

## 逆ミセル法で作製した CdSe ナノ微粒子の光学特性

野上 拓真<sup>\*</sup>、荒木 翼<sup>\*\*</sup>、海老原 快人<sup>\*\*</sup>、鈴木 大和<sup>\*\*</sup>、森 龍男

Optical Properties of CdSe nano-particles synthesized in reverse micellar method

Takuma NOGAMI, Tsubasa ARAKI, Kaito EBIHARA, Yamato SUZUKI and Tatsuo MORI

**Abstract:** CdSe nano-particles are synthesized in the reverse micellar method and analysed the optical properties in optical transmittance, luminescence, time resolved luminescence and Raman scattering measurements. The particle size of CdSe nano particles estimated from the absorption energy is 2-4nm. Stokes shift and FWHM of the band edge emission are 0.1eV and 0.15eV, respectively. The relaxation time of the band edge emission is 2-4ns. LO phonon peak is measured at 208cm<sup>-1</sup>.

## 1. はじめに

CdSe ナノ微粒子は、これまで様々な方法で作製され、その基礎物性の研究やソーラーセルやバイオ研究で応用されてきている。これらの方法では、200°C以上の高温での化学反応を利用し、CdSe ナノ微粒子の表面を高分子等で修飾して、微粒子のサイズや界面を固定している。その結果、微粒子のサイズを容易に制御でき、長期間安定して保存することも可能になってきている。しかしながら、CdSe ナノ微粒子の成長過程での電子状態の変化や界面状態の研究にはあまり適さない。一方、我々はこれまで、室温で容易にナノメートルのサイズの微粒子を作製することができる逆ミセル法を用いて CdS 等のナノ微粒子の作製を行ってきた。この方法では、微粒子作製の温度や反応時間により、微粒子のサイズを変化させることが可能である。そこで本研究では、逆ミセル法を用いて CdSe ナノ微粒子を作製し、成長過程とそれに伴う電子状態の変化をその光学特性の測定からの解明を試みた。

## 2. 実験

## 2. 1 CdSe ナノ微粒子の作製

図1に逆ミセル法による CdSe 微粒子の作製手順をフローチャートで示す。<sup>1)</sup>

まず、イソオクタン 40cc に界面活性剤スルホコハク酸-ジ2-エチルヘキシルナトリウム (NaAOT) を濃度 0.1mol/l で溶かす。このイソオクタン溶液を 20cc ずつに分けた後、それぞれに Se 水溶液と CdCl<sub>2</sub> 水溶液をモル比  $W$  に対応した量だけ入れ、2時間攪拌を行う。ここでモル比  $W$  とは H<sub>2</sub>O と界面活性剤 NaAOT のモル比のことであり

$$W = \frac{[H_2O]}{[NaAOT]}$$

で定義する。

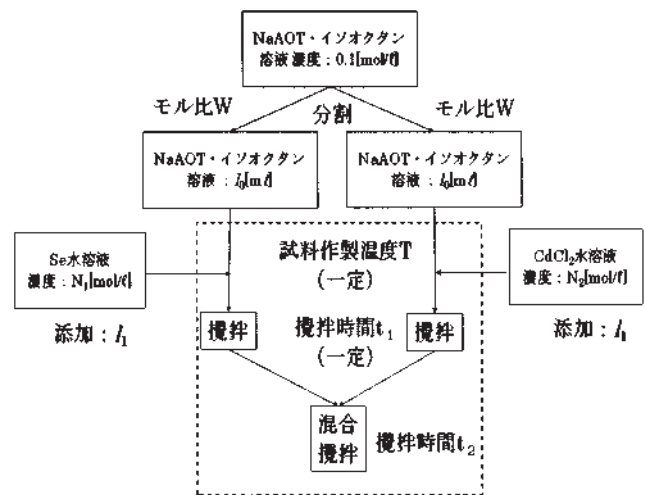


図1 CdSe 作製手順のフローチャート

その後2つのイソオクタン溶液を再び混合し、更に2時間攪拌し、逆ミセル中に CdSe ナノ微粒子を作製した。本実験では、このモル比  $W$  は 4, 6, 8, 10 の 4 種類、Se と Cd の濃度は等しくし、Se 水溶液のモル濃度は 0.04mol/l、0.06mol/l、0.08mol/l の 3 種類、Se と Na<sub>2</sub>SO<sub>3</sub> のモル比  $R$  値を変化させたものを  $R=5, 10, 15$  と 3 種類作製した。ここで  $R$  値は

$$R = \frac{[Na_2SO_3]}{[Se]}$$

で定義する。

## 2. 2 透過測定

作製した試料の透過スペクトルは、紫外可視近赤外分光光度計 (日本分光 V-570) によりすべて室温で測定した。測定波長域は 300~800nm、波長送りは 100nm/min とした。また、溶液の透過測定に用いた光学セルは光路長 1cm のポリメタクリル酸メチル製であり、310nm 以上の波長域で 90% 以上透過する。

\* 茨城高専 専攻科 AE コース

\*\* 茨城高専 電気電子システム工学科

### 2. 3 静的蛍光測定

作製した試料の蛍光スペクトルは、蛍光分光光度計 (日本分光 FP-777) によりすべて室温で測定した。励起波長は吸収スペクトルの第1吸収波長から 380nm~450nm の範囲で決定し (これを  $\lambda$  nm とする)、測定波長域は  $\lambda$  nm +20nm~2 $\lambda$  nm -20nm とした。

### 2. 4 時間分解蛍光寿命測定

作製した試料の蛍光寿命は、ピコ秒蛍光寿命測定装置 (浜松フォトニクス製 C11200) によりすべて室温で測定した。励起光源には  $N_2$  パルスレーザ (波長 337.1nm, パルス幅 700ps, パルスエネルギー 100  $\mu$ J, 繰り返し 20Hz) を用いた。

### 2. 5 Raman 散乱測定

作製した試料のラマン散乱測定は、顕微 Raman 散乱分光光度計 (日本分光製 NR-5100) によりすべて室温で行った。励起光源には 532nm の半導体レーザを使用し、測定範囲は 110~1229 $cm^{-1}$  で行った。なお、ラマン散乱測定においては、液体の状態での測定が困難なため、加熱によりイソオクタンを揮発させ、固体の状態で行った。

## 3. 実験結果

### 3. 1 CdSe ナノ微粒子作製

Se 水溶液作成について、Se 濃度と  $R$  値を変化させて作製した結果、どの組み合わせでも Se は溶解した。また、 $R$  値が増加するほど Se の溶解に要する時間が短くなった。CdSe 微粒子作製条件すべてにおいて、一様で透明な溶液となり沈殿等のにごりは見られず、ナノ微粒子が逆ミセル中に作製されていることが確認できた。

### 3. 2 透過測定

作製した試料の透過スペクトルを図2~7に示す。なお、図2~4は  $W$  値による変化を、図5~7は  $R$  値による変化を比較したものである。

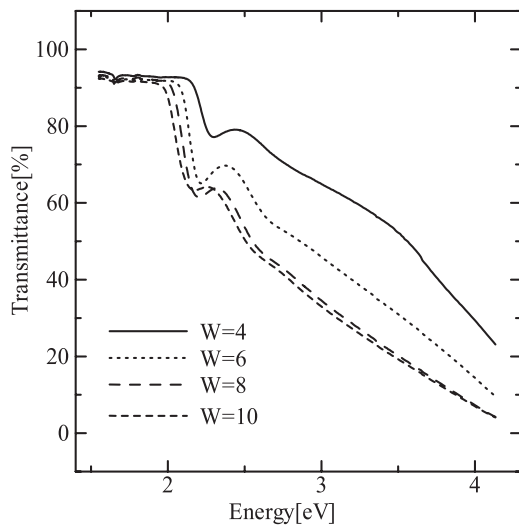


図2 Se 濃度 0.04mol/l  $R=10$  の透過スペクトルの  $W$  依存性

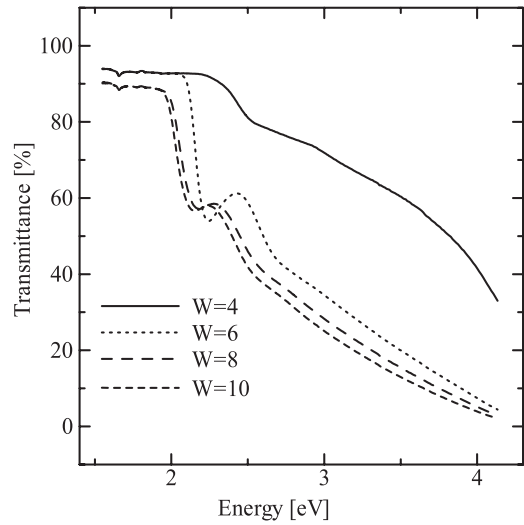


図3 Se 濃度 0.06mol/l  $R=10$  の透過スペクトルの  $W$  依存性

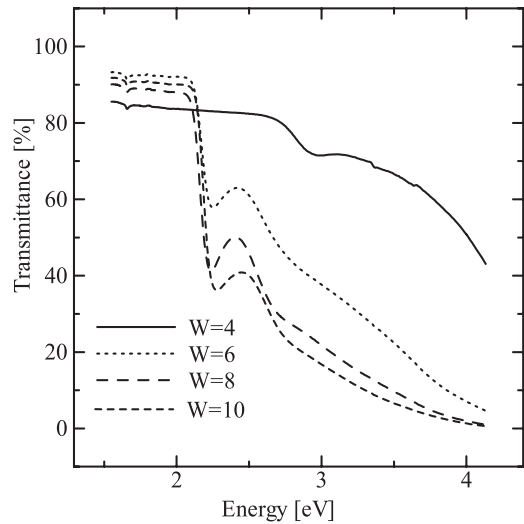


図4 Se 濃度 0.08mol/l  $R=10$  の透過スペクトルの  $W$  依存性

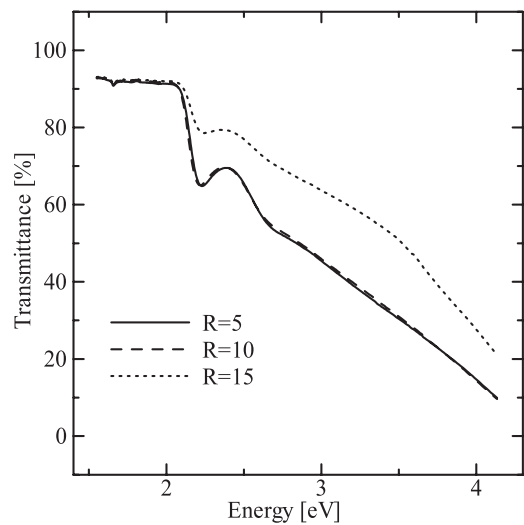


図5 Se 濃度 0.04mol/l  $W=6$  の透過スペクトルの  $R$  依存性

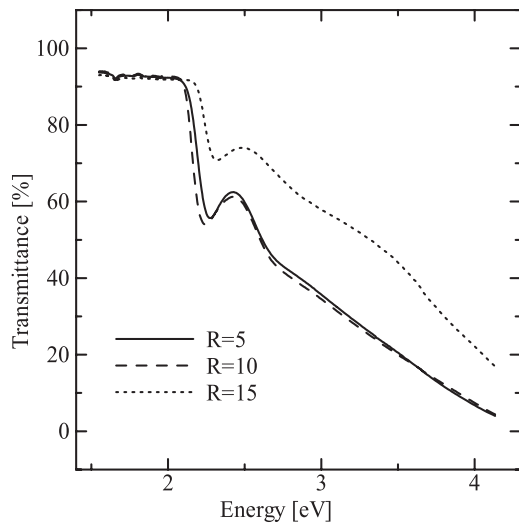


図6 Se 濃度 0.06mol/l  $W=6$  の透過スペクトルの  $R$  依存性

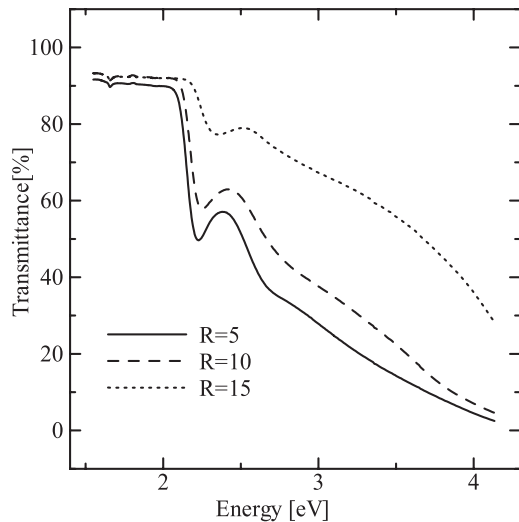


図7 Se 濃度 0.08mol/l  $W=6$  の透過スペクトルの  $R$  依存性

2~2.5eV の範囲に見られる凹みは第1励起状態への吸収である。以降、この吸収を吸収端  $E_g$  とする。

図2と3からモル比  $W$  が大きくなるにしたがって吸収端エネルギーは低エネルギー側へシフトしており、 $W$  が増大すると粒子サイズが増加していることが分かる。この吸収端エネルギーの  $W$  依存性は、CdS ナノ微粒子と同じ結果になっている。しかし、図4では  $W$  依存性が逆になっている。これは他の試料でも見られる。また、作製直後では吸収端エネルギーが  $W$  依存性を明確に示さない試料も多く見られた。また、吸収端エネルギーの  $R$  依存性としては、 $R$  の増加につれて、高エネルギー側へシフトする傾向が見られ、透過率も上昇している(図5、6、7)。逆ミセル法で作製した CdS ナノ微粒子は、 $W$  の増加に伴い粒子サイズが増加し、吸収端エネルギーがレッドシフトする特徴を明確に示すが、CdSe ナノ微粒子については、 $W$  のみで粒子サイズが制御されているのではなく、粒子サイズを決める重要な別のパラメータの存在を暗示している。

### 3.3 静的蛍光測定

作製した試料の蛍光スペクトルを図8~13に示す。図8~10は Se 濃度 0.04~0.08mol/l の各試料における  $W$  依存性、図11~13は同条件での  $R$  依存性を比較したものである。なお、2.5~3eV に見られるピークはラマン散乱である。

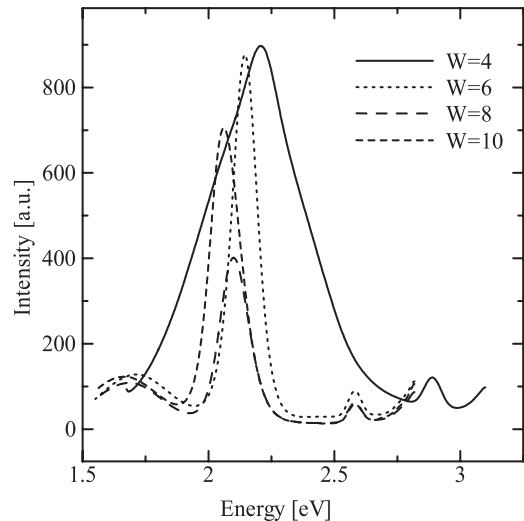


図8 Se 濃度 0.04mol/l  $R=10$  の蛍光スペクトルの  $W$  依存性

$W=6\sim 10$  については2つのエネルギー領域に見られたが、この内 2~2.5eV にピークを持つ発光は透過スペクトルの結果から、第一励起状態からの発光(以降、この発光をバンド端発光と呼び、そのピークエネルギーを  $E_m$  とする)と考えられる。しかし、 $W=4$  では2つ以上の発光の重なりがあるように見られ、発光強度も強い傾向が見られる。また Se の mol 濃度によるピークエネルギーの大きい変化は見られなかった。

