Oct. 15, 2018, Nagoya Univ.

シミュレーションサイエンス 1

第1回　概観

情報学研究科　複雑系科学専攻

（多自由度システム講座）

杉山雄規　：　理論物理学･数理物理学

シミュレーションとは何か？（その理解のために）

- ハードとソフト　：　物質的実体 と システム（情報）的存在
- 情報一元論　：世界は情報で造られている。
- デジタル一元論　：情報はすべてデジタル（言語・記号）で表せる。
- 情報処理＝計算　：デジタル処理はすべて数学的計算により可能。

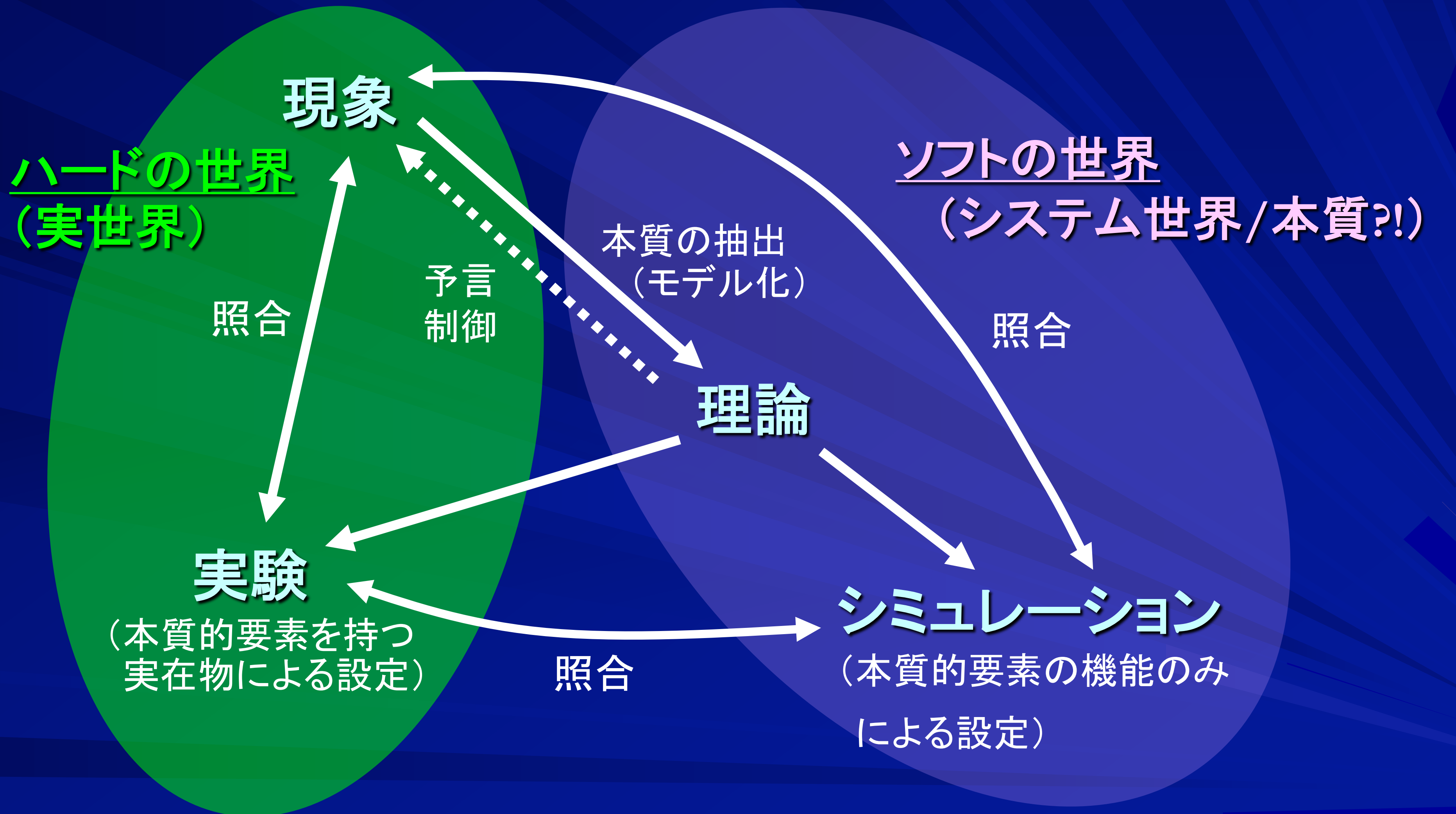
「世界は計算機によって造られる。」⟷ “シミュレーション” という。

創造された抽象世界 ⟶ 物質的実体を材料として具現化した世界

‖　　　‖

シミュレートされた世界 ⟵ 我々の宇宙/森羅万象

シミュレーションという研究方法

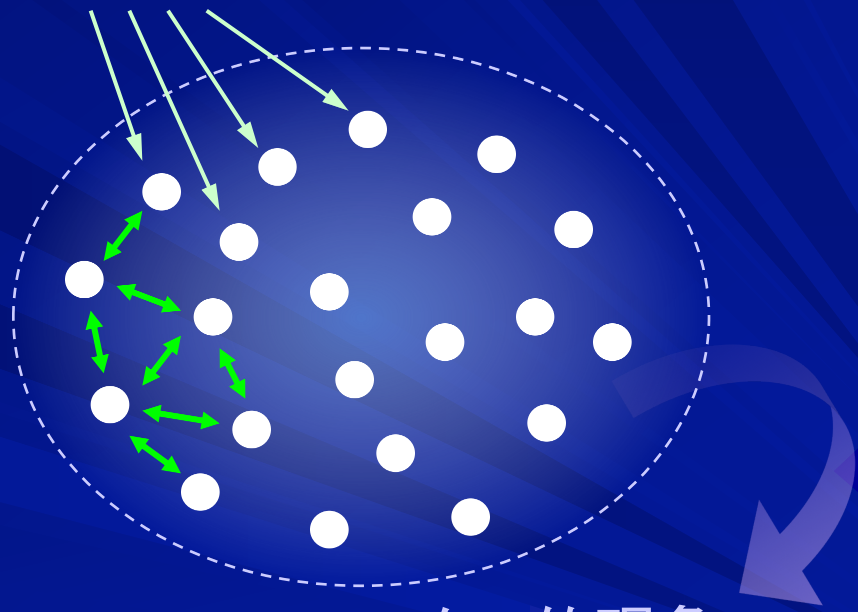


■ シミュレーションでのみ現実との照合が可能な現象
（宇宙/生物の進化、社会/経済現象、地球環境、e.t.c）

数理模型(ミクロ的基礎模型)の考え方

■ 構成分子（ 個性の無い同一の性質
を持つ局所的存在: 粒子 ）

■ 構成分子の間の
ミクロ的相互作用
（Interaction）
関係性



↓

■ 最小模型(数学的表現)

＋ 付加的要素 ⇒ 現実現象への適用

■ 物質的実世界 ⇔ 論理構造の世界

- 大きさ/形(体積): 物体 → 分子 → 原子 → 原子核 → 素粒子 ⇔ "点粒子"
  10^{-8} 10^{-10} 10^{-15} 10^{-18} (m) 大きさを持たない！
  (∵ 相対性理論)
  ⇒ 点の集団の構造(正味の体積=0)
  ⇒ 空間的位置座標の集合 → 数値
- 色 ⇒ 光 ⇒ 電磁波の波長(4000〜8000Å) → 数値
- 電磁気力(原子/分子を構成する相互作用) 電荷(属性) → 数値
  ゲージ場(素粒子) ⇔ 位置座標の関数
  (∵ 相対論的場の量子論)

