

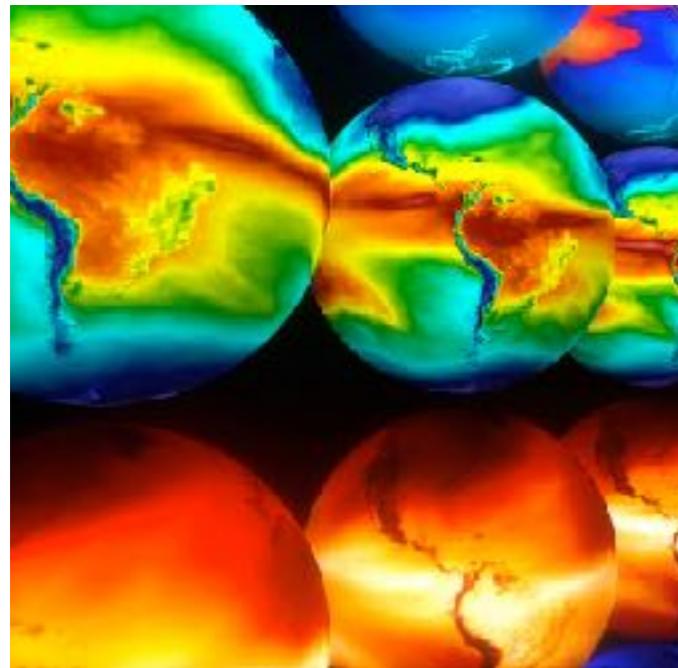
ミニ・スーパコンピュータを自作しよう！

奈良先端科学技術大学院大学
ソフトウェア設計学研究室
高橋 慧智

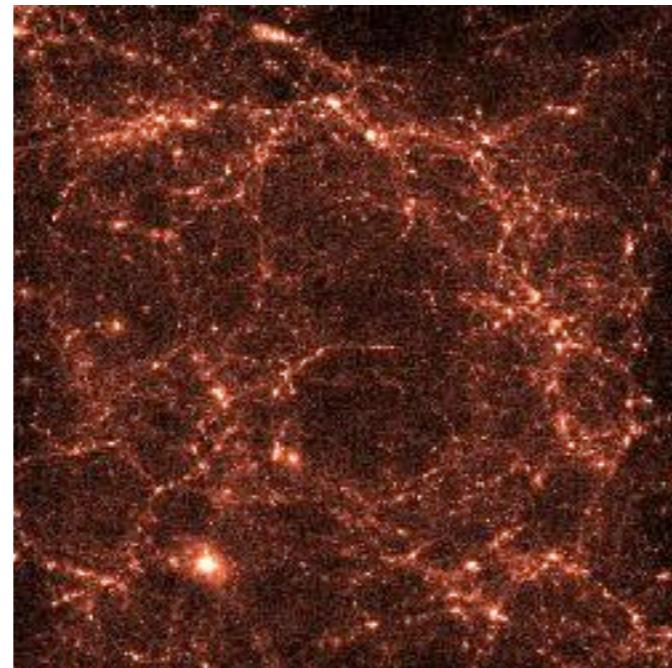
スパコンとは

スーパコンピュータの応用分野

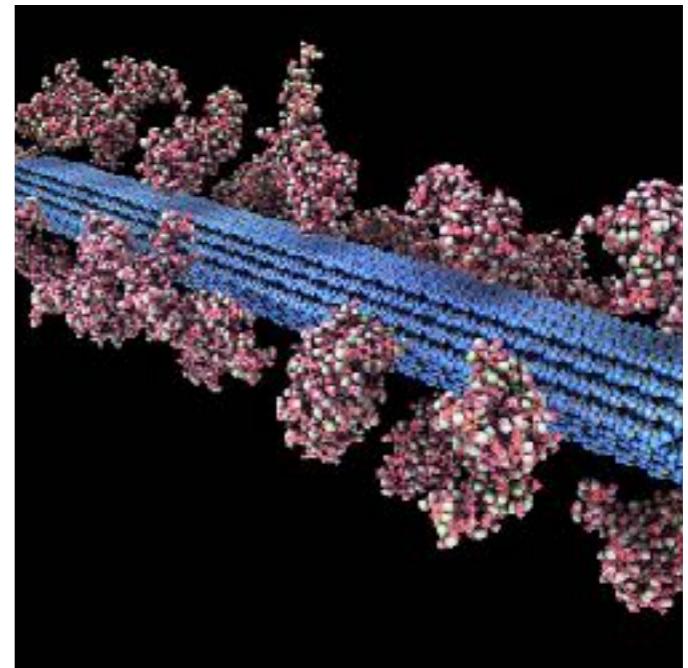
気象学



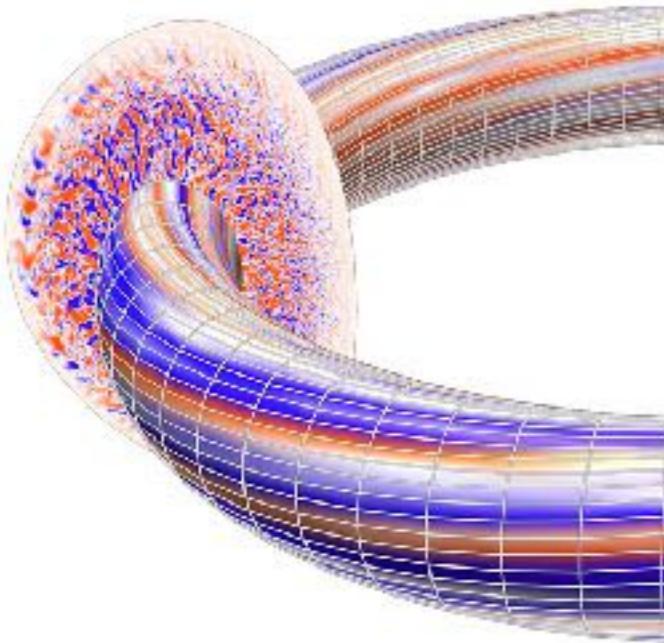
天文学



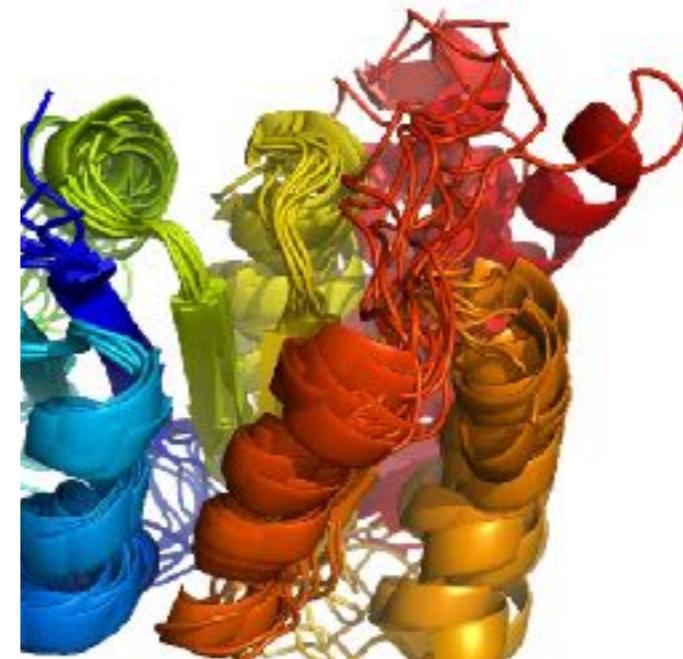
化学



