

# 計算科学の発展に向けて

情報基盤研究開発センター

西田 晃

平成24年6月6日

# スパコンに期待される成果

- 基礎科学への貢献
- シミュレーション技術の発展と活用
- 計算機工学への貢献

# シミュレーションのあり方

- 初期値問題
  - 時間発展による予測
  - 多項式近似
    - 差分
  - 計算精度には本質的な限界
  - メッシュを細かくしても、ずれは次第に大きくなる
- むしろ周期性を見出すことの方が重要ではないか？
  - GPS 観測網を利用した地震予測
    - 東北地方太平洋沖地震は予測できず
  - 地質学的な痕跡はあった

# シミュレーション技術の現状(1)

- 多項式近似による予測の例
  - 地球温暖化
  - 重力多体問題
- メッシュの細分化は格子QCD計算(場の量子論)のための計算機開発などで重要視されてきたが...
  - 果たしてメッシュを細かくすれば解決する問題か？
  - 例えて言えば、 $\pi$ の計算のようなもの
  - 厳密解がなく、解の検証は難しい
- 検証可能でなければ科学とはいえない

# シミュレーション技術の現状(2)

- 検証手段としての有用性
  - SPEEDIIによるデータに関する議論
- 検証が必要な分野については、解は周期関数に帰着されるべきではないか？
  - すべての運動には周期性がある(保存則が満たされるなら)
    - 天体力学
    - 量子力学
  - 遷移の詳細が分かったとしても、それは途中経過であって最終状態ではない
    - 何が必要な情報なのか、何を知りたいのかを明確にすべき
    - 結果は途中経過に依存しない場合もある

# 今後の方向性について

- シミュレーション技術のあり方について、今一度検証が必要
- 計算科学の方法論の再検討
  - この点は京の開発の際にも問題になった
  - 例えば、格子QCD計算から科学的知見を得ることは可能か？
  - 数学(科学)の本質は、周期性(規則性)の発見にあるのではないか？
  - 周期性(規則性)が見えない場合に、補外に頼るのは正しいといえるか？

# 結論

- シミュレーションは、規則性を見出すための補助的な手段として活用すべき
  - 観測結果に合わせてチューニングすべきではない
  - 計算機は水晶玉ではなく、人知を超えて未来を予測することはできない
- 規則性が見えない場合は、スケールを変えてみる
  - 閉じた系を見つけ、保存則を利用する
  - 計算機パワーはそのために活用すべき