



確率的状態選択法の 分布推定GAへの応用



宗久研究室

T03kf022 近山 祐美





目次

- ・遺伝的アルゴリズムの概要
 - ・マルコフ連鎖
 - ・マルコフ連鎖とGAの対応
 - ・選択法の導入
 - ・分布推定GA
 - ・まとめ
- 
- 

遺伝的アルゴリズムの概要

- ・遺伝的アルゴリズム (Genetic Algorithms)
生物界の進化を模倣して最適化を行う手法
- ・GAで用いられる遺伝的オペレータ
 - 選択: 環境に適応する個体を生き残らせる
 - 交叉: 親から遺伝子を組み換え子供を生成する
 - 突然変異: ランダムに遺伝子を1つ変化させる
- ・GAの探索能力
 - 局所解に落ちやすく, 真の最適解を得る保証はない
- ・ボルツマン分布に従うと言う数学的保証をGAに組み込み, 大域的な収束を数学的に保証する
⇒マルコフ連鎖に基づきGAを動作させる事を実現させる

マルコフ連鎖について

- ・マルコフ連鎖

次の状態に遷移するとき、遷移する確率は現在の状態にのみ依存するというマルコフ性を持った確率過程

- ・ある時点 t での存在確率 $f^{(t)}$ は以下のように表し、次の条件を満たす必要がある

$$f^{(t)} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_n \end{bmatrix}$$

$$\sum_{i=1}^n f_i = 1$$

f_i : 時点 t において、状態 i にいる存在確率



- ・状態遷移確率 P_{ij} は次式を満たす

$$0 \leq P_{ij} \leq 1, \sum_j P_{ij} = 1$$

- ・状態遷移確率行列 P は以下のように表す

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

- ・初期状態から N 時点後の遷移は以下の式で計算できる

$${}^t f^{(N)} = {}^t f^{(N-1)} P = {}^t f^{(N-2)} P P = \cdots = {}^t f^{(0)} P^N$$





- ・既約マルコフ連鎖において、全ての状態がエルゴード的である時、状態遷移を繰り返しても分布が変化しない定常分布が存在する
- ・定常分布は以下の式で表すことができる

$$\lim_{N \rightarrow \infty} {}^t f^{(0)} \mathbf{P}^N = {}^t \mathbf{u}$$



マルコフ連鎖とGAの対応

- ・集団の個体の構成は状態分布として表現される
- ・状態遷移確率は以下の式で構成される

$$P_{ij} = P_{g(i,j)} \cdot P_{(i \rightarrow j)}$$

- ・受理確率の設定: 受理確率を以下のように定める

$$P_{(i \rightarrow j)} = \frac{1}{1 + e^{\frac{(E_i - E_j)}{T}}}$$

E_j : 状態jの適合度
 E_i : 状態iの適合度
T: 温度パラメータ

- ・生成確率の設定: 任意の状態で次の条件が成立するよう構成する

$$P_{g(i,j)} = P_{g(j,i)}$$

- ・世代交代は存在確率にPをかけることでおこなう。
 - t世代の存在確率は以下の式で求められる

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

- ・存在確率は以下で示されるボルツマン分布となる

$$f_i = C \cdot e^{-\frac{E_i}{T}}, \quad C = \frac{1}{\sum_j e^{-\frac{E_j}{T}}}$$

選択法の導入

- ・状態空間が広大であると、計算処理、メモリ容量の点で問題が出てくる
⇒ 状態を絞って扱う事をしなくてはならない。
- ・ボルツマン分布に従うようにしなくてはならない
 - 2値($a_i, 0$)を取る確率変数 η を使用し、状態を絞る
 - 確率変数 η は次式の確率で、どちらの値を取るかを定める

$$\eta_i = \begin{cases} a_i \cdots P_{a_i} = \frac{1}{a_i} \\ 0 \cdots P_0 = 1 - \frac{1}{a_i} \end{cases} \quad a_i = \min \left\{ 1, \frac{f_i}{\varepsilon} \right\}$$



・選択行列Mを以下のように定義する

$$M = \begin{bmatrix} \eta_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \eta_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \eta_n \end{bmatrix}$$

* 確率変数 η_i の統計平均は1となるので、
選択行列Mの統計平均はEとなる

・確率分布の統計平均は以下のようになる

$$\begin{aligned} \langle\langle {}^t f^{(N)} \rangle\rangle &= {}^t f^{(0)} \langle\langle M \rangle\rangle P \cdots \cdots \langle\langle M \rangle\rangle P \\ &= {}^t f^{(0)} EP \cdots \cdots EP \\ &= {}^t f^{(0)} P \cdots \cdots P \end{aligned}$$



