スパコンに通じる
並列プログラミングの基礎

宮武勇登（大阪大学 サイバーメディアセンター）

2024年6月3日 (月)

はじめに：この講習会の対象者

プログラミング/数値計算の経験はあるけれど,
スパコンや**並列計算**にも興味がある，という方

- 普段はWindowsやMac
- 近い将来，研究・開発などで大規模計算が必要になりそう
- 少しでも計算が速いと嬉しい
- とはいえ，並列計算の全体像がよく分からない
  どのような技術？難しいの？コストは？
- 普通のPCで試せることはある？

より詳しく知りたくなったら

より詳しい講習会へ！（以下は公開済の情報）

6月6日	初めてのスパコン*
6月12日	OpenMP入門*

* 一週間使える無料お試しアカウント付き!

http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/lecture_event/lecture/

今日お話すること

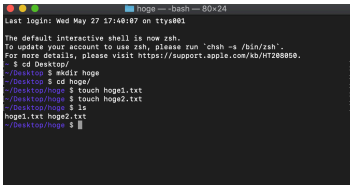
- CUI (とUnix)
  - いわゆる「黒い画面+白い文字」
  - CUIの最低限の操作に慣れる必要があります
- 並列計算
  - スパコンの概略
  - 並列計算とは？どんな技術なのか？
  - 普通のPCで試してみると...？

目次（この講習会の内容）

目次

GUIとCUI, OSの関係

GUI (Graphical User Interface)



CUI (Character User Interface)

- OS (Windows, Mac, Unix) の GUI の見かけはほぼ同じ
- CUI / CLI (Command Line Interface) の充実度は OS により異なる
- Unix (系のOS) は CUI / CLI が非常に充実 (Unixの強み)
- Unix コマンド：CUI で使うコマンド

GUIとCUI

GUI

- 俯瞰的．同時並行表示．多くの情報量．
- 直感的．
- 環境や状況への高い依存性．
- 自動化しづらい．ソフトウェア間の連携がしづらい．

CUI

- 局所的．表示情報は原則一度に一つ．情報はミニマム．
- 理論的．
- 環境や状況への依存性は低い．
- 自動化しやすい．ソフトウェア間の連携がしやすい．

遠隔操作で役に立つ！

- 遠隔操作はネットワークに負荷 → 通常はCUIで.
- 通常は ssh というプロトコルが使われる.

（注意）今日の講習会では遠隔操作については扱いません

CUI ≈ Google View

GUI ≈ Google Map

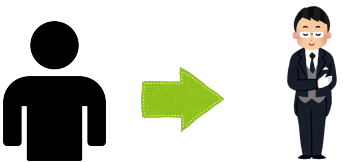
CUI ≈ Google View

CUI では

- 常に**「今どこにいるか」**を認識する必要がある
- 他の場所の情報は
  「自分が移動するか取り寄せるか」して取得する必要がある

CUI の操作 = shell への命令

CUI の操作 = shell (とよばれるソフトウェア) への命令



使えるエディタは主に二種類 (のみ)

CUI で使われるエディタは事実上

Emacs　or　vi

- 普通は (まだ) とっつきやすい **Emacs** がお勧め (らしい)
- サーバーの管理人は **vi** が使えないと困る (ことも)
- **vim** は vi の派生版
- vscodeのようなエディタでも拡張機能を導入すれば利用・練習できる

目次

これだけ知っていれば戦える!

- ディレクトリ操作
- ファイル操作
- ファイルの中身の操作
- ファイル編集（エディタ）

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 ディレクトリを作成
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*

* 既に poko ディレクトリがあるなら移動．なければ名前変更

Unix コマンド：ファイル操作

ls	今のディレクトリの中のファイルリストを表示
touch hoge	hoge というファイルを作成
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*

* 既に poko ディレクトリがあるなら移動．なければ名前変更

Unix コマンド：ファイルの中身の操作

less hoge	hoge というファイルの中身を表示 more, cat もほぼ同様の動作
grep kore *	ディレクトリ内で kore という文字列を含むファイルを表示

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，C- は Ctrl キー同時押し，M- は Esc キーを押してから

