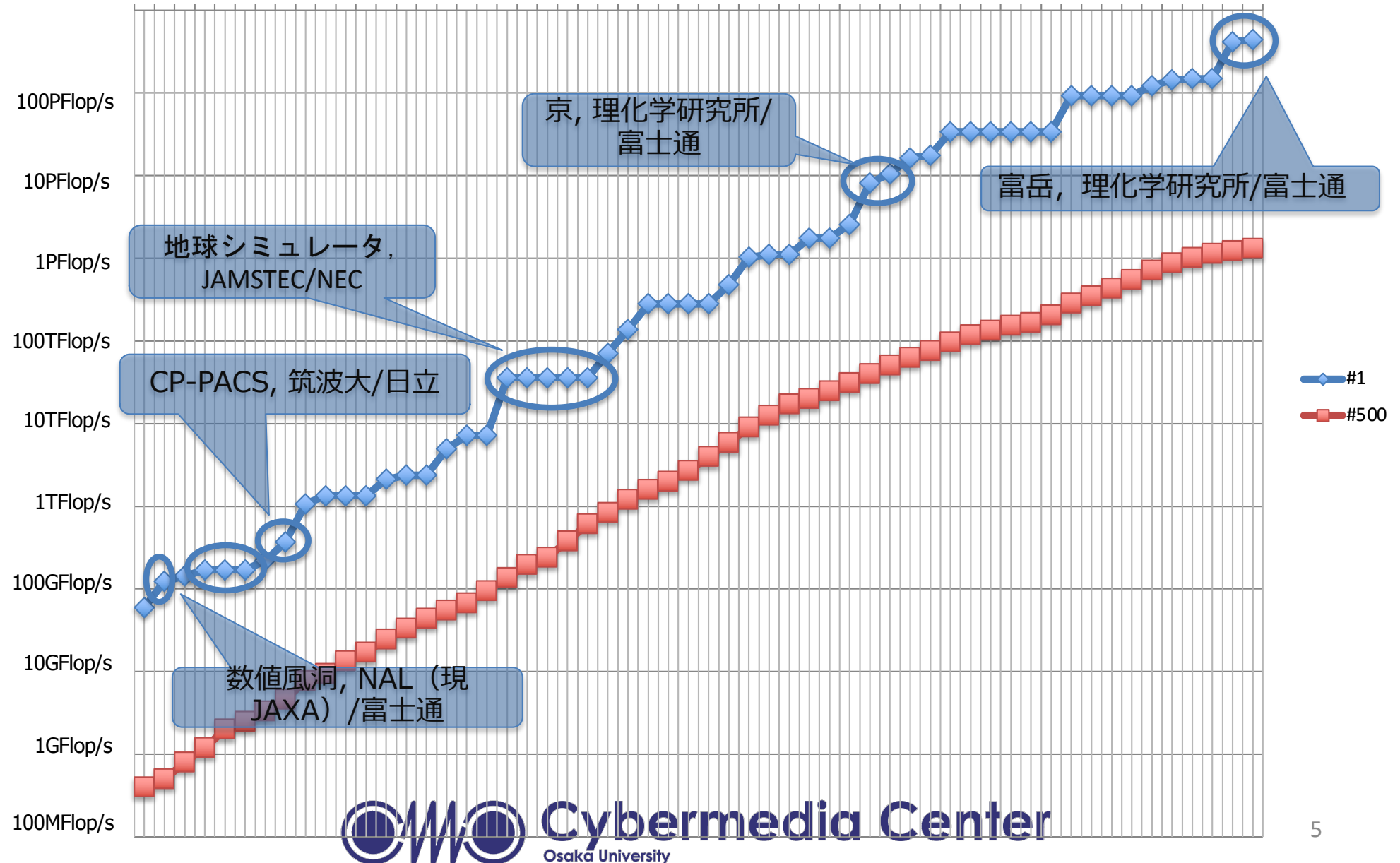
400,000,000,000,000,000

世界初のスパコン
CDC 6600

3,000,000

1. スパコンの概要

Top500 Nov. 2020

[illegible]

