

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

2025/10/10

目次

1. スパコンの概要

2. D3センターのスパコン

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



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)
 - 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)

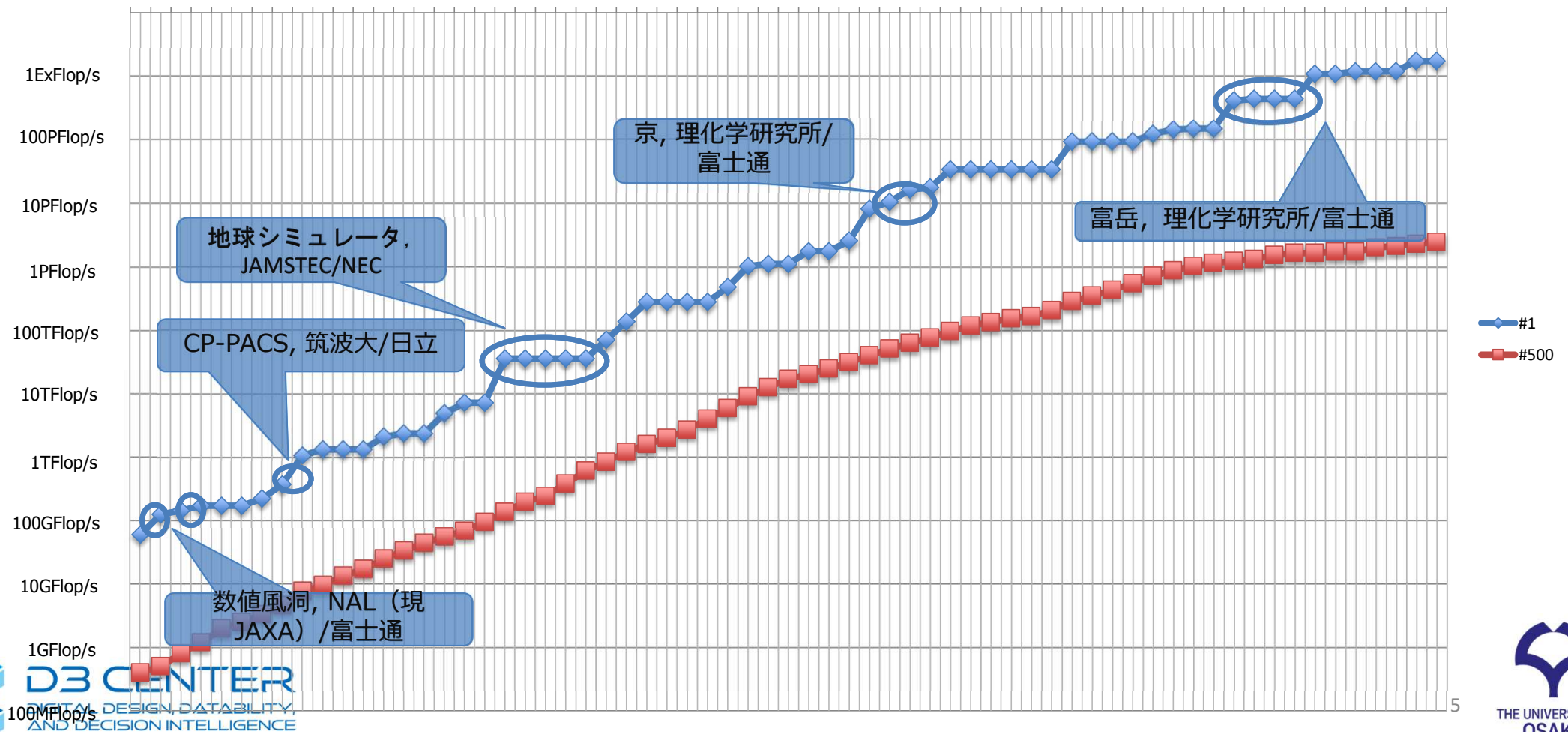
Y : ヨタ
Z : ゼタ E : エクサ P : ペタ T : テラ G : ギガ M : メガ k : キロ

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

Top500 Jun. 2025

[illegible]

