

平成29年度
宮崎大学大学院博士学位論文

進化的アルゴリズムにおける
突然変異に対する
マルコフ連鎖解析に関する研究

宮崎大学大学院農学工学総合研究科
物質・情報工学専攻

杜 一飛

目次

| | | |
|------------|----------------------------------|-----------|
| 第1章 | 緒言 | 1 |
| 1.1 | 概要 | 1 |
| 1.2 | 研究の背景 | 3 |
| 1.3 | 研究の目的 | 4 |
| 1.4 | 本論文の構成 | 5 |
| 第2章 | 進化的アルゴリズムにおける求解性能の解析手段 | 7 |
| 2.1 | マルコフ連鎖 | 7 |
| 2.1.1 | マルコフ連鎖を用いた既存研究 | 7 |
| 2.1.2 | マルコフ連鎖の性質 | 8 |
| 2.2 | スキーマ理論 | 9 |
| 2.3 | 連鎖 | 9 |
| 第3章 | 対称突然変異を用いた遺伝的アルゴリズムに関する解析 | 11 |
| 3.1 | 概要 | 11 |
| 3.2 | 研究の対象 | 12 |
| 3.2.1 | 遺伝的アルゴリズム | 12 |
| 3.2.2 | 数値モデル | 14 |
| 3.3 | 解析 | 15 |
| 3.3.1 | 連鎖平衡 | 15 |
| 3.3.2 | 最適解の出現時間の解析 | 15 |
| 3.3.3 | 1次スキーマ解析 | 16 |
| 3.3.4 | 分布変化量 | 19 |
| 3.3.5 | 収束後の最適解の出現分布 | 19 |

| | | |
|------------|--------------------------------------|-----------|
| 3.4 | 実験 | 20 |
| 3.4.1 | 実験の設定 | 20 |
| 3.4.2 | 収束までの分布に関する評価 | 20 |
| 3.4.3 | 収束後の分布に関する評価 | 26 |
| 3.5 | まとめ | 29 |
| 第4章 | 遺伝的アルゴリズムにおける非対称突然変異モデルに関する解析 | 31 |
| 4.1 | 概要 | 31 |
| 4.2 | 研究の対象 | 31 |
| 4.2.1 | 非対称突然変異モデル | 31 |
| 4.2.2 | 数値モデル | 32 |
| 4.3 | 解析 | 33 |
| 4.3.1 | Fisher の定理 | 33 |
| 4.3.2 | 1次スキーマ | 34 |
| 4.3.3 | 分散の導出 | 34 |
| 4.3.4 | 連鎖平衡 | 35 |
| 4.3.5 | 非対称突然変異 | 36 |
| 4.3.6 | マルコフ連鎖解析 | 36 |
| 4.4 | 実験 | 37 |
| 4.5 | まとめ | 40 |
| 第5章 | (1 + 1) 進化的アルゴリズムに関する解析 | 41 |
| 5.1 | 概要 | 41 |
| 5.2 | 研究の対象 | 42 |
| 5.2.1 | $(\mu + \lambda)$ EA | 42 |
| 5.2.2 | (1 + 1)EA | 43 |
| 5.2.3 | Leading Ones 問題 | 44 |
| 5.3 | 解析 | 44 |
| 5.3.1 | 吸収マルコフ連鎖による解析 | 44 |
| 5.3.2 | 遷移確率 | 48 |

| | | |
|------------|------------------------------|-----------|
| 5.3.3 | 最適解が出現する世代数の平均値と分散 | 51 |
| 5.3.4 | 最適な突然変異率 | 55 |
| 5.3.5 | 成功確率 | 57 |
| 5.4 | 実験 | 58 |
| 5.5 | まとめ | 69 |
| 第6章 | 結言 | 71 |
| 6.1 | 結論 | 71 |
| 6.2 | 今後の課題 | 72 |
| | 参考文献 | 73 |
| | 謝辞 | 79 |
| | 公表論文 | 80 |

表 目 次

| | | |
|-----|---|----|
| 5.1 | 4つの突然変異率の場合, \bar{T} と Var を求めた結果 | 57 |
|-----|---|----|

目次

| | | |
|------|---|----|
| 3.1 | 実際の GA の最適解の出現分布. | 21 |
| 3.2 | 1 次スキーマの定常分布 ($N = 100, L = 20, p_m = 0.02$). | 22 |
| 3.3 | 世代数による 1 次スキーマの収束 ($N = 100, L = 20, p_m = 0.02$). | 22 |
| 3.4 | 1 次スキーマの定常分布 ($N = 200, L = 20, p_m = 0.02$). | 23 |
| 3.5 | 世代数による 1 次スキーマの収束 ($N = 200, L = 20, p_m = 0.02$). | 23 |
| 3.6 | 1 次スキーマの定常分布 ($N = 100, L = 10, p_m = 0.02$). | 24 |
| 3.7 | 世代数による 1 次スキーマの収束 ($N = 100, L = 10, p_m = 0.02$). | 25 |
| 3.8 | 1 次スキーマの定常分布 ($N = 100, L = 20, p_m = 0.01$). | 25 |
| 3.9 | 世代数による 1 次スキーマの収束 ($N = 100, L = 20, p_m = 0.01$). | 26 |
| 3.10 | 突然変異率による分布変化量の変化. | 27 |
| 3.11 | 収束後の最適解の出現分布. | 27 |
| 3.12 | $\log[h(t)]$ の世代による変化. | 28 |
| 3.13 | 収束後の最適解の出現分布. | 28 |
| 3.14 | 突然変異率が変化した時, パラメータ b の変化. | 29 |
| 4.1 | 1 次スキーマの定常分布 ($N = 200, L = 20, p_\alpha + p_\beta = 0.1, p_\alpha : p_\beta = 1 : 9, 1 : 1, 9 : 1$). | 38 |
| 4.2 | 世代数による V_I の変化 ($N = 200, L = 20, p_\alpha + p_\beta = 0.1, p_\alpha : p_\beta = 1 : 9, 1 : 1, 9 : 1$). | 39 |
| 5.1 | 適応度が i から j へ遷移するイメージ図 ($j \neq L$). | 49 |
| 5.2 | 適応度が i から j へ遷移するイメージ図 ($j = L$). | 50 |
| 5.3 | ($L = 10$) 突然変異率による最適解が出現する世代数の平均値. | 59 |
| 5.4 | ($L = 10$) 突然変異率による最適解が出現する世代数の分散. | 59 |

| | | |
|------|--|----|
| 5.5 | ($L = 50$) 突然変異率による最適解が出現する世代数の平均値. | 60 |
| 5.6 | ($L = 50$) 突然変異率による最適解が出現する世代数の分散. | 60 |
| 5.7 | ($L = 100$) 突然変異率による最適解が出現する世代数の平均値. . . . | 61 |
| 5.8 | ($L = 100$) 突然変異率による最適解が出現する世代数の分散. | 61 |
| 5.9 | ($L = 10$) パラメータ c による最適解が出現する世代数の平均値. . . . | 63 |
| 5.10 | ($L = 10$) パラメータ c による最適解が出現する世代数の分散. | 63 |
| 5.11 | ($L = 50$) パラメータ c による最適解が出現する世代数の平均値. . . . | 64 |
| 5.12 | ($L = 50$) パラメータ c による最適解が出現する世代数の分散. | 64 |
| 5.13 | ($L = 100$) パラメータ c による最適解が出現する世代数の平均値. . . . | 65 |
| 5.14 | ($L = 100$) パラメータ c による最適解が出現する世代数の分散. . . . | 65 |
| 5.15 | ビット長 L による最適解が出現する世代数の平均値 ($c = 1.5$ と $c = 1$ の比較). | 66 |
| 5.16 | ビット長 L による最適解が出現する世代数の分散 ($c = 1.5$ と $c = 1$ の 比較). | 67 |
| 5.17 | $L = 100, c = 1$ の場合, 世代数による最適解の出現回数の分布. . . . | 68 |
| 5.18 | $c = 1.5$ の場合, ビット長 L による予測された世代範囲内の成功確率. | 69 |

第3章の符号対照表

| | | |
|----------|-------|-----------------------|
| GA | | 遺伝的アルゴリズム |
| t | | 世代 |
| N | | 集団の個体数 |
| L | | 個体ビット長 |
| p_m | | 突然変異率 |
| p_c | | 交叉率 |
| x_i | | 遺伝子型 i の相対頻度 |
| f_i | | OneMax 問題の適応度関数 |
| h_1 | | 1 次スキーマがビット 1 となる確率 |
| T_H | | 最適解の出現時間 |
| T_c | | 1 次スキーマの収束時間 |
| T_h | | 収束後の最適解の出現時間 |
| P | | 1 次スキーマ分布の遷移行列 |
| $\mu(t)$ | | 世代 t において 1 次スキーマ分布 |
| π | | 1 次スキーマ分布の定常分布 |
| TV | | 1 次スキーマの分布変化量 |
| $h(t)$ | | 収束後の最適解の出現分布 |
| b | | 収束後の最適解の出現分布に関するパラメータ |

第4章の符号対照表

| | | |
|------------|-------|----------------------------|
| GA | | 遺伝的アルゴリズム |
| t | | 世代 |
| N | | 集団の個体数 |
| L | | 個体ビット長 |
| p_α | | 非対称突然変異率 $0 \rightarrow 1$ |
| p_β | | 非対称突然変異率 $1 \rightarrow 0$ |
| p_c | | 交叉率 |
| x_i | | 遺伝子型 i の相対頻度 |
| f_i | | OneMax 問題の適応度関数 |
| \bar{f} | | 平均適応度 |
| $VAR(f)$ | | 適応度の分散 |
| V_A | | 各ビットだけに寄与する分散 |
| V_I | | 2つのビットに寄与し、ビット間の相関を表す分散 |
| h_1 | | 1次スキーマがビット1となる確率 |
| h_0 | | 1次スキーマがビット0となる確率 |
| P | | 1次スキーマ分布の遷移行列 |
| $\mu(t)$ | | 世代 t において1次スキーマ分布 |
| π | | 1次スキーマ分布の定常分布 |

第5章の符号対照表

| | | |
|---------------|-------|---------------------------|
| EA | | 進化的アルゴリズム |
| t | | 世代 |
| L | | 個体ビット長 |
| p_m | | 突然変異率 |
| x | | (1 + 1)EA の親個体 |
| x' | | (1 + 1)EA の子個体 |
| $f(x)$ | | Leading Ones 問題の適応度関数 |
| u | | 適応度の確率分布 |
| P | | 遷移行列 |
| Q | | 一時状態における遷移行列 |
| I | | 単位行列 |
| $T(t)$ | | 世代 t における最適解が出現する確率 |
| \bar{T} | | 最適解が出現する世代数の平均値 |
| M | | 基本行列 |
| m | | 最適解が出現する世代数の平均値に関わるベクトル |
| Var | | 最適解が出現する世代数の分散 |
| V | | 最適解が出現する世代数の分散に関わるベクトル |
| ξ | | 全ての要素が1となる横ベクトル |
| c | | 突然変異率のパラメータ |
| $c_{\bar{T}}$ | | \bar{T} を最小にするパラメータ c |
| c_{Var} | | Var を最小にするパラメータ c |
| S | | 成功確率 |
| $f_S(t)$ | | 成功確率に関する正規分布関数 |
| $f(z)$ | | 標準正規分布 |

第1章 緒言

1.1 概要

進化的アルゴリズム (Evolutionary Algorithms:EAs) は、生物の進化を模擬した問題解決手法である。EA はこれまで、探索や最適化などの様々な分野で多くの成果を上げて来た。しかし、応用面での成功と比べ、EA の理論的な解明は大きく遅れている [1]。本論文では、EA の理論的な側面、特に遺伝的アルゴリズム (Genetic Algorithms:GA) と (1 + 1)EA, 2 種類の EA の求解性能を分析する。

