

遺伝的アルゴリズムの2ビット問題に対する収束性

5E-8

高橋祥兼

NTT情報通信網研究所

1. まえがき

遺伝的アルゴリズム(GA)は、探索問題や規則学習等の最適化問題に有効な手法であることが経験的に知られている。しかし、GAの最適解への収束性に関する理論は、その重要性にも係わらず、現在、単純GAに関しても確立していない。単純GAが必ずしも最適解に収束しない可能性のある最も簡単な最適化問題としては、2ビット問題がある<sup>(1)</sup>。本稿では、GAの収束理論の確立に向けて、最も簡単である「2ビット問題に対する単純GAの収束理論」を確立する。

2. 2ビット問題

2ビット問題は、ストリングが2ビットからなる場合に、適合性関数fの最大値を求める問題である。ストリングを、00, 01, 10, 11で表し、ストリングijにおけるfの値を、 $f_{ij}$ で表す( $i, j=1, 2; \forall f_{ij} > 0$ と仮定)。ここで、2ビット問題を次の2タイプに分類する(図1)。  
 タイプI:  $0 < f_{10} < f_{00} < f_{01} < f_{11}$  (1)  
 タイプII:  $0 < f_{10} < f_{01} \leq f_{00} < f_{11}$  (2)

3. 単純GAとその可解問題

(1) 単純GA

単純GAのオペレーションを次のように定義する。

- ① 淘汰: 各ストリングの平均適合度に比例した数のストリングを次世代に再生する。
- ② 交差: 交差が起こる確率はc ( $0 < c < 1$ )である。
- ③ 突然変異: 突然変異が起こる確率は0である。

(2) 可解問題のクラス

一般に、最適化問題に対して、単純GAがその問題の最大値に収束する場合、その問題は単純GA可解な問題であると言う。単純GA可解な問題には、次の2クラスがある。

④ 大局クラスの問題

初期ストリング集合の選択によらず、単純GA可解となる問題である。

⑤ 局所クラスの問題

初期ストリング集合を上手に選択した場合に限り、単純GA可解となる問題である。

4. 2ビット問題の収束理論

4.1 スキーマ方程式

2ビット問題に単純GAを適用したとき、各世代tにおけるストリングijの数の割合 $P_{ij}(t)$ は、次のスキーマ方程式(差分方程式)によって表現される。

$$[f^*(t)]^2 P_{11}(t+1) = f_{11} P_{11}(t) [f^*(t) - c f_{00} P_{00}(t)] + c f_{01} P_{01}(t) f_{10} P_{10}(t) \quad (3)$$

$$[f^*(t)]^2 P_{10}(t+1) = f_{10} P_{10}(t) [f^*(t) - c f_{01} P_{01}(t)] + c f_{00} P_{00}(t) f_{11} P_{11}(t) \quad (4)$$

$$[f^*(t)]^2 P_{01}(t+1) = f_{01} P_{01}(t) [f^*(t) - c f_{10} P_{10}(t)] + c f_{00} P_{00}(t) f_{11} P_{11}(t) \quad (5)$$

$$[f^*(t)]^2 P_{00}(t+1) = f_{00} P_{00}(t) [f^*(t) - c f_{11} P_{11}(t)] + c f_{01} P_{01}(t) f_{10} P_{10}(t) \quad (6)$$

ここで、任意のtに対して、 $P_{ij}(t)$ に関する条件および記号 $f^*(t)$ の意味は次の通りである。

$$0 \leq P_{ij}(t) \leq 1, \sum_i \sum_j P_{ij}(t) = 1 \quad (1 \leq i, j \leq 2) \quad (7)$$

$$f^*(t) = f_{00} P_{00}(t) + f_{01} P_{01}(t) + f_{10} P_{10}(t) + f_{11} P_{11}(t) \quad (8)$$

また、スキーマ方程式の初期条件は、次の通りとする。

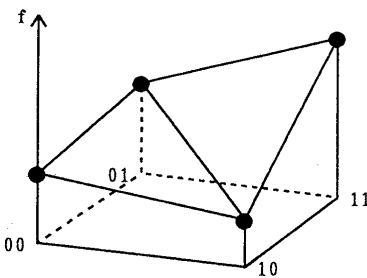
$$0 < P_{ij}(0) < 1 \quad (1 \leq i, j \leq 2) \quad (9)$$

以下、スキーマ方程式が解をもち、しかも収束することを仮定する。

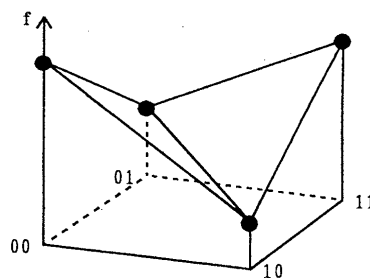
4.2 タイプIの2ビット問題の収束

[定理1] タイプIの2ビット問題は、大局クラスの単純GA可解問題である。すなわち、初期ストリングのいかに係わらず、次の式が成立する。  
 $P_{11}(\infty) \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} P_{11}(t) = 1$ , i.e.  $f^*(\infty) \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} f^*(t) = f_{11}$

