

応用数理と計算科学における理論と応用の融合に向けての提言

石川 英明 (Hideaki Ishikawa) ¹

概要

応用数理と計算科学における理論と応用の融合を進展させる事例を示す。融合が単に 1 と 1 とが合わさったもの以上の相乗効果を生み出すためには、一人一人の研究者が複数の専門領域に対して広い知識と深い理解を持たねばならない。どのような問題 (対象) を扱うか? 個別分野のみならず、より広い分野へ適用可能性を拡げるものが望ましい。視野を広げて、世の中の現実の問題に目を向けなければならない。そこは解くべき課題の宝庫である。現実の問題を解決するために、何をしなければならないかを理解した上で、多くの分野から、持っているもの、使えるもの、を調達し、それでも足りなければ新しい道具を作り、それらを駆使して課題を克服する。それはマルチ・ディシプリン (multi-discipline)、即ち、「一人一人が多方面に渡り、広い知識と深い理解を持って、課題を克服する」という世界である。本報告では、マルチ・ディシプリンについて述べ、更にその実践例として、量子力学の数値解析を述べる。

1. 序論

応用数理と計算科学における理論と応用の融合というテーマについて、「10 年後に影響を与えるかもしれない講演」という京都大学数理解析研究所研究集会の標語に勇気付けられて行った講演をベースにして、自分の経験からこれまで考えていたことを整理したので、以下に述べる。いろんな分野の人が、建前論ではなく、本音で話をし、実現して行くことが大切と考えている。以下の項目に従って述べる： 2. 自己紹介、3. 高精度分子軌道法への道、4. 役に立つということについて—マルチ・ディシプリンの薦め—、5. 歴史から学ぶこと、6. 応用数理と計算科学、7. マルチ・ディシプリンとしての量子力学。

2. 自己紹介

自分の経験に照らして述べるので、先ず、自己紹介を行う。経歴 (学歴、職歴)、職務歴、研究歴は以下のとおりである。

学歴

- 1970 年 4 月 埼玉大学理工学部物理学科入学
- 1974 年 4 月 東京都立大学大学院物理専攻修士課程入学 (物性理論研究室)
- 1976 年 4 月 東京都立大学大学院応用物理専攻博士課程入学 (物性理論研究室)
1980 年単位取得退学
- 1984 年 2 月 理学博士 (東京都立大学)

¹ 〒257-0001 神奈川県秦野市鶴巻北 2-8-1-001 (E-mail: UHI91261@nifty.com)

職歴・職務歴

- 1980年4月 東京都立大学理学部研究生（1982年3月まで）
- 1982年4月 株式会社富士通入社
1982 - 1984 電子交換ソフトウェアの開発
- 1984年5月 富士通研究所株式会社入社（富士通から富士通研究所へ出向）
1984 - 1987 分子線エピタキシー技術を用いた化合物半導体結晶成長
1987 - 1992 DV (Discrete Variational) - $X\alpha$ 法を用いた分子の電子状態計算
1992 - 1995 高精度数値計算法に基づく分子軌道計算プログラムの研究開発
1995 - 1997 TCAD (Technology Computer Aided Design) の研究開発
(半導体コンパクト・モデルのパラメータ抽出法)
- 1997年4月 財団法人国際超電導産業技術研究センター超電導工学研究所へ出向、主管研究員
1997 - 2000 超伝導体におけるトンネル接合の理論と数値解法の研究開発
- 2000年4月 富士通研究所株式会社復職
2000 - 2001 TCAD の研究開発
- 2001年4月 株式会社半導体先端テクノロジーズへ兼務出向
2001 - 2002 TCAD の研究開発（3次元でのメッシュ生成法の開発）
- 2002年12月 株式会社半導体先端テクノロジーズへ出向、主任研究員
2002 - 2008 TCAD の研究開発（3次元でのメッシュ生成法の開発）
2008 - 2011 TCAD の研究開発（ソリッド・モデラーを使った形状作成法の開発）
- 2011年3月 株式会社半導体先端テクノロジーズ定年退職
現在に至る

兼務

- 1996年4月 信州大学地域共同研究センター客員教授（人工知能及びCAE (Computer Aided Engineering) 担当で分子軌道法の研究開発、1997年3月まで兼任)
- 1997年4月 ソニー学園湘北短期大学非常勤講師（応用数学担当、2000年3月まで兼任)

自宅における研究

- 1995年 1995 - 高精度数値計算法に基づく分子軌道計算プログラムの研究開発
2000 - 量子力学の数値解析（固有値問題の高精度数値計算法）
現在に至る

3. 高精度分子軌道法への道

会社での研究開発が高精度分子軌道法に進むきっかけとなった。富士通研究所入社当初の実験のことから述べる。

1984-1987年： III-V 化合物半導体の結晶成長の実験では、実験を通して物質に関して実感を持つことができた。また、実験家がどんなことに関心を持つか、理解が進んだ。高純度結晶を作るため、原子や分子の構造や反応を考える必要があった。そこで表面化学反応に関して、我々が如何に無知であるか、を思い知った。

1987-1992年： そこで第1原理計算へ進み、DV- $X\alpha$ 法を用いて、シリコン系半導体原料ガスやシリコン・クラスターの電子状態と光吸収スペクトルの計算を行った。

