

最適化問題としてのシミュレーション物理

名古屋大学 松本 正和

- ✿ 化学・生物・物理の分野で多体・多自由度系のシミュレーションが広く行われている。
- ✿ しかし、化学・生物と物理ではシミュレーションの目的が違う。
- ✿ 本質的に多自由度な現象をどう**理解**すればいいか。
 - ✿ 何を示せば**理解**したことになるのか。
- ✿ 物理において、高性能コンピュータは何に使えるか？

注釈

！ オレンジの文字は「っこみ」。

連成シミュレーションの役割

❁ 第二回 連成シミュレーションフォーラムの枕詞 (2006-12-12)

「昨今のマルチスケール・マルチフィジックスを標榜する表層的な研究の多さに辟易しはじめている皆様へ、このような領域の本質的な問題点を探ろうという研究会を計画しています。**階層性**は複雑な自然現象の中で重要な役割を担っていますが、シミュレーション的手法によって計算結果ときれいなグラフィックスは得られても現象の本質をとらえたことにはならないと考え、今回の研究会では、非平衡統計力学と力学系の観点から**階層性**のある問題の本質的な部分に如何にアプローチするかを討論することとします。」

シミュレーション物理の2つの困難

1. シミュレーションそのものの困難

- ✿ どうやって計算機にのせればいいかわからない。
- ✿ 時間がかかりすぎる。

2. 解析の困難

- ✿ 計算したはいいが、何がおこっているか説明できない。

(その他、お金、熱、場所、etc.)

- ✿ 次世代スパコンはシミュレーション時間の問題は解決してくれる。

生物・化学のシミュレーション

- ✿ 多自由度(～数万原子)、長時間(～ μsec)、精密
- ✿ 文字通りのシミュレーション(模倣);
実験結果の再現性と、精度が要求される

様々な近似計算手法の発展

計算アルゴリズムの発展

計算機技術の発展

「対象の規模を拡大し、精度を上げたい」という
潜在的欲求は、この分野のシミュレーション屋なら
誰もが抱いている。

計算規模拡大の結末

精度を上げようとするシミュレーション可能な時間が短くなる。



1. 大規模並列計算

2. 適当なところで線引きし、精密な計算を行う部分と
それ以外を分離する(連成計算)

規模を拡大すると結果も大量になる。解析が困難になる。



あらかじめ、解析が困難でなさそうな系を選ぶ?

「解析が大変になる/できなくなるのがわかっているのに、
なぜ大規模計算に邁進するのか?」

問題設定の違い

- ✿ 生物・化学系のシミュレーションの問題設定：
 - 「実験に近い結果が得られるかどうか」
 - ✿ そのために、第一原理計算を重視し、規模を拡大し、連成計算を行う。
 - ✿ 「**精確な計算をすればするほど現象の理解が深まる**」という信念
 - ！ 化学や生物の研究者は個別の問題や差異に興味があるのだ。
- ✿ 物理のシミュレーションの問題設定：
 - 「現象の背後にある共通原理を抽出し、モデル化したい」
 - ✿ そのために、本質的と思われる自由度を抽出し、トイモデルを作る。
 - ✿ 「**ものごとはシンプルな原理に基いている**」という信念
- ✿ どちらも、「現象を**説明**したい」という動機は共通。
- ✿ 前者を批判するのは簡単だが・・・

シミュレーションと説明

- ※ シミュレーション自体は「**説明**」ではない。
 - ※ どんなに大規模で正確な計算を行っても、**説明**が与えられなければ、価値がない。
 - ※ シミュレーションできるからといって、**説明**できるとは限らない。
 - ※ より精密なシミュレーションを行うことで、**説明**が質的に向上しなければ価値がない。
- ※ 本当の困難は、シミュレーションそのものではなく、そのあとの**説明**にある。
 - ※ **説明**ができそうにない問題には手を出すべきでない？

「ものごとはシンプルな原理に基いている」のか?

