

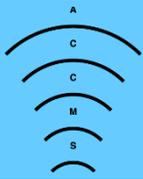
計算科学が拓く世界

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

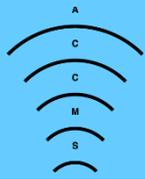
中島 浩

- <http://www.cs.kyoto-u.ac.jp/>
提供科目 > 計算科学が拓く世界 > 後期 #1



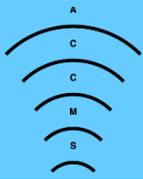
科目の概要 (1/2)

- **計算科学**: 理論 & 実験科学に続く第3の科学
 - **実施困難・不可能**な実験を(スーパー)コンピュータの中で**仮想的に実施**(=シミュレーション)
 - **観測困難・不可能**な空間 (星の内部, 原子・分子レベル...)
 - **到達困難・不可能**な時間 (過去の再現, 未来の予測...)
 - **構築困難・不可能**な実験規模 (宇宙, 地球, 日本全土...)
- **科目の内容**
 - 最新の計算科学の研究事例を
 - さまざまな分野の第一線研究者が
 - なるべく数式を使わずに紹介・解説



科目の概要 (2/2)

1	中島浩	ACCMS	スーパーコンピュータは何故スーパーか
2	黒瀬良一	工・機械	数値流体力学の役割
3	石岡圭一	理・地球惑星	地球流体力学における計算機利用について
4	平原和朗	理・地球惑星	地震発生シミュレーション最前線
5	山本量一	工・化工	シミュレーション科学の挑戦～メソスケールの物質科学～
6	阿久津達也	化研	バイオインフォマティクスにおける計算科学
7	岡本久	数解研	非線形力学入門
8	木元小百合	工・社基	地盤の変形シミュレーション
9	中嶋洋	農・地環	オフロード車両の走行力学について
10	榎本剛	防災研	スーパーコンピュータを用いた気象の予測
11	佐藤啓文	工・分子	化学現象・化学反応の理論～pHから蛋白質まで～
12	青木一洋	医・生命動態	細胞内情報伝達系のシステムズバイオロジーと計算科学
13	小山田耕二	教育院	可視化の世界
14	藤澤和謙	農・地環	土と水の相互作用を科学する



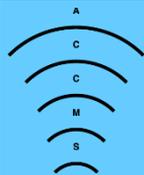
講義の概要

■ 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



どのくらいスーパー？ (1/2)



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

は  の**180万倍も高速**

- **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**
 - $10^{-308} \sim 10^{308}$ の実数を近似的に(10進16桁精度)表現したもの
 - $2.99792458... \times 10^8$ (m/s), $9.1093829140... \times 10^{-31}$ (kg)
-  11.5 P(ペタ 10^{15}) FLOPS (1.15 )
- ÷  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

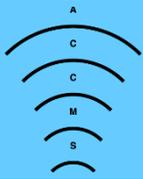
ここがスーパー

$$\div \text{computer monitor} : 1.6\text{GHz} \times 2 \times 2 \times 1$$

$$= 1,797,120$$

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 \doteq パソコン \times 550万

- 京大スーパーコンピュータ \doteq パソコン \times 9万

→ パソコンで1ヶ月かかる計算 = 0.5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) \doteq パソコン

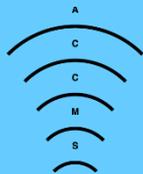
- 非常に多数のパソコン(のようなもの)の集合体

- パソコン = 1～16 CPU

- 京大スパコン = 40,208 CPU

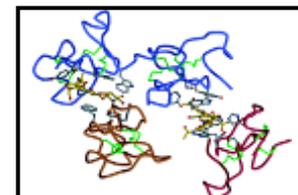
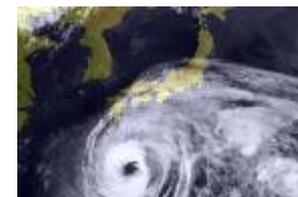
- 世界最高速スパコン = 3,120,000 CPU

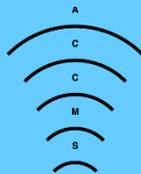
- 世界最大規模スパコン = 3,120,000 CPU



スーパーコンピュータ (スパコン) とは (2/2)

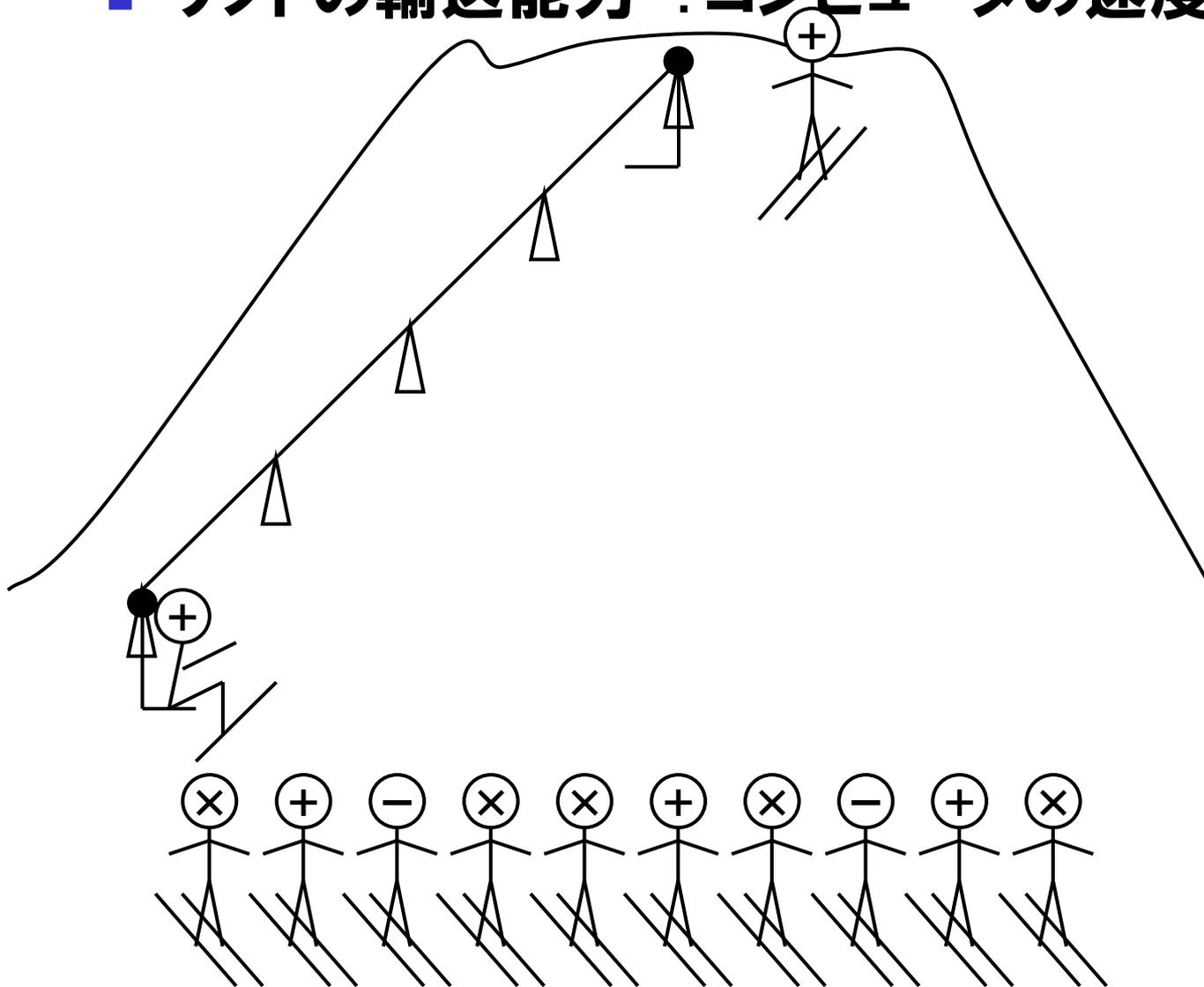
- スパコンが得意な計算 = 大量CPUによる分担計算
= 超大量のデータを対象とする計算
 - 地球全体の気象・気候・海洋現象の予測
 - 1km² あたり1データ
 - データ数 ≒ 5億 (× 高さ方向)
 - 生体物質・化学物質・材料の解析
 - 膨大な分子・原子数
 - (e.g. 水 1ml = 3.3 × 1兆 × 100億)
 - 自動車の空力・衝突解析
 - 1mm² or 1cm³ あたり1データ
 - データ数 = 1~10億
 - Web 文書の解析
(← 自動翻訳用データ作成など)
 - 文書数 = 数億 ~ 数10億