1992-1995年： 更に現実の系を扱うために必要な高精度分子軌道法の研究開発に入って行った。目的は、数値計算の精度を高め、信頼できる全エネルギーと力を計算し、化学反応を追えるようにすることであった。改良の主な項目は、高精度三次元数値積分法の開発、汎関数を $X\alpha$ 近似から当時知られていた多様なものに拡張すること、であった。開発の結果、単一中心の三次元数値積分で15桁、多中心の三次元数値積分で13桁の高精度の結果を得た（7.3.5節）。

尚、会社での他の仕事については、別の機会に譲り、ここでは割愛する。また、自宅での研究開発について、7.3.5 節で述べる。

4. 役に立つということについて — マルチ・ディシプリンの薦め —

4. 1. 役に立つということの意味

役に立つという意味は何かを考える必要がある。「役に立つ」という言葉は、国語辞典（新明解国語辞典、第5版、三省堂）では、①その仕事をやらせてみて、十分な働きが有る；②十分、使える；③仕事を依頼した側のプラスになる；とあり、和英辞典（新和英中辞典、第4版、研究社）では、be useful であり、英英辞典（The Concise Oxford Dictionary of Current English, 8th ed.）では、1 a of use; serviceable. b producing of able to produce good results. 2. *colloq.* highly creditable or efficient. とある。要は、使う側が、これは良い、使える、と判断することである。提供側は、逆に、これは良い、使える、と思ってもらうことが必要である。そのために、提供側が、これは使える、と自信を持つことは大切である。しかし、その評価を行うのは他人であって、自分ではないことに注意が必要である。

以下の価値観はおそらく多くの人々が共有していると思う：人は社会の中で生きている。自分は多くの人から沢山の事をしてもらっているおかげで生きている。自分もまたお返しをしないといけない。研究も同じである。研究者は多くの人々のおかげで研究をさせてもらっている。（誰が研究資金を払っているか、の大元を考えれば明らか。）研究者もお返しに、研究の結果を世の中に還元しなければならない。

4. 2. 役に立つ仕事を進めるためには

役に立つためには何をしなければならないかを知る、理解することが必要である。解くべき問題は世の中の現実の課題の中にある。それは様々な分野と関わっていることが多い。そして、それぞれの分野で深い掘り下げがある。そうした状況で対応するには、個々の分野に閉じこもらずに、複数の分野が融合した領域で課題を探ることが必要である。また、複数の分野の人と横断的に深い議論ができるようにすることが必要である。

次に、課題の解決で本当に必要な要件は何か、本質的に使えるものにするにはどのような条件を満たさねばならないかを理解し、把握することが必要である。把握のための調査検討に労力と時間を惜しんではならない。

要件や条件が把握できたら、次に、それを実現するための手段を集めて来る。ここでも調査に時間と労力を惜しんではならない。既にあるもので使えるものは使う。人の力を借りることができるのであれば、借りれば良い。どうしても条件を満たすものがなければ、自分で作れば良い。そして、手段を使って要件や条件を実現する。その結果は、自分がやっている分野のみならず、他の多数の分野で使われて行く。

上記の実現に必要な知識と理解を得るために必要な事柄はマルチ・ディシプリン、即ち、一人の人間が、多方面に渡り、広い知識と深い理解を持つことである。

これは大変、それよりも各分野の専門家と連携して仕事を進めれば良いではないか、一人よりも多くの智慧が入って効率的だ、また一人一人の分担が増えないから気が楽になる、という考えもある。これは一つの見識であり、連携が上手く行けばそれに越したことはない。しかしながら、連携には落とし穴があって、未知の世界を切り開くには不適なことがある。先ず、目的意識には個人差がある。その差が大きいと、連携そのものが始められない。知識レベルが不統一だと議論にならない。人や分野によって言葉が違う、或いは同じ言葉でも意味が違うことが多々あり、互いに相手の事を理解するのに時間がかかる。近年、学問の細分化（狭く、深く）が進み、同じ

言葉で括られている既存の分野（数学、物理、化学、…）の中でも、更なる細分化が重層的に進んでいる。このため、狭い範囲内のことしか分からない、少し分野がはずれたら、言葉が通じない、ということが常態になっている。²連携できるためには、手間と時間を惜しまない必要があるが、手間と時間を節約するために連携するのだと考えていると、結局上手く行かない事が多い。また、組織が絡んでくると、互いに良い所を持ち寄ろうと始めたが、こちらから良い所を出すのは少しにして相手から沢山もらおう、となるのが時にはある。困難に直面し、乗り越えるのに苦労している時に、悪いのは自分ではない、と居直るケースがある。特に分野の境界領域で。

こうした困難を乗り越えるには、一人の人間が多分野のことを理解し、問題の所在が何所にあるかを突き止めて、問題の解決にはどこで対処するのが合理的かという判断基準に従って課題を適切に切り分けること、そして切り分けた課題を全て対処することが、理に適った解決法である。課題の質が問題となる場合には、人の数が多いことは解決に結びつかない。但し、ここで注意しておくが、著者は連携を否定していない。必要な連携を上手く行うには、上に述べた多くの障害を取り除くことが必要である。それにはマルチ・ディシプリンが有用である。

いろんな分野の人と深い議論ができること、それは大学のみならず、企業の人達とも、分野を超えて話ができるだけの実力を身につけることが必要である。昔は、研究できる環境は大学しかなかったが、今では企業の方が大学よりも遙かに先に進んでいるケースが多い。³こうした状況にあって、大学が知の拠点として存続するためには、大学の中でも、研究者が個々の分野を究めるだけでなく、分野を超えた共同研究を行うことが有用かつ必要ではないだろうか？

