



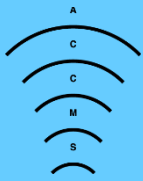
計算科学が拓く世界

# 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

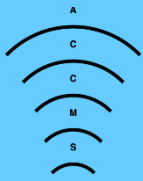
中島 浩

- <http://www.cs.kyoto-u.ac.jp/>  
提供科目 > 計算科学が拓く世界 > 前期 #1-2



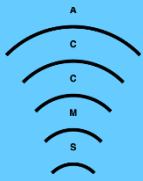
## 科目の概要 (1/2)

- **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~ 4	<b>中島浩</b>	ACCMS	<b>高性能システムとプログラミング</b>
1	<b>中島浩</b>	ACCMS	スーパーコンピュータは何故スーパーか(1)
2	<b>中島浩</b>	ACCMS	スーパーコンピュータは何故スーパーか(2)
3	<b>小山田耕二</b>	ACCMS	データ分析と可視化
4	<b>木村欣司</b>	情・数理	(偏)微分方程式の差分解析
5~ 8	<b>牛島省</b>	ACCMS	<b>応用計算力学</b>
9~11	<b>山本量一</b>	工・化工	<b>物質・材料の計算科学</b>
12~14	<b>大村善治</b>	生存圏研	<b>地球・惑星・宇宙と計算科学</b>



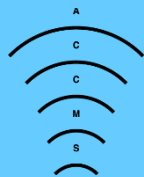
# 講義の概要

## ■ 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)



<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

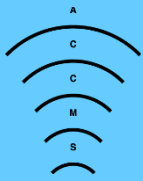
ここがスーパー

÷  : 1.6GHz × 2 × 2 × 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

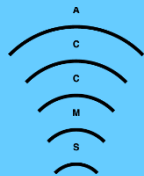
- 非常に多数のパソコン(のようなもの)の集合体

- パソコン = 1～16 CPU

- 京大スパコン = 40,208 CPU

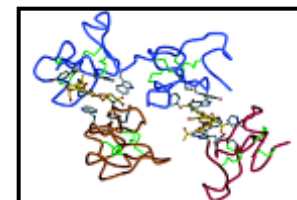
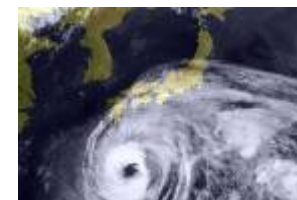
- 世界最高速スパコン = 3,120,000 CPU

- 世界最大規模スパコン = 3,120,000 CPU

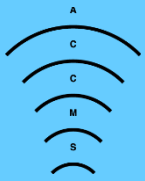


# スーパーコンピュータ (スパコン) とは (2/2)

- 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
    - 1km<sup>2</sup> 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
    - 1mm<sup>2</sup> or 1cm<sup>3</sup> 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

