

コンピュータ・シミュレーションで できること、わかること

- コンピュータ・シミュレーションにはどんな価値があるのか
- なぜコンピュータで 自然現象の解明・予測ができるのか
- ポスト「京」プロジェクトとはなにか

2017年7月
理化学研究所
計算科学研究機構

本資料について

本資料は、コンピュータ・シミュレーションになじみの無い方に、「シミュレーションとはなにか」「シミュレーションの価値」について、紹介することを目的に作成しました。

- ご利用例
 - コンピュータ・シミュレーションの基礎知識の資料として
 - 講演会での講演や資料として
 - コンピュータ・シミュレーションと直接関わりの少ない研究者への説明資料として
 - ご利用条件
 - 全ページ、もしくは、ページ単位でご利用ください（図のみを切り出して使用することはできません）
 - ご利用に際して、下記クレジットおよびページ毎の出典をご明記ください
(C)理研AICS 2017「コンピュータ・シミュレーションでできること、わかること」
 - 利用実績の確認や、資料に関するご意見などを、差し支えない範囲で理研AICSのウェブサイトのフィードバックフォームからお知らせいただけますと幸いです。
 - ①氏名、所属、メールアドレス
 - ②利用予定日、利用機会、資料に関するご意見・ご感想
- フィードバックフォーム https://www.aics.riken.jp/forms/simulation_mat.html

もくじ

- 1章 コンピュータ・シミュレーションにはどんな価値があるのか？
- 2章 なぜコンピュータで自然現象の解明・予測ができるのか？
- 3章 ポスト「京」プロジェクトとはなにか？

1章 コンピュータ・シミュレーションには どんな価値があるのか

コンピュータ・シミュレーションの価値

現代の科学技術に欠かせないツールとなった、コンピュータ・シミュレーションを使ってできること・わかること。

A. 世の中のしくみがわかる

1. 自然現象・社会現象のメカニズムが解明できる。
2. 現象の本質が理解できる。
3. 原因と結果だけでなく、途中経過がわかる。
4. 自然災害や社会の安全を脅かす事象を仮想的に起こすことができる。
5. 可視化できるため、情報の共有化がしやすい。

B. 実験・観測、理論との知的共創により科学の進歩が加速する

6. 実験や観測での抜けを埋めることができる。
7. 実験・観測計画の立案、設計に利用できる。
8. 自然界にない物や極端な状態を作ることができる。
9. これまでにない理論・法則に気付ける。新たな創造。

C. 未来の予測ができる

10. 定量的な予測ができる。
11. 研究の確度を高め、余分な労力・時間やお金をかけずに済む。

A. 世の中のしくみがわかる 2. 現象の本質が理解できる

がん研究においては、がんの進化を探ることがとても重要な課題だが、実験データだけではその全貌を明らかにすることは困難である。

しかし、膨大な条件でシミュレーションをすることで、がんの進化の細かい動きを追跡することが可能になり、進化の原理をより深く理解できるようになる。

スパコンでのシミュレーションは、実験データの背後に潜む生命現象の動作原理、本質を捉えることができる。



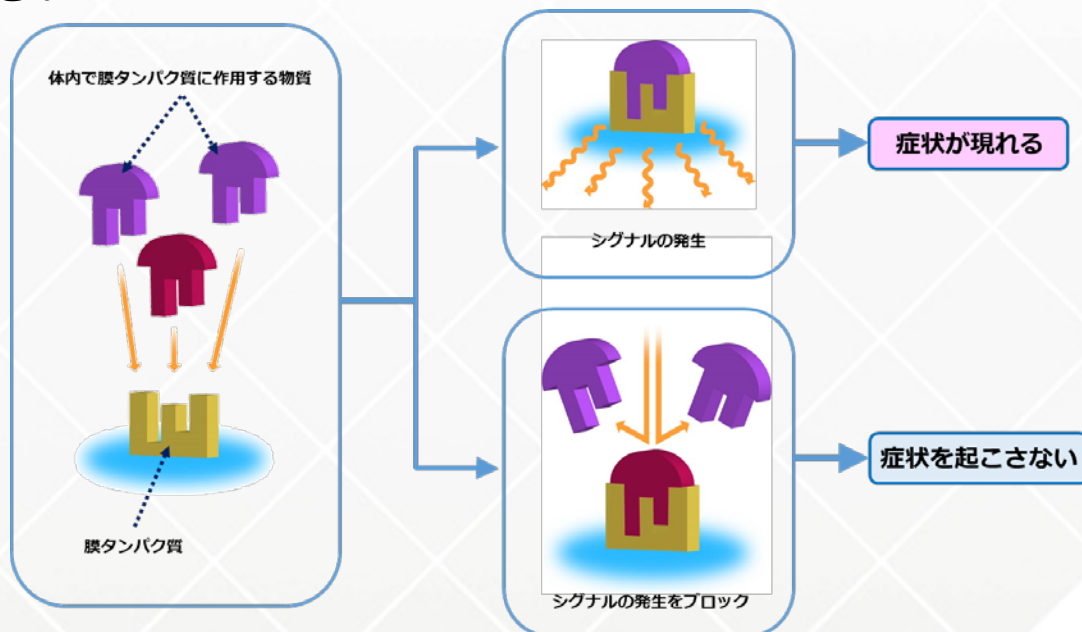
提供：理化学研究所

A. 世の中のしくみがわかる

3. 原因と結果だけでなく、途中経過がわかる

薬は、病気の原因となるタンパク質に作用することで効く。薬の作用メカニズムを理解する、つまり途中経過を知ることによって、より効果があり、副作用の少ない安全な薬分子を設計することが可能になる。

薬が作用する分子の世界は、簡単に見ることができない。体の中のさまざまな分子のはたらきをスパコンでシミュレーションすることによって、薬が作用するメカニズムを明らかにできる。