4. 3. マルチ・ディシプリンを根付かせるには

4. 3. 1. 必要な項目

一人の人間が複数の専門分野を持てるようにするには、研究と教育の場で以下のことが必要である。

- ・教える側をマルチ・ディシプリンにする。学ぶ側にだけやれと言っても、やれない人間が教えることは困難である。このため、教える側の再教育が必要である。これには on the job training (OJT) で対応するのが現実的であろう。
- ・業績評価基準をこれまでのモノ・ディシプリン重視から マルチ・ディシプリン重視へ変えて行く。業績評価者を マルチ・ディシプリン経験者に変えて行く。
- ・人生経験豊かな年配者にマルチ・ディシプリンへの転換を促す。それは業績評価法を変えると、制度の不備や綻びが続出するからである。その解決には人生経験豊かな人の智慧が役に立つ。また、制度の改正には種々の施策が必要となる。そうした事には人生経験豊富な人達が率先して取り組んで頂きたい。特に、功なり名を成し遂げた方々に推進者となって頂きたい。また、そうした方々が逆方向に推進されては逆効果となるので、謹んで頂きたい。
- ・いろんな分野の勉強をするには時間と労力が結構かかる。業績評価に知識を獲得することへの評価を加えることも必要である。
- ・環境を整備する。勉強しやすくするガイドラインを作成する。例えば、読むべき本のガイドを作って公開する。何故なら、各分野の専門家はそれぞれの分野で何をどの順番で読みこなすと良

² こうした状況を「知の爆発」と言うことがある。

³ 例えば、著者が所属した半導体の分野はハイテクの最先端の分野であった[1]。現代技術の最高品質のものを使う(広い多業種分野から調達)。人、金、モノを投入し、最高水準のモノを作る。豊富なデータ、ノウハウの蓄積がある。業界内で熾烈な競争(世界の中で競争)を行っている。これと関連して、業界の内部にいないと情報が入って来ない。日本の大学の研究者には、ごく一部の共同研究者を除いて、馴染みが低い世界となっている。

いかを知っているが、他分野の人達にその知識が伝わっていないことが多いからである。

・入学試験では、教える方が受験者におもねらないこと。大学入試では関連科目を複数受験させる。高校、中学、で幅広く学ばせる。分野が異なると、頭の働く部位が異なる（経験的に）ので、人生の早期からいろんな部位が働くようにするように訓練する。幅広く勉強するのを開始する年齢は低い方がよい。年が行ってから幅広くを開始するのはバリアが段々高くなる。不可能ではないが、早く始めた方がよい。

4. 3. 2. 学際研究に関する報告例の紹介

以下に、学際研究に関する最近の調査報告例[2]を紹介する。

まず、報告書で使われている言葉や内容の対応を述べておく。我々が multidiscipline と呼んでいるのは、報告書では学際研究 (Interdisciplinary research) に対応する研究である。これは[2]の表 1 の特徴から言える。我々は一人の研究者が複数分野の研究領域に通じる状況を扱っているが、報告書では複数分野の研究者が集まって一つの研究課題に取り組む状況を扱っている。こうした違いはあるが、内容は共通していることが多々あるので、以下にその概要(項目)を述べる。

- ・我が国における現状認識
 - ・学際研究推進政策を進めたけれど、分野連携・融合領域研究への取り組みは進んでいない。
 - ・分野連携や新たな融合領域の創出に関する研究者の活動に対し、大学の支援は不十分である。
 - ・人文・社会科学と自然科学の知の統合は弱い。
- ・研究実施側の課題と取り組み
 - ・研究実施機関が内包する学際研究の阻害要因
 - ・研究者へのインセンティブの問題
 - ・学際研究者に対するポストが限られている
 - ・学際研究成果を適切に(正当に)審査・評価できない → 採用や昇進に不利
 - ・研究文化の違いを乗り越えるための学習・訓練の機会がない
 - 既存分野で研究業績を確立した研究者である程、学際領域への取り組みが阻まれる
 - ・研究資源配分の問題
 - ・安定的、継続的な運営資金を確保することが困難である
 - ・研究者間の交流施設・設備が整備されていない
 - ・海外研究実施機関における学際研究促進のための取り組み事例
 - ・ウィスコンシン大：学際研究グループの一括採用、
 - ・南カリフォルニア大学：学際研究者の優遇、
 - ・カリフォルニア大学デイビス校：大学本部から学際プログラムへ研究費を直接配分…、等。
 - ・研究助成側の課題と取り組み
 - ・研究助成を実施するに際しての学際研究の阻害要因
 - ・研究立案の土壌形成を行い、学際研究テーマの起案、学際研究チームを組織化するためのハードルが高い
 - ・研究公募・採否審査では大規模な審査チームが必要で審査コストが高くなる
 - ・研究遂行支援では、研究立ち上げ時に必要な初期投資が十分に行われない
 - ・研究成果の評価では、現状の専門家による評価システム(当該分野の専門家による評価)では、学際研究の正当な評価ができず、結果的に低評価につながっている可能性がある
 - ・海外研究助成機関における学際研究促進のための取組
- ・まとめ
 - ・学際研究の促進は、従来の研究文化を超える必要があり、従来の科学技術政策の延長線上にない新しい制度設計が求められるよう。

以上は結構思い当たる節もあるが、こうした状態がいつまでも続く訳ではないだろう。何故なら、このような調査報告書が公表されたということは、変えて行くための前触れであるから。

