

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)

藤 堂 眞 治

東京大学大学院理学系研究科

本稿では、2022年度S Semester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）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。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。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6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、その内容から、座学1回のみとしている。

2020年度、2021年度は、新型コロナウイルスの感染拡大の影響により、完全オンライン講義となったが、2022年度は最初の2回を除き、3回目以降は対面で実施した。本講義は最先端の計算科学の現状を知ることを目的としている。そのためにもスーパーコンピュータを使ったシミュレーション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。実習では、学生が自身のPCからOakbridge-CXにログインして行った。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。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グの基礎の学習と、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座学・実習を展開した。第4, 10回では、並列化構造解析アプリケーションの利用、第5, 6回では、高性能プログラミングの実践として、ベクタintrinsic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。第7, 8回では、密度汎関数電子状態計算により物質科学シミュレーションを、第9, 11回は、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。

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、学生は合計6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。24名の学生がOakbridge-CXのアカウント

¹ <https://www.compsci-alliance.jp/>

トを取得し実習に取り組んだ。そのうち、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9名であった。

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	4月11日(月)	中村 宏 ¹	高性能計算機のアーキテクチャ (座学のみ)
2	4月18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 (座学・実習)
3	5月2日(月)		
4	5月16日(月)	奥田洋司 ³	並列FEMとCAE (Computer Aided Engineering) (座学)
5	6月6日(月)	田浦健次朗 ⁴	高性能プログラミングと性能測定 (座学・実習)
6	6月13日(月)		
7	6月20日(月)	尾崎泰助 ⁵	第一原理計算による物質科学研究 (座学・実習)
8	6月27日(月)		
9	7月4日(月)	市村 強 ⁶ 藤田航平 ⁶	大規模疎行列ソルバー入門 (座学)
10	7月11日(月)	奥田洋司 ³	並列FEMとCAE (Computer Aided Engineering) (実習)
11	7月19日(月)	市村 強 ⁶ 藤田航平 ⁶	大規模疎行列ソルバー入門 (実習)

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. 大学院情報理工学系研究科電子情報学専攻
5. 物性研究所附属物質設計評価施設
6. 地震研究所計算地球科学研究センター