

理論屋、実験屋、計算機屋

——コンピュータの進歩が自然科学を変える——

輪 湖 博

初対面の自然科学研究者に出会うと、まず尋ねてみたくなるのはその専攻分野である。物理学であるとか、化学であるとか、生物学であるとか答えるのが一般的であろうか。それがわかると、更にその細かな分野についても尋ねてみたくなるかもしれない。

一方で、化学とか生物学の場合にはあまり聞かないかもしれないが、物理学の場合にはよく「理論ですか、実験ですか」と尋ねることがある。そうすると、自分のことを「理論家です」とか「実験家です」というのは何となく面映ゆいから、「理論屋です」とか、「実験屋です」と多くの人が答える。でも、最近では、自分は理論屋なのだろうか、実験屋なのだろうか、答に窮する新しいタイプの研究者が登場してきた。彼らはいわゆる実験装置を使っている実験をしないから「実験屋」ではない。かといって、「理論屋」と称するにはペン一本と紙だけで事足りるというわけではないので、どうも世の中の人をもつ「理論屋」のイメージとも違うようである。彼らには、大型計算機が必要なのである。まあ「理論屋」の中の変り種でもあり、大型計算機を使って実験をやる「実験屋」のようでもあるが、敢えて彼らを「計算機屋」と称する新しいタイプの研究者として眺めたほうがいいようでもある。

この「計算機屋」の出現は、もちろん、最近の計算機の驚異的な技術革新に負うている。しかし、彼らは、「理論屋」でもなく「実験屋」でもない「計算機屋」と称するに足る新しいタイプの科学者として認められ、しかも彼らの出現によって自然科学が変貌していくのであろうか。確かに、計算機が自然科学の発展に重要な道具であることは誰もが認めている。しかし、「計算機屋」とよばれる自然科学研究者に対して、現時点では、あまり高い評価が与えられているとはいえない。計算機が出現しても、科学の本質は変わらないと考える人も多い。それが、計算機の自然科学における価値に対する正しい評価なのであろうか。そこで、自然科学研究と計算機の関わりに焦点を絞りながら、最近の自然科学の一面をみてみたいと思う。

実験と理論

現在の自然科学は、概ね理論を専門とする研究者と実験を専門とする研究者の分業が成り立っているといっている。それは一つには、科学が複雑になって、一人の研究者が何もかもできる時代ではないことにもよるが、自然を理解するための自然へのアプローチの仕方が、実験と理論では本質的に異なるためであるように思われる。実験と理論の違いを一言で言えば、実験は分析的であり、理論は演繹的である。また、実験家は現象を起こす対象を直接に扱い、理論は対象とは距離をおいて現象を眺める、という側面もある。

実験はまず現象を起こす対象をじっくり観察することから始まるといえる。その内部構造を明らかにし、その現象を引き出す機構を探る。特に、直接目でみることが不可能な場合には、その実験に外部から様々な働きかけをし

ては、そこから生じる応答を調べることによって内部構造を推測することになる。そのための測定法の開発は実験家の重要な仕事である。更に進んで、現象の本質を見極めるための適当な実験系を生み出すことが必要となる場合もある。自然現象は様々な要素が複雑にからまりあっており、ただ眺めていただけでは、その背後にある法則性を看破することは一般に困難である。そこで、まず、系を構成する要素を分析し、続いて副次的要因とみなされるものをなるべく捨象した実験系を企画、構築し、その系の解析によって初めて本来の現象の背後に潜む基本法則を引き出すことが可能となる。

実験家が常に自然に働きかけることによって、それを理解しようと努めるのに対して、理論家は決して自然に働きかけることをしない。十七世紀にニュートンによって運動の法則が見出され、さらに十八世紀から十九世紀にかけてそれが数学的に洗練化されていくと、自然現象の背後にある基本法則、それはニュートンの運動の法則がすべてであり、したがって、現象を記述するためには、その現象の構成要素とその要素間に働く力を明らかにしさえすれば、現象を記述する運動方程式が立てられ、後はそれを数学的に解くことによって演繹的に現象が説明されるということになった。このことは、二十世紀にはいつて量子力学が誕生し、ミクロの世界ではニュートンの運動方程式に波動方程式がとってかわっても、その事情は基本的に変っていない。こうしたアプローチによって、自然が包括的に捉えられ、それまで考えもしなかった現象さえも予言された。その予言の中にはまさに理論家の勝利宣言でもあった。

