

スパコンプログラミング（１），（Ⅰ） ガイダンス

東京大学情報基盤センター准教授 片桐孝洋

2015年4月14日（火）10:25－12:10

スパコンプログラミング（１）、（Ⅰ）

ガイダンスの流れ

1. 講義の目的
2. 講師紹介
3. 講義日程の確認
4. 成績の評価方法
5. 計算機利用申請
6. イントロダクション(30分)

本講義の目的

- ▶ 高性能計算の研究者として生き残るための、最低限の技術を習得する
 1. 情報基盤センターのスーパーコンピュータ利用法
 2. 並列化手法とMPIの使い方
 3. 高性能計算手法
- ▶ 上記技術の習得により、受講生の分野の研究を格段に進めることを目的とする

本講義のシラバス上での位置付け

- ▶ スパコンプログラミング(1)
 - ▶ 工学部学生対象(共通科目)
- ▶ スパコンプログラミング(I)
 - ▶ 工学系研究科大学院生対象(共通科目)
- ▶ 他学部の学生、他大学院の大学院生も受講できます
- ▶ 本科目は、夏学期、冬学期の通年科目です
 - ▶ 夏学期、冬学期ともに、同様の講義内容です

講師紹介

- ▶ お前は何者か？
- ▶ 名前: 片桐 孝洋 (かたぎり たかひろ)
- ▶ 経歴:
 - ▶ 1994年3月 国立 豊田工業高等専門学校 情報工学科 卒業
 - ▶ 1996年3月 京都大学 工学部 情報工学科 卒業
 - ▶ 1996年4月 東京大学大学院理学系研究科情報科学専攻修士課程入学
 - ▶ 2001年3月 東京大学大学院理学系研究科情報科学専攻博士課程 修了
 - ▶ 2001年4月 日本学術振興会特別研究員-PD
 - ▶ 2001年12月 科学技術振興事業団 さきがけ研究21 専任研究者
 - ▶ 2002年6月～2007年3月 電気通信大学 大学院情報システム学研究科 助手
 - ▶ 2005年3月～2006年1月 米国カリフォルニア大学バークレー校 計算機科学科 訪問学者
 - ▶ 2007年4月～2011年12月 東京大学 情報基盤センター 特任准教授
 - ▶ 2011年12月～現在 情報基盤センター 准教授
- ▶ <並列数値計算アルゴリズム>、<ソフトウェア自動チューニング>分野で、現在も論文とプログラムを書いている現役の研究者！
- ▶ 詳しくは「片桐孝洋」でググってください

講義日程（工学部共通科目）

レポートおよびコンテスト課題
(締切:
2015年8月3日(月)24時 厳守

▶ 4月14日: ガイダンス

1. 4月21日

- 並列数値処理の基本演算(座学)

2. 4月28日: 座学のみ

- ソフトウェア自動チューニング
- 非同期通信

3. 5月12日: スパコン利用開始

- ログイン作業、テストプログラム実行

4. 5月19日

- 高性能演算技法1
(ループアンローリング)

5. 6月2日(8:30-10:15)

- 高性能演算技法2
(キャッシュブロック化)

5. 6月2日(10:25-12:10)

- 行列-ベクトル積の並列化

▶ 6

6. 6月9日(8:30-10:15)

★大演習室2

- べき乗法の並列化

7. 6月9日(10:25-12:10)

- 行列-行列積の並列化(1)

8. 6月16日

- 行列-行列積の並列化(2)

9. 6月23日

- LU分解法(1)
- コンテスト課題発表

10. 6月30日

- LU分解法(2)

11. 7月7日

- LU分解法(3)

スパコンプログラミング(1)、(I)



東京大学情報基盤センター
Information Technology Center, The University of Tokyo

評価方法

1. 実習で出題される課題を解きレポートにして提出
 - 加算方式
 - 解けば解くほど評価が高まる
 - すべての問題を解く必要はない(解けないほど多く出す)
 2. コンテスト課題を解く
 - 入賞(1位～3位(予定))は、無条件に“優”(予定)
 - ちゃんと動作するものをつくれば、実習レポート点に加点
- ▶ 1のみ、2のみ、1と2の両方、の選択がある。
- ▶ 1と2の両方を行った場合は、加算方式で成績を決定する。
- ▶ 目的で述べたとおり、技術の習得が目的だから、単位希望の学生はいないよね？

