

## 遺伝的アルゴリズムにおける最適解出現分布のマルコフ連鎖による研究

古谷博史<sup>†1</sup> 張玉安<sup>†2</sup> 坂本真人<sup>†1</sup>

本論文では、遺伝的アルゴリズム (GA) の計算性能を評価する指標として成功確率を定義し、マルコフ連鎖理論を用いた成功確率の計算方法を提案する。ここで、集団中に少なくとも 1 つの最適解が存在する確率を成功確率と定義する。一般に、GA の進化を理論的に解析することは非常に困難である。そのため、集団が連鎖平衡にあることを仮定し、1 次スキーマの確率分布を求める。我々はその 1 次スキーマ分布から、集団中の最適解の個数を計算するアルゴリズムを導く。その応用として、積型適応度関数を用いた GA に対しマルコフ連鎖理論とその拡散近似を適用し、理論的な成功確率の計算法を示す。数値実験では、成功確率に対する突然変異率  $p_m$  の効果を調べた。その結果、突然変異は成功確率を大幅に増加させることが分かった。この突然変異の効果に対し理論的検討を行った。

### Study of the Distribution of Optimum Solution in Genetic Algorithm by Markov Chains

HIROSHI FURUTANI,<sup>†1</sup> YU-AN ZHANG<sup>†2</sup>  
and MAKOTO SAKAMOTO<sup>†1</sup>

In this paper, we define the success probability as a measure of the performance of Genetic Algorithms (GAs), and propose the method for calculating the success probability by means of Markov chain theory. We define the success probability as there is at least one optimum solution in a population. In general, it is very difficult to analyze GA evolution theoretically. Therefore, we assume that the population is in linkage equilibrium, and obtain the distribution of the first order schemata. We derive the algorithm to calculate the number of optimum solutions in the population by using the distribution of the first order schemata. As an application of the method, we use Markov chain model and its diffusion approximation to a GA on the multiplicative landscape. We show the process to calculate the success probability. In numerical experiments, we studied the effect of mutation rate  $p_m$  on the success probability. We found that mutation greatly improve the success probability of GA. We studied

theoretically this effect of mutation.

#### 1. はじめに

遺伝的アルゴリズム (GA) を現実の問題に適用する際にいつも問題となるのが、交叉率  $p_c$ 、突然変異率  $p_m$ 、集団の個体数  $N$  など計算パラメータの選択である。残念ながら、これらのパラメータを決定するための信頼すべき理論はほとんどなく、我々は直観的、または経験によって選択している。そのとき注意することの 1 つは、最終的に最適解もしくは準最適解を得ることができるか否か、という点である。本論文では、成功確率  $S$  を、集団中に最適解が少なくとも 1 つは存在する確率、として定義し、その計算パラメータとの関係について調べる。そのため、我々が考案した成功確率を計算する理論的方法について報告する。

一般に、GA の進化を理論的に解析することは非常に困難である。そのため、この方法では集団が連鎖平衡にあることを仮定し、1 次スキーマの確率分布を求める。本論文ではその 1 次スキーマ分布から、集団中の最適解の個数を計算するアルゴリズムを導く。この方法は突然変異のある場合も適用可能である。我々は、突然変異のない場合における成功確率の計算法を提案し、GA の数値計算をよく再現できることを示した<sup>1)</sup>。その中で突然変異が成功確率に及ぼす影響を調べ、その効果が大きいことを明らかにした。しかし、突然変異を含む成功確率の理論的枠組みを持たなかったため、突然変異のある場合は数値計算の結果を用いて突然変異のない場合と比較した。本論文の方法を用いることにより、成功確率のより理論的な解析が可能となる。ここでは、その応用例として確率的解析が比較的容易な積型適応度関数を用い、突然変異が計算に与える影響を中心に、理論的解析と数値実験を比較しながら分析を行う。

有限集団の進化を数学的に解析するためには、確率論的枠組みが必要となる。集団遺伝学では、この問題を取り扱うため Wright や Fisher らによって開発されたマルコフ連鎖理論が用いられ、Wright-Fisher モデルと呼ばれている<sup>2)</sup>。しかし、Wright-Fisher モデルは解の解析的表現を得ることが難しく、単純な問題でさえいまだに完全な解が得られていない。

<sup>†1</sup> 宮崎大学工学部

Faculty of Engineering, University of Miyazaki

<sup>†2</sup> 宮崎大学大学院農学工学総合研究科

Interdisciplinary Graduate School of Agriculture and Engineering, University of Miyazaki

そのため集団遺伝学の研究者は、拡散方程式を用いてマルコフ連鎖を近似し、数種類の問題についてその解析解を得ることに成功した<sup>3)</sup>。

集団遺伝学では、1 遺伝子座の進化を考えることがほとんどで、GA のように多遺伝子座（多ビット）の問題には直接適用することができない。GA の分野でマルコフ連鎖理論を適用した例としては、Nix らによる研究がある<sup>4)</sup>。また彼らとは独立に Davis らも GA のマルコフ連鎖モデルを提案した<sup>5)</sup>。さらにこれらとは別に、混合システムの視点からの GA のモデルも提案されている<sup>6)</sup>。Nix らによるマルコフ連鎖モデルは、ビット長  $\ell$  や個体数  $N$  の増加とともにマルコフ連鎖の遷移行列の次元が指数関数的に増加し、その取扱いが非常に難しくなる。これは他の微視的モデルにも共通した問題である。したがって、これらの方法を GA の解析に応用する場合、なんらかの近似が必要となる。

