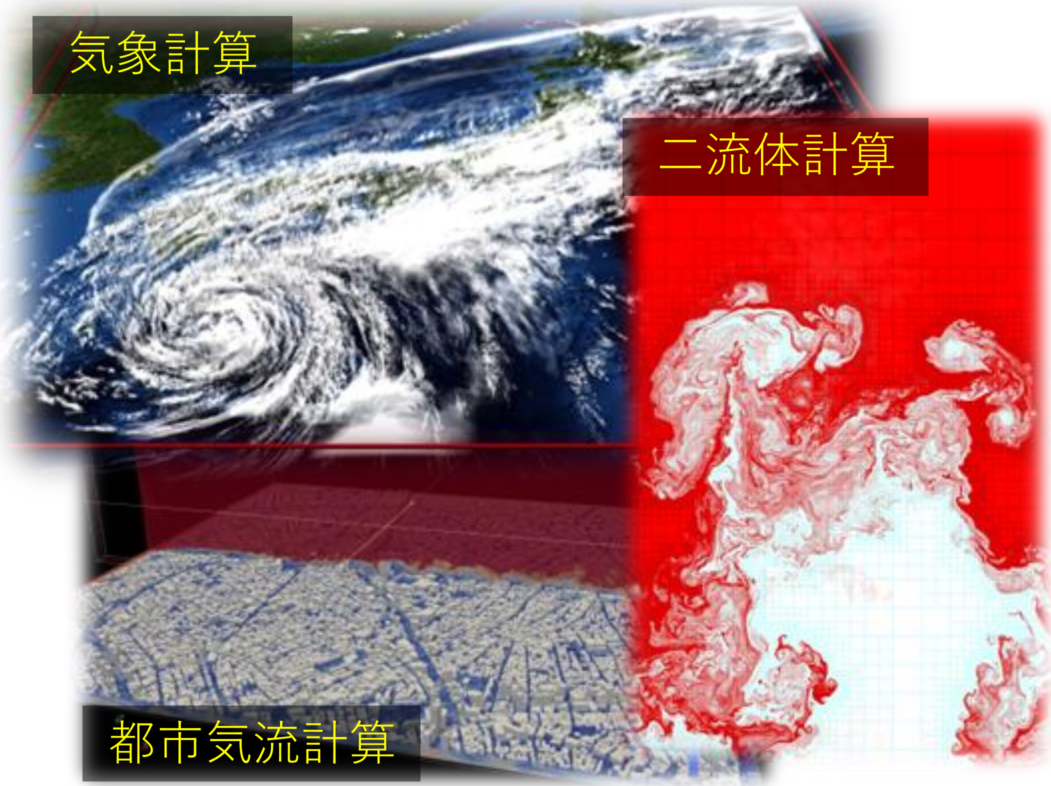
シミュレーションってなあに？
- スパコンで再現する物理現象 -



スパコンならば、難しい
数式も簡単に解ける！？

下川辺 隆史
（東京大学 情報基盤センター）

さっそくですが、
シミュレーションとは何でしょうか？

シミュレーション
物理的・生態的・社会的等のシステムの挙動を、これとほぼ同じ法則に支配される他のシステムまたはコンピューターによって、模擬すること。（広辞苑）

気象シミュレーションの一例

ASUCA simulation

5376 x 4800 x 60 mesh (horizontal mesh resolution = 500 m)

一番身近なスパコンによるシミュレーション

一番身近な
数値シミュレーション
「天気予報」
を通して
シミュレーションの原理
を考えてみましょう。

気象庁（https://www.jma.go.jp/jma/index.html）

気象計算などの流体現象の表現

■ナビエ-ストークス方程式

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} + (\boldsymbol{u} \cdot \nabla)\boldsymbol{u} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \nu\nabla^2\boldsymbol{u} + \frac{1}{\rho}\boldsymbol{F}$$

