計算科学が拓く世界

# スーパーコンピュータは何故スーパーか

学術情報メディアセンター
中島　浩

http://www.para.media.kyoto-u.ac.jp/jp/

username=super  password=computer

# 講義の概要

- 目的
  - 計算科学に不可欠の道具**スーパーコンピュータ**が
    - どうスーパーなのか
    - どういうものか
    - なぜスーパーなのか
    - どう使うとスーパーなのか

    について**雰囲気**をつかむ
- 内容
  - スーパーコンピュータの歴史を概観しつつ
  - スーパーである基本原理を知り
  - どういう計算が得意であるかを学んで
  - それについて**レポート**を書く

# どのぐらいスーパー？ (1/2)

-  は  の180万倍も高速

http://www.aics.riken.jp/jp/k/system.html

- 速さの単位＝FLOPS (フロップス)

＝FLoating-point Operations Per Second

＝浮動小数点演算毎秒

＝1秒間に実行可能な浮動小数点数の加減乗算回数

- 浮動小数点数
  - $10^{-308}$~$10^{308}$の実数を近似的に(10進16桁精度)表現したもの
  - 2.99792458...×$10^{8}$(m/s), 9.1093829140...×$10^{-31}$(kg)

-  11.5 P(ペタ $10^{15}$)FLOPS (1.15 京)

÷ 6.4 G(ギガ $10^{9}$ ) FLOPS (64億)

＝1,797,120

# どのぐらいスーパー？ (2/2)

- ＝  ×180万と  ＝  ×3 は**話が違う**
- 同じ土俵で比べるなら
  - N700系　：300km/h×1323人＝396,900人・km/h
  - ÷B767-300：880km/h×　270人＝237,600人・km/h
  - ＝1.67（倍も新幹線は飛行機より高速）
- 180万倍を細かく見ると
  - ：2.0GHz×8×8×88,128
  - ÷  ：1.6GHz×2×2×1
  - ＝1,797,120

ここがスーパー

Atom 330

Core i7なら
3.3GHz×8×6も

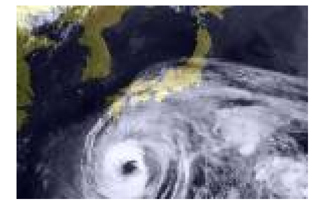
# スーパーコンピュータ (スパコン) とは (1/2)

- パソコンの数千倍～数万倍の規模・性能を持つ巨大な超高速コンピュータ
  - 世界最大・最高速マシン ≒パソコン x 180万
  - 京大スーパーコンピュータ ≒パソコン x 9万

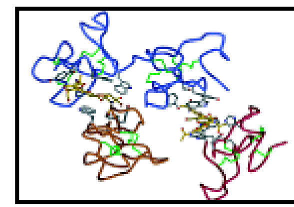
  ➔パソコンで1ヶ月かかる計算＝1.5秒～30秒
  （ただしスパコン向きの問題をうまくプログラムしたら）
- スパコンが高速な理由
  - 個々の部品(CPU, メモリなど)≒パソコン
  - 非常に多数のパソコン(のようなもの)の集合体
    - パソコン = 1~16 CPU
    - 京大スパコン = 40,208 CPU
    - 世界最高速スパコン = 705,024 CPU
    - 世界最大規模スパコン = 705,024 CPU

# スーパーコンピュータ (スパコン) とは (2/2)

- スパコンが得意な計算＝大量CPUによる分担計算＝超大量のデータを対象とする計算
  - 地球全体の気象・気候・海洋現象の予測
    ➔1km$^2$ あたり1データ
    ➔データ数≒5億(x 高さ方向)



  - 生体物質・化学物質・材料の解析
    ➔膨大な分子・原子数
    (e.g. 水1ml = 3.3 x 1兆 x 100億)

