

進化計算における OneMax 問題の Markov 連鎖を用いた収束時間解析

古賀 仁信¹ 安永 和馬² 馬 青蓮³ 坂本 真人² 古谷 博史^{2,a)} 張 玉安⁴

受付日 2012年11月7日, 再受付日 2012年12月27日,
採録日 2013年1月23日

概要: 進化計算を実際の問題に適用する場合, その計算時間を予測することは非常に重要である. 本論文では, OneMax 問題の収束時間を Markov 連鎖モデルを用いて解析した結果について報告する. 最初に, OneMax 問題の進化過程を Markov 連鎖モデルの 1 つである Wright-Fisher モデルを用いて記述し, その遷移行列を計算する. 次に, 集団が連鎖平衡にある場合, OneMax 問題が非対称突然変異モデルと同等であることを示す. 非対称突然変異モデルは集団遺伝学でよく研究されており, 遷移行列の固有値はすでに知られている. 我々は, その結果から OneMax 問題における遷移行列の固有値の解析的な形を導いた. Markov 連鎖の定常状態への収束時間は, 遷移行列の 2 番目に大きい固有値を用いることで理論的に予測することができる. 得られた理論的予測値と平均適応度の収束時間を実験的に比較し, 良い一致が得られること示す.

キーワード: 進化計算, 遺伝的アルゴリズム, マルコフ連鎖, 収束時間, OneMax 問題

Analysis of Convergence Time Using Markov Chain for OneMax Problem in Evolutionary Computation

KIMINOBU KOGA¹ KAZUMA YASUNAGA² QINGLIAN MA³
MAKOTO SAKAMOTO² HIROSHI FURUTANI^{2,a)} YU-AN ZHANG⁴

Received: November 7, 2012, Revised: December 27, 2012,
Accepted: January 23, 2013

Abstract: In applying Evolutionary Computation (EC) to realistic problems, it is very important to estimate their computational times. In this paper, we report the results obtained by Markov chain model for the convergence time of OneMax problem. First, we describe the evolution process of OneMax problem within the framework of Wright-Fisher model, which is a version of Markov chain, and calculate its transition matrix. Next, we show that, if a population is in linkage equilibrium, OneMax problem is equivalent to the asymmetric mutation model. The asymmetric mutation model is well studied in population genetics, and the eigenvalues of its transition matrix were already known. From this result, the analytical form of eigenvalues of transition matrix for OneMax problem can be obtained. In Markov chain theory, the convergence time of Markov chain can be estimated by using the second largest eigenvalue of the transition matrix. We compare this theoretical estimation with the convergence time of average fitness, and show that the agreement is very good.

Keywords: Evolutionary Computation, Genetic Algorithm, Markov chain, convergence time, OneMax problem

¹ 宮崎大学大学院工学研究科
Graduate School of Engineering, University of Miyazaki,
Miyazaki 889-2192, Japan

² 宮崎大学工学部
Faculty of Engineering, University of Miyazaki, Miyazaki
889-2192, Japan

³ 宮崎大学大学院農学工学総合研究科
Interdisciplinary Graduate School of Agriculture and Engi-
neering, University of Miyazaki, Miyazaki 889-2192, Japan

1. はじめに

進化計算は, これまで最適化などの様々な問題に適用さ

⁴ 中国青海大学コンピュータ技術・応用工学科
Department of Computer Technology and Applications,
Qinghai University, China

a) furutani@cs.miyazaki-u.ac.jp

れ、多大な成果をあげてきた。しかし応用面での成功に比べ、計算機構の理論的解明については大きく遅れているのが現状である [1]。進化計算の理論的研究において、最近注目されている確率論的解析手法の 1 つに Markov 連鎖がある [2]。進化計算では多くの場合、Markov 性（未来の状態は現在の状態のみによって予測できる）が成り立ち、Markov 連鎖の理論が適用可能である。Markov 連鎖理論は豊富な理論的内容を持ち、理学、工学の分野に応用され、その有効性は広く認められている。特に集団遺伝学では多くの Markov 連鎖による研究がなされている [3], [4]。近年、進化計算の分野でも Markov 連鎖を利用した研究が次第に増加しつつある。

遺伝的アルゴリズム (GA) における Markov 連鎖理論の適用として、Nix らによる GA の進化方程式 (Markov 連鎖の遷移行列) の導出がある [5]。また彼らとは独立に Davis らは同様な方程式を導いた [6]。彼らの方法は、選択、突然変異、交叉を含む GA の確率論的枠組みを与え、GA の進化過程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、集団の個体数 N や個体を表現するビット長 ℓ の増加とともに指数関数的に増加する。そのためある程度の個体数を持つ現実的問題に彼らのモデルを適用することはほぼ不可能である。

Evolutionary Algorithm (EA) において、Drift Analysis と呼ばれる Markov 連鎖を応用した手法が開発され、研究者の注目を集めている [1], [7]。Drift Analysis は、1982 年の Hajek の論文 [8] から始まるといわれている。しかし実際に EA の分野に応用したのは Yao らの Birmingham 大学のグループである [9]。その後、ヨーロッパの研究者を中心に急速に Drift Analysis を行う研究者が増加し、様々な問題に適用されつつある。