GA は自然界での適応過程を説明し、生物の進化を模擬する人工モデルとして提唱された計算手法である [2]。多くの分野に適用され、その有効性について疑問を差し挟む余地は無い。一方、理論面ではその有効性についての解明が難しいとされてきた。本論文では、OneMax 問題における最適解の出現時間を GA の求解性能評価の指標とし、求解性能に影響を与えるものは何か、いかにして GA の求解性能を高めるか、という点を論じる。GA で用いられている主要な遺伝的操作としては、選択、突然変異、交叉の3つが挙げられる。また、GA で用いられている重要なパラメータは個体数 N , ビット長 L , 突然変異率 p_m , 交叉率 p_c が挙げられる。これらの設定の最適解の出現時間への影響についての研究は切実な問題である。最適解の出現時間に対する理論的な解析手法があれば、GA の現実問題への応用に役に立つ。しかし、最適解の出現時間に対する理論的な解析を直接に行うことは容易ではない。GA の理論的な研究では、スキーマ理論が有名であるが、その有用性について疑問を呈する研究者も多い [4, 5, 6]。一方、最近注目を集めている方法にマルコフ連鎖理論がある。本論文では、マルコフ連鎖理論を用い、1次スキーマの収束までと、収束後の進化過程を分けて理論的に解析する。前半部分では、マルコフ連鎖理論を採用し、まず、1次スキーマの収束時間を解析する。そのため、1次スキーマの解析では集団が連鎖平衡 [4, 3] にあることを仮定し、その収束時間を解析する。GA へのマ

マルコフ連鎖理論の適用については先行研究がある [7]. Ma ら [7] の研究では有限な N における 1 次スキーマの進化過程を調査している. 本論文は 1 次スキーマ分布にマルコフ連鎖を適用し, 1 次スキーマの時間変化がよく再現できる事を示す. 次に, 世代による 1 次スキーマの変化を調べるために, 分布変化量という概念を引用する [8]. 特に, 一定の世代数における分布変化量を分析し, 突然変異率 p_m が収束時間へ及ぼす影響を調べる. 後半部分で収束後の集団を分析する. 集団における最適解の出現時間を調査するために, 収束後の最適解の出現時間を解析する. 収束後の最適解の出現時間に対する理論的な解析が困難なため, シミュレーションによって調査する. 特に, 突然変異率 p_m による収束後の最適解の出現時間への影響を調べる. さらに, 求解効率を向上させるために, GA の集団中に最適解が出現する時間の予測方法を提案する.

対称突然変異を用いた GA の進化過程を解析した後, 非対称突然変異モデルに着目し, 非対称突然変異を用いる GA の求解性能について解析する. 多くの研究者が非対称突然変異は進化的アルゴリズムの効率を高める効果があるという結果を示している [9, 10]. 本論文では, 集団が連鎖平衡 [3, 4] にあることを仮定し, マルコフ連鎖理論を採用して 1 次スキーマの収束を分析する. また, 非対称突然変異が集団を連鎖平衡の状態へ導くかどうかにも検証する.

EA の理論的な研究の目的は, 計算過程を数学的に解析し, 効率を向上させる計算パラメータを得るためである [11]. Auger ら [1] による $(\mu + \lambda)$ EA は EA の中で一般的な構造である. $(1 + 1)$ EA が $(\mu + \lambda)$ EA を単純化した構造になるため, $(1 + 1)$ EA による解析結果は一般的な EA に適用できる. 本論文では $(1 + 1)$ EA について, Leading Ones 問題を取り上げ, 吸収マルコフ連鎖理論を用いて進化過程の理論的な解析を行う. この研究の目的は, Leading Ones 問題の最適解が出現する世代数の平均値と分散を表す式を, EA における遺伝的パラメータで記述する事である. 導出した平均値と分散を表す式から, 効率が良い突然変異率を推定する手法を提案, 評価する.

1.2 研究の背景

EA は、生物の進化を模した問題解決手法であり、これまで探索や最適化などの様々な分野で多くの成果を上げている。一般に、EA には GA や $(\mu + \lambda)$ EA などの構造がある。本論文では GA と $(1 + 1)$ EA, 2 種類の構造を取り上げる。

GA を現実の問題に適用する際に問題となるのが、重要な計算パラメータの選択である。個体数 N , ビット長 L , 突然変異率 p_m , 交叉率 p_c などの計算パラメータを適切に設定する事で、効率的な解探索が可能となる。残念ながら、これらのパラメータを決定するための理論的な解析結果はほとんどなく、ほとんどは直感や経験的に決めている。GA の収束性は Nix ら [12] により証明されているが、GA の時間計算量に関する研究はまだ少ない。Suzuki ら [13] は、最適な解によって集団が占有されるまでの時間 (domination time) を定義し、その出現時間をスキーマ理論により解析した。また、GA の進化速度について確率論的に検討し、進化速度における交叉の役割を数学的に解析して、交叉が進化を速めることを報告した。Goldberg ら [14] は、集団内における最適解の数が 1 個から $N - 1$ 個に増加するまでの時間を takeover time, 集団内に最適解が新たに生成されるまでの時間を innovation time と定義し、それらの理論的解析を行った。Ambati ら [15] は traveling salesman problem(TSP) 問題において GA の計算時間を予測したが、理論的な解析は行っていない。

GA の理論的研究の中で有限集団の進化を数学的に解析するためには、確率論的な理論を必要とし、その代表的なものにマルコフ連鎖理論がある。He ら [16] は GA の計算時間について研究し、マルコフ連鎖を用いた最適解出現時間の計算法を提案した。マルコフ連鎖理論以外では、Drift 解析や Walsh 解析などを用いた研究も行われている [17, 18, 19].

突然変異は GA における遺伝的操作の 1 つである。多くの研究では遺伝子の値が互いに同じ確率で変異する対称突然変異を利用している。一方、多くの研究者が非対称突然変異モデルに着目し、非対称突然変異を用いる EA を解析している [20, 21]. 非対称突然変異では遺伝子の値が互いに異なる確率で変異する。Jansen ら [9] や Doerr ら [10] は、非対称突然変異が EA の効率を高める効果があるという結果を示している。

EA の理論的研究の目的は、計算過程を数学的に解析し、効率が向上する計算パラメータを得るためである [11]. Auger ら [1] による $(\mu + \lambda)$ EA は、EA の一般的な

構造である。(1 + 1)EA は $(\mu + \lambda)$ EA の最も単純な構造であり、(1 + 1)EA による解析結果は一般的な EA の性質の理解に役に立つ。Wegener[22] は、(1 + 1)EA が局所最適解に収束しにくく、多くの最適化問題の解析に適している事を示した。Furutani ら [23, 24] は、マルコフ連鎖を用いて、(1 + 1)EA と Randomized Local Search(RLS) の OneMax 問題における求解性能を解析した。OneMax 問題を対象とした (1 + 1)EA において、Droste[25] と Back[26] は、最適な突然変異率は一般に $p_m = \Theta(1/L)$ であることを示した。一方、Neumann ら [27, 28] は OneMax 問題より複雑な問題を対象に (1 + 1)EA と RLS を解析している。Sudholt ら [29] と Doerr ら [30] はは Leading Ones 問題を解く (1 + 1)EA の時間複雑度や計算時間の範囲などを示した。Droste ら [31] の研究結果によると、突然変異率 $p_m = 1/L$ の場合、Leading Ones 問題における (1 + 1)EA の計算時間は $[L^2/6, eL^2]$ の範囲内となる。しかし、Droste らが示した (1 + 1)EA の計算時間の範囲が広く、計算時間の予測範囲としては十分ではない。一方、Bottcher ら [32] は最適解が出現する世代の平均値を最小にする最適な突然変異率 $p_m \approx 1.59/L$ を示している。しかし、計算時間の範囲は最適解が出現する世代の平均値だけではなく、その分散にも関係があり、その導出はまだ行われていない。

1.3 研究の目的

EA は、生物の進化を模擬した問題解決手法であり、探索や最適化などの様々な分野で多くの成果を上げて来た。しかし、応用面での成功と比べ、EA の理論的な解明が大きく遅れていることは、第 1.2 節で述べた通りである。本論文では、マルコフ連鎖理論を用いて、GA と (1 + 1)EA の求解性能へ影響を与える突然変異の仕組みを理論的に分析する。特に、以下の 3 つの課題を解決する事を目的とする。

1)GA では選択、突然変異、交叉などの操作を行い、与えられた問題に対する最適解を確率的に探索していく。GA には個体数 N 、ビット長 L 、突然変異率 p_m など様々なパラメータがあり、問題ごとに適切なパラメータを選択することが効率的に問題を解くために必要である。本研究の 1 つ目の目的は、これらの操作やパラメータが GA の求解性能に与える影響を明らかにする事である。特に、対称突然変異の仕組みを分析し、最適な突然変異率が存在する事を示す。

2) 非対称突然変異を用いる GA の求解過程を解析する。一般に、突然変異は遺伝子座間の連鎖を弱め、集団を連鎖平衡の状態へ導く。本研究の2つ目の目的は、非対称突然変異が集団を連鎖平衡の状態へ導く役割があるかどうかを明らかにする事である。

3) (1+1)EA について、Leading Ones 問題を取り上げ、吸収マルコフ連鎖理論を用いて進化過程の理論的な解析を行う。(1+1)EA が $(\mu + \lambda)$ EA の単純な構造になるため、(1+1)EA による解析結果は一般的な EA の理解に役に立つ。本研究の3つ目の目的は、突然変異率 p_m を用いて、最適解が出現する世代数の平均値と分散を表す式を導く事である。さらに、突然変異率 p_m により記述される最適解の平均出現世代数とその分散の式から、最適な突然変異率や最適解が出現する世代数の範囲などを推定する手法を提案する。

1.4 本論文の構成

本論文の構成は以下の通りである。

第2章では、マルコフ連鎖理論が生まれた背景とその性質を紹介する。エルゴード的なマルコフ連鎖と吸収マルコフ連鎖について、それぞれの条件や性質を説明する。また、GA に関する研究におけるスキーマ定理と連鎖の概念を紹介する。

第3章では、最適解の出現時間を GA の求解性能を評価する指標とし、この指標に影響を与えるものは何か、どのように GA の求解性能を高めるか、という点を問題とする。前半部分では、マルコフ連鎖理論により、まず、1次スキーマの収束時間を解析する。そのため、集団が連鎖平衡 [3, 4] にあることを仮定し、集団の1次スキーマの収束時間を解析する。後半部分では収束後の集団を分析する。集団の最適解の出現時間を調査するために、収束後の最適解の出現時間を解析する。また、収束後の最適解の出現時間に対する理論的な解析が困難なため、シミュレーションにより評価を行う。特に、突然変異率 p_m の収束後の最適解の出現時間への影響を調べる。最後に、計算効率を向上させるために、GA の集団中に最適解が出現する時間の予測方法を提案する。

第4章では、第3章の解析方法を利用し、非対称突然変異を用いる GA の進化過

程を解析する。集団が連鎖平衡 [3, 4] にあることを仮定し、マルコフ連鎖理論を採用して1次スキーマの収束を分析する。一般に、突然変異は遺伝子座間の連鎖を弱め、集団を連鎖平衡の状態へ導く。本研究では、非対称突然変異が集団を連鎖不平衡の状態へ導く場合がある事を証明する。

第5章では、 $(1 + 1)EA$ を対象に、Leading Ones 問題を取り上げ、吸収マルコフ連鎖理論を用いて進化過程の理論的な解析を行う。ここでの目的は、Leading Ones 問題を解く計算時間の平均値と分散を表す式を導く事である。ここでの計算時間は Leading Ones 問題の最適解が出現する世代数の事をいう。また、突然変異率 p_m により記述される、最適解の平均出現世代数とその分散から、効率がよい突然変異率を推定し、理論的な結果とシミュレーションにより得られた結果を比較検討する。

