

大規模数値計算論

石原卓

岡山大学大学院環境生命科学研究科

1. はじめに

岡山大学環境理工学部環境数理学科¹では1年次に「計算機リテラシー」を履修した後、2年次は「プログラミング言語A」と「プログラミング言語B」でPythonとC言語を用いたプログラミングを各々履修する。また、2年後期は「計算解析」で基礎的な数値計算法、3年次には「数値シミュレーションI」と「数値シミュレーションII」で常微分方程式や偏微分方程式の解を数値的に求める方法について計算機実習を併用して学ぶ。その他、統計データ解析系の講義ではRを用いたプログラミングやデータ解析も履修する。したがって、計算機実習については結構手厚い教育を受けており、学生もパソコンを活用することについては特に何も躊躇することなく取り組めるようになっている。ただ、その先のさらに進んだ教育がないのが現状であった。

私は2017年に岡山大学に着任する前、名古屋大学において21世紀COEプログラム「計算科学フロンティア」にメンバーとして参加させていただいた経験がある。そのCOEの教育プログラムの目玉の一つが「スパコン実機を用いた演習」であった。COEに関する研究室には並列計算の技術が学生を通じて導入されていくような感じがあった。この演習は好評でCOE終了後も計算科学連携教育研究センターが名古屋大学情報基盤センターと連携し、「大規模並列数値計算特論」という講義で継続実施された。学生は特に躊躇することなく並列計算できるようになっていったという印象がある。スパコンは敷居が高いが、使ってみるとそれほどでもなく、「スパコンを使ったことがある」とひとこと言えるようになる体験こそが重要であると私は思うようになった。

岡山大学大学院環境生命科学研究科にてどんな講義をしようかと考え、無謀にも「スパコン実習ができる講義」を行ってみようと思って計画したのが「大規模数値計算論」であった。自分自身が応用計算側の研究者であり、並列計算の講義もまともに受けたことがないのに教えるというのはかなり無理があった。また、当初は使用予定であった名古屋大学のスパコンがリプレイスの関係で2020年度の前半は使えないことを知って途方に暮れていた。そんな時見つけたのが、東京大学情報基盤センターの利用案内にあったスーパーコンピュータの「教育利用」であった。こうして、とにかく実施することにした「大規模数値計算論」の実験について簡単に報告する。

2. 大規模数値計算論

本講義の目的は、ただ一つ『「スパコンを使ったことがある」とひとこと言えるようにする』であったので、学期のはじめのガイダンスでもそのように宣伝した。履修者は少なくて良い、自分の研究室の学生が並列計算できるようになれば良いと思っていたところ、11人と想定以上に多くの履修者がいた。さて、『「スパコンを使ったことがある」と言えるためには、確かに「速い!」と実感できることが重要であると思うと、実はこれが大変であった。そう言えば、名古屋大学にいた頃、山本有作先生(現電気通信大学)が並列計算の講義を大学院生向けにされていて、行列・

¹ 2021年4月より岡山大学工学部数理データサイエンスコース

行列積がいくつかの並列計算手法の導入で速くなっていく様子を演習入りで講義されていたが、最終的にはマシンに特化したライブラリを使うのが最も速いという結論であったことを思い出した。また、GRAPE を開発されゴードンベル賞の常連という印象のあった牧野淳一郎先生（現神戸大学）とお話しする機会があった時、N 体シミュレーションで高速計算しやすい主な理由は「データの load/store に比べ演算が多い問題であるから」という趣旨の説明をされていたことも思い出した。その他、私自身の研究では実際に大規模な流体計算を行っており、そもそも領域を分割（並列計算）しなければ解けない問題があることも教えるべきであると思った。また、自分の学生がパラメータスタディを多数の逐次計算で行っていたので、一気に並列計算する手法も早く導入しなければいけないと感じていた。以上が、当初思いついた「題材」であった。

実際の講義は、名古屋大学での「大規模並列数値計算特論」を参考に、スパコンの歴史、並列計算の必要性、スパコン使用環境の構築、スパコンへのログイン、スレッド並列（自動並列と OpenMP）、MPI とハイブリッド計算という順番で実施することにした。新型コロナウイルスの感染防止の関係で講義をオンラインでする必要があった。学生の多くは windows の PC を持っていたので、VirtualBox を install させ、そこにインポートした ubuntu の環境からスパコンにログインして使うことにした。実際のオンライン講義で、ubuntu と zoom の併用はメモリの少ない PC ではうまくいかない場合もあったが、zoom をスマートフォンに切り替えてもらって対処した。

スレッド並列（自動並列と OpenMP）では N 体シミュレーションのプログラムを例題に用いた。自動並列と OpenMP の速度の差が出る理由についてはうまく説明できなかったが、確かにスレッド並列計算による高速化を体験できた。学期の前半で Oakforest-PACS を用いた並列計算の講習会があったので参加した。Batch job の shell の書き方についての説明が勉強になった。1 node 中のコアとメモリの使い方について質問してみると何が最良かは試してみないとわからないとのことであった。この情報は実際に有益であった。MPI では、既存のプログラムを少し書き換えて、パラメータスタディが並列でできるようなプログラムをまず扱った。次に、MPI の文献を参考にして、偏微分方程式を差分法で数値積分する問題において領域を分割して並列計算する実習を行なった。扱ったのは小さい問題サイズであったが、領域を分割して通信しながら解くとは「こういうこと」という体験は学生にとって新鮮だったようである。

3. まとめと感想

2020 年度の前期、東京大学情報基盤センターのホームページで見つけた「スーパーコンピュータの教育利用」を活用して、岡山大学大学院環境生命科学研究科の修士課程の学生対象に「大規模数値計算論」という講義でスパコン実機を用いた演習を行ってみた。新型コロナウイルスの感染防止の関係で、講義も途中に受講した講習会もオンラインであった。オンライン講義やオンライン講習会が普通に行われるようになってくると、身近にスパコンがないことは教育や学習において全くハンディにはならないと実感するようになった。私の講義の評判がどうであったかはさておき、少なくとも現在、研究室の学生が並列計算を普通に実行できるようになっていることを考えると「スパコン活用のカルチャー」の導入には成功したのではないかと思えた。今後も講習会や教育目的のためのスパコン利用サービスは活用していきたいと考えている。

参 考 文 献

青木幸也 並列プログラミング虎の巻 MPI 版 平成二十八年八月一日版