ボルツマン分布への収束証明実験

Goldbergのoder-3だまし問題(Tight問題)を6ビットで使用

-1ビット突然変異, 1点交叉を使用

-適合度は以下の表で定義された値の合計を使用

表1: Tight問題

x	000	001	010	011	100	101	110	111
f(x)	28	26	22	0	14	0	0	30

適合度計算の例)

$$010111 = 010 + 111 = 22 + 30 = \underline{52}$$



実験1) 選択 + 突然変異

$$\text{計算モデル } {}^t f^{(N)} = {}^t f^{(0)} M P_m \cdots M P_m$$

世代交代数: 500

サンプル数: 1000

ε : 0.05

温度: 10.0

実験2) 選択 + 突然変異 + 交叉

$$\text{計算モデル } {}^t f^{(N)} = {}^t f^{(0)} M P_c M P_m \cdots M P_c M P_m$$

世代交代数: 500

サンプル数: 1000

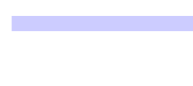
間隔: 交互, 10世代

ε : 0.05

温度: 10.0

* M: 選択行列, P_m : 突然変異の状態遷移確率, P_c : 交叉の状態遷移確率

* 統計平均した結果とボルツマン分布とを比較する



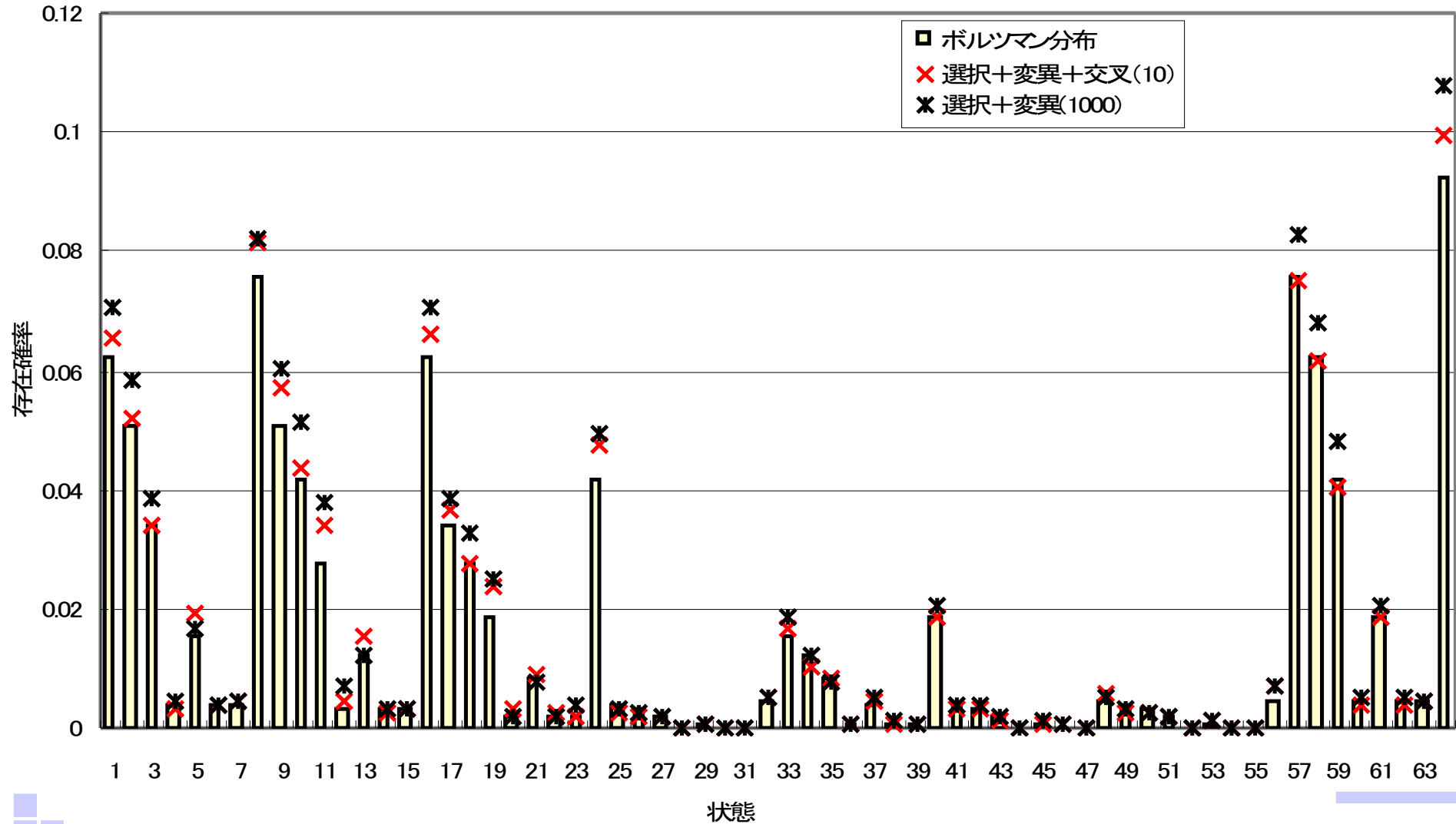
実験結果

実験1・ほぼボルツマン分布と一致する

実験2・ほぼボルツマン分布と一致する

- ・交叉を行っている世代で分布への乱れが見て取れる
 - ⇒交叉が収束の乱れを起こす原因である
 - ⇒交叉の影響が強いほど乱れが起こる

結果





分布推定GA

- ・選択を含めた交叉はボルツマン分布への収束を妨げる
⇒交叉の変わりに、優れた探索能力を持つオペレータとして、
分布推定アルゴリズムを使用
- ・分布推定アルゴリズム
解候補から推定された分布を“確率モデル”として利用し、
解空間を探索する方法である



-UMDA (Univariate Marginal Distribution Algorithm)

遺伝子間の相互作用を考慮しないもの

手順

- 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 x が生成される確率:
$$P(x) = \prod_i P_i(x_i)$$

- 3) 世代交代をおこなう



- ・分布推定GAでの状態遷移確率は以下のようにする

$$P_{ij} = P_{g(i,j)} \cdot P_{(i \rightarrow j)}$$

- ・補正を行うことで、ランダムに生成された場合と同じとみなす事が出来る
 - 個体をビットとすると、 P_{ij} は以下のように補正される。

