最適化問題における確率的状態選択法
―焼きなまし法との比較―

氏名　山崎 紘揮　宗久 知男　宗久 保子
所属　山梨大学 医学工学総合教育部

1.目的

確率分布に沿ったサンプリングを行う方法として，マルコフ連鎖モンテカルロ法 (MCMC)がある.[5]今回の研究では,MCMC の数学的基礎である確率過程の行列計算をアルゴリズムとする確率的状態選択法(SSS:Stochastic State Selection Method)[1]を提案し,その特徴を考える.行列計算では全状態を考えていくので,状態数が増えると計算が困難になってしまう.そこで,SSS ではこの問題への対策としての選択法を導入している.また,この SSS の特徴を考えるために最適化問題とサンプリングに適用する.

2.SSS のアルゴリズム

SSS におけるアルゴリズムは以下の行列式をもとに考える.

$$ {}^t\vec{f}^{(N)} = {}^t\vec{f}^{(0)} P^N $$

$\vec{f}^{(N)}$: 時点Nでの存在確率
P : 全状態の推移確率行列

また推移確率行列 P は以下のように表す.また,以下の推移確率は定常分布が存在するように定める.

$$ P = \begin{bmatrix} p_{11} & p_{12} & \cdots & p_{1n} \\ p_{21} & p_{22} & \cdots & p_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{n1} & p_{n2} & \cdots & p_{nn} \end{bmatrix} $$

n : 全状態数　p_{ij} : 推移確率
i : 推移元状態　j : 推移先状態

上記の計算式から初期分布に推移確率行列をかけていくことで,各時点における全状態の存在確率を求めることができる.しかし,この計算式では常に全状態の分布を考えるので状態数が増えると計算が困難になってしまう.そこで,分布を崩さない次のような選択法を考える.[1]

$$ \eta = \begin{cases} 0 & \left(p = 1 - \dfrac{1}{a}\right) \\ a & \left(p = \dfrac{1}{a}\right) \end{cases} $$

$$ \langle\langle \eta \rangle\rangle = 0 \cdot \left(1 - \frac{1}{a}\right) + a \cdot \frac{1}{a} = 1 $$

η : 確率変数
a : 1以上の定数

上記の確率変数を構成要素とする行列 M を考え,確率過程の行列計算式に組み込むと以下のようになる.

$$ {}^t\vec{f}^{(N)} = {}^t\vec{f}^{(0)} PMPM \cdots PM $$

$\vec{f}^{(N)}$: 時点Nでの確率分布
P : 推移確率行列
M : 確率変数行列

そして,この関係式に対して統計平均を考えることで以下のようになる.

$$ \langle\langle {}^t\vec{f}^{(N)} \rangle\rangle = {}^t\vec{f}^{(0)} P \langle\langle M \rangle\rangle \cdots P \langle\langle M \rangle\rangle $$
$$ = {}^t\vec{f}^{(0)} PP \cdots P $$

よって全状態を考えた場合と同じ式になるので数学的保証として確率分布が崩れていないと考えられる.

3.比較実験

ここで,SSSの特徴を考えるために2つの比較実験を行う.実験1では最適化問題に対して巡回セールスマン問題[2,3,4,6]を適用し,SA との比較実験を行う.実験 2 ではサンプリングに対して Tight 問題に適用し期待値の比較実験を行う.実験 1,2 ともに比較対象は一定の評価値計算回数内での最適解の出現回数とする.

・実験 1

実験 1 におけるパラメータは次のようにする.

都市数:101, 225 状態推移方法:2-OPT

評価値計算回数:1000 万回,5000 万回

状態推移確率(受理確率を含まない):0.5

状態選択数:5000

初期状態:ランダムに選択

統計平均のためのサンプル数:100

実験 1 の結果を以下の表 1,表 2 で表す.

SA	SSS	
T:変化	T:変化	T:固定
0(7.5%)	6	5

表 1.都市数=101 の最適解の出現回数と解の精度

SA	SSS	
T:変化	T:変化	T:固定
0(8.7%)	2	2

表 2. 都市数=225 の最適解の出現回数と解の精度

実験結果から SA では,局所解にはまり抜け出せなくなったのに対し,SSS では評価値計算回数を増やすことでどちらの都市の場合でも最適解を見つけることができた.この実験から SSS の特徴は,温度を SA のように変化させなくても最適解に到達できること,解集合を見ると SA がはまった局所解が多数存在していることから ,多峰性のある分布に対する探索が SA のように局所探索になりにくいことが考えられる.

・実験 2

実験 2 におけるパラメータは次のようにする.

ビット数:30

サンプリング数:10000

評価値計算:5 万回 受理確率:1.0, 0.6, 0.3

比較対称,状態推移に関するパラメータは実験 1 と同じとする.また,結果は期待値との誤差を表示する.

・実験 2 の結果を以下の表 3 で表す.

受理確率	MCMC	SSS
1.0	0.031%	0.032%
0.6	0.12%	0.051%
0.3	0.93%	0.092%

表 3.MCMC と SSS の期待値誤差

実験 2 の結果から,受理確率が高い場合での期待値計算ではどちらのアルゴリズムでも誤差は小さいことがわかる .しかし,受理確率が低い場合では ,MCMC と SSS には誤差がでるようになった。この結果から温度変化のように分布制御を行わなくても目的の分布からサンプリングが出来ると考えられる.

4.考察

今回の実験から SSS では,行列式の計算に対する選択法が重要であることが考えられる .特に,選択を行うための行列を組み込むタイミングが重要と考えられる.これは,タイミングにより選択のための存在確率の価値が制御できるからだと考えられる.

文 献

[1] T.Munehisa and Y.Munehisa J.Phys.Soc.Japan 72 2759,2003

[2] 澤谷 智:数学的保証をもった遺伝的アルゴリズムの構 築とその応用 山梨大学工学部 修士論文, 2005

[3] 藤原 周一:焼きなまし法の巡回セールスマン問題への適用 山梨大学工学部 卒業論文, 2001

[4] 柘植 研二:焼きなまし法における大域的協力更新 山梨大学工学部 卒業論文, 2002

[5] 伊庭 幸人:マルコフ連鎖モンテカルロ方の基礎 計算統計Ⅱマルコフ連鎖モンテカルロ法とその周辺, 株式会社岩波書店(2006)

[6] 山崎 紘揮:巡回セールスマン問題への確率的状態選択法の適用 電子情報通信学会[人工知能と知識処理], 2007