



令和7年度 計算科学アライアンス学生募集説明会

1. はじめに
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. 東京大学工学教程
8. 質疑応答

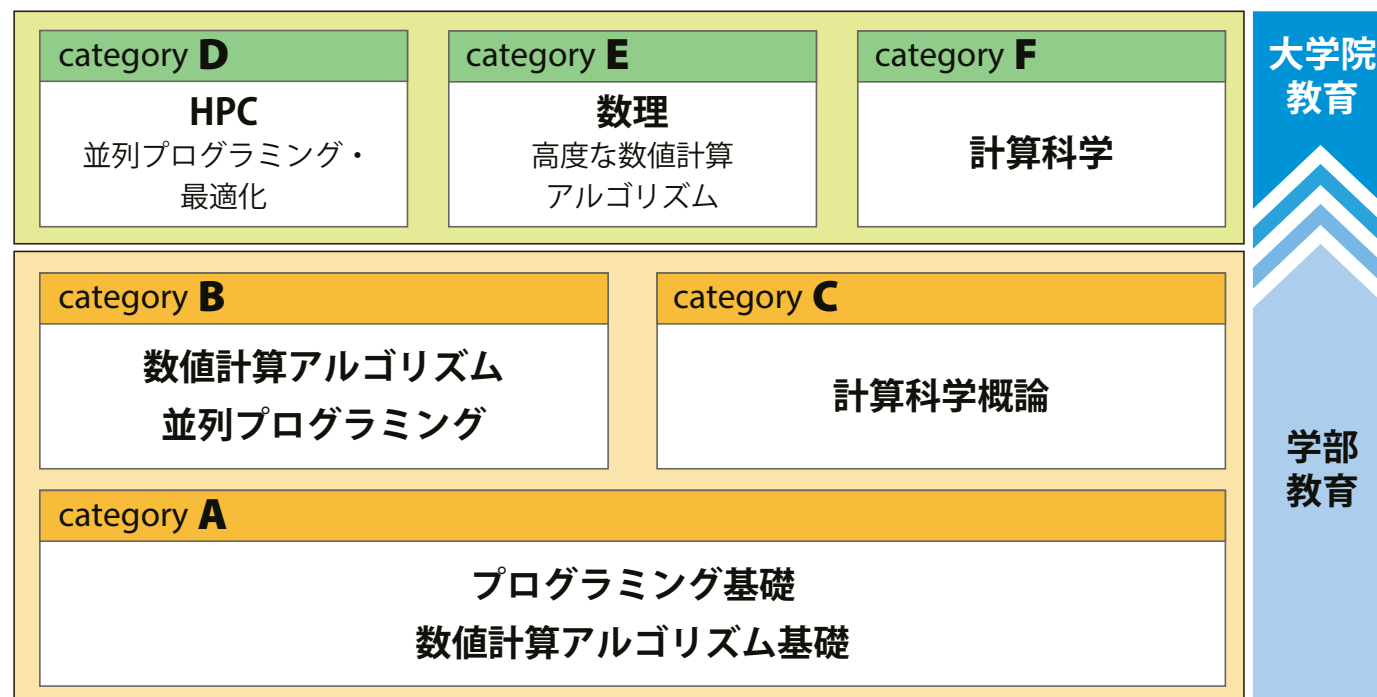
開始： 17:00

終了予定： 18:00

- ・ オンライン参加の方はマイクとビデオはミュートに設定してください
- ・ 質問の際には、
対面：挙手
オンライン：「チャット」または「挙手」の機能の利用
をお願いいたします。司会が指示した後、質問を始めてください。
- ・ 本日の資料は計算科学アライアンスのwebサイト
<https://www.compsci-alliance.jp> に置いてあります

