

グローバル COE プログラム

「計算世界観の深化と展開」

東京工業大学 情報理工学研究科 数理・計算科学専攻



<http://compview.titech.ac.jp>

1. はじめに

平成 19 年度より文部科学省のグローバル COE (Center of Excellence) プログラムの 1 つとして東京工業大学で始めた「計算世界観の深化と展開」(以下「**CompView GCOE**」と略記)の取り組みについて紹介する。文部科学省は、それまでの 21 世紀 COE に代わって新たにグローバル COE (以下, GCOE と略記) という拠点形成支援事業を平成 19 年度より開始し、情報・電気・電子の分野で合計 13 の拠点が採択されたが、CompView GCOE もその中の 1 つである。

CompView GCOE では、計算世界観という考え方のもとに、計算を中心とした新たな科学の手法の基盤の確立と、それを実践する人材の育成を目指して活動している。運営組織的は、中核専攻である数理・計算科学専攻の全教員、それに加えて東工大の数理情報系の各専攻(数学, 計算工学, 知能システム科学), 学術国際情報センター, グローバルエッジ研究院から事業推進担当者として参加した教員から構成されている。また、海外拠点として ETH Zurich の理論計算機科学グループと San Diego Supercomputing Center に所属する教員も事業推進担当者に加わっている。

2. 計算世界観とは?

「計算世界観って何?」と思われる方も多いただろう。それは当然で、「計算世界観」は CompView GCOE の目指すところを示すために作った造語である。計算世界観とは、科学的に解明可能なものすべてを「計算」とみなす世界観である。その立場のもと、

科学の対象を「計算」を中心に見よう

というのが、我々が確立を目指す計算世界観的な科学へのアプローチである。ここで「計算」とは単純な処理の組合せのことである。その代表はコンピュータの上にも実現できるような「計算」であるが、後でも述べるように、それに限る必要はない。

もちろん「森羅万象すべてが「計算」である」とは言い過ぎである。実は企画がスタートした当初、私は安易に「すべてが計算だ!」と叫んでいた。それがプロジェクト準備メンバーと何度も議論する中で、洗練され、最後には(名参謀で文才のある S 教授の手により)以下のような計画申請書の説明に落ち着いたのである。

客観知の限界が「紙と鉛筆でできること総体」から「コンピュータでできること総体」に拡張された現在、計算ならざるものの客観的・確証的な解明は人知を超えているという達観が背景にあり、そのもとでの主張が計算世界観である。

この考え方は、計算機科学者の間では、もう随分前から「常識」だった。実際、NP 完全性の理論の基礎を作り、その功績で昨年、京都賞を受賞された Richard Karp 教授も、「生命科学を計算という観点から見よう」と主張し、Bioinformatics という分野の創設に大きく貢献

されたのである。我々は、それをさらに進めて「科学を行う新たな手法にまで高めよう！」そして「その手法を実践できる人材を育成しよう！」という意気込みで旗揚げしたのである。

では、なぜ計算世界観なのか？我々は計算世界観的アプローチが新たな、そして強力な科学の手法になりうると考えている。その根拠を説明しよう。

▶ 計算を中心に見る ⇒ 新たな発見

ここ数年、コンピュータを使って科学する手法は飛躍的に発展している。しかし、計算世界観は「ただ使う」だけでなく、「計算を主体としてみる」という意味で 180 度の転換をした見方である。この見方の転換により、今までにない新たな枠組みや概念、関係などを発見できる可能性がある。その例として、ここでは公開鍵暗号系の発見を挙げよう（囲み記事：例 1）。このような影響力のある発見をそう簡単にできるわけではない。しかし、小粒ながらそれぞれの分野で重要な発見が我々のグループ内からもいくつか出始めている。

