

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、2020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@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。

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、山地先生と奥田先生にお願いしたテーマでは連続した日程ではなくなってしまった。

昨年度まで本講義では、座学パートは工学部6号館セミナー室A、実習パートは情報基盤センターの大演習室においてそれぞれ対面で行われ、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、全て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。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（Oakbridge-CX）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Oakbridge-CX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Oakbridge-CXの併用を前提に、第4、8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、9回には、並列化構造解

¹ <http://www.compsci-alliance.jp/>

析アプリケーションの利用, 第 6, 7 回では, 高性能プログラミングの実践ということで, `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 回には有限要素解析のための大規模疎行列ソルバー, 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 15 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 6 名のみであった。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り, オンライン講義への対応のために講義開始日が 4 月 20 日までずれ込んだことや, 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。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慮していく必要がある。受講者のうち, 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もあり, 今後は `with` コロナを見据えて, オンライン講義を前提とした講義構成を考えていく必要がある。

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 20 日 (月)	中村 宏 ¹	高性能計算機のアーキテクチャ
2	04 月 27 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	05 月 11 日 (月)		Oakbridge-CX の利用, MPI プログラミング
4	05 月 18 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 25 日 (月)	奥田 洋司 ³	連続体の並列有限要素法解析入門
6	06 月 08 日 (月)	田浦健次朗 ⁴	高性能プログラミングと性能測定
7	06 月 15 日 (月)		SIMD プログラミング, <code>OpenMP</code> 並列化
8	06 月 22 日 (月)	山地 洋平	オープンソースアプリ <code>HΦ</code> による実習
9	06 月 29 日 (月)	奥田 洋司	構造解析アプリケーションによる CAE 実践
10	07 月 06 日 (月)	市村 強 ⁵	大規模疎行列ソルバー入門
11	07 月 13 日 (月)		有限要素解析の高速化
12	07 月 14 日 (火)	大久保 毅	格子スピン模型の計算科学
13	07 月 15 日 (水)		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. 大学院新領域創成科学研究科人間環境学専攻
4. 大学院情報理工学系研究科電子情報学専攻
5. 地震研究所巨大地震津波災害予測研究センター