↓

■ 現象世界は、点(粒子)の集合の関数関係(相互作用/力)の総体である。

‖

■ 数字・記号で表現される世界 = 論理構造の世界

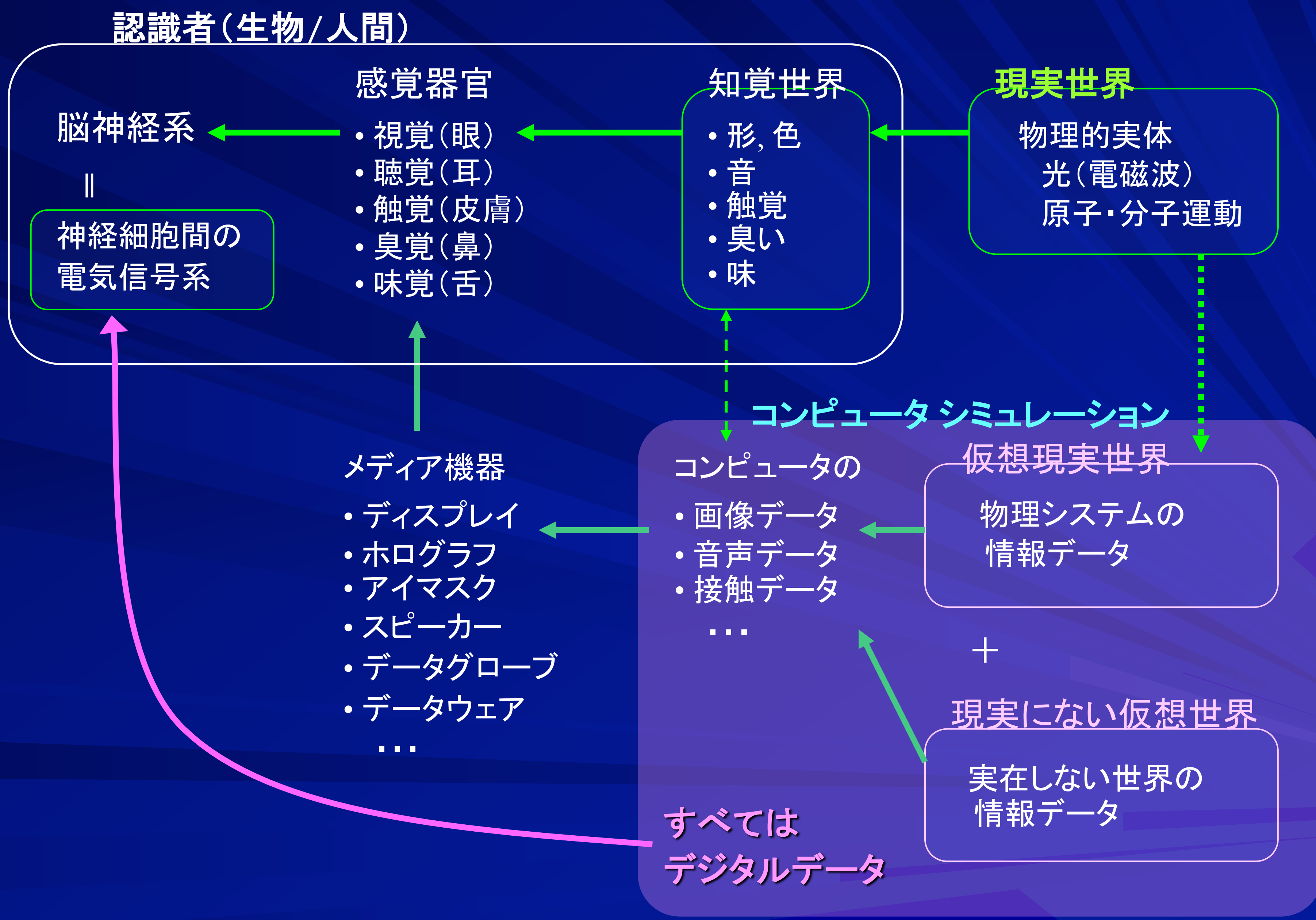
‖

我々の宇宙/森羅万象 ──→ "シミュレートされた世界"

‖ ‖

物質的実体を材料として具現化した世界 ←─ 関係性のみの抽象世界

■ シミュレーション と バーチャルリアリティ（virtual reality）



【今後の話の道案内】

システム世界のマクロ現象

形態形成・自己複製（増殖）・代謝・
進化・集団運動・同期/引き込み・

抽象化

現実世界の対象：

生物・社会・スウォーム・脳・
非平衡多体系物質現象・

説明

本質の抽出

基礎になる抽象概念（数理的概念）

- ■ カオス
- ■ 自己相似性（スケーリング/フラクタル）
- ■ 相転移（臨界現象）/分岐/カタストロフィ
- ■ パターン形成
- ■ ホメオダイナミックス（代謝）
- ■ “複雑性”

説明

数理モデル / システム

- ・微分方程式系，振動子系
- ・力学系、多体系，
- ・スピン系，セルオートマトン，
- ・アルゴリズム，PNP問題

キーとなる基本的性質

- ◆ 非線型性　　　　（≠ 線型性）
- ◆ 非平衡系　　　　（≠ 平衡系）
- ◆ 非保存系/散逸系（≠ 保存系）
- ◆ 離散性　　　　　（≠ 連続性）

例1） カオス（Chaos）

- 周期性から → 非周期性へ
  ⇒ カオス

カオス（Chaos）：周期性から → 非周期性へ/⇒カオス

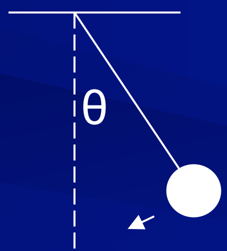
■ 古典力学 ： Newtonの運動方程式（2階の微分方程式）
を解けば

ある時刻 t_0 : 位置 x_0, 速度 v_0
が わかれば、

→ 未来の任意の時刻 t : 位置 x(t), 速度v(t)
が 完全にわかる。
［決定論］

■ 振り子

・単振り子



運動方程式: 位置θ(t)

