広域分散アプリケーション特論

2005前期　月曜　3時限
場所：情報基盤センター3F 多目的講義室

担当　青柳　睦
aoyagi@cc.kyushu-u.ac.jp

5月9日（月）

講義の内容，成績評価方針(再々々々掲)

計算科学の概論

計算機のシンポと計算科学
計算科学的手法の特徴
主要なシミュレーション手法の紹介

講義の内容

- グリッドの概要
  - Gridコンピューティングとは
  - サイエンス分野での利用
  - ビジネス分野での利用
- 計算科学の概論
  - 主要なシミュレーション手法
- サイエンスGrid　NAREGI
  - Globus, Unicoreの現状
  - NAREGIミドルウエア概要
  - 連成計算とその類型化
- テーマ　考え中

  GT4の動向に依存・・

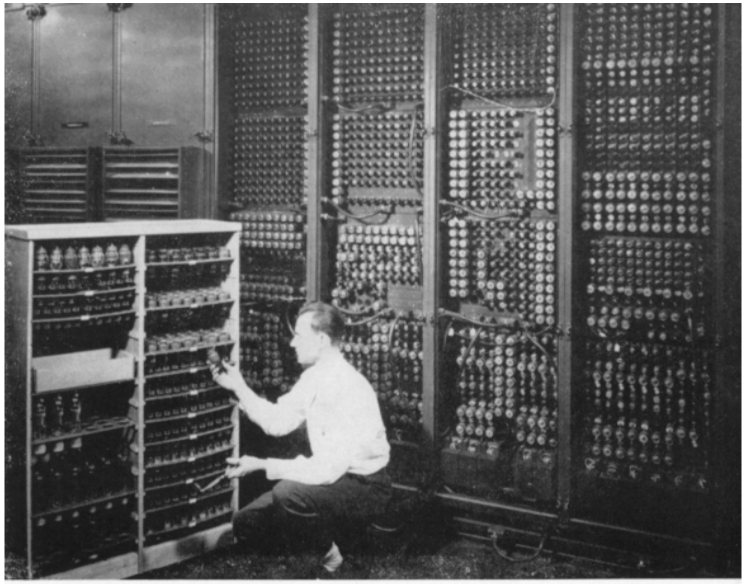
講義資料はWebで公開
server-500.cc.kyushu-u.ac.jp

計算科学の概論

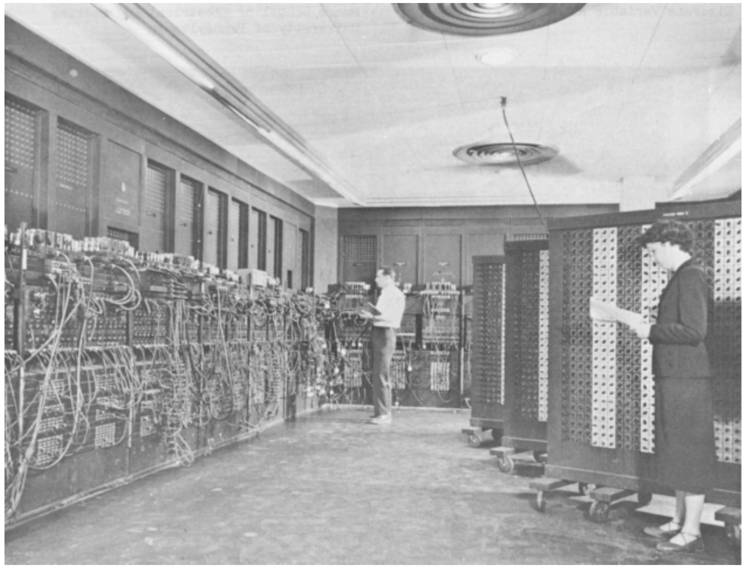
- 計算機の発展と計算科学
- シミュレーション手法の特徴
- シミュレーション手法の紹介
  - 古典系・・流体，構造解析
  - 量子系・・分子動力学，量子化学
  - 連成計算の概観

Von Neumannの頃

- 計算機の新登場　　ENIAC(1946)　1９０００真空管
  今のポケット電卓程度の能力　1500リレー、13トン
- 「乱流、量子力学、多体系の研究に電子計算機を使う」（Von Neumann）
- 現実系（10^{23}個の粒子）は到底無理



Replacing a bad tube meant checking among ENIAC's 19,000 possibilities.

