

計算科学フロンティアの開拓

金田 行雄 名古屋大学工学研究科計算理工学専攻 kaneda@cse.nagoya-u.ac.jp
吉川 大弘 名古屋大学工学研究科計算理工学専攻 tom@fcs.coe.nagoya-u.ac.jp

本拠点の目的

本稿では、文部科学省21世紀COEプログラム「計算科学フロンティア」について、その概要と構成、今後の展開について紹介する。本拠点の目的を一言で言うと、多方面にまたがった多分野の研究者の連携の下に、超多自由度の系の解明に挑戦し、非経験的計算科学の先端的研究分野を開拓すること、またそのセンスと技術を身に付けた若手研究者、技術者を育成することにあるとまとめられる。

本拠点プログラムの背景には、実験や理論の限界を超えて、超多自由度の系に対する計算を可能にしつつあるコンピュータ技術の急速な進歩がある。そのコンピュータの高度利用に基づく科学が「計算科学」である。歴史を振り返ると、「道具は世界を変え得る」ことが分かる。このことは、たとえば望遠鏡の出現によってアリストテレス的宇宙観が打破され、また、顕微鏡の出現により医学・生命観が大きく変革されたことから分かる。20世紀になって、コンピュータが出現したが、顕微鏡や望遠鏡が目を助ける道具だとすれば、目以上の、人間の最高次の機能を持つ脳を助ける道具であるコンピュータが、望遠鏡や顕微鏡以上の影響を与え、新しい世界観を広げても不思議ではない。

実際、現在のコンピュータの技術は、科学者が「多次元性」と「非線形性」に正面から立ち向かうための唯一の強力な武器を与えているといっても過言ではないであろう。21世紀に至って、コンピュータは(i)シミュレーションと(ii)ヴィジュアル化により、逼真のリアリティを提供し、自然認識の仕方そのものに根本的変革を与えるまでに進化している。現代の科学者に与えられた、この新しい道具の使用による科学的方法、すなわちコンピュータの高度利用に基づく計算科学の方法は、

これまでにすでに実験、理論と並ぶ第3の方法として広く認知されている。この方法によれば、これまでの理論では解けなかった非線形方程式を解くことができるばかりか、自然・社会の基本法則に基づく基礎方程式からシミュレーション世界を構築し、実験(経験的世界)では得られなかった、その限界・制約をも超えた高精度解析を行う方法(非経験的計算科学手法)の展開が可能となる。

このように、本拠点の目指す学問分野は、21世紀の“革新的”高度コンピュータ利用基盤技術に裏打ちされている点、“革新的”な超多自由度の系の解明に挑戦する点、そして計算科学的非経験化による科学的認識の“革新”という多重の意味で「革新的な学問分野」であると言え、名古屋大学大学院工学研究科計算理工学専攻を始めとして、情報科学研究科、工学研究科、理学研究科、経済学研究科などの複数専攻群の協力により、基盤と応用各分野の連携による研究教育を進めていこうとしている。

計算科学

高度コンピュータ技術を駆使して、自然・社会を対象とした計算科学諸分野を推進するには、桁違いの超多自由度系に挑戦し得る量的革新と、現象認識の計算科学的非経験化という質的革新とをつなぐ計算科学研究教育拠点の構築が必須である。本拠点はこの要請に応えるべく、これまで先導的研究を行ってきた基盤研究分野と応用展開分野の研究グループの統合(図-1)(構成員：http://fcs.coe.nagoya-u.ac.jp/coe_sosiki/index.htm)によって、計算科学フロンティアを開拓・伸展させようとするところに特色がある。本拠点への結集によって、高精度計算アルゴリズムや大規模データ処理技術など高度な基盤技術を集積融合することが可能になり、高機能ナノ物質設計、生体超分子ダイナミクス、地球規模流動現象、ゲノム情報解析など、従来とは桁違いの複雑さを扱

