

# 選択における連鎖不平衡の効果 —— OneMax 問題のスキーマ解析

古 谷 博 史<sup>†</sup>

選択は遺伝的アルゴリズムにおける最も重要な遺伝的操作の 1 つである。一方、遺伝学では連鎖という現象が知られている。選択と連鎖は、互いに密接な関係があり、選択は連鎖を生成し、逆に選択の効果は連鎖の程度に依存する。しかし、これらのメカニズムについてはあまり研究が進んでいない。本研究では、OneMax 問題について選択と連鎖の関連を調べた。平均適応度と集団中の最適解の頻度を取り上げ、連鎖の役割を解析した。連鎖の強さは交叉により減少するので、交叉の効果を選択との関連において分析することができる。そのため、交叉についてスキーマ理論を用いて解析し、遺伝的アルゴリズムにおいて交叉の与える影響を定量的に調べた。この中で、確率的効果の重要性が明らかになり、それは連鎖を通じて現れることが示された。また、最適解の頻度は交叉により増加するが、交叉による直接的効果と選択を通じて現れる間接的効果があり、数値実験では、間接的効果の方がより重要であることが明らかになった。

## Effect of Linkage Disequilibrium in Selection —— Schema Analysis of OneMax Problem

HIROSHI FURUTANI<sup>†</sup>

Selection is one of the most important genetic operators in Genetic Algorithms, and linkage is a famous phenomenon in genetics. There is a close relationship between selection and linkage. Selection induces linkage, and the effect of selection is closely related to the degree of linkage. However, our research on their mechanisms is still in the primitive stage. In this study, we consider the OneMax problem for investigating the interaction between selection and linkage. We analyzed the effect of linkage on the average fitness and the frequency of the optimum solution. Since the degree of linkage decreases by the action of crossover, we can study the effect of crossover in terms of linkage theory. We used the schema theory in the analysis of crossover, and surveyed the role of crossover in Genetic Algorithms quantitatively. In this study, we found that the effect of random sampling is very large, and it appears through linkage. We also found that the frequency of the optimum solution increases by the crossover process. There are direct and indirect effects of crossover, and the indirect effect appears in the selection process. Numerical experiments suggest that the indirect effect is more important than the direct effect.

### 1. はじめに

選択は遺伝的アルゴリズム (GA) における最も重要な操作の 1 つであり、進化を推進するエンジンの役割をする。一方、遺伝学でよく知られた現象に連鎖がある<sup>1)</sup>。選択と連鎖は一見すると無関係のように思えるが、選択による集団分布の変化は、連鎖によって大きく影響される。Holland らは早くからこのことに気づき、文献 2) でもその重要性を指摘している。逆に、連鎖は選択の過程で生成され、選択における適応度関

数の形に依存する。しかし、これまでのところその基礎的な研究は不十分であり、これからの大きな課題といつてよい。

ここで連鎖とは、異なる遺伝子座間における遺伝子頻度の相関のことであり、遺伝学では最も重要な概念の 1 つである<sup>1)</sup>。本論文では、選択と連鎖の関係について数理的、実験的に解析し報告する。具体的には OneMax 問題を取り上げ、連鎖の果たす役割について研究する。交叉は、連鎖を切断する働きを持つことが知られている<sup>3)</sup>。したがって、連鎖の役割を研究することにより、交叉の役割についても知見を得ることができる。

我々は、論文 4)~6) において、OneMax 問題を例

<sup>†</sup> 京都教育大学教育学部

Faculty of Education, Kyoto University of Education

に、進化における連鎖と交叉の役割を検討した。ここでは、遺伝学者 Fisher が導いた「自然選択の基本定理」<sup>7)</sup>をもとに進化速度と集団の分散の係数に注目し解析を行った。Fisher の定理を大まかに述べると、平均適応度の増加と適応度の分散は比例する、ということである。したがって、進化を速くするためには適応度の分散を大きくする必要があるが、後で示すように分散は連鎖の強さに依存する。したがって、選択の効果は連鎖の強さによって大きく変化し、進化の速さを議論する場合、連鎖の概念が非常に重要になる。

連鎖は交叉によって変化し、上述のことから、交叉は結果的に選択の効果に影響を与える。最近、交叉を数学的に取り扱うためには、スキーマを用いることが有効であることが分かってきた<sup>8)</sup>。また、スキーマに対する交叉や突然変異の効果を厳密に記述する方法が開発された<sup>8),9)</sup>。これらのことから、GA における交叉の効果をも、連鎖を通じて分析することが可能になった。

本研究では、OneMax 問題における選択、連鎖と交叉の関係について検討する。そのため、平均適応度と最適解の時間的変化に注目し、スキーマを用いて解析を行う。また連鎖は、確率的揺らぎの効果により変化するため、確率的效果の役割についても議論する。

## 2. 方法

本論文では、Goldberg のテキストに記載されている Simple Genetic Algorithm に準じた GA を採用する<sup>10)</sup>。選択は適応度比例選択を、交叉は一様交叉を用いる。集団を構成する個体は世代ごとに入れ替わるものとし、進化を差分方程式により記述する。集団中の個体数  $N$  は非常に大きいものとし、確率的な揺らぎは無視する。このため進化を記述する方程式は決定論的となるが、確率的揺らぎの効果は、理論的予測と有限の  $N$  を用いた数値実験との比較の中で議論することにする。数学的な取扱いの詳細については、論文 3), 9) を参照されたい。

### 2.1 集団の表現

GA 集団としては、ビット列の集合を考える。長さ  $\ell$  のビット列  $B_i$  により  $i$  番目の遺伝子型を表現する

$$B_i = \langle i_\ell, i_{\ell-1}, \dots, i_2, i_1 \rangle.$$

ここで  $i_k$  は第  $k$  番目のビットを表す。このビット列を整数  $i$  の 2 進数表現と見なして  $B_i$  と  $i$  を同一視する。遺伝子型は全部で  $n = 2^\ell$  種類ある。また、

