最適化問題における確率的状態選択法 -焼きなまし法との比較-

G06MK029
山崎 紘揮

研究目的

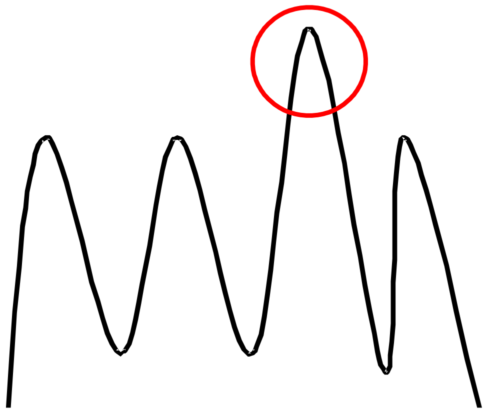
- 最適化アルゴリズムとして焼きなまし法(SA:Simulated Annealing)が存在する。
- SAは確率分布からのサンプリングをもとに考えている。
- SAとは違うサンプリングをもとにした確率的状態選択法(SSS:Stochastic State Selection Method)を考え、SAとの比較実験を行う。

SAの目的

$$u_i = \frac{\exp\left(-\frac{E(i)}{T}\right)}{\sum_j \exp\left(-\frac{E(j)}{T}\right)}$$

u_i:状態iの存在確率　　T:温度

$E(i)$:状態iの適合度　　$E(j)$:状態jの適合度



- 最適化を表現する確率分布は上記のボルツマン分布で表すことが出来る。

SAのアルゴリズム

- 推移元状態から推移先状態の候補を1つ選ぶ。
- その状態に対して受理確率を適用して推移先状態を決定する。

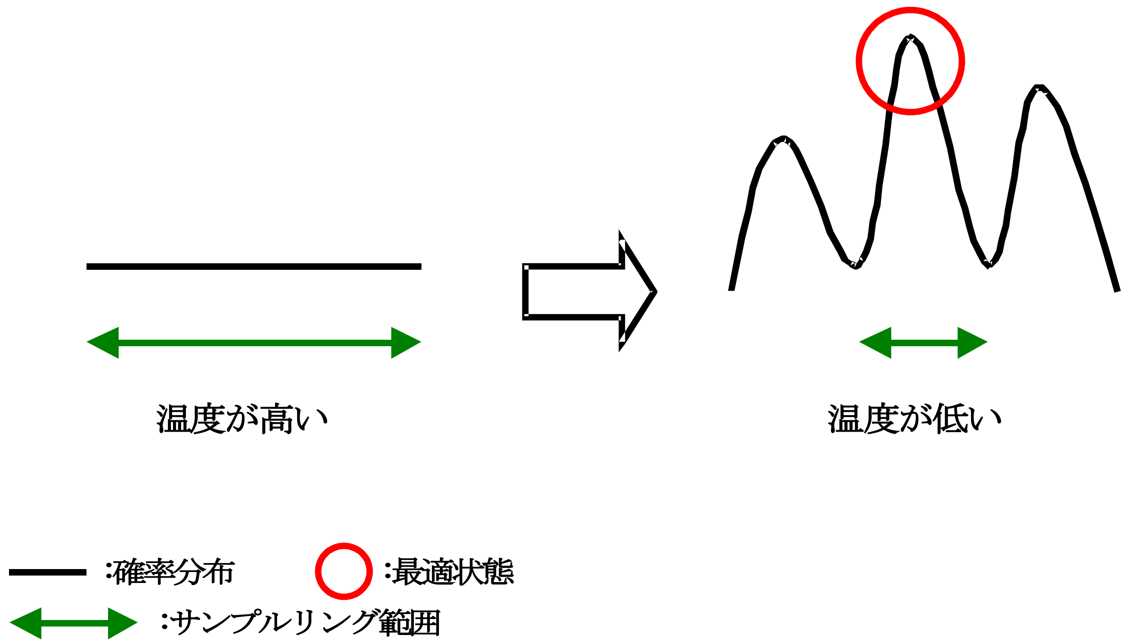
$$p(i \to j) = \frac{\exp\left(-\frac{E(j)}{T}\right)}{\exp\left(-\frac{E(i)}{T}\right) + \exp\left(-\frac{E(j)}{T}\right)}$$

$E(i)$: 状態iの適合度

$E(j)$: 状態jの適合度

T : 温度

最適状態を得るためのサンプリング(SA)



- SAでは、最適状態を得られるかは温度の更新方法に依存する。

最適状態を得るためのサンプリング(SSS)

[redacted]

- 温度を下げてもサンプリング範囲を維持することで存在確率の高い状態を得ることを考える。
- SAに数学的保証を与えている確率過程の分布計算法を適用する。

目的となる確率分布(ボルツマン分布)

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

$\vec{u}$: 定常分布

P : 推移確率行列

$$u_i = \frac{\exp\left(-\frac{E(i)}{T}\right)}{\sum_j \exp\left(-\frac{E(j)}{T}\right)}$$

u_i : 状態iの存在確率　T : 温度

$E(i)$: 状態iの適合度　$E(j)$: 状態jの適合度

- 定常分布をボルツマン分布と考える。

定常分布の収束条件

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

$\vec{u}$: 定常分布

P : 推移確率行列

- 確率過程がエルゴード性を満たせば、定常分布が存在する。
- エルゴード性とは既約と非周期という性質を満たした性質のことである。

詳細釣り合いの条件

$$u_i p_{ij} = u_j p_{ji}$$

p_{ij} : 状態iからjへの推移確率

p_{ji} : 状態jからiへの推移確率

- 詳細釣り合いの条件が成立する。
  →定常分布が存在するための十分条件

推移確率

$$p_{ij} = p(select(j)/X = i) \cdot p(i \to j)$$

i:推移元状態　　j:推移先状態

$p(select(j)/X = i)$:生成確率

$p(i \to j)$:受理確率

$$p(select(j)/X = i) = p(select(i)/X = j)$$

$$p(i \to j) = \frac{\exp\left(-\frac{E(j)}{T}\right)}{\exp\left(-\frac{E(i)}{T}\right) + \exp\left(-\frac{E(j)}{T}\right)}$$

