平成２９年度

社会人向け実践教育プログラム

「計算技術科学実践教育プログラム」

日程およびシラバス

豊橋技術科学大学

社会連携推進センター

目次

1　はじめに

豊橋技術科学大学は，開学以来，「技術」を「科学」で裏付けし，そこから新しい技術を創造する技術科学の教育・研究を使命としています。計算機によるシミュレーションは，まさにこの理念を実践する上で不可欠な技術であることから，平成 24 年度より「次世代シミュレーション技術者教育プログラム」を開始し，我が国の産業の強化・活性化に欠かせない次世代シミュレーション技術を「使いこなせる」,「開発できる」人材を育成してきました。

この新たなプログラムでは，これまで開発してきた教育カリキュラムや教材開発ノウハウを最大限に活用し，大学院生（修士・博士）と社会人教育のための実践的な人材育成に取り組みます。本学が得意とするナノバイオ研究に必要な「計算物質科学」と，ビッグデータ科学の研究にも要求される「並列プログラミング」を中心に，教室講義と e-ラーニングによって基礎技術を習得し，研修（講習会）や課題研究を通じて実践応用まで学ぶことができます。

本プログラムは、以下の 4 つのコース（フルコースおよび 3 つのサブコース）を設定しており、そこから一つのコースを選択して受講可能です。

フルコース：

１）計算技術科学技術者コース　　　　　　(A、B、C、D、E、F: 156H)

サブコース：

２）高速プログラミング技術者コース　　　（A、B、F：96H）

３）物質科学シミュレーション技術者コース（A、C、E、F：96H）

４）第一原理シミュレーション技術者コース（A、D、E、F：96H）

ここで、A,B,C,D,E,F は以下の講義群を意味します。

A. 計算技術科学基礎・実践（全 24H）

B. 並列プログラミング基礎・実践・関連 （全 48H）

C. 物質科学シミュレーション（全 24H，うち 12H は D と共通）

D. 第一原理シミレーション（全 24H）

E. 事例研究（全 24H）

F. 計算技術科学特論（全 24H）

2 日程

2.1 日程表において使用する各種省略表現の説明

2.1.1 時限の定義

時限	時間	時限	時間
1	8:50-10:20	5	16:20-17:50
2	10:20-12:00	6	18:00-19:30
3	13:00-14:30		
4	14:40-16:10		

2.1.2 日にち欄に付けられた省略記号など

省略記号	意味
e	e-Learning（ビデオ配信）での受講を意味する。。 （詳細は 4 章参照してください。）
w	来学しての受講が基本ですが、Web 会議システムによるライブ授業への参加も受け付けます。 （詳細は 4 章参照してください。）
随時	e-Learning 授業について「随時」とあるものはあらかじめ受講計画書を提出していただき、それに従って受講をお願いします。

2.2 A. 計算技術科学基礎・実践（全 24H）

シミュレーション応用については 6 講義(12 時限)から 4 講義(8 時限)を受講すること。

回	タイトル	担当	日にち	時限	概要
1	シミュレーション基礎 1	濱田	随時 e または 9/28w	2,3,4	シミュレーション入門 差分法(常微分方程式)
2	シミュレーション基礎 2	濱田	随時 e または 9/29w	2,3,4	差分法(移流拡散方程式)
3	シミュレー	濱田	随時 e	3,4	差分法（波動方程式）

	ション基礎 3		または 10/2w		有限要素法
4	シミュレーション実践 1	中村	随時 e	2 時限分	電磁波と熱のマルチフィジックス解析（磁気ホログラフの記録再生シミュレーション）
5	シミュレーション実践 2	飯田	随時 e または 10/19w	4,5	ものづくりにおける大規模数値流体解析
6	シミュレーション実践 3	後藤	随時 e	2 時限分	Insight to Molecular Simulations
7	シミュレーション実践 4	小口	随時 e	2 時限分	計算機で化学反応を予測する
8	シミュレーション実践 5	加藤	随時 e	2 時限分	沿岸域の災害
9	シミュレーション実践 6	関下	随時 e	2 時限分	流体のシミュレーション

