

組織的な大学院教育改革推進プログラム 平成19年度採択プログラム 事業結果報告書

教育プログラムの名称	: 大学連合による計算科学の最先端人材育成
機関名	: 神戸大学
主たる研究科・専攻等	: 工学研究科情報知能学専攻
取組代表者名	: 賀谷 信幸
キーワード	: 計算科学、計算機シミュレーション、シミュレーション工学、並列プログラミング、スーパーコンピュータ

I. 研究科・専攻の概要・目的

本プログラムで主体となったのは、神戸大学工学研究科情報知能学専攻である。情報知能学専攻では、次世代知能化情報システムの創出を目指して、旧来の学問の壁を打ち破るフロンティア精神に溢れた教育・研究の推進とともに、創造性豊かな思考と研究開発能力をもった技術者・研究者の養成を目指している。特に、情報知能学は、「情報」を媒体として既存の諸工学分野を有機的に結合し、「知能」による創造的プロセスを追求し、次世代の「知能」化情報システムを創出するこれまでにない新しい学問領域の探求である。カリキュラムは、情報知能学に関する基礎科目と先進的・学際的な専門科目から構成され、基礎および専門知識を統合・融合することにより、高度情報化社会の様々な技術問題を解決できる能力の育成を目指している。教員数は、教授24名、客員教授8名、准教授18名、客員准教授4名、助教6名、助手1名で構成され、博士課程前期課程の入学定員は74名、後期課程は12名であった（学部定員（情報知能工学科）は、100名）。

平成19年3月に理化学研究所が、世界最先端・最高性能（10ペタFlops）の「次世代スーパーコンピュータ」を神戸ポートアイランドに設置することを決定した。ペタコンプロジェクトの大きな柱の一つに、「ペタコンを中核とする世界最高水準のスーパーコンピューティング研究教育の拠点の形成」が掲げられた。この国家プロジェクトを地元大学として、スーパーコンピューティング研究教育の拠点形成に貢献すべく、情報知能学専攻を改組し、平成22年4月からシステム情報学研究所を発足させた。

システム情報学は、高速・大容量計算技術を基に、大規模・複雑な「システム」に内在する意味のある情報である「システム情報」の創出・処理・活用などに寄与することを目指した学問領域である。ここで定義する「システム」は、いわゆる情報システムを単に指すものではなく、宇宙、地球、人間、生体、人工物などを包含し、自然から工学、社会までの広範な「システム」を意味する。システム情報学研究科では、「システム」並びにシステムに内在する「システム情報」を対象として、次の3つの学問分野を教育研究の柱とし、それぞれがコアとなり、あるいは融合することにより、システム情報学を追求するための理論・方法論に関する教育研究を強力に推進する。

- (1) スーパーコンピュータの活用による高度計算の基盤技術及び計算アプローチによる科学技術探求の方法論の展開を図る「計算科学」分野
- (2) 情報と計算の理論的基礎並びに情報処理や情報メディアの基礎から応用に関する新しい技術や方法論を開拓することにより、システム情報の創出・処理・活用に寄与する「情報科学」分野
- (3) システムの解析や統合のための基礎理論・方法論並びにシステム・アプローチによる問題解決の方法論を展開することにより、大規模・複雑なシステムに対する解析・統合の基礎を供する「システム科学」分野

システム情報知能学研究所は、日本では数少ない計算科学専攻を中心に、全国のスーパーコンピューティング研究教育の中核をなすべく設置された独立研究科である。なお、教員数は、情報知能学専攻と変わらず、教授24名、客員教授8名、准教授18名、客員准教授4名、助教6名、助手1名で構成され、博士課程前期課程の入学定員は80名、後期課程は14名で、前期後期とも増員している。

II. 教育プログラムの概要と特色

本教育プログラムで育成する人材像

「計算機シミュレーションは時空間を超越できる望遠鏡」と呼ばれるように、未来に起こる現象を予測したり、過去にさかのぼって現象を検証したり、到達できない場所での現象を観測することができる有力な研究手法である。計算機の驚異的な発達に伴い、計算機シミュレーションは、理論と実験に並ぶ第3の科学技術手法として位置付けられるようになった。さらに、単なる物理現象の解明に留まらず、経済・社会現象の検証など幅広い研究分野における重要な地位を築いている。

本教育プログラムでは、それぞれの研究分野での深い理解と、最新の研究成果を基に新たな可能性を追求する能力、分野を横断した多様な計算機シミュレーションに習熟し、現状を迅速・的確に掌握する能力を有する若手技術者・研究者の育成を目的とする。

本教育プログラムの背景

理化学研究所が、世界最先端・最高性能（10ペタ Flops）の「次世代スーパーコンピュータ」（以下ペタコン）を神戸ポートアイランドに設置中である。ペタコンプロジェクトの大きな柱の一つが、「ペタコンを中核とする世界最高水準のスーパーコンピューティング研究教育の拠点の形成」である。ペタコンを活用して世界水準での研究成果を創出するには、ハードウェアの充実と並行して、ペタコンを各研究分野において高いレベルで活用できる人材（高度スパコン技術者・高度スパコン利用者）の育成が不可欠である。高度スパコン技術者は、スーパーコンピュータ、特にペタコンの特性を十分に理解し、高い並列化プログラミング技術の習得はもとより、計算機・ネットワークアーキテクチャやプレ処理・ポスト処理などの応用的技術の習得が求められる。また、高度スパコン利用者については、超大型計算により明らかになるターゲットサイエンスについての理解はもとより、異分野間での横断的な学際的知識と広い視野が求められる。

計算科学は、第3の科学技術手法とその重要性が認識されているにもかかわらず、日本ではスーパーコンピュータを用いた大規模シミュレーションに関する教育研究が遅れている。そのため本教育プログラムでは、ペタコンの開発とあいまって参加大学のそれぞれの特徴ある教育を結集させて、人材育成のためのカリキュラム開発を行い、教育拠点の構築のための教育システムを開発する。本教育プログラム終了後、その成果を持って全国の大学と協力して計算科学の教育拠点の構築を目指す。この教育プログラムで輩出された人材が今後の計算科学の分野を担っていくものと期待される。

