第 217 回お試しアカウント付き並列プログラミング演習「異種システム間連成アプリケーション開発を学ぶ:WaitIO/MP 講習会　-シミュレーションと機械学習融合編-」開催報告

住元真司，荒川 隆
東京大学情報基盤センター

1. 講習会概要

本稿は、 2023 年 10 月 19 日（木）13：00 － 17：30 にオンライン会議システム Zoom を用いて開催された行われた第 191 回お試しアカウント付き並列プログラミング演習「異種システム間連成アプリケーション開発を学ぶ:WaitIO/MP 講習会-シミュレーションと機械学習融合編-」の開催報告である。

本講習会では，今後のアプリケーション開発で重要になる異種システム間の連成アプリケーション開発について、Wisteria/BDEC-01 システムに新しく導入されたソフトウェアである h3-OpenSYS/WaitIO(WaitIO)と h3-Open-UTIL/MP(MP)を利用した異種システム間連成アプリケーション開発について学ぶことを目的に開催された。今回は特に特にシミュレーションと機械学習融合の手法を目標として、連成計算の基本から WaitIO と MP を用いることにより Odyssey と Aquarius を用いてどのように異種システム間連成アプリケーションを開発することができるのかを中心に、WaitIO についてはファイルを用いた弱連成アプリケーション記述を MPI ライクな通信 API を用いて書き換える方法、MP についてはシミュレーションと機械学習融合、特に Fortran/C で書かれた物理モデルと Python で書かれた機械学習ライブラリの連成を通じて、シミュレーションモデル同士の連成にとどまらない Wisteria/BDEC-01 の特性を生かしたプログラム連携について講習を行った。講習会の詳細（教材と講習会録画）については以下を参照されたい。
https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/217/

講習会のプログラムは以下であり、2 回目の開催であるが、実習に時間がかかる場合があるので比較的時間に余裕を持たせたものとした。

13:00 - 13:10	受講イントロダクション
13:10 - 13:50	Wisteria/BDEC-01 の概要
13:50 - 14:00	システム利用制度案内
14:00 - 14:10	h3-Open-BDEC ソフトウェア概要
14:20 - 15:40	h3-Open-SYS/WaitIO,h3-Open-UTIL/MP の概要とプログラミング
15:50 - 17:30	h3-Open-SYS/WaitIO と h3-Open-UTIL/MP を使ってみよう

参加者は 4 名であり、アンケートでは内容的に高度であるとの意見を頂いた。連成アプリケー

ション自体が広く知られていないため、連成アプリケーション自体の認知を広めていく必要があると考えている。講習についても、様々な応用を含め、身近な例を含めた簡単な事例を組み込むなどの工夫が必要であると考えている。

2. h3-Open-SYS/WaitIO

今回は、連成アプリケーション実行の h3-Open-UTIL/MP 主体として h3-Open-SYS/WaitIO については、簡易なファイルを用いた連成アプリケーションを WaitIO 利用のアプリケーションに書き換えるものを選択した。講習の中で説明の部については時間通り終えることができたが、実際の異種実行の実習においては、実行が待たされるケースがあった。今後の改善が必要である。

今後も WaitIO が広く認知されることを念頭に講習会プログラムを改善してきたい。

3. h3-Open-UTIL/MP

h3-Open-UTIL/MP に関しては、連成ライブラリおよびこのライブラリを用いた機械学習アプリケーションの連成計算について講習を行った。はじめに理論編として連成計算の概要と h3-Open-UTIL/MP の連成方法、具体的な利用手順について説明し、次いで実践編として事前に準備したサンプルプログラムを受講者にコンパイル・実行していただいた。サンプルプログラムはシミュレーションモデルを模した Fortran プログラムと Python(PyTorch)を用いた AI アプリケーションで、Odyssey で実行している Fortran プログラムの結果を逐次 Aquarius 側の Python アプリケーションに送信し学習計算するというものである。なお、当初は Python 環境の構築も実習内容に含める予定だったが、構築に必要なインタラクティブジョブをゲストアカウントでは利用できなかったためこのプロセスは割愛せざるを得なかった。ただし実習に要した時間を考えると環境構築をスキップしたことはむしろ適切だったと言える。今回は連成計算と AI という異なる 2 つの要素を同時に実習したが、その分内容が散漫になった感は否めない。今後は焦点を絞り受講者の必要性に即したより具体的で高度な内容の講習についても検討してゆきたい。

異機種間連成はアーキテクチャの異なる複数のノード群で構成される Wisteria-BDEC01 のハードウェア構成に基づいたきわめて先進的な機能であるが、今のところその機能が広く認知されているとは言いがたい。一方、今回講習した機械学習との連成あるいはビッグデータの活用など異機種間連成の潜在的なニーズは増加してゆくであろう。今後も講習会等を通じて h3-Open-UTIL/MP の周知・普及に務めたい。

参考文献

[1] Arakawa T., Yashiro H., Nakajima K., Development of a coupler h3-Open-UTIL/MP, ACM Proceedings of the International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (HPC Asia 2022), 2022

[2] Sumimoto S. et al., A System-Wide Communication to Couple Multiple MPI Programs for Heterogeneous Computing, Proceedings of the 23rd International Conference on Parallel and Distributed Computing, Applications and Technologies (PDCAT '22), 2022 (Best Paper Award)