

教育活動報告：計算科学概論（工学部物理工学科・理学部物理学 学科共通開講科目）

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

大久保毅

東京大学大学院理学系研究科物理学専攻

本稿では、2018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4年生対象、月曜3限@工学部6号館セミナー室A/情報基盤センター大演習室1）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が、本講義は、計算科学アライアンスの認定講義として昨年度（2017年度）より新たに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し、並行して計算機を使った実習を行うことで、計算科学の現状を俯瞰し、最先端の研究とその手法についての知識を得ることを目的としている。表1に講義日程と各回の担当者、内容を示す。計算科学の幅広い分野に加えて、計算機科学分野も扱い、合計7テーマのオムニバス形式で、各テーマについて、基本的に座学1回と実習1回の計2回を基本とした講義を行った。2つ目のテーマ（第3回）だけは、座学1回のみで実習は無かった。実習については、情報基盤センターの大演習室1で教育用計算機システム（ECCS）の端末を利用させて頂いた。

本講義は、昨年度から新たに開講されたこともあり、講義の立ち上げに際し課題や反省点がいくつか挙がっていた。オムニバス形式の授業ということで、見方によっては、各テーマを担当する先生方が自分の分野でやっている計算をバラバラに紹介しているだけ、とも受け取れる構成となってしまう、テーマの順番や、各テーマの繋がりを意識するなど（各先生方のスケジュールの都合もあるので、簡単ではないが）、より体系的な構成を考えるべきであった。また、昨年度の当初の授業計画では、本講義でスーパーコンピュータを利用する予定はなく、全ての実習はECCSで計算可能なアプリケーションの利用やプログラミングを行う予定であった。しかし本講義が、計算科学の現状を俯瞰し、最先端の研究とその手法についての知識を得ることを目的とする以上、スーパーコンピュータの利用は欠かせないであろう、という判断のもと、急遽、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**）を教育利用させて頂くこととなったという経緯がある。したがって昨年度は、第9回（担当：松本）と11回（担当：田浦）の2回のみ、**Reedbush** を利用して実習を行った。

今年度はこれらの反省から、講義日程の前半（第1回～第5回）は、計算機科学よりの話題を

¹ <http://www.compsci-alliance.jp/>

まとめ、中・後半（第 6 回～第 13 回）は、各専門分野の先生方による計算科学よりの話題をまとめた。また、スーパーコンピュータの利用についても、第 2 週目の講義から利用を開始することを前提に実習内容を見直すこととなり、ほとんどの学生にとってスーパーコンピュータの利用自体が始めてであったので、それを踏まえて、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的な内容を第 1 週目に講義し、第 2 回目は **Reedbush** の基本的な利用方法や、ソースコードのコンパイル・実行方法、**MPI** プログラミングに関する基礎について、ハンズオンによる実習を行った。続けて第 4, 5 回では、高性能プログラミングの実践ということで、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に関する実習を行った。

講義の成績は、各テーマの担当者の先生方に、講義・実習内容に関連したレポート課題を設定して頂き、学生はそれら合計 7 つの課題のうちから 3 つを選んで提出することで評価を行った。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。履修登録者数は合計 33 名であったが、3 つ以上の課題を提出し、最終的に単位を取得した者は 17 名であった。

本講義を通じて、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、実際にアプリケーションを動かしたり、プログラミングをしたりといった、計算科学の手法に関する実践的な実習ができたことが学生にとって貴重な経験であったとすれば、大変うれしく思う。

表 1 講義日程・担当者・内容

回数	日付	担当者	内容
1	04 月 09 日 (月)	松本 正晴 ¹	スーパーコンピュータと並列プログラミング
2	04 月 16 日 (月)		Reedbush の利用, MPI プログラミング
3	04 月 23 日 (月)	中村 宏 ²	高性能計算機のアーキテクチャ
4	05 月 07 日 (月)	田浦健次朗 ³	高性能プログラミングと性能測定
5	05 月 21 日 (月)		Reedbush の利用, SIMD , OpenMP
6	05 月 28 日 (月)	市村 強 ⁴	大規模疎行列ソルバー入門
7	06 月 04 日 (月)		有限要素解析の高速化
8	06 月 11 日 (月)	大久保 毅 ⁵	格子スピン模型の計算科学
9	06 月 18 日 (月)		モンテカルロ法, テンソルネットワーク法
10	06 月 25 日 (月)	奥田 洋司 ⁶	連続体の並列有限要素法解析入門
11	07 月 02 日 (月)		構造解析アプリケーションによる CAE 実践
12	07 月 09 日 (月)	山地 洋平 ⁷	大規模疎行列固有値問題と量子多体問題
13	07 月 17 日 (火)		オープンソースアプリ HΦ による実習

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. 大学院情報理工学系研究科電子情報学専攻
4. 地震研究所巨大地震津波災害予測研究センター
5. 大学院理学系研究科物理学専攻
6. 大学院新領域創成科学研究科人間環境学専攻
7. 大学院工学系研究科物理工学専攻