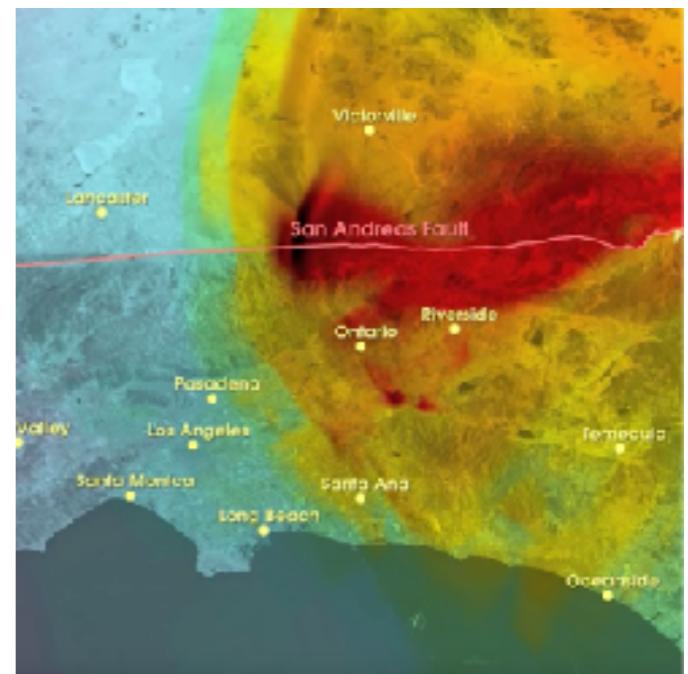
核物理学



生物学



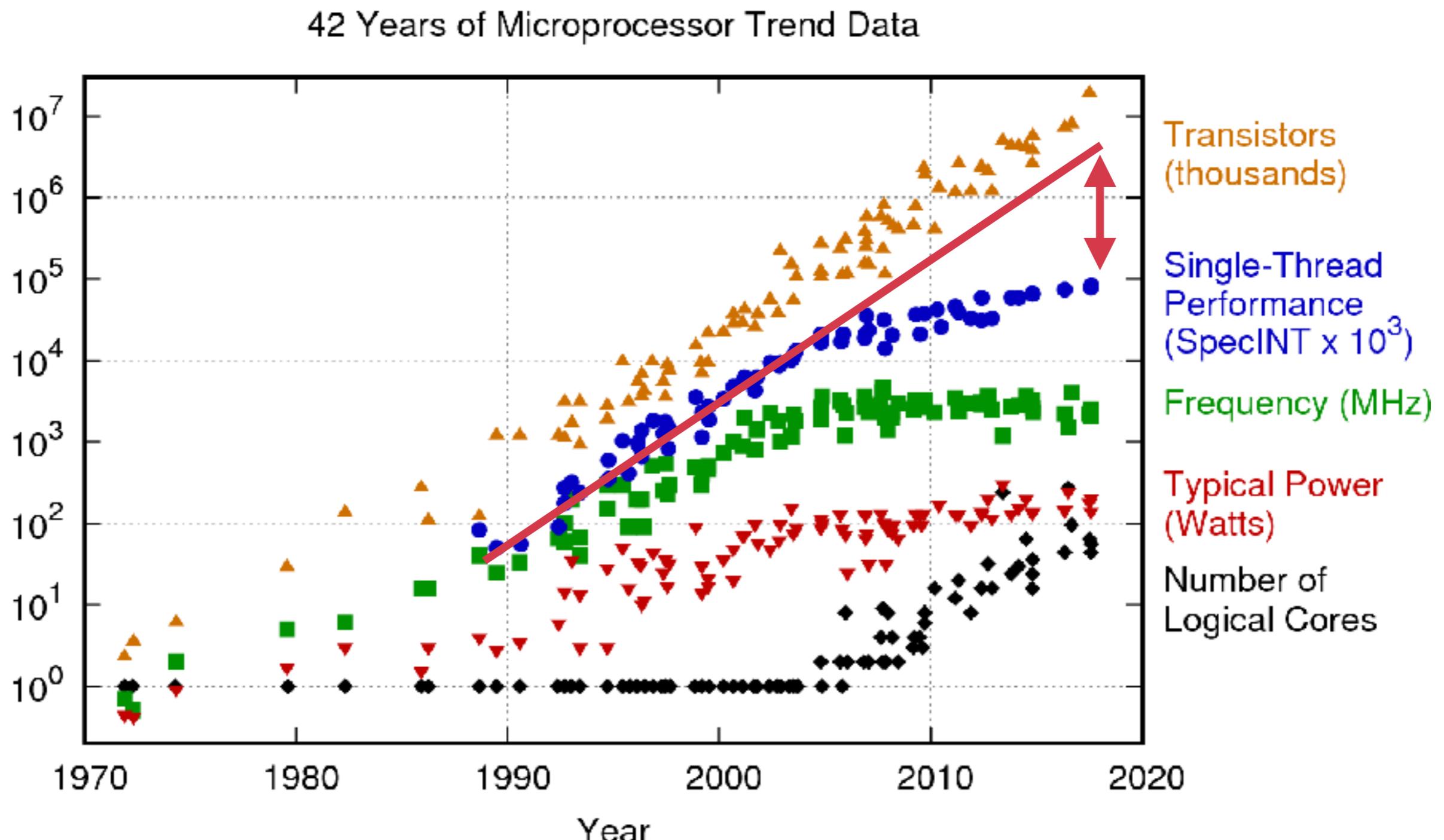
地震学



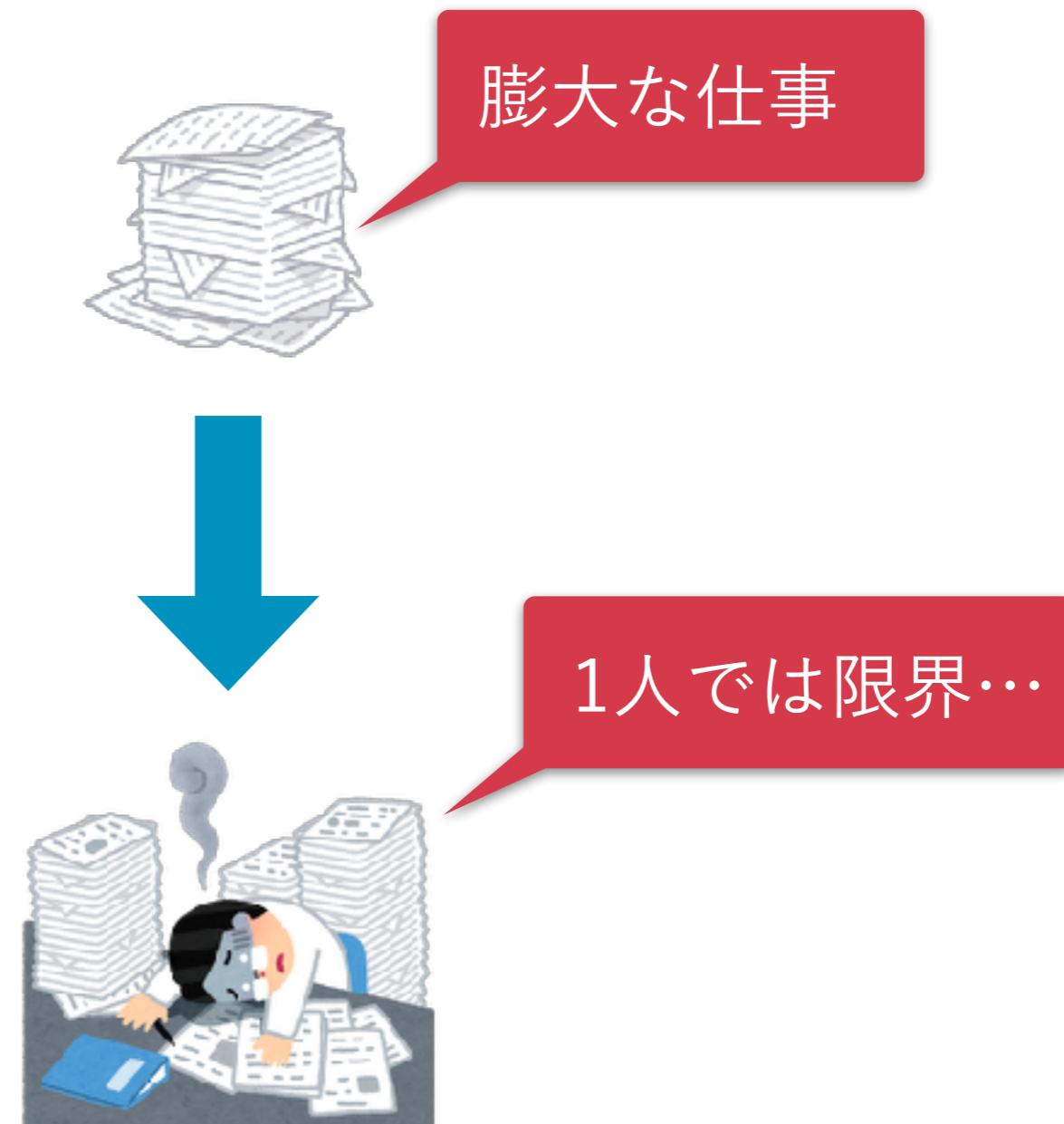
スーパコンピュータ (ORNL Summit) の外観



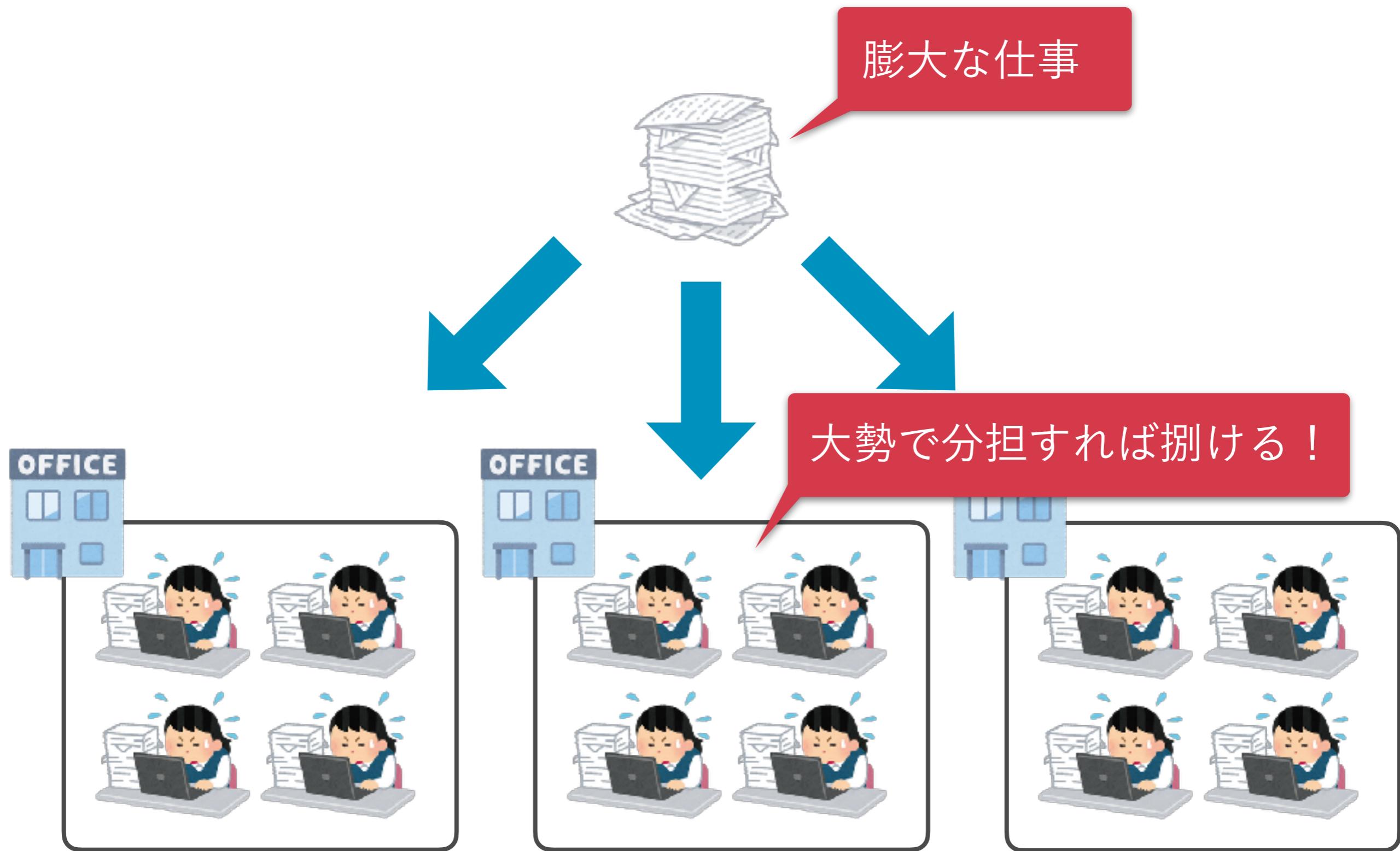
CPUコアの単体性能の停滞



逐次処理の限界



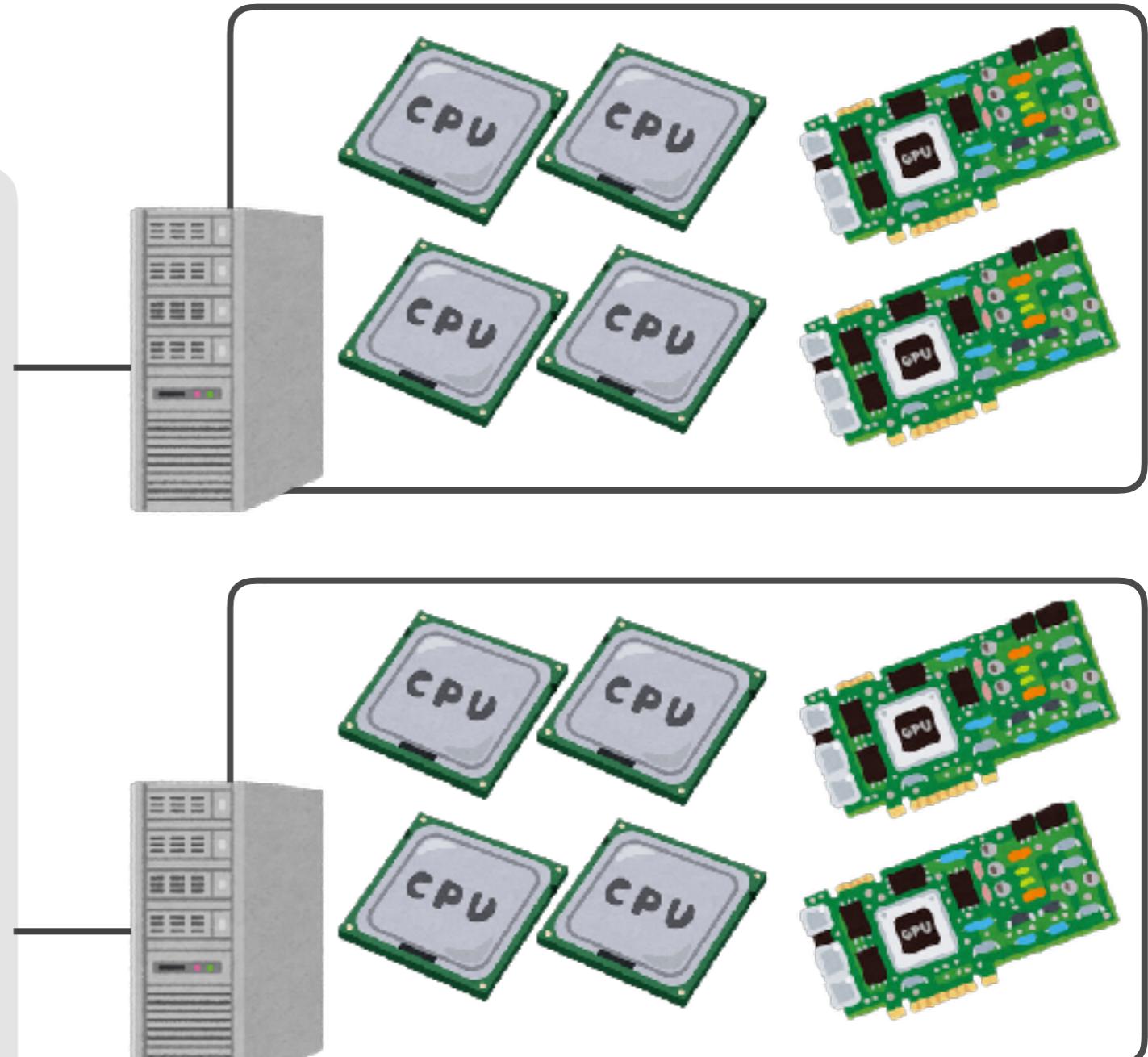
並列処理による計算の分担



スーパコンピュータは大規模な並列計算機



ネットワーク



