

アドバンス・シミュレーション ・セミナー2025 開催報告

2026年5月発行

<https://doi.org/10.69290/j.001222>

アドバンスソフト株式会社は、我が国における計算科学技術の振興を目的として、幅広い分野の最先端研究を対象とする「アドバンス・シミュレーション・セミナー 2025」を開催いたしました。本セミナーで紹介される多種多様な最先端研究をきっかけに、企業の研究開発を担う技術者の方が新たな視点を持つこと、最先端研究を産業に応用する起点となること、長期的には計算科学シミュレーション分野の裾野が広がること等を期待しております。

| | |
|--------------------------------------------------------------------------|----|
| ・第01回 名古屋大学 堀田 英之 教授 「太陽内部の磁気乱流シミュレーション」 | 2 |
| ・第02回 東京理科大学 犬伏 正信 准教授 「流体乱流における同期現象とデータ駆動型手法」 | 4 |
| ・第03回 東京理科大学 土橋 律 教授 「火災・爆発災害のリスク低減への燃焼研究の応用」 | 6 |
| ・第04回 文部科学省 計算科学技術推進室 栗原 潔 室長 「AI 新時代を切り拓く政府の次世代 HPC 戦略の展望」 | 8 |
| ・第05回 九州大学 久谷 雄一 准教授 「量子技術を応用した次世代流体解析基盤の確立に向けて」 | 10 |
| ・第06回 東京理科大学 桑名 一徳 教授 「火災・爆発現象のモデリングおよび早期異常検知」 | 12 |
| ・第07回 東京科学大学 大上 雅史 准教授 「AI とシミュレーションが駆動する創薬分子設計」 | 14 |
| ・第08回 早稲田大学 山路 哲史 教授 「原子力から考える汎用解析コードの役割と可能性」 | 16 |
| ・第09回 東京大学 中島 研吾 教授 「『計算・データ・学習』融合と富岳 NEXT, その先にあるもの」 | 18 |
| ・第10回 原子力発電環境整備機構 石田 圭輔 グループマネージャー 「地層処分安全評価におけるシミュレーションの活用と展望」 | 20 |
| ・AS セミナー2025 まとめ | 22 |
| ・YouTube 動画&セミナー資料 QR コード一覧 | 23 |

資料の二次配布・抜粋利用を固く禁じます。



アドバンスソフト 出版事業部

第1回アドバンス・シミュレーション・セミナー2025

名古屋大学 宇宙地球環境研究所 教授 堀田 英之 様

「太陽内部の磁気乱流シミュレーション」

開催概要

○講演概要

太陽内部は、乱流的な熱対流と、その乱流によって形成されている磁場で占められている。この乱流と磁場が、太陽内部で観測される大きなスケールの流れ場や11年周期などを司っていると考えられている。太陽の大きなサイズと小さな粘性率から、レイノルズ数は極めて大きくなっており、「高解像度」のシミュレーションをすることが、上記のような現象を理解することに本質的に重要と考えられている。本セミナーでは、京や富岳で実施してきている太陽内部のシミュレーションについて、特に大規模シミュレーションをしたからこそ解決した問題の最新の成果を報告する。

ご講演内容

1. 講演内容

1.1. 太陽物理学の謎と11年周期への挑戦内容

私たちの最も身近な恒星である太陽には、現代科学をもってしても解明されていない大きな謎が多く存在する。名古屋大学宇宙地球環境研究所の堀田先生は、スーパーコンピュータを用いた大規模シミュレーションを駆使し、これらの謎、特に太陽の活動が約11年周期で変動する「11年周期問題」の解明に取り組んでいる。太陽物理学には、大きく分けて3つの未解決問題が存在する。1つ目は、太陽表面で起こる大規模な爆発現象「太陽フレア」。2つ目は、太陽表面の温度が約6000度であるのに対し、上空の太陽大気であるコロナが100万度以上にも達する「コロナ加熱問題」。そして3つ目が、本研究の主題である「11年周期問題」である。

太陽の黒点の数は、約400年にわたる観測の歴史の中で、ほぼ一貫して約11年の周期で増減を繰り返してきた。黒点は非常に強い磁場を持っており、11年周期は太陽全球の磁気活動の周期であると考えられている。なぜ太陽の活動にこのような規則的な周期が生まれるのか、その根本的なメカニズムは未だにわかっておらず、太陽物理学における最難関の問題とされている。

この11年周期の謎を解く鍵は、太陽の内部に存在するプラズマの流れ、すなわち「熱対流」を正確に理解することにある。太陽内部の磁場は、このプラズマの流れによって生成・維持されているため、流れの振る舞いを解明することが、磁場の周期性を理解する上で不可欠である。堀田先生の研究は、この太陽内部の現象を大規模なシミュレーションによって再現し、11年周期の謎に迫ることを目指している。

1.2. 太陽内部シミュレーションの長所と短所

太陽内部のシミュレーションには、他の天文学分

野のシミュレーションにはない、特有の「良い点」と「難しい点」が存在する。最大の長所は、計算に必要な物理法則や入力パラメータに不確定な要素がほとんどないことである。まず、シミュレーションで解くべき方程式は、プラズマの振る舞いを記述する「磁気流体方程式(MHD方程式)」として確立されている。また、計算の初期条件となる太陽内部の密度や温度、圧力といったパラメータも、「日震学」という太陽表面の振動を観測する学問によって、極めて精緻に決定されている。理論モデルと観測の差は0.1%程度に収まっており、入力パラメータの任意性がないため、「もし正しい計算を実行できれば、正しい結果が得られるはずだ」という強い確信を持って研究を進めることが可能である。

一方で、シミュレーションを実行する上では極めて大きな困難が伴う。最も大きな壁は、流れの複雑さを示す指標である「レイノルズ数」が10の14乗という天文学的な値になることである。これは、流れが極めて高度な乱流状態にあることを意味し、エネルギーを持つ渦の大きさが、太陽全体のスケール(数十万km)からわずか1cmという微小なスケールまで、非常に広範囲に及ぶことを指す。この全てを計算することは、現存する、また将来登場すると考えられるいかなるスーパーコンピュータでも不可能である。

さらに、太陽の表面と対流層の底では密度が100万倍も異なるため、流れの時間スケールも数分から数十日と大きく異なる。このような広範なスケールを同時に扱うことは計算上、非常に困難である。これらの課題は、太陽シミュレーションが直面する本質的な難しさとなっている。

1.3. 研究者を悩ませる「熱対流の難問」

太陽内部シミュレーションは、そのパラメータがほぼ確定した2000年頃から世界中で盛んに行われるようになった。しかし、研究が進むにつれて、シミュレーション結果と実際の太陽観測との間に、看過できない深刻な矛盾が生じていることが明らかになった。これが「熱対流の難問(Convective Conundrum)」と呼ばれる問題である。この難問は、主に2つの側面から指摘されている。

1つ目は「差動回転」の問題である。実際の太陽は、赤道域が極域よりも速く自転する「差動回転」をしている。この回転は熱対流によって維持されていると考えられているため、シミュレーションでも再現されるべきである。しかし、2000年代のシミュレーションでは、スーパーコンピュータの性能が向上し、より高解像度な計算を行うほど、結果は実際の太陽とは真逆の「赤道が遅く、極が速く回る」という、似ても似つかないものになってしまった。

2つ目は「熱対流の速度」の問題である。シミュレーションが予測する深部の熱対流速度と、観測(日震学)から見積もられる速度には大きな隔たりがあり、大きなスケールの熱対流においては、シミュレーションの方が3桁ほど大きなエネルギーになってしま

うことがわかった。これは、味噌汁の対流の速さを数十倍も間違えて計算するようなものであり、物理モデルのどこかに根本的な欠陥があることが示唆される。ただし、熱対流のスケールとエネルギーの関係は、シミュレーション、日震学ともに妥当性は十分に確認されていないことに注意する必要がある。

入力パラメータはほぼ完璧にわかっているはずなのに、計算すればするほど現実からかけ離れていく。この不可解な状況は、太陽シミュレーション研究を十数年にわたって停滞させる「闇」となり、その解決が強く求められていた。

1.4. 「富岳」によるブレイクスルー

この「熱対流の難問」という大きな壁を打ち破るきっかけとなったのが、スーパーコンピュータ「京」、そしてその後継機である「富岳」の登場である。堀田先生のグループは、これらの超大規模な計算機資源を最大限に活用するため、従来の手法とは異なるアプローチを取った。従来のシミュレーションで広く使われていた「アネラスティック近似(非弾性近似)」という手法は、音速を無限大と仮定することで、計算コストを抑える利点がある一方で、陰解法により全対通信が必要となるため、大規模な並列計算には不向きで、性能を出しにくいという欠点があった。そこで、堀田先生の研究グループでは、逆に計算コストのかかる音波の伝播も解きつつ、実効的な音速を人工的に抑制すること(結果として、大きな時間刻みを取ることができる)で計算のコストを抑える独自の手法「音速抑制法」を開発した。この手法は、陽解法であるため局所通信のみとなり、富岳のような大規模並列コンピュータとの相性が非常に良く、高い並列性能を達成することが可能となった。

さらに、富岳の性能を限界まで引き出すためのコードのチューニングにも多大な労力が費やされた。富岳は計算能力こそ高いものの、そのアーキテクチャは複雑で、単純にプログラムを移植しただけでは性能が出ない。キャッシュメモリの特性やレジスタの制約などを深く理解し、ループの分割や演算順序の入れ替えといった、普段はやらないような地道な最適化を無数に試みている。その結果、富岳の理論性能の約10%という、この分野では極めて高い実行性能を達成するコードを完成させた。

この強力な計算手法とコードを武器に、従来のシミュレーションの数百倍にも及ぶ54億格子点という超大規模計算を富岳で実行した結果、ついにブレイクスルーが訪れた。計算を進めていくと、それまで再現できなかった「赤道が速く、極が遅く回る」という、実際の太陽と酷似した差動回転の構造が自発的に現れたのである。これは、「熱対流の難問」の1つが、計算の解像度を飛躍的に向上させることで解決可能であることを示す画期的な成果であった。

1.5. 富岳の先へ、今後の研究と将来の展望

富岳による超大規模シミュレーションの成功は、太陽シミュレーション研究の流れを大きく変えた。十数年間「絶対に間違っている」とされてきた状況から、「もしかしたら合っているのかもしれない」という、検証可能な段階へと初めて移行できたのである。もう1つの難問であった「熱対流の速度」についても、シミュレーションの高解像度化と観測見積もり

の見直しにより、両者の差は2桁程度まで縮まってきており、解決の兆しが見え始めている。

しかし、まだ全ての謎が解けたわけではない。現在の計算でも、解像度を上げると結果が変化してしまうため、どの計算結果が最終的な答えなのかはまだ確信できていない。真のゴールは、解像度を上げても結果が変わらない「数値的収束」(大規模な流れや磁場が解像度に依存しない状態)を達成し、観測と完全に一致する結果を得ることである。

今後の課題は、富岳、そして次世代の「富岳 Next」を用いて、さらなる高解像度計算に挑むことである。ただし、単純に解像度を2倍にするだけでも計算量は16倍になるため、計算資源の力だけに頼るのではなく、頭を使った新しいアプローチが不可欠である。例えば、太陽全体を大まかに計算する全球シミュレーションと、特定の領域を極めて詳細に計算する局所シミュレーションを組み合わせ、異なるスケールの現象を繋ぎ合わせる手法の開発などが考えられている。

また、太陽内部のゆっくりとした流れと、太陽表面の数分単位の激しい現象を同時に解き明かし、内部の磁場がどのようにして表面に現れ、黒点を形成するのかを直接シミュレーションすることも、究極の目標の一つである。こうした研究の先に、太陽物理学最大の謎である「11年周期」の完全解明という壮大なゴールが見えてくる。富岳が切り拓いた道をさらに前進させ、太陽の謎に挑む挑戦はこれからも続く。

1.6. 聴講における感想(アドバンスソフト)

堀田先生には、シミュレーション研究者・技術者にとっての夢でもあるスーパーコンピュータを使い倒す超大規模数値シミュレーションを駆使することで、太陽内部の熱対流の難問である差動回転の謎が解き明かされる様子をダイナミックに講演していただきました。個人的には、差動回転がどうして再現できるようになったのか、その物理を理解したいと思いました。例えば、回転系においては回転軸方向に一樣な運動が卓越するといういわゆるテイラープラウドマンの定理がどうして破れるのかなど興味深いです。いつか解説論文を読んでみようと思います。



【ご経歴】

2009年 東京大学。2014年 東京大学大学院理学系研究科修了。2015年 千葉大学大学院理学研究院特任助教(テニュアトラック)。2020年 同准教授。2023年 名古屋大学宇宙地球環境研究所教授。

【ご研究内容】

太陽や恒星の乱流とそれによる磁場生成、活動周期などを大規模シミュレーションにより研究している。

第2回アドバンス・シミュレーション・セミナー2025

東京理科大学 理学部 第一部 応用数学科 准教授 犬伏 正信 様

「流体乱流における同期現象とデータ駆動型手法」

開催概要

○講演概要

流体乱流の理解と予測・制御は、幅広い工学分野において重要である。近年の研究動向の一つとして、乱流中の小規模構造が大規模構造の運動に隷属する「同期現象」が注目されている (Inubushi et al., 2023)。

この現象は、数値シミュレーションを用いた予測の精度向上のために観測データを活用する「データ同化」手法によって調べられており、乱流の数値シミュレーションや機械学習モデルにおいても重要な役割を果たす (Matsumoto, Inubushi, and Goto, 2024)。本講演ではこれらの研究動向を紹介し、今後の展望について議論したい。

ご講演内容

1. 講演内容

1.1. データ駆動と同期現象による数理的説明

本研究の根底には、流体シミュレーションに代表される、極めて高い計算コストを要する科学技術計算上の課題がある。特に、無数の渦が複雑に絡み合う乱流現象の直接計算は、スーパーコンピュータをもってしても膨大な時間を必要とする。このコストを、計算精度を維持したまま劇的に削減することは、工学的な応用はもちろん、学術的にも「非線形問題のクロージャ問題」として知られる根源的な難問に挑むことと等しい。この課題解決のアプローチとして、近年目覚ましい発展を遂げているのが、機械学習やデータ同化に代表される「データ駆動型手法」である。しかし、これらの手法は強力である一方、なぜうまく機能するのか、そしてその性能の限界はどこにあるのか、といった原理的な理解は未だ十分に進んでいない。本研究では、このブラックボックスに「力学系理論」、特にカオス理論の視点から光を当てることを目指す。具体的には、一見すると無関係に見える複数のシステムが、互いに影響し合い、あたかも一つのシステムのように振る舞う「同期 (シンクロナイズーション)」という現象を、統一的なキーワードとして用いる。

例えば、冒頭で示された動画は、本研究の射程を象徴している。これは、観測によって得られた解像度の粗い乱流のデータから、データ同化という手法を用いて、本来の姿である高精細な渦構造をリアルタイムで復元するデモンストレーションである。これは、観測可能な大きなスケールの情報が、観測不可能な小さなスケールの情報を決定づける、一種の「スケール間同期」が起きていると解釈できる。本稿では、この同期現象という数学的な枠組みが、リカレントニューラルネットワークによる時系列予測や、乱流のデータ同化といった異なる問題の核心に共通して存在することを示していく。

