



スーパーコンピューティングへの招待

スパコンへの数学・スパコンへの算数

「行列・ベクトル」を勉強しよう！

中島 研吾
東京大学情報基盤センター

2024年10月



東京大学
THE UNIVERSITY OF TOKYO



東京大学情報基盤センター
INFORMATION TECHNOLOGY CENTER, THE UNIVERSITY OF TOKYO

- 第3の科学: 計算科学
- スーパーコンピュータとは
- シミュレーションと連立一次方程式
- 行列とベクトル
- 数値線形代数とその実用例

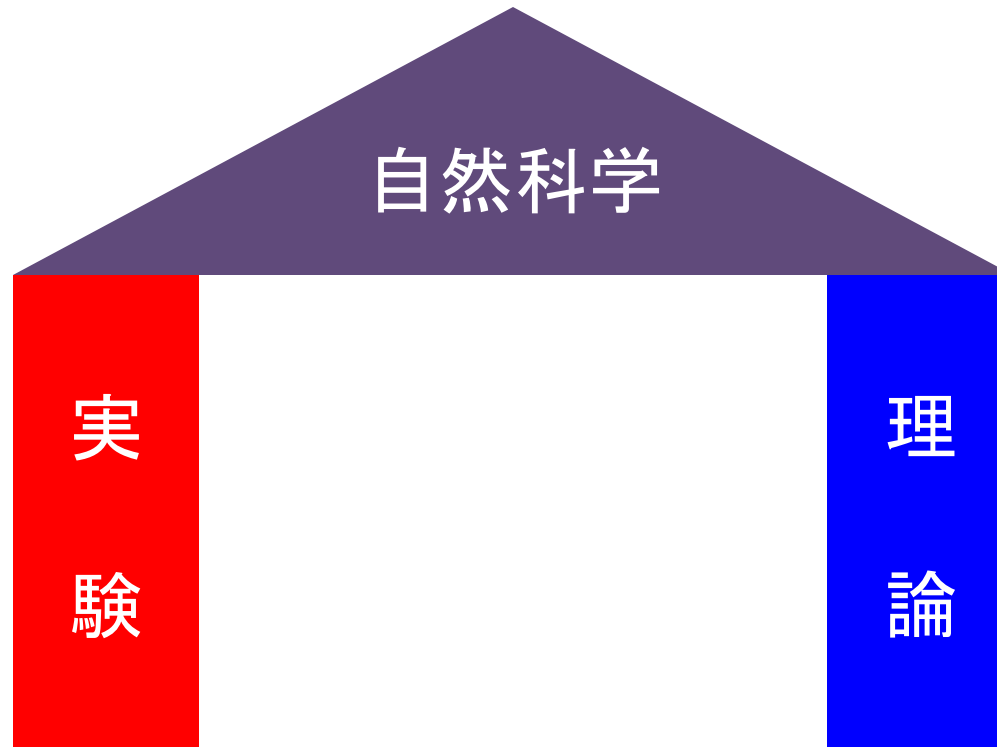
中島研吾(1962年岡山県出身)

1969年(小学校1年)アポロ11号月着陸,
当時の小学生(男子)の人気職業は、プロ野球選手, 宇宙飛行士, パイロット,
新幹線運転手, 医者(野口英世の伝記の影響)など
航空宇宙への夢絶ちがたく, 工学部航空学科(航空工学専修)へ進学したが,



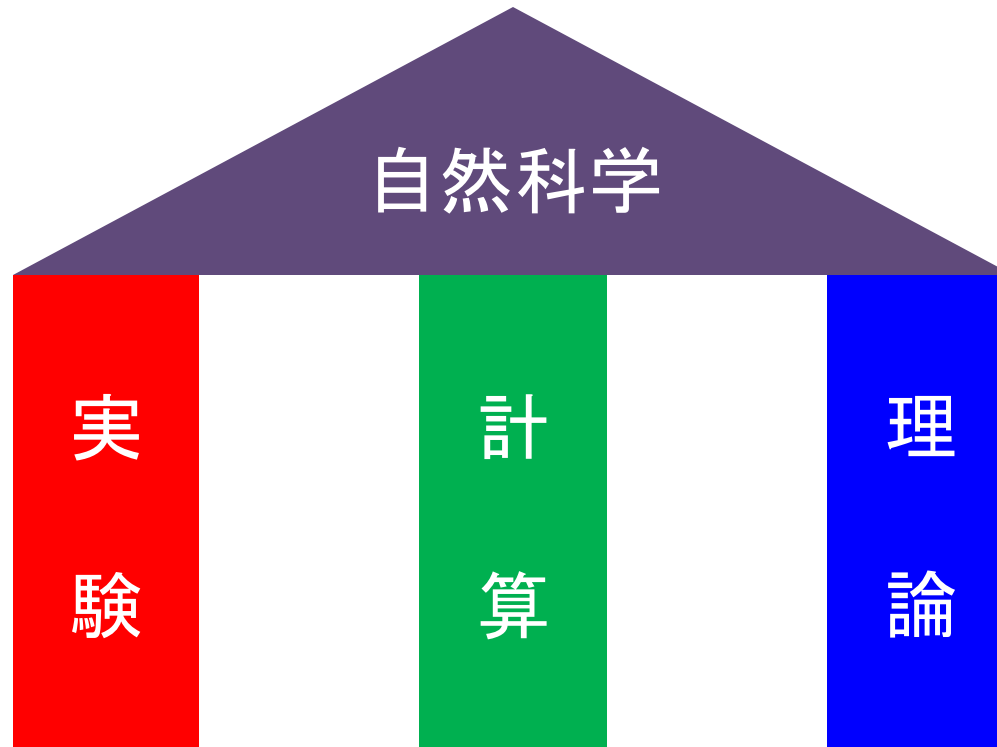
自然科学：実験＋理論

自然科学：「実験 (Experiment)」と「理論 (Theory)」⇒ 2本の柱



第3の科学：計算科学（1990年代）

スーパーコンピュータ(スパコン)によるシミュレーションに基づく「計算科学」
「第3の科学」, 「科学の3本目の柱」



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:大学の「学科」
- 一人で全てやるには限界がある
 - 協力が大切: Collaboration, Co-Design
 - 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

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:大学の「学科」
- 一人で全てやるには限界がある
 - 協力が大切: Collaboration, Co-Design
 - 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



物理
・
科学

Science

Modeling

Algorithm

Software

Hardware

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:大学の「学科」
- 一人で全てやるには限界がある
 - 協力が大切: Collaboration, Co-Design
 - 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



数学

Science

Modeling

Algorithm

Software

Hardware

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:大学の「学科」
- 一人ですべてやるには限界がある
 - 協力が大切: Collaboration, Co-Design
 - 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

コンピュータ

Science

Modeling

Algorithm

Software

Hardware

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



識と

ル

法・原



– Hardware 計算機本体

• 各階層は独立した専門分野:大学の「学科」

• 一人で全てやるには限界がある

– 協力が大切: Collaboration, Co-Design

– 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

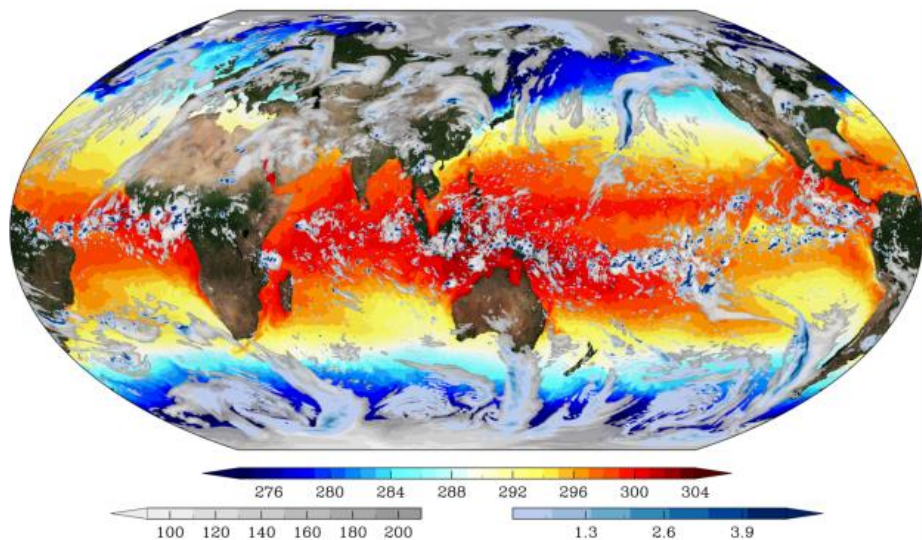
Algorithm

Software

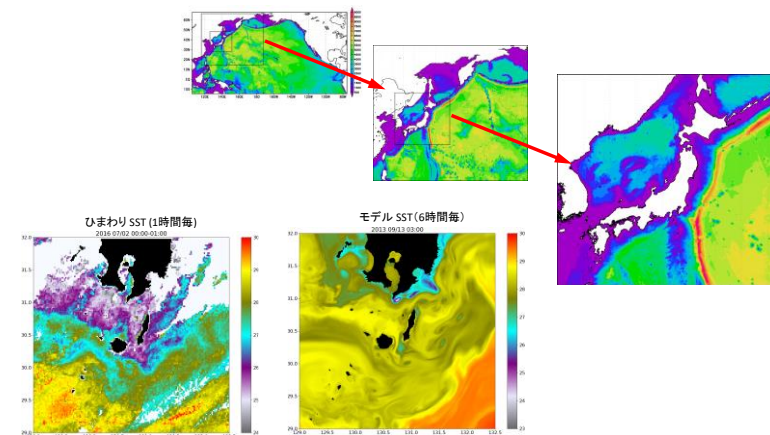
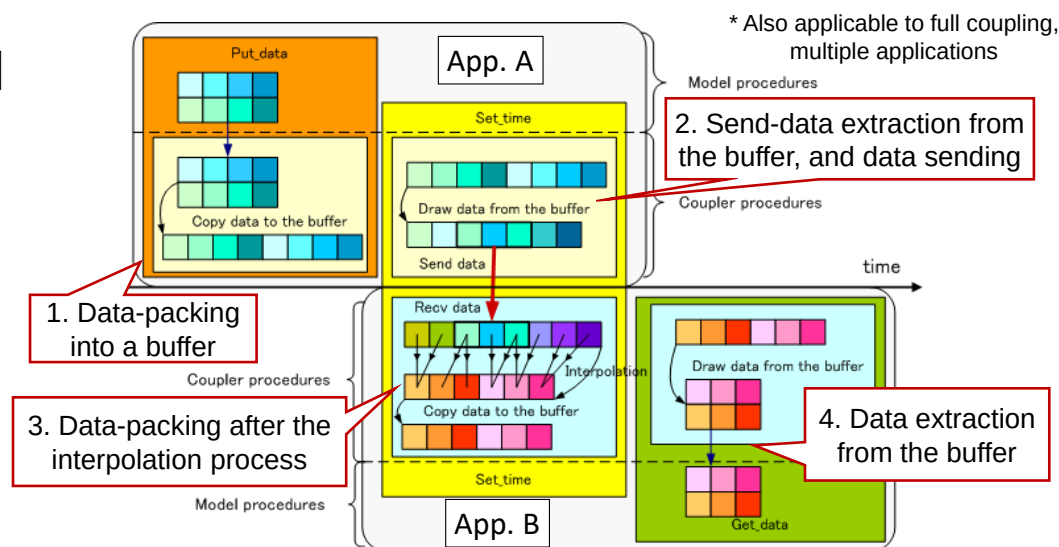
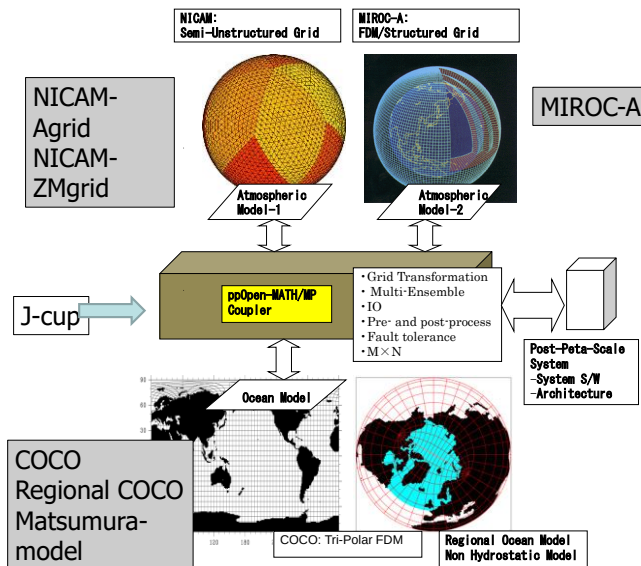
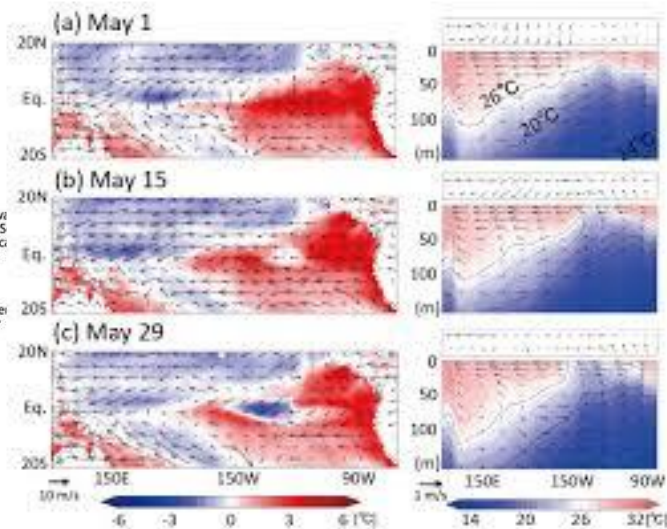
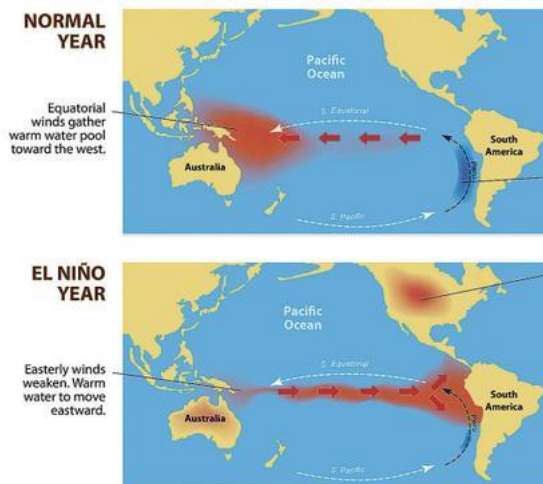
Hardware

全地球大気・海洋シミュレーション(気候・気象)

東大大気海洋研究所, 東大理学系研究科等



THE EL NIÑO PHENOMENON



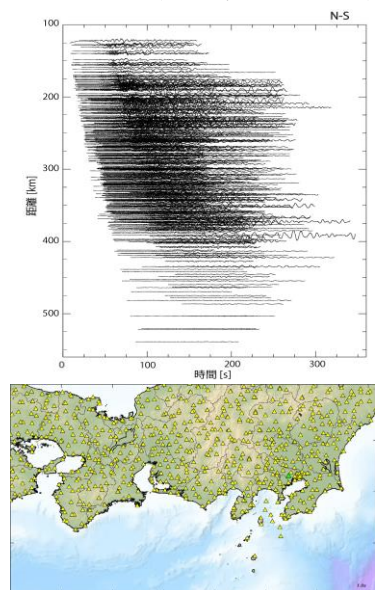
〔画像提供: 佐藤正樹教授・
羽角博康教授(東大・大気海洋研)〕

地震シミュレーション・地殻変動

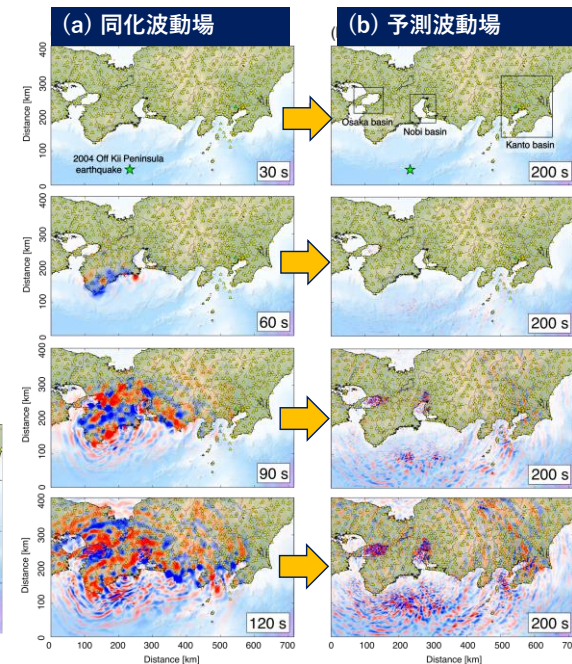
東大地震研究所, 東大理学系研究科等

〔画像提供: 古村孝志教授・市村強教授(東大・地震研)〕

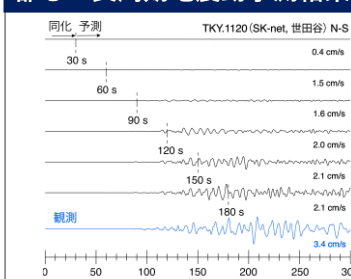
○ 使用データ(K-NET, KiK-net 446点)



