

計算理工学第2

電気通信大学情報工学科・2007年度後学期・竹田辰興

1. 計算理工学概要
2. 物理モデル・数理モデル・数値計算
3. 粒子多体系および連続体系シミュレーション
4. 数値積分とモンテカルロ法
5. ランダムウォーク

ここでは、「計算理工学」～「計算科学」として議論を進める。本授業では、特に教科書は用いないが、多くの部分の内容は下記参考文献[1]に依存している。

参考文献の例

1. H. Gould, J. Tobochnik (鈴木増雄監訳)、計算物理学入門(ピアソンエデュケーション、東京、2000)
2. R.H. Landau, M.J.P. Meija (小柳義夫監訳) 計算物理学(基礎編、応用編) (朝倉書店、東京、2001)

1. 計算理工学概要

1.1 科学技術とコンピュータ

1.2 歴史的概観

1.3 科学技術と計算科学

1.4 計算科学における種々のシミュレーション

1.1 科学技術とコンピュータ

1.1.1 現状の整理

情報科学&コンピュータ

◇対象分野: 人類の活動の全ての分野に関係

自然科学、人文科学、社会科学

基礎的研究 ⇔ 応用研究

研究手段の研究 ⇔ 哲学的研究

◇思考法: 要素還元 ⇒ 複雑なままに

◇課題: コンピュータパワーの効率的利用法

複雑系の現実的モデル化

コンピュータは

計算機です

計算科学は、常に、高速計算性能を要求しコンピュータの発達の牽引車となってきました。

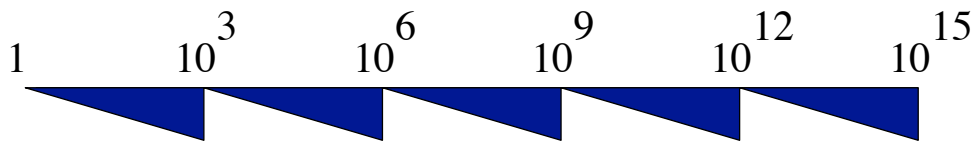
1.1.2 「超」への挑戦

- ◇FLOPS,数の広がり(1):大きい数
- ◇数の広がり(2):小さい数
- ◇「知覚」の世界～「超」の世界

◇ FLOPS, 数の広がり(1): 大きい数

FLOPS=FLOATING OPERATIONS PER SECOND

kFLOPS, MFLOPS, GFLOPS, TFLOPS, PFLOPS



壺 千 百万 十億 兆 千兆

k: kilo M: Mega G: Giga T: Tera P: Peta

壺・千・万・億・兆・京・垓・**し***・穰・溝・澗・正・載・

極・恒河沙・阿僧祇・那由他・不可思議・無量大数

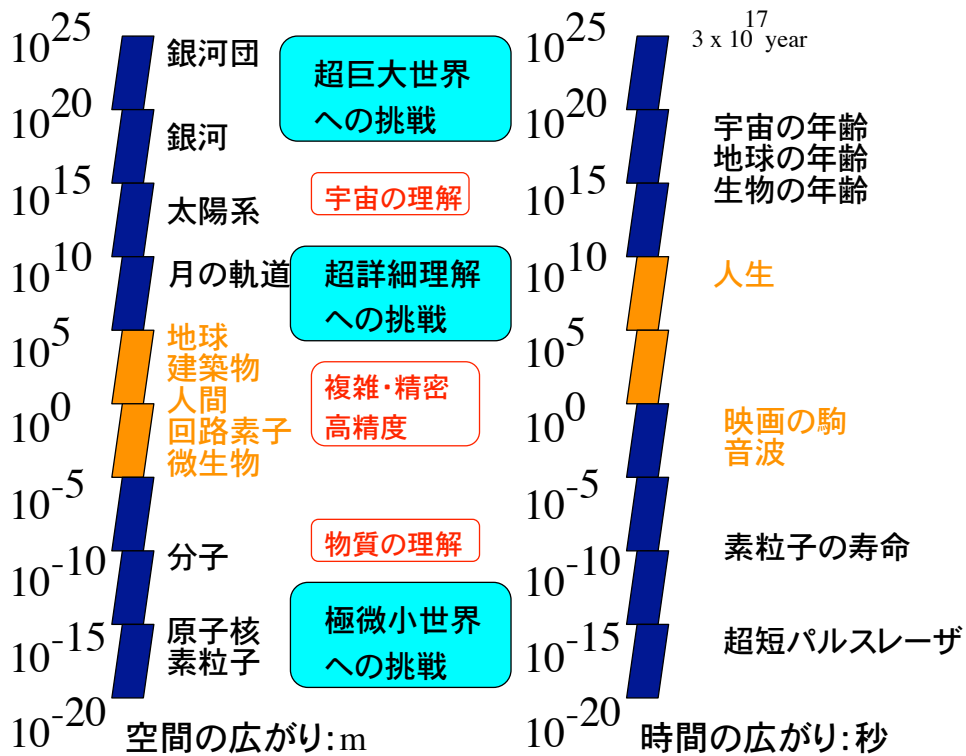
*し= 垓

◇ 数の広がり(2) 小さな数

	10^0		壺
	10^{-1}	d: deci	分
	10^{-2}	c: centi	厘
	10^{-3}	m: milli	毛
	10^{-6}	μ : micro	微
	10^{-9}	n: nano	塵
	10^{-12}	p: pico	漠
	10^{-15}	f: femto	須臾
	10^{-18}	a: atto	刹那
	10^{-21}	z: zepto	清浄
	10^{-24}	y: yocto	