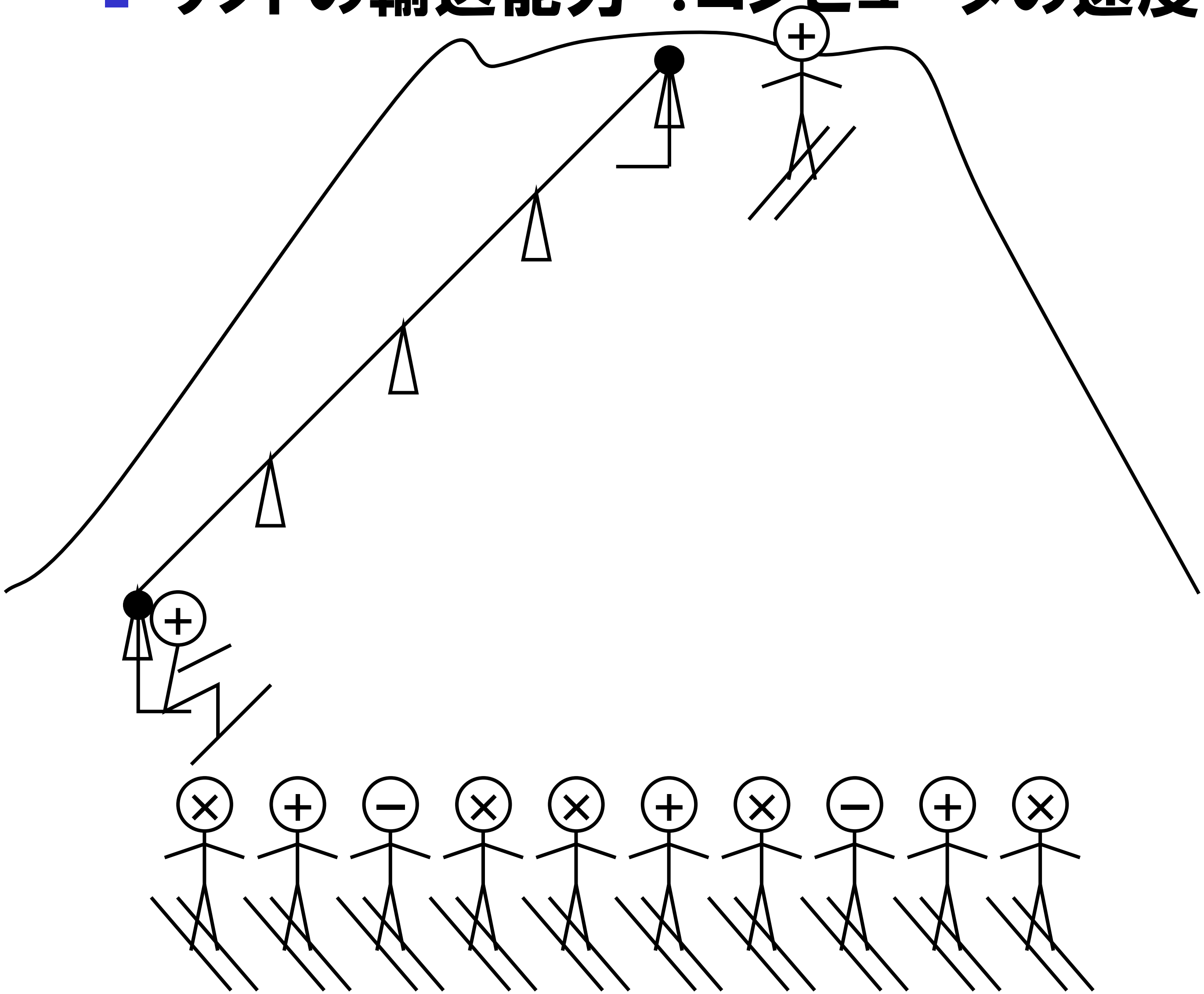


  - 自動車の空力・衝突解析
    ➔1mm$^2$ or 1cm$^3$ あたり1データ
    ➔データ数＝1~10億

  - Web 文書の解析
    (←自動翻訳用データ作成など)
    ➔文書数＝数億～数10億

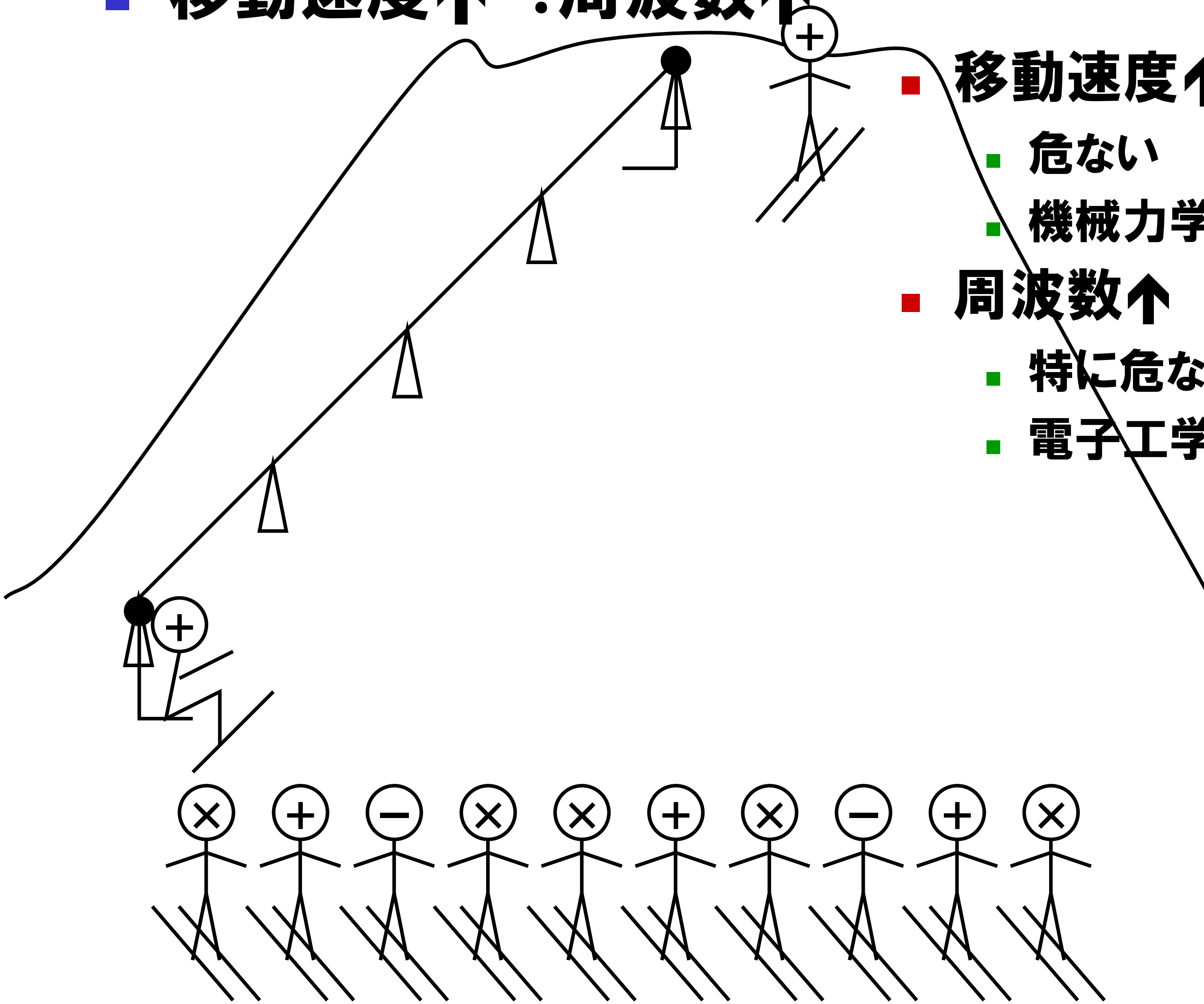
# スーパーにする方法

- リフトの輸送能力≒コンピュータの速度

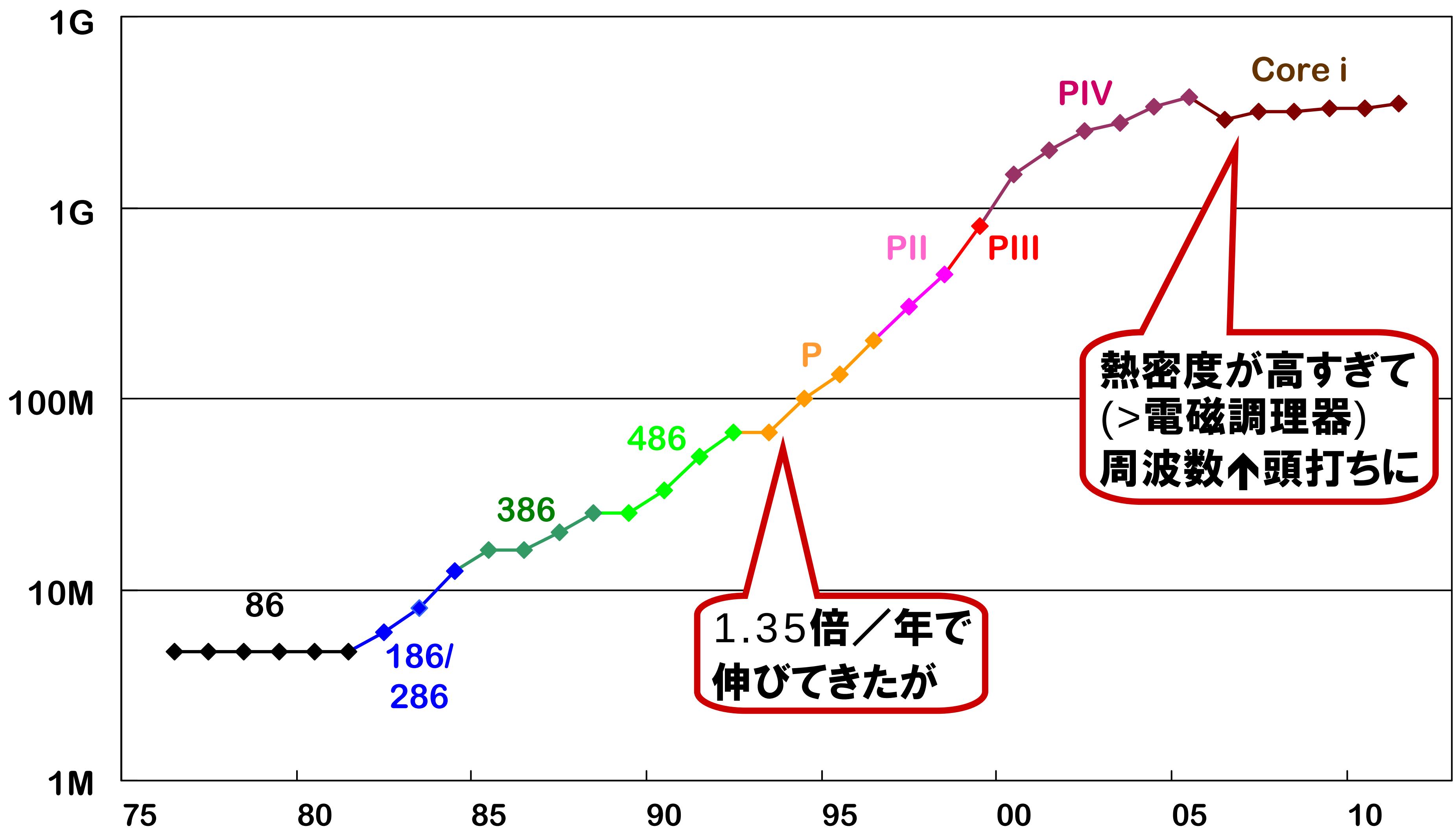


# スーパーにする方法：～1970

- 移動速度↑≒周波数↑
  - 移動速度↑
    - 危ない
    - 機械力学的に無理
  - 周波数↑
    - 特に危なくはない
    - 電子工学的に無理ではない？



# スーパーにする方法：周波数↑の歴史

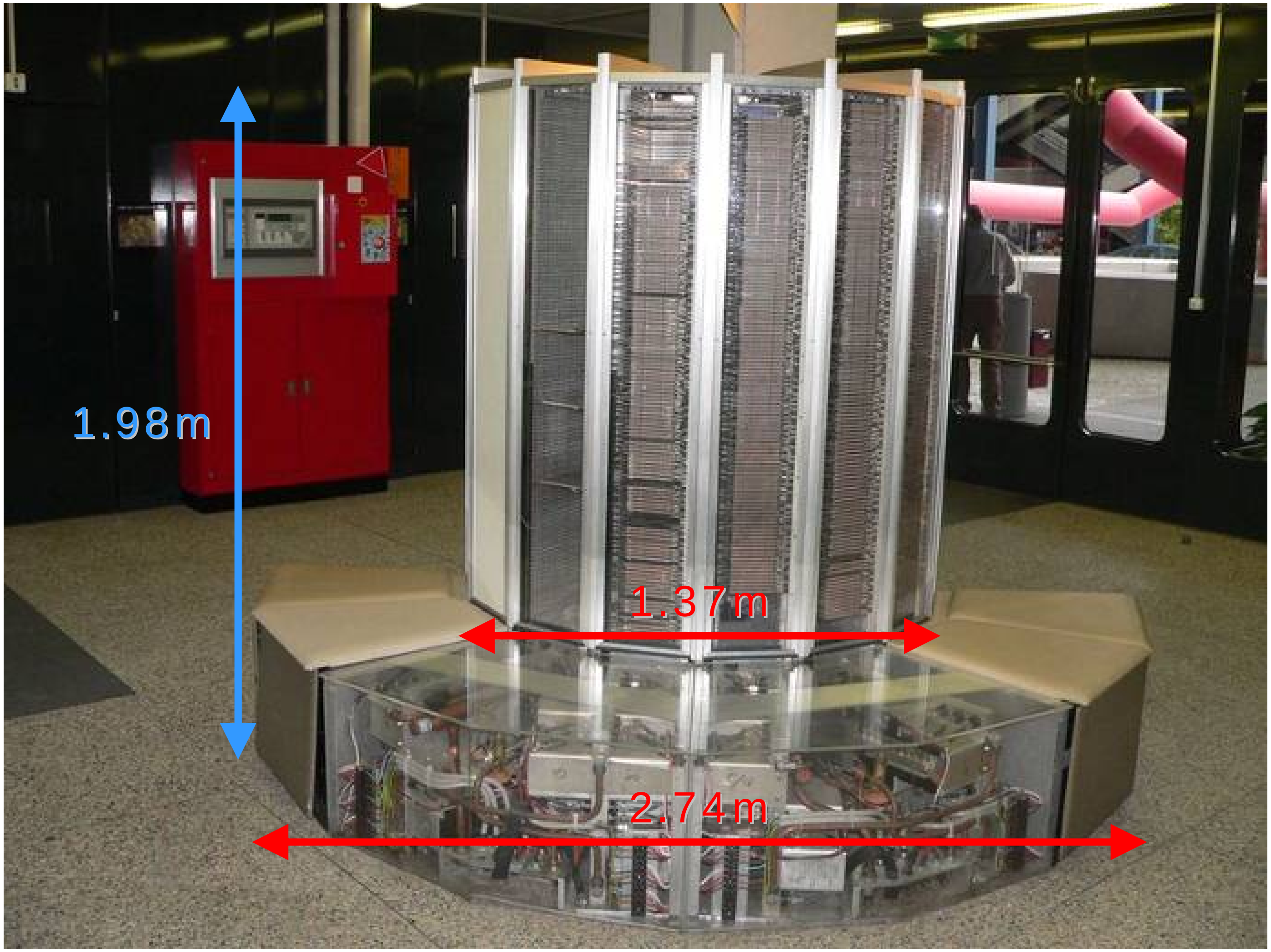


## ちょっと話を変えて：スーパーコンピュータの歴史
## そもそもの始まり：ベクトルマシン (1)



- 1976年：最初のスパコンCray-1登場
  - 動作周波数=80MHz (< 携帯電話)
  - 演算性能=160MFlops (< 携帯電話)
  - 消費電力=115kW
  - 大量の数値データ（ベクトル）に対する同種演算が得意
- 1976年（中島=20歳）での「スーパー」度
  - 最速@京大(富士通 F230-75) < 5MFlops
  - 最速@京大情報工学科(日立 H8350) < 1MFlops
  - Intel 8086/87(1978/80) ≒ 50KFlops

