# 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

中島研吾

東京大学情報基盤センター

#### 1. はじめに

本稿は、2009年9月14日(月)・15日(火)に東京大学情報基盤センター遠隔講義室(本郷)において開催された『第7回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会(試行)):科学技術計算のためのマルチコアプログラミング入門(Hybrid 並列プログラミングモデルへの道)』の開催報告である。

本センターでは、スパコンによる実習を含む講習会を 2007 年度から開催しており、2008 年 9 月からは特に T2K オープンスパコン (東大) [1] を使用している。受講者は会場にノート PC を持参し、無線 LAN 経由でスパコンに接続し、スパコンを実際に利用した実習を行うことができる。また、アカウント (お試しアカウント) は講習会終了後、1 週間程度有効なため、研究室、自宅等からログインして復習をすることも可能である。このような実習付きの講習会は学習効果も高く、受講者からも大変好評である。

当初は、スパコン利用者の拡大、啓蒙を主たる目的として、受講資格をスパコンの利用資格者(学生、教育機関・研究機関教職員)に限定してきた。2008 年 10 月より、社会貢献の一環として企業ユーザーにもスパコン利用の門戸を開放したのを契機として、2008 年 12 月に日本応用数理学会との共催で開催した『日本応用数理学会「2008 秋の学校」: 科学技術計算のためのマルチコアプログラミング入門』[2] では、企業からの参加者の受講、お試しアカウントの利用を初めて認めた。本講習会を含む 2009 年度(2009 年 9 月~2010 年 3 月)に実施される 3 回の講習会についても、同様に企業からの参加を認めている。

### 2. 概要

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(ディレクティヴ)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。本講習会では、「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習、実習を実施した。

筆者は本学理学系研究科(地球惑星科学専攻)で 2004 年度~2007 年度の間,冬学期に開講された「先端計算機演習 II」において,日立 SR8000,日立 SR11000/J2(東京大学情報基盤センター) 1等の共有メモリ型並列計算機を対象とした OpenMP による並列化についての同様の講義,演習を実施してきた〔3〕。また,2007 年度には本「スーパーコンピューティングニュース」に「OpenMP によるプログラミング入門(I~III)」 [4~6] を連載している。

<sup>1</sup> http://www.cc.u-tokyo.ac.jp/

2008年12月には、2008年6月より稼動を開始した、「T2K オープンスパコン(東大)(HA8000 クラスタシステム)」[5]を対象として、日本応用数理学会との共催で『日本応用数理学会「2008 秋の学校」: 科学技術計算のためのマルチコアプログラミング入門』を開催した〔2、7〕。最近のマルチコアプロセッサへの適用を念頭において、〔3~6〕の教材の内容を一新した。

## 3. 本講習会の理念

本講習会のスケジュールを表 1 に示す。基本的な内容は、日本応用数理学会「2008 秋の学校」 [2,7] とほぼ同じである。

9月14日(月)・15日(火,午前のみ)の正味10時間程度の講義であるが、その中で目を引くのが、対象となるアプリケーション(有限体積法、ICCG法)に2時間、オーダリングのアルゴリズム、実装について3時間と合計半分程度を占めていることである。それに対して、OpenMPの文法に関わる部分はごく少ない。

9月14日(月)	1000~1200	ICCG 法によるポアソン方程式ソルバー
		(講師:中島研吾(東京大学情報基盤センター))
	1300~1400	OpenMP「超」入門, T2K オープンスパコンへのログイン
		(講師:中島研吾)
	1415~1715	オーダリングについて (講師:中島研吾)
9月15日 (火)	0900~1100	並列化実装について (講師:中島研吾)
	1100~1200	最新の研究事例の紹介,質疑,実習(講師:中島研吾)

表 1 科学技術計算のためのマルチコアプログラミング入門 スケジュール

筆者は科学技術計算プログラミング教育について以下の2点が 重要であると考えており、本講習会もこれに基づき実施した:

- ① 科学技術計算の真髄は「SMASH = Science, Modeling, Algorithm, Software, Hardware」[8] にあり、各カテゴリーについてバランスよく学ぶことが重要である(図1)
- ② 実アプリケーションのソースコードを「読む」ことがプログラム開発能力を効率的に高める方法である。