$E(i)$:状態iの適合度

$E(j)$:状態jの適合度

T:温度

SSSのアルゴリズム

$${}^t\vec{f}^{(0)}PPP\cdots P$$

$$\Downarrow$$

$${}^t\vec{f}^{(0)}PMPM\cdots PM$$

M:確率変数行列

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

η_i:状態iの確率変数

$$\left\langle\left\langle {}^t\vec{f}^{(0)}PMPM\cdots PM\right\rangle\right\rangle$$

$$={}^t\vec{f}^{(0)}P\langle\langle M\rangle\rangle\cdots P\langle\langle M\rangle\rangle$$

$$={}^t\vec{f}^{(0)}PP\cdots P$$

$$\langle\langle M\rangle\rangle=\begin{bmatrix}1 & 0 & \cdots & 0\\ 0 & 1 & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & 1\end{bmatrix}$$

$\langle\langle M\rangle\rangle$:統計平均

確率変数行列Mについて

- 行列Mの役目は、状態を落とすことと平均が1となることである。

$$\eta = \begin{cases} 0 & \left(p = 1 - \dfrac{1}{a}\right) \\ a & \left(p = \dfrac{1}{a}\right) \end{cases}$$

$$\langle\langle \eta \rangle\rangle = 0 \cdot \left(1 - \frac{1}{a}\right) + a \cdot \frac{1}{a} = 1$$

η :確率変数

a :1以上の定数

$$\frac{1}{a_i} = \min\left(1, \frac{f_i}{\varepsilon}\right)$$

f_i :状態iの存在確率

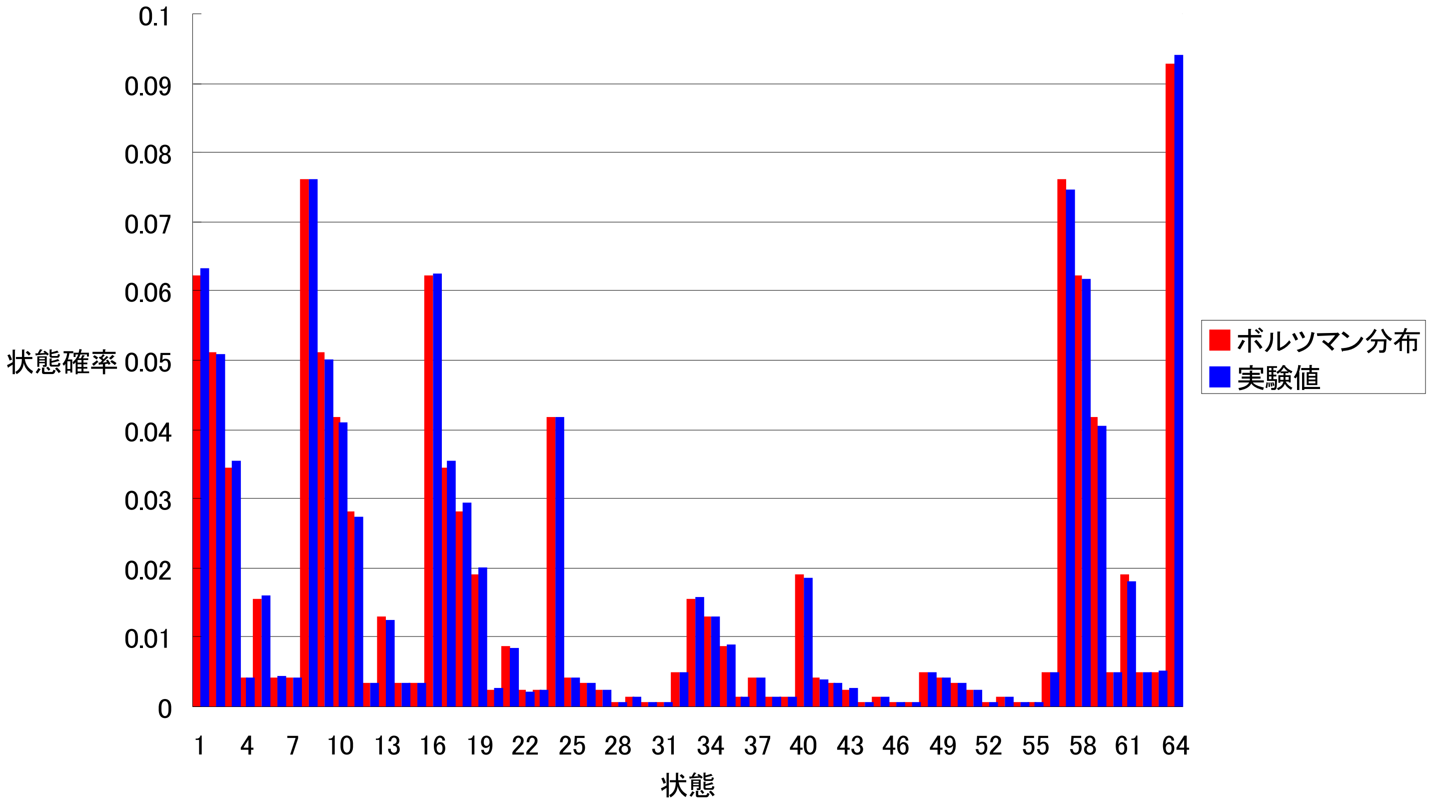
ε :正定数$(\varepsilon > 0)$

実験(6ビットTight問題)

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

- 確率的状態選択法を使用した場合でもボルツマン分布に収束するかを確認する。
- N=100(Pの掛ける数)
- ε=0.05(選択数:約20)
- 平均をとるためのサンプル数:100
- T=10

