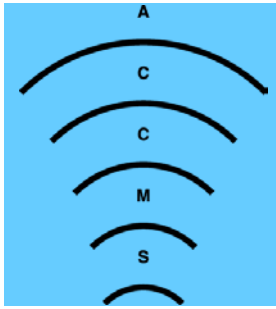


計算科学が拓く世界

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 K computer)

÷ 
6.4 G(**ギガ** 10^{9}) FLOPS (64**億**)

＝1,797,120

どのぐらいスーパー？ (2/2)

- 京 =  ×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**
  - 京：2.0GHz×8×8×88,128
  ÷  ：1.6GHz×2×2×1
  ＝1,797,120

ここがスーパー

intel Atom 330

intel 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)

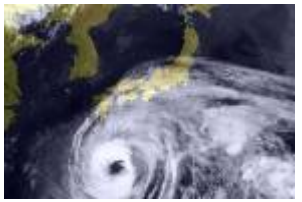
- パソコンの数千倍～数万倍の規模・性能を持つ巨大な超高速コンピュータ
  - 世界最大・最高速マシン ≒パソコン x 420万
  - 京大スーパーコンピュータ ≒パソコン x 9万

  ➔パソコンで1ヶ月かかる計算＝0.6秒～30秒

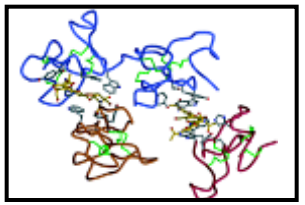
  （ただしスパコン向きの問題をうまくプログラムしたら）
- スパコンが高速な理由
  - 個々の部品(CPU, メモリなど)≒パソコン
  - 非常に多数のパソコン(のようなもの)の集合体
    - パソコン = 1~16 CPU
    - 京大スパコン = 40,208 CPU
    - 世界最高速スパコン = 299,008 CPU + 261,632 GPU
    - 世界最大規模スパコン = 1,572,864 CPU

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)