2007～2009年度の様子

▶ C言語もしくはFortran言語 と MPI を用いて実習

1. 平成19年度(夏学期)
 - ▶ 受講申し込み: **81名**
 - ▶ レポート課題提出: **19名**
 - ▶ 優:16名、良:3名、うち、コンテスト課題提出者:4名(3名は無条件で優)
2. 平成19年度(冬学期)
 - ▶ 受講申し込み: **29名**
 - ▶ レポート課題提出: **13名**
 - ▶ 優:13名、うち、コンテスト課題提出者:4名(3名は無条件で優)
3. 平成20年度(夏学期)
 - ▶ 受講申し込み: **62名**
 - ▶ レポート課題提出: **13名**
 - ▶ 優:10名、良:2名、可:1名。うち、コンテスト課題提出者:3名(3名は無条件で優)
4. 平成20年度(冬学期)
 - ▶ 受講申し込み: **35名**
 - ▶ レポート課題提出: **9名**
 - ▶ 優:8名、良:1名、可:0名。うち、コンテスト課題提出者:3名(3名は無条件で優)
5. 平成21年度(夏学期)
 - ▶ 受講申し込み: **24名**
 - ▶ レポート課題提出: **6名**
 - ▶ 優:4名、良:2名、可:0名。うち、コンテスト課題提出者:0名(0名は無条件で優)
6. 平成21年度(冬学期)
 - ▶ 受講申し込み: **16名**
 - ▶ レポート課題提出: **3名**
 - ▶ 優:3名、良:0名、可:0名。うち、コンテスト課題提出者:1名(1名は無条件で優)

2010年度以降の様子

7. 平成22年度(夏学期)
 - ▶ 受講申し込み: **23名**
 - ▶ レポート課題提出: **12名**
 - ▶ 優:12名、良:0名、うち、コンテスト課題提出者:3名(3名は無条件で優)
8. 平成22年度(冬学期)
 - ▶ 受講申し込み: **22名**
 - ▶ レポート課題提出: **9名**
 - ▶ 優:9名、良:0名、うち、コンテスト課題提出者:0名
9. 平成23年度(夏学期)
 - ▶ 受講申し込み: **20名**
 - ▶ レポート課題提出: **10名**
 - ▶ 優:9名、良:0名、可:1名、うち、コンテスト課題提出者:0名
10. 平成23年度(冬学期)
 - ▶ 受講申し込み: **25名**
 - ▶ レポート課題提出: **10名**
 - ▶ 優:9名、良:1名、可:0名、うち、コンテスト課題提出者:2名
11. 平成24年度(夏学期)
 - ▶ 受講申し込み: **34名**
 - ▶ レポート課題提出: **15名**
 - ▶ 優:15名、良:0名、可:0名、うち、コンテスト課題提出者:5名
12. 平成24年度(冬学期)
 - ▶ 受講申し込み: **21名**
 - ▶ レポート課題提出: **8名**
 - ▶ 優:8名、良:0名、可:0名、うち、コンテスト課題提出者:0名

2013年度以降の様子

-
7. 平成25年度(夏学期)
 - ▶ 受講申し込み: **27名**
 - ▶ レポート課題提出: **14名**
 - ▶ 優:14名、良:0名、うち、コンテスト課題提出者:0名(0名は無条件で優)
 8. 平成25年度(冬学期)
 - ▶ 受講申し込み: **25名**
 - ▶ レポート課題提出: **10名**
 - ▶ 優:9名、良:1名、うち、コンテスト課題提出者:3名(3名は無条件で優)
 9. 平成26年度(夏学期)
 - ▶ 受講申し込み: **37名**
 - ▶ レポート課題提出: **11名**
 - ▶ 優:8名、良:2名、うち、コンテスト課題提出者:2名(2名は無条件で優)
 10. 平成26年度(冬学期)
 - ▶ 受講申し込み: **23名**
 - ▶ レポート課題提出: **10名**
 - ▶ 優:8名、良:0名、可:2名、うち、コンテスト課題提出者:0名(0名は無条件で優)

講義の様子

- ▶ C言語（もしくはFortran言語）とMPIを用いて実習
- ▶ ほとんどが、並列化の課題実行時で脱落
 - ▶ UNIXの基本コマンド、及び、プログラムの基本がわかっていないと厳しい。
- ▶ なるべく脱落者を減らしたい
- ▶ UNIXの基本コマンドがわかっていない人、プログラムの基本がわかっていない人は、個別に、集中的に教えるよう配慮していますので、遠慮なく聞いてください。
- ▶ 平成22年度から、出席を考慮（評価得点全体に対し20%程度）
 - ▶ その結果：単位取得率は約50%前後、ほぼ全員が「優」。

講義の流れ

- ▶ 次次回から、基盤センタのスーパーコンピュータ（富士通FX10スーパーコンピュータシステム）を利用します。
- ▶ 5月12日（火）の講義中に、アカウント名とパスワードを紙で配布する予定です。必ず出席してください。