結果



0.1
0.09
0.08
0.07
0.06
状態確率 0.05
0.04
0.03
0.02
0.01
0
1 4 7 10 13 16 19 22 25 28 31 34 37 40 43 46 49 52 55 58 61 64
状態
ボルツマン分布
実験値

比較実験(最適化問題と比較対象)

- SAとSSSに対して150都市と225都市の巡回セールスマン問題を適用する。
- 比較対象は、一定の適合度計算回数での最適状態の出現回数
- 適合度計算回数は温度更新方法によって決める。

初期温度

$$\chi(T) = \frac{(T\text{で採択される状態数})}{(T\text{で生成された状態数合計})}$$

$$\chi(T) : T\text{での採択率}$$

- 生成した状態数は10万個
- 初期温度は採択率が1.0になる温度を採用する。

温度の更新方法

- 温度更新は適合度計算回数がある一定回数以上になったら行う。
- 150都市では50万回,225都市では500万回
  10^6
- 温度は以下の採択率から決定しておく。
- 採択率:1.0, 0.9, .., 0.2, 0.1
  0.09, 0.08, .., 0.02,0.01

- 温度を固定する場合は、採択率が0.01程度になるTを使用する。

比較実験(パラメータ)

- 最適化問題:巡回セールスマン問題
- 比較対象:一定の適合度計算回数による最適状態の出現回数
- 状態生成方法:2-OPT
- 初期設定:ランダム
- サンプル数:100

SAの基本設定

都市数	150 都市	225 都市
適合度計算回数	50 万回×19	500 万回×19
温度	変化	変化

SSSの基本設定

都市数	150 都市	225 都市
適合度計算回数	50 万回×19	500 万回×19
状態生成確率	0.5	0.5
温度	変化，固定	変化，固定
ε の値	0.0005	0.0005

距離の説明

- 実験距離:アルゴリズムを実行して得られた状態
- 最短距離:温度を固定した確率分布からの サンプリングで最も距離が短い状態
- 最適距離:最適状態

実験距離の精度

- 実験で得られる状態(実験距離)が最適状態(最適距離)でない場合は、下記の式から状態の精度を表示する。

$$\left(\frac{te - oe}{oe}\right) \times 100$$

te: 実験による最短距離

oe: 最適距離

最適距離の出現回数

都市数:150 都市

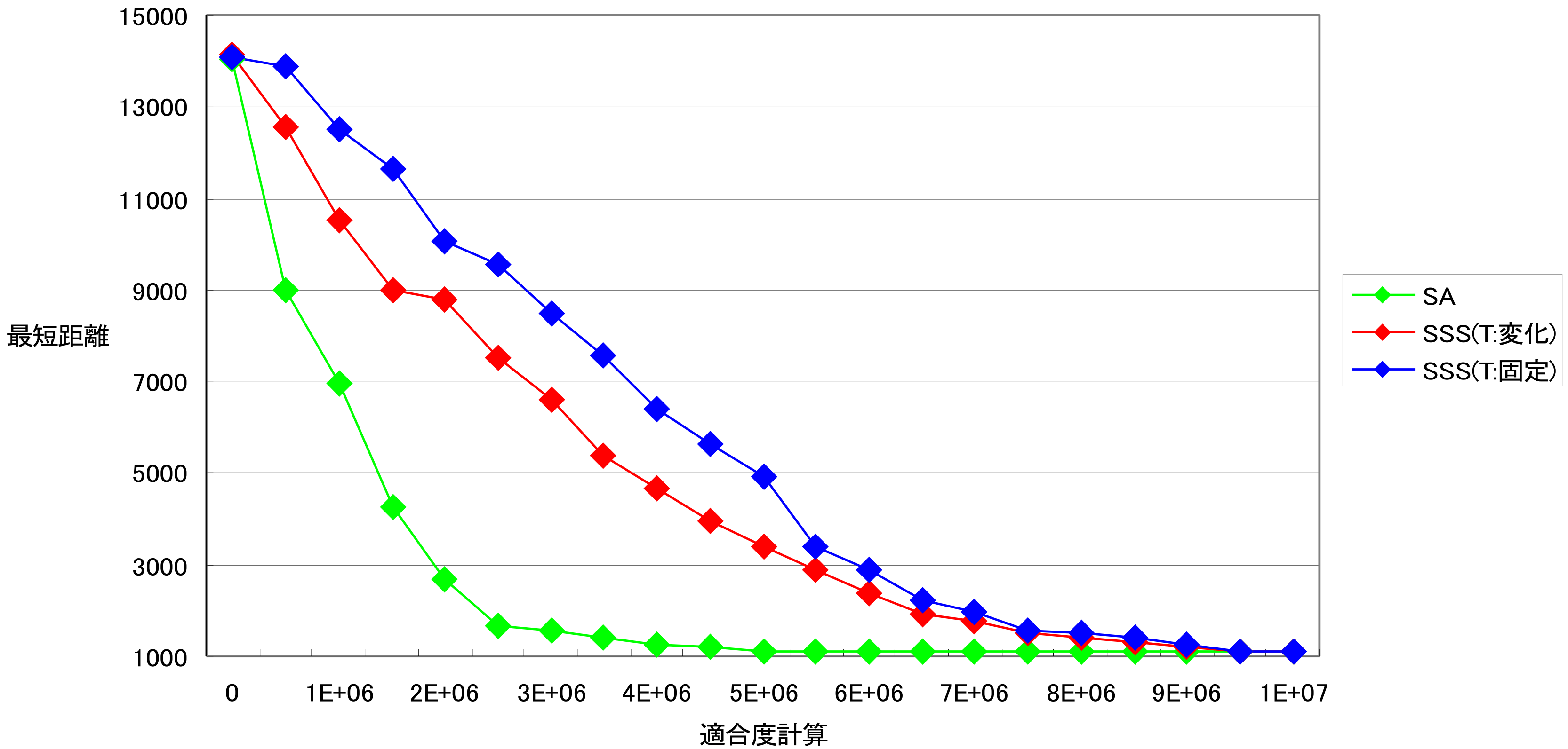
SA	SSS	
T:変化	T:変化	T:固定
0 回 (1.7%)	6 回	5 回

