



計算科学

# 科学と計算機をつなぐ

自然の不思議を解き明かすコンピュータ

**吉本 芳英 准教授** Yoshihide Yoshimoto

## コンピュータの発明・発展とその曲がり角

コンピュータ(電子計算機)が発明された背景には、科学技術が大量の計算を必要としているという大きな要因がありました。水や空気の流れ、電子と原子核からできている極小の世界、多数の星々から成り立つ銀河の歴史……これらの理論を構築しても、実際に計算できなければ検証も活用もできないのです。

コンピュータは、半導体集積回路の急速な進歩、すなわちムーアの法則に牽引されて大きく発展しました。初期のスーパーコンピュータのひとつ、CDC6600(1964年)は、1秒間に100万回程度の四則演算ができたといいます。すでに人間よりもずっと速いのですが、2015年の日本でもっとも高速なスーパーコンピュータ「京」の性能はこの100億倍です。

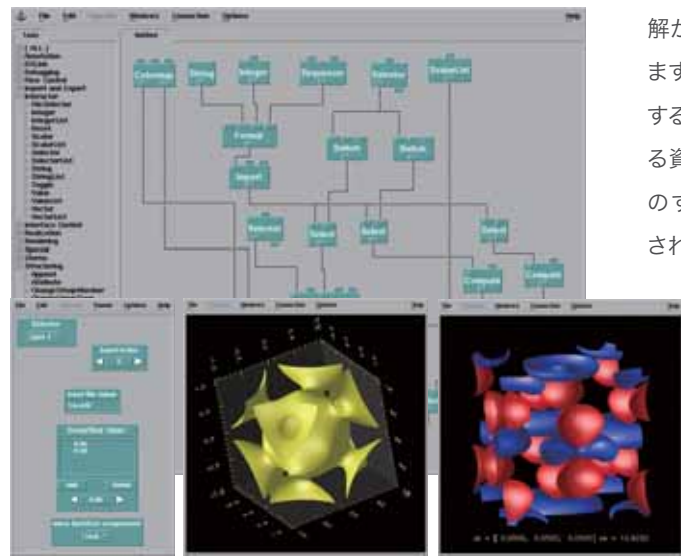
しかし速さの中身には違いがあります。実は、「京」は小さな計算機を約10万個も

組み合わせたものなのです。つまり単体の性能は10万倍程度、それを多数組み合わせると100億倍の性能を出しているのです。これを並列化といいます。

並列化は、半導体技術の制約が顕在化して演算器単体の速度向上が困難になった2000年ごろから重要になっているのですが、さらに並列化の数が増し、組み合わせ方が複雑になっていることが、計算機から性能を引き出すソフトウェアづくりを困難にしています。体育祭の集団演技を思い出せば、多数の計算機を協調させてひとつの仕事を効率よく実行するのがいかに難しいか、感覚的にわかるでしょう。

そのため、計算機を活用して科学をする計算科学と計算機そのものを研究する計算機科学の関係にも変革が求められています。かつて計算科学は、年々向上していく計算機性能にただ依存することができました。しかし今日、計算科学者がさらに巨大な計算を行うためには、専門分野の知識だけ

だけでなく計算機自体の理解が必要になってきています。一方計算機を設計する側にも、振り分けられる資源と目的とする計算のすり合わせが必要とされるようになりました。



図では、Cuの第一原理電子状態計算を可視化している。下段中央がフェルミ面、右が波動関数である。下段右の赤と青の曲面はそれぞれ正と負の等高面を表しており、波動関数の節の構造が分かる。

つまり、計算機が誕生した時と同じように、2つの分野が密接に協力する時代を迎えているのです。

## 再び歩み寄る計算科学と計算機科学

吉本研究室はこのような背景で、計算機科学と計算科学の協調を、教育と研究の両面から推し進めることを目標としています。

私は計算科学をおもな専門とし、半導体、磁性体、金属、誘電体といった多様な物質の性質の大きな支配要素である電子の量子力学をできるだけ写實的に解く手法、第一原理電子状態計算を専門とし、この計算を行なうプログラムxTAPPを維持しています。一方で、国内有数の規模を持つ東京大学物性研究所のスーパーコンピュータシステムの計画運用を経験し、計算機科学への理解もあります。

研究室では、計算機科学と計算科学の境界に立ち、(1)電子状態計算をホームタウンとしつつも、計算科学の幅広い分野で個々に発展している方法論を計算機科学の観点からとらえなおし、両者をつなげること、(2)計算科学のニーズを計算機科学の観点から定義してより本質的な解決法を提案すること、(3)計算科学と計算機科学の相互理解を促す教育、を目指しています。