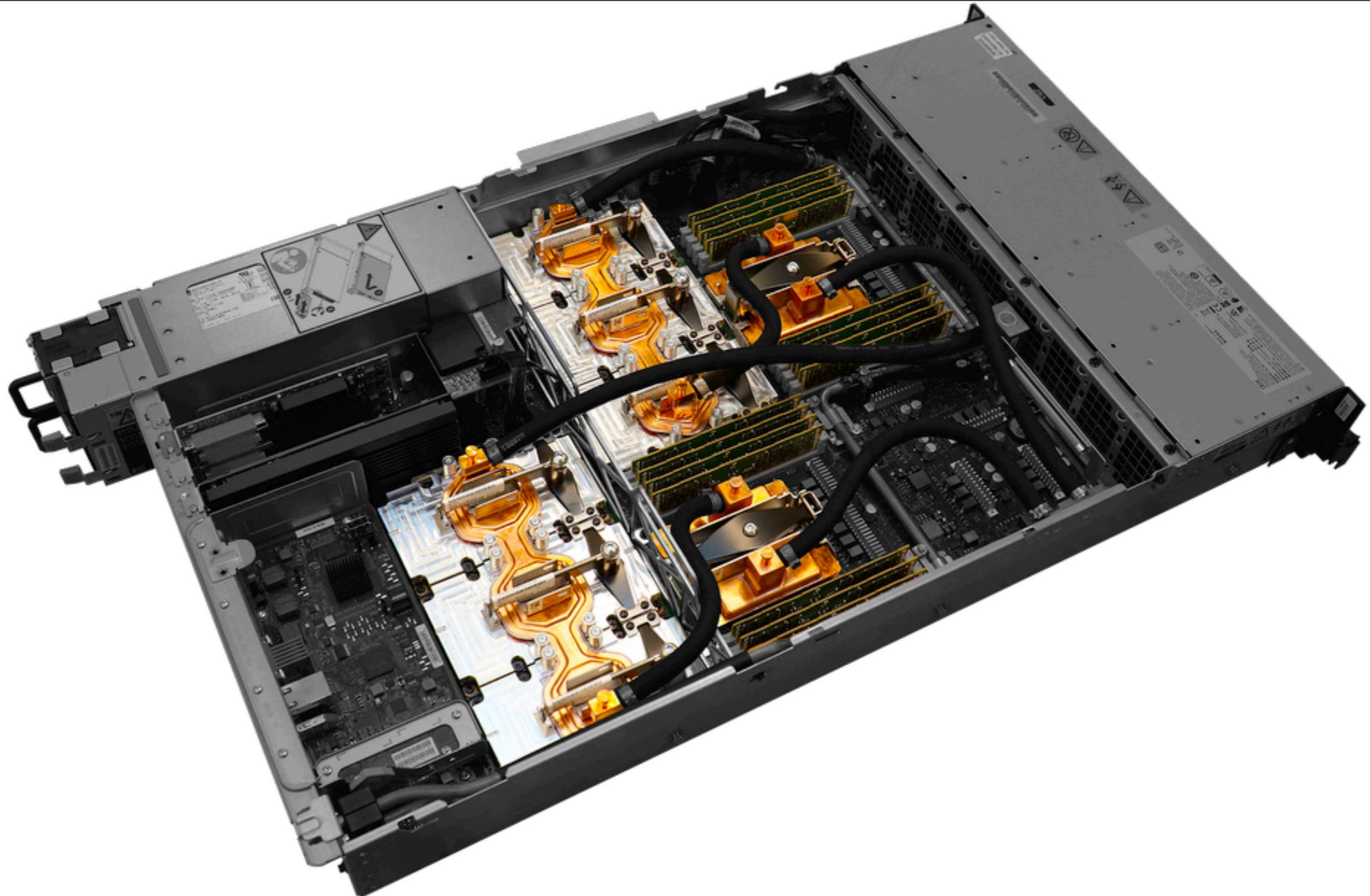
スーパコンピュータ (ORNL Summit) の外観



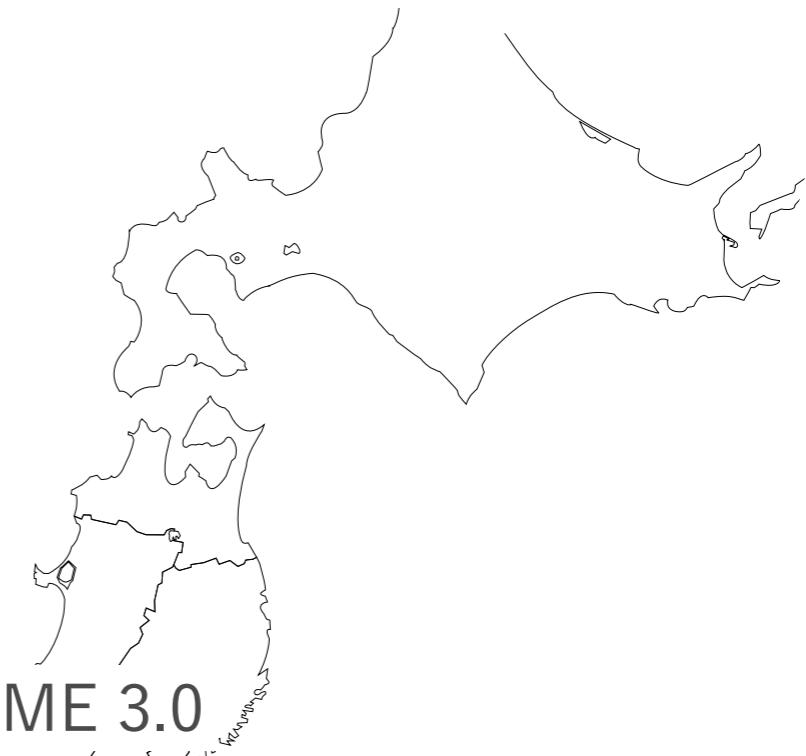
スーパコンピュータ (ORNL Summit) のラック



スーパコンピュータ (ORNL Summit) のノード



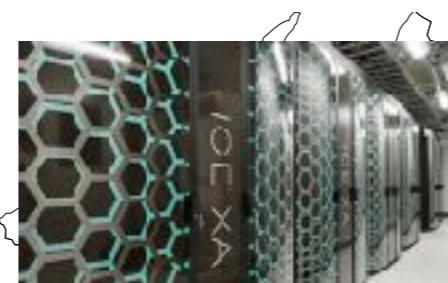
国内のスーパコンピュータ



理研 京, 富岳



東工大 TSUBAME 3.0



東大・筑波 Oakforest-PACS



阪大 OCTOPUS



気象庁 Cray XC50



