

## COEプログラム「計算科学フロンティア」のスタートにあたって

美宅成樹 金田行雄

科学の中で計算が重要になってきたのはいつ頃だろうか。科学の歴史を頭の中で転がして思い当たるのは、近代科学成立の時期に、すでに大規模の計算が重要な役割を果たしていたということである。1600年代はフックの弾性の法則や、ニュートンの力学法則など、科学の基本的な知識が大きく芽を出した時期である。特に、ニュートンの業績につながる研究の流れは興味深い。チコ・ブラーエという占星術師が、数10年にわたって、惑星の動きを記述した。これは現代的な言い方をすれば、典型的なデータ駆動型研究なのである。

チコ・ブラーエに引き続き観測を行ったのがケプラーである。しかし、ケプラーは単に観測するだけではなかった。大量のデータに対して、さまざまな計算を行い、惑星の運動は楕円運動となっていること、太陽が楕円の焦点の一つとなっていること、面積速度が一定であることなど、惑星の挙動を整理し、非常に単純な数学的構造にまとめあげたのである。ニュートンは、このケプラーの法則をさらに抽象化し、惑星と太陽の間に働く重力を導入し、それが距離の2乗に反比例するというを示した。

もちろん科学的には、もっとも抽象度の高いニュートンの仕事が評価されているが、ここで注目したいのはケプラーの仕事である。ケプラーの仕事は、決して容易なものではなかった。大量の計算を要したからである。ケプラーはいろいろなモデルを試したらしい。もちろん太陽を中心とした円上に惑星があるというモデルも考えた。それに基づき大量のデータを整理したことは言うまでもない。それでもかなり良い結果が得られるのだが、体系的な誤差が残り、満足できるものではなかった。長年の計算の結果、楕円軌道というアイデアに行き着いたのである。計算科学という学問はケプラーが開いたと言っても良いかもしれない。

もう一つ、ここで指摘しておきたいことは、チコ・ブラーエからケプラーへ、さらにニュートンへという2段階の科学的抽象化が科学的には注目され、そのプロセスでどのくらい大変な計算の労力が費やされたかということは、歴史の中に埋もれてしまっているということである。その後の科学の歴史でも、これに似た経緯をたどった研究は多かったと思う。科学史というのは、目覚ましい科学的成果の陰に、途中で行われた大量の計算が忘れ去られる歴史でもあったと言えるだろう。

ある学問が科学である条件は、数学的解析に耐えられることだという考え方がある。そういう意味で、19世紀の化学は科学ではなかったし、生物学はごく最近まで科学ではなかったというのである。しかし、19世紀の生物学でも、統計処理が本質的な役割を果たした例があった。19世紀中頃、遺伝の法則を見出したメンデルは、毎年大量のエンドウを栽培し、その植物体のさまざま

な性質を統計処理したのである。この時期は、物理学においても統計力学が成立しつつある頃であり、生物に対して統計学を適用するというのは、あまりにも先進的で、メンデルの研究は死後30年間も無視されてしまった。しかし、このメンデルの研究でも計算が重要な役割を果たした。大量のデータに対して、統計処理をすることで、はじめて生物における本質的な法則があきらかにされたのである。

20世紀後半に入り、計算科学の様相が大きく変わってきた。というより、ようやく本来の計算科学が成立してきた。コンピュータの登場で、本当の大量計算が可能となってきたからである。いわゆる計算機シミュレーションによって、実験や理論だけからでは得られない驚くべき事実があきらかになってきたのである。実験ではできない理想化された現象をコンピュータの中では実現できる。また、純粹の理論ではとても扱うことができない多自由度の現象を、コンピュータではリアルに計算してみることができる。そうした研究の初期の例として、アルダー転移と呼ばれる粒子の結晶化のシミュレーションがある。剛体ポテンシャル以外の相互作用がない剛体球のシステムの振舞いをコンピュータで計算したのである。剛体ポテンシャルだけの粒子は、非常に理想化されたもので、実験的にそれを実現することは非常に難しい。剛体ポテンシャル以外の相互作用を完全に消すことができないからである。また、系の熱力学的な性質を求めるには、多くの粒子を扱うことが必要であり、コンピュータによるシミュレーションが必要であった。結果は、剛体球の系でも、濃度を上げれば結晶化するという簡単なものであった。2体の引力がなくても、剛体球が結晶化するというのは、意外な結果であり、これによって計算科学の新しい地平が開かれたと思う。