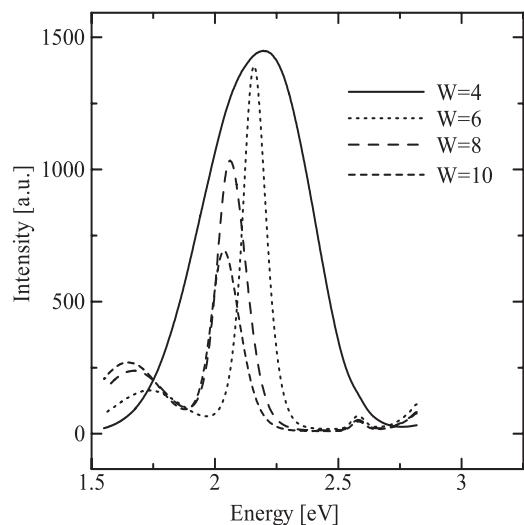


図9 Se 濃度 0.06mol/l  $R=10$  の蛍光スペクトルの  $W$  依存性

さらに、透過スペクトルと同様に作製した試料の全体的な傾向として、蛍光のピークエネルギーはモル比  $W$  が大きくなるほど低エ

エネルギー側へシフトし、 $\text{Na}_2\text{SO}_3$ の割合が増加すると高エネルギー側へシフトするが、一部それに該当しない試料が見られた。

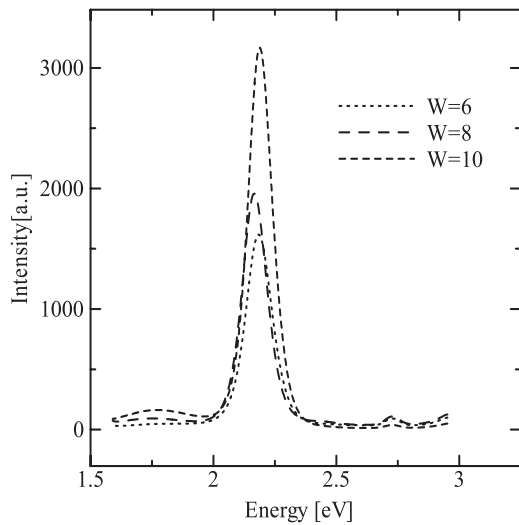


図10 Se 濃度 0.08mol/l R=10 の蛍光スペクトルの W 依存性

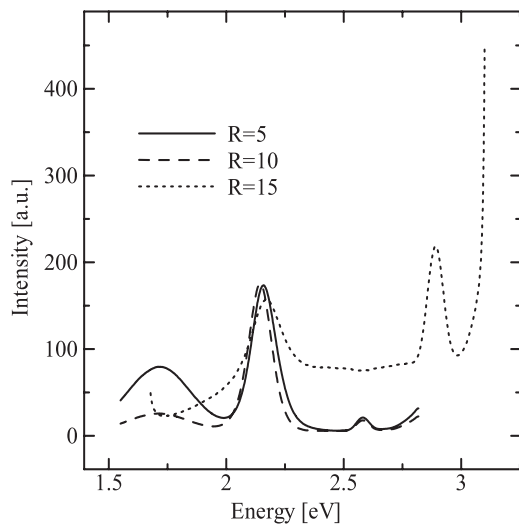


図11 Se 濃度 0.04mol/l W=6 の蛍光スペクトルの R 依存性

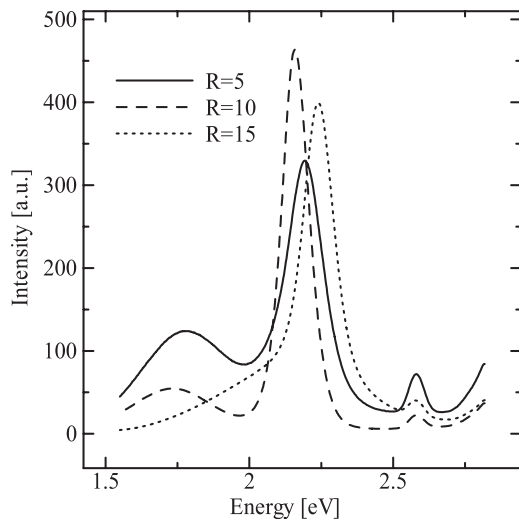


図12 Se 濃度 0.06mol/l W=6 の蛍光スペクトル R 依存性

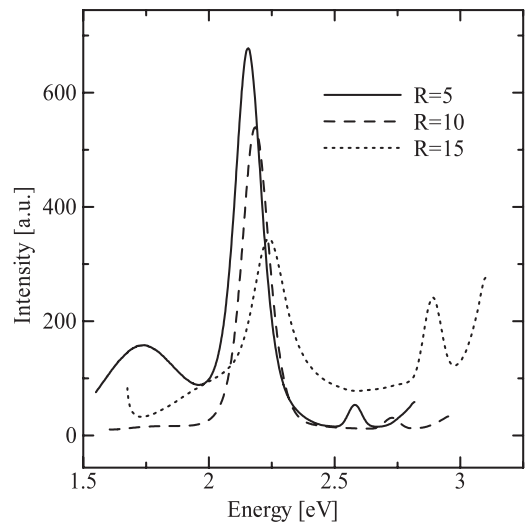


図13 Se 濃度 0.08mol/l W=6 の蛍光スペクトルの R 依存性

### 3. 4 時間分解蛍光寿命測定

Se 濃度 0.06mol/l R=15 の試料の蛍光寿命測定結果を図14~17に示す。図の横軸に蛍光の波長を nm で、縦軸に  $\text{N}_2$  パルスレーザー光励起時からの時間を表す。なお、すべての測定時間域で同じ位置に蛍光寿命特性を表示するため、装置の測定ソフトで適宜ディレイをかけている。したがって、時間分解蛍光寿命スペクトルは、図中の緩和特性の立ち上がり時間を  $t=0$  として解析を行っている。蛍光寿命測定は W=4 の全ての Se 濃度と、0.08mol/l R=10 0.06mol/l R=15、0.04mol R=10 W=6、0.08mol/l R=15 W=6,10 の試料について測定を行った。また、蛍光寿命の解析は付属のソフトにより行った。数値解析は多成分指数関数型緩和モデルを用いて、励起光と蛍光のデコンボリューション処理を行って求めた。

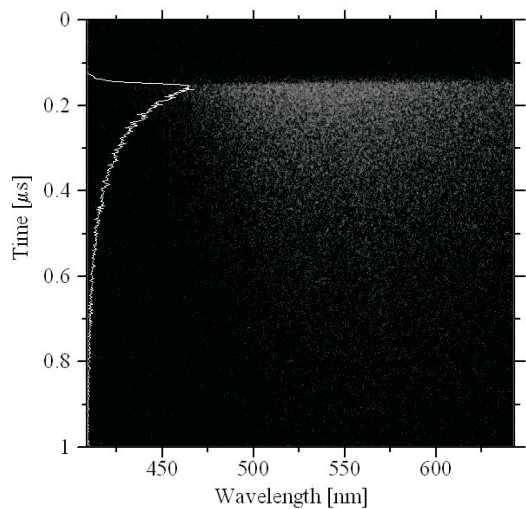


図14 Se 0.06mol/l W=4 R=15 の蛍光寿命特性

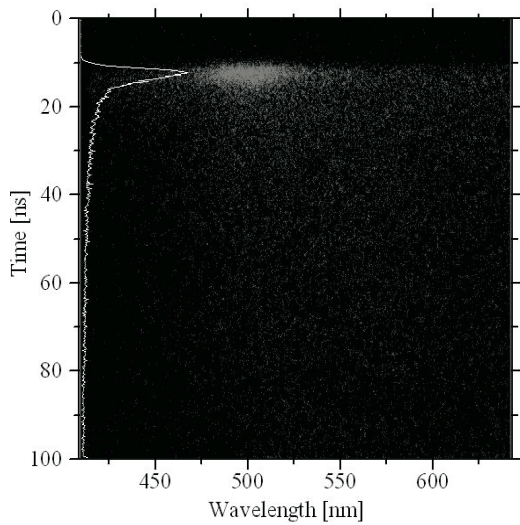


図 15 Se0.06mol/l W=6 R=15 の蛍光寿命特性

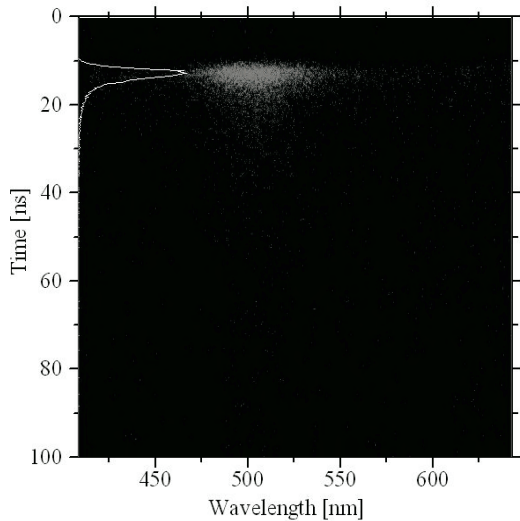


図 16 Se0.06mol/l W=8 R=15 の蛍光寿命特性

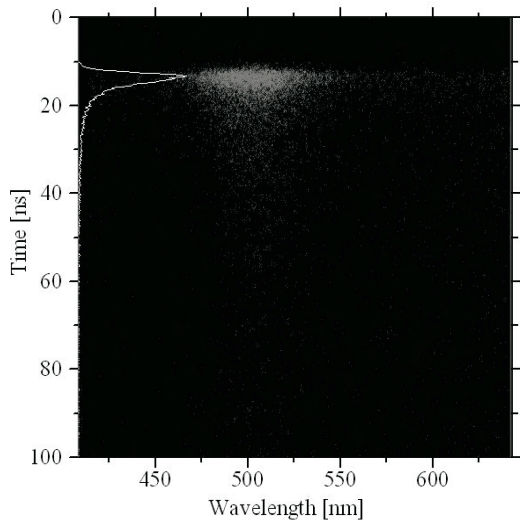


図 17 Se0.06mol/l W=10 R=15 の蛍光寿命特性

図から明らかのように、 $W=4$  は波長域の広い寿命の長い蛍光が見られるのに対して、 $W=6\sim 10$  では寿命の短い、バンド幅の狭いバンド端発光のみが測定された。

### 3. 5 Raman 散乱測定

Se0.06mol/l  $R=15$  の試料と Se0.06mol/l  $R=10$  の試料のラマン散乱スペクトルを図 18~21 示す。図 19 と 21 は、それぞれ図 18 と 20 の測定スペクトルの蛍光成分を付属ソフトで処理したものである。

いずれの試料も Se 濃度と  $W$  値によらず  $208\text{cm}^{-1}$  付近に CdSe の LO フォノンによるピークが見られる。また、図 19 と 21 のスペクトルには  $420\text{cm}^{-1}$  付近に構造が見られる試料もある。これは、CdSe の 2LO フォノンに一致している。励起光  $785\text{nm}$  では、CdSe に対応するラマン散乱スペクトルは得られなかった。

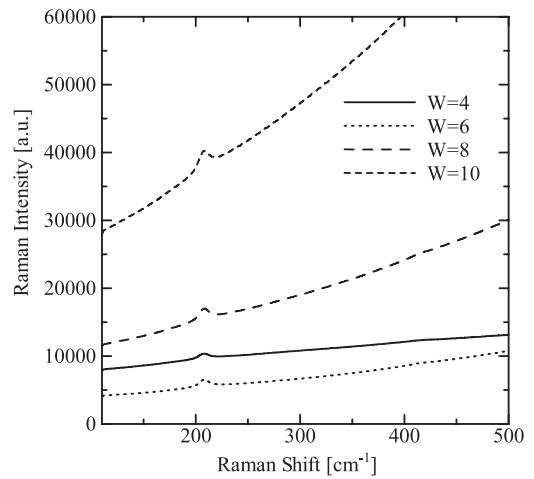


図 18 Se0.06mol/l R=15 のラマン散乱スペクトル

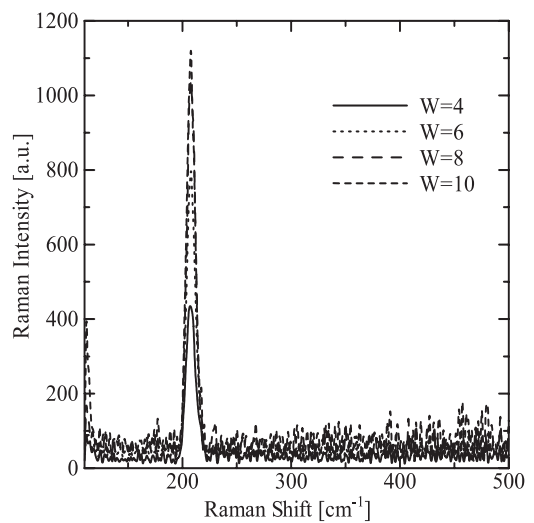


図 19 蛍光補正後 Se0.06mol/l R=15 のラマン散乱スペクトル

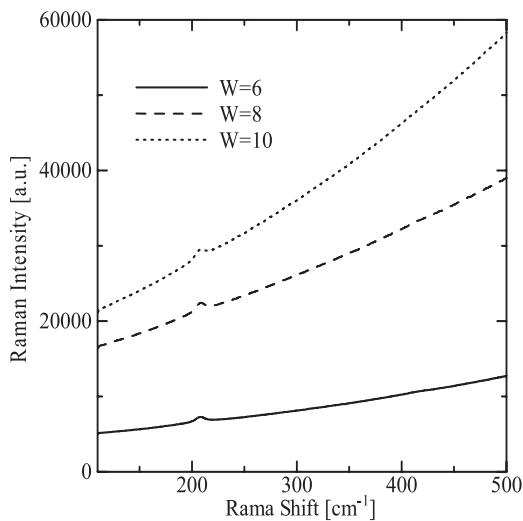
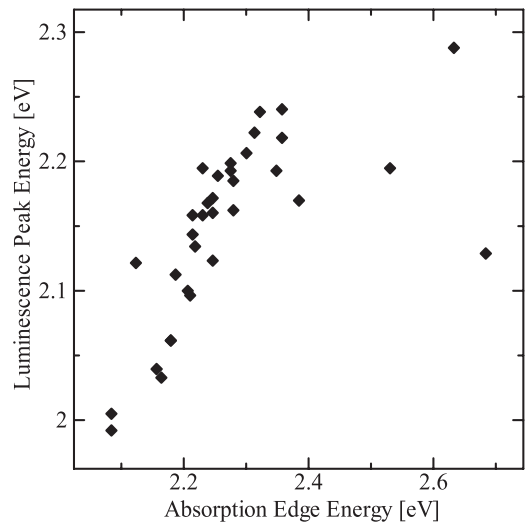
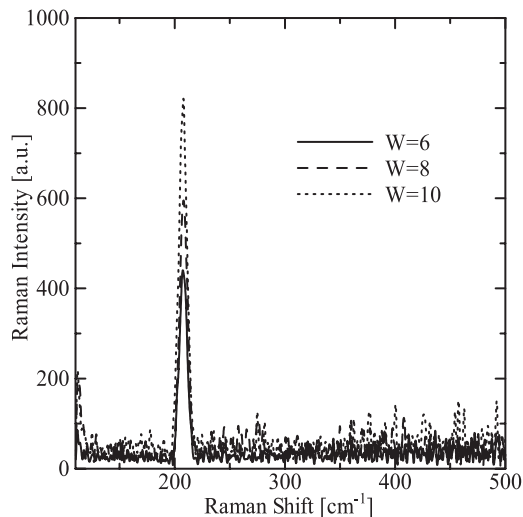
図20 Se<sub>0.08</sub>mol/l R=10 のラマン散乱スペクトル

図22 バンド端発光のピークエネルギーの吸収端エネルギー依存性

図21 蛍光補正後 Se<sub>0.08</sub>mol/l R=10 のラマン散乱スペクトル

#### 4. 考察

透過スペクトルの結果より、今回作製した CdSe ナノ微粒子の吸収端の波長は 430nm~600nm 範囲にあった。W. W. Yu et al.<sup>2)</sup>による吸収端波長と粒子サイズの関係式から求めると、今回作製した CdSe ナノ微粒子のサイズは約 1.8~4.6nm であった。

図 22 は作製した全ての試料のバンド端発光のピークエネルギーの吸収端のエネルギー依存性を示す。

図 22 から分かるように、吸収端のエネルギーが増加するとバンド端発光のピークエネルギーもそれに比例して増加している。

なお、吸収端エネルギーが 2.4eV 以上のものはいずれも W=4 の場合であり、吸収端のエネルギーと発光スペクトルのピークエネルギーの関係にはばらつきが見られる。これは、図 8,9 に示すように W=4 の試料の発光スペクトルが、複数の発光の重ね合わせになっているためと考えられる。

透過測定と蛍光測定の実験結果でも述べたとおり、作製した試料全体の一般的傾向として、吸収端のエネルギーやバンド端発光のピークエネルギーはモル比  $W$  が大きくなると低エネルギー側へシフトしている。

これは、逆ミセル法で作製した CdS ナノ微粒子と同様に、 $W$  が増加するにつれて逆ミセルのサイズが増加し、その中で作製できるナノ微粒子のサイズも大きくなることを示している。

しかしながら、微粒子のサイズ (吸収端エネルギー) がモル比  $W$  だけで制御できない場合もある。これは、今回作製した微粒子のサイズが 1.8~4.6nm 程度と狭い範囲であり、逆ミセル法の多数の作製条件のわずかな変化が、微粒子のサイズに影響することを示している。

一方、Na<sub>2</sub>SO<sub>3</sub> の割合  $R$  が増加すると吸収端のエネルギーやバンド端発光のピークエネルギーは高エネルギー側へシフトしている。

これは、 $R$  の増加に伴い CdSe 微粒子のサイズが小さくなっていることを意味している。したがって、Na<sub>2</sub>SO<sub>3</sub> が CdSe 微粒子の成長を抑制していることを示している。

吸収端のエネルギーとバンド端発光のピークエネルギーの差 (ストークスシフト) の吸収端のエネルギー依存性を図 23 に示す。

図からわかるように、吸収端のエネルギーによらず、ストークスシフトの値は 0.1eV 付近で一定である。吸収端エネルギーが 2.4eV 以上のものは前述のとおり W=4 の試料であり、一般的な関係とは異なっている。

図 24 に吸収端エネルギーとバンド端発光の半値幅の関係を示す。今回の測定結果からは半値幅は約 0.15eV でほぼ一定である。

また、図 25 に吸収端エネルギーとバンド端発光の緩和時間の関係を示す。緩和時間についても約 2~4ns で一定である傾向が見られた。しかし W=4 の試料については 10ns~20ns の極端に長い緩和時間を示している。このことは、図 8,9 に示す W=4 の試料の発光が、バンド端からの発光ではないことを示している。