参考資料について

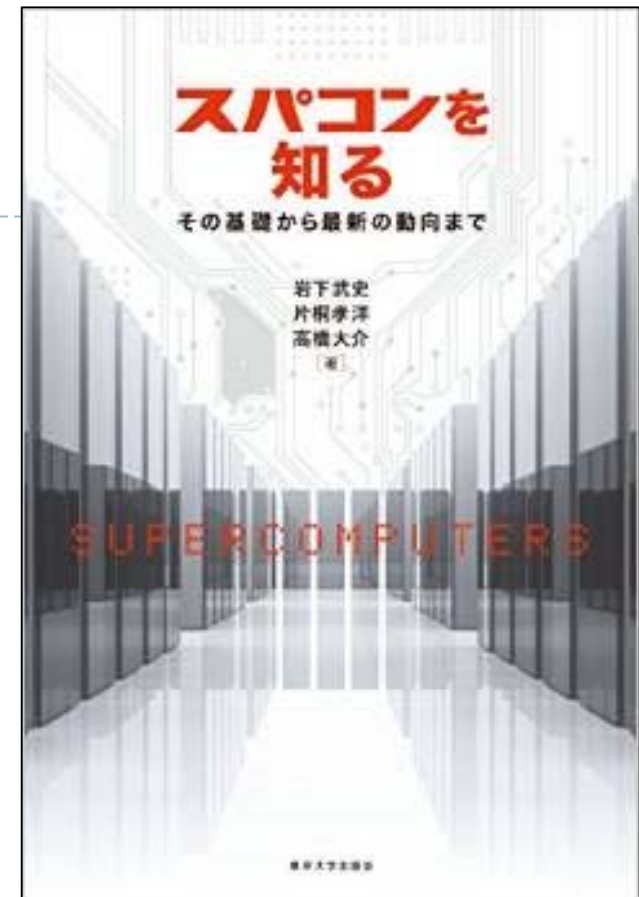
- ▶ 配布したプリントに従い、以下の参考資料をダウンロードしてください。

- 講義OHPのPDFファイル

<http://www.kata-lab.itc.u-tokyo.ac.jp/class-matr.htm>

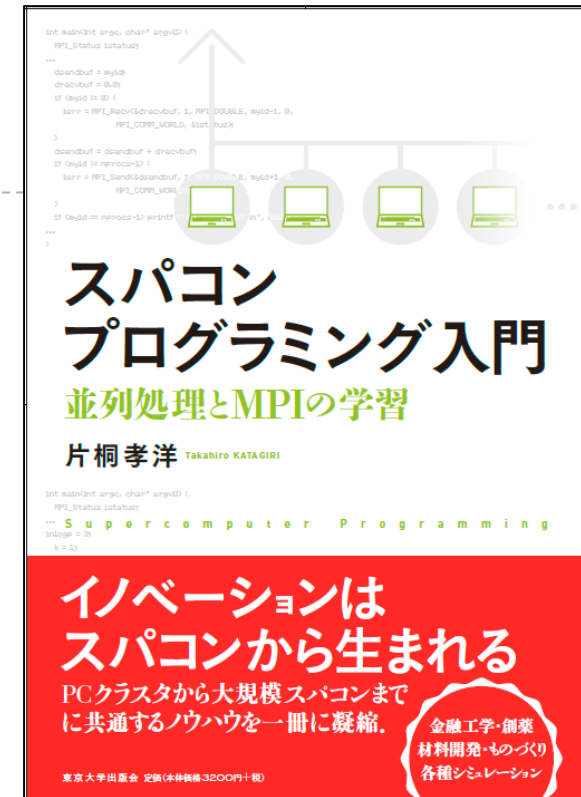
参考書

- ▶ 「スパコンを知る:
その基礎から最新の動向まで」
 - ▶ 岩下武史、片桐孝洋、高橋大介 著
 - ▶ 東大出版会、ISBN-10: 4130634550、
ISBN-13: 978-4130634557、
発売日: 2015年2月18日、176頁
 - ▶ 【本書の特徴】
 - ▶ スパコンの解説書です。以下を
分かりやすく解説しています。
 - スパコンは何に使えるか
 - スパコンはどんな仕組みで、なぜ速く計算できるのか
 - 最新技術、今後の課題と将来展望、など



教科書（演習書）

- ▶ 「スパコンプログラミング入門
ー並列処理とMPIの学習ー」
 - ▶ 片桐 孝洋 著、
 - ▶ 東大出版会、ISBN978-4-13-062453-4、
発売日:2013年3月12日、判型:A5, 200頁
 - ▶ 【本書の特徴】
 - ▶ C言語で解説
 - ▶ C言語、Fortran90言語のサンプルプログラムが付属
 - ▶ 数値アルゴリズムは、図でわかりやすく説明
 - ▶ 本講義の内容を全てカバー
 - ▶ 内容は初級。初めて並列数値計算を学ぶ人向けの入門書



教科書（演習書）

- ▶ 「並列プログラミング入門：
サンプルプログラムで学ぶOpenMPとOpenACC」(仮題)
 - ▶ 片桐 孝洋 著
 - ▶ 東大出版会、ISBN-10: 4130624563、ISBN-13: 978-4130624565
、発売日：2015年5月25日(出版予定)
 - ▶ 【本書の特徴】
 - ▶ C言語、Fortran90言語で開設
 - ▶ C言語、Fortran90言語の複数のサンプルプログラムが
入手可能(ダウンロード形式)
 - ▶ 本講義の内容を全てカバー
 - ▶ Windows PC演習可能(Cygwin利用)。スパコンでも演習可能。
 - ▶ 内容は初級。初めて並列プログラミングを学ぶ人向けの
入門書