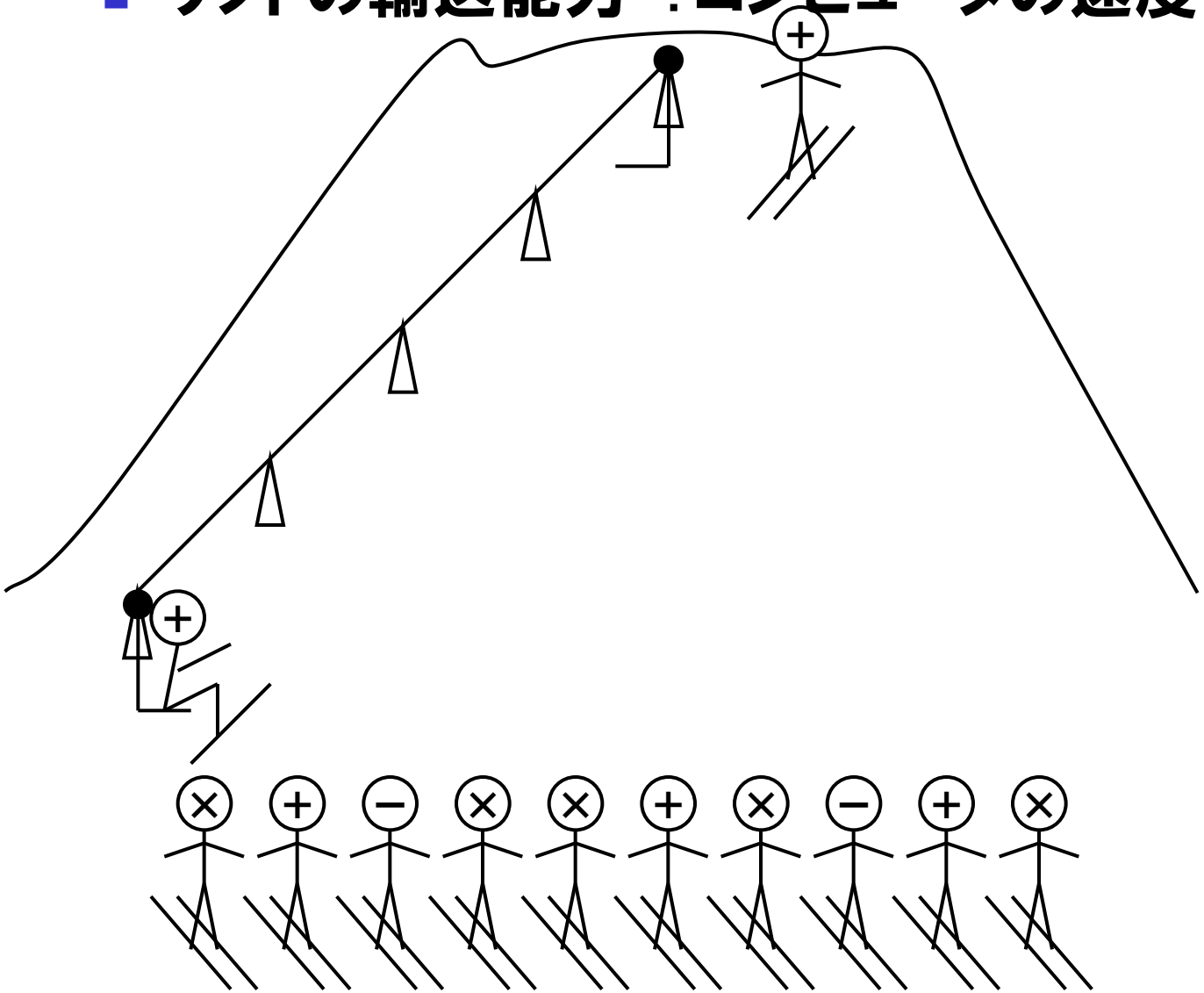


  - 自動車の空力・衝突解析
    → $1mm^2$ or $1cm^3$ あたり1データ
    →データ数＝1~10億

  - 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

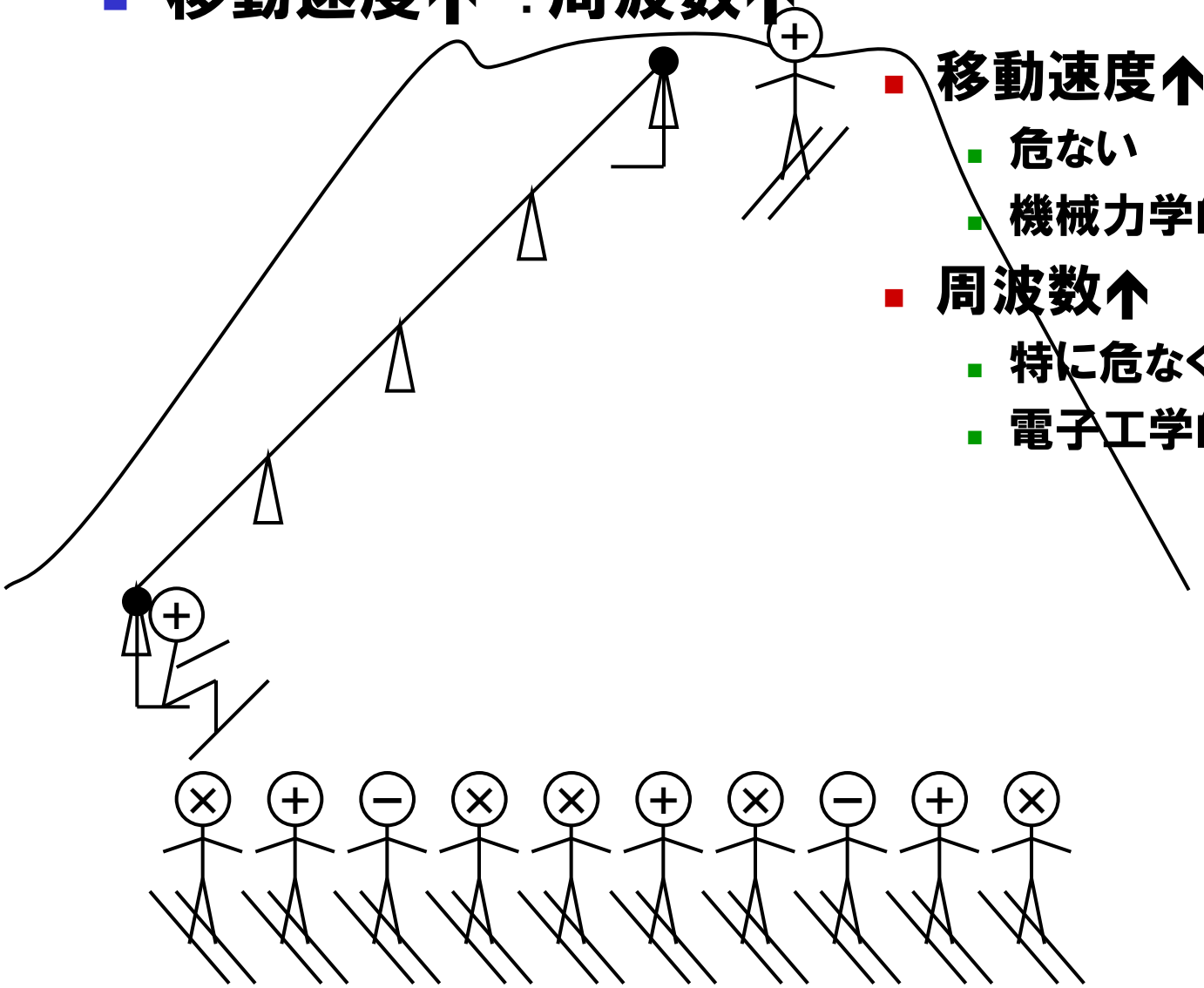
スーパーにする方法

- リフトの輸送能力≒コンピュータの速度



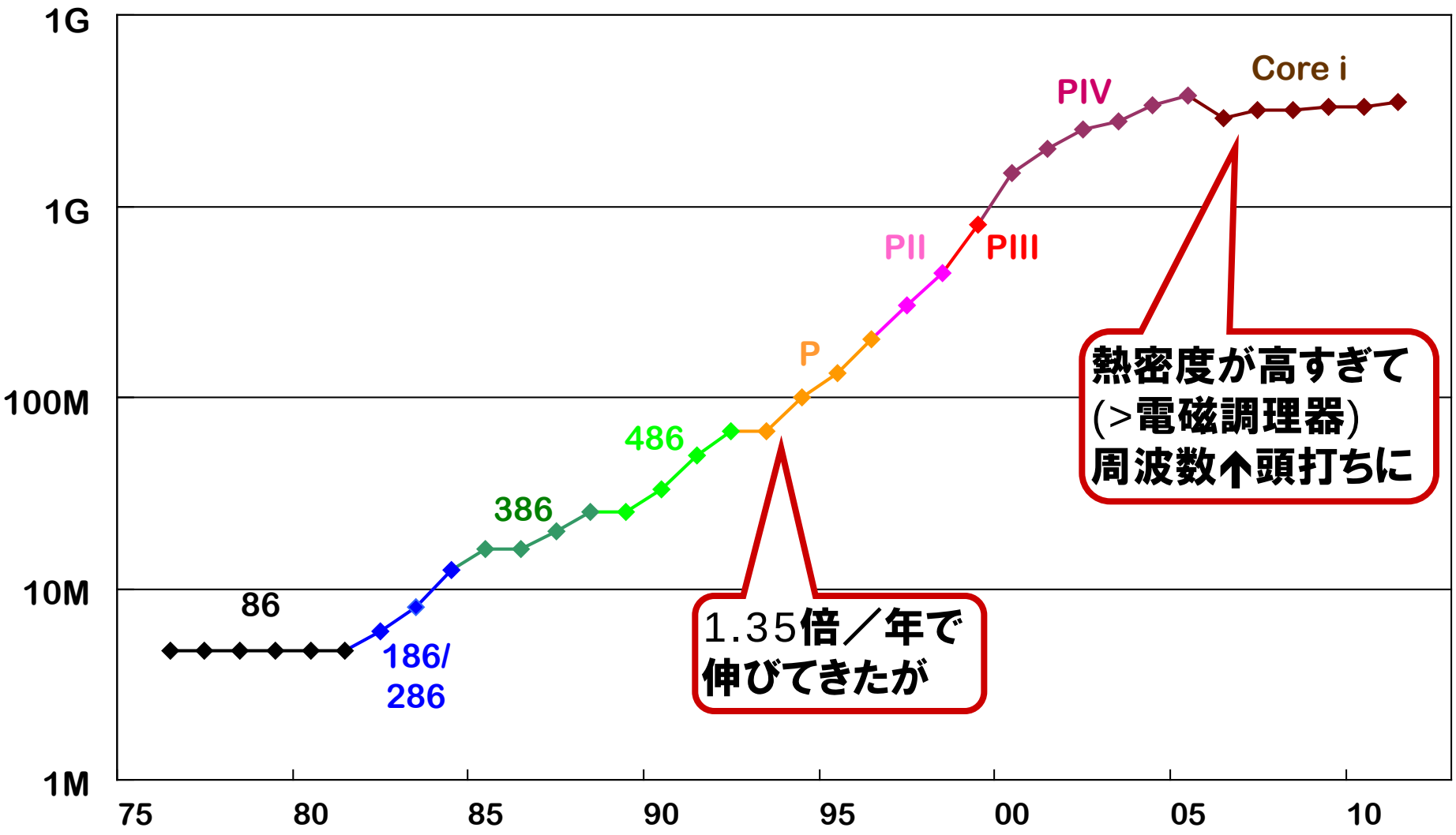
スーパーにする方法:～1970

- 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？

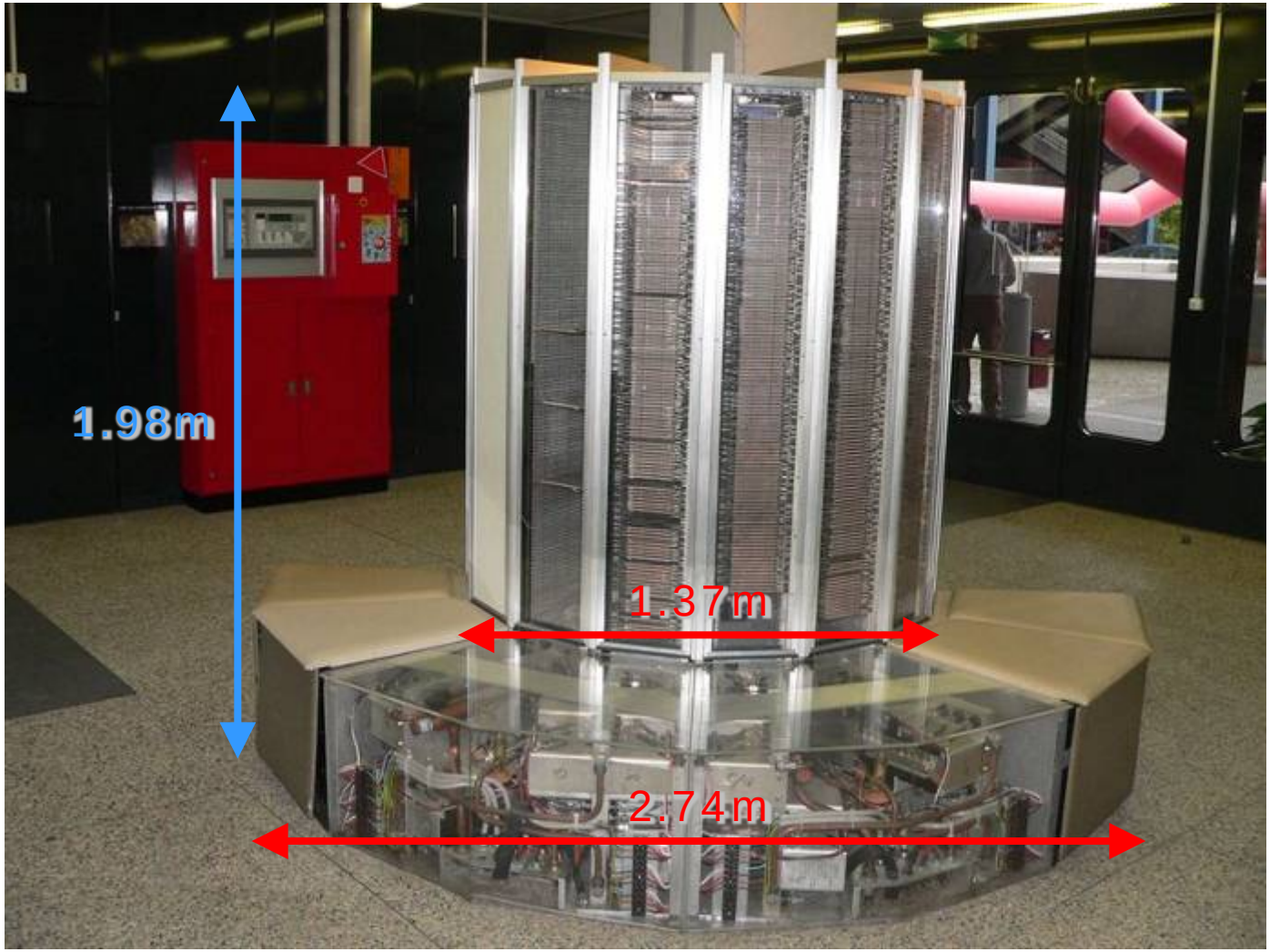
スーパーにする方法：周波数↑の歴史



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

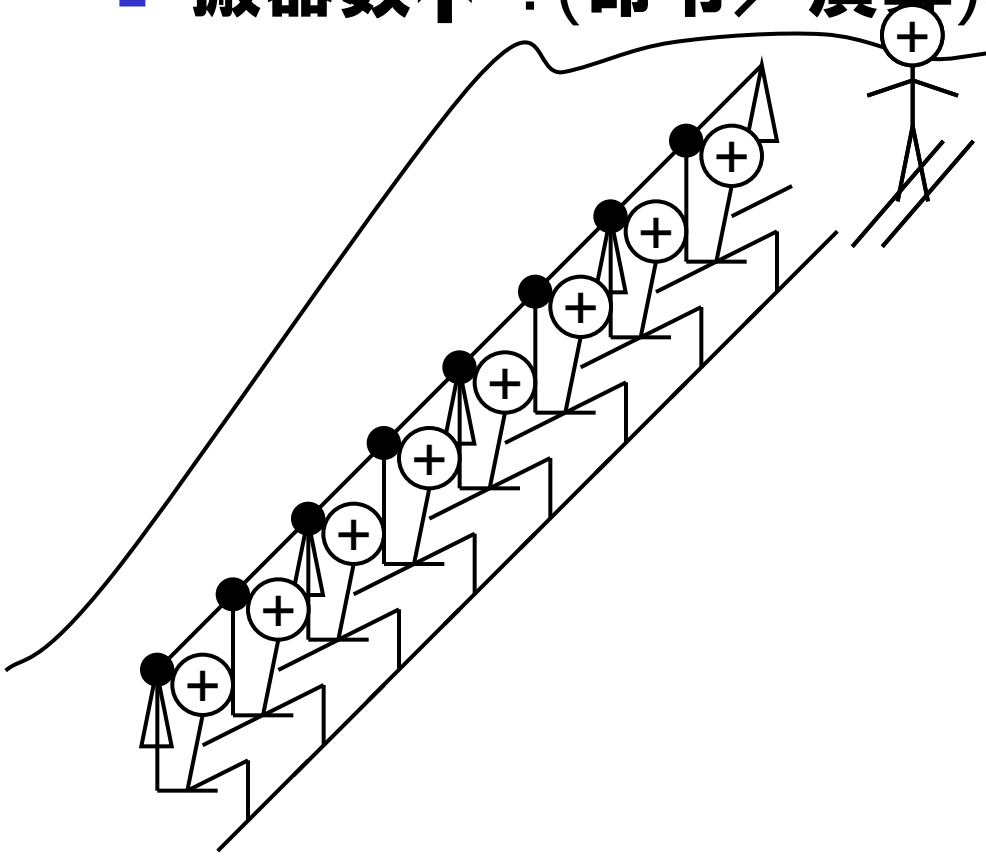
そもそもの始まり：ベクトルマシン (2)