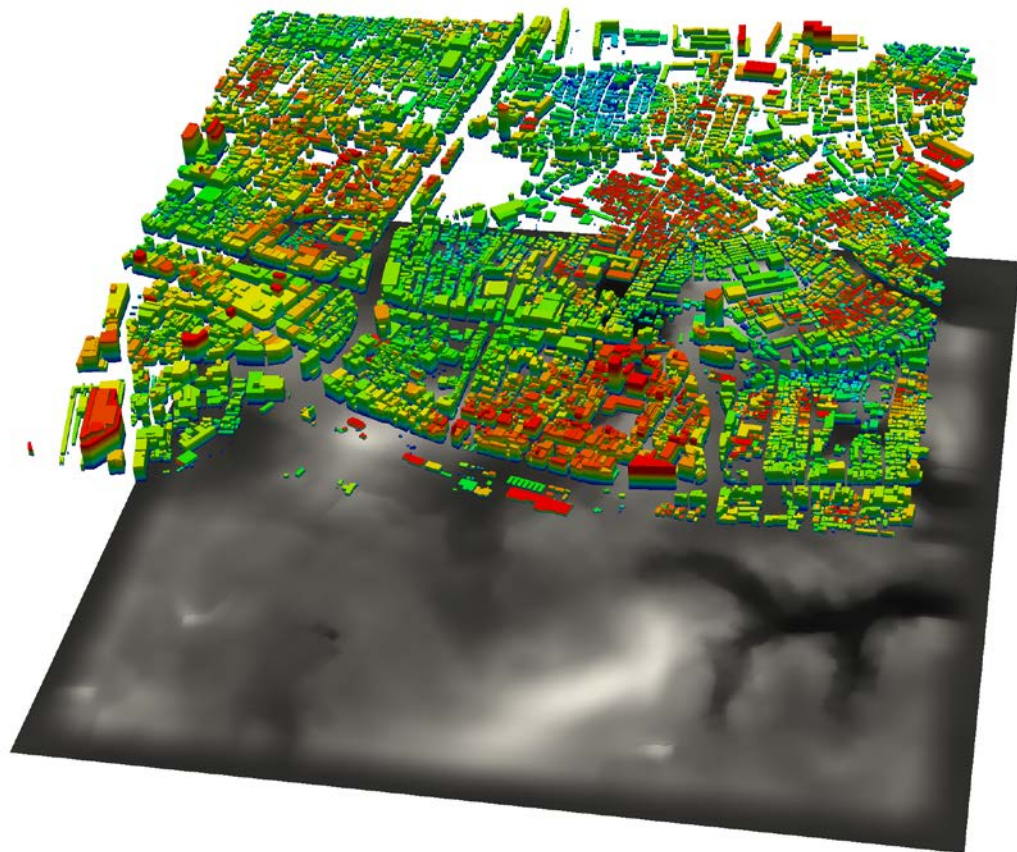
A. 世の中のしくみがわかる

4. 自然災害や社会の安全を脅かす事象を仮想的に起こすことができる

自然災害に備えるために、建物は丈夫にしなければならないが、これにはコストがかかる。また、重要な建物はより丈夫にすることが求められる。

建物と同様、都市の場合も、自然災害に備えるためには、コストや重点的に守るべき都市機能を考える必要がある。

シミュレーションを使うと、自然災害、さらには安全を脅かす事象を仮想的に起こすことができる。建物や都市の、コストを含めた効果的な備えを考えることができる。



都市の地震シミュレーションの例。上は建物の揺れの大きさ（赤が大きく青が小さい）。下は地震による地盤の揺れの大きさ（黒が大きく白が小さい）。

提供：東京大学地震研究所

A. 世の中のしくみがわかる

5. 可視化できるため、情報の共有化がしやすい

ここ数年、日本上空で飛行機の渋滞が深刻化している。スパコンを使った高度なシミュレーションによって、たとえ一部の飛行機に遅れが生じた場合でも、全体の安全と効率を考えた最適な運航方法を見つけ出すことができる。飛行機の航路をリアルタイムに3次元で可視化することによって、他分野の専門家とも情報共有がしやすく現象の理解も深まる。



提供：電子航法研究所

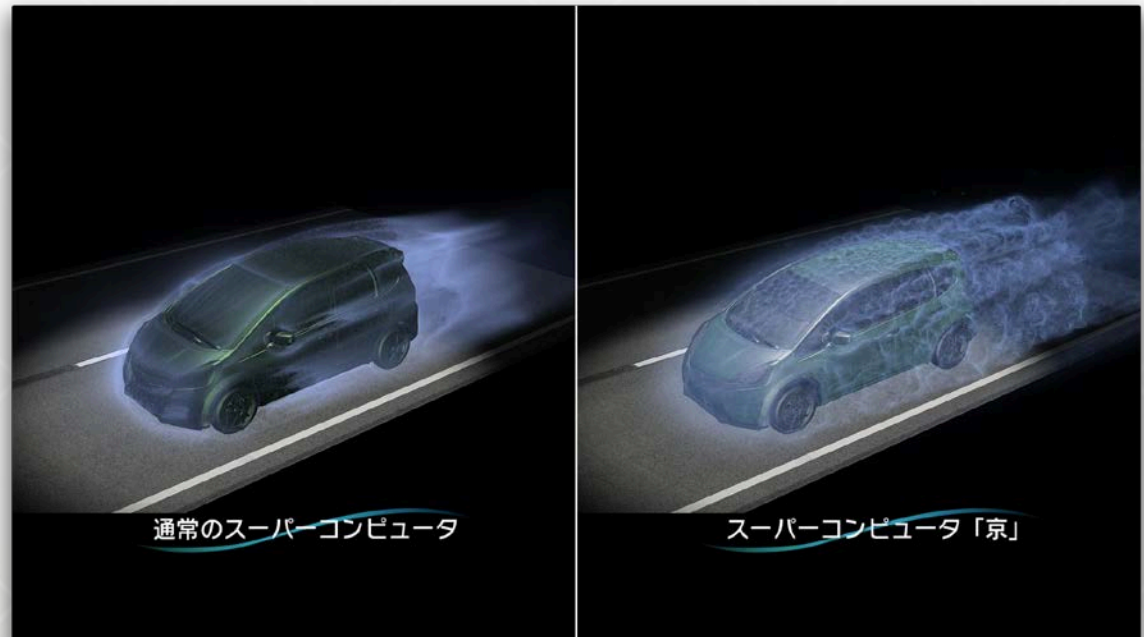
B. 実験・観測、理論との知的共創により科学の進歩が加速する

6. 実験や観測での抜けを埋めることができる

自動車のまわりの空気の流れを制御することで、空気抵抗を減らして燃費を良くすることや、騒音を減らして快適な乗り物とすることができる。

車体を使った実験では空気の流れを細かく測定することはできないが、空力シミュレーションであれば空気の渦や流れの詳細まで見ることができ、自動車のまわりの流れを理解し制御することが可能となる。

自動車開発では、形状を色々と変えて性能評価していく。実験では形状を変えるたびに多くの時間とお金がかかるが、空力シミュレーションならば色々な形状を簡単かつ大量に試すことができる。その結果、より高性能な自動車をより早く、より安く開発することができる。



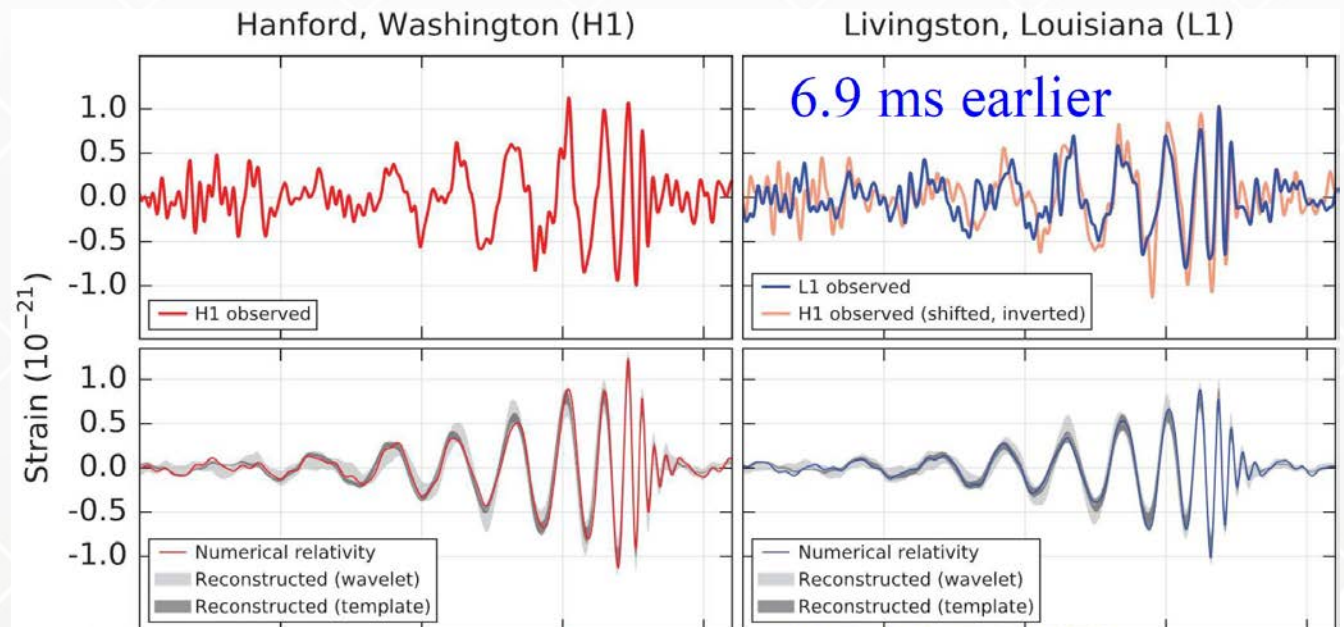
提供：理化学研究所、協力：本田技術研究所

B. 実験・観測、理論との知的共創により科学の進歩が加速する

7. 実験・観測計画の立案、設計に利用できる

宇宙や天体の観測は光（電波、赤外線、可視光線、X線など）によって行われてきた。ブラックホールや太陽の内部などは光で見えないため、重力波やニュートリノによって「見る」必要がある。