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

により  $B_i$  中のビット 1 の総数を表すことにする。

集団の分布は相対頻度

$$x_i(t) = \frac{N_i}{N} \quad (0 \leq i \leq n-1), \quad (1)$$

により表す。ここで  $N_i$  は第  $i$  遺伝子型を持つ個体数である。頻度  $x_i(t)$  は規格化の条件を満たす

$$\sum_{i=0}^{n-1} x_i(t) = 1. \quad (2)$$

### 2.2 Walsh 変換

ここで Walsh 関数と Walsh 変換について簡単にふれておく<sup>11),12)</sup>。長さ  $\ell$  のビット列  $i$  に対する第  $j$  番目の Walsh 関数を次式で定義する

$$W_{ij} \equiv \prod_{k=1}^{\ell} (-1)^{i_k \cdot j_k}. \quad (3)$$

頻度  $x_i(t)$  の Walsh 変換  $\tilde{x}_i(t)$  を

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

とし、その逆変換を

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

と定義する。 $\tilde{x}_i$  を Walsh 係数とよぶ。

すべての  $j$  について  $W_{0j} = 1$  が成り立つことと、規格化条件 (2) から次式を得る。

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

この式が Walsh 係数による規格化条件の表現になっている。

$k = |i|$  となる  $\tilde{x}_i$  を  $k$  次の Walsh 係数とよぶ。 $k$  次の Walsh 係数については次の表現を用いることもある。

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

ここで  $k = |i|$  であり、 $b_1 < b_2 < \dots < b_k$  は  $i$  の中のビット 1 の位置を表す。

### 2.3 スキーマ

スキーマは、すべての遺伝子型のうち、ある共通したビットパターンを持つものの集合のことである<sup>2),10)</sup>。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 でもよいことを表し、ビット 0 と 1 を定義されたビットとよぶ。スキーマを特徴付ける量としては、オーダー  $\mathcal{O}$  (次数) がある。次数  $\mathcal{O}$  は、スキーマに含まれる定義されたビット (ビット 0 と

1) の数の和を表す．スキーマと Walsh 変換は密接な関係があり，スキーマ頻度は Walsh 係数を用いて表すことができる．その具体的内容については文献 6)，9) を参照されたい．

ここでは，例として 1 次と 2 次のスキーマ頻度の Walsh 係数による表現を示す．まず第  $m$  ビットのみが定義されその値が 1 であるスキーマの頻度，すなわち位置  $m$  のビットの値が 1 である確率  $P_m^{(1)}$ ，を Walsh 係数を用いて表す．そのためまず次の関係に注意する

$$\frac{1}{2}(1 - \tilde{x}^{(1)}[m]) = \frac{1}{2} \sum_j \{1 - (-1)^{jm}\} x_j.$$

この式から，位置  $m$  における値が 1 であるビット列  $j$  を抜き出す演算子が定義できる

$$\delta(1 - j_m) = \frac{1 - (-1)^{jm}}{2}.$$

同様にして，ビット 0 のビット列を抜き出す演算子は

$$\delta(j_m) = \frac{1 + (-1)^{jm}}{2},$$

で与えられる．したがって

$$P_m^{(0)} = (1 + \tilde{x}^{(1)}[m])/2, \quad (7)$$

$$P_m^{(1)} = (1 - \tilde{x}^{(1)}[m])/2, \quad (8)$$

となる．

2 次のスキーマ頻度，位置  $m$  と  $m'$  のビット値がともに 1 である確率  $P_{m,m'}^{(11)}$  も Walsh 係数を用いて表すことができる

$$P_{m,m'}^{(11)} = \frac{1}{4} \{1 - \tilde{x}^{(1)}[m] - \tilde{x}^{(1)}[m'] + \tilde{x}^{(2)}[m, m']\}. \quad (9)$$

本論文では，定義されたビットの値が 1 であるスキーマのみを扱うので，スキーマの次数と定義されたビットの位置のみを表すこととし

$$P_m^{(1)} = P^{(1)}[m], \quad P_{m,m'}^{(11)} = P^{(2)}[m, m'],$$

のように表現する．一般に定義されたビットがすべて 1 である  $k$  次のスキーマの頻度は

$$P^{(k)}[m_1, m_2, \dots, m_k],$$

となる．

### 3. 集団の時間変化

#### 3.1 選 択

遺伝的操作が選択のみの場合の平均適応度  $\bar{f}(t)$  の時間変化を求める．選択として適応度比例選択を用い

る．世代  $t+1$  における頻度は  $x_i(t)$  から計算され

$$x_i(t+1) = \frac{f_i}{\bar{f}(t)} x_i(t) \quad (i = 0, \dots, n-1), \quad (10)$$

となる．ここで  $f_i$  は遺伝子型  $B_i$  に対する適応度であり， $\bar{f}(t)$  は世代  $t$  における集団の平均適応度である

$$\bar{f}(t) = \sum_{i=0}^{n-1} f_i x_i(t). \quad (11)$$

次に，この進化方程式から Fisher が「自然選択の基本定理」と名づけた定理を導く<sup>7)</sup>．進化方程式の両辺に  $f_i$  をかけ，すべての  $i$  についての和をとり，次式を得る

$$\bar{f}(t+1) = \frac{1}{\bar{f}(t)} \sum_i f_i^2 x_i(t).$$

平均適応度の世代あたりの変化率

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

は次式で与えられる．

$$\Delta \bar{f}(t) = \frac{1}{\bar{f}(t)} \text{VAR}(f), \quad (12)$$

$$\text{VAR}(f) = \sum_i f_i^2 x_i(t) - \bar{f}(t)^2.$$

平均適応度  $\bar{f}(t)$  の変化率を進化速度の 1 つの指標と見なし

$$v(t) \equiv \Delta \bar{f}(t) = \bar{f}(t+1) - \bar{f}(t), \quad (13)$$

とする．進化速度  $v(t)$  は適応度の分散  $\text{VAR}(f)$  に比例する．したがって，進化を促進するためには適応度の分散を大きくすればよいことが分かる．

