

特集 / システム という見方

システムという見方

藤原 毅 夫

1. はじめに

集合や組織が機能を持つときこれをシステムと呼ぶ。様々な分野でシステムという見方の重要性が改めて広く認識されている。社会や機構の中で、局所的に最適な処理がなされても、全体としてそれが最適な選択になるわけではない。このことは自然のシステムでもあるいは工学システムでもよく知られていることだが、しかし自然科学や工学を離れるとあまり注意されていない。その結果、社会や組織のシステムとしての機能が十分理解されず、多くの困難の原因となっている。社会が複雑になり、ひとつひとつの問題が社会システム全体に関係するようになってきているからである。

2. 様々な研究分野で

物理学では普通、原子・分子スケールでの過程を明らかにし、それに対して熱力学や統計力学の助けを借りて全体像を作り上げる。このように、要素に還元しそれから再び組み立てるやり方が、現象を理解するための典型的な方法である。そんな物理の分野でもシステムとして理解することの重要性が改めて強調されている。複雑系はその例である。流れの中での気泡や粒子、あるいは形や秩序形態を変える高分子混合系等の振る舞いは、液

体に新しい分野を開いたといえよう。複雑系、複雑流体などの新しい領域が活発に研究されている。さらにそこで生まれた新たな概念や解析手法は、生命現象や経済社会現象などの他の複雑なシステムの研究に適用されている。異なったシステムの共通性が強調されることも少なくない。

筆者の専門は物性物理学、特に物質の電子構造の理論的研究である。この分野では近年、古典粒子分子動力学と量子力学に基づく第一原理電子構造計算が結びついた第一原理分子動力学法が開発され、液体、固体表面、その他広い物質群と現象に適用され多くの成果を得ている¹⁾。最近では「オーダー N 法」という考えも注目されている²⁾。一般に、電子構造計算や分子動力学計算では、対象とする系の大きさ（あるいは粒子数 N ）に対して計算時間は N^3 または $N \log N$ で増加する。したがって計算できる系の大きさを 100 倍にすることは、計算機の演算速度が数千倍から 100 万倍にならなくては不可能である。それに対して、系の大きさを 100 倍にしても計算機の性能が 100 倍程度ですむように、計算アルゴリズムで挑戦しようというのが「オーダー N 法」である。オーダー N 法により、第一原理電子構造計算や第一原理分子動力学法の対象を大きくし、物質系をミクロからナノスケールまで広がった一つの系として捕らえる可能性が期待されている。

物性シミュレーションの分野で注目を集めてい