

最適化問題の1考察: 高次元化と自律運動

新上 和正 (ATR 光電波通信通信研究所)[†]佐々田 友平 (湘南工科大学)^{††}

最適化問題と意味変数に余分な変数を加えた高次元空間で構成することにより得られる自律運動を議論する。また, NP 完全性問題との関連を議論する。

§1. 始めに

一見最適化問題に帰着されるように見えながらそうではない問題がある。例えば, 物質 (システム) 設計は, ある所望の性質を最大にする物質 (材料ではない; 既に機能という性質を含んでいる) を得るための考えと方法を与えることであるが, 「ある所望の性質を最大にする」というところは確かに通常の最適化問題となる。しかし, この問題で更に肝心なことは最適化問題に対する物質変数の取り得る領域を, 実際に合成出来るか自然に存在する物質であるかなどを振り所として確定することにある。従ってより一般的に「最適化問題を解く」とは解を求めることと定義域を確定することを共に考えなければならない。^{注1}

この報告書の内容は, モデルは自然により模倣され得るのか (普通ならモデルが自然を模倣すると

^{注1} 最適解が一意的に存在するのではなく屢々「より効率的」にするためには物質変数をどう動かせばよいかを決めることが可能となるのみである。¹⁾ これらの問題では (最大化させる) コスト関数は二種類の変数 x_i, y_j ($i=1, \dots, m; j=1, \dots, n$) を使って (Cartan 分解に類似して形式で)

$$\gamma(x_i, y_j) = \gamma^{\dagger}(x_i) \Psi_{\{x_i\}}(y_j) \quad (\Psi_{\{x_i\}}(y_j) \leq 1) \quad (t1)$$

と分解される。但し $\Psi_{\{x_i\}}(y_j)$ は x_i をパラメタに y_j を変数とする関数である。 y_j は x_i に依存した値 $y_j^*(x_i)$ を取る時 $\Psi_{\{x_i\}}(y_j)=1$ となる。この式から不等式

$$\gamma(x_i, y_j) \leq \gamma^{\dagger}(x_i) \quad (t2)$$

を得る。上記の分解は $\Psi_{\{x_i\}}(y_j)$ は y_j がどんな値を取ろうが $\gamma(x_i, y_j)$ の最大値 (最小値) は $\gamma^{\dagger}(x_i)$ と x_i のみで決まることを言っている。上の分解式は式の存在についてであり, 具体的な分解手続きを与えているのではない。また分解の仕方は $m=0$ 又は $n=0$ 以外の場合には一意的に決まらない。

Operations research (OR) のテキストでは専ら定義域は予め与えられたものとしている通常の最適化問題であり最適解が一意的に存在する。この最適化問題は $\Psi_{\{x_i\}}(y_j)=1$ となる y_j を求めることに対応する。(この際 $m=0$ であり x_i なる変数は現れない) 従って, 分解式は最適化問題を解くことより寧ろ二つのクラスの変数に分類される場合に意味が出てくる。効率的に変数を動かすかを定める指針は, 変数 x_i に対しては $\gamma^{\dagger}(x_i)$ を増大させるように, また変数 y_j に対しては $\Psi_{\{x_i\}}(y_j)=1$ になるように, つまり y_j を $y_j^*(x_i)$ に近付ける ことになる。OR でも定義域自身が問題となる問題群が幾らでもあるように思える。

るであろうが)? 或は, 自然は NP 完全問題を解き得るか? という期待と高次元系の運動の理解とクロスした領域での研究の一部である。

ある (特に yes-no で答えられる) 問題が NP 完全²⁾ であるとは (1) NP 問題である - 非決定性計算モデルで多項式時間計算量で解ける, (2) 全 NP 問題からその問題に多項式時間内で還元可能な写像 / アルゴリズムが存在するような問題である。この際重要なことは 全ての問題 (各問題を構成する例題の全部) が対象としている問題 (例題の集合) の上に多対1または1対1で写像されることである。つまり, 対象とする問題が多項式時間還元可能という条件の下で全ての NP 問題の例題を含むような「より広い」問題であるなら NP 完全である。 全て (V) という意味はあるパラメタ値を持つ問題のある (V) 例題が偶々解くことが出来たからと言って NP 完全問題が解けたことにはならないということを含んでいる。最初の NP 完全な問題は充足可能性問題である (Cook の定理)。³⁾ 証明のエッセンスは多項式時間計算量で任意の問題を非決定性チューリング機械で受理する動き (内部状態とテープ上の空白を除く記号列の時間変化) をある型のブール代数式で (模倣する) 書けることである。(そのブール代数式は充足可能性問題の部分集合を構成し, 多対1になっている)

§2. 結晶化機械

自然現象である結晶化とは相互作用する多数の粒子は相互作用エネルギーを最小にする (と思える) 配置に収斂して行くことである。「結晶配置に比べより低い相互作用エネルギーを持つ他の構造配置があるかどうか」という問題が (1) NP 問題であることを示すことは容易である。(2) 既知の NP 完全問題がこの問題の 上に 多項式時間計算量でチューリング機械によって受理される決定性アルゴリズムがあるかどうかかが問題となる。この問題に関して二体力で相互作用する原子系の相互作用エネルギー

$$V_n = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^n v(\vec{q}_i - \vec{q}_j) \quad (1)$$

を最低にする配置を決めることが NP 困難であることが既に証明⁴⁾ されている (NP 困難とは yes-no 問題の NP 完全性の最適化問題版をいう, また, $v(q)$ の形に少し制限があるのが気になるが)。原子の位置は digit 値のみを取ると仮定した場合の簡単な証明の骨子はグラフ $G=(V, E)$ の頂点, 頂点間を結ぶ各辺に重み $w(e)$ ($\forall e \in E$) を与えると上記の問題は

$$\frac{1}{2} \sum_{e=(i,j)} w(e) = \text{minimal} \quad (2)$$

にするような n 個の点を多数のメッシュ点上に分配するという既知の NP 困難な問題と等価になるということである。より一般的な問題は TS (Travelling salesman) 問題の特殊ケースとして書けることを利用して証明される。

にも拘らず結晶配置は最低のエネルギーを与えるものであると考えられている。もしそうであるなら、この結晶化機械はこの種の最適化問題を解く上で驚くべき能力を持っていることになる。初期配置から結晶配置までの最短距離は $c_1\sqrt{n}$ (n : 粒子総数) である。また、異なる配置の総数は $c_2 2^{\beta n}$ である。結晶化が終了するまでの時間を t_c をすれば、その間に初期配置が変化する距離はノーマル拡散の場合には $d(t) = c_3\sqrt{nt_c}$ となるので次の不等式が得られる:

$$c_1\sqrt{n} \leq d(t_c) \left(= c_3\sqrt{nt_c} \right) \leq c_2 2^{\beta n} \quad (3)$$

