令和3年度 計算科学アライアンス
学生募集説明会

開始：　　17:00
終了予定：18:35

1. 代表挨拶
2. カリキュラムの構成・認定講義
3. 講義の一部紹介
4. コース生登録
5. スパコン利用
6. 海外派遣事業
7. 国際シンポジウム
8. 東京大学工学教程
9. 質疑応答

Computational Science Alliance
The University of Tokyo

Computational Science Alliance
The University of Tokyo

計算科学アライアンス

2021 年度 ガイダンス

2021/04/06 17:00 ～

2021/04/09 17:00 ～

主な活動

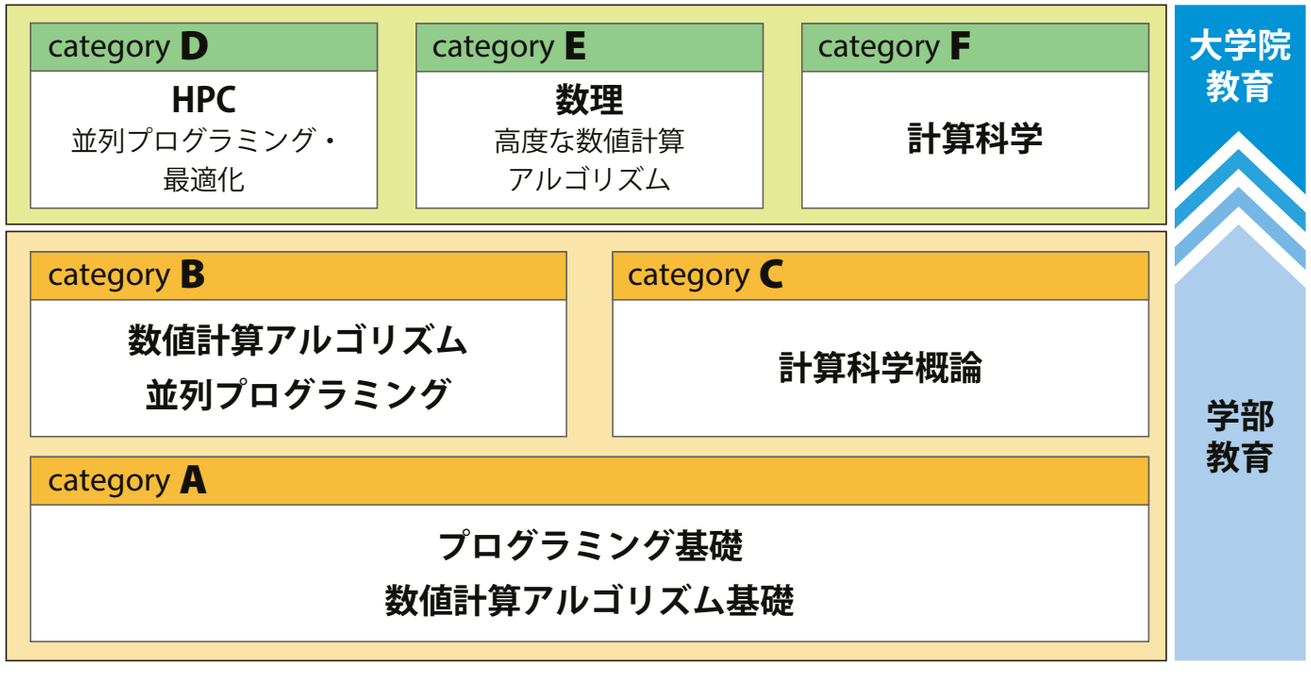
- 認定講義
  - 学部、大学院
  - 一定の課程を収めた学生に修了証を発行
- アライアンスの講義
- 海外派遣
- 国際シンポジウム
- スーパーコンピューターアカウント