参考書

- ▶ 「並列数値処理 – 高速化と性能向上のために –」
 - ▶ 金田康正 東大教授 理博 編著、
片桐孝洋 東大特任准教授 博士(理学) 著、黒田久泰 愛媛大准教授
博士(理学) 著、山本有作 神戸大教授 博士(工学) 著、五百木伸洋
(株)日立製作所 著、
 - ▶ コロナ社、発行年月日:2010/04/30, 判 型: A5, ページ数:272頁、
ISBN:978-4-339-02589-7, 定価:3,990円(本体3,800円+税5%)
 - ▶ 【本書の特徴】
 - ▶ Fortran言語で解説
 - ▶ 数値アルゴリズムは、数式などで厳密に説明
 - ▶ 本講義の内容に加えて、固有値問題の解法、疎行列反復解法、
FFT、ソート、など、主要な数値計算アルゴリズムをカバー
 - ▶ 内容は中級～上級。専門として並列数値計算を学びたい人向き

教科書（スパコンプログラミング入門） の利用方法

- ▶ 本講義の全内容、演習内容をカバーした資料
- ▶ 教科書というより、実機を用いた並列プログラミングの演習書として位置づけられている
 - ▶ 使える並列計算機があることが前提
- ▶ 付属の演習プログラムの利用について
 1. 東京大学情報基盤センターのFX10スーパーコンピュータシステムでそのまま利用する
 2. 研究室のPCクラスタ(MPIが利用できるもの)で利用する
 3. 東大以外の大学等のスーパーコンピュータで利用する
- ▶ 各自のPCを用いて、(MPIではない)逐次プログラムで演習する(主に逐次プログラムの高速化の話題)

イントロダクション

スパコンとは何か？

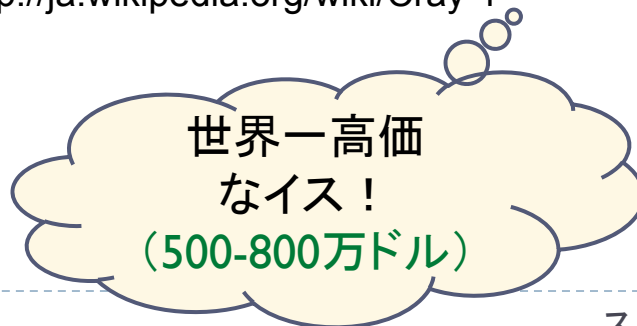
スーパーコンピュータとは

- ▶ 人工知能搭載のコンピュータではない
- ▶ 明確な定義はない
 - ▶ 現在の最高レベルの演算性能をもつ計算機のこと
 - ▶ 経験的には、PCの1000倍高速で、1000倍大容量なメモリをもつ計算機
 - ▶ 外為法安全保障貿易管理の外国為替及び外国貿易法の法令（平成26年8月14日公布、9月15日施行）の規制対象デジタル電子計算機
 - ▶ 第7条第三項ハ: デジタル電子計算機であって、加重最高性能が八・〇実効テラ演算を超えるもの
- ▶ 現在、ほとんどすべてのスーパーコンピュータは並列計算機
- ▶ 東京大学情報基盤センターが所有するFX10スーパーコンピュータシステムも、並列計算機

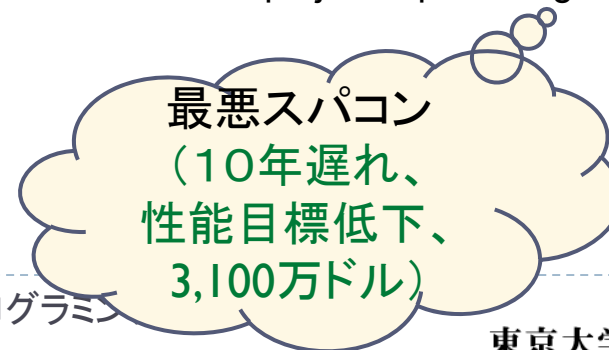
スーパーコンピュータの歴史

- ▶ 1976年 Cray-1
ベクトル型、クレイ社
- ▶ 1974年(1機) ILLIAC-IV、
並列型(64プロセッサ)、
イリノイ大学

出典: <http://ja.wikipedia.org/wiki/Cray-1>



出典: http://ja.wikipedia.org/wiki/ILLIAC_IV



スーパーコンピュータで用いる単位

▶ TFLOPS(テラ・フロップス、 Tera Floating Point Operations Per Second)

- ▶ 1秒間に1回の演算能力(浮動小数点)が1FLOPS。
- ▶ K(キロ)は1,000(千)、M(メガ)は1,000,000(百万)、G(ギガ)は1,000,000,000(十億)、T(テラ)は1,000,000,000,000(一兆)
- ▶ だから、一秒間に一兆回の浮動小数点演算の能力がある こと。

▶ PFLOPS(ペタ・フロップス)

- ▶ 1秒間に0.1京(けい)回の浮動小数点演算の能力がある。
- ▶ 「京コンピュータ」(2012年9月共用開始、11.2PFLOPS、**現在TOP500で4位**)

