

マルコフモンテカルロに基づ 分布推定法を用いた最適化アルゴリズム

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

本研究の目的は、数学に基づいた最適化問題を解く新しいアルゴリズムを提案する事である。そのため”マルコフモンテカルロ””分布推定法”の2つを組み合わせる事を考え、提案するアルゴリズムの検証を行う。

2. マルコフモンテカルロ

マルコフモンテカルロ [1]とは確率分布からサンプリングを行う手法である。これはマルコフ連鎖を導入し、局所的な情報を用いることが可能になっている。

2.1 マルコフ連鎖

マルコフ連鎖 [2][3]とは、”前の状態のみに依存し、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。状態が移動することを遷移するといひ、その確率を遷移確率という。またマルコフ連鎖は以下の2つの条件を満たすとき定常分布を持つ。

- ・マルコフ連鎖が既約で非周期である
- ・詳細釣り合いの定理を満たす

1つ目はマルコフ連鎖がどんな初期分布に対してもある1つの分布に収束するための条件で、2つ目は定常分布がボルツマン分布となるための条件であり、次式で表される。

$$P(x)\pi(x \rightarrow x') = P(x')\pi(x' \rightarrow x)$$

2.2 独立サンプラー

独立サンプラー [1]は、候補を提案する分布が現状態によらないという特徴がある。

動作 次の1)~3)を繰り返す

- 1) 分布 $Q(x')$ から候補 x' をサンプルする
- 2) r を以下の式で計算する

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

- 3) $(0, 1]$ の一様乱数 R と r を比較する

- i) $R \leq r$: 候補を受理
- 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、ボルツマン分布となる定常分布が存在する。

3. 分布推定法

分布推定法 [3][4]とは、良い解の分布を推定しその推定分布から新しい個体を生成する手法である。Univariate Marginal Distribution Algorithm (UMDA) [4] と Bivariate Marginal Distribution Algorithm (BMDA) [5] を使用する。

3.1 UMDA

依存関係を考慮しないものである。

動作

- 1) 全状態群から n 個の状態を選択する
- 2) 選択された状態群に対して、各遺伝子座の遺伝子 x_i の出現確率 $p_i(x_i)$ を求める

- 3) 出現確率から新たな個体を生成させる。個体 x の生成確率は次式で計算される

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

3.2 BMDA

2変数間の依存関係を考慮したものである。

動作

- 1) 全状態群から n 個の状態を選択する
- 2) 選択された状態群から、出現確率 $p_i(x_i)$ 、各ビット間の変数 $x_i x_j$ の出現確率 $p_{ij}(x_i x_j)$ を求める
- 3) 以下の式で依存関係を決め、依存グラフを作成する。 χ^2 の値が 3.84 以上なら依存関係有り

$$\chi_{i,j}^2 = \sum_{x_i, x_j} \frac{(Np_{i,j}(x_i, x_j) - Np_i(x_i)p_j(x_j))^2}{Np_i(x_i)p_j(x_j)}$$

- 4) 依存グラフと出現確率から新たな個体を生成させる。個体 x の生成確率は次式で計算される

$$p(x) = \prod_{r \in R} p_r(x_r) \prod_{i \in V \setminus R} p_{i, e(i)}(x_i | x_{e(i)})$$

$e(i)$ は i の接続先の頂点

2進6ビットの具体例(出現確率と依存関係)

i, j はビット位置なので $0 \leq i, j \leq 5$, $x_i = \{0, 1\}$, $x_i x_j = \{(0, 0), (0, 1), (1, 0), (1, 1)\}$ をとる。

今選択された状態群を以下の3状態とする

000000 (0) 101010 (42) 111111 (63)

従って $p_0(0) = 2/3$, $p_1(0) = 1/3$

$p_{01}(0, 0) = 1/3$, $p_{01}(0, 1) = 1/3$, となる。

また 0bit と 1bit 間は χ^2 の値が 3.84 以下なので依存関係は無しとなる。この判定は自由度 1 のカイ二乗検定(独立性の検定)をしている。

依存グラフの作成

カイ二乗の値が最大となるようなスパニング木を作成する

4. 分布推定最適化アルゴリズム

本研究が提案する、分布推定最適化アルゴリズムとはマルコフモンテカルロに分布推定法を組み込むことで実現する。実際には独立サンプラーの提案分布に分布推定法を使用する。

