

遺伝的アルゴリズムにおける確率的揺らぎの効果 ——スキーマの固定と消滅

古谷博史[†] 片山 晋[†] 坂本真人[†]

遺伝的アルゴリズム (GA) では有限な個体数の集団を扱うため、進化過程における確率的揺らぎの効果についての研究が必要である。本研究では、積型適応度関数を例にとり、有限な個体数をもたらす遺伝的揺動が GA の効率に及ぼす影響について調べた。有限個体数の数値実験では、決定論的理論の予測と大きな差が見られた。このとき数値実験では、有利な 1 次スキーマの消滅が起こっていた。また、交叉を含む GA 計算では、集団の状態が連鎖平衡にあるものと仮定してよいことが分かった。そこで 1 次スキーマの頻度に注目した解析を行い、進化の数学的解析において重要な役割を果たしてきた Wright-Fisher モデルおよび拡散方程式を用い、その時間的変化を確率論的に求めた。これらの数理モデルにより、1 次スキーマの究極固定確率、平均固定時間などの多くの値が理論的に予測できることを示した。

Effect of Stochastic Fluctuations in Genetic Algorithms ——Fixation and Extinction of Schemata

HIROSHI FURUTANI,[†] SUSUMU KATAYAMA[†] and MAKOTO SAKAMOTO[†]

Since genetic algorithms (GAs) treat a population of finite size, it is necessary to study the effect of stochastic fluctuations in evolution processes. In this study, we investigated the influence of genetic drift due to finite population size on the performance of GA on the multiplicative landscape. We observed large difference between numerical experiments with finite population size and the prediction of deterministic theory, and noted the extinction of favorable first order schemata in the experiments. It was also noted that the population can be assumed to be in linkage equilibrium in GA calculations with crossover. Therefore, we performed the investigation of frequencies of the first order schemata, and calculated their changes in time by using the Wright-Fisher model and diffusion equations, which have played important roles in the mathematical analysis of evolution. We showed that these mathematical theories reasonably predict various quantities including the ultimate fixation probability and average fixation time.

1. はじめに

集団の個体数 N の値は、遺伝的アルゴリズム (GA) を個々の問題に適用するうえで重要となるが、その選択を理論的に基礎付けることは非常に困難である。この問題の難しさの一因は、有限な集団の問題を考えることが確率論的取扱いを必要とすることにある。本研究では、有限な個体数 N が GA の計算過程に与える影響を理論的に検討し、数値シミュレーションとの比較を行った。

GA の理論的研究の中で有限な個体数を仮定したものは少なく、その大部分は個体数が非常に多いことを

仮定した決定論的アプローチである。有限の個体数 N を理論の中にも含めるためには、確率論的枠組みを必要とするが、そのため理論は複雑になり、取扱いが難しくなる。GA への確率論的アプローチの代表的なものに Markov 過程理論がある。Nix らは、GA を Markov 過程と見なし、選択、突然変異、交叉を含む GA の確率論的枠組みを与えた¹⁾。彼らの理論は、遺伝子型の進化を正確に記述することができるが、その遷移確率行列の次元は、個体数 N や個体を表現するビットの長さ ℓ の増加とともに指数関数的に増加する。そのため現実的なサイズの問題にこの理論を適用することはほとんど不可能である。たとえば $N = 10$, $\ell = 5$ の問題でも、遷移行列は 11 億 \times 11 億次元になる。De Jong らは、少数の個体数と短いビット長 ($N = 5$, $\ell = 2$) のもとで Markov モデルと GA 計算を比較し、

[†] 宮崎大学工学部

Faculty of Engineering, University of Miyazaki

良い一致が得られることを示した²⁾。

集団遺伝学でも Markov モデルを用いた研究は幅広く行われた。集団遺伝学の基礎を築いた Fisher³⁾ や Wright⁴⁾ らにより提案された Wright-Fisher モデルなどはその代表的なものである。しかし、その数学的取扱いは難しく、具体的問題に適用しようとするとき様々な限界があった⁵⁾。そこで登場したのが拡散モデルである⁶⁾。拡散モデルは、Markov モデルを拡散方程式により近似するもので、これまでの確率論的アプローチの中で、最も実用上の寄与が大きい理論といえてよいであろう⁷⁾。

GA の分野でも、拡散モデルを用いて計算過程を確率論的に解析する試みがいくつかある。Asoh らは選択と突然変異を含まない GA の進化過程を理論的に研究し、平均収束時間の解析的表現を導いた⁸⁾。Suzuki らは、バベル形適応度関数（1 種類の遺伝子型だけが高度な適応度を持つ）の下での GA の進化速度について確率論的に検討し、交叉の効果について数値実験と良い一致をみた⁹⁾。

先に述べたように、Nix らの理論¹⁾では遺伝子型の頻度そのものを扱ったため計算量の爆発の問題が発生した。そのため、本研究では遺伝子型そのものではなく、1 次のスキーマに注目し数学的解析を行うことにした。このことにより、集団遺伝学における Markov モデルや拡散モデルで得られた成果を利用することができた。さらに、Markov 遷移行列も $(N+1) \times (N+1)$ 次元に縮小され、Markov 過程の計算も十分可能となった。

GA や遺伝学分野では、連鎖の概念が重要である¹⁰⁾。連鎖は、集団内での異なる遺伝子座間の統計的相関を意味する。遺伝子座間に何らかの相関があるとき、その集団は連鎖不平衡状態にあるという。逆に遺伝子座間に連鎖がない状態を連鎖平衡状態という。集団が 1 次のスキーマのみで記述できるのは連鎖平衡にある場合である。

本研究では、積型適応度関数を例にとり、GA の計算効率に及ぼす確率的揺らぎの効果を調べた。積型適応度関数の特徴は、決定論的モデルでは集団が連鎖平衡状態になることである¹¹⁾。しかし、実際には確率的揺らぎの効果のため連鎖が発生する。このため、積型適応度関数は確率的揺らぎの働きを調べる良いモデルになると期待された。遺伝的オペレータとして選択と交叉のみ取り入れ、突然変異はとりあえず無視した。Markov モデルや拡散モデルによる理論的予測と数値実験を比較し、1 次スキーマの頻度の時間的变化に対する個体数と交叉の影響を調べた。

集団遺伝学において最もよく研究されてきたものの

1 つに、1 遺伝子座の進化に関する確率論的研究がある。これは、GA における 1 次スキーマの進化に対応している。そのため、2 章と 3 章にそれらの研究成果のうち本研究に関連した内容をまとめて示した。この分野には定評のある教科書がいくつかあり⁵⁾⁻⁷⁾、より深く理解したい場合は参照されたい。また、拡散モデルに関しては Kimura の論文集¹²⁾があり、重要な論文の多くが収録されている。