(c_1, c_2, c_3, β : n に依存しない定数)。左側の不等式の等式は結晶化が最短時間で終了する場合に成立する。ま

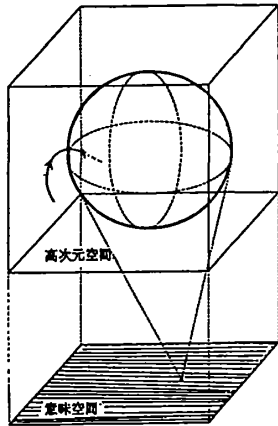


図 1. 高次元化と意味空間

た右側の不等式の等式は粒子配置が初期配置から出発して全ての粒子配置を経るような最悪の場合に成立する。結晶化が NP 問題であることは初期配置から結晶配置までの最短距離は $c_1\sqrt{n}$ と n の多項式で表される事実と関連している。また、NP 完全であろうことは不等式の右側の最悪の場合に $t_c = c_2 2^{\beta n} / (c_3\sqrt{n})$ となることに関係している (NP 問題を決定性チューリング機械で解けば exhaustive search を反映して $2^{p(n)}$ 時間要する ($p(n)$: n の多項式) ことを思い浮かべよ)。結晶化が n に依存しないで有限時間内で終わるということは上記の不等式でいえば左側の不等式を使っていることになる。 $d(t)$ の n 依存性と最短距離の n 依存性が異なるなら、例えば仮に $d(t) = c_3 n^\delta$ ($\delta < 1/2$) であるなら大きな n に対する系では結晶化は起こらない筈である。逆に $\delta = 1/2$ であることは結晶化がほぼ最短距離上を走ることによって起こっていることを意味する。結晶化は不要な粒子配置をスキップする自律運動の機構、即ち、非決定性チューリング機械の各計算ステップで最も効率的な動作の選

注2 この時間評価は粒子配置が初期配置から出発して全ての粒子配置を順番に巡るような最悪の場合に成立する。各粒子が各々 '独立に' 動くような場合には単位時間当たり n の配置数を巡る。このとき全ての配置を巡る時間は $t_c = c_2 2^{\beta n} / (c_4 n)$ で与えられる。この時間は (3) の右側の等号から来る時間より短くなる。

択に相当する '見えざる switching' を行う機構 - これが §3 の運動の強度の内容である - が内在されていることになる (これはソフト・レベルで対応可能である)。どれ程結晶性が完全かという確認は実験的にはポジトロンを使って行うことが出来て欠陥の存在確率は精度的には $10^{-4}\%$ 程度以下で確認されているようである。結晶化機械のこの驚くべき能力は、この報告書の副題である '高次元化と自律運動' に関係している。

最適化問題では意味空間に於けるメジャー・ゼロの集合の扱いが重要となる。⁵⁾ 結晶化はエネルギーを与える粒子配置に対応する意味変数の他に運動量変数を加えて、高次元化された相空間での運動である。一般的には (neural nets でも可能だろう) 意味変数の他に余分な変数が加わることによって、意味変数空間で '解' に相当する領域は非常に小さい (大きければ話が簡単である) にも拘わらず高次元空間では '解' に相当する体積を非常に大きくなる。つまり、意味空間での領域は非常に微細であるにも拘わらず運動量空間で体積が非常に拡大することによって結晶化機械の能力が際立ったものとなっている (図 1)。逆に運動量空間が収縮していて意味空間が拡大されている場合が粒子ガラスに対応している。この様子は屡々不可逆性の例として持ち出される「箱の左半分」に閉じ込められていた初期粒子配置が時間の経過により箱全体に一樣分布するように拡散して行く」という言葉に即して言えば (初めと終りでミクロ状態数の比率は $1:2^n$ となる)、結晶化は箱全体で一樣分布な粒子配置から箱の左半分のみ分布する初期状態に収束することに例えられる (エントロピー増大の法則は破れている訳ではない)。意味空間で $O(2^{-p(n)})$ ($p(n)$: n の多項式関数) なるサイズの領域が高次元空間で $O(q(n)^{-1})$ ($q(n)$: n の多項式関数) のサイズになるならば NP 完全な問題は高次元空間に埋め込まれたときクラス P となると思われる。これはボール (= 質点) を壁の幅が 2^{-n} (n : 壁を含む全体の系のサイズ) で薄くなる壁の高さをすれすれに投げてことによって壁の位置を計算する問題で現れてくる (しかし、この場合にはチューリング機械や T3D MC や VPP500 などの通常の計算機で動くソフトプログラムでは計算出来ないのだが)。自然現象ではそのハードウェアは相当に制限を受けておりその制限の下で例題を解いていることになる。従ってその programability (或はその architecture) を確保することが重要となる。NP 完全性は例題全てという全称記号 $\forall$ で結ばれた凄さでもある。

§3. 運動の強度⁶⁾

(この節の内容については研究会 '多自由度力学系と幾何学化' の報告に詳しく書く予定なのでそちらを見て下さい。以下は要点のみ) 意味空間で眺めた運動に関する測度を考えてみよう。運動の再帰時間は大雑把に $t_r \approx c_2 2^{\beta n} / (c_4 n)$ となる。系を観測する時間 t_o が $t_r \ll t_o$ を満たすなら不変測度を考えることが可能となる: ミクロカノニカルの場合に意味変数区間 $(q_i, q_i + \Delta q_i)$ での分布関数 (滞在時間に比例) は (mixing を前提とすると)

$$\Omega_q \approx (\epsilon - V[q_i])^{\frac{n}{2}-1} \Pi_i^n \Delta q_i \quad (4)$$

となる。 ϵ は全エネルギー、 $V[q_i]$ は意味変数 q_i を変数とするコスト関数とする。 $V[q_i]$ から $(V[q_i]-\Delta)$ に進む運動では前後での分布関数比

$$\gamma = (1 + \frac{\Delta}{\epsilon - V[q_i]})^{\frac{n}{2}-1} \quad (5)$$

となり $V[q_i]$ が低くなる方が滞在時間が長くなる。

しかし、系の次元数が非常に大きい時には再起時間 t_r は大きくなり $t_0 \ll t_r$ となる。この時 ($t \leq t_r$ の運動では) (4) が成立するとは期待されない。しかし、(4) は運動量空間での mixing が完了する時間 τ_p に比べ意味空間で有意な $V[q_i]$ の変化を与える時間 τ_q に比べ $\tau_p \leq \tau_q$ であるなら (4) で表されているように運動量空間に関して測度の push forward が起こる。このような測度の push forward/pull back とそれが運動自身に跳ね返ることに関係する概念として運動の強度⁷⁾という言葉を導入する。その度合い σ は

$$\begin{aligned} \sigma &= \tau_p / \tau_q \\ &= \frac{c(\epsilon_k)}{2\lambda(\epsilon_k)} \ln \left(\frac{4\epsilon_k/3}{\Delta \bar{p}^2} \right) \end{aligned} \quad (6)$$

