

臺大數學科學中心 科學計算冬季學校 (Short Course for Scientific Computing (SC4SC 2015))

邁向 Petascale 高速運算

Introduction to Parallel Programming for Multicore/Manycore Clusters

中島研吾

東京大学情報基盤センター

1. 背景

本稿は、2015年2月9日(月)～12日(木)に國立臺灣大學(National Taiwan University, NTU)¹で開催された「臺大數學科學中心 科學計算冬季學校(Short Course for Scientific Computing (SC4SC 2015))」邁向 Petascale 高速運算，Introduction to Parallel Programming for Multicore/Manycore Clusters²(共催:臺大數學科學中心(Taida Institute for Mathematical Sciences, TIMS)³，東京大学情報基盤センター他)について紹介したものである。

國立臺灣大學(台灣 台北市)は1945年11月に設置された台湾を代表する高等研究・教育機関であり，1928年に設立された臺北帝國大學にその源を発している。

東京大学情報基盤センターとTIMSの上部組織である臺大理論科學研究中心(Taida Center for Advanced Study in Theoretical Sciences (CASTS))⁴は2014年2月17日にハイパフォーマンスコンピューティング(HPC)及び計算科学・工学分野における基礎的，学術的な共同研究の促進を目的とした研究交流協定覚書(Memorandum of Understanding, MOU)を取り交わしている⁵。SC4SC 2015はそのMOUに基づき，TIMSの王偉仲教授(Professor Weichung Wang)⁶の以下の2点に関する強い要望によって実現したものである：

- 台湾の大学には並列プログラミングを系統的に教える講義体系が存在しないため，是非，MPI, OpenMP等の並列プログラミング教育を受けさせたい
- 台湾の研究者，学生は最先端の大規模並列計算機に触れる機会がないため，東大情報基盤センターのOakleaf-FX(Fujitsu PRIMEHPC FX10)で実習をさせてやりたい

我が国のスペコンの外国人及び海外在住者による利用には外国為替及び外国貿易法による制限があり，例えば本学に学籍を有する留学生も入国後6ヶ月を経過していない「非居住者」の場合には法令上の規制対象となっている⁷。関係法令を踏まえ，東大情報基盤センターでは東大本部安全保障輸出管理支援室⁸との緊密な連携の下に，必要な確認を行った上で，非居住者のFX10(Oakleaf-FX, Oakbridge-FX, グループコース)の利用を認めている。

利用資格の判定基準は，ケース・バイ・ケースであるが，基本的には以下の3条件を満たすことが最低条件である：

¹ <http://www.ntu.edu.tw/>

² <https://sites.google.com/site/school4scicomp/>

³ <http://www.tims.ntu.edu.tw/>

⁴ <http://www.casts.ntu.edu.tw/>

⁵ http://www.cc.u-tokyo.ac.jp/support/press/news/VOL16/No2/11_MOU201403.pdf

⁶ <http://www.math.ntu.edu.tw/~wwang/>

⁷ <http://www.cc.u-tokyo.ac.jp/support/application/qualification/non-resident.html>

⁸ <http://www.u-tokyo.ac.jp/ja/administration/export-control/>

- 利用資格を有する居住者と共同研究協約等を結んでいる（今回の場合は、2014年2月に締結したMOUがこれに相当する）
- 平和目的の利用である
- 東大情報基盤センタースパコンシステムの利用規程を遵守し、本来の利用目的以外には使用しない旨記載した誓約書に署名し、FX10グループ代表者も確認の署名をする

場合によってマニュアルのアクセス制限を設けることがある。FX10のオンラインマニュアルへのアクセスは利用者ごとに制限を加えることができるようになっており、例えば留学生がスパコンを使用する講義を受講する場合には個別に事前に資格審査・確認が行われ、非居住者の場合にはマニュアルにアクセスできない場合もある。

東大情報基盤センターでは2014年度から上記のような条件の下での非居住者の利用を認めているが、今回のように海外で講習会を実施するのは初めての試みである。

今回は王教授の強い希望で國立臺灣大學（NTU）以外に所属する学生、研究者からも受講者を募ることになったが、NTU以外に所属している場合は上記MOUの適用外であり、FX10を利用できないため、このような受講者に対してはNTUのアカウントを準備してもらった。また、外国為替及び外国貿易法を考慮し、本学安全保障輸出管理支援室とも協議して、今回はNTU所属受講者（FX10のアカウントは付与）もFX10のマニュアルの閲覧はできないように制限を適用した。