2. Markov モデル

集団遺伝学における Markov モデルの 1 つである Wright-Fisher モデルを取り上げ、その内容について説明する。Wright-Fisher モデルは本研究でも重要な役割を担うことになる。

いま、遺伝子座が 1 つ ($\ell = 1$) の集団を考える。対立遺伝子は A と a の 2 つとする。世代は不連続で、世代ごとにすべての個体（親と子）は入れ替わるものとし、集団の個体数 N は一定とする。遺伝子 A を持つ個体の数を N_0 、遺伝子 a を持つ個体数を N_1 とすると、 $N_0, N_1 \in \{0, 1, \dots, N\}$ かつ $N = N_0 + N_1$ となる。

2.1 選択のない場合

まず最も単純な例として選択や突然変異のない場合を考える。親世代の N 個体の中から重複を許してランダムに子を取り出していき、それらが N 個体になれば止めるものとする。こうして世代 t において遺伝子 a を持つ個体の数が $N_1 = i$ であるとすると、次の世代 $t+1$ において $N_1 = j$ となる条件付き確率 $Q(j|i)$ は

$$Q(j|i) = \binom{N}{j} \left(\frac{i}{N}\right)^j \left(1 - \frac{i}{N}\right)^{N-j} \quad (1)$$

で与えられる。この集団の進化は、世代 t において遺伝子 a を持つ個体の数が i である確率を $q_i(t)$ とし

$$q_j(t+1) = \sum_{i=0}^N Q(j|i) q_i(t), \quad (2)$$

と表される。

進化方程式は、 $(N+1)$ 次元ベクトル

$$\mathbf{q}(t) = (q_0(t), \dots, q_N(t))^T,$$

(T はベクトルの転置) と行列 $Q = [Q(j|i)]$ を用いて

$$\mathbf{q}(t+1) = Q \mathbf{q}(t),$$

と表すことができる。この集団の進化は Markov 過程となり、行列 Q の固有値と固有ベクトルが分かれば進化過程を解析的に記述することができる。行列の固有値は Feller により導かれ⁵⁾

$$1, \quad 1, \quad 1 - \frac{1}{N}, \quad \dots, \quad \prod_{i=1}^{N-1} \left(1 - \frac{i}{N}\right),$$

となることが分かっている。しかし、残念ながらこれに対する固有ベクトルの形はまだまだ知られていない。ただ固有値 1 に対応する 2 つの固有ベクトルは簡単に分かり

$$\mathbf{q}_A = (1, 0, \dots, 0)^T, \quad (3)$$

$$\mathbf{q}_a = (0, 0, \dots, 1)^T, \quad (4)$$

である。 \mathbf{q}_A は集団の全個体が遺伝子 A を持つ状態を、 \mathbf{q}_a は全個体が遺伝子 a を持つ状態を表す。また、この 2 つの状態は Markov 過程の吸収状態になっており、集団は進化の過程で最終的にこれらの状態のいずれかに収束していく。

2.2 選択のある場合

次に遺伝子間に適応度の差があり、選択機構が働く場合を考える。2 つの遺伝子 A, a の適応度をそれぞれ

$$f_A = 1, \quad f_a = 1 + s, \quad (s \geq 0),$$

とし、集団の適応度を最大化する問題を与えるものとする。したがって、この例では遺伝子 a が有利な遺伝子となる。さらに選択はあまり強くない ($s \ll 1$) ものとする。

この場合も進化は Markov 過程として記述される。遺伝子 a を持つ個体数が i から j に遷移する確率は

$$Q(j|i) = \binom{N}{j} a(s)^j \{1 - a(s)\}^{N-j}, \quad (5)$$

$$a(s) = \frac{(1+s)i}{(1+s)i + N - i},$$

となる。この行列は、選択のない場合の遷移確率行列、式 (1)、よりさらに取扱いが難しい。

しかし、基本的な統計量は比較的容易に求めることができる。世代 t における遺伝子 a を持つ個体数 i を固定し、その相対頻度を $y(t) = i/N$ とする。世代 $t+1$ における相対頻度 $y(t+1) = j/N$ の期待値は次式で与えられる

$$E\{y(t+1)\} = \sum_{j=0}^N \frac{j}{N} Q(j|i) = a(s).$$

$a(s)$ を $y(t)$ を用いて書き直すと

$$E\{y(t+1)\} = \frac{(1+s)y(t)}{1+sy(t)}, \quad (6)$$

を得る。

再び進化方程式 (6) に帰る。世代あたりの頻度変化を

$$\Delta y(t) = y(t+1) - y(t),$$

とする。 $s \ll 1$ を仮定すると、付録 A.1 に示したよ

うに、その期待値

$$E\{\Delta y(t)\} = M(y) = sy(1-y), \quad (7)$$

およびその 2 次の項の期待値

$$E\{\Delta y(t)^2\} = V(y) = \frac{y(1-y)}{N}, \quad (8)$$

を得る。

3. 拡散モデル

3.1 Kolmogorov 前向き方程式

Markov モデルは、進化過程を扱うための良い模型になっていると思われるが、その数学的取扱いは必ずしも簡単ではない。そこで集団遺伝学の分野では、拡散方程式を用いて Markov 過程を近似する手法が導入され、多くの成果が得られた。ここでは Wright-Fisher モデルの拡散近似を紹介する。得られる拡散方程式は Kolmogorov 前向き方程式と呼ばれるが、その導出の過程は文献 6) などに詳しい。結果のみ示すと

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi(y, t)}{\partial t} &= \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \{V(y)\phi(y, t)\} \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial y} \{M(y)\phi(y, t)\}, \end{aligned} \quad (9)$$

となる。選択のない場合の式 (1) に対応する拡散方程式は

$$V(y) = \frac{y(1-y)}{N}, \quad M(y) = 0, .$$

を用いる。関数 $\phi(y, t)$ は、世代 t において遺伝子 a の相対頻度が y となる確率を表す確率密度関数である。したがって、Wright-Fisher モデルにおける i/N を連続変数として近似したものが y であり、 $\phi(y, t)$ は $q_i(t)$ に対応する。また世代 t も連続量として近似されている。この拡散方程式の一般解は Kimura により与えられ⁶⁾、興味ある結果が導かれているが、その詳細は省略する。

選択のある Wright-Fisher モデルに対応する拡散方程式では、式 (7) と (8) を用いる。この方程式の解も Kimura により得られたが⁶⁾、非常に複雑な形をしており、その結果についても省略する。