それでは、理論家は自然現象をすべて理解できるだけの理論を構築したかといえば、もちろん、多くの未解決の問題が残されている。その理由のいくつかを次に考えていこう。

解ける問題

理由の第一は、たとえ現象を記述する運動方程式や波動方程式が立てられても、それを解くことの数学的な困難さにある。そのため、立てられた運動方程式や波動方程式を如何に解くか（一般には、如何に近似的に解くかということであるが）というやや数学的な問題の解決が、理論家の重要な仕事のひとつとさえなっている。しかし、もう一つ重要な理論家の仕事は、常に運動方程式や波動方程式から出発するのではなく、それぞれの現象にあった基本法則を出発点にして、解析的に解くことが可能で、しかも現象を的確に捉えたモデルを案出することである。そこでは、しばしば、副次的要因をなるべく捨象し、主要で本質的な要因だけをとりこんだ単純なモデルであることが好まれてきた。その単純化されたモデルから現象が説明されなければならないことはもちろんであるが、考えた以上の現象が予言されたり、ただ一つの現象を説明するにとどまらず、より高次の美しい体系へとまとめあげられたりすることができれば、それは理論家にとって最高の喜びなのである。

しかし、モデルの単純化の背景には、現象の構成要素を何もかもいれると数学的に複雑となり解けないからというより実践的な事情もある。言い方を変えれば、モデルはそのエレガントさのために単純化されたのではなく、解析的に解けるモデルが考えられてきた結果としてモデルが単純化されてきたという一面もある。その意味では、現代の自然科学は、解析的に解ける問題の大半は研究し尽してしまった状況にあるとさえ言えるのである。量子力学の創始に関わった理論物理学者であるディラックが言う。「要するに、物理学の大部分と化学の全体の数学的理論

に必要な基礎的物理法則は完全にわかっていうことであり、困難は、ただこれらの法則を厳密に適用すると複雑すぎて解ける望みのない方程式にいきついてしまうことにある」(一九二九年)。

理論屋にとつての実験の意義

自然を完全に理解しきれない第二の理由は、実験そのものが困難な現象の存在である。理論家にとつては実験からの情報は不可欠である。ニュートンの運動方程式や量子力学の波動方程式、あるいは、より高次の階層の基本法則などから演繹的に導かれたから、もともとの法則が正しい限り私の理論は正しい、と胸を張っても、実際の現象は複雑であつて、すべての要因を正しく組み入れたモデルを考えているか、あるいは、すべての要因を入れると数学的に解けない場合にはいくつかの要因を捨象しているわけだが、本質的な要因を取りこんだモデルになっているか、などはそう自明なことではない。そのため、理論は絶えず実験によつて検証されなければならないのだ。この辺のところを朝永振一郎は次のように表現した。

「ある意味で物理学者というのはいちばん頭が悪い存在でして、試験問題が出たときにカンニングをやるんです。こつそり実験というようなことをやってのぞいてしまう。そうしないとなかなかわからないという頭の悪いところがあるんです。つまり自然の女神のベールをめくってじかに見ないとわからないというのが物理学者なんです……」(朝永振一郎「物理学とは何であろうか」(岩波新書))。

ところが、理論を検証するために実験を行うとしても、必ずしも実験が容易にできるとは限らないことがある。

例えば、極低温、超高温、超高压など実験条件としてはなかなか実験室のなかでは実現しにくいものがある。原子のレベルで非常に短い時間に起こる現象などでは、その観測技術がまだ十分開発されていない場合もある。また、宇宙レベルの現象で絶対に実験が不可能なもの、生物進化のように非常に長い時間の現象などもある。中には、飛行機の風洞実験のように、大掛りな装置を必要とし、その費用が膨大で、気軽にいろいろなモデルを制作しては実験するというわけにはいかない場合もある。

このことは、自然科学に限ったことではない。むしろ社会科学では、過去のできごとのデータしかなく、実験をすることなしに未来を予測しなければならないのがむしろ普通でさえある。核戦争の人類に及ぼす影響は実験なくして予想しなければならないのである。

