本田財団レポート　No. 150
第 34 回本田賞授与式 記念講演（2013 年 11 月 18 日）

「第３の科学
～計算力学がもたらす科学技術革新～」

テキサス大学オースティン校計算工学・科学研究所（ICES）設立所長、教授

ティンズリー・オーデン博士

THE THIRD PILLAR: The Computational Revolution of Science and Engineering

Commemorative lecture at the 34th Honda Prize
Award Ceremony on the 18th November 2013

Dr. J. Tinsley Oden

Ph.D., Founding Director of the Institute for Computational Engineering and Sciences (ICES), The University of Texas at Austin

公益財団法人 本田財団
HONDA FOUNDATION

ティンズリー・オーデン博士

テキサス大学オースティン校計算工学・科学研究所(ICES)設立所長、教授

Ph.D., Founding Director of the Institute for Computational Engineering and Sciences(ICES), The University of Texas at Austin

Dr. J. Tinsley Oden

■生まれ

1936年12月25日	ルイジアナ州アレクサンドリア生 (アメリカ国籍)

■学　歴

1959年	ルイジアナ州立大学土木工学科卒業
1960年	オクラホマ州立大学土木工学科修士課程修了
1962年	オクラホマ州立大学機械工学科博士課程修了

■名誉学位

1987年	ポルトガル・リスボン工科大学より名誉博士号
2000年	ベルギー・モン理工科大学より名誉博士号
2001年	ポーランド・クラクフ工業大学より名誉博士号
2004年	テキサス大学オースティン校にて学長表彰
2006年	フランス・カシャン高等師範学校より名誉博士号
2010年	オハイオ州立大学より名誉博士号

■職　歴

1959年	ルイジアナ州立大学助手
1961年～63年	オクラホマ州立大学応用力学科講師、土木工学科准教授
1963年～64年	General Dynamics 社勤務 （研究部門構造担当シニア技師）
1964年9月 ～73年８月	アラバマ大学ハンツビル校 機械工学科 助教授～教授
1973年9月 ～現在	テキサス大学オースティン校 航空宇宙工学/機械工学科教授
1974年9月 ～現在	テキサス大学オースティン校 計算工学・科学研究所(ICES)所長 (1974-1993 TICOM, 1993-2003 TICAM)
1981年9月 ～現在	テキサス大学オースティン校 数学科教授
2003年3月 ～現在	テキサス大学オースティン校 研究担当副校長
2011年～現在	テキサス大学オースティン校 コンピューター科学科教授

■BORN

December 25, 1936 in Alexandria, Louisiana, USA
(USA citizenship)

■EDUCATION AND TRAINING

1962	Ph.D., Oklahoma State University, Engineering Mechanics
1960	M.S., Oklahoma State University, Civil Engineering
1959	B.S., Louisiana State University, Civil Engineering

■HONORARY DEGREES

2010	Ohio State University Honoris Causa
2006	Ecole Normale Superieure Cachan (ENSC), France Honoris Causa
2004	The University of Texas at Austin Presidential Citation
2001	Cracow University of Technology, Poland Honoris Causa
2000	Faculte Polytechnique de Mons, Mons Belgium Honoris Causa
1987	Technical University of Lisbon, Lisbon, Portugal Honoris Causa

■EMPLOYMENT HISTORY

University of Texas-Austin, Director, Institute for Computational Engineering and Sciences (ICES), (TICOM 9/1974 - 8/1993, TICAM 9/1993 - 2/2003) 3/2003 - present.

University of Texas-Austin, Associate Vice President for Research, 3/2003 - present.

University of Texas-Austin, Professor, Computer Science Department, 2011 - present.

University of Texas-Austin, Professor, Mathematics Department, 9/1981 - present.

University of Texas-Austin, Professor, Aerospace Engineering and Engineering Mechanics Department, 9/1973 - present.

University of Alabama-Huntsville, Assistant Professor and Professor in Engineering Mechanics, 9/1964 - 8/1973.

General Dynamics, Senior Structures Engineer, Research Department, Fort Worth, 1963-64.

Oklahoma State University, Instructor in Applied Mechanics, Assistant Professor in Civil Engineering, 1961 - 63.

Louisiana State University, Teaching Assistant, 1959.

■略　歴

オーデン博士は工学、数学、そしてコンピューター科学を統合し、自然科学の世界にコンピューター・シミュレーションを生み出した、計算力学の創設と発展に多大な貢献をしたことで国際的な名声を得ている。このようなシミュレーションは、医学、材料工学、エネルギー探査そして気候科学など様々な分野で活用されている。現在博士はテキサス大学オースティン校において計算工学・科学研究所所長として、半導体モデルと癌治療に主眼を置いたマルチスケール“アダプティブ”モデルの研究を進めている。また、アメリカ土木学会のカルマンメダル(1992年)、アメリカ計算力学学会のニュウマンメダル(1993年)、国際計算力学連合のニュートン・ガウスメダル(1994年)、アメリカ機械学会のティモシェンコメダル(1996年)他多数を受賞している。

■BIOGRAPHICAL SKETCH

J. Tinsley Oden is world renowned for his contributions in establishing and developing the field of computational mechanics, which applies mechanics, mathematics, and computer science to create computer models of the physical world. Such simulations are used in fields as diverse as medicine, material engineering, energy exploration, and climate science. As the Director of the Institute for Computational Engineering and Sciences, Dr. Oden's current research is in multi-scale "adaptive" modelling, with a focus on semiconductor modelling and cancer treatment. For his scientific contributions, Dr. Oden was awarded the Theodore von Karman Medal of American Society for Civil Engineers in Engineering Mechanics in 1992, the John von Neumann Medal of U.S. Association for Computational Mechanics in 1993, the Newton-Gauss Congress Medal of International Association for Computational Mechanics in 1994, and The Stephen P. Timoshenko Medal of American Society of Mechanical Engineers in Applied Mechanics in 1996, among others.

■出版物

"Mechanics of Elastic Structures"：
McGraw-Hill, New York City, 1967年

"非線形連続体の有限要素法"：
McGraw-Hill, New York City, 1972年

"Finite Elements vol.1 to 6"：
(E.B Becker および Graham F. Carey 共著)
Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1981年

"Applied Functional Analysis, 2nd ed."：
(L. F. Demkowicz 共著)
CRC Press, Boca-Raton, 2010年

"An Introduction to Mathematical Modelling"：
Wiley, Hoboken, 2011年

(27冊の著作を含め、800にも及ぶ論文、記事の中から抜粋)

■PUBLICATIONS

Mechanics of Elastic Structures：
McGraw-Hill, New York City, 1967

Finite Elements of Nonlinear Continua：
McGraw-Hill, New York City, 1972

Finite Elements vol.1 to 6：
(with E.B Becker and Graham F. Carey)
Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1981

Applied Functional Analysis, 2nd ed.：
(with L. F. Demkowicz)
CRC Press, Boca-Raton, 2010

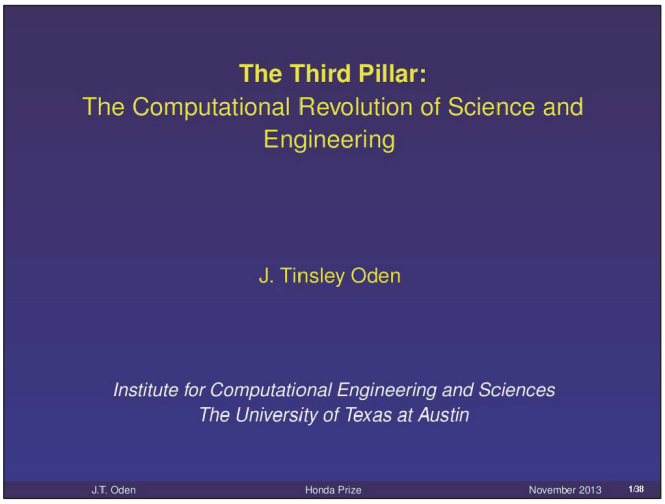
An Introduction to Mathematical Modelling：
Wiley, Hoboken, 2011

(selected among 800 publications, including 27 books)

このレポートは、2013 年 11 月 18 日　東京、帝国ホテルにおいて行なわれた第 34 回本田賞授与式記念講演の要旨をまとめたものです。
This report is the gist of the commemorative lecture at the 34th Honda Prize Award Ceremony at the Imperial Hotel, Tokyo on 18th November 2013.

第 3 の科学
～計算力学がもたらす科学技術革新～

ティンズリー・オーデン



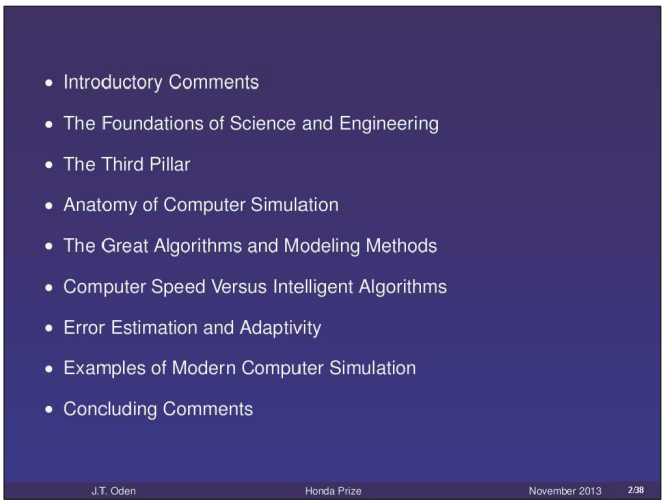
本田財団よりたいへん栄誉ある賞を私のような者に授与していただき、本当に身に余る光栄です。このように特別な式典において、多くの素晴らしい来賓の方々にご列席いただく中で、本田賞の偉大なる系譜に列せられる名誉にあずかるというのは、一研究者としての人生の頂点となる出来事です。計算科学者、エンジニア、数学者、また研究者としての私のキャリアにとって、輝かしい瞬間です。私の研究を評価し、この賞に選定してくださった本田財団、石田寛人理事長、また選考委員会の皆様には、心より御礼を申し上げます。本田技研工業株式会社代表取締役会長の池史彦様にも、感謝申し上げます。時間を割いて授与式にお越しいただき、特別なひとときを共有してくださる素晴らしいご列席者の皆様にも、御礼を申し上げます。また、本田財団常務理事である松澤聡様の、親切でじつに行き届いたご手配のおかげで、なんの心配もなくこの授与式を楽しむことができました。本当にありがとうございます。仕事でもプライベートでも親しく交際し、長年にわたる私の最も心強い支持者である、今日この場にいる親愛なる友人たちにも感謝します。本日ご列席いただいたすべての皆様、本当にありがとうございます。

私は、本田財団の提唱しておられるエコテクノロジーの理念に心から共感するとともに、計算力学、より広い意味で申し上げれば計算科学は、科学技術のあらゆる分野に大きなインパクトを与えてきましたし、これからも与え続けるであろうということ、さらには我々人類にとってかけがえのない生態系を保護し、またエコテクノロジーを発展させるために不可欠な要素となるであろう、ということをご説明したいと思っています。

私は、自分の研究生活を助けてくれた多くの人たちのおかげで、長い道のりをへて、人生のこの地点にまでたどり着くことができました。家族である妻のバーバラ、息子のウォーカー、娘のリーは、献身的な愛情をそそいでくれ、私が仕事に集中できるように尽くしてくれました。私の両親は、

私を息子として、また一人の大人として、学問と研究に打ち込むことを励ましてくれました。そして、何人かは今日ここに来てくれている多くの学生たち、博士研究員や同僚の研究者たちは、長年にわたり、多くの研究について協力やサポートをしてくれました。心から感謝しています。