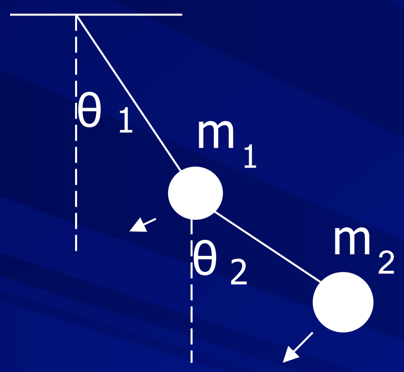
$$\frac{d^2\theta}{dt^2} = -\frac{g}{l}\sin\theta$$
$$= -\frac{g}{l}\left(\theta - \frac{1}{3!}\theta^3 + \frac{1}{5!}\theta^5 - \frac{1}{7!}\theta^7 + \cdots + (-1)^{n-1}\frac{1}{(2n-1)!}\theta^{2n-1} + \cdots\right)$$

非線型（1次式ではない） 単純ではないが、
やはり 周期的運動

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} = -\frac{g}{l}\,\theta$$

線型化（1次式に近似） 単振動：周期的運動

・2重振り子　　運動方程式: 位置$\theta_1(t)$, $\theta_2(t)$
連立微分方程式



$$(m_1+m_2)l_1^2\frac{d^2\theta_1}{dt^2}+m_2l_1l_2\cos(\theta_1-\theta_2)\frac{d^2\theta_2}{dt^2}$$
$$+m_2l_1l_2\sin(\theta_1-\theta_2){\frac{d\theta_2}{dt^2}}^2+(m_1+m_2)gl_1\sin\theta_1=0$$

$$m_2l_2^2\frac{d^2\theta_2}{dt^2}+m_2l_1l_2\cos(\theta_1-\theta_2)\frac{d^2\theta_1}{dt^2}$$
$$-m_2l_1l_2\sin(\theta_1-\theta_2){\frac{d\theta_1}{dt^2}}^2+m_2gl_2\sin\theta_2=0$$

■ 決定論である微分方程式の解であるが、

m_1, m_2 の運動は カオス的！ 予測不可能な運動をする。

(解析的には解けない。⇒ 数値シミュレーションで運動を
追跡する。)

■ 個体数増殖のモデル：Meiの力学系/Logistic写像

x_n：n年目のある生物の個体数 → $x_{n+1}= f(x_n)$ で変化する．：写像(mapping)

● 個体数の時間的変化：$x_0 \rightarrow x_1 \rightarrow x_2 \rightarrow x_3 \rightarrow \cdots$ ［決定論］

i) 増殖率: $x_{n+1}/x_n = a$(>0, 一定)とする。⇒ $x_{n+1}= ax_n$ よって $x_n= a^n x_0$

- ■ 0<a<1：$x_n\ (n\rightarrow\infty) \rightarrow 0$ 死滅
- ■ 1<a ：$x_n\ (n\rightarrow\infty) \rightarrow \infty$ 際限なく増殖

} 非現実的

ii) 増殖率: $x_{n+1}/x_n = a(1-x_n)$とする。⇔ 個体数が増えていくと増殖率が抑えられ、1（ある限界単位）で増殖率=0になる。

$$\Rightarrow x_{n+1}= ax_n(1 - x_n)$$ 現実的

・$x_n\ (n\rightarrow\infty)$ →どうなるか？ ⇒ $n\rightarrow\infty$で収束するならば、$x_n = x_{n+1} = x_\infty$