# そもそもの始まり：ベクトルマシン (2)

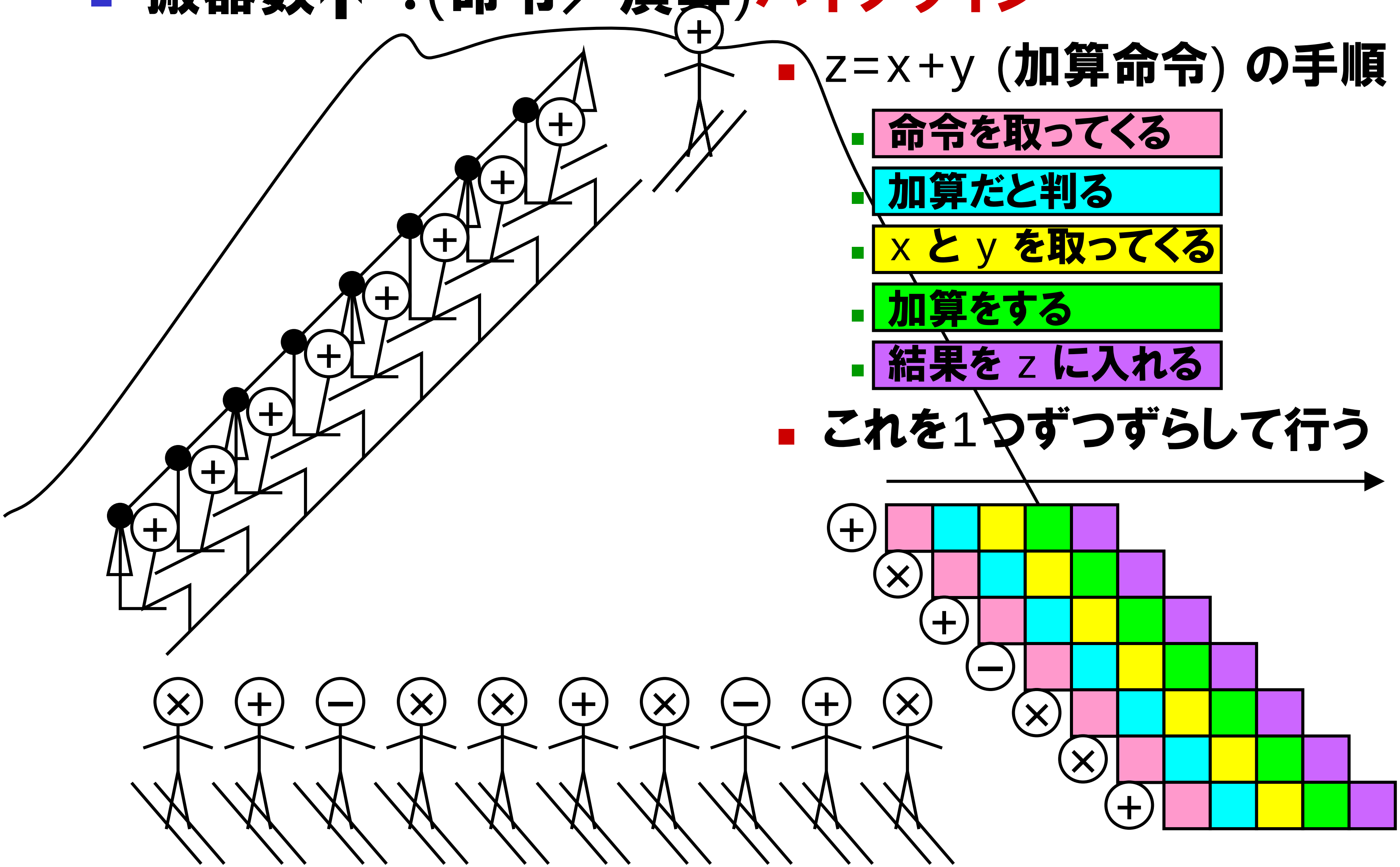



source: http://en.wikipedia.org/wiki/Image:Cray-1-p1010221.jpg

# 少し話を戻して
# スーパーにする方法：1970~



- 搬器数↑≒(命令／演算)パイプライン
  - z=x+y（加算命令）の手順
    - 命令を取ってくる
    - 加算だと判る
    - x と y を取ってくる
    - 加算をする
    - 結果を z に入れる
  - これを1つずつずらして行う



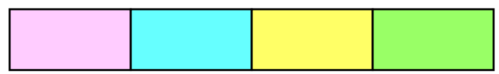
# スーパーにする方法：ベクトル計算の原理 (1)

- 大量数値データの同種演算を高速に行う方法

  例：$z_i = x_i \times y_i \quad (i = 1, 2, \ldots)$

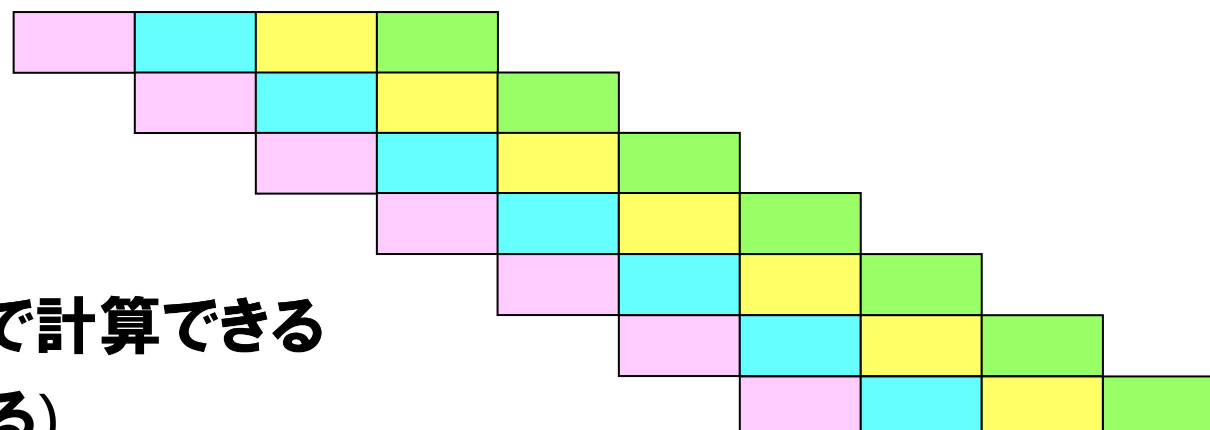
  - 1つの乗算をいくつか(たとえば4つ)の小さい操作に分ける

$z_i = x_i \times y_i$



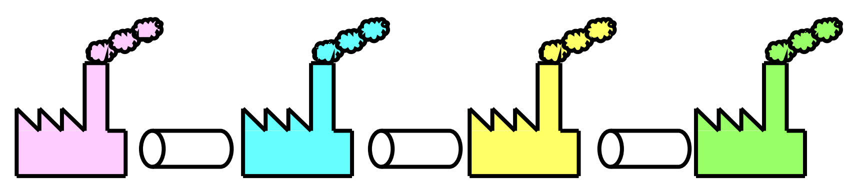
  - 多数の乗算を1小操作ずつ**ずらして**行う

$z_1 = x_1 \times y_1$
$z_2 = x_2 \times y_2$
$z_3 = x_3 \times y_3$
$z_4 = x_4 \times y_4$



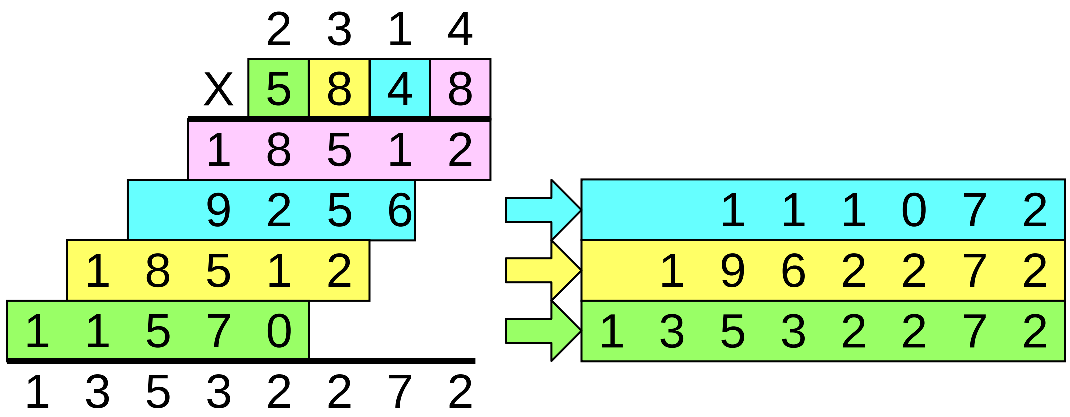
→**4倍の速度**で計算できる
(ように見える)

→(演算)**パイプライン処理**



# スーパーにする方法：ベクトル計算の原理 (2)

- 乗算を4分割してずらす考え方(たとえ話≠真実)




2314x5848=13532272

| | | | |
|---|---|---|---|
| 2314x8 | +2314x4 | +2314x8 | +2314x5 |

7872x6752=53151744

| | | | |
|---|---|---|---|
| 7872x2 | +7872x5 | +7872x7 | +7872x6 |

1778x7142=12698476

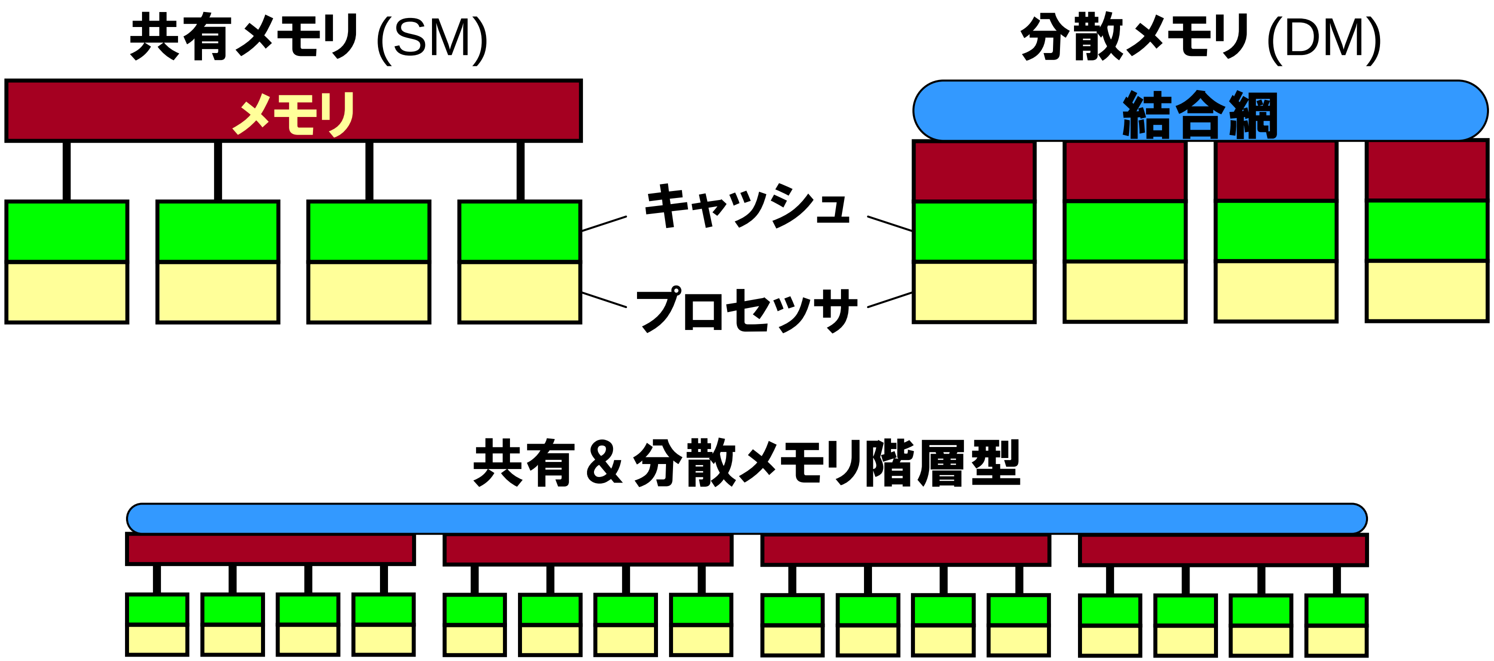
| | | | |
|---|---|---|---|
| 1778x2 | +1778x4 | +1778x1 | +1778x7 |