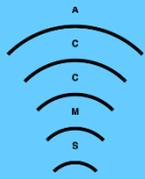




スーパーにする方法

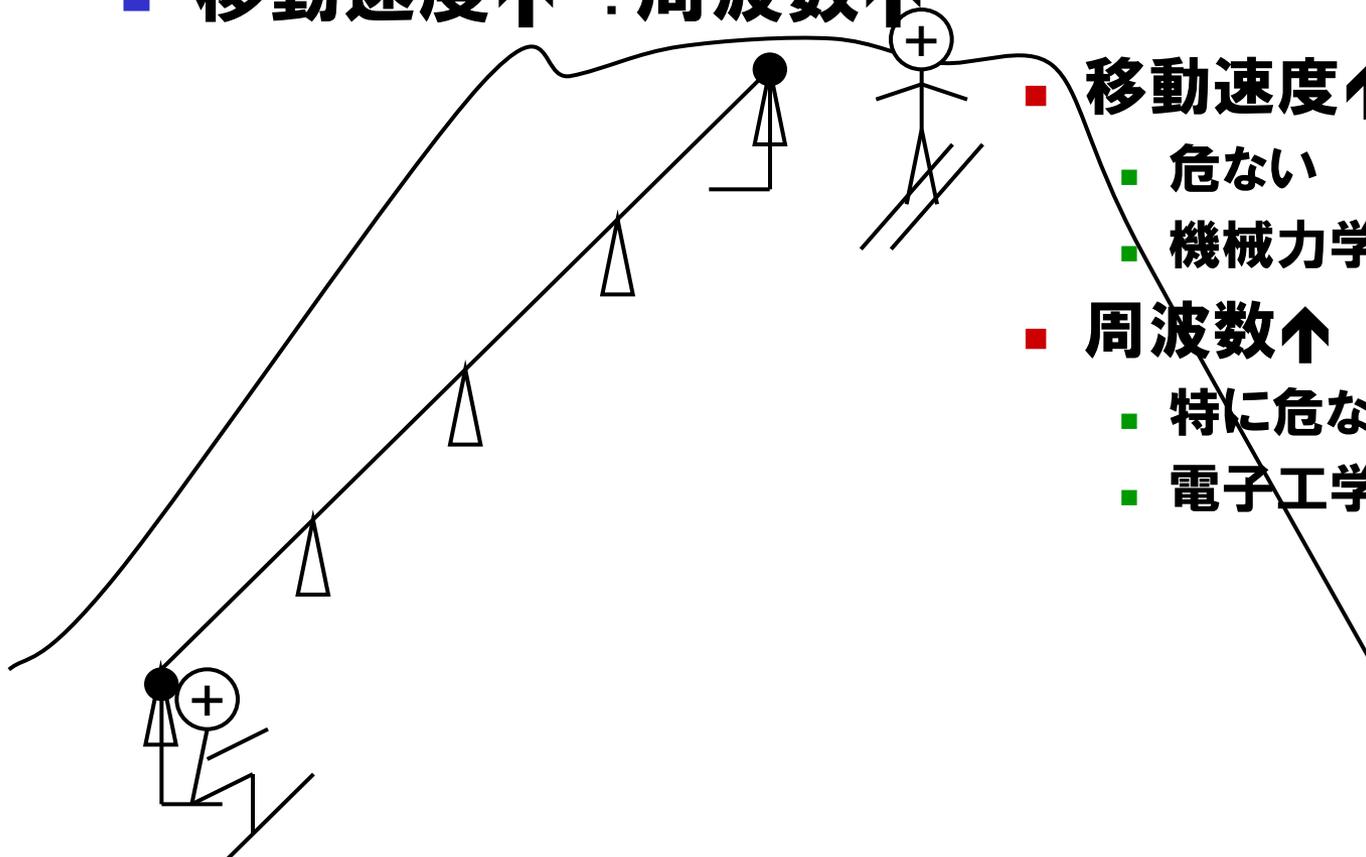
- リフトの輸送能力 \equiv コンピュータの速度



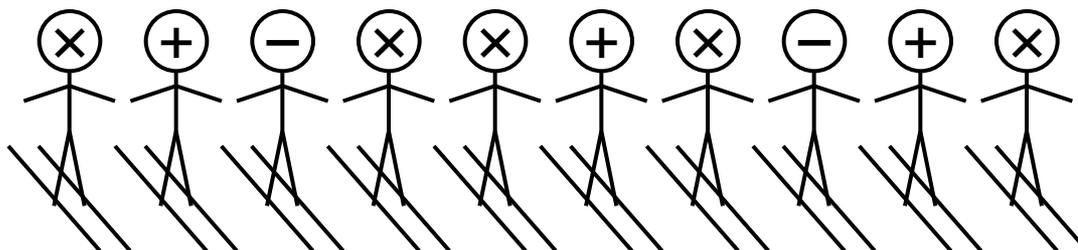


スーパーにする方法: ~1970

■ 移動速度↑ ≡ 周波数↑

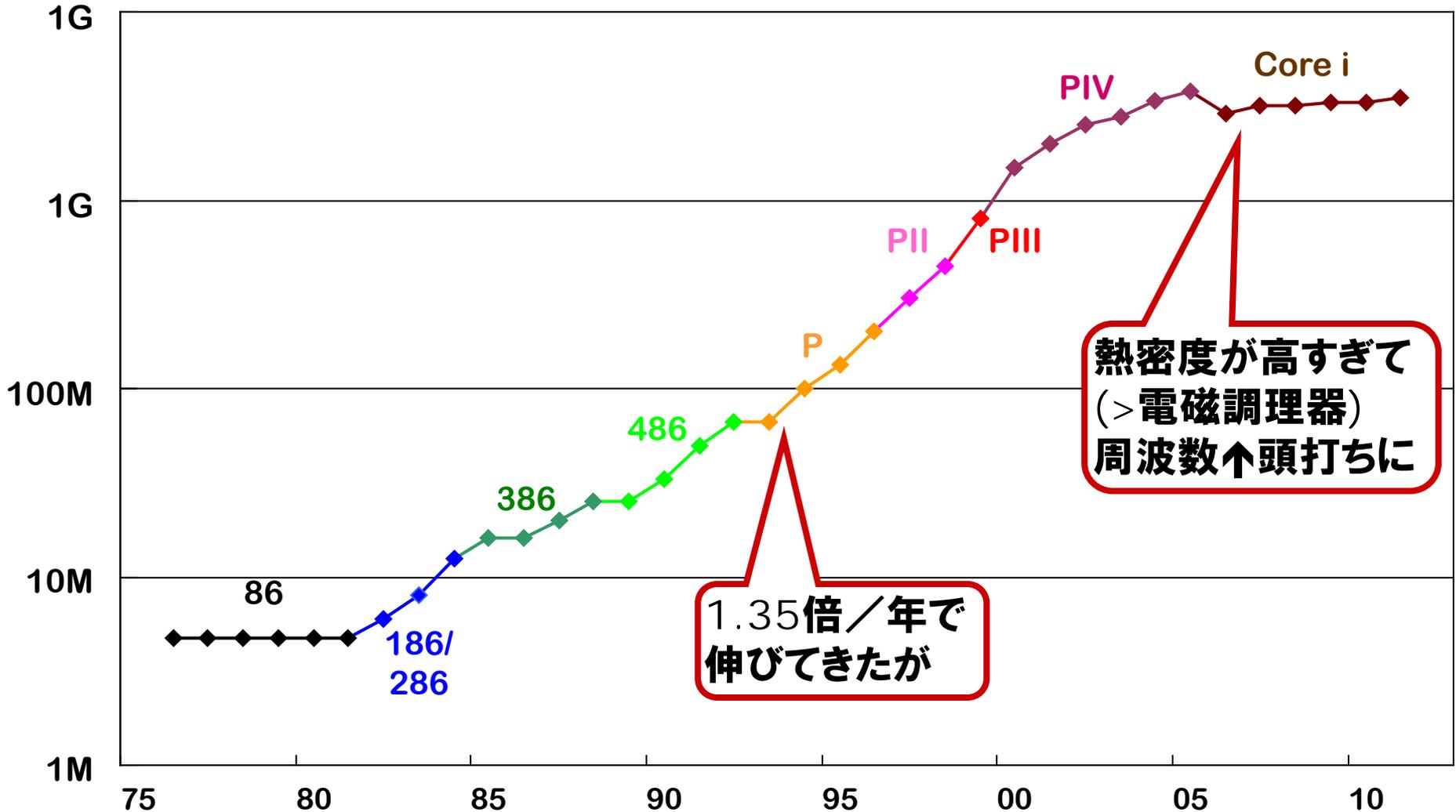


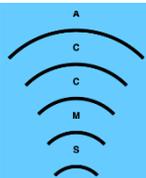
- 移動速度↑
 - 危ない
 - 機械力学的に無理
- 周波数↑
 - 特に危なくはない
 - 電子工学的に無理ではない?





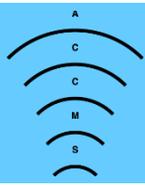
スーパーにする方法：周波数↑の歴史



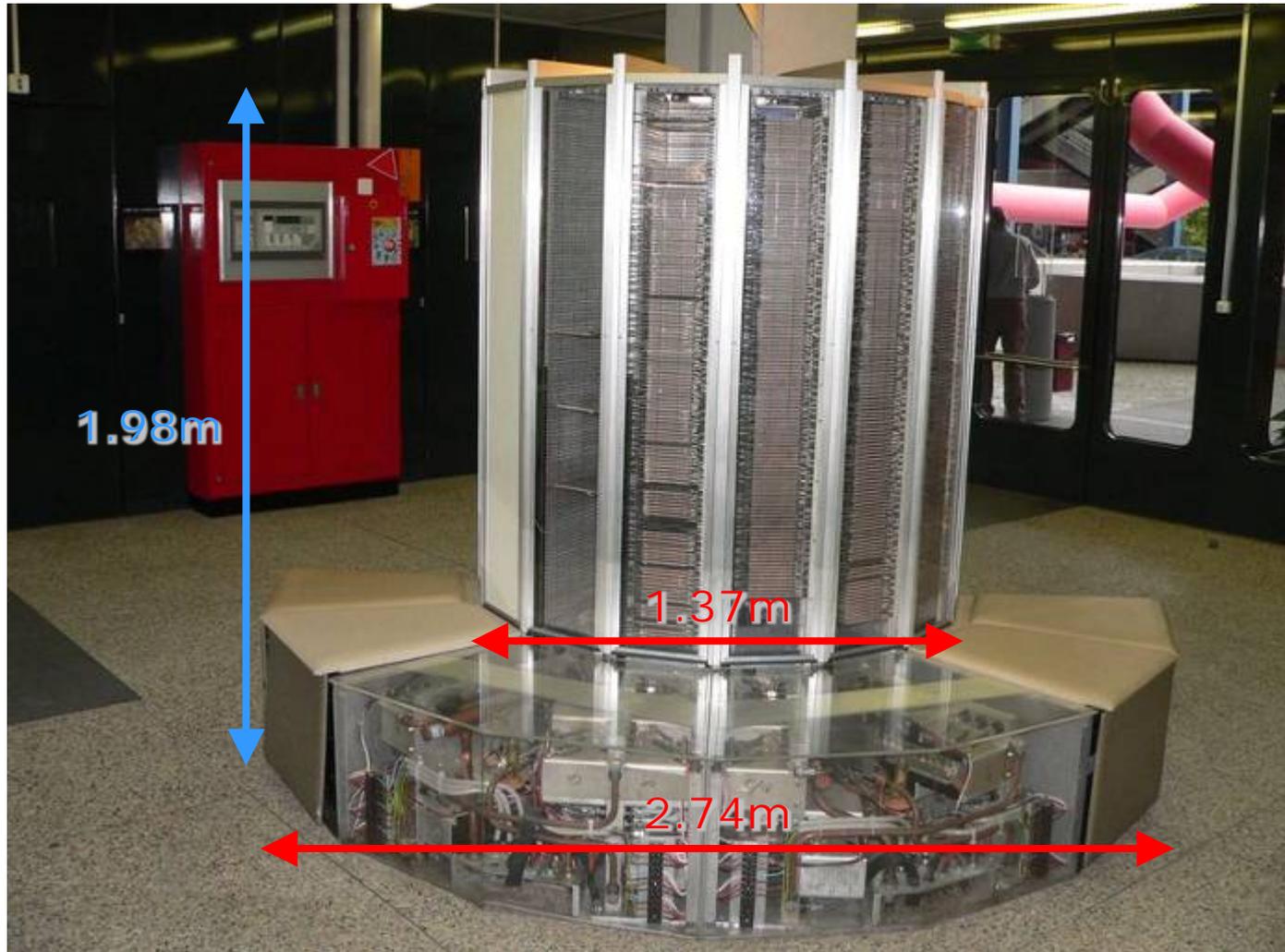


そもそもの始まり:ベクトルマシン (1)

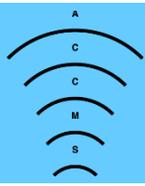
- 1976年:最初のスパコンCray-1登場
 - 動作周波数=80MHz (< 携帯電話)
 - 演算性能=160MFlops (< 携帯電話)
 - 消費電力=115kW
 - 大量の数値データ(ベクトル)に対する同種演算が得意
- 1976年(中島=20歳)での「スーパー」度
 - 最速@京大(富士通 F230-75) < 5MFlops
 - 最速@京大情報工学科(日立 H8350) < 1MFlops
 - Intel 8086/87(1978/80) \doteq 50KFlops



そもそもの始まり:ベクトルマシン (2)



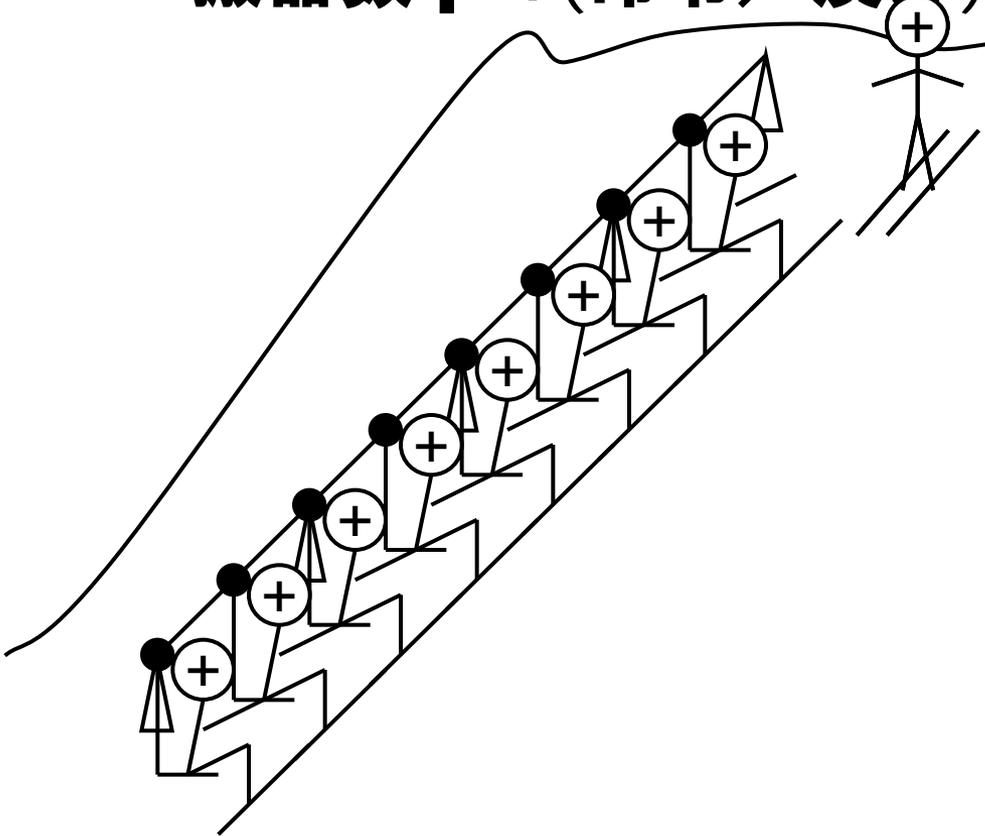
source: <http://en.wikipedia.org/wiki/Image:Cray-1-p1010221.jpg>