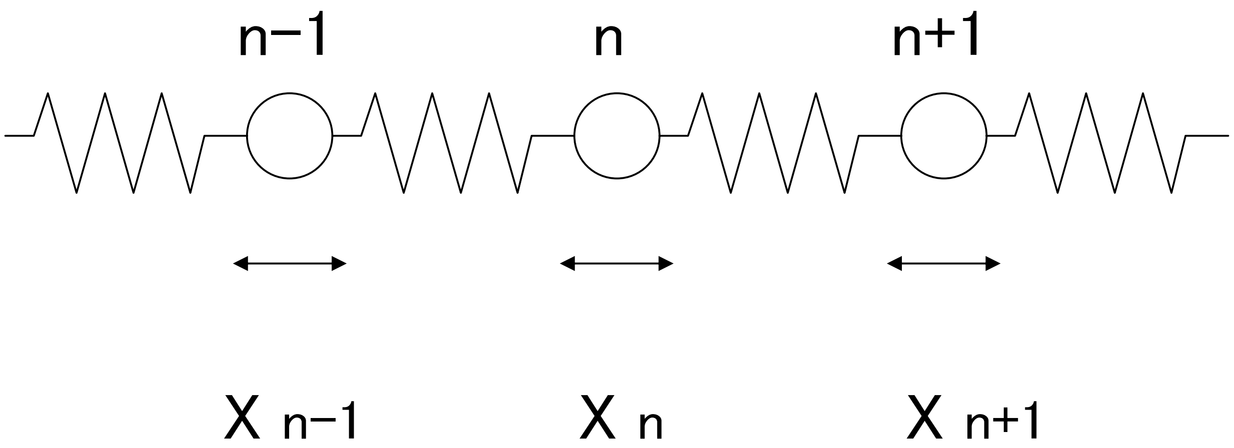


初期の成果(計算機実験)

- 1954　Fermi-Pasta-Ulam’s recurrence
  Non-equilibrium in nonlinear system
- 1960　Alder transition
  Phase transition in repulsive particles
- 1965　Soliton (Kruskal and zabusky)
  Stable pulse wave in nonlinear medium
- コンピュータシミュレーションは予期しない結果をもたらすことがある.

フェルミ・パスタ・ウラムの問題(1)

- １次元の非線形格子



もしバネがフックの法則に従えば線形格子

フェルミらは3次（以上）の非線型項を含むバネで計算機実験を行った(n=32, 64)

フェルミ・パスタ・ウラムの問題(2)

- 線形格子では、基準振動（モード）は互いに独立。すなわち1つのモードを励起しても、他のモードにエネルギーは移らない

- E.Fermiらは、非線形性があれば、すべてのモードにエネルギーが等配分され、熱平衡状態になると予想した

フェルミ・パスタ・ウラムの問題(3)

- 1955年頃、当時開発されたばかりの計算機を用いシミュレーションを行った
- 最低エネルギーのモードを励起し、それが他のモードにどのように移るかを分析
- 他の数個のモードに一旦は移るが、予想に反して、ある時間がたつと再び最低のモードにエネルギーが集中

フェルミ･パスタ･ウラムの問題(4)

- これをフェルミの再帰現象とよぶ
- シミュレーションを行うことによって初めて見いだされた現象
  →計算機実験の有用性
- 再帰現象はソリトンと関係
- 今日では系の自由度と非線形性とエネルギーを十分大きく取れば等配分が起こることが解っている →ハミルトン系カオス

ソリトン(1)

- 孤立波の発見

  J.Scott-Russel(1834)は、運河で馬に引かれていた船が急に止まったとき、船首から水面が盛り上がり、波形を変えずに伝播するのを観測した

- 水槽実験も行い、進行速度が水深だけではなく、波高にも依存することを発見した。

ソリトン(2)

- Kortewegとde Vries (1895)

  浅水波を記述する非線形方程式

  KdV方程式と呼ばれる
- 孤立波解の存在を示した
- しかし、それ以後ほとんど忘れられていた

これはTheoretical science（理論）

deductive

ソリトン(3)

- N.J.ZabuskyとM.D.Kruskal (1965)
  再帰現象やプラズマの波に関連して、KdV方程式を数値シミュレーションにより解析した
- 同じ方向に走る孤立波同士が、追い越しの前後で形を変えないことも発見した
- 非線形なら重ね合わせの原理が成り立たないはずなので、当時は不思議な現象と考えられた

ソリトンと再帰現象(4)

