

## 私の計算機実験

物理部 別役 廣

### 1 はじめに

電子計算機はその出現直後から物理学の基礎研究に有効であることを示し注目されたが、今では理論物理学・実験物理学につぐ第3の物理学としての計算機物理学が台頭している。そして計算機を駆使した新たな理論構築が試みられているし、また物理的・時間的・コスト的に実際には実験不可能な現象に対して計算機実験が盛んに行われている。電子計算機の高速度・大型化に従ってその適用範囲はますます拡大し、物理研究の新しい趨勢となっている。原研でも基礎研究センターの発足と共に、先端研究のテーマの一つとして計算科学が取り上げられる予定と聞いている。このような時期に当って、30有余年にわたる原研での計算機使用の実体験と、私が試みた計算機実験事始めを振り返ってみるのも一興と思われる。題して「私の計算機実験」、多少でも他山の石となれば望外の喜びである。

昭和33年10月に導入された原研の初代電子計算機 IBM 650 を見たことのある者は、今では数少ないだろう。私は昭和32年4月公募一期生として原研に入所した。当初は「固体物理・冶金研究室」（室長橋口東大教授兼務）に配属された。入所直後から駒込の理研の一室に間借りした研究室で、国富信彦さん（現広島工業大教授）、浜口由和さん（現室蘭工大教授）、坂本正誠さんと共に中性子回折の勉強をしていた。すべて手探りの時代ではあったが、Bacon の中性子回折の教科書を輪講していて、中性子回折の反射能は重要な量で、単結晶のモザイクの大きさとコリメータの拡がり角に関係していることが分かった。それでモザイクの大きさとコリメータの拡がり角をガウス形で近似して、反射能の表を作ることにした。当時では最新鋭の電動計算器ルートフリーデンではどうにもならず、そのころ新橋にあった原研本部に設置されたばかりの IBM 650 を使うことにして、コーディングを桂木学さん（現日本総合研究所）にお願いした。プログラミングはパッチコードでやっていたようである。今改めて考えると、TSS を使うとフォトラプログラムは数時間で出来上がり、実行時間は数秒程度の仕事ではあったが、当時タイガー手回し計算器を使っていた身としては、電動計算器の出現にすら感激していたので、その能力には唯感嘆した。まさに新しい時代の到来が予感された。この時の原体験が、後年電子計算機にのめりこむ要因の一つとなった。なおこの計算結果は、後年 JRR-2 に中性子回折装置が完成後実測値と比較して発表した。[1]

原研入所以来の研究テーマと時期と関係した論文、および使用した原研の電子計算機を表1に示した。当初は主に実験データの処理と理論解析で使用していたが、グレードアップで計算機の性能が向上すると共にテーマが計算機実験に移り論文数も増加していることが見られる。

### 2 計算機実体験時代 — 実験データ解析と制御ソフト作成

計算センターの‘ブラックリスト’に初めて載ったのは、昭和43年計算機が IBM から FACOM に切り替わった頃である。当時は核磁気共鳴の実験をしていたが、Abragam の教科書にもものっている  $\text{CaF}_2$  で観測された free inductin decay の異常な振動的挙動に興味を持った。核スピンの双極子相互作用が原因であることは明かであったが、単純なモーメント展開では振動部分は現れないので、相互作用をゼーマン項に対角な部分と非対角な部分に分解して、久保-富田の磁気共鳴の一般論に従って摂動計算を行い展開式を求めた。各項を時間をパラメータとして数値計算を行った。低次の項は IBM 7044 を使って簡単に計算できた。高次の展開項となると項数が多くなり、それに従って計算量も多くなった。丁度 FACOM 230-60 への切替時期で、パ

表 1 : 研究テーマ, 実施時期, 論文, 計算機機種

研究テーマ	実施時期	論文	計算機機種
核磁気共鳴の実験	S34-47	[2-5]	FACOM 230-60
中性子散乱の実験	S48-52	[6-8]	FACOM 230-60
モンテカルロ法による 古典スピン系の研究	S51-56	[9-12]	FACOM 230-75 F75APU M200
数値転送行列法による フラストレートした系の研究	S56-61	[13-16]	M200 M380 VP100
量子転送行列法による 量子スピン系の研究	S58-63	[17-28]	M380 M780 VP100

ンチカードで打った二・三本の job を前日に計算センターに申し込むと、富士通の工場で計算して翌日には結果が受け取れた。あまりの計算量に稲見泰生さん（現茨城大助教授）が様子を見に来られた程だった。結果は首尾良く *Physical Review Letters* に掲載された。[5] これが私の計算物理学の第一歩で忘れ難いものがある。