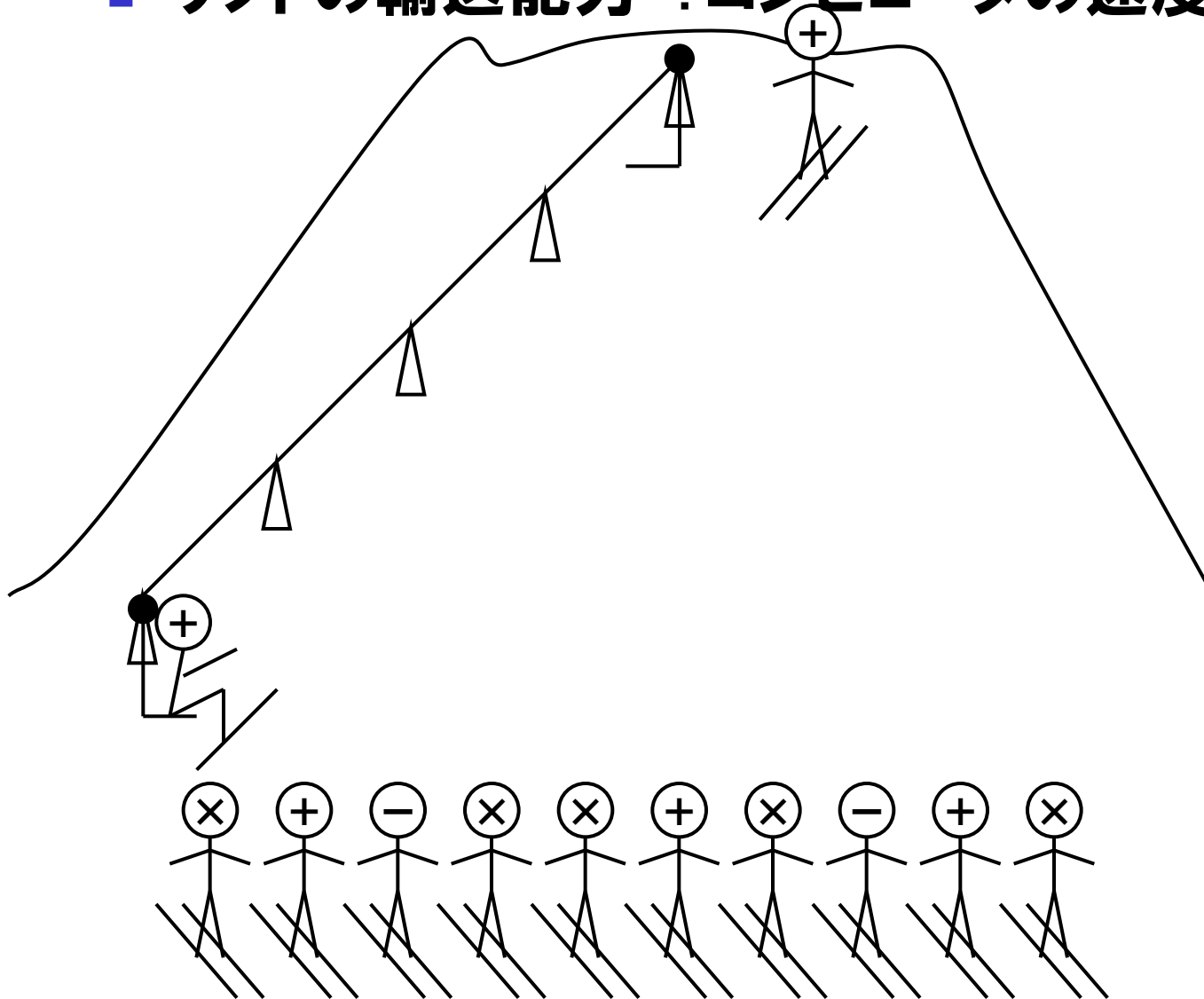






# スーパーにする方法

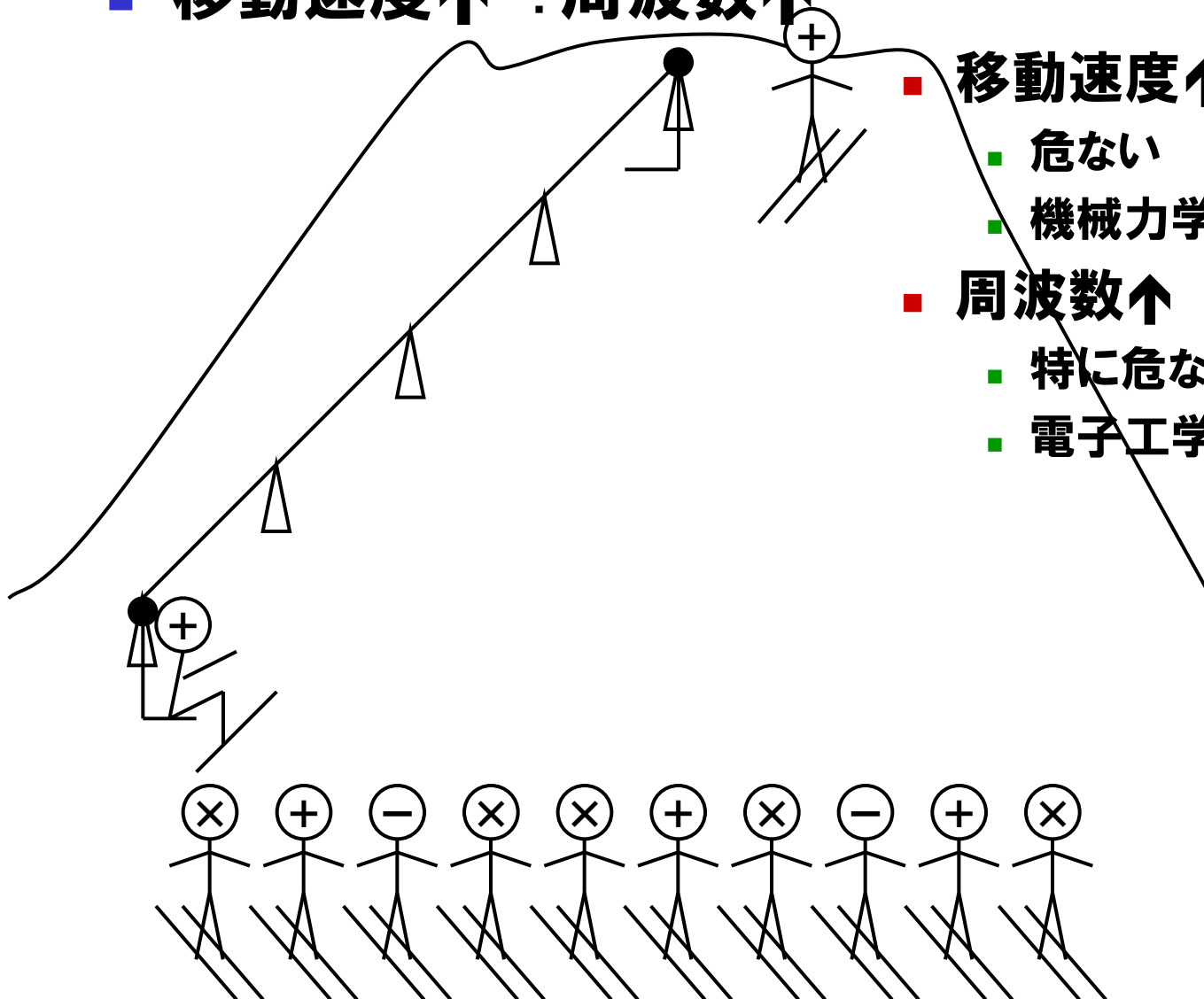
- リフトの輸送能力  $\equiv$  コンピュータの速度





# スーパーにする方法: ~1970

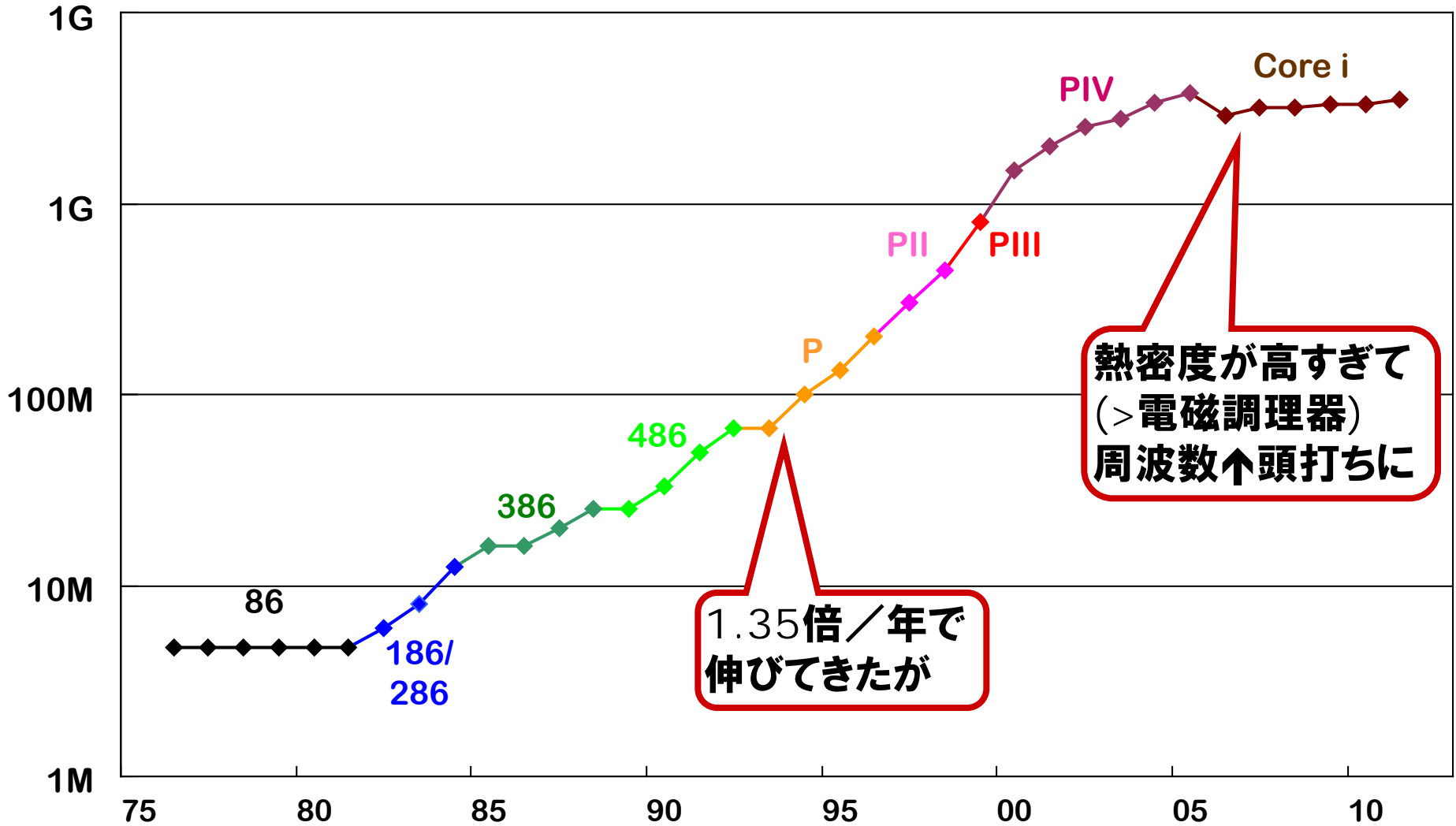
## ■ 移動速度↑ ≡ 周波数↑



- 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?

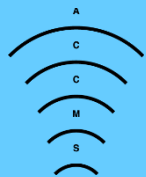


# スーパーにする方法：周波数↑の歴史



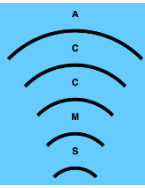
1.35倍／年で  
伸びてきたが

熱密度が高すぎて  
(>電磁調理器)  
周波数↑頭打ちに

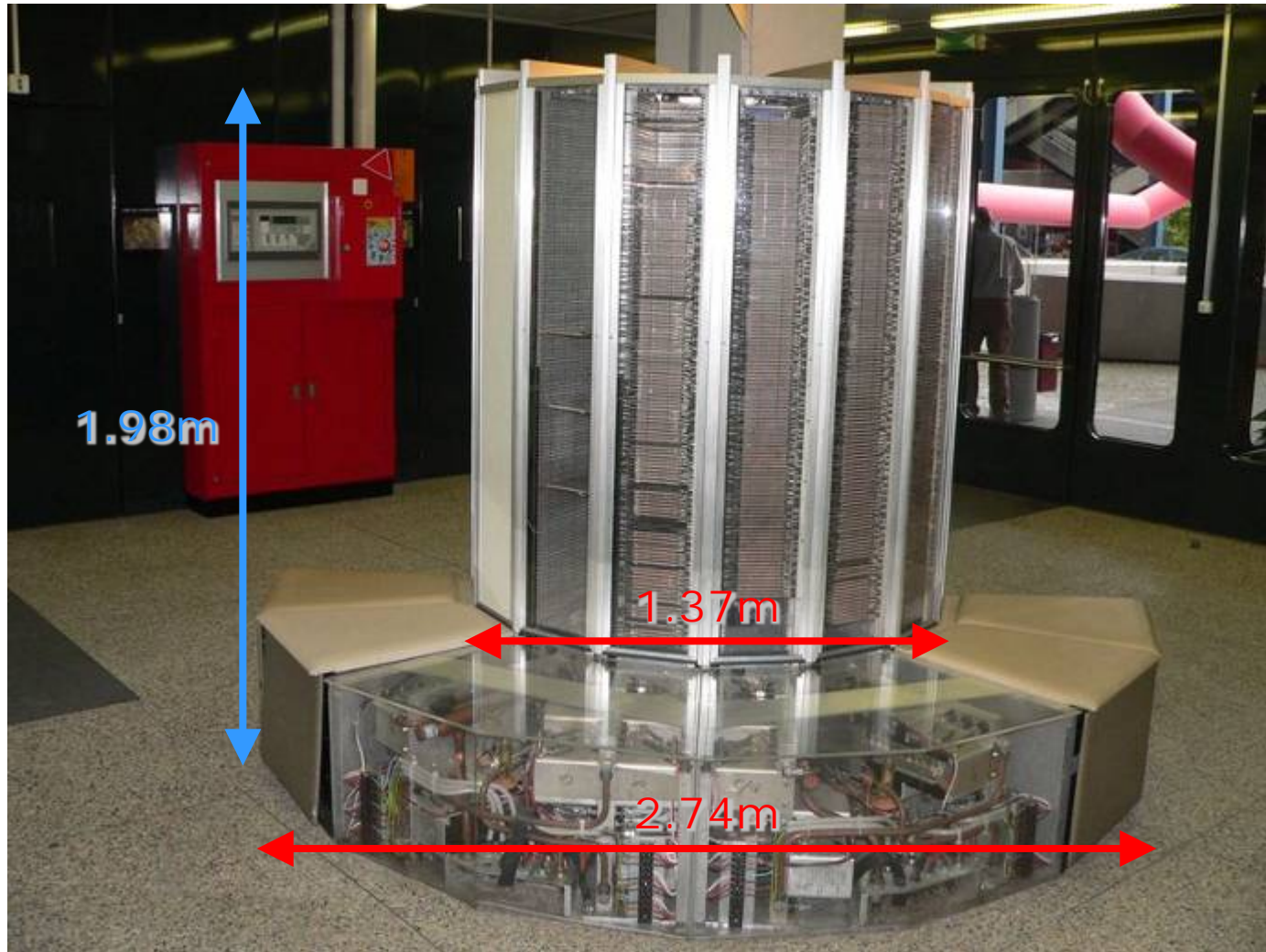


## そもそもの始まり:ベクトルマシン (1)

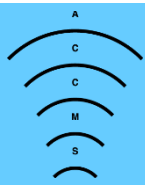
- 1976年:最初のスパコンCray-1登場
  - 動作周波数=80MHz (< 携帯電話)
  - 演算性能=160MFlops (< 携帯電話)
  - 消費電力=115kW
  - 大量の数値データ(ベクトル)に対する同種演算が得意
- 1976年(中島=20歳)での「スーパー」度
  - 最速@京大(富士通 F230-75) < 5MFlops
  - 最速@京大情報工学科(日立 H8350) < 1MFlops
  - Intel 8086/87(1978/80)  $\doteq$  50KFlops



## そもそもの始まり:ベクトルマシン (2)



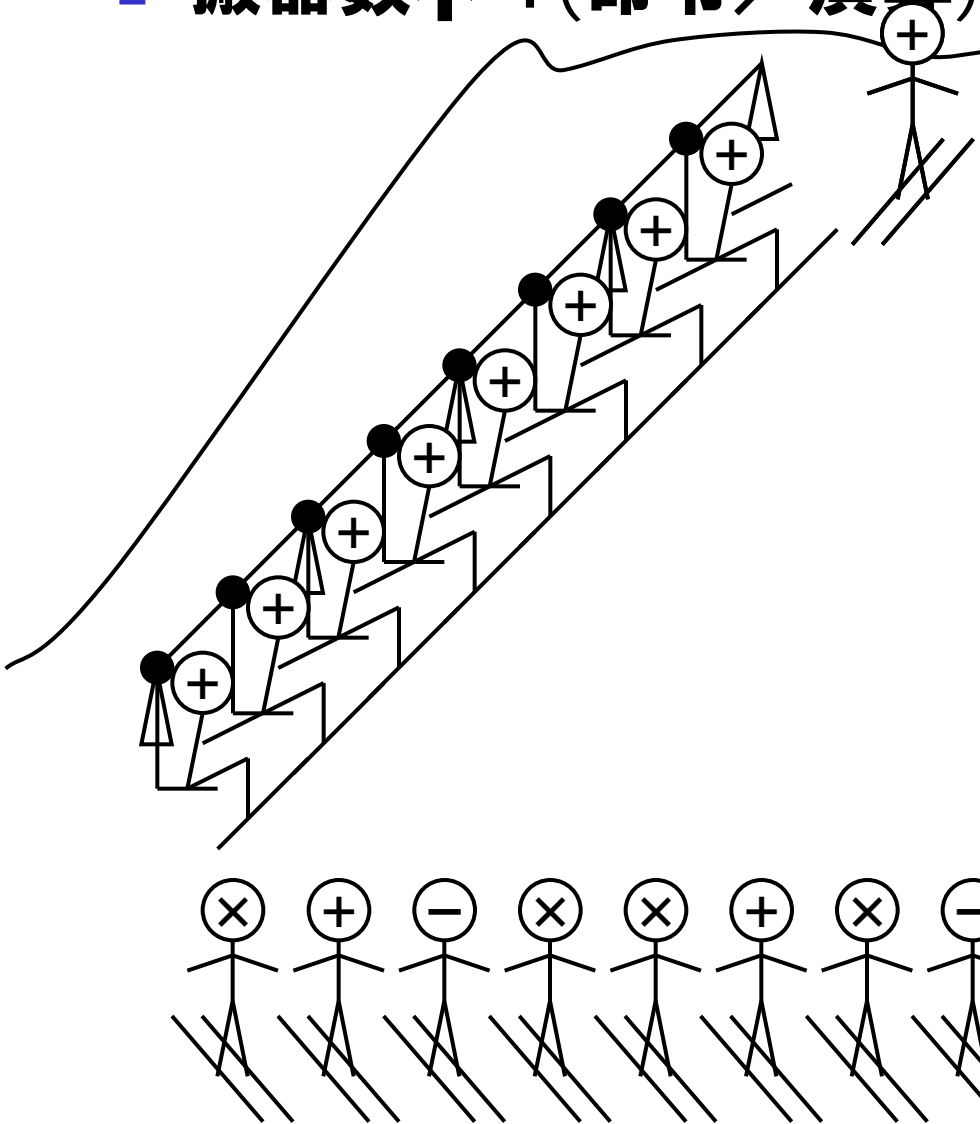
source: <http://en.wikipedia.org/wiki/Image:Cray-1-p1010221.jpg>