▶ 計算を中心に見る ⇒ 新たな切り口の創出

計算を主体にして見ることで今までになかった切り口を提唱するような研究も期待できる。私は、この点が「新しい科学の手法」としてもっとも期待できる点だと考えている。

いまスパコン等を利用した高性能計算が、新しい時代を迎えようとしている。その能力だけでなく、特定の研究者だけでなく、多くの人々が様々なことに利用できるような時代になりつつあるのだ [2]。またストレージ技術の進歩も期待でき、これまでになく多量のデータを扱うことができるようになってくる。こうした高性能計算を利用した新しい科学「e-サイエンス」が生まれつつあると言ってよいだろう。

さて、その e-サイエンスの中心となる手法の 1 つがシミュレーションである。シミュレーションは対象となる現象をモデル化し、スパコンなどのコンピュータ上で仮想的に実行し、その結果を解析などに応用する手法である。通常は、対象の物理法則等を中心にモデル化する。それはもちろん妥当なことなのだが、完璧な法則を考えるのが不可能な場合がほとんどだろう。その際に「どういう観点で妥協するか？」の基準を決める必要が出てくる。ここで分野の色が出るのである。計算世界観で主張したいのは、各々の分野の切り口も大切だが、計算を中心にした切り口も一つの重要な切り口となる、という点なのである（囲み記事：例 2）。

例 1：公開鍵暗号系の発見

現在の情報セキュリティ技術の基礎である公開鍵暗号系は、従来、通信理論などで統計的観点から研究されてきた暗号通信を、盗聴者も含めて通信系全体を「計算」という観点で見ることにより生まれた新たな概念である。盗聴者も解読するには計算を用いるしかないとする、そこには自ずと解読能力の限界も出てくる。それを逆に利用したのが公開鍵暗号系である。

例 2：たんぱく質間の相互作用の研究

事業推進担当者の一人の秋山教授（計算工学専攻）は、多数のタンパク質間の相互結合解析問題を、フーリエ空間上の積和問題に変換して実施する手法を開発した。この変換は、従来の量子力学的な解析から離散構造を見ることへ視点を変えたことにより可能となった。その結果、これまで不可能と考えられていた網羅的な照合がスパコンで実施可能（数ヶ月の計算）となったのである。

▶ 計算を中心に見る ⇒ 強力な解析手法・アルゴリズムが利用可能

計算を中心に見ることで、別の分野で開発されたアルゴリズムや、数学的に洗練された解

析手法を利用できる可能性が生まれてくる。「計算」として見た方が、対象をそのまま考えるより、より一般的な見方ができるため、共通性質が見えるようになってくるからである。

ここでは手前味噌だが、筆者の研究グループでの研究を紹介する。我々は、近似信念伝播法 (Loopy Belief Propagation) が、なぜうまく働くのか、という点について理論的に解析していたが、グラフのクラスタ構造の分解において、この近似信念伝播法の「計算」を見つめることで、実は、よく利用されている固有値法の拡張である、という共通点を見出し、性能限界などの解析を行うことができたのである。

3. CompView GCOE の教育プログラム

GCOE のプログラムでは、博士課程の学生の教育に重点が置かれている。CompView GCOE においても教育事業に力を入れている。我々は、計算を中心とした新たな科学の手法の確立を目指しているが、実は最も重要なのが、その手法の実践者の育成だからである。

ご承知の方も多いと思うが、GCOE では、博士課程の学生に対して手厚く支援できるような予算を組むことができる。具体的には、たとえば、博士課程の学生を RA (Research Assistant) として学振の DC 並みの給料で雇用できたり、学生による研究プロジェクトや海外研修等を財政的に支援することも可能である。CompView GCOE では、この手厚い支援を有効に利用し、RA として採用した博士課程の学生だけでなく、関連の研究分野の学生を計算世界観の実践者たるフロントランナーとして活躍できるような教育事業を実施している。その中の特徴的なものを紹介する。

