シミュレーションって何だろう

吉戸智明
理化学研究所 計算科学研究推進室 広報グループ
筑波大学 計算科学研究センター 広報・戦略室

シミュレーションが
未来をひらく

シミュレーションって何やねん（八尾 歴7年、灘 歴2年）

シミュレーションゲーム

サッカーのシミュレーション（わざとファウルをもらう反則）

住宅ローンのシミュレーション

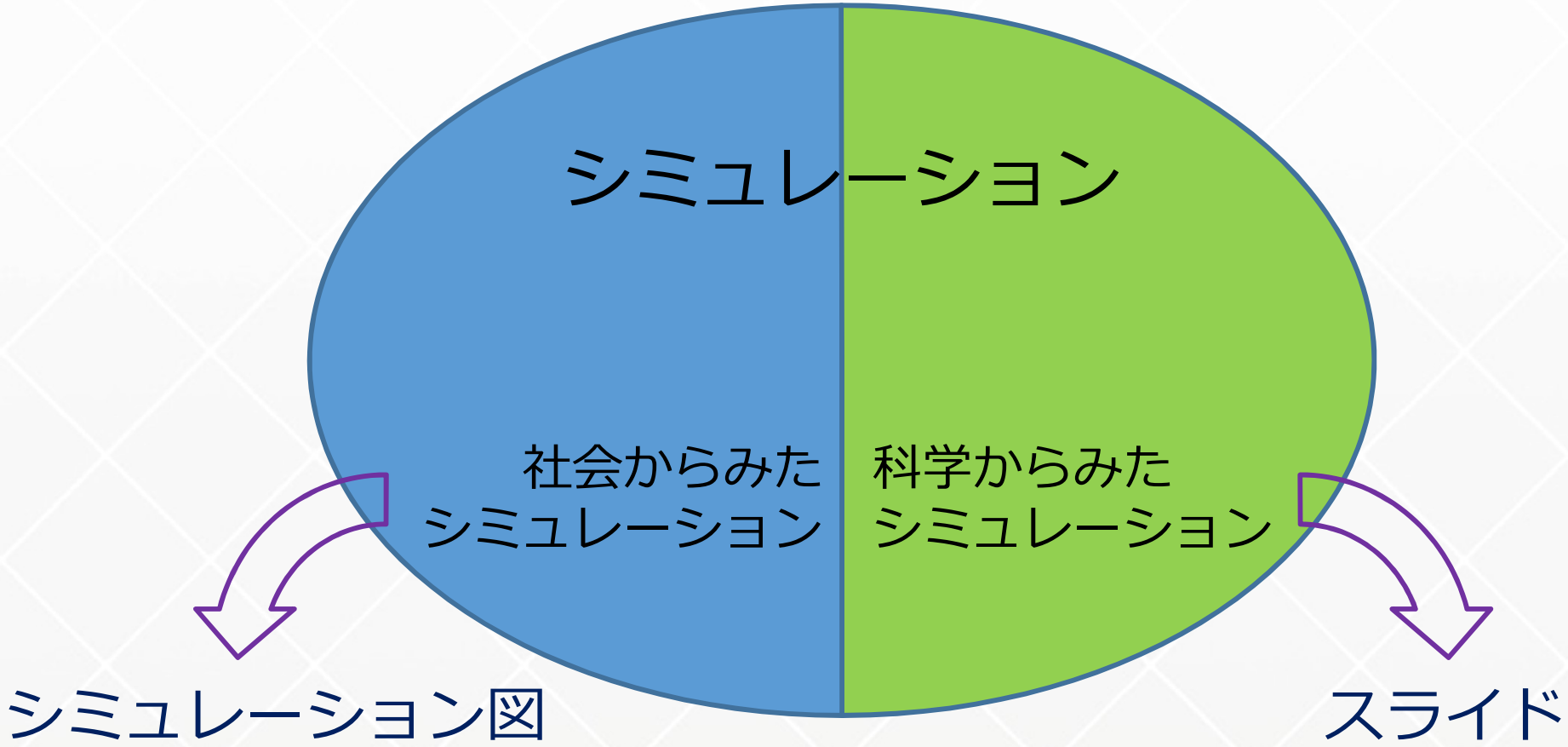
科学の世界では、昔は数値計算と言ってた気がする

辞書によると（三省堂 大辞林）

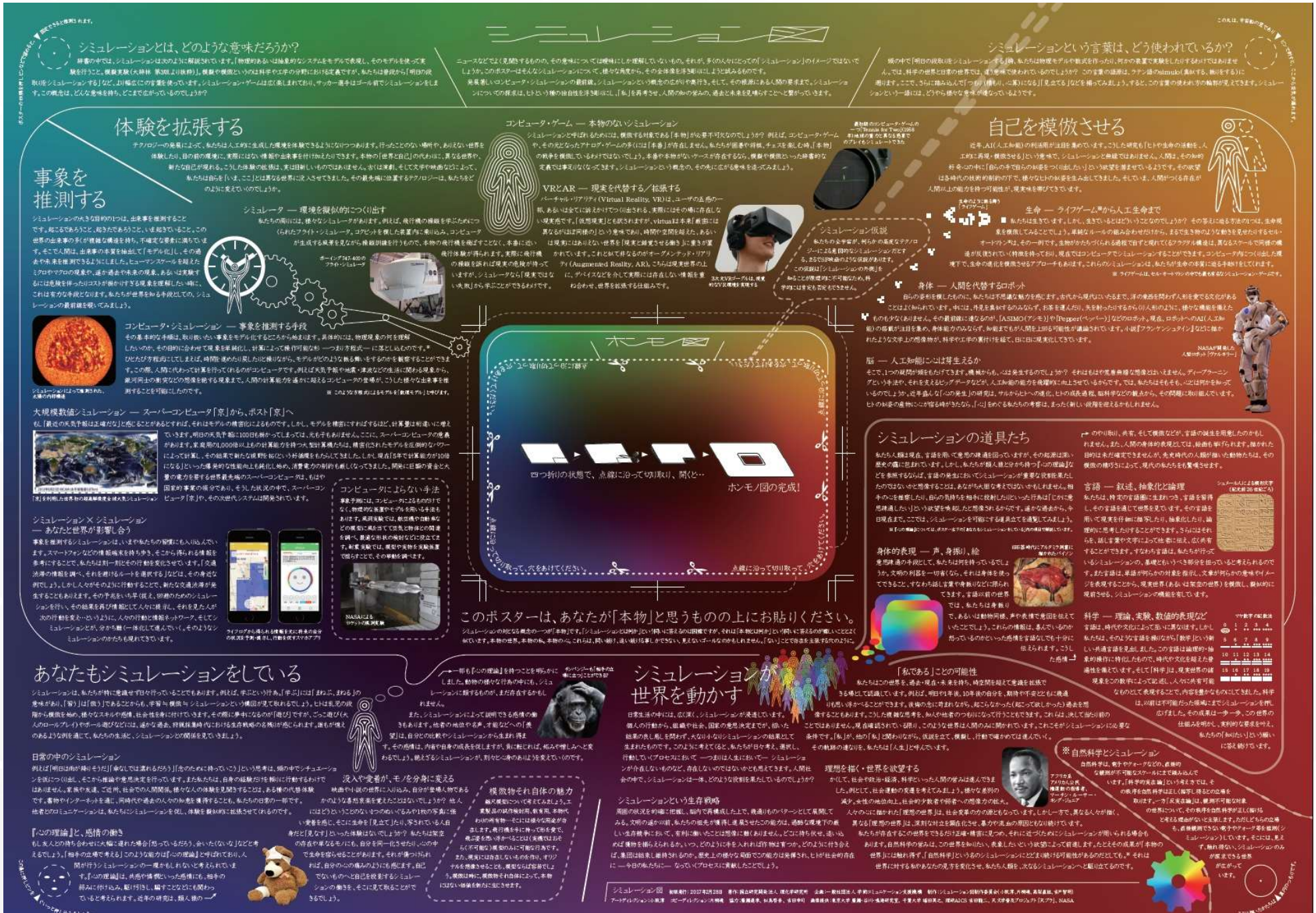
物理的あるいは抽象的なシステムをモデルで表現し、そのモデルを使って実験を行うこと。実際に模型を作って行う物理的シミュレーションと、数学的モデルをコンピュータ上で扱う論理的シミュレーションがある。模擬実験。

「京」ではこれ

科学で使うシミュレーションと、社会で使われるシミュレーションは違うんじゃない？



シミュレーション図（制作委員会：小阪淳、片桐暁、高梨直紘、吉戸智明）



科学からみたシミュレーション

研究者へインタビューを行い、スライドにまとめる

「シミュレーションの価値は何ですか？」

- 協力いただいた研究者：43名
  「京」やポスト「京」関連の学術・産業界
- インタビューワー：5名
  理研 フラグシップ2020プロジェクト企画調整室
  理研 計算科学研究推進室 広報グループ
- インタビュー期間：2016/5/20～7/26

まとめに当たって注意した点

- 想定読者：
  シミュレーションの研究者、シミュレーションで研究しようと思う人（大学などの研究者、企業研究開発者）
  シミュレーション研究の応援者（企業経営者、著名人、一般）
  政治家・官僚（国、地方）

- 15秒ルール：
  とても忙しい人は、文書1ページを読むのに15秒しかかけないとする経験則。何が書かれているかを15秒で察知し、続く15秒で中身を理解する。

- 説明の仕方：
  「京」やポスト「京」プロジェクトありきの説明をしない。
  まずシミュレーションで何ができるかをあげて、その具体例として「京」などの成果を活用する。

まとめてみた個人的な感想

- インタビューで、研究者のコメントすべてに納得した
- 研究や科学の枠からほとんど外れていなかった（質問の仕方が良くなかった？）
- かなり吉戸風味のまとめになった（のではないか）

科学からみたシミュレーションのスライド公開中

計算科学研究機構ホームページ　http://www.aics.riken.jp/jp/
＞もっと知りたい
＞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