少し話を戻して

# スーパーにする方法: 1970~

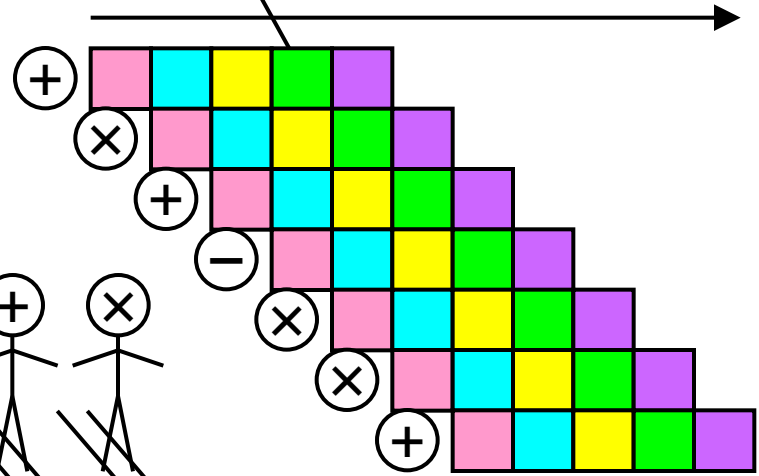
## ■ 搬器数↑ ≡ (命令 / 演算) **パイプライン**

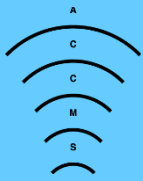


### ■ $Z = X + Y$ (加算命令) の手順

- 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)

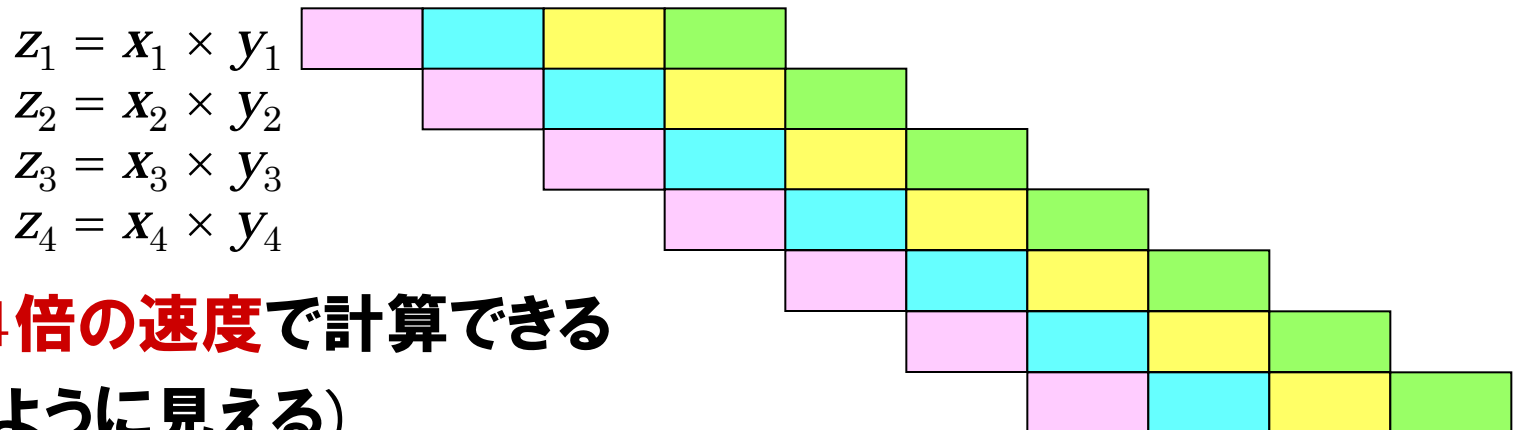
- 大量数値データの同種演算を高速に行う方法

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

$$z_i = x_i \times y_i$$

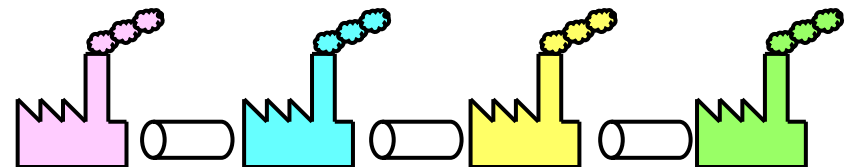

- 多数の乗算を1小操作ずつずらして行う

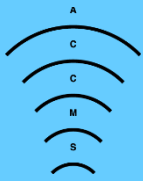


→ **4倍の速度**で計算できる

(ように見える)

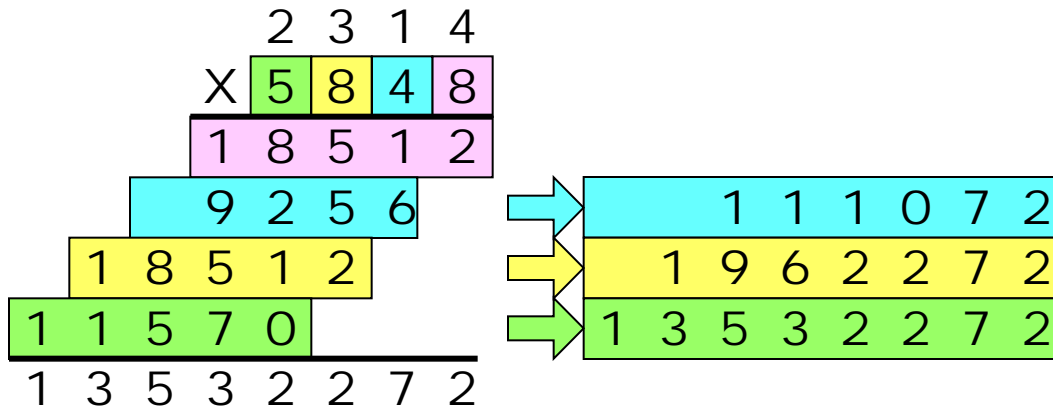
→ (演算) **パイプライン処理**





# 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
--------	---------	---------	---------

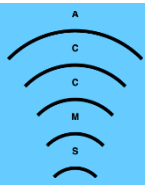
$$1778 \times 7142 = 12698476$$

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

$$8485 \times 1651 = 13843635$$

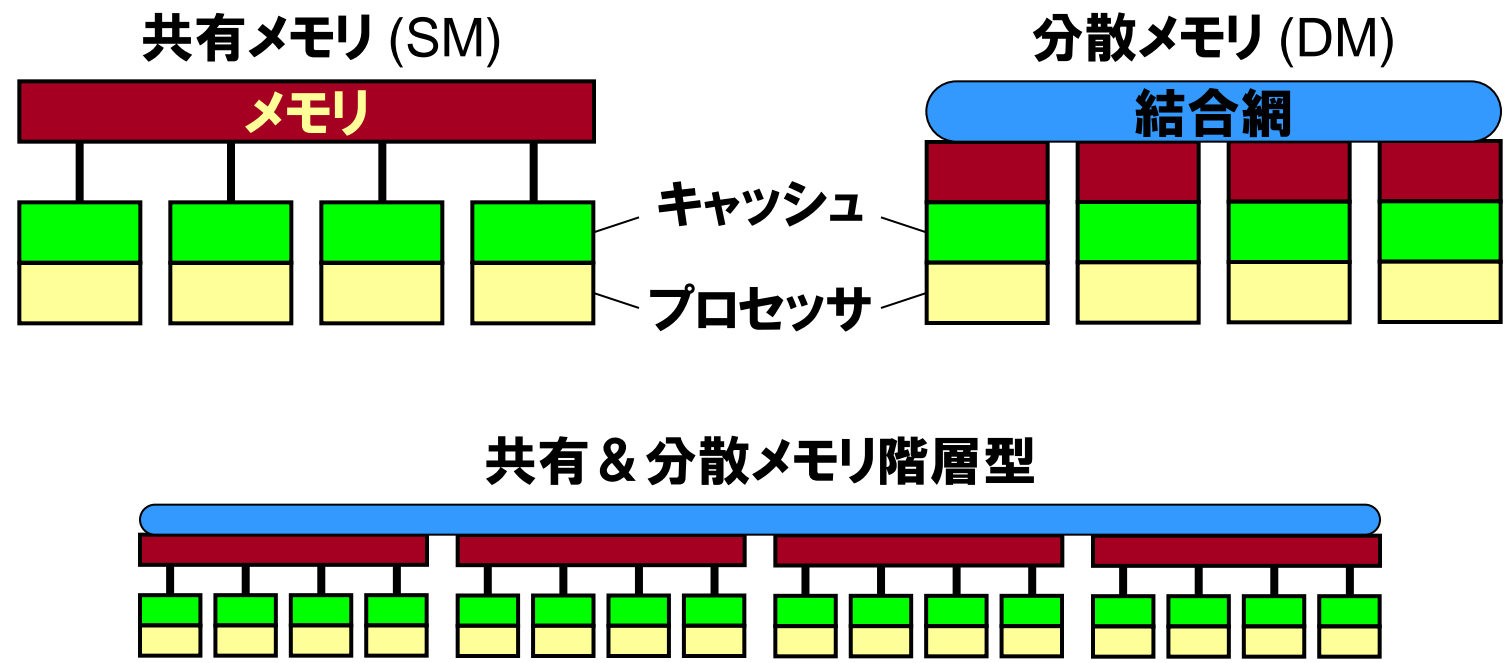
8385x1	+8385x5	+8385x6	+8385x1
--------	---------	---------	---------

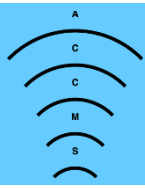




# スーパーコンピュータの歴史(に戻って) もう一つの方法: 並列マシン

- 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)