計算機の役割

前節までに、理論家がいままで、解析的に解ける問題を中心に扱ってきたこと、そして、理論は常に実験による裏付けを必要としていることを述べた。そして、解析的に解けない問題があること、実験ができない対象があることが、自然科学の行く手に立ちはだかる障壁の一つであることをみてきた。ここでは、この二つの問題点に対して、計算機の果してきた、そしてこれから果していくであろう役割について述べようと思う。

まず、自然科学の問題が解析的に解けるということは、要するに紙のうえに書かれた計算式を眺めながら、その関数の性質などからその系の振舞が議論できるということである。単に式が紙のうえに書かれても、それをもとに

系の振舞が議論できないのではその数式は意味をなさない。したがって、手計算で式の振舞が議論できるモデルを作ることに理論家は長い間制約されてきたのである。しかし、計算機の進歩によって、いままで解析的に解けなかった多くの計算が、数値的にであるにせよ、解けるようになってきた。このことは、モデルを立てるときに、それが解析的に解けなければならぬという制約から理論家を解放したといえる。もちろん、解析的に解けるモデルであればそれに越したことはない。解析的に解けないモデルを拒否する理論家もいる。しかし、解析的に解けないことが、むしろ本質である現象さえある。今まで、理論といえば解析的に解けるモデル、と自己抑制してきた枠は、計算機の出現によって取り除かれたのである。もちろん、計算機によって解ける問題という枠が今度ははめられてはいるが、それが従来の枠を含み、さらに大きなものであることは明らかである。

また、第二の問題について言えば、計算機シミュレーションの果たす役割の重要性が指摘される。計算機の進歩は、人間の行為を模倣化しその代行をする計算機を開発する方向と、自然（社会現象も含む）を模倣するための計算機を開発する方向の二つの方向に向かって発展しているとも言われる。前者は人工知能に代表されるものであり、後者はスーパーコンピュータの開発である。計算機シミュレーションは特に後者の自然の模倣化を意味することが多い。いうなれば、実際の実験装置を使わないで、模擬実験を行うわけである。

計算機シミュレーションの利点はいくつかある。実験室では行えないような極限状態であろうと自由に設定できる。現実の実験にはつきものの不測の要因や不純物が全く除去された、真の意味での副次的要因を捨象した理想的な系が設定できる。現実の実験で観測されるものは、測定方法によって時間の長短はあるものの、ある時間の間の平均量である。これに対して時間的にも空間的にも高い分解能でその現象を詳しく調査することが計算機シミュレ

ーションでは可能である。費用の面でも、例えば、航空機などの流体力学では、二千億円の工費を必要とする風洞実験装置にかわって、高々五十億円のスーパーコンピュータによる数値実験によって、複雑な乱流現象を再現できる見通しもできてきた。

計算機シミュレーションはしばしば計算機実験ともよばれるが、いわゆる実験と本質的に異なっている。計算機シミュレーションは、現象をモデル化し、その構成要素の振舞を数値の変化として計算機の中に表現し、一般にその時間経過を追跡していく。このとき、実験が自然を分析的に取り扱うのに対して、計算機シミュレーションでは、モデルの構造や要素間の相互作用が基礎理論、基礎法則をもとに予め設定され、それをもとに系の振舞を調べていくのであって、決して自然そのものを扱うわけではない。その意味で、計算機シミュレーションは演繹的であり、統合的な理論家的手法である。しかし、模擬的であるにせよ、実験系を設計し、条件を変えてはそこで起こる現象を観察するというアプローチは、明らかに実験家的である。そして、この二面性こそ、「計算機屋」を「理論屋」とも「実験屋」とも異なる新たな研究者のタイプと考える最大の理由である。

道具としての計算機

計算機が自然科学に果たしてきた役割は右に述べてきただけではない。計算機に関する技術革新は今世紀後半のもっとも特筆すべきことの一つであるが、特に自然科学者にとってどんな恩恵があったかを、ちょっと列記してみよう。

実験の面からは、実験装置の制御を計算機に任せることができるようになった。これによって、単に、データ採取という単調な繰り返しから実験家が解放されただけではなく、精密な実験の制御、大量なデータを瞬時に処理しながら実験を統行できるなど、人間の手に負えなかった大規模な実験、あるいは精度の高い実験が可能となった。

