一様でない遷移確率を用いた焼き鈍し法

鈴木悠也　宗久　知男　宗久　保子

山梨大学　大学院医学工学総合教育部コンピュータメディア工学専攻

1　焼きなまし法と研究目的

焼きなまし法とは最大値探索問題の解法の１つであり、温度を示すパラメーターを徐々に下げることにより最適な解を求めるものである。今回の研究目的は温度が一定という条件の下でも温度を徐々に下げていく場合と同様に、次の遷移候補を選ぶのに交叉と突然変異を導入することで一様でない遷移確率を実現し、最適解を求めることができることの証明をすることである

１．１　焼き鈍し法のアプローチ

目的関数 ｆ の最大値を与える平衡状態${}^t b$を求める問題と考え，収束状態が最適分布となるようなマルコフ連鎖をつくり、適当な初期状態から状態遷移させることにより${}^t b$に収束させる

２．マルコフ連鎖

マルコフ連鎖とは次の状態が現在の状態だけに依存するような過程のうち時間のパラメータｔが離散的で状態空間Ｓが有限であるときのもので過程が時間に依存しないとき一様なマルコフ連鎖であるといい、依存するときを一様でないマルコフ連鎖という

２．１状態遷移確率Ｐと遷移確率行列Ｍ

$i,j\in S$のとき時刻tにおける状態iから時刻$t+1$における状態jに遷移する状態遷移確率は$P(X(t+1)=j|X(t)=i)$と表される。またi行j列の成分$M(i,j;t)\equiv P(X(t+1)=j|X(t)=i)$が$M(x,y;t)\geq 0$　かつ　$\sum_{j\in S} M(i,j;t)=1$を満たすとき$M(i,j;t)$をx行y列の成分とする行列Mをマルコフ連鎖の遷移確率行列という

２．２チャップマン・コルモゴルの方程式

$M(i,j;t,t+m)\equiv P(X(t+m)=j|X(t)=i)$を$i$行$j$列の要素とする時刻$t$から$t+m$への遷移確率行列行列Mは下の式で表される

一様でないマルコフ連鎖

$$M(t,t+m)=M(t)\cdot M(t+1)\cdots M(t+(m-1))$$

一様なマルコフ連鎖　$M(t,t+m)=M^m$

２．３　一様なマルコフ連鎖のエルゴード定理

マルコフ連鎖の遷移確率行列Mが既約かつ非周期的であるとき初期状態分布ｃによらず時間経過とともに平衡分布ｂに収束する

$$\lim_{m\to\infty} {}^t cM^m = {}^t b$$

２．４一様でないマルコフ連鎖の平衡分布への収束

一様でないマルコフ連鎖でも以下の式が成り立つ　$\lim_{m\to\infty} {}^t cM(0)\cdot M(1)\cdots M(m) = {}^t b$

ただしMは以下の式を満たすものである

$${}^t bM(k) = {}^t b$$

この式の証明は参考文献[1]に示す

２．５　マルコフ連鎖の設計

マルコフ連鎖を作るための確率分布としてボルツマン分布がある

$$b_i(T)=\frac{1}{\sum \exp(f_i/T)}\exp(f_i/T)$$

受理行列Ａと遷移行列Ｑ(t)を用いてｉ行ｊ列の成分Ｍ(i, j;t)が次式で表される行列Mを作る

$$M(i,j;t)\equiv\begin{cases} Q(i,j;t)A(i,j) & for \quad i\neq j \\ 1-\sum_{j\neq x} Q(i,j;t)A(i,j) & for \quad i=j \end{cases}$$

ＡはＡ(i, j)をＱはＱ(i, j;t)をそれぞれ成分とする行列である

$$A(i,j)\equiv W(b_j(T)/b_i(T))$$

$$W(s)\equiv sW(1/s) \quad for \quad \forall s\in(0,\infty)$$

$$Q(i,j;t)=\begin{cases} 0 & for \quad i=j \\ Q(j,i;t)(\geq 0) & for \quad i\neq j \end{cases}$$

$$\sum_{j\in S} Q(i,j;t)=1, \exists n: Q^n(i,j;t)\geq 0$$

今回の実験では関数Wは以下のものを使用した

$$W(s)=\begin{cases} 1 & s\geq 1 \\ b_j(T)/b_i(T) & s<1 \end{cases}$$

Simulated Annealing that uses transition probability the not same

Yuya Suzuki, Munehisa Tomoo, Munehisa yasuko: Yamanashi University graduate school medicine engineering synthesis and education part computer media engineering major

