

秩序・無秩序現象の計算機実験——50年前に考えられたこと

小田垣 孝 〈科学教育総合研究所 t.odagaki@kb4.so-net.ne.jp〉

1. はじめに

人類が月まで行けることが実証された1968年は、世界中が学生運動の喧噪の中にあった年でもあるが、この年に京都市で開催された統計力学の国際会議で多くの参加者に強い印象を与えた発表が、計算機実験グループ(荻田直史(理研), 上田顯(京大工), 松原武生(京大理), 松田博嗣(京大基研), 米沢富美子(京大基研))による「Computer Simulation of Order-Disorder Phenomena (秩序・無秩序現象の計算機実験)」¹⁾である。この発表の特徴は、単なる計算機実験の結果の発表ではなく、相転移現象をミクロな視点から捉えた様子を映画として見せたことにあり、グラフィックの表示技術がほとんどなかった時代の画期的な発表で、そのインパクトの大きさから映画は会議中何度も上映されたという。技術の進歩した現在であれば、同様の映画を作るとは学部学生の演習課題になるようなものであろうが、数10キロバイトのメモリーしかもたない当時の計算機を使い、映画を作ろうという考え方に至った経緯や各研究者の問題の捉え方は、今後も若い研究者が新しい研究を始めるときのヒントになるものと思う。残念ながら計算機実験グループのうち、荻田、松原両先生は他界されており、また本稿執筆中に米沢先生の訃報に接したが、昨年12月に上田、松田両先生(以下敬称略)とお目に掛かる機会があり、この研究に至った経緯や考え方をいろいろと伺うことができた。この時伺った話とすでに発表されている報告²⁻⁴⁾を参考にして、当時計算機実験グループの方々を考えられたことを振り返ることにする。

なお私は、1968年は京都大学の修士課程1年生であったが、残念ながら国際会議には参加していない。しかし、1970年代には計算機実験グループの方々のうち、荻田、松田、米沢とは共同研究を行い、また松原、米沢も参加していた遠藤裕久研究室(京大物理)の液体金属のゼミには常時参加し、松原研のゼミ、上田研のゼミにも折に触れ参加していた。このような接触を通して計算機実験グループの方々の考え方に近くで触れ、私自身の研究の進め方も少なからずその影響を受けている。

2. 時代背景

1950年代に大きく進歩したプログラム可能な計算機は、物理学にも新しい発展をもたらした。その一つは、Broadbent and Hammersley⁵⁾によるパーコレーション過程の再定義である。彼らは、FloryやStockmayerによってゲル化のメカニズムとして導入されたつながりの概念を、計算機が

最も能力を発揮できる抽象的な問題として格子上で定義し、実際に計算機を用いてパーコレーション閾値を求めた。今やパーコレーションの考え方はランダム系の物理学の一つのパラダイムとなっているが、この研究がきっかけとなったのである。もう一つの重要な研究は、剛体球の密度を上げると結晶化するというAlder and Wainwright⁶⁾およびWood and Jacobson⁷⁾の計算機実験である。物質が結晶になるためには分子間の引力が必要であるという当時の常識を覆した結果は、計算機が単に数値計算の手段としてだけでなく、新しい研究の道を拓く手段として用いることができることを示した。

一方、統計力学・物性論の分野では、2次相転移の研究が発展し、その転移点を求める多くの近似法が開発されていたが、実際の相転移で見られる臨界指数が平均場近似で予想されるものとは異なっていることがHeller⁷⁾によって示され、さらに臨界指数の間で成立するスケーリング則がKadanoff⁸⁾によるブロックスピンの考え方で説明できることが示されていた。1968年の統計力学の国際会議はそんな状況下で開かれたのである。

3. 計算機実験を始めるきっかけとそれぞれの役割

計算機を用いた研究をしようとして最初に決断したのは上田であった。上田は、宇宙線の研究者で、空気シャワーの発生モデルの数値計算を荻田とともに京都大学基礎物理学研究所に置かれたモンローの電動計算機でやっており、さらに請われてシドニー大学に移り、計算機を用いた計算をやっていた。シドニー大学ではすでにモンテカルロ法などが行われており、上田は身をもって計算機の能力を体験していた。数年後、素粒子実験における宇宙線の研究分野が、高エネルギー加速器に取って代われつつあり、宇宙線の研究に限界を感じた上田は、研究分野を統計力学に変え、その中で計算機を用いた研究をしようと思った。このような研究分野の大転換は、多くの一線の研究者がやっており、あるノーベル賞学者は、分野を変えるたびにそれまでの研究資料を全て捨てるということを聞いたことがある。日本でも計算機は使われ始めていたが、計算機実験に手を付ける研究者はなく、上田は日本で誰もやっていないところで自分の強みを生かした研究をやろうと考えた。この考え方は、京都大学で学んだ者が自然と身につけた京都大学の学風ということができよう。上田は、その著書に見られるように、緻密な論理立てを得意としており、この研究においても基本的な問題の設定とプログラミングに力を発揮した。

