

特集／理論と計算の物理学

理論物理と計算物理

初田 哲男

計算物理は、理論物理、実験物理と並んで物理学研究の3本柱の一つです。計算物理は、20世紀半ばから本格的な利用が開始された電子計算機の発展と密接に関わりながら進展してきました。そのルーツは、米国ロスアラモス研究所において、当時の理論部門長ニコラス・メトロポリス (N. Metropolis) の指揮のもと建造された汎用デジタル電子計算機 MANIAC I (Mathematical Analyzer Numerical Integrator And Computer Model I)¹⁾とされています。

当時、毎秒 10^4 回の演算^{*1)}を実行できる最高性能の計算機だった MANIAC I では軍事関連研究に加えて様々な基礎科学研究が行われました²⁾。中でも、物理学者エンリコ・フェルミ (E. Fermi) は、同僚のジョン・パスタ (J. Pasta)、スタニスワフ・ウラム (S. Ulam)、プログラミングを担当したマリー・ツィンゴ (M. Tsingou) と共に、フェルミ-パスタ-ウラム-ツィンゴ (FPUT) 実験と呼ばれる歴史的な計算機実験 (1954年-1955年) を MANIAC I を使って行いました³⁾。これは、統計力学におけるエネルギー等分配則 (粒子間の相互作用によってエネルギーが各自由度に均等に分配されること) を計算機で検証しようという目的で、

一列に並べた 64 個の質点を非線形性を持つバネで繋いで、その時間発展を数値的に解くという数値実験でした。ある日、偶然に計算機を長く動かしてしまった結果を確認してみたところ、特定なエネルギー分配を持った初期状態に戻る再帰現象を発見しました。その結果、この論文の要旨の最後の文章は以下のようになっています (筆者の和訳): 「これらの結果は、エネルギー等分配則へ向かう傾向が⁴⁾、ほとんどないことを示している。」

フェルミが 1954 年の 10 月に亡くなったこともあり、この計算機実験はロスアラモス研究所のレポートとしてのみ報告されています³⁾。しかし、この奇妙な結果を理解しようとする理論研究が、ソリトンやカオスの概念を大きく進展させることとなります⁴⁾。特に、FPUT 実験に触発されて行われたノーマン・ザブスキー (N. Zabusky) とマーティン・クルスカ (M. Kruskal) の研究 (1965年)⁵⁾は、衝突しても形を保つソリトンの理論を生むきっかけとなりました。また、FPUT 実験は間接的に、戸田盛和による周期解を持つ非線形格子 (戸田格子) の発見 (1967) にも繋がっています⁶⁾。コンピュータが理論の基礎に新しい光を投げかける手段になるという好例が、計算物理学の黎明時にすでに存在したことは驚嘆に値します。

本特集「理論と計算の物理学」では、物理現象を解明する際に、理論物理的アプローチと計算物

*1) 2019年8月に引退した京コンピュータは毎秒 10^{16} 回/秒、現在建造中の富岳コンピュータはその 100 倍の速度であることを思い出すと、隔世の感があります。