



数理科学の産業応用 シミュレーション技術を例として

高田 章*

Application of Mathematical Sciences to Industry – Computer Simulation as an Example –

Akira TAKADA*

Abstract– Mathematical science is expected to be one of the most fundamental research fields that promote the next-generation scientific and technological innovation. Mathematical science is not staying within the traditional academic nutshell, but is crossing the other scientific and technological fields and industry. Great expectations are put on the industrial applications that enable the Japanese industry to fight the global competition employing the advanced mathematical tools. In this paper, the industry-academia collaboration is discussed in terms of application of computer simulation.

Keywords– mathematical science, industry-academia collaboration, computer simulation

1. はじめに

第4期科学技術基本計画において数理科学の重要性が改めて認識されて以来、数理科学を推進する新しい活動が展開されるようになってきた。

ここでは、企業の一研究者として長年コンピュータシミュレーションをコアとして数理科学の応用を実践してきた立場から数理科学の産業応用についての過去・現在・未来について議論する。数理科学のように諸科学の基盤となる分野は科学に重点を置いてアカデミアサイドの視点から議論されることが多いが、ここでは特に企業現場への応用の視点に重点を置いて議論する。

2. 経済成長期の企業における応用数理

私が会社に入社した昭和52年は戦後ずっと右肩上がりで成長してきた日本経済が第一次石油危機のために最初に転機を迎えた時期に当たる。既に生産現場ではプロセスコンピュータによる自動化が進み、需要予測・生産計画といったOR手法もコンピュータ利用により格段と進歩を遂げた状況にあった。しかしながら現在と比べて利用できる汎用ソフトがほとんど無かったため、社内で教科書を読み理論を勉強しながら自分のソフトを書く

か、米国の国立研究所から公開されていたソースプログラムを入手し、そのアルゴリズムを理解して自分のニーズを満たす機能を付け加えていくという作業が日々の仕事であった。大学時代に応用数理を勉強していたとはいえ、入社早々、輻射伝熱を伴う非定常の熱交換のシミュレーションソフトを、さらにその後ガラス融体の流れ解析のシミュレーションソフトを自作することは大変骨の折れる仕事であった。当時の計算機の能力の制約から、前者のシミュレーションの例では流れと熱の連成解析は無理であったし、後者の例では温度・流れの境界条件はできるだけ簡単にし、計算量が膨大とならないように粗いメッシュを用いたモデル作成が精一杯であった。解くべき方程式は理論からわかっていても、数値解析のノウハウの蓄積が無かった時代であり、解が収束しない、あるいは不安定になるということに悩まされることもしばしばであった。妥当そうなシミュレーションの計算結果を得ることができても、その後もっとも大変な仕事は、シミュレーション結果を定期的に製造現場へ持って行き、生産性向上に資するプロセス最適操作条件等を納得してもらって製造現場で採用してもらうことであった。現象の本質をできるだけ捉えたモデル化を心掛けてはいたが、その当時の計算機の能力では大胆な近似をせざるをえない、その上高温の複雑な現象ではモデルの妥当性を十分に検証するための温度分野・流速分布の測定データを得ることも容易では無い、という状況であった。数理科学分野に限った話ではないが、企業ではきれいな解が求まる理想的な状態だけを研究しては役に立たない

*旭硝子(株)中央研究所 神奈川県横浜市神奈川区羽沢町 1150

*Research Center, Asahi Glass Co., Ltd., 1150 Hazawa-cho, Kanagawa-ku, Yokohama-shi, Kanagawa

Received: 18 January 2014, 28 January 2014

という現実を嫌というほど経験した。現在はその当時と比べて計算機の能力は比較にならないほど向上しているし、数理解析のノウハウも大幅に体系化され、また測定技術も大幅に向上しているが、現象のモデル化がいかに重要であるかと言う点は当時も今も変わっていないように思われる。

自分たちでプログラムを作りながら実現象と対比しながら長い時間をかけてモデルを作り込んでいく作業は、時の流れの早い現在の仕事のパターンと比べると悠長と思われるかもしれないが、シミュレーションがうまくいかないで躓き、それを解決することを繰り返すことによって自分の実力が着実に上がっていったのは確かである。出来合いの市販ソフトを買ってきて使いこなすことは一見大変効率が良いように見えるが、落とし穴がしばしばある。さらに別の観点では数理学は他の分野と比べて多くの作業は頭の中だけで進められることを忘れてはいけない。最終段階で実現象に理論を展開した場合、頭の中で想定していなかった現象が発生し、製品に欠陥が発生してお客様からクレームが出る、あるいはプロセス上のトラブルで大きな欠損を生むようなことがあっては取り返しがつかなくなる。小さな失敗をたくさん積んで、大きな成功に繋がられるような学習・教育方法がもっとも望ましいが、そういう方法論はまだ無い。