シミュレーションが
未来をひらく

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。

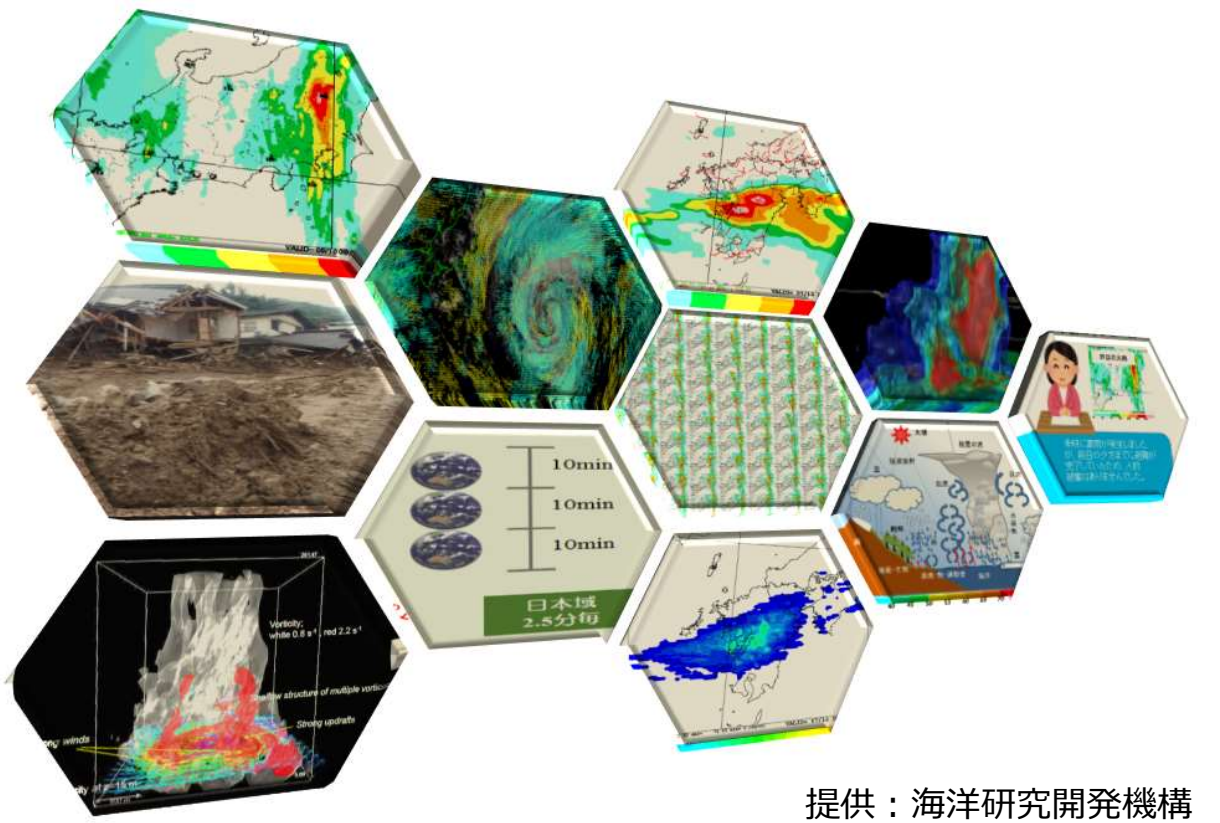
A. 世の中のしくみがわかる

1. 自然現象・社会現象のメカニズムが解明できる

天気予報の的中率は現在、24時間後に80%を超える程度（※）であり、年々上がっている。天気予報は、物理法則をスパコン上でシミュレーションした結果である。大気や海洋の物理法則を理解して精密にモデル化し、大規模シミュレーションにより、実験ができない自然現象のメカニズムを解明する。

