

科目名	計算科学の拓く世界 [Frontier of Computational Science]				
講義題目					
責任教員	大宮 学 [Manabu OMIYA] (情報基盤センター)				
担当教員	大島 伸行(工学研究科), 武次 徹也(大学院理学研究院), 田中 譲(情報科学研究科), 中村 知裕(低温研・環オホーツク), 羽部 朝男(大学院理学研究院), 三浦 信明(理学研究科), 毛利 哲夫(工学研究科), 矢久保 考介(工学研究科), 木村 真明(創成科学共同研究機構)				
科目種別	大学院共通授業科目				
開講年度	2010	開講学期	1学期	時間割番号	101018
授業形態	講義	単位数	2	対象年次	～
対象学科・クラス		補足事項	代表教員内線番号 2946		
キーワード					
計算科学、大規模並列計算、スーパーコンピュータ					
授業の目標					
計算機の性能の飛躍的な発展により、計算機シミュレーションは広い学問分野において従来の研究の補助的な手段から相補的な手段に変わりつつある。理学・工学・生命科学の代表的な講師陣のオムニバス形式の講義により各分野の最新の成果に接し、異分野間を結ぶ共通の手法について学ぶ。					
到達目標					
計算機シミュレーションの手法には異分野にまたがる共通的な要素が多く、計算科学は極めて学際性が強い学問である。他分野での先端的な応用例を学ぶと共に、異分野を結ぶ手法の共通性や広範な学問領域に渡る普遍性を見出し、自分の研究を客観的に捉える習慣を身につける。さらに、修士論文・博士論文の研究に異分野の手法を効果的に応用する。					
授業計画					
基礎:①超並列計算機のアーキテクチャ、並列プログラミングとプログラムチューニング、②代表的な数値計算アルゴリズムと大規模行列の対角化の重要性と具体例					
応用:①インターネット上の知的資源の連携統合による研究支援、②宇宙物理学における宇宙の構造形成に関する数値シミュレーション、③量子化学における化学反応ダイナミクスの追跡シミュレーション手法、④先端生命科学における生体関連分子のシミュレーション、⑤機械宇宙工学における高分子型燃料電池(PEFC)内の熱流動、相変化、電気化学反応などの解析、⑥材料科学におけるマルチスケール材料設計シミュレーション、⑦海洋と大気の数値シミュレーション、⑧原子核反応・原子核の構造に関する数値シミュレーション					
準備学習（予習・復習）等の内容と分量					
大学院で取り組んでいる研究テーマに計算科学的手法の適用を試みる。並列処理およびプログラムチューニングを実際のプログラムコードに適用し、その効果について検証およびベンチマーク試験を実施する。さまざまな研究分野で利用されている計算アルゴリズムおよび計算手法を比較検討し、研究テーマへの適用、その大規模計算および高速計算への可能性について考察する。なお、予習および復習には毎回それぞれ2時間以上、合計4時間以上をかけること。					
成績評価の基準と方法					
出席率が70%以上の者を対象に、各回出題するレポートの採点を行い、総合評価を行う。					
テキスト・教科書					
担当教員が作成した資料に基づいて講義を進める。さらに、講義において教科書・参考書・文献などを推薦する。					
講義指定図書					
参照ホームページ					
備考					
特になし					