計算科学アライアンス認定講義

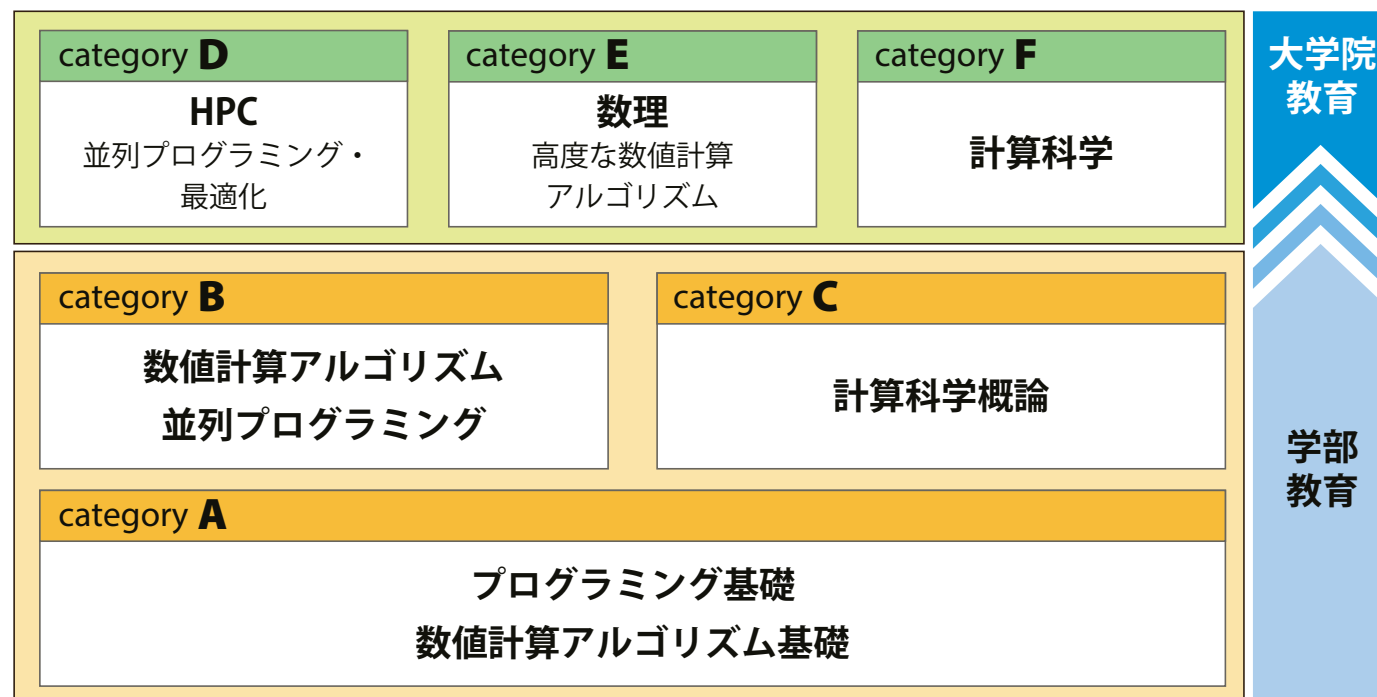
- 実習にも力点をおいた計算科学アライアンス講義を立ち上げ
- 計算科学・計算機科学に関する80以上の学部・大学院講義とあわせ、「計算科学アライアンス認定講義」として体系化
- 認定講義を内容に応じて6つのカテゴリに分類
- 所定の単位を取得した学生には「修了認定証」を発行



- 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

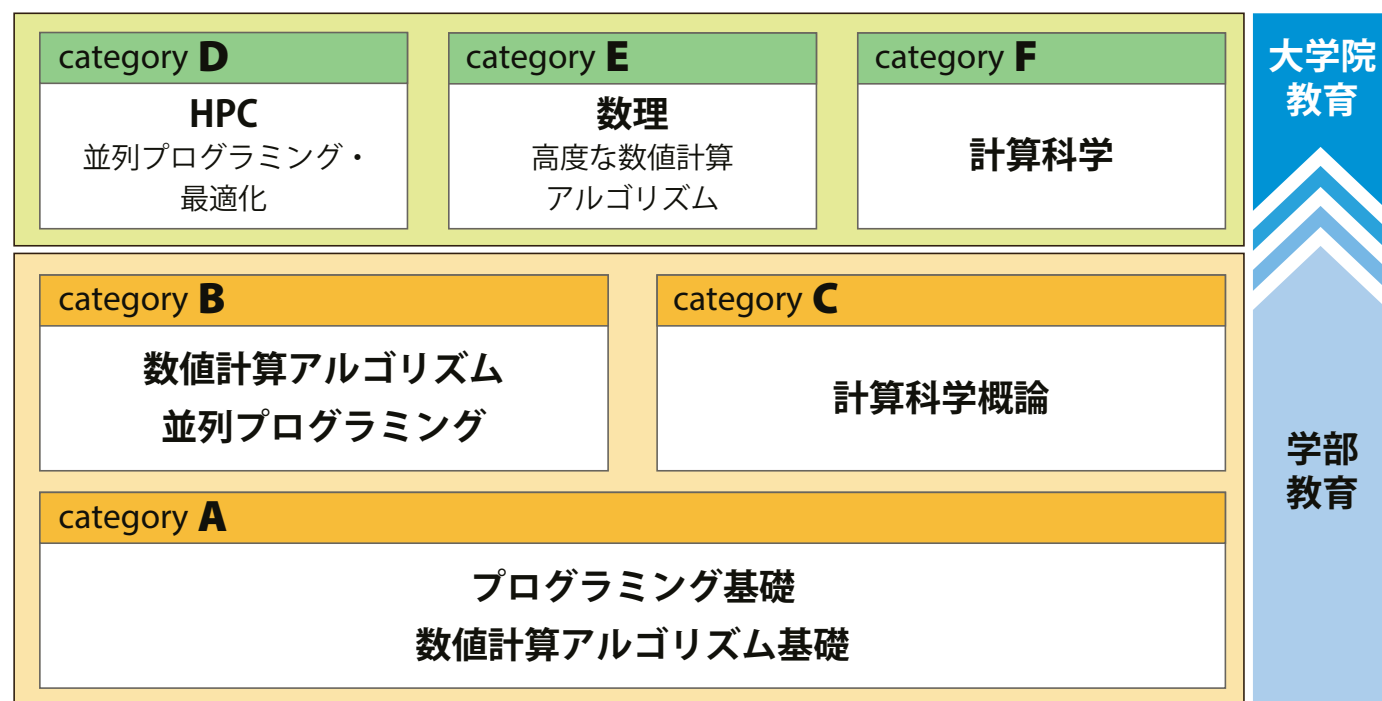
- カテゴリA - 計算機システムの使い方、CやFortranなどプログラミング言語の基礎。常微分方程式、連立方程式、固有値問題の解法、データ統計処理など、基礎的な数値計算アルゴリズム
- 例) 計算機実験I,II (3年夏冬)
- カテゴリB - より高度な数値計算アルゴリズム。疎行列に対する反復解法、クリロフ部分空間法、偏微分方程式の基礎解法、モンテカルロ法、最適化問題



