

第 1 章

序論

自然科学の分野において，従来の理論や実験のみでは達成が困難な規模，物理的条件下での予測を実現するために，コンピュータを用いたシミュレーションが行われている．また，今日の科学技術や産業の分野においても，同様なシミュレーションを行うことは，生産性向上や予算軽減の観点からも必要不可欠となっている．これまでに，天気予報，航空機設計，スペースシャトル計画，海洋物理，分子科学，素粒子論や天体物理などをはじめ，様々な分野でコンピュータを用いたシミュレーションが行われてきている．これらの中で扱われる物理現象では，多くの場合，“偏微分方程式”が現れる．ところが，現実の問題から生ずる偏微分方程式を解析的に解くことは非常に困難であるため，近年のコンピュータの普及につれて，偏微分方程式を離散化し数値的に解いて近似解を求める“数値シミュレーション”が益々盛んに行われるようになってきている．これらの数値シミュレーションにより近似解を求めることは，最終的に大規模な線形方程式

$$Ax = b \quad (1.1)$$

を解くことに帰着される．ここで，係数行列 A は $N \times N$ の行列， x, b は N 次のベクトルである．さらに，数値シミュレーションは物理現象の解明にとどまらず，近年では，社会工学，数理計画や人間工学など応用数理全般に亘って用いられている．これらにおいてもやはり，多くの場合，大規模な線形方程式 (1.1) を解くことに帰着される．そして，この線形方程式の求解には多くの演算を要し，数値シミュレーションにおける計算時間の大部分を占める．したがって，方程式 (1.1) の数値解を効率良くしかも精度良く求めることは，科学技術計算の分野で大変重要な位置にあるテーマと言っても過言ではない．

ここで，数値シミュレーションの歴史について簡単に振り返ってみる．いまから 100 年前の 1900 年頃に，Richardson は天気予報を数値的に行うために，1000 人の人員が円形スタジアムにて紙と鉛筆を用いて手計算で行おうと試みた．“リチャードソンの夢”と呼ばれるこの方法は，まさに人間による並列計算である．1945 年には，Von Neumann により，今日のノイマン型と呼ばれる単一プロセッサのプログラム記憶方式が提案された．そして 1946 年，弾道の軌道計算のために，初のコンピュータ ENIAC が真空管を用いて開発された．その後，逐次処理方式のコンピュータのハードウェア性能の制約を解決するために，並列処理する計算機アレイプロセッサの構想が生まれ，1960 年代に SOLOMON 計画

が発足した。これの主な目標は、天気予報や原子炉の計算に現れる偏微分方程式を解くことであったが、最終的に机上設計のみで失敗に終わった。これと同時期に、命令パイプライン処理の CDC6600 の開発が成功したことで、その後、米国におけるアレイプロセッサ開発には二つの流れができた。一つは、SOLOMON 計画の流れから、イリノイ大学とバローズ社による並列計算方式の ILLIAC IV が 1972 年に開発され、NASA エームズセンターに設置された。もう一つは、CDC6600 の流れから、Texas Instruments 社と CDC 社が各々独立にパイプライン方式の ASC(1972) と STAR-100(1973) を開発し、NASA、リバモア研究所、国防省などに設置した。このように、コンピュータは物理問題から生ずる方程式の求解の必要性とともに発展し、その成果を受けて Cray 1 をはじめとする商用機が市場に現れるようになった [48][58]。この頃より、時代のコンピュータの中で、特に抜きん出て超高速の処理能力を持つコンピュータは、“スーパーコンピュータ”として位置付けられるようになった [31][39][46][47]。

今日の、20 世紀から 21 世紀に亘る時代においてもなお、コンピュータを用いた数値シミュレーションを行うプロジェクトが多数発足しており、ここでは、各々の計算種別に応じた専用計算システムの開発が行われている。米国の DOE (Department of Energy) における国家プロジェクト「ASCI(The Accelerated Strategic Computing Initiative) 計画 (1996-2006)」として、ASCI Red (Sandia 国立研究所)、ASCI Blue-Pacific (Lawrence Livermore 国立研究所)、ASCI White (Lawrence Livermore 国立研究所)、ASCI Blue-Mountain (Los Alamos 国立研究所) と各々のプロジェクトが展開されており、これらでは、包括的核実験禁止条約に伴い、貯蔵核兵器の安全性、信頼性、性能を確保するため、核実験を代替するためのシミュレーション技術と、スカラー並列計算機である MPP(Massively Parallel Processors) が開発されている。日本国内においても、様々なプロジェクトが発足している。科学技術庁(当時)の「地球シミュレータ計画」(1997-2002)では、地球環境変動の解明・予測を行うために、プロセス(基礎科学)研究、観測および計算機シミュレーションの三位一体で研究が行われており、より高精度な予測のために、より大容量で高速なベクトル並列計算機が開発されている。筑波大学の「CP-PACS 計画」(1992-1997)では、素粒子の振舞いを定量的に解析することを目的としており、素粒子の四次元空間や多自由度の系を表現するために大規模な問題となるために、独自に開発した擬似ベクトルプロセッサで構成されるベクトル並列計算機が開発された。また、日本原子力研究所の計算科学技術推進センターにおいては、数種類の商用スーパーコンピュータから構成される複合同並列計算機システムを用いて、並列計算法、基本システムおよび並列処理支援技術の開発を目的とする数々のプロジェクトが行われている¹。これらのプロジェクトをはじめ、今日の多くのプロジェクトが独自のハードウェア開発だけでは成り立たず、数値計算アルゴリズムやソフトウェア開発も合せた共同体制で研究グループを構成している。これらは、“HPC (High Performance Computing)”や、あるいは理論科学や実験科学とならんで第3の科学とも呼ばれる“計算科学”という一つの学問領域として位置づけられつつある [30][44][45][59]。

