

計算科学アライアンス

活動のご案内

Information on activities

問い合わせ先

計算科学アライアンス事務局
理学部化学東館 2F 234号室
Tel: 03-5841-4283 (内線:24283)
e-mail: secretariat@compsci-alliance.jp

計算科学という道具を手に入れ、 21 世紀の人類課題を解決する。



常行 真司

東京大学大学院理学系研究科教授
物性理論と計算物質科学、とくに第一原理に基づく構造・物性シミュレーション手法やマテリアルズインフォマティクス手法の開発と、物理教育に従事。

量子の運動の解明から株価の変動予測まで、今やあらゆる学問領域の発展がコンピュータによる計算科学と共にあると言っても過言ではありません。人類の様々な課題を解決に導くためには、常により高性能の計算機が求められ、課題解決を追求する計算科学もまた常に高度化し続けることで画期的な未来を切り開く武器が手に入ります。計算科学の素養は、ちょうど語学力のように、どのような分野でも役立つ課題解決の道具となり得ます。

平成 28 年 4 月より始動した「計算科学アライアンス」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、本学の学際的研究教育プログラムです。学生の計算科学の基礎知識の醸成を図り、優秀な学生を世界に派遣するとともに、シミュレーション科学研究で世界を牽引し、ここ東京大学から最先端の計算科学を世界に発信します。



須田 礼仁

東京大学大学院情報理工学系研究科教授
高性能・並列計算、高速数値アルゴリズム、スケジューリング理論、自動チューニング、ユーザ定義プログラム変換の研究教育に従事。

■ 計算科学アライアンスの目標

1. 学問分野の牽引と学際融合
2. 教育体系標準化
 - 2.1 基礎と素養
 - 2.2 エリート（最先端）教育

■ 募集対象学生

全学部全学科／全研究科

■ 参加部局（平成 31 年度）

情報理工学系研究科
理学系研究科
工学系研究科
情報基盤センター
新領域創成科学研究科
情報学環
数理学研究科

物性研究所
地震研究所
大気海洋研究所
カブリ数物連携宇宙研究機構
生産技術研究所
医科学研究所

■ 計算科学アライアンスの狙い

**あらゆる分野で活用できる計算科学手法の確立をめざし、
先端的計算科学・計算機科学で世界をリードします**

微分積分法を編み出したニュートンが力学と万有引力の法則を発見したように、新しい道具の誕生は絶えず新たな知見や着想の礎となります。ニュートンの時代の数学だけでなく、現代の我々にとって多くの可能性を秘めた道具が、計算機です。既に様々な分野で、シミュレーションやデータ解析などの計算科学手法を駆使した研究が盛んに行われていますが、その活用ノウハウは分野ごとに独自に発展しており、異なる分野の研究者の意思疎通にしばしば困難が生じています。

コンピュータを作る人、能力を高めるツールを開発・改良する人、使って科学を発展させる人が相互に自由に意思疎通ができれば、異分野の研究者が互いの知見を共有でき、ある分野で使われる計算手法が別の分野の研究を飛躍的に進展させる可能性も広がります。計算機は、数学に加えて異分野を融合する「共通言語」となり得るのです。たとえば、防災対策の研究者が地滑りの発生機構を解明するため、原子レベルのシミュレーションから知見を得ようとする時には、ミクロな物理とマクロな災害という異なる階層を繋ぐ計算科学が鍵となります。あるいは気象と株価など、自然科学と社会科学を横断した研究も進展するはずです。様々な研究者が共通言語でコミュニケーションできるようにすれば、人類の英知はよりボーダーレスに発展していくでしょう。計算科学はあらゆる科学の中で最も分野横断で発展する学問です。本アライアンスでは計算科学に関わる異なる分野の研究者の間の交流を促進し、学際的な分野や手法を開拓します。

学際交流の成果をもとに計算科学や計算機科学の各分野それぞれの研究で世界をリードすることも本アライアンスのテーマです。日本の計算科学を切り開き、世界をリードする先進的な研究成果を発信していきます。