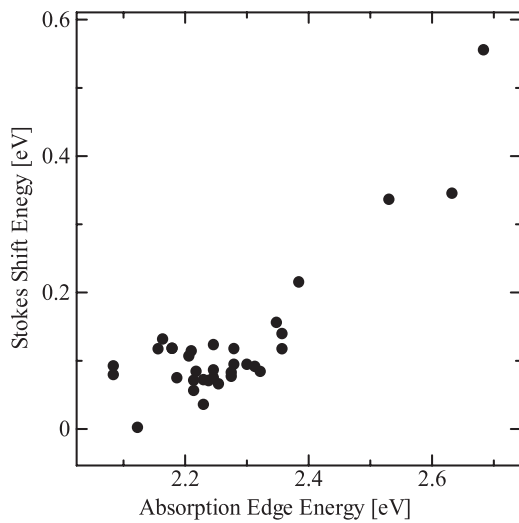


図23 ストークスシフトの吸収端エネルギー依存性

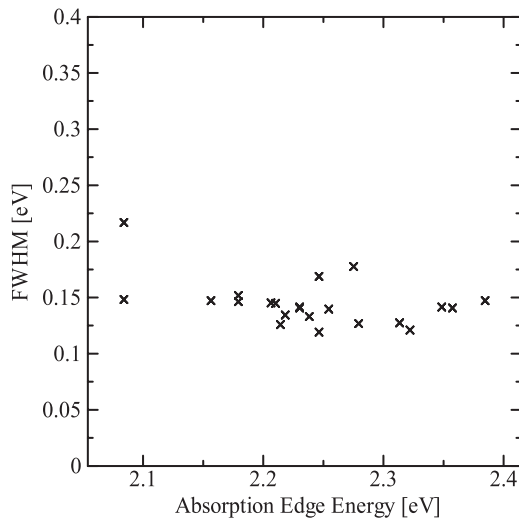


図24 バンド端発光の半値幅の吸収端エネルギー依存性

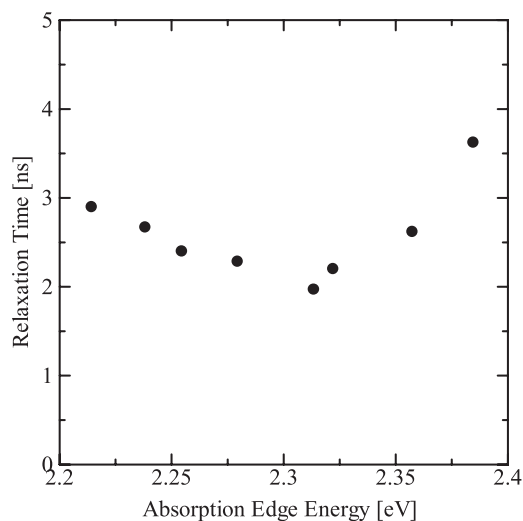


図25 バンド端発光の緩和時間の吸収端エネルギー依存性

最後に、ラマン散乱についてはどの試料も図に示した通り LO フォノンによるピークが  $208\text{cm}^{-1}$  で一定であった。これはバルクの CdSe とほぼ同じであり、ナノスケールにおける構造変化が見られていない。これは、測定に用いた試料を液体中の分散状態から固体化した影響も考えられ、さらなる検討が必要である。

バンド端発光のストークスシフト、半値幅、と緩和時間ならびに LO フォノン振動数が CdSe ナノ微粒子のサイズ (吸収端エネルギー) にほとんど依存しないことは、吸収端エネルギーが量子サイズ効果を示すことと矛盾している。これは、最近接領域程度の局所効果と数 nm の領域での閉じ込め効果との間には大きな差があることを示しているものと考えられる。したがって、よりサイズの小さな (1nm 程度) 微粒子を作製して、その光学特性を解析しなければならないことを示している。

## 5. まとめ

今回、CdSe ナノ微粒子を合成法が容易な逆ミセル法を用いて作製できることが確認できた。この作製方法を用いることにより、作製条件を容易に変化させて微粒子の電子状態の変化を研究できることが明らかになった。

まずモル比  $W$  が大きくなると吸収端エネルギー  $E_g$  とバンド端発光のピークエネルギー  $E_m$  は低エネルギー側へシフトし、量子サイズ効果を示す。また、モル比  $R$  が大きくなると  $E_g, E_m$  は高エネルギー側へシフトし、微粒子の成長が遅くなる傾向がみられる。さらに、 $W=4$  での発光特性は他の試料とは異なる特性を示し、微粒子の成長過程での電子状態の変化を示している可能性がある。

バンド端発光のストークスシフト、半値幅、蛍光の緩和時間並びにラマンピークは、Se 濃度、モル比  $W$  値と  $R$  値にはほとんど依存しなかった。

今後の課題として、 $W$  による微粒子の粒子サイズをより精密に制御し、粒子サイズが 1nm 程度からの粒子の成長過程における光学特性を明確にする必要がある。それにより、CdSe ナノ微粒子の成長過程における電子状態の変化を解明できる。

## 参考文献

- 1) R.Rai,A.srivastavab,K.Jain Sensors and Actuators B138.2009.304-309
- 2) W. W. Yu, L. Qu, W. Guo, and X. Peng Chem. Mater. 2003, vol15,p 2854-2860

# 量子論における Bell 不等式について

四王天 正臣

On Bell's inequalities in quantum theory

Masaomi SHIODEN

**Abstract:** We review Bell's inequalities which is often proclaimed as the most profound/abstruse discovery. These inequalities must hold if the local hidden variable theory envisaged in EPR paper is indeed available. However, basically all experiments performed so far have shown that these inequalities do not hold. We mention briefly the subtle interplay between the non-locality of quantum theory and the causal propagation of information.

## 1. はじめに

西暦 1900 年にドイツの Max Planck による作用量子の概念の導入により始まった前期量子論を基礎に、1925 年～1926 年頃、Werner Heisenberg (ドイツ) による行列力学と Erwin Schrödinger (オーストリア) による波動力学を中心として、今日の量子力学は一応の完成を見た。

現在、量子力学の主流と考えられているのは、Niels Bohr が推し進めてきた実証論的手法をとる、所謂 Copenhagen 解釈に基づく理論体系であるが、量子力学建設に貢献した一流の物理学者の中にも、当初からその解釈に異論を唱えた者が複数存在した。

その最たる者が Albert Einstein であり、1935 年には B.Podolsky および N.Rosen と共著で、近年引用回数が飛躍的に上昇している有名な EPR 論文[1]を発表した。その頃、Erwin Schrödinger や Louis de Broglie のように、どちらかという Einstein 寄りの立場に立った反応を示した物理学者も存在したが、多くは EPR 論文に対する Bohr による反論を、必ずしも積極的に支持したわけではなく、またその内容を深く理解したわけでもなかったように思われる。

それにも拘わらず、大部分の物理学者が Bohr に従った立場で原子核などを対象とした量子力学の応用に従事してきたのは、そこで論じられる問題が、当時は物理実験を行うことで明確に決着を付けられるような状態ではなく、思考実験のみに頼って議論せざるを得なかったことが背景にあったと考えられる。

ところが、EPR 論文が発表されてから約 30 年を経た 1964 年に John Bell が画期的な論文を提出し、その状況に大きな変化を与えることになった。その中で Bell が示したことは、EPR 論文で示唆されたと考えられるような、完全性をもつ所謂「隠れた変数(hidden variable)」の理論が局所性を持つためには、物理量の相関に対して Bell 不等式が成り立つ必要があるということである[2]。

本稿では、Bell 不等式の概要を、一般的な形式としてしばしば用いられる CHSH 不等式を用いて説明し、量子

論におけるこの不等式の破れと、それを支持する検証実験の例を紹介する。また、最後に量子論における非局所性と情報伝達に関する議論について言及する。

## 2. 局所的な隠れた変数の理論

昨年度の掲載論文[3]で触れてあるが、まず最初に、局所的な隠れた変数の理論についてここに要約しておく。

決定論的な隠れた変数の理論では、何らかの決定因子というものが存在し、その決定因子が決まれば全ての物理の値が決まり、従って物理量は実在していることになる。この決定因子を  $\lambda$  で表わすことにすると、 $\lambda$  は一般的には変数の集合であり、これを「隠れた変数」と呼ぶ。隠れた変数と呼ぶのは、この変数が物理量の背後に在って、実験的に観測されるような実証的な存在ではないからである。一方、量子力学は確率論的であり、これに対応するような決定因子は存在しない。

一般的に、実験において測定対象に対応するものは「状態」である。これは量子力学においては、Hilbert 空間  $\mathcal{H}$  のベクトル  $|\psi\rangle$  によって表わされる。

隠れた変数の理論においては、状態  $|\psi\rangle$  は決定因子の分布関数(ensemble) に対応させることができる[4]。隠れた変数の理論において、決定因子  $\lambda$  の分布関数を  $\rho(\lambda)$  と書くと

$$\int d\lambda \rho(\lambda) = 1 \quad \text{確率の規格化}$$

$$\rho(\lambda) \geq 0$$

という条件を満たし、量子力学と隠れた変数の理論は波動関数  $|\psi\rangle$  と分布関数  $\rho(\lambda)$  との対応によって関係がつけられる。

$$|\psi\rangle \rightarrow \rho(\lambda)$$

量子力学と隠れた変数の理論との比較を纏めると次のようになる。



	量子力学	隠れた変数の理論
決定因子	存在しない	隠れた変数 $\lambda$
状態	$ \psi\rangle$ : 波動関数	$\rho(\lambda)$ : 分布関数
物理量	$\hat{A}$ : Hermite 演算子	$A$ : 抽象的概念
測定値	$\hat{A}$ の固有値	$A(\lambda)$

局所的な隠れた変数の理論は、その局所性と実在性から局所の実在論とも呼ばれる。局所性(locality)という性質は現在の物理学において、最も基本的な要請になっている。何故ならば、ある位置における現象の情報が瞬時に遠く離れた位置に伝わり、また影響を与えるようなことは、情報は真空中の光速を超えて伝わらないという相対論の因果律によって、起こり得ないとされているからである[5]。量子力学における局所性の意味との相違については、後に言及する。

### 3. Bell 不等式

Bell 不等式にはいろいろな型があるが、ここでは 1964 年に初めて Bell が提出した型ではなく、より一般的なものとして 1969 年に J.F.Clauser, M.A.Horne, A.Shimony, R.A.Holt の 4 名が導いた通称 CHSH 不等式を、Bell 本人が 1971 年にレビューした文献を引用しながら紹介することにする[6]。

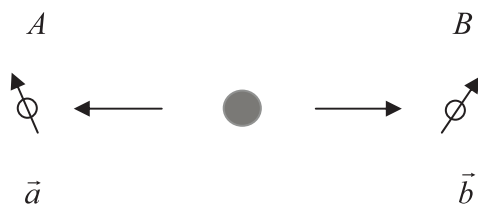


図 1 2 個の  $\text{spin}-\frac{1}{2}$  の粒子の系

例として図 1 のように、2 個の  $\text{spin}-\frac{1}{2}$  の粒子からなる系を考える。左右の 2 方向に向かう粒子の spin 成分を、2 粒子が十分に離れた段階で、 $\vec{a}$  方向と  $\vec{b}$  方向につ

いて測定する装置を用意する。実際の測定結果は、 $\frac{\hbar}{2}$  を

単位として、 $+1$  または  $-1$  のいずれかの値になる。隠れた変数の理論においては、与えられた量子力学的状態に対して、隠れた変数  $\lambda$  の関数である分布関数  $\rho(\lambda)$  を用いた初期状態の完全な表現を仮定する。

左側の測定で  $\pm 1$  となる結果  $A$  は明らかに  $\lambda$  と最初の装置の設定  $\vec{a}$  に依存する。右側の  $B$  の測定結果

$\pm 1$  についても同様に  $\lambda$  と  $\vec{b}$  に依存する。ここで局所

性の概念から、 $A$  は  $\vec{b}$  に依存せず、また  $B$  は  $\vec{a}$  に依存しないことが要求される。それは、2 個の粒子が互いに遠方に離れているからである。そこで、積  $AB$  の平均値

$$P(\vec{a}, \vec{b}) = \int d\lambda \rho(\lambda) A(\vec{a}, \lambda) B(\vec{b}, \lambda) \quad (1)$$

が量子力学の予言と等しくなるかどうかを考察することにする。

現実には、もっと一般的に考えて、結果に影響しうる別の隠れた変数を装置自身が内包しているとしてもよいであろう。初めにそれらの平均をとって、

$$A \rightarrow \bar{A}, \quad B \rightarrow \bar{B}$$

とする。そうすると、積  $AB$  の平均値(相関)は

$$P(\vec{a}, \vec{b}) = \int d\lambda \rho(\lambda) \bar{A}(\vec{a}, \lambda) \bar{B}(\vec{b}, \lambda) \quad (2)$$

のように表わされる。

ここで、局所性によって装置の変数の対応する分布がそれぞれ  $\vec{b}$  と  $\vec{a}$  には依存せず、平均である  $\bar{A}$  と  $\bar{B}$  も、

それぞれ  $\vec{b}$  と  $\vec{a}$  には依存しないことを用いた。

また、平均化したことにより、

$$A = \pm 1, \quad B = \pm 1 \quad (3)$$

という測定結果は、

$$|\bar{A}| \leq 1, \quad |\bar{B}| \leq 1 \quad (4)$$

という制限に置き換わる。

実際には、一つまたは両方の装置が片方の方向を記録することに失敗するような場合があるかも知れない。 $P, \bar{A}, \bar{B}$  を定める上で  $A$  もしくは  $B$  の値が 0 になる場合もあるかもしれないが、その場合でも式(4)は正しいし、以下の議論は有効である。

いま、 $\vec{a}'$  と  $\vec{b}'$  とを測定者が選べる装置の別の設定とする。左で  $\vec{a}, \vec{a}'$ 、右でも同様に  $\vec{b}, \vec{b}'$  の 2 方向を測定方向として選択できるとすれば、

$$\begin{aligned}
& P(\vec{a}, \vec{b}) - P(\vec{a}, \vec{b}') \\
&= \int d\lambda \rho(\lambda) [\bar{A}(\vec{a}, \lambda) \bar{B}(\vec{b}, \lambda) - \bar{A}(\vec{a}, \lambda) \bar{B}(\vec{b}', \lambda)] \\
&= \int d\lambda \rho(\lambda) [\bar{A}(\vec{a}, \lambda) \bar{B}(\vec{b}, \lambda) (1 \pm \bar{A}(\vec{a}', \lambda) \bar{B}(\vec{b}', \lambda))] \\
&- \int d\lambda \rho(\lambda) [\bar{A}(\vec{a}, \lambda) \bar{B}(\vec{b}', \lambda) (1 \pm \bar{A}(\vec{a}', \lambda) \bar{B}(\vec{b}, \lambda))]
\end{aligned}$$

となるが、ここで式(4)を用いると、

$$\begin{aligned}
& |P(\vec{a}, \vec{b}) - P(\vec{a}, \vec{b}')| \\
&\leq \int d\lambda \rho(\lambda) (1 \pm \bar{A}(\vec{a}', \lambda) \bar{B}(\vec{b}', \lambda)) \\
&+ \int d\lambda \rho(\lambda) (1 \pm \bar{A}(\vec{a}', \lambda) \bar{B}(\vec{b}, \lambda))
\end{aligned}$$

あるいは、

$$|P(\vec{a}, \vec{b}) - P(\vec{a}, \vec{b}')| \leq 2 \pm (P(\vec{a}', \vec{b}') + P(\vec{a}', \vec{b}))$$

より対称的な表現では、

$$|P(\vec{a}, \vec{b}) - P(\vec{a}, \vec{b}')| + |P(\vec{a}', \vec{b}') + P(\vec{a}', \vec{b})| \leq 2 \quad (5)$$

と書ける。これが、CHSH 不等式である。

いま特に、 $\vec{a}' = \vec{b}'$  と選び、完全反相関

$$P(\vec{b}', \vec{b}') = -1 \quad (6)$$

が実現されている状況を考える。これは、実際に 2 電子スピンの singlet 状態として作ることができる。

このとき、式(5)から

$$|P(\vec{a}, \vec{b}) - P(\vec{a}, \vec{b}')| \leq 1 + P(\vec{b}', \vec{b}) \quad (7)$$

が得られるが、これが、1964 年に Bell が導いた最初の式の形であり、CHSH 不等式の特殊な場合に相当している。

なお、以下では式(5)よりも緩い形での CHSH 不等式

$$|P(\vec{a}, \vec{b}) - P(\vec{a}, \vec{b}') + P(\vec{a}', \vec{b}') + P(\vec{a}', \vec{b})| \leq 2 \quad (8)$$

を用いることにする。また、これらの不等式(5)、(8)などを総称して、単に Bell 不等式と呼ぶことが多いので、本稿に於いてもこれに従うことにする。

#### 4. 量子論における Bell 不等式の破れについて

3 章で考えた相関について量子力学で考察し、Bell 不等式が破れる一例を[4][7]に基づいて紹介する。

まず、状態が量子力学における直積状態のときを考える。

$$|\Psi\rangle = |\psi\rangle_1 |\varphi\rangle_2 \quad \cdots \text{直積状態} \quad (9)$$

$$A(\vec{a}) \rightarrow \hat{A}(\vec{a}) \quad \cdots \text{物理量の演算子} \quad (10)$$

$$B(\vec{b}) \rightarrow \hat{B}(\vec{b}) \quad \cdots \text{物理量の演算子} \quad (11)$$

