

スパコンへの数学・ スパコンへの算数

数学と物理が好きな中学生・高校生のための
スーパーコンピューティングへの招待



- 東大情報基盤センターの現状

- ✓ スパコンシステム紹介
- ✓ 様々な利用分野
- ✓ COVID-19に対する取り組み

- 数値線形代数

- ✓ 第3の科学と連立一次方程式
- ✓ 行列とベクトル
- ✓ 連立一次方程式の解法と実用例



3システム：利用者2,600+, 学外55+%

- Reedbush (HPE, Intel BDW + NVIDIA P100 (Pascal))(本郷)

- データ解析・シミュレーション融合スーパーコンピュータ
- 3.36 PF, 2016年7月～ 2021年3月末(予定)
 - Reedbush-U (CPU only, 2020年6月30日で退役)
 - Reedbush-H (2GPU's/n), Reedbush-L (4GPU's)
- 東大ITC初GPUクラスタ (2017年3月より), DDN IME (Burst Buffer)



- Oakforest-PACS (OFP) (富士通, Intel Xeon Phi (KNL))(柏)

- JCAHPC (筑波大CCS & 東大ITC)
- 25 PF, TOP500で18位(日本3位)(2020年6月)
- Omni-Path アーキテクチャ, DDN IME (Burst Buffer)

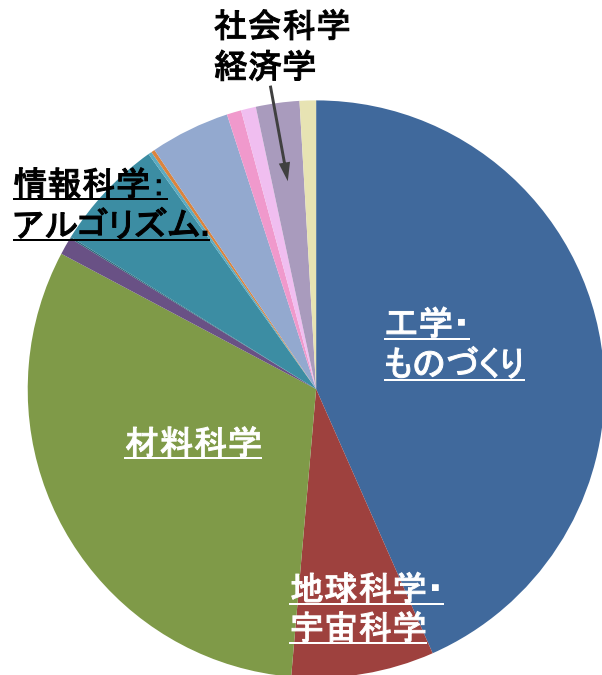


- Oakbridge-CX (OBCX) (富士通, Intel Xeon Platinum 8280)(柏)

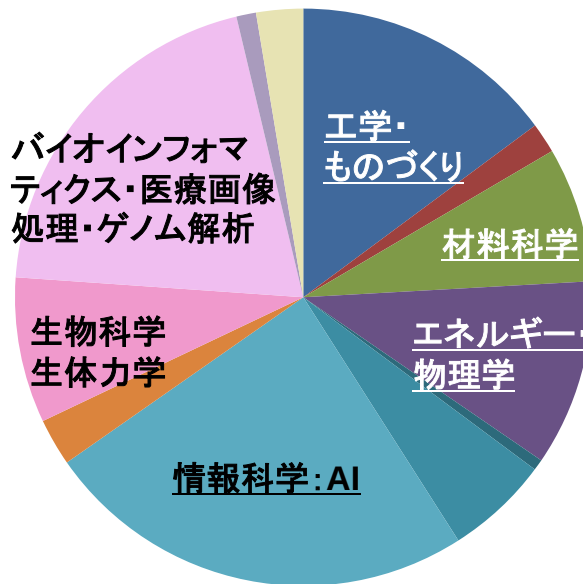
- 大規模超並列スーパーコンピュータシステム
- 6.61 PF, 2019年7月～ 2023年6月, TOP500で60位(2020年6月)
- 全1,368ノードの内128ノードにSSDを搭載



研究分野別利用CPU時間割合(2019年度)



マルチコアクラスタ
Intel BDW Only
(Reedbush-U)



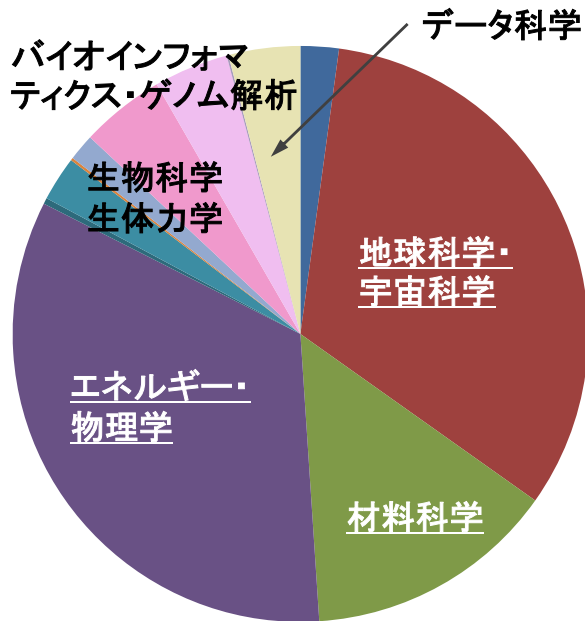
GPUクラスタ
Intel BDW + NVIDIA P100
(Reedbush-H)

- 工学・ものづくり
- 地球科学・宇宙科学
- 材料科学
- エネルギー・物理学
- 情報科学: システム
- 情報科学: アルゴリズム
- 情報科学: AI
- 教育
- 産業利用
- 生物科学・生体力学
- バイオインフォマティクス
- 社会科学・経済学
- データ科学・データ同化

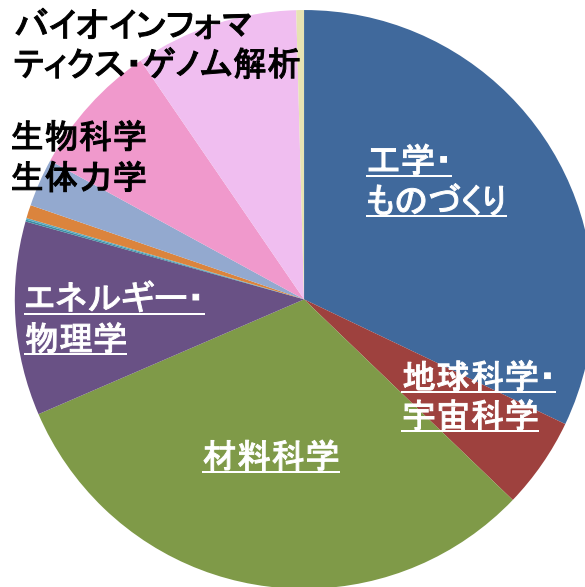


研究分野別利用CPU時間割合(2019年度)

OBCXは2019年10月～2020年9月末(12ヶ月)



メニコアクラスタ
Intel Xeon Phi
(Oakforest-PACS)



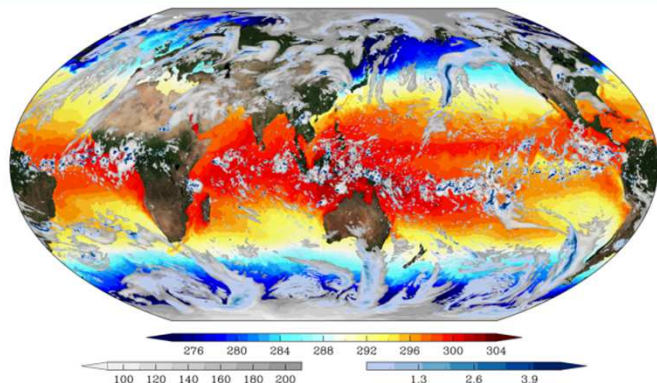
マルチコアクラスタ
Intel CLX
(Oakbridge-CX)

- 工学・ものづくり
- 地球科学・宇宙科学
- 材料科学
- エネルギー・物理学
- 情報科学:システム
- 情報科学:アルゴリズム
- 情報科学:AI
- 教育
- 産業利用
- 生物科学・生体力学
- バイオインフォマティクス
- 社会科学・経済学
- データ科学・データ同化

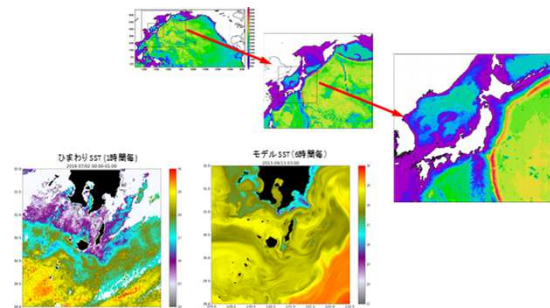
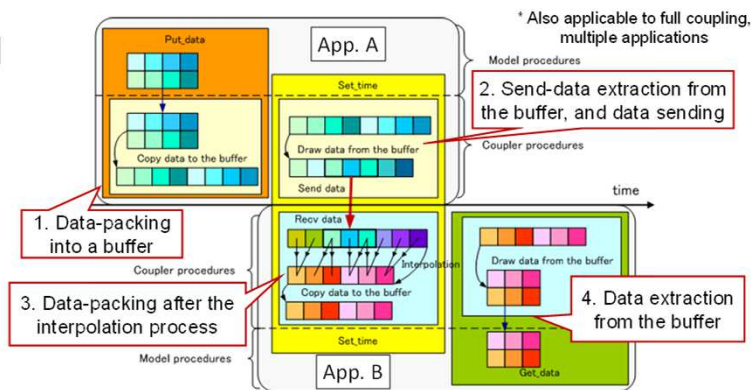
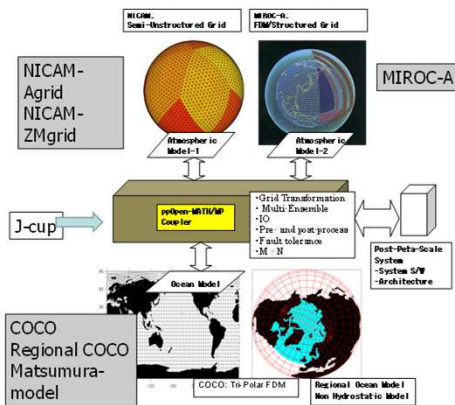
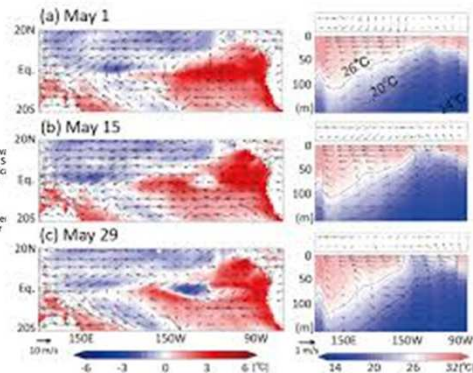
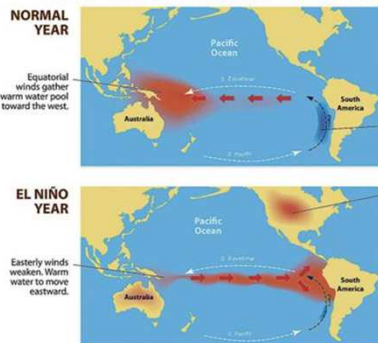


全地球大気環境シミュレーション

東大大気海洋研究所, 東大理学系研究科等



THE EL NIÑO PHENOMENON



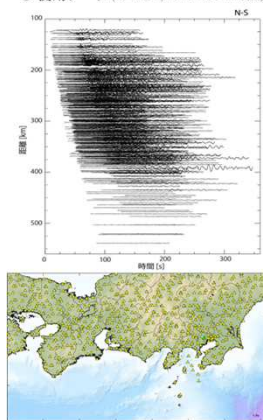
〔画像提供: 佐藤正樹教授・
羽角博康教授(東大・大気海洋研)〕

地震シミュレーション・地殻変動

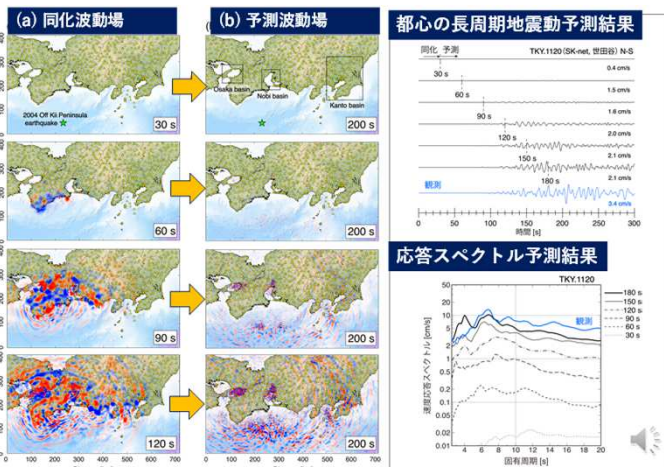
東大地震研究所，東大理学系研究科等

〔画像提供：古村孝志教授・市村強教授（東大・地震研）〕

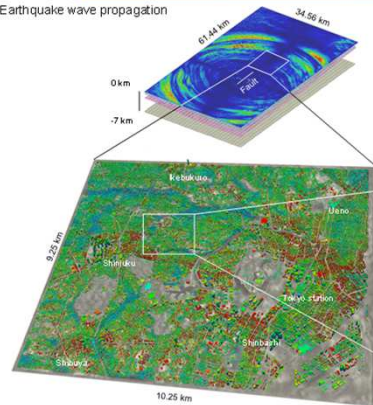
○ 使用データ (K-NET, KIK-net 446点)