計算機実体験の上からは、3 軸型中性子分光器を制御するミニコン用のソフトを作成した仕事も忘れ難い。[8] 昭和 50 年に JRR-2 に新しい 3 軸型中性子分光器 DMNS を設置することになりミニコン HITAC 10 で制御するソフトを作成する仕事を担当することになった。当時は中性子分光器をミニコンで on-line 制御して、波数ベクトル一定・エネルギー一定などの条件で測定する実験方法が主流となる頃であった。しかし HITAC 10 はメモリー 8K ワードで入出力には紙テープを使用していて、アセンブラでコーディングした紙テープをコンパイルして機械語のオブジェクトテープを作成するようになっていた。この仕事の大変なことは、既に稼働していた 3 軸型中性子分光器 CTNS の例からも予想できた。計算センターの浅井清さん（現企画室次長）に相談したところ次のようなステップで処理することを勧めてくれた。(1) 浅井さんの開発した GPL（原研プログラミング言語）で書いたソフトを HITAC 10 のアセンブラに変換するプリコンパイラーを、小沼吉男さん（現那珂研）が作成する。(2) そのアセンブラを HITAC 10 の機械語に変換するコンパイラーを、私がフォトランでコーディングする。(3) 最後にリモートステーションで紙テープに出力する。最終的に HITAC 10 の 8K ワードに納めるのに苦労をしたが、この試みは成功してかなり省力化できた。その時作成した制御プログラムは、多少形を変えて今でも新 3 号炉に移転された TAS-II で稼働をしている。一年以上もこの仕事に専念し苦労も多かったが、その時必要にせまられて勉強したアセンブラと機械語の知識は後々まで役に立った。また大抵のプログラムはこなせる自信が得られた。

### 3 計算機実験事始め — 古典スピン系のモンテカルロ計算

中性子非弾性散乱の実験結果を説明するには、スピン系の挙動についての詳しい知識が必要である。当時の理論ではモーメントを用いて散乱のスペクトラムを計算する方法が行われていたが、実験結果を説明するには不十分なのでスピン系の計算機実験を始めることにした。モンテカルロ法で熱平衡状態を決め、その後は分子動力学法を用いて時間的挙動を調べる予定であった。

スピン系のモンテカルロ法の原理は非常に簡単であるが、魅力に富んでいる。一定の温度の下で、各々のスピンの方向を局所的に自由エネルギーが極小になるように確率的に決める。この過程を繰り返すことで、全系の自由エネルギーを極小にするようにスピンの配置が決まる。確率過程論的にはこれはマルコフ過程になり、初期条件によらず平衡状態は一義的に決まることが証明されている。

モンテカルロ法の実行には良質の乱数が必要である。また統計を上げるためにモンテカルロのステップ数

を大きくとることが肝心であり、そのためには1個のステップの処理速度を上げなければならない。幸い原研では遮蔽計算にモンテカルロ法が用いられていた。とくに KENO-IV という原子力コードは合同乗算法を用いて一様乱数を発生していた。この乱数の一様性は検証済みであった。斉藤直之さん（現那珂研）をお願いして IBM 7044 時代に作成したというアセンブラのソースを見せて頂いた。それを FACOM 230-75 のアセンブラ FASM に書き換えた。ついでにランダムにサイトを選ぶのに必要な整数の乱数を発生するプログラムもアセンブラで作成した。このようにして作成したモンテカルロのプログラムはかなり速く、ステップ数も大きく取れた。昭和 50 年代に入って盛んになり始めた大学関係のモンテカルロの結果に比べて、私の結果は統計が良くきれいなデータが得られていたのはささやかな自慢であった。

モンテカルロ計算で最初に取り上げたのは、3次元立方格子上に配置してハイゼンベルグ的相互作用をしている古典スピン系の相転移の問題である。[9]  $14 \times 14 \times 14$  のサイズまで計算した。この系は等方的であるので自発磁化は特定の方向には固定されない。磁化の自乗平均から計算した自発磁化は、有限系のサイズ効果のために転移点近傍で rounding が大きい。これを減少する試みとして最大距離の相関関数から自発磁化を計算することにした。得られた自発磁化を  $A(1 - T/T_c)^\beta$  の形にフィッティングして転移温度  $T_c$  と磁化の指数  $\beta$  を求めた。

この結果を京大基研の「臨界現象」研究会に発表したのが縁で、鈴木増雄さん（現東大教授）と大学院生であった宮下精二さん（現京大助教授）と知り合いになれた。宿舎で夜遅くまで熱っぽく議論をしたのは懐かしい思い出である。鈴木さんは当時から頭髪が薄く既に大家の風貌を備えられていた。後になり本当の年齢を知りびっくりした。後年有限スケール理論さらに CAM 理論まで発展したが、有限系の rounding 効果には相転移に関する重要な情報が含まれているので、サイズ効果を詳しく調べることにより取り出せる筈だということを熱っぽく論じておられた。また2次元系の重要性も教えられた。

この議論に刺激されて、モンテカルロ法を用いてカダノフのブロック変換を行い、実空間でくりこみ群を遂行する方法を考案した。この方法を2次元平面回転子系に適用して、この系の相転移機構を調べた。この方法で求まる相関関数は四つの温度領域をもち、それぞれに特徴的な様相を示すが、これはこの系に特有の渦の挙動と密接な関係があることを指摘した。この結果を昭和 55 年 8 月カナダのエドモントンにあるアルバータ大学で開かれた第 14 回統計物理学国際会議で報告した。[12]