拡散方程式はパラメータとして s と N を含むが、解のパラメータ依存性について興味ある結果が得られている。拡散方程式に関数 $M(y)$ 、 $V(y)$ について式 (7)、(8) を代入し、時間変数を $\tau = t/N$ に変換すると、次式が得られる

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi(y, \tau)}{\partial \tau} &= \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \{y(1-y)\phi(y, \tau)\} \\ &\quad - sN \frac{\partial}{\partial y} \{y(1-y)\phi(y, \tau)\}. \end{aligned} \quad (10)$$

この式ではパラメータとして残るのは $S = sN$ のみになる。すなわち $S = sN$ が同じであれば、拡散方程式の解は時間のスケールを除いて同じ形をしている。

3.2 Kolmogorov 後向き方程式

集団遺伝学では、Kolmogorov 前向き方程式と同様に、次の Kolmogorov 後向き方程式と呼ばれる方程式も重要な役割を果たしている

$$\frac{\partial u(p, t)}{\partial t} = \frac{V(p)}{2} \frac{\partial^2}{\partial p^2} \{u(p, t)\} + M(p) \frac{\partial}{\partial p} \{u(p, t)\}. \quad (11)$$

ここで変数 p は初期状態における y の値を表す。関数 $u(p, t)$ は、初期条件 p の下で、集団が世代 t において $y = 1$ もしくは $y = 0$ いずれかの吸収状態にある確率密度を表す。 $y = 1$ と $y = 0$ の2つの状態を区別するのは境界条件であり、

$$u(1, t) = 1, \quad u(0, t) = 0,$$

とすれば集団が $y = 1$ の状態に収束する確率密度を表す。これを遺伝子 a の固定確率と呼ぶ。すなわち、初期状態が $p = 1$ であればすでに $y = 1$ に収束しており、任意の時刻 t においてその確率は1である。逆に $p = 0$ であれば集団は $y = 0$ 状態に吸収されており、 $u(0, t) = 0$ となる。

Kolmogorov 後向き方程式 (11) から多くの興味深い性質を導くことができる。ここでは時間が十分経過した集団の固定確率 $u(p) = \lim_{t \rightarrow \infty} u(p, t)$ の具体的な関数形を求める。以下では $u(p)$ を遺伝子 a の究極固定確率と呼ぶ。付録 A.2 に示した手順に従い、集団遺伝学でよく知られた関係式^{6),7)}

$$u(p) = \frac{1 - \exp(-2sNp)}{1 - \exp(-2sN)}, \quad (12)$$

を得る。この式もやはりパラメータ $S = sN$ に依存した形をしている。

3.3 平均収束時間

Wright-Fisher モデルや拡散モデルを用い、集団が吸収状態に収束する平均世代数を求めることができる。Wright-Fisher モデルでは、 $i = 0$ と $i = N$ の状態に吸収されるまでの平均世代数 \bar{t} は

$$\bar{t} = \sum_{k=1}^{\infty} k \{q_0(k) - q_0(k-1) + q_N(k) - q_N(k-1)\},$$

で与えられる⁸⁾。また有利な遺伝子 a が固定されるまでの平均世代数 $\bar{t}_a(p)$ は

$$\bar{t}_a(p) = \frac{T_a(p)}{u(p)}, \quad (13)$$

$$T_a(p) = \sum_{k=1}^{\infty} k \{q_N(k) - q_N(k-1)\},$$

を用いて計算できる。すべての進化過程で遺伝子 a が固定されるわけではないので、究極固定確率 $u(p)$ で割る必要がある。

拡散モデルでも式 (13) に対応する数式を導くことができる。結果のみ示すと⁷⁾

$$\bar{t}_a(p) = 2N \{F_1(Ns) + F_2(Ns)\} \quad (14)$$

$$F_1(S) = \frac{\sinh(S(1-p))}{2 \sinh(Sp)}$$

$$\times \int_0^p \frac{\cosh(2Sx) - 1}{Sx(1-x) \sinh(S)} dx,$$

$$F_2(S) = \int_p^1 \frac{\sinh(Sx) \cdot \sinh(S(1-x))}{Sx(1-x) \sinh(S)} dx,$$

となる。ただし、 F_1 の積分の下限と F_2 の積分の上限は、小さい正数 ε を用いて $0 \rightarrow \varepsilon$, $1 \rightarrow 1 - \varepsilon$ と置き換えて計算する必要がある。式 (10) から予想できることであるが、 $S = Ns$ を1つのパラメータと考えると、 \bar{t}_a は N に比例し、その比例係数は S の関数である。

4. 積型適応度関数

4.1 進化モデル

この節以降は、積型適応度関数の下での GA の進化過程について考察する。選択は適応度比例選択、交叉は一様交叉を採用する。集団は世代ごとに親と子が入れ替わるものとし、集団の個体数は世代によらず一定 N とする。

個体は長さ ℓ の2進ビット列で表し、前の例では遺伝子 A がビット0、遺伝子 a がビット1に対応するものとする。遺伝子の総数は $n = 2^\ell$ となる。2進ビット列と整数 i ($0 \leq i \leq n-1$) を

$$i = \langle i(\ell), \dots, i(1) \rangle,$$

のように対応させ、第 k ビットの値を $i(k) \in \{0, 1\}$ とする。遺伝子型 $\langle i(\ell), \dots, i(1) \rangle$ を整数 i で表し、世代 t における遺伝子型 i の個数を $N_i(t)$ 、その相対頻度を $x_i(t)$ とする

$$x_i(t) = \frac{N_i(t)}{N}.$$

積型適応度関数を次式で定義する。

$$f_i = \prod_{k=1}^{\ell} (1 + i(k)s). \quad (s \geq 0), \quad (15)$$

適応度の差を表すパラメータ s は、すべてのビットにおいて同じ値をとるものとした。適応度を最大に

する最大化問題を考え、すべてのビットが 1 となる $i = n - 1 = \langle 1, 1, \dots, 1 \rangle$ が最適解となる．ビット 1 の適応度が $1 + s$ 、ビット 0 の適応度が 1 であり、ビット 1 が有利な遺伝子となる．

以下では、積型適応度関数の下での GA の進化を、決定論的モデルによって記述する．突然変異まで含めた進化方程式を求めるにはスキーマ理論の手法が必要となるが^{(11), (13)}、選択のみの場合は以下に示す方法で十分である．積型適応度関数における進化については他の論文⁽¹⁴⁾も参照されたい．

4.2 連鎖平衡

GA では初期集団を作るとき、各ビットごとにある確率で 1 または 0 を発生させて個体を生成させることが多い．この場合は、初期集団は連鎖平衡にある．しかし一般的に、この後計算が進行していくにつれ平衡状態からずれていき、連鎖不平衡状態になる．