GA の基礎的研究において、Markov 連鎖などの確率過程論を適用する場合、問題の次元数が大きくなりすぎて、数値計算がほとんど実行不可能なほどになってしまう、という困難が存在する。しかし、GA では従来からスキーマ理論とよばれる解析法がある。最近になり、より厳密で定量的取扱いができる新しいスキーマ理論が開発された [10], [11]。スキーマ理論は進化計算における問題の次元数を大幅に縮小することができるという特徴を持つ。本研究の特色は、定量的なスキーマ理論に着目し、対象問題の次元数を大幅に縮小することにより、理論的、数値的研究を可能とすることにある。また、確率的揺らぎの効果は、従来の研究では副次的なものにすぎないと考えられてきたが、我々のこれまでの研究によれば、本質的に重要な働きを持つ。その計算に及ぼす影響を総合的に理解することは、今後の進化計算の発展において非常に重要である。

本研究では、OneMax 問題を取り上げ、その進化過程の定量的な分析を行った。計算過程を Markov 連鎖としてモデル化し、連鎖が定常状態に収束する世代数を予測する手

法を提案する。まず集団が連鎖平衡にある場合、OneMax 問題が非対称突然変異モデルと同等であることを示す。非対称突然変異モデルは集団遺伝学でよく研究されている [4], [12]。モデルの様々な確率論的性質が得られており、遷移行列の固有値も知られている。我々は、その結果から OneMax 問題における遷移行列の固有値の解析的な形を導いた。Markov 連鎖の定常状態への収束時間は、遷移行列の 2 番目に大きい固有値を用いることで理論的に予測することができる。この理論的予測値と実験的に得られた平均適応度の収束時間を比較検討した。本研究の一部は、国際会議において短報の形で発表した [13]。

2. 数学モデル

進化のモデルとして Goldberg の Simple Genetic Algorithm (SGA) を用い [14]、選択は適応度比例選択を、交叉は一様交叉を適用する。以下では、OneMax 問題における標準的な突然変異モデルと非対称突然変異モデルとの関係を導出する。

集団の個体数は世代によらずつねに一定とする。個体の遺伝子型を固定長 ℓ の 2 進ビット列で表す。このとき、遺伝子型の総数は $N = 2^\ell$ となる。遺伝子型の番号 i ($0 \leq i \leq n-1$) と 2 進ビット列を

$$i = \langle i(\ell), i(\ell-1), \dots, i(2), i(1) \rangle, \quad (1)$$

のように対応させる。 $i(k)$ は第 k ビットの値である。世代 t における遺伝子型 i の個体数を N_i とすると、

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

となる。遺伝子型 i の相対頻度を

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

と表す。OneMax 問題の適応度関数は

$$f_i = \sum_{k=1}^{\ell} i(k),$$

として定義される。適応度はすべてのビットが 1 のとき最大となる。

スキーマは、文字列を構成するアルファベットに * (don't care symbol) を加えた文字列である [15]。スキーマ中の固定されたビット $\{0, 1\}$ の数をスキーマの次数という。たとえば $H = \langle *, *, 1, *, * \rangle$ は 1 次のスキーマであり、 $\langle *, 0, *, 1, *, * \rangle$ は 2 次のスキーマである。以下では、ビット k の値が 1 に固定された 1 次スキーマの世代 t における集団中での相対頻度を $h_1^{(k)}(t)$ 、0 に固定された 1 次スキーマの相対頻度を $h_0^{(k)}(t)$ と表す。

連鎖は GA の計算効率に大きな影響を及ぼす重要な概念である。交叉や突然変異はビット間の連鎖を弱め、集団を

連鎖平衡の状態へ導く。もし、集団が連鎖平衡の状態であれば、個体の分布は1次スキーマの頻度のみ依存する。式(1)で表された遺伝子型の相対頻度 $x_i(t)$ は、1次スキーマの相対頻度を用いて

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

となる。また OneMax 問題における平均適応度は

$$\bar{f}(t) = \sum_{k=1}^{\ell} h_1^{(k)}(t), \quad (2)$$

となる [11].

さらに、一様交叉を適用したのですべての1次スキーマは対等に進化すると仮定し、

$$h_1(t) = h_1^{(k)},$$

と1次スキーマ頻度の k 依存性を無視することにする。この近似のもとで、選択による1次スキーマの進化方程式は

$$\tilde{h}_1(t) = h_1(t) + \frac{1}{\ell}(1 - h_1(t))$$

となる。ここで $\tilde{h}_1(t)$ は選択後の1次スキーマ頻度である。導出の詳細は定量的スキーマ理論を応用した文献 [11] を参照されたい。

次に突然変異を適用し、その結果を $h_1(t+1)$, $h_0(t+1)$ とする。突然変異の効果は

$$h_1(t+1) = (1 - p_m)\tilde{h}_1(t) + p_m\tilde{h}_0(t),$$

$$h_0(t+1) = (1 - p_m)\tilde{h}_0(t) + p_m\tilde{h}_1(t),$$

と表される。ここで p_m は突然変異率である。さらに $\tilde{h}_1(t) + \tilde{h}_0(t) = 1$ の関係を用いると

$$h_1(t+1) = (1 - 2p_m)\tilde{h}_1(t) + p_m,$$

を得る。

選択と突然変異の効果をもとめると、1次スキーマの進化方程式は

$$h_1(t+1) = ah_1(t) + b, \quad (3)$$

となる [11], [16]. 係数 a と b は

$$a = \left(1 - \frac{1}{\ell}\right)(1 - 2p_m), \quad (4)$$

$$b = \frac{1}{\ell}(1 - 2p_m) + p_m, \quad (5)$$

によって与えられる。

非対称突然変異モデルは、集団遺伝学で詳しく研究されており、その数学的内容について多くの報告がある [4], [12]. また、進化計算の分野でも非対称突然変異を用いた研究が報告されている [17]. 非対称突然変異モデルにおいて、ビット $1 \rightarrow 0$, $0 \rightarrow 1$ の突然変異率を、それぞれ p_α , p_β と