重力波は極端に微弱なため、観測が難しい。重力波には「波形」があり、観測結果から波形を見つけ出すのが困難。波形をシミュレーションであらかじめ計算しておくことで、観測結果から重力波を特定しやすくなる。



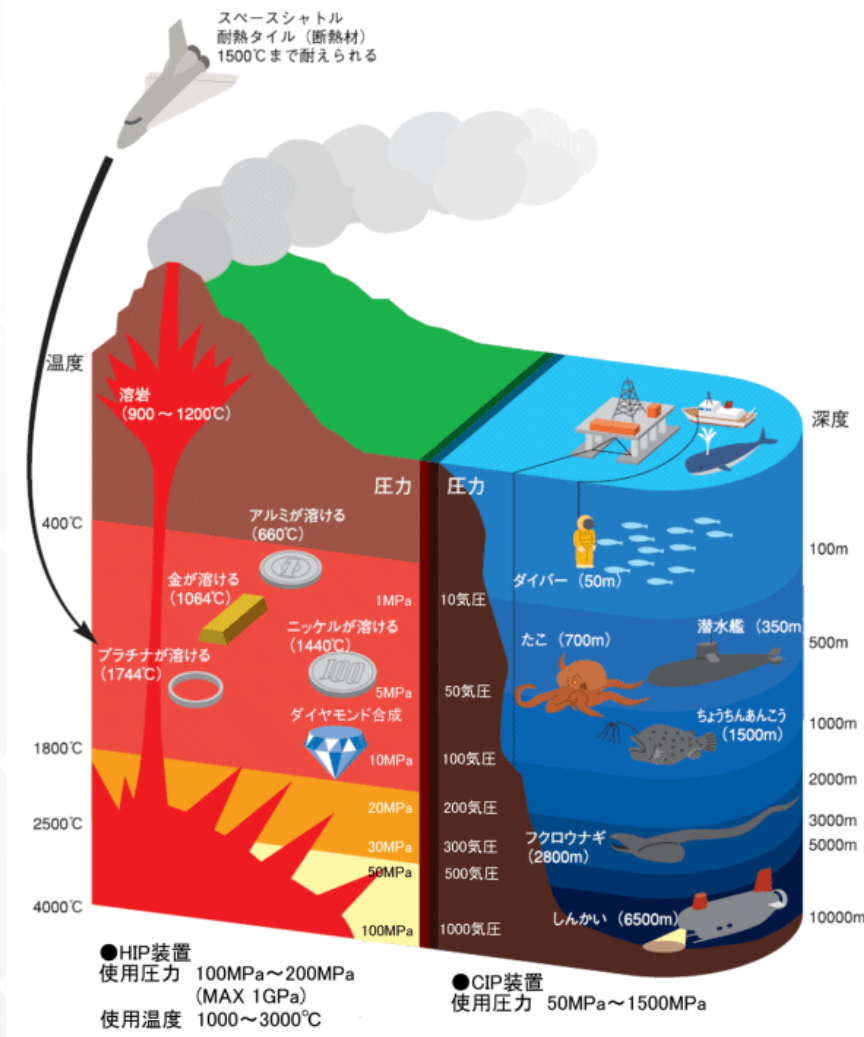
重力波形：上が観測、下がシミュレーション結果 (B. P. Abbott et al. 2016)

B. 実験・観測、理論との知的共創により科学の進歩が加速する 8. 自然界にない物や極端な状態を作ることができる

超高圧や極低温といった極限状態でしかみられない現象や、極限状態でしか作られない物質がある。

実験や観測が困難な超高圧や超高温などの極限状態でシミュレーションを行う。

その結果、超電導メカニズムなどの解明や、新物質の発見が実験・観測に先駆けて可能になる。



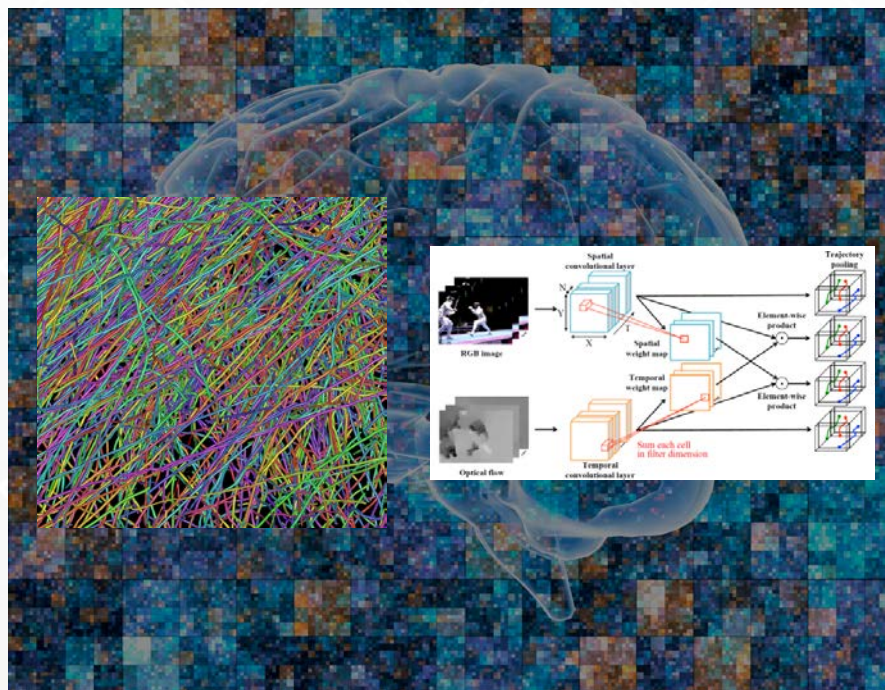
画像提供：(株)神戸製鋼所

B. 実験・観測、理論との知的共創により科学の進歩が加速する 9. これまでにない理論・法則に気付ける。新たな創造。

人工知能の研究は、その黎明期から神経科学の発展と歩みを共にしてきた。大量のデータから学習して法則やパターンを発見する機械学習手法であるディープラーニング。これは、ほ乳類の脳の初期視覚野の神経結合様式にヒントを得て発明された。

脳神経系のシミュレーションの発展は、より高度な人工知能技術の開発につながる。それは、シミュレーションを通じた思考の仕組みの理解を、更に加速させる。

シミュレーションを介した理学と工学の共創が、科学と技術の新たな価値創造に結びつく。



左：確率シミュレーションによる神経繊維同定
右：人工神経回路を用いた動画解析

提供：京都大学、東京大学、電気通信大学

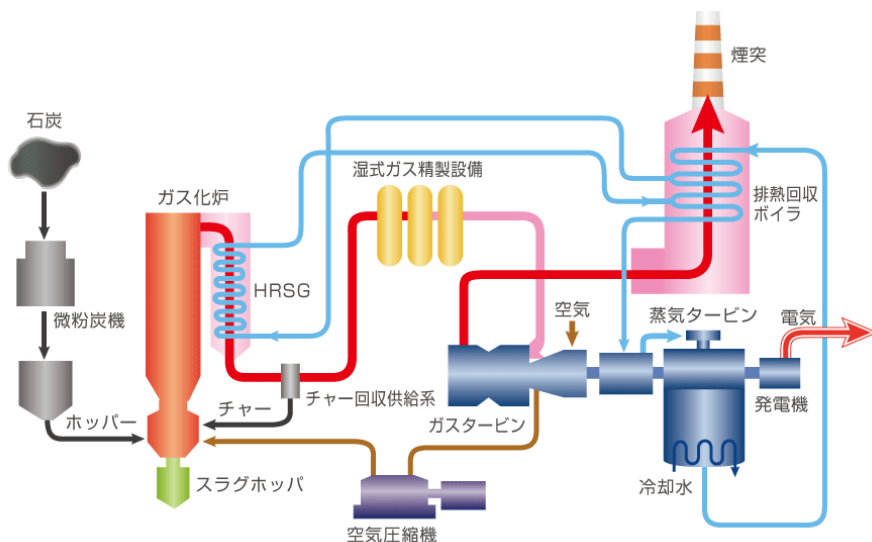
C. 未来の予測ができる

10. 定量的な予測ができる

石炭はエネルギー資源の主力であり、世界中で使用されているため、環境負荷の低減が常に求められている。二酸化炭素回収貯留（CCS）技術を利用した石炭火力発電システム実現のカギを握るのが、石炭ガス化炉である。

