

Computational Science Practice A1

計算科学演習A1



2017年4月13日

神戸大学大学院システム情報学研究科 計算科学専攻

陰山聡、横川三津夫、臼井英之、坪倉誠

中村匡秀、谷口隆晴、三宅洋平、坂本 尚久

TA: 大羽秀明、山本晃平



Web page for this class

- http://exp.cs.kobe-u.ac.jp/wiki/comp_practice/



Contact

- 陰山 聡（計算科学専攻）
- Akira Kageyama (Dep. Comput. Sci.)
- Email: kage@port.kobe-u.ac.jp



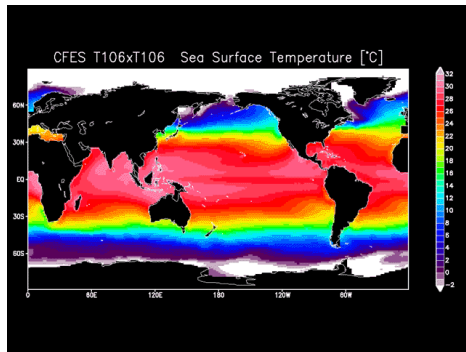
Objective of this class

- To develop the knowledge and skills of computational science, including parallel programming (with MPI and OpenMP) data, visualization, and programming techniques using Fortran90/95.
- 計算機シミュレーションを行うために不可欠な下記の技法を, 演習を通じて学ぶ
 - スーパーコンピュータの利用方法
 - 並列化の概念・手法
 - 並列プログラミング
 - データ可視化

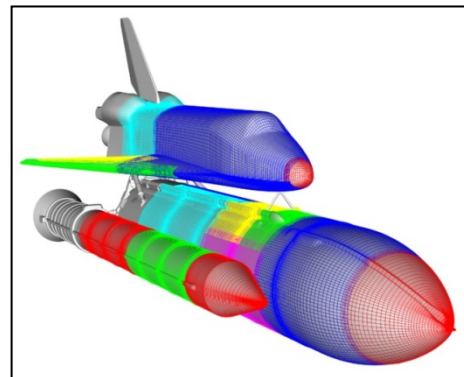
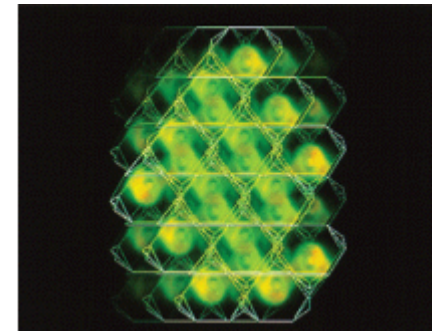


Importance of Computer Simulations

CFD (Computational Fluid Dynamics)