本教育プログラムの内容

本教育プログラムでは、様々な専門分野の大学院生に、それぞれの分野での計算機シミュレーションの技術を習得させるために、博士前期課程では「高度先端計算科学基礎コース」を、博士後期課程では「高度先端計算科学アドバンスト・コース」を開講する。更に、それぞれの大学では特徴のある講義を開講し、相互の受講を認めることにより幅広い知識を習得可能にする。この教育プログラムと本来の専門分野のカリキュラムを同時に教育することにより、幅広い分野の計算科学の人材育成を達成するものである。例えば、流体を専門とする学生は、機械工学を学びながら、本教育プログラムを受講することにより、理論と実験に加え計算機シミュレーションで流体の挙動を解析する手法を習得することができる。経済学を専門とする学生は、経済学と本教育プログラムで、経済シミュレーションの専門家を目指す。本教育プログラムでは、様々な専門を持つ学生に計算シミュレーションの教育の実践を通して、「次世代スーパーコンピュータ」を目標とした人材育成のために、3年を掛けて計算科学のカリキュラムの改良開発を行い、完成を目指す。

本教育プログラムは、神戸大学が主宰し複数の大学が参加する。博士前期課程では、大学院生がより高いレベルの計算科学に目覚め、好奇心や向上心を喚起するため、計算科学の各分野の著名な研究者を講師として国内と海外から招聘し、持ち回りで開講する。開催地以外の他大学の学生にはビデオ会議システムと3次元コンテンツ同期システムを活用して受講する。また、資料配布・成績管理・試験・質疑などを双方向的に行うために、e-Learningシステムを活用する。博士後期課程では、研究でスパコンを利用する実践型の教育を中心に行う。並列化プログラミングと計算結果の可視化等の演習指導は、神戸大学の教育用スパコンを活用して集中的に行う。

以上に示すように、本プログラムは個々の研究分野で発展してきた計算機シミュレーションの分野横断・分野融合型教育を目指したもので、本プログラムの最大の特徴であり、大いなる目標である。また、単なる講義や演習のみならず新たな教育法を探求することも最重要課題である。この様々な取組を現状の大学院教育に織り込むことは、正に、大学院教育の実質化に資するものである。

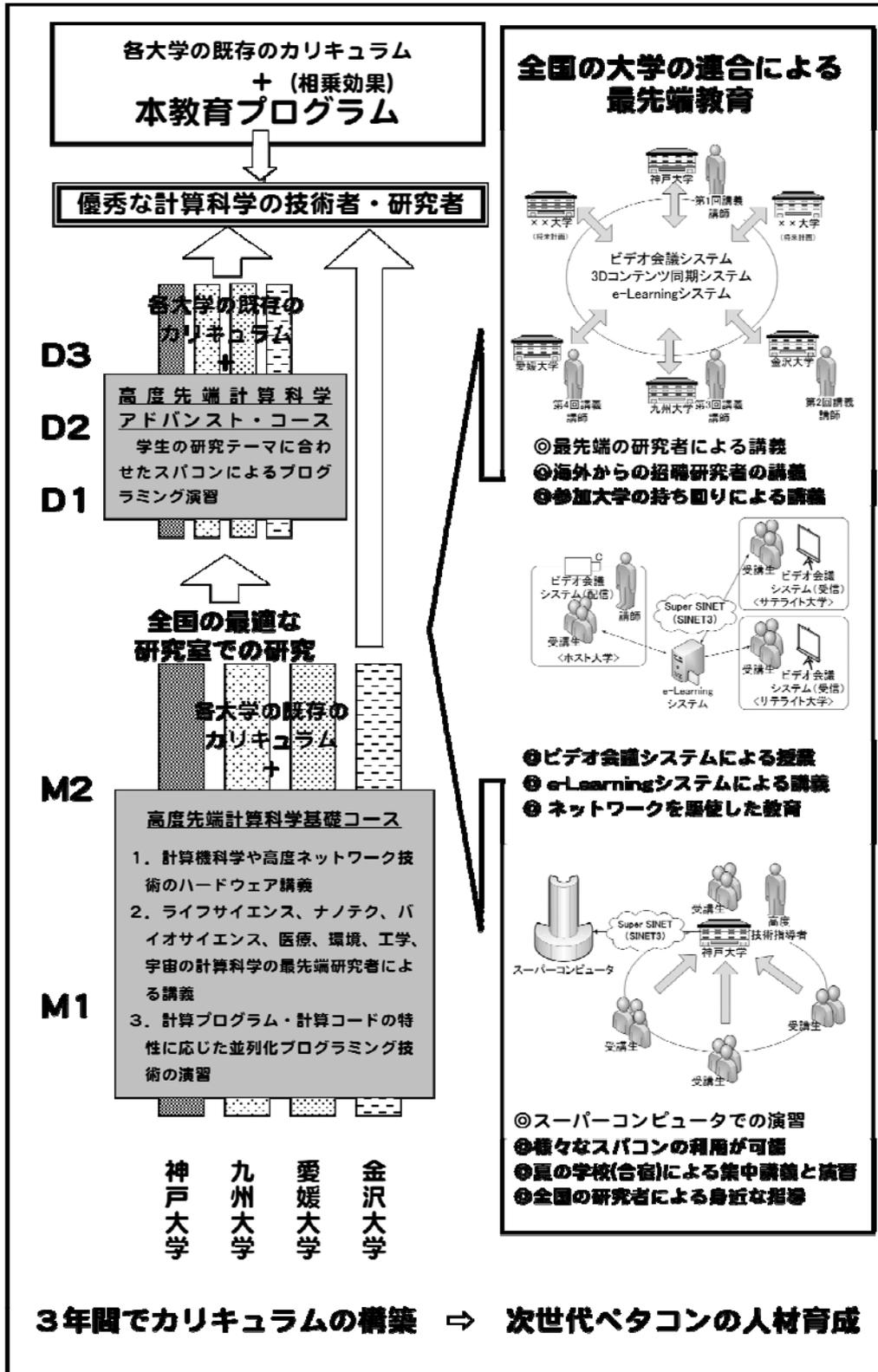


図1:履修プロセスの概念図

Ⅲ. 教育プログラムの実施結果

1. 教育プログラムの実施による大学院教育の改善・充実について

(1) 教育プログラムの実施計画が着実に実施され、大学院教育の改善・充実に貢献したか

計算機シミュレーションは、あらゆる研究分野で理論・実験に続く第3の研究手段として活用され、それぞれの研究分野で大いに発展してきた。それぞれの分野で発展してきた計算機シミュレーションの手法を分野横断で共有することにより、従来になかった新たな有力な計算機シミュレーションの手法が生み出される可能性がある。一つの研究分野で発展してきた手法を、他研究分野で生かされるばかりではなく、分野を融合し新しい研究分野が創成され、旧来の研究分野を突破する融合研究が開始される期待が込められている。神戸にペタコンが設置される契機から、分野横断型教育の必要性が叫ばれ、本教育プログラムは、この課題達成を目的とするものである。