**基礎教育で広く計算科学の素養を持つ人材を養成し、
専門教育でエリートを養成します**

計算科学アライアンスに参加する学生は、2016 年に国内最速スーパーコンピュータとなった Oakforest-PACS をはじめ、本学のスーパーコンピュータを自身の研究や学習に利用する機会が得られます。スーパーコンピュータの性能を活かし、目的に合った計算を行い、正しい結果を出すためには、スーパーコンピュータに合わせたアルゴリズムやプログラミングなど様々な技術が必要です。本アライアンスでは、計算機をいかに有効に利用して課題を解決するかを考え、これを実践して課題解決する「計算科学」と、課題解決に役立つ計算機のハードとソフトを発展させる「計算機科学」という「車の両輪」で知識と技術を養います。

扱う計算機はスーパーコンピュータに限りません。本アライアンスを通じて計算機を利用している様々な技術についての理解を深めることができます。天気予報や災害情報の当たる確率を知っておくことがリスクマネジメントに繋がるなど、多くの人が科学とその予測の不確定性への正しい認識を持つことが、行政や産業など様々な局面において、より適切な判断と行動に繋がります。こうした基礎的な計算科学の素養を持つ人材を社会に送り出すことも、本アライアンスの重要な使命です。本アライアンスは 21 世紀の学問、社会、産業、行政のあらゆる分野で必要とされる計算科学を、作り、駆使し、理解する立役者を育てます。

教育内容と目標

計算科学の手法を実際の研究や開発に役立てるには、プログラミングの技術はもちろん、適切な課題設定、アルゴリズム、計算機ハードウェアなど、幅広い知識を身につける必要があります。これまで各学科・専攻において個々に行ってきた計算科学の各種講義に加えて、実習などにも力点を置いた講義も立ち上げ、「アライアンス認定講義」として体系化しました。

アライアンス認定講義は内容に応じて学部・大学院それぞれ 3 つのカテゴリに分類されています。カテゴリ分けに従って受講することで、計算科学を体系的かつ実践的に学ぶことが可能となっています。

■ 計算機のメカニズム理解とプログラミング技術

2019 年現代の最先端のスーパーコンピュータを使うと、1 秒間に約 10 京回 (10 の 17 乗回) もの和や積を計算することが可能です。どのようなデータに対して、どのような順序で、どのような演算を実行するかをコンピュータに指示することを「プログラミング」と呼びます。プログラミングには C 言語や Fortran 言語といったプログラミング言語を使います。

プログラミング言語を正しく用い、数値計算アルゴリズムをコンピュータへの指示の形に正確に翻訳する技術はもちろん重要です。しかしながら、それだけではコンピュータの高い性能を使いこなすことはできません。現代のコンピュータは、複数の演算装置 (CPU コア) からなっています。また、記憶装置 (メモリ) も複雑な階層構造をなしています。ハードウェアの階層構造を理解し、その特徴を活かすプログラミングを行って初めて、コンピュータのもつ性能を最大限に引き出すことが可能となります。適切なプログラミング・チューニングによって、何桁もの高速化が達成されることも決して珍しいことではありません。

学部後期課程の講義カテゴリ A [プログラミング基礎・数値計算アルゴリズム基礎] においては、計算機システムの使い方やプログラミング言語の基礎を習得します。また、常微分方程式、連立方程式、固有値問題の解法など、基礎的な数値計算アルゴリズムの原理を学習し、実際にプログラミングしてみることで、数値計算アルゴリズムを正確かつ効率よくプログラミングする技術を習得します。さらに、大学院の講義カテゴリ D [HPC: 並列プログラミング・最適化] においては、種々の並列アルゴリズム、MPI 並列や OpenMP 並列といった並列プログラミング技術、メモリアクセス最適化などのチューニング技術を学びます。これら技術を取得することで、並列プログラムを作成し、最先端のスーパーコンピュータを駆使した大規模なシミュレーションを実行することが可能となります。

■ 最適なアルゴリズムの選択・設計・利用

多くの物理現象は方程式の形で表すことができます。しかしながら、方程式をそのまま渡してもコンピュータは解いてはくれません。データの移動やコピー、四則演算の組み合わせや繰り返しといった基本的な手順に分解して渡す必要があります。これらの手順のことを「アルゴリズム」と呼びます。課題を方程式の形で定式化し、適切なアルゴリズムを用いて手順に分解し、コンピュータの理解できる形にプログラミングすることではじめて、シミュレーションが可能となります。