C-x C-f	ファイル読み込み
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
C-y	ペースト

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，文字挿入モード と コマンドモード を切り替えて使用

i	文字挿入モードへ切り替え
Esc	コマンドモードへ切り替え

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
yy	1 行コピー
p	ペースト

CUI 入門のまとめ

- CUI を理解する幾つかのコツ
  - 遠隔操作でよく使われる
  - CUI の性質は “Google View” に近い
  - CUI の操作 = shell への命令
  - エディタは事実上 Emacs or vi
- 今回紹介したコマンドである程度戦える
  (必要に応じて 書籍 / web で検索)
- 薄くてよいので本があると便利

目次（この講習会の内容）

これからの内容

話すこと

- スーパーコンピュータの概要（歴史）
- 高速化の仕組み・手法
- 原理的に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！
- 並列計算のチューニングなど

目次（この講習会の内容）

スーパーコンピュータとは

大規模，並列計算処理

100万単位のプロセッサコア

Top 500 (2024.06) `https://www.top500.org/`

rank	system	コア数	Rmax (PFlops / s)
1	Froutier (米)	870万	1,206
4	**Fugaku** (理研)	763万	442
5	LUMI (芬蘭)	222万	379
7	神威・太湖之光 (中)	1.06千万	93
32	SSC-21 (韓)	20万	25
39	ABCI 2.0 (産総研)	50万	22

(Rmax: 実効性能値)

阪大の **SQUID** は **6.1PFlops**, **152位！** (2021年6月のランキングでは67位)

スーパーコンピュータとは

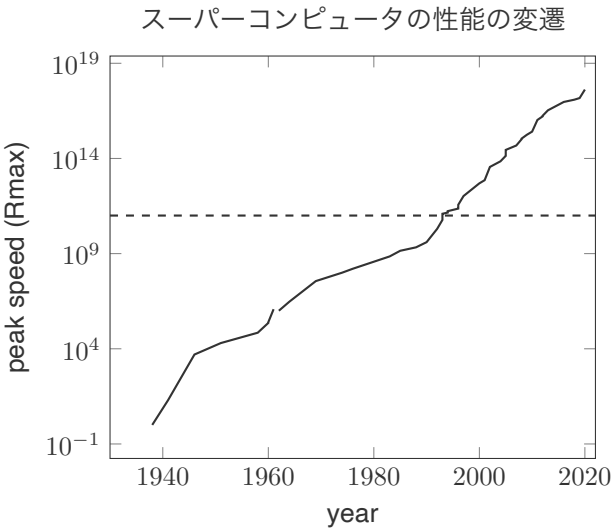
巨大メモリ

Fugaku: **4.9P** バイト,
Froutier: **9.2P** バイト, 神威: **1.3P** バイト, ABCI: **479T** バイト
SQUID: **389TB**

大電力（困るけど...）

Fugaku: **29.9 MW**,
Froutier: **21.1MW**, 神威: **15.4 MW**, ABCI: **1.6MW**
SQUID: **1.2 MW**
* 淀川水系水力発電所 29 中,
  発電力が 10MW 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」（登場時，2 位の 5 倍の性能）
- **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) CPU を数多く繋ぐ．33.8 PFLOPS.
- **神威・太湖之光** (2016) CPU をとにかく数多く．93 PFLOPS.
- **Summit** (2018) 122 PFLOPS.
- **Fugaku** (2020) 415 PFLOPS.
- **Froutier** (2022) 1,102 PFLOPS.

スーパーコンピュータの歴史 III

トップ性能のスパコンの所持・開発に絡んでいる国

- **アメリカ** (171 / top 500)
  数・性能ともに自国開発の強み.
- **日本** (29)
  ベクトル型スパコンを作る唯一の国か.
  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.
- **中国** (80)
  2010年代は急激に数を増やしていたが，近年は減速気味.
- **ドイツ (40), フランス (24), イギリス (16), 韓国 (13), イタリア (11), カナダ (10), ...**

目次（この講習会の内容）

そもそも計算とは？

高速化するためには

- 計算のアルゴリズムを工夫する.