で表される ($\lambda(\epsilon_k)$: リアプノフ数; ϵ_k : 粒子平均の運動エネルギー; $c(\epsilon_k)$: 単位時間当り一粒子が有意な $V[q_i]$ の変化する回数), $\sigma < 1$ で運動量空間での mixing が速く起こり (5) で与えられる γ が 1 以上になる方向 ($V[q_i]$ を下げる方向に) に運動が進む。一方 $\sigma > 1$ なら (4)(5) が意味を失うために $V[q_i]$ の構造を反映しない運動となる。最適化問題では σ を外部から操作することに図 1 のような特に高次元な空間での構造を生成したり消去することが出来る。

§4. 最適化の 1 方法⁸⁾

n 個の変数を含み、これらの変数値の解としての適合性を評価する評価関数を設定できる最適化問題に対して、 n 個の変数と更に付加した変数が張る高次元化された空間で力学系を構成することによって解を求めることが出来る。即ち、この高次元空間に於ける (運動) 点が評価関数を最大又は最小にする方向に向い易く、そうでない方向には向い難いような偏りを持つ自律的な運動を行うこと (§3 参照) を利用して、評価関数の最大又は最小問題を解くことが出来る。このような方法を種々の最適化問題、例えば光ファイバーなどの光軸合わせ、位置決め、ビーム、映像などのトラッキング、半導体集積回路、電話回線網などの設計建築、トラヒックのスケジューリング、通信ネットワークのルーチング、種々の機械或いはその集合の分散制御、線形及び非線形計画法、ゲームの自動解法、画像の復元などに適用される。

設定された問題の解は評価関数或いは出力信号を最小又は最大にすることで得られる。例えば、光ファイバーの軸合わせ問題は、一対の向かい合った光ファイバーの一つを左右に動かすことによって光出力が最大にすることである。この場合、左右の変化に対し光出力を極大にする位置 (以下安定点と呼ぶ) は一つとは限らなく一般に多重になる場合がある。多重安定点を有する場合、従来方法 (最急勾配降下法など) に

は、探索のための出発位置に最も近い安定点のみ探し出し光出力を最大にするとは限らない多重安定点の出現という難点があった。また、確実に安定点を探すためには左右の位置変化を同時に行なうことが出来ない (並列処理できない) 難点があった。又、多芯光ファイバーの同時軸合わせ実行終了時間は、単芯の場合に比して速く出来ない問題があった。又、最適化問題の中には一般に多重安定点を持つために、ニューラルネットワークなどを用いた従来法では、最急勾配降下法と同様の (並列処理に向かない、一つの安定点に引っかかったままの) 難点があった。又、遺伝子突然変位・進化法則を真似た (遺伝子アルゴリズムなど) アルゴリズム、統計力学 (確率過程を含む) に基づくモンテカルロ法やシミュレーテッドアニーリング法、active/passive 制御などの従来アルゴリズムは最適化問題を解く上で同様の難点があった。これから述べる方法は (1) 並列処理に向かない、(2) 評価関数の変数の数の増大による計算量の大幅な増大、(3) 解くために必要なパラメータの注意深い選択 (elaborately tuning)、(4) 多重安定点の一つに引っかかる、などの難点を解決するであろう。

従来では探索点位置の変化による評価関数値を評価した後に探索点の位置変化させるのに対して、この方法は、評価関数値の変化を探索点の運動として内部表現化することで実行する。この手段により探索のための出発点が評価関数を最大又は最小にするように向かおうとする自律的運動を構成し、従来方法の難点を解決する。

評価関数を $V(q_1, q_2, \dots, q_n)$ (以下簡単に $V[q_i]$ で表わす) と表わす。ここで q_i は評価関数を指定する意味変数で n は意味変数の個数である。評価関数 $V[q_i]$ を最小にする意味変数を $q_1^0, q_2^0, \dots, q_n^0$ (以下簡単に $\{q_i^0\}$ で表わす) とする。以下、一般性を失うことなしに最小にする場合のみを考えてよい。何故なら、最大にする意味変数を求める場合には評価関数を $-V[q_i]$ と取ることにより最小にする問題に帰着されるからである。評価関数を定義する n 個の変数の他に余分な変数を付加した高次元空間で力学系を構成し、高次元空間での探索のための出発点が評価関数を最大又は最小にする方向に向い易く、(評価関数を最大又は最小にしないような) 他の方向には向い難いような高次元空間での探索点の運動に偏りを持つような自律的運動を構成する方法は、力学系がハミルトン関数を持つか又は持たないクラスの力学系の場合でも行なうことが出来る。ここではハミルトン関数を持つ力学系での方法を述べる。意味変数 q_i に正準共役な変数 p_i を導入して運動を指定する力学系のハミルトン関数を

$$\begin{aligned} H[p_i, q_i] &= \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n a_{ij} (p_i + \int_0^t g_i(t') dt') \\ &\quad \times (p_j + \int_0^t g_j(t') dt') + V[q_i] \end{aligned} \quad (7)$$

と設定する。 $g_i(t)$ は問題に依って設定される。例えば、 $g_i(t) = -\lambda(t) dq_i/dt$ ($\lambda(t)$ はパラメータである。) また、 a_{ij} は自律的運動を導入するための行列である。

自律的運動は、正準方程式

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H[p_m, q_m]}{\partial p_i} = \sum_{j=1}^n a_{ij}(p_j + \int_0^t g_j(t') dt'), \quad (8a)$$

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H[p_m, q_m]}{\partial q_i} = -\frac{\partial V[q_m]}{\partial q_i} \quad (8b)$$

を解くことにより得られる。全エネルギー変化は、

$$\begin{aligned} \frac{dH[p_i, q_i]}{dt} &= g_i(t) \sum_{j=1}^n a_{ij}(p_j + \int_0^t g_j(t') dt') \\ &= -\lambda(t) \sum_i^n \left(\frac{dq_i}{dt} \right)^2. \end{aligned} \quad (9)$$

$\lambda(t)$ は全エネルギーの値を増減させ、運動するエネルギー面を変化させる役割を持っている。このために $\lambda(t)$ は自律的運動を形成する領域を制御するパラメーターである。

特に $\lambda(t)=0$ の時、各意味変数 q_i が区間 $(q_i, q_i + \Delta q_i)$ に存在する時間分布 $\tau[q_i]$ は意味変数を除いた変数 p_i について積分和を取ることににより、即ち、

$$\begin{aligned} \tau[q_i] &= \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^n dp_i \prod_{i=1}^n \Delta q_i \delta(\epsilon - H[p_i, q_i]) \\ &\propto (\epsilon - V[q_i])^{n/2-1} \prod_{i=1}^n \Delta q_i \end{aligned} \quad (10)$$