これまでに様々なアルゴリズムが考案されています。例えば、連立一次方程式の解を求める問題においても、方程式の形や性質、どのような解が欲しいかなどに応じて、使うべきアルゴリズムは異なります。どのアルゴリズムを選んだかによって、扱える問題の規模 (粒子数など)、シミュレーションの速度、結果の精度などに大きな違いが生じます。新しいアルゴリズムの開発それ自身も計算機科学・計算科学の研究分野の一つであり、日々新たな研究成果が生まれています。

学部後期課程の講義カテゴリ B [数値計算アルゴリズム・並列プログラミング] においては、カテゴリ A よりもさらに進んだ数値計算アルゴリズムを学習します。疎行列に対する反復解法、クリロフ部分空間法、偏微分方程式の基礎解法、モンテカルロ法など幅広いアルゴリズムを取り上げます。さらに、大学院の講義カテゴリ E [数理 : 高度な数値計算アルゴリズム] では、現代の計算科学で広く用いられている差分法・有限要素法・有限体積法、特異値分解、最適化問題などの手法とその応用について学びます。さまざまなアルゴリズムの数理的基礎付けとその実装や応用例を系統的に学習することで、新しい問題に対して、最適なアルゴリズムを選択・設計・利用することができるようになることを目指します。

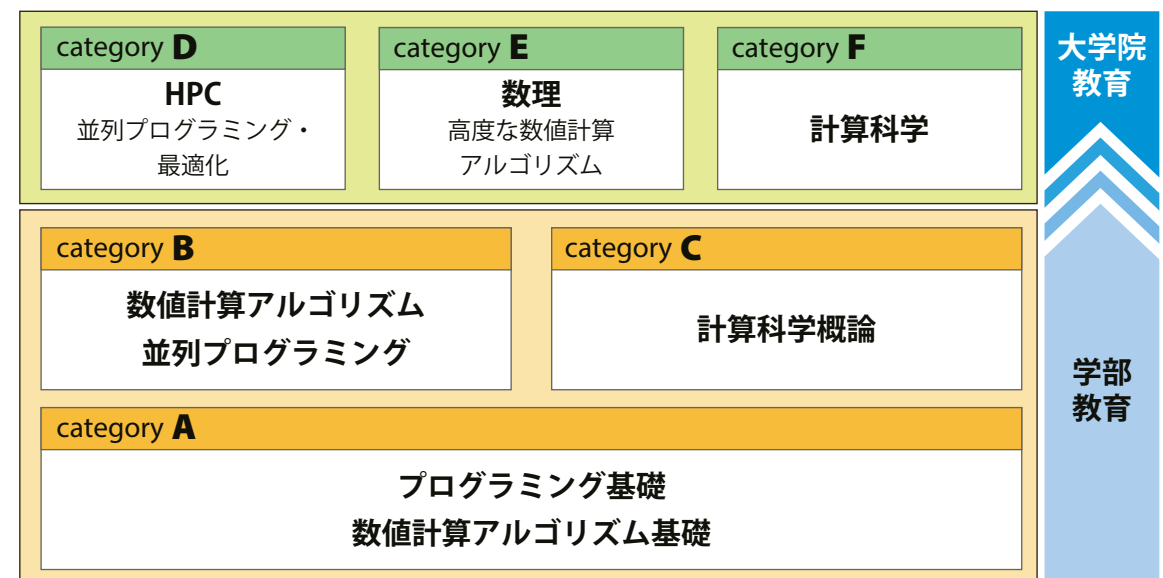
■ 各専門分野における計算科学の実践

2020 年頃を目標にエクサスケール級 (*) の性能を目指して開発が進められているポスト「京」コンピュータをはじめとし、最先端スーパーコンピュータを用いた様々な研究・開発が始まっています。素粒子物理学、原子核物理学、物性物理学、量子化学、天体物理学に代表される基礎科学の研究だけではなく、新しい薬の開発やゲノム解析による新しい医療、地震や津波、豪雨などの災害や気象の予測、太陽電池・人工光合成・二次電池によるエネルギーの創出と貯蔵、クリーンエネルギーシステムの実用化、次世代デバイスや素材の開発、シミュレーションを利用した設計・製造など、社会に大変革をもたらす研究開発が各分野で行われています。さらには、社会経済現象や神経回路・人工知能など、ビッグデータ解析に基づく新たな科学も急速に発展しつつあります。これら最先端の分野に新たな可能性を切り開いていくには、それぞれの専門分野に関する知識だけでなく、ソフトウェアやハードウェア、アルゴリズムに関する計算機科学的な素養も必要不可欠です。

学部後期課程の講義カテゴリ C [計算科学概論] においては、計算科学のさまざまな分野で行われている研究やシミュレーション手法について概観します。どのような課題にシミュレーションが用いられているか、またそこにどのようなアルゴリズムが用いられているかを学び、実際にソフトウェアを用いて計算科学シミュレーションを体験します。大学院の講義カテゴリ F [計算科学] では、計算科学の各分野におけるシミュレーション手法とその研究成果についてより詳細に学びます。電子状態計算、分子動力学、量子多体計算、数値流体力学、構造計算、ゲノム解析など、さらには社会科学や経済分野における最先端手法を習得し、実際にソフトウェアを用いて大規模計算科学シミュレーションを実行します。各分野におけるシミュレーションのエキスパートを養成し、科学的・社会的に重要な研究成果の創出につなげるだけでなく、大規模シミュレーションソフトウェアの設計・開発・公開に貢献するスペシャリストの養成も目指します。