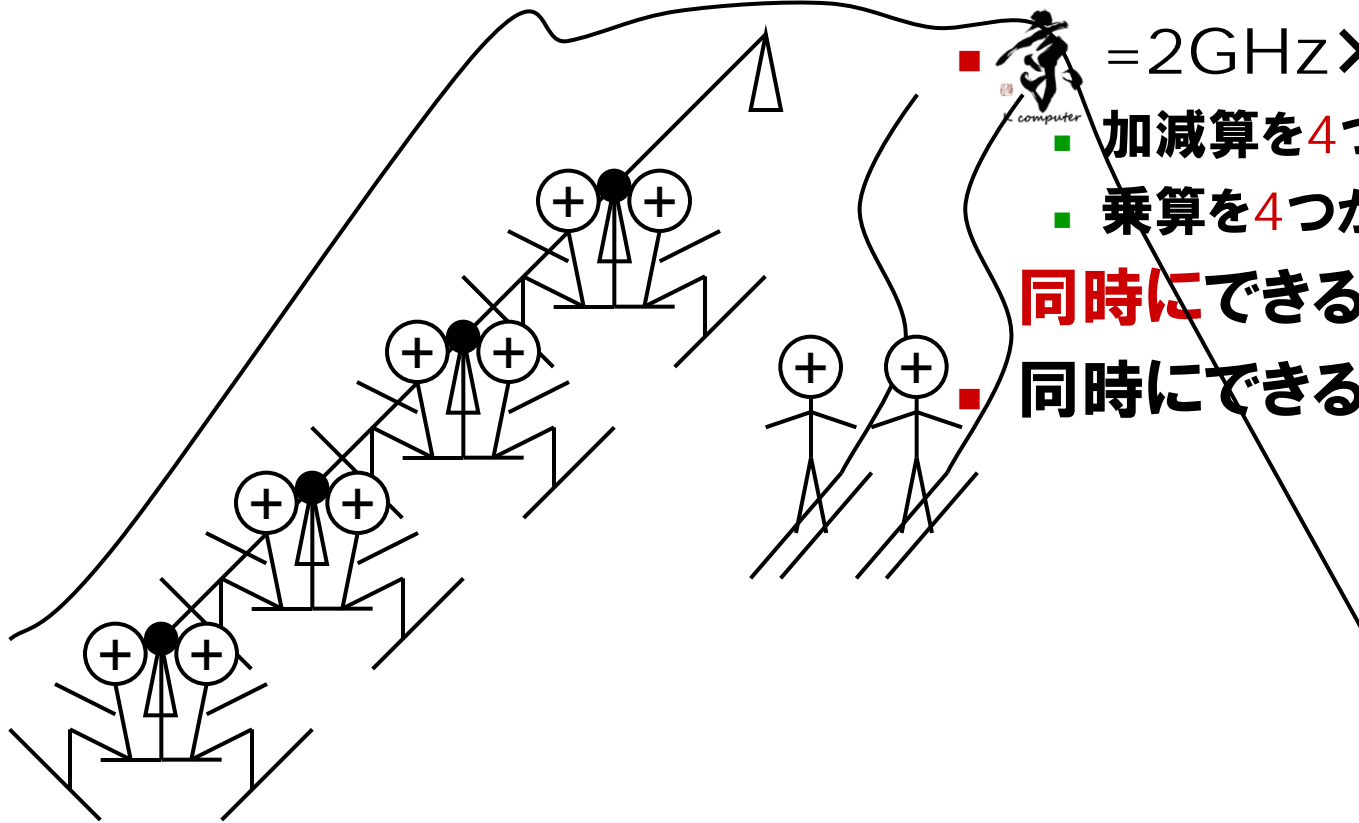




また話を戻して

# スーパーにする方法: 1990~

## ■ 座席数↑ ≡ スーパースカラー / SIMD



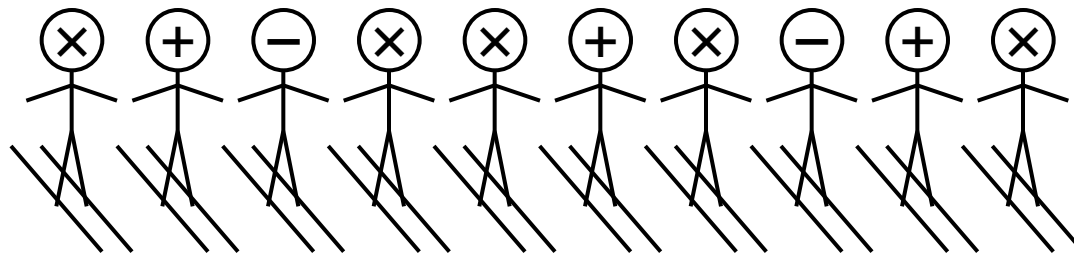
■  $= 2\text{GHz} \times 8 \times 8 \times 88128$

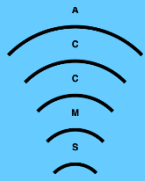
- 加減算を4つと

- 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

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

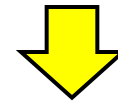


$$\begin{cases} x - \frac{3}{2}y + \frac{4}{2}z = \frac{8}{2} \\ x - \frac{4}{3}y + \frac{2}{3}z = \frac{1}{3} \\ x - \frac{2}{4}y + \frac{3}{4}z = \frac{9}{4} \end{cases}$$



同時にできる加減算

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



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

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

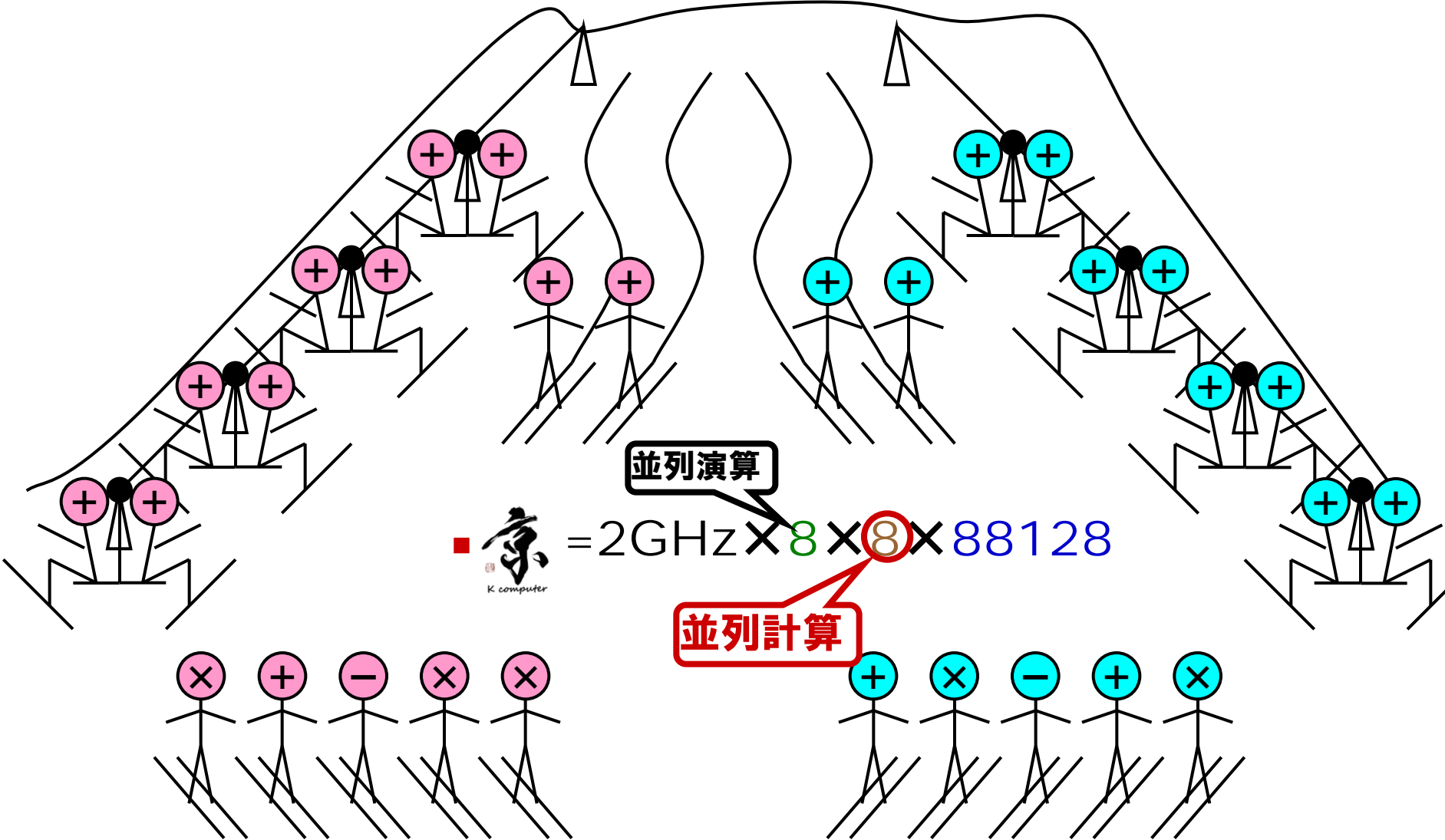
$$x = \frac{8}{2} + \frac{3 \cdot 2}{2} - \frac{4 \cdot 3}{2} = \frac{2}{2} = 1$$