つまり $x= ax(1 - x)$の解：$x=0$ または $(a-1)/a$

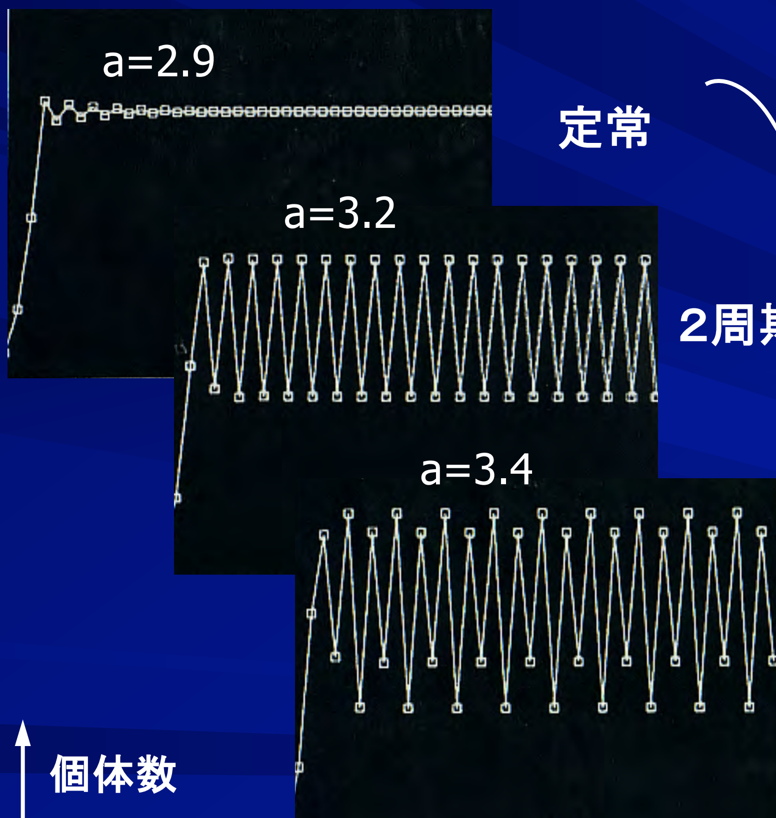
- ■ 0<a<1：$x_n\ (n\rightarrow\infty) \rightarrow x=0$ 死滅
- ■ 1<a ：$x_n\ (n\rightarrow\infty) \rightarrow x=(a-1)/a$ 一定数に収束するように思えた。← 実はそう単純ではない ?!

↑
シミュレーション

■ 個体数増殖のモデル：Mei の力学系のシミュレーション

x_n：n年目の個体数 → $x_{n+1} = ax_n(1 - x_n)$ で変化する.

個体数の時間的変化：$x_0 \to x_1 \to x_2 \to x_3 \to \cdots$



定常

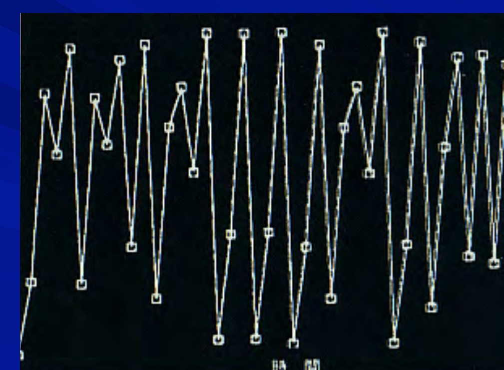
2周期

周期的

4周期

8周期

・・・ 無限周期



a≧ 3.5699456....