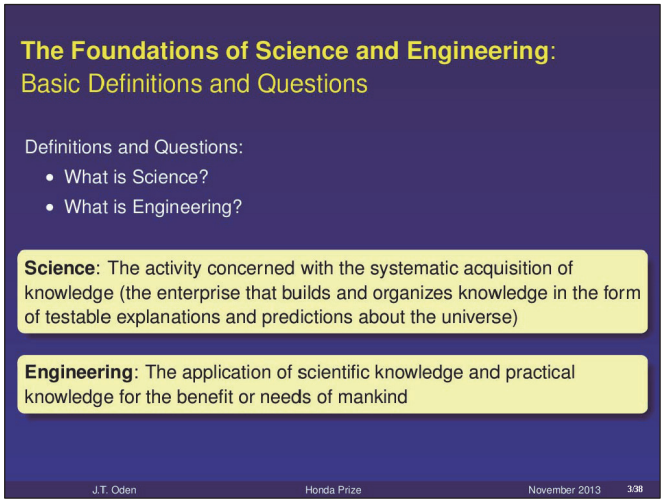
■ 講演の構成



図－1

〈図－1〉　ご覧のように本日の講演は、いまお話した「受賞に際して」を含む、9 つのトピックについてお話をさせていただきたいと思います。

■ 理工学の根幹



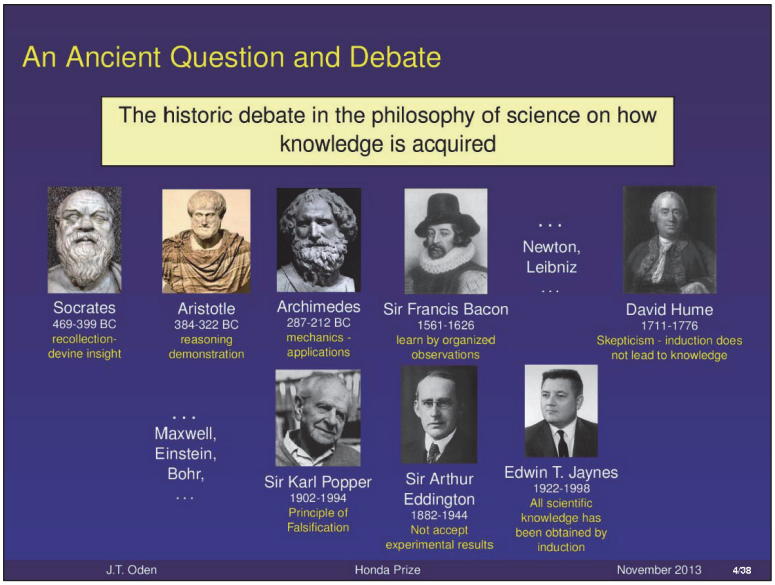
図－2

〈図－2〉　私はこの講演を、われわれ人類が古くから関心をもってきたテーマについてお話することから始めたいと思います。すなわち「科学とは何か」、「科学的手法とは何か」、そして人間を脅かす諸問題を解決するために科学をどう応用するのか、ということです。科学という語を簡単に定義するとこうなります。「科学とは、系統的な知識の獲得にまつわる諸活動である。」science という英語は、ラテン語で「知識」を意味する scientia に由来します。ケンブリッジ辞典によると、科学とは「検証可能な説明や予測を用いて宇宙についての知識を構築し、組織化する試みである」とされています。科学は、情報を獲得し、理解することによって未知の世界を減らす、もしくは無くすことを目的としており、それには人が認識を通して知覚した真実または事実を、知的に理解するという営みも含まれます。工学（エンジニアリング）とは、科学的・実用的な知識を、人間の利益や必要のために系統的に応用することです。

科学的発見の重要性について、またそのおかげで前世紀におけるテクノロジーの飛躍的な発展が可能になり、社会福祉や安全保障の面で改善がみられ、寿命が伸び、人間の生活が豊かになったという事実について、疑いを抱く人はほとんどいないでしょう。科学の発展により、私たちの生きるこの宇宙について、それを支配している力や法則について、そして究極的には、そうした力をコントロールし、人類の利益となるように方向づける能力について、理解することができるようになります。

私は科学のために、すなわち知識を獲得するのみならず、それを応用するために時間と労力を捧げることは、人間が携わることのできるもっとも立派な行為のひとつだと信じていますが、それはまた計りしれないほど困難で、同時に非常にわくわくさせてくれる営みでもあります。

■ 古くからの問いと議論



図－3

〈図－3〉　「知識とはどのように獲得されるのか」という問いは、約 3,000 年もの間、科学哲学者にとって、議論のテーマとなってきました。プラトンが、紀元前 469 年～399 年に生きた偉大な哲学者であるソクラテスについて書いた文章を見ると、ソクラテスは、知識とは不滅の魂の中に存在するものと考えていたことがわかります。彼は人間の感覚というものを信用せず、知識は瞑想や直感的な洞察によって生ずると考えていました。そして弟子であるプラトンは、そうした考え方を受けつぎ、永く後世にまで伝えたのです。しかし紀元前 384 年～322 年に生きたプラトンの弟子のアリストテレスは、より注目すべき回答をもっていました。知識は論理的思考と実証によって獲得される――すなわち彼は、物理的観測と帰納的仮定によって知識が生み出されるという考え方の先駆者でした。紀元前 500 年から 15 世紀までの 2,000 年間には、アルキメデス、ダ・ヴィンチなどが登場しました。16 世紀から 18 世紀には、フランシス・ベーコン卿、デヴィッド・ヒューム、ガリレオ、ニュートンなどが後に続きます。そして 20 世紀には、ディラック、エディントン、ボーア、アインシュタイン、マクスウェル、ボルツマンの他、多くの科学者が現れました。

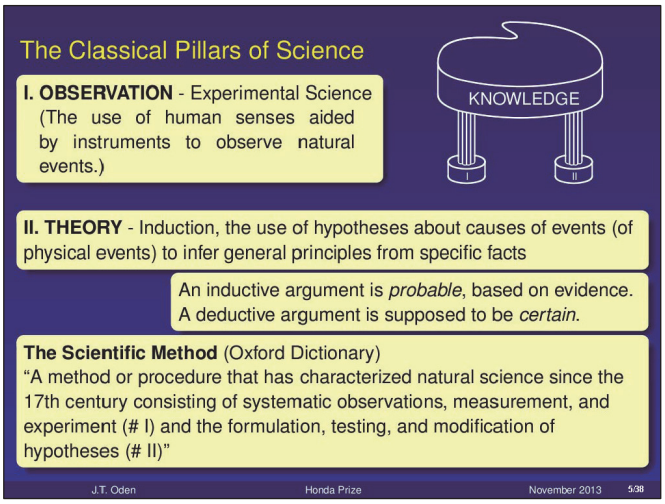
フランシス・ベーコン卿は、産業化社会の黎明期において功績を残した人物とされています。彼は、あらゆる事象は帰納法と系統的な観測によって理解できるという考えを示しました。これに異を唱えたのが、帰納法は知識へと導かれないという命題に基づく懐疑主義の哲学を考え出した英国の哲学者、デヴィッド・ヒュームでした。ヒュームによれば、知識とは、観測や実験によってのみ得ることができるものでした。帰納法とは、まず観測した物理現象の原因の解釈に基づく仮説（一般的には理論）を立て、仮説から推定して未来の出来事を予測したり、過去を検証したりすることを意味します。

悲観的だったヒュームは置いておくとして、結局のところ、19 世紀および 20 世紀の偉大な科学者たちはみな帰納的理論を構築し続け、それが世界を変えたのでした。しかしその哲学的な基盤が確立されるのには、「反証の原理」を提唱した 20 世紀の哲学者、カール・ポパーの仕事を待たねば

なりませんでした。この原理は「一つの帰納的仮説、あるいは一つの理論は、予測と相反する観測を通して反証することが可能でない限りは、つまりその理論と矛盾する観測結果を得ることができなければ、真の科学理論と承認されることはできない」というものです。反証の可能性のない仮説は疑似科学であり、真の科学理論ではないのです。ひとたび反証されると、その理論は観測結果に合致するよう修正されるか、あるいは破棄されます。ここにいたって私たちは、帰納法の産物である科学理論は、物理的観測に矛盾しない限りにおいてはじめて有効である、ということを認識するのです。いっぽう演繹法（公理を定立し、数学的理論を用いてその公理の結論を証明すること）によって生まれる数学の理論は、永続的であり、失敗することも変わることもありません。したがって、正確な数学的証明は永久不滅ですが、科学的証明は、観測による矛盾が生じるまでしかもちません。ポパーでさえも結局は、客観的にすぎる、という批判を受けたのです。客観主義哲学は、実際の科学的営為がどのようになされるかを説明するものではない、と言われていました。実際の物理的宇宙の観測は、事象の統計的性質によって説明されるものであり、ポパーの少なくとも初期の原理においては、統計的解釈は用いられていませんでした。

20 世紀が進むにつれ、物理的宇宙に関する人類の知識について帰納的な面での貢献を果たした、傑出した科学者たちが登場しました。レネ・ド・ブロイは、電磁波と運動量との関係を、実験によって確認されるよりも 10 年早く定式化しました。ポール・ディラックは、純粋な数学的計算に基づいて、反物質の存在を発見しました。これは彼が提唱した十数年後に初めて実験によって観測され、物理的現実となりました。この流れは、アインシュタインの相対性理論を、相対性理論による予測からずっと後になって天体観測を通じて確認した、アーサー・エディントン卿へと繋がります。彼はこう述べました。「実験主義者は、理論によって確認されない限り、私たちが実験データを受け入れることはないと知ったら、びっくりするだろう。」これはヒュームらの見方と明らかに反しています。さらに最近になると、物理学者であり蓋然(がいぜん)論者でもあるエドウィン・T・ジェインズは、あらゆる科学は帰納的であり、実験を計画するときにも、データを理解・活用するときにも、また存在する物理的システムの中に観測される事象の原因を明らかにするときにも、帰納法的なプロセスが採用されねばならない、と主張しました。

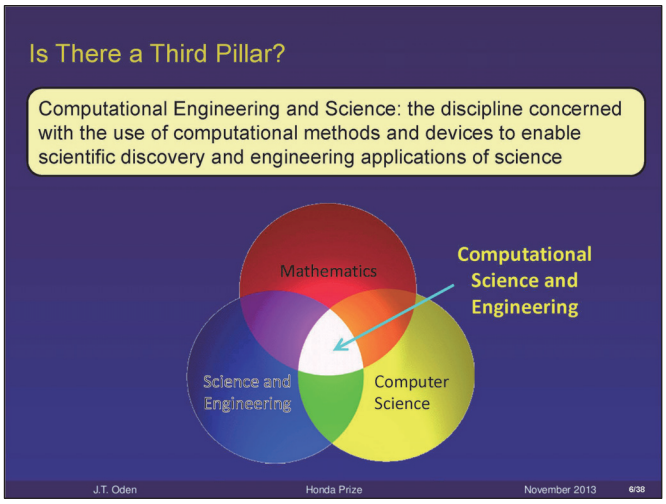
■ 科学における古典的な柱



図－4

〈図－4〉　このように、人類史上に残る偉大な頭脳たちによる何千年にもわたる議論の結果として、科学的知識へと到達するための２つの道が現れました。①器具を使用し、人間の知覚を通じて得られる、観測結果や実験による測定結果といった情報、そして②多くは数学的言語で記述される理論や帰納的仮説、の２つです。観測と理論とはしたがって、科学における古典的な２つの柱なのです。オックスフォード辞典によれば、科学的手法とは「系統的観測・計測・経験と実験、そして仮説の定式化・検証・修正から成る、17 世紀以来の自然科学を特徴づけてきた一連の手続き」を意味します。

