

初めてのスパコン

大阪大学サイバーメディアセンター 招へい教授

木戸 善之

2024/09/05

目次

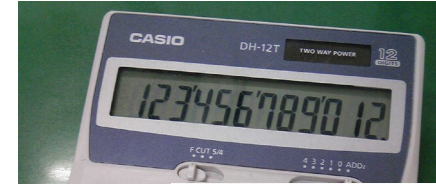
1. スパコンの概要

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、天文地学...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？
- Frontair: 1Exa FLOPS over (1×10^{18} 回)
- 富岳: 400Peta FLOPS over (4×10^{17} 回)

Y: ヨタ

Z: ゼタ

E: エкса P: ペタ T: テラ G: ギガ M: メガ k: キロ

1,000,000,000,000,000,000

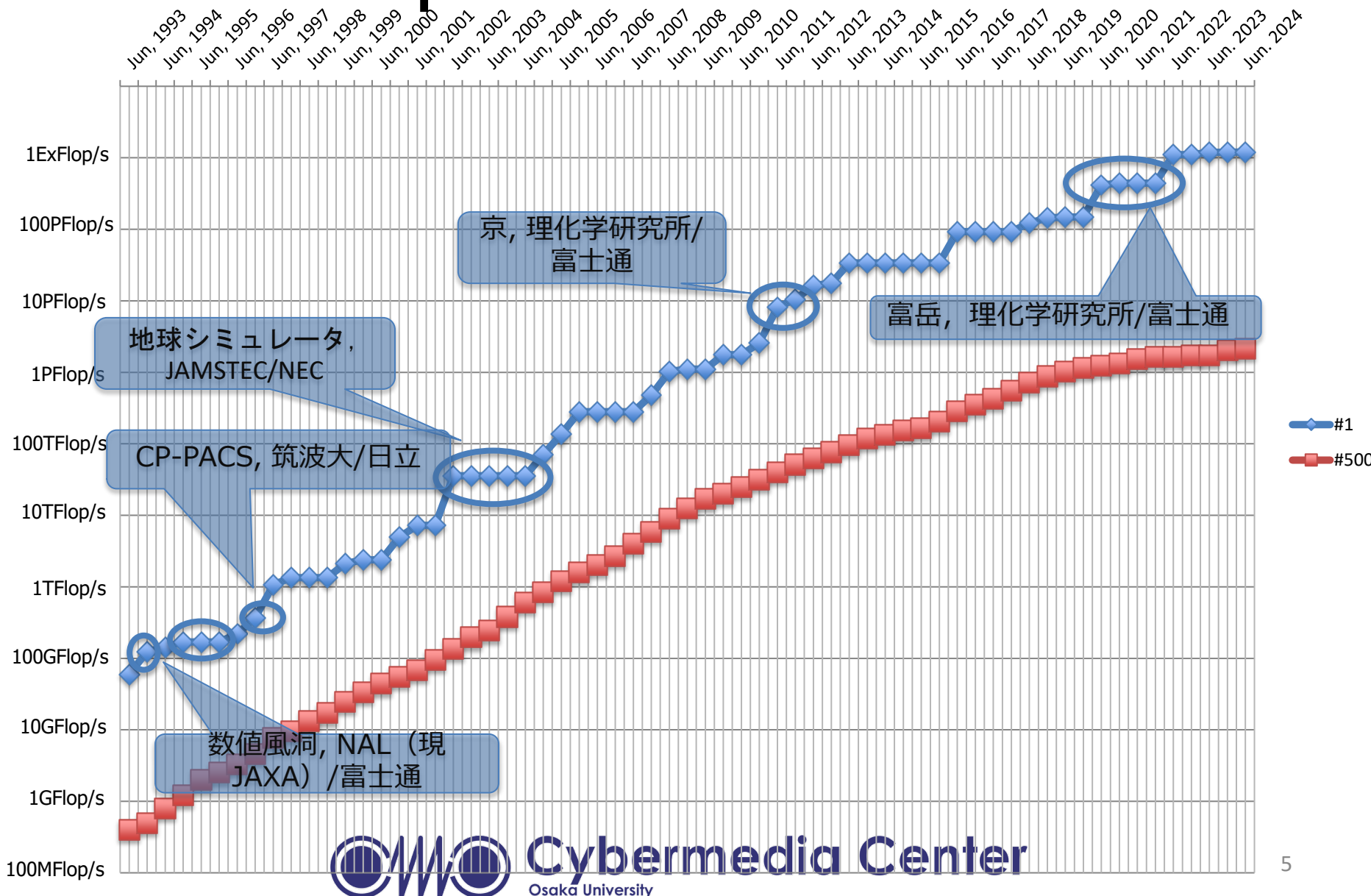
世界初のスパコン
CDC 6600

3,000,000



Cybermedia Center
Osaka University

Top500 Jun. 2024

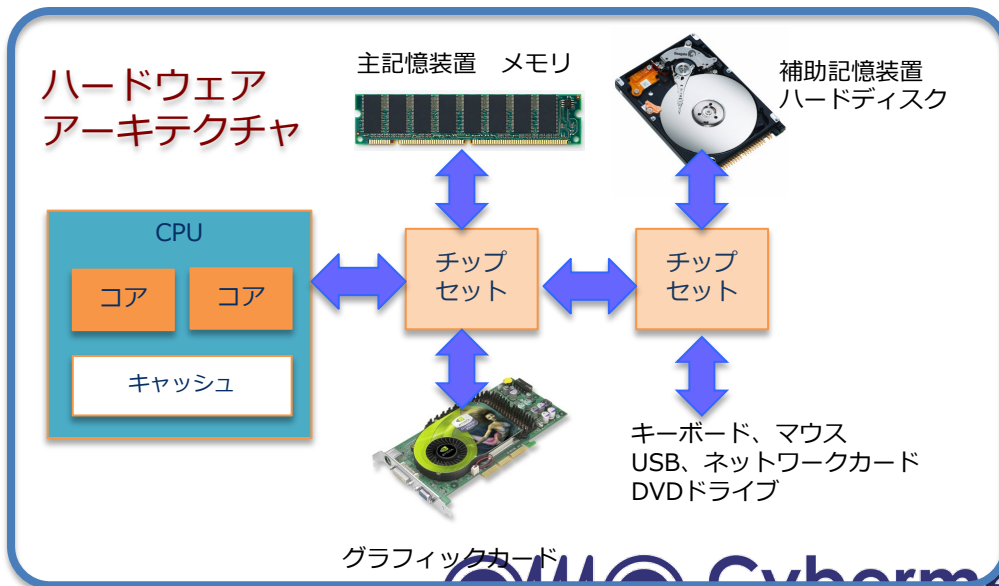
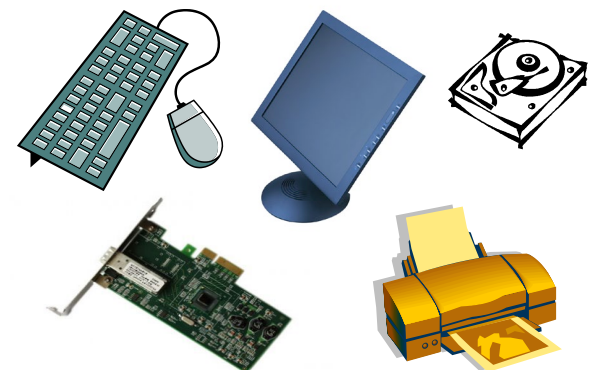
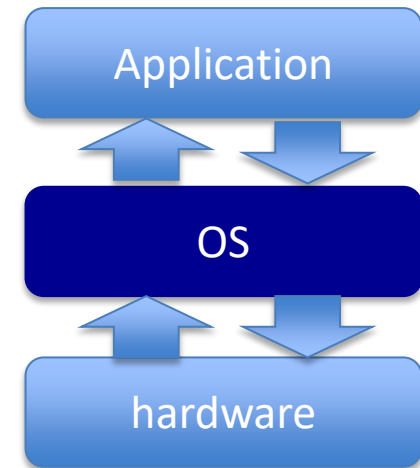