4. 4. 広い視野と先見性の薦め

広い視野と先見性を持つことの重要性はこれまでも指摘されている。福井謙一先生のお言葉[3]は心して聴くべき事柄である：

- ・ 学問の視野をできるだけ広げること。すなわち、自分の専門分野に凝り固まることなく、それとは一見無縁に見える学問を大いに学ぶこと。(p. 2)
- ・ 先見性を養うこと。すなわち自分が学問していること、しようとしていることが今後どのように発展し、世の中にどのようにかかわっていくかを見通す目を培うこと。(p. 2)
- ・ 科学者が科学だけを過信していい時代は過ぎた。これからは科学者が“人間学”を学び、科学と人間のかかわりをもっと科学的に明らかにしていかなければならない時代である。(p. 4)
- ・ 自然科学を志す人が、好奇心だけから学問する時代は疾うに過ぎた。“野放しのサイエンス”は驕るべき宿命にある。(p. 20)
- ・ 創造をめざすには、せまい勉強はためにならない。努めて広く学ぶことが大切だ。(p. 80)

5. 歴史から学ぶこと

5. 1. 現在と歴史

学ぶ時に、(1) 現時点で仕事をするために必要となるまとまった知識と理解を得ることと、(2) それがどのような歴史を経て成立したのかについての知識と理解を得ること、は共に重要な事柄である。何故なら、どのような分野であれ、知識と理解の獲得は、人間の営みの中から生まれて来たのであり、現在のものが過去のものに繋がっているからである。現在と過去を知ることは、車の両輪である。片方だけでは危うい。

忙しいからと、我々はとかく前者のみに陥り易いが、それには大きな欠陥がある。即ち、人の後追いの仕事をするには前者は効率的である。しかしながら、新しく創造する時は、それだけでは足りない。これまで、先人達が何故そのような事をしなければならなかったのか、その際、何をどのようにしてきたのか、そうした歴史も踏まえて理解することが、これから進むべき正しい方向を見つける際の参考となり、足を踏み出す勇気を与えてくれる。

勉強の際、人物伝は著者により取り上げる人、取り上げ方や評価が異なるので、複数の著書を読んで、複眼視的な見方を養うのがよい。

自然科学(主に物理学と数学)の歴史[4-10]に学ぶ。物理学の基本的な分野は二つのカテゴリー、即ち、古典物理学(19世紀以前に成立した分野)と現代物理学(20世紀に成立した分野)に分類される。前者には力学、連続体(流体、弾性体)の力学、熱力学、電磁気学、があり、後者には、相対論、量子力学、統計力学、がある。物理学の現在と歴史をみるには、これら二つのカテゴリーで分けるのが理解しやすい。古典物理学の優れた教科書にはゾンマーフェルトの理論物理学講座[11]がある。現代物理学(特に量子力学)の文献は後で示す(7.2節)。

5. 2. 歴史の教訓

歴史からの経験的知識として、以下のことが言えると思う。

・ 一つの分野が誕生し、整備され、多くの人々に使われるようになるまでに100年(1世紀)位の時間がかかる。即ち、ものごとは100年単位で考えよ。この典型例は力学と電磁気学の歴史で

ある。力学の創始(Newton)から万人が使えるようにする(Lagrange)まで100年かかった[12,13]。電磁気学では、定量的な実験事実の積み重ねから(クーロンの法則の発見以降)、電磁気の法則の確立(マクスウェルやヘビサイドによる数学的な定式化)まで約100年かかった[14,15]。

- ・新しい分野は実験から見つかった現象あるいは観測から出て来た規則から始まる。その現象や規則を記述するために、新しい表現が必要となり、考え抜いた末に出て来た式を取り扱う、或いは解くことが数学を発展させる駆動力となった。即ち、現実の問題は新しい分野を生み出す駆動力である。この典型例は電磁気学の歴史である。

- ・新しい分野を産み、育てた人達(例えば、Newton [16-19, 9], Euler [20,21], Gauss [22,9,10,23])に共通していることは、いずれもマルチ人間ということである。守備範囲が広い。その時代の最先端の科学技術と直接関わっている。しかも、具体的な計算(今でいう多倍長の数値計算)を手で行っていた。数値計算の大家である。もし、彼らが現代に生きていたら、コンピュータを駆使して、質の高い膨大な計算をするのではないかと想像してしまう。

- ・人々の要求は新しい試みを促す。例えば、人が楽できるための動力が欲しいという要求から、水車が発明され、それが流体力学につながり、また、蒸気機関が発明され、さまざまな試みの末に熱力学を考えねばならなかった。

6. 応用数理と計算科学

応用数理とは、数値計算の手法(数値解析)の開発と数値計算を用いた現象の解析からなる。数値解析の個別分野は、補間、数値微分、数値積分、微分方程式(常微分及び偏微分方程式)、積分方程式、関数計算(関数近似、他)、代数方程式、超越方程式、行列計算、連立一次方程式、固有値問題、最適化、最大・最小問題、最小自乗法、統計、推定、等、多岐に渡る。

計算科学とは、科学的な対象を、具体的な数値計算を通して明らかにすることである。科学の手法には、実験科学、理論科学、計算科学があり、関連しあっている。計算科学の分野は科学の全分野に渡っている。例えば、次世代スーパーコンピュータの HPCI (High Performance Computing Infrastructure) には五つの分野が計上されている：分野1 予測する生命化学・医療および創薬基盤、分野2 新物質・エネルギー創成、分野3 防災・減災に資する地球変動予測、分野4 次世代ものづくり、分野5 物質と宇宙の起源と構造。無論、これらは計算科学の一例に過ぎないが典型例としてホットな話題である。

