非定常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．はじめに

焼き鈍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。焼き鈍し法の特徴として以下の２つがある。

１：最適解への到達の数学的保証がある

２：解候補の決定が局所的な変更である

遺伝的アルゴリズムとは個体集団に対する自然淘汰および交叉、突然変異などのオペレータによって新しい個体集団を生成し、最も適応度の高い個体を効率よく探索するアルゴリズムである。遺伝的アルゴリズムの特徴として以下の２つがある。

１：交叉を行うことで大域的変更ができる

２：最適解への到達の数学的保証がない

今回の研究目的は焼き鈍し法と遺伝的アルゴリズムの両者の長所を活かすため、焼き鈍し法に遺伝的アルゴリズムの交叉を取り入れることである。具体的には交叉を取り入れた場合でも最適解への数学的保証があることの証明をすることと交叉を取り入れない場合との性能の比較をすることである。

2　焼き鈍し法のアプローチ

目的関数ｆ（適応度）の最大値を与える平衡状態$'b$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$'b$に収束させる

２．１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。

一様なマルコフ連鎖の例として遺伝的アルゴリズムの突然変異があり、一様でないマルコフ連鎖として交叉がある。

Simulated Annealing that uses nonstationary transition probability
Yuya Suzuki, Munehisa Tomoo, Munehisa yasuko: Yamanashi University graduate school medicine engineering synthesis and education part computer media engineering major

２．２　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$M(i,j;t)\geq 0$かつ$\sum_{j\in S}M(i,j;t)=1$を満たすとき$M(i,j;t)$を$i$行$j$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

２．３　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

$$g(i;t)=\frac{1}{\sum_{k\in S}\exp(f_k/T)}\exp(f_i/T)$$

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

$$A(i,j)\equiv W(g(j;t)/g(i;t))$$

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

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

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

今回の実験では関数Wは以下のものを使用した

$$W(s)=\begin{cases}1 & s\geq 1\\ g(j;t)/g(i;t) & s<1\end{cases}$$

２．４　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　$M(t,t+m)=M^m$

２．５　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${}^t b$に収束する

$$\lim_{m\to\infty} {}^t c M^m = {}^t b \quad (1)$$

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、一様交叉などがある。例えば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。

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　焼き鈍し法の拡張

(1)式のMの条件はゆるくすることが可能であり、以下の式のように拡張できる。

$$\lim_{m\to\infty} {}^t c M(0)\cdot M(1)\cdots M(m) = {}^t b \quad (2)$$

ただしMは以下の式を満たすものである

$${}^t b M(k) = {}^t b \quad (3)$$

この式の証明は参考文献[1]に示す。

交叉は交叉相手によって遷移候補が変わってくる、つまり交叉相手によってMが変化するので(1)式では交叉を取り入れた場合の平衡分布への収束を保証できない。しかしこの式では(3)式さえ満たしているMならばMが変わってもよいので交叉を取り入れても数学的保証があることを示すことができる。

5　実験

order-3 だまし問題を使用し、適応度の値を表1に示す。 表1: 適応度の値

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

例えば6ビットで次の状態の場合、適応度は 111010 = 111 + 010 = 30 + 24 = 54 となる。

5．1　ボルツマン分布への収束証明実験

(2)式が成り立つことを確認するために温度が一定という条件で次の遷移候補を決定するのに交叉を導入することで一様でないマルコフ連鎖を実現し、初期状態から状態遷移させていくことでボルツマン分布に一致することを確認する実験を参考文献[2]に示す。

5．2　従来の方法と本手法の比較実験

初期状態はランダムとし初期温度から徐々に温度を下げながら状態遷移させていき、従来の方法と本手法で最適解への到達の早さを比較する。

5．2．1　温度の減らし方

温度は一般的には指数的に減らしていくので以下の式を用いる。

従来の手法

$$T = T_{syoki} * 0.9999999^i \qquad i:現在の遷移回数$$

本手法 $T = T_{syoki} * 0.999^i$

交叉を用いる本手法では状態が大域的に遷移するので従来の手法に比べ温度の下がり方を急にしても最適解に到達することができる。

5．2．2　最終温度の決定

最も適応度の高い状態からその次に適応度が高い状態へ遷移する確率が 1/10 となる温度を最終温度とする。今回の実験では状態を 27 ビットとするので以下の式のようになる。

$$\frac{\dfrac{e^{268/T}}{\sum_{j\in S}\exp(f_j/T)}}{\dfrac{e^{270/T}}{\sum_{j\in S}\exp(f_j/T)}} = \frac{1}{10}$$

上の式を解いて最終温度T_{low}=0.865 とする。

5．2．3　最適解への到達の早さの比較

初期温度を 10、温度の更新回数は 10000 回に1回、交叉は２点交叉、交叉相手は適応度の値が 180 以上ものを 10 万個とし、最適解への到達の早さを比較する。

表２：最適解への到達の早さの比較

	遷移回数（平均）
従来の方法	1520435 回
本手法	3710 回

本手法を用いたときの結果がよいのがわかる。

まとめ

焼き鈍しに交叉を導入しても最適解への到達の数学的保証を持ったまま性能を向上させることができた。

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]鈴木悠也：一様でない遷移確率を用いた焼き鈍し法，情報処理学会第 71 回全国大会，5M-2(2009)
[3] 長尾智晴：最適化アルゴリズム，P209，昭晃堂（2000）
[4] 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）