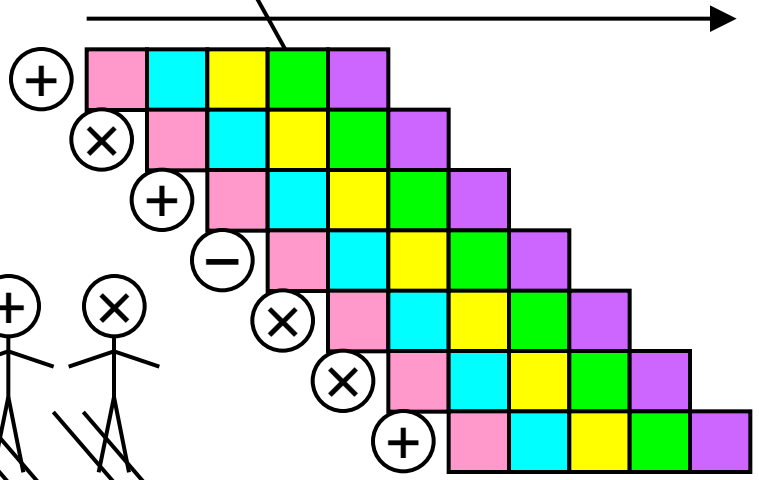
source: http://en.wikipedia.org/wiki/Image:Cray-1-p1010221.jpg

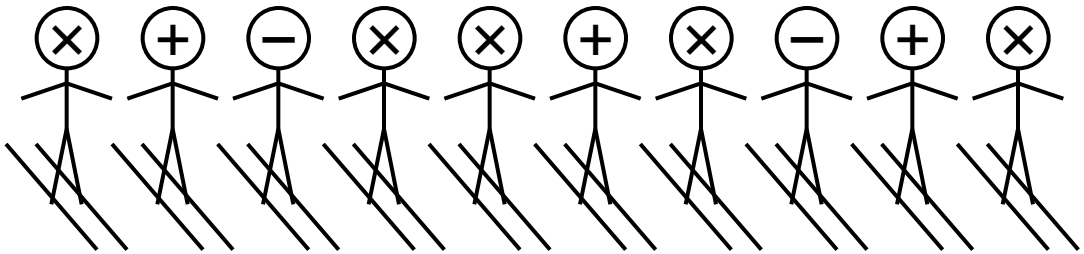
少し話を戻して
スーパーにする方法：1970~

- **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

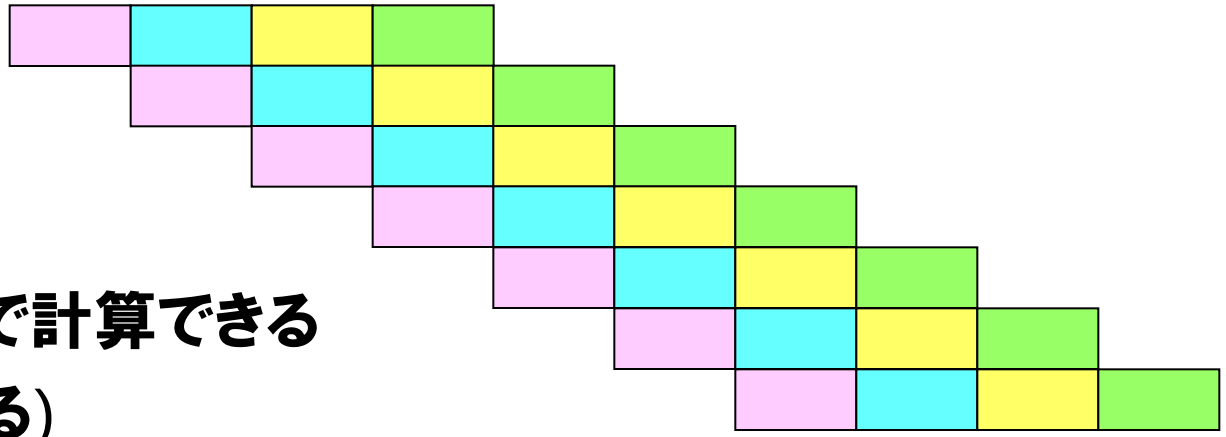
  例：$z_i = x_i \times y_i \quad (i = 1, 2, \ldots)$

  - 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

$z_i = x_i \times y_i$ 

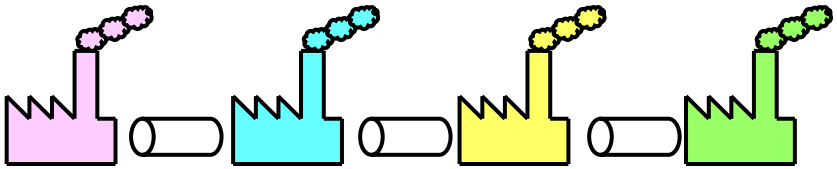
  - 多数の乗算を1小操作ずつずらして行う

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



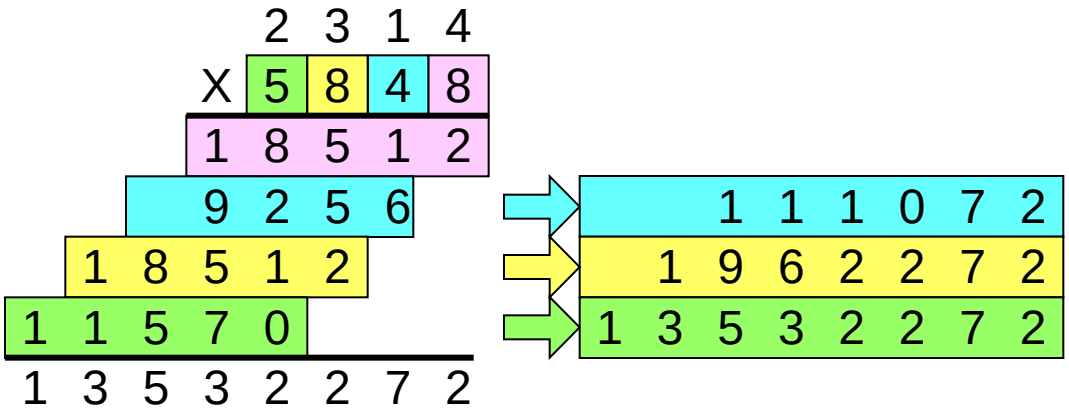
➔4倍の速度で計算できる
(ように見える)