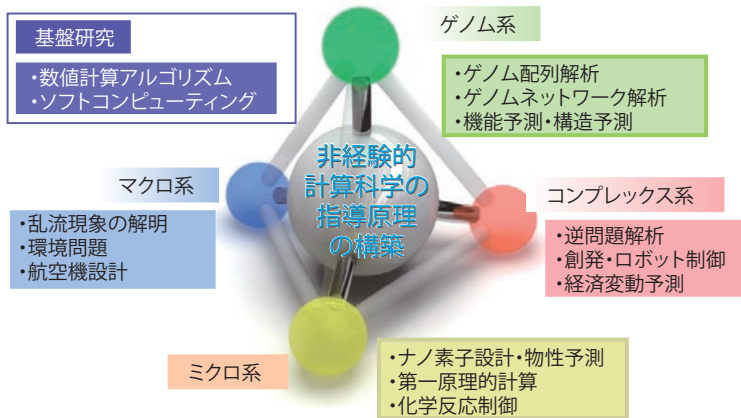


図-1 拠点の形成

多次元データ

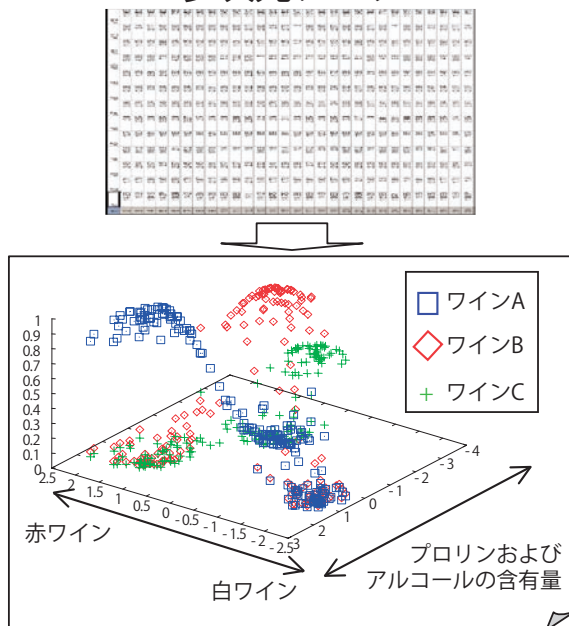


図-2 多次元データの可視化

う超多自由度系理解のブレークスルーを目指すことができる。

基盤研究分野における研究計画

■数値計算アルゴリズム部門

本部門では、各応用展開分野において非経験的アプローチで研究を進めるに不可欠な、超大規模計算のための数値計算アルゴリズム、および、アルゴリズムを計算機上に実装するための高性能プログラミング技術（並列化技術、グリッド技術）を研究開発する。

応用展開分野と連携して、個別の問題に対する数値計算アルゴリズムの開発を行うことはもちろんであるが、広く計算科学の基盤技術としての数値計算アルゴリズム、

特に、大規模線形方程式系の数値解法、大規模固有値問題の数値解法、大規模連立常微分方程式の数値解法、2重指数関数型変数変換に基づく数値計算アルゴリズムの研究も行う。また、これらの研究に基づいて、並列計算機への実装やグリッド環境における計算も意識したアルゴリズム開発も並行して行う。

大規模線形方程式系の数値解法については、現在主流となっているクリロフ部分空間反復法、および、計算機パワーの増大により蘇りつつある直接法について研究を行う。特に、クリロフ部分空間反復法については、応用上重要な前処理に焦点をあてて、各応用分野に対する適切な前処理を開発することを目指す。直接法に関しては、並列化技術が重要であり、そのための手法の研究を行う。

大規模固有値問題の数値解法については、大規模系の数値解法、Lanczos法、Jacobi-Davidson法、射影法等の比較研究と同時に、大規模線形方程式系の数値解法の研究で得られた知見をそれらの解法に組み込み、それらの解法の高速化を目指す。

大規模連立常微分方程式系の数値解法については、並列化を意識したアルゴリズムを開発する。ただし、方程式系が硬い系かどうかによって、異なるアルゴリズムを開発する必要がある。ここでも、当然であるが、大規模線形方程式系の数値解法の研究で得られた知見をアルゴリズムに組み込み、高速化をはかる。なお、本研究においては、計算科学に必要性が高い確率微分方程式系の数値解法についても、その基礎研究（安定性等の研究）を行う。

2重指数関数型変数変換に基づく数値計算アルゴリズムについては、現在、基本アルゴリズムの開発は目途がついており、応用分野への展開が期待されているところであり、後の「コンプレックス系部門」で述べるオプション価格計算（金融工学分野の問題）のための高速計算アルゴリズムのような、2重指数関数型変数変換に基づく応用数値計算アルゴリズムの開発を目指す。