ここに注目！
「拡散」といいます

- 流体を表現しています。
- 難しい方程式です（大学の物理で習います）。

■この方程式を解きたい。

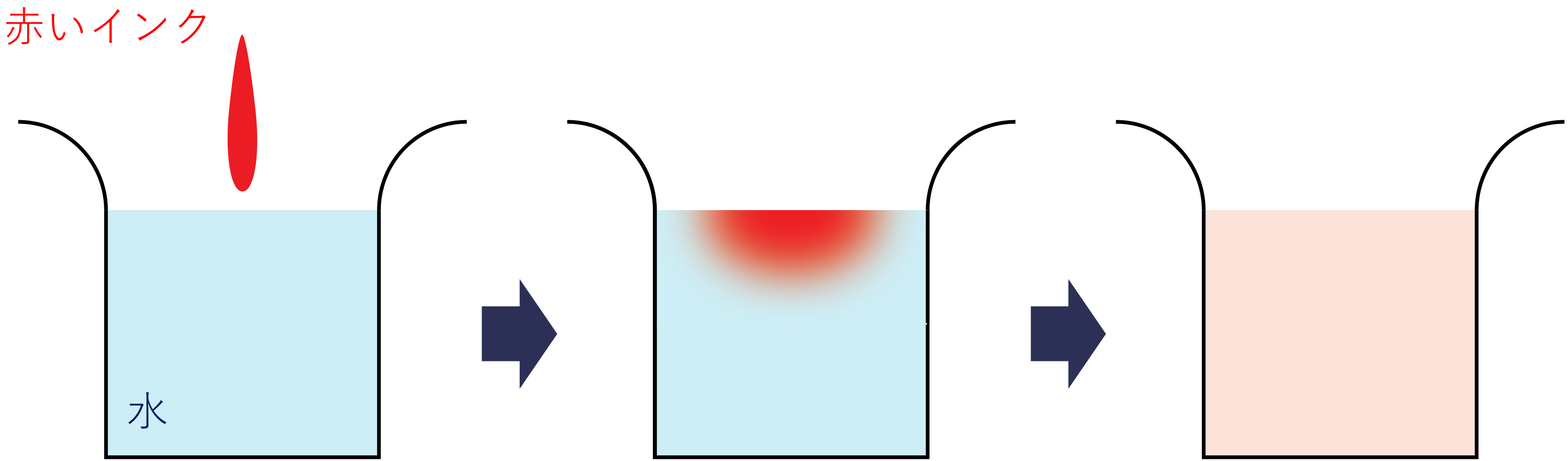
■人間には難しい。スパコンならば解ける？

実はこのままではスパコンでも解けません。
例として、この方程式中の「拡散現象」を
どのようにシミュレーションするか考えてみます。

Wisteria/BDEC-01 スパコン
（1階で見学できます）

拡散現象：水の中を広がるインク

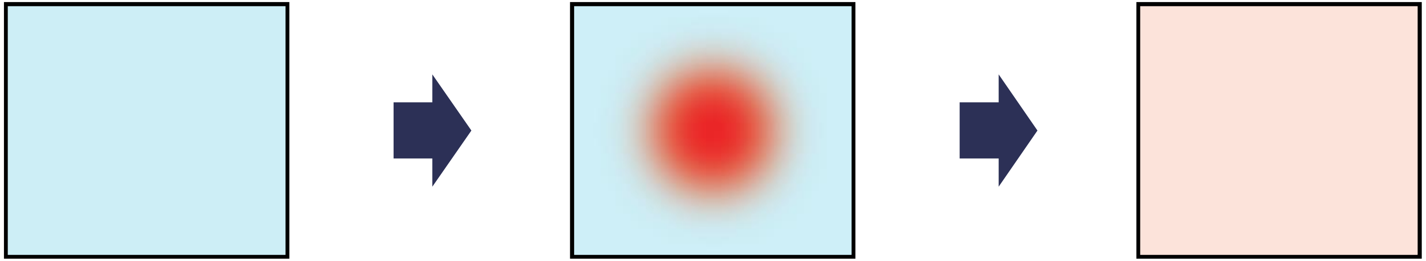
■水中にインクをこぼすと、インクは水中で広がります。
■これを「拡散」と呼びます。