1.2. RNN と一般化同期

時系列データの予測やモデル化に強力な性能を発揮するリカレントニューラルネットワーク (RNN) の動作原理を、同期現象の観点から解き明かす。ここでは、RNN の特定フレームワークである「リザーバーコンピューティング (RC)」を具体例として取り上げる。RC は、入力層から中間層 (リザーバー)、およびリザーバー内部の結合重みをランダムに生成・固定し、リザーバーから出力層への結合重みのみを学習対象とする点に特徴がある。学習が出力層の線形回帰のみで完結するため、計算コストが極めて低いにもかかわらず、しばしば高い性能を示す。

この RC の成功の背景を説明する上で、「一般化同期」という概念が極めて重要となる。一般化同期とは、二つの力学系、ドライブ系 (駆動系) とレスポンス系 (応答系) が存在し、レスポンス系がドライブ系から一方的に駆動される状況を考える。このとき、十分な時間が経過した後、ドライブ系の状態 x が決まると、それに応じてレスポンス系の状態 y が関数 $y = \varphi(x)$ のように一意に定まる現象を指す。つまり、二つの系の間に安定した関数関係が構築される状態が一般化同期である。これを RC の文脈に当てはめてみる。予測対象である物理現象 (例: 乱流) のダイナミクスをドライブ系、その観測データを入力として受け取る RC の内部状態 (リザーバーの状態) をレスポンス系と見なす。このとき、両者の間で一般化同期が成立していると仮定する。すると、予測対象の現在の状態 x_t と、リザーバーの内部状態 r_t との間に、 $r_t = \varphi(x_t)$ という関数関係が成立していることになる。RC の学習とは、まさにこの未知の関数 φ を介して、入力 x_t から望みの出力 (例えば、未来の状態 $x_{t+\tau}$) を得るための変換を、出力層で近似するプロセスに他ならない。RC が機能する根源には、このような力学系としての同期メカニズムが存在するのである。

1.3. 同期理論に基づくニューラルネットの改良

前章で述べたように、リザーバーコンピューティング (RC) の学習プロセスは、予測対象の系とリザーバー状態との間に同期によって生じる関数関係を、出力層で近似する行為と解釈できる。従来の標準的な RC では、出力層はリザーバー状態の線形和で表現される。これは、近似対象である複雑な非線形写像を、テイラー展開における定数項と 1 次の項のみで近似していることに等しい。しかし、この写像が真に線形である保証はなく、むしろ非線形であるのが一般的である。したがって、線形近似は RC の表現能力に原理的な限界を課していると考えられる。

この理論的考察に基づき、本研究ではより高次の近似を可能にする手法を提案する。具体的には、出力層の計算にリザーバー状態の 2 次の項 (二次形式) を導入する。これにより、近似対象の写像をテイラー展開の 2 次まで捉えることが可能となり、表現能力の向上が期待できる。重要なのは、学習パラメータ (重み) に対しては依然として線形であるため、学習は線形回帰の枠組みで高速に実行できるという RC の利点は維持される点である。

この提案手法の有効性を検証するため、カオス力学系の代表例であるローレンツ方程式の時系列予測タスクで数値実験を行った。その結果、従来法と同じ、あるいはより少ないニューロン数のリザーバーであっても、提案した二次形式 RC は予測誤差を大幅に低減した。短期的な予測精度のみならず、長期的な軌道が描くアトラクタの形状(統計的性質)の再現性においても、従来法を圧倒する性能を示した。これは、同期現象という力学系の視点からの考察が、ニューラルネットワークのアーキテクチャ設計に有効な指針を与えうることを実証するものである。

1.4. 乱流のデータ同化とスケール間同期

本稿の後半では、テーマを乱流現象に移し、データ同化の背後にある同期現象を解析する。データ同化とは、気象予報などで実用化されている技術であり、物理法則に基づく数値モデル(方程式)と、まばらで不完全な観測データを逐次的に融合させることで、システムの真の状態をより正確に推定する手法である。乱流における中心的な課題は、観測によって捉えることが可能な大きなスケールの流れの情報から、直接観測することが困難な小さなスケールの無数の渦構造をいかにして再構成するか、という点にある。この問題は、大きなスケールの流れが小さなスケールの流れの振る舞いを支配している、という一種の同期現象として捉えることができる。大きな流れを「ドライブ系」、小さな流れを「レスポンス系」と見立てるのである。

この仮説を検証するため、「連続的データ同化(Continuous Data Assimilation)」という手法を用いた。これは、シミュレーションを行う際に、観測データが得られている低波数(大きなスケール)の成分を、常に観測値で上書きし、残りの高波数(小さなスケール)成分をナビエ-ストークス方程式に従って時間発展させるというものである。

三次元乱流の数値シミュレーションを用いた実験の結果、極めて興味深い事実が明らかになった。それは、データ同化の成否が、観測データの解像度、すなわちどこまで細かいスケールの情報を観測できるかという「観測窓」の広さに依存するという点である。この観測窓がある臨界値よりも狭い場合、再構成誤差は減衰せず、同化は失敗する。しかし、観測窓が臨界値を超えて広がると、誤差は劇的に、かつ指数関数的に減少し、やがて観測不可能なはずの微細な渦構造までが正確に復元された。この臨界点の存在は、大きなスケールが小さなスケールを一方的に決定づける「スケール間同期」が、ある条件のもとで成立することを明確に示している。

1.5. 同期の理論的解明とモデル構築への応用

データ同化における同期現象の成功が、観測解像度の臨界値に依存することが示されたが、なぜその臨界値で成否が分かれるのか、そのメカニズムを理論的に説明する必要がある。この問いに答えるため、本研究では「条件付きリアプノフ指数」という指標を計算する理論的フレームワークを構築した。リアプノフ指数は、カオス系において初期値のわずかなズレが時間とともにどれだけ指数関数的に増大するかを示す指標であり、正の値は予測不能性を意味する。条件付きリアプノフ指数は、観測データという「条件」のもとで、誤差がどのように振る舞うかを定量化するものである。

提案したフレームワークを用いて乱流のナビエ-ストークス方程式からこの指数を計算したところ、観測窓が狭い領域では指数は正の値を取り、誤差が増大して同化が失敗することを示した。一方で、観測窓を広げていくと、ある点で指数が負に転じる。これは誤差が指数関数的に減衰し、同期が成立することを意味する。そして、この理論計算によって得られた指数がゼロを横切る臨界点が、前章の数値実験で観測された臨界値と極めてよく一致した。これにより、データ同化の成否を、力学系理論に基づいて定量的に予測・説明することが可能となった。

さらに、この同期の知見は、機械学習を用いた乱流の低次元モデル構築にも重要な示唆を与える。少ない計算コストで乱流をシミュレートするモデルを構築する際、どこまでのスケールを正確に解き、どこからモデル化するかというカットオフの決定が重要となる。実験の結果、このカットオフを同期の臨界点付近に設定すると、モデルが数値的に発散することなく安定し、かつ物理的にも妥当な結果を生成する確率が劇的に高まることが判明した。これは、スケール間同期が成立する領域でモデルを閉じることが、安定なモデル構築の鍵であることを示唆している。結論として、RNNと乱流データ同化という異なる応用分野の問題が、「一般化同期」という共通の数学的構造によって統一的に理解され、その理解が手法の改良や性能限界の解明に直結することが示された。

1.6. 聴講における感想(アドバンスソフト)

昨今、AIは万能の技術であるかのような錯覚を伴った希望的な発言を耳にすることがある。本講演では冒頭に、AIや機械学習は決して万能ではないが、技術そのものは年々着実に進歩していることが強調された。そのような限界を正しく認識し、完全な再現が困難であるという前提に立ったうえで、「ではどこまで可能なのか」「どの程度の精度が期待できるのか」を把握することが重要であるという指摘は、極めて本質的である。

内容は非常に高度であったが、今後これらを的確に理解し、自社ソフトへの応用を通じて日本のモノづくりに貢献していきたいと強く感じた。



【ご経歴】

2008年 東京工業大学 工学部卒、2013年 京都大学 大学院理学研究科 数学・数理解析専攻 博士課程修了(博士(理学))。NTTコミュニケーション科学基礎研究所 研究員、大阪大学 大学院基礎工学研究科 助教を経て、2021年より現職。東京大学 生産技術研究所 リサーチフェロー、ケンブリッジ大学 応用数学理論物理学科 客員研究員(2024-25年)などを兼務。

【ご研究内容】

専門は、流体力学・力学系理論・データ科学。

第3回アドバンス・シミュレーション・セミナー2025

東京理科大学 創域理工学研究科 国際火災科学専攻 教授 土橋 律 様
「火災・爆発災害のリスク低減への燃焼研究の応用」

開催概要

○講演概要

火災や爆発災害の発生防止や被害軽減をおこなうためには、現象を科学的に的確に把握する必要がある。災害の拡大過程は火災と爆発では異なっており、火災では比較的低速の可燃性固体に沿った火炎の燃え拡がり現象、ガス爆発・粉じん爆発では高速の可燃性混合ガス・可燃性浮遊粉じん雲中の火炎伝ば現象が重要な過程となる。

本講演では、これらの現象に関する燃焼学的な検討結果について解説する。また爆発時の爆風の発生現象についても解説する。爆風の強度予測は、保安距離を法律や基準で定める時にも必要となり、その予測精度の向上は重要な課題となっている。

ご講演内容

1. 講演内容

1.1. 安全のための燃焼科学

燃焼は、エネルギーや動力を得るための重要な技術であり、その高性能化や効率化が追求されてきた。しかしその一方で、燃焼は火災や爆発といった甚大な災害の原因ともなりうる。本講演では、土橋先生のこれまで取り組んできた火災・爆発研究による知見に基づき、燃焼現象を科学的に解明し、その知見を安全対策に役立てる「安全への応用」という観点から、燃焼の基礎、災害メカニズム、そしてリスク評価について論じるものである。シミュレーション技術が進化する現代においても、燃焼が引き起こす特異な現象を実験的に捉え、その本質を見極めることの重要性を具体的な事例を通して示していく。安全管理における合理的な手法であるリスク評価の枠組みを理解し、その中でシミュレーションがどのように貢献できるかを考える一助となることを目的とする。

1.2. 燃焼の二つの基本形態

燃焼現象は、燃料と酸化剤の混合状態によって、大きく「予混合燃焼」と「非予混合燃焼（拡散燃焼）」に分類される。この違いが、災害の様相を決定づける。

予混合燃焼は、燃料と酸化剤があらかじめ混合された状態で燃える形態である。理科の実験で使うブンゼンバーナーで、空気の流入量を増やした際に見られる内側の青い炎（内炎）がその典型例である。燃焼には「燃料」「酸化剤」「着火源（熱）」の三要素が必要であり、可燃性混合気に着火源が与えられると、活性化エネルギーの山を越えて高速な反応が開始される。この火炎は、未燃焼ガス中に自ら伝播していく性質を持つ。火炎の厚さは通常 0.1mm 程度と非常に薄く、その狭い領域内で温度は室温から 2000°C 近くまで急上昇し、燃料と酸素が消費される。この「火炎伝播」こそが、後述するガス爆発の根本的なメカニズムとなる。

一方、拡散燃焼は、燃料と酸化剤が別々の領域に存在し、両者が会合する界面で燃焼が起こる形態を指す。ろうそくの炎や、予混合しない燃料ガスを燃やす際の炎がこれにあたる。燃焼する速度は、分子の濃度勾配に従って燃料と酸化剤が互いに拡散していく速度（フィックの法則）に支配されるため、化学反応そのものに比べて緩やかである。このため「拡散律速」の燃焼とも呼ばれる。この形態の火炎は、予混合火炎のように未燃焼領域へ自ら伝播することはない。しかし、火炎からの輻射熱や伝導熱によって周囲の未燃物（固体や液体）が熱分解や蒸発を起して可燃性ガスの供給が増大し、それによって燃焼範囲が拡大していく「燃え拡がり」という現象を引き起こす。これが火災の主な拡大メカニズムである。

このように、燃焼の形態は災害の種類と密接に関連しており、両者を明確に区別して理解することが、現象解明と安全対策の第一歩となる。

1.3. 火災とガス爆発の決定的差異

燃焼による災害の代表例である火災とガス爆発は、前章で述べた燃焼形態の違いによって、その様相と被害の甚大さが大きく異なる。同じ量の燃料が燃焼する場合でも、その燃え方によって単位時間あたりのエネルギー放出速度が全く違うからである。

火災は、主に拡散燃焼によって進行する。例えば引火点が約 50°C の灯油を室温でプールに満たしても、直接火はつかない。しかし芯などを介して着火すると、その上に拡散火炎が形成される。火炎からの熱がまだ燃えていない液面に伝わり、そこから可燃性蒸気を発生させることで、燃焼領域が徐々に広がっていく。これが「燃え拡がり」であり、その速度は毎秒数センチメートル程度と比較的遅い。ヒンデンブルク号の事故映像でみられる現象も、水素ガスが漏れ出しながら空気との界面で燃える大規模な火災（拡散燃焼）であり、予混合状態からの爆発ではなかった。もしあれだけの量の水素が予混合状態で爆発していれば、被害は比較にならないほど大きかったはずである。

対照的に、ガス爆発は予混合燃焼の高速な「火炎伝播」によって引き起こされる。可燃性ガスや粉塵が空気と混ざり合った「予混合気」が形成され、そこに着火源が存在すると、火炎が球状に高速で伝播していく。このとき、燃焼による急激な温度上昇と体積膨張が圧力上昇を引き起こし「爆風」を発生させる。火炎は伝播するにつれてその表面積が急激に増大するため、発熱速度も時間とともに加速度的に増加する。例えば、1kg のヘプタンを燃焼させた場合、火災（プール火災）では毎秒数百キロワット程度の発熱速度で数分間にわたって燃え続ける。一方、気化させてガス爆発を起こした場合では、同じ量の燃料が 1 秒未満で燃焼し尽くされ、最大発熱速度は毎秒 100 メガワットに達する。これは火災の数百倍のオーダーである。この短時間での急激なエネルギー放出が、ガス爆発の被害を桁違いに大きくする。火災の場合は、燃焼時間が長いため、人が避難したり、消火活動を行ったりする時間的猶予があるが、ガス爆発はそれが許されない。この発熱速度の違いこそが、両者の危険性を決定的に分ける要因なのである。

1.4. 燃焼災害のリスク評価手法

化学プラント等における安全管理では、事故シナリオを想定し、そのリスクを定量的に評価する手法が用いられる。リスクは一般的に「事故の発生可能性」と「発生した場合の被害の大きさ」の組み合わせ（多くは積）で定義され、これを評価することで合理的なリスク低減対策を導き出す。

可燃性ガスの漏洩事故を例に事故シナリオを考えてみよう。漏洩したガスに直ちに着火した場合は、拡散燃焼による「ガス火災」となる。これは比較的遅い燃焼であり、被害は限定的である。しかし、着火せずにガスが拡散し、広範囲に可燃性の予混合気を形成した後に着火すると、高速に予混合燃焼が起こり大規模な「ガス爆発」に至り、甚大な被害をもたらす。したがって、ガス火災を発見した場合、元栓を閉められない状況で安易に消火すると、漏洩が続き、最終的にはより危険なガス爆発を誘発する二次災害のリスクを高めることになる。

