

# 講義紹介：並列計算プログラミング，先端計算機演習（地球惑星科学専攻）

中島研吾

東京大学情報基盤センター

## 1. はじめに

本稿では、2009年度夏季集中講義として実施した、「並列計算プログラミング」，「先端計算機演習」について紹介する。

本講義・演習は、21世紀COEプログラム「多圏地球システムの進化と変動の予測可能性（観測地球科学と計算地球科学の融合拠点の形成）」（2003年度～2007年度）において2004年度より開講されたもので〔1〕，2008年度からは「理学系研究科大学院教育高度化プログラム」に認定され、夏季集中講義として開講された。

また、本講義・演習は情報基盤センターが関連部局との協力のもと2009年度から始動している「学際計算科学・工学人材育成プログラム<sup>1</sup>」の一環として実施されたものである。

表1に講義日程と内容を示す。2008年度<sup>2</sup>は「集中講義」と言いつつ、7月、8月、9月と分散して講義を実施したため、「予定を合わせにくかった」という声も多かった。そこで、2009年度は表1に示すように、期間を2週間に圧縮して1限～4限に実施した。この他、8月20日（木）・21日（金）、28日（金）に自由参加の「演習」を実施し、予習・復習、課題の質問などを受けられるような時間を設けた。担当教員が必ず演習室に待機し、質問への対応を実施した。

詳細については本講義のホームページ<sup>3</sup>を参照されたい。講義資料等を入手することができる。

---

<sup>1</sup> <http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/CSEedu/>

<sup>2</sup> <http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/08s/>

<sup>3</sup> <http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/09e/>

表 1：講義日程，内容

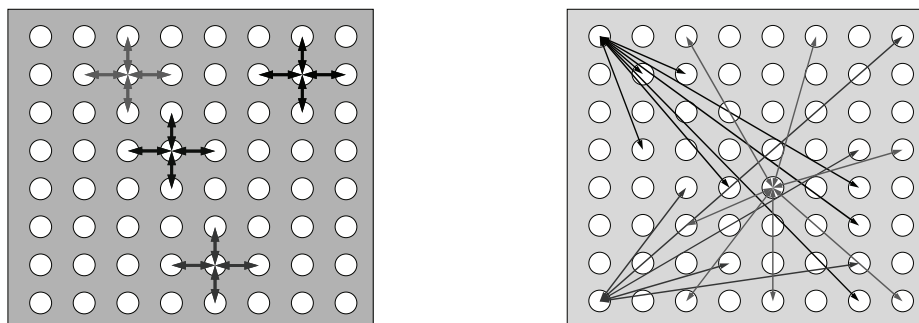
日付	時間	番号	内容
8月17日(月)	0830-1000	CE01	イントロダクション
	1015-1145	CE02	一次元熱伝導解析(1/2)
	1315-1445	CE03	一次元熱伝導解析(2/2)
	1500-1630	CE04	MPIによるプログラミング概要(I)(1/2)
8月18日(火)	0830-1000	CE05	MPIによるプログラミング概要(I)(2/2)
	1015-1145	CE06	MPIによるプログラミング概要(II)(1/3)
	1315-1445	CE07	MPIによるプログラミング概要(II)(2/3)
	1500-1630	CE08	MPIによるプログラミング概要(II)(3/3)
8月19日(水)	0830-1000	CE09	課題S1解説
	1015-1145	CE10	並列アプリケーション開発法(I)有限体積法(1/2)
	1315-1445	CE11	並列アプリケーション開発法(I)有限体積法(2/2)
	1500-1630	CE12	可視化手法について
8月25日(火)	0830-1000	CE13	課題S2解説
	1015-1145	CE14	線形ソルバーについて
	1315-1445	CE15	T2K オープンスパコン(東大)の概要
	1500-1630	CE16	チューニング入門(1/2)
8月26日(水)	0830-1000	CE17	チューニング入門(2/2)
	1015-1145	CE18	並列アプリケーション開発法(II)有限体積法:局所分散データ構造,領域分割(1/3)
	1315-1445	CE19	並列アプリケーション開発法(II)有限体積法:局所分散データ構造,領域分割(2/3)
	1500-1630	CE20	並列アプリケーション開発法(II)有限体積法:局所分散データ構造,領域分割(3/3)
8月27日(木)	0830-1000	CE21	並列アプリケーション開発法(III)有限体積法:並列化(1/2)
	1015-1145	CE22	並列アプリケーション開発法(III)有限体積法:並列化(2/2)
	1315-1445	CE23	並列アプリケーション開発法(IV)粒子間熱伝導(1/2)
	1500-1630	CE24	並列アプリケーション開発法(IV)粒子間熱伝導(2/2)