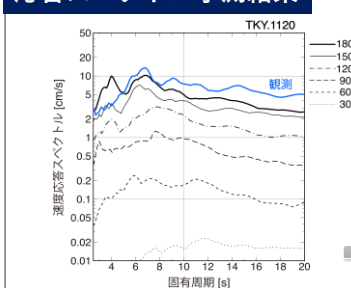
90秒間の同化→予測計算



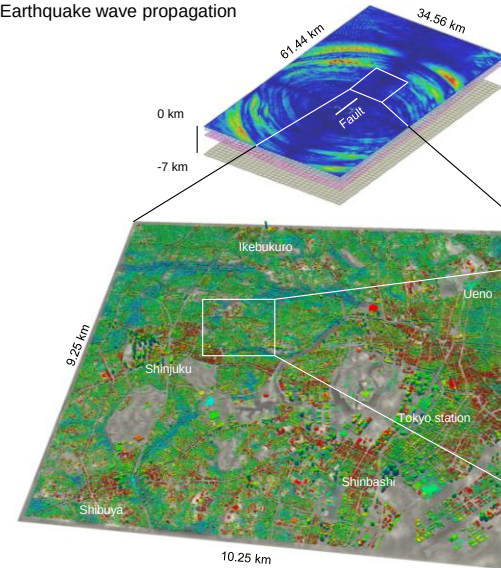
都心の長周期地震動予測結果



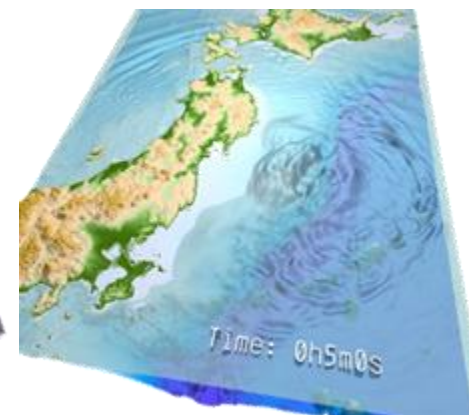
応答スペクトル予測結果



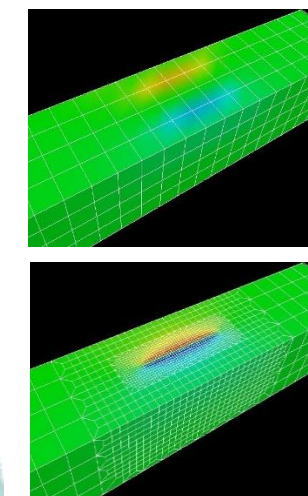
a) Earthquake wave propagation



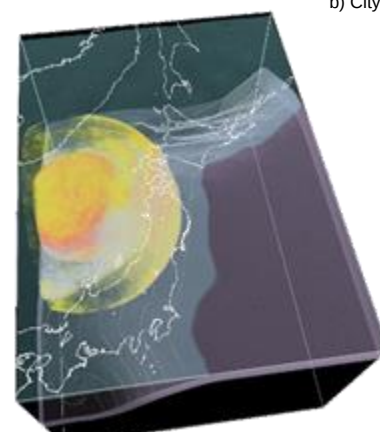
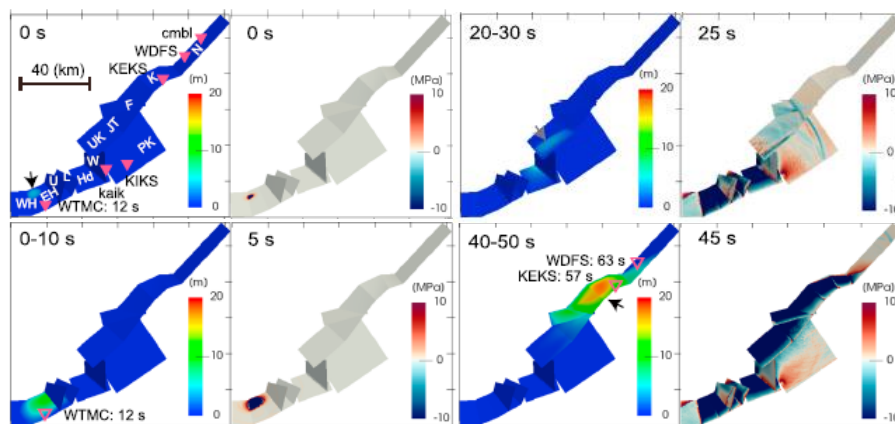
b) City response simulation



c) Resident evacuation

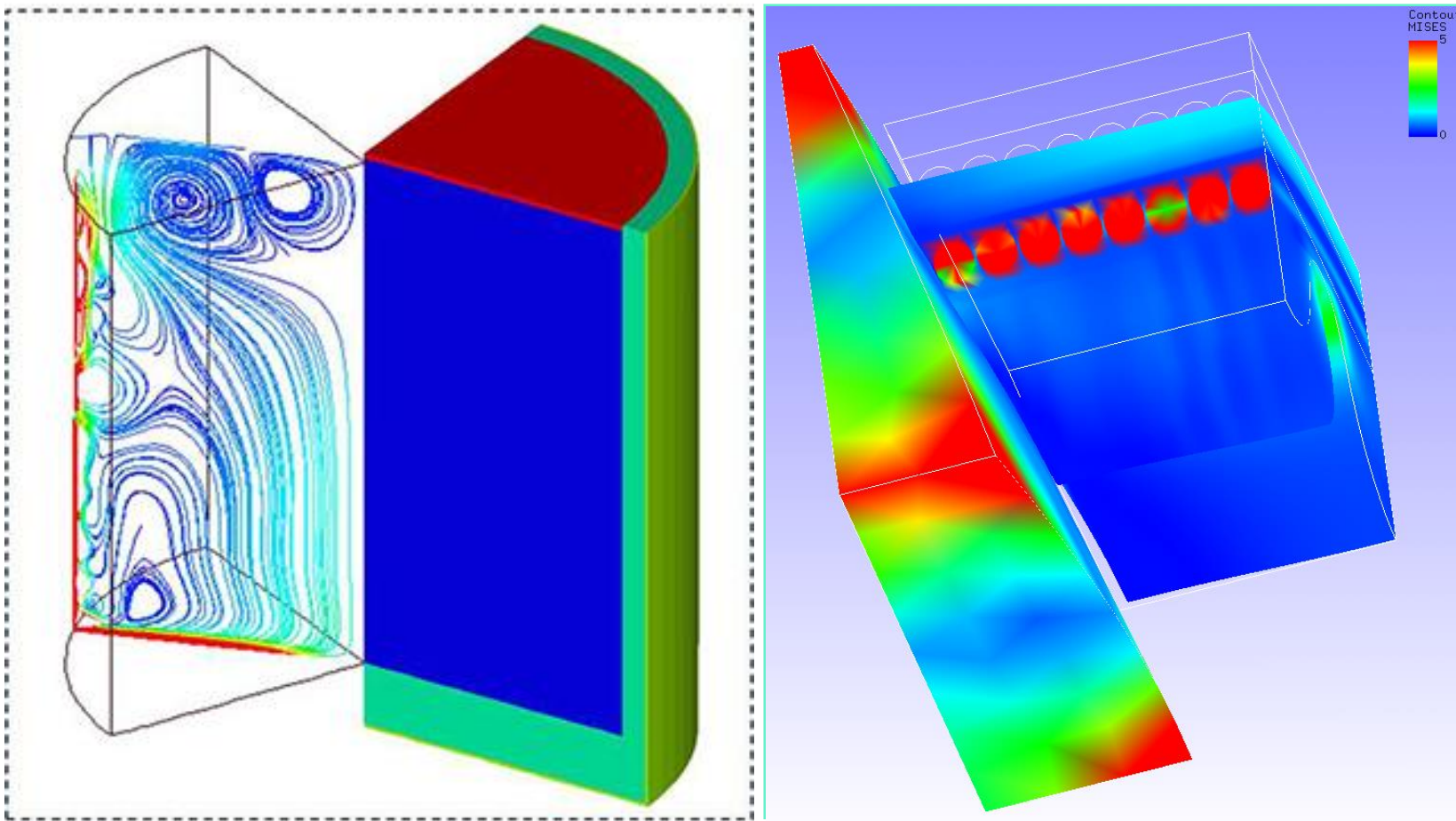


〔画像提供:
安藤亮輔准教授
(東大・理学系)〕

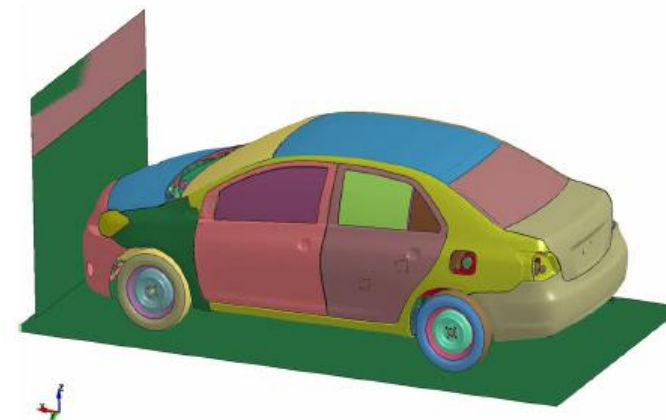


ものづくり分野（流体シミュレーション，構造解析など）

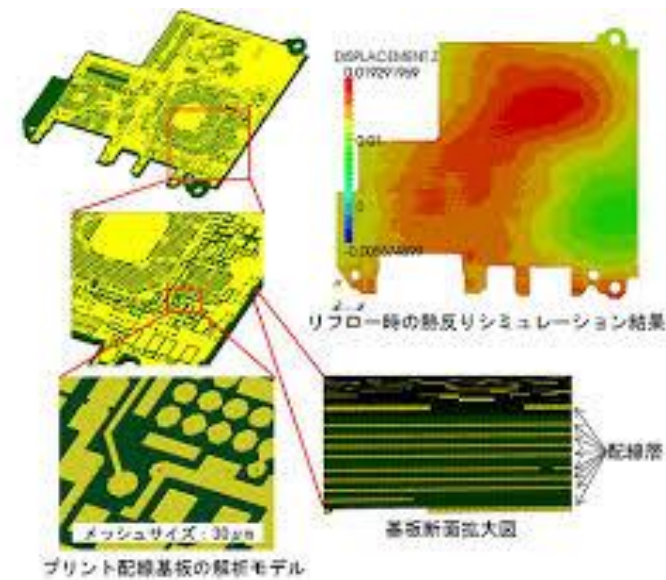
様々な大学・研究機関・企業



〔画像提供：奥田洋司教授（東京大学新領域創成科学専攻）〕

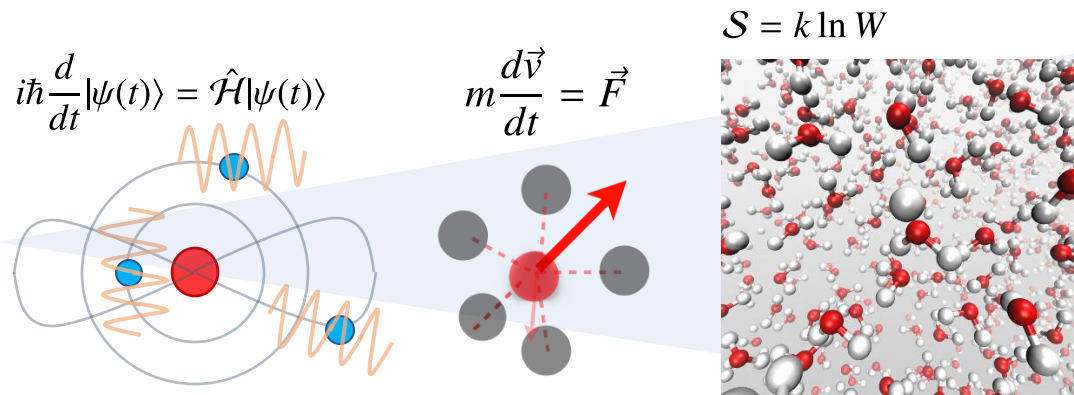


〔画像提供：日本自動車工業会（JAMA）〕

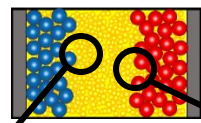


材料科学・物性科学・分子科学

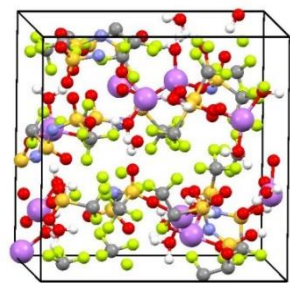
東大工, 阪大基礎工, 物質・材料研究機構 他 様々な大学・研究機関



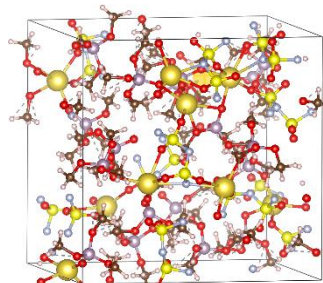
DFT-MDによる蓄電池用新型
電解液のミクロ物性解明



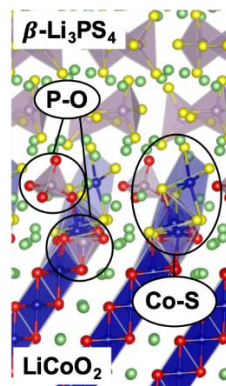
全固体電池の電極-電解質
界面のDFTミクロ解析



高濃度水系電解液
Nature Energy 2016



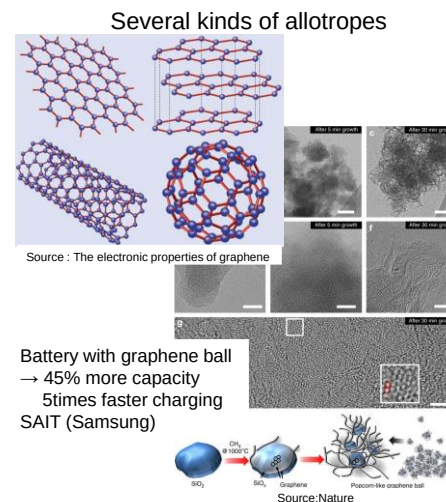
高濃度消火性電解液
Nature Energy 2018



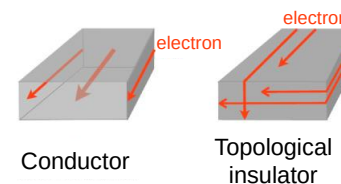
Chem. Mater. 2020

〔画像提供: 山田研究室(東大工), 館山グループ(物材機構)〕

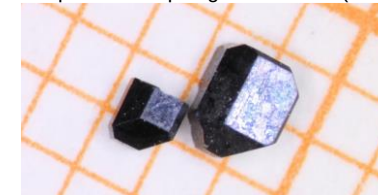
ディラック電子系・トポロジカル絶縁体のtight-binding計算



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

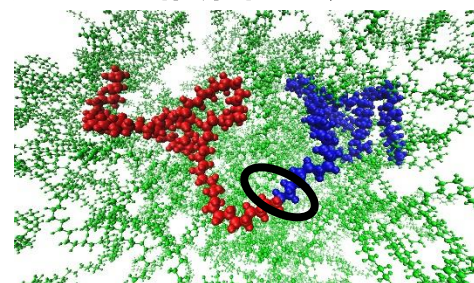


Sample of the topological insulator (SbB6)