ガス爆発のシナリオにおける発生可能性の評価には、ガスの「燃焼範囲（爆発範囲）」や「最小着火エネルギー」といった特性値が重要となる。燃焼範囲は、燃焼が継続できる燃料濃度の上限と下限であり、この範囲が広いほど危険性が高い。例えば水素は4～75%と、メタン（5～15%）やプロパン（2.1～9.5%）に比べて格段に広い。最小着火エネルギーは、着火に必要な最小のエネルギーであり、この値が小さいほど静電気のような微小なエネルギーでも着火しやすい。水素の最小着火エネルギーはメタンやプロパンの10分の1以下であり、着火のしやすさも際立っている。これらの特性値は測定装置や条件によって変動するため、標準化された手法での比較が重要となる。

被害の大きさの評価には、「燃焼速度」や「爆発圧力」が関わる。燃焼速度が速いほど、エネルギー放出率が高まり、爆風も強力になる。密閉空間で爆発が起きた場合、圧力は最大で初期圧力の約8倍に達し、その力は1平方メートルあたり数十トンにも相当する。これはほとんどの建物を破壊するのに十分な力である。これらの要因を総合的に評価し、リスクが許容できないレベルにあると判断された場合は、発生可能性を低減する対策（漏洩検知など）や、被害を軽減する対策（圧力放散設備の設置など）を講じることでリスクを管理（リスクマネジメント）することができる。

1.5. 特異現象と自主保安への展開

標準的なリスク評価に加え、燃焼には予測が困難な特異現象が存在し、これらを理解することがより高度な安全対策には不可欠である。特に、火炎の「不安定化」により火炎の乱れが発生し燃焼が加速される現象と、極めて高速な燃焼である「爆轟（デトネーション）」は重要である。

通常、開放空間でのガス爆発（爆燃：デフラグレーション）の爆風は比較的弱いですが、実験では理論予測を大幅に上回る爆風が観測されることがある。これは、伝播する火炎面自体が、流体力学的な要因（ハイドロダイナミック不安定性）などによって自発的に乱れ、シワの多い複雑な形状になるためである。火炎面がシワだらけになると実質的な燃焼面積が増大し、火炎が自己加速する。特に水素は、この火炎の不安定性が顕著であり、燃焼速度が極めて速いため、プロパンなどに比べて数十倍も強力な爆風を生じさせる可能性があることが実験で確認されており、開放空間の爆発でもリスクが重大であることが分かっている。

さらに、この火炎加速が進行し、障害物がある場合

など特定の条件下では、火炎の伝播速度が音速を超える「爆轟（デトネーション）」に遷移することがある。爆轟は、強力な衝撃波を伴う極めて破壊的な現象であり、通常の爆燃とは比較にならない被害をもたらす。配管内などでは爆燃から爆轟への遷移（DDT）が起こりやすく、特に水素やアセチレンのような燃焼速度の速いガスではその危険性が高まる。このため、水素などを扱う設備の圧力放散口の設計では、DDTの発生が否定できないため、既存の計算式が適用できないケースがあるなど、特別な配慮が求められる。

日本の安全管理は、高圧ガス保安法や消防法といった法規制の遵守が中心となる傾向がある。つまり、法規は最低限の規準であり、状況に応じて法規の要求以上の対策が望ましいが、そこまで実行しない傾向がある。米国のFM Globalのような保険会社では、自ら大規模な安全研究を行い、科学的知見に基づいて顧客にコンサルティングを行い保険契約にあたり必要な安全対策を要求している。結果的に事故やその被害を減らしているとのことであり、自らの事業所のリスクを主体的に評価し、法規制に加えてプラスアルファの対策を講じる「自主保安」の重要性とその動機付けの事例を示唆している。燃焼の複雑で特異な現象を深く理解し、シミュレーションなども活用しながら、より高度で合理的な安全管理を目指していくことが、今後の重要な課題である。

1.6. 聴講における感想（アドバンスソフト）

複雑流動現象の解析には、まず、レイノルズ数や流体の構成といった複雑性の原因の把握が重要である。幸いなことに、スパコンの性能の向上に伴って、種々の複雑流動現象のシミュレーションに挑戦可能な世界が訪れている。さらに、混相流や非ニュートン流に関する数値シミュレーション方法自体も年々進化している。CFD解析においてもその結果分析こそが重要であり、背後に隠されている物理をよく理解することで一見複雑な現象自体も理解できる可能性がある。今後5年から10年で複雑流動現象の理解も劇的に進むことが期待される。

土橋先生は燃焼科学分野を代表する研究者であり、数多くの研究成果を発表しつつ、様々な安全政策や事故安全評価に係る検討会・委員会にも参加され、科学的な機構の解明のみならず、損害評価手法の検討などにおいても社会的貢献度は大きい。損害度合いの大きい火災や爆発事故は、そのスケールの大きさ、事象の複雑さから不確定要素が大きい中、科学的知見、工学的な見解から適切な予測、評価手段を講じられる。エンジニアリングに関わる者として、土橋先生の考え方は大きな学びとなっている。



2023年 東京理科大学

【ご経歴】

1983年 東京大学大学院 工学系研究科 反応化学専門課程修了。同年富士写真フイルム株式会社入社。

1990年 東京大学 工学部 反応化学科 助手。

1998年 東京大学 工学系研究科 化学システム工学専攻 講師、准教授を経て、2005～2024年 同教授。

2023年 東京理科大学 国際火災科学専攻 教授。

【ご研究内容】

専門は、燃焼学、安全工学。

第4回アドバンス・シミュレーション・セミナー2025

文部科学省 研究振興局 参事官 (情報担当) 付

計算科学技術推進室 室長 栗原 潔 様

「AI 新時代を切り拓く政府の次世代 HPC 戦略の展望」

開催概要

○講演概要

ポスト「富岳」時代を見据え、国際比較データを交えた科学技術政策の背景から、次世代の計算基盤構築で世界をリードするための日本政府の取組を紹介。米国・中国の動向や欧州 EuroHPC 等の事例を参考に、AI for Science 時代の計算基盤として求められる次世代スパコンの開発戦略の方向性や関連する政府予算等を解説。国内のスーパーコンピュータの連携体制構築、産学官連携によるソフトウェア開発の推進、人材育成や国際連携、量子計算機との連携や生成 AI との融合も含め、計算科学が拓く科学技術成果や社会課題解決、新産業創出のためのポスト「富岳」時代における日本の戦略的展望を示す。

ご講演内容

1. 講演内容

1.1. 日本の国際的地位と構造的課題

日本の科学技術力および経済力は、過去 20 年間で停滞が深刻である。GDP、研究開発費、研究者数、論文数といった主要な指標において、日本が横ばいを続ける一方で、中国や韓国、インドなどの新興国は驚異的な成長を遂げ、欧米諸国も着実に規模を拡大している。特に、質の高い論文（トップ 10%被引用論文）数では日本の順位は世界 13 位まで低下し、博士号取得者数に至っては減少傾向にある。

この背景には、深刻な少子高齢化という構造的問題が存在する。日本の年間出生数は 70 万人を割り込み、世界一の人口となったインド（年間出生数約 2500 万人）とは比較にならない規模まで縮小している。この人口動態は、才能ある人材の絶対数の差として、将来の国力に直接的に影響を及ぼす。社会全体の活力という点でも、日本は若者の起業家精神が低く公務員志望が突出して高い、あるいは自己研鑽や海外での活躍への意欲が低いといった調査結果があり、内向きで停滞した空気感を浮き彫りにしている。また、増大し続ける社会保障費は国家財政を圧迫し、科学技術への投資を困難にしている。

歴史を俯瞰すれば、現代の世界経済の構図は、中国とインドが大きな存在感を持っていた 2000 年前に回帰しつつあり、日本が「日米欧三極」の一角を占めた時代は過去のものとなった。しかし、悲観すべきではなく、日本は今なお世界の中で一定のポテンシャルを持つ。この厳しい現状認識こそが、限られた資源を戦略的に投下し、HPC のような特定の強みを持つ分野で国家の活路を見出すための政策の原点となっている。

1.2. 国家戦略としての計算科学の歩み

日本政府は、半世紀以上にわたり、計算科学を国家の競争力を支える基盤と位置づけ、戦略的な投資を続けてきた。1990 年代、冷戦が終結し世界が新たな競争の時代に入る中、日本では「地球シミュレータ」の開発が始まり、計算科学が国家戦略上、極めて重要であるとの思想が確立された。これは、理論・実験に次ぐ第三の科学の手法として、あらゆる科学技術分野のブレークスルーを支えるという認識に基づくものであった。

2000 年代に入ると、科学技術基本計画の下で HPC 分野への投資が本格化し、2012 年にはスーパーコンピュータ「京」が完成した。「京」の開発は、その構想段階から科学技術の発展のみならず、産業競争力の基盤となることを明確に掲げていた点が重要である。ハードウェア開発のみならず、その上で動作するアプリケーションソフトウェアの開発支援も一体的に行われた。この「Co-design（協調設計）」という思想は、ハードウェアとアプリケーションソフトウェアの両輪で実用的な性能を追求するアプローチとして、その後の日本のスパコン開発の根幹をなしている。

この流れを受けて、2020 年に稼働を開始したのが現在のフラッグシップ機「富岳」である。「富岳」は、単に計算速度世界一を目指すだけでなく、防災・減災、エネルギー問題、健康長寿社会の実現といった、Society 5.0 の社会的課題解決に貢献するという、より広範な要請を背負って開発された。このように、日本の HPC 政策は、常にその時代の国家的課題と密接に連携しながら、ハードとソフト、そして利用促進を一体で推進する形で進化を続けてきた。

1.3. 「富岳」の成果とエコシステムの進化

「富岳」は、理化学研究所と富士通（株）が共同開発したスパコンであり、約 16 万個の高性能 CPU 「A64FX」を搭載する。その最大の特徴は、我が国が独自開発した Arm アーキテクチャベースの CPU を採用した点にあり、このアーキテクチャは現在、世界のスパコンの新たな潮流となりつつある。「富岳」は稼働開始以来、各種ベンチマークで長期間にわたり世界一を維持し、極めて高い稼働率を誇る。

産業利用も活発であり、既に 400 社以上が利用し、その用途も創薬や材料開発、ものづくりにおける大規模シミュレーションなど多岐にわたる。特に、気象庁の「線状降水帯」の予測精度向上や、JR 東海と連携した超電導リニアの空力解析、大阪・関西万博で実証されるリアルタイムのゲリラ豪雨予測など、国民の安全や産業競争力に直結する成果も生み出している。また、昨年には国産大規模言語モデル（LLM）の開発にも活用され、日本の AI 開発基盤としての役割も担い始めた。

さらに「富岳」は、単独のシステムとして存在するのではなく、全国の大学スパコン群と連携する広域的な計算基盤「HPCI」の中核をなしている。クラウドとの連携も進められており、「バーチャル富岳」としてAWS (Amazon Web Services) 上で富岳と同様のソフトウェア環境を利用可能にするなど、アクセシビリティの向上も図られている。そして現在、その機能はさらなる進化を遂げつつある。本年度中には、AI 計算を飛躍的に向上させるための GPU が追加接続されるほか、先月には米国以外では最大規模となる IBM 製の量子コンピュータが「富岳」に直結された。これは、次世代のコンピューティングを見据え、「富岳」を中心としたハイブリッドな計算エコシステムを構築する試みである。

1.4. 次世代機「富岳 NEXT」と未来の計算基盤

政府は、2029年から2030年の稼働開始を目指し、次世代フラッグシップ機、通称「富岳 NEXT」の開発に着手した。その基本構想は、世界の最先端技術と日本の強みを融合させ、国際標準となりうる新たなアーキテクチャを創造することにある。具体的には、富士通が開発する国産の次世代高性能 CPU 「FUJITSU-MONAKA」と、世界最先端の演算加速器（アクセラレータ、主に GPU）を組み合わせたハイブリッド構成を取る。この CPU 開発は経済産業省の半導体戦略とも連携しており、スパコンだけでなく次世代の省電力データセンター等への汎用的な展開も視野に入れている。この構成により、従来の科学技術計算に加え、生成 AI の開発・実行に最適化された性能を目指す。その目標性能は、現在のエクサ（ 10^{18} ）級のさらに 1000 倍にあたるゼタ（ 10^{21} ）級コンピューティングの実現である。

開発においては、「ガラパゴス」化を避け、世界標準の地位を獲得することが至上命題である。そのため、米国エネルギー省（DOE）や欧州とも緊密な国際協調を進める。AI が科学的手法そのものを再定義する「AI for Science」の時代において、「富岳 NEXT」は重要な役割を担う。2024 年のノーベル化学賞が深層学習の基礎理論や AlphaFold のタンパク質構造予測に与えられたように、AI は既に科学発見のプロセスを根底から変えつつある。「富岳 NEXT」はシミュレーションと AI、さらには量子コンピューティングを融合させることで、この潮流を加速し、新材料、気候変動、創薬といった分野で革新的成果を生み出す基盤となることが期待されている。

1.5. 産業利用促進と人材育成への挑戦

「富岳 NEXT」のような最先端の計算基盤を構築するだけでは、国家の競争力には直結しない。その性能を最大限に引き出し、社会実装へとつなげるためのソフトウェア、人材、そして利用しやすい仕組みの整備が不可欠である。政府は、このエコシステム全体の強化にも注力している。

産業界の利用促進策として、RIST（情報科学技術研究機構）が中心となり、企業が「富岳」の利用枠をサービスとして提供する「アプリケーションサービス」制度を導入し、専門的なサポートを受けながら利

用できる環境を整えている。また、小規模なノード数から試用できる「試行課題（ファーストタッチオプション）」など、中小企業を含めた幅広い層が HPC にアクセスできるような取り組みも進めている。

最大の課題の一つは、アクセラレータ（主に GPU）を使いこなすためのソフトウェア開発と人材育成である。GPU で高い性能を引き出すには、分岐を避けつつ膨大なスレッドにデータを供給し続けるなど、アルゴリズムレベルからの根本的な見直しが必要であり、高度な専門知識が求められる。この技術的障壁に対応するため、新たに「次世代 HPC・AI 開発支援拠点形成事業」の公募を開始した。この事業は、企業や大学が連携し、GPU プログラミングに関する体系的な技術支援、コミュニティ形成、教材開発、講習会などを実施する拠点を整備するものである。これにより、国内に数少ない専門家や知見を集約し、産業界も含めた幅広いユーザのソフトウェア開発を支援し、日本の計算科学コミュニティ全体のレベルアップを図ることを目指している。

1.6. 聴講における感想（アドバンスソフト）

日本の現状を冷静かつ的確に分析した上で、計算科学が果たすべき役割を説く本講演は非常に示唆に富んでいた。「富岳」に続く次世代機「富岳 NEXT」では、AI・量子・HPC の融合を図り、国際的な競争力を維持するだけでなく、世界標準を目指す姿勢に、国家としての覚悟を感じた。特に、産業界との連携促進策や GPU 人材育成の課題認識は実務的で現実的なものであり、計算科学を軸にした国家戦略の将来性に強い期待を抱かせるものであった。