都市数:225 都市

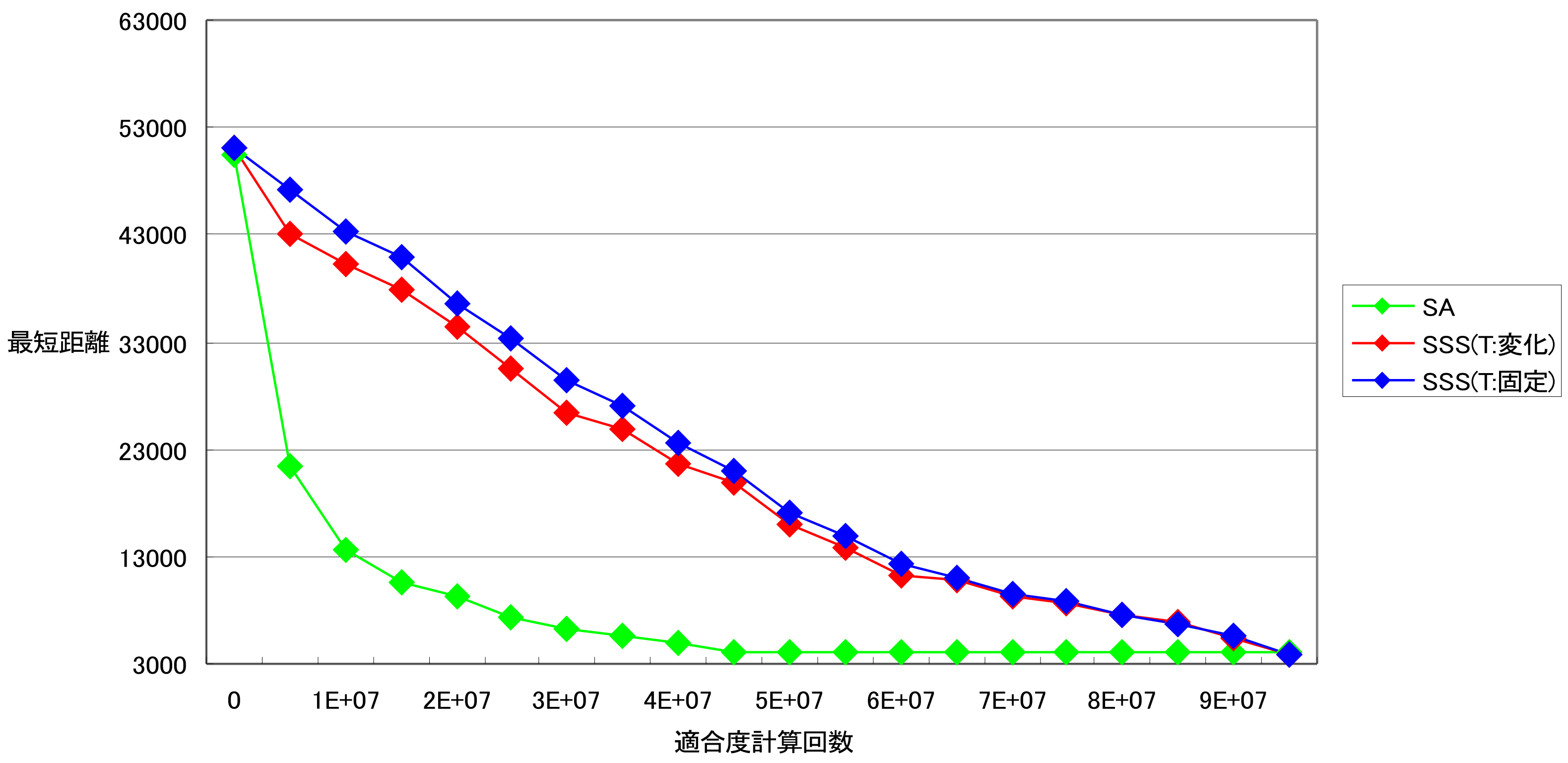
SA	SSS	
T:変化	T:変化	T:固定
0 回 (2.9%)	2 回	2 回