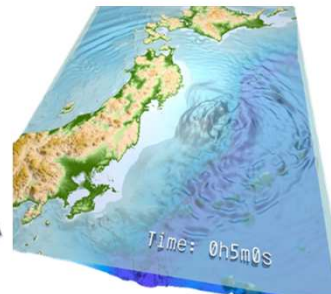
90秒間の同化→予測計算



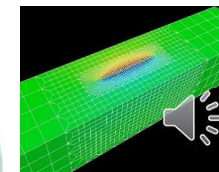
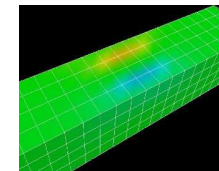
a) Earthquake wave propagation



b) City response simulation



c) Resident evacuation



〔画像提供：
安藤亮輔准教授
（東大・理学系）〕

二酸化炭素地下貯留シミュレーション

大成建設, 理化学研究所等

〔画像提供:
山本肇博士(大成建設)〕

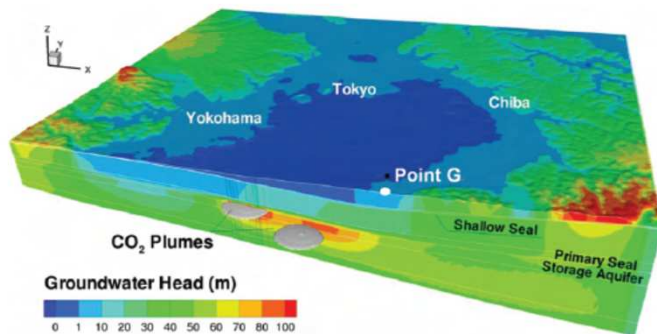
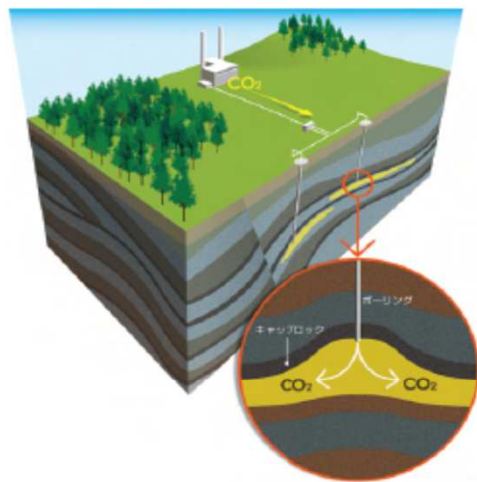
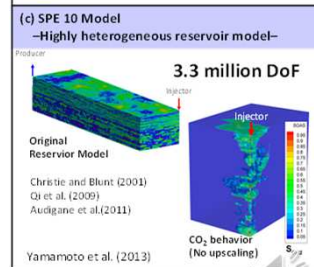
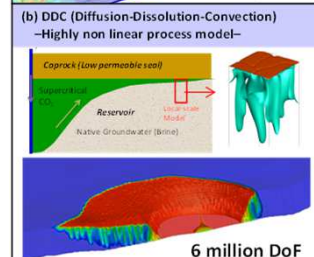
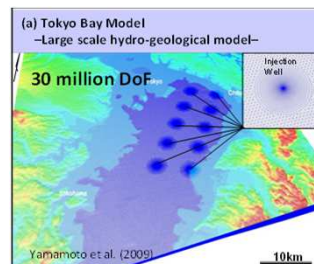
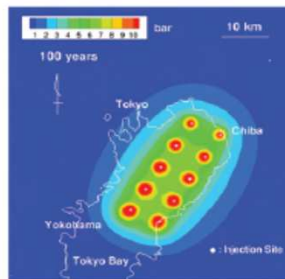
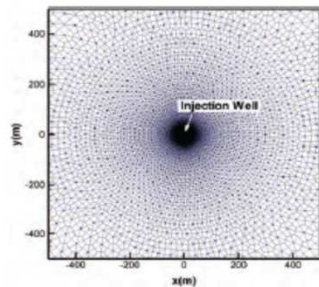


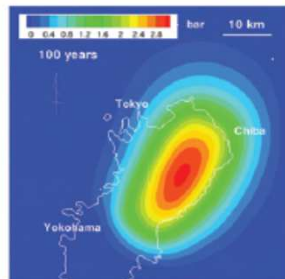
図-4 CO₂ 圧入後の地下水圧 (全水頭換算) の分布 (100 年後)



※DOF: degrees of freedom



(a) 深部遮蔽層下面

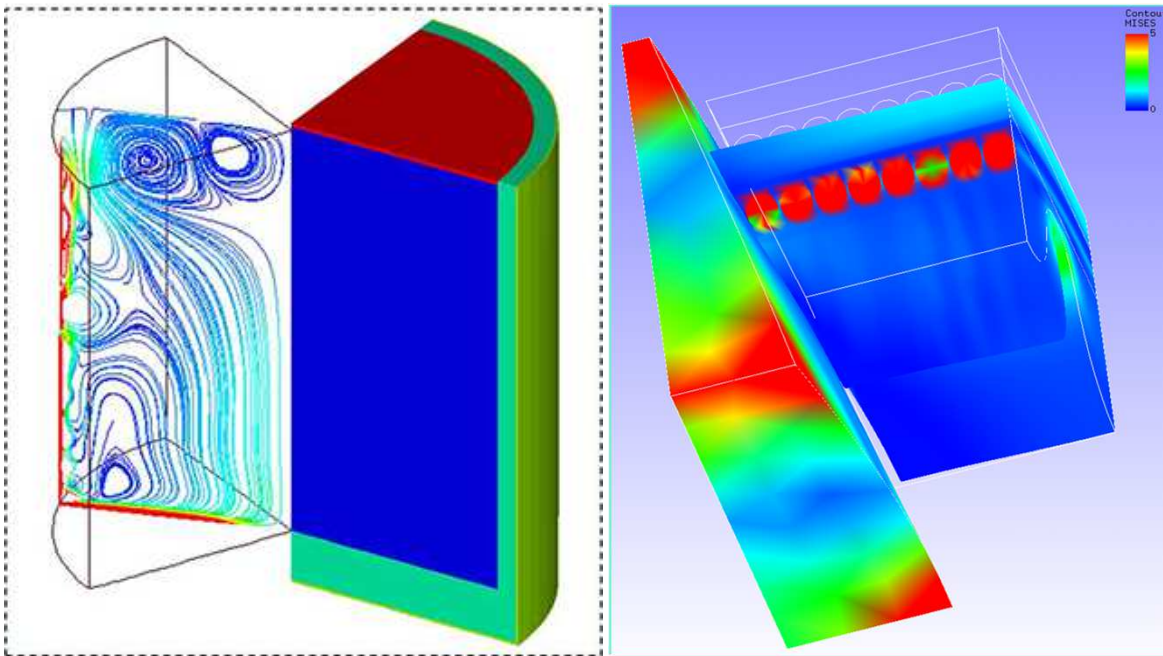


(b) 浅部遮蔽層下面

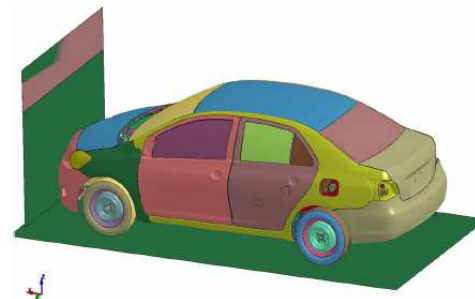
図-5 圧力上昇量の平面分布 (初期状態からの増分、圧入開始から 100 年後)

ものづくり分野(流体シミュレーション, 構造解析など)

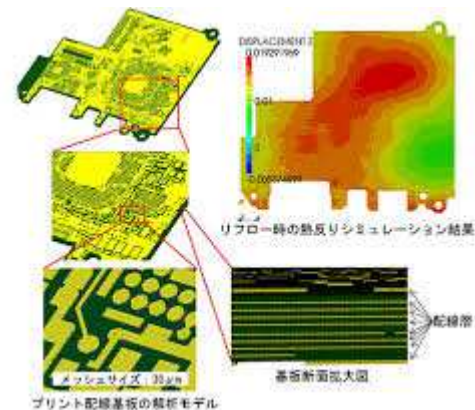
様々な大学・研究機関・企業



〔画像提供: 奥田洋司教授(東京大学新領域創成科学専攻)〕

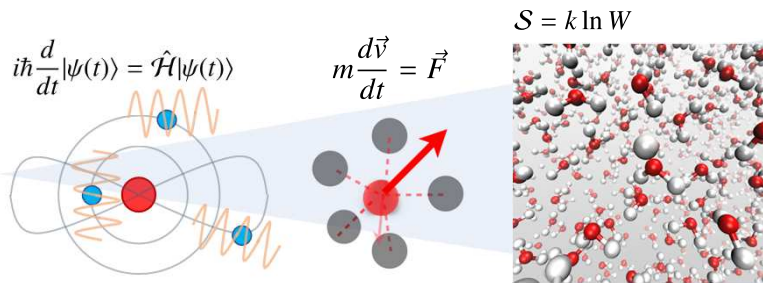


〔画像提供: 日本自動車工業会(JAMA)〕

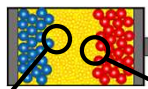


材料科学・物性科学・分子科学

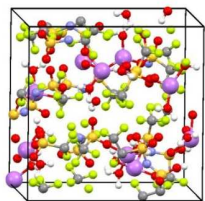
東大工, 阪大基礎工, 物質・材料研究機構 他 様々な大学・研究機関



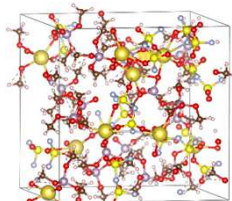
DFT-MDによる蓄電池用新型
電解液のミクロ物性解明



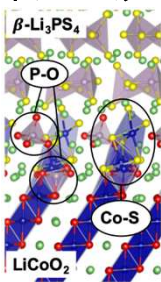
全固体電池の電極-電解質
界面のDFTミクロ解析



高濃度水系電解液
Nature Energy 2016



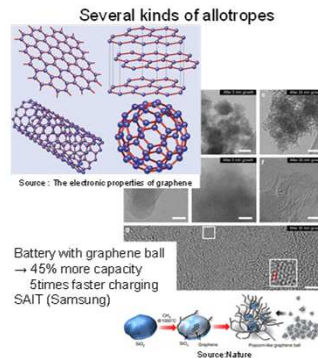
高濃度消火性電解液
Nature Energy 2018



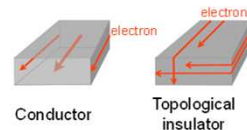
Chem. Mater. 2020

[画像提供: 山田研究室(東大工), 館山グループ(物材機構)]

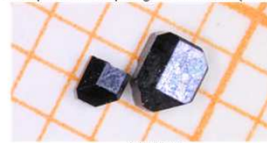
ディラック電子系・トポジカル絶縁体のtight-binding計算



A new material which has special properties
Inside: insulation Outside: Conduction

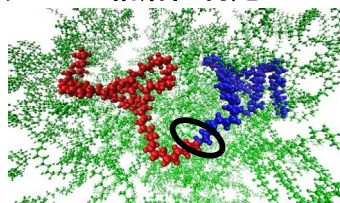


Sample of the topological insulator (SmB6)



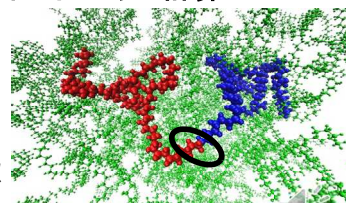
[画像提供: Gerhard Wellein教授 (FAU, Germany)]

ポリマーの相溶性判定のための全原子自由エネルギー計算



Macromolecules 2020

逐次伸張
モノマーごとの
相互作用考慮

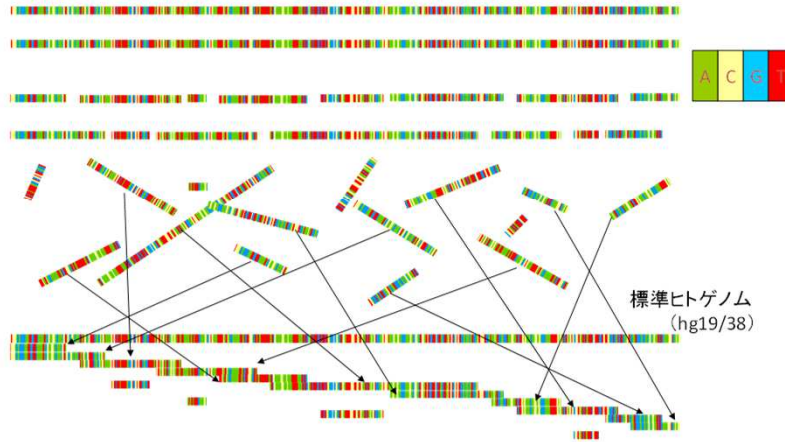


[画像提供: 松林研究室(阪大)]

バイオインフォマティックス:ゲノム解析

東大新領域創成科学研究科 等

ヒト個人ゲノムはどのよ
うに再解読するか？

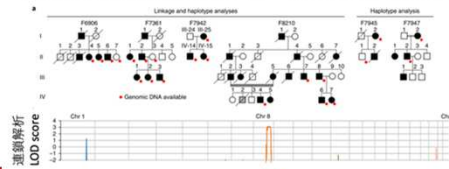


長さ 100～150 塩基のDNA 断片を 10～20億本収集(ヒト1人当たり)
接尾辞配列(suffix array), Burrows-Wheeler 変換等が活用される

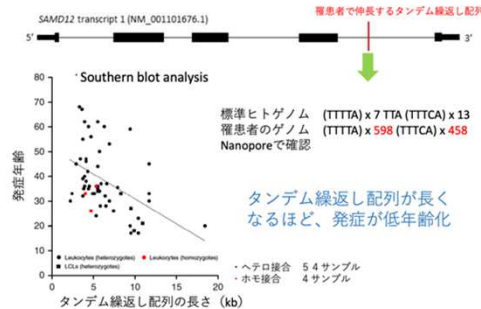
[画像提供:

森下真一教授(東京大学新領域創成科学研究科)]

良性成人型家族性ミオクロームステんかんの家系



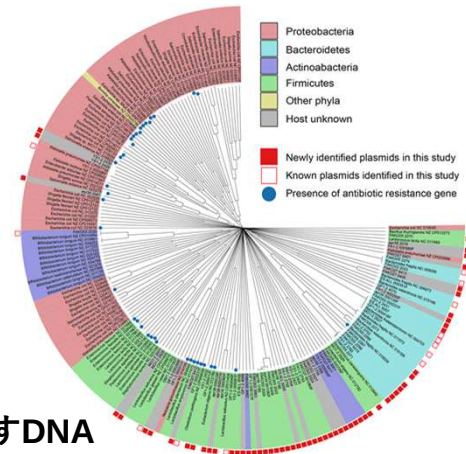
家系の連鎖解析により絞り込んだ8番染色体の領域に存在する38個遺伝子のコード領域には、原因となる1塩基変異が見つからなかった。しかしこの領域のSAMD12のイントロンに、罹患者で伸長するタンデム繰返し配列を発見。



Nature Genetics 2018

新たに発見された疾患を引き起こすDNA
の繰返し配列伸長異常: 様々な動的計画
法, de Bruijn グラフ探索等が活用

ヒト腸内細菌叢から
発見された
多様なプラスミド・
ファージ配列の全貌



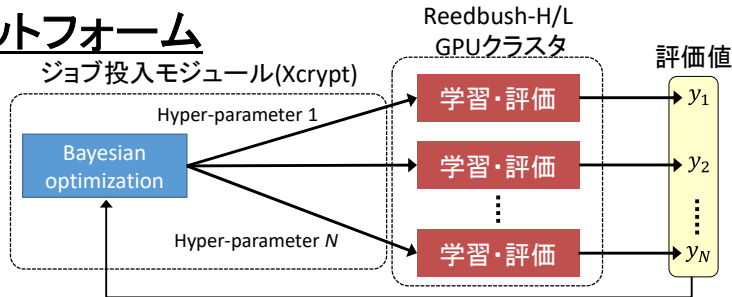
Microbiome 2019



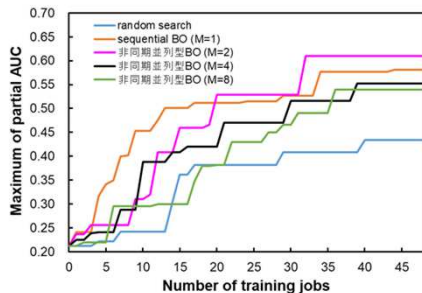
バイオフィンフォーマティクス: 医療画像処理

東大病院等

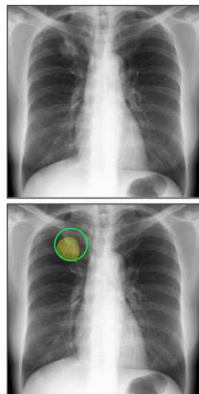
深層学習自動チューニングプラットフォーム



胸部X線写真の肺腫瘍検出



学習ジョブ数と評価値(partial AUC)の最大値との関係

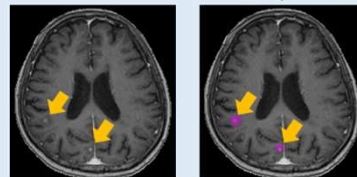


上: 元画像、下: 検出結果
(黄、緑丸: 病変領域)