8485x1651=13843635

| | | | |
|---|---|---|---|
| 8385x1 | +8385x5 | +8385x6 | +8385x1 |

# もう一つの方法：並列マシン

- 1980年代: スカラーマルチプロセッサ台頭
  - 多数のパソコン(のようなもの)の集合体
  - Sequent Balance : 20 x NS32016 ('84)
  - Intel iPSC/1: 128 x i80286 ('85)



# また話を戻して
# スーパーにする方法：1990~



- **座席数↑≒スーパースカラー／SIMD**
- 京=2GHz×8×8×88128
  - **加減算を4つと**
  - **乗算を4つが**
- **同時にできる**
- **同時にできる演算って？**

# スーパーにする方法：並列演算

- 3元連立一次方程式

$$\begin{cases} 2x - 3y + 4z = 8 \\ 3x - 4y + 2z = 1 \\ 4x - 2y + 3z = 9 \end{cases}$$

$$\begin{cases} x - \frac{3}{2}y + \frac{4}{2}z = \frac{8}{2} \\ x - \frac{4}{3}y + \frac{2}{3}z = \frac{1}{3} \\ x - \frac{2}{4}y + \frac{3}{4}z = \frac{9}{4} \end{cases}$$

同時にできる除(乗)算

同時にできる加減算

$$\begin{cases} \left(-\frac{4}{3} + \frac{3}{2}\right)y + \left(\frac{2}{3} - \frac{4}{2}\right)z = \frac{1}{6}y - \frac{8}{6}z = \frac{1}{3} - \frac{8}{2} = -\frac{22}{6} \\ \left(-\frac{2}{4} + \frac{3}{2}\right)y + \left(\frac{3}{4} - \frac{4}{2}\right)z = \frac{8}{8}y - \frac{10}{8}z = \frac{9}{4} - \frac{8}{2} = -\frac{14}{8} \end{cases}$$

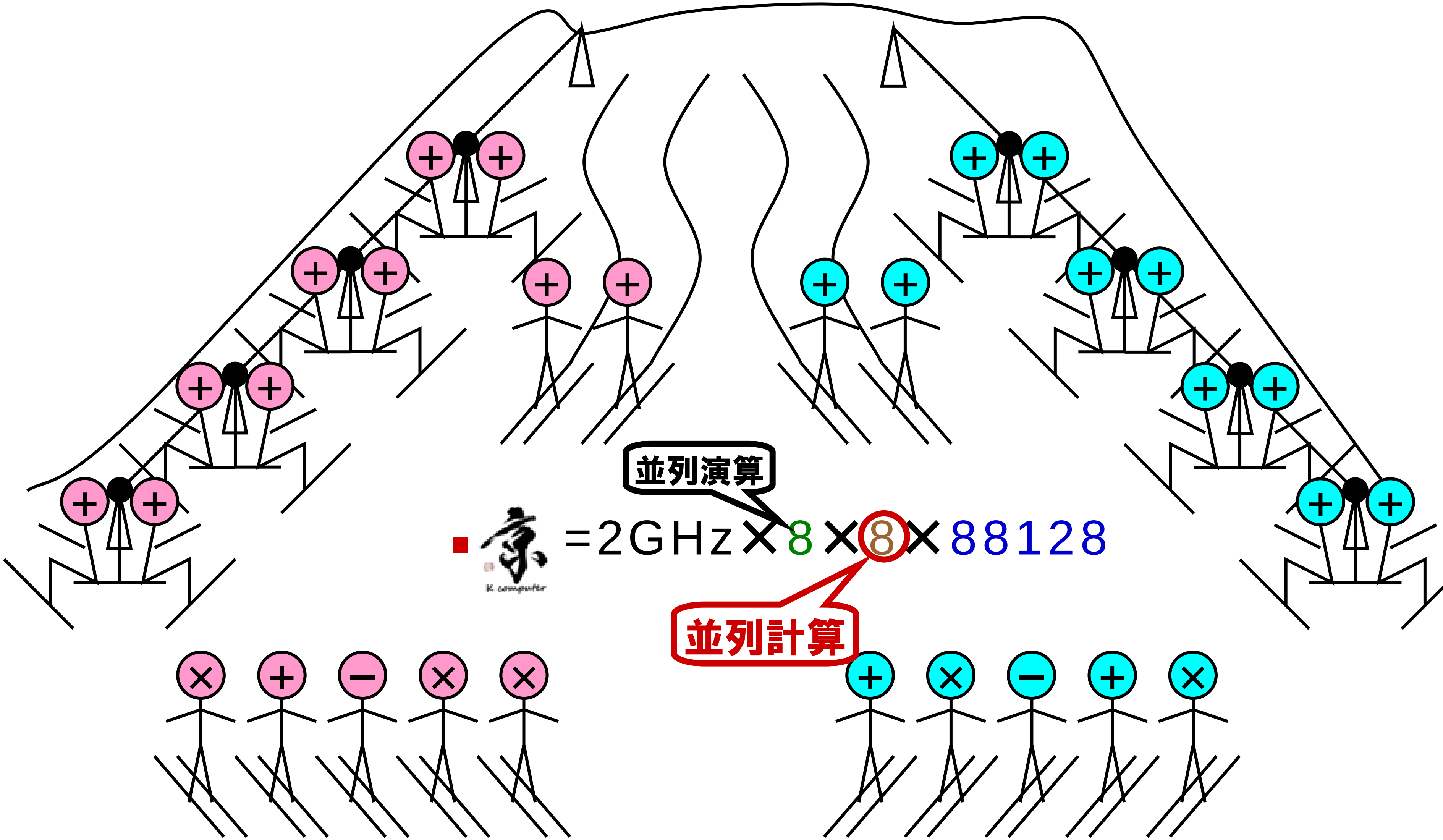
$$\left(-\frac{10}{8} + 8\right)z = \frac{54}{8}z = -\frac{14}{8} + 22 = \frac{162}{8} \Rightarrow z = 3$$

$$y = -22 + 8 \cdot 3 = 2$$

$$x = \frac{8}{2} + \frac{3 \cdot 2}{2} - \frac{4 \cdot 3}{2} = \frac{2}{2} = 1$$