さて、16年度21世紀COEプログラムの革新的学術分野で、名古屋大学から提案した「計算科学フロンティア」が採択された。約20名の研究者、多くの協力研究者、ポスドク、リサーチアシスタント、ティーチングアシスタントを擁して、5年間の活動に入った。「道具は世界（観）を変え得る」というキーワードを軸に、コンピュータを道具として研究を進めてきた研究者が集まり、新しい研究手法を目指し、革新的学術分野の創出に乗り出したのである。このキーワードを理解するには、他の道具の例を考えてみればよい。例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、顕微鏡の出現によって医学・生命観が大きく変革された。

望遠鏡や顕微鏡は私たちの目を助ける道具として用いられてきたが、20世紀になって出現したコンピュータは、脳を助ける道具と言える。このコンピュータが私たちの世界観を変えないはずはない。実際、すでにコンピュータは望遠鏡や顕微鏡以上の影響を与え、私たちの日常生活を変え、新しい世界観を広げてきている。そして、科学の分野でもコンピュータの利用は目覚ましいものがある。

「計算科学フロンティア」では、コンピュータの高度利用に基づく科学を目指している。これによって、非線形方程式など従来の理論的方法では解けない問題を解くことができ、実験では得られない正確詳細な情報を得ることができる。その方法は理論、実験にならぶ第3の方法として、すでに気象予測などの実応用というまでもなく、ソリトンやカオスの研究にも見られるように新しい概念や原理の発見、展開にも大きく貢献している。当然、自然や社会におけるさまざまな未

解決の問題，例えば環境，ゲノム，ミクロな物質，経済変動などの問題への計算科学による挑戦が考えられる。しかしながら，これらの現象は一般にあまりに複雑で，多くの自由度を含み，これまでは説明が難しいとされてきた。

しかし，コンピュータ能力の飛躍的増大は，この事情を大きく変革しつつある。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ってきているのである。例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2700億と512倍に増大した。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）に根差すという方法的な意味と
- 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や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広がっていく。

本COE教育研究拠点は，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している。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。私たちは，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している。

本拠点は概略図1のように形成されている。全体は大きく2つの部門（基盤部門と応用部門）に分けられる。基盤部門は，並列計算など計算アルゴリズム，ソフトコンピューティングを，応用部門は1) マクロ，2) ミクロ，3) ゲノム，4) コンプレックスの研究・教育を行う。これらはいずれも，計算科学の分野で最近大きく進展し，注目を集めている分野である。これらの各分野のフロンティアを開拓するとともに，各分野のさらなるブレークスルーを可能にする指導原理とでもいえる視点と方法論の構築を目指しているのである。

この核となる指導原理あるいは視点・方法論としては，1) コンピュータを高度に駆使するための基盤となる計算手法だけでなく，2) 超多自由度系が共通に持つ性質やその背後にある法則性の解明，3) 外見の違いに関わらずさまざまな現象に共通に内在する問題（例えば最適化問題など）に対する核となる考え方・方法論などが考えられる。

組織的には，図2に示したように，計算科学の基盤と応用の融合を目指し実績をもつ計算理工学専攻をはじめとして，全学横断的に広範な分野の形成を目指している。そして，この連携をサポートし実のあるものにするため，計算科学研究教育推進センターを新たに設置することを考えている。教育面では，例えば1) 専攻横断型教育，2) プレゼンテーション教育，3) 国内外に

おける研究交流の奨励，さらに4)おそらく世界に類をみないスーパーコンピュータ実習などを行っている。そして，将来5年間の成果を集約するものとして，(1)次世代の計算科学の体系化を行い，教程あるいは講座として出版・公開，また(2)計算科学フロンティアの研究，教育のさらなる発展につなげるために，基盤から応用までの広範な知識を備え，次世代を担う若手研究者・技術者の育成を目的として，新たに「計算科学教育研究機構」(仮称)を設置する予定である。

COEプログラムの5年間は科学の歴史の中では，ほんの一点に過ぎない。しかし，この一点を契機に科学の質が変わったと言われるくらいの歴史の評価を目指してあせらず研究教育を進めていきたいと考えている。