2.3　B. 並列プログラミング基礎・実践・関連　(全 48H)

回	タイトル	担当	日にち	時限	概要
1	並列プログラミング基礎 1	濱田（小畑）	随時 e	1 時限分	OpenMP の基礎
2	並列プログラミング基礎 2	濱田（小畑）	随時 e	1 時限分	OpenMP によるスレッド並列化
3	並列プログラミング基	濱田（小畑）	随時 e	1 時限分	数値計算ライブラリの利用

	礎 3				
4	並列プログラミング基礎 4	濱田（小畑）	随時 e	1 時限分	MPI の基礎
5	並列プログラミング基礎 5	濱田（小畑）	随時 e	1 時限分	MPI によるプロセス並列化
6	並列プログラミング基礎 6	濱田（小畑）	随時 e	1 時限分	MPI によるプロセス並列化
7	並列プログラミング基礎 7	濱田（小畑）	随時 e	1 時限分	MPI/OpenMPI ハイブリッド並列プログラミング
8	並列プログラミング基礎 8	濱田（小畑）	随時 e	1 時限分	MPI/OpenMPI ハイブリッド並列プログラミング
9	python 入門 1（基本）	濱田	9/15	4,5	python3, numpy, matplotlib
10	並列プログラミング実践 1	濱田	9/25	2,3,4	キャッシュの有効利用 プロファイラの利用
11	並列プログラミング実践 2	濱田	9/26	2,3,4	MPI プログラムの作成
12	並列プログラミング実践 3	濱田	9/27	3,4	Hybrid 並列プログラムの作成
13	python 入門 2（pandas）	濱田	11/1w	5,6	pandas
14	python 入門 3（高速化・並列化）	濱田	11/8w	5,6	cython, mpi4py
15	python 入門 4（GPU の利用例）	濱田	11/15w	5,6	chainer, cupy

16	HPC 特論 1	エクセルソフト	12/14	2,3,4,5	プログラム性能解析
17	HPC 特論 2	エクセルソフト	12/21	2,3,4,5	XeonPhi

2.4　C. 物質科学シミュレーション(全 24H, うち 12H は D と共通)

回	タイトル	担当	日にち	時限	概要
1	ChemOffice 入門	ヒューリンクス	12/6	2,3	ChemOffice の基礎
2	Gromacs による古典分子動力学入門	米谷（産総研）	12/6	4,5	古典分子動力学の基礎
3	OCTA 入門	小沢（JSOL）	12/7	2,3	OCTA の基礎
4	CONFLEX による配座探索と結晶構造探索	小畑（Conflex）	12/7	4,5	CONFLEX の基礎
5	第一原理シミュレーション	-	1/16,17 1/29,30	8 時限分	D から 2 タイトル分(12H)を受講のこと。

2.5　D. 第一原理シミレーション(全 24H)

回	タイトル	担当	日にち	時限	概要
1	PHASE 入門	濱田（JST）	1/16	2,3,4,5	PHASE の基礎
2	量子化学計算入門	小口	1/17	2,3,4,5	GAMESS による量子化学入門。Gaussian, NWChem についても簡単に触れる。（事前に ChemOffice の受講・学習を推奨）
3	Quantum Espresso 入門	中村・谷林	1/29	2,3,4,5	Quantum Espresso の基礎
4	Materials Studio 入門	ダッソーシステムズ・バイオビア	1/30	2,3,4,5	CASTEP, DMOL3

2.6　E. 事例研究（全 24H）

回	タイトル	担当	日にち	時限	概要
-	事例研究相談	後藤・中村・小口	9/15(初回)以後随時	3	研究相談計画書を提出していただきます。
-	事例研究発表会	後藤・中村・小口	3/2	4,5	-

2.7　F. 計算技術科学特論（全 24H, 45 講義から 16 講義を選択）

2.7.1 F-1 計算科学特論 A (2017)

回	タイトル	担当	日にち	時限	概要
1	プログラム高速化の基礎	後藤・濱田	随時 e	1 時限分	理研 WEB 参照のこと http://www.aics.riken.jp/library/event/tokurona_170406.html
2	MPI の基礎	後藤・濱田	随時 e	同上-	同上
3	OpenMP の基礎	後藤・濱田	随時 e	同上	同上
4	Hybrid 並列化技法	後藤・濱田	随時 e	同上	同上
5	プログラム高速化の応用	後藤・濱田	随時 e	同上	同上
6	線形代数演算ライブラリ BLAS と LAPACK の基礎と実践 1	後藤・濱田	随時 e	同上	同上
7	線形代数演算ライブラリ BLAS と LAPACK の基礎と実践 2	後藤・濱田	随時 e	同上	同上