# スーパーにする方法：2000～ (1980~)

- リフト数↑≒マルチコア／共有メモリ並列マシン

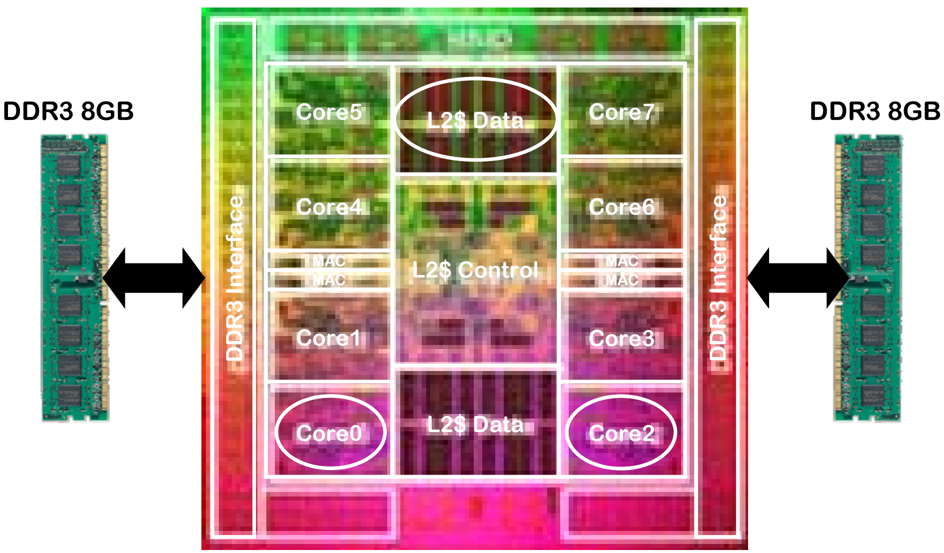



- 京 $=2\text{GHz} \times 8 \times 8 \times 88128$

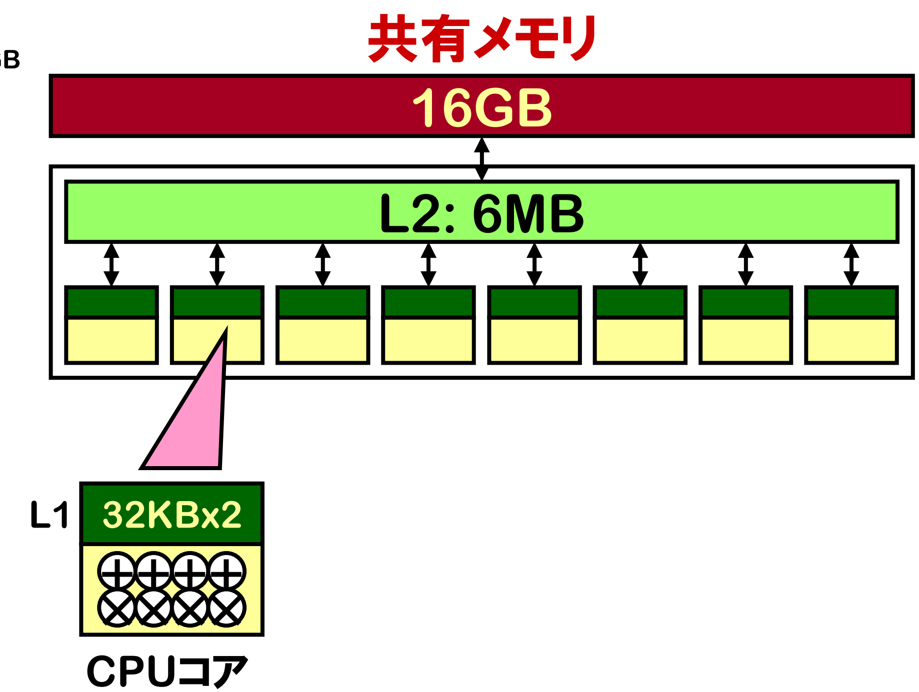
# スーパーにする方法: 京 のプロセッサ

K computer

FUJITSU SPARC 64 VIIIfx




http://www.aics.riken.jp/jp/k/system.html

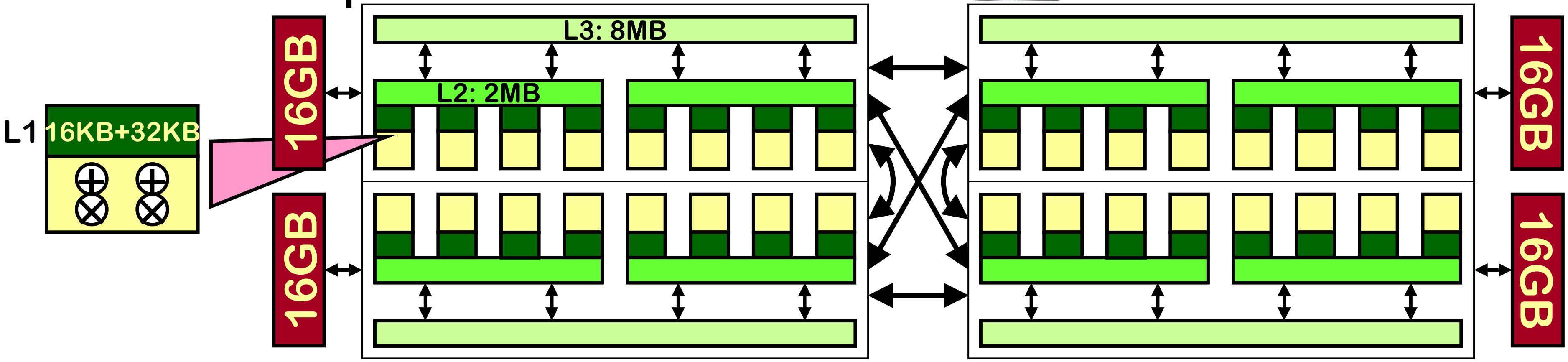


# スーパーにする方法
# 京大スパコンのプロセッサ



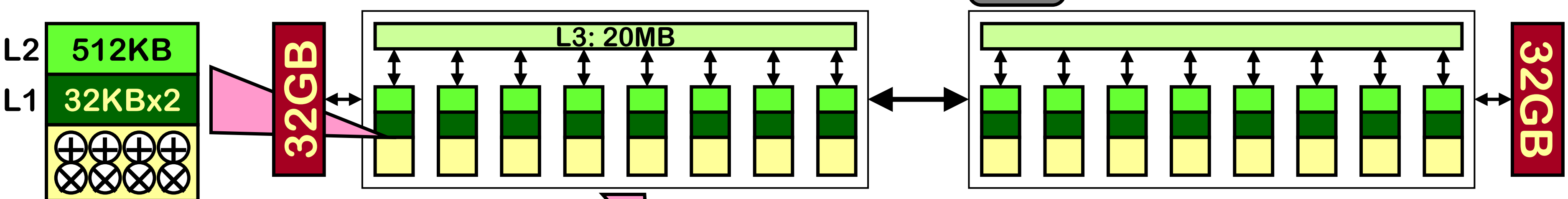
- Camphor

Interlagos

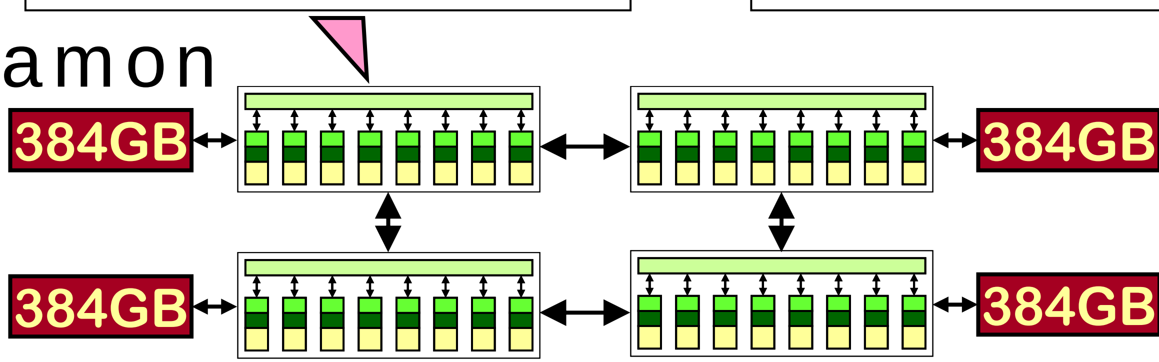



- Laurel

Sandybridge




- Cinnamon



# スーパーにする方法：連立方程式の並列計算

$$\left\{\begin{array}{l}
a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + a_{14}x_4 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\
a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + a_{24}x_4 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\
a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 + a_{34}x_4 + \cdots + a_{3n}x_n = b_3 \\
a_{41}x_1 + a_{42}x_2 + a_{43}x_3 + a_{44}x_4 + \cdots + a_{4n}x_n = b_4 \\
\cdots \\
a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + a_{n3}x_3 + a_{n4}x_4 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n
\end{array}\right.$$

1行目担当のコアが書いて

$$a'_{1j} = a_{1j} / a_{11}$$

$$a'_{ij} = a_{ij} / a_{i1} - a'_{1j}$$

*i* 行目担当のコアが読む

$$\left\{\begin{array}{l}
x_1 + a'_{12}x_2 + a'_{13}x_3 + a'_{14}x_4 + \cdots + a'_{1n}x_n = b'_1 \\
x_1 + a'_{22}x_2 + a'_{23}x_3 + a'_{24}x_4 + \cdots + a'_{2n}x_n = b'_2 \\
x_1 + a'_{32}x_2 + a'_{33}x_3 + a'_{34}x_4 + \cdots + a'_{3n}x_n = b'_3 \\
x_1 + a'_{42}x_2 + a'_{43}x_3 + a'_{44}x_4 + \cdots + a'_{4n}x_n = b'_4 \\
\cdots \\
x_1 + a'_{n2}x_2 + a'_{n3}x_3 + a'_{n4}x_4 + \cdots + a'_{nn}x_n = b'_n
\end{array}\right.$$

