

# 進化するシミュレーション・サイエンス

## 堀内利得

総合研究大学院大学教授核融合科学専攻/核融合科学研究所教授

コンピュータ・シミュレーションが新たな展開を見せている。

VR(仮想現実)技術と結びついた各種のソフトウェアが開発され、科学者はこれまでにない革新的な研究道具を手に入れた。

実際、研究者自身が3次元のシミュレーション空間に入り込み、それを自由に操作・解析できるのである。

このようなリアルな研究環境からどのような研究が始まりつつあるのか、システムの内容を含めて紹介する。

半世紀前に登場したコンピュータが飛躍的に発展する中で、コンピュータ・シミュレーションは、実験・理論に次ぐ第3の研究法として確立され、いまや、プラズマ、物性、スペース、天体、等々の研究分野で非線形問題を解く強力なソルバー(問題を解く道具)として、必要不可欠の存在となっている。さらに、近年、扱うことのできる情報量が10テラ(10兆)スケールを超えるスーパーコンピュータが登場し、またネットワーク技術や画像処理技術をはじめとするIT技術が革命的に発達することにより、科学研究のあり方そのものにも大きな変革をもたらされようとしている。

このような背景の下、平成14年度の総

研大国際シンポジウムのテーマとして「シミュレーション・サイエンス」が採択され、平成15年3月5日から7日まで、国内外から幅広い分野の科学者が葉山キャンパスに集まって開催された。会議では「21世紀の科学の方法論」としてのシミュレーション・サイエンスに光を当て、学際的・国際的な視野からその進むべき方向と将来への展望が議論された。

一方で、総研大共同研究「仮想現実技術の科学研究への応用」(平成12年~14年)において、シミュレーション・サイエンスの一翼を担う科学的可視化手法(Scientific Visualization)に関する開発研究が推進されてきた。ここでは、こうしたさまざまな研究活動で明らかになってきたシミ

ュレーション・サイエンスの概略と、その重要な課題の1つである科学的可視化手法について紹介したい。

### シミュレーション・サイエンスの意義

図1に示したように、コンピュータのCPU性能は、時の経過に対して指数関数的に増大している。この驚異的な技術発展に呼応して、シミュレーション研究において扱える計算量も飛躍的に増大した。この意味をシミュレーション手法の1つである有限差分法を用いた場合で考えてみよう。この手法では、空間の連続関数である物理量を空間に設けられた有限数の格子点上で定義された不連続関数で置き換え、その物理量の時間発展を解