$$P_{ij} = P_{g(i,j)} \cdot P_{(i \rightarrow j)} \cdot \left[\frac{1}{P_{g(i,j)}} \cdot \frac{1}{2^l} \right]$$





ボルツマン分布への収束証明実験

Goldbergのoder-3だまし問題 (Tight問題) を6ビットで使用

- 適合度として以下のquadratic 関数を使用

- quadratic関数

$$f_{quadratic}(x) = \sum_{i=0}^{\frac{l}{2}-1} f(x_i, x_{i+\frac{l}{2}})$$

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

- 定義される2箇所 (3ビット分離れたもの) の遺伝子座の相互作用を伴う関数
適合度計算の例)

$$f_{quadratic}(101100) = f(x_0, x_3) + f(x_1, x_4) + f(x_2, x_5)$$


$$f(0,1) = 0.9 - 0.9(0 + 1) + 1.9(0 \cdot 1) = 0$$

$$f(0,0) = 0.9 - 0.9(0 + 0) + 1.9(0 \cdot 1) = 0.9$$

$$f(1,1) = 0.9 - 0.9(1 + 1) + 1.9(1 \cdot 1) = 1$$

$$f_{quadratic}(101100) = 0 + 0.9 + 1 = 1.9$$





・計算モデル ${}^t f^{(N)} = {}^t f^{(0)} MP_e MP_e \cdots MP_e MP_e$

実験1)補正なし

実験2)補正あり

* M:選択行列 * P_e : UMDAの状態遷移確率

* 統計平均した結果とボルツマン分布を比べる

* 使用するパラメータ

-世代交代数:100, サンプル数:1000, ε :0.05, 温度:10.0





・UMDAの状態遷移確率の計算

1) 選択法で個体を選択

2) 選択された個体から各遺伝子座で0(又は1)の出現確率を計算

3) 出現確率から以下の計算式で各状態の出現確率を計算

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

4) 出現確率を生成確率として状態遷移確率を計算

例) 101010(状態i) \Rightarrow 111000(状態j)の場合

$$* p(111000) = p_5(1) \cdot p_4(1) \cdot p_3(1) \cdot p_2(0) \cdot p_1(0) \cdot p_0(0)$$

$$\begin{aligned} P_{ij} &= P_{g(l,j)} \cdot P_{(i \rightarrow j)} \\ &= p(111000) \cdot P_{(i \rightarrow j)} \\ &= p(111000) \cdot \frac{1}{1 + e^{\frac{(E_i - E_j)}{T}}} \end{aligned}$$



