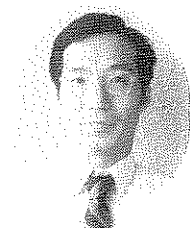


卷 頭 言

材料シミュレーションの現状と課題



谷 口 研 二

材料科学の分野では、実験を通して導いた経験的な理論が各種の現象を説明するために使われている。しかし、このような現象論的な理論が適用できるのは、ある限られた場合だけである。もっと一般的な条件にまで適用範囲を拡張するには高次の効果を組み込んだ複雑な定式化が必須である。理論式が複雑になると物質の挙動の物理的イメージが損なわれるだけでなく、数式の遊びと化してくる危険性もある。「多数のパラメータを使えばどのような実験データでも再現することができる」からである。このような意味でマクロな現象を取り扱う経験的な理論は大きな壁に突き当たっているといえる。

一方、最近の計算機の急速な進歩によってこの壁の一部が突き崩されようとしている。計算物理と呼ばれる新しい学問分野である。従来の近代科学の基本であった実験と理論という枠組みの中に計算機という強力な助っ人を加えることによって、われわれの思考範囲が大きく広がった。これは産業革命を契機として肉体労働の形態が大きく変化した過去と類似しており、とてつもない時代にわれわれは遭遇しているのである。まるでタイムカプセルに乗り込んだ「ミクロの決死隊」のように、計算機という「エンジン」を駆使して前人未到の時間・空間スケールの領域にまで自由に立ち入り、そこで起こる現象をつぶさに見てくることができるのである。たとえば、第一原理に基づく計算によれば結晶表面で起こる化学反応の様子が CRT 画面上で手にとるように見えてくる。このようなことは十年前には考えられもしなかったことである。

しかし計算物理も膨大な計算機資源を使い込むという大きな問題を抱えている。特に第一原理的な計算では電子の波動関数とイオンとの相互作用を微小時間ステップで正確に計算する必要があり、最高速の計算機を用いても数百個の原子の系を取り扱うのが精一杯である。将来、多数の粒子系で本格的な計算をするためには画期的な計算アルゴリズムの開発や超並列計算機の開発が不可欠である。ただ研究開発の効率化の観点からは膨大な計算機資源を枯渇するほど使い込むことは決して望ましいわけではない。上記の第一原理的なシミュレーションに替わるものとして、原子レベルと現象論的な理論との間に位置するメソスコピックな領域をシミュレーションする方法も研究開発の効率化の面から期待されている。

過去数年間、急速に発展してきたシミュレーションも今その応用が始まったばかりである。今後、多くの人がこれを思考の道具として利用し、さまざまな分野で手軽に使われることを期待したい。

(大阪大学工学部)