このとき、相関は、

$$\begin{aligned}
P(\vec{a}, \vec{b}) &= \langle \Psi | \hat{A}(\vec{a}) \otimes \hat{B}(\vec{b}) | \Psi \rangle \\
&= {}_1 \langle \psi | \hat{A}(\vec{a}) | \psi \rangle_1 {}_2 \langle \varphi | \hat{B}(\vec{b}) | \varphi \rangle_2
\end{aligned} \quad (12)$$

となり、分離している相関の部分を  $A(\vec{a}), B(\vec{b})$  とみなすと、状況は隠れた変数の理論の場合式(1)と構造の上では同じになり、Bell 不等式は破れない。

直積状態では Bell 不等式は破れなかったが、一方、量子力学における singlet 状態(量子もつれ状態)

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 - |\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 \right) \quad (13)$$

$$\sigma_z^i |\uparrow\rangle_i = +|\uparrow\rangle_i, \quad \sigma_z^i |\downarrow\rangle_i = -|\downarrow\rangle_i, \quad i=1,2 \quad (14)$$

を考えると、以下のようにして Bell の不等式が破れることが分かる。

まず、演算子は、各方向のスピンを表わす演算子

$$A(\vec{a}) \rightarrow \hat{A}(\vec{a}) = \vec{\sigma}^1 \cdot \vec{a} \quad \vec{a} \text{ 方向の spin} \quad (15)$$

$$B(\vec{b}) \rightarrow \hat{B}(\vec{b}) = \vec{\sigma}^2 \cdot \vec{b} \quad \vec{b} \text{ 方向の spin} \quad (16)$$

で与えられ、ここで測定方向を表わすベクトルは規格化

$$|\vec{a}| = |\vec{b}| = 1 \quad (17)$$

してある。それぞれの粒子のスピンは同時測定可能であり、これは、

$$[\hat{A}(\vec{a}) \otimes \mathbf{1}, \mathbf{1} \otimes \hat{B}(\vec{b})] = 0 \quad (18)$$

という交換関係で保証されている。

いま、図 2 のように、 $\vec{a}$  を  $z$  軸方向に、 $\vec{b}$  を  $zx$  平面上にとり、 $\vec{a}$  と  $\vec{b}$  とのなす角を  $\phi$  とすると、

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = \cos \phi \quad (19)$$

であり、相関は、

$$\begin{aligned}
 P(\vec{a}, \vec{b}) &= \langle \Psi | (\vec{\sigma}^1 \cdot \vec{a}) \otimes (\vec{\sigma}^2 \cdot \vec{b}) | \Psi \rangle \\
 &= \frac{1}{2} \{ \langle \uparrow | \sigma_z^1 | \uparrow \rangle_{12} \langle \downarrow | \cos \phi \sigma_z^2 + \sin \phi \sigma_x^2 | \downarrow \rangle_2 \\
 &\quad + (\uparrow \leftrightarrow \downarrow) \} \\
 &= \frac{1}{2} (-\cos \phi \times 2) \\
 &= -\cos \phi \tag{20}
 \end{aligned}$$

となる。

いま、図2に示すような  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{a}', \vec{b}'$  をとると、

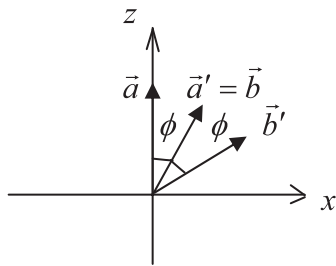


図2  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{a}', \vec{b}'$  のとり方

$$\begin{aligned}
 &|P(\vec{a}, \vec{b}) - P(\vec{a}, \vec{b}') + P(\vec{a}', \vec{b}') + P(\vec{a}', \vec{b})| \\
 &= |-\cos \phi + \cos 2\phi - \cos \phi - 1| \\
 &= 2|\cos^2 \phi - \cos \phi - 1| \tag{21}
 \end{aligned}$$

となる。この関数を、

$$C(\phi) = 2|\cos^2 \phi - \cos \phi - 1|$$

とおいてグラフにすると、おおよそ図3のようになり、相関が2を超えて(最大値 2.5)、Bell 不等式を破っている部分が存在する。すなわち、量子力学は実在性と局所

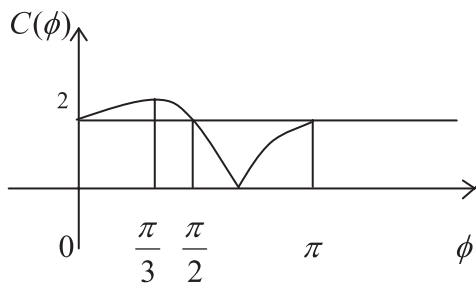


図3  $C(\phi)$  のグラフの概要

性の両方を同時には満たしていないことがわかる。

Bell 不等式の検証実験は、一般に局所性の十分な確保と統計的な意味でのデータの信頼性の両者に技術的な困難があることが知られている。初期の実験としては、1982年に A. Aspect, J.Dalibard と G.Roger による time-varying analyzers を使った検証実験が有名である[8]。ただ、この実験は実証的には局所性と統計性の両面で、やや不完全なものであったとされている。一方、1998年の G.Weih らの実験では局所性の問題を、2001年の M.A.Rowe らの実験では統計性の問題を解決したとされている。現在までこの2つの問題を同時に解決した実験は行われていないが、光子の他に中間子や陽子など様々な粒子による追実験の結果がいずれも Bell 不等式の破れを示しており、その結果は十分に信頼のおけるものと考えられている[9]。

ここでは、1982年に発表された Aspect らの実験、彼がその後に行われて諸実験について纏めた文献[10]を基にして、Aspect らが行った Bell 不等式の検証実験の一例の結果を紹介するにとどめる。

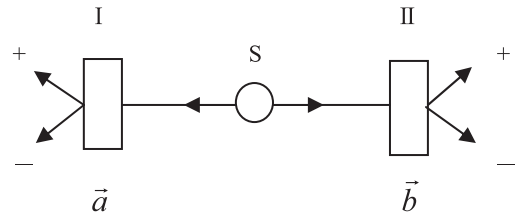


図4 実験の模式図

図4の模式図にあるように、I と II は2チャンネルの偏光子で、これを用いて中央の source S より左右に放出された光子の偏光を測定する。

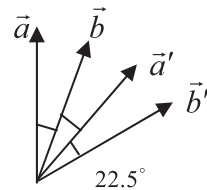


図5 測定の方法

ここで、前の2つの章の表記に対応する

$$\begin{aligned}
 &S(\vec{a}, \vec{a}', \vec{b}, \vec{b}') \\
 &= P(\vec{a}, \vec{b}) - P(\vec{a}, \vec{b}') + P(\vec{a}', \vec{b}') + P(\vec{a}', \vec{b}) \tag{22}
 \end{aligned}$$

という量を図5のような方向について測定した結果、

$$S_{\text{exp}} = 2.697 \pm 0.015$$

という実験結果が得られた。これは、 $|S| \leq 2$  となる

CHSH 不等式を破る値となっている。

この実験結果に対応する量子力学に基づく理論値は彼らの用いた偏光子の効率やレンズの開口部の大きさを考慮すると

$$S_{QM} = 2.70 \pm 0.05$$

となるとされており、実験結果と良く一致している。

## 5. まとめ

CERN(欧州素粒子原子核研究機構)で理論を研究していた Bell は、1964 年に「EPR パラドックスについて」という論文を発表することによって、EPR 論文の議論が単なる哲学的なものではなく、量子力学の物理的予言と矛盾する点があることを指摘して、それまでに気付かれていなかった量子力学の深奥を明らかにした[11]。

局所性と統計性を両方とも満足させた実験は今のところ行われていないが、前章で見たように、実験は量子力学による予言を再現しているように思われる。

したがって、Einstein らが EPR 論文で前提としていた「局所性」と「実在性」は少なくとも、そのいずれかを放棄する必要がある。もし「実在性」を保持するとすれば「局所性」を放棄することになるが、これは因果律の上から問題を引き起こさないのだろうか。その答は、直接的には否であると考えられている。なぜなら、測定行為によって情報通信を行う事そのものが不可能であることが比較的簡単に証明できるように見えるからである[12]。

しかしながら、非局所性と因果律の問題は、厳密にはなお未解決の問題として残されている。晩年、Bell は文献[13]の中の結論部分で次のような問題を提起している。この部分の翻訳は、文献[11]の 3 章に引用されているが、最後にそれをここでも引いておくことにする。

我々は、現代理論物理学の基本的な因果的構造を表現するものとして、「超光速信号は存在しない」という事実に依存しなければならないのか。それは、どうして私には受け入れられないことである。その一つの理由は、相関を説明できるという考えを失ってしまうことになり、少なくともこの考えについては、今後の再考を待つべきであるからである。より重要な理由としては、「超光速信号は存在しない」という概念が酷く曖昧な概念であり、あるいは漠然としか適用できないものであるからである。「我々は光速を超えて信号を送ることができない。」という主張は直ちに次の疑問を呼び起こす。

我々とは、いったい誰を指すのか？

## 謝辞

本稿を纏めるに当っては、高エネルギー加速器研究機構素粒子原子核研究所理論部の筒井 泉氏に示唆と御助言をいただきました。ここに篤く御礼申し上げます。

## 付記

最近、真空中の光速を超える実験結果が発表されて話題となっている[14]。以下に記す事柄は、このニュースに際し、これから再検討してみるのもあながち無駄ではないと思われる観点についての忘備録のようなメモと考えていただきたい。もっとも、この文章が印刷される頃には、一応の決着がついているかも知れないが。

真空中の光速という表現を使うけれども、装置内を真空にするという行為は、元来、真空ポンプを使用して、装置内から気体の分子・原子を限りなく除くという作業であった。現在では、場の量子論などにおける真空の定義は、光子の数が 0 であるような、エネルギー 0 の状態とされている。

現在、地球上に降り注いでいる太陽からのニュートリノのフラックスは、 $10^6 \text{cm}^{-2} \text{sec}^{-1}$  のオーダーであるといわれている。ニュートリノは電荷を持たないため電磁相互作用を行わないので、光とは直接的には相互作用しない。そうではあるが、仮に実験的に装置内を超高真空にできたとしても、地球上は勿論のこと、太陽系に在っては常に太陽ニュートリノのフラックスにさらされているから、宇宙全体に恒星が数数多(かずあまた)存在していることを考えると、何処へ行ったとしてもニュートリノの海の中に居ることになる。したがって、少なくともニュートリノという物質が分布している以上、本当の意味で真空中の光速が測定されたことはないと言える。

光は、媒質中、たとえば水の中を通過する場合には、その速さは水の屈折率分の 1 になる。水中を水中の光速より速い荷電粒子が通ると、ちょうど超音速ジェット機が音速の壁を破る際に衝撃波を出すことと同様に、チェレンコフ光を出すという現象がある。

ただ、今回、真空中の光速より速いと観測された粒子がニュートリノであるので、ニュートリノと光との相互作用を厳密に分析していかなければならないが、このあたりについて、今一度考察してみる価値があるのではあるまいか。

ニュートリノの質量にしても、ニュートリノが W.Pauli によって導入されてから、半世紀以上、質量は 0 と考えられてきたにもかかわらず、近年になってニュートリノ振動が観測されて質量をもつことが示唆されてきたりしている。

また、現在、宇宙には正体不明のダークマターが存在していると考えられている[15]。このダークマターも媒質と

して考えることが当然可能で、この点については、「素粒子論研究・電子版」に速報の考察が掲載されている[16]。

かつて、 $\beta$ 崩壊においてエネルギーが保存しないという観測結果が出たとき、ミクロの世界ではエネルギー保存則が成り立たないことがあるのではないかと一時考えた指導的な物理学者もいたと言われている。

ただ、新たな局面を迎えた時点では、現在の常識を用いて初めから否定してしまうのではなく、条件を緩めてみて、あらゆる可能性を吟味する方がよいのではないかと考える。

### 参考文献等

- [1] A.Einstein, B.Podolsky and N.Rosen, Phys.Rev.47, 777-780 (1935)  
翻訳は アインシュタイン選集 1, 共立出版, 185-192, (1971) 等にある。
- [2] J.S.Bell, Physics 1, 195-200 (1964)
- [3] 四王天正臣, 茨城工業高等専門学校研究彙報 46, 51-56 (2011)
- [4] 筒井 泉, 総合研究大学院講義「現代物理学」(2009)
- [5] 清水 明, 新版 量子論の基礎 サイエンス社 (2004)
- [6] J.S.Bell, Introduction to hidden-variable question. *Foundations of Quantum Mechanics*. Proceedings of the International School of Physics ' Enrico Fermi', course IL, New York, Academic 171-181 (1971)
- [7] Chris J.Isham, Lectures on Quantum Theory, Imperial College Press (1995)
- [8] A. Aspect, J.Dalibard and G.Roger, Phys.Rev.Lett. 49 1804-1807 (1982)
- [9] 筒井 泉, 数理科学, 548, 7-13 (2009)
- [10] A.Aspect, in "Quantum [Un]speakables—From Bell to Quantum Information", eds. R.A.Bertlmann and A.Zeilinger, Springer (2002)  
A.Aspect, P.Grangier and G.Roger, Phys.Rev.Lett. 49, 91-94 (1982)
- [11] 筒井 泉, 量子力学の反常識と素粒子の自由意志, 岩波科学ライブラリー179, 岩波書店 (2011)
- [12] G.C.Ghirardi, A.Rimini and T.Weber, Lett. Nuovo Cimento, 27, 293-298 (1980)  
A.Shimony, Proc.Int.Symp. Foundation of Quantum Mechanics, Tokyo, 225-230 (1983)
- [13] J.S.Bell, La nouvelle cuisine, *Between Science and Technology*, Ch.6, North-Holland (1990)
- [14] 朝日新聞 2011年9月24日(土)朝刊 1面・3面  
朝日新聞 2011年9月29日(木)朝刊 33面科学欄
- 朝日新聞 2011年10月9日(日)朝刊 2面  
<http://arxiv.org/hep-ex/1109.4897>  
The OPERA Collaboration, Measurement of the neutrino velocity with the OPERA detector in the CNGS beam (2011)
- [15] 扱っている文献は多数あるが、比較的容易に知ることの出来る本としては、例えば、  
村山 斉, 「宇宙は何でできているのか—素粒子物理学で解く宇宙の謎—」 幻冬舎新書 187 (2010)  
村山 斉, 「宇宙は本当にひとつなのか—最新宇宙論入門」 講談社 ブルーバック B1731 (2011)
- [16] 中西 襄, 「超光速ニュートリノ」を相対論と両立させるには, 素粒子論研究・電子版 Vol.9 No.3 (2011)  
<http://www2.yukawa.kyoto-u.ac.jp/~sokened/sokendenshi/sokendenshi.htm>

## EPR 論文と現在から見たその意義について(II) — Bohr の反論に対する再評価 —

四王天 正臣

On the paper by EPR and its significance today(II)  
—Re-Assessment for Bohr's Response —

Masaomi SHIODEN

**Abstract:** The seminal paper written by A.Einstein, B.Podolsky and N.Rosen (EPR) had questioned on the very basis of quantum mechanics. Bohr's response to EPR paper had been recognized as a valid refutation because the application of quantum mechanics based on the Copenhagen interpretation, which was advocated primarily by Bohr, had explained all the microscopic phenomena satisfactorily. Recently, however, a re-assessment that Bohr's response is merely a restatement of his interpretation has been put forward. We here review some of the important points which constitute this re-assessment.