石炭ガス化炉は、石炭を微粉化→高温でガス化→環境汚染物質を除去→完全燃焼、という極めて複雑な工程をとる。炉の開発では、実験炉から順番にスケールアップして最終的に商業炉を作る。ところが、石炭燃焼は複雑な非線形現象のため、炉を単純に10倍大きくしても、10倍の能力が得られるわけではない。

シミュレーションを用いて、スケールアップした炉の定量的な予測を行うことで、試行錯誤の回数を減らすことができ、商業炉の実現が早まる。



出典：新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）

((C) 理研AICS 2017「コンピュータ・シミュレーションでできること、わかること」

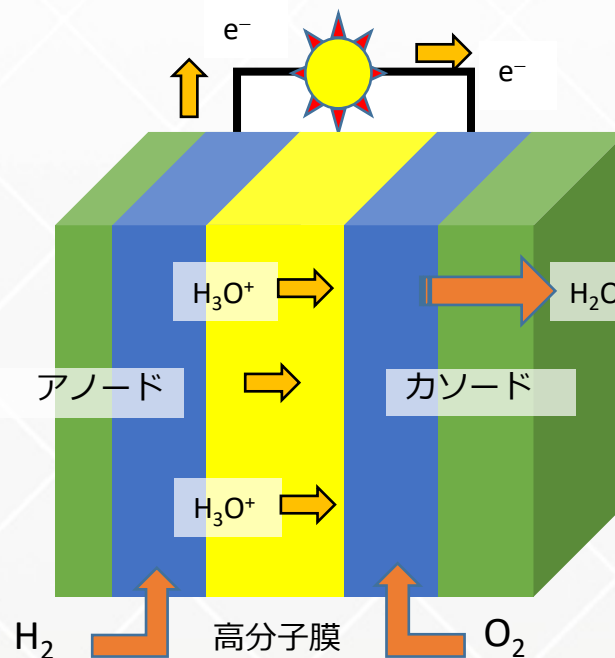
C. 未来の予測ができる

11. 研究の確度を高め、余分な労力・時間やお金をかけずに済む

多くの化学反応実験では、反応前と反応後の分子しかわからない。分子がどのように変化していったかの途中経過を捉えることが重要であり、シミュレーションにより途中の反応や触媒の働きを理解することができる。

途中の分子の変化、電子やイオンの流れを知ることで、希望する条件で効率のよい化学反応を起こす材料の組み合わせを見つけることができる。

この予測をベースに実験することにより、労力・時間やお金をなるべく掛けずに、より良い製品を開発することができる。



固体高分子形燃料電池（模式図）

提供：東京大学物性研究所

2章

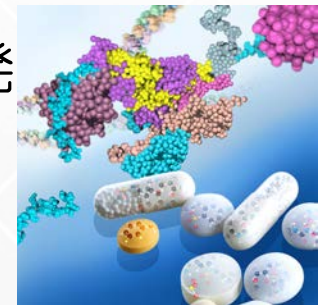
なぜコンピュータで自然現象の解明・ 予測ができるのか？

スーパーコンピュータを使って、何ができる？

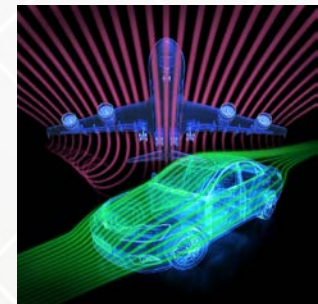
- 「コンピュータ・シミュレーション」により自然現象を解明できる



- 気象: 毎日の天気予報、地球環境の予測
- 防災: 地震に強い建物の設計(免震構造)、津波被害の予想
- 医療: 心臓病の解明、新しい薬の開発
- ものづくり: 自動車の開発、半導体の材料開発
- 新エネルギーの開発
- . . . などなど



- シミュレーションを使って、
 - ものごとのしくみを探る
 - 科学的に未来を予測することを目指す



なぜコンピュータで自然現象の解明ができるのか？

【1】 世の中の自然現象は、なんらかの法則によって支配されている、とする

【2】 その法則を、方程式で表してみる

$$m \frac{d^2 r}{dt^2} = F$$
$$C_v \frac{\partial T}{\partial t} = K \Delta T$$

【3】 方程式は、数値的に解く(極めて近い値を求める)ことができる

この計算結果を解析することで、自然現象のメカニズムを解明することができる



【1】 自然現象はなんらかの法則によって支配されている、とする

- ボールに力を加えると運動する
 - バasketボールをゴールに入れる(想定する軌道に沿って入る)
- 所定のスピードを出すと、飛行機が空を飛ぶ
 - 設計どおりに、揚力が発生する

(注) 実際には、いくつかの法則を組み合わせることが多い

・ 社会現象にも法則性

例: 交通渋滞、株価、コンビニの出店
社会現象(社会・経済・文化・政治的な現象)も法則性を持っていると思われるが、まだ解明されていない部分が多い

【2】法則を方程式で表してみる

- さまざまな方程式 (例)
 - ニュートン方程式
 - 物質の運動に関する法則

$$m \frac{d^2 r}{dt^2} = F$$

- 熱伝導方程式
 - 熱の伝わり方に関する法則

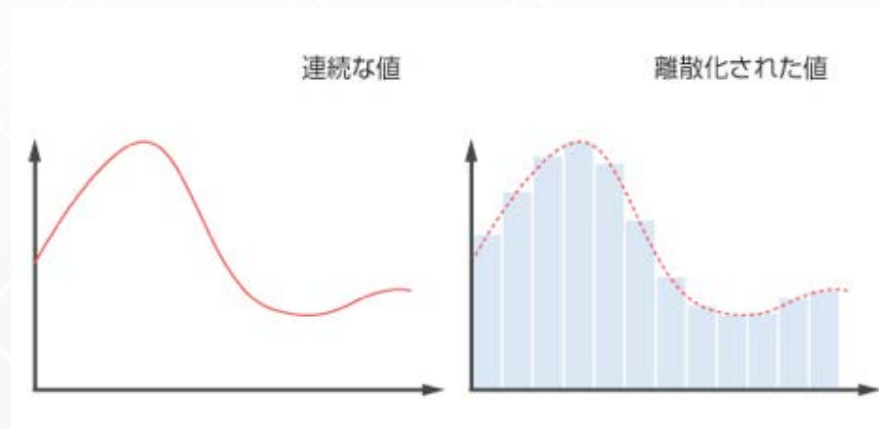
$$C_v \frac{\partial T}{\partial t} = K \Delta T$$

- ナビエ・ストークス方程式
 - 水・空気等の流れに関する法則

$$\frac{\partial v}{\partial t} + (v \cdot \nabla)v = -\frac{1}{\rho} \nabla P + \nu \nabla^2 v + F$$

【3】方程式は、数値的に解くことができる

- 方程式を、解きやすい数式(四則演算)に変換して、計算する
 - 解けない方程式は、極めて近い解(近似)を求める
 - コンピュータで解くために、とびとびの値を用いる(離散化)