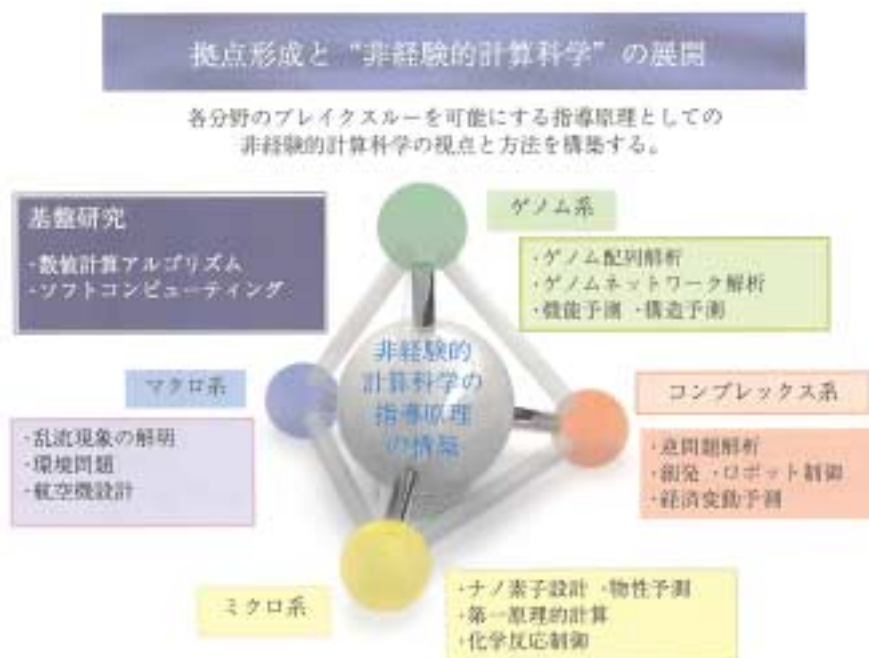


図1 拠点形成の考え方

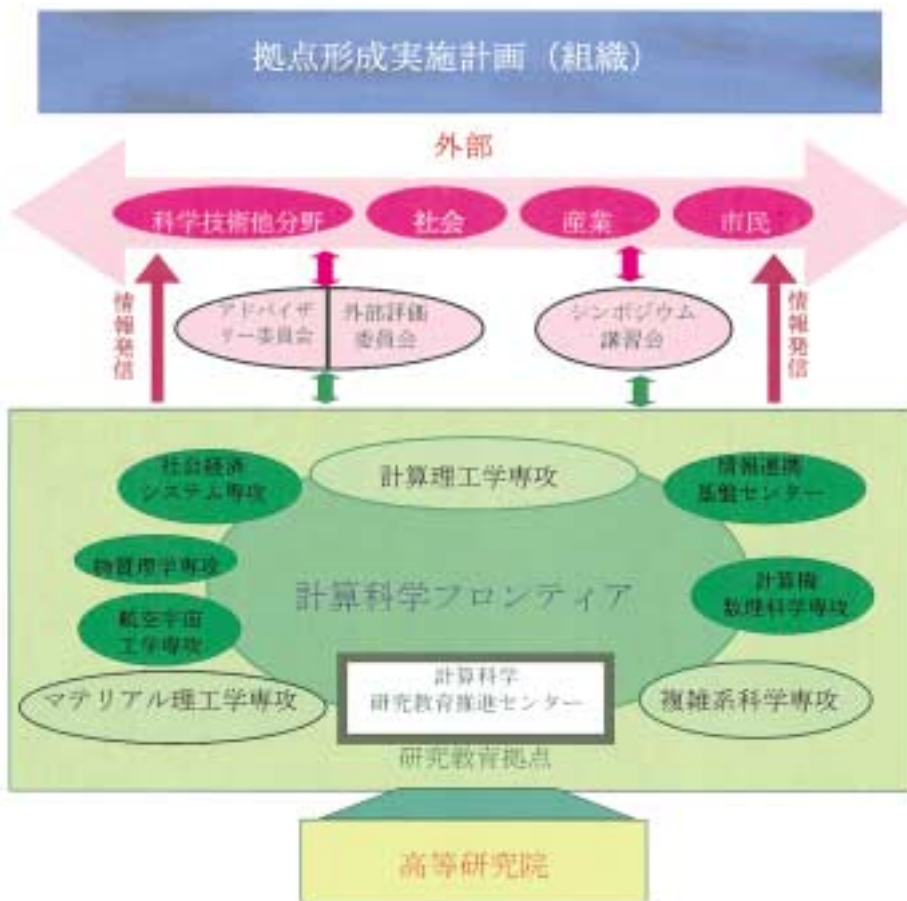


図2 組織図

(みたく しげき：名古屋大学大学院工学研究科)  
 (かねだ ゆきお：名古屋大学大学院工学研究科)