

8. シミュレーテッドアニーリングにおけるエネルギーの 時間スケールリング

樺 島 祥 介

シミュレーテッドアニーリング法とは物理系とのアナロジーを利用した組合せ最適化問題の近似解法である。与えられた問題に対し、その目的関数をハミルトニアン $E(s)$ とする仮想的な物理系を考える。一般にこのような系には多数の局所的最小状態が存在する。したがって低エネルギー状態を求めるために単純な最急降下法を適用してもすぐに状態は局所的最小に捕まってしまうエネルギーを効果的に下げることは困難である。シミュレーテッドアニーリング法ではこの困難を克服するために高いエネルギー状態への確率的な遷移を導入する。

エネルギーの降下と局所的最小からの脱出という二つの要請を満たすために通常メトロポリス法が用いられる。このダイナミクスの下で同一体系のアンサンブルを考えると状態 s の分布はボルツマン分布

$$P(s) \propto e^{-E(s)/T} \quad (1)$$

に緩和する。この分布では低温であるほど低エネルギー状態をとる確率は高くなるが、一般に (1) への緩和時間は低温になるほど急激に増大する。そこで無駄な探索を極力減らすため、普通高温で大規模な探索をした後ゆっくりと温度を下げていく“アニーリング”という方策がとられる。

最終的に得られるエネルギー ε はアニーリングに要した時間 τ が長いほど低くなると期待される。多くの数値実験もその傾向を示しているが、定量的な議論はあまり行われていない。本研究では、以下の2つの特徴的なエネルギー眺望を持つ系でのアニーリングを考察することにより ε の τ に対する依存性を調べた。

1. Wiggly parabola potential

きわめて多数の局所的最小を持つ系の中にもそのエネルギー眺望が巨視的にある種の連続性を持つと期待できるものがある。そのような系を想定し図1のようなエネルギー眺望を持つ系を考える。シミュレーテッドアニーリングは温度によって遷移確率が変化するこのエネルギー眺望の上でのランダムウォークであると考えることが出来る。この過程を独立な点のアンサンブルを用いて統計的に取り扱う。分布関数 P の時間発展は粗視化を行うことによってフォッカープランク方程式に

より記述できる。この方程式から導かれる平均エネルギーの発展方程式を解析することにより

$$\varepsilon(\tau) \propto 1/\ln \tau \quad (2)$$

というスケーリングを得た。また、このスケーリングはアニーリングスケジュールにはあまり依存しないことも分かった。

2. White noise potential

Wiggly parabola potential において我々はエネルギー眺望に巨視的な連続性を期待した。その対照例としてエネルギー眺望がいかなる連続性も持たない系を考えることが出来る。その様な場合を想定し図2のようなエネルギー眺望を持つ系でのアニーリングプロセスを取り扱った。解析的な結果は得られてはいないが、数値実験による結果はスケーリング(2)に矛盾するものではない。

主な参考文献

Kirkpatrick S, Glett CD and Vecchi MP, Science 220 (1983) 671.

Huse DA and Fisher DS, Phys. Rev. Lett. 57 (1986) 2203.

Shinomoto S and Kabashima Y, J. Phys A to be published.

