

交叉によるスキーマ保存

山本公洋 内藤昭三
{kimihiro,naito}@slab.ntt.co.jp

NTT ソフトウェア研究所
〒180 東京都武蔵野市緑町 3-9-11

概要

遺伝的アルゴリズムの交叉の役割を考察する。遺伝的アルゴリズムが低次数だまし問題に有効であることを示す。標本（ビット列）集合内部におけるスキーマを含有する標本の個数の経時変化を調べる。遺伝操作をスキーマ増殖操作とスキーマ減衰操作に分ける。標本数の増殖率と減衰率を導入する。増殖率と減衰率を数式で算出、グラフ曲線化する。曲線形状に基づき標本数の経時変化が安定相と非安定相に区別されることを説明する。安定相にある場合、標本数は不動点へ向かって収束する。スキーマを含有する標本の適応値平均と標本集合全体の適応値平均との大小関係が反転することで相転移が生じることを説明する。交叉は標本集合の多様性を保ち、副次的効果として標本数の経時変化を安定相にとどめ、スキーマを保存する機能のあることを示す。理論値と実験値を比較、検証する。

Schema Preservation by Crossover

Kimihiko YAMAMOTO Shozo NAITO
{kimihiro,naito}@slab.ntt.co.jp

NTT Software Laboratories
Midori-Cho 3-9-11 Musashino-Shi Tokyo 180 Japan

Abstract

This paper discusses how the crossover operator preserves the schema, taking account of the propagation dynamics of the schemata in the sample bit string pool. This paper describes the fact that the crossover makes it possible to solve the middle order deception problems. We divide the propagation dynamics into the stable and unstable phase, on account of the fixed point and the two curves produced by the propagation iteration which includes the selection and the copying, and the demolition iteration which includes the crossover and the mutation. The switchover between the stable and unstable phase depends on the fitness values of the bit strings which include the schema. Crossover keeps the fitness average high with merging the schema into the bit strings of the sample pool uniformly. The configuration of the propagation curve by the crossover keep the propagation dynamics stay in the stable phase. This paper evaluates correctness of the propagation curve and the demolition curve by some computer experiments.

1 はじめに

組み合わせ最適化手法のひとつである遺伝的アルゴリズムの有効適応範囲を明らかにする。モンテカルロ法 [3] は、標本空間から解をランダムに標本抽出し、抽出した解の中で目的関数最小（もしくは最大）のものを近似最適解として出力する。シミュレーテッドアニーリングは、暫定最適解の近傍を重点的に標本抽出する。近傍における傾向に基づき、標本空間から標本抽出する。一方、遺伝的アルゴリズム [2] は 3 種類の遺伝操作（淘汰、交叉、突然変異）を用いて標本抽出する。淘汰と突然変異のみを用いる遺伝的アルゴリズムは、暫定解を複数保持するシミュレーテッドアニーリングと等しい。交叉の果たす役割が遺伝的アルゴリズムの有効適応範囲を決定する。ビルディングブロック仮説 [2] やスキーマ定理 [2] は、

交叉の役割がスキーマ保存にあることを示唆した。だまし問題に対する遺伝的アルゴリズムの優位性は計算機実験を通して検証されている [1]。しかし、交叉のスキーマ保存機能については不明な点が多い。本稿ではだまし問題を対象として、交叉がスキーマを保存する機構について仮説をたてる。

第 2 章では、遺伝的アルゴリズムを説明する。第 3 章では、低次数だまし問題を設定する。第 4 章では、スキーマを含有する標本（ビット列）の個数が遺伝操作によって変化する割合（増殖率と減衰率）を導入する。第 5 章では、スキーマを含有する標本の個数の経時変化を安定相と非安定相に分類する。また、相転移機構を明らかにする。第 6 章では、交叉がスキーマを標本集合へ均等に埋め込むことを示す。交叉のこの機能がスキーマ保存につながることを

を説明する。第7章では、理論値と実験値を比較、検証する。

2 遺伝的アルゴリズム

n 個の標本 (ビット列) を抽出、集団で保持する。これを標本集合 S と呼ぶことにする。標本集合 S は、根元事象すべての集合である標本空間の部分集合となる。標本集合 S は経時変化する。標本集合から重み付けに準じて標本を確率的にコピーする。この遺伝操作を淘汰と呼ぶ。目的関数値 (以後、適応値 e と呼ぶ) の高い標本ほどコピーされる回数が多い。

