

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—

古 谷 博 史†

遺伝的アルゴリズム (GA) の成功にもかかわらず、その理論的基礎付けに関する研究は少ない。スキーマ定理はそれらの中で歴史も長く重要な理論であるが、有効性について様々な批判があり、多くの欠点が指摘されている。最近、我々は突然変異と交叉について厳密なスキーマの進化方程式を導出する方法を見出した。このことにより、突然変異と交叉によるスキーマの変化を理論的に調べるのが可能となった。本論文では、One-Max 問題を例にとり、選択の役割も加えたスキーマ理論の立場から進化の解析を行う。1 次のスキーマについて厳密なスキーマ定理を導き、数値実験と比較する。

Analysis of Genetic Algorithms by Schema Theorem -Roles of Mutation and Crossover-

HIROSHI FURUTANI†

In spite of the success of genetic algorithms (GAs), there are only a few theories on the foundation of GAs. The schema theorem is a long standing and important theory among them. However, there are a variety of criticisms on it, and have been pointed out many shortcomings. Recently, we have obtained a method for deriving exact evolution equations of schemata under the actions of mutation and crossover. This makes it possible to study theoretically the changes of schemata by them. In this paper, we analyze the roles of these operators and selection in the One-Max problem by means of the new schema theory. We derive an exact schema theorem for the first order schemata, and compare the theory with numerical experiments.

1. はじめに

最近の様々な分野における遺伝的アルゴリズム (GA) の成功にもかかわらず、その理論的基礎付けに関する研究は少ない。Holland により提案されたスキーマ定理は、それら理論的研究の中でもっとも重要なものと考えられる¹⁾。しかし一方で、その有効性について多くの異論があることも事実である。そのような批判に答えるため、より定量的なスキーマ定理を導く試みもなされている。Stephens らは、突然変異と一点交叉についてスキーマの進化を表現する方程式を導いた²⁾。

最近、我々は Walsh 変換を利用し、遺伝子型頻度の進化方程式からスキーマ頻度の進化方程式を求める方法を開発した³⁾。都合のよいことに突然変異と交叉の場合、遺伝子型頻度の Walsh 変換に対する進化方程式は簡潔な形に表される⁴⁾。したがって、突然変異と交叉に対するスキーマ進化方程式を比較的容易に導く

ことができた³⁾。しかし、選択によるスキーマの進化方程式は非常に複雑になり、任意の適応度関数についてその形を求めることは難しい。そのため論文³⁾では、選択によるスキーマ進化方程式について詳しくはふれなかった。そこで本論文では、線形の適応度を持ち、数学的取り扱いが容易な One-Max 問題を例にとり、スキーマ理論の立場から GA の時間発展に対する理論的解析を行う。

2. 数学モデル

本論文では、GA における選択、突然変異、交叉の役割について考察する。選択では適応度比例選択、交叉では一様交叉を用いることにする。

集団の構成要素は世代毎に入れ替わるものとし、進化の過程は差分方程式により記述する。また、仮想的に個体数が無限大の集団を考え、確率的揺らぎは無視する。集団内の個体数は時間的に一定とする。個体は ℓ ビット固定長の 2 進ビット列で表し、個体の遺伝子型とよぶ。場合によりこのビット列を非負整数の 2 進表現とみなす。すなわち、 i 番目の遺伝子型 B_i に対応す

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

る2進ビット列は、 $i = \langle i_\ell, \dots, i_1 \rangle$ と表される。2進ビット列*i*に含まれるビット1の数を $|i| = \sum_{k=1}^{\ell} i_k$ で表す。遺伝子型の種類の総数は $n = 2^\ell$ である。集団内の遺伝子型分布の変化を表すため、世代*t*における遺伝子型*B_i*の相対頻度 $x_i(t)$ を用いる。

GAの進化を記述するとき、直接 $x_i(t)$ を扱うより、そのWalsh変換

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

を用いたほうが表現が簡単になることがある⁴⁾。以下、 \bar{x}_i をWalsh係数とよぶ。Walsh係数では、ビット列*i*に含まれる1の個数とその位置 b_m が重要になる。そのような場合には $k = |i|$, $b_1 < \dots < b_k$ とし

$$\bar{x}_i(t) = \bar{x}^{(k)}[b_1, \dots, b_k](t) \quad (2)$$

と表すことにする。また、 k をWalsh係数の次数とよぶ。

交叉や突然変異の役割を考察する上で非常に重要な概念に連鎖不平衡(linkage disequilibrium)⁴⁾がある。集団が、遺伝子座*b*においてビット値*m*をとる相対頻度を $P[m_b]$ と表す。また、遺伝子座*b, b'*においてビット値*m, m'*をとる相対頻度を $P[m_b, m'_{b'}]$ とする。このとき連鎖不平衡係数を次式で定義する

