

# まえがき

この巻で扱う対象は、計算科学の研究を行う道具としてのコンピュータの使い方、特に、「並列計算」である。このため、コンピュータの道具としての限界、つまり、実験科学での観測機器の制限に近い内容を考えることとなる。計算科学の主たる対象は、コンピュータの内部でのデータの処理の仕方や可視化技術が強く関係する仮想現実ではなく、コンピュータとは独立に存在する自然現象や人工物の作り出す現実である。このため、現実の現象を解析するために必要なデータは何か、その中で現在のコンピュータの性能で得られるのは何か、さまざまな現象の解析方法はそれぞれどれくらい計算時間や記憶容量を必要とするのか、などを知って、計算科学の研究計画をたてることが必要となる。特に、計算的手段は理論的手段に近いものだと誤解されることが多いが、理論において解析が容易なすぐ解ける問題設定は、計算科学においては必ずしも、簡単で時間がかからず解ける問題設定とはならない。たとえば、フーリエ変換をして3次元の問題を解くとき、無限区間を扱うことはできないし、無限個の関数をあつかうことはできない。さらに、どの部分の計算をどのように並列的に計算を行ったら高速に計算できるかという手段の問題も、必ずしも簡単な解はない。このような計算科学の制約は、コンピュータの種類、問題設定やアルゴリズムを適切に選ぶことで低減できるが、その選択のために、さまざまなコンピュータでどのように数値計算が実行されているかという基礎的知識を持つことが重要となる。

計算科学を進めるとき、直接関係するのがプログラムを書くことである。しかし、「並列計算」を実行するプログラムを書くためには、プログラム言語の知識を独立に学ぶだけでなく、1) コンピュータアーキテクチャ、2) 並列のためのアルゴリズム、3) プログラミング言語を組み合わせた知識が必要となる。この巻の第2～4章は、並列プログラミングにあてられる。具体的には、コンピュータアーキ

テクチャとして名古屋大学情報基盤センターに設置されたスーパーコンピュータを考慮し、それを使用した演習と組み合わせた講義をもとに記述されている。

名古屋大学情報基盤センターのスーパーコンピュータは、2000年～2004年には複数のパイプライン方式のベクトルプロセッサからなるベクトル並列コンピュータ VPP5000 システム、2004年～2009年には 512 GB の大規模共有メモリをもつスカラー並列コンピュータ HPC2500 システム、2004年～2013年には富士通の開発したプロセッサ SPARC64VII をもつ 1 TB の大規模共有メモリ型スカラー並列コンピュータ M9000 と 768 ノード (3072 コア) を結合した分散メモリ型スカラー並列コンピュータ FX1、および、コモディティ技術に基づく AMD 社の CPU を持つ 160 ノード (2560 コア) の分散並列コンピュータ HX600 の 3 種類であった。2013年 10 月より、富士通のプロセッサ SPARC64IXfx を使った 384 ノード (6144 コア) の分散メモリ型スカラー並列コンピュータ FX10 と Intel 社のプロセッサを使った 368 ノード (8832 コア) の分散並列コンピュータ CX400/250 と 184 ノード (4416 コア) の分散並列コンピュータ CX400/270 が稼働している。このうち、CX400/270 の各ノードは Intel の開発した MIC アーキテクチャの 57 コアのアクセラレータを持っている。さまざまなプログラムのそれぞれの環境での最適化をどうしたらよいかを示すことは非常に難しく、また、簡単で一般的な目安を示すことも不可能である。この巻での記述は、基本的なことにとどめるが、逐次計算プログラムとは根本的に異なることを知ることによって、さまざまな並列計算環境における応用のための準備を行なうことをめざす。

第 1～4 章の部分は並列計算特論として名古屋大学工学研究科、情報科学研究科の大学院 1 年生を対象に開講されている講義を基にしている。この講義は、名古屋大学 COE「計算科学フロンティア」(2004年～2008年)の中で始められ、現在まで名古屋大学工学研究科計算科学教育研究センター、情報基盤センターの教員により続けられている。また、講義の内容を補うために、コンピュータアーキテクチャについては第 5 章で解説し、第 6 章では離れた場所にあるコンピュータを結びつけて、コンピュータを一体として使用するグリッド技術について解説する。

2014 年 5 月

石井克哉