標本集合から標本を2個コピーする。2個の標本間でビットを交換する。この遺伝操作を交叉と呼ぶ。標本を任意の2点を定めて3個の部分 (先頭、中央、末尾) に分割する。標本を分割する点を交叉位置と呼ぶ。2個の標本を、同じ交叉位置で3個の部分に分割、中央の部分だけを残し、両端 (先頭と末尾) 部分を交換する。この交叉位置を2箇所設ける方法を2点交叉と呼ぶ。新たに生成された2個の標本の各ビットを一定の確率で反転させる。この遺伝操作を突然変異と呼ぶ。

一連の操作 (淘汰、交叉、突然変異) を通して新たな標本を2個生成する。一連の操作を $n/2$ 回繰り返すことで、新たな標本集合 S を再生する。古い標本集合 S を新しい標本集合 S で置き換える。遺伝的アルゴリズムは標本集合の再生を繰り返す。

3 低次数だまし問題

3.1 だまし問題

ビット長 $l=5$ の2進ビット列へビットパターンに応じて適応値 e を与える。0ビットを含まない場合 (つまり1ビットを5個含む場合)、 $e=5$ 点を与える。0ビットを1個含む場合、 $e=4$ 点を与える。以後、0ビットの個数が1個増える毎に、与える点数を1点減らす。但し、0ビットを5個含む場合、 $e=20$ 点を与える。最適解をとりまく近傍解の適応値が低い。このような問題をだまし問題と呼ぶ。本稿ではこのビット長 $l=5$ のビット列を8個組み合わせてビット長 $l=40$ のビット列を作る。ビット長 $l=5$ のビット列の適応値の総和をビット長 $l=40$ のビット列の適応値とする。ビット全てが0の場合、ビット列の得点は最高点 $e=160$ 点となる。この低次数だまし問題を対象に、遺伝的アルゴリズムのスキーマ保存機構を解析する。

3.2 スキーマ

標本 (ビット列) 上の意味あるビットパターンをスキーマと呼ぶ。スキーマは3種類の記号 (0, 1, *) で表される。記号*は、該当する位置のビットが0ビットでも1ビットでもかまわないことを示す。

たとえば、スキーマ $H = "11*0*"$ を含有するビット長5の2進ビット列は {"11000", "11001", "11100", "11101"} となる。スキーマ $H = "11*0*"$ において先頭の固定ビット1ビットから末尾の固定ビット0ビットまでの距離をスキーマ H の定義長 δ と呼ぶ。この場合、定義長 $\delta = 4$ となる。また、スキーマ $H = "11*0*"$ において固定0ビットと固定1ビットとの総数をスキーマ H の次数 o と呼ぶ。この場合、次数 $o = 3$ となる。

4 増殖と減衰

遺伝操作を増殖操作と減衰操作に分類する。淘汰を増殖操作とする。交叉と突然変異を減衰操作とする。一回の遺伝操作適用のもと、標本集合内部においてスキーマを含有する標本 (ビット列) の個数 m が変化する割合を計算する。増殖操作により標本数 m が変化する割合を増殖率 R_+ と定義する。減衰操作により標本数 m が変化する割合を減衰率 R_- と定義する。標本数 m と増殖率 R_+ 、減衰率 R_- の積で次世代の標本数 m が決まる。増殖率 R_+ と減衰率 R_- は、標本数 m から標本数 m への自己写像関数でもある。

増加率 R_+ を式 (1) で定義、計算する。

$$R_+ = \frac{m \times \bar{e}}{m \times \bar{e} + (n - m) \times \bar{E}} \quad (1)$$

スキーマを含有する標本の集合を s ($s \subset S$) とする。標本 $x \in s$ の適応値 e の平均を適応値平均 \bar{e} と定義する。標本 $x \in S$ の適応値 e の平均を適応値平均 \bar{E} と定義する。式 (1) の分子項と分母第1項とは、標本 $x \in s$ の適応値 e の総和を示す。標本集合 S と標本集合 s の差集合は $(S - s)$ となる。分母第2項は標本 $x \in (S - s)$ の適応値 e の総和を示す。差集合 $(S - s)$ の適応値平均と標本集合 S の適応値平均は等しいと仮定して \bar{E} で近似する。分母第