■ 第３の柱は存在するのか？

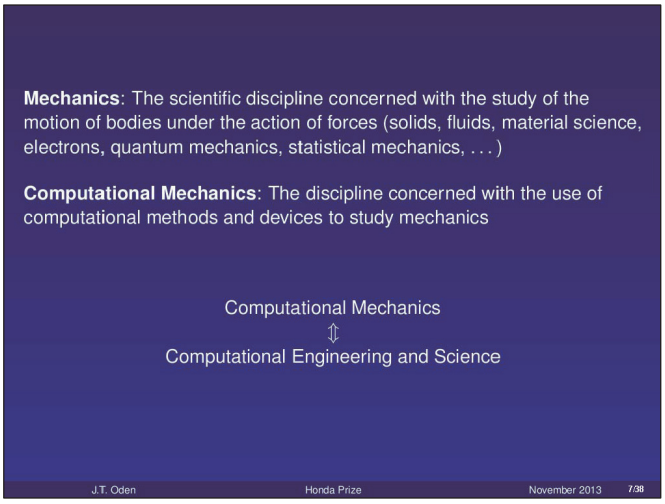


図－5

〈図－5〉　それでは、第３の柱はあるのでしょうか？科学的知識を得るための、新たな道は存在するのでしょうか？私や最先端をゆく科学者・エンジニアなら、はっきり「Yes」と答えます。それこそは「計算科学」という新しい分野です。コンピューターやモデル、計算アルゴリズム、計算装置を用いて、物理的宇宙のふるまいについてのモデルを作り、それによって未来を予測し、あるいは過去を再構築します。200～400 万年におよぶ人類史上のほんの半世紀と少しの間、巨視的なスケールで捉えればほんの瞬きほどの間に、科学的な展望全体が決定的に変わってしまいました。計算科学の登場は、人類史上もっとも重要な科学上の出来事です。それは科学的発見がなされる方法や、工学的な応用が行なわれる方法を永久に変容させました。計算科学は、数学、コンピューター科学、その他の主な理工学分野が交じり合う領域に存在しています。数学は、科学理論を記述し、観測によって得られた情報を書き換えたり転送したりするための言語であるため、古典的な科学において柱となる、不可欠な要素です。数学はまた、科学の数学的理論を再構成し、デジタルコンピューターによって処理可能な形にするための言語でもあります。コンピューター科学は、計算装置を理解し構築するため、また計算装置と対話するための言語と手法を開発するために考案されたもので、科学的知識やテクノロジーの主体となるものです。もちろん、伝統的な理工学の核となる専門分野も、今また見直され、再構築されねばなりません。なぜなら、旧来の科学では手に負えなかったことが、計算科学のもたらした強力な新しいツールや方法論のおかげで、十分に手に負えるものになっているからです。

私の携わっている計算科学は、「第３の科学」です。この第３の科学は、コンピューターモデル・コンピューターシミュレーション・データの復旧／検索・大容量データの処理・計算技術の飛躍的な発展を実現します。さらには、製造・内科学・外科学・材料科学・気象科学・地球物理学、自然災害の分析、その他多くの領域におけるテクノロジーおよび科学的研究において、以前では不可能と考えられていたような、科学上の発見や進歩を可能にします。

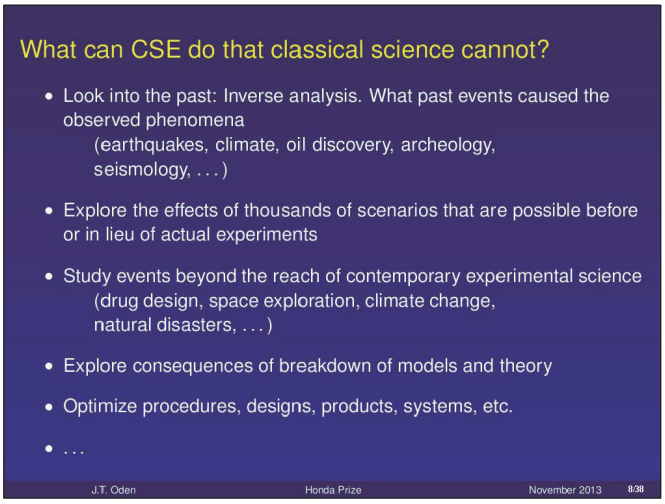
■ 力学と計算力学



図－6

〈図－6〉　私はこのテーマに取り組むに当たり、力学と計算力学について学ぶことから始めました。どちらも、エネルギーの作用を受けた物体の動作を研究する科学分野です。したがって、この分野には固体力学と流体力学が含まれますが、今や材料科学・電子運動・量子力学・統計力学も含まれます。私の考えでは、力学は、その定義が広義かつ明確なために、計算科学と区別することはできないと思います。

■ CSE（Computational Science and Engineering）には、旧来の科学にはできないどんなことができるのか？

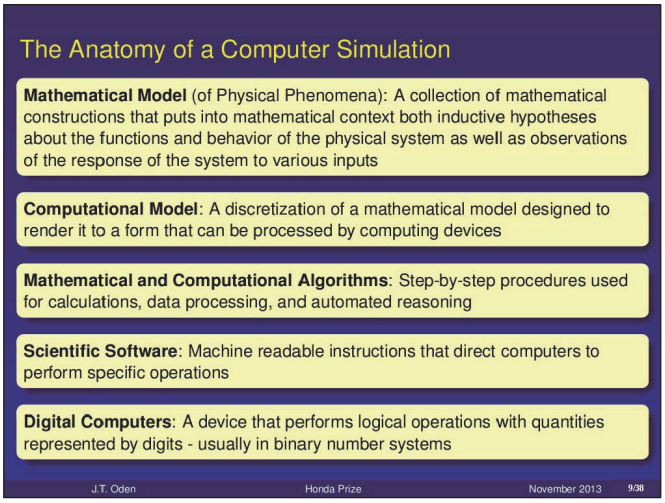


図－7

〈図－7〉　計算理工学には、旧来の科学にはできないどんなことができるのでしょうか？たとえば、逆解析を用いて過去を覗き込み、観測された現象が、どのような過去の事象が原因で生じたのかを突き止めることができます。実際に実験を行なわなくても、何千通りものシナリオの効果を研究することができます。薬物設計・宇宙開発・気候変動・自然災害などの、現代の実験科学の限界

を拡張したとしても手に負えない事象の研究に用いることもできます。さらに、モデルや理論がなぜ失敗したのかを解明することも可能です。プロジェクトやシステムの設計手順を最適化することもできます。

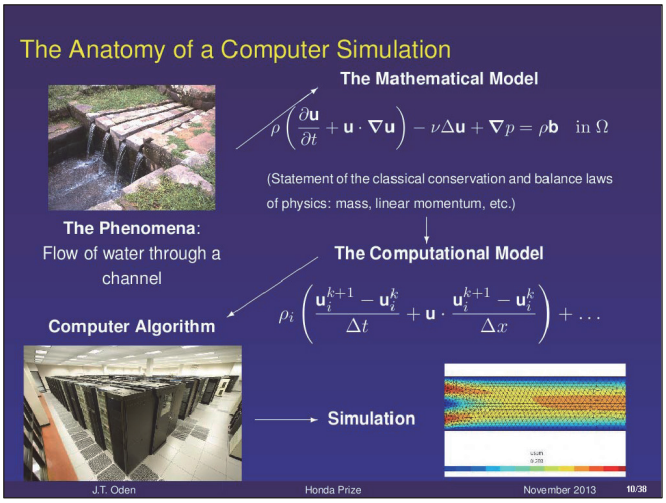
■ コンピューター・シミュレーションの構造



図－8

〈図－8〉　それでは、コンピューター・シミュレーションの構造を詳しく分析してみましょう。知識を獲得したり、構築されたシステムのふるまいを理解したりするための計算科学のツールには、具体的にどのようなものがあるのでしょうか？まず、物理系システムの機能とふるまいについての帰納法的仮説、および物理系システムの数理的状況における、様々なインプットへの反応を観測した結果の解釈に用いられる、数学的構成の集積としての数理モデルがあります。２つ目は、数理モデルについて誤差を含む離散化を行い、計算装置で処理可能な形へと翻訳したものである、計算モデルです。３つ目は、計算・データ処理・自動推論に用いられる段階的な手順および定式化である、数学／計算アルゴリズムです。４つ目は、コンピューターへ特定の機能を実行するよう命ずるために、コンピューターにマシン読み出し可能命令を提供してくれる、科学的ソフトウェアです。さらに、通常は２進法で表現される数を用いて論理演算を実行するデバイスである、コンピューターがあります。最後に、処理され、解釈されて予測・設計・意思決定に用いられるべき出力データがあります。

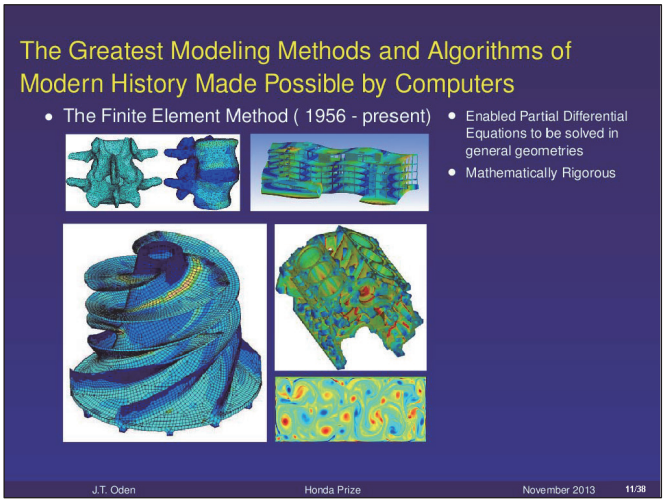
■ コンピューター・シミュレーションの構造 2



図－9

〈図－9〉　物理現象のコンピューターモデルの好例としては、水路を流れる水流のモデルがあります。このシステムは、質量保存の基本法則や、線形運動量および角運動量の保存／平衡の原理に支配されているものと推定できます。粘性流体の動作を支配する法則を推定するにあたっては、有名なナビエ・ストークス方程式を物理現象の数理モデルとして選択します。この場合、物理的パラメータとして流体の速度を u、密度を ρ、粘度を ν とし、また圧力を p、体積力（流体の重量または浮力の場合もある）を b とします。これが運動量均衡の原理として具現化された、理論の数理的分類となります。これを計算可能な形にするには、離散化を用います。導関数を離散近似に置き換えて計算モデルを作り、それからコード、つまりコンピュータープログラムを構築し、計算モデルを解くようコンピューターで実行します。こうして、私たちがシミュレートしようとしている、流体の流れを表現する数理モデルの解の離散的特性化がなされます。計算結果を生み出し、それを利用する前に、もう一つ別のステップがあります。それはその解を発展させ、解釈し、可視化すること、それから私たち人間の知識を使ってそのシステムのふるまいを推測することです。ここであらためて、現代のコンピューター科学の方法と技術がクローズアップされてきます。