¹ 本論文の研究の一部は、当センターとの協力研究「計算科学技術ソフトウェア研究開発提案」の採択テーマである。

このような背景をふまえた上で、実際の数値シミュレーションにおける核心の計算部分である、線形方程式 (1.1) の効率の良い求解が特に重要である。方程式 (1.1) を解くとき、その解法を選択では線形方程式の規模やその係数行列の構造などによって、直接法と反復法が使い分けられる。また多くの場合、これらの解法とともに前処理が併用される。ここで前処理とは、反復法に対して“収束性の向上を担う”、あるいは、様々な解法に対して“問題を解き易くする”重要な計算手法である [17]。これらの前処理の特長は、前処理を伴わない元の解法と同じ解が得られるように数学的裏付けがなされている、または、計算誤差を抑えて安定な求解を行うことである。一方で上述したとおり、大規模問題を効率良く求解するために、スーパーコンピュータを用いた数値シミュレーションが行われている。しかし、計算機の計算性能に頼るのみで効率の良い数値計算手法の検討を怠ると、極めて計算効率の悪い数値計算となる例も少なくない。極端な例では、スーパーコンピュータの性能が全く発揮されないことにもなる。また、大規模な問題にも十分に耐える解法の開発も必要である。このような点から、既存アルゴリズムをスーパーコンピュータ向けに改良することと共に、スーパーコンピュータでの計算方法や、その特化されたアーキテクチャの特性を考慮した計算手法の開発が重要である [54]。

ところが、反復法と併用される従来の前処理法、例えば、不完全分解に基づく前処理などは、数学上の観点から収束性を高める目的で提案されている。そのような前処理を施した解法をスーパーコンピュータを用いて計算する場合、多くの前処理が、その計算手順と特化されたアーキテクチャとががみ合わず、結果として、前処理とスーパーコンピュータともにその効果が発揮されない。また、代表的な求解アルゴリズムそのものにおいても同様の問題が生ずるものもある。これらの問題点に対して、スーパーコンピュータ向けの様々な前処理手法が提案されているが、反復法と併用する前処理の多くは、従来の前処理と比較して収束性が低下する。計算効率という観点からも、上述のとおりアーキテクチャ特性を十分に引き出しているとは言えない。

本研究の目的は、大規模線形方程式に対するスーパーコンピュータ向きの前処理法を提案することである。まず本研究では、前処理を二つの観点から考えることを試みた。一方は、数学上の観点のみから提案される前処理であり、これまで一般的に考えられてきた収束性や計算精度の向上を念頭にしている。もう一方は、計算機アーキテクチャの観点も念頭に置いて提案される前処理であり、主に計算効率の向上を念頭にしている。そして本研究では、ベクトル型や並列型アーキテクチャに代表されるスーパーコンピュータによる大規模線形方程式の求解において、その計算効率を一層向上させる数学的な裏付けに基づいた、いくつかの前処理法を提案した。

本論文の構成と共にそれらの内容を示す。第2章では、代表的な解法について述べた上で、スーパーコンピュータでそれら数値解法を計算する場合の具体的な問題点について説明し、それらを解決するための前処理の役割について説明する。第3章では、圧縮性の流体計算などで頻繁に出てくる、3次元ナビエ・ストークス方程式を離散化して得られる大規模なブロック5重対角行列群を係数行列とする線形方程式を、ベクトル計算機上で効率良く解くための前処理法について述べ、本研究において提案した“Rotated Alternative LU (Rotated ALU) 分解法”について説明する。第4章では、周期境界要素 (偏微分方程式の離

散化で周期境界条件から生ずる行列要素)を伴うブロック5重対角行列群を係数行列とする線形方程式を解くために, Rotated ALU 分解法を適用する上での問題点について述べる. そして, それを解決するために本研究で提案した前処理を利用した “Split/SMW+Rotated ALU 分解法” について説明する. 第5章では, 周期境界条件を課した2次元偏微分方程式を, 5点中心差分法にて離散化したときに得られる大規模でスパースな係数行列をもつ線形方程式に対し, 並列計算機で非定常反復法を用いて解く場合のブロック前処理について述べる. そして, 本研究において提案した, 周期境界問題に対して収束性・計算効率共に良い並列計算向けのブロック前処理 “Splitting Correction (SC)” について説明する. 第6章にてまとめる.