【ご経歴・ご研究内容】

2005 年 文部科学省入省、文科省のほか内閣府、外務省、経産省等で政策立案に従事し、日中韓投資協定交渉、iPS 細胞研究拠点整備、AI 戦略会議設立等に携わる。英国留学後、在インド日本国大使館一等書記官、2024 年より文部科学省 研究振興局 計算科学技術推進室長として、「富岳」の次世代となる新たなフラッグシップシステムの開発・整備や、HPCI ネットワークの構築等を推進。

第5回アドバンス・シミュレーション・セミナー2025

九州大学 工学研究院 航空宇宙工学部門 准教授 久谷 雄一 様

「量子技術を応用した次世代流体解析基盤の確立に向けて」

開催概要

〇講演概要

ムーアの法則の限界が指摘される中、量子力学の原理に基づき、特定の問題ではスーパーコンピュータを凌駕する可能性を持つ量子コンピュータが注目されており、世界中で開発競争も激化している。一般に量子コンピュータとは「ゲート型」のものを指すが、それとは全く異なる仕組みで動作する量子アニーリングマシンの開発も進んでいる。量子アルゴリズムは従来の古典コンピュータに対するアルゴリズムとは大きく異なるため、量子コンピューティングの流体理工学分野への応用に関してはまだ模索が始まったばかりである。本発表では、量子コンピューティングの基礎や当該分野の現状、そして我々の最近の取り組みを紹介したい。

ご講演内容

1. 講演内容

1.1. 研究の動機

本研究の主な動機は二つである。一つは次世代解析基盤の確立である。将来的にスーパーコンピュータの性能が物理的限界に達することは避けられない。特に演算による発熱の問題は深刻である。このため、従来の CFD とは異なるアプローチが必要とされる。流体理工学分野での研究例はまだまだ少ない一方で、情報科学や物理学の分野では量子コンピューティングの研究がすでに活発であり、この分野に先駆的に取り組むことには大きな意義がある。もう一つは、ソフトウェアがハードウェアを牽引するという考え方である。良質なソフトウェアがなければ企業はハードウェアに投資しない。量子コンピュータの開発が活発な背景には、現在の暗号技術を破る可能性を秘めた量子暗号の存在がある。イノベーションを起こすソフトウェアが誕生すれば、それがハードウェア開発を加速させる原動力となる。本研究はまさにこの「ソフトウェアからハードウェアを牽引する」という思想に基づく取り組みである。現在の研究は、量子アニーリング、ゲート型量子コンピュータ、量子インスパイアード手法という三つの計算手法と、流体に関するソフトウェアアプリケーションを組み合わせ、その可能性を模索している。

1.2. 量子コンピューティングの種類と特徴

量子コンピュータは大きくゲート型とアニーリング型の二種類に分かれる。ゲート型は、従来のコンピュータと同様に論理演算を模した量子ゲートを用いて汎用的な計算を行う、いわば現在の計算機能をさらに上位へ引き上げる存在である。一方、アニーリン

グ型は量子アニーリングマシン（量子アニーラ）と呼ばれ、組合せ最適化問題に特化している。コスト関数を最小化する組合せを見つけ出すことに限られるが、その処理能力は非常に高く、量子超越を示した研究成果もすでにある。D-Wave 社の最新機種はすでに5000量子ビットを扱える段階に達しており、実用化が進んでいるといえる。

量子コンピュータは依然として完全に制御できず「紙飛行機」に例えられる。紙飛行機は「飛行機の原型」ではあるが、実際の航空機とは構造も仕組みも違う。同様に、現在の量子コンピューティングデバイスは、本格的な量子計算機の姿とは異なる過渡的段階にある。しかし、研究者や企業による投資の増加により、実用化までの期間は当初の予測より短縮される見込みである。最大の強みは量子力学特有の現象を利用する点にある。量子重ね合わせは量子ビットが同時に0と1の両方の状態をとることを可能にし、量子もつれは離れた量子ビットが互いに状態を共有する現象である。これらの性質を活用することで、膨大な組合せの中から最適解を効率的に見つけることができる。また、量子コンピュータは熱効率に優れる。従来のコンピュータが電子の移動によって熱を放出するのに対し、量子コンピュータはエネルギー消費を抑えて計算を行うため、たとえ計算速度が同等であっても価値は非常に高いといえる。一方で課題も多く、演算時のエラーが生じやすい。したがって、エラー訂正を含めた論理量子ビットの数は物理量子ビットの数より大幅に少なく、実用的な計算にはなお多くの論理量子ビットが必要とされる。

1.3. 量子アニーリングによる流体計算への応用

久谷先生の研究グループは、量子アニーリングを流体計算に応用できるかを検討している。量子アニーリングが解くのは QUBO (Quadratic Unconstrained Binary Optimization) もしくは Ising と呼ばれる特定形式の最適化問題であるため、流体の支配方程式をこの形式へ変換する必要がある。ここで着目したのが、流体計算手法の一つである格子気体法 (LGA) である。LGA は格子上的粒子状態を「存在する (1)」か「存在しない (0)」かで表現でき、量子アニーリングとの相性が良いと考えられる。

この手法では、粒子衝突に伴う質量保存則と運動量保存則をコスト関数として表現する。具体的には、それぞれの保存則の式を二乗し、最小値がゼロとなるように設定する。これにより量子アニーリングは、物理法則を満たす衝突後の粒子状態を導き出すことができる。この方式を一次元のチャネル流れに適用した結果、量子アニーリングのソルバー上で流体計算が可能であることが示された。さらに、従来の計算のように時間積分を必要とせず、一度の量子計算で物理的に正しい解を抽出する手法も開発している。量子アニーリングの最大の利点は、問題規模にかか

わずら実行時間が一定になる可能性である。十分な量子ビットが用意されれば、大規模問題であってもわずか 20 マイクロ秒で解を得ることが期待される。

1.4. 量子アニーリングによるブラックボックス最適化

流体工学分野で現実的な応用が見込まれるのがブラックボックス最適化である。これはシミュレーションや実験から得られたデータに基づき、最適なパラメータの組合せを探索する手法である。この手法は、次のサイクルで実行される。

- データセットの作成：

CFD や実験により、パラメータと結果のデータセットを作成する。

- QUBO 行列の推定：

作成したデータセットから、量子アニーリングに必要な QUBO 行列を機械学習的に推定する。

- 量子アニーリングの実行：

推定された QUBO 行列を用いて量子アニーリングを実行し、最適なパラメータの組合せを導出する。

- フィードバック：

得られた最適解候補を新たな実験やシミュレーションのパラメータとして追加し、サイクルを反復する。

適用例として、高速鉄道車両の「微気圧波」低減に関する研究データを用いた。鉄道車両がトンネルに突入する際に発生する音を、車両側面の開口部の開閉パターン（2048 通り）によって低減する問題である。先行研究では CFD により 42 パターンが解析されていたが、この 42 パターンのデータを用いてブラックボックス最適化を試したところ、解析済みのパターンよりも優れた低減効果を示唆する結果が得られた。さらに、QUBO 行列を分析することで「どの窓とどの窓を同時に開けるべきか」といった物理的意味合いを読み取れる可能性も示された。

この手法は航空機の翼の空力形状最適化にも適用可能であり、CFD でさまざまな翼形状と空力性能を計算し、ブラックボックス最適化を行うことで、従来データよりも優れた空力性能を持つ形状を導出できる可能性がある。

1.5. 量子インスパイアード手法と研究の展望

未だ実用的な量子コンピュータ実機は開発されていないため、量子アルゴリズムの検証には量子シミュレーションが使われるが、そこから着想を得た量子インスパイアード手法が存在する。これはテンソルネットワークを用いて従来コンピュータ上での流体計算の高速化・効率化を狙ったものである。この手法では、流体の物理量を行列積状態（MPS）という特殊な形にエンコードし、特異値分解を用いて不要な情報を捨ててデータを圧縮する。圧縮した状態のまま計算を行い、最後にデコードすることで、計算時

間を大幅に短縮できる。

久谷先生の研究グループはこの手法を様々な流体計算手法に応用する研究を進めている。圧縮を行わない場合には従来の計算手法より時間がかかる局面もあったが、適切にデータを圧縮すると計算時間を大幅に短縮できることが分かった。一方、過度の圧縮は重要な情報の喪失を招き、計算結果が大きく乖離することも明らかになった。

本講演では、量子技術に応用した次世代流体解析基盤の確立に向けた取り組みを概説した。量子コンピュータの実機は依然発展途上であるが、完成後に準備を始めるのでは遅い。ソフトウェア側から何ができるかを示すことが今後の開発には不可欠である。当該分野は世界的に注目され、研究者も増加している。流体計算のような厳密な計算には課題が多いものの、創薬や材料開発、ブラックボックス最適化のように最適な組合せを見つける問題には大きな可能性が秘められている。久谷先生の研究グループは今後も量子技術の可能性を最大限に引き出すべく、研究を継続する方針である。

1.6. 聴講における感想（アドバンスソフト）

一般には量子コンピューティングは計算速度の可能性ばかりが強調され、具体的な応用事例の公表が依然として限られている。久谷先生の講演は、現行機が抱えるエラー率を含む性能水準を前提に、流体解析や組み合わせ最適化への適用可能性を具体的に論じた点に特色があり、実務的示唆に富む内容であった。量子コンピュータの本格的実用化が数十年先と見なされる現状においても、アプリケーションの進化がハードウェアの進化を牽引するという視点は、日々のソフトウェア開発に携わる技術者の姿勢にも通底する重要な示唆である。



【ご経歴】

2010 年 University of Southampton, School of Engineering Sciences, Postgraduate Research programme 修了 (PhD). 2011 年 University of Southampton, Airbus Noise Technology Centre, Research fellow.

2012 年より Mercedes-AMG Petronas Formula One Team, CFD aerodynamicist. 2016 年 10 月より東北大学 大学院工学研究科 航空宇宙工学専攻 助教, 2022 年 4 月より同准教授. 2025 年 1 月より九州大学 大学院工学研究院 航空宇宙工学部門 准教授.

【ご研究内容】

専門分野は、空気力学、数値流体力学、量子コンピューティング

第6回アドバンス・シミュレーション・セミナー2025

東京理科大学 創域理工学研究科 国際火災科学専攻

教授 桑名 一徳 様

「火災・爆発現象のモデリングおよび早期異常検知」

開催概要

○講演概要

火災・爆発事故を未然に防ぐためには、火災・爆発現象を科学的に理解することが重要である。そして、多くの火災・爆発現象は燃焼反応を伴う。本講演では、燃焼理論をもとにした火災・爆発現象のモデリング研究例を紹介したい。火災現象には、被害の急拡大を招くものがある。例えば、タバコ火災における燻焼から有炎燃焼への遷移現象や、フラッシュオーバー（屋内火災で燃焼範囲が急拡大する現象）、火災旋風の発生などである。このような現象のモデリングや、早期検知に関する研究について、特に焦点を当てる。2025年には、岩手県大船渡市などで大規模な山林火災が発生した。これらの火災の調査で得た、延焼メカニズム等に関する知見も紹介する。

ご講演内容

1. 講演内容

1.1. シンプルな燃焼モデリング

本講演では、火災や爆発といった燃焼現象のモデリング、および早期検知に関する研究を紹介する。昨今主流の詳細な数値シミュレーションとは異なり、「シンプルに捉える」という観点を重視している。単純なモデルは、現象の本質を大雑把に理解し、基礎的な情報を得る上で有用であると考えている。まずガス爆発や粉塵爆発のモデリングについて述べる。次に、タバコ火災が炎の上がる危険な火災へどう遷移するかを論じる。続いて、屋内火災のフラッシュオーバーや火災旋風といった現象とその早期検知に触れ、最後に山火事の研究を紹介し、スケールを徐々に大きくしながら解説を進める。

1.2. ガス爆発とフラクタル火災

ガス爆発は、燃料と空気が予め混ざった予混合状態で着火し、火災が伝播する現象である。被害の大きさは火災伝播速度に依存し、この速度は火災の面積に比例する。火災は、燃焼による急激な「体積膨張」などの不安定性の影響で「モコモコ」とした複雑なしくちの構造を発達させる。この「しわ」の分だけ火災表面積は滑らかな球形よりはるかに増大し、伝播速度を加速させることが、被害を甚大にする要因である。この火災構造は「フラクタル構造」を持つことが知られ、その面積は半径の2乗ではなく、2.3乗といった2より大きな値（フラクタル次元）に比例して増大する。このフラクタル次元がわかれば爆発被害を推定できるが、大規模な実験や詳細な数値流体学（CFD）による特定は容易ではない。

そこで、よりシンプルなモデルとして、火災界面の運動を記述する「シバシンスキー方程式」を採用し

た。この方程式には体積膨張の効果を表すパラメータ γ が含まれており、体積膨張が引き起こすフラクタル的な火災形状を再現できる。このモデルの最大の利点は、数学的な変数変換により、パラメータ γ の影響を消去できる点にある。これは、ある一つの γ の値で計算を実行しさえすれば、その結果を変数変換するだけで、あらゆる膨張率に対するフラクタル次元を理論的に導出できることを意味する。この効率性は、条件ごとに膨大な計算を要するCFDにはない強力な利点である。この手法で導出した膨張率とフラクタル次元の関係は、過去の研究結果とも非常によく一致した。

1.3. 粉塵爆発と離散的燃焼

粉塵爆発は、燃料が固体の微粒子であるという「つぶつぶ感」の存在がガス爆発と決定的に異なる。この現象をモデル化するため、粉塵の集まりを連続的なガスのように見なす「連続体モデル」と、個々の粒子を「点の熱源」と見なす「点熱源モデル」という二つのシンプルなモデルを検討した。

計算を極限まで単純化するため、燃焼による「熱膨張を無視」し、化学反応を「着火温度」と「燃焼時間」という単純なルールに置き換えた。これにより、解くべき方程式は実質的に「熱方程式」一本になる。このモデルで解析した結果、粒子の「燃焼時間」が現象の様相を大きく左右することがわかった。燃焼時間が（熱の伝わる時間に比べて）短い場合、熱が周囲に拡散する暇がなく、温度分布は「つぶつぶ感」が際立つ。逆に燃焼時間が長い場合、温度分布は滑らかになり、「連続体モデル」の結果と近くなる。

この簡易モデルは、微小重力下のアルミニウム粉塵の実験データとも比較し、伝播速度をある程度再現できた。条件によっては、つぶつぶ感を考慮した点熱源モデルの方が実験値との適合性が高いことも確認された。さらに、このモデルは粉塵爆発における重力の特異な影響も明らかにした。ガス燃焼とは異なり、重い粒子は伝播方向に影響する。火災が下向きに伝播する場合、粒子が火災から逃げるように沈降するため燃焼は不利になり、「消炎限界」が現れる。逆に上向き伝播では粒子が火災に降ってくるため有利となり、明確な限界が現れにくくなる。このモデルは爆発下限濃度の予測にも応用可能であった。