● PCの演算能力は？

- 3.3GHz(1秒間に3.3G回のクロック周波数)として、もし1クロックあたり1回の浮動小数点演算ができれば3.3GFLOPS。
- Intel Core i7 (Sandy Bridge)では、6コア、1クロックで8回の浮動小数計算ができるので、 $3.3 \text{ GHz} * 8 \text{ 回浮動小数点演算/Hz} * 6 \text{ コア} = 158.4 \text{ GFLOPS}$
- Cray-1は160MFLOPS。1970年代のスパコンより、PCの方が990倍以上高速！

スーパーコンピュータ用語

▶ 理論性能(Theoretical Performance)

- ▶ ハードウェア性能からはじき出した性能。
- ▶ 1クロックに実行できる浮動小数点回数から算出したFLOPS値を使うことが多い。

▶ 実効性能(Effective Performance)

- ▶ 何らかのベンチマークソフトウェアを実行して実行時間を計測。
- ▶ そのベンチマークプログラムに使われている浮動小数点演算を算出。
- ▶ 以上の値を基に算出したFLOPS値のこと。
- ▶ 連立一次方程式の求解ベンチマークであるLINPACKを用いることが多い。

ムーアの法則

- ▶ 米Intel社の設立者ゴードン・ムーアが提唱した、半導体技術の進歩に関する経験則。

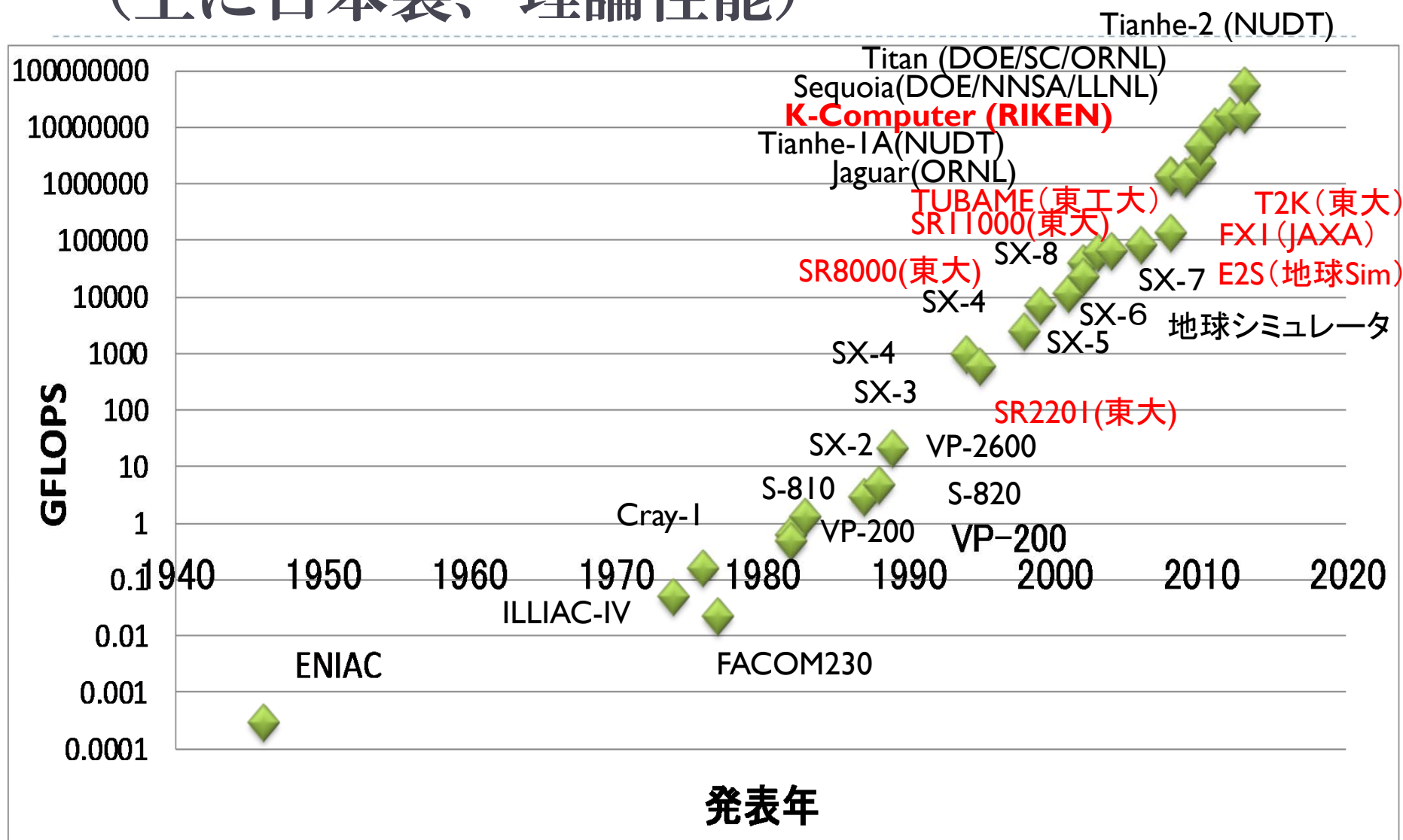
「半導体チップの集積度は、およそ18ヵ月で2倍になる」

- ▶ これから転じて、

「マイクロプロセッサの性能は、およそ18ヵ月で2倍になる」

- ▶ 上記によると、約5年で10倍となる。

スーパーコンピュータ性能推移 (主に日本製、理論性能)