### 1. はじめに

昨年度の茨城工業高等専門学校研究彙報第 46 号において、自由意志定理についての紹介と EPR 論文についての意義などに関して概説を試みた。自由意志定理について深く議論する際には Bell の定理について理解しておくことが必要であり、そのためには EPR 論文についての意義について歴史的な流れに沿ってさらに検討を加えておくことが重要である。そこで本稿においては、EPR 論文発表直後に提出された Niels Bohr による反論に関する現在の評価について纏めることにし、別の稿において Bell の定理について論じることとする。

EPR 論文の概要については、研究彙報第 46 号の 9[1]の 3 章において、原論文から重要部分を引用しながら紹介を行った。原論文については参考文献[2]を参照していただきたい。

文献[1]の 4 章における Bohr による反論では、その当時、支配的であった量子力学の Copenhagen 解釈にもとづいた評価を紹介したが、それから 75 年を経た今日、Bohr の議論は Copenhagen 解釈を再確認しているに過ぎず、EPR 論文への反論にはなっていないのではないかという評価も提出されるようになってきている。

ところで、Copenhagen 解釈は Bohr による解釈そのものだと考えてしまいがちであるが、Copenhagen に集った当時の一流の物理学者達は、個々それぞれの考え方をもち、量子力学解釈に当っては必ずしも一枚岩の様相を呈していたわけではない。実際、Werner Heisenberg や Wolfgang Pauli も、Bohr とはやや異なった解釈に立っており、その共通認識が Copenhagen 解釈と呼ばれているものの実体であるという方が精確である [3]。

### 2. EPR 論文に対する Bohr の反論

EPR 論文に対する Bohr の反論の論文は参考文献[4]にあるが、このうち、核心になる部分は、原論文では 700 ページ以降、翻訳書では 113 ページの下から 3 行目以降の部分である。Bohr はこの論文に於いて、自らが Einstein の「相対性原理」に比肩するものとして導入した「相補性原理 (complementarity)」を中核として反論を試みている。

さて参考文献[4]に沿って読み進めると、前半で Bohr は例として、量子力学の教科書によく掲載されているような、隔壁に開けられた 1 つのスリットを通過した 1 つの粒子という単純な場合から考察を始めている。スリットに到達する前の粒子の運動量が完全に知られていても、スリットによる回折の結果、隔壁通過後の粒子の運動量には必然的に不確定さが生じる。

例えば、スリットの幅を  $a$  とし、スリットの幅方向の位置の不確定さを  $\Delta x$  とすれば  $\Delta x \sim a$  で、 $\theta$  を回折角、 $\lambda$  をこの粒子の波動性を論ずる時の波長とすれば、 $a \sin \theta \sim \lambda$  である。この粒子の同じ方向についての運動量の不確定さは、粒子の運動量を  $p$  とすれば、

$$\Delta p \sim p \sin \theta$$

となるので、de Broglie の関係  $p = \frac{h}{\lambda}$  により、

Heisenberg の不確定性関係  $\Delta x \cdot \Delta p \sim h$  が成り立つことが見られる。

これは量子力学においては、任意の共役な物理量の対に対する交換関係の直接の帰結であり、 $\Delta p$  という不確定さは粒子と隔壁との間の運動量交換の可能性と結びついている。

さらに、最初の隔壁に平行に複数個のスリットをもつ第2の隔壁や写真乾板が設置された実験系の場合についての考察を進めている。Bohr が、単純で事実上よく知られているこのような実験系についての考察を繰り返した目的は、位置確定という曖昧さのない使い方か、運動量保存則の適正な適用か、いずれか一方のみに適した異なる実験の仮定と手法の合理的な区別を論じていることを強調するためである。

古典物理学に於いては、組み合わせることによって方法の特徴付けられる物理現象の2つの側面も、量子力学においては相補性により測定方法に対する測定対象の反作用を正確に制御することが不可能である。つまり、量子力学を古典的な統計力学によって表現しようとする際、理論上の形式表現としては有用であったとしても、本質的には誤りなのであると指摘する。そして、この点は EPR が指摘している特殊な問題に対しても同様に当て嵌まり、従来論じてきた例以上に難解なものではないとしている。

EPR でとりあげられている波動関数[5]は

$$\psi(x_1, x_2) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\left(\frac{2\pi i}{h}\right)(x_1 - x_2 + x_0)p\right] dp$$

で与えられる。2つの自由粒子のある特定の量子力学状態は、原理的には2つの平行なスリットと剛体である隔壁から構成される実験系で再現できるとして考察を進める。スリットの幅は、2つのスリットの間隔に比べて十分に小さく、そのそれぞれのスリットを初めに運動量が正確にわかっている粒子が別々に通過するものとする。隔壁の運動量が2つの粒子の通過の前後に正確に測定されれば、通過する2つの粒子の運動量のスリットの幅方向の成分の和  $p_1 + p_2$  と2つの粒子の最初の位置座標の同じ方向成分の差  $x_1 - x_2$  (= 2つのスリットの間隔)とを共に知ることができる。他方、これらの共役な変数、すなわち位置座標の和、 $x_1 + x_2$  と運動量成分の差  $p_1 - p_2$  は全く分からない。

この設定で、2つの粒子の自由運動に対応する波長がスリットの幅に比べて十分に小さければ、粒子の一方(これを粒子1とする)の位置または運動量のどちらか一方を測定すれば、もう一方の粒子(これを粒子2とする)の位置または運動量が自動的に任意の精度で決められるだろう。

ここで、EPR が指摘しているところでは、着目している粒子2に直接の影響を及ぼすことなく、位置と運動量のいずれを決めるかを、自由に選択できるとしている。一方 Bohr はスリットを通過した1つの粒子の位置または運動量のどちらかの予言に適した実験設定の選択の自由に於いては、古典論の相補的な概念の曖昧さのない使用を可能

にする異なる実験手続きの区別にかかわっていると主張する。結局、粒子1の運動量を測定すれば、運動量保存則により、粒子2の運動量は確定できるが、そのとき、粒子1と粒子2の位置に関しては、その物理量の定義は出来ない。

すなわち、EPR によって提唱されている物理的实在の判断基準である「系をいかなる仕方でも掻き乱すことなく」という表現に曖昧さが含まれており、考察している粒子2に対して、なんら力学的擾乱は加えられていないが、

その系の将来の振る舞いに関して、いかなるタイプの予言が可能なのかを定める諸条件そのものに対する影響

という問題が本質的なものとして存在するとの主張が Bohr の反論の根幹であった。

量子力学は、対象と測定装置の間の相互作用が無視できず制御が不可能であるという量子的な領域での事実を記述するが、これは「相補性」という概念で特徴付けられる全く新しい物理現象の記述となっている。

量子論における時間測定に関する議論に於いても、いままで概観してきた位置測定の場合と全く同様に行うことができる。現象の記述のためには相対的な位置の情報が必要であるが、この場合、測定装置への運動量の移行が完全に制御不可能とみなされるのと同様に、装置と対象との間のエネルギー交換も完全に正確に分析することは叶わないであろう。すなわち、

実際、時計に受け渡しされるエネルギーを、時間指示器としてその使用に本質的に影響することなく制御することは、原理的に排除されているのである。

従って、この点に関して、時間変数とエネルギー変数という互いに共役な変数についての不確定性関係に対応するエネルギー収支の不確定を見込んでおかなければならない。つまるところ、Bohr の言明は

それぞれの実験設定において、測定装置として扱われるべき部分と考察している対象を構成する部分とを識別することの必要性が、じつは物理現象の古典論による記述と量子論による記述の原理的な区別を形成しているのだと言ってよい。

ということに纏められる。

### 3. EPR 論文に対する Bohr の反論についての近年の再吟味

Copenhagen 解釈に基づく量子力学が次々とミクロの世界の現象の説明に成功してきたことから、1935 年以後、物理研究者の中にも EPR 論文は誤りで Bohr の反論が正しいという一方的な評価が固まって来ていた。ところが、近年になって、

- ① Bohr の反論で展開されている議論の内容は Bohr の持論の繰り返し・再確認になっているに過ぎず、EPR 論文に対する反論にはなっていない。
- ② そもそも Bohr の主張の正確な内容が判然としな

いという評価が提出されてくるようになった。

以下、その中で 2004 年に M.Whitaker による review 文献[6]を参考に、それらの議論の概略を紹介する。

Whitaker はこの文献で、EPR 論文が提出される以前の Bohr - Einstein 論争、EPR 論文についての概要と結論、それに対する Bohr の反論を纏めた上で、Bohr の反論を数学的に再構成した、H.Halvorson と R.Clifton [7] (以後 HC と略記する)、および M.Dickson [8] による最近の取り組みを紹介し、それに対する論評を行っている。

### 3.1. Halvorson - Clifton

HC は EPR に対する Bohr の議論が十分に正当性のあるものであるものとしてこれを補強しようとした。彼らは Bohr の量子論についての哲学は、Bohr に最近与えられている評価よりももっと公平に扱われてしかるべきであると考えた。特に、彼らは、Fine や Beller が「EPR は Bohr を実証主義者と決め付けた」というような見解を示していることに対して、それを認めない。HC は Bohr の自論の弁護が「ともかくも、量子力学の完全性が信用のおけない哲学的教義に依存している訳ではない」ということであると議論している。

ただ、この Bohr に対する支持は必ずしも EPR 論文自身に反対しているということを意味しはしないし、HC が試みた Bohr 理論の再構成が「EPR の実在主義的見解よりも Bohr の見解の方の優位性についての議論」を、それ自身で構成しているわけではない。実際、HC の考えは EPR の議論の主要な結論を拒絶したりそれに反論するよりも、むしろいくらか補強しているとさえ思われると Whitaker は指摘している。

HC は Bohr は古典論的表記法の立場から系に関して正当と仮定しうる事柄への疑問を呈しているのではなくて、むしろ離れた系に対して真に実在であるという事柄に関心を抱いているとしている。いずれにしても、量子もつれの性質を正しいものとする方法で、古典論的立場から量子もつれの系を記述することは困難である。

HC の議論では、Bohr は粒子 1 の測定が空間的に離れた粒子 2 の実在性の要素を構成しようとしていたという考えに立脚しているが、このことは、明瞭に局所性を否定していることになる。

HC はまた、Bohr は測定による波動関数の崩壊という射影仮説 (projection postulate) も、また固有関数 - 固有値の対応関係も受け入れなかったと強く主張している。正確には、

Bohr : 粒子 1 の測定が粒子 2 の力学的変化をもたらすということは否定

HC : 波動関数の崩壊は、波動関数の解釈として無知解釈 (ignorance interpretation) を援用しない限り力学的変化を引き起こすに違いないから、波動関数の崩壊は現実の、しかし知られていない隠れた系の状態かもしれない

しかし、後者の可能性は、正しく量子力学の不完全性であって、EPR の主張を認めたことになってしまう。

HC は Bohr にとって射影仮説が解となるような「測定の問題」は存在していなかったと信じている。彼らは Bohr が測定というものを、オブザーバブル(物理量)が値をもつと見出されるような過程であると見なすべきであって、量子論からの説明は要求されていないと考えていたと信じている。崩壊がなければオブザーバブルに対する固有関数の状態に系がある場合のみ、オブザーバブルは値をもつという見解を認めることはできないことは明白であり、従って Bohr は固有関数 - 固有値の対応関係を放棄せねばならなくなる。

HC は、この解析において測定状況 (measurement context) を指定するものとして、 $(R, \Psi)$  の組を用いた。すなわち

$\Psi$  : 量子状態を表わす  
 $R$  : 測定されるべきオブザーバブルを表わす演算子

である。

この測定状況において真の値を整合的に持ちうる命題の最大の組を探せば、これらは実在の要素とみなされるだろう。HC は EPR の位置 - 運動量の場合と Bohm のスピンの場合に対する実在性の要素の正しいリストを確立した。付加的な規準としては、実在性の要素が  $R$  と  $\Psi$  が保つ対称性によって限定されるというものである。このような方法で EPR の筋書に対する実在性の要素のリストを提供することによって、EPR にたいする Bohr の反論を構成したのである。

局所性の話に戻ると、もし粒子 1 の系の測定が粒子 2 の系の実在性の要素を構成しているのであれば、局所性は破れているのに違いない。この示唆に従うことは、粒子 2



の位置と運動量の両方の値が、EPR の実在の要素として存在することを意味するが、粒子 1 への対応するオブザーバブルの測定によってのみ活性化する (activated) かもしれない。オブザーバブルの高々 1 つが粒子 1 について測定されるかもしれないので、対応する粒子 2 のオブザーバブルのせいぜい 1 つが活性化する。このようにして、粒子 1 の測定は粒子 2 に対して、いかなる物理的変化も生じさせないが、我々が粒子 2 に関して主張できる事象について変化を与えると考えるのである。

一方、EPR はオブザーバブルの値が実際に EPR の実在の要素として存在するかという点について関心があったのであって、我々がそれらの値に対して何か主張できるかという点については論じていない。従って、この議論は確かに EPR 解析の反論にはなっていない。Whitaker は、HC の議論は興味深く数学的に見て印象的なものではあるが、概念的側面では寧ろ不鮮明なものになっていると評価している。

### 3.2. Dickson

次に Dickson による議論[8]であるが、これは Bohr の議論を説明するにあたり HC の論文よりも直接的な試みを行っており、位置測定と運動量測定についてその動作過程を詳細に検討した。この試みは勿論、Bohr のやり方に沿ったものであり、測定の設定を定めるために十分に規定された (測定装置の支持台などの) 参照系 (frames of reference) は、粒子の「位置」と「運動量」そのものに意味を与えることに決定的な要因を成すものであることを強く主張する。

ここで Dickson は次の 2 つの原理を提示している。

(1) 弱い不擾乱の原理:

粒子 1 の運動量が測定され、粒子 2 の運動量が決まるならば、粒子 1 の運動量を測定しなかったとしても、粒子 2 の運動量はやはり確定している。位置測定についても然り。

(2) 強い不擾乱の原理:

粒子 1 の運動量が測定され、粒子 2 の運動量が決まるならば、粒子 1 の運動量を測定せずに、その代わりに粒子 1 の位置を測定しても、粒子 2 の運動量はやはり確定している。

Dickson は Bohr は弱い不擾乱の原理を採用し、EPR は Bohr が否定した強い不擾乱の原理を要請したと解釈する。Dickson が指摘している Bohr の考えの中核は、位置を測定する場合、粒子 1 から装置の支持台へ移行する運動量が本質的に制御不能であることを認めれば、2 個の粒子からなる系の運動量保存則をそれ以後の時間に適用すること

はできないという考え方である。Dickson 自身の言葉で言えば次のようになる。

粒子 1 の位置  $x_1$  を測定することは、以前、EPR に対して議論されたより単純な場合になされた全く同じ方法で、粒子 1 と支持台との間の制御不能な運動量の交換を含むことになる。このようにして、粒子 1 の運動量は決定されないことになり、粒子対の全運動量もやはり決定されない。

Dickson も HC も Bohr を実証主義者 (positivist) とは見えていない。なぜなら、Bohr は Dickson の言う弱い不擾乱の原理、すなわち、1 つの粒子の測定は他の粒子の属性の測定値を与えるという意見に賛成しているからである。Bohr は、測定されていない系に対してその属性や実在性を与えるべきではないとは主張しなかったのである。

Dickson は Einstein と Bell はともに Bohr とは違う意味での実在論の見解をもっていたと考えている。それは、より強い形の実在論であり、その値を推測するための前提が存在しない時でさえ、その値は存在するというものである。

Dickson の論文で興味深いところは、EPR に対する Bohr の反論が非局所性を容認しているか否かという点である。なぜなら、もし非局所性を容認しているとすれば、Bohr の議論は EPR に対する反論にはなり得ないからである。Dickson の解釈によれば、EPR の場合について Bohr は粒子 1 の測定が粒子 2 に影響を与え得るということはないが、粒子 1 の測定の結果から粒子 2 についての情報を推定する為の、2 粒子間の相関の利用可能性に影響を与えることが可能であるとしている。しかしこれが非局所性の容認かどうかは分からない。

Dickson は Bohr の議論を再構成することによって、多くの要点や価値ある主張を提示し、いくつかの曖昧な点、難解な箇所を明確にしたと言えるが、これで Bohr の反論を正当化できたかどうかは疑問があり、また Bohr の議論の立脚点が相補性なのか、それとも実証主義にあるのかも判然としない。

## 4. Whitaker の論評

相補性の基本的な諸仮定は、EPR タイプのいかなる議論も許さない。それらの仮定は、EPR による議論の根本的な基礎である選択可能な測定を考えることを、ことごとく排除する。また、それらの仮定は位置の測定が実際に行われたことを考える時にのみ粒子の位置を議論することができると断定する。運動量についても然り。相補性原理によれば、EPR の主張の真髄である 2 つの測定を同時に実行することはできないので、位置と運動量が同時に分かっている粒子の可能性を議論することは意味がない。

相補性による議論は、実証主義的議論と同じ結論に達するが、より知的な位置を獲得するかも知れない。不毛な実証主義は単に測定し得ない量には関心がないと主張するが、相補性による議論の方は量子論的要請に基づく有用な議論の可能性についての十分な分析からなされる。

Bohr はこの反論を EPR に対して行うことを選ばなかった。この反論は、相補性それ自身の言葉では状況を首尾一貫した形で取り扱うことができるが、勿論、EPR 議論におけるいかなる誤りも証明しない。Bohr は相補性のどちらかと言えば正式な議論によって効果的に否定することができない、強固さを EPR 議論の中に見つけたのかもしれない。彼は、「相補性は、それ自身の表現方法で、うまく状況を掴んでいる」とは言えないが、「EPR の議論はそれ自身の表現方法が矛盾している」ことを示そうとしたのかもしれない。またより正しい見方としては、Bohr がこの 2 つの目的の間の二者択一を決めかねていたことを示しているのかもしれない。

このような、相補性の考えを要求する難解な議論の動機は不鮮明に見える。これを読む者にとって、概念的な案内無しで、この議論が純粋に物理的な議論であるか否か、あるいは、特別な哲学的立場に頼っているのか判然としない。後者の場合でさえ、相補性から来るものか、実証主義から来るものか、あるいは、他のいろいろな見解から来るものか明らかにされていない。事実、Bohr の議論は非常に簡潔なものであり、最も自然な解釈としては、それが実証主義から直接に導かれたものと考えられる。これらの考察から、なぜ EPR に対する Bohr の反論が理解し認めるのに非常に困難であるかということの説明が出来るかもしれない。

結論として、もし Bohr の反論が EPR の議論の誤りを指摘しようとしたものであるとするならば、それは失敗であった。なぜならば、その反論が本来の議論には無い、外部から持ち込まれた教条に依拠しているからである。一方、もし Bohr の反論が相補性によって EPR の提示した問題に解決を見いだせることを指摘しようとしたものであるとしても、それは説得力を持つものではなかった。なぜならば、その議論の核心が正当化されていないからである。

Whitaker はさらに summary として、以下の 7 項目を論評のために列挙している。

- (1) 量子もつれ状態の一般的な例として Dickson によって論じられた EPR 議論の運動量-位置形式化の困難に、特別な重要性を与えることは公平ではない。単なる例に過ぎないからである。
- (2) EPR は数学的に議論を進めたが、一般の解析がこのやり方では実行し得ないということは必ずしも明瞭ではない。この議論の方法は EPR が試

