

## [3-2] コンピューターシミュレーション 50 年の思い出 50 Years of Computer Simulation — a Personal View

William Graham Hoover hooverwilliam@yahoo.com

(翻訳) 磯部雅晴 isobe@nitech.ac.jp

### 概要

1950年代から始まったコンピューターシミュレーションは、半世紀で我々の物理に対する理解を変えてしまいました。高価で速度が遅く図体の大きく希少であった第2次世界大戦の汎用コンピューターが、今日の無数の安価で高速な机サイズのワークステーションやパソコンの普及への発展への道を提供しました。このようなコンピューター環境の変化の結果として、物理の形式的な理論は、実用的で役に立つものに焦点があたるように次第に変化していきました。一般的でしかし漠然とした手法や方法論は、はっきりと限定されたモデルの具体的な結果にとって変わられています。このコンピューターの発展していく変化の間に、私はミシガン大学、デューク大学、リバモア研究所、そしてネバダ州で、私はシミュレーションの技術を学び、開発し、記述してきました。一方で、しだいに世界中の広範な有力な知人とのつきあいを形成していきました。計算は今や、すべての科学の分野に普及しています。私自身は粒子シミュレーション、主として平衡系から離れた非平衡系の物理に着目して研究を遂行してきました。私はこの解説記事において、私の分子シミュレーションに関する仕事の概要を紹介したいと思います。それらの仕事は私に、平衡系と非平衡系の両方の物理学において、モデルを基礎とした理解を提供してくれました。しかし、いくつかのギャップはいまだに存在しますし、依然として多くのやるべきことが残されています。

### 1 はじめに (INTRODUCTION)

コンピューターによってもたらされた変化は、特に物理学を「理解する」ことの意味を変えてしました。この変化は、統計力学と運動論の多体系モデルに基づいた研究では、特に顕著なものになっています。昔ながらの手法では、多体問題を、理想気体や調和結晶の基礎としてその周りで形式的に展開をすることにより、原理的 (“in principle”) に (しかし実際 (“in fact”) にではなく) 解いてきました。計算機を使った新しいやり方では、展開することの代わりに、直接モデル系の数値シ

ミュレーションを行います。平衡系では、アンサンブルを基礎とした“モンテカルロ (Monte Carlo)”シミュレーションが適切です。“分子動力学 (Molecular dynamics)”シミュレーションは、平衡系と非平衡系の両方に適用できるため、より一般的で有用です。典型的な非平衡系の問題は、流れや勾配を含んでおり、静的で一様な平衡系とは全く異なります。多体系モデルを記述する方程式 (例えば、状態和や運動方程式) を書き下すことは、今やそれで終わりではなく、まさに挑戦の始まりと考えられます。

Masaharu Isobe (訳者) は、私の計算機シミュレーションを通して経験した体験や思い出が、「アンサンブル」誌の特に若い読者に有益できっと興味を持つだろうと考えました。「アンサンブル (Ensemble)」は、統計力学のギブスアンサンブルと関係している可能性がある一方で、協力することや「協同作業」という意味もあります。「アンサンブル」は、たいへんよい概念です。特に、今日の電子社会では、インターネットや電子メールは、効率的でリアルタイムの国際共同作業を可能にし、科学の着実な進歩の基盤となっています。

私は、Masaharu (訳者) の提案に同意しました。この記事において、私のこれまでにした仕事についていくつかの画期的なものや重要な出来事をまとめたいと思います。時代や様式 (流行) は変化しますが、学習すること、創造すること、教えることの経験は、永遠に続く連続性を明らかにします。このことは、考察しまとめる価値があります。私は特に若い読者にとって有用であることを望み、計算機シミュレーションの個人小史を記しました。この記事では、私のオハイオ州とミシガン州での日々の大学生活から始まり、ネバダ州で現役を引退することまでで終わります。この記事に関連した (また触れなかった) 多くの文献、また研究の詳細は私のウェブサイトにもまとめています。<sup>1</sup>

[<http://williamhoover.info>]

<sup>1</sup> 訳注: 本稿の原文は、Hoover 氏のホームページ並びにプレブリントサーバよりダウンロードできます。

## 2 オハイオ (OHIO), 1953-1958, そしてミシガン (MICHIGAN), 1958-1961

私はオハイオ州にあるオベリン大学 (Oberlin College) に通っていました。そこは、小さく離れた場所にあり、物理学において非常に役立つ懐疑的な姿勢を特色とし奨励してました。しかし、それ以外には、オベリン大学の教養課程での科学の内容は、私の研究経歴に対して全く無関係なものとなったでしょう。数学と物理学の教育は形式論的で、過去の泥沼にはまっていました。この失望させられる教育形式は、科学から私の父親の研究分野であった経済学に転向することをほとんど確信させるまでにいたりしました。

自動車事故からの回復の期間、私は学期の期間中、大学の外で過ごしました。私は、受講できなかった物理化学コースを習得するために、ハーバード大学の夏の学校に参加しました。そこでは、講師であった Stuart Rice 教授が研究の興奮を提供し、私が科学に対して深く心を引かれ夢中になることを強く促しました。Stuart Rice 教授は、気体運動論が好きでした。彼は、彼のコースの実用的な研究室の仕事の一部において、いかなる過ちをしたとしても、我々の成績には、何の影響も与えないであろうことを私たちに再確認させてくれました。

私は、アナーバー (Ann Arbor) にあるミシガン大学 (The University of Michigan) の大学院に行きました。そこはオベリンをはるかに凌駕するほどのよい環境でした。ミシガン大学は有用な研究コースと最新の計算機、さらに研究するのに必要な刺激やインスピレーションに満ち溢れていました。ミシガン大学に入学した少し後に、私は、Scientific American 誌に掲載された Alder と Wainwright の “Molecules in Motion” [1] という解説記事に出会いました。解説記事には、剛体球系の流体相および固体相での軌道が非常に異なっている図が掲載されており、これは今日でも一見の価値があります。例として、Farid Abraham による 1980 年の融解転移に関する研究から転載した 2 つの図 (図 1) を参照してください [2]。1950 年代は、108 粒子の運動をシミュレーションすることはひとつの挑戦でした。Alder と Wainwright の図は、微視的な構造と分子の動力学に私に興味を持つきっかけとなりました。

ミシガン大学では、若い化学物理の教授で私の博士論文のアドバイザーだった Andrew Gabriel De Rocco 教授が、統計力学に興奮し夢中になっていました。彼は、形式的な理論を現実の世界へ関係づけるまれな技巧を持っていました。何が “現実の世界” を構成するのかには、もちろん見解の問題があります。私はよく Andy の妻の Sue を思い出します。Sue は、2 体ポテンシャル

についての階上での会話の一つを立ち聞きして、階上に向かって叫びました: 「Andrew, あなたの能力の将来の可能性 (潜在力) はすべてぞっとします! (“Andrew, all your potentials are repulsive!”) <sup>2</sup>まさしく十人十色! Andy の統計力学への熱狂ぶりおよび助力の結果、私は Mayer の「ビリアル」展開 (流体の圧力に関する密度のべき級数展開表式) の専門家になりました。B<sub>n</sub> すなわち級数展開の n 番目の係数は、比較的複雑な n 体積分の和となります。これらの積分の被積分関数は、n 粒子を結合する n(n-1)/2 個の関数の掛け算になります。剛体正方形 (hard parallel squares) や剛体立方体 (hard parallel cubes) の入った多体モデル系<sup>3</sup>では、これらの積分は解析的に実行できます [3] が、B<sub>6</sub> を越えるとトポロジカル登録法は、高速なコンピューターを要求します。1960 年までは、私は “MAD” コンピューター (ミシガンアルゴリズムデコーダ) [4] を使用して、これらの数百万の積分の FORTRAN での計算をプログラムするための忍耐と訓練を受けました。その当時、プログラミングは少し退屈なものでした。各プログラム行につき、1 枚のパンチカードに命令を書いてました。しかし、それを行わなければ実行できませんでした。剛体立方体系の B<sub>7</sub> は、468 × 7! = 2,358,720 の独立な積分の計算 (!) が必要でした。MAD は機械的な原因で、再現できないエラーが時々生じていました。これらのエラーは数値計算を行う上で、用心のための有用なリマインダーとなりました。(運動量やエネルギーの保存則のような) 明らかに成り立つ条件からの逸脱は、通常、プログラミングにおける論理または文法エラーの結果です。