本教育プログラムは、神戸大学、九州大学、金沢大学、愛媛大学の参加4大学で実施するものであるが、教育方針、教育内容、実施方法などの多面的な議論、支援、評価を目的に、アドバイザリー・ボードを設置した。アドバイザリーボード委員には、工学院大学、東北大学、名古屋大学、京都大学、北陸先端科学技術大学、広島大学、海洋研究開発機構、計算科学振興財団からの参加を得た。年に数回、アドバイザリーボード会議を開催し、貴重な議論、適切な評価・指導を得た。

本教育プログラムの教育方針として、図2に示すように、「講義で学ぶ」、「演習で学ぶ」と「指導して学ぶ」の三層構造とした。特に、「指導して学ぶ」の教育方針は、他の受講生を教えることにより、不明な個所が明確となり、理解度をたいへん向上させる絶大な効果がある。本教育プログラムでは、この教育方針の実施に主眼を置いて、成果を得た。

本教育プログラムで実施した主な事業は以下である。

- ① 計算科学の要素を示す SMASH (Science, Modeling, Algorithm, Software, Hardware) をテーマにしたシミュレーション・スクール形式の集中講義の開催
- ② 神戸大学教育用並列計算機を用いた実践的な計算機シミュレーション演習の実施
- ③ e-Learning 用コンテンツの作成と、作成したコンテンツを用いた遠隔授業の実施
- ④ 南カリフォルニア大学におけるシミュレーション・スクールへの大学院生の海外派遣
- ⑤ インターネットを用いた質問室の実施
- ⑥ 社会人教育のためのセミナー・演習の開催
- ⑦ いろいろな計算機シミュレーション研究分野の講演会の開催

1. シミュレーション・スクール

大学院生や若手研究者を対象に、国内外で先端的な研究を行っている講師による集中講義を、平成 19 年度に 1 回、平成 20 年度に 3 回、平成 21 年度に 3 回の計 7 回、「Kobe Interdisciplinary Simulation School (以下 KISS とする)」と題して開催した。講義の詳細は以下の通りである。

1.1 第 1 回 KISS 「網羅的な研究の紹介」

高性能計算を各種のシミュレーション分野に応用されている講師を招き、大学院生が各大学の専攻で履修している分野以外の計算機シミュレーションについての知見を得ることにより、計算科学の全般的な内容と各応用分野間の学際性を理解できる講義を行った。

1.2 第 2 回 KISS 「他の研究分野の講義」

第 1 回 KISS の主旨を更に深く掘り下げ、粒子シミュレーションを学習している大学院生に流体シミュレーションの基礎から応用までを演習を交え学んでもらった。同様に通常の電子状態計算法 (分子軌道法) を学んでいる大学院生に、量子モンテカルロ法を習得してもらうほか、プラズマ粒子シミュレーションについても知見を深め、計算科学の学際性を理解してもらった。

1.3 第 3 回 KISS 「プログラム手法の演習 (MPI, OpenMP)」

高性能計算、並列計算に必要な計算機科学のバックグラウンドから始め、MPI, OpenMP の基礎からはじめ、実アプリケーションとして量子化学計算プログラムの並列手法までを学んでもらった。特に、「SMASH (Science-Modeling-Algorithm-Software-Hardware)」の後半部分である MASH のつながりを



意識した講義内容となった。

1.4 第4回 KISS 「計算手法(差分法)の理解」

コンピュータによるシミュレーションを可能にするためには、対象とする現象の数値モデル化(偏微分方程式等による定式化)、アルゴリズムとその解法、計算プログラムとして具現化するための離散化の手法を習熟する必要があり、その基本的な離散化法として差分法を取り挙げ、差分法の基礎から応用まで、演習も含めた講義を行った。特に、「SMASH (Science-Modeling-Algorithm-Software-Hardware)」の前半部分である SMAS のつながりを意識した講義内容となった。

1.5 第5回 KISS 「GPGPU による高速並列計算機の実現」

近年の GPU は本来の高性能グラフィック処理能力に加え、ベクトル・行列の倍精度実数演算等の複雑な処理が行える汎用演算器としてその進歩が目覚ましく、高性能計算科学(HPC)分野で大きな注目を集めており、次々世代のエクサフロップス級の計算機システムでは、消費電力対性能比から、なんらかの形で演算加速機構がシステムの一部として実装されることが予想されている。このことから、アクセラレータ技術の動向、宇宙N体問題、分子動力学等、GPU を利用した各種の応用シミュレーションの動向を学ぶため、CUDA 環境による演習も含めた講義を行った。

1.6 第6回 KISS 「長期間 PBL 演習の試行」

5つの主要な研究分野における計算機シミュレーション・コードの演習を行い、与えられた計算機シミュレーションのための演習課題に関して期間内にプログラムを作成し課題を解き、最後にその成果を発表するという内容を課した。

- 1) 集中講義：1週間のうち1日で、講義、プログラムの作成方法の説明、そして課題を与える。
- 2) 計算演習：11週間で、実際にプログラムを作成し、課題を解く。その間、決められた Office Time に質問等を受け付ける。
- 3) 成果発表：最終週に発表会を行い、それぞれの成果を報告し、評価を受ける。

1.7 第7回 KISS 「学生の指導による PC クラスターの構築」

これまでにない試みとして、「教えることを通じ自ら学ぶ」ことに重点を置き、大学院生が講師となり研究室規模で扱うような比較的小規模の PC クラスターを構築し、自分たちで作成した並列プログラムを走らせ性能を評価した。また、PC クラスターのシステム構築にも重点を置き、MPI やセキュリティ、ジョブ管理システムのインストール、設定などを中心に講義を行った。さらには、簡単な並列化の手法を学習し、与えられたシングルコアで動作するプログラムの並列化を自から行い、性能を評価した。

