

小特集「スーパーコンピュータと大型行列計算 アルゴリズム」の編集にあたって

福西宏有† 名取亮††

スーパーコンピュータ CRAY-1 が世界に初めて出現してわずか 10 年余にすぎないが、スーパーコンピュータがもたらした超高速計算、大記憶容量の計算環境は、科学技術計算の世界を一新しつつあると言える。この間、我が国においても、S-810, VP-200, SX-2 などの機種が相次いで登場した。とくに、これら国産のスーパーコンピュータは優れた VLSI 技術による超高速性、FORTRAN コンパイラの高自動ベクトル化能力、数学的ソフトウェアとの整合性の良さ、などにより、大型計算を必要とする学術・産業のさまざまな分野で大きなインパクトを与えつつある。

スーパーコンピュータが用いられるようになり、汎用計算機とは質的に異なる成果をあげているものに第一原理計算や計算機シミュレーションがある。前者は、複雑な高次の方程式系の厳密解を求め、分子や原子レベルの状態を予測しようとするものであり、後者は、半導体デバイスや量子力学系などの物理モデルを仮定し、数値解析により帰納的に系の本質を理解しようとするものである。このような計算では多くの場合、偏微分方程式を出発点とし、最終的には大規模な連立一次方程式や行列の固有値問題に帰着されることが多い。

ところで、現在のスーパーコンピュータのほとんどは、パイプライン方式によるベクトル計算機であり、単一のデータの流れに対し複数の命令が作用して、このような問題の行列計算を効率よく処理するのに都合がよい。しかし、一般には大規模行列の非対称性や、大型疎行列の問題が生じ、スーパーコンピュータの超高速性を引き出すには、ベクトル計算向けの数値解法を工夫すると共に、ベクトル処理機能を十分活用できる

算法を採用し、さまざまな問題の要求に応じたプログラムを作る必要がある。

本特集では、大規模な行列計算に関連し、スーパーコンピュータを効率よく用いることができる数値解法や、プログラム技法の最近の話題や応用例についての解説を試みる。

1章では、スーパーコンピュータの現状およびベクトル計算機での高速処理の特徴と高速化技法の例について述べ、行列計算への適用法を紹介する。

2章では、大型疎行列からなる連立一次方程式を解くためのスーパーコンピュータ向けの反復解法について解説し、対称正値行列、非対称行列いずれの場合にも前処理付きの共役勾配法系の解法が優れていることを述べる。

3章では、スーパーコンピュータを用いた流体モデルによるデバイスシミュレーションを紹介する。この場合の境界条件の複雑さ、対称および非対称の大型疎行列を解くなどの問題に対処した行列計算方式について述べる。

4章では、スーパーコンピュータの性能向上策の壁を破る手段として、汎用型のマルチプロセッサシステムでの並列処理手法であるマルチタスキングについて述べ、回路解析への適用例を紹介する。

スーパーコンピュータは今後ますます、さまざまな科学技術計算に用いられるものと思われる。本特集が、このような場合に必要となる数値解法についての基礎的な理解を深めることに役立つことを念願する。

最後に、ご多忙中にもかかわらず、快く時間をさいていただいた執筆者、査読者の方々に心から謝意を表します。

(昭和 62 年 9 月 28 日)

† (株)日立製作所基礎研究所
†† 筑波大学電子情報工学系