少し話を戻して

スーパーにする方法: 1970~

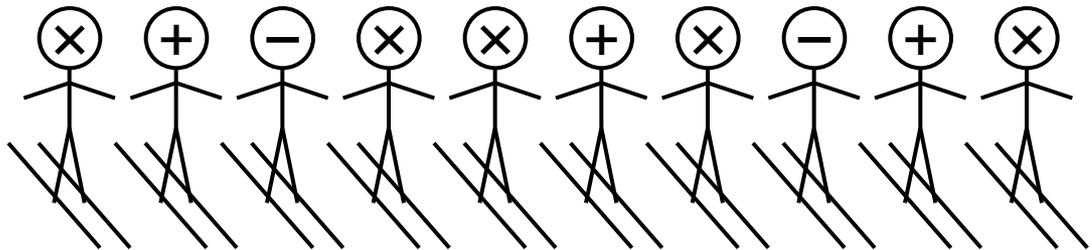
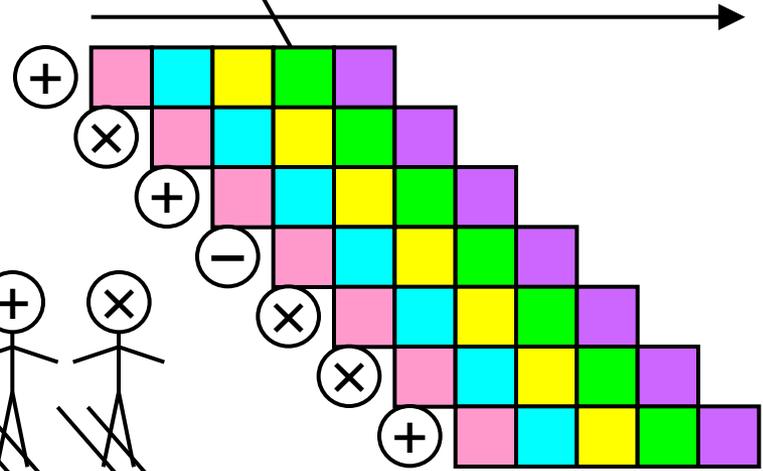
■ 搬器数↑ ≡ (命令 / 演算) **パイプライン**

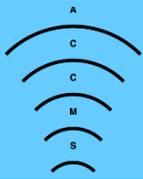


■ $Z = X + Y$ (加算命令) の手順

- 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)

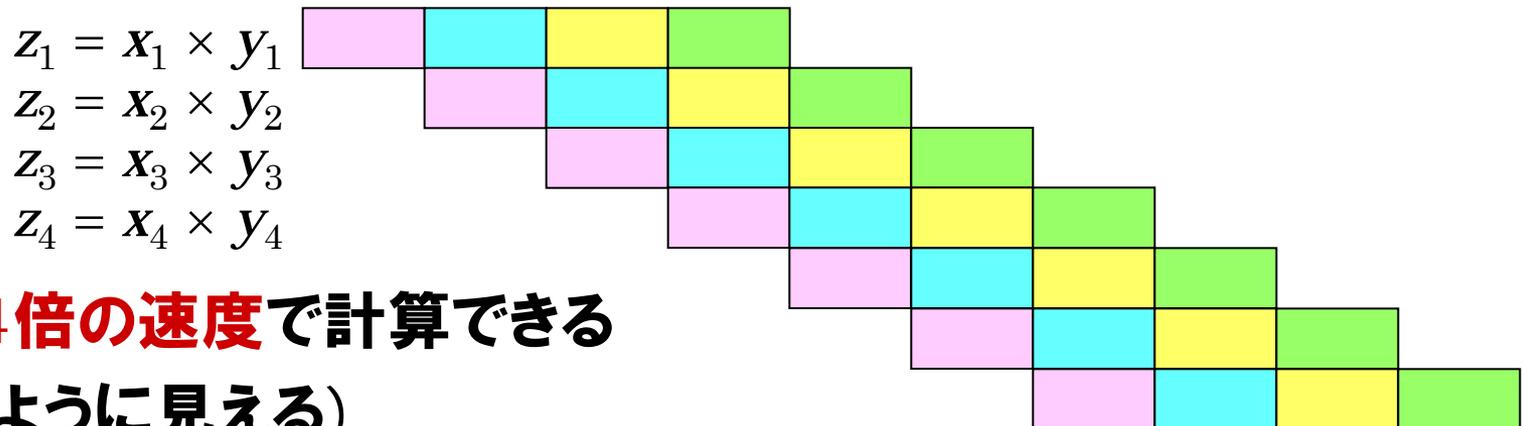
- 大量数値データの同種演算を高速に行う方法

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

- 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

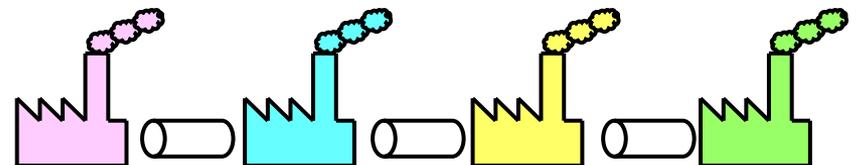
$$z_i = x_i \times y_i$$

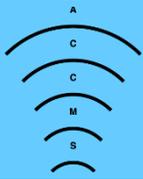
- 多数の乗算を1小操作ずつずらして行う



→ **4倍の速度**で計算できる
(ように見える)

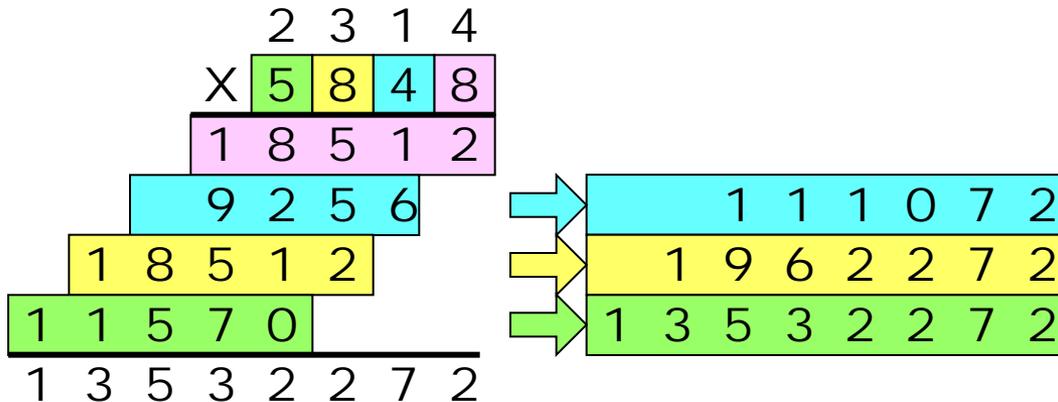
→ (演算) **パイプライン処理**





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)



$$2314 \times 5848 = 13532272$$

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

$$7872 \times 6752 = 53151744$$

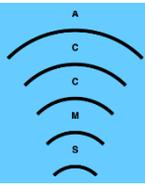
7872x2	+7872x5	+7872x7	+7872x6
--------	---------	---------	---------

$$1778 \times 7142 = 12698476$$

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

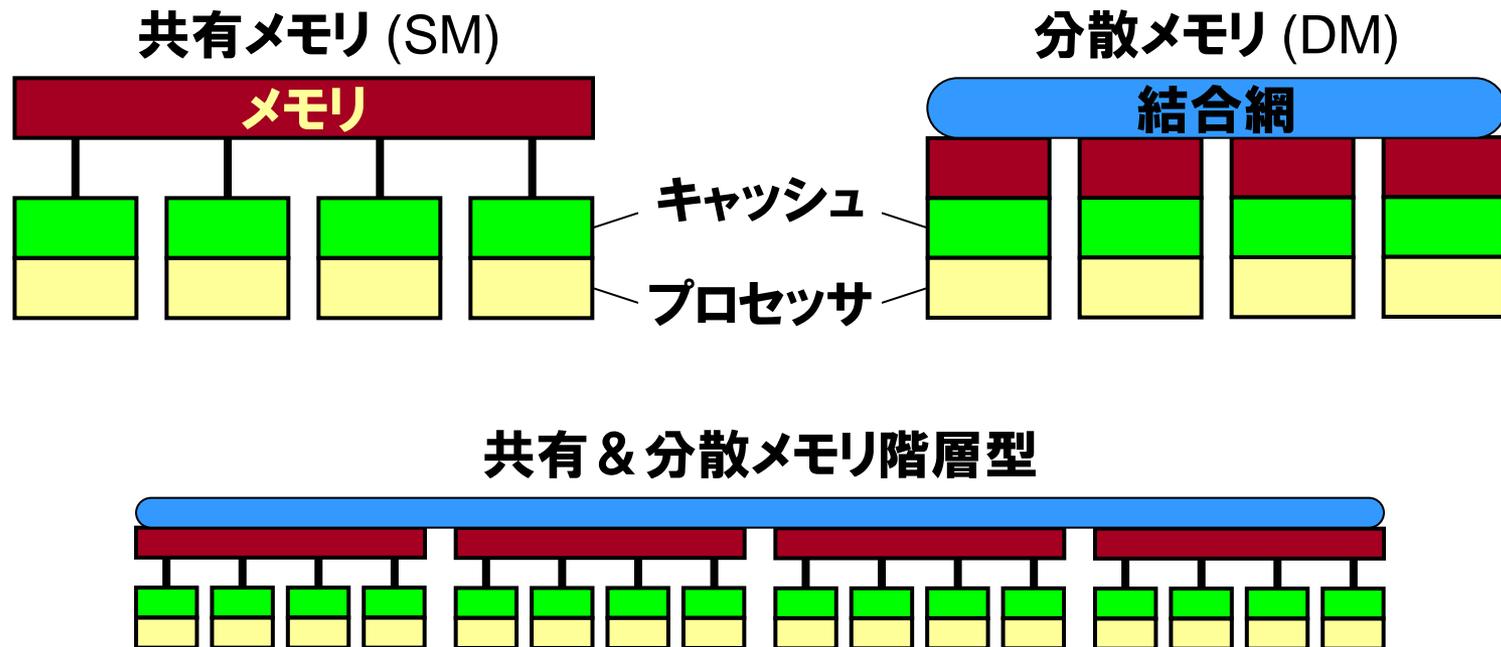
$$8485 \times 1651 = 13843635$$

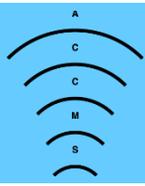
8385x1	+8385x5	+8385x6	+8385x1
--------	---------	---------	---------



スーパーコンピュータの歴史(に戻って) 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)