#### 3.2 突然変異

突然変異による相対頻度の変化は

$$x_i(t+1) = \sum_{j=0}^{n-1} M_{ij} x_j(t), \quad (14)$$

と表すことができる．突然変異行列  $M_{ij}$  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  $p$  と  $i$  と  $j$  の間の Hamming 距離  $d(i, j)$  を用いて

$$M_{ij} = (1-p)^{\ell-d(i,j)} p^{d(i,j)}, \quad (15)$$

と表すことができる．

突然変異による進化方程式 (14) の Walsh 変換は，突然変異の効果をも形式的に  $\hat{M}$  として

$$\hat{M} \tilde{x}_i(t) = (1-2p)^{|i|} \tilde{x}_i(t), \quad (16)$$

で与えられる．

選択と突然変異の効果を一元的に扱うことができる．式 (10) と式 (14) から

$$x_i(t+1) = \sum_{j=0}^{n-1} \frac{M_{ij} f_j}{f(t)} x_j(t), \quad (17)$$

を導くことができる．この式は Eigen 方程式とよばれ，分子進化の研究から生まれた<sup>13)</sup>．

#### 4. 連鎖不平衡

連鎖不平衡は異なる遺伝子座の遺伝子が互いに相関を持つことを意味し，遺伝子座間に相関がない場合を連鎖平衡という<sup>1)</sup>．一般に交叉は，遺伝子座間の連鎖を弱める働きをし，交叉を繰り返し適用すると最終的に連鎖平衡の状態に収束する．また，突然変異も交叉と同様に連鎖不平衡を弱める働きをする．

2 次の連鎖不平衡係数を次式で定義する<sup>1)</sup>

$$D^{(2)}[m, m'] = P^{(2)}[m, m'] - P^{(1)}[m]P^{(1)}[m']. \quad (18)$$

式 (7), (9) をこの定義に代入し

$$D^{(2)}[m, m'] = \frac{1}{4} \{ \tilde{x}^{(2)}[m, m'] - \tilde{x}^{(1)}[m] \tilde{x}^{(1)}[m'] \}, \quad (19)$$

を得る．

Walsh 関数を用いた交叉の表現は Vose のテキストなどに記述されている<sup>3), 6), 12)</sup>．それらの結果から連鎖不平衡係数に対する交叉の効果を求めることができる．

1 次の Walsh 係数は交叉に対して不変である<sup>12)</sup>

$$\hat{C} \tilde{x}^{(1)}[m] = \tilde{x}^{(1)}[m],$$

ここで  $\hat{C}$  は交叉率  $\chi = 1$  における交叉の効果を表すものとする．

2 次の Walsh 係数に対する交叉の効果も同様に計算することができ，一様交叉の場合<sup>4)</sup>

$$\begin{aligned} \hat{C} \tilde{x}^{(2)}[m, m'] \\ = \frac{1}{2} \{ \tilde{x}^{(2)}[m, m'] + \tilde{x}^{(1)}[m] \tilde{x}^{(1)}[m'] \}. \end{aligned}$$

となる．したがって連鎖不平衡係数に対する効果は次式で与えられる

$$\hat{C} D^{(2)}[m, m'] = \frac{1}{2} D^{(2)}[m, m']. \quad (20)$$

突然変異も同様に  $D$  係数の絶対値を小さくする働きがある

$$\hat{M} D^{(2)}[k, m] = (1 - 2p)^2 D^{(2)}[k, m]. \quad (21)$$

したがって，突然変異と交叉が十分に働けば， $D^{(2)} = 0$  と仮定することができる．また，高次の連鎖不平衡係数もすべて 0 になれば，連鎖平衡状態に収束し

$$x_i = \prod_{m=1}^{\ell} P_m^{(i_m)}, \quad (22)$$

と表すことができる．

#### 5. OneMax 問題

OneMax 問題の適応度関数を次式で定義し，

$$f_i = \sum_{k=1}^l i_k = |i|.$$

この適応度を持つ集団の最大化問題を考える．したがって，

$$B_{n-1} = \langle 1, 1, \dots, 1 \rangle,$$

が最適解となる．適応度の Walsh 変換も非常に簡単な形をしており

$$\tilde{f}_i = \begin{cases} n\ell/2 & (i=0) \\ -n/2 & (|i|=1) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (23)$$

で与えられる．

この関数から 2 つの統計量を計算する．1 つは平均適応度  $\bar{f}$  であり，他の 1 つは適応度の分散  $\text{VAR}(f)$  である．世代  $t$  における平均適応度は

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

で与えられ，分散は

$$\text{VAR}(f) = V\{|i|\} = \sum_{i=0}^{n-1} |i|^2 x_i(t) - E\{|i|\}^2,$$

となる．これらの量は次の母関数  $G(s, t)$  を用いて容易に計算できる<sup>4)</sup>

$$G(s, t) = \sum_{i=0}^{n-1} \exp(|i|s) x_i(t).$$

母関数  $G(s, t)$  中の  $x_i(t)$  を Walsh 係数  $\tilde{x}_j(t)$  で展開すると以下の計算が容易になる

$$G(s, t) = \frac{1}{n} \sum_{i,j} \exp(|i|s) W_{ij} \tilde{x}_j(t).$$

母関数  $G$  の具体的な形は次式で与えられる．

$$G(s, t) = \sum_{j=0}^{n-1} \left( \frac{1+e^s}{2} \right)^{\ell-|j|} \left( \frac{1-e^s}{2} \right)^{|j|} \tilde{x}_j(t). \quad (24)$$

平均適応度  $E\{|i|\}$  は母関数から

$$E\{|i|\} = \left. \frac{\partial}{\partial s} G(s, t) \right|_{s=0},$$

として求めることができ、次式を得る

$$\begin{aligned} E\{i\} &= \sum_{k=1}^{\ell} P^{(1)}[k] \\ &= \sum_{k=1}^{\ell} \frac{1 - \tilde{x}^{(1)}[k](t)}{2}. \end{aligned} \quad (25)$$