※気象庁ウエブサイトより

集中豪雨、落雷や竜巻のように数時間で急変する局地的な現象についても、短い時間内で精緻な予測シミュレーションを行うことで、防災や減災の助けになる。



提供：海洋研究開発機構

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。

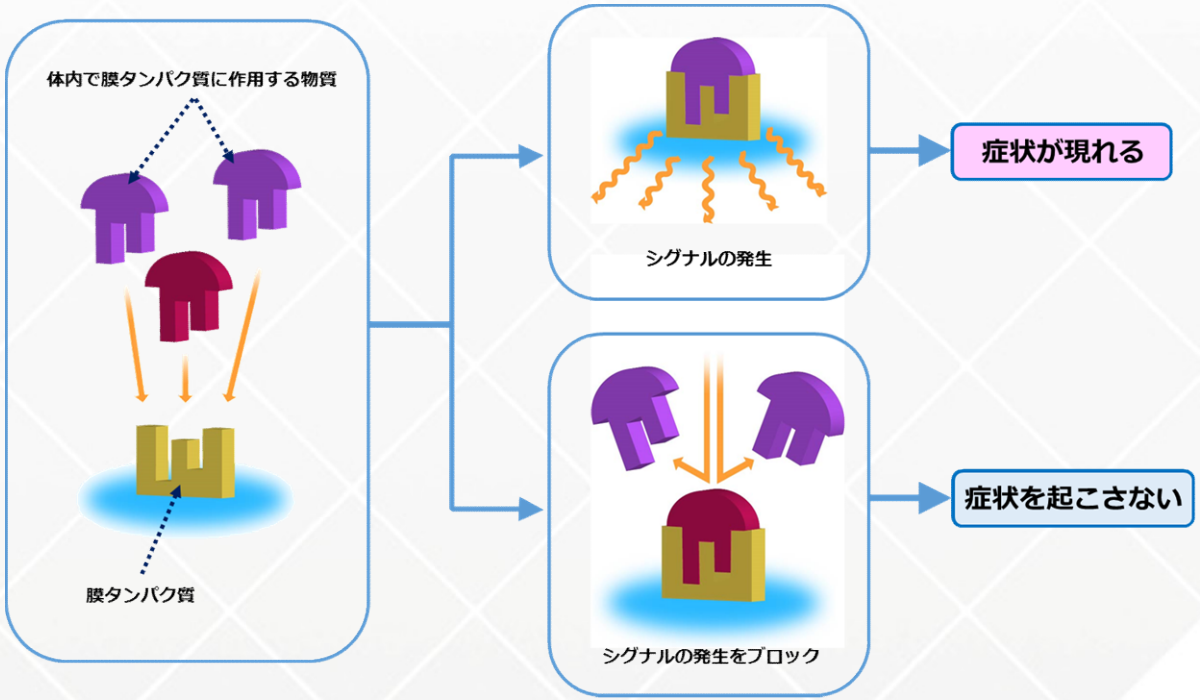
提供：理化学研究所

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で、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。



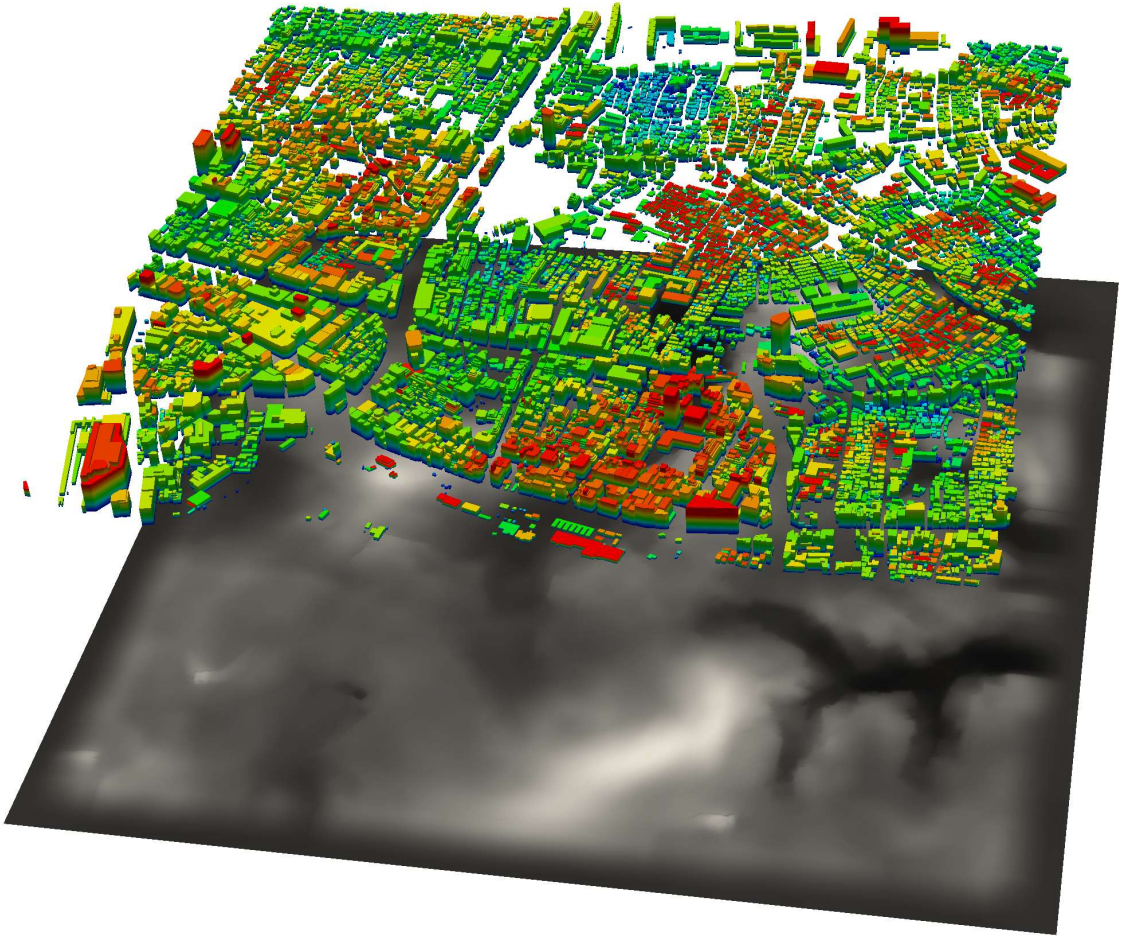
出典：新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）

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だすことができる。
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。

