計算科学演習I　第1回講義

2015年4月16日

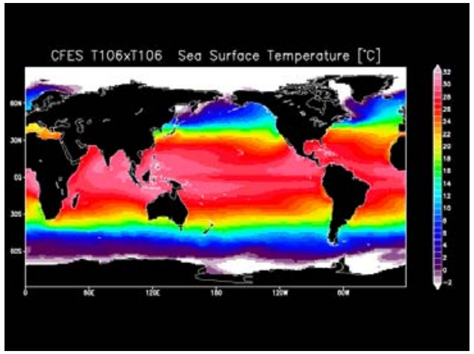
神戸大学大学院システム情報学研究科 計算科学専攻
臼井英之　陰山聡　横川三津夫 坪倉誠
谷口隆晴　中村匡秀　三宅洋平

授業の目標

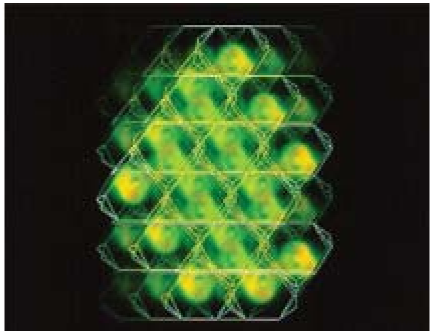
- 計算機シミュレーションを行うために不可欠な下記の技法を，演習を通じて学ぶ
  - 計算機利用法
  - プログラミング言語
  - 並列化プログラミング
  - 可視化