- 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

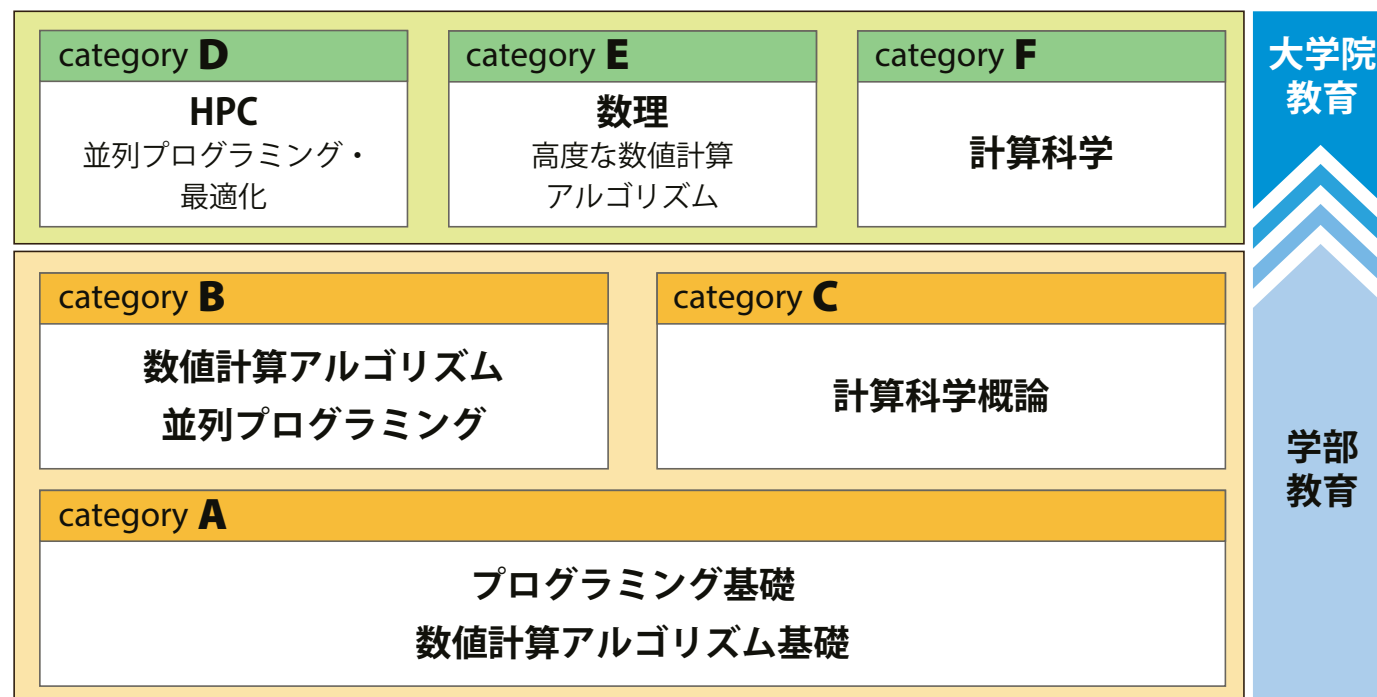
- カテゴリD - 最先端のスーパーコンピュータを駆使するのに必要とされる技術。種々の並列アルゴリズム、MPI並列やOpenMP並列などの並列プログラミング、メモリアクセス最適化などのチューニング技術
- 例) 計算科学アライアンス特別講義I,II
- カテゴリE - 最先端の数値計算アルゴリズムとその数理的基礎付け。差分法・有限要素法・有限体積法、特異値分解、最適化問題などの手法とその応用