- SA:焼きなまし法
- SSS：確率的状態選択

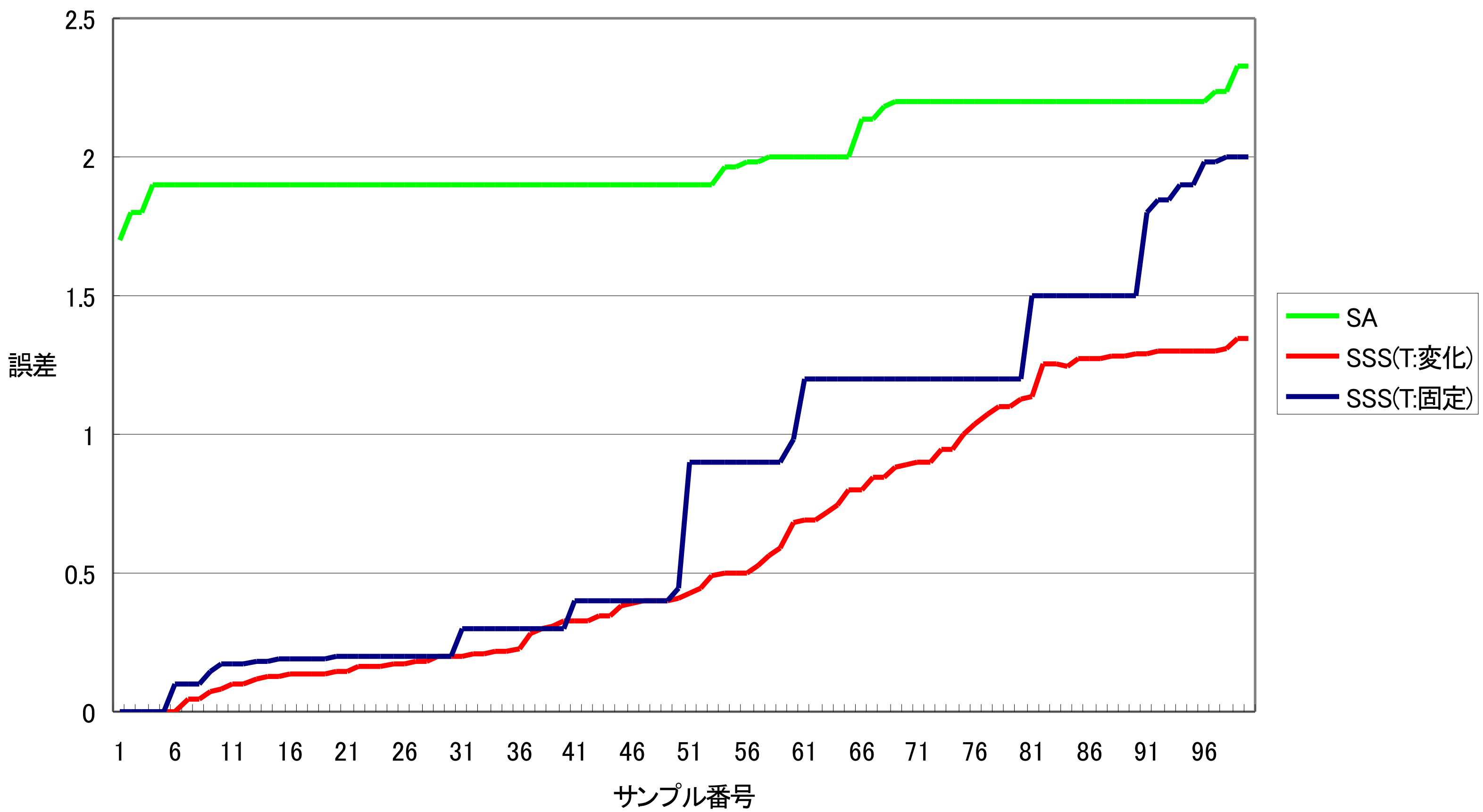
適合度計算回数ごとの最短距離(都市数:150)



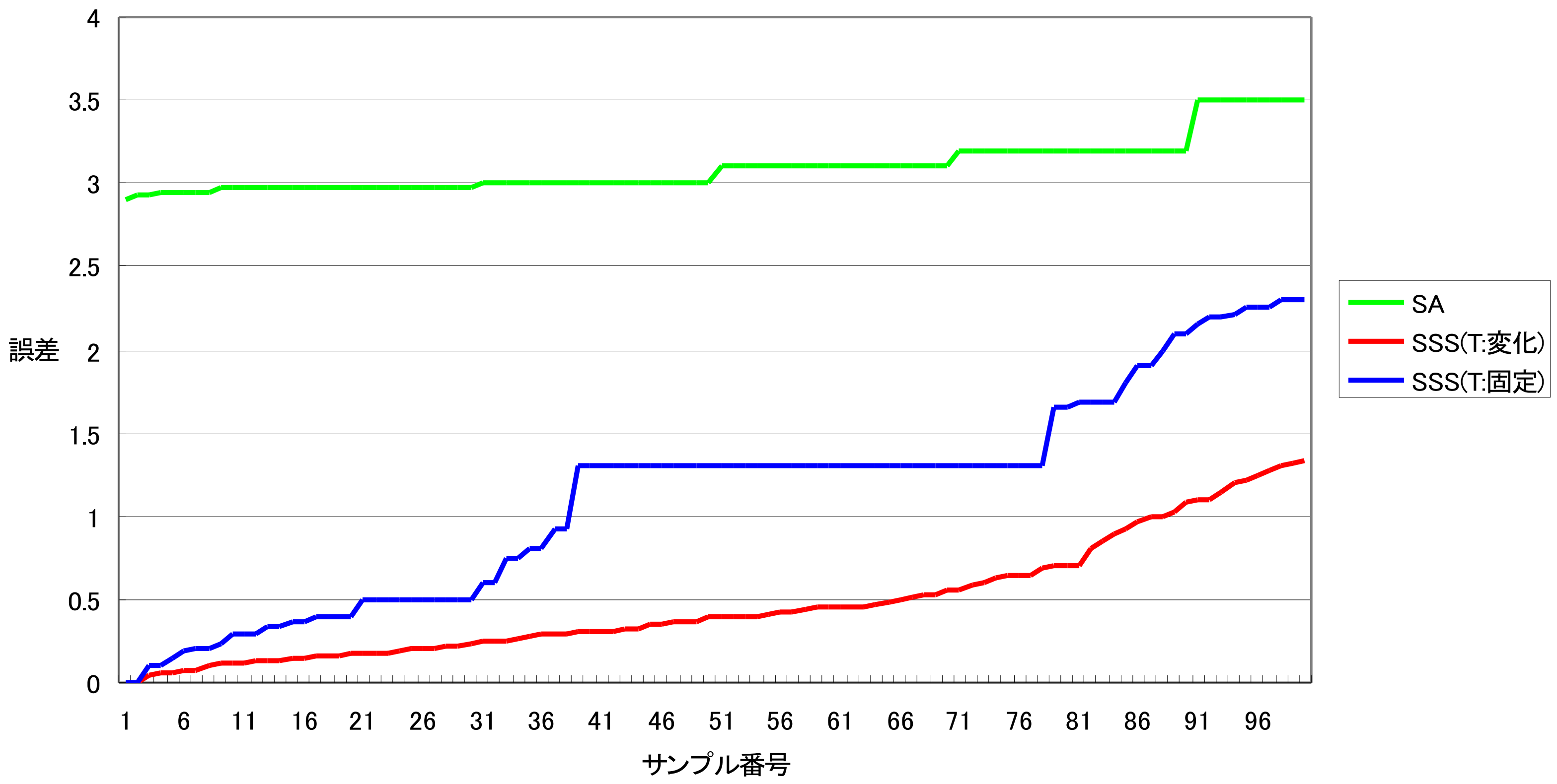
適合度計算回数ごとの最短距離(都市数:225)