連鎖平衡状態における集団の分布を相対頻度 $x_i(t)$ によって表現すると

$$x_i(t) = \prod_{k=1}^{\ell} h_{i(k)}(t), \quad (16)$$

と 1 次のスキーマ頻度 $h_0(t)$ と $h_1(t)$ の積の形になる． $h_{i(k)}(t)$ は、 k 番目のビットが $i(k)$ である個体の相対頻度を表す．またビット位置を表したい場合は $h_0^{(k)}$ 、 $h_1^{(k)}$ という表現も用いる．

相対頻度 $x_i(t)$ を用いて適応度比例選択の過程を表現すると

$$x_i(t+1) = \frac{f_i x_i(t)}{\bar{f}(t)}, \quad (17)$$

となる．ここで $\bar{f}(t)$ は集団の平均適応度である

$$\bar{f}(t) = \sum_{i=0}^{n-1} f_i x_i(t). \quad (18)$$

平均適応度の式 (18) に積型適応度の式 (15) と連鎖平衡の式 (16) を代入すると

$$\begin{aligned} \bar{f}(t) &= \sum_{i=0}^{n-1} \prod_{k=1}^{\ell} (1 + i(k)s) h_{i(k)}(t) \\ &= \prod_{k=1}^{\ell} \sum_{i(k)=0}^1 (1 + i(k)s) h_{i(k)}(t) \\ &= \prod_{k=1}^{\ell} (1 + s h_1^{(k)}(t)), \end{aligned} \quad (19)$$

を得る．平均適応度もやはり積型になる．同様に決定論的進化方程式 (17) の右辺に式 (15) と (16) を代入すると

$$x_i(t+1) = \prod_{k=1}^{\ell} \frac{(1 + s i(k)) h_{i(k)}(t)}{1 + s h_1^{(k)}(t)}, \quad (20)$$

を得る．すなわち、初期状態が連鎖平衡なら、その後すべての世代において連鎖平衡となる．このことが積型適応度関数の著しい特徴である．この進化方程式から 1 次スキーマの決定論的進化方程式

$$h_1^{(k)}(t+1) = \frac{(1 + s) h_1^{(k)}(t)}{1 + s h_1^{(k)}(t)},$$

が導かれる．この方程式の解は、1 次スキーマ頻度の初期値 $h_1^{(k)}(0)$ を用いて

$$h_1^{(k)}(t) = \frac{(1 + s)^t h_1^{(k)}(0)}{1 - h_1^{(k)}(0) + (1 + s)^t h_1^{(k)}(0)}, \quad (21)$$

と表される．

5. 数値計算

これまでの考察を基に、実際の GA 計算と理論を比較しながら、確率的揺らぎによる影響を調べる．先に述べたように、選択は適応度比例選択 (ルーレット選択)、交叉は一様交叉とし、突然変異は除いた．ビット長は $\ell = 8$ とした．交叉の効果を調べるため、交叉率 $\chi = 0$ (交叉なし) の計算と $\chi = 1$ (交叉あり) の計算を行った．初期集団は各ビットごとに同一の確率 0.5 でビット 0 と 1 を発生させ、初期個体を生成した．したがって、初期集団は連鎖平衡状態にある．乱数を変えながら同じ計算を 1000 回行い、その結果を集計、平均した．

5.1 平均適応度

図 1 と図 2 に、交叉の有無による平均適応度 $\bar{f}(t)$ の個体数 N 依存性を比較した結果を示した．いずれも選択パラメータは $s = 0.1$ とした．図 1 は交叉あり ($\chi = 1$) の結果である、決定論的進化方程式の解、式 (21)、から 1 次スキーマの頻度を求め、式 (19) により求めた平均適応度を理論値として示した．この図から $N = 10$ では実験値と決定論的理論値の差は大きく、確率的揺らぎの影響を無視できないことが分かる．しかし、 $N = 200$ では実験値と決定論的理論値はほぼ等しく、集団の進化の決定論的な記述が可能である．また、 $N = 40$ でも決定論的理論値がかなり良い近似となっていることが分かる．一方、図 2 で示した交叉なし ($\chi = 0$) の計算では、 $N = 200$ としても実験値と決定論的理論値の差は大きく、確率的揺らぎの影響を無視できないことが分かる．このように交叉の有無は、確率的揺らぎの効果に大きな差をもたらす．そして、交叉は集団の進化にとって有利な役割を果たすことが分かる．

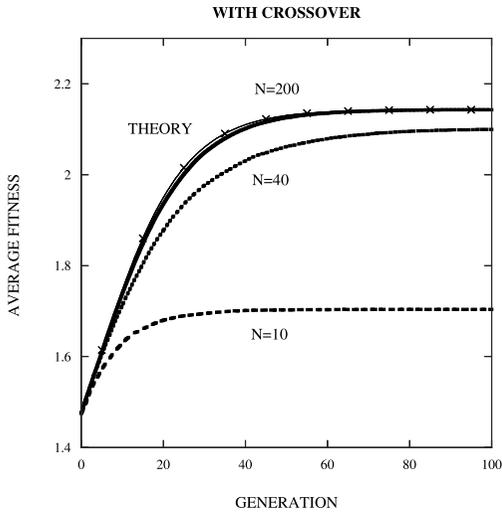


図 1 平均適応度 $\bar{f}(t)$ の N 依存性. 選択のパラメータ $s = 0.1$. 交叉あり ($\chi = 1$) の数値計算の結果. \times の付いた実線は決定論的モデルの値

Fig. 1 Dependence of average fitness $\bar{f}(t)$ on N . Selection parameter $s = 0.1$. Results of numerical experiment with crossover ($\chi = 1$). Solid line with \times shows values of deterministic model.

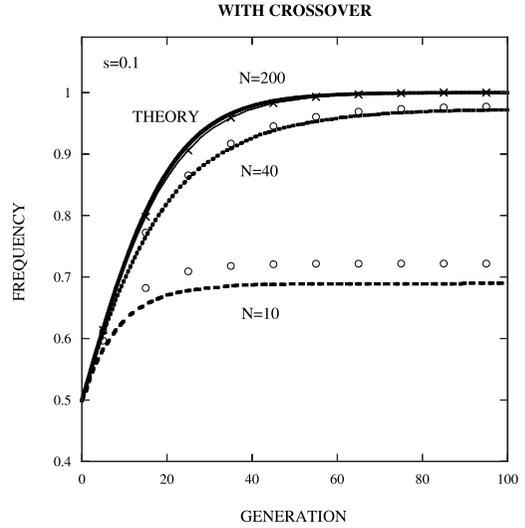


図 3 スキーマ頻度 h_1 の N 依存性. 交叉あり ($\chi = 1$) の数値計算の結果. \times の付いた実線は決定論的モデルの値. \circ は $N = 10, 40$ における Wright-Fisher モデルの値

Fig. 3 Dependence of schema frequency h_1 on N . Results of numerical experiment with crossover ($\chi = 1$). Solid line with \times shows values of deterministic model. \circ for Wright-Fisher model with $N = 10, 40$.