**研究テーマ**  
 ■ 計算科学  
 ■ 並列シミュレーションソフトウェア (特に第一原理電子状態計算)

● 参考データ  
 吉本研究室:  
<http://www.cp.is.s.u-tokyo.ac.jp>  
 xTAPP:  
<http://ma.cms-initiative.jp/ja/listapps/xtapp>

# 競技プログラミングにチャレンジ

PROGRAMMING COMPETITION REPORT

スゴ腕プレイヤーが集まる国際的なプログラミング・コンテスト。そのオンライン競技場で、ISerの魂が熱く燃え上がります。歴代の健闘はいかに？

## ACM/ICPC

世界2000大学から2万人以上が参加する、大学対抗のプログラミングコンテスト。3人1チームで、制限時間内により多くの問題を、より短時間で解く。国内オンライン予選、アジア地区予選を勝ち抜くと、世界大会へ(ちなみに、東大チームは、世界大会の常連だ)。

世界大会には、強豪チームがたっぷり練習を積んでやってくる。課題や実験で練習時間が少なく、英語での出題というハンディは、作戦の工夫でカバー。2003年のチームlighthouseはあと1問で銀メダルまでこぎつけ、銅メダルを獲得した。チームlighthouse / 世界大会11位

●2002年(ホノルル)  
 青い海の綺麗なワイキキビーチで、海一ではなくアルゴリズムの世界を力泳。制限時間内に最も多くの問題を、より短時間で正答したチームが勝者となる。時間配分を誤ってしまったものの、上位チームと日本のレベルに大きな開きがないことを体感。  
 チームXXX-TOKYO / 世界大会18位

●2005年(上海)  
 ところ変われば品変わる。2005年のマニラ地区予選で出た問題は、なんと自分たちで制限を設定しないと解けなかった(適当に制限を加えて突破)。こんなのアリか? 世界大会の上海では、真紅のチャイナドレスの案内嬢がずらりと並んでお出迎え。かわいらしい制服のアテンダントにもとり囲まれて、至福のひととき。  
 チームGokuri-Squeeze

地区予選や世界大会では、お楽しみイベントもいろいろ。2007年地区予選では、「Javaチャレンジ」が併催された。課題は「鮭をたくさん獲れるように熊の動きを制御するAI」。kitsuneは鮭を追わずに、「ライバルの熊を追いかけ、途中で鮭がいたらとる」という奇策で善戦。対戦では相手の熊にびたり貼りつく熊の動きで会場を笑いの渦に巻きこみ、決勝に進んだ。  
 チームkitsune / 世界大会26位



●2006年(サン・アントニオ)  
 テキサスはアラモ砦の近くにやってきたチームGNC。まずは京大チームと小手調べの練習会。そこで仕入れた解法が本戦でそっくり使え、ラッキー! そのとき出会った両大学のメンバーが、その後会社を起業。  
 チームGNC / 世界大会19位

●2008年(バンフ)  
 2008年の世界大会会場は、ロッキーの城と呼ばれるホテル。世界大会が東京だった前年参加者から、羨望の眼差しを向けられる。コンテストのラスト3分、会場に希望と焦りと憔悴がうず巻くなかで1問正答。13位にすべり込んだ。  
 チームUnknown / 世界大会13位

ICPCの世界大会に出場できるのは、1大学1チーム。そこで例年、出場をめぐる学内チームが激しい競争を繰り広げる。ISerを中心にしたチームはたびたび世界大会に進出してきたが、2009年は駒場生のモンスターチームHITORI++がISerのチームを抑えて出場権獲得。そのHITORI++も、進振りではめでたくISerとなってさらに腕を磨き、2010年世界大会(ハルビン)へ!  
 チームHITORI++ / 世界大会20位

## TopCoder

TopCoder社が毎週オンラインで開催する、個人競技のコンテスト。3問の問題をいくつ正答できるかを競う。勝ち進むと、米国で開催される年に一度の世界大会に出られる。トップクラスのプレイヤーに与えられる「Red Coder」は、参戦者至高の勲章だ。

先輩の命を受けて、強豪ロシアの強化合宿に送り込まれたISer 2人。飛行機と夜行列車を乗り継いだ合宿地は、言葉は通じなくても、誰よりも速く問題を解けば認められる世界だった。その後、修行の甲斐あって手にしたタイトルがずしりと重い。  
 TopCoder Open:  
 wata / 2010年Marathon部門1位  
 [Iwi] / 2011年Algorithm部門第7位  
 ACM/ICFP Programming Contest:  
 Unagi:The Gathering / 2011年2位

