計算科学概論

（工学部物理工学科・理学部物理学科共通開講科目）

藤 堂 眞 治

東京大学大学院理学系研究科

本稿では，2023 年度 S セメスターに実施した，計算科学概論（工学部物理工学科・理学部物理学科 4 年生対象，月曜 3 限）の内容について紹介する。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。本講義は，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ものである。

本講義では, 計算科学の様々な分野で行なわれている研究やシミュレーション手法の概要を複数の教員によるオムニバス形式で紹介することで，計算科学の現状を俯瞰し，最先端の研究と手法についての知識を得ることを目的としている。また，学生の理解を深める工夫として，座学と実習をセットで行うことで, 計算科学の各手法について実際に手を動かして体験できる場を準備している。表 1 に講義日程と各回の担当者, 内容を示している。計算科学の幅広い分野に加えて，計算機科学分野も扱い，計 6 テーマのオムニバス形式で実施した。座学 1 回と実習 1 回の計 2 回を基本とし，第 2 回のみ，その内容から，座学 1 回のみとしている。

2020 年度，2021 年度は，新型コロナウイルスの感染拡大の影響により，完全オンライン講義となったが，2022 年度からは再び対面で実施している。本講義は最先端の計算科学の現状を知ることを目的としている。そのためにもスーパーコンピュータを使ったシミュレーションを体験することは重要であり，情報基盤センターの教育利用制度を利用してスーパーコンピュータ（Oakbridge-CX）を利用させて頂いた。実習では，学生が自身の PC から Oakbridge-CX にログインして行った。ほとんどの学生にとって，スーパーコンピュータの利用は初めてである。第 1，3 回で，スーパーコンピュータの特性や並列プログラミングの基礎の学習と，Oakbridge-CX の利用方法，及び，OpenMP，MPI プログラミングの実習を行い、第 2 回で高性能計算機のアーキテクチャについて学んだ。第 4 回以降では，Oakbridge-CX も使用できることを前提として，各教員がテーマに沿った座学・実習を展開した。第 4，6 回では，有限要素法を例とした大規模疎行列ソルバー，地震シミュレーションの紹介と有限要素法の SIMD 化，第 5，9 回では，高性能プログラミングの実践として，ベクタ intrinsics 関数による演算の SIMD 化や，OpenMP によるマルチコア並列化を扱った。また，第 7，8 回では，密度汎関数電子状態計算により物質科学シミュレーションを，第 10，11 回では，並列化構造解析アプリケーションを扱った。

講義の成績は，各テーマ担当の教員が，講義・実習内容に関連したレポート課題を設定し，学生は合計 6 つの課題のうちから 3 つを選んで提出することで評価した。また，4 つ以上の課題を提出した場合はその内容に応じて加点することとした。35 名の学生が Oakbridge-CX のアカウントを取得し実習に取り組んだ。

---

[1] https://www.compsci-alliance.jp/

本講義の座学と実習を通じて，計算科学・計算機科学の最先端の研究に関する知識を得るだけでなく，実際に手を動かして，アプリケーション利用やプログラミングの実践的な実習ができたことが，学生にとって貴重な経験になっていれば幸いである。

表 1　講義日程・担当者・内容

回数	日付	担当者	内容
1	4 月 10 日(月)	吉本芳英 [1]	スーパーコンピュータと並列プログラミング(座学)
2	4 月 17 日(月)	中村 宏 [2]	高性能計算機のアーキテクチャ (座学のみ)
3	4 月 24 日(月)	吉本芳英 [1]	スーパーコンピュータと並列プログラミング (実習)
4	5 月 8 日(月)	市村 強 [3] 藤田航平 [3]	大規模疎行列ソルバー入門 (実習)
5	5 月 15 日(月)	田浦健次朗 [4]	高性能プログラミングと性能測定 (座学)
6	6 月 5 日(月)	市村 強 [3] 藤田航平 [3]	大規模疎行列ソルバー入門 (実習)
7 8	6 月 12 日(月) 6 月 19 日(月)	尾崎泰助 [5]	第一原理計算による物質科学研究 (座学・実習)
9	6 月 26 日(月)	田浦健次朗 [4]	高性能プログラミングと性能測定 (実習)
10 11	7 月 3 日(月) 7 月 10 日(月)	奥田洋司 [6]	並列 FEM と CAE (Computer Aided Engineering) (実習)

1. 大学院情報理工学系研究科コンピュータ科学専攻
2. 大学院情報理工学系研究科システム情報学専攻
3. 地震研究所計算地球科学研究センター
4. 大学院情報理工学系研究科電子情報学専攻
5. 物性研究所附属物質設計評価施設
6. 大学院新領域創成科学研究科人間環境学専攻