大量のデータの管理や、統計処理も計算機なくてはできなかった。例えば、人間の遺伝子は塩基配列にして三十億の文字列からなっているが、近い将来その全文が明らかにされるであろう。また、地球上の他の生物の遺伝子の塩基配列もぞくぞくと解明されつつある。その管理など計算機なくして不可能であり、計算遺伝学という学問分野の誕生を予測する人さえある。

数式処理も手計算の一部を解放した。まだ発展途上のようなものであるが、何ページにもおよぶ数式の変形を計算用紙に何回となく検算していた時代も、もうじき懐かしい時代になるかもしれない。

作図や作表といった作業、画像処理も進歩してきた。計算機の出現によって、より複雑な系が取り扱い可能となってきたが、計算機がいくらそれらを精確に計算しても、最終的にその結果が複雑すぎて、人間の認識の能力を越えたものであつては意味がない。その意味で、美しいグラフィックスなどの映像は、今まで想像することすらなかった未知の自然の姿をわれわれの前に描き出してくれるかもしれない。

ワープロとして論文の制作に威力を発揮していることも、科学の発展に少なからず貢献しているかもしれない。教育面でも貢献は大きいはずである。教育用ソフトというと、対話形式で問題を与えては解くようなものばかりが想像されるが、自然科学教育という面からはむしろ、教科書のあるパラメータの一組についてのみ描かれた静止図が、読者の指定する任意のパラメータに対して様々に動くようにできる、あるいは、抽象的で数学的な表現をデ

イスブレイに表示することによって可視化あるいは具現化できる、などの利点を有効に生かすことによって、自然科学をより実感として理解していくことができるようになるであろう。自然科学教育のための強力な支援システムとなることへの期待が大きいが、この方面での研究はあまり進められていないようである。

ここに列記したように、計算機が他の実験機器と本質的に異なるのはその融通性である。それは単にわれわれの手作業を助ける道具であることを越えて、われわれの思考を支援するツールへと、確実に進歩している。

計算機なくして発見されなかったこと

前節で述べたように、計算機の道具としての便利さは誰もが認めるところである。しかし、単に便利になったというだけでは、敢えて計算機屋とよばれる研究者の出現は特筆すべきことではないであろう。そこで、次に、最近計算機でなされた画期的な発見のいくつかを列記してみよう。それらは、計算機なくしては発見されなかったことであるというにとどまらず、われわれに自然を見る新たな視点を与えたという点で意義深いものである。

(a) 四色問題は長い間未解決の数学の難問として有名であった。問題自体は単純である。地図を国ごとに色分けするとき、共通の境界線をもつ隣り合う国が同色にならないようにするには、最低何色必要であるかという問題である。三色で不十分なことはすぐにわかる。五色で十分なことも証明された。問題は四色ではどうかということであった。四色で不十分である反例がなかったから、たぶん四色で十分であろうと信じられてはいたが、なかなか証

明ができなかった。それが、一九七六年、イリノイ大学のアップルとハーケンによって、計算機を使って証明されたのだ。それは、演算時間のベキ時間を越えるものであったという。

この難問解決のニュースは数学者の間に当惑を生じさせた。というのも、それまで数学の証明といえば、それをペンと紙だけで行うものであり、エレガントな証明が他の分野に比べより強く好まれていたからである。四色問題は証明されたといっても、結果は予想通りであったため、その結果がもたらした影響はそれほど大きくはなかった。むしろ、これを数学的証明というべきか、もっと簡単に証明できないであろうか、ということが強く数学者たちの関心をひいた。しかし、もしその可能性があるならば、「もうとっくに見つかっているはずだ」と証明したハーケンはいう。更に彼は、当惑する数学者の状況をこう述べている。「多くの数学者、とくに高速計算機の発展以前の教育を受けた人々は、計算機を標準的な数学的道具として使うことに抵抗した。彼らは、全部または一部が手計算で検閲することができないような議論は、弱いと感じた……」。

(b) カオスという概念も計算機で初めてでてきた。

あるものの運動は運動方程式によって記述され、それを解くことによって運動は理解されることは前に述べた。しかし、実際にはその方程式が解けることはまれである。それでも、何らかの近似を行ったり、摂動法とよばれる近似解法によって解かれてきた。近似を行っても、実験結果が説明されれば、それはよい近似とみなされた。ここでも数学と同様、導かれた結果の美しさや、導出のエレガントさが評価されてきた。