2. 遠隔授業

本教育プログラムで考案されたカリキュラム「高度先端計算科学基礎コース」及び「高度先端計算科学アドバンスド・コース」に基づいた集中講義を、金沢大学において平成20年11月、平成21年11月の2回実施した。この集中講義は、TV 会議システムを利用した遠隔講義としてリアルタイム配信された。本教育プログラム独自カリキュラムに沿って作成した e-Learning コンテンツも講義中・自習用として大いに活用された。演習では、神戸大学の教育用スパコンを用いた。

殊に、金沢大学においては、学部では計算科学コース(計算科学科)、大学院では計算数学講座及び計算機実験学講座が現存し、分野横断的な計算科学の実践的教育の試みが日々行われている。したがって、計算科学を専攻する学生が多数在籍するため、本遠隔集中講義を施行するには最適であった。金沢大学における受講者はそれぞれの回において20名程度であった。遠隔講義に参加した他大学でも数名の学生が受講した。更に、本集中講義は「高度先端計算科学概論」(金沢大学大学院自然科学研究科数物科学専攻・博士前期課程)という数物科学専攻の選択必修の講義に相当していた。したがって、金沢大学の受講生は集中講義への出席及び課題レポートによって単位を取得した。

2. 教育プログラムの成果について

(1) 教育プログラムの実施により成果が得られたか

本教育プログラムで得られた大きな成果として、以下の項目が挙げられる。

- ① 研究分野横断型教育のためのカリキュラムの提言
- ② 計算機シミュレーションの本質を理解させるための教育
- ③ 計算機シミュレーション演習の改善
- ④ 「教えて学ぶ」教育法の確立
- ⑤ 全国の大学の共同体制の構築（e-Learning、遠隔授業）
- ⑥ 計算機シミュレーションの解析・評価のための可視化教育
- ⑦ 社会人教育

1. 研究分野横断型教育のためのカリキュラムの提言

これまでの計算科学は、種々の研究分野の一部としての計算科学であり、その研究分野のなかに閉じていた。従って研究分野の中での交流はあったが、異なる研究分野の計算科学の交流はあまり盛んではなかったと言わざるを得ない。しかし、異なる研究分野であっても、モデル化をおこない数式の形に定式化した段階ではかなり類似性が高いことが多い。方程式を解くアルゴリズムにも共通性がある。さらに、次世代スーパーコンピュータに代表されるこれからの超並列計算機の性能を最大限に引き出すための並列コンピュータの利用技術に関しても共通性がある。また通信ミドルウェア、I/O、耐障害対応等、計算機システムそのものに関する基礎知識もこれまで以上に要求され、これらの知識は研究分野を問わず重要である。

全体シミュレーションという用語で近年、注目されているように複雑な系の全体を各部分系に分割し、複数の部分系についてのシミュレーションを連成させ、全体の系をまるごと解析する手法としてマルチスケール・マルチフィジックス・シミュレーションは今後ますます重要となる。この手法においても、計算科学のそれぞれの応用分野は他の複数の応用分野と学際的な連携が必要となる。

2年間半にわたり実施した本教育プログラムの成果から、計算科学の学際性を鑑み、高性能計算が可能な並列計算機システムのハードウェアと基幹ソフトウェアの知識を計算科学諸分野の学習に有機的に結びつけた教育カリキュラムを提案する。すべての科目は講義と演習から構成され、演習科目では超並列計算機、PC クラスタを含む多様な計算機を用いた計算アルゴリズム、並列・分散ソフトウェア、簡単な応用シミュレーションプログラムの開発に関する実地教育を行う。これにより大学院前期博士課程以降、計算機科学の基礎を十分に備えかつ実用規模の科学技術シミュレーションプログラムを開発できる人材または計算科学の応用分野を理解できる次々世代の計算機を設計できる人材を養成し、わが国における先端的計算科学技術分野の国際競争力を飛躍的に高める。

講義・演習科目は、学部4年生から修士課程1年次までに履修し、単位取得者は、修士課程1年次の末に習熟度試験及び「応用アプリケーションの提案」に関するプレゼンテーションを行い、応用分野を基に修士課程2年次のグループ分けを行い応用科目である実アプリケーション実習コースへ進む。なお、講義は1コマを90分とし、演習はe-Learningによる遠隔講義も随時行う。

(1) 数値計算法論

数値モデル概論、並列計算アルゴリズム、偏微分方程式の数値解法、固有値問題、常微分方程式の解法、誤差論を含む数値計算結果の正当性といった最新の数理・数値解析研究を盛り込み、講義と実機を用いた計算アルゴリズム、並列・分散ソフトウェア開発に関する実習教育を行う。これらの教育により、これまではそれぞれの応用分野に関連の深い数理および数値解析とそのアルゴリズムの基礎を修士課程初年次に習得させ、大学院におけるわが国における先端的計算科学技術分野及び高性能計算科学分野の国際競争力を飛躍的に高める。

(2) 計算科学論

従来の専門分野毎の計算科学の基礎とは異なり、応用シミュレーション分野全体の類型化を通して、決定論的手法と確率論的手法、時間依存と定常問題、古典系と量子系、粒子系と連続系、離散化手法といった学際的な視点から、各応用分野で展開される数値計算手法の関係と、前述の連成問題解決を学ぶ。

(3) 並列計算機システム論

計算機科学の概論として、Moore の法則、消費電力問題、マルチコア・プロセッサ、GPGPU 等のアクセラレータの発展、スケーリング、プログラミング環境、大規模データ処理等、計算機システムの基礎を応用分野に関わらず学び、次世代スーパーコンピュータに代表されるこれからの超並列計算機の性能を最大限に引き出すための知識を習得させる。また演算を実行するプラットフォームとしてベクトル並列計算機からスカラ並列コンピュータ、PC クラスタ、専用計算機そして分散コンピューティング環境などの様々な並列計算機システムを習得する。

(4) 並列プログラム構成論

並列プログラムの設計と実装の方法論を学習する。特に多様な計算機を用いた実習に加え、命令レベル並列化、アウトオブオーダー(out-of-order)実行機能、分岐予測、投機実行、複数演算器の同時実行、キャッシュおよびメモリシステム、並列化技術 (MPI、 OpenMP)、並列言語等に関する講義を並行して行い、実習科目への足がかりを作る。

