Walsh 変換による突然変異と交叉に対するスキーマ定理の導出

古　谷　博　史[†]

遺伝的アルゴリズムにおける重要な基礎理論であるスキーマ定理の新しい導出法を提案する．スキーマの頻度が遺伝子型の頻度の Walsh 変換を用いて与えられることを示し，遺伝的操作によるスキーマの頻度の変化を表現する方法を導く．最近の研究により，突然変異と交叉の働きが Walsh 変換を用いて簡潔に表現できることが知られるようになった．それらの研究の成果をスキーマ理論に適用し，スキーマに対する突然変異と交叉の効果を厳密に表現する式を導く．

Derivation of Schema Theorem for Mutation and Crossover by Walsh Transformation

Hiroshi Furutani[†]

We propose a new method for deriving the schema theorem, which is the important theory for the foundation of genetic algorithms. We show that frequencies of schemata can be obtained by the Walsh transform of the frequencies of genotypes, and give the method for representing the changes in the frequencies of schemata by genetic operators. In recent studies, it is demonstrated that the action of mutation and crossover can be described in a simple form by the Walsh transformation. We apply these results to the schema theory, and give an exact formulation for the effect of mutation and crossover on schemata.

1. はじめに

遺伝的アルゴリズム（Genetic Algorithms，以下 GA と略す）の有効性については，様々な分野において具体的問題に適用される中で，実例を通じて確立されてきたといってよいであろう．しかし，その理論的基礎付けについては，多くの研究者の努力にもかかわらずいまだ不満足な状況のままおかれている．たとえば，GA は必ずしも万能ではなく，問題によってはきわめて貧弱な結果しか得られない場合もある．現状では，どのような問題に対して GA が有効で，どのような場合がそうでないのか，という問いかけにも十分説得力のある解答を与えることができない[1)]．

現在，GA 計算における進化の過程を記述する最も標準的な理論として，Holland によるスキーマ理論があげられる[2)]．しかし，その基礎となるスキーマ定理の有効性については，多くの研究者から疑問が投げかけられている．スキーマ定理の最大の問題は，進化のプロセスを不等式で記述した点にあり，単に解の集団が世代の進展につれて改善していくという事実を述べた定理にすぎないという指摘がある．また，GA における代表的な遺伝的操作としては，選択，突然変異，交叉があるが，スキーマ定理では，突然変異と交叉は進化の途上で出現した近似解を破壊してしまう操作として記述される．しかし，よく知られているように，GA では突然変異や交叉なしに最適解を得ることはほとんど不可能である．また逆に，突然変異や交叉によって近似解が出現するような過程も存在するはずである．このように従来のスキーマ定理では，特に突然変異と交叉の取扱いについて多くの問題がある．

これまで，より定量的な内容を持つスキーマ定理を導こうとする研究が進められている．Altenberg は，集団遺伝学における重要な定理である Price の定理を拡張し，遺伝子型に対する微視的な進化方程式からスキーマに対する進化方程式を導く一般的な方法を示した[3)]．最近，Stephens らは，一点交叉の場合についてスキーマの進化を表現する厳密な式を示し，さらに，突然変異についてもスキーマの進化方程式を導いた[4),5)]．彼らは，突然変異や交叉のスキーマを破壊する効果ばかりでなく，新しいスキーマを生成する役割も考慮している．

本論文の目的は，突然変異と交叉による進化に関する微視的理論からスキーマ定理を導出することである．

† 京都教育大学教育学部
Faculty of Education, Kyoto University of Education

そのため，遺伝子型の頻度を Walsh 変換したものはスキーマの頻度と密接な関係があることを示し，突然変異や交叉に対する Walsh 解析の結果をスキーマ解析に応用した．

我々は論文 6) において，集団の分布に突然変異と交叉が与える効果は，Walsh 変換を用いて簡潔に表現できることを示した．特に一点交叉と一様交叉については，それらの効果を表す進化方程式の解析的な形を得ることができた．ここではその結果をスキーマ定理に適用し，突然変異と交叉に関する厳密なスキーマ定理を導いた．突然変異については，2 通りのスキーマ定理を導いたが，その 1 つは Stephens らのものと一致した．交叉についてのスキーマ定理では，Stephens らの定理を含むより一般的な結果を得た．また，その意味する内容についても議論した．

2. 数学モデル

2.1 モデルの数学的記述

ここでは使用する数学記号の定義を与える．本論文では，世代ごとに集団の構成要素が入れ替わる世代的 GA を採用し，集団の進化は差分方程式の形で記述する．また，仮想的に個体数が非常に多い集団を考え，確率的揺らぎは無視する．個体数 N は時間的に一定とする．

集団の構成要素は，ℓ ビット固定長の 2 進ビット列で表す．したがって，遺伝子型の種類は $n = 2^\ell$ で与えられる．i 番目の遺伝子型は，2 進ビット列 B_i で表現する．本論文では，B_i を非負整数 i の 2 進数表現を用いて表す．

$$B_i = < i_\ell, i_{\ell-1}, \cdots, i_2, i_1 > .$$

ここで i_k $(k = 1, \ldots, \ell)$ は，i の第 k ビットの値を表す．また

$$|i| = \sum_{k=1}^{\ell} i_k$$

でビット列 i に含まれるビット 1 の個数を表す．

世代 t における集団の状態は，各遺伝子型の相対頻度を用いて記述する．遺伝子型 B_i の頻度を $x_i(t)$ と表すものとする．これらをまとめてベクトル形で表現することもある．

$$\boldsymbol{x}(t) = (x_0(t), x_1(t), \ldots, x_{n-1}(t))^T,$$

ここで T はベクトルや行列の転置を表す．頻度 $x_i(t)$ は次の規格化条件に従う．

$$\sum_{i=0}^{n-1} x_i(t) = 1. \tag{1}$$

また各 $x_i(t)$ は非負であり，すべての i について

$$1 \geq x_i(t) \geq 0$$

を満足する．

2.2 Walsh 変換

ここでは，Walsh 関数および Walsh 変換について述べる．Walsh 変換については，たとえば文献 7)，8) を参照されたい．ℓ ビットのビット列 j に対する第 i 番目の Walsh 関数を次の式で定義する．

$$W_{ij} \equiv W_i(j) = \prod_{k=1}^{\ell} (-1)^{i_k \cdot j_k}. \tag{2}$$

またウォルシュ関数を n 次元の列ベクトルで表すこともある．

$$\mathbf{w}_i = (W_i(0), W_i(1), \ldots, W_i(n-1))^T.$$

$\mathbf{w}_i$ どうしは直交性を持つ

$$(\mathbf{w}_i \cdot \mathbf{w}_j) = n\delta_{i,j}, \quad (0 \leq i, j \leq n-1). \tag{3}$$

相対頻度 $x_i(t)$ の Walsh 変換 $\tilde{x}_i(t)$ を用いると，突然変異や交叉による進化方程式の形が簡単になることが多い．

$$\tilde{x}_i(t) \equiv \sum_{j=0}^{n-1} W_{ij} x_j(t). \tag{4}$$

また，その逆変換は

$$x_i(t) = \frac{1}{n} \sum_{j=0}^{n-1} W_{ij} \tilde{x}_j(t), \tag{5}$$

で与えられる．以下，$\tilde{x}_i(t)$ を Walsh 係数と呼ぶことにする．

Walsh 関数の定義からすべての j について $W_{0j} = 1$ となることを用い，規格化条件式 (1) から

$$\tilde{x}_0(t) = \sum_{i=0}^{n-1} x_i(t) = 1 \tag{6}$$

を得る．相対頻度のベクトル表現 $\boldsymbol{x}(t)$ は，Walsh 係数を用いて次のように表される．

$$\boldsymbol{x}(t) = \frac{1}{n} \sum_{j=0}^{n-1} \tilde{x}_j(t) \mathbf{w}_j. \tag{7}$$