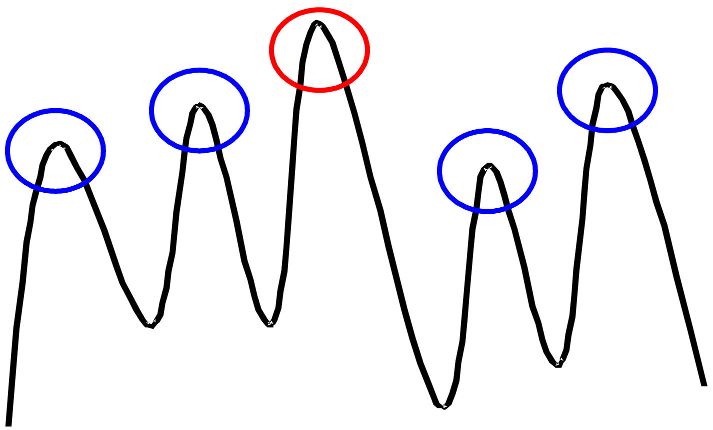
サンプルごとの実験距離と最適距離の誤差(都市数:150)



サンプルごとの実験距離と最適距離の誤差(都市数:225)



SSSのサンプルについて



- サンプル範囲を広げたことで上記のような状態を得られているかを確認する。
- SAIによって得られた状態が局所状態と考える。

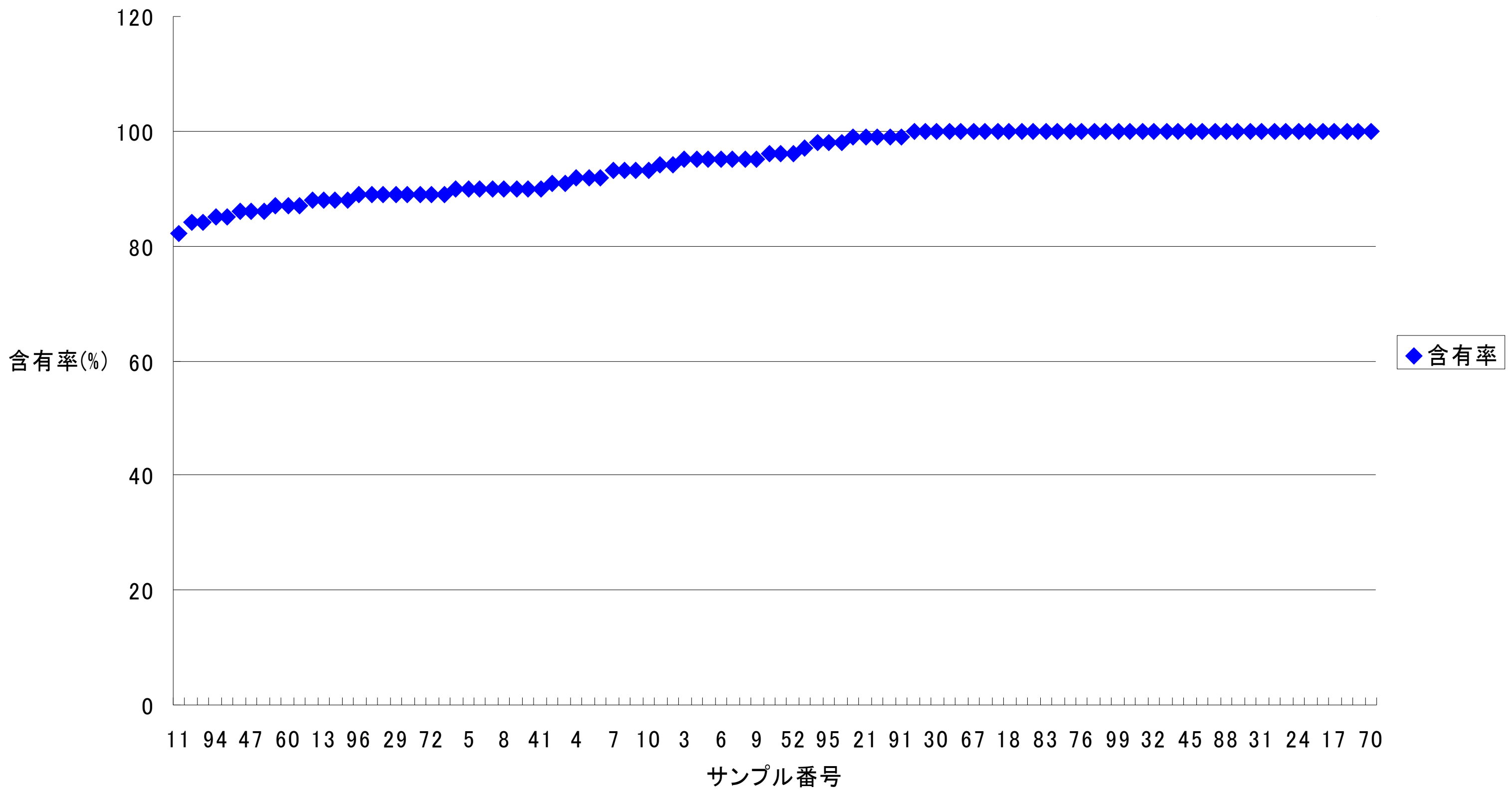
含有率について

