

計算性能の向上がもたらすものは何か

蛭名 邦禎 (EBINA Kuniyoshi)

神戸大学大学院人間発達環境学研究科人間環境学専攻

本ワークショップ「High Performance Computing の哲学」への話題提供で、企画者から与えられた課題は、

問題 1：計算の能力の向上は、科学における計算の役割を変えたのか。

問題 2：計算の出現が変えたのは科学の在り方ではなく科学と工学の関係ではないかというものである。これに直接応えることにはならないかもしれないが、関連するいくつかの問について、小柳(2011)も参考にして考察してみたい。

数値計算の誤差

解析的な解が得られない問題に対して、数値的な解を得ることは近似解法のひとつと考えられている。線形振動子の運動方程式の解は、厳密に三角関数で表わされるので良く分かった気になるが、それは、三角関数のグラフに馴染みがあるからにほかならない。良く知らない関数 $f(t)$ の場合、それをグラフ化してみないと分かった気にならない。そのためには、各 t の値に対して $f(t)$ の値を数値的に計算することになるが、その際（十分に細かいが）有限個の t の値に対して有限桁の $f(t)$ の値で満足するしかない。そう考えると、厳密解を数値化して認識することと微分方程式の解を数値的に得ることの間には、それほど差がないのかもしれない。微分方程式の数値解法では時間 t を差分化して解くことになるが、重要なことは、そのときの時間幅 Δt をある値に固定して満足するのではなく、時間幅を小さくしていったときに必要な精度で解が変化しなくなったときに初めてそれが求める解であると考えなければならないことである。

計算機の性能が向上すると、扱える桁数が大きくなったり、試行錯誤の繰り返しの回数を多く取ったりすることができるようになるので、「近似解法」自身が厳密なものにより近づいていくと言えるのではないか。

モデルの種類と妥当性

現実の現象を理解したり予測したりするのに、シミュレーションが用いられる。それにはまず、数学的なモデルを設定しそれを解いていく。そのときのモデル化には、ミクロの構成要素と物理学の基本原則に従った第一原理的なモデル化と、興味がある現象を直接記述する単純化や粗視化した現象論的なモデル化がある。現象論的なモデルでは、それを厳密に解いたとしても、モデル自身に近似があるため、それが真にこの世界を表していると言い切れない。しかし、第一原理の計算においても、現実の一部を切り取ることは避けられないし、数値計算による限界も存在する。そうすると、現象論的な扱いが特に劣るとも言い切れない。そうだとすると、計算機の性能が向上しても質的に新しい結果を得ることはないということになるのだろうか。

重要な点は、第一原理による計算とマクロの現象論的モデルの間に、モデルの階層構造があることを認識し、異なる階層のモデル間を矛盾なくつなげていくような理解を図ることではないだろうか。そうすると、高性能計算がもたらすものとしては、第

一原理計算の質と量を向上させるという方向だけではなく、何段階かの現象論的なモデルの階層間のつながりの理解を得るという方向も重要になるだろう。

計算が生成するデータから何が得られるか

第一原理計算にしる、現象論的なモデルでの計算にしる、高性能計算によって大量のデータがもたらされるようになる。研究や開発で大規模計算を行うとき、通常は何らかの問いがあり、その問いに答えるために計算を行う。しかし、得られた大量のデータからどのような結論が導かれるかの推論は、データが増えれば増えるほど困難になっていく。さらに、大規模計算から得られたデータの中には、当初設定した問いに答える以上の潜在的に役に立つ情報が潜んでいるかもしれない。それらを含めて、計算の結果を現実に役だてるためには、何らかの特徴抽出が必要になるだろう。そこでは、データ処理の技術、あるいはデータ処理の科学が必要になってくる。

計算結果から何を理解するか

科学においては、問いが立てられそれに根拠を持って答えて行くが、それだけでなく、その問いへの答えを通じて、世界というものがどのようなものであるかの理解を深めることも重要である。そのためには、個々の問いへの答えを知るだけでなく、種々の問いへの答えがどのように関連しているかの分析も欠かせない。

計算性能の向上によって、圧倒的に多数の問いかけへの答えが得られるようになったとき、これらの問いへの解答群から、世界像を抽出するための方法論を新たに開拓する必要があるのではないだろうか。

「将来予測」への貢献

高性能計算が大きな役割を果たしている分野として、気候変化の問題がある。例えば、100年後の地球の平均気温やその他の気候指標を予測するために、世界の10数箇所の研究所に置かれたスーパーコンピュータで、それぞれに開発された大気海洋大循環モデル(AOGCM)による計算がなされている(IPCC, 2007)。そこで扱われるモデルは、大気や海洋の現象の詳細を組み入れたものであり、ここ10数年程の間に大きく進歩している。個々のモデルだけでなく、多数のモデルの結果を統計的に集約するデータ処理技術も進歩している。しかし、その結果、21世紀末における気温の予測値の不確定性の幅は、狭まっているというよりは、むしろ広がっているようにさえ見える。これは、おそらく、現実の気候システム自身が持っている不安定性を、モデルがより精密にシミュレートできるようになったためではないだろうか。この場合、この現実の地球システムのもつ不安定性や予測困難性を高性能計算によって正しく理解することが必要であり、そこで得られる意味を、他分野の研究者や一般市民など、誰にでもわかるように正しく表現していくことが今後重要になってくるのではないだろうか。

文献

小柳義夫 (2011), ハイパフォーマンスコンピューティングによる計算科学の歴史・現状・展望, 『応用物理』第80巻, 557-567.

IPCC (2007), Climate Change 2007: The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Fourth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change [Solomon, S., D. Qin, M. Manning, Z. Chen, M. Marquis, K.B. Averyt, M. Tignor and H.L. Miller (eds.)]. Cambridge University Press.