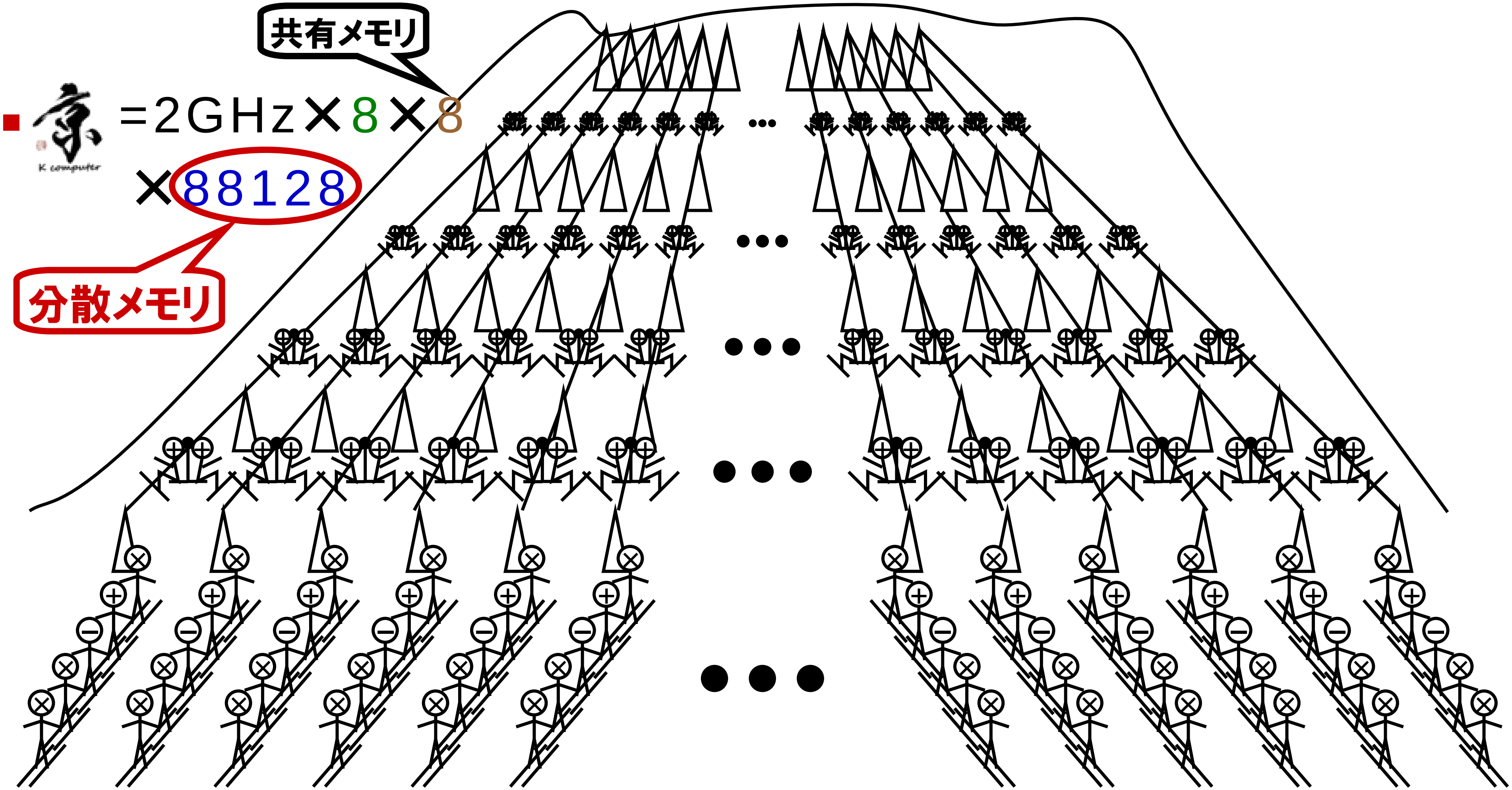
# スーパーにする方法：1980～

- リフト数↑↑↑↑↑↑↑↑↑≒超並列コンピュータ

共有メモリ

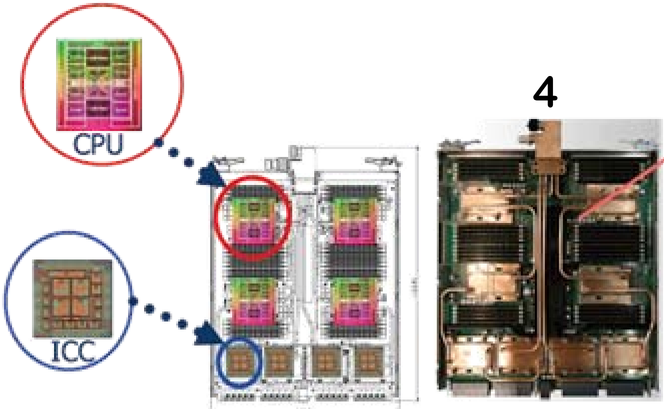
- 京=2GHz×8×8 ×88128

分散メモリ



# スーパーにする方法:京 の全体像

K computer

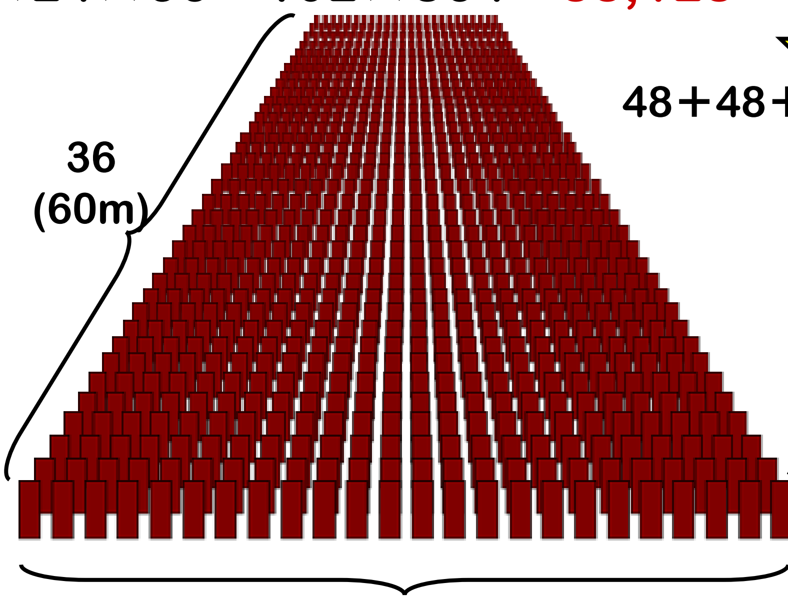



http://www.aics.riken.jp/jp/k/system.html



48+48+6=102

102×24×36=102×864=88,128

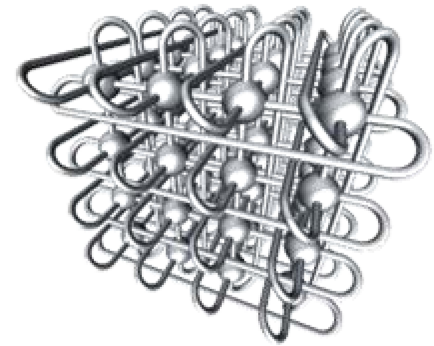



京計算機室
60m x 50m

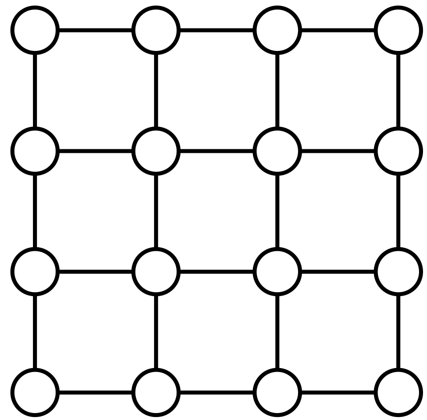
京大体育館
56m x 54m

# スーパーにする方法：京 の通信路 (1/2)

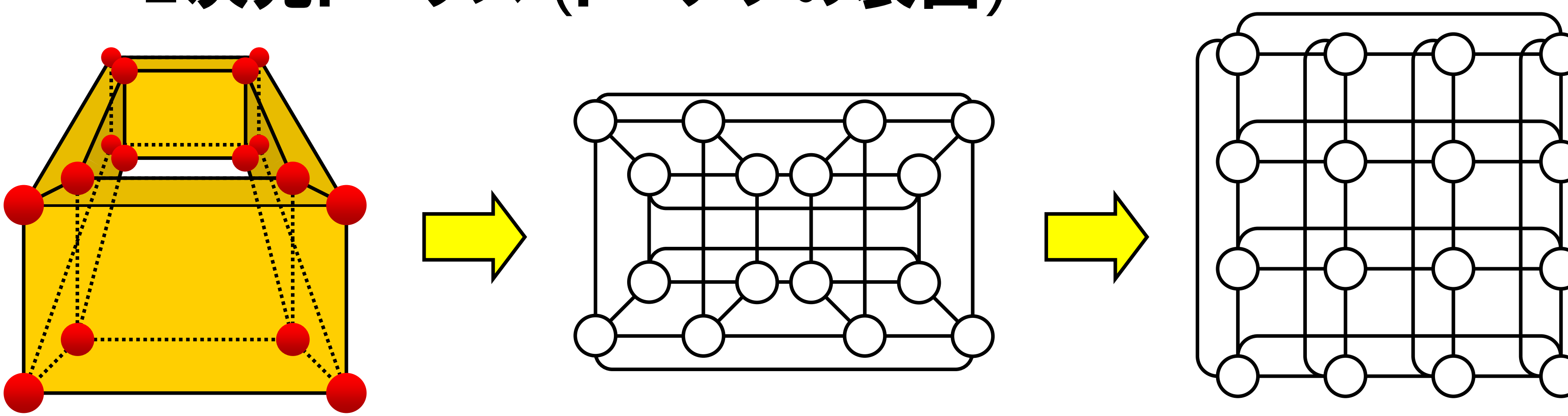
- 6次元メッシュ／トーラス結合網 Tofu
  - って意味不明～



- 2次元メッシュ



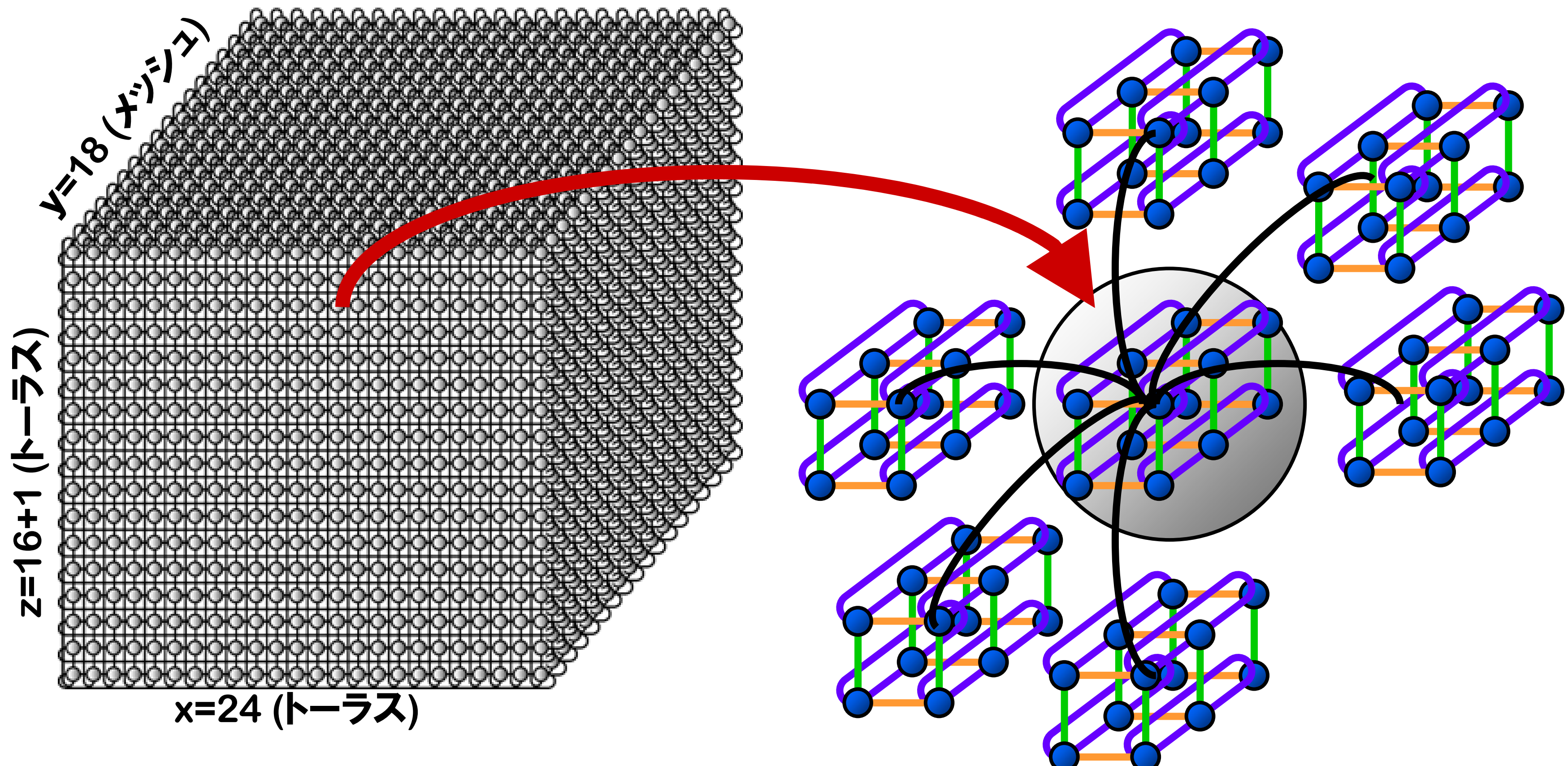
- 2次元トーラス (ドーナツの表面)



# スーパーにする方法：京 の通信路 (2/2)

K computer

- 6次元メッシュ／トーラス結合網 Tofu




24×18×(16+1)×2×2×3

＝88,128

スーパーにする方法

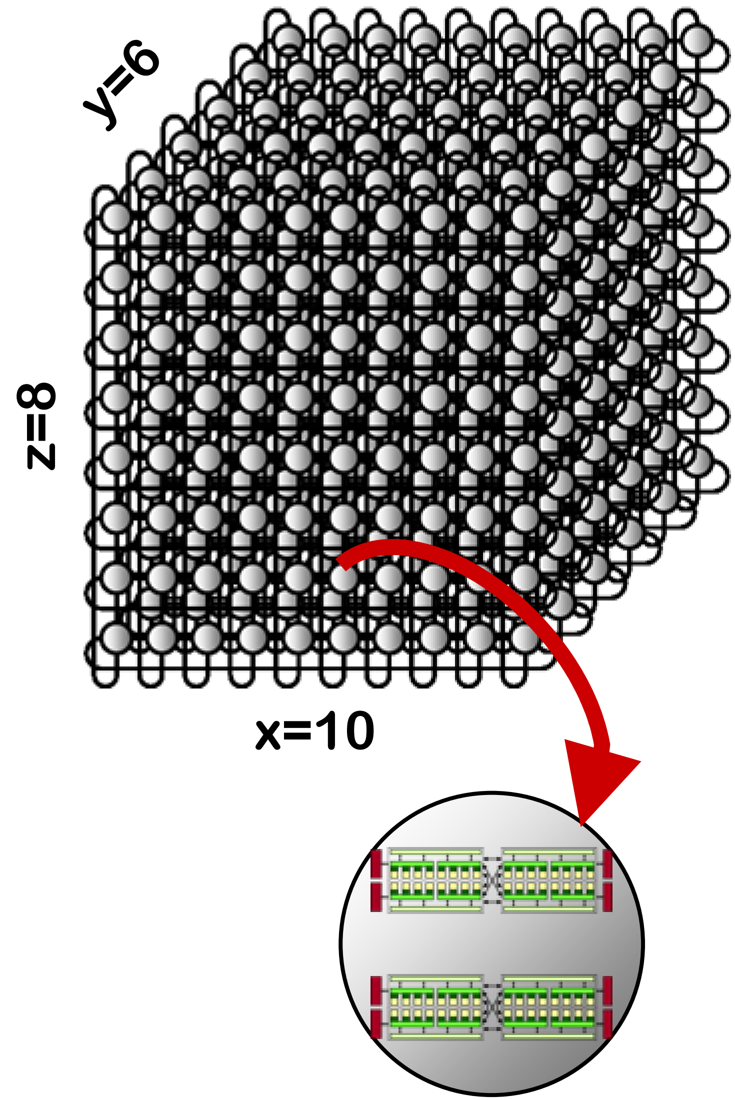
# 京大スパコンの全体像 (1/3)



