

教育活動報告：計算科学プログラミング II（大学院情報理工学系研究科コンピュータ科学専攻開講科目）

松本正晴

東京大学大学院情報理工学系研究科コンピュータ科学専攻

本稿では、2018年度Aセメスターに実施された大学院講義、計算科学プログラミングII（大学院情報理工学系研究科コンピュータ科学専攻、金曜1限@情報基盤センター大演習室2）について紹介する。東京大学では、計算物理学などの計算科学・工学から情報科学まで様々な学問領域の英知を結集した学際的研究教育プログラム「計算科学アライアンス¹」が2016年4月より開始されているが、本講義は、Sセメスターに開講されている大学院講義、計算科学プログラミングIと同様に、計算科学アライアンスの認定講義として2017年度より開講されている。

計算科学とは、科学技術上の様々な問題に対して数値的なモデル化を施し、計算機シミュレーションによる評価を行う学問分野であるが、本講義では、計算科学プログラミングIと同様に、座学とスーパーコンピュータ（データ解析・シミュレーション融合スーパーコンピュータシステム Reedbush）による実習を通じて、計算科学についての実践的な知識やプログラミング技術を手につけることを目的としている。東京大学情報基盤センターに設置されている Reedbush では、演算アクセラレータとして GPU を搭載したノード（Reedbush-H/L）が利用できる一方で、東京大学では GPU を利用する講義があまり開講されていないことに鑑み、本講義では特に GPU を搭載する計算機上での並列計算に関する講義・実習を行っている。すなわち、GPU 上で計算を行うために必要となる知識である、CPU を GPU で補うヘテロジニアスアーキテクチャとヘテロジニアス並列プログラミングへのパラダイムシフト、GPU をはじめとするアクセラレータ、メモリアーキテクチャの特性、並列計算のための OpenACC や CUDA C/CUDA Fortran などのプログラミング手法、GPU アクセラレーションライブラリ、MPI+OpenACC、MPI+CUDA などのマルチ GPU プログラミング手法などである。

講義で扱うプログラミング言語は、ハイパフォーマンスコンピューティング分野でよく用いられる C 言語と Fortran の 2 種類とし、それぞれの言語に対応する教材を用意し、履修者がどちらか一方を選んで実習を行うこととした。ローカル端末は情報基盤センターの教育用計算機システム（ECCS）を利用させていただいた。また、大学院の講義であることから履修する上で、UNIX の基本的な知識（ファイル構造、コマンド、ログイン方法、エディタの操作など）と経験、C 言語、または Fortran の基本的な知識と経験があること、を前提条件とした。

表 1 に講義日程と内容を示す。3 回目の授業から Reedbush の利用を開始し、6 回目まではディレクティブベースの標準並列プログラミングモデルである OpenACC について、また 7 回目以降は、NVIDIA 社の GPU 向けではあるが OpenACC よりも詳細なプログラミングが可能となる CUDA C/CUDA Fortran についての講義・実習を主に行った。基本的には講義は毎回、座学に 30 分～1 時間程度の時間を割り、残りの時間を実習時間とすることが多かった。

¹ <http://www.compsci-alliance.jp/>

履修登録者数は合計 21 名であり、本講義の開講所属である大学院情報理工学系研究科コンピュータ科学専攻の学生は 6 名で、他 15 名の内訳は、情報理工学系研究科の他専攻から 5 名、工学系研究科から 7 名、理学系研究科から 1 名、総合文化研究科から 1 名、薬学系研究科から 1 名と、他専攻・研究科のさまざまな学生が履修したという点が本講義の特徴の一つと言える。このうち、実際に講義に出席して、単位を取得したのは 14 名であった。

一般に、学生がスーパーコンピュータを自由に利用できるという機会は限られているが、本講義で（情報基盤センターのスーパーコンピュータの教育利用を通じて）、学生に並列プログラミングの基礎知識から、実践的な科学技術アプリケーションへ向けた並列プログラムの実装までを（計算資源は限られているが、）経験させたことは、非常に貴重な体験で有意義なものであったと期待すると同時に、今後、本講義を履修した学生が、自分の研究テーマで Reedbush などのスーパーコンピュータを利用し、研究を進展させていくことを願っている。

表 1 講義日程・内容（2018 年度 A セメスター@情報基盤センター大演習室 2）

回数	日付	時間	内容
1	09 月 28 日（金）	08:30 – 10:15	ガイダンスとイントロダクション （座学のみ） 計算科学とは？スーパーコンピュータとは？
2	10 月 05 日（金）	08:30 – 10:15	OpenACC 入門 （座学のみ） OpenACC の概要、OpenMP との相違点
3	10 月 12 日（金）	08:30 – 10:15	スーパーコンピュータ（Reedbush）の利用 アカウント発行、ログイン方法、ジョブ投入方法
4	10 月 19 日（金）	08:30 – 10:15	OpenACC プログラムの実行 行列-行列積、熱伝導プログラムの OpenACC 化
5	10 月 26 日（金）	08:30 – 10:15	並列プログラミングと MPI の基礎 （座学のみ） アムダールの法則、台数効果、プロセス並列化
6	11 月 02 日（金）	08:30 – 10:15	MPI + OpenACC マルチ GPU プログラミング、CUDA-aware MPI
7	11 月 09 日（金）	08:30 – 10:15	CUDA C/CUDA Fortran 1 CUDA プログラミングモデル、基礎的な実装手法
8	11 月 30 日（金）	08:30 – 10:15	（休講）
9	12 月 07 日（金）	08:30 – 10:15	CUDA C/CUDA Fortran 2 論理的コンポーネントとハードウェアの対応
10	12 月 14 日（金）	08:30 – 10:15	CUDA C/CUDA Fortran 3 GPU のメモリ階層構造、シェアードメモリ
11	12 月 21 日（金）	08:30 – 10:15	CUDA C/CUDA Fortran 4 （座学のみ） CUDA ストリーム、GPU 向けライブラリ
12	12 月 25 日（火）	08:30 – 10:15	CUDA C/CUDA Fortran 5 Warp シャッフル、リダクション
13	01 月 11 日（金）	08:30 – 10:15	MPI + CUDA マルチプロセスサービス (MPS), CUDA-aware MPI