出典: Software Cradle流体解析の基礎講座

- 正確な数字に近づけようとする(離散化が細かいほど)、計算量が増える

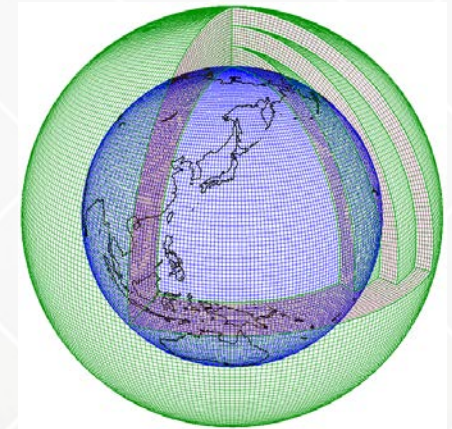
なぜコンピュータで自然現象の解明ができるのか？

- まとめ: なぜコンピュータで自然現象の解明ができるのか？
 - 世の中の自然現象から、法則性を見つける
 - 法則は、方程式で表すことができる
 - 方程式は、計算で解くことができる
 - この計算結果を解析することで、自然現象のメカニズムを解明することができる
- この仕組みを利用したものが、コンピュータ・シミュレーション(模擬実験)
 - シミュレーション装置(コンピュータ)が必要
- シミュレーションを使うことで、
 - ものごとのしくみを探る
 - 科学的に未来を予測することを目指す



コンピュータ・シミュレーションとは

- 自然現象・社会現象をモデル(方程式)によって表現し、いろいろなケースにおいてその振る舞いを計算する
- 前提条件
 - モデル(方程式)があること
 - 解くために必要なデータがあること
- 例: 天気予報
 - モデル: 大気の運動(風速・風向)や状態(気温、気圧、湿度など)をあらわす方程式
 - データ: ある時点での風や気温・気圧等のデータ(地上観測、風船観測、気象レーダー、航空機、人工衛星、船舶、海上ブイ等による観測)



出典: 気象庁・数値天気予報とは

コンピュータ・シミュレーションのステップ

$$\frac{1}{2} \hat{P}(ij|ab) \sum_{k,l} \sum_{c,d} \langle kl||cd \rangle t_{ik}^{ac} t_{jl}^{bd}$$

- 法則・方程式の適用: モデル化

解きたい現象を、法則に沿った方程式で表す

実際の現象は複数の方程式の組み合わせで表現されます

- 方程式の簡略化: 離散化

モデルの方程式を、コンピュータで計算しやすいように、四則演算の式に変える

- 効率の良いアルゴリズムを用いたプログラム化

コンピュータが効率的に処理できるようなプログラム作成

- 並列化・チューニング

利用する計算機にあわせてプログラムを見直す

実際には
それぞれの段階で何度も
見直しながらかつて行くので
結構大変です

- 計算の実行

- 計算結果の解析・可視化

現象の本質・メカニズムの解明



3章 ポスト「京」プロジェクトとはなにか？

ポスト「京」プロジェクト

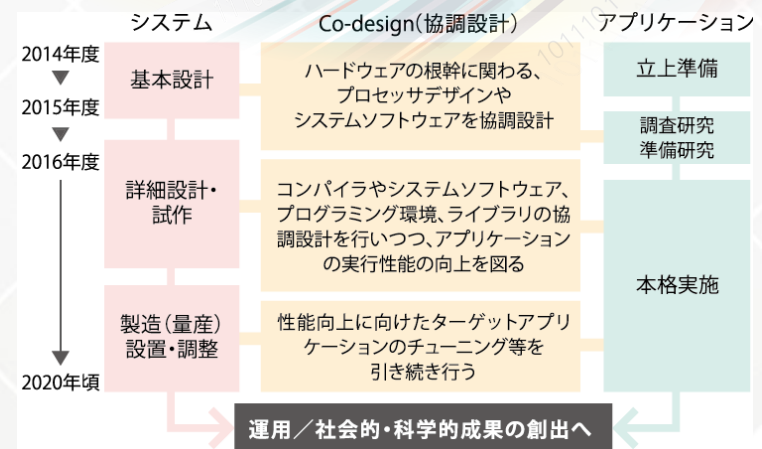
● 目的

- 世界トップレベルのコンピュータ・シミュレーションの実現を通じて、社会が抱える複雑な課題の解決と、サイエンスの探究に挑むスーパーコンピュータのプロジェクト

● ポスト「京」の開発

- この目的を果たすためポスト「京」は、完成時に世界最高水準の性能をもち、さまざまな用途に使える大規模シミュレーション装置となることをめざしている。

- 課題解決を最優先
- 国際競争力を持つ
- 国際協力でより高い次元へ
- 「京」の資産を継承



重点課題・萌芽的課題

● 重点課題

- プロジェクトの目的である 国家的課題の解決に向け、ポスト「京」の開発とともに、ポスト「京」を用いて重点的に取り組むべき課題が、以下の3つの観点から選定された。
 - 【1】 社会的・国家的にみて、取り組む意義が高いか
 - 【2】 世界をリードするような成果が期待されるか
 - 【3】 ポスト「京」の性能を有効に活用できるか

● 萌芽的課題

- またポスト「京」で新たに取り組むチャレンジングな課題として、萌芽的課題が選定された。約2年間の調査研究・準備研究を経て本格実施フェーズに移行する予定である。

重点課題



重点課題1 生体分子システムの機能制御による革新的創薬基盤の構築

- ここ十数年、製薬業界では新薬の創出が低迷し、開発費が増え続けているという深刻な課題に直面しています。それは、つくりやすいタイプの薬はすでに開発され、つくることが難しいタイプが残ってしまったことが大きな原因の一つだといわれています。病気の原因となるタンパク質などに結合して、その機能を制御する分子が薬となります。たくさんの分子の中から標的のタンパク質だけに強く結合する薬の候補分子を探し出し、薬効を上げ、副作用を軽減するための実験に大きなコストと時間が掛かっています。ポスト「京」を用いてそれらの実験をコンピュータシミュレーションに置き換えることで、開発プロセスの効率化、開発費の低減、さらには薬のつくり方を革新し、薬効が高く副作用の少ない新薬の創出を促進します。



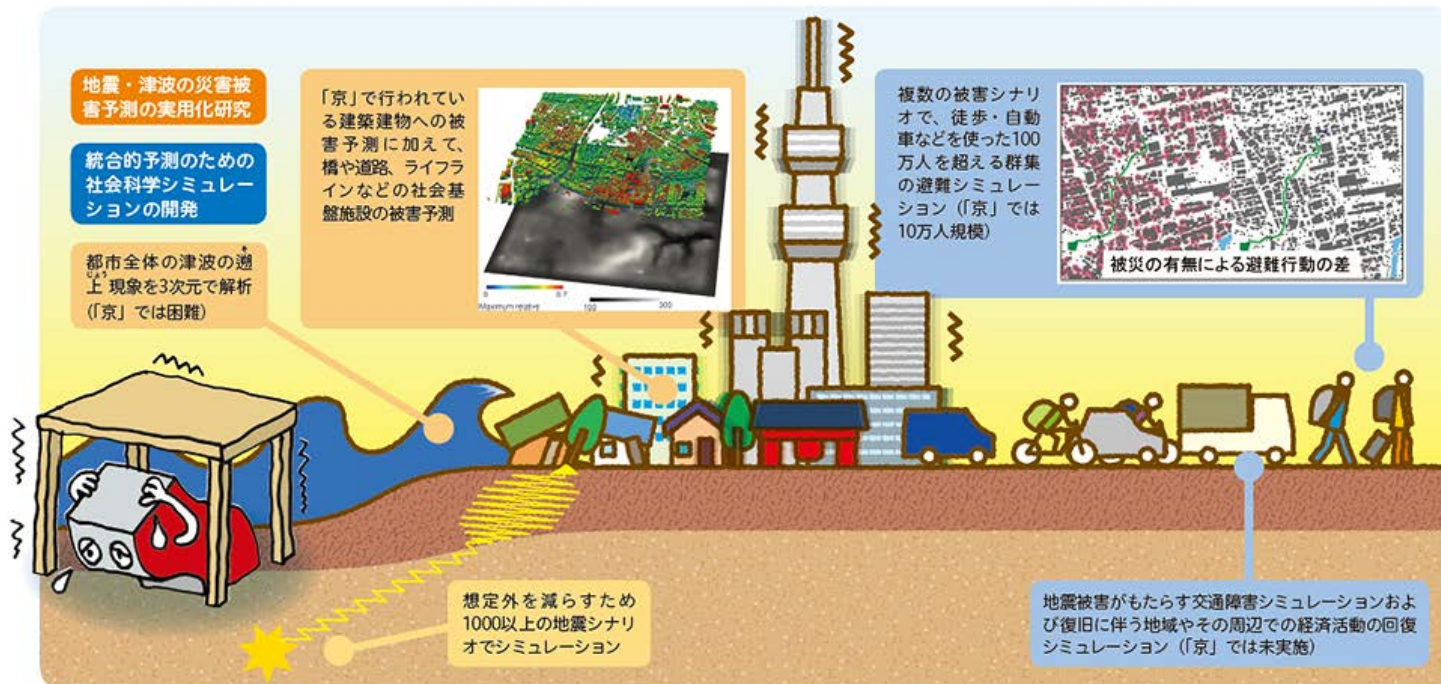
重点課題2 個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学