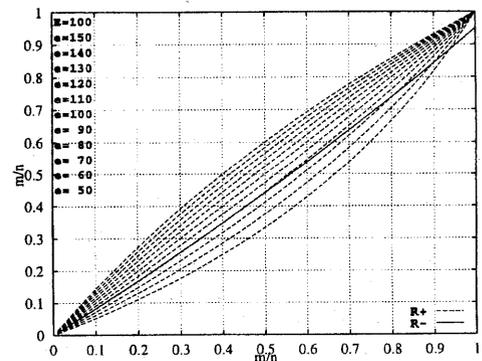


図1: 増殖曲線と減衰曲線 (理論値)

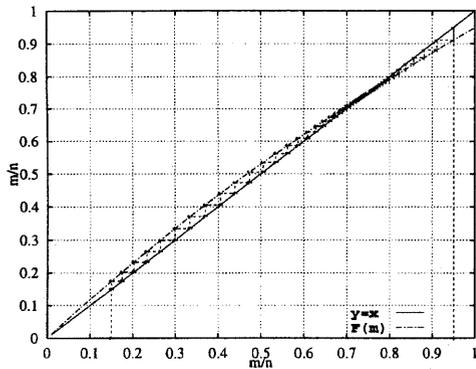


図 2: 安定相における写像軌道

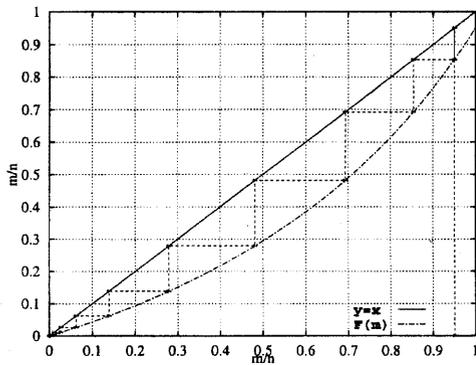


図 3: 非安定相における写像軌道

1 項と分母第 2 項の和は標本集合 S の適応値総和を示す。 m が小さい時、 R_+ は式 (2) で近似される。

$$R_+ = \frac{m \times \bar{e}}{n \times \bar{E}} \quad (2)$$

m が大きくなるにつれ、 R_+ は 1.0 へ漸近する。

減衰率 R_- は式 (3) で定義、計算する。

$$R_- = \{(1-\alpha) + \alpha \times \mathcal{R}\} \times (1-\beta \times o) \quad (3)$$

α を交叉確率、 β を突然変異確率とする。減衰率 R_- は交叉を経てもスキーマが破壊されない確率と、突然変異を経てもスキーマが破壊されない確率との積で定義する。式 (3) の $\{\}$ カッコ内の第 1 項は交叉が実施されない場合を示す。 $\{\}$ カッコ内の第 2 項は交叉が実施される場合を示す。交叉を経てもスキーマが破壊されない確率 \mathcal{R} を式 (4) で定義する。

$$\mathcal{R} = \frac{m}{n} + \frac{n-m}{n} \times \frac{(l-\delta)^2}{l^2} \quad (4)$$

淘汰は標本集合 S より 2 個の標本をコピーする。式 (4) の第 1 項は、2 個の標本の両方にスキーマが含まれる場合を示す。式 (4) の第 2 項は、どちらか一方のみにスキーマが含まれる場合を示す。

標本数 m を変数として増殖率 R_+ と減衰率 R_- とをグラフ曲線化する (図 1 参照)。増殖曲線の形状は適応値平均 \bar{e} と \bar{E} の値に依存して変化する。 $\bar{e} = \bar{E}$ の場合、増殖曲線は原点を通る傾き 1 の直線となる。 $\bar{e} > \bar{E}$ の場合、増殖曲線は上に凸の曲線となる。 $\bar{e} < \bar{E}$ の場合、増殖曲線は下に凸の曲線となる。一方、交叉確率 $\alpha = 0.6$ 、突然変異確率 $\beta = 0.01$ とした時、ビット長 l に比べて定義長 δ や次数 o が十分小さければ、減衰曲線は原点を通る傾き 1 の直線 ($y = x$) とほぼ等しくなる。