- ❁ 近代物理の成功談は「よく調べると背後にはシンプルな原理があるのが見付かった」というものばかり。
- ❁ シンプルなモデルに落とせない問題がある。
 - ❁ 四色問題(電算機を援用して証明) 朝日新聞、1976年8月31日
「...なぜならスマートな証明ができるような問題は、ほとんどすべて証明済みとなり、あとは電算機に頼るしかないような**複雑な問題**しか残っていないと予想されるからだ。」
 - ❁ 数理科学1998-9「モデルとモデリング」p.60 池口徹、合原一幸
「このような実世界カオスの実験データ解析は、一見華々しい成果を上げたが、他方でそれは低次元カオスで説明可能な実現象を探すという営為であったともいえよう。そしてその過程で見捨てられた、低次元カオスで説明しきれないより**複雑な現象**のほうがはるかに多いのである。」

複雑さ \approx 多様さ

- ※ 現実の現象の複雑さ(多様さ)は、人間の理解力をしのぐ。

- ※ 例：水の中のプロトンホッピング

H.Lapid et al, J. Chem. Phys. 122, 014506 (2005).

- ※ 第3隣接までの水分子の配置とネットワークのトポロジーがホッピング可能性を支配する。

- ※ 例：低密度非晶質氷の構造

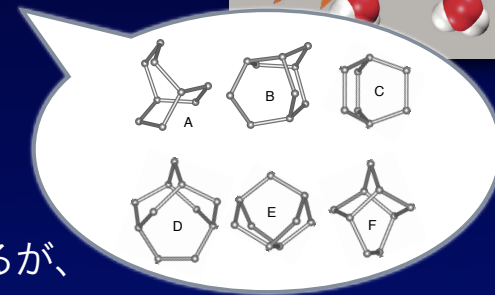
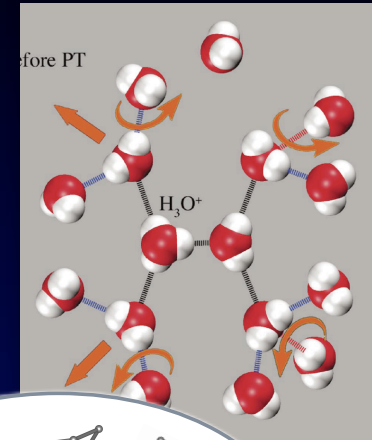
M. Matsumoto et al, J. Chem. Phys., in press.

- ※ ランダムだが中距離秩序をもつ構造。

- ※ 例：氷の融解のはじまり

K. Mochizuki et al (private communication)

- ※ 結晶の壊れ方のパターンは限られているように見えるが、数え上げられるかどうかはわからない。



- ※ 多様性のある現象をどうやって**説明**すればいい?

- ※ 典型例だけ挙げて、わかった気になっていいのか?
- ※ 平均化してしまっているのか?

物理=物の理?

✿ Wikipedia日本語版「物理学」より

物理学（ぶつりがく、Physics）は、自然科学の一分野である。自然界に見られる現象には、人間の恣意的な解釈に依らない普遍的な法則があると考え、自然界の現象とその性質を、物質とその間に働く相互作用によって**理解**すること（力学的理解）、および物質をより基本的な要素に還元して**理解**すること（原子論的理解）を目的とする。

✿ 人間が**理解**しなくても、世界は自然法則にのっとって動く。

理解は人間の営為であって自然の一部ではないことに注意。

物理 = 物の理の説明

※ 「理解」 「説明」とは何か

※ 説明

- ※ 他人(または自分)の頭の中に、モデル構築をうながすこと。
- ※ 無限自由度の現象を、有限のことばで表現すること。
アルゴリズム、ルール、縮約、圧縮、エンコーディング、パターン分類、学習、離散化、近似。
- ※ 情報が失われる。(失われない場合もある。)

※ 理解

- ※ 説明をもとに、頭の中にモデルを構築すること。
- ※ 説明をデコードすること。
- ※ **理解と説明はほぼ同じもの。**
「説明できなければ理解したとは言えない」