著者の研究開発と関連するのは第2分野。その延長上に第1分野がある。これらは巨大な分野であり、その波及分野が広いという特徴がある。その基礎理論は量子力学である。

ここで、応用数理と計算科学とのギャップを述べる。応用数理の分野で研究者が多いのは、古典物理学の分野：古典力学、連続体力学(流体、弾性体)、電磁気学、等である。これらは主に工学の世界と関係している。特に計算力学の生い立ちについては[24]を参照。応用数理では(世界的に見ても)量子力学の数値解析の分野の研究者が少ない。つまり、応用数理の研究者が向いている方向(古典物理)と巨大分野である物質の構造と物性の計算科学の研究者が向いている方向(量子力学)とがずれている。これは学問の細分化の流れの中で起きている現象と考えると分かり易い。その解決策のひとつは学際領域の融合であり、次章で述べる。

7. マルチ・ディシプリンとしての量子力学

7. 1. 現実世界と量子力学との関係

現実世界の現象は多数の階層から成る(図1)。階層にはマイクロ、中間、マクロがある。扱う対象は原子・分子、メゾスコピック、連続体であり、方法は量子力学、分子動力学或いはモンテカル

ルロ法、そして流体・固体力学である。各階層の境界は幅を持っていて、次第に移り変わる。このように多数の階層から成り、かつそれらが有機的に連成している系を扱う分野をマルチスケール・フェジックスと言う。



図 1. 現実世界の階層

図 2 に学際間の融合領域における量子力学と数値解析の位置と役割を模式的に示す。学際間の融合領域には広大なフロンティアがある。解くべき課題は世の中の現実の要求にある。ミクロな現象を記述する量子力学と、方程式を解く手段を与える数値解析とが協力してフロンティアを開拓し、人類に役立てるという使命がある。

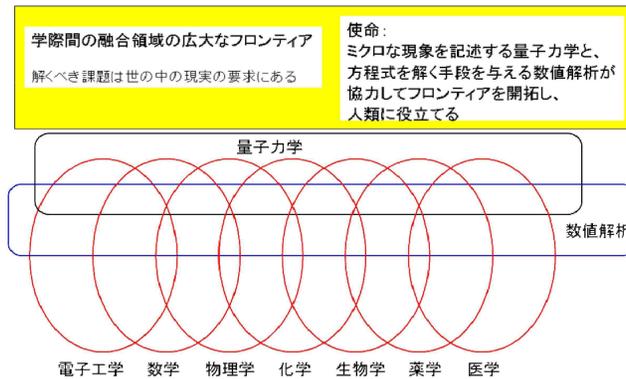


図 2. 量子力学と数値解析の位置と役割

量子力学と関連分野との関係は以下のようなになる。量子力学と融合領域の多くの分野とは、現実の要求が数値解法と近似法を高度化させ、それがフィードバックされて各分野の深い掘り下げと相互の結び付きを促進し、現実の要求水準を更に高めさせる、という有機的循環的な関係にある。量子力学は原子、分子レベルの挙動を記述する基礎を与える。

分野別の役割分担は、数学は方程式を解くための計算手段（数値解析とその基礎）を提供する。物理学は現象を記述する量子力学の理論と方程式、近似法を提供する。量子力学は数値解析と相まって、化学で分子の構造（原子の位置）と特性（エネルギーと波動関数）の基礎を、固体物理学で固体、表面、界面の構造と特性の基礎を、生物学で生体分子、高分子の構造と特性の基礎を、薬学で分子、高分子、ラジカルの構造と特性の基礎を、医学で分子レベルでの基礎を、電子工学で半導体のプロセスやデバイス特性の基礎を提供する。こうした分野横断的な領域はマルチ・ディシプリンの対象領域である。

7. 2. 量子力学の概要

量子力学は粒子が粒子性と波動性の両方を持つ現象を扱う力学である。波長と系のサイズが同程度である場合に波動性が顕著に表れる。典型的なサイズは 10^{-11} から 10^8 m のオーダーである。記述（支配）方程式は Schrödinger 方程式である。これは波動関数について、時間に関して 1 階、空間に関して 2 階の偏微分方程式である。ポテンシャルが時間に露わに依存しない場合、変数分離できて、定常状態の Schrödinger 方程式が得られ、それは微分方程式の固有値問題に帰着される。量子力学は経験則、即ち種々の実験事実と合致するように作られた理論である。（この事情は古典物理学と同様である。）理論と実験との対応付けは以下のように行う。波動関数そのものは確率振幅であり観測可能でないため、観測可能な物理量を計算する。このため種々の行列要素を計算する。更に系の全エネルギーや外場への応答関数（散乱断面積、光吸収強度、等）を計算する。

量子力学の詳細は以下の参考書に示されている：量子力学の入門書 [25-28]、量子力学の専門書 [29-33]、原子構造の専門書 [34-38]、量子化学と分子軌道法の専門書 [39-44]、量子力学の歴史（一般向け、入門書、時代背景の記載）[45,46]、量子力学の歴史（専門家向け）[47-50]、をお薦めする。量子力学が特徴的に表れる例は、原子、分子、固体中の電子である。その具体例は上記の参考書の中に多数載っている。量子力学を学ぶには、先ず、確立した量子力学の体系を学び、ある程度実力が付いてから歴史を学ぶと良い。前者では、きちんと書かれた本（例えば[25-33]で気に行ったもの）をしっかりと読む。後者では、どのような実験がどのような背景でなされたか、を知ることは量子力学を深く理解するのに役立つ[45,46]。実験データを理解するために、あれこれ思案した結果、こう考えるしかないということで量子力学が出て来た [47-50]。