で与えられる。ここで ϵ は評価関数 $H[p_i, q_i]$ の値を与える。 $n \geq 3$ で $\tau[q_i]$ が評価関数を最小とする q_i^0 で最大となる。このため評価関数を最小にするように向かおうとする自律的運動が生成される。つまり、時間分布 $\tau[q_i]$ は評価関数 $V[q_i]$ をより最小とする q_i でより大きくなるためである。しかし、 $\tau[q_i]$ が式 (10) のように表わされる場合は、任意の運動に対してではなく運動が混合性 (mixing property) を持つ場合に限る。従って、行列 a_{ij} は混合性を運動に導入するためのパラメーターの役割をする。また、意味変数の個数 n (≥ 3) が増大すればするほど、時間分布 $\tau[q_i]$ は評価関数 $V[q_i]$ をより最小とする q_i で大きくなる。このために上記の方法は、 n の大きいほど有効となる。この自律的運動の形成により、並列処理に向かない、評価

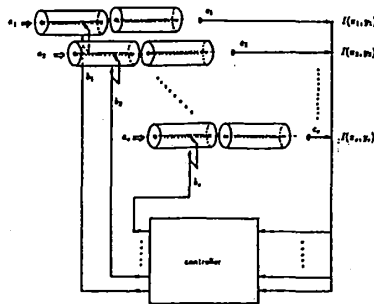


図2. ファイバーアライメント

関数の変数の数の増大による計算量の大幅な増大、解くために必要なパラメーターの注意深い選択 (elaborately tuning)、多重安定点の一つに引っかかる、などが克服される。

[例1] ファイバーアライメント

向かい合った s 組のファイバーを一度に最も光を通過するようにファイバーのアライメント (位置合わせ) を行なう。(図2) この問題では、一組ずつの向かい合った二つのファイバーの一方を固定し他のファイバーの位置 (x_i, y_i) ($i=1, 2, 3, \dots, s$) を動かす。固定したファイバー側から光を入力し他方のファイバー側から出力光の強度を測定し位置 (x_i, y_i) を動かすことによって出力光の強度を最大にするように位置を決めることになる。この問題の意味変数の個数は $n=2s$ である。 i 番目の出力光はファイバーの位置 (x_i, y_i) に依存するので出力光は (x_i, y_i) の関数となるので以下では $I(x_i, y_i)$ で表わす。上の方法を適用するには、評価関数 $V(x_1, y_1, x_2, y_2, \dots, x_s, y_s)$ (以下簡単に $V[x_i, y_i]$ で表わす) を

$$V[x_i, y_i] = -\sum_{i=1}^s I(x_i, y_i) \quad (11)$$

ととる。各ファイバーの出力光の強度を最大とする位置 (x_i, y_i) を求める問題は評価関数を最小とする位置を求める問題に帰着される。ハミルトン関数を

$$\begin{aligned} H[p_i^x, p_i^y; x_i, y_i] &= \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^s a_{ij}^{xx} [p_i^x + \int_0^t g_i^x(t') dt'] [p_j^x + \int_0^t g_j^x(t') dt'] \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^s a_{ij}^{xy} [p_i^x + \int_0^t g_i^x(t') dt'] [p_j^y + \int_0^t g_j^y(t') dt'] \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^s a_{ij}^{yy} [p_i^y + \int_0^t g_i^y(t') dt'] [p_j^y + \int_0^t g_j^y(t') dt'] \\ &+ V[x_i, y_i] \end{aligned} \quad (12)$$

ととる。正準方程式は

$$\begin{aligned} \frac{dx_i}{dt} &= \sum_{j=1}^s a_{ij}^{xx} [p_j^x + \int_0^t g_j^x(t') dt'] + a_{ij}^{xy} [p_j^y \\ &+ \int_0^t g_j^y(t') dt'], \end{aligned} \quad (13a)$$

$$\begin{aligned} \frac{dy_i}{dt} &= \sum_{j=1}^s a_{ij}^{yx} [p_j^x + \int_0^t g_j^x(t') dt'] + a_{ij}^{yy} [p_j^y \\ &+ \int_0^t g_j^y(t') dt'], \end{aligned} \quad (13b)$$

$$\frac{dp_i^x}{dt} = -\frac{\partial V[x_m, y_m]}{\partial x_i} = f_i^x, \quad (13c)$$

$$\frac{dp_i^y}{dt} = -\frac{\partial V[x_m, y_m]}{\partial y_i} = f_i^y. \quad (13d)$$

計算と測定の手続きは、($i=1,2,\dots,s$)

- 1) 時刻 t と $t+\Delta$ での適当な初期値 $\{x_i(t), y_i(t)\}$, $\{x_i(t+\Delta), y_i(t+\Delta)\}$ を適当に与える,
 - 2) 出力光 $I(x_i(t+\Delta), y_i(t+\Delta))$ の測定,
 - 3) $x_i(t+\Delta)$ を $x_i(t+\Delta)+\Delta_x$ に移動,
 - 4) 出力光 $I(x_i(t+\Delta)+\Delta_x, y_i)$ の測定,
 - 5) $x_i(t+\Delta)+\Delta_x$ を $x_i(t+\Delta)$ に移動,
 - 6) $y_i(t+\Delta)$ を $y_i(t+\Delta)+\Delta_y$ に移動,
 - 7) 出力光 $I(x_i(t+\Delta), y_i(t+\Delta)+\Delta_y)$ の測定,
 - 8) $f_i^x = [I(x_i(t+\Delta)+\Delta_x, y_i(t+\Delta)) - I(x_i(t+\Delta), y_i(t+\Delta))] / \Delta_x$ の計算,
 - 9) $f_i^y = [I(x_i(t+\Delta), y_i(t+\Delta)+\Delta_y) - I(x_i(t+\Delta), y_i(t+\Delta))] / \Delta_y$ の計算,
 - 10) 式 (9) を使って, $\{x_i(t+2\Delta), y_i(t+2\Delta)\}$ を計算する,
 - 11) $\{x_i(t+\Delta), y_i(t+\Delta)\}$ を $\{x_i(t), y_i(t)\}$ に代入,
 - 12) $\{x_i(t+2\Delta), y_i(t+2\Delta)\}$ を $\{x_i(t+\Delta), y_i(t+\Delta)\}$ に代入する,
 - 13) 次に 1) に戻って 1) から 12) までの手続きを繰り返す.
- 8)-12) までは計算機上でやり、また、1)-7) は実際に光ファイバーを移動し出力光の強度を測定する。計算: ここでは装置を具体的に組むことなしに、計算で 1)-12) までは行ないその方法の有効性を確認する。

