

# 東京大学での計算科学教育

資料提供:

中島研吾 (東大・情報基盤センター特任教授)

説明: 常行真司 (東大・理)

# 背景

- 「次世代スーパーコンピュータ」, 「T2Kオープンスパコン」, 等の開発を背景に, 大規模並列シミュレーションへの期待は, 産学において一層高まっている。
- 並列計算機を使いこなすためには, 「並列プログラミング」の習得が必須である。
  - 並列計算機を使いこなす, アプリケーション分野の研究者, 技術者の育成
- 人材育成
  - とても大きな課題
  - 理研シンポジウム(2008年9月)

# 背景(続き)

- T2K連携
  - 東大の役割は「人材育成」
- 他大学, コミュニティのプログラムとの連携
  - e.g. 大学院GP(神戸大他)



# 学際計算科学・工学 人材育成 プログラム(東京大学)

- 情報基盤センター, 理・情報理工学・工学系研究科, 新領域創成科学研究科, 気候センター, 生産技術研究所によって, 全学的なHPC教育プログラムの整備が検討されている(平尾委員会)(2008.2.~)
- 地球惑星物理学科・地球惑星科学専攻における取り組みがモデルとなっている
  - 1990年代から世界的にも他に類を見ない充実した計算機・プログラミング教育が行なわれている
  - FY.2004~: 並列プログラミング教育(21世紀COE)
- 平成21年度からの実施を予定
  - 平成20年度冬学期は試験的に実施中
  - 現在はガイドライン策定中(WG)

# 地球惑星物理学科, 地球惑星科学専攻

- 地球惑星物理学演習: 3年夏
  - 計算機リテラシー
  - FORTRAN
  - 基本的な数値解析
- 地球物理数値解析: 4年夏, 大学院(2005~2007)
  - 偏微分方程式の数値解法
  - 差分法, 有限要素法
- 並列計算プログラミング, 先端計算機演習I/II(2004~)
  - 有限体積法, 境界要素法
  - SPMDの考え方, MPI, OpenMP
  - <http://www-solid.eps.s.u-tokyo.ac.jp/~nakajima/class/>
- その他「地球物理データ解析」, 「時系列データ解析」など

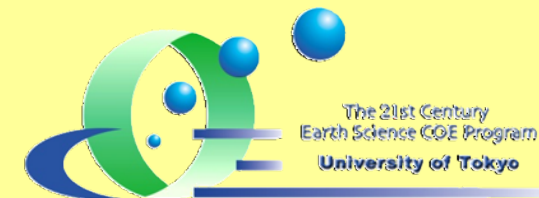
# 地球惑星物理学演習

- <http://www-geoph.eps.s.u-tokyo.ac.jp/ta/resume2007/index.php>
- 週3回, 各2コマ(3限, 4限)
  - 計算機リテラシー 16コマ
  - FORTRAN 20コマ
  - 時間発展微分方程式 16コマ
  - 行列 16コマ
  - データ解析 16コマ
- かなり充実した内容
  - ほぼ「計算機漬け」・・・これが原因で計算機嫌いになる人もいるらしい
- 受講者35人, 必ず2~3名のTAがつく, 1人1台の端末
- 1980年代末にはこの手法が定着

# 地球物理数値解析

- 偏微分方程式の数値解法のアルゴリズムとプログラミング
  - 非定常一次元圧縮性流体(差分法, 陽解法): 横山(央)
  - 非定常・定常二次元非圧縮性流体, ポアソン方程式(差分法, 陽解法・陰解法): 升本
  - 定常熱伝導方程式(有限要素法, 陰解法): 中島
- 大学院との共通講義
  - 受講者の3分の1程度は大学院生(主に学外から進学したM1)
- 第3部「有限要素法」(中島担当部)
  - 有限要素法の背景から二次元双一次アイソパラメトリック要素を使用したプログラムまでの解説を5コマの講義で実施
  - 反復法による連立一次方程式求解, 疎行列格納法(CRS)
  - 盛りだくさんの内容, プログラムを自作するのは難しいと考え, 教員が作成したプログラムを「解説」し「読解」することを中心
    - 実用的なプログラムを意識したマテリアル

# 多圏地球COEにおける 並列計算プログラミング教育



- 「並列計算プログラミング」, 「先端計算機演習I・II」は「地球シミュレータ」に代表されるような大型並列計算機を使いこなし, 未解決の問題にチャレンジしていくような研究者を育成することが重要な目標の一つである。
- これまで, 計算機科学を専門としない学生に対して科学技術シミュレーションのための並列プログラミング技術を体系的に教える授業は, 日本では皆無であった。
- 「並列計算プログラミング」, 「先端計算機演習I・II」は, そうした試みの日本で最初の内の一つであると自負している。
  - 現在でもこれだけの内容をカバーするものは世界的に見ても他に例は無い!