$$D[b, b'] = P[1_b, 1_{b'}] - P[1_b]P[1_{b'}]. \quad (3)$$

我々は論文3)において、Walsh変換によりスキーマ定理が導出できることを示した。この方法では、突然変異や交叉のスキーマを生成する効果も考慮されている。

L 次のスキーマの場合、 $S = \{b_1, \dots, b_L\}$ をすべての定義されたビットの位置の集合とし、 $S' = \{b'_1, \dots, b'_k\}$ をその部分集合とする。スキーマの頻度を $h^{(L)}[i(b_1), \dots, i(b_L)]$ とすると

$$\begin{aligned} & h^{(L)}[i(b_1), \dots, i(b_L)] \\ &= \frac{1}{2^L} \sum_{S'} (-1)^{i(b'_1) + \dots + i(b'_k)} \bar{x}^{(k)}[b'_1, \dots, b'_k] \end{aligned} \quad (4)$$

を得る。ここで右辺の和は集合*S*のすべての部分集合についてとるものとする。

逆変換も同様に次式で与えられる

$$\begin{aligned} & (-1)^{i(b_1) + \dots + i(b_L)} \bar{x}^{(L)}[b_1, \dots, b_L] \\ &= \sum_{S'} (-1)^{L-k} 2^k h^{(k)}[i(b'_1), \dots, i(b'_k)]. \end{aligned} \quad (5)$$

ここでも和は集合*S*のすべての部分集合についてとるものとする。

これらの結果を用いて、Walsh係数の進化方程式をスキーマの進化方程式に変換することができる。

$$\begin{aligned} & \hat{M} h^{(L)}[i(b_1), \dots, i(b_L)] \\ &= \sum_{S'} (1-2p)^k p^{L-k} h^{(k)}[i(b_1), \dots, i(b_k)] \end{aligned} \quad (6)$$

を得る。ここで右辺は、集合*S*のすべての部分集合についての和である。

交叉についてのスキーマ方程式を導くため、スキーマの別の表現として

$$\{0, 1\} \rightarrow 1, \quad \{*\} \rightarrow 0 \quad (7)$$

で与えられるビット列*i*(\mathcal{H})を用いる。スキーマに対する交叉の効果は

$$\hat{C}(R) h(k) = \sum_{i=0}^{n-1} c_{i \oplus k}(R) h(i) h(i \oplus k), \quad (8)$$

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(7)である。

3. One-Max問題におけるスキーマ解析

One-Max問題の適応度は

$$f_i = |i| = \sum_{k=1}^{\ell} i_k \quad (9)$$

と定義され、ビット列*i*の中のビット1の個数に等しい。このように線形の適応度をもつため、One-Max問題の解析は数学的取り扱いが比較的容易である。ここでは主に1次のスキーマに注目し、選択、突然変異、交叉の効果調べてゆく。式の表現を簡単にするため

$$h^{(1)}[i_k = 1] \rightarrow h^{(1)}[1_k]$$

などと簡略化して表すことにする。

適応度のWalsh変換も非常に簡単な形をしており

$$\bar{f}_i = \begin{cases} n\ell/2 & (i=0) \\ -n/2 & (|i|=1) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (10)$$

で与えられる。平均適応度は

$$\bar{f}(t) = \sum_{m=1}^{\ell} h^{(1)}[1_m] \quad (11)$$

となる。

1次のスキーマについて進化方程式を求め、

$$\bar{x}^{(1)}[k](t+1) = \frac{1}{2\bar{f}(t)} \left\{ \bar{x}^{(1)}[k] - \sum_{m \neq k} \bar{x}^{(2)}[k, m] - 1 \right\}$$

を得る。ただし、右辺の $\bar{x}^{(2)}[k, m]$ について*k*と*m*の大小は問わないことにする。このように選択の場合には、1次の式に対しより高次の項が現れる。One-Max問題では2次の項までしか現れないが、一般の適応度では多くの高次項が現れて取り扱いが難しくなる。

