

特集に寄せて

“実測と違う”から“実測をしてみよう”へ

Mismatch Between Simulation and Experiment?
Let's Consider Model Systems for Better Interplay!

古山 通久 KOYAMA, Michihisa

九州大学稲盛フロンティア研究センター教授
博士（工学）

この20年間のコンピュータの普及、および計算理論や計算機科学の発展を受けて、シミュレーション技術の実践・活用による成功事例は多数見られるようになったとの実感はあるだろうか。CADなど製品に近いシミュレーション技術を思い描けば、成功うんぬん以前にありふれたものとも考えるかもしれないし、材料に近ければ、成功事例はいくつか知っているな、との感想にすぎないかもしれない。

シミュレーション技術の活用のフェーズは、解明のフェーズと設計のフェーズに分けられる。前者は、手法やモデルの妥当性確認プロセスから始まる。実測される現象や物性などとシミュレーション結果を比較し、目的とする特性や機能を的確にシミュレーションできているか確認するプロセスは、いずれの系でも重要である。このプロセスでつまずけば、次の、何が支配因子であるか明らかにするプロセスに進めず、その次の設計のフェーズには当然進めない。すなわち、シミュレーション技術は役立たないとの評価にまっしぐらである。

シミュレーションの妥当性の確認において何が重要か思いをはせてみていただきたい。さまざまな要因が事例ごとにあるだろうが、機器分析とのアナロジーで考えるとすっきりと理解されるかもしれない。計測の結果は、入れたサンプルのスペクトル以外のものは当然出てこず、装置を決めれば、入れるサンプルの準備が全てである。実動作環境での実構造のオペランド計測ができればよいだろうが、試料ホルダなどの制約から、モデル系の計測とせざるを得ない事例に直面するのが通例だろう。SPring-8のような高精度な計測もできればよいが、必要なスピード感から、精度は劣ってもラボで日々アクセス可能な機器を活用することも往々にして求められる。シミュレーションにおいても手法・計算環境の選択に同様の悩みに直面する。また得られる結果は、手法を決めれば、どのようなパラメータや構造モデルを入力とするかで全て決まると言える。シミュレーションと実測に乖離（かいり）が見られるとき、手法が適切であり計算条件の設定などが適切であるのであれば、入力する物性などに係るパラメータや構造モデル以外に乖離の原因はないだろう。分子シミュレーションにおいては、

理想的な組成や表面・界面構造を仮定することが乖離の要因となることは容易に想像できるし、有限要素解析などでは、多孔構造など複雑な構造を簡易的に表現することやさまざまなものを丸め込んだ数値を“物性”として用いることなどは乖離の要因となる。乖離が見られたときに、研究者・技術者はどのように行動するだろうか？

例えば、シミュレーション技術が役立ちそうにないとは別のアプローチをとる、合わせ込むようにシミュレーション側の検討を継続する、などは20世紀型だと言ったら過言だろうか。実測が何か違ったものを見ているに違いないので精査再測定しようとするのが21世紀型だと言ったら夢想到過ぎるだろう。身の回りのラボにおける現況はどうなっているだろうか？ 現況はともかく15年後、2030年ごろの姿はどうあるのが望ましいと考えるだろう。日本の人口は今より1,000万人減り、高齢者の割合は高くなっている。中国の人口はピークアウトしているがインドの人口が中国を抜いている。そんな世界において競争力を維持しようとしたときに、気合と勤と根性のもづくりには知性を加えるのは必須であろう。シミュレーション技術は人類が蓄積してきた“知識”をコンピュータ上に実装したソフトウェアを用いて、現実の写像であるモデルを用いた仮想実験を可能とする技術である。計算機は年間8,000時間以上働かせてもブラックだ！などと文句も言わず、役所も介入しない。15年後の会社の活力を支える世代がシミュレーション技術を苦もなく活用できれば、未来も明るい。そのような長期的な視点で何ができるだろうか？

現在、シミュレーション技術を活用して活躍している若手研究者・技術者は、きっと2030年の上司、評価者だ。適切な評価基準と評価力を身に付けている。すると残るは、後進の育成だ。シミュレーションと実測に乖離が見られたとき、理想系ではなく実在系のシミュレーションをとの発想に加えて、理想系を模したモデル系で検証のための実測をしようとの提案もしてみよう、などと実測・シミュレーションの良好なインタープレイを支える人材が次々と躍動し始める。そのような姿は素晴らしいことだと思ったなら、そのためにできることは他にもきっとあるに違いない。



*本誌に記載されている会社名および製品名は、それぞれの会社が所有する
商標または登録商標である場合があります。