

## CMSI 若手技術交流会 [第四回]

### 「高並列化計算のための HPC アーキテクチャの基礎」

片桐 孝洋

東京大学情報基盤センター

2012年2月1日(水)、東北大学金属材料研究所講堂にて、CMSI 若手技術交流会 [第四回]「高並列化計算のための HPC アーキテクチャの基礎」(主催: 計算物質科学イニシアティブ (CMSI: Computational Materials Science Initiative)) が開催された<sup>1</sup>。

CMSI 若手技術交流会は、計算科学、物質科学の分野で活躍されている研究者を中心に運営されており、(1) 並列計算技術の積極的な活用とさらなる発展、(2) 各分野で発展してきた強力な計算技術・理論的手法を分野を超えて共有すること、(3) これらを通じた異分野間の相互発展、を目指して活動している。特に、京速コンピュータ「京」のように、8万以上の CPU (ノード) から構成される超並列計算機を有効活用するためには、高い並列化効率と実行効率が要求される。計算機科学と物質科学の力を合わせることで、科学計算の可能性を広げ、新たな研究土台を生み出す技術交流を指向している。

以上の背景を鑑み、高並列計算を推進していくために、プロセッサやアーキテクチャを理解することが必要になっている。そこで今回は、2人の専門家に講師に招き、基礎から最近の動向を講義することを目的に、本セミナーは企画された。当センターからは、片桐が数値計算ライブラリの利用、および複数 CPU 最適化の講師として参加した。

参加者の内訳は以下のとおりである。大学院生 7 名 (修士 2 名、博士 5 名)、教員 13 名 (教授 2 名、准教授 4 名、講師 2 名、助教 5 名)、研究員: 20 名、その他: 6 名、の合計: 46 名であった。

本セミナーの内容を以下に載せる。以下の内容からわかるように、片桐の担当内容は、これまで当センターで実施してきた「お試しアカウント付き講習会」の内容に基づいている。実習には、T2K オープンスパコンを利用した。

- 《第一部》

9:30-11:45 コンピュータアーキテクチャーの基礎: 単一 CPU

近藤 正章 (電通大)

- 《第二部》

現代の高速科学技術計算の基礎: 複数 CPU

片桐 孝洋 (東大)

➤ 13:00 - 14:15 ノートパソコンの設定、T2K スパコンの利用、MPI サンプルプロ

---

<sup>1</sup> [http://www.cms-initiative.jp/ja/events/cmsi\\_host/120201\\_wakate](http://www.cms-initiative.jp/ja/events/cmsi_host/120201_wakate)

#### グラム実行 (演習)

- ・ コンパイルの仕方
- ・ バッチジョブシステムの使い方
- ・ ピュア MPI 実行
- ・ ハイブリッド MPI 実行
- 14:15 - 15:15 並列処理の基礎 (座学)
  - ・ 並列計算機の種類、並列プログラミングモデル
  - ・ 性能評価指標：台数効果とは
  - ・ アムダールの法則とは
  - ・ データ分散方式：1次元分散、2次元分散、ブロック分散、サイクリック分散
  - ・ 数値計算における実例：行列-ベクトル積、行列-行列積の並列化
- 15:30 - 16:30 性能チューニングの基礎 (座学)
  - ・ ループ内連続アクセス
  - ・ ループアンローリング
  - ・ キャッシュライン衝突
  - ・ ブロック化
  - ・ 通信最適化の方法
- 16:45 - 18:00 数値計算ライブラリ実習 (演習)
  - ・ BLAS とは
  - ・ LAPACK とは
  - ・ ScaLAPACK とは
  - ・ GOTO BLAS とは
- (いずれか1つを選択して実習)
  - ・ BLAS の利用法と実習(行列 - 行列積 : DGEMM 関数)
  - ・ LAPACK の利用法と実習
  - ・ ScaLAPACK の利用法とテストプログラム実行

以上