2次の項 $\bar{x}^{(2)}[k, m]$ を取り扱うため、連鎖不平衡係数

$$D[k, m] = h^{(2)}[1_k, 1_m] - h^{(1)}[1_k]h^{(1)}[1_m]$$

を用い、 $v_k(t) = v_k^a(t) + v_k^e(t)$ とし、

$$v_k^a(t) = h^{(1)}[1_k]h^{(1)}[0_k] \quad (12)$$

$$v_k^e(t) = \sum_{m \neq k} D[k, m] \quad (13)$$

と定義すると、1次のスキーマに対するスキーマ定理

$$h^{(1)}[1_k](t+1) = h^{(1)}[1_k](t) + \frac{v_k(t)}{\bar{f}(t)} \quad (14)$$

を導くことができる。1世代あたりの変化は

$$\Delta h^{(1)}[1_k](t) = \frac{v_k(t)}{\bar{f}(t)} \quad (15)$$

となる。Fisher は平均適応度の変化について同様な定理を導いたが⁵⁾、そのスキーマへの拡張になっている。

交叉の効果は2次以上のスキーマに現れる。この例では、1次のスキーマに対する方程式(14)の v_k を通じて影響する。 v_k^e は1次のスキーマの積であるから、 v_k^e のみが交叉により変化する。一様交叉は v_k^e の絶対値を小さくするよう働く。また、突然変異も v_k^e の絶対値を小さくする働きをする。交叉率を $\chi = 1$ とした場合、突然変異と一様交叉による v_k^e への効果は

$$\widehat{M}v_k^e = (1-2p)^2v_k^e, \quad \widehat{C}(R)v_k^e = v_k^e/2,$$

で与えられる。

1次スキーマに対する選択と突然変異の効果をもとめて表現することができる。

$$\begin{aligned} \widehat{M}h^{(1)}[1_k](t+1) \\ = (1-2p)h^{(1)}[1_k](t) + \frac{(1-2p)v_k(t)}{\bar{f}(t)} + p \end{aligned}$$

から、選択と突然変異による1次スキーマ頻度の変化は

$$\Delta h^{(1)}[1_k](t) = \{1-2h^{(1)}[1_k](t)\}p + \frac{(1-2p)v_k(t)}{\bar{f}(t)} \quad (16)$$

となる。右辺の第1項は $h^{(1)}[1_k] > 1/2$ では負になり、第2項の係数 $1-2p$ はスキーマの頻度を増加させる v_k の効果を減少させてしまう。

4. 数値実験

これまで1次のスキーマについて得られた結果を数値実験により検討する。集団の個体数は200とし、乱数を変えながら同じ計算を100回くりかえし平均をとった。突然変異率 p は、0.00001, 0.001, 0.01 と0.1の4種類の値を用いた。交叉は一様交叉を適用した。 $h^{(1)}[1_k]$ はビット位置に依存しないので、それらを平均した P_1 について進化を調べた。

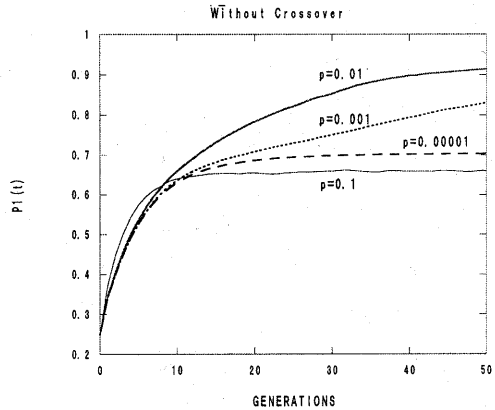


図1 $P_1(t)$ の数値実験 (交叉なし)。

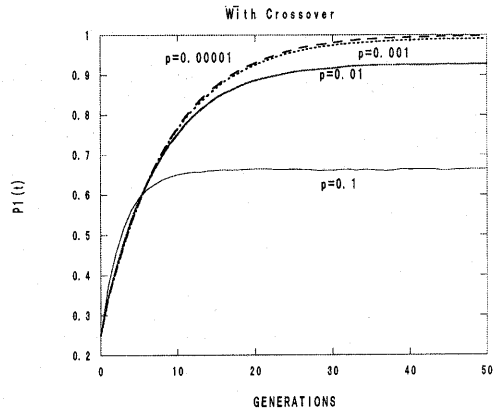


図2 $P_1(t)$ の数値実験 (交叉あり)。

図1は交叉率 $\chi = 0$ としたGA計算の結果である。もともと進化の効率がよいのは $p = 0.01$ の計算であり、 $p = 0.00001$ によるGAは大幅に進化速度が遅くなっている。しかし一方で、 $p = 0.1$ の結果はほとんど変化なく、やはり一番進化が遅い。このように、交叉のない場合は最適な突然変異率 p がある。

しかし交叉があると状況は大きく異なる。図2に交叉率 $\chi = 1$ としたGAでの、 $P_1(t)$ の世代による変化を示した。この結果は理論予測とほぼ一致し、突然変異率 p が小さいほどよい結果を与える。

次に計算結果が大きく変化した $p = 0.00001$ について、交叉の有無による変化を調べた。図3に v_k 、 v_k^a 、 v_k^e の世代による変化を $\chi = 0$ と $\chi = 1$ について示した。 $\chi = 0$ の計算を太い実線 (v_k)、細い実線 (v_k^e)、