こっちが話してます

Computational Science Alliance
The University of Tokyo

計算科学アライアンス認定講義

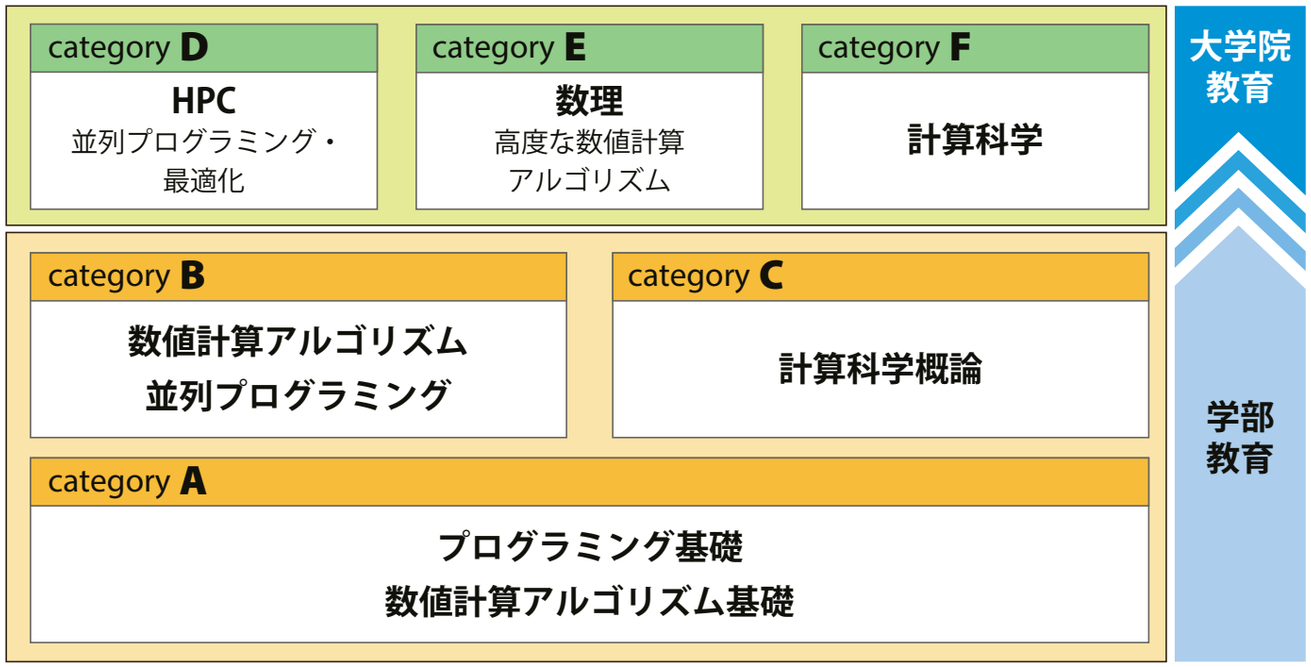
- 実習にも力点をおいた新しい講義を立ち上げ
- 計算科学・計算機科学に関する90以上の学部・大学院講義とあわせ、「計算科学アライアンス認定講義」として体系化
- 認定講義を内容に応じて6つのカテゴリに分類
- 所定の単位を取得した学生には「修了認定証」を発行



- 学部
  - カテゴリA,B,Cからそれぞれ1.5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から2単位以上

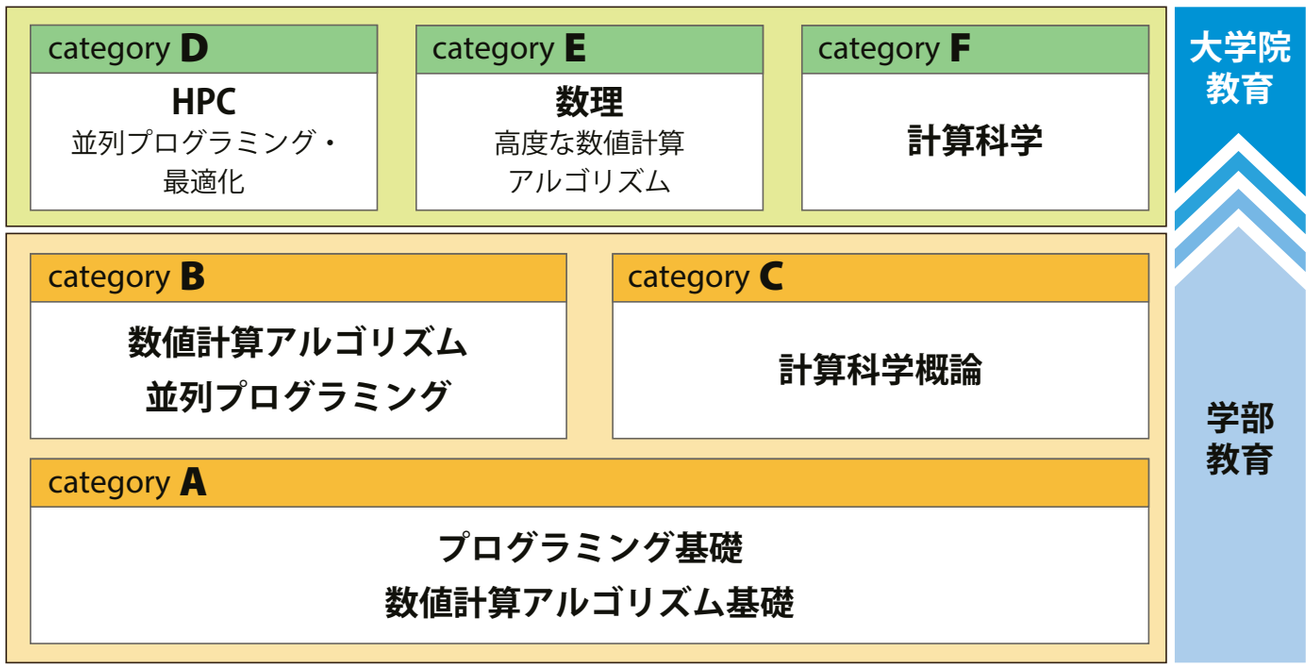
アライアンス認定講義 - 学部

- カテゴリA - 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。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
  - 例) 計算機実験I,II (3年夏冬)
- カテゴリB - より高度な数値計算アルゴリズム。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
  - 例) 連続系アルゴリズム (4年冬)
- カテゴリC - 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。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
  - 例) 計算科学概論 (4年夏)



