

科学技術計算 I / コンピュータ科学特別講義 I / スレッド並列コンピューティング 「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、2016 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) / スレッド並列コンピューティング (大学院工学系研究科電気系工学専攻) 「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。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) を題材とし、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・実習を実施してきた。

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、両者をお互いに独立した科目として履修できるように：

- ・ 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、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

¹ <http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/16s/>

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/16e/>

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 39 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 11 日 (月)	0830-1015	CS-01	はじめに
04 月 18 日 (月)	0830-1015	CS-02	有限体積法 (1/3)
04 月 25 日 (月)	0830-1015	CS-03	有限体積法 (2/3)
05 月 02 日 (月)	0830-1015	CS-04	有限体積法 (3/3)
05 月 09 日 (月)	0830-1015	CS-05	FX10 ログイン, OpenMP (1/3)
05 月 16 日 (月)	0830-1015	CS-06	OpenMP (2/3)
05 月 19 日 (木)	0830-1015	CS-07	OpenMP (2/3)
05 月 23 日 (月)	0830-1015	CS-08	リオーダーリング (1/2)
05 月 30 日 (月)	0830-1015	CS-09	リオーダーリング (2/2)
06 月 13 日 (月)	0830-1015	CS-10	チューニング入門
06 月 27 日 (月)	0830-1015	CS-11	OpenMP による並列化 (1/2)
07 月 04 日 (月)	0830-1015	CS-12	OpenMP による並列化 (2/2)
07 月 11 日 (月)	0830-1015	CS-13	質疑