1.4. 燻焼から有炎燃焼への遷移

火災の発生段階として、タバコ火災に着目する。タバコの火は、まず「燻焼（くんしょう）」と呼ばれる炎の上から表面燃焼から始まる。この際、煙（可燃性ガス）は発生するが燃えていない。しかし、ある条件がそろると、この煙に火が付き、「有炎燃焼（ゆうえんねんしょう）」、すなわち炎を上げて燃える状態へと「遷移」する。この遷移が火災を危険にするため、遷移条件の解明が重要である。この現象を研究するため、タバコを太くした「棒炎（ぼうきゅう）」を

用いた基礎実験系を構築した。異なる酸素濃度の空気を送り込み、どの濃度で有煙燃焼へ遷移するかを観測した。この実験系を、一次元の対向流モデルとして単純化した。固体の「熱分解反応（ガスとチャー（char）を生成）」と、チャーの「表面燃焼（燻焼）」の二つを考慮した。モデルの方程式を解き、酸素濃度と表面温度の関係（解曲線）を求めた。その結果、燻焼には酸素濃度が一定以下で燃焼が停止する「消炎限界」が存在することが示された（S字状カーブ）。さらに、気相（煙）の燃焼反応もモデルに組み込むと、酸素濃度がある値を超えたところで、それまで存在していた燻焼の解が突然消滅する「分岐点」が見つかった。これが、燻焼が維持できなくなり有煙燃焼へ移行する「遷移限界」を理論的に示すものである。複雑なCFDシミュレーションでは特定が困難な「不安定解」や、こうした「限界条件（分岐点）」を明確に導出できることこそが、シンプルなモデル解析の大きな利点であると言える。

1.5. 火災の早期検知と山火事

最後に、火災がさらに拡大した状況と、その早期検知、そして大規模火災について述べる。

屋内火災において最も危険な現象の一つが「フラッシュオーバー」である。これは、火災が徐々に燃え広がるのではなく、ある瞬間に部屋全体が爆発的に炎に包まれる現象を指す。このメカニズムは、火元から出た高温の煙が天井付近に蓄積し、天井全体が均一に高温になることに起因する。この高温の天井層から床面へ向かって放たれる強力な「輻射熱」が、まだ燃えていない可燃物を一斉に発火させるのである。このフラッシュオーバーが発生する「予兆」を早期に検知できれば、避難や消火活動において非常に有益である。この検知手法を開発するため、まず火災シミュレータ（FDS）や、さらに単純化したモデル方程式を用いて、フラッシュオーバーが「起きる条件」と「起きない条件」の時系列データ（発熱速度など）を多数生成した。これらのデータをAI（機械学習）で判別させることも試みたが、うまくいかなかった。そこで、別の物理的な特徴量に着目した。一般に、システムが安定な状態から不安定な状態へ移行する「分岐点」に近づくと、その挙動に見られる「ノイズ（ゆらぎ）」が増大し、かつ、そのゆらぎに「自己相関性（過去のゆらぎが未来に影響する性質）」が強まることが知られている。

この知見に基づき、発熱速度の生データだけでなく、そこから抽出した「ノイズ成分の標準偏差」と「自己相関関数」を監視する指標を作成した。FDSのシミュレーションデータにこの指標を適用したところ、発熱速度が急上昇してフラッシュオーバーが発生するよりも「かなり前」の段階で、ノイズの標準偏差が明確に増大し始めることが確認された。これにより、現象の急変を早期に検知できる可能性が示された。

同様の手法は「火災旋風（炎の竜巻）」の検知にも応用した。火災旋風は、関東大震災などで甚大な被害をもたらした現象であり、局所的な燃焼の激化や「飛び火」の広域化を引き起こす。実験室で、同じ設定でも火災旋風が「起きる時」と「起きない時」がある条件を再現し、その際の火災の高さを時系列で計測し

た。

その結果、火災がまだ高くなっていない実験開始直後（例えば20秒時点）でも、火災高さのデータに含まれる「ノイズ成分の標準偏差」と「自己相関」を解析すると、「起きる時」の方が「起きない時」よりも両方の値が明確に高く、その後の旋風の発生を統計的に見破ることができた。

最後に、最もスケールの大きな火災として「山火事」の研究を紹介する。米国西海岸などで深刻化している山火事は、2025年（講演当時）には岩手県大船渡市や愛媛県今治市など、日本でも大規模なものが発生し、看過できない問題となっている。山火事には、地面の小草や落ち葉が燃える「地表火」と、樹木の上部まで燃え上がる「樹冠火」があり、後者は飛び火を伴うため鎮火が極めて困難となる。

大船渡市の火災跡地の調査を行った結果、地形の影響が極めて大きいことが明らかになった。衛星写真や現地調査から、特に「尾根筋」や「登り斜面」で燃焼が激化していることが強く示唆された。現在はまだ調査段階であるが、今後はこれらの地形効果のメカニズム解明や、延焼シミュレーションモデルの開発を進めていく計画である。

1.6. 聴講における感想（アドバンスソフト）

桑名先生は火災・爆発現象の科学および防災工学の最前線で研究・教育に取り組む、第一線の研究者で、「燃焼科学」を基盤とし、粉塵爆発、ガス爆発、延焼火災、火災伝播など、スケールの異なる火災・爆発現象を対象とし、定量的リスク評価手法の構築に取り組んでいる。実験室から大型スケール、さらには数値シミュレーションを併用しながら、「いかに火災・爆発が起こるか／起こったらどうなるか」を多面的に解明されている。

本セミナーでも燃焼モデル構築の考え方、粉塵爆発では実現象を再現するのに有意な物理モデルについて解説された。また、大災害につながるフラッシュオーバーではその予兆である「ノイズ（ゆらぎ）」を早期に検知することにより、予測の可能性があることを示された。そのノイズは数値シミュレーション（例えばFDS）で確認することができ、安全工学の観点で非常に興味深い内容である。



【ご経歴】

2000年に東京大学大学院修了、博士（工学）。2000年から2006年まで米国ケンタッキー大学で研究員、2006年から2009年まで東京大学で特任講師、特任准教授、2009年から2021年まで山形大学で准教授

（2019年から教授）、2021年4月から現職。

【ご研究内容】

タバコ火災や火災旋風、ガスおよび粉塵爆発など、さまざまな火災・爆発現象のモデリングや早期異常検知技術に関する研究を行っている。

第7回アドバンス・シミュレーション・セミナー2025

東京科学大学 情報理工学院 情報工学系 准教授 大上 雅史 様

「AIとシミュレーションが駆動する創薬分子設計」

開催概要

○講演概要

深層学習に代表される AI 技術の生命科学や化学領域への応用は、近年爆発的な広がりを見せている。AlphaFold (特に AlphaFold2) の登場は、タンパク質立体構造予測に関係する研究者のみならず、生物学や情報学の研究者が広く注目する一種の「祭り」を引き起こした。現在では、複合体構造予測、タンパク質-ペプチドドッキング予測、人工タンパク質設計、薬剤スクリーニングへの応用など、AlphaFold をベースとした予測技術の発展が急速に進んでいる。

本セミナーでは、AlphaFold を軸に、情報学・AI・シミュレーション計算が分子設計・創薬へもたらす革新の可能性について、特に低分子化合物設計、ペプチド設計、抗体設計、タンパク質間相互作用予測などを題材として取り上げる。

ご講演内容

1. 講演内容

1.1. 創薬の課題と AI の台頭

AI とシミュレーションが駆動する創薬分子設計について、昨年のノーベル化学賞の主題である AlphaFold やタンパク質デザインの研究と関連させながら、我々の研究を紹介する。

医薬品開発は、従来の低分子医薬に加え、抗体医薬、ペプチド、核酸医薬、さらには遺伝子治療や細胞治療など、その手段が著しく多様化し、複雑性が増している。サイズや作用機序が異なるため、開発プロセスも個別に最適化する必要が生じている。一方で、開発の成功確率は 3 万分の 1 とも言われ、莫大な時間とコストを要する。特に、既存の薬で治せない「アンメット・メディカル・ニーズ」に応える創薬は、過去の努力で達成できなかった難易度の高い疾患が残されているため、年々そのハードルが高まっている。

この状況下で、AI とシミュレーションの役割が急速に重要視されている。これらの技術は、開発初期段階で有望な「薬の種」を効率的に設計・選別し、後半の動物実験や臨床試験の成功率を上げることを目指す。特に近年は動物福祉の観点から動物実験を減らすよう求める動きが強く、2025 年には米国 FDA (食品医薬品局) が、AI、シミュレーション、または臓器チップ (organ-on-a-chip) などを活用し、動物実験を代替していく方針を出した。この流れは産業界でも加速しており、アストラゼネカのようなメガファーマが Microsoft や Google といった IT 企業と大規模な戦略的業務提携を結んでいる。AI が何らかの形で介在した医薬品候補化合物が臨床試験に入るケースは年々増加しており、AI 技術の浸透は業界全体の大きな潮流である。

1.2. タンパク質構造予測の衝撃

大規模言語モデル (LLM) に代表される近年の AI

技術は、要約、翻訳、生成など多岐にわたるタスクで成果を上げている。AI が特に成功してきたのは、囲碁や将棋、ゲームのように「勝敗」や「成否」が明確で、大量のデータを安価に生成できる分野であった。

対照的に、創薬を含む自然科学は AI が苦手とする分野であった。その理由は、予測の正しさを検証するために時間とコストのかかる「実験」が必要であり、データ収集が困難であるためだ。また、企業の機密データが多く、AI の学習に使える公開データが不足している点も課題であった。この状況を一変させたのが、2024 年のノーベル化学賞の対象となったタンパク質立体構造予測 AI「AlphaFold」である。タンパク質の立体構造、特に薬が結合する「ポケット」の形状を知ることが、創薬 (Structure-Based Drug Design: SBDD) の基盤である。従来、この構造決定は X 線結晶構造解析などの大規模な実験に依存していた。

長年の構造生物学の取り組みにより、PDB (Protein Data Bank) には 20 万件を超えるタンパク質構造データが蓄積されてきた。この膨大なデータが、AI の学習基盤となった。AlphaFold は、深層学習を用い、タンパク質のアミノ酸配列データに隠された「共進化」の情報を解読することで、実験なしに高精度な立体構造予測を可能にした。共進化とは、立体構造上で近接するアミノ酸ペアが、進化の過程で構造を維持するために同時に変異する傾向を指す。AlphaFold はこのペア間の距離を高精度に予測することで、2020 年の構造予測コンペティション (CASP) において、2 位以下の研究グループ (デイヴィッド・ベイカーの研究室など) を圧倒する精度を叩き出し、実験構造に肉薄する予測を達成した。

1.3. 低分子創薬と相互作用予測

AlphaFold によって、誰でも容易にタンパク質の立体構造を予測できる時代が来た。この構造を基に、薬の候補となる低分子化合物を計算機上でスクリーニングする試みが活発化している。しかし、単純に AlphaFold の予測構造を使えば良いわけではない。AlphaFold が予測するのは、多くの場合、薬物が結合していない「アポ型」の構造であり、そのポケットは閉じていることがある。薬物が結合するためには、ポケットが適切に「開いた」構造が必要となるが、AI の予測する構造がドッキングに適しているとは限らない。我々の研究室では、この問題に対し、AlphaFold の入力パラメータを遺伝的アルゴリズムなどで探索し、ドッキングに「都合の良い」(例: ポケットが開いた) 立体構造を意図的に生成させる手法を開発した。AI の予測は一つではなく、設定次第で多様な構造をサンプリングできるため、その中から最適なものを選択するのである。さらに、精密な結合の強さを予測するには、ドッキング計算だけでは不十分であり、分子シミュレーションによる結合自由エネルギー計算 (自由エネルギー摂動法 (FEP) 等) が不可欠である。我々は、FEP 計算を用いて天然物誘導体の結合親和性を予測し、実験と一致する結果を得るなど、AI とシミュレーションの連携を進めている。

また、タンパク質間相互作用 (PPI) の予測においても、AlphaFold-Multimer は有用だが、実際には結

合しないペアを結合すると誤予測する「偽陽性」が多い。我々が検証したところ、偽陽性の予測構造は、真の結合構造と比較しても、接触面積や信頼度スコアにおいて明確な差がなく、AIの予測スコアだけでは判別が困難であった。このため、我々はこの偽陽性をAI (ResNetなどのニューラルネットワーク) で判別するモデルを別途開発した。最近では、立体構造予測を介さず、タンパク質言語モデル (PLM) を用いて配列情報のみから高速かつ高精度に相互作用を予測する手法も開発しており、計算速度と精度の両立を実現している。

1.4. AIによるペプチドと抗体の設計

ノーベル賞のもう一つの主題は、デイヴィッド・ベーカーらが進める「タンパク質デザイン」である。これは構造を予測する「順問題」とは逆に、望みの構造や機能を持つタンパク質の「配列を設計する」という「逆問題」である。仮に200アミノ酸のタンパク質を設計する場合、配列の組合せは20200という天文学的な数になるため極めて困難だが、ベーカーらはAlphaFoldなどのAI技術を駆使して、ヘビ毒を中和する人工タンパク質など、全く新しいタンパク質をゼロから設計 (de novo 設計) することに成功している。この設計技術は、タンパク質の断片であるペプチド医薬にも応用可能である。我々は、AlphaFoldを設計プロセスに組み込み、標的タンパク質に結合するペプチド配列を創出する研究を行っている。ただし、AIは疎水性相互作用を好む傾向があり、そのままでは「脂ぎった」ペプチドを設計しがちである。そこで、疎水性をペナルティとして加えることで、これを回避し、より望ましい性質を持つ環状ペプチドなどを設計する手法を開発した。さらに、近年では20種類の標準アミノ酸だけでなく、メチル化アミノ酸などの「非標準アミノ酸」を組み込んだ設計も可能になりつつある。抗体医薬の設計も同様だが、抗原を認識するCDRループは変異が激しく柔軟なため、AlphaFoldは予測を苦手とする。我々は、AIでCDR配列を生成し、その結合自由エネルギーをシミュレーションで評価し、その結果をAIにフィードバックする、という能動学習の枠組みを構築した。さらに、抗体配列の「文法」や「雰囲気」を学習した抗体特化型言語モデルを用いることで、抗体らしい多様な配列を効率的に生成する研究も進めている。

1.5. ゲノム創薬とAI活用の未来

AIの応用は、個別の分子設計から、創薬ターゲット探索の源流であるゲノム解析へと広がっている。Google DeepMind社は、ゲノム上の変異がタンパク質の機能に与える影響を予測するAI (AlphaMissense) を発表しており、遺伝性疾患の原因究明に役立つと期待される。さらに、タンパク質言語モデル (PLM) と同様に、ゲノム配列全体の「文法」を学習する「ゲノム言語モデル (GLM)」も開発されている。これは、GPTのような自然言語処理技術の生物学への応用である。これにより、ゲノム配列から細胞や組織レベルの機能、さらにはエピゲノム情報を予測し、個々の遺伝子変異がどの生物学的ネットワーク (パスウェイ) を通じて疾患 (例: ニューロン障害) につながるかをシステムとして理解する試みが始まっている。AlphaFoldは構造予測の時代を変えたが、万能ではない。およそ9割ぐらいは当たっているが、AIが「外した」場合 (例: 柔軟な領域、薬剤結