結果

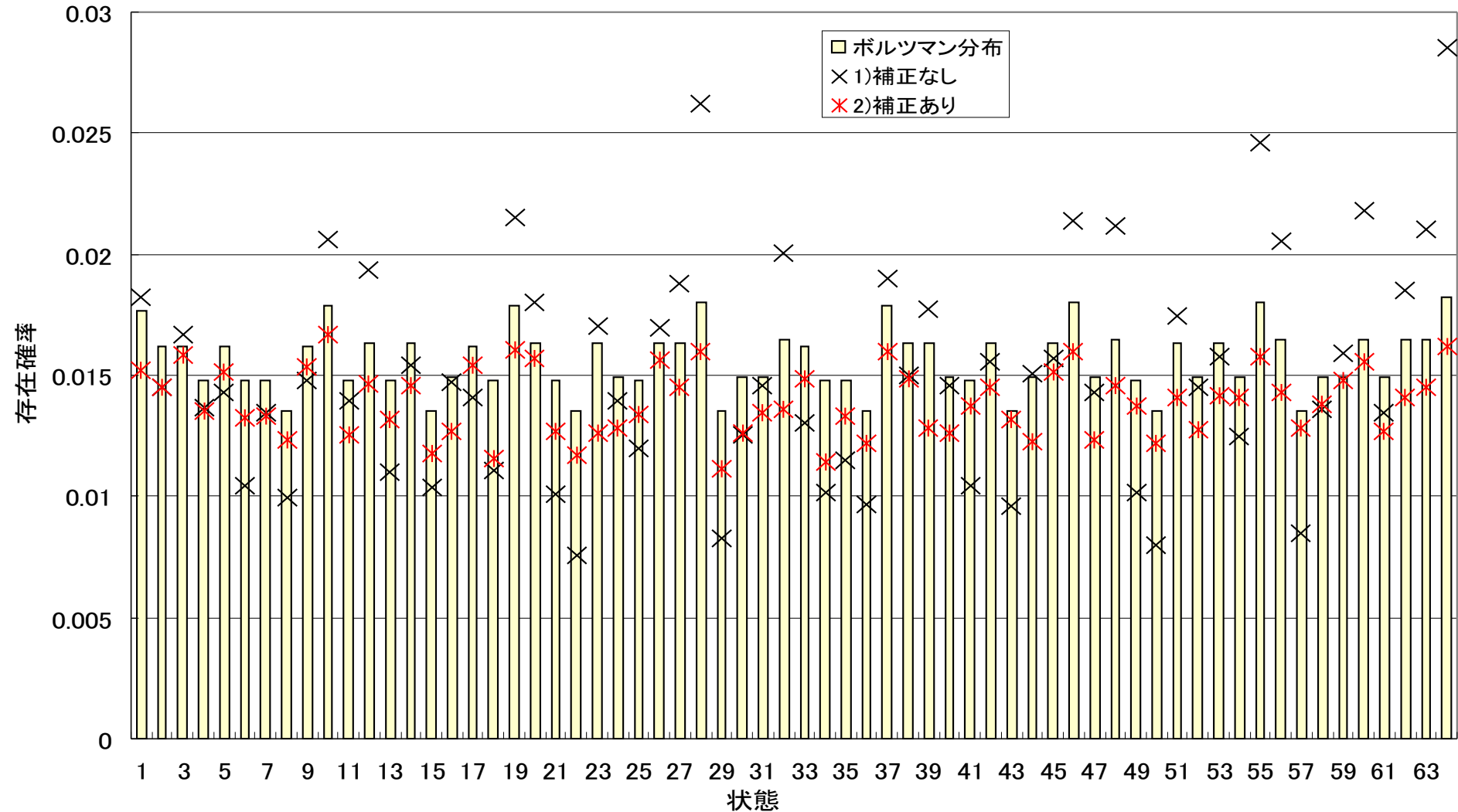



図2. 分布推定GAでの分布

まとめ

- ・確率的状態選択法を導入しても、真の最適解が得られることが証明された
 - パラメータの値によって差がでることがわかった
 - サンプル数が多い方がボルツマン分布に近い結果を得られる。
- ・分布推定GAIにおいても、真の最適解が得られることが証明された
 - 生成確率の計算の仕方に工夫が必要だと考えられる



参考文献

- ・高橋幸雄, 森村英典: マルコフ解析 日科技連出版(1991)
 - ・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)
 - ・平早 哲明 数学的保証を持つ遺伝的アルゴリズムの改良
山梨大学修士論文(2006)
 - ・倉橋節也, 勝又勇治, 寺田隆隆雄 ベイジアン最適化手法と分布推定アル
ゴリズムの動向 人工知能学会誌vol.18 No.5 (2003)
- 
- 