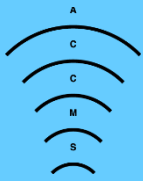
同時にできる除(乗)算



# 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



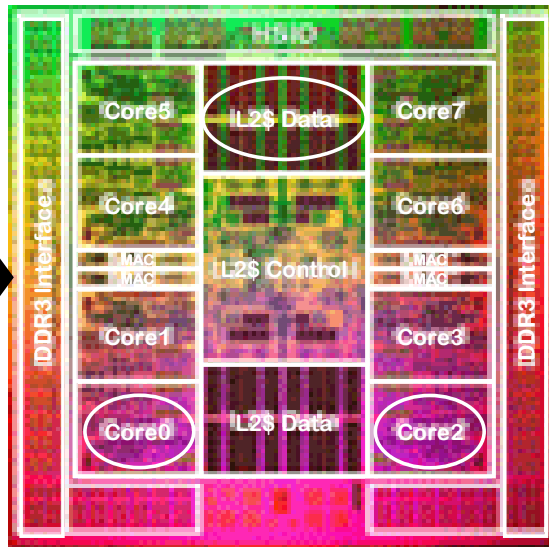


# スーパーにする方法：**京** のプロセッサ

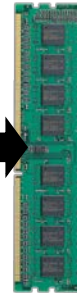
K computer

FUJITSU SPARC 64 VIIIfx

DDR3 8GB

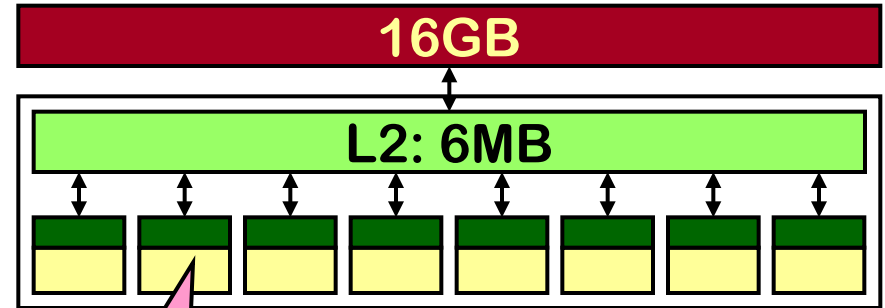


DDR3 8GB



共有メモリ

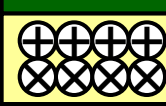
16GB



L2: 6MB

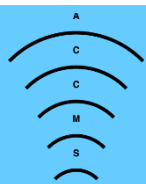
L1

32KBx2



CPUコア

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

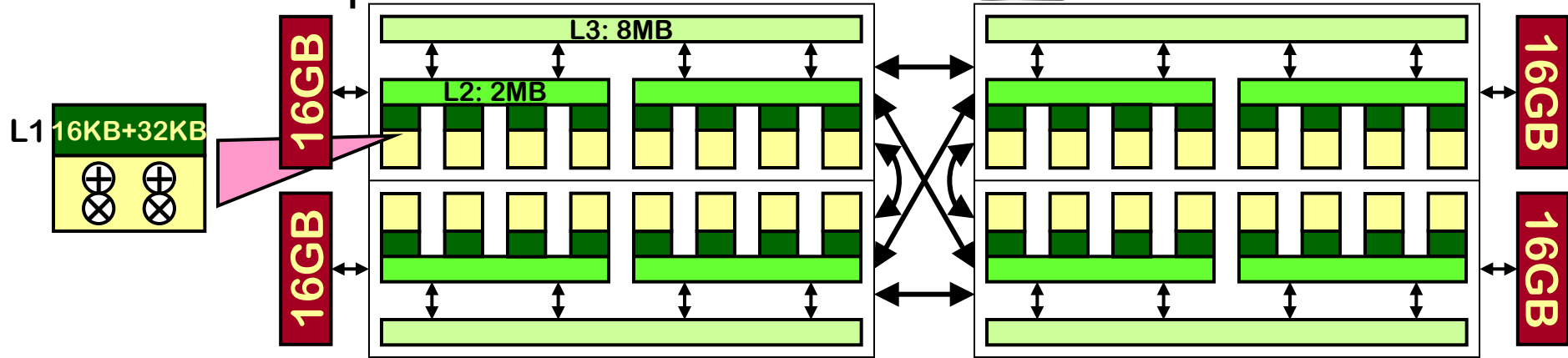


## 京大スパコンのプロセッサ (1/2)

### ■ Camphor



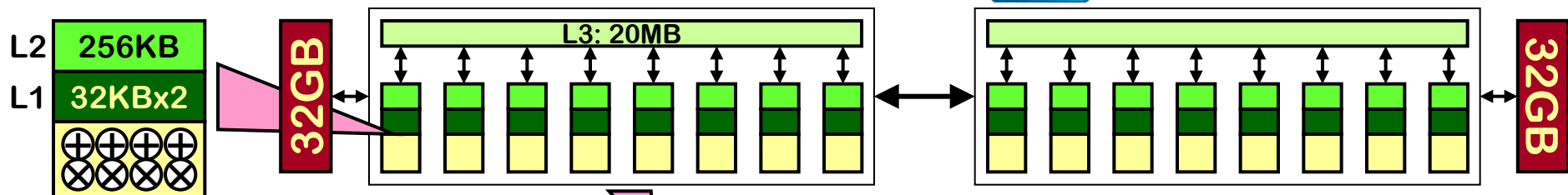
Abu Dhabi



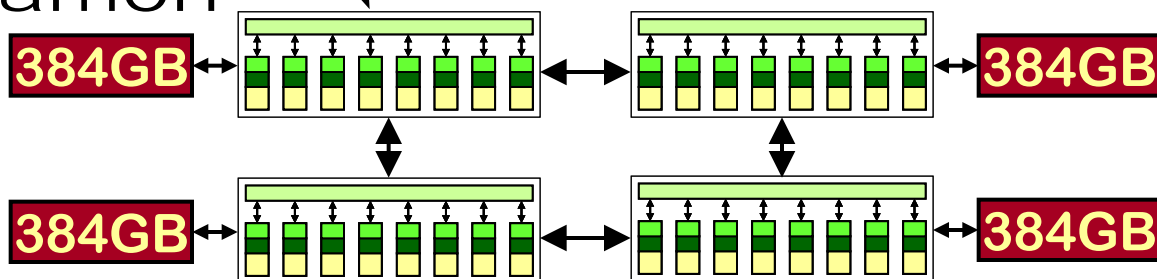
### ■ Laurel

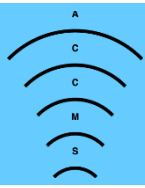


Sandybridge



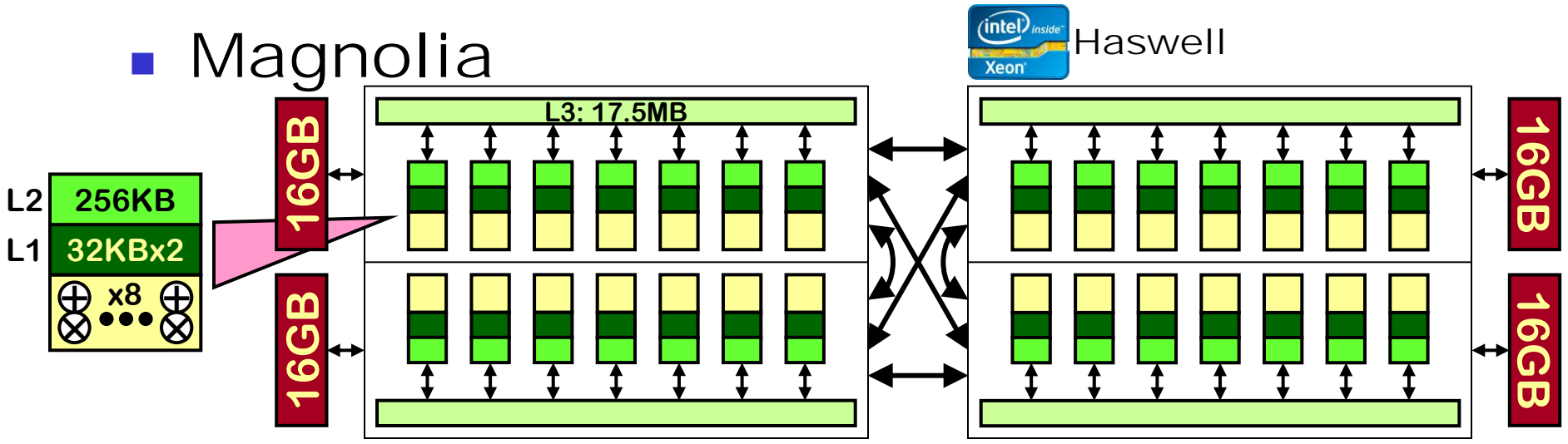
### ■ Cinnamon



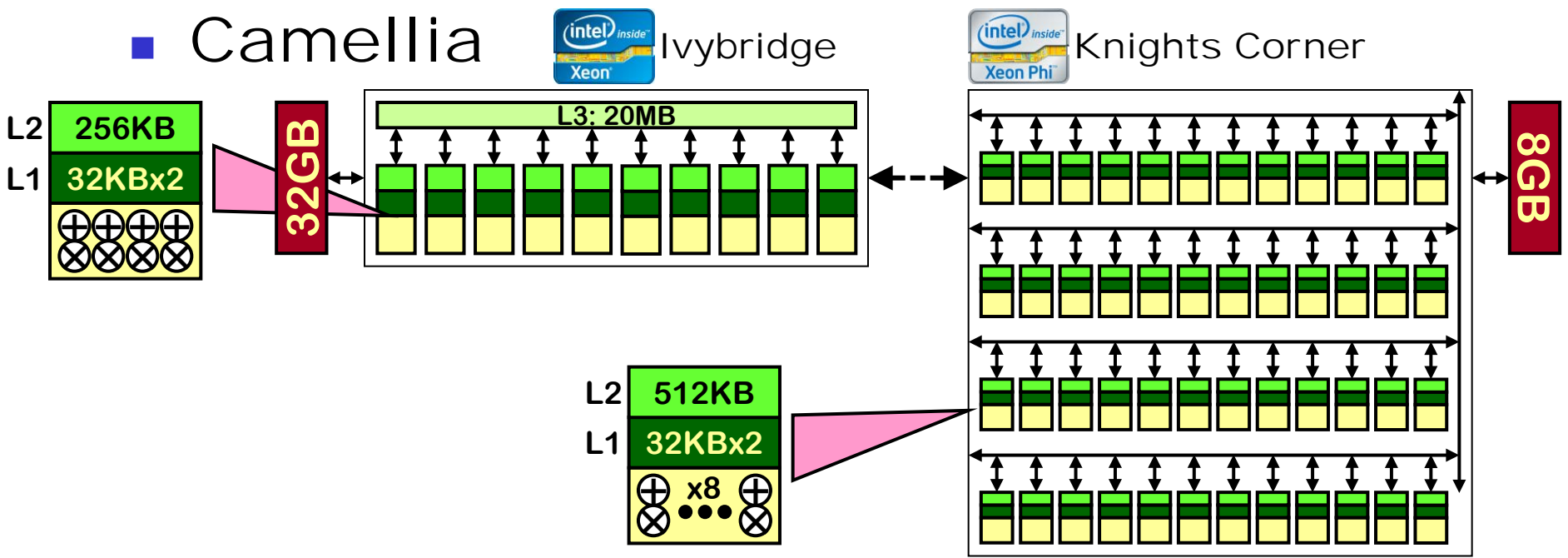


## 京大スパコンのプロセッサ (2/2)

### ■ 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

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

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

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

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

...

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



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

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

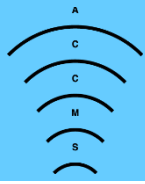
$$x_1 + a'_{32}x_2 + a'_{33}x_3 + a'_{34}x_4 + \cdots + a'_{3n}x_n = b'_3$$

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

...

