

初めてのスパコン

大阪大学D3センター 招へい教授

木戸 善之

2025/06/05

目次

1. スパコンの概要

2. D3センターのスパコン

1. スパコンの概要

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



1. スパコンの概要

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理を行い出力する装置



計算機の速さって？

- FLOPS (Floating-point Operations Per Second)

- 1秒間に浮動小数点演算を何回できるか？
- Frontair : 1Exa FLOPS over (1 x 10¹⁸回)
- 富岳 : 400Peta FLOPS over (4x10¹⁷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

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

世界初のスパコン
CDC 6600

3,000,000

1. スパコンの概要

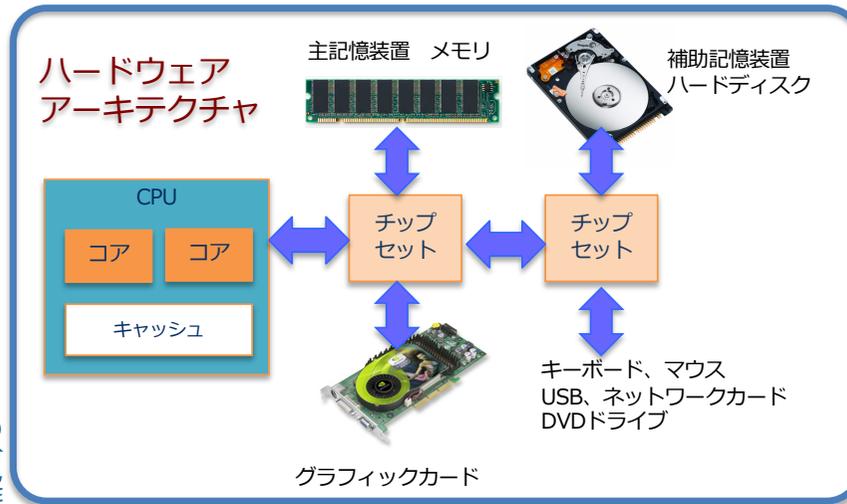
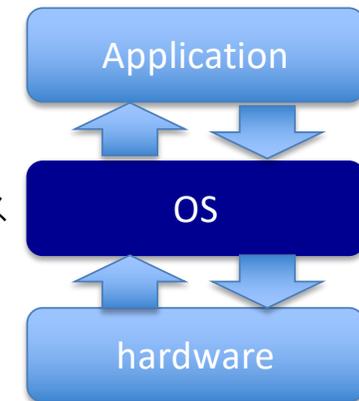
日本のスパコン

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

1. スパコンの概要

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



1. スパコンの概要

ベクトル計算とスカラー計算

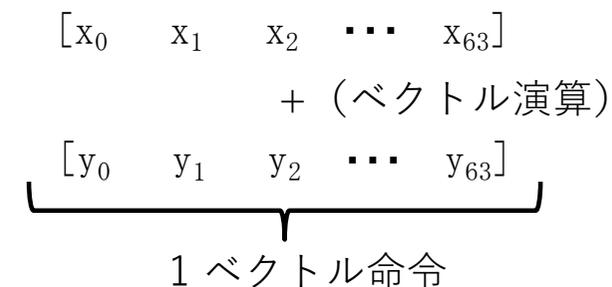
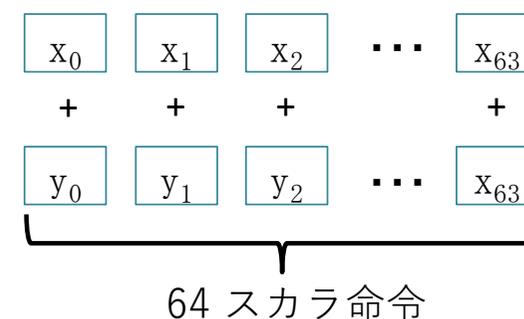
- スカラー

- 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

- 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SQUID、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