プログラムがうまくパンチカードに打ち込まれ注意深くチェックされると、私は反発力を持つ剛体立方体の B<sub>6</sub> と B<sub>7</sub> の両方に、負のビリアル係数を見つけました。正の反発力しか持たない粒子系での負の張力の寄与は、大きな驚き (!) でした。私は、研究の興奮し完全に夢中になりました。もちろん、当時のペースは遅かったですが、私はビリアル展開の詳細について、“H. N. V.” Temperley と何通かの手紙を交換しました。何通かの手紙のやりとりの後に打ち解けて、“H. N. V.” は、親しい “Neville” に変わりました。当時は、航空便でも米国-英国往復の手紙のやり取りに 2 週間ほど必要としました。Bob Zwanzig は、私が剛体立方体を導入するきっかけとなった論文を出版していました [3]。しかし

<sup>2</sup> 訳注: Sue は、Andrew の仕事を (将来性も含めて) 嫌悪感をいだいており、2 体ポテンシャルの反発力といった科学用語を知らないため、“potential” と “repulsive” が 2 つの違う意味で使われたユーモアの意味が含まれた描写 (Hoover 氏からの私信より)

<sup>3</sup> 訳注: xy(z) 軸に平行に置かれた剛体反発をする正方形 (立方体) の多体系のこと。各剛体正方形 (立方体) は有限の質量をもっているが、慣性モーメントが無限大で回転の自由度がない (回転しない)。

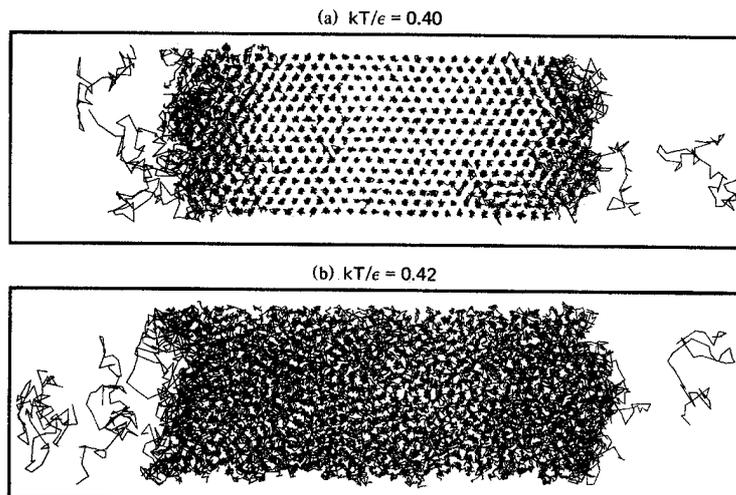


図 1: 融点直下 (上図) と直上 (下図) の原子の軌道 (トラジェクトリー). (文献 [2] より転載).

私の負の係数の結果と矛盾しており、誤っていました。Andy と私は、電話で一緒に会話した際、彼は快く誤りを認めました。それは、本当にぞくぞくさせるもので教訓的なものでした。

### 3 ノースカロライナ州 (NORTH CAROLINA) ダーラム (DURHAM), デューク大学 (DUKE UNIVERSITY), 1961-1962

1960年代のアメリカでは、ポストドクの職に就くことが“正規の職”を求職する前に必要なことでした。Andy は私をデューク大学に送りました。そこでは、John Kirkwood の学生の一人である Jacques Poirier が理論的趣向を強くもった化学の教授として、周囲とは孤立した存在として過ごしていました。Salem 煙草の工場からのハッカ (メントール) の匂いは、夕刻には数マイル離れたカブの植えられた畑の隣の未舗装の道路上にあった私たちの家に漂ってきました。化学学科では日中、様々な有機物の匂いに比べて、ハッカ (メンソール) の匂いは、物理学の主流から静かに避けて通るのを助けてました。私たちの共同研究に対する Jacques のアイデアは妥当なものではないことがわかったため、デュークにいる間、私はビリアル展開に関するさらなる研究をすることができました。コンピューター・シミュレーションがまだ希少だった当時、2体分布関数  $g(r)$  の近似積分方程式が大流行していました。 $g(r)$  に関して方程式は非線形だったため、完全な解を求めるためには手の込んだ骨を折る計算を必要としていました。しかし、 $g(r)$  の密度展開を代入し、密度のべき展開係数を等式化することにより、ビリアル係数の近似計算やそれらを Mayer の正確な表式 [5] との比較ができるよう

になりました。

デューク時代には、私は、Mayer 展開の熱愛者であり、熟練したジャズミュージシャンであり、いまだによい親友である George Stell に接触しました。私は、グレンニッチ村のアパートまで彼 (George) を訪ねていきました。その訪問では、2つのことを鮮明に記憶に残っています：一つは、George のアパートにはサウナがありました。もう一つは、彼のアパートの比較的静寂だった環境が、すぐ外での下水ガスの爆発によって壊されたことです。それは、重いマンホールのふたが空中に浮揚するのに十分な強さでした。デュークにいったん戻り、私はリバモア研究所とロスアラモス研究所に首尾よく就職面接をする機会を得ました。それら2つの研究所は、カリフォルニア大学によって管轄された計算機における2つの巨人でライバルでした。Alder と Wood は、私が仕事を求職している2つの研究所にそれぞれ働いていて、またライバル関係でもありました。剛体円板と剛体球の融解相転移 [6,7] の理解に関して、彼らの相対的優先権と寄与に対して一致した見解をもっていませんでした。

### 4 リバモア (LIVERMORE) とデービス (DAVIS), カリフォルニア (CALIFORNIA), 1962-2004

1962年に私はロスアラモスおよびリバモア両研究所で、面接を受けました。ミシガンからそれぞれの研究室での1ダース人程度の科学者と話をし、私のビアールの5次展開の仕事のセミナーをするために飛行機で出かけました。

ニューメキシコの山にあるロスアラモスは、物理的な面から、2つの爆弾を開発した研究所として、より関

心が大きかった。リバモアは、かつては田園風のブドウや牛の牧場を経営している谷であったが、現在では、公害や郊外に不規則に宅地が広がっていくスプロール現象に遭遇して苦しんでいるところに位置しています。私がリバモアに到着した頃、Alder と Wainwright は周期境界条件を課した約 1000 粒子の剛体円板系と剛体球系の研究を続けてました。彼らの研究の目標の一つは、剛体円板や剛体球が高密度で凝固や融解をするのかどうかを理解することでした。私の剛体球のビリアル展開の専門知識は、それらの仕事とよく適合してしました [8]。

ロスアラモスでは、相対的に湿度は低く、また科学者は中西部のスーツよりもむしろハワイのシャツを着て砂漠のブーツを履いてました。そこでの給料は、おおよそ 20 パーセント低いものでした（その理由の一部は、研究所が辺鄙なところにあるため 5 週間の長期休暇があったことによります）。この給料の差が、私がリバモアで働く決断をした理由です。ここでは、Berni Alder が私に物理学科に仕事場を提供してくれました。リバモアは、刺激的な時間および場所でした。粒子、連続体、プラズマ、天体物理学そして核物理学者はすべて、Edward Teller の注意深い目での毎週開催される科学の会合（セミナー）に、一緒に参加していました。その会合の一つの講演のため、Francis Ree と私は計算するのに大変な労力を要する剛体円板と剛体球系の相転移の単占有 (single-occupancy) の説明 [9] を追跡並びに発表するための Teller の許可を得ました。Francis Ree は、Henry Eyring の指導を受けましたが、私のように、正確で注意深い統計的解析をすることに献身的で、精密な仕事をしていました。私たちは、Berni Alder と Bill Wood の剛体球並びに剛体円板の問題を（流体相に対して）Mayer のビリアル展開と（Kirkwood の単占有 (single-occupancy) 固相に対して）Metropolis-Rosenbluth-Teller のモンテカルロシミュレーションを使って解きました。図 2 を参照してください。私たちの“月曜の朝の会合 (Mondy Morning Meeting)”での発表はうまくいきました。