第6章では、研究内容の結果をまとめ、今後の課題について述べる。

各章では独立な記号を使う。記号の意味が共通ではない事に注意されたい。

第2章 進化的アルゴリズムにおける求解性能の解析手段

2.1 マルコフ連鎖

2.1.1 マルコフ連鎖を用いた既存研究

GAの理論的な研究において、有限集団の進化を数学的に解析するためには、確率論的理論が必要であり、その代表的なものにマルコフ連鎖理論がある。集団遺伝学ではWrightやFisherらによって提案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[34, 35, 36]。しかしWright-Fisherモデルでは、最適解が出現する世代数とパラメータとの間の明示的な関係を導くことが困難な場合が多く、具体的な問題に適用するには最適化問題の複雑度による限界がある[37]。そのためKimuraら[38]は、Wright-Fisherモデルの近似として拡散方程式を用いた手法を開発した。

Nixら[12]の研究は、GAに対しマルコフ連鎖理論を適用した例である。しかし、Nixらのマルコフ連鎖モデルでは、ビット長 L や個体数 N の増大とともに遷移行列の次元が指数関数的に増加し、その計算が非常に難しくなる[39]。例えば、 $N = 20$ 、 $L = 10$ の問題でも遷移行列は22億×22億次元になる。したがって、マルコフ連鎖理論をGAの解析に応用する場合、問題を単純化することが必要となる。

Asohら[40]の研究では、集団が連鎖平衡状態にあると仮定した上で、Hollandのスキーマ理論[2]を適用し、GAの進化過程を1次スキーマを用いて確率論的に記述した。連鎖平衡とは遺伝学の概念であり、第2.3節で詳しく説明する。Asohらは、解候補である個体のビット列を1次スキーマの問題に分割し、確率的解析を可能にした。Asohらの方法を、Furutaniら[41, 42]は積型適応度関数の問題に適用し、有限な集団サイズ N における1次スキーマの進化を調べた。Furutaniら[43, 44]は1次

スキーマの分布から突然変異の効果も解析している。Furutani らの研究では、マルコフ連鎖を用い、1次スキーマの分布の収束性も調査している。また、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 S と定義し、1次スキーマを利用して成功確率を計算するアルゴリズムを提案した。Wright-Fisher モデルは近似モデルであるが、比較的簡単で GA の進化過程を数学的に解析することを可能にした。

2.1.2 マルコフ連鎖の性質

本研究で扱うマルコフ連鎖の概念 [45, 46] について簡単に述べる。マルコフ連鎖とは現在の時刻 t の状態 $X(t)$ から時刻 $t+1$ の状態 $X(t+1)$ へと遷移するとき、その遷移が時刻 t より過去の状態によらない進化過程である [47]。

マルコフ連鎖の状態 i から、 t 回の推移で状態 j に移行する確率 P_{ji}^t が 0 でないとき、すなわち $P_{ij}^t > 0$ であるとき、状態 i は j に到達可能であるという。逆に $P_{ji}^t > 0$ も成り立つならば、状態 i と j は互いに到達可能である。すべての状態が互いに到達可能であるとき、そのマルコフ連鎖は既約と呼ばれる [48]。

マルコフ連鎖において、任意の状態 i に対して、

$$k = \gcd \{t | \Pr(X(t) = i | X(0) = i) > 0\},$$

である時、 k を状態 i の周期という。ここで \gcd は最大公約数を表す。特に $k=1$ のときは、マルコフ連鎖が非周期的であるという。このときマルコフ連鎖はエルゴード的となり、状態遷移を繰り返しても分布が変化しない定常分布が存在し、十分時間が経過すると定常分布に収束する。

ある状態に遷移すると決して他の状態に遷移することができなくなり、一度その状態に入ると決してその状態から抜け出せない状況のことを吸収状態という。また、ある状態を離れるとその状態には戻ってこない状況のことを一時状態という。マルコフ連鎖が吸収状態と一時状態で構成される時、このマルコフ連鎖は吸収マルコフ連鎖であるという。第5章では、吸収マルコフ連鎖の性質を利用して求解性能に解析する。

2.2 スキーマ理論

スキーマ理論とは、遺伝子型の部分集合(スキーマ)が適応度に大きな影響を与えることを前提とした解析理論である。ここでの遺伝子型とは、個体を持つ二進ビット列であり、例えば個体の長さ $L = 7$ の場合、遺伝子型の数は 2^7 個となる。適応度とは最適化問題の適応度関数による個体の評価値であり、EA で高い適応度の個体を得ることが、最適化問題の解を得ることにつながる。スキーマは、例えば $H = *10**1*$ のような形で表される。ここで*(アスタリスク)はワイルドカードであり、この部分には0と1のどちらが入っても良い。この時、

0101110

1101011

などのように、スキーマ H の*以外の部分が一致している遺伝子型を持つ個体を「スキーマ H を含む個体」と表現する。

スキーマ理論に特有な用語として、定義長 $\delta(H)$ とオーダ $O(H)$ がある。定義長 $\delta(H)$ は、スキーマのアスタリスク以外が一番左の文字と一番右の文字との距離を表す。オーダ $O(H)$ は、スキーマのアスタリスク以外の文字の数を表す。例えば $H = *10**1*$ の場合は $\delta(H) = 4$, $O(H) = 3$ である。また、 $O(H) = 1$ の場合、スキーマは1次スキーマと呼ばれる。

2.3 連鎖

連鎖とは、生物における遺伝子間の関係を研究する上で必要となる、遺伝学の概念である [49, 50]。連鎖不平衡とは、遺伝子の2箇所の遺伝子座が互いに相関を持つ事を意味する。遺伝子の遺伝子座間に相関がない場合を連鎖平衡という。一般に、交叉と突然変異は遺伝子座間の相関を断ち切る働きがあり、交叉と突然変異を繰り返し適用すると最終的に連鎖平衡状態に収束する。

いま、二進ビット列の個体からなる集団を考え、その中の2つの遺伝子座 k, k' に注目する。集団において、遺伝子座 k のビット値が $i(k)$ とする相対頻度を $h_{i(k)}$ と表す。 $h_{i(k)}$ は1次スキーマの相対頻度に対応する。また、遺伝子座 k, k' においてビット値

が $i(k)$, $i(k')$ をとる相対頻度を $h_{(i(k),i(k'))}$ とする. $h_{(i(k),i(k'))}$ は2次スキーマの相対頻度に対応する. 連鎖不平衡を定量的に表すために連鎖不平衡係数を定義する. 連鎖不平衡係数としてよく使われるのは D 係数で,

$$D(k, k') = h_{(i(k),i(k'))} - h_{i(k)}h_{i(k')},$$

と定義される. また, より高次の連鎖不平衡係数も定義されるが, ここでは省略する [49]. 集団が連鎖平衡にあり, 2つの遺伝子座が独立であれば $h_{(i(k),i(k'))} = h_{i(k)}h_{i(k')}$ となり, $D(k, k') = 0$ が成り立つ.

第3章 対称突然変異を用いた遺伝的アルゴリズムに関する解析

3.1 概要

GA は、自然界における生命の適応過程を説明し、生物の進化を模擬する人工モデルとして提唱された計算手法である [2]. 多くの分野に適用され、その有効性について疑問を差し挟む余地は無い. 一方、理論面ではその有効性についての解明が難しいとされてきた. GA を実用問題に適用する際、最適解の出現時間を予め知ることは切実な問題である. 本章では、OneMax 問題における最適解の出現時間を GA の求解性能評価の指標とし、求解性能に影響を与えるものは何か、いかにして GA の求解性能を高めるか、という点を論じる. 最適解の出現時間に対する理論的な解析手法があれば、GA の現実問題への応用に役に立つ. GA で用いられている主要な遺伝的操作としては、選択、突然変異、交叉の3つが挙げられる. また、GA で用いられている重要なパラメータは個体数 N 、ビット長 L 、突然変異率 p_m 、交叉率 p_c がある. これらの設定の最適解の出現時間への影響についての研究は切実な問題である. しかし、最適解の出現時間に対する理論的な解析を直接的に行うことは容易ではない. GA の理論的な研究では、スキーマ理論が有名であるが、その有用性について疑問を呈する研究者も多い [4, 5, 6]. 一方、最近注目を集めている方法にマルコフ連鎖理論がある. 本論文では、マルコフ連鎖理論を用い、1次スキーマの収束までと、収束後の進化過程を分けて理論的に解析する.

前半部分では、第節で説明したマルコフ連鎖理論を用いて1次スキーマの収束時間を解析する. そのため、1次スキーマの解析では集団が連鎖平衡 [4, 3] にあることを仮定する. 本研究では、GA へのマルコフ連鎖理論の適用について研究し [7]、有限的な N 個の個体における1次スキーマの進化を調べる. 1次スキーマ分布にマ

ルコフ連鎖を適用し，1次スキーマの時間変化がよく再現できることを示す．次に，世代による1次スキーマの変化を調べるために，分布変化量という概念を引用する [8]．特に，一定の世代数における分布変化量を分析し，突然変異率 p_m が収束時間へ及ぼす影響を調べる．

後半部分で収束後の集団を分析する．集団における最適解の出現時間を調査するために，収束後の最適解の出現時間を解析する．収束後の最適解の出現時間に対する理論的な解析が困難なため，シミュレーションによって調査する．特に，突然変異率 p_m による収束後の最適解の出現時間への影響を調べる．さらに，求解効率を向上させるために，GAの集団中に最適解が出現する時間の予測方法を提案する．

3.2 研究の対象

3.2.1 遺伝的アルゴリズム

GAは生物の適応進化過程をコンピュータによって模倣した最適化手法であり，様々な最適化問題の解法として注目されている [2, 51]．GAは4つの主要な進化的アルゴリズムの1つであり，その中でも最も一般的に使用されている．遺伝的アルゴリズムの特徴としては，多量のデータを扱う組み合わせ問題や，非線形問題の最適化などにおいて良い結果を得ている．さらに，基本概念が受け入れやすいため，数学や工学，生物学，医学，遺伝学など様々な分野で応用されている．

GAの流れについて述べる．まず，遺伝子を生成し個体の集団を作成する．この集団を第一世代と言う．次に，自然界の生物の進化を基に選択，交叉，突然変異などの操作を行うことにより，個体の集団を進化させて行く．そして，目的関数による条件を満たすまで同様の処理を繰り返す [2]．目的関数は，主に「適応度が〇〇以上になるまで」や「個体の集団が〇〇世代になるまで」といった，If…Then…ルールで表現する．

本研究は，主要な遺伝的操作として，ルーレット選択，一様交叉，対称突然変異を用いて，OneMax問題を解析して行く．これらの操作は，GAでは一般的な方式である．従って，GAは以下の手順に沿って進められていく．

GA の流れ

1. 初期化: 世代 $t = 0$ に設定する. N 個の個体をランダムに生成し, 初期集団を作る. (個体は 2 進ビット列である)
2. 評価: それぞれの個体について, 評価関数に従って適応度を計算する.
3. 選択: ルーレット選択を用いて N 個の個体を選択し, 新しい集団を構成する. (個体が選ばれない事や複数回選ばれる事も可能である)
4. 交叉: 交叉率 p_c で親個体を選ぶ. 2 つの親個体ずつを一様交叉で交叉させ, 2 つの新しい個体を構成する.
5. 突然変異: 突然変異率 p_m で各個体の遺伝子座の値を反転させる.
6. 終了条件: 世代 $t = t + 1$ に設定する. 終了条件を満たすまで, 2 から 5 まで繰り返す.