アライアンス認定講義 - 大学院

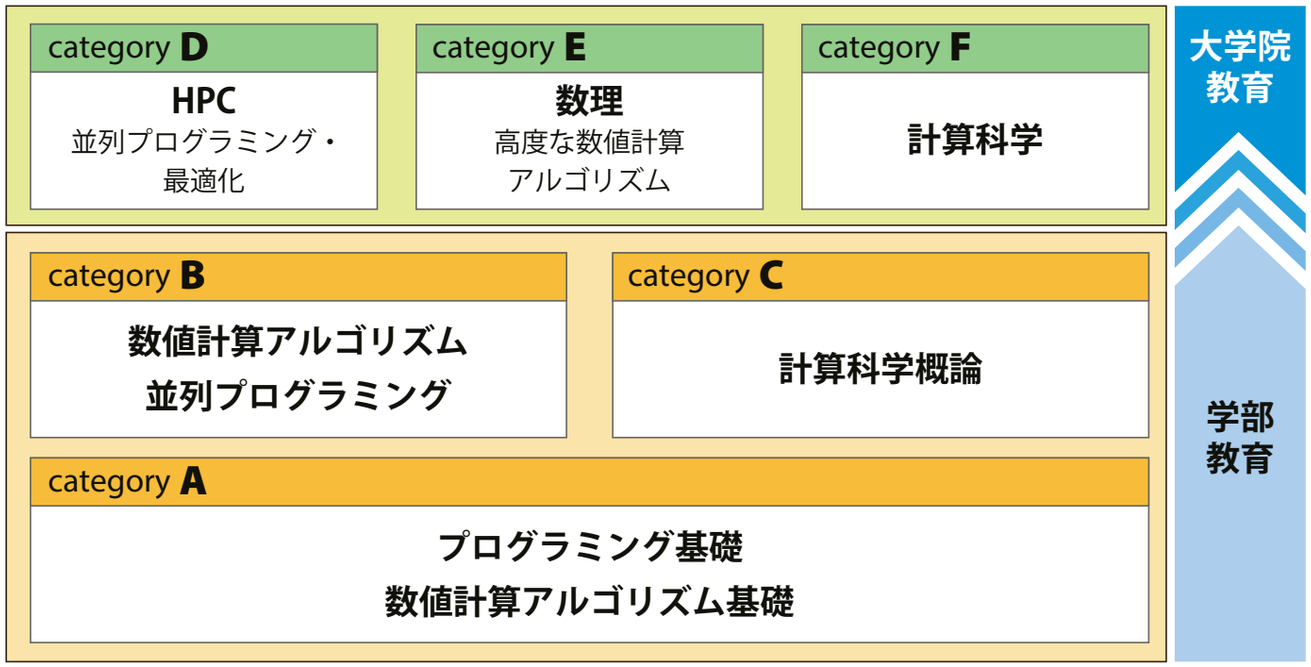
- カテゴリD - 最先端のスーパーコンピュータを駆使するのに必要とされる技術。種々の並列アルゴリズム、MPI並列やOpenMP並列などの並列プログラミング、メモリアクセス最適化などのチューニング技術
  - 例) 計算科学アライアンス特別講義I,II
- カテゴリE - 最先端の数値計算アルゴリズムとその数理的基礎付け。差分法・有限要素法・有限体積法、特異値分解、最適化問題などの手法とその応用
  - 例) 計算科学における情報圧縮
- カテゴリF - 各分野におけるシミュレーション手法とその研究成果。電子状態計算、分子動力学、量子多体計算、数値流体力学、構造計算、ゲノム解析など
  - 例) 多体問題の計算科学



Computational Science Alliance
The University of Tokyo

修了認定条件

- 学部 - 卒業時に修了認定
  - 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 - 修士課程修了時あるいは博士課程修了時のいずれか
  - カテゴリD,E,Fのうち2つのカテゴリを選択し、それぞれから2単位以上(計4単位以上)。ただし、情報理工と数理科学の学生は2つのうちひとつはカテゴリFでなければならない