以下では Walsh 係数のうち $|i| = k$ となる $\tilde{x}_i$ を k 次の Walsh 係数と呼ぶことにする．Walsh 係数の次数は，このあとの解析において重要な意味を持つ．そこで，$\tilde{x}_i$ の次数を明示的に示したい場合には

$$\tilde{x}_i \ \equiv \ \tilde{x}^{(k)}[b_1, b_2 \ldots b_k],$$

と表すことにする．ここで $k = |i|$ であり，$b_1 < b_2 < \ldots < b_k$ は 2 進ビット列 i におけるビット 1 の位置

を表す．このとき

$$\tilde{x}^{(k)}[b_1, b_2 \dots b_k] = \sum_{j=0}^{n-1} \prod_{m=1}^{k} (-1)^{j(b_m)} x_j \quad (8)$$

と表される．ここで $j(b_m)$ はビット列 j の b_m におけるビットの値を表す．

3. 突然変異と交叉の Walsh 表現

突然変異と交叉は，Walsh 変換により簡潔に見通しよく記述できる．数学的取扱いの詳細についてはたとえば文献 6)，9) を参照されたい．

3.1 突然変異の Walsh 表現

まず突然変異の Walsh 表現について述べる．突然変異による $x_i(t)$ の世代ごとの変化は，突然変異行列 M を用いて

$$x_i(t+1) = \sum_{j=0}^{n-1} M_{ij} x_j(t), \quad (9)$$

と表すことができる．ここで M_{ij} は遺伝子型 B_j から B_i への 1 世代あたりの変異の確率であり，ビットあたりの突然変異率 p，ビット列 i と j の間の Hamming 距離 $d(i,j)$ を用いて次のように表される．

$$M_{ij} = (1-p)^{\ell - d(i,j)} p^{d(i,j)}. \quad (10)$$

差分連立方程式 (9) を解くためには，突然変異行列 M の固有値と固有ベクトルを知る必要がある．結果のみ示すと，行列 M の固有ベクトルは Walsh 関数 $\mathbf{w}_i$ であり，n 個の独立な固有ベクトルが存在する．その固有値方程式の解は

$$M\mathbf{w}_i = (1-2p)^{|i|} \mathbf{w}_i, \ (0 \le i \le n-1) \quad (11)$$

となる．

方程式 (9) のベクトル表現

$$\boldsymbol{x}(t+1) = M\boldsymbol{x}(t)$$

の両辺に $\boldsymbol{x}$ の Walsh 係数による展開式 (7) を代入し，固有値方程式 (11) と Walsh 関数の直交性 (3) から，M による Walsh 係数に対する進化方程式を得る．突然変異の効果を形式的に $\widehat{M}$ と表すと

$$\widehat{M}\, \tilde{x}_i(t) = (1-2p)^{|i|}\, \tilde{x}_i(t), \quad (12)$$

となる．

3.2 交叉の Walsh 表現

次に，交叉による集団分布の変化を考える．形式的に

$$\boldsymbol{x}(t+1) = C[\boldsymbol{x}(t), \boldsymbol{x}(t)], \quad (13)$$

と表す．この式の具体的な定義は，$n \times n^2$ 交叉行列 C を用いて

$$x_k(t+1) = \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{j=0}^{n-1} C(k, \widehat{ij})\, x_i(t)\, x_j(t) \quad (14)$$

で与えられる[6)]．ここで，整数 $\widehat{ij}$ は i と j から構成される 2ℓ ビットのビット列である．論文 6) で示したように，

$$\widehat{ij} = < i_\ell, j_\ell, i_{\ell-1}, j_{\ell-1}, \dots, i_1, j_1 >,$$

とすれば，交叉行列 C は 2 つの小行列

$$F = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad G = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

を用いて表現することができる．

いま親世代から B_i と B_j を選択し，交叉の結果，子 B_k，$B_{k'}$ が生まれるものとする．一般に交叉には様々なパターンがあるが，ここでは交叉マスクと呼ばれる長さ ℓ のビット列 r を用いて交叉パターンを表すことにする．子 B_k は r のビット 0 の位置のビットを第 1 親 B_i から，ビット 1 の位置のビットを第 2 親 B_j から遺伝するものとする．逆に第 2 子 $B_{k'}$ はその残りのビットを 2 人の親から遺伝するものとする．たとえば $\ell = 5$ の場合，$r = < 1,1,0,0,1 >$ とすると，$k = < j_5, j_4, i_3, i_2, j_1 >$，$k' = < i_5, i_4, j_3, j_2, i_1 >$ となる．

あとの議論に便利なように，交叉マスクの別な表現を与える．ビット位置の集合を

$$S = \{1, 2, \dots, \ell\}$$

とする．交叉マスク r に含まれるビット 0 のすべての位置を $S(r)$，ビット 1 のすべての位置を $S(\bar{r})$ とすると，集合の関係

$$S = S(r) \cup S(\bar{r}), \quad \emptyset = S(r) \cap S(\bar{r}),$$

を満たす.先の例では, $S(r) = \{2,3\}$, $S(\bar{r}) = \{1,4,5\}$ となる．

交叉による進化方程式 (13) は，Walsh 変換を用いて解くことができる[6)]．まず式の右辺にある 2 つの $\boldsymbol{x}(t)$ をそれぞれ $\mathbf{w}_i$ と $\mathbf{w}_j$ で置き換える．その結果は次式で与えられる

$$C[\mathbf{w}_i, \mathbf{w}_j] = n\, c_{ij}\, \mathbf{w}_{i \oplus j}. \quad (15)$$

ここで $\oplus$ はビットごとの排他的論理和を表す．交叉係数 c_{ij} は交叉に関わるすべての情報を含み，交叉マスク r に依存する．そこで，その r 依存性を明示し $c_{ij}(r)$ と表すことにする．これも結果だけ示すと

$$c_{ij}(r) = \frac{1}{2}\prod_{m\in S(r)}\delta(j_m)\prod_{m\in S(\bar{r})}\delta(i_m) + \frac{1}{2}\prod_{m\in S(r)}\delta(i_m)\prod_{m\in S(\bar{r})}\delta(j_m) \qquad (16)$$

となる．

交叉による進化方程式 (13) に式 (7) を代入し式 (15) を用いると，Walsh 係数 $\tilde{x}_k(t)$ についての進化方程式が得られる．

$$\tilde{x}_k(t+1) = \sum_{k=i\oplus j}\sum c_{ij}(r)\,\tilde{x}_i(t)\,\tilde{x}_j(t).$$

右辺の i と j に関する二重和は，式 (16) において i と j の同じビット位置の値がともに 1 になれば $c_{ij}=0$ となることに注意し

$$\tilde{x}_k(t+1) = \widehat{C}(r)\,\tilde{x}_k(t) = \sum_{i=0}^{n-1} c_{i,i\oplus k}(r)\,\tilde{x}_i(t)\,\tilde{x}_{i\oplus k}(t), \qquad (17)$$