7. 3. 量子力学と世の中の現実の問題との関係

7. 3. 1. 量子力学と数値解析との関係

量子力学と数値解析との関係を述べる。量子力学における数値計算の必要性和要請は以下に示す通りである：解析解（自由粒子、調和振動子、水素原子、等）は理解に不可欠である。しかしながら解析解が得られる例は限られている。近似法（摂動論、変分法、WKB (Wentzel-Kramers-Brillouin) 近似、等) [29-33] は有用だが適用範囲が限られる。このため、現実の系で現象を正しく把握するには、数値計算が不可欠である。その際、その現象が何桁目の数値で起こっているか、即ち、現象の理解にどれだけの桁数が必要かを認識する必要がある。

量子力学における数値計算への要請は以下の通りである。原子、分子、固体、高分子、等では大規模数値計算を行う。その際、任意のポテンシャルに対して要求精度を満たす数値解を出すことが必要で、多数回の演算で有効桁数が低下しないことが必須である。特に、数値誤差に埋もれずに、現象を正しく理解するには高精度計算が必要である。現状出回っているプログラムの数値計算の精度は分子構造で 5 桁、原子構造で 8 桁である。しかしながら、次に示すように、目標の目安は分子構造で 10 桁以上、原子構造でそれ以上、約 13 桁である。こうした要求水準は世の中の進展と共に厳しくなる。

7. 3. 2. 数値計算上の課題

何故それだけの桁数が必要か？ それは大きな量から大きな量を差し引くためである。また実験と比較するには種々の行列要素の精度が必要である。このために高精度計算が不可欠である。

大きな量の引き算につき、もう少し詳しく述べる。原子は大きな全エネルギーを持っている。以下に示す数値は Hartree-Fock 計算で得られた計算値である (Hartree の atomic units) [38]。

H	-0.5	C	-37.688619	Na	-161.85891	S	-397.50490
He	-2.8616800	N	-54.400934	Mg	-199.61463	Cl	-459.48207
Li	-7.4327269	O	-74.809398	Al	-241.87671	Ar	-526.81751
Be	-14.573023	F	-99.409349	Si	-288.85436		
B	-24.529061	Ne	-128.54710	P	-340.71878		

化学結合のエネルギーは、原子同士が近くにある分子の全エネルギーと、原子が無限に離れた系の全エネルギーとの差で定義される。結合エネルギー ΔE の定義は、原子を A, B, C, \dots とすると

$$\Delta E = E_{A+B+C}^{tot} - (E_A^{tot} + E_B^{tot} + E_C^{tot} + \dots).$$

化学結合は結合エネルギーが負になると起き、その大きさは 0.01 au 以下のオーダーである (図 3)。振動エネルギー、回転エネルギーは更に小さなオーダーである。

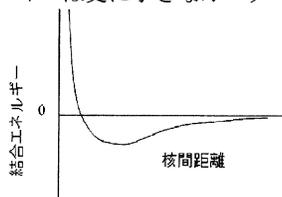


図 3. 結合エネルギーの模式図

高精度計算が必要な例を以下に示す。薬は分子量が 1 万個以上ある。目安として、炭素原子が 1 万個あるとすると、全エネルギーは 376886.19**** の大きさになる。分子の構造や反応は 10 ~ 1 ミリ・原子単位のオーダーの値で決まる。つまり、8 桁から 9 桁目の数値が決めるのである。次に、半導体の Si で 1000 個 (= 10 X 10 X 10 個) のクラスター (これでも小さいが) の全エネルギーは 288854.36**** の大きさになり、構造や反応は 8 から 9 桁目の数値で決まる。実際には、更に不純物原子が加わるので、状況は複雑になる。

7. 3. 3. 現状の課題と今後の方向性

現状の課題には以下のようなものがある：現在出回っている多くのプログラムは計算精度が不足している。それでも知見を得るために、種々の論法が使われている。例えば、全エネルギーの絶対値の計算精度はないが、元素を変えた場合の相対的な変化から、定性的な傾向を抽出するというものである。経験とノウハウが必要で、種々の検証が必要である。

また多中心積分の精度が低い (5 桁以下) のので、次のトリックを使っている (図 4)。先ず、分子全体の全エネルギーを計算する。次に個々の原子位置に 1 個だけ原子を置いて分子の全エネルギーを計算し、それらの総和を計算する。それから二つの値を引いて結合エネルギーとする。この計算方法では、経験的に、差は距離を変えてもガタガタせずに滑らかに変化するので、それで良いだろう、誤差はキャンセルするだろうと期待する。しかし、誤差のキャンセルは誰も確認していないし、計算量は全エネルギーだけではない。

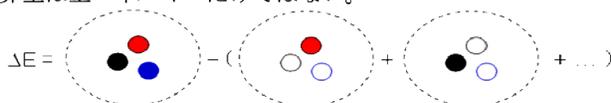


図 4. 結合エネルギー計算のトリック

今後のあるべき方向性は以下の通りである：数値計算の精度が得られるように、数値計算法を根本的に対処する。その上で、近似法の精度と信頼性を検証し、必要ならば、近似法を改良する。