同様に分散は、

$$V\{i\} = V_A + V_E, \quad (26)$$

で与えられ、ここで

$$V_A = \sum_{k=1}^{\ell} P^{(1)}[k] (1 - P^{(1)}[k]), \quad (27)$$

$$V_E = 2 \sum_{k < k'} D^{(2)}[k, k']. \quad (28)$$

となる。

$V_A$  は  $P^{(1)}[k]$  にもみ依存し、交叉の影響は受けない。一方、 $V_E$  は 2 つの遺伝子座間の相関に依存し、 $D^{(2)}[k, k']$  の関数である。したがって、交叉によって値が変化する。一様交叉の場合、式 (20) から

$$\hat{C}V_E = \frac{1}{2} V_E, \quad (29)$$

となる。

同様に、突然変異の効果も式 (21) から

$$\hat{M}V_E = (1 - 2p)^2 V_E, \quad (30)$$

と表すことができる。

一方、スキーマについても同様な式を求めることができる。0 次のスキーマは規格化条件を表し、世代により変化することはない。1 次のスキーマ頻度  $P^{(1)}[k]$  に対する進化方程式は

$$P^{(1)}[k](t+1) = P^{(1)}[k](t) + \frac{v_k(t)}{\bar{f}(t)}, \quad (31)$$

となる。ここで  $v_k$  は 2 つの項の和となり

$$\begin{aligned} v_k(t) &= v_k^a(t) + v_k^e(t), \\ v_k^a(t) &= P^{(1)}[k](t) \{1 - P^{(1)}[k](t)\}, \end{aligned} \quad (32)$$

$$v_k^e(t) = \sum_{m \neq k} D^{(2)}[k, m], \quad (33)$$

と定義する。 $v_k^a$  と  $v_k^e$  は

$$V_A = \sum_k v_k^a, \quad V_E = \sum_k v_k^e,$$

という関係にある。

進化方程式 (31) を解くため、後で述べる理由により、連鎖平衡の状態を仮定し、 $v_k^e = 0$  とする。またすべてのビットは対等に進化するとして  $k$  依存性を無視し

$$P_1(t) = P^{(1)}[k](t),$$

と仮定する。すると

$$\bar{f}(t) = \ell P_1(t),$$

$$v_k(t) = v_k^a(t) = P_1(t) \{1 - P_1(t)\},$$

から進化方程式

$$P_1(t+1) = P_1(t) + \frac{1}{\ell} \{1 - P_1(t)\}, \quad (34)$$

を得る。その解は

$$P_1(t) = 1 - \left(1 - \frac{1}{\ell}\right)^t \{1 - P_1(0)\}, \quad (35)$$

で与えられる。

次に、突然変異の効果を考える。選択の後で突然変異を適用したとすると

$$\begin{aligned} P_1(t+1) &= (1 - 2p) \left(1 - \frac{1}{\ell}\right) P_1(t) + \frac{1}{\ell} (1 - 2p) + p, \end{aligned}$$

となる。この解は

$$\alpha = (1 - 2p) \left(1 - \frac{1}{\ell}\right),$$

$$\beta = 1 - \frac{p}{2p + (1 - 2p)/\ell},$$

として

$$P_1(t) = \alpha^t \{P_1(0) - \beta\} + \beta, \quad (36)$$

で与えられる。もし、集団が連鎖平衡状態にあれば、最適解  $\langle 1, 1, \dots, 1 \rangle$  の相対頻度  $x_{n-1}$  について

$$x_{n-1}(t) = P_1(t)^\ell, \quad (37)$$

が良い近似で成立する。

## 6. 数値実験

OneMax 問題における、連鎖と選択、交叉、突然変異の関係を数値実験により調べた。ビット長  $\ell = 8$ 、集団の個体数  $N = 200$  とした。また、比較のため  $N = 2000, 20000$  の計算も行った。突然変異は、弱い突然変異 ( $p = 0.001$ ) と強い突然変異の場合について ( $p = 0.05$ ) 結果を比較した。また、2 通りの交叉係数 ( $\chi = 1, \chi = 0$ ) について計算を行い、交叉の効果を検討した。初期状態は、すべての  $k$  について  $P^{(1)}[k] = 1/\ell$  とし、集団の個体をランダムに生成した。乱数を変えながら同じ計算を 100 回繰り返し、得られた結果の平均を求めた。

### 6.1 平均適応度

平均適応度については、すでに文献 4)~6) などの研究があるが、ここでは主に確率的揺らぎの効果を中心に調べた。

図 1 に、 $N = 200$ 、弱い突然変異の場合 ( $p = 0.001$ )

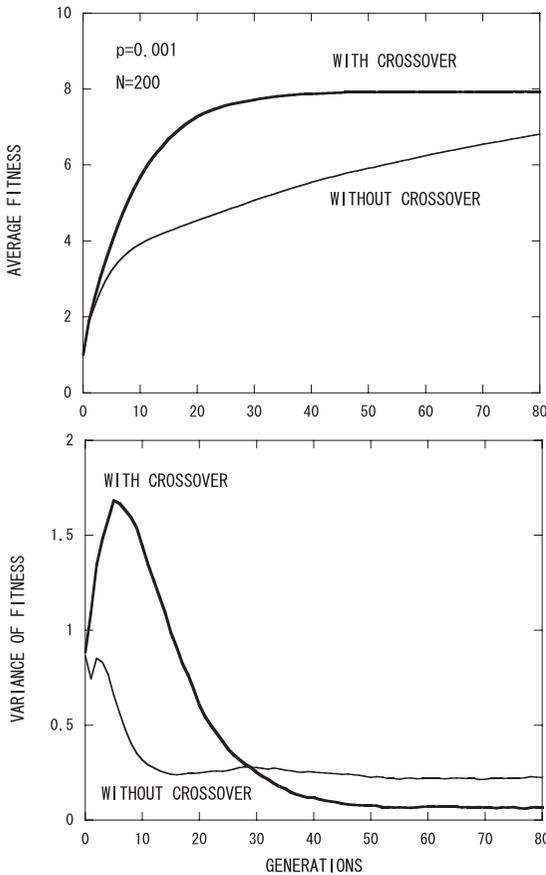


図 1 OneMax 問題における平均適応度 ( 上段 ) と適応度の分散 ( 下段 ).  $\ell = 8, p = 0.001, N = 200$ . 太い実線は交叉あり, 細い実線は交叉なし

Fig. 1 The average fitness in OneMax problem (upper figure), and the variance of fitness (lower figure).  $\ell = 8, p = 0.001$ , and  $N = 200$ . Thick solid line shows the result with crossover, and thin solid line without crossover.

