

平成22年度研究科横断型教育プログラム (Aタイプ) 授業科目

担当研究科名	情報学研究科				授業の場所	学術情報メディアセンター南館 201			
授業科目名	計算科学入門				講義担当者 所属・氏名	情報学研究科・教授・中村佳正、 教授・船越満明、 教授・永持仁、 特定准教授・木村欣司、 助教・藤原宏志 学術情報メディアセンター・ 特定准教授・矢作日出樹			
配当 学年	修士	単位 数	2単位	開講 期	前期	曜時限	水 5 限 (16:30-18:00)	授業形態	講義・演習
〔授業の概要・目的〕									
<p>計算アルゴリズムと計算機アーキテクチャによる高精度計算と高速計算の基礎、並列計算技法、応用事例を教授する。コンピュータを活用する上で最も重要な逐次計算の高速化技法と、マルチコア CPU を搭載する計算機での並列計算技法について、C 言語を利用して実習を行う。計算科学についての基礎力をつけることを目的とする。</p> <p>【研究科横断型教育の概要・目的】 計算機アーキテクチャの理解、並列プログラミングの習得に止まらず、多くの事例研究の学習により、幅広い分野における計算科学の技法の習得ができる。そのため、より実践的な場面での学習成果の活用が期待される。特に、計算科学の技法を強く意識していなかった理系分野の大学院生が、この授業を受講することにより、新しい視点で、自分の分野の研究にアプローチできるようになる。</p>									
〔授業計画と内容〕									
<p>シミュレーション科学の基礎として、計算の精度と実行時間、並列プログラミング (OpenMP と MPI 入門)、事例研究について学ぶ。全 15 回の予定は以下の通りである。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・数値計算についての講義 4 回 (1)数値計算の精度と安定性 数値計算の結果の精度を向上させるための数理的背景を持つ事例、多倍長計算の活用、計算機における演算、計算スキームの安定性などの解説 (2)数値計算の高速化 BLAS&LAPACK 数値計算を高速化するための一つの有効な手段として、数値計算ライブラリとして有名な BLAS と LAPACK の構造やその活用法の解説 ・計算科学についての講義 3 回 (1)逐次計算の高速化と並列計算 計算機アーキテクチャの説明、キャッシュの有効活用、データの再利用などによる逐次計算の高速化とデータ分割、キュー、粒度などの並列計算の基礎理論の説明 (2)OpenMP による並列計算 並列計算のための OpenMP プログラミング技法、基礎理論、逐次プログラムからの変更点などの紹介 (3)MPI による並列計算 並列計算のための MPI の並列モデル、基礎理論、基本関数の使い方などの解説 ・スーパーコンピュータ実習 3 回 (1) C 言語による逐次計算の高速化技法についての実習 (2) C 言語によるマルチコア CPU を搭載する計算機での並列計算技法についての実習 (3) C 言語による分散メモリ型並列計算機での並列計算技法についての実習 ・事例研究についての講義 5 回 (1)多体問題等におけるシミュレーション事例研究 (2)化学反応の理論的解明と機能分子設計におけるスパコンの活用についての事例研究 (3)流体力学におけるシミュレーション事例研究 (4)経済時系列分析におけるシミュレーション事例研究 (5)最適化におけるシミュレーション事例研究 									
〔履修要件〕									
<ul style="list-style-type: none"> ・課題実習では、学術情報メディアセンターのスーパーコンピュータを使用します。情報学研究科に所属の学生は事前に取得しているアカウントを使用します。他研究科履修生については本演習用に必要に応じてアカウントを配布します。 ・実習用端末として、ノート型 PC を持参してください。持参できるノート型 PC がない場合には情報学研究科教務掛にあらかじめ申し出てください。 									

〔成績評価の方法・基準〕
<p>計算を高速、高精度化するための技法の習得と、逐次計算の高速化ならびに並列計算の基礎知識を身につけることを目標とします。さらに、ライブラリの有効活用や、事例研究を通しての実問題への有効なアプローチのための数値と並列化などの効率的な計算のための知識を習得することも目標とします。「数値計算についての講義」とスーパーコンピュータ実習の中で、レポート課題を出題し、そのレポートの内容から習熟度を判断し、さらに出席状況を加えて、総合的に評価します。</p>
〔教科書〕
<p>講義資料を配布 特に定めない</p>
〔参考書等〕
<p>特に定めない</p>
〔その他(授業外学習の指示・オフィスアワー等)〕
<p>中村佳正：水曜・4限目 14:45-16:15 ynaka@i.kyoto-u.ac.jp 木村欣司：金曜・3限目 13:00-14:30 kkimur@amp.i.kyoto-u.ac.jp 矢作日出樹：月曜・3限目 13:00-14:30 yahagi@media.kyoto-u.ac.jp 授業時間外で、質問がある場合には、あらかじめ、上記のアドレスにメールをすること。</p>