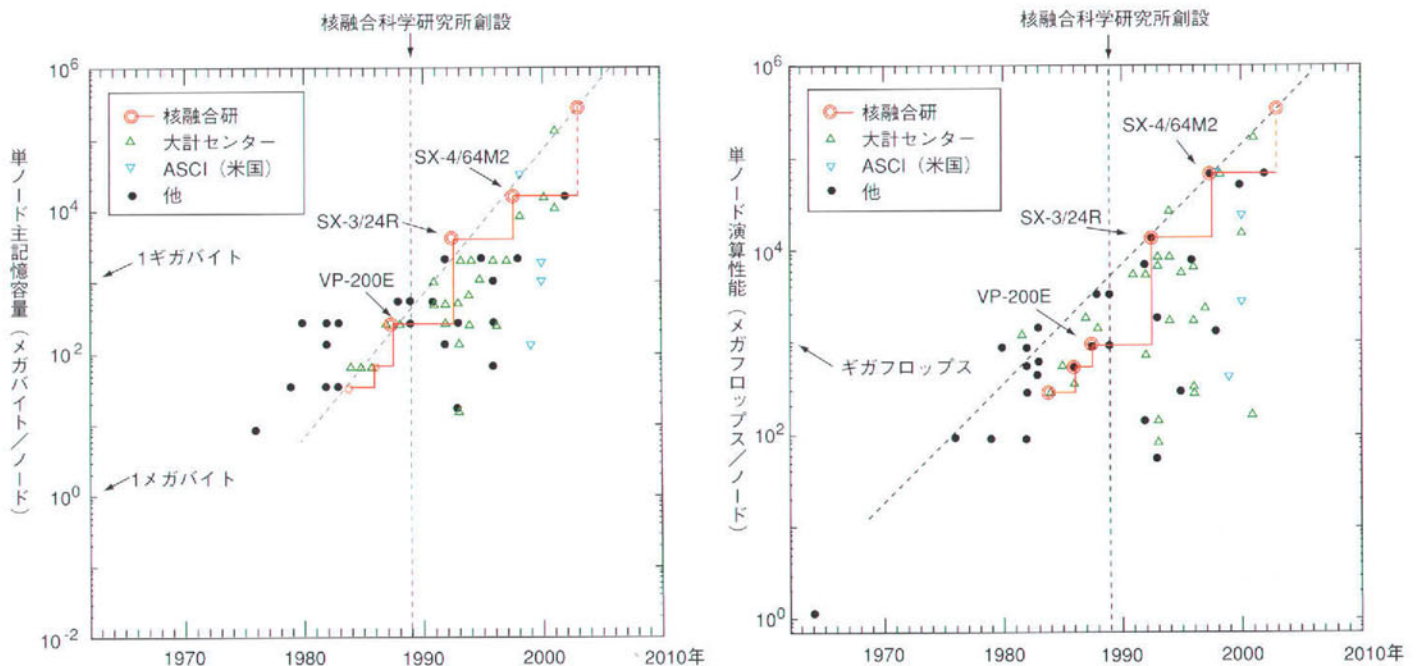


図1 スーパーコンピュータの単ノード当たりの主記憶容量と性能の変遷



いている。

例えば、これまでの計算機で、 $1000 \times 1000$ の空間格子点を用いた2次元計算が可能であるとしよう。そこに、これまでより1000倍の計算性能（計算領域の容量と計算処理スピード）を持った計算機が登場したとする。すると、もう1つの次元方向に1000個の空間格子点を加えることができることになり、それまで不可能だった高精度の3次元ダイナミクス（動力学）の数値解析が可能になる。

コンピュータ性能の驚異的な発展は、このような膨大な数の数値解析を可能にしているだけでなく、科学研究に新しい可能性をもたらそうとしている。従来の科学では、その複雑さゆえに置き去りにされてきた諸問題が山積みになっている。上で述べたコンピュータ性能をはじめとするIT技術の飛躍的な発展を背景に、これらの諸問題への挑戦の扉が、いま開かれようとしている。

プラズマ・シミュレーションを例に説明しよう。プラズマ中には、プラズマの構成粒子である電子やイオンの運動などに関連したミクロスケールの物理から、それらが集団として動くことにより生まれる流体の運動や熱の輸送などマクロスケールの物理までのさまざまな時空間スケールの物理が存在しており、時として、それらが複雑に絡み合って現実の現象が生み出されている。例えば、電子とイオンの衝突（ミクロ過程）の結果生まれる電気抵抗は、プラズマの加熱や磁場トポロジー変換等の過程を通じて、流体の運動や熱輸送（マクロ過程）に影響するし、逆に、その粒子同士の衝突は、流体の運動や熱輸送によって決まるプラズマの大局的な物理量（温度、磁場、密度など）に依存している。

これまでの研究では、現象の物理特性に見られる「階層性」に注目し、適当なモデルや近似を導入して目標とする階層における物理を別の階層から切り離し、問題を1つの階層だけに絞り込んで、その解明をめざしてきた。しかし、上の例のように、多くの場合、異なった階層・スケールでの物理がたがいに複雑に絡み