- 含有率は以下のように定義する。

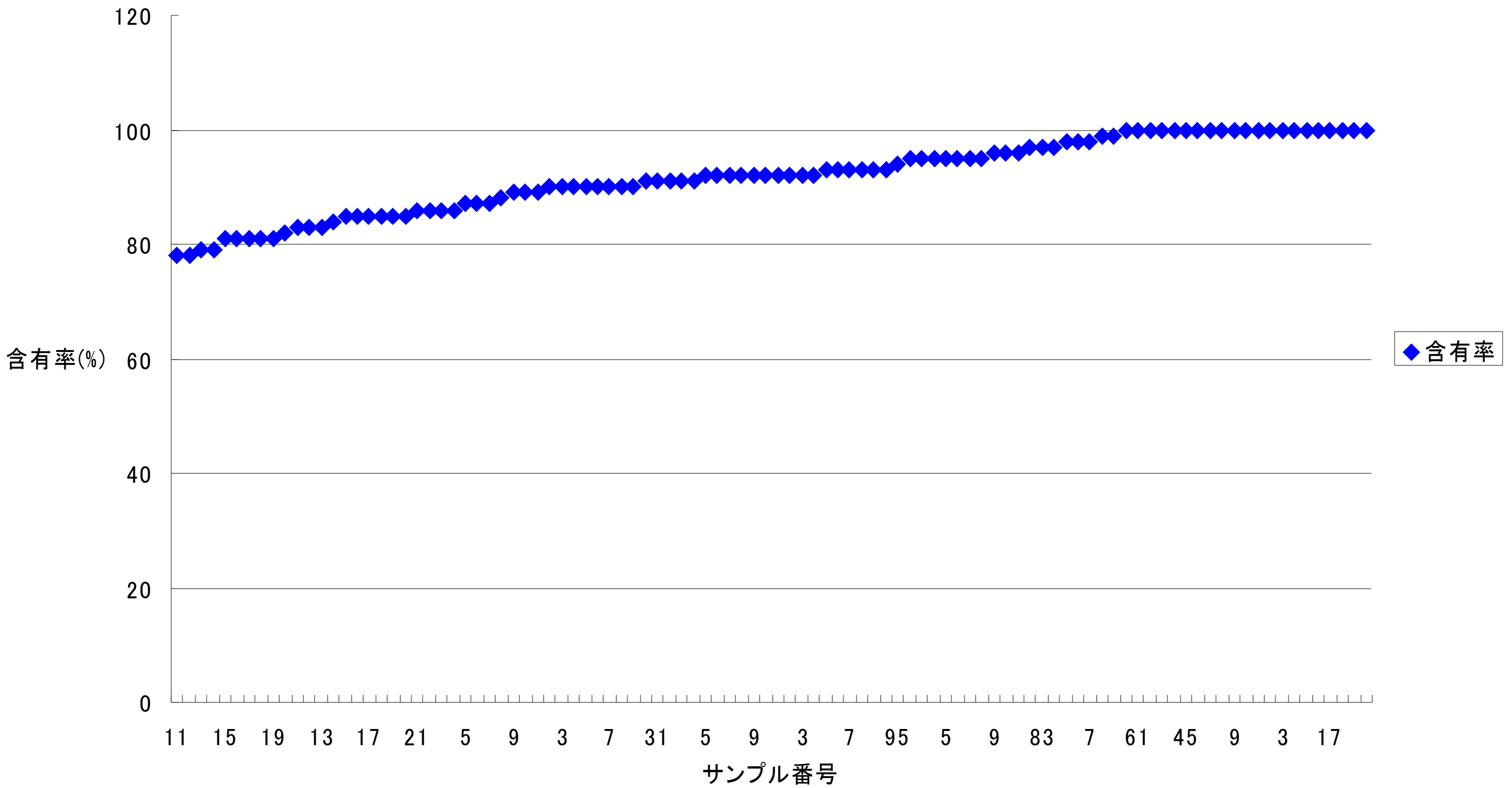
$$含有率 = \frac{(1つのSSSで得られた局所状態の数)}{(100個のSAで得られた局所状態の数)}$$

	温度:変化	温度:固定
都市数=150	93.1%	92.8%
都市数=225	92.4%	90.4%

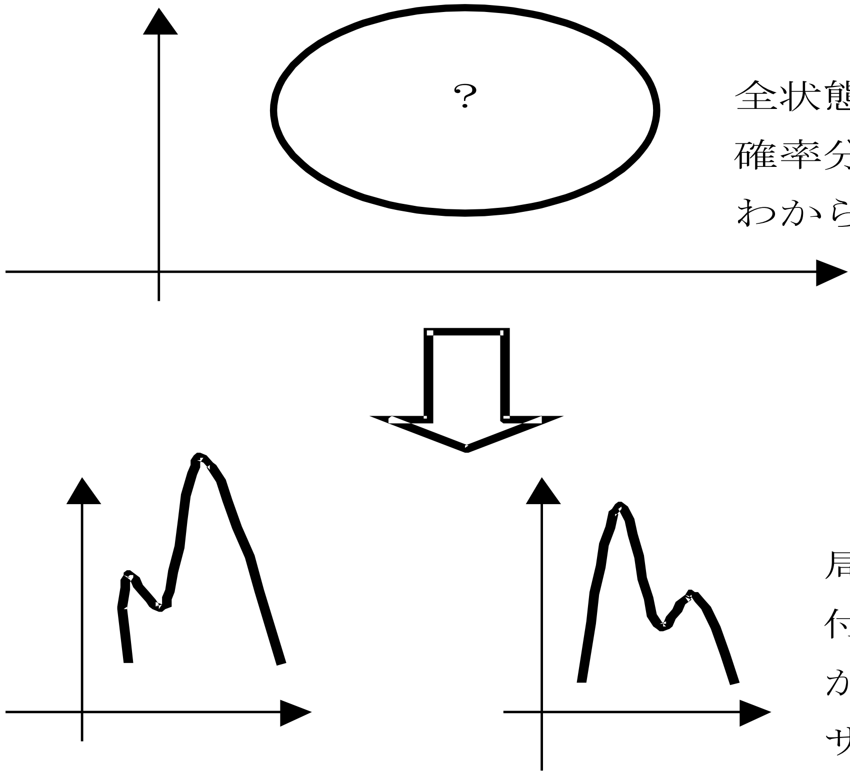
サンプルごとの含有率(都市数: 150)