科学・工学におけるシミュレーションの重要性

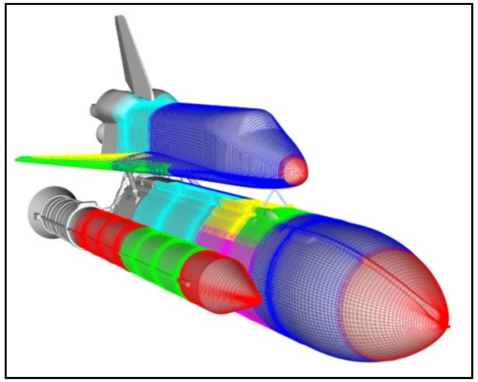
流体計算



電子状態計算



構造解析

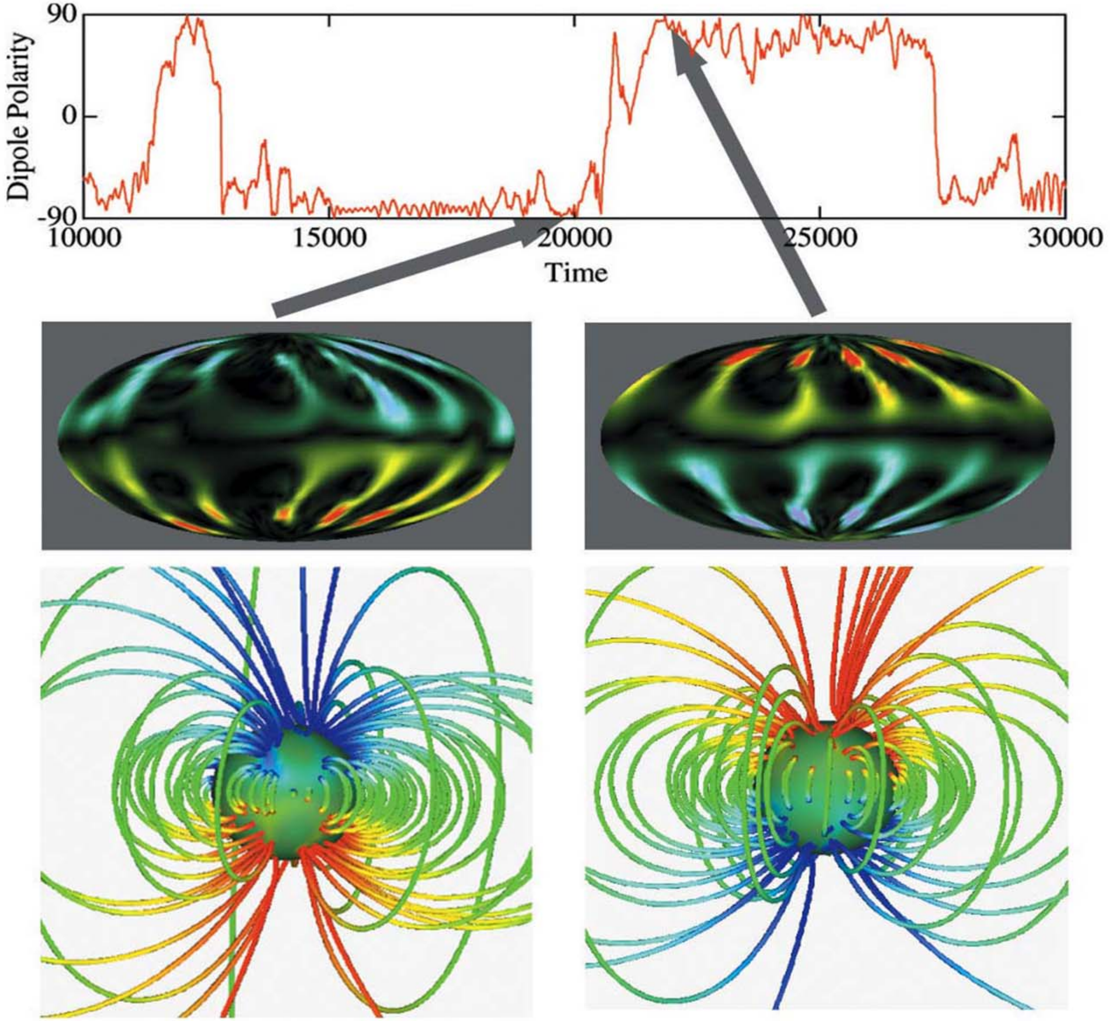


- 実験が困難な現象
- 観測が困難な現象