➔(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

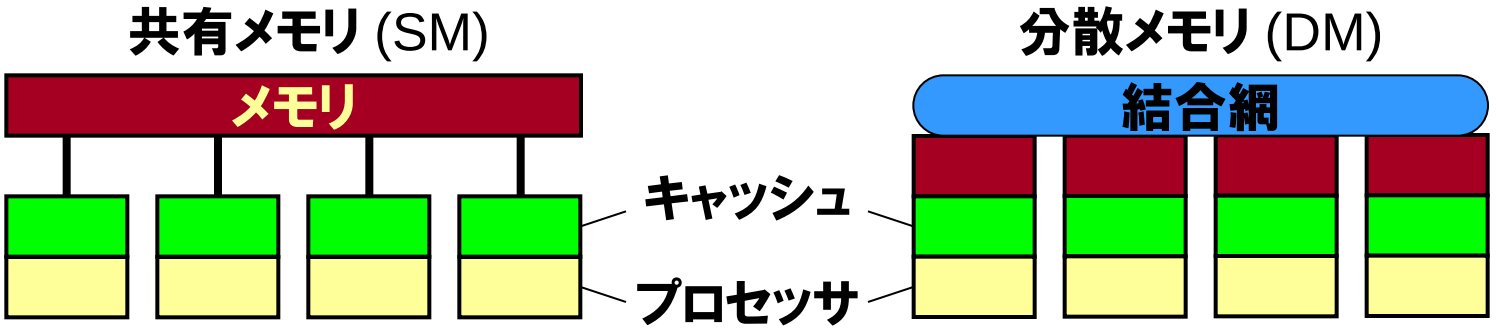
1778x2 | +1778x4 | +1778x1 | +1778x7

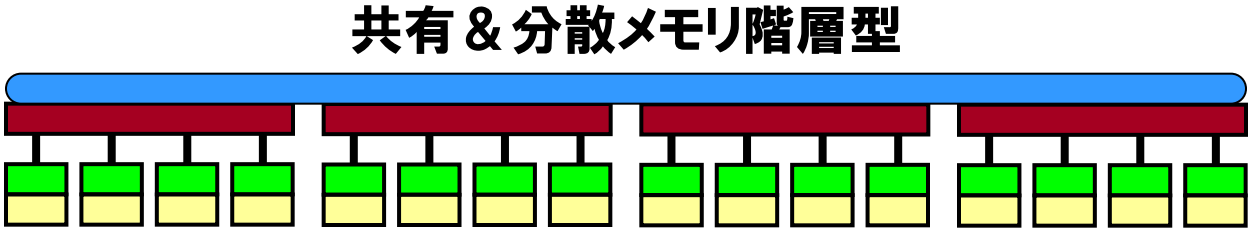
8485x1651=13843635

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

もう一つの方法:並列マシン

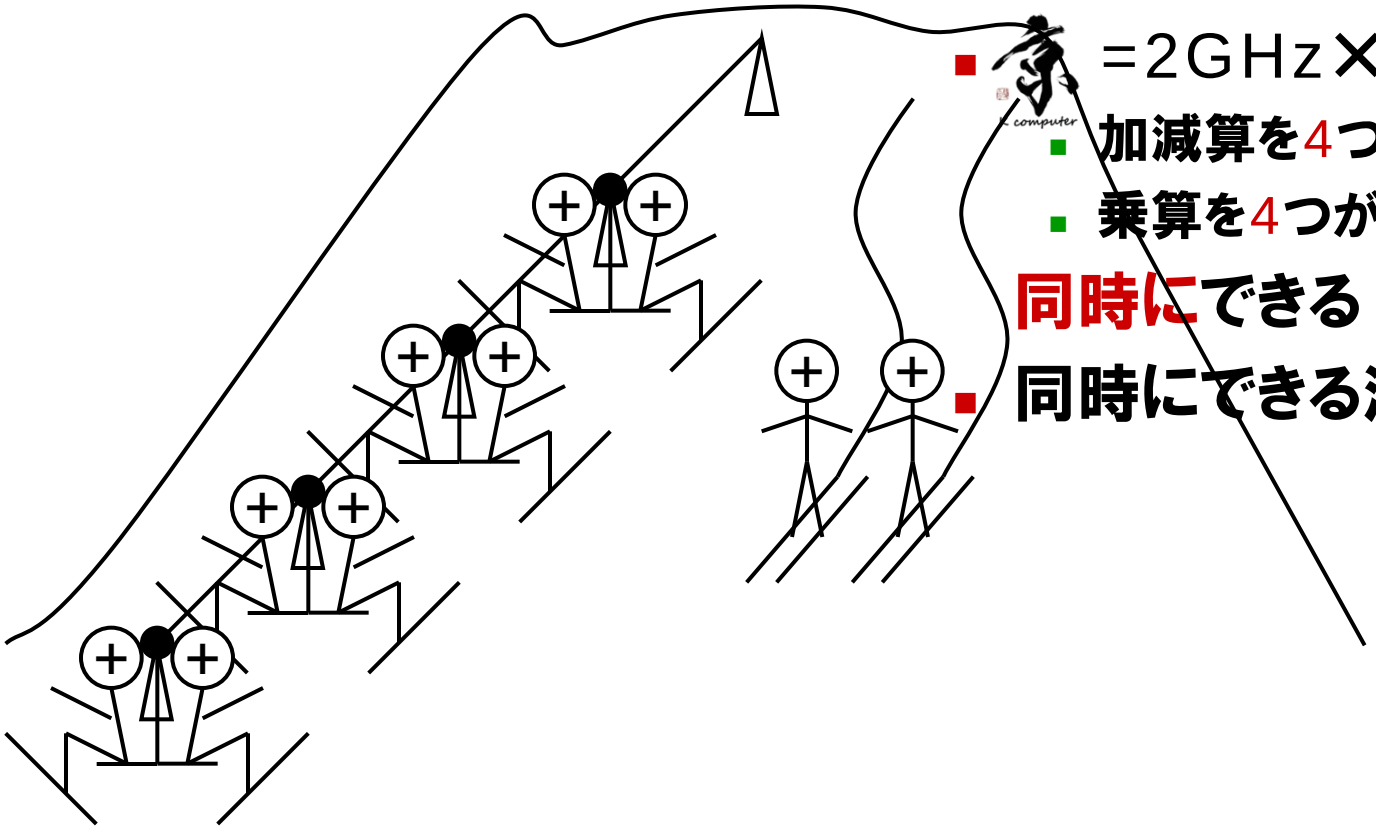
- 1980年代: スカラーマルチプロセッサ台頭
  - 多数のパソコン(のようなもの)の集合体
  - Sequent Balance : 20 x NS32016 ('84)
  - Intel iPSC/1: 128 x i80286 ('85)





また話を戻して
スーパーにする方法：1990~

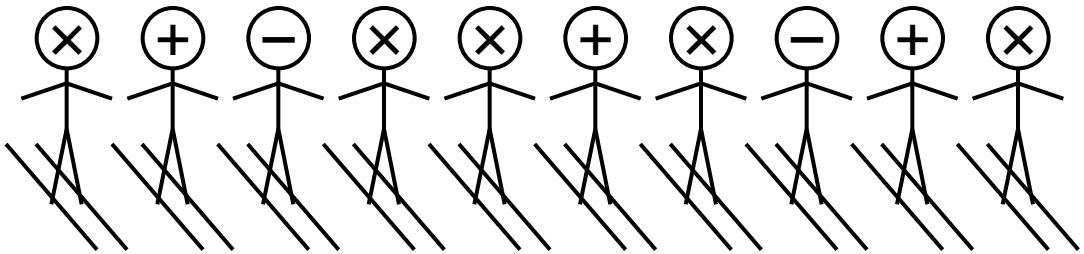
- 座席数↑≒スーパースカラー／SIMD



- =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

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

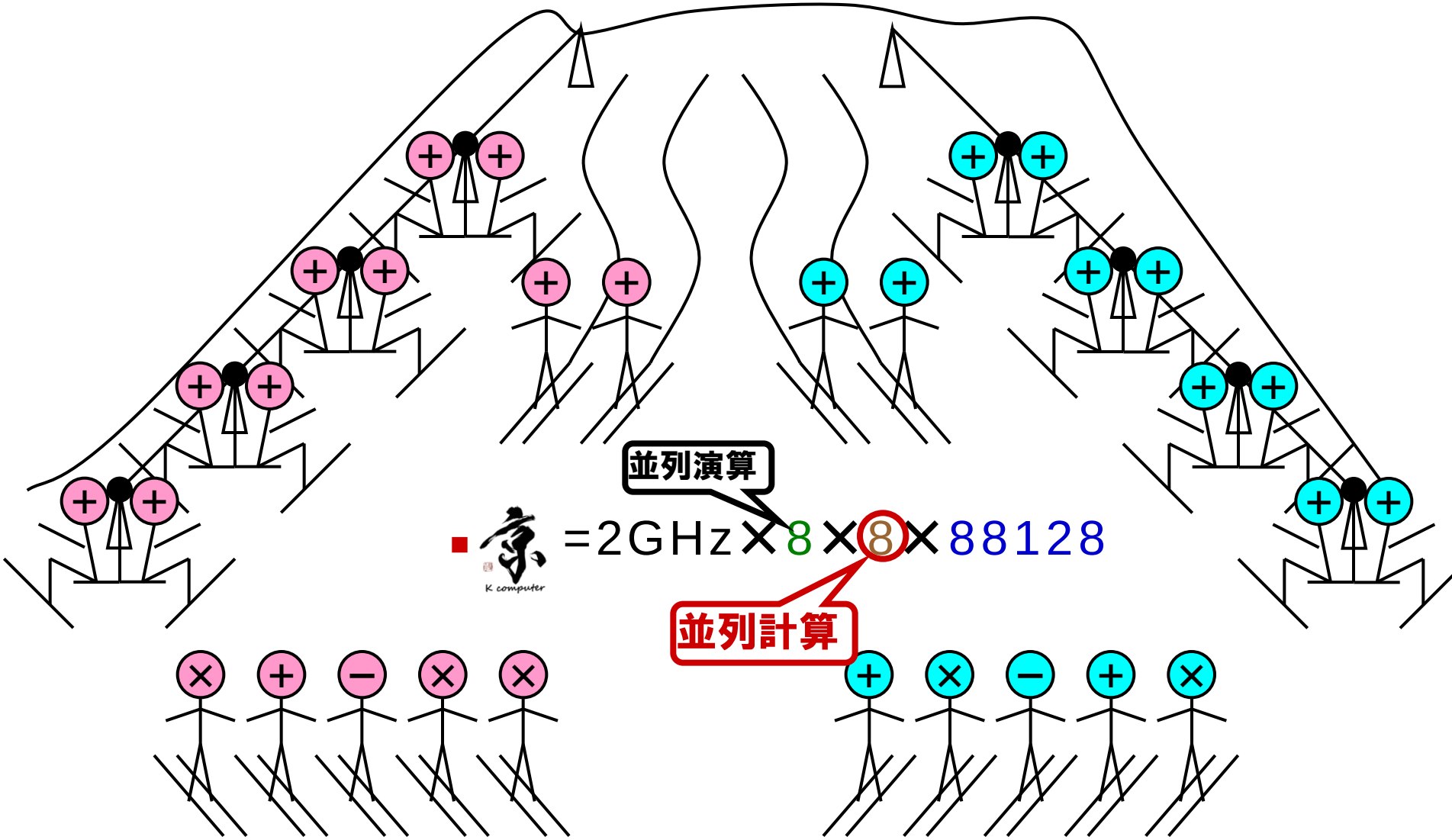
$$\left(-\frac{10}{8}+8\right)z=\frac{54}{8}z=-\frac{14}{8}+22=\frac{162}{8}\Rightarrow z=3$$

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

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

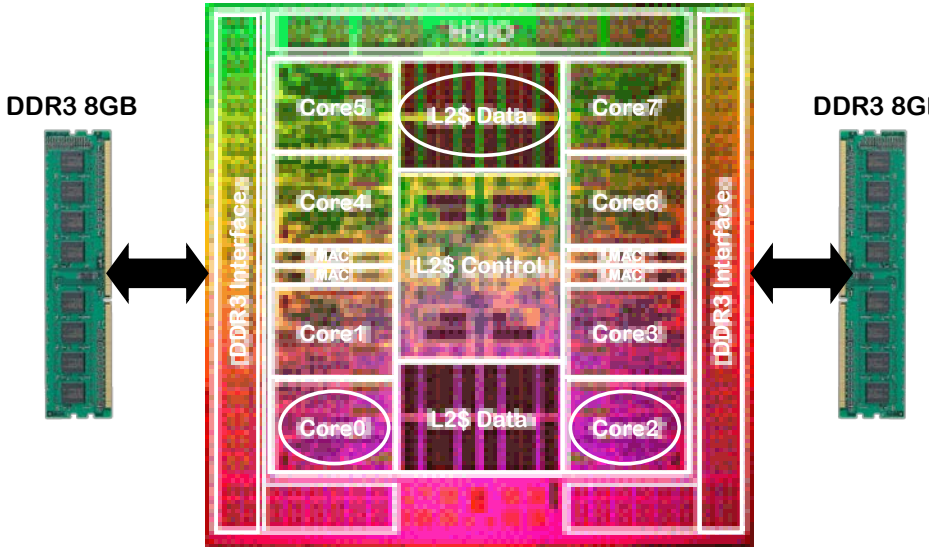
スーパーにする方法:2000～ (1980~)

