

科学技術計算 I・II / コンピュータ科学特別講義 I・II 「科学技術計算プログラミング (有限要素法)」

中島 研吾

東京大学情報基盤センター

本稿では、2012 年度夏学期、冬学期に実施した、科学技術計算 I・II / コンピュータ科学特別講義 I・II 「科学技術計算プログラミング (有限要素法)」について紹介する。

本講義は 2008 年度冬学期から大学院情報理工学系研究科コンピュータ科学専攻で新たに開講されたコンピュータ科学特別講義「科学技術計算プログラミング (有限要素法)」にその源を発している。その後 2009 年度から夏・冬学期に分けてコンピュータ科学特別講義 I・II が実施されるようになった。2010 年度から大学院情報理工学系研究科数理情報学専攻の講義となり科学技術計算 I・II とその名称が変更となった。

2011 年度からは：

- 科学技術計算 I・II：大学院情報理工学系研究科数理情報学専攻
- コンピュータ科学特別講義 I・II：大学院情報理工学系研究科コンピュータ科学専攻

という 2 つの名称を持つ講義として実施している。

本講義では偏微分方程式の数値解法として、様々な科学技術分野のシミュレーションに使用されている有限要素法 (Finite-Element Method, FEM) について、背景となる基礎的な理論から、実用的なプログラムの作成法まで、連立一次方程式解法などの周辺技術も含めて講義を実施し、プログラミングの実習を実施している。題材としては一次元及び三次元弾性静力学を扱っており、プログラミング言語としては C 言語を使用している。夏学期 (I) と冬学期 (II) に分けて、夏学期は有限要素法の理論とプログラミングの基礎、冬学期はその並列化についての講義・実習を行っている。冬学期は東大情報基盤センターのスーパーコンピュータを使った実習を実施している。2011 年度までは T2K 東大を使用していたが、2012 年度は 2012 年 4 月より運用を開始した Fujitsu PRIMEHPC FX10 (Oakleaf-FX) を使用した。

本講義は、科学技術計算プログラミングに必須の項目であるところの「SMASH (Science-Modeling-Algorithm-Software-Hardware)」を、できるだけ幅広くカバーし、広い視野を持った人材を育成することを目標とするものである (図 1)

有限要素法は計算機と深い関係にあり、計算機の発展とともに進歩してきた分野であるが、本学の各学部、研究科において実施されている有限要素法関連の講義は、理論、アルゴリズムに関する教育が中心で、プログラミングまでカバーしているものはほとんど無い。また、有限要素法は最終的には疎行列 (行列成分のうち 0 が非常に

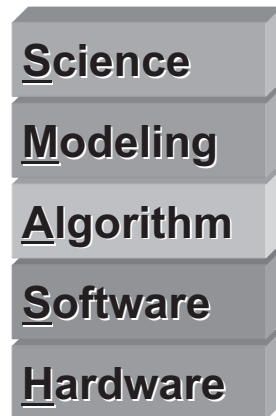


図 1 SMASH : 科学技術計算の真髄

多い行列のこと)を係数行列とする大規模な連立一次方程式を解くことに帰着されるため、疎行列を係数とする行列解法と密接な関係を持っている。有限要素法を学ぶためには、背景となる物理、変分法などの基礎的な理論の他に、疎行列解法、特にプログラミングのためには疎行列の係数格納法に習熟することが不可欠である。しかしながら、疎行列解法まで含んだ教育を実施している講義は皆無である。

筆者は、計算力学が専門であるが、数値線形代数、特に実用問題向けの前処理付並列反復法の研究に長年従事しており、疎行列解法と関連したプログラミング技術の教育の経験がある。本講義は有限要素法そのものだけでなく、連立一次方程式解法についても学習できる非常にユニークな試みであると言える。

大規模並列シミュレーションにおいては、科学・工学と計算機科学・応用数理科学の専門家の密接な協力が必要である。本講義は、単に並列アプリケーション開発技術を習得するだけでなく、特にコンピュータ科学専攻、数理情報学専攻などの情報理工学系研究科の学生がアプリケーション側のニーズを把握し、各分野の融合領域を開拓する問題意識を育てることも目的としている。