このような手順で, 集団が進化していく.

- ルーレット選択

ルーレット選択は個体 i を選ぶ確率を p_i と置いたとき,

$$p_i = \frac{f_i}{\sum_{k=1}^N f_k},$$

とする選択方式である. 上記の式の f_i は個体 i の適応度を表す. この方式はホランドが最初に提案したときに使われた選択方式であり, 最も有名な選択方式であるが適応度が負の値を取らないことが前提になっている. また適応度が高いことが前提になっているため最小値を求める問題で使いづらい. さらに, もし個体間の適応度の格差が激しい場合は適応度の高い個体の選ばれる確率が非常に高くなり, 初期収束の原因にもなる. このため, 実際には適応度をスケールリングした値を使用することが多い.

- 一様交叉

2 つの個体遺伝子に対して, 各遺伝子座ごと独立に $1/2$ の確率で値を入れ換える交叉である.

- 突然変異

突然変異は生物に見られる遺伝子の突然変異をモデル化したもので、個体の遺伝子の一部を変化させる操作である。局所（的）最適解に陥ることを防ぐ効果がある。突然変異の確率は0.1%~1%、高くても数%である。確率が低すぎると局所（的）最適解に陥りやすくなり、高すぎるとランダム探索に近づいてしまう（解が収束しにくくなる）。本章では、対称突然変異を用いて、各遺伝子座ごとに確率 p_m でビット値（ビット値：0, 1）を反転する方法を利用する。

3.2.2 数値モデル

進化のモデル [52] として Goldberg の Simple Genetic Algorithm (SGA) を用い、One-Max 問題について研究する。集団の個体数は世代に依らず一定で N 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 $n = 2^L$ 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

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

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

$$x_i = \frac{N_i(t)}{N} \quad (0 \leq i \leq n-1),$$

と表す。ここで、 N_i は第 i 遺伝子型を持つ個体数を表し、 N は集団の個体数を表す。頻度 $x_i(t)$ は以下の規格化の条件を満たす。

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

集団の平均適応度は次式で表される。

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

OneMax 問題の適応度関数は,

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

として定義される. 適応度は全てのビットが 1 のとき最大となる.

3.3 解析

3.3.1 連鎖平衡

連鎖 [33] 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という. 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適応度を用いた場合, および遺伝的揺らぎの結果として引き起こされる [3]. 交叉と突然変異は遺伝子座間の連鎖を弱め, 集団を連鎖平衡の状態へ導く.

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. もし, 集団が連鎖平衡の状態であれば, 個体の分布は 1 次スキーマの頻度にも依存する. 1 次スキーマの進化方程式は,

$$h_1(t+1) = ah_1(t) + c, \quad (3.1)$$

である [4]. 式 (3.1) の導く過程は第 4 章で詳しく説明する. $h_1(t)$ はビット 1 をもつ 1 次スキーマの相対頻度を表す. 係数 a と c は,

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

$$c = \frac{1}{L}(1 - 2p_m) + p_m,$$

によって与えられ, p_m は突然変異率を表す.

3.3.2 最適解の出現時間の解析

GA において, 集団の最適解の出現時間についての研究は切実な問題である [43]. 本研究では, 最適解の出現時間 T_H を, GA の求解性能を評価する指標とする. また,

パラメータの設定による T_H への影響を調べる。しかし、最適解の出現時間に対する理論的な解析を直接に行うことは容易ではない。

本章では、最適解の出現時間の解析を2つの部分に分ける [53]。前半部分では、集団の1次スキーマの収束時間 T_c を解析する。後半部分では、収束後の最適解の出現時間 T_h を解析する。

T_c と T_h の解析により、式 (3.2) のように T_H の上限値を導くことができる [55]。

$$T_H \leq T_c + T_h. \quad (3.2)$$

本章では、マルコフ連鎖理論を採用し、集団の1次スキーマの収束時間 T_c を解析する。また、シミュレーションにより、収束後の最適解の出現時間 T_h を解析する。

3.3.3 1次スキーマ解析

集団遺伝学におけるマルコフモデルの1つに、Wright-Fisher モデルがある [7]。Wright-Fisher モデルでは、1つの遺伝子座と2つの対立遺伝子を持つ染色体を取り扱う [37, 38]。これは遺伝子型が $i \in \{0, 1\}$ で長さが $L = 1$ の GA 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

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

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

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。

$$\boldsymbol{\mu}^T = (\mu_0, \mu_1, \dots, \mu_N).$$

また、正規化条件は、

$$\sum_{i=0}^N \mu_i(t) = 1, \quad (3.3)$$

となる。このとき、進化の過程は、

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

で表される。進化方程式はベクトル形式、

$$\boldsymbol{\mu}(t+1)^T = \boldsymbol{\mu}(t)^T \mathbf{P}, \quad (3.4)$$

で与えられる。 \mathbf{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 [56, 7]。固有値は、

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

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 \mathbf{P} の左固有ベクトルと右固有ベクトルを、

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

とする。これらの固有ベクトルは式 (3.5) のように直交性の条件を満たす。

$$\mathbf{u}_i^T \cdot \mathbf{v}_j = 0 \quad (i \neq j). \quad (3.5)$$

右固有ベクトル \mathbf{v}_0 は自明であり、

$$\mathbf{v}_0 = (1, 1, \dots, 1)^T, \quad (3.6)$$

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 \mathbf{P} のすべての要素は正となり，スキーマ進化におけるマルコフ連鎖は既約かつ非周期的である．既約かつ非周期的なマルコフ連鎖は定常分布 $\boldsymbol{\pi}$ に収束する [45, 46].

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

また，すべての要素 π_i は正である．ここで， π_i は定常分布において遺伝子型 1 の個体数が i 個となる確率である．

1 次スキーマの初期分布は左固有ベクトルによって，

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

と表される． \mathbf{u}_i は固有ベクトルなので，式 (3.4) より，

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

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，

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

を得，さらに式 (3.3) と式 (3.6) から $C_0 = 1$ を得る． t が十分大きい場合，

$$\boldsymbol{\mu}(t) \approx \mathbf{u}_0 + a^t C_1 \mathbf{u}_1, \quad (3.7)$$

となり， \mathbf{u}_0 は定常分布 $\boldsymbol{\pi}$ を表す．

式 (3.7) から，マルコフ連鎖の収束時間に 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，

$$T_c = \min_t \{a^t < 0.05\},$$

と定義する．分布の確率 a^t が 0.05 より小さい場合，十分収束できたと認められている [7, 55].

3.3.4 分布変化量

1次スキーマの進化状況を詳しく調べるために、分布変化量 [8] という概念を引用する。世代 t での分布変化量 $TV(t)$ は、

$$TV(t) = \frac{1}{2} \sum_{i=0}^N |\mu_i(t) - \pi_i|,$$

と定義され、世代数 t における 1 次スキーマの分布と定常分布の差を表す。

式 (3.7) から、分布変化量が、

$$TV(t) = Ca^t,$$

と求められる。ただし、 a は次式で表される。

$$a = \left(1 - \frac{1}{L}\right)(1 - 2p_m).$$

3.3.5 収束後の最適解の出現分布

本研究では、収束後の最適解の出現時間 T_h を解析するため、収束後の最適解の出現分布 $h(t)$ を解析する。収束後の最適解の出現分布 $h(t)$ は、集団が収束した時点で、世代数 $t = 0$ をリセットした最適解の出現分布である。本研究では、OneMax 問題を利用し、シミュレーションにより $h(t)$ を解析する。

まず、出現分布 $h(t)$ が指数分布だと考え、

$$h(t) \approx b^t, \quad (3.8)$$

と仮定する。

シミュレーションの結果 $h(t)$ は

$$h(t) = B(t)^t, \quad (3.9)$$

を満たす。

そして、指数関数のままでは b の平均値を計算することが困難であるから、式 (3.9) の両辺の対数を取り、線形関数に変換する。

$$\begin{aligned} \log h(t) &= \log B(t)^t, \\ \log h(t) &= t \log B(t). \end{aligned} \quad (3.10)$$

線形関数の傾きを計算し,

$$\begin{aligned}\log B(t) &= \frac{\log h(t)}{t}, \\ \overline{\log B(t)} &= \frac{\sum_t \log B(t)}{t},\end{aligned}\tag{3.11}$$

となる.

式 (3.11) から, b の値を確定できる.

$$b = \exp[\overline{\log B(t)}],\tag{3.12}$$

式 (3.8) の仮定により, 最適解の出現分布がパラメータ b だけに依存する. パラメータ b の変化により, GA のパラメータが収束後の最適解の出現時間 T_h へ与える影響を調べる [55].

$$T_h = \min_t \{b^t < 0.05\}.\tag{3.13}$$

分布の確率 b^t が 0.05 より小さい場合, 十分収束できたと認められている [55].

3.4 実験

3.4.1 実験の設定

本節では, OneMax 問題を用い, 実際の GA 計算を行い, 最適解の出現分布を調べる. 選択はルーレット選択とし, 交叉は一様交叉, 交叉率は $p_c = 1$ と設定する. 初期状態は, $p^{(1)} = 1/2$ として集団の個体をランダムに生成する. 3つのパラメータ, 個体数 $N = 100$, ビット長 $L = 20$, 突然変異率 $p_m = 0.02$ として GA を実行する. 10,000 回の計算を行い, 実際の GA の最適解の出現分布を求める.

本章の目的は, 図 3.1 に示したように最適解の出現時間を解析することである.

3.4.2 収束までの分布に関する評価

第 3.4.1 節の実験と同じ設定で実験を行う. 図 3.2 に, 1 次スキーマが収束した後の定常分布を示す. 個体数, ビット長, 突然変異率が $N = 100, L = 20, p_m = 0.02$

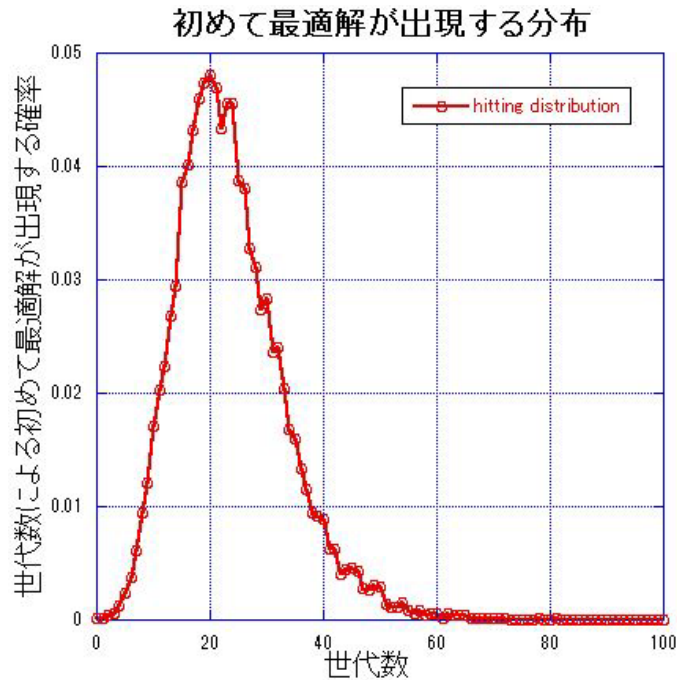


図 3.1: 実際の GA の最適解の出現分布.

