

## 連続最適化手法を用いたスピクラスタの計算化学的研究

(東北薬大\*, 阪大院理\*\*) 小田彰史\*, 松崎久夫\*, 北河康隆\*\*, 奥村光隆\*\*, 山口兆\*\*

【序】自然科学の研究において、相互作用が複雑に張り巡らされた系の最安定状態を求めるといった問題に直面することが多々ある。分子認識や配座探索などがその好例であるが、磁性体研究の分野においてはスピクラスタの最安定状態の探索がそれに当たる。スピングラスなどのように、様々な強さ・符号を持った磁氣的相互作用が複雑に絡み合っている場合、その最安定状態の探索は容易ではない。イジングモデルに限った場合でも NP 困難な問題となり、ハイゼンベルグモデルではさらに連続値の最適化の問題も加味しなければならない。我々はこれまで、イジングスピクラスタの最安定状態の探索について、主に遺伝的アルゴリズム (GA) を中心に検討を行ってきた。その結果、Edward-Anderson スピングラスのような規則正しく相互作用の並べられた系だけではなく、完全にランダムに相互作用の絡み合っている系や、 $Mn_{12}$  クラスタや有機強磁性体結晶のような現実に存在する系に対しても有効なアルゴリズムを構築することができた。そこで本研究では、ハイゼンベルグモデルスピクラスタの最安定状態探索について検討する。ハイゼンベルグモデルスピクラスタの最安定状態探索では、スピン状態を記述する際に連続値を使用しなければならない。そのため、イジングモデルを扱ったときのような離散最適化手法ではなく、連続最適化手法を使用することになる。本研究では、連続最適化手法を磁性体に適用するための手法の開発や、離散最適化手法を連続値が扱えるように改良するための方策について提案する。また、それぞれの手法の能力についても比較検討し、ハイゼンベルグモデルを扱う場合に適した最適化手法は何か、といった点についても考察を行う。

【計算】本研究では、最適化手法としてGAのほかにアニーリング法 (SA)、particle swarm optimization 法 (PSO) 等を用いる。これらのうち、GAは生物の進化を模した手法であり、優れた個体(解の候補)ほど生き残りやすいという「適者生存」の考え方に基づいた最適化手法である。生き残った個体が2つずつ組になって「親」となり、それらの染色体を組み合わせることで新たな「子」となる個体を作り出す。これを繰り返すことによってより優れた解を得る手法である。SAは単純な山登り法にメトロポリス法の考え方を組み合わせた手法で、温度の項を入れることで局所解に陥るのを防いでいる。また、PSOは群知能の考え方に基づいた最適化手法である。群知能は単一では低い知能しか持たない生物が、群れをなすことによって高度に知的な(ように見える)行動をとることを指した言葉で、アリなどの昆虫が取る社会行動や、鳥や魚などの移動様式を説明する際に用いられる。PSOでは、各個体がそれぞれに探索してきた個人的な最適解と、群れ全体における最適解との両方の情報を使用して探索を行う(次ページ図参照)。その結果、各個体がバラバラに探索を行った場合よりも効率的に

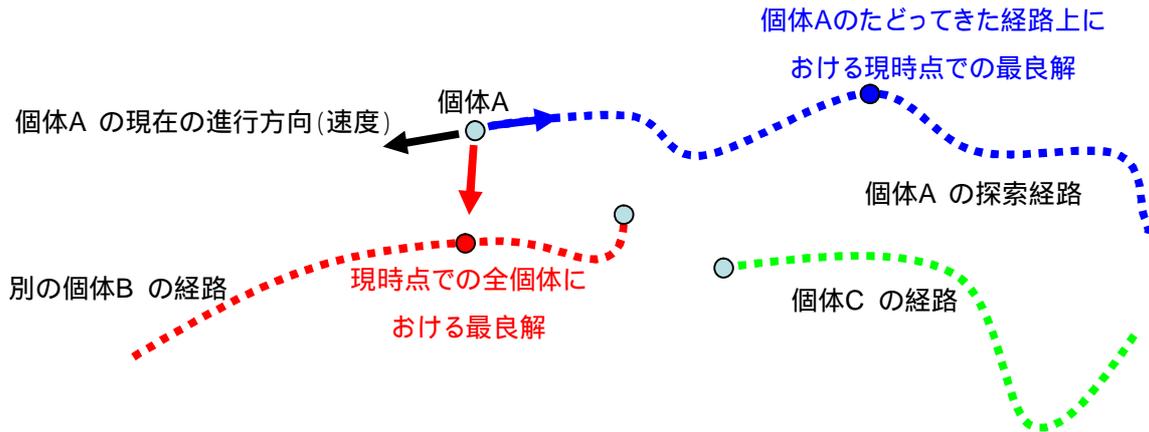


図 PSO の概略

個体 A の探索経路は、現在の進行方向(速度)、個体 A がこれまでに見つけてきた個人的な最良解、全個体における最良解の三つの要素に基づいて決定される。

優れた解を得ることができる。GA が元々は離散最適化手法であるのに対して、PSO は開発の当初より連続最適化手法として検討されており、ハイゼンベルグモデルへの適用が比較的容易であろうと期待できる。

本研究ではハイゼンベルグモデルスピクラスタの最安定状態探索を行っているため、最適化問題の目的関数としてはハイゼンベルグハミルトニアン

$$H = -\sum J_{ij} s_i s_j$$

を使用した。また、スピクラスタとしては  $S = 1/2$  のスピサイトランダムに配置したクラスタを作成している。磁気的相互作用については近傍のスピ間のみならず、全スピサイト間に対して考慮した。

【結果】 各アルゴリズムに対して、パラメータを様々に変動させた場合の最適化の結果を比較した。GA の個体群サイズや世代数および突然変異確率、SA の初期温度や最大サイクル数、PSO の各ベクトルの重みなどがその主なものである。その結果、SA、GA では最大サイクル数(世代数)をある程度大きく取らなければ妥当な結果が得られないのに対して、PSO では比較的小さいサイクル数で良好な結果が得られることがわかった。また、GA については突然変異確率が大きい方が良好な結果が得られていることから、あるいは局所最適化手法と GA とを組み合わせたハイブリッド GA が有効に機能するかもしれない。これらの結果はハイゼンベルグモデルスピクラスタの最安定状態に連続最適化手法を適用する際の基礎となるものであり、この結果からアルゴリズムのさらなる改良や、あるいは全く新規な最適化手法の適用などへの展開が可能となるだろう。また、スピクラスタのみならず、冒頭であげた分子認識などへの応用に際しても一つの指針となりうると考えている。