8	高速化チューニングとその関連技術 1	後藤・濱田	随時 e	同上	同上
9	高速化チューニングとその関連技術 2	後藤・濱田	随時 e	同上	同上
10	行列計算における高速アルゴリズム 1	後藤・濱田	随時 e	同上	同上
11	行列計算における高速アルゴリズム 2	後藤・濱田	随時 e	同上	同上
12	古典分子動力学法の高速化	後藤・濱田	随時 e	同上	同上
13	Parallelization of Molecular Dynamics（分子動力学法の並列化）	後藤・濱田	随時 e	同上	同上
14	量子化学計算の大規模化 1	後藤・濱田	随時 e	同上	同上
15	量子化学計算の大規模化 2	後藤・濱田	随時 e	同上	同上

2.7.2 F-2 計算科学特論 B (2016)

回	タイトル	担当	日にち	時限	概要
1	スーパーコンピュータとアプリケーションの性能	後藤・濱田	随時 e	1 時限分	理研 WEB 参照のこと http://www.aics.riken.jp/library/event/tokurona_170406.html
2	アプリケーションの性能最適化 1 (高並列性能最適化)	後藤・濱田	随時 e	同上	同上
3	アプリケーシ	後藤・濱田	随時 e	同上	同上

	ョンの性能最適化 2（CPU 単体性能最適化）				
4	アプリケーションの性能最適化の実例 1	後藤・濱田	随時 e	同上	同上
5	アプリケーションの性能最適化の実例 2	後藤・濱田	随時 e	同上	同上
6	大規模系での高速フーリエ変換 1	後藤・濱田	随時 e	同上	同上
7	大規模系での高速フーリエ変換 2	後藤・濱田	随時 e	同上	同上
8	オーダーN 法 1	後藤・濱田	随時 e	同上	同上
9	オーダーN 法 2	後藤・濱田	随時 e	同上	同上
10	OpenACC・CUDA による GPU コンピューティング	後藤・濱田	随時 e	同上	同上
11	インテル Xeon Phi コプロセッサー向け最適化、並列化概要	後藤・濱田	随時 e	同上	同上
12	大規模量子化学計算 1	後藤・濱田	随時 e	同上	同上
13	大規模量子化学計算 2	後藤・濱田	随時 e	同上	同上
14	大規模 MD 並列化の技術 1	後藤・濱田	随時 e	同上	同上
15	大規模 MD 並	後藤・濱田	随時 e	同上	同上

	列化の技術 1				

2.7.3 F-3 計算科学特論 C (2015)

回	タイトル	担当	日にち	時限	概要
1	ALPS と量子多体問題①	後藤・濱田	随時 e	1 時限分	CMSI WEB 参照のこと http://www.cms-initiative.jp/ja/events/2015-haishinC
2	ALPS と量子多体問題②	後藤・濱田	随時 e	同上	同上
3	OpenMX と DFT①	後藤・濱田	随時 e	同上	同上
4	OpenMX と DFT②	後藤・濱田	随時 e	同上	同上
5	xTAPP をはじめとした DFT コードと ユーザーインターフェース	後藤・濱田	随時 e	同上	同上
6	可読性と性能の両立を目指して	後藤・濱田	随時 e	同上	同上
7	ライセンスについて	後藤・濱田	随時 e	同上	同上
8	アウトソーシングによるシミュレータの 共同開発	後藤・濱田	随時 e	同上	同上
9	feram と強	後藤・濱田	随時	同上	同上

	誘電体①		e		
10	feram と強誘電体②ゴリズム1	後藤・濱田	随時e	同上	同上
11	SMASH と量子化学	後藤・濱田	随時e	同上	同上
12	MODYLAS と古典MD①	後藤・濱田	随時e	同上	同上
13	ソフトウェア工学の視点から（前編）	後藤・濱田	随時e	同上	同上
14	MODYLAS と古典MD②	後藤・濱田	随時e	同上	同上
15	ソフトウェア工学の視点から（後編）	後藤・濱田	随時e	同上	同上

