

計算科学は今後の科学技術の基盤

(財) 高度情報科学技術研究機構

常務理事 狐崎 晶雄

計算科学の世界に入って半年たった。本文の読者は、すでに計算科学の世界に浸った方たちだろうが、外分野のひとたちに向かって、これからは計算科学の時代であることを機会を捉えて言っていく必要があると思う。とくに実験分野のひとは、いまだにシミュレーション計算なんか、という感覚、理解の人が多く見受けられる。しかし、最近のシミュレーション計算の発達は著しく、数年前とは月とすっぽんの差がある。とくに世界最高性能の計算機である地球シミュレーターが昨年春に運転開始した後の進歩は刮目に値する。いままでのシミュレーション計算のほとんどは、すでに分かっている結果を出すことで満足していた。そのようなシミュレーション計算しか知らないひとは、シミュレーション計算などよりは実物が大事だ、と思っていたし、今でも思っているだろう。よくテレビなどで出てくる地球の気象のシミュレーションも、まだ次の台風がいつどこで発生するかを予測するまでに至ってはいないが、それができるようになるのも近いだろう。すでに、いくつかの分野では従来知られていなかった現象や特性をシミュレーション計算で得ている。分子間の相互作用の力を第一原理から出して計算し、どのような状態のときにどのようなアミノ酸が自然に形成されるか、という計算ができています。RISTで行ってきたカーボンナノチューブに関する計算も良い例である。触媒の上にカーボンナノチューブが自然に形成されていく様子が計算できている。

また、微小なナノチューブの熱伝導率は実験的には計測不可能であるが、シミュレーション計算ならば値を求めることができる。その結果ナノチューブが短いときには熱伝導率が長さに比例して大きくなるという予想もしていなかった結果を得た。チューブを長くして実験的に計測した場合の値につながるので、真実性はあると考えられる。もうひとつの例は高温プラズマの中の乱流で、特殊な電流分布のもとではプラズマの断面内に非常に高性能な断熱層ができることがシミュレーション計算で示された。この場合は実験的に断熱層を発見したほうが早かったが、実験よりも早くシミュレーション計算の結果がでてもおかしくなかった。実験では詳細にプラズマの断面内を計測することはできないので、シミュレーション計算がなかったら単に実験で出てきたというだけで科学にはならなかっただろう。細かすぎたり、変化が早すぎたり、高温すぎたりで実験で計測ができないものもシミュレーション計算ならば、全領域、全時間帯について詳細なデータが得られる。このようにシミュレーション計算は従来知られていなかったことを見つけ出す段階に達している。

また、科学技術の進歩には試行錯誤が不可欠なことを否定するひとはいないだろう。しかし、最近のように実験装置が大型化し、マシンタイムが高価になると、従来のように気軽に試行錯誤をするわけにもいなくなってきている。そこを埋めるのが計算科学による高度

なシミュレーション計算である。さらに、毒性のある物質や放射性物質も計算機ならば毒性や放射線を気にしないで、いろいろな試行錯誤ができる。なによりも周辺への影響の心配なしに、実物だったら危険なことでも計算機なら平気で試行できることは、なににも代えがたい利点だろう。産業界にとっても強力なツールである。

本文を読んだ計算科学分野の読者には、たとえば上記のような説明で計算科学分野の外の多くの方に最近の計算科学の進歩と今後への重要性を積極的に説明していただき

たい。また、計算科学の分野外の読者には、これからの科学技術には計算科学が重要な鍵であることを知っていただきたい。ある著名な科学評論家は、これからの国力は計算力である、と言っている。そうであれば、世界最高性能の地球シミュレータをもっているわが国の国力が世界一になっても不思議はないのである。ソフトとハードとの両面の高度な能力を持つ点がわが国の特徴であるが、今後、世界の中でも特色ある計算科学がわが国でますます進展することを期待する。