- 加齢とともにさまざまな病気の発症リスクが高まります。高齢化が進行する中で、これらの病気の予防や早期発見、個人ごとに最適な治療を行う「個別化・予防医療」が切望されています。ポスト「京」によって初めて実現できる、検査データやゲノム情報などのビッグデータ解析や大規模な生体シミュレーションを行い、がん・心臓・循環器系・神経系などの疾患の病態の理解を深め、予防・早期発見の手法や個人ごとに最適な治療の探索法を研究します。それにより、個別化・予防医療の支援基盤となる統合計算生命科学を確立し、健康長寿社会の実現に貢献することが目標です。



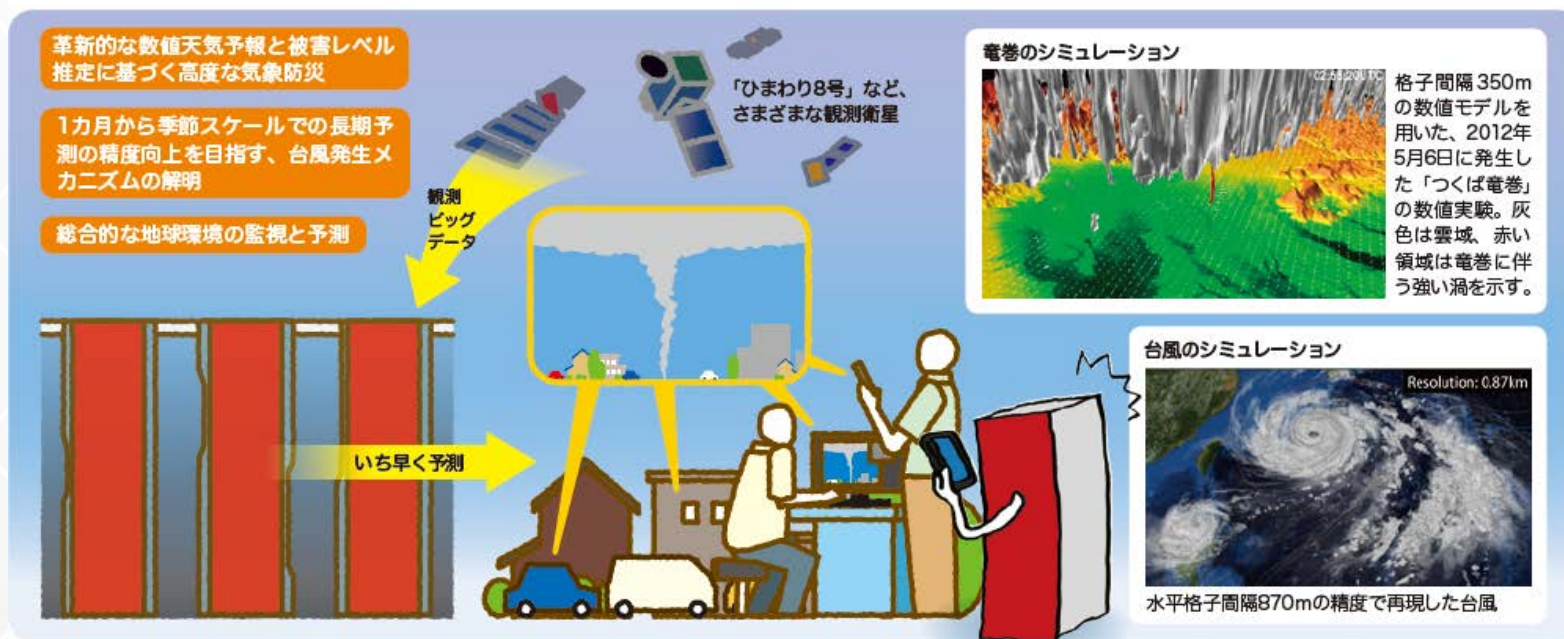
重点課題3 地震・津波による複合災害の統合的予測システムの構築

- 2011年の東日本大震災の大きな教訓は、過去の経験からでは予測が困難な想定外の地震・津波に備える必要があることです。想定外を減らすためには、季節や時間、場所、天気、地震・津波の規模など、さまざまな条件のシナリオについて、どのような被害が起きるのか統合的な予測を行う必要があります。「京」であっても、一つのシナリオの予測にもかなりの計算時間がかかるため、ポスト「京」の登場に期待が寄せられています。将来は、ポスト「京」で築いた地震・津波の統合的予測システムを、国や自治体などが防災や災害復旧に有効利用できるように実用化を進めようとしています。