## 2. 講義内容

本講義・演習は，科学技術計算プログラミングに必須の項目である「SMASH (Science-Modeling-Algorithm-Software-Hardware)」を，できるだけ幅広くカバーし，広い視野を持った人材を育成することを最終的な目標としている。特に，MPI (Message Passing Interface) を使って，差分法，有限要素法，境界要素法等によるアプリケーションを並列化する能力を身につける，ことを重視している。

MPI には 400 以上の関数があるが，実際，科学技術シミュレーションで必要になるのは 10

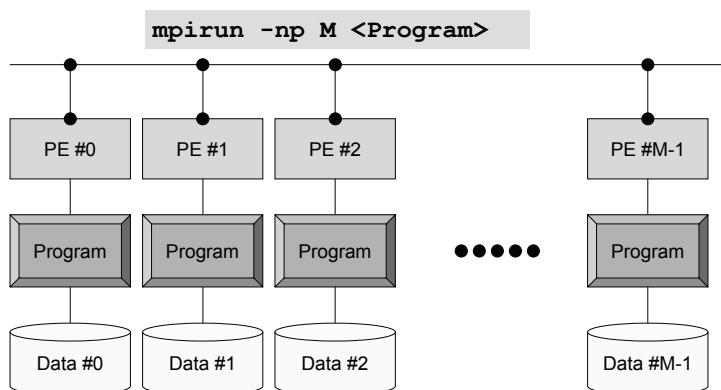
程度である。本講義では、まず、科学技術シミュレーションの手法を図1に示す2種類（局所的手法、大域的手法）に分類した。これらの手法は連立一次方程式の解法、並列化の手法が図1に示すように大きく異なっている。局所的手法は空間的に近接した領域とのみ相互作用があるため、並列計算時の通信も1対1通信（point-to-point communication）が中心である。大域的手法はグローバルな相互作用があるため、グループ通信（collective communication）を多用する。



- 局所的手法（差分法，有限要素法等）
  - 疎行列，1対1通信
- 大域的手法（境界要素法，スペクトル法等）
  - 密行列，グループ通信（collective）

図1 科学技術シミュレーション手法の分類

講義では、それぞれを「並列化」するために必要な最小限のMPI関数（1対1通信，グループ通信）について教え、できるだけ実習によって経験を積んでもらうことにした。MPIの基本的な考え方であるSPMD（Single-Program Multiple-Data）（図2）を実際のアプリケーションの並列化を通して学ぶことに主眼を置いた。SPMDの考え方は計算機科学専攻の学生でも中々理解するのが難しく，教育にあたって苦勞するところなのだそうであるが，アプリケーションという具体的な対象があると逆に理解が進むようである。



各プロセスは「同じことをやる」が「データが違う」  
大規模なデータを分割し，各部分について各プロセス（プロセッサ）が計算する

図2 SPMD（Single-Program Multiple-Data）の考え方

講義の中では、アプリケーションの中身をよく理解し、並列化するための局所データ構造をどのように考えるか，というような話題が中心であった。表1によると，MPIに関する講義は5コマ実施されているが，ほとんどの時間は局所データ構造の考え方の説明に費やした。アプリケーションの中身，アルゴリズムの特性，をよく理解していれば，「並列化」というのはそれほど難しいことでは無い，ということを伝えることには成功したと考えている。実際，講義の中では「並列計算」に直接結びつくものは少なく，むしろ基礎的なモデリングやアルゴリズム

に関する基本的な項目について、学習することを重視している。ごく基本的なプログラミングと数値解析に関する知識があれば、これまで、自分でアプリケーションプログラムを開発した経験が無くても充分受講できる内容である。

いわゆる「並列化」に関係した講義のほか、「線形ソルバー」、「可視化手法」、「チューニング」等についても講義，実習を行った。

「チューニング」については、キャッシュブロッキング，ループアンローリング等スカラープロセッサ向けのテクニックの他、「地球シミュレータ」を念頭において、ベクトルプロセッサ向けのチューニングについても講義した。結果的に講義・演習全体で「SMASH」の「MASH」はほぼカバーするような内容になっている。並列化のためのターゲットアプリケーションとしては、図3に示すような有限体積法（局所的手法），粒子間熱伝導（大域的手法）を扱った。