◇「知覚」の世界～「超」の世界

1 year = 3.15×10^7 sec

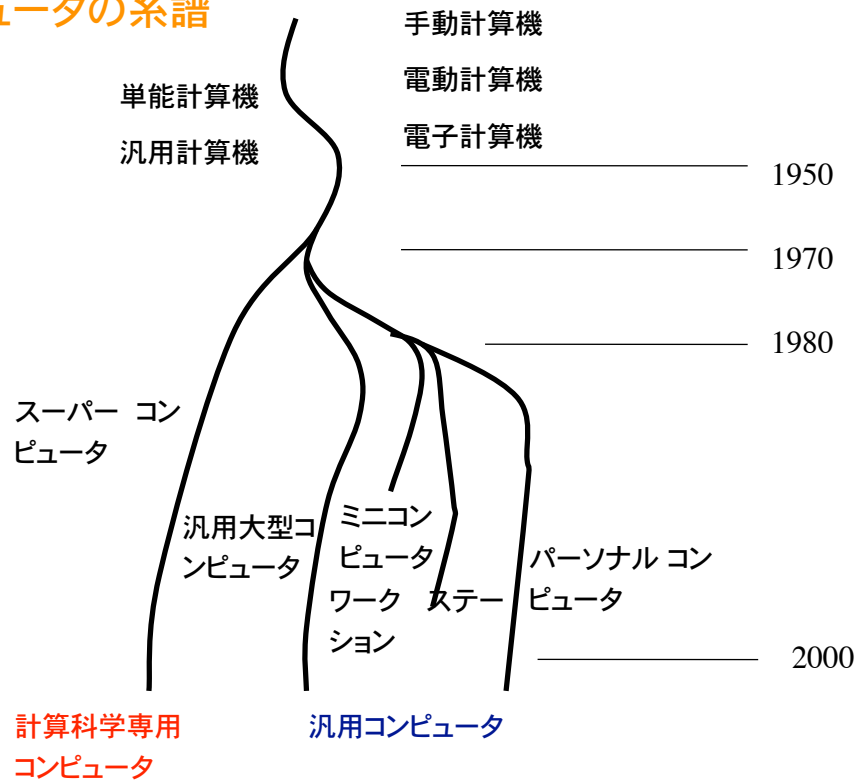


1.2 歴史的概観

1.2.1 計算機の歴史

- ◇コンピュータの系譜
- ◇計算機とその利用の歴史: 前史時代
- ◇計算機とその利用の歴史: 第1世代
- ◇計算機とその利用の歴史: 第2世代
- ◇計算機とその利用の歴史: 第3世代
- ◇計算機とその利用の歴史: 第3.5世代
- ◇計算機とその利用の歴史: 第4世代
- ◇スーパーコンピュータへの道

◇コンピュータの系譜



◇計算機とその利用の歴史:前史時代

~1940年代

手動機械式
電動機械式

~1300 そろばん

17世紀 歯車式

19世紀 解析機械、統計機械

1942 ABC

1943 COLOSSUS

1944 MARK-1

1945 ノイマン理論

会計計算

統計計算

弾道計算

暗号解読

手動計算機 0.01 FLOPS

MARK-1('44) 0.2 FLOPS

◇ 計算機とその利用の歴史: 第1世代

1940年代後半～1950年代

1946 ENIAC

1949 EDSAC (初のノイマン型)

1950 EDVAC

1951 UNIVAC-1 (商用計算機)

1953 IBM-701 (科学技術計算)

1953 IBM-702, 650, UNIVAC-1103

1954 IBM-704 (浮動小数点)

1956 FORTRAN言語 (科学技術計算)

1956 FUJIC (日本最初)

1957 ETL-MARK (電気試験所)

リレー式

真空管式

弾道計算

科学技術計算

事務計算

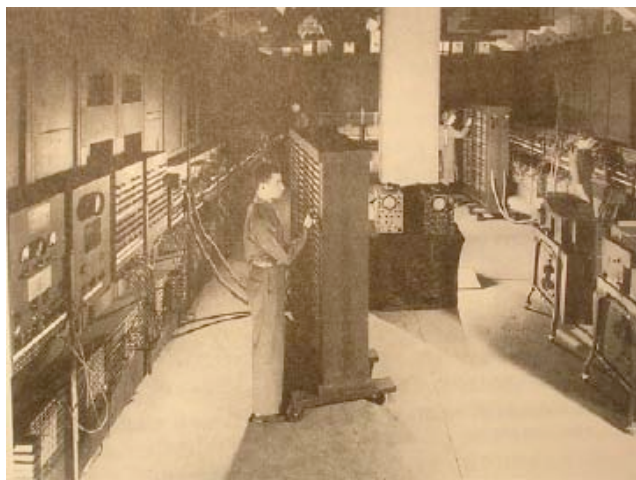
レンズ設計

ENIAC('46) 0.3 kFLOPS

IBM701('53) 2.5 kFLOPS

前計算科学時代
計算は理論の補助

・ENIAC



1946: 最初の真空管式コンピュータ; ENIAC

1951: 真空管式商用コンピュータ; UNIVAC-1

1953: IBM701

・PC-1を用いた学生実験(1960頃、東京大物理学科)
—私が学生の頃—



PC-1:パラメトロン計算機、1958稼働、2MHz、512 words

・みどりの窓口開設へ(1965.9.24)