〔画像提供: Gerhard Wellein教授 (FAU, Germany)〕

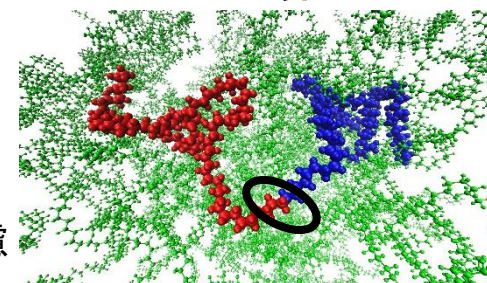
ポリマーの相溶性判定のための全原子自由エネルギー計算



Macromolecules 2020

逐次伸張

モノマーごとの
相互作用考慮

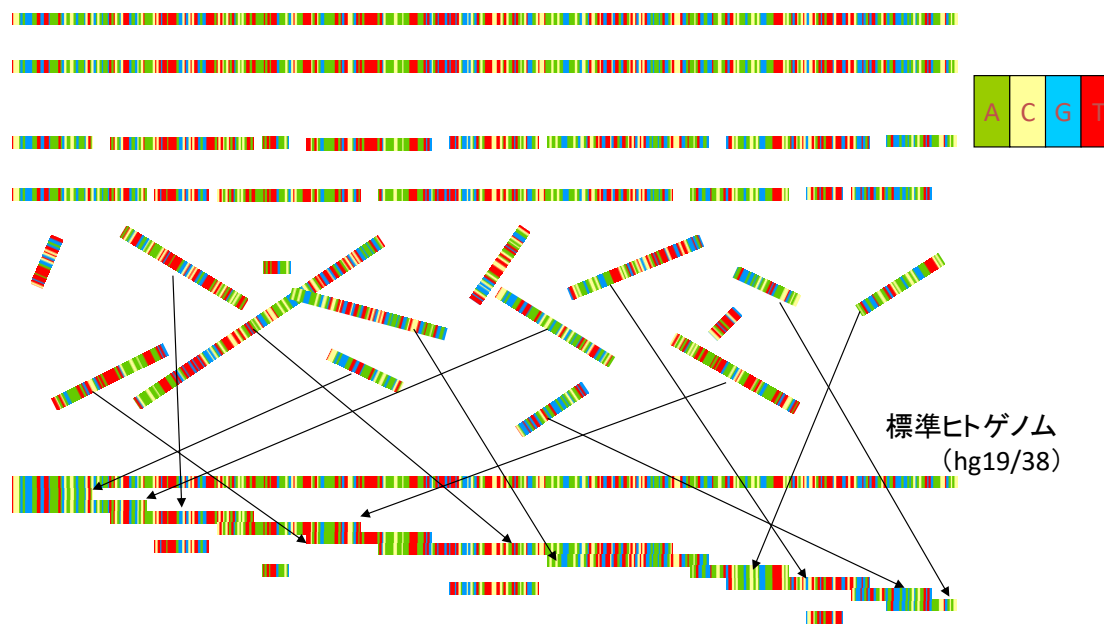


〔画像提供: 松林研究室(阪大)〕

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

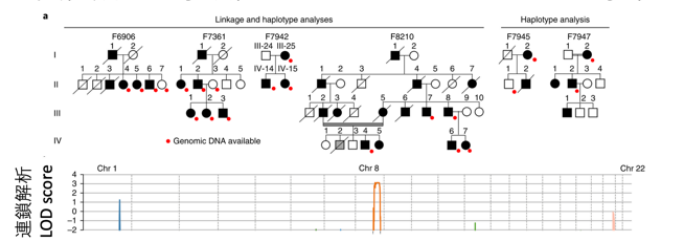
ヒト個人ゲノムはどのよう
に再解読するか？



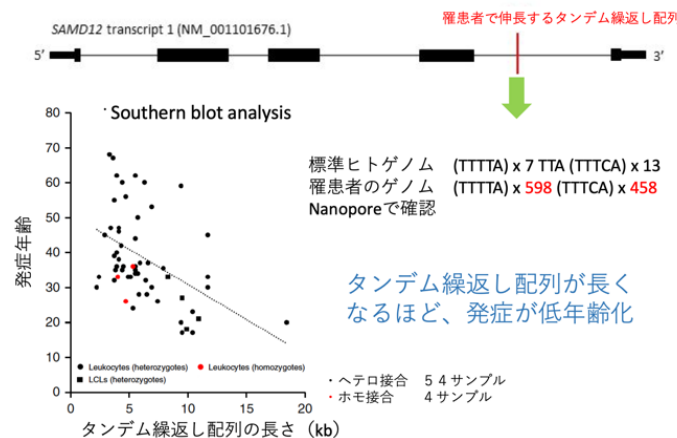
長さ 100~150 塩基のDNA 断片を 10~20億本収集(ヒト1人当たり)
接尾辞配列(suffix array), Burrows-Wheeler 変換等が活用される

〔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ノステんかの家系



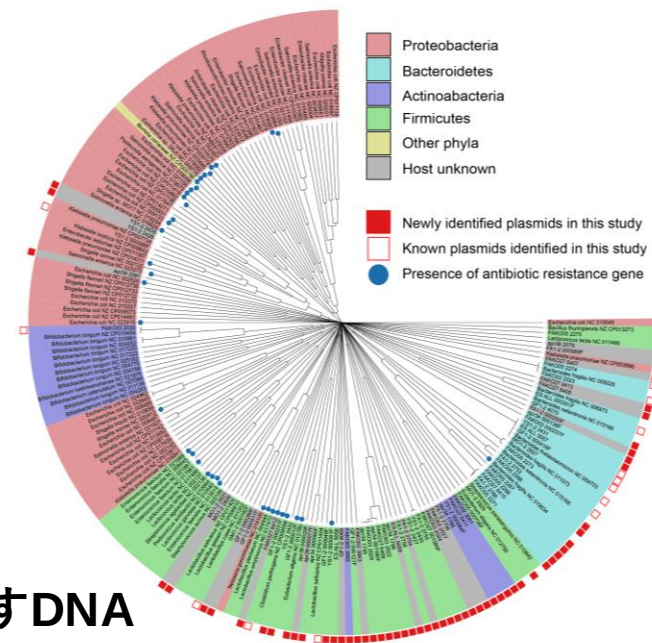
家系の連鎖解析により絞り込んだ8番染色体の領域に存在する38個遺伝子のコード領域には、原因となる1塩基変異が見つからなかった。しかしこの領域のSAMD12のイントロンに、罹患者で伸長するタンデム繰返し配列を発見。



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

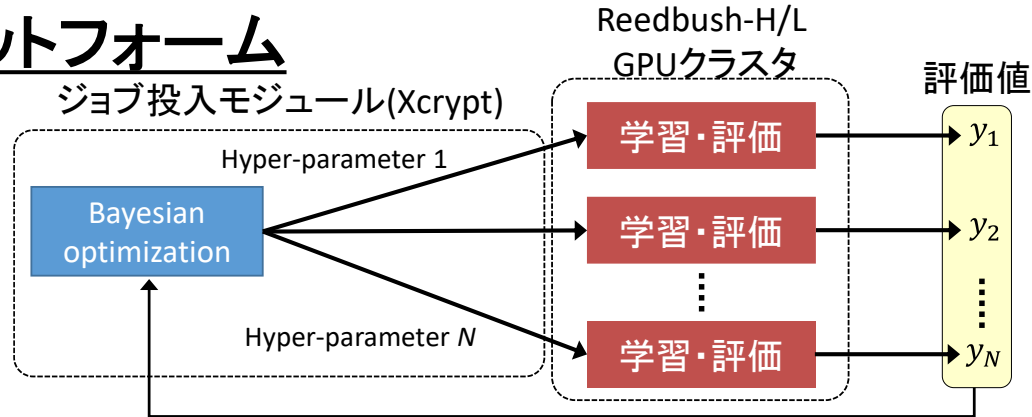


Microbiome 2019

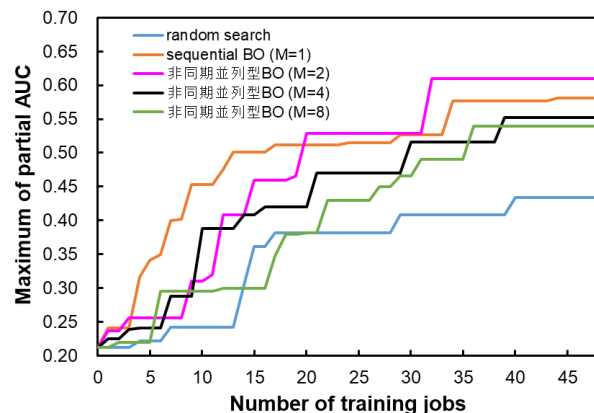
バイオインフォマティクス：医療画像処理

東大病院等

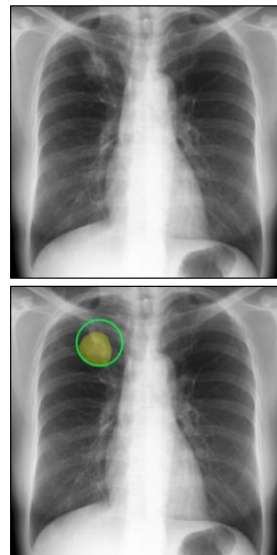
深層学習自動チューニング プラットフォーム



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

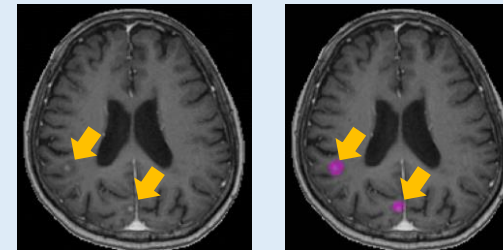


上：元画像、下：検出結果
(黄、緑丸：病変領域)

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

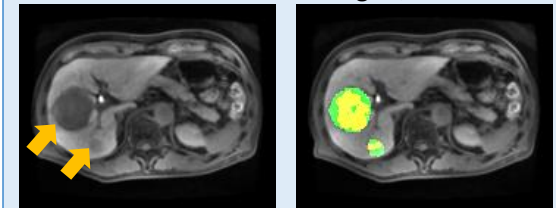
村田, JAMIT2018



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

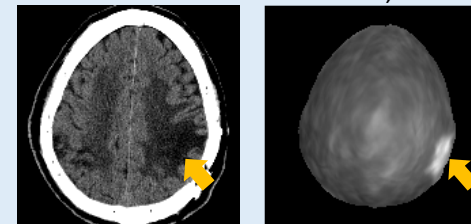
Takenaga T, CARS 2018



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

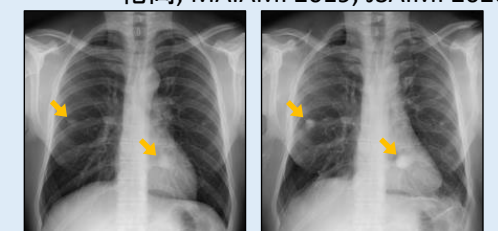
Sato D, SPIE MI 2018



脳梗塞症例
(左：元画像、右：異常度マップ)

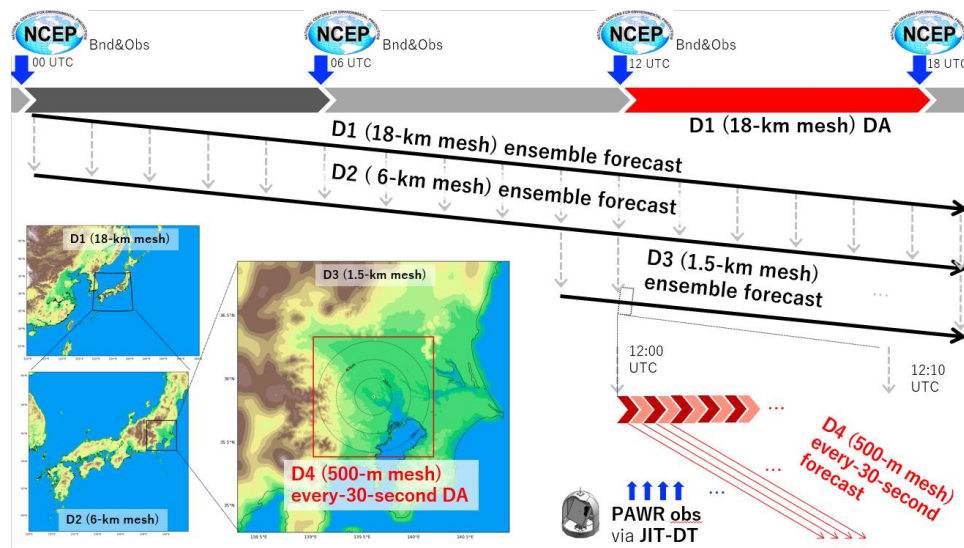
胸部X線画像の異常強調

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)



全体のワークフロー

15:30:00

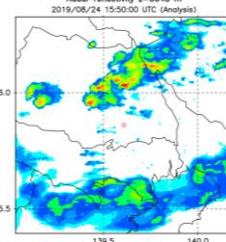
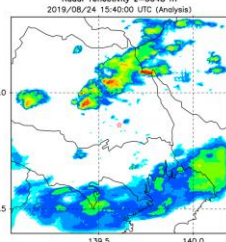
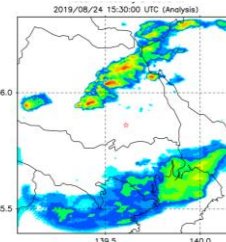
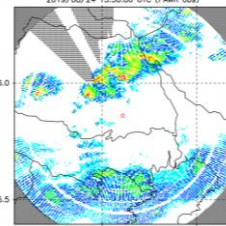
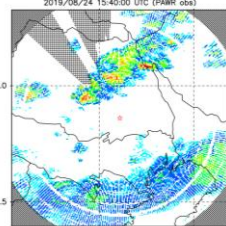
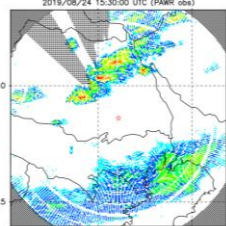
15:40:00

15:50:00



PAWR
Obs

SCALE-
LETKF
Analysis



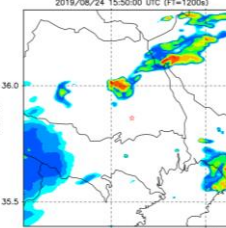
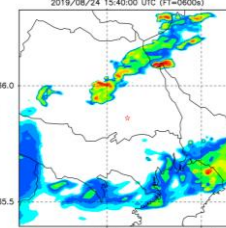
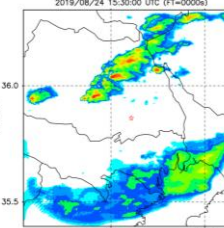
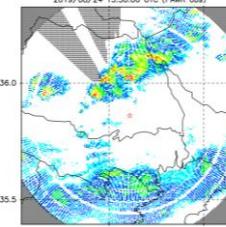
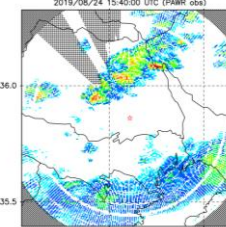
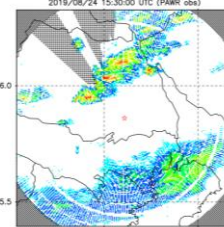
16:00

16:10

16:20

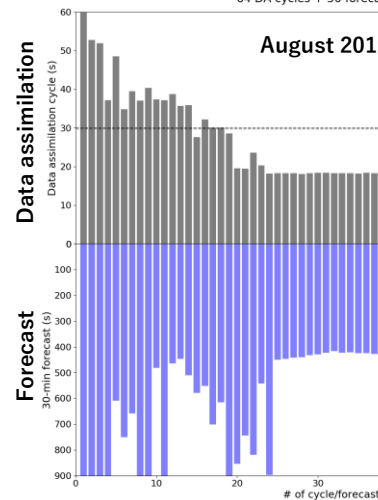
FT=10min

FT=20min



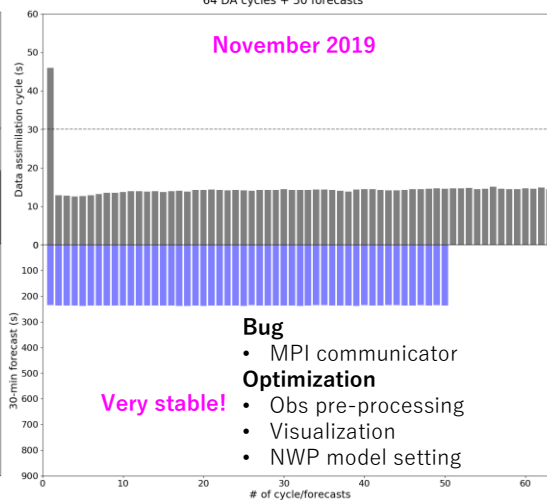
Computation time (6528 nodes)
64 DA cycles + 50 forecasts

August 2019



Computation time (6528 nodes)
64 DA cycles + 50 forecasts

November 2019



Bug

- MPI communicator

Optimization

- Obs pre-processing
- Visualization
- NWP model setting

Very stable!