日本のスパコン

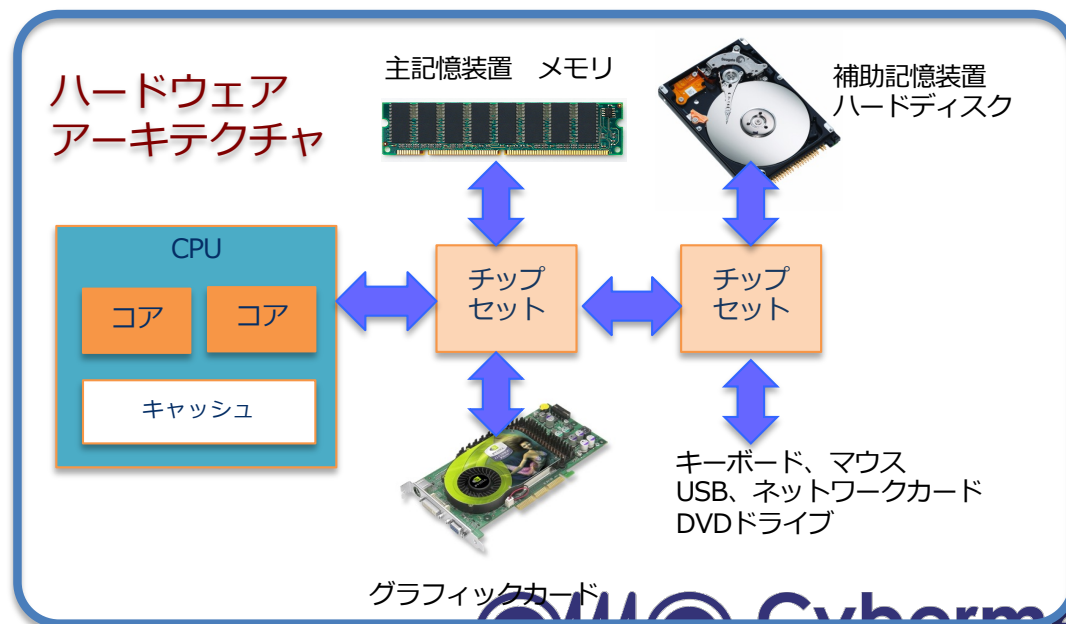
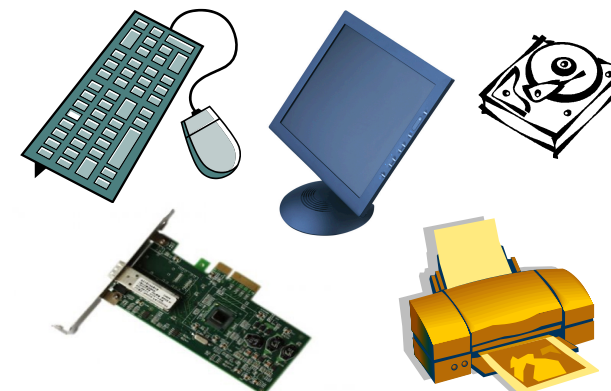
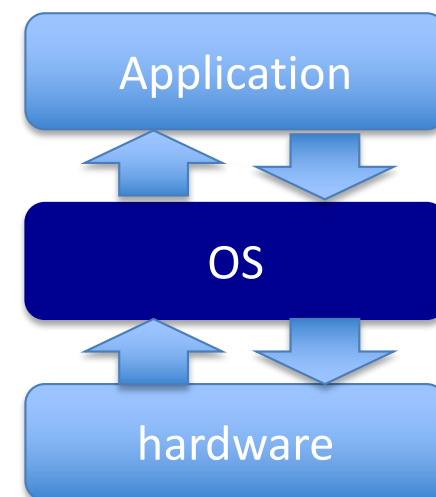
名称・愛称	設置者	メーカー	実行性能	Top 500ランク
富岳	理研	Fujitsu	442.0 PFlops	1
AI Bridging Cloud Infrastructure (ABCI)	産総研	Fujitsu	19.9 PFlops	14
TOKI-SORA	JAXA	Fujitsu	16.5 PFlops	19
Oakforest-PACS	東大・筑波大	Fujitsu	13.6 PFlops	22
TSUBAME3.0	東工大	HPE	8.1 PFlops	31
Plasma Simulatar	NIFS	NEC	7.8 PFlops	33