※NHKプロジェクトX

<非・数値計算>



手動予約発券



MARS(Magnetic electronic Automatic Reservation System):日立、1960 完成

◇ 計算機とその利用の歴史: 第2世代

1960年代前半

1958 IBM 7070, 7090
NEAC2201, CDC1604
1959 NEAC2203, TOSBAC2100
HITAC301
1960 OKITAC5090
ALGOL, COBOL, LISP
1961 FACOM222
1964 **CDC 6600**
(最初の商用スーパーコンピュータ)

トランジスター

事務計算(証券、商事、保険会社等)

科学技術計算

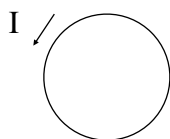
IBM 7090 0.2 MFLOPS

CDC 6600 1.5 MFLOPS

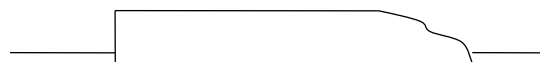
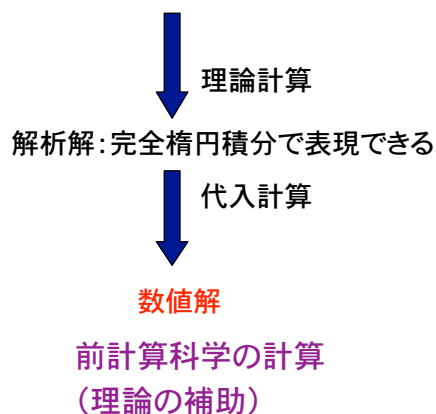
計算科学時代の夜明け
計算科学は第3の科学

・「理論の補助」としての計算: 「計算科学」の計算

例: 磁場計算

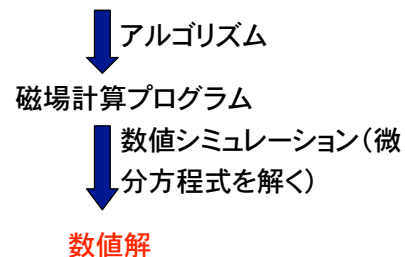


1ターン円形コイルのつくる磁場



リニアモーターカーからの漏れ磁場

(解析解は作れない)



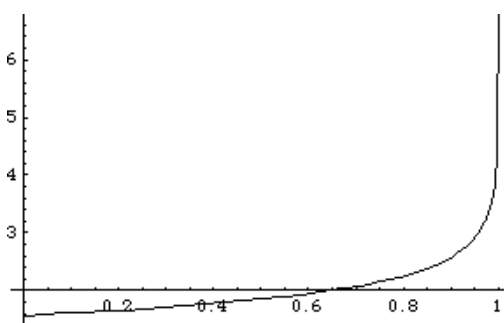
計算科学の計算

$$B_{R,ji} = \frac{\mu_0 I_i}{2\pi \sqrt{(\rho_j + R_i)^2 + (\xi_j - Z_i)^2}} \frac{\xi_j - Z_i}{\rho_j} \left[-K(\kappa) + \frac{\rho_j^2 + R_i^2 - (\xi_j - Z_i)^2}{(\rho_j - R_i)^2 + (\xi_j - Z_i)^2} E(\kappa) \right]$$

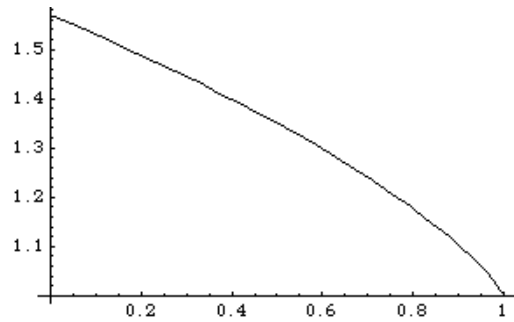
$$B_{Z,ji} = \frac{\mu_0 I_i}{2\pi \sqrt{(\rho_j + R_i)^2 + (\xi_j - Z_i)^2}} \left[K(\kappa) - \frac{\rho_j^2 - R_i^2 - (\xi_j - Z_i)^2}{(\rho_j - R_i)^2 + (\xi_j - Z_i)^2} E(\kappa) \right] \quad \text{代入計算!!}$$

$$\kappa^2 = \frac{4\rho_j R_i}{(\rho_j + R_i)^2 + (\xi_j - Z_i)^2}$$

円形コイルによる磁場の公式



第1種完全楕円積分:K



第2種完全楕円積分:E

マックスウェル方程式

$$\text{div} \vec{D} = \rho$$

$$\vec{D} = \epsilon \vec{E}$$

$$\text{div} \vec{B} = 0$$

$$\vec{B} = \mu \vec{H}$$

$$\text{rot} \vec{E} + \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = 0$$

微分方程式の数値解!!

$$\text{rot} \vec{H} - \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} = \vec{j}$$

振動磁場による渦電流の解析

オームの法則

$$\vec{j} = \sigma(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$$

◇ 計算機とその利用: 第3世代

1960年代後半

1964 IBM/360
1965 UNIVAC1908, PDP8
GE635/645, FACOM230
1966 CDC6400, HITAC8400
1967 Burroughs B8500
1968 CDC7600
NCR Century100
1971 TOSBAC5600

IC: 集積回路

(~1000トランジスタ)