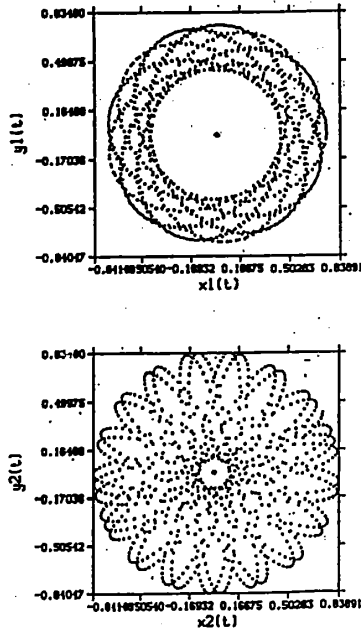


図3. ファイバー位置の軌跡

出力光 $I(x_i, y_i)$ を

$$I(x_i, y_i) = \exp[-2(x_i^2 + y_i^2)] \quad (14)$$

と仮定する。(出力光を最大にするファイバーの位置は $\{x_i^0=0, y_i^0=0\}$ である。) ハミルトン関数は

$$H[p_i^x, p_i^y; x_i, y_i] =$$

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^s a_{ij}^{\alpha\beta} (p_i^\alpha + \int_0^t g_i^\alpha(t') dt') (p_j^\beta + \int_0^t g_j^\beta(t') dt') - \sum_i^s e^{-2(x_i^2 + y_i^2)} \quad (15)$$

となる。但し、 $g_i^\alpha(t) = -\lambda(t) d\alpha_i/dt$ ($\alpha, \beta = x$ または y .) $a_{ij}^{\alpha\beta}$ は運動に混合性を持つように導入された行列である。

自律運動を生じない場合: 図3は $a_{ij}^{\alpha\beta}$ ($\alpha, \beta = x, y$) は $\alpha = \beta, i = j$ で $a_{ij}^{\alpha\beta} = 1$, それ以外は $a_{ij}^{\alpha\beta} = 0$, また、 $\lambda = 0$ の場合での 100 組のファイバーつまり $n=200$ の場合の一組目と二組目のファイバーの時間に関する位置 $(x_1(t), y_1(t))$ と $(x_2(t), y_2(t))$ の変化の軌跡を示している。この場合のハミルトン関数は

$$H[p_i^x, p_i^y; x_i, y_i] = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^s (p_i^{x2} + p_i^{y2} - e^{-2(x_i^2 + y_i^2)}) \quad (16)$$

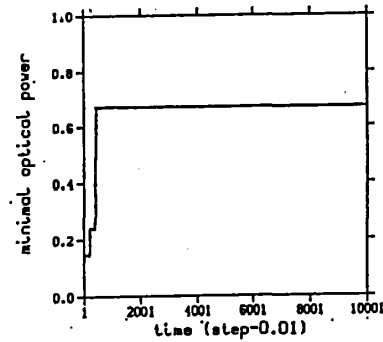


図4. 最も低いファイバーの光出力

となり、各々のファイバーは全く独立に運動する。また、この場合は混合性を持たない運動となり式 (11) で与えられる評価関数を最小とする方向に進む自律的運動を有しない。このことは図のファイバー位置が出力光を最大にする原点に近付くことが無いことからわかる。また、各ファイバーについて出力光を最大にした位置 (x_i, y_i) のうち最も低い強度の出力光、つまり、運動で各ファイバーは位置を変えるが最も原点に近寄った時の位置を記録して置き、全ファイバーで記録した位置の中で最も原点から遠い位置を時間の関数としてプロットしたのが図4である。図4ではその位置を最大となる出力光の強度に換算した値を与えてある。この図から、運動は光出力を最大とする位置に近付けないことを示している。

自律運動を生じる場合: 図5は、ランダムな値を持つ $a_{ij}^{\alpha\beta}$ ($\alpha, \beta = x, y$) と $\lambda = 0$ の場合での 100 組のファイバーつまり $n=200$ の場合の一組目と二組目のファイバーの時間に関する位置 $(x_1(t), y_1(t))$ と $(x_2(t), y_2(t))$ の変化の軌跡を示している。各ファイバーは独立でなくなり混合性を持つ運動となる。この時、意味変数の時間分布は式 (10) で与えられる。即ち、出力光の強度

を最大にする自律的運動を生じる。図6は出力光を最大にする原点に集中して分布することを示してい

化を示している。混合性を持つ運動である。図8で分かるように、初めの $0 \leq t < 300$ で $\lambda=2.5$ と式(10)からハミルトン関数の値が減少し探索する意味空間の

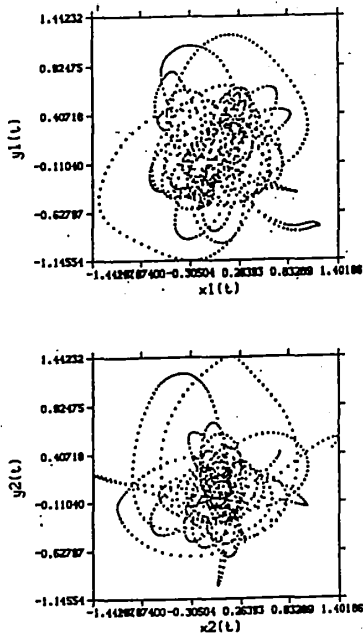


図5. ファイバー位置の軌跡

る。図4と類似な図6は、全ファイバーで記録した位置の中で最も原点から遠い位置(最大となる出力光の強度に換算して)は時間の増大と共に大きくなり約 $8000 < t$ で最大の1になっていることが分かる。図4と図6を比較すると自律的運動が生成されるかどうかの問題を解く上で決定的役割を演じていることを示している。自律運動は、評価関数を最小にする方向に進むという利点の代わりに、一方で、($\lambda=0$ の場合には)運動する領域が広がるという欠点がある。このことは、図3と図5の横軸と縦軸の範囲を比較すれば分かる。この欠点を解消するために、 λ を導入し運動する領域の範囲を制御する。

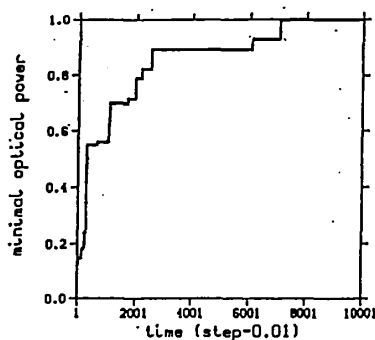


図6. 最も低いファイバーの光出力

図7は、図5と同様にランダムな値を持つ $a_{ij}^{\alpha\beta}$ ($\alpha, \beta=x, y$)と $\lambda=2.5$ の場合の100組のファイバーつまり $n=200$ の場合の一組目と二組目のファイバーの時間に関する位置 $(x_1(t), y_1(t))$ と $(x_2(t), y_2(t))$ の変