行列和の計算



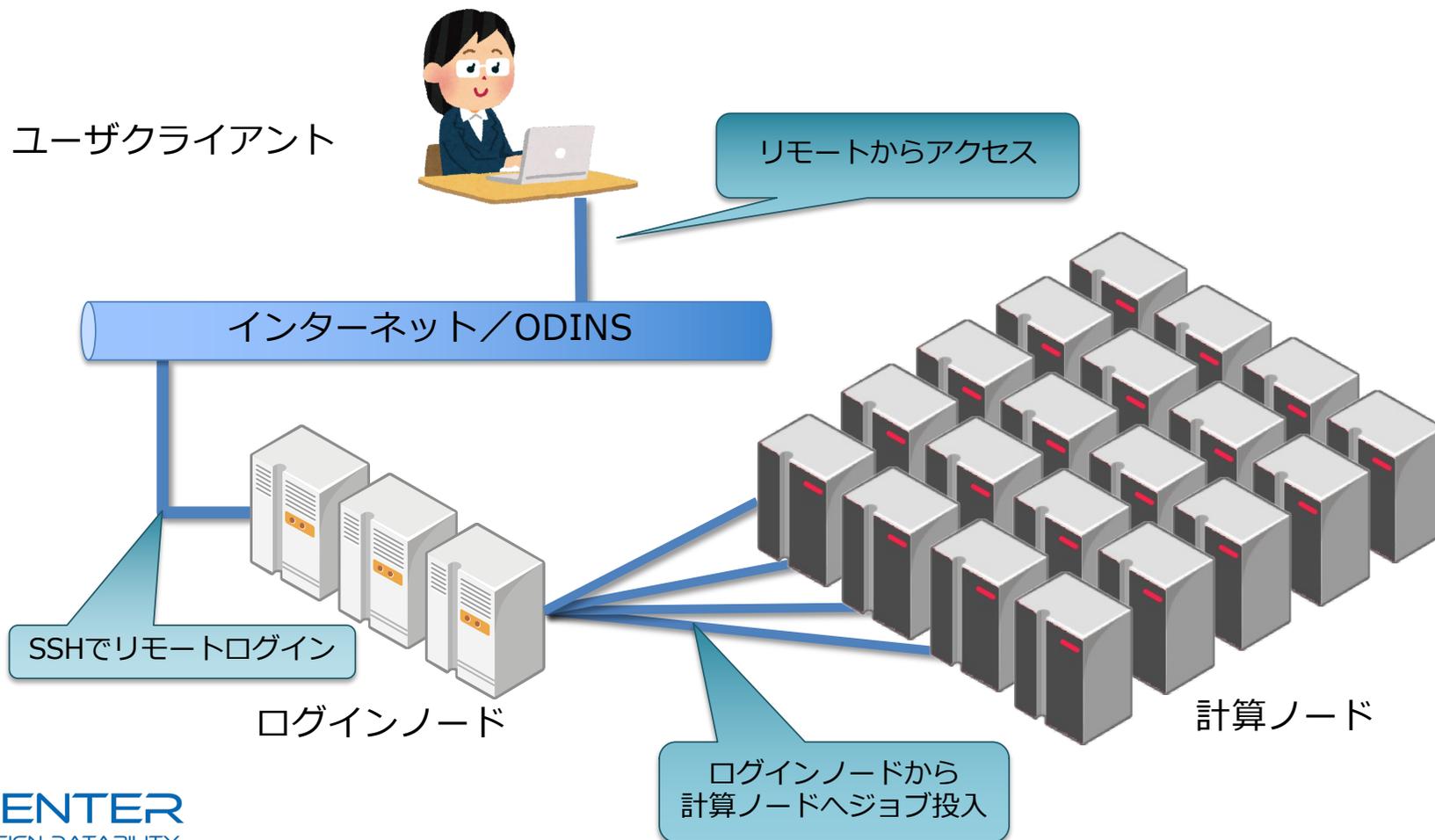
1. スパコンの概要

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

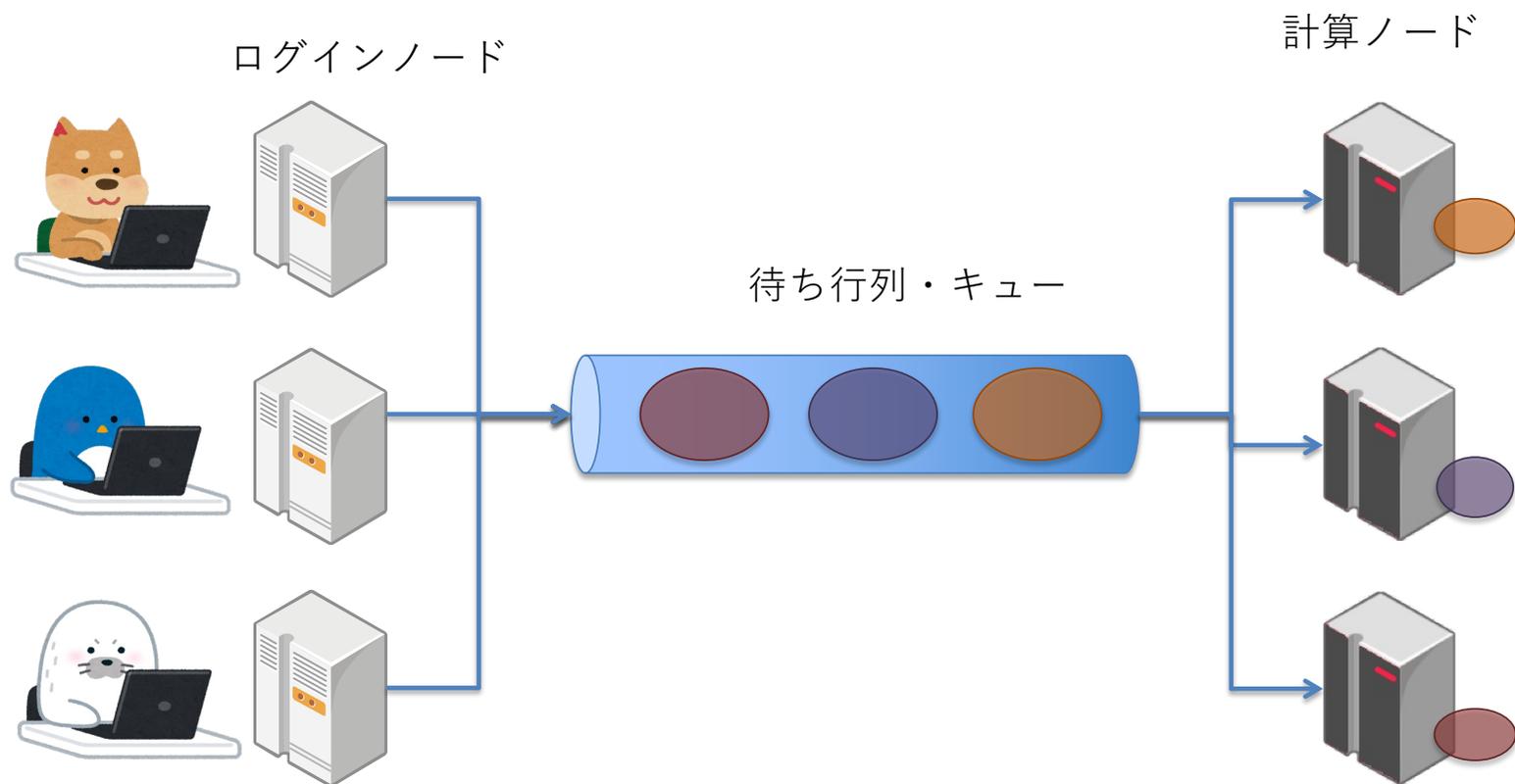
1. スパコンの概要

コンピュータ・クラスタ



1. スパコンの概要

ジョブ投入 — バッチキューシステム



1. スパコンの概要

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.
$
```

2. D3Cのスパコン

D3C大規模計算機システムサービス

汎用計算機システム
"OCTOPUS"

CPU
GPGPU

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

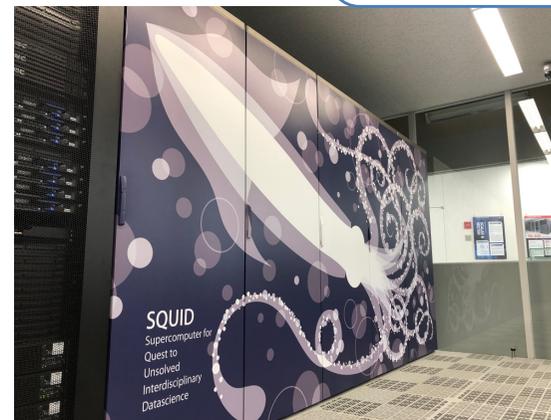


汎用計算機システム
"OCTOPUS2"
2025年秋頃稼働予定!



高性能計算・データ分
析基盤システム