3. 産業界コミュニティにおける貴重な経験

私が企業人としてシミュレーション技術の仕事を進めてきた中で、長い活動の歴史を持つ二つの産業界のコミュニティにおける経験を紹介したい。ここで紹介する理由は、産業応用を本気で考えその活動を継続していくためにはいくつか重要な点があると痛感しているためである。

最初に挙げるコミュニティは公益法人「新化学技術推進協会」[1]である。計算機利用技術の化学産業への展開を目指して新化学発展協会（現、新化学技術推進協会）に「コンピュータケミストリ分科会」が設立されたのは昭和61年に遡り、現在私はその主査を務めている。「コンピュータケミストリ」という言葉は設立された当時の先輩方が作った造語で、「コンピューテーション（計算）」だけでなく、情報化学あるいは利用者の使い勝手の部分まで含めて、企業研究者が現場で利用できる実用的な技術を目指すという想いが込められている。

設立5年後には、分科会から高分子ワークショップおよび触媒ワークショップの活動が生まれ、動向調査の段階から将来企業が必要とするソフトウェアツールを検討できる段階まで進んだ。この段階で学べたことは、現状では何ができ、その上にさらに必要なことを追加するためにはどのようなブレークスルーを考えればよいのかを産

学官のメンバーが継続的にじっくり議論することがどんなに重要であるかということであった。

さらなる飛躍としてこれらのワークショップの活動成果がもとなり、平成8年度には産学官の英知を結集した先導研究「計算機材料設計」が採択される段階まで進んだ。最終的には平成10年に一連の活動成果が結実し、分科会メンバーの悲願であった経産省プロジェクト「高機能材料設計プラットフォーム（通称：土井プロジェクト）」をスタートさせることができた。プロジェクトリーダーであった土井正男先生（当時、名大教授）の発案で「シームレスズーミング」という産業界にとっても魅力的な新概念が生まれ産学官が一丸となって世界的にも類を見ない研究プラットフォーム（OCTA: Open Computational Tool for Advanced material technology）が完成した。準備に十分な時間をかけ、企業も本気で取り組んだ結果、開発されたシステムは国プロの事後評価も非常に高かったと聞いている。

通常の国プロと異なる点は、プロジェクト終了後も企業サイドの開発者が中心となりアカデミアからの強力な支援を得ながらOCTAソフトの維持更新に努めると同時に、新化学技術推進協会の高分子ワークショップの場を利用してOCTAの利用技術に関する意見交換、初心者への講習会を継続してきたことであろう。

次に挙げるのは一般社団法人「企業研究会」の活動である「CAMMの会（Computer-aided Materials and Molecular Design Forum）」[2]であり、私は現在その幹事を務めている。こちらは化学企業だけでなく、全産業分野から材料分野（化学、金属、非鉄金属、製薬等）の研究者が参加している。月に一回の月例会では午前中に専門技術ごとの分科会に分かれて調査・計算結果の議論を実施、午後には外部講師による最先端技術の講演会を開催している。年に2回開催される合宿では講師も交えて産学の交流をさらに深める取り組みを行っている。今年で第27期（準備期間も含めると30年あまり）となっている。会がスタートした当時はコンピュータによる材料設計及び分子設計が徐々に実験による材料探索に置き換わっていくという、世の中の大きな期待の中で多くの材料分野の企業のトップが大きな期待を持って活動のブーム期を迎えた。その後数年を経るうちにブームは去り、1,2年で夢のような成果を得ることは難しいという現実が待っていた。企業では大風呂敷を広げて夢を語りそれだけで研究を長く継続させることは許されない。活動を休止せざるをえない会社もあった。ここからが踏ん張り所であった。小さな課題でも企業が直面している課題を一つ一つ解決していく研究フェーズに変わり、派手さは無いが着実に技術を積み上げていくサイクルになった。企業を取り巻く環境は30年の間には山あり谷ありで大きく変化するが、その中で技術を生き残らせ、また産業競争力の

確実なコア技術にしていこうという参加者全員の努力・協力があつたからであり、両方のコミュニティーで共通して言えることは会社の壁を越えた企業人同士の連携関係を築いてこられたからと考えている。