スーパーコンピュータのランキング

- ▶ **TOP500 Supercomputer Sites**
(<http://www.top500.org/>)
- ▶ LINPACKの値から実効性能を算出した値の500位までのランキング
- ▶ 米国オークリッジ国立研究所／テネシー大学ノックスビル校の Jack Dongarra 教授が発案
- ▶ 毎年、6月、11月（米国の国際会議SC | xy）に発表

現在のランキング

2014年11月現在

- 1位: 中国 NUDTのTianhe-2
33.862 PFLOPS
- 2位: 米国 DOE/SC/ORNのTitan
17.590 PFLOPS
- 3位: 米国 DOE/NNSA/LLNLのSequoia (BlueGene/Q)
17.173 PFLOPS
- 4位: 日本 K-Computer (Sparc64 Xliffx)
10.510 PFLOPS
- 5位: 米国 DOE/SC/ANLのMira (BlueGene/Q)
8.586 PFLOPS
- 6位: スイス国立スパコンセンターのPiz Daint (Cray XC30)
6.271 PFLOPS
- その他の日本のマシン
 - 15位の東工大のTUBAME2.5
2.785 PFLOPS
 - 38位の国際核融合研のHelios (Xeon E5-2680)
1.237 PFLOPS
 - 48位の東京大学情報基盤センターのOakleaf-fx (Sparc64 IVfx)
1.042 PFLOPS

Rank	Site	Computer/Year	Vendor	Cores	R _{max}	R _{peak}	Power
1	Oak Ridge National Laboratory United States	Jaguar - Cray XT5-HE Opteron Six Core 2.6 GHz / 2009	Cray Inc.	224162	1759.00	2331.00	6950.60
2	National Supercomputing Centre in Shenzhen (NSCC) China	Nebulae - Dawning TC3600 Blade, Intel X5650, Nvidia Tesla C2050 GPU / 2010	Dawning	120640	1271.00	2984.30	
3	DOE/NNSA/LLNL United States	Roadrunner - BladeCenter QS22LS21 Cluster, PowerPC Cell 8i 3.2 GHz / Opteron DC1.9 GHz, Voltaire Infiniband / 2009	IBM	122400	1042.00	1375.78	2345.50
4	National Institute for Computational Sciences/University of Tennessee United States	Kraken XT5 - Cray XT5-HE Opteron Six Core 2.6 GHz / 2009	Cray Inc.	98928	831.70	1028.85	
5	Forschungszentrum Juelich (FZJ) Germany	JUJECENE - Blue Gene/P Solution / 2009	IBM	294912	825.50	1002.70	2268.00
6	NASA/Ames Research Center/NAS United States	Pleiades - SGI Altix ICE 8200EX/6400EX, Xeon HT QC 3.0/Xeon Westmere 2.93 GHz, Infiniband / 2010	SGI	81920	772.70	973.29	3096.00
7	National Supercomputer Center in Tianjin/NUDT China	Tianhe-1 - NUDT TH-1 Cluster, Xeon E5405E450, ATI Radeon HD 4870 2, Infiniband / 2009	NUDT	71680	563.10	1206.19	

出典: <http://www.top500.org/list/2014/11/>

プログラミング(1)、(I)

京コンピュータ (K-Computer) 理研

- ▶ 理研 計算科学機構(神戸ポートアイランド)
- ▶ 2012年9月共用開始
- ▶ CPU: SPARC64 VIIIfx(CPU当たり 128GFLOPS)
- ▶ 2011年11月TOP500のLINPACK性能
 - ▶ 理論性能: **11.280 PLOPS**
 - ▶ 実行性能: **10.510 PFLOPS** 効率: **93.1%**

参照: 理研

計算科学機構(<http://www.aics.riken.jp/index.html>)

東工大TUBAME2.5

- ▶ HP Proliant SL390s G7
 - ▶ CPU: Intel Xeon 2.93 GHz
(6 cores) x 2
(Hyperthreading enabled)
 - ▶ GPU: NVIDIA Tesla K20X x 3
 - ▶ Memory: 54GB(一部128GB)
 - ▶ 1408台
- ▶ 合計コア数: 74,358コア
- LINPACK効率
 - $2843\text{TF}/5609\text{TF} = 50.6\%$

参考: <http://tsubame.gsic.titech.ac.jp/hardware-architecture>

国内のスーパコンピュータ ー地球シミュレータ 2

▶ 海洋研究開発機構 地球シミュレータ2

- ▶ NEC SX-9
- ▶ 1280プロセッサ
- ▶ 1ノードあたり8プロセッサ
- ▶ 160ノード
- ▶ 理論性能:
131TFLOPS
- ▶ 実効性能:
122.4TFLOPS
- ▶ 実効効率:
93.4%

参照: 海洋研究開発機構
(<http://www.jamstec.go.jp/es/jp/system/index.html>)