しかし、方程式は立てたものの、それまで知られている数学の知識では解の定性的な議論すらできないものも数

多くあり、そうした問題は残されたままになっていた。それが、計算機で解くことができるようになって、解が求められてみると、全く想像しなかった事態が生じてきたのである。

例えば、地球が太陽を回る運動は物理学の最も基本的な練習問題みたいなものであるが、そこでは、太陽と地球の間だけの相互作用を考えて運動方程式を立て、これを解けば、その未来も過去も予言できる。実際には、他の天体の影響もあるし、計算に必要な位置や速度の観測値の有効桁数に限度があるのは明らかであるから、計算結果は近似的なものである。それでもその精度の範囲で十分実用的な予測が可能である。そして、この未来（及び過去）の予測可能性が、いわゆるニュートンの運動方程式のもつ決定論的な世界観と等価に考えられてきた。

ところが、決定論的な運動方程式で表される運動の中に、初期値（注目する物体のある時刻における位置と速度）がわずかに異なるだけでも、その後の運動が大きく異なる系があることが明らかになった。それは見方を変えたと、初期値に誤差があると、しばらくは真の運動に非常に近い運動であるが、やがて、真の運動からは大きく離れていくというのである。人間が誤差なく測定を行うことは不可能である。したがって、運動は決定論的な法則によって起こっていないながら、未来の運動状態が（人間には？）予測不可能な現象があるというのである。天気予報の長期予報が当たらないのもこのためと考えられている。それは、科学がお粗末であるからではなく、基本法則が解明されているにもかかわらず未来が本質的に予測できないかもしれないという新奇な問題を提起している。

また、決定論的な運動方程式で記述される運動は、どこか規則的であるという観念があったが、そうした運動のなかにも、見た目に非常に不規則に運動することがあることも発見された。それがカオスとよばれる所以であるが、それは、裏返せば、自然現象に見られる一見不規則な運動の中には、それまで単に多自由度であるがゆえの熱

的なゆらぎと思われるけれども、実は、少数自由度で決定論的な法則によって運動しているものもあることを示唆しており、この方面でも今、盛んに研究が進められている。

(c) フラクタルという新しい言葉も誕生した。雲の形、海岸線、宇宙の星の分布、身の回りの規則性のない形の複雑さを、定量的に表現できないか、そんな発想と、無限に自己相似性をもつ図形の解析が結びついた。そこに扱われる図形、それは、いくら拡大していっても無限に自己相似な形が現われてくるもので、その異様ともいえる形の複雑さはコンピュータ・グラフィックスの助けなくして決して表現できなかったし、計算そのものも計算機によって始めて可能となった。計算機なくしては、こんな世界があることを誰も気付かなかったであろう。

(d) 個性をもった対象の研究も、計算機なくして研究が進展しなかったといえる。例えば、蛋白質という分子がある。これについては、社会科学部二十周年記念論文集に触れたが、この原子レベルの動きを計算機でシミュレートしようとしている。蛋白質は地球上のすべての生物をあわせると十兆種類以上あると推定され、その機能の多様性は生命現象の多様性にそのまま反映されている。問題は二十種類のアミノ酸の配列の仕方との対応を如何に理解するかである。

従来の物理学とか化学は、取り扱う系が、均一であるとか、一様であるとか、等方的であるとか、あるいは、周期性があるといった場合に、あるいはそう仮定することによってその系の振舞を理論的に解くことができた。しかし、蛋白質の場合は、たった二十種類のアミノ酸の配列の仕方（それは一見ランダムであるが、各蛋白質はそれぞれ

れ固有のアミノ酸配列をもつ）によって、その機能の多様性延いては生命現象の多様性を醸し出しているのであって、まさに、均一性、等方性、周期性といったものがないところにその本質が潜んでいる。

実際に蛋白質のシミュレーションをするときのモデルは、分子科学で築きあげられてきた基礎理論の範囲を一步も出ていない。すべてそこからの演繹的な計算で、蛋白質の多様性、蛋白質個々の機能発現の機構が説明できると信じて研究が進められている。そこでは、蛋白質一般という平均像よりも、むしろ、個々の蛋白質の機能の違い、すなわち個々の蛋白質の個性が説明されることが重要なのである。

