遺伝的アルゴリズムにより生成される遺伝子配列からの
ボルツマン分布の学習

北形 学

北海道大学 大学院情報科学研究科 複雑系工学講座　混沌系工学研究室

平成 21 年度 修士論文

目 次

1　はじめに

遺伝的アルゴリズム (Genetic Algorithm : GA) [1] は選択淘汰や交叉，突然変異などの生物進化の原理を最適化問題に応用したものであり，確率を用いた「近似解」探索手法である．このアルゴリズムが最初に提案/導入されたのは 1975 年にミシガン大学の John Holland による *Adaptation in Natural and Artificial Systems* [2] においてである．GA は様々な組合せ最適化問題において優良な「近似解」を短時間で効率的に見つけることができることで知られている．NP 完全に属するクラスの問題に対しては多項式時間で最適解を求めることのできるアルゴリズムは現段階で発見されてはいないが, 厳密な意味での最適解を求めることはあきらめ, その近似解で良しとする立場をとるのであれば, GA はこの種の問題を各遺伝操作による確率的探索で適切に解くこと — 優良な近似解を求めること — ができる．現在のところ, この GA は様々な実問題における組み合わせ問題に対して有効に機能する最適化アルゴリズムとして広く認知され, その手法の有用性は今や確立されていると言ってよい．しかしながら，どのような実問題に対してもオートマティックに適用でき, すぐさま解の候補が求まるというわけではない．個別な問題に応じて適切に個体表現を定義する必要があり，遺伝操作の各パラメータの値の設定も問題となる．また，適応値に依存する「選択」以外の操作は，問題にも依存するが基本的には乱数を用いたランダムな状態生成であり，それらの操作が必ずしも適応値を増加させる保証はない. また, GA が最適化を行う際の収束性などに関する定理はわずかであり, 数理的側面の理解は現時点で決して十分とは言えない.

1.1　GA と SA

本研究では前述の背景をふまえて, この GA の統計的性質を熱力学的な観点から考察する．GA では遺伝子配列を $\boldsymbol{s} = (s_1, s_2, \cdots, s_N), s_i \in \{-1, +1\}$ とし[1], 各アンサンブルをエネルギー関数 $H(\boldsymbol{s})$ の最小値を与える最適解 $\boldsymbol{s}_*$ に収束させる．時刻 (ステップ, あるいは世代[2]) t での分布関数を $P_{GA}^{(t)}(\boldsymbol{s})$ とすると, 系はある種のマルコフ過程に従って状態を遷移していき，十分な時間の経過後に $P_{GA}^{(t)}(\boldsymbol{s}) \to P_{GA}^{(\infty)}(\boldsymbol{s})$ となり

$$P_{GA}^{(\infty)}(\boldsymbol{s}) = \delta(\boldsymbol{s} - \boldsymbol{s}_*) = \prod_{i=1}^{N} \delta(s_i - s_{i*}) \tag{1}$$

が達成されれば, 最適化問題が解かれたことになる.

一方，最適化手法としてよく知られる**擬似徐冷法 (Simulated Annealing)** [3] は**マルコフ連鎖モンテカルロ法 (Markov Chain Monte Carlo: MCMC 法)** によって各温度で平衡状態を実現しつつ温度 T を下げることで得られる非斉次マルコフ過程を用いることで最小エネルギーを高頻度で求めるアルゴリズムであり，各時刻 t において温度 $T = \beta^{-1}$ で次の**ボルツマン分布 (あるいはギブス分布)**:

$$P_B^{(t)}(\boldsymbol{s}) \;=\; \frac{\mathrm{e}^{-\beta^{(t)} H(\boldsymbol{s})}}{Z}, \quad Z = \sum_{\boldsymbol{s}} \mathrm{e}^{-\beta^{(t)} H(\boldsymbol{s})} \tag{2}$$

[1]情報科学 (計算機科学) では通常, $\{0, 1\}$ の情報表現を用いるが, 本論文では専ら $\{-1, +1\}$ の「イジング・スピン」表現を用いる．もちろん, 両表現間に本質的違いはないが, 解析的な取り扱いを考えると「対称性」のある表現であるイジング・スピン表現が便利な場合が多い.

[2]後の節でも述べるが, 本研究では GA の遺伝子配列からボルツマン分布を学習する．その際, 分布を特徴つける「有効温度」に関する学習方程式を導出するが, その微分方程式を数値的に解く際の時間刻みがここでの「ステップ t」である．一方, この各ステップで内部エネルギーの値を算出する必要があるが, この内部エネルギーの評価 (GA の経験分布での期待値計算) を行うごとに新しい「世代」を GA で生成する．その意味で「ステップ t」と「世代」は比例関係にあり, 特に時間刻みのスケールを適切に選ぶことで両者は「等価」であるとみなすことができる.

を生成し, 十分な時間経過後に $\beta^{(\infty)} \to \infty$ のもとで

$$P_B^{(\infty)}(\boldsymbol{s}) = \delta(\boldsymbol{s} - \boldsymbol{s}_*) = \prod_{i=1}^{N} \delta(s_i - s_{i*}) \tag{3}$$

を実現することで最適化問題を解くものである [4].

従って, GA, SA は「分布を (最適解でデルタ・ピークの意味での) 最適分布に近づける」という意味では共通点があるが, SA の状態更新が詳細釣り合い (Detailed balance) を満たすパラメトリックな「局所的」遷移確率 (遷移行列) に基づくマルコフ過程であるのに対し, GA のそれは交叉, 突然変異などの遺伝子操作が遺伝子間の「大域的」遷移を引き起こすため, その性質が直観的理解と数学的な性能評価を著しく難しくしている.

1.2 熱・統計力学再考

ここで, 前出のボルツマン分布とは熱平衡統計力学において, 温度 T で系が状態 α にある確率 P_α を意味する. β を「逆温度」T^{-1} で定義すると, P_α は $\exp(-\beta E_\alpha)$ に比例し, E_α を状態 α での系のエネルギー, 確率の規格化因子を $Z = \sum_\alpha \mathrm{e}^{-\beta E_\alpha}$ とぞれぞれおくと, P_α は具体的に

$$P_\alpha \quad = \quad \frac{\mathrm{e}^{-\beta E_\alpha}}{Z} \tag{4}$$

と表される. これがボルツマン分布 (あるいは「ギブス分布」と呼ばれる) である. 温度 T が無限大の場合, すなわち, $\beta = 0$ では上記確率は $\sim Z^{-1}$ となり, P_α は状態 α に依存しない. すなわち, 温度無限大ではどの状態も等確率で現れる. エネルギーが無限大ではなく, かなり大きいが, しかし有限温度の場合, 分布の典型値はエネルギーの低い状態のまわりに集中するが, 比較的高いエネルギー状態も有限確率で実現されることになる. つまり, 各温度で熱平衡状態を保ちながら温度を下げていくことで, ボルツマン分布から生成される状態はエネルギー最小状態 (基底状態) のまわりに集まり, $T = 0$ では最小エネルギー状態にピークをもつデルタ関数になる. 上述のプロセスを計算機上で実現したものが SA に他ならない. ここで規格化定数 Z は**分配関数 (Partition function)** と呼ばれる.

ところで, この分配関数はボルツマン分布の規格化定数としての役割の他, 数々の熱力学的統計量を算出するための「母関数」を作る際にも役立つことが知られている. 例えば, 分配関数の対数と温度を用いて**自由エネルギー (Free energy)** は次のように書ける.

$$F \quad = \quad -T \log Z \tag{5}$$

これは統計学において**キュミュラント母関数 (Generating function)** と呼ばれるものであり, 実際, この母関数を各種パラメータ (統計学では「ハイパーパラメータ」と呼ばれる) で微分することで様々な物理量を計算することができる. 例えば, この自由エネルギーを逆温度 β で微分することにより, 内部エネルギー E を

$$E \quad = \quad \frac{\partial}{\partial \beta}(\beta F) \tag{6}$$

として導出することができる. 内部エネルギーと自由エネルギー F はエントロピー $S > 0$ を介して

$$F \quad = \quad E - TS \tag{7}$$

で結ばれることがわかっている. また, 「自然界の事象は自由エネルギーを最小化する方向に変化する」ことも知られている. 従って, この関係式から $T=0$ では $F=E$ となり, 「エネルギー最小状態」と「自由エネルギー最小状態」は等価である. しかし, $T>0$ の場合, 「エネルギー最小」は必ずしも「自由エネルギー最小」とはならない. なぜならば, この場合, エントロピーを大きくする状態の方が結果として自由エネルギーを小さくする場合もあるからである. また, 温度が大きければ大きいほど, 自由エネルギーを小さくするためにはエントロピーを大きくする方が得策であることもわかる. エントロピーが最大な状態は言うまでもなく, 全ての状態が等確率で現れる場合であるから, 前述の SA とはこの「エントロピー効果」を巧妙に使い, 「エントロピー最大状態」から「エネルギー最小状態」へと系を「断熱的」に移行させることによって構築されるアルゴリズムと考えることができる. つまり, SA とは自然界における「自由エネルギー最小原理」

エントロピー最大状態 $(T=\infty)$ $\to$ 断熱的状態変化 $\to$ **エネルギー最小状態** $(T=0)$

を巧妙に利用した探索アルゴリズムであると言うことができる.

さて, 自由エネルギーは上述の通り, 熱・統計力学において基本的かつ重要な量であり，磁場や温度などの「ハイパーパラメータ」でその微分をとることで磁化，内部エネルギーなどの物理量を導出することができる．具体的には状態 $\boldsymbol{s}$ の関数である任意の物理量を $A(\boldsymbol{s})$ の期待値 $\langle A(\boldsymbol{s})\rangle$ を計算する場合，$A(\boldsymbol{s})$ に共役なパラメータ a を用いて $aA(\boldsymbol{s})$ を分配関数の指数部分に加えた自由エネルギー

$$-\beta F \;\;=\;\; \log\left(\sum_{\boldsymbol{s}} e^{-\beta H(\boldsymbol{s})+aA(\boldsymbol{s})}\right) \tag{8}$$

を作り, ここから

$$\langle A(\boldsymbol{s})\rangle \;\;=\;\; \lim_{a\to 0}\frac{\partial}{\partial a}(-\beta F) \tag{9}$$

によって所望の期待値 $\langle A(\boldsymbol{s})\rangle$ を求めることができる．本研究で扱う有効温度に関する学習方程式の中には内部エネルギー E が現れるが, 自由エネルギーが解析的に求めることのできる確率モデルを扱う場合にこの内部エネルギーを求めるためは, 上式から

$$E \;\;=\;\; \frac{\partial}{\partial\beta}(\beta F) \tag{10}$$

とすればよいことがわかる.

1.2.1 組み合わせ最適化問題に現れる「乱雑さ」

ところで, 具体的な組み合わせ最適化問題では制約条件や問題自体の構造に依存する, ある種の「乱雑さ」を表す状態変数とは別のパラメータセット $\{J\}$ がエネルギー関数の中に現れるのが普通である. 一般的に最小エネルギーの値はこのパラメータセット $\{J\}$ の選び方に依存するから, これらパラメータの選び方に依らない「フェア」な「平均」最小エネルギーを評価するためにはこのパラメータセットの確率分布での「エネルギー期待値」を計算しなければならない.

1.2.2 レプリカ法による平均的性能評価

具体的には, この平均を $[\cdots]_{\{J\}}$ で表すことにすれば

$$E \;\;=\;\; \left[\frac{\partial}{\partial\beta}(\beta F)\right]_{\{J\}} = \frac{\partial}{\partial\beta}(\beta[F]_{\{J\}}) = \frac{\partial}{\partial\beta}\left\{\left[\log\left(\sum_{\boldsymbol{s}} e^{-\beta H(\boldsymbol{s}:\{J\})+aA(\boldsymbol{s})}\right)\right]_{\{J\}}\right\} \tag{11}$$

を計算する必要がある. しかし, 平均をとるべき確率変数 $\{J\}$ が対数関数の中に現れるため, この平均を具体的に求めることは極めて困難である. そこで, $n \to 0$ で成立する恒等式 $\log Z = (Z^n - 1)/n$ を用いることで, $\log Z$ の平均を Z^n の平均で置き換えることを考える. 具体的には $\alpha = 1, 2, \cdots, n$ 個のコピー (レプリカ) を導入し, $[\log Z]_{\{J\}}$ を $[Z^n]_{\{J\}}$ を介して次のように計算する.

$$[\log Z]_{\{J\}} = \lim_{n\to 0} \frac{[Z^n]_{\{J\}} - 1}{n} = \lim_{n\to 0} \frac{\left[\prod_{\alpha=1}^{n} \sum_{\boldsymbol{S}_\alpha} e^{-\beta \sum_\alpha H(\boldsymbol{S}_\alpha : \{J\}) + a \sum_\alpha A(\boldsymbol{S}_\alpha)}\right]_{\{J\}} - 1}{n} \tag{12}$$

このような手の込んだ平均操作の遂行方法を**レプリカ法**と呼ぶ [6, 7]. 我々は後の節で, この方法を用いて有効温度の従う学習方程式の平均的性能を評価する[3].

1.3 アニーリング・スケジュール

さて, SA の状態遷移は GA のそれと同様にマルコフ過程に従っており，上記ボルツマン分布を用いたマルコフ連鎖モンテカルロ法によって各温度で平衡状態を実現しつつ温度を下げていく — 遷移確率が温度を介して各ステップで変化する「非斉次マルコフ過程」を生成する — ことで最小エネルギー状態を高頻度で拾い上げる．SA の場合にはボルツマン分布を最適に制御する変数 $T = \beta^{-1}$ のステップ依存性が陽に与えられており, エネルギーのランドスケープが複雑でな場合には

$$T(t) \geq \frac{c}{1+t} \tag{13}$$

であったり，または

$$T(t) \geq \frac{c}{\log(1+t)} \tag{14}$$

を選ぶ. 特に式 (14) で最適解が (3) 式の意味で確率 1 で得られることが非斉次のマルコフ連鎖の強エルゴード性の結果として証明されている [4].

