

分布推定とマルコフモンテカルロ

近山 祐美[†] 宗久 知男[‡] 宗久 保子[‡]山梨大学医学工学総合教育学部[†] 山梨大学医学工学総合教育学部[‡] 山梨大学医学工学総合教育学部[‡]

1. はじめに

確率分布からサンプリングを行う手法にマルコフモンテカルロがある。また遺伝的アルゴリズムの交叉の問題を解決する方法として利用されている。良い解の分布を推定して、その推定分布からサンプリングを行う手法に分布推定法がある。本研究では、モンテカルロ法の一種の独立サンプラーの提案分布に分布推定を組み込む事を考え、検討を行う。

2. マルコフ連鎖

マルコフ連鎖 [1] とは、“前の状態にのみに依存して、次の状態が決まる” というルールで動作するシステム”の事である。状態 i から状態 j へ遷移する確率で構成されている行列を遷移確率行列 T とする。すると遷移は、 T をかければ良いことになる。ここでマルコフ連鎖が 既約で非周期、かつ推移確率が詳細釣り合いの定理を満たす時、定常分布を持つ。

定常分布の存在証明

定常分布 (P_*) は初期分布 (P_0) と遷移確率行列 (T) を使って以下の式によってあわせることができる。

$$P_* = \lim_{N \rightarrow \infty} T^N P_0$$

ここで T はジョルダンの分解より、固有値とそれに属する右固有ベクトルと左固有ベクトルで次式の用に分解できる。

$$T = v_1 \lambda_1^t u_1 + v_2 \lambda_2^t u_2 + \dots + v_n \lambda_n^t u_n$$

$$T^N = v_1 \lambda_1^{Nt} u_1 + v_2 \lambda_2^{Nt} u_2 + \dots + v_n \lambda_n^{Nt} u_n$$

ここでフロベニウスの定理より、

$$\lambda_1 = 1, |\lambda_i| < 1 (i=2, 3, \dots, n)$$

なので、遷移確率行列は十分かけると次式となる。

$$\lim_{N \rightarrow \infty} T^N = v_1 u_1$$

したがって

$$\lim_{N \rightarrow \infty} P_0 T^N = u_1$$

となり、最大固有値 1 に対する固有ベクトルである定常分布がどんな初期分布に対しても存在し、定常分布に収束することが証明できる。

3. マルコフモンテカルロ

マルコフモンテカルロ [2] とは通常のモンテカルロにマルコフ連鎖を導入したものである。本研究では独立サンプラーを使用する。ただし $Q(x)$ と $P(x)$ は十分似ていないと受理の可能性が低くなる。独立サンプラーの動作は次である。

1) 分布 $Q(x)$ から候補 x をサンプルする

2) r を計算する

$$r = \frac{P(x')Q(x)}{P(x)Q(x')}$$

3) $(0, 1)$ の一様乱数 R と r を比較する

i) $R < r$: 候補に移動

ii) $R > r$: そのまま

このとき r は詳細釣り合いの定理を満たすので、定常分布が存在する。

4. 分布推定アルゴリズム

分布推定には色々な種類があるが、本研究では Univariate Marginal Distribution Algorithm (UMDA) [3] [4] を使用する。UMDA は依存関係を考慮しないものである。UMDA の動作は次である。

1) 選択された個体群に対して、各遺伝子座の遺伝子 x_i の出現確率 $p_i(x_i)$ を求める

2) 確率モデルを作り、それに従い新たな個体を生成させる。個体の生成確率は次式となる。

$$p(x) = \prod_i p_i(x_i)$$

4. マルコフモンテカルロと分布推定

マルコフモンテカルロに分布推定を組み込む。実際には独立サンプラーの提案分布に UMDA を使用することで実装をする。

動作はつぎのようになる。

1) 優良個体を n 個体選択する

2)UMDA により, 候補を生成する

3)r を計算する

$$r = \frac{P(x')Q(x)}{P(x)Q(x')}$$

4) (0, 1) の一様乱数 R と r を比較する

i) $R < r$: 候補に移動

ii) $R > r$: そのまま

定常分布への収束証明実験

Goldberg の order-3 だまし問題 (Tight 問題) を 6 ビットで使用する. 定常分布としてボルツマン分布 (温度 5) を考える. 優良個体の選択に適合度関数を利用し, 適合度の良いもから 20 個体選択する. 遷移後の各状態の出現確率がボルツマン分布と一致するかを見る.