参考性能

SQUID	阪大	NEC	理論性能 16 PFlops	理論性能だと40～ 50位と同じくらいの 性能
-------	----	-----	-------------------	-------------------------------

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) とスカラ部を持つ
- 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
- アクセラレータ
 - GPGPU
 - ベクトルプロセッサ
- 入力装置: キーボード、マウス

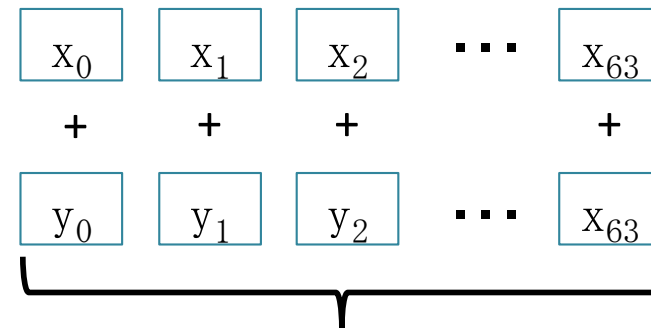


ベクトル計算とスカラ計算

- スカラ

- 計算機の命令を1つずつ実行
- 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

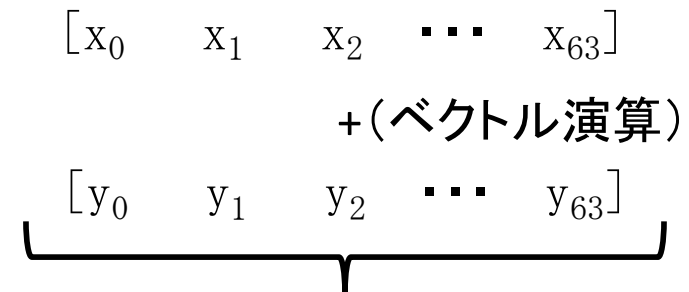
行列和の計算



64 スカラ命令

- ベクトル

- 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

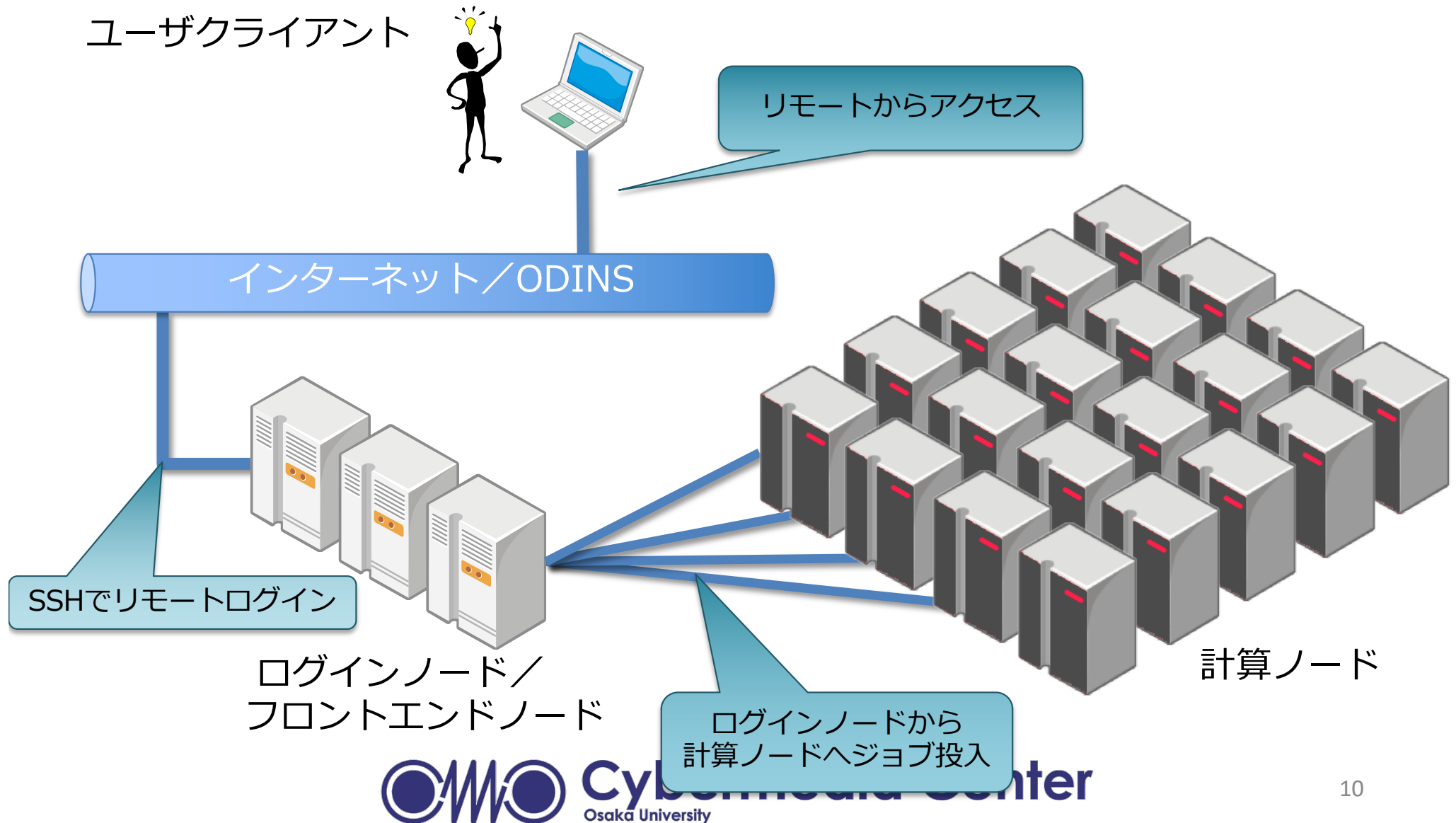


1 ベクトル命令

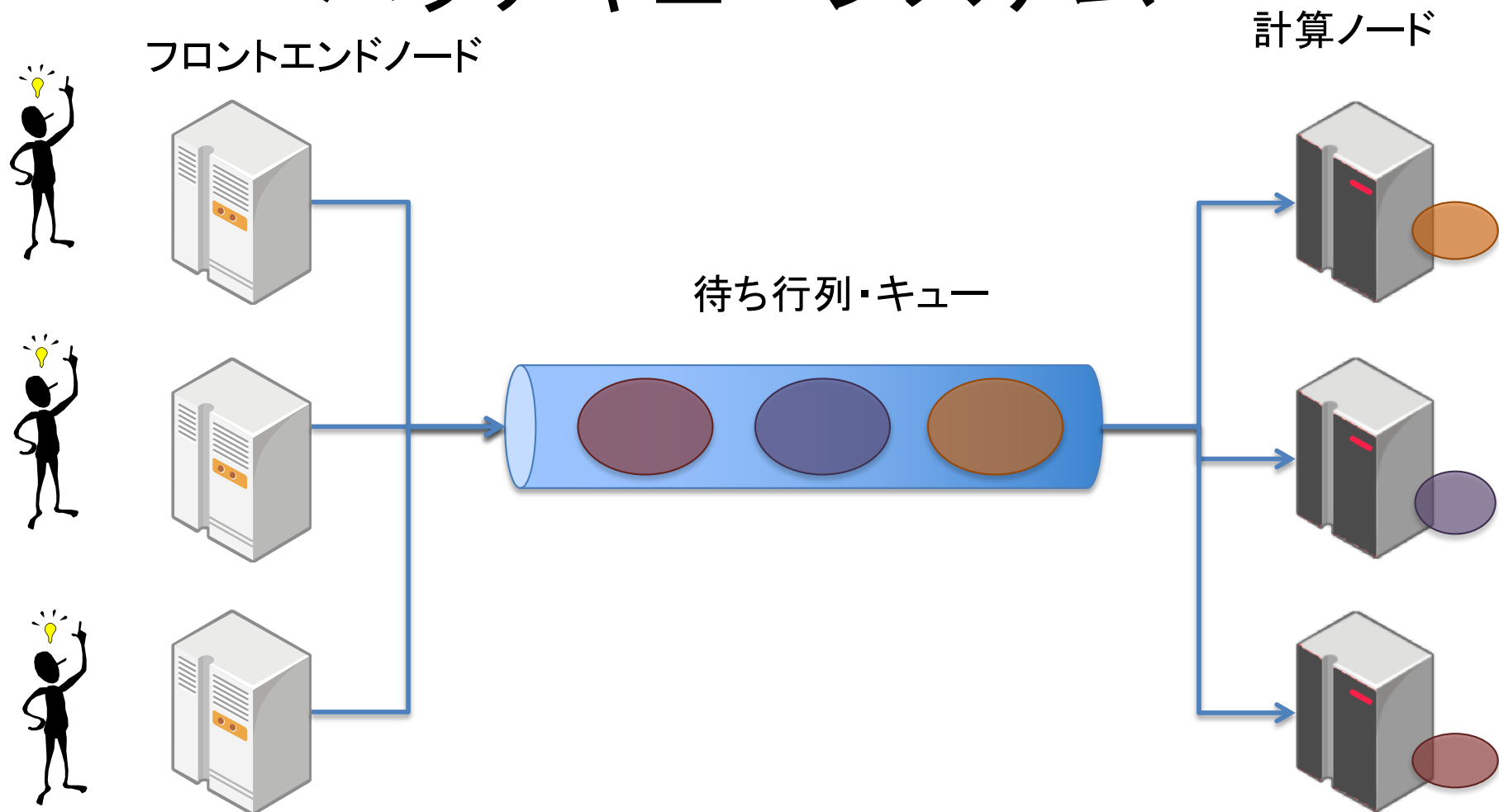
CPU, GPGPUとベクトルプロセッサ

- CPU (Intel AVX-512, SIMD)
 - ベクトル長: 512 bit
- GPGPU (NVIDIA A100)
 - ベクトル長: FP32 (32bit) × 256並列 = 8192 bit
- ベクトルプロセッサ
 - ベクトル長: 256 × 64 = 16384 bit

コンピュータ・クラスタ



ジョブ投入 バッチキューシステム



qsubでジョブ投入

```
#!/bin/bash
#PBS -q SQUID
#PBS --group=G01234
#PBS -l elapstim_req=1:00:00, memsz_job=60GB
#PBS -l cpunum_job=76
module load BaseCPU/2021
cd $PBS_O_WORKDIR
./a.out
```