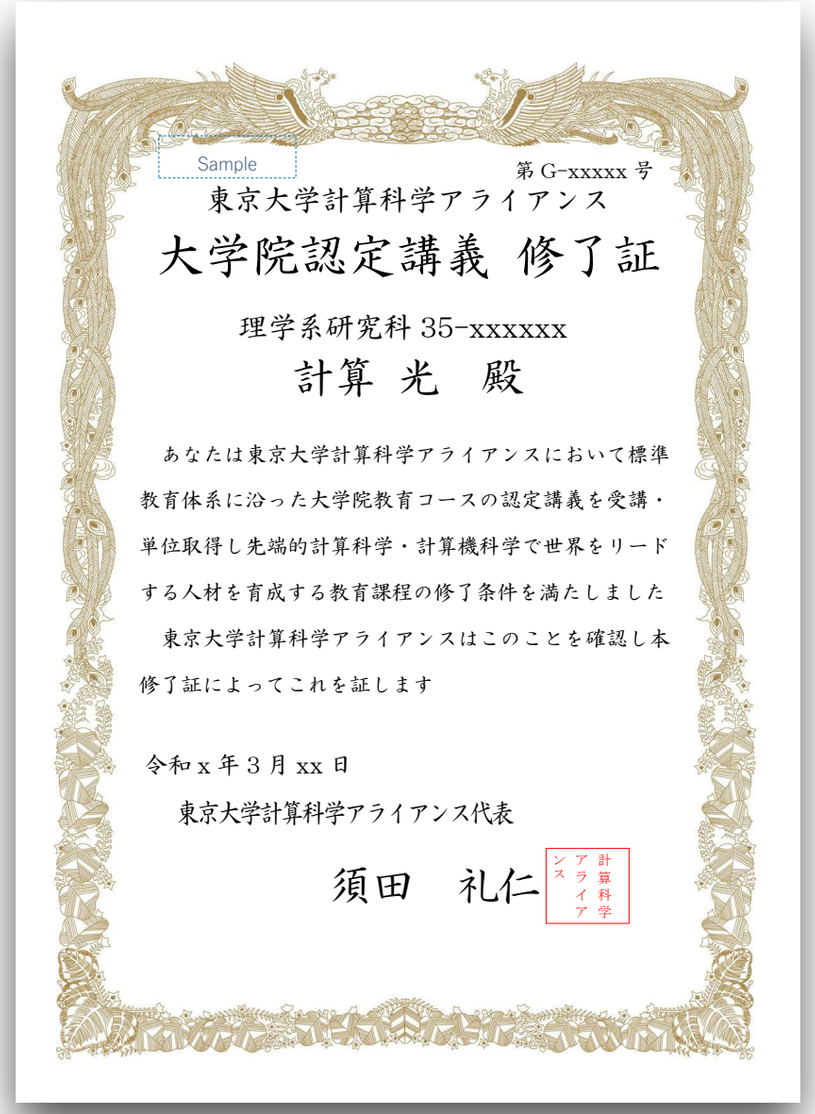


- H28年度中に取得した単位は合計2単位を上限として修了認定に算入できる
- 大学院の修了認定には学部の終了認定を要しない
- 学部で取得した単位を大学院の単位に転換したものについては、大学院の修了認定に算入できない

Computational Science Alliance
The University of Tokyo

認定講義 修了証

- 修了証の申請は、学部卒業又は大学院修了の1、2ヶ月前
  - 3月修了者 - 1月～2月
  - 9月修了者 - 7月～8月
  - 詳細は、計算科学アライアンスホームページ、登録者向けMLで告知
- 認定講義リストは毎年見直し・修正があり
  - 2021年度版は4月中旬に確定予定 (ホームページに掲載予定)
  - 講義の追加、カテゴリの変更、開講しない講義、など
  - 適宜、計算科学アライアンスホームページで最新の認定講義リストを確認のこと


Sample
第 G-xxxxx 号
東京大学計算科学アライアンス
大学院認定講義 修了証
理学系研究科 35-xxxxxx
計算 光 殿
あなたは東京大学計算科学アライアンスにおいて標準教育体系に沿った大学院教育コースの認定講義を受講・単位取得し先端的計算科学・計算機科学で世界をリードする人材を育成する教育課程の修了条件を満たしました
東京大学計算科学アライアンスはこのことを確認し本修了証によってこれを証します
令和 x 年 3 月 xx 日
東京大学計算科学アライアンス代表
須田 礼仁
計算科学アライアンス

Computational Science Alliance
The University of Tokyo

計算科学概論（学部：カテゴリC）

工学部・物理工学科、理学部・物理学科の４年生対象

概要

- 計算科学の様々な分野で行われている研究や
  シミュレーション手法の概要をオムニバス形式で紹介
- 講義（座学）１回と計算機を使った実習１回の合計２回を１セット

目的

- 計算科学・計算機科学の種々の分野を俯瞰し、
  研究手法や最先端の研究について知識を得る
- 実際に手を動かすことで、計算科学の手法について
  手応えを得る

Computational Science Alliance
The University of Tokyo

令和３年度の講義

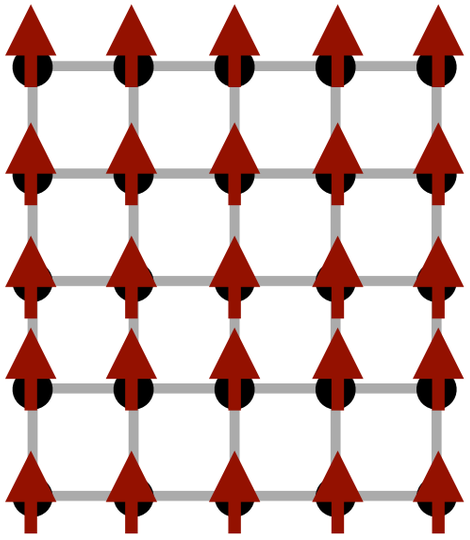
- 中村宏 先生　「高性能計算機のアーキテクチャ」
- 吉本芳英 先生　「スーパーコンピュータと並列プログラミング」
- 奥田洋司 先生　「連続体の並列有限要素法解析入門」
  「構造解析アプリケーションによるCAE実践」
- 山地洋平 先生　「大規模疎行列固有値問題と量子多体問題」
- 市村強 先生　「大規模疎行列ソルバー入門」
- 田浦健次朗 先生　「高性能プログラミングと性能測定」
- 大久保毅　「格子スピン模型の計算科学」