日本のスパコン

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	4
TSUBAME4.0	東工大	HPE	25.5 PFLOPS	31
AI Bridging Cloud Infrastructure (ABCI) 2.0	産総研	Fujitsu	22.2 PFLOPS	39
Wisteria/BDEC-01 (Odyssey)	東大	Fujitsu	22.1 PFLOPS	40
AOBA-S	東北大	NEC	17.2 PFLOPS	61
TOKI-SORA	JAXA	Fujitsu	16.5 PFLOPS	64
-	気象庁	Fujitsu	15.6 PFLOPS	77
Earth Simulator -SX-Aurora TSUBASA	JAMSTEC	NEC	9.9 PFLOPS	95
Plasma Simulatar	NIFS	NEC	7.8 PFLOPS	121
Camphor3	京大	NEC/DELL	6.7 PFLOPS	137
不老	名古屋	Fujitsu	6.6 PFLOPS	143
SQUID	阪大	NEC	6.1 PFLOPS	152

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

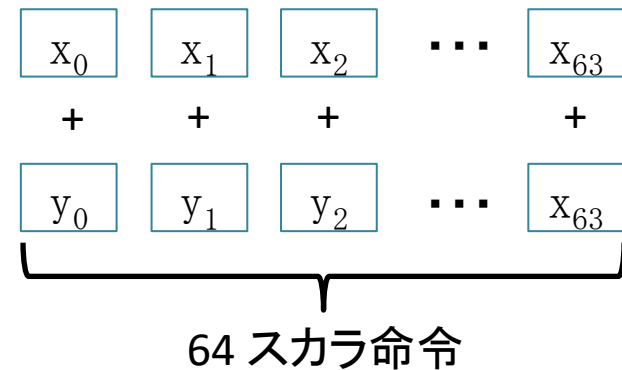


ベクトル計算とスカラ計算

スカラ

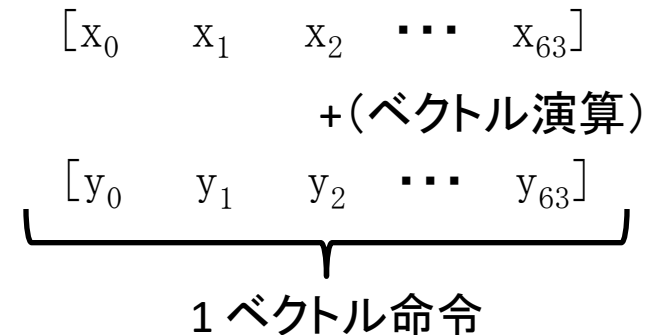
- 計算機の命令を1つずつ実行
- 逐次的に命令を実行
- 高速化: パイプライン処理, スーパースカラ
- 代表システム: 富岳、Tsubame、etc.
- 得意な計算: 遺伝子相同性検索