昭和 56 年に F75APU が原研に設置された。Array Processor Unit の略で現在のスーパーコンピュータの前身をなすものだ。外来研究員の長谷部芳男さん（現富士通）に依頼してモンテカルロのコードの改造をいろいろ試みて、3.8 倍程度の効率が得られた。当時の常識に従ってランダムにサイトを選ぶ方法を踏襲したために、効率がそれ程上がらなかったと考えられる。今では常識になっている偶奇論理を用いたら、もう少し効率が上がっていたのではないかと思ひ多少の悔いは残る。

## 4 計算物理学へ — 数値的転送行列法による計算

カナダの国際会議では小口武彦先生（現長岡技術科学大教授）と知り合いになれた。日本まで一緒に帰ってきたが、帰路航空機の小事故などありいろいろとお世話になった。途中スピングラスの面白さを教えていただいた。この縁で帰国後はスピングラスのモンテカルロ計算の共同研究をすることになった。

最近接相互作用がランダムに正負の値を取って分布している2次元正方格子上のイジングスピン系である  $\pm J$  モデルでモンテカルロ計算を開始した。相互作用に小さなランダム性を入れるなどいろいろと試みてみた。しかし通常のモンテカルロ法で用いられているメトロポリスの single spin flip では、位相空間の局所的極小に落ち込んだ時に抜け出せなくなり、自由エネルギーの真の極小値は得られないだろうという意見が大勢を占めた。

結局位相空間内のすべての状態について和を取る方法が必要となった。N 個のスピンからなる系には  $2^N$

個の状態があるので、 $N$ の値が大きくなると状態数はたちまち膨大な数になる。そもそもモンテカルロ法は、膨大な数の状態から最も重要な状態を選び出すために考案された手法であるので、その意味では原点に立ち戻らなければならなくなった訳である。この目的で考えられた手法に **Morgenstern** と **Binder** によって報告された **recursive method** というのがあった。彼等の論文からアルゴリズムを勉強してプログラムを作り上げた。昭和 57 年春の物理学会で報告したところ、福岡工大の中村勝弘さんにこの方法は転送行列法そのものであると教えていただいた。以後数値的転送行列法という名を使っている。転送行列法は、行列論で良く知られている累積法の変形である。累積法ではエルミート行列の積を次々に作ることにより、最大固有値と固有状態が得られる。 $N$  個のスピンの系からなる系の転送行列のサイズは  $2^N \times 2^N$  であるので、 $N$  が大きくなるとそのままの形では計算機のコアに入り切らなくなる。これを逃れるために行列を小さな部分に分解して次々に (**recursively**) 数値的に積を作っていく手法をとっている。この方法では  $2^N$  の **DIMENSION** を使うだけで最大固有値と対応する固有関数が数値的に得られる。最大固有値から熱力学的諸量が数値的に正確に求められるし、相関関数も固有状態から計算できる。まさにこの方法は計算物理の典型的な例をなすものである。

転送行列法を用いて  $\pm J$  モデルの相転移の様相を研究した。対称破りの磁場に対する応答を詳しく調べた。また相関関数の距離依存性と温度依存性からスピングラスの様相を明らかにした。[13] フラストレーションが規則的に並んでいる 2 次元格子上のイジングスピン系についても、熱力学的諸量と相関関数を求めた。[14] これらを昭和 57 年京都で開かれた国際磁気会議と直後に開かれた「新しい型の秩序相への相転移」国際ミーティングで報告した。

昭和 59 年スーパーコンピュータ **VP100** が原研にもようやく設置された。外来研究員の篠沢尚久さん（現メイトック）に依頼して、数値的転送行列法のコード **SPIN** をベクトル演算向きに改造して頂いた。篠沢さんは、プログラムを解析してベクトル演算向きのアルゴリズムを発見し 15 倍の効率を得られた。従来の 1 時間 **job** が 4 分で済むのであるから大変な効率である。篠沢さんのアイデアはリストベクトルの表を作る事で、これによりベクトル計算の効率を上げていた。この表はかなり大きなものであったが、平気で **DIMENSION** を切っていた。**VP100** は 32MB の実メモリを持っていたのである。（昭和 62 年に 128MB に増強された。）**FACOM 230-60** 使用時代には **DIMENSION** を少し大きく取るとエラーになることを度々経験していた者には、想像も付かない大きさであったので、ある種のカルチャーショックを受けた。まさに電子計算機の新しい時代の到来が実感された。‘**Memory is time.**’ ともいうべきこの手法は以後便利に利用させて頂いている。

**SPIN** コードのプログラム構造は文献 [15] に掲載されている。この **SPIN** コードは、通産省の大型プロジェクト「科学技術計算用高速計算システム」（昭和 61 年-平成 2 年）の性能評価用のプログラムとして使用された。なお最近行なわれた **FORTRAN77EX** への移行に際しても、**SPIN** は優等生で 1.76 倍の性能比が得られている。