Asoh らは、平らな適応度関数において集団が連鎖平衡にあると仮定し、GA の進化を 1 次スキーマを用いて確率的に記述した<sup>7)</sup>。彼らは多ビット問題である GA を 1 次スキーマの問題に分割し、その確率的解析を可能にしたのである。我々は彼らのアプローチを積型適応度関数の問題に適用し、有限な  $N$  における 1 次スキーマの進化を調べた<sup>8)</sup>。1 次スキーマ分布にマルコフ連鎖理論を適用し、1 次スキーマの時間変化がよく再現できることを示した。また、マルコフ連鎖に対する近似である拡散方程式を用いて、究極固定確率や究極消滅確率を求め、GA の結果とよく一致することを示した。集団が 1 次スキーマのみを用いて表現するためには、連鎖平衡にあることが必要である。交叉は集団を連鎖平衡に導く役割をするため、交叉が十分有効に働けば集団は連鎖平衡状態になる。また、積型適応度関数による進化では連鎖が弱く、そのため本研究ではこの適応度関数を採用した。

## 2. 数学モデル

### 2.1 数学的表現

本研究では選択、交叉、および突然変異の過程を考慮し、計算の効率について突然変異の影響を中心に調べた。選択は、適応度比例選択を用いた。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で  $N$  とする。個体の遺伝子型を固定長  $L$  の 2 進数列によって表す。したがって、遺伝子型の総数は  $n = 2^L$  となる。整数  $i$  ( $0 \leq i \leq n-1$ ) を 2 進ビット列と  $i = (i(L), \dots, i(1))$  のように対応させる。

世代  $t$  における遺伝子型  $i$  の個体数を  $N_i(t)$  とし

$$N = \sum_{i=0}^{n-1} N_i(t),$$

となる。遺伝子型  $i$  の相対頻度を

$$x_i(t) = N_i(t)/N,$$

と表す。

集団の平均適応度は次式で表される

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

$f_i$  は遺伝子型  $i$  の適応度である。我々は、積型適応度関数を

$$f_i = \prod_{k=1}^L \{1 + i(k)s\}, \quad (s \geq 0) \quad (2)$$

と定義する。パラメータ  $s$  は、選択の強さを表す。

### 2.2 連鎖平衡

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し、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<sup>9)</sup>。逆に相関がない状態を連鎖平衡と呼ぶ。連鎖不平衡は選択の過程で遺伝子座間に強い相関をもたらす (epistatic) 適応度を用いた場合、および遺伝的揺らぎの結果引き起こされる。交叉は連鎖不平衡の程度を減らすオペレータとして働き、突然変異も同様な働きをする。連鎖に着目した GA の手法としては、リンケージ学習などがある<sup>10)</sup>。

集団が連鎖平衡にあるならば、相対頻度  $x_i(t)$  は積型になり、次式で表される。

$$x_i(t) = \prod_{k=1}^L h_{i(k)}(t). \quad (3)$$

ここで  $h_{i(k)}$  は  $k$  番目のビットにおける 1 次スキーマの相対頻度を表す。式 (2) と式 (3) を式 (1) に代入すると、平均適応度も  $i(k) = 1$  の 1 次スキーマ頻度の積で表される<sup>11)</sup>。ここで  $i(k) = 1$  を  $1(k)$  と表した。

$$\bar{f}(t) = \prod_{k=1}^L \{1 + s h_{1(k)}(t)\}. \quad (4)$$

さらにまた、位置依存性がなければ  $h_1 = h_{1(k)}$  とし

$$\bar{f}(t) = \{1 + s h_1(t)\}^L \quad (5)$$

となる。

### 2.3 決定論的方程式

ここでは選択のための決定論的方程式を導く<sup>11),12)</sup>。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

$$x_i(t+1) = \frac{f_i x_i(t)}{\bar{f}(t)}, \quad (6)$$

となる。集団が連鎖平衡にあるならば、 $x_i(t)$  は式 (3) で表される。これらの表現と方程式

(4) を用いて, 進化方程式 (6) を書き直すと

$$\prod_{k=1}^L h_{i(k)}(t+1) = \prod_{k=1}^L \frac{(1+s i(k)) h_{i(k)}(t)}{1+s h_{1(k)}(t)} \quad (7)$$

となる. ここで  $i(k) = 1$  とおき, 1 次スキーマの決定論的進化方程式を導くことができる.

$$h_{1(k)}(t+1) = \frac{(1+s) h_{1(k)}(t)}{1+s h_{1(k)}(t)}. \quad (8)$$

突然変異を加えたときの決定論的進化方程式は,  $p_m$  を突然変異率として

$$h_1'(t+1) = (1-p_m) h_1(t+1) + p_m h_0(t+1),$$

$$h_0'(t+1) = p_m h_1(t+1) + (1-p_m) h_0(t+1)$$

となる. ここで  $h_0(t+1) = 1 - h_1(t+1)$  の関係に注意して

$$h_1'(t+1) = (1-2p_m) h_1(t+1) + p_m, \quad (9)$$

を得る.