適合度関数には次式で定義する Quadratic 関数を利用する.

$$f_{quadratic}(x) = \sum_{l=0}^{\frac{l}{2}} f(x_l, x_{l+\frac{l}{2}})$$

$$f(u, v) = 0.9 - 0.9(u + v) + 1.9uv$$

これは 3 ビット離れた 2 箇所の相互作用を考慮することになる.

また誤差は次式で定義する.

$$dif = \sum_{i=0}^n |(Bolt)_i - (f)_i|$$

n: 全状態数, bolt: ボルツマン分布の値, f : 実験結果

実験結果

遷移回数: 十万 (誤差: 0.0391905)

誤差は小さい. しかしボルツマン分布とはずれが見れる. また最適解の確率が他より小さくなっている.

遷移回数: 一千万 (誤差: 0.00319101)

誤差は非常に小さい. ほぼボルツマン分布と一致している. また最適解の確率が一番大きくなっている.

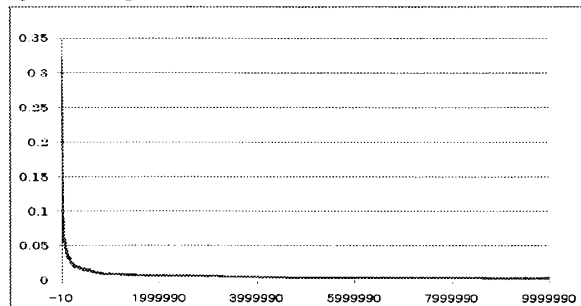


図 1 : 誤差の収束の様子

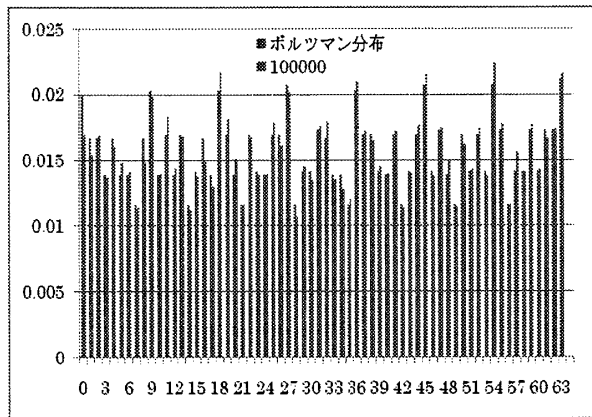


図 3 : 遷移回数十万の分布

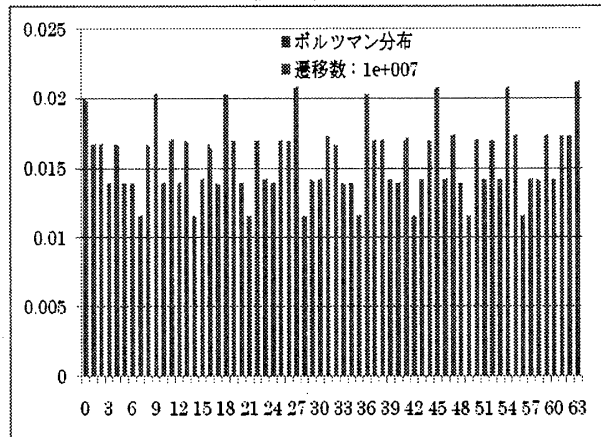


図 2 : 遷移回数一千万の分布

5. 考察

分布推定を組み込んでも, 十分な状態遷移を繰り返せば, 定常分布へ収束するといえる.

今回使用した分布推定は最も簡単な独立の場合だが, 依存性を考慮した場合の分布推定を組み込んでも成り立つか実験をし, 依存がない場合との性能を比較したい.

6. 参考文献

- [1] 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応用, 山梨大学修士論文, (2005)
- [2] 伊藤幸人, 種村正美: 計算統計 2 マルコフ連鎖モンテカルロ法とその周辺, 岩沼書店 (2005)
- [3] 平早哲郎: 数学的保証をもつ遺伝的アルゴリズムの改良, 山梨大学修士論文 (2006)
- [4] 倉橋節也, 勝又勇治, 寺田隆雄: ベイジアン最適化手法と分布推定アルゴリズムの動向, 人工知能学会, val. 18, No. 5, P487~P493 (2003)