開発中のソフトウェア

頭部造影MR画像の転移性脳腫瘍検出

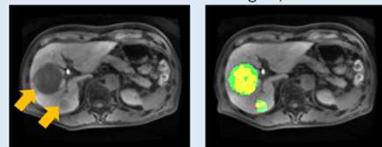
村田, JAMIT2018



検出結果例
左: 元画像、右: 検出結果(マゼンダ)

造影MR画像の肝結節性病変検出

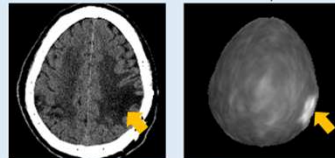
Takenaga T, CARS 2018



検出結果例
(肝細胞がん、左: 元画像、右: 検出結果)
●: 検出、●: 過検出、●: 未検出

頭部救急CT画像の異常検知

Sato D, SPIE MI 2018



脳梗塞症例
(左: 元画像、右: 異常度マップ)

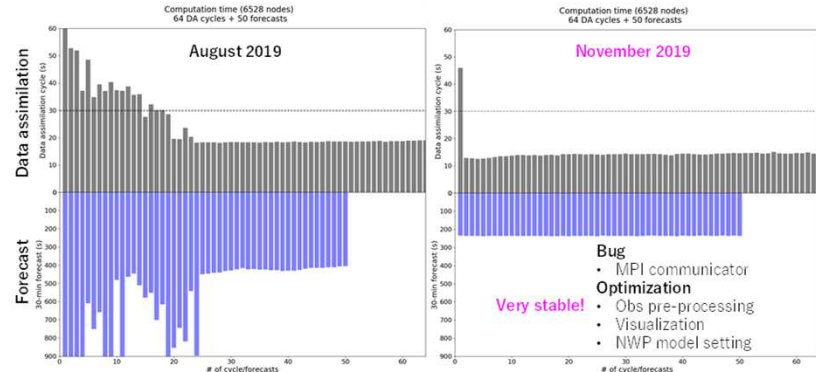
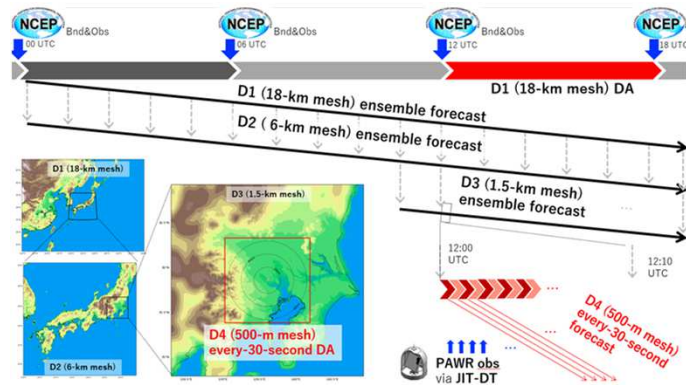
胸部X線画像の異常強調

花岡, MAIAMI 2019, JSAIMI 2020



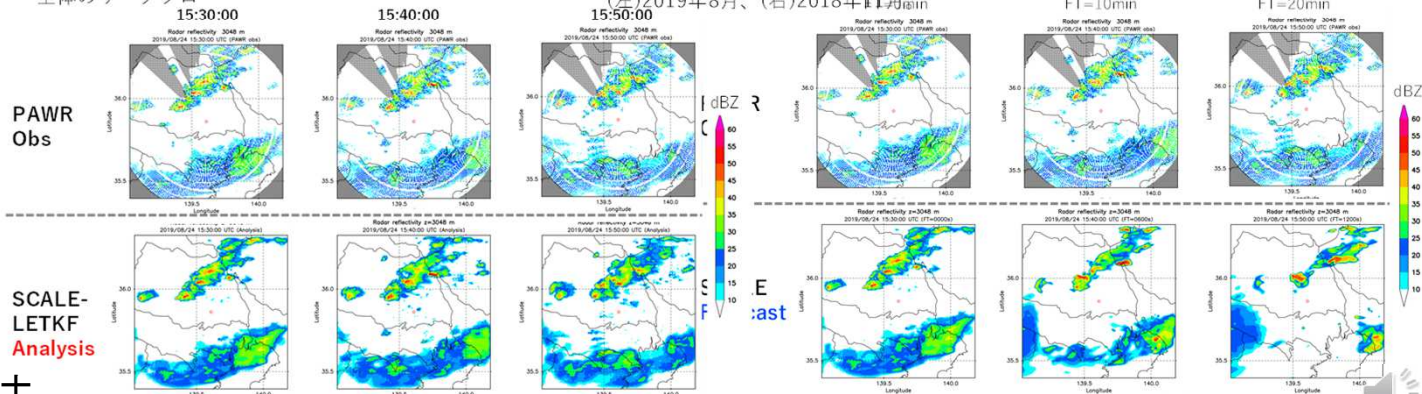
強調画像例
(左: 元画像、右: 強調結果、矢印: 肺腫瘍)

ゲリラ豪雨予測のリアルタイム実証実験 (理化学研究所)



計算性能の向上。上段はデータ同化、下段は30分予報にかかった時間(秒)。

(左)2019年8月、(右)2018年11月



2019年8月24日の事例についてのテスト結果。(上)レーダー観測と(下)SCALE-LETKFによる予報で得られたレーダー反射強度(dBZ)を示す。

〔画像提供: 三好建正博士
(理化学研究所)〕

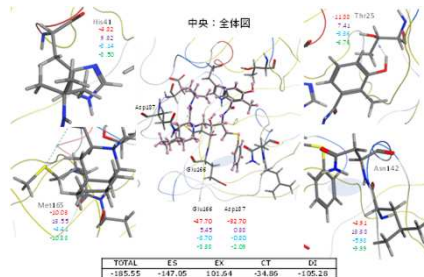
「COVID-19」対応臨時公募採択課題

全国9国立大学等のスパコンによる課題

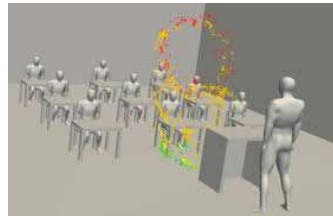
全13のうち6課題が東大システムを利用



課題名	代表者(所属)	使用システム
新型コロナウイルスの主要プロテアーゼに関するフラグメント分子軌道計算	望月 祐志 (立教大学)	OFP
COVID-19治療の候補薬: chloroquine、hydroxychloroquine、azithromycinの催不整脈リスクの評価ならびにその低減策に関する研究	久田 俊明(株式会社UT-Heart研究所 / 東大)	
新型コロナウイルス表面のタンパク質動的構造予測	杉田 有治 (理化学研究所)	
計算機解析によるSARS-CoV-2増殖阻害化合物の探索	星野 忠次 (千葉大学)	OBCX
室内環境におけるウイルス飛沫感染の予測とその対策: 富岳大規模解析に向けたケーススタディ	坪倉 誠 (神戸大学)	
Spreading of polydisperse droplets in a turbulent puff of saturated exhaled air	Marco Edoardo Rosti (OIST)	



[資料提供: 望月祐志教授(立教大学)]



[資料提供: 坪倉誠教授(神戸大学)]

- 東大情報基盤センターの現状

- ✓ スパコンシステム紹介
- ✓ 様々な利用分野
- ✓ COVID-19に対する取り組み

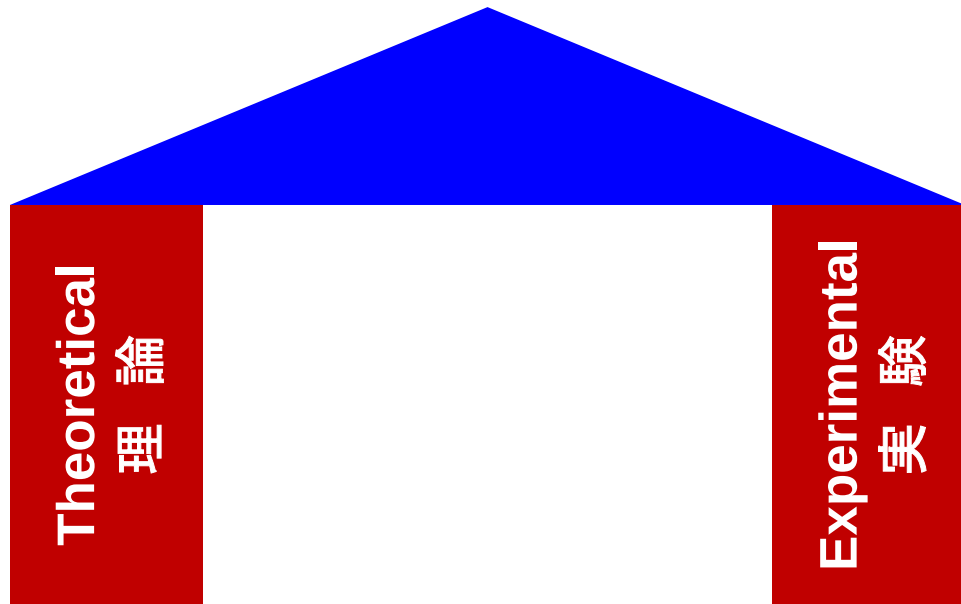
- 数値線形代数

- ✓ 第3の科学と連立一次方程式
- ✓ 行列とベクトル
- ✓ 連立一次方程式の解法と実用例



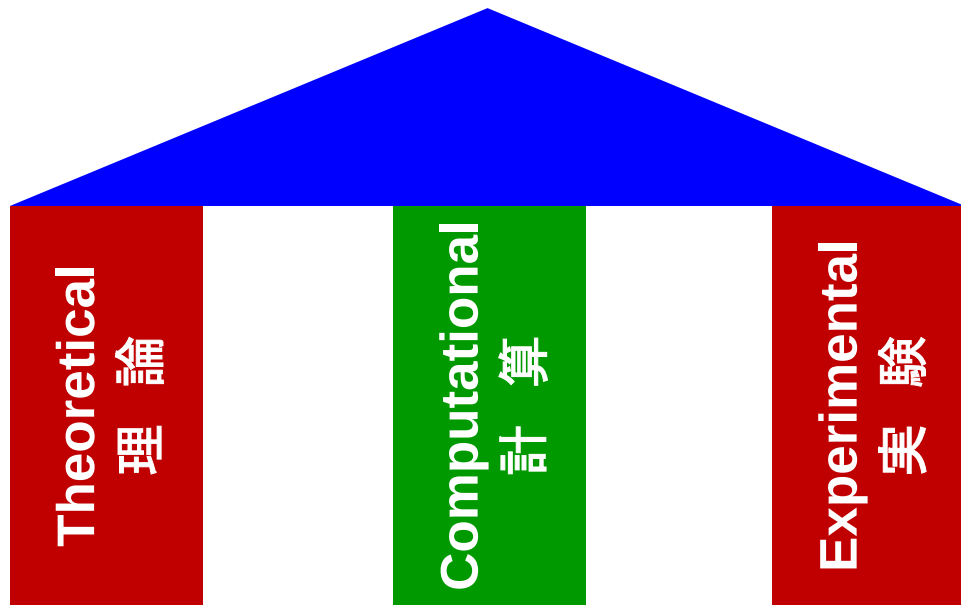
計算科学(Computational Science) = 第3の科学

- 理論(Theoretical), 実験(Experimental)に続く科学の「第3の柱」
 - 計算機, 特に大規模並列計算機(スーパーコンピュータ, スパコン)を駆使したシミュレーション



計算科学(Computational Science) = 第3の科学

- 理論(Theoretical), 実験(Experimental)に続く科学の「第3の柱」
 - 計算機, 特に大規模並列計算機(スーパーコンピュータ, スパコン)を駆使したシミュレーション



計算科学(第3の科学):スパコンによるシミュレーション に必要なこと:SMASH

- サイエンスから計算機まで幅広い知識と経験が必要 (SMASH)
 - Science 科学, 現象
 - Modeling 微分方程式, 計算モデル
 - Algorithm 数学アルゴリズム(手法・原理)
 - Software プログラム
 - Hardware 計算機本体
- 各階層は独立した専門分野
- 一人で全てやるには限界がある
 - 協力が大切
 - 協力のためには「自分の専門外についてのある程度の知識」がなければならない



Science

Modeling

Algorithm

Software

Hardware



様々な自然現象を記述する偏微分方程式

Partial Differential Equation: PDE

- 2階の偏微分方程式で記述される現象は多い: 熱, 流れ, 変形

- 楕円型

- 定常熱伝導, ポアソン・ラプラス方程式

$$\lambda \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) + Q = 0$$

- ヘルムホルツ方程式

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + k^2 u = 0$$

- 放物型

- 非定常熱伝導方程式

$$\rho c \frac{\partial u}{\partial t} = \lambda \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) + Q$$

- 双曲型

- 波動方程式

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right)$$

- 非定常移流方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = c \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) + S$$

Science

Modeling

Algorithm

Software

Hardware

感染症の数理モデル: SIRモデル: 常微分方程式

感受性保持者 (Susceptible) ・感染者 (Infected) ・免疫保持者 (Recovered) /
隔離者 (Removed)

$$\frac{dS}{dt}(t) = -\beta S(t) I(t)$$

β 感染率

γ 回復率 (隔離率)

– $1/\gamma$ は平均感染期間

$$\frac{dI}{dt}(t) = \beta S(t) I(t) - \gamma I(t)$$

$$\frac{dR}{dt}(t) = \gamma I(t)$$



偏微分方程式の解法

- 非線形方程式, 複雑形状等⇒解析解は存在しない
- 空間を, メッシュ, 格子, 粒子(mesh, grid, particle)に分割し, 計算機を使用して数値的に解くのが一般的