する。1次スキーマの決定論的進化方程式は

$$h_1(t+1) = (1 - p_\alpha)h_1(t) + p_\beta h_0(t),$$

$$h_0(t+1) = p_\alpha h_1(t) + (1 - p_\beta)h_0(t),$$

となる。この両式に $h_1(t) + h_0(t) = 1$ を用いると

$$h_1(t+1) = (1 - p_\alpha - p_\beta)h_1(t) + p_\beta, \quad (6)$$

を得る。式(3)と式(6)を比較し、次の関係を得る。

$$p_\alpha = p_m, \quad p_\beta = p_m + \frac{1}{\ell}(1 - 2p_m). \quad (7)$$

3. Markov モデル

集団遺伝学において Markov 連鎖を利用したものに、Wright-Fisher モデルがある [18], [19]. Wright-Fisher モデルでは、1つの遺伝子座に2つの対立遺伝子を持つ染色体を取り扱う。これは遺伝子型が $i \in \{0, 1\}$ で長さが $\ell = 1$ の進化計算に相当する。遺伝子型1の個体数を

$$N_1 = 0, 1, \dots, N,$$

と表すと、遺伝子型0の個体数は $N_0 = N - N_1$ で与えられる。

ここでは、Wright-Fisher モデルを OneMax 問題に適用する。世代 t において遺伝子型1の個体数が $N_1 = i$ のとき、次世代 $t+1$ で $N_1 = j$ となる条件付き確率は

$$P_{i,j} = P(j|i) = \binom{N}{j} p_i^j (1 - p_i)^{N-j} \quad (8)$$

$$p_i = ay + b = a \left(\frac{i}{N}\right) + b,$$

と表される。世代 t において遺伝子型1の個体数が i 個となる確率を $\mu_i(t)$ とする。この $\mu_i(t)$ をベクトル形式で次のように表す。

$$\mu^T = (\mu_0, \mu_1, \dots, \mu_N)$$

また、正規化条件は

$$\sum_{i=0}^N \mu_i(t) = 1, \quad (9)$$

となる。このとき、進化の過程は

$$\mu_j(t+1) = \sum_{i=0}^N \mu_i(t) P_{i,j}, \quad (10)$$

で表される。

進化方程式はベクトル形式

$$\mu(t+1)^T = \mu(t)^T P, \quad (11)$$

で与えられる。 P は $(N+1) \times (N+1)$ の行列である。この行列の固有値は条件付きモーメントの計算から求めることができる [12]. その導出法を付録に示した。固有値は

$$\lambda_0 = 1, \quad \lambda_1 = a, \quad \lambda_2 = a^2(1 - 1/N), \dots, \quad (12)$$

となる．このうち，2番目に大きな固有値 $\lambda_1 = a$ が集団サイズ N に依存しないことは重要なことである．

行列 P の左固有ベクトルと右固有ベクトルを

$$\mathbf{u}_i^T P = \lambda_i \mathbf{u}_i^T, \quad P \mathbf{v}_i = \lambda_i \mathbf{v}_i \quad (0 \leq i \leq N),$$

とする．これらの固有ベクトルは直交性の条件を満たす．

$$\mathbf{u}_i^T \cdot \mathbf{v}_j = 0 \quad (i \neq j) \quad (13)$$

右固有ベクトル \mathbf{v}_0 は自明であり，

$$\mathbf{v}_0 = (1, 1, \dots, 1)^T \quad (14)$$

によって与えられ，左固有ベクトル \mathbf{u}_0 のすべての要素は正である．正規化条件を適用すると

$$\sum_{i=0}^N |u_i| = 1, \quad \mathbf{u}_i^T \cdot \mathbf{v}_i = 1,$$

を得る．

突然変異率 p_m が正の場合，遷移行列 P のすべての要素は正となり，スキーマ進化における Markov 連鎖は既約かつ非周期的である．既約かつ非周期的な Markov 連鎖は定常分布 π に収束する [2]．

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

また，すべての要素 π_i は正である．定常分布 π は時間的に変化しないので

$$\pi P = \pi,$$

となる．このことから定常分布は，遷移行列 P の固有値 $\lambda_0 = 1$ に対応する左固有ベクトル \mathbf{u}_0 であることが分かる．

1次スキーマの初期分布は左固有ベクトルによって

$$\mu(t=0)^T = \sum_{i=0}^N C_i \mathbf{u}_i^T, \quad (16)$$

と表される． \mathbf{u}_i は固有ベクトルなので，式 (11) より

$$\mu(t)^T = \sum_{i=0}^N \lambda_i^t C_i \mathbf{u}_i^T \quad (17)$$

を得る．ここで右側から右固有ベクトル \mathbf{v}_0 を掛けると

$$\mu(t)^T \cdot \mathbf{v}_0 = \sum_{i=0}^N \lambda_i^t C_i \mathbf{u}_i^T \cdot \mathbf{v}_0 = \lambda_0^t C_0 = C_0,$$