この月曜日の朝の会議 (Monday-Morning-Meeting) の様々な研究分野の予備知識は、私にとって科学的にも社交的な面でも非常に有用でした。Teller は、1963 年にリバモアで広い予備知識（核物理、量子物理、古典物理、化学物理、電磁気学）が学生を教育するのに本質的であるという考えから、応用科学科 (Department of Applied Science) をスタートさせました。私は約 30 年間、応用科学科で教え、そのことを十分に楽しみました。私の妻 Carol は、私が応用科学科で教えた統計力

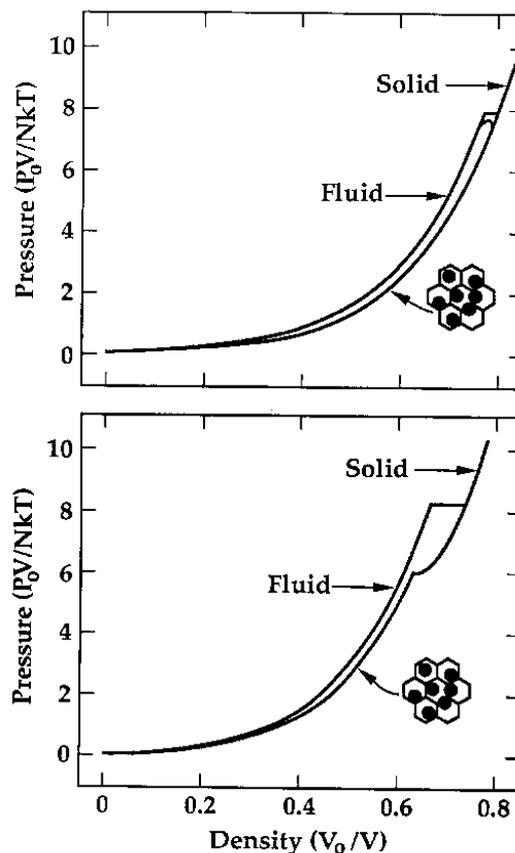


図 2: 剛体円板 (上図) と剛体球 (下図) の状態方程式。(文献 [9] より転載)。 $V_0$  は、最密充填体積 (2次元の場合は面積) である。下の「単占有」曲線は、空間に充填されたセル (挿入図で示されている) に制限された粒子の圧力に相当している。

学のコースの学生の一人でした。

剛体球の衝突に関連した簿記 (ブックキーピング) 法は、私にとって分子動力学法は、モンテカルロシミュレーションよりも興味のない (あるいは少なくとも難しく) ものにみえました。しかし、1960 年代初頭に、Rahman, Verlet や Vineyard [10] らは皆、連続的な力が働く場合のシミュレーションの手法を提示した Fermi の 1950 年代の仕事に追従しました。当時、私のグループのリーダーだった Russ Duff は、私の分子動力学法を学ぶ興味を支援してくれました。彼は、衝撃波の実験家として、分子動力学法で衝撃波に駆動された融解をシミュレーションする考えを好んでいました。私は、磁気テープに何千もの粒子の長時間の軌道を保存することを含んでいる、そのシミュレーションプロジェクトを引き受けました。これらのテープのいくつかは物理的に引き延ばされてしまって、しばしば長時間計算

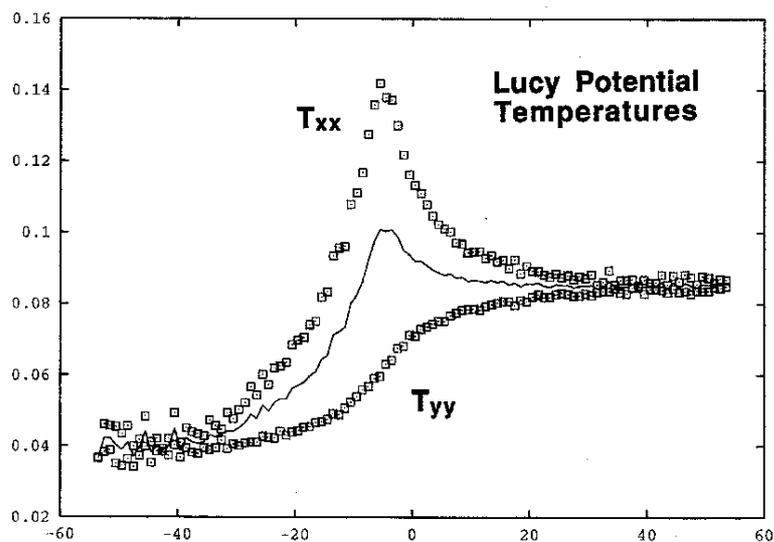


図 3: Lucy ポテンシャル粒子系の流動状態中を伝播する衝撃波における, 縦方向 (上のグラフ), 平均, そして横方向 (下のグラフ) の運動論的温度 (kinetic temperature). (文献 [12] より転載.)

のためにデータを保存した過程が無駄になってしまうほど, 解読不能になっていました. 1967 年の衝撃波シミュレーションは, 一時的に脇におかなくてはいけなくなりました. 磁気テープがまだ旧式のときは, 1980 年まで復活しませんでした [11]. また再び復活したのは, 1997 年に温度の異方性が私の興味の対象になったときです [12]. 図 3 は, 衝撃波の面白い結果を示しています. 強い衝撃波では, 温度はテンソルになります. 強い衝撃波は, 進行方向の温度 (運動方向の速度揺らぎ) は, 横方向の温度よりも非常に大きくなります.

後の私のグループリーダーとなった Mark Wilkins は, 私の科学観に大きな影響を及ぼしました. Mark は, 兵器のシミュレーションでは不可欠な塑性流動 (変形) や破壊を特に専門とした連続体力学の偏微分方程式の数値解に関する独学の専門家でした. Mark は, 物理学は“モデル”の研究であることを強調していました. つまり, “現実の生活”での我々の経験にいくらか類似したものを含む閉じた一連の微分方程式であるということです. 量子力学はそのようなモデルですが, 明らかに全く不完全ですし, 現実の世界で観察されるユニークな結果を一度も予言しません.

1960 年代のリバモア研究所では, 私が一緒に働くことができる多くの面白い共同研究者がいました. Al Holt は, 形式主義者で, ジョージア工科大学のカオスの専門家 Joe Ford により教育を受けてきたテンソルの専門家でした. Al の弾性定数への関心は, 私の統計力学と格子動力学の技術とうまく融合しました. Dave Squire は, ノースカロライナ州のダーラムにある陸軍研究所

で働きました. 彼は, Berni の同僚である Zevi Salsburg により教育を受けた実践的な化学者でした. Dave は, 妻と 8 人の子供と一緒に, 1960 年代後半の数か月間リバモア研究所を訪れました.

Al と Dave と私は, 等温 [13] 並びに断熱 [14] 条件の下で変形を加えて行った際の結晶の弾性応答を定式化しました. これらの結果は, モンテカルロあるいは分子動力学シミュレーションによって計算し見積もることができますが, しばしば再発見されています.