計算機環境の指定

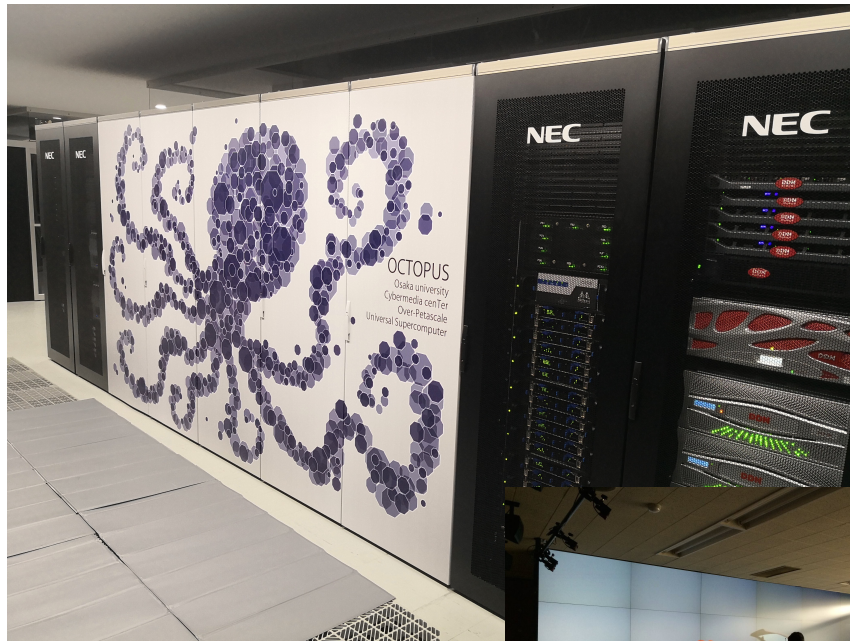
ジョブキューに登録

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

CMC大規模計算機システムサービス

CPU
GPGPU

汎用計算機システム
“OCTOPUS”



大規模可視化装置



CPU
ベクトルプロセッサ
GPGPU

高性能計算・データ分析基盤システム
“SQUID”



new!

高性能計算・データ分析基盤システム “SQUID”



new!