みた事であるが、Bohr はもっと物理的な議論を選んだ。

- (3) 量子力学の不完全性を確立するためには、EPR は最初の状態の固有関数とは対応しない 1 つの物理量 (observable) が測定前に確定した値をもつと言えればそれで良かった。
- (4) EPR の議論の標準的な解釈では 2 つの物理量の測定の可能性を前提とするが、その場合においても 1 回のみ測定の議論だけを要する。引き続いて、もしくは同時に行う測定のための装置を想定することは必要としない。
- (5) 1 つの物理量もしくは物理量の対に対する実在性の証明には、将来、それらの値を知ることができる、あるいは、知っている必要はない。
- (6) 「EPR パラドックス」という表現は、Einstein が当惑していた、あるいは彼自身の解釈の論理的な矛盾への解答を求めようとしていたといったことを示すものではない。EPR の議論は、一つの特定の結論へ導く磨き抜かれた論理に過ぎない。
- (7) EPR の結論は、量子論は同時に完全かつ局所的ではありえないというものである。従って、もしどのような反論であれ、その結論が量子論が完全でも局所的でもないというのであれば、そもそもそれは EPR 議論への反論とはならない。

そして、結語として次のように述べている。

EPR 論文は、非常に深く良く考え抜かれた大変に重要な仕事であると考えられる。その結論は、今まで見てきたように論理的であり、かつ健全なものである。

Bohr の反論は、Halvorson-Clifton や Dickson が詳しく調べたように、相補性を明白に用いなくては EPR の挑戦に答えることができなかった。そのことは、明らかに実証主義や操作主義の甚だ根拠不十分な教条に引き籠もっているように思われる。EPR 論文が Bell の仕事に刺激を与え、量子情報理論をもたらしたことに對し、高い評価が与えられるべきである。EPR 議論の概念的構造については、これまで多くの有用な進展が見られたが、EPR 論文の基本的で非常に強力な主張は明快なものであり、何ら補足的な説明を要しないのである。

## 5. まとめ

EPR 論文に対する Bohr の反論は数学的な展開を行っておらず、量子論を構成する上で彼が導入した「相補性原理」を中核として、実証主義的立場から EPR 論文に反論したことになっている。

Whitaker が論じたように、近年、Halvorson と Clifton、

また Dickson らが、Bohr の反論を数学的に再構成し、その論理的構造を整理することによって、その正当性を主張することが試みられている。しかしながら、EPR が主張したことは实在論的立場に立脚したものであり、Bohr の実証主義的立場とは直接の関係をもたない。

そういう意味では、Bohr の反論は、EPR 論文に対する反論になっておらず、自身の量子力学についての解釈の繰り返しに過ぎないことになる。

この最近の Bohr の反論の内容の再吟味が、さらにどのように発展するかは不明であるが、近年著しく発展する量子物理学において、少なくとも Einstein と Bohr の間で交わされた量子力学の基礎に関する論争が、今なおその内容と意義について議論が行われ、新たな知見が得られていることは、それ自身、驚くべきことのように思われる。また、このような議論は、単に科学史の興味深い考証の争点であるだけでなく、将来の量子情報科学の基礎を成す量子もつれそのものの深い理解に必要であり、科学研究の進歩にも有益なものである。その意味では、EPR-Bohr 論争は、科学史と物理学の最前線との、極めて稀有な橋渡しとなっているのである。

## 謝辞

本稿を纏めるに当っては、高エネルギー加速器研究機構素粒子原子核研究所理論部の筒井 泉氏に示唆と御助言をいただきました。ここに篤く御礼申し上げます。

## 参考文献等

- [1] 四王天正臣, 茨城工業高等専門学校研究彙報 46, 57-62 (2011)
- [2] A.Einstein, B.Podolsky, N.Rosen, Phys.Rev.47, 777-780 (1935) 翻訳は アインシュタイン選集 1, 共立出版, 185-192 (1971) 等にある。
- [3] 筒井 泉氏, (高エネルギー加速器研究機構 素粒子原子核研究所) 談話
- [4] N.Bohr, Phys.Rev.48, 696-702 (1935)  
翻訳は、山本義隆編訳, 因果性と相補性 ニールス・ボーア論文集 1, 岩波文庫 青(33) - 940 - 1, 岩波書店, 101-119 (1999) にある。
- [5] 茨城工業高等専門学校研究彙報第 46 号(前号)9 番の論文にこの波動関数形を記載する際、誤植がありました。訂正の上、お詫び申し上げます。
- [6] M.A.B.Whitaker, Foundations of Physics, Vol.34, No.9 (2004)
- [7] B. H. Halvorson and R. Clifton, "Reconsidering Bohr's reply to EPR," in *Non-locality and Modality*, T. Placek and J. Butterfield, eds, Kluwer Academic, Dordrecht, p. 3 (2002)
- [8] M. Dickson, "Bohr on Bell: a proposed reading of Bohr and its implications for Bell's theorem," in *Non-locality and Modality*, T. Placek and J. Butterfield, eds, Kluwer Academic, Dordrecht, p. 19 (2002),

# MPIを用いたコンピュータネットワーク性能評価シミュレータの開発および性能評価

村田和英、八島亮平\*

Development and evaluation of a simulator to evaluate interconnection networks for array computer with MPI

Kazuhide MURATA and Ryohei YASHIMA

**Abstract:** The performance of personal computers has been improving every year. But, more high performance computers are needed for array computing. Array computers can get high processing speed by increasing number of PU. And various types of network are used in array computers. So, we must decide a network type used for array computer. When decide network type, we need calculating the network performance. But, we can't calculate it in theory. Therefore, we need a simulator to calculate it. Our aim is to develop a simulator and evaluate it.

## 1. はじめに

パーソナルコンピュータの性能は年々飛躍的に向上している。しかし、詳細なシミュレーションを行う場合、更に高性能な計算機が必要となる。この要求を満足させる手段のひとつに並列計算機がある。並列計算機は、PU(Processing Unit)の台数増やすことでより高い処理速度を得ることが可能となる。このため、並列計算機は科学技術の発展には必要不可欠のものである。本論文では、並列計算機のひとつであるアレイコンピュータに用いられる相互結合ネットワーク(interconnection network)の処理能力を求めるシミュレータの紹介と、その性能評価を報告する。

## 2. アレイコンピュータ

アレイコンピュータは、データ格納用のメモリを持つPUを相互結合ネットワークで結んだ分散メモリ型 MIMD のシステムの一つである。この相互結合ネットワークには、PUが他の全てのPUと通信路を持つ完全結合型ネットワーク、PU間を結ぶネットワーク中にスイッチング機能を持たせた動的相互結合ネットワークまたはPU内にスイッチングの機能を持たせた静的相互結合ネットワークなどが存在する。完全結合ネットワーク以外の相互結合ネットワークに関しては、その処理能力を理論的に求めることは困難である。

## 3. MPIを用いた並列処理プログラミング

並列処理プログラミングでは、アレイコンピュータで最も広く用いられているメッセージパッシング方式のMPIが

ある。

MPIは新しいプログラミング言語ではなく、CまたはFortranから呼び出すサブプログラムのライブラリである。このライブラリを用いることにより、並列処理プログラミングの詳細を隠蔽することが可能となり、CやFortranを使用する研究者にとって、並列処理を非常に身近なものとしている。

## 4. シミュレーション方法

本研究では、相互結合ネットワークの性能評価をコンピュータシミュレーションによって行っている。MPIによって提供される並列処理機能を用いて、PC内に仮想的に相互結合ネットワークの動作状況を再現し、ネットワークの評価を行なうものである。MPIとは本来、発生させる複数のプロセスをプロセスと同数のPCに一つずつ割り当てることで、全体の処理能力の向上を目指すものである。しかし、複数のプロセスを一台のPC内に生成させることも可能である。本研究では、単一のPC内にネットワークを構成するPUに対応した数のプロセスを配置することにより、仮想的な相互結合ネットワークを構築している。実際のネットワークでは、図1のようにPU間のみで通信は完了するが、この動作をシミュレーションで再現すると、各PUがPU全体の状況を把握できないことから、通信しているPU間の同期をとることができず、PUが処理を待たされるといった実際のネットワーク上で発生する状態を作り出すことはできない。この問題の解決策として、ネットワークを構成するPUの他に、全てのPUの状態を管理するHOSTと呼ばれるひとつ別のプロセスを用意し、全ての通信はHOSTを介して実行することにより、実際の相互結合ネットワークの動作を実現させている。HOSTは各PUからの通信要求を受け付けると、状態遷移表(表1)を参照し、送信先のPUが空いてい

\* 茨城高専専攻科情報工学専攻修了生

れば、要求元のPUに通信可能である旨を通知し、送信先のPUにはメッセージを受け付けるよう指示し、これに対し、送信先PUが処理中の状態ならば、要求元のPUに待機するよう指示を与えている。この様にして、PU間での通信を実際に行うことなく、PUの処理の待ち時間が発生する実際の通信と同様の状態を再現することが可能となる(図2)。

表1 状態遷移表

Rank of PU	Status of PU 0: Not Processing 1: Processing	Rank of Receive PU n:HOST	Number of Receiving
0	1	95	251
1	0	n	195
⋮	⋮	⋮	⋮
n-1	1	156	158

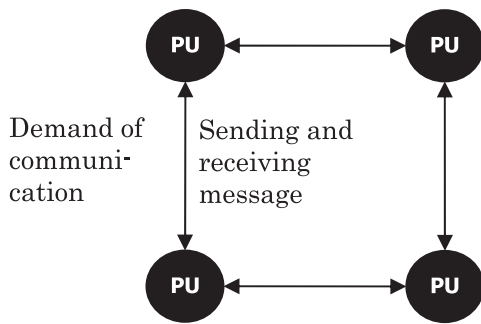


図1 PUのみによる通信

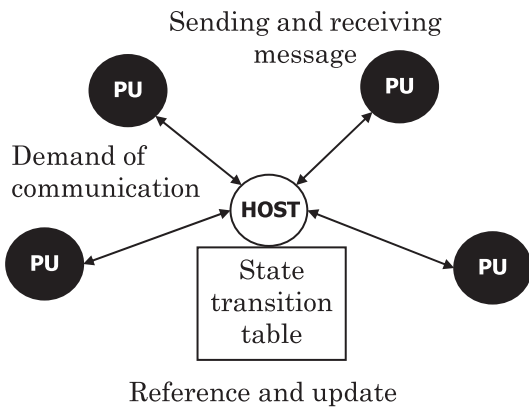


図2 HOSTを用いたPU間通信

HOSTを用いた場合に問題なのは、実際のネットワークには存在しないHOSTの動きを含めた上で、シミュレーションを行っていることである。シミュレーションは、全てのPUがHOSTへのアクセスを繰り返しながら進むため、PU数が増加するほどHOSTで消費される時間が無視できなくなり、

シミュレーション結果に実際のネットワークとの誤差が生じてしまう点である。そこで、本シミュレーションでは時間単位として[unit]を定義し、この[unit]を実時間上で大きくとることによって、HOSTでの消費時間が無視可能となるまで小さくすることになっている。

5. シミュレーション条件

表2にシミュレーション条件を示す。ここでの内部処理(Execution Time)とは、最終目的のPUにメッセージが届いて初めて実行される処理で、中継PUでは実行されない。この内部処理に費やす時間を内部処理時間とした。スループットはPUを結合する通信網の転送能力のことである。

各PUは中継作業を行いながらメッセージを送受信し、内部処理を実行する。この時、中継、メッセージの送受信、内部処理を同時に実行することはできず要求を受けた順に実行することになる。

実際のシミュレーションでは、表2に示す条件下で、各PUはメッセージを送るPUをランダムに決定しながら送受信を繰り返し、シミュレーション時間内に最終目的のPUにおいて内部処理が終了したメッセージの個数をカウントしている。また、PUが待たされている時間(待ち時間)を計測し、すべてのPUにおける待ち時間の平均を算出させている。

表2 シミュレーション条件

Simulation Time	500[unit]
Execution Time	1,5[unit]
Message Length	10~50[byte], Carving 10[byte]
Throughput	10[byte/unit]
Number of PU	32,64,128,256

6. 評価方法

ネットワークの性能評価を行うにあたり、評価項目としてメッセージ転送効率および総メッセージ転送量を定義した。

6.1 メッセージ転送効率

メッセージ転送効率は、完全結合型ネットワークと評価すべきネットワークを比較するためのものである。以下に、メッセージ転送効率を求めるための式を示す。

完全結合型ネットワークにおいて、1個のPUで1個のメッセージを処理するために必要な時間 $T_m$ は、メッセージ受信時に消費する内部処理時間を $T_e$ 、隣り合うPUでのメッセージの送受信に消費する転送時間を $T_s$ とすると、

$$T_m = T_e + T_s$$

となり、PU 数を  $P$  とすると、シミュレーション時間  $T$  に完全結合型ネットワークを構成する全ての PU で処理できるメッセージの個数  $R_s$  は、

$$R_s = \frac{T}{T_m} \times p = \frac{T}{T_e + T_s} \times p$$

となる。ここで、シミュレーション結果から得た、メッセージの個数を  $R$  とすると、メッセージ転送効率  $E$  は、

$$E = \frac{R}{R_s} = \frac{R}{\frac{T}{T_e + T_s} \times p}$$

と求められる。つまり、完全結合型ネットワークを 100% としてネットワークのメッセージ転送効率を求め、種類の違うネットワークどうしを比較し、必要とするシステムに最も適したネットワークの種類を選択するために使用する。

## 6. 2 総メッセージ転送効率

メッセージ転送効率に、各種ネットワーク固有の平均通信距離を加味したものが総メッセージ転送量である。

完全結合型ネットワーク以外のネットワークでは、隣り合う PU 以外の PU とメッセージ送受信を行う際、スイッチ或いは PU による中継を必要とする。この時、ネットワークの平均中継量から平均通信距離  $d$  が求まる。平均通信距離は、ネットワークの種類によって定義が異なり、同種類のネットワークであっても PU 数によって値は変化する。そのため、1 個のメッセージを送受信するために消費する時間は、転送時間  $T_s$  に評価すべきネットワークの平均通信距離を掛け合わせたものとなり、1 個の PU で 1 個のメッセージを処理するために必要な時間  $T_m$  は、

$$T_m = T_e + T_s \times d$$

となる。よって、このネットワークでシミュレーション時間  $T$  に処理できるメッセージの個数  $R_s$  は、PU の数を  $P$  とすると、

$$R_s = \frac{T}{T_m} \times p = \frac{T}{T_e + T_s \times d} \times p$$

となり、総メッセージ転送量  $A$  は、

$$A = \frac{R}{R_s} = \frac{R}{\frac{T}{T_e + T_s \times d} \times p}$$

と求められる。平均通信距離は同じネットワークであって

も、PU 数によって値は変化する。従って、総メッセージ転送量は、ネットワークの種類が決まったシステムにおいて、どのような条件が最も適しているかを判断するために用いる。本研究では、ハイパーキューブネットワークについての評価を行うため、総メッセージ転送効率を用いて検討を行った。 $n$  次元ハイパーキューブネットワークの平均通信距離  $d$  は、PU 数が  $p = 2^n$  個であることから、

$$d = \frac{\log_2 p}{2} = \frac{n}{2}$$

となり、総メッセージ転送量  $A$  は、

$$A = \frac{R}{R_s} = \frac{R}{\frac{T}{T_e + T_s \times d} \times p} = \frac{R}{\frac{T}{T_e + T_s \times \frac{n}{2}} \times 2^n}$$

となる。

## 7. シミュレーション結果および考察

今回、PU 数が  $32 \cdot 64 \cdot 128 \cdot 256$  ( $5 \cdot 6 \cdot 7 \cdot 8$  次元) のハイパーキューブネットワークについて、前述の条件下で性能評価シミュレーションを行った。結果を図 3 (総メッセージ転送量) および図 4 (PU の待ち時間) に示す。

PU 数に関わらず、メッセージ長の変化に伴う総メッセージ転送量の変化は認められなかった。これは、図 4 に示す様に、メッセージ長の増加に対して、PU の待ち時間が一定の割合で増加していることが要因であると考えられる。一度に送信することのできるメッセージ量が増加しても、それに伴って増加する転送時間や待ち時間といったネガティブな部分と相殺していることが判る。一方、内部処理時間が 1[unit] の時より 5[unit] の時に、全体的に総メッセージ転送量が大きくなるのは、ひとつのメッセージを処理するために必要な時間が増加し、理論的にシミュレーション時間内に処理できるメッセージの個数が減少するためであり、総メッセージ転送量の定義からも自然な事象と考えられる。また、PU 数が増えると、総メッセージ転送効率が極端に低下することが判った。これは、ハイパーキューブネットワークの平均通信距離が PU 数に依存しているためで、PU 数が増加すると平均通信距離も増加し、結果として中継回数も増加するためと考えられる。中継回数が増加すれば、その分 PU での負担は増大し、メッセージの送受信に遅れが生じ、待ち時間が増大してしまうことになる。このため、図 4 では PU 数が多い程、待ち時間が大きくなっている。ここ

で注目すべき点は、内部処理時間が変化しても、待ち時間に変化が無かったことである。これは、内部処理時間よりも、平均通信距離の増加に伴う中継量増加の方が、全体の待ち時間が増加する要因として大きいと考えられる。