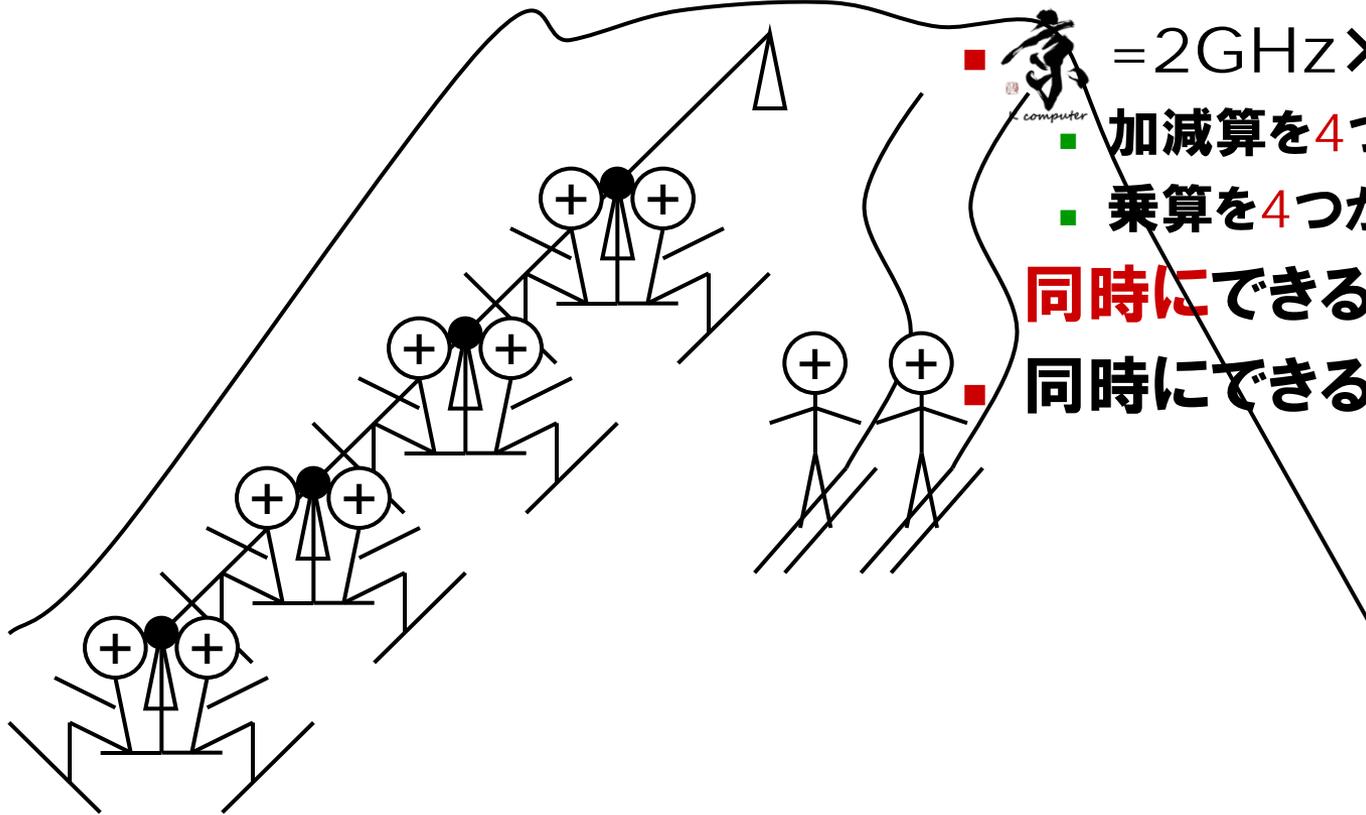




また話を戻して

スーパーにする方法: 1990~

■ 座席数↑ ≡ スーパースカラー / SIMD



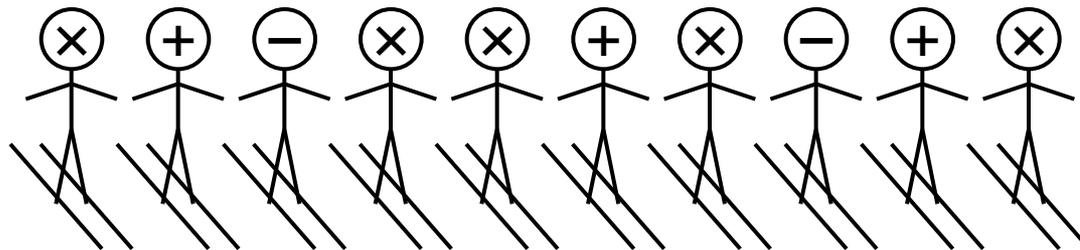
■ $= 2\text{GHz} \times 8 \times 8 \times 88128$

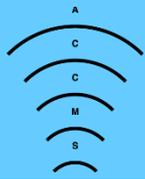
- 加減算を4つと

- 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

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

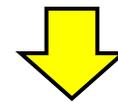


$$\begin{cases} x - \frac{3}{2}y + \frac{4}{2}z = \frac{8}{2} \\ x - \frac{4}{3}y + \frac{2}{3}z = \frac{1}{3} \\ x - \frac{2}{4}y + \frac{3}{4}z = \frac{9}{4} \end{cases}$$



同時にできる加減算

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

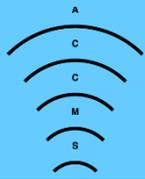


$$\left(-\frac{10}{8} + 8\right)z = \frac{54}{8}z = -\frac{14}{8} + 22 = \frac{162}{8} \Rightarrow z = 3$$

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

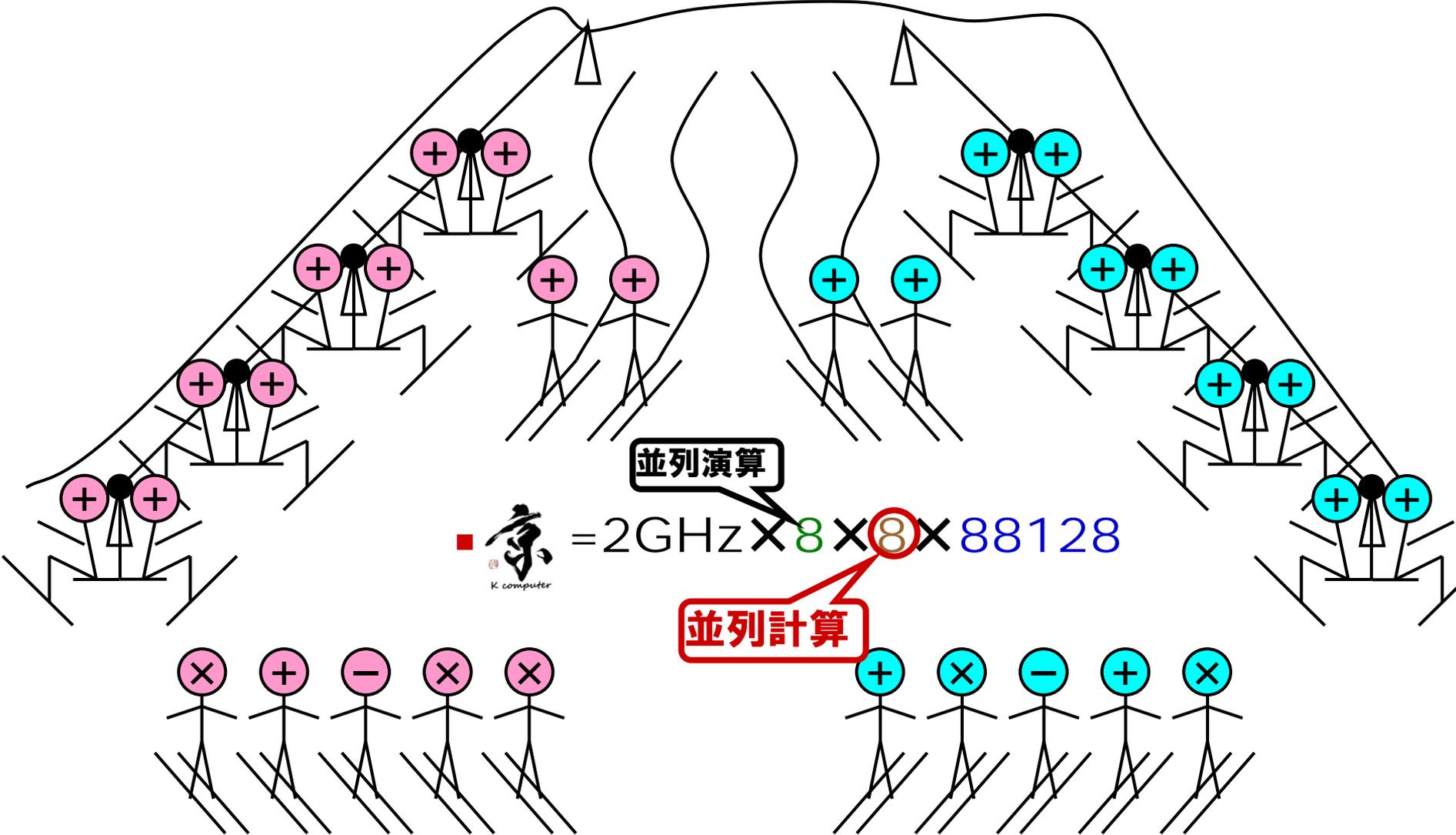
$$x = \frac{8}{2} + \frac{3 \cdot 2}{2} - \frac{4 \cdot 3}{2} = \frac{2}{2} = 1$$

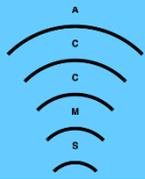
同時にできる除(乗)算



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



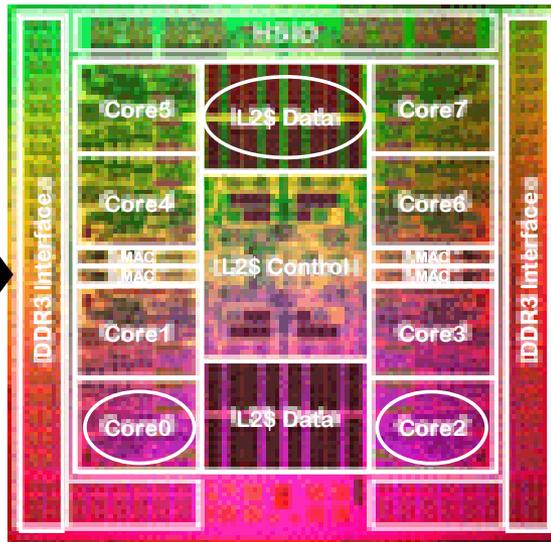
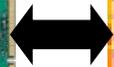


スーパーにする方法：**京** のプロセッサ

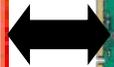
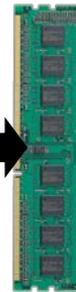
K computer