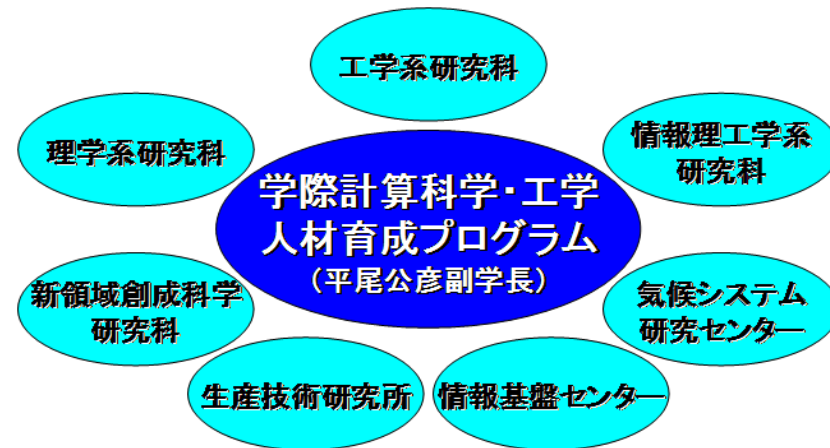
# 2008年度夏季集中講義

## 並列計算プログラミング, 先端計算機演習

日付	番号	内容
7月23日(水)	CS-01	イントロダクション, 数値解析の基礎, 線形ソルバー(I)
7月24日(木)	CS-02	共役勾配法による一次元熱伝導解析プログラム
7月25日(金)	CS-03	MPIによるプログラミング概要(I)
7月30日(水)	CS-04	MPIによるプログラミング概要(II)
7月31日(木)	CS-05	MPIによるプログラミング概要(II)
8月25日(月)	CS-06	課題S1解説, T2Kオープンスパコン(東大)の概要, 見学
8月26日(火)	CS-07	課題S2解説, 線形ソルバー(II)
8月27日(水)	CS-08	チューニング入門(I)
8月28日(木)	CS-09	並列アプリケーション開発法(I)有限体積法, 並列可視化手法
8月29日(金)	CS-10	並列アプリケーション開発法(II)有限体積法:局所分散データ構造, 領域分割
9月08日(月)	CS-11	並列アプリケーション開発法(III)有限体積法並列化
9月09日(火)	CS-12	並列アプリケーション開発法(IV)粒子間熱伝導
9月25日(木)	CS-13	チューニング入門(II)
9月26日(金)	-	演習(自習)

# 前提・基本方針

- 修士課程修了時まで「並列プログラミング」を習得
  - 基礎から並列計算までの積み重ね
- 幅広い知識: SMASH
- 無理のないカリキュラム
  - 現行のカリキュラムをできるだけ崩さない
  - ガイドラインに従って既存の講義・演習を改良⇒読み替え
- 多様なスタイル
  - 大学院からの進学者への配慮
  - 集中講義, 講習会, e-Learning
- T2K連携
  - 教材共通化, 講師相互派遣
- 普及: T2Kから全国へ



# Scientific Computing = SMASH

David Levermore (Univ.Maryland)