1.4 「有効温度」を介して GA を眺める理由

GA は前述の大域的状態遷移を用いることでエネルギー関数の局所最小からの脱出機構を実現していると言えるが, 大域的状態遷移がハミング距離が大きな状態間の遷移であるならば, その状態遷移の過程には無数の局所最小解が存在するはずであり, SA ではこの局所最小を脱出するために「温度」により制御される「熱揺らぎ」を用いる. この熱揺らぎの振幅は高温であればあるほど大きく, 従って大域的状態間「移動」を可能にする. 前述のように, SA ではこの高温から低温へのアニーリングを非常に「ゆっくり」と行うが, GA から生成される遺伝子配列がアニーリングの初期の段階で極めて効率的に大域的最小の含まれる部分空間を形成するのであれば, その後, 温度をすばやく下げたとしても大域的最小を高頻度で拾い上げることができるはずである. 従って, ボルツマン分布を特徴つける温度が遺伝子配列からの学習に要するステップに対し, いかに素早くゼロになるかを SA のアニーリング・スケジュールと比較することで SA の有効性が議論できる.

[3]「個数」を表す自然数 n をゼロにする極限操作の妥当性は数学的意味で厳密に保証されているわけではない. しかし, 理論物理学では得られる結果と「実験結果」をつき合わせて検証することで, このやや乱暴な取り扱いをチェックすることができるし, 計算機科学や情報理論の諸問題に対しては有限サイズの計算機実験を行うことで, その妥当性を確認できる.

1.5 研究目的

そこで本研究では，可解模型として知られるスピングラス鎖 [8, 9] および, シェリントン-カークパトリック (Sherrington-Kirkpatrick: SK) 模型 [10] の最小エネルギー状態を GA を用いて生成し，その各ステップで得られる遺伝子配列から可能な限りそのマルコフ過程を再現するボルツマン分布 (有効温度) を学習させることを試みる．一般的には未知である GA の生成分布をボルツマン分布で近似するのである．具体的には, GA から生成される遺伝子配列からなる経験分布とボルツマン分布間の距離を最小化する有効温度に関する発展方程式を導出し, その方程式を解析することで GA のマルコフ過程から得られる経験分布を可能な限り近似，再現するようなボルツマン分布の時間変化の様相を介して熱力学的観点から GA のマルコフ過程を調べる.

1.6 研究位置づけ: Estimation of Distribution Algorithm (EDA) との関係

遺伝子配列の経験分布を推定しつつ, また, その分布を用いながら最適解を探す方法それ自体は決して新しいものではない．このような方法を **Estimation of Distribution Algorithm (EDA)**[11, 12, 13, 14] と呼ぶが, この EDA に関する先行研究を数学サイドからのものに限定して拾いだしてみると, 得られる経験分布のキュムュラントに着目し, その時間発展を追うことで分布を推定するアプローチ [15] や遺伝子配列の成分間の依存関係をグラフィカル・モデルで表現し, ベイジアンネットを利用した機械学習を行うことで成分間の同時分布あるいは周辺分布の推定を実現するアルゴリズムの性能評価 [16] に関する研究も行われている．このような先行研究のなかで, 我々の研究の目的, および, 位置づけ (特徴) は, GA の経験分布としてボルツマン分布というパラメトリックな高次元分布を想定し, その分布を特徴つける温度 T を世代 t の関数として学習することで, シミュレーテッド・アニーリング的描像から GA の動作原理についての理解を深めることであり, この際, 最適化すべきコスト関数として多くの組み合わせ問題の雛形とされる可解スピングラスモデルでの「アニーリング・スケジュール」を精密評価することによって, GA の有効性を部分的ではあるが「解析的」に議論できる点が本研究の大きな特徴である.

1.7 本論文の構成

本論文の構成は以下の通りである．まず, 次の第 2 節で GA の基本概念や各種遺伝子操作の概要を説明した後, 基本的な定理として知られている「スキーマ定理」のアウトラインを示す．また, John Holland によって提案された探索アルゴリズムが優良である条件式 [2] として世代 t においてスキーマ H が存在する確率 (出現確率)$P(H,t)$ の従う微分方程式 (ある種の「マスター方程式」) を導入し, ボルツマン分布がこの条件式を満たすことを証明する．この事実は我々が本研究で用いるアプローチ, すなわち, GA から生成される遺伝子配列からボルツマン分布を学習することの正当性を保証するものである．続く第 3 節では本研究で中心となる基礎方程式である有効温度の従う微分方程式を GA が生成される遺伝子配列の経験分布とボルツマン分布のカルバック・ライブラ情報量に関する勾配を構成することで導出し, その定常状態について議論する．続く第 4 節では本研究で用いるコスト関数を与えるスピングラス模型を導入し, その基本的な性質について概観した後, 2 つの可解な数理模型に対し, その内部エネルギーの温度依存性を解析的に導出する．この内部エネルギーの解析解は有効温度についての学習方程式を部分的にではあるが解析的に取り扱うために重要となる．5 節では実際に数値解析を行うことで有効温度スケジューリング, 残留エネルギーの時間発展について議論する．得られる結果を SA のスケジューリングと比較することで GA のダ

イナミックスについての考察を行う．また, 得られた数値結果により, 第 2 節で導入された Holland の条件式 [2] がどのように修正を受けるのかについても議論する．最後の第 6 節はまとめである．

2　GA の基本概念および本研究での扱い

2.1　遺伝子表現と適応値および遺伝子操作

GA では解を「遺伝子」という形で表現する．問題をどのように表現すべきかの決定を「コーディング」と呼び，一般的に遺伝子は「0」か「1」を要素にもつ配列であるが，他にも木構造などの表現がある.「適応値」は各個体の評価の高さを表し, 対象となる問題においてどの程度好ましい適応性を有するかを表す度合いである．この適応値をもとに各個体は評価を受け，良い個体ほど次世代に子孫を残すことができる．本研究では，スピングラス模型を扱うため，各遺伝子座としては, より対称性の良い $-1, +1$ のいずれかの値をとるものとする．また適応値は，エネルギー最適化問題を扱うので (適応値) $= -$(各個体のエネルギー) とする．以下で本論文で用いる GA の各オペレーション (遺伝子操作) について述べる.

2.1.1　選択

集団の全ての個体について適応値を求め，それに基づいて次の世代に残す個体を決定する操作である．その方法はいくつか存在するが，ここではトーナメント選択を用いる．トーナメント選択は，集団から決められた数 s 個の個体をランダムに選択し，その中で最も適応値の高い個体を取り出し，同様の操作を必要な集団の個体数が得られるまで繰り返す．これにより次の世代を決定する．ランクサイズ s が大きくなるほど選択の淘汰圧が高くなる．

2.1.2　交叉

選択によって選ばれた個体から，親の遺伝子を反映した子個体を生成する．生物の遺伝子進化を模している点で次の突然変異と並んで GA を特徴づける操作である．いくつかの方法が提案されているが, 最もポピュラーなものとして，「一点交叉」からマスクを用いて交換する遺伝子座を決定する「一様交叉」などが用いられている．また，交叉の目的は親から別々の良い形質を受け継ぎ優良な遺伝子を作り出すことであるが，良い部分を上手く継承するためには問題ごとに適切な交叉方法を用いる必要があり，それぞれの個別問題ごとに様々な手法が提案されている．本研究では一点交叉を用いる．これは遺伝子の交叉する一点をランダムに決め，その前後どちらかを入れ替える方法である.

2.1.3　突然変異

各個体の局所的最適解からの脱出を目的とし，より広い範囲で解を探索するため遺伝子を一定の確率で対立遺伝子に変化させる操作である．ランダムな遺伝子変化によって集団に存在しなかった高い適応度をもつ個体が生まれる可能性がある．本研究では遺伝子は $+1, -1$ のどちらかで表されているので，一定確率 p_m で対立遺伝子に置き換える方法をとる．染色体が $0, 1$ のような離散的な値でない連続値である場合にはランダムな幅だけ遺伝子に変更を加える摂動や，ランダムに選ばれ

た 2 点の遺伝子を逆転する逆位などもある．他にも交叉同様問題領域に応じていくつかの方法がある．

2.2 スキーマ定理

GA の性能/動作を示す数少ない理論に**スキーマ定理** [1, 2] がある．この定理は本研究に対して適用するにはあまりにもナイーブ過ぎて使いものにならないが, GA の理論では重要な定理の一つとして位置づけられているので, ここでは簡単にその定理のアウトラインだけを述べておきたい．

遺伝子が一次元の文字列で表される場合，その中の意味あるパターンを**スキーマ**と呼び，形式的には次のような形で表現される．

$$H = (h_1, h_2, \cdots, h_n), h_j \in \{0, 1, *\}, 1 \leq j \leq n \tag{15}$$

$*$ は 0 か 1 いずれかの値をとる．また，スキーマの長さ (最初の固定部分から最後の固定部分までの個数) を**定義長** $\delta(H)$，スキーマの中で $*$ 以外の部分の数を**オーダー** $o(H)$ と名づける．例えば, スキーマ $H = (*1**01)$ は $\delta(H) = 4$, $o(H) = 3$ である．スキーマ定理はあるスキーマが次の世代でどの程度の確率で生き残るかを表すものである．世代 t において集団のあるスキーマ H の個数 (スキーマ H の出現頻度の平均) を $m(H, t)$ とすると，世代 $t+1$ での個数は次のように表せる．

$$m(H, t+1) = m(H, t) \frac{f(H, t)}{\bar{f}(t)} \tag{16}$$

ここで, $f(H, t)$ は世代 t でのスキーマ H の平均適応度:

$$f(H, t) = \sum_{i \in H} g(i) p_i(t) \tag{17}$$

である．ここに, $p_i(t)$ は世代 t において遺伝子配列 i の出現する確率, $g(i)$ は遺伝子配列 i の適応度である．また, $\bar{f}(t)$ は世代 t での全個体の平均適応度:

$$\bar{f}(t) = \sum_{i} g(i) p_i(t) \tag{18}$$

である．従って, スキーマ H の平均適応度が全個体の平均適応度より大きい $f(H, t) \geq \overline{f}(t)$ のであれば, (16) 式から

$$m(H, t+1) = m(H, t) \frac{f(H, t)}{\bar{f}(t)} \geq m(H, t) \tag{19}$$

が成立する．これは,「スキーマ H の平均適応度が個全体の平均適応度より大きくなるように選択をかけるとスキーマ H の出現頻度が世代が進むにつれ高くなる」という, やや自明な結果を意味する．

もちろん, より正確な評価をするためには, GA の遺伝操作には選択の他, 交叉や突然変異があるため, これらの操作によってスキーマが破壊される可能性をも考慮しなければならない．交叉確率を p_c とすると, 交叉による破壊確率は $p_c \delta(H)/(n-1)$ となり，また同様にして突然変異確率を p_m とすると, それによるスキーマの破壊確率は $o(H) p_m$ となる．以上を考慮すると次の不等式が成立する．

$$m(H, t+1) \geq m(H, t) \times \frac{f(H, t)}{\bar{f}(t)} \left\{ 1 - p_c \frac{\delta(H)}{n-1} - o(H) p_m \right\} \tag{20}$$

この不等式より，高い評価値を持ち，定義長が短く，次数が低いスキーマが飛躍的にその数を増やしていくと推測できる．しかし, 考えてみるとこの不等式はあまりにもナイーブであり, 実際に GA の有効性や具体的な動作原理を正確に理解するためにはほとんど役に立たない．

2.2.1 Holland の条件式

Holland は探索アルゴリズムが「良い」ものであるためには, 世代 t でのスキーマ H の出現確率 $P(H,t)=\sum_{i\in H}p_i(t)$ が次の微分方程式に従うことが必要であると言及している [2].

$$\frac{dP(H,t)}{dt} = f(H,t)-P(H,t)f(J,t) \tag{21}$$

ここで, J は H とは異なる任意のスキーマであり, $p_i(t)$ は世代 t において, 遺伝子配列 i が出現する確率である. この式の意味するところを考えてみると, もし仮に上式右辺第 2 項がないのであれば, この方程式の意味するところは, 「スキーマ H の存在確率の増加率はスキーマ H の平均適応度に比例する」であり, これは直観的に正しい主張である. しかし, 現実にはスキーマ J の適応度に比例した分スキーマ H の存在確率は減少しなければならない. その比例係数が現在の世代 t のスキーマ H の存在確率であるとして第 1 項から $P(H,t)f(J,t)$ を引いたものが (21) 式右辺であり, 結局, これら 2 項の和が世代 t でのスキーマ H の存在確率の増加率を決めることになる. これが Holland の条件式 (21) の物理的な解釈である.

さて, ここで問題となるのは (興味が換気されるのは), この確率 $p_i(t)$ としてボルツマン分布を選んだ場合, はたして上記の方程式 (21) は成立するか否かという点である. 以下でこの論点について検証する.