「理解」とはモデル化である。

- ✿ **モデル化**とは、人為的に選んだ少数の自由度で物理を近似すること。
あるいは、自由度を選別する行為。

- ✿ 人為が介入する。

- ✿ 木村英紀「モデルとは何か」、数理科学「モデルとモデリング」p. 10, 1998-9

「モデルこそが計算機を前提とした現代における対象認識の方法論的な核ではなかろうか。」

「現代の学問はモデルという形で知を集積し、流通し、洗練しているのではないか、と思われてならない。」

- ✿ 情報縮約の編集操作

- ✿ 遅い運動の抽出、(Causal) Stateの抽出、(格子化、)格子の粗視化、統計力学的操作、ハミルトン系ダイナミクス

！ 自由度を減らすだけでは理解した気がしない

モデリングと予測

- ※ 自然現象に「**階層性**」があるように見える? (人間の直感に基く仮説)

1. 過去のデータをもとに「**階層性**」をモデル化する。
2. そのモデルを、未知データにあてはめ、**予測**の良さを定量評価する。
3. 予測が良くなるようにモデルをチューニング/最適化/翻案する。

- ※ 「**階層性**」には「水素結合」「**階層性**」「水分子間相互作用」などが入る。

- ※ 評価関数は人間が提供する必要がある。

- ※ 「**階層性**」は人間の認識に存在する。

- ※ 人によって、立場の違いが鮮明になる。

- ※ 物の理を説明するしかたをさらにモデル化する=物理理

! 階層性も人間の感覚にすぎない、というのは言いすぎだ。階層は現に存在しているように思える。

モデル化には主観が入る

- ❁ 評価関数の優劣を客観的に評価できるだろうか。

「あなたのモデルと私のモデル、どちらが良いか？」

- ❁ 伊藤：最も速いプログラムが最善である。
- ❁ 小松崎：数学的に最適さを保証する。（「 ϵ -マシンは時系シンボル列を統計的に再現予測する唯一かつ最小最適モデル」）
- ❁ 何を見たいかによって違っててよい。
- ❁ 賛同する人が多いモデルが最良。

！ 民主主義的評価はおかしい

- ❁ モデルを使ってシミュレーションを行い、意味のある上位モデルを作れるなら、下位モデルは良いモデルと言えるし、そこには階層があると言える。

シミュレーション物理の2つの困難

1. シミュレーションそのものの困難



モデルの上になのっかってシミュレーションする場合、下位モデルが悪いと、上位のシミュレーションが劣化する。

例：古典MDで反応を扱う、流体方程式で音波を扱う。

- ✱ 下位モデルを改善するか、悪い近似で我慢するか。

2. 解析の困難

- ✱ 計算したはいいが、何がおこっているか説明できない。

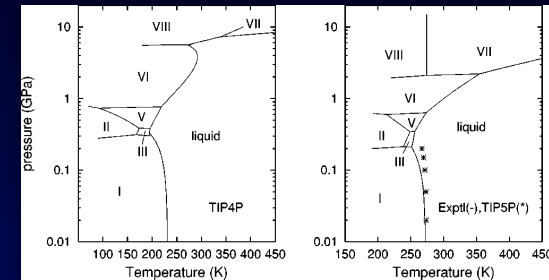
計算機は「理解」を拡張する。

- メタモデル(=モデルの評価規準)を人間が提供すれば、モデル化作業は計算機にまかせられる。「**モデルの最適化問題**」

- 例：古典力学的水分子モデルのデザイン

- TIP4P、SPC/E、6サイト、3サイト、分極モデル、etc.
- 評価規準：相図とダイナミクスの再現性

E. Sanz et al, J. Chem. Phys. 121 (2004) 1165-1166.



- 例：水素結合の判別関数

- 本来はアナログな相互作用を、デジタルな「結合」というモデルにおきかえる。
- 様々なモデル：対エネルギーによる判別、原子間距離による判別、etc.
- 評価規準：PES地形がもつトポロジーの再現性

M. Matsumoto, J. Chem. Phys. 126, 054503 (2007).

- 例：“Do-it-yourself climate prediction”(渡部さんの基調講演より)

！ モデルを考えつくのはそう簡単でないし、結果を見ずに評価規準を決めるのは難しいはず。
全自動では無理。

モデルの最適化問題

✿ パラメータはいくつ必要？

- ✿ 変数が過少だと誤解をまねくし、過剰だとわかりにくい。
- ✿ 問題の複雑さを測る方法、主要な変数を選ぶ方法はいろいろ
 - ✿ Kolmogorovの複雑度、相関次元、埋め込み次元、多変量解析、主成分分析、ウェーブレット変換、独立成分分析、パターン識別、強化学習
- ✿ 数理科学2006-9「ランダムネス」 p.51 田口善弘 (非計量多次元尺度法の紹介)