1. スパコンの概要

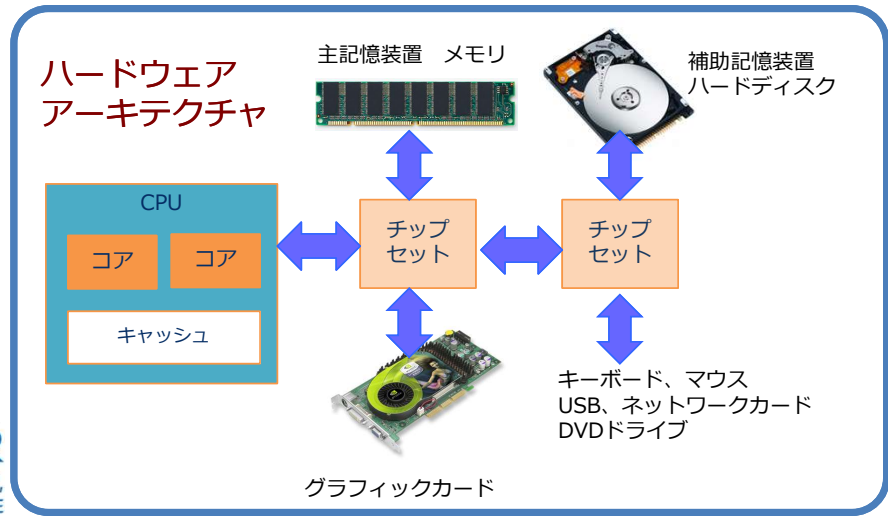
日本のスパコン

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	7
ABIC 3.0	産総研	Fujitsu	145.1 PFLOPS	15
CHIE-3	Softbank	Nvidia	91.9 PFLOPS	22
CHIE-2	Softbank	Nvida	89.8 PFLOPS	24
ABCI-Q	産総研	Fujitsu	74.6 PFLOPS	27
FPT AI Factory Japan	FPT AI Factory Japan	HPE	49.9 PFLOPS	36
Miyabi-G	筑波大／東大 (JCAHPC)	Fujitsu	46.8 PFLOPS	37
TSUBAME4.0	東科大	HPE	39.6 PFLOPS	46
SAKURACORE	さくらインターネット	Supermicro	34.0 PFLOPS	49
Wisteria/BDEC-01	東大	Fujitsu	22.1 PFLOPS	73
...	...	...	...	...
SQUID	阪大	NEC	6.1 PFLOPS	213

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



ベクトル計算とスカラ計算

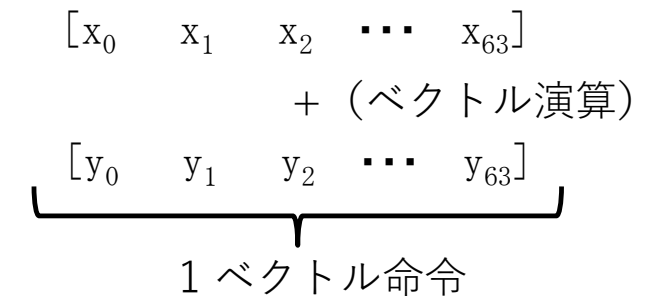
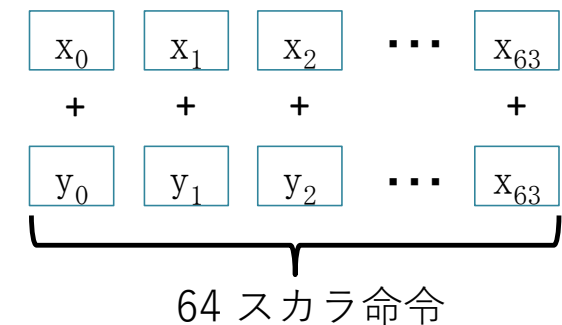
- スカラ

