

科学技術計算 I / コンピュータ科学特別講義 I

「科学技術計算のためのマルチコアプログラミング入門」

中島 研 吾

東京大学情報基盤センター

本稿では、2015 年度夏学期に実施した、科学技術計算 I（大学院情報理工学系研究科数理情報学専攻）／コンピュータ科学特別講義 I（同 コンピュータ科学専攻）「科学技術計算のためのマルチコアプログラミング入門」¹について紹介する。

2014 年度までは、夏学期、冬学期に、科学技術計算 I・II／コンピュータ科学特別講義 I・II「科学技術計算プログラミング（有限要素法）」²を実施してきた。2014 年までは偏微分方程式の数値解法として、様々な科学技術分野のシミュレーションに使用されている有限要素法（Finite-Element Method, FEM）について、背景となる基礎的な理論から、実用的なプログラムの作成法まで、連立一次方程式解法などの周辺技術も含めて講義を実施し、プログラミングの実習を実施している。題材としては二次元及び三次元弾性静力学を扱っており、プログラミング言語としては C 言語を使用している。夏学期（I）と冬学期（II）に分けて、夏学期は有限要素法の理論とプログラミングの基礎、冬学期はその並列化についての講義・実習を行っている。冬学期は東大情報基盤センターのスーパーコンピュータを使った実習を実施している。2011 年度までは T2K 東大を使用していたが、2012 年度からは 2012 年 4 月より運用を開始した Fujitsu PRIMEHPC FX10（Oakleaf-FX）を使用してきた。

2014 年度までの講義では、冬学期（II）の履修は夏学期（I）の履修を前提としていたが、昨今の大学の国際化に伴い、10 月に入学する留学生が増加しており、そのような条件を満たさない履修者が増えてきた。そこで 2015 年度からは、方針を変更し、両者がある程度独立した科目として履修できるよう：

- 夏学期（I）：お試し講習会「科学技術計算のためのマルチコアプログラミング入門³」で実施している内容
- 冬学期（II）：理学系研究科「並列計算プログラミング・先端計算機演習⁴」で実施している内容

を実施することとした。両者は若干のオーバーラップはあるものの、ほぼ独立した内容である。

近年マイクロプロセッサのマルチコア化が進み、様々なプログラミングモデルが提案されている。中でも OpenMP は指示行（ディレクティブ）を挿入するだけで手軽に「並列化」ができるため、広く使用されており、様々な解説書も出版されている。メモリへの書き込みと参照が同時に起こるような「データ依存性（data dependency）」が生じる場合に並列化を実施するには、

¹ <http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/15s/>

² <http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/14s/>, <http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/14w/>

³ <http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/seminars/multicore/>

⁴ <http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/15e/>

適切なデータの並べ替えを施す必要があるが、このような対策は OpenMP 向けの解説書でも詳しく取り上げられることは余り無い。本講義では、「有限体積法から導かれる疎行列を対象とした ICCG 法」を題材として、科学技術計算のためのマルチコアプログラミングにおいて重要なデータ配置、reordering などのアルゴリズムについての講義、スパコン (FX10 スーパーコンピュータシステム (Oakleaf-FX)) を使用した実習を実施した。

本講義のスケジュールを表 1 に示す。講義内容の詳細については、ウェブページから資料をダウンロードできるのでそちらを参照いただきたい。本講義では英語版教材のみを提供している他、受講者の多様なバックグラウンドを考慮して、ほぼ全講義内容について Fortran, C 両方による教材を準備した。登録者は 36 名であったが、実際に出席していたのは 15 名程度、単位を取得したのは 10 名程度であった。

表 1：講義日程，内容（夏学期）

日付	時間	番号	内容
04 月 06 日 (月)	0830-1015	CS-01	はじめに
04 月 13 日 (月)	0830-1015	CS-02	有限体積法 (1/3)
04 月 20 日 (月)	0830-1015	CS-03	有限体積法 (2/3)
04 月 27 日 (月)	0830-1015	CS-04	有限体積法 (3/3)
05 月 11 日 (月)	0830-1015	CS-05	FX10 ログイン, OpenMP (1/3)
05 月 18 日 (月)	0830-1015	CS-06	OpenMP (2/3)
05 月 25 日 (月)	0830-1015	CS-07	OpenMP (2/3)
05 月 28 日 (木)	0830-1015	CS-08	リオーダーリング (1/2)
06 月 08 日 (月)	0830-1015	CS-09	リオーダーリング (2/2)
06 月 15 日 (月)	0830-1015	CS-10	チューニング入門
06 月 26 日 (金)	0830-1015	CS-11	OpenMP による並列化 (1/2)
07 月 06 日 (月)	0830-1015	CS-12	OpenMP による並列化 (2/2)