Computational Science Alliance
The University of Tokyo

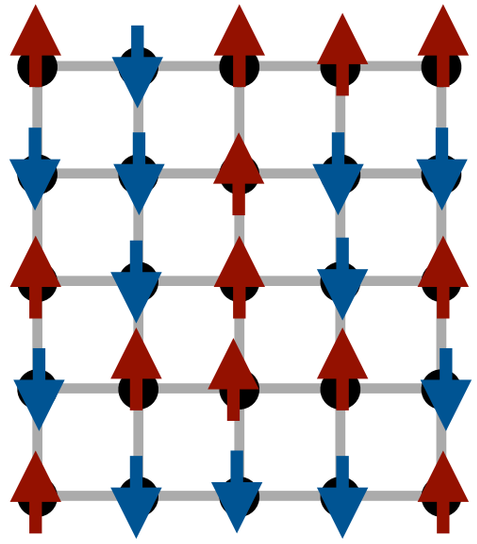
講義例：格子スピン模型の計算科学

格子スピン模型

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j$$



相転移！

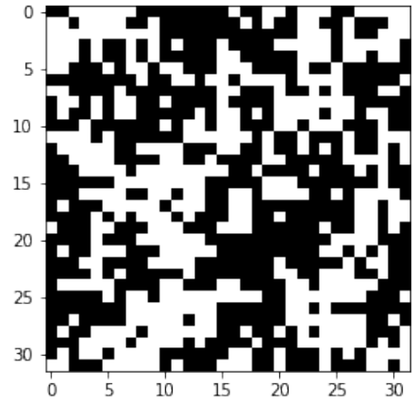


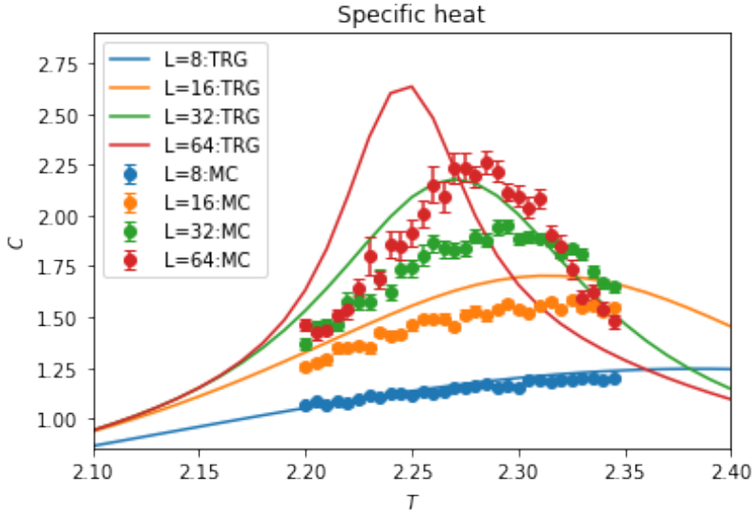
シミュレーション手法

モンテカルロ法、テンソルネットワーク法、……

実習（昨年度）：

- Google Colaboratoryを用いて、オンラインで実施
- モンテカルロシミュレーション、スピン状態の可視化
- テンソルネットワーク法とモンテカルロ法との比較





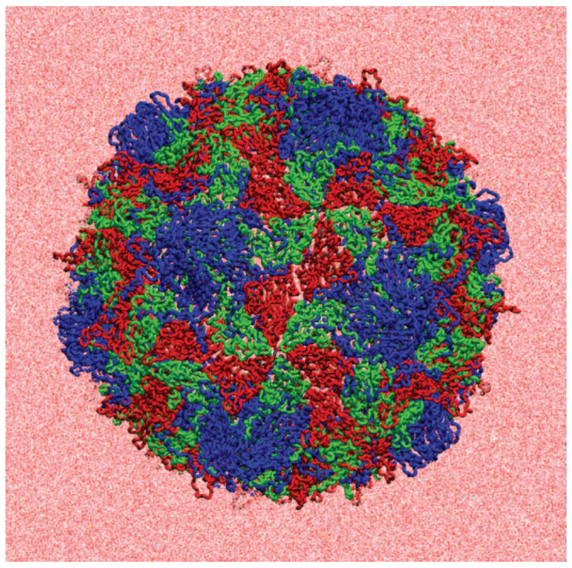
Computational Science Alliance
The University of Tokyo