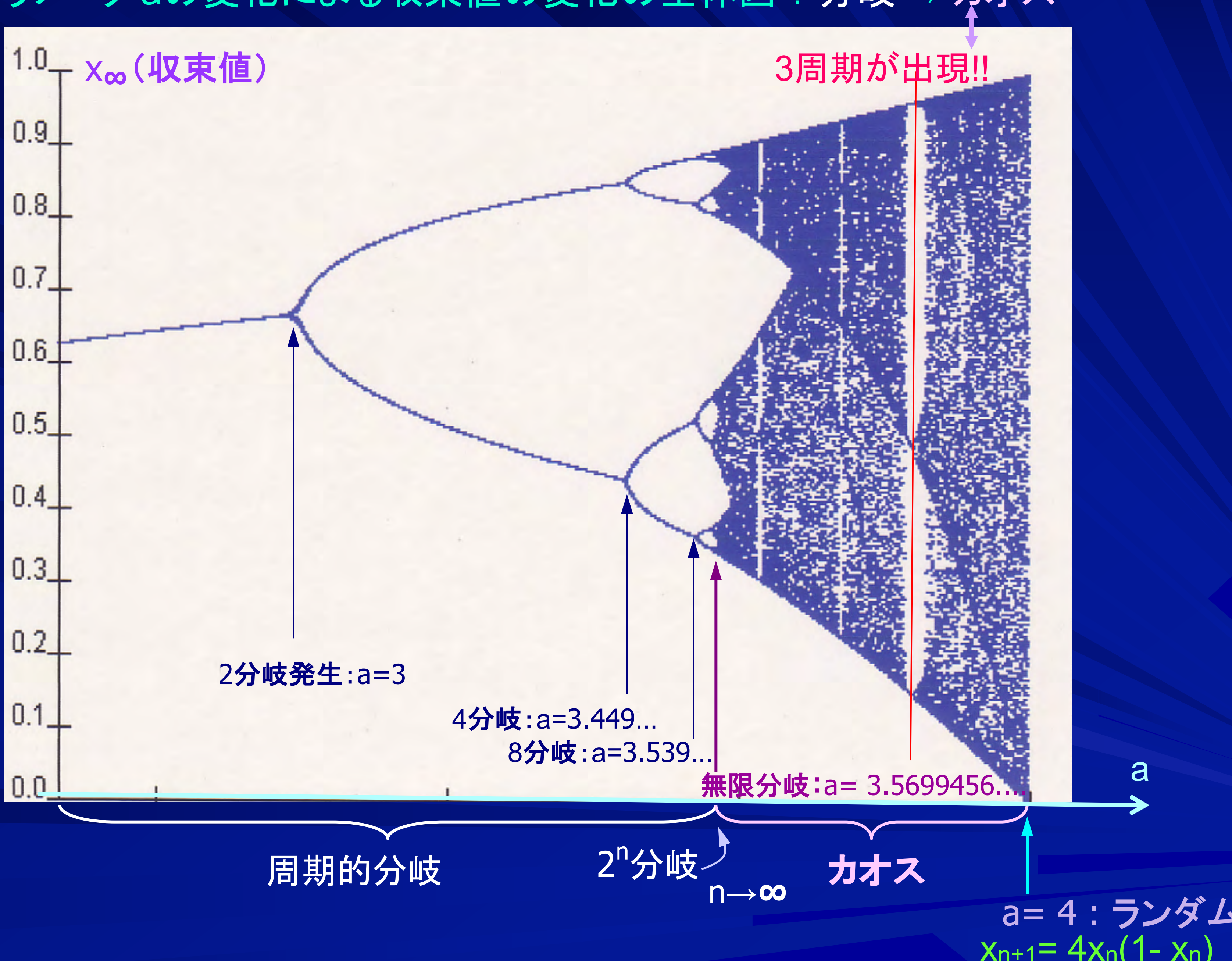
個体数

時間変化

非周期的 ⟷ カオス

■ 僅かな初期値の違いで、軌道が大きく変動する。

パラメータ aの変化による収束値の変化の全体図 : 分岐 ⇒ カオスへ



例2） 相転移現象

- 自己相似性（スケーリング則）

強磁性体の磁化現象：強磁性体金属は極低温で磁石になる。

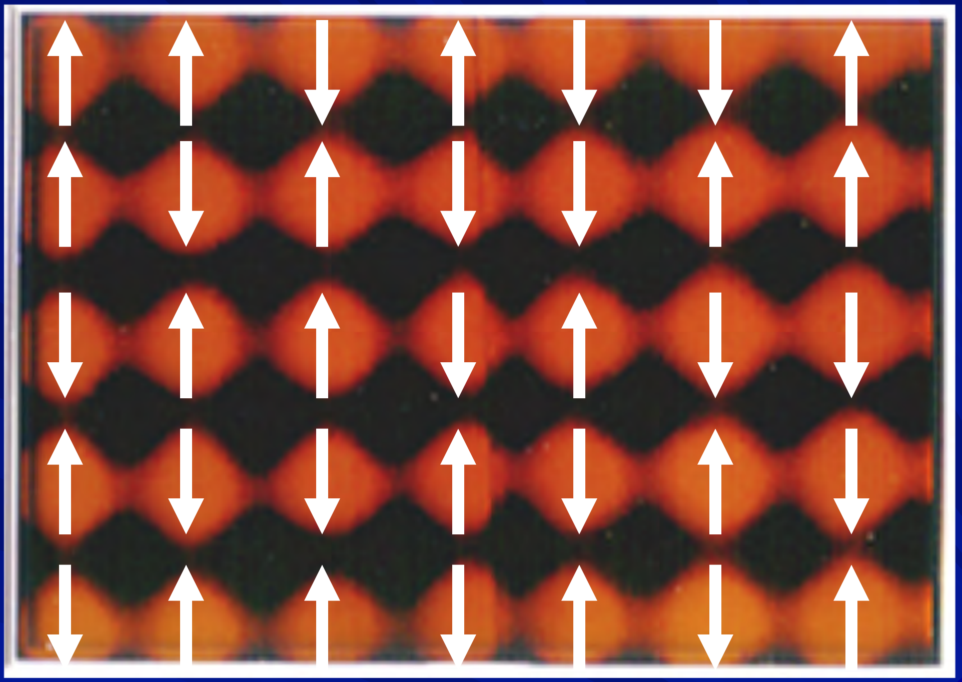
金属：単原子分子の配列

↕

小さな棒磁石 N S ↑

スピンモデル（Spin Model）

Ising Model
- 上向き ↑