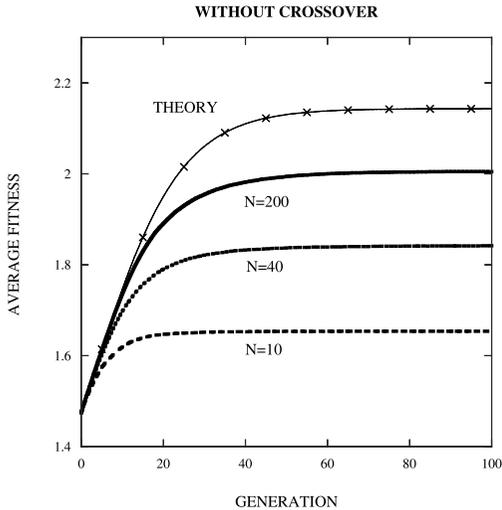


図 2 平均適応度 $\bar{f}(t)$ の N 依存性. $s = 0.1$. 交叉なし ($\chi = 0$). \times の付いた実線は決定論的モデルの値

Fig. 2 Dependence of average fitness $\bar{f}(t)$ on N . $s = 0.1$. Without crossover ($\chi = 0$). Solid line with \times shows theoretical values.

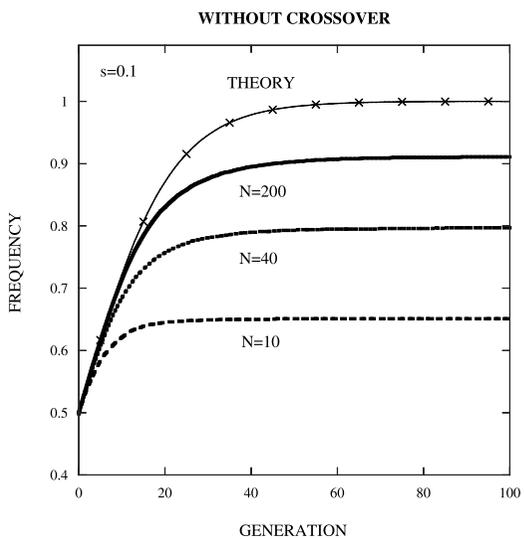


図 4 スキーマ頻度 h_1 の N 依存性. 交叉なし ($\chi = 0$) の数値計算の結果. \times の付いた実線は決定論的モデルの値

Fig. 4 Dependence of schema frequency h_1 on N . Results of numerical experiment without crossover ($\chi = 0$). Solid line with \times shows values of theoretical model.

5.2 1次スキーマ

図 3 は、交叉あり ($\chi = 1$) の計算から 1 次スキーマ頻度 h_1 を求めたものである。 h_1 はビットごとの頻度 $h_1^{(k)}$ を平均して求めた。 \circ は $N = 10$ と 40 において Wright-Fisher モデルを用いて計算した結果である。 $N = 200$ における Wright-Fisher モデルの値

は、数値計算の結果や決定論的モデルの値とほぼ同じであった。 $N = 40$ では理論値と実験値はよく一致している。しかし、 $N = 10$ では実験値に比べて理論は少し大きな値を与えている。図 4 は、図 3 と同様に交叉なし ($\chi = 0$) の結果から 1 次スキーマ頻度 h_1

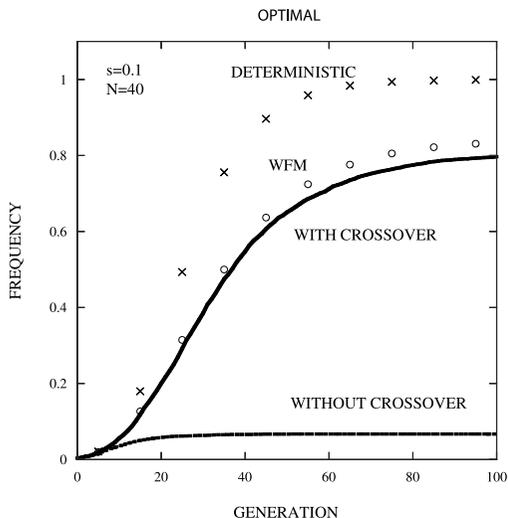


図5 最適解 $x_{n-1}(t)$ の頻度. $S = 4$ の場合. 実線は交叉あり ($\chi = 1$), 点線は交叉なし ($\chi = 0$) の数値計算の結果. \times は決定論的進化方程式による理論値. \circ は Wright-Fisher モデルの値

Fig.5 Frequency of the optimal solution $x_{n-1}(t)$ with $S = 4$. Solid line shows the result of calculations with $\chi = 1$, and dotted line for $\chi = 0$. \times are the theoretical estimation by the deterministic evolution equation. \circ are values by Wright-Fisher model.

を求めたものである. 図2 から推測できるように, 交叉がないと数値計算の結果は強い N 依存性を持ち, $N = 200$ でも確率的揺らぎの影響が大きいことを表している. また, すべての N において1次スキーマ頻度 h_1 は交叉ありの結果より小さい.

図5は, $S = 4$ ($N = 40, s = 0.1$) における最適解の相対頻度 $x_{n-1}(t)$ をグラフに表したものである. 決定論的理論による値は, 1次スキーマの理論式 (21) から $h_1^{(k)}(t)$ を計算し, 連鎖平衡の仮定の下で

$$x_{n-1}(t) = \prod_{k=1}^{\ell} h_1^{(k)}(t),$$

より求めた. 同様に確率的理論値は, 図3の Wright-Fisher モデルの値を ℓ 乗して求めた. 決定論的理論値と確率的理論値の差が, 確率的揺らぎの効果を反映していると考えられる. 図3の数値計算では, $N = 40$ の1次スキーマ頻度はほぼ1に近い値 (0.97) に収束しているが, 最適解ではその ℓ 乗となるので, 1から離れた値 (0.80) に収束する. このように最適解の頻度では確率的揺らぎの効果が拡大して現れる. 収束値の Wright-Fisher モデルによる予測は0.83である. これは究極固定確率の式 (12) から, $u(0.5) = 0.98$ を用いて $0.98^8 \approx 0.85$ よりほぼ説明することができる. また, 図5で注目されるのが交叉の効果である. 交叉