多体問題の計算科学（大学院：カテゴリF）

工学系・理学系・新領域で開講

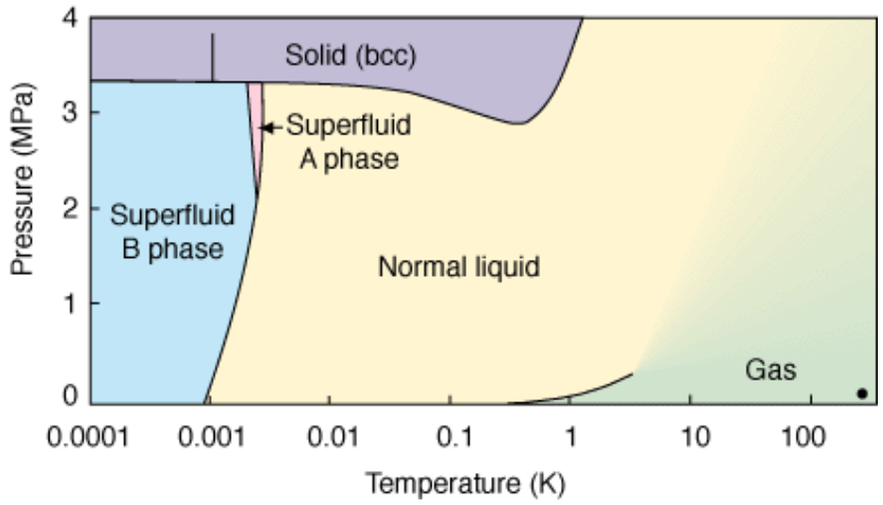
概要

- 物質科学を具体例とし、分子動力学法、（古典・量子）モンテカルロ法、クリロフ部分空間法など、多体問題を計算機で取り扱うアルゴリズムの数理を学ぶ
- サンプルコードの配布やオープンソースソフトウェアの紹介、それを利用したレポート課題により、学んだ手法を実際に試せる



溶液中のウイルス

Y. Ando et al, J. Chem. Phys. **141**, 165101(2014).



^{3}Heの相図

Erkki Thuneberg, http://ltl.tkk.fi/research/theory/helium.html

Computational Science Alliance
The University of Tokyo

多体問題の計算科学：講義予定

古典

- 第１回：　物理学における多体問題
- 第２回：　多体問題における困難
- 第３回：　古典統計力学模型と数値計算
- 第４回：　古典モンテカルロ法とその応用
- 第５回：　分子動力学法とその応用

量子

- 第６回：　拡張アンサンブル法によるモンテカルロ計算
- 第７回：　量子統計力学模型と数値計算
- 第８回：　量子モンテカルロ法
- 第９回：　量子モンテカルロ法の応用
- 第１０回：　量子多体問題と巨大な疎行列の線形代数
- 第１１回：　クリロフ部分空間法の量子多体問題への応用
- 第１２回：　巨大な疎行列と量子統計力学
- 第１３回：　多体問題の並列計算アルゴリズム

Computational Science Alliance
The University of Tokyo

計算科学における情報圧縮（大学院：カテゴリE）

工学系・理学系・新領域・情報理工学系で開講

概要

- 巨大な自由度を圧縮し効率的に表現する基礎となる、スパース・モデリングやクリロフ部分空間法、および、行列・テンソルの低ランク近似、テンソルネットワーク分解などを学ぶ

巨大なデータの線形代数　$\vec{v} \in \mathbb{C}^M$　（例）固有値問題 $A\vec{v} = \lambda\vec{v}$

（計算科学での）3つのカテゴリ

	必要なメモリ
1. 行列Aがメモリにのる	$O(M^2)$
2. ベクトル$\vec{v}$がメモリにのる	$O(M)$
3. ベクトルもメモリにのらない	$\ll O(M)$

Computational Science Alliance
The University of Tokyo

計算科学における情報圧縮：講義予定

- 第１回：　現代物理学における巨大なデータ
- 第２回：　現代物理学と情報圧縮
- 第３回：　情報圧縮の数理１　(線形代数の復習)
- 第４回：　情報圧縮の数理２　(特異値分解と低ランク近似)
- 第５回：　情報圧縮の数理３　(スパース・モデリングの基礎)
- 第６回：　情報圧縮の数理４　(クリロフ部分空間法の基礎)
- 第７回：　物質科学における情報圧縮
- 第８回：　データ解析の高速化：スパース・モデリングの物質科学への応用
- 第９回：　データ空間の圧縮：クリロフ部分空間法の物質科学への応用
- 第１０回：　高度なデータ圧縮：情報のエンタングルメントと行列積表現
- 第１１回：　行列積表現の固有値問題への応用
- 第１２回：　テンソルネットワーク表現への発展
- 第１３回：　テンソルネットワーク繰り込みによる情報圧縮