## 5 量子転送行列法 — 古典スピン系から量子スピン系へ

鈴木-トロッタの定理によると、 $N$  のスピンからなる 1 次元量子スピン系はトロッタ次元と呼ばれる新しい次元を導入することによりサイズが  $N \times 2m$  の 2 次元イジングスピン系と等価であることが証明されている。 $m$  はトロッタの分割数である。4 スピン間の相互作用がチェス盤状に並んでいるのでチェス盤分解と言われている。このチェス盤状のイジングスピン系をモンテカルロ法で計算することは、昭和 50 年頃から鈴木・宮下によって既になされていた。

昭和 59 年に数値転送行列法でこの系を計算することを考えた。最初は実空間方向の  $N$  個のスピンの  $2^N$  個の状態をトロッタ方向に転送することを考えたがすぐに無理なことは分かった。トロッタ方向について周期的という条件のためである。発想を転換して縦のものを横にすればうまく行くことに気が付いた。すなわちトロッタ方向の  $2^{2m}$  個の状態を実空間に沿って収斂するまで転送すれば良い。さらに試行を進めるうちに、

チェス盤分解より実空間分解の方が収斂が速いことを見出した。トロツタサイズを変えて計算し、サイズ依存性を調べたところ  $m^{-2}$  に非常に良く合うことを見つけた。この  $m^{-2}$  依存性は鈴木-トロツタ公式と等価の式を使って証明できた。とくに XY 模型では、 $m^{-2}$  で外挿して得た値は桂の厳密解を 5 桁迄再現することを発見した時には興奮した。この結果は *Physical Review Letters* に掲載されている.[17] その後固体物理第 2 研究室の横田光史さんの協力を得てフェルミ系、スピン 1 の系、クラスタ転送行列法、さらには鈴木先生と共同の熱場転送行列法へと発展した.[18-28]

これらは昭和 59 年に始まって 61, 62 年に集中して行われた。まさに疾風怒涛の時代であった。今改めて考えてみると、天の時、地の利、人の和を得た研究生活が一時でも持てたのは非常に幸運なことである。

## 6 射影演算子法の新たな発展

実空間方向の  $N$  個のスピン  $2^N$  個の状態をトロツタ方向に転送する方法は、有限温度ではトロツタ方向の周期性のために実行不可能であるが、温度が 0 の極限では話が変わってくる。この場合はトロツタの分割数が無限になり、ある状態から出発して転送を繰り返すと一定の状態に収斂する。前に述べた累積法の考え方によると系の最大固有値と固有関数が求まることになる。任意の状態を最低エネルギーの状態に射影するという意味で、この方法を射影演算子法と呼んでいる。この方法では適当に初期状態を選ぶことによって、基底エネルギーと基底状態、および低次の励起エネルギーと状態を計算できる。 $N$  個のスピン  $S$  からなる系には  $(2S+1)^N$  個の状態がある。基底状態は全スピンの  $Z$  成分が 0 の部分空間であるので状態数は多少減るが、状態を対応付ける表の大きさは変わらないので、 $N$  と  $S$  の値が大きくなると必要なコアサイズはたちまち膨大な数になる。

この射影演算子法を用いて 1 次元反強磁性ハイゼンベルグ-イジング系を調べた。異方性パラメータ  $\Delta$  を含むような形にハミルトニアンを書く時、 $\Delta$  の値により次の三つの場合が含まれる：(1) $\Delta=0$  XY 系; (2) $\Delta=0.5$  等方的反強磁性的ハイゼンベルグ系; (3) $\Delta=1$  反強磁性的イジング系。従って  $\Delta$  の関数として相図を作ることにより、この系の相転移を調べることができる。Haldane によるとスピン  $S$  が整数の場合は、半奇数の場合とは異なり、 $\Delta=0.5$  の近傍でエネルギーギャップが存在し基底状態は一重項である。 $S=1$  の場合マグノンとソリトンの異方性依存性から、 $\Delta=0.5$  の近傍でエネルギーギャップが存在することを確かめた.[25] これに対して  $S=\frac{1}{2}$  の場合は  $\Delta=0.5$  にエネルギーギャップは存在せず、異方性パラメータの変化に伴う crossover 効果を見出した.[26] このように  $S=1$  と  $\frac{1}{2}$  を比較する限りでは、Haldane の予測は成立しているように見える。

昭和 61 年 4 月に IBM の Bednorz と Müller によって高温超伝導酸化物が発見されて、次いで起こった昭和 62 年の超伝導フィーバ以来、高温超伝導の発生機構に興味を持った。高温超伝導酸化物で観測される種々の異常を  $\text{CuO}_2$  面におけるハバード模型を用いて説明することが試みられている。電子が同一サイト上に来る時に斥力が働くハバード模型は、相互作用の強い極限では反強磁性的ハイゼンベルグ模型と等価になるので、この系の性質を明らかにする必要があると考えて、正方格子上の反強磁性ハイゼンベルグ-イジング系を射影演算子法を用いて調べることを始めた。幸いスーパーコンピュータ VP2600 が平成 2 年 7 月原研に導入された。メモリーも 500MB に増強されている。VP2600 は非常に強力で、プログラムによっては VP100 の 10 倍程度実行速度が速い場合がある。このために VP100 では不可能であったスピン値が大きい場合も計算可能になった。