行列和の計算



ベクトル

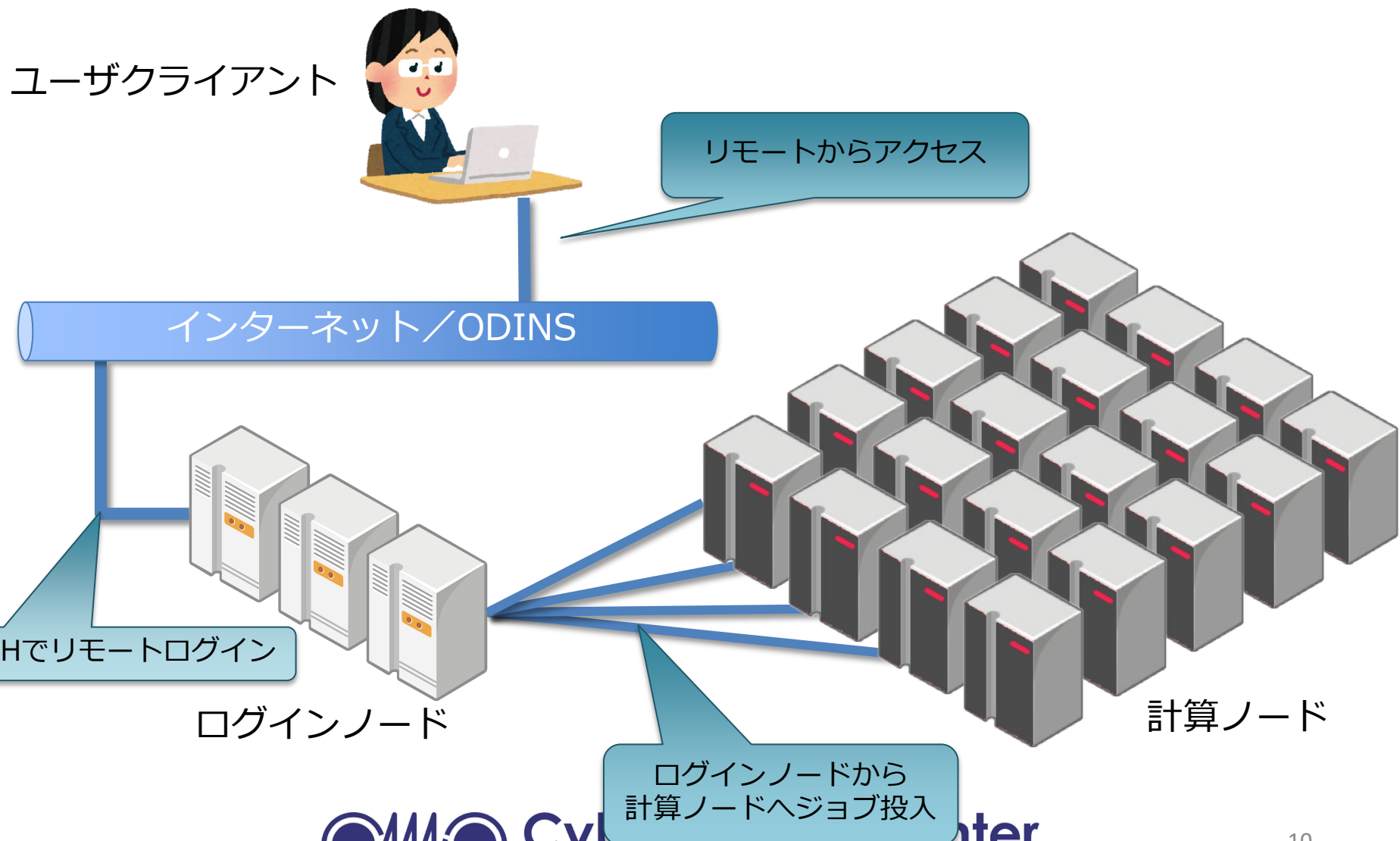
- 複数の命令を一つにまとめて実行
- 同じ命令(演算)に対し異なるデータ(項)で実行する場合、1つにまとめて実行することができる
- 代表システム: 阪大SX-ACE、地球シミュレータ
- 得意な計算: 気候シミュレーション、流体解析