5 スキーマ数の経時変化

5.1 写像軌道

スキーマを含有する標本の個数 m と増殖率 R_+ 、減衰率 R_- の積で次世代のスキーマを含有する標本数 m が決まる。増殖率 R_+ と減衰率 R_- の積を標本数 m の写像関数 $F(m)$ とする。交叉確率 $\alpha = 0.6$ 、突然変異確率 $\beta = 0.01$ 、ビット長 $l = 40$ 、適応値平均 $\bar{E} = 100$ とする。この標本集合 S において、定義長と次数が $\delta = o = 5$ であるスキーマ H を含有する標本 $x \in s$ の適応値平均 $\bar{e} = 150$ とする。この時の写像関数 $F(m)$ を図 2 に示す。減衰曲線は直線 $y = x$ とほぼ等しくなる。しかし、突然変異確率 β が 0 でないため、厳密には傾きが若干 1 より小さくなる (図 1 参照)。このため、写像関数曲線 $F(m)$ は直線 $y = x$ と交わる (図 2 参照)。この交点は写像の不動点となる。標本数 m の経時変化は $F(m)$ の写像軌道である。写像軌道は、写像関数曲線 $F(m)$ 上と直線 $y = x$ 上とを交互に辿りながら、不動点へ向かって収束する。

5.2 安定相と非安定相

前節の標本集団 S において、定義長と次数が $\delta = o = 5$ であるスキーマ H を含有する標本 $x \in s$ の適応値平均 $\bar{e} = 50$ とする。この時の写像関数 $F(m)$ を図 3 に示す。図 3 では写像関数曲線 $F(m)$ と直線 $y = x$ は交わらない。標本数 m の経時変化は単調減少を続け、原点へと収束する。

写像関数曲線 $F(m)$ と直線 $y = x$ とが交わるかは、増殖曲線の形状に依存する。適応値平均 $\bar{e} > \bar{E}$ の場合、増殖曲線は上に凸の曲線となる。この時、写像関数曲線 $F(m)$ と直線 $y = x$ は交わり、不動点が発生する。適応値平均 $\bar{e} < \bar{E}$ の場合、増殖曲線は下に凸の曲線となる。この時、写像関数曲線 $F(m)$ と直線 $y = x$ は交わらない。このことより、スキーマを含有する標本数 m の経時変化を 2 種類の相へと区別できる。不動点が発生する場合を安定相と定義

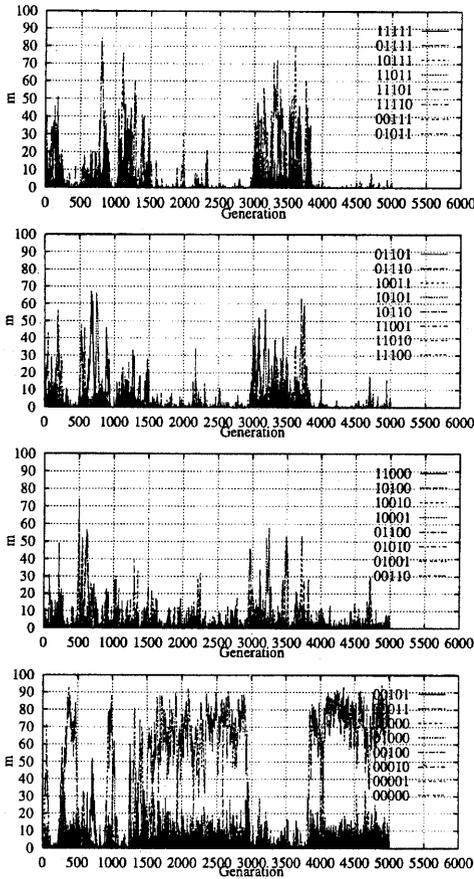


図 4: スキーマ含有標本数の変化 (交叉なし)

