遺伝的アルゴリズムの収束理論

8D−5

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）において、収束理論は、ＧＡの問題解決能力の可能性と限界を明らかにするために重要な課題であり、現在研究が開始されつつある。ＧＡの手本である集団遺伝学においては、二倍体細胞の最も簡単な２遺伝子座・２対立遺伝子モデルの淘汰・交差方程式でも、リミットサイクルをもつ場合があることが知られており[1]、一般的な収束理論の確立は極めて難しい問題である。一方、ＧＡでは、これまで、主に、半数体細胞を前提としたアルゴリズムについて研究されてきており、その最も簡単な２遺伝子座・２対立遺伝子モデルの淘汰・交差を用いた２ビット問題（タイプⅠ、Ⅱ）の解法に関して、一点収束性および最大値／非最大値への収束初期条件がほぼ解明されている[3]。ＧＡの淘汰・交差方程式は、基本的に、集団遺伝学における一般的な淘汰・交差方程式の特定化であるため、ＧＡ固有の収束理論は確立可能であろうと想定される。本稿では、このようなＧＡ収束理論の確立をねらいとして、ＧＡ差分方程式の解析という数理生物学的手法[2]を用いて、ｎビット問題に対するＧＡ（淘汰・交差）の一点収束性と最大値／非最大値への収束条件を明らかにする。

2．nビット問題とGA

2．1 nビット問題の定義

２ビット問題を一般的に拡張したｎビット問題は、ｎビットからなるストリングを変数とする適合性関数fの最大値を求める問題である（図１）。ストリングと関数値を次の記号で表す。

$$x_1=00\cdots00,\ x_2=00\cdots01,\ \cdots,\ x_N=11\cdots11 \quad (N=2^n)$$

$$f_i=f(x_i) \quad (1\leqq i\leqq N) \tag{1}$$

ストリングx_iの全体集合をXと書く。ここで、一般性を失うことなく、次の条件を仮定することができる。

$$0<f_i<f_N \text{ for } 1\leqq\forall i\leqq N-1;\ f_i\neq f_j \text{ if } i\neq j. \tag{2}$$

2．2 GA差分方程式

考察対象とするＧＡは、次の２つのオペレーションにより構成されるものとする（突然変異は用いない）。

① 淘汰　各世代$t(\geqq0)$の各ストリングx_iごとに、$f_i\times$（x_iの数）に比例した数のストリングを次世代$(t+1)$に再生する。

② 交差　$1\leqq L\leqq n-1$なるLを任意に一つ固定する。第Lビットと第$(L+1)$ビットの間で次の式(3)のように表現する交差ϕが、次の式(4)の条件を満たす任意に一つ固定した確率cで起こるものとする（表１）。

$$\phi:\ X\times X \rightarrow X\times X$$

$$\phi(x_j,x_k)=(x_{u(j,k)},x_{v(j,k)}) \tag{3}$$

$$0\leqq c<1 \tag{4}$$

このとき、x_jとx_kとの交差ϕによるx_iの生成係数ζ_{ijk}と消滅係数η_{ijk}を、次の記号で表現する（$k\leqq j$: ζ_{ijk}およびη_{ijk}の値は交差表を用いて求める必要がある）。

$$\zeta_{ijk}\equiv\begin{cases}0 \text{ if } x_u\neq x_i \text{ and } x_v\neq x_i.\\ 1 \text{ if } x_u=x_i \text{ exclusively or } x_v=x_i.\\ 2 \text{ if } x_u=x_i \text{ and } x_v=x_i.\end{cases} \tag{5}$$

$$\eta_{ijk}\equiv\begin{cases}-2 \text{ if } j=k=i.\\ -1 \text{ if } j\neq k \text{ and } (j=i \text{ exclusively or } k=i)\\ 0 \text{ if } j\neq k \text{ and } j\neq i \text{ and } k\neq i.\end{cases} \tag{6}$$