- Camphor


CRAY XE6

2×(10×8×6−10)＝940



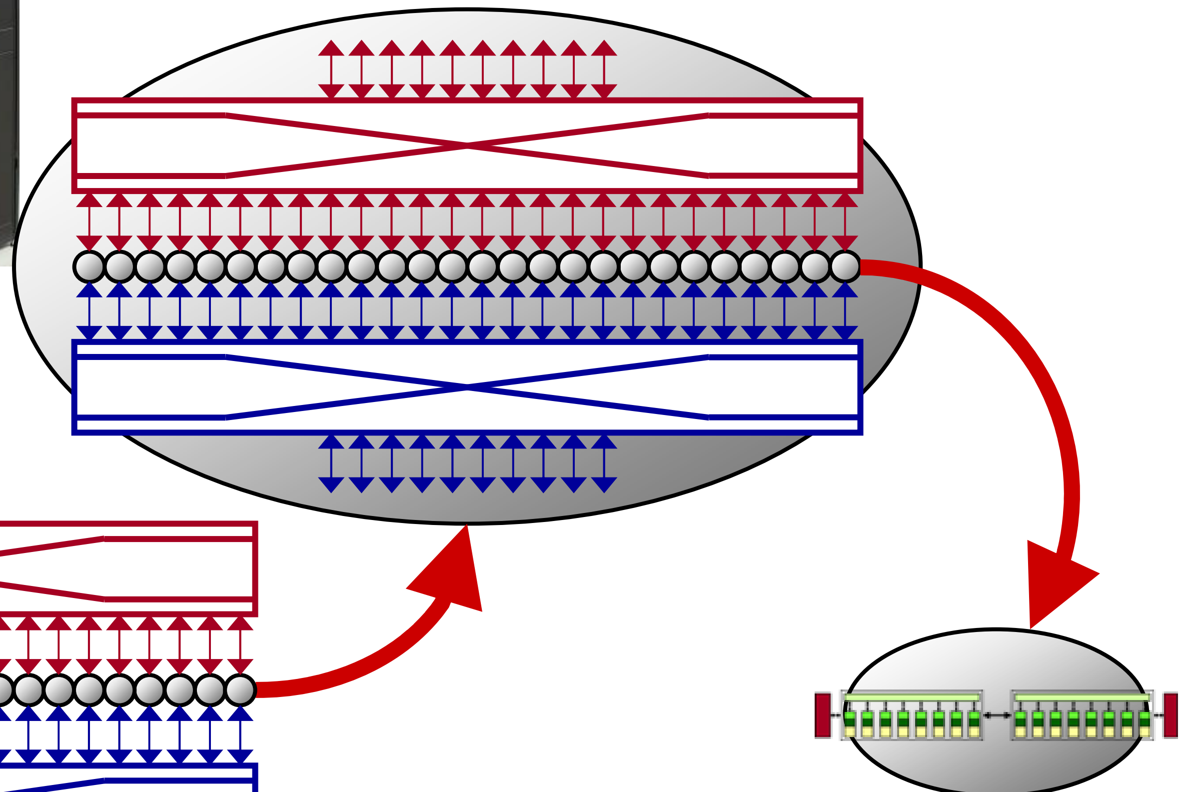
# スーパーにする方法
# 京大スパコンの全体像 (2/3)

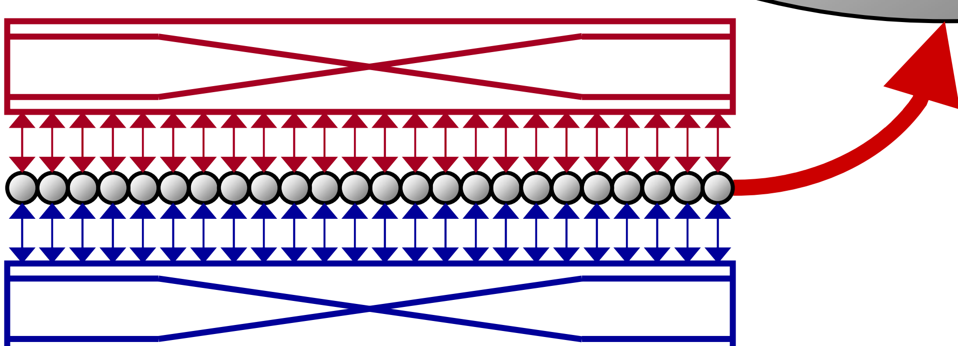


- Laurel


GreenBlade 8000

24×26−23＝601





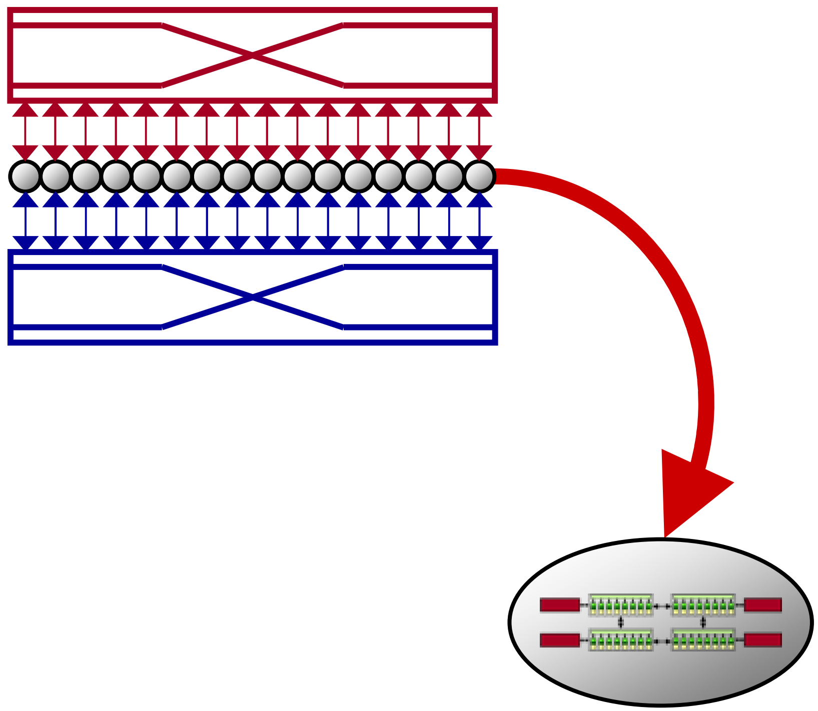
スーパーにする方法

# 京大スパコンの全体像 (3/3)



- Cinnamon

2548X



# スーパーにする方法：連立方程式の並列計算

$$
\begin{cases}
a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + a_{14}x_4 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\
a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + a_{24}x_4 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\
a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 + a_{34}x_4 + \cdots + a_{3n}x_n = b_3 \\
a_{41}x_1 + a_{42}x_2 + a_{43}x_3 + a_{44}x_4 + \cdots + a_{4n}x_n = b_4 \\
\cdots \\
a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + a_{n3}x_3 + a_{n4}x_4 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n
\end{cases}
$$

1行目担当のプロセッサから

$$a'_{1j} = a_{1j} / a_{11}$$

$$a'_{ij} = a_{ij} / a_{i1} - a'_{1j}$$

全てのプロセッサへ通信（放送）

$$
\begin{cases}
x_1 + a'_{12}x_2 + a'_{13}x_3 + a'_{14}x_4 + \cdots + a'_{1n}x_n = b'_1 \\
x_1 + a'_{22}x_2 + a'_{23}x_3 + a'_{24}x_4 + \cdots + a'_{2n}x_n = b'_2 \\
x_1 + a'_{32}x_2 + a'_{33}x_3 + a'_{34}x_4 + \cdots + a'_{3n}x_n = b'_3 \\
x_1 + a'_{42}x_2 + a'_{43}x_3 + a'_{44}x_4 + \cdots + a'_{4n}x_n = b'_4 \\
\cdots \\
x_1 + a'_{n2}x_2 + a'_{n3}x_3 + a'_{n4}x_4 + \cdots + a'_{nn}x_n = b'_n
\end{cases}
$$

# スーパーコンピュータの歴史(にまた戻って)
# ベクトル vs 並列



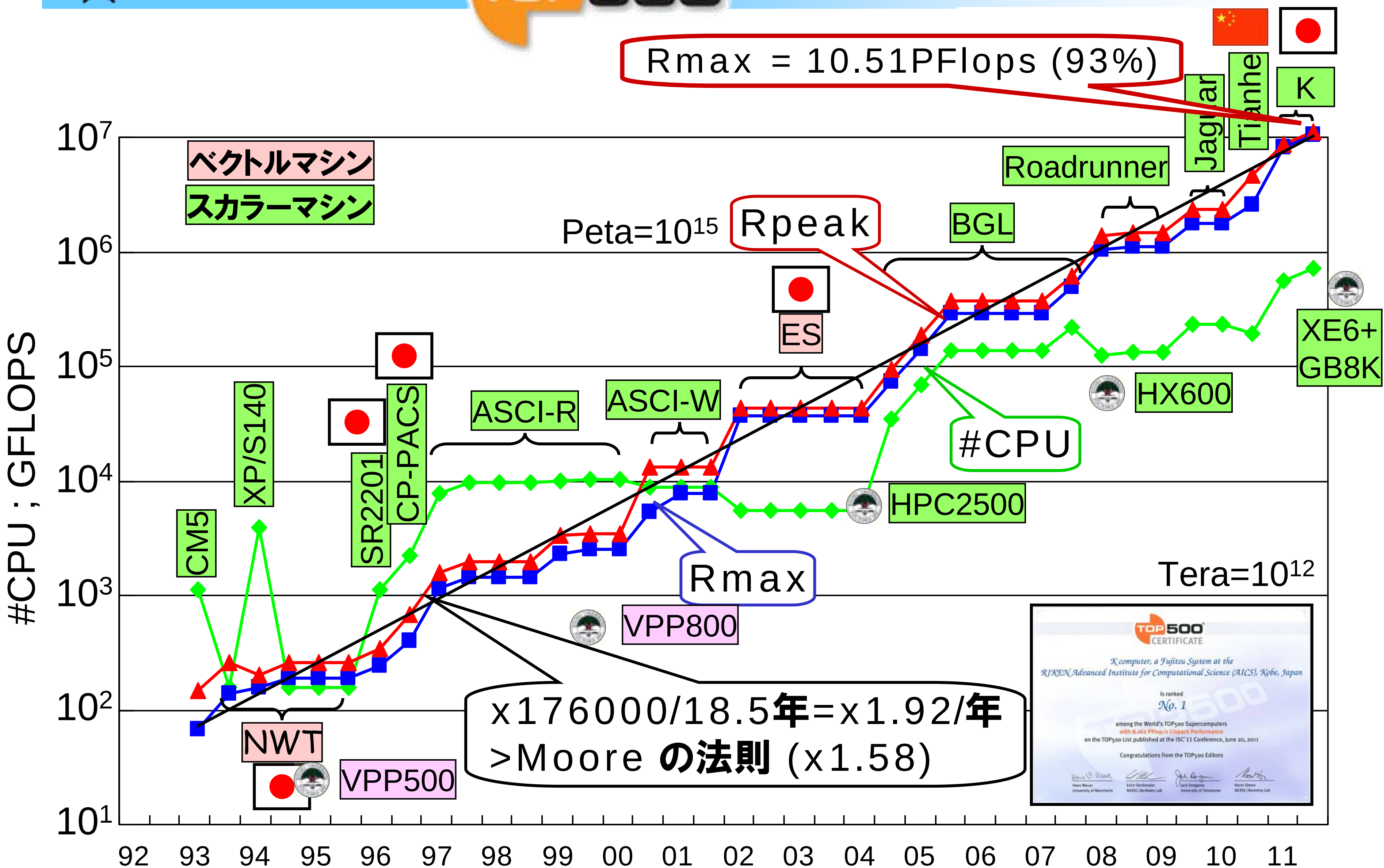
- 1990年代：ベクトル並列 vs スカラー並列
  - TOP-10 of TOP500 @ 1993.6