東京大学情報基盤センター スパコン (1 / 2)

HITACHI SR16000

Total Peak performance	: 54.9 TFLOPS
Total number of nodes	: 56
Total memory	: 11200 GB
Peak performance per node	: 980.4 GFLOPS
Main memory per node	: 200GB
Disk capacity	: 556 TB
IBM POWER7 3.83GHz (30.64GFLOPS)	

2011年10月～試験運用開始



東京大学情報基盤センター スパコン (2 / 2)

Fujitsu PRIMEHPC FX10 (FX10スーパーコンピュータシステム)

Total Peak performance	: 1.13 PFLOPS
Total number of nodes	: 4,800
Total memory	: 150TB
Peak performance per node	: 236.5 GFLOPS
Main memory per node	: 32 GB
Disk capacity	: 2.1 PB
SPARC64 IXfx 1.848GHz	

2012年4月2日運用開始



FX10 (Oakleaf-FX)@柏



長時間ジョブ用FX10 (Oakbridge-FX)@本郷

FX10計算ノードの構成

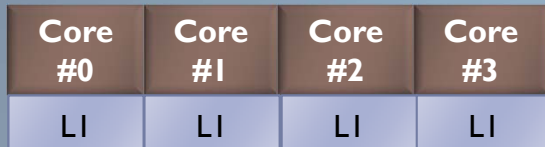
1ソケットのみ

TOFU
Network

各CPUの内部構成

20GB/秒

ICC



... : L1データキャッシュ32KB



L2 (16コアで共有、12MB)