- リフト数↑≒マルチコア／共有メモリ並列マシン

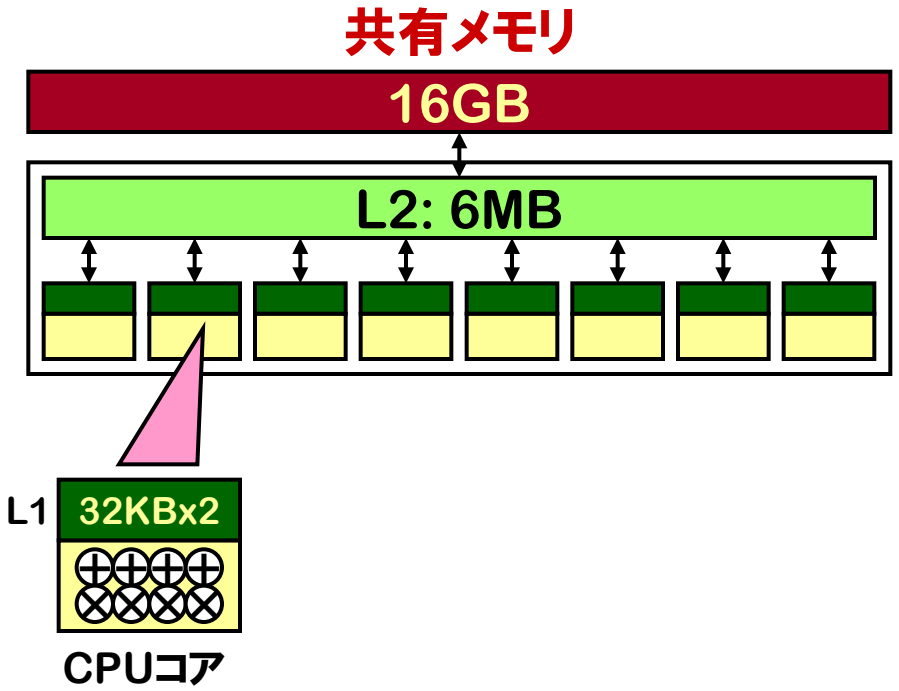


スーパーにする方法：京 のプロセッサ

FUJITSU SPARC 64 VIIIfx

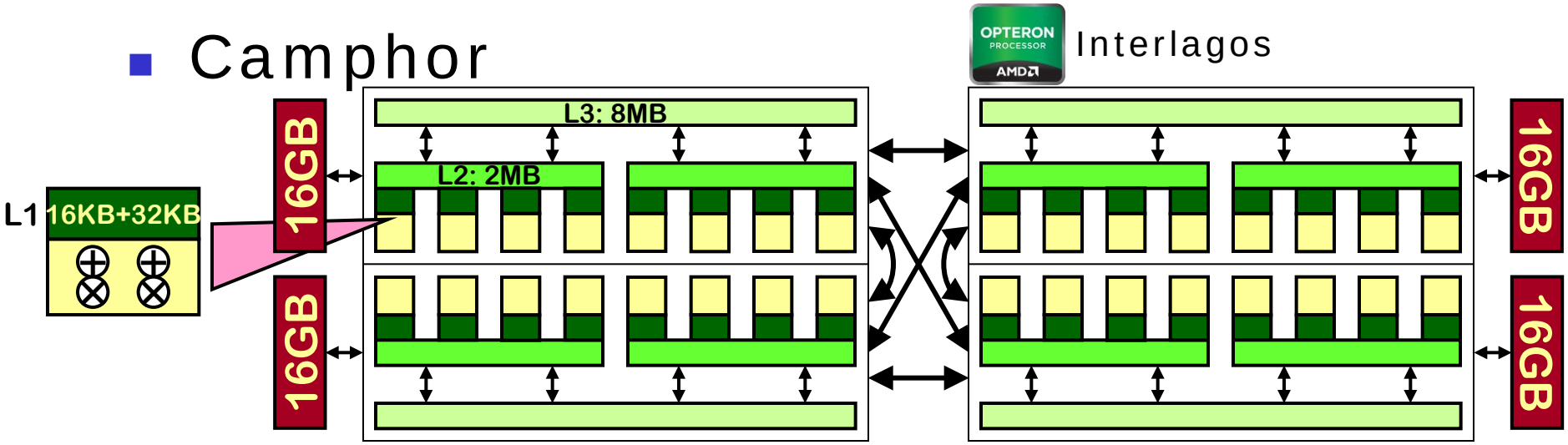


http://www.aics.riken.jp/jp/k/system.html

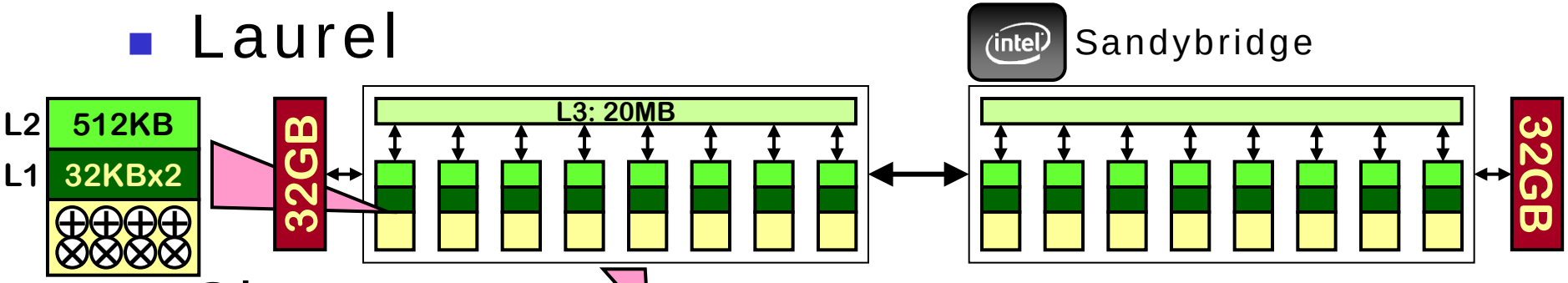


スーパーにする方法
京大スパコンのプロセッサ

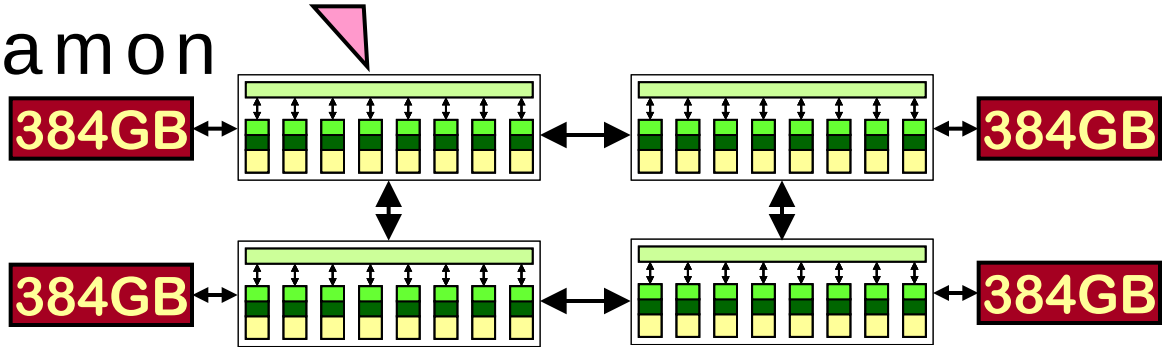
- Camphor



- Laurel



- Cinnamon



スーパーにする方法：連立方程式の並列計算

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

1行目担当のコアが書いて

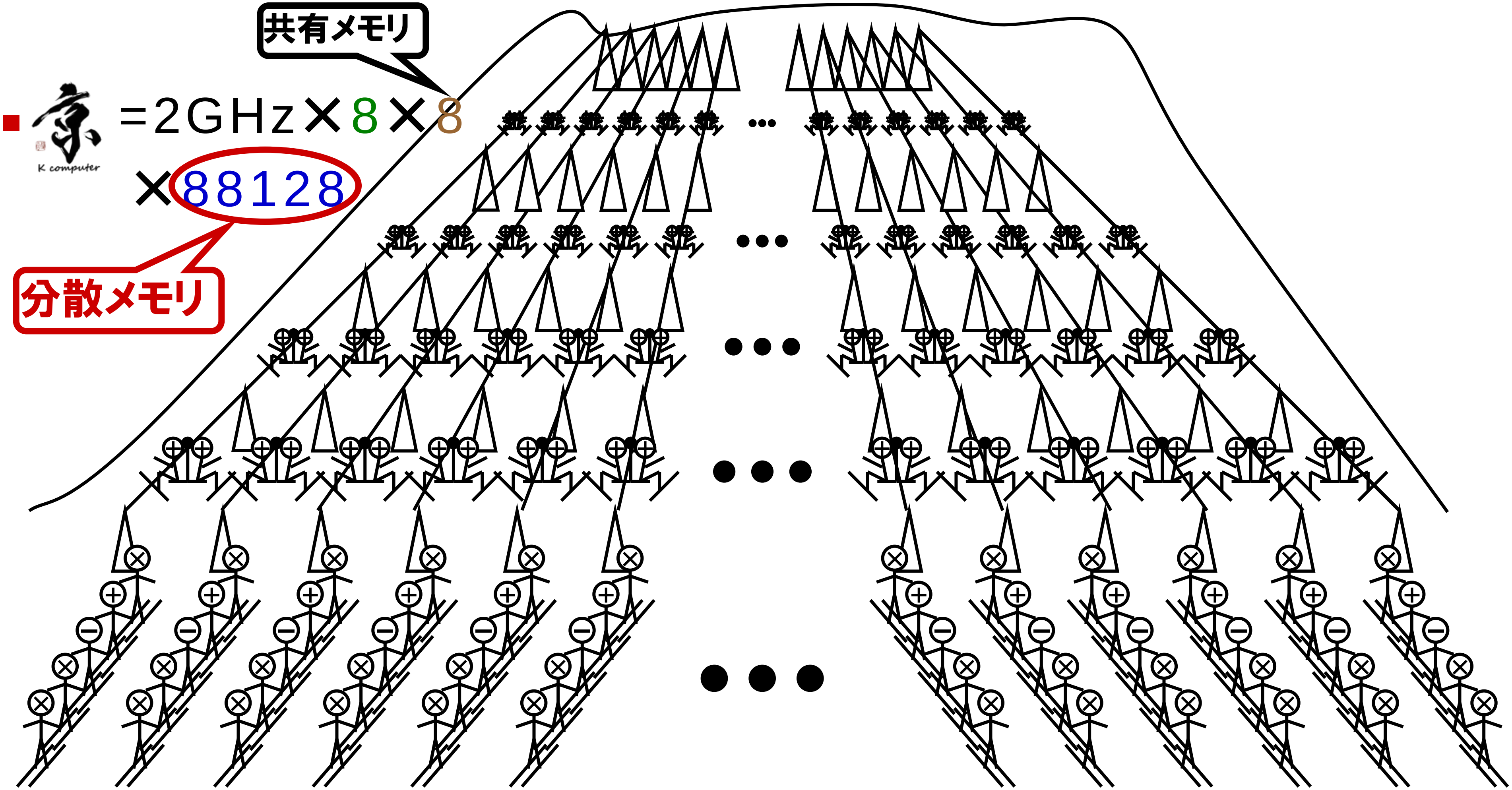
$$a'_{1j} = a_{1j} / a_{11}$$
$$a'_{ij} = a_{ij} / a_{i1} - a'_{1j}$$

