

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[†] 張 玉安^{††} 坂本 真人[†]

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一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,[†] YU-AN ZHANG^{††} and MAKOTO SAKAMOTO[†]

In this paper, we use 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、計算パラメータの選択である。本論文では、成功確率 S を集団中に最適解が少なくとも一つは存在する確率、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。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。

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 モデルとよばれている。確率論的方法を 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 と Mühlenbein 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論的に記述した¹⁾。我々は彼らの確率論的なアプローチを積型適応度の問題に適用し、有限な N における 1 次スキーマの進化を調べた²⁾。集団を 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、交叉が十分に働けば手段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。

[†] 宮崎大学工学部

Faculty of Engineering, University of Miyazaki

^{††} 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

2. 数学モデル

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。遺伝子型 i の相対頻度を $x_i(t)$ とする。

我々は、積型適応度関数を

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

と定義する。 f_i は遺伝子型 i の適応度である。パラメータ s は、選択の強さを表す。

ここでは選択のための決定論的方程式を導く³⁾。集団が連鎖平衡にあるならば、1 次スキーマの決定論的進化方程式は

$$h_1(t+1) = \frac{(1+s)h_1(t)}{1+sh_1(t)}, \quad (2)$$

となる。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

$$h_1'(t+1) = (1-2p_m)h_1(t+1) + p_m, \quad (3)$$

となる。

3. 確率論的モデル

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。このモデルでは遺伝子座は一つ ($L = 1$) で、2 つの対立遺伝子 A と a をもつ。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 をもつ個体の数を 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。

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。

$$P_{i,j} = P(j|i) = \binom{N}{j} b^j (1-b)^{N-j}, \quad (4)$$

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

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。

$$\mu_j(t+1) = \sum_{i=0}^N \mu_i(t) P_{i,j}. \quad (5)$$

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。

突然変異を加えたときの Wright-Fisher モデル遷移確率 $P_{i,j}$ は、置き換え

$$b' = (1-2p_m)b + p_m, \quad (6)$$

をして得られる

$$P_{i,j} = P(j|i) = \binom{N}{j} (b')^j (1-b')^{N-j}. \quad (7)$$

$p_m > 0$ 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 π に収束する。

$$\pi = \lim_{t \rightarrow \infty} \mu(t). \quad (8)$$

研究者は Wright-Fisher モデルに対する拡散近似を導入した。ここでは究極固定確率 $u(p)$ を求める。結果のみ示すと、

$$u(p) = \frac{1 - \exp(-2Nsp)}{1 - \exp(-2Ns)}, \quad (9)$$

となる。変数 p は初期状態における遺伝子 A の相対頻度を表す。究極消滅確率 $v(p)$ は次式で表される

$$v(p) = 1 - u(p). \quad (10)$$

4. 成功確率の計算

成功確率 S を集団中に少なくとも一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、失敗確率とよぶことにする。

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か消滅状態に収束する。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

$$S = u(p)^L \quad (11)$$

と表される。

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、定常状態に替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

すべてのビットが1の列 $\langle 1, 1, \dots, 1, 1 \rangle$ を $(\ell-1)$ ビット部分最適解とよぶことにする。つぎに、集団中に存在する ℓ ビット部分最適解の個数を表す確率変数 X_ℓ を定義する。第 ℓ 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。 $\pi_i^{(\ell)}$ は、第 ℓ 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、長さ ℓ の部分列が j 個の部分最適解をもつ確率を $S_j^{(\ell)}$ と表す

$$S_j^{(\ell)} = \Pr\{X_\ell = j\}. \quad (12)$$

さきに定義した成功確率と失敗確率は

$$S = \sum_{j=1}^N S_j^{(L)}, \quad F = S_0^{(L)}, \quad (13)$$

から計算できる。

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

$$S_j^{(1)} = \pi_j^{(1)}, \quad (0 \leq j \leq N), \quad (14)$$

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 ℓ の部分列が j 個の最適解をもつ確率は

$$Q_{i,j}^{(\ell)} = \Pr\{X_\ell = j | X_{\ell-1} = i\}, \quad (15)$$

とする。遷移確率 $Q_{i,j}^{(\ell)}$ は、第 ℓ 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

$$Q_{i,j}^{(\ell)} = 0, \quad (16)$$

(2) $j \leq i$ の場合は

$$Q_{i,j}^{(\ell)} = \sum_{m=j}^{N-i+j} \binom{N}{m}^{-1} \binom{i}{j} \binom{N-i}{m-j} \pi_m^{(\ell)} \quad (17)$$

で与えられる。ただし $\binom{0}{0} = 1$ と定義する。確率 $S_j^{(\ell)}$ は

$$S_j^{(\ell)} = \sum_{i=0}^N S_i^{(\ell-1)} Q_{i,j}^{(\ell)}, \quad (18)$$

から計算することができる。

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、 $\pi = \pi^{(\ell)}$ と表す。

5. 数値計算

数値計算では、選択の強さ $s = 0.02$ 、集団のサイズ $N = 100$ とした。交叉は一様交叉を用い、交叉確率は $p_c = 1$ とした。乱数を変えながら同じ計算を1000回行い、その和や平均を求めた。