を得，さらに式 (9) と式 (14) から $C_0 = 1$ を得る． t が十分大きい場合

$$\mu(t) \approx \mathbf{u}_0 + a^t C_1 \mathbf{u}_1, \quad (18)$$

となり， \mathbf{u}_0 は定常分布 π を表す．

式 (18) から，Markov 連鎖の収束時間に a^t が大きな影

響を与えていることが分かる． a は遷移確率行列の2番目に大きな固有値である．この値を用いて収束時間の理論予測値を

$$T_c(\text{eigenvalue}) = \min_t \{a^t < 0.05\}, \quad (19)$$

と定義する．

式 (2) から OneMax 問題の平均適応度は1次スキーマの相対頻度 $h_1(t)$ に比例することが分かる．そこで，数値実験から定常状態への収束を推定する指標として平均適応度を用いることにする．ここでは実験的な収束時間推定値として

$$T_c(\text{fitness}) = \min_t \left\{ \frac{\bar{f}(\infty) - \bar{f}(t)}{\bar{f}(\infty) - \bar{f}(0)} < 0.05 \right\}, \quad (20)$$

と定義する．ただし， $\bar{f}(t)$ は世代 t での平均適応度， $\bar{f}(\infty)$ は定常状態での平均適応度を表す．

4. 数値計算

これまでの考察をもとに，数値計算の結果と理論的予測を比較する．選択は適応度比例選択，交叉は一様交叉を用い，交叉率は1とした．突然変異は各ビットごとに確率 p_m でビット値を反転させる方法を用いた．初期集団は各ビットごとに確率0.5でビット0と1を発生させ，初期個体を生成した．よって，初期集団は連鎖平衡の状態にある．乱数を変えながら同じ計算を1,000回繰り返し，それらを集計した結果と理論値を比較した．

4.1 OneMax 問題と非対称突然変異の GA との関係

まず，OneMax 問題と非対称突然変異モデルが同等の振舞いをすることを確かめる．

図1，図2，図3，図4に OneMax 問題と非対称突然変異モデルの1次スキーマの分布を示した． \mathbf{u}_0 は遷移確率行列 P の固有値 $\lambda_0 = 1$ に対応する固有ベクトルであり，同時に1次スキーマの定常分布 π である．したがって，OneMax 問題も非対称突然変異モデルも，同じ定常分布に収束していることが分かる． N や p_m の値により分布の形は異なるものの，いずれの場合においても OneMax 問題と非対称突然変異モデルの1次スキーマ分布はほとんど一致している．ただ，図1に見られるように $N = 20$ の場合は理論値と食い違いがある．

4.2 収束時間

図5は平均適応度の時間変化の集団サイズ N 依存性を示した． N の値が大きくなると平均適応度も大きくなるが，定常値に収束する速さはあまり変化がない．

図6は収束時間の N 依存性を示した． N の値が小さい場合を除けば，収束時間は N の値にかかわらずほぼ一定となっている．本研究では，収束時間を N によらない固有値 a を用いて予測している．図6に示した結果は，理論

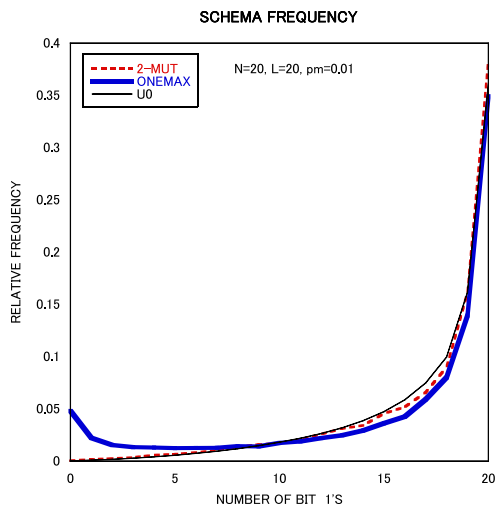


図 1 $N = 20$, $p_m = 0.01$ の場合の 1 次スキーマの分布. 点線は非対称突然変異モデルの結果を示す. 太い実線, 細い実線はそれぞれ, OneMax 問題の数値計算, 左固有ベクトル \mathbf{u}_0 を表す

Fig. 1 The distribution of the number of bit 1's with $N = 20$ and $p_m = 0.01$. The dotted line shows the result of asymmetric mutation model. The thick solid line for OneMax GA calculation and the thin solid line for the left eigenvector \mathbf{u}_0 , respectively.

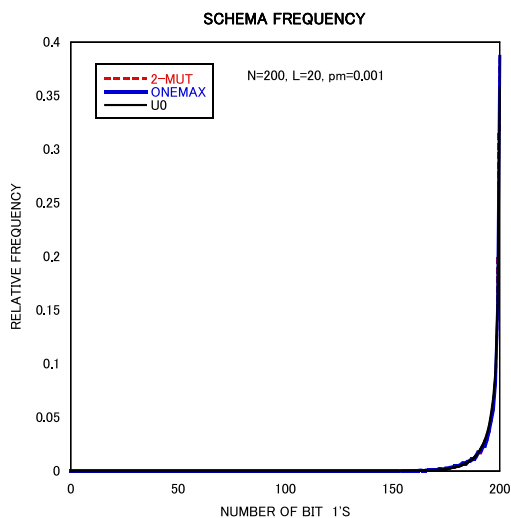


図 2 $N = 200$, $p_m = 0.001$ の場合の 1 次スキーマ分布

Fig. 2 The distribution of the number of bit 1's with $N = 200$ and $p_m = 0.001$.