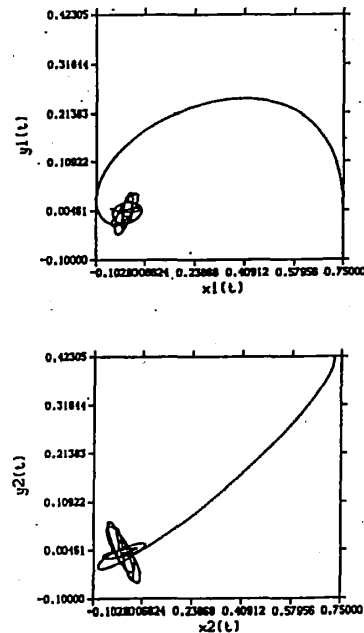


図7. ファイバー位置の軌跡

領域が狭くなる。図8は全ファイバーで記録した位置の中で最も原点から遠い位置(最大となる出力光の強度に換算して)は時間の増大と共に大きくなり約 $300 < t$ の短時間の内に最大の1になっていることが分かる。図5と図7を比較すると、ハミルトン関数の値が減少し探索する意味空間の領域が狭窄する効果

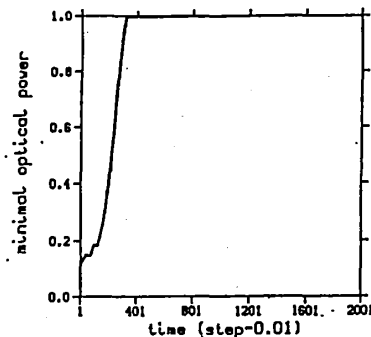


図8. 最も低いファイバーの光出力

が大きいことが分かる。図3から図8までの図は、探索問題で自律運動の形成と探索領域の狭窄効果の大きさが分かる。狭窄効果と自律運動の形成は、各々、探索する領域を狭窄し、その領域内で解を他の解の候補である多重安定点に引っかけらずに有効に探索する役割を持っている。また、この方法は多数ファイバーを一度に位置合わせをする時に有効となる。この探索制御アルゴリズムは、他の(今使われている)ファイバーの位置合わせの方法と比べる。一つのファイバーのいくつかの多重安定点がある場合で、他の方

法では数分を要するがこの方法を使えば数秒に短縮できることが、探索の際のファイバーが動く距離を決定することにより結論される。

[例2] 画像復元

画像復元には大まかに分けて二つの場合がある。一つは、撮像システムと対象物との間に相対的な動きが生じると撮像システムの蓄積効果によりボケを生じる。動きボケにより劣化した画像の復元である。もう一つは、ボケやノイズなどにより劣化した観測画像から出来る限り元の画像に近い画像を推定する画像復元である。前者は、標本の原画と劣化した観測画像を概知として、劣化した画像から復元画像を得るための逆フィルターを設計する問題であるが後者は劣化過程を表すフィルターは既知として観測画像から原画を推定する問題である。ここでは前者について、逆フィルターを最少二乗誤差を統計的に最少にするように求めるやり方に適用する。(後者の場合が逆フィルターの代わりに原画像を求める変数にとれば前者の特別な場合として求められる。)

この時、評価関数は最少二乗誤差量

$$V[h] = E\{|f(x) - \int dsh(x-s)r(s)|^2\} \quad (17)$$

で与えられる。 $f(x), r(x)$ は各々原画像及び劣化画像である。ここで E は $f(x)$ と $r(x)$ についての統計平均を取ることを示す。 $h(x)$ は劣化画像を復元する逆フィルターである。問題は、評価関数 $V[h]$ を最少にするように逆フィルター $h(x)$ を決めることである。これを行なうには、二次元平面の画素番号を i で表わすと、画素単位での原画像及び劣化画像は f_i と r_i で表わされる。評価関数を画素単位で表せば、

評価関数

$$V[h] = \frac{1}{2} E\{\sum_i |f_i - \sum_j h_{ij} r_j|^2\}. \quad (18)$$

または、

$$V[h] = \frac{1}{2} \sum_i \{E\{f_i^2\} - \sum_j h_{ij} E\{f_i r_j\} + \frac{1}{2} \sum_{ijk} h_{ij} h_{ik} E\{r_j r_k\}\}. \quad (19)$$

ハミルトン関数は、

$$H[p_{ij}, h_{ij}] = \frac{1}{2} \sum_{ijk} a_{ijk} [p_{ij} + \int_0^t g_{ij}(t') dt'] [p_{ik} + \int_0^t g_{ik}(t') dt'] + \frac{1}{2} \sum_i \{E\{f_i^2\} - \sum_j h_{ij} E\{f_i r_j\} + \frac{1}{2} \sum_{ijk} h_{ij} h_{ik} E\{r_j r_k\}\}. \quad (20)$$

運動方程式は、

$$\frac{dh_{ij}}{dt} = \sum_k a_{ijk} [p_{ik} + \int_0^t g_{ik}(t') dt'], \quad (21a)$$

$$\frac{dp_{ij}}{dt} = -E\{f_i r_j\} + \sum_k h_{ik} E\{r_j r_k\}. \quad (21b)$$

これら方程式系を解くことにより逆フィルター h_{ij} が得られる。

ボケやノイズなどにより劣化した観測画像から出来る限り元の画像に近い画像を推定する画像復元の場合には、上の式で逆フィルター h_{ij} の代わりに推定原画像 r_i を変数に前者の特別な場合として求められる。具体的には、運動方程式 (21) は次の式で置き換えられる、

$$\frac{dr_i}{dt} = \sum_j a_{ij} [p_j + \int_0^t g_j(t') dt'], \quad (22a)$$

$$\frac{dp_i}{dt} = -f_i r_j + \sum_{jk} h_{ji} h_{jk} r_k \quad (22b)$$

である。

[例3] 組合せ問題

組合せ問題の一つの例である巡回セールスマン問題へ適用する。巡回セールスマン問題はあある一人のセールスマンが異なる s 都市を各都市を一度づつ且つ洩れなく回る場合に巡回する距離が最短になるように回る道筋を求める問題である。

評価関数は

$$V[v_{ij}] = \frac{1}{2} [AV_1 + BV_2 + CV_3], \quad (23a)$$

$$V_1 = \sum_i \{\sum_j v_{ij} - 1\}^2 + \sum_i \{\sum_j v_{ji} - 1\}^2, \quad (23b)$$

$$V_2 = \sum_{ijk} d_{ij} v_{ik} \{v_{jk+1} + v_{jk-1}\}, \quad (23c)$$

$$V_3 = \sum_{ij} \left\{ \frac{v_{ij}^4}{4} - \frac{v_{ij}^3}{2} + \frac{v_{ij}^2}{4} \right\} \quad (23d)$$