■ソフトコンピューティング部門

本部門においては、応用展開分野、特に複雑系部門において基礎方程式が未確立の現象に取り組むために不可欠な、多次元非線形データの可視化・モデル化手法の研究開発を行っていく。この可視化手法の開発により、他の分野との、超多自由度系の視点による共通の性質・手法の発見を目指す。

多次元データの可視化(図-2)は、多自由度系の構造解明の有力な手法の1つである。現在広く用いられている主成分分析、判別分析などの多変量解析手法は、デー

データの統計的性質をとらえるのに対し、当COEのグループはデータが十分には得られない場合にファジィ技法により可視化する手法を世界に先駆けて発表してきた。データの構造を視覚的にとらえられるようにすることで超多自由度に挑む。

超多自由度系における最適化問題の解探索過程の解明に、多次元データの可視化手法が有効と期待される。超多自由度の解空間を持つ問題において、複数の解候補の離合集散の様子を見られるようにすることで、解探索オペレータの効果などについて新たな評価指標の導出を目指す。基本手法の開発と併せて、看護師スケジューリング支援システム（看護師勤務表作成は、20人の看護師規模の病棟で、解が約 $10^{300\sim 500}$ 通り）への応用を進めている。本システムは、松阪市のM病院において実用に供されているが、当COEのグループは解探索能力のさらなる向上を目指している。

また、モジュラーロボットの形態制御を通して、無限定環境において実時間かつ合目的に行動を創発する多自由度系について研究開発を行っていく。当COEのグループは、複数の機械ユニット（モジュール）から構成されるモジュラーロボットについて、その本質的に有する優れた特徴（環境適応性、耐故障性、拡張性、柔軟性など）を引き出すことを目指し、モジュラーロボットの創発的制御方策の構築を行っている。

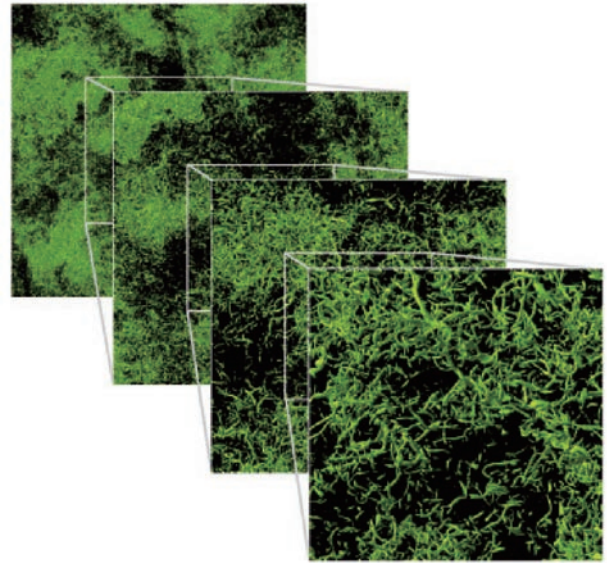
応用展開分野における研究計画

■マクロ系部門

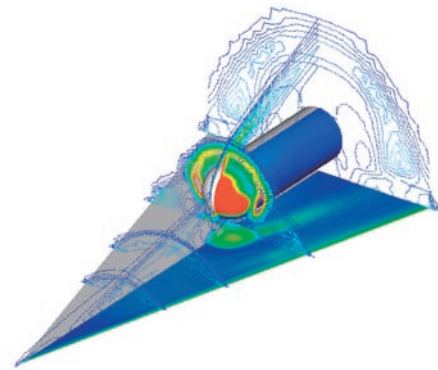
乱流や複雑形状周りの流れなど超多自由度複雑流動現象を計算科学的に解明・予測・制御するための非経験的な方法論を展開する。数値計算アルゴリズム部門と連携し、高精度・高解像度・高速な数値計算手法を用いて、乱流や複雑形状周りの流れを超大規模直接数値計算（Direct Numerical Simulation：DNS）する。そのデータに基づいて、現象を解明・予測し、モデル化（自由度の縮約手法の開発）と制御（航空宇宙機設計などを含む）を非経験的に行う。