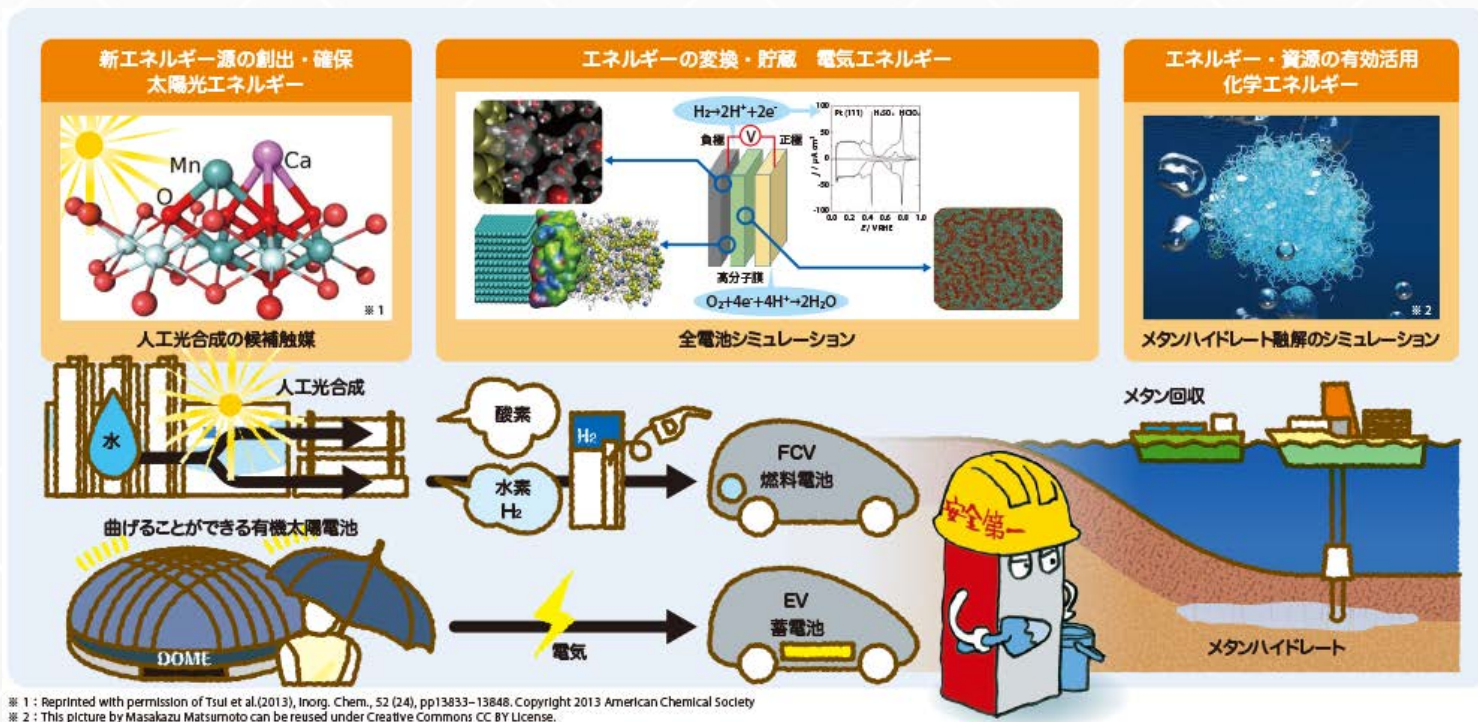
重点課題4 観測ビッグデータを活用した気象と地球環境の予測の高度化

- 地球温暖化の進行に伴い、局地的豪雨や竜巻、巨大台風などの極端な気象現象が増加する可能性が指摘されています。ポスト「京」を駆使して、高精度のシミュレーションと「ひまわり8号」などの観測ビッグデータを最大限に活用することで、局地的豪雨や竜巻をいち早く予報する技術を開発するとともに、それらの極端な気象現象が人や建物に及ぼす被害レベルを推定する技術を開発します。さらに、数週間から数十年スケールの台風の発生や特性の変化を予測するシステムの技術開発を進めます。また、人間活動に伴い大気中に放出されたエアロゾル（微粒子）や温室効果ガス、PM2.5などが気象や環境に与える影響を予測・監視するシステムの基盤技術を開発し、環境政策や防災、健康対策へ貢献することを目指します。



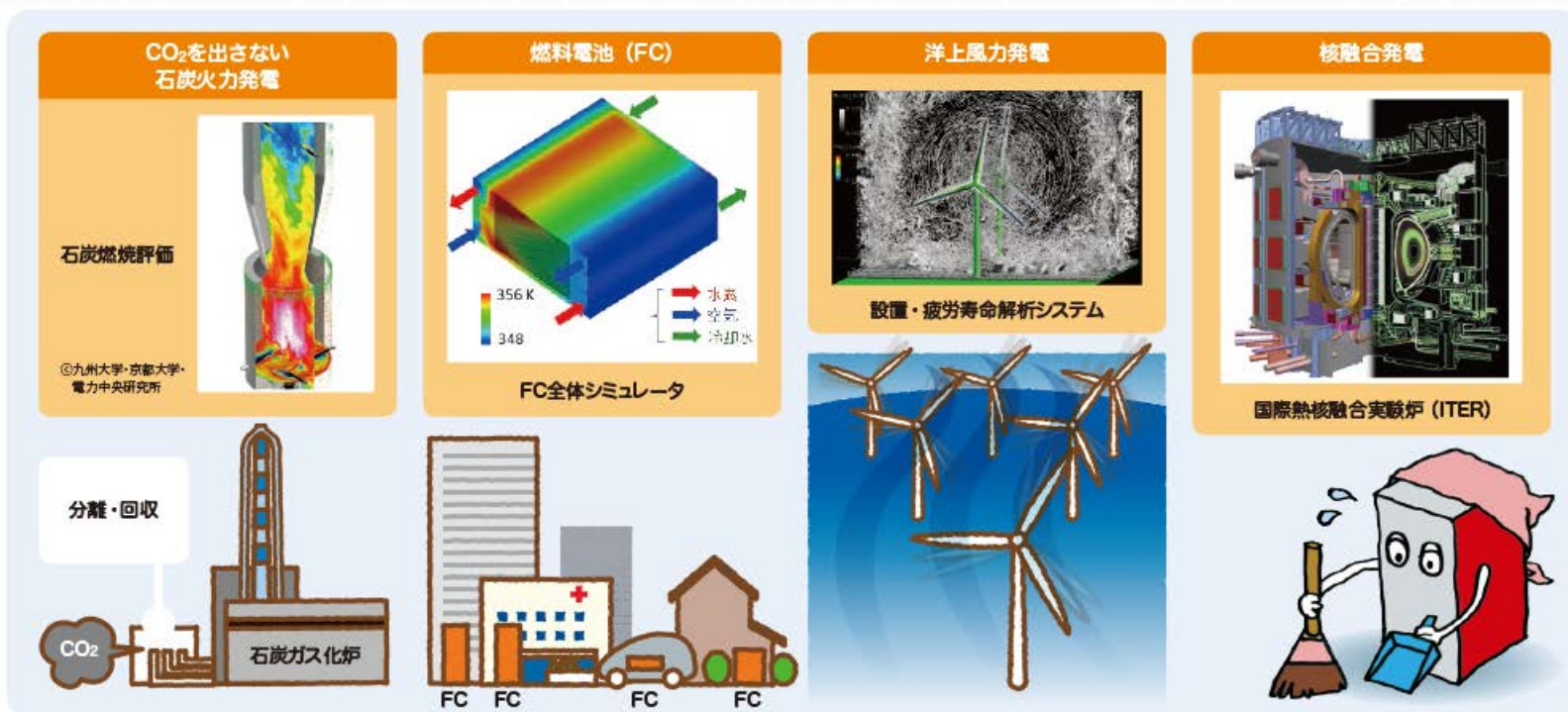
重点課題5 エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発

- 日本と世界にとってエネルギー問題の解決は最重要課題の一つです。エネルギーをつくり、蓄え、うまく利用するためのシミュレーションに取り組みます。これまでは、装置や反応の一部、理想的な状況でのシミュレーションが行われてきました。ポスト「京」により、装置や反応の全体、現実的な状況におけるシミュレーションを実現して、多くの原子・分子が関係し合う複雑な現象の仕組みを解明します。それにより、低コストでつくることができる有機太陽電池や高効率太陽電池、太陽光で水から水素を取り出す人工光合成、高性能の燃料電池や蓄電池、日本近海の海底下に豊富にあるメタンハイドレートからメタンを回収する技術などの開発に貢献します。



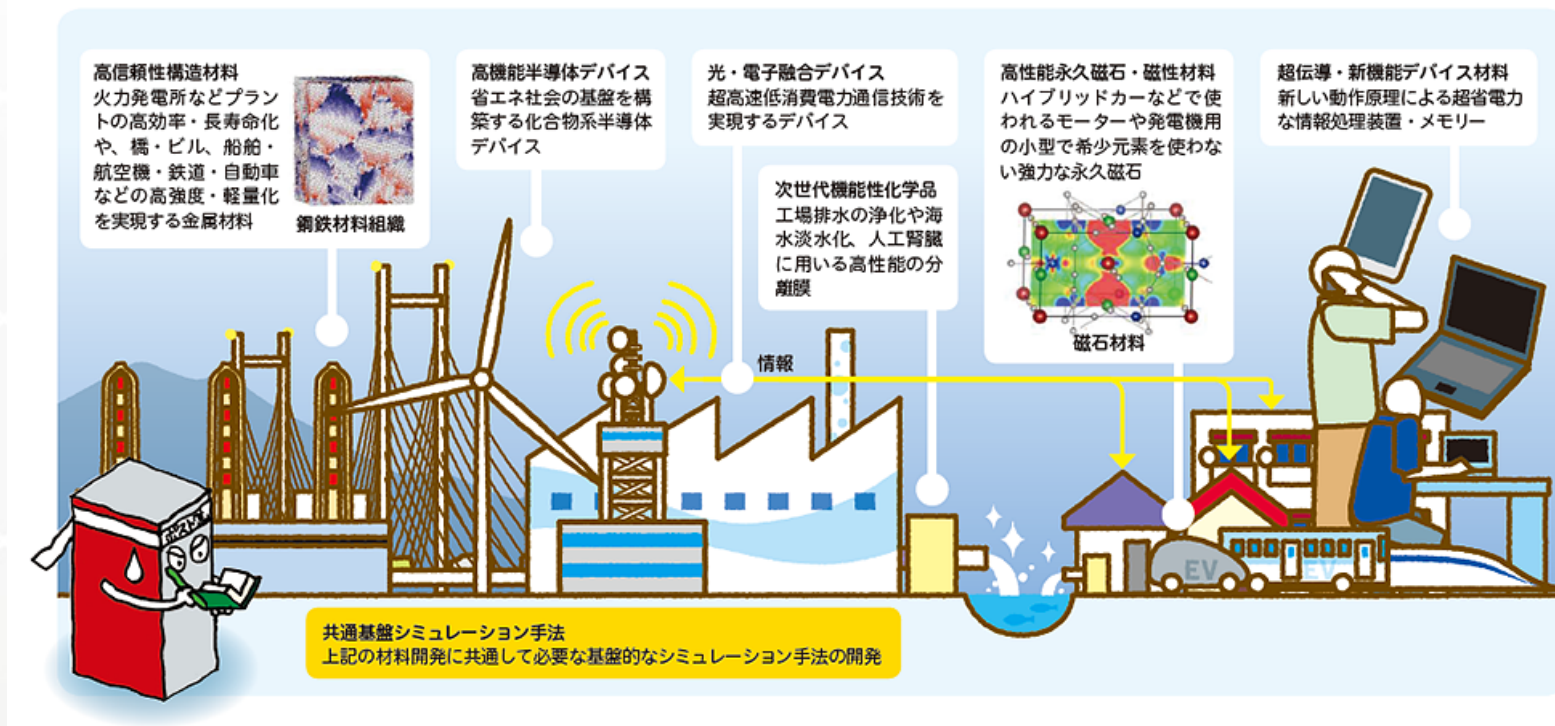
重点課題6 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化

