計算物理の発展と新たな挑戦

宇川　彰　〈日本学術振興会世界トップレベル拠点形成推進センター　ukawa@ccs.tsukuba.ac.jp〉

物理的自然観と計算

物理学は自然現象の背後に潜む定量的な法則を明らかにしてきた．定量的な法則を発見する上でも，その帰結・予言を導く上でも，計算は本質的な役割を果たす．その意味で，計算と物理学は古くから切っても切れない関係にある．ティコ・ブラーエの観測データに基づくヨハネス・ケプラーの惑星運動の三法則の発見（1605–1618）や，ユルバン・ルベリエとジョン・アダムズによる海王星の軌道の予言とヨハン・ガレによる発見（1846）は，誰もが知る例だろう．その一方で，計算は退屈なものであり，計算ができないほど面倒であるがゆえに理解が進まない現象も数多くあった．

20世紀半ばに発明された電子計算機，そして1970年台以降に急速な発展を遂げたスーパーコンピュータはこの状況を変えた．現象を記述する変数の変化を直接捉える計算が可能となり，それによって近似に頼らずに基本方程式や基本モデルの導くままに現象を理解する立場が成り立つようになった．さらに，実験や観測ができないような場合の研究も可能となり，科学的研究の大幅な拡大がなされた．

平成の時代は，昭和後期の計算物理の胎動期を受け，スーパーコンピュータと計算物理が手を携えて発展・成熟し，そして新たな挑戦へと向かう30年間であった．

計算物理の胎動

電子計算機による科学研究はエニアック（1946，米国）に遡ると言って良いだろう．統計物理学の研究はモンテカルロ法やメトロポリス法から知られるように1950年前後に起源がある．宇宙物理学では，恒星の内部構造や多体重力系の研究が1950年代から始まっている．物性物理学では電子状態計算が行われていたが，1960年代半ばの密度汎関数法などの開発に伴い，研究が急速に拡大した．さらに視野を広げれば，電子計算機による最初の気象予報の試みは1950年であり，その後の気象・気候の研究は電子計算機の発達と密接に結びついている．工学での航空機設計や自動車設計に重要な計算流体力学の発展も同様である．

平成に先立つ昭和の後期，1970年代から80年代は，その後の計算物理の発展を惹き出す多くの重要な進歩が起こった時期である．相転移現象は物性物理学の長年の難問であったが，繰り込み群によって大きな進歩がもたらされた．統計力学系と（虚数時間の）量子場の理論の対応が認識され，対称性の自発的破れや強相関系について物性物理と素粒子物理の両面にわたり進歩があった．物性物理学における近藤効果や，素粒子物理学における量子色力学のクォークの閉じ込めなどは，このような動きの中で新しい考え方を引き出した顕著な例である．対象となる物理系は，時空間上に力学変数が配置された多自由度系で，それらが非線形・強結合に相互作用しているので，近似に頼らない計算方法が渇望されたのである．

スーパーコンピュータ技術でも昭和の後期は重要な時期である．1976年にはスーパーコンピュータCRAY-1が稼働し，その後1980年代を通じてベクトル型スーパーコンピュータが発展した．最初のマイクロプロセッサであるインテル4004は1971年に発表され，1970年代を通じて性能が向上した．マイクロプロセッサは小さいながらそれ自体が1個のコンピュータである．n個のマイクロプロセッサを通信回路で結合し，データのやりとりを行いつつ全体で計算すれば，1個のマイクロプロセッサで行うより最大$1/n$の計算時間で計算できる．これが並列コンピュータであり，その萌芽的な研究開発も1980年代に始まった．

スーパーコンピュータ開発と計算物理の発展

物理自由度が時空の各点に置かれているのであれば，時空を部分空間に分割し，それぞれの部分空間を1個のマイクロプロセッサに分担させれば，物理系と並列コンピュータ系の自然な対応が付き，いわば物理法則に則った計算ができる．1980年代に入ると，物理学の研究のための要請とスーパーコンピュータ技術の発展が自然に結びつき，マイクロプロセッサを使った並列コンピュータを開発制作して計算物理学研究を行う動きが，世界各地の大学・研究機関で勃興した．平成の前半にはこの動きが花開いて計算物理学が大きく進展した．1996年には筑波大学計算物理学研究センターと日立製作所により開発されたCP-PACSが世界のスーパーコンピュータのトップ500リストの1位となった．米国でもコロンビア大学とIBMが協力して進めたプロジェクトがIBMのBlueGeneシリーズに結実し，2000年代を通じて世界のスーパーコンピュータをリードした．

宇宙物理学では重力多体専用計算機GRAPEシリーズが開発され，同時代のスーパーコンピュータを超える計算性能を達成した．また，CP-PACSプロジェクトに前後して，数値風洞NWT（1992，数値流体力学）と地球シミュレータES（2002，気候・気象科学）が開発された．

これらのスーパーコンピュータはKEKや物性研究所などの研究機関や大学の情報基盤センターに導入され，世界最高水準の計算環境を提供した．その結果，世界をリード

©2019 日本物理学会

する計算物理の成果が生み出された．素粒子物理学を取れば，ハドロンの質量スペクトルがQCDの第一原理から求められてその正しさが検証された．また，温度$T \approx 150$ MeVを境として，ハドロンガスはクォーク・グルーオンのプラズマ相へと転移することが定量的に明らかにされ，高エネルギー重イオン衝突実験でのクォークグルーオンプラズマの発見の定量的な基礎付けを与えた．さらに，標準理論の検証，特にボトムクォークとCP非保存に関わる物理量の計算はBファクトリー実験の解析に必須の要素となっている．