### 3. 確率論的モデル

#### 3.1 Wright-Fisher モデル

決定論的方程式は個体数を無限大に近づけた場合に相当し, 集団サイズ  $N$  が十分大きい場合には良い近似を与える. しかし, 比較的少数の個体を扱う場合には適切でないことがある. そのため, Wright と Fisher は独立に, 有限の個体数を考慮した進化モデルを提案した<sup>2)</sup>. このモデルでは遺伝子座は 1 つ ( $L = 1$ ) で, 2 つの対立遺伝子を持つ. ここでは対立遺伝子を A および a と表し, 遺伝子 A をビット 1, 遺伝子 a をビット 0 に対応させる. 集団の個体数  $N$  は一定とし, 遺伝子 A を持つ個体の数を  $N_1$  とする. 遺伝子  $i = 0, 1$  の適応度を次式で定義する.

$$f_0 = 1, \quad f_1 = 1 + s.$$

$s > 0$  とし, ビット 1 が有利な遺伝子である.

#### 3.2 突然変異のない場合

Wright-Fisher モデルの遷移確率  $P_{i,j}$  は適応度を考慮した選択による集団分布の変化を表すために用いられる<sup>13)</sup>.

$$P_{i,j} = P(j|i) = \binom{N}{j} b^j (1-b)^{N-j}, \quad (10)$$

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

ここで  $i$  は世代  $t$  における遺伝子 A の数,  $j$  は世代  $t+1$  における遺伝子 A の数とする.

集団が世代  $t$  において  $N_1 = i$  となる確率を  $\mu_i(t)$  とする. 集団の進化は次式で与えられる.

$$\mu_j(t+1) = \sum_{i=0}^N \mu_i(t) P_{i,j}. \quad (11)$$

規格化条件から

$$\sum_{i=0}^N \mu_i(t) = 1 \quad (12)$$

となる. 遺伝子 A が集団中から失われる状態 (消滅状態) は  $i = 0$ , 逆に遺伝子 A が集団をすべて占める状態 (固定状態) は  $i = N$  に対応する.  $\mu_0(t)$  と  $\mu_N(t)$  が吸収状態の確率を与える.

#### 3.3 突然変異のある場合

突然変異を加えたときの Wright-Fisher モデル遷移確率  $P_{i,j}$  は, 決定論的進化方程式 (9) から

$$h_1(t+1) \rightarrow b, \quad h_1'(t+1) \rightarrow b',$$

の置き換え

$$b' = (1-2p_m)b + p_m, \quad (13)$$

をして得られる

$$P_{i,j} = P(j|i) = \binom{N}{j} (b')^j (1-b')^{N-j}. \quad (14)$$

有限な突然変異率の場合, マルコフ連鎖はエルゴード的となり, 吸収状態はもはや存在しない. エルゴード的マルコフ連鎖では, 定常状態の概念は成立せず, それに代わって定常分布  $\pi$  に収束する.

$$\pi = \lim_{t \rightarrow \infty} \mu(t). \quad (15)$$

定常分布のすべての成分は

$$\pi_i > 0, \quad (0 \leq i \leq N)$$

となる. 式 (11) から, 定常分布は

$$\pi_j = \sum_{i=0}^N \pi_i P_{i,j}. \quad (16)$$

を満たすことが分かる. これは  $P$  を  $(N+1) \times (N+1)$  行列と見なしたとき,  $\pi$  は固有値 1 の左固有ベクトルとなることを意味する.

#### 3.4 拡散近似

一般に, 進化方程式 (11) を解析的に解くことは非常に難しい. そのため研究者は Wright-

Fisher モデルに対する拡散近似を導入した<sup>3)</sup>。この場合、拡散方程式による近似はコルモゴロフ前向き方程式と呼ばれる偏微分方程式で表される。拡散方程式では、Wright-Fisher モデルにおける  $i/N$  を連続変数として近似し、また世代  $t$  も連続量として扱われる。

さらに、確率過程理論では別のタイプの拡散方程式があり、コルモゴロフ後向き方程式と呼ばれる。この方程式は固定確率と消滅確率を導くために使用され、

$$\frac{\partial \psi(p, t)}{\partial t} = \frac{V(p)}{2} \frac{\partial^2 \psi(p, t)}{\partial p^2} + M(p) \frac{\partial \psi(p, t)}{\partial p}, \quad (17)$$

と表される。ここで、変数  $p$  は初期状態における遺伝子 A の相対頻度を表す。我々はコルモゴロフ後向き方程式を用いて GA の解析を行い、GA の進化をよく再現することを示した<sup>8)</sup>。

突然変異のない場合、 $V(p)$  と  $M(p)$  は

$$V(p) = \frac{p(1-p)}{N}, M(p) = sp(1-p),$$

となる。

我々は固定確率に関心があり、究極固定確率を次式で定義する。

$$u(p) = \lim_{t \rightarrow \infty} \psi(p, t) \quad (18)$$

方程式 (17) において定常性から

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi(p, t) = 0,$$

とすると

$$\frac{d^2 u(p)}{dp^2} + \frac{2M(p)}{V(p)} \frac{du(p)}{dp} = 0,$$

となり、方程式境界条件は

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

で与えられる。 $2M/V = 2Ns$  から解は

$$u(p) = \frac{1 - \exp(-2Nsp)}{1 - \exp(-2Ns)}, \quad (19)$$

となる。通常、GA では  $p = 0.5$  とすることが多いので、その場合は

$$u(0.5) = \frac{1 - \exp(-Ns)}{1 - \exp(-2Ns)}, \quad (20)$$

とすればよい。

同様に究極消滅確率  $v(p)$  は

$$v(p) = 1 - u(p), \quad (21)$$

となる。

#### 4. 成功確率の計算

本論文では成功確率  $S$  を、突然変異のない場合は定常状態、突然変異のある場合は定常分布、において集団中に少なくとも 1 つは最適解が存在する確率、と定義する。一方、集団中に最適解が存在しない状態の確率  $F$  は