①について、本講習会は「マルチコアプログラミング入門」と言うタイトルであるが、対象となるアプリケーションをよく理解し、それに適した並列化戦略、アルゴリズムを選択することが最も重要であると考えている。時間の制約もあるため、アプリケーショ

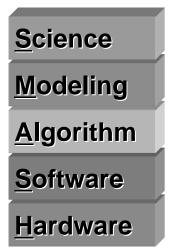


図1 SMASH: 科学 技術計算の真髄

ンは一種類に限定しなければならないため、汎用性に乏しいという危惧もあるが、「データ依存性」を克服するための手法としてはごく一般的な手法を紹介しているため、色々な分野に応用は可能であると考えている。この手法については、「2008 秋の学校」〔2〕でもある程度手ごたえがあったので、本年も踏襲することとした。

②について, これまでの筆者の経験では, 断片的な知識や経験を積み重ねても中々実際に使

い物になるアプリケーションの開発能力は身につかない。実アプリケーションのソースコードを読む、それも各自の自習に任せるのでなく講義、演習の中で、講師が逐一「解説する」ということが、効率的に開発能力を高める教育方法の一つである。その場ではわからなくても、一回詳しく解説しておけば、あとで自習して理解できる可能性は高くなる。

実際には、対象となるアプリケーションが余りに大規模、複雑であったり、背景となる「Science」が特殊なものであったり、難解であったりすると教材として扱うことは困難なので、「実アプリケーション」と同じデザインに基づき、本講習会でとりあげた「有限体積法、ポアソン方程式」のような比較的に容易に理解できる内容で、教材用のサンプルプログラムを別途用意するのが通例である。

本講習会で使用した資料,サンプルプログラムについてはウェブページ<sup>2</sup>から取得可能である。また,「2008 秋の学校」の内容をもとに作成した記事〔7〕も併せて参考にされたい。

#### 4. 受講者の感想等

合計 38 名の事前登録者があり、33 名が受講した。所属の内訳は表 2 に示すとおりである。 企業から 22 名と全体の 3 分の 2 に達する受講者があった。挙手によるアンケートでは、半分以 上が科学、工学のアプリケーション分野の専門家ということであった。

熱心に聴講し、活発な質疑が行われた。今回は、後述のように並列プログラミングの経験者が比較的多かったこともあり、高度な質問が多かった。表1にも示したが、9月15日の最後の1時間は少し予定を変更して最新の研究事例について紹介した。

本年は、スケジュールの都合で実習時間を充分にとれなかったが、ほぼ全員が無線 LAN 経由で T2K オープンスパコン (東大) へ接続して実習に参加した。各 PC のセキュリティ設定等の問題により、接続までに時間がかかるケースが、従来の同様の講習会と比較して多かった。

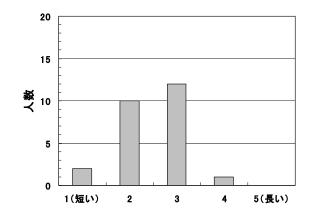
所 属	人 数
学部学生	1
大学院生	6
大学教職員	2
研究機関	2
企業	22

表 2 受講者の内訳

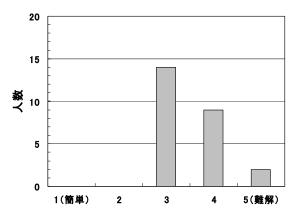
講習会終了後にアンケートを実施した。図 2 は質問項目と回答(5 段階評価)の人数分布である。なお、アンケートの回収数は25(うち並列プログラミング経験者は18名)であった。