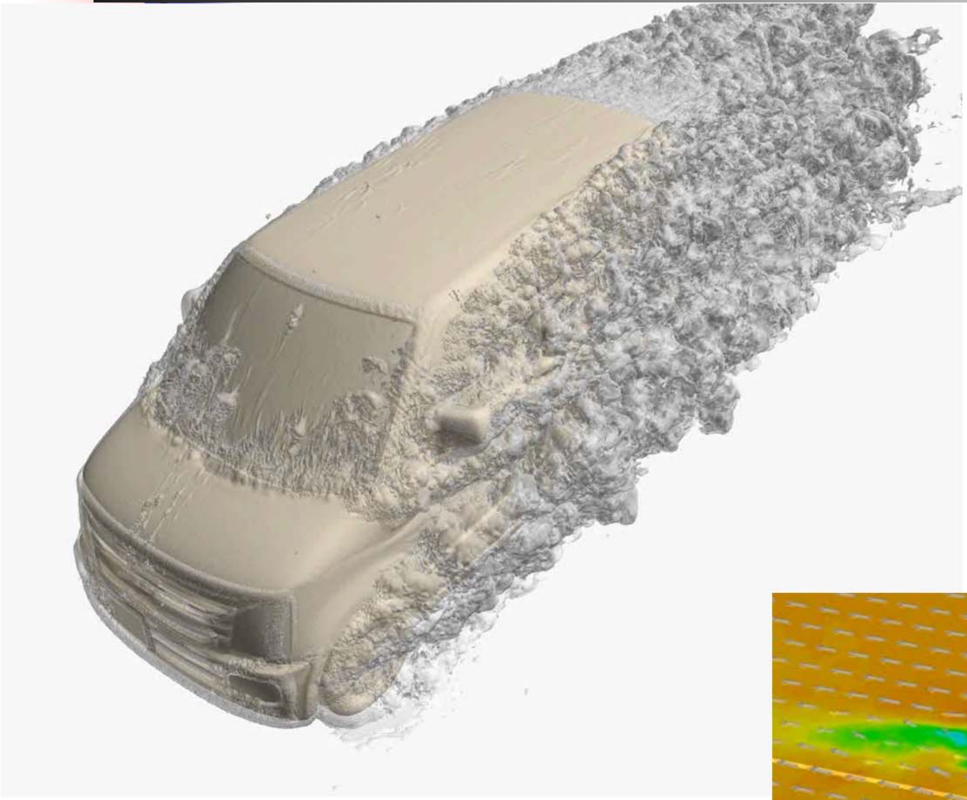
→ シミュレーションによる解析が必須

大規模シミュレーションの例（陰山教授）

- 地磁気の形成と逆転現象の再現

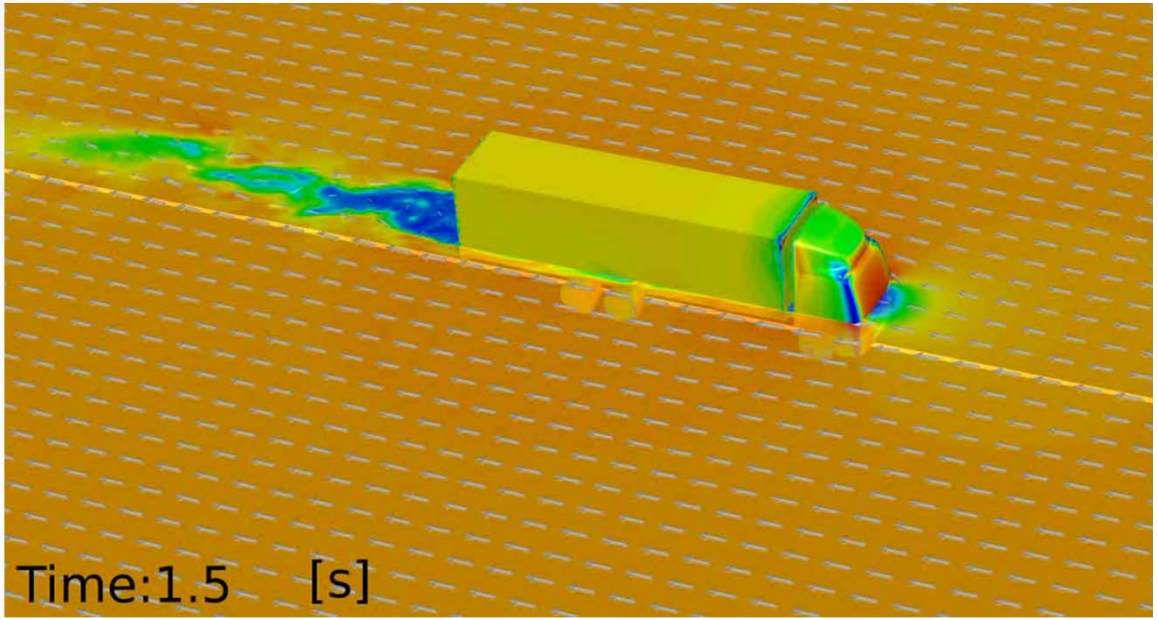


超並列流体シミュレーションによる次世代空力解析 (坪倉教授)