汎用大型

ファミリー概念

制御/計測用ミニ

計算科学用大型

CDC 7600 8 MFLOPS

汎用コンピュータ

=>メインフレームコンピュータ

◇ 計算機とその利用の歴史: 第3.5世代

1970年代

1970 IBM/370
<国産汎用大型機>
(FACOM M, HITAC M, ACOS)
<マイクロコンピュータ>
(i4004, i8080, MC6800, Z80, MC68000)
1974 ILLIAC-IV
1976 CRAY-1
1977 FACOM 230-75APU

LSI: 大規模集積回路

(~100,000トランジスタ)

行政指導::企業連合

汎用大型全盛

マイクロコンピュータ

スーパーコンピュータ

>>計算科学

ILLIAC-IV 20 MFLOPS

CRAY-1 30 MFLOPS

FACOM 230-75APU 22 MFLOPS

◇ 計算機とその利用の歴史: 第4世代

1980年代

<汎用大型コンピュータ>

IBM3090, FACOM M780, HITAC
M680, ACOS2000, UNIVAC1100

<パーソナルコンピュータ>

1976 CP/M, 1981 MS-DOS)
1981 IBM-PC, FM-8, PC-9800
1984 IBM PC/AT, 1984 Macintosh

<スーパーコンピュータ>

IBM3090VF, FACOM VP200,
HITAC S810, NEC SX-2

VLSI: 超大規模集積回路
(>100,000トランジスター)

国家プロジェクト:
超LSI技術研究組合 日電・東芝
& 富士通・日立・三菱 |

パーソナルコンピュータ始動
計算科学本格的開始

1982 FACOM VP-200 500 MF
1987 HITAC S-820 3 GF
1988 Cray YMP 4 GF
1991 NEC SX-3 22 GF

◇ スーパーコンピュータへの道

1946 ENIAC 0.005 MIPS 200 μ s/add

1972 HITAC835 0.3 MIPS 3 μ s/add

1977 Cray 1 160 MFLOPS

IBM370/195 13 MIPS

1983 Fujitsu VP200 500 MFLOPS

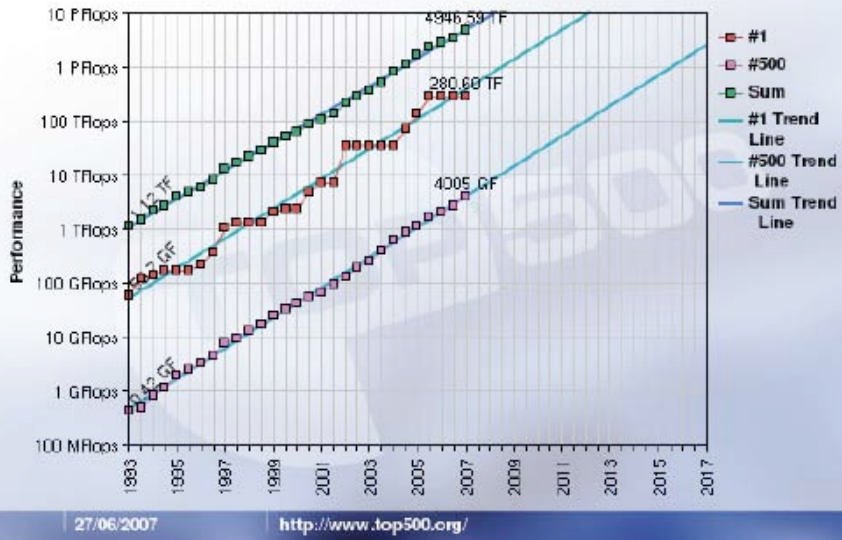
1992 HITAC S3800/180 32 GFLOPS

*Top 500 Computers

1年に2回、世界のスーパーコンピュータの性能を比較してそのランキングを公表するプロジェクトが1993年から開始された。ドイツのマンハイム大学および米国のテネシー大学が運営している。性能評価はテネシー大学のJack Dongarra 教授による線形計算コードLINPACKを使って行われる。