以上の準備の下に、ＧＡをｎビット問題に適用したとき、その世代tにおけるx_iの数の割合$P_i(t)$は、次の差分方程式によって表現できる。

$$\{f^*(t)\}^2P_i(t+1)=f^*(t)f_iP_i(t)+cz_i(t) \tag{7a}$$

$$\Sigma_i\ P_i(t)=1,\ 0\leqq P_i(t)\leqq1 \tag{7b}$$

$$f^*(t)\equiv\Sigma_i\ f_iP_i(t) \tag{7c}$$

$$z_i(t)\equiv x_i(t)+y_i(t) \tag{7d}$$

$$x_i(t)\equiv f_iP_i(t)\Sigma_{jk}\ \eta_{ijk}f_kP_k(t) \tag{7e}$$

$$y_i(t)\equiv\Sigma_{jk}\ \zeta_{ijk}f_jP_j(t)f_kP_k(t) \tag{7f}$$

ただし、ここで、式(7e)、(7f)のΣ_{jk}は、$1\leqq k\leqq j\leqq N$なるj,kに関する和を表す。

なお、この差分方程式(7)の初期値は、次の条件を満たすものとする。

$$0<P_i(0)<1 \text{ for } 1\leqq\forall i\leqq N. \tag{8}$$

2．3 nビット問題のタイプ

２ビット問題の差分方程式[3]と式(7)の比較に基づいて、２ビット問題のタイプⅠ、Ⅱを、ｎビット問題に拡張する。まず、$z_N(t)$において$f_NP_N(t)$を含む項の中に存在しているf_{s_i} $(1\leqq s_i\leqq N-1, 1\leqq i\leqq M\leqq N-1)$は次の順序に並んでいるものとし、$s_i$の全体集合を$S$とする。

$$f_{s_1}<f_{s_2}<\cdots<f_{s}<\cdots<f_{s_{M-1}}<f_{s_M} \tag{9}$$

このとき、$f_{s_i}(s_i\in S)$および$f_w(w\in S^c)$が、次の各条件を満たすとき、ｎビット問題は、各々、タイプ０（non-deceptive）、タイプⅠ（apparently deceptive）、およびタイプⅡ（deceptive）であると言う。

$$\forall w\in S^c:\ f_{s_M}<f_w \tag{10a}$$

$$\exists w_1\in S^c-\{N\},\exists w_2\in S^c-\{N\}:\ f_{w_1}<f_{s_M}<f_{w_2}<f_N \tag{10b}$$

$$\forall w\in S^c-\{N\}:\ f_w<f_{s_M}<f_N \tag{10c}$$

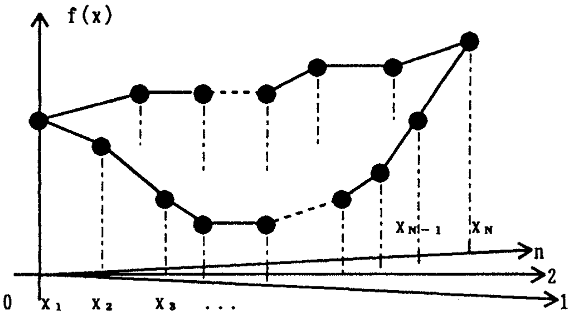

図１．ｎビット問題

表１．交差表（ｎ＝３、Ｌ＝１の場合の例）

<table>
<tr><th>x_k \ x_j</th><th>000</th><th>001</th><th>010</th><th>011</th><th>100</th><th>101</th><th>110</th><th>111</th></tr>
<tr><td>000</td><td>S</td><td>S</td><td>S</td><td>S</td><td>S</td><td colspan="3">100(001,010,011)</td></tr>
<tr><td>001</td><td>−</td><td>S</td><td>S</td><td>S</td><td>101·000</td><td>S</td><td colspan="2">101(010,011)</td></tr>
<tr><td>010</td><td>−</td><td>−</td><td>S</td><td>S</td><td colspan="2">110(000,001)</td><td>S</td><td>110·011</td></tr>
<tr><td>011</td><td>−</td><td>−</td><td>−</td><td>S</td><td colspan="3">111(000,001,010)</td><td>S</td></tr>
<tr><td>100</td><td>−</td><td>−</td><td>−</td><td>−</td><td>S</td><td>S</td><td>S</td><td>S</td></tr>
<tr><td>101</td><td>−</td><td>−</td><td>−</td><td>−</td><td>−</td><td>S</td><td>S</td><td>S</td></tr>
<tr><td>110</td><td>−</td><td>−</td><td>−</td><td>−</td><td>−</td><td>−</td><td>S</td><td>S</td></tr>
<tr><td>111</td><td>−</td><td>−</td><td>−</td><td>−</td><td>−</td><td>−</td><td>−</td><td>S</td></tr>
</table>