Memory

4GB × 2枚

Memory

4GB × 2枚

Memory

4GB × 2枚

Memory

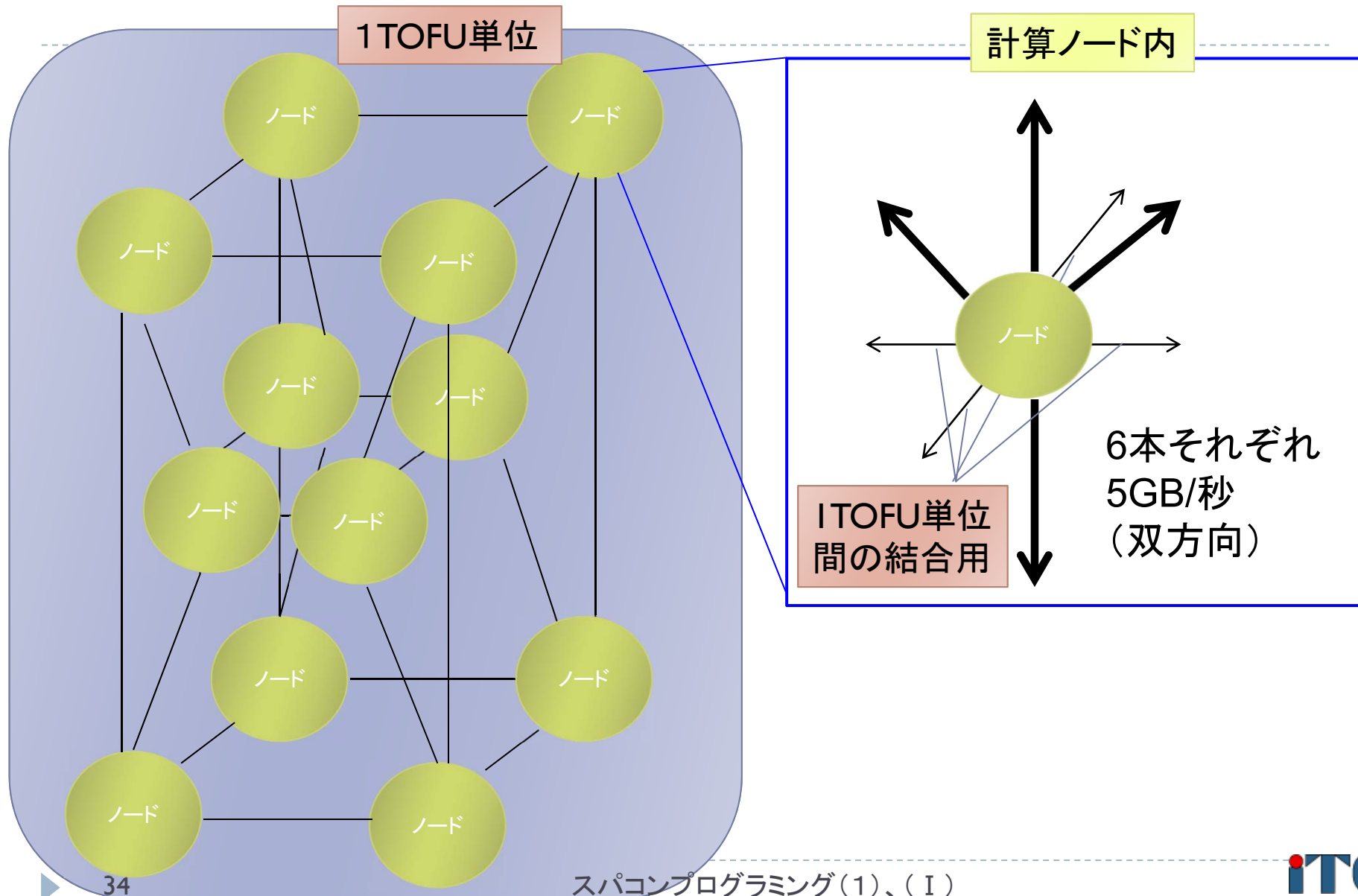
4GB × 2枚

DDR3 DIMM

ノード内合計メモリ量: 8GB × 4 = 32GB

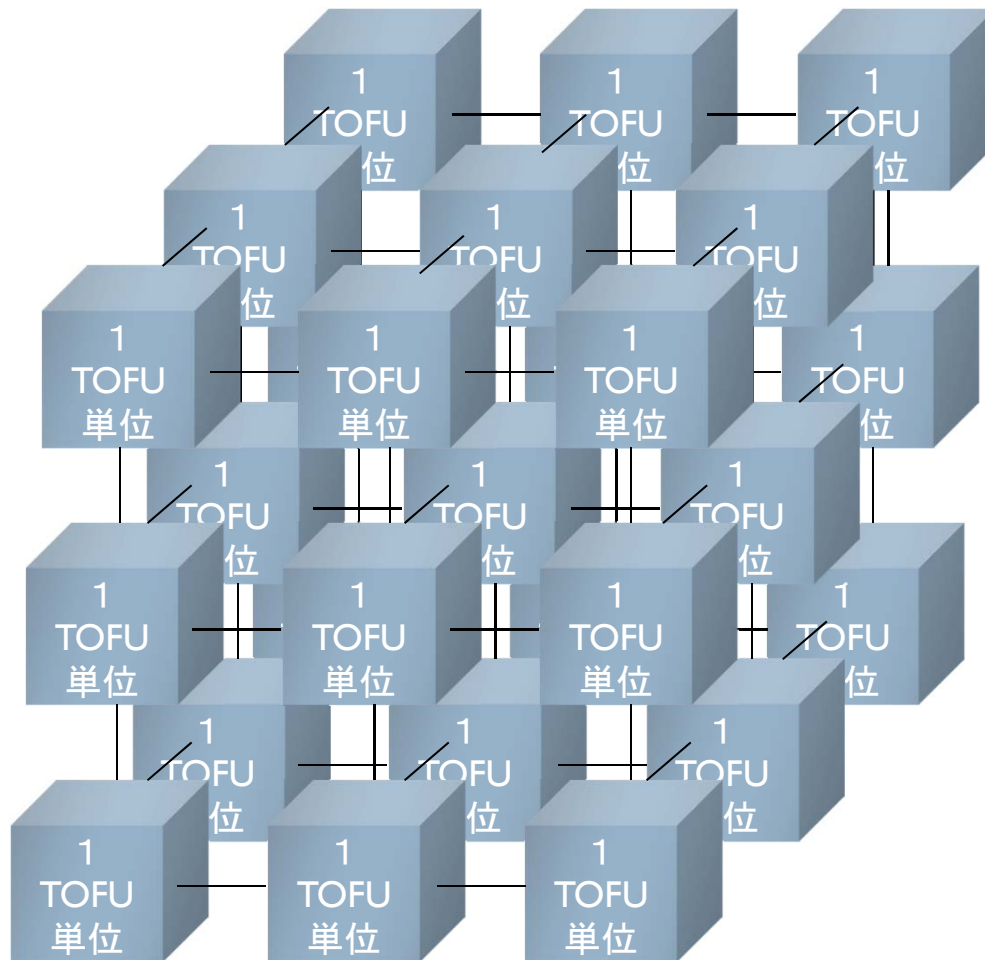
85GB/秒
=(8Byte × 1333MHz
× 8 channel)

FX10の通信網（1 TOFU単位）



FX10の通信網（1 TOFU単位間の結合）

3次元接続



- ユーザから見ると、
X軸、Y軸、Z軸について、
奥の1TOFUと、手前の
1TOFUは、繋がって見えます
(3次元トラス接続)
 - ただし物理結線では
 - X軸はトラス
 - Y軸はメッシュ
 - Z軸はメッシュまたは、
トラス
- になっています

東大情報基盤センターFX10スーパーコンピュータシステムの料金表 (2011年4月1日)

▶ パーソナルコース(年間)

▶ コース1: 120,000円 : 12ノード(優先)、最大24ノードまで

▶ コース2: 250,000円 : 24ノード(優先)、最大96ノードまで

▶ グループコース

▶ 500,000円 : 1口、12ノード(優先)、最大1440ノードまで

▶ 以上は、「トークン制」で運営

▶ 申し込みノード(優先ノード) × 360日 × 24時間の「トークン」が与えられる

▶ 優先ノードまでは、トークン消費係数が1.0

▶ 優先ノードを超えると、超えた分は、消費係数が2.0になる

来週へつづく

並列数値計算の基礎