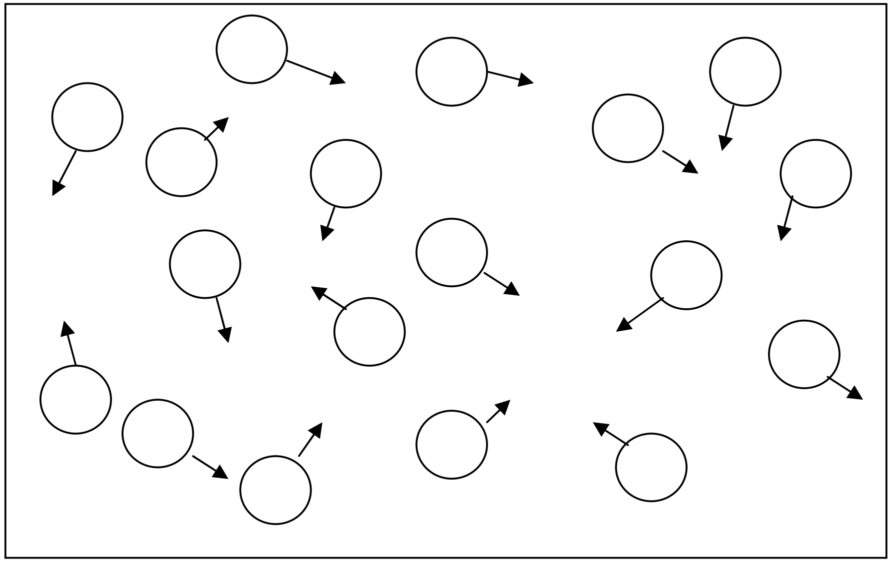
- フェルミの再帰現象は、速度の異なるいくつかのソリトンが、互いに追い抜き合い、相対位置を変えて、元の状態に戻る現象と解釈される
- 両者とも、数値シミュレーションにより、予期されなかった現象が発見された典型的な例である
- その後、逆散乱法など理論的手法へも発展

アルダー転移(1)

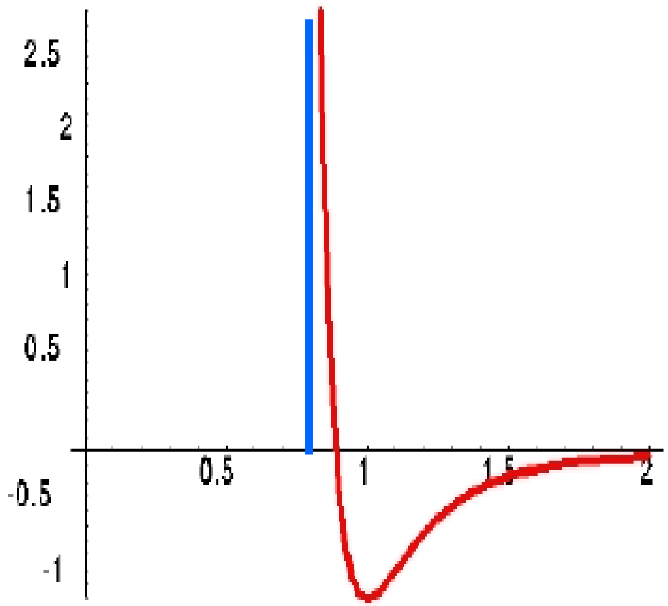
- 液体は圧力を加えると(あるいは温度を下げると)なぜ固体(液晶)に相転移するのか?
- 結晶になるのだから、分子間の引力に起因しているのではないか？
- B.J.Alderらは、実は、引力ではなく斥力が本質的であることを、数値シミュレーションにより発見した。

アルダー転移(2)

２次元での模式図



ポテンシャルエネルギー $\phi(r)=r^{-12}-2r^{-6}$ の概形.



レナードジョーンズポテンシャルと剛体ポテンシャル

アルダー転移(3)

- 分子動力学: 分子の運動を計算機によって時間的に追跡する粒子シミュレーション
- B.J.AlderとT.E.Wainwrightは1958年頃から剛体球の集団の性質を分子動力学により研究
- 斥力しかないのに、液相・固相の相転移（アルダー転移）が起こることを発見した

アルダー転移(4)

その後‥

- アルダー転移は、剛体球だけでなく、斥力だけを及ぼし合う分子の集団でも起こる
- 気相・液相の相転移では引力が重要
  液相・固相の相転移では斥力が重要
- 1939年頃から予想はされていたが、計算機によるシミュレーションで初めて確立された

計算シミュレーション　　第三の科学

- Experimental science（実験）

  Do experiments and analyze the data inductively（帰納的に）
- Theoretical science（理論）

  Make a model and analyze it deductively（演繹的に, a prioriに）
- Computational science（計算科学）

  Do simulations with a model and analyze the data inductively

シミュレーションとは何か

- 多くの構成要素からなる系の振る舞いを、構成要素間の基本法則に従ってコンピュータで計算し、そのマクロな振る舞い（時間的発展、定常状態の性質、平衡状態での統計量など）を観測する手法