最終的には55名の申込があり、NTU関係者はうち29名であった。55名のうち45名が学生（学部：13名、大学院（修士）：23名、大学院（博士）：9名）であった。

2. 実施内容

実施した講義内容と資料は東大側で準備したHP⁹で見ることができる。

当センターで実施しているマルチコア向けプログラミング講習会¹⁰の内容に基づいているが、これではOpenMPしか扱っていないため、これも王教授の強い要望によりOpenMP/MPIハイブリッド並列プログラミングモデルについても教えることになり、この部分については本SC4SC 2015のために新たに教材を整備した。

4日間のうち最初の3日間については：

- 1日目（2月9日（月））：導入、大規模科学技術シミュレーションの概要、ICCG法を使用した有限体積法ポアソン方程式ソルバーの概要
- 2日目（2月10日（火））：OpenMPの基礎、リオーダリング法と並列性抽出
- 3日目（2月11日（水））：OpenMPによるポアソン方程式ソルバーの並列化

に関する講義、実習を実施した。普段の講習会では2日間で実施するところを3日間かけてじっくり行った。単にプログラミング技術を教えるだけでなく、科学技術計算の習得にはSMASH（Science-Modeling-Algorithm-Software-Hardware）を幅広く学ぶことの重要性を説明した上で：

⁹ <http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/NTU2015/>

¹⁰ <http://www.cc.u-tokyo.ac.jp/support/kosyu/41/>

- 有限体積法
- クリロフ部分空間法, 共役勾配法 (Conjugate Gradient, CG) のアルゴリズム
- 前処理 (Preconditioning)
- リオーダリング (Reordering) による並列性抽出
- 変数配置法 (Coalescing/Sequential Numbering) の効果

等の様々な分野について詳細な説明を実施した。

4日目は、最初の3日間で扱ったOpenMPによって並列化されたポアソン方程式ソルバーをMPIによって分散並列化し、OpenMP/MPIハイブリッド並列プログラミングモデルについて学ぶというものである。MPIの文法よりは、むしろ並列分散データ構造などについて詳細に解説を実施した。普段の講義ではMPIを最初に教えてからOpenMP、OpenMP/MPIハイブリッドと進むため、教える側でも多少の戸惑いがあり、また時間もわずか1日と非常に少なかったが、計算と通信のオーバーラップ等の最近の技術についても説明することができた。

余談ながら、当地は春節（旧正月、2015年は2月19日）を控え、2月9日の週はちょうど冬休みに当たっていたこともあり、SC4SC 2015のような集中講義には適した時期であったようだ。

3. 感想等

全ての説明資料の英語化、Fortran版とC版のプログラムと説明資料の準備、FX10に加えてNTUクラスタでのテストなども含めて準備には思ったよりも時間がかかった。また、4日目の教材はSC4SC 2015向けに新たに作ったものであったため、これらの準備にはプログラム作成も含めて正味3日程度を要した。

本学の講義時間は90分が基本であり、2015年度からは105分となるが、台湾では50分講義、10分休憩が基本であるため、最初はなかなかペースがつかめなかつた。

受講者は学部学生から筆者よりはるかに年長の教授まで幅広かった。残念ながら1日目から2日目に20名ほどが離脱したが、その後は4日目の終了まで残りの35名程度は非常に熱心に聴講してくれた。また、受講者は講義の内容を全般的に良く理解しており、積極的に的確な質問をしてくるのには少々驚いた。1箇所バグも見つけてくれた。

王教授によると、最初に教材を見たときは、かなり専門的な内容のため最後まで何人について来られるか非常に不安だったそうである。王教授は月曜の朝から木曜の夕方まで全ての講義、実習に出席して、全てのやりとりを目撃していたわけであるが、受講者の反応の良さ、理解度には正直驚いたそうである。貴重な機会を有効に利用したいという受講者の強い気持ちの表れだったのかも知れない。教える側からもそのような熱意、手応えを充分に感じ取ることができ、非常に楽しく過ごすことができた。