| machine | #proc | Rmax | Rpeak |
|---|---|---|---|
| TMC CM-5 | 1024 | 59.7 | 131.0 |
| TMC CM-5 | 544 | 30.4 | 69.6 |
| TMC CM-5 | 512 | 30.4 | 65.5 |
| TMC CM-5 | 512 | 30.4 | 65.5 |
| NEC SX-3 | 4 | 23.2 | 25.6 |
| NEC SX-3 | 4 | 20.0 | 22.0 |
| TMC CM-5 | 256 | 15.1 | 32.8 |
| Intel Delta | 512 | 13.8 | 20.5 |
| Cray Y-MP | 16 | 13.7 | 15.2 |
| Cray Y-MP | 16 | 13.7 | 15.2 |

- 巨大で(>100万元)密な連立一次方程式の求解性能に基づく世界中のスパコン順位表
- 1993.6から毎年2回発表(6月&11月)
- Rmax: 求解性能
  Rpeak: 理論最大性能
  (単位GFlops：毎秒10億演算)

# スーパーコンピュータの歴史
# Top 1 of TOP500






source: http://www.top500.org/

# スーパーコンピュータの原理（いきなり＆とりあえず）まとめ



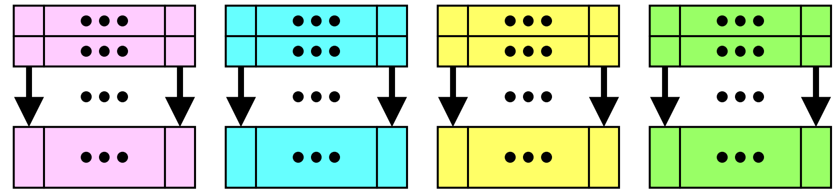
- **ベクトルマシン**
  - 1つの演算を $k$ 個の小さい操作に分割する
  - 多数の同種演算を1小操作ずつ**ずらして**行う
  - ➔ $k$ 倍の速度で計算できる(ように見える)
  - ➔ 大量 ($\gg k$) の同種演算が得意
- **並列マシン**
  - 多数の同じ(ような)演算を $p$ 個のCPUに分割
  - それぞれのCPUが割当てられた計算をする
  - ➔ $p$ 倍の速度で計算できる(ように見える)
  - ➔ 大量 ($\gg p$) の同じ(ような)演算が得意

➔ スパコンは大量の同じ(ような)演算(や処理)が得意

# 大量同種演算は何でも得意か? (1/2)

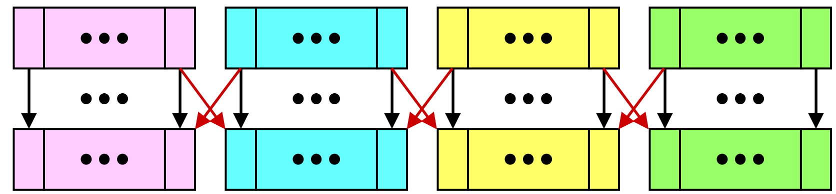
- **超得意**

$$z_i = x_i + y_i$$



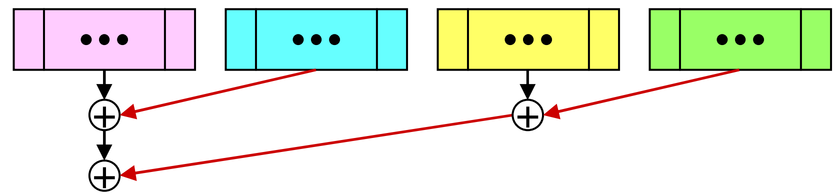
- **普通に得意**

$$z_i = (x_{i-1} + 2x_i + x_{i+1}) / 4$$



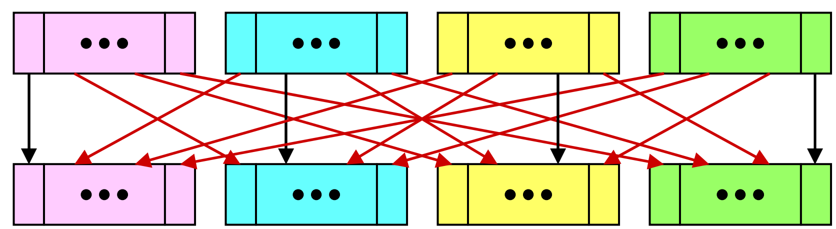
- **微妙に得意**

$$z = x_1 + x_2 + \cdots + x_n$$



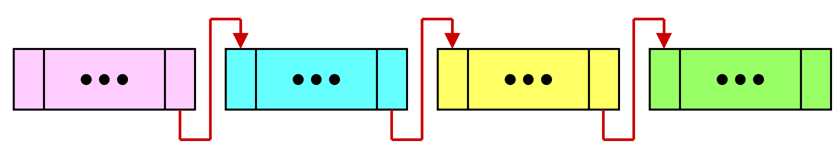
- **何とかなる**

$$z_i = x_{f(i)} \text{ s.t. } z_1 \le z_2 \le \cdots \le z_n$$



- **全然ダメ**

$$z_1 = f(x_1, 0),\ z_i = f(x_i, z_{i-1})$$

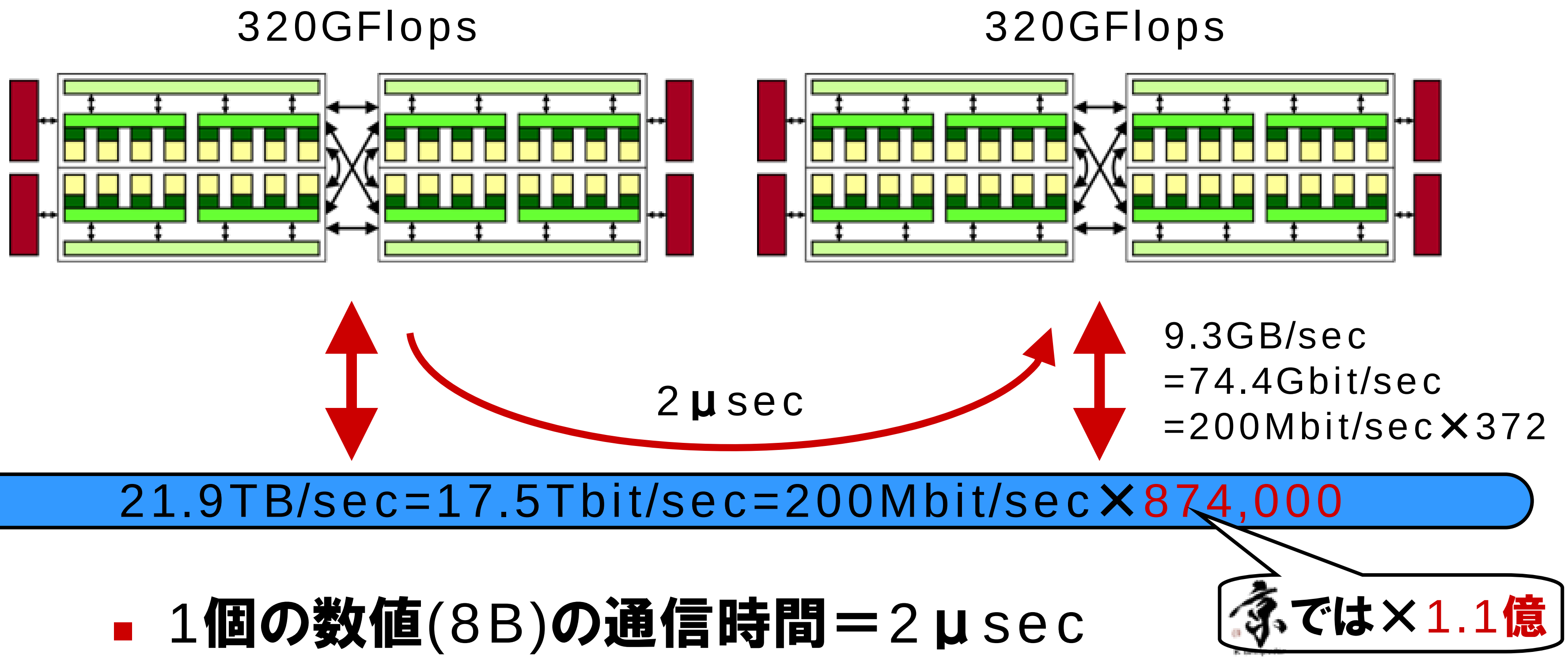


## スーパーコンピュータの原理

# 大量同種演算は何でも得意か？ (2/2)



- **京大スパコン** (Camphor) **の通信速度**




- 1**個の数値**(8B)**の通信時間**＝2μsec
  ＝640,000**個分の演算時間**
- 10**億個の数値**(8GB)**の通信時間**＝0.86**秒**
  ＝2,752**億個分の演算時間**

# まとめ＆課題

- スーパーコンピュータは …
  - 大量の同じ(ような)演算(や処理)が得意
  - ただし演算どうしの依存性が少ないことが必要

➔そんな都合のよい問題はあるのか？

- そこでレポート課題

  (できればスパコンに適する大規模な)並列計算により高い性能が期待できる実際的な問題を一つ挙げ、なぜその問題が並列計算に適するのかを説明せよ。