- コストや環境に対する影響、安全性や資源量などあらゆる面で優れたエネルギー源はありません。複数の革新的クリーンエネルギーシステムの実用化を進める必要があります。ポスト「京」により、巨大なエネルギーシステムの中で起きるさまざまな現象の過程を、条件を変えて何度でもシミュレーションできるようにします。そのようなシミュレーションにより、二酸化炭素（CO₂）を出さない石炭火力発電の鍵となる石炭ガス化炉、低コストで耐久性の高い燃料電池、洋上の大規模な風力発電施設、核融合発電の実用化を加速します。



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

- 私たちの暮らすIT社会は、数多くのデバイスや材料に支えられています。より健康で安心・安全な省エネ社会を目指すため、「京」では特に今後重要となるデバイスや材料のもとになる物質について、かつてない1000から1000万クラスの原子数のシミュレーションを行い、機能や性能の向上と電子状態の関係を調べています。ポスト「京」では、さらに複雑な構造や組成も考慮した現実に近いシミュレーションにより、産業化が可能な新しいデバイスや材料の設計を目指します。また、膨大な実験データとシミュレーションを融合させた新しい材料設計手法の開発にもチャレンジします。



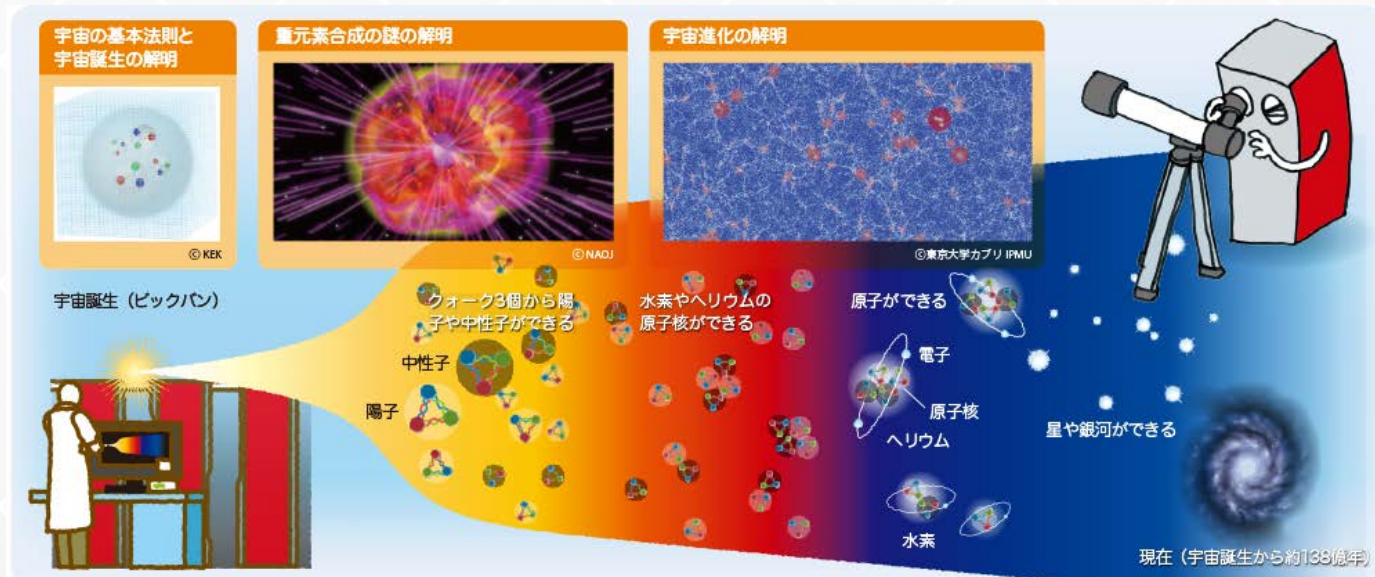
重点課題8 近未来ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発

- 社会のニーズに応える付加価値の高い新商品・技術を生み出すために、設計と製造のプロセスに革新をもたらすシミュレーションをポスト「京」で実現します。具体的には、送風機やポンプなどのターボ機械、自動車、航空機などを対象にした設計と、それらの設計を具体化する溶接と炭素繊維強化プラスチック（CFRP）成形のシミュレータを開発します。例えば、自動車の車体の周りやエンジンルーム内の空気の流れ、ハンドル操作と車の運動、車内の騒音などを連携してシミュレーションできる統合設計システムをつくり、設計を少し変えたときに燃費や安全性、快適性などがどう変わるかを何度も高速にシミュレーションして最適設計を実現することが目標です。

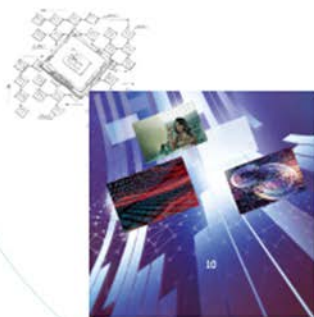


重点課題9 宇宙の基本法則と進化の解明

- 宇宙は約138億年前に超高温・超高密度状態のビッグバンから始まりました。宇宙の膨張により温度が下がるにつれて、素粒子のクォークから陽子や中性子がつくられ、陽子と中性子から水素やヘリウムといった軽い元素の原子核ができました。一方、宇宙には正体不明のダークマターが存在し、陽子や原子核など普通の物質の数倍あることが分かってきました。まずダークマターが重力によって集まり、そこに普通の物質が引き寄せられて星や銀河が誕生しました。このような素粒子から宇宙までスケールをまたがる現象の精密な計算を、ポスト「京」で実現します。さらに、その精密計算と大型実験・観測のデータを組み合わせて宇宙の基本法則の手掛かりを見つけ、ダークマターの正体や金などの重い元素がどこでどのように合成されたのかなど、多くの謎が残されている宇宙誕生と進化の解明を目指します。



萌芽的課題



基礎科学のフロンティア
-極限への挑戦-

1



複数の社会経済現象の相互作用
のモデル構築とその応用研究

2

萌芽的課題

ポスト「京」で新たに取り組む
チャレンジングな課題として、
今後調査研究を通じて実現化が
検討される4課題

4



太陽系外惑星（第二の地球）の誕生と
太陽系内惑星環境変動の解明

3



思考を実現する神経回路機構の
解明と人工知能への応用