で与えられる。ここで A, B, C は定数、 v_{ij} は i 番目に訪れる j 都市の確率である。 $v_{ij}=0$ なら訪れない、又、 $v_{ij}=1$ なら訪れることを表す。 d_{ij} は i 番目と j 番目の都市の間の距離である。 $v_{0i}=v_{si}, v_{s+1i}=v_{1i}$ と約束する。これに対するハミルトン関数は

$$H[p_{ij}, v_{ij}] = \frac{1}{2} \sum_{ij,kl} a_{ij,kl} [p_{ij} + \int_0^t g_{ij}(t') dt'] [p_{kl} + \int_0^t g_{kl}(t') dt'] + V[v_{ij}]. \quad (24)$$

運動方程式を解くことができその結果として都市の巡回する順番/道筋が得られる。

[例4] 多要素の制御問題

多要素の制御問題の一つのアクチーブ制御の例を取り上げ適用する。並立する柔軟構造物の制御系の構

成例として図9に示す。今建築の分野では超高層ビルの実現が話題になっているがこれを実現するには風に対する揺れ防止が不可欠である。この時超高層ビルでは長周期の揺れになるので揺れ防止のためには、複数のセンサーとアクチュエータを適当に配置させお互いに並列する構造物同士で振動を止め合う方法が考えられている。左右のビルの揺れを感知するセンサーの出力信号を q_i^l, q_i^r とし風の強度を $w_i^l(t), w_i^r(t)$ で表す、また揺れを防ぐためにアクチュエータに入力する信号を $Q_i^\alpha(t)$ とする。

ハミルトン関数を設定する、

$$H[P_i^\alpha, Q_i^\alpha; p_i^\alpha, q_i^\alpha] = \frac{1}{2M} \sum_i [P_i^\alpha + \int_0^t F_i^\alpha(t') dt']^2 + H[p_i^\alpha, q_i^\alpha]. \quad (25a)$$

ここで

$$H[p_i^\alpha, q_i^\alpha] = \frac{1}{2} \sum_{ij\alpha} a_{ij}^\alpha [p_i^\alpha + \int_0^t \{w_j^\alpha(t') - Q_j^\alpha(t')\} dt']^2 + k_2 v_2[q_i^\alpha]. \quad (25b)$$

$v_2[q_i^\alpha]$ は変数 q_i^α 同士の相互作用である。例えば、

$$v_2[q_i^\alpha] = \frac{1}{2} \sum_{i\alpha}^{s-1} (q_{i+1}^\alpha - q_i^\alpha - \ell)^2$$

である。 $F_i^\alpha(t)$ は揺れの大きさを与える量、即ち、評価関数

$$v_1[q_i^\alpha]$$

(例えば、 $v_1[q_i^\alpha] = k_1 v_2[q_i^\alpha]$) を使って

$$F_i^\alpha(t) = -Q_i^\alpha(t) - \lambda \frac{dQ_i^\alpha}{dt} + \sum_j a_{ij}^\alpha \frac{\partial v_1[q_i^\alpha(t)]}{\partial q_j^\alpha} \quad (26)$$

で与えられる。 $P_i^\alpha, Q_i^\alpha, p_i^\alpha, q_i^\alpha$ の運動方程式は、

$$\frac{dQ_i^\alpha}{dt} = P_i^\alpha + \int_0^t F_i^\alpha(t') dt', \quad (27a)$$

$$\frac{dP_i^\alpha}{dt} = 0, \quad (27b)$$

$$\frac{dq_i^\alpha}{dt} = \sum_j a_{ij}^\alpha [p_j^\alpha + \int_0^t f_j^\alpha(t') dt'], \quad (27c)$$

$$\frac{dp_i^\alpha}{dt} = -k_2 \frac{\partial v_2[q_i^\alpha]}{\partial q_i^\alpha}, \quad (27d)$$

($\alpha=l, r$) 或は、

$$M \frac{d^2 Q_i^\alpha}{dt^2} = -Q_i^\alpha(t) - \lambda \frac{dQ_i^\alpha}{dt} + k_1 \sum_j a_{ij}^\alpha (q_{i+1}^\alpha + q_{i-1}^\alpha - 2q_i^\alpha), \quad (28a)$$

$$\frac{d^2 q_i^\alpha}{dt^2} = -k_2 \frac{\partial v_2[q_i^\alpha]}{\partial q_i^\alpha} + w_i^\alpha(t) - Q_i^\alpha(t). \quad (28b)$$

アクチュエータへの入力信号 $Q_i^\alpha(t)$ を計算する方法は二つある。一つは、風の強さ $w_i^\alpha(t)$ を与えて構造物の揺れも含めて式(28a)と(28b)を解くことができ、揺れを小さくするためのアクチュエータに入力する信号 $Q_i^\alpha(t)$ が得られる。(但し、 $-Q_i^\alpha(t)$ が入力信号となる。) 他の方は、アクチュエータへの入力信号を規定するのは式(28a)である。これを解くには構造物の揺れの出力信号 $q_i^\alpha(t)$ が必要である。 $q_i^\alpha(t)$ を実際の観測値で置き換えることでアクチュエータへの入力信号 $Q_i^\alpha(t)$ が得られる。式(28a)を解くことで $Q_i^\alpha(t)$ が得られる。(但し、 $-Q_i^\alpha(t)$ が入力信号となる。)

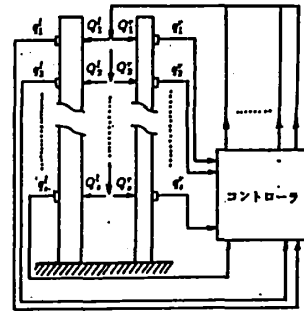


図9. 多要素分散制御系

[例5] 非線形計画法

非線形計画法の一つの例である、 s 個の仕事（それを x_i で表わす）を m 個の機械でこなすとき総終了時間を最小にするように s 個の仕事を m 個の機械に分配する仕方を求める問題に適用しよう。(スケジューリングの問題の一つでもある。) 個々の (i 番目の) 機械の仕事処理の最大能力は b_i で制限されていて、又個々の機械が仕事を終了する時間は仕事量の二乗に比例する (比例係数を c_i とする) ような場合を考える。

評価関数

$$V[T_{ij}] = \frac{1}{2} \sum_i c_i \left(\sum_j T_{ij} x_j \right)^2 + k_1 \sum_i \left\{ \sum_j T_{ij} - 1 \right\}^2 \quad (29)$$