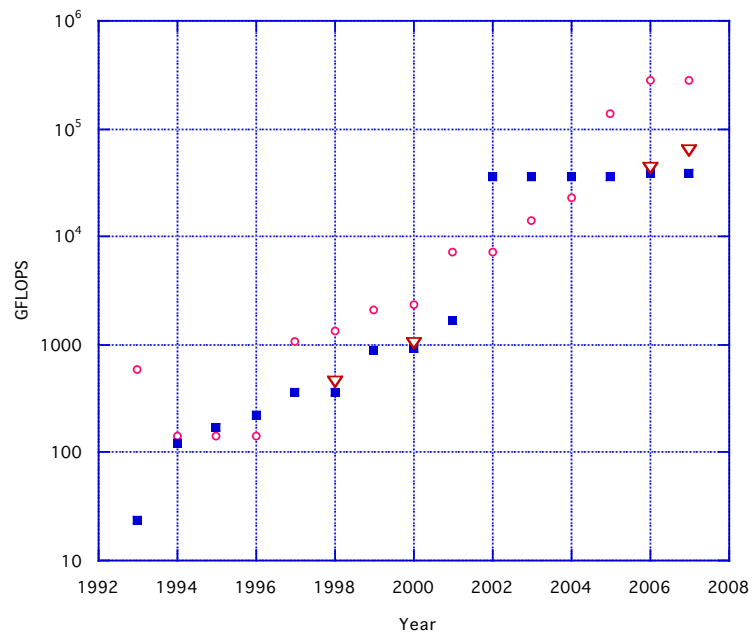
Projected Performance Development



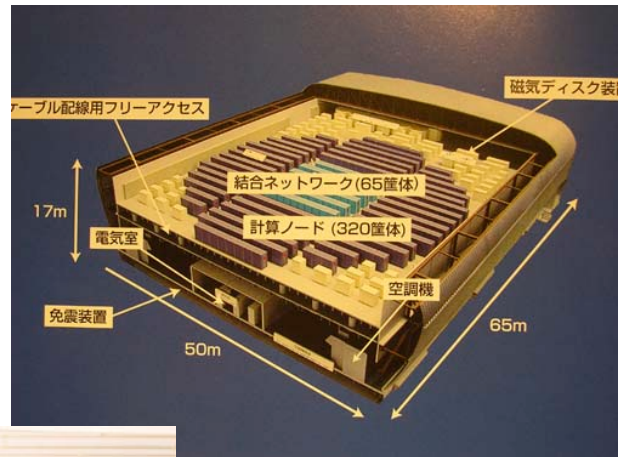
<http://www.top500.org/>

- USA Computer
- Japan Computer
- ▽ Other Computer

TopComp



・地球シミュレータ



1.2.2 計算科学発達の歴史

◇計算(Computation)に対する見方の変遷

*~1960:限られた適用範囲(物理、化学、工学の一部)

計算は理論の補助手段<電子計算機時代へ>



*1960~:計算は現代科学の三要素の一つ

汎用大型スカラー計算機



ベクトル型スーパーコンピュータ

超並列計算機・ベクトルパラレル計算機



*1990~:メタコンピューティング

◇変化をもたらした要因

(1)ハイエンドコンピュータの発達

*計算速度の変遷(FLOPS値の上昇)

1976:~100 MFLOPS (Cray 1)

1995: >10 GFLOPS

2002: ~40 TFLOPS (地球シミュレータ)

*記憶容量の変遷

1970: MB

1990: GB

2000: TB~PB

(2)関連技術の発達

*マイクロプロセッサ技術

*ネットワーク容量の増大

◇スーパーコンピュータ性能を支配する要素

1)プロセッサ形式

ベクトルプロセッサ

スカラープロセッサ

2)プロセッサ構成

並列プロセッサ

超並列プロセッサ

(GRID計算、PCクラスター、専用計算機)

3)メモリ構成

共有メモリ

分散メモリ

		#CPU	GFLOPS
1993 LASL	CM-5/1024	1024	59.7
1994 Sandia NL	Intel XP/S140	3680	143.4
1995 N. Aerospace Lab	Fujitsu Num WT	140	170
1996 U. Tokyo	Hitachi SR2201	1024	220.4
1997 Sandia NL	Intel ASCI Red	7264	1068
1998 Sandia NL	Intel ASCI Red	9152	1338
1999 Sandia NL	Intel ASCI Red	9472	2121
2000 Sandia NL	Intel ASCI Red	9632	2379
2001 LLN	LIBM ASCI White	8192	7226
2002 Earth Sim Center	NEC Earth Sim	5120	35860
2003 Earth Sim Center	NEC Earth Sim	5120	35860
2004 Earth Sim Center	NEC Earth Sim	5120	35860
2005 DOE/NNSA/LLNL	IBM BlueGene/L	65536	136800
2006 DOE/NNSA/LLNL	IBM BlueGene/L	131072	280600
2007 DOE/NNSA/LLNL	IBM BlueGene/L	131072	280600

◇ベクトル計算機

*ベクトル計算:

① 一つの処理をいくつかのステージに分解

(例)浮動小数点加算の場合

指数部比較、仮数部シフト、仮数部加算、正規化

② 数値をパイプラインの中を流しながら各ステージを流れ

作業的に処理していく

*パイプラインのアイデア

1965:Don Senzig (IBM)

1964	CDC6600	1 MF	
1965	IBM2983 Array Proc	10 MF	石油探査
1969	CDC7600	5 MF	
1972	Texas Instr. ASC	30 MF	
1973	CDC Star-100	50 MF	
1976	CRI Cray-1	160 MF	ベクトルレジスター
1977	FACOM 230-75APU	22 MF	日本初のベクトル計算機
1978	HITACHI M-180IAP	>10 MF	
1979	HITACHI M-200IAP	48 MF	
1980	Cyber 203	200 MF	
1981	Cyber 205	400 MF	
1982	HITACHI M-280H	67 MF	
1982	NEC ACOS-1000IAP	28 MF	
1982	Cray XMP-2	630 MF	

1983	HITACHI S-810/20	630 MF
1983	Fujitsu FACOM VP-200	570 MF
1984	Cray XMP-4	1260 MF
1985	NEC SX-2	1300 MF
1985	Cray-2	1952 MF
1985	Fujitsu VP-400	1140 MF
1987	HITACHI S-820	3 GF
1988	Cray-YMP	4 GF
1989	Fujitsu VP 2600	5 GF
1990	NEC SX-3	22 GF

1991	Cray-YMP C90	16 GF
1993	HITACHI S-3800	32 GF
1994	Fujitsu VP 500	1.6 GF/CPU x 222(max)
1995	NEC SX-4	2 GF/CPU x 512(max)
1995	Cray T90	57.6 GF
1995	Fujitsu VPP300	2.2 GF/CPU x 16
1996	Fujitsu VPP700	2.2 GF/CPU x 256
1996	HITACHI SR 2201	0.3 GF/CPU x 2048
1997	Intel ASCI red (Pentium Pro)	1.8 TF
1998	IBM ASCI Blue Pacific (PowerPC 604e)	3.8 TF
1998	HITACHI SR 8000	8 GF/CPU x 128
1998	SGI ASCI Blue Mountain	3 TF
1999	Fujitsu VPP5000	9.6 GF/CPU x 512
2000	IBM ASCI White	12.3 TF
2000	NEC Earth Simulator	40 TF