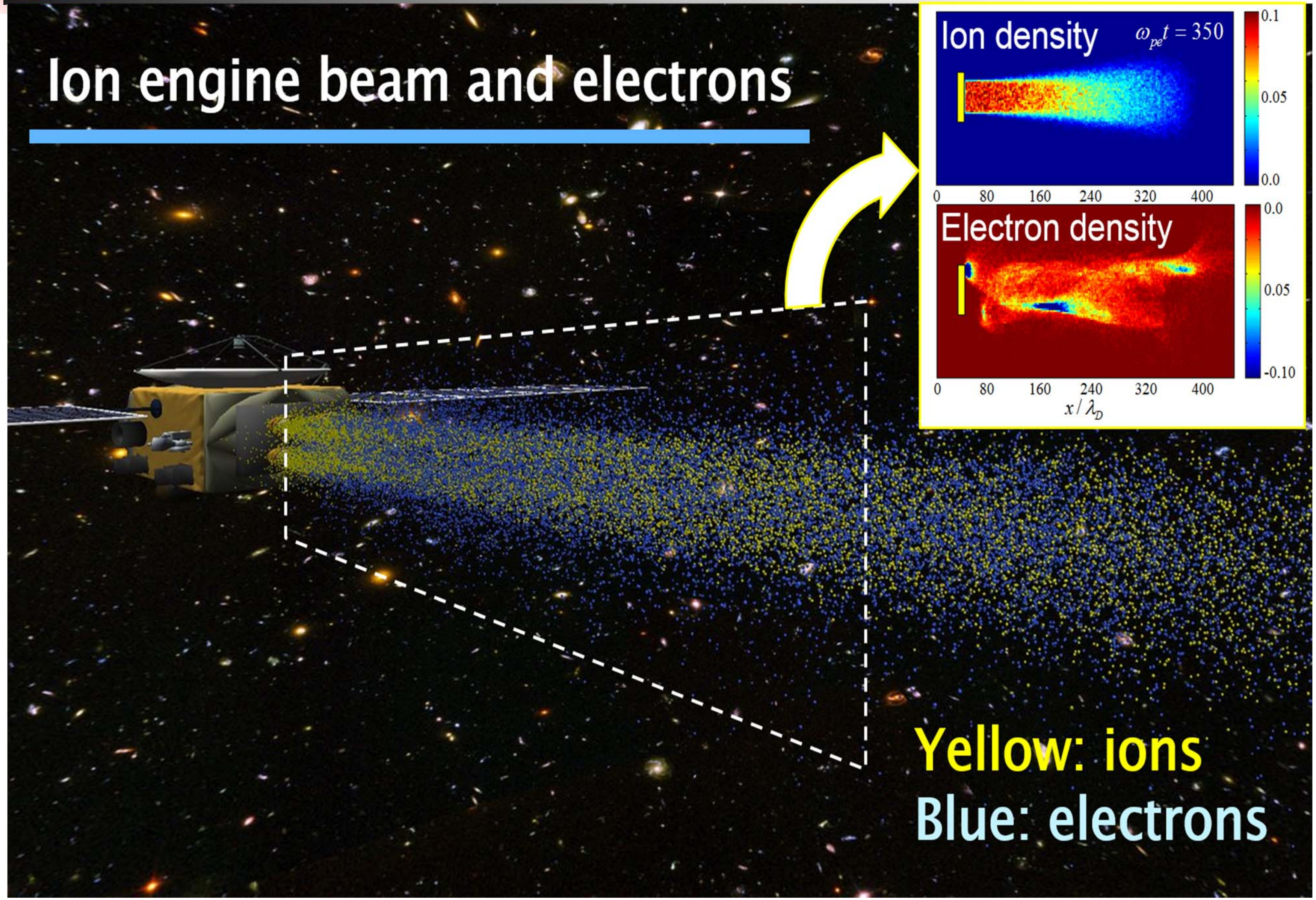


京スパコン（32,000コア並列）の活用により、自動車空気抵抗を、風洞実験値誤差2%で予測

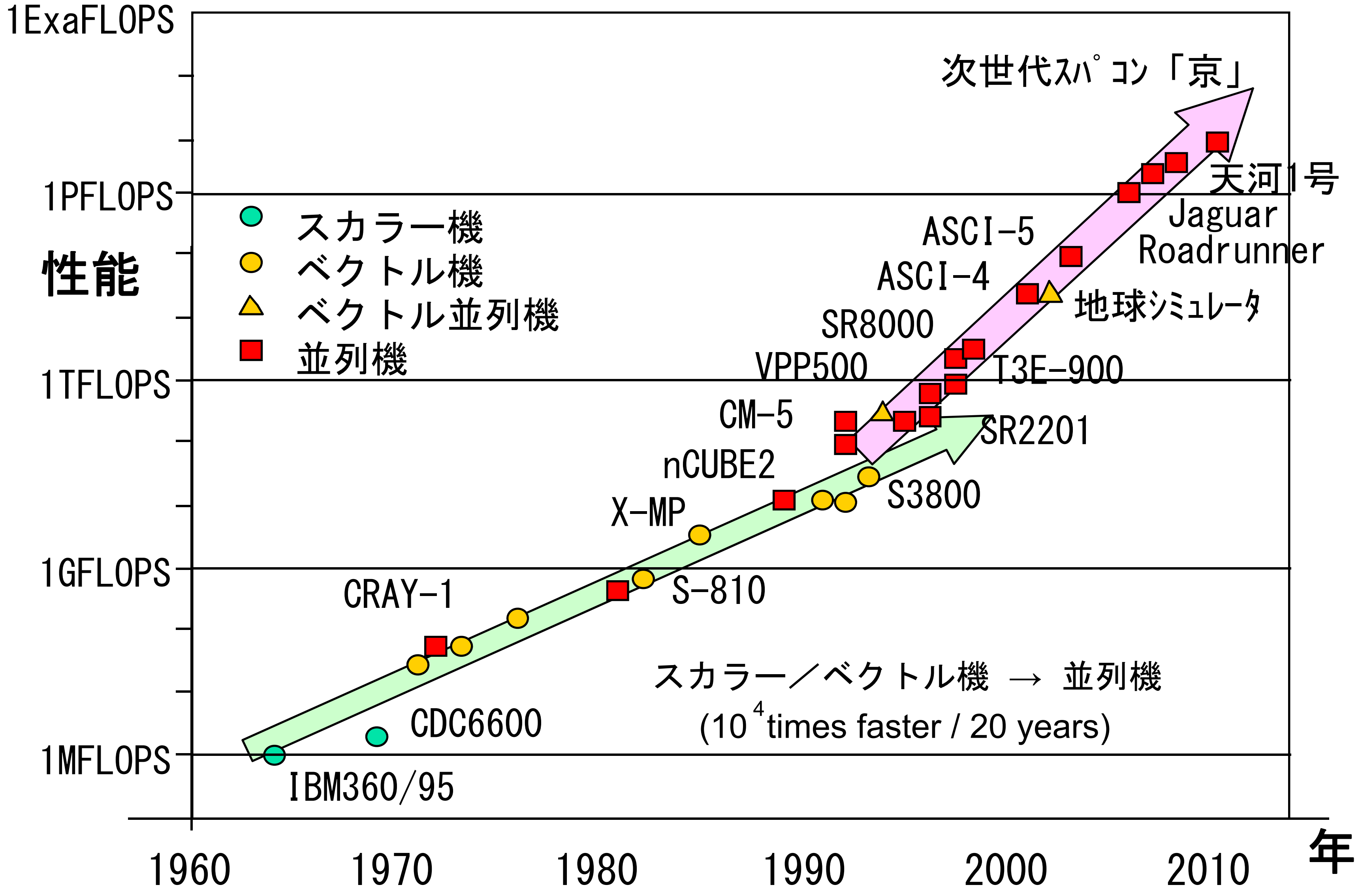
車両運動空力連成解析により、突風時の自動車運動挙動を予測



大規模シミュレーションの例（臼井教授）



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

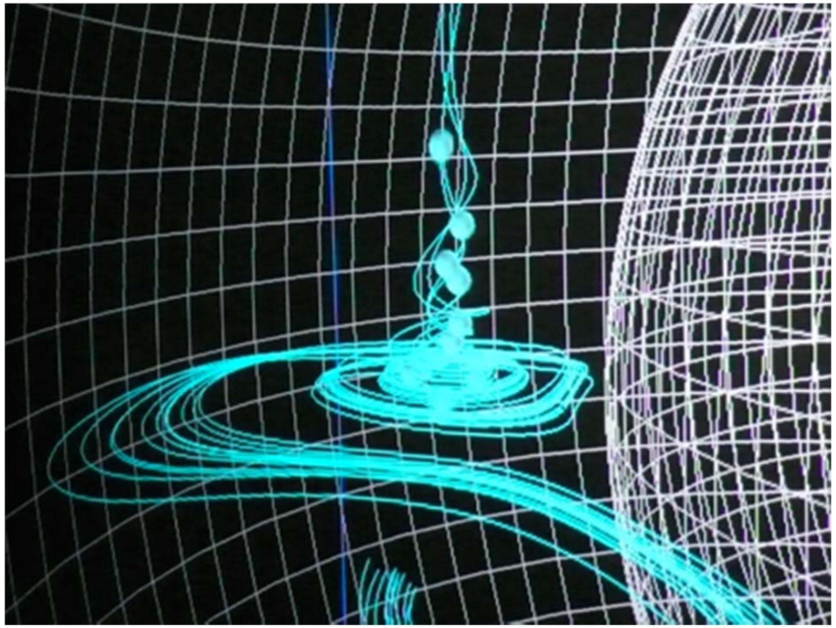
建屋（ポートアイランド）

PCクラスタ

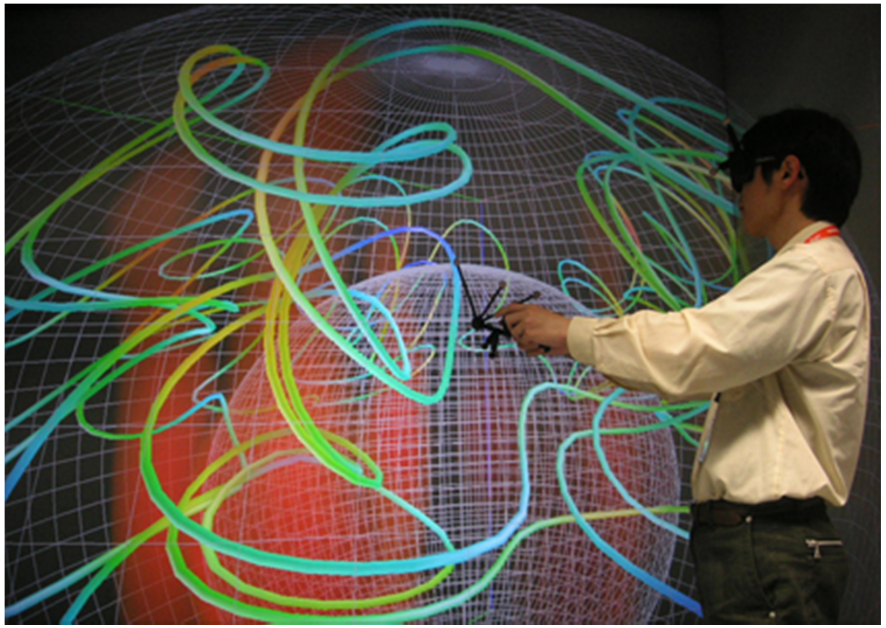
可視化による現象理解

- 膨大な計算結果から人間にとって意味のある情報を取り出すには，可視化技術が重要

トレーサー粒子による流れの可視化



VR技術を応用した3次元可視化



授業の構成

1. UNIX の復習