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)。

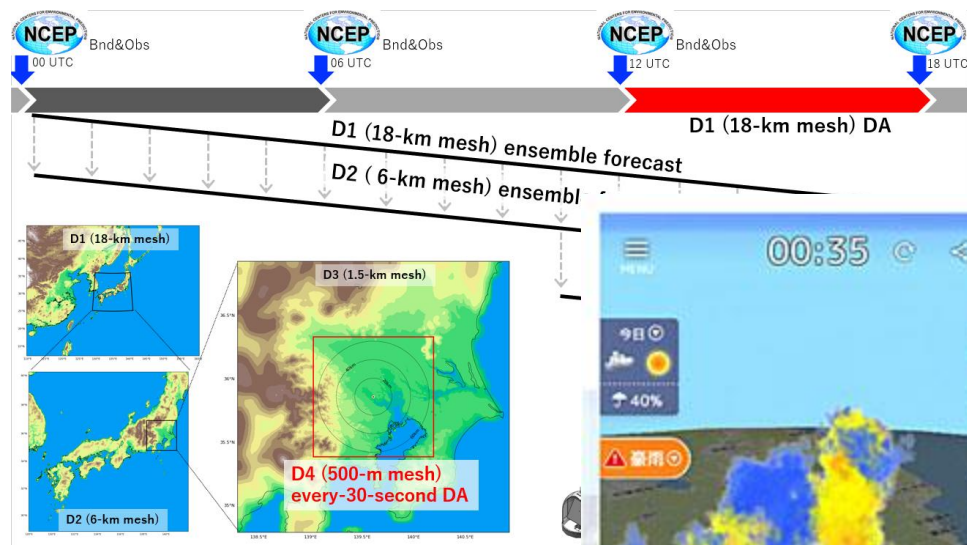
(左)2019年8月、(右)2018年11月

〔画像提供: 三好建正博士
(理化学研究所)〕

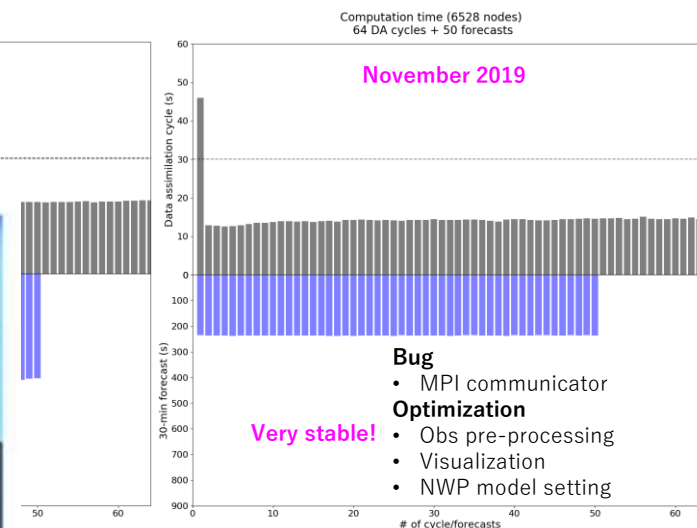
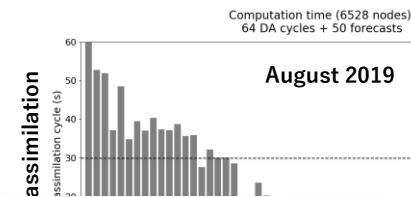
2019年8月24日の事例についてのテスト結果。(上)レーダー観測と(下)SCALE-LETKFによる解析で得られたレーダー反射強度(dBZ)を示す。

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。

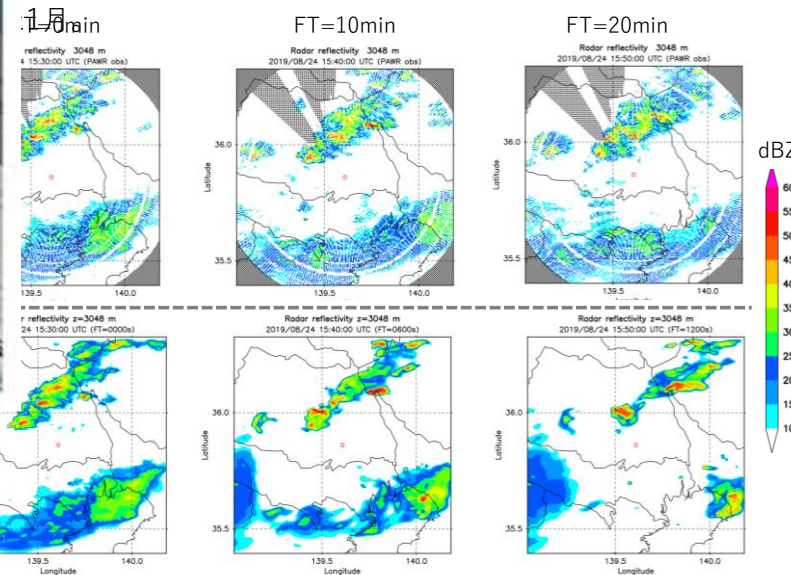
ゲリラ豪雨予測のリアルタイム実証実験 (理化学研究所)



全体のワークフロー



タ同化、下段は30分予報にかかった時間(秒)。



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による解析で得られたレーダー反射強度(dBZ)を示す。



SCALE-LETKF Analysis

〔画像提供: 三好建正博士 (理化学研究所)〕

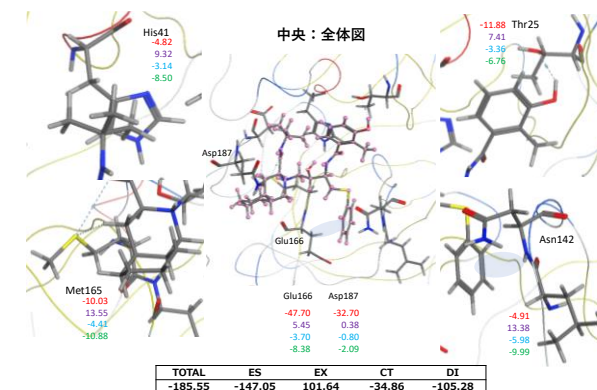
「COVID-19」対応臨時公募採択課題

全国9国立大学等のスパコンによる課題

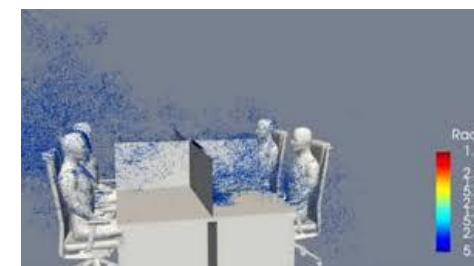
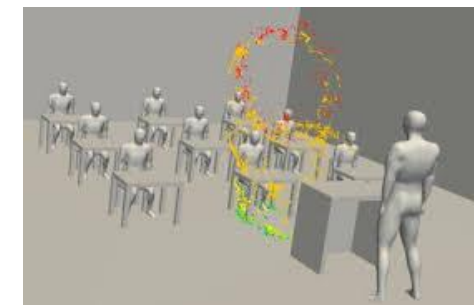
全14のうち6課題が東大システムを利用(2020年度)



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)〕

- 第3の科学: 計算科学
- スーパーコンピュータとは
- シミュレーションと連立一次方程式
- 行列とベクトル
- 数値線形代数とその実用例

スーパーコンピュータ(スパコン)とは？

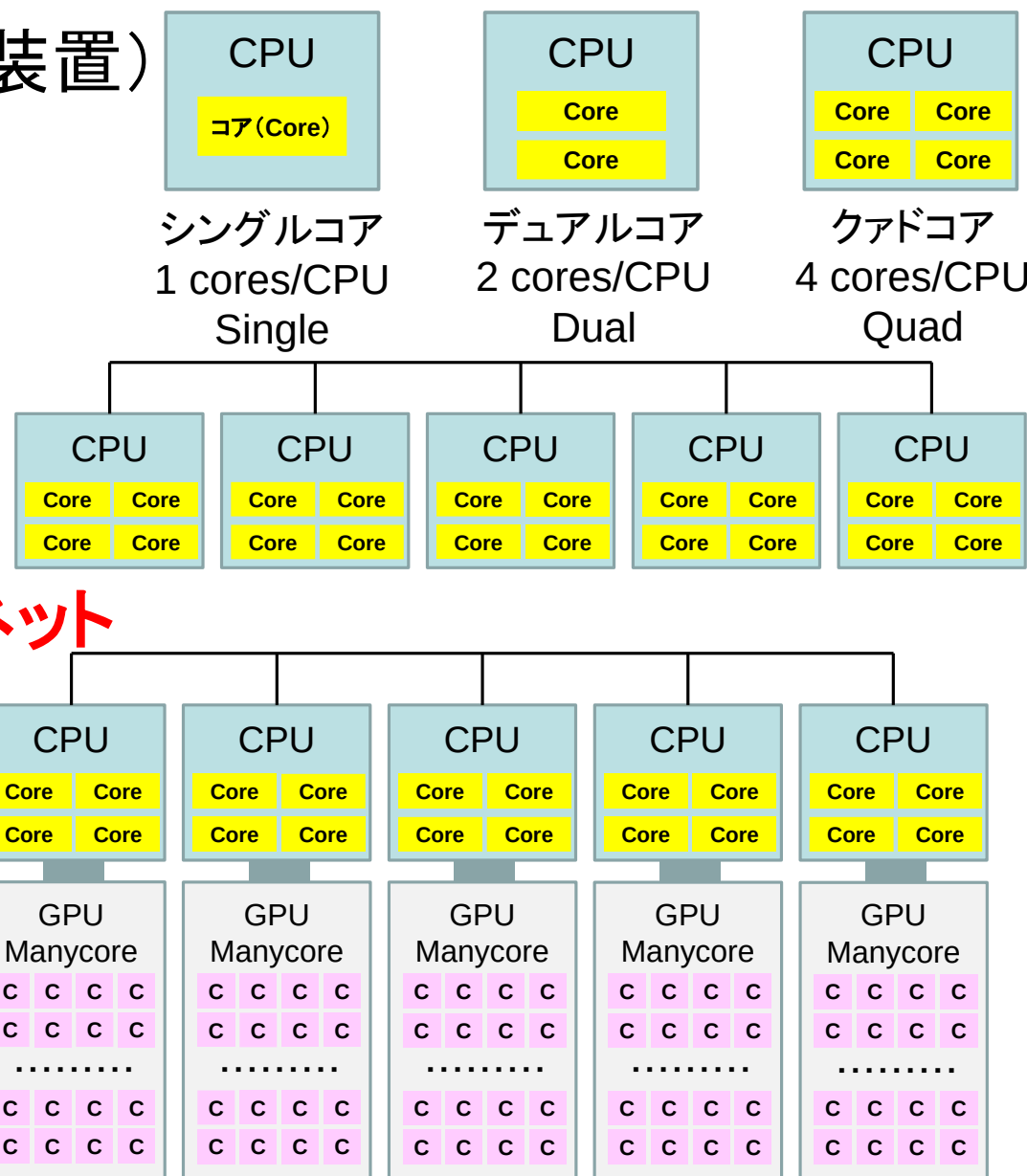
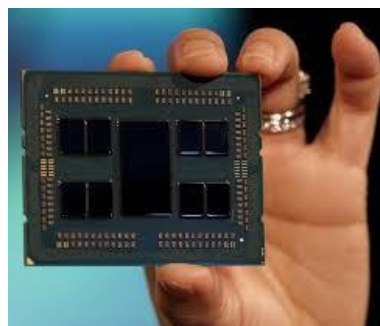
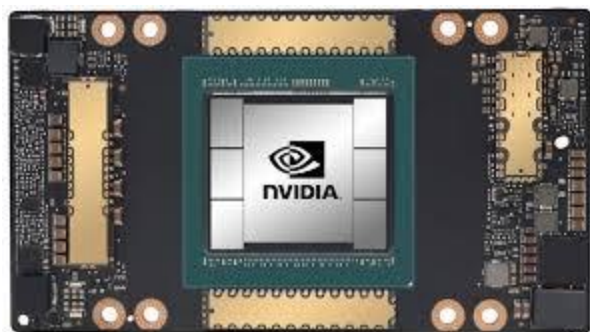
- CPU (Central Processing Unit, 中央演算装置)

- 21世紀以降: マルチコア化, メニィコア化: 省電力
- 並列処理, 並列計算: PC, スマホも同様

- GPU (Graphic Processing Unit)

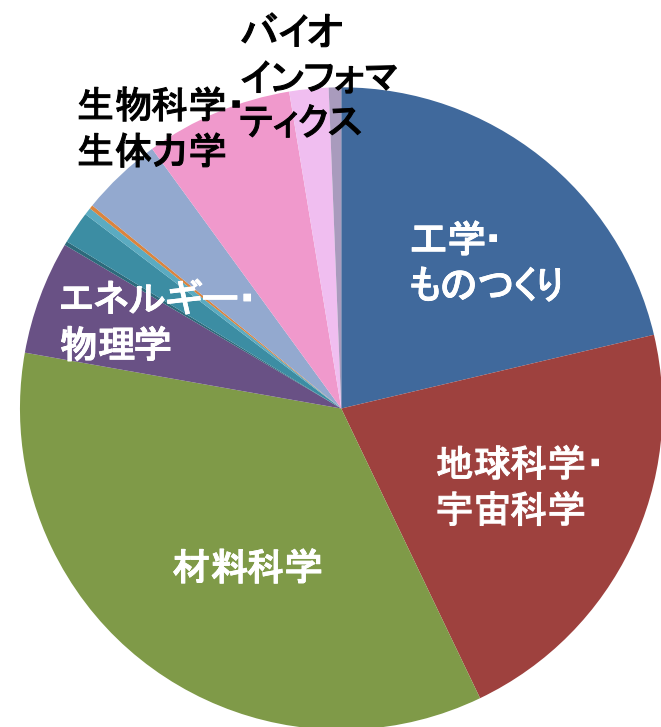
- 描画用途⇒高いデータ転送能力を計算に利用
- 数千～数万のコアを有する「メニィコア」