2.2.2 ボルツマン分布が Holland の条件式を満たすことの証明

既に述べたように, 本研究では GA から生成される遺伝子配列からボルツマン分布を学習することを考えるが, 学習後に得られる世代 t でのボルツマン分布が Holland の条件式を満たすことを次のようにして簡単に証明することができる . この事実は我々のアプローチの正当性 (研究の方向の妥当性) を一部保証するものである. 世代 t における学習後, $p_i(t)$ が逆温度 β_t のボルツマン分布に従うとすれば, 遺伝子配列 i の適応度を $g(i)$ とすると[4]

$$p_i(t) = \frac{\mathrm{e}^{\beta_t g(i)}}{\sum_{j\in J}\mathrm{e}^{\beta_t g(j)}} \tag{22}$$

と書ける. ここで, 学習によって得られる逆温度のスケジューリングを簡単のため $\beta_t=t$, すなわち, 「線形」に逆温度を上昇させることを考えると, (22) 式は

$$p_i(t) = \frac{\mathrm{e}^{tg(i)}}{\sum_{j\in J}\mathrm{e}^{tg(j)}} \tag{23}$$

と書き直すことができる. この両辺の時間微分をとると直ちに

$$\begin{aligned}
\frac{dp_i(t)}{dt} &= \frac{g(i)\,\mathrm{e}^{tg(i)}(\sum_{j\in J}\mathrm{e}^{tg(j)})-\mathrm{e}^{tg(i)}\sum_{j\in J}g(j)\mathrm{e}^{tg(j)}}{(\sum_{j\in J}\mathrm{e}^{tg(j)})^2}\\
&= \frac{g(i)\mathrm{e}^{tg(i)}}{\sum_{j\in J}\mathrm{e}^{tg(j)}}-\left(\frac{\mathrm{e}^{tg(i)}}{\sum_{j\in J}\mathrm{e}^{tg(j)}}\right)\left(\frac{\sum_{j\in J}g(j)\mathrm{e}^{tg(i)}}{\sum_{j\in J}\mathrm{e}^{tg(j)}}\right)\\
&= p_i(t)g(i)-p_i(t)\sum_{j\in J}g(j)p_j(t)
\end{aligned} \tag{24}$$

[4] エネルギー関数 $e(i)$ で考えたいのであれば単に $e(i)=-g(i)$ を採用すればよい.

が得られる．$P(H,t)=\sum_{i\in H}p_i(t)$ の両辺を世代 t で微分したものの右辺に上式 (24) を代入すると

$$\begin{aligned}\frac{dP(H,t)}{dt} &= \sum_{i\in H}\frac{dp_i(t)}{dt}=\sum_{i\in H}\left\{p_i(t)g(i)-p_i(t)\sum_{j\in J}g(j)p_j(t)\right\}\\ &= \sum_{i\in H}p_i(t)g(i)-\sum_{i\in H}p_i(t)\sum_{j\in J}g(j)p_j(t)=f(H,t)-P(H,t)f(J,t)\end{aligned}\tag{25}$$

が得られる．ここで, 最後の等式の導出では世代 t でのスキーマ H の平均適応度の定義式 (17) を用いたことに注意されたい．これは Holland の条件式 (21) に他ならない．従って, GA により生成した遺伝子配列の経験分布は, その GA が Holland の条件式 (21) の意味で有効な探索アルゴリズムであるのであれば, **その経験分布は逆温度 β_t で特徴つけられるボルツマン分布である (近似できる) 可能性が高い**ことがここで示した事実から示唆される．

2.3 本研究における GA の実行手順

GA は異なる問題領域に対して様々な応用がなされているが，本研究では最も簡単な Simple GA を用いる．実行手順に関しては一般的に知られているような以下の通りである．

(i) N 個のスピンを有する個体を M 個生成し，各スピンの値はランダムに ± 1 に設定する．

(ii) M 個の個体全ての適応値を計算し，それに基づいてトーナメント選択を行う．

(iii) 選択された個体からランダムに 2 個体を選び，交叉率 p_c の交叉を行って子個体を生成する．

(iv) 交叉を行った個体に確率 p_m で突然変異を起こし，新たな個体を作る．

(v) 新たに生成した M 個の個体を次世代の個体とし, 条件を満たしていない場合 (ii) へ戻る．これら一連の手順を繰り返すことで経験分布 $P_{GA}^{(t)}(\boldsymbol{s})$ を生成する．

3 有効温度に関する発展方程式の導出

既に序論でも述べたが, 本研究の目的は **GA のマルコフ過程における生成分布をボルツマン分布で近似し, そのボルツマン分布を特徴つけるハイパーパラメータである「温度」を学習する**ことである．このとき, 近似をする際に用いる分布としてボルツマン分布を選ぶことの正当性は前節で示したように, Holland の関係式が保証している．ここでは, その有効温度に関する学習方程式を分布間距離に関する勾配法を基礎に導出する．

3.1 カルバック・ライブラ情報量の勾配と定常状態

GA の生成分布 $P_{GA}^{(t)}$ と，それに対応するボルツマン分布 $P_B^{(t)}$ の分布間距離を最小化するような勾配法に基づき温度の発展方程式を構成する．そこで, ここでは次のような**カルバック・ライブラ情報量 (KL 情報量)** を定義する．

$$\begin{aligned}K(P_{GA}\|P_B) &= \sum_{\boldsymbol{s}}P_{GA}(\boldsymbol{s})\log\left\{\frac{P_{GA}(\boldsymbol{s})}{P_B(\boldsymbol{s})}\right\}\\ &= \sum_{\boldsymbol{s}}P_{GA}(\boldsymbol{s})\log P_{GA}(\boldsymbol{s})-\sum_{\boldsymbol{s}}P_{GA}(\boldsymbol{s})\log P_B(\boldsymbol{s})\end{aligned}\tag{26}$$

これを逆温度 β の関数とみなし，各ステップでこのコスト関数を最小化するように学習方程式を構成すると

$$\frac{d\beta}{dt} = -\frac{\partial K(P_{GA}^{(t)} \| P_B^{(t)})}{\partial \beta} = \sum_{\boldsymbol{s}} P_{GA}^{(t)}(\boldsymbol{s}) \cdot \frac{\partial P_B^{(t)}(\boldsymbol{s})/\partial \beta}{P_B^{(t)}(\boldsymbol{s})} \tag{27}$$

である．もちろん, 分布間距離の測り方としては, ここで導入した KL 情報量以外にも様々考えられるが, ここでは最も自然なものとして KL 情報量を採用する．ここで, 十分な時間の経過後 $t = \infty$ に両分布が一致 ($P_{GA}^{(\infty)}(\boldsymbol{s}) = P_B^{(\infty)}(\boldsymbol{s})$) したとすれば,

$$\frac{d\beta}{dt} = \sum_{\boldsymbol{s}} P_{GA}^{(\infty)}(\boldsymbol{s}) \cdot \frac{\partial P_B^{(\infty)}(\boldsymbol{s})/\partial \beta}{P_B^{(\infty)}(\boldsymbol{s})} = \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_{\boldsymbol{s}} P_B^{(\infty)}(\boldsymbol{s}) = \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_{\boldsymbol{s}} \delta(\boldsymbol{s} - \boldsymbol{s}_*) = \frac{\partial \alpha}{\partial \beta} = 0 \tag{28}$$

となり，逆温度の時間発展が終了する．ここで α は逆温度に依存しない定数である (最小エネルギー状態の縮退数)．従って, 勾配法に基づく有効温度更新式の定常状態の一つが GA から生成される遺伝子配列分布であることが保証されることになる.

3.2 磁性体の数理模型での定式化

既に述べたように, ボルツマン分布は考える最適化問題のエネルギー関数が与えられれば定義することができる．以下では, 具体的にエネルギー関数を次の磁性体の数理模型:

$$H(\boldsymbol{s}) = -\sum_{ij} J_{ij} s_i s_j \tag{29}$$

に選んだ場合の学習方程式を導出する．ここにスピン変数 s_i は ± 1 の 2 値をとり, スピン間の結合 J_{ij} は一様, あるいはランダムな変数である.

$$\frac{\partial P_B(\boldsymbol{s})}{\partial \beta} = \frac{(\sum_{ij} J_{ij} s_i s_j) e^{\beta \sum_{ij} s_i s_j} (\sum_{\mathbf{s}} e^{\beta \sum_{ij} s_i s_j}) - (\sum_{\mathbf{s}} \sum_{ij} J_{ij} s_i s_j e^{\beta \sum_{ij} J_{ij} s_i s_j}) e^{\beta \sum_{ij} J_{ij} s_i s_j}}{(\sum_{\mathbf{s}} e^{\beta \sum_{ij} s_i s_j})^2}$$

$$\frac{\partial P_B(\boldsymbol{s})/\partial \beta}{P_B(\boldsymbol{s})} = \sum_{ij} J_{ij} s_i s_j - \frac{\sum_{\boldsymbol{s}} (\sum_{ij} J_{ij} s_i s_j)\, \mathrm{e}^{\beta \sum_{ij} J_{ij} s_i s_j}}{\sum_{\boldsymbol{s}} \mathrm{e}^{\beta \sum_{ij} J_{ij} s_i s_j}}$$

であるから, 磁性体の数理模型に対して学習方程式 (27) は直ちに

$$\frac{d\beta}{dt} = \sum_{\boldsymbol{s}} P_{GA}(\boldsymbol{s}) \left(\sum_{ij} J_{ij} s_i s_j \right) - \frac{\sum_{\boldsymbol{s}} (\sum_{ij} J_{ij} s_i s_j)\, \mathrm{e}^{\beta \sum_{ij} J_{ij} s_i s_j}}{\sum_{\boldsymbol{s}} \mathrm{e}^{\beta \sum_{ij} J_{ij} s_i s_j}} \tag{30}$$

と書き直すことができる．この右辺第 2 項は, 温度 $T = \beta^{-1}$ での内部エネルギーに相当する量である．第 1 項はエネルギー関数 $\sum_{ij} J_{ij} s_i s_j$ を GA の配列生成分布 $P_{GA}(\boldsymbol{s})$ で平均したものを表している．従って, ここでもやはり, $P_{GA}(\boldsymbol{s}) = P_B(\boldsymbol{s})$ であるのならば

$$\sum_{\boldsymbol{s}} P_{GA}(\boldsymbol{s}) \left(\sum_{ij} J_{ij} s_i s_j \right) = \sum_{\boldsymbol{s}} P_B(\boldsymbol{s}) \left(\sum_{ij} J_{ij} s_i s_j \right) = \frac{\sum_{\boldsymbol{s}} (\sum_{ij} J_{ij} s_i s_j)\, \mathrm{e}^{\beta \sum_{ij} J_{ij} s_i s_j}}{\sum_{\boldsymbol{s}} \mathrm{e}^{\beta \sum_{ij} J_{ij} s_i s_j}}$$

となり, これは (30) 式右辺第 2 項の符号を変えたものに等しく, このとき逆温度の更新が停止する. あとは (30) 式を解けばよいのだが, 一般に時刻 t での GA の生成分布は未知であるので, これを時

刻 t で実現される GA の生成経験分布からのサンプリングによる期待値計算で置き換える. 具体的には $s_i(t,l)$ を時刻 t での l 回目のサンプリング点とし，L 回遺伝子個体からサンプリングするとして，

$$\sum_{\boldsymbol{s}} P_{GA}(\boldsymbol{s}) \left(\sum_{ij} J_{ij} s_i s_j \right) = \lim_{L\to\infty} \frac{1}{L} \sum_{l=1}^{L} \left(\sum_{ij} J_{ij} s_i(t,l) s_j(t,l) \right) \tag{31}$$

と計算する. (30) 式の右辺第 2 項の内部エネルギーは J_{ij} が符号も含めてランダムなスピングラス模型の場合には特殊な場合を除いて厳密解は無いので, 別途, マルコフ連鎖モンテカルロ法などを用いて数値テーブルを作成しておく必要があるが, ここでは一般に

$$E(\{J\}:\beta) = -\frac{\sum_{\boldsymbol{s}} (\sum_{ij} J_{ij} s_i s_j)\, \mathrm{e}^{\beta \sum_{ij} J_{ij} s_i s_j}}{\sum_{\boldsymbol{s}} \mathrm{e}^{\beta \sum_{ij} J_{ij} s_i s_j}} \tag{32}$$

と略記する. なお, 本論文で用いる数理模型では内部エネルギーを解析的に算出する事ができることに注意されたい.

以上より逆温度 β の学習方程式は次のように書ける.

$$\frac{d\beta}{dt} = \lim_{L\to\infty} \frac{1}{L} \sum_{l=1}^{L} \left(\sum_{ij} J_{ij} s_i(t,l) s_j(t,l) \right) + E(\{J\}:\beta) \tag{33}$$

これから直ちにエネルギーに共役なパラメータ[5] β の更新がそれぞれのエネルギーの差になっていることがわかる．そこで, $t\to\infty$ での取り扱いを簡単にするため, $\beta = 1/T$ を用いて，温度についての方程式に変換すると, $d\beta/dt = -(1/T^2)dT/dt$ に注意し

$$\frac{dT}{dt} = -T^2 \lim_{L\to\infty} \frac{1}{L} \sum_{l=1}^{L} \left(\sum_{ij} J_{ij} s_i(t,l) s_j(t,l) \right) - T^2 E(\{J\}:\beta) \tag{34}$$

となる. この「有効温度」に関する微分方程式が本研究で用いる基礎方程式である. 以下の節では, この微分方程式を数値的に解き, 結果として得られる有効温度の時間依存性 (スケジューリング) の普遍性について考察する.