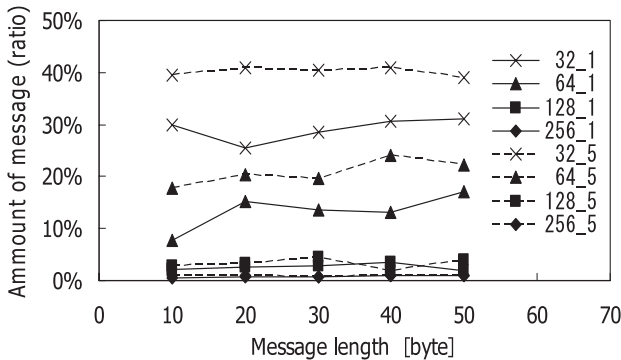


図3 総メッセージ転送量 (ハイパーキューブ)

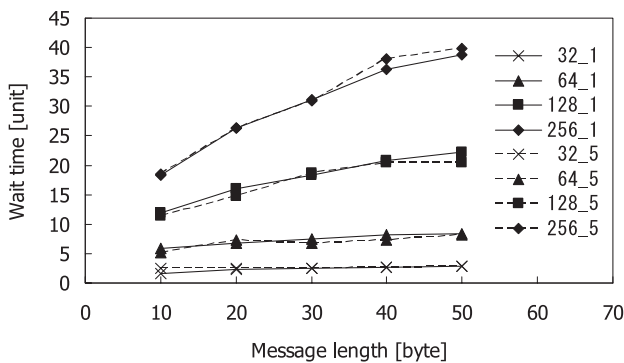


図4 PUの待ち時間 (ハイパーキューブ)

## 8. まとめ

本研究では、MPI を用いることによりネットワークの性能評価を行えることが確認できた。以下に、今後検討すべき事項をあげる。

### (1) 詳細な性能評価法の完成

今回は Store & Forward ルーティングについてのみシミュレーションを行った。シミュレーションに一般性を持たせる観点から、Worm-Hole ルーティングについても行う必要がある。

### (2) 各種ネットワークの性能評価

アレイコンピュータに用いられるネットワークは多種多様存在しており、オメガネットワークといったネットワークなどがある。MPI を用いた今回のシミュレーション方法を用いれば、これらネットワークについてのシミュレーションは、表1に示すネットワーク毎に特有な

状態遷移表を定義することで容易に実現できるものと考えている。

### (3) シミュレーション規模の拡大

コンピュータリソース (主にメモリ容量) 不足のため、最大で256個のPUがシミュレーションの限界であった。今後、MPIの基本的な機能であるLAN接続を用いたクラスタリングによって、シミュレーションを複数のマシン規模で並列して実行することが考えられる。しかし、本シミュレーションでは、全てのPUの状態を管理するためにHOSTを用いているため、複数のPCからHOSTにアクセスするとPC間の物理的なネットワークの負担が大きく、正確なシミュレーションができない可能性がある。今後、HOSTに負荷をかけないシステムを構築する必要がある。

これら検討事項を解決することにより、様々なネットワークの性能評価を、より多くの条件下で行うことができると考える。

### 参考文献

- 1) P. パチェコ : MPI 並列プログラミング (2001)
- 2) MPI で並列プログラミング ([http://www.fireproject.jp/pc\\_cluster/mpi/index.html](http://www.fireproject.jp/pc_cluster/mpi/index.html))
- 3) 町田、他 : MPI による並列処理の適用と性能評価に関する研究  
第14回電気学会東京支部茨城支所研究発表会講演予稿集 (2006), pp. 15
- 4) 八島、他 : アレイコンピュータに用いられるプロセッサ間接続ネットワークの性能評価シミュレータの開発  
第17回電気学会東京支部茨城支所研究発表会講演予稿集 (2009), pp. 36
- 5) 村田、他 : MPI を用いた分散処理型データ収集システムの開発および性能評価  
茨城工業高等専門学校研究彙報第46号 (2011), pp. 63-66

## 遺伝的アルゴリズムを用いた魔方陣の解法

秋山 幸雄、弘畑 和秀

### The Solution of Magic Square by the Genetic Algorithm

Yukio AKIYAMA and Kazuhide HIROHATA

**Abstract:** Genetic Algorithm (GA) has broad utility and the searching ability to figure out an approximate solution in short time. GA is good at extensive searches, but it isn't good at local searches. In this paper, we apply GA to a problem named Magic Square. The problem is a mathematical puzzle and a combinatorial problem. Our research aims to improve the solution of Magic Square and the local searching ability of GA.

#### 1. はじめに

遺伝的アルゴリズム (Genetic Algorithm ; GA) は、生物の進化の過程をモチーフにした学習型のアルゴリズムである。GA は様々な問題に適用できる汎用性と近似解を短時間で導出できるという特徴を持ち、組み合わせ最適化問題やスケジューリング問題の解法ツールとして利用されている [1]。GA は広域探索を得意とする反面で局所探索を苦手としている。これは GA の主軸の探索処理である交叉が局所探索に向いていないことが影響している。今回は GA の能力を用いて魔方陣という数学パズルの作成を行うと共に、GA の局所探索能力の向上を図ることを目的とする。魔方陣とは、正方のマス目に数字を並べることで縦・横及び対角線の各列の数字の和が全て等しくなるようにしたものである [2]。つまり、魔方陣は複数の制約を持つ組み合わせ問題として捉えることができる。魔方陣には任意の大きさに対応できる解法がないため、GA の探索能力を活かせるのではないかと考えた。さらに、GA が魔方陣の解探索に有効性を示すことができれば、その探索能力を数独などのパズルにも応用しやすくなると考えた。

過去に GA を魔方陣に適用した文献 [3] はすでにある。この文献では選択法としてトーナメント選択とエリート選択を用いて 4 次と 6 次の魔方陣について作成を行っている。20 回のシミュレーションの結果は 4 次の魔方陣で 4 割の完成率、6 次の魔方陣は完成なしであった。今回は選択や交叉について方法を増やして挑戦し、近傍を探索する山登り法や焼き鈍し法とのハイブリッド化も視野に入れて解の向上を図る。

#### 2. 魔方陣

##### 2. 1 魔方陣の概要

魔方陣とは  $N \times N$  の正方のマス目を用意して、互いに異

なる数字を並べることで縦・横・斜め (2 本の対角線) のどの列においても  $N$  個の数の和が等しくなるようにしたものである。ここで 1 列の和の値を定和といい、魔方陣の大きさを示す  $N$  を魔方陣の次数という。一般的に使用する数字は 1 から  $N^2$  までであり、これらを使用した魔方陣は正規形の魔方陣という。また、正規形の魔方陣の定和は次数によって予め計算で求めることが可能で、その式は  $(N^2+N) / 2$  である [2]。今回は正規形の魔方陣のみを扱うこととし、正規形の魔方陣を単に魔方陣と呼ぶこととする。図 1 は 5 次の魔方陣の例であり、定和は 65 である。

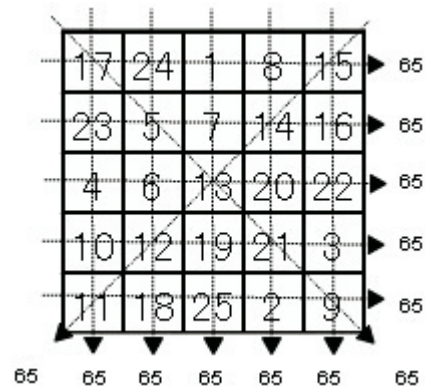


図 1 魔方陣の例 (5 次)

##### 2. 2 魔方陣の分類

魔方陣は次数  $N$  で大きさを表すことができる。ただし、意味のある魔方陣は 3 次以上である。1 次の魔方陣は自明であり、2 次の魔方陣は完成することができないためである。魔方陣は大きさによって以下の 3 種類の場合分けが存在する [2]。

- 奇数次の魔方陣…大きさが奇数の魔方陣 (3, 5, 7, …  $2n+1$ )



- 複偶数次の魔方陣…大きさが偶数であり、4の倍数の魔方陣(4, 8, 12, …4n)
- 単偶数次の魔方陣…大きさが偶数であり、4で割り切れない魔方陣(6, 10, 14, …4n+2)

但し、 $n=1, 2, 3, \dots$ とする。

この3種類の場合分けを行うことで分類ごとの解法は存在する。これは魔方陣の1パターンを作る方法である。魔方陣が成立する数字の配置は次数によって複数パターン存在し、1パターンから $90^\circ$ ごとの回転と鏡映して8個の魔方陣を作ることが可能である。ただし、回転や鏡映しによって作成できる8個の魔方陣を1種類と見なした場合、複数種類の魔方陣を作成する汎用的なアルゴリズムはないため、GAの適用を試みた。

### 3. 遺伝的アルゴリズム

#### 3. 1 遺伝的アルゴリズムの概要

GAは、自然界における生物の交叉・突然変異・自然淘汰といった環境への適応進化の過程をモチーフに解の探索を行うアルゴリズムである[4]。複数点からの同時探索が可能であり、乱数による確率的な処理と探索を制御するためのパラメータが多く存在する。

GAでは探索点の一つ一つは個体と呼ばれ、仮想的な生物として扱われる。個体は遺伝子という複数の要素で構成されている。各個体は問題環境に適しているかについて評価関数を元に適応度を計算される。適応度は解の良さを示す値であり、適応度が高い個体は最適解に近いということになる。個体の集まりを個体群と呼び、適応度計算・選択・交叉・突然変異といった処理を経て、解を求める。上記の工程を一まとめにして世代と呼び、任意の世代数を繰り返すことで適応度の低い個体が淘汰されていって最適解へと近づいていく[4]。

GAは複数点からの同時探索を行うことで広域から近似解を短時間で導出できる探索能力を持つ。しかし、広域探索を得意とする反面で局所探索は苦手としている。その解決策として提案されているのがハイブリッド遺伝的アルゴリズム（ハイブリッドGA）である。GAは処理の組み込みがしやすいため、他の探索法と組み合わせることで苦手を補うことが可能であり、いくつか提案・実現されている[5]。今回は解の進行状況に応じてハイブリッド化も視野に検討を行う。

#### 3. 2 遺伝的アルゴリズムの基本操作

GAの探索操作には以下のものが挙げられる。

- 初期生成…1世代目の最初の個体群を作る。各個体を生成する遺伝子を乱数によって決定する。

- 適応度計算…各個体について問題環境への適応度を計算する。適応度の計算には評価関数が用いられ、一般的に優良な解を持つ個体は適応度の値が高い。

- 選択…現在の個体群から次世代に残る個体を決定する。選択方法によって操作は異なるが、ほとんどの場合は適応度を元に選択が行われる。

- 交叉…個体2体を1ペア（親）としてそれらの遺伝子の交換を行い、親の特徴を受け継いだ新しい個体（子）を生み出す。

- 突然変異…探索範囲を広げるために個体の遺伝子をランダムに変化させる。

図2にGAのフローチャートを示す。

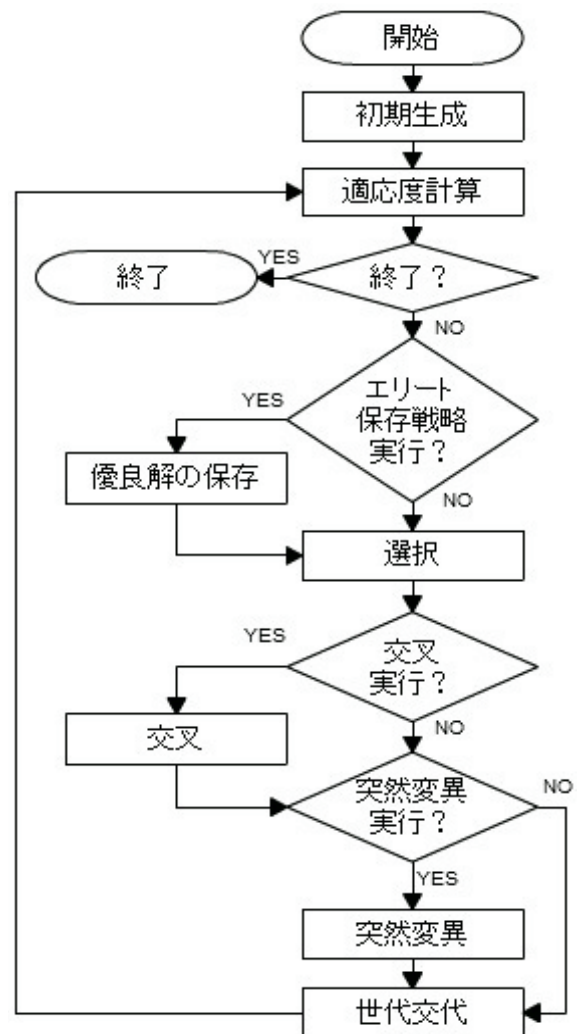


図2 GAのフローチャート

### 3.3 選択

選択は適応度に応じて個体群から個体を選ぶ処理である。ここで選ばれた個体が次の処理や世代へと移動し、選ばれなかった個体は淘汰される。選択方法はいくつか提案されており、方法によって選択圧が異なる。選択圧とは、選択における適応度の影響力であり、選択圧が高いと適応度が低い個体が淘汰される確率は高くなる[4]。今回は以下の5つの方法について検討した。

○ルーレット選択…一つの個体を選ばれる確率が  
(個体の適応度) / (個体群の適応度の合計) で表現できる選択方法である。この方法は個体群の中の適応度の格差が激しいと初期収束の可能性がある。

○トーナメント選択…以下の2つの処理からなる選択方法である。

- ① 個体群から任意の数の個体をランダムに選ぶ。この数をトーナメントサイズという。
- ② 選ばれた個体の中で適応度が一番高い個体を選ぶ。トーナメント選択はトーナメントサイズを変えることで選択圧を変化させることができる。

○ルーレットトーナメント選択…ルーレット選択とトーナメント選択を組み合わせた方法である。この選択方法もトーナメントサイズによって選択圧を変えることができる。

- ① 個体群からトーナメントサイズ分個体を選ぶ。(個体の選択はルーレット選択で行う)
- ② 選ばれた個体の中で適応度が一番高い個体を選ぶ。

○ランキング選択…個体を適応度順にソートして、順位別に選択確率を決めていく選択方法。ルーレット選択と方法は似ているが、適応度の格差にあまり影響されない。ただし、適応度が非常に近い個体でも一定の選択確率の差が発生するという特徴がある。

○選択淘汰なし…個体の選択に適応度をまったく使わず、乱数によるランダムで選択する方法。多様性に優れているが、解の改悪の可能性が高くなるためエリート保存戦略との併用が望ましい。

### 3.4 交叉

交叉とは、2体の個体を両親に見立てて親の特徴を受け継いだ子を誕生させる処理である。具体的には2体の親の遺伝子を部分的に交換することで新しい個体を作る。交換する遺伝子の数は交叉方法によって異なるが、交換場所は交叉点と呼ばれる印を元に決定される。ただし、交叉の有

無は交叉率と呼ばれるパラメータで制御されているため、交叉を行わないこともある。その場合は親の個体そのまま次の処理へと移される[4]。

○一点交叉…交叉点が1点のみの処理。交叉点の前後どちらかの要素について交換を行う。

○多点交叉…交叉点が複数ある場合の処理。ただし、交叉点を必要以上に多くすると親の特徴が失われやすい。

○一様交叉…交叉点を用いず、遺伝子ごとに2分の1の確率で交換を行う。

### 3.5 突然変異

突然変異とは、個体の要素をランダムに変化させることで探索範囲を広げて局所解に陥る可能性を減らす処理である[4]。今回は個体の各遺伝子について突然変異率を元に発生を決定し、突然変異が起こった場合は遺伝子を別の値にランダムに変えることとする。

### 3.6 エリート保存戦略

エリート保存戦略とは、選択や交叉によって解が改悪するのを防ぐために適応度の高い個体をそのまま次世代へ残す処理である[4]。今回は以下の2種類の方法を用いた。

- (1) 個体群を適応度順にソートして、上位から任意数を次世代へ残す方法。
- (2) 現在の最良個体を任意数複製して次世代へ残す方法。

## 4. 探索における魔方陣適用

### 4.1 遺伝子型の表現方法

魔方陣の作成をGAで行うにあたり、遺伝子型の表現方法と評価関数を設定する必要がある。GAは扱う問題の解法が分からなくても適用できるが、上記2点を設定するための問題の知識は要求される。

個体の遺伝子は遺伝子型と呼ばれる表現方法で構成される。遺伝子型は2進数表現など、情報を扱いやすいように変換されている。遺伝子型に対して実際の問題で使用する表現を表現型と呼ぶ。表現型から遺伝子型へと変換する処理をコード化といい、遺伝子型から表現型への変換はデコード化という[4]。魔方陣の場合、使用する数字に制限があるため、致死遺伝子の発生を抑えるよう遺伝子型の表現方法を考えなければならない。致死遺伝子とは問題の制限を満たしていない遺伝子の事であり、問題に適していないため解の対象にならない[4]。魔方陣の場合は1から $N^2$ までの数字を過不足なく使うという制限があるため、表現型をそのまま遺伝子型として使用すると交叉等で遺

伝子を交換した際に条件が崩れてしまうことがある。そのため、今回は遺伝子型の表現方法として順序表現を使用する。

順序表現は、数列の前から  $i$  番目の要素が  $1$  から  $N^2-i+1$  の範囲の数字で表現される方法である。この方法については、具体例を挙げてコード化・デコード化の方法を説明する。図 3, 図 4 に順序表現を用いた場合の表現型と遺伝子型の相互変換の工程を示す。今回は 3 次の魔方陣作成を想定して、1 から 9 までの数字を使用した。また、図 3 のように方陣に数字が入っていた場合は左上から順に数字を取り出すことで数字列とする。この数列が表現型であり、順序表現で変換された後の数列が遺伝子型である。