と i についての一重和に変換できる．ここで交叉マスク r による交叉の効果を形式的に $\widehat{C}(r)$ とした．

1 次の Walsh 係数について簡単な関係が存在する．進化方程式 (17) から，第 m ビットだけが 1 となる Walsh 係数 $\tilde{x}_i = \tilde{x}^{(1)}[m]$ は交叉によって変化しないことが容易に証明できる．

$$\widehat{C}(r)\,\tilde{x}^{(1)}[m](t) = \tilde{x}^{(1)}[m](t). \qquad (18)$$

この式は，集団における第 m ビットのビット 1 とビット 0 の割合が交叉によって変化しないことを意味している．

交叉の効果は 2 次以上の Walsh 係数に現れる．一般に L 次の Walsh 係数について，ビット 1 の位置の集合を $U=\{b_1,b_2,\ldots,b_L\}$ とする．それを交叉マスク r で 2 分して 2 つの部分集合

$$U_0 \subseteq S(r), \quad U_1 \subseteq S(\bar{r})$$

を定義する．このとき U_0 の要素の数を m，U_1 の要素の数を $L-m$ とすると，交叉による進化方程式 (17) は

$$\widehat{C}(r)\,\tilde{x}^{(L)}[U](t) = \tilde{x}^{(m)}[U_0](t)\,\tilde{x}^{(L-m)}[U_1](t) \qquad (19)$$

となる．部分集合 U_0 と U_1 のいずれかが空集合のときは 0 次の Walsh 係数 $\tilde{x}_0 = 1$ を対応させるものとする．

3.3 一点交叉と一様交叉

GA においてよく用いられる一点交叉，一様交叉などの交叉演算は，単独の交叉マスク r ではなく，それらの重ね合わせ

$$R = \sum_r R(r)\,r \qquad (20)$$

で表される．ここで各交叉マスクの重み係数 $R(r)$ は，$0 \le R(r) \le 1$ であり，条件

$$\sum_r R(r) = 1 \qquad (21)$$

を満たす．進化方程式は

$$\widehat{C}(R)\,\tilde{x}_k(t) = \sum_{i=0}^{n-1} c_{i,i\oplus k}(R)\,\tilde{x}_i(t)\,\tilde{x}_{i\oplus k}(t) \qquad (22)$$

となり，式 (17) と同じ形をしているが，右辺は一般に多数の項を含む．

一点交叉の場合，r の 2 進表現 $r=<r_\ell,\ldots,r_1>$ を用いて

$$R(r) = \begin{cases} \frac{1}{\ell-1} \\ (\sum_{k=1}^{\ell-1}|r_{k+1}-r_k| = 1 \text{ with } r_1 = 1) \\ 0 \\ (\text{otherwise}) \end{cases}$$

で与えられ，一様交叉の場合は

$$R(r) = \frac{1}{2^\ell}$$

となる．

式 (16) と $R(r)$ の具体的な形を用いて交叉係数 $c_{ij}(R)$ を求めることができる．ここでは，一点交叉と一様交叉について結果のみ示す．導出の過程は，論文 6) を参照されたい．

一点交叉の場合は，

$$c_{ij}(R) = (1-\chi)\frac{(\delta(i)+\delta(j))}{2} + \chi\, c_{ij}(\chi=1). \qquad (23)$$

ここで χ は交叉率である．$c_{ij}(\chi=1)$ は，交叉率が $\chi=1$ における値で

- $i=0$ または $j=0$ の場合

$$c_{ij}(\chi=1) = \frac{\mathrm{lo}(i)-\mathrm{hi}(i)+\mathrm{lo}(j)-\mathrm{hi}(j)}{2(\ell-1)}. \qquad (24)$$

ここで $\mathrm{hi}(i)$，$\mathrm{lo}(i)$ はそれぞれ

$$\mathrm{hi}(i) = \begin{cases} 1 & (i=0) \\ i_{\max} & (\text{otherwise}), \end{cases}$$

$$\mathrm{lo}(i) = \begin{cases} \ell & (i=0) \\ i_{\min} & (\text{otherwise}), \end{cases}$$

と定義される．$i_{\max}$ はビット列 i の最も左（上位）にあるビット 1 の位置を示し，$i_{\min}$ は最も右（下位）にあるビット 1 の位置を示す．したがって，$1 \le i_{\min} \le i_{\max} \le \ell$ である．

- $i \neq 0$ かつ $j \neq 0$ の場合
  $i_{\min}$，$i_{\max}$，$j_{\min}$，$j_{\max}$ の相対的な位置関係に依存し，

$$c_{ij}(\chi = 1) = \begin{cases} (i_{\min} - j_{\max})/2(\ell - 1) \\ \qquad\qquad (i_{\min} > j_{\max}) \\ (j_{\min} - i_{\max})/2(\ell - 1) \\ \qquad\qquad (j_{\min} > i_{\max}) \\ 0 \qquad\quad (\text{otherwise}) \end{cases} \tag{25}$$

となる．

Vose は，より簡潔な表現を与えた[9]．

$$c_{ij}(R) = (1 - \chi)\frac{(\delta(i) + \delta(j))}{2} + \chi\frac{\theta[\mathrm{lo}(j) - \mathrm{hi}(i)] + \theta[\mathrm{lo}(i) - \mathrm{hi}(j)]}{2(\ell - 1)}. \tag{26}$$

ここで関数 $\theta[x]$ は次式で定義される．

$$\theta[x] = \begin{cases} x & (x \geq 0) \\ 0 & (x < 0). \end{cases}$$

一様交叉の場合は，

$$c_{ij}(R) = (1 - \chi)\frac{(\delta(i) + \delta(j))}{2} + \chi\prod_{m=1}^{\ell}\frac{1}{2}\{\delta(i_m) + \delta(j_m)\}, \tag{27}$$

となる．

4. スキーマとスキーマ定理

スキーマ定理は，GA の基礎理論として Holland により示された[2]．この定理は GA の理論的解析の分野において一貫して中心的地位を占めており，これまでも多くの論文が発表されている．また，定理そのものについては研究者により種々の表現がされ，様々な解釈がなされている．ここでは Holland によるスキーマ定理を紹介し[2]，次に，Stephens と Waelbroeck によって導かれたスキーマ定理について述べる．

4.1 Holland のスキーマ定理

スキーマは，すべての遺伝子型の集合について，あるビットパターンを持ったものだけを集めた部分集合のことである．スキーマは 3 種類の記号 $\{0, 1, *\}$ で表現される．記号 $*$ は 0 でも 1 でもよいことを表す．ビット 0 と 1 を定義されたビットと呼ぶ．たとえば $\ell = 4$ の場合，スキーマ

$$\mathcal{H} = *10*$$

は遺伝子型の部分集合 $\{0100, 0101, 1100, 1101\}$ を表す．スキーマ $\mathcal{H}$ を特徴付ける量としては，オーダー $\mathcal{O}(\mathcal{H})$ と定義長 $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ とがある．オーダー $\mathcal{O}(\mathcal{H})$ はスキーマ $\mathcal{H}$ に含まれる定義されたビット（ビット 0 と 1）の数の和を表し，このスキーマの例では $\mathcal{O}(*10*) = 2$ となる．定義長 $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ は，$\mathcal{H}$ の両端にあるビット 0 または 1 の間の距離（ビット数）であり，たとえば $\mathcal{L}(*11**0*) = 4$ となる．

