

Course number		G-LAS12 80016 SJ11 G-LAS12 80016 SJ10					
Course title (and course title in English)	計算科学演習 A Exercise on Computational Science A				Instructor's name, job title, and department of affiliation	Graduate School of Informatics Program-Specific Associate Professor,SATO HIROYUKI Institute for Liberal Arts and Sciences Program-Specific Senior Lecturer,SEKIDO HIROTO	
Group	Interdisciplinary Graduate Courses			Field(Classification)	Statistics, Informatics and Data Science		
Language of instruction	Japanese			Old group		Number of credits	1
Number of weekly time blocks	1	Class style	Seminar (Face-to-face course)		Year/semesters	2025・First semester	
Days and periods	Mon.2		Target year	Graduate students		Eligible students	For science students
( Students of Graduate School of Informatics cannot take this course as liberal arts and general education course. Please register the course with your department. )							
[Overview and purpose of the course]							
<p>大規模データに対する統計処理を通して、高速な逐次計算プログラムを作成する技法と並列計算の初歩を学ぶことを目的とする。数値計算と統計計算について簡単に触れた後、計算機アーキテクチャの説明、キャッシュの有効活用などの話題を解説し、高速な逐次計算プログラムを作成する上での注意点を解説する。さらに、マルチコアCPUを搭載する計算機での代表的な並列計算技法であるOpenMPと分散メモリ型並列計算機のための並列化技法であるMPIについて学ぶ。</p> <p>実習では、最小二乗法の問題を解く為のコードを作成する。最小二乗法については、列フルランク行列の場合には、QR分解によって計算可能である。よって、始めに、列フルランク行列の場合を仮定し、QR分解を行うための逐次計算のコードを、「逐次計算の高速化」の内容を意識して作成する。次に、そのアルゴリズムを基礎として、MPI並列計算用のQR分解法であるAll Reduce アルゴリズムを実装する。列フルランクでない行列については、ピボット選択付QR分解の後、特異値分解を用いてノルム最小二乗解を求めるのが一般的であったが、近年、それに代わるより簡便な新しい手法が提案されており、この授業では、その手法を実装する。さらに、作成した逐次計算のコードをOpenMPの技法を用いた並列計算のコードへと拡張する。</p>							
【大学院横断型教育の概要・目的】							
基本的な並列プログラミングの習得に止まらず、具体的な題材を課題とした実習により、計算科学の技法の習得ができる。そのため、より実践的な場面での学習成果の活用が期待される。特に、計算科学の技法を強く意識していなかった理系分野の大学院生が、この授業を受講することにより、新しい視点で、自分の分野の研究にアプローチできるようになる。							
[Course objectives]							
統計の基礎事項である最小二乗法についてその概念や利用法を理解する。加えて、高速な逐次計算プログラムを作成する技法と並列計算技法を理解する。マルチコアCPUを搭載する計算機における並列計算技法であるOpenMPと、分散メモリ型並列計算機における並列計算技法であるMPIについて、その利用法を習得することを到達目標とする。							
[Course schedule and contents)]							
・数値計算と統計計算 (2回)							
計算科学の重要な手法である数値解析・数値計算の基礎について講述する。							
線形代数の知識について復習した後、計算機で統計計算を行う上で重要となるアルゴリズムを解説する。特に、統計計算における最小二乗法と、それを行うための基礎となるQR分解について解説する。							
----- Continue to 計算科学演習 A (2) -----							

## 計算科学演習 A (2)

### ・逐次計算の高速化(1回)

計算機アーキテクチャの説明、キャッシュの有効活用、データの再利用、さらに演算器の有効活用、効率的なプログラムを作成する上での注意事項などハイパフォーマンスコンピューティングという分野の基本的な内容を解説する。

### ・ OpenMP 入門(2回)

OpenMP並列プログラミングの基本的な考え方と技法について解説する。簡単な課題を用いて実習を行う。

### ・ MPI入門(2回)

MPI並列プログラミングの基本的な考え方と技法について解説する。簡単な課題を用いて実習を行う。

### ・ 最小二乗法を行うためのC言語によるコードの作成 (8回)

最小二乗法については、列フルランク行列の場合には、QR分解によって計算可能である。よって、始めに、列フルランク行列の場合を仮定し、QR分解を行うための逐次計算のコードを、「逐次計算の高速化」の内容を意識して作成する。次に、そのアルゴリズムを基礎として、MPI並列計算用のQR分解法であるAll Reduce アルゴリズムを実装する。

列フルランクでない行列については、ピボット選択付QR分解の後、特異値分解を用いてノルム最小二乗解を求めるのが一般的であったが、近年、それに代わるより簡便な新しい手法が提案されており、この授業では、その手法を実装する。さらに、作成した逐次計算のコードをOpenMPの技法を用いた並列計算のコードへと拡張する。

## [Course requirements]

・ 課題実習では、学術情報メディアセンターのスーパーコンピュータを使用します。情報学研究科に所属の学生は事前に取得しているアカウントを使用します。他研究科履修生については本演習用に必要に応じてアカウントを配布します。

・ 実習用端末として、ノート型PCを持参してください。持参できるノート型PCがない場合には教員に申し出てください。

・ C言語については、その文法を習得していることを前提として演習を行う為、すでに習得しているか、それについての予習と復習を授業と並行して行うことを期待する。

## [Evaluation methods and policy]

レポート試験の成績(80%)・平常点評価(20%)

「All Reduce アルゴリズムを実装した並列計算のコード」を作成するレポート課題を出題する(配点 40点)。

「OpenMPの技法を用いた並列計算のコード」を作成するレポート課題を出題する(配点 40点)。それぞれプログラムを作成することを課題とするレポートであり、独自の工夫がみられるものについては、高い点を与えます。

平常点評価には、出席状況と質問など通した授業への積極的な参加を評価します。

## [Textbooks]

講義資料を配布する。  
教科書は特に定めない。

Continue to 計算科学演習 A (3)

## 計算科学演習 A (3)

### [References, etc.]

( References, etc. )  
特に定めない。

### [Study outside of class (preparation and review)]

最小二乗法について理解するための予習あるいは復習を期待する。さらに、各話題について、授業時間の制約の為、詳細に解説することが困難であるため、各自で、図書館等を利用して各話題についての深い知識を得ることを期待する。

### [Other information (office hours, etc.)]

オフィスアワーについては担当教員の KULASIS 登録情報を参照すること。  
佐藤寛之: [hsato@amp.i.kyoto-u.ac.jp](mailto:hsato@amp.i.kyoto-u.ac.jp)  
關戸啓人: [sekido@amp.i.kyoto-u.ac.jp](mailto:sekido@amp.i.kyoto-u.ac.jp)  
授業時間外で質問がある場合には、あらかじめ、上記のアドレスにメールをすること。

### [Essential courses]