の場合，理論結果 (Theory) と実験結果 (OneMax) がほぼ一致する．図 3.3 に， $N = 100, L = 20, p_m = 0.02$ の場合の世代数による分布変化量を表す．世代数 $t = 10$ の時の $C \times a^t$ の値を理論結果と一致するよう， C を設定したところ，図 3.3 に示した通り，予測結果と実験結果がほぼ同じ収束状況を示した．

第 3.4.1 節と同様の条件で個体数 $N = 200$ として実験を行った．図 3.4 に，1 次スキーマの収束後の定常分布を示す．個体数，ビット長，突然変異率が $N = 200, L = 20, p_m = 0.02$ の場合，理論結果 (Theory) と実験結果 (OneMax) がほぼ一致することが分かる．図 3.5 に， $N = 200, L = 20, p_m = 0.02$ の場合の世代数による分布変化量を表す．世代数 $t = 10$ の時の $C \times a^t$ の値を理論結果と一致するよう， C を設定したところ，図 3.5 に示した通り，予測結果と実験結果がほぼ同じ収束状況を示した．図 3.3 と比べると，個体数が変えても，収束時間は変わらないことが分かる．

第 3.4.1 節と同様の条件でビット長 $L = 10$ として実験を行った．図 3.6 に，1 次スキーマの収束後の定常分布を示す．個体数，ビット長，突然変異率が $N = 100, L = 10, p_m = 0.02$ の場合，理論結果 (Theory) と実験結果 (OneMax) がほぼ一致すること

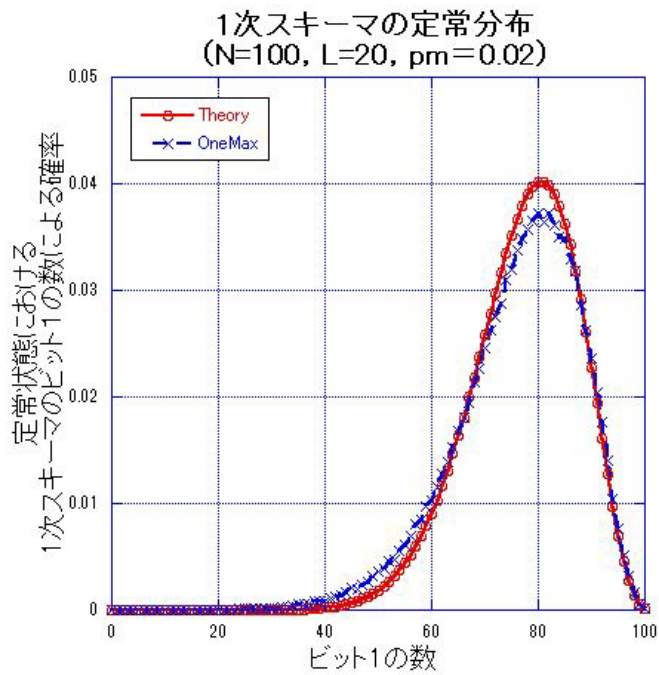


図 3.2: 1 次スキーマの定常分布 ($N = 100, L = 20, p_m = 0.02$).

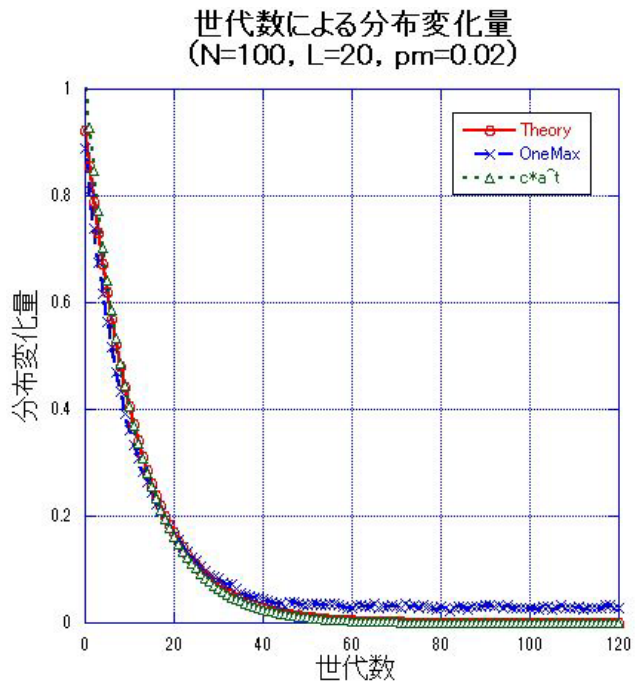


図 3.3: 世代数による 1 次スキーマの収束 ($N = 100, L = 20, p_m = 0.02$).

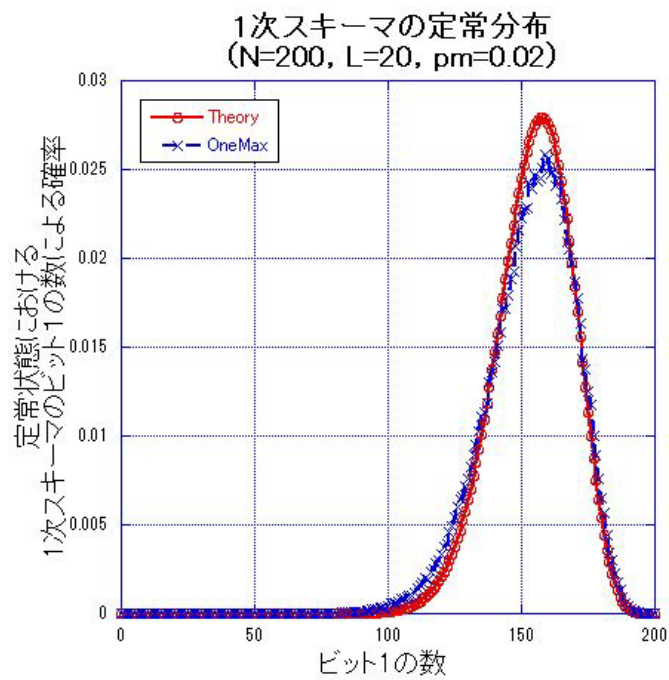


図 3.4: 1次スキーマの定常分布 ($N = 200, L = 20, p_m = 0.02$).

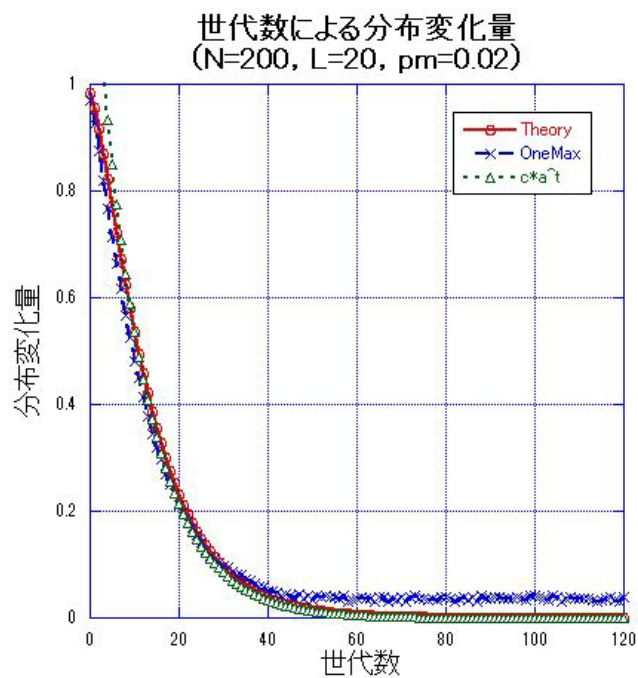


図 3.5: 世代数による 1 次スキーマの収束 ($N = 200, L = 20, p_m = 0.02$).

が分かる。図 3.7 に、 $N = 100, L = 10, p_m = 0.02$ の場合の世代数による分布変化量を表す。世代数 $t = 8$ の時の $C \times a^t$ の値を理論結果と一致一致するよう、 C を設定したところ、予測結果と実験結果はほぼ同じ収束状況を示した。図 3.3 と比べると、ビット長を短くすると、収束までの時間は短くなることが分かる。

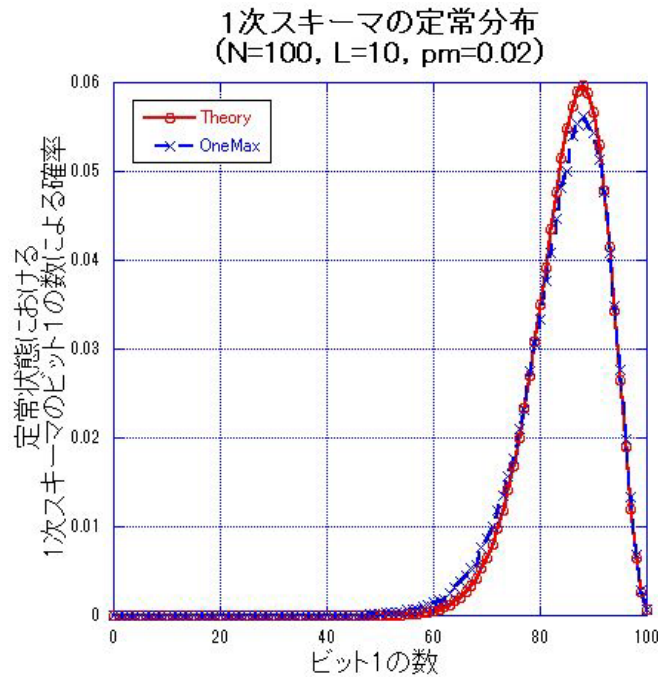


図 3.6: 1次スキーマの定常分布 ($N = 100, L = 10, p_m = 0.02$).

第 3.4.1 節と同様の条件で突然変異率 $p_m = 0.01$ として実験を行った。図 3.8 に、1次スキーマの収束後の定常分布を示す。個体数、ビット長、突然変異率が $N = 100, L = 20, p_m = 0.01$ の場合、理論結果 (Theory) と実験結果 (OneMax) がほぼ一致することが分かる。図 3.9 に、 $N = 100, L = 20, p_m = 0.01$ の場合の世代数による分布変化量を表す。世代数 $t = 15$ の時の $C \times a^t$ の値を理論結果と一致するよう、 C を設定したところ、予測結果と実験結果はほぼ同じ収束状況を示した。図 3.3 と比べると、突然変異率を小さくすると、収束までの時間は遅くなることが分かる。

突然変異率が収束時間への影響を詳しく調べる。突然変異率のみ異なる、同じの世代数 $t = 20$ における分布変化量を図 3.10 に示す。図 3.10 から、実験結果と理論結果がほぼ一致することが分かる。また、突然変異率が大きくなると、収束までの時

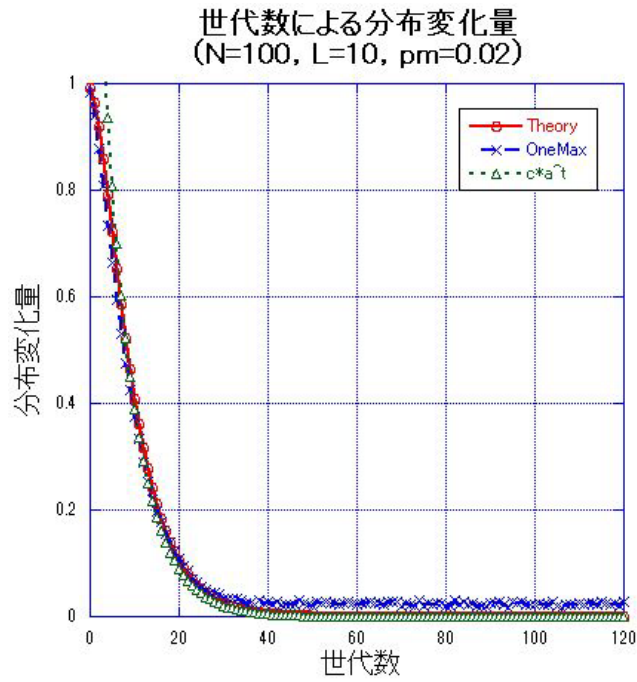


図 3.7: 世代数による 1 次スキーマの収束 ($N = 100, L = 10, p_m = 0.02$).

