私の計算 (機) 遍歴

奈良女子大学大学院人間文化研究科 上江洌 達也

私の専門は統計力学であるが，その中でも，非線形動力学 (カオス) やスピングラス，ニューラルネットワークなどであり，計算機を用いたシミュレーションや数値積分などが不可欠である。例えば，ニューラルネットワークにおける記憶の想起の問題では，まずモデルを設定し，それを統計力学的手法を用いて解析し，最終的に想起過程を既述する微分方程式を導く。それを数値的に積分した結果と，モデルをじかにシミュレーションした結果とを比較して，理論が正しいか否かを判定する。別の例だと，モデル設定のあと，それのシミュレーションを行なってどのような現象が生じるかを調べる。その結果をみて理論を構築する。これの有名な例としては，カオスに至る 1 つのルートを発見した，ファイゲンバウムの研究が挙げられる。彼は，プログラム可能な電卓 HP65 で，1 次元写像，$x_{n+1} = \lambda x_n(1 - x_n)$ の軌道を計算した [1]。パラメータ λ の値を例えば 1.5 とし，x_0 の値を $(0, 1)$ 区間の値に設定して，x_1 を上の式から計算し，更に x_2, x_3 と計算していくと最終的に固定点に落ち着く。パラメータ λ の値を増やして，落ち着き先を調べてみると，周期が

$$2^0 \to 2^1 \to 2^2 \to \cdots$$

と増えていき，周期解が収束した後，複雑な運動，カオス，が出現する。このとき，2^n 周期解が安定なパラメータ λ の幅 $\Delta\lambda_n$ と 2^{n+1} 周期解が安定なときの幅 $\Delta\lambda_{n+1}$ の比 $\dfrac{\Delta\lambda_n}{\Delta\lambda_{n+1}}$ が，$n \to \infty$ の極限で一定になることを発見した。そして，その値，ファイゲンバウム定数 δ，は，$x_{n+1} = \lambda f(x_n)$ のタイプの 1 次元写像で普遍的であることを見いだした。その後，繰り込み群の手法を応用して理論を構築したのである。但し，関数 $f(x)$ はひと山であり，δ はその頂点でのベキ z に依存する。

このように，シミュレーションは，コンピューター上での「実験」と言うことができる。また，理論と比較するための数値計算などを行なうときには，「計算機にオウカガイを立てる」などと言う場合がある。

さて，この小文では，私がこれまで計算機を用いて行なってきた数値計算について記そうと思う。

実を言うと，学生時代，私は計算機が大嫌いであった。その頃はパンチカードを用いてプログラムを作成した。穴を空けた 1 枚のカードがプログラムの 1 行に相当する。何百枚，何千枚ものカードをカードリーダーに読み込ませるのだが，修論の頃や学会の頃になると，大型計算機センターのカードリーダーの前に長い行列ができる。カード入力が終わったら，計算が終わる頃を見計らって出力ターミナルに行き，出力用紙が自動出力されるのを待つ。カードに 1 枚でも間違いがあったり，並べる順序を間違ったりすると，結果はエラーメッセージのみである。カードを作り直して，再びカードリーダーの前に並ばなければならない。しかも，当時はカオスの研究が主であったから，理論計算などは殆んど不可能で，ストレンジアトラクタなる世の中でもあまり知られていないものの実体を明らか

にすべく，図を描かなければならない。それを描くにも，1 台しかない XY プリンターの前で順番を待ったものである。おかげで修論の終わる頃には，体重が 40 キロ台になってしまった。この頃は主としてローレンツモデルと呼ばれる 3 次元の常微分方程式をルンゲクッタジル法で数値積分していた。

本学に就職した後，カオスの研究の他に人並みにスピン系の研究も始めた。当時は，まだ情報処理センターがなかった頃で，電話回線で京大の大型計算機センターに接続して計算を行なっていた。電話代が何十万にもなり甚だしく予算を圧迫していた。このときは，動的イジングモデルの解析を行なった。ダイナミクスの研究では数値的に微分方程式を解き，平衡状態の解析では，連立の非線形方程式を解いた。後者は，京大の大型計算機センターのプログラムを利用させてもらった。今でもこのプログラムは役に立っている。