- ミクロな法則からマクロな現象へ

  ・・「部分」から「全体」へ・・

  しばしば構成的手法とも呼ばれる

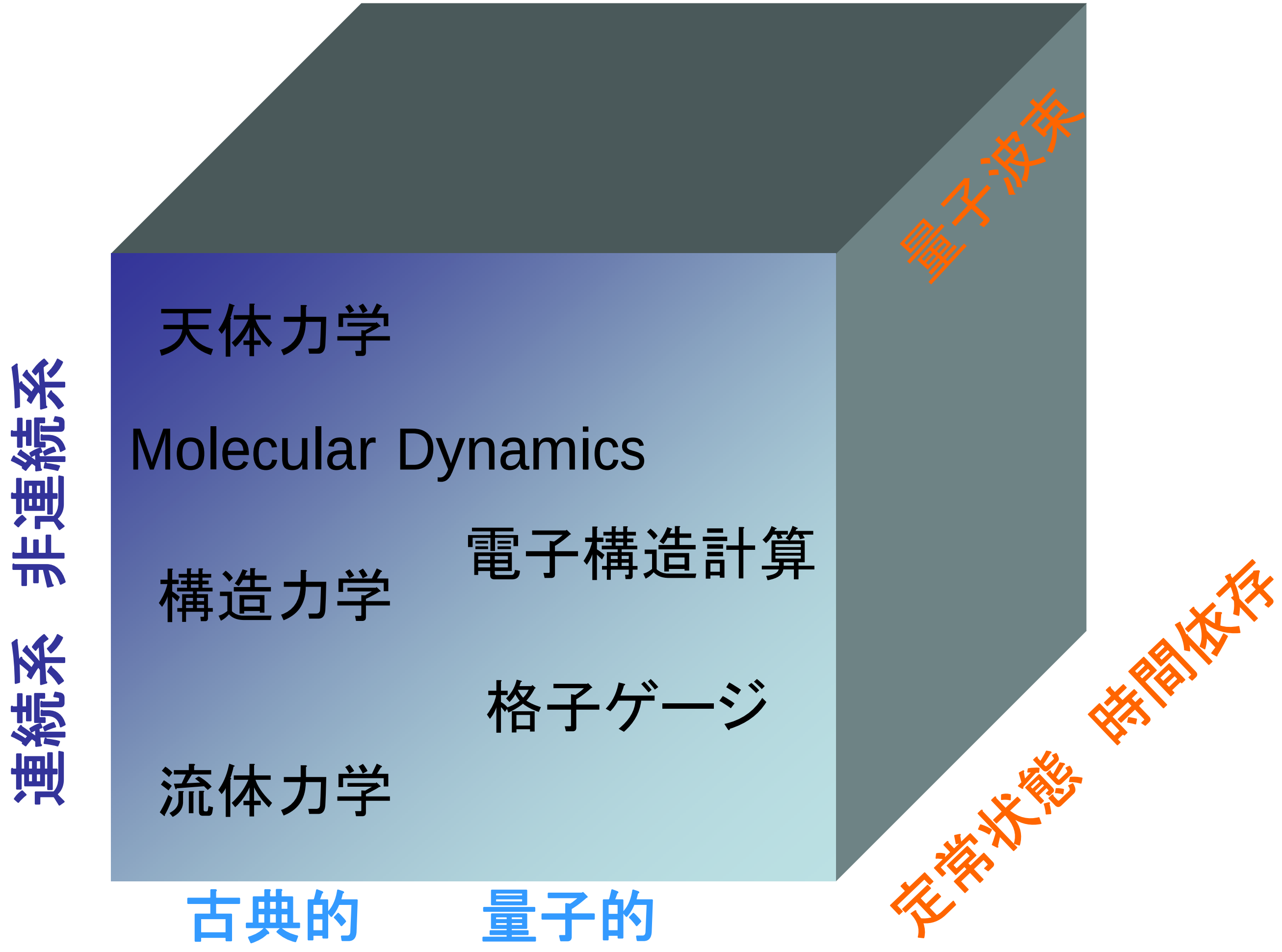
計算科学的手法の特徴

・適切なモデルを設定することにより，着目している現象を覆い隠してしまう様々な要因を排除できるので，物理的な本質を捉えやすい

・温度や圧力など，パラメタを自由に調節できる。したがって，実現しようとすると膨大な経費を要するような極限条件下や，現実の系では実現不可能な条件での物理的知見を得ることができる