- 例) 計算科学・量子計算における情報圧縮
- 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、構造計算など
- 例) 多体問題の計算科学

修了認定条件

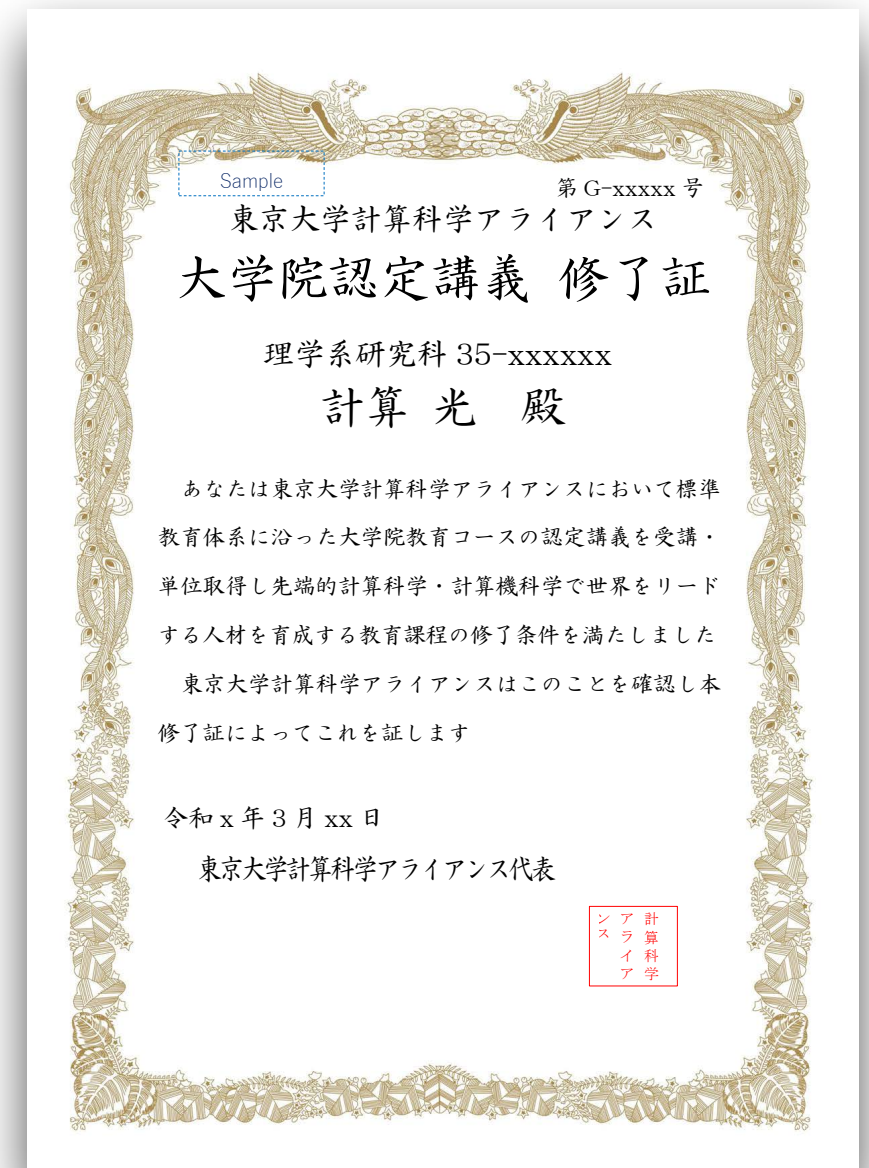
- 学部
 - カテゴリA,B,Cからそれぞれ1.5単位以上 (計4.5単位以上)
- 大学院
 - カテゴリD,E,Fのうち2つのカテゴリを選択し、それぞれから2単位以上(計4単位以上)。ただし、情報理工と数理科学の学生は2つのうちひとつはカテゴリFでなければならない



- 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

修了証

- 修了証の申請は随時行える。ただし
 - 学部: 卒業から1年以内
 - 大学院: 修士または博士課程終了から1年以内
 - 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・修正あり
 - 2025年度版は4月中に確定予定
 - 講義の追加、カテゴリの変更、開講しない講義、など
 - 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