理由はあとで明らかになるが，スキーマ $\mathcal{H}$ のもう 1 つの表現として

$$\{0, 1\} \to 1, \quad \{*\} \to 0 \tag{28}$$

と変換したビット列 $i(\mathcal{H})$ を用いることもある．たとえば

$$\mathcal{H} = *10* \Rightarrow i(\mathcal{H}) = <0, 1, 1, 0>$$

となる．この表示ではビット 0 と 1 の区別がないが，交叉の場合は演算の前後でビットの値が変化することはないので，そのことさえ注意していればこの表現で十分である．

前述したようにスキーマ定理には様々な表現があるが，代表的なものとして一点交叉を用いた次の式がある．

$$h(\mathcal{H}, t+1) \geq h(\mathcal{H}, t)\frac{f(\mathcal{H})}{\bar{f}(t)}\{1 - \chi\frac{\mathcal{L}(\mathcal{H})}{\ell - 1} - p\,\mathcal{O}(\mathcal{H})\} \tag{29}$$

ここで $h(\mathcal{H}, t)$ は世代 t におけるスキーマ $\mathcal{H}$ の相対頻度を表す．また $\bar{f}(t)$ は集団の平均適応度であり，$f(\mathcal{H})$ はスキーマ $\mathcal{H}$ に含まれる遺伝子型の平均適応度である．

これから分かるように $h(\mathcal{H}, t)$ は遺伝子型の分布 $x_i(t)$ におけるある周辺分布を表している．交叉によりスキーマが破壊される確率が $\chi\mathcal{L}(\mathcal{H})/(\ell - 1)$ であり，突然変異による破壊の確率が $p\mathcal{O}(\mathcal{H})$ となる．したがって，Holland のスキーマ定理では交叉と突然変異によるスキーマの破壊のみ取り入れられており，スキーマの生成過程がまったく考慮されていない．

4.2 Stephens-Waelbroeck のスキーマ定理

最近，Stephens と Waelbroeck は，スキーマ頻度 $h(\mathcal{H}, t)$ の突然変異と一点交叉による時間的変化を記述する厳密な進化方程式を導いた[4),5]．ここでは，彼らの結果のみを示すことにする．導出の過程などは，原論文を参照されたい．

突然変異の効果を記述する進化方程式は，スキーマ $\mathcal{H}$ のオーダーを $k = \mathcal{O}(\mathcal{H})$ として

$$\widehat{M}\,h(\mathcal{H}) = \sum_{\mathcal{H}'}(1 - p)^{k - d(\mathcal{H}, \mathcal{H}')}p^{d(\mathcal{H}, \mathcal{H}')}h(\mathcal{H}') \tag{30}$$

で与えられる．右辺の和は，同じビット位置で定義されたすべての k 次のスキーマについてとり，スキーマ $\mathcal{H}$ 自身も含まれる．$d(\mathcal{H}, \mathcal{H}')$ は，定義されたビッ

トについての 2 つのスキーマ間の Hamming 距離である．この式は，突然変異による遺伝子型の進化方程式 (9) および (10) と同じ形をしている．このことは，遺伝子型 B_i をオーダー ℓ のスキーマと考えれば理解できる．

彼らは交叉について，一点交叉によるスキーマの進化を記述する方程式を導いた．進化方程式の具体的な形は

$$\widehat{C}(R)h(\mathcal{H}) = (1-\chi)h(\mathcal{H}) + \frac{\chi}{\ell-1}\sum_{m=1}^{\ell-1} h(\mathcal{H}[L_m])h(\mathcal{H}[R_m]), \qquad (31)$$

となる．ここで $\mathcal{H}[L_m]$ は，スキーマ $\mathcal{H}$ の定義されたビットのうち交叉点 m より左側 $[m+1,\ell]$ のみを残し，その右側 $[1,m]$ にある定義されたビットをすべて $*$ で置き換えて得られるスキーマである．スキーマ $\mathcal{H}[R_m]$ はその逆で，$\mathcal{H}$ の定義されたビットのうち交叉点より右側のみを残して得られるスキーマである．

スキーマに対する効果をもう少し分かりやすくするため，交叉によるスキーマの変化

$$\Delta h(\mathcal{H}) \;=\; \widehat{C}(R)\,h(\mathcal{H}) - h(\mathcal{H})$$

を考える．式 (31) を変形し

$$\Delta h(\mathcal{H}) = -\frac{\chi}{\ell-1} \times \sum_{m=1}^{\ell-1}\{h(\mathcal{H}) - h(\mathcal{H}[L_m])h(\mathcal{H}[R_m])\} \qquad (32)$$

を得る．したがって，交叉によりあるスキーマが増加する（$\Delta h(\mathcal{H}) > 0$）ためには，この式の右辺における各交叉点からの寄与の総和が負になっていなければならない．逆に総和が正の場合は，交叉のためにそのスキーマの頻度が減少してしまうことが分かった．このことの意味はまたあとで議論する．

5. Walsh 変換によるスキーマ定理の導出

最初に，スキーマと Walsh 係数の関係を示す．この関係を用いて突然変異と交叉によるスキーマの進化を記述する定理を導く．

5.1 スキーマと Walsh 係数の関係

集団におけるスキーマの相対頻度 $h(\mathcal{H})$ と Walsh 係数 $\tilde{x}_i$ の間には密接な関係がある．その関係はスキーマのオーダー $\mathcal{O}(\mathcal{H})$ と Walsh 係数の次数 $|i|$ に依存するため，スキーマ $h(\mathcal{H})$ のオーダー，定義されたビットの位置および各ビットの値を明示的に

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(k)}[i(b_1), i(b_2), \ldots, i(b_k)],$$

と表すことにする．ここで，$k = \mathcal{O}(\mathcal{H})$ はスキーマのオーダーであり，

$$1 \le b_1 < b_2 < \ldots < b_k \le \ell$$

は定義されたビットの位置を表す．また

$$i(b_1), \ldots, i(b_k)$$

はビット列 i の各ビット位置におけるビット値を表す．スキーマ $\mathcal{H}$ の相対頻度 $h(\mathcal{H})$ も同様にして

$$h(\mathcal{H}) = h^{(k)}[i(b_1), i(b_2), \ldots, i(b_k)],$$

と表すことにする．場合により簡略化して

$$h^{(k)}[i(b_1), \ldots, i(b_k)] = h^{(k)}[1, \ldots, k] \qquad (33)$$

と表すこともある．

まず，0 次のスキーマ $\mathcal{H}^{(0)}$

$$\underbrace{***\ldots***}_{\ell}$$

について考えてみる．このスキーマは，長さ ℓ のすべてのビット列を含むので

$$h^{(0)} \;=\; 1 \qquad (34)$$

となる．0 次の Walsh 関数に関する式 (6) で $\tilde{x}_0 = 1$ を示したので

$$h^{(0)} \;=\; \tilde{x}_0 \qquad (35)$$

となることが分かる．

次に 1 次のスキーマ $\mathcal{H}^{(1)}[i(b_1)]$ について，その相対頻度 $h(\mathcal{H})$ の表現を求める．ビット $i(b_1)$ と $j(b_1)$ について

$$\delta(i(b_1) - j(b_1)) = \frac{1}{2}\{1 + (-1)^{i(b_1)}(-1)^{j(b_1)}\}$$

に注意して，

$$\begin{aligned} h^{(1)}[i(b_1)] &= \sum_{j=0}^{n-1}\delta(i(b_1) - j(b_1))x_j \\ &= \sum_{j=0}^{n-1}\frac{1}{2}\{x_j + (-1)^{i(b_1)}(-1)^{j(b_1)}x_j\} \\ &= \frac{1}{2}\{1 + (-1)^{i(b_1)}\tilde{x}^{(1)}[b_1]\} \end{aligned}$$