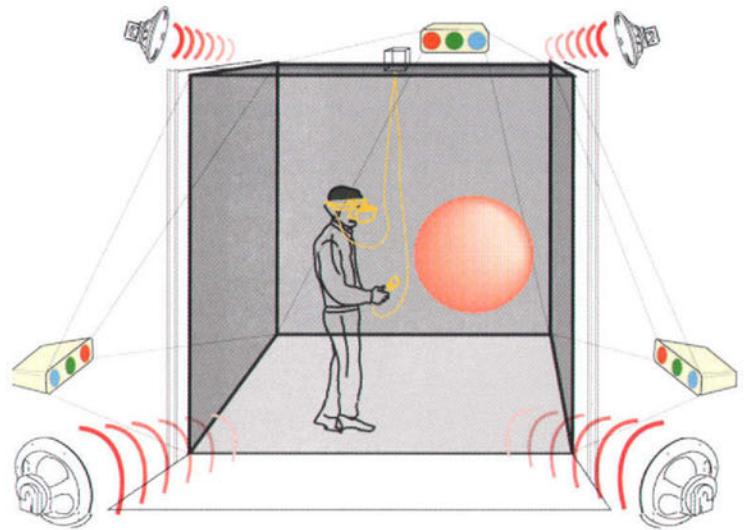


図2 CAVE方式による立体仮想現実装置ComplexScopeの概念図

合っており、「異なるスケールの階層が繋がった世界を、同時にかつ矛盾なく解くこと」なくして、その全体像を真に理解することはできない。

近年のスーパーコンピュータの驚異的な進歩は、このようなミクロからマクロまでの全階層を包含し、かつ、それらが相互に作用しながら発展する系全体の進化を、シミュレーションによって探求できる時代が到来したことを告げている。国際シンポジウムでのグリッグ氏（英国ハドレー気候研究センター長）の講演「気候変動シミュレーション」は、まさにこのようなシミュレーションをめざした典型例であった。

### 克服すべき3つの課題

では、どうすれば具体的にこのようなシミュレーション研究が可能になるのだろうか。シミュレーション研究は一連の研究活動から構成されており、それには、研究戦略や具体的な物理モデルの立案、シミュレーション手法・コードの開発、シミュレーションの実行、結果の解析・吟味、さらには理論体系化などがある。そしてこれらの過程の中に、克服すべき問題や課題が存在している。代表的な問題として、次の3項目をあげることができるだろう。

(1) いうまでもなく、現在ある世界最高性能のスーパーコンピュータを使ったとしても、ミクロな電子の運動からマクロな熱輸送までのすべてのスケールの物理を第一原理だけを用いて解くのは、そのCPU性能からして到底不可能である。そこで、この困難を克服するために「連結階層モデル」を用いた研究が始まっている（第一原理とは、対象とする系の物理過程を記述するために必要な方程式のうち、最も基礎をなしている経験パラメータや近似を含まない法則・原理）。

具体的には、まず、これまでの研究と同様に物理特性の階層性に注目し、それぞれの階層ごとに物理モデルを構築する。次に、このモデルの中に、時々刻々変化する他の階層の物理状態に依存している部分を「階層間相互作用」として取り入れる。例えば階層が空間領域で分離できる場合、領域の境界に他の階層と物理情報を交換するためのインターフェイスを設け、2つの階層を繋ぐ。このような「連結階層モデル」で各階層の物理を連動して解くことにより、系全体の挙動を追跡することが可能になる。

(2) 構築したモデルを使って大規模なシミュレーションを実行するには、計算機資源の大部分を占有するような、大きな計算領域と計算時間が必要になる。そのため、「いかにして、計算機的能力を