4. 次世代スーパーコンピュータプロジェクト開発による新たな飛躍

文部科学省の「次世代スーパーコンピュータプロジェクト」は2006年から開始されたが、産業界ではそのプロジェクトを応援するために2005年12月に「スーパーコンピューティング技術産業応用協議会（通称、産応協）」を発足させている[3]。この協議会は、その前身である「戦略的シミュレーションソフトウェアの研究開発」（2002年より開始、東京大学生産技術研究所が拠点）を応援するために設立されていた「戦略的基盤ソフトウェア産業応用推進協議会」と、「超高速コンピュータ網形成プロジェクト（通称、NAREGI）」（2003年より開始、国立情報学研究所と分子科学研究所が拠点）を応援するために設立されていた「グリッド産業応用協議会」がオールジャパン体制の産業界の形に統合された結果であった。もともとは国の税金をもとに大学で開発された世界的に優れたシミュレーションソフトウェアが産業界、社会に応用されることなく消えていってしまうのはもったいない、産業界のニーズを開発段階の早い段階でアカデミアに知ってもらい産業応用できるソフトウェアに育ててもらいたいという想いを産学官で共有したことから始まったものであった。私は前身である両方の協議会で運営委員を務めていた関係で、統合後の協議会でも運営小委員会の委員長を務めることになった。

当初は企業の一研究者として自分の専門分野におけるシミュレーションソフトの社内応用を進めつつ、他社の企業研究者と共同で新しいソフトのニーズに関する意見集約とアカデミアへの要望取りまとめが主な活動内容であった。その後、産学官で議論を重ねるうちに産業界にとって三つの柱を同時に強化していくことが必要である、という考えを関係者の間で共有できるようになったことがその後の活動の大きな軸となった。三つの柱とは（1）産業応用を目指したアプリソフト群の開発（2）世界最速のコンピュータ及びそれに関連したインフラの開発とその積極的な産業利用（3）コンピュータと高度な情報を使いこなせる産業界人材の育成であり、今後もその重要性は変わらないと考えられる。アプリソフト群の開発ではそれぞれの現象を取り扱う固有の分野の発展が必要であることは言うまでも無いが、世界最速のコンピュータ及びそれに関連したインフラの開発では計算機科学、情報科学が、またモデル化及び超並列化に対応した数値解析手法の開発では数理科学が大きく貢献してい

る。三本目の柱である産業人材の育成についても基盤技術として数理科学能力の向上が今後ますます重要になってくると考えている。

産応協は現在200を超える機関が会員となり、多様な業種、規模の企業が参加している。その上他の産業界の団体（公益法人計算科学振興財団[4]、特定非営利活動法人バイオグリッド関西[5]、等）とも連携したオールジャパンの活動が繰り広げられている。

これまでの活動を通して実感したことを以下では議論したい。協議会の外からは「産業界」という一括りで「産業界のニーズ」とか、「産業界の人材」という風に見られることが多いが、その点はさらに細分化した議論が必須である。まず、業種によりニーズは様々である。物理・化学・ライフサイエンスにベースを置く材料に関するニーズ、流体・構造等の連続体をベースに置くプロセスに関するニーズ、最適化・情報処理にベースを置くシステム系のニーズを一つの方法論で一緒に議論することはできない。次に、会社の規模、シミュレーション技術の経験の有無によっても状況は大きく異なる。会社の規模は社内に専門人材を抱えることが可能かどうかという点に関連する。専門人材を抱えることができない場合には別の専門家がパートタイム的にシミュレーション業務を行うか、必要な時に他社にアウトソーシングできるような仕組みを作る必要がある。企業内秘密を外に持ち出すことは難しいし、新しく知財に関連した案件が発生した場合の処理も問題になってくる。シミュレーション技術の経験者がいる場合には社内教育である程度カバーすることが可能であるが、そうでない場合は外部で教育する場を作る必要が生じる。たとえシミュレーション技術の経験者が社内にいる場合でも科学技術の流れが早い現代では絶えず世の中の最先端の動向をキャッチアップできる場を作ることが重要である。

次に問題と言えるのは組織の維持と活性化である。企業人であれば人事異動で部署を移動することは日常茶飯事の出来事である。技術開発に関するモチベーションは個々人の熱い想いがベースになるため、人事異動で担当者が交替した場合に単なる引き継ぎでは活動が行き詰まってしまうことも多い。それとは逆に、創設時の人材がそのままずっと将来まで組織を引っ張り新しい人材への新陳代謝が進まないとやはり新しい視点での取り組みがなかなか進まないと言う状況にもなる。専門家がずっとその道を究めるアカデミアの社会との大きな違いであり、この点は産業界の場合は非常に重要なポイントである。

三つ目の重要な点は活動成果を社会全体に拡大していくことが挙げられる。企業の場合、業種毎に出口を意識してターゲットを絞り込み縦割りの活動あるいは国のプロジェクトを実施することがこれまでは多かった。しか

しながら本プロジェクトのようにオールジャパンの企業に有用な活動であれば文科省のプロジェクトからスタートしてもその成果がベースとなり、経産省等の他の新しいプロジェクトに繋がり、国全体の大きな成果拡大に発展していくことが強く望まれる。内閣府の総合科学技術会議では省庁横断的なプロジェクトが開始される動きがあり、今後のさらなる発展形を期待したい。