▶ 計算世界観・特別教育研究コースの開設

博士課程の学生という日本では 1 つの研究室に所属し、そこでの研究に打ち込むのみ、というタイプが少なくない。しかし、我々は、従来の所属研究室での研究に加えて、「計算世界観の実践者」としての重要な知識や技術を学ぶことも重要であり、それが各自のキャリア形成にも役立つと考えた。そこで、博士課程の学生対象としては異例かもしれないが、それを教育するための特別コース（下図）を制定し、平成 20 年度より開始した。

	博士課程 1 年	博士課程 2 年	博士課程 3 年
準備コース	数学速成コース プログラミング速成コース		
技術習得科目 (コア科目)	計算数理基礎：最適化 計算数理応用：アルゴリズム 計算数理実践：HPC 離散数理と計算構造		
(集中講義)	代数学特論第四 パターン情報処理 データ解析特論 バイオインフォマティクス 数値流体力学		
フォーラム	計算数理特論第一 第二 第三 第四		
インターンシップ	数理科学フォーラム 第一 第二 第三 第四 第五 第六 研究インターンシップ		

※技術修得科目、インターンシップについては年次に関係なく履修可能。

※フォーラムは履修上の都合により名称を分けているが実質は同じ科目。

コースの科目は 3 つに大別される。分野外の学生がコースの各授業科目を取るために必要

な最低限の知識を学ぶ準備科目，計算世界観の基礎となる理論や技術について学ぶ技術修得科目，他研究者との連携や共同研究の手法を身に着けるための実践科目である。各科目は 2 単位で，準備科目と技術修得科目 2 科目 枠内から 6 単位以上，実践科目 2 科目 枠内から 6 単位以上を取得した者を（集中講義はどちらにカウントしてもよい），計算世界観・特別教育研究コース修了と認定し，卒業時に学長より「コース修了証明書」を発行する。どちらも，通年で 1 科目（合わせて 2 科目）を取れば，博士課程 3 年間で十分取得できる単位数である。

RA の博士課程学生には，この中から数理科学フォーラム（後述）と年間に少なくとも 1 科目の単位修得を義務付け，その成績も RA の評価の一部として使うことにした。（平成 21 年度から入学の学生には，博士 1 年次に年 2 科目の履修義務に強化する予定。）

教育には時間がかかるため，とにかく早期に実施しようと考え，準備は大変ではあったが，プロジェクト 2 年目の平成 20 年度から実施することができたのはいろいろな意味でよかったと思っている。以下，この中で特徴的な 2 つの科目を紹介しよう。

▶ 数理科学フォーラム：RA 研究交流の場

毎月末に行なわれる数理科学フォーラムでは，各々持ち回りで，RA が自分の研究を他の RA ならびに CompView GCOE 関係教員に説明する講演を行なっている。これは計算世界観・特別教育研究コースの授業科目の 1 つでもある。分野外の人に自分の研究を上手にアピールする練習，そして自分の専門外の話も上手に聞く訓練を目的とし設計したのである。

上記は当初の目的だったのだが，実際に 1 年間実施してみると，意外な効用があることもわかってきた。まずは，学生同士の交流が，この月 1 回の会合をきっかけに始まったという点である。この会を通じて（まあ，多分にその後にはしばしば開かれている飲み会の効果もあるようだが），約 30 名の RA 諸君が，お互いに知り合い，議論しあうようになったのである。

また，私も含め参加教員自身も，学生の話を通して，CompView GCOE に加わっている各研究室での研究も知ることができた点も大きい。近い将来，それが次節でも述べる共同研究への第一歩になるのでは，と期待している。

▶ 研究インターンシップ：出向修行制度

理工系の大学院生の場合，生活も含めて世界が自分の研究室だけになることが少なくない。1 つのテーマに没頭するのも大切だが，ある期間，自分の研究環境から外に出て研究を行なうことも重要である。それを行わせる仕組みとして「出向修行制度」というアイデアを出した。いわゆる「他人の釜の飯を食う」体験をさせる制度である。