私はアルマデンにある近くの IBM 研究所を訪れました. そこでは, John Barker と Doug Henderson が働いていました. 私は, セミナーのために招待され, 一連のスライドを準備しました. Baker はスライドプロジェクトを走らせ, Henderson は時折質問をしました. それがアルマデンでのすべて聴衆でした. リバモアでは私は幸運でした. 多数の科学者が積極的に統計力学における研究を行っていました. 1960 年代後半, Barker と Henderson は Mansoori, Canfield, Weeks, Chandler, Andersen, Rasaiah, そして Stell と一緒に, ヘルムホルツの自由エネルギーの摂動理論を開発し大きな成功を収めました [15]. 剛体球の 2 体分布関数だけが必要となり, 積分方程式の仕事から利用できる有用な形式でした. その理論は, 現実の世界の平衡系の熱力学の計算に実際に役に立ちました. この平衡系の理論に関するブレークスルーは, 私に非平衡系の問題を研究に切り替えるべき潮時であったことを確信させました. 当時, 非平衡系では, Green と Kubo の線形応答理論だけしかありませんでした [16].

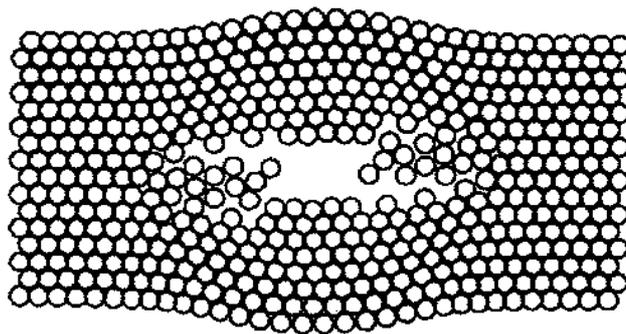


図 4: 破壊のシミュレーション例. (文献 [18] より転載.)

カーター大統領の政権でのエネルギー危機は、リバモア研究所での大量解雇および重点と構造の変化をもたらし、急に多くのグループリーダー、進捗報告書やプロポーザル、細目にわたる予算が生じました。私は熱流束に関するコリオリカの効果を研究するために、CRAY 計算機のマシンタイムを多く必要としていたとき、爆弾開発部門のお気に入りである Roger Minich は、寛大にも私に彼の兵器開発の物理のアカウントからマシンタイムを与えてくれました [17]。

リバモアでの基礎研究の削減のため、共同研究のために研究所の外に目を向けることが必要になりました。私は、ロスアラモスにいた Brad Holian と働くことで多くを楽しみました。私たちは、統計力学とシミュレーションで共通の関心を持っていました。一緒に働くことができるように、Brad はリバモアで仕事をしようとし、私はロスアラモスで仕事をしようとしたのですが、これらの両方の提案はうまくいきませんでした。

“適切”な研究をするように増大する研究所の圧力を満足させる私の試みとして、私は Bill Ashurst [18] 並びに Bill Moran の博士論文の仕事でいくつかの動的破壊シミュレーションを研究しました。図 4 は典型的な破壊の例を示しています。研究所の所長であった Mike May との会議で、Mike は私にこれらの破壊のシミュレーションは本当に“適切”かどうかをたずねました。私は、空間スケールの面で原子モデルは実際上はとても制限されており、(今日でさえ) しばしば誤解させていることを認めなければなりませんでした。

Bill Ashurst は、私の最初の博士号をとった応用科学科の学生で、非平衡流のシミュレーションを研究することを切望していました。私たちは、一様な周期境界系のアルゴリズムとともに等温境界条件でのシア流のシミュレーションをするための方法を開発していました [19]。Bill は (ロスアラモスの Brad Holian と同様に)

シミュレーションの動画を作ることができました。これらの動画は、非平衡分子動力学の初期の頃には、最先端の物理が議論される小規模の会議ではお定まりの物でした。

NSF (National Science Foundation) での初期の経験は教育的で、解くべき良い問題を選ぶ政府の能力の私の懐疑を強くすることとなりました。1980 年代初頭に、私は単純な非平衡分布関数のフーリエ解析を提案しました。そのプロポーザルは 5 人のレビューアーに“優秀 (excellent)”と評価され、6 人目のレビューアーに“非常によい (very good)”と評価されました。これにも関わらず、プロポーザルは却下されました。この初期の失敗は、研究資金を求めするために物乞いをするのを慎む私の飾り気のない傾向を強くしました。

## 5 オーストラリア (AUSTRALIA), オーストリア (AUSTRIA), そして日本 (JAPAN) でのサバティカル旅行紀

私は、Verlet, Levesque および Kürkijarvi の多少間違った Green-Kubo 輸送係数の結果 [20] に対して Bill Ashurst と私が計算した非平衡系の類似した計算と直接比較するために、フランスに最初に訪問しました。以降、フランスのオルセー (Orsay) 市はたびたび訪問する場所となりました。Carl Moser は、CECAM (原子・分子系シミュレーションのヨーロッパセンター) で、長く続いている一連のワークショップやセミナーおよび学会を主催しており、それは発展的で刺激的でした。CECAM はパリ郊外の約 1 時間くらいのところにあり、よい仕事を促してくれました。ランチに行く途中には、野生の黒イチゴで覆われていた丘陵が側にありました。また、パリの酒場 (ビストロ) やレストランは、仕事の後の夜の飲食で私たちを魅惑しました。

応用科学科とリバモア研究所は、毎年私に資金援助

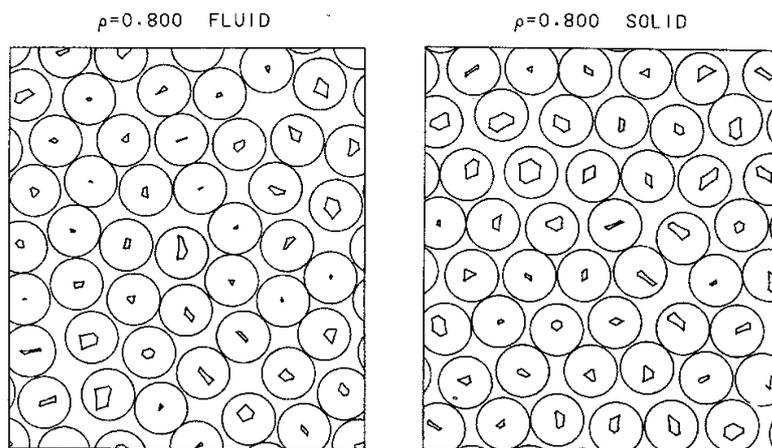


図 5: 最密充填密度の 4/5 の同密度における, 流動(左)および固体(右)の剛体円板の自由体積. “自由体積”は, 残りの円板が固定されているとき, それぞれの円板の重心が移動可能な領域を示している. (文献 [27] より転載.)

をしてくれました. 学術的基準に基づき応用科学学科が私の給料を決めていましたが, 研究所は私の給料の大半 (8 分の 5) を支払うことを正当化するため, いつも研究内容を“実用的な応用 (practical applications)”へと圧力をかけようとしてました. この圧力に対する補償として, 研究所では“専門の研究および教育の休暇期間”が利用可能となっており, サバティカル研究へ逃げるのが可能でした. フルブライト財団やウィーン大学および日本学術振興会からの支援によって増大した休暇期間で, 私は家族と 1977 年にオーストラリアへ, 1984 年にオーストリアに, また 1989 年に日本へ行くことができました.

1980 年, オーストラリアとオーストリアのサバティカルの期間の間, 私は周期的なシアかけた多体系の形状とエネルギーのバランスを正確に再現できるハミルトニアンを作ることができる可能性に気付きました. これが“ドールズテンソル (Doll's Tensor)”のハミルトニアンです. 1980 年 8 月のエドモントン (カナダ) で開催される STATPHYS の会議の組織委員に講演申込を却下された後, 1980 年 6 月にスペインのシッチェス (Sitges) で発表しました [21]. “ドールズテンソル”は, 単純にデカルト座標での粒子の位置  $\{q\}$  と運動量  $\{p\}$  からなる  $qp$  行列のテンソルでした.  $\dot{\epsilon} \sum y p_x$  の項を通常の多体系のハミルトニアンに付け加え,  $\langle \dot{x} \rangle = \dot{\epsilon} y$  のマクロな動きで, 単純なシアや“平面クエット流”を生じさせます. 1982 年 6 月, Howard Hanley 氏の企画した発展性のある会議“非平衡流体の挙動 (Nonlinear Fluid Behavior)”では, 私も運営を手伝いました. 私は, ついに興味をもっているアメリカの多くの同業者の聴衆を前にして, 非平衡分子動力学法に関する研究内容を

発表することができました [22].