$$F = 1 - S$$

となり、失敗確率と呼ぶことにする。

##### 4.1 突然変異がない場合

突然変異がない場合、1 次のスキーマは固定状態（ビット 1 のみからなる状態）か消滅状態（ビット 0 のみからなる状態）に収束する。定常状態において最適解が存在するためには、 $L$  個の 1 次スキーマすべてが固定状態に収束する必要がある。したがって、成功確率は究極固定確率  $u(p)$  とビット長  $L$  により

$$S = u(p)^L \quad (22)$$

と表される<sup>1)</sup>。成功した GA 計算では、集団のすべての個体は最適解であることに注意されたい。

しかし、定常状態に至るまでの途中の状態の最適解存在確率は、この方法では計算することができない。そのためには、次に示す突然変異がある場合の計算法を用いればよい。

##### 4.2 突然変異がある場合

突然変異を入れた GA はエルゴード的なマルコフ連鎖となり、集団のすべての可能な配置状態の間を遷移していく。このため、時間さえあればいつかは最適解を含んだ状態に遷移していくことになる。したがって有限な突然変異率  $p_m > 0$  の GA を解析するためには、成功確率の定義を変える必要がある。ここではエルゴード的なマルコフ連鎖について、定常状態に代えて定常分布を用いて収束性を議論する。すなわち、乱数を変えながら同じ計算を繰り返し、その収束する状態の分布について調べていくことにする。

いま第 1 ビットから第  $\ell - 1$  ビットまでの長さ  $\ell - 1$  の部分ビット列を考える。この部分列についてそのすべてのビットが 1 の列

$$\langle 1, 1, \dots, 1, 1 \rangle$$

を  $(\ell - 1)$  ビット部分最適解、また混乱する恐れがなければ部分最適解または最適解と呼ぶことにする。

次に、集団中に存在する  $\ell$  ビット部分最適解の個数を表す確率変数  $X_\ell$  を定義する。 $X_\ell$  は  $\{0, 1, \dots, N\}$  を値にとる。

第  $\ell$  ビット目の 1 次スキーマの分布を表すベクトルを  $\pi^{(\ell)}$  とする.

$$\sum_{i=0}^N \pi_i^{(\ell)} = 1, \quad \pi_i^{(\ell)} \geq 0.$$

ここで  $\pi_i^{(\ell)}$  は, 第  $\ell$  ビットにおける 1 ビットの個数が  $i$  となる確率を表す.

また, 集団中の長さ  $\ell$  の部分列のうち  $j$  個が部分最適解である確率を  $S_j^{(\ell)}$  と表す.

$$S_j^{(\ell)} = \Pr\{X_\ell = j\}. \quad (23)$$

さきに定義した成功確率と失敗確率は

$$S = \sum_{j=1}^N S_j^{(L)}, \quad F = S_0^{(L)}, \quad (24)$$

から計算できる. このように,  $S$  と  $F$  を求めるには  $S_j^{(\ell)}$  が必要である.

以下では,  $S_j^{(\ell)}$  を再帰的に計算していく. すぐ分かるように初期条件は

$$S_j^{(1)} = \pi_j^{(1)}, \quad (0 \leq j \leq N), \quad (25)$$

となる.

( $\ell - 1$ ) ビット部分列の最適解の個数を  $i$  としたとき, 長さ  $\ell$  の部分列が  $j$  個の最適解を持つ確率を

$$Q_{i,j}^{(\ell)} = \Pr\{X_\ell = j | X_{\ell-1} = i\}, \quad (26)$$

とする.

遷移確率  $Q_{i,j}^{(\ell)}$  は, 第  $\ell$  ビットの 1 次スキーマ分布  $\pi^{(\ell)}$  を用いて

(1)  $j > i$  の場合は

$$Q_{i,j}^{(\ell)} = 0, \quad (27)$$

(2)  $j \leq i$  の場合は

$$Q_{i,j}^{(\ell)} = \sum_{m=j}^{N-i+j} \binom{N}{m}^{-1} \binom{i}{j} \binom{N-i}{m-j} \pi_m^{(\ell)} \quad (28)$$

で与えられる. ただし

$$\binom{0}{0} = 1,$$

と定義する. 式の導出については, 付録を参照されたい.

$j$  個の  $\ell$  ビット部分最適解を持つ確率  $S_j^{(\ell)}$  は

$$S_j^{(\ell)} = \sum_{i=0}^N S_i^{(\ell-1)} Q_{i,j}^{(\ell)}, \quad (29)$$

から計算することができる.