3.3 平均的性能評価と自己平均性

後に詳しく述べるが, 上記のような磁性体の数理モデルのエネルギー関数を採用した場合, その最適化問題の難しさは結合 $\{J_{ij}\}$ の統計的性質に依存する. 有限サイズの系でで $\{J_{ij}\}$ を一つ選び, 学習方程式 (34) を解き, T に関する時間発展が得られたとすれば, それは明らかに選んだ $\{J_{ij}\}$ に依存する. 用いた GA がある特定の $\{J_{ij}\}$ を有するエネルギー関数で与えられる最適化問題に特異的に良い結果を与えるかもしれないし, その逆もあり得る. 従って, 「フェアな評価」として重要なのは $\{J_{ij}\}$ の選び方に依らない学習方程式の「平均的な」振る舞いであり, それを評価するためには (34) 式の両辺を $\{J_{ij}\}$ の実現確率で平均した

$$\frac{dT}{dt} = -T^2 \lim_{L\to\infty} \frac{1}{L} \sum_{l=1}^{L} \left[\left(\sum_{ij} J_{ij} s_i(t,l) s_j(t,l) \right) \right]_{\{J_{ij}\}} - T^2 \left[E(\{J\}:\beta) \right]_{\{J_{ij}\}} \tag{35}$$

[5] 既に第 1 節で使った用語であるが, ここでは指数関数の肩でパラメータ a と物理量 A が aA の形でエネルギーの次元を持つ量を構成するとき, 「a と A は互いに共役である」と言うことに注意されたい.

をこそ評価すべきである．ところで, 内部エネルギーと自由エネルギーの関係は (6) 式で与えられたことを思い出すと, 上式右辺第 2 項の内部エネルギーに関する平均は

$$[E(\{J\}:\beta)]_{\{J_{ij}\}} \quad = \quad \frac{\partial}{\partial\beta}\left(\beta\,[F(\{J\}:\beta)]_{\{J_{ij}\}}\right) \tag{36}$$

のように自由エネルギー経由で書くことができる．統計力学では自由エネルギーなどの物理量はスピンの数が無限大の極限では[6], 結合 $\{J_{ij}\}$ の選び方に依らない, 言い方を変えると, スピン数無限大の極限では一つの $\{J_{ij}\}$ の選び方に対して観測される自由エネルギーの値はその $\{J_{ij}\}$ での平均値に等しいという**自己平均性 (Self-averaging)** が成り立つことが知られている．式で書くと

$$\lim_{N\to\infty} F(\{J\}_{\text{一つの実現値}}:\beta) \quad = \quad [F(\{J\}:\beta)]_{\{J_{ij}\}} \tag{37}$$

が成り立つ．従って, この事実を用いることによって, (54) 式を評価する際, 上 (37) 式右辺の平均操作は実行可能な確率モデルに関してはその平均値を用い[7], 逆に, そのような平均操作が実行できない (37) 式の右辺第 1 項の場合にはその平均をとる代わりに, **十分大きな系で計算機実験を行うことで, 与えた一つの実現値 $\{J_{ij}\}$ で計算されたこの (37) 式第 1 項は $\{J_{ij}\}$ でその平均をとったものとみなすことができる**．従って, 本研究では十分に大きな系を考えることで実質的に学習方程式の平均的振る舞いを評価していることになるわけである．

4　スピングラスとその可解模型

ここでは本論文の数値実験で用いる磁性体の一つである「スピングラス」[18] について簡単に説明する．スピングラスの数理モデルはスピングラス磁性を説明するための人工的モデルではあるが, その数理モデルは脳の記憶モデル [19] やタンパク質の折りたたみ構造 [18, 20], 巡回セールスマン問題 [21] 等のエネルギー関数の雛形を与える基本的モデルとして認知されており, 多くの局所最小を有するシステムを記述するための標準模型でもある．

4.1　磁性体と相転移

物理学において，原子のもつ磁気モーメント (原子スケールの「小磁石」) をスピンと呼ぶ．このスピン間の相互作用によって引き起こされる協力現象は, 物性物理学 (もしくは凝縮系物理学) の分野で古くから研究されている．典型的な例として磁石（強磁性体）が挙げられるが, この磁石には隣接するスピン間に互いの向きを平行に揃えようとする相互作用が存在し, 絶対零度, および, 低温ではエネルギーが最小となるように全てのスピンが一つの方向に整列する (図 4 参照．これは強磁性秩序と呼ばれる)．逆にスピンの向きを反平行に揃えようとする相互作用が存在する場合には反強磁性秩序と呼ばれる (図 5 参照)．スピンの秩序は磁性体の温度がある値以上になると, 熱揺らぎ効果が顕著となり, 先に説明したように自由エネルギーを小さくするためには, エントロピーを大きくすることが系にとって得策となり, ほどなく秩序は消滅する．これを**相転移**とよび，その機構解明によって強磁性体のみならず，様々な多体系の協力現象が理解できる．

[6]「熱力学極限」と呼ばれる．
[7]第 1 節で説明したレプリカ法を用いる．

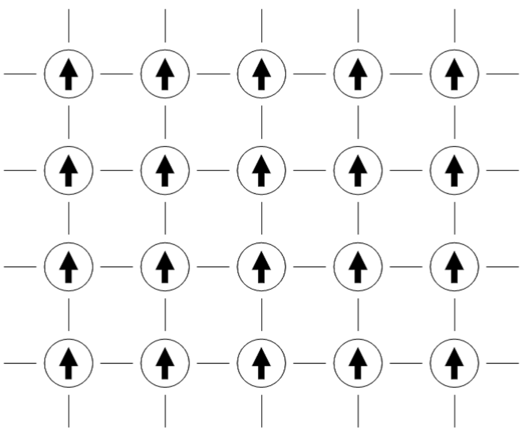

図 1: 強磁性秩序状態. 矢印がスピン変数. 実線で与えられる結合は $J_{ij} = J > 0\,(\forall_{i,j})$ である.

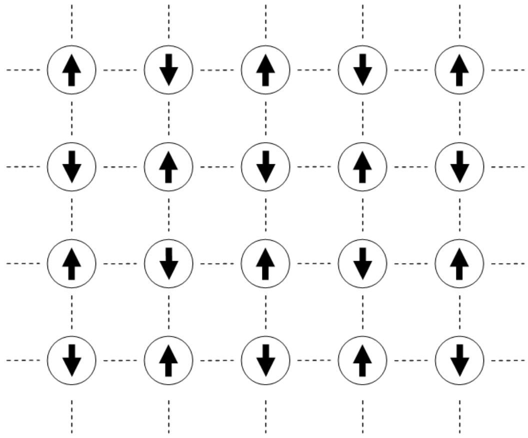

図 2: 反強磁性秩序状態. 矢印がスピン変数. 破線で与えられる結合は $J_{ij} = J < 0\,(\forall_{i,j})$ である.

4.2 スピングラスとは何か?

スピングラス磁性もそれと同様に多体協力現象の一つであるが，有限次元系でのスピングラス相の存在の有無も含めて未解決な問題が多く, 磁性体理論の分野では重要な研究テーマとして認識されている．スピングラスとは金や銅などの非磁性の金属に電子スピンをもった磁性体を薄い濃度で不純物として混ぜ, 磁性体の電子スピンが乱雑なまま固まった物質である．混ぜる磁性体の不純物は鉄やマンガンが選ばる．磁性不純物はランダムに混ざるため、そのスピンは反強磁性的な相互作用によりバラバラなスピン間の各所でフラストレーションを起こし, 冷えて固まればバラバラな状態でフラストレーションを持ったまま固定される. 磁性を発揮する電子スピンの向きがガラスのようにバラバラな配列のままで固定されている．この時のスピンの向きに長距離秩序は存在しない. このようなランダム磁性体の特徴の一つとして低温にかけて特徴的な遅い緩和現象 (スローダイナミクス) がみられる．例えば, 低温で物質を磁化した後に磁場を切ると, 磁化は単純な指数関数とはならず, 温度領域の違いなどによって時間 t の対数関数やべき関数，あるいは引き伸ばされた指数関数に従って現象することが知られている．これらの緩和現象はガラス物質が過冷却の液体状態からガラス状態に転移する際によく見られる現象である．また，引き伸ばされた指数関数による緩和現象はコールラォシュ則として様々な物質で観測されている [18].

スピングラス模型はこのスピングラスを数学上の模型で表したしたものであり, サイト i のスピンの値を s_i とすると，次のようなエネルギー関数 (ハミルトニアン) を持つ.

$$H \quad = \quad -\sum_{ij} J_{ij} s_i s_j \tag{38}$$

最近接スピン対の間の相互作用 J_{ij} の全てが正である場合が前出の強磁性体，全て負であるものが反強磁性体である．エドワーズとアンダーソン [22] はスピングラスにとっての本質がスピン間相互作用の正負のランダム性であると考え，ランダムな変数である J_{ij} の統計的性質をを平均 $J_0 > 0$, 分散 J である正規分布に従うと仮定した．すなわち, ϵ_{ij} を平均がゼロ, 分散が 1 の正規分布に従う, ランダムな確率変数とすれば

$$J_{ij} \quad = \quad J_0 + J\epsilon_{ij} \tag{39}$$

であり, これをハミルトニアン (38) に代入すれば

$$H \quad = \quad -J_0 \sum_{ij} s_i s_j - J \sum_{ij} \epsilon_{ij} s_i s_j \tag{40}$$

となる[8]．従って, $T = 0$ で $J_0 \gg J$ であれば, ハミルトニアンの最小エネルギー状態は明らかに全てのスピンが「上向き」$s_i = +1 \;\; \forall(i)$ か全てのスピンが「下向き」$s_i = -1 \;\; \forall(i)$ の強磁性状態である. 逆に $J \gg J_0$ であれば, 系はスピングラス相となり, フラストレーションのためにエネルギー・ランドスケープが多谷構造を持ち, 結果として最小エネルギーを与えるスピンの配列は非自明となる[9]. 有限温度の場合も含めた Edwards-Anderson (EA) スピングラス [22] の相図は図 3 のようになる. 高温の常磁性相ではスピンの値が完全にランダムな状態であり，一定の秩序はない．また低温の領域ではスピングラス相と強磁性相が存在し，前述のように, J_0 が J に比べて十分に小さい系がスピングラス相である．スピングラスモデルは巡回セールスマン問題 [21] など組み合わせ最適化

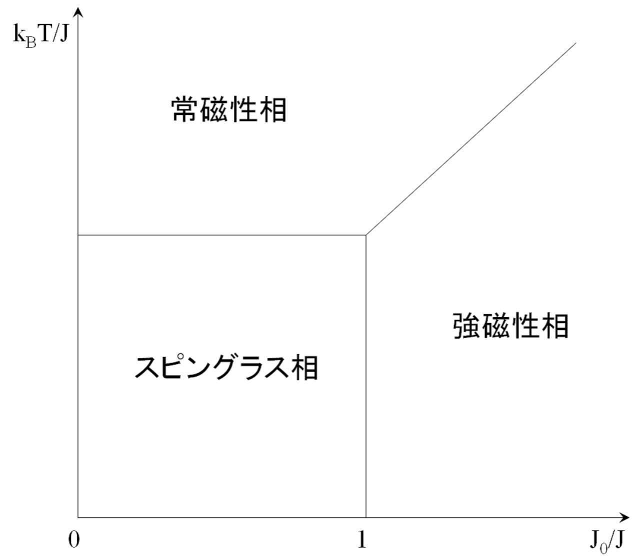

図 3: スピングラスの相図. 後に述べるように, m を自発磁化, q をスピングラス秩序変数とすると, 強磁性相は $m, q \neq 0$, 常磁性相は $m = q = 0$, スピングラス相は $m = 0, q \neq 0$ で特徴付けられる.

問題のエネルギー関数を与えるなど, 多くの問題の雛形を与える模型であり，アルゴリズムの数理

[8]実は直後に述べるように系に「ランダムネス」を与えただけではスピングラス磁性は発現されない. 例えば, ランダムネスを含むだけであれば, $J_{ij} = \xi_i \xi_j$ とし, $\xi_i \;\; \forall(i)$ に $\xi_i = \pm 1$ をランダムに割り当てることでエネルギー関数

$$H = -\sum_{ij} \xi_i \xi_j s_i s_j$$

を持つ磁性体をを作ることができる. しかし, 全サイトで同時に $s_i \to \xi_i s_i$ と変数変換 (「ゲージ変換」) を行うと

$$H = -\sum_{ij} \xi_i \xi_j \xi_i s_i \xi_i s_j = -\sum_{ij} s_i s_j$$

となり, このエネルギー関数からわかるように, 系はスピングラスではなく, 「強磁性体」となる. 上記の数理模型を**マチス模型 (Mattis model)**[23] と呼び, ランダムネスを有するがスピングラスにはならない例の一つとして知られている. スピングラス磁性が発現するためには「ランダムネス」と「フラストレーション」の双方の存在が必要であり, どちらか一方が欠けてもスピングラスにはならない.

[9]ここで「信号処理」的な解釈をするのであれば, 比: J_0/J は「シグナル/ノイズ (S/N) 比」とみなすことができる. $J_0 \gg J$ であれば全てのスピンが揃った所望の「信号」が問題なく取り出せる. しかし, $J_0 \sim J$ であると全てのスピンが揃った所望の「信号」はその他の雑音に埋もれてしまい, もはやエネルギー最小状態として全てのスピンの揃った「信号」を取り出すことは困難となる.