1984 年までに, エディンバラで 1983 年に開催された STATPHYS 国際会議で“ドールズテンソル”の仕事の話したいという私の希望は, 再び挫折しました. 残念賞 (シア流の仕事の歴史を扱ったユーモアのあるポスター) は, 9 年後のサルジニア (Sardinia) での国際会議プロシーディングス [23] まで出版されませんでした. このすべての STATPHYS への欲求不満に反発して, 私は Giovanni Ciccotti とコモ湖でエンリコ・フェルミ・サマースクールの国際会議を主催し非常に成功しました. この会議では, 新しい非平衡系のアルゴリズムが徹底的に議論されています [24]. (特に, Denis Evans の講義“非平衡分子動力学法” (サマースクールのプロシーディングス 221-240 ページ) を参照してください.)

ごく最近, 妻の Carol, また Janka Petravac と一緒に, 私はドールズアルゴリズムおよびそれと非常に密接に関係したスロッド (S'Ilrod) のアルゴリズムによって招かれる誤差 (ひずみ率  $\epsilon$  における非線形) を定量化することができました [25]. キューピー人形<sup>4</sup>は, 統計物理のマスコットとして有効であるのに加えて, とても面白い歴史を持っています (2009 年は, 100 周年記念です!).

シア流の問題を解決したのと一緒に, Denis Evans と Mike Gillan は完全に独立に, 外場が熱流を正確に生成することを 1982 年に発見しました. 詳細は, Evans の

<sup>4</sup>訳注: ドールズアルゴリズムは, 粒子の位置  $\{q\}$  と運動量  $\{p\}$  が, キュー (q) ビー (p) と発音されることから, Kewpie Doll にちなんでドールズ (Doll's) と命名された. スロッド (S'Ilrod) アルゴリズムは, Doll's の綴りを逆から読んだもの. サルジニアの国際会議プロシーディングス [23] の図 3 には, ドールズテンソルの周囲をたくさんキューピー人形が手をつないで囲んでいるユニークな絵が掲載されている. (Hoover 氏からの私信より)

講義 [24] を再び参照してください。この問題の解法はとても興味深いものでした。なぜなら、ガウスの最小束縛原理（平衡系の最小作用と等価）が（Green-Kubo 公式と一致しない）平衡から離れた間違った運動方程式を与える具体的な例を提示していたからです [26]。

オーストラリアでのサバティカルでの経験は、少し混沌としていましたが興味深いものになりました。キャンベラにあるオーストラリア国立大学のコンピューターセンターで **Bob Watts** がセンター長になったため、私の提案した彼と行う予定だった共同研究は、最初の週でいきなり終わりました。オーストラリアで研究するつもりだった **Watts** の水のポテンシャルは、不安定であることがわかったため、私にとってより興味深いプロジェクトに集中することが可能となりました。それは、液体と固体の自由体積を決定することでした。私の息子の **Nathan** は、ちょうど高校を卒業したばかりで、私と一緒にオーストラリアにいて、私たちは、オーストラリア国立大学コンピューターセンターで一緒に働きました。そこで行った仕事は、軽い一つの粒子が自由体積をトレースして、一方でより重い粒子が近傍にとどまっているという“思考実験 (gedanken experiment)” [27] でした。私は、以前にもセルモデルの理論的な説明に同じアイデアを使いました [28]。図 5 は、この考え方の流体相と固体相の間の相違を図示しています。流動相の自由体積が固体が共存する相のそれより実際に小さいことを示すこれらの結果から学ぶことは大変教育的でした！

私のオーストラリア滞在中での最初の経験もまた、予期しない展開となりました。私が最初もっぱら **Karl Kratky** と仕事をするつもりでいたのですが、むしろ **Harald Posch** [29] と共同研究を開始しました。彼は、統計力学や非平衡シミュレーションにおける関心が私と似ていました。**Harald** と私は、再現性と精度に高い価値をおいてました。私たちは、しばしば独立に作成した 2 つのコンピュータープログラムから得られた結果を比較しました。**Kratky** は形式論者でした。私は、私が数日で数値的に得られる結果を彼が再現するのに何カ月も待つ忍耐をすぐに失いました。オーストラリアでのサバティカルは、私の最初の本“**Molecular Dynamics**”を執筆するための下地となったウィーン大学での講義をする機会を提供してくれました。1986年にリバモアに戻った後にその本を書き上げました。電子化が未発達な当時、ひとつの建物の中で **TeX** ファイルの原稿を編集し、別の建物まで約半マイルほど車でドライブしてプリントアウトした結果を見る必要がありました。ウィークディの車の運転は 18:00 までに制限されてい

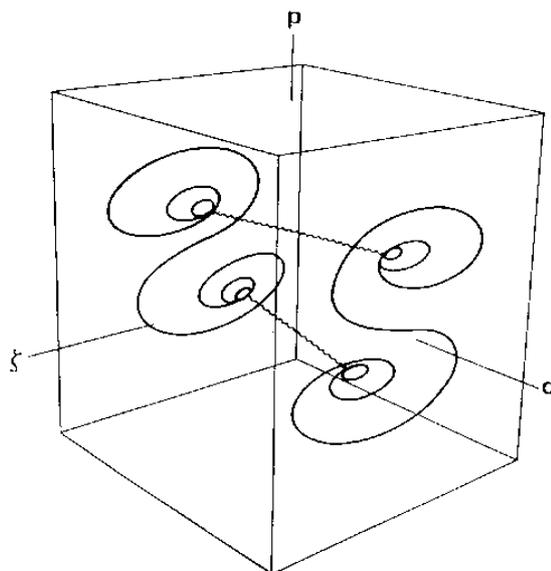


図 6: 座標  $q$  と運動量  $p$  を使った熱浴に結合した調和振動子の周期的な軌道と摩擦係数  $\zeta$ 。(文献 [33] より転載.)

ため、本の仕事のほとんどは夜に行わなければいけませんでした。

1984年、オルセーで CECAM ワークショップに先立ち、私はオルリー (Orly) 空港から降り立った列車のプラットフォームで幸運にも能勢修一さんにも会う機会がありました。(私はスーツケースに印字された彼の名字に気付きました。) この出会いは、後の日本でのとても楽しくクリエイティブな年につながりました。能勢さんは、他のワークショップのメンバーから離れて、日本式のホテルに滞在していました。私たちはノートルダム大聖堂で会うようにアレンジしました。教会の前のベンチで、私たちは彼の新しい熱浴のアイデアについて話しました [30,31]。ワークショップの後、私は調和振動子の結果を計算するため、ローザンヌの **Philippe Choquard** のところへ訪問しました。その結果は、私の最も引用されている論文となりました [32]。振動子の軌道のいくつかは、とても美しいものでした [33]。図 6 は、熱浴振動子の通常の周期軌道を示しています。振動子はカオスの軌道も示します。“カオス的”軌道は、リアプノフ不安定性という特徴があります。すなわち、軌道のわずかな摂動が時間とともに指数関数的に成長します。仕事が熱に変換される散逸系での軌道は、それらが埋め込まれている空間次元よりも小さいフラクタル次元をもつ典型的な“フラクタル”になります。一例として図 7 を参照してください。

計算機内で再現する温度制御法 (thermostats) に対する私の興味は、直接的で今日まで継続しています。私は、Berni Alder に私のエネルギーや温度制御のアイデアに関してどう思うかたずねてみました。彼はそのアイデアには、小馬鹿にして批判的でした。私は Bill Wood の考えを聞くため、ロスアラモスに旅立ちました。彼は少しだけ外交的でしたが、彼の考えも Berni と同じでした。温度制御法 (サーモスタット) はあまり有益なアイデアではないと考えてました。幸運にも、私は次の 2, 3 年で熱浴に結合した統計物理の詳細を研究する十分な自由な時間がありました。Bill Moran と私は、とても単純な問題で生じる衝突を記述するフラクタル物体を作りました。私たちは、剛体円板散乱体からなる周期的な“ガルトン壁 (Galton Board)” を通って落ちる温度制御された粒子の研究をしました [34]。衝突は、外場の増大とともに減少する次元をもったマルチフラクタル物体を形成しました。例として、図 7 を見てください。