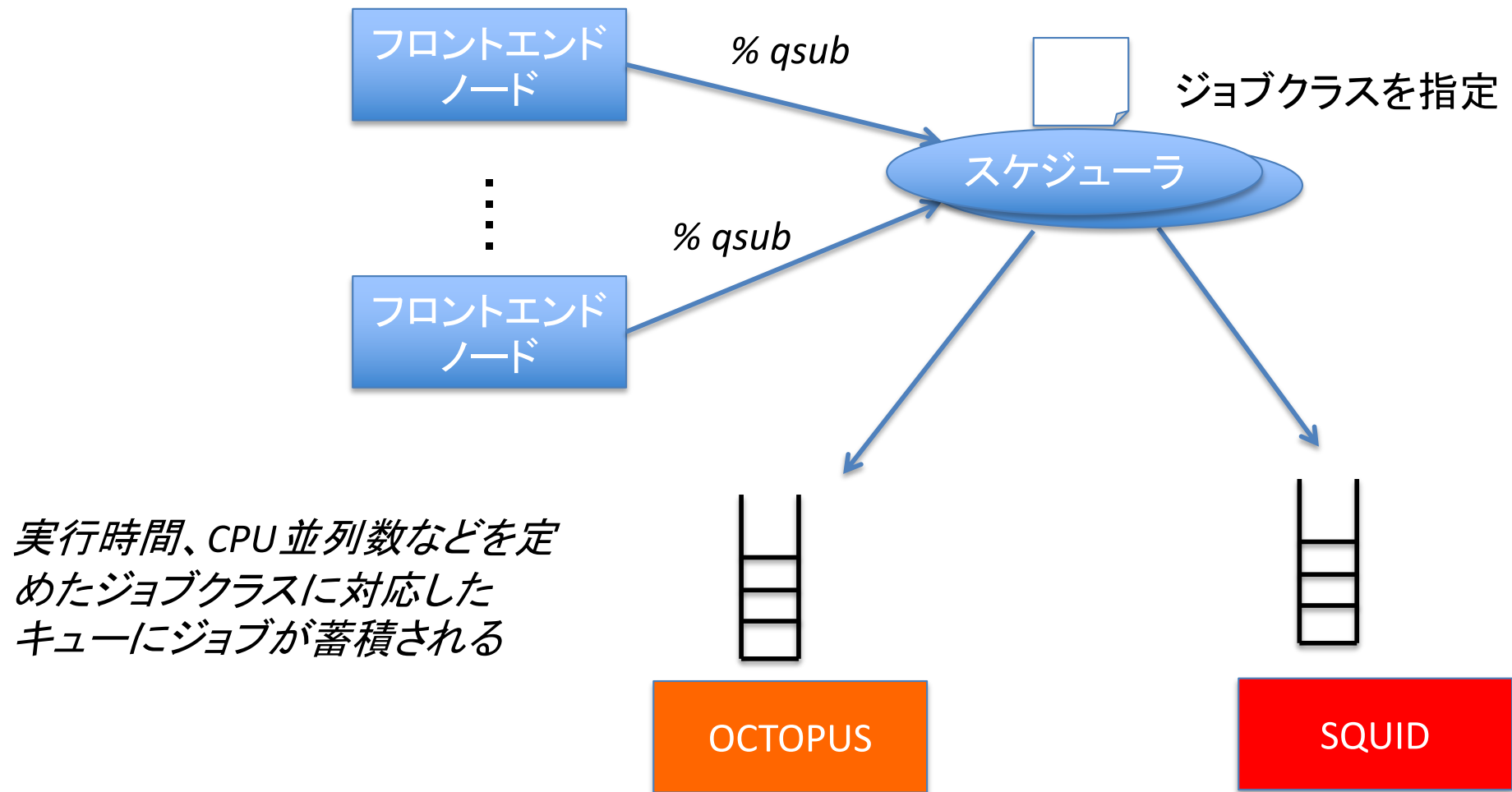
総演算性能	16.591 PFLOPS	
ノード構成	汎用CPUノード群 1520 ノード(8.8 PFLOPS)	CPU : Intel Xeon (Icelake) 2.40 GHz 38コア × 2基 MEM : 256 GB
	GPUノード群 42 ノード(6.7 PFLOPS)	CPU : Intel Xeon (Icelake) 2.40 GHz 38コア × 2基 MEM : 512 GB GPU : NVIDIA A100 × 8基
	ベクトルノード群 36ノード(0.9 PFLOPS)	CPU : AMD EPYC 7402P 2.8 GHz 24コア × 1基 ベクトルプロセッサ : NEC SX-Aurora TSUBASA Type 20A × 8基
ストレージ	DDN EXAScaler (Lustre)	HDD : 20.0 PB NVMe : 1.2 PB
ノード間接続	Mellanox InfiniBand HDR (200 Gbps)	

汎用計算機システム “OCTOPUS”



総演算性能	1.463 PFLOPS	
ノード構成	汎用CPUノード群 236 ノード (0.4 PFLOPS)	CPU : Intel Xeon (Skylake) 2.60 GHz 12コア × 2基 MEM : 192 GB
	GPUノード群 37 ノード (0.8 PFLOPS)	CPU : Intel Xeon (Skylake) 2.60 GHz 12コア × 2基 MEM : 192 GB GPU : NVIDIA P100 × 4基
	Xeon Phiノード群 44ノード (0.9 PFLOPS)	CPU : Intel Xeon Phi (Knights Landing) 1.3 GHz 64コア × 1基 MEM : 192 GB
	大容量MEMノード群 2ノード (16.38 TFLOPS)	CPU : Intel Xeon (Skylake) 2.0 GHz 16コア × 8基 MEM : 6 TB
ストレージ	DDN EXAScaler (Lustre)	HDD : 3.1 PB
ノード間接続	Mellanox InfiniBand EDR (100 Gbps)	

CMC大規模計算機システムの利用方法



講習会・セミナーの予定

- 4/26, 5/13 スーパーコンピュータ SQUID利用説明会
- 5/25 スーパーコンピュータ 利用説明会
- 6/14 スパコンに通じる並列プログラミングの基礎
- 並列コンピュータ 高速化技法の基礎
- 並列プログラミング入門(MPI)
- http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/lecture_event/lecture/