- 下向き ↓



■ 空間にスピンが配列し、隣同士のスピンとだけ相互作用する.

各スピンはそれぞれ上か下かに向く。⇒
- ・スピンの向きがバラバラ ＝ 磁化しない。
- ・スピンの向きが揃う ＝ 磁化する。（磁石）

空間にスピンが配列し、隣のスピンとだけ相互作用する。

Ising Model

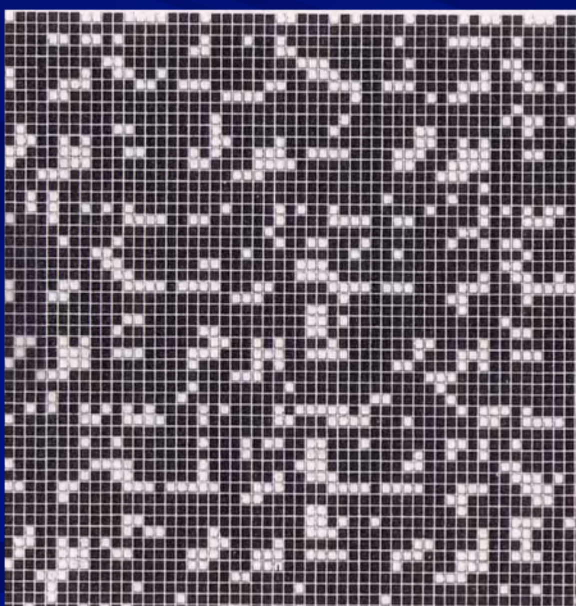
- 上向き ↑
- 下向き ↓

並んだ2つのスピンは
揃う方がエネルギーが低い。

スピンの向きは温度に
よって揺らぐ。

巨視的様相はどうなるか？

$T < T_c$ （磁化）
低温 :スピンの向きが揃う.