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





# スーパーにする方法:1980~

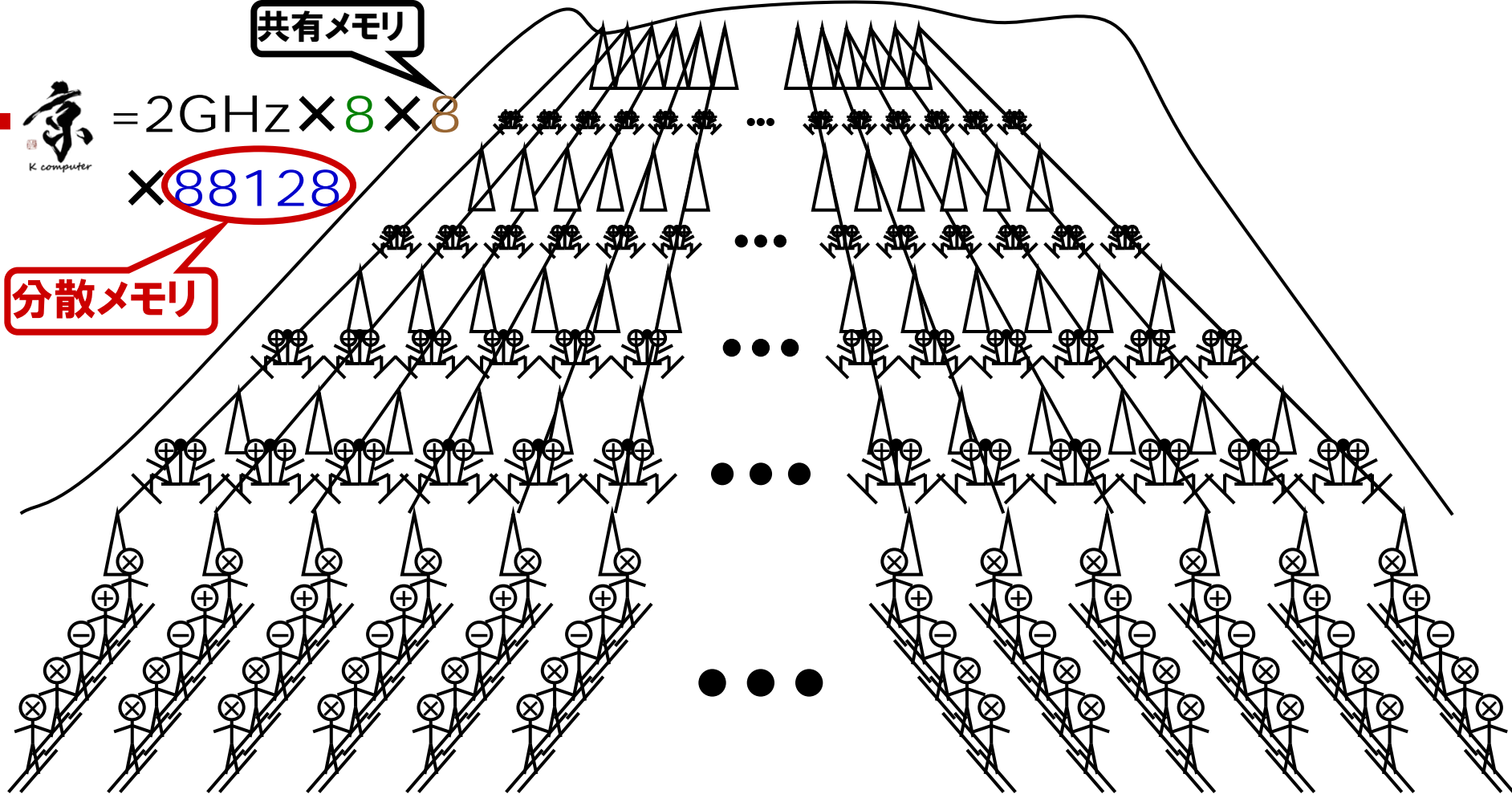
## ■ リフト数↑↑↑↑↑↑↑↑↑↑ ≡ 超並列コンピュータ

共有メモリ



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

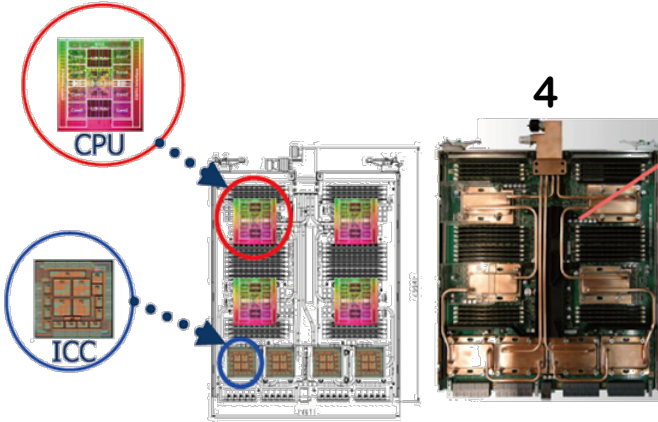
分散メモリ





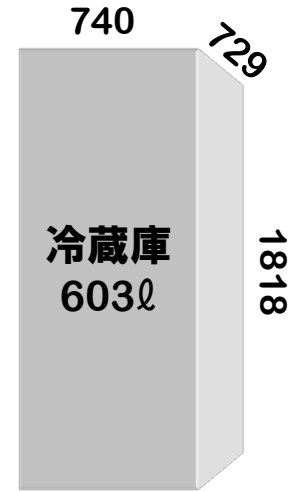
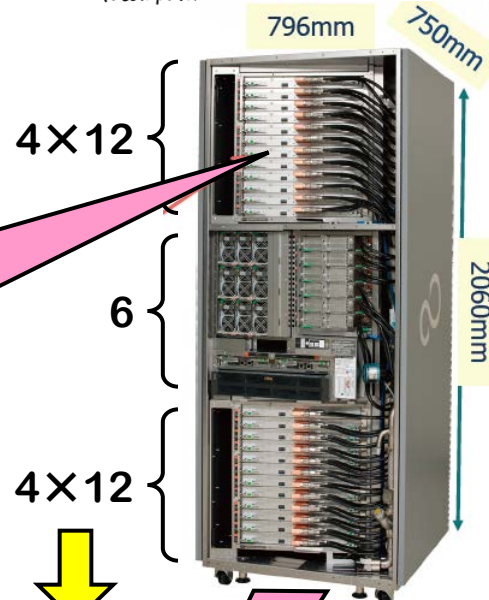
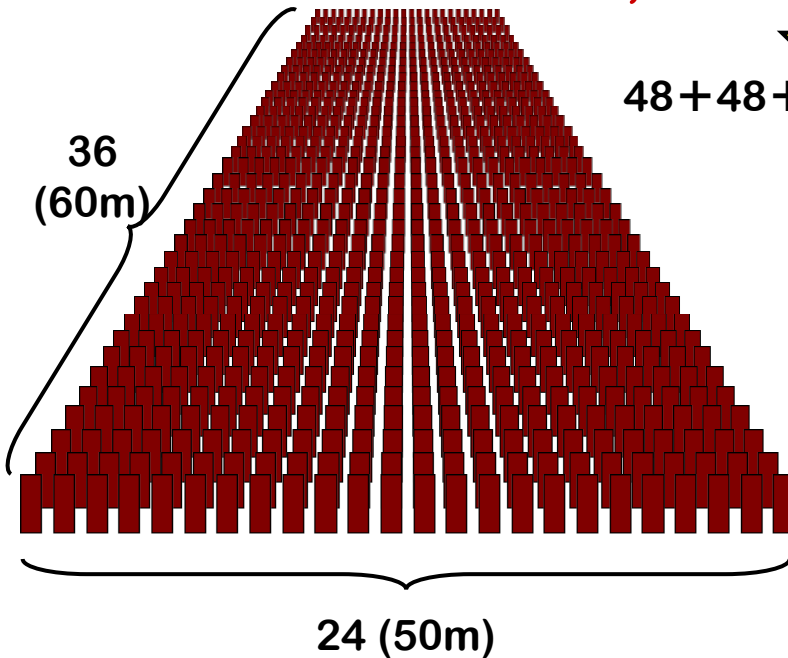
# スーパーにする方法：京の全体像

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



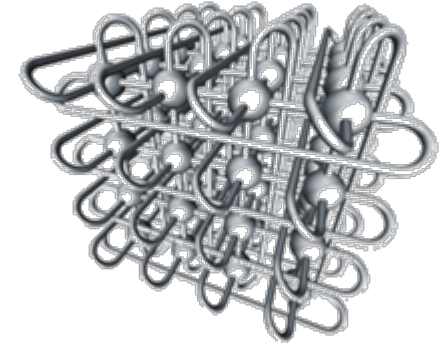
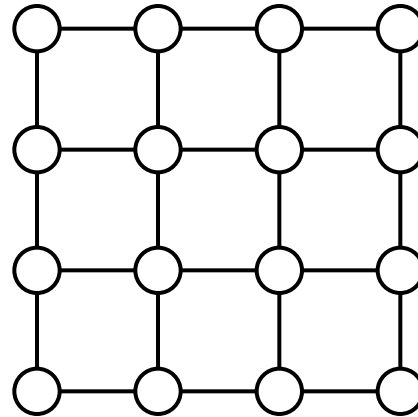
# スーパーにする方法：**京** の通信路 (1/2)

K computer

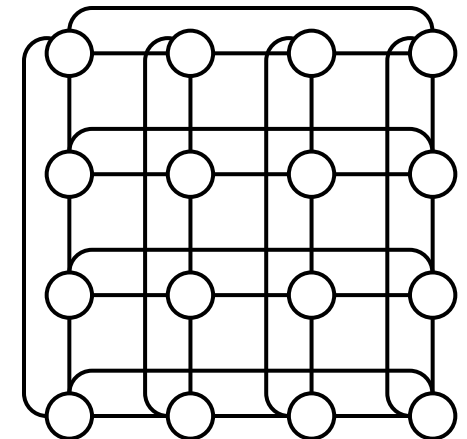
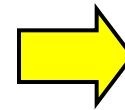
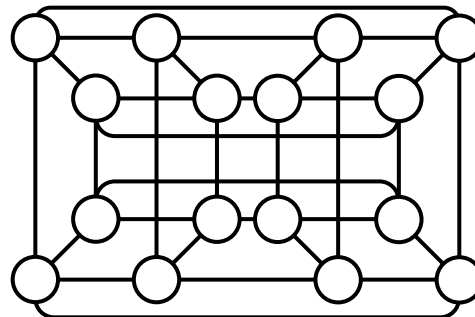
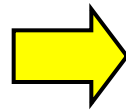
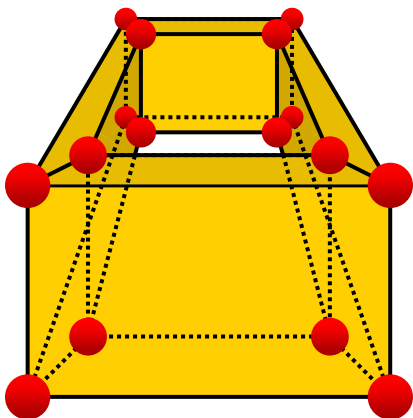
- 6次元メッシュ/トーラス結合網 **Tofu**

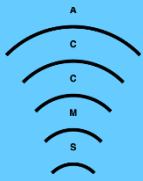
- って意味不明～

- 2次元メッシュ



- 2次元トーラス (ドーナツの表面)

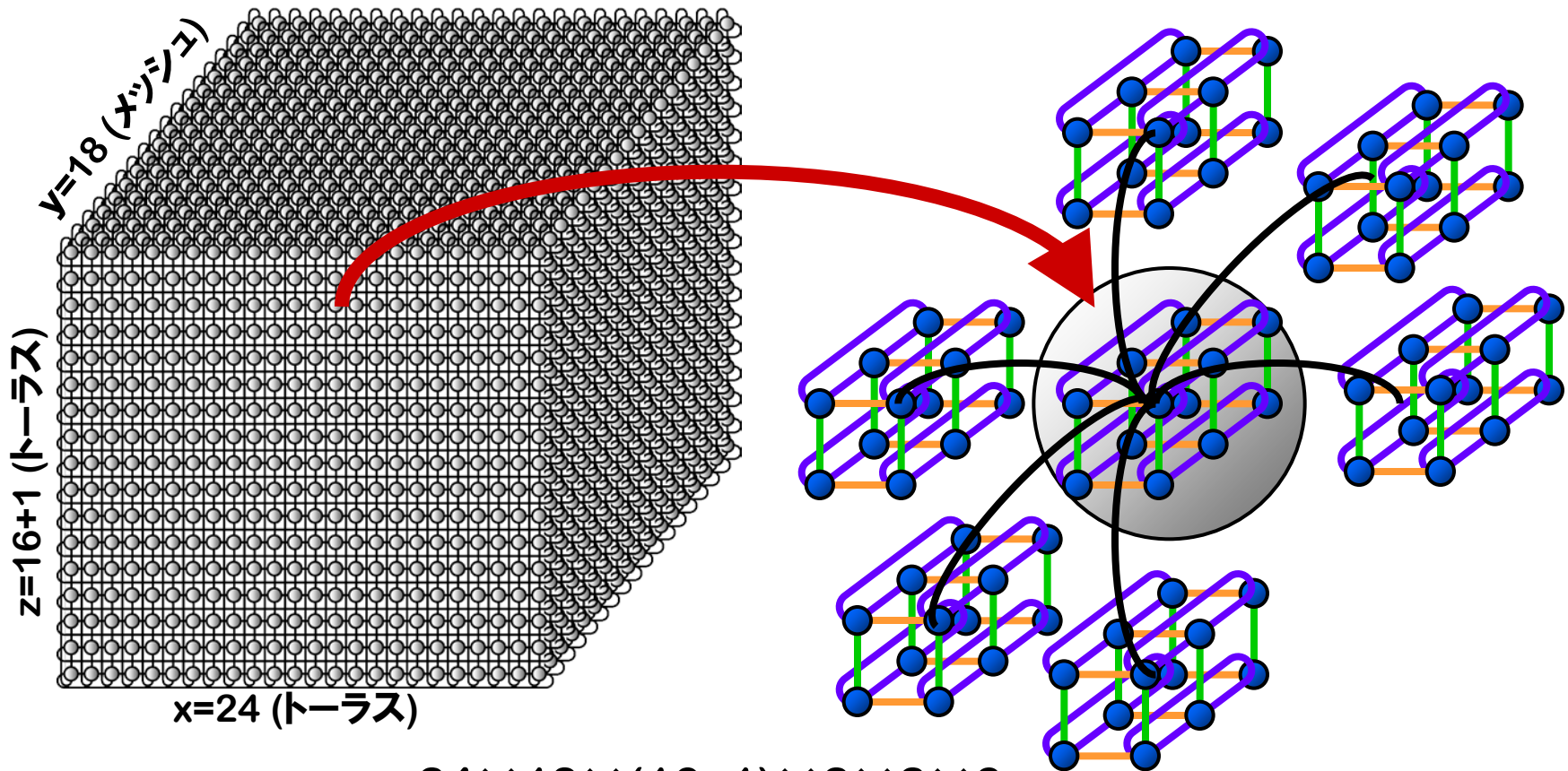




# スーパーにする方法：京 の通信路 (2/2)

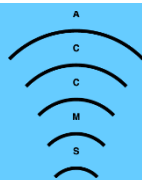
K computer

## ■ 6次元メッシュ/トーラス結合網 Tofu



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

$$= 88,128$$



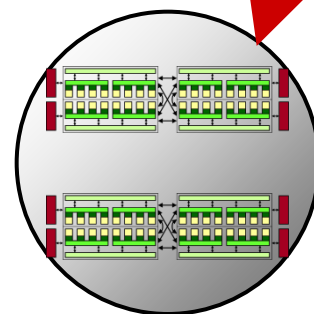
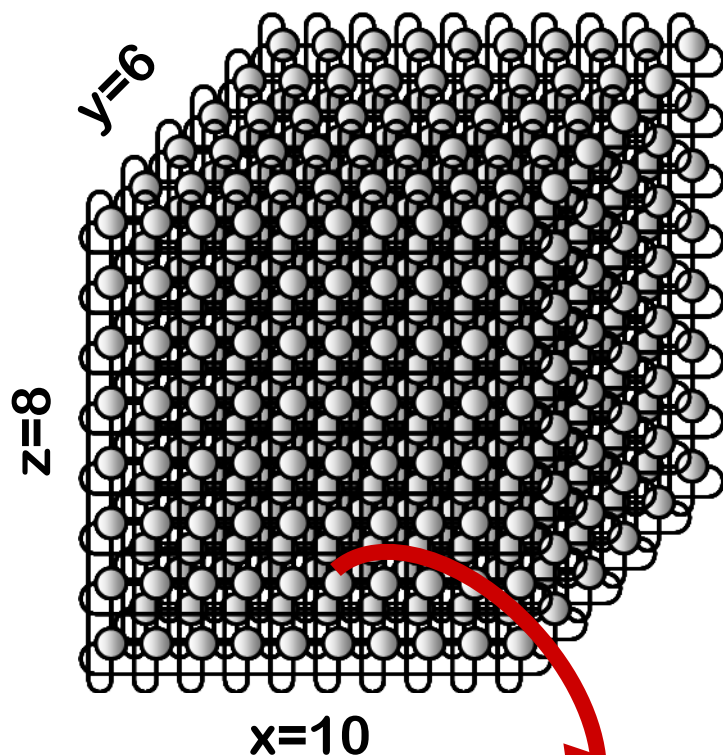
# 京大スパコンの全体像 (1/4)