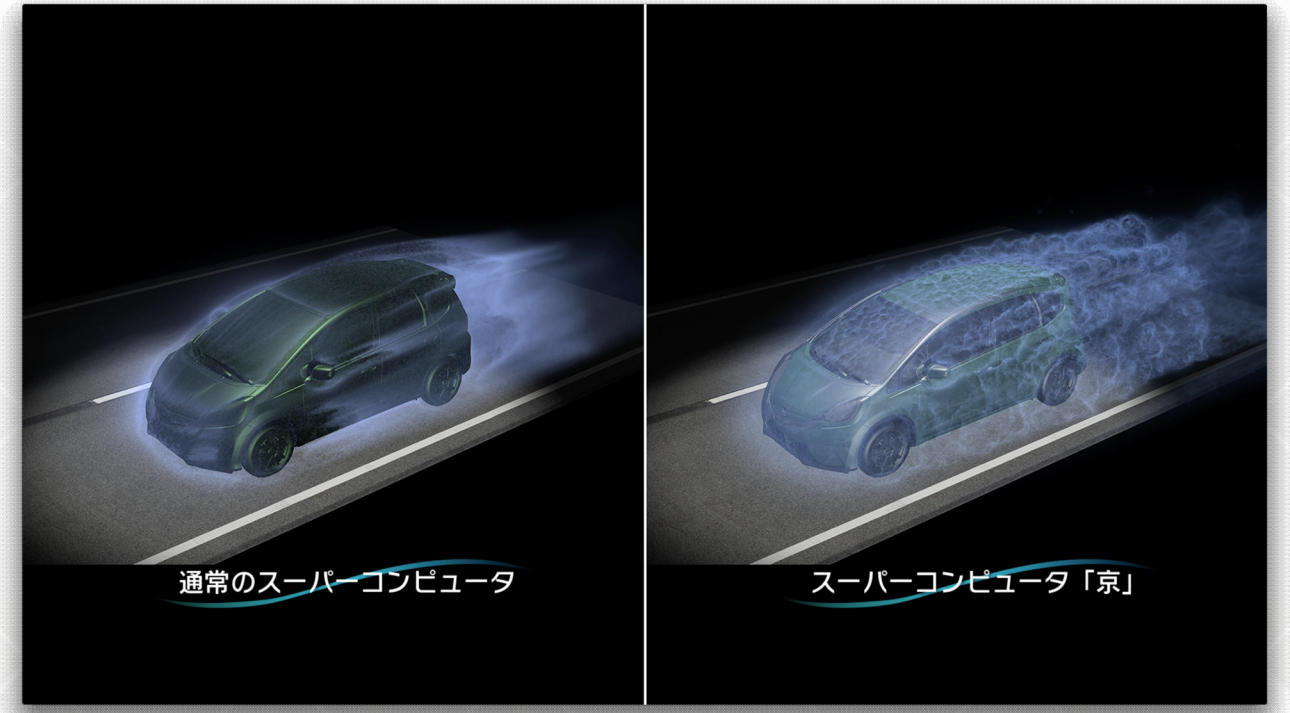
提供：電子航法研究所

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。

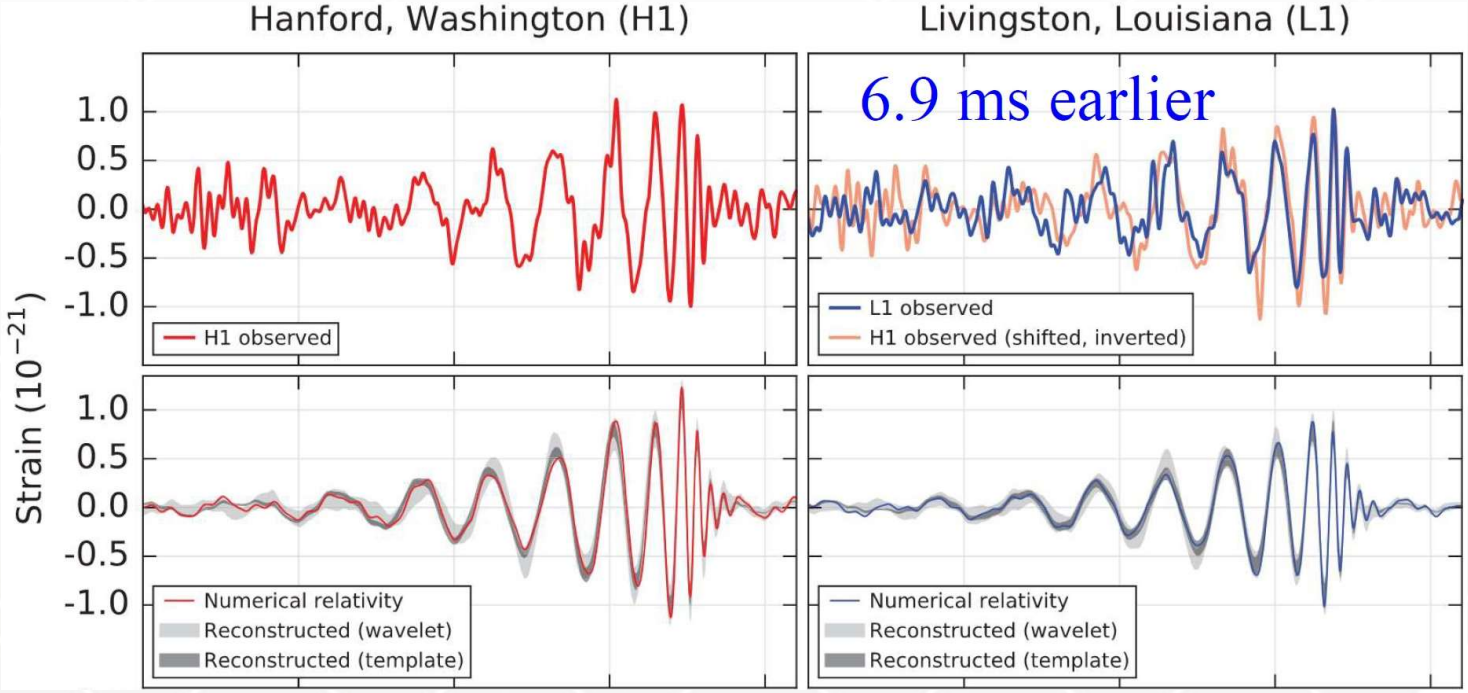