乱流の計算科学

乱流現象の解明と予測のためには流体の基礎方程式（ナビエ・ストークス方程式）のDNSが非常に有効であることが知られているが、乱流はレイノルズ数の増加とともに自由度数が急激に増大するため、高レイノルズ数のDNSは困難であった。しかし、地球シミュレータの出現により、従来とは桁違いの約2,700億（従来の約500倍）もの自由度の3次元一様等方性乱流の超大規模DNSが金田らにより実現され、世界で初めて広いスケールにわたる多階層構造（図-3(a)）がとらえられた。我々はこの乱流解明へのブレークスルーとなるDNSデータを用



(a)3次元乱流における微細渦構造とその階層構造



(b)将来型宇宙機の極超音速流解析結果

図-3 大規模数値計算結果

いて、乱流の小スケールにおける普遍的な統計法則の理解、および非経験的な乱流モデルの開発とその直接的な検証を行う。また、平行二平板間乱流、壁乱流などカノニカルな乱流場についても効率的なDNS手法を開発し、それをを用いて大規模DNSを実現する。得られたデータをもとに非経験的なモデル計算手法を開発し、工学的問題に応用する。

航空宇宙機設計における計算科学

近年の航空宇宙機の設計には、数値流体力学が広く活用され、設計過程で必要となる風洞実験が20年前の約7分の1（Boeing767と777の比較）にまでなっている。ところが、再使用型の宇宙機をはじめ革新的な機体を設計するためには、複雑物体周りの流体現象の解明が不可欠であり、高精度・高効率数値計算手法、乱流モデル、熱的・化学的非平衡モデルなどが必要である。我々は、複雑形状周りの流れのDNSを行い（図-3(b)）、流体の剥離や乱流遷移に代表される航空流体力学に関連する物理現象を解明し、工学的に有用な非経験的設計手法を確立

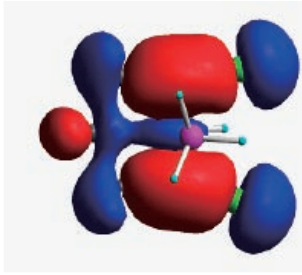


図-4 計算科学的反応理論：
Grubbs触媒による化学反応のコントロール

する。

■マイクロ系部門

超伝導接合デバイスは量子ナノ素子の代表例である。とりわけ、超伝導波動関数がd波、p波などの異方性を持つときに、その異方性ゆえにデバイスは特異な性質を示す。当COEのグループはこの性質の存在を初めて明らかにし、国際的なインパクトを与えてきた。この性質をナノ素子として活かすためには、界面と不純物の効果を取り入れた大規模な量子計算が必要である。量子モンテカルロの新しいアルゴリズムにより、波動関数の異方性をキーポイントとするまったく新しい素子の設計を行う。また、スピンの集団が電子を散乱することによって生じる特異な電気的性質を利用するナノ素子の開発にも期待がかけられており、世界的な競争が行われている。このスピンエレクトロニクスと呼ばれる新しいエレクトロニクスを展開するための計算科学的アプローチを開発する。

こうした固体電子素子のほかに、電子の量子力学的性質があざやかに表れる例は、化学反応である。反応の触媒として遷移金属が有用であることは広く知られているが、当COEグループは遷移金属錯体によって促進される化学反応を首尾一貫して計算することに成功し、理論化学をリードしてきた(図-4)。その成果を基礎として、電子間相互作用を正しく取り入れる新しい密度汎関数法を展開し、多彩な化学反応へと計算の対象を拡大する。こうして生体反応をも視野に入れた、大規模でデリケートな反応の計算科学を発展させる。

また、フラレン、タンパク質など大規模で複雑な分子や分子複合体、分子性結晶を理解するためには、まずその構造を正確に知ることが重要であるが、その最も有力な手段はX線解析である。最大エントロピー法、遺伝アルゴリズムなどを用いて、X線実験データと合致する構造イメージをセルフコンシステントに求める計算科学的方法を開発する。さらに、タンパク質およびタンパク質複合体のダイナミクスを計算するためのモデルを開発し、タンパク質フォールディング、分子モーターによる

