

特集／計算が拓く数学と物理の世界

巻頭言

大石 進一

数値計算について、最近になって幾つもの非常に大きな発展があり、思いもかけない理工学における展開がなされている。本特集号はその展開を数学と物理を中心として俯瞰するものである。

大きな展開の一つは、誰もが超大規模計算を行えるような計算環境を得たということである。少し前までは、大規模科学計算はスーパーコンピュータの扱うものとほぼ限定されていた。しかし、パソコンの普及によって、単体でも高性能な計算ユニット（CPU）が開発され、それが誰でも持つパソコンに組み込まれるようになった。スーパーコンピュータも超並列化はされるものの、パソコンに用いられるようなCPUを多数個集めることによって実現されるようになった。したがって、計算時間の違い等を別にすれば、スーパーコンピュータの計算とパソコンの計算は質的にはそんなに変わらないものになったといえる。円周率の計算の世界記録が、パソコンを使って出される時代になったことはその例証である。パソコンを進化させようという日常的な競争がついに誰もがとてつもない計算をできるような時代にしたのである。本特集の記事「数値計算の今昔」は現代的な数値計算の分野において、世界レベルの研究成果を次々に与えてきた著者の、計算機が導入された直後から現代に至る、個人史が記されたものである。個人史を越えて、数値計算の研究が如何にダイナミックなものであるか、息を呑む。「固有値問題におけ

る数値計算の発想」では、数値アルゴリズムの中で最も難しいものである固有値計算のアルゴリズムを創造する発想が如何に桁外れであるかが語られている。

このような進展により、物理においては、基本法則を表す微分方程式を初期値を与えて数値計算する法則主導型の方法が成立するようになった。これによって、世界の誕生の瞬間から現在まで、そして遠い将来までをシミュレーションする壮大な計算が行われている。ダークエネルギーなどの研究の成果を見ると幻想的な感覚まで揺さぶられる。実際、様々に違う宇宙の誕生からその宇宙の発展を計算し現宇宙がその中で非常に特異なバランスの上に成立しているというようなことが計算で証言されると何とも言えない感動に身震いする。まさに計算が開く物理の世界に驚きを隠せないのである。本特集における、「シュレーディンガー方程式から物性へ」は原子分子の世界の基本法則であるシュレーディンガー方程式から物性を計算するアプローチで、電子顕微鏡を越える究極の倍率をもつ顕微鏡で物質を見ているような感覚を覚える。一方で、「数値計算と相対性理論」では、相対性理論をベースに宇宙を数値計算によって再構成するという研究分野が紹介されている。

数値計算における信じられないような進歩は、また、数値計算の厳密な数学化の形でなされた。数値計算は、数学的には実数を、有限桁の小数で近似