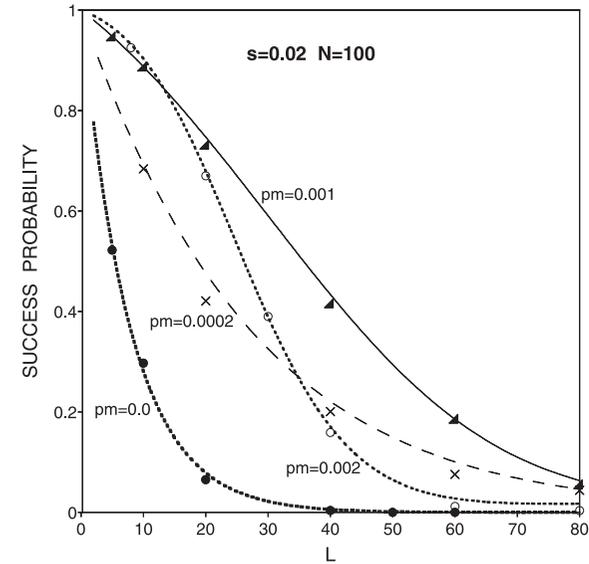


図 1 成功確率  $S$  の  $L$  依存性. 集団サイズ  $N = 100$ , 選択の強さ  $s = 0.02$ . 突然変異:  $\bullet$  ( $p_m = 0$ ),  $\times$  ( $p_m = 0.0002$ ),  $\blacktriangle$  ( $p_m = 0.001$ ),  $\circ$  ( $p_m = 0.002$ )  
Fig. 1  $L$ -dependence of success probability  $S$  with population size  $N = 100$  and selection strength  $s = 0.02$ . Mutation:  $\bullet$  ( $p_m = 0$ ),  $\times$  ( $p_m = 0.0002$ ),  $\blacktriangle$  ( $p_m = 0.001$ ),  $\circ$  ( $p_m = 0.002$ ).

選択には積型適応度関数を, 交叉には一様交叉を用いた場合, 1 次スキーマ分布はすべてのビットで等しいとしてよいであろう. そのため, これ以降

$$Q_{i,j} = Q_{i,j}^{(\ell)}, \quad \pi = \pi^{(\ell)},$$

と表す.

## 5. 数値計算

数値計算では, 選択は適応度比例選択, 適応度関数は積型適応度関数を用いた. 選択の強さは  $s = 0.02$  とした. 集団のサイズ  $N = 100$  とした. 交叉は一様交叉を用いた. 交叉確率は  $p_c = 1$  とし, 以下の解析では連鎖平衡を仮定した. 1 次スキーマの初期値は  $p = 0.5$  とした. 乱数を変えながら同じ計算を 1,000 回を行い, その和や平均を求めた. 定常分布の値は, 世代数  $t = 2000$  まで計算した値を用いた.

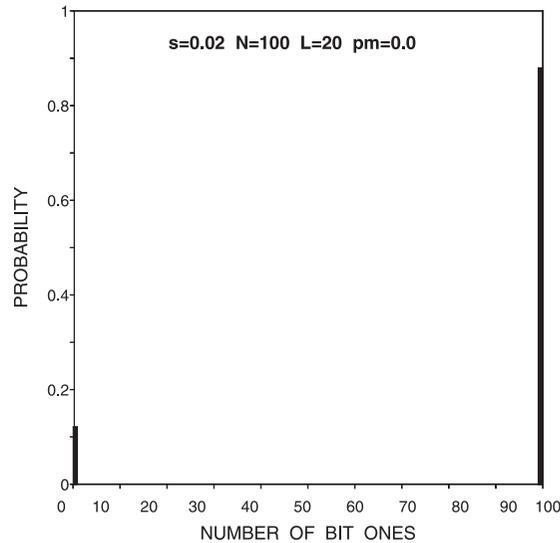


図2 集団サイズ  $N = 100$ , ビット長  $L = 20$  における 1 次スキーマ分布. 突然変異のない場合,  $p_m = 0$   
 Fig. 2 Distribution of the first-order schemata with population size  $N = 100$  and bit length  $L = 20$ . Without mutation,  $p_m = 0$ .

図 1 は, 定常分布における成功確率  $S$  のビット長  $L$  依存性を示したものである. 数値実験は, 突然変異のない場合 ( $p_m = 0$ ) と, 突然変異のある場合 ( $p_m = 0.0002, 0.001, 0.002$ ) について行い, それぞれ理論値と比較した. 突然変異率  $p_m = 0.001$  は,  $L = 20$  において  $p_m$  を変えて行った数値計算の中で最も大きな  $S$  を与えた.

突然変異のない場合の理論値は, 式 (22) から計算した. 究極固定確率の値は, 拡散近似の式 (20) を用いた. 点線で示した理論値が, ●で示した実験値をよく再現している.

突然変異のある場合の理論値は, 式 (29) から計算した. 1 次スキーマの分布  $\pi$  は, Wright-Fisher モデルの遷移確率の式 (14) を用い, 固有値問題の式 (16) を解いて求めることができる. しかしここでは数値計算の安定性を考慮し, 進化方程式 (11) を繰り返し適用し (2,000 回), 収束すること  $\mu(t+1) = \mu(t)$  を確認したうえで  $\mu(2000)$  を定常分布  $\pi$  として用いた. この  $\pi$  を使って式 (28) から遷移確率  $Q_{i,j}^{(l)}$ , 式 (25) から初期条件を求める. 最後に式 (29) と式 (24) から成功確率や失敗確率を計算する. 突然変異のある場合も, 実線, 点線, 破線で示した理論値が記号 ( $\times, \blacktriangle, \circ$ ) で示した実験値をよく再現している. 突然変異のない