サンプルごとの含有率(都市数:225)



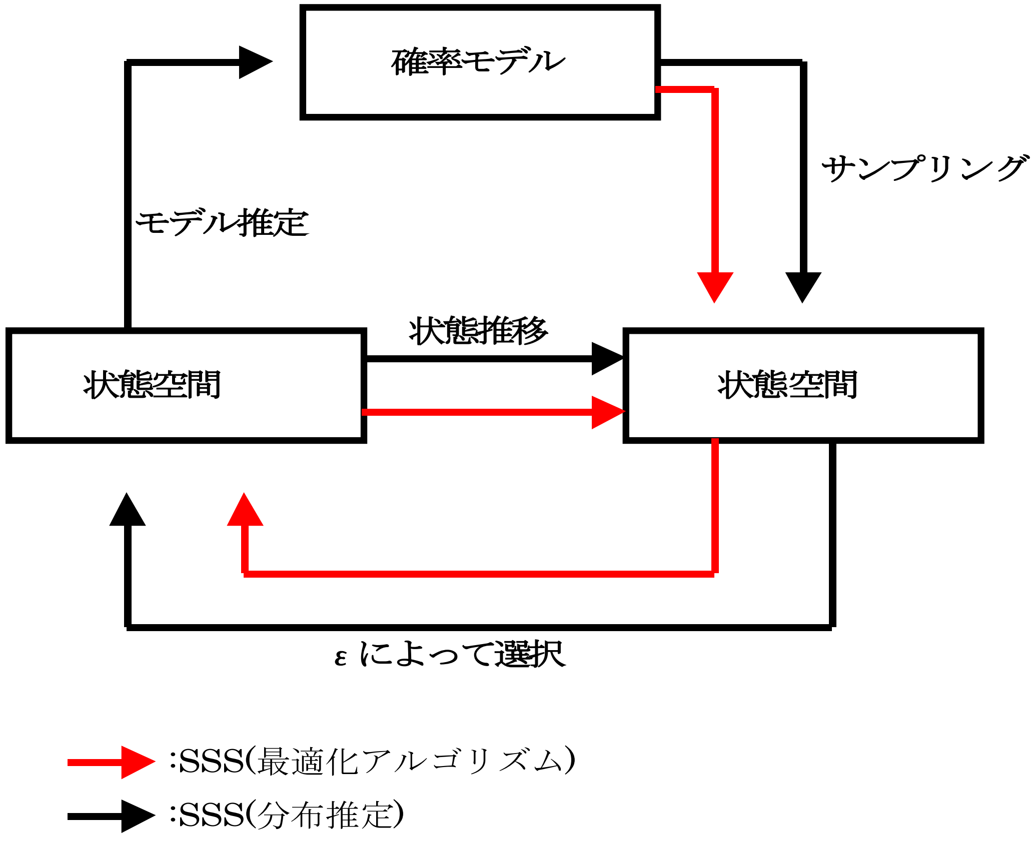
サンプリングについてのまとめ



全状態の
確率分布は
わからない。

局所状態
付近の分布
からの
サンプリン
グが出来る。

SSSのモデル推定の流れ



まとめ

- SSSは最適状態を得ることができる。
- SSSは、温度変化による最適状態までの到達過程に差がない。
- SSSで得られる状態は、サンプルごとによってばらつきがある。しかし、温度を変化させることでばらつきを小さくできる。
- SSSは対象となる確率分布に従ったサンプリングができる。

今後の展開

- SSSに確率分布の推定アルゴリズムに適用できるか。
- モデル推定を行うためのサンプリング方法に適用できるか。

参考文献

- [1] T.Munehisa and Y.Munehisa J.Phys.Soc.Japan 72 2759,2003
- ［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その応用　山梨大学工学部　修士論文, 2005
- ［3］藤原　周一:焼きなまし法の巡回セールスマン問題への適用　山梨大学工学部　卒業論文, 2001

- ［4］ 柘植 研二：焼きなまし法における大域的協力更新 山梨大学工学部 卒業論文, 2002
- ［5］伊庭 幸人：マルコフ連鎖モンテカルロ方の基礎 計算統計IIマルコフ連鎖モンテカルロ法とその周辺, 株式会社岩波書店(2006)
- ［6］山崎 紘揮：巡回セールスマン問題への確率的状態選択法の適用 電子情報通信学会［人工知能と知識処理］, 2007

- [7] Emile Aarts and Jan Korst： Simulated Annealing and Boltzmann Machines, JOHN WILEY ＆ SONS,(1990)
- [8]著者 Sadiq M.Sait and Habib Youssef,　訳者 白石 洋一：組み合わせ最適化アルゴリズムの最新手法 基礎から工学応用まで 丸善株式会社(2002)
- [9]西森 秀稔：情報統計力学ことはじめ，確率的情報処理と統計力学 -さまざまなアプローチとその チュートリアル- p12～p19(2006)

- [10]福島　孝治：サイコロふって積分する方法　-モンテカルロ法, 確率的情報処理と統計力学　-さまざまなアプローチとそのチュートリアル- p60～p66(2006)
- [11]喜多　一：遺伝的アルゴリズムによる最適化計算　確率的情報処理と統計力学　-さまざまなアプローチとそのチュートリアル- p67～p72(2006)
- [12]渡辺　治：乱択アルゴリズムへの招待，確率的情報処理と統計力学　-さまざまなアプローチとそのチュートリアル- p73～p79(2006)

- [13]来嶋 秀治　松井 知己：CFTPを用いたパーフェクトサンプリング，確率的情報処理と統計力学 -さまざまなアプローチとそのチュートリアル- p80～p89(2006)