時間とともに赤いインクが広がります。

拡散現象：上から見た広がるインク

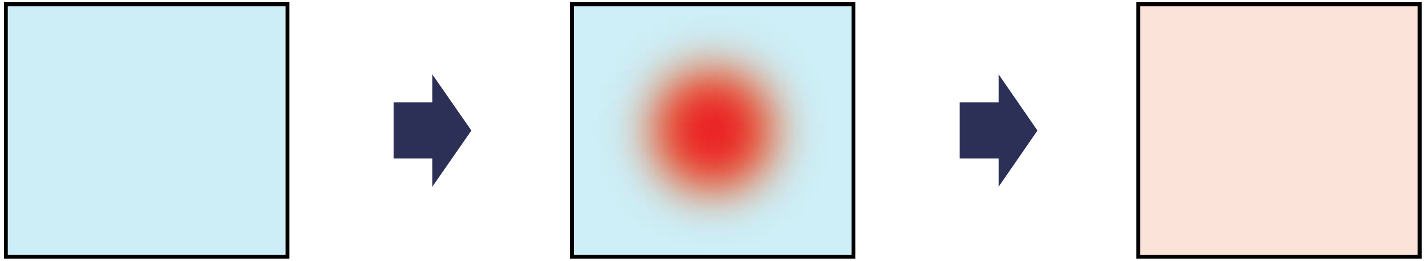
■これを上から見ると



■コンピュータはこれをどのように計算するのでしょうか？

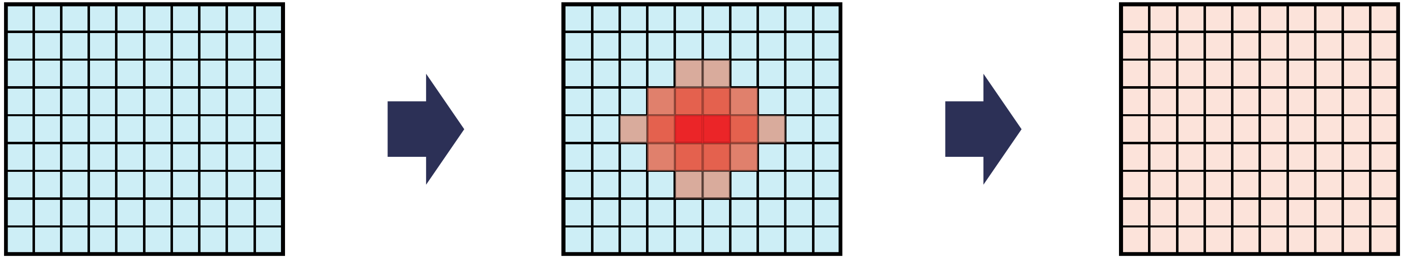
拡散現象：上から見た広がるインク

■これを上から見ると



■コンピュータはこれをどのように計算するのでしょうか？

■空間を細かいマス目で切って計算します。つまり近似計算です。



一つのマス目は同じ濃度（値）とします。
ギザギザした形になります。

拡散現象のルール

■新しいインクの濃度は、自分自身の値の1/2と上下左右の隣り合うマス目の値の1/8を足した濃度になります。

■例：

- 真ん中の点は、
  64x1/2 + （0 + 0 + 0 + 0)/8 = 32
- 一つ右側の点は、
  0x1/2 + （64 + 0 + 0 + 0)/8 = 8

0	0	0	0	0
0	0	0	0	0
0	0	64	0	0
0	0	0	0	0
0	0	0	0	0

？

最初の状態。インクが真ん中にあります。

拡散現象のルール

■新しいインクの濃度は、**自分自身の値の1/2と上下左右の隣り合うマス目の値の1/8**を足した濃度になります。

■例：

- 真ん中の点は、
  64x1/2 + （0 + 0 + 0 + 0)/8 = 32
- 一つ右側の点は、
  0x1/2 + （64 + 0 + 0 + 0)/8 = 8