◇PCクラスター

*Big Mac: Virginia Polytechnic Institute and State University

2004 November #3 of Top500

X-1100 Dual 2.0 GHz Apple G5/Meallanox 2200CPUs

(PowerPC970, 2004)

10280 GF)Peak: 17600 GF)

*BlueGene/L (PowerPC 440)

2004.11 70.72 TF

2005.6 136.80 TF

2005.10 280 TF

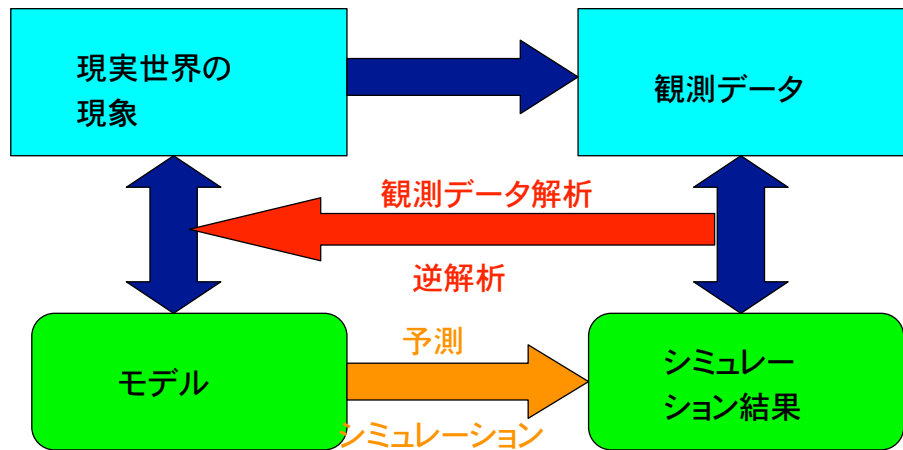
*BlueGene/P (PowerPC 450)