- 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

- 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

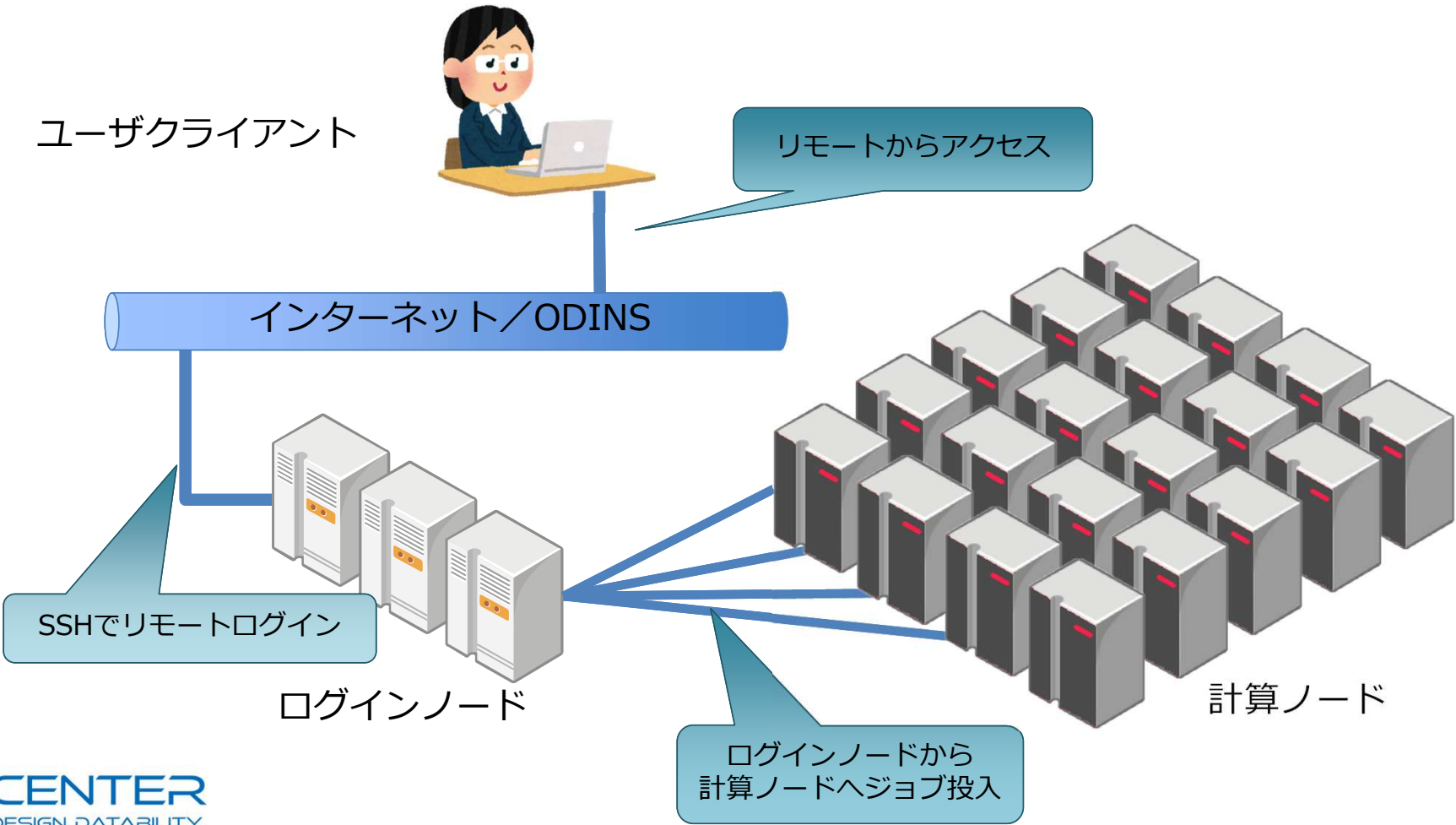
行列和の計算



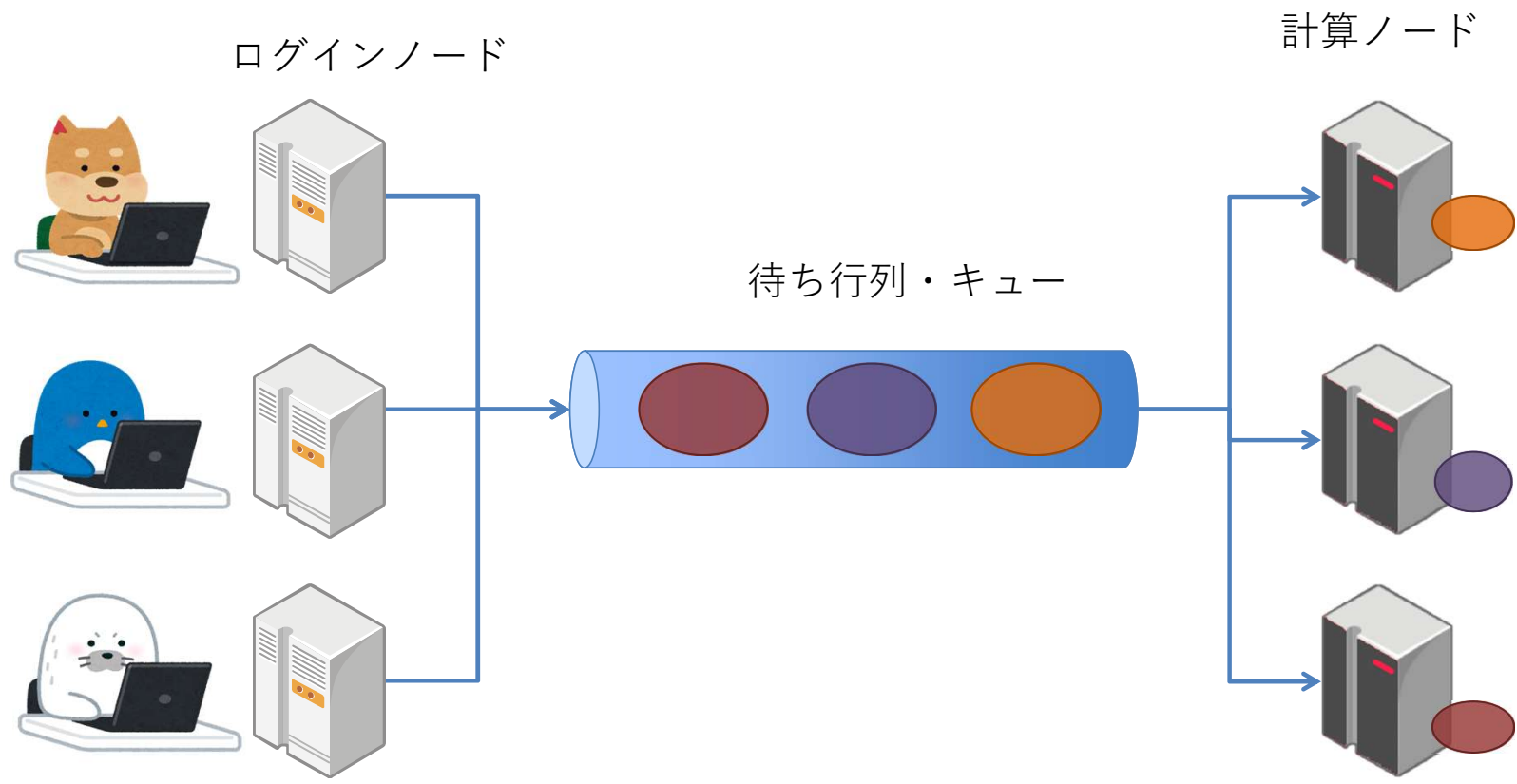
CPU, GPGPUとベクトルプロセッサ

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



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.
$
```


D3C大規模計算機システムサービス

次世代計算・ストレージ基盤
"OCTOPUS" **new!**