を得る．ここで規格化条件の式 (6) と Walsh 係数の表現 (8) を用いた．このように，一般にスキーマの相対頻度 $h(\mathcal{H})$ は Walsh 係数を用いて表すことができる．

L 次のスキーマの場合，

$$h^{(L)}[i(b_1), i(b_2), \ldots, i(b_L)] = \sum_{j=0}^{n-1}\prod_{m=1}^{L}\delta(i(b_m) - j(b_m))x_j$$

の右辺の δ 関数を展開し，

$$\begin{aligned}&h^{(L)}[1,2,\ldots,L]\\&=\frac{1}{2^L}\Big\{\ 1\\&+(-1)^{i(b_1)}\tilde{x}^{(1)}[b_1]+\ldots+(-1)^{i(b_L)}\tilde{x}^{(1)}[b_L]\\&+(-1)^{i(b_1)+i(b_2)}\tilde{x}^{(2)}[b_1,b_2]+\ldots\\&+(-1)^{i(b_{L-1})+i(b_L)}\tilde{x}^{(2)}[b_{L-1},b_L]\\&+\ldots\\&+(-1)^{i(b_1)+\cdots+i(b_L)}\tilde{x}^{(L)}[b_1,\ldots,b_L]\ \Big\}\end{aligned}\tag{36}$$

を得る．ここで右辺の各項は，$1/2^L$ を空集合 $\emptyset$ に対応させせると，集合 $\{b_1,\ldots,b_L\}$ のすべての部分集合に対応している．たとえば，要素数 k の部分集合 $\{b_1,\ldots,b_k\}$ に対応する項は

$$(-1)^{i(b_1)+\cdots+i(b_k)}\,\tilde{x}^{(k)}[b_1,\ldots,b_k]\,/2^L$$

で与えられる．

両者の関係をみると，スキーマ表現における定義されたビット $\{0,1\}$ は Walsh 係数のビット $\{1\}$ に対応し，スキーマの各ビット i_k における $\{0\}$ と $\{1\}$ の区別は Walsh 係数では位相因子 $(-1)^{i_k}$ になっている．

$$\begin{cases}\{0,1\} & \to 1\\ \{*\} & \to 0\end{cases},\quad \begin{cases}0 & \to 1\\ 1 & \to -1\end{cases}\tag{37}$$

逆に Walsh 係数のスキーマの頻度 $h^{(k)}$ による展開は次式で与えられ，

$$\begin{aligned}&(-1)^{i(b_1)+\cdots+i(b_L)}\,\tilde{x}^{(L)}[b_1,\ldots,b_L]\\&=2^L h^{(L)}[i(b_1),\ldots,i(b_L)]\\&-2^{L-1}(h^{(L-1)}[i(b_1),\ldots,i(b_{L-1})]+\ldots\\&\qquad+h^{(L-1)}[i(b_2),\ldots,i(b_L)])\\&+\ldots\\&+(-1)^{L-1}2(h^{(1)}[i(b_1)]+\ldots+h^{(1)}[i(b_L)])\\&+(-1)^L,\end{aligned}\tag{38}$$

ここでも展開の各項は集合 $\{b_1,\ldots,b_L\}$ のすべての部分集合に対応している．部分集合 $\{b_1,\ldots,b_k\}$ に対応する項は

$$(-1)^{L-k}\,2^k\,h^{(k)}[i(b_1),\ldots,i(b_k)]$$

となる．こうして Walsh 係数について得られた結果が，スキーマについても適用できることが分かる．

5.2 スキーマに対する突然変異の効果

Holland の古典的スキーマ定理では，突然変異のスキーマを破壊する効果のみが強調されているが，もちろん突然変異にも創造的な面がある．我々はすでに Walsh 変換を用いて，Walsh 関数が突然変異の固有関数であることを示した．ここではこのことを用いて，スキーマに対する突然変異の影響を表してみる．

1 次のスキーマに対しては

$$\begin{aligned}\widehat{M}h^{(1)}[i(b_1)]&=\frac{1}{2}\{1+\widehat{M}(-1)^{i(b_1)}\tilde{x}^{(1)}[b_1]\}\\&=\frac{1}{2}\{1+(1-2p)(-1)^{i(b_1)}\tilde{x}^{(1)}[b_1]\}\end{aligned}$$

から

$$\widehat{M}h^{(1)}[i(b_1)]=(1-2p)h^{(1)}[i(b_1)]+p\tag{39}$$

を得る．$i(b_1)$ のビット反転を $\overline{i(b_1)}$ とし，

$$h^{(1)}[i(b_1)]+h^{(1)}[\overline{i(b_1)}]=1$$

を用いると

$$\widehat{M}h^{(1)}[i(b_1)]=(1-p)\,h^{(1)}[i(b_1)]\;+\;p\,h^{(1)}[\overline{i(b_1)}]$$

を得る．この式はちょうど $\ell=1$ の系における突然変異方程式 (9) および (10) の形をしており，Stephens-Waelbroeck の突然変異によるスキーマ進化方程式 (30) が得られる．

一般に L 次のスキーマについては，次式が成り立つ．

$$\begin{aligned}&\widehat{M}\,h^{(L)}[i(b_1),\ldots,i(b_L)]\\&=(1-2p)^L\,h^{(L)}[i(b_1),\ldots,i(b_L)]\\&+(1-2p)^{L-1}\,p\Big\{\ h^{(L-1)}[i(b_1),\ldots,i(b_{L-1})]\\&+\ldots+h^{(L-1)}[i(b_2),\ldots,i(b_L)]\ \Big\}\\&+\ldots\\&+\ (1-2p)\,p^{L-1}\Big\{h^{(1)}[i(b_1)]+\ldots+h^{(1)}[i(b_L)]\Big\}\\&+p^L\end{aligned}\tag{40}$$

ここでも右辺の各項は，集合 $\{b_1,\ldots,b_L\}$ の部分集合に対応している．部分集合 $\{b_1,\ldots,b_k\}$ に対応する項は

$$(1-2p)^k\,p^{L-k}\,h^{(k)}[i(b_1),\ldots,i(b_k)]$$

となる．

次に，Stephens-Waelbroeck のスキーマ定理 (30) を導く．彼らの式では両辺とも同一オーダー（k 次）のスキーマのみ現れることに注意する．部分集合 $\{b_1,\ldots,b_k\}$ に対応するスキーマは

$$\begin{aligned}&h^{(k)}[i(b_1),\ldots,i(b_k)]\\&=\sum_{i(b_{k+1})=0}^{1}\cdots\sum_{i(b_L)=0}^{1}h^{(L)}[i(b_1),\ldots,i(b_L)]\end{aligned}$$