A Convergence Theory of Genetic Algorithms
Yoshikane TAKAHASHI, NTT

3. 差分方程式の一点収束性

差分方程式(7)は、振動したり、あるいは周期アトラクタやリッミトサイクルをもつことなく、任意の初期値に対して一点に収束することを、次の定理1で示す。

> ［定理1］　初期値$P_i(0)$ $(1 \leqq i \leqq N)$は条件(8)を満たす任意の点とする。このとき、タイプ0、Ⅰ、Ⅱのいずれの場合も、差分方程式(7)は、次の範囲の極限値$P_i(\infty)$ $(1 \leqq i \leqq N)$および$f^*(\infty)$に収束する。
> $$0 \leqq P_i(\infty) \leqq 1,\quad f_{min} \equiv \min(f_s, f_w) \leqq f^*(\infty) \leqq f_N$$
> $$P_i(\infty) \equiv \lim_{t \to \infty} P_i(t),\quad f^*(\infty) \equiv \lim_{t \to \infty} f^*(t) \tag{11}$$

［略証］ 集団遺伝学におけるFisherの「自然淘汰の基本定理」（c=0の交差を伴わない場合に相当）の一つの証明法[2]を拡張し、２つのCaseに分けて証明する。

＜Case1＞ $\forall t \geqq 0$に対して、$\xi(t) \equiv \Sigma_i f_i z_i(t) \geqq 0$である場合、式(7)とJensenの不等式[2]から次の式を得ることことができるため、$f^*(t)$は一点収束する。

$$\{f^*(t)\}^2 f^*(t+1) = f^*(t)\Sigma_i (f_i)^2 P_i(t) + \xi(t) > \{f^*(t)\}^3 \tag{12}$$

＜Case2＞ $\xi(t_0) < 0$なる$t_0 \geqq 0$が存在する場合は、まず、次の式が成立することが証明できる。

$$\exists t_1 \geqq t_0+1:\ f^*(t_1) \geqq f_{s1} \tag{13}$$

式(13)において、$f^*(t_1)=f_{s1}$かつ$P_{s1}(t_1)=1$となる場合は、時刻t_1で差分方程式(7)は停止し、収束する。もし、式(13)において、$f^*(t_1) > f_{s1}$が成立する場合は、f_{s2}に対して式(13)と同様の式が成立し、以下、順次、同様の議論をf_{sM}に到るまで、さらに、最後にf_Nに到るまで続けることができるため、$f^*(t)$は一点収束する。　［証終］

4. 最大値/非最大値への収束条件

4.1 タイプ0とタイプⅠの最大値収束性

タイプ0、Ⅰのｎビット問題は、大局クラスのＧＡ可解問題（初期条件によらず最大値に収束する）であることを、次の定理2で示す。

> ［定理2］　初期値$P_i(0)$ $(1 \leqq i \leqq N)$は条件(8)を満たす任意の点とする。このとき、タイプ0およびタイプⅠの場合、差分方程式(7)の収束点に関して次の式が成立する。
> $$P_N(\infty)=1;\ P_i(\infty)=0 \text{ for } i \neq N;\ f^*(\infty)=f_N \tag{14}$$

［略証］ 2ビット問題に対して確立されている証明手法[3]を、ｎビット問題に拡張する。証明法は、背理法を基本とする。式(14)を否定して、$P_N(\infty) \neq 1$、$f^*(\infty) \neq f_N$と仮定すると、定理1の式(11)から、$f_{min} \leqq f^*(\infty) < f_N$である。このとき、$f^*(\infty)$の値を図2の２つのCaseに分けると、各々、矛盾を導くことができる。　［証終］

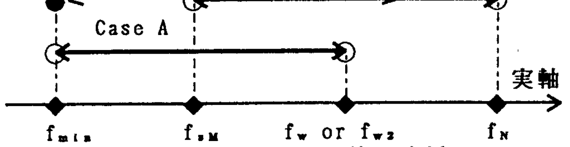

図2．$f^*(\infty)$の仮定の値の分類

4.2 タイプⅡの非最大値収束初期条件

タイプⅡのｎビット問題は、局所クラスのＧＡ可解問題（初期条件を上手に選択した場合に限り、最大値に収束する）となることを、特に、差分方程式(7)が非最大値に収束するために初期値が満たすべき一つの十分条件を求めるという観点から、以下に示す。