的側面を深く調べるために有効な数理模型である．本研究ではスピングラスの中でも最も単純で厳密解のわかっている**一次元鎖モデル** [8, 9] と **SK (Sherrington-Kirkpatrick)** 模型 [10] を扱う．

4.3　可解模型その 1：一次元スピングラス鎖

スピン変数が一次元鎖上に並んだ最も単純なスピングラス模型である．この模型ではエネルギーの温度依存性だけでなく，最小エネルギーの値も厳密に求めることができるため，最小エネルギーとの差で定義される残留エネルギーも計算することができる．エネルギー関数は

$$H = -\sum_{i=1}^{N} J_i s_i s_{i+1}, \quad J_i = \mathcal{N}(J_0, J) \tag{41}$$

である．J_i は各スピン間の結合の重みを表し，平均 J_0，分散 J の正規分布に従う．

4.4　可解模型その 2：Sherrington-Kirkpatrick 模型

完全グラフ上にスピンが配置されることで全てのスピンがつながっており, 相互作用の及ぶ範囲 (レンジ) が無限大に及ぶことから, **無限レンジ・スピングラス模型**とも呼ばれる．そのエネルギー関数は

$$H = -\sum_{i=1}^{N}\sum_{j\neq i} J_{ij} s_i s_j, \tag{42}$$

で与えられる．ここで，相互作用 J_{ij} は次の正規分布に従う確率変数である．

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{J}\sqrt{\frac{N}{2\pi}}\exp\left\{-\frac{N}{2J^2}\left(J_{ij}-\frac{J_0}{N}\right)^2\right\} \tag{43}$$

この確率分布の平均と分散はいずれも $1/N$ に比例しているが，こうすることでエネルギーや比熱などの物理量が N に比例する「示量性」の量となる．SK 模型は一次元鎖と比べてエネルギーのランドスケープが極めて複雑であり，そのエネルギー障壁は無限に大きくなる可能性もある．そのため, 最適化問題の観点からは一次元鎖よりも難しいと考えられる．2 つのモデルの略図を下に示す．SK モデルは磁性体の数理模型としては「人工的」であるが, 情報科学の諸問題では完全グラフ, あ

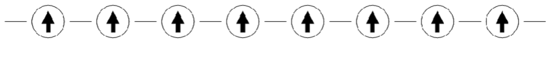

図 4: 一次元鎖モデル (両端が繋がっている「周期的境界条件」を用いる．$N = 8$)

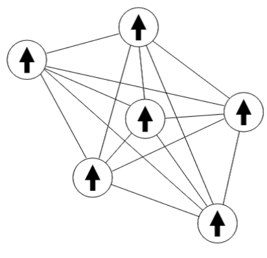

図 5: SK 模型 ($N = 6$)

るいは完全グラフに近いネットワーク構造上での情報処理を扱う場合も多く (例えば「脳」), その意味で重要な数理模型の一つと考えられている．

4.5 可解模型の内部エネルギー

ここでは学習方程式を解くにあたって必要なそれぞれの内部エネルギーを導出しておく. 既に第1節で述べたように, 学習方程式の平均的性能を議論するために, 内部エネルギーの結合 $\{J_{ij}\}$ についての平均操作を行う必要がある. 一次元鎖に関してはこの操作は容易である. SK 模型の場合はレプリカ法を用いるしかなく, やや複雑な計算を実行しなければならないが, そのような面倒な計算を解析的に行うことで, 部分的にではあるが計算機による数値計算の精度や統計誤差に依らない精密な議論が可能となる.

4.5.1 一次元スピングラス鎖

まずは一次元スピングラス鎖の内部エネルギーを導出する. 系は次のエネルギー関数を持つ.

$$H = -\sum_{i=1}^{N} J_i s_i s_{i+1} \tag{44}$$

このとき, s_i は ± 1 の値をとるが, この積 $s_i s_{i+1}$ も ± 1 の値を持つから, 変数 τ_i を $\tau_i = s_i s_{i+1}$ で導入すると, この新たな変数もやはり $\tau_i \in \{1, -1\}$ の値をとることになる. 従って, ハミルトニアンは

$$H = -\sum_{i} J_i \tau_i \tag{45}$$

と書き直すことができて, このエネルギーを最小化するためには, 明らかに各サイト i で J_i の符号と同じ値を τ_i に割り当てればよいので, $\tau_i = \mathrm{sgn}(J_i)$ を全てのサイトへ割り当てれば基底エネルギー (最小エネルギー) が

$$E_{min} = -\sum_{i} J_i\, \mathrm{sgn}(J_i) = -\sum_{i} |J_i| \tag{46}$$

と求まる. ここで, $A\,\mathrm{sgn}(A) = |A|$ なる恒等式を用いた. 従って, J_i が平均 J_0, 分散 J の正規分布に従うとすると, 単位スピンあたりの基底エネルギーは

$$\frac{E_{min}}{N} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dJ_i}{\sqrt{2\pi}J}\, \mathrm{e}^{-\frac{(J_i - J_0)^2}{2J^2}} |J_i| = -J_0 - J\sqrt{\frac{2}{\pi}}\, \mathrm{e}^{-\frac{J_0^2}{2J^2}} \tag{47}$$

となる. 従って, $J_0 = 0, J = 1$ に選ぶと, 基底エネルギーは $-\sqrt{2/\pi}$ と評価できる.

次に有限温度の場合を考える. 有限温度の場合の単位スピンあたりの内部エネルギーは

$$\frac{[\langle H \rangle]}{N} = \left[\frac{\sum_{\{\tau\}} \{-\sum_i J_i \tau_i\}\, \mathrm{e}^{\beta \sum_i J_i \tau_i}}{\sum_{\{\tau\}} \mathrm{e}^{\beta \sum_i J_i \tau_i}} \right] = -\frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial \beta} \left[\log \sum_{\{\tau\}} \mathrm{e}^{\beta \sum_i J_i \tau_i} \right] \tag{48}$$

である. ここに括弧 $[\cdots]$ は $\{J_i\}$ に関する平均操作を意味する.

さて, この系の分配関数: $Z = \sum_{\{\tau\}} \mathrm{e}^{\beta \sum_i J_i \tau_i}$ は次のように計算できる.

$$Z = \sum_{\{\tau\}} \mathrm{e}^{\beta \sum_i J_i \tau_i} = \{2 \cosh(\beta J_i)\}^N \tag{49}$$

従って, 直ちに

$$\frac{[\log Z]}{N} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dJ_i}{\sqrt{2\pi}J} \mathrm{e}^{-\frac{(J_i - J_0)^2}{2J^2}} \log 2\cosh(\beta J_i) = \int_{-\infty}^{\infty} Dx \log 2\cosh\beta(J_0 + Jx) \tag{50}$$

が得られる．よって, 単位スピンあたりの内部エネルギーは簡単な計算の結果

$$\frac{[\langle H\rangle]}{N} = -J_0\int_{-\infty}^{\infty} Dx\tanh\beta(J_0+Jx) - \beta J^2\int_{-\infty}^{\infty}\frac{Dx}{\cosh^2\beta(J_0+Jx)} \tag{51}$$

となる．特に, $J_0=0, J=1$ の場合には, 内部エネルギーの温度依存性は

$$\frac{[\langle H\rangle]}{N} = -\beta\int_{-\infty}^{\infty}\frac{Dx}{\cosh^2\beta x} \tag{52}$$

で与えられる．すると, この一次元スピングラス鎖の場合, GA からのボルツマン分布の学習方程

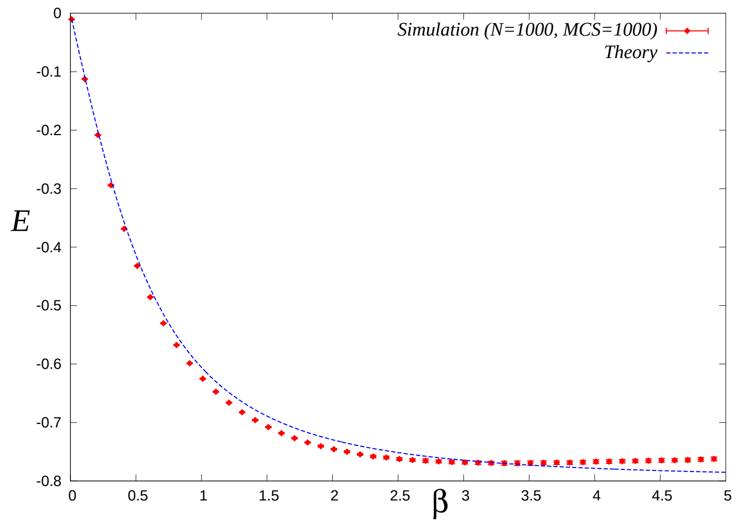

図 6: 一次元スピングラス鎖の内部エネルギーの逆温度依存性．理論曲線は式 (52) をプロットした．シミュレーションはスピン数 $N=1000$, 各温度でのモンテカルロステップ数は 1000 に選んである．誤差棒は 10 回の独立試行によって計算してある．

式は

$$\frac{dT}{dt} = T^2\lim_{M\to\infty}\frac{1}{M}\sum_{l=1}^{M}\left(\sum_{ij}J_{ij}s_i(t,l)s_j(t,l)\right) - T\int_{-\infty}^{\infty}\frac{Dx}{\cosh^2\beta x} \tag{53}$$

のように簡略化される．よって, この場合, 数値的に評価することが必要になるのは上式右辺第 1 項のみとなる．

4.5.2 Sherrington-Kirkpatrick 模型

一次元鎖模型と同様に SK 模型も内部エネルギーを解析的に導出することができる．しかし, SK 模型の場合は一次元鎖模型のように自由エネルギーの $\{J_{ij}\}$ についての平均操作を実行することができない．その理由は $\{J_{ij}\}$ の $\log Z$ への依存性が非常に複雑であり, この種の平均操作を実行することがほぼ不可能なためである．そこで, 第 1 節で述べたように, 次の恒等式を用い, この計算を間接的に実行することを考える．

$$[\log Z] = \lim_{n\to 0}\frac{[Z^n]-1}{n} \tag{54}$$

つまり, $\log Z$ の平均操作より簡単な Z^n の $\{J_{ij}\}$ 平均を求めてから $n \to 0$ の極限をとる**レプリカ法**を用いる．具体的に $[Z^n]$ は次のように表される．

$$[Z^n] \;=\; \int_{-\infty}^{\infty}\left\{\prod_{i<j} dJ_{ij}P(J_{ij})\right\}\mathrm{Tr}\exp\left(\beta\sum_{i<j}J_{ij}\sum_{\alpha=1}^{n}S_i^\alpha S_j^\alpha\right) \tag{55}$$

ここで, α, β ($\alpha \neq \beta$) はレプリカの番号であり, スピントレース $\mathrm{Tr}(\cdots)$ は $S_k^\gamma = \pm 1, \forall_{\gamma=\alpha,\beta;k=i,j}$ に関する和を意味する．実際に各 J_{ij} に対し, その分布 $P(J_{ij})$ での平均を計算すると

$$\begin{aligned}[Z^n] \;&=\; \mathrm{Tr}\exp\left\{\frac{1}{N}\sum_{i<j}\left(\frac{1}{2}\beta^2J^2\sum_{\alpha,\beta}S_i^\alpha S_j^\alpha S_i^\beta S_j^\beta\right)+\beta J_0\sum_\alpha S_i^\alpha S_j^\alpha\right\} \\ &=\; \mathrm{e}^{N\beta^2J^2n/4}\,\mathrm{Tr}\exp\left\{\frac{\beta^2J^2}{2N}\sum_{\alpha<\beta}\left(\sum_i S_i^\alpha S_i^\beta\right)^2+\frac{\beta J_0}{2N}\sum_\alpha\left(\sum_i S_i^\alpha\right)^2\right\}\end{aligned} \tag{56}$$

が得られる．上式で各 i ごとで独立にスピントレース $\mathrm{Tr}(\cdots)$ を実行するため, $(\sum_i^\alpha S_i^\beta)^2$ と $(\sum_i S_i^\alpha)^2$ を次の恒等式:

$$\mathrm{e}^{\frac{a^2}{2}} \;=\; \int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2}+\sqrt{2}ax} \tag{57}$$

を用いて書き換えよう[10]．具体的には, それぞれ変数 $q_{\alpha\beta}$, m_α を上記恒等式における x だとみなせば

$$\exp\left[\left(\frac{\beta J}{\sqrt{2N}}\sum_i s_i^\alpha s_j^\beta\right)^2\right] \;=\; \int_{-\infty}^{\infty}\frac{dq_{\alpha\beta}}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{-\frac{q_{\alpha\beta}^2}{2}}\exp\left(\frac{\beta J}{N}q_{\alpha\beta}\sum_i s_i^\alpha s_i^\beta\right) \tag{58}$$

$$\exp\left[\left(\frac{\beta J_0}{\sqrt{2N}}\sum_i s_i^\alpha\right)^2\right] \;=\; \int_{-\infty}^{\infty}\frac{dm_\alpha}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{-\frac{m_\alpha^2}{2}}\exp\left(\frac{\beta J_0}{N}m_\alpha\sum_i s_i^\alpha\right) \tag{59}$$

であるから, これを用いたのち, $q_{\alpha\beta}/N \to \beta Jq_{\alpha\beta}, m_\alpha/N \to \beta J_0m_\alpha$ なる変数変換を施すと分配関数のモーメントは

$$\begin{aligned}[Z^n] \;&=\; e^{N\beta^2J^2n/4}\int_{-\infty}^{\infty}\prod_{\alpha<\beta}dq_{\alpha\beta}\int_{-\infty}^{\infty}\prod_\alpha dm_\alpha\exp\left(-\frac{N\beta^2J^2}{2}\sum_{\alpha<\beta}q_{\alpha\beta}^2-\frac{N\beta J_0}{2}\sum_\alpha m_\alpha^2\right) \\ &\times\; \mathrm{Tr}\exp\left(\beta^2J^2\sum_{\alpha<\beta}q_{\alpha\beta}\sum_i S_i^\alpha S_i^\beta+\beta\sum_\alpha J_0m_\alpha\sum_i S_i^\alpha\right)\end{aligned} \tag{60}$$

