Vol.2012-MPS-91 No.41
Vol.2012-BIO-32 No.41
2012/12/7

(1+1) EA のマルコフ連鎖モデルによる分析

安永和馬† 古賀仁信††
坂本眞人† 古谷博史†

進化的アルゴリズム (EA) の計算過程について，これまで様々な手法を用いて分析がなされている．我々は,(1+1)EA について Markov 連鎖モデルを用いてその進化機構を研究した．本報告では (1+1)EA における OneMax 問題を取り上げ，Markov 遷移行列の明示的な形を与える．次にそれを用いて最適解出現時間などを計算した結果を示す.

Analysis of (1+1) EA by Markov chain model

KAZUMA YASUNAGA,† KIMINOBU KOGA,††
MAKOTO SAKAMOTO† and HIROSHI FURUTANI†

There have been performed analyses for computational processes of Evolutional Computation (EA) by using various methods. We studied the evolutionary mechanism of (1+1) EA by Markov chain model. In this report, we treat OneMax problem in (1+1) EA, and give the explicit form of a Markov transition matrix. Next, we show the results of calculations for the average first appearing time of optimal solution, and others.

1. はじめに

進化的アルゴリズム (EA) の計算性能を高めるには，計算時間の研究が重要である．本報告では (1+1)EA における OneMax 問題を取り上げ，Markov 連鎖理論を用いて研究した．そのため,(1+1)EA OneMax 問題における Markov 遷移行列の明示的な形を求めた．次に, 時間 t において初めて最適解が出現する確率と, 時間 t の平均値を計算した.

2. 理　論

集団の親個体数が 1 つのみで，突然変異によってできた子と適応度の比較を行い，より適応度が高い方が次の世代の親として選択される (1+1)EA を進化のモデルとした．個体は長さ ℓ の固定長 2 進ビット列とし，突然変異率を P_m と表す．個体の適応度は OneMax 関数の適応度（ビット列中のビット 1 の数）とする．

(1+1)EA は (ℓ+1) 個の状態によって記述することができる．各状態はビット列中のビット 1 の数で定義する．時間 t におけるビット 1 の数を i，時間 $t+1$ におけるビット 1 の数を j とする．状態 i から状態 j へ遷移する確率 $p(i \to j)$ を次のように表す.

まず $i > j$ の場合，時間 $t \to t+1$ において適応度が悪くなることはないので

$$p(i \to j) = 0 \quad i > j \tag{1}$$

となる．次に $i < j$ の場合，時間 t におけるビット 1 の個数 i 個のうち r 個がビット 0 に変異するとする．時間 $t+1$ におけるビット 1 の数は j 個であるから，時間 t においてビット 0 の個数 $\ell - i$ 個のうち $j-i+r$ 個がビット 1 に変異しなければならない．また，組み合わせの式から r の最大値 k は $\ell - j$ と i の最小値をとることがわかる.

$$p(i \to j) = \sum_{r=0}^{k} K {P_m}^{r+s} (1-P_m)^{\ell-(r+s)} \tag{2}$$

$$i < j; \quad s = j - i + r; \quad k = \min(\ell - j, i);$$
$$K = \binom{i}{r}\binom{\ell-i}{s}$$

最後に状態が変化しない場合，全体の確率から $i < j$ の時の $p(i \to j)$ の確率を合計したものを引けばよい.

$$p(i \to i) = 1 - \sum_{j>i} p(i \to j) \tag{3}$$

遷移確率はこの (1) 式 (2) 式 (3) 式で定義される.

2.1 最適解出現確率

ここで求めた (1+1)EA は吸収マルコフ連鎖である．吸収マルコフ連鎖では, 遷移行列 $\mathbf{P}$ を用いることにより, 初めて最適解が出現する時間を理論的に計算することが出来る．そのため遷移行列 $\mathbf{P}$ を次の式で定義する.

† 宮崎大学工学部
Faculty of Engineering, University of Miyazaki
†† 宮崎大学工学研究科
Graduate School of Engineering, University of Miyazaki

$$\mathbf{P} = \left(\begin{array}{c|cc} p(\ell \to \ell) & \cdots & p(\ell \to 0) \\ \hline \vdots & \ddots & \vdots \\ p(0 \to \ell) & \cdots & p(0 \to 0) \end{array} \right)$$

この遷移行列 $\mathbf{P}$ を次のように分割して考える．

$$\mathbf{P} = \left(\begin{array}{c|c} \boldsymbol{I} & \boldsymbol{O} \\ \hline \boldsymbol{R} & \boldsymbol{Q} \end{array} \right)$$

時間 t における遺伝子の分布確率を

$$\boldsymbol{q}(t) = \left(\begin{array}{cccc} q_\ell(t), & q_{\ell-1}(t), & \cdots & ,q_0(t) \end{array} \right)$$

と定義する．$q_i(t)$ は時間 t においてビット 1 の数が i である確率を表す．規格化条件から $\sum_{i=0}^{\ell} q_i = 1$, および $0 \le q_i \le 1$ を満たす．また，$\boldsymbol{q}(t)$ は遷移行列 $\mathbf{P}$ を用いて次式により求めることが出来る．

$$\boldsymbol{q}(\mathrm{t}) = \boldsymbol{q}(0) \cdot \boldsymbol{P}^t \tag{4}$$

