

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)

大久保 毅

東京大学大学院理学系研究科量子ソフトウェア寄付講座

本稿では、2021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）の内容について紹介する。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することで、計算科学の現状を俯瞰し、最先端の研究と手法についての知識を得ることを目的としている。また、学生の理解を深める工夫として、座学と実習をセットで行うことで、計算科学の各手法について実際に手を動かして体験できる場を準備している点が一つの特色である。表1に講義日程と各回の担当者、内容を示している。計算科学の幅広い分野に加えて、計算機科学分野も扱い、計7テーマのオムニバス形式で実施した。座学1回と実習1回の計2回を基本とし、第1回のみ、内容から、座学1回のみとなっている。

昨年度に引き続き、新型コロナウイルスの感染拡大の影響により、座学・実習ともにZoomを用いたオンライン講義となり、実習は基本的に学生所有のPCを用いて行った。また、本講義が最先端の計算科学の現状を知ることを目的としていることから、スーパーコンピュータの使用を体験することは重要であり、情報基盤センターの教育利用制度を利用してスーパーコンピュータ（Oakbridge-CX）を利用させて頂いた。ほとんどの学生にとって、スーパーコンピュータの利用は初めてであることが想定されるため、第1回で高性能計算機のアーキテクチャについて学んだのち、第2、3回で、スーパーコンピュータの特性や並列プログラミンの基礎の学習と、Oakbridge-CXの利用方法、及び、OpenMP, MPI プログラミングの実習を行った。第4回以降では、Oakbridge-CXも使用できることを前提として、各教員がテーマに沿った実習・座学を展開した。オンライン環境での実習では、テーマに応じて、Google Colaboratory や Amazon WorkSpace など活用することで実習環境の統一と整備を行った。第4、5回では、並列化構造解析アプリケーションの利用、第6、7回では、量子多体問題を例に、大規模疎行列固有値問題の解法を扱い、第8、9回には、有限要素法を例とした大規模疎行列ソルバー、地震シミュレーションの紹介と有限要素法のSIMD化を行った。続いて、第10、13回では、統計物理学に現れる格子スピン模型を例に、マルコフ連鎖モンテカルロ法とテンソルネットワーク形式による実空間繰り込み群を、第11、12回では、高性能プログラミングの実践として、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を扱った。

講義の成績は、各テーマ担当の教員が、講義・実習内容に関連したレポート課題を設定し、学

¹ <https://www.compsci-alliance.jp/>

生は合計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した。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。Oakbridge-CXのアカウントを取得し、毎回の講義に出席していた学生は15名程度であったが、3つ以上のレポートを提出し、最終的に単位を取得した者は4名であった。今年度も新型コロナウイルス感染拡大の影響により、講義の大多数がオンラインとなったため、学生のレポート負担が大きかったことが想像される。これが、受講者数に比べて最終的な単位取得者が少数に留まってしまった原因の一つではと考えている。

本講義はオムニバスであるため、例年、担当教員間でのスケジュール調整が難しいが、本年度は比較的まとまり良く、前半に計算機ハードウェアとスーパーコンピュータ入門を行った後に、種々の計算科学の事例に入れることができ、また、講義と実習が連続して行えなかった例も1件のみに抑えることができた。そのため、参加者にとっては、講義内容が理解しやすい状況にできたと考えられる。一方で、昨年に引き続き、オンラインでの実施となったことで、特に実習において、実習スピードが異なる学生が混在している際の、細かなサポートが対面講義に比べて不足していた可能性もあり、今後、オンラインでの実習について、改善の検討も必要だと考えている。

本講義の座学と実習を通じて、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、実際に手を動かして、アプリケーション利用やプログラミングの実践的な実習ができたことが、学生にとって貴重な経験になっていれば幸いである。

表1 講義日程・担当者・内容

回数	日付	担当者	内容
1	04月05日(月)	中村 宏 ¹	高性能計算機のアーキテクチャ
2	04月19日(月)	吉本 芳英 ²	スーパーコンピュータと並列プログラミング
3	04月26日(月)		Oakbridge-CX, OpenMP, MPI プログラミング
4	05月17日(月)	奥田 洋司 ³	連続体の並列有限要素法解析入門
5	05月24日(月)		構造解析アプリケーションによる CAE 実践
6	05月31日(月)	山地 洋平 ⁴	大規模疎行列固有値問題と量子多体問題
7	06月07日(月)		1D Heisenberg model のランチョス法
8	06月14日(月)	市村 強 ⁵	大規模疎行列ソルバー入門
9	06月21日(月)	藤田 航平 ⁵	有限要素法シミュレーションの SIMD 化
10	06月28日(月)	大久保 毅	格子スピン模型の計算科学
10	07月05日(月)	田浦 健次朗 ⁶	高性能プログラミングと性能測定
11	07月12日(月)		Oakbridge-CX での SIMD, マルチコア並列化
13	07月19日(月)	大久保 毅	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. 大学院情報理工学系研究科コンピュータ科学専攻
3. 大学院新領域創成科学研究科人間環境学専攻
4. 物質・材料研究機構エネルギー・環境材料研究拠点
5. 地震研究所計算地球科学研究センター
6. 大学院情報理工学系研究科電子情報学専攻