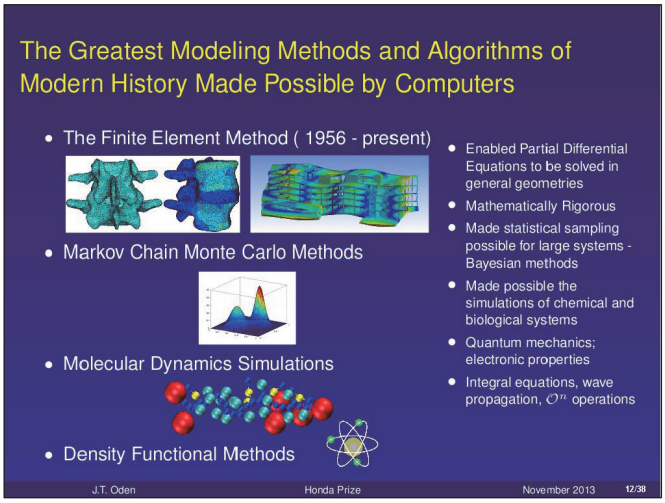
■ コンピューターが実現した現代における偉大なモデリング手法とアルゴリズム



図－10

〈図－10〉　今日の進歩を可能にした現代の手法とアルゴリズムとは、どんなものなのでしょうか？いくつかの現代の計算方法は、コンピューターの出現なしには存在しなかったかも知れません。最初にお話するのは、有限要素法についてです。その萌芽はもっと以前に見いだされていましたが、一般的には 1950 年代に生み出されたと言われています。有限要素法は、今日にいたるまで発展を続け、広く用いられ続けています。複雑な物理的問題を小さな欠片、すなわち有限要素へと分割し、個々の欠片に対してさまざまな力学法則を適用する、という巧妙な手法です。それからそれらの欠片をひとまとめにして、大きく複雑なシステムの完全なモデルを形成するのです。有限要素法は事実上、科学技術のあらゆる分野に影響をおよぼしました。私は幸運にも、有限要素法が表われだしたころに研究を行うことができ、この手法を採用して、複雑な航空宇宙システムや航空システムを分析する、いくつかの最初期のコンピュータープログラムを構築しました。1960 年代初頭のことです。のちに 1970 年代になって、私はその数学的基礎をあつかった最初期の本のうちの一冊を書きました。このテーマは今や、応用／計算数学において活気のある充実した研究分野となっており、世界中で教えられています。

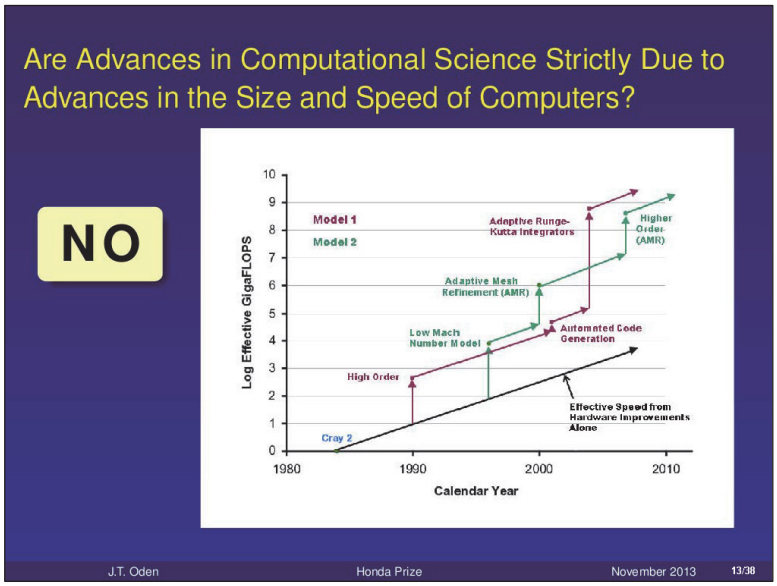
■ コンピューターが実現した現代における偉大なモデリング手法とアルゴリズム２



図－11

〈図－11〉　要するに有限要素法によって、理工学の分野では、幾何学的に複雑な領域における偏微分方程式を解くことができるようになりました。これは数学的に精密な手法でもあるのです。偏微分方程式を解く能力は、現代の数学に絶大なる影響をおよぼしたのみならず、工学分野においても革命を起こしました。その他の統計学や統計サンプリングの手法はコンピューターの進歩によって可能になったのであり、マルコフ連鎖モンテカルロ法のような新しい強力なアルゴリズムは、その良い例です。これは、化学・統計法・確率システムなどの研究に分子動力学を使用するものです。どちらも 1980 年代から 90 年代にかけてのデジタル演算と計算数学の進歩がなければ、存在し得なかった領域です。今日、これらの統計サンプリングの手法は、理工学の多くの分野において基礎的なツールとなりつつあります。分子動力学的シミュレーションは生物学において、薬物送達のためのナノ分子の開発や新素材の設計のため、またウイルスやバクテリアの挙動を理解するために使われています。これらは、原子・分子レベルで自然現象をモデリングする計算アルゴリズムです。そして私たちが現代の生物学・化学・物理学をどのように理解し、教え、また用いるかということについて、計り知れないほどの影響を及ぼしてきました。次にご紹介するのは、密度汎関数理論です。量子システムについての理論で、量子力学の革新的な再編に寄与し、電子レベルでの問題解決、また物質および物理システムのふるまいに関する第一原理の研究のための、多くの新しい手法をもたらしました。最近では、1980 年代から 90 年代のころの手法やアルゴリズムにおいては何十億もの未知数があった非常に大きな問題を、一瞬にして解決することを可能にする、いくつかの新しい高速アルゴリズムが設計されました。これらの理論は、非常に重要な油田やガス田を発見・開発するために用いられる地震学のような分野にも、大きな進歩をもたらしました。

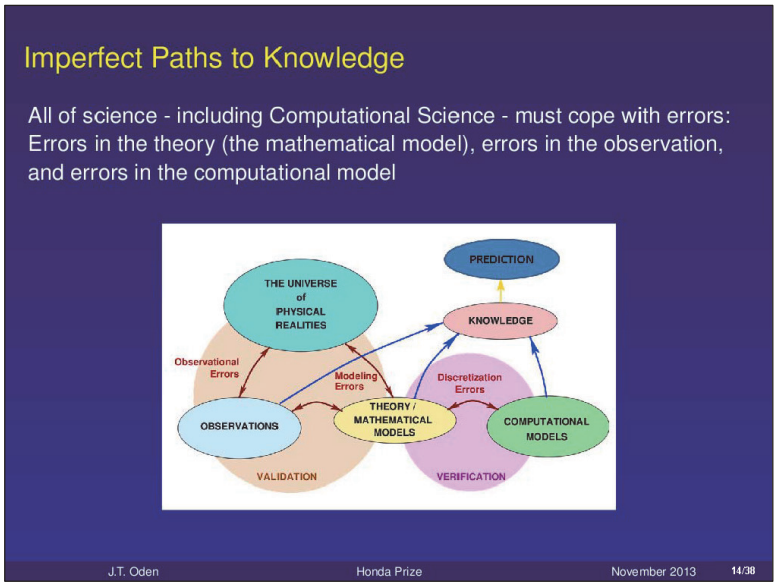
■ 計算科学の進歩は、コンピューターのサイズやスピードの進歩によってもたらされたのか？



図－12

〈図－12〉　このようにコンピューターのもたらした科学的発展を見てくると、こういう疑問が浮かぶかもしれません。「こうした発展は全て、コンピューターの小型化や高速化のおかげなのか？」この質問に対しては、声を大にして、強い口調で「No」と言わねばなりません。反証は幾つもあげることができます。このグラフは、例えばコンピューターチップ１つ当たりの半導体数が増加するなどして、計算装置の計算速度が時間の流れに沿ってどれくらい向上したかを、横軸を暦年で、縦軸を有効なギガフロップスで示したものです。その向上は、過去 30 年間にわたってほぼ直線を描いています。これはよく知られ、論文にもなっている事実です。既にご説明してきたようなアルゴリズムの劇的な進歩によって、扱えるサイズ、処理スピード、および問題そのものの複雑さは、４桁単位で増加します。コンピューター単独では、近年の計算科学の進歩のうち、ほんの一部に貢献したとしか言えません。

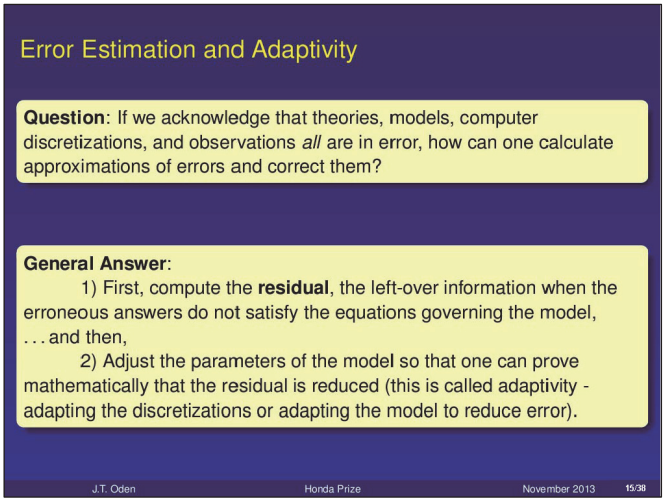
■ 知識への不完全な道のり



図－13

〈図－13〉　現代の計算科学において、科学的手法の全ての段階には不確定要素が含まれています。観測についても、モデルを分類するデータについても、またモデルそのものについても同じことが言えます。なぜならどれも、現実を数学的に抽象化したものにすぎないからです。モデルをコンピューターで処理可能な形にするために行なう離散化によっても、不確定要素が生じます。現代の統計と確率の手法を用いたこうしたあらゆる不確定要素の管理・定量化・制御についての研究は、計算科学の最先端分野です。科学的予測における不確定要素の存在は長年にわたって認識されてきたものの、現代のアルゴリズム・手法・計算装置が大幅な進歩を遂げ、不確定要素の管理・定量化・制御が可能となるほどのレベルに到達したのは、つい最近のことです。これは私が過去 10 年間ずっと取り組んでいるテーマです。不確定要素を定量化し、またいわゆる「予測科学」の基礎を作るために、必要充分かつ強固な理論を構築できる日も近いと思います。

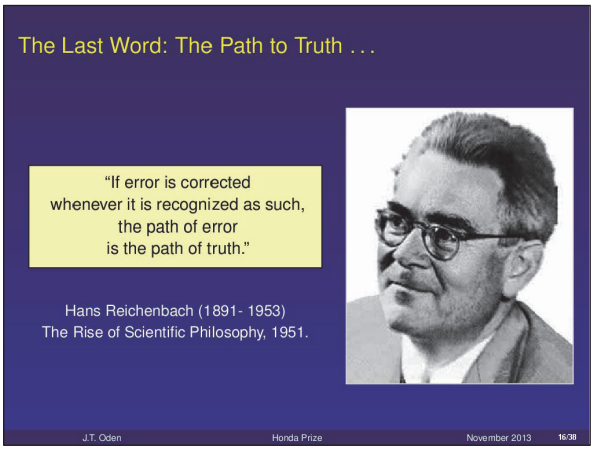
■ 誤差の予測と適応性



図－14

〈図－14〉　さてここで、先ほどお話したことにも関連する、未来を予測するためのコンピューター、モデル、そして科学理論にさえも含まれている可謬性について取り上げましょう。複雑な問題を解くにあたって、私たちは過去数十年間で、そのような誤差を予測し、減らし、制御する方法を開発することができたのか？答えは「Yes」です。誤差予測と適応性にまつわるテーマ全体は、計算科学における広範かつ重要な研究分野であり、光栄にも私が長年に渡り携わってきた分野でもあります。一般的な問いはこうなります。「もし理論や、モデルや、コンピューターによる離散化や観測に誤差がつきものであることを認めるのなら、どうすれば誤差の近似値を計算し、また修正することができるのか？」私が仕事で用いてきた一般的な回答は、いわゆる剰余と呼ばれるものを求めればよい、というものです。剰余とは、誤った解答により、計算モデルを支配する方程式が成立しないときに発生する、余りの情報のことです。その場合は、その剰余が減少したことを数学的に証明できるようモデルのパラメータを調整する必要があります。これは適応性と呼ばれ、離散化を適応させること、あるいは誤差を減らすためにモデルを適応させることは、私の研究を含むほとんどの現代の計算科学の研究に共通する、基本的なコンセプトです。