FUJITSU SPARC 64 VIIIfx

DDR3 8GB

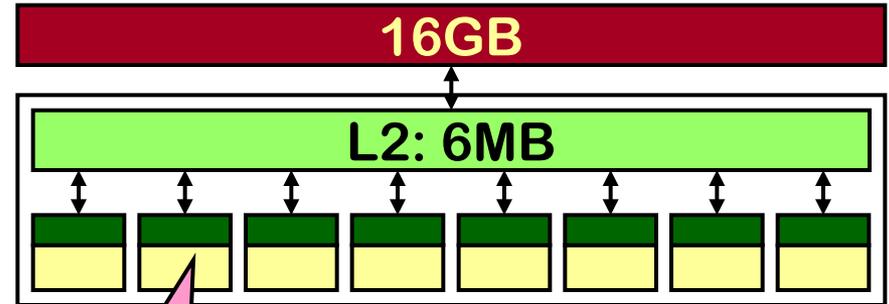


DDR3 8GB



共有メモリ

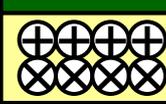
16GB



L2: 6MB

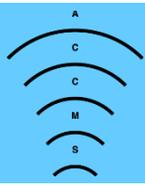
L1

32KBx2



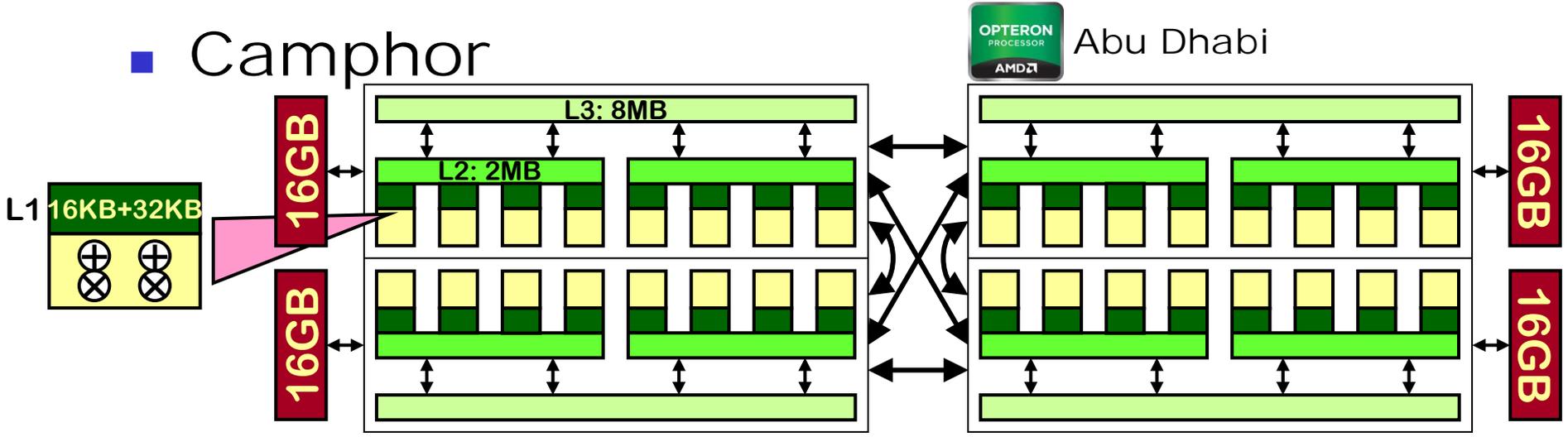
CPUコア

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

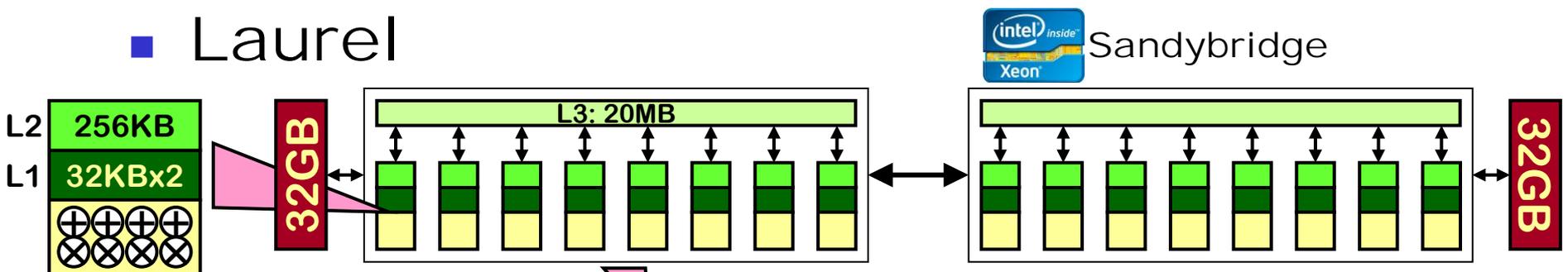


京大スパコンのプロセッサ (1/2)

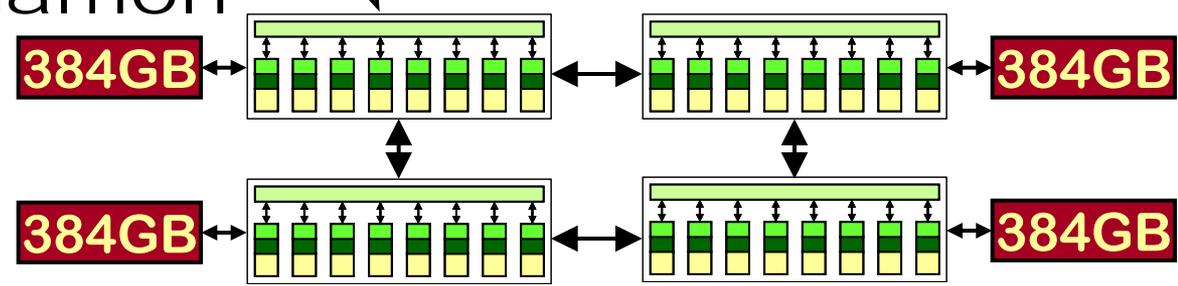
■ Camphor

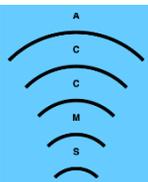


■ Laurel



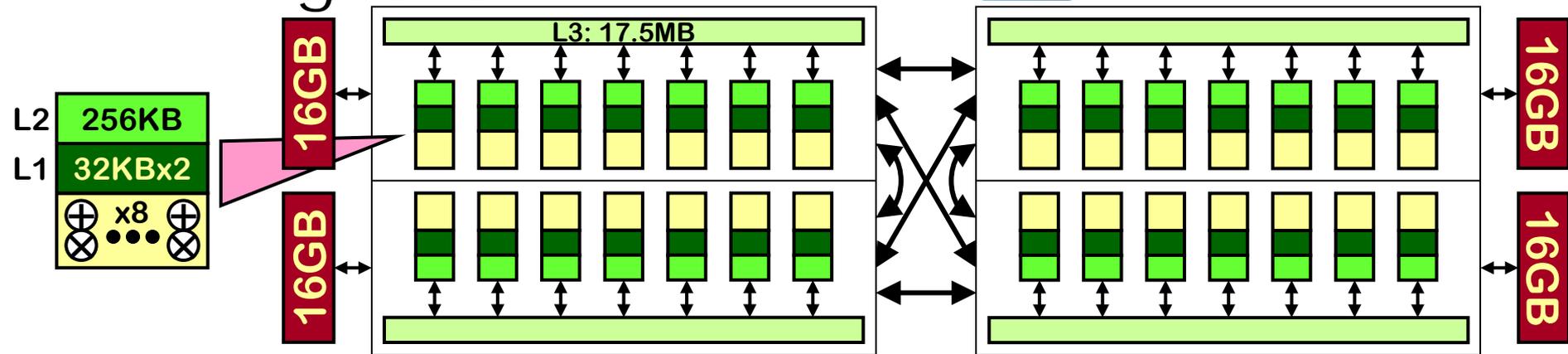
■ Cinnamon



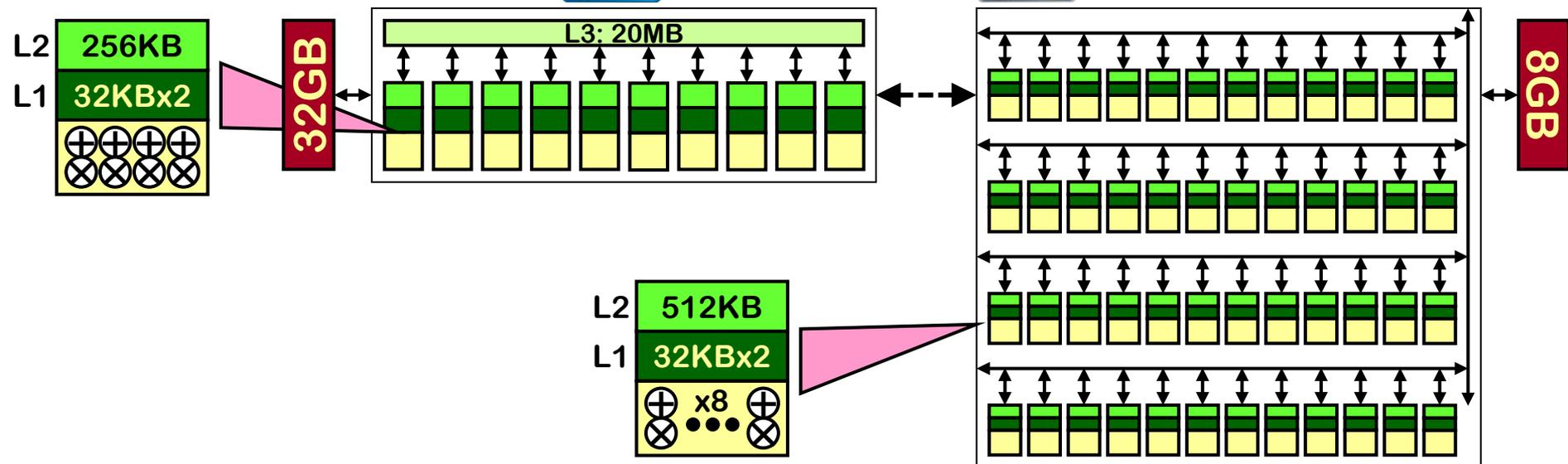


京大スパコンのプロセッサ (2/2)

■ Magnolia



■ Camellia



スーパーにする方法：連立方程式の並列計算

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

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + a_{14}x_4 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1$$

$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + a_{24}x_4 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2$$

$$a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 + a_{34}x_4 + \cdots + a_{3n}x_n = b_3$$

$$a_{41}x_1 + a_{42}x_2 + a_{43}x_3 + a_{44}x_4 + \cdots + a_{4n}x_n = b_4$$

...

$$a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + a_{n3}x_3 + a_{n4}x_4 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n$$



$$x_1 + a'_{12}x_2 + a'_{13}x_3 + a'_{14}x_4 + \cdots + a'_{1n}x_n = b'_1$$

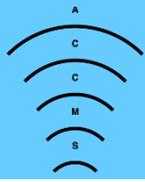
$$x_1 + a'_{22}x_2 + a'_{23}x_3 + a'_{24}x_4 + \cdots + a'_{2n}x_n = b'_2$$

$$x_1 + a'_{32}x_2 + a'_{33}x_3 + a'_{34}x_4 + \cdots + a'_{3n}x_n = b'_3$$

$$x_1 + a'_{42}x_2 + a'_{43}x_3 + a'_{44}x_4 + \cdots + a'_{4n}x_n = b'_4$$

...