1988 年に情報処理センターが設立されたのは画期的であった。これで電話代を気にせずに計算ができるようになった。また，1992 年大型汎用機と呼ばれた，Fujitsu の M770/6 が導入された。この頃に，野倉一男氏 (当時 相模工大，現 湘南工大) とスピングラスの研究も始めた。これは，相互作用がランダムな磁性体で，窓ガラスなどと同様に多数の準安定状態を持つと考えられている。ランダム系においては，レプリカ法と呼ばれる強力な解析手段があり，これを用いると平衡状態の式を導くことができる。ただ，1 ヶ所，実に奇妙な操作を行なう。n 個の全く同じ系を用意して計算し，そのあと，$n \to 0$ (個数が 0) の極限を取る! そのため，この方法は必ずしも万人に受け入れられているわけではない。が，数値シミュレーションと矛盾する結果はこれまで一例もない。

ところで，スピングラスの研究では，このシミュレーションが大きな役割を果たす。これは，例えば N 個のスピンを用意して，個々のスピンの時間変化を実際にコンピュータ上で実現する。スピンの時間変化は確率的な法則に従うので，モンテカルロ法と呼ばれている。このプログラム作成時には，当時，物理学科に所属していた岡本祐幸氏 (現 分子化学研究所) に，彼のプログラムを参考にさせていただき，大変お世話になった。このプログラムはうまくワークし，レプリカ法で導いた非線形連立方程式の解と比較した結果，満足のいく一致をみることができた。

スピングラスのモデルは，実は，ニューラルネットワークのホップフィールドモデルと殆んど同じである。そこで，次に，自然な成り行きでニューラルネットワークの研究を野倉氏と行なった。また，この頃，樺島祥介氏 (現 東工大) が同じ研究グループに赴任したのを契機に，パーセプトロンによる学習の統計力学的解析に取り組んだ。一方，1996 年に，当時としてはかなり珍しいことであったと思うが，1.6 ギガフロップスのベクトル計算機 VX が導入された。この時，わざわざ山口大学から当センターに計算機利用状況を調査に来られた先生方がいたほどであった。早速，レプリカ法で得られた非線形の連立方程式の解を求めてみた。それらの方程式の変数は，それほど多くはなく 4 個程度であった。しかしながら，方程式自体は (多重) 積分が含まれておりかなり複雑であった。問題の種類にも依存するが，もっとも時間がかかった場合では，ワークステーション等による計算だと，あるパラメータで解を 1 個求めるにも数日かかった。ところが，VX を用いると，うまくベクトル化すると何十倍にも計算が速くなり，ベクトル計算機恐るべし，と感激したものである。もちろん，どんな計算でもこのように速くなるわけではなく，逆に遅くなるケースも経験した。

また，この頃，ある4回生の卒研として，頂点が平らな関数 $f(x)$ についてのファイゲンバウム定数の数値計算を課した。ところが，通常のベキ的な収束にならない。計算が間違っているかとも思ったが，収束の様子を $\log$ スケールで図に描いてみると，直線になる! これは，収束が指数的であることを意味する。ということで，理論を構築した。この結果は論文となった。4回生の卒研が論文になったのは，唯一このときのみである。この計算も，ファイゲンバウムと同様，電卓でできる程度のものであった。その後，数学的に厳密な証明も与えた。

1998 年，情報処理センター広報の巻頭言を依頼され，10 年後のセンターの予測を行なった [2]。内容としては，総合情報処理センターになっていて，超高速計算機のサポート以外は，センター業務はネットワーク関係のみになっているだろうというものであった。2003 年 4 月に総合情報処理センターになったため，予測の 1/3 だけは当たった格好である。理由は，主として，CPU の著しい高速化である。昨今では，パソコンが数ギガヘルツの速さとなって殆んどの計算がパソコンでできるようになり，総合情報処理センターができた後も，研究でセンターのお世話になることは殆んどなくなった。

最近 (といっても 2002 年から 2003 年にかけて)，これまでよりも桁違いに長くかかる計算を行なったが，それについて述べよう。レプリカ法については，前に述べたが，これを動的過程に適用した研究があり，動的レプリカ理論 (Dynamical Replica Theory, DRT) と呼ばれている。我々は，ニューラルネットワークにおける記憶の想起過程に DRT を適用する研究を行なった。問題は，DRT によって導かれた 8 変数の連立常微分方程式を解くことである。この方程式を

$$\frac{d\boldsymbol{x}}{dt} = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})$$