- 細かいメッシュほど計算量が多いが精度の良い解

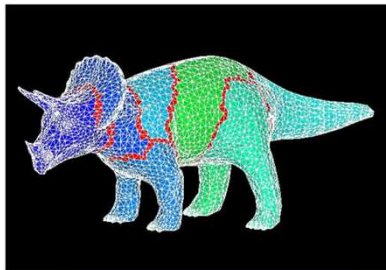
Science

Modeling

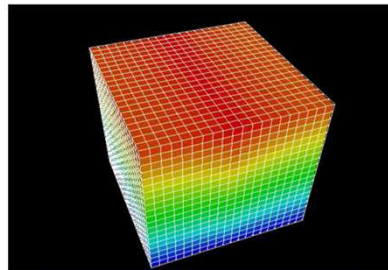
Algorithm

Software

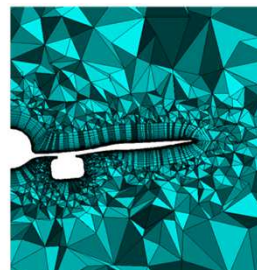
Hardware



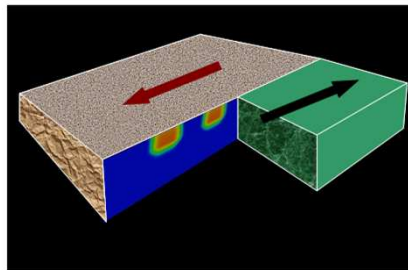
有限要素法
Finite Element Method
FEM



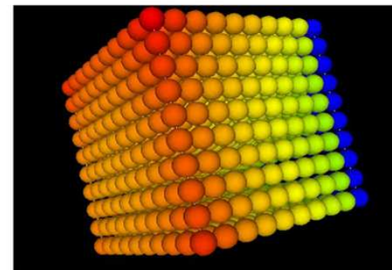
差分法
Finite Difference Method
FDM



有限体積法
Finite Volume Method
FVM



境界要素法
Boundary Element Method
BEM



個別要素法
Discrete Element Method
DEM

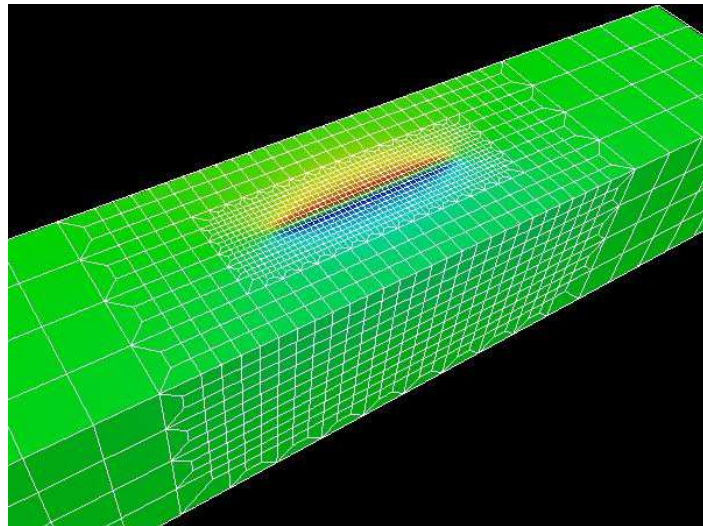
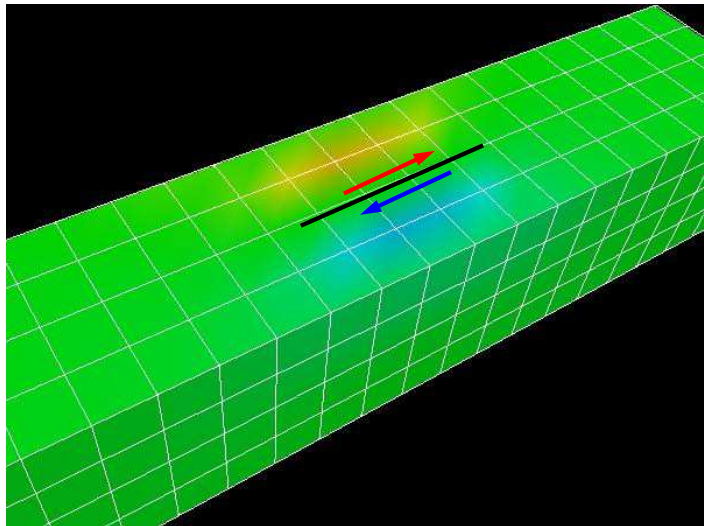


地震発生メカニズム研究：有限要素法の例

San Andreas Faults, CA, USA

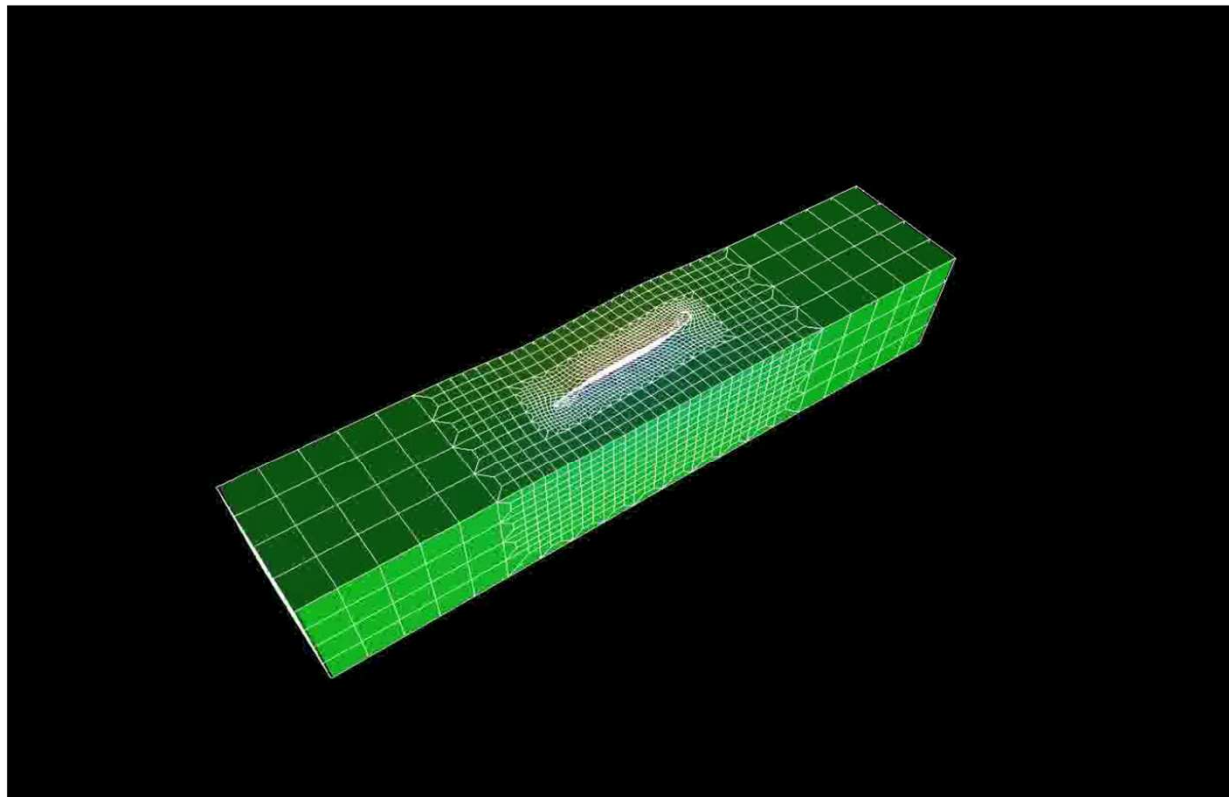
Stress Accumulation at Transcurrent Plate Boundaries

地震を引き起こす力が蓄積する断層周辺には
高解像度の細かいメッシュを適用している



変化量・力の蓄積の大きい断層周辺では高解像度の細かいメッシュが必要

[K. Nakajima, C. Hashimoto, M. Matsu'ura 2000]



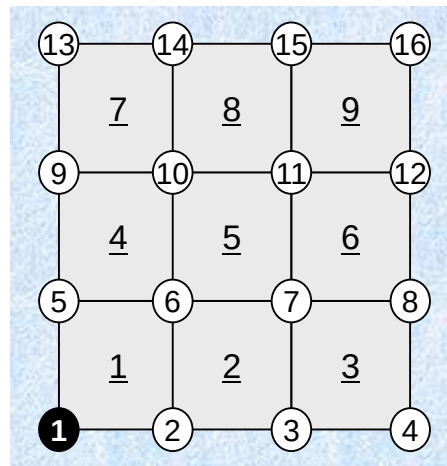
有限要素法

Finite-Element Method (FEM)

- 偏微分方程式の解法として広く知られている
 - elements (meshes, 要素) & nodes (vertices, 節点)
- 以下の二次元熱伝導問題を考える:

$$\lambda \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + Q = 0$$

- 16節点, 9要素 (四角形)
- 一様な熱伝導率 ($\lambda=1$)
- 一様な体積発熱 ($Q=1$)
- 節点1で温度固定: $T=0$
- 周囲断熱



ガラーキン法 : Galerkin FEM

- 各要素にガラーキン法を適用:

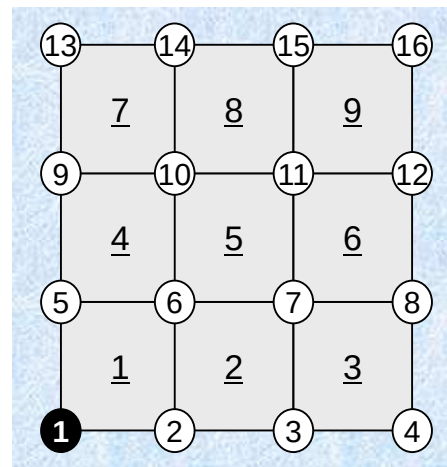
$$\int_V [N]^T \left\{ \lambda \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + Q \right\} dV = 0$$

各要素で: $T = [N]\{\phi\}$

$[N]$: 形状関数(内挿関数)

- 偏微分方程式に対して, グリーンの定理を適用し, 以下の「弱形式」を導く

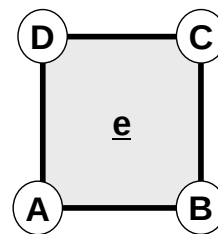
$$\begin{aligned} & - \int_V \lambda \left(\frac{\partial [N]^T}{\partial x} \frac{\partial [N]}{\partial x} + \frac{\partial [N]^T}{\partial y} \frac{\partial [N]}{\partial y} \right) dV \cdot \{\phi\} \\ & + \int_V Q [N]^T dV = 0 \end{aligned}$$



Element Matrix : 要素マトリクス

- 各要素において積分を実行し，要素マトリクスを得る

$$-\int_V \lambda \left(\frac{\partial [N]^T}{\partial x} \frac{\partial [N]}{\partial x} + \frac{\partial [N]^T}{\partial y} \frac{\partial [N]}{\partial y} \right) dV \cdot \{\phi\} + \int_V Q[N]^T dV = 0$$



$$[k^{(e)}] \{\phi^{(e)}\} = \{f^{(e)}\}$$



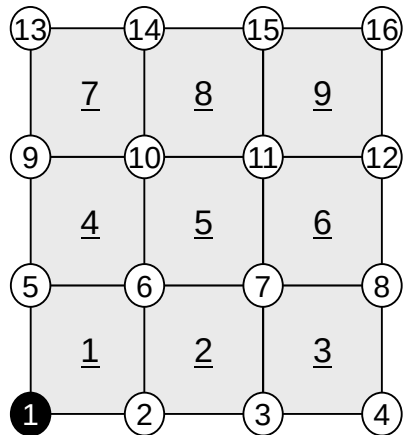
$$\begin{bmatrix} k_{AA}^{(e)} & k_{AB}^{(e)} & k_{AC}^{(e)} & k_{AD}^{(e)} \\ k_{BA}^{(e)} & k_{BB}^{(e)} & k_{BC}^{(e)} & k_{BD}^{(e)} \\ k_{CA}^{(e)} & k_{CB}^{(e)} & k_{CC}^{(e)} & k_{CD}^{(e)} \\ k_{DA}^{(e)} & k_{DB}^{(e)} & k_{DC}^{(e)} & k_{DD}^{(e)} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \phi_A^{(e)} \\ \phi_B^{(e)} \\ \phi_C^{(e)} \\ \phi_D^{(e)} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} f_A^{(e)} \\ f_B^{(e)} \\ f_C^{(e)} \\ f_D^{(e)} \end{Bmatrix}$$



Global/overall Matrix : 全体マトリクス

各要素マトリクスを全体マトリクスに足しこむ

$[K]\{\Phi\}=\{F\}$



$$\begin{bmatrix}
 D & X & & & X & X & & & & & & & & & & \\
 X & D & X & & X & X & X & & & & & & & & & \\
 & X & D & X & & X & X & X & & & & & & & & \\
 & & X & D & & X & X & & & & & & & & & \\
 X & X & & & D & X & & & X & X & & & & & & \\
 X & X & X & & X & D & X & & X & X & X & & & & & \\
 & X & X & X & & X & D & X & & X & X & X & & & & \\
 & & X & X & & & X & D & & X & X & & & & & \\
 & & & & X & X & & & D & X & & X & X & & & \\
 & & & & X & X & X & & X & D & X & & X & X & X & \\
 & & & & & X & X & X & & X & D & X & & X & X & \\
 & & & & & & X & X & & & X & D & X & & X & \\
 & & & & & & & X & X & & & X & D & X & & \\
 & & & & & & & & X & X & & & X & D & & \\
 & & & & & & & & & X & X & & & X & D & \\
 & & & & & & & & & & X & X & & & X & D
 \end{bmatrix}
 \begin{Bmatrix}
 \Phi_1 \\
 \Phi_2 \\
 \Phi_3 \\
 \Phi_4 \\
 \Phi_5 \\
 \Phi_6 \\
 \Phi_7 \\
 \Phi_8 \\
 \Phi_9 \\
 \Phi_{10} \\
 \Phi_{11} \\
 \Phi_{12} \\
 \Phi_{13} \\
 \Phi_{14} \\
 \Phi_{15} \\
 \Phi_{16}
 \end{Bmatrix}
 =
 \begin{Bmatrix}
 F_1 \\
 F_2 \\
 F_3 \\
 F_4 \\
 F_5 \\
 F_6 \\
 F_7 \\
 F_8 \\
 F_9 \\
 F_{10} \\
 F_{11} \\
 F_{12} \\
 F_{13} \\
 F_{14} \\
 F_{15} \\
 F_{16}
 \end{Bmatrix}$$



得られた大規模連立一次方程式を解く

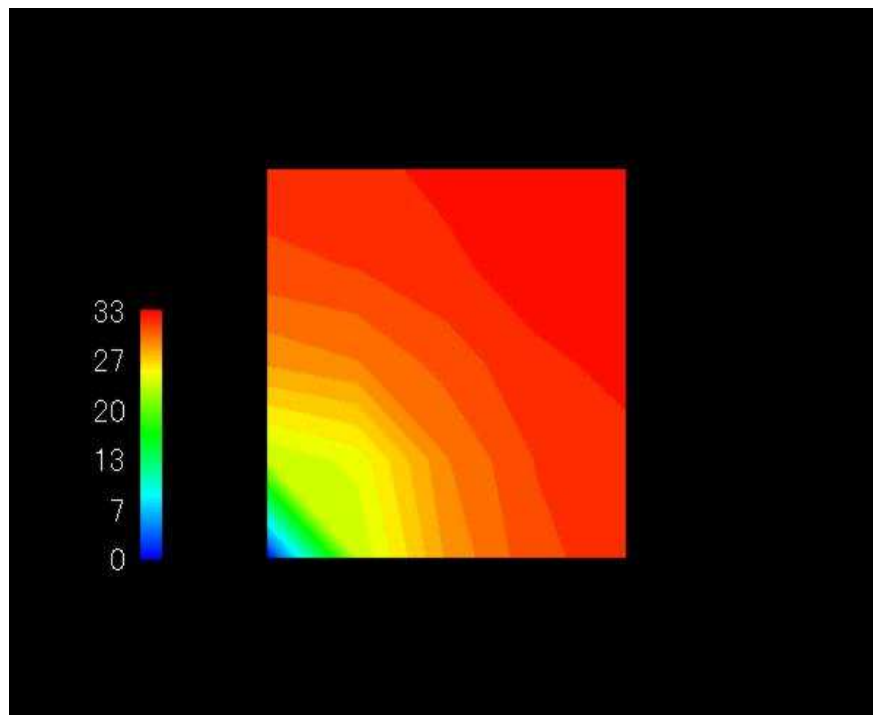
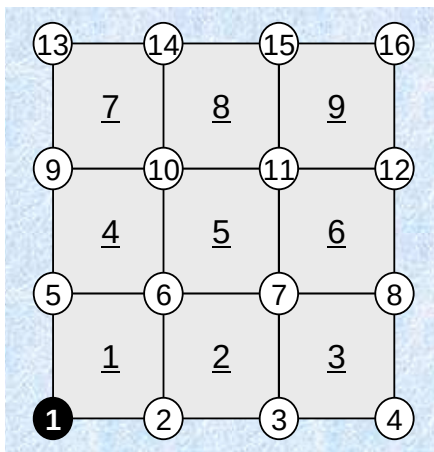
ある適切な境界条件 (ここでは $\Phi_1=0$)を適用

$$\begin{bmatrix}
 D & X & & & X & X & & & & & & & & & & & \\
 X & D & X & & X & X & X & & & & & & & & & & \\
 & & X & D & X & & X & X & X & & & & & & & \\
 & & & X & D & & & X & X & & & & & & & \\
 X & X & & & D & X & & & X & X & & & & & & \\
 X & X & X & & X & D & X & & X & X & X & & & & & \\
 & & X & X & X & & X & D & X & & X & X & X & & & \\
 & & & X & X & & & X & D & & & X & X & & & \\
 & & & & X & X & & & D & X & & & X & X & & \\
 & & & & & X & X & X & & X & D & X & & & & \\
 & & & & & & X & X & X & & X & D & X & & & \\
 & & & & & & & X & X & X & & X & D & X & & \\
 & & & & & & & & X & X & & & X & D & X & \\
 & & & & & & & & & X & X & & & X & D & \\
 & & & & & & & & & & X & X & & & X & D
 \end{bmatrix}
 \begin{Bmatrix}
 \Phi_1 \\
 \Phi_2 \\
 \Phi_3 \\
 \Phi_4 \\
 \Phi_5 \\
 \Phi_6 \\
 \Phi_7 \\
 \Phi_8 \\
 \Phi_9 \\
 \Phi_{10} \\
 \Phi_{11} \\
 \Phi_{12} \\
 \Phi_{13} \\
 \Phi_{14} \\
 \Phi_{15} \\
 \Phi_{16}
 \end{Bmatrix}
 =
 \begin{Bmatrix}
 F_1 \\
 F_2 \\
 F_3 \\
 F_4 \\
 F_5 \\
 F_6 \\
 F_7 \\
 F_8 \\
 F_9 \\
 F_{10} \\
 F_{11} \\
 F_{12} \\
 F_{13} \\
 F_{14} \\
 F_{15} \\
 F_{16}
 \end{Bmatrix}$$