とオーダー L のスキーマだけを用いて展開することができ，その中で各スキーマは 1 回だけ現れる．いま，スキーマ $\mathcal{H}^{(L)}[i(b_1),\ldots,i(b_L)]$ に対して m ビットが同じで $L-m$ ビットだけ異なるスキーマ

$$\mathcal{H}^{(L)}[i(b_1),\ldots,i(b_m),\overline{i(b_{m+1})},\ldots,\overline{i(b_L)}]$$

に注目する．このスキーマの式 (40) 中における重み係数は

$$
\begin{aligned}
&p^L + p^{L-1}(1-2p)\binom{m}{1} + \dots \\
&+ p^{L-m}(1-2p)^m \binom{m}{m} \\
&= p^{L-m}\,(p+1-2p)^m \;=\; p^{L-m}\,(1-p)^m
\end{aligned}
$$

である．m は 2 つのスキーマ間の Hamming 距離であるから，式 (30) と (40) は同値である．

5.3　スキーマに対する交叉の効果

突然変異の Walsh 係数に対する効果は非常に簡単な形をしているが，スキーマに対する効果は少し複雑になり，かえって見通しが悪くなってしまう．それに比して，交叉の効果は Walsh 係数とスキーマとで同等であり，どちらの表現でも同じ結果を与える．

まず，単独の交叉マスク r を用いた交叉によるスキーマ分布への効果を求める．理解を助けるため，$i(b_1) = i(b_2) = i(b_3) = 0$ となる 3 次のスキーマを例に考えてみる．スキーマの相対頻度の Walsh 係数による展開式 (36)

$$
\begin{aligned}
h^{(3)}[1,2,3] = \frac{1}{8}\,(\,&1 + \tilde{x}^{(1)}[1] + \tilde{x}^{(1)}[2] + \tilde{x}^{(1)}[3] \\
&+ \tilde{x}^{(2)}[1,2] + \tilde{x}^{(2)}[2,3] + \tilde{x}^{(2)}[1,3] \\
&+ \tilde{x}^{(3)}[1,2,3]\,)
\end{aligned}
$$

に式 (19) を代入し，

$$\{b_1, b_2\} = U_0, \quad \{b_3\} = U_1$$

とすると，

$$
\begin{aligned}
&\widehat{C}(r)\,h^{(3)}[1,2,3] \\
&= \frac{1}{8}\,(\,1 + \tilde{x}^{(1)}[1] + \tilde{x}^{(1)}[2] + \tilde{x}^{(1)}[3] \\
&+ \tilde{x}^{(2)}[1,2] + \tilde{x}^{(1)}[2]\,\tilde{x}^{(1)}[3] + \tilde{x}^{(1)}[1]\,\tilde{x}^{(1)}[3] \\
&+ \tilde{x}^{(2)}[1,2]\,\tilde{x}^{(1)}[3]\,) \\
&= \frac{1}{4}\,(\,1 + \tilde{x}^{(1)}[1] + \tilde{x}^{(1)}[2] + \tilde{x}^{(2)}[1,2]\,) \\
&\times \frac{1}{2}\,(\,1 + \tilde{x}^{(1)}[3]\,) \\
&= h^{(2)}[1,2]\,h^{(1)}[3]
\end{aligned}
$$

を得る．この式は交叉の Walsh 係数に対する効果

$$\widehat{C}(r)\,\tilde{x}^{(3)}[1,2,3] \;=\; \tilde{x}^{(2)}[1,2]\,\tilde{x}^{(1)}[3]$$

とまったく同じ形をしている．

一般の次数 L の場合にも，同様の簡単な関係が成り立つことがすぐ分かる．定義されたビットの位置の集合を $U = \{b_1, b_2, \dots, b_L\}$ とし，交叉マスク r により 2 分されるビット位置の集合を U_0，U_1 とすれば

$$\widehat{C}(r)\,h^{(L)}[U] \;=\; h^{(m)}[U_0]\,h^{(L-m)}[U_1], \qquad (41)$$

が成り立ち，この式も Walsh 係数に対する式 (19) とまったく同じ形をしている．

実際に GA で適用される交叉は，複数の交叉マスクの重ね合わせであり，式 (20) のように表される．形式的に

$$\widehat{C}(R) \;=\; \sum_r R(r)\,\widehat{C}(r) \qquad (42)$$

と定義すると，スキーマに対する交叉の効果は式 (22) を用いて

$$\widehat{C}(R)\,h(k) \;=\; \sum_{i=0}^{n-1} c_{i,i\oplus k}(R)\;h(i)\,h(i\oplus k), \qquad (43)$$

と表現される．ただし，$h(k)$ ，$h(i)$ の k や i はスキーマの 2 進表現 (28) である．前に述べたように，この表示ではビット 0 と 1 の区別がないが，対応するビット位置での値は交叉の前後で変化していない．

一点交叉に対する Stephens-Waelbroeck のスキーマ定理も容易に導くことができる．式 (41) と (42) を組み合わせればスキーマ定理 (31) を得る．また，式 (43) に Walsh 解析の結果 (26) を代入しても同値であるが異なった表現が得られる．

5.4　低次のスキーマに対する突然変異と交叉の効果

ここでは低次のスキーマに対するスキーマ定理の具体的な表現を与える．0 次のスキーマ $\mathcal{H}^{(0)}$ の頻度は突然変異によって変化しない．またすべての交叉マスク r による交叉についても同様である．

$$\widehat{M}h^{(0)} \;=\; \widehat{C}(r)h^{(0)} \;=\; h^{(0)} \;=\; 1. \qquad (44)$$

したがって一点交叉や一様交叉など交叉マスクの重ね合わせによって表される交叉に関しても変化しない．式 (34) はすべての遺伝子型の存在確率の和が 1 であることを意味しており，突然変異や交叉によって変化することはない．

1 次のスキーマ頻度 $h^{(1)}$ も交叉マスク r による交叉では変化しない．

$$\widehat{C}(r)h^{(1)} \;=\; h^{(1)}. \qquad (45)$$

このことは式 (18) から導くことができる．また交叉マスクの重ね合わせによって表される交叉によっても変化しない．しかし，突然変異については式 (39) によりスキーマ頻度は変化することが分かる．突然変異の効果をより分かりやすく示すため表示法を変えてみる．

$$\tilde{h}^{(1)}[i(b_1)] = h^{(1)}[i(b_1)] - \frac{1}{2}. \qquad (46)$$

この表示のもとで式 (39) を変形し次式を得る．

$$\widehat{M}\tilde{h}^{(1)}[i(b_1)] = (1-2p)\tilde{h}^{(1)}[i(b_1)]. \tag{47}$$

一般に p として小さい正の数を用いるので，$\tilde{h}^{(1)}$ の絶対値は突然変異のため小さくなり，突然変異を繰り返し適用していくと $t \to \infty$ では $\tilde{h}^{(1)} = 0$ となる．すなわち，

$$t \to \infty \quad h^{(1)}[i(b_1)=0] = h^{(1)}[i(b_1)=1] = 1/2$$

となる．このことは，突然変異が乱雑化の演算であることを思い出せば理解できる．

2 次のスキーマに対する突然変異の効果は式 (40) から

$$\begin{aligned}\widehat{M}h^{(2)}[i(b_1),i(b_2)] &= (1-2p)^2\, h^{(2)}[i(b_1),i(b_2)]\\ &+(1-2p)p\big\{h^{(1)}[i(b_1)]+h^{(1)}[i(b_2)]\big\}\\ &+p^2.\end{aligned} \tag{48}$$