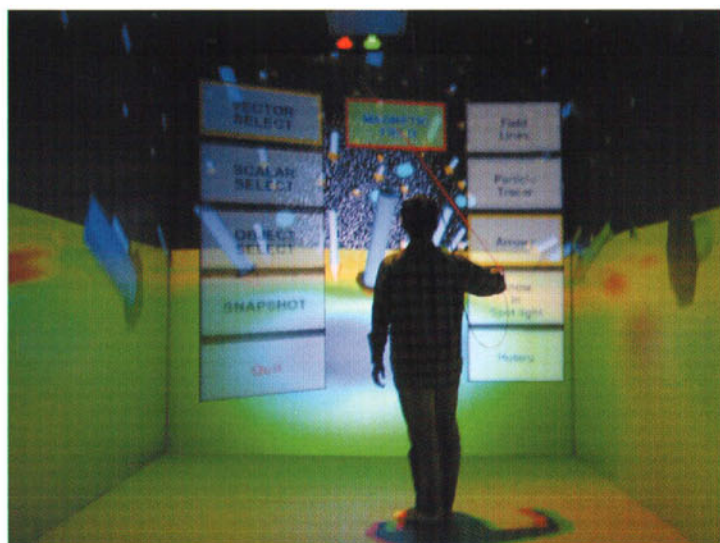


図3 対話型ベクトル場可視化環境 (VFIVE)。仮想空間上に映し出された可視化メニューをコントローラで選択することにより、VR像を作成・加工できる。

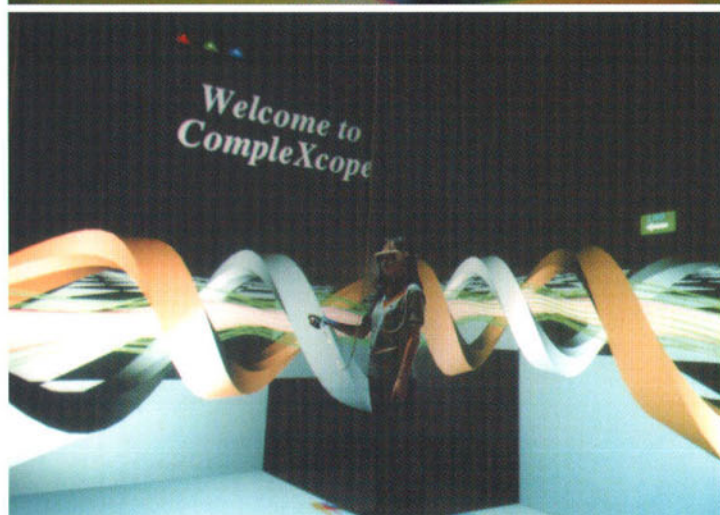


図4 VRソフト「バーチャルLHD」によるヘリカルコイルと閉じこめ領域内のプラズマ情報の表示。

最大限に引き出し、効率的に計算実行するか」が第2の重要課題である。

この効率化を推進する上で考慮すべき事項として、次のような具体的な問題がある。すなわち、それぞれの階層での計算に使われるシミュレーション・コードの中には、まったく異なる技法やアルゴリズムが含まれていること、そして、それぞれの計算効率は計算機アーキテクチャに強く依存していることである。そのため、例えば、ある階層に対しては効率よく計算できる計算機でも、別の階層ではきわめて非効率になってしまうケースが多々ある。このような場合の解決策として、計算アルゴリズムに適したアーキテクチャを持つ別の計算機を導入し、たがいにネットワーク接続して複数のシステムによるシミュレーションを行う方法

が検討されている。

(3) 大規模シミュレーションでは膨大で複雑な数値データが生成される。この複雑なデータの中から有意義な物理的情報を抽出するために、「科学的可視化手法」などの解析手法を開発する必要がある。

簡単にまとめよう。現在私たちが目標にしているシミュレーション・サイエンスとは、これまで個々の科学分野で蓄積されてきたマイクロ階層、メゾ階層、マクロ階層のシミュレーション研究の成果・ノウハウを結集し、そこに驚異的な発展を遂げているIT技術を導入して、「マイクロからマクロまでの全階層を包含し、それらが相互に作用しながら発展する系全体の進化を探求すること」である。「新しい学際的学問分野」と呼ぶ理由がここにある。以下、シミュレーション・

サイエンスの最重要課題の1つである「仮想現実技術を用いた科学的可視化手法」の開発研究について紹介する。

### 科学的可視化手法の重要性

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では、テラバイトクラスの数値データが生成されることもしばしばある。また、それらは複雑な3次元構造をしていたり、その構造自体がダイナミカルに時間変化したりする。このような複雑で膨大な数値データから、有意義な物理的情報を抽出するための解析手法として「科学的可視化手法」の重要性が認識され、それを実現するためのさまざまなソフトウェアやハードウェアが開発されてきた。