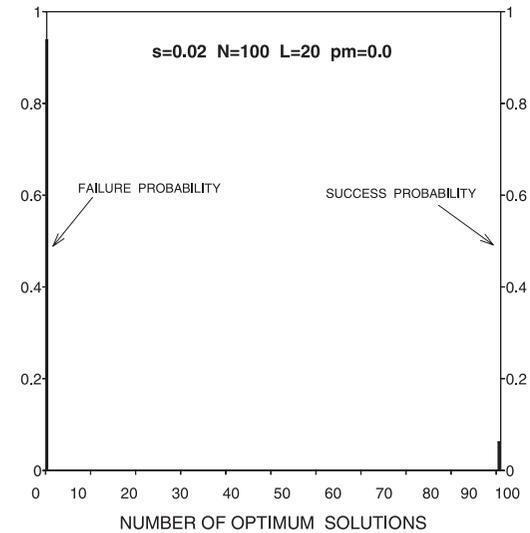


図3 集団サイズ  $N = 100$ , ビット長  $L = 20$  における最適解の個数分布  $S_j^{(L)}$ . 突然変異のない場合,  $p_m = 0$   
 Fig. 3 Distribution of the number of optimum solution  $S_j^{(L)}$  with  $N = 100$  and  $L = 20$ . Without mutation,  $p_m = 0$ .

場合, ビット長  $L$  の増加とともに  $S$  は急速に減少する. このことは式 (22) から容易に予測できる. それに対し, 突然変異を入れた場合は減少が緩やかであることが特徴的である. また, 成功確率は大幅に増加している.

図 2 は, 図 1 と同じパラメータで突然変異のない場合に, ビット長  $L = 20$  における 1 次スキーマ分布の実験値を示したものである. 横軸は, 1 次スキーマがビット 1 となる個数を示す. この図では, 特定のビット位置 (この場合は最上位のビットを用いた) について, 1,000 回の繰返し計算を集計した結果をまとめた. 先に述べたように, 積型適応度と一様交叉を用いた場合はすべてのビット位置で 1 次スキーマ分布は同じになるからである. 突然変異がない場合, 1 次スキーマはすべてのビットが 1 となる固定状態 ( $N_1 = N$ ) か, ビット 1 が消滅する消滅状態 ( $N_1 = 0$ ) のいずれかに収束する. この例では, 究極固定確率の実験値は  $u = 0.879$  と大きい値であるが, 成功確率は  $u^L$  の形で減少するため, 図 1 に示したように  $L$  とともに急速に小さくなっていく.

図 3 は, 図 2 と同じパラメータの計算で最適解, すべてのビットが 1 の解, の個数分布

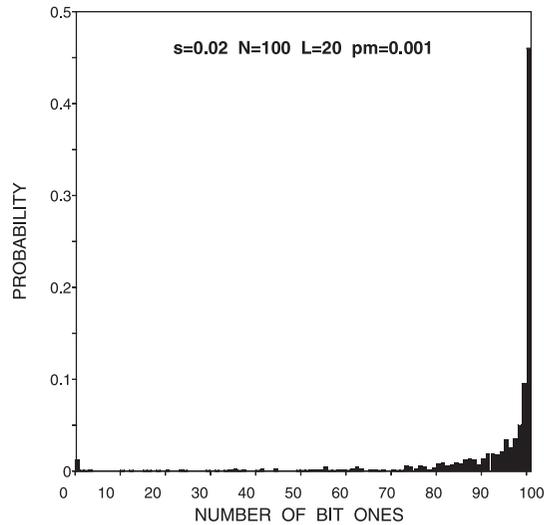


図4 集団サイズ  $N = 100$ , ビット長  $L = 20$  における1次スキーマ分布. 突然変異のある場合,  $p_m = 0.001$   
 Fig. 4 Distribution of the first-order schemata with population size  $N = 100$  and bit length  $L = 20$ .  
 With mutation,  $p_m = 0.001$ .

を示したものである. すでに指摘したように, 突然変異がない場合, 集団はすべてが最適解か, 最適解が1つもない状態のいずれかに収束する. そのため, 成功確率  $= S_N^{(L)}$  (最適解の個数  $= N$  となる確率) の関係があり, 図の右端の棒グラフ  $S_{100}^{(L)}$  は成功確率も表している. そして左端の棒グラフは失敗確率を表す. このように  $L = 20$  では成功確率が非常に小さくなる.

次に突然変異の効果を調べるため, 図4と図5にデータを示した. 図4は, 図2との比較で1次スキーマ分布  $\pi$  を表したものである. この図でも, 図2と同様に最上位のビット位置について, 1,000回の繰返し計算を集計した結果をまとめた.  $\pi_N$  が究極固定確率  $u(0.5)$  に対応し,  $\pi_0$  が究極消滅確率  $v$  に対応する.  $\pi_N = \pi_{100}$  は0.5より小さくなっており, その代わりに  $70 \leq i < 100$  の領域に幅広く確率が分布している. 一方, 消滅確率  $\pi_0$  は非常に小さな値0.012となっている.