*) 「エクサ」とは 100 京 (10 の 18 乗) を表します。

■ 認定講義の構成概念図



活動について

計算科学アライアンスでは、学部から大学院、若手の研究者までを一貫した理念の下に教育し、計算科学と計算機科学をリードする人材を育成していきます。

その活動は認定講義の整備にとどまらず、海外での学会やワークショップへの派遣事業や国際シンポジウムならびにサマースクールの企画・開催を通して、最先端の計算科学・計算機科学の教育・研究に触れ、参加する機会を提供しています。

認定講義

計算科学アライアンスでは、標準教育体系に沿った教育コースを受けた学生に修了証を発行します。教育コースの認定講義は以下の6つのカテゴリに分類されています。

学部

【カテゴリ A】

プログラミング基礎・数値計算アルゴリズム基礎

計算機システムの使い方、C や Fortran などプログラミング言語の基礎を習得する。常微分方程式、連立方程式、固有値問題の解法、データ統計処理など、基礎的な数値計算アルゴリズムを学習する。

【講義例】

- ・計算数理Ⅰ(理・数学)
- ・計算機実験Ⅰ,Ⅱ(理・物理)
- ・地球惑星物理学演習(理・地球惑星物理)
- ・数値解析(工・物理工学/計数工学)、他

【カテゴリ B】

数値計算アルゴリズム・並列プログラミング

より高度な数値計算アルゴリズムを学習する。具体的には、疎行列に対する反復解法、クリロフ部分空間法、偏微分方程式の基礎解法、モンテカルロ法、最適化問題などを学ぶ。初歩的な並列プログラミング技術を習得する。

【講義例】

- ・計算数理Ⅱ(理・数学)
- ・連続系アルゴリズム(理・情報)
- ・地球物理数値解析(理・地球惑星物理)、他

【カテゴリ C】

計算科学概論

計算科学のさまざまな分野で行われている研究やシミュレーション手法について概観する。それぞれのシミュレーションでどのようなアルゴリズムが用いられているかを学ぶ。また、実際にソフトウェアを用いて計算科学シミュレーションを体験する。

【講義例】

- ・計算科学概論(工・物理工学)
- ・情報科学とバイオイノフォーマティクス(理・情報)
- ・システム設計科学(工・システム設計科学)、他

大学院

【カテゴリ D】

HPC: 並列プログラミング・最適化

最先端のスーパーコンピュータを駆使するのに必要とされる技術を学ぶ。種々の並列アルゴリズム、MPI 並列や OpenMP 並列などの並列プログラミング、メモリアクセス最適化などのチューニング技術を習得する。