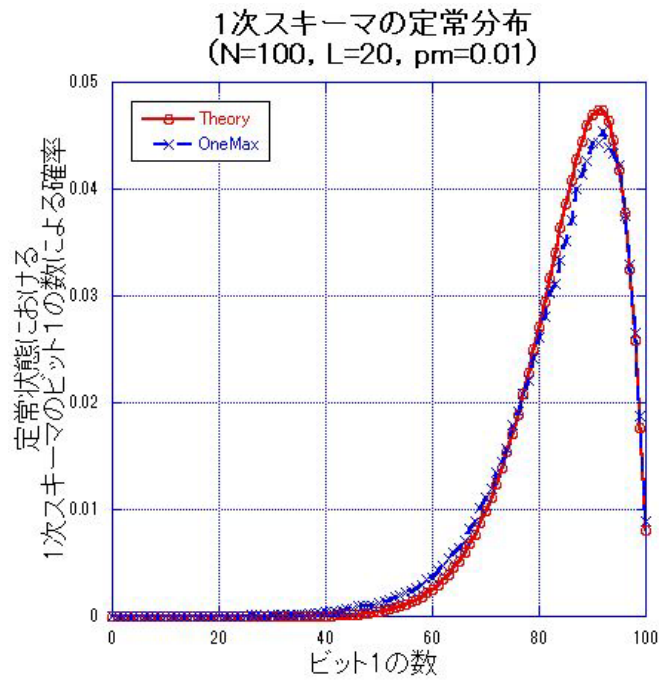


図 3.8: 1 次スキーマの定常分布 ($N = 100, L = 20, p_m = 0.01$).

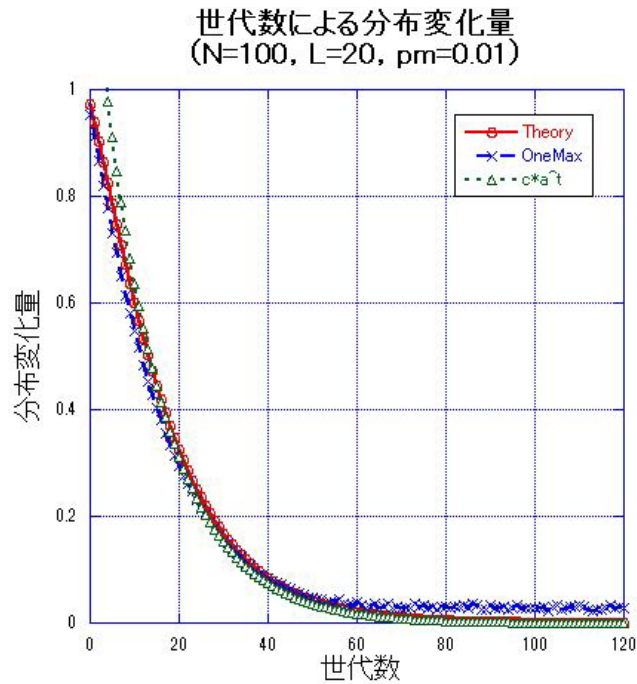


図 3.9: 世代数による 1 次スキーマの収束 ($N = 100, L = 20, p_m = 0.01$).

間は短くなる。

3.4.3 収束後の分布に関する評価

第 3.4.1 節で、最適解の世代ごとの出現分布をシミュレーションにより示した。第 3.4.2 節では、収束時間を調べた。本節では、収束後の最適解の出現分布を表す。実験の条件は第 3.4.1 節と同じである。図 3.11 に、収束時点で世代数 $t = 0$ をリセットした最適解の出現分布を示す。

図 3.11 に示した結果と式 (3.10) から、図 3.12 を得、式 (3.11) から、 $t \times \log(b)$ が得られる。

図 3.12 の結果と式 (3.8), 式 (3.12) から、図 3.13 を得、 b は以下のように近似できる。

$$b \approx 0.78.$$

図 3.13 は図 3.11 の実験結果とほぼ一致していることが分かる。

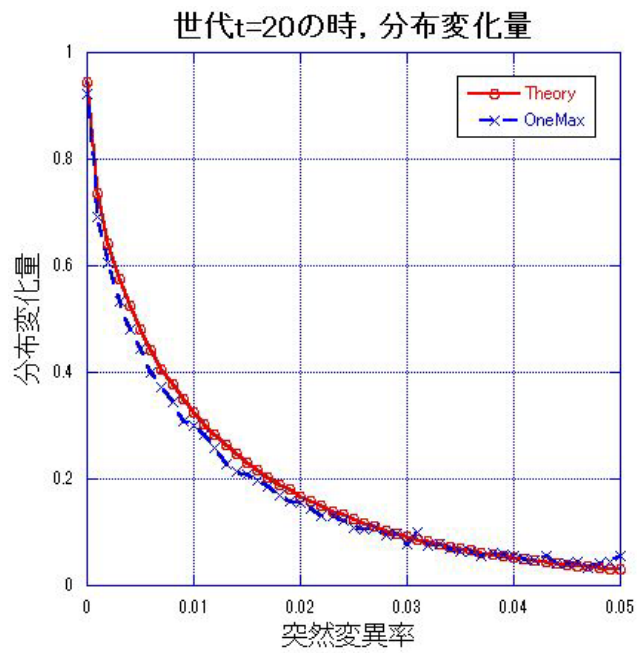


図 3.10: 突然変異率による分布変化量の変化.

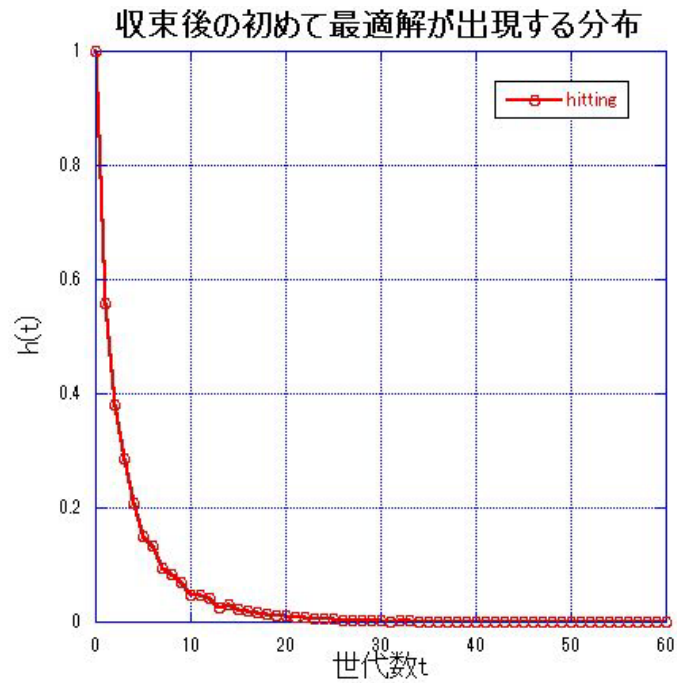


図 3.11: 収束後の最適解の出現分布.

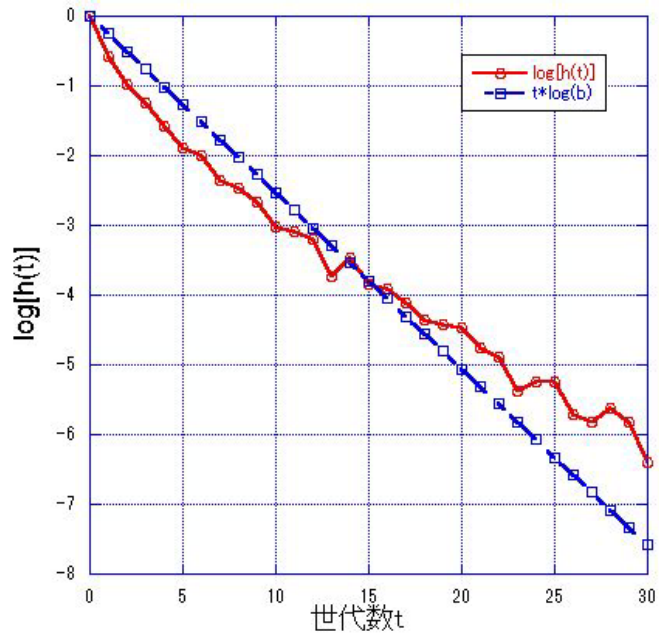


図 3.12: $\log[h(t)]$ の世代による変化.

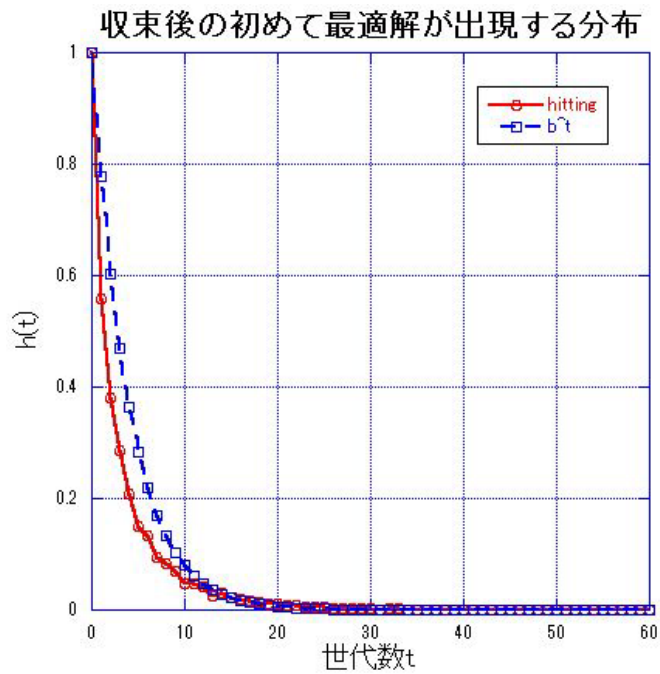


図 3.13: 収束後の最適解の出現分布.