このような1次スキーマ分布の変化が, 最適解の出現分布に及ぼす影響を見たものが図5である. 定常分布における最適解の個数の分布を示した. ただし右端の棒グラフは成功確率

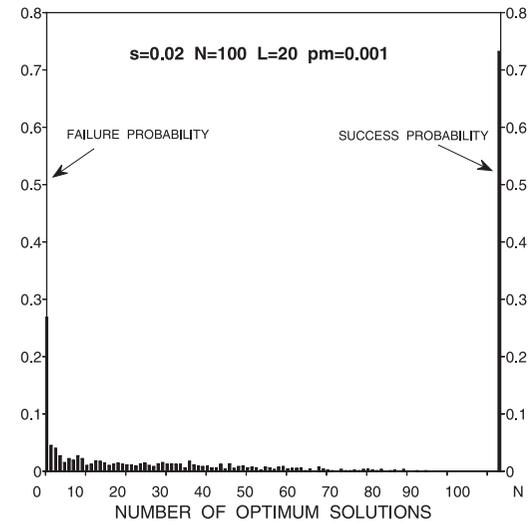


図5 集団サイズ  $N = 100$ , ビット長  $L = 20$  における最適解の個数分布  $S_j^{(L)}$ . 突然変異のある場合,  $p_m = 0.001$ . 右端には成功確率  $\sum_{j=1}^N S_j^{(L)}$  を示した  
 Fig. 5 Distribution of the number of optimum solution  $S_j^{(L)}$  with  $N = 100$  and  $L = 20$ . With mutation,  $p_m = 0.001$ . Right vertical axis shows success probability  $\sum_{j=1}^N S_j^{(L)}$ .

$S = \sum_{j=1}^N S_j^{(L)}$  を表している. 図3と比較すると  $S_{100}^{(L)}$  の値がほぼ0になり, むしろ小さい  $j$  の値の  $S_j^{(L)}$  が幅広く分布している. 一方, 失敗確率  $F = S_0^{(L)}$  は大幅に小さくなっている. これは図4に示したように, 究極消滅確率に相当する  $\pi_0$  が大幅に減少したためと考えられる.

先に述べたように,  $p_m = 0.001$  を選んだ理由は成功確率について最も良い値を与えたからである. 図6に究極固定確率  $u(p)$  と究極消滅確率  $v(p)$  のWright-Fisherモデルの理論値について, その突然変異率  $p_m$  依存性を示した. ただし,  $p_m > 0$  では  $u(p) = \pi_N, v(p) = \pi_0$  とした. この図から分かるように  $v(p)$  は  $p_m = 0.001$  近辺でほぼ0になり, それより  $p_m$  を大きくしてもあまり変化しない. それに対して  $p_m$  を大きくすると  $u(p)$  は次第に小さくなっていく. このことが,  $p_m = 0.001$  が最適な突然変異率となる理由ではないかと考えられる.

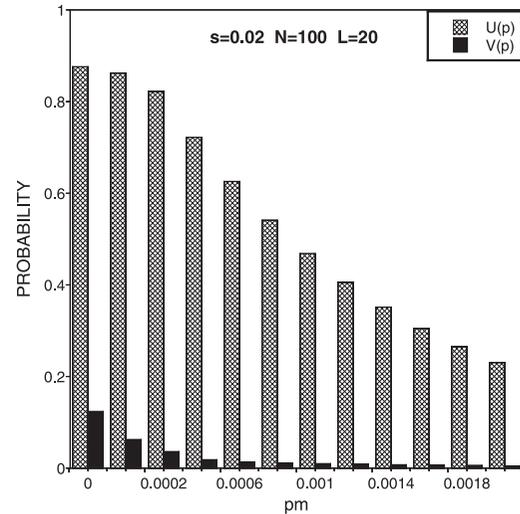


図6 究極固定確率  $u(p)$  と究極消滅確率  $v(p)$  に対応する  $\pi_{100}$  及び  $\pi_0$  の突然変異率  $p_m$  依存性  
Fig.6 Dependences of  $\pi_{100}$  and  $\pi_0$  on mutation rate  $p_m$ . They correspond to ultimate fixation probability  $u(p)$  and ultimate extinction probability  $v(p)$ , respectively.

## 6. まとめと今後の課題

我々はこれまで、積型適応度関数を対象に、GA の成功確率について解析を進めてきた。その中で、1 次スキーマ分布を用いて集団中の最適解の個数を計算する方法を開発し、本論文で報告した。交叉の働きが十分で、集団が連鎖平衡にあるという仮定が成り立てば、この方法は他の適応度関数についても適用でき、GA の計算性能を予測するための有効な方法となることが期待される。

1 次スキーマの分布を求めるには、マルコフ連鎖モデルおよびその拡散近似が有効で、これまでの計算では非常に良い結果を得ている。今後、より複雑な適応度関数についてもマルコフ連鎖モデルによる解析を進めたい。

しかし、次のことには注意する必要がある。現実の問題の多くは、交叉がビルディングブロックを破壊する働きをし、良い解候補を残すためには連鎖を保存する必要がある<sup>10)</sup>。その場合は、本論文の方法はこのままでは適用できず、ビット位置間の相関を取り入れたより一般的な方法の開発が必要となる。またなんらかの近似も取り入れる必要があるであろう。

突然変異のない場合、1 次スキーマに対する Wright-Fisher モデルは 2 つの吸収状態を持つマルコフ連鎖となる。吸収状態の 1 つの消滅状態は、有利な遺伝子が集団から消滅してしまう状態に対応し、これが失敗確率を大きくしてしまう。突然変異を加えた GA では、1 次スキーマの個数  $i = N$  と  $i = 0$  の状態はもはや吸収状態ではないが、やはり成功確率または失敗確率を決めるうえで重要な意味を持つ。突然変異の影響により  $\pi_N$  も  $\pi_0$  も減少する。 $\pi_0$  の減少は成功確率に対して良い効果を、 $\pi_N$  の減少は成功確率にとって悪い影響を与える。しかし、 $\pi_N$  の減少によって最適解の個数が減少しても、その個数が 0 にさえならなければ計算は成功したことになる。そのため、あまり大きな  $p_m$  でさえなければ突然変異は成功確率にとって望ましい効果を及ぼすと考えられる。