予測と矛盾しない結果となっている. N が小さい場合については, 図 1 も $N = 20$ の場合であるが, 他の分布と比べると不一致の部分が目立つことから, 集団が連鎖平衡の状態にないことが考えられる. 本研究では, 集団が連鎖平衡の状態にあることを前提としているため, このことが不一致の原因の可能性はある.

図 7 に比較のため, 非対称突然変異モデルにおける収束時間の N 依存性を示した. この場合, 収束時間は N の値にかかわらずほぼ一定で, 実験値と理論値がよく一致している.

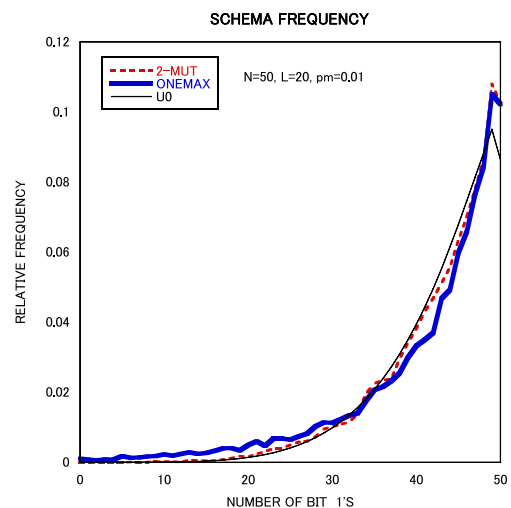


図 3 $N = 50$, $p_m = 0.01$ の場合の 1 次スキーマ分布

Fig. 3 The distribution of the number of bit 1's with $N = 50$ and $p_m = 0.01$.

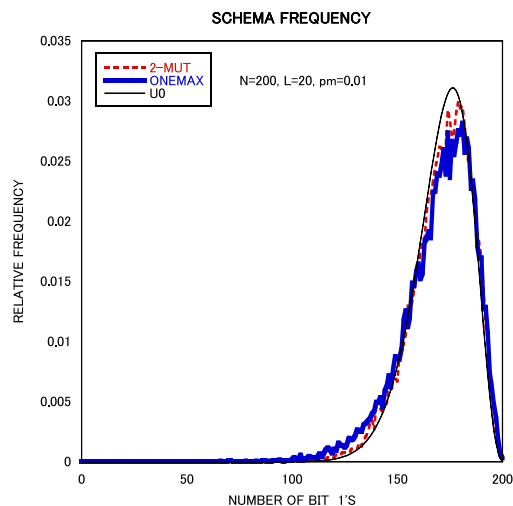


図 4 $N = 200$, $p_m = 0.01$ の場合の 1 次スキーマ分布

Fig. 4 The distribution of the number of bit 1's with $N = 200$ and $p_m = 0.01$.

図 8 と図 9 は収束時間のビット長 l に対する依存性を示した. ここでは p_m の値を 0.01 と 0.03 にとった場合を示す. いずれの場合においても, 計算結果と予測値はよく一致している. 式 (4) より, l を大きくするほど, a の値も大きくなる. 式 (19) によると, a が大きいほど収束時間は遅くなり, 数値計算の結果と一致している.

図 10 は収束時間の p_m 依存性を示す. 数値計算の結果が予測値よりもやや大きい値をとるが, よく予測できている. l の場合とは逆に, 式 (4) より p_m が大きくなるほど a は小さくなるので, それにともなって収束は速くなる. 実際の計算結果も p_m の増加とともに T_c が小さくなっていることが分かる.

収束時間が個体数 N によらないことは, 最適解出現時間が N によらないことを意味しない. たとえばビット長を l とすると, 遺伝子型の数は $n = 2^l$ となり, 初期状態 $t = 0$

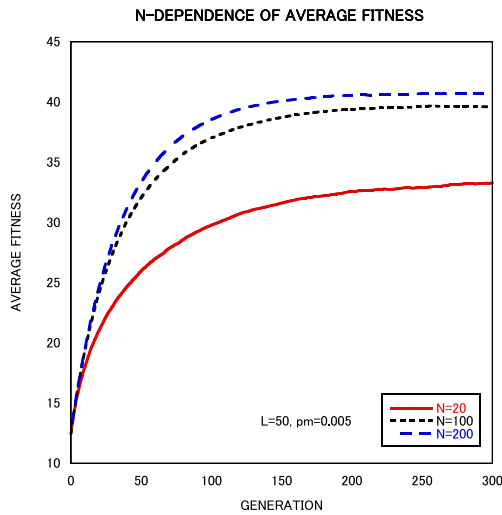


図 5 平均適応度の N 依存性

Fig. 5 Dependence of the average fitness on N . $p_m = 0.005$. The horizontal axis represents generation.