3次元の複雑な現象を解析する場合、



従来の2次元モニター画面による表現法には限界がある。それは、3次元情報を2次元画面に投影する際に、多くの有用な物理情報が落ちてしまうからである。もし、計算結果をそのまま3次元空間に再現し、直接そのデータを操作・分析することができるなら、有用な物理情報を落とすことなく、より現象の本質に早く迫ることができるであろう。

われわれの研究グループでは、このような可視化手法の1つとして、CAVE方式と呼ばれる仮想現実 (Virtual Reality=VR) 装置の潜在能力に注目し、科学応用をめざした開発研究を続けてきた (CAVE方式は米国イリノイ大学の研究グループにより開発されたVR装置の方式で、観測者が、直接、装置の中つまりVR空間に入って、VR像を観測・操作することができる。図2参照)。

研究を始めた当初は、VR装置を科学研究に本格的に応用するという試みは、国内はもちろん、世界でもほとんど例がなかった。そのため、専門知識を必要とするVRライブラリ (VR装置を用いてVR像を作るための基礎ソフトウェア群) やVR装置本体と、利用者が実際にVR像を作成・加工するときに必要な操作・入力情報との間に、大きなギャップが存在していた。

このギャップを埋め、シミュレーション研究者が気軽にこの装置を使えるようにするため、VR技術の専門家でないわれわれシミュレーション研究者が、試行錯誤を繰り返しながら、必要なソフトウェアの開発やハードウェア環境の整備を行ってきた。この開発過程で重視したのは、目的が科学応用であり、利用者の多くがVRに馴染みのない科学者だということであった。別の言い方をすると、簡便で使いやすいシステム、利用者に優しいシステムこそが、この開発研究でめざすべき1つの目標であった。

これまでの研究で、VR技術に不慣れた科学者でも気軽に利用可能で簡便な汎用ソフトの開発、立体音響や音声入力システムの構築、遠隔地間での共同研究を可能にするVRネットワークの開発などに成功した。こうした付加機能を加えることにより、具体的な問題をターゲット

にした装置として、機能の強化・環境の整備をすることができたのである。現在、われわれの装置は“CompleXcope”と呼ばれ、物理学をはじめ、物質科学、生体科学などの分野で、複雑現象の解析システムとして活用され始めている。

### 仮想現実システムの概略

CompleXcopeの主なハードウェア構成 (図2) は、以下の通りである。

《4面のスクリーン》正面と左右の壁は半透明のスクリーンになっており、それぞれの背後に設置されたプロジェクターから立体画像が投影される。床は木製のスクリーンで、天井から画像が投影される。

《プロジェクター》それぞれのスクリーンに左眼用と右眼用の画像を高速に切り替えながら映し出すための装置で、スクリーンの数に対応して4台構成となっている。

《グラフィック・ワークステーション》シミュレーション・データからスクリーン・イメージを作り出すためのもので、8つのCPU、4つのグラフィックパイプ、2Gバイトのメモリから構成されている。

《液晶シャッター眼鏡》スクリーンに映し出される画像と同期させて、左右の目に見える画像を高速に切り替える。

《コントローラ》仮想物体の表示、移動、拡大等に必要な情報を、コントローラ的位置や方向、コントローラにある3ボタンとジョイスティックの操作より入力するための装置。

《3次元立体音響装置》仮想物体に音を付加するための装置で、主にシンセサイザー、音像定位装置、スピーカーから構成されている。

CompleXcopeの特徴として、まずその没入感をあげることができる。装置内にいる観測者は、視野の大部分が4面のスクリーンで覆われるため、その没入感他は他のVR装置と比べて格段に深くなる。また、仮想空間上に映し出された3次元データは、観測者の動作や操作に従い、違和感なく高速に描画されているため、あたかもそれが本当に目の前に実在するかのようにリアルに感じられる。さらに、目の前に映し出された3次元シミュレーション・データを直接操作して、解析することもできる。このようにCompleXcopeは、言わば、シミュレーション空間の中に研究者自身が体ごと入り込み、解析することもできる革新的なシステムである。