<http://www.math.umd.edu/~lvrmr/>

**Science**

**Modeling**

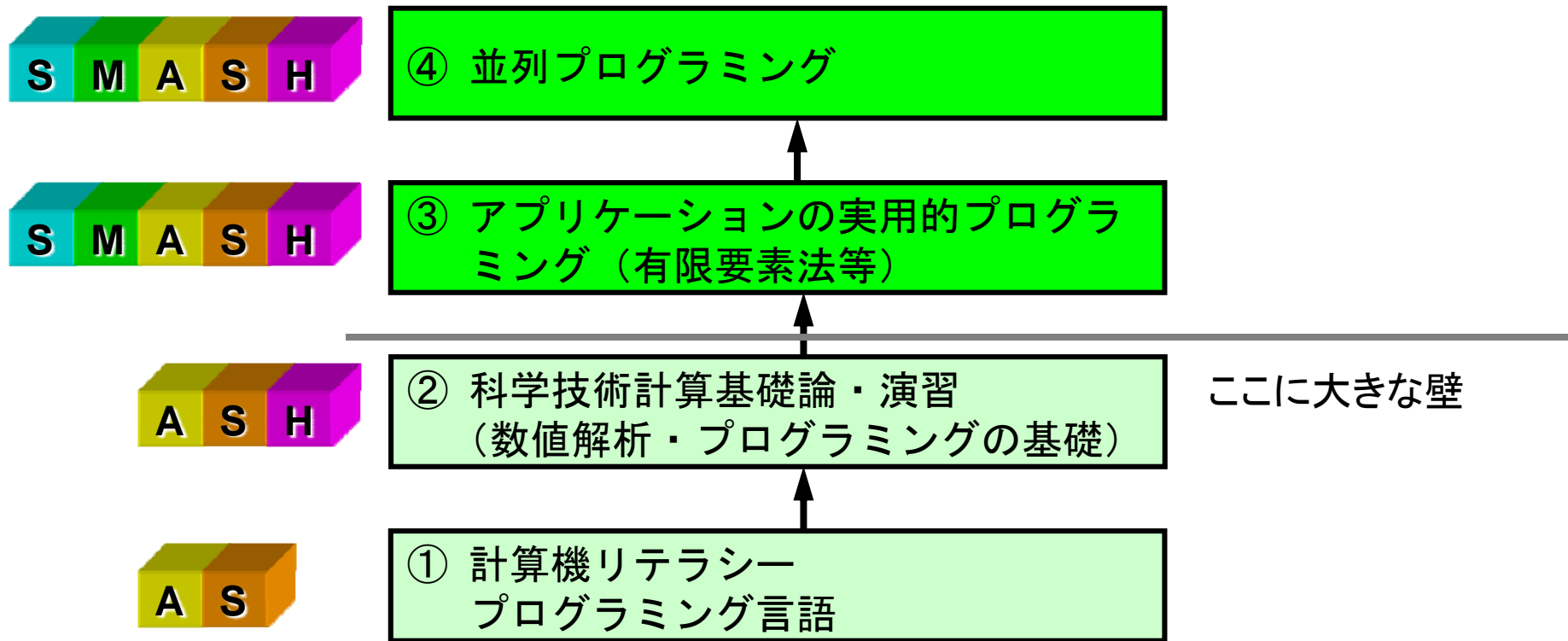
**Algorithm**

**Software**

**Hardware**

- これだけ幅広い分野を扱わなければならない
- 分野間の協力の重要性を示しているとも言える。
- 一人で全てをカバーすることは難しいが、「並列」シミュレーションコードを全て自力で開発するためには、これだけの範囲の知識と経験はそれぞれある程度必要
  - 例：チューニング (ES)

# 並列プログラミングへの道



- ③がとにかく重要
- ①～④の各レベル(縦糸)において「SMASH」(横糸)

# レベルに応じた教育(実はA~B)

- A型:「SMASH」
  - 並列プログラムを全て自分で開発(可視化などは除く)
- B型:「SMASH」
  - 「HPC-MW・HEC-MW」等により並列プログラムを自分で開発
  - オープンソースのコードを自分で改良できる
    - 少しでも新しいことをやるとなると「A型」級の知識は必要
- C型:「SMASH」
  - 既存の並列プログラムを使用してシミュレーション等を実施する
    - RSS21, Gaussian
- S型(究極の人材):A型に加えて
  - コンパイラ開発, 計算機設計に提言, 研究協力ができる
  - 反復法の前処理手法など, アルゴリズムの開発に貢献できる
  - ライブラリ, HPC-MWなど計算基盤の整備に貢献できる
- 各レベルに応じた教育プログラムを提供することが重要

# カリキュラム案(連続体力学):CS考慮