  演算回数が 1/2 になれば，計算時間もおおよそ 1/2

- 高性能な計算機を使う

- **並列計算**：分担して処理

アルゴリズムの工夫

アルゴリズムそのものの改善

「より速い」or 「並列化により適している」アルゴリズムへ

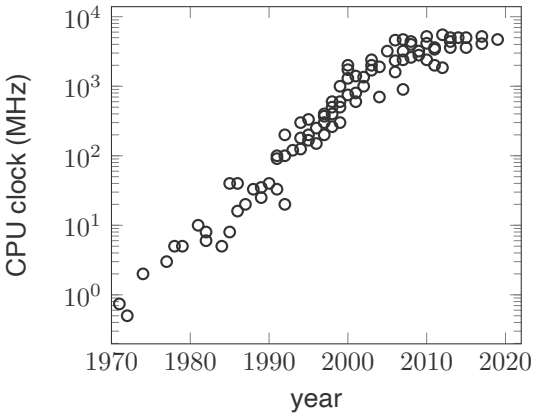
例：$1+2+\cdots+100$?

- for i = 1:100 do result += i;
- result = $(100 + 1) * 100 / 2$
  四則演算の回数を大幅に削減！

高性能な計算機を使う

速く回す！

CPU，メモリ，HDD などのスピードを単純に上げる．



単純なスピードアップはそろそろ限界？

並列計算 I-1

一度に沢山！

似たような処理を一度に沢山行う（ハードウェアで）

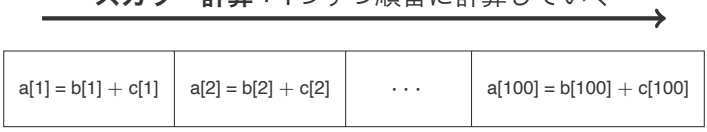
- ベクトル計算
- SIMD (Single Instruction Multiple Data)
  単一命令・複数データ流

（注意）

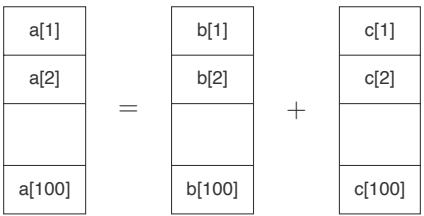
- ベクトル計算機：
  パイプラインによるベクトル演算が可能な計算機
- simdはPCのCPU等にも搭載

並列計算 I-2

スカラー計算：1つずつ順番に計算していく



ベクトル演算：一度に全部計算できる

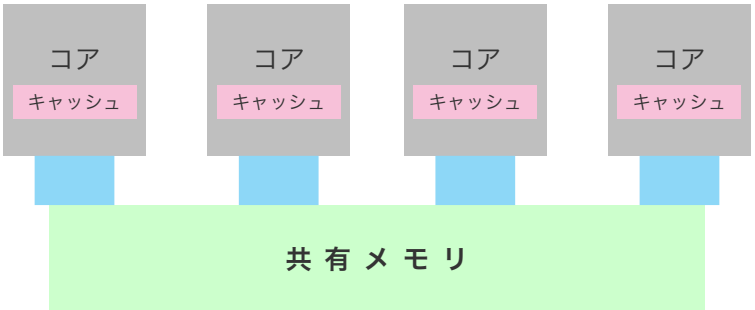


皆でやる！メモリ共有型

メモリ (データ) を共有した状態で，処理を並列化.

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**.

並列計算 II-2



メモリ共有型計算機の概念図

- 一つの CPU に複数のコア
- ノード：共有メモリを持つハードウェアの構成単位

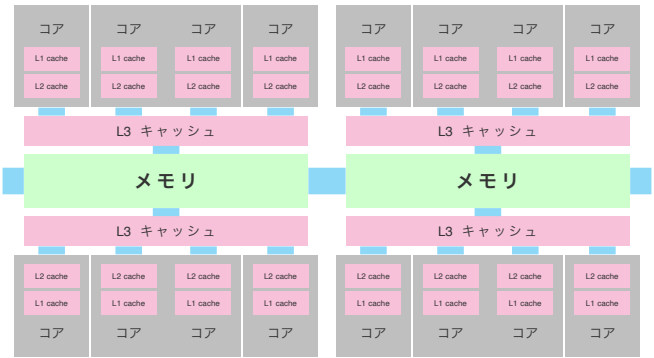
皆でやる！メモリ分散型

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，**高速化しやすい**.

- 「メモリ+CPU」がたくさん繋がっている場合
- ノードがたくさん繋がっている場合

並列計算 III-2



メモリ分散型計算機の概念図

計算の高速化手法の現状

- 「単純に速く」というのは困難になりつつある.
- ベクトル型スパコンは今や 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.
- 多くのスパコンは超並列 (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.