産総研 ABCI

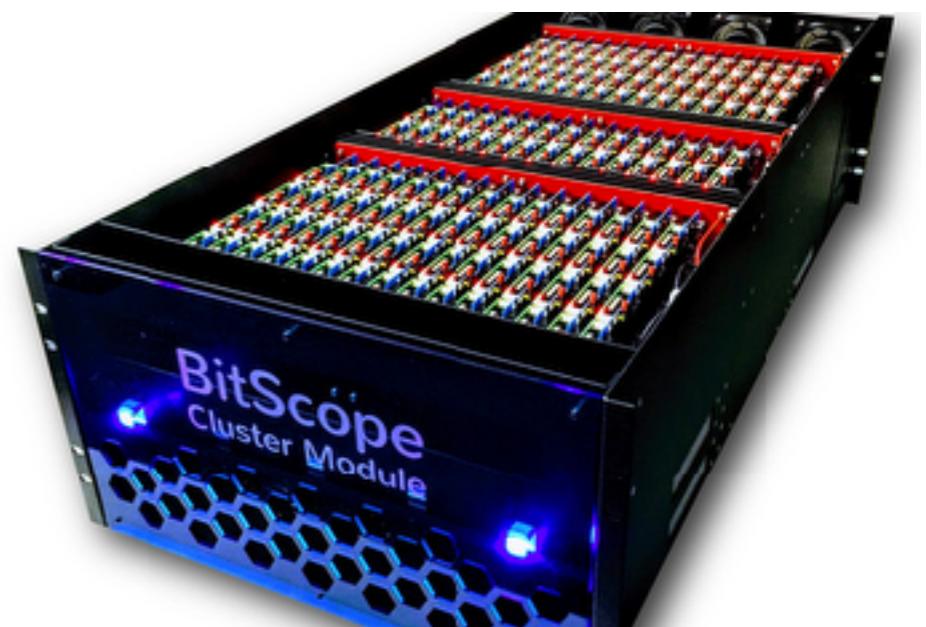


スパコンのつくり方

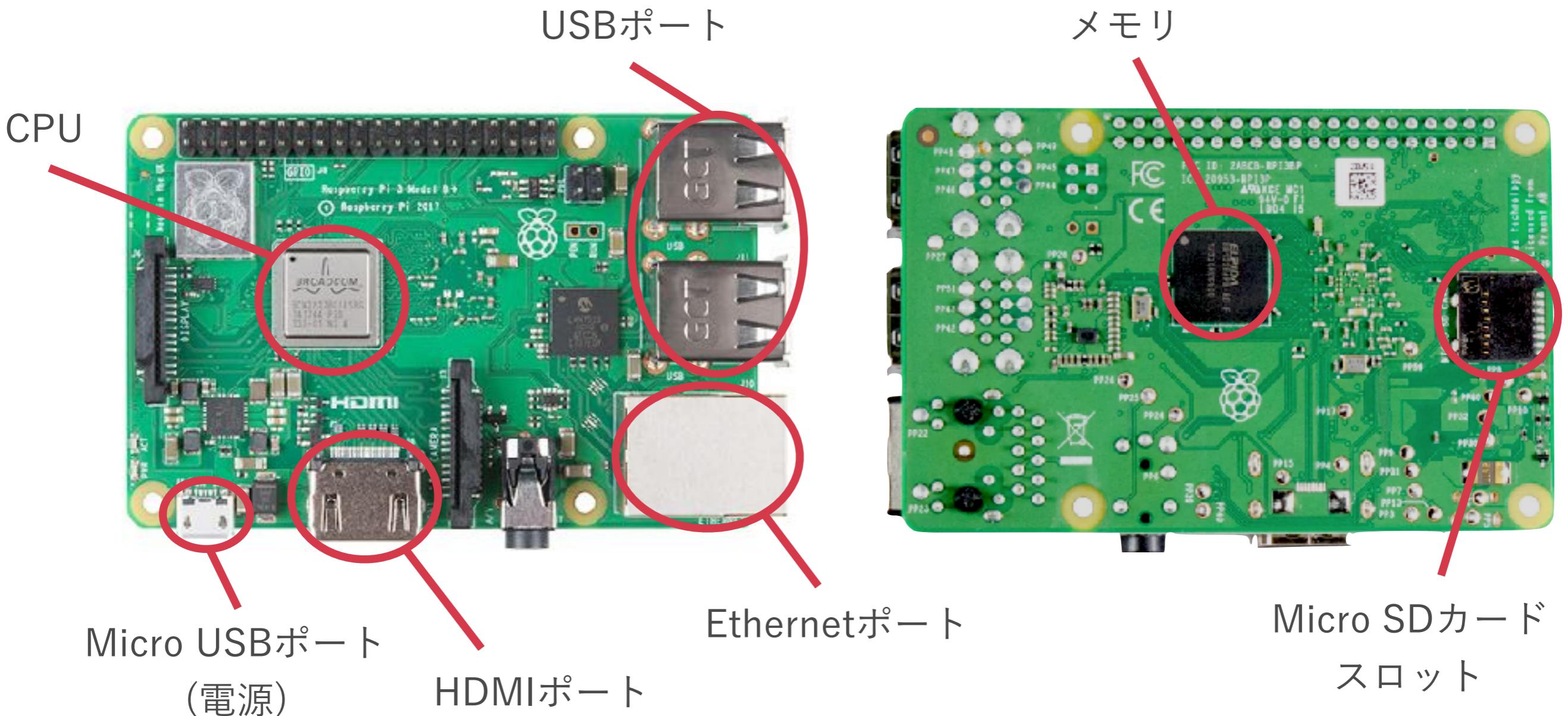
自作するミニ・スーパコンピュータ

小型PCをネットワークを介して相互接続し、クラスタを構築

- ▶ 安価な小型PCであるRaspberry Pi 3B+を4台使用
- ▶ スパコンで用いられる必要最小限のソフトウェア (SSH, NFS, MPI) をインストール・設定し、Raspberry Pi同士を連携動作させる
- ▶ 性能は本物のスーパ・コンピュータに比較すると低いものの、
使用するソフトウェアや動作原理は同一