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と、突然変異のある場合について行い、それぞれ理論値と比較した。

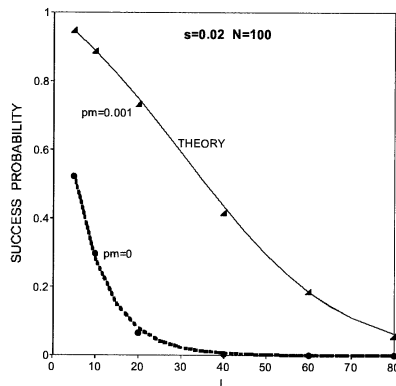


図1 成功確率 S の L 依存性。集団サイズ $N = 100$ 、選択の強さ $s = 0.02$ 。

突然変異のない場合の理論値は、式(11)から計算した。点線で示した理論値が、黒丸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(18)から計算した。この場合も、実線で示した理論値が黒三角で示した実験値をよく再現している。

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。

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、の個数分布を示したものである。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。

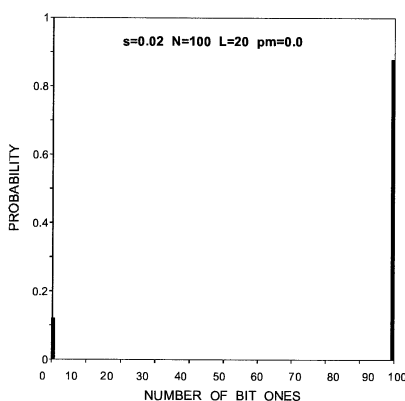


図2 1次スキーマ分布。突然変異のない場合。

図4は、図2との比較で1次スキーマ分布 π を表

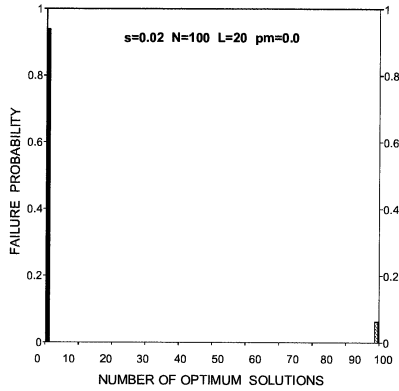


図3 最適解の個数分布 $S_j^{(L)}$. 突然変異のない場合.

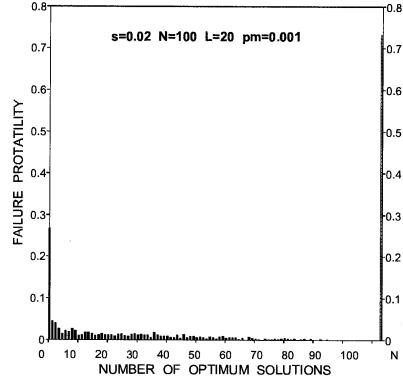


図5 $p_m = 0.001$ における最適解の個数分布 $S_j^{(L)}$.

したものである。 π_N が究極固定確率 u に対応し、 π_0 が究極消滅確率 v に対応する。 π_N は 0.5 より小さくなっており、広い領域に確率が分布している。一方、消滅確率 π_0 は非常に小さな値となっている。

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 $S = \sum_{j=1}^N S_j^{(L)}$ 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。

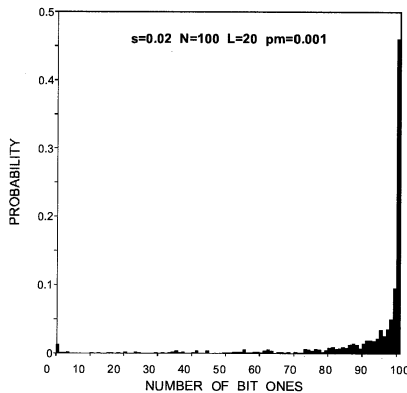


図4 1 次スキーマ分布 $p_m = 0.001$.

6. まとめ

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。交叉の働きが十分に、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る。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。

突然変異の無い場合、吸収状態の一つの消滅状態では、有利な遺伝子が集団から消滅してしまい、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上で重要な意味をもつ。突然変異の影響により π_N も π_0 も減少する。 π_0 の減少は成功確率に対してよい効果を、 π_N の減少は成功確率にとって悪い影響を与える。しかし、 π_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。

参考文献

- 1) H. Asoh and H. Mühlenbein: On the Mean Convergence Time of Evolutionary Algorithms without Selection and Mutation. *Parallel Problem Solving from Nature, Lecture Notes in Computer Science*, **866**, Springer-Verlag, New York, (1994) 88-97
- 2) 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*, **47**, (2006) 29-39
- 3) H. Furutani: Schema Analysis of Genetic Algorithms on Multiplicative Landscape, *Proceedings of the Simulated Evolution and Learning Conference, SEAL'02*, (2002) 230-235