・コード化の手順

- ① 1 から  $N^2$  までの順序数列を用意する。
- ② 表現型の先頭の数字と同じ数字を順序数列から取り除く。その際、取り除いた数字が順序数列の何番目の要素であったかを求める。
- ③ 求めた数を遺伝子型の次の要素に加えて、表現型の先頭の数字を取り除く。
- ④ 手順②, ③を順序数列がなくなるまで繰り返す。

<table border="1"><tr><td>7</td><td>1</td><td>6</td></tr><tr><td>3</td><td>5</td><td>2</td></tr><tr><td>4</td><td>8</td><td>9</td></tr></table>	7	1	6	3	5	2	4	8	9	→	7 1 6 3 5 2 4 8 9 [表現型] 実際に使用する 数字列
7	1	6									
3	5	2									
4	8	9									
1 2 3 4 5 6 7 8 9	[表現型]	7 1 6 3 5 2 4 8 9									
1 2 3 4 5 6 8 9	[表現型]	7 1 6 3 5 2 4 8 9									
	[遺伝子型]										
1 2 3 4 5 6 8 9	[表現型]	1 6 3 5 2 4 8 9									
	[遺伝子型]	7									
2 3 4 5 6 8 9	[表現型]	6 3 5 2 4 8 9									
	[遺伝子型]	7 1									
2 3 4 5 8 9	[表現型]	3 5 2 4 8 9									
	[遺伝子型]	7 1 5									
2 4 5 8 9	[表現型]	5 2 4 8 9									
	[遺伝子型]	7 1 5 2									
2 4 8 9	[表現型]	2 4 8 9									
	[遺伝子型]	7 1 5 2 3									
4 8 9	[表現型]	4 8 9									
	[遺伝子型]	7 1 5 2 3 1									
8 9	[表現型]	8 9									
	[遺伝子型]	7 1 5 2 3 1 1									
9	[表現型]	9									
	[遺伝子型]	7 1 5 2 3 1 1 1									
	[表現型]										
	[遺伝子型]	7 1 5 2 3 1 1 1 1									
変換前:	[表現型]	7 1 6 3 5 2 4 8 9									
変換後:	[遺伝子型]	7 1 5 2 3 1 1 1 1									

図 3 順序表現を用いたコーディング例

・デコード化の手順

- ① 1 から  $N^2$  までの順序数列を用意する。
- ② 順序数列の  $i$  要素目 ( $i$ : 遺伝子型の先頭の数字) を取り除く。
- ③ 取り除いた数字を表現型の次の要素に加えて、遺伝子型の先頭の数字を取り除く
- ④ 手順②, ③を順序数列がなくなるまで繰り返す。

1 2 3 4 5 6 7 8 9	[遺伝子型]	7 1 5 2 3 1 1 1 1
1 2 3 4 5 6 8 9	[遺伝子型]	7 1 5 2 3 1 1 1 1
	[表現型]	
1 2 3 4 5 6 8 9	[遺伝子型]	1 5 2 3 1 1 1 1
	[表現型]	7
2 3 4 5 6 8 9	[遺伝子型]	5 2 3 1 1 1 1
	[表現型]	7 1
2 3 4 5 8 9	[遺伝子型]	2 3 1 1 1 1
	[表現型]	7 1 6
2 4 5 8 9	[遺伝子型]	3 1 1 1 1
	[表現型]	7 1 6 3
2 4 8 9	[遺伝子型]	1 1 1 1
	[表現型]	7 1 6 3 5
4 8 9	[遺伝子型]	1 1 1
	[表現型]	7 1 6 3 5 2
8 9	[遺伝子型]	1 1
	[表現型]	7 1 6 3 5 2 4
9	[遺伝子型]	1
	[表現型]	7 1 6 3 5 2 4 8
	[遺伝子型]	
	[表現型]	7 1 6 3 5 2 4 8 9
変換前:	[遺伝子型]	7 1 5 2 3 1 1 1 1
変換後:	[表現型]	7 1 6 3 5 2 4 8 9

図 4 順序表現を用いたデコーディング例

順序表現を用いることで遺伝子型から表現型へ戻す際に必ず 1 から  $N^2$  までの数字を使用するため、致死遺伝子の心配がない。そのため、今回は順序表現を使用した。

4. 2 評価関数の設定

魔方陣の問題を解くために以下の評価関数を設定した。  
 評価関数:  $1 / \{1 + (\text{計算誤差})\}$   
 1 列分の計算誤差:  $|\text{(定和)} - (\text{1 列の和})|$

縦 ( $N$  列)・横 ( $N$  行)・2 本の対角線について、それぞれ 1 列の和を求めて定和との差分を出す。それらを足し合わせることで 1 個体分の計算誤差とする。評価関数では求めた計算誤差を逆数で使用することで個体の適応度を示している。また、魔方陣完成時は計算誤差が 0 になるため、設定した評価関数を用いることで適応度が 1 を示して完成が確認しやすい。図 5 に評価関数の適応例を示す。上の数字は 1 列の和を、下の括弧内の数字は定和との差を示している。

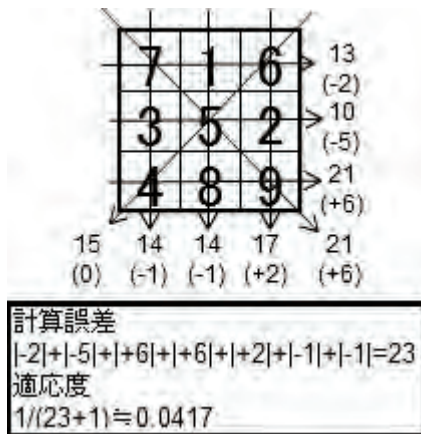


図5 評価関数の適応例

### 5. 局所探索法

#### 5. 1 山登り法

山登り法 (Hill Climbing ; HC) 局所的探索とも呼ばれる探索アルゴリズムで以下の手順で探索を行う。

- ①ランダムに最初の探索点を決める。その点を最良解として保存する。
- ②保存した探索点の近傍を探索する。
- ③近傍解が保存解より良ければ近傍解を保存する。
- ④手順②③を終了条件が満たされるまで繰り返す。

山登り法は解が多峰性を持つ場合、局所解に陥る可能性がある[6]。

#### 5. 2 焼き鈍し法

焼き鈍し法 (Simulated Annealing ; SA) は山登り法とアルゴリズムが似ているが、解が良くなった場合のみ保存解を更新する山登り法と違って、改悪の場合も確率的に更新を行う。焼き鈍し法の探索アルゴリズムの手順を以下に示す。

- ①ランダムに最初の探索点を決めて、その点を保存する。
- ②保存した探索点の近傍を探索する。
- ③遷移確率関数によって近傍解を保存するかどうかを決定する。
- ④手順②③を終了条件が満たされるまで繰り返す。

遷移確率関数では、解が良くなった場合は必ず解の保存を行う。解が悪くなった場合も探索の序盤は高い確率で保存を行い、探索が進むにつれて確率が低くなるよう設定する[6]。改悪での保存も考慮することで局所解に陥りやすいという山登り法の欠点を補うことができる。

## 6. シミュレーション結果

3次から6次の魔方陣について遺伝的アルゴリズム・山登り法・焼き鈍し法・ランダムサーチの4つの探索法を用いて作成を行った。山登り法と焼き鈍し法は近傍を探索する方法であり、任意の2つの数字の入れ替えを近傍解と定義した。各探索法の比較を行うためにGAの計算回数(100個体・2000世代)で統一した。実験においては各方法・次数とも20回のデータを取り、完成個数と計算誤差の平均について求めた。表1に実験結果を示す。表の数字は20回中の完成個数、括弧内の数字は計算誤差の平均を表している。

表1 探索法別の魔方陣個数と計算誤差

	3次魔方陣	4次魔方陣
遺伝的アルゴリズム(GA)	20(0)	19(0.25)
山登り法	3(4.65)	4(3.9)
焼き鈍し法	14(1.8)	15(0.5)
ランダムサーチ	20(0)	0(11.6)
	5次魔方陣	6次魔方陣
遺伝的アルゴリズム(GA)	3(2.45)	0(4.6)
山登り法	0(8.75)	0(8.95)
焼き鈍し法	1(3.05)	0(4.25)
ランダムサーチ	0(33.05)	0(124.25)

表1より、3、4次の魔方陣についてはGAで9割以上の完成率を示した。5次の魔方陣は完成率が2割以下と低いため、改良が必要であると考えた。GA以外の探索アルゴリズムは、GA以上の完成個数を示すことはできなかった。

続いて、表2に5次魔方陣におけるGAの処理方法別の完成個数及び計算誤差の平均を示す。表2におけるR&Tとはルーレットトーナメント選択を示している。

表2 処理方法別の完成個数と計算誤差

	Roulette	Tournament	R&T
1点交叉	3(2.45)	1(2.5)	2(4.1)
2点交叉	1(2.5)	1(3.75)	1(3.6)
一様交叉	2(2.5)	1(4.15)	2(2.95)
	Ranking	淘汰なし	
1点交叉	0(4.65)	1(4.4)	
2点交叉	1(4.75)	0(3.65)	
一様交叉	0(4.55)	2(4.1)	

表2より、ルーレット選択やルーレットトーナメント選択といった選択圧の高い方法が良い結果を出していることが分かる。ランキング選択や選択淘汰なしは、他の選択

方法と比べると計算誤差が大きくなっていることが分かる。

交叉法別にみると1点交叉と一様交叉が全体的に良い結果を出している。2点交叉についてはランキング選択や選択淘汰なしで一番良い成績を残している。これより、選択圧が高い選択法では1点交叉や一様交叉を使用し、選択圧が低めで解の多様性を活かす選択法では2点交叉を使用するのが良いと考えられる。

### 7. ハイブリッド遺伝的アルゴリズムの提案

#### 7. 1 ハイブリッド化の検討

GA 単体では5次以降の魔方陣について有効な結果が得られなかった。探索能力の向上を図るため、焼き鈍し法とのハイブリッド化を行う。GA で広域探索を行った後、最良解について焼き鈍し法で近傍解の探索を行う方法をとる。探索のスケジューリングを決めるにあたり、図6のグラフデータを使用した。これはGAが魔方陣を完成させた場合の完成世代数について分布を示したものである。

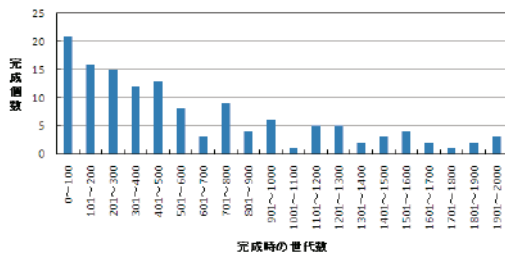


図6 GAにおける世代別解の分布 (5次魔方陣)

図6を見ると遺伝的アルゴリズムでは、2000世代中500世代までに完成個数全体の約6割が集中している。これよりハイブリッド化におけるGAの探索世代数は500世代以内で検討することとする。局所探索を行うSAのループ数についてはGAより少ない範囲で検討することにした。GAによって探索が進められているため、SAでは必要以上にループ数を多くする必要はないと判断したからである。図7にハイブリッドGAの処理手順を示す。

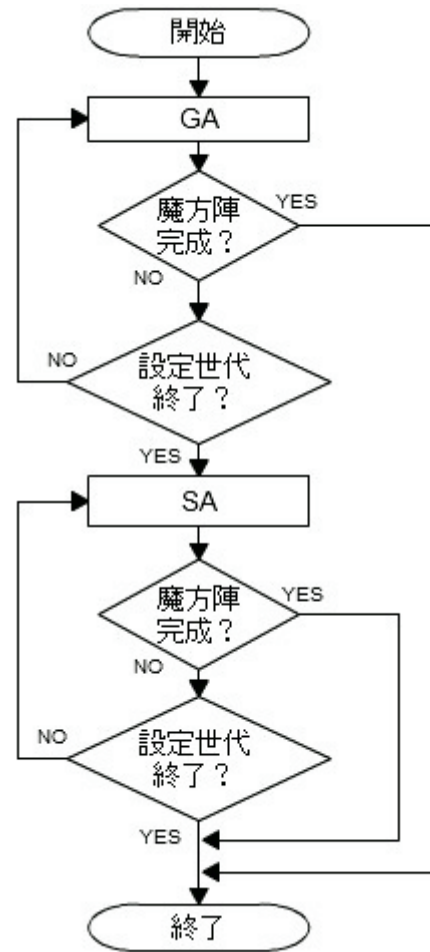


図7 ハイブリッドGAの処理手順

#### 7. 2 ハイブリッド遺伝的アルゴリズムの評価

ハイブリッドGAを用いて魔方陣の作成を行った。ハイブリッド時の探索数の割合は実験からGA 400世代、SA200世代に設定した。また、GA単体の探索数(1世代100点探索を2000世代)に合わせるため、SA探索終了後はGAの初期生成に戻って探索を続け、以後2000世代が終了するまでGAとSAを繰り返すようにした。以下の表がその結果である。表1同様に20回計算を行い、魔方陣の完成個数(表の数字)、計算誤差の平均(括弧内の数字)を表3に示す。

表3 GA単体とハイブリッドGAの比較

	3次魔方陣	4次魔方陣
遺伝的アルゴリズム(GA)	20(0)	19(0.25)
ハイブリッドGA	20(0)	19(0.15)
	5次魔方陣	6次魔方陣
遺伝的アルゴリズム(GA)	3(2.45)	0(4.8)
ハイブリッドGA	12(1.0)	1(3.1)

ハイブリッド GA についても 3 次・4 次の魔方陣は高い完成率が得られた。5 次魔方陣については、ハイブリッド GA を用いることで魔方陣の完成個数が 4 倍になり、計算誤差についても大きく減少した。また、6 次の魔方陣についても完成を示すことができた。

SA を組み合わせたことによる近傍探索の実現と探索の効率化が解の向上につながったと考える。図 8 にハイブリッド GA における世代別の解の分布を示す。このグラフを見ると 3 次・4 次の魔方陣の場合は 600 世代以内、つまり GA・SA のループ 1 回分の探索で多くが完成しているが、5 次魔方陣は 2 回以上のループ後に完成することが多い。これより GA 単体についても 2000 世代より少ない探索で効率化を図ることが可能であると考えられる。ただし、6 次の魔方陣については、ハイブリッド GA のみで完成が確認されていることから SA とのハイブリッド化による探索能力の向上はあったと判断できる。

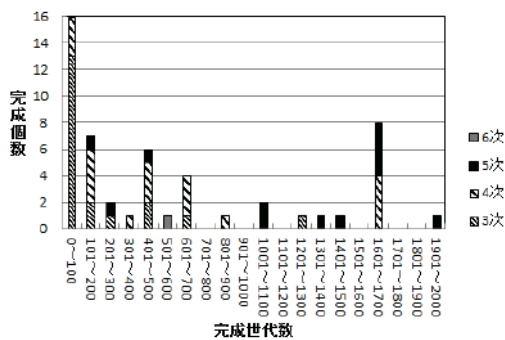


図 8 ハイブリッド GA の世代別解の分布

## 8. まとめ

今回は遺伝的アルゴリズムによる魔方陣の作成を行った。5 種類の選択方法と 3 種類の交叉法について実装し、3 次から 6 次の魔方陣について検討を行った。また、ランダムサーチ・山登り法・焼き鈍し法についても同様に適用して各手法の完成率や計算誤差の比較を行った。以下が今回の成果である。

- GA 単体では 3 次・4 次の魔方陣まで高い完成率を示し、5 次魔方陣は完成したものの完成率は低く、6 次魔方陣は完成できなかった。
- 今回用いた GA 以外の探索アルゴリズムでは GA 以上の結果を示すことはできなかったが、局所探索法によるアプローチでも低い計算誤差を維持できた。
- 遺伝的アルゴリズムと焼き鈍し法のハイブリッドによって 5 次魔方陣の完成率は大きく向上し、6 次魔方陣についても完成を示すことができた。

今後は 6 次以降の解の向上を図るとともに、他のパズル等への応用についても検討したい。

## 参考文献

- [1]寺田悟・内海秀樹・松井三郎、「遺伝的アルゴリズムを用いた都市ごみ収集車スケジューリング手法の開発」土木学会年次学術講演会講演概要集 58 巻 7 号 P281-282、(2003)
- [2]内田伏一、『魔方陣にみる数のしくみ 汎魔方陣への誘い』、日本評論社、(2004)
- [3]前泊貴予・又吉光邦、「遺伝的アルゴリズムにおける魔方陣の解法」、情報処理学会全国大会講演論文集 第 51 回平成 7 年後期(2) P51-52、(1995)
- [4]三宮信夫・喜多一・玉置久・岩本貴司、『遺伝的アルゴリズムと最適化』システム制御情報学会編、朝倉書店、(1998)
- [5]榎倉達郎・陳延偉・仲尾善勝、「ハイブリッド GA/SA による画像復元」、琉球大学工学部紀要 (56) P37-41、(1998)
- [6]伊庭斉志、『C による探索プログラミング—基礎から遺伝的アルゴリズムまで』、コロナ社、(2008)