3　遺伝的アルゴリズム

遺伝的アルゴリズムとは選択、交叉、突然変異などの操作を繰り返し行うことで解を求めるアルゴリズムである。今回は交叉と突然変異のみを行う

3．1　交叉

交叉には１点交叉、２点交叉、一様交叉がある。１点交叉はランダムに交叉位置を決め、そこから左を交叉相手と入れ替える。２点交叉ではランダムに２箇所交叉位置を決め、その間を交叉相手と入れ替える。一様交叉は各要素で 1/2 の確率で交叉相手と入れ替えるかどうかを決める

3．2　突然変異

突然変異とは一部を変化させる操作であり、今回は１回の突然変異で変化するのは１箇所のみである。

4．実験

order-3 だまし問題を使用し、関数 f の値を表1に示す

表1: 関数 f の値

000	001	010	011	100	101	110	111
28	26	24	0	14	0	0	30

温度は固定でＴ＝１０とする。

4．1ボルツマン分布への収束証明実験

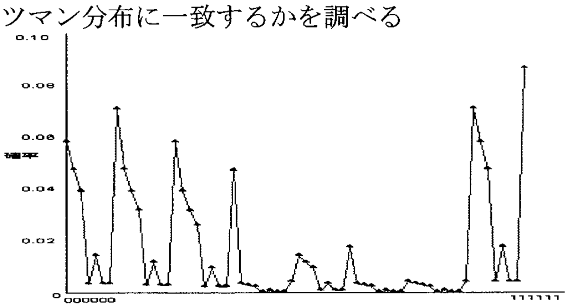
初期状態　００１１００

繰り返し回数　１００００００００回

交叉相手　１０個

交叉方法：１点交叉

初期状態から状態遷移させていき、その状態が表れた回数を数え、それを全回数で割ったものがその状態の確率となる。そしてそれがボルツマン分布に一致するかを調べる



ほぼボルツマン分布に一致しているのがわかる

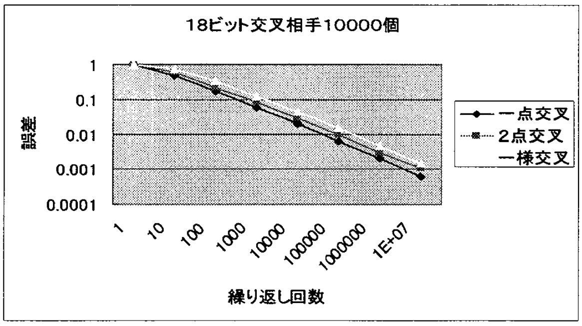
4．2　交叉方法を変えたときのボルツマン分布との誤差の比較

１点交叉以外でもボルツマン分布に一致するかの確認とそれぞれの交叉方法で違いがあるかを調べる

初期状態　000000000000000000

繰り返し回数　10000000 回

交叉相手　10000 個



どの交叉方法でもボルツマン分布に一致するが交叉方法による違いはあまりみられなかった。

4．3　交叉と突然変異の割合と誤差の比較

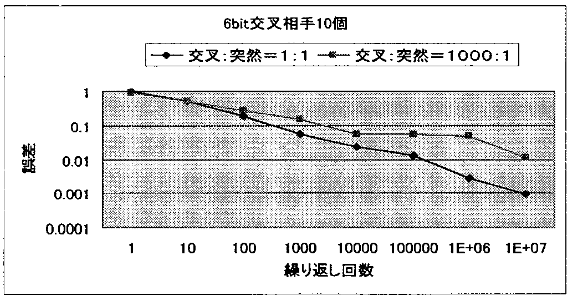
突然変異だけでは一様なマルコフ連鎖にしかならず、交叉を入れることで一様でないマルコフ連鎖となる。交叉と突然変異の割合を変えることで一様なマルコフ連鎖と一様でないマルコフ連鎖が誤差にどう影響するか調べる

初期状態　００１１００

繰り返し回数　１００００００００回

交叉相手　１０個

交叉：１点交叉



突然変異の割合を大きくしたときのほうが誤差が小さくなっているのがわかる。

5．まとめ

交叉という一様でないマルコフ連鎖と突然変異という一様なマルコフ連鎖の両方を用いた場合でもボルツマン分布に一致することがわかった。

参考文献

[1]鈴木悠也：一様でない遷移確率を用いた焼き鈍し法，山梨大学卒業論文（2007）

[2]長尾智晴：最適化アルゴリズム，P209，昭晃堂（2000）

[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）