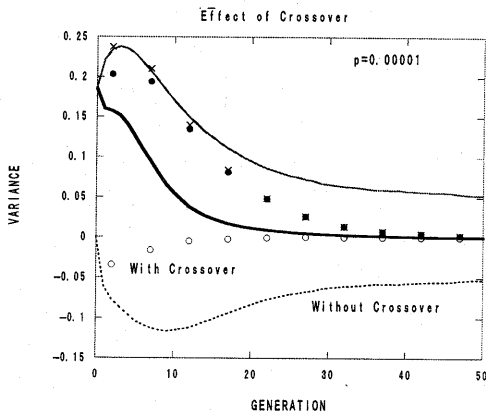


図3 分散に及ぼす交叉の効果 ($p = 0.00001$).

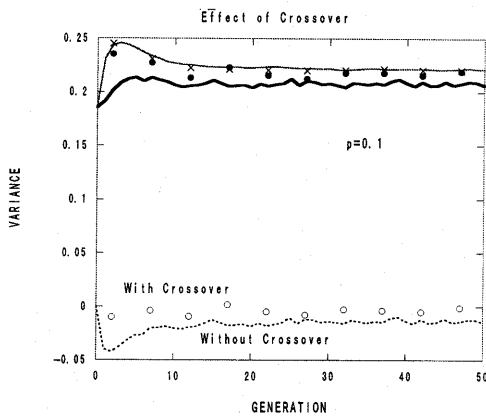


図4 分散に及ぼす交叉の効果 ($p = 0.1$).

点線 (v_k^*) で表した。 $\chi = 1$ の結果は $\bullet(v_k)$, $\times(v_k^*)$, $\circ(v_k^*)$ で示した。交叉があると v_k の値が大きくなり、式 (16) から進化が加速されることがわかる。交叉がない場合、 v_k^* が大きな負の値をとり、結果的に v_k の値を小さくし、進化が遅れてしまうことが分かる。逆に交叉があると v_k^* の絶対値が小さくなり、大きな v_k をもたらしめている。

対照的な結果を図4に示した。強い突然変異 ($p = 0.1$) を用いた以外は全く図3と同じ計算の結果である。図1と2を比較すると、交叉の効果はほとんど見られないが、この図からも交叉の効果が小さいことが分かる。それは、交叉がなくても突然変異の効果ですでに v_k^* の絶対値が小さくなっているからである。しかし、この場合は突然変異の負の効果も大きく、進化

速度が計算例中でもっとも遅い。

5. おわりに

1次のスキーマはもっとも基本的なスキーマであり、そのふるまいを調べることから始めなければならない。突然変異は1次のスキーマに対して直接の効果をもつが、交叉は影響を与えない。しかし、交叉の効果は選択を通じて間接的に現れる。また突然変異も同様に間接的な効果を与える。

GAでは解集団の分散は大きいほどいい、といわれている。このことはFisherの定理から理解でき、適応度の分散が大きいほど進化速度は速くなる。そしてOne-Max問題では負の連鎖不均衡を生成するので⁶⁾、結果的に交叉が遺伝にとって有益な遺伝的操作となる。このように交叉が有効になるためには、連鎖不平衡が負になることが重要である。

突然変異は、よく指摘されるように進化にとって有害な働きをすることがある。しかしOne-Max問題の例では、とくに交叉がない場合、有益な効果も及ぼす。この効果は、進化を阻害する働きをもつ v_k^* の絶対値を小さくすることによりもたらされるが、交叉も同じ効果をもつため、交叉があると突然変異の有害な面のみ現れることになる。このように、突然変異と交叉は互いに無関係ではなく、両者を統一的に取り扱うことによってのみ、二つの遺伝的操作の役割を明らかにすることができる。

参考文献

- 1) J.H. Holland: *Adaptation in Natural and Artificial Systems*, p.211, MIT press, Massachusetts (1992).
- 2) C. R. Stephens and H. Waelbroeck: "Effective degrees of freedom in genetic algorithms," *Physical Review E*, **57** (1998) 3251-3264.
- 3) 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, **43**(4) (2002) 掲載予定.
- 4) 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, **42** (2001) 2270-2283.
- 5) R.A. Fisher: *The Genetical Theory of Natural selection*, 2nd edition, Dover, New York (1958).
- 6) H. Furutani: "Study of Crossover in One Max Problem by Linkage Analysis," L. Spector et al. (Eds.) *Proceedings of the Genetic and Evolutionary Computation Conference, GECCO-2001 Morgan Kaufmann*, (2001) 320-327.