[証明] 証明は背理法を用いて行う( $P_{11}(\infty) \neq 1$ と仮定して矛盾を導く)。仮定を、次のケースに分類する。



(a) タイプI



(b) タイプII

図1. 2ビット問題のタイプ

[ケース A]  $P_{ij}(\infty) \neq 1$  ( $1 \leq i, j \leq 2$ ) の場合  
 [ケース A 1]  $f_{10} < f^*(\infty) < f_{01}$ ,  $f^*(\infty) \neq f_{00}$  の場合  
 [ケース A 2]  $f_{00} < f^*(\infty) < f_{11}$ ,  $f^*(\infty) \neq f_{01}$  の場合  
 [ケース B]  $\exists i, j, (i, j) \neq (1, 1): P_{ij}(\infty) = 1$  の場合  
 [ケース B 1]  $f^*(\infty) = f_{00}$  の場合  
 [ケース B 2]  $f^*(\infty) = f_{10}$ , または,  $f^*(\infty) = f_{01}$  の場合  
 いずれのケースの証明も、ほぼ同様の手法で行えるため、以下、ケース A 1 の場合の証明を示す (他の場合の証明は省略する)。

まず、[(4)-(5)]をつくる。  
 $f^*(t)P_{10}(t+1) - f_{10}P_{10}(t) = f^*(t)P_{01}(t+1) - f_{01}P_{01}(t)$  (10)  
 式(10)において  $t \rightarrow \infty$  とすると、次の式が得られる。  
 $[f^*(\infty) - f_{10}]P_{10}(\infty) = [f^*(\infty) - f_{01}]P_{01}(\infty)$  (11)  
 ケース A 1 の仮定が成り立つときは、 $[f^*(\infty) - f_{10}] > 0$  かつ  $[f^*(\infty) - f_{01}] < 0$  であり、しかも  $P_{10}(\infty) \geq 0$  かつ  $P_{01}(\infty) \geq 0$  であるから、式(11)が成立するためには、次の式が成立しなければならない。

$P_{10}(\infty) = P_{01}(\infty) = 0$  (12)  
 ケース A 1 の仮定、式(12)、および式(8)より、 $f^*(\infty)$  について次の式が成立する。

$f_{00} < f^*(\infty) < f_{01}$  (13)  
 式(13)より、次の条件を満たすように正数  $\varepsilon > 0$  と世代  $t_1$  を選ぶことができる。  
 $f_{01} - f^*(t) > \varepsilon$  for  $\forall t \geq t_1$ . (14)

従って、式(5)と式(14)から、次の式が成立する。  
 $[f^*(t)]^2 [P_{01}(t+1) - P_{01}(t)] > P_{01}(t) [\varepsilon f^*(t) - cf_{10}P_{10}(t) + cf_{00}P_{00}(t) + f_{11}P_{11}(t)]$  for  $\forall t \geq t_1$ . (15)  
 ここで、式(12)、(13)より、次の条件が成立するように世代  $t_2$  を選ぶことができる。

$\varepsilon f^*(t) - cf_{10}P_{10}(t) + f_{01} > 0$  for  $\forall t \geq t_2$ . (16)  
 従って、式(15)、(16)より、次の式が成立する。  
 $P_{01}(t+1) - P_{01}(t) > 0$  for  $\forall t \geq \max(t_1, t_2)$ . (17)

任意の  $t$  に対して、 $P_{01}(t) \geq 0$  であるから、式(17)より次の式が得られる。  
 $P_{01}(\infty) > 0$  (18)  
 ところが、式(18)は式(12)と矛盾する。 [証明終]

### 4.3 タイプIIの2ビット問題の収束

[定理 2] タイプ II の 2 ビット問題は、局所クラスの単純 GA 可解問題である。具体的には、次のことが成立する。  
 A.  $P_{11}(0) - P_{00}(0) > 0$  の場合は、  
 $P_{11}(\infty) = 1$ , すなわち、 $f^*(\infty) = f_{11}$  である。  
 B. 次の条件 (#) が成立するとき、  
 $P_{00}(\infty) = 1$ , すなわち、 $f^*(\infty) = f_{00}$  である。  
 $P_{11}(t) - P_{00}(t) < 0$  for  $\forall t \geq 0$  (#)  
 条件 (#) は、例えば、初期条件を、 $P_{00}(0) = 1$ , かつ  $P_{11}(0), P_{01}(0), P_{10}(0) = 0$  と選択したときに、満たされる。

[注意] ① A, B 以外の条件の場合の収束性は、今後の課題である。

② 一般に、 $t+1, t+2$  の場合の条件 (#) を、式(3)、(6)を使用して、 $t$  の条件として書き下すと、以下の通りとなる。  
 $f^*(t) [P_{11}(t+1) - P_{00}(t+1)] = f_{11}P_{11}(t) - f_{00}P_{00}(t) < 0$  (19)