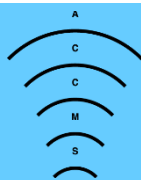
## ■ Camphor



CRAY XE6

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





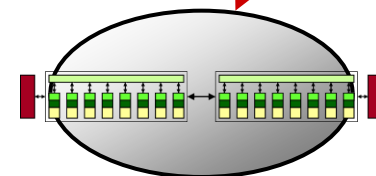
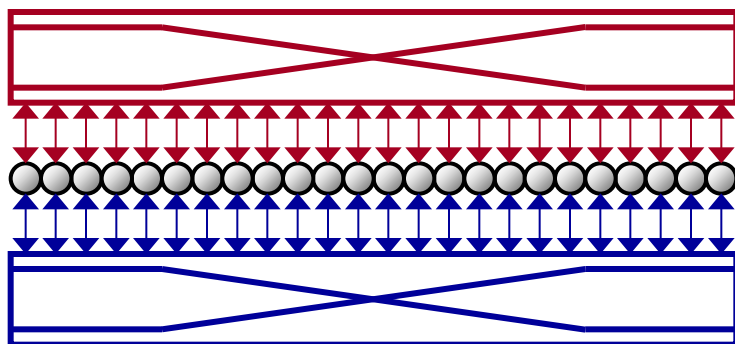
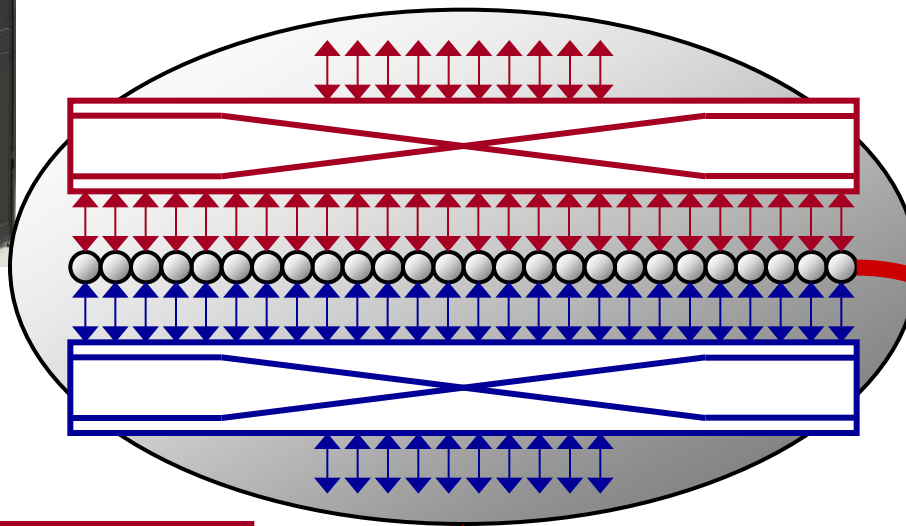
# 京大スパコンの全体像 (2/4)

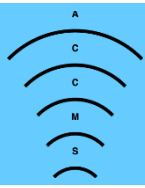
## ■ Laurel



GreenBlade 8000

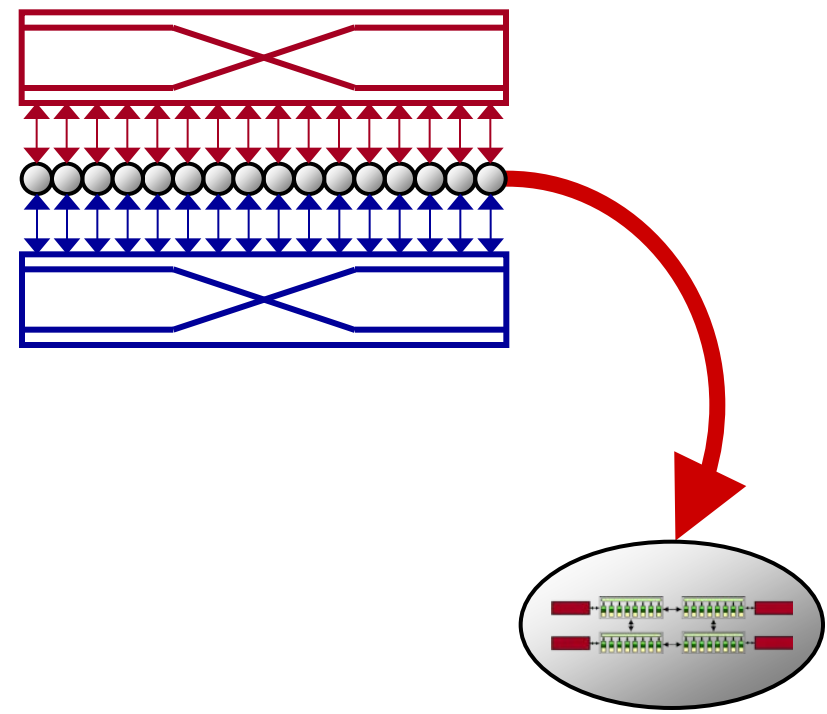
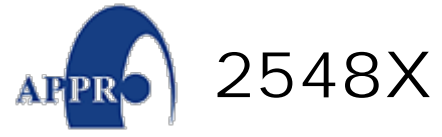
$$24 \times 26 - 23 = 601$$

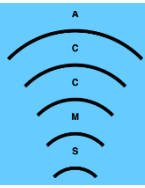




# 京大スパコンの全体像 (3/4)

## ■ Cinnamon



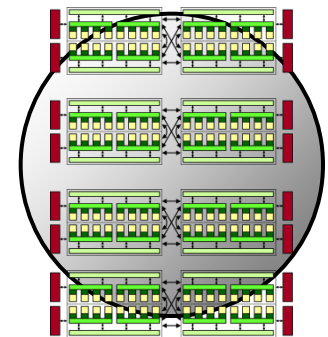
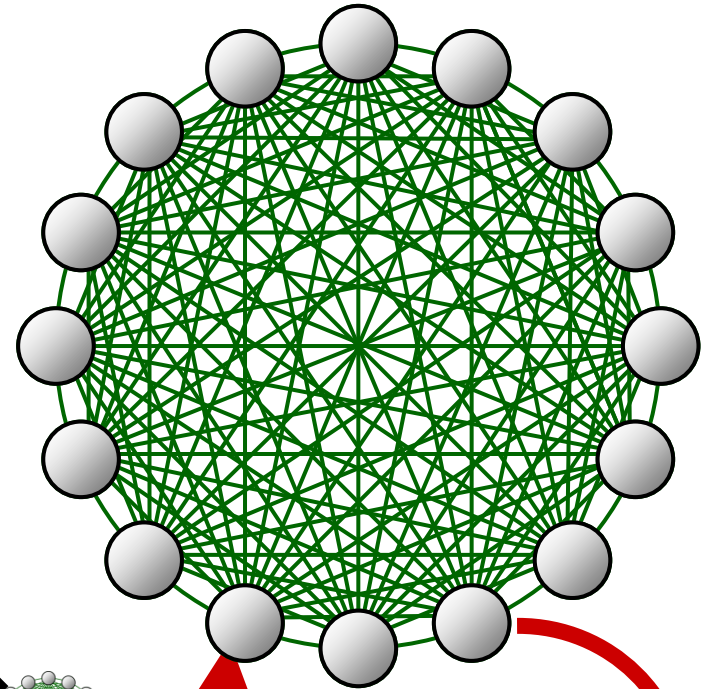
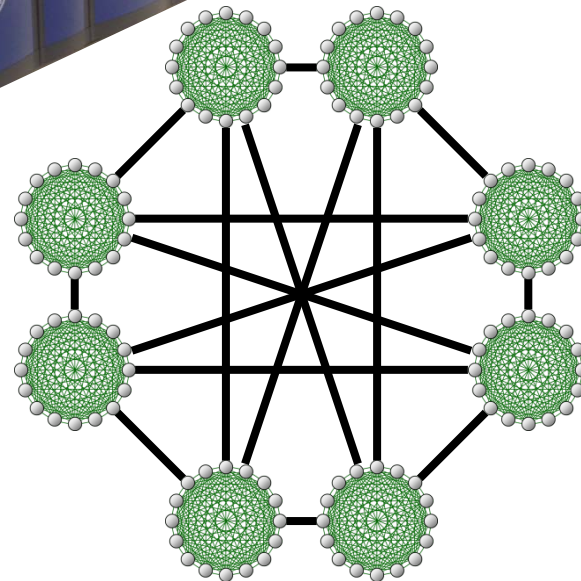


# 京大スパコンの全体像 (4/4)

## ■ 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)

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

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

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

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

...

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



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

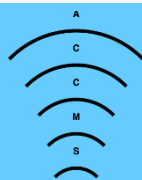
$$x_1 + a'_{22}x_2 + a'_{23}x_3 + a'_{24}x_4 + \cdots + a'_{2n}x_n = b'_2$$

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

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

...