と書いたとき，$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})$ を求めるのに，すごく手間がかかる。まず，この系には，$\boldsymbol{x}$ の関数である変数が 14 個有るが，それらは積分を含む非線形連立方程式の解である。しかもその非線形連立方程式には，± 1 の値をとる 13 個の変数についての 2^{13} 個の和が必要である。これらの計算を行なって，$\boldsymbol{x}$ が与えられたときの $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})$ が求まる。この微分方程式をルンゲクッタ法のような精度のよいアルゴリズムで数値計算することは殆んど不可能であり，我々は単なるオイラー差分を用いた。それでも，ある初期条件から出発して収束するまで積分するのにかかる積和の数を見積もると，約 1 兆 (10^{12}) 個必要であった! この計算は，研究室と自分のパソコンで行なったが，Pentium IV 1.8GHz のパソコンで 3ヶ月程度かかった。しかも，何かしらのトラブルは必ず起り，それが原因で計算がストップするため，最後の数値を初期条件として入力して，その続きを計算するという作業を途中，何回か行なった。その結果とシミュレーション結果を比較し，殆んど一致したときには，心底ほっとした。初期条件を変えて計算し，またパラメータも変化させたため，全データが出そろうのに 2 年ほどかかった。最終的に論文になってみると，以上の計算の結果はたった 4 つの図でしかない! しかし，この論文は，投稿して一ヶ月以内に受理され，私にとってこれまでの最速であり，いろんな意味で記録的な研究であった。

現在は，これほど大規模な計算は行なっていない。しかしながら，私は統計力学的手法で理論計算を行なうことが多い。その際，系内の粒子数を N とすると，N を無限に飛ばす極限で理論結果が導かれる。つまり，シミュレーションを行なうにしても，できるだけ

大きな N で計算する宿命を背負っている。従って，できるだけ速い計算機が常に必要なのである。もちろん，有限サイズスケーリングといって，いくつかの有限個の N における結果を用いて，N が無限の極限の値を' 外挿' するという手法をとるので，それほど大きな N をとる必要がない場合もあるのだが。

ところで，私が行なってきた計算の多くは，実はそれほど大規模なものではない。誤解を招かないよう，世の中にはもっと大規模な計算を行なっている研究者が沢山いることをここでことわっておきたい。

さて，私が行なってきた数値計算は，主として，

1. 非線形連立方程式を解く
2. 常微分方程式をルンゲクッタジル法で解く
3. 行列の固有値，固有ベクトルの計算
4. モンテカルロシミュレーション，特に，温度を高温からゆっくり下げて低温での解を得る，シミュレーティド アニー リング

などである。最近は，更に偏微分方程式も取り扱う必要が生じた。これは，全くの素人なので，一から勉強しなければならない。

ところで，自動化ができたらといつも思っているのは，1 である。というのも，初期条件が適切でなければ解が求まらず，また，初期条件を変えると異る解が求まるなど，いろいろあり，さらに，パラメータを変えて解を求めたいので次のようなプログラムができれば最高である。つまり，方程式さえ入力すれば，パラメータを変えて自動的に複数の解を求めてくれるようなプログラム。

謝辞

本学就職以来，情報処理センターには大変お世話になりました。とりわけ，長きに渡って技術専門職員として献身的に働いてこられた高津秀子様には，プログラムの問題やワークステーションなどの様々な機器やソフトウェアーの使用法など，常に親切に教えていただきました。ここに，深く感謝の意を表します。高津様は 2004 年４月に退職されました。長い間，本当に御苦労様でした。また，西岡弘明先生には，プログラムの問題やハードウェアの使用法，物理学科が独自に LAN を引いたときのケアなど，専門的な立場からいろいろ教えていただきました。深く感謝致します。また，情報処理センター設立や維持，機種更新，総合情報処理センターの設立などに貢献された関係者の皆様にも深く感謝致します。

参考文献

[1] ２０世紀の物理学 第 24 章「カオスの物理と計算機」ミッシェル J．ファイゲンバウム 著 上江洌達也 編・訳, 565-600, (全 2576 ページ, 1999, 丸善,「Twentieth Century Physics」, IOP and AIP, London, New York, 1995)

[2] 「情報処理センターの過去，現在そして未来」上江洌達也，奈良女子大学情報処理センター広報第１０号 (1998) １．