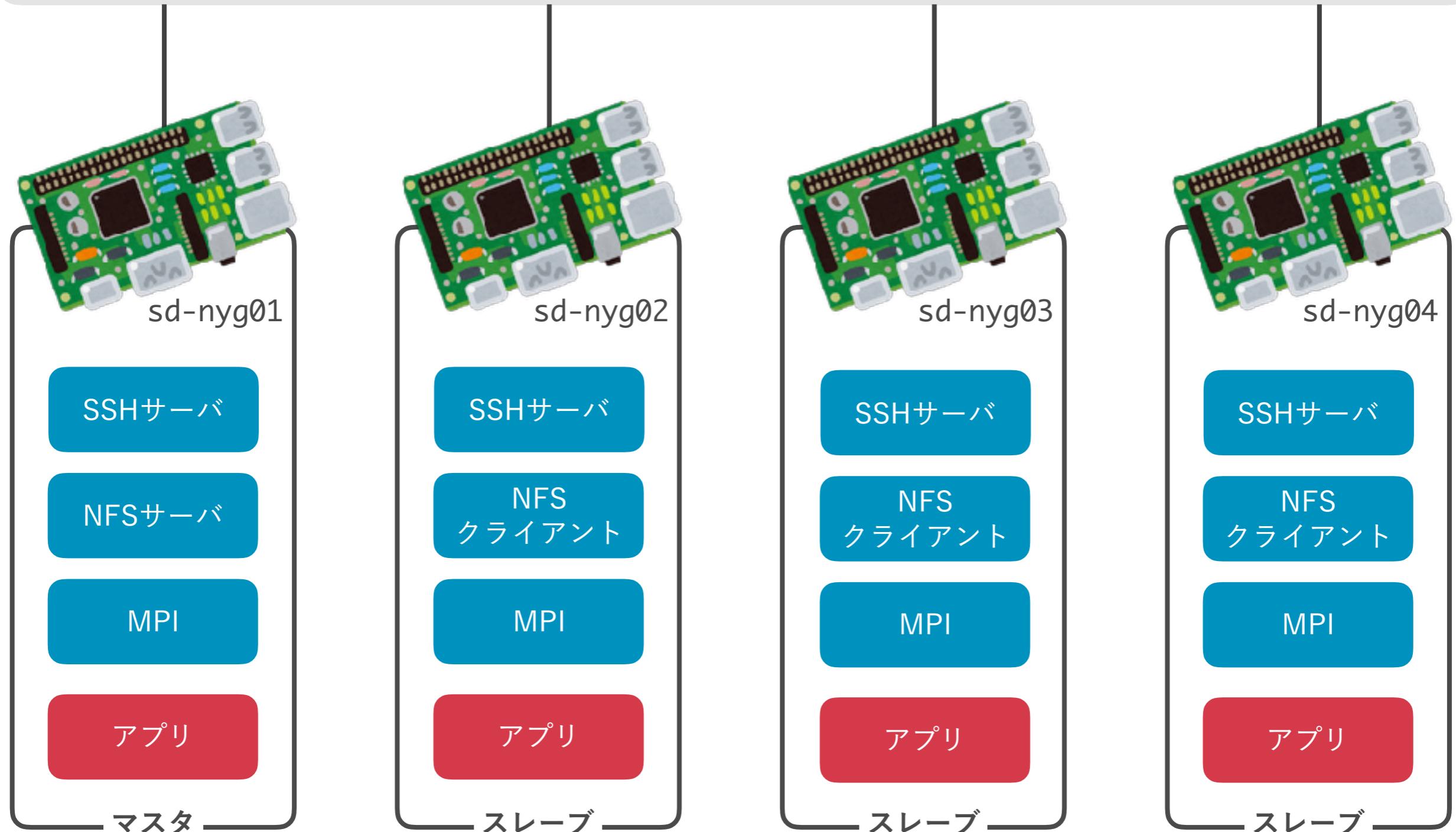


Raspberry Piのハードウェア



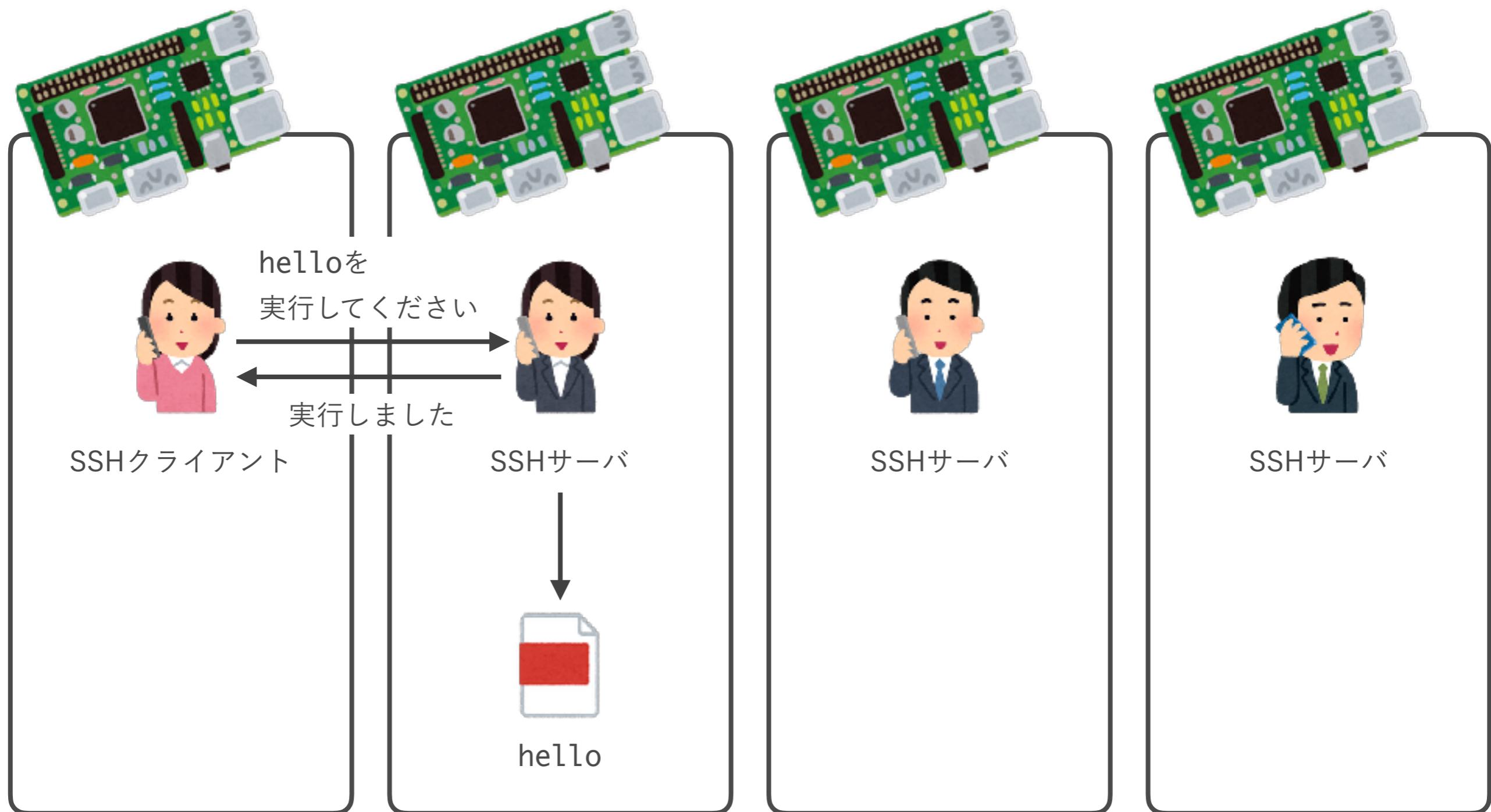
全体構成

ネットワーク



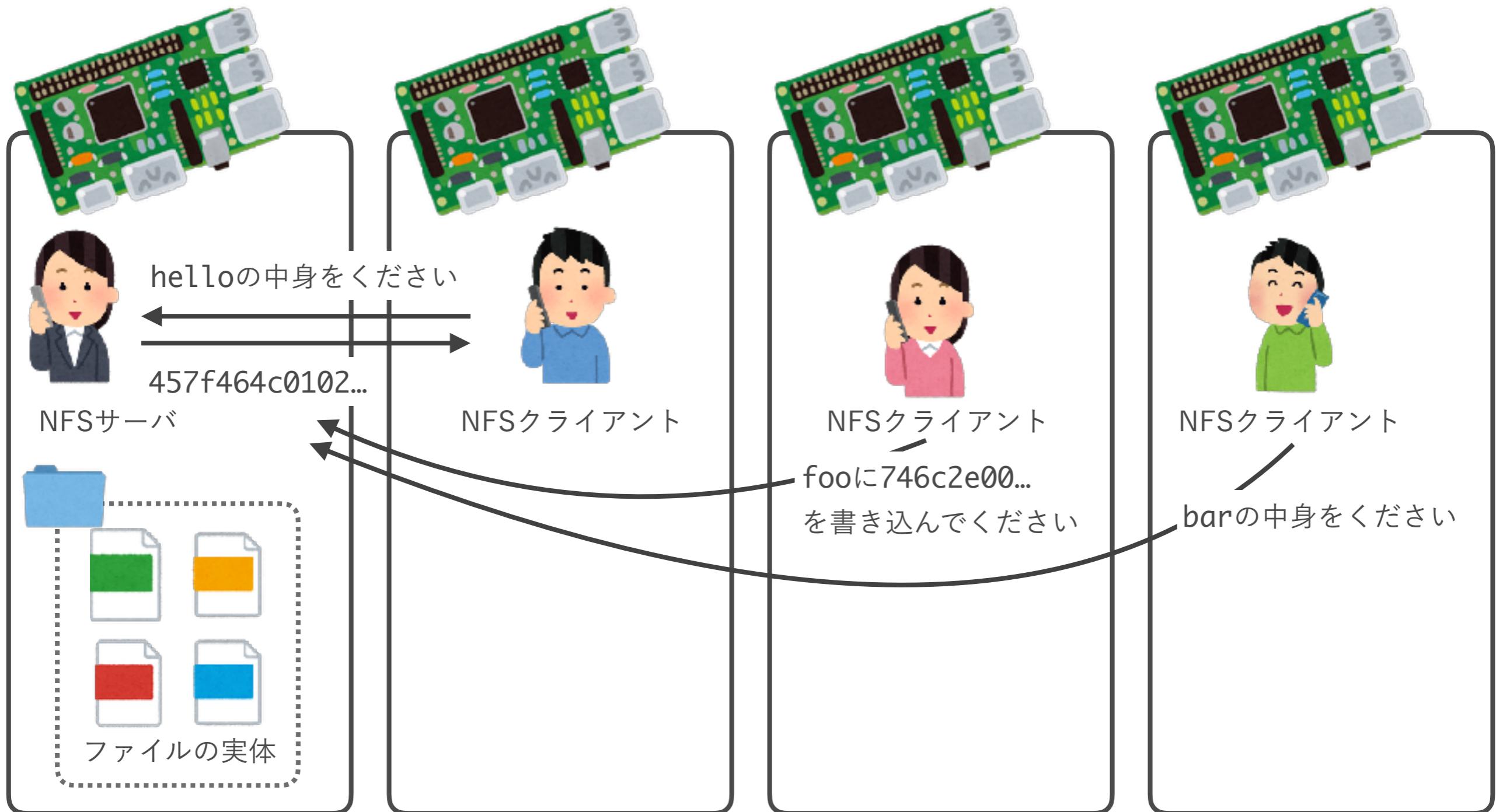
Secure Shell (SSH)