i行目担当のコアが読む

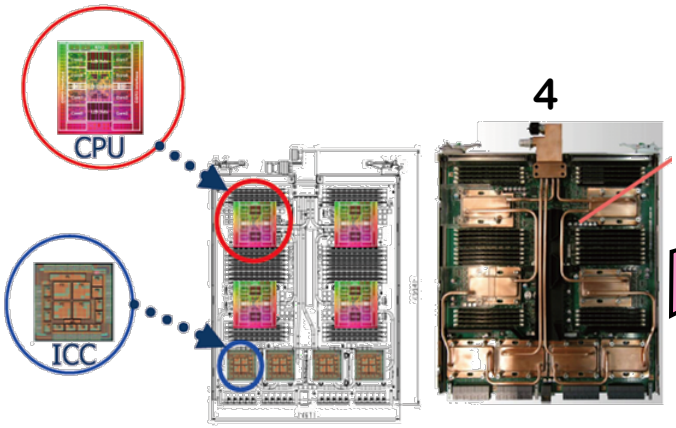
$$x_1 + a'_{12}x_2 + a'_{13}x_3 + a'_{14}x_4 + \cdots + a'_{1n}x_n = b'_1$$
$$x_1 + a'_{22}x_2 + a'_{23}x_3 + a'_{24}x_4 + \cdots + a'_{2n}x_n = b'_2$$
$$x_1 + a'_{32}x_2 + a'_{33}x_3 + a'_{34}x_4 + \cdots + a'_{3n}x_n = b'_3$$
$$x_1 + a'_{42}x_2 + a'_{43}x_3 + a'_{44}x_4 + \cdots + a'_{4n}x_n = b'_4$$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

スーパーにする方法：1980~

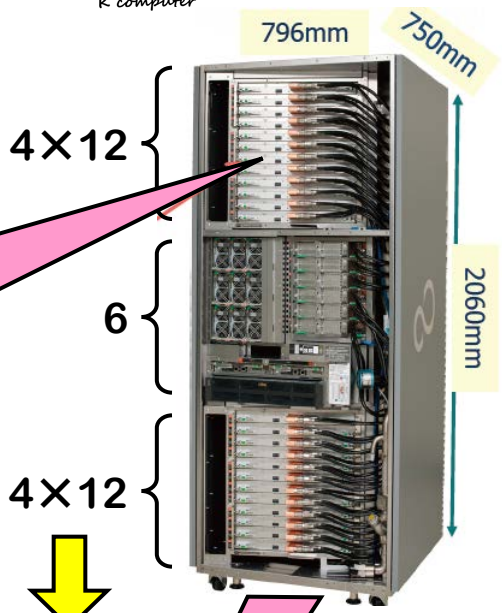
- リフト数↑↑↑↑↑↑↑↑↑≒超並列コンピュータ
- 京 =2GHz×8×8×88128



スーパーにする方法：京 の全体像

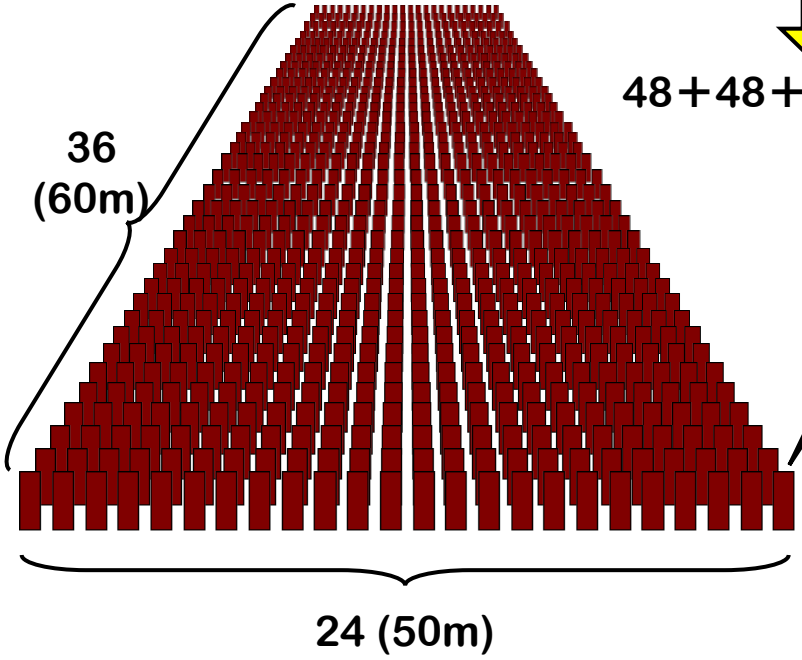


http://www.aics.riken.jp/jp/k/system.html



102×24×36＝102×864＝88,128

48＋48＋6＝102

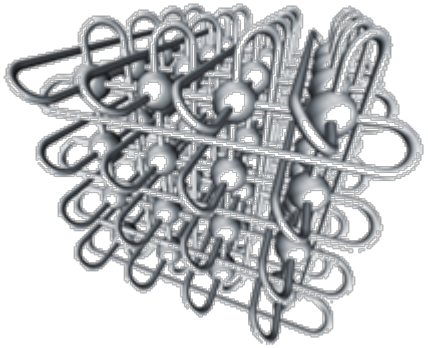


京計算機室
60m x 50m

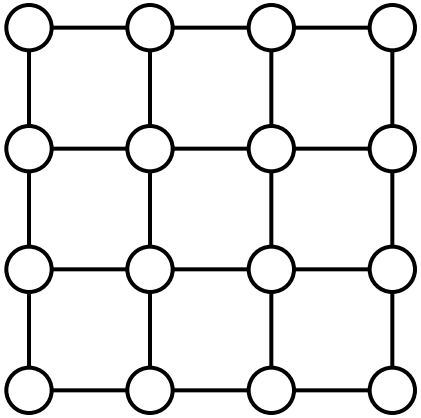
京大体育館
56m x 54m

スーパーにする方法：京 の通信路 (1/2)