目次（この講習会の内容）

並列計算でどれくらい速くなる？

アムダール則

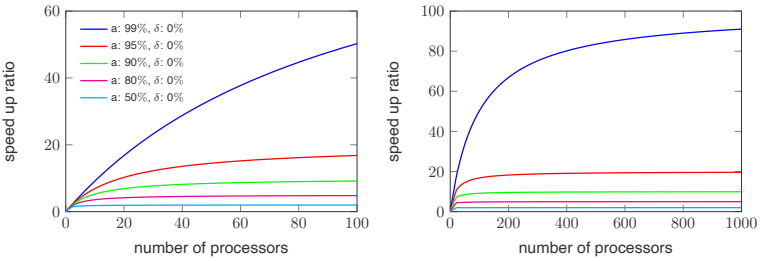
プログラム中，割合 a の部分を n 個のプロセッサで並列化し，
残りの $1-a$ の部分を並列化しない場合，全体は

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

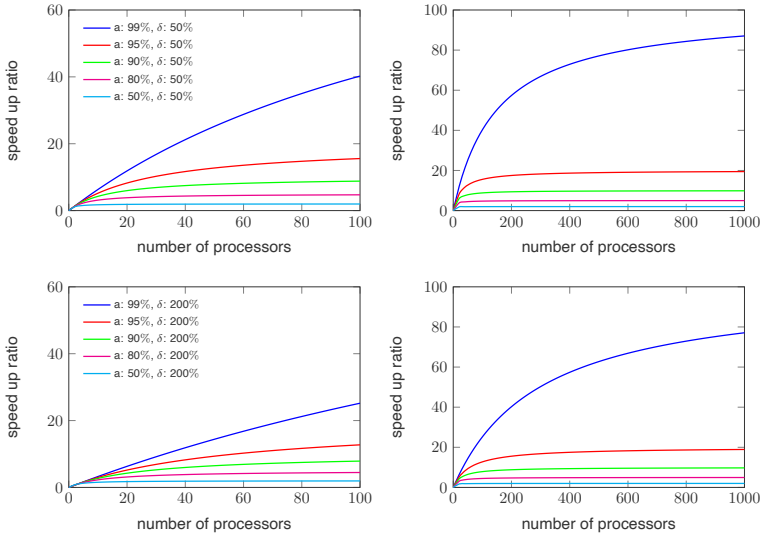
に高速化される
*δ: 並列化に伴って発生する通信などによる遅延率

(例) $a=0.8$, $n=8$, $\delta=0.2$ だと，3.125 倍

遅延がない場合


speed up ratio
number of processors
a: 99%, δ: 0%
a: 95%, δ: 0%
a: 90%, δ: 0%
a: 80%, δ: 0%
a: 50%, δ: 0%
0
20
40
60
80
100
200
400
600
800
1000

遅延がある場合


a: 99%, δ: 50%
a: 95%, δ: 50%
a: 90%, δ: 50%
a: 80%, δ: 50%
a: 50%, δ: 50%
speed up ratio
number of processors
0
20
40
60
80
100
200
400
600
800
1000

a: 99%, δ: 200%
a: 95%, δ: 200%
a: 90%, δ: 200%
a: 80%, δ: 200%
a: 50%, δ: 200%
speed up ratio
number of processors
0
20
40
60
80
100
200
400
600
800
1000

結局のところ

- 並列化できない箇所が信じられないくらい足を引っ張る
- 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しれない

目次（この講習会の内容）

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強い方から並べると...

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

- 一般に，上の方がプログラミングは容易
- 上２つはラップトップなどでも試せる
- ハードウェアは下の方がスケールしやすい

SIMD / ベクトル化

- ハードウェア，ソフトウェア，ライブラリの
  「準備」をしさえすれば容易に利用できる.
- 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.