エネルギー変換など、生体分子による特異な現象を計算科学の方法によって解明し、バイオ素子設計への道筋を示す。

こうして、電子、原子、分子からなる非常に自由度の大きい複雑な系の構造、運動を非経験的に解析する計算科学を展開し、その本質をとらえることによって、有用な素子の設計を可能にする。超多自由度系の計算をいかに可能にするか？その計算結果からいかに本質的な自由度を抽出するか？複雑な構造をいかにつきとめるか？構造間の遷移ダイナミクスをいかにとらえるか？など、具体的なマイクロ物質を相手に研究を進めることにより、マイクロ物質にとどまらず、自然と社会の広い対象に共通する普遍的な計算科学的方法、概念を明らかにすることを目指す。

■ゲノム系部門

1個の生物体とその設計図であるゲノム情報の関係は、階層化されていて、しかも多くの分子がかかわった超多自由度の系となっているので、直接的に関係付けることが非常に難しい問題となっている。本ゲノム系部門では、各階層に対して適切な粗視化(大まかに見ること)を行うことにより、高精度の予測を行うことを目的としている。

ヒトゲノム計画によって解析された完全なDNA塩基配列には、1個の生物体を作るのに十分な情報が含まれている。DNAの中にある数千～数万種類の遺伝子領域は細胞内の転写・翻訳というプロセスによって、タンパク質のアミノ酸配列に変換されるのだが、各遺伝子領域は単にタンパク質の情報だけではなく、それを適切なタイミングで、適切な細胞に発現するように遺伝子調節の情報も含まれているのである。それによって、1次元的に書き込まれたゲノム情報が、3次元的に階層化され、ダイナミックな生物体が作られるのである。1次元のゲノム情報と、3次元の階層的生物体の関係を簡単に理解することが難しいことは当然であり、問題を切り分けて解決していかねばならない。これまでもいくつかの種類のプロジェクトが行われてきたが、階層化のメカニズムに切り込むことによって、生物を素子であるタンパク質のレベルから細胞システム全体のレベルまで、統一的に理解することができるからである。

細胞における階層化の問題の中で、タンパク質の細胞内局在は最も重要な問題の1つである。特定のタンパク質が、核やミトコンドリアなどに移送されることで、細胞が階層化される(図-5)。細胞内局在には各タンパク質のアミノ酸に局在化シグナルが含まれているということが分かっている。しかし、シグナルを構成しているアミノ酸には完全に一致するような配列がなく、一見あいまいな特徴しか見当たらないところにこの問題の難しさ

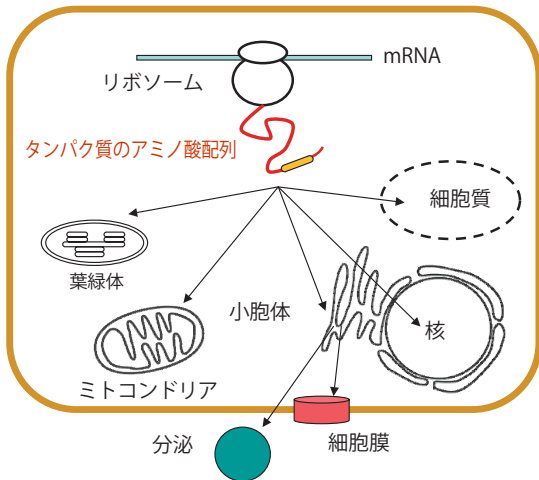


図-5 細胞の階層化

がある。これに対して、アミノ酸配列を単なる文字の配列と見るのではなく、粗視化した物理的実体としてとらえ、物性の比較の計算から高精度の判別を試みる。さらに、階層化の問題は細胞レベルからタンパク質間相互作用やタンパク質内部のレベルまでつながっているが、そこでも同じ問題（文字配列としてはあいまいだが、構造や挙動はきっちりできるという謎）が起こって形成や動きの問題、色素を基質とするタンパク質における低分子色素の異性化の問題など各階層での適切な計算手法を開発しようとしている。

■コンプレックス系部門

経済現象、知能の創発現象など、基礎方程式が未確立の分野の非経験化に挑戦する。

超多階層・多自由度系の可視化・モデリング手法の開発をソフトコンピューティング部門と連携して行っている。「ソフトコンピューティング部門」で述べた可視化手法の応用例の1つとして、人間の持つ言葉の意味に対する主観の可視化技術の開発を行っている。ある対象とそれを表現する言葉の関係を超多自由度系としてとらえ、その階層性を含めた言葉の関係を可視化することで、自らの主観へのフィードバック、主観の他者との共有や伝達等を可能とする。