における, 平均適応度と適応度の分散の世代による変化を示した. 太い実線が交叉あり ( $\chi = 1$ ), 細い実線が交叉なし ( $\chi = 0$ ) の結果である. 平均適応度については, 明らかに交叉のある方が速く定常状態に収束していくことが分かる. 適応度の分散を見てみると, 交叉がない場合は交叉のある場合に較べ値が小さくなっており, Fisher の定理 (12) から, 交叉による平均適応度の増加の違いが理解できる.

Fisher の自然選択の基本定理によれば, 適応度の分散が大きくなるとそれに比例して進化速度 (この場合は平均適応度の変化率) も大きくなる. 一般に突然変異があると, Fisher の定理は厳密には成り立たないが,  $p$  が小さい場合は近似的な意味で成り立つ. 今回の計算では  $p = 0.001$  と非常に弱い突然変異を用いたの

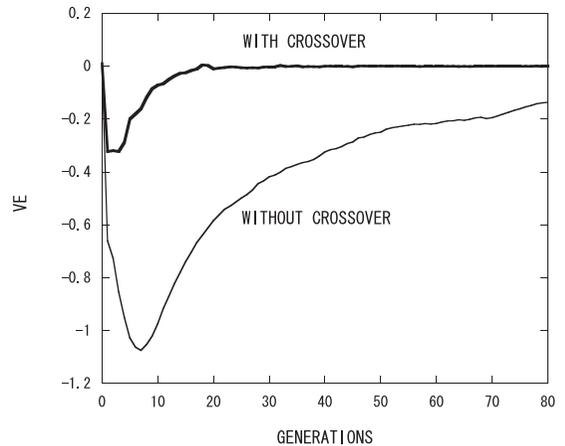


図 2 OneMax 問題における  $V_E$ . 交叉のある場合 ( 太い実線 ) とない場合 ( 細い実線 ).  $N = 200, p = 0.001$ .

Fig. 2  $V_E$  in OneMax problem. With crossover (thick solid line) and without crossover (thin solid line).  $N = 200, p = 0.001$ .

で, Fisher の定理がほぼ成り立つことが期待できる.

この結果をより詳しく検討するため, 図 1 と同じ条件 ( $p = 0.001, N = 200$ ) で  $V_E$  の変化を調べた. 図 2 に交叉による  $V_E$  の違いを世代の関数として示した. 太い実線が交叉あり ( $\chi = 1$ ), 細い実線が交叉なし ( $\chi = 0$ ) の結果である. いずれも負の値をとっているが, 交叉のない場合は大きな負の値をとり, 適応度の分散が小さくなる. その結果が, 平均適応度の増加の差となって現れる.

図 3 に交叉のない場合の平均適応度の世代による変化を示した. 点線は数値実験の結果で, 実線は理論値である. 数値実験では, 個体数として  $N = 200, 2000, 20000$  の 3 通りの計算を行った. 理論値は Eigen 方程式 (17) を解いて求めた. 理論値は, 確率的揺らぎを無視して導かれたことに注意されたい. この図から, 理論値が数値実験の結果と大きくずれていることが分かる. このことは確率的揺らぎの効果が無視できないことを示している. また, 数値実験と理論値のずれの大きさは, 集団の大きさ  $N$  に大きく依存しており, 確率的揺らぎが一番少ないと思われる  $N = 20000$  の結果が, 最も理論値に近づいている. このように, 交叉のない場合の数値実験と理論値の比較は, 揺らぎの効果が無視できない重要な要素であることを示している.

次に, 図 4 では同じ条件で交叉を入れて行った計算の結果を示した. 理論値は近似式 (36) を用いて

$$\bar{f}(t) = \ell P_1(t)$$

から求めた. 理論の予測は数値実験とよく一致し, 近似の条件  $v_k^e = 0$  が成立していることを意味している.

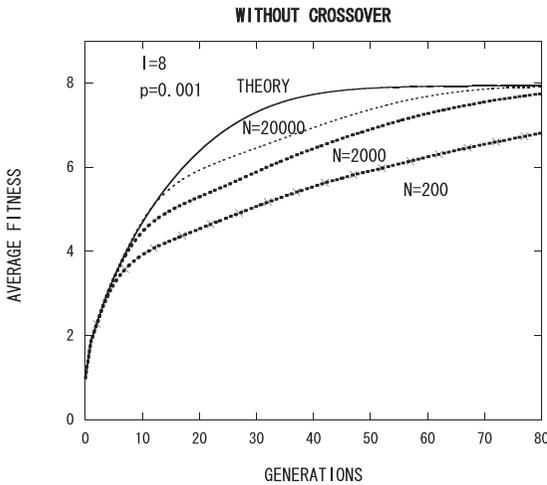


図 3 OneMax 問題における平均適応度 .  $p = 0.001$ , 交叉なし . 点線は数値実験の結果,  $N = 200, 2000, 20000$ . 実線は理論値

Fig.3 Average fitness in OneMax problem.  $p = 0.001$ . Without crossover. Dotted lines show numerical experiments. Population sizes are  $N = 200, N = 2000$  and  $20000$ . Solid line shows the result of theoretical prediction.

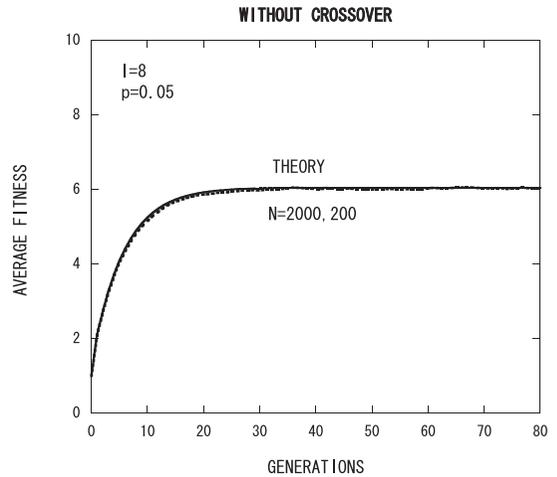


図 5 平均適応度の変化 .  $p = 0.05$ , 交叉なし . 点線は数値実験の結果,  $N = 200, 2000$ . 実線は理論値

Fig.5 Change in average fitness.  $p = 0.05$ . Without crossover. Dotted lines show numerical experiments. Population sizes are  $N = 200, N = 2000$ . Solid line shows the result of theoretical prediction.

