

教育活動報告：計算科学プログラミング I (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、2017年度S Semesterに実施した、計算科学プログラミング I (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」が平成 28 年 4 月より開始されているが、本講義は、計算科学アライアンスの認定講義として今年度 (平成 29 年度) より新たに開講したものである。

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、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-U) 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身につけることを目的とした。具体的な学習内容は、計算科学を行う上で必要となる数理物理学的な知識として、物理現象の偏微分方程式による記述とその特性や種類、偏微分方程式の数値解法の一つである差分法を基にした支配方程式の離散化手法とその計算精度、計算スキームアルゴリズムと数値安定性、などの他、マルチコア CPU を搭載する計算機上で並列計算を行うために必要となる知識として、計算機アーキテクチャの特性、並列計算のための MPI/OpenMP プログラミング手法、逐次計算/並列計算の高速化、数値計算ライブラリの利用法、などについて講義・実習を行った。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、本講義は大学院向けであることから、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、7 回目までは差分法や並列計算に関する基礎的な内容となっている。8 回目以降は、実践的な科学技術解析用アプリケーションの開発へ向けて、電磁波解析や流体解析など、具体的な物理計算のための計算アルゴリズムの学習とプログラム実装等を行う、という内容であった。一方で、Reedbush を含む情報基盤センターのスーパーコンピュータは各月の最終週の金曜日に月末処理のためのメンテナンスを行うことが多く、本講義も毎週金曜 1 限に開講していた関係で、第 4、7、12 回はスーパーコンピュータが利用できない座学のための回となってしまう、当初考えていた講義の進行方法を変える必要があり、講義の組み立てに多少の苦労もあったが、基本的には講義は毎回、座学に 30

¹ <http://www.compsci-alliance.jp/>

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。

履修登録者数は合計 34 名であったが、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 名しか履修しておらず、他 28 名の内訳は、情報理工学系研究科の他専攻から 6 名、工学系研究科から 12 名、理学系研究科から 6 名、新領域創成科学研究科から 2 名、数理科学研究科から 1 名、総合文化研究科から 1 名と、他専攻、他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。しかし、実際に講義に出席して、単位を取得したのは 26 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のが普通であるが、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（2017 年度 S 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	04 月 07 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	04 月 14 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
3	04 月 21 日（金）	08:30 - 10:15	スーパーコンピュータ（Reedbush-U）の利用 アカウント発行、ログイン方法、ジョブ投入方法
4	04 月 28 日（金）	08:30 - 10:15	差分法の基礎 （座学のみ） 偏微分方程式の種類と特徴、離散化方法
5	05 月 12 日（金）	08:30 - 10:15	差分法プログラムの実行と可視化（1） 逐次計算、gnuplot の利用
6	05 月 19 日（金）	08:30 - 10:15	差分法プログラムの実行と可視化（2） MPI 並列計算、paraview の利用
7	05 月 26 日（金）	08:30 - 10:15	OpenMP 入門 （座学のみ） スレッド並列化、ハイブリッド並列化
8	06 月 02 日（金）	08:30 - 10:15	数値解析ライブラリの利用
9	06 月 09 日（金）	08:30 - 10:15	FDTD 法による電磁波解析
10	06 月 16 日（金）	08:30 - 10:15	非圧縮性流体（MAC 法系）の数値解析
11	06 月 23 日（金）	08:30 - 10:15	差分法における一般座標変換 メトリックス、ヤコビアン、格子生成法
12	06 月 30 日（金）	08:30 - 10:15	高性能プログラミングの基礎 （座学のみ） SIMD、メモリアリケッシュ
13	07 月 07 日（金）	08:30 - 10:15	粒子法（SPH 法、MPS 法）による流体解析