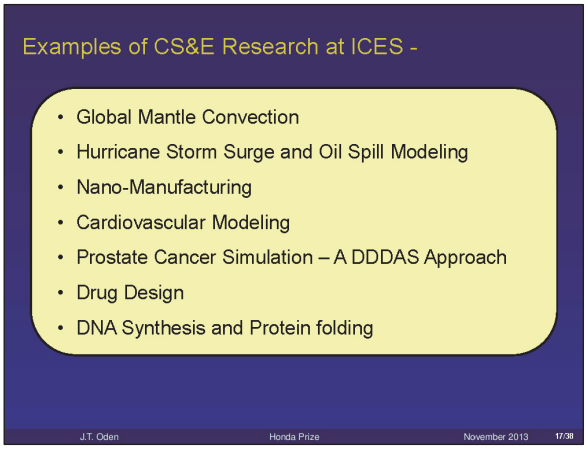
■ 最後の言葉：真実への道



図－15

〈図－15〉　哲学者のハンス・ライヘンバッハは、『科学哲学の形成』という著書のなかでこう述べています。「もし誤りが、そのようなものとして認識されたときに訂正された場合、誤りへの道は、つねに真実への道である。」これが適応的計算法の根本的な哲学です。

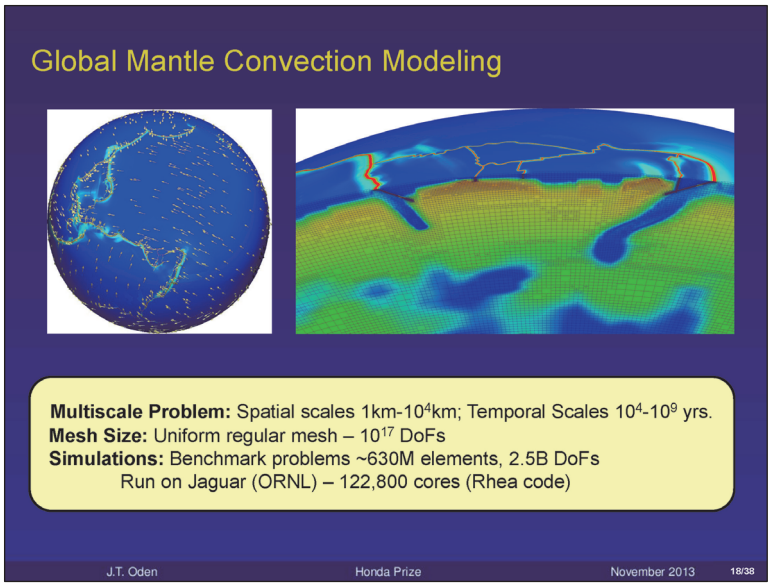
■ ICES における計算理工学研究の例



図－16

〈図－16〉　ここで、私の所属する研究機関において過去 5 年間にわたって行われてきた、現代における計算科学の応用例をいくつか取り上げたいと思います。

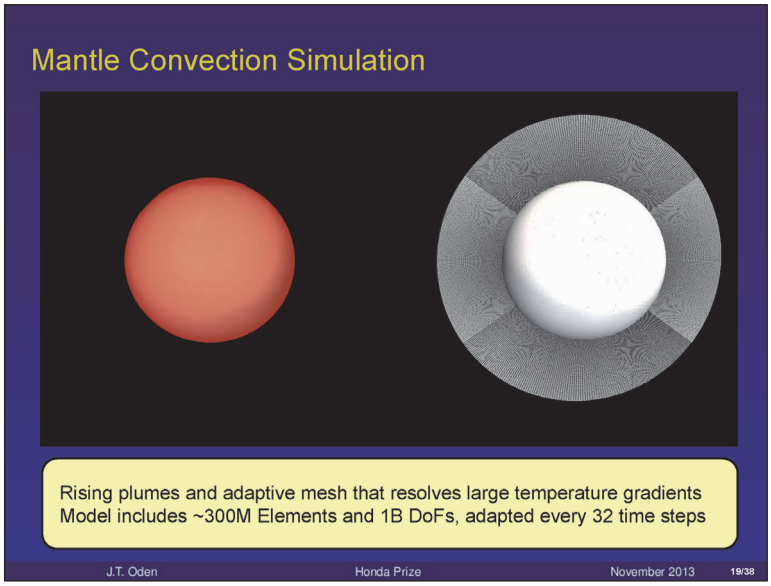
■ 地球のマントル対流のモデリング



図－17

〈図－17〉　これは地核の冷却と、地球のマントル、すなわち粘性を持ちゆっくりと動く、非圧縮性かつ非ニュートン性の流体としてモデル化された、核を覆う球状の殻の形成についての注目すべき計算結果です。このモデルには、運動量収支・質量・エネルギーについての基本方程式が含まれています。このモデルは Science Magazine 紙に取り上げられ、2010 年には Science 紙の表紙にもなりました。実に約 3 億の 6 面体有限要素、約 12 億の自由度を表現し、スーパーコンピューターRanger の、約 5,000～10,000 プロセッサコアを使って解かれました。この計算は 3 年ほど前に、オマール・ガッタス率いる ICES 計算地球科学・最適化センターの研究チームによって行われ、約 100,000 タイムステップを必要としました。

■ マントル対流のシミュレーション

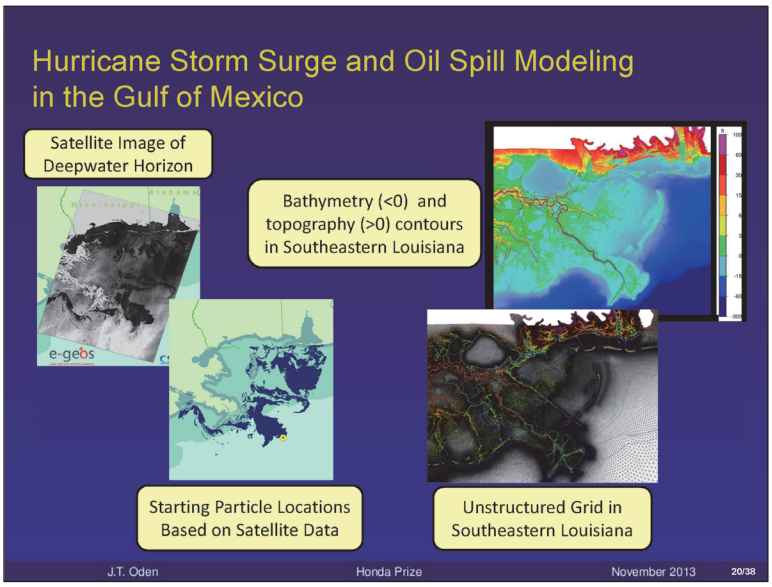


図－18

〈図－18〉　この映像は、地球のマントルが、マントルの中心部から浮き上がって流れている高温の岩のプルームから発生する様子を表現しています（動画上映）。このプルームは湧昇流とも呼ばれ、地殻に沿って上方へと流れています。最終的には冷えて崩壊し、地球の核へと還ってゆきます。この現象を沈降流と呼びます。このように対流セルは、年に数センチという標準的流速で、数億年単位で一往復します。この現象は、プレート運動を、非常に高いレイノルズ数の流れで地球の表面へと向かわせると考えられています。それは非常に不安定で、分解能 10 キロメートルというシャープな熱フロントを必要とし、プレート境界においては 1 キロメートルというさらに精密な分解能を必要とします。この分解能を計算するのは非常に困難です。地球の大きさは約 1 兆立方キロメートルを超えるからです。アダプティブメッシュ改良法は、ひとつの因数に必要な要素数を 5,000 分の 1 に減らすことができます。この映像は、温度勾配の大きいエリアと粘度の高いエリアが、モデルの予測する重要な物理的ディテールの分解能を制御するために、アダプティブメッシュ法を同時に推進する様子も示しています。

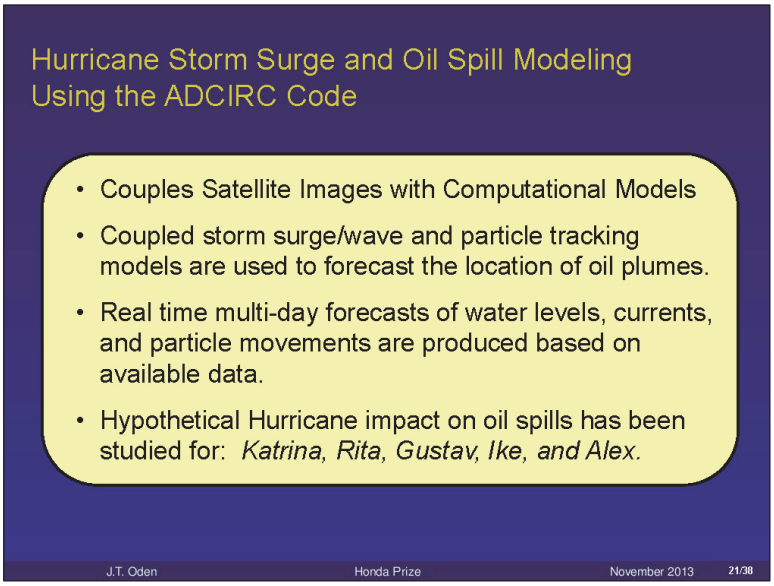
最終的には、プレートの動きと地震との関係や、火山・山脈・長期にわたる海水面の形成の原因となる動的システムのふるまいを予測することにより、プレートテクトニクスの推進力と抵抗力の原理の基礎となっているのは何なのか、また地球全体のエネルギーバランスとは何なのか、という疑問に対しての、私たちの知識と真実との間に横たわる大きな隔たりが埋まることでしょう。マントル対流について理解することは、地球科学における「大いなる 10 の疑問」のひとつになっています。私たちは今、これらの疑問を解き明かす手助けとなるようなモデルを構築しているのです。