突然変異率の収束後の最適解の出現時間への影響を調べる。突然変異率によるパラメータ b の変化を、図 3.14 に示す。図 3.14 から、突然変異率が大きくなると、パラメータ b が大きくなる。また、式 (3.13) により、パラメータ b が大きくなると、収束後の最適解の出現時間が遅くなる。結果として、突然変異率が大きくなると、収束後の最適解の出現時間は遅くなる。

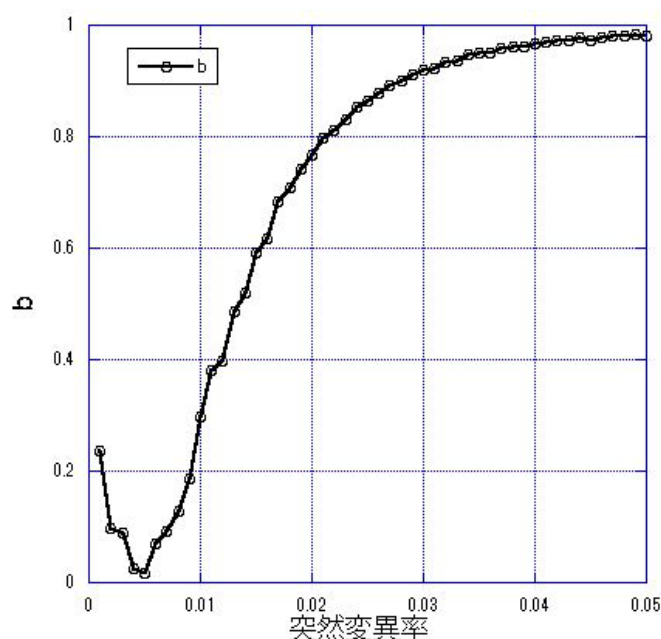


図 3.14: 突然変異率が変化した時、パラメータ b の変化。

3.5 まとめ

GA は生物の進化のメカニズムを工学に応用した計算手法 [54] で、その有効性は広範囲な領域で認められている。GA では選択、突然変異、交叉などの操作を行い、与えられた問題に対する最適解を確率的に探索していく。このとき、個体数 N 、突然変異率 p_m など様々なパラメータがあり、問題ごとに適切なパラメータを選択することが効率的に問題を解くために重要である。残念ながら、パラメータを選択する上で有効な指針は少なく、過去の経験や試行錯誤によって選んでいるのが現状であ

る。本研究では OneMax 問題において、最適解の出現時間を GA の計算性能を評価する指標とし、計算パラメータが最適解の出現時間へ与える影響を解析した。具体的には、最適解の出現時間を 2 つの部分に分けて解析した。1 つはマルコフ連鎖理論を採用し、1 次スキーマの収束時間を解析した。もう 1 つはシミュレーションにより収束後の最適解の出現時間を解析した。

1 次スキーマの収束時間の理論的解析結果は実験結果をよく再現した。また、シミュレーションによる解析も、収束後の最適解の出現時間を推定できることを示した。結論としては、突然変異率が大きくなると収束時間は速くなり、収束後の最適解の出現時間は遅くなる。収束時間と収束後の最適解の出現時間から、GA 全体の最適解の出現時間の最大値を推定できる。以上の結果から、最適解の出現時間を速くする最適な突然変異率が存在することが分かった。

今後の課題としては、今回で得られた結果がより複雑な問題について成り立つかどうかを確認する必要がある。OneMax 問題は研究にふさわしく、今回の解析方法が適用できる。しかし、実用性が高い問題にも今回の解析方法の適用性を調べる必要がある。

第4章 遺伝的アルゴリズムにおける非対称突然変異モデルに関する解析

4.1 概要

本章では、非対称突然変異モデルに着目し、非対称突然変異を用いるGAの求解性能について解析する。多くの研究者は非対称突然変異モデルに着目し、非対称突然変異を用いる進化的アルゴリズムを解析した [20, 21]。Jansen ら [9] と Doerr ら [10] は、非対称突然変異が進化的アルゴリズムの効率を高める効果があるという結果を示している。本章では特に、集団が連鎖平衡 [3, 4] にあることを仮定し、マルコフ連鎖理論を採用して1次スキーマの収束を分析する。

4.2 研究の対象

4.2.1 非対称突然変異モデル

本章では、主要な遺伝的操作として、ルーレット選択、一様交叉、非対称突然変異を用いて、OneMax問題を解決して行く。これらの操作は、GAの分野で一般的な方式である。従って、GAは以下の手順に沿って進められていく。

非対称突然変異モデルの流れ

1. 初期化: 世代 $t = 0$ に設定する. N 個の個体をランダムに生成し, 初期集団を作る. (個体は2進ビット列である)
2. 評価: それぞれの個体について, OneMax 問題の評価関数に従って適応度を計算する.
3. 選択: ルーレット選択を用いて N 個の個体を選択し, 新しい集団を構成する. (個体選ばれない事や複数回選ばれる事も可能である)
4. 交叉: 交叉率 p_c で親個体を選ぶ. 2つの親個体を一様交叉で交叉させ, 2つの新しい個体を構成する.
5. 突然変異: 各個体が非対称突然変異を用いて突然変異を行う.

非対称突然変異

非対称突然変異は, 遺伝子の変異する確率が変化の方向によって変わってくる突然変異の方式である.

ビット0が反転する確率: $p_{\alpha}, 0 \rightarrow 1$

ビット1が反転する確率: $p_{\beta}, 1 \rightarrow 0$

6. 終了条件: 世代 $t = t + 1$ に設定する. 終了条件を満たすまで, 2から5まで繰り返す.

このようなメカニズムで, 集団が進化していく.

4.2.2 数値モデル

進化のモデル [52] として Goldberg の Simple Genetic Algorithm (SGA) を用い, OneMax 問題について解析する. 集団の個体数は世代に依らず一定で N とする. 個体の遺伝子型は固定長 L の2進ビット列で表す. このとき, 遺伝子型の総数は $n = 2^L$ 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,

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

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，

$$x_i = \frac{N_i(t)}{N} \quad (0 \leq i \leq n-1),$$

と表す．ここで， N_i は第 i 遺伝子型を持つ個体数を表し， N は集団の個体数を表す．頻度 $x_i(t)$ は式 (4.1) の規格化の条件を満たす．

$$\sum_{i=0}^{n-1} x_i(t) = 1. \quad (4.1)$$

集団の平均適応度は次式で表される．

$$\bar{f}(t) = \sum_{i=0}^{n-1} f_i x_i(t). \quad (4.2)$$

OneMax 問題の適応度関数は，

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

として定義される．適応度は全てのビットが 1 のとき最大となる．

4.3 解析

4.3.1 Fisher の定理

進化過程を分析するため，Fisher の定理を用いる [34, 35, 57]．本研究はルーレット選択を利用するため，遺伝子型 i の相対頻度の進化式は，

$$x_i(t+1) = \frac{f_i}{\bar{f}(t)} x_i(t), \quad (4.3)$$

と表される．また，式 (4.2) と式 (4.3) により，世代 $(t+1)$ の平均適応度は次式で表される．

$$\bar{f}(t+1) = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{f_i^2}{\bar{f}(t)} x_i(t).$$

平均適応度と適応度の分散の関係は式 (4.4) で表される.

$$\bar{f}(t+1) - \bar{f}(t) = \frac{1}{\bar{f}(t)} \text{VAR}(f). \quad (4.4)$$

もし, 突然変異を行わない, 適応度の分散が大きくなると進化速度は速くなる. この結果は Fisher の定理と呼ばれる.

4.3.2 1次スキーマ

本章では1次スキーマを利用し, 遺伝子の1つの桁だけに注目して分析する. 遺伝子型 i の k 桁目のビット $i(k)$ が1の時, その確率を $h_1^{(k)}$ と表す. 同様に, 遺伝子型 i の k 桁目のビット $i(k)$ が0の時, その確率を $h_0^{(k)}$ と表す. 規格化の条件により,

$$h_1^{(k)} + h_0^{(k)} = 1,$$

が成り立つ. 平均適応度は次式で表される.

$$\bar{f} = \sum_{k=1}^L [h_1^{(k)} \times 1 + h_0^{(k)} \times 0] = \sum_{k=1}^L h_1^{(k)}. \quad (4.5)$$

4.3.3 分散の導出

本節では適応度の分散を式 (4.6) のように2つの部分に分けて分析する [3].

$$\text{VAR}(f) = V_A + V_I. \quad (4.6)$$

V_A は各ビットだけに関連し, 式 (4.7) で定義される.

$$V_A = \sum_{k=1}^L h_1^{(k)}(1 - h_1^{(k)}). \quad (4.7)$$

V_I は2つのビットに関連してビット間の相関を表し, 式 (4.8) で定義される.

$$V_I = 2 \sum_{k < k'} [h_{11}^{(k,k')} - h_1^{(k)} h_1^{(k')}]. \quad (4.8)$$

ただし, $h_{11}^{(k,k')}$ は遺伝子型の k 桁のビットと k' 桁のビットが同時に1となる確率を表す.

4.3.4 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という [33]。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適応度を用いた場合、および遺伝的揺らぎの結果として引き起こされる [3]。交叉と突然変異は遺伝子座間の連鎖を弱め、集団を連鎖平衡の状態へ導く。

本章では交叉率 p_c を 1 に設定するため、集団が連鎖平衡の状態となることを仮定して理論的な分析を行う。集団が連鎖平衡の状態であれば、

$$h_1 = h_1^{(k)}, 1 \leq k \leq L,$$

$$h_{11}^{(k,k')} = h_1^{(k)} h_1^{(k')},$$

が成り立つ。式 (4.7) は、

$$V_A = L \cdot h_1(1 - h_1),$$

となる。式 (4.8) は、

$$V_I = 0,$$

となる。そのため、式 (4.6) は、

$$\text{VAR}(f) = L \cdot h_1(1 - h_1), \quad (4.9)$$

となる。 $h_1 = 0.5$ の時、適応度の分散が最大になることが分かる。また、式 (4.5) により、平均適応度は次式で表される。

$$\bar{f} = L \cdot h_1. \quad (4.10)$$

式 (4.9) と式 (4.10) を式 (4.4) に代入すると、選択による 1 次スキーマの進化過程は次式で表される。

$$\tilde{h}_1(t) = \frac{1}{L} [1 - h_1(t)] + h_1(t). \quad (4.11)$$

また、交叉は同じの桁のビットを交換することとなるため、1 次スキーマの進化に影響を及ぼさない。そのため、式 (4.11) は選択と交叉を行う 1 次スキーマの進化過程を示すことができる。

4.3.5 非対称突然変異

非対称突然変異は，遺伝子の変異する確率が変化の方向によって変わる突然変異の方式であり，その確率 p_α, p_β は式 (4.12) で表される．

$$p_\alpha : 0 \rightarrow 1, p_\beta : 1 \rightarrow 0, \quad (4.12)$$

非対称突然変異による 1 次スキーマの進化式は，

$$h_1(t+1) = (1 - p_\beta)\tilde{h}_1(t) + p_\alpha\tilde{h}_0(t), \quad (4.13)$$

となる．式 (4.13) を式 (4.11) に代入すると，非対称突然変異を用いる GA の 1 次スキーマの進化方程式である式 (4.14) が得られる．

$$h_1(t+1) = ah_1(t) + b, \quad (4.14)$$

$$\begin{cases} a = (1 - \frac{1}{L})(1 - p_\alpha - p_\beta), \\ b = \frac{1}{L}(1 - p_\alpha - p_\beta) + p_\beta. \end{cases}$$

$p_\alpha = p_\beta$ の時は，対称突然変異になり，第 3 章の式 (3.1) が得られる．

4.3.6 マルコフ連鎖解析

集団遺伝学におけるマルコフモデルの 1 つに，Wright-Fisher モデルがある [7]. Wright-Fisher モデルでは，1 つの遺伝子座と 2 つの対立遺伝子を持つ染色体を取り扱う [37, 38]. これは遺伝子型が $i \in \{0, 1\}$ で長さが $L = 1$ の GA に相当する．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

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

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

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．

$$\boldsymbol{\mu}^T = (\mu_0, \mu_1, \dots, \mu_N).$$

このとき、進化の過程は、

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

で表される。進化方程式はベクトル形式

$$\boldsymbol{\mu}(t+1)^T = \boldsymbol{\mu}(t)^T \mathbf{P},$$

で与えられる。 \mathbf{P} は $(N+1) \times (N+1)$ の行列である。遷移行列 \mathbf{P} のすべての要素は正となり、スキーマ進化におけるマルコフ連鎖は既約かつ非周期的である。既約かつ非周期的なマルコフ連鎖は定常分布 $\boldsymbol{\pi}$ に収束する。

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

また、すべての要素 π_i は正である。ここで、 π_i は定常分布において遺伝子型1の個体数が i 個となる確率である。第3章の解析方法を利用し、1次スキーマの進化と定常分布は以上のようなになる。

4.4 実験

本節では、OneMax問題を用い、非対称突然変異を用いるGAの計算を行う。選択はルーレット選択、交叉は一様交叉とし、交叉率は $p_c = 1$ と設定する。初期状態は、 $p^{(1)} = 1/L$ として集団の個体をランダムに生成した。個体数 $N = 200$ 、ビット長 $L = 20$ 、非対称突然変異率 $p_\alpha + p_\beta = 0.1$ としてGAを実行した。実験は3つの場合($p_\alpha : p_\beta = 1 : 9, p_\alpha : p_\beta = 1 : 1, p_\alpha : p_\beta = 9 : 1$)に分けて行い、その結果を比較する。10,000回の計算を行い、1次スキーマの定常分布を求める。