2010 (Planned) 1 PF

2010~12 10 PF

1.3 科学技術と計算科学

1.3.1 計算の役割: 解析と予測

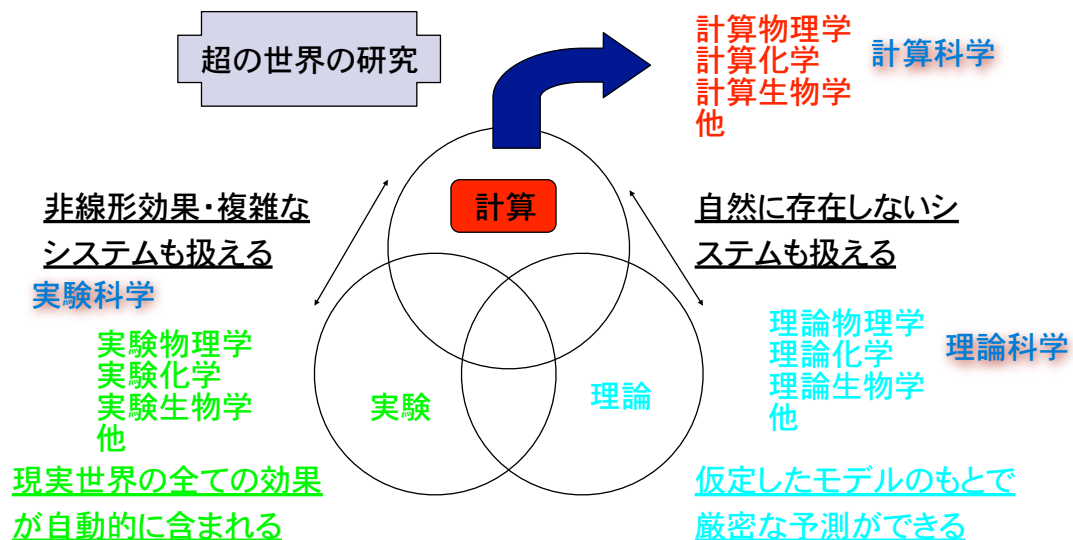


目標: 現実世界の現象とモデルを近づける

1.3.2 第3の科学としての計算科学

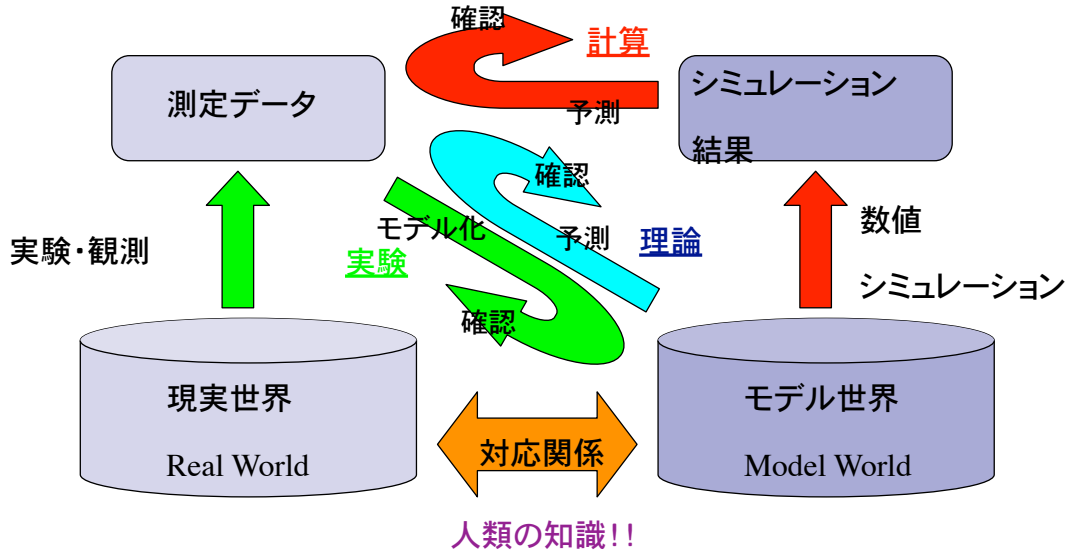
◇三つの科学: 計算科学の出番(1)

<科学における第3の方法: 計算(Computation)>



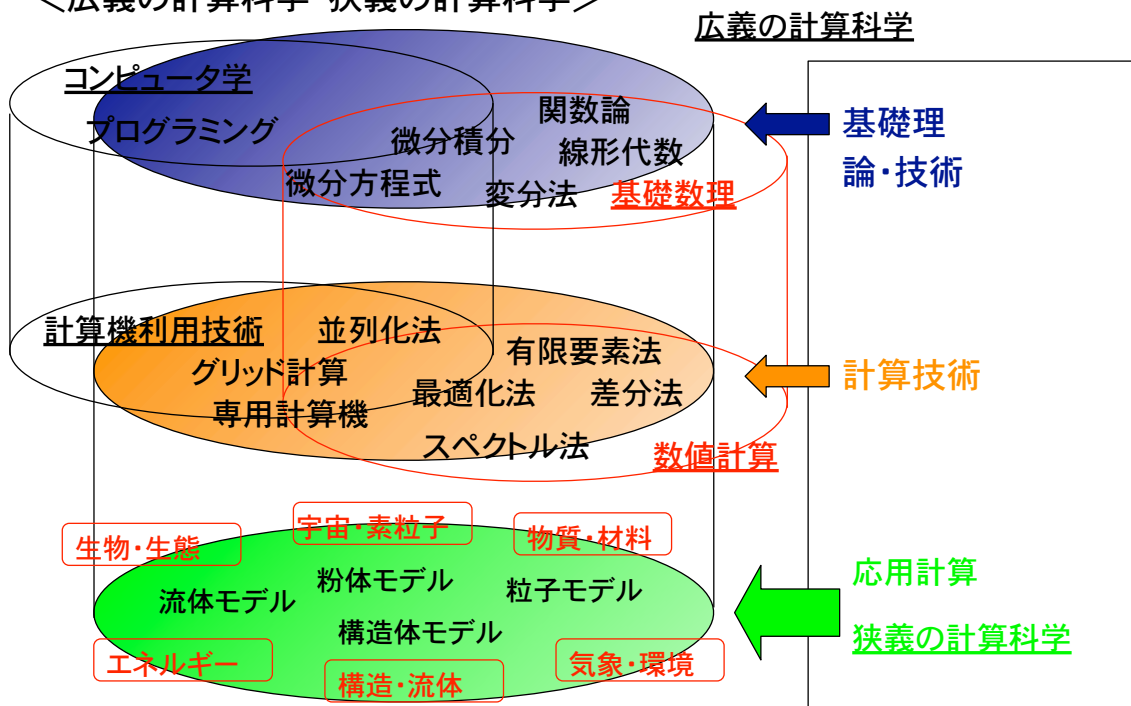
◇三つの科学:計算科学の出番(2)

<別の見方:実験・理論・計算の関係>



◇三つの科学:計算科学の出番(3)

<広義の計算科学・狭義の計算科学>



◇計算科学で何ができるようになったか？

*きわめて複雑なシステムが解析できるようになった。

きわめて複雑なシステム:要素が極端に多いシステム

デカルト的アプローチ(要素還元的アプローチ)

⇒ 総合的シミュレーション

*非線形システムが定量的に扱えるようになった。

線形システム ⇔ 非線形システム

線形システム:原因→結果

非線形システム:原因→結果→原因→結果……

1.4 計算科学における色々なシミュレーション

1.4.1 数値計算とシミュレーション

◇粒子多体系シミュレーション

①分子動力学シミュレーション

②重力多体系シミュレーション

③超粒子シミュレーション

粒子間に働く力を与えて運動方程式を解く

③は粒子の集団を一つの粒子と見る

①:物質解析、②:天体宇宙、

③:核融合プラズマ、等

④モンテカルロシミュレーション

乱数を用いた数値積分を基礎とする

分子動力学法 (MD法)

* 古典力学、多粒子系

* 1950年代

↓

* 1980年代：新方法

エネルギー・体積一定 \Rightarrow 温度・圧力一定

非平衡状態

量子力学的効果

* 目的：多粒子系を近似なしに理解する。

$$m_i \frac{d^2 \vec{q}_i}{dt^2} = \vec{F}_i = - \frac{\partial \Phi}{\partial \vec{q}_i}$$

* 効率化の方法

周期境界条件

相互作用のカットオフ

モンテカルロ法

* 原理

: 状態の集合 $\{\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n\}$
: 確率分布 $P(\omega), \omega \in \Omega$