動作 次の2)~4)を繰り返す

- 1) 全状態群から n 個の状態を選択し、分布推定を行う
- 2) 分布推定法より、候補 x' を生成する
- 3) r を以下の式で計算する

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

- 4) $(0, 1]$ の一様乱数 R と r を比較する

- i) $R \leq r$: 候補に移動
- ii) $R > r$: そのまま

この提案アルゴリズムは、以下の特徴がある。

- ・ボルツマン分となる定常分布が存在すること

が数学的に証明されている

- ・有利となる状態が生成されると考えられる
- ・状態生成時にビット長の処理だけで状態を生成できる

5. 実験

分布推定最適化アルゴリズムが考えたとおり動作しているかを確認するため2つの実験を行い、評価をする。

*遷移確率の更新

これは新しく推定分布のために状態を選択し、することである。途中で遷移確率を更新しても定常分布への収束は保障される。[6]

*実験の共通条件

- ・Goldbergのorder-3だまし問題を使用
- ・定常分布としてボルツマン分布(温度10)
- ・適合度関数はQuadratic関数を使用

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

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

- ・更新は10万回に1度

5.1 定常分布への収束実験

定常分布へ収束しているかを確認する。遷移回数は1000万回。評価には次式で示す絶対値誤差を利用。

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

n: 全状態数 f: 実験結果

Bolt: ボルツマン分布の値

実験条件(UMDAとBMDA両方)

	ビット数	生き残り個体数	更新
実験1	6bit	40%	有り
実験2	6bit	40%	無し
実験3	12bit	40%	有り
実験4	12bit	40%	無し

表5_1. 実験条件

実験結果

	誤差(UMDA)	誤差(BMDA)
実験1	2.34E-02~2.64E-03	2.20E-02~4.64E-03
実験2	2.34E-02~2.26E-03	2.20E-02~2.51E-03
実験3	1.72E-01~1.72E-02	1.73E-01~2.91E-02
実験4	1.72E-01~1.73E-02	1.73E-01~1.72E-02

表5_2. 実験結果

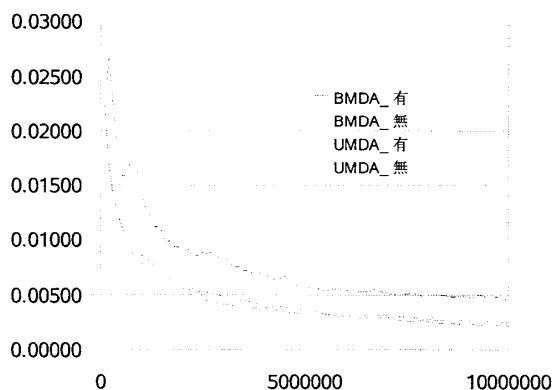


図5.1 6bitでの誤差収束の様子

5.2 最適解への到達実験

最適解へ到達するまでの遷移回数を比較する。評価には15回実験を行った場合の平均値を利用。実験条件(UMDAとBMDA両方)

	ビット数	生き残り個体数	更新
実験1	18bit	40%	有り
実験2	18bit	40%	無し

表5_3. 実験条件

実験結果(小数点以下切捨て)

	遷移回数(UMDA)	遷移回数(BMDA)
実験1	292846	265255
実験2	313345	341207

表5_4. 実験結果

6. まとめ

提案したアルゴリズムは、実験5.1の結果から定常分布へ収束するといえる。

また実験5.2で更新有りのほうが最適解に早く到達する。そのことから考えたとおり、更新をすることで遷移途中の情報を有効に使い、よい個体が生成されやすくなると言える。

しかし問題サイズが大きくなると選択個体サイズの増加、計算時間が掛かるなど言った問題が考えられる。そのため今後は選択個体サイズを減らすといったことを考える必要がある。

7. 参考文献

- [1] 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)
- [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応用, 山梨大学修士論文, (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)
- [5] M. Pelikan and H. Muehlenbein, The Bivariate Marginal Distribution Algorithm, 1999
- [6] 鈴木 悠也: 一様でない遷移確率を用いた焼きなまし法, 山梨大学卒業論文, (2008)