合状態、複合体形成) を人間が見抜き、適切に対処することが求められる。しかし、AI、特に言語モデルの概念は、タンパク質、ゲノム、化合物といった異なるデータを統合的に扱うことを可能にし、研究を著しく加速させている。我々は、AIと分子シミュレーションという「使える道具」を適切に組み合わせ、新しい科学的知見の創出を目指している。

AlphaFoldは構造予測の時代を変えたが、万能ではない。約9割は高精度だが、AIが「外す」場合 (例: 柔軟な領域、薬剤結合状態、複合体形成) を人間が見抜き、適切に対処することが求められる。しかし、AI、特に言語モデルの概念は、タンパク質、ゲノム、化合物といった異なるデータを統合的に扱うことを可能にし、研究を著しく加速させている。我々はAIと分子シミュレーションという「使える道具」を適切に組み合わせ、新しい科学的知見の創出を目指している。

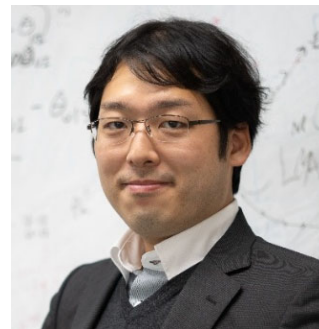
1.6. 聴講における感想 (アドバンスソフト)

本講演を通じ、AI創薬技術はあらゆる課題を単独で解決しうる万能解ではなく、物理シミュレーションとの適切な使い分けと融合こそが肝要であると再認識しました。特に質疑応答にて、探索対象の規模やフェーズに応じた計算戦略、すなわち数万件規模のスクリーニングには Boltz-2、さらに大規模なら Boltzina、そして Hit-to-Lead 段階での誘導体の精密評価には FEP 等の物理シミュレーションを適用するという、計算資源と精度のバランスを考慮した実践的かつ階層的なアプローチが示された点は、実務において非常に示唆に富むものでした。

また、PPI予測の真偽判定において、タンパク質表面残基のグラフ構造とタンパク質言語モデル (PLM) から抽出した特徴量を融合させたグラフニューラルネットワーク (GNN) を用いる手法も紹介されました。構造情報と「言語」モデルの統合という新たな潮流を的確に捉え、各手法の原理的特性を見極めた上で、目的に応じた最適な計算戦略を構築する能力が、今後の技術者に強く求められると痛感しました。

【ご経歴】

2014年 東京工業大学大学院情報理工学研究科 博士後期課程修了、博士 (工学)。日本学術振興会 特別研究員 (PD)、東京工業大学情報理工学院 助教を経て、2020年 東京工業大学情報理工学院 テンユアトラック助教



(PI) として独立し、大上研究室をスタート。2024年 東京工業大学 情報理工学院 准教授 (大学名改称により 2024年10月からは 東京科学大学情報理工学院 准教授)、現在に至る。

【ご研究内容】

AIによるタンパク質間相互作用予測技術の開発を中心に、生命科学・創薬とAIの融合研究を展開。

第8回アドバンス・シミュレーション・セミナー2025

早稲田大学 理工学術院 先進理工学研究科 共同原子力専攻

教授 山路 哲史 様

「原子力から考える汎用解析コードの役割と可能性」

開催概要

○講演概要

総合理工学である原子力に用いられる汎用解析コードは様々な分野を横断する共通課題を専門家同士が互いに認識する共通言語の役割を果たしており、今後、その役割は益々大きくなると期待される。

本発表では、原子力に多用される数値流体力学や有限要素法を例に紹介する。また、原子力の歴史でも最大級の事故となった福島第一原子力発電所事故の理解や対策に必要な課題の中には私達の日常と共通するものがあることを紹介する(例:お風呂のお湯の温度成層化、飛沫感染症対策)。

原子力の課題は、多分野への応用展開が期待される新しい先進的な解析手法(例:粒子法)の開発やその高度化をもたらしている。

ご講演内容

1. 講演内容

山路先生の講演内容は、原子力システムの研究を起点とし、その知見を応用して汎用解析コードの役割と可能性を広範な工学・自然科学分野にわたって考察するものであった。山路先生は、普段は原子炉の設計、熱流動、および事故シミュレーションに取り組んでいるが、本日はその専門分野を超えて、沸騰、構造力学、エアロゾル挙動、溶融物挙動解析といった共通の工学課題におけるシミュレーション技術の貢献に焦点を当てた。

この考察の背景には、高度な解析技術が特定の専門領域に留まらず、工学全体に共通する課題解決の鍵を握るという認識がある。解析技術への期待は、以下の二点に例示される。一つは、評価の不確かさを低減し、リスクを増大させることなくシステムの性能を向上させること。もう一つは、破損限界そのものを引き上げる新しい材料の開発に寄与し、システムの定格パフォーマンスを向上させることである。

1.1. 原子力システムと汎用解析技術への期待

原子力発電所の主要な構造物は、原子炉を封じ込め原子力発電所の放射能放出に対する主要なバリアには、原子炉を封じ込める圧力容器と圧力容器を収納している格納容器等がある。圧力容器内の燃料集合体は高圧の冷却水によって冷却されている。原子炉設計の基本原則は、異常事態時でも炉心損傷に至らせないことであり、その設計要求の一つが、冷却水が熱しすぎることで生じる沸騰遷移(Departure from Nucleate Boiling: DNB)を回避することである。DNBは、燃料棒表面が蒸気膜で覆われることにより熱伝達率が急激に低下し、燃料温度が許容限界を超えて急上昇する現象である。

沸騰遷移の限界評価は安全設計の根幹をなすが、

実機規模での実験的な検証は困難を伴う。具体的には、実機の燃料集合体一つを模擬する加熱実験に必要な電力は、概算で電気自動車を東京からインドのバンガロールまで走行させるのに匹敵するほどの莫大な量となる。そのため、設計者は、限定的な実験データに基づき、評価の不確かさを見積もり、その分を安全裕度として確保する必要がある。シミュレーション技術の進歩は、この不確かさを定量的に低減し、リスクを上げることなくシステムの性能、すなわち定格出力等を向上させることに貢献する。不確かさが低減すれば、安全性の向上に寄与していない無駄な安全裕度を削減できるためである。これは原子力に限らず、ボイラーや熱交換器など、あらゆる熱流動システム設計における共通の課題であり、数値流体力学(CFD)などの汎用解析コードが定量的なリスク管理と性能向上に重要な役割を担う。なお、山路先生が取り組む超臨界圧軽水炉システムの研究は、水の臨界点を越えた超臨界水を作動流体として利用する先進的な原子炉であり、従来の軽水炉とは冷却材の熱物性が大きく異なる。このシステムにおいても、冷却材の正確な熱伝達率の予測とその不確かさの低減が、設計上の重要課題の一つとして位置づけられている。

1.2. 新材料開発と構造解析の役割

二つ目の解析技術への期待は、システムの破損限界そのものを引き上げることによる性能向上、すなわち新しい材料の健全性評価である。原子炉の燃料棒では、運転中に内部の燃料ペレットが核分裂生成物の蓄積や熱膨張により膨張し、外側の燃料被覆管と接触して応力が働く。この応力とひずみが過大になると被覆管は破損に至るため、その破損限界の正確な予測と向上が求められる。

2011年の福島事故の教訓から、従来のジルコニウム合金被覆管が高温蒸気と反応して水素を発生しやすいという弱点を克服するため、事故耐性燃料(ATF)の開発が世界的に進められている。その主要な候補の一つが、高温での耐酸化性に優れたセラミック系材料(例:SiC/SiC複合材)を用いた被覆管である。しかし、セラミック系材料は、金属材料と比較して粘りが無い(脆い)という特性を持つため、ペレットとの接触による局所的な応力が働いた際の破損挙動の評価が大きな課題となる。この脆性材料の健全性評価のためには、有限要素法(FEM)を用いた構造力学に基づく弾塑性変形・クリープ変形解析が不可欠となる。特に、脆性材料の破損を模擬する方法として、応力が設定された破損限界に達した要素のヤング率を仮想的に小さくすることで剛性を喪失させ、破損を表現するモデルが開発されている。この処理により、応力は健全な隣接要素に再分配され、破損の影響を評価できる。新しい材料の熱的、機械的特性を正確にモデル化し、その破損限界を定量的に評価することは、高性能なATFを実用化するための核心的な課題であり、汎用解析コードの適用範囲を広げている。

1.3. 過酷事故とエアロゾル・可燃性ガス対策

原子炉の状態が悪化し、福島第一原発で発生したような過酷事故（シビアアクシデント）に至った場合、炉心損傷に伴うエアロゾル放出と可燃性ガス（水素）発生への対応が重要課題となる。このような極限的な状況を実験で検証することは極めて困難なため、シミュレーションの役割は一層大きくなる。炉心から放出される放射性エアロゾルは、公衆の被ばくリスクになるだけでなく、崩壊熱による発熱性を持つため、格納容器への熱負荷源となり得る。エアロゾルは水蒸気などの流れに乗って移動するが、加えて、重力沈降、ブラウン拡散、熱泳動といった現象の複雑な相互作用に支配される。原子力分野では古くからエアロゾル挙動のシミュレーションが行われてきたが、近年は新型コロナウイルス禍における飛沫・エアロゾル解析（富岳利用）など、公衆衛生や換気システム設計の分野でも同様のCFD解析が注目を集め、汎用的な知見が共有されている。また、過酷事故時に燃料被覆管が高温の水あるいは水蒸気と反応することで水素ガスが発生する。水素は非凝縮性ガスであるため、格納容器内の圧力を上昇させ、建屋内に漏れ出すと空気中の酸素と混合し、水素爆発のリスクが生じる。福島第一原発3号機の事故の事例では、水素と水蒸気は主として建屋の最上階に漏れ出したが最初の水素爆発は建屋の最上階より低い階で発生した可能性が指摘されている。これは、炉内から漏れた水蒸気が建屋内の下部で比較的多く凝縮し、相対的にその空間の水素と酸素の濃度割合が上がり、爆発しやすい雰囲気（可燃限界）になった解析結果例からも指摘されている。このような複雑な流動・混合現象の解明には、CFDを用いた解析が不可欠であり、過酷事故対策としての水素再結合装置やフィルター付きベントシステムなどの安全対策設計にも有用である。

1.4. 熱流動解析の難題と計算効率化

福島第一原発事故の解析では、格納容器内の圧力変動について、実機で測定されたデータと計算結果が合わない問題が生じており、その要因の一つが、圧力抑制プール内の温度成層化であると指摘されている。これは、プール水の表面層が高温となり、内部は低温に維持されているという状態であり、シミュレーションがこれを正確に模擬できないと圧力を低く評価してしまう。CFDシミュレーションにおいて、流体内部における微小な密度差に基づく自然対流や複雑な熱移行を正確に解くことは、依然として非常に難しい課題であり、汎用CFDコードの高度化が求められる分野である。

山路先生の専門分野の一つである燃料溶融物やデブリの挙動解析は、過酷事故の進展評価において極めて重要である。燃料が溶融・落下し、再固化する現象を解析するためには、粒子法的一种であるMoving Particle Semi-implicit (MPS) 法が用いられる。MPS法は、非圧縮性流体の流れを計算点（粒子）の相互作用として扱うラグランジュ法であり、液体の飛散や複雑な界面変化の追跡に特長を持つ。溶融物解析で特に難しいのは、流動（液体）と凝固（固体）が混在する状態のモデル化である。MPS法で凝固を粘性の増大で模擬する場合、厳密な非圧縮性と完全な凝固が同時には達成できないため、両者の実用的な両立が課題である。この課題解決のため、山路先生らは以下の手法により効率化を図っている。

① アルゴリズムの改良：実用的な計算タイムステ

ップで必要十分な流動計算精度（非圧縮性）が得られる範囲で凝固による流動の完全停止を優先したアルゴリズムの開発。

② 計算コストの削減：

- ◆ 流動の寄与が小さい時間帯に流動計算をスキップする。
- ◆ 流動しない（固化した）粒子の一部の計算をスキップする。

1.5. 汎用解析コードの役割と展望

汎用解析コード（CFD、FEMなど）は、特定の専門分野に留まらず、工学・科学全般に共通する課題を扱うための共通言語としての役割を果たしている。原子力研究で培われた、極限的な熱流動、構造、物質挙動の解析技術は、沸騰の不確かさ低減、新材料の破損限界評価、エアロゾル拡散予測、複雑な多相流（溶融・凝固）モデル化といった課題解決に貢献している。これらの課題は、分野は異なれども、その本質において共通する熱・物質移動、流体力学、構造力学の法則に支配されている。今後、さらなる解析精度の向上と、非線形・多相・多物理現象の効率的なシミュレーション技術の開発が進むことで、汎用解析コードは、専門分野を超えた研究者・技術者間の知識共有と、新たな技術開発の一助となるであろう。

1.6. 聴講における感想（アドバンスソフト）

原子力の分野では、実物を使った実験が難しいため、古くからコンピューターシミュレーションが広く用いられてきた。しかし、例えば福島第一原発で発生した過酷事故では、原発の構造の複雑さに加えて多くの個別現象が錯綜して事象が進展したこともあり、そのシミュレーションには一定の不確かさが依然として存在する。実は、この不確かさの要因の一つが、我々の日常生活の感覚で理解できる温度成層化の解析の不確かさに起因していることなど、生活感覚に基づいて分かりやすく解説していただいた。このように個別現象を取り上げると、実は原子力以外の分野でも見ることで見ることのできる現象と極めて類似している点が多い。今回のご講演では、山路先生のご専門である原子炉設計や熱流動、事故時挙動の解明などについてご紹介いただくとともに、原子力で使われている解析コードが他の分野においても広く適用できる機能を有していることを分かりやすくご説明していただいた。今後、原子力で使われているソフトウェアが原子力以外の分野でも広く活用されるようになることを期待している。



【ご経歴】

2006年に東京大学大学院修了、博士（工学）。2006年から2011年まで日本原子力研究開発機構・研究員。2011年から2014年までOECD Nuclear Energy Agency 職員（Nuclear Scientist）。2014

年から早稲田大学 共同原子力専攻 講師、准教授を経て教授（現職）。

【ご研究内容】

専門分野は、原子炉設計工学、原子炉物理学、原子炉の安全、計算工学。

第9回アドバンス・シミュレーション・セミナー2025

東京大学 情報基盤センター スーパーコンピューティング研究部門

教授 中島 研吾 様

『計算・データ・学習』融合と富岳 NEXT, その先にあるもの

開催概要

○講演概要

近年、スーパーコンピューティングは急速に変革しており、従来の計算科学シミュレーションに加えて、データ科学、機械学習・AIなど様々な分野に利用されています。東京大学情報基盤センター(本センター)では、2015年頃から「計算・データ・学習(Simulation・Data・Learning, S+D+L)」融合による新しい科学の開拓を推進してきました。2021年に運用を開始した「Wisteria/BDEC-01」システム上で、革新的ソフトウェア基盤「h3-Open-BDEC」を使用して実現した様々な成果とともに、近年取り組んでいる量子・HPCハイブリッド連携についても紹介します。スーパーコンピュータ「富岳」の後継機である富岳 NEXT は GPU を搭載したシステムです。CPU向けに開発されたアプリケーションの移行、プログラミング環境の整備に向けた本センターの取り組みについても紹介します。