SIMD / ベクトル化：内積計算の例

- C / C++ on SQUID:

  #pragma simd ← #pragma simd をつけるだけ

  ```
  for(i=1;i<length(x);i++){ s += x[i] * y[i]; }
  ```

- Fortran90/SX on SQUID

  !DEC# SIMD を挿入

- Julia lang:

  @simd for i=1:length(x) ← @simd をつけるだけ

  ```
    @inbounds s += x[i] * y[i]
  end
  ```

実際に，6〜7倍高速 (1万次元ベクトル, 1万回平均)

Macbook Air	12.689 μs → 1.967 μs
Mac mini	9.175 μs → 1.398 μs
Mac Pro	9.170 μs → 1.589 μs
Squid	11.805 μs → 1.586 μs

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化」というディレクティブを書き入れるくらい. (thread を用いると少し難しい)
- 移植性は高い.
- 解説書は多い.
- やや高速化しにくい.
- ソフトウェアとしては
  - Open MP
  - OS や言語の用意するライブラリ
    - Grand Central Dispatch (MacOS X 10.6, FreeBSD),
    - intel TBB, Google Go, Rust など

サンプル：OpenMP 的な並列化 (1)

Fortran の例

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

- 並列化したいところをディレクティブで挟むのが基本.
- C/C++ の場合は #pragma omp parallel など.
- 並列度等はコンパイラや環境変数で指定.

サンプル：OpenMP 的な並列化 (2)

Julia lang の例（コイントス）

```
nheads = @distributed (+) for i=1:200000000
    Int(rand(Bool))
end
```

Macbook Air	デュアルコア	1.654 s → 1.010 s	約1.6倍高速
Mac mini	6 コア	1.271 s → 250 ms	約5倍高速
Mac Pro	28 コア	494.4 ms → 25.7 ms	約19倍高速
Mac Studio	20 コア	243.4 ms → 18.8ms	約13倍高速
Squid	38コア	575.7 ms → 13.254 ms	約44倍高速

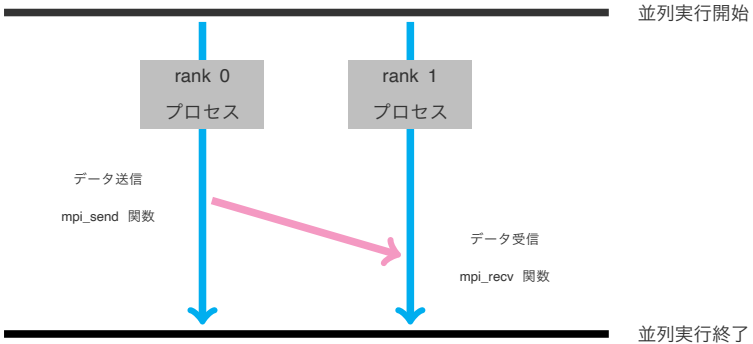
SIMD, OpenMP の並列化手法ならば，通常のプログラミング能力で十分.

マシン間並列化：分散メモリ

- **通信** (Message)：
  並列して動く各部分同士の情報のやりとり
- 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 (移植性はやや低い)
- 解説書は多い
- スーパーコンピュータはほぼこれ
- 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

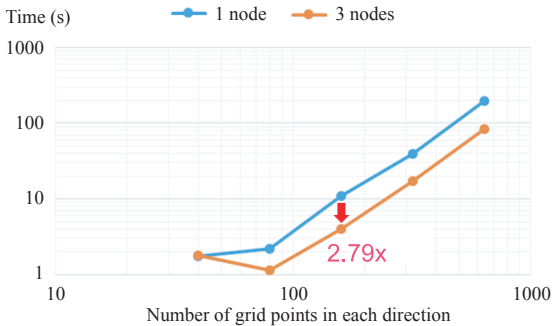
MPI

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



MPI：例

非線形Schrödinger方程式の数値計算 (Reedbush-U @ 東大)



T. Sakai, S. Kudo, H. Imachi, Y. Miyatake, T. Hoshi, Y. Yamamoto
A parallelizable energy-preserving integrator MB4 and its application to quantum-mechanical wavepacket dynamics
Japan J. Indust. Appl. Math., 38 (2021) 105–123.

目次（この講習会の内容）

まとめ

- ハードウェアによって並列化の方法は異なる.
  → ソフトウェアはそれに合わせて選択.
- (他に比べ) MPI はやや敷居が高い.
- SQUID-CPU (阪大スパコン) ：
  1 ノード (2 cpu) でおさまる計算ならば，テクニック的には割と容易.
  (ベクトル化率を高める為の工夫はまた別に必要)
- 普通のPCで 4 コア持っていたりする.
  → 4 倍 (弱) く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.
  SQUIDの情報：`http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/system/manual/squid-use/`