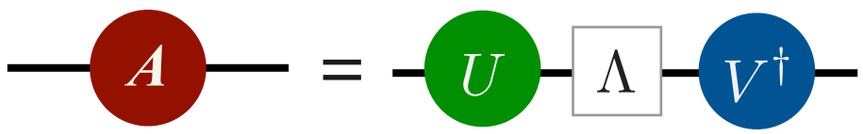
Computational Science Alliance
The University of Tokyo

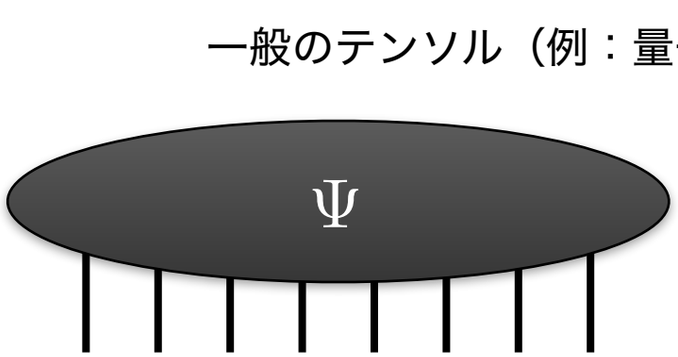
計算科学における情報圧縮：トピック例

テンソルネットワーク分解

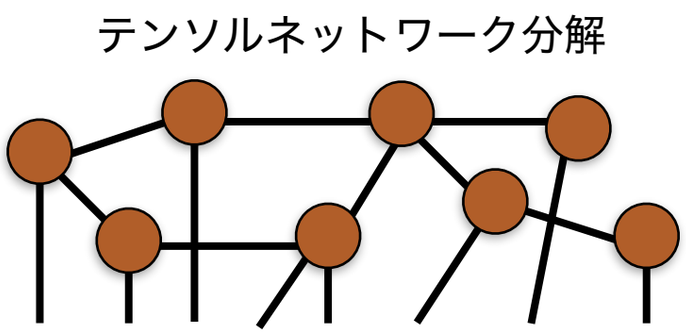
行列の低ランク近似（特異値分解）をテンソルへ拡張

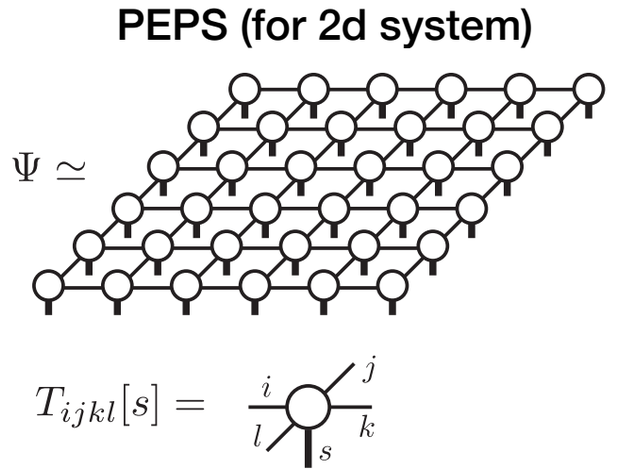
$$A \simeq U \Lambda V^\dagger$$





情報の相関構造の
特徴を利用





応用例：

- 量子多体問題、古典統計力学
- データサイエンス・機械学習
- 量子コンピュータへの応用

計算科学アライアンス
への登録

https://www.compsci-alliance.jp

計算科学アライアンス

Computational Science Alliance

ホーム　海外派遣　スーパーコンピュータ利用　組織　学生募集　教育事業　イベント　計算科学アライアンス規則

認定講義　問い合わせ先

東京大学　計算科学アライアンス

検索

学生募集

検索

募集対象学生：全学部／全研究科

登録学生には、認定講義の修了証が発行される事に加え、海外派遣への優先権や国際シンポジウムでの発表機会、東京大学のスーパーコンピュータの利用機会が与えられます。

登録はこちらから

確認はこちらから

ニュース

平成30年度学生募集説明会

2018年度3月修了者の修了証申請の期限が2/20までに延長されました

計算科学アライアンス2018年度3月修了者の修了証申請について

東京大学情報基盤センター 若手・女性利用 平成29年度（前期課題）成果報告会

登録

登録には東京大学に所属する.u-tokyo.ac.jpで終わるメールアドレスをご利用ください。

また学部学生は学部組織を、大学院生は大学院組織を所属組織として登録して下さい。

社会人大学院生の方は、チェックボックスにチェックを入れてください。

新規ユーザー登録

ユーザー名*

すでに利用されている名前は使えません

姓*

名*

学籍番号*

学籍番号*

所属学部または研究科*

法学部

所属学科または専攻*

社会人大学院生

メール*

メールアドレス（確認）*

パスワード*

パスワード（確認）*

登録

.u-tokyo.ac.jpで終わるメールアドレスを使ってください。
また、メールアドレスに誤りがある登録が見られますので、注意してください。

こんな時には？

- 登録内容を確認、変更したい
  パスワードを忘れた、ユーザ名を忘れた

https://www.compsci-alliance.jp/学生募集/確認/
にアクセスすること

Computational Science Alliance
The University of Tokyo

スーパーコンピュータ利用

計算科学アライアンスに登録した学生に、情報基盤センターのスーパーコンピュータ（Oakbridge-CX /Reedbush）の利用機会を無償で提供

Oakbridge-CX: https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/obcx/service/