身体性人工知能は、ロボットが言葉を獲得するためには身体を必要とする指摘している。言葉は記号とイメージから構成され、身体（多種・多数のセンサ）の情報からイメージを生成し、そのイメージと記号との関係の同定が言葉の獲得であるとされる。ロボットによる言葉の獲得を実現するために、超多自由度系としての記号—イメージ関係の可視化技術の開発を進めている。

また、ソフトコンピューティングのモジュ

ラーロボットの研究グループと連携して、細胞の運動シミュレーションを行っている。細胞においては、シグナル受容が細胞の状態を変え、運動を変える。そして、その運動が細胞の状態を変え、シグナル受容の仕方を変える（図-6 (a)）。細胞は、試行錯誤しながら複雑な環境でも効率的に動くことができる。モジュラーロボットの原形質流動の生起（図-6 (b)）と対比しながら、多自由度系において創発するダイナミクスの解明を進めている。

またそのほかにも、数値計算アルゴリズム部門と連携し、高性能数値計算アルゴリズムの開発と、その金融工学への応用を目指す。オプション価格計算の問題を中心に、数値解析の新手法を適用することで高速・高精度な計算を可能にする新しいアルゴリズムの開発を行う。これまでの具体的成果としては、分子運動力学の分野で提案されたアルゴリズムである高速多重極展開法を利用してアメリカンオプションの価格を高速に計算する手法、高速多重極展開法と2重指数型数値積分公式を組み合わせることにより、さまざまなエキゾチックオプションの価格を従来法に比べて格段に高速、高精度に計算できるDE-FGT (Double-Exponential Fast Gauss Transform) 法などがある。また、これらのアルゴリズムを基盤として、大規模資産ポートフォリオのリスク評価や最適化を高速に行う手法の開発を行っている。

さらに、人間工学の計算科学手法として、ユビキタス・情報ネットワークのヒューマン・インタフェースや、携帯電話などによる多言語防災情報の発信、IT機器利用のリスク・コミュニケーションの開発を目指す。

非経験的計算科学手法

コンピュータの能力の飛躍的増大は、もちろんこれを十分駆使できればという前提つきではあるが、これまでと桁違いの自由度あるいは変数の数、すなわち超多自由度の系が直接扱えるようになることを意味する。たとえば乱流の研究分野では最近の約5年間で、計算で取り扱える最大の自由度は約5億から2,700億と512倍に増