この式も見通しよくするため式 (12) と式 (38) に注意し

$$\begin{aligned}\tilde{h}^{(2)}[i(b_1),i(b_2)] &= h^{(2)}[i(b_1),i(b_2)]\\ &-\frac{1}{2}h^{(1)}[i(b_1)]-\frac{1}{2}h^{(1)}[i(b_2)]+\frac{1}{4}\end{aligned} \tag{49}$$

と変換すると，

$$\widehat{M}\tilde{h}^{(2)} = (1-2p)^2\tilde{h}^{(2)}, \tag{50}$$

を得る．突然変異を繰り返し適用すれば $t \to \infty$ で $\tilde{h}^{(2)} = 0$ となる．また同時に $h^{(1)} = 1/2$ となるので

$$t \to \infty \quad h^{(2)}[i(b_1),i(b_2)] = 1/4$$

となる．

2 次以上のスキーマに対し交叉は効果を及ぼす．ここでは一点交叉と一様交叉による 2 次のスキーマに対する効果を求める．そのため，式 (43) に式 (26) または (27) を代入すればよい．このとき，式 (43) 右辺の $c_{i,i\oplus k}$ はビット列 i，$i\oplus k$ の同一位置のビット値がともに 1 になると値が 0 になることに注意し，$h(k) = h^{(2)}[i(b_1),i(b_2)]$ とすると，式 (43) 右辺の和に寄与する i は b_1，b_2 以外のビット位置の値はすべて 0 でなければならないことが分かる．これらのことから結果のみ示す．

- 一点交叉

$$\begin{aligned}&\widehat{C}(R)h^{(2)}[i(b_1),i(b_2)]\\ &= \Big(1-\chi\frac{b_2-b_1}{\ell-1}\Big)h^{(2)}[i(b_1),i(b_2)]\\ &+\chi\frac{b_2-b_1}{\ell-1}h^{(1)}[i(b_1)]h^{(1)}[i(b_2)].\end{aligned}$$

ここで，$b_2 - b_1$ がスキーマの定義長に等しい（$\mathcal{L}(\mathcal{H}) = b_2 - b_1$）ことに注意すれば

$$\begin{aligned}&\widehat{C}(R)h^{(2)}[i(b_1),i(b_2)]\\ &= \Big(1-\chi\frac{\mathcal{L}(\mathcal{H})}{\ell-1}\Big)h^{(2)}[i(b_1),i(b_2)]\\ &+\chi\frac{\mathcal{L}(\mathcal{H})}{\ell-1}h^{(1)}[i(b_1)]h^{(1)}[i(b_2)],\end{aligned} \tag{51}$$

となり Holland のスキーマ定理 (29) によく似た結果が得られた．彼の定理では右辺の第 2 項が無視されていることが分かる．

- 一様交叉

$$\begin{aligned}&\widehat{C}(R)h^{(2)}[i(b_1),i(b_2)]\\ &= \Big(1-\frac{\chi}{2}\Big)\, h^{(2)}[i(b_1),i(b_2)]\\ &+\frac{\chi}{2}\, h^{(1)}[i(b_1)]h^{(1)}[i(b_2)].\end{aligned} \tag{52}$$

5.5 交叉と連鎖不平衡

スキーマに対する交叉の効果，式 (43) をもう少し具体的にみていく．とくに，遺伝学において重要な概念である連鎖不平衡（Linkage Disequilibrium）との関連に注目してこの定理の意味を考える[11]．連鎖不平衡は異なる遺伝子座（ビット）の間に相関があることを表し，GA では各ビットが独立ではなく互いに関係しあっていることを意味する．この逆の概念が連鎖平衡（Linkage Equilibrium）であり，各遺伝子座が独立に進化していくことを表す．交叉の効果は，この連鎖不平衡を壊し，連鎖平衡状態に近づけることにある．もし，交叉だけを繰り返し行えばいつかは連鎖平衡状態にたどりつき，そのときの遺伝子型 B_i の頻度は 1 次のスキーマの積

$$x_i = \prod_{m=1}^{\ell} h^{(1)}[i(m)] \tag{53}$$

で与えられる．このことは Geiringer の定理として遺伝学ではよく知られている[12]．連鎖平衡にあるスキーマに対する式は

$$h^{(k)}[i(b_1),\ldots,i(b_k)] = \prod_{m=1}^{k} h^{(1)}[i(b_m)] \tag{54}$$

であるが，このことは Holland も指摘している[2]．

これらのことを念頭に置き，一点交叉の中から交叉点 m のものを取り出して考察する．交叉点が m の交叉を表す交叉マスクは

$$r = <\underbrace{0,0,\ldots,0}_{\ell-m},\underbrace{1,\ldots,1,1}_{m}>$$

となることに注意し，スキーマ方程式

$$\widehat{C}(R)\,h(\mathcal{H}) = (1-\chi)h(\mathcal{H}) + \chi h(\mathcal{H}[L_m])h(\mathcal{H}[R_m]),$$

を得る．交叉によるスキーマの頻度の変化 $\Delta h(\mathcal{H})$ は

$$\begin{aligned}\Delta h(\mathcal{H}) &= \widehat{C}(R)\,h(\mathcal{H}) - h(\mathcal{H})\\ &= -\chi\left(h(\mathcal{H}) - h(\mathcal{H}[L_m])h(\mathcal{H}[R_m])\right),\end{aligned}$$

となる．連鎖不平衡係数 $D_m(\mathcal{H})$ を

$$D_m(\mathcal{H}) = h(\mathcal{H}) - h(\mathcal{H}[L_m])h(\mathcal{H}[R_m]) \quad (55)$$

と定義すると

$$\Delta h(\mathcal{H}) = -\chi\, D_m(\mathcal{H}) \quad (56)$$

であり，連鎖不平衡係数 $D_m(\mathcal{H})$ が負であれば交叉によりスキーマの頻度は増加し，正であれば減少する．このことをもう少し詳しく検討するため，

$$\Delta h(\mathcal{H}[L_m]) = \Delta h(\mathcal{H}[R_m]) = 0$$

に注意して，連鎖不平衡係数の交叉による変化を求める

$$\Delta D_m(\mathcal{H}) = (1-\chi)\, D_m(\mathcal{H}). \quad (57)$$

したがって，有限の χ に対して連鎖不平衡係数の絶対値は減少し，交叉を繰り返し適用すると（部分的）連鎖平衡状態に到達する

$$h(\mathcal{H}) = h(\mathcal{H}[L_m])h(\mathcal{H}[R_m]). \quad (58)$$

このように，交叉はビット間の相関（不平衡）を解消し，無相関（平衡）状態へ近づける働きをする．そして,「連鎖不平衡係数が負の場合に交叉の作用でスキーマ頻度が増加する」ということは,「スキーマ頻度が連鎖平衡状態で予想される値より小さい場合は交叉により連鎖平衡状態に近づく」と同じことである．したがって，交叉によりスキーマ頻度が増加するとしても上限がある．