■ メキシコ湾でのハリケーンによる高潮と石油流出のモデリング



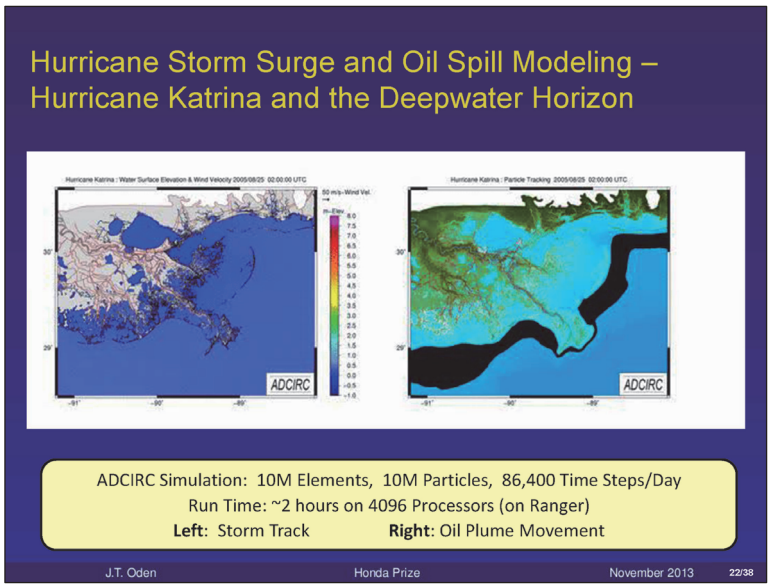
図－19

■ ADCIRC コードを用いたハリケーンによる高潮と石油流出のモデリング



図－20

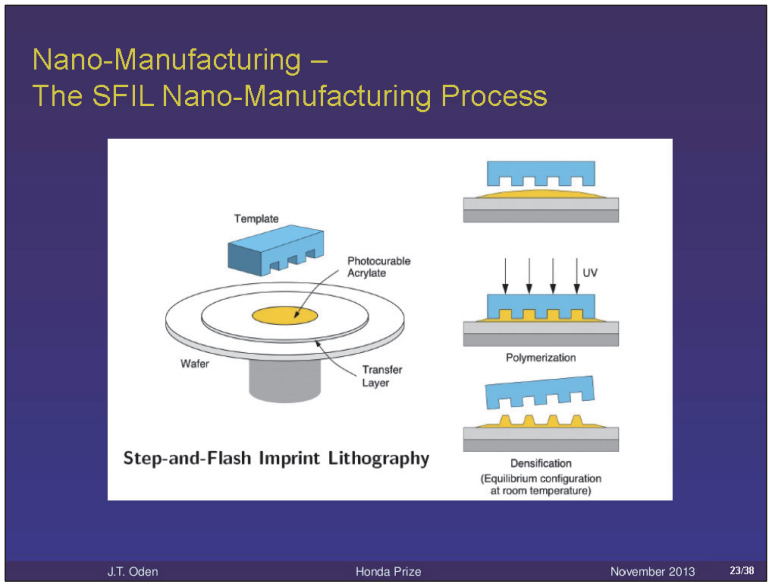
■ ハリケーンによる高潮と石油流出のモデリング―ハリケーン・カトリーナと石油掘削装置「ディープウォーター・ホライズン」



図－21

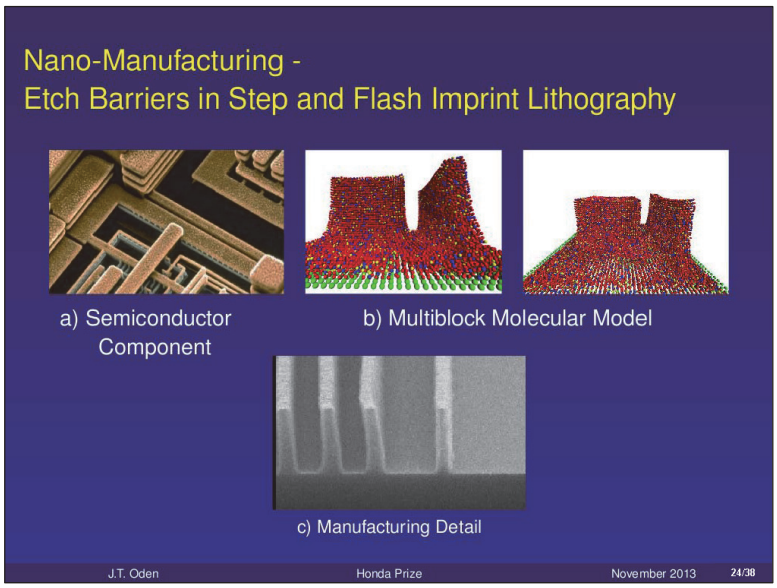
〈図－19～21〉　次に、ハリケーンが引き起こした水文学的結果と、いわゆるハリケーンによる高潮の予測についてご紹介します。同様の計算は、2010 年に、クリント・ドーソン率いる ICES 計算水力学グループによっても行われました。この図は、ルイジアナ州南部に大規模な水害をもたらした 2005 年のハリケーン・カトリーナにおける風ベクトルおよび高潮の輪郭です。（図－19）地勢図と深浅測量は、海岸線と海底地勢図の衛星画像を使って生成しました。図－21 の右側の図は、ハリケーンによる高潮の際に石油流出が起こった場合、流出がどのように広がるかをシミュレートしたものです。海岸線の浸水状況は、ADCIRC という有限要素コードを、約 1,000 万の有限要素メッシュに用いてシミュレートしました。石油流出の様子は、1,000 万のラグランジュ粒子によって表現しました。沿岸部の浸水状況は、1 秒間のタイムステップで、7 日間のスパンでシミュレートしました。四次ルンゲ・クッタ法を使用し、コンピューター上の流れを同じスパンで挿入することによって解を得ました。もしハリケーン・カトリーナが上陸している時に石油流出が起こっていたら、流出はさらに沖合へと広がるとともに、大都市ニューオーリンズのすぐ近くにまで迫っていた可能性もありました。こうした計算を用いることで、深刻な自然的もしくは人工的災害のさいに発生する、沿岸部の浸水に関連した危険について定量化したいと思っています。

■ ナノ・マニュファクチュアリング―原子レベルにおけるエンジニアリング



図－22

■ ナノ・マニュファクチュアリング―ステップ＆フラッシュインプリントリソグラフィにおけるエッチバリア



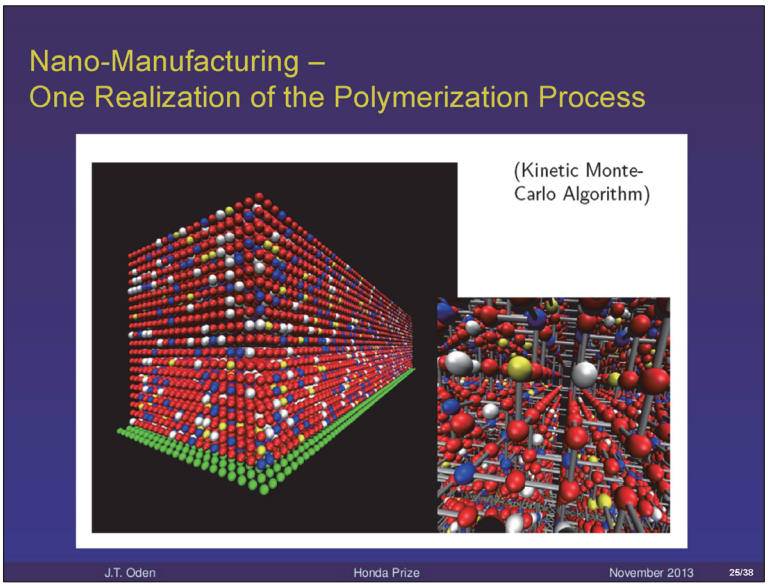
図－23

〈図－22～23〉　コンピューターによるモデリングとシミュレーションによって、電子顕微鏡でしか認知できない規模の世界において、現象を予測したり、製造システムを設計したりすることができます。この種のモデルは ICES の私のマルチスケールモデリンググループによって開発され、薬物送達に用いられるナノ粒子から、今日における半導体デバイスの製造まで、ナノメーター規模の物体の製造に関するシミュレーションに用いられています。現代のスーパーコンピューターの最適速度は、1 つのコンピューターチップに搭載される半導体の数によって決まるということが知られています。そのため、現代のチップの設計における大いなる挑戦は、できる限り小さな半導体を作るためのプロセスを開発することなのです。しかしそのためには、製造プロセスを慎重に設計し、かつモニタリングすることが必要不可欠です。

この図は、ナノスケール（1 メートルの 10 億分の 1、あるいは髪の毛の 1000 分の 1 のサイズの事物を対象とする）でのナノ・マニュファクチュアリングの例です。（図－22）このステップ&フラッシュインプリントリソグラフィと呼ばれるプロセスは、微小な半導体コンポーネントの幾何学的特徴を刻み込むために設計されたクオーツのテンプレートを通して、光硬化性アクリレート溶液を、紫外線にさらされたウエハー上に堆積させる仕組みです。このプロセスに用いられるテンプレートとデバイスには 2,000 万ドル以上かかり、ほぼ完全な幾何学的正確性をもつナノサイズのコンポーネントを作る精密さで設計されなければなりません。

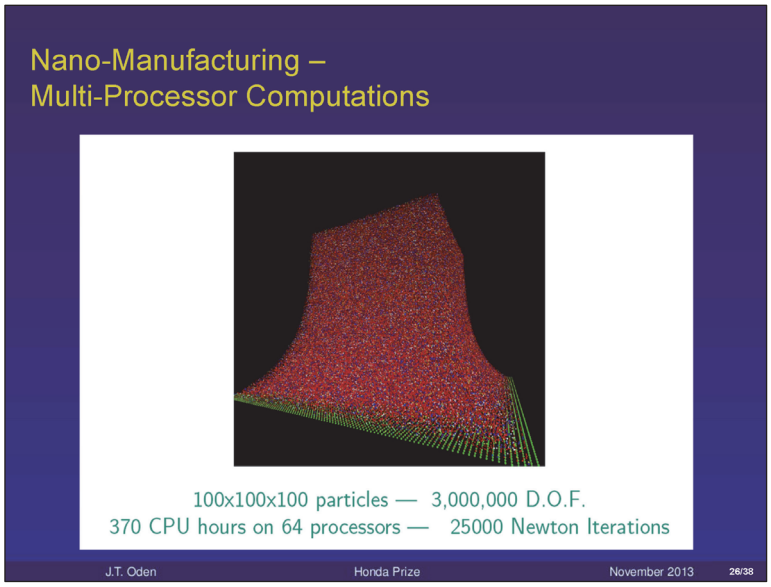
ご覧のような重要なエッチバリアを作るためのプロセスでは、ポリマー素材の巨大な計算モデルを用いてモデリングします（図－23）。このモデルは、主要な半導体コンポーネントを定義するために用いられます。

■ ナノ・マニュファクチュアリング―重合プロセスの具現化



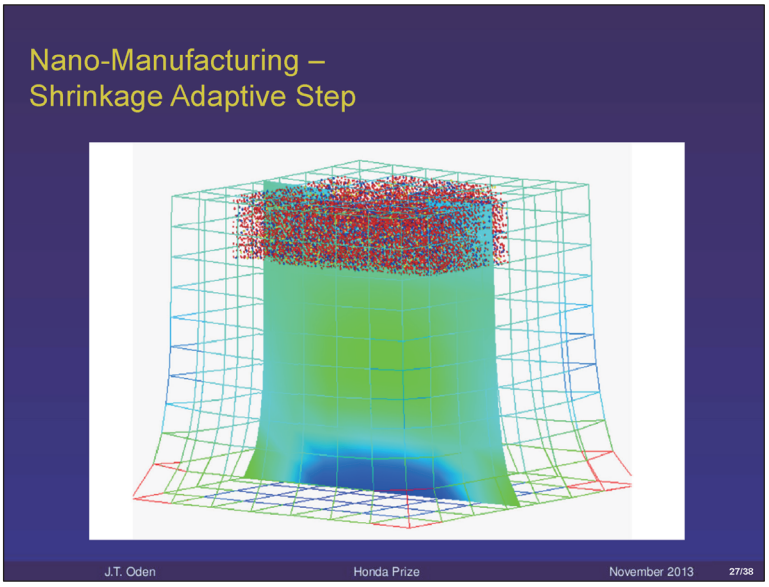
図―24

■ ナノ・マニュファクチュアリング―マルチプロセッサによる計算



図―25

■ ナノ・マニュファクチュアリング―収縮適応ステップ

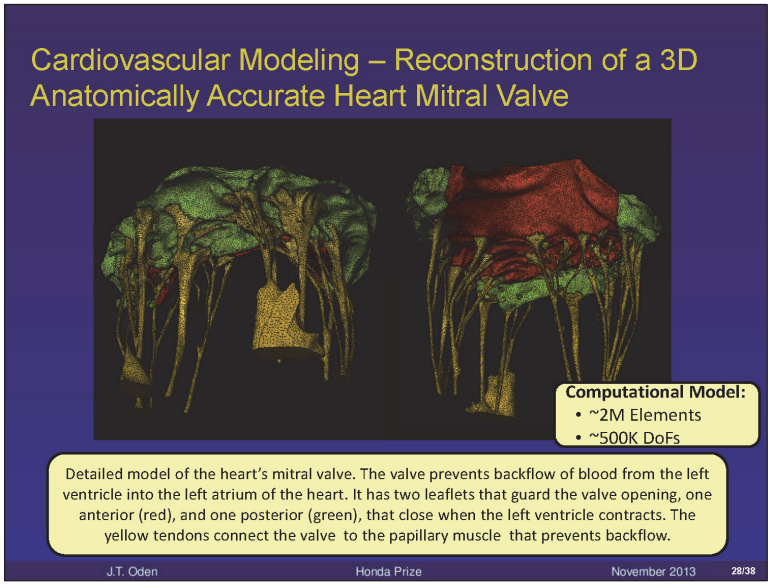


図－26

〈図－24～26〉　これはコンピューターで生成したエッチバリアの分子構造です（図－24)。もっともあり得そうな分子状態を決定するために動的化学反応率を採用している、モンテカルロというアルゴリズムを使用しました。これらの構造はそれから、ご覧の 300 万自由度モデルのような、ポリマーバリアの歪んだ形を計算するための、分子力学モデルへと導入されます（図－25)。