・自由度が比較的小さな場合には正確な結果が得られるので，実験結果や解析的に厳密解が得られない問題にたいして，観測値の予測と吟味、近似理論の検討や改良のための規準となり得る

計算科学手法の分類



ダイナミックスvs統計力学

決定論 vs 確率論

- 確率論的(stochastic)シミュレーションー
  代表例はMonte Carlo(MC) simulation
  - 基本方程式に確率変数を含む

    （例）ホッカー・プランクEq、ボルツマンEq、・・
  - 乱数を用いる

- 決定論と確率論の区別は方法論的側面
  - 確率分布の満たす方程式は（あくまで）決定論的
  - 分子動力学とエルゴード定理
  - ほとんどのMCは多次元積分と見なせる

    例：分配関数～位相空間積分

[対象]古典系

- 古典粒子系：分子、イオン、電子、（古典的）スピンなどの粒子が古典的運動方程式に従う
  - 平衡状態vs時間発展（反応、変形、破壊、構造形成など）---有限温度では定常状態は存在しない

- 古典連続系：偏微分方程式に従う・・

液体が典型例

ナビエ・ストークス（*Navier-Stokes*）方程式

離散化（差分法、有限要素法、境界要素法・・・）

  - 乱流には定常状態はない

[対象]量子系

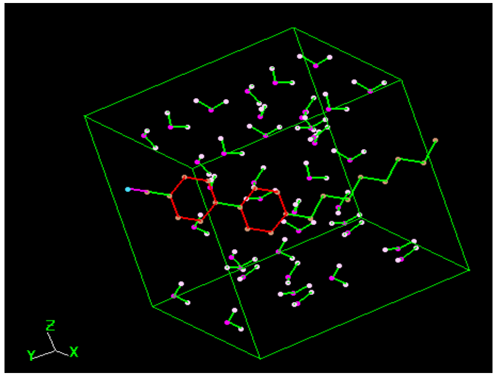
- 量子的粒子系
  - 粒子：原子、電子、陽子、スピン・・・
  - 定常状態---分子軌道法、バンド理論
  - 時間変化---量子散乱法、Car-Parrinello法
  - 量子モンテカルロ法
- 量子的連続系(?)
  - 格子ゲージシミュレーション
    - **クエンチ近似**
    - Full QCD

古典的手法　･･代表例と課題･･

- 分子動力学
  - 時間積分法、シンプレクティク
  - Force計算の工夫

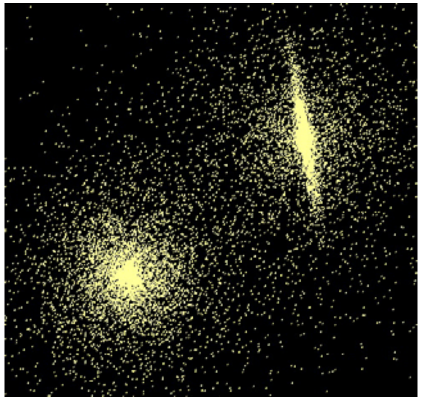
    ２体相互作用モデルの適用範囲･･
  - アンサンブル平均
- Metropolis法
  - 状態が有限個の場
  - 状態が連続の場合
  - 熱浴法
- 古典連続系
  - 空間の離散化:差分法、有限要素法、スペクトル法
  - 時間の離散化と時間積分
  - 基本解法