6. 考察とまとめ

集団遺伝学や GA において，最も詳細に集団の状態を調べる方法は，世代 t において遺伝子型 B_i を持つ個体が集団中にいくら存在するか，ということを記述することである．この立場に立って GA の進化を記述する試みが Vose らによってなされ，進化方程式の形も示された[10]．しかしすぐ予想できるように，この方程式は個体数，ビット長が増えると次元数が急激に増加し，意味のあるシステムについて調べることは実際上不可能である．

GA の基礎理論が実用上の意味を持つためには，何らかの形の省略や近似を導入しなければならない．Stephens らの言葉を借りれば，粗視化（coarse graining）を行う必要がある[5]．そして，この粗視化は平均をとる操作によって実現されることが多い．最もよく行われる平均化は，平均適応度 $\bar{f}(t)$ の計算

$$\bar{f}(t) = \sum_{i=0}^{n-1} f_i x_i(t)$$

であろう．ここで f_i は遺伝子型 B_i の適応度である．平均適応度は，集団内での最大適応度などとともに，最も重要な量であり，計算実行中にもモニタされることが多い．次に重要な量は適応度の分散 $V(f)$ であり，Fisher の定理から平均適応度の増加

$$\Delta\bar{f}(t) = \bar{f}(t+1) - \bar{f}(t)$$

と密接な関係があることが知られている[6]．したがって，この量も GA の計算中にもっと注意をはらう必要がある．

最近，我々は集団中の個体について，最適解からの Hamming 距離 H_i の分布がスキーマを用いて表せることを示した[6]．それによると，最適解からの Hamming 距離の平均値 $\bar{H}$ は 1 次のスキーマ $h^{(1)}$ の線形和になり，その分散 $V(H)$ は 1 次と 2 のスキーマによって表すことができる．そして，積型の適応度関数を用いた GA の数値実験の結果，平均適応度の増加 $\Delta\bar{f}(t)$ と $V(H)$ はよく相関することが分かった．また，適応度が各ビットの線形和となる GA（One-Max 問題）における数値実験でも，$\Delta\bar{f}(t)$ と $V(H)$ は高い相関を示した[13]．

このように，積型適応度と One-Max 問題という限られた範囲ではあるが，GA の進化における低次のスキーマの重要性を示すことができた．おそらく，この結果は非常に単純化された適応度関数を用いたことによるもので，より一般的な適応度を用いた場合，高次のスキーマが重要になってくるであろう．しかし，それでも低次のスキーマの振舞いを調べていくことが，GA における進化過程を理解するうえで有効であろう．同様のことは Stephens らも指摘しており，まず 1 次のスキーマの解析から行っていくことを提案している[5]．

この論文では，選択の過程についてはほとんど議論しなかった．Stephens らは，スキーマに対し有効適応度（effective fitness）と呼ばれる量を導入し，選択のより定量的取扱いをめざしている．彼らの方法がどれだけ有望であるか否かは，今後の研究の発展に注目していく必要があるであろう．我々がここで提案した Walsh 変換による方法は，選択の過程にも適用可能である．しかし突然変異や交叉と異なり，選択の場合はスキーマの進化方程式に低次のスキーマだけでなく，それより高次のスキーマの頻度が結合してくる．そしてこのことが，スキーマ理論における選択の取扱いを

難しくしているのである．

実際のGAにおける突然変異や交叉の役割をスキーマ定理を用いて解析することは非常に興味がある．今後，ここで得られた結果を具体的なGA計算と比較することにより，本研究の有用性や適用の限界について検討していきたい．また，選択に対するスキーマ定理についても別の機会に報告したい．

本論文では，Walsh変換を用い突然変異と交叉に対するスキーマ定理を導いた．以下にその結果をまとめる．

- 突然変異によるスキーマの進化は，Stephens-Waelbroeckの式(30)または式(40)により表現できる．これらは同値であるが，その表現する内容はまったく異なる．式(40)では，スキーマ頻度の変化は交叉に対するスキーマ定理のようにより低次のスキーマを用いて表され，両者の整合性という点で優れているように思える．いずれにしろ，2つの表現の有用性については今後の研究を待ちたい．
- 交叉によるスキーマの進化を記述する一般的な方程式(43)を導いた．交叉についてはWalsh解析の成果がスキーマ定理にそのまま応用できる．連鎖不平衡との関係を検討することが，交叉の役割を理解するうえで重要である．
- 選択の場合，スキーマの進化方程式にそれより高次のスキーマが現れるため，スキーマ定理は複雑になる．そのため，スキーマ定理を意味あるものにするには，近似の導入などなんらかの工夫が必要になる．

参 考 文 献

1) 伊庭斉志：遺伝的アルゴリズムの基礎，p.254，オーム社，東京(1994).
2) Holland, J.H.: *Adaptation in Natural and Artificial Systems*, p.211, MIT Press, Massachusetts (1992).
3) Altenberg, L.: The Schema Theorem and Price's Theorem, *Foundations of Genetic Algorithms 3*, Whitley, L.D. and Vose, M.D.(Eds.), pp.23–49 (1995).
4) Stephens, C.R. and Waelbroeck, H.: Effective Degrees of Freedom in Genetic Algorithms, *Physical Review E*, Vol.57, pp.3251–3264 (1998).
5) Stephens, C.R. and Waelbroeck, H. : Schemata Evolution and Building Blocks, *Evolutionary Computation*, Vol.7, pp.109–124 (1999).
6) 古谷博史：遺伝的アルゴリズムにおける交叉のWalsh解析，情報処理学会論文誌，Vol.42, pp.2270–2283 (2001).
7) Goldberg, D.E.: Genetic Algorithms and Walsh Functions: Part I, A Gentle Introduction, *Complex Systems*, Vol.3, pp.129–152 (1989).
8) 遠藤 靖：ウォルシュ解析，p.216，東京電機大学出版局，東京（1993）.
9) Vose, M.D. : *The Simple Genetic Algorithms,* p.251, MIT Press, Massachusetts (1999).
10) Nix, A.E. and Vose, M.D.: Modeling Genetic Algorithms with Markov Chain, *Annals of Mathematics and Artificial Intelligence*, Vol.5, pp.79–88 (1992).
11) Maynard Smith, J.: *Evolutionary Genetics*, p.330, Oxford University Press, Oxford (1998).
12) Geiringer, H. : On the Probability Theory of Linkage in Mendelian Heredity, *Annals of Mathematical Statics*, Vol.15, pp.25–57 (1944).
13) Furutani, H.: Study of Crossover in One Max Problem by Linkage Analysis, *Proc. Genetic and Evolutionary Computation Conference, GECCO-2001*, San Francisco, CA, Spector, L., Goodman, E., Wu, A., Langdon, W.B., Voigt, H.-M., Gen, M., Sen, S., Dorigo, M., Pezeshk, S., Garzon, M. and Burke, E.(Eds.), pp.320–327, Morgan Kaufmann Publishers (2001)

(平成13年8月 1 日受付)
(平成14年1月16日採録)

古谷 博史（正会員）

昭和26年生．昭和49年京都大学理学部卒業．昭和51年同大学大学院理学研究科物理学第二専攻修士課程修了．昭和54年同大学院博士課程単位修得退学．昭和56年高知医科大学助手．昭和63年同大学助教授．医療情報システムの研究開発に従事．平成2年より京都教育大学教授．遺伝子情報システム，遺伝的アルゴリズム等の研究に従事．理学博士．医療情報学会，ソフトウェア科学会各会員．