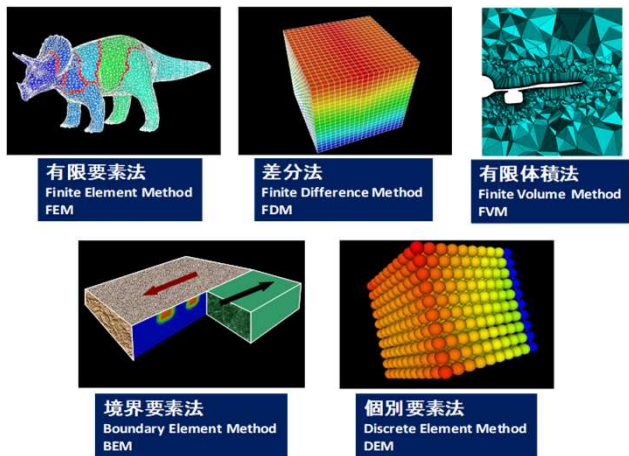


計算結果

$$\lambda \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + Q = 0$$



最後は結局、
連立一次方程式を解くこと
に行き着く



局所的方法
差分方程式

局所的方法
微分方程式

条件的方法
停留条件式

全体的方法
積分方程式

ガラーキン法

変分法
リッツ法

積分方程式法

差分法

有限要素法

境界要素法

連立一次方程式

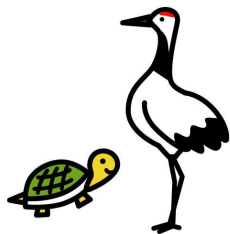


偏微分方程式の数値解法⇒連立一次方程式

- 有限要素法に代表される偏微分方程式の数値解法
 - 最終的には個々のメッシュが満たす式を重ね合わせて得られる大規模な連立一次方程式を解く必要がある, 計算時間の殆どがこの求解に費やされるため高速に安定に求解することが非常に重要
- 数値線形代数 (Numerical Linear Algebra)
 - 連立一次方程式を計算機を使って解くことを研究する学問 (SMASHの「A」) ⇒ 鶴亀算
- 鶴と亀の合計が10匹, 足の数の合計が28本
 - 鶴と亀は何匹ずつ?
 - 鶴は2本足: x_1 匹, 亀は4本足: x_2 匹

$$x_1 + x_2 = 10$$

$$2x_1 + 4x_2 = 28$$



Science

Modeling

Algorithm

Software

Hardware

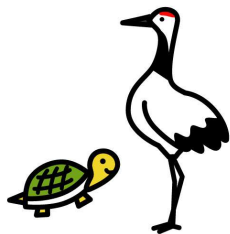


偏微分方程式の数値解法⇒連立一次方程式

- 有限要素法に代表される偏微分方程式の数値解法
 - 最終的には個々のメッシュが満たす式を重ね合わせて得られる大規模な連立一次方程式を解く必要がある, 計算時間の殆どがこの求解に費やされるため高速に安定に求解することが非常に重要
- 数値線形代数 (Numerical Linear Algebra)
 - 連立一次方程式を計算機を使って解くことを研究する学問⇒鶴亀算
- 鶴と亀の合計が10匹, 足の数の合計が28本
 - 鶴と亀は何匹ずつ?
 - 鶴は2本足: x_1 匹, 亀は4本足: x_2 匹

$$x_1 + x_2 = 10$$

$$2x_1 + 4x_2 = 28$$



$$x_1 = 6, x_2 = 4$$

鶴

亀



- 連立一次方程式は「行列 (Matrix)」と「ベクトル」で表すとわかりやすい
- しかし、最近の高校数学では「行列」を教えていないようだ



- 東大情報基盤センターの現状

- ✓ スパコンシステム紹介
- ✓ 様々な利用分野
- ✓ COVID-19に対する取り組み

- 数値線形代数

- ✓ 第3の科学と連立一次方程式
- ✓ 行列とベクトル
- ✓ 連立一次方程式の解法と実用例



行列とベクトル(1/4)

- 連立一次方程式の求解に必要な, 行列(Matrix), ベクトル(Vector)について簡単に説明しておこう
 - 「行列・ベクトル」は筆者が高校生だった約40年前は高2の数学(数Ⅱ)で勉強していた
- 下記のような未知数 n 個の n 元一次方程式を考える(x_i : 未知数, a_{ij} : 係数(既知), b_j : 右辺(既知), $1 \leq i, j \leq n$):

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n &= b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n &= b_2 \\ &\vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n &= b_n \end{aligned}$$

- 「行列」とは, 数や記号や式などを「行(Row)」と「列(Column)」に沿って矩形状に配列したものである



行列とベクトル(2/4): 連立一次方程式

- ベクトルは, n 個の変数の組で, 上記の連立一次方程式の未知数 x_i , 右辺 b_j をまとめて, 未知数ベクトル, 右辺ベクトルとして扱うことができる。
- ここで下記のように係数行列 (Coefficient Matrix) : A , 右辺ベクトル: b , 未知数ベクトル: x を定義すると, 前頁の連立一次方程式は行列とベクトルの積によって $Ax=b$ と表すことができる。

$$\begin{array}{c}
 \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}
 \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}
 =
 \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} \\
 \mathbf{A} \qquad \mathbf{x} \qquad \mathbf{b}
 \end{array}$$



行列とベクトルの演算

- 行列ベクトル積

第2行

$$\begin{bmatrix} a & a & a & a \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a & a & a & a \\ a & a & a & a \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y \\ y_2 \\ y \\ y \end{bmatrix}$$

$$a_{21} \times x_1 + a_{22} \times x_2 + a_{23} \times x_3 + a_{24} \times x_4 = y_2$$

- 行列・行列積

第3列

第2行

$$\begin{bmatrix} a & a & a & a \\ a & a & a & a \\ a & a & a & a \\ a & a & a & a \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b & b & b & b \\ b & b & b & b \\ b & b & b & b \\ b & b & b & b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c & c & c & c \\ c & c & c_{23} & c \\ c & c & c & c \\ c & c & c & c \end{bmatrix}$$



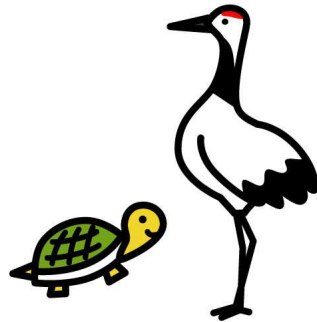
鶴亀算を「行列」を使って解く

- 鶴と亀の合計が10匹，足の数の合計が28本，鶴と亀は何匹ずつ？
- 鶴は2本足： x_1 匹，亀は4本足： x_2 匹

$$\begin{aligned} x_1 + x_2 &= 10 \\ 2x_1 + 4x_2 &= 28 \end{aligned}$$

$$Ax = b, \quad A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}$$

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 10 \\ 28 \end{bmatrix}$$



- Cramerの公式

$$x_i = \frac{\det(A_i)}{\det(A)} \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

$\det(A)$: A の行列式

A_i : A の i 列目を b で置き換えた行列

$$\det \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} = a_{11} \times a_{22} - a_{12} \times a_{21}$$



$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10 \\ 28 \end{bmatrix} \quad x_i = \frac{\det(A_i)}{\det(A)} \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

$$x_1 = \frac{\det \begin{bmatrix} \boxed{10} & 1 \\ 28 & 4 \end{bmatrix}}{\det \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}} = \frac{10 \times 4 - 1 \times 28}{1 \times 4 - 1 \times 2} = \frac{12}{2} = 6$$

$$\therefore \det \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} = a_{11} \times a_{22} - a_{12} \times a_{21}$$

$$x_2 = \frac{\det \begin{bmatrix} 1 & \boxed{10} \\ 2 & 28 \end{bmatrix}}{\det \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}} = \frac{1 \times 28 - 10 \times 2}{1 \times 4 - 1 \times 2} = \frac{8}{2} = 4$$

Cramerの公式は一見簡単そうだが未知数が多くなると計算量が膨大になるため、実問題では絶対に使われない(N個の未知数に対してO(N³)の演算)

鶴亀算くらいに使うのが丁度良い。

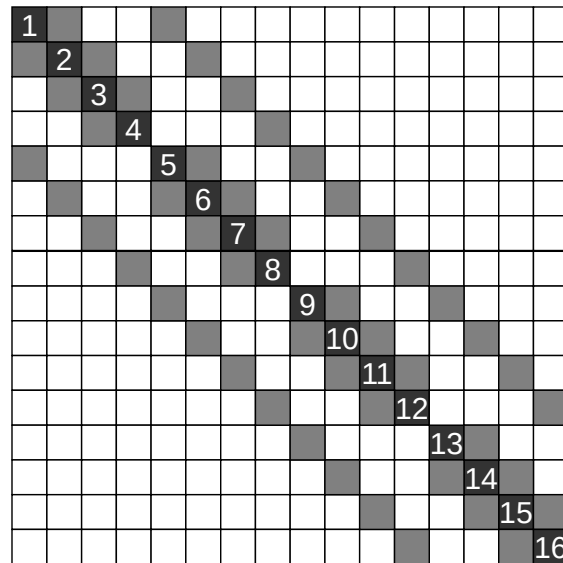
$$x_1 = 6, x_2 = 4$$

鶴 亀



行列とベクトル(3/4): 単位行列・逆行列

■ 対角成分
 ■ 非ゼロ非対角成分
 □ ゼロ成分



- 対角成分(a_{ii})が全て1, 他の成分が全て0となるような行列を「単位行列 (Identity Matrix)」と呼ぶ
 - 任意のベクトルに単位行列を乗じてもベクトルは不変である。
 - 単位行列は I と書かれることが多い
- $AX=I$ が成立するとき行列 X は A の逆行列 (Inverse Matrix) A^{-1} であると言う。
 - 逆行列は一般の数値演算における逆数に相当する。

$$I = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$



鶴亀算を「逆行列」を使って解く

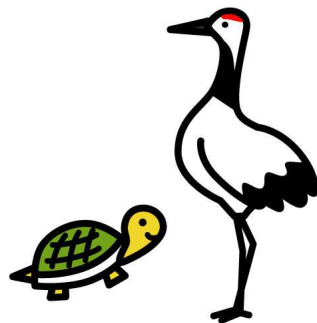
- 鶴と亀の合計が10匹，足の数の合計が28本，鶴と亀は何匹ずつ？
- 鶴は2本足： x_1 匹，亀は4本足： x_2 匹

$$x_1 + x_2 = 10$$

$$2x_1 + 4x_2 = 28$$

$$Ax = b, \quad A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}$$

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 10 \\ 28 \end{bmatrix}$$



- 逆行列の公式

$$A^{-1} = \frac{1}{\det(A)} \begin{bmatrix} a_{22} & -a_{12} \\ -a_{21} & a_{11} \end{bmatrix} = \frac{1}{a_{11} \times a_{22} - a_{12} \times a_{21}} \begin{bmatrix} a_{22} & -a_{12} \\ -a_{21} & a_{11} \end{bmatrix}$$

$$Ax = b \Rightarrow A^{-1}Ax = A^{-1}b \Rightarrow (A^{-1}A)x = A^{-1}b \Rightarrow x = A^{-1}b$$



$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10 \\ 28 \end{bmatrix} \quad \mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{1 \times 4 - 1 \times 2} \begin{bmatrix} 4 & -1 \\ -2 & 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 4 & -1 \\ -2 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 4 & -1 \\ -2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 4 \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 4 \times 1 - 1 \times 2 & 4 \times 1 - 1 \times 4 \\ -2 \times 1 + 1 \times 2 & -2 \times 1 + 1 \times 4 \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \mathbf{I} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b} = \mathbf{x} &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 4 & -1 \\ -2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 10 \\ 28 \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 4 \times 10 - 1 \times 28 \\ -2 \times 10 + 1 \times 28 \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 12 \\ 8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 \\ 4 \end{bmatrix} \begin{matrix} \text{鶴} \\ \text{亀} \end{matrix} \end{aligned}$$

単位行列

これも実は計算量多い(N個の未知数に対して $O(N^3)$ の演算), Nが増えると大変



行列とベクトル(4/4): 固有値

- $Ax = \lambda x$ ($x \neq 0$) が成立するとき, λ を行列 A の固有値 (Eigenvalue), ベクトル x を固有値に対応する固有ベクトル (Eigenvector) と呼ぶ
- 固有値, 固有ベクトルとその分布は行列の性質を表し, A が連立一次方程式の係数行列の場合には, 解きやすさ, 解きにくさの指標となる
 - 固有振動数とも関係する

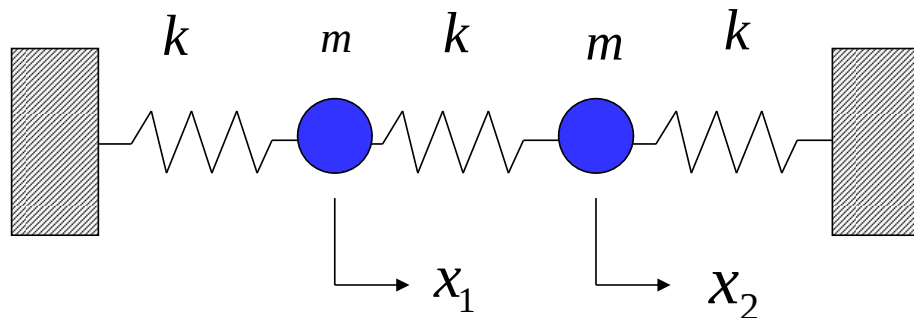
$$Ax = \lambda x, \quad x \neq 0$$

λ 固有値 (eigenvalue)

x 固有ベクトル (eigenvector)



行列の固有値問題の例(1/2)



運動方程式

$$kx_1 + k(x_1 - x_2) = -m\ddot{x}_1$$

$$k(x_2 - x_1) + kx_2 = -m\ddot{x}_2$$



$$\frac{d}{dt^2} \mathbf{x} = \begin{bmatrix} -2k/m & k/m \\ k/m & -2k/m \end{bmatrix} \mathbf{x} \quad \mathbf{x} \equiv \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{Bmatrix}$$