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

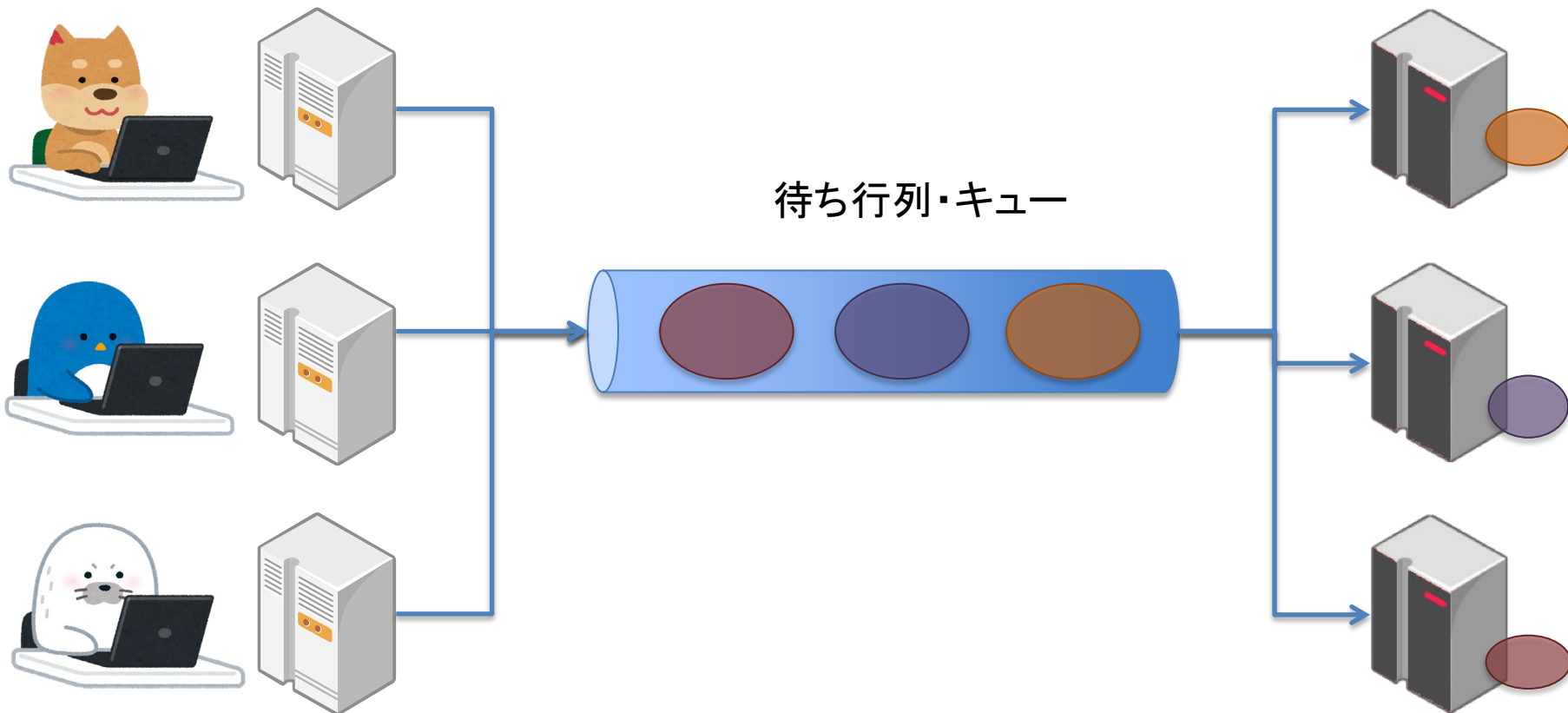


ジョブ投入 バッチキューシステム

ログインノード

計算ノード

待ち行列・キュー



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”

OCTOPUS
2024年3月 供用停止

お疲れ様でした！

OCTOPUS

Osaka university Cybermedia cenTer
Over-Petascale Universal Supercomputer

データ集約基盤
“ONION”



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”