$$x_1 + a'_{n2}x_2 + a'_{n3}x_3 + a'_{n4}x_4 + \cdots + a'_{nn}x_n = b'_n$$



スーパーにする方法:1980~

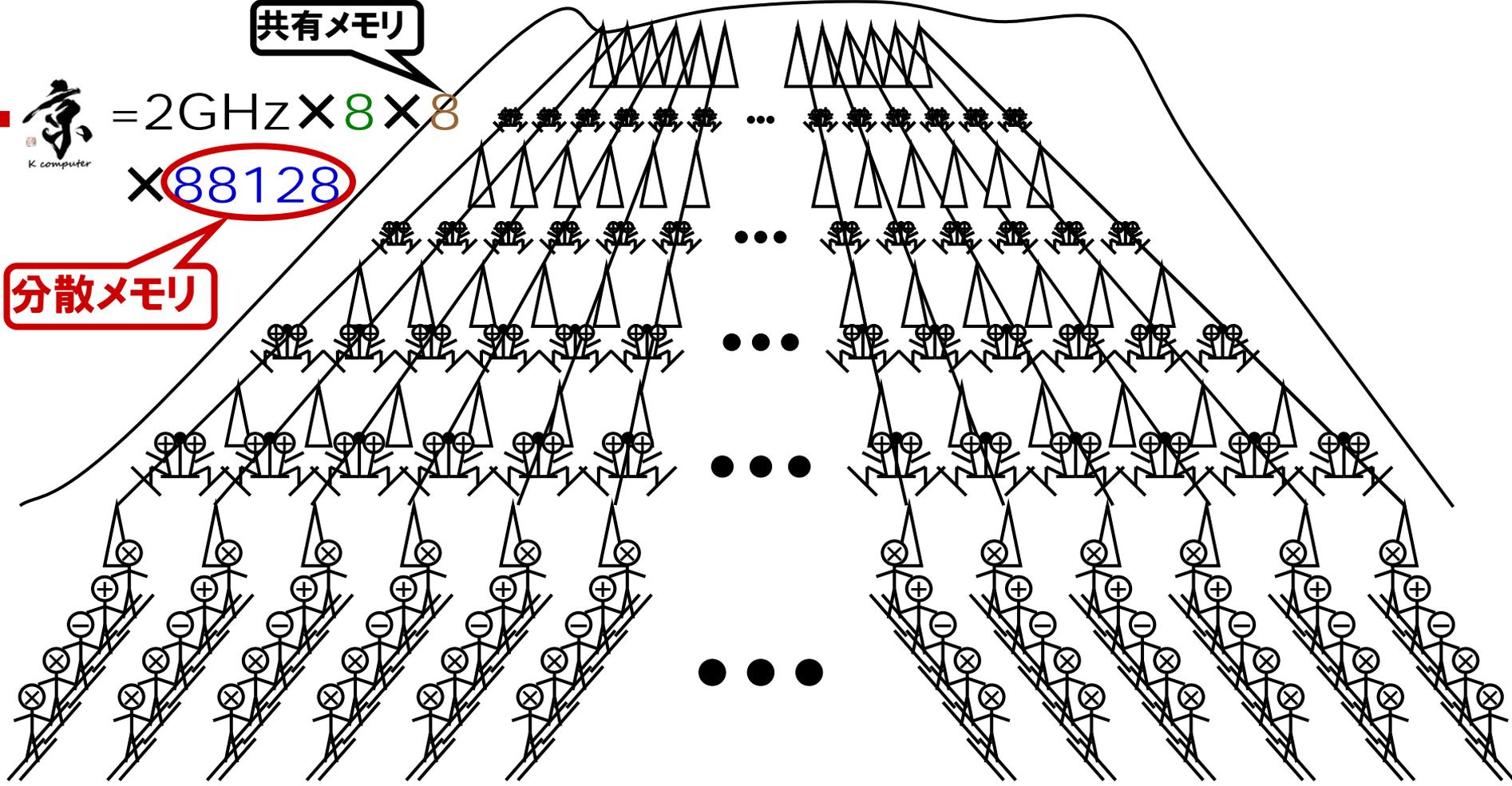
■ リフト数↑↑↑↑↑↑↑↑↑↑ ≡ 超並列コンピュータ

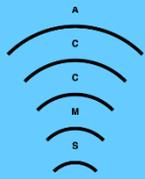
共有メモリ



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

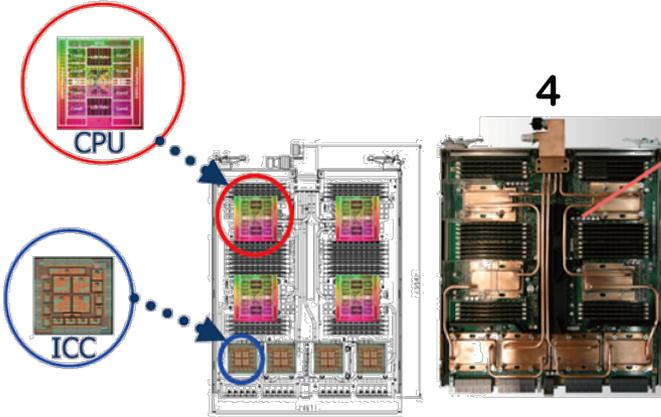
分散メモリ





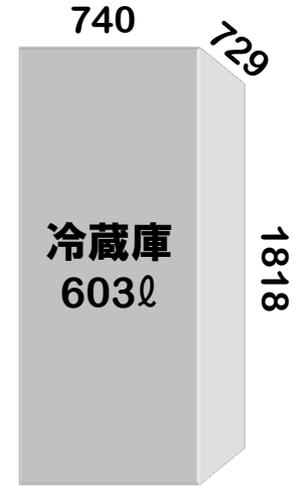
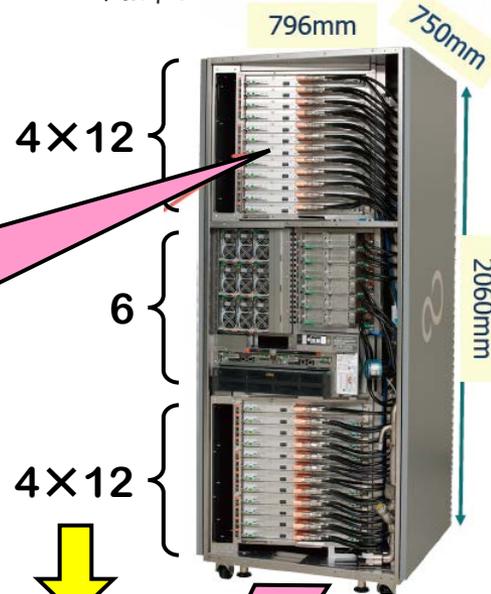
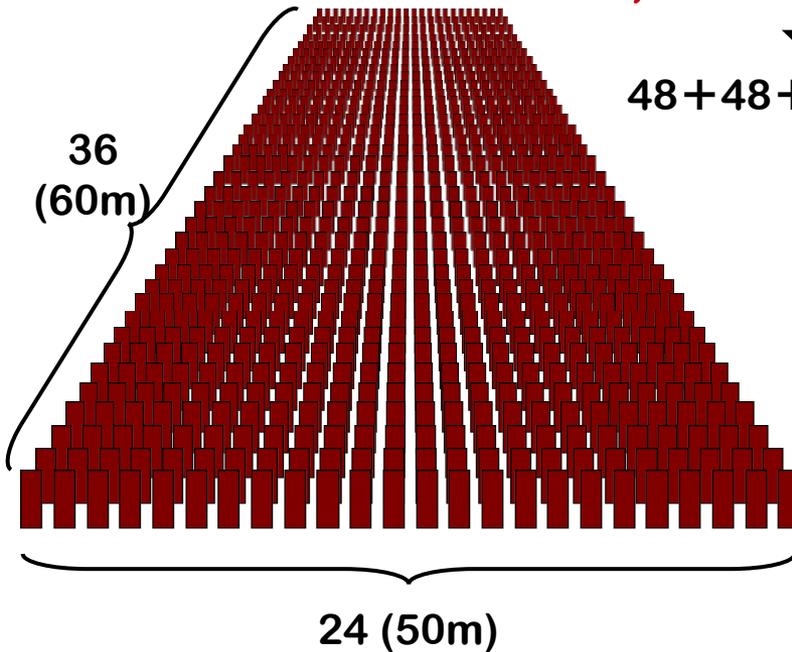
スーパーにする方法：京の全体像

K computer



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

$$102 \times 24 \times 36 = 102 \times 864 = 88,128$$



$$48 + 48 + 6 = 102$$

京計算機室
60m x 50m

京大体育館
56m x 54m



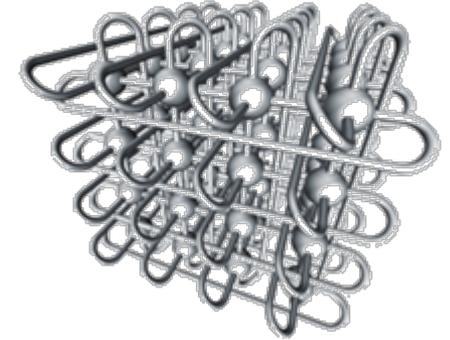
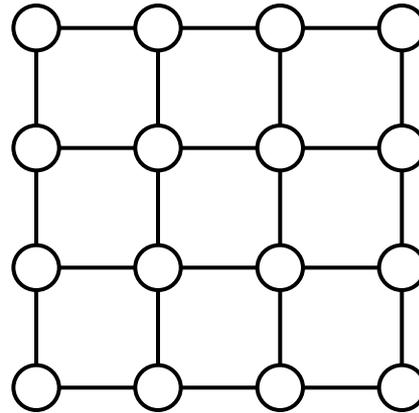
スーパーにする方法：**京** の通信路 (1/2)

K computer

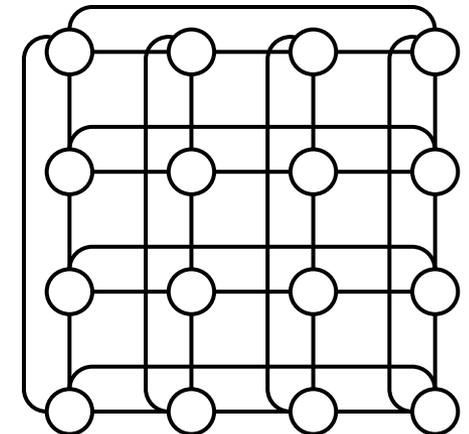
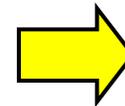
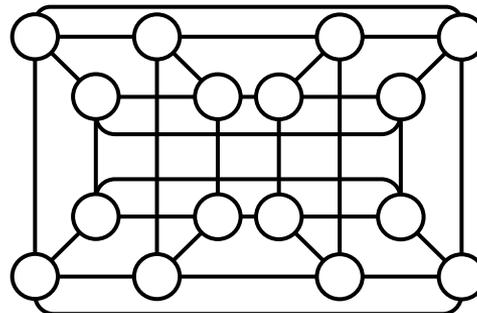
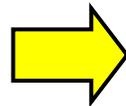
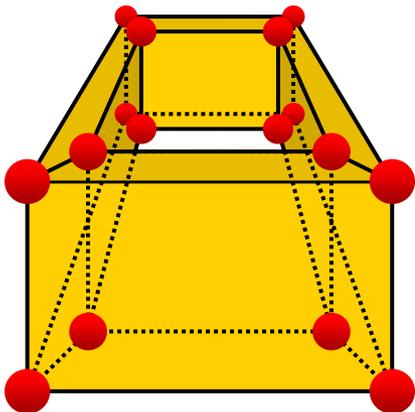
- 6次元メッシュ/トーラス結合網 **Tofu**

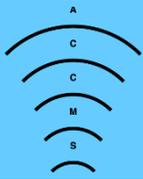
- って意味不明～

- 2次元メッシュ



- 2次元トーラス (ドーナツの表面)

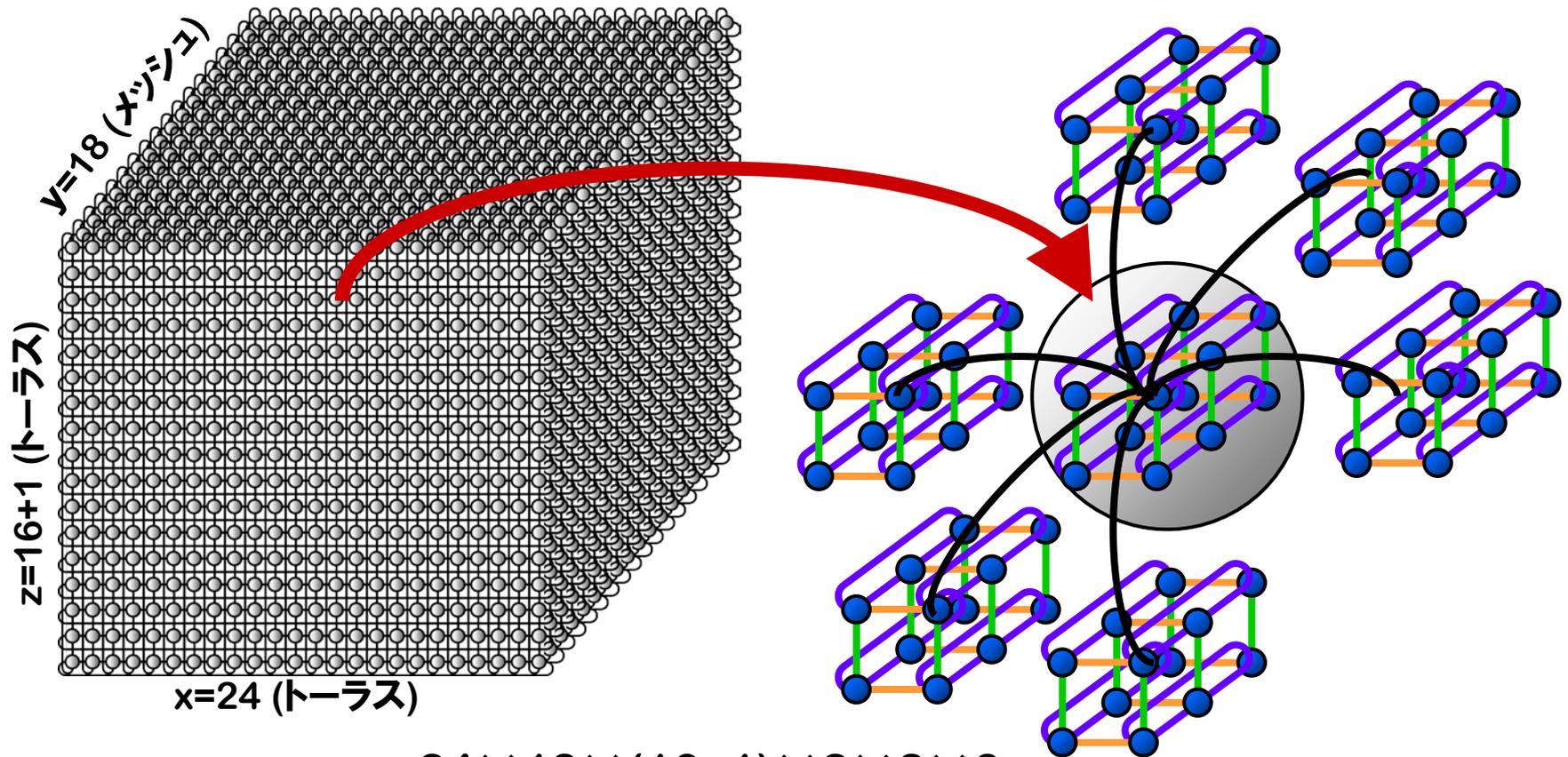




スーパーにする方法：京 の通信路 (2/2)