0	0	0	0	0
0	0	0	0	0
0	0	64	0	0
0	0	0	0	0
0	0	0	0	0

最初の状態。インクが真ん中にあります。

0	0	0	0	0
0	0	8	0	0
0	8	32	8	0
0	0	8	0	0
0	0	0	0	0

次の状態。インクが拡散。総量は保存。

拡散現象のルール

- 新しいインクの濃度は、**自分自身の値の1/2**と**上下左右の隣り合うマス目の値の1/8**を足した濃度になります。
- 例：
  - 真ん中の点は、
    64x1/2 + （0 + 0 + 0 + 0)/8 = 32
  - 一つ右側の点は、
    0x1/2 + （64 + 0 + 0 + 0)/8 = 8

0	0	0	0	0
0	0	0	0	0
0	0	64	0	0
0	0	0	0	0
0	0	0	0	0

最初の状態。インクが真ん中にあります。

0	0	0	0	0
0	0	8	0	0
0	8	32	8	0
0	0	8	0	0
0	0	0	0	0

次の状態。インクが拡散。総量は保存。

拡散現象のルール

■新しいインクの濃度は、自分自身の値の1/2と上下左右の隣り合うマス目の値の1/8を足した濃度になります。

■例：

- 真ん中の点は、
  64x1/2 + (0 + 0 + 0 + 0)/8 = 32
- 一つ右側の点は、
  0x1/2 + (64 + 0 + 0 + 0)/8 = 8

0	0	0	0	0
0	0	0	0	0
0	0	64	0	0
0	0	0	0	0
0	0	0	0	0

最初の状態。インクが真ん中にあります。

0	0	0	0	0
0	0	8	0	0
0	8	32	8	0
0	0	8	0	0
0	0	0	0	0

次の状態。インクが拡散。総量は保存。

拡散現象のルール

- 新しいインクの濃度は、**自分自身の値の1/2**と**上下左右の隣り合うマス目の値の1/8**を足した濃度になります。
- これを繰り返すと、

0	0	0	0	0
0	0	0	0	0
0	0	64	0	0
0	0	0	0	0
0	0	0	0	0

0	0	0	0	0
0	0	8	0	0
0	8	32	8	0
0	0	8	0	0
0	0	0	0	0

0	0	1	0	0
0	2	8	2	0
1	8	20	8	1
0	2	8	2	0
0	0	1	0	0

最初の状態。インクが真ん中にあります。

インクが拡散。総量は保存。

拡散現象の計算

■ルールを一般的な数式で表すと、

$$\underbrace{u_{i,j}^{n}}_{\text{平均後の自分自身の値}} = (\underbrace{u_{i-1,j}^{n-1} + u_{i+1,j}^{n-1} + u_{i,j-1}^{n-1} + u_{i,j+1}^{n-1}}_{\text{上下左右の値}} + \underbrace{4u_{i,j}^{n-1}}_{\text{自分自身の値の４倍}})/8$$

j \ i	1	2	3	4	5
1	0	0	0	0	0
2	0	0	0	0	0
3	0	0	64	0	0
4	0	0	0	0	0
5	0	0	0	0	0

最初の状態

繰り返し適用すると、インクが拡散します。

拡散現象の計算

■ルールを一般的な数式で表すと、

$$u_{i,j}^{n} = (\underbrace{u_{i-1,j}^{n-1} + u_{i+1,j}^{n-1} + u_{i,j-1}^{n-1} + u_{i,j+1}^{n-1}}_{\text{上下左右の値}} + \underbrace{4u_{i,j}^{n-1}}_{\text{自分自身の値の４倍}})/8$$

