



計算科学特論

佐賀大学大学院
工学系研究科博士前期課程
情報システム学専攻

計算科学とは

- Computational Science
 - 計算機科学(Computer Science)ではない
- 科学研究の手法としての位置付け
 - 実験・観測
 - 対象を測定装置などを使って調べる
 - データ処理をする
 - 理論
 - 数学的モデルを作り解析する：数値計算を含む
 - シミュレーション：計算科学的手法

シミュレーション

- Simulation
 - 現象を模倣する
 - Simulate : まねる
- 目的
 - モデルを直接的に動かしその性質を調べる
 - 実験・実測の補助手段
 - 理想的環境を作り、各要素の効果を調べる

二つのタイプのシミュレーション

- モデルの動作を追う
 - モデルの運動方程式を直接に動作させる
 - 分子動力学法：Molecular Dynamics
- 統計的性質を見る
 - 列挙する
 - サンプリングを行う
 - 確率過程を模倣する

講義の目的

- モンテカルロ (Monte Carlo) 法
 - シミュレーション技法の一つ
 - サンプルングによって平均量を計算する
- 特に統計力学系
 - 非常に多数の要素からなる系の統計的性質
- サンプル出現確率に応じたサンプルング
- 確率過程の模倣

組み合わせ最適化問題への応用

- 全ての場合を列挙できない場合
 - 組合せの数が多過ぎる
- Simulated Annealing
 - 徐冷過程を模倣する
- 統計力学で基礎を与えることができる
 - なぜ最適解を得ることが出来るか
- 神経回路網への応用
 - 記憶と想起

何が身につく (希望)

- 擬似乱数生成
- Monte Carlo法
- 確率と統計
 - 確率過程の模倣
- Javaプログラミング
- 統計力学の基礎
 - 様々な最適化問題で出てくる

シミュレーションの必要性

- **計算できないもの**
 - 複雑な和や積分
 - 適切な近似法や数値計算法が使えない場合
- **実験が困難な系の性質を見る**
 - 巨大なもの、唯一のもの(地球環境、宇宙、進化)
 - 実験が危険なもの、高価なもの
- **理想的な系の性質を見る**
 - 系の要素の役割を知る

シミュレーションの危うさ

- シミュレーションに過ぎない
 - 本物ではない
 - モデル化の精度
 - シミュレーションプログラムの精度
- 結果の正当性を吟味しなくてはならない
 - 定性的検討
 - 極限状態での定量的検討
 - 他の方法との比較

計算しても仕方の無いもの

- 個々の事象よりも**統計的量**がほしい場合
 - サンプルにばらつきがある場合
 - 個々の事象が観測できない場合
- 例：気体分子運動
 - 気体分子の軌道を追っても無駄
 - 観測できる量の関係が欲しい
- 例：神経回路
 - 個体ごとに違う
 - 「平均的」性質を知りたい

主な内容

- Spin系の統計力学
- 統計力学系のMonte Carlo Simulation
- 乱数
- 組み合わせ最適化問題
- 神経回路網模型
- Hopfield模型