行列の固有値問題の例(2/2)

$$\frac{d}{dt^2} \mathbf{x} = - \begin{bmatrix} 2k/m & -k/m \\ -k/m & 2k/m \end{bmatrix} \mathbf{x} \quad \longrightarrow \quad \mathbf{A} \equiv \begin{bmatrix} 2k/m & -k/m \\ -k/m & 2k/m \end{bmatrix}$$

$\mathbf{x} \equiv \mathbf{a}e^{j\omega t}$ 振動的な解を仮定



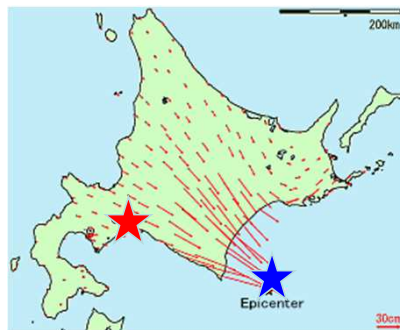
ω (固有円振動数) = $2\pi \times$ 固有振動数:
自乗すると固有値

$$\mathbf{A}\mathbf{a} = \omega^2 \mathbf{a}$$



2003年 十勝沖地震

長周期地震波動(表面波): 苫小牧の石油タンクが激しく揺れ, 金具がこすれた火花が, 液面揺動(スロッシング)する石油に引火して大火災に

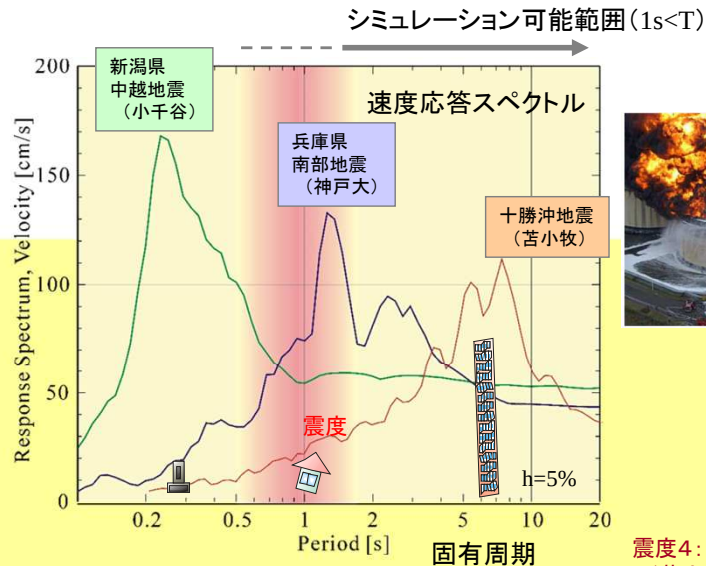
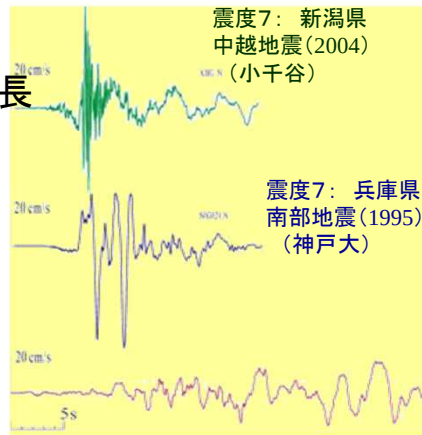


地震波：様々な波長の成分の合成

- 卓越成分と同じ固有周期の建物がもっとも激しく揺れる：一種の「共鳴」
 - 建物等人工構造物の固有周期(振動周期)は0.1~10 sec 大きな建物ほど大きい
 - 長周期の波は長く続き、遠くまで届く：測定場所によってもスペクトル分布は異なる

– どの成分が卓越的になるか、というメカニズムは実は良くわかっていない(地下構造不均質性, 破壊箇所特性)

- 中越(2004)短
- 神戸(1995)中
- 十勝沖(2003)長

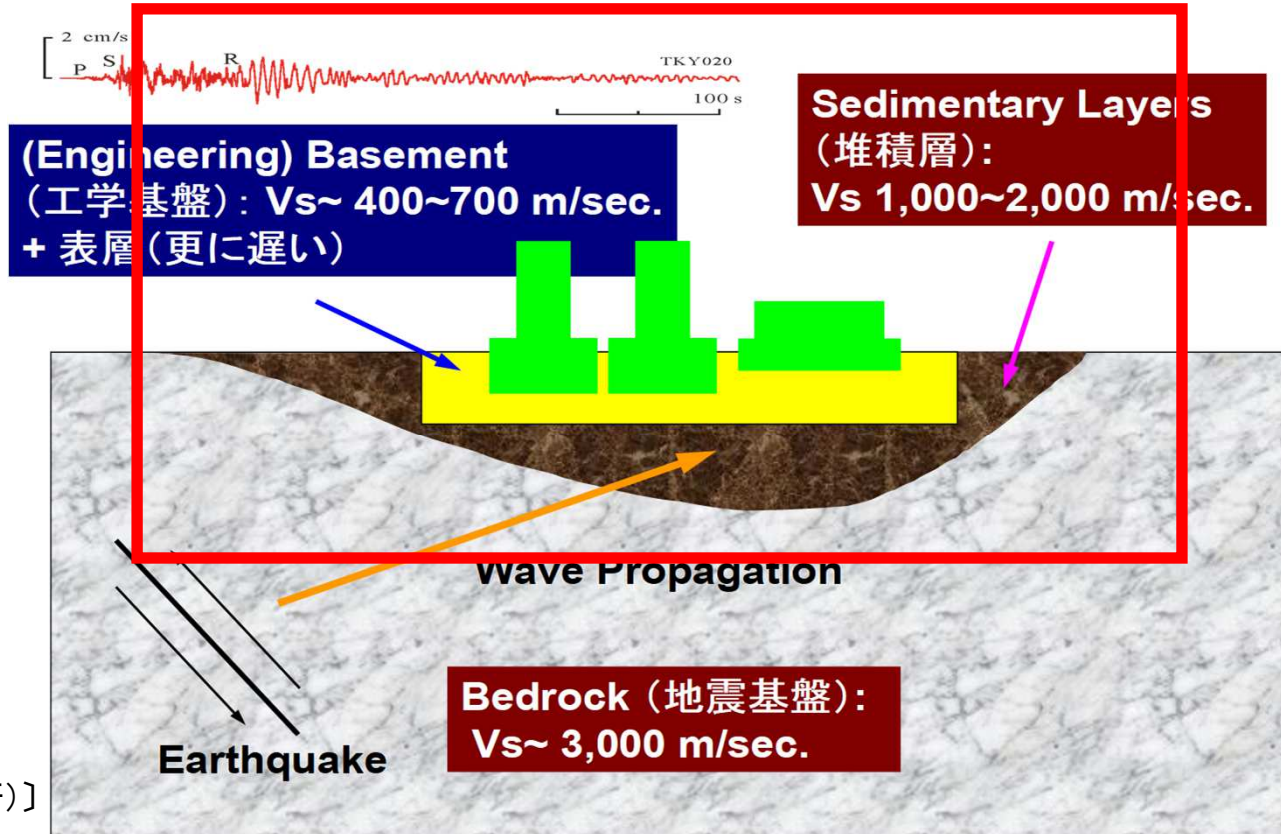


震度4：十勝沖地震(2003)
(苫小牧)

〔画像提供：
古村孝志教授
(東大・地震研)〕



地盤・石油タンク振動連成シミュレーション

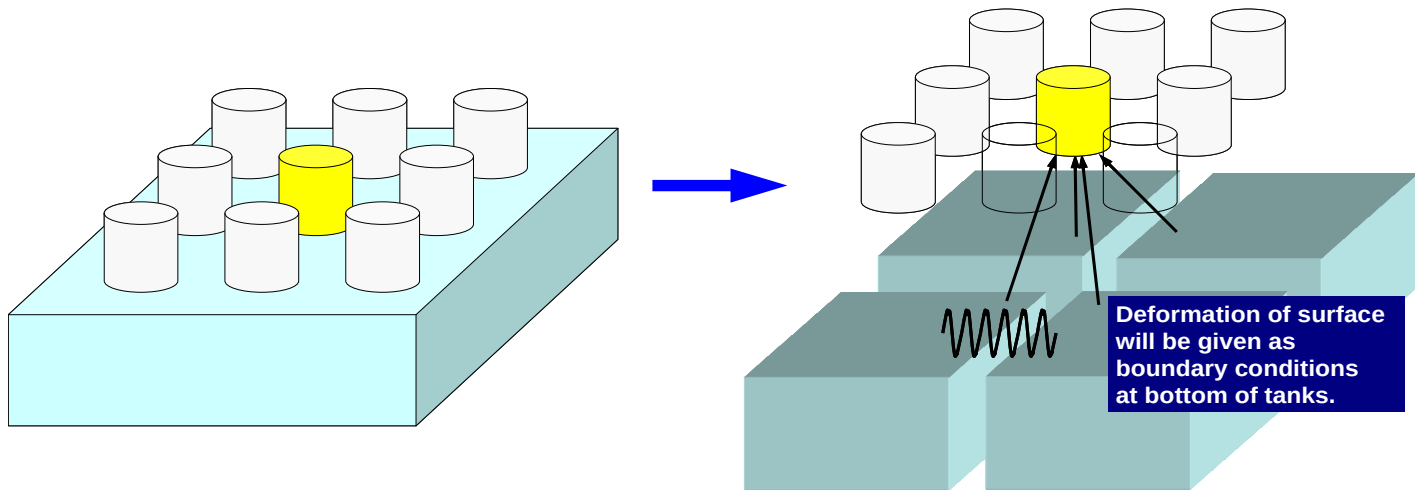


[画像提供:
市村強教授
(東大・地震研)]

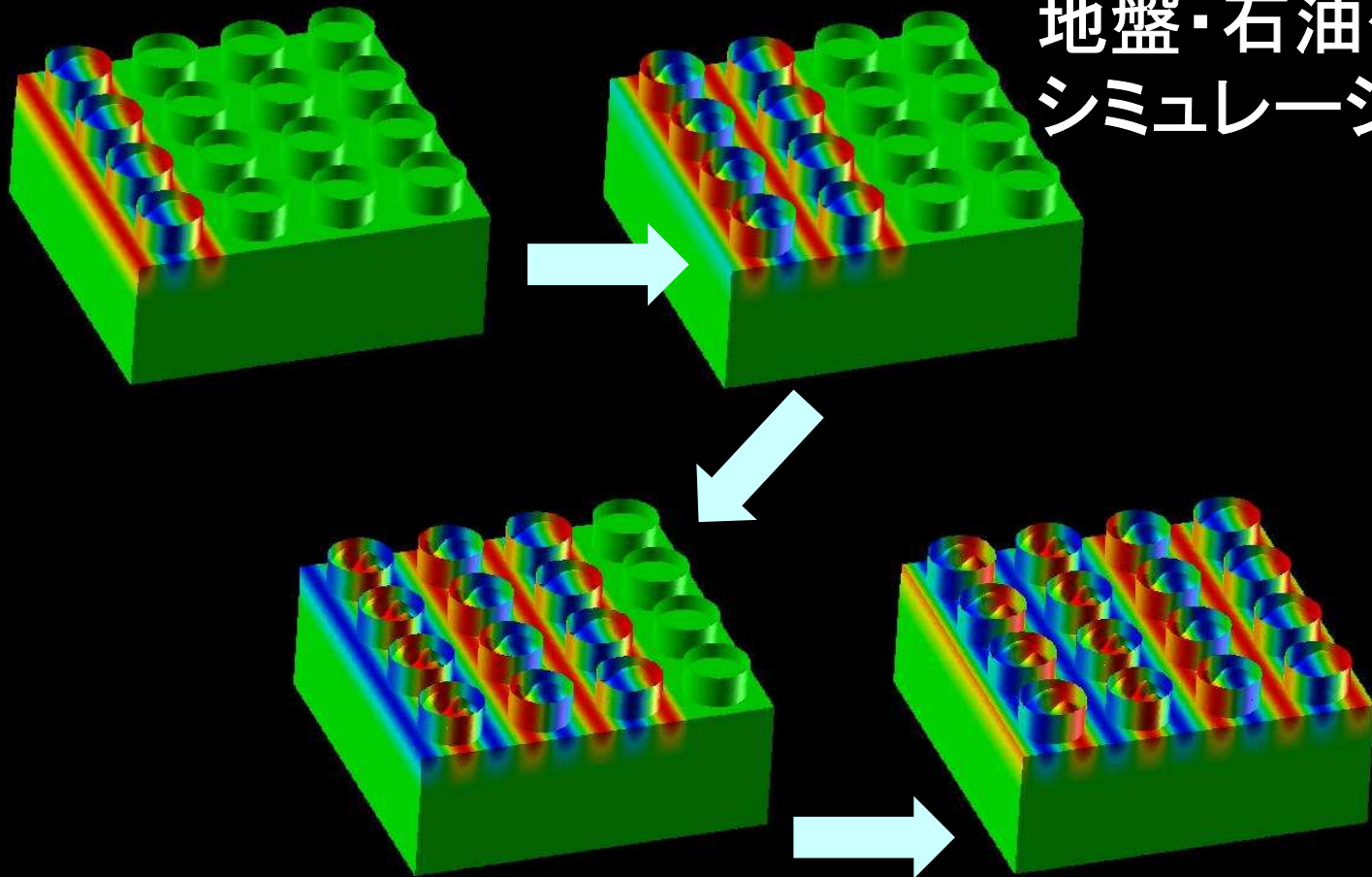


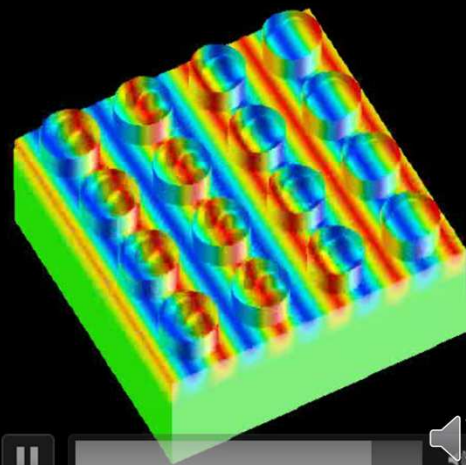
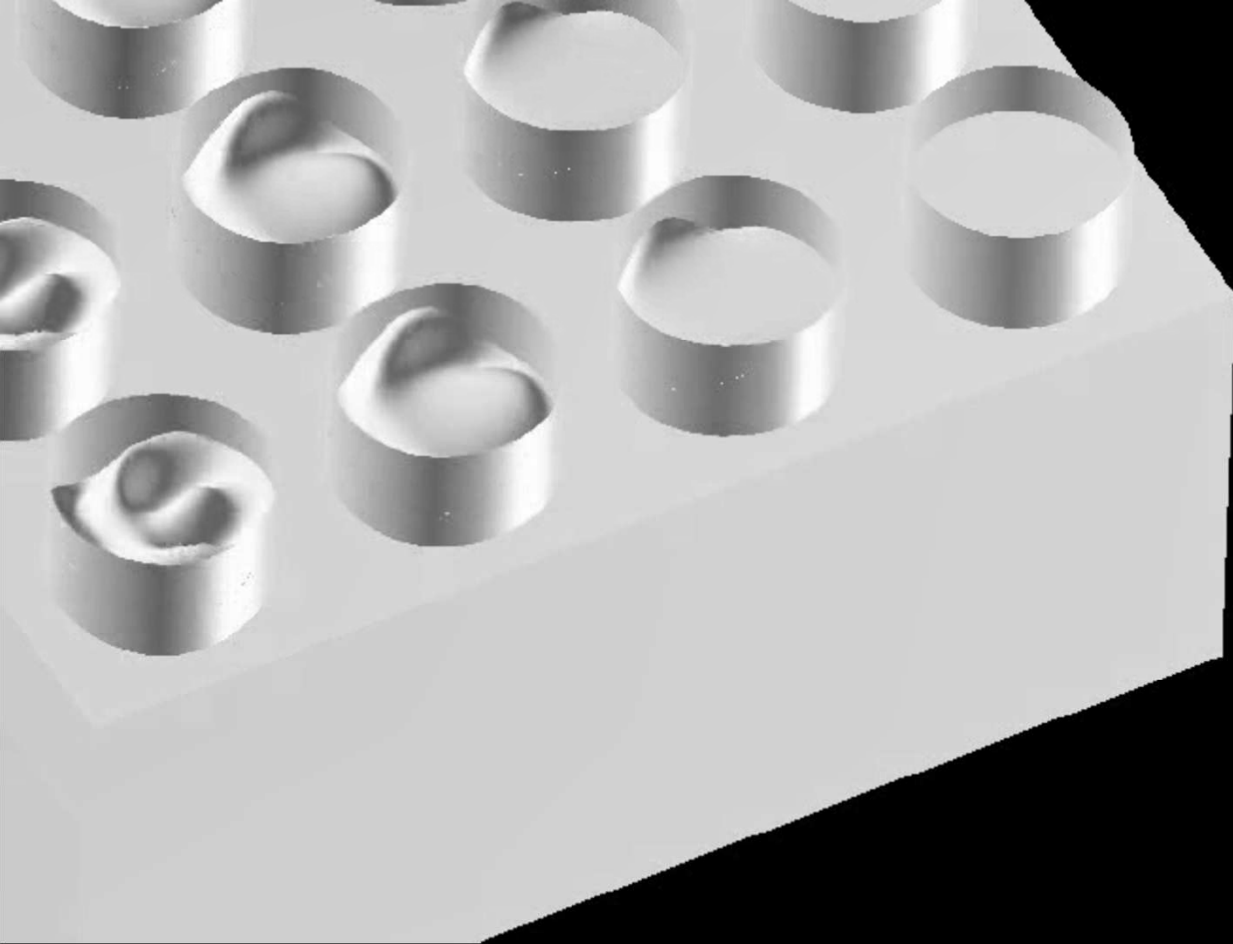
対象とするアプリケーション