まず、定理1によって式(11)の範囲に一点収束することを保証した$f^*(\infty)$の値が、タイプⅡの場合は、さらに、高々(M+1)個の収束可能点に絞り込めることを、次の補題で示す。

> ［補題］　タイプⅡの場合、$P_i(\infty)$および$f^*(\infty)$は次の(M+1)通りのいずれかである。
> ① $P_N(\infty)=1;\ P_j(\infty)=0$ for $\forall j \neq N;\ f^*(\infty)=f_N$
> ② $P_{si}(\infty)=1;\ P_j(\infty)=0$ for $\forall j \neq s_i;\ f^*(\infty)=f_{si}$
> $(s_i \in S,\ 1 \leqq i \leqq M)$ (15)

［略証］　定理2の証明手法を精密化・拡張し（一部の証明でJensenの不等式を利用）、背理法を基本として証明できる。　［証終］

この補題の式(15)において、ＧＡがだまされて次善最大値であるf_{sM}に収束してしまうための初期値の一つの十分条件を、次の定理3に示す（$f_{sM-1}, f_{sM-2}, \cdots, f_{s1}$への収束条件も同様にして求めることができる）。

> ［定理3］　タイプⅡの場合、次の２条件が同時に成立すれば、$P_{sM}(\infty)=1$かつ$f^*(\infty)=f_{sM}$が成立する.
> $$\exists w \in S^c:\ f_{sM-1} < f_w < f_{sM} \tag{16}$$
> $$\alpha(0) < 0 \tag{17}$$
> ただし、$\alpha(t)$ $(\forall t \geqq 0)$の定義は次の通りである。
> $$\alpha(t) \equiv \{f^*(t)\}^2\{P_N(t+1)-P_N(t)-\tau(t)z_N(t)\}$$
> $$= f^*(t)P_N(t)\{f_N-f^*(t)\}+z_N(t)-\{f^*(t)\}^2\tau(t)z_N(t)$$
> $$\tau(t) \equiv \{f_N f^*(t)\}^{-1} \tag{18}$$

［略証］　$\alpha(t)$に関して、次の漸化式が成立する。

$$\{f^*(t)\}^2\{f_N-f^*(t)\}\alpha(t+1)$$
$$= f^*(t+1)f_N\{f_N-f^*(t+1)\}\alpha(t)$$
$$+c\{f_N-f^*(t)\}^2[1-\{f^*(t+1)\}^2\tau(t+1)]\{f^*(t)\}^2 z_N(t+1) \tag{19}$$

式(17)を仮定したとき、式(19)と数学的帰納法を用いることにより、次の式が成立することを証明できる。

$$\alpha(t) < 0 \quad \text{for } \forall t \geqq 0. \tag{20}$$

式(20)より、次の式が成立する。

$$P_N(t+1) < P_N(t) \quad \text{for } \forall t \geqq 0. \tag{21}$$

式(21)、補題の式(15)、および仮定(16)を用いると、問題は、f_Nをf_{sM}で置き換えたときのタイプ0またはタイプⅠと同等であるため、定理2により、$P_{sM}(\infty)=1$かつ$f^*(\infty)=f_{sM}$が成立する。　［証終］

5. むすび

最も単純に特定化した淘汰・交差方程式によって定まるＧＡを用いてｎビット問題を解く場合を考察し、ＧＡの一点収束性と最大値／非最大値への収束初期条件を明らかにした。これにより、ＧＡ固有の収束理論の基盤が構築できた。今後の課題は、一点収束するためのＧＡ（淘汰・交差方程式）の一般的形態の網羅的解明、ならびに最大値／非最大値に収束するための初期値の必要十分条件の解明である。

文　献

(1) Akin: “Hopf Bifurcation in the two locus genetic model”, Memoirs Amer.Math.Soc. No.284, (1983).
(2) Sigmund and Hofbauer: “ Evolution theory and dynamic systems”, Cambridge Univ. Press (1988).
(3) 高橋: “遺伝的アルゴリズムの２ビット問題に対する収束性”, 情処全大 (1992-10).