実際には「研究インターンシップ」という無難な名称に改め，授業科目の 1 つとした。この科目では，(1) 企業等の研究機関が提供しているインターンシップに参加する，(2) 海外の研究機関に数ヶ月滞在して共同研究を行う，(3) CompView GCOE の他の研究室に出向き，そこで自分の研究を少し別の観点から眺め，共同研究を行う，といった 3 通りの修行のパターンを推奨している。そのいずれかをこなした上で，その成果がわかるような研究報告を提出することが求められるのである。平成 20 年度は，4 名の RA が，この研究インターンシップの単位を取得した。

以上は，主に計算世界観・教育研究特別コースに関する説明だが，その他にも，教育事業の一環として以下のような活動を行っている。

- ・ 計算世界観に関する特定的话题を選定し，国内外の一流の若手研究者を招聘し，合宿形式集中講義を行う「GCOE スクール」の実施（共催を含め，年に 2 回以上）。
- ・ 有望な学生を CompView GCOE の博士課程学生へリクルートするための「GCOE 紹介セ

ミナー」の実施（国内外で年に数回）。

- ・ RA や博士課程学生の国際会議での発表や出席の奨励と支援．計算世界観に関係した話題の集中講義型スクールへの参加支援．
- ・ 国内外の優秀な博士課程学生の招聘と CompView GCOE の RA との学生共同研究の実施．

ちなみにこれらすべてが順調に教育効果をあげているわけではない．とくに博士課程学生へのリクルートに関しては，まだまだ工夫が必要だと感じている．

4. CompView GCOE での研究

我々は計算世界観に基いた研究手法を強化し，それを科学の手法として確立していこうとしている．そのためには次の三つの重要な柱があると考えている．

柱1：計算という視点から物事を分析する研究

これは計算世界観的手法を実際に適用し，「計算」を中心に物事を見つめる研究である．つまり，先に挙げた計算世界観的手法の強みを生かす研究である．計算という視点から見ることで，たとえば次のような研究が期待できる．

- a) 今までに見えなかった新たな理屈，関係等を発見する研究
- b) 今までにない切り口を提唱するような研究
- c) 統一的な観点から新たな解析手法やアルゴリズムを見出す研究

柱2：計算そのものを追求し，新たな視点や概念を導き出す研究

計算世界観的手法を確立するためには，我々は「計算」について，もっと深く知らなければならぬ．「計算」という概念も画一的なものではなく，色々な見方や手法が考えられる．また，「計算」を武器に科学を解析するためには，もっと多くの手法やアルゴリズムを世に出す必要がある．したがって，「計算」そのものを対象にした研究は，計算世界観には欠かせない大きな柱である．具体的には，たとえば，新たな計算原理やメカニズムの発見，様々な計算の可能性・限界の研究，計算を上手に表現する技術の研究などがある．

柱3：計算世界観的手法を科学の手法として実証する研究

計算世界観的手法を新たな科学の手法として世に認めてもらうためには，コンピュータサイエンスの境界を大きく越え，他の科学の分野で，計算という視点から見ることで何かおもしろい発見をするなど，他分野への貢献を示すことが重要である．そのためには，柱1のような研究をさらに発展させ，応用分野でもその有用性を実証する必要がある．

これら3つの研究の柱を GCOE として推進するために我々が行ってきた取り組みを2つ紹介しよう．

GCOE の取り組み：共同研究プロジェクト

CompView GCOE に参加する異なる分野の研究者たちの共同研究を推奨するために，昨年度夏に GCOE 内研究プロジェクトの計画を募集し，合計12件の研究プロジェクトを採択し，10月より研究に取りかかってもらっている．その多くは，GCOE 特任教員や PD などの若手研究者を中心とするもので，複数の分野の研究者による共同研究である．ある研究グループの PD が他の研究室の RA と組んで行う研究もある．すでにいくつかの成果も出始めており，本ワークショップでも，そのうちの1つを紹介させて頂く予定である．

