

## 科学史のこぼれ話（その7）

### ウラムとモンテカルロ法

(財)原子力データセンター

顧問 能澤正雄

第2次世界大戦の後期、日本側はアメリカ海軍の艦砲の正確な着弾に驚かされたとの話を、終戦後になって聞いたことがある。弾道計算に電子計算機が用いられたからだと言われた。しかし、それはどうやら本当ではなかったらしい。

真空管を用いて計算機ができる筈だと考え、これを実用にまでこぎつけたのは、フィラデルフィアのペンシルバニア大学の科学者と技術者達であった。その中心人物は、第一級の物理学者ジョン・モウクリイと才能豊かな技術者プレスパー・エッカートであった。モウクリイは実験室でガイガー計数管を使い慣れていた。つまり電子回路で放射線を計数していたので、電子回路方式で足し算、引き算ができれば、素晴らしい速さで微分方程式も解けるに違いないと考えたのだ。彼らはアーバディンにある弾道研究所が多くを女性を使って手回し計算機による弾道計算表を作成している事を知っていた。そこでこれらの計算を行うための電子式計算機を作るように働きかけたのであった。

フォン・ノイマン（1903-1957；ブダペスト生まれ、1930年プリンストン大学教授、1933年プリンストン高級研究所教授）は、この弾道研究所とロスアラモス国立研究所双方への助言者でもあった。弾道研究所の電子計算機ENIACの完成が近づいたころ、彼は親しくしていたロスアラモス研究所の、同じハンガリー生まれのエドワード・テラーとその仲間の研究者達に、この電子計算機の能力を試す試験問題を作るよう働きかけたのであ

た。

テラーのグループのことであるから、もちろん問題は熱核反応を利用した水爆に関するものとなった。この時、問題作成に協力したのはスタン・フランケルとニック・メトロポリス、そして後から加わったアンソニー・ターケヴィチである。問題作成中に戦争は終わりをアラモス研究所の将来について疑問が持たれる時期になったが、ともかく計算は実行され、1946年の春、ENIACの計算結果のレビュー会議がロスアラモスで持たれた。この会議にはテラーの他にエンリコ・フェルミ、フォン・ノイマン、所長のノーリス・ブラッドブリー等が参加したが、この中にポーランドのリヴォフ生まれの数学者スタン・ウラム（1909-1984）がいた。

ウラムはこの計算機を用いれば、統計的な標本抽出法（現在モンテカルロ法と呼ばれるもの）による計算が容易であると考え、この方法で臨界計算をやってみることが出来るのではないかと、1946年の終わり頃に、プリンストンへ帰っていたフォン・ノイマンに手紙を出したのである。ちなみに、ウラムはフォン・ノイマンと1934年の終わり頃に測度論（Measure Theory）に関する文通で知り合い、プリンストンへ招待され、以来、親しい友人であった。さて、この手紙を受けてフォン・ノイマンがロスアラモス研究所の理論部門のリーダーであるリッチマイヤーに具体的な提案をしたのは1947年の3月11日付けの手紙であった。その冒頭部分を引用してみると；「この手紙はさきの金曜日、3月7日に

我々が電話で話した際に約束したものです。

私は、スタン・ウラムによって示唆された原理に一致するような方法で中性子の拡散と増倍に関する問題を解くのに統計的方法を用いる可能性について随分考えました。考えれば考えるほど、このアイデアは大きな利点を持っていることを確信するに至りました。私の結論と予想は次のようにまとめることが出来ます。…”

このあと、手紙には核分裂物質を含む体系についての問題解法が具体的に、かつ詳細に述べられていた。フォン・ノイマンがこの方法に関心を示したことが、ロスアラモスの多くの研究者達の興味をよぶところとなった。その中に先に述べたメトロポリスがいた。彼がこの統計的な方法のためにびったりの名前を提案したのはこの時のことである。この提案はウラムにある叔父さんがいて、「ちょっとモンテカルロへ行く用があるので」とっては親戚からいつも借金していたという話とは無関係ではない。そしてこの名前は定着していった。

さて、フォン・ノイマンのこの最初の手紙では、炉心がタンパー物質で囲まれる球対称の体系を考え、中性子は既知の速度分布と空間分布の初期値をもつとし、核物質については吸収、散乱、分裂の断面積を与え、減速材や反射体の特性については中性子速度の関数として与えた。最後に個々の核分裂中性子の扱いでは、放出数が2、3、4等の場合の確率を仮定することによって、統計的に取り扱うこととしている。後に重要な適用例を見いだすこととなる捕獲ガンマ線は無視されているが、ENIACでなんとか意味のある結果を得たいのであれば、これは止むをえないことであった。

