

目 次

第 1 章 進化的計算	1
1.1 遺伝的アルゴリズム	1
1.1.1 コーディング (coding)	3
1.1.2 初期集団 (initial population) の生成	5
1.1.3 評価 (evaluation)	5
1.1.4 選択 (selection)	6
1.1.5 交叉 (crossover)	10
1.1.6 突然変異 (mutation)	20
1.1.7 終了条件	23
1.1.8 おわりに	24
1.2 進化型多目的最適化	26
1.2.1 多目的最適化	26
1.2.2 進化型多目的最適化によるパレート最適解集合の探索	33
1.2.3 代表的な進化型多目的最適化アルゴリズム	36
1.2.4 進化型多目的最適化アルゴリズムの問題点	43
1.2.5 今後の研究方向	51
1.3 並列進化的計算	56
1.3.1 成長を続ける並列計算環境と並列最適化	56
1.3.2 進化的計算の並列モデル	59
1.3.3 マスタスレーブモデル	64
1.3.4 分割母集団モデル	76

1.3.5	分割母集団モデルにおける選択の適用範囲の限定が解に及ぼす影響	83
1.3.6	Grid 計算環境における遺伝的アルゴリズム	90
1.3.7	多目的遺伝的アルゴリズムの並列モデル	96
1.3.8	遺伝的アルゴリズムの並列処理フレームワーク： GAROP	103
1.3.9	おわりに	110
第 2 章	拡張アンサンブル法	119
2.1	統計力学の基礎	120
2.1.1	統計力学的集団	120
2.1.2	カノニカルアンサンブルの統計力学	122
2.2	統計力学に基づいた計算機シミュレーション	128
2.2.1	カノニカルアンサンブルを再現するシミュレーション 手法	128
2.2.2	徐冷法	146
2.3	拡張アンサンブル法	149
2.3.1	マルチカノニカル法	149
2.3.2	焼き戻し法	155
2.3.3	レプリカ交換法	161
2.4	マルチカノニカル法, 焼き戻し法, レプリカ交換法の合体	167
2.4.1	レプリカ交換マルチカノニカル法とレプリカ交換焼き戻し 法	168
2.4.2	マルチカノニカルレプリカ交換法と焼き戻しレプリカ交 換法	170
2.5	多次元拡張アンサンブル法の一般定式化	175
2.5.1	一般化されたポテンシャルエネルギー	176
2.5.2	多次元レプリカ交換法	177
2.5.3	多次元焼き戻し法	180
2.5.4	多次元マルチカノニカル法	182

2.5.5	多次元焼き戻し法および多次元マルチカノニカル法の重み因子の決定法	183
2.5.6	多次元拡張アンサンブル法における物理量の期待値の計算	184
2.6	多次元拡張アンサンブル法 of 具体例	187
2.6.1	レプリカ交換自由エネルギー摂動法とレプリカ交換傘サンプル法	187
2.6.2	ファンデルワールスレプリカ交換法	193
2.6.3	マルチオーバーラップ法とマルチカノニカル・マルチオーバーラップ法	196
2.6.4	定圧定温アンサンブルにおける拡張アンサンブル法	200
2.7	拡張アンサンブルシミュレーションの実例	206
2.8	おわりに	237