

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、2019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@工学部6号館セミナー室A/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。1つ目のテーマ（第1回）だけは、その内容から実習を行うことが難しいため、座学1回のみで実習は無く、また講義と各教員のスケジュールを勘案した結果、山地先生にお願いしたテーマでは、第4回（座学）と第7回（実習）と、連続した日程ではなくなってしまった。実習については、情報基盤センターの大演習室2で教育用計算機システム（ECCS）の端末を利用させて頂いた。

また本講義では、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、という判断の下、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いていた。これは、第3回目の講義から利用を開始することを前提に実習内容を組んでおり、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初めてであったので、それを踏まえて、第1回に、近年の高性能計算機のアーキテクチャについて、第2回に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について講義し、第3回は 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。第3回以降は、ECCS 端末と Reedbush の併用を前提に、第4、7回には量子多体問題とオープンソースアプリケーション HΦ の利用、第5、6回には、有限要素解析のための大規模疎行列ソルバー、第8、9回では、高性能

¹ <http://www.compsci-alliance.jp/>

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、第 10, 11 回には並列化構造解析アプリケーションの利用、そして第 12, 13 回は、格子スピン模型の計算科学に関する講義と実習を行った。

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。毎回の講義参加者数は約 20 名程度であったが、3 つ以上の課題を提出し、最終的に単位を取得した者は 7 名のみであった（昨年度は 17 名）。本講義では、各テーマを担当する教員が自分の分野でやっている研究（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ことを避けるため、テーマの順番や、各テーマの繋がりを意識するなど、より体系的な構成を考えるべきとの判断の下、昨年度は、講義日程の前半（第 1 回～第 5 回）は、計算機科学寄りの話題をまとめ、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寄りの話題をまとめることができていたが、今年度は上述の通り、各教員のスケジュール調整が難しく、テーマの順番について課題を残す結果となってしまった。また単位取得者が少なかったのは、このテーマの順番が受講者の興味を削いでしまった原因の一部になった可能性があり、これらは今後の課題である。

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 08 日 (月)	中村 宏 ¹	高性能計算機のアーキテクチャ
2	04 月 15 日 (月)	松本 正晴	スーパーコンピュータと並列プログラミング
3	04 月 22 日 (月)		Reedbush の利用, MPI プログラミング
4	05 月 13 日 (月)	山地 洋平 ²	大規模疎行列固有値問題と量子多体問題
5	05 月 27 日 (月)	市村 強 ³	大規模疎行列ソルバー入門
6	06 月 03 日 (月)		有限要素解析の高速化
7	06 月 10 日 (月)	山地 洋平	オープンソースアプリ HΦ による実習
8	06 月 17 日 (月)	田浦健次朗 ⁴	高性能プログラミングと性能測定
9	06 月 24 日 (月)		Reedbush の利用, SIMD, OpenMP
10	07 月 01 日 (月)	奥田 洋司 ⁵	連続体の並列有限要素法解析入門
11	07 月 08 日 (月)		構造解析アプリケーションによる CAE 実践
12	07 月 17 日 (水)	大久保 毅	格子スピン模型の計算科学
13	07 月 18 日 (木)		モンテカルロ法, テンソルネットワーク法

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