2025年度の変更予定 - 4/7現在

- カテゴリB
 - 先端コンピューティング：2025年度以降は開講されない
 - 先端コンピューティングの後継として、以下の2つの講義が開講される
 - 連続体の力学とCAE
 - 高性能コンピューティング
- カテゴリD
 - 並列数値計算論：2025年度は開講されない
 - 並列分散プログラミング：2025年度は開講されない
- カテゴリF
 - DNA情報解析特論：2025年度は開講されない
 - 数値流体力学入門：2025年度は開講されない

計算科学概論（学部：カテゴリーC）

- 対象: 学部4年生
- 概要
 - 計算科学の最先端研究動向とスーパーコンピュータによる実践的シミュレーション技術をオムニバス形式で紹介する
 - 並行して、東京大学情報基盤センターのスーパーコンピュータ「Wisteria/BDEC-01」を用いた実習を行う
- 目的
 - 計算科学の各分野でどのようなシミュレーションが活用されているか学ぶ
 - 現代のスーパーコンピュータのアーキテクチャや並列化について学ぶ
 - シミュレーション手法を学び、実際にスーパーコンピュータ上で実行してその概略を掴む

計算科学概論（2025年度）

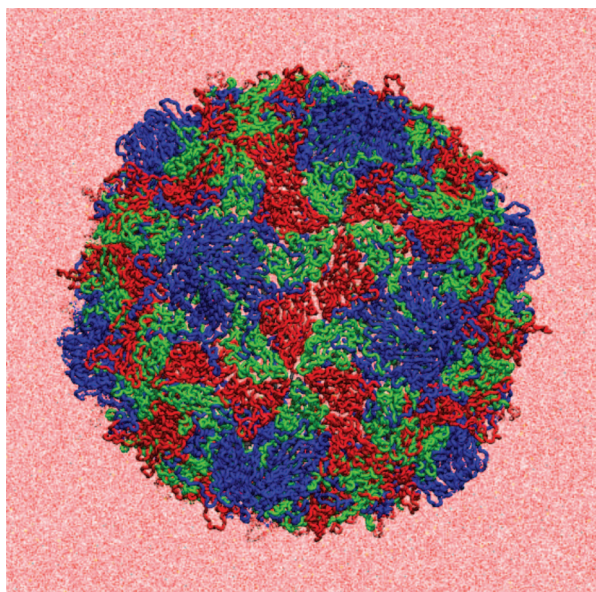
- 4/7(月) 中村 「高性能計算機のアーキテクチャ」(座学)
- 4/21(月)・4/28(月) 吉本 「スーパーコンピュータと並列プログラミング」(座学、実習)
- 5/8(木) 市村/藤田 「大規模疎行列ソルバー入門」(座学)
- 5/19(月)・5/26(月) 奥田 「並列FEMとCAE (Computer Aided Engineering)」(座学、実習)
- 5/30(月) 市村/藤田 「大規模疎行列ソルバー入門」(実習)
- 6/16(月)・6/23(月) 尾崎 「第一原理計算による物質科学研究」(座学、実習)
- 6/30(月)・7/7(月) 田浦 「高性能プログラミングと性能測定」(座学、実習)

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・情報理工学系で開講

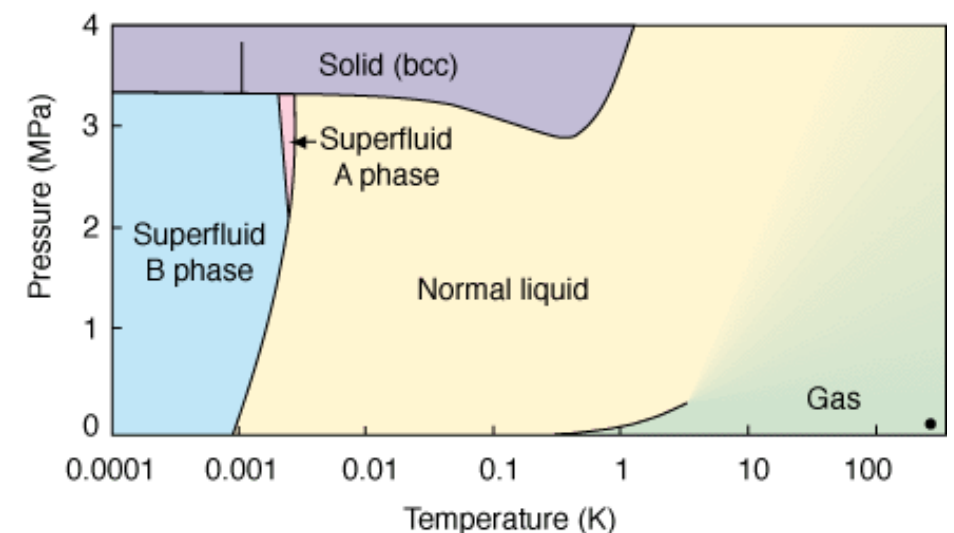
概要

- 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、テンソル繰り込み群法、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).