平均後の
自分自身の値

j \ i	1	2	3	4	5
1	0	0	0	0	0
2	0	0	8	0	0
3	0	8	32	8	0
4	0	0	8	0	0
5	0	0	0	0	0

1回目の操作後

繰り返し適用すると、インクが拡散します。

拡散現象の計算

■ルールを一般的な数式で表すと、

平均後の自分自身の値

$$u_{i,j}^{n} = (\underbrace{u_{i-1,j}^{n-1} + u_{i+1,j}^{n-1} + u_{i,j-1}^{n-1} + u_{i,j+1}^{n-1}}_{\text{上下左右の値}} + \underbrace{4u_{i,j}^{n-1}}_{\text{自分自身の値の４倍}})/8$$

j \ i	1	2	3	4	5
1	0	0	1	0	0
2	0	2	8	2	0
3	1	8	20	8	1
4	0	2	8	2	0
5	0	0	1	0	0

2回目の操作後

繰り返し適用すると、インクが拡散します。

拡散現象の数式

■実際の物理現象に対して、**数式（偏微分方程式）**によるモデル化を行います。実はこちらがおおもとです。

■空間をマス目のように切り近似した値にすることを**離散化**と言います。

■コンピュータで計算できる**足算、かけ算などの四則演算**にします。

拡散方程式
（偏微分方程式）

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$$

離散化し、コンピュータが計算できる式にします。
基本的に人がやります。

四則演算

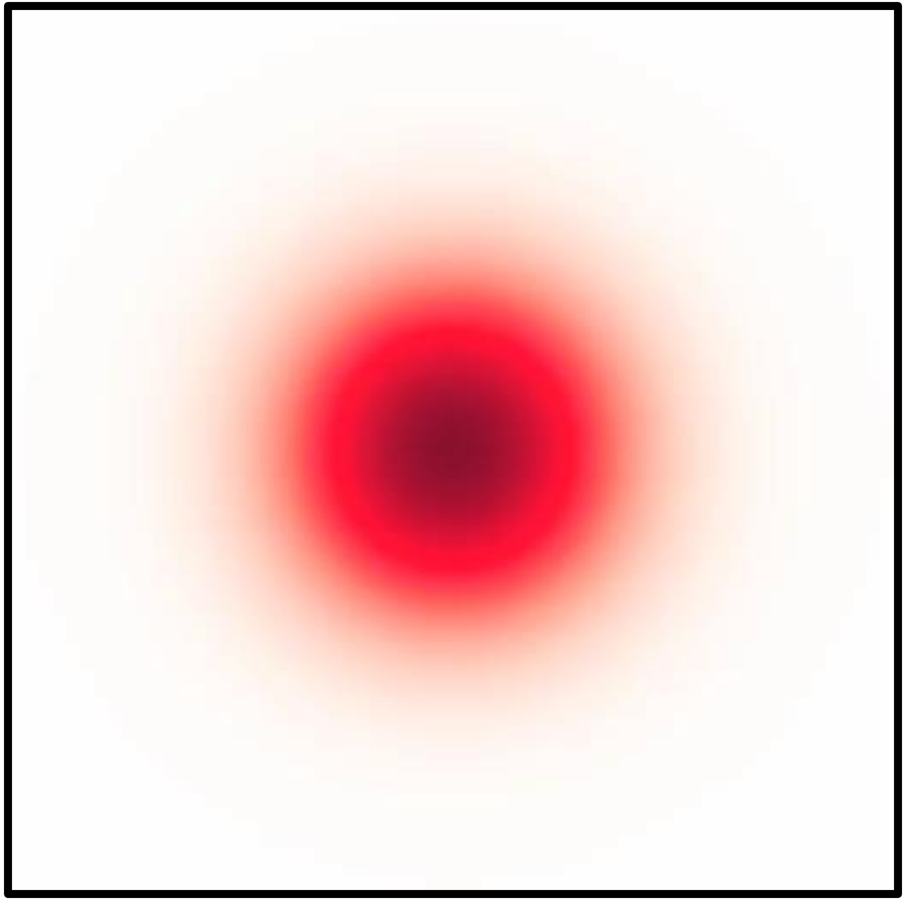
$$u_{i,j}^{n} = (u_{i-1,j}^{n-1} + u_{i+1,j}^{n-1} + u_{i,j-1}^{n-1} + u_{i,j+1}^{n-1} + 4u_{i,j}^{n-1})/8$$