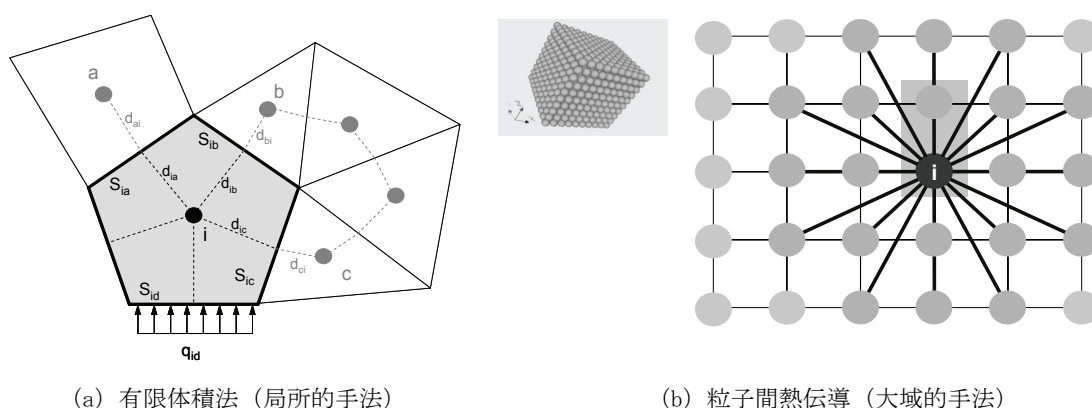


図3 並列計算プログラミング，先端計算機演習で扱ったアプリケーション

プログラミングの実習のために、21世紀COEで導入したAMD Opteronプロセッサ(1.8GHz) 32台(16ノード)から構成されるPCクラスタを使用する他、2008年6月より稼動を開始したT2K オープンスパコン(東大)を使用した。実習では、NUMA Controlの性能への影響評価等も実施した。講義は情報基盤センター(本郷)大演習室で実施し、受講者は教育用計算機システム(ECCS2008)から上記PCクラスタ、T2K オープンスパコンにログインして実習を行なった。可視化ツールとしてはECCS2008で稼動する「MicroAVS (KGT社製)」<sup>4</sup>を使用した。

WEB環境を有効に活用し、連絡事項の伝達、教材配布のほか、並列計算用ユーティリティプログラムのオンラインマニュアル等にも利用した。

地球惑星科学専攻の学生にFORTRANユーザーが多いこともあり、プログラミング言語はFORTRAN中心であったが、他専攻、他研究科(物理、天文、化学、工学系、新領域等)の受講者も居ることから、C言語で書かれたサンプルコード、模範解答も用意する等配慮した。

評価は、以下のような課題実習レポートによって実施した：

- 課題 S1 : MPIの基本的な機能(台形法則等, グループ通信)
- 課題 S2 : CG (Conjugate Gradient) 法による一次元熱伝導方程式ソルバーの並列化(1対1通信)
- 課題 S3 : T2KにおけるNUMA Controlに関する実習
- 課題 P1 : 有限体積法による三次元熱伝導方程式ソルバーの並列化

<sup>4</sup> <http://www.kgt.co.jp/feature/microavs/>

## 5. まとめ

登録者は50名（うち地球惑星科学専攻が28名，天文学専攻3名，物理学専攻10名，その他9名）であったが，実際に出席していたのは25名程度であった。物理学専攻からの受講者が特に増加している（2008年度は2名）。

2009年度は逆にスケジュールがハード過ぎて，受講者からは「毎日疲れ果てて，復習する時間もなく，ついて行くのが大変だった。」という声に代表されるように必ずしも評判がよくなかった。自分自身も4コマの講義を3日間連続して実施するのは非常に大変であった。2010年度は1日のコマ数を3つにして，内容をよりコンパクトにして，8月16日～27日のうち8日程度で実施の予定である。

## 参 考 文 献

- [1] 中島研吾（2008）究極の「並列プログラミング教育」を目指して：地球惑星科学専攻での4年間と「学際計算科学・工学 人材育成プログラム」，スーパーコンピューティングニュース（東京大学情報基盤センター）10-3  
<http://www.cc.u-tokyo.ac.jp/publication/news/VOL10/No3/200805nakajima.pdf>