3 シラバス

3.1 シミュレーション基礎 1,2,3 (12H)

タイトル	担当	日にち	備考
シミュレーション基礎 1,2,3	濱田信次	9/28,9/29,10/2	e-Learning (Web 会議可)
内容			
シミュレーションの基本的考え方を簡単なサンプルプログラムを通じて理解する。サンプルプログラムはすべて Python で書かれているため、はじめに Python 講習会の内容を簡単に復習する。主に差分法について理解し、最後に有限要素法について理解する。 差分法に関してはまず Python によるプログラミング入門も兼ねて、常微分方程式(粒子系)のサンプルプログラムを理解する。次に、最も基本的かつ重要な線形偏微分方程式である移流・拡散・波動方程式のサンプルプログラムを使って、差分解法を理解し、さらにその安定性についても理解する。最後に拡散・波動方程式の定常解および時間発展解を有限要素法を使って求める。			

3.2 シミュレーション応用 1-6 (12H、6 講義から 4 講義選択)

タイトル	担当	日にち(参考)	備考
シミュレーション応用 1-6	各講師	随時(受講計画書)	e-Learning (一部 web 会議可)
内容			
広範囲な科学・技術分野において利活用されるシミュレーション技術について、最先端の研究成果や将来動向など、実践的知識、勘所など学ぶ。各専門分野でシミュレーションを活用している本学教員による講義を行う。			

3.3 並列プログラミング基礎 1-8 (12H)

タイトル	担当	日にち(参考)	備考
並列プログラミング基礎 1-8	小畑繁明	随時(受講計画書)	e-Learning
内容			
1. OpenMP による並列計算プログラミング ① 共有メモリ型並列計算機を用いた並列計算の概念 ② OpenMP の基礎，および OpenMP による並列プログラミング			

③ OpenMP による逐次プログラムの並列化 ④ 共有メモリ型並列プログラムの性能評価 2. 数値計算ライブラリの利用方法 3. MPI による並列計算プログラミング ① 分散メモリ型並列計算機を用いた並列計算の概念 ② MPI の基礎，および MPI による並列プログラミング ③ MPI による逐次プログラムの並列化 ④ 分散メモリ型並列プログラムの性能評価 4. ハイブリッド並列プログラミング ① MPI/OpenMP ハイブリッド並列計算プログラミングの基礎 ② MPI/OpenMP ハイブリッド並列計算で行列積

3.4 Python 入門 1,2,3,4 (12H)

タイトル	担当	日にち	備考
Python 入門 1,2,3,4	濱田信次	9/15,11/1,11/8,11/15	web 会議可
内容			
近年、科学技術計算を含むさまざまな分野で Python 言語の利用が進んできており、これを修得しておくことが必須になりつつある。第一回で、python 言語(ここでは python3 を使用）の基本的使い方を習得する。また python におけるもっとも多用されるパッケージである numpy(配列処理)と matplotlib(可視化)の基本的使い方を習得する。第二回ではデータサイエンスにおいてとくに重要なパッケージである pandas を習熟する。第三回では、cython を用いた高速化手法、C 言語とのインターフェイス手法、mpi4py を用いた Python からの MPI の利用方法を修得する。第四回では Python からの GPU の利用例として、深層学習フレームワークである Chainer および、CUDA の Python インターフェースである Cupy について学習する。			

3.5 並列プログラミング応用 1,2,3 (12H)

タイトル	担当	日にち	備考
並列プログラミング応用 1,2,3	濱田信次	9/25, 9/26, 9/27	
内容			
第 1 回では、これまでの講義等で学んできたキャッシュの有効利用について実際にパフォーマンス測定することでさらに理解を深める。また、主なプロファイラの使い方について学ぶ。第 2 回では「並列プログラミング基礎」で学んだプログラミング技法をもう			