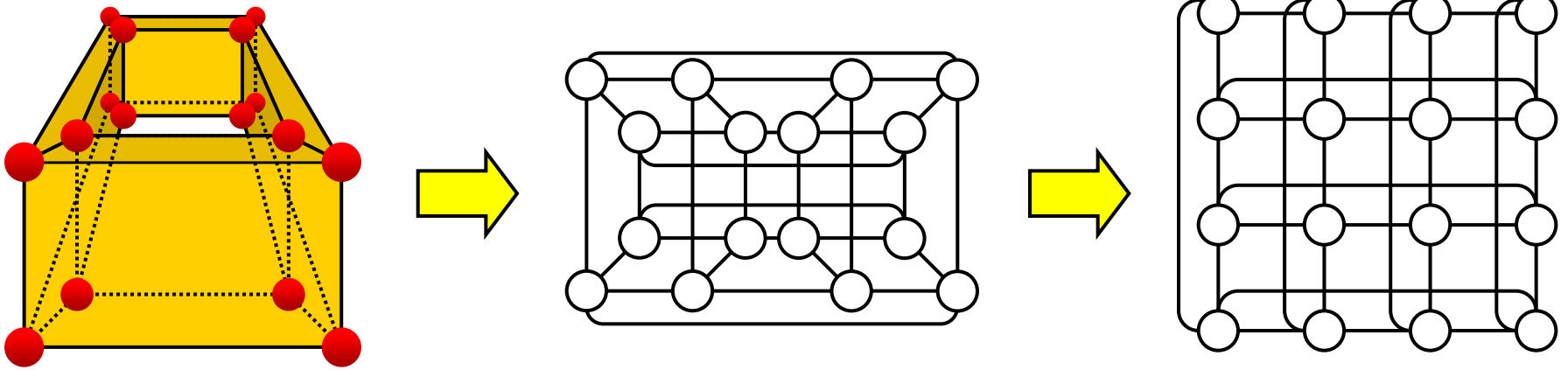
- 6次元メッシュ／トーラス結合網 Tofu
  - って意味不明～



- 2次元メッシュ

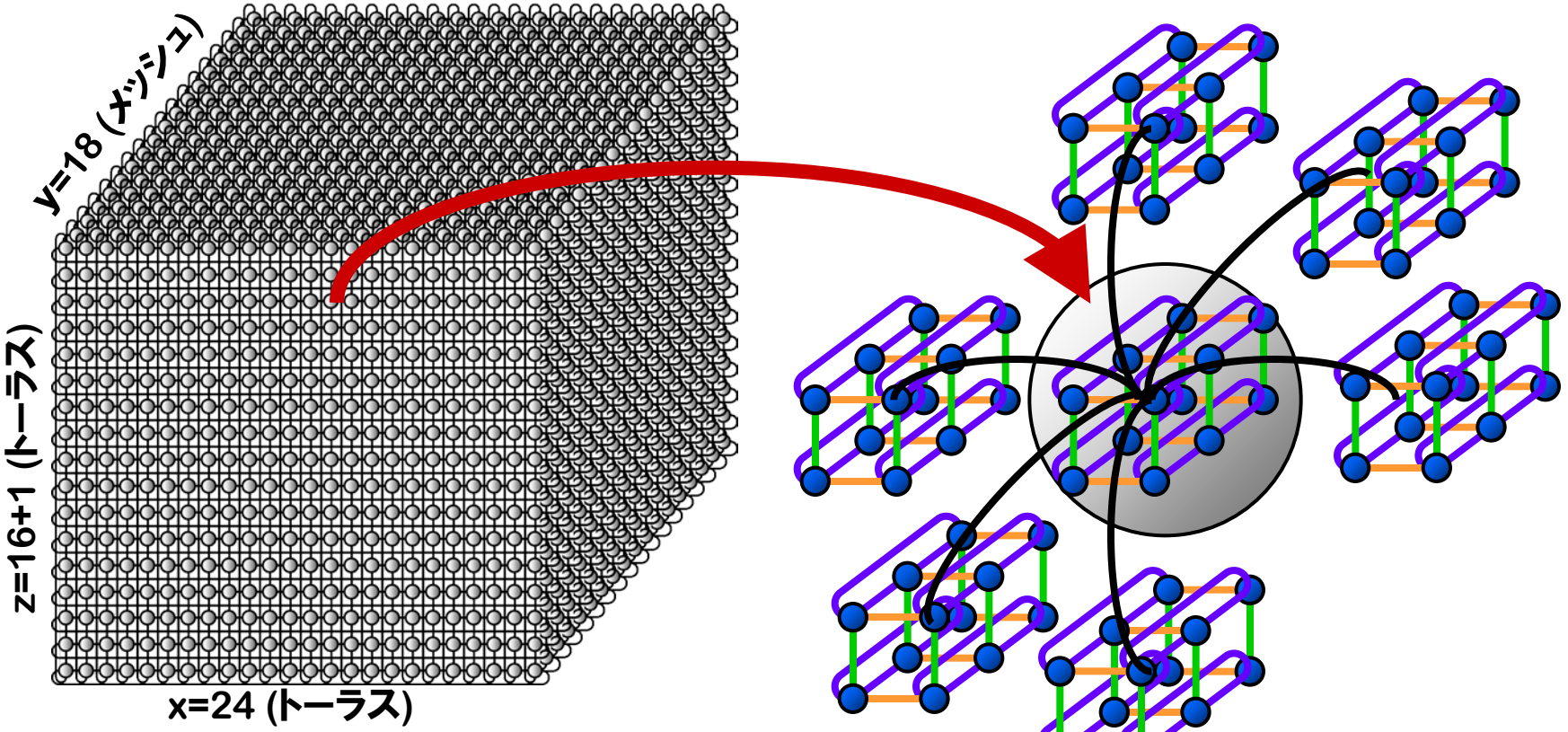


- 2次元トーラス (ドーナツの表面)



スーパーにする方法：京 の通信路 (2/2)

- 6次元メッシュ／トーラス結合網 Tofu



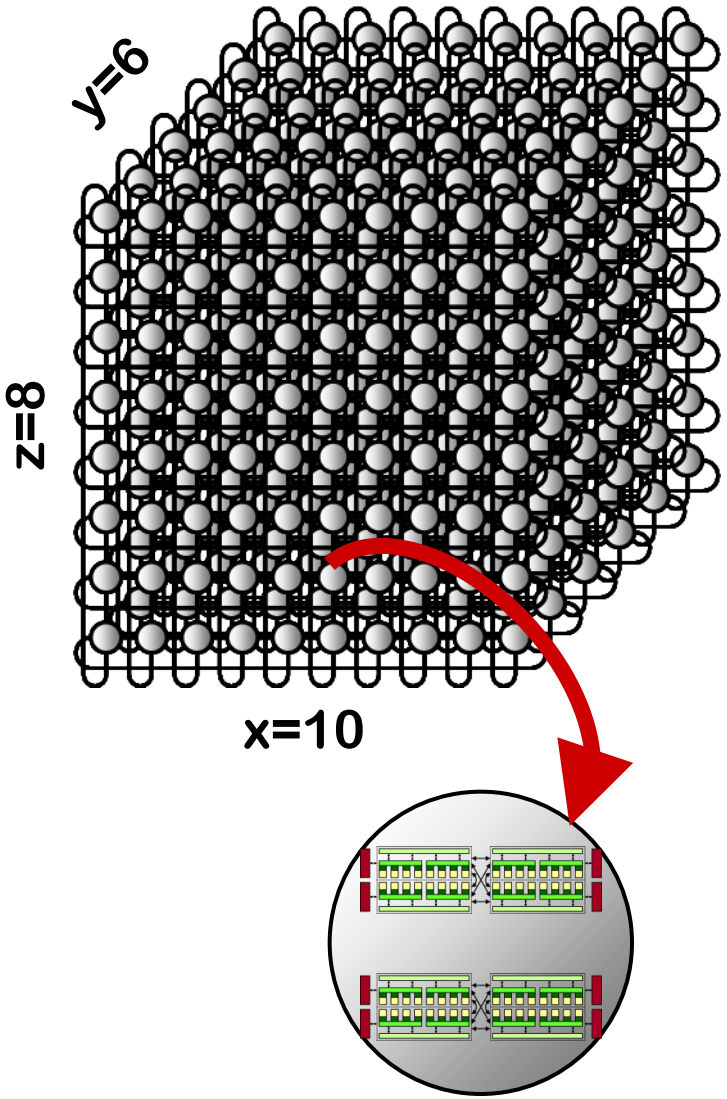
24×18×(16+1)×2×2×3
＝88,128

京大スパコンの全体像 (1/3)

- Camphor

CRAY XE6

2×(10×8×6−10)＝940

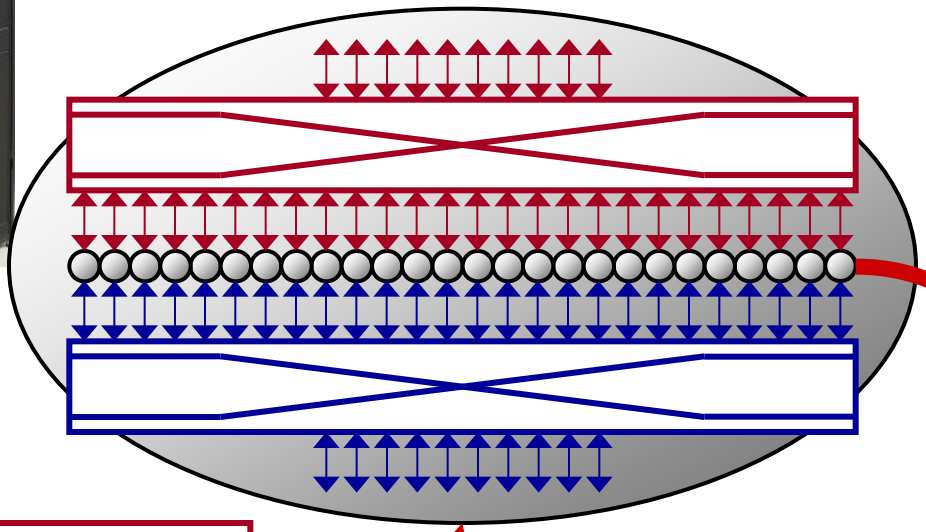


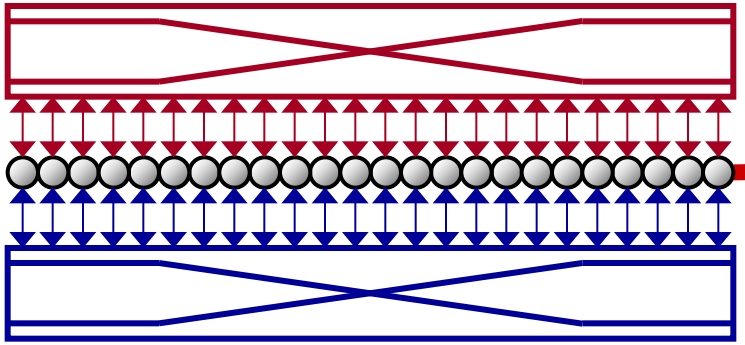
京大スパコンの全体像 (2/3)

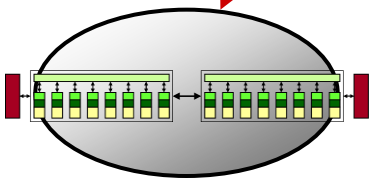
- Laurel

APPRO GreenBlade 8000

24×26−23=601



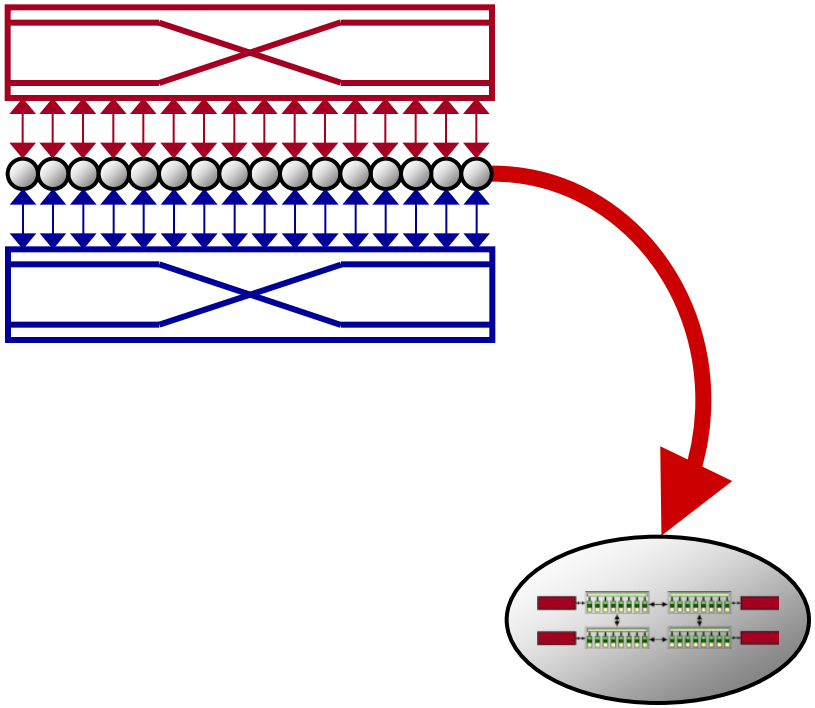




京大スパコンの全体像 (3/3)

- Cinnamon

APPR 2548X



スーパーにする方法：連立方程式の並列計算

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

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)

