

開講科目名	計算科学基礎論		
担当教員	上原 邦昭	開講区分	単位数
		前期	2単位

### 授業のテーマと目標

計算科学の基盤となる数理的方法論や超並列情報処理などに関する最新のトピックスをオムニバス形式で取り上げて講義することにより、高度な専門知識を幅広く習得させる。

### 授業の概要と計画

大規模データのモデル化と可視化  
 大規模データを数理モデルに基づいて効率的に処理する方法について、最新の話題も含めて講義する。(山本有作 / 3回)  
 計算機シミュレーションで得られた膨大な数値データから価値ある情報を人間の感性に合わせて効果的に抽出するための可視化技術に関する最新の話題について講義する。(陰山聡 / 3回)  
 大規模データの知的処理  
 大規模データを処理するためのデータ分析技術、多様なデータから新たな知識を獲得する技術であるデータマイニングについて最新動向を講述する。(上原邦昭 / 3回)  
 大規模計算を行うソフトウェアを如何に効率良く、信頼性高く開発するかを工学的観点から論じる。オブジェクト指向による開発プロセスやサービス/グリッドコンピューティング等、最新の話題についても紹介する。(中村匡秀 / 3回)  
 知的エージェントを利用した様々な問題解決やシミュレーションに関して講義する。知的エージェントとは、知的な判断に基づき自律的に行動する主体のことである。知的エージェントの構成法や学習手法、複数のエージェントを用いたマルチエージェントに関する技術を議論する。(安村禎明 / 3回)

### 成績評価方法と基準

レポート及び講義内で実施する演習の結果を総合評価し、評価が60点以上のものを合格とする。

### 履修上の注意(関連科目情報等を含む)

### オフィスアワー・連絡先

### 学生へのメッセージ

### テキスト

講義中に適宜指示する。

### 参考書・参考資料等

開講科目名	計算科学演習III		
担当教員	計算科学専攻教員	開講区分	単位数
		前期	2単位

### 授業のテーマと目標

本演習は、問題解決型授業であり、オムニバス形式で各専門分野における先端的な問題を与え、スーパーコンピュータを用いた計算機シミュレーションによって求解させる。これによりスーパーコンピュータによる計算科学の基礎を幅広く習得させる。

### 授業の概要と計画

スーパーコンピュータを用いた大規模計算機シミュレーションは最先端の科学技術の発展には不可欠である。本演習では、博士前期課程の計算科学演習I, IIに引き続き、各研究分野の計算科学専任教員により、それぞれの分野で実際に扱われている最先端の研究課題に関する計算機シミュレーション演習を行う。特に、スーパーコンピュータを用いた大規模並列シミュレーション手法及びそのチューニング手法を、演習を通して習得するとともに、数値データの三次元可視化手法、データ解析手法についても習得する。演習結果はレポートにまとめ提出するとともに、発表会においてその成果を披露し、プレゼンテーション技術の習得も行う。

1. 物理系シミュレーション演習 (5回)
2. 化学系/生物系シミュレーション演習 (5回)
3. 工学系シミュレーション演習 (5回)

### 成績評価方法と基準

研究背景への理解度、研究遂行への取り組み、研究成果、プレゼンテーション能力を基に、総合的に評価する。

### 履修上の注意(関連科目情報等を含む)

### オフィスアワー・連絡先

### 学生へのメッセージ

### テキスト

### 参考書・参考資料等

開講科目名	大規模数値シミュレーション特論		
担当教員	菊池 誠	開講区分	単位数
		前期	2単位

### 授業のテーマと目標

数値シミュレーションに必要な数値計算の基礎知識を身に付けている学生を対象として、大規模な数値シミュレーションを行なう際に考えるべきアルゴリズム上の問題点と計算手法について議論する。これにより、超並列計算機や大規模ベクトル計算機を活用した大規模数値シミュレーションのための各種技法を習得する。

### 授業の概要と計画

超並列計算機や大規模ベクトル計算機の発展により、数値シミュレーションの大規模化が進んでいる。ところが、計算の大規模化に伴う特有の困難があり、小規模計算向けに作られたアルゴリズムやプログラムをそのまま用いて、単に規模だけを大きくしたのではうまくいかない場合も多い。むしろ、一般の数値計算の教科書に書かれたアルゴリズムは、そのままでは大規模シミュレーションに使えないと思っておくべきである。この講義では、数値シミュレーションに必要な数値計算の基礎知識を身に付けている学生を対象として、大規模な数値シミュレーションを行なう際に考えるべきアルゴリズム上の問題点と計算手法について、主として以下のトピックを取り上げて議論する。

1. 非線形常微分方程式（3回）  
非線形性とカオス，システムの安定性
2. 偏微分方程式の離散化手法（4回）  
保存性と散逸性
3. 大規模行列の数値解法（4回）  
不完全分解，共役勾配法，並列化手法
4. 確率的な方法（4回）  
モンテカルロ・シミュレーションの基礎，乱数と精度，大規模ベイズ問題

### 成績評価方法と基準

レポート及び講義内で実施する演習の結果を総合評価し、評価が60点以上のものを合格とする。

### 履修上の注意(関連科目情報等を含む)

数値計算の基礎知識を習得していること。

### オフィスアワー・連絡先

### 学生へのメッセージ

### テキスト

### 参考書・参考資料等