【講義例】

- ・スパコンプログラミングⅡ(工・共通)
- ・科学技術計算Ⅱ(理・数理情報学)
- ・スレッド並列コンピューティング(工・電気系工学)、他

【カテゴリ E】

数理: 高度な数値計算アルゴリズム

最先端の数値計算アルゴリズムとその数理的基礎付けについて学ぶ。現代の計算科学で広く用いられている差分法・有限要素法・有限体積法、特異値分解、最適化問題などの手法とその応用について学習する。

【講義例】

- ・計算科学における情報圧縮(工/理/新領域/情報理工)
- ・計算科学プログラミングⅡ(情報理工・コンピュータ科学)
- ・地球物理数値解析(理・地球惑星科学)
- ・数値解析学(数理科学)、他

【カテゴリ F】

計算科学

計算科学の各分野におけるシミュレーション手法とその研究成果について学ぶ。電子状態計算、分子動力学、量子多体計算、数値流体力学、構造計算、ゲノム解析など、さらには社会科学や経済分野における最先端手法を学習する。また、実際にソフトウェアを用いて大規模計算科学シミュレーションを実行する。

【講義例】

- ・多体問題の計算科学(工/理/新領域)
- ・計算物理学(工/理/新領域)
- ・数値流体力学入門(新領域・先端エネルギー工学)、他

● 認定基準

下記の単位を取得し計算科学アライアンスに登録した学生には修了認定が与えられます。

学部:

カテゴリ A、B、C からそれぞれ 1.5 単位以上(計 4.5 単位以上)

大学院:

カテゴリ D、E、F のうち 2 つのカテゴリを選択し、それぞれのカテゴリから 2 単位以上(計 4 単位以上)。

ただし、情報理工学系研究科、数理科学研究科のいずれかに所属する学生については、2 つのカテゴリのうち 1 つはカテゴリ F でなければならない。

※原則として平成 29 年度以降に受講した講義が対象。

ただし平成 28 年度中に取得した単位については、合計 2 単位を上限として修了認定に必要な単位として算入できる。

計算科学アライアンスへの登録と認定講義のリストは以下のページで

<http://www.compsci-alliance.jp/>



海外派遣

計算科学アライアンスでは、国際的にトップクラスの計算科学・計算機科学の人材を育成するために、海外派遣プログラムを用意しています。

● 応募資格

東京大学に在籍する学部生・大学院生で、計算科学および計算機科学に関連する研究を行っているもの。

● 内容

海外の国際会議における研究発表、サマースクール等への参加、大学・研究機関における国際共同研究などの必要経費を支援します。1〜2 週間程度の滞在を想定しています。

国際シンポジウム

計算科学アライアンスは、現代のスーパーコンピュータを使いこなすための教育と最先端の研究についての国際シンポジウムを毎年開催しています。

計算機を使いこなす人材を育てるための先端的教育プログラム、および計算機を使った科学(計算科学)と計算機ハードウェアと計算機を使いこなすための科学(計算機科学)における最先端の研究動向について、国内外から著名な研究者・教育者を招き、教育と研究の将来を探索しています。

2018 年 9 月には、『3rd International Symposium on Research and Education of Computational Science』と題し、計算機科学とデータ科学の興隆が可能とした高度な計算科学や機械学習研究の最先端での発展と基礎となる数理や応用など、多岐にわたる課題について議論が交わされました。(くわしくは計算科学アライアンスのホームページをご覧ください)

希望する計算科学アライアンス登録学生には、ポスター発表などシンポジウム参加の機会が与えられます。

サマースクール

海外派遣や国際シンポジウムのみならず、計算科学アライアンスでは毎年、実習を通して最先端の計算科学・計算機科学にふれることができるサマースクールを開催しています。

2018 年 8 月には、『機械学習と計算科学』と題して、ベイズ最適化やボルツマン機械の応用、それらを高速に実行するための GPGPU の活用方法を実習とグループワークを通して学ぶサマースクールを開催し、学部生、大学院生と若手研究者が自ら設定した課題への機械学習の応用に取り組みました。