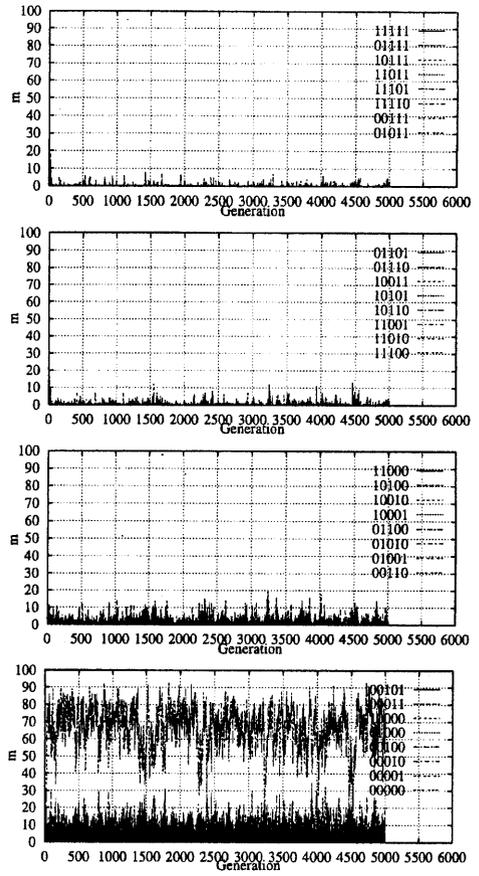


図 5: スキーマ含有標本数の変化 (交叉あり)

する。不動点が発生しない場合を非安定相と定義する。適応値平均 \bar{e} と \bar{E} との大小関係が相を決定する。適応値平均 \bar{e} と \bar{E} との大小関係が反転することで相転移が生じると考えられる。

6 交叉の役割

遺伝的アルゴリズムは淘汰において標本をコピーする。標本空間における着目点は、現在の暫定標本点もしくはその近傍に集中する。標本に偏りがある場合、スキーマ自身の適応値が高くてもスキーマを含有する標本 $x \in s$ の適応値平均 \bar{e} が標本集団の適応値平均 \bar{E} より大きくなるとは限らない。遺伝的アルゴリズムは交叉を用いることで、標本集合へ均等にスキーマを埋め込んでいると考えられる。淘汰を繰り返しても適応値平均 $\bar{e} > \bar{E}$ の大小関係を保つ。このことにより、スキーマを含有する標本数 m の経時変化は安定相に留まり、スキーマは保存されると考えられる。交叉の役割はスキーマ保存にあると考

えられる。

7 計算機実験

7.1 パラメータ

3章で設定した低次数だまし問題を遺伝的アルゴリズムを用いて解く。交叉を用いない遺伝的アルゴリズム (アルゴリズム 1) と交叉を用いた遺伝的アルゴリズム (アルゴリズム 2) とを比較する。両方のアルゴリズムにおいて標本総数 $n = 100$ 、世代交代 $g = 5000$ 、合計 500000 の試行を行なう。突然変異確率 $\beta = 0.01$ とする。アルゴリズム 1 では交叉確率 $\alpha = 0.0$ 、アルゴリズム 2 では交叉確率 $\alpha = 0.6$ とする。実験の結果、アルゴリズム 1 は最適解を獲得できなかった。アルゴリズム 2 は 255 世代において最適解 (適応値 160) を獲得した。

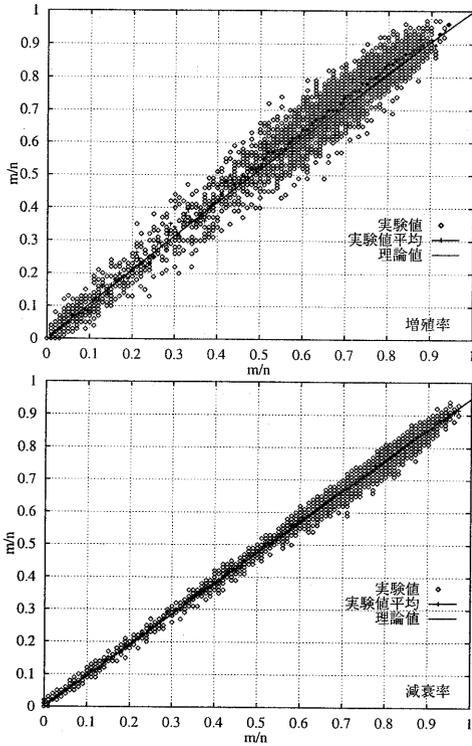


図 6: 増殖率と減衰率 (交叉なし)