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/seminars/0909-multicore/

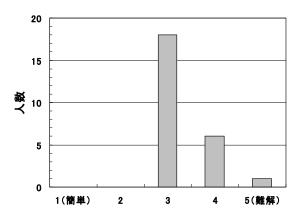
#### (a) 講習会時間について



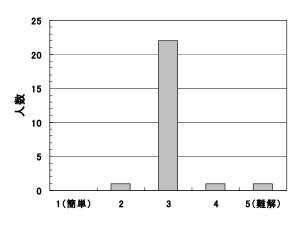
# (b) 講習会講義内容(プレゼン) について



(c) 配布資料内容について



(d) サンプルプログラム内容について



(e) 満足度

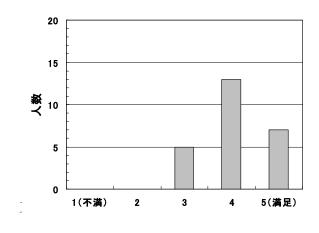


図2 アンケート集計結果

全体的な満足度は高かったようで(平均値は 4.08) あるが、図 2 (a) にも見られるように時間がやや短いと感じた受講者も半数程度あり、特に実習時間が少なかった。また、休憩時間も少なかった。講義内容のレベルについては丁度良いか、やや難しめというところであった。

以下は、アンケートの自由記述部分に書かれていたコメントである:

- MPI 並列についても扱ってほしい(5名)(うち2名は「タイトルに『Hybrid 並列プログラミングモデルへの道』とあったのに説明が無かった」というものであった)
- 分子動力学についても同様の講習をやってほしい(2名)
- ハードウェアに関する説明がもっとあった方が良い(2名)

• Cell, GPU に関する講習会をやってほしい (2名)

これらのコメントを参考にして、より本講習会の内容、スケジュールの改善、また新たな講習 会の企画等を実施していく予定である。

### 謝辞

本講習会では、計算結果の可視化用ソフトウェアとして、株式会社ケイ・ジー・ティー社製「MicroAVS」教育用バージョンを無料で利用させていただいた。この場を借りて、関係各位に 篤く御礼申し上げます。

## 参考文献

- [1] HA8000 クラスタシステム 利用の手引(東京大学情報基盤センター) http://www.cc.u-tokyo.ac.jp/service/ha8000/ha8000-tebiki.pdf
- [2] 中島研吾(2009) 日本応用数理学会「2008 秋の学校」: 科学技術計算のためのマルチコア プログラミング入門, スーパーコンピューティングニュース(東京大学情報基盤センター) 11-1
  - http://www.cc.u-tokyo.ac.jp/publication/news/VOL11/No1/200901JSIAM.pdf
- [3] 中島研吾 (2007), Hitachi SR11000 を利用した並列プログラミング教育: 東京大学 21 世紀 COE プログラム 多圏地球システムの進化と変動の予測可能性, スーパーコンピューティングニュース (東京大学情報基盤センター) 9-3
- [4] 中島研吾(2007) OpenMPによるプログラミング入門(I), スーパーコンピューティングニュース(東京大学情報基盤センター) 9-5
  - http://www.cc.u-tokyo.ac.jp/publication/news/VOL9/No5/200709OpenMP.pdf
- [5] 中島研吾 (2007) OpenMPによるプログラミング入門 (II), スーパーコンピューティングニュース(東京大学情報基盤センター) 9-6
  - http://www.cc.u-tokyo.ac.jp/publication/news/VOL9/No6/200711OpenMP.pdf
- [6] 中島研吾 (2008) OpenMPによるプログラミング入門 (III), スーパーコンピューティングニュース (東京大学情報基盤センター) 10-1
  - http://www.cc.u-tokyo.ac.jp/publication/news/VOL10/No1/200801OpenMP.pdf
- [7] 中島研吾 (2009) T2K オープンスパコン (東大) チューニング連載講座 (その 5), OpenMP による並列化のテクニック: Hybrid 並列化に向けて, スーパーコンピューティングニュース (東京大学情報基盤センター) 11-1
  - http://www.cc.u-tokyo.ac.jp/publication/news/VOL11/No1/200901tuning.pdf
- [8] 中島研吾(2008) 究極の「並列プログラミング教育」を目指して:地球惑星科学専攻での 4年間と「学際計算科学・工学 人材育成プログラム」,スーパーコンピューティングニュ ース(東京大学情報基盤センター)10-3
  - http://www.cc.u-tokyo.ac.jp/publication/news/VOL10/No3/200805nakajima.pdf