この計算の特筆すべき点は、モデリングの誤差を制御するために、マルチスケールモデリングを用いている点です。そうすることにより、ご覧のように構造のある部分は分子レベルで、他の部分はマクロスケールの連続的レベルでモデリングされているという、ハイブリッド型のモデルとなります（図－26)。この予測結果は、半導体コンポーネントのプロセス設計の最適化と欠陥の最小化に役立ちました。これが、コンポーネントのふるまいの予測における誤差を制御するために私たちが開発した、適応モデリングの一例です。

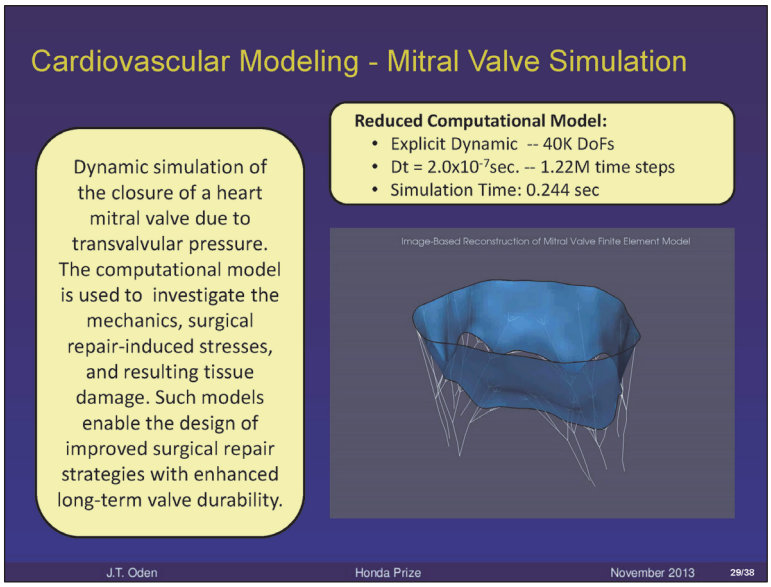
■ 心臓血管のモデリング―3D による解剖学的に正確な心臓僧帽弁の再構成



図－27

〈図－27〉　次にご覧いただくのは、心臓血管における現象の非常に興味深いシミュレーションです。ICES 心臓血管シミュレーションセンターにおいて、マイケル・サックスの指揮によって構築されました。この計算モデルは、心臓僧帽弁を解剖学的に正確に再構成したものです。これは解像度およそ 39.46 ミクロンで、完全なボクセル解像度による、およそ 1,014 スライスのマイクロ CT 画像から構築されました。内部の葉状部は赤色、後部の葉状部は緑色、心臓バルブの腱索と乳頭筋は黄色であることを、50 万ノードと約 200 万の 4 面体要素で示しています。この単純化されたモデルは僧帽弁の動きを表現しており、ここでは約 6,500 のシェル要素に加えて、僧帽弁の腱索には 6 面体要素を使用しています。計算には 24 のコアを使用しました。

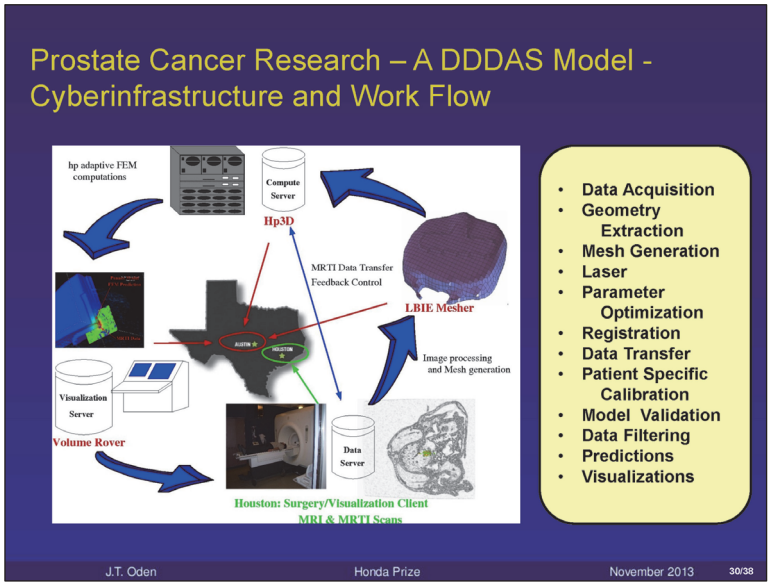
■ 心臓血管のモデリング―僧帽弁のシミュレーション



図－28

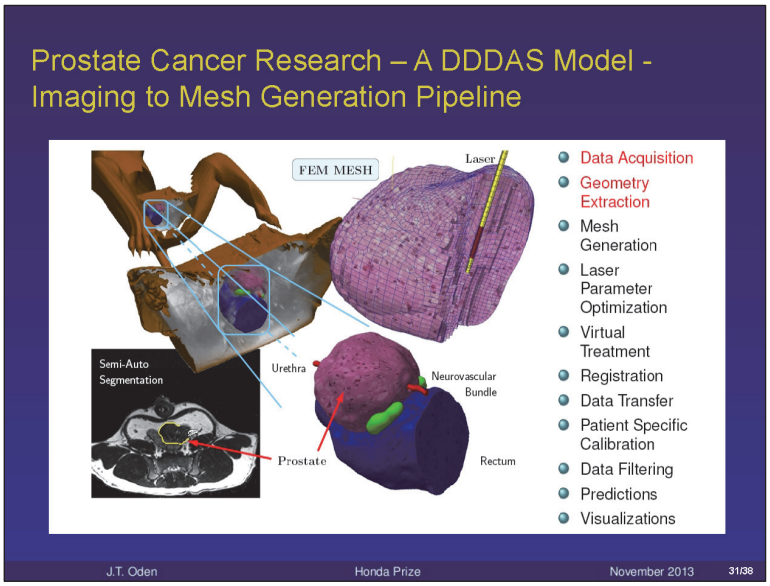
〈図－28〉　ここでは、僧帽弁のモデリングおよびトランス弁圧による閉鎖を見てみましょう。体外実験データを用いた計算モデルの徹底的な検証による、ローディングとエンディングの様子です（動画上映）。

