

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、2020年度Sセメスターに実施した、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@オンライン講義) 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年度より開講されているものである。

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、本講義は、座学とスーパーコンピュータ (Oakbridge-CX) 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する。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種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、などに関する座学・実習である。

昨年度まで本講義は情報基盤センターの大演習室において対面で行われており、実習に用いるローカル端末として教育用計算機システム (ECCS) を利用させていただいていたが、今年度は新型コロナウイルスの影響により対面講義が禁止となったことにより、Zoom を用いたオンライン講義となり、実習には個人所有の PC を用いることとした。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。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。5回目の授業から Oakbridge-CX の利用を開始し、8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。9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、Oakbridge-CX 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11回はスーパーコンピュータが利用できない座学のみとなり、講義の組み立てに多少の苦労もあ

¹ <https://www.compsci-alliance.jp/>

ったが、基本的には講義は毎回、座学に 30 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 2017 年度が 34 名、2018 年度は 37 名、2019 年度は 75 名と年々増加傾向にあり、今年度は 80 名となった。内訳は、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が 15 名、情報理工学系研究科の他専攻から 27 名、工学系研究科から 26 名、理学系研究科から 6 名、その他研究科から 6 名と、他専攻・研究科のさまざまな学生が履修している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 69 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（2020 年度 S セメスター@オンライン講義）

回数	日付	時間	内容
1	04 月 03 日（金）	08:30 - 10:15	ガイダンス 講義の進め方や Zoom の使い方等に関する説明
2	04 月 10 日（金）	08:30 - 10:15	イントロダクション 計算科学とは？スーパーコンピュータとは？
3	04 月 17 日（金）	08:30 - 10:15	並列プログラミングの基礎 アムダールの法則、台数効果
4	04 月 24 日（金）	08:30 - 10:15	MPI の基礎 プロセス並列、集団通信、1 対 1 通信
5	05 月 01 日（金）	08:30 - 10:15	スーパーコンピュータ（Oakbridge-CX）の利用 アカウント発行、ログイン方法、ジョブ投入方法
6	05 月 08 日（金）	08:30 - 10:15	スーパーコンピュータ（Oakbridge-CX）の利用 （第 5 回に引き続き）
7	05 月 15 日（金）	08:30 - 10:15	Poisson 方程式の差分解法と並列化 偏微分方程式の種類や特徴、領域分割
8	06 月 05 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
9	06 月 12 日（金）	08:30 - 10:15	FDTD 法による電磁波解析
10	06 月 19 日（金）	08:30 - 10:15	非圧縮性流体（MAC 法系）の数値解析
11	06 月 26 日（金）	08:30 - 10:15	高性能プログラミングの基礎（座学のみ） SIMD、メモリキャッシュ
12	07 月 03 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
13	07 月 10 日（金）	08:30 - 10:15	粒子法（SPH 法、MPS 法）による流体解析