各状態 ω_i に存在する確率が $P(\omega_i)$ に等しい

ランダムウォークを作る条件

① 詳細釣り合い条件 $P(\omega_i)W(\omega_i \rightarrow \omega_j) = P(\omega_j)W(\omega_j \rightarrow \omega_i)$

for $\forall \omega_i, \forall \omega_j \in \Omega$

$W(\omega_i \rightarrow \omega_j)$ ω_i ω_j

ここで、 $W(\omega_i \rightarrow \omega_j)$ は ω_i から ω_j への遷移確率。

② エルゴード性

任意の状態から任意の状態に到達できる。

◇連続体系シミュレーション

基礎方程式は、通常、発見的に構成されたものを使うが、これらは、粒子多体系方程式の連続体近似として導出できる(3章参照)。

①数値流体力学:流体方程式系のシミュレーション

高速交通機関(航空機、列車、自動車)

気象、気候、海洋、固体地球、地質

②構造計算:構造方程式系のシミュレーション

建築物、機械、材料のマクロ挙動

③連成系のシミュレーション

計算流体力学 (CFD) と可視化

* ナビエストークス方程式

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} = -\nabla p + \frac{1}{\text{Re}} \Delta \vec{u}$$

$$\nabla \vec{u} = 0$$

$$\text{Re} = \rho \frac{UL}{\mu}$$

* 数値計算の歴史: 川口光年の計算

円柱周りの流れ Re=40

⇒ 1週間当たり20時間の計算で1年間

* 低レイノルズ数

非線形性は余り出てこない、前後対称

* 中レイノルズ数: 双子渦

* 高レイノルズ数: 非定常、カルマン渦

* 1980年頃までの計算: Re<10000、カルマン渦

* 人間が歩くときのレイノルズ数: ~100000

◇実験データ・観測データ解析

- ①マッチング計算
- ②データマイニング
- ③時系列解析・予測

◇基礎的事項

- ①非線形現象:相転移、カオス等
- ②相対論的效果
- ③量子論的效果

量子力学的状態

*原子核の殻模型

*シュレーディンガー方程式

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \sum_{i=1}^A \nabla_i^2 + \sum_{i<j} V(i, j) - E \right\} \Psi(1, 2, \dots, A) = 0$$

数値的相対性理論

*アインシュタインの一般相対論方程式

(10変数連立非線形方程式)

初期値問題として解く。

星の生成

*流体方程式、重力効果が大きい

◇別のアプローチ

- ①セルラーオートマトン
- ②パーコレーション
- ③ニューラルネットワーク
- ④ファジーロジック
- ⑤遺伝アルゴリズム
- ⑥人工生命(Artificial Life)

1.4.2 広がる計算科学活動の場

具体的な数値シミュレーションの例をいくつか示す。

- (1)宇宙・天文・素粒子
- (2)物質・材料研究
- (3)エネルギー研究:核融合等
- (4)構造解析・流体解析
- (5)気象・環境・資源等
- (6)生物・生態系解析

◇広がる計算科学の活動の場
(1)宇宙・天体・素粒子

現状
銀河系シミュレーション
素粒子・原子核理論のシミュレーション
観測 ↔ シミュレーション



将来:目標
宇宙形成のメカニズムの
解明

計算・モデルの特徴
重力に支配された粒子多体系シミュレーション

計算機
TFLOPS以上の計算速度
専用計算機が活躍

◇広がる計算科学の活動の場
(2)物質・材料研究

現状
第一原理シミュレーション
で、特定物質の構造、性質
を解析



将来:目標
新物質の設計、機能、生
成法の解明

計算・モデルの特徴
第一原理「分子動力学」シ
ミュレーション

計算機
大量原子を取り扱えるように、
速度、メモリの向上。共有メモ
リ型

◇広がる計算科学の活動の場
(3)エネルギー研究:核融合等

現状

プラズマのMHD平衡、不安定性、輸送現象の解析、工学システムの設計

計算・モデルの特徴

MHD流体モデル、粒子モデル、工学的設計プログラム

将来:目標

第一原理シミュレーション(マイクロ)、マクロ・工学系統統合的プログラム

計算機

TFLOPS以上の計算速度
専用計算機が必要?

◇広がる計算科学の活動の場
(4)構造解析・流体解析

現状

航空機・自動車等の構造・流体解析、建造物の構造解析ほか

計算・モデルの特徴

複雑な幾何学形状が課題、連成挙動

将来:目標

統合化シミュレーション、基礎現象(燃焼・爆発等)シミュレーション、ポアラス領域の現象

計算機

複雑形状の統合モデルの解析にはPFLOPS以上の計算速度

◇広がる計算科学の活動の場
(5) 気象・環境・資源等

現状

大気・海洋モデルによる気象・気候予測計算。マントル対流シミュレーション。資源探査。



将来: 目標

高精度気象予測、温暖化やオゾン層予測。地震予知、解明等。

計算・モデルの特徴

流体・構造計算。データ同化。予測問題。

計算機

TFLOPS以上の計算速度、大規模メモリ。

◇広がる計算科学の活動の場
(6) 生物・生態系解析

現状

遺伝子解析、たんぱく質構造解析。生体機能解析。



将来: 目標

医学への応用。たんぱく質の機能解析。

計算・モデルの特徴

各種データ処理計算(マッチング計算等)。第一原理シミュレーション。

計算機

TFLOPSをはるかに越える計算機が必要。