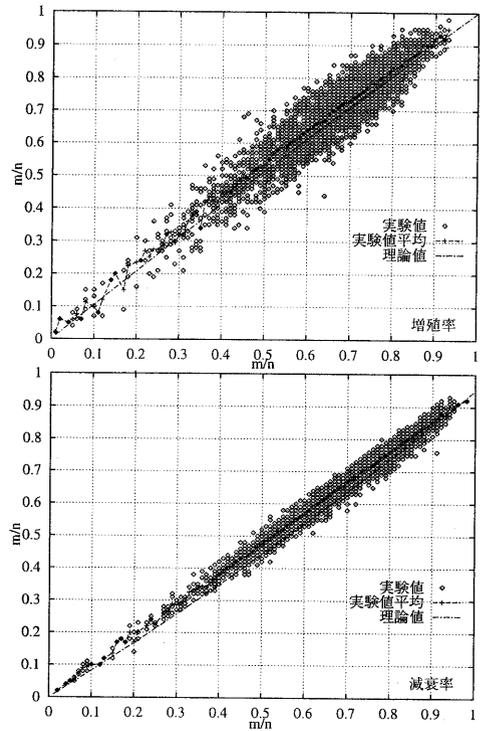


図 7: 増殖率と減衰率 (交叉あり)

7.2 スキーマ数の経時変化

ビット長 $l = 40$ の標本の第 6 ビットから第 10 ビットまでの 5 ビットに着目する。“11111” から “00000” までの 32 種類のスキーマに着目する。各スキーマを含有する標本数の経時変化を図 4 に示す。アルゴリズム 1 における標本数の経時変化を図 4 に示す。アルゴリズム 2 における標本数の経時変化を図 5 に示す。着目する 5 ビットが “00000” となるビットパターンをスキーマ $H32$ とする。アルゴリズム 1 では経時変化の相転移が何回も生じている。(図 4 参照)。これに対して、アルゴリズム 2 では相転移が生じない。スキーマ $H32$ およびその近傍解が安定的に保存されている。図 4～5 より、交叉の役割がスキーマ保存にあることが推測される。

7.3 増殖曲線と減衰曲線

アルゴリズム 1 を用いた計算機実験において 0～5000 世代の各世代におけるスキーマ $H32$ の増殖率 R_+ を図 6 にプロットする。0～5000 世代を通した標本集合 S の適応値平均は $\bar{E} = 95.677$ 、標本集合 s の適応値平均は $\bar{e} = 89.560$ であった。この実験値より計算した増殖曲線の理論値を図 6 に示す。図

6 において、増殖率 R_+ の理論値と実験値が一致している。アルゴリズム 2 を用いた計算機実験においても増殖率 R_+ の実験値と理論値が一致する。このことより、式 (1) は妥当であると考えられる。

アルゴリズム 1 を用いた計算機実験において 0～5000 世代の各世代におけるスキーマ $H32$ の減衰率 R_- を図 6 にプロットする。スキーマ $H32$ の定義長と次数は $\delta(H) = \alpha(H) = 5$ である。これらの値から計算した減衰曲線の理論値を図 6 に示す。アルゴリズム 1 において減衰率 R_- の理論値と実験値が一致する。また、アルゴリズム 2 を用いた計算機実験においても減衰率 R_- の理論値と実験値が一致している。このことより、式 (4) は妥当であると考えられる。

7.4 適応値平均とスキーマ数の経時変化

適応値平均 \bar{e} と適応値平均 \bar{E} の大小関係の経時変化を示す。着目する 5 ビット (第 6～第 10 ビット) が “10100” となるビットパターンをスキーマ $H18$ とする。スキーマ $H32$ の適応値平均 \bar{e} とスキーマ $H18$ の適応値平均 \bar{E} 、および標本集合全体の適応値平均 \bar{E} の経時変化を図 8 に示す。各スキーマを含有する