$[f^*(t)]^2 [f^*(t+1)] [P_{11}(t+2) - P_{00}(t+2)] = f^*(t) [(f_{11})^2 P_{11}(t) - (f_{00})^2 P_{00}(t)] + c(f_{11} - f_{00}) [f_{01}P_{01}(t) + f_{10}P_{10}(t) - f_{00}P_{00}(t) + f_{11}P_{11}(t)] < 0$  (20)

$\forall t \geq 1$  に対する条件 (#) を、このように  $t=0$  の初期条件として書き下すことは極めて難しいため、条件 (#) の初期条件表示は、現在求められていない。

[証明] 証明は次の 2 ステップに分けて行う。  
 <ステップ 1> 任意の初期条件の場合について、 $P_{11}(\infty) = 1$  または  $P_{00}(\infty) = 1$  であることを証明する。  
 <ステップ 2> 定理 2 の A と B を証明する。

#### [1] ステップ 1 の証明

証明は背理法による。すなわち、 $P_{11}(\infty) \neq 1$  かつ  $P_{00}(\infty) \neq 1$  と仮定し、矛盾を導く。この証明は、定理 1 の証明を、タイプ II の 2 ビット問題の条件である  $f_{01} \leq f_{00}$  を考慮して拡張することにより行う (詳細略)。

#### [2] ステップ 2 の証明

まず、[(3)-(6)]をつくらせておく。  
 $f^*(t) [P_{11}(t+1) - P_{00}(t+1)] = f_{11}P_{11}(t) - f_{00}P_{00}(t)$  (21)

#### (1) 定理 2 A の証明

次の仮定が成立するとする。  
 $P_{11}(0) - P_{00}(0) > 0$  (22)

最初に、数学的帰納法により、次のことが成立することを示す。

$P_{11}(t) - P_{00}(t) > 0$  for  $\forall t \geq 0$  (23)

(a)  $t=0$  の場合

式(22)が成立する。

(b)  $\forall t \geq 1$  の場合

$t \geq 1$  なる任意の一つの  $t$  に対して、次のことを仮定する。

$P_{11}(t) - P_{00}(t) > 0$  (24)

ここで、式(2)の  $f_{00} < f_{11}$  を用いると、次の式が成立する。

$f_{11}P_{11}(t) - f_{00}P_{00}(t) > f_{00} [P_{11}(t) - P_{00}(t)]$  for  $\forall t \geq 0$  (25)

式(21)、(25)より、次の式が成立する。

$f^*(t) [P_{11}(t+1) - P_{00}(t+1)] > f_{00} [P_{11}(t) - P_{00}(t)]$  for  $\forall t \geq 0$  (26)

そこで、式(24)、(26)より、式(24)が成立する  $t$  に対して、次の式が成立する。

$P_{11}(t+1) - P_{00}(t+1) > 0$  (27)

従って、上記(a), (b)より、式(23)が成立する。

次に、ここで、 $P_{00}(\infty) = 1$  であると仮定すると、次の条件を満たすように正数  $\varepsilon > 0$  と世代  $t^*$  を選ぶことができる。

$P_{00}(t) > 1 - \varepsilon > 0$  for  $\forall t \geq t^*$ . (28)

式(23)、(28)より、次の式が得られる。

$P_{11}(\infty) \geq P_{00}(\infty) \geq 1 - \varepsilon > 0$  (29)

ところが、 $P_{00}(\infty) = 1$  と仮定したときは  $P_{11}(\infty) = 0$  であるから、これと式(29)は矛盾である。従って、 $P_{00}(\infty) \neq 1$ , すなわち、 $P_{11}(\infty) = 1$  である。

#### (2) 定理 2 B の証明

条件 (#) が成立するとき、定理 2 A の証明の後半とほぼ同様にして、 $P_{11}(\infty) = 1$  であると仮定すると矛盾が生じる。従って、 $P_{00}(\infty) = 1$  である。また、 $P_{00}(0) = 1$ , かつ  $P_{11}(0), P_{01}(0), P_{10}(0) = 0$  であるときには、式(19)、(20)等から条件 (#) が成立する。 [証明終]

### 5. おわりに

GA の収束理論の確立に向けて、①タイプ I の 2 ビット問題が大局クラスの単純 GA 可解問題であること (定理 1) と、②タイプ II の 2 ビット問題が、局所クラスの単純 GA 可解問題であること (定理 2) を、示した。今後の課題は、③タイプ II の 2 ビット問題において、 $P_{00}(\infty) = 1$  となるための必要十分な初期条件を求めることと、④本稿の結果を、一般の最適化問題における単純 GA の収束理論に拡張することである。

(1) Goldberg, D.E.: "Genetic algorithms in search, optimization and machine learning". Addison-Wesley (1989).