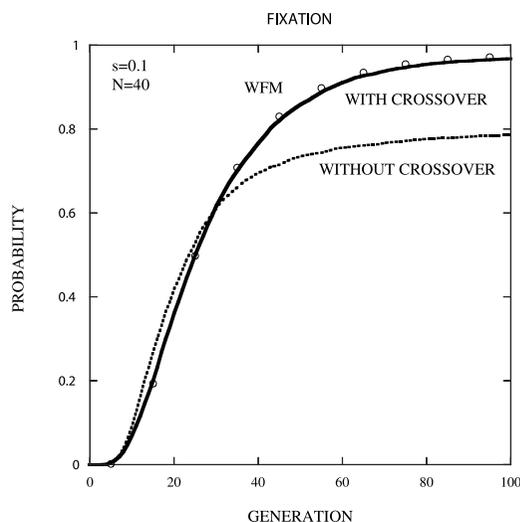


図6 1次スキーマ固定確率 $u(0.5, t)$ の世代依存性 ($S = 4$). 実線は交叉あり ($\chi = 1$), 点線は交叉なし ($\chi = 0$) の結果を表す. \circ (WFM) は Wright-Fisher モデルの値

Fig.6 Generation dependence of the fixation probability of the first order schema $u(0.5, t)$ ($S = 4$). Solid line for the calculation with $\chi = 1$, and dotted line for $\chi = 0$. Symbols \circ (WFM) for the Wright-Fisher Model.

により, 最適解の頻度が大きく増加している.

次に, 有利なビット1の1次スキーマが固定される確率 $u(p, t)$ の世代による変化の様子を調べた. 数値計算では $p = 0.5$ としたので $u(0.5, t)$ を計算したことになる. しかし実際には, $p = 0.5$ として乱数を発生させたので, 0.5を中心とした2項分布となることは注意しておく必要がある. 図6は, $S = 4$ ($N = 40, s = 0.1$) の場合における $u(0.5, t)$ の世代変化をグラフにしたものである. 図5と同様に, 交叉の有無が大きな違いをもたらしている. 選択のある Wright-Fisher モデルから, 遷移確率 (5) を用いて1次スキーマの頻度分布 $q_i(t)$ の世代変化を求めることができる. その中の $q_N(t)$ が $u(0.5, t)$ に対応するので比較のため図中に示した. 図から Wright-Fisher モデルが, 交叉のある場合の GA 計算を非常に良い近似で再現することが分かる. 一方, 交叉のない計算では究極固定確率 $u(0.5)$ が小さくなってしま ($u(0.5) \approx 0.8$). このように, 交叉には有利なスキーマの消滅を防ぐ働きのあることが分かる.

図7は, 同じ計算を1次スキーマの消滅確率からみたものである. 交叉がある場合の消滅確率は $t = 100$ で0.027とごくわずかであるが, 交叉なしの計算ではこれが0.193にもなってしまう. このため, 平均適応度も最適解の頻度も交叉ありの計算に比べて劣った結

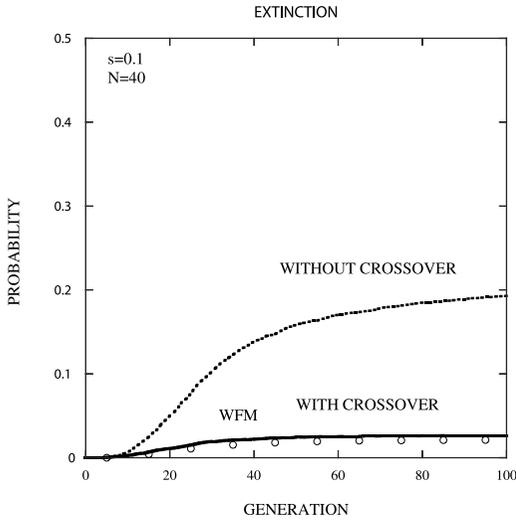


図 7 1 次スキーマの消滅確率 ($S = 4$)。実線は交叉，点線は交叉なし。o (WFM) は Wright-Fisher モデルの予測
 Fig. 7 The extinction probability of the first order schema ($S = 4$). Solid line with crossover, and dotted line without crossover. Symbols o (WFM) for the Wright-Fisher Model.

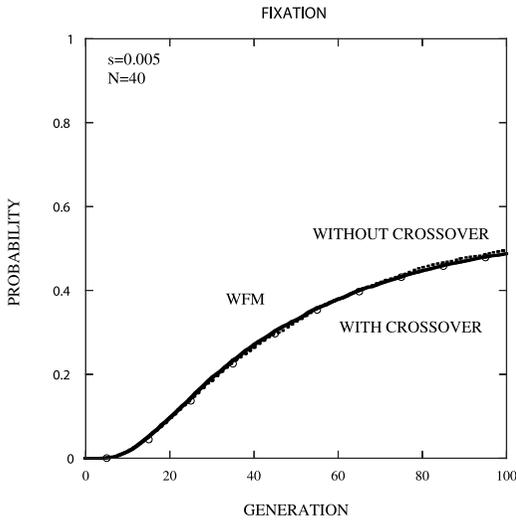


図 8 1 次スキーマ固定確率 $u(0.5, t)$ の世代依存性 ($S = 0.2$)
 Fig. 8 Generation dependence of the fixation probability of the first order schema $u(0.5, t)$ ($S = 0.2$).

果が出てしまう。また、このように交叉の効果が大いということは連鎖平衡の近似がもはや成り立たないことを意味する。

図 8 は、弱い選択 $S = 0.2$ ($N = 40, s = 0.005$) の場合における 1 次スキーマ固定確率 $u(0.5, t)$ の世代変化をグラフにしたものである。拡散モデルの究極固定確率 $u(0.5) = 0.55$ が良い近似で成り立っていることが分かる。この場合、交叉の有無は計算結果には

表 1 究極固定確率。 $u(0.5)$ は拡散モデルから得られた値。WFM は Wright-Fisher モデルの値。GA ($\chi = 1$) は交叉をいれた数値実験の結果

Table 1 Ultimate fixation probability. $u(0.5)$ are values obtained by the diffusion model. WFM stands for the Wright-Fisher model. GA ($\chi = 1$) are results of numerical experiments with crossover.