今後は、成功確率について理論的により定量的な検討を進め、特に突然変異の最適な値を決める方法の開発を行いたい。また、今回はふれなかったが、最適解が出現する世代数の予測についても研究を行う予定である。

## 参考文献

- 1) 張 玉安, 坂本真人, 古谷博史: 遺伝的アルゴリズムにおける最適解出現確率に及ぼす突然変異の効果, 情報処理学会研究報告: 数理モデル化と問題解決, 2008-MPS-68, pp.161-164 (2008).
- 2) Ewens, J.W.J.: *Mathematical Population Genetics. I. Theoretical Introduction*, 2nd Edition, Springer-Verlag, New York (2004).
- 3) Crow, J.F. and Kimura, M.: *An Introduction to Population Genetics Theory*, Harper and Row, New York (1970).
- 4) 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).
- 5) Davis, T.E. and Principe, J.C.: A Markov Chain Framework for the Simple Genetic Algorithm, *Evolutionary Computation*. Vol.1, pp.269-288 (1993).
- 6) 今井順一, 塩谷浩之, 栗原正仁: 混合システムの視点に基づく遺伝的アルゴリズムのモデリング, 情報処理学会論文誌: 数理モデル化と応用, Vol.44, pp.51-60, (2003).
- 7) 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).
- 8) 古谷博史, 片山 晋, 坂本真人: 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, 情報処理学会論文誌: 数理モデル化と応用, Vol.47, pp.29-39 (2006).
- 9) Maynard Smith, J.: *Evolutionary Genetics*, 2nd edition, Oxford University Press,

Oxford, (1998).

- 10) 棟朝雅晴：遺伝的アルゴリズム—その理論と先端的手法，森北出版，東京（2008）.
- 11) Furutani, H.: Schema Analysis of Genetic Algorithms on Multiplicative Landscape, *Proc. Simulated Evolution and Learning Conference, SEAL'02*, pp.230–235 (2002).
- 12) Furutani, H.: Schema Analysis of Average Fitness in Multiplicative Landscape, *Proc. Genetic and Evolutionary Computation Conference, GECCO-2003, Lecture Notes in Computer Science*, 2723, pp.934–947, Springer-Verlag, New York (2003).
- 13) Furutani, H., Sakamoto, M. and Katayama, S.: Influence of Finite Population Size—Extinction of Favorable Schema, *Proc. 1st International Conference on Natural Computation, Lecture Notes in Computer Science*, 3611, pp.243–248 (2005).

付 録

遷移確率の導出

$j > i$  の場合は，遷移確率が  $Q_{i,j}^{(\ell)} = 0$  となるのは明らかである． $j \leq i$  の場合は，式 (28) で与えられることを示す．

まず最初に簡単な場合， $N = 6, i = 4, j = 3$  を例にとる．遺伝子座（ビット位置）を並べ替え， $\ell - 1$  ビット系の部分最適解と非最適解をまとめ，下図のように表す．



ここで□は最適解，□は非最適解を示す． $\ell$  ビット系の最適解の個数が  $j = 3$  となるためには，図の左側 4 ビットの位置に第  $\ell$  ビットのビット 1 が 3 個，ビット 0 が 1 個あればよい．右側の非最適解の位置については，すべてのビット配列が許される．このことから

$$Q_{i=4,j=3}^{(\ell)} = \binom{6}{5}^{-1} \binom{4}{3} \binom{2}{2} \pi_5^{(\ell)} + \binom{6}{4}^{-1} \binom{4}{3} \binom{2}{1} \pi_4^{(\ell)} + \binom{6}{3}^{-1} \binom{4}{3} \binom{2}{0} \pi_3^{(\ell)},$$

を得る．

一般の場合も同様に，



と並べ替える．第  $\ell$  ビットのビット 1 の個数を  $m$  とし，その確率を  $\pi_m^{(\ell)}$  とする． $S_j^{(\ell)}$  を得るためには左側  $i$  ビットの位置に  $j$  個のビット 1， $i - j$  個のビット 0 を配置する必要がある．この配置が可能な  $m$  の範囲は  $j \leq m \leq N - (i - j)$  である．この範囲にある  $m$  を固定し，この  $m$  からの遷移確率への寄与を考えると

$$\binom{N}{m}^{-1} \binom{i}{j} \binom{N-i}{m-j} \pi_m^{(\ell)}$$

となり，すべての項を足し合わせて式 (28) を得る．

(平成 21 年 2 月 5 日受付)

(平成 21 年 3 月 27 日再受付)

(平成 21 年 4 月 10 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取得退学．昭和 56 年理学博士（京都大学）．同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教授．遺伝的アルゴリズム，遺伝子情報システム等の研究に従事．



張 玉安（学生会員）

昭和 56 年生．平成 17 年中国青海大学工学部卒業．平成 20 年宮崎大学大学院工学研究科情報システム工学専攻修士課程修了．同年宮崎大学大学院農学工学総合研究科物質情報工学専攻博士後期課程に進学．遺伝的アルゴリズムの理論的研究に興味を持っている．



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に勤務し、現在情報システム工学科准教授。専門は理論計算機科学であるが、計算機科学の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。

---