ご講演内容

1. 講演内容

1.1. 計算・データ・学習の融合と BDEC 計画の全貌

東京大学情報基盤センターは、1965年の設立から2025年で節目となる60周年を迎えた。日本で最も古い学術向けスーパーコンピュータセンターとしての歴史を持ち、現在は全国8大学からなる「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点」の中核として、日本のハイパフォーマンス・コンピューティング(HPC)を牽引している。同センターが現在、最も注力しているのが「計算(Simulation)」「データ(Data)」「学習(Learning)」の三要素を高度に融合させる「S+D+L」という新たなパラダイムである。この概念を具現化するのが、約10年前から推進されている「BDEC(Big Data and Extreme Computing)」計画だ。従来のスパコンの主用途は、物理法則に基づく数値シミュレーション(S)であった。

しかし、近年のデータ爆発とAI技術の飛躍的発展により、シミュレーションに膨大な観測データ(D)を取り込み、機械学習(L)によって計算を高速化・高度化するアプローチが不可欠となっている。これは単なる手法の組み合わせではなく、ハードウェアとソフトウェアの両面において、計算機科学の在り方を根本から再定義する挑戦である。具体的には、地球科学のような複雑なシステムを扱う分野において、観測データとシミュレーションをリアルタイムで結びつける「データ同化」や、計算コストの極めて高い物理プロセスをAIで代替する「サロゲートモデル」の開発が進められている。同センターは、これらの融合計算を支えるための先端的な計算資源として、「Wisteria/BDEC-01」や「Miyabi」などのシステムを導入し、多様化するワークロードに対応している。

1.2. ヘテロ環境を支える革新的基盤ソフトウェア

計算・データ・学習の融合を実現するためには、異なるアーキテクチャを持つ計算資源を混載した「ヘテロジニアス・システム」の活用が鍵となる。同センターが運用する「Wisteria/BDEC-01」は、シミュレーション用の「Odyssey(CPUノード)」と、データ・学習用の「Aquarius(GPUノード)」という二つの独立したノード群を内包している。Odysseyは富岳と同じA64FXプロセッサを搭載している。これらを単一の計算基盤として機能させるには、物理的な接続だけでなく、論理的な連携を司るソフトウェア基盤が極めて重要となる。そこで開発されたのが、科研費プロジェクトとして推進された「h3-Open-BDEC」である。このプロジェクトがもたらした最大のイノベーションの一つが、通信ライブラリ「Wait-IO」だ。分散メモリ型並列計算機における通信には、MPI(Message Passing Interface)が使用されているが、Wisteria/BDEC-01のOdysseyとAquariusはアーキテクチャが異なるため、両者間をMPIによって通信することは不可能である。WaitIOは、Odyssey-Aquarius間を連結する高速なInfiniBandネットワークや高速ファイルシステム経由で、OdysseyとAquarius間の通信をMPIライクなインタフェースによって実現するライブラリである。これにより、Odysseyで実行中のシミュレーション結果を、逐次Aquariusへ転送して学習させ、その推論結果を再びOdysseyへフィードバックするという動的な連携が可能になった。

また、大気と海洋、あるいは構造と流体といった異なる物理現象を連成させる「マルチフィジックス・カプラー」の概念を拡張し、計算プロセスと学習プロセスを直接結びつける試みも特筆に値する。さらに、ファイルシステム経由とネットワーク経由の通信を自動で切り替える「Wait-IO Hybrid」などのユーティリティ群が整備されたことで、研究者はインフラの複雑さを意識することなく、高度な融合計算に専念できる環境が整いつつある。これらの基盤技術は、将来の「富岳 NEXT」においても、異なるデバイス間を繋ぐ重要な役割を果たすことが期待されている。

1.3. 融合計算が導くシミュレーションの最前線

融合計算の有効性は、具体的な科学的課題において驚異的な成果として現れている。その代表例が、東京大学地震研究所との共同研究による「リアルタイムデータ同化」を用いた地震波伝搬シミュレーションである。日本全国に展開された2,000点規模の地震観測網「JDXネット」からは、1秒間に100回という高頻度でデータが送られてくる。これらをSINET6経由でスパコンに取り込み、シミュレーション結果をリアルタイムで補正することで、従来の「Forwardシミュレーション」では困難であった、震源断層の破壊過程の影響を考慮した正確な強震動予測が可能となった。さらに、気象予測の分野では「AIエミュレーター」の活用が劇的な効率化をもたらしている。全球規模の雲物理シミュレーションにおいて、物理法則を厳密に解く膨大な計算時間を要する特定のプロセスを、三層パーセプトロンのような

シンプルなAIモデルで代替する試みである。高精度のシミュレーション結果を教師データとして学習させることで、精度を維持しながら計算負荷を大幅に削減することに成功した。当初はAIの精度不足も懸念されたが、入力パラメータを最適化することで、現在では実用レベルに近い精度を達成している。これらの取り組みの中でも、特に際立った成果が「アンサンブル連成計算」による100倍以上の効率化である。気象予測において不可欠なアンサンブル計算（多数のシナリオ計算）において、低解像度モデルと高解像度モデルを効率的に組み合わせる手法を開発した。また、これらの一連の成果により、研究チームは文部科学大臣表彰を受賞した。

1.4. 量子スパコン連携とハイブリッド計算

HPCのさらなるフロンティアとして、古典的なスーパーコンピュータと量子コンピュータを連携させる「量子・スパコン連携プラットフォーム」の構築が進んでいる。これはNEDOのプロジェクト「JHPC-quantum」として推進されており、理研、ソフトバンク、東京大学、大阪大学などが参加している。量子コンピュータは、特定の探索や量子化学計算において圧倒的な優位性を持つ可能性がある一方で、大規模なデータ処理や汎用的な計算には課題が残る。そこで、スパコンをメインエンジンとし、量子コンピュータを特定のタスクを処理する「加速装置」として利用するハイブリッド計算が構想されている。

具体的には、原子や分子のエネルギー状態を求める「VQE（変分量子固有値ソルバー）」などのアルゴリズムがターゲットとなっている。量子デバイスがサンプルの生成や期待値の測定を並列で行い、スパコンがその結果をもとに最適化計算を実行するという役割分担である。東京大学では、この連携を容易にするために「Wait-IO」をPythonに対応させ、既存の量子計算フレームワーク（CUDA-Q等）との統合を図っている。JHPCN-quantumでは、IBM製の超伝導型（ibm_kobe、神戸）とQuantinuum社製によるイオントラップ型（REIMEI、和光）という2基の量子コンピュータを導入し、これらと富岳、Miaybiを接続した量子スパコン連携を推進している。

この他、東京大学が主導する量子イノベーションイニシアティブ協議会（QII）が運用する、川崎に設置されたibm_kawasakiシステム（ibm_kobeと同等の性能）をMiyabiと連携させる試みも始まっている。ここではデータ活用社会創生プラットフォーム「mdx」上にワークフローサーバーを構築し、オープンソースの「Prefect」などを活用して、量子スパコン連携を実現している。このように、量子計算を「遠い将来の技術」としてではなく、現在のHPCエコシステムの一部として統合していくアプローチは、日本の計算機科学における独自の強みとなりつつある。

1.5. 富岳NEXTの展望とプログラミング変革

現在、日本の次世代フラッグシップ機「富岳NEXT」に向けた開発が加速している。富岳NEXTは、富士通の低消費電力CPU「Monaka-X」とNVIDIA製の最新GPUを組み合わせた構成となることが公表されている。特筆すべきは、アプリケーション性能において「富岳比100倍」という極めて高い目標を掲げている点だ。しかし、ハードウェアの倍精度演算性能（FP64）そのものの向上は数倍程度に留まると予測されており、この100倍という目標を達成するには、アルゴリズムとソフトウェアの大胆な刷新が不可欠である。その有力な武器となるのが、AI計算向けの

低精度演算（INT8やFP16）を活用して倍精度（FP64）相当の精度を得る「尾崎スキーム」などの混合精度演算技術だ。ハードウェアの進化がAI向けに最適化される中、数値計算の側がその特性を逆手に取り、高性能を劇的に引き出すための研究開発が進められている。また、膨大な数のCPUユーザをスムーズにGPU環境へ移行させるため、RIST、東京大学、筑波大学、東京科学大学が中心となり、全国規模の技術支援組織「次世代HPC・AI研究開発支援センター（HAIRDESC）」が立ち上げられた。しかし、技術以上に困難な課題は「Fortranからの脱却」という文化的な変革かもしれない。日本の科学技術計算を長年支えてきたFortranは、最新のGPU環境や広大なAIエコシステムとの親和性において課題を抱えつつある。今後10年を見据え、C++やポータブルなプログラミング環境（Kokkos等）への移行、あるいは生成AIを用いた自動コード変換を戦略的に進める必要がある。富岳NEXTへの道は、単なるマシンの更新ではない。それは、計算手法、アルゴリズム、そしてプログラミング言語に至るまで、日本の計算科学の土壌そのものを、AIと協調する新たなステージへとアップデートする歴史的なプロセスなのである。

1.6. 聴講における感想（アドバンスソフト）

東京大学情報基盤センターが推進するBDEC計画や「富岳NEXT」に向けた展望は、日本の計算科学を新たなステージへと引き上げる革新的な取り組みであり、プログラム開発に従事する立場として、より高速な計算環境が整備され、広く公開されることは非常に喜ばしいと感じる。一方で、ハードウェアが高度にヘテロジニアス化（多様化）する中で、その潜在性能を最大限に引き出すための最適化には、従来以上に多大な工数が求められている。

報告の中で触れられた「Fortranからの脱却」という文化的な変革やプログラミング言語の移行は、長年資産を積み上げてきた技術者にとって、開発効率や信頼性の維持という面で極めて大きなリスクを伴うものである。今後のHPC環境においては、特定の言語への移行を強いるだけでなく、Wait-IOやH3-Open-BDECのような、インフラの複雑さを隠蔽するミドルウェアの拡充を強く期待したい。研究者や開発者が、ハードウェアの細部を意識することなく高度な融合計算に専念できる「使いやすい」基盤ソフトウェアの整備こそが、真の計算機科学の発展に直結すると確信している。



【ご経歴】

東京大学 工学部 航空学科卒業（1985）、テキサス大学 オースティン校大学院修了（1993）、三菱総合研究所（1985-1999）、高度情報科学技術研究機構（RIST）（1999-2004）、東京大学 理学系研究科（2004-2008）を経て2008年より現職。2018年より理化学研究所計算科学研究センター（R-CCS）副センター長を兼務。

【ご研究内容】

専門は、高性能計算（High-Performance Computing）、計算力学、数値線形代数。

第10回アドバンス・シミュレーション・セミナー2025

原子力発電環境整備機構 技術部 性能評価技術グループ
グループマネージャー 石田 圭輔 様
「地層処分の安全評価におけるシミュレーションの活用と展望」

開催概要

○講演概要

地層処分システムは、不均質性を有する複数の構成要素から成り、これらの構成要素の空間スケールは数十 cm～数十 km 以上である。また、システム全体の性能に求められる時間スケールは数万年以上となる。このため、規模や期間に限られる室内試験や原位試験によってシステムの性能を直接的に実証することは困難であることから、シミュレーションによる評価が必須である。

本セミナーにおいては、地層処分の実施主体である弊機構が安全評価において使用しているシミュレーションについて紹介する。また、これらのシミュレーションにおける課題と今後の技術開発の展望について報告する。

ご講演内容

1. 講演内容

1.1. 地層処分の基本概念と多重バリアの構造

原子力発電環境整備機構 (NUMO) は、わが国における高レベル放射性廃棄物および TRU 廃棄物の地層処分事業の実施主体である。処分する廃棄物の量は、ガラス固化体 4 万本以上、TRU 廃棄物 19,000 m³以上 (2008 年に公表された「特定放射性廃棄物の最終処分に関する計画」に示された値) とされる。また、2025 年 3 月時点で原子力発電所に保管されている使用済燃料はガラス固化体換算で約 27,000 本相当と整理されている。ガラス固化体の放射能は時間とともに減衰するが、極めて長期間にわたり残存するため、人の管理がなくなるとも長期に安全が確保できる仕組みが求められる。

地層処分は、放射能の減衰を待つ間、放射性廃棄物を地表から隔離し、処分施設周辺に閉じ込める考え方により、人間の管理に頼らずとも処分場の閉鎖後長期にわたって安全を確保する。これを具体化するのが、人工バリアと天然バリアを組み合わせた多重バリアシステムである。人工バリアは、放射性物質をガラスの構造内に取り込むガラス固化体、その周囲を覆う金属製の容器オーバーバック、そして地下水の侵入を抑えつつ核種の移動を遅延させる緩衝材 (ベントナイト) で構成される。一方、岩盤である天然バリアは、廃棄物を地下 300 メートルより深い安定した地層に埋設することによって、廃棄物を地表から遠ざけるとともに、万が一核種が漏出した際にも、岩石表面への吸着機能によってその移動を大幅に遅らせる役割を果たす。このように、複数の物理的・化学的障壁を幾重にも重ねることで、一部の機能が損なわれたとしても全体としての安全性が確保されるよう設計されている。

1.2. サイト選定の要件と段階的な調査プロセス

適切な地質環境を選定し、これに対して地下施設を設計したうえで、処分場の閉鎖後長期における安全性の評価を行い、安全な地層処分を実現する。NUMO では、科学的な客観性に基づき、主に二つの観点から選定を進めている。第一は長期安定性である。日本は地震や火山活動が活発な変動帯に位置するため、将来にわたって大規模な地殻変動や火山噴火、隆起・侵食の影響を受けにくい場所を特定しなければならない。活断層の近傍を避けることはもとより、地下深部の環境が数万年単位で安定し続けることが条件となる。第二は適切な地質環境特性を有する地質環境である。これには力学的、熱的、水理学的、化学的という四つの側面からの評価が含まれる。地下深部に巨大な空間を建設・維持できる岩盤強度、廃棄物の熱による劣化を招かない温度環境、核種移動の主因となる地下水の流速の遅さ、そして腐食の抑制などに関係する還元的な化学環境が求められる。

こうした特性を判断する指標として、国は 2017 年に科学的特性マップを公表した。これは日本全土の地質情報を集約し、火山や断層からの距離などに基づき適性を視覚化したものであるが、実際の適否は段階的な調査によって判断される。サイト選定プロセスは文献調査、概要調査、精密調査の三段階で構成される。文献調査は 2020 年 11 月 17 日に北海道の寿都町・神恵内村で開始され、2024 年 6 月 10 日に佐賀県玄海町でも開始された。文献調査では既存の学術データに基づく机上検討が行われ、概要調査では地表からの物理探査やボーリング調査が実施される。最終的な精密調査では地下調査施設を建設し、地下深部の実地環境を直接観察・評価する。こうしたプロセスを通じて、点の情報を三次元、あるいは時間軸を加えた四次元の地質環境モデルへと統合し、科学的エビデンスに基づいた処分地の決定が行われる。