有限系の基底エネルギー、励起エネルギー、相関関数をスピン数  $N$ 、スピンの大きさ  $S$ 、および  $\Delta$  の関数として計算した。正方格子に対する Betts の周期的境界条件を適用して計算した  $S$  と対応する最大スピン数は以下の通りである： $S=\frac{1}{2}(26)$ ,  $1(16)$ ,  $\frac{3}{2}(10)$ ,  $2(10)$ ,  $\frac{5}{2}(8)$ ,  $3(8)$ 。  $N$  と  $S$  に対する状態数、計算に必要なコアサイズ、および一点当たりの実行時間を表 2 に示した。  $N$  と  $S$  が大きくなるとコアサイズと実行時間が急激に大きくなるのが見られる。相図を画くには  $\Delta$  の値を変えていくつかの点で計算しなければならないのであるか

ら、計算量は膨大になる。

$S^2$  で規格化した相関関数を  $\Delta$  の関数として求めた。XY 領域 ( $\Delta=0\sim 0.4$ ) では xy 相関が優勢であり、イジング領域 ( $\Delta=0.6\sim 1.0$ ) では zz 相関が優勢である。ハイゼンベルグ領域 ( $\Delta=0.4\sim 0.6$ ) で両者の crossover が起る。S が大きくなるに従って転移は急激に起こるようになる。1 次元に対する同様な計算と比較することにより、 $2dS=\frac{1}{2}$  の相図は  $1dS=1$  の相図と良く一致することが分かった。これは  $1dS=1$  の VBS 状態と  $2dS=\frac{1}{2}$  の RVB 状態の対応性から予想される結果である。同様な対応は  $2dS=1$  と  $1dS=2$ , および  $2dS=\frac{3}{2}$  と  $1dS=3$  にも見られる。

1 次元・2次元を通して、相関関数は、 $1dS=\frac{1}{2}$  を除いて、ハイゼンベルグ領域ですべて同じような挙動を示す。 $1dS=\frac{1}{2}$  を除けば Haldane によって予想されたスピンの偶数・半奇数による差は見られない。この事実から、 $1dS=1$  に見られるエネルギーギャップは、 $1dS=\frac{1}{2}$  を除いては、ハイゼンベルグ領域に共通に存在すると思われる。 $1dS=\frac{1}{2}$  だけは特別で、ハイゼンベルグ点でエネルギーギャップがない。エネルギーギャップ等についての詳しい結果は、春の日本物理学会で報告した。[29] 2次元  $S=\frac{1}{2}$  の系のハイゼンベルグ領域でエネルギーギャップが存在するという事実は、酸化物超伝導体の超伝導発生機構を考える上で重要な手掛かりを与えるものと考えられる。

この仕事の主要部分であるメモリーを 500MB 近く使う大規模計算は、情報システムセンターの特別の御配慮で年末年始にかけて行われた。しかし今後は大メモリー計算でも常時行える態勢が望まれる。また世界でも有数の VP2600 の性能にふさわしく 1 GB 程度のメモリーは備えて欲しい。

## 7 おわりに

昭和 50 年にモンテカルロ計算を始めて以来書き続けた記録は、既に研究ノートで 40 冊を越えた。今改めて読み返してみると、‘やるべき事’という項目があって考えついた研究テーマがいろいろと書き並べてあるのが目につく。その中にはものになったものもあるが、むしろならなかったものの方が多い。しかし若い時には、何時もいくつかのテーマを並行して考えていたようである。近年のノートの‘やるべき事’の数はめっきり少なくなり、あるにしても短時間に結果がでるものに限られているのは、まことに淋しいことである。

最近ではダウンサイジングという言葉がしばしば新聞紙上でも見かけられるように、電子計算機をめぐる基盤構造に顕著な変化が見られるようになった。私個人の場合にもそれが当てはまる。これ迄論文を作成するには、計算結果を得るのは勿論のこととして、英文は大型計算機の ATF を使って作成清書し、図は PTS で作成し NLP に出力してした。このように 100%大型機に頼っていたが、今では計算実行以外はパソコンを使っている。英文は  $\text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}+\text{REV}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$  を使って作成してる。特に  $\text{REV}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$  を使うと Physical Review には bitnet を通して投稿でき、出版迄の日時がかなり短縮される。図は PDS の Ngraph を使って作成しているが、このソフトは使い易く図の仕上がりも素晴らしい。このような事情から考えてみても、中小規模の計算はワークステーションで処理することによって大型機の負担を軽くして、大型計算機は大規模の計算を高速で処理するように専門が分化していくのが今後の趨勢と思われる。この点について情報システムセンターの一層の御尽力をお願いしたい。

最後に「私の計算機実験」を遂行するにあたって、いろいろと面倒をお掛けしました情報システムセンターの皆様にお詫びとお礼を申し上げます。特に陰に陽に御配慮いただいた浅井企画室次長と、昭和 49 年の TSS 導入当時から御指導いただいた富山さんには感謝の言葉もありません。

表 2 : スピンの大きさ  $S$ , 計算したスピンの数  $N$ , 状態数  $(2S+1)^N$ ,  
 使用したコアの大きさと 1 点当たりの実行時間

$S$	$N$	$(2S+1)^N$	コアサイズ	計算時間
$\frac{1}{2}$	26	67108864	466MB	1h19m
	20	1048576	14	48s
1	16	4304721	271	1h32m
	10	59049	1	3s
$\frac{3}{2}$	10	1048576	7	2m
	8	65536	1	5s
2	10	9765625	56	50m
	8	390625	3	2m
$\frac{5}{2}$	8	1679616	10	11m
	3	5764801	31	50m

## 参考文献

[\*] \*は計算機に関係したコメントを示す.