^3He の相図

Erkki Thuneberg, <http://lth.tkk.fi/research/theory/helium.html>

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とその困難
- ・ 第2回： 古典統計力学模型と数値計算
- ・ 第3回： 古典モンテカルロ法の基礎
- ・ 第4回： 古典モンテカルロ法の応用
- ・ 第5回： 分子動力学法とその応用
- ・ 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： 高度なモンテカルロ法アルゴリズム
- ・ 第8回： テンソル繰り込み群法とその応用

量子

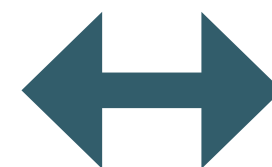
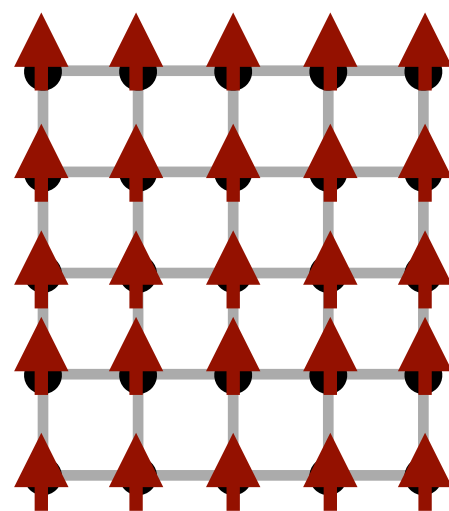
- ・ 第9回： 量子統計力学模型と数値計算
- ・ 第10回： 量子モンテカルロ法
- ・ 第11回： 量子モンテカルロ法の応用
- ・ 第12回： 量子多体問題と巨大な疎行列の線形代数
- ・ 第13回： 量子多体系のための実用的アルゴリズム