1.3. 長期安全評価の論理と包括的技術報告書

地層処分における安全評価の特異性は、処分場の閉鎖後長期という、人間の知覚を超えた時間スケールを扱わなければならない点にある。この長期的な安全性を定量的に証明するために用いられるのが安全評価である。評価はまず、将来起こり得る事象を科学的に想定し、論理的なストーリーとして組み立てるシナリオ構築から始まる。代表的な基本シナリオでは、地下水によりオーバーバックが腐食し、千年後に地下水がガラス固化体に接触して核種が溶け出す過程を想定する。溶け出した核種が緩衝材や岩盤中を移行し、最終的に生活圏へ到達して人間に及ぼす放射線量を算出し、それが基準値を下回るかを確認する。後述する包括的技術報告書 (包括的技術報告) においては、国内で閉鎖後長期の規制基準値が未設定であるため、諸外国で設定されている厳しい基準値等を参考に、年あたり 10 μ Sv を「めやす (目標値)」とし、基本シナリオ結果と比較している。

包括的技術報告は、これまでに蓄積された科学的知見や技術を統合し、実施主体として安全な地層処

分を実現するための方法と最新状況を取りまとめたセーフティケースである。1999年の「第2次取りまとめ」以降の知見・技術開発成果を踏まえ、代表的な地質環境モデル等に対する安全評価を整理し、基本シナリオの最大線量が、めやすとして設定した目標値(年あたり $10 \mu\text{Sv}$)を下回る結果が示されている。また、包括的技術報告に関する OECD/NEA による国際レビューを 2023 年 1 月に完了しており、現段階において適切なものであると結論付けられている。

1.4. 高度なシミュレーション技術と二階層モデル

地層処分システムの性能評価には、数十センチメートルのバリア構成要素から数十キロメートルの広域地質環境まで、極めて広範な空間スケールを扱う技術が求められる。これを効率的かつ精密に実行するため、NUMO は二階層モデルという戦略的アプローチを採用している。第一の階層である現象解析モデルは、特定のサブシステム内での複雑な物理・化学現象を精緻に解析するものである。例えば、緩衝材の中での熱、地下水、化学物質の相互作用を詳細に解き、安全性を左右する重要な因子を特定する。第二の階層であるシステム評価モデルは、現象解析モデルで抽出された重要なプロセスを、合理的な保守性を確保しつつ簡略化したうえで、地層処分システム全体を対象に放射線学的影響(線量/リスク)を推定する。この二階層を並行して運用することで、科学的な詳細さと実用的な計算スピードを両立させている。現象解析モデルとシステム評価モデルの境界(時間的・空間的対象範囲)は、科学技術の進歩、解析目的と必要精度、利用可能な計算資源に応じて柔軟に変更される。

近年の計算機科学の進歩により、シミュレーションは領域の大規模化と精緻化を両立させる段階に入った。米国サンディア国立研究所により開発された並列計算対応の公開解析コード PFLOTRAN を地下水流動解析へ導入し、広域スケールを対象とした解析へ拡張する取り組みが進められている。さらに、詳細度の異なるモデルを組み合わせた入れ子モデル技術の整備が進み、個々の廃棄体から発生した核種がどの断層を経由し、どのような時間軸で地表へ至るかを個別に追跡できるようになった。これにより、地質環境の不均質性や時間的な変遷を考慮した四次元的な評価が実現している。また、従来は特定の断面に限定されていた評価が、処分場全体の数万本の廃棄体を対象とした網羅的な解析へと拡張されており、サイト固有の特性に合わせた最適設計を行うための基盤技術が整いつつある。

1.5. AI 導入による計算効率化と今後の技術展望

シミュレーション技術の高度化に伴い、新たな課題として浮上したのが膨大な計算リソースの消費とデータ処理の複雑化である。広域スケールを対象に処分場に埋設する 40,000 体の HLW や異なる TRU 廃棄物それぞれについて核種移行解析を実施するには、概算で 100 万 CPU 時間程度を要する例が示された。また、出力される膨大な解析結果から人間が安全性の本質を直感的に把握することは困難になりつつある。この課題を解決するため、NUMO は AI や機械学習の導入に注力している。具体的には予測評価ツールとクラスター分析ツールの開発が進められている。予測評価ツールでは、一部の廃棄体から得ら

れた詳細な解析結果を機械学習の教師データとして用い、残りの数万体の挙動を AI に予測させる。試行結果では、AI による予測値が詳細解析の結果を比較的精度よく再現できることが確認されており、計算負荷低減に資する可能性が示された。

一方、クラスター分析ツールでは、粒子の移行率等の指標に基づき廃棄体をグループ化する(k-means 法の利用)。また、膨大な移行経路データを自動処理して粒子の集まる箇所を特定し、主要経路を抽出する手法として DBSCAN の利用が示された。これにより、どの経路が核種の移行経路として支配的であるかといった安全性を左右する主要な要因について、人間が目すべき情報を効率的に抽出することが可能となった。今後の展望として、シミュレーションは安全性の確認に加えて、設計と調査へのフィードバックをする技術としての役割を広げていく。AI と高度なシミュレーションを融合させることで、サイトの地質特性に最適化された合理的な処分場設計や、最も効果的な調査ポイントの特定が可能になる。これは事業の効率性を高めるだけでなく、科学的根拠に基づいた透明性の高い説明を社会に対して行うための重要な手段となる。NUMO は今後も、最新のデジタル技術を積極的に取り入れ、数万年後の将来世代に対する責任を果たすべく、地層処分の確実な実現を目指していく。

1.6. 聴講における感想(アドバンスソフト)

地層処分の閉鎖後長期安全評価は、数万年以上・数十 cm から数十 km に及ぶマルチスケール問題であり、実験のみでは実証できないためシミュレーションが不可欠であることを体系的に理解できた。特に、現象解析モデルとシステム評価モデルを二階層で運用し、科学的知見の成熟度や計算資源に応じて両者の境界を柔軟に見直すという考え方は、実務に即した合理的なアプローチであると感じた。詳細解析から簡易モデルへ落とす際に、主要な移行経路や支配要素を残しつつ、埋戻し効果を敢えて見込まないことで保守性を担保する点や、線量が目安を超えた場合にはまず評価側の保守性合理化を検討し、その後に設計へ反映するという優先順位付けは印象的であった。また、PFLOTRAN による並列計算や機械学習を活用した予測評価・データ整理は、計算負荷低減と説明性向上の両立に有効であり、当社としても解析環境やデータ活用の面で大いに参考にできると感じた。



【ご経歴】

2005 年 東京大学工学部卒業。2010 年 東京大学大学院工学系研究科システム量子工学専攻 博士課程修了。2010 年 原子力発電環境整備機構 入構。

【ご研究内容】

主に、地層処分施設の閉鎖後長期における安全性の評価に関する業務のうち、熱-水-力学-化学に関する連成現象を対象としたシミュレーションや放射性核種の移行シミュレーションなどに従事。

アドバンス・シミュレーション・セミナー2025を終えて

アドバンスソフト株式会社 セミナー事務局

1. はじめに

アドバンス・シミュレーション・セミナーは、アドバンスソフト株式会社が2021年度から主催している公開セミナーであり、我が国の計算科学技術のさらなる発展と産業界への応用を目指して開催されてきました。2025年度もその基本的な趣旨を継続し、全10回のセミナーをオンライン形式で実施いたしました。本セミナーの共通した目的は、計算科学研究の最前線にいらっしゃる方々により最先端の計算科学・シミュレーション研究の成果を広く紹介していただくことで、産業界等で活躍されている技術者や研究者の方が新たな視点を得る契機とし、研究と産業の接続点を創出することです。さらに長期的には計算科学を中心とした科学技術分野の裾野を広げていくことも目的としています。

2. 2025年度のセミナーを振り返って

2.1. 実施内容

2025年度に開催された10回の講演は、太陽内部の磁気乱流といった基礎科学から、実社会の安全を支える火災・爆発現象のモデリングや地層処分安全評価まで、極めて広範なテーマを扱いました。その中では、データ駆動型手法による乱流予測、量子技術の流体解析への応用、AIと物理シミュレーションを融合させた創薬分子設計、原子力分野における汎用解析コードの役割、そして「計算・データ・学習」の融合が拓く新しい科学のパラダイムなど、次世代の計算基盤を見据えた先進的な知見の講演が実施され、参加者との間でその知見が共有されました。また、富岳NEXTをはじめとした政府の次世代HPC戦略についても解説がなされ、政策面からの展望も示されました。

2.2. 共通する点

これらの講演に共通しているのは、従来の数値シミュレーションを基盤としつつ、AIや機械学習、さらには量子コンピューティングといった新たな技術要素をどのように統合し、複雑な社会課題の解決や産業競争力の強化に結びつけるかという視点です。

特に、2024年のノーベル化学賞でも注目された「AI for Science」の流れが各分野で加速しており、シミュレーションが単なる予測ツールを超えて、科学的発見や設計最適化を自動化・高度化する「社会の中核インフラ」へと進化している姿が浮き彫りとなっていると考えております。

2.3. 参加者層

本セミナーの大きな特徴は、参加者層の多様性にあります。材料、自動車、エネルギー、電機、IT、建築など、幅広い産業界の技術者・研究者が多数参加しており、実務に直結する知見への高い関心がうかがえました。各回での活発な質疑応答からは、アカデミアの最先端理論をいかに自社の開発現場へ実装するかという、具体的かつ実践的な問題意識が共有されました。また、若手研究者や学生の参加も継続しており、次世代の計算科学を担う人材育成の場としての役割も定着しつつあります。

3. まとめ

計算科学は今や、科学技術のブレークスルーを支えるだけでなく、経済安全保障やカーボンニュートラルの実現といった国家戦略の成否を握る重要な鍵ともなっています。

2021年の開始以来、延べ参加者数は5,000名を超え、本セミナーが目指す「知のネットワーク」は着実に拡大しています。今後のセミナー運営においては、これまでの「つながり」をさらに深めつつ、異なる専門分野が交差する領域での新たな協働を促すような、よりダイナミックなプラットフォーム構築に貢献できること目指してまいります。

アドバンス・シミュレーション・セミナーが、計算科学の社会への貢献を拡大するための一助となるよう、今後も継続的な発展を図ってまいります。2026年度においても、皆様のお役に立つことができるアドバンス・シミュレーション・セミナー2026を企画いたしますのでよろしくお願いいたします。

(アドバンスソフト株式会社 代表取締役社長)

第1回 アーカイブ動画

第1回 セミナー資料



第2回 アーカイブ動画

第2回 セミナー資料

アーカイブ動画は
非公開です



第3回 アーカイブ動画

第3回 セミナー資料



第4回 アーカイブ動画

第4回 セミナー資料



第5回 アーカイブ動画

第5回 セミナー資料

アーカイブ動画は
非公開です



第6回 アーカイブ動画

第6回 セミナー資料



第7回 アーカイブ動画

第7回 セミナー資料



第8回 アーカイブ動画

第8回 セミナー資料



第9回 アーカイブ動画

第9回 セミナー資料



第10回 アーカイブ動画

第10回 セミナー資料



※ アーカイブ動画・セミナー資料は、先生のご許可をいただいたもののみ公開しております。

技術情報誌『アドバンスシミュレーション』のご案内

技術情報誌「アドバンスシミュレーション」は、アドバンスソフト株式会社の技術力を広く理解してもらおうと同時に、わが国のシミュレーション技術の発展、普及を目的として創刊したものです。(すべて無料)

アドバンスソフト株式会社の特長は、広範な産業分野の大規模な実用的応用ソフトウェアを開発する技術力であり、また、このようなソフトウェアを用いた解析、コンサルティング技術にあります。一言でいえばどのようなシミュレーションにも対応できる総合力にあります。技術情報誌「アドバンスシミュレーション」はこのような特長を生かし幅広い情報を提供しております。多少とも、皆さまの参考になれば幸いです。

バックナンバー：<https://www.advancesoft.jp/support/magazine/>

| | | | |
|---------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------|--------------------------------------------|
| Vol.3 (2010.11) | 第一原理計算シミュレータ Advance/PHASE | Vol.4 (2010.11) | 構造解析ソフトウェア Advance/FrontSTR |
| Vol.5 (2010.11) | 材料設計統合システム Advance/Material Design System/ 2次電池CADシステム Advance/Battery Design System/ 3次元デバイスシミュレータ Advance/DESSERT | Vol.6 (2010.12) | 建物内の火災安全・防災のためのシミュレータ Advance/EVE SAYFA |
| Vol.7 (2011.4) | 管路系流体解析シミュレーション | Vol.8 (2011.7) | 構造解析ソフトウェア Advance/FrontSTR |
| Vol.9 (2011.10) | 材料設計統合システム Advance/Material Design System/2次電池CADシステム Advance/Battery Design System | Vol.10 (2011.12) | 原子力安全解析 |
| Vol.11 (2012.4) | Made in Japan の計算科学技術ソフトウェアの開発 | Vol.12 (2012.6) | アドバンスソフト株式会社 設立10周年記念 |
| Vol.13 (2012.10) | 気液二相流解析ソフトウェア Advance/FrontFlowMP | Vol.14 (2013.1) | 第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE |
| Vol.15 (2013.5) | 音響解析ソフトウェア Advance/FrontNoise | Vol.16 (2013.8) | 爆燃、爆轟の解析に関する最新動向 |
| Vol.17 (2013.12) | 流体解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/red | Vol.18 (2014.1) | 産業界と管路系流体解析技術 |
| Vol.19 (2014.10) | 原子力安全解析 | Vol.20 (2014.12) | アドバンスソフト株式会社が製造販売するソフトウェア パッケージ |
| Vol.21 (2015.9) | Made in Japan の LSI デバイス設計 CAD システム Advance/TCAD | Vol.22 (2016.6) | 未来を拓くスーパーコンピューティング |
| Vol.23 (2016.12) | アドバンスソフトからサービスを提供するソフトウェア | Vol.24 (2017.7) | 管路系流体解析技術の高度化 |
| Vol.25 (2018.1) | アドバンスソフトにおける研究開発 | Vol.26 (2018.7) | 数値解析のフロンティア |
| Vol.27 (2019.12) | 防災シミュレーション | Vol.28 (2020.9) | 特集1 ; PRA、特集2 ; AI |
| Vol.29 (2022.4) | 原子力安全解析 | Vol.30 (2023.7) | 流体解析 |
| Vol.29 増刊号 (2022.4) | アドバンス・シミュレーション・セミナー 2021 | Vol.30 増刊号 (2023.7) | アドバンス・シミュレーション・セミナー 2022 |
| Vol.31 (2024.7) | 計算科学の裾野を広げる | Vol.32 (2025.7) | シミュレーションと先端技術の融合 |

「アドバンス・シミュレーション・セミナー 2023・2024 開催報告」のご案内

2023・2024 年度に開催したセミナーの各記事を一つにまとめて、冊子として発行しております。
全10回分の記事を一度にご覧いただけますので、ぜひお手元にてご一読いただけますと幸いです。



ダウンロード
はこちら



ダウンロード
はこちら

