

平成29年度研究科横断型教育プログラム（Aタイプ）授業科目

開講方式	Aタイプ (研究科 開講型)	研究科名	情報学研究科	カテゴリー	情報活用・計算科学 科目群	横断 区分	理系横断型				
授業科目名 (英訳)	計算科学演習 A (Exercise on Computational Science A)			講義担当者 所属・職名・ 氏名	情報学研究科・ 特定准教授・木村欣司 情報学研究科・特定助教・ 關戸啓人	開講 場所	吉田南 学術情報メディ アセンター南館 201				
配当 学年	修士 博士後期 専門職	単位 数	1単位	開講期	前期	曜時限	月3限 (13:00-14:30)	授業 形態	演習	使用 言語	日本語
【授業の概要・目的】											
<p>大規模データに対する統計処理を通して、高速な逐次計算プログラムを作成する技法と並列計算の初歩を学ぶことを目的とする。数値計算と統計計算について簡単に触れた後、計算機アーキテクチャの説明、キャッシュの有効活用などの話題を解説し、高速な逐次計算プログラムを作成する上での注意点を解説する。さらに、マルチコア CPU を搭載する計算機での代表的な並列計算技法である OpenMP と分散メモリ型並列計算機のための並列化技法である MPI について学ぶ。</p> <p>実習では、最小二乗法の問題を解くためのコードを作成する。最小二乗法については、列フルランク行列の場合には、QR 分解によって計算可能である。よって、始めに、列フルランク行列の場合を仮定し、QR 分解を行うための逐次計算のコードを、「逐次計算の高速化」の内容を意識して作成する。次に、そのアルゴリズムを基礎として、MPI 並列計算用の QR 分解法である All Reduce アルゴリズムを実装する。列フルランクでない行列については、ピボット選択付 QR 分解の後、特異値分解を用いてノルム最小二乗解を求めるのが一般的であったが、近年、それに代わるより簡便な新しい手法が提案されており、この授業では、その手法を実装する。さらに、作成した逐次計算のコードを OpenMP の技法を用いた並列計算のコードへと拡張する。</p>											
【研究科横断型教育の概要・目的】											
<p>基本的な並列プログラミングの習得に止まらず、具体的な題材を課題とした実習により、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>											
【到達目標】											
<p>統計の基礎事項である最小二乗法についてその概念や利用法を理解する。加えて、高速な逐次計算プログラムを作成する技法と並列計算技法を理解する。マルチコア CPU を搭載する計算機における並列計算技法である OpenMP と、分散メモリ型並列計算機における並列計算技法である MPI について、その利用法を習得することを到達目標とする。</p>											
【授業計画と内容】											
<ul style="list-style-type: none"> ・数値計算と統計計算 (2 回) 計算科学の重要な手法である数値解析・数値計算の基礎について講述する。 線形代数の知識について復習した後、計算機で統計計算を行う上で重要となるアルゴリズムを解説する。特に、連立一次方程式の解法である LU 分解、最小二乗法において基礎となる QR 分解について解説する。 ・逐次計算の高速化(1 回) 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、さらに演算器の有効活用、効率的なプログラムを作成する上での注意事項などハイパフォーマンスコンピューティングという分野の基本的な内容を解説する。 ・OpenMP 入門(2 回) OpenMP 並列プログラミングの基本的な考え方と技法について解説する。簡単な課題を用いて実習を行う。 ・MPI 入門(2 回) MPI 並列プログラミングの基本的な考え方と技法について解説する。簡単な課題を用いて実習を行う。 ・最小二乗法を行うための C 言語によるコードの作成 (8 回) 最小二乗法については、列フルランク行列の場合には、QR 分解によって計算可能である。よって、始めに、列フルランク行列の場合を仮定し、QR 分解を行うための逐次計算のコードを、「逐次計算の高速化」の内容を意識して作成する。次に、そのアルゴリズムを基礎として、MPI 並列計算用の QR 分解法である All Reduce アルゴリズムを実装する。 列フルランクでない行列については、ピボット選択付 QR 分解の後、特異値分解を用いてノルム最小二乗解を求めるのが一般的であったが、近年、それに代わるより簡便な新しい手法が提案されており、この授業では、その手法を実装する。さらに、作成した逐次計算のコードを OpenMP の技法を用いた並列計算のコードへと拡張する。 											

<p>〔履修要件〕</p> <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 がない場合には教員に申し出てください。
<p>〔成績評価の方法・観点及び達成度〕</p> <p>レポート試験の成績(80%) 平常点評価(20%)</p> <p>「All Reduce アルゴリズムを実装した並列計算のコード」を作成するレポート課題を出題する(配点 40 点)。 「OpenMP の技法を用いた並列計算のコード」を作成するレポート課題を出題する(配点 40 点)。 それぞれプログラムを作成することを課題とするレポートであり、独自の工夫がみられるものについては、高い点を与えます。平常点評価には、出席状況と質問など通した授業への積極的な参加を評価します。</p>
<p>〔教科書〕</p> <p>講義資料を配布する。 教科書は特に定めない。</p>
<p>〔参考書等〕</p> <p>特に定めない。</p>
<p>〔授業外学修(予習・復習)等〕</p> <p>最小二乗法について理解するための予習あるいは復習を期待する。プログラミング言語 C については、その文法を習得していることを前提として演習を行う為、それについての予習と復習を授業と並行して行うことを期待する。さらに、各話題について、授業時間の制約の為、詳細に解説することが困難であるため、各自で、図書館等を利用して各話題についての深い知識を得ることを期待する。</p>
<p>〔その他(授業外学習の指示・オフィスアワー等)〕</p> <p>オフィスアワーについては担当教員の KULASIS 登録情報を参照すること。 木村欣司: kimura.kinji.7z@kyoto-u.ac.jp 關戸啓人:sekido@amp.i.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>