講義・実習は図5に示すような計算機室で実施した。それぞれの「島」には所属が近い知り合い同志が座って受講していたようだが、実習のときには互いに助け合って、先に終わった人は他の人の様子を見てやるなど、普段の本学での講義・実習ではあまりお目にかかるない光景にしばしば遭遇した。

今回のSC4SC 2015は筆者にとっても貴重な体験であり、教材、教え方等について色々とアイディアを考えつくとともに、教育の重要性について改めて考える機会も与えてくれた。本文

中にしばしば「王教授の強い希望により」という表現があったが、王偉仲教授の情熱無くしてSC4SC 2015は無く、自分のこのような貴重な体験をする機会は無かったであろう。この場を借りて王偉仲教授に対して深甚なる謝意を表したい。



図1 國立臺灣大學椰林大道：正門から続く椰子並木、キャンパス内の建物の建築様式は本学と驚くほどよく似ているが、南国らしく銀杏並木ではなく椰子並木、中央遠方に台北101が見える



図2 講義・実習を実施した天文數學館、手前に見える池は醉月湖と呼ばれている



図3 受講者集合写真、前列中央は林長壽教授（臺大理論科學研究中心主任）（Professor Chang-Shou Lin, Director, Taida Center for Advanced Study in Theoretical Sciences）



図4 王偉仲教授（臺大數學科學中心）（Professor Weichung Wang, Taida Institute for Mathematical Sciences）（右）、筆者（左）



図5 講義風景

臺大數學科學中心
科學計算冬季學校

邁向 Petascale 高速運算

Introduction to Parallel Programming for Multicore/Manycore Clusters

日期：2015年2月9-12日

地點：國立臺灣大學 天文數學館

課程簡介

從筆電、桌機，到超級電腦，各種電腦系統都已進入「多核心」(multicore) 與「眾核心」(manycore) 處理器的世代。要充分利用這些電腦，平行計算是關鍵的知識與能力。在這個四天的密集課程，我們聚焦在 MPI 和 OpenMP 的平行計算環境，講授如何在 MPI+OpenMP 的混合環境中，將有限體積法以及大型線性系統疊代法平行化，藉以求解三維 Poisson 方程。

此課程的另一個特點是，我們將使用東京大學的超級電腦 Oakleaf-FX 進行平行計算。Oakleaf-FX 是全球最先進的超級電腦之一，它採用 Fujitsu PRIMEHPC FX10 大規模平行電腦架構，包含 4,800 個計算節點，每個節點配有 16 核心的 SPARC64 IXfx 處理器，節點間以六維 Torus Fusion 網路串接，全機包含高達 76,800 核心，150 TB 的主記憶體，以及 1.13 PFLOPS 的尖峰運算能力。Oakleaf-FX 是目前在 TOP500 排名全球第四的 K Computer 的改良機型。（註：Oakleaf-FX 帳號須經申請，並依相關規定審核。）

這個短期課程提供一個非常難得的機會，可以接觸到目前全世界最前沿的高效能平行計算環境。歡迎教師、碩博士生、大學部同學報名參加。本課程以英語授課，課程內容概要如下：

- Finite Volume Method (FVM), Preconditioned Krylov Iterative Methods
- Parallel FVM using OpenMP, Reordering/Coloring Methods
- Parallel FVM using MPI on Distributed Memory Systems, Data Structure for Parallel FVM
- Parallel FVM using OpenMP/MPI Hybrid Parallel Programming Model



課程網站
<https://goo.gl/4JpOvc>

授課教授



中島 研吾 教授

東京大學 情報基盤中心 超級計算研究部門

主辦單位與聯絡人

主辦單位：臺大數學科學中心
協辦單位：東京大學情報基盤中心、臺灣大學應用數學科學研究所、
台灣工業與應用數學學會 GPU 與高效能計算活動學群
主持人：王偉仲教授（臺灣大學應用數學科學研究所，www.math.ntu.edu.tw）
聯絡人：劉英貞小姐（臺大數學科學中心，tassist4@tims.ntu.edu.tw, 02-3366-9901）

報名資訊

報名網址：<https://goo.gl/4JpOvc>

報名截止日期：2015/01/18 錄取通知日期：2015/01/21



図 6 SC4SC 2015 のポスター