- マルチコア・メニィコアCPU(+GPU)を高速ネットワークで接続した並列計算機 (Parallel Computer) が「スパコン」

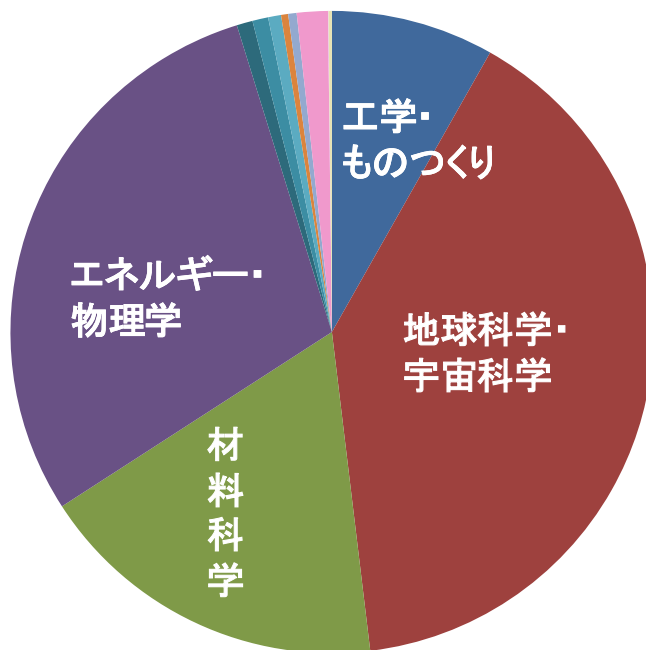


2023年度分野別計算資源利用割合

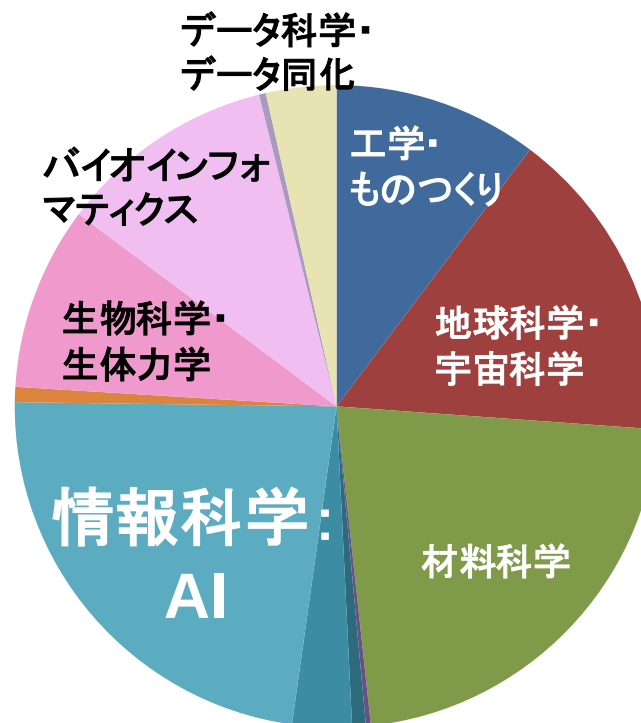
■ 汎用CPU, ■ GPU



OBCX
CascadeLake
 2023年9月末退役



Odyssey
A64FX

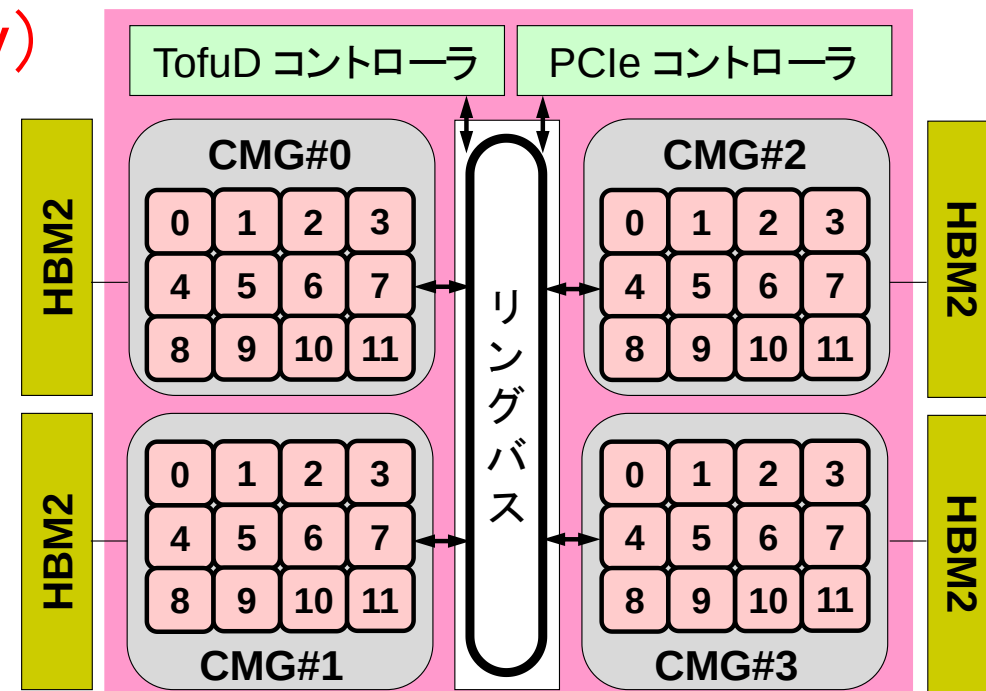


Aquarius
A100

- 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

スーパーコンピュータ(スパコン)の性能

- FLOPS値 (Floating Point Operations per Second, 浮動小数点演算)
 - 1秒当たりの(倍精度)実数演算性能
 - 10^6 FLOPS = 1 Mega FLOPS = 1 MFLOPS (百万)
 - 10^9 FLOPS = 1 Giga FLOPS = 1 GFLOPS (十億)
 - 10^{12} FLOPS = 1 Tera FLOPS = 1 TFLOPS (兆)
 - 10^{15} FLOPS = 1 Peta FLOPS = 1 PFLOPS (千兆) 「京」: 10 PFLOPS
 - 10^{18} FLOPS = 1 Exa FLOPS = 1 EFLOPS (百京) 富岳: 442 PFLOPS
- 東大センターの「Wisteria/BDEC-01 (Odyssey) (シミュレーションノード群)」(富岳と同じ)
 - Fujitsu/Arm A64FX, 1コア性能は70.4GFLOPS
 - 1秒間に704億回の倍精度実数演算
 - 1CPU(1ノード): 48コア
 - 3,379.2 GFLOPS = 3.379 TFLOPS
 - 3兆3,792億回
 - 全システム: 7,680 CPU(ノード)
 - 25.95 PFLOPS: 2京5,952兆2,600億回



スーパーコンピュータは何をするのか？

- 大量の計算
 - Odyssey: 25.95 PFLOPS: 2京5,952兆回(世界40位, 日本4位)
 - 富岳: 537.21 PFLOPS: 53京7,210兆回(世界4位, 日本1位)
 - Frontier: 1,679.82 PFLOPS: 167京9,820兆回(世界1位)(=1.678 EFLOPS)
 - Frontier(Oakridge国立研究所, USA)はEFLOPS($=10^{18}$)を超えた世界初めてのシステム

- 第3の科学: 計算科学
- スーパーコンピュータとは
- シミュレーションと連立一次方程式
- 行列とベクトル
- 様々な利用分野
- 数値線形代数とその実用例

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)

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

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

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

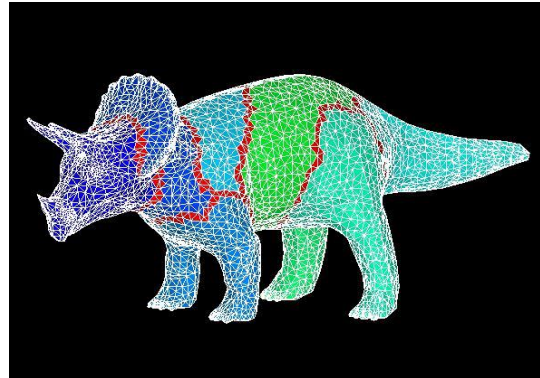
β 感染率

γ 回復率 (隔離率)

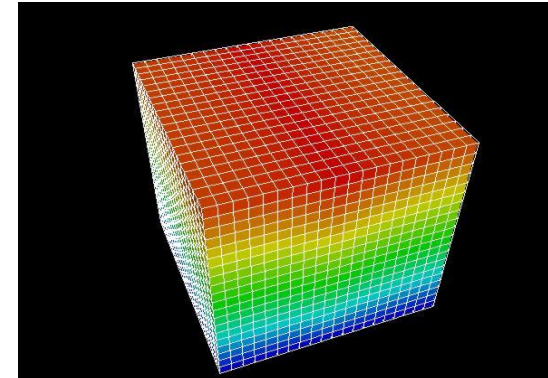
– $1/\gamma$ は平均感染期間

偏微分方程式の解法

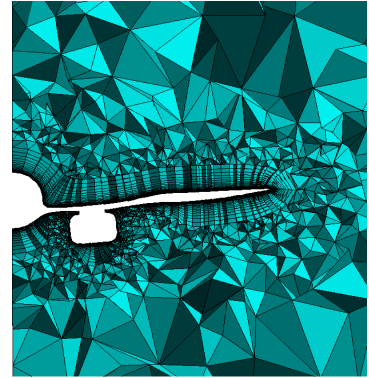
- 非線形方程式, 複雑形状等⇒解析解は存在しない
- 空間を, メッシュ, 格子, 粒子 (mesh, grid, particle) に分割し, 計算機を使用して数値的に解くのが一般的



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

- 細かいメッシュほど計算量が多いが精度の良い解

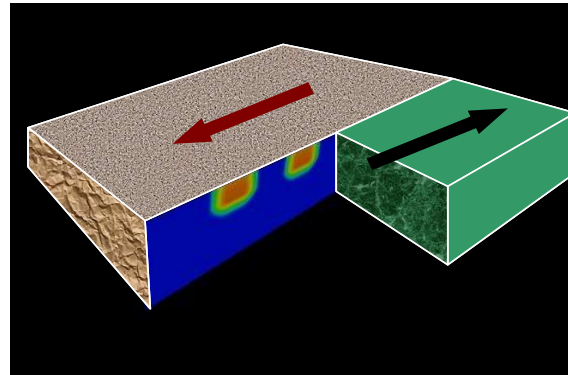
Science

Modeling

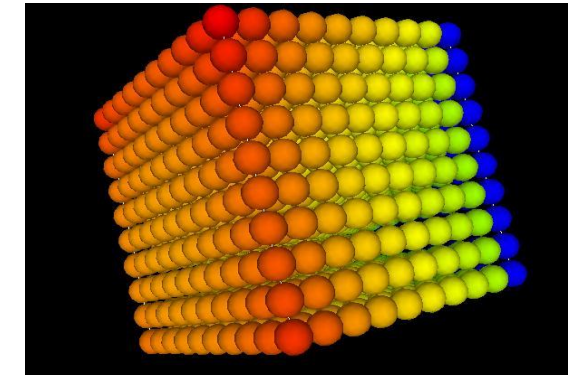
Algorithm

Software

Hardware



境界要素法
Boundary Element Method
BEM



個別要素法
Discrete Element Method
DEM

偏微分方程式の数値解法⇒連立一次方程式

- 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(未知数: 数百万～数億, 数十億以上)。
 - 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
 - 高速に安定に求解することが非常に重要

Science

Modeling

Algorithm

Software

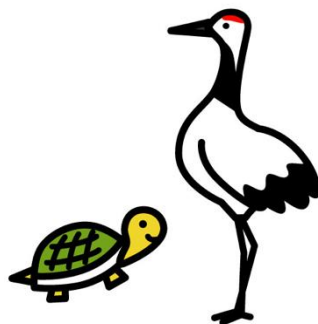
Hardware

偏微分方程式の数値解法⇒連立一次方程式

- 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(未知数: 数百万～数億, 数十億以上)。
 - 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
 - 高速に安定に求解することが非常に重要
- 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 ⇒ 二元一次方程式

$$x_1 + x_2 = 10$$

$$2x_1 + 4x_2 = 28$$



$$x_1 = 6, x_2 = 4$$

鶴

亀

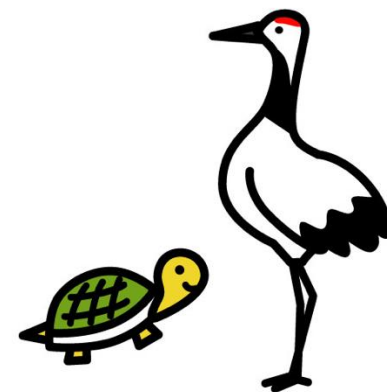
ScienceModelingAlgorithmSoftwareHardware

- 第3の科学: 計算科学
- スーパーコンピュータとは
- シミュレーションと連立一次方程式
- 行列とベクトル
- 数値線形代数とその実用例

- 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
- 最近の高校数学では「行列」を教えない学校も多いようだ
- 大学レベル以上の物理を学ぶには「行列」, 「ベクトル」は必須なのだが...

スーパーコンピュータは何をするのか？

- 大量の計算
 - Odyssey: 25.95 PFLOPS: 2京5,952兆回(世界40位, 日本4位)
 - 富岳: 537.21 PFLOPS: 53京7,210兆回(世界4位, 日本1位)
 - Frontier: 1,679.82 PFLOPS: 167京9,820兆回(世界1位)
- 連立一次方程式求解(巨大な鶴亀算), 固有値計算など, 「行列・ベクトル」に関する演算が主流
- 探索等も行列・ベクトル演算(一次変換)が関わっている
- 機械学習, AIの計算も行列・ベクトル演算
- 量子コンピュータの計算も実は行列・ベクトル演算



行列とベクトル(1/3)

- 行列 (Matrix), ベクトル (Vector)
- 「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, その魅力に取り憑かれた
- 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), $1 \leq i, j \leq n$):

$$\begin{array}{c} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \text{L} + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \text{L} + a_{2n}x_n = b_2 \\ \text{M} \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \text{L} + a_{nn}x_n = b_n \end{array}$$

- 「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(2/3): 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。