となる．ここで便宜上導入した m_α,$q_{\alpha\beta}$ はそれぞれ, **自発磁化**, **スピングラス秩序パラメータ**に相当する．従って, このように「一体問題化」してしまえば, 添字 i はもはや「ダミー」なのでスピントレースの部分は直ちに

$$\left\{\mathrm{Tr}\exp\left(\beta^2J^2\sum_{\alpha<\beta}q_{\alpha\beta}S^\alpha S^\beta+\beta\sum_\alpha J_0m_\alpha S^\alpha\right)\right\}^N \equiv \exp\left(N\log\mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^L\right) \tag{61}$$

と実行できる．ただし

$$L \;\equiv\; \beta^2J^2\sum_{\alpha<\beta}q_{\alpha\beta}S^\alpha S^\beta+\beta J_0\sum_\alpha m_\alpha S^\alpha \tag{62}$$

[10] このような手続きを**ハバード・ストラトノビッチ変換 (Hubberd-Stratonovich transformation)** と呼ぶ．

と定義したことに注意されたい．よって, 分配関数のモーメントは

$$[Z^n] \;=\; \mathrm{e}^{N\beta^2J^2n/4}\int_{-\infty}^{\infty}\prod_{\alpha<\beta}dq_{\alpha\beta}\int_{-\infty}^{\infty}\prod_{\alpha}dm_\alpha \exp\left(-\frac{N\beta^2J^2}{2}\sum_{\alpha<\beta}q_{\alpha\beta}^2-\frac{N\beta J_0}{2}\sum_{\alpha}m_\alpha^2+N\log\mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^L\right)$$

となる．N を大きく保ったまま n をゼロに近づける鞍点法により上記の多重積分を評価すると

$$[Z^n] \;\simeq\; 1+Nn\left(-\frac{\beta^2J^2}{4n}\sum_{\alpha\neq\beta}q_{\alpha\beta}^2-\frac{\beta J_0}{2n}\sum_{\alpha}m_\alpha^2+\frac{1}{n}\log\mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^L+\frac{1}{4}\beta^2J^2\right) \tag{63}$$

が得られる. 以上より自由エネルギーはレプリカ法の定義に遡って考え直すと

$$-\beta[f] \;=\; \lim_{n\to 0}\frac{[Z^n]-1}{nN}=\lim_{n\to 0}\left(-\frac{\beta^2J^2}{4n}\sum_{\alpha\neq\beta}q_{\alpha\beta}^2-\frac{\beta J_0}{2n}\sum_{\alpha}m_\alpha^2+\frac{1}{n}\log\mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^L+\frac{1}{4}\beta^2J^2\right) \tag{64}$$

で与えられる. ただし, $q_{\alpha\beta}, m_\alpha$ は鞍点であり, 上記自由エネルギーの $q_{\alpha\beta}$ についての極値条件より

$$q_{\alpha\beta} \;=\; \frac{1}{\beta^2J^2}\frac{\partial\log\mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^L}{\partial q_{\alpha\beta}}=\frac{\mathrm{Tr}\,S^\alpha S^\beta\mathrm{e}^L}{\mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^L} \tag{65}$$

m_α についても同様に

$$m_\alpha \;=\; \frac{1}{\beta J_0}\frac{\partial\log\mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^L}{\partial m_\alpha}=\frac{\mathrm{Tr}\,S^\alpha\mathrm{e}^L}{\mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^L} \tag{66}$$

となる．

さて, ここから先さらに計算を進めるため, $q_{\alpha\beta}=q, m_\alpha=m$ と仮定する．これを**レプリカ対称性の仮定**と呼び, 人為的に導入したレプリカの選び方に $q_{\alpha\beta}$ と m_α などの物理量が依存してはならない, という考えに基づいて正当化されるが, その仮定は部分的に間違っており, 具体的には低温のある範囲 (*Almeida-Thouless* 線 [24] とよばれる相図内のある「境界」外) でこの対称性が破れていることがわかっている (「レプリカ対称性の破れ (Replica Symmetry Breaking: RSB)[25]」. しかし, 本研究ではレプリカ対称解の範囲内で議論を進めることにする.

さて,

$$\beta^2J^2q\sum_{\alpha<\beta}S^\alpha S^\beta \;=\; \frac{\beta^2J^2q}{2}\left(\sum_{\alpha}S^\alpha\right)^2-\frac{n\beta^2J^2q}{2} \tag{67}$$

に注意し, $(\cdots)^2$ に対して恒等式 (57) を用いると

$$\begin{aligned}
\mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^L &= \mathrm{e}^{-\frac{nq\beta^2J^2}{2}}\int_{-\infty}^{\infty}Dz\,\mathrm{Tr}\exp\left(\beta(J_0m+J\sqrt{q}z)\sum_{\alpha}S^\alpha\right)\\
&= \mathrm{e}^{-\frac{nq\beta^2J^2}{2}}\int_{-\infty}^{\infty}Dz\,\left\{\mathrm{Tr}_{S^\alpha}\exp\left(\beta(J_0m+J\sqrt{q}z)S^\alpha\right)\right\}^n\\
&= \mathrm{e}^{-\frac{nq\beta^2J^2}{2}}\int_{-\infty}^{\infty}Dz\,\left\{2\cosh\beta(J_0m+J\sqrt{q}z)\right\}^n\\
&\simeq \mathrm{e}^{-\frac{nq\beta^2J^2}{2}}\left\{1+n\int_{-\infty}^{\infty}Dz\log 2\cosh\beta(J_0m+J\sqrt{q}z)\right\}
\end{aligned} \tag{68}$$

となる. 従って, この両辺の対数をとり, $n\to 0$ の極限において, その主要項のみを残すと

$$\log\mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^L \;\simeq\; -\frac{n\beta^2J^2}{2}+n\int_{-\infty}^{\infty}Dz\log 2\cosh\beta(J_0m+J\sqrt{q}z) \tag{69}$$

が得られる．ここで，$Dz \equiv dz \exp(-z^2/2)/\sqrt{2\pi}$ であり, $H(z) = J\sqrt{q}z + J_0 m$ の表記を用いて, 上記 $\log \mathrm{Tr}\, \mathrm{e}^L$ を (64) 式に代入すると, 自由エネルギーはレプリカ対称解の仮定のもとでは (64) 式右辺括弧内の第 1,2 項が $-(\beta^2 J^2/4n)\sum_{\alpha \neq \beta} q_{\alpha\beta}^2 = -(\beta^2 J^2/4n)n(n-1)q^2 \simeq (\beta^2 J^2/4)q^2, -(\beta J_0/2n)\sum_\alpha m_\alpha = -(\beta J_0/2)m^2$ となることに注意して

$$-\beta[f] = \frac{\beta^2 J^2}{4}(1-q)^2 - \frac{1}{2}\beta J_0 m^2 + \int_{-\infty}^{\infty} Dz \log 2\cosh\beta H(z) \tag{70}$$

となり，パラメータ m の極値条件 (66) は具体的に

$$m = \int_{-\infty}^{\infty} Dz \tanh \beta H(z) \tag{71}$$

である．また q については極値条件 (65) から

$$\frac{\beta^2 J^2}{2}(q-1) + \int_{-\infty}^{\infty} Dz(\tanh \beta H(z)) \cdot \frac{\beta J}{2\sqrt{q}z} = 0 \tag{72}$$

すなわち

$$q = \int_{-\infty}^{\infty} Dz \tanh^2 \beta H(z) \tag{73}$$

となる．また, 単位スピンあたりの内部エネルギー $E/N = (\partial/\partial\beta)(-\beta[f])$ は

$$E/N = -\frac{1}{2}J_0 m^2 - \frac{\beta J^2}{2}(1-q^2) \tag{74}$$

である．従って, (71)(73), および, (74) 式を用いて学習方程式の第 2 項が解析計算できる．具体的には, オイラー法 (あるいはルンゲ・クッタ法) の刻み幅で更新された新しい $T = \beta^{-1}$ が決まるごとに, その逆温度で状態方程式 (71)(73) を数値的に解き, その解を (74) に代入することで内部エネルギーを計算し, その値で定まる微分方程式を差分化し, そのオイラー法での時間を更新させ … という操作を繰り返すことになる.

4.5.3 SK 模型の絶対ゼロ度でのエネルギー値

レプリカ対称解の範囲内であれば, 絶対ゼロ度でのエネルギーの値を解析的に求めることができる．$\beta \to \infty$ の極限では, $\tanh \beta(\cdots) = \mathrm{sgn}(\cdots)$ であるから, スピングラス秩序変数は (73) 式より $q = 1$ となる．また, 自発磁化は (71) 式より

$$m = \int_{-\infty}^{\infty} Dz\, \mathrm{sgn}(Jz + J_0 m) = 1 - 2H\left(\frac{J_0}{J}m\right) \tag{75}$$

の解で与えられる．ただし, $H(x)$ は補誤差関数であり

$$H(x) = \int_x^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} \mathrm{e}^{-\frac{z^2}{2}} \tag{76}$$

で定義される．従って, 絶対ゼロ度でのエネルギーの値は (75) 式の解 m を (74) 式で $q = 1$ とおいた内部エネルギーの式:

$$\frac{E}{N} = -\frac{1}{2}J_0 m^2 \tag{77}$$

に代入すればよい．特別な場合として, 強磁性相 $J_0/J \to \infty$ では, 補誤差関数の性質より $m = 1$ となるので, エネルギーの値は発散を防ぐために J_0 でスケールし直して

$$\frac{E}{J_0 N} = -\frac{1}{2} \tag{78}$$

となる．図 7 に絶対ゼロ度での自発磁化 m, および, 単位スピンあたりの内部エネルギー E/N を $a \equiv J_0/J$ の関数としてプロットする．

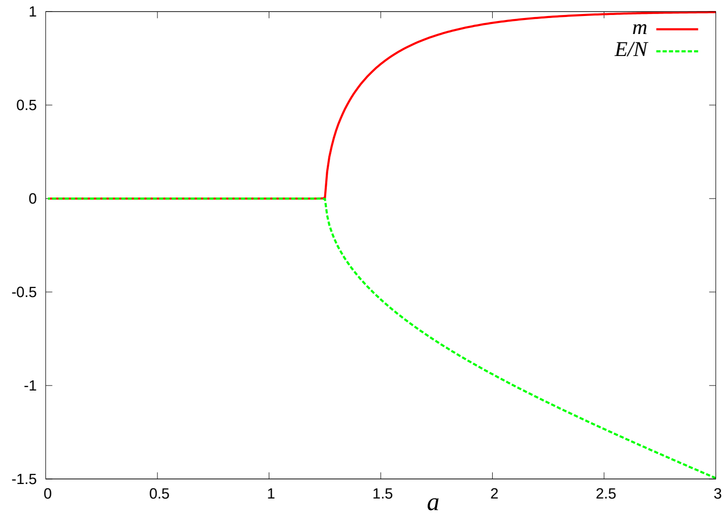

図 7: 絶対ゼロ度での自発磁化 m, および, 単位スピンあたりの内部エネルギー E/N の $a \equiv J_0/J$ 依存性.

5　温度スケジューリングの数値実験とその結果

前節で導入した 2 つの可解模型に関し, 温度 T の時間変化を前節で導出した更新式に従って計算する．また，一次元スピングラス鎖では, 理論的に求められる最小エネルギー状態と現在のエネルギーの値の差として定義される**残留エネルギー (Residual energy)** : ϵ の時間変化についても調べる．

以下では実験で用いる各パラメータの値について説明する．

- **スピン数** N
  遺伝子配列の成分数であり, スピングラスを構成するスピンの数である．これが大きいと分配関数 Z に含まれる和の数が指数オーダ $2^N \sim \mathrm{e}^{N\log 2}$ となるため実質的に計算不可能となる．統計力学ではマルコフ連鎖モンテカルロ法や平均場理論を用いてこれを求める．本研究では解析解が近似解であるため，ある程度大きな値である事が望ましいが，一次元鎖を $N = 2000$, SK 模型は $N = 500$ とする

- **アンサンブル数** M
  GA における個体数．多い方が集団の多様性が大きくなる可能性はあるが，ここでは $M = 100$ としている．

- **GA の各パラメータに関して**

  s : トーナメント選択における各世代で集団から選ぶ個体数

  p_c : 交叉確率

  p_m : 突然変異確率

- **温度パラメータ** T

  GA の生成分布を近似するボルツマン分布を制御するパラメータである．高いほど分布は一様に近くなり，逆に低ければ分布は収束している．$T \sim t^{-\xi}$ と仮定したときの時刻 t での両対数表示の傾きは分布の収束指数を表す．この値が大きいほど分布は速く収束する．逆に小さければ分布の収束にかかる時間が長くなる．初期温度は T_0 とするが，大きすぎると温度パラメータの発散を招くおそれがあるため，ここでは $T_0 = 10$ とした．特に表記がない場合，これらのパラメータを数値実験に用いることとし, GA のパラメータに関しては適宜値を示す．

5.1　数値解析: 一次元スピングラス鎖

一次元鎖に関して実験パラメータを $s = 2, p_c = 0.1, p_m = 0.001$ と選んだ場合の有効温度と残留エネルギーの時間変化を図 8 に示す．この図より, 温度の漸近的な振る舞いが概ね冪関数に従って減少することがわかる．これはスピングラスの低温での物理的振る舞いが，特徴的な遅い緩和現象を伴うことが理由と考えられる．これは時刻 t に対して冪関数に従うというものであり，算出した上記の有効温度スケジューリングが低温にて冪関数に従うことは理にかなっていると言える．また，収束過程で収束指数 ξ が小さくなり, より緩やかな分布収束へと移っていく可能性も考えられる．当然これらは SA などで用いられる温度制御 $1/\log(1+t)$ に比べると明らかに速い温度変化であるといえる．残留エネルギーに関しても同様に漸近的に冪関数に従う現象が確認できる．また,