なお $\mathbf{P}^t$ は次のように表すことが出来る．

$$\mathbf{P}^t = \left(\begin{array}{cc} \boldsymbol{I} & \boldsymbol{O} \\ (\boldsymbol{I} + \boldsymbol{Q} + \boldsymbol{Q}^2 + \cdots + \boldsymbol{Q}^{t-1}) \cdot \boldsymbol{R} & \boldsymbol{Q}^t \end{array} \right)$$

時間 t において初めて最適解が出現する確率 $T(t)$ は

$$T(t) = q_\ell(t) - q_\ell(t-1) \tag{5}$$

と表すことができる．$\boldsymbol{q}(t)$ を

$$\boldsymbol{q}(t) = \left(\begin{array}{cc} q_\ell(t), & \tilde{\boldsymbol{q}}(t) \end{array} \right)$$

と分割することで次式を得る．

$$T(t) = \tilde{\boldsymbol{q}}(0) \cdot \boldsymbol{Q}^{t-1} \cdot \boldsymbol{R}$$

2.2 最適解出現時間の平均

初めて最適解が出現する時間の平均 $\bar{T}$ を

$$\bar{T} = \sum_{t=0}^{\infty} T(t) \cdot t \tag{6}$$

と定義する．(6) 式を計算すると

$$\bar{T} = \tilde{\boldsymbol{q}}(0) \cdot \{\boldsymbol{I} + 2\boldsymbol{Q} + 3\boldsymbol{Q}^2 + \cdots\} \cdot \boldsymbol{R}$$

となる．$\{\boldsymbol{I}+2\boldsymbol{Q}+3\boldsymbol{Q}^2+\cdots\} = (\boldsymbol{I}-\boldsymbol{Q})^{-1} \cdot (\boldsymbol{I}-\boldsymbol{Q})^{-1}$ と表すことができる[2)]．$\boldsymbol{N} = (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{Q})^{-1}$ とすると

$$\bar{T} = \tilde{\boldsymbol{q}}(0) \cdot \boldsymbol{N}^2 \cdot \boldsymbol{R}$$

となる．さらに$\boldsymbol{R}$は $\boldsymbol{N}$ を用いて次のように表すことができる．

$$\boldsymbol{R} = \boldsymbol{N}^{-1} \cdot \boldsymbol{\zeta}$$

$\boldsymbol{\zeta}$ は長さ ℓ の全ての値が 1 である縦ベクトルである．これにより，初めて最適解が出現する時間の平均 $\bar{T}$ は

$$\bar{T} = \tilde{\boldsymbol{q}}(0) \cdot \boldsymbol{N} \cdot \boldsymbol{\zeta}$$

と求めることができる．

3. 数 値 計 算

OneMax 問題を例に取り上げ，数値的に初めて最適解が出現する時間を検討する．ビット長を $\ell = 20$ とし突然変異率 P_m を変化させていき，初めて最適解が出現する時間を求めた．乱数を変えながら同じ計算を 10000 回繰り返し，得られた結果の平均を求めた．初期状態はビット 1 の出る確率を 1/2 とした．なお Markov 連鎖理論を用いた計算では，初期状態 $\boldsymbol{q}(0)$ を確率 1/2 の 2 項分布で作成した．

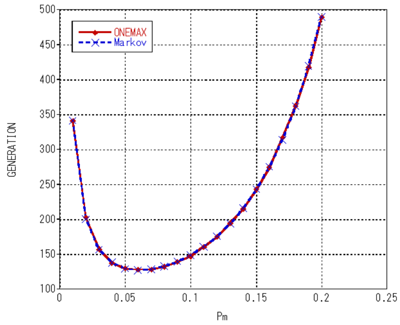

図 1 The average time that the optimal solution appears for the first time, with $\ell = 20$.

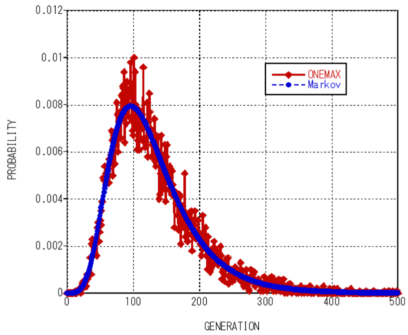

図 2 The probability that the optimal solution appears for the first time at time t, with $\ell = 20$ and $P_m = 1/\ell$.

図 1 はビット長 $\ell = 20$ の場合の初めて最適解が出現する時間の平均 $\bar{T}$ を示した．

図 2 はビット長 $\ell = 20$，突然変異率 $P_m = 1/\ell$ の場合の時間 t で初めて最適解が出現する確率 $T(t)$ を示した．いずれの図も，Markov 連鎖により導いた理論値と数値実験の結果はよく一致しており，Markov 連鎖がよいモデルであることが分かる．

4. ま と め

(1+1)EA について OneMax 問題を例として取り上げ,Markov 連鎖と見た場合の性質をいくつか導いた．吸収 Markov 連鎖であるとき，初めて最適解が出現する時間の平均は理論的に計算でき，計算速度を上げるには突然変異率を $1/\ell$ にすると良いことが分かった．

参 考 文 献

1) S. Droste, T. Jansen and I.Wegener:“On the analysis of the (1+1) evolutionary algorithm”, Theoretical Computer Science, **276**, pp.51–81, 2002
2) J. G. Kemeny and J. L. Snell: “Finite Markov chains”, Springer-Verlag, 1976