SSH: マスタからスレーブを制御するために使用



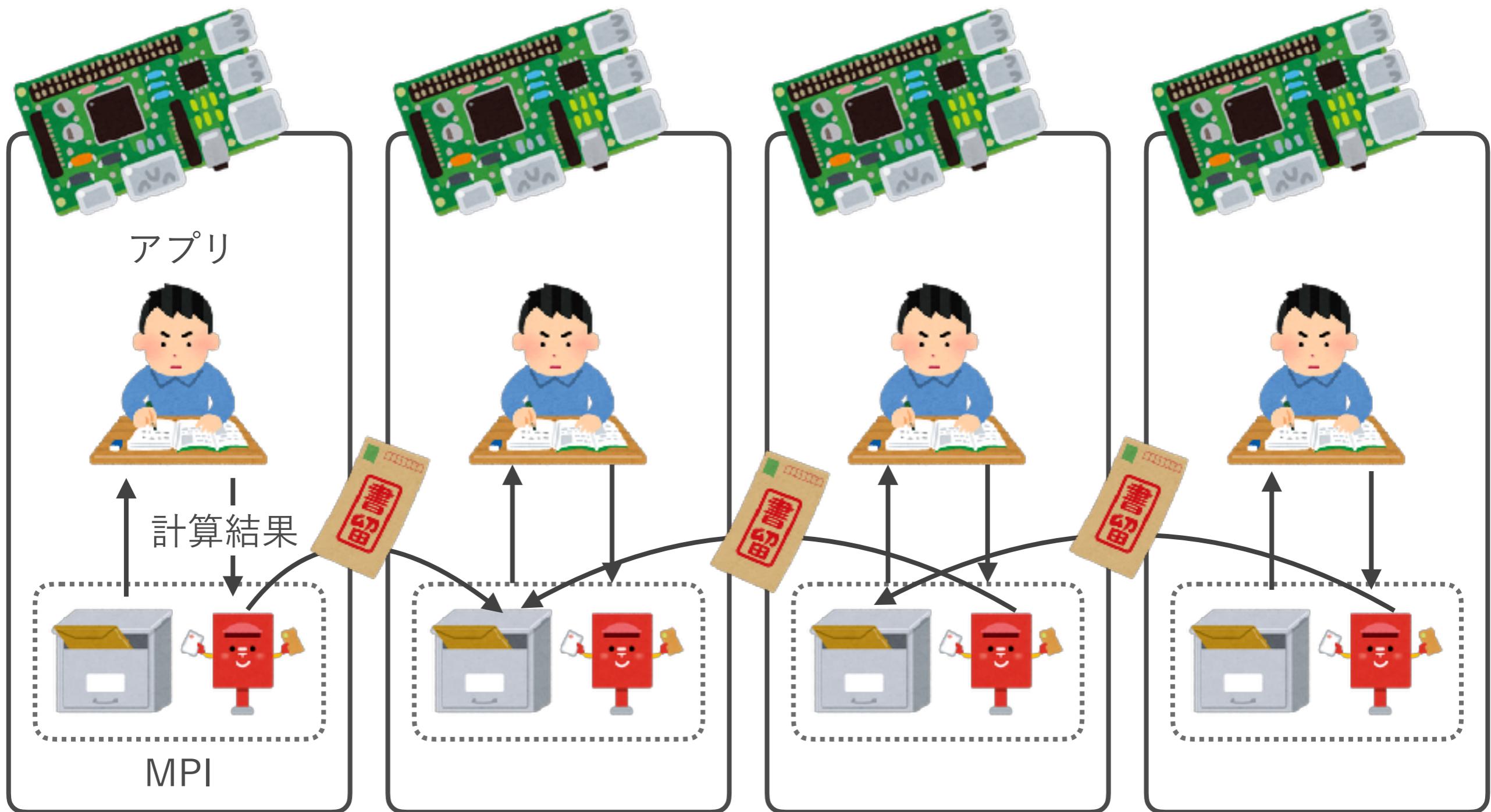
Network File System (NFS)

NFS: マスタとスレーブの間でファイルを共有するために使用



Message Passing Interface (MPI)

MPI: ノード間で通信による協調動作を実現し、並列処理を実現



まとめ

スパコンとは

- CPU1コアあたり性能は2000年代以降頭打ちになっている
- スパコンは並列処理によって多数のCPUの計算能力を束ね, 大きな計算性能を実現している

自作ミニ・スパコン

- 小型PC (Raspberry Pi)を相互接続し, 実際のスパコンと同一のソフトウェアで連携動作させる
- 今回はSSH, NFS, MPIの3つのソフトウェアを使用する

事務連絡

実習時間・集合場所など

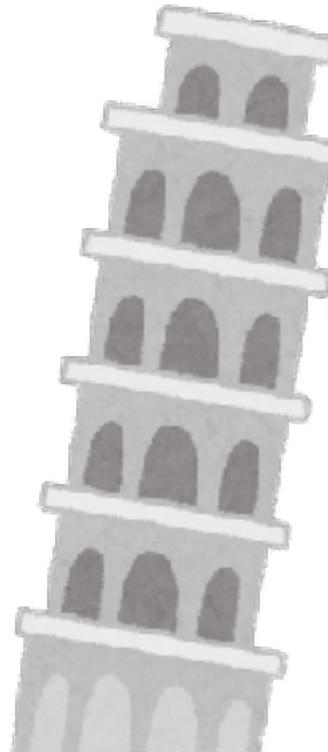
- ▶ 各日、9:30から17:00までを実習時間とします
- ▶ 明日以降は、この部屋（A307）に直接来てください
- ▶ この部屋は研究室のミーティング等でも使いますが、
基本的にミーティング中も実習を続けていて構いません
- ▶ 実習中の飲食は可です

連絡先など

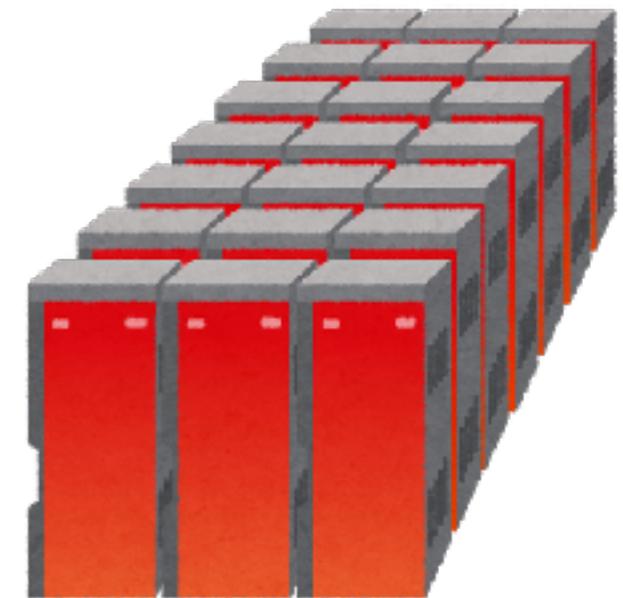
- ▶ ラボステイ終了後の質問等はこちらへ: keichi@is.naist.jp
- ▶ 教科書はこちらのURLから: <http://ssh-textbook.keichi.net/>

シミュレーションとは

数値解析（シミュレーション）



$$y = \frac{1}{2}gt^2$$



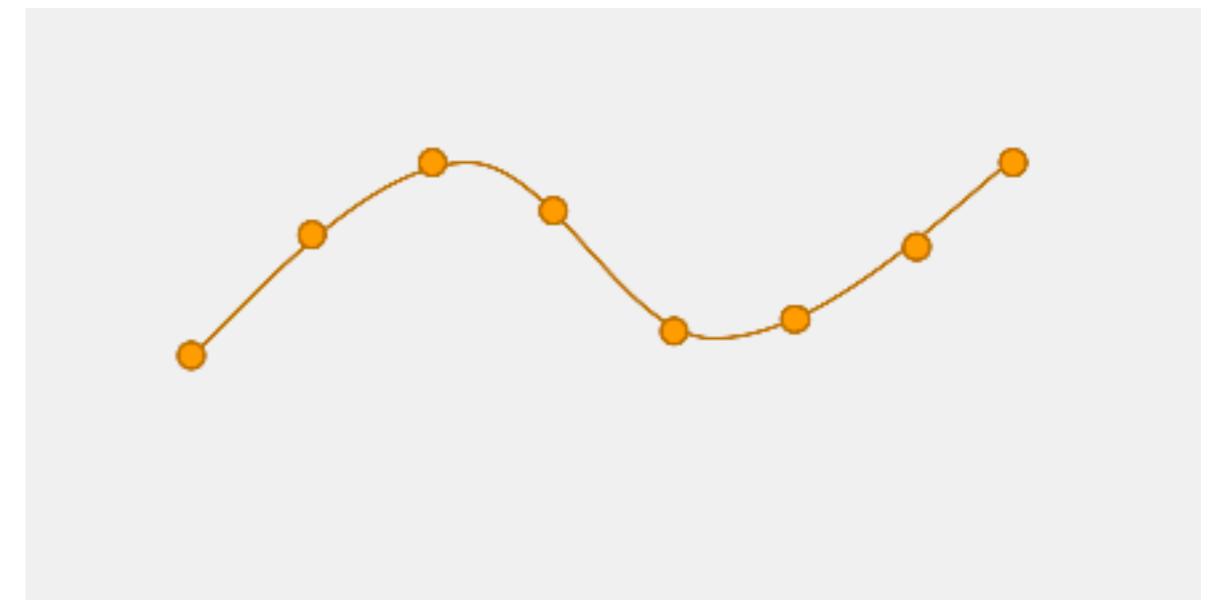
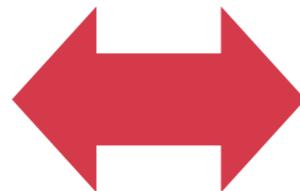
実験による
物理現象の解析