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

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

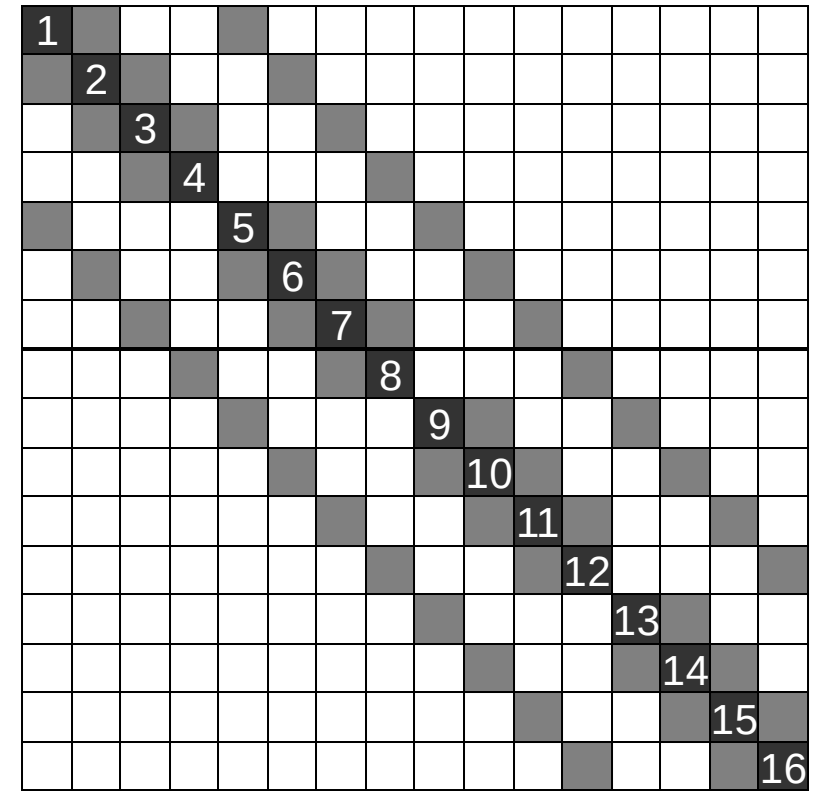
第3列

第2行

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

行列とベクトル(3/3): 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。

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

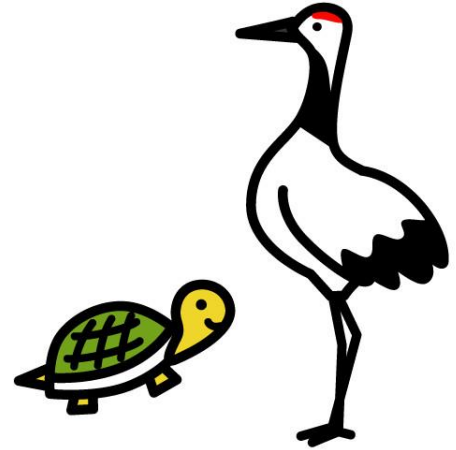
鶴亀算を「逆行列」を使って解く

- 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

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

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

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



- 逆行列の公式

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

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

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

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

単位行列

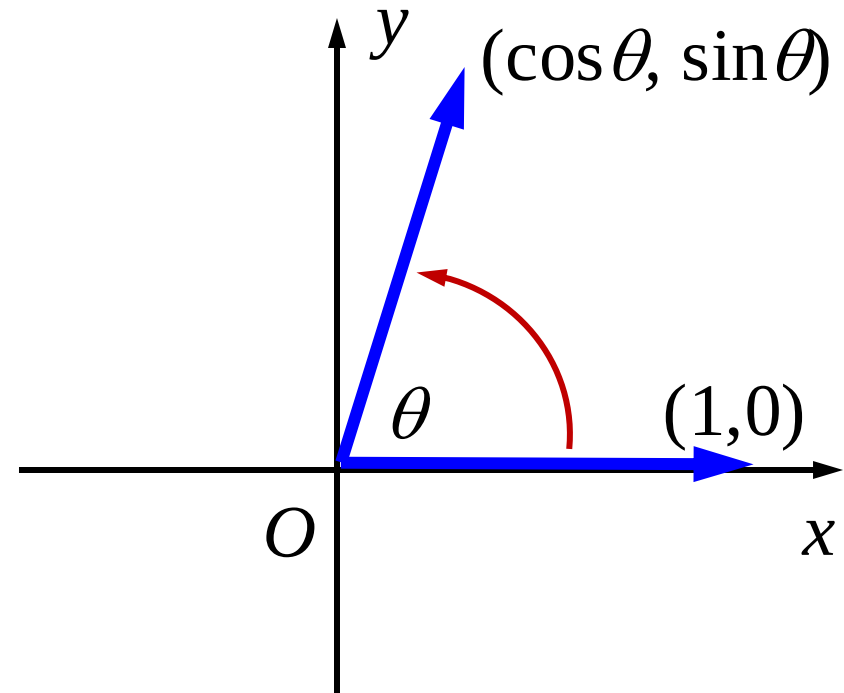
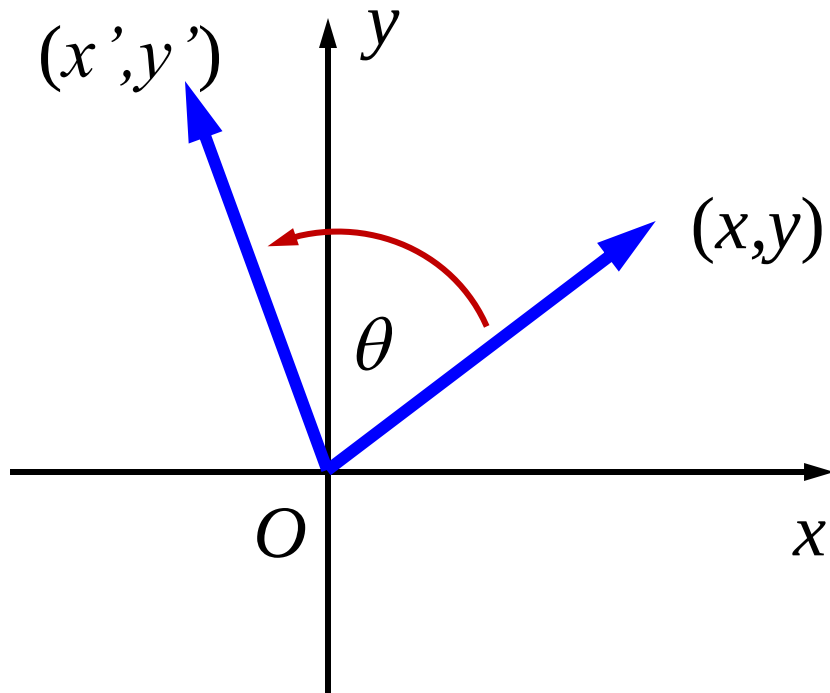
$$\begin{aligned} \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b} = \mathbf{x} &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 4 & -1 \\ -2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 10 \\ 28 \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 4 \times 10 - 1 \times 28 \\ -2 \times 10 + 1 \times 28 \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 12 \\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

計算量多い(N個の未知数に対して
O(N³)の演算), Nが増えると大変

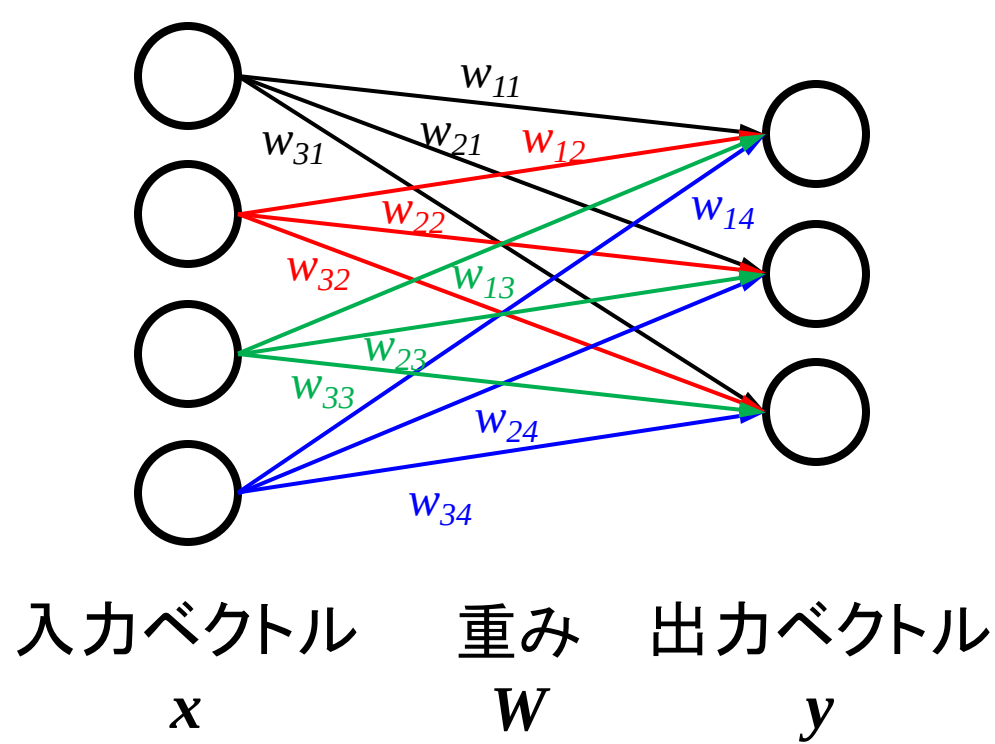
行列の応用:ベクトルの回転(二次元)

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



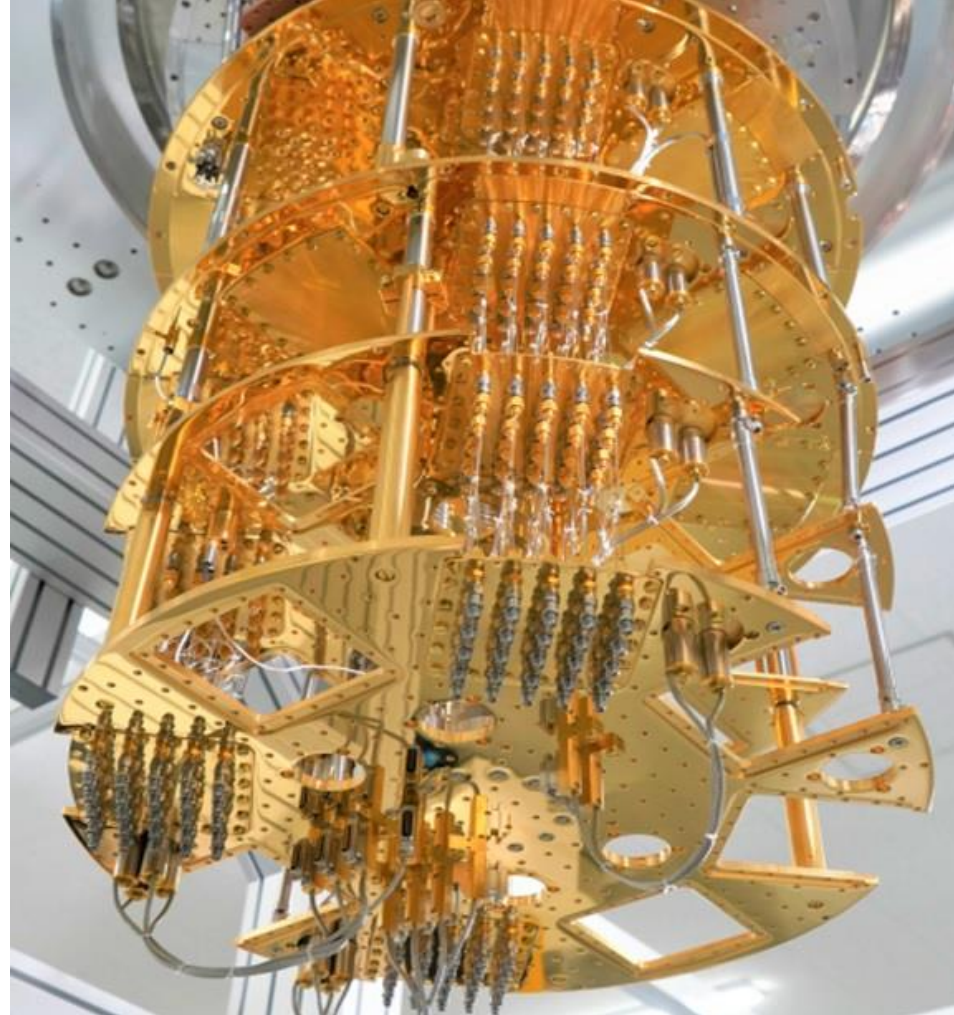
$$Wx = y$$

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

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

- 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)

量子コンピュータでやっている計算も実は 一次変換(線形変換)



- 第3の科学: 計算科学
- スーパーコンピュータとは
- シミュレーションと連立一次方程式
- 行列とベクトル
- 数値線形代数とその実用例

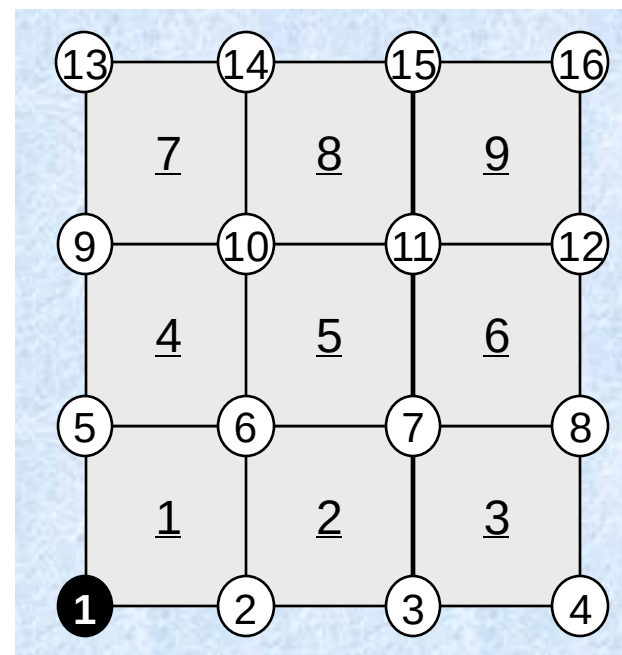
有限要素法

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:

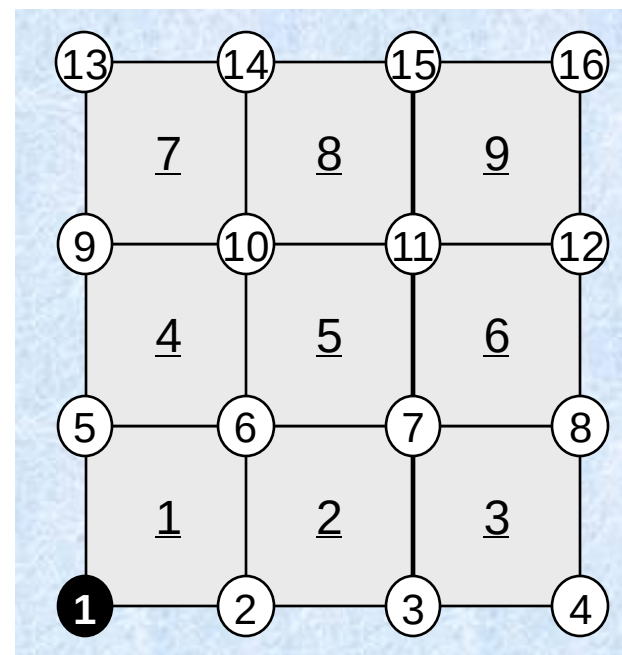
$$\int_V [N]^T \left\{ \lambda \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + Q \right\} dV = 0$$

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

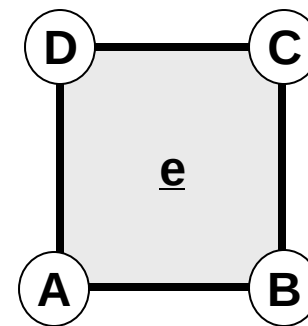
$$\begin{aligned} & - \int_V \lambda \left(\frac{\partial [N]^T}{\partial x} \frac{\partial [N]}{\partial x} + \frac{\partial [N]^T}{\partial y} \frac{\partial [N]}{\partial y} \right) dV \cdot \{\phi\} \\ & + \int_V Q [N]^T dV = 0 \end{aligned}$$



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

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



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

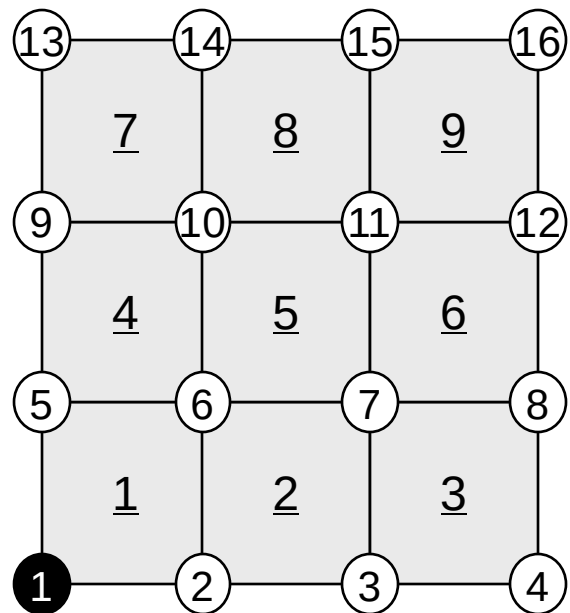


$$\begin{bmatrix} k_{AA}^{(e)} & k_{AB}^{(e)} & k_{AC}^{(e)} & k_{AD}^{(e)} \\ k_{BA}^{(e)} & k_{BB}^{(e)} & k_{BC}^{(e)} & k_{BD}^{(e)} \\ k_{CA}^{(e)} & k_{CB}^{(e)} & k_{CC}^{(e)} & k_{CD}^{(e)} \\ k_{DA}^{(e)} & k_{DB}^{(e)} & k_{DC}^{(e)} & k_{DD}^{(e)} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \phi_A^{(e)}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