CPU



OCTOPUS
Osaka university Cybermedia cenTer
Over-Petascale Universal Supercomputer

データ集約基盤
"ONION"



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



SQUID
Supercomputer for Quest to Unsolved
Interdisciplinary Datascience

次世代計算・ストレージ基盤"OCTOPUS"



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)	

無料お試し利用！

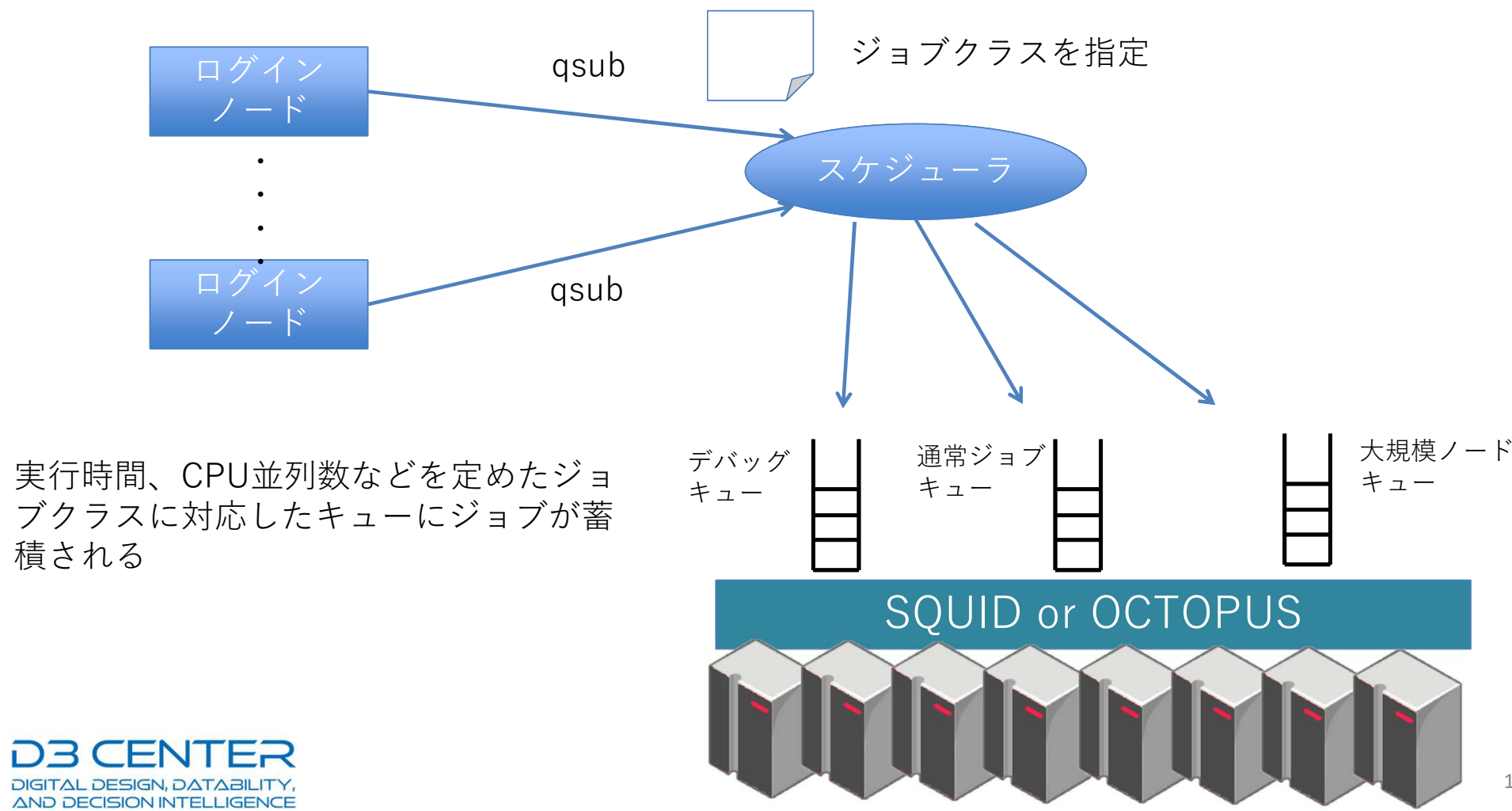
<https://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/octopus2-free-trial/>

高性能計算・データ分析基盤システム"SQUID"



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)	

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

- 10/2 コンテナ入門
- 10/9 AkaiKKR講習会－ハンズオン
- 10/10 初めてのスパコン <- イマココ
- 10/17 スパコンに通じる並列プログラミングの基礎
- 11/6 レーザー加工の理解と解析に向けたSALMON利用法講習会

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