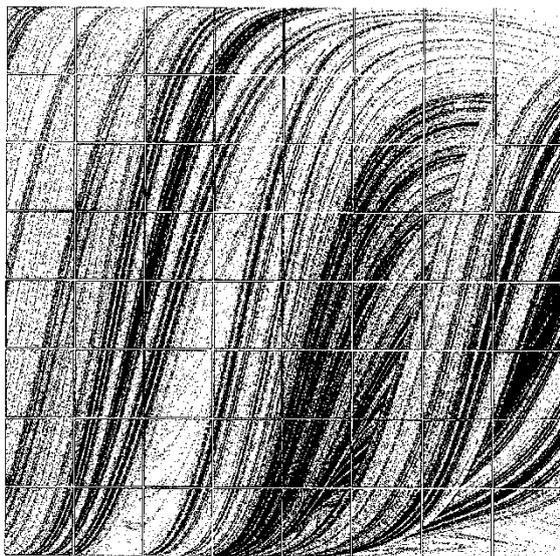


図 7: 一様重力場中でガルトン盤 (三角格子に剛体円板散乱体が設置してあるボード) において、粒子が落下する際に起こる一連の散乱体との衝突に関して、位相空間で生じるマルチフラクタル図を示す。横軸は、重力場の方向を基準とした粒子が散乱体と衝突した角度 (場所) に対応し (散乱体円板の一番下が図の左端、一番上が図の右端に対応)、縦軸は、散乱体との衝突後の速度の接線方向の大きさ (-1 ~ +1) に対応している。なお粒子速度は次第に重力場で加速されるが、ここでは一定速度になるように温度制御して規格化している。(参考文献 [34] 参照。)

位相空間分布の次元が、ギブズ平衡分布の次元よりも減少したという発見は、私にとって啓発的で意義深く価値のある見識でした。フラクタルな非平衡状態のとても優れていることは、不可逆性を説明していることです。運動方程式は時間反転対称で、初期のフラクタル状態を選ぶ確率はメジャー 0 であるので、時間反転可能な軌道 (トラジェクトリー) から、熱力学の第 2 法則を破る確率はなくなります。位相空間の分布のフラクタル的な性質は、非平衡エントロピーがないことも示しています。

これはギブズによる  $N$  体分布関数  $f$  とボルツマン定数  $k$  についての以下のエントロピーの処方箋が、 $f$  が特異であれば発散するためです。

$$S_{Gibbs} \equiv -k(f \ln f), \quad (1)$$

ニューヨークで行われたアメリカ物理学会では“高温超伝導体 (High-Temperature Superconductors)” のホットトピックが力説されていました。私は、セントラルパークを長時間歩きながら、強い衝撃波での位相空間の次元の減少を評価することや時間可逆な運動方程式が不可逆性を示すパラドックスに思いをめぐらせていました。これらのトピックは後に、私の 3 番目の本“時間の矢、コンピュータシミュレーション、カオス (Time Reversibility, Computer Simulation, and Chaos)” の出版につながりました。大変に奇妙にも、私にとって非平衡系はより多くのより重要でより面白い問題があるにも関わらず、今日の多くの研究ははまだ平衡系の問題を扱っています。

私が 1977-1978 に Down Under<sup>5</sup> でサバティカルで滞在した年から、非平衡分子動力学法は急速に発展していきました。ちょうど同じ時期に、私の結婚生活は悪化していきました。1980 年から離婚する 1986 年まで、特に困難な時期でしたが、研究は依然として比較的生産的でした。1988 年、リバモア研究所への訪問者と共にとても幸運な出会いがありました。ルイジアナ州立大学の若い研究者 Gupta 博士が、彼のもてなし役であり、私のかつての学生であった Carol Griswold Tull を連れてきました。Carol は、リバモア研究所でスーパーコンピューターを使って仕事をしていました。また、彼女自身の結婚は 1984 年に終了してました。私たちは幸運にも、科学、自然、音楽そして食物など“よい生活 (Good Life)” をするために非常に似通った興味を共有していました。私はついに生活を共有できる誠実な女性を見つけました。私たちは正式に結婚した夫婦として日本でのサバティカル滞在できるように、1989 年

<sup>5</sup> 訳注: オーストラリアの俗称

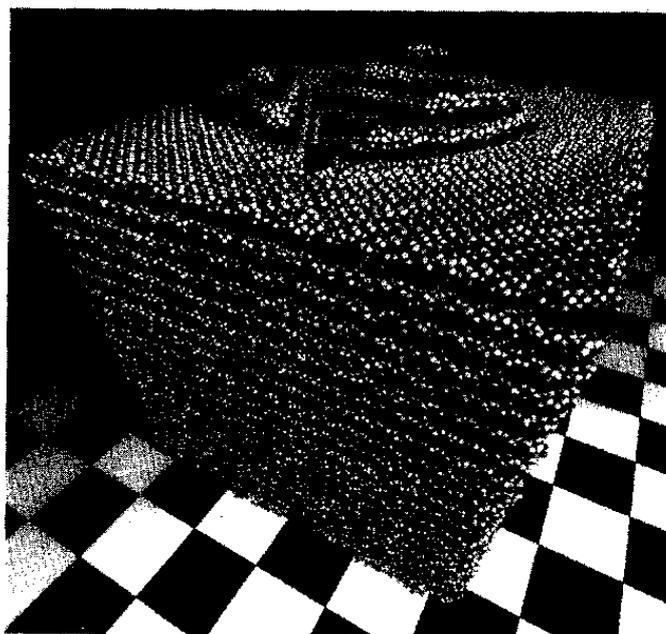


図 8: 373,248 個のシリコン原子モデルを使って計算したプラスチック刻付穴. 形が四面体のインデント (示されていない) は, 音速の 5 分の 1 で移動している. 2 次元での同様なシミュレーションは, 文献 [35] に記載されている.

に結婚しました. 私の息子 Nathan は, Carol のリバモアの家で結婚のセレモニーを行いました.

横浜にある慶應義塾大学に滞在した際の, 日本での経験は驚きでした. 慶應義塾大学への滞在を依頼した能勢さんが, 共同研究の計画を持っていないようでしたので, 私は約 1 ダースの共同研究のリストを用意し, 議論のために彼の研究室に持って行きました. しかし, 依然として何も起こりませんでした. このことをよくよく回顧してみると, 少なくとも私には, 日本の平穏な仕事を行う雰囲気を楽しんでいる間, 私はリバモア研究所の応用科学科で教えた内容をまとめたもう一冊の本“計算統計力学 (Computational Statistical mechanics)”を執筆する自由な時間を与えてくれました. Carol と私は原稿を執筆するため, 日吉駅の近くの計算機研究室で多くの夜を過ごしました. 私たちの Nestle House (慶應義塾大学の宿舎) と呼ばれているアパートからは, いつも練習が行われている野球場を見下ろすことができ, 歩いていける距離にありました. 我々の仕事の時間は, 電車のスケジュールによる制約はありませんでした.

Nestle House では, リバモアにいた Tony DeGroot から私は毎週のように進捗を伝える電話を受けました. 彼は 100 万原子の分子動力学計算が可能となるような 64 並列コンピューターを構築していました. リバモア

の Irv Stowers と Fred Wooten の助力を受けた Tony と Jeff Kallman と日本の朴泰祐と川合敏雄と井原茂男と長距離を隔てた共同研究により, 我々はシリコン結晶が変形するカラー映画を作成しました. 図 8 には, その映画における静止画を表示します. この 9 人の共同著者との共同作業は, 私の研究史において一番多くの人間が関与していました [35].