計算科学と「京」プロジェクト

計算の果たす役割は幅広い科学の分野で平成の時代を通じて増大し計算科学として世界的に追求された．これを支えるスーパーコンピュータの計算性能が指数関数的に向上し続けたことはよく知られている（図1）．ところが，我が国においては地球シミュレータES（2002）を除いて世界トップクラスのスーパーコンピュータの設置台数は急落し，2000年代初頭の10年間は計算科学の苦難の時代となった．

これに応えて2006年度からは計算科学全般を推進するスーパーコンピュータ「京」プロジェクトが国によって進められた．「京」の開発に並行して，5つの戦略分野が国によって定められ，目標を定めた計算科学の研究開発が行われた．物理学関係では，物性物理が戦略分野2「新物質・エネルギー創成」，宇宙・素粒子・原子核物理が分野5「物質と宇宙の起源と構造」である．

「京」プロジェクトは，2009年11月の事業仕分けで「計画中止に限りなく近い縮減」という厳しい判定結果を受けた．文部科学省と研究者コミュニティの努力もあって，開発者視点から利用者視点への転換を行ってHPCI計画として実施された．スーパーコンピュータの開発・運用には多額の費用を要する．社会への説明責任と結果の還元について厳しく問いかけられた出来事である．

スーパーコンピュータ「京」は2012年に完成し，計算科学の推進と「京」の運用を目的とした理化学研究所計算科学研究機構（現計算科学研究センター）が発足した．「京」では，2016年3月まで実施された戦略プログラムによる利用に加えて，計算科学全般の研究課題を申請採択する一般利用が行われている．超並列スーパーコンピュータを利用した大規模計算が大きく進展し，世界水準の多くの成果が科学の幅広い分野で生み出されている．

2014年からは，「京」の後継機であるポスト「京」の開発が進められており，2021年頃に運用が開始される予定である．並行して社会的・科学的課題の解決を目指す9つの重点課題と4つの萌芽的課題の研究も進められている．物性物理学は重点課題7「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」，宇宙・素粒子・原子核物理は重点課題9「宇宙の基本法則と進化の解明」に属している．

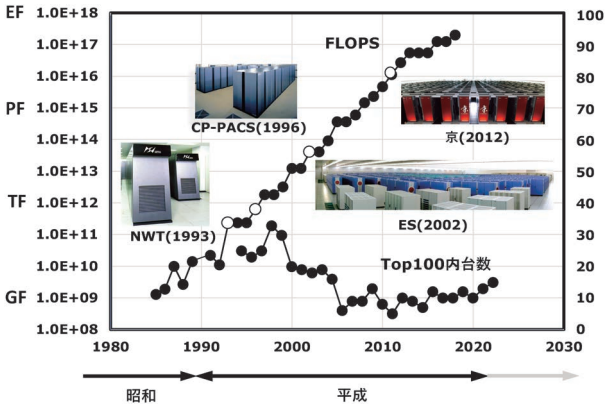

図1　スーパーコンピュータの計算性能の向上（FLOPS左目盛．1993年以降は世界のスーパーコンピュータトップ500リストの1位のピーク計算性能）と日本に設置されたトップ100位以内のスーパーコンピュータの台数（右目盛）．白丸は日本の代表的なスーパーコンピュータ開発プロジェクトにより開発されたスーパーコンピュータ．

新たな挑戦

計算物理は，物理法則の基本方程式やモデルから出発して物理現象を再現し，さらに予言や予測を行う研究方法を確立し，物理現象全般にわたり幅広くかつ大きな成果を挙げてきた．その中では，所与のスーパーコンピュータを利用するに留まらず，必要な機能・性能のスーパーコンピュータを計算機科学者と協力して開発するという視点は大変重要であった．

計算物理は，基本方程式やモデルは与えられたものとして，それから帰結を導くことを得意としてきた．他方，今日の科学においては，様々な分野で実験や観測のデータは膨大になりつつあり，その中から科学的発見をいかにして行うかが極めて深刻な問題になっている．単純なモデル仮説をデータに照らして検証するといった古典的な計算物理の方法だけではもはや立ち行かないであろう．最近発展の著しい人工知能や深層学習を推論や学習の理論化と捉えるなら，これらを積極的に取り入れることによって，自然法則の新たな捉え方にも繋がる計算科学の発展があることを期待したい．

スーパーコンピュータを支える半導体の微細加工技術は既に10 nmを切り，最近のスーパーコンピュータの計算性能向上の減速は図1にもみて取れる．微細加工技術の進歩が終焉を迎えるならば，計算物理は，新たな計算技術を生み出さなければならない．量子コンピュータが新たな計算パラダイムを与えるかどうかは大きな挑戦であろう．

参考文献

1）『岩波講座　計算科学』全6巻（計算の科学，計算と宇宙，計算と物質，計算と生命，計算と地球環境，計算と社会），別巻（スーパーコンピュータ）（岩波書店，2012–2013）．

（2018年12月4日原稿受付）

©2019 日本物理学会