### ユーザーインターフェイスの開発

専門知識をもたない研究者でも気軽にこの装置が使えるようにするために、わ

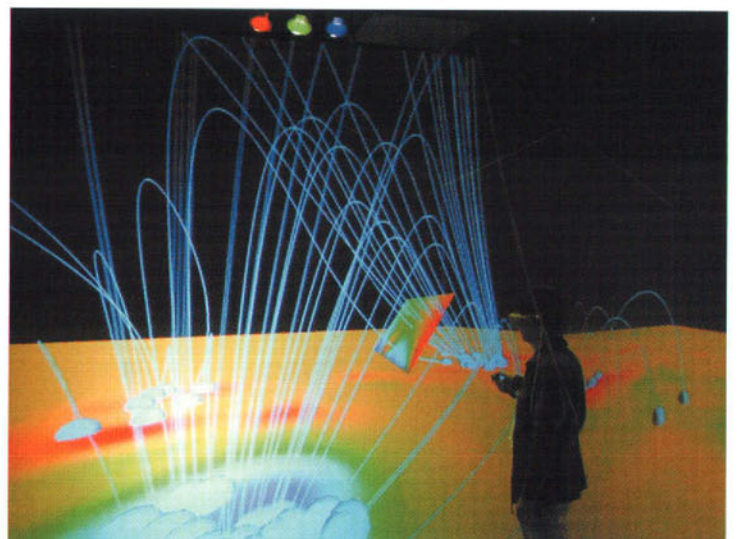


図5 太陽コロナの3次元磁場構造解析



れわれは、結果の解析に必要な操作、入力情報とVR装置やそのライブラリを繋ぐユーザーインターフェイスを開発した。主なソフトウェア・システム環境の概略は次のようなものである。

《対話型ベクトル場可視化環境(VFIVE)》このソフトウェアでは、可能性のあるすべての可視化機能を取り込むのではなく、科学応用で利用頻度が高く、汎用性の高い機能(等値面、ベクトルの矢印表示、流線、断面図など)を抽出し、専門知識を要するVRライブラリを直接意識することなく操作できる可視化環境を実現した。利用者は、図3に示したように、仮想空間上に映し出された可視化メニューをコントローラに付加したポインター機能で選択すれば、VR像を作成・加工することができる。また、例えば、空間の任意の場所でのベクトル場や断面図表示、任意の場所から出発した流線・磁力線表示も、コントローラの簡単な操作でできるようになっている。

《VR用高速ボリュームレンダリング手法》テクスチャマッピングを用いた高速ボリュームレンダリング技法をVR用に開発したもので、例えば心臓の時系列

CT画像のような、シミュレーション・データと異なる形式の複雑データの高速度3次元再生も可能である。この手法は、従来のボリュームレンダリングよりはるかに高速の処理が可能で、例えば、心臓の時系列CT画像から拍動する心臓を「3次元アニメーション」としてVR装置内に再現させることができる(ボリューム・レンダリングは、ボリュームを構成する各要素の数値(物理情報)に応じて色や不透明度を割り当て、雲状の画像として3次元表示するための手法。また、テクスチャマッピングは、物体の表面の質感を表現するために画像(テクスチャ)を貼り付けること)。

《立体音響・音声認識システム》これまでシミュレーション結果の表現法としては用いられなかった、音響表現のためのシステムをCompleXscope用に開発した。このねらいは、表現の自由度を増やし、視覚情報だけでは理解しにくい現象を、視覚より鋭い感覚を持つ聴覚情報も利用して表現することにより、シミュレーション結果の理解を深めようとしたものである。

