

特集

次世代統合 シミュレーション技術

粒子法によるマルチフィジクスシミュレータ

医療・創薬のためのマルチスケール・マルチフィジクス心臓シミュレータ

放射線治療の高度化のための超並列シミュレーションシステム

システムバイオロジーのためのモデリング・シミュレーション環境

数値／数式ハイブリッド計算に基づくロバスト最適化プラットフォーム

数値シミュレーションを支える精度保証技術

編集にあたって

土居 範久¹

¹ 中央大学理工学部情報工学科

近年のコンピュータ、ネットワークの驚異的進歩を背景に、ミクロ現象からマクロ現象に至る多様な現象を統合的に解析できる技術が確立すれば、ナノ材料や生体高分子機能等を物理化学の法則に基づき正確に把握できるようになる。その結果、開発に精密性が求められるナノデバイス設計や精度の高さが恒常的課題として求められる最適治療が可能になるなど、医療・情報産業における精密製品設計・高度治療等の飛躍的発展が実現できる。また、研究開発や医療現場における高い成功率・スピード化を実現し、ナノ、バイオ市場の拡大速度を加速するとともに、製品化に至るまでの開発ステップの簡略化、治療期間の短縮化等による時間的・経済的な効率化を図ることができる。さらに、高度なシミュレーション技術には、スーパーコンピュータ、サーバ、データベース等の計算資源をネットワーク上に共有化するための技術開発や環境整備が不可欠となることから、次世代のIT基盤への貢献も期待でき、社会的・経済的な波及効果はきわめて大きいと考えられる。

独立行政法人科学技術振興機構(JST)の戦略的創造研究推進事業「シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築」研究領域では、計算機科学と計算科学が連携することによりシミュレーション技術を革新し、信頼性や使いやすさも視野に入れて実用化の基盤を築く研究を推進している。具体的には、物質、材料、生体などのミクロからマクロに至るさまざまな現象をシームレスに扱える新たなシミュレーション技術、分散したデータベースやソフトウェアをシステム化する技術、また、計算手法の飛躍的な発展の源となる革新的なアルゴリズムの研究や、基本ソフト、情報資源を取り扱いやすくするためのプラットフォームあるいは分野を越えて共通に利用できる標準パッケージの開発などが含まれる。本特集では上記の研究対象におけるさまざまな分野において開発されている次世代統合シミュレーション技術のうち以下の6件について解説をする。

(1)「粒子法によるマルチフィジクスシミュレータ」(東大 越塚ほか)では、粒子法による多相流体構造連成解析手法に基づいた汎用マルチフィジクスシミュレータに

ついて解説する。本シミュレータにより特にマイクロ生化学システムの研究開発能力の向上に寄与できる。

(2)「医療・創薬のためのマルチスケール・マルチフィジクス心臓シミュレータ」(東大 久田ほか)では、計算科学における新たな理論開発と計算機科学による高速化・並列化のための実装とを組み合わせ、世界で初めてミクロからマクロに至る統合的理解を可能とするマルチスケール・マルチフィジクス心臓シミュレータの解説を行う。

(3)「放射線治療の高度化のための超並列シミュレーションシステム」(原子力機構 斎藤ほか)では、放射線がん治療を対象として、詳細人体モデルと電磁カスケード・モンテカルロ法を用いた超並列計算により、患者に与えられる線量を短時間に高精度で計算し、治療を支援するシミュレーションシステム技術等について解説する。

(4)「システムバイオロジーのためのモデリング・シミュレーション環境」(慶大 富田ほか)では、知識工学・ソフトウェア工学的手法を導入し、システムバイオロジーのための、本格的な実用に耐えられる細胞モデリング・シミュレーションソフトウェア環境について解説を行う。

(5)「数値/数式ハイブリッド計算に基づくロバスト最適化プラットフォーム」(富士通 穴井)では、ものづくりにおける設計・製造の効率化・高品質化・高付加価値化実現のための新しいシミュレーション技術の確立を目指し、これまでの数値計算手法に数式処理計算を融合した数値・数式融合計算に基づく最適化手法およびそのツール化の解説を行う。

(6)「数値シミュレーションを支える精度保証技術」(早大 大石ほか)では、数値線形シミュレーションツールを精度保証付きシミュレータへと性能向上させる理論とアルゴリズムの解説を行う。

以上のようにシミュレーション技術は、従来の理論・実験とは異なる新しい研究手法を実現し、科学技術のブレークスルー・国際競争力の強化に資する基盤技術として、その重要性が高まっている。本特集によってシミュレーション技術のさらなる発展のために議論が深まれば幸いである。

(平成19年7月20日)