(e) 自然現象であろうと、社会現象であろうと、ある現象を説明するのに、その現象に付随するある量が最適化されている（最大になっている、あるいは最小になっている）として解釈されることが多い。物理学や化学ではそれはポテンシャル・エネルギーや自由エネルギーであって、最適化とはその最小化を意味する。単純な系では、その最小値を求めることは容易であって、実現される現象もその結果から予測できる。しかし、一般に構成要素が増え、機構が複雑になるにつれ極値が多数現われ、いくつかの極値（ある限られた範囲における最適値）は求められなくても、大域的な最適値が求められないのが普通である。その場合、極値をすべて求めることができればそれで問題は解決されるが、それも一般には不可能である。

それでも、現時点の状況から最適化を行って、取敢えず最寄りの極値を求めることは、ある場合には理論的にも可能であるし、またかなり複雑な場合でも計算機の得意とするところである。しかし、まわりに高い障壁がある場合には、最寄りの最適値よりもっと最適な点がその障壁の向こうにあったとしてもそれを見出すことはなかなか難

しい問題である。しかし、少なくとも計算機シミュレーションは、その障壁の向こうにある思いもよらないもっと最適な地点があることをみつけたしてくれる可能性をもっている。山の向こうにあるバラ色の人類の未来像を、計算機シミュレーションが見出してくれるかもしれないのだ。

計算機自然科学の問題と展望

最後に、当初の問題であった「計算機屋」が新しいタイプの自然科学研究者たりえるかという話題に戻ることにしよう。そのために、まず、「計算機屋」とはやたらと計算機に頼りたがる理論家の端くれで、計算機といっても電卓の巨大なものというくらいのイメージしかもたない古き時代の理論家の先生方の、計算機屋への苦言を見ているのも価値があらう。以下にそれを列記してみよう。

- ・自然科学の発見は、あくまで科学者個人の想像力と直感力に負う。したがって、計算機が自然科学を変えるわけではない。
- ・モデルの構築の際に、それが解析的に解ける必要性から解放されると、やたらに複雑な系や、やたらにパラメータの多いモデルも平気になる。パラメータの数が増えると、一見現実をうまく説明できるようにみえることがある。しかし、それが必ずしもモデルの正しさを意味しない。
- ・一度あるモデルについてプログラムが完成すれば、パラメータの値さえ変えれば、いくらでも以前とは異なる

結果が出てくる。しかし、そうした実例報告だけで科学をしていることになる、えせ科学者がいくらでも製造されることになる。また、解析的に解ける問題までも、やたらと計算機にかけることによって、考えなくすることも心配である。そうになると、研究者というよりも計算機の前に座ったチンパンジーである。

・コンピュータが適用できるような研究対象や思考方法に自己規制するようになる。そして、誰もが計算機を使うようになると、研究が画一化してくる恐れがある。

・計算機シミュレーションには、膨大な計算時間を必要とするものが多い。高速で計算をするアルゴリズムの開発も重要な研究である。しかし、その高速化を達成するのに、アルゴリズムを開発するか、それともより高速の計算機を設計するかということになる。もし高速化が計算機の機能アップの競争になってしまったら、それは素粒子の実験で各国が競って巨大な加速器を作ってきたと同様に単に財力の競争となる。

こうした苦言に応えながら、計算機の自然科学における意義とその問題点をまとめ、しめくりとしよう。

計算機シミュレーションの基本はモデルである。モデルの良し悪しが、その研究の価値を決めるといふ点では、理論家の仕事の評価基準がそのまま計算機屋の研究の評価基準と一致する。この点で、理論家の計算機屋に対する見方は厳しくなる。しかし、一方で、計算機シミュレーションはあくまで、そのモデルを通して、それをあたかも自然とみなして行う実験としての側面をもつ。いかなる実験系を設計することによって求める現象の解明が達成されうるかといった、実験家としてのセンスも要求されるし、また、成果も実験データとして評価されなくてはならない面がある。しかし、決して現実世界そのものを扱うのではないから、いわゆる実験ともまたはっきり異なるの

である。

先に、計算機は様々なことに利用できる、とその融通性を指摘したが、それらは、あくまで様々なプログラムに対応できるという意味の融通性であって、与えられたプログラムに対しては、全くの融通のきかない石頭そのものの機械である。その意味で、計算機から出てきた結果は、プログラムを組んだ人間が出した結果である。理論家が紙の上に鉛筆で式を変形していつて最終的に何らかの結果へと到達することと同じ行為である。ただ、自分の腕が動いたということに、取分け価値を認めるかどうかの問題である。計算機屋の仕事は、決して、頭のいい計算機がやった仕事ではないのだ。