また、音声命令でパラメータ入力を可能とする独自の音声認識インターフェイスも開発した。これによって、Comple

Xscopeと対話しながらVR画像の編集・加工ができるようになった。従来のコントローラを使ったパラメータ入力には、コンテンツによってその指示方法も変える必要があること、一度に複数人が操作できないこと、多数のパラメータを指定するのが困難であることなど、いくつもの制約があった。このシステムはそうした制約を取り除き、より多機能な操作を可能にした。例えば、シミュレーションの時間発展のVR画像を「シミュレーションスタート」や「シミュレーションストップ」といった音声命令で制御することができる。

《仮想現実実験室ネットワーク》これまで単体で使用されてきたVRシステムを高速ネットワークで接続し、地理的に離れたさまざまな分野の研究者が、VR空間に映し出されたシミュレーション結果を共有しながら、協調して議論・加工・分析できることのできる新しいタイプの共同研究のための環境システムの開発研究も進めている。すでに、各研究機関に設置されたVRシステムをネットワークで接続し、同じVR画像をリアルタイムに操作できる簡易型のシステムを構築した。また、他の地点の観測者をVR空間内に表現し、相手がどの方向からバーチャルオブジェクトを見ているかがわかるような機能も開発している。

## 科学応用の例

科学応用のために機能拡張されたVRシステムCompleXscopeは、プラズマ物理ばかりでなく、さまざまな研究分野での複雑現象を解析するための科学的可視化システムとして活用されている。具体的な応用例を紹介しよう。

### ①バーチャルLHD(図4)

これは、LHDと呼ばれるヘリカル型のプラズマ閉じ込め装置のコイルとその内部に閉じ込められたプラズマの情報(磁場、圧力、粒子軌道など)を、VR空間に表示するソフトウェアである。コントローラを操作して、任意の点から磁力線を描いたり、任意の位置とピッチ角で出発させたドリフト粒子の複雑な軌道を追跡す

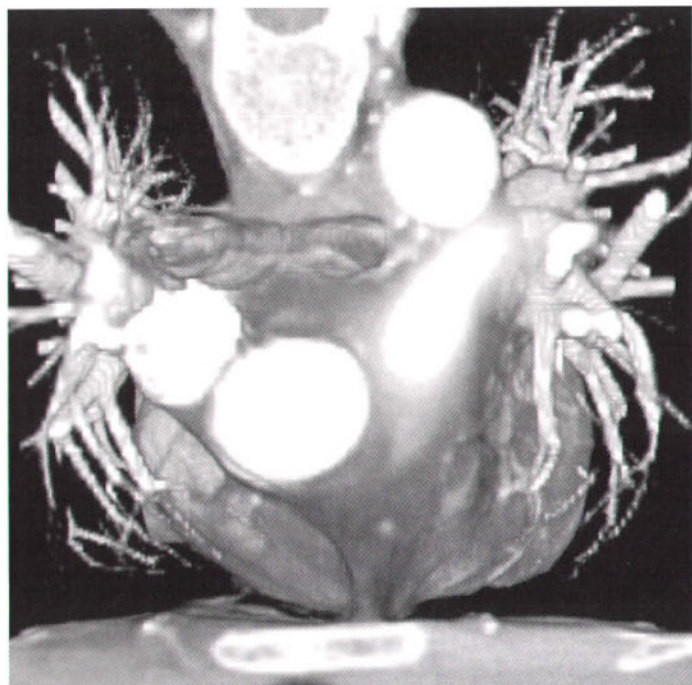


図6 VR空間に再現された拍動する心臓



することもできる。また、ドリフト粒子から仮想音を出させることにより、粒子の位置や複雑な運動の情報も直観的に知ることができるといえる。

#### ②太陽コロナ (図5)

これは、観測で得られた太陽表面の磁場の分布を基に、太陽表面上空(コロナ領域)の磁場の3次元分布をVR空間に再現するソフトウェアである。観察者は太陽表面に立ち、コントローラを使って、任意の点から出発した磁力線や、任意の断面での磁場強度を表示することができ、コロナ磁場の3次元構造解析をすることができる。

#### ③高分子系での構造形成

これは、高温でランダムな立体配置を取っている鎖状分子を急冷したときの配向秩序構造形成過程をVR空間に再現したもの。ローカルな分子間の結合状態を色で表現し、グローバルな配向秩序構造を示すパラメータを立体音響で表現している。なお、シミュレーションの開始や停止などの命令を音声で入力できるようになっている。