2. FORTRAN90/95入門
3. 並列計算とは
4. OpenMP を用いた並列計算
5. MPI を用いた並列計算
6. データの可視化
7. 実践編

スケジュール

4/16	オリエンテーション、UNIX の復習 I	臼井
4/23	UNIX の復習 II	臼井
4/30	FORTRAN の基礎 I	坪倉
5/7	FORTRAN の基礎 II	坪倉
5/14	データの可視化I	陰山
5/21	並列計算イントロ、OpenMP を用いた並列計算 I	谷口
5/28	OpenMP を用いた並列計算 II	谷口
6/4	MPI を用いた並列計算 I	横川
6/11	MPI を用いた並列計算 II	谷口（横川）
6/18	MPI を用いた並列計算 III	横川
6/25	データの可視化II	陰山
7/2	実践編 I	陰山
7/9	(休講）	
7/16	実践編 II	陰山

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してもらう

- 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
- 4回以上欠席した場合は，単位を与えない

4年生の参加について

- 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4年生も，指導教員が認めた場合は参加可能
- 4年生は履修登録は不要
- 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，履修の事実が記録され，修士に入った段階で（出席なしに）単位を出す
- ただし，M1もしくはM2になったときに履修登録を忘れずに行うこと

受講者が定員を超えた場合について

- 端末の数から，受講者は40名が限度
- 定員を超えた場合は，M1を優先したい

授業に関する連絡先

- 計算科学専攻　臼井英之
- Email:　h-usui@port.kobe-u.ac.jp
- 電話:　078-803-6140