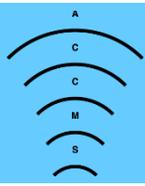
K computer

■ 6次元メッシュ/トーラス結合網 Tofu



$$24 \times 18 \times (16+1) \times 2 \times 2 \times 3$$

$$= 88,128$$



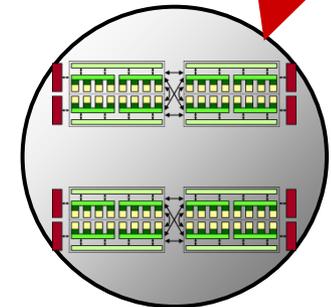
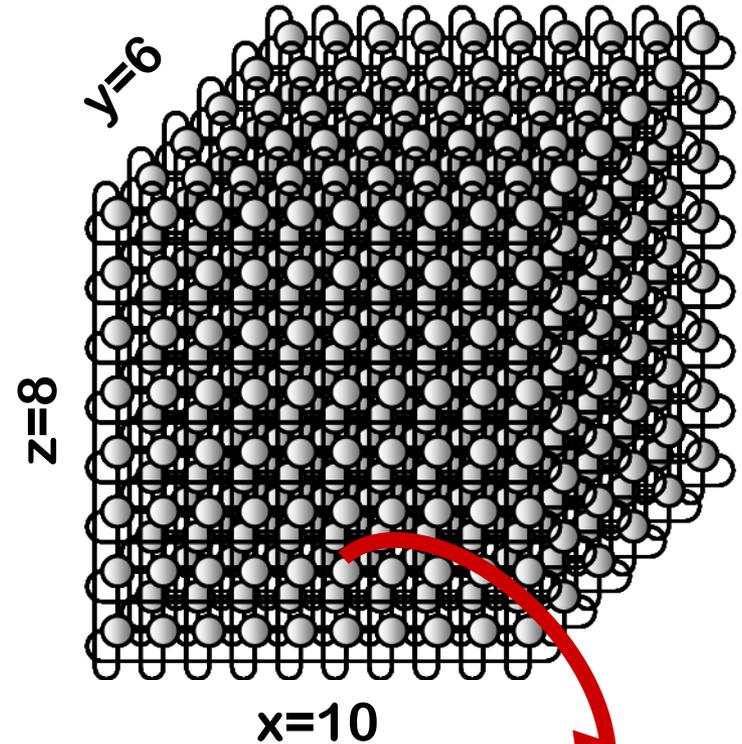
京大スパコンの全体像 (1/4)

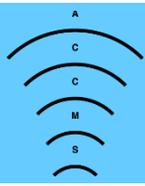
■ Camphor



CRAY XE6

$$2 \times (10 \times 8 \times 6 - 10) = 940$$





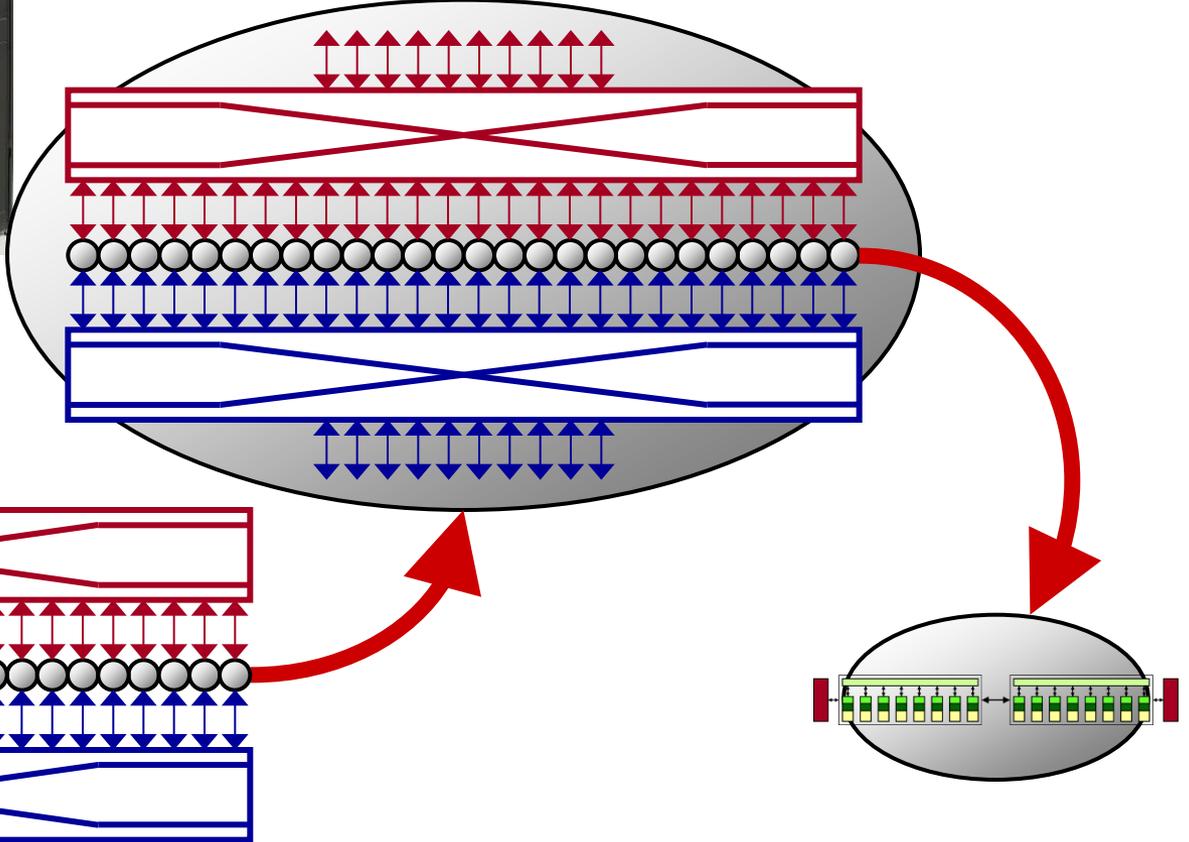
京大スパコンの全体像 (2/4)

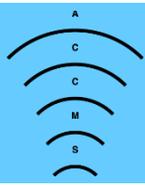
■ Laurel



GreenBlade 8000

$$24 \times 26 - 23 = 601$$



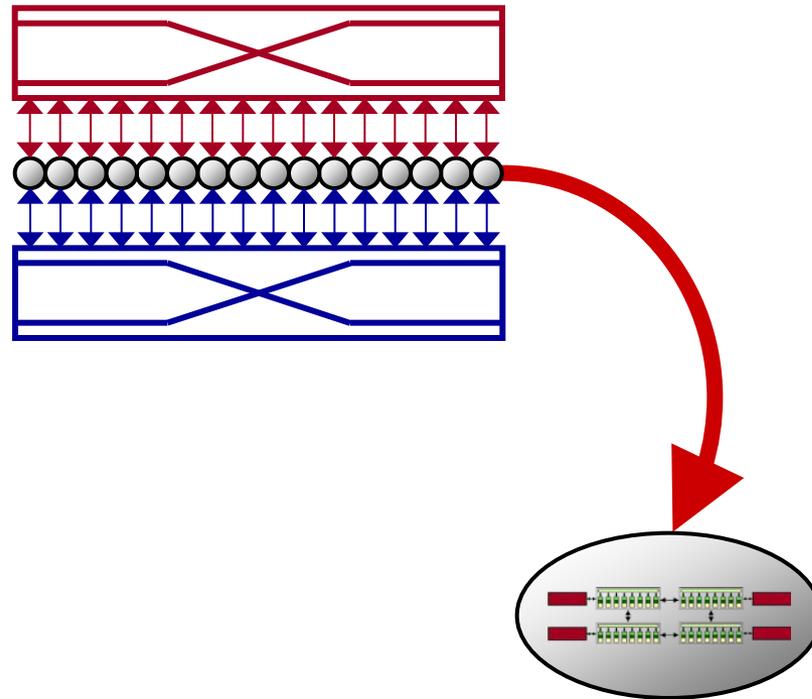


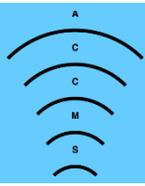
京大スパコンの全体像 (3/4)

■ Cinnamon



2548X



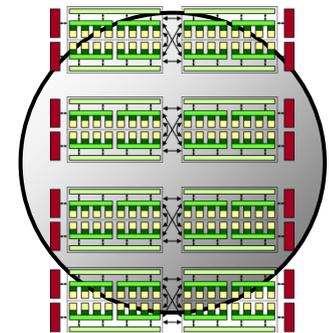
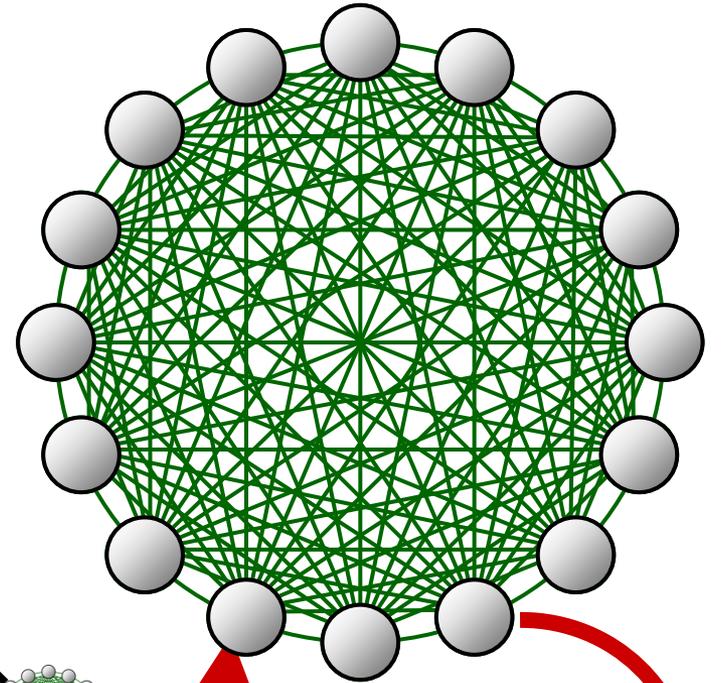
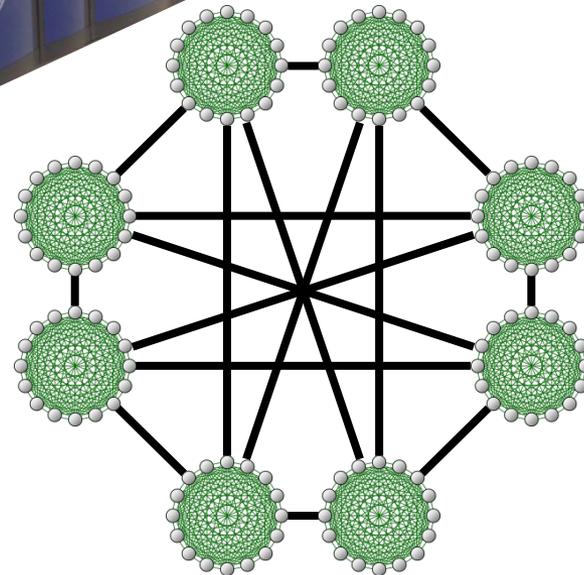