- [1] N. Kunitomi, M. Sakamoto, Y. Hamaguchi and H. Betsuyaku: *Reflectivity of Collimated Neutrons by a Mosaic Single Crystal*, J. Phys. Soc. Jpn. **19** (1964) 2280.  
 単結晶による中性子回折の反射能をモザイクの大きさとコリメータの拡がり角度の関数として計算し、実験結果と比較した。  
 \*詳細は本文参照.
- [2] H. Betsuyaku: *Calculation of  $^{14}\text{N}$  Quadrupole Constant in the Nitrite Ion*, J. Chem. Phys. **50** (1969) 3117.  
 $\text{NO}_2$ -イオンの  $^{14}\text{N}$  核の核 4 重極相互作用定数を分子軌道法を用いて計算し、実験と一致する値を得た。  
 \* CNDO 法を用いた簡単な分子軌道法. 自己無撞着法までは出来なかった. [3] も同じ.
- [3] H. Betsuyaku: *Calculation of the Charge Distribution and Orbital Energies of the Ground State of the Nitrite Ion*, J. Chem. Phys. **50** (1969) 3118.  
 $\text{NO}_2$ -イオンの基底状態の電荷分布と軌道エネルギーを分子軌道法を用いて計算した x.
- [4] H. Betsuyaku: *Charge Distribution and Nuclear Quadrupole Interactions in Ionic Crystals*, J. Chem. Phys. **51** (1969) 2546.  
 多原子分子を含むイオン結晶中での核 4 重極相互作用定数の成因を調べた. 特に  $\text{NaNO}_2$  の場合について、電荷分布による寄与の重要性を指摘した。  
 \* Planewise Lattice Summation 法のコードを入手して、電気双極子が作る電場勾配の格子和を計算した.
- [5] H. Betsuyaku: *Lowe-Norberg Theory of Nuclear-Magnetic-Resonance Free Induction Decay in Solids*, Phys. Rev. Lett. **24** (1970) 934.  
 スピン-スピン緩和過程を記述する相関関数を、久保-富田の磁気共鳴に関する一般論に従い摂動の 5 次の項まで考慮に入れる事により、 $\text{CaF}_2$  で観測された異常な挙動を良く説明できることを示した。  
 \*昭和 43 年は IBM から FACOM への切替時期で、前半は IBM 7044 で後半は導入されたばかりの FACOM 230-60 で計算した. 摂動展開の項数が多く当時としては、かなりの計算量になった. 本文参照.
- [6] H. Betsuyaku and Y. Hamaguchi: *Neutron Scattering Investigation of Magnetic Excitations in  $\text{KMnF}_3$* , J. Phys. Soc. Jpn. **37** (1974) 975.  
 中性子非弾性散乱の実験から  $\text{KMnF}_3$  の散乱関数の温度変化を決めた. この実験は  $\text{KMnF}_3$  の常磁性相にはスピン波に似たモードが存在する確証を与えた.

\*飛行時間型中性子分光器で得られた紙テープ上のデータを、リモートステーションで大型計算機に取り込み、エネルギーと波数で分類して分散スペクトルを計算した。最終的には、プロッターに出力した。本橋治彦さん（現大型放射光）の協力で行ったが、液体窒素のチャージに夜中に JRR-2 に出かけるなどかなりの労力を要する実験であった。

- [7] H. Betsuyaku: *Neutron Scattering Function in a Heisenberg Paramagnet: Application to  $KMnF_3$* , J. Phys. Soc. Jpn. **38** (1975) 21.

ハイゼンベルグ型常磁性体の中性子散乱関数の計算を行った。Kadanoff-Martin による sum-rule moment の方法を拡張することにより、一般化帯磁率の連分数表示を求めた。 $KMnF_3$  の中性子散乱の実験結果と比較した。

\* [6] の理論計算。ガウス形とローレンツ形を合成した関数が必要になり作成した。

- [8] 小沼 吉男・藤井 実・別役 廣・浅井 清・八木 秀之:「大型機によるミニコン・マイコンのプログラミング・サポート」, 第 18 回プログラム・シンポジウム報告集 (1977) p.181.

3 軸型中性子分光器 DMNS を制御するミニコン HITAC 10 のソフトを大型計算機を使って作成した。\*本文参照。当時は大型計算機のサポートによりミニコンの性能不足を補おうという考えで計画を進めたが、ミニコン・マイコンの高性能化・低価格化により今ではドンキホーテの記念碑に過ぎなくなった。新 3 号炉に設置された新しい中性子分光器では、ワークステーションの VAX で制御していて、制御プログラムはフォトランでコーディング出来る。技術革新の速さにはただただ目を見張るだけである。

- [9] H. Betsuyaku: *A New Monte Carlo Calculation of the Magnetization of a Classical Heisenberg Ferromagnet*, Phys. Lett. **64A** (1977) 98.