S	N	s	$u(0.5)$	WFM	GA($\chi = 1$)
4.0	10	0.4	0.982	0.968	0.892
	40	0.1		0.979	0.973
	100	0.04		0.981	0.977
	200	0.02		0.981	0.980
0.2	10	0.02	0.550	0.549	0.554
	40	0.005		0.550	0.532
	100	0.002		0.550	0.556
	200	0.001		0.550	0.574

ほとんど影響がなく、連鎖平衡の仮定が良い近似で成り立っている。またここでも Wright-Fisher モデルは、2 つの数値計算をよく再現している。

5.3 究極固定確率と平均固定世代数

次に 1 次スキーマの究極固定確率について、拡散モデルの予測式 (12) および Wright-Fisher モデルを理論値として数値計算の結果を比較した (表 1)。初期値は $p = 0.5$ とし、 $u(0.5)$ を求めた。また GA の数値計算は交叉あり ($\chi = 1$) の結果を表示した。結果は拡散モデル、Wright-Fisher モデルともに GA 計算の結果をよく予測できることが分かる。パラメータ S の値が一定であれば究極固定確率はほぼ一定と見なしてよく、拡散モデルの結論を支持している。パラメータがこの範囲であれば、拡散モデルと Wright-Fisher モデルの結果はあまり変わらない。したがって、より計算の容易な拡散モデルを用いてもよいことも分かる。

次に 1 次スキーマが固定されるまでの平均世代数を求めた。有利なビット 1 の 1 次スキーマの平均固定世代数を \bar{t}_1 とする。拡散モデルでは式 (14) から

$$\bar{t}_1 = \alpha(N, s) N,$$

のように N に比例する。またその比例係数 $\alpha(N, s)$ は $S = Ns$ の関数になり $\alpha(N, s) = 2\{F_1(S) + F_2(S)\}$ と表される。図 9 は、 $\alpha(N, s)$ を S の関数として表したものである。

表 2 は、比例係数 $\alpha(N, s)$ について、拡散モデル、Wright-Fisher モデルによる理論値と、交叉あり ($\chi = 1$) の数値計算の結果を比較したものである。ここでも拡散モデルは GA 計算の結果をほぼ再現することに成功している。また、 S の値が一定であれば比例係数もほぼ一定である。

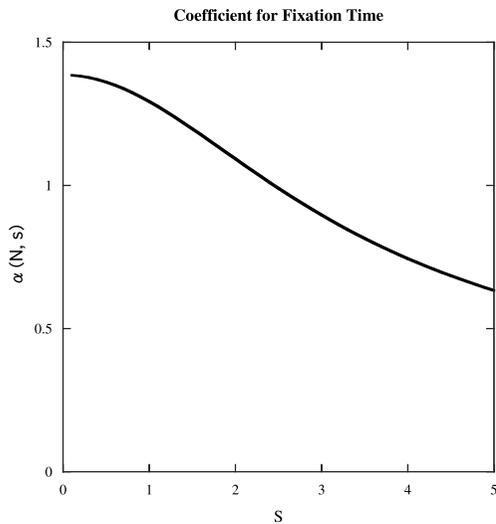


図9 平均固定世代数の比例係数 $\alpha(N, s)$ の S 依存性
Fig. 9 Dependence of the proportional coefficient $\alpha(N, s)$ of average number of generations for fixation on S .

表2 平均固定世代数の比例係数 $\alpha(N, s)$

Table 2 Proportional coefficient $\alpha(N, s)$ of average number of generations for fixation.

S	N	s	$\alpha(N, s)$	WFM	GA($\chi = 1$)
4.0	10	0.4	0.745	0.749	0.701
	40	0.1		0.738	0.752
	100	0.04		0.739	0.739
	200	0.02		0.741	0.704
0.2	10	0.02	1.382	1.255	1.199
	40	0.005		1.339	1.326
	100	0.002		1.362	1.330
	200	0.001		1.370	1.396

6. まとめと今後の課題

我々は、とすれば確率的揺らぎを脇役のように見ながちであるが、これまでみてきたように計算の効率に無視できない影響を及ぼすことがある。特に、個体数が少なくなると有利なスキーマの消滅が起こり、このことが数値計算に様々な望ましくない結果をもたらしている。

GAにおける進化は、連鎖の程度が問題になるが、交叉がある場合は連鎖平衡の近似が成り立つことが多い。その場合は、1次スキーマのみを用いて集団を記述することが可能である。積型適応度関数の下で計算に交叉を含めると、集団は連鎖平衡の状態にあり、個体の分布は1次スキーマのみを用いて精度良く記述できることが分かった。そのため、集団に及ぼす確率的揺らぎの効果を、1次スキーマに対する効果として表現することが可能であり、Wright-Fisherモデルや拡

散モデルが有力な数学的道具として利用できる。こうして、1次スキーマの究極固定確率や平均固定世代数など様々な量をかなり正確に予測することができた。

積型適応度関数の場合、パラメータとして個体数 N と選択の強さを表す s を持つ。拡散モデルによると、集団の進化はパラメータ $S = sN$ に依存し、そのときの時間尺度は N に比例する。したがって、 N が大きくなるとそれに比例して収束が遅れていく。このことは数値実験で確認し、良い近似で成り立っていた。

一般にGAでは1点交叉が使われることが多い。交叉は連鎖を解消する働きがあるが、1点交叉の場合、ビット位置によってその働きに差が出る恐れがある。スキーマ定理から予想できるように、離れたビット間に対する交叉の効果は、近接したビット間の交叉の効果に比べ大きくなる。そのためビット列の中心にあるビットより端にあるビットの方が交叉の効果をやりに大きく受ける可能性がある。一方、一様交叉ではビット位置にかかわらず交叉の効果も一様である。そのためこの数値実験では、一様交叉を採用した。ただし、詳しい報告は省略するが実際の数値計算では2つの交叉の間に大きな差はみられなかった。

交叉はGAの計算に大きな影響を与えるが、個体数有限の集団では有利な1次スキーマの消滅を防ぐ働きをすることが分かった。 $N = 40, s = 0.1$ の例では、有利なスキーマの消滅が大幅に減少し、交叉は計算効率を改善する役割を果たしていた。しかし、 $s = 0.005$ の計算では交叉の効果は無視できる程度で、集団は連鎖平衡状態にあったことになる。スキーマ理論によると、交叉は1次のスキーマには直接の効果を及ぼすことはない。おそらく、高次のスキーマを通じ、間接的に効果を及ぼしているものと考えられる。しかし、有限な系における選択と交叉の関係については研究が少なく(たとえば文献15)、今後の重要な課題の1つである。

本論文では、もう1つの重要な遺伝的操作である突然変異を含めなかった。これは議論が複雑になりすぎることを恐れたからであるが、本研究のような確率論的取扱いにおいても重要であることはもちろんである。次の機会に突然変異を含めた理論的枠組みについて報告したい。

参考文献

- 1) Nix, A.E. and Vose, M.D.: Modelling Genetic Algorithm with Markov Chains, *Annals of Mathematical and Artificial Intelligence*, Vol.5, pp.79-88 (1992).