(5) MPI、 OpenMP プログラミング演習 (C 言語、 Fortran 言語)

並列プロセス間通信ライブラリの国際標準規格である MPI (Message Passing Interface) を用いた並列プログラミングと、共有メモリモデルでプログラムの並列化を行う OpenMP の使用法を、実習を通じて習得する。使用言語は C 言語および Fortran である。

(6) 科学技術シミュレーション入門

さまざまな応用分野で実際に用いられている数値シミュレーションについて、原理となる方程式が離散化・プログラム化されていく過程を、事例をもとに学習する。必要に応じて、各種シミュレーションを行っている研究室での実習を実施する。

(7) 科学技術シミュレーション応用実習

特定の応用分野を選択し、その分野の数値シミュレーションを行っている研究室と共同で、実用規模のシミュレーションプログラムの設計と開発から、テストおよびデバッグ、チューニング、ドキュメント作成までの一連の作業を実習する。

2. 計算機シミュレーションの本質を理解させるための教育

計算機シミュレーションは、図 3 に示すように、解かなくてはならない課題を、モデル化・数式化して、計算機を用いて解を求める。求めた解を解析して、問題解決になっているかどうか評価しなければならない。一般に、計算機を用いて解を求める数値計算が注目され、教育もプログラム開発に重点を置かれがちであるが、モデル化と解析・評価が計算機シミュレーションではもっとも本質な点であり、このモデリングと、その結果を解析・評価を的確に行う能力を養成することが重要である。そのために、実験研究者からの課題の提供、実験研究者へのシミュレーション結果報告と議論の演習を通して、計算機シミュレーションの遂行能力の向上を目指す。

3. 計算機シミュレーション演習の改善

本教育プログラムでは、シミュレーション・スクールで講義と同時に演習を実施し、演習に重点をおいた。実際にプログラムをスーパーコンピュータで実行することにより、講義内容や計算機シミュレーションの手法を容易に理解させることができた。しかしながら、シミュレーション・スクールは、期間を 1 週間としたためプログラムを作成するには時間が不足した。そこで、十分な演習時間を確保するため、2～3 ヶ月で一つの課題を解く長期間演習を提案し、第 6 回 KISS 「長期間 PBL 演習の試行」で検証した。この演習では、最初の課題説明と最終の成果発表以外は、受講者の好きな場所で、好きな時間にプログラム開発するシステムとした。プログラム開発時に生じる質問は、以下 4. に記述する質問室で常時対処する。

4. 「教えて学ぶ」教育法の確立

すべての教育に当てはまることではあるが、教育方法としては、3 段階の方法が考えられる。「講義を聴

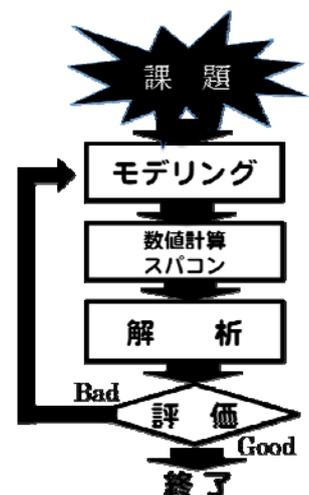


図3: 計算機シミュレーションの概念図

いて学ぶ」、「自習して学ぶ」と最後に「教えて学ぶ」である。従来、大学院教育においても講義と論文作成のための研究と、教育補助のTAがある。今回は、このTAを強化して、その教え方でTAの理解度の評価を行う。特に、第7回 KISS「学生の指導によるPCクラスターの構築」シミュレーション・スクールでは、大学院生による運営、教材の作成、実際の講義を行い、質問を受けることにより、教師側の理解度を高めることができた。「教えて学ぶ」教育法の有効性が実証できたばかりか、その有効性に目を見張るものがあった。3.の演習には、質問室を設け常時質問に対応できる体制を構築する。

5. 全国の大学の共同体制の構築（e-Learning、遠隔授業）

本教育プログラムは、九州大学、愛媛大学、金沢大学と神戸大学の4大学が連携して実施した。それぞれの大学の強みを持ち寄り、相乗効果により成果をあげることができた。また、コアの4大学のみならず、東北大学、北陸先端、名古屋大学、広島大学など多くの大学からアドバイザーボード委員としての参加により、全国規模の協力関係を構築することができた。今後、さらに拡大し、真の全国規模の連携の構築を目指す。また計算機シミュレーションはそれぞれの研究分野の研究手段としか見なされていない点があり、これを全研究分野に波及させることにより新たな研究分野の創出が可能と考える。

6. 計算機シミュレーションの解析・評価のための可視化教育

計算機シミュレーションでは、スーパーコンピュータで計算された大量の数値データを可視化処理することにより、計算結果の理解を高め、発見が可能となる。シミュレーション研究者はその画像を見ながら、マウスなどを使い、画像の拡大・縮小・回転や、可視化パラメータの変更など、対話的にその可視化結果を操作する。このような対話的可視化処理により、大規模な数値データに潜む情報を引き出すことで、シミュレーション結果を理解・解析することが可能となる。この可視化技術の教育を通して、計算機シミュレーションの結果解析や評価の能力を養成する。

7. 社会人教育

本教育プログラムは大学院の教育改革のためのものではあるが、大学院を卒業した社会人の教育の必要性と、大学院で計算科学を教育した後の就職先を開拓する必要性がある。就職先がなければ、教育しても無駄なことになる。そのため計算科学計算機シミュレーションの普及活動は重要な大学院改革であり、受け入れ先の企業を理解させることはたいへん重要な仕事と考える。特に、社会人のための教育は、それぞれのスキル、知識、達成目標が大きく異なるため、個人個人に適したカリキュラムのテーラーメイド教育を必要とする。このテーラーメイド教育は、計算機シミュレーションに関する知識やスキルのレベルの異なる大学院生を教育するためにも有効な教育方法である。

以上に示すように本教育プログラムでは、申請時に期待された成果が大いに得られたと判断する。

3. 今後の教育プログラムの改善・充実のための方策と具体的な計画

(1) 実施状況・成果を踏まえた今後の課題が把握され、改善・充実のための方策や支援期間終了後の具体的な計画が示されているか

本教育プログラム終了後に得られた成果を基に、本格的な実施、その改善と、より充実のための種々の方策を計画している。主な計画を以下に示す。

- ① 神戸大学計算科学専攻での本格的な実践
- ② 学部での教育と理解増進
- ③ 社会人教育への展開
- ④ 全国の大学へのハブとしての役割（参加大学における教育の充実と同時に協力関係の樹立）
- ⑤ 海外の大学との連携