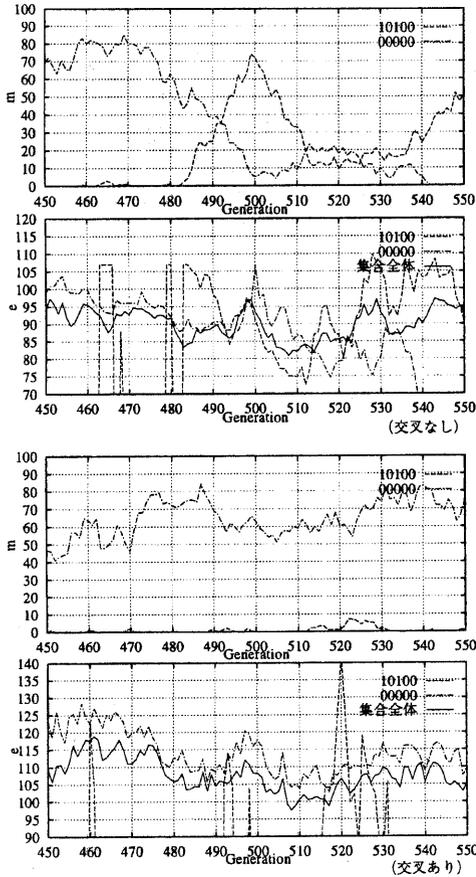


図 8: 450 世代～550 世代の経時変化 (拡大図)

標本数 m の経時変化をあわせて図 8 に示す。アルゴリズム 1 では適応値平均 \bar{e} と適応値平均 \bar{E} の大小関係が変化する。適応値平均 \bar{e} と適応値平均 \bar{E} の大小関係の変化に伴い、スキーマを含有する標本数 m が増加から減少へ、もしくは減少から増大へと転じている。アルゴリズム 2 では適応値平均 \bar{e} と適応値平均 \bar{E} の大小関係が一定に保たれている。各スキーマを含有する標本数 m も一定に保たれている。このことは、交叉が適応値平均の大小関係を一定に保つことを示している。

さらに、アルゴリズム 1 におけるスキーマ H32 を含有する標本数 m と、適応値平均の大小関係との相関関係を図 9 に示す。スキーマ H32 を含有する標本数が m となる世代において、かつ $\bar{e} \leq \bar{E}$ となる世代数をカウントして曲線 1 とする。また、スキーマ H32 を含有する標本数が m となる世代において、かつ $\bar{e} > \bar{E}$ となる世代数をカウントして曲線 2 とする。曲線 1 は m の小さい領域に局在する。一方、

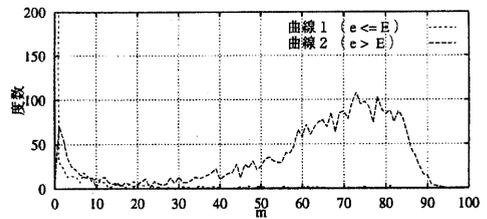


図 9: 適応値平均の大小関係と相転移の相関関係

曲線 2 は m の大きい領域に局在する。このことは、標本数の経時変化の相転移機構と適応値平均の大小関係が密接な相関関係をもつことを示している。

8 おわりに

本稿では、交叉がスキーマを保存する機構を考察した。また、遺伝的アルゴリズムが低次数だまし問題に対して有効なことを示した。遺伝操作を増殖操作と減衰操作に分けた。スキーマ含有標本数の増殖率と減衰率を導入し、定義した。増殖曲線や減衰曲線の形状から、スキーマ含有標本数の経時変化が 2 種類の相 (安定相と非安定相) に区別されることを示した。安定相にある場合、スキーマ数が不動点に向かって収束することを示した。スキーマを含有する標本の適応値平均と標本集合全体の適応値平均との大小関係が反転することで、相転移が生じることを示した。また、交叉がスキーマを標本集合全体へ均等に埋め込むことを示した。交叉の持つこの機能により、スキーマを含有する標本の適応値平均が標本集合全体の適応値平均より高くなり、標本数の経時変化は安定相に留まり、スキーマは保存される。本稿では、理論値と実験値が一致することを検証した。

謝辞

日頃よりご支援頂く NTT ソフトウェア研究所 広域コンピューティング研究部 市川晴久部長、後藤厚宏グループリーダー、ならびに知的ソフトウェア研究グループのみなさまに感謝します。

参考文献

- [1] Eshelman, L.J. and Schaffer, J.D.: Crossover's Niche, *Proc. of the 5th International Conference on Genetic Algorithms*, pp.9-14(1993).
- [2] Goldberg, D.E.: *Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning*, Addison Wesley(1993).
- [3] 西川, 三宮, 茨木: 最適化, 岩波書店(1982).