提供：理化学研究所、協力：本田技術研究所

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。



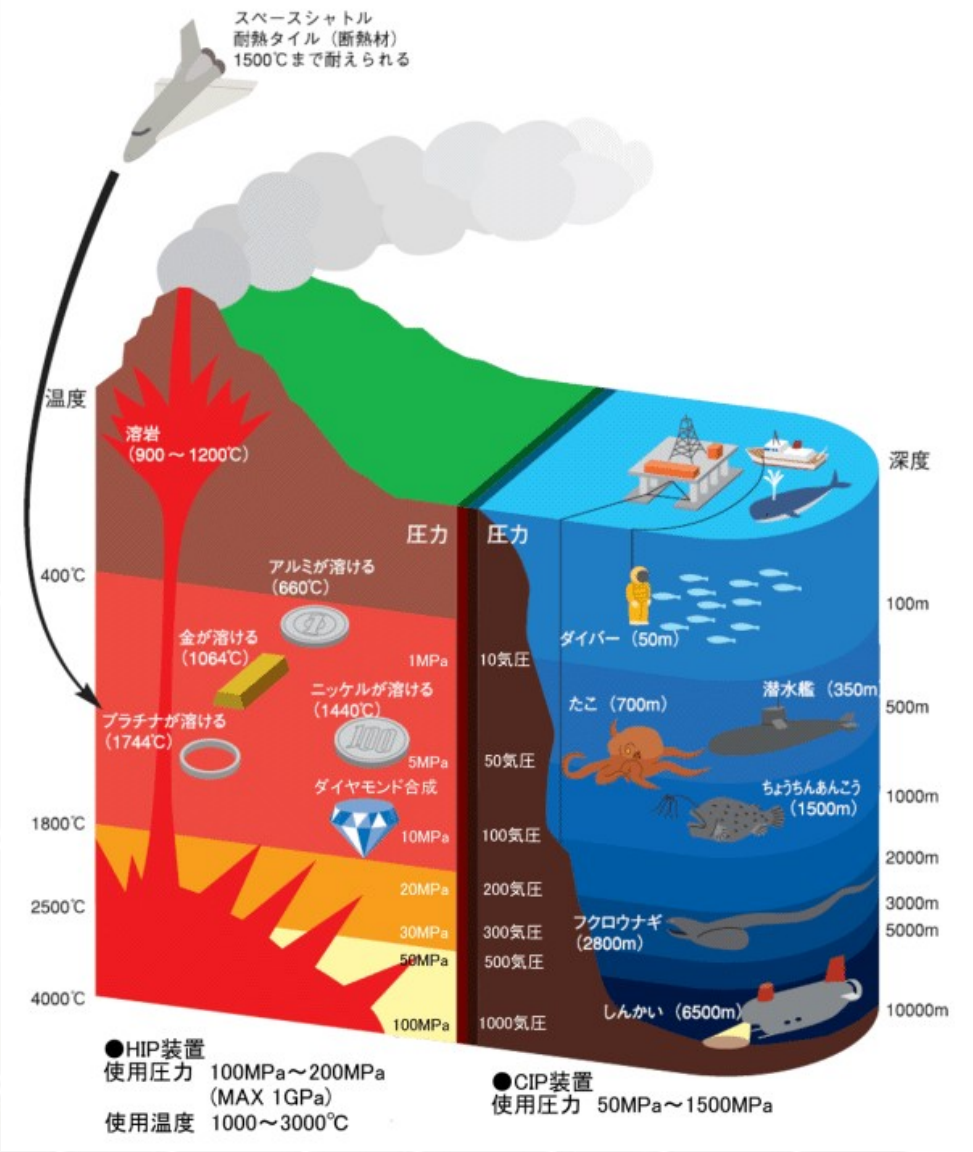
重力波形：上が観測、下がシミュレーション結果（B. P. Abbott et al. 2016）