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



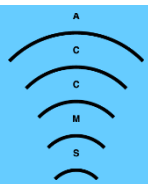
## ベクトル VS 並列

### ■ 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)



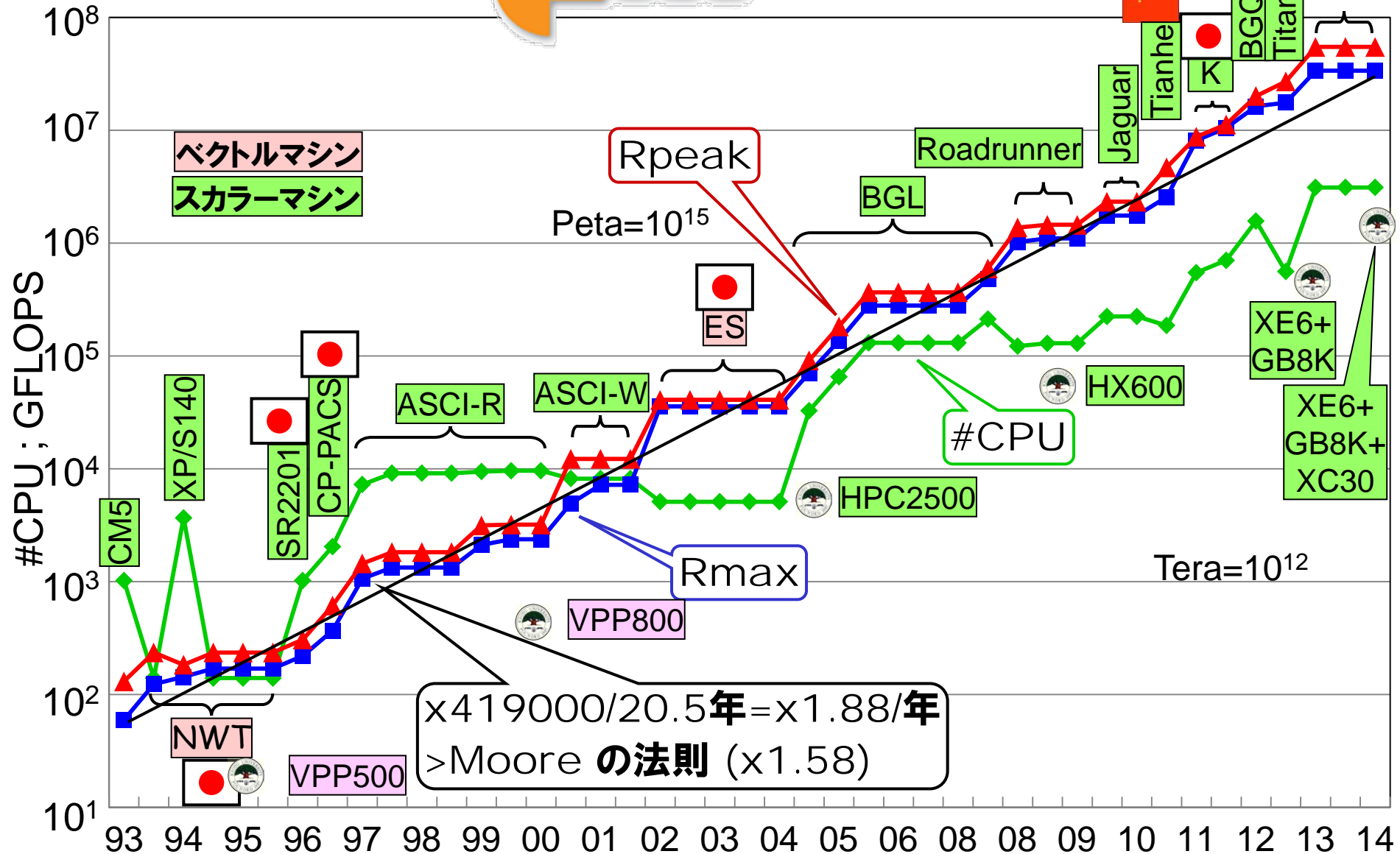
# スーパーコンピュータの歴史

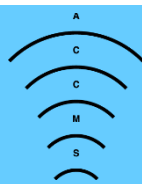
© 2015 H. Nakashima

## Top 1 of



Tianhe2

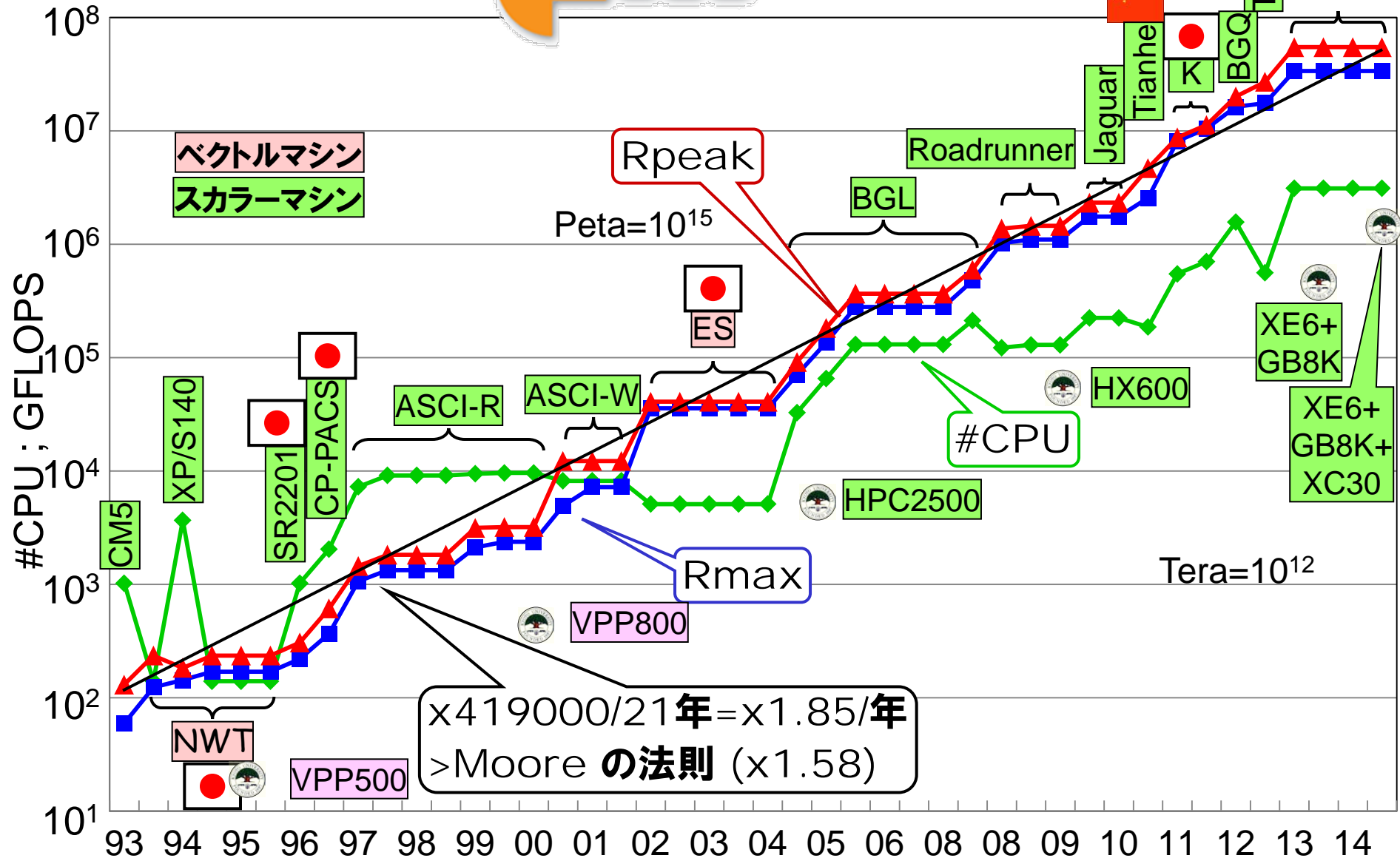


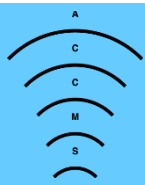


# スーパーコンピュータの歴史

© 2015 H. Nakashima

## Top 1 of





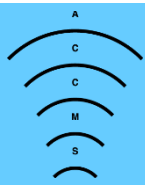
## (いきなり&とりあえず)まとめ

### ■ 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

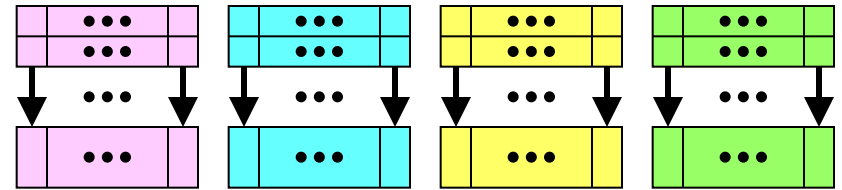
- 多数の同じ(ような)演算を  $p$  個のCPUに分割
- それぞれのCPUが割当てられた計算をする
  - $p$  倍の速度で計算できる(ように見える)
  - 大量 ( $\gg p$ ) の同じ(ような)演算が得意
- スパコンは大量の同じ(ような)演算(や処理)が得意



# 大量同種演算は何でも得意か？ (1/2)

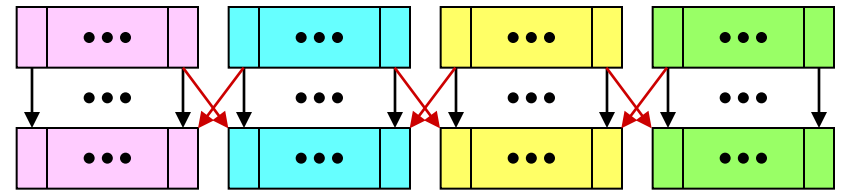
## ■ 超得意

$$Z_i = X_i + Y_i$$



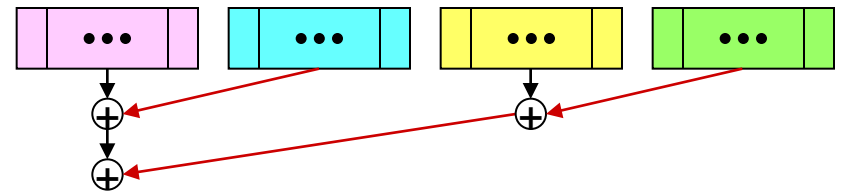
## ■ 普通に得意

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



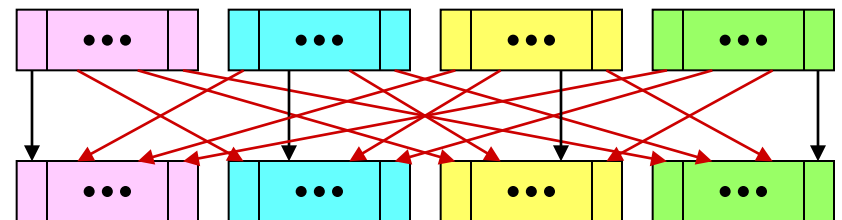
## ■ 微妙に得意

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



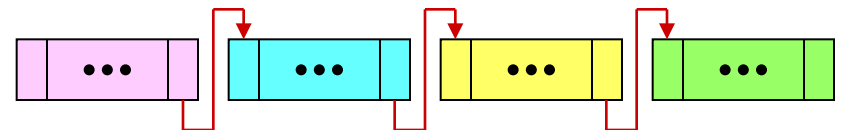
## ■ 何とかなる

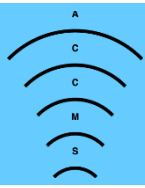
$$Z_i = X_{f(i)} \text{ s.t. } Z_1 \leq Z_2 \leq \dots \leq Z_n$$



## ■ 全然ダメ

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



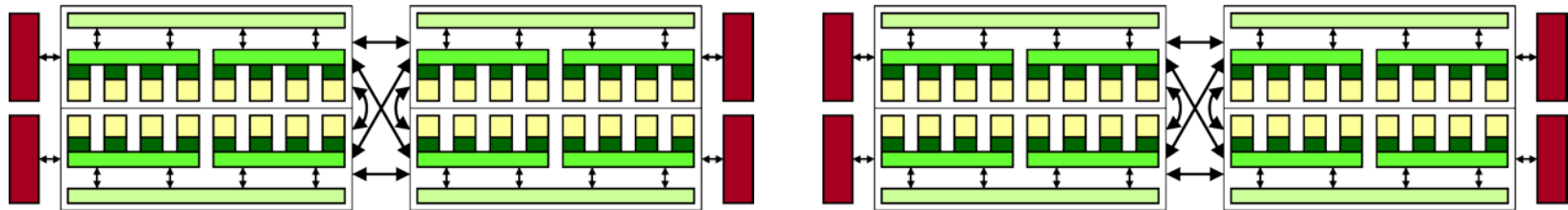


# 大量同種演算は何でも得意か? (2/2)

## ■ 京大スパコン (Camphor) の通信速度

320GFlops

320GFlops



2μsec

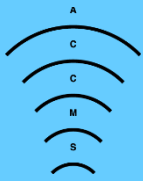


9.3GB/sec  
=74.4Gbit/sec  
=200Mbit/sec×372

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。