統計的な標本抽出法を実用化するのに重要な問題は乱数の発生である。完全で一様な分布をもつ乱数を速やかに得る方法の開発が必要であった。あとは解くべき問題に応じて、

この乱数を細工してやることになる。すなわち、乱数を一様な分布から、任意の欲しい形の分布に変換してやる技術が必要となる。その最初の方法は、ウラムによって提案されたもので、欲しい形の分布関数に対して、その逆関数を用いる方法であった。そして、これは現在でもよく用いられる方法である。例えば、中性子の飛程のように区間0から無限大にわたって指数関数的に減少するものを代表させるための乱数分布については、开区間0から1の間の一様な乱数分布を変形して、必要な係数をもった対数分布にすればよい。このようにして、与えられた中性子がタンパーに届くのか、炉心内で衝突するのかが決定される。次の例としては、中性子が原子核と衝突した際に起こる反応が単なる散乱なのか、吸収なのか、または分裂なのかを実験的に求められた割合に適合させることがある。この場合は、区間 $[0, 1]$ を実験で定まった三反応の割合に、あらかじめ分割しておき、つぎに区間 $[0, 1]$ で一様な乱数を発生させて、各乱数が3分割区間のいずれに属するかを判定すればよい。

一様乱数そのものの発生方法に関して、種々の開発がなされ、今日でも真の一様性と非周期性を求めて、多くの努力がなされている。

計算結果は、多くの、数千個以上の、中性子のそれぞれの経歴として記録蓄積され、これを統計的に処理することによって、求める物理量の平均値や誤差としての分散値が算定される。

統計誤差つまり分散値を減らすには、標本の数を増やせば良いことは当然であるが、それには計算時間を増やす必要がある。簡単に言えば、誤差を10分の1に減らすには、計算時間を100倍にしなければならない。精度のよい結果を得るには大変な計算時間を費やさなければならない。したがって、そのような方法でなくて、扱う物理現象を踏まえた分散値低減テクニックがいろいろと開発されて

きた。ここでも一例を挙げれば、中性子吸収を扱う重み付きサンプリング法というものがある。このテクニックでは、個々の中性子はその経歴の始めに重みが付けられる。そしてこの重みは各衝突毎に吸収断面積を全断面積で除した比に従って少しづつ減らされる。したがって、それぞれの衝突毎に吸収ではない他の反応がこの重み結果として選ばれ、飛行は継続される。このようにして、突如として生ずる中性子吸収を、緩やかな中性子の消滅に置き換え、分散値を減らすのである。

核設計計算におけるモンテカルロ法の特徴は、核断面積曲線での山や谷のような通常の解析的手段では扱い難いもの、体系内の物質構成や密度が空間的・時間的に急激に変化する場合に適していることであった。つまり、誤解を恐れずにいえば核兵器の計算で困難を感じていた人達の発案であったと言える。

1950年代は一連のモンテカルロ輸送コードがロスアラモスから生まれてきた。そして、新しい版になるにしたがって核断面積ライブラリーの追加、分散値低減テクニックの採用、核分裂中性子に対する熱化モデルの追加などが行われてきた。さらに、初期にはなかったガンマ線の輸送を扱うことが出来るものも開発された。1973年には、中性子輸送コードとガンマ線輸送コードが結合されたのであった。そして1977年、MCNPコードの第1版が公開されたのである。それ以来、このコードは世界中200以上の機関に配布されてきた。

MCNPコードの利用分野は原子炉の設計、核物質管理と保障措置、臨界性解析、油井探査、保健物理、放射線損傷等の広い範囲に亘っている。

もちろん、他の国立研究所でも同じような目的のためにモンテカルロコードが開発されてきている。その中でもORNLのKENOコード、MORSEコード、VIMコードは良く知られている。

モンテカルロの方法が使われているのは原

子力の分野に限られたものではない。一例を挙げると、物理の分野で使われるメトロポリスの方法がある。多粒子系での最低エネルギー状態のエネルギーと配位を求める問題は概念的には簡単である。それぞれの粒子がランダムに少し動いたところで、システムのエネルギーを計算し、それが減少しているならばそれを受け入れる。これを繰り返して、もうシステムのエネルギーが変化しないようになればそれが答えである。しかし、ある温度での有限の系の平衡状態を計算する問題はそう易しくはない。1953年にN.メトロポリス、A. W. ローゼンブルス、M. N. ローゼンブルス、A. H. テラー、E. テラーはこのような問題に対して、重要な変更を提案した。すなわち、小運動がエネルギーの増加を招いてもその新しい配位のエネルギー状態が $e^{-\Delta E/T}$ の確率に合致するならば受け入れるべきだとしたのであった。ただし、 $\Delta E$ はエネルギー変化、 $T$ はその温度(K)である。この方法はどんな系の平衡状態の計算にも用いることが出来るのである。