拡散現象の計算例

■マス目 512 x 512

■赤インクが時間とともに拡散

512マス並んでいます
（細かくて見えません）



気象計算などの流体現象の表現

■ナビエ-ストークス方程式

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} + (\boldsymbol{u} \cdot \nabla)\boldsymbol{u} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \nu\nabla^2 \boldsymbol{u} + \frac{1}{\rho}\boldsymbol{F}$$

ここに注目！
「拡散」といいます

- 流体を表現しています。
- 難しい方程式です（大学の物理で習います）。

■流体をシミュレーションするため、この方程式を解きたい。

■人間には難しいけれども、

気象計算などの流体現象の表現

■ナビエ-ストークス方程式

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} + (\boldsymbol{u} \cdot \nabla)\boldsymbol{u} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \nu\nabla^2\boldsymbol{u} + \frac{1}{\rho}\boldsymbol{F}$$

ここに注目！
「拡散」といいます

- 流体を表現しています。
- 難しい方程式です（大学の物理で習います）。

■流体をシミュレーションするため、この方程式を解きたい。

■人間には難しいけれども、スパコンもそのままでは解けません。

数値シミュレーションは、偏微分方程式などで表された数式モデルを離散化し、足算やかけ算などの四則演算に書き換えて、解くことがわかりました。

四則演算ができればシミュレーションはできる？

■数値シミュレーション：たくさんの「算数」で構成

■例えば、先ほどの拡散計算では、

- 64x1/2 + （0 + 0 + 0 + 0)/8 = 32
- 0x1/2 + （64 + 0 + 0 + 0)/8 = 8

のような四則演算をたくさん解きました。

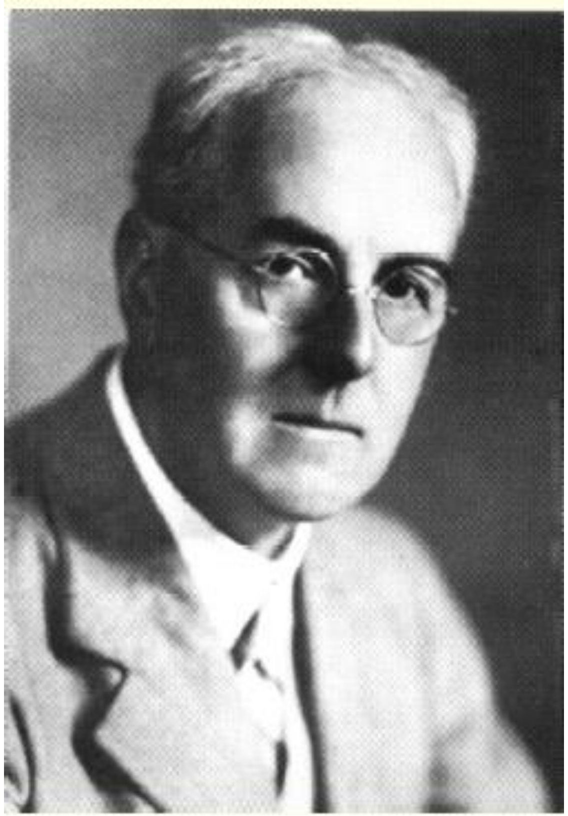
■では、四則演算さえできれば、気象計算はできるのでしょうか？

実はできます。四則演算ができれば良いので、
原理的には手で計算できるはずです。

世界初　天気の数値手計算

■6時間の天気予報を計算してみよう！(1922年)