1. 神戸大学計算科学専攻での本格的な実践

神戸大学では、スーパーコンピュータを用いた大規模シミュレーションによる基礎科学の探究と、先進的アルゴリズムや可視化手法等の研究開発を通じて、次世代の計算科学を担う研究者・技術者を養成するとともに、計算機シミュレーション手法を身につけて幅広い分野で社会に貢献する視野と能力を持った人材を

養成するために、平成22年4月に、計算科学専攻を含めたシステム情報学研究科を新設した。

計算科学専攻の特徴として、日本で数少ない計算科学の教育を目指すとともに、「計算科学」博士号を授与するための前期課程・後期課程の一貫教育コースである「計算科学インテンシブコース」を設け、高性能計算を駆使した革新的な科学技術を開拓・展開・実践する卓越した能力を身に付けた研究者・技術者の養成を目指す。特に、計算機シミュレーションによる科学技術探求の方法論、これを支える高性能計算の理論・基盤技術を追求し、超高速・超並列計算システムの技術的基礎、並びに数理モデリング、シミュレーション、可視化などの計算アプローチの基礎と応用、さらには、計算アプローチによる自然現象の理解と解明、未知の現象や事象の予測など計算科学の産業応用と社会貢献までを視野に入れた教育研究を行う。

この新計算科学専攻で、本教育プログラムで得た成果を実践し、その結果の検証・改良を計画している。

- 計算機シミュレーションの演習では、PBLを充実させ、あらゆる研究分野のシミュレーションの手法を理解可能な能力を養成する。特に、計算機シミュレーションの本質である課題のモデリングと計算結果の解析・評価の能力を高める演習を工夫する。
- PBLの課題を選定する時に、実際に行われている実験・観測のデータを得て、実験研究者との共同研究形式での課題を取り上げ、解析・評価の方策の修得を目指す。
- 「教えて学ぶ」を実践するため、大学院生が企画するシミュレーション・スクールを開催する。大学院生により教材の作成から、実際に講義・指導を行うことにより、教師側の理解度を高める。
- 演習のなかに「質問室」を開設する。演習を修了間際の大学院生に「質問室」を担当させ、演習中に生じた質問に答える体制を作る。質問への返答を評価し、演習の課題の理解度を評価する。
- 現在研究されている計算機シミュレーションの課題は三次元モデルが大多数である。三次元の課題を検討・解析するには三次元の表示が不可欠である。三次元の可視化演習の充実を図り、計算機シミュレーションの本質である計算機シミュレーション結果の解析・評価の教育を目指す。

2. 学部での教育と理解増進

本教育プログラムは、大学院教育の改革を目指したもので、支援期間中に学部教育の改革に関しては、議論・検討を行わなかった。しかしながら、計算科学の教育は大学院だけで行うものではなく、学部教育はもちろん、中高校生への計算科学に対する理解を高める試みが大切である。特に、学部学生には、

- ① 科学・物理への関心を高める試みが重要である。実験課題を与え、実験によるデータ取得を行う。
- ② 実験課題を表すモデルを作成し、教育用並列計算機を用いて計算を行う。
- ③ 計算結果を、簡単な可視化装置を用いた三次元表示する。
- ④ その結果が、実験データと合致して、物理的な説明ができるかどうか検討し、発表する。

以上に示すような導入教育が必要であり、早急を実施する計画である。

3. 社会人教育への展開

本教育プログラムを実施している期間中に、兵庫県・神戸市の計算科学振興財団との協力のもと、社会人に対する演習・セミナーを開催して、成果を上げた。社会人教育を行い、企業に計算機シミュレーションの重要性、有効性を理解させ、企業内の研究開発に計算機シミュレーションの導入を促進することは、大学院生にとって将来の活躍する場の拡大になる。将来の展望が開けることにより、大学院生にとって計算科学が魅力的なものとなり、計算科学の大学院教育の必要性が高まる。また、企業にとっても計算機シミュレーションを導入することにより、研究開発や設計プロセスの劇的な高度化・高効率化の実現が可能となり、早急に計算機シミュレーションの導入を計る必要がある。本教育プログラムの参加大学にも、社会人教育の重要性を認識し、平成22年度から新たな社会人教育を実施する計画である。

4. 全国の大学との連携（参加大学における教育の充実と同時に協力関係の樹立）

本教育プログラムを4大学およびアドバイザーボードメンバーの大学と共同で実施し、それぞれの大学の特徴や異なる専門分野を生かすことの有効性が実証された。この成果を高めるため参加校を増やし、相互の協力、補完することにより、全国の大学で共通的であり、かつ最先端の教育を実現可能となる。そのために全国の大学のハブになる計算科学教育センターの設立が、大きな将来構想である。

5. 海外の大学との連携

平成20年3月に金沢大学とインドネシア共和国バンドン工科大学との間に大学間協定が締結され、バンドン工科大学自然科学研究科内に計算科学専攻が平成21年7月に新設された。同時に金沢大学大学院自然科学研究科数物科学専攻博士前期課程IIコース(計算科学コース)との間に計算科学ダブル・ディグリー・プログラムが開設された。この計算科学ダブル・ディグリー・プログラムは第二セメスタおよび第三セメスタに在籍学生を交換留学するプログラムであり、修了要件は各大学の卒業要件を満たすものとしている。平成21年10月に第一期生が8名入学し、平成22年4月には計算科学ダブル・ディグリー・プログラム特別生4名が入学する予定である。

計算科学ダブル・ディグリー・プログラムでは、計算科学の数学、物理、化学分野の専門的講義に加え、分野横断的な計算科学教育を反映させた講義を実施している。現在、本教育プロジェクトで作成されたe-Learningコンテンツの英語化作成に取り組んでおり、今後この計算科学ダブル・ディグリー・プログラムの中で「高度先端計算科学基礎コース」の英語版講義を実施する予定である。