確かに計算機を使うことによって、計算機のもつ限界に縛られることになる。例えば、実世界はアナログであるが、計算機はデジタルしか取り扱うことができない。実世界は、 10^{23} 個というオーダーの分子がひきおこす現象であったり、要素がとてつもなく多かつたりもする。実時間に対応するシミュレーションを実行するための計算時間が計算機的能力をはるかに越えることもある。そうした、限界があってもなおかつ自然を捉えるより深い情報をわれわれに与えてくれるものである。そして見方をかえれば、そうした限界を見極めたりうえでモデルをたて、自然現象を理解していかなければならないがゆえに、モデルを立てる理論屋のセンスと実験を企画する実験屋のセンスをもち、そして更に、計算機に通曉した専門家が必要となるのである。

計算の結果得られる結果は、あくまで、モデルの枠内の世界でのことである。このことを忘れると、「計算機が出した精度の高い結果だから正しい」という迷信に惑わされることになる。これは、むしろ、計算機を使わない研究者の陥る過ちである。計算機を使っている研究者はむしろその限界をわきまえているものである。

大量のデータを処理できるのも計算機ならはだが、ここでも似たような誤解をしてはならない。データを計算機にいれても、人間が解析方法を指示しない限り何もできないのである。よく計算機を知らない研究者が、計算機の得意な研究者に、これこれのデータがあるが計算機で何か処理できないか、といって持ってきて困ったという話を耳にする。データさえあれば、あとは計算機が考えてくれるという錯覚に陥っているのだ。最近では、社会科学でよく行われるデータ処理は、使い勝手のよいソフトがあつて、いれば何かでてる。しかし、何を計算しているかをしっかりと認識せずに機械的にデータを入力しているとなると、これは、計算機の前のチンパンジーといわれでも仕方あるまい。

しかし、系が複雑になればなる程、計算結果の正当性を評価する方法がないことは深刻な問題である。それは、モデルの正当性の評価ももちろんのこと、書かれたプログラムに誤りがないかをチェックすることができないという問題も含んである。長時間を要する計算では他の研究者が追試実験をすることもできない。計算機の中で何が行われているか計算を行った研究者しかわからないという不安が残ります。

計算機のソフトの開発というのは、細心の注意が必要で、完成には長時間を要する。にもかかわらず、現在の日本では、計算機ソフトの開発をする研究者に対する自然科学者としての評価は必ずしも高いとはいえない。「計算機屋」という言葉には、理論屋に徹しきれないプログラマーといった蔑んだ響きすらある。そのため、自然科学関係のソフト開発の欧米に対する立ち遅れは、分野によっては十年以上あるといわれる。しかし、その欧米ですら、一九八二年ノーベル物理学賞をもらったウィルソンの仕事ははじめての計算物理学の分野の受賞といわれるが、その業績の評価が、その研究の重要な部分が計算機に負うていたというだけで遅れたといわれている。

人間が他の動物とは違うこと、それは未来をシミュレートする能力をもつことである。計算機シミュレーションは、その人間の思考作用の量と質を格段と高めてくれた。いまや計算機とともに育った研究者が一線で活躍し始めた。「計算機屋」という言葉もやがては消えて、また、単に「理論屋」や「実験屋」に吸収されていく、いまはその過渡期であるのかもしれないし、「理論屋」「実験屋」につぐ第三の研究者のタイプとして確固たる地位を確保するのもかもしれない。いずれにしろ、計算機を単なる道具としてでなく、手と頭脳の延長として利用することによって、新しい自然へのアプローチが生まれ、また、新たな自然観をわれわれに与えつつあることは確実である。

本研究は昭和六二年度特定課題研究「自然科学教育のためのパーソナルコンピュータ用ソフトの試験的作製」の一部として行った。

参考文献

- 科学、特集「コンピュータは科学を変えるか」第56巻、10号（1986）
数理科学、特集「計算物理」、5月号（1984）
一松 信著「四色問題」、ブルーバックス、講談社（1978）
石田晴久、シミュレーション科学、現代化学、4月号、48頁（1986）