物理現象を記述した
モデル

コンピュータを用いた
モデルの計算

運動方程式, マクスウェル方程式,
ナビエ・ストークス方程式,
シュレディンガー方程式, …

離散化

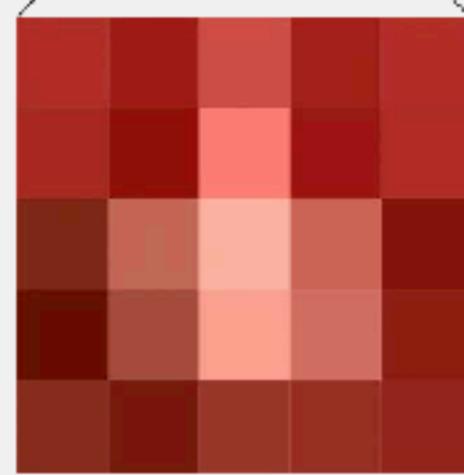


物理現象は連続的
(微分方程式で記述される)

コンピュータは
離散的値しか扱えない

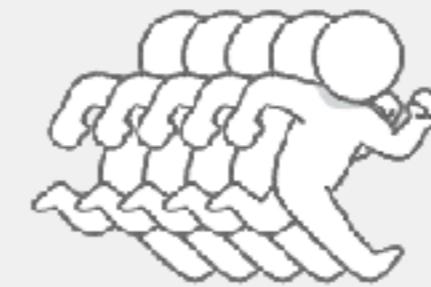
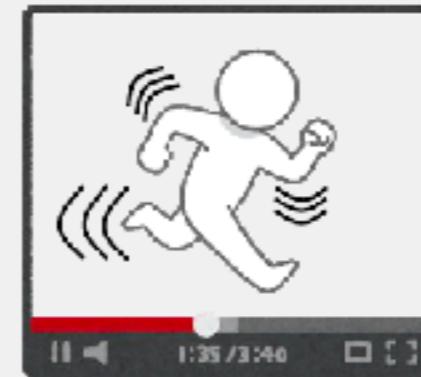
空間と時間の離散化

空間の離散化



拡大するとピクセルに

時間の離散化



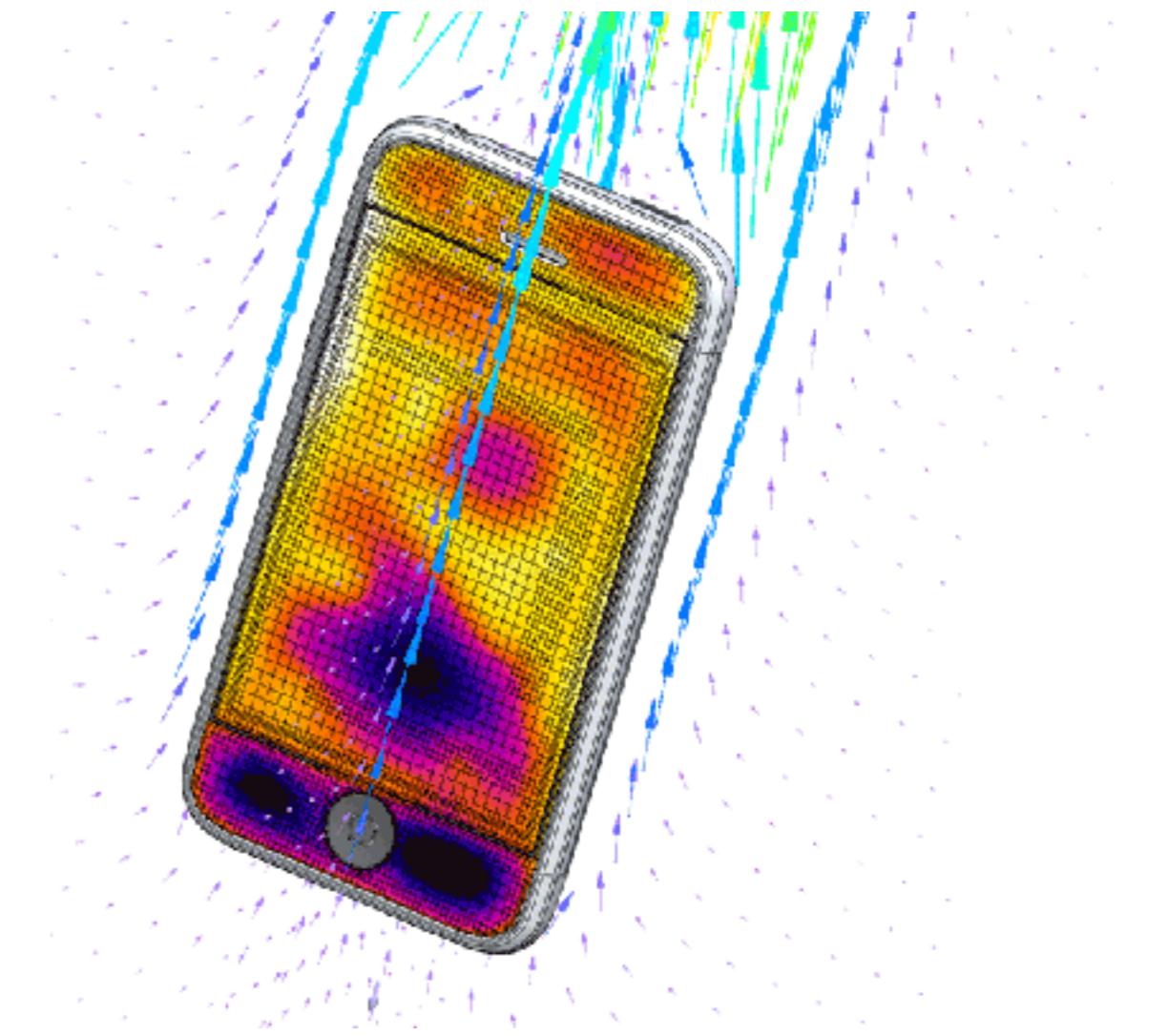
静止画像を高速コマ送り

熱伝導方程式

物質中の熱の伝わり方を記述する
偏微分方程式

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

例: スマートフォンなどの電子機器,
内燃機関, タービンの開発



有限差分法

有限差分法: 微分を有限の差分によって近似する

$$f'(x) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x}$$

実際には、テイラー展開を用いて差分近似を求める

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2!} f''(x_0)(x - x_0)^2 + \frac{1}{3!} f'''(x_0)(x - x_0)^3 + \dots$$

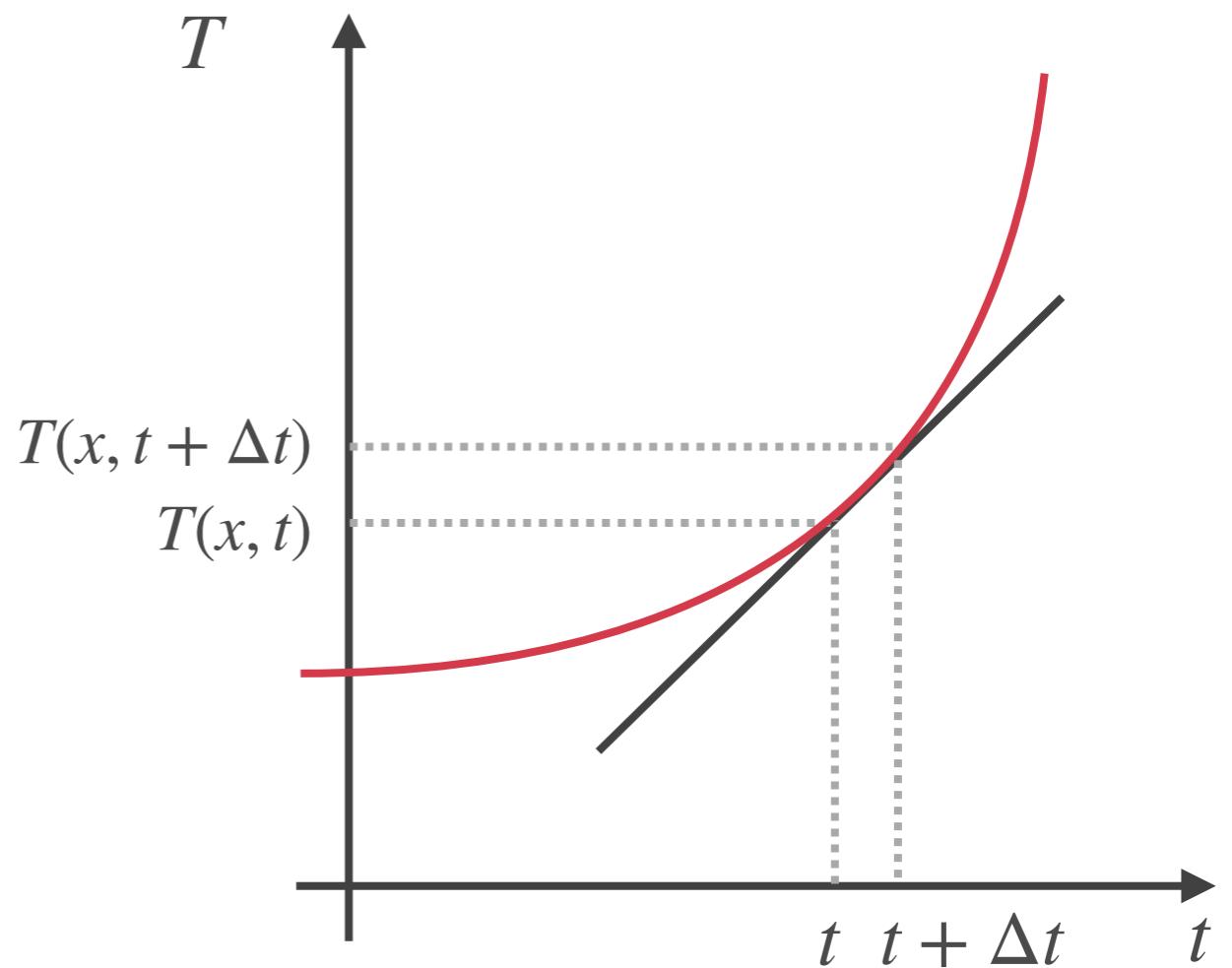
$$f(x_0 + \Delta x) = f(x_0) + f'(x_0)\Delta x + \frac{1}{2!} f''(x_0)\Delta x^2 + \frac{1}{3!} f'''(x_0)\Delta x^3 + \dots$$