イジングモデルを計算機実験のテーマとして取り上げたのは、上田が大学の同級生の松田に相談したとき、松田が提案したことによる。松田は、松原とともに超流動を記述する格子模型や、不純物格子の格子振動などモデルを用いた厳密な研究をやってきており、イジングモデルにおける相転移において、系の微視的状态を計算機によって直接見られれば、解析的手段では到底得ることのできないモデルの特徴を明らかにできると考えた。つまり、世界的に多くの人がしのぎを削っていた臨界指数を正確に決めるという定量的な研究ではなく、計算機の特長を生かした研究を狙ったのである。松田は、「研究は未知のものを既知にする」ことであり、「未知なものに対して計算機にしかできないことをやる」のが計算物理学の役割であると言っていた。「どう考えて現象を理解し、既知のものに変えるか」という考え方は、湯川秀樹教授が講義の中でもよく言われていたことであり、京都大学物理学科に流れている基本的発想法である。

松原は、松田からイジングモデルの計算機実験をやるという話を聞いた。松原は、物理現象の本質を捉える単純なモデルを構築して、現象を物理的に説明することに長けており、ニューヨークの私のアパートに泊まれた折に教わったように「よい研究をするには自分の研究分野だけでなく、他の分野の研究にもヒントがあるからそれを見逃さないことが大切だ」と考えていた。松原は、磁性体のモデルとして導入されていたイジングモデルを変位型強誘電体の相転移に応用できると考え、Glauberの動的イジングモデル¹⁰⁾を用いたシミュレーションを提案した。最終的に作成された映画の前半部分はそのモデル化の話となっているが、イジングモデルにおける相転移の微視的構造を明らかにするという当初の趣旨がぼかされてしまった感は否めない。実際、後に書かれた解説²⁾では、当初の趣旨が前面に出されている。

京都大学で持ち上がったプロジェクトを遂行するためには最新の計算機が必要であったので、理化学研究所にいた荻田に話が持ちかけられた。荻田は、上田、松田と京都大学の同級生であり、計算機を用いた宇宙線に関する理論的計算をやっていた。荻田は、問題点を直ちに見抜き、信条としていた「最先端の計算機技術をそのぎりぎりの限界まで活用して、世界で唯一の研究をする」ために、様々な工夫を行った。荻田は、微視状態を直接見るために、グラフィックディスプレイ上にカラーで描き出した1/4あるいはそれより短いモンテカルロステップ毎のスピンを配置をコマ撮りし、それをつなげて動画を作った。実際のシミュレーションの詳細は論文¹⁾に譲るが、32,768個のスピンに対して、臨界点直上の温度 $T/T_c=1.05$ では10,000モンテカルロステップ(実時間300時間)という当時としては考え

られない大きな系の長時間シミュレーションが行われた。

なお、米沢はこの研究の手法を将来高分子やタンパク質に応用するための若手研究者として議論に参加しており、映画の最後でその決意が述べられている。

4. 映画完成後

1968年の国際会議では、東京大学のグループによる小さな系の分配関数を計算機を用いて厳密に求めた結果も報告されているが、これはいわば統計力学の理論的枠組みを計算機で確認するという研究である。計算機実験グループが発表した計算機の新たな利用法であるマイクロな状態を可視化するという仕事は当時としては画期的なものであった。実際、京都大学基礎物理学研究所で湯川を含む少人数の研究者に上映されたときに、湯川は「これは素晴らしい、何かの賞に値するものだ」と高く評価していたという。

臨界点近傍で大きな揺らぎをもつスピンの空間構造は、研究者が初めて目にするものであった。その構造は、Kadanoffのブロックスピンの考え方⁹⁾を支持するものであり、その後のWilson¹¹⁾による繰り込み群の方法へと発展するきっかけとなったと言えよう。

5. おわりに

物理学は、自然現象が「どうして起こるのか」を説明する学問であり、その考え方を構築する手段として、計算機は大きな役割を果たしている。特に、モデル系のパラメータをコントロールした実験は、計算機上でしかできないので、計算機実験から得られるデータは重要である。また、微視的な構造を直接可視化することができるので、物理的な描像を作るのに大きな役割を果たすことができる。この映画が作られたときから50年が経過し、その間の計算物理学の進歩は計り知れない。しかし、この映画の作成過程で示された計算機実験グループの方々の研究に対する姿勢は、現在においても独創的研究を目指す研究者の大きな指針となろう。

参考文献

- 1) N. Ogita et al., J. Phys. Soc. Jpn. Suppl. **26**, 145 (1969).
- 2) 計算機実験グループ, 自然7月号, 66 (1969).
- 3) 松田博嗣, アンサンブル **12**, 36 (2010).
- 4) 上田 顯, 固体物理 **33**, 869 (1998).
- 5) S. R. Broadbent and J. M. Hammersley, Math. Proc. Camb. Phil. Soc. **53**, 629 (1957).
- 6) B. J. Alder and T. E. Wainwright, J. Chem. Phys. **27**, 1208 (1957).
- 7) W. W. Wood and J. D. Jacobson, J. Chem. Phys. **27**, 1207 (1957).
- 8) P. Heller, Rep. Prog. Phys. **30**, 731 (1967).
- 9) L. P. Kadanoff, Physics **2**, 263 (1966).
- 10) G. J. Glauber, J. Math. Phys. **4**, 294 (1963).
- 11) K. G. Wilson, Phys. Rev. B **4**, 3174 (1971); *ibid.* **4**, 3184 (1971).

(2019年1月12日原稿受付)