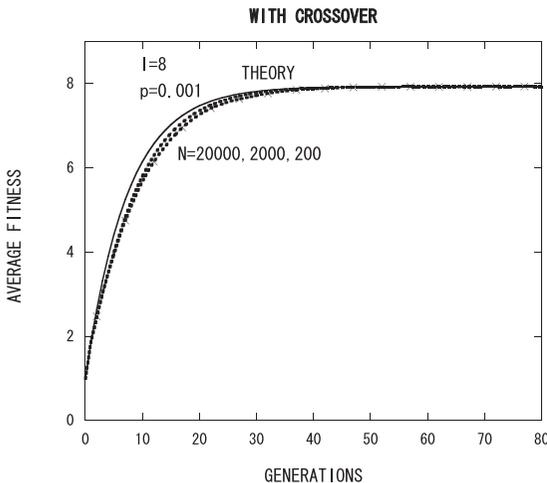


図 4 OneMax 問題における平均適応度 .  $p = 0.001$ , 交叉あり . 点線は数値実験の結果,  $N = 200, 2000, 20000$ . 実線は理論値

Fig.4 Average fitness in OneMax problem.  $p = 0.001$ . With crossover. Dotted lines show numerical experiments. Population sizes are  $N = 200, N = 2000$  and  $20000$ . Solid line shows the result of theoretical prediction.

また、もう1つ注目する点は  $N$  依存性がほとんど現れないことである。このことは、確率的揺らぎの効果が少ないことを示唆している。

図 5 に、交叉なしで強い突然変異を用いた場合の計

算結果を示した。理論値は図 3 と同様に Eigen 方程式 (17) の解を用いた。この計算では交叉は用いていないが、実験値と理論値は非常によく一致し、個体数による違いも少ない。その意味で交叉を入れた図 4 の結果とよく似ている。このことは図 4 の場合と同様に、確率的揺らぎの効果が少ないことを示している。

図 5 において、世代数が大きくなると平均適応度が最大値 8 ではなく 6 あたりに収束している。このように突然変異が強くなると、平均適応度は最大値ではなくもっと小さい値に収束するようになる。こうした突然変異の効果については、たとえば文献 14) を参照されたい。一般に突然変異は、すべての遺伝子型を一樣に分布させる働きがある<sup>3)</sup>。それに対し選択は高い適応度を持つ遺伝子型を増加させる。こうして集団は選択と突然変異が均衡する分布に収束し (selection-mutation balance), 突然変異率  $p$  が大きいと低い適応度を持つ遺伝子型も有限の頻度で存在する。Eigen はこのような分布を quasi-species と名付けた<sup>13)</sup>。こうした機構により、強い突然変異の下では平均適応度は最大適応度より小さな値に収束していく。

図 6 と図 7 に、交叉のある場合とない場合、強い突然変異を用いた場合における適応度の分散の成分  $V_E$  の変化を示した。図 6 には、弱い突然変異で交叉ありの計算 (上段) と強い突然変異で交叉なしの計算 (下段) を示した。図 4, 5 で示したように、いずれの計算も個体数依存性が小さく、理論値が数値実験をよく再現することができた例である。両結果とも  $V_E$  は初

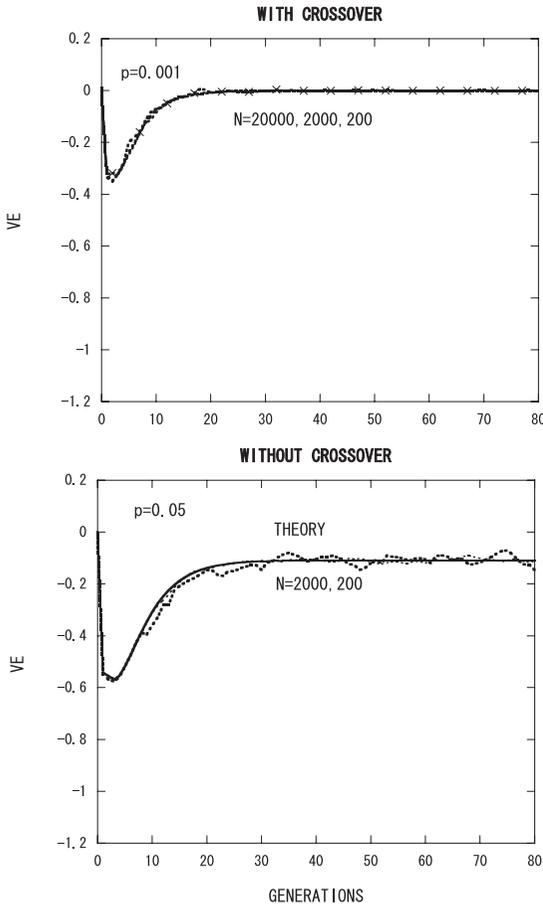


図 6  $V_E$  の  $N$  依存性 . 上段 : 交叉あり , 弱い突然変異 . 下段 : 交叉なし , 強い突然変異 . 数値実験と理論予測  
 Fig.6  $N$  dependence of  $V_E$ . Upper figure: with crossover, weak mutation. Lower figure: without crossover, strong mutation. The theoretical prediction is also shown.

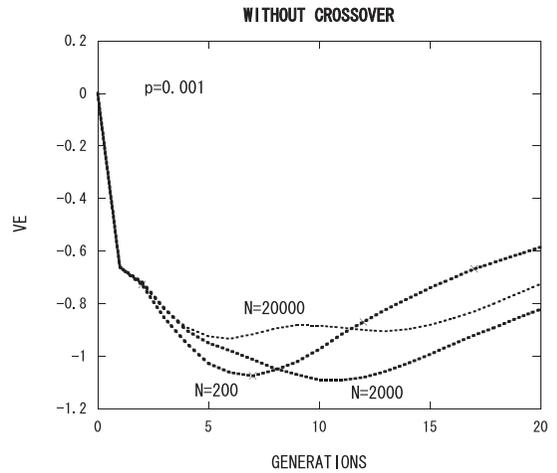


図 7  $V_E$  の  $N$  依存性 . 交叉なし , 弱い突然変異  
 Fig.7  $N$  dependence of  $V_E$ . Without crossover, weak mutation.