一様（周期的）

$T = T_c$
相転移点（臨界温度）

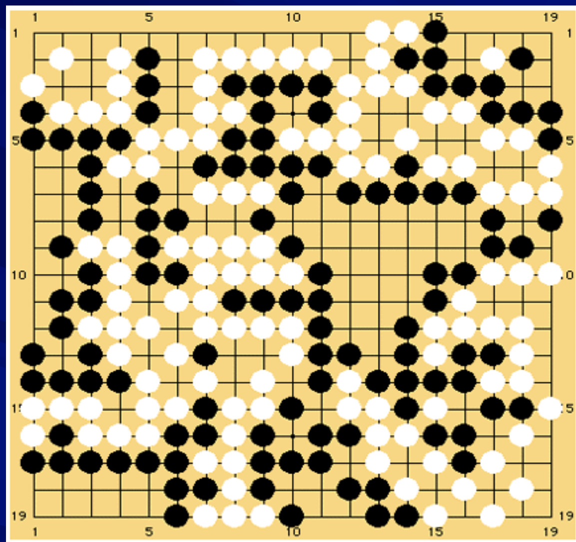
様々なスケールが共存（非周期的）
スケーリング則 ： 自己相似的

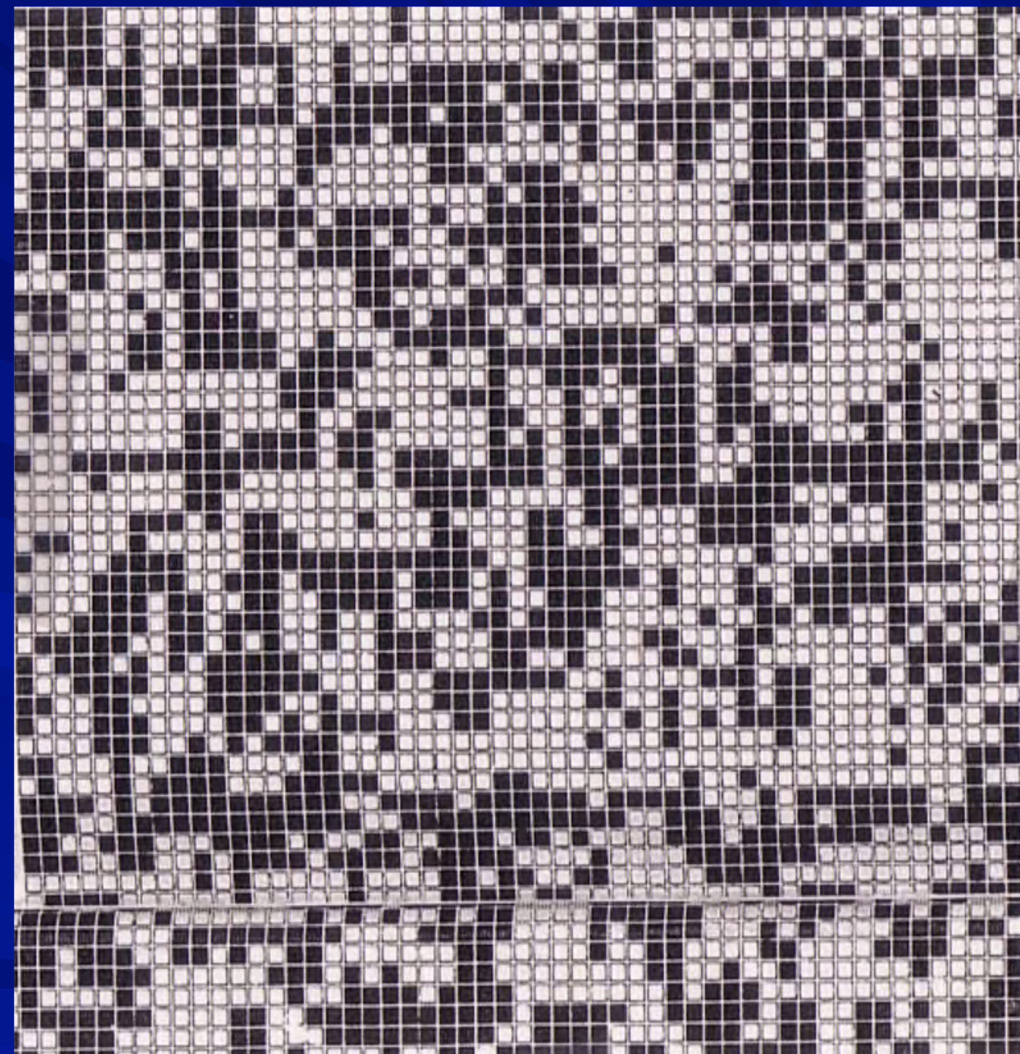
$T > T_c$
高温 ： スピンの向きはバラバラ

ランダム

[動力学的に似たシステム]

囲碁は相転移点上の様相を示す





囲碁		スピンモデル
■ 白黒順番に打つ	⇔	熱的ゆらぎ
■ 陣地取りゲーム	⇔	磁化領域の拡大
■ 熟練者同士の好ゲームの終局図		
	⇔	相転移点の様相

複雑 ： スケーリング則（自己相似/フラクタル）↔ 相転移

マクロの様相の種類と現象例

様々な世界	定常(消滅): convergence	周期的: periodic	"複雑": complex	カオス / ランダム(乱雑): chaos /random
CA	クラス１	クラス２	クラス４	クラス３
数		有理数		無理数(超越数/代数的数)
無限		離散(デジタル)	連続(アナログ)	
計算/論理(情報)		アルゴリズムの存在	決定不能問題	無意味な言語配列
力学	１体(自由運動)	２体		３体
力学系	秩序			カオス　無秩序
微分方程式系	可積分	可積分ソリトン		積分不可能
	線型		非線形	
多体系物理	平衡系		相転移	非平衡系/散逸系
			自己組織化/形態形成	
自然	物質 (死)		生命: 代謝 自己複製 進化	
生態系/生物集団			群知能	
社会	孤立社会		経済現象 情報社会	