全体マトリクス⇒連立一次方程式⇒解く

各要素方程式を足し込む⇒全体マトリクス, 連立一次方程式
境界条件 (ここでは $\Phi_1=0$)を適用, 連立一次方程式を解く

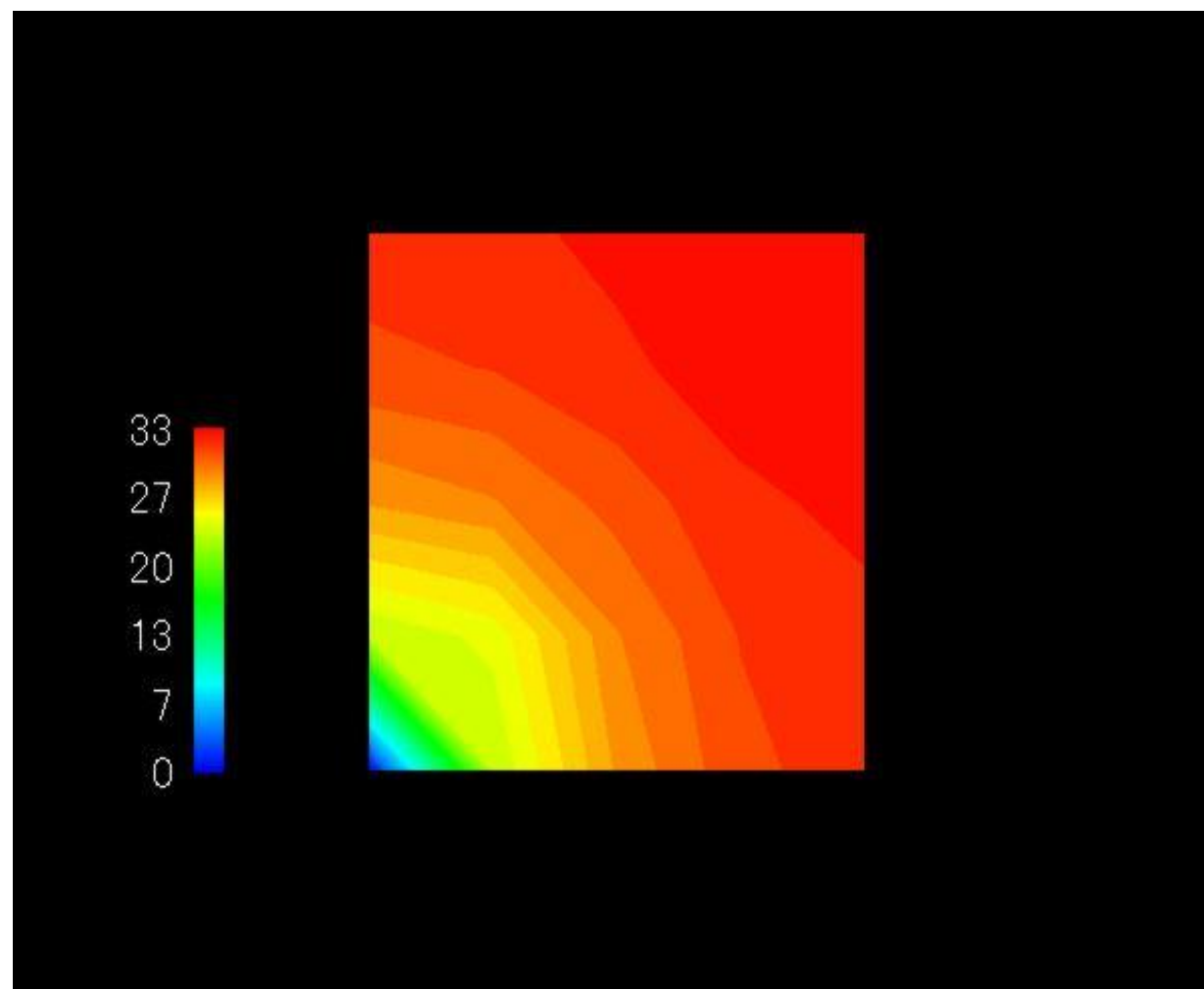
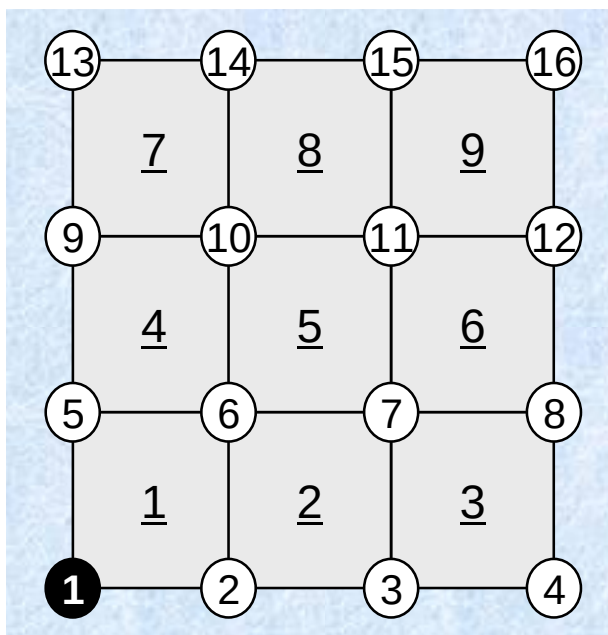
$[K]\{\Phi\} = \{F\}$



Φ_1	Φ_2	Φ_3	Φ_4	Φ_5	Φ_6	Φ_7	Φ_8	Φ_9	Φ_{10}	Φ_{11}	Φ_{12}	Φ_{13}	Φ_{14}	Φ_{15}	Φ_{16}	}	=	{	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}
----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	-------------	-------------	-------------	-------------	-------------	-------------	-------------	---	---	---	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------

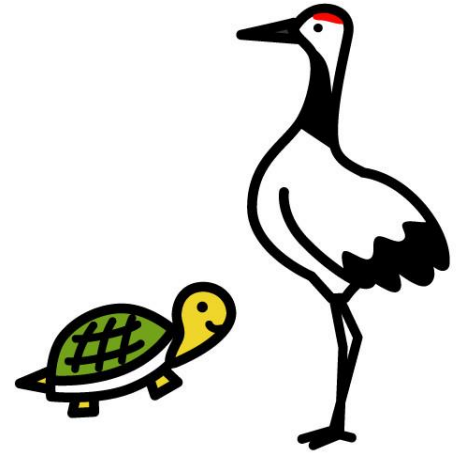
計算結果

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



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
 - 巨大な「鶴亀算」の解法に関する研究
 - 様々な分野のシミュレーションに役に立つ(と思う)
- 直接法 (Direct Method)
 - 「逆行列」を求める方法⇒大規模問題では時間がかかる
- 反復法 (Iterative Method)
 - 繰り返しにより, 正解に近づける
 - 大規模問題, 並列計算機向け



Science

Modeling

Algorithm

Software

Hardware

反復法とは . . .

Linear Equations
連立一次方程式

Initial Solution
初期解

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

$\mathbf{A} \qquad \mathbf{x} \qquad \mathbf{b}$

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

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

- 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

```

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
  
```

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)〕

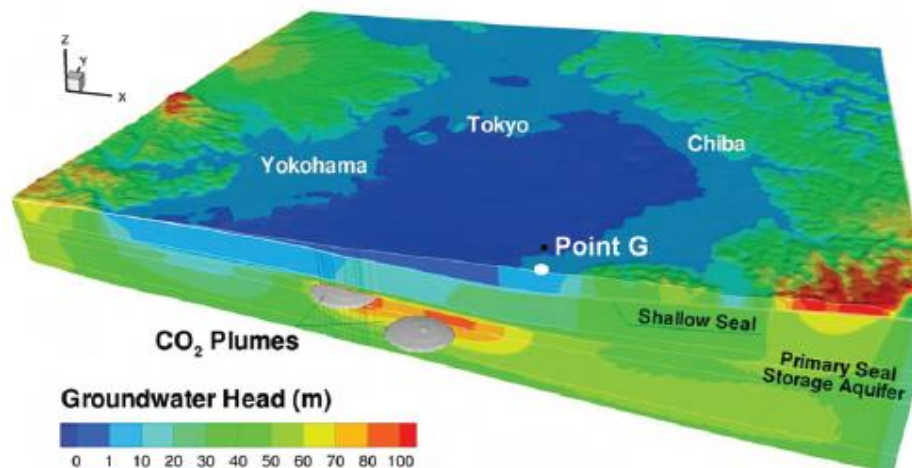
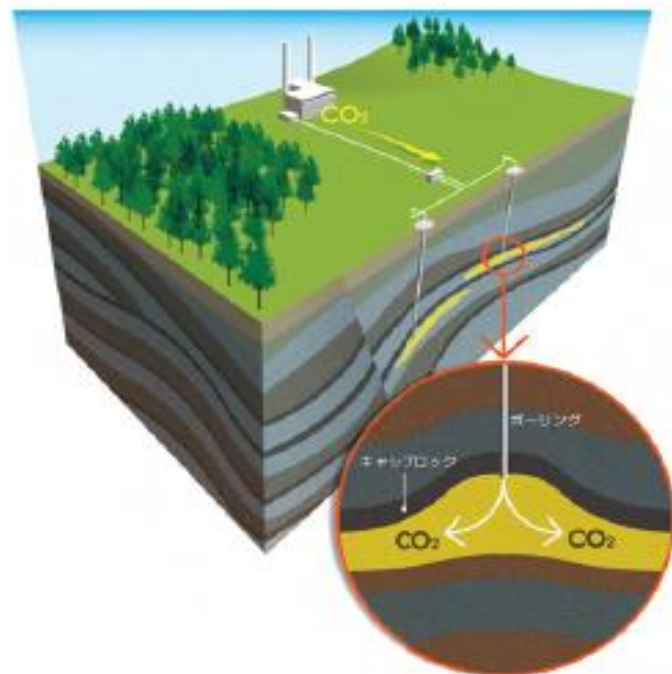
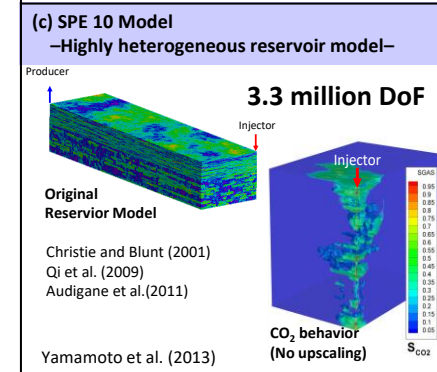
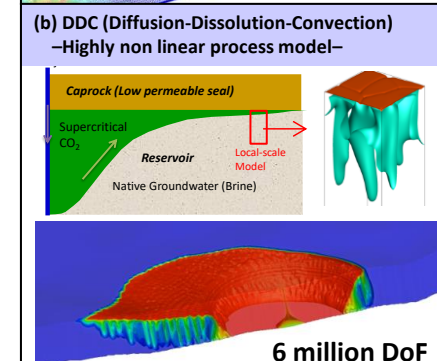
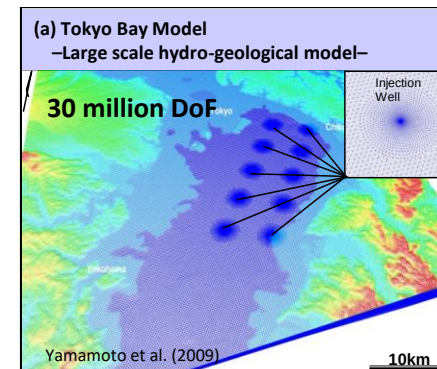


図-4 CO₂ 圧入後の地下水圧 (全水頭換算) の分布 (100 年後)



※DOF: degrees of freedom

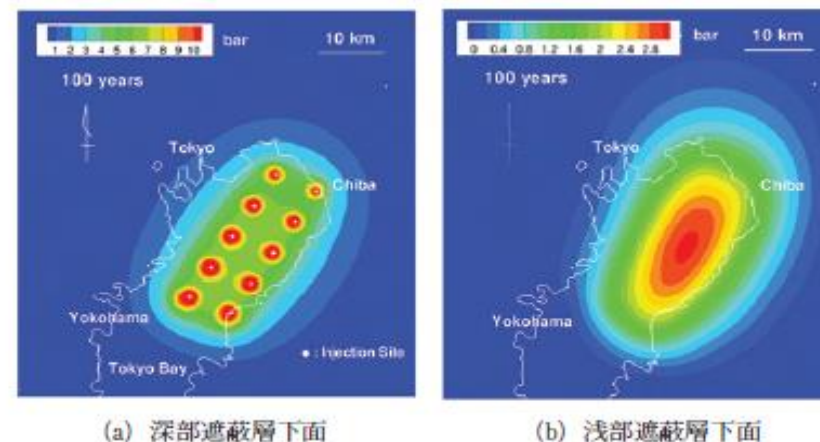
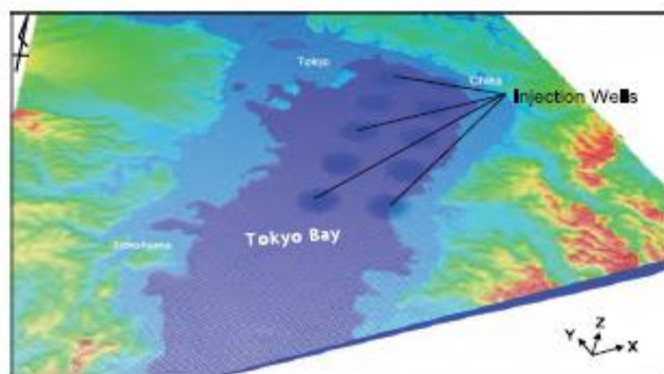
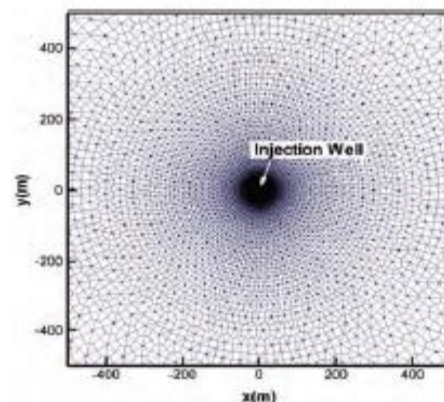


図-5 圧力上昇量の平面分布 (初期状態からの増分、圧入開始から 100 年後)



実用事例: CO₂地下貯留 シミュレーション

Science

Modeling

Algorithm

Software

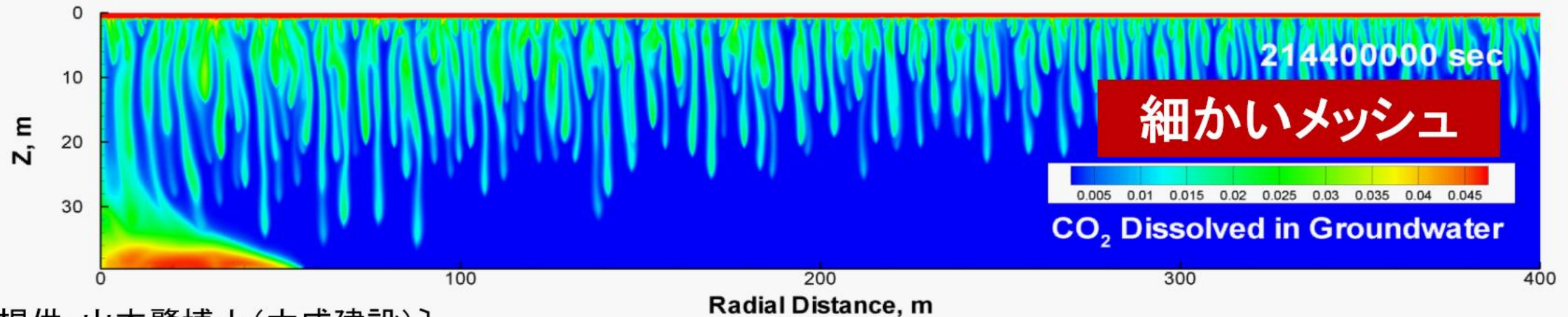
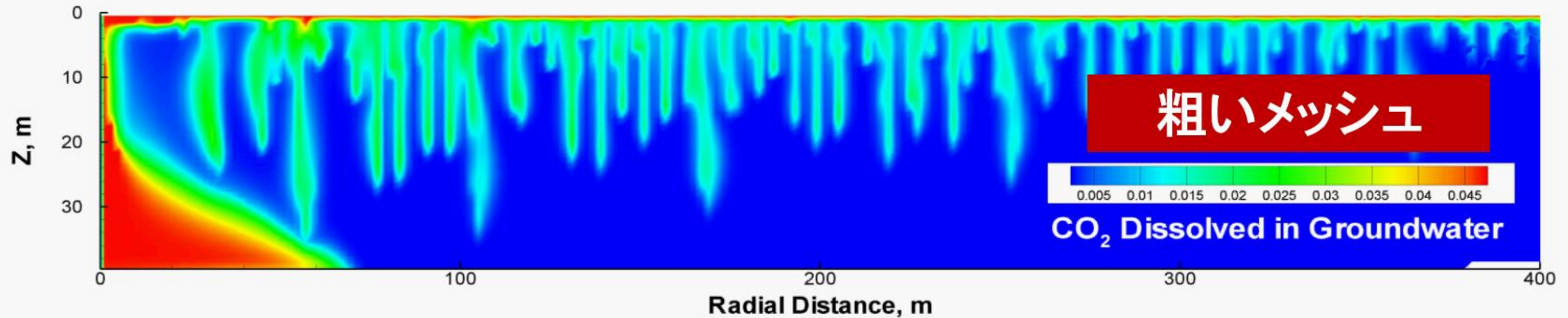
Hardware

- 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(巨大な鶴亀算)
 - 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): 共役勾配法と類似した解法
- Hardware
 - 地球シミュレータ(海洋研究開発機構, NEC), FX10(東大)