表1、表2に講義日程、内容を示す。講義は情報基盤センター(本郷)1階の大演習室を使用した。評価は夏学期(I)、冬学期(II)ともにプログラミング課題のレポートによって行った。

夏学期(I)は、変分法、重み付残差法から始まって、一次元・三次元コードについて、例題プログラムを一行一行解説し、教育用計算機システム(ECCS2012)を使用したプログラミングの実習を実施した。背景となるアプリケーションに関する知識を持たない受講者が居ることも考慮して、弾性力学についても1コマを割いて解説を実施した。疎行列解法、前処理手法に関する解説も実施した。計算結果の可視化にあたってはフリーソフトウェアであるParaView¹を使用した。

冬学期は(II)、MPIの基礎的な解説、夏学期に解説した一次元、三次元コードのMPIを用いた並列化について解説した。並列データ構造、並列前処理アルゴリズムについての解説に主眼を置き、あとは実際にOakleaf-FXを使った計算を実施した。

登録者は前期39名、後期9名であった。表1、表2に示すように、火曜の1限にも関わらず最後までコンスタントな出席者があった。情報・数理系の他、理学・工学系(社会基盤、システム創成)の受講者もあった。

詳細は本講義のホームページを参照されたい。講義資料等を入手することができる。留学生の受講生に配慮して英語の教材を準備している²。

計算科学・工学、ハードウェアの急速な進歩、発達を背景に、「第3の科学」としての大規模並列シミュレーションへの期待は、産学において一層高まっているが、最新ハードウェアを駆使して、大規模並列シミュレーションプログラムを開発するための体系的な教育プログラムの事例は、世界的に見てもまだまだ少ない。本講義はその少ない事例の一つである。今後もスーパーコンピュータシステムのリプレースに合わせて最先端のトピックスも取り入れながら継続していく予定である。

¹ <http://www.paraview.org/>

² <http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/12s/>, <http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/12w/>

表 1 : 講義日程, 内容 (夏学期)

日付	時間	番号	内容
04月10日(火)	0840-1010	CS-01	はじめに, 有限要素法入門 (I)
04月17日(火)	0840-1010	CS-02	有限要素法入門 (II)
04月24日(火)	0840-1010	CS-03	弾性力学入門, 一次元コード (I)
05月11日(金)	0840-1010	CS-04	一次元コード (II)
05月15日(火)	0840-1010	CS-05	一次元コード (III), 線形ソルバー入門
05月22日(火)	0840-1010	CS-06	一次元コード (IV)
05月29日(火)	0840-1010	CS-07	一次元コード (V), 課題 1 出題
06月05日(火)	0840-1010	CS-08	三次元コード (I)
06月12日(火)	0840-1010	CS-09	三次元コード (II)
06月22日(金)	0840-1010	CS-10	三次元コード (III)
06月29日(金)	0840-1010	CS-11	三次元コード (IV)
07月03日(火)	0840-1010	CS-12	三次元コード (V), 課題 2 出題
07月10日(火)	0900-1000	CS-13	課題 1 解説

表 2 : 講義日程, 内容 (冬学期)

日付	時間	番号	内容
10月02日(火)	0840-1010	CW-01	はじめに
10月09日(火)	0840-1010	CW-02	復習, 並列データ構造
10月16日(火)	0840-1010	CW-03	並列データ構造 (前回の続き), Oakleaf-FX ログイン
10月30日(火)	0840-1010	CW-04	MPIによるプログラミング概要 (I)
11月06日(火)	0840-1010	CW-05	MPIによるプログラミング概要 (II)
11月20日(火)	0840-1010	CW-06	MPIによるプログラミング概要 (III)
11月27日(火)	0840-1010	CW-07	MPIによるプログラミング概要 (IV)
12月04日(火)	0840-1010	CW-08	課題 S1 解説
12月11日(火)	0840-1010	CW-09	チューニング入門
12月18日(火)	0840-1010	CW-10	課題 S2 解説
1月08日(火)	0840-1010	CW-11	三次元並列有限要素法 (I)
1月15日(火)	0840-1010	CW-12	三次元並列有限要素法 (II)
1月29日(火)	0840-1010	CW-13	三次元並列有限要素法 (III)
2月12日(火)	0840-1010	CW-14	最近の話題