7. 3. 4. 分子軌道計算の高精度化

上記の方向性に適った分子軌道計算を高精度化するための現実的なアプローチは、原子構造を数値計算で高精度に解く（数値基底関数を高精度で計算すること、高精度の多中心三次元数値積分法を実現すること、更に種々の多中心三次元積分の被積分関数を数値基底関数を用いて高精度に計算すること、である。このアプローチは分子軌道計法の原理に適っており、単純明快、かつ分子軌道計算の根拠付けを行える、即ち、rationale を与える、というメリットがある。また、このアプローチは分野横断的であるため、前例がないことを新規に開拓するには、マルチ・ディシプリンが欠かせない。

7. 3. 5. 課題の克服に向けての取り組み

課題の克服への取り組みでは、我々は 1990 年代に、単一中心の三次元数値積分で 15 桁の計算精度を実現した[51]。また、多中心の三次元数値積分で 13 桁の計算精度を実現した[52]。

更に、改良を加えた多中心三次元数値積分法を用いて分子軌道計算を行ったが、被積分関数の計算精度が不十分であった。このため、被積分関数の高精度高速数値計算法の研究開発が不可欠となった。

その後、被積分関数の計算精度を向上させてきた。数値計算の方法を基礎から構築し直している。方針は、可能な限り単純なアルゴリズムにすることである。それは頑健性と高速化の観点から必要である。また、現実の系では何が起こるか事前に予測できないので、アルゴリズムが単純な程、適用性が広がるからである。

計算精度向上のために改良してきた項目は数値解析の全分野と関係する。

- ・ 一体問題 13 桁以上の計算精度を実現した。
 - ・ 1 次元問題： 補間、微分、積分（2 区間）、2 階常微分方程式の固有値問題における離散化行列固有値法、2 階常微分方程式の初期値問題の数値解法（線形多段法）、2 階常微分方程式の固有値問題における shooting 法[53-55, 57]。
 - ・ 中心力場問題： 動径微分方程式の固有値問題では離散化行列固有値法、shooting 法、特異点近傍での処理として、原点周りでの冪級数展開法、無限遠点周りの漸近級数展開法、また原点周りでのポテンシャルの冪級数展開係数を求めるための線形最小二乗法[56,57]。
- ・ 多体問題
 - ・ 原子構造計算
 - ・ 平均場近似
 - ・ Hartree 近似で、ポテンシャルの計算（不定積分、1 階常微分方程式）、固有関数とポテンシャルをセルフコンシステントに解く。13 桁以上の計算精度を実現した。
 - ・ Fock 近似は進行中。

我々は今後とも上記の方針に従って高精度計算に取り組む。更に、近似法の検証や改良、物理的効果（外部電場・磁場への応答、相対論的効果）の取り込みも行う。そうして世の中で現実に使われている物質の構造や物性をコンピュータで確実に再現・予測できるようにして行く。

謝辞

研究会で話す機会を与えてくださった降旗大介先生（大坂大学）と谷口隆晴先生（神戸大学）に感謝致します。

参考文献

- [1] 株式会社 半導体先端テクノロジーズ (Selete, Semiconductor Leading Edge Technologies, Inc.), 「Selete 15 周年記念誌」、2011 年 2 月.
- [2] 国立国会図書館 調査資料 2012 年刊行分 「国による研究開発の推進—大学・公的研究機関を中心に—」、第五部 研究活動と社会をつなぐ、2 学際研究とその評価。
<http://www.ndl.go.jp/jp/data/publication/document/2012/>
- [3] 福井謙一、「学問の創造」、佼成出版、東京、1984.
- [4] 小野山伝六、三谷健次 (編)、「物理学史と現代物理学」、朝倉書店、東京、1975.
- [5] フォーブス、R. J., デイクステルホルス、J. E., 「科学と技術の歴史」、みすず書房、東京、1977.
- [6] フント、F., 「思想としての物理学の歩み (上、下)」, 吉岡書店、京都、1982, 1983.
- [7] 三輪修三、「工学の歴史—機械工学を中心に」、(ちくま学芸文庫)、筑摩書房、東京、2012.
- [8] セグレ、エミリオ、「古典物理学を創った人々—ガリレオからマクスウェルまで」、みすず書房、東京、1992.
- [9] ベル、E. T., 「数学をつくった人びと (上、下)」, 東京図書、1977.
- [10] 高木貞治、「近世数学史談」、(岩波文庫)、岩波、東京、1995. 共立出版もあり.
- [11] ゾンマーフェルト、A., 「ゾンマーフェルト理論物理学講座」、講談社、東京。
第 1 巻 力学、2 巻 変形体の力学、第 3 巻 電磁気学、第 4 巻 光学、第 5 巻 熱力学および統計力学、第 6 巻 物理数学 (偏微分方程式) .
- [12] 山本義隆、「古典力学の形成—ニュートンからラグランジュへ」、日本評論社、東京、1997.
- [13] 山本義隆、「Euler の力学」、数理解析研究所講究録、第 1608 巻、2008 年、pp. 1-13.
- [14] 太田浩一、「マクスウェル理論の基礎」、東大出版、東京、2002.
- [15] 太田浩一、「電磁気学の基礎 I, II」、東大出版、東京、2012.
- [16] ニュートン、「自然哲学の数学的諸原理」、中央公論社、東京、1971.
- [17] ニュートン、「光学」、(岩波文庫)、岩波書店、東京、1983.
- [18] Whiteside, D. T. ed., *The mathematical papers of Isaac Newton*, 8 vols., Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1967-1981.
- [19] 藤原正彦、「心は孤独な数学者」、(新潮文庫)、新潮社、東京、1997.
- [20] Euler, Leonhardt, *Opera Omnia*, Birkhäuser, Basel.
Euler 全集は The Euler Archive, <http://www.eulerarchive.org/> で公開されている。
- [21] フェルマン E. A., 「オイラー：その生涯と業績」、シュプリンガー東京、東京、2002.
- [22] Gauss, Carl Friedrich, *Werke* (Gauss 全集) 全 12 巻, Georg Olms Verlag, Hildesheim.
Gauss 全集は Göttingen University からアーカイブとして公開されている。
- [23] ダニングトン、「ガウスの生涯—科学の王者」、東京図書、東京、1992.
- [24] 社団法人 土木学会、応用力学委員会、計算力学小委員会 (編)、「いまさら聞けない計算力学の常識」、丸善、東京、2008, pp. 3-4.
- [25] 原島鮮、「初等量子力学」(改訂版)、裳華房、東京、1986.
- [26] 小出昭一郎、「量子力学 (I)、(II)」(改訂版)、裳華房、1991, 1990.
- [27] 桜井捷海、「パーソナルコンピュータを用いた量子力学入門」(修正版)、裳華房、1990.
- [28] ブラント、S., ダーメン、H. D., 「コンピュータによる図説量子力学」、共立、東京、1986.
- [29] Pauling, L. and Wilson, E. B. Jr., *Introduction to Quantum Mechanics with Applications to Chemistry*, Dover, New York, 1985.
ポーリング、ウィルソン、「量子力学序論」、白水社、東京、1965.
- [30] ランダウ、L. D., リフシッツ、E. M., 「量子力学 非相対論的理論 1 & 2」、東京図書、東京、1967, 1970.
- [31] Messiah, A., *Quantum Mechanics*, Dover, New York, 1999.