- 地盤・石油タンク振動
 - 地盤⇒タンクへの「一方向」連成
 - 地盤表層の変位 ⇒ タンク底面の強制変位として与える
- 地盤: 並列有限要素法
- タンク: 有限要素法 (各タンクは独立に1プロセッサで計算 (非並列))



地盤・石油タンク連成 シミュレーション

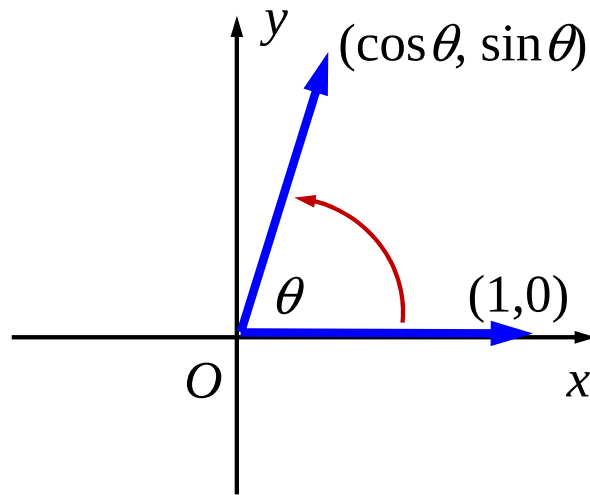
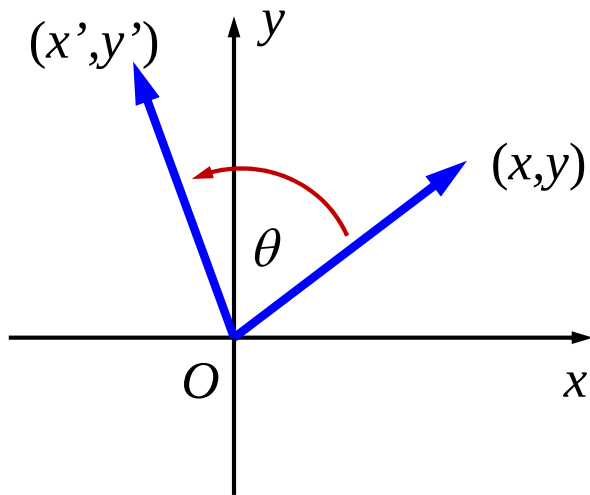




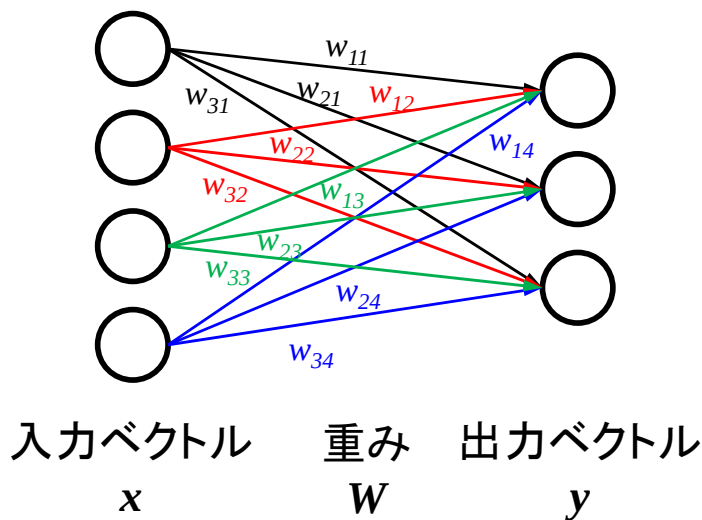
行列の応用: ベクトルの回転(二次元)

行列をかける処理: 一次変換(線形変換)

$$\begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \cos \theta - y \sin \theta \\ x \sin \theta + y \cos \theta \end{pmatrix} \quad \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix}$$



一次変換(線形変換)とニューラルネットワーク



$$Wx = y$$

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix}, \quad y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix}$$

$$W = \begin{bmatrix} w_{11} & w_{12} & w_{13} & w_{14} \\ w_{21} & w_{22} & w_{23} & w_{24} \\ w_{31} & w_{32} & w_{33} & w_{34} \end{bmatrix}$$

- 人工知能で使用する「ニューラルネットワーク」の計算の基本は、パラメータと重みのかけ算の足し合わせ⇒一次変換(線形変換)



- 東大情報基盤センターの現状

- ✓ スパコンシステム紹介
- ✓ 様々な利用分野
- ✓ COVID-19に対する取り組み

- 数値線形代数

- ✓ 第3の科学と連立一次方程式
- ✓ 行列とベクトル
- ✓ 連立一次方程式の解法と実用例



数値線形代数: Numerical Linear Algebra

- 連立一次方程式を計算機を使って解くことを研究する学問
- 偏微分方程式の数値解法等による計算科学シミュレーションは、一般に、最終的に大規模連立一次方程式 $Ax=b$ を解くことに帰着される。
 - 重要かつ時間がかかる
 - 計算時間全体の90%以上を占めることもある: 計算性能も重要
- 2種類の解法
 - 直接法 (Direct Method)
 - 反復法 (Iterative Method)



直接法(Direct Method)

- Gaussの消去法, 完全LU分解
 - 逆行列 A^{-1} を直接求める, または同等の計算を実施する
 - 「Cramerの公式」も直接法の一つ
- 利点
 - 安定, 幅広いアプリケーションに適用可能
 - Partial Pivoting
 - 疎行列, 密行列いずれにも適用可能
- 欠点
 - 反復法よりもメモリ, 計算時間を必要とする
 - 密行列の場合, $O(N^3)$ の計算量
 - 大規模な計算向けではない
 - $O(N^2)$ の記憶容量, $O(N^3)$ の計算量



反復法とは . . .

Linear Equations
連立一次方程式

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

A **x** **b**

Initial Solution
初期解

$$\mathbf{x}^{(0)} = \begin{pmatrix} x_1^{(0)} \\ x_2^{(0)} \\ \vdots \\ x_n^{(0)} \end{pmatrix}$$

適当な初期解 $\mathbf{x}^{(0)}$ から始めて, 繰り返し計算によって真の解に収束 (converge) させていく $\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots$



共役勾配法 (Conjugate Gradient, CG) : 反復法

未知数がN個の場合N回以内に収束することが理論的に証明されている:
 実際の問題ではそうは行かない(丸め誤差)

```

Compute  $r^{(0)} = b - [A]x^{(0)}$ 
for  $i = 1, 2, \dots$ 
   $z^{(i-1)} = r^{(i-1)}$ 
   $\rho_{i-1} = r^{(i-1)} z^{(i-1)}$ 
  if  $i=1$ 
     $p^{(1)} = z^{(0)}$ 
  else
     $\beta_{i-1} = \rho_{i-1} / \rho_{i-2}$ 
     $p^{(i)} = z^{(i-1)} + \beta_{i-1} p^{(i-1)}$ 
  endif
   $q^{(i)} = [A]p^{(i)}$ 
   $\alpha_i = \rho_{i-1} / p^{(i)} q^{(i)}$ 
   $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i p^{(i)}$ 
   $r^{(i)} = r^{(i-1)} - \alpha_i q^{(i)}$ 
  check convergence  $|r|$ 
end
  
```

- 行列ベクトル積
- ベクトル内積
- ベクトル定数倍の加減

$x^{(i)}$: ベクトル

α_i : スカラー

Top 10 Algorithms in the 20th Century (SIAM)

<http://www.siam.org/news/news.php?id=637>

モンテカルロ法, シンプレックス法,

クリロフ部分空間法 (CG法等の反復法), 行列分解法,

最適化Fortranコンパイラ, QR法,

クイックソート, FFT,

整数関係アルゴリズム, FMM (高速多重極法)



前処理(preconditioning)とは？

- 反復法の収束(解きやすさ)は係数行列の固有値分布に依存
 - 固有値分布が少なく、かつ1に近いほど収束が早い(単位行列)
 - 条件数(condition number) = 最大最小固有値比(対称行列の場合)
 - 条件数が1に近いほど収束しやすい
 - 条件数が大きいと共役勾配法でN回以内に収束しない可能性アリ
- もとの係数行列 A に良く似た前処理行列 M を適用することによって固有値分布を改善する。
 - $Ax=b$ を解く代わりに, $M^{-1}Ax=M^{-1}b$ を解く
 - $M^{-1}A$ が単位行列 I に近くなる(かも知れない)

$$Ax = b \Rightarrow M^{-1}Ax = M^{-1}b \quad (M^{-1}A \sim I)$$



二酸化炭素地下貯留シミュレーション

三次元多相流れ+物質移動

〔画像提供:
山本肇博士(大成建設)〕

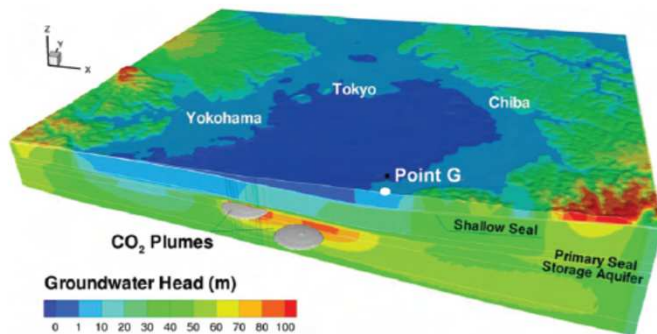
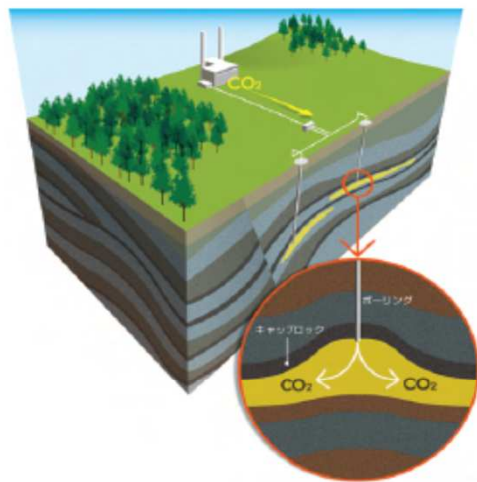
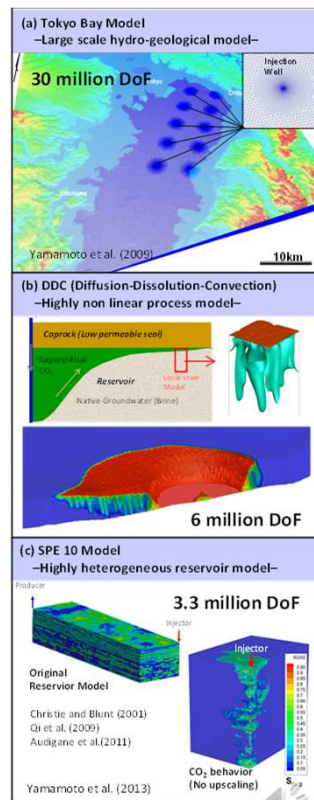
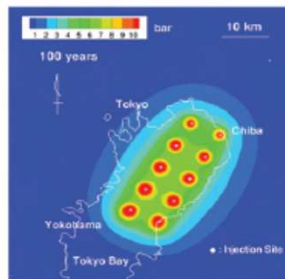
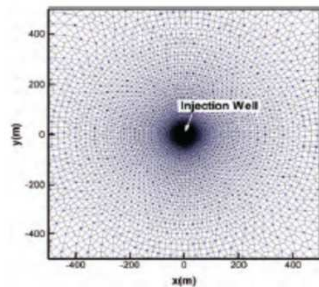


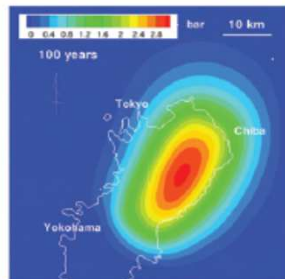
図-4 CO₂ 圧入後の地下水圧 (全水頭換算) の分布 (100 年後)



※DOF: degrees of freedom



(a) 深部遮蔽層下面



(b) 浅部遮蔽層下面

図-5 圧力上昇量の平面分布 (初期状態からの増分、圧入開始から 100 年後)