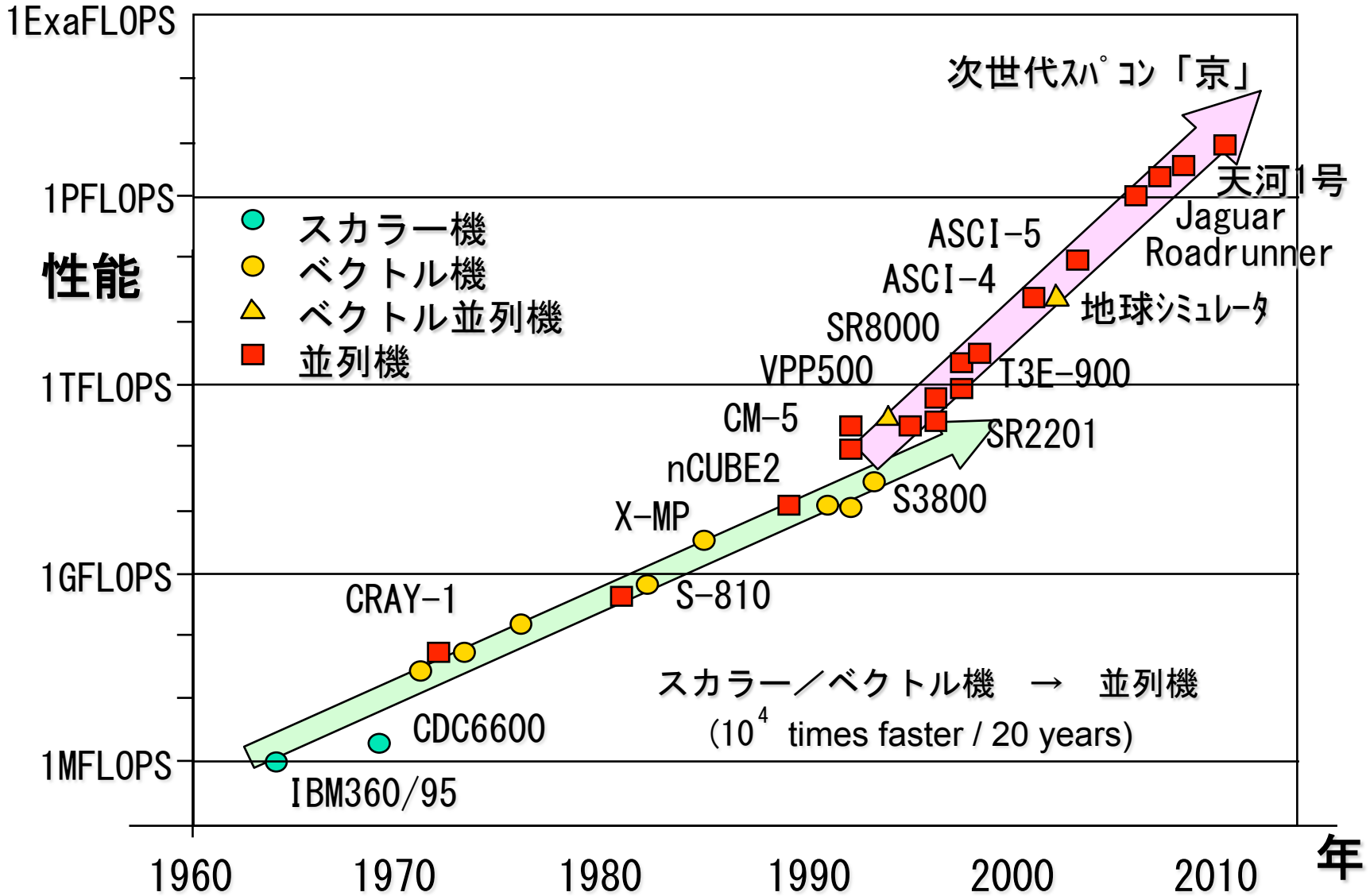
Computational chemistry



CAE (Computer Aided Engineering)

- 実験が困難な現象
 - 観測が困難な現象
- ⇒ シミュレーションによる解析が必須

大規模計算を支えるスーパーコンピュータ



科学技術計算のための並列処理

- 研究室レベルのPCクラスタからスーパーコンピュータに至るまで、様々な並列計算機が科学技術計算に活用されている

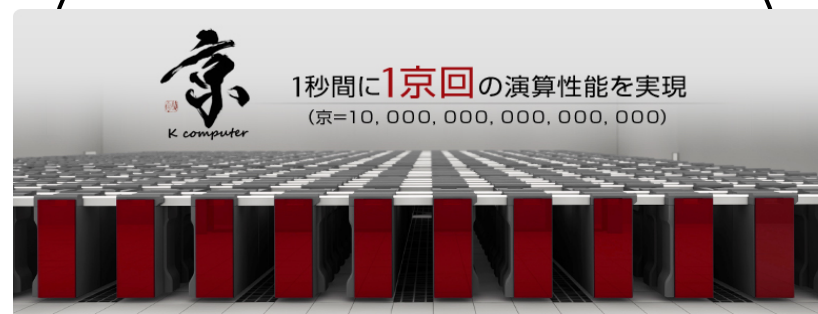
様々なスパコン



天河2号

Titan

「京」コンピュータ



「京」本体

PCクラスタ



建屋(ポートアイランド)



授業の構成 1st Q

- 01 | 4/13 | オリエンテーション (陰山)
UNIX の復習 I(臼井)
- 02 | 4/20 | UNIX の復習 II(陰山)
- 03 | 4/27 | データ可視化 I(坂本)
- 04 | 5/11 | Fortran 90/95 入門 I(坪倉)
- 05 | 5/18 | Fortran 90/95 入門 II(坪倉)
- 06 | 5/25 | 休講
- 07 | 6/01 | 並列計算とは、OpenMP (臼井)
- 08 | 6/08 | OpenMP を用いた並列計算 II(三宅)



授業の構成 2nd Q

- | | | |
|----|------|----------------------|
| 01 | 6/15 | MPI を用いた並列計算 I(谷口) |
| 02 | 6/22 | MPI を用いた並列計算 II(谷口) |
| 03 | 6/29 | MPI を用いた並列計算 III(横川) |
| 04 | 7/06 | MPI を用いた並列計算 IV(横川) |
| 05 | 7/13 | データ可視化 II(坂本) |
| 06 | 7/20 | 実践編 I(陰山) |
| 07 | 7/27 | 実践編 II(陰山) |
| 08 | 8/03 | (予備日) |



授業の進め方

- 授業形式

- 演習形式で進める
- 毎回レポート課題を出し、時間内あるいは次週までに提出する。
- レポート提出の確認方法は各教員ごとに異なる。

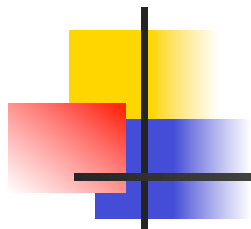
- 授業のwebページ

- http://exp.cs.kobe-u.ac.jp/wiki/comp_practice/
- 授業で使うスライドを掲載するので、授業中に適宜参照すること



成績評価

- レポートの点数により評価を行う
- 毎回出席を取る
 - pi-computerへのログイン
- 4回以上欠席した場合は、単位を与えない



注意事項 Catuion



B4生の参加について

- 本来はM1向けの講義だが，計算科学専攻の研究室に配属されたB4生も（指導教員が認めた場合）参加可能
- 定員（40名）を超えた場合は，M1を優先
- 4年生は履修登録は不要
- 今年の成績（単位）は修士に持ち込み可能
 - ただし、修士入学後に履修登録すること（次ページ）



B4生の単位持ち越しについて

- レポートと出欠の条件を満たした場合、4年生の段階では単位が出ないが、修士課程入学後、**履修登録すれば**(出席なしに)単位を出す。
- ただし、M1向け講義(第2クォーター)
「システム運用論」と「計算科学演習A2」
は時間割が重複している。
- 「計算科学演習A2」の単位が必要ならばM2で履修登録すること。