

國家理論科學研究中心數學組「高性能計算」短期課程： Introduction to Parallel Programming for Multicore/Manycore Clusters

中島 研吾

東京大学情報基盤センター

2018年2月22日(木)～25日(日)に國立臺灣大學(National Taiwan University, NTU)¹で開催された「國家理論科學研究中心數學組「高性能計算」短期課程(Introduction to Parallel Programming for Multicore/Manycore Clusters)」²(共催：國家理論科學研究中心(National Center for Theoretical Sciences)³，東京大学情報基盤センター他)について紹介する。

國立臺灣大學での集中講義は2015年2月から毎年この時期に開催しているが、受講者は東京大学情報基盤センターと研究交流協定覚書(Memorandum of Understanding, MOU)を取り交わしている國立臺灣大學と國立中央大學の学生、教職員に限定されていた。これは、両大学関係者しか東大センターのスパコンを利用できないためである。本集中講義は2017年から國家理論科學研究中心(National Center for Theoretical Sciences, NCTS)⁴の主催となり、國立臺灣大學、國立中央大學以外の受講者も受け入れたいとの意向があったため、東大情報基盤センターとNTCSは2018年1月にMOUを締結した。今回は合計56名の受講申込があり、國立臺灣大學と國立中央大學からはそれぞれ26名、2名の受講者があったが、半数が他大学からの受講であった。國立臺灣師範大學(National Taiwan Normal University)11名、國立成功大學(National Cheng Kung University)5名の参加が多かった。

2017年は旧正月明けの学期始めに開講したため、単位を出すことができたが、今回は正月休み中の開講であったため、残念ながら講習会扱いとなった。

実施した講義内容と資料は東大側で準備したHP^{5,6}で見ることができる。講義は前年に引き続き片桐孝洋教授(名古屋大学情報基盤センター)とともに実施し、ほぼ2016、2017年度と同じ内容であるが、今回は、Reedbush-Uシステムを利用した実習を実施した。前半は当センターで実施していた「MPI基礎：並列プログラミング初級入門」⁷の内容に基づいている。後半は有限体積法によるポアソン方程式ソルバーの並列化に関する教材であり、MPI, OpenMP, OpenMP/MPI ハイブリッド並列に加えて、密行列・疎行列計算アルゴリズム、前処理付き共役勾配法、並列分散データ構造等も含めて学習することができる。4日間のスケジュールの概要を以下に示す：

1日目(2月22日(木))

- スーパーコンピューティングへの招待(中島)
- OpenMP 並列プログラミング(片桐)

¹ <http://www.ntu.edu.tw/>

² <https://sites.google.com/site/school4scicomp/2018-b-nk/>

³ <http://www.cts.nthu.edu.tw/main.php>

⁴ <http://www.cts.nthu.edu.tw/main.php>

⁵ <http://www.abc-lib.org/MyHTML/Lectures/NU/class-matrNTU2018.htm>

⁶ <http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/NTU2018/>

⁷ <http://www.cc.u-tokyo.ac.jp/support/kosyu/53/>

- Reebush-U システムへのログイン (中島)
- MPI 並列プログラミング (片桐)
 - 並列プログラミングの基礎
 - 基本的な MPI 関数

2 日目 (2 月 23 日 (金))

- MPI/OpenMP ハイブリッド並列プログラミング (片桐)
 - ノン・ブロッキング MPI 関数と通信隠蔽手法
 - 並列化演習
 - ✧ 行列-ベクトル積
 - ✧ 固有値問題におけるべき乗法
 - ✧ 行列-行列積
 - ✧ 完全分散版の行列-行列積

3 日目 (2 月 24 日 (土))

- 有限体積法による三次元ポアソン方程式ソルバー (中島)
 - クリロフ部分空間法, 共役勾配法 (Conjugate Gradient, CG) のアルゴリズム
 - CRS (Compressed Row Storage) による疎行列格納法
- 有限体積法アプリケーションの MPI による並列化 (中島)
 - 並列分散データ構造
 - 共役勾配法の並列化

4 日目 (2 月 25 日 (日))

- 有限体積法アプリケーションの OpenMP による並列化 (中島)
- 有限体積法アプリケーションへの OpenMP/MPI ハイブリッド並列プログラミングモデルの適用 (中島)