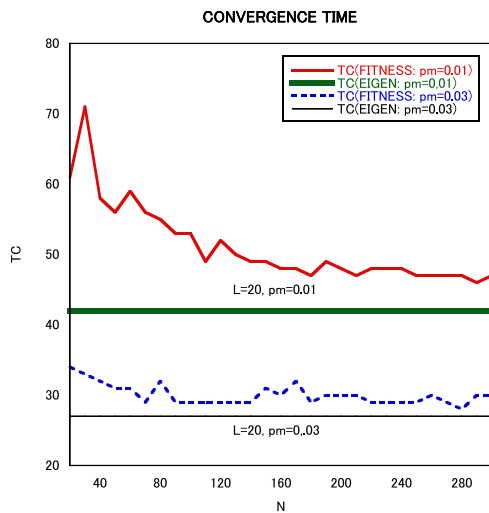


図 6 収束時間 $T_c(\text{fitness})$ の N 依存性. $p_m = 0.01$ と 0.03 . $\ell = 20$. 実線は理論的予測値 $T_c(\text{eigenvalue})$

Fig. 6 The population size dependence of the convergence time $T_c(\text{fitness})$ with $p_m = 0.01$ and 0.03 . $\ell = 20$. Solid lines are theoretical estimation $T_c(\text{eigenvalue})$.

において最適解が存在する確率 $P(0)$ は

$$P(0) = 1 - \left(1 - \frac{1}{n}\right)^N,$$

から計算できる. これは一般に非常に小さな値となる. しかし非常に大きな N , たとえば $N = 2^\ell$ とすると, 確率 $P(0)$ は

$$P(0) = 1 - \left(1 - \frac{1}{N}\right)^N \approx 1 - e^{-1} = 0.63$$

である. 図 11 は初めて最適解が出現した時間の N 依存性を示している. 当然な結果であるが, 集団サイズが大きくなるほど最適解が早く出現することが分かる.

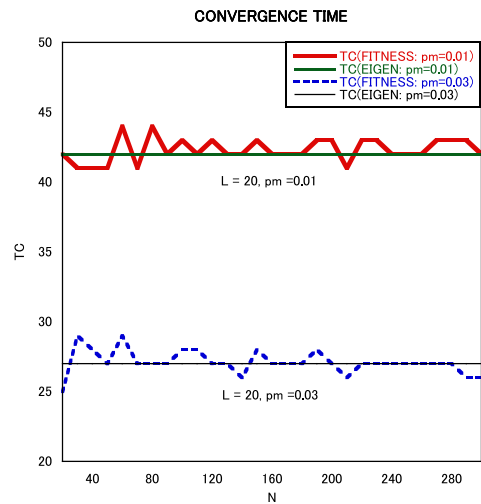


図 7 非対称突然変異モデルにおける収束時間 $T_c(\text{fitness})$ の N 依存性. $p_m = 0.01$ と 0.03 . $\ell = 20$. 実線は理論的予測値 $T_c(\text{eigenvalue})$

Fig. 7 The population size dependence of the convergence time $T_c(\text{fitness})$ in the asymmetric mutation model, with $p_m = 0.01$ and 0.03 . $\ell = 20$. Solid lines are theoretical estimation $T_c(\text{eigenvalue})$.

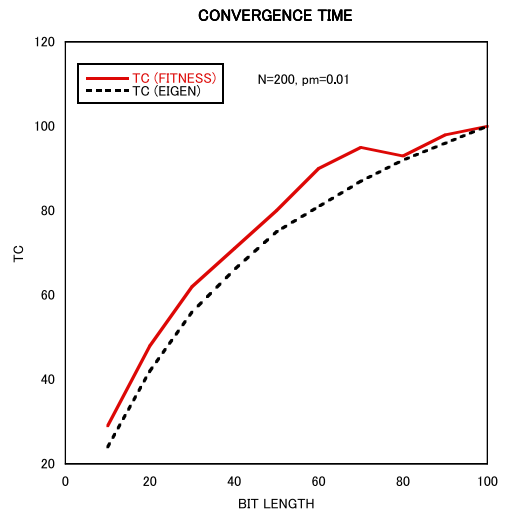


図 8 収束時間のビット長 ℓ 依存性

Fig. 8 The bit length dependence of the convergence time $T_c(\text{fitness})$ with $N = 200$, $p_m = 0.01$.

5. まとめと今後の課題

本研究では, OneMax 問題と非対称突然変異の GA が同等であることを示し, OneMax 問題の収束時間を定量的に予測する方法を提案した. 実際に計算した結果が示すとおり, 提案した予測法である程度の収束時間の予測ができることが分かった. 特に, 収束時間が集団サイズ N によらないことは重要なことである. また, ビット長 ℓ が短いほど, 突然変異率 p_m が大きいほど速く収束することが分かった.

今回は Markov 連鎖理論を用いて 1 次スキーマ分布の収束時間を予測する手法を提案した. 次のステップとして,

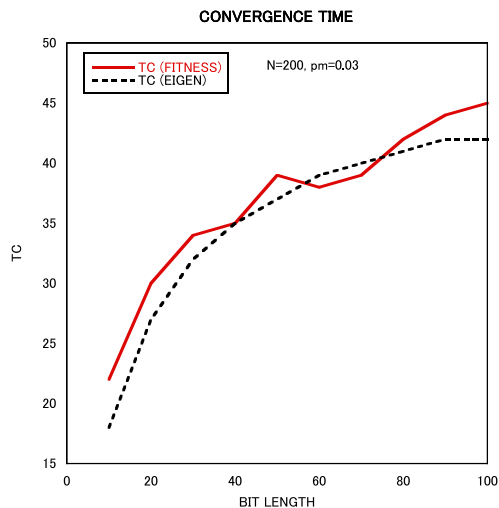


図 9 収束時間のビット長 ℓ 依存性

Fig. 9 The bit length dependence of the convergence time $T_c(\text{fitness})$ with $N = 200$, $p_m = 0.03$.

