

Title	一般化された遷移確率によるシミュレーテッドアニーリング(基研研究会「ニューラルネットワーク～これからの統計力学的アプローチ～」,研究会報告)
Author(s)	西森, 秀稔
Citation	物性研究 (1998), 70(3): 393-394
Issue Date	1998-06-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/96381
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

一般化された遷移確率によるシミュレーテッドアニーリング

東工大理学部 西森 秀稔*

1 最適化問題とシミュレーテッドアニーリング

最適化問題の数値的な一般解法としてシミュレーテッドアニーリングが知られている。Geman-Geman [1] は、最適化問題一般に関して、温度を時間の関数として

$$T(t) \geq \frac{RL}{\log(t+2)} \quad (1)$$

のように下げるならば、十分長い時間の後に系の状態は最適なものに収束することを証明した。ここで、 R は系の大きさ（要素の数）に比例する量、 L は1ステップでの評価関数の変化の最大値である。

2 Tsallis の遷移確率

Tsallis-Stariolo [2] は、遷移確率として、新たに変数 q を導入した量

$$G(x \rightarrow y) = \frac{1}{[1 + (q-1)\Delta E/T]^{1/(q-1)}} \quad (E(y) > E(x) \text{ のとき}) \quad (2)$$

を使うと収束が高速化されると考え、数値計算を行った。彼らの提案に刺激されて、(2) を使ったシミュレーテッドアニーリングの研究が数多くなされ、パラメータ q を適切に取るならば、通常の遷移確率を使うより高速化されることが多いことが確認された [3]。

3 弱いエルゴード性 [4]

私たちは、(2) の遷移確率を使ったシミュレーテッドアニーリングはアニーリングスケジュールを

$$T(t) \geq \frac{a}{(t+1)^c} \quad (3)$$

と選べば、 $q > 1$ の場合、弱いエルゴード性の意味で収束することを証明した。最適状態への収束証明には至らなかったが、弱いエルゴード性は確率分布に漸近的に初期条件依存性がないことを保証するという意味で、初期条件に依存して局所的な最小値に陥ることはないことが明らかになった。ただし、この結果はシミュレーテッドアニーリングが高速化されることを保証するものでは必ずしもない。

4 1次元系 [4]

(2) の遷移確率によりシミュレーテッドアニーリングが高速化されることを解析的に確かめるため、篠本と樺島 [5] によって提案された1次元の放物ポテンシャル上の粒子の拡散の問題を解いた。その結果、通常

*共同研究者：井上純一、門脇正史

のボルツマン因子を使った場合には、温度とエネルギー期待値がいずれも時間の対数に比例して低下するのが最適解であるのに比べて、時間の逆数で下がっていく解が存在することを見出した。

さらに、この高速収束は (2) の遷移確率に特異的なものではなく、遷移確率が温度の漸近値付近で微分可能であるような任意関数の場合にも成立することを示した。

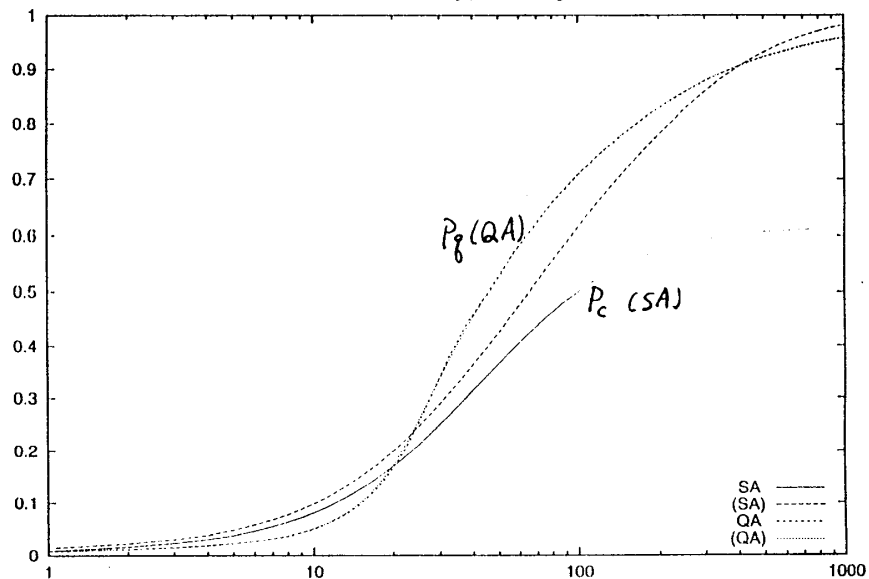
5 量子アニーリング

状態間の遷移を、熱揺らぎではなく量子揺らぎで生起させることにより最適状態へ高速に収束させることが出来れば興味深い。私たちは、横磁場イジング模型

$$H = -\sum J_{ij}\sigma_i^z\sigma_j^z - \Gamma(t)\sum\sigma_i^x \quad (4)$$

で横磁場 $\Gamma(t)$ を無限大から0に落としていったときに、系の状態が $\Gamma = 0$ での最適状態(基底状態 ψ_0)にどれだけ近いか $P_q = |\langle\psi_0|\psi(t)\rangle|^2$ を、時間依存のシュレディンガー方程式を直接数値的に解くことにより調べた。その結果を、通常の熱揺らぎによるシミュレーテッドアニーリングと比較するために、上のハミルトニアンで Γ の項がないものについてマスター方程式を直接数値的に解いて、各時刻で基底状態にどれだけ存在確率があるか P_c を求めた。その際、温度は量子アニーリングと同じスケジュールで低下させた($T(t) = \Gamma(t)$)。

計算結果の一例を下の図に示す。 $N = 8$ のSK模型で $T(t) = \Gamma(t) = 1/\sqrt{t}$ と選んだときの P_q (QAの線)と P_c (SAの線)を時間の関数として描いたものである。SAでは局所的な最小値に陥っているのに対し、QAでは望ましい状態に漸近している様子が見られる。これは、私たちが調べた系について一般的な傾向であった。したがって、量子アニーリングが有効な例がある事が分かった。



参考文献

- [1] S. Geman and D. Geman, IEEE Trans. PAMI 6 721 (1984)
- [2] C. Tsallis and D.A. Stariolo, Physica A233 395 (1996)
- [3] <http://tsallis.cat.cbpf.br/biblio.htm>
- [4] H. Nishimori and J. Inoue, cond-mat/9801206
- [5] S. Shinomoto and Y. Kabashima, J. Phys. A24 L141 (1991)