現在、バンドン工科大学自然科学研究科計算科学専攻博士コースの新設に伴う、計算科学ダブル・ディグリー博士コースプログラムの平成23年開設準備に取り組んでいる。また、ベトナム社会主義共和国フエ大学理学研究科との間で計算科学特別コース新設の準備を進めている。いずれのプログラムでも、計算科学各専門分野の講義とともに、分野横断的内容を含む講義「高度先端計算科学アドバンストコース」の開講を予定している。

4. 社会への情報提供

(1) 教育プログラムの内容、経過、成果等が大学のホームページ・刊行物・カンファレンスなどを通じて多様な方法により積極的に公表されたか

社会への情報提供として、種々の会議やカンファレンスでの講演で、本教育プログラムの広報に努めた。

招待講演

1. 理化学研究所「次世代スーパーコンピューティング・シンポジウム」(平成20年9月16日)

理化学研究所が主催する「次世代スーパーコンピューティング・シンポジウム」の中の分科会A:「次世代の産業界をリードする人材の育成を目指して」で、パネリストとして本教育プログラムの活動報告を行い、計算科学の教育に関して参加者との議論に参加した。

このシンポジウムの提言に以下の文言が盛り込まれ、本教育プログラムが評価された。

一、教育、人材育成プログラムの多様な展開

21世紀の学術の展開を見据え、計算科学・計算機科学、さらにはその融合による新たな学術分野の展開を追究する研究科や専攻、教育研究の中核となる研究センターの設置が進展しつつある。また、大学院教育改革支援プログラムなどを活用したユニークな人材育成も進められている。

2. 名古屋大学工学研究科附属計算科学連携教育研究センター(平成20年11月26日)

名古屋大学工学研究科附属計算科学連携教育研究センターの開所式で、本教育プログラムに関する講演を行った。名古屋大学工学研究科において実施されてきた21世紀COE「計算科学フロンティア」プログラムでは、計算科学の新分野創成のための高レベルな教育・研究の実践を目標に掲げ、部局を跨って計算科学に関わる教育・研究を行ない、若手研究者の育成に努めた。本センターは、この実績を引き継ぐものとして平成20年10月1日に、工学研究科附属のセンターとして設置されたものである。

3. 日本教育工学協会(平成20年12月10日)

日本教育工学協会の関西幹事会で、本教育プログラムの活動を報告した。この幹事会では、京都大学はじめ関西圏の大学と三菱電機などの企業からの幹事委員で構成されている。この報告のあと、企業幹事委員と計算科学の企業内教育に関して検討を行った。

4. スーパーコンピューティング技術産業応用協議会(平成21年1月23日)

スーパーコンピューティング技術産業応用協議会(産応協)の主催するシンポジウム「計算シミュレー

ションの学際性と産学人材育成」で、活動報告をおこなった。産応協は、スーパーコンピューティング技術の産業界での有効活用をめざし、関係機関と多角的な連携を図りながら、より高度な有効活用環境の実現に向けて活動する団体である。

5. 計算物質科学連絡会議（平成20年12月22日、平成21年4月10日）

計算物質科学連絡会議の役割は、□計算物質科学コミュニティの窓口として、次世代スーパーコンピュータプロジェクトを視野に入れ、計算物質科学の研究・教育活動に関する全国的な情報および意見交換の場を提供するものである。この連絡会議で、2回講演する機会を得た。1回目は、神戸大学での計算科学教育で本教育プログラムの活動報告を行い、第2回目は、全国の大学のハブとなるべく「計算科学全国共同人材育成センター」の提案説明をした。

6. 北海道大学シミュレーションサロン（平成21年2月24日）

北海道大学シミュレーションサロン（HSS）は、北大における計算科学研究に関心の強い研究者の連携を目指して、平成16年に発足した。第7回ワークショップでは、初日には種々の研究成果の発表を、2日目には計算科学の教育に特化した講演会・討論会が計画され、本教育プログラムの活動報告を行った。

7. 文部科学省次世代スーパーコンピュータ戦略委員会（平成21年4月17日）

ペタコンの共有のあり方を検討する次世代スーパーコンピュータ戦略委員会において、1)人材育成における神戸大学の取組、2)神戸のスパコン拠点における人材育成の提案、3)教育利用枠のあり方について、本教育プログラムの成果を基に提案した。

8. 日本材料学会分子動力学部門委員会（平成21年11月27日）

分子動力学部門は、材料工学の広い分野における物質系の特性を原子/分子レベルの構造とその挙動を考慮したミクロな視点から明らかにするため、計算機シミュレーションを中心とした研究分野の発展を目的に設立された。その運営委員会で、テーマを「計算力学分野における教育」とし、本教育プログラムの報告が求められた。

9. 九州工業大学物理リメディアルフォーラム（平成22年1月15日）

九州工業大学の物理リメディアルのグループでは、e-Learningを用いた物理リメディアルのプロジェクトを推進している。今年度、初年次教育を推進する大学教育GPも採択され、物理のほか、数学、英語、情報の基礎教育を推進する。そこで昨年度から他大学の現状を把握し意見を交換する場としてフォーラムを開催している。このフォーラムで、本教育プログラムの活動報告が求められ、講演した。担当教員から今後の参加の申込があった。

10. 京都大学情報教育推進センターシンポジウム（平成22年3月11日）

京都大学における全学共通情報教育、特に、コンピュータリテラシー、情報科学、情報技術演習を担当している情報教育推進センターでは、シンポジウムを毎年開催している。平成21年度のシンポジウムでは、「大学院人材育成における情報教育-これからの大学院教育-」と題して開催された。この中で本教育プログラムの活動報告を行った。

ホームページ

主な活動の紹介や、大学院生や研究者を対象として定期的に行う集中講義の宣伝、また、参加者の復習や個々のスキルアップを目的とした資料・e-Learningコンテンツを掲載するために、ホームページを作成し公開している（URL：<http://www.e-k3.jp>）。このホームページはその構成を大きく2つに分けており、1つは「一般公開ページ」とし、誰もが閲覧可能となっている。もう1つは「受講者専用ページ」とし、集中講義に参加した学生、研究者および講師に向けてのみの閲覧という制限を設けて公開している。

5. 大学院教育へ果たした役割及び波及効果と大学による自主的・恒常的な展開

(1) 当該大学や今後の我が国の大学院教育へ果たした役割及び期待された波及効果が得られたか

計算科学を専門に教育する専攻は、日本では、今まで金沢大学自然科学研究科数物科学専攻と名古屋大学工学研究科計算理工学専攻だけで、神戸大学に新設された計算科学専攻が第3番目となり、その数が少な

