

先日の大学院発表会で、金野は軽い気持ちで釣り合いの問題が遺伝的アルゴリズムで解けるという主旨の話をしましたが、学生さんにはうまく伝わらなかったようでしたので、補足しておきます。なに、そんなに難しい話じゃない。

エネルギーの授受なりなんなり、何か釣り合っているということは、2つの関数 $f(x)$ と $g(x)$ との値が等しい、つまり $f(x) = g(x)$ ということです。そこで、 $h(x) \equiv f(x) - g(x)$ という関数を定義すると、釣り合いの問題は $h(x) = 0$ となるような x を探すという問題に変わるわけです。

$h(x) = 0$ となる点を探すといっても、数値計算で現実に行うことは、 $|h(x)|$ が許容される値よりも小さくなるような x を探すという作業です。これはつまり、 $|h(x)|$ を目的関数としてこれを最小にする状態変数 x を見つけるということですから、最適化の問題に他なりません。見つかった最適値が十分に小さくなければ、根は存在しないというわけです。ですからある方程式の根を求めるといことは、数値計算の視点からは、最適化問題を解いているのと同じことになるわけです。

うちの研究室で最適化をやっている人は、ある関数を最大にする状態変数を求めていますから、最小にするのとは方向が逆ですね。もし上の問題を最大化問題に置き換えれば、 $k(x) \equiv 1 - |h(x)|$ という関数を定義して、それを最大にするような状態変数を探したっていいのです。とはいえこれは余談でしょう。この形の関数でなくとも、 $1 + |h(x)|$ の逆数を目的関数にしてもいいし、いくらでも工夫がきくことは言うまでもありません。

(2005年10月23日)