多体問題の計算科学：トピック例

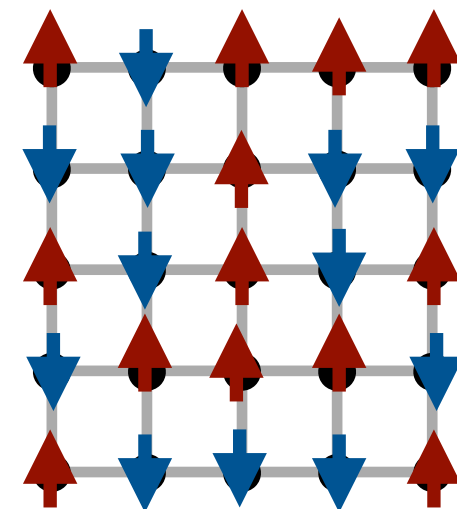
統計物理学を例とした数値シミュレーション

格子スピン模型

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

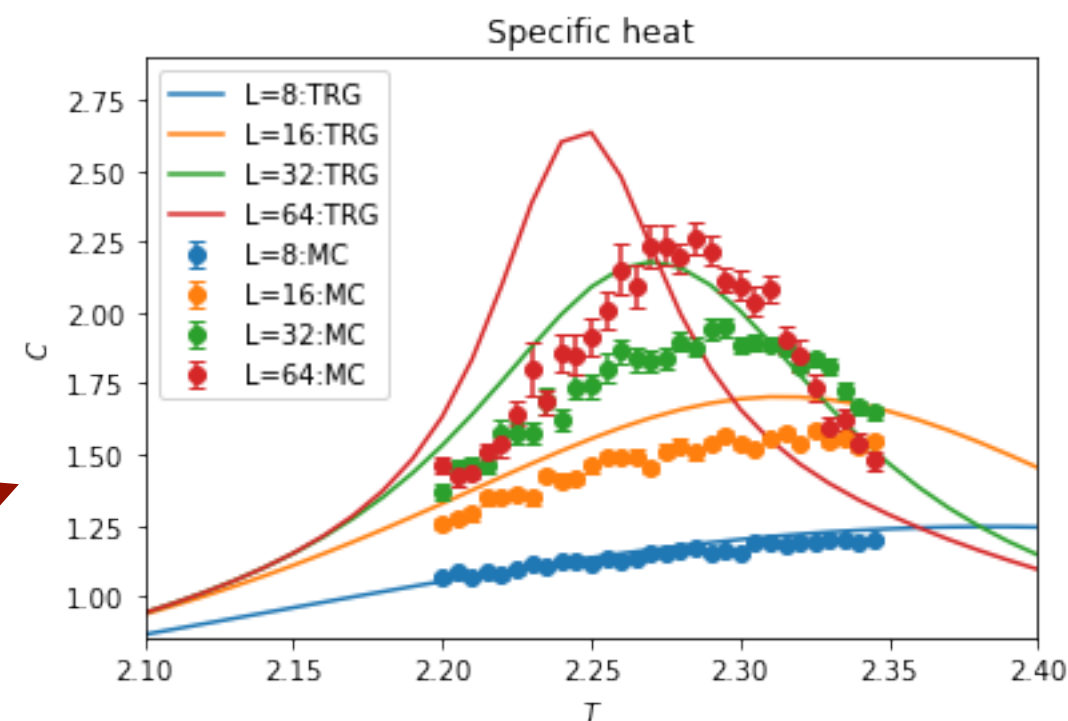


相転移！



- マルコフ連鎖モンテカルロ法
 - 拡張アンサンブル・レプリカ交換法
 - ハイブリッドモンテカルロ法
- テンソルネットワーク法
 - テンソル繰り込み群

テンソルネットワーク法と
モンテカルロ法との比較



工学系・理学系・新領域・情報理工学系で開講

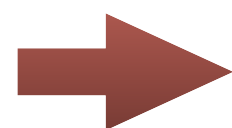
概要

- ・ 巨大な自由度を圧縮し効率的に表現する基礎となる、**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、および、それらの計算科学・量子計算への応用**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 $A\vec{v} = \lambda\vec{v}$

ベクトル $\vec{v}$ が**計算機のメモリに収まらない** (メモリ量 $\ll O(M)$)



情報圧縮による近似計算

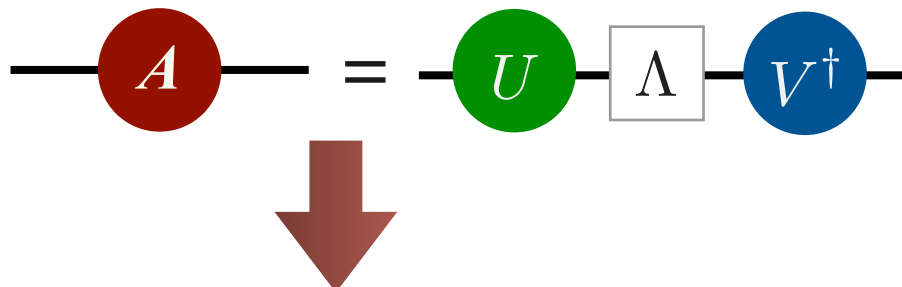
計算科学・量子計算における情報圧縮： 講義予定

- ・ 第1回： 計算科学・量子計算と情報圧縮
- ・ 第2回： 線形代数の復習
- ・ 第3回： 特異値分解
- ・ 第4回： 特異値分解のテンソルへの拡張と応用
- ・ 第5回： 情報のエンタングルメントと行列積表現
- ・ 第6回： 行列積表現の固有値問題への応用
- ・ 第7回： テンソルネットワーク表現への発展
- ・ 第8回： テンソルネットワークにおける情報圧縮
- ・ 第9回： テンソルネットワーク繰り込みによる情報圧縮
- ・ 第10回： 量子力学と量子計算
- ・ 第11回： 量子コンピュータ・シミュレーション
- ・ 第12回： 量子古典ハイブリッドアルゴリズムとテンソルネットワーク
- ・ 第13回： 量子誤り訂正とテンソルネットワーク