5. 数理科学分野コミュニティの連携強化

学会会議が中心となり「理学・工学における科学・夢ロードマップ」の改訂作業が進行中（2014年1月現在）である。内容は公開予定のロードマップを見ていただくとして、産業応用に関連した部分のみここでは紹介したい。数学は古代ギリシアの時代に端を発する長い歴史と伝統を有する分野であることは言うまでもないことであるが、第4期科学技術基本計画作成時に、科学技術全体の共通基盤技術として位置づけられ、他分野との連携強化、産業界・社会への貢献が大きく期待されるようになってきている。そういう点では数学をコアに関連分野も含めた数理科学としてさらに発展していくため、数理科学のコアを充実・深化していく軸と、他分野との連携・融合により横展開、分野を拡大していく軸の両方を進めていく必要があるという共通認識を関連コミュニティで共有することができた。後者の、他分野との連携・融合を含む水平展開の例としては、国際的な産業競争力強化のための材料イノベーション、プロセスイノベーションの推進、さらには「ビッグデータ」に代表されるデータ中心科学のような成長分野を進展させること、地震・原発事故で改めて重要性が極めて高くなった予測・リスク管理の新技术を開発・応用していくこと等の、産業的・社会的課題全般に对应していく方向を打ち出している。

今回の数理科学分野のロードマップは日本数学会、日本応用数学会、統計学会連合が力を合わせて作成した。今回のように関連する学会が将来の夢・展望を議論しなから共有できる絵を描き、それを一歩ずつ実現していく活動に繋げていくことは産業あるいは社会へ貢献していく上で極めて重要と思われる。ロードマップの中で数理科学の応用を示すキーワードとして「自然・物質の数理」、「生命の数理」、「人間の数理」、「社会・システムの数理」を掲げ、自然・物質だけでなく、生命・人間の脳・心を取り扱う分野へ発展させることにより、健康で楽しく働きがいのある環境・社会を作るための科学技術基盤構築への貢献を強く意識している。また社会・システムは複雑で多様な現象の集合体であるが、そういう分野の取り組みも一層加速し、安心・安全社会を実現していく科学技術基盤構築への貢献へも強く意識している。これらの方針を実施していくためには、関連コミュニ

ティーの緊密な連携が重要であるし、産業界も今後もっと積極的に参加・協力していくことが重要となっている。

6. 終わりに

英国留学の折に世界で最初の英語辞典と言われるサミュエル・ジョンソン博士編纂の辞典のレプリント版を入手し時々読むようになって以来、巨大な英語辞典である“OED”，日本を一流の文明国とするため政府が後押しして編纂された国語辞典である大槻文彦博士編纂の「言海」，漢字の本国である中国でも重宝されている諸橋轍次博士編纂の「大漢和辞典」のような、人類の至宝に魅せられるようになった。小学生の時に辞書はわからない単語を「引く（調べる）」単なる道具と習ったが、上記の大辞典群は文化・思想に関する「知の体系化」の大きな遺跡であり、辞書は「熟読し知的遺産を採検し発展させる」道具であると思うようになった。人類の至宝である数理科学を産業・社会に応用することも上記の辞書編纂と同じである。別の言い方をすればこれから数理科学応用の新しい大船原に舟を出そうとしていることに例えられる。大航海を乗り切っているために必須なものは二つある。一つは荒波に耐えられる舟（辞典）であり、数理科学応用の新しい理論・手法を開発していく必要がある。もう一つは舟の進路を導いてくれる水先案内人とチームワークの良い船乗りの集団（編纂者）であり、産学官の優秀な数理科学の人材が連携していくことである。今後産業界、社会で一層成果が挙がっていくことを期待している。

謝辞：これまでの活動の中で、産業界の多くの諸先輩、仲間から会社の壁を超えたご指導、ご協力いただいたことをこの場を借りて深謝する次第である。

参考文献

- [1] 新化学推進協会ホームページ, <http://www.jaci.or.jp/>
- [2] 企業研究会 CAMM の会ホームページ, <http://www.cammm.bri.or.jp/camm/>
- [3] スーパーコンピューティング技術産業応用協議会ホームページ, <http://icscp.jp/>
- [4] 計算科学振興財団ホームページ, <http://www.j-focus.or.jp/>
- [5] 特定非営利活動法人バイオグリッド関西ホームページ, <http://www.biogrid.jp/>

高田 章



1955年2月20日生。77年東京大学工学部計数工学科卒業。77年旭硝子株式会社入社、94年University College London PhD取得・復職、2006年より旭硝子（株）中央研究所特任研究員、現在に至る。2004年よりUniversity College London 客員教授兼任、2013年より日本応用数学会会長。