「...データ自身が明確に語ることを尊重すれば、自ずと意味が浮かび上がるということだ。」

「創意工夫が常にデータ解析に必要なということであり、固定した方法が通用しないということだ。」
- ✿ パラメータの個数を最適化することさえも自動化できそうだ。
最適解は、人間が理解できないほど複雑である可能性もある。

！ 人間が理解できないほど難しいものをモデルと呼べるか？

シミュレーション物理の2つの困難

1. シミュレーションそのものの困難

- ✿ モデルの上ののっかってシミュレーションする場合、下位モデルが悪いと、上位のシミュレーションが非現実的になる。
例：古典MDで反応を扱う、流体方程式で音波を扱う。
- ✿ 下位モデルを改善するか、悪い近似で我慢するか。

2. 解析の困難



複雑と言われている問題をカタログ化し、共通の複雑さをみつけだして、取り組むべき問題を整理集約できないか？

- ✿ 乱流、核生成、相転移、階層間の相互作用、
- ✿ 複雑な問題に対し、とっかかりをつける手法をカタログ化できないか？
 - ✿ 情報の発生と輸送(相関)を事前知識なしに見付けだす方法。(小松崎)
 - ✿ 連続量の文節化、カテゴリイズ、ネットワーク化(馬場)
 - ✿ ネットワークモチーフの分析、スモールワールド性。
 - ✿ (階層化、連成化)←成功例の分析が必要

最適化問題としてのシミュレーション物理

- ✿ 計算機資源がふんだんに使えるなら、何に使うか?
- ✿ 例： 翼の設計
- ✿ 理学的発想 「鳥はなぜ翔べるのか?」
- ✿ 工学的発想 「滑空するのに、最適な翼の形状は?」
 - ✿ 流体力学やカオスを知らなくても、進化的に設計することが可能。
 - ✿ 得られる解は、大型の鳥の翼と似たものになるだろう。

過度な機能主義に対する批判

✿ 人工知能で同じことができれば、人間の脳の機能を理解したと言えるのか？

✿ 津田一郎「カオス的脳観」 p.191

「かりに、そのアプローチによって脳の理解が進まなくとも、人工的に有用なものができればそれでよいではないか、という逃げ道・・・の用意はその研究を真理とは別の方向へ向かわせる傾向を持つものである。」

「我々は“鳥”のように空を飛ぶ飛行機を知っているが、“鳥のように”空を飛ぶ人工的な鳥をだれも知らない。」

批判に対する反論

- ✿ 実際のところ、鳥の滑空とグライダーの滑空はほぼ同じ原理ではないか？
- ✿ 手本となる(生命)現象が知られていない場合には、目的を実現するために、手段を選ばないという道もありではないか？
- ✿ はばたき飛行についても、風洞実験やシミュレーションによる最適化の結果、鳥と同じような翼が解として得られる可能性はある。
- ✿ 翼竜、蝙蝠、鳥、巨大昆虫を含む、翼の一般的な解が得られるかもしれない。

最適化問題としてのシミュレーション物理

- ✿ いろんな困難な問題を、すこしいじると最適化問題にできる
→ 計算機にまかせられる!
 - ✿ 最も性能の良いMaxwell Demonの作り方は?
 - ✿ 最も性能の良い分子ふるいの作り方は?
 - ✿ キャビティの圧壊現象で最も高温を得るには?
 - ✿ 2つのタンパク質がうまく会合できるように表面構造を設計できるか?
 - ✿ 疎水性分子で親水的な壁を作れるか?
 - ✿ 特定の波長の光のみを広角に散乱する構造体の設計(モルフォ蝶からの類推)
 - ✿ できるだけ結晶化しにくい物質を設計する。(ガラス転移の起源)
- ✿ 一旦解が得られれば、理解が爆発的に進むはず。
- ✿ 最適化(人工進化)の途中経過からも、学ぶべきことはあるのでは?

次回

- ✻ テーマ
- ✻ 進行方法
- ✻ 人選
- ✻ 期間、場所