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

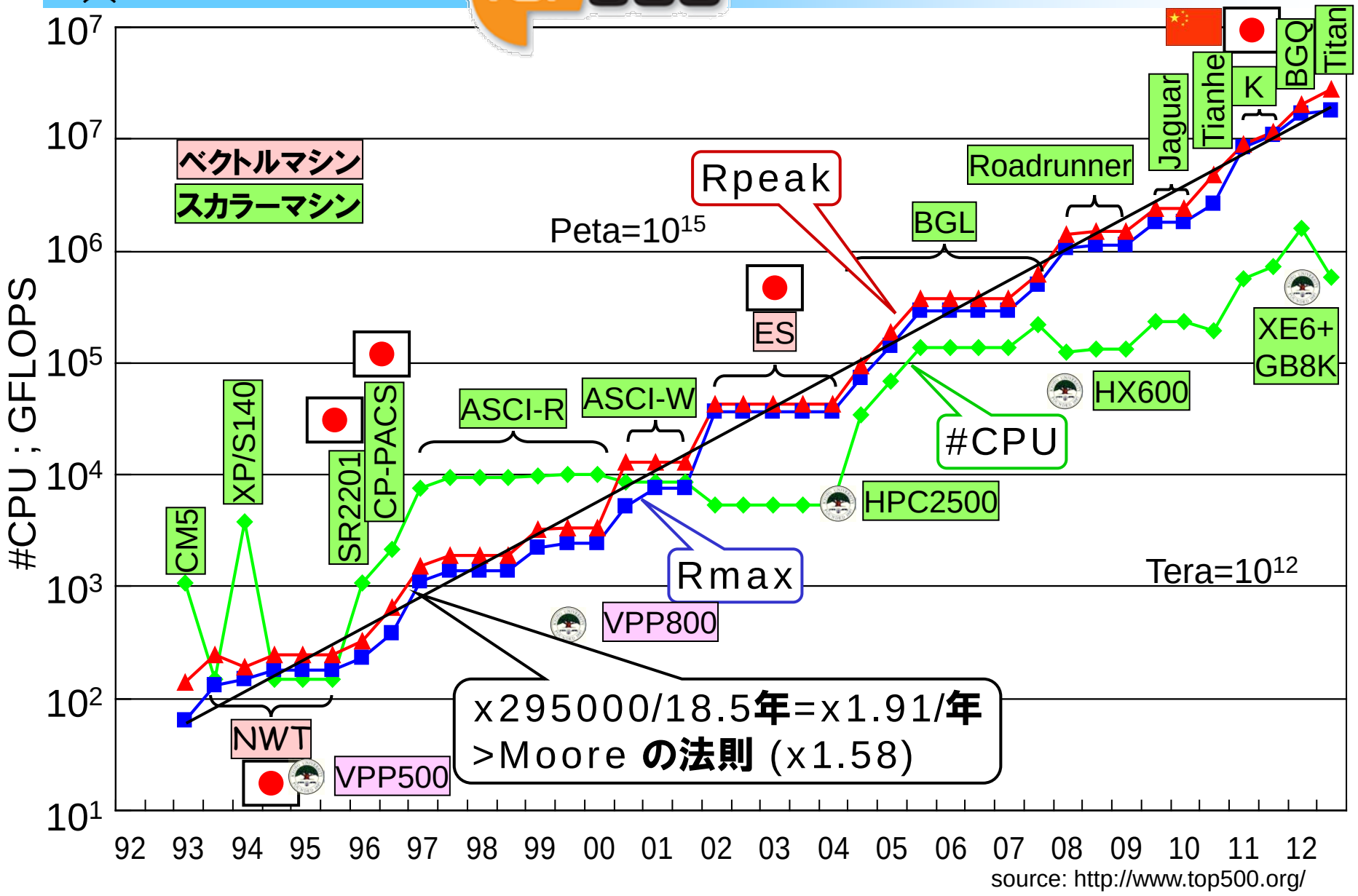
スーパーコンピュータの歴史(にまた戻って)
ベクトル vs 並列

- 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/

（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**

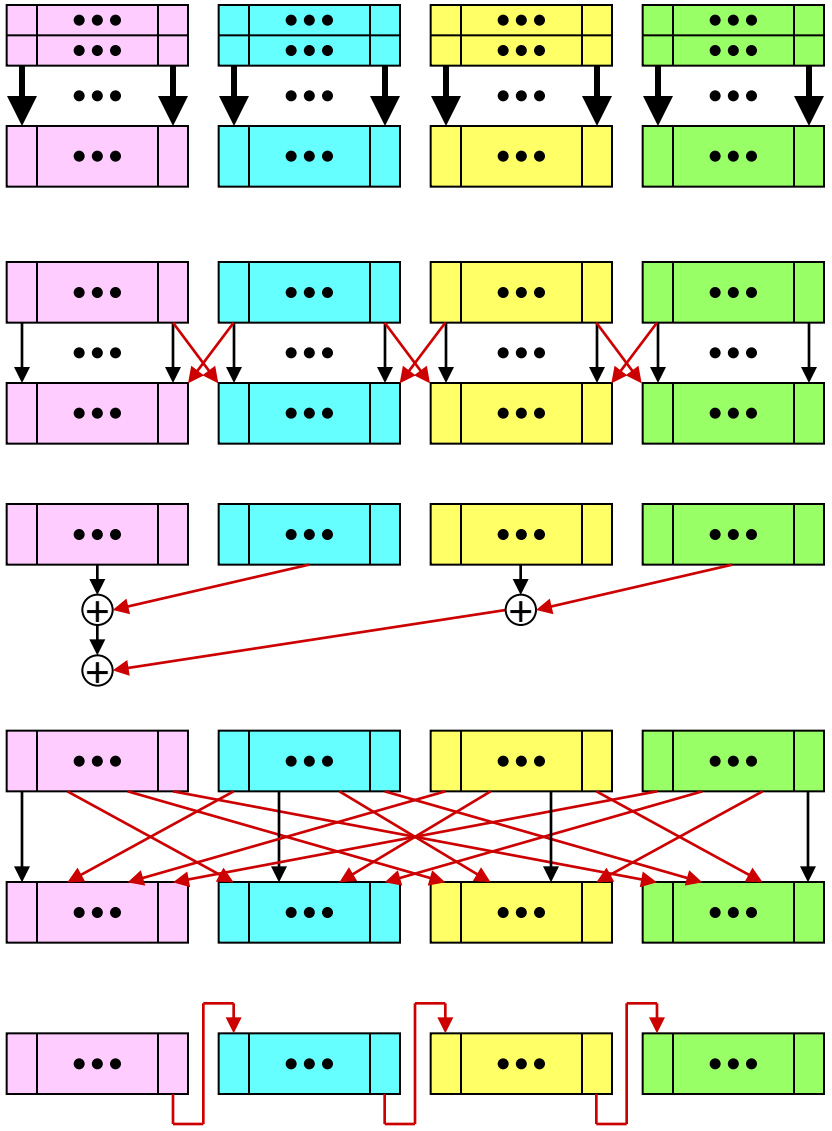
$$z = x_1 + x_2 + \cdots + x_n$$

- **何とかなる**

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

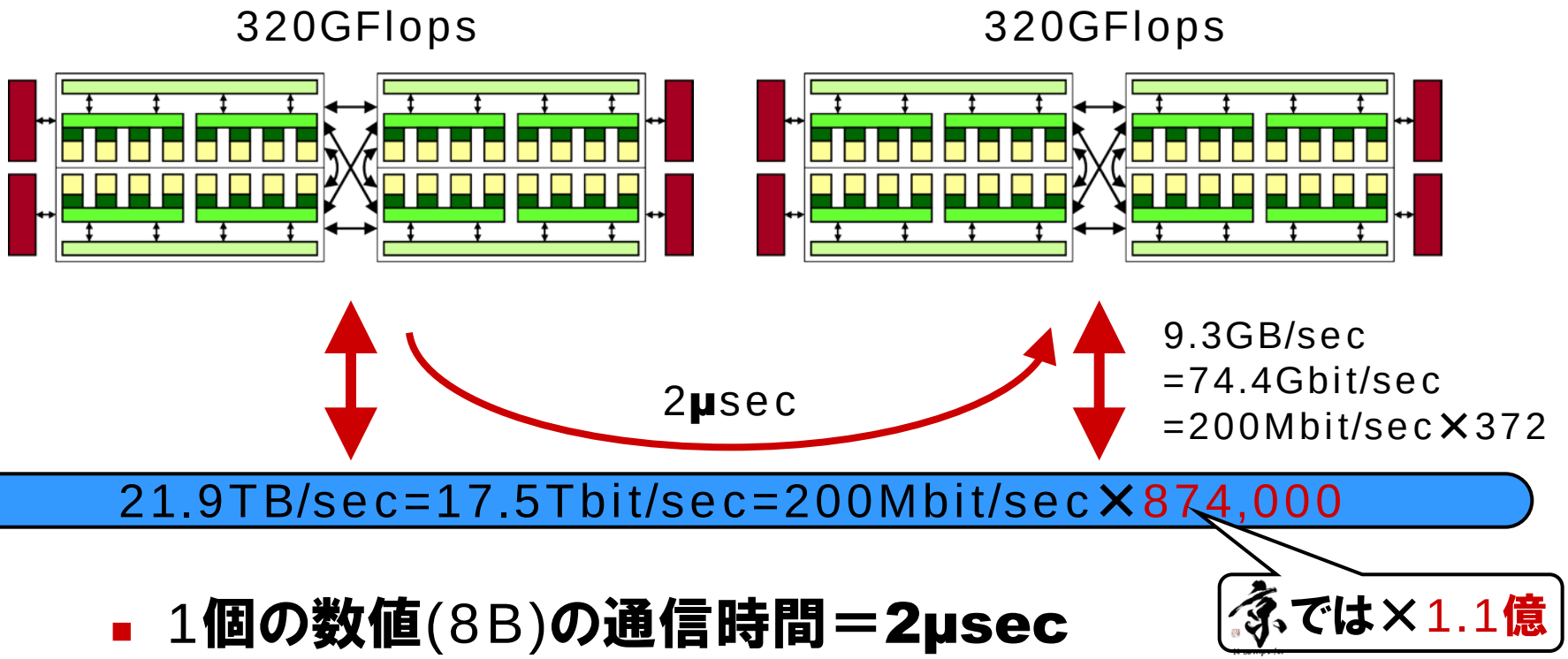
- **全然ダメ**

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



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。