- イギリスのリチャードソン
  (L.F. Richardson)
- 一人で一ヶ月かけて手計算
- 縦横200km、高さ5層に分割した各マス目の気圧変化を計算



L.F. Richardson

(http://docsrv.godac.jp/MSV2_DATA/12/be77_09.pdf
Weather Prediction by Numerical Process, 1922)

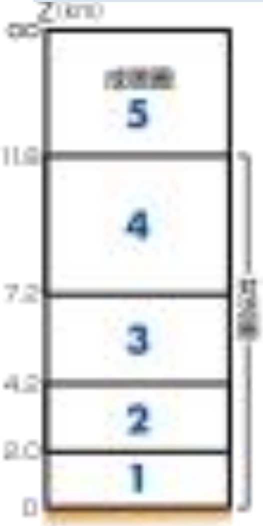
世界初　天気の数値手計算

■6時間の天気予報を計算してみよう！(1922年)

リチャードソンが用いたマス目
先程の拡散の例のようにマス目
を切っている

水平方向

鉛直方向



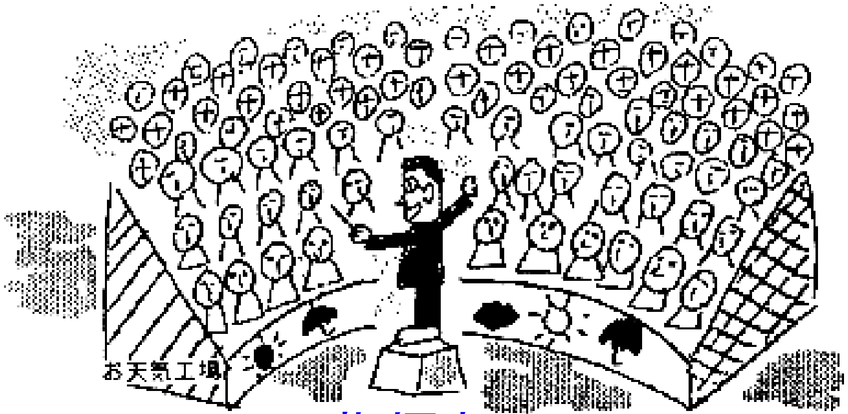
でも、天気予報は失敗

(http://docsrv.godac.jp/MSV2_DATA/12/be77_09.pdf
Weather Prediction by Numerical Process, 1922)

世界初　天気の数値手計算

■「リチャードソンの夢」
- コンピュータ誕生以前の1922年
- もしも実際の時間と同じスピードで天気予報するには…

64000人



指揮者

64000人が指揮者のもとで
となりの人と結果を交換しながら
紙と鉛筆で計算すればできる！

リチャードソンの計算は失敗したが、
まさしく現在の天気の数値計算のアイディア

気象庁（http://www.jma.go.jp/jma/kishou/know/whitep/1-3-2.html）

現代のスパコン

■「リチャードソンの夢」からほぼ100年

■東京大学 情報基盤センター Wisteria/BDEC-01

- 毎秒3.3京回の計算（毎秒33,000,000,000,000,000回=33ペタフロップス）
- 世界40位、日本4位
- 7,680 + 45台の計算機で構成
- 一階で見学できます。

スパコンは魔法の箱
ではなかった。

多数の四則演算を高
速で実行する計算機

数理モデル、離散化、実装など
シミュレーションに必要なこと
は、基本的には人が行います。

ここが私たちの研究

まとめ

■シミュレーション
- 天気予報、物づくりなど、我々の生活に非常に身近なもの

■シミュレーションは、実は多くの四則演算で行われている。
- 原理的には手で計算できる！

■スパコンは難解な物理現象を解く魔法の箱ではない。

■スパコンは多数の四則演算を短時間で計算できる。

■情報基盤センターでは、
- その時代に実現可能な高精細や高精度な計算手法（離散化方法）の研究
- 最先端のスパコンの効率的な利用
- それによる新しい科学工学計算とその発展

に取り組んでいます。