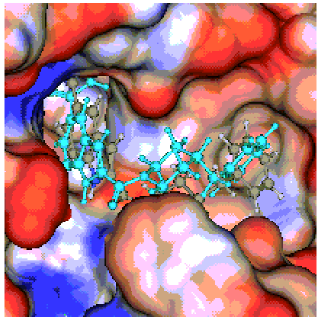
分子動力学



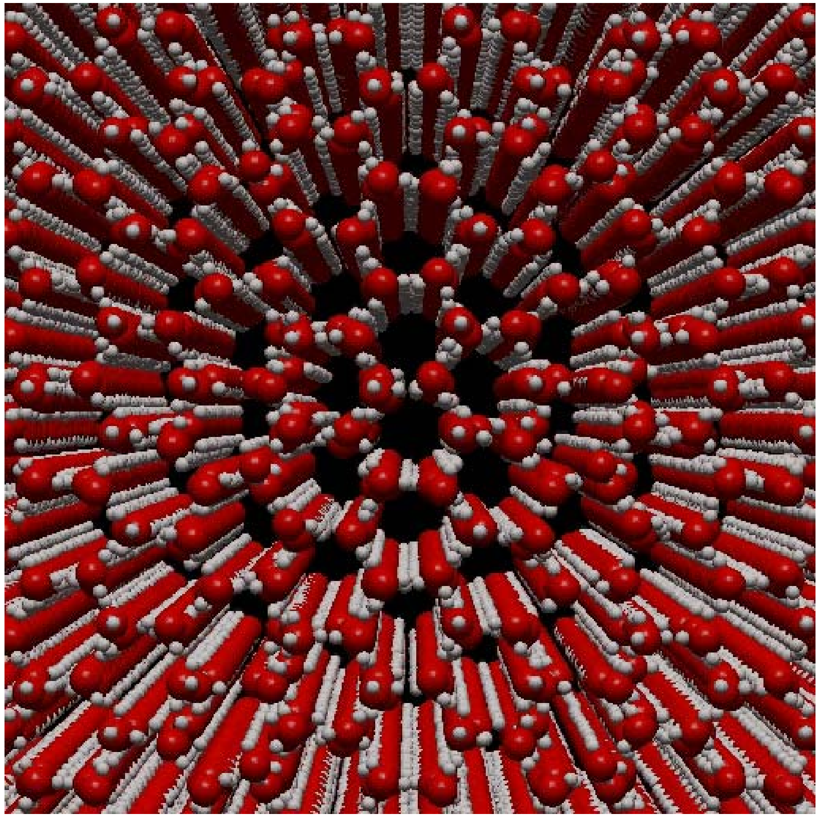
- Newton運動方程式を解く：分子、タンパク質、イオン、星、銀河、・・・
- 時間積分(連立常微分方程式解法)
  - 陽的解法：明示的に計算（RK,leap-frog)
  - 陰的解法：方程式を解いて計算、安定（台形法など）
  - 単段階法：直前のステップだけから計算（RK,台形法など）

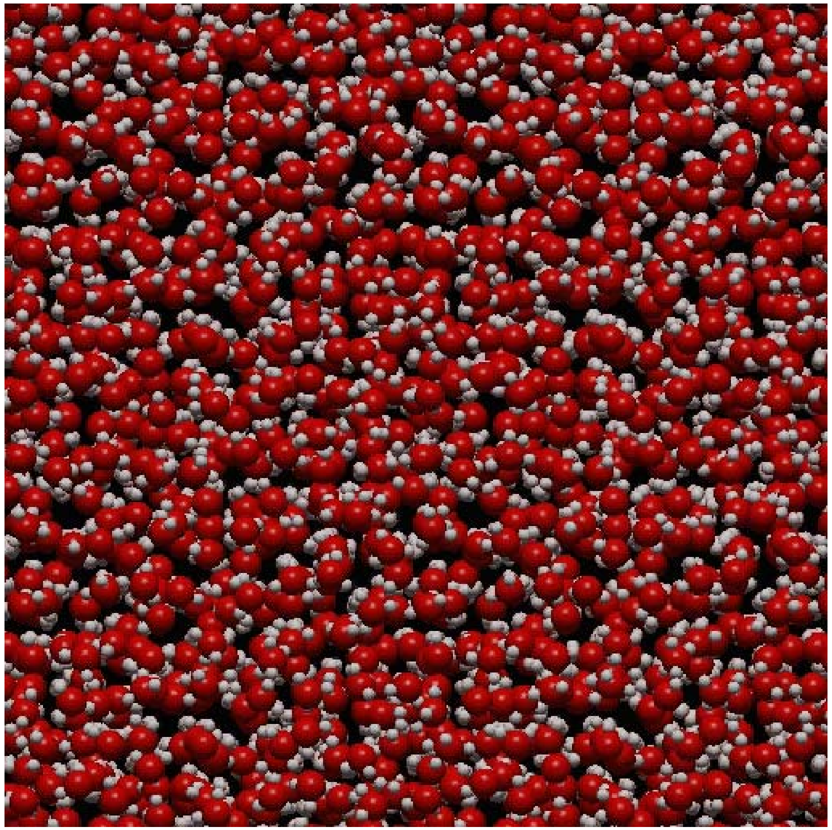
    多段階法：複数ステップから計算(leap-frog)





