

IIIIII 巻頭言 IIIIII

計算機シミュレーション

竹内 伸



記憶とはいいい加減なものである。本稿を書くに当って、以前（20年以上前）に「コンピュータシミュレーションの功罪」という記事を書いたように思い資料を探したのであるが、公に出版された関連記事としては、1984年に「物性研究と計算科学」という特集に書いた「格子欠陥研究の現状と将来」（「物性研究」41(1984)77-88）という論文しか見つからず、その他は研究会等で話した資料が数件であった。「・・・の功罪」という記事を書きたいと思っていたことが書いたという記憶になってしまったようだ。私の研究室で計算機シミュレーション研究を行っていた1980年頃は、まだコンピュータの性能が今日とは比較にならないほど低いものであったので、シミュレーションに用いられていたモデルは信頼性の乏しいものであった。書こうとしていた「罪」とは、「鉄はなぜ低温で脆くなるか」ということを説明する物理モデルに関することである。アメリカを中心に行われた経験的原子間ポテンシャルによる転位芯構造のシミュレーションの結果が根拠となって、鉄などの体心立方金属の転位芯が **non-planar dissociation** と呼ばれる特異な構造をもつことが低温で脆くなることの物理的理由であるという誤った概念が通説になってしまった。今日では、「第1原理計算」によってようやく転位芯の真の構造が解明され、上記の物理概念が誤りであることが明らかにされているが、この誤った概念は未だに世界的に広く信じられているのである。

1980年代に比べると、計算機を用いた研究も格段に進歩した。まず、「計算物理学」という、「理論」と「実験」に続く第3の研究手法が確立した。「シミュレーション」とは日本語で「模擬実験」であり、現実を模したモデルを作って現象を擬似的に再現することである。一方、計算機物理学とは、物理学（量子論を含む）の基本法則から現実の現象そのものを、コンピュータの中に実現して、特定物質の特定条件下での挙動を解析することにより、現象を理解し、新しい物理法則や物理概念を創出する学問分野である。コンピュータが、昔は解析的に解けない問題を数値的に解くことのための道具に過ぎなかったものが、今日ではより積極的に科学に貢献する役割が期

待されているのである。このようなコンピュータの利用は、物理学にとどまらず多くの分野に波及し、「計算科学」と呼ばれる大きな分野を形成するに至った（例えば、岩波講座「計算科学」1-6巻）。

このような時代背景の下で、微小重力科学の研究分野でもコンピュータの役割はますます重要にはなっていることは確かである。特に、国際宇宙ステーションでの貴重な実験機会を利用して得られた結果の科学的成果を最大限に高めるためにも、コンピュータの支援は不可欠である。計算機シミュレーションの目的は、(1)現象のメカニズムを知る、(2)実験の代替あるいは再現、(3)現象の予測、の3つに大別されよう。流体科学は筆者にとって専門外の分野であるが、今回の特集の解説では「凝固分野」は(1)が主で、「融体熱物性」では実験データの解釈のための(2)に属する内容が主であると思われる。「流体熱物性のモデリング」では、計算上の仮定や不確定さが結果に決定的な影響を及ぼすことは少ないのではないかとと思われる。それに対して、凝固分野のシミュレーションなどでは異相界面での反応が関与するために、界面構造の詳細や界面移動の原子過程、界面と不純物の相互作用など、おそらく現象を左右する重要な不確定要素が含まれるのではないかと想像され、ある仮説のもとにシミュレーションが行われることになる。問題は、実験結果を説明できたからといって直ちにその仮説が真実であるとは今も変わりはない。

将来は、我々の知見が大幅に拡大し計算能力・技術も進歩して、結晶成長のような問題もコンピュータ内で仮説なしに再現できるようになることが期待される。そうなる宇宙に行ってまで実験することの意義はなくなる。やや突飛な連想であるが、将棋の対局でコンピュータがプロ棋士に勝ったという半年ほど前のニュースを思い出した。コンピュータが勝負を決してくれるのであれば、人間同士が勝負を争うことが味気なくなる。物理現象もコンピュータがすべて実現してくれるようになることは科学の大きな進歩には違いないが、実験研究者としてはさびしい感もある。しかし、自然現象はゲームと違ってそう生易しいものではなからうし、特にコンピュータは概念形成を行ってくれないので、一般法則の抽出やメカニズム概念の創生など、研究者の重要な役割がなくなることはない。

東京理科大学近代科学資料館館長，東京大学名誉教授，
東京理科大学名誉教授
(E-mail: takeuchi@rs.noda.tus.ac.jp)