Reedbush*: https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/reedbush/service/

*Reedbush-L/H （GPUノード）のみ運用中。2021年11月30日まで。

Oakbridge-CX

Reedbush （情報基盤センターwebページより）

- スパコンのグループ利用コースを計算科学アライアンスが契約
- 利用希望者をグループのメンバーに登録しアカウント発行
- 各計算機毎に、172ノード時間の計算資源（トークン）を無償で提供

Computational Science Alliance
The University of Tokyo

スパコン利用申し込み方法

利用希望者*は計算科学アライアンスの教育コースに登録後、

1. 所属、学年
2. 氏名（ふりがな付き）
3. 住所（研究室所属の方は研究室、それ以外の方は自宅）
4. メールアドレス
5. 電話番号
6. 利用目的

を明記の上、メールで以下の宛先まで申し込んでください。

宛先：scapp@compsci-alliance.jp

締切：毎月20日（利用開始は翌月（目安））。2022年1月まで。

*東京大学情報基盤センター、スーパーコンピュータ利用資格（下記url参照）
を満たす方に限ります
https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/guide/application/qualification.php

スパコン利用申し込み：注意事項

- アカウント情報は研究室所属の方は研究室に届きます。
  - それ以外の方はアカウント発行の準備が整い次第、担当者からメールで連絡し、計算科学アライアンス事務局（理学部化学東館233号室）まで取りに来て頂くことになります。
- アカウントは原則として年度単位で管理されます。
  - 余ったトークンは年度末で廃棄されます。
  - 次年度への継続等については、年度末にアナウンスします。
- 当初の172ノード時間を使い切った場合、追加申請が可能です。
  - 申請内容の1~6に加えて、トークンの追加理由（400字程度）と希望トークン量を明記した計画書（様式自由）を作成して申し込んでください。
  - 審査の上で、トークン追加の可否を判定します。

Computational Science Alliance
The University of Tokyo

スパコン利用申し込み：注意事項

- スパコンを無償で利用できる非常に貴重な機会ですので、奮ってご応募ください！
  - 計算資源には限りがありますので、利用状況によっては、新規申込、トークン追加申込を中止する場合があります。

Computational Science Alliance
The University of Tokyo

海外派遣

- 目的：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。
- 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(登録者を優先)。
- 期間及び内容：1〜2週間程度。 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。
- 報告書：海外派遣終了後2週間以内にA4紙1枚以上(写真貼付可)を提出。

- 現在は募集停止中, 募集を再開する際にはお知らせします。
- 募集要項と応募申込書は時期を見て計算科学アライアンスのWebページ(http://www.compsci-alliance.jp/overseas-support/)にアップロード

- 2017年度は10件, 2018年度は12件(うち海外研修7件), 2019年度11件(うち海外研修4件含, ただし直前に中止)を実施。

国際シンポジウム

- International Symposium on Research and Education of Computational Science (RECS)
- 目的
  - 学生が、世界の一流の研究者と直接意見交換できる
  - 計算科学関連分野の最先端の動向がわかる
- 日程・会場
  - コロナのため検討中・・・

Computational Science Alliance
The University of Tokyo

ー昨年のシンポジウム

- **10 月 2 日～3 日、小柴ホール**
- **招待講演者**

  Hartwig Anzt: Karlsruhe Institute of Technology
  Lei Wang: Chinese Academy of Science
  Qibin Zhao: RIKEN AIP
  S. Matsuoka / K. Sato: RIKEN R-CCS
  他、第一線の研究者たち

- **プログラム**
  - **招待講演**
  - **ポスターセッション**
  - **バンケット**

特別企画

2017年度
招待講演者と学生の
ランチミーティング

2018, 2019年度
前日に招待講演者に
よるチュートリアル

Computational Science Alliance
The University of Tokyo

工学教程

- 国内のみならず世界から集う最優秀な学生に対して教授すべき工学すなわち、学生が本学で学ぶべき工学を開示し、工学の知の殿堂として世界に問う教程
- 現在までに、市販版34巻（数学17, 物理学4, 化学3, システム4, 情報工学4, 原子力工学2）、試行版39巻（数学14, 物理学4, 化学5, システム7, 情報工学4, 原子力工学3, 電気電子工学1, 経済・知財・経営工学1）を刊行済み
- 計算科学アライアンスに関連の深いものとしては、例えば
  - アルゴリズム（渋谷 哲朗）
  - 機械学習（中川 裕志）
  - 情報システム（萩谷 昌己）
  - 知識情報処理（伊庭 斉志、Danushka Bollegala）
- 工学系は各学科・専攻の図書室に配架済み
- 駒場・本郷の生協にて販売中。Amazon等でも購入可
- ぜひご活用ください！