京大スパコンの全体像 (4/4)

■ Magnolia (& Camellia)

CRAY XC30

$$4 \times (16 \times 8 - 24) = 416$$



スーパーにする方法：連立方程式の並列計算

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)

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + a_{14}x_4 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1$$

$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + a_{24}x_4 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2$$

$$a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 + a_{34}x_4 + \cdots + a_{3n}x_n = b_3$$

$$a_{41}x_1 + a_{42}x_2 + a_{43}x_3 + a_{44}x_4 + \cdots + a_{4n}x_n = b_4$$

...

$$a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + a_{n3}x_3 + a_{n4}x_4 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n$$



$$x_1 + a'_{12}x_2 + a'_{13}x_3 + a'_{14}x_4 + \cdots + a'_{1n}x_n = b'_1$$

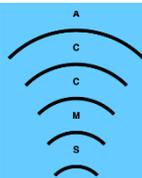
$$x_1 + a'_{22}x_2 + a'_{23}x_3 + a'_{24}x_4 + \cdots + a'_{2n}x_n = b'_2$$

$$x_1 + a'_{32}x_2 + a'_{33}x_3 + a'_{34}x_4 + \cdots + a'_{3n}x_n = b'_3$$

$$x_1 + a'_{42}x_2 + a'_{43}x_3 + a'_{44}x_4 + \cdots + a'_{4n}x_n = b'_4$$

...

$$x_1 + a'_{n2}x_2 + a'_{n3}x_3 + a'_{n4}x_4 + \cdots + a'_{nn}x_n = b'_n$$



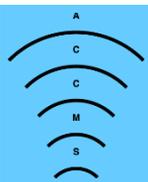
ベクトル VS 並列

■ 1990年代:ベクトル並列 VS スカラー並列

■ TOP-10 of @ 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)



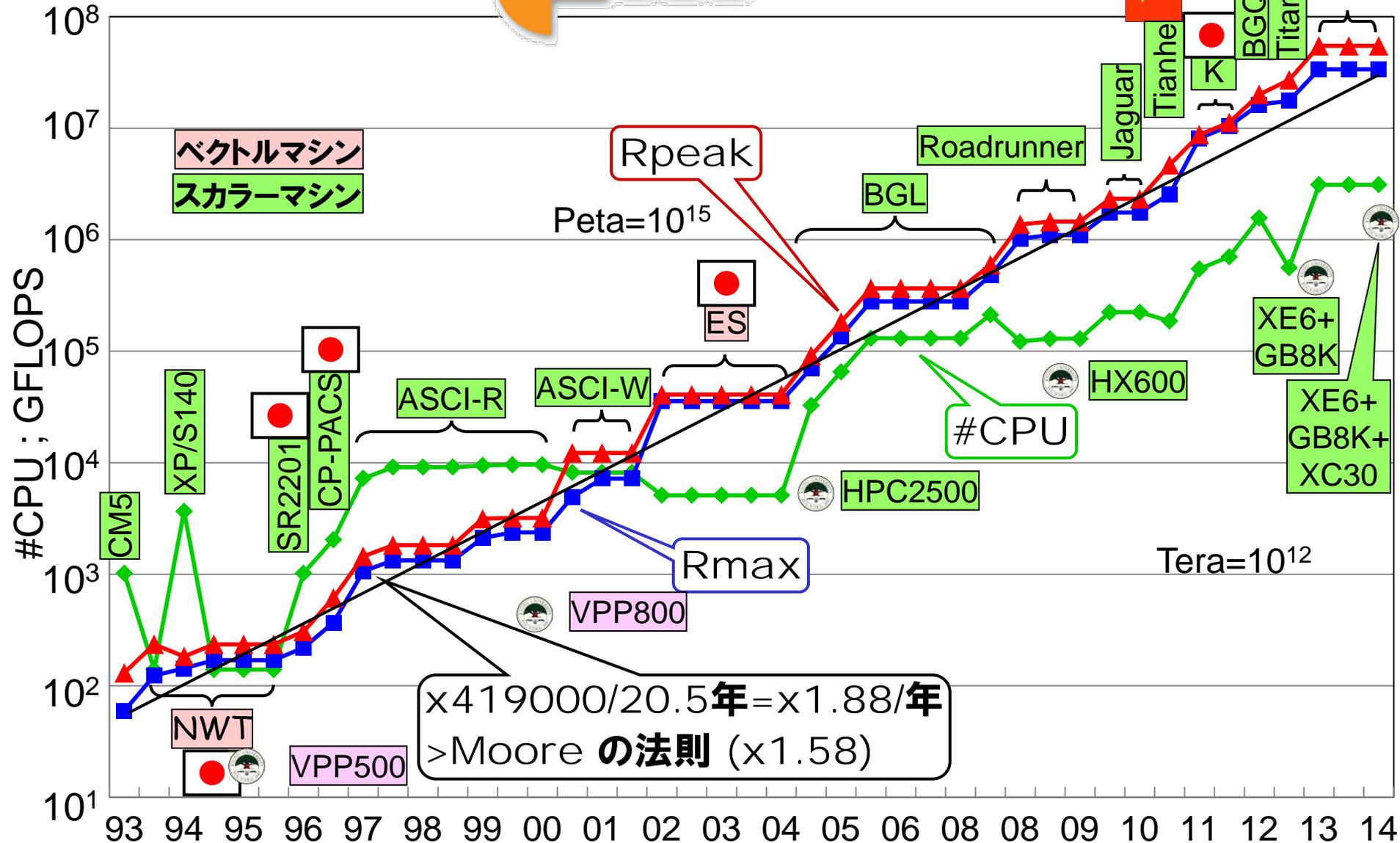
スーパーコンピュータの歴史

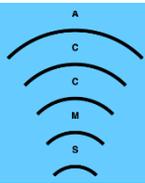
© 2014 H. Nakashima

Top 1 of



Tianhe2





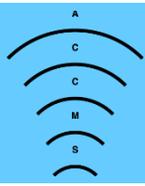
(いきなり&とりあえず)まとめ

■ 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

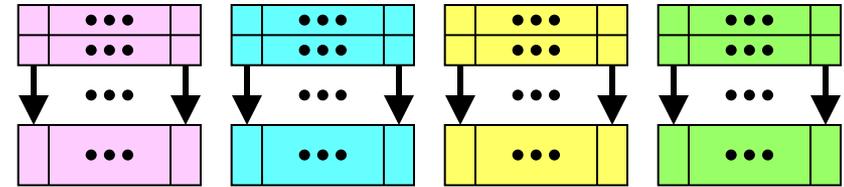
- 多数の同じ(ような)演算を p 個のCPUに分割
- それぞれのCPUが割当てられた計算をする
 - p 倍の速度で計算できる(ように見える)
 - 大量 ($\gg p$) の同じ(ような)演算が得意
- スパコンは大量の同じ(ような)演算(や処理)が得意



大量同種演算は何でも得意か？ (1/2)

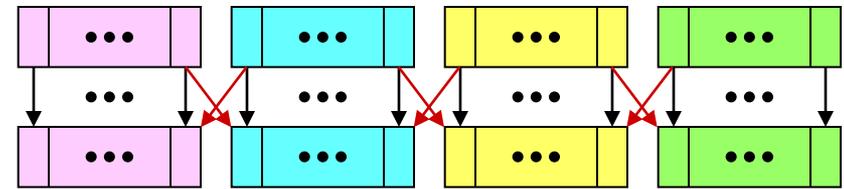
■ 超得意

$$Z_i = X_i + Y_i$$



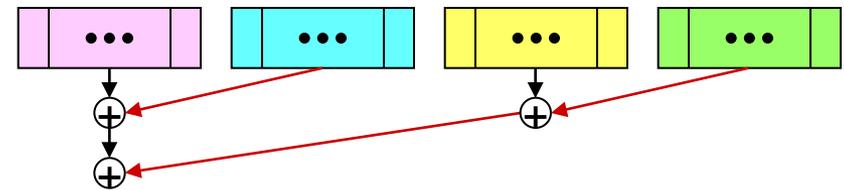
■ 普通に得意

$$Z_i = (X_{i-1} + 2X_i + X_{i+1}) / 4$$



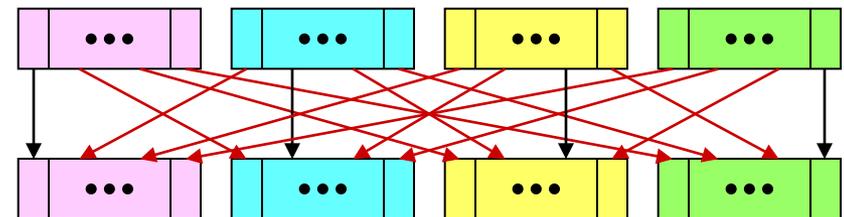
■ 微妙に得意

$$Z = X_1 + X_2 + \dots + X_n$$



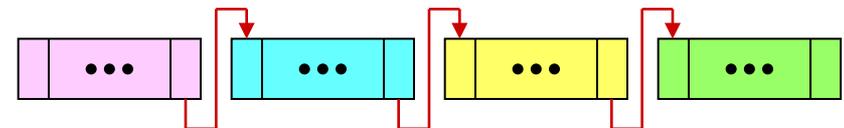
■ 何とかなる

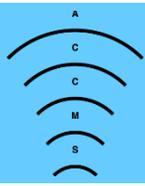
$$Z_i = X_{f(i)} \text{ s.t. } Z_1 \leq Z_2 \leq \dots \leq Z_n$$



■ 全然ダメ

$$Z_1 = f(X_1, 0), Z_i = f(X_i, Z_{i-1})$$



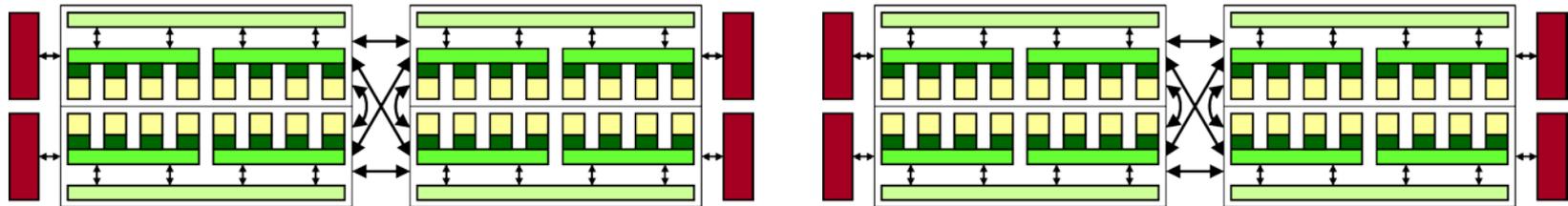


大量同種演算は何でも得意か？ (2/2)

■ 京大スパコン (Camphor) の通信速度

320GFlops

320GFlops



2μsec

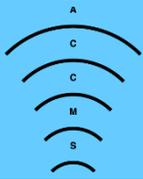


9.3GB/sec
=74.4Gbit/sec
=200Mbit/sec×372

21.9TB/sec=17.5Tbit/sec=200Mbit/sec×874,000

- 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

京では×1.1億



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**実地的な**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。