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

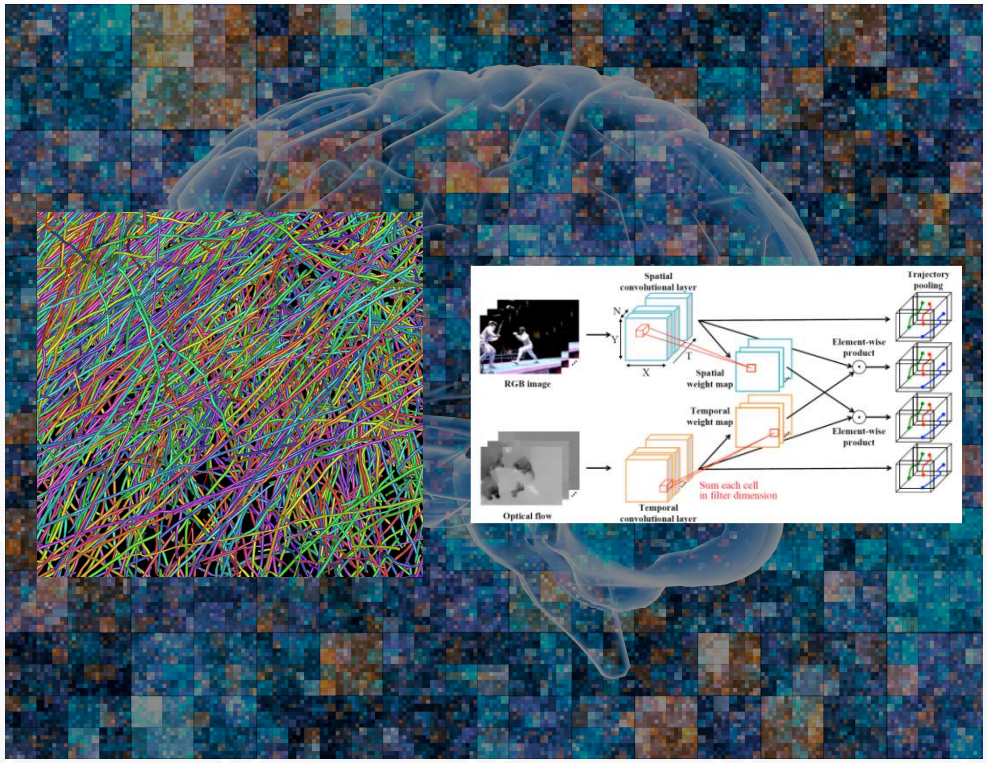
B. 実験・観測、理論との知的共創により科学の進歩が加速する

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

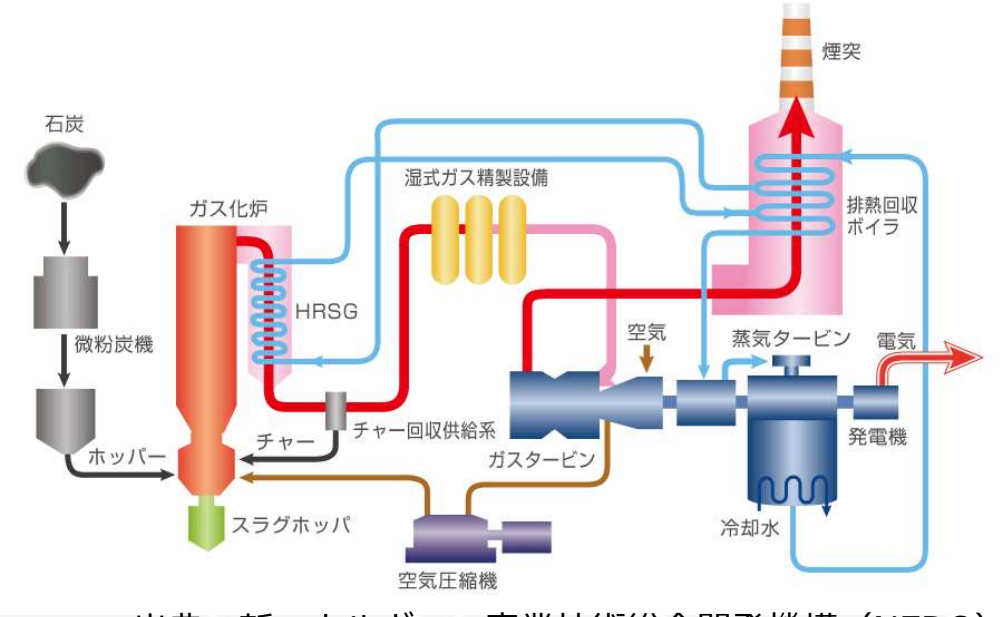
C．未来の予測ができる

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。



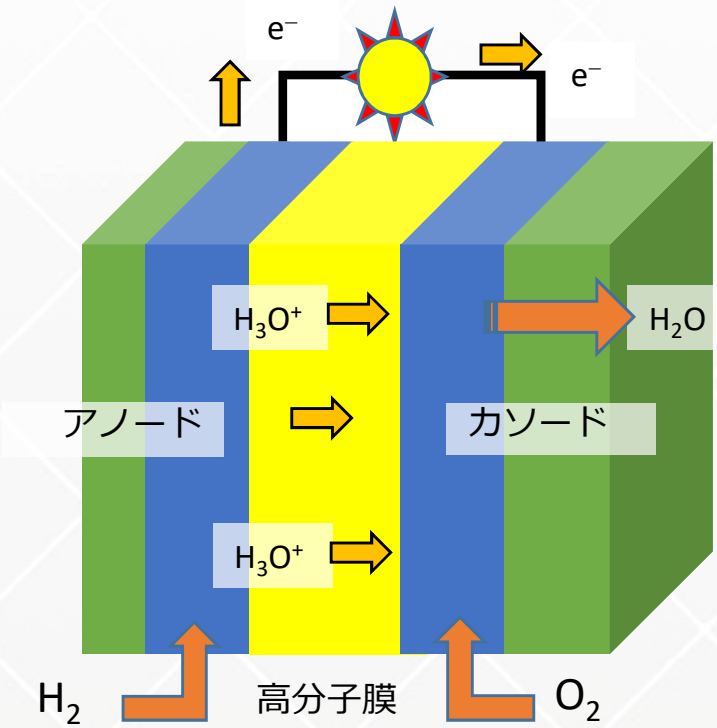
出典：新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）