- 2) De Jong, K.A., Spears, W.M. and Gordon, D.F.: Using Markov Chains to Analyze GAFOs, *Foundations of Genetic Algorithms 3*, pp.115–157, Morgan Kaufmann, San Francisco (1995).
- 3) Fisher, R.A.: On the Dominance Ratio, *Proc. Royal Society of Edinburgh*, Vol.42, pp.321–341 (1922).
- 4) Wright, S.: Evolution in Menderian Populations, *Genetics*, Vol.16, pp.97–159 (1931).
- 5) Ewens, J.W.J.: *Mathematical Population Genetics I. Theoretical Introduction*, 2nd edition, Springer-Verlag, New York (2004).
- 6) Crow, J.F. and Kimura, M.: *An Introduction to Population Genetics Theory*, Harper and Row, New York (1970).
- 7) 福島正俊, 石井一成: 自然現象と確率過程, 増補版, 日本評論社, 東京 (1996).
- 8) Asoh, H. and Mühlenbein, H.: On the Mean Convergence Time of Evolutionary Algorithms without Selection and Mutation, *Parallel Problem Solving from Nature*, Lecture Notes in Computer Science, Vol.866, pp.88–97, Springer-Verlag, New York (1994).
- 9) Suzuki, H. and Iwasa, Y.: Crossover Accelerates Evolution in GAs with a Babel-like Fitness Landscape: Mathematical Analyses, *Evolutionary Computation*, Vol.7, pp.275–310 (1999); Errata: Vol.8, pp.121–122 (2000).
- 10) Maynard Smith, J.: *Evolutionary Genetics*, 2nd edition, Oxford University Press, Oxford (1998).
- 11) Furutani, H.: Schema Analysis of Genetic Algorithms on Multiplicative Landscape, *Recent Advances in Simulated Evolution and Learning*, Chapter 6, pp.93–111, World Scientific, Singapore (2004).
- 12) Kimura, M.: *Population Genetics, Molecular Evolution and The Neutral Theory*, The University of Chicago Press, Chicago (1994).
- 13) Furutani, H.: Schema Analysis of OneMax Problem — Evolution Equation for First Order Schemata, *Foundations of Genetic Algorithms 7*, pp.9–26, Morgan Kaufmann, San Francisco (2003).
- 14) Furutani, H.: Schema Analysis of Average Fitness in Multiplicative Landscape, *Proc. Genetic and Evolutionary Computation Conference, GECCO-2003*, Lecture Notes in Computer Science, Vol.2723, pp.934–947, Springer-Verlag, New York (2003).
- 15) Hill, W.G. and Robertson, A.: Linkage Disequilibrium in Finite Population, *Theoretical and Applied Genetics*, Vol.38, pp.226–231

(1968).

付 録

A.1 $M(y)$ と $V(y)$ の導出

$$\Delta y(t) = y(t+1) - y(t),$$

の期待値は, $y(t)$ が固定されていることに注意して,

$$\begin{aligned} E\{\Delta y(t)\} &= E\{y(t+1)\} - y(t) \\ &= \frac{sy(t)(1-y(t))}{1+sy(t)}, \end{aligned}$$

となる. さらに $s \ll 1$ に注意すると

$$E\{\Delta y(t)\} \approx sy(t)(1-y(t)),$$

と近似できる. $M(y) = E\{\Delta y(t)\}$ とおき, $y(t)$ を独立変数と見なし, 関数 $M(y)$ を定義する

$$M(y) = sy(1-y).$$

次に $\Delta y(t)$ の 2 次の項について期待値を求める

$$\begin{aligned} E\{\Delta y(t)^2\} &= E\{y(t+1)^2\} - 2y(t)E\{y(t+1)\} + y(t)^2. \end{aligned}$$

ここで

$$E\{y(t+1)^2\} = a(s)^2 + \frac{a(s)(1-a(s))}{N},$$

なることに注意し, 次式を得る

$$E\{\Delta y(t)^2\} = \{a(s) - y(t)\}^2 + \frac{a(s)(1-a(s))}{N}.$$

先ほどと同様に $s \ll 1$ から

$$E\{\Delta y(t)^2\} \approx \frac{y(t)(1-y(t))}{N},$$

と近似し, $y(t)$ を独立変数と見なし関数

$$V(y) = \frac{y(1-y)}{N},$$

を定義する.

A.2 究極固定確率の導出

十分時間が経過した後, 集団は定常状態にあるものとする. このとき $\partial u(p, t)/\partial t = 0$ となり, $V(p)$ と $M(p)$ の具体的な関数形を代入し, Kolmogorov 後向き方程式を変形すると次式を得る

$$\frac{d^2 u(p)}{dp^2} + 2sN \frac{du(p)}{dp} = 0.$$

この微分方程式を境界条件

$$u(1) = 1, \quad u(0) = 0,$$

の下で解けば, 式 (12) を得る.

(平成 17 年 1 月 2 日受付)

(平成 17 年 5 月 16 日再受付)

(平成 17 年 8 月 14 日再々受付)

(平成 17 年 8 月 26 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 年京都教育大学教授。平成 16 年より宮崎大学工学部情報システム工学科教授。最近は遺伝的アルゴリズムの理論的解析に興味を持っている。理学博士。



片山 晋

昭和 46 年生。平成 7 年東京大学農学部卒業。平成 9 年同大学大学院工学系研究科情報工学専攻修士課程修了。平成 12 年東京工業大学大学院総合理工学研究科知能システム科

学専攻博士課程修了。平成 12 年同大学リサーチアソシエート。強化学習の研究に従事。平成 13 年 NEC Research Institute, Princeton ポストドクトラルサイエンティスト。平成 14 年より宮崎大学工学部情報システム工学科助手。最近は帰納プログラミングに興味を持っている。博士(工学)。



坂本 真人

東京都出身。平成 11 年山口大学大学院理工学研究科より工学博士の学位を取得。平成 13 年より宮崎大学工学部情報システム工学科助教授。当初は電子通信工学ならびに海洋環

境等を専攻し、海洋観測機器や海洋波の情報処理に興味があった。現在は理論計算機科学を中心に、基礎から応用まで幅広く研究に従事している。特に、オートマトン・言語理論・計算論、デジタル幾何学、CG、画像処理、コンピュータアニメーション、複雑系解析等に関心が強い。日本物理学会、電気学会、電子情報通信学会、システム制御情報学会、EATCS, LA 等に所属。