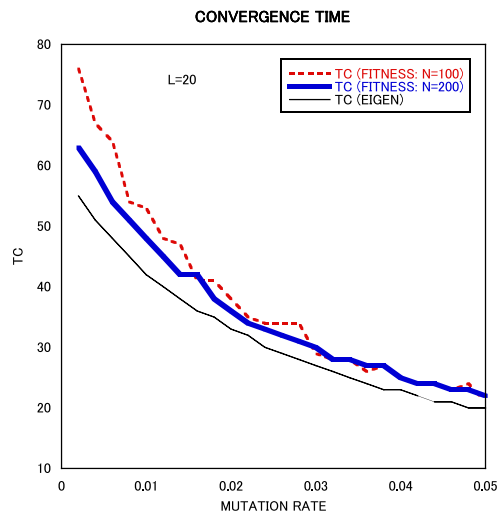


図 10 収束時間の p_m 依存性

Fig. 10 The mutation rate dependence of the convergence time $T_c(\text{fitness})$ with $N = 100$ and $N = 200$. $\ell = 20$.

この結果をもとに最適解が初めて出現する時間を予測する方法について考えていきたい。

最近、確率的計算手法として乱択アルゴリズムが注目を集めている [20], [21]. 乱択アルゴリズムでは、計算効率の予測のため Chernoff 限界, Azuma 不等式など様々な数学的手法が取り入れられている. 我々もこれらの手法の進化計算の分野での応用も考えていきたい.

進化計算において Markov 連鎖などの確率論的方法を取り入れたものとして分布推定に基づく進化計算がある [15]. これは Estimation of Distribution Algorithm (EDA) などと呼ばれるが様々なバリエーションがある. 分布推定法は明示的に統計的計算を行って集団を生成するため, 従来の進化計算と比べて確率論的性質が比較的単純であり, 研究の対象として取り上げてみたい.

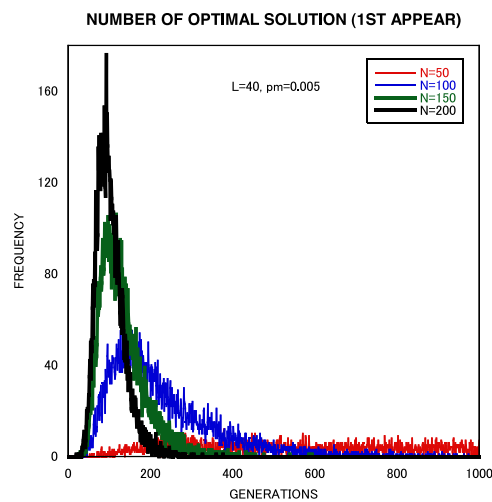


図 11 初めて最適解が出現する時間の N 依存性 ($p_m = 0.005$, $L = 40$)

Fig. 11 The N dependence of number of generations that the optimal solution will appear for the first time. $\ell = 40$, $p_m = 0.005$.

参考文献

- [1] Auger, A. and Doerr, B. (Eds.): *Theory of Randomized Search Heuristics*, World Scientific, New Jersey (2011).
- [2] Kemeny, J.G. and Snell, J.L.: *Finite Markov Chains*, Springer-Verlag (1976).
- [3] Crow, J.F. and Kimura, M.: *An Introduction to Population Genetics Theory*, Harper and Row, New York (1970).
- [4] 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).
- [5] Nix, A.E. and Vose, M.D.: Modeling Genetic Algorithm with Markov Chains, *Annals of Mathematical and Artificial Intelligence*, Vol.5, pp.79–88 (1992).
- [6] Davis, T.E. and Principe, J.C.: Markov Chain Framework for the Simple Genetic Algorithm, *Evolutionary Computation*, Vol.1, pp.269–288 (1993).
- [7] Droste, S., Jansen, T. and Wegener, I.: On the Analysis of the (1+1) Evolutionary Algorithm, *Theoretical Computer Science*, Vol.276, pp.51–81 (2002).
- [8] Hajek, B.: Hitting-time and Occupation-time Bounds Implied by Drift Analysis with Applications, *Advances in Applied Probability*, Vol.13, pp.502–525 (1982).
- [9] He, J. and Yao, X.: Drift Analysis and Average Time Complexity of Evolutionary Algorithms, *Artificial Intelligence*, Vol.127, pp.57–85 (2001).
- [10] 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: 数理モデル化と応用, Vol.43, pp.1050–1060 (2002).
- [11] 古谷博史: 選択における連鎖不平衡の効果—OneMax 問題のスキーマ解析, 情報処理学会論文誌: 数理モデル化と応用, Vol.45, pp.12–21 (2004).
- [12] Wai-Yuan, T.: *Stochastic Models with Applications to Genetics, Cancers, AIDS and Other Biomedical Systems*, World Scientific, New Jersey (2002).
- [13] Ma, Q., Zhang, Y., Koga, K., Sakamoto, M. and Furutani, H.: Analysis of First Order Schema for One-Max Problem, *Proc. 17th International Symposium on Artificial Life and Robotics* (2012).
- [14] Goldberg, D.E.: *Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning*, Addison Wesley, Read-

- ing (1989).
- [15] 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 (2008).
 - [16] Furutani, H.: Schema Analysis of OneMax Problem — Evolution Equation for First Order Schemata, *Foundations of Genetic Algorithms* Vol.7, pp.9–26, Morgan Kaufmann, San Francisco (2003).
 - [17] Doerr, B., Hebbinghaus, N. and Neumann, F.: Speeding up Evolutionary Algorithms through Asymmetric Mutation Operators, *Evolutionary Computation*, Vol.15, No.4, pp.401–410 (2006).
 - [18] Fisher, R.A.: On the Dominance Ratio, *Proc. Royal Society of Edinburgh*, Vol.42, pp.321–341 (1922).
 - [19] Wright, S.: Evolution in Menderian Populations, *Genetics*. Vol.16, pp.97–159, (1931).
 - [20] Motwani, R. and Raghavan, P.: *Randomized Algorithms*, Cambridge University Press, Cambridge (1995).
 - [21] 玉木久夫：乱択アルゴリズム，共立出版 (2008).