い。元来、計算科学は、それぞれの研究分野で独自に発達した研究手法であったがために、本格的に広く分野横断型で計算科学を専門に教育する専攻は少ない。本教育プログラムによる分野横断型計算科学のカリキュラムや教育法の開発成果は、いろいろな大学での計算科学教育の促進に貢献するものと確信する。

現在、建設中の理化学研究所のペタコンプロジェクトの大きな柱の一つが、「ペタコンを中核とする世界最高水準のスーパーコンピューティング研究教育の拠点の形成」であることから、今後、計算科学の教育がたいへん重要視され、かつ日本の企業を次世代型製造業へ転換するための計算機シミュレーションの導入が促進されることは明らかである。現在、文部科学省研究振興局情報課の指導のもと計算科学の教育についての検討が進められ、本教育プログラムの成果について報告・議論する機会を得ている。本教育プログラムの成果が大きく今後の計算科学の大学院教育に大きな貢献をするものである。

本報告書3.「今後の教育プログラムの改善・充実のための方策と具体的な計画」で記述したように、学際的な計算科学教育を充実するために、本教育プログラムの成果は、神戸大学システム情報学研究科計算科学専攻に引継がれる。更に、地元大学の計算科学専攻として、ペタコンプロジェクトの人材育成に貢献するものである。

本教育プロジェクトに参加した九州大学では、平成21年度よりシステム情報科学府情報学専攻内に、新講座（計算科学講座）が設置された。そこでは計算科学の学際性を重視した人材を育成するシステムが採用されている。本講座では、シミュレーション分野を横断する計算科学の基礎として、モデリング、並列アルゴリズム、高精度計算の基礎技術を確立し、各応用分野における応用展開を図ることを目的としている。特に重視している点は、計算科学を単なる高速化の技術的な手法の追求のみにとどまらず、Multi-Scale Multi-Physics系や複雑系を数理モデルに射影・抽象化する手法とそのアルゴリズム、アプリケーションの超並列化から計算結果の品質や精度までをカバーする広い意味でのハイパフォーマンスコンピューティングについて教育研究を行っている。また分子科学、高精度固有値解析をコアとするシミュレーション分野を中心に応用展開を実施している他、同じ学府内の情報知能工学専攻先端情報・通信機構学講座と連携し、計算機工学、計算機科学との境界領域について、PBLによる実践教育も実施している。

しかし計算科学者を育成するためのプログラムは未熟であるため、本教育プログラムが培ってきたコース及びカリキュラムに関する試行の結果は重要なものとなる。具体的には、e-Learningコンテンツを利用した授業を恒常的に取り入れ、例えば、通常の授業の最初や最後に導入、応用として変化をつけるために用いることとする。授業中の利用の際には、講師やTAを配置し、説明を補足したり、質問に対応する。もちろん演習・予習・復習でのe-Learningコンテンツの利用も行う。自習の場合、質問はe-mailで担当教員が対応する。国内には計算科学を専攻できる場所はまだまだ少ないため、点在する計算科学教育を行う機関及び計算科学を学ぶ学生にとって、最新の計算科学カリキュラムで学習できる機会が増えることは朗報である。

(2) 当該教育プログラムの支援期間終了後の、大学による自主的・恒常的な展開のための措置が示されているか

理化学研究所のペタコンの隣接地に、ポートアイランド統合研究拠点の形成を目指して、研究棟の建設を神戸大学が決定した。平成23年3月の完成時には、計算科学専攻が入居し、理化学研究所や兵庫県・神戸市の計算科学振興財団の支援センターと協力して、計算科学の人材育成に貢献する計画である。この拠点を活用して、本教育プログラムの参加大学のみならず、全国や海外の大学、研究機関と共同で、自主的で恒常的な教育拠点にするために、ハブ的な機能を担う全国共同利用型の計算科学人材育成センターの設置を目指している。このセンターでは、大学院生をはじめとする大学生や社会人のみならず、中高校生の科学技術の理解増進をも目的とする構想である。

ポートアイランド統合研究拠点がペタコンの隣接地であることから、ペタコンに併設される計算科学研究機構の研究者やペタコンを使用するために神戸を訪れる戦略機関の最先端研究者にも、地の利を生かして計算科学人材育成センターでの教育に参加を依頼する予定である。また、統合研究拠点での研究目標として、多様な研究分野での計算機シミュレーションの研究を進めるとともに、計算機シミュレーションのデータ可視化の研究を進める計画であり、計算科学の教育のためにも貢献できる可視化研究拠点を目指す。

組織的な大学院教育改革推進プログラム委員会における評価

【総合評価】
<input type="checkbox"/> 目的は十分に達成された <input checked="" type="checkbox"/> 目的はほぼ達成された <input type="checkbox"/> 目的はある程度達成された <input type="checkbox"/> 目的はあまり達成されていない
<p>〔実施（達成）状況に関するコメント〕</p> <p>計算機科学のための最先端人材を育成する試みについては、カリキュラム構築が着実に行われ、スーパーコンピュータによるシミュレーション実行のための人材育成に関して期待された成果がほぼ得られている。しかしながら、教育内容、参加人数などのより具体的な明示が望まれ、また、成果についてもより詳細に分析し、今後の改善につなげることが必要である。</p> <p>ホームページは有効に使用されており、また、シミュレーション科学に関する本教育プログラムの波及効果も評価できる。</p> <p>今後の自主的・恒常的な展開のための方策については、財源も含めて検討することが望まれる。</p> <p>本教育プログラムは多くの大学の参加を得て実行されているが、参加大学へのフィードバックや理化学研究所との協力体制についても一層の明確化が必要である。</p>
<p>（優れた点）</p> <p>計算機科学に関わる、最先端人材育成のためのカリキュラム構築と実施が行われた。</p> <p>スーパーコンピュータによるシミュレーション実行のための人材育成に関しては、期待された成果はほぼ得られたと言える。</p> <p>（改善を要する点）</p> <p>開発されたカリキュラムの成果に関する分析と評価が必要である。シミュレーションにより方法論的にも、学問的成果にも何らかの前進があったかどうかの検証が必要である。</p> <p>また、学位授与率の改善のための方策が望まれる。</p>