少し本格的な MPI プログラムを作成することで理解を深める。第 3 回ではさらに、これを Hybrid 並列化する実習を行う。

3.6 HPC 特論 1,2 (12H)

<table>
<tr><td>タイトル</td><td>担当</td><td>日にち</td><td>備考</td></tr>
<tr><td>HPC 特論 1,2</td><td>エクセルソフト</td><td>12/14, 12/21</td><td></td></tr>
<tr><td colspan="4">内容</td></tr>
<tr><td colspan="4">第一回ではインテル VTune Amplifer XE などインテルの分析ツールを使用した OpenMP および MPI プログラムの解析方法に関する講習・実習を行います。
分析ツールを使用する意義
シリアル / 並列プログラムの性能解析ツールインテル VTune Amplifier XE (VTune) の使用方法の紹介
CPU の動作に対応したスカラーチューニングおよびベクトル化
OpenMP および MPI プログラムの振る舞いや，デバッグが必要な状況 と対応方法
MPI と OpenMP プログラムの複合化について
NUMA (非対称メモリーアクセス) 環境について
MPI アプリケーションの性能解析，問題検証ツール インテル Trace Analyzer & Collector (ITAC) の使用方法の紹介

第 2 回ではインテル Xeon Phi コプロセッサー向けプログラミングに関する講義・実習を行います
インテル Xeon Phi コプロセッサーの構造，ソフトウェア環境
Xeon Phi 上で動作するプログラムの作成方法(ネイティブ実行およびオフロードのプログラミング)
Xeon Phi の性能特性，コンパイラーによる最適化について
Xeon Phi を含むクラスター環境での実行方法(非同期オフロードあるいは MPI プログラムの適用)
Xeon Phi でのスカラーチューニングおよびベクトル化
OpenMP による Xeon Phi 向け並列化の対応方法</td></tr>
</table>

3.7　ChemOffice (3H)

タイトル	担当	日にち	備考
ChemOffice 入門	ヒューリンクス	12/6	
内容			
化学ドキュメント作成用の統合パッケージである ChemOffice の使い方の説明をおこなう。ChemOffice に含まれる以下の代表的アプリケーションを説明する。 (1) ChemDraw：描画機能、分析機能 (2) Chem3D：3D モデルを生成する。構造最適化機能内蔵。GAMESS も装備 (3) ChemFinder：個人向け化学データベースシステム (4) Signals Notebook：クラウドベース型の共同作業用実験ノート			

3.8　Gromacs による古典分子動力学入門 (3H)

タイトル	担当	日にち	備考
Gromacs による古典分子動力学入門	米谷慎	12/6	
内容			
古典分子動力学は経験的ポテンシャルを用いて多数の原子分子からなる系の運動を追跡することで、動的な振る舞いを調べたり、統計量を算出する手法です。代表的な分子動力学プログラムである Gromacs（無償）を使って、この分子動力学の基礎を学びます。			

3.9　OCTA (3H)

タイトル	担当	日にち	備考
OCTA 入門	小沢拓	12/7	
内容			
OCTA はソフトマターのシミュレーションをターゲットにしたオープンソースのソフトウェアで、分子動力学法から連続体の有限要素法までのマルチスケールシミュレーションが可能です。本セミナーではフリー版 OCTA および商用版 J-OCTA の概要と事例紹介の後、フリー版 OCTA を用いた簡単な解析を体験します。OCTA を使うのに必要な基本知識、Python の活用方法などを解説します。			

3.10 CONFLEX (3H)

タイトル	担当	日にち	備考
CONFLEX による配座探索と結晶構造探索	小畑繁昭	12/7	
内容			
本講義では，有機化合物が形成する分子性結晶を対象に，その立体配座の生成， 結晶多形構造の探索，安定な結晶構造の予測までの一連の手法を習得します。			

3.11 PHASE (6H)

タイトル	担当	日にち	備考
PHASE 入門	濱田智之	1/16	
内容			
物質の第一原理計算は、量子力学の原理に基づいて物質の構造と性質を理論的に明らかにする手法である。本講義では、固体の第一原理法について、その原理、考え方、計算法を解説したのち、第一原理プログラム PHASE を用いて、計算の実習を行う。			