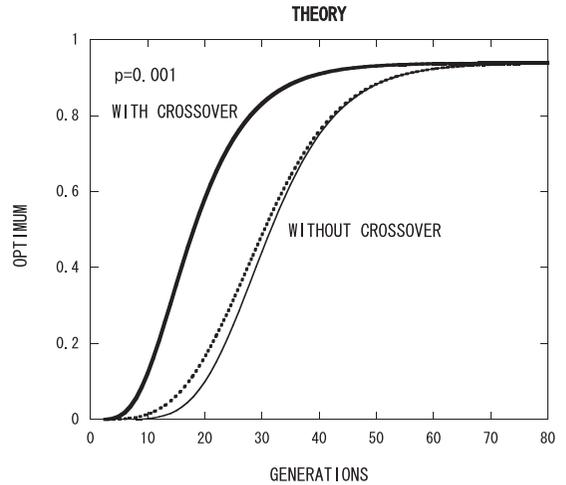


図 8 最適解の頻度の理論的予測  
 Fig.8 Theoretical prediction of the frequency of the optimum solution.

期段階 ( 世代数  $t < 20$  ) を除いて小さな値であり , その個体数依存性も小さい . 図下段の強い突然変異の計算では , Eigen 方程式 (17) の解から  $V_E$  を求め , 数値実験と比較した . 図から分かるように両者は非常によく一致し , ここでも確率的効果の小さいことが示される .

次に ,  $N$  に大きく依存した , 弱い突然変異 , 交叉なしの計算における  $V_E$  の値を求めた . 図 7 に世代  $t$  の初期における  $V_E$  の値を示した . この計算では大きな  $N$  依存性が見られ , とくに  $N$  が小さくなると初期段階で負の大きな値をとることが分かる . このことは , 交叉がないと連鎖不平衡係数  $D^{(2)}$  が負の大きな値を取り , そのため確率的揺らぎの効果が現れやすくなることによると思われる .

### 6.2 最適解

次に , OneMax 問題の最適解の頻度 ,  $x_{n-1} = P^{(\ell)}[1, 2, \dots, \ell]$  の時間変化を調べた . 最適解を  $\ell$  次のスキーマと考えると , 最高次のスキーマの性質を知ることにもなる .

図 8 は , 弱い突然変異 ( $p = 0.001$ ) の下で , 最適解の頻度が増加する過程を理論的に予測したものである . 細い実線は Eigen 方程式の解で , 交叉がない場合に相当する . 細い点線は Eigen 方程式の解に連鎖平衡の近似を導入した場合の解である . そのため , まず Eigen 方程式の解から 1 次のスキーマ頻度  $P^{(1)}[k]$  を計算し ,

$$x_{n-1} = \prod_{k=1}^{\ell} P^{(1)}[k], \quad (38)$$

として解を得た．太い実線は，交叉が最も有効に働いて近似式 (37) が成立した場合の解である．最適解の頻度  $x_{n-1}$  は，交叉によって連鎖平衡式 (38) の状態に近づく．これを交叉の直接的効果とよぶことにする．この図では，細い実線と細い点線の違いが直接的効果を表している．しかし，その違いを見るかぎり直接的効果はあまり大きくない．すでに見たように，交叉の効果は選択の過程を通じて間接的に現れる．交叉のある場合（太い実線）とない場合（細い実線）の結果を比較し，それから交叉の直接的効果を引いたものを定義し，これを交叉の間接的效果とよぶことにする．図では，太い実線と細い点線の違いが交叉の直接的効果に相当する．図 8 における理論の予測からは，この間接的效果がより重要であると思われる．

図 9 は，弱い突然変異で交叉のない場合における，最適解の変化の数値実験を示したものである．点線は，連鎖平衡の式 (38) を用いた解で，実線との差が交叉の直接的効果を表している．この計算でも交叉の直接的効果はあまり大きくないことが分かる．ここで注目するのは際立った個体数依存性である．これは，平均適応度が 1 次のスキーマ頻度  $P^{(1)}[k]$  に比例するのに対し，最適解頻度はほぼその  $\ell$  乗に比例することから理解できる．

しかし，同じ数値実験でも交叉があると状況は大きく異なる．図 10 は図 9 と同じ計算結果であるが交叉が入っている．理論値を太い実線で示した．理論解には近似式 (37) を用いた．数値実験では個体数  $N$  依存性が見られなかったため， $N = 200$  の結果のみを細い実線で示した．図から数値実験と理論値の差が非常に小さいことが分かる．このように，最適解についても交叉が加わると確率的揺らぎの効果が非常に小さくなる．この実験結果に対しさらに連鎖平衡の仮定 (38) を用いた結果も細い点線で示したが，実験の結果（細い実線）と重なり見えなくなっている．これは，数値実験で得られた最適解の頻度  $x_{n-1}$  が連鎖平衡状態にあることを意味する．

次に個体数  $N = 200$  での数値実験の比較から交叉の間接的效果を調べてみる．図 9 の細い点線 ( $N = 200$ ) と図 10 の細い実線の差が，間接的效果に相当する．2 つの結果は大きく異なっており，この比較から，非常に大きな間接的效果があることが分かる．図 9 の説明で述べたように，最適解の頻度  $x_{n-1}$  に対する交叉の直接的効果はあまり大きくはなく，むしろこのように

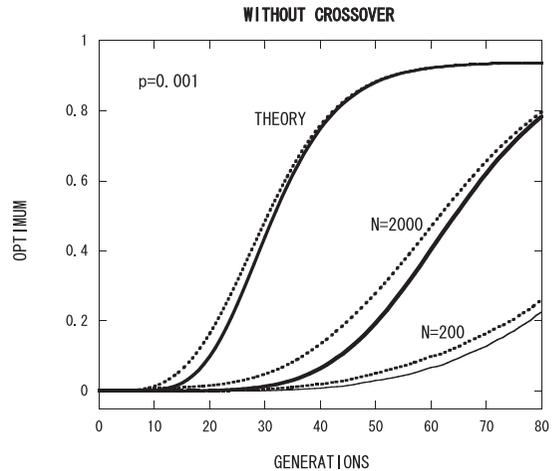


図 9 最適解の頻度．交叉なし，弱い突然変異

Fig. 9 The frequency of the optimum solution. With crossover, weak mutation.