モンテカルロ計算により自発磁化を計算する新しい方法を開発した。これにより 3 次元ハイゼンベルグ系の磁化の指数として実験値に近い値を得た。

\*モンテカルロ計算の最初の論文。有限系の rounding 効果を減少するために、最大距離の相関関数から自発磁化を計算した。 $A(1-T/T_c)^\beta$  の形にフィッティングして磁化の指数  $\beta$  を求めることを試みた。

- [10] H. Betsuyaku: *Monte Carlo Investigation of Magnetic Properties of a Two-Dimensional Classical Heisenberg Magnet*, Solid State Commun. **25** (1978) 185.

モンテカルロ計算を用いて 2 次元ハイゼンベルグ系の帯磁率を計算した。帯磁率は異常な温度依存性を示すことを発見した。

\* 2 次元ハイゼンベルグ系は有限温度では転移温度を持たないという Mermin-Wigner の定理がある。しかし有限系のモンテカルロ計算では自発磁化があるようにみえた。これは当時の有限系のサイズ  $50 \times 50$  が小さすぎたため、最近改めて  $1024 \times 1024$  のサイズまで計算してみて、自発磁化は、たしかに 0 に向かう傾向があることを確かめた。

- [11] H. Betsuyaku: *Monte Carlo Investigation of Magnetic Properties of a Two-Dimensional Plane-Rotator Model*, Solid State Commun. **25** (1978) 829.

モンテカルロ計算により、2 次元平面回転子系で Zittartz の提案した連続次の相転移に対する実験的証拠を与えた。

\* 2 次元平面回転子系に存在する渦が知られる前の論文。分布関数の温度依存性から、異常な挙動を論じている。

- [12] H. Betsuyaku: *Monte Carlo Realization of Kadanoff Block Transformation in the 2d Plane-Rotator Model*, Physica **106A** (1981) 311.

モンテカルロ法を用いてイジングスピン系の実空間くりこみ群変換を行なう手法を開発した。この方法を用いて相転移に伴う臨界現象を調べた。 $130 \times 130$  個のスピンの系では、ブロックスピン間の相関関数は相転移点の近傍でスケール則を満足していることを見出した。（第 14 回統計物理学国際会議招待講演）

- [13] H. Betsuyaku: *Spin-Glass Properties of  $\pm J$  Random-Bond Model*, J. Magn. Magn. Mat. **31-34** (1983) 1311.

数値的転送行列法を用いて、最近接相互作用がランダムに正負の値をとっている 2 次元正方格子上的イジング系について、相関関数の温度変化及び距離依存性を調べスピングラス相の機構を解明した。

\*数値的転送行列法の最初の論文。1982 年京都で開かれた国際磁気会議で報告した。

- [14] H. Betsuyaku: *New Type of Phase Transition in the 2-d Ising Model with regularly Disposed Frustration*, J. Phys. Soc. Jpn. **52** (1983) Suppl. 225.



数値的転送行列法を用いて、フラストレーションが規則的に並んでいる2次元格子上のイジングスピ  
ン系について熱力学的諸量と相関関数を求めた。

\*国際磁気会議の直後に、京都で開かれた「新しい型の秩序相への相転移」国際ミーティングで報告  
した。

- [15] 浅井 清・横川 三津夫・別役 廣 その他：「ベクトル・パラレル計算処理の原子力コードへの適応性」,  
JAERI-M 87-136 (1987) p.99.

転送行列法による数値解析の手法を、ベクトル・パラレル計算機で行うためのアルゴリズムを開発し  
た。パラレル処理を併用することにより、現存の電子計算機に比べて8倍程度の速度向上が見込まれる  
ことを明らかにした。

\*本文参照。数値的転送行列法のコードは SPIN という名前で原子力コードに登録されている。SPIN プ  
ログラムの構造については、横川さんの要領を得た解説がこのレポートに収められている。

- [16] H. Betsuyaku: *Thermodynamics of the Two-Dimensional Ising Model with Regularly Disposed Frustrations*,  
Prog. Theor. Phys. Suppl. No. 87 (1986) 43.

結合の不满の度合を示すフラストレーションが規則的に並んでいる2次元正方格子上のイジング系の  
自由エネルギーを数値的に正確に求める手法を開発し熱力学的諸量の挙動を調べた。転移点はフラスト  
レーションの密度だけに依存しており、その分布の違いは比熱の発散の様相に差を生ずることを明らか  
にした。

\*2次元イジング系の厳密解を与える Vdovichenko の方法に従って行列要素をつくり、それを EISPACK  
を使って対角化して、分配関数を数値的に計算する方法を考案した。フラストレーションのない場合に  
は、エネルギーと比熱は Onsager の厳密解に一致する。

- [17] H. Betsuyaku: *Study of One-Dimensional XY Model by the Transfer-Matrix Method*, Phys. Rev. Lett. **53** (1984)  
629.