時間の離散化

$$T(x, t + \Delta t) = T(x, t) + \frac{\partial T}{\partial t}(x, t)\Delta t + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 T}{\partial t^2}(x, t)\Delta t^2 + \dots$$

両辺を整理すると、

$$\frac{\partial T}{\partial t}(x, t) \approx \frac{T(x, t + \Delta t) - T(x, t)}{\Delta t}$$



空間の離散化

$$T(x + \Delta x, t) = T(x, t) + \frac{\partial T}{\partial x}(x, t)\Delta x + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(x, t)\Delta x^2 + \dots$$

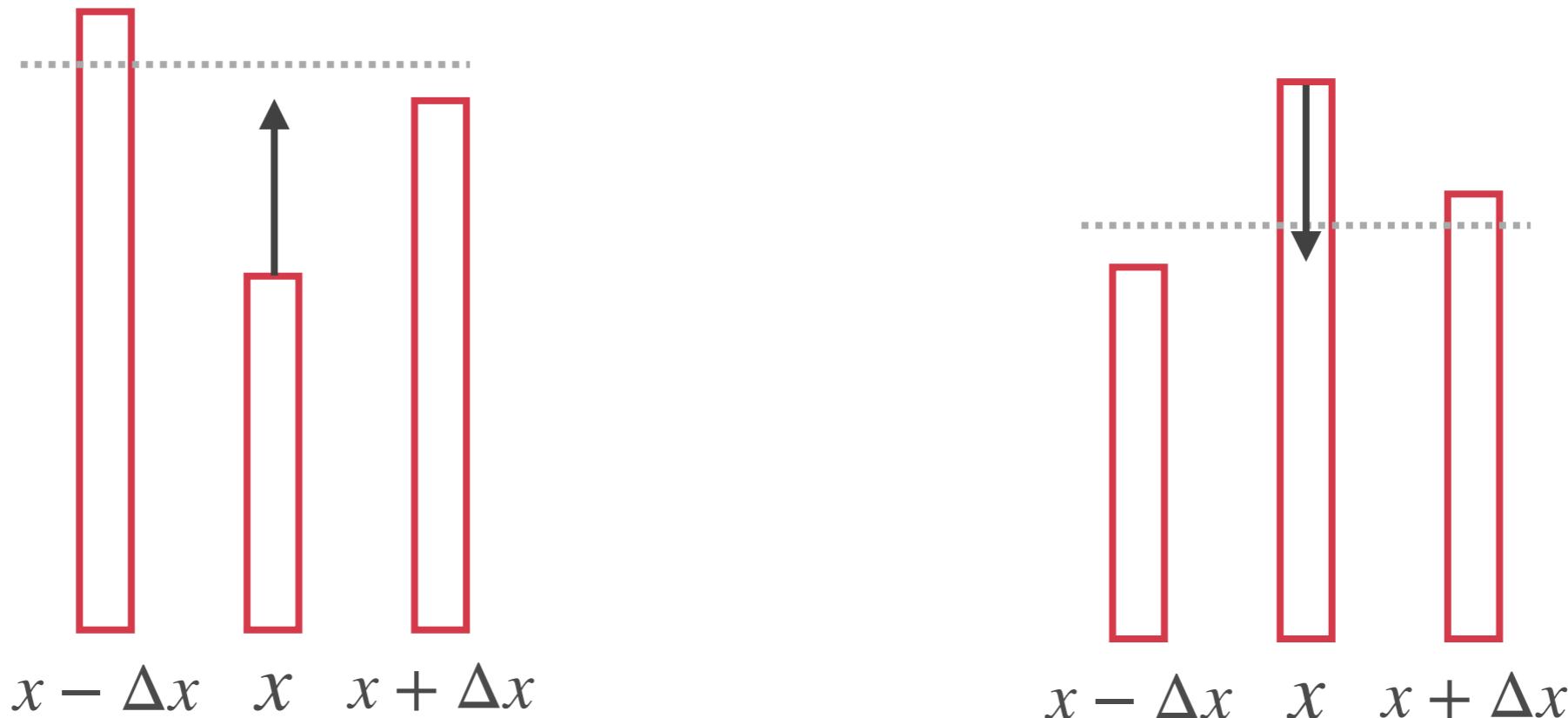
$$T(x - \Delta x, t) = T(x, t) - \frac{\partial T}{\partial x}(x, t)\Delta x + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(x, t)\Delta x^2 + \dots$$

これら2式を足し合わせて整理すると,

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(x, t) \approx \frac{T(x + \Delta x, t) + T(x - \Delta x, t) - 2T(x, t)}{\Delta x^2}$$

離散化した熱伝導方程式

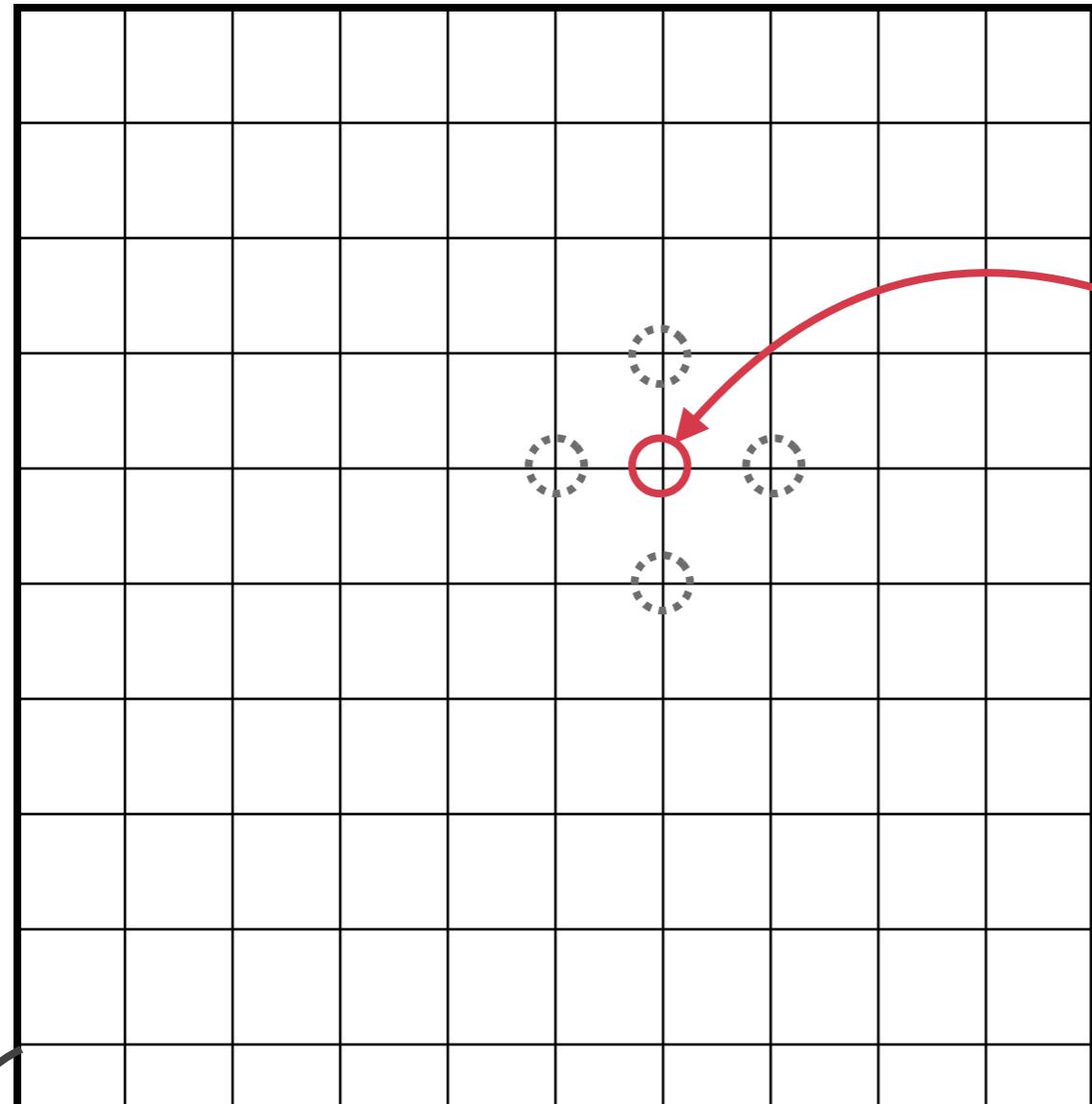
$$T(x, t + \Delta t) \approx T(x, t) + \frac{2\alpha\Delta t}{\Delta x^2} \cdot \left(\frac{T(x + \Delta x, t) + T(x - \Delta x, t)}{2} - T(x, t) \right)$$



周りの平均温度が自分より高い
→自分の温度上昇

周りの平均温度が自分より低い
→自分の温度低下

シミュレーションの手順



Δx

Δx

$$T(x, y, t)$$



Δt 秒後の温度

$$T(x, y, t + \Delta t)$$

これをシミュレーションする
空間内の全ての点について繰り返す