古典粒子系
のシミュレーション
例





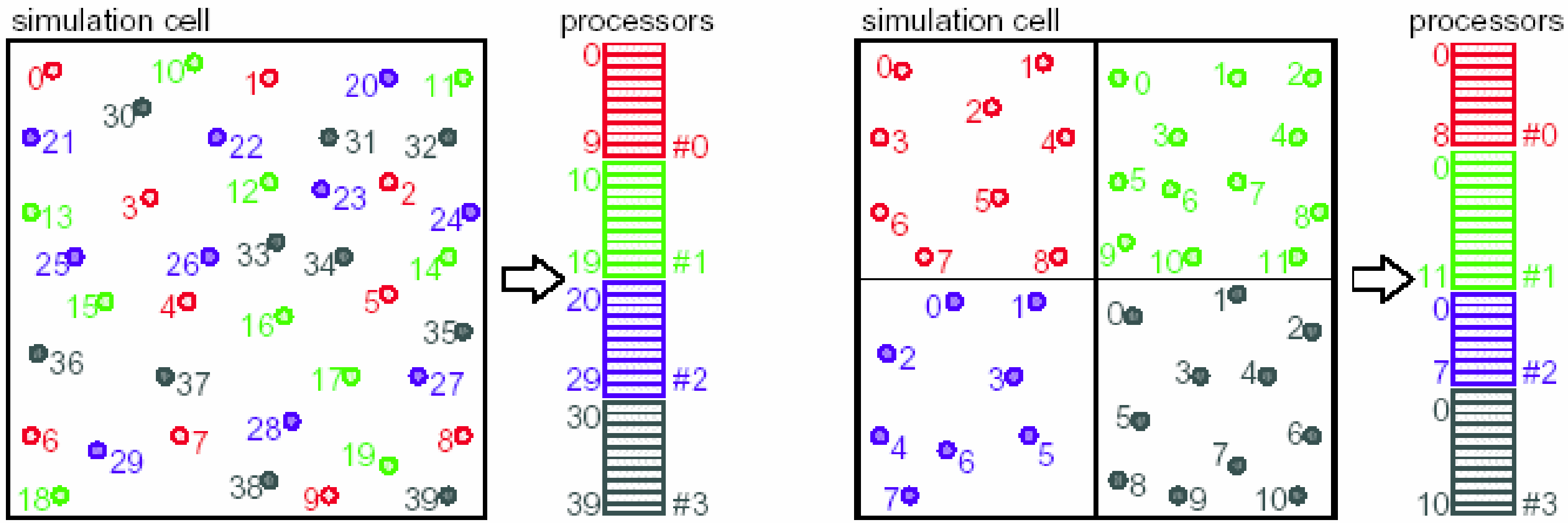
分子動力学

- 相互作用の計算：原理的にはO(n^2)
  - 長距離力---Barns-Hut, multipole法, Ewald法,…
  - 短距離力---近接粒子のbook-keeping
  - 接触力（剛体球、個別要素法）---接触判定
  - 並列化の工夫（粒子分割vs空間分割）
- 温度・圧力の制御