■ 前立腺がんの研究―DDDAS モデル―サイバーインフラストラクチャーとワークフロー



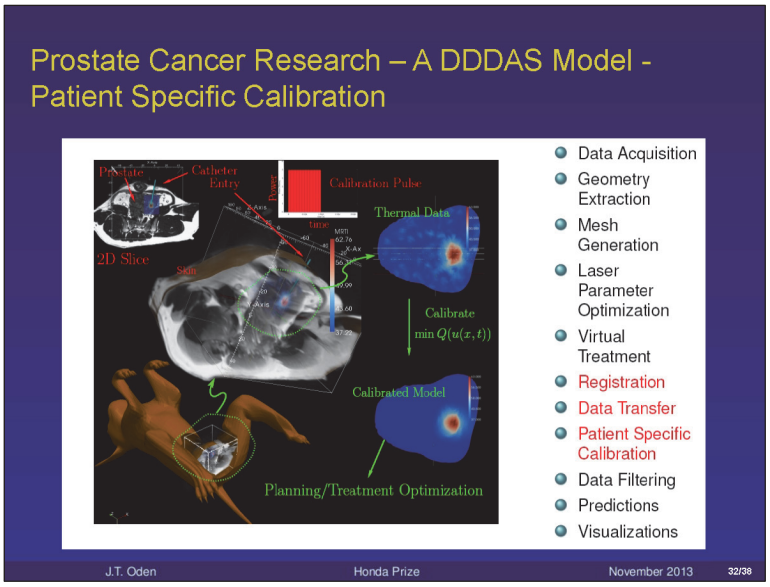
図－29

■ 前立腺がんの研究―DDDAS モデル―メッシュ生成パイプラインの画像化



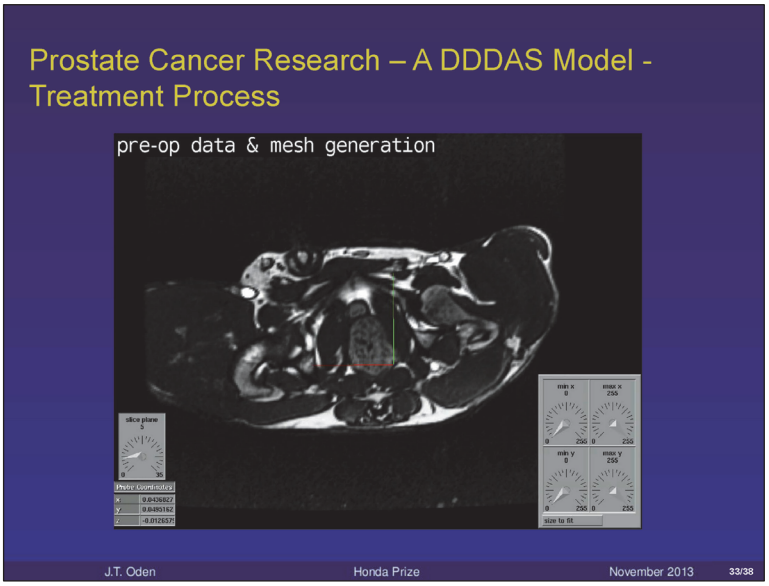
図－30

■ 前立腺がんの研究―DDDAS モデル―患者特有のキャリブレーション



図－31

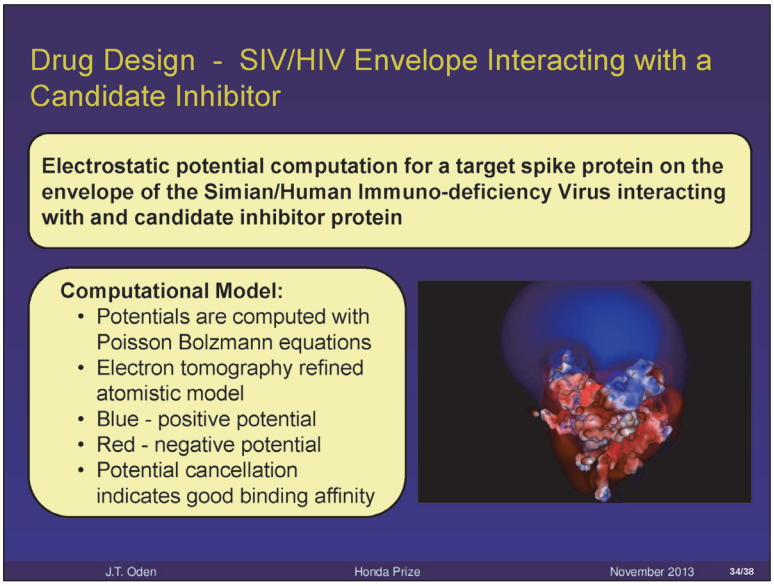
■ 前立腺がんの研究―DDDAS モデル―治療プロセス



図－32

〈図－29～32〉　これは、前立腺がんを扱うために設計された、動的データ駆動型のアプリケーションシステムです（図－29）。患者であるイヌを MRI 装置の中に入れ、患部の前立腺の MRI 画像を撮影し、それを高帯域幅ネットワークを通じて、ICES 内の計算領域に送ります。そこでは有限要素と生体熱伝達モデルを用いて、感染前立腺の 3D 生体熱伝達モデルが作られます（図－30）。これは前立腺の有限要素メッシュにより、がん細胞を破壊するために患部近くにまで挿入されるカテーテルを示しています。この領域の温度を上げるために、レーザーが用いられました。また、細胞の損傷、熱ショックタンパク質、熱剥離の計算モデルを採用しました（図－31）。物理的事象の全体をモデリングすることにより、健康な細胞へのダメージを最小限にとどめるとともに、カテーテル付近のがん細胞へのダメージを最大化することができます。この計算モデルは、このプロセス中におけるレーザーの出力、結果として生じる温度、カテーテルに供給される熱環境、カテーテルの留置の、リアルタイムでの適応制御を可能にしました。続いて、計算モデルと実験データとの非常に良いマッチングが得られたため、使用したモデルの妥当性が証明されました。この研究は、私の ICES のマルチスケールモデリンググループが行いました。

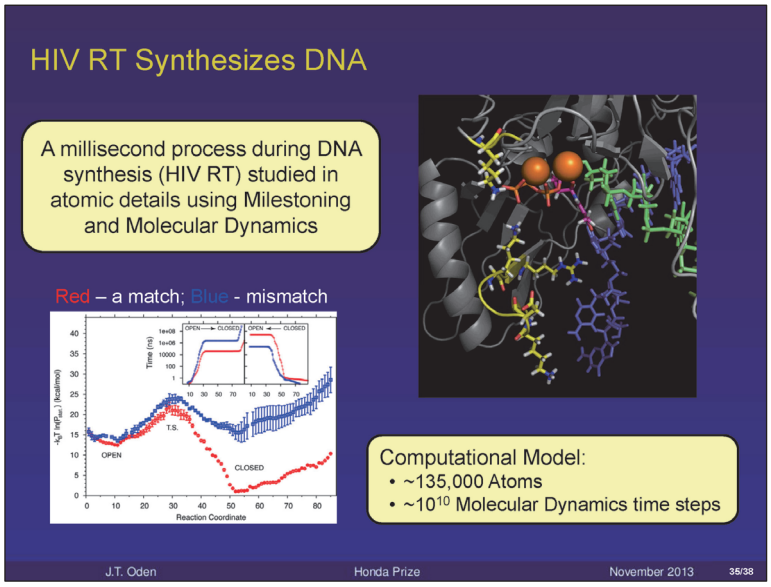
■ 薬物設計―対象抑制剤と相互作用する SIV/HIV エンベロープ



図－33

〈図－33〉　次の例は、ICES 計算可視化センターのチャンドラジット・バジャジのグループによって得られた、対象抑制性プロテイン NIH45-46 と相互作用する SIV/HIV サル免疫不全ウイルスのエンベロープ上にある、対象阻害性プロテイン GP120 の静電ポテンシャル計算の結果です。HIV は GP120 を、サル―ヒト免疫 T 細胞の侵入を得るための重要な警告メカニズムとして使用します。映像では、静電ポテンシャルは、初めに GP120 の精密原子構造モデリングのための電子断層撮影を使い、ポアソン＝ボルツマン方程式を用いて計算しています。青色は正のポテンシャルを、赤色は負のポテンシャルを示しています。また正と負のポテンシャルを解除すると、対象や抑制剤の静電相補性を可視化したり、結合親和性を得るために役立ちます。

■ HIV RT の DNA 合成

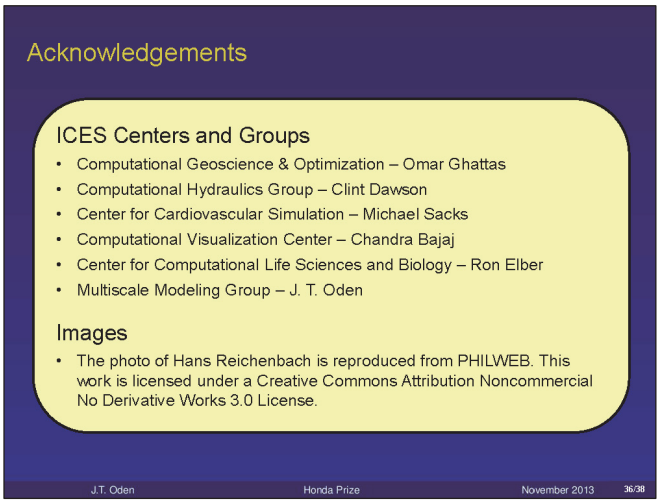


図－34

〈図－34〉　最後の例として、生命の神秘を解き明かすための計算方法についてご紹介しましょう。ご覧いただいているのは、ロン・エルバーの指揮により ICES 計算生命科学・生物学センターで得られた、HIV 逆転写酵素の立体配座遷移のための、最小の自由エネルギー経路です。HIV RT は、テンプレートに従って新しい DNA 分子を合成するという役割をもつ、DNA ポリメラーゼです。ヌクレオチドを閉じる際のプロテインの等角遷移の様子が表示されています。この遷移において、DNA に加えられる正しいヌクレオチドが選択されます。誤った基質では、成功裏に完了することができません。ここで私たちは、プロテインが選択と再生産を行なうことにより、その構造を変える時間が数ミリ秒以内であるということを、定量的に特定することができました。モデルのサイズは、135,000 アトムです。その自由エネルギーのプロファイルの計算には、1 つのタイムステップにつき 10 フェムト秒で、約 100 億の分子動力学的ステップが必要でした。テキサス先端計算センターの Lonestar コンピューターを使って、1 ヶ月以上をかけ、100 のコアを用いて解かれました。映像では、プロテインの活性部位のクローズアップと、プロテインが基質を閉じる際、どのようにその構造を変えるのかを見る事ができます（動画上映）。紫色のグループは、緑色で示された DNA に加えられることになるヌクレオチド基質です。橙色の球体は、反応に必要なマグネシウムイオンで、動いている黄色のグループは正電荷の生命兆候の側鎖で、負電荷のヌクレオチドを閉じており、化学反応の準備をしています。私たちが知りたいと思っているのは、プロテインがオリジナル DNA の正確なコピーを得るために、どのようにして正しいヌクレオチドを選択するのか、ということです。立体配座遷移では正しい基質のみを固定し、シミュレーションでは、結合エネルギーの反応率や、酵素全体の正確性への貢献度を決定する、固定メカニズムを定量化することができます。このモデルは、DNA のふるまいと輸送のメカニズムに関する生命の神秘について教えてくれるものだ、と信じる人もいます。細胞膜は細胞の内と外を隔てていますが、栄養を供給し、老廃物を取り除くためには、やはり細胞膜を越えての輸送が必要になります。輸送メカニズムには、受動的で、膜貫

通タンパク質の助けなしに細胞膜を直接通過するものがあります。受動輸送は、薬物送達とも関連があります。ここでは、単体のアミノ酸トリプトファンの DOPC 細胞膜を横断しての輸送を、適度なサイズの浸透モデルとしています。

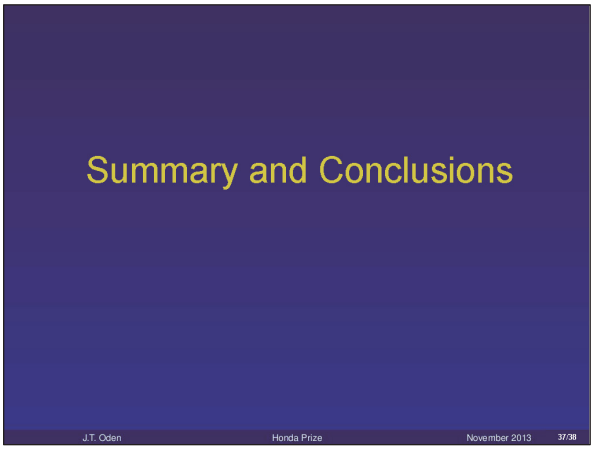
■ 謝　辞



図－35

〈図－35〉　本日ご紹介した例は、協同研究者の方々や同僚の研究者たちが提供してくれたものに加えて、ICES の私の研究チームが作成したものです。

■ まとめと結論



図－36

〈図－36〉　私たちはこの「第 3 の科学」が、未来の科学者やエンジニアを教育する方法や、どのように研究を組織し、また行うのかについて、さらには知識というものをどのように捉え、また獲得するのかについての考え方を間違いなく変革するだろうということを、次第に認識しつつあります。今の大学や多くの産業に広まっている伝統的な知識は、もはや不自然であり、計算科学の勃興によって実現し、また意義を持つことになった学際的な活動を考慮して設計されたものではない、と見なされています。旧来のシステムはいずれ変容するか、永久に失われることになるでしょう。

これから皆さんや皆さんの子供たち、お孫さんたちが学ぶ事になるのは、計算科学によって、古来より科学者やエンジニアが理解できなかった事について研究し、理解できるようになるだろうということです。数世紀前に起こった事象を、正確に研究する事はできるでしょうか？地震や津波の原因となる、発生時の力学的状態を理解することはできるでしょうか？物理系システムの確率的性質を理解し、地球の気候や天気についての長期的予測を立てることはできるでしょうか？素粒子や電子の性質を理解し、それらがどのようにして新たな物質を形成するのかについて、理解できるでしょうか？新薬の設計・操作や、疾病の理解、人間には知覚できないスケールにおける薬物送達など、生物学的なシステムについてはどうでしょう？人間の身体機能、心臓血管のシステム、がんの治療法をモデル化し、理解することはできるでしょうか？あるいは一人の人間の身体機能をマッピングするのに必要な膨大な量のデータを、どうやって収集・蓄積・処理し、使用すればよいのでしょうか？計算科学によって、これらのすべては夢物語の段階から、現実のテーマとなりました。そして未来には、必ずや真の科学技術上の達成がなされる運命にあるのです。

■このレポートは本田財団のホームページに掲載されております。
講演録を私的以外に使用される場合は、事前に当財団の許可を得て下さい。

公益財団法人 本田財団

HONDA FOUNDATION

発行責任者　松　澤　　聡
Editor in chief　Satoshi Matsuzawa

104-0028 東京都中央区八重洲 2-6-20 ホンダ八重洲ビル
Tel. 03-3274-5125　Fax. 03-3274-5103

6-20, Yaesu 2-chome, Chuo-ku, Tokyo 104-0028 Japan
Tel. +81 3 3274-5125　Fax. +81 3 3274-5103

http://www.hondafoundation.jp