C．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。

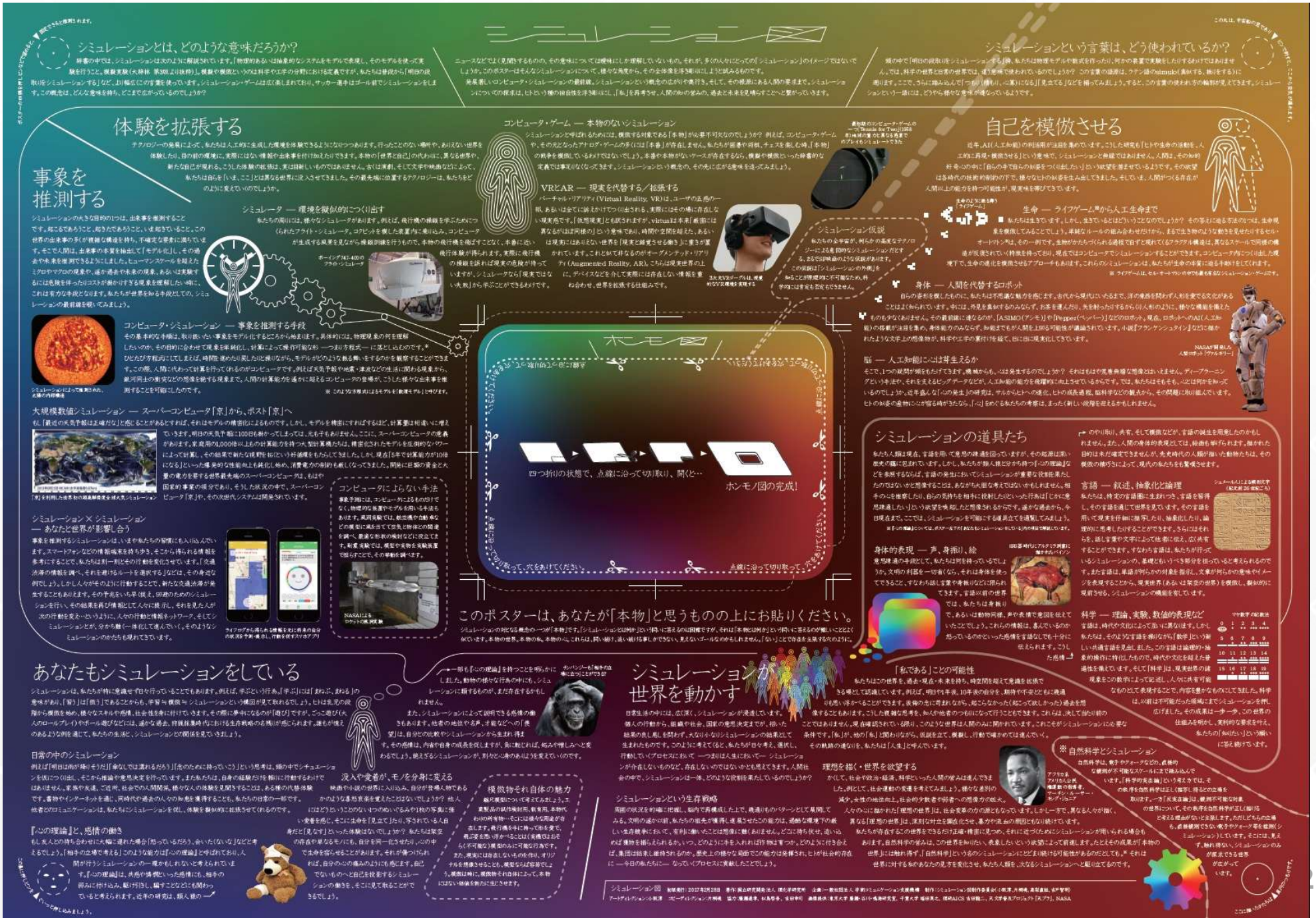
途中の分子の変化、電子やイオンの流れを知ることで、希望する条件で効率のよい化学反応を起こす材料の組み合わせを見つけることができる。
この予測をベースに実験することにより、労力・時間やお金をなるべく掛けずに、より良い製品を開発することができる。



固体高分子形燃料電池（模式図）

提供：東京大学物性研究所

シミュレーション図を振り返ってみると



みなさまへ

- われわれが気付いていないシミュレーションの使い方があれば、ぜひご一報ください。

- ビッグデータやAI（人工知能）は、スーパーコンピュータという装置を使うのは同じです。しかし、シミュレーションとは異なる手法です。
  →上手な使い分けと相互協力が必要です。

シミュレーション研究者・関係者のみなさまへ

- スライド「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」に対するご意見・ご感想をお寄せください。

- アウトリーチ・広報活動などで、ぜひスライドをご利用ください。1ページ単位での利用が可能です。