3.12 量子化学計算入門（6H）

タイトル	担当	日にち	備考
量子化学計算入門	小口達夫	1/17	
内容			
本講では，比較的小さな孤立分子系を対象として，量子力学原理（第一原理）に基づいた量子化学計算の手法を用い，安定分子構造の探索，赤外・ラマン分光法との対応，分子熱力学的物性値（生成エンタルピー，結合解離エネルギーなど）の予測，といった実験と対応づけられる情報の取得法を解説します．後半では，実際にコンピュータを用いた計算演習を行い，出力ファイルの読み方等を解説します．実習は無償の GAMESS を使って行いますが、Gaussian(有償)についても簡単に触れる予定です。			

3.13 Quantum Espresso (6H)

タイトル	担当	日にち	備考
Quantum Espresso 入門	中村雄一 谷林慧	1/29	
内容			
Quantum Espresso はオープンソースの第一原理電子状態計算プログラムです。最初に第一原理計算の基本概念（バンド構造、平面波基底、擬ポテンシャル、SCF 計算等）を簡単に説明します。次に、グラフェンを例として、入力ファイルの作成方法、擬ポテンシャルファイルの準備方法、SCF 計算の実行方法を具体的に説明します。次に計算結果からの可視化の方法（バンド構造、DOS(状態密度)、電荷密度等）およびその見方を説明します。最後に、収束性や精度についての技術的内容および構造最適化についても触れます。後半では、Quantum Espresso を使った応用事例について紹介します。			

3.14 Materials Studio (6H)

タイトル	担当	日にち	備考
Materials Studio 入門	ダッソーシステムズ・バイオビア	1/30	
内容			
本講義では，Materials Studio（MS）の入門編として，MS の機能について学習するとともに，Visualizer，CASTEP，DMol3 の利活用方法を実習する。特に，MS を利用した結晶物性解析として，CASTEP によるバンドギャップ，状態密度，電子密度計算や XANES 計算			

について学ぶ。さらに，DMol3 を用いて，遷移状態計算と反応速度計算について学習するとともに，ラマンスペクトルや UV/Vis スペクトル計算について学ぶ。

3.15 事例研究（24H）

タイトル	担当	日にち	備考
事例研究	後藤仁志 中村雄一 小口達夫	初回相談会(9/15)。以後随時。最終日(3/2)に研究発表会を行う	web 会議での打ち合わせも可
内容			
受講者が業務等で抱える問題を持ち寄り、本学担当教員と議論を重ね、分子材料シミュレーション手法を利用することで解決することを目指す。打ち合わせは互いに都合の良い時間に随時行う(Web 会議システムなどの利用も可能)が、最終日には本学に集まっていただき、研究発表会を行う予定である。			

3.16 計算技術科学特論（24H, 45 講義から 16 講義を選択）

タイトル	担当	日にち	備考
計算技術科学特論	後藤仁志 濱田信次	随時	e-Learning
内容			
大阪大学から配信された計算科学技術特論 A,B,C（全 45 講義）から受講者が興味がある 16 講義(24 時間分）を視聴し、計算技術科学に関するさまざまな技術・理論を修得する。視聴した際の疑問等については、担当教官と議論して解消する。各講義について小テストも用意しておりこれに取り組むことで理解の助けとする。			

4 その他情報

4.1 e-Learning について

本プログラムで利用する e-Learning とは教育用 Web システム(Moodle)を通じて学習することです。Moodle 上には講義資料、講義ビデオ、サンプルプログラム、小テストなどが置かれており、登録ユーザーは自宅等から任意の時間にアクセスして学習することができます。日程表にて e マーク付きの講義は本受講者に対しては e-Learning で行います。(なお、それ以外の講義についても、Moodle 上にコンテンツを用意する予定ですので、講義に参加できなかった受講者が後日 e-Learnig として利用することも想定しています。)

4.2 Web 会議システムについて

本プログラムでは一部の講義(日程表にて w マーク付きの講義)では来学が困難な受講者のために Web 会議システム(OmniJoins)を用いることで授業のライブ配信を行うことを予定しています。自宅 PC(Win/MAC)から接続して、その場で質問等が可能となります。Web 会議システムでの参加を希望される方は前日 17 時までに担当(濱田 0532-44-6881, hamada@adsim.tut.ac.jp)までご連絡ください。接続テスト(講義時間外)を希望される方もご連絡ください。