

●巻頭言

サイエンス (科学) のパラダイム変化を表現する際に、実験、理論、計算およびデータに基づく科学を、それぞれ、「第一の科学」、「第二の科学」、「第三の科学」、「第四の科学」などと呼ぶことがあります。元来、人類は自然現象の観察やモノづくりの経験から直感的に法則性を発見し、一般化して現象の予測に用いる「理論」とすることで科学を構築・確立してきました。二十世紀の中盤以降、コンピュータの発展に伴い、理論を検証する、あるいは数値計算で予測する「シミュレーション」が科学技術を発展させ、さらに、統計や機械学習を用いて実験や計算の大量データから法則や関係性を見つけ出す「データサイエンス」が複雑な問題を解決する新たな手法として注目されています。

現在、シミュレーションは防災・気候変動をはじめとした自然科学分野、工業製品の開発やインフラ構造物の設計といった工学分野、さらには金融、物流等の社会科学に適用され、世の中のあらゆる問題解決に不可欠な技術となっています。これは、時代の変化とともに問題が複雑化・多様化し、実験による理解や理論からの予測といった人海戦術だけでは扱えなくなってきたためと考えられます。さらに、今世紀に入っては、社会全体を長期的に維持させていく「持続可能性 (Sustainability)」が企業活動に求められており、例えば、気候変動対策としてのカーボンニュートラル、限りある資源を効率的に活用するサーキュラーエコノミーなどがその代表的な取り組みです。その実現に向けては、社会構造・産業の変革も重要であり、例えば、脱炭素化に向けたキーテクノロジーの革新やサプライチェーン、インフラ構築の一助として、シミュレーションへの期待も一層高まっていくことでしょう。

一方、これまで半導体の進歩とともに発展してきた最新のコンピュータを駆使しても、解くべき現象・システムを表現する方程式を厳密に計算できない問題も少なからず存在していることも事実です。例えば、量子力学におけるシュレディンガー方程式は、膨大な数の電子を含む系の物質の性質を解くことは難しいですし、流体力学のナビエ・ストークス方程式も、自然科学や工学における乱流や他の現象が絡んだマルチフィジックス等の複雑な問題となると膨大な計算量が要求されます。

その解決手法として上で述べた「データサイエンス」の活用が注目されています。測定データを用いて現実の時空間に近づけるデータ同化やリアルタイムシミュレーション、シミュレーションの入出力データを学習させることで適切な数学的予測モデルを構築し、データを入力すれば高速で結果を導き出すサロゲートモデルなど、データ駆動による新しい手法がトレンドになりつつあります。いまのところ、実用的に活用できる範囲は限定的な技術ですが、今後、こうした技術開発が急速に進展し、シミュレーション×データサイエンスによる問題解決のパラダイムシフトが生まれると想定されます。

当社サイエンスソリューション部は、『「科学」を活かして、お客さまとともに、より良い未来を創造する』をビジョンに掲げ、シミュレーション、データサイエンスの技術開発への挑戦、時代の変化を適切にキャッチアップする科学技術・産業動向のResearchを通じて、当部の「知」と「技」を様々な分野のお客さまへ提供するための努力を継続してまいります。本技報は、これらの取組の一端として「計算科学の最新技術」、「Sustainability Transformation(SX)の実現に向けて」の2テーマについて取り纏めました。皆様のご参考になれば幸甚です。

みずほリサーチ&テクノロジーズ株式会社
サイエンスソリューション部長 米田雅一