付 録

A.1 遷移行列の固有値

確率変数 $X(t)$ は，世代 t においてビット 1 の数を実現値に持つものとする．世代 t における実現値を $X(t) = i$ としたとき， $X(t+1)$ の m 次モーメントを計算する．遷移行列を

$$P_{ij} = \binom{N}{j} p_i^j (1-p_i)^{N-j}, \quad p_i = \frac{i}{N} a + b,$$

とすると， $m = 0$ の場合は，

$$E\{X(t+1)^0 | X(t) = i\} = E\{1 | X(t) = i\} = 1,$$

$m = 1$ の場合は i について 1 次式になる．

$$\begin{aligned} & E\{X(t+1)|i\} \\ &= \sum_{j=0}^N j \binom{N}{j} p_i^j (1-p_i)^{N-j} \\ &= \left\{ p \frac{\partial}{\partial p} \sum_{j=0}^N \binom{N}{j} p^j q^{N-j} \right\}_{p=p_i, q=1-p_i} \\ &= \left\{ p \frac{\partial}{\partial p} (p+q)^N \right\}_{p=p_i, q=1-p_i} \\ &= p_i N = ai + bN. \end{aligned}$$

同様に $m = 2$ の場合は

$$\begin{aligned} & E\{X(t+1)^2|i\} \\ &= \sum_{j=0}^N j(j-1) \binom{N}{j} p_i^j (1-p_i)^{N-j} \\ &\quad + \sum_{j=0}^N j \binom{N}{j} p_i^j (1-p_i)^{N-j} \\ &= p_i^2 N(N-1) + p_i N, \end{aligned}$$

から i について 2 次多項式になることが分かる．

一般に $0 \leq m \leq N$ について m 次モーメントは i の m

次多項式になる．

$$E\{X(t+1)^m | X(t) = i\} = \sum_{k=0}^m A_{m,k} i^k. \quad (\text{A.1})$$

最高次の係数 $A_{m,m}$ は

$$\begin{aligned} & \left\{ p^m \frac{\partial^m}{\partial p^m} \sum_{j=0}^N \binom{N}{j} p^j q^{N-j} \right\}_{p=p_i, q=1-p_i} \\ &= N(N-1) \cdots (N-m+1) p_i^m \end{aligned}$$

から

$$A_{m,m} = \frac{a^m}{N^m} \left\{ \prod_{c=1}^m (N-c+1) \right\} \quad (\text{A.2})$$

となる．

$(N+1) \times (N+1)$ 行列 A を

$$A = \begin{pmatrix} A_{00} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ A_{10} & A_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ A_{20} & A_{21} & A_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{N0} & A_{N1} & A_{N2} & \cdots & A_{NN} \end{pmatrix}$$

$(N+1) \times (N+1)$ 行列 R を

$$R = \begin{pmatrix} 0^0 & 1^0 & 2^0 & \cdots & N^0 \\ 0^1 & 1^1 & 2^1 & \cdots & N^1 \\ 0^2 & 1^2 & 2^2 & \cdots & N^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0^N & 1^N & 2^N & \cdots & N^N \end{pmatrix}$$

ただし $0^0 = 1$ ，と定義する．式 (A.1) の左辺は

$$\begin{aligned} & E\{X(t+1)^m | X(t) = i\} \\ &= \sum_{k=0}^N P_{ik} k^m \\ &= \sum_{k=0}^N k^m \{P^T\}_{ki} = \{RP^T\}_{mi}, \end{aligned}$$

ここで P^T は遷移行列 P の転置行列である．次に式 (A.1) の右辺は

$$\sum_{k=0}^m A_{m,k} i^k = \{AR\}_{mi},$$

$0 \leq m, i \leq N$ について等式が成り立ち $RP^T = AR$ より

$$P^T = R^{-1}AR. \quad (\text{A.3})$$

したがって P の固有値と A の固有値は一致する． A は下三角行列なのでその対角成分 A_{mm} が固有値である．



古賀 仁信

昭和 63 年生。平成 23 年宮崎大学工学部卒業。同年同大学大学院工学研究科修士課程に入学。遺伝的アルゴリズムの確率論的研究に興味を持つ。



安永 和馬

平成 2 年生。現在、宮崎大学工学部情報システム工学科在学中。古谷研究室に所属し、進化計算を研究。特に、進化的アルゴリズムの解析に興味を持つ。



馬 青蓮 (学生会員)

中国青海省出身。平成 17 年中国青海大学資源工学部卒業。平成 23 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。同年同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。進化計算の理論的

解析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。



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

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。平成 23 年同大学院農学工学総合研究科物質情報工学専攻博士号取得。平成 24 年より中国青海大学コンピュータ技術・応用工学科教員。遺伝的アルゴリズムの理論等の研究に従事。