SQUID

Supercomputer for Quest to Unsolved
Interdisciplinary Datascience

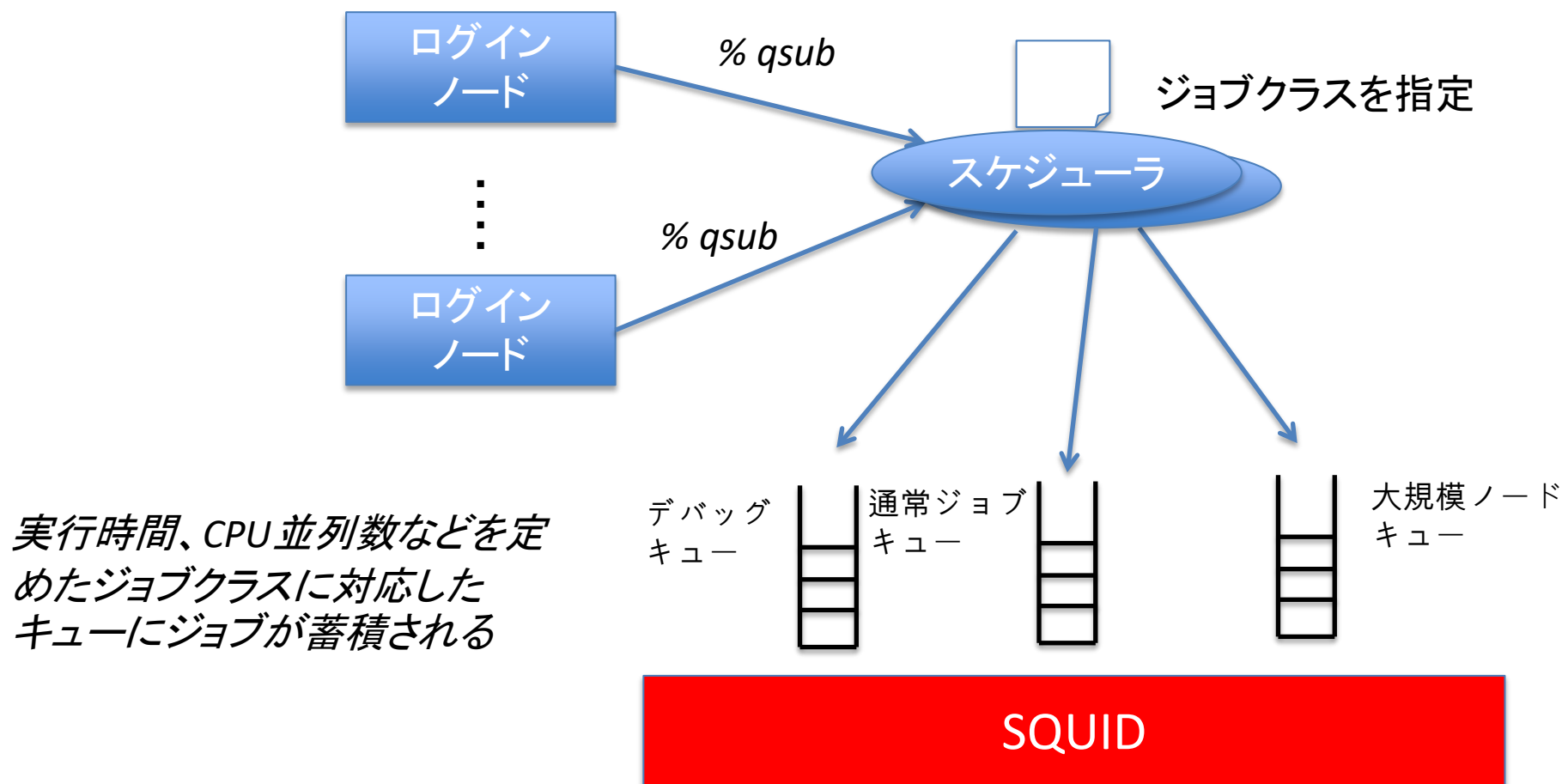
高性能計算・データ分析基盤システム “SQUID”



Supercomputer for Quest to Unsolved
Interdisciplinary Datascience

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)	

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

- 6/12 OpenMP入門
- 6/17 並列プログラミング入門 (OpenMP/MPI)
- 6/18 スーパーコンピュータ バッチシステム入門/応用
- 6/24 SX-Aurora TSUBASA 高速化技法の基礎
- 6/26 ONION活用講習会
- 6/27 GPUプログラミング入門 (OpenACC)
- 6/28 コンテナ入門
- 7/4 GPUプログラミング実践 (OpenACC)
- 7/9 汎用CPUノード 高速化技法の基礎 (Intelコンパイラ)
- 9/2 利用者交流会: Pythonチュートリアル (初級編)
- 9/5 初めてのスパコン <- イマココ
- 9/25 スパコンに通じる並列プログラミングの基礎
- http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/lecture_event/lecture/