"SQUID"

CPU
ベクトルプロセッサ
GPGPU



データ集約基盤
"ONION"

オブジェクトストレージ



Supercomputer for Quest to Unsolved
Interdisciplinary Datascience

高性能計算・データ分析基盤システム"SQUID"

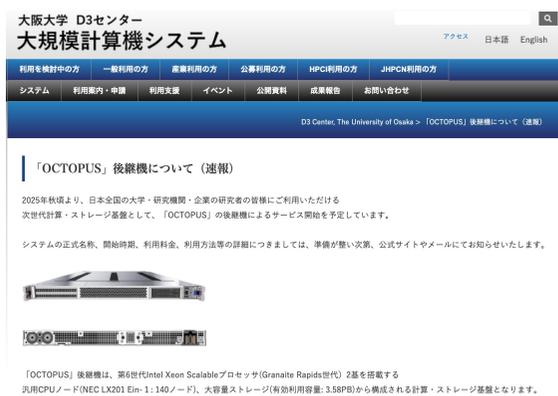


Supercomputer for **Q**uest to **U**nsolved
Interdisciplinary **D**atascience

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)	

2. D3Cのスパコン

汎用計算機システム"OCTOPUS"後継機



OCTOPUS

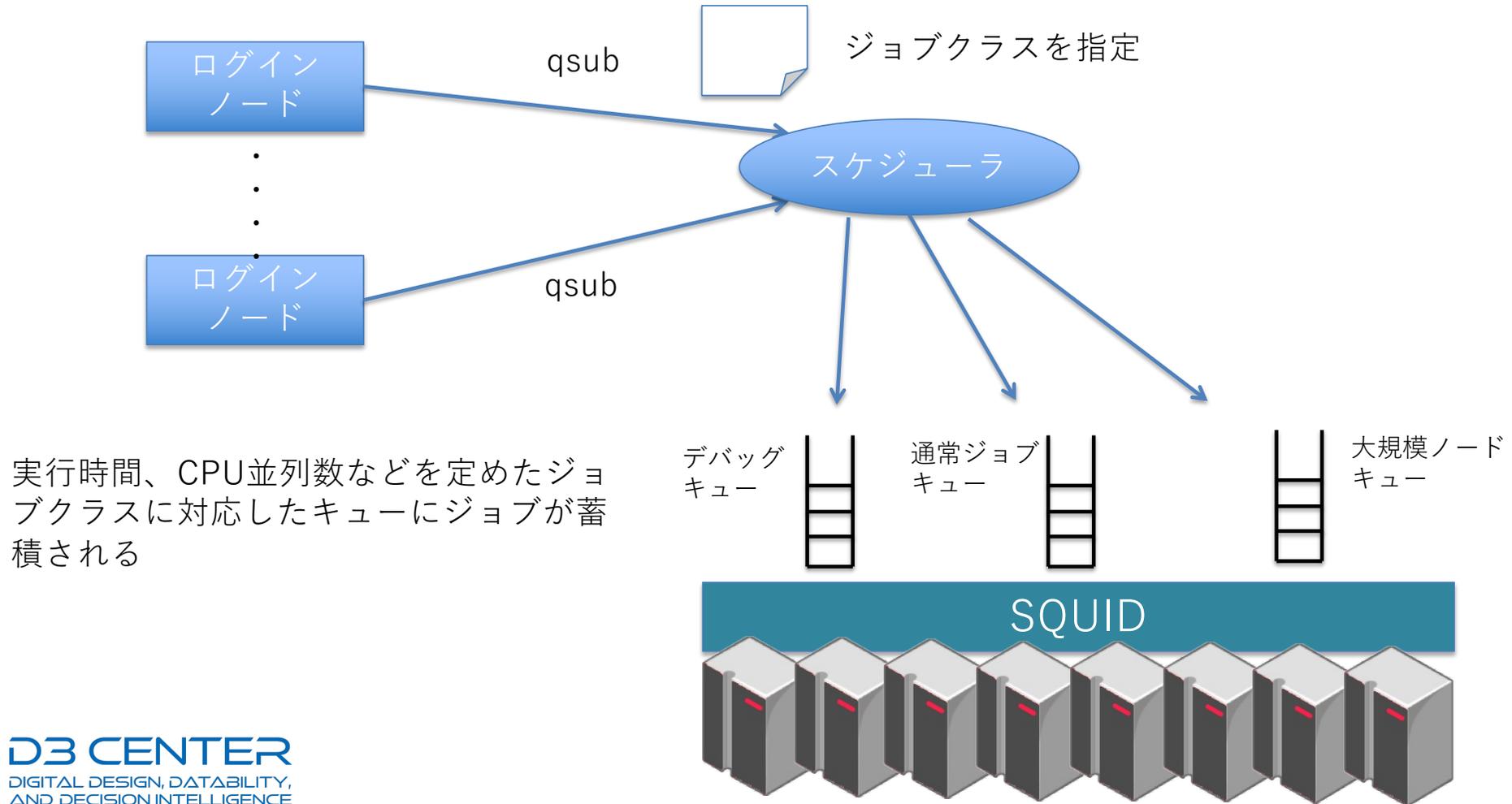
Osaka university Cybermedia cenTer
Over-Petascale Universal Supercomputer

総演算性能	2.293 PFLOPS	
ノード構成	汎用CPUノード群 140 ノード (16.384TFLOPS)	CPU : Intel Xeon (Granite Rapids) 2.00 GHz 128コア × 2基 MEM : 768 GB
ストレージ	DDN EXAScaler (Lustre)	HDD : 4.48 PB
ノード間接続	Mellanox InfiniBand NDR200 (200 Gbps)	

2025年秋頃稼働予定！

https://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/news/successor_to_octopus/

D3センター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

- 6/3 スパコンに通じる並列プログラミングの基礎
- 6/5 初めてのスパコン <- イマココ
- 6/9 OpenMP入門

- 6/6, 13 利用者交流会：Pythonチュートリアル（初級編）

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