  能勢・Hooverの方法

分子動力学

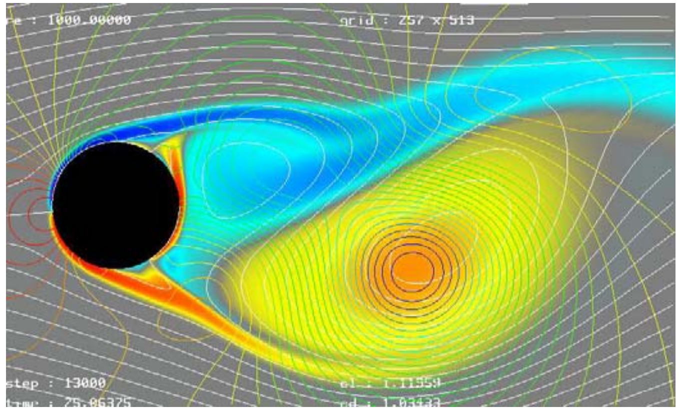
並列化の工夫（粒子分割vs空間分割）



(a) Particle decomposition method　　(b) Spatial decomposition method

熱源　　熱源

古典連続系

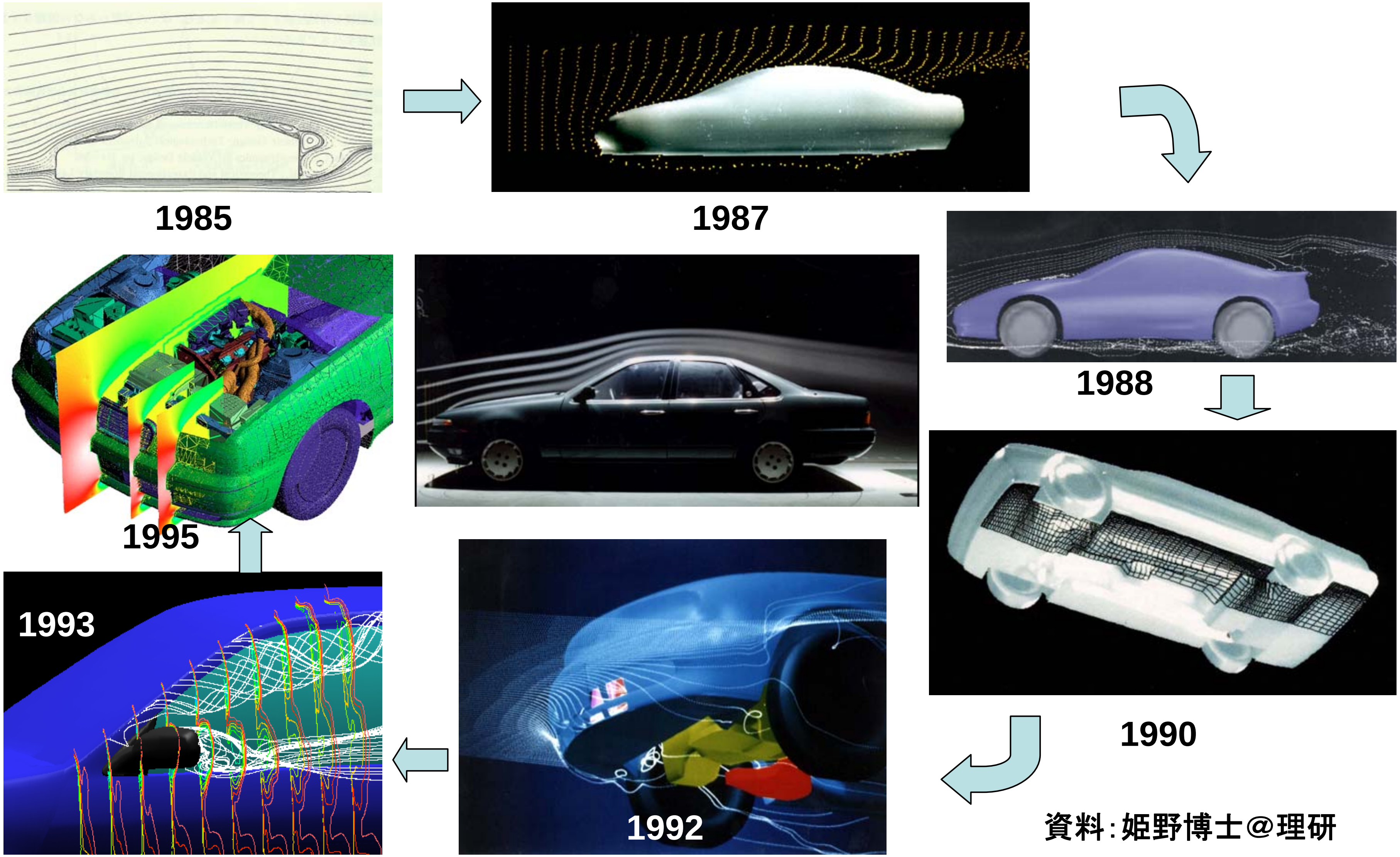


- 空間の離散化
  - 差分法:簡単、規則的、複雑な形状には不向き
  - 有限要素法:複雑な形状可、メッシュ生成に時間が掛かる、ボクセル有限要素法, 粗いメッシュと精密なメッシュを使い分ける→マルチグリッド
  - メッシュレス法・・関数基底の利用、Wavelet変換
  - スペクトル法:単純な形状のみ、FFTを効果的に利用
  - 基本解法:基本解の線形結合で展開する
    境界要素法、仮想電荷法など

古典連続系

- 時間積分:時間依存問題の場合
  - ODE(Ordinary Differential Eq.)のアルゴリズム（粒子系と同じ）
  - Courant条件:陽的解法では、空間離散化の間隔と、時間間隔との間に条件が付く
- 例
  - 線形問題:拡散、移流拡散、真空の電磁場、構造力学など
  - 非線形問題:流体、気象、海流、プラズマ、弾塑性問題など

自動車の流体解析に見る短期間の進歩



資料:姫野博士@理研

来週(5月16日)はここから・・

量子論的手法　・・例と課題・・

- 分子軌道法・・量子化学の1分野

  1体近似、平均場近似、それを越えて・・

- 密度汎関数法

  エネルギーは全電子密度関数の汎関数

  交換相関ポテンシャルの問題

- 量子モンテカルロ法

  強相関量子系

- 格子ゲージシミュレーション

今日のおわりに・・

【まとめ】

- 第三の科学手法としてシミュレーションは研究開発現場で重要な役割を果たしている.
- 構成的手法(ミクロの要素からマクロを理解)
- 現実の物理は連成・複合系
  - Multi-Scale, Multi-Physics Simulation へ.