

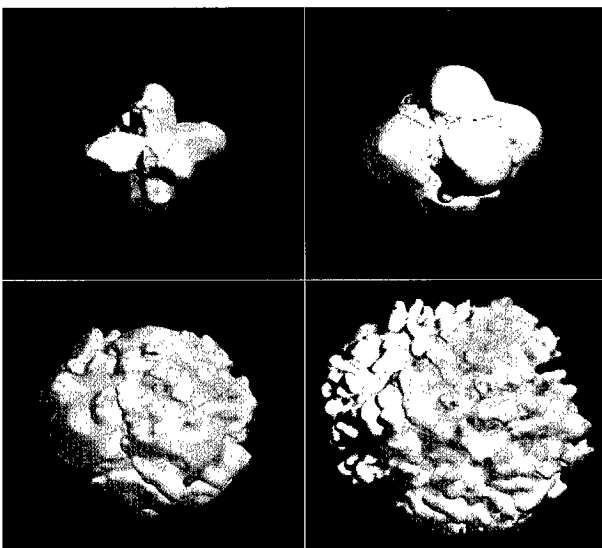
Special Features

特集

# コンピュータが描く 科学の世界

—進化するシミュレーション技術—

Scientific World in Computer  
—Advancing Simulation Technology—



p.552 「複雑形状の複雑でない計算法」(図-2) より

# 特集

## 「コンピュータが描く科学の世界」

### 編集にあたって

緑川 博子

成蹊大学工学部 経営・情報工学科

midori@is.seikei.ac.jp

コンピュータは、もともと軍事応用として、またそれにかかわる物理学などの計算道具として発明されたものであるが、近年では、人間の使うあらゆる道具に小型化されて埋め込まれ、電気・ガス・水道、交通、金融などのライフラインを制御し、社会基盤そのものを支える必須アイテムとなった。さらに、ここ数年、コンピュータは小中学校にも導入され、若いも若きもインターネットという言葉を知らぬ者はなくなり、理科系人間のみならず、従来ならば無意識に使用していたにすぎない一般庶民ですら、陽にコンピュータを使わざるを得ない時代である。コンピュータは、いまや単なる計算道具を越えて、社会的な影響を持つカルチャとしての存在意義さえ持つようになってきた。

一方で、コンピュータは、従来の物理学、天文学にとどまらず、化学、遺伝学、生物学などのありとあらゆる学問に不可欠な道具となり、現代のすべてのサイエンス、エンジニアリングを支える礎であるといっても過言ではない。その中でも、最も古くからあるコンピュータ応用の1つ、コンピュータシミュレーションに、本特集では目を向けてみることにする。

コンピュータの起源にもかかわるこの古典的応用、シミュレーションにおいても、その技術は進化し続けており、ますます重要になってきている。シミュレーションは、ありとあらゆる科学現象を解析する手段であり、現にさまざまな実際の応用、気象予測、工業製品開発などに使われ、日夜、さらなる精度の向上と処理の高速化を要求され続けている。

いまやシミュレーションは、単に、実験を主体とした場合の補助的手段、理論的裏付け確認手段という役割を持つだけではない。計算能力の飛躍的な進歩により、実験では不可能な、あるいは実験では未確認の、「実」世界をコンピュータの「中にも」、あるいは「中にだけ」作り出すことができるようになった。いまさらのように、シミュレーションの可能性、汎用性に驚く。本特集はどの記事から読み始めてもよい。式が面倒ならば飛ばして、図や絵を眺め、それぞれの筆者の話を追うだけでも、シミュレーションには未知のネタがありそうということが伝わってくると思う。

第1編は、現在、注目を集めているシミュレーション手

法、CIP法に関するものである。固体、液体、気体のシミュレーションには従来、それぞれ異なる方法を用いて、シミュレーションが行われてきたが、CIP法は、これらの相が混在する多相環境をもこの手法1つで計算できるという画期的な方法である。この手法の考案者が、CIP法の簡単な原理、応用、可能性、さらには、シミュレーション結果が信じてもらえず、実験して証明したという研究上の苦労話、いまやノートパソコンでもできるというシミュレーションの楽しさについて述べている。

第2編は、シミュレーションすること自体が難しい複雑で不安定な現象、たとえば枝から離れた枯れ葉はどこに落ちるか？ 樹枝状凝固する物体の結晶成長の様子は？ といった問題をどう解析するのか、どのような手法があるのか、幅広く解説している。メッシュを細かくして、力づくで計算すればある程度の精度を持つ結果が出るのではと思われる分野とはまた別の、さまざまな工夫のいる分野で、シミュレーション手法の重要性、奥深さを実感する。

第3編は、実際に企業の現場で行われている計算流体力学(CFD)について、特に自動車乱流モデルに関して、処理結果だけでなく処理時間、計算点数などの具体的な数値を挙げて解説している。従来のスーパーコンピュータに性能的に迫っている汎用CPUを用いた計算機クラスタでの処理の可能性、メッシュ作成に経験と多くの時間がかかるという現状を打破するための、CADとシミュレーションとのリンクなど、実体験に基づいた問題点と可能性についても触れている。

第4編は、原子・分子、遺伝子などのマイクロな世界から、宇宙・天体などのマクロな世界まで、まさにシミュレーションワールドの楽しさを大いに語っている。筆者は、重力や静電力に代表される、物体間の距離の逆2乗に比例する力の計算を行うTFLOPS級の分子動力学専用の並列計算機をすでに構築し、さらに、2006年までにペタマシンを計画している。高速シミュレーションにより、人間との実時間双方向シミュレーションが可能になると、より直感的な把握ができるようになり、教育や娯楽に大きな変革を与える。

(平成13年5月11日)