ベルリンの壁が 1989 年に崩壊した後, リバモア研究所は“他のための仕事”をし実用的に見えるよう努力をしていたミッションから解放され, 以前の自分自身のおもかげになりました. この風潮では, Teller の応用科学科は, 研究室への魅力を失い, 次第に衰退していきました. 私は有利な早期退職制度がやってくるまで, さらに半ダースほどの年を研究所で働き続けましたが, リバモアでの研究上の興奮は完全になくなりました. 研究所で働いている人の数は, 今 (2008 年の終わり) では以前の半分になっています. 1994 年から現在まで, 私の研究は妻の Carol と研究所の外の大きな国際的なグループとの共同研究と行われています.

## 6 過去を振り返ることにより得た教訓

私のリバモア研究所での経歴は, その間の多くの楽しい海外での短い滞在とともに, いくつかの有力な教訓を残してくれました. それらは, 研究とその結果の

価値、どのようにそれが最良に指導されるのかに関係しています。再現可能である結果の出版は、科学の必要条件です。研究プロジェクトは、それがどんなに光り輝くものであっても、もし他の人たちがその結果を共有できなければ、全く役に立ちません。共同研究者、組織の管理者および雑誌のエディターは、研究プロジェクトが文献に記録される前に、研究成果が通過してはいけないフィルタです。彼らの提言は、多くの場合よい提言です。

いくつかの出版物はそれほどよくはありません。George Stell は、ジャーナル名“物理学の後退 (Setbacks in Physics)”を提案しました。“物理学の後退”は、もっぱら過去の文献の中で既に正確に解決されていた重要な問題が、不完全で正しくない解法の出版に専念されることとなってしまいました。私の研究歴において、私はそのジャーナルで2つの優れた候補となる記事に遭遇しました。それらの候補は両方とも、私が研究論文を多数出版した研究分野の内容でした。Tuckerman とその共同研究者 [36] による一連の論文は、私が論文に繰り返し記載した、Nosé-Hoover 力学と位相空間のマルチフラクタルな構造による熱力学の第2法則の成立についての単純な関係を明白に無視しました。2つ目は、Zhou [37] による著しく長い論文でした。その論文は、圧力のビリアル定理の(全く正確な)微視的形式が正しくなく、圧力テンソルに運動論パート (kinetic part) が含まれているべきでない、というオリジナルな主張を押し進めまていました。その論文のおかげで後退の論文が大量に生産されてしまったため、特に効果的な後退でした。

別の範疇の“悪質な”論文(ねつ造したデータを含んだ)は、めったにありません。私自身が遭遇したただ一つの例は、Watanabe の自由エネルギー計算でした。彼の結果は、文字通りに“よすぎたため、真実になりえませんでした”[38]。彼の学位論文のアドバイザーへの電話で、彼が使用した自由エネルギー計算の計算プログラムでは、非常に大きな揺らぎが生じていることが明らかになりました。プログラムは、単に自由エネルギーが“正確な”値に到達したときに止められました。

過去には、よい論文はしばしば査読過程によってやりこめられました。Ed Jaynes が最大エントロピーの理論に関する将来性のある独創的な論文を投稿しましたが、George Uhlenbeck がその論文の掲載を却下したことを思い出します。私は、Ed がその却下された文書をワシントン大学の研究室の壁にかけていたことを思い出します。今日では、査読過程のそのような欠陥はそれほど重要ではありません。私は掲載を却下された

論文が他の雑誌で出版公表できなかったことは一度もありません。今では、出版に関しては、プレプリントサーバー (LANL arXiv) や自分自身のウェブサイトも含め、とても多くの発表手段や雑誌があるため、恣意的な掲載拒否はもはや深刻な問題ではありません。今日、公表出版したければ、著者は確実にそうすることができます。

計算機シミュレーションを使った半世紀間の仕事は、私にいくつかの継続的な教訓を残してくれました。再現性が一番大切であり、明瞭性は必要です。懐疑と公開は望ましい。また展望のセンスもまた望ましい。他人と訪問したり議論することは、しばしば有用なアイデアに結びつきます。時折ピアレビュー制度に不満や身びいきが新規性を落胆させたことがあったりするにも関わらず、結局のところ出版は、絶対に必要である。

私にとって 1960 年代のリバモア研究所は、シミュレーションを学ぶのに、ほとんど理想的な環境を提供しました - すなわち刺激的な人々、自分の研究を選択する自由、豊富な秘書のサポートと豊富な計算機資源、旅行や出版が可能なこと -。ここで述べたように、最初に平衡系、次に非平衡系の数年間の微視的シミュレーションを研究した後に、原子振動の長さや時間から生じる系のサイズや時間スケールの制限を超えるための連続体の方法論を開発することは私にとって自然でした。1977年に Lucy と Monaghan により開発された Smooth-particle 法は、連続体の方程式を解くために分子動力学に似た方法論を提供しました。しかし、粒子は必ずしも小さくありません。それらは天体物理学で扱うような大きさでも可能です。私は長年、Smooth particle に関心を持ち続けました。その結果が、そのテクニカルな面に重点を置いた最近の執筆した本につながっています。

日本人の同僚、志田晃一郎さん(武蔵工業大学講師)は、慶應義塾大学の朴泰祐さんと川合敏雄さんの指導を受けました。我々は皆、Carol と私が 1989-1990 に慶應義塾を訪問した際に、お会いしました。志田晃一郎さんとは、リバモア研究所でマックスウェルのサーマルクリープ問題に関して一緒に仕事をすることができました。彼は、大変親切にも私の執筆した4冊の本すべてを日本語に翻訳してくれました。私はこのことに彼に非常に感謝します。また、私の研究の詳細に興味を持つ読者が、英語あるいは日本語のこれらの本を入手し拝読していただけたら幸いです: [1] Molecular Dynamics (邦題: フーヴァー分子動力学入門, 田中実(翻訳), 共立出版); [2] Statistical Mechanics (邦題: 計算統計力学, 小竹進(監訳), 志田晃一郎(翻訳), 森北出版); [3] Time

Reversibility, Computer Simulation, and Chaos (邦題: 時間の矢 コンピュータシミュレーション, カオス-なぜ世界は時間可逆ではないのか?, 志田 晃一郎 (翻訳), 森北出版); [4] Smooth Particle Applied Mechanics, the State of the Art. (邦題: 粒子法による力学-連続体シミュレーションへの展開, 志田 晃一郎 (翻訳), 森北出版) (私のウェブサイト <http://williamhoover.info> には, [1], [2] および [4] の本の電子版並びに詳細なテクニカル情報を多く提供しています.)