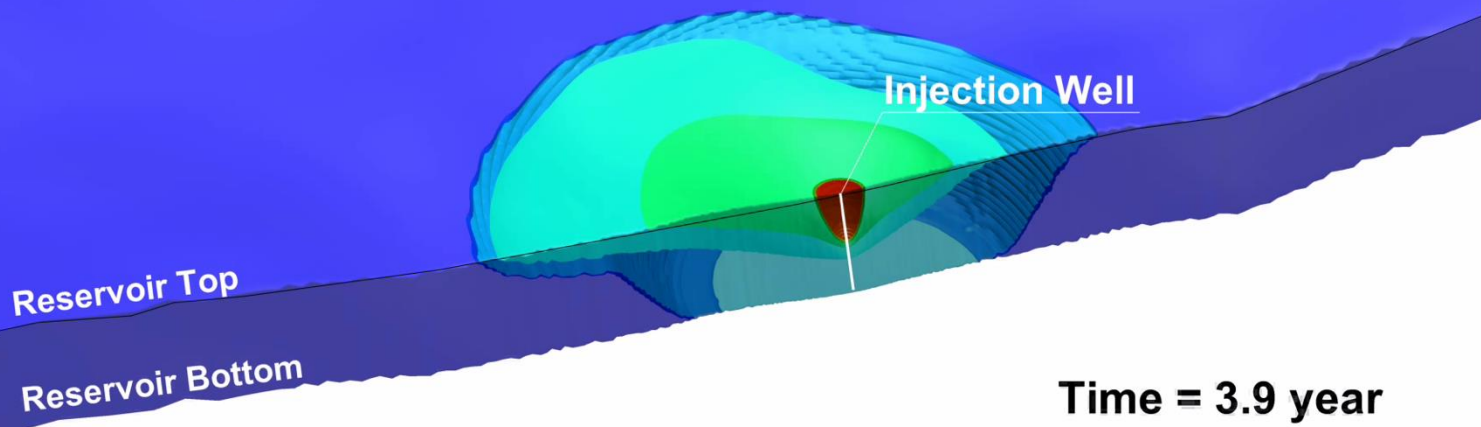
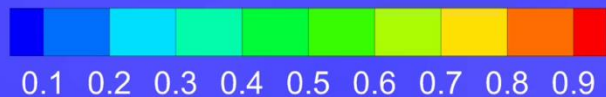
CO₂が地下水に溶けていく様子

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

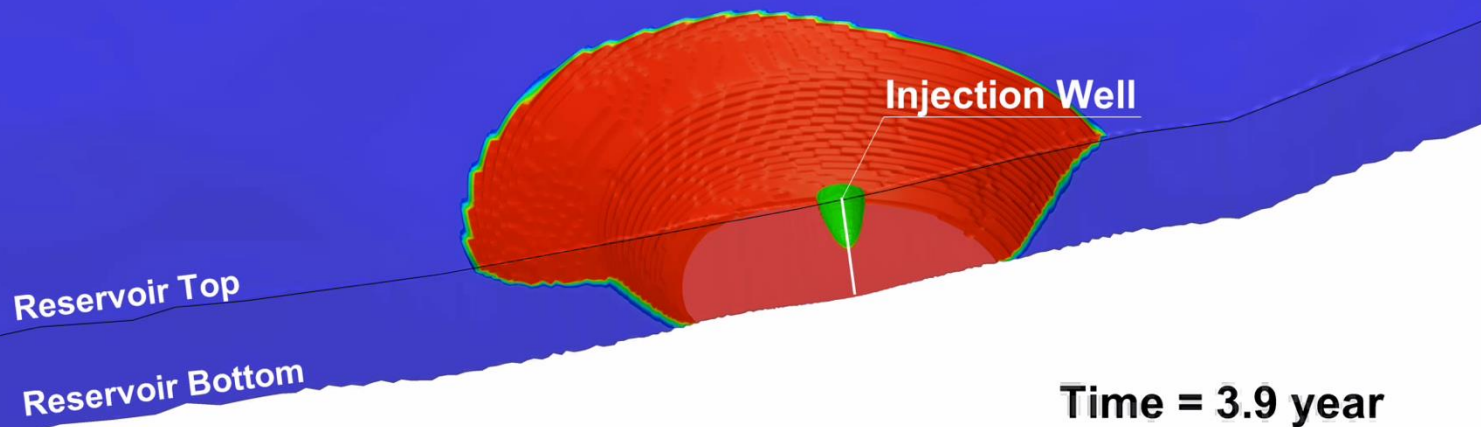
三次元多相流れ（気液）
＋物質移動, という非常に
複雑で難しい問題



CO₂ Saturation



CO₂ Dissolution in Groundwater



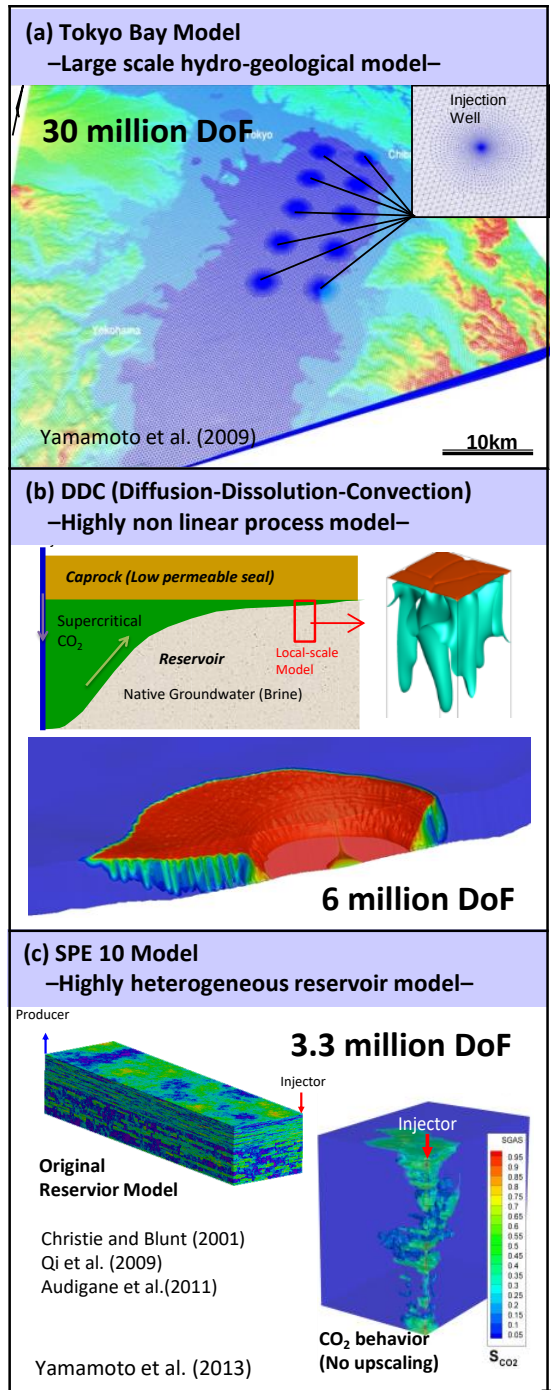
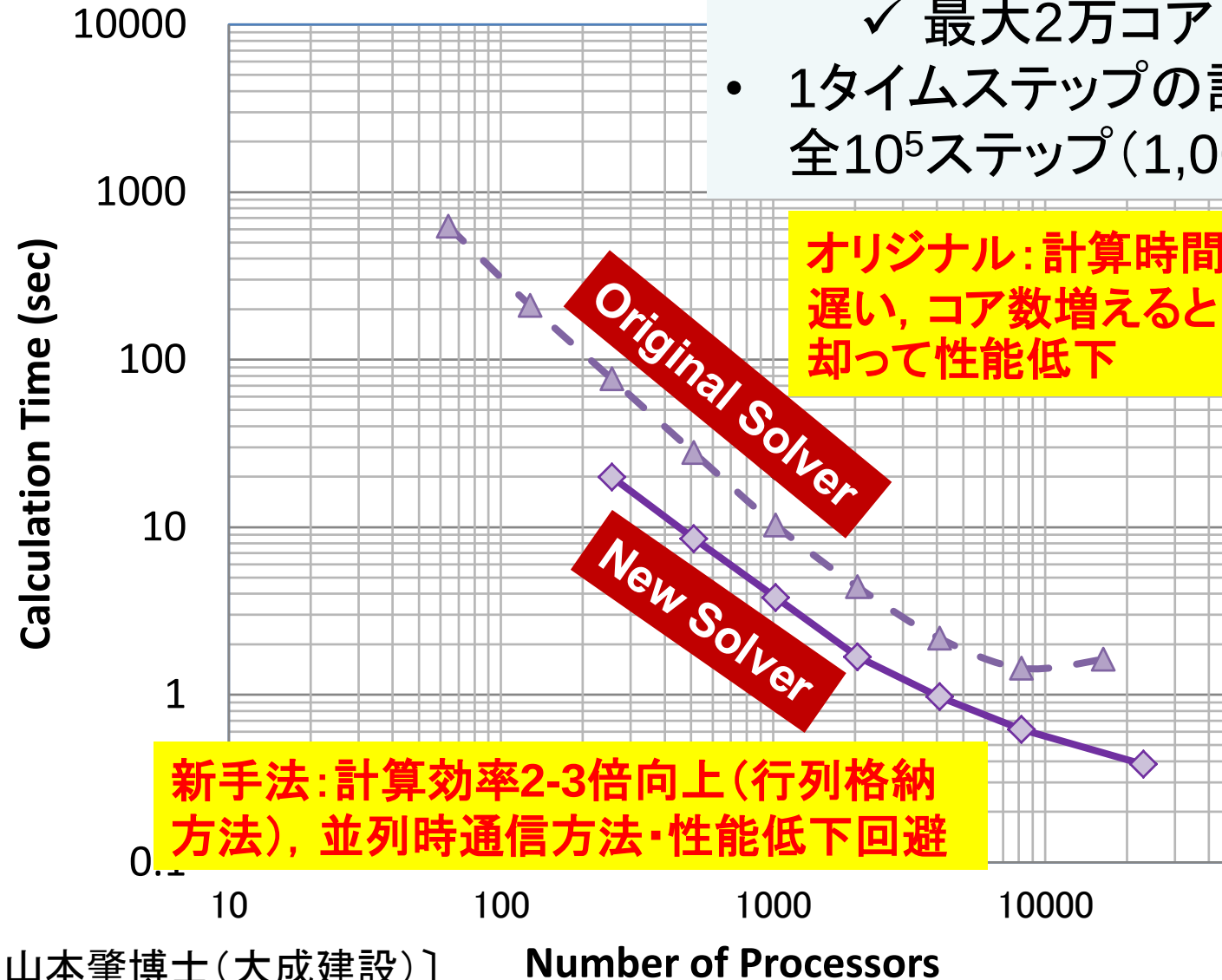
1,000年分の
計算時間履歴
未知数: 3千万
10⁵タイムステップ
(1ステップ3日)

〔画像提供: 山本肇博士(大成建設)〕

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)

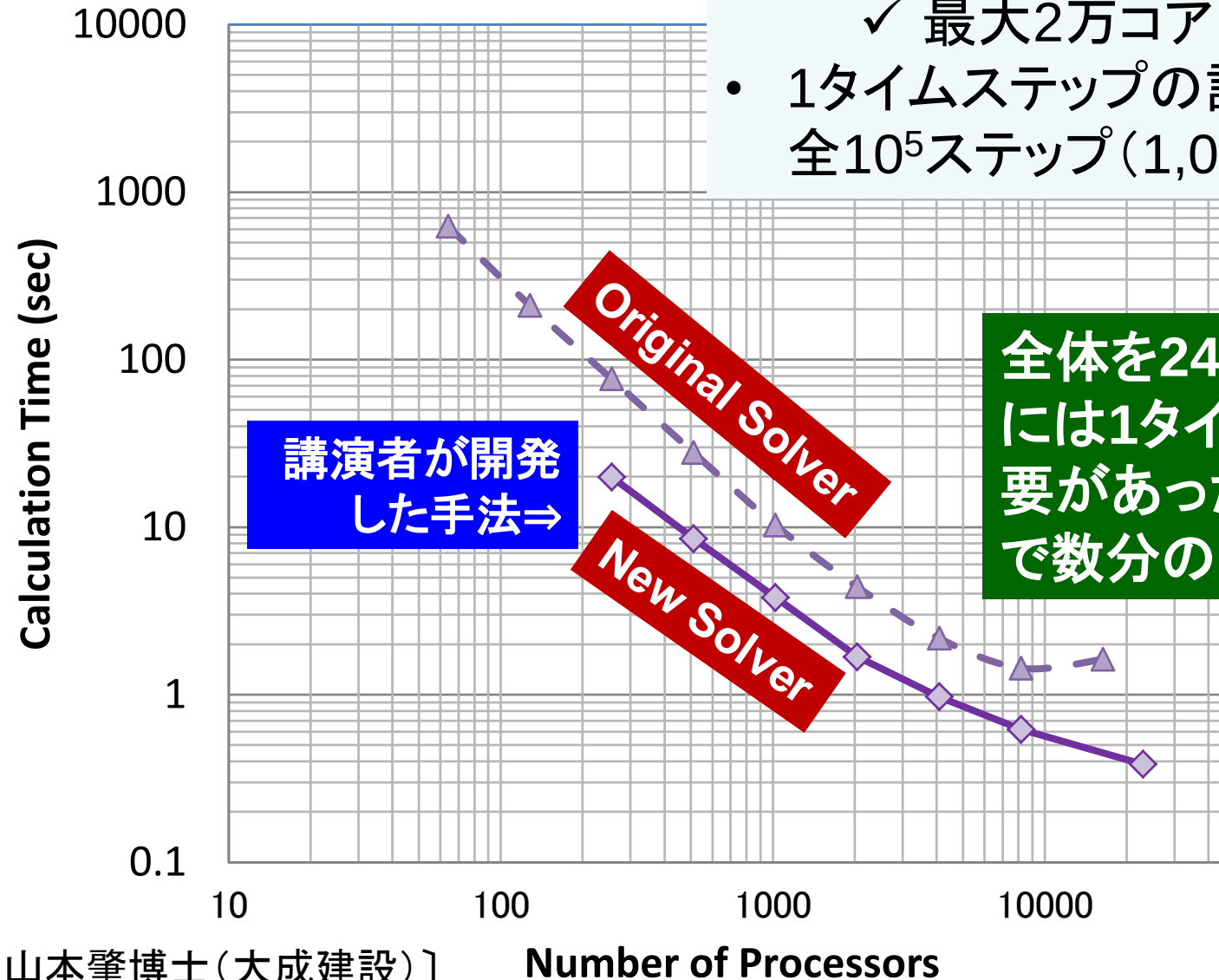


※DOF: degrees of freedom

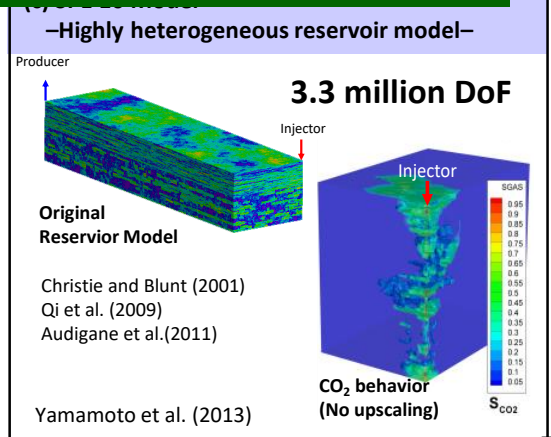
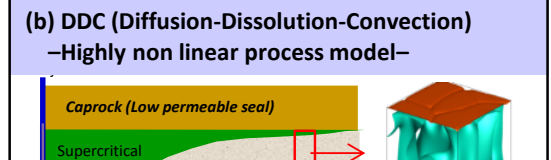
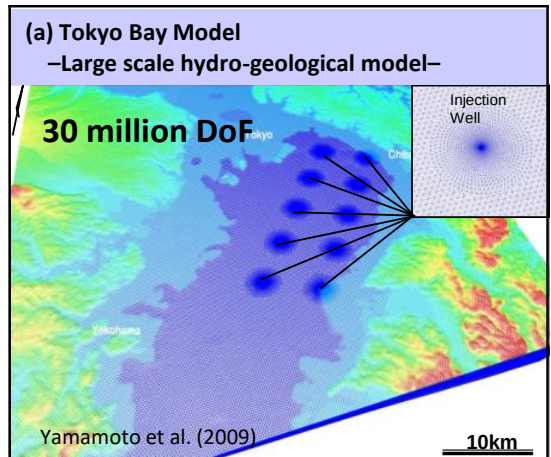
大規模計算結果

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)



全体を24時間以内で終わらせるためには1タイムステップ0.80以内にする必要があった(Odysseyでは同じCPU数で数分の1の計算時間)



※DOF: degrees of freedom

まとめ

- 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
- 「行列・ベクトル」を勉強しよう！

Thank you for watching