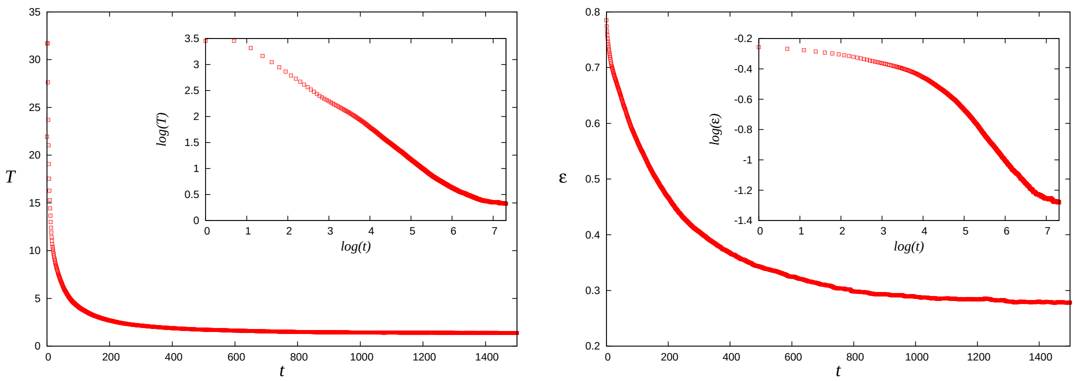

図 8: 一次元スピングラス鎖に対し, 実験パラメータを $s = 2, p_c = 0.1, p_m = 0.001$ と選んだ場合の有効温度 (左) と残留エネルギーの時間変化．インセットは両対数プロット．

選択操作がない場合には図 9 のようにボルツマン分布を特徴つける有効温度が初期の高温度を保ち, 減少することはない．つまり有効温度は主に選択操作を反映していると解釈することができる．スピングラス模型では低温において強磁性領域が緩和指数が大きく収束が速いのに対し，スピングラス領域では一般に緩和時間が長い．この相は強磁性と反強磁性が混在した状態で凍結するため各所にスピン間のフラストレーションが生じるからである．低温において強磁性領域からスピングラスとの境界である $a \equiv J_0/J = 1$ に近づくにつれて急激に緩和指数が大きくなることが知られてい

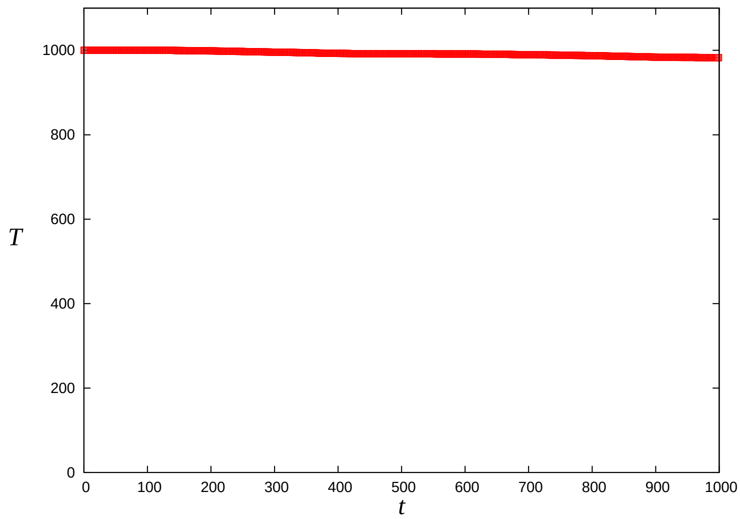

図 9: 一次元スピングラス鎖に対し, 実験パラメータを $p_c = 0.1, p_m = 0.001$ と選び, 選択操作なしでの有効温度の時間変化.

る．そこで, GA による最適化を実行し，ある温度 T(低温) での a と緩和指数の値をグラフにすると図 10 のようになり，境界に向かって急激に緩和指数が大きくなっていることがわかる．

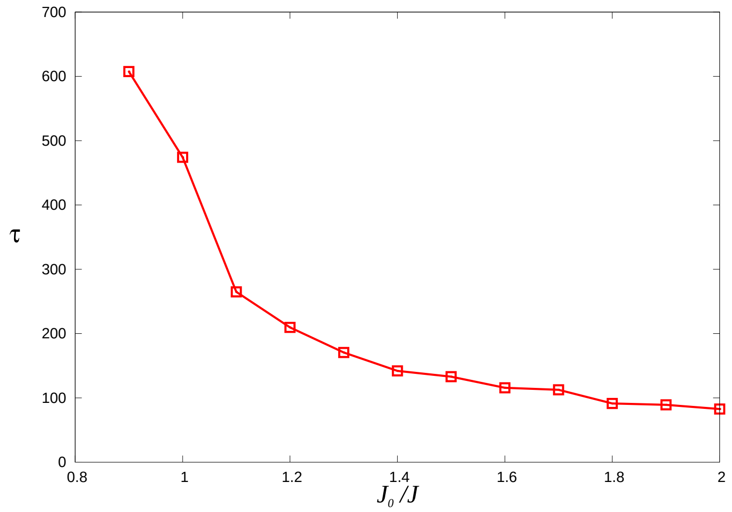

図 10: 一次元鎖モデルにおける J_0/J と緩和指数の関係.

5.1.1 各種パラメータと有効温度/残留エネルギーの時間変化との関係

次に, GA の各遺伝操作のパラメータの値と温度変化および残留エネルギーの関係について考える．各遺伝操作のパラメータの基準値を選択圧: $s = 2$, 交叉確率: $p_c = 0.1$, 突然変異確率: $p_m = 0.001$ とし，オペレーションごとに, これら基準値から数値を変えて有効温度と残留エネルギーの時間変化がどのように変更されるかを観察する．

まず, 選択に関して選択圧を $s = 2, 3, 4$ と変えた場合の結果を図 11 に示す．この図より, ボルツマン分布の初期収束は選択圧力が高い方が速く，残留エネルギーの減りも速いが，漸近的な有効温度の時間変化には大きな違いはなく, どのパラメータでも同じように緩やかに分布収束が緩和していることがわかる．つまり, 選択操作は漸近的には分布の収束に大きな変化を与えない．それは残留エネルギーの漸近的挙動からも同様に理解できる．

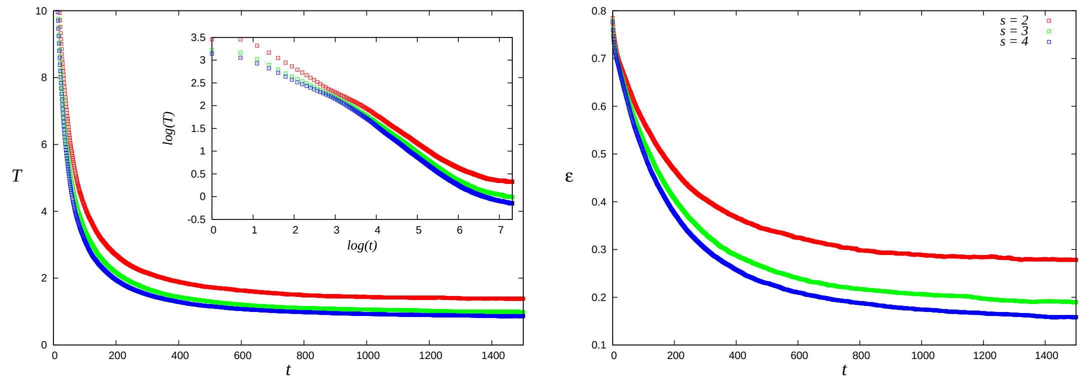

図 11: 選択圧を $s = 2, 3, 4$ と変えた場合の有効温度 (左) と残留エネルギーの時間変化．その他のパラメータは交叉確率 : $p_c = 0.1$, 突然変異確率 : $p_m = 0.001$ とした．

次に, 突然変異率を $p_m = 0.0005, 0.001, 0.005$ と変えた場合の結果を図 12 に示す．この図より, $p_m = 0.001$ では温度変化は初期段階から非常になだらかであり, 分布収束は遅い．これは変異確率が高いことでランダムな遺伝子間の「ミキシング」による効果が強くなるため分布収束を遅らせ, 結果として収束時間が長くなるためと考えられる．残留エネルギーをみても, ある程度高いエネルギーで留まっていることがわかる．$p_m = 0.0005$ では序盤の収束は比較的遅いが，後半は分布収束性を高く維持していることがわかる．残留エネルギーをみても，より良い最適化がなされていることがみてとれる．さらに, $p_m = 0.0001$ では温度変化の両対数表示の傾き, つまり, ボルツマン分布の収束指数 ξ が最も大きい．突然変異は集団に多様性を持たせ, 局所解からの脱出を目的としている操作ではあるが, 以上の結果から，それに適切な値を割り当てることで, 漸近的分布収束速度を高める効果があると考えられる．

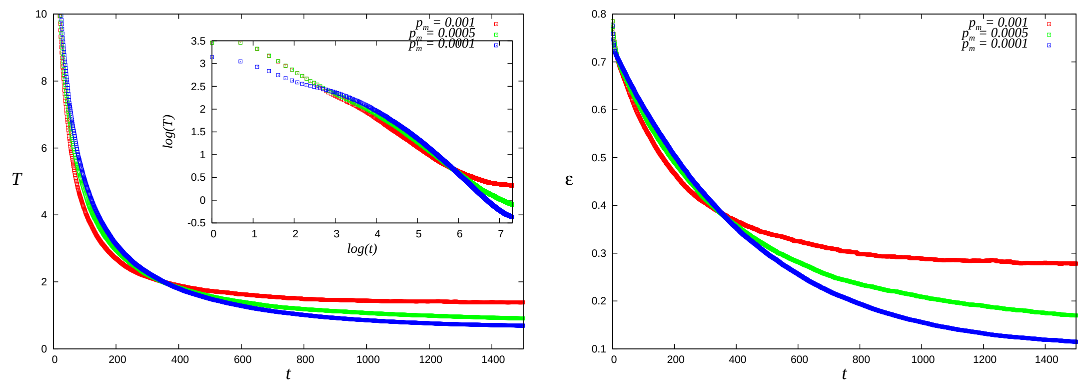

図 12: 突然変異率を $p_m = 0.0005, 0.001, 0.005$ と変えた場合の有効温度 (左) と残留エネルギーの時間変化．その他のパラメータは交叉確率 : $p_c = 0.1$, 選択圧: $s = 2$ とした．

最後に交叉確率を変えた場合であるが, $p_c = 1.0, 0.5, 0.1$ のそれぞれの値について温度変化を図

13 に載せる．この図より, 交叉確率が高いほど分布収束が速くなることがわかる．一般的に, 交叉は良質な個体を作るための操作であるから，GA の最適化にとって重要なオペレーションである．しかし, その一方で交叉確率を大きくしすぎると遺伝子を破壊する恐れもある．この場合は対象のモデルが一次元スピングラス鎖であり, スピン間の相互作用は隣接する 2 つのスピンの間にのみ働く．よって, 後述の SK モデルと違い, 交叉によって優良な個体が破壊される確率は低いと推察され, 実際 $p_c = 1.0$ で最良の結果を示している．しかしながら, どの交叉率でも漸近的に分布収束指数を高く保つ効果は選択操作と同様に顕著ではない．

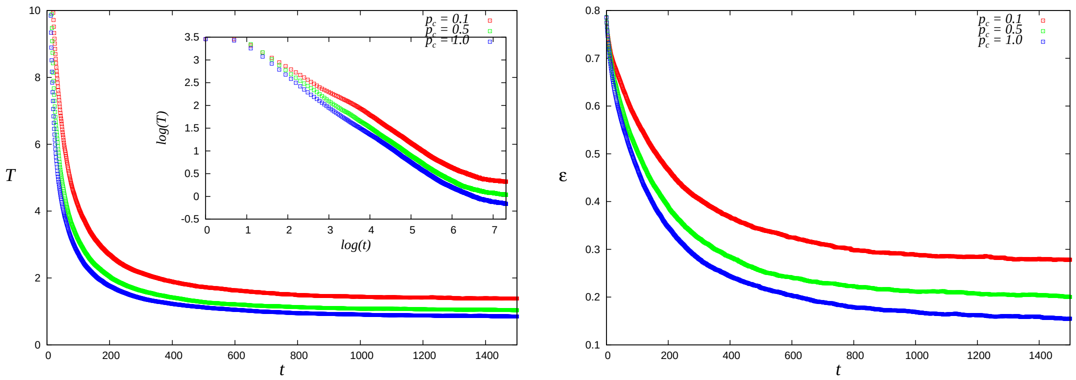

図 13: 交叉確率を $p_c = 1.0, 0.5, 0.1$ と変えた場合の有効温度 (左) と残留エネルギーの時間変化．その他のパラメータは突然変異確率：$p_m = 0.001$, 選択圧: $s = 2$ とした．

5.2 数値解析: Sherrington-Kirkpatrick 模型

SK 模型では有効温度の時間変化, および, 平均適応値 $-E$ の時間変化を示す．

5.2.1 各種パラメータと有効温度/平均適応度の時間変化との関係

基準となるパラメータの値を $s = 2, p_c = 0.05, p_m = 0.005$ とし，各パラメータをこれら基準値から変更して有効温度/平均適応値の時間変化がどのように影響を受けるかを調べる．