実用事例： CO₂地下貯留 シミュレーション

Science

Modeling

Algorithm

Software

Hardware

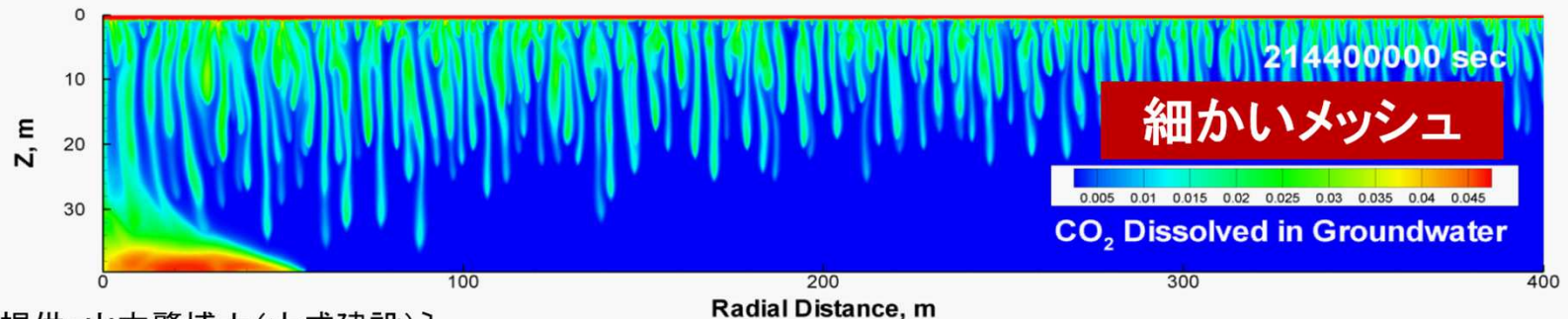
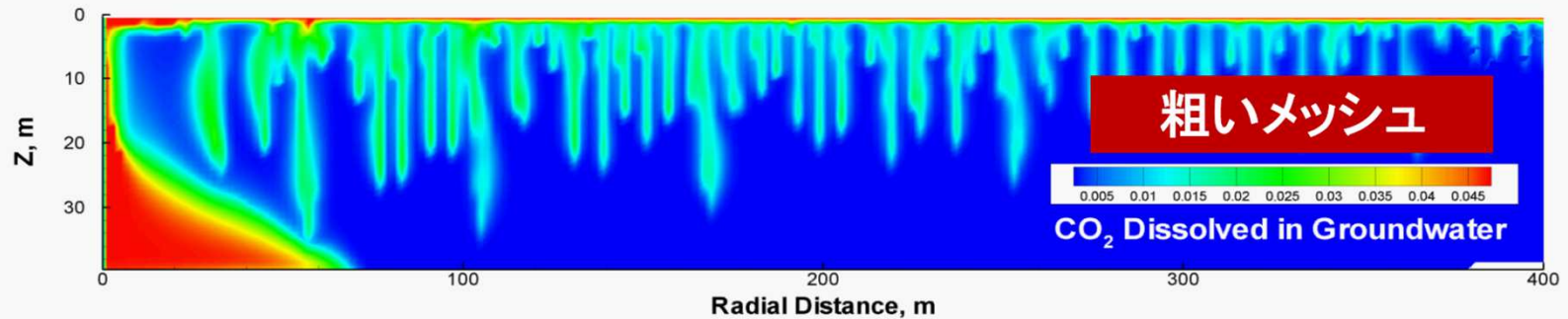
- CO₂を地下水(1km以深, 超臨界状態(Supercritical State))に貯留⇒温暖化ガス削減に寄与
 - 大成建設, 海洋研究開発機構, NEC, 東大情報基盤センター, 米国立Lawrence Berkeley研究所による共同研究・協力
 - 2010年度地盤工学会地盤環境賞受賞
- Science
 - 地下深部における超臨界状態のCO₂の挙動
- Modeling・Algorithm・Software
 - 三次元多相流れ(液体・気体)＋三次元物質移動方程式
 - 非線形性強い, 長期間(1,000年単位)の計算必要
 - TOUGH2: 有限体積法による多相流れ・物質移動・化学反応シミュレータ(地下水)(米国立Lawrence Berkeley研究所)
 - 計算時間の90%以上が連立一次方程式求解
 - 高速連立一次方程式ソルバー(東大情報基盤センター)
 - 並列前処理付き反復法(BiCGSTAB)
- Hardware
 - 地球シミュレータ(海洋研究開発機構, NEC), FX10(東大)



CO₂が地下水に溶けていく様子

正確な予測のためには細かいメッシュが必要⇒
大規模な計算モデル, 連立一次方程式

三次元多相流れ（気液）
＋物質移動, という非常に
複雑で難しい問題

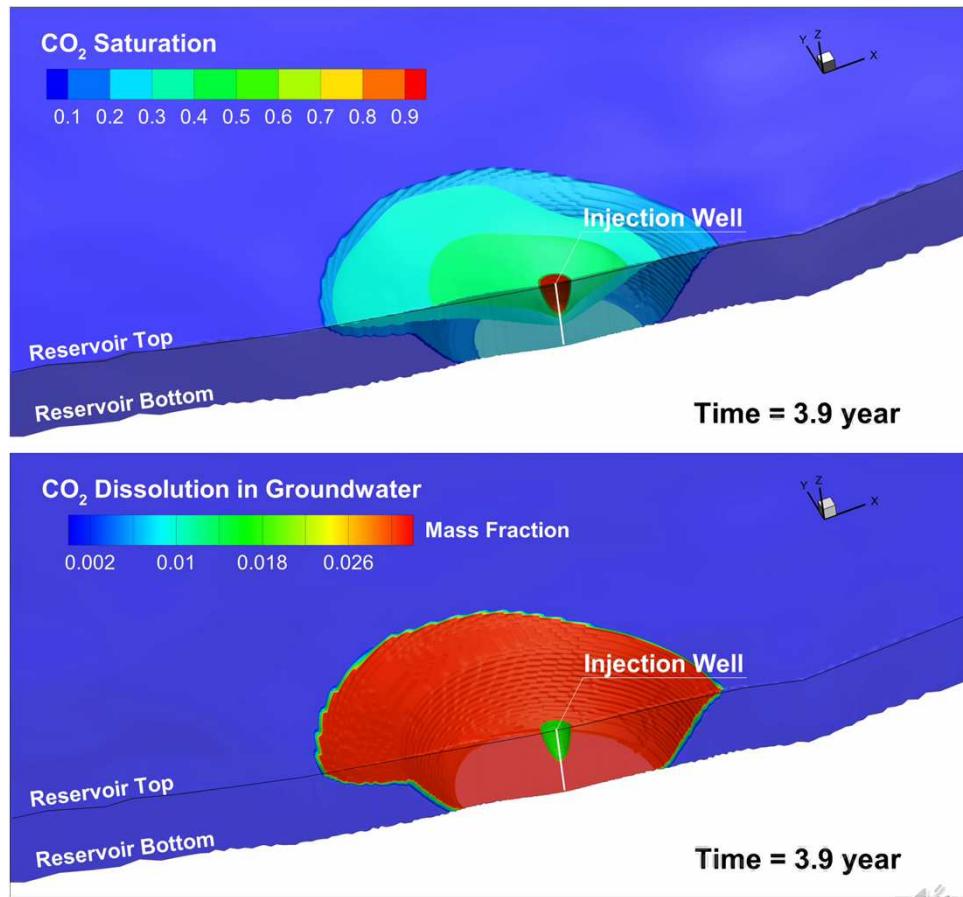


Density convections for 1,000 years: Flow Model

Only the far side of the vertical cross section passing through the injection well is depicted.

Reservoir Condition

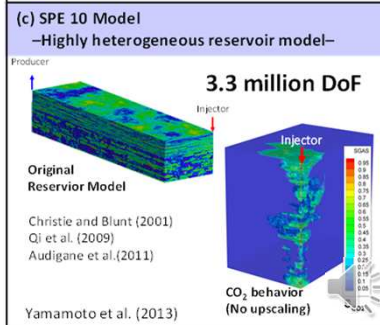
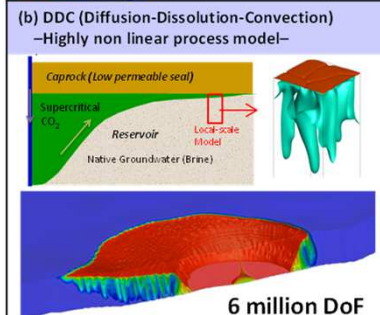
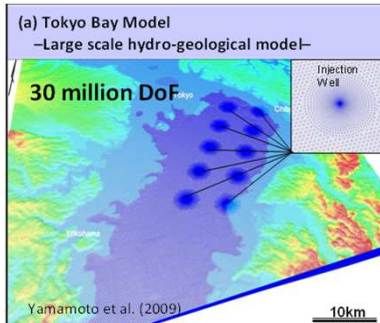
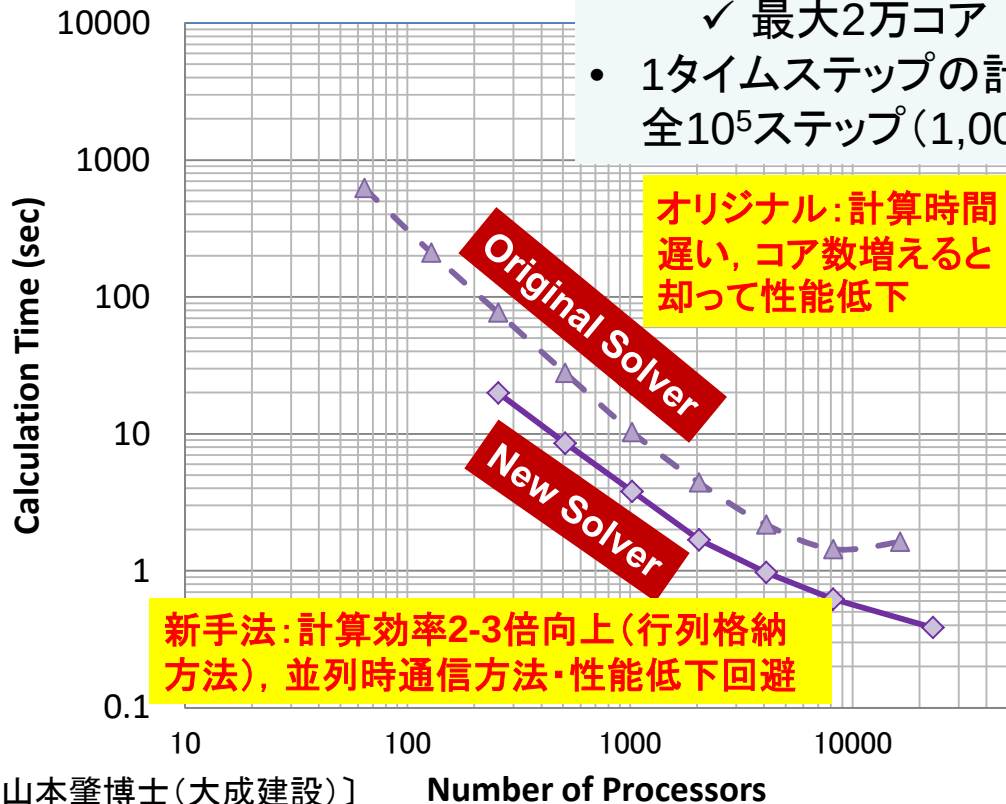
- Permeability: 100 md
- Porosity: 20%
- Pressure: 3MPa
- Temperature: 100°C
- Salinity: 15wt%
- The meter-scale fingers gradually developed to larger ones in the field-scale model
- Huge number of time steps ($> 10^5$) were required to complete the 1,000-yr simulation
- Onset time (10-20 yrs) is comparable to theoretical (linear stability analysis, 15.5yrs)



大規模計算結果

連立一次方程式解法の影響大

- 約3千万自由度
- 前処理付BiCGSTAB法
- Fujitsu FX10 (Oakleaf-FX)
 - ✓ 最大2万コア
- 1タイムステップの計算時間, 全 10^5 ステップ(1,000年)

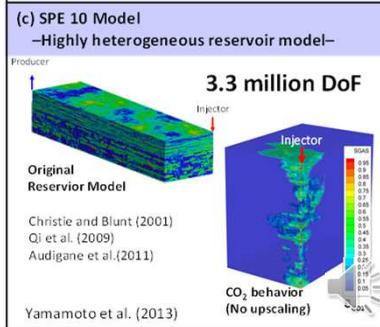
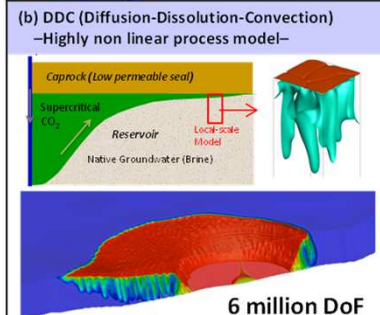
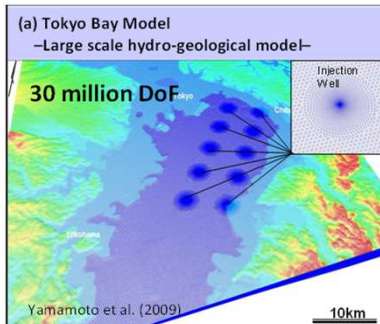
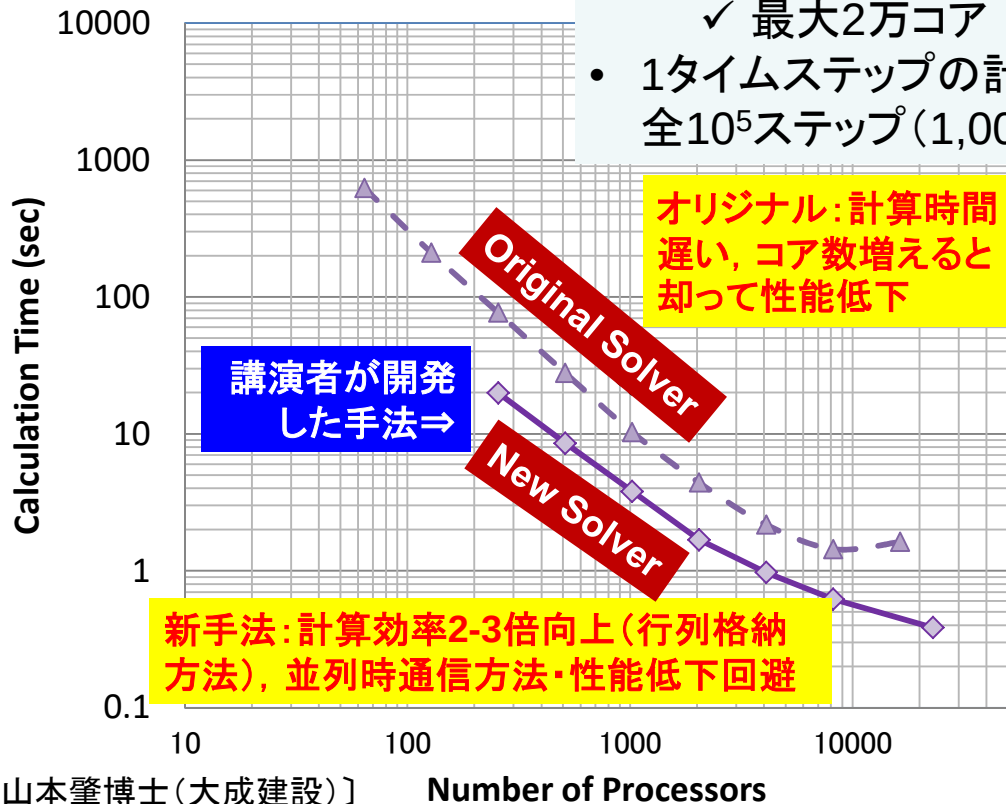


※DOF: degrees of freedom

大規模計算結果

連立一次方程式解法の影響大

- 約3千万自由度
- 前処理付BiCGSTAB法
- Fujitsu FX10 (Oakleaf-FX)
 - ✓ 最大2万コア
- 1タイムステップの計算時間, 全 10^5 ステップ(1,000年)



※DOF: degrees of freedom

- 第3の科学：計算科学，シミュレーション
- 偏微分方程式の数値解法等による計算科学シミュレーションは，一般に，最終的に大規模連立一次方程式 $Ax=b$ を解くことに帰着される。
 - 重要かつ時間がかかる
 - 計算時間全体の90%以上を占めることもある
- 数値線形代数（Numerical Linear Algebra）
 - 連立一次方程式を計算機を使って解くことを研究する学問
- 高速な連立一次方程式解法によって，計算科学による新たな科学的発見の促進，加速が期待される
 - CO₂地下貯留シミュレーションの事例
 - 数学，応用数学の計算科学への貢献