### 謝辞

Masaharu Isobe は親切にもこの仕事を提案していただいた。また, 私の妻 Carol には原稿の準備を手伝っていただいた。

### 参考文献

- [1] B. J. Alder and T. E. Wainwright, "Molecules in Motion", *Scientific American*, **201**(4), 113-130 (1959).
- [2] F. F. Abraham, "Two-Dimensional Melting, Solid-State Stability, and the Kosterlitz-Thouless-Feynman Criterion", *Phys. Rev. B*, **23**, 6145-6148 (1981).
- [3] R. W. Zwanzig, "Virial Coefficients of Parallel Square and Parallel Cube Gases", *J. Chem. Phys.*, **24**, 855-856 (1956).
- [4] W. G. Hoover and A. G. De Rocco, "Sixth Virial Coefficients for Gases of Parallel Hard Lines, Hard Squares, and Hard Cubes", *J. Chem. Phys.*, **34**, 1059-1060 (1961).
- [5] W. G. Hoover and J. C. Poirier, "Determination of Virial Coefficients from the Potential of Mean Force", *J. Chem. Phys.*, **37**, 1041-1042 (1962).
- [6] W. W. Wood and J. D. Jacobsen, "Preliminary Results from a Recalculation of the Monte Carlo Equation of State of Hard Spheres", *J. Chem. Phys.*, **27**, 1207-1208 (1957).
- [7] B. J. Alder and T. E. Wainwright, "Phase Transition for a Hard Sphere System", *J. Chem. Phys.*, **27**, 1208-1209 (1957).
- [8] B. J. Alder, W. G. Hoover, and T. E. Wainwright, "Cooperative Motion of Hard Disks Leading to Melting", *Phys. Rev. Lett.*, **11**, 241-243 (1963).
- [9] W. G. Hoover and F. H. Ree, "Melting Transition and Communal Entropy for Hard Spheres", *J. Chem. Phys.*, **49**, 3609-3617 (1968).
- [10] J. B. Gibson, A. N. Goland, M. Milgram, and G. H. Vineyard, "Dynamics of Radiation Damage", *Phys. Rev.*, **120**, 1229-1253 (1960).
- [11] B. L. Holian, W. G. Hoover, B. Moran, and G. K. Straub, "Shockwave Structure via Nonequilibrium Molecular Dynamics", *Phys. Rev. A*, **22**, 2798-2808 (1980).
- [12] O. Kum, Wm. G. Hoover, and C. G. Hoover, "Temperature Maxima in Stable Two-Dimensional Shock Waves", *Phys. Rev. E*, **56**, 462-465 (1997).
- [13] D. R. Squire, A. C. Holt, and W. G. Hoover, "Isothermal Elastic Constants for Argon. Theory and Monte Carlo Calculations", *Physica*, **42**, 388-397 (1969).
- [14] W. G. Hoover, A. C. Holt, and D. R. Squire, "Adiabatic Elastic Constants for Argon. Theory and Monte Carlo Calculations", *Physica*, **44**, 437-443 (1969).
- [15] J. A. Barker and D. Henderson, "What is Liquid? Understanding the States of Matter", *Rev. Mod. Phys.*, **48**, 587-671 (1976).
- [16] R. W. Zwanzig, "Time Correlation Functions and Transport Coefficients in Statistical Mechanics", *Ann. Rev. Phys. Chem.*, **16**, 67-102 (1965).
- [17] W. G. Hoover, B. Moran, R. M. More, and A. J. C. Ladd, "Heat Conduction in a Rotating Disk via Nonequilibrium Molecular Dynamics", *Phys. Rev. A*, **24**, 2109-2114 (1981).
- [18] W. T. Ashurst and W. G. Hoover, "Microscopic Fracture Studies in the Two-Dimensional Triangular Lattice", *Phys. Rev. B*, **14**, 1465-1473 (1976).
- [19] W. G. Hoover and W. T. Ashurst, "Nonequilibrium Molecular Dynamics", *Advances in Theoretical Chemistry*, **1**, 1-51 (1975).
- [20] D. Levesque, L. Verlet, and J. K urkijarvi, "Computer Experiments on Classical Fluids. IV. Transport Properties and Time-Correlation Functions of the Lennard-Jones Liquid Near its Triple Point", *Phys. Rev. A*, **7**, 1690-1700 (1973).
- [21] W. G. Hoover, "Adiabatic Hamiltonian Deformation, Linear Response Theory, and Nonequilibrium Molecular Dynamics", *Lecture Notes in Physics*, **132**, 373-380 (1980).
- [22] W. G. Hoover, "Atomistic Nonequilibrium Computer Simulations", *Physica A*, **118**, 111-122 (1983).

- [23] W. G. Hoover, “Nonequilibrium Molecular Dynamics at Livermore and Los Alamos”, in *Microscopic Simulations of Complex Hydrodynamic Phenomena*, M. Mareschal and B. L. Holian, editors (Plenum Press, New York, 1992).
- [24] G. P. F. Ciccotti and W. G. Hoover, Editors, “Molecular Dynamics Simulation of Statistical-Mechanical Systems”, *Proceedings of the International Enrico Fermi School of Physics, Course 97* (1986).
- [25] Wm. G. Hoover, C. G. Hoover, and J. Petracic, “Simulation of Two- and Three-Dimensional Dense-Fluid Shear Viscosities via Nonequilibrium Molecular Dynamics. Comparison of Timeand-Space-Averaged Stresses from Homogeneous Doll’s and Sllod Shear Algorithms with those from Boundary-Driven Shear”, *Phys. Rev. E*, **78**, 046701 (2008).
- [26] W. G. Hoover, B. Moran, and J. M. Haile, “Homogeneous Periodic Heat Flow via Nonequilibrium Molecular Dynamics”, *J. Stat. Phys.*, **37**, 109-121 (1984).
- [27] W. G. Hoover, N. E. Hoover, and K. Hanson, “Exact Hard-Disk Free Volumes”, *J. Chem. Phys.*, **70**, 1837-1844 (1979).
- [28] W. G. Hoover, W. T. Ashurst, and R. Grover, “Exact Dynamical Basis for a Fluctuating Cell Model”, *J. Chem. Phys.*, **57**, 1259-1262 (1972).
- [29] Wm. G. Hoover, C. G. Hoover, and H. A. Posch, “50 Joint Explorations, 1985-2007”, Schrödinger Institute (Wien) Preprint Archive, #1898 (2007).
- [30] S. Nosé, “A Unified Formulation of the Constant Temperature Molecular Dynamics Methods”, *J. Chem. Phys.*, **81**, 511-519 (1984).
- [31] S. Nosé, “A Molecular Dynamics Method for Simulations in the Canonical Ensemble”, *Mol. Phys.*, **100**, 191-198 (2002).
- [32] W. G. Hoover, “Canonical Dynamics: Equilibrium Phase-Space Distributions”, *Phys. Rev. A*, **31**, 1695-1697 (1985).
- [33] H. A. Posch, W. G. Hoover, and F. J. Vesely, “Canonical Dynamics of the Nosé Oscillator: Stability, Order, and Chaos”, *Phys. Rev. A*, **33**, 4253-4265 (1986).
- [34] B. Moran, W. G. Hoover, and S. Bestiale, “Diffusion in a Periodic Lorentz Gas”, *J. Stat. Phys.*, **48**, 709-726 (1987).
- [35] W. G. Hoover, A. J. De Groot, C. G. Hoover, I. F. Stowers, T. Kawai, B. L. Holian, T. Boku, S. Ihara, and J. Belak, “Large-Scale Elastic-Plastic Indentation Simulations via Nonequilibrium Molecular Dynamics”, *Phys. Rev. A*, **42**, 5844-5853 (1990).
- [36] Wm. G. Hoover, D. J. Evans, H. A. Posch, B. L. Holian, and G. P. Morriss, ‘Comment on “Toward a Statistical Thermodynamics of Steady States” ’, *Phys. Rev. Lett.*, **80**, 4103-4103 (1998).
- [37] M. Zhou, “A New Look at the Atomic Level Virial Stress — On Continuum-Molecular System Equivalence”, *Proceedings of the Royal Society of London A*, **459**, 2347-2392, (2003).
- [38] B. L. Holian, H. A. Posch, and W. G. Hoover, “Free Energy via Thermostated Dynamic Potential-Energy Changes”, *Phys. Rev. E*, **47**, 3852-3861 (1993).

William Graham Hoover : [経歴]

1961年ミシガン大学物理化学科 Ph.D, デューク大学博士研究員を経て, 1963年リバモアのローレンス放射研究所物理学研究員, 1972年カリフォルニア大学デービス校リバモア校舎応用科学科教授兼任. オーストラリア国立大学, ウィーン大学, 慶應義塾大学滞在. 1994年早期退職. [専門] 現在は, 衝撃波構造と輸送の研究をしている [趣味] Ruby Valley にて, 乗馬や猫と楽しんでいる.

#### 著者紹介



訳者 (磯部雅晴) は翻訳に際し, 訳者の博士論文の指導教員で慶應義塾大学において能勢修一先生の同僚であった中西秀先生 (九州大学), 志田晃一郎先生 (武蔵工業大学) からは, いくつかの有益な情報をいただいた. また Adam Neff 氏にも校正作業にて訳文に対していくつかの貴重なご意見をいただいた. ここに謝意を示します.