このような分野横断型の共同研究の提案が出てきたのも，特任教員や PD を各分野で囲うことなく，互いに議論できる環境を提供するよう配慮したためだろう．また，数理科学フォ

ーラムを継続的に行ってきた効果も大きい。このフォーラムで、特任教員や PD などが、他の分野の RA の研究を知ったお陰で、共同研究の話が出てきたのだと思われる。

GCOE の取り組み：CompView ワークショップ

上記の 3 つの研究の柱をよくよく考えてみると何も奇抜なことを言っているわけではない。実は情報を中心とする数理科学から計算科学まで多くの研究者がやっていることの中に、計算世界観的要素が入っている場合が多い。要するに研究者各人が行ってきた研究を「計算」という立場から見つめなおしてみれば、そこに計算世界観的手法の基盤が見出せるのである。

そこで、我々は互いの研究の中にどのような計算世界観が見出せるか、を議論することにした。毎年度 12 月に行うことにした計算世界観シンポジウムの中の 1 つのイベントとして、昨年度行った CompView ワークショップを議論の場としたのである。2 日間のワークショップでは、7 つのテーマを選び、関連の教員たちが自らの研究を紹介し合い、上記の研究の 3 本柱と照らし合わせて、各自の研究のどの部分を推し進めると計算世界観的手法の確立に貢献できるのか、を討論したのである。

数理科学フォーラムで RA 諸君が汗をかきかき自分の研究の説明を他分野の人々にしていたのを、今度は逆に教員を舞台に立たせ、教員間での討論会を行わせたのである。はたして観客が来るのか、議論がかみ合うか、などの心配もあったが、多くの聴衆を得て、かなり白熱した議論もあり、RA にもかなり刺激を与えることができたように思う。現在、書記役を割り当てられた RA 諸君を中心に、各テーマでの議論をまとめている段階だが（拠点のホームページで公開する予定）、そのまとめの中から、今後 3 年間の共同研究のテーマが生まれることを期待している。

5. おわりに：数学と計算世界観

さいごに計算世界観という考え方と数学の関係について私見を述べさせて頂く。計算という目で見ること、科学の様々な対象に対して、これまでにない手法を適用しよう、というのが計算世界観である。その新たな手法の開発には数学が不可欠である。既存の数学を使い回すだけでなく、そのために新たな数学技法が必要となることがほとんどである。我々は、数学の研究者（とくに学生諸君）の中に、このような数学を開発することにも面白さを感じて真剣に取り組む人が多く出てくれば、と思っている。

数学自身に対しても計算世界観のアプローチが大切だと思う。最近では、コンピュータを駆使して数学を深めていく試みも少なくない。実験数学という分野もその 1 つだろう。だが、私はそれだけが数学に対する計算世界観的アプローチではないと思っている。「計算世界観＝コンピュータを使う」というのは狭すぎる。対象の中に計算のような構造（たとえば再帰構造）を見出す研究や、それを用いてさらに深い解析を行う研究も計算世界観的な解析なのである。たとえば「 $a^5 + b^5 = c^5$ となる自然数 a, b, c の組が存在しない」ことを証明するのに、「このような組を探索するアルゴリズムが停止しない」ことを示してもよい。もちろん、こんな直接的で幼稚な計算的解釈が役立つとは思えないが、もっと深い見方ができる計算的解釈があるかもしれない。それにより、別の美しい見方ができれば素晴らしいと思う。

本拠点では様々な行事を企画しており、そのほとんどが一般にも公開されています。また、博士課程学生の参加に対する支援の可能性もあります。これらの情報については、是非、拠点ホームページをご覧ください。最後になりましたが、本拠点を紹介する機会を与えてくださいましたことに深く感謝し、本稿を終えます。

(文責：拠点リーダー 渡辺 治)