を機械の仕事処理の能力の制約条件

$$\sum_j T_{ij} x_j - b_i \leq 0, \quad (i = 1, 2, \dots, m) \quad (30)$$

の下で最小にする分配関数 T_{ij} を求める分離系二次計画問題を対象にする。ハミルトン関数を

$$H[p_{ij}, T_{ij}] = \frac{1}{2} \sum_i^s a_{ij;kl} [p_{ij} + \int_0^t g_{ij}(t') dt] [p_{kl} + \int_0^t g_{kl}(t') dt] + V[T_{ij}] + k_2 \sum_i^m \{ \sum_j^s T_{ij} x_j - b_i \} \theta \left(\sum_j^s T_{ij} - b_i \right). \quad (31)$$

$a_{ij;kl}$ は運動に混合性を導入する行列である。また $\theta(x)$ はステップ関数で $x < 0$ で $\theta(x) = 0, x \geq 0$ で $\theta(x) = 1$ となる関数である。また $g_{ij}(t) = -\lambda(t) dT_{ij}/dt$ (特に $0 < \lambda(t)$ である) である。 k_1 は正定数である。 $T_{ij}(t), p_{ij}(t)$ に対する運動方程式を解くことができ、評価関数を最小にする T_{ij} が求まる。

[例 6] ゲームの自動解法

ゲームの一例として MC(ルービック・石毛・キューブ又はマジック・キューブと呼ばれている) の自動解法を与える。MC は三次元空間で $3 \times 3 \times 3$ の立方体の中の小立方体を色が揃うように持って行くゲームである。(図 9) MC で小立方体を色が揃うように持って行くための回転操作は三種類ある。三つの軸に対し各々垂直な三つの回転がある。これらの回転操作を記号 $r^{i\alpha}$ (i は軸の方向を指定し $i=1,2,3; \alpha$ は軸に垂直な回転を指定し $\alpha=1,2,3$) で表わす。キューブの 6 つの面からなる表面は各面は色の付いた $9(=3 \times 3)$ 個の四角形でカバーされる。一つの回転操作はこれら $54(=6 \times 9)$ 個の四角形の色を置き換えることに対応している。このことから各回転操作は 54×54 個の行列要素 $b_{st}^{i\alpha}$ ($s, t=1,2,\dots,54$) で表わされる:

$$r^{i\alpha} \rightarrow (b_{s,t}^{i\alpha}) \quad (b_{s,t}^{i\alpha} = 0, 1). \quad (32)$$

ハミルトン関数は

$$H[p^{i\alpha}, r^{i\alpha}] = \frac{1}{2} \sum_{i\alpha\beta} a_{ij}^{\alpha\beta} [p^{i\alpha} + \int_0^t g^{i\alpha}(t') dt'] [p^{j\beta} + \int_0^t g^{j\beta}(t') dt'] + v_1[r^{i\alpha}] + v_2[r^{i\alpha}] + v_3[r^{i\alpha}] \quad (33)$$

$$v_1[r^{i\alpha}] = \frac{k_1}{2\pi} \sum_{i\alpha} \sin\{2\pi(r^{i\alpha} - \frac{1}{4})\}, \quad (34a)$$

$$v_2[r^{i\alpha}] = \frac{k_2}{54} \frac{1}{2\pi} \sum_{(i,\alpha) \neq (j,\beta)} [\sin\{2\pi(r^{i\alpha} - \frac{1}{4}) + 1\}] \times [\sin\{2\pi(r^{j\beta} - \frac{1}{4}) + 1\}]. \quad (34b)$$

色合わせの程度を評価する関数

$$v_3[r^{i\alpha}] = \frac{k_3}{36\pi} \sum_{e,f=1}^6 v_{ef}(t)^2 \sum_{i\alpha} \sin\{2\pi(r^{i\alpha} - \frac{1}{4})\}. \quad (34c)$$

(k_1, k_2, k_3 は正定数である) から,

$$\frac{dr^{i\alpha}}{dt} = \frac{\partial H[p^{i\alpha}, r^{i\alpha}]}{\partial p^{i\alpha}}, \quad (35a)$$

$$\frac{dp^{i\alpha}}{dt} = -\frac{\partial H[p^{i\alpha}, r^{i\alpha}]}{\partial r^{i\alpha}} \quad (35b)$$

から $r^{i\alpha}(t)$ と $p^{i\alpha}(t)$ に対する運動方程式が得られる。式 (34c) の v_{ef} は

$$v_{ef}(t) = \sum_{e',f'} c_{6(e-1)+e', 6(f-1)+f'}(t) \quad (36)$$

で与えられる。ここで行列 $c_{s,t}(t)$ ($s, t=1,2,\dots,54$) は $c_{s,t}(0)$ は初期での MC の色の配置を与える行列から出発して) 式 (34) を任意の整数値 $r^{i\alpha}(0)$ の下に解くことで得られる $r^{i\alpha}(t)$ が整数値 $+0.5$ (-0.5) を横切るときにのみその回転操作に対応する行列 $b_{st}^{i\alpha}$ (その逆行列 $(b_{st}^{i\alpha})^{-1}$) を次々に掛けることで得られる:

$$c_{s,t}(t + \Delta) = b_{s,t}^{i\alpha} c_{s,t}(t),$$

又は,

$$c_{s,t}(t + \Delta) = (b_{s,t}^{i\alpha})^{-1} c_{s,t}(t). \quad (37)$$

式 (36) と (37) を組み合わせて式 (35) を解くことができ色合わせの評価関数 $v_3[r^{i\alpha}]$ を最小にする回転操作の手順 $r^{i\alpha}(t)$ が求まる。回転の手順は $r^{i\alpha}(t)$ が整数値 $+0.5$ (-0.5) を横切るときにのみそれに対応する回転操作 (逆回転) を行なうことによって回転操作を行なう順番 / 順序が得られる。

† 〒 611-02 京都府相楽郡精華町光台 2-2
e-mail: shinjo@atr-rd.atr.co.jp

†† 〒 251 藤沢市辻堂西海岸 1-1-25

参考及び文献

- 1) Ohtawara K., Shinjo K., Jp.J.Appl.Phys.(in press).
- 2) Garey M.R., Johnson D.S., *Computers and Intractability* (Freeman.W.H. and Company, 1979).
- 3) Cook S.A., Proc. 3rd Ann. ACM Symp. on Theory of computing, association for computing machinery, New York,(1971)151.
- 4) Wille L.T., Vennik J., J.Phys.A:Math.Gen., 18(1985)L419.
- 5) Baum E., Phys.Rev.Lett.,59(1987)374.
- 6) Klossowski P., ニーチェと悪循環 (哲学書房, 1989).
- 7) Shinjo K., Sasada T., Phys.Rev.(to be published); 新上和正, 物性研究 12 月 (1993).
- 8) 新上和正, 特許 (出願番号: 平成 05 年特許願第 252907 号).