#### ④心臓の拍動 (図6)

これは、高速撮影した人体のCT画像(心臓)の時系列データを、高速ボリュームレンダリング手法を用いて3次元VR画像として再現したもの。断面図の表示や透明度を変更することで、血流、乳頭筋や房室弁の動きを調べることができる。目の前の空中に浮かび上がった拍動している心臓を、好きな方向からのぞき込んだり、断面で切って見たりするのは非常に印象深い経験であり、医学教育の目的に限れば現状でも十分に有用であるといえる。

### 今後の課題

シミュレーション・サイエンスの推進を目的として、われわれは仮想現実技術の科学応用をめざしたさまざまな開発研究を行ってきた。この研究は、大規模シミュレーションで生成された膨大な複雑データの解析に用いる科学的可視化手法に、新たな可能性を開いたものといえる。

このシステムを用いたさまざまな分野での科学研究は始まったばかりであるが、「拍動する心臓」(図6)の例でもわかるように、シミュレーション・データの可視化といった本来の目的以外にも、3次元VR像を用いた新しい解剖学教育、拍動するVR心臓画像による病変診断法などの医療、リハビリテーションやスポーツ医学への応用、また、仮想現実実験室ネットワーク技術を利用した遠隔地医療といった具合に様々な可能性を示唆している。

その一方で、このようなさまざまな可能性を実現する上で克服すべき問題点が存在することも明らかとなった。まず、このシステムが高価でかつ大きな空間を必要とする点である。さまざまな研究現場、医療現場、教育現場等に普及させていくには、安価で小型のシステムが望まれる。総研大の共同研究「仮想現実技術の科学研究への応用」では、現存する小型のVRシステムとの性能の比較・検討も行っている。それらは、(a) HMD (Head Mounted Display) 方式、(b) 液晶ディスプレイステレオ表示方式、(c) 一面投影型(ワークベンチ方式)の3種類である。

結論としては、いずれもCAVE方式のVR装置とは性能に格段の開きがあった。

特に、VR画像の持つ臨場感に関しては、4面のスクリーンで視界を覆われたことによって生まれるCAVE方式の効果と比べると、はるかに見劣りする。

価格の問題は今後急速に改善する可能性が高い。近年、パソコンのCPUとグラフィックボードの性能が劇的に進歩しており、すでに従来のCAVEに採用している高額なグラフィック・ワークステーションを使わなくても、安価なパソコンだけでCAVE方式のVRシステムが構築できるめどが立っている。今後は、このようなパソコンベースのCAVEシステムが基本となって普及していくと予想される。

シミュレーションの規模が大きくなればなるほど、表示すべきデータのサイズも大きくなる。現在のシステムでは、右眼用と左眼用の画像をそれぞれ1秒間に48フレームの割合で高速に切り替えながら表示しているが、このスピードこそがVR像を観測者に違和感なく受け入れさせ、リアル感を作り出している生命線である。サイズの大きなデータに対しても、このスピードを落とさずに画像表示するには、高性能のグラフィックボードや並列化などによる高速画像処理技術の開発が必要であろう。

CompleXscopeの概略を紹介したが、最後に、そのすばらしさを理解するには、この装置に実際に入って、目の前に浮かび出たVR像を操作すること、すなわち実体験するしかないことを付記しておきたい。われわれ核融合科学研究所では、CompleXscopeの利用者・見学者を大いに歓迎している。

堀内利得 (ほりうち・りくとく)

専門はプラズマシミュレーション。広島大学大学院理学研究科博士課程修了後、学振研究員、サイエンスプロジェクト社取締役を経て、核融合科学研究所助教授、教授。平成4年より、総合研究大学院大学数物研究科の併任教官となる。主な研究としては、核融合プラズマや宇宙プラズマ等の複雑性プラズマにおけるエネルギー緩和・自己組織化に関するシミュレーション研究。