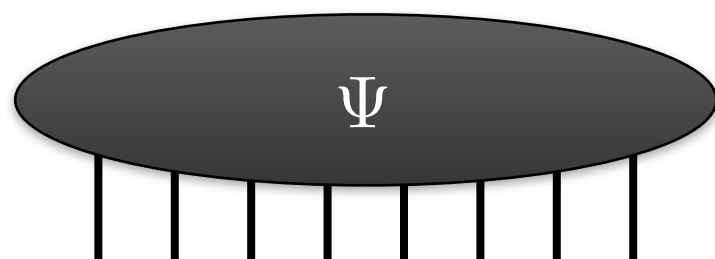
計算科学・量子計算における情報圧縮： トピック例

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

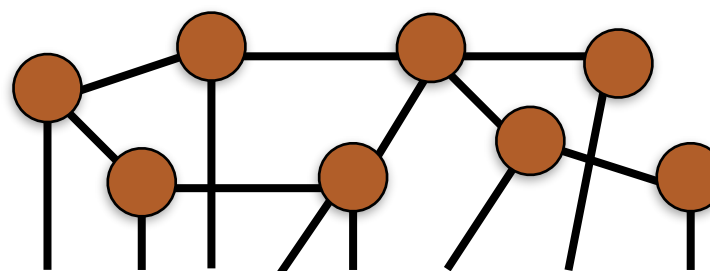
$$A \simeq U \Lambda V^\dagger$$


一般のテンソル（例：量子状態）

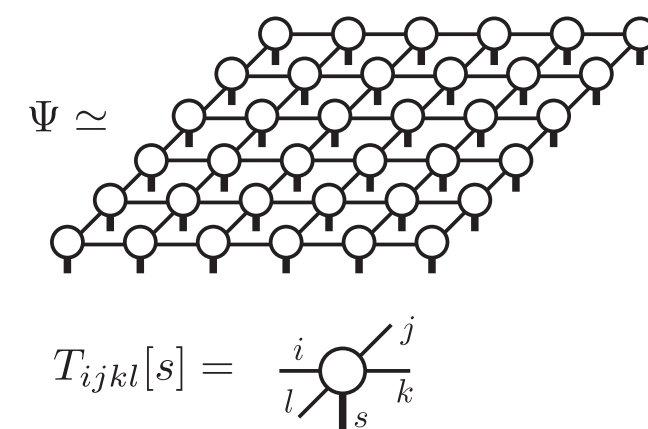


情報の相関構造の
特徴を利用

テンソルネットワーク分解

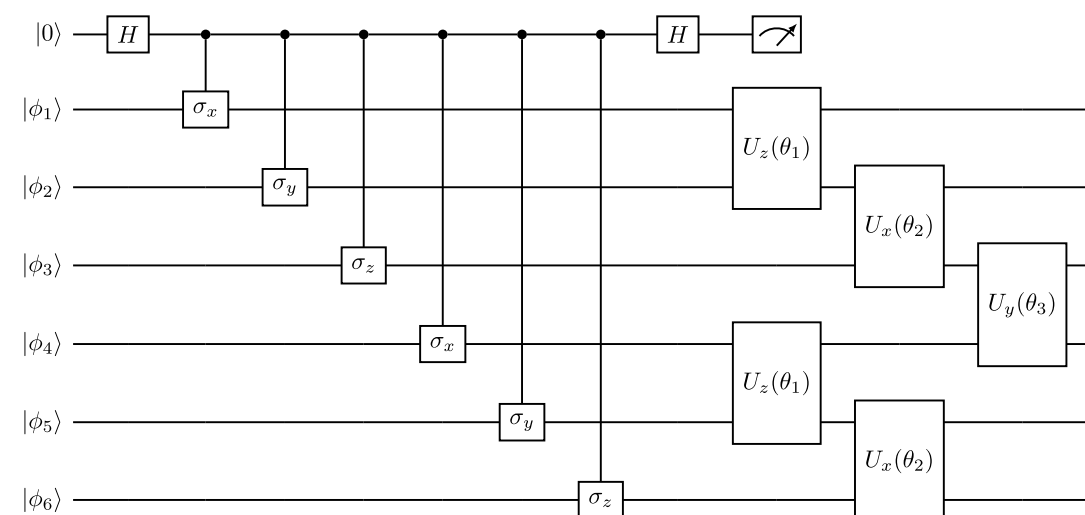


PEPS (for 2d system)



応用例：

- 量子多体問題、古典統計力学
- データ科学・機械学習
- 量子計算への応用



計算科学アライアンスへの登録

- UTOLに用意したコース「[計算科学アライアンス](#)」で行います（令和6年度から）
- コース検索で「計算科学アライアンス」を検索し、時間割コード「[4892501](#)」のものを選択して登録してください（自己登録扱いになります）
- UTASとは[連携していません](#)のでご注意ください
- コースの[お知らせ](#)機能を用いて、計算科学アライアンスから各種[ご案内](#)を行います

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（Wisteria/BDEC-01）の利用機会を無償で提供

Wisteria/BDEC-01: <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/wisteria/service/>



（情報基盤センターwebページより）

Wisteria/BDEC-01

- 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、300ノード時間の計算資源（トークン）を無償で提供

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
- ・ 情報基盤センターの申請者情報登録・変更申し込みページより申請者番号を取得
 - ・ 利用案内、通常利用(一般)、利用申込書・記入要領とたどります

を行った後

1. 申請者番号
2. メールアドレス（申請者番号の登録に用いたもの）
3. 氏名
4. 所属、学年
5. 学籍番号
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））。2026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

- アカウント情報は登録したメールアドレスに届きます
 - 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300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。

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。

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。
- 募集時期等については計算科学アライアンスのWebページ(<http://www.compsci-alliance.jp/overseas-support/>)にて告知します。
- これまでの実施内容は「海外派遣報告書」のページ(<https://www.compsci-alliance.jp/overseas-support/report/>)をご覧ください。

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43巻**、**試行版51巻**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）
- 詳細は「[東京大学工学教程特設ページ](#)」をご覧ください ➡
- 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！