- メシア、「量子力学 1, 2, 3」、東京図書、東京、1971,1972.
- [32] Johnson, C. S. Jr. and Pedersen, L. G., *Problems and Solutions in Quantum Chemistry and Physics*, Dover, New York, 1986.
- [33] Flügge, S., *Practical Quantum Mechanics*, Springer, Berlin, 1971.
- [34] Bethe, H. A., Salpeter, E. E., *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms*, Dover, New York, 2008.
- [35] Condon, E. U., Shortley, G. H., *The Theory of Atomic Spectra*, Cambridge University Press, Cambridge, 1962.
- [36] Slater, J. C., *Quantum Theory of Atomic Structure*, Vol. 1 and 2, McGraw-Hill, New York, 1960.
- [37] Hartree, D. R., *The Calculation of Atomic Structures*, Wiley, New York, 1957.
- [38] Fischer, C. F., *The Hartree-Fock Method for Atoms*, Wiley, New York, 1977.
- [39] 藤永茂、「入門分子軌道法」、講談社、東京、1990.
- [40] 藤永茂、「分子軌道法」、岩波書店、東京、1980.
- [41] 米澤貞次郎、永田親義、加藤博史、今村詮、諸熊奎治、「三訂 量子化学入門 (上)、(下)」、化学同人、東京、1983.
- [42] Eyring, H., Walter, J., and Kimball, G. E., *Quantum Chemistry*, Wiley, New York, 1944. アイリング、ウォルター、キンボール、「量子化学」、生産技術センター新社、東京、1978.
- [43] Slater, J. C., *Quantum Theory of Molecules and Solids*, Vol. 1, 4, McGraw-Hill, New York, 1963, 1974.
- [44] Slater, J. C., *Quantum Theory of Matter*, 2nd ed., McGraw-Hill, New York, 1968.
- [45] 西尾成子、「こうして始まった 20 世紀の物理学」、裳華房、東京、1997.
- [46] 池内了、「ノーベル賞で語る現代物理学」、新書館、東京、2008.
- [47] 荒木源太郎、「原子物理学」、培風館、東京、1963.
- [48] フント、F.、「量子論の歴史」、講談社、東京、1978.
- [49] ブラウン、L. M.、パイス、A.、ピバード Sir B.、「20 世紀の物理学 I」、丸善、東京、1999.
- [50] 河合潤、「量子分光化学—分光分析の基礎を学ぶ」、アグネ技術センター、東京、2008.
- [51] Yamamoto, K., Ishikawa, H., Fujima, K. and Iwasawa, M., "An accurate single-center three-dimensional numerical integration and its application to atomic structure calculations," *J. Chem. Phys.* **106** (1997) 8769-8777.
- [52] Ishikawa, H., Yamamoto, K., Fujima, K. and Iwasawa, M., "An accurate numerical multi-center integration for molecular orbital theory," *Intern. J. Quantum Chem.*, **72** (1999) 509-523.
- [53] Ishikawa, H., "An accurate method for numerical calculations in quantum mechanics," *J. Phys. A* **35** (2002) 4453-4476.
- [54] Ishikawa, H., "Numerical methods for the eigenvalue determination of second-order ordinary differential equations," *J. Comput. Appl. Math.* **208** (2007) 404-424.
- [55] 石川英明、「二階線型常微分方程式の固有値問題の高精度数値解法と量子力学への応用」、*J. Compt. Chem., Jpn*, **6** (2007) 199-216.
- [56] Ishikawa, H., "Numerical methods for the eigenvalue determination of central-force-field problems in quantum mechanics," *J. Comput. Chem., Jpn*, **9** (2010) 89-108.
- [57] Ishikawa, H., "Numerical methods for the eigenvalue determination of second-order ordinary differential equations in quantum mechanics," Chapter 2 in *Quantum Mechanics*, edited by J. P. Groffe, NOVA Science Publishers, New York, 2012, pp. 67-117.

A PDF file is available from the author.