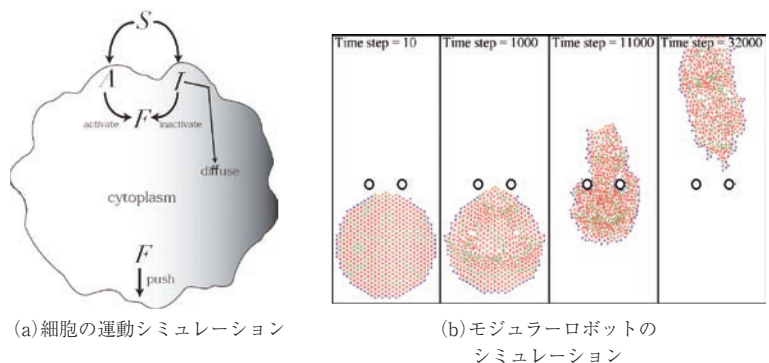


図-6 多自由度系において創発するダイナミクス

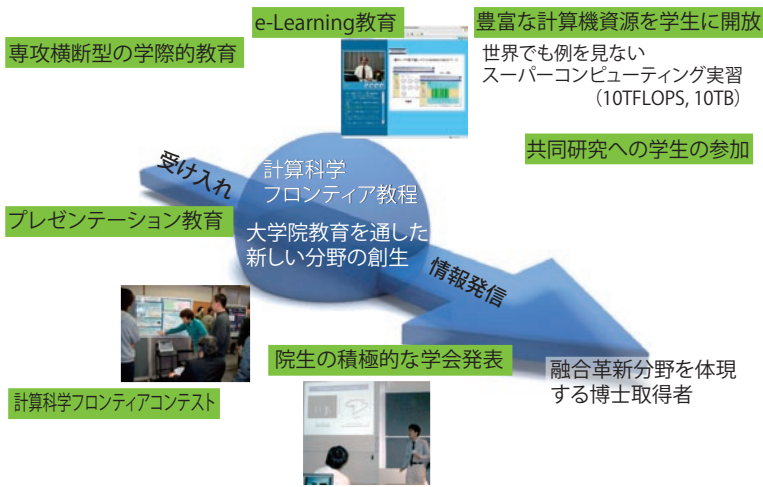


図-7 大学院研究での取り組み

大した。このような激しいスピードで進化する道具あるいは分野は、ほかにはほほ例を見ない。

このような量的変化は質的变化をもたらす。その変化は、「非経験的」という言葉でまとめることができる。ここで「非経験的」という言葉には、

- (1) 経験や勘に頼った不確実な直感や想像あるいは恣意的なモデルに依存しない、つまり自然や社会の法則・原理(知見)に根ざす、
という方法論的な意味と、
- (2) 大きすぎたり、小さすぎたり、危険すぎたり、の理由で決して現実には実現あるいは経験できないこと、
世界を扱える。

という対象についての意味がある。この2つの意味で、経験の束縛からより自由な、非経験的認識とでも呼べる理解が超多自由度系を扱えることによって広がると期待される。ここで(2)についての認識をSFと混同させないためにも(1)が不可欠である。

すなわち、現実世界において、解析的に研究するには複雑すぎ、難しすぎ、その一方で実験的に対峙するには、費用がかさみすぎたり、対象が大きすぎたり、小さすぎたり、時に危険であるといった問題に対し、本COEプログラムは、今日の高性能コンピュータと計算科学技術を縦横に駆使・展開して、自然・社会現象をそのまま超多自由度系として捉え、(i) 計算量から質への転換と(ii) 現象認識の非経験化とを達成しようとするものである。これはちょうど望遠鏡や顕微鏡という道具が天文学や細菌学の新興を促し、世界観をも変革したように、今日の超高速・大容量コンピュータが、新しい世界観をも生み出し得る成熟した道具となっていることを主張するものである。一方で、計算科学技術は、単に道具や知識としてだけでは値踏みできない富を社会的にももたらすことも事実であり、本COEプログラムの研究教育の

戦略スタイルは、計算科学技術が生む学術的変革と概念的変革の一般社会への普及・浸透という面からきわめて社会的な意義が大きい。

若手研究者の育成

本COEプログラムの目的は、研究だけでなく、人づくりにある。分野横断型の組織を作ることで、若い才能により異分野の融合、新分野の創出が促進されるように研究・教育環境の整備を行う。図-7に、本COEプログラムにおける大学院教育の取り組みの概要を示す。これらの中でも、本拠点の特色として、世界でも類を見ない

スーパーコンピュータ(10TB, 10TFLOPS)実習が挙げられる。これにより、学生・若手研究者の自由な発想を計算機上で試すことが可能となる。また、若手研究者の育成として、研究課題の公募と研究費の助成、研究環境の整備、最先端の研究への参加、国際性の涵養、学内外の交流・議論の場の確保など、我が国における次世代の計算科学を担う国際的な若手研究者を育成する研究教育拠点を目指し、現在さまざまな計画を実行中である。

まとめと今後の展開

本稿では、新しい革新的な学術分野「計算科学」を紹介し、文部科学省21世紀COEプログラム「計算科学フロンティア」について、その概要と構成、今後の展開について述べた。

本拠点は、

- (1) 日進月歩で進化飛躍するコンピュータを高度に駆使し、
- (2) これまでと桁違いの自由度、超多自由度の系に挑戦し、
- (3) 非経験的計算科学に基づく認識手法を開拓する、
という3重の意味での革新的な学術分野の開拓を目指す。

その開拓のためには、それを担うアイデア(理念)と人の養成が不可欠である。「道具が世界を変え得る」としても、道具がそこにあるだけでは不十分である。実際、望遠鏡や顕微鏡によって宇宙観や生命観が変革されるにはガリレオやパスツール、コッホが必要であったように、その変革や開拓を担うアイデア、人が必要である。本拠点は、そのためのセンスと技術を身につけた若手研究者・技術者を育成することを目指す。

(平成17年3月31日受付)