最後にスタニスラフ・ウラムについて簡単に紹介しよう。1909年オーストリア・ハンガリー帝国の一部ガリシア地方の首都であったポーランドのリヴォフで生まれ、父は弁護士であった。ウラム家は中欧における大銀行家を擁する一族の一員であった。現在、この土地はウクライナになっている。1927年にリヴォフ工科大学に入学、1928年に集合論の分野で最初の論文を書く。この工科大学のパナッハやマズールを中心とする数学の教授達は一風変わった人達であった。彼らの興味は測度論、集合論、関数解析等の新しい分野であった。夜遅くまでリヴォフの町の“スコティッシュ・カフェ”等で大理石のテーブルに式を書いたりして仕事の議論をするのが常であった。ウラムはこの議論の仲間になる。ライバルのワルシャワの数学者達はこのグループを素人くさい連中と見下していた。しかし、

バナッハが著書“線型作用素 (Linear Operator)”を出版するや、この学派は世界中の数学者の注目を集めることになる。そしてこの本のなかで最も多く引用されているのはウラムの名前であった。

1935年にフォン・ノイマンの招待でプリンストンに一年滞在し、翌年からハーバード大学のハーバード協会の研究員として毎年渡米し、1939年に留学する弟を連れて渡米したところで、第2次大戦が勃発する。ユダヤ人であった彼の家族や一族の大部分の人々はナチスによって消されてしまう。それまで家からの送金によって豊かな生活をしてきた彼はそのままアメリカで自活の道を考えざるを得なくされる。そして、ウィスコンシン大学で助教授をしていた1944年、フォン・ノイマンの紹介で当時マンハッタン計画の中心であったロスアラモス研究所に入るのであった。

彼は最初、テラーのグループに編入される。抽象数学者に兵器開発のような仕事が出来たのであろうか。だが彼はここでフェルミ、ベテ、ファインマン等と出会い、エキサイティングな空気の中で、多彩な才能を開花させることになる。戦争の終焉で一時的に南カリフォルニア大学の教授になるが、またロスアラモスに戻る。今度は、以前いたウィスコンシン大学から呼び寄せたエヴェレットと一緒に、テラーのグループに対抗して仕事を始めることになる。そして約2年間をかけた計算の末、テラーの水爆のアイデアが間違っていることを示すことに成功するのである(1949年)。彼はこれの解決策をテラーに提言し、それが成功の基礎になったといわれている。

その後は、所長の相談に与かる研究補佐2名の一人として恵まれた地位でロスアラモスに勤務した。1955年にお互いに心を許した友人であったフォン・ノイマンが不治の病に

倒れた際は、しばしば入院先のワシントンDCのウォルターリード海軍病院に見舞って元気付けようとし、ついに亡くなったときにはベッドサイドで号泣したといわれる。1967年に定年を迎えコロラド大学で数学部門の主任を勤めたりしたが、ロスアラモス研究所との絆はその後も続いていた。彼の仕事は集合論、測度論、位相幾何学、変換理論、群論、数理生物学、非線形物理学、天体物理学等々、数多くの分野にわたっている。

この稿を仕上げるのに際して、数多くのコメントを下された原子力データセンターの佐々木健氏および下記文献[1]を貸して下さったカスタマシシステム(株)の後藤頼男氏に感謝いたします。

#### 参考文献

本文の執筆に当たっては、下記の文献を参考にしました。

- [1] ウラム著、志村利雄訳：「数学のスーパースターたち」－ウラムの自伝的回想－(東京図書, 1979).
- [2] Gian-Carlo Rota : “The Lost Cafe”, in “STANISLAW ULAM 1909-1984”, LOS ALAMOS SCIENCE, No 15, SPECIAL ISSUE, 1987 (Los Alamos National Laboratory) p.23.
- [3] N. Metropolis : “THE BEGINNING of the MONTE CARLO METHOD”, *ibid.*, p.125.
- [4] Roger Eckardt : “STAN ULAM, JOHN VON NEUMANN, and the MONTE CARLO METHOD”, *ibid.*, p.131.
- [5] Gary D. Doolen and John Hendricks : “MONTE CARLO at WORK”, *ibid.*, p.142.