まず, 選択圧力を $s = 2, 3, 4$ と変えた場合の結果を図 14 に載せる．この図の有効温度の時間変化から, 選択圧を上げても分布収束に大きな変化がないことがわかる．一方, 平均適応値をみると序盤は高い適応値をもつ個体数が多くなるため, その値は大きいが，終盤は選択圧の変化から影響を受けていない．これは一次元鎖での結果とも大きく矛盾はせず，選択の漸近的分布収束に与える影響が小さいことを示唆する．

次に, 突然変異確率を $p_m = 0.005, 0.001$ と変えた場合の実験結果を図 15 に示す．この図より, $p_m = 0.005$ では終盤に分布収束速度が遅くなるのに対し，$p_m = 0.001$ ではそれを序盤の速度を維持することがわかる．平均適応度の値をみても終盤まで増え続けており，一次元鎖の場合と同様, 漸近的に高い分布収束速度を維持している．

最後に交叉確率を $p_c = 0.1, 0.05, 0.01$ と変えた場合の結果を図 16 に載せる．SK 模型は全サイトがつながりをもっており, 一次元鎖モデルと違い, 一点交叉によって個体の遺伝子が破壊される可能性が高い．結果をみると適応値に関しては交叉率に比例して高くはなっているが, 値にそれほどの差はなく不安定である．また，選択と同様, 漸近的分布収束に影響は見られない．

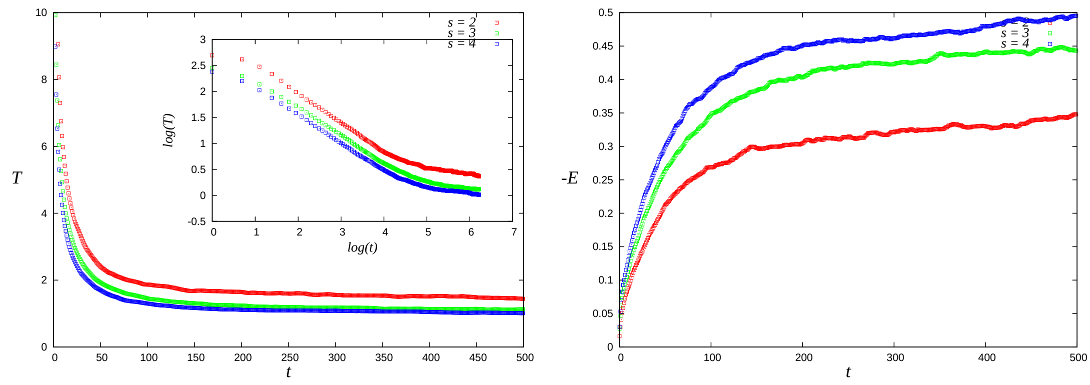

図 14: 選択圧を $s = 2, 3, 4$ と変えた場合の有効温度 (左) と平均適応度 $-E$ の時間変化. その他のパラメータは突然変異確率 : $p_m = 0.005$, 交叉確率: $p_c = 0.05$ とした.

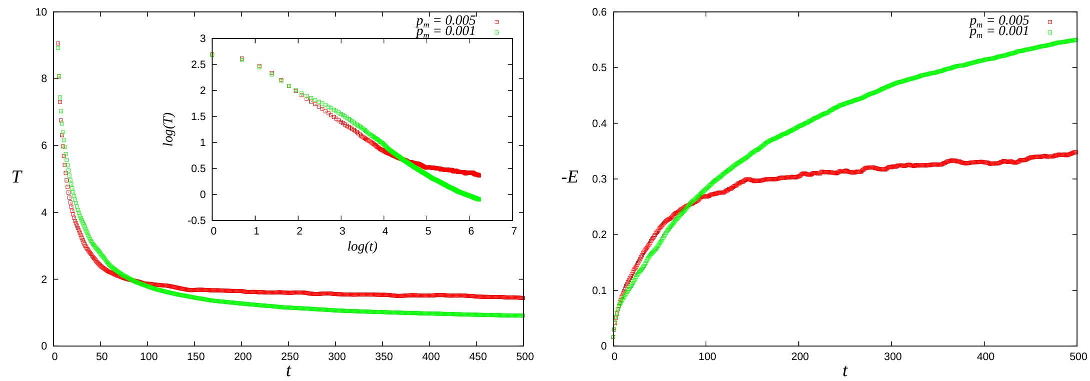

図 15: 突然変異確率を $p_m = 0.005, 0.001$ と変えた場合の有効温度 (左) と平均適応度 $-E$ の時間変化. その他のパラメータは交叉確率 : $p_s = 0.05$, 選択圧: $s = 2$ とした.

5.3 Holland の条件式再考

以上の結果より, 一次元スピン鎖, SK 模型ともにボルツマン分布を特徴つける有効温度の世代依存性はシンプル GA の場合, $T(t) \sim t^{-\xi}$, すなわち $\beta_t \sim t^{\xi}$ であることがわかった. 第 2 節で我々は $\beta_t = t$ とおいたボルツマン分布が Holland の条件式 (21)[2] を満たすことを示したが, ここでの実験結果より, $\beta_t = t^{\xi}$ とおいたボルツマン分布を選んだ場合, Holland の条件式 (21) がどのように修正を受けるか, また, その修正がスキーマ H の出現確率を介した GA のダイナミックスに対してどのような意味をもつか, をみておくことは重要である.

この場合に適応度 $g(i)$ をもつ遺伝子配列に対するボルツマン分布は

$$p_i(t) = \frac{e^{t^{\xi} g(i)}}{\sum_{j \in J} e^{t^{\xi} g(i)}} \tag{79}$$

である. この両辺の時間 (世代) 微分をとると直ちに

$$\frac{dp_i(t)}{dt} = \xi t^{\xi - 1} \left\{ p_i(t) g(i) - p_i(t) \sum_{j \in J} g(i) p_j(t) \right\} \tag{80}$$

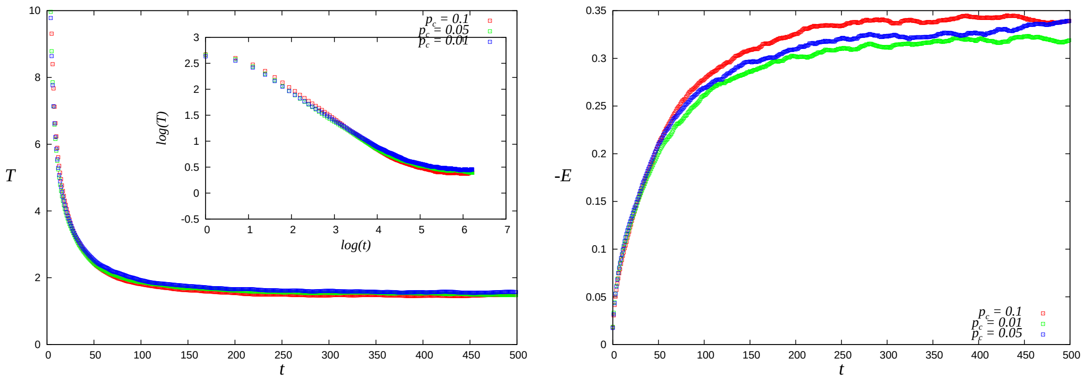

図 16: 交叉確率を $p_c = 0.1, 0.05, 0.01$ と変えた場合の有効温度 (左) と平均適応度 $-E$ の時間変化. その他のパラメータは突然変異確率 : $p_m = 0.005$, 選択圧: $s = 2$ とした.

が得られる. 従って, スキーマ H の出現確率を $P(H,t)$ とすると, これの従う微分方程式は $P(H,t) = \sum_{i \in H} p_i(t)$ の両辺を時間微分したものに (80) 式を代入することで, Holland の条件式は

$$\frac{dP(H,t)}{dt} = \xi t^{\xi-1} \{f(H,t) - P(H,t)f(J,t)\} \tag{81}$$

のように修正を受ける. これは, スキーマ H の出現確率の時間的な変化率は有効温度の時間依存性 $\beta_t = \xi t^{\xi-1}$ に対して $\xi t^{\xi-1}$ だけ増加することを意味する. 上の議論から直ちに, 一般的はスケジューリング β_t に対し, この変化率は $d\beta_t/dt$ だけ増加することになる. 従って, 有効温度の時間依存性 $\beta_t = \xi t^{\xi-1}$ をもつシンプル GA が良い探索アルゴリズムであるための Holland の条件式は本研究で得られた数値計算結果とあわせると (21) 式から (81) 式のように変更を受けることがわかる.

6　おわりに

本研究では，遺伝的アルゴリズムの統計的性質を熱力学の観点から理解することを試みた．可解スピングラス模型である一次元鎖, SK 模型に対し, GA の経験分布を近似するボルツマン分布を遺伝子配列から学習し，温度パラメータや残留エネルギーなどを観察することで，その時間変化と GA の各遺伝操作のパラメータとの関係を考察した．本論文においてはボルツマン分布の変遷は，主に冪関数によって表される有効温度の時間変化により制御されており，ここでの実験結果から，適切にボルツマン分布を学習できたと言える. また, ボルツマン分布の有効温度変化をみることにより，突然変異適切な値を与えることで，GA の生成分布の漸近収束を維持する効力があると解釈できる．逆に選択と交叉は分布に関しては初期収束に影響は与えるものの，漸近的には分布収束に関して大きな影響を与えない．有効温度以外の統計的指標に対する性質をあわせて評価することができれば GA のダイナミックスに関するさらなる知見が得られると考えられる．

本研究で我々が示した結果はシンプル GA に関して限定的なものであるが, ここで与えた GA の性能評価の手続き, すなわち, 可解スピングラス模型を最適化すべきエネルギー関数のベンチマークとし, その探索アルゴリズムの善し悪しを有効温度や残留エネルギーの時間変化を介して評価するアプローチはより手の込んだ GA に対しても適用可能である. 事実, そのような複雑な手続きを

必要とする GA から生成される遺伝子配列からのエネルギーに関する経験期待値:

$$E_{GA} = \lim_{L\to\infty} \frac{1}{L} \sum_{l=1}^{L} \left[\left(\sum_{ij} J_{ij} s_i(t,l) s_j(t,l) \right) \right] \tag{82}$$

を数値的に見積もり, それを用いて学習方程式を構築し, それを解くことで所望のスケジューリングが議論できる. 従って, この性能評価方法の提案こそが本研究の最も重要な結果であると考える.

参考文献

[1] D.E. Goldberg, *Genetic Algorithms in Search, Optimization* & *Machine Learning*, Addison-Wesley (1989).

[2] J.H. Holland, *Adaptation in natural and artificial systems*, Ann Arbor: The University of Michigan Press (1975).

[3] S. Kirkpatrick, C.D. Galatt, Jr. and M.P. Vecchi, *Science* **220**, no.4598, 671 (1983).

[4] S. Geman and D. Geman, *IEEE Trans. on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, **PAMI-6**, no.6, pp. 721-741 (1984).

[5] 上坂吉則, 「ニューロコンピューティングの数学的基礎」近代科学社 (1993).

[6] 西森秀稔, 「スピングラス理論と情報統計力学」新物理学選書, 岩波書店 (1999).

[7] 堀口剛, 佐野雅己, 「情報数理物理」講談社サイエンティフィック (2000).

[8] T. Li, *Phys. Rev.* B **24**, 6579 (1981).

[9] H.H. Chen and S.K. Ma, *J. Stat. Phys.* **29**, 717 (1982).

[10] D. Sherrington and S. Kirkpatrick, *Phys. Rev. Lett.* **35**, 1792 (1975).

[11] S. Baluja, *Technical Report CMU-CS-94-163, School of Computer Science, Carnegie Mellon University* (1994).

[12] M. Pelikan, D.E. Goldberg and E. E. Cantu-Paz, *Proceedings of GECCO-99*, pp. 525-532 (1994).

[13] M. Pelikan, D.E. Goldberg and E.E. Cantu-Paz, *Linkage Problems, Distribution Estimation and Bayesian Networks*, *Evolutionary Computation* **8**, pp. 311-340 (2000).

[14] M. Pelikan, E.G. Goldberg and F.G. Lobo, *Survey of Optimization by Building and Using Probabilistic Models*, *Computational Optimization and Applications* **21**, pp. 5-20 (2002).

[15] A. Prugel-Bennet and J.L. Shapiro, *Phys. Rev. Lett.* **72**, pp. 1305-1309 (1994), *Physica D* **104**, pp. 75-114 (1997).

[16] J. Suzuki, *IEEE Trans. on System, Man and Cybernatics* **25**(2), pp. 655-659 (1995).

[17] M. Mezard, G. Parisi and M.A. Virasoro, *Spin Glass Theory and Beyond*, World Scientific, Singapore (1987).

[18] 高山一, 「スピングラス」丸善株式会社 (1991).

[19] J.J. Hopfield, *PNAS* **79**, pp. 2554-2558 (1982).

[20] 川勝年洋 「高分子物理の基礎: 統計物理的手法を中心に」臨時別冊 数理科学, サイエンス社 (2000).

[21] M. Mezard and G. Parisi, *J. Physique* **47**, 1285 (1986).

[22] S.F. Edwards and P. W. Anderson, *J. Phys.* **F5**, pp. 965-974 (1995).

[23] D.C. Mattis, *Phys. Lett.* **56A** p.421 (1976).

[24] J.R.L. de Almeida and D.J. Thouless, *J. Phys.* **A11**, pp. 983-990 (1978).

[25] G. Parisi, *J. Phys. Math. and Gen.* **13**, pp. L115-121 (1980).

謝辞

本研究を進めるにあたり，混沌系工学研究室の井上純一准教授には多くの適切な指導・助言を賜りました．心より御礼申し上げます．小野哲雄教授には有益な助言を頂きました．また，研究面であらゆる角度からサポートしていただきました混沌系工学研究室のメンバーに深く感謝いたします．