

大規模シミュレーションの意義

田中成典 (Shigenori Tanaka)

神戸大学大学院システム情報学研究科計算科学専攻計算生物学講座

本ワークショップ「High Performance Computing の哲学」での議論の呼び水となるようないくつかの視点を提供したい。ここでは、HPC の中でも特に「シミュレーション」に話を限定する。なお、話題提供者は、医療・創薬・分子生物学・ナノバイオなどに関わる計算機シミュレーションを専門としており、今までの経験を踏まえ、できるだけ具体的な例を紹介することで、問題点を明確にするよう心がけたい。

A) 「シミュレーションは科学に何を与える (与えた) か？」

第二次世界大戦後、電子計算機の開発が進み、1950-60 年代には基礎科学の分野で強いインパクトを与えた研究成果が計算機シミュレーションを通して得られた。例を挙げると、フェルミーパスターウラムによる非線形結合振動子の再帰現象、KdV 方程式に基づくソリトン、剛体球モデルによる液相-固相転移 (アルダー転移) などの発見である。しかしながら、いわゆるスーパーコンピュータの開発が始まった 1970 年代以降は、むしろこれらに匹敵するインパクトを持つ科学上の発見が計算機シミュレーションを通じて得られた例は少ないように思える。その間、計算機の能力は時代とともに指数関数的に向上し続けたにもかかわらず、である。これはなぜか？一つの説明は、上の 3 つの例がいずれも、結果としてそれまでの「常識」を覆すことになっており、いわば「仮説反証型」の形式・構造をしていることにあるように思える。科学哲学の分野でよく知られているように、ヒューム以来、帰納的手法に対する懐疑論があり、「仮説は反証・棄却されるためにある」とするポパーの反証主義の主張もある。現代の大規模シミュレーションは、あり余る計算資源があるが故に逆に、「仮説を帰納的に証明しようとする」という立場に知らず知らずのうちに立ってはいないか？

B) 「シミュレーションは何をしていることになるのか？」

水の性質・物性を分子論の立場から理解したいとする。HPC の分野で通常行われるアプローチは、水分子の間に働く力場ポテンシャルを量子化学計算や実験を通じて求め、それを基に分子動力学シミュレーションを行って、多数個の水分子の運動のトラジェクトリーをニュートンの運動方程式から求めて、統計平均により粒子相関構造や熱力学量を計算することである。シミュレーションの結果が実験と一致すれば、「理解」できたと見なされる。一方、できるだけ解析的な立場から同様の結果を得ようとするアプローチもある。カークウッドらの研究に代表されるような、いわゆる積分方程式の方法を用いて、比較的軽い数値計算により相関関数や熱力学量を求める手法も開発されてきた。後者は前者ほどの計算資源を必要としない点で実用的なメリットを有していたが、昨今の計算機の進歩により、前者の半ば「強引な」アプローチがスタンダードになりつつある。こういった変化は、人間が「理解する」ということの意味を変容させてしまうのか？「理解」は一体どこに存在するのか？ Winsberg (2009) が指摘

したように、実験と違って、シミュレーションはモデルを作成するための「背景知識」を必要とする。言い換えれば、予め「本質」がわかっているとシミュレーションは始められない。これは一種の **tautology** ではないのか？また、あまりにも多くのファクターを取り入れた複雑な大規模シミュレーションは、究極的に現実世界の実験と同じになってしまわないか？膨大な出力データを整理しきれない、解析しきれないという問題は様々な分野で既に生じている。捨象し「近似」するからこそ「本質」がつかめるのではないか？「科学の目的は思考の経済である」とするマッハの言葉は重い。

C) 「シミュレーションは「役に立つ」か？」

「シミュレーションは役に立てばよい」とする現実的な立場もある。シミュレーションとは、科学的な理解を深めたり、物事の本質を捉えたりする手段ではなく、何かを創るためのサポートとして使えばよいとする立場である。例えば、創薬の過程においては、1000 万を超える候補物質からの選別を行うために、コンピュータによる「バーチャル・スクリーニング」がしばしば行われる。そこでは精度はコストとの兼ね合いの中で要求され、計算機は「科学的真実」を求めるための道具ではなく、「効率的な試行錯誤を行う」ための補助的手段として用いられる。また、上で述べた複雑な大規模シミュレーションも、いったん現実世界が模倣でき、モデリングできるとなれば、「本質」や「メカニズム」がわかろうとわかるまいと、予測・予言や設計が可能となる。現実世界では実験することが難しい「制御」の可能性を論じることできるだろう。こういった視点は、明らかに「科学」から「工学」への展開を示唆している。

D) 「シミュレーションの定義と意義」

上では、「シミュレーション」という言葉はかなり雑駁に用いてきた。しかしながら、本ワークショップの参加者の間でも、「シミュレーション」をどう定義し、どうイメージしているかには、かなりの個人差があるのではないかと想像する。シミュレーションを和訳すると「模擬実験」といった言葉があり、この言葉は「何かに似せる」というイメージを喚起し、上で述べた「仮説の実証」への利用に心理的なバイアスをかけるように思える。それでは、「コンピュータ・シミュレーション」あるいは「計算機実験」は（より広い）「数値計算」からどういった点で区別されるのであろうか？例として、何らかの自由度の時間発展（微分）方程式を考えてみる。これを離散化して数値積分することを考えるならば、それは「シミュレーション」とは言えそうもないが、いくつかの自由度が結合した系を考え、非線形性が増し、自由度が多くなってくると、次第に「シミュレーション」のイメージが強くなってくる。上で例に挙げた、水の分子動力学計算は誰もが「シミュレーション」のイメージを抱くだろう。どこから差異が生じるのか？「系全体の振舞いを事前に予測できない」という観点には個人差があるように思える。もう少し明確に言おうとするならば、1) 計算の結果が初期条件や境界条件の影響をかなり強く受け、2) その初期条件や境界条件を一意的に決めるのが難しく、3) 従って、計算をどこで止めるべきかが明確ではない、あたりが「シミュレーション」を特徴づけるのであろうか。上で述べたように、シミュレーションは今後もますます大規模化と複雑化に向かい、それに伴って反証の手段から実証の手段への傾向が強まっていくならば、新たな科学的発見の道具としては機能しない虞がある。工学的応用の道具と割り切るか、何らかの発想の転換が必要かもしれない。