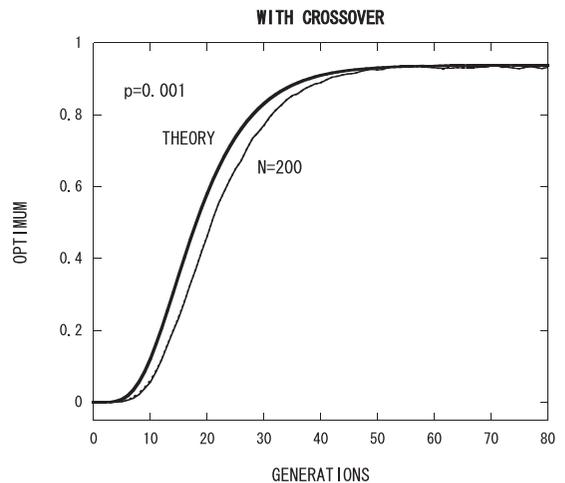


図 10 最適解の頻度．交叉あり，弱い突然変異

Fig. 10 The frequency of the optimum solution. With crossover, weak mutation.

選択を通じて現れる間接的效果が重要である．

## 7. まとめと今後の課題

連鎖は遺伝学における最も重要な概念の 1 つであるが，GA 研究においては省みられることが少ない．連鎖不平衡を生み出す原因としては，選択と random sampling による確率的揺らぎが指摘されている<sup>1)</sup>．連鎖に対する選択の役割については，適応度の関数形や選択の方式などに注目した解析が必要となる．しかし，この問題に関する研究は少なく，今後の重要な課題である．確率的揺らぎの役割については，選択の役割以上に分からないことが多い．しかし，少数の個体を用

いて計算することが多い GA にとって避けては通れない問題である。

本論文で示したように、連鎖の原因は選択であるが、逆に選択の効果は連鎖の強さに大きく影響される。このように、両者は相互に関連し合っており、このことに注意しながら進化のメカニズムを調べる必要がある。OneMax 問題を選んだ理由は、適応度が線形で、取扱いが容易と思われたからであったが、それでも、選択の働く様子は複雑であった。まして、一般の問題は高次のスキーマを含んだ適応度を持っており、より複雑な動きをすることが予想される。そのため、OneMax 問題などの簡単な適応度を持つ課題を選びながら、一步一步着実に研究を進めていく必要がある。

交叉は連鎖を弱める働きをし、結果として選択とも密接に関係する。最適解の分析において示されたように、交叉には最適解に直接働く効果（直接的効果）と選択の過程を通じて現れる効果（間接的効果）とがあり、区別して調べる必要がある。今回の研究では、間接的効果が直接的効果よりかなり大きいことが分かった。OneMax 問題の適応度関数は 1 次のスキーマのみで表されるため、交叉の直接的効果はない。しかし、一般の問題では適応度関数が高次のスキーマを含むため、交叉の直接的効果は無視できなくなる。別の機会にこの問題は報告したい。

確率的揺らぎの効果は連鎖を通じて現れる。そのため、交叉のある場合や強い突然変異の働く場合は、確率的効果は交叉や突然変異にうち消されて見えなくなる。しかし、先に述べたようにそのメカニズムに関する取り組みは不十分である。今後は、その確率論的枠組みの構築について研究を進めていきたい。

## 参 考 文 献

- 1) Maynard Smith, J.: *Evolutionary Genetics*, Oxford University Press, Oxford (1998).
- 2) Holland, J.H.: *Adaptation in Natural and Artificial Systems*, MIT Press, Massachusetts (1992).
- 3) 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).
- 4) Furutani, H.: Study of Crossover in One Max Problem by Linkage Analysis, *Proc. Genetic and Evolutionary Computation Conference, GECCO-2001*, Spector, L., et al. (Eds.), Morgan Kaufmann, pp.320–327 (2001).
- 5) 古谷博史：遺伝的アルゴリズムのスキーマ定理

による解析 — 突然変異と交叉の役割, 情報処理学会論文誌: 数理モデル化と応用, Vol.43, No.SIG 10 (TOM 7), pp.35–45 (2002).

- 6) Furutani, H.: Schema Analysis of OneMax Problem — Evolution Equation for First Order Schemata, *Foundations of Genetic Algorithms 7*, De Jong, K., et al. (Eds.), Morgan Kaufmann, pp.19–36 (2003).
- 7) Fisher, R.A.: *The Genetical Theory of Natural selection*, 2nd edition, Dover, New York (1958).
- 8) Stephens, C.R. and Waelbroeck, H.: Effective Degrees of Freedom in Genetic Algorithms, *Physical Review E*, Vol.57, pp.3251–3264 (1998).
- 9) 古谷博史：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, 情報処理学会論文誌, Vol.43, No.4, pp.1050–1060 (2002).
- 10) Goldberg, D.E.: *Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning*, Addison Wesley, Massachusetts (1989).
- 11) Goldberg, D.E.: Genetic Algorithms and Walsh Functions: Part I, a Gentle Introduction, *Complex Systems*, Vol.3, pp.129–152 (1989).
- 12) Vose, M.D.: *The Simple Genetic Algorithms*, MIT Press, Massachusetts (1999).
- 13) Eigen, M.: Selforganization of Matter and the Evolution of Biological Macromolecules, *Die Naturwissenschaften*, Vol.58, pp.465–523 (1971).
- 14) Furutani, H.: Application of Eigen's Evolution Model to Infinite Population Genetic Algorithms with Selection and Mutation, *Complex Systems*, Vol.10, pp.345–366 (1996).

(平成 15 年 4 月 11 日受付)

(平成 15 年 5 月 20 日再受付)

(平成 15 年 6 月 3 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。