電子計算機を用いた量子転送行列法を開発した。この方法を1次元XY模型に適用して、桂の厳密解  
を5桁まで再現することを実証した。

\*量子転送行列法に関する最初の論文で、以下の論文群の出発点となった。この論文の発表後、筑波大  
の久保健さんも同じことを独立に考えていたことを知った。

- [18] H. Betsuyaku: *Study of One-Dimensional Quantum Spin System by the Transfer-Matrix Method*, Prog. Theor.  
Phys. **73** (1985) 319.

量子転送行列法を用いて、厳密解が未だ知られていない1次元ハイゼンベルグ系の熱力学的諸量を求  
めた。

- [19] T. Yokota and H. Betsuyaku: *Study of One-Dimensional Fermion Model by the Transfer-Matrix Method*, Prog.  
Theor. Phys. **75** (1986) 46.

量子転送行列法を用いて、1次元フェルミ系の相関関数を計算した。相互作用の大きさに対するこの  
量の挙動から、この系では金属-絶縁体転移が起っていることを明らかにした。

- [20] H. Betsuyaku: *Cluster Transfer-Matrix Method for One-Dimensional Quantum Spin Systems*, Prog. Theor.  
Phys. **75** (1986) 774.

クラスター分解法を用いて、量子転送行列法の精度を向上することを試みた。1次元量子スピン系に  
対する有効性を実証した。

- [21] H. Betsuyaku and T. Yokota: *Study of One-Dimensional Quantum Spin System by the Transfer-Matrix Method*.  
II  $S=1$  Case,  
Prog. Theor. Phys. **75** (1986) 808.

1次元ハイゼンベルグ系のスピンの場合について、量子転送行列法を用いて熱力学的諸量を求  
めた。

- [22] H. Betsuyaku and T. Yokota: *Ground State of Antiferromagnetic Heisenberg Rings Studied by the Projector  
Method*,  
Phys. Rev. B **33** (1986) 6505.

量子転送行列法を実空間方向に用いた射影演算子法は、1次元量子スピン系の基底エネルギーと固有  
関数を同時に求めるのに非常に有力な手法であることを明らかにした。

\*射影演算子法に関する最初の論文。以下の [24-26] の出発点となる。

- [23] M. Suzuki and H. Betsuyaku: *Thermofield Transfer-Matrix Method and its Applications to Quantum Spin Systems*, Phys. Rev. B **34** (1986) 1829.  
熱場転送行列法は、量子転送行列法と射影演算子法の両者の長所を統一した有限温度で有効な方法であることを指摘した。1次元量子スピン系について実際に確かめた。
- [24] H. Betsuyaku: *Finite-Lattice Extrapolations for the Ground-State Energies of Antiferromagnetic Heisenberg Rings*, Phys. Rev. B **34** (1986) 8125.  
Vanden Broeck と Schwartz の級数変換法を用いて、有限系の基底エネルギーの数値データから無限系の値を外挿することを試みた。S=1/2 の1次元反強磁性ハイゼンベルグ系と XY 系では、厳密解を再現する非常に正確な基底エネルギーが得られた。また S=1 の反強磁性ハイゼンベルグ系の基底エネルギーも正確に推定できた。  
\*サイズの異なった有限系の正確な数値データから、無限系の値が正確に外挿出来ることを示した。以後有限系における有効な外挿法として広く用いられている。
- [25] H. Betsuyaku: *Magnons and Solitons in a Spin-1 Antiferromagnetic Heisenberg-Ising Ring*, Phys. Rev. B **36** (1987) 799.  
射影演算子法を用いて、S=1 の1次元反強磁性的ハイゼンベルグ-イジング系のマグノンとソリトンの異方性依存性を調べ Haldane の予測を確認した。
- [26] H. Betsuyaku: *Crossover Effects in a Spin-1/2 Antiferromagnetic Heisenberg-Ising Ring*, Phys. Rev. B **36** (1987) 5613.  
射影演算子法を用いて、S=1/2 の1次元反強磁性的ハイゼンベルグ-イジング系を調べた。異方性パラメータの変化に伴う Crossover 効果を見出した。
- [27] H. Betsuyaku: *Quantum Transfer-Matrix Method and its Applications to Quantum Spin Systems*, in *Quantum Monte Carlo Methods*, edited by M. Suzuki (Springer, Berlin, 1987), pp.50-61.  
1次元の量子スピン系は2次元のイジング系に等価であるという Suzuki-Trotter の定理に基づいて、数値的転送行列法の手法を用いて量子スピン系の熱力学的諸量を求める方法について報告した。  
(第9回谷口シムポジウム講演)
- [28] 別役 廣:「量子転送行列法」, 日本物理学会誌 **42** (1987) 161.  
量子転送行列法の原理と1次元量子スピン系に応用した結果について解説した。
- [29] 別役 廣:「正方格子異方的量子反強磁性体の相図」, 日本物理学会第47回年回講演 於慶応大学(日吉) 平成4年3月27日。  
\*本文参照。