図4.1に、1次スキーマが収束した後の定常分布を示す。 $p_\alpha : p_\beta = 9 : 1$ の場合、理論結果(Theory)と実験結果(OneMax)がほぼ一致することが分かる。しかし、 $p_\alpha : p_\beta = 1 : 9$ の場合、理論値と実験値の間にずれが生じている。その原因を調べるため、 V_I の変化を調べ、集団の連鎖を調査する。

図4.2は世代数による V_I の変化を示す。図4.2から、 $p_\alpha : p_\beta = 9 : 1$ の場合、 V_I は0に収束し、集団が連鎖平衡となる。しかし、 $p_\alpha : p_\beta = 1 : 9$ の場合、集団が連鎖不平衡となることが分かる。本研究での理論的な解析は、連鎖平衡状態を仮定して非

1次スキーマの定常分布

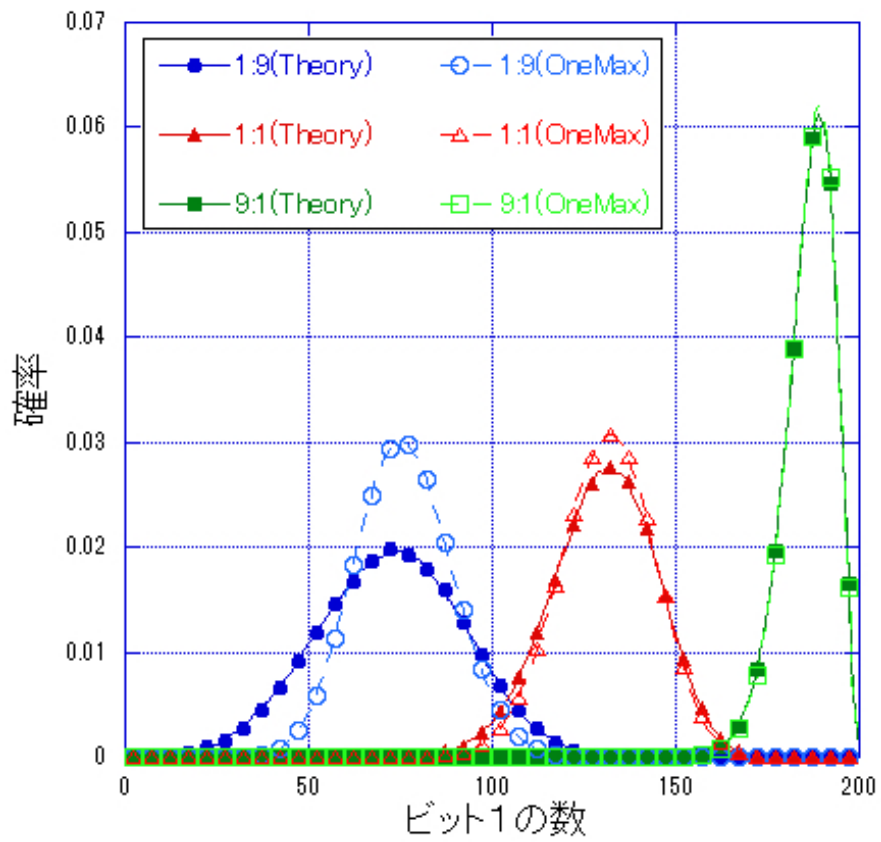


図 4.1: 1次スキーマの定常分布 ($N = 200, L = 20, p_\alpha + p_\beta = 0.1, p_\alpha : p_\beta = 1 : 9, 1 : 1, 9 : 1$).

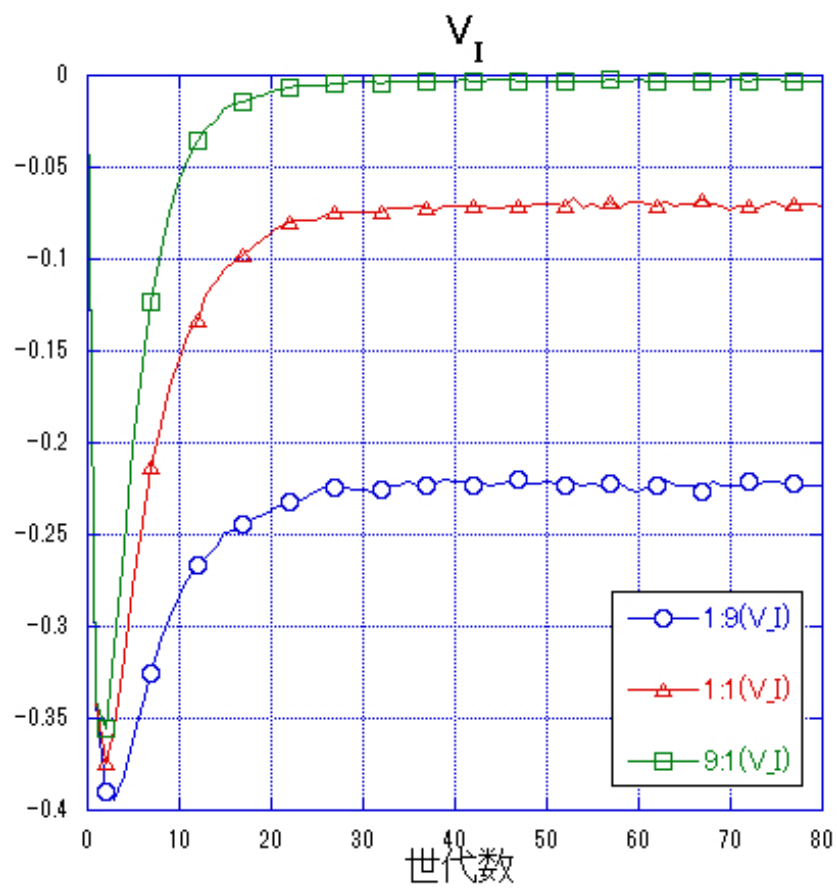


図 4.2: 世代数による V_I の変化 ($N = 200, L = 20, p_\alpha + p_\beta = 0.1, p_\alpha : p_\beta = 1 : 9, 1 : 1, 9 : 1$).

対称突然変異モデルを分析する。そのため、集団が連鎖不平衡となる場合、この解析方法は適用できないことが分かった。

4.5 まとめ

本研究では非対称突然変異を用いる GA の進化過程を解析した。一般に、突然変異は遺伝子座間の連鎖を弱め、集団を連鎖平衡の状態へ導く。しかし、本研究では非対称突然変異が集団を連鎖不平衡の状態へ導く場合があるということを見出した。

今後の課題としては、非対称突然変異が GA の進化の中にどんな仕組みで働くかを調べる事が挙げられる。

第5章 (1 + 1)進化的アルゴリズムに関する解析

5.1 概要

EA は、生物の進化を模擬した問題解決手法である。EA はこれまで、探索や最適化などの様々な分野で多くの成果を上げて来た。しかし、応用面での成功と比べ、EA の理論的な解明は大きく遅れている [1]。EA の理論的な研究の目的は、計算過程を数学的に解析し、効率を向上させる計算パラメータを得るためである [11]。Auger ら [1] による $(\mu + \lambda)$ EA は EA の中で一般的な構造である。 $(1 + 1)$ EA が $(\mu + \lambda)$ EA を単純化した構造になるため、 $(1 + 1)$ EA による解析結果は一般的な EA に適用できる。また、Wegener[22] は、 $(1 + 1)$ EA が局所最適解に収束しにくく、多くの最適化問題の解析に適している事を示した。

近年、EA の理論的な研究において注目されている確率論的な解析手法の 1 つにマルコフ連鎖がある [12, 58]。EA の多くの場合ではマルコフ性が足り立ち、マルコフ連鎖理論が適用可能である。マルコフ連鎖理論は、数学や物理学、工学などの様々な学問に応用されており、その有効性が広く認められている。EA の分野においてもマルコフ連鎖を用いた研究が増加しつつある。しかしながら、マルコフ連鎖モデルは遷移行列の次元が問題のサイズの増加とともに指数関数的に増加する。そのため、ある程度のサイズを持つ現実の問題に適応する事はほぼ不可能である。従って、マルコフ連鎖理論を EA の解析に応用する場合、なんらかの近似が必要となる。

Furutani ら [23, 24] は、マルコフ連鎖を用いて、 $(1 + 1)$ EA と Randomized Local Search(RLS) の OneMax 問題における求解性能を解析し、計算時間と最適な突然変異率を分析した。ここでの計算時間は最適化問題の最適解が出現する世代数を表す。OneMax 問題を計算する $(1 + 1)$ EA において、Droste[25] と Back[26] は最適な突然

変異率が一般的に $p_m = \Theta(1/L)$ である事を示した。一方, Neumann ら [27, 28] は OneMax 問題より複雑な問題を対象に $(1+1)$ EA と RLS を解析している。Sudholt ら [29] と Doerr ら [30] は Leading Ones 問題を解く $(1+1)$ EA の時間複雑度や計算時間の範囲などを示した。Droste ら [31] の研究結果によると, 突然変異率 $p_m = 1/L$ の場合, Leading Ones 問題における $(1+1)$ EA の計算時間は $[L^2/6, eL^2]$ の範囲内となる。しかし, Droste らが示した $(1+1)$ EA の計算時間の範囲は広く, 計算時間の予測範囲としては十分ではない。一方, Bottcher ら [32] は最適解が出現する世代の平均値を最小にする最適な突然変異率 $p_m \approx 1.59/L$ を示している。しかし, 計算時間の範囲は, 最適解が出現する世代の平均値だけではなく, その分散にも関係があり, その導出はまだ行われていない。

本章では $(1+1)$ EA について, Leading Ones 問題を取り上げ, 吸収マルコフ連鎖理論を用いて進化過程の理論的な解析を行う。本章の目的は, 突然変異率 p_m を用いて, 最適解が出現する世代数の平均値と分散を表す式を導く事である。さらに, 突然変異率 p_m により記述される最適解の平均出現世代数とその分散の式から, 最適な突然変異率や最適解が出現する世代数の範囲などを推定する手法を提案する。最後に, シミュレーション実験によりこの理論的な結果を比較検討する。

5.2 研究の対象

5.2.1 $(\mu + \lambda)$ EA

$(\mu + \lambda)$ EA は EA の中で一般的な構造の 1 つである [1]。 $(\mu + \lambda)$ EA は, 集団の個体 (親) が μ 個で, 突然変異により出来た λ 個の個体 (子) と適応度を比較し, 適応度が高い μ 個の個体を選択し次世代の親個体とするアルゴリズムである。 $(\mu + \lambda)$ EA は μ 個の親個体と λ 個の子個体があるため, その動作の分析は非常に複雑になる。

一般的に, $(\mu + \lambda)$ EA は以下の手順に沿って進められていく。最適化問題を解く場合には, 最適化問題を遺伝子の個体で表現し, 終了条件を設定する必要がある。

($\mu + \lambda$)EA の流れ

1. 初期化: 世代 $t = 0$ に設定する. μ 個の親個体をランダムに生成する.
2. 突然変異: 親個体の一部から, λ 個の子個体を生成する.

λ 回の変異
ランダムに μ 個の親個体から 1 つを選び, 突然変異率に従って変化させ, 新しい子個体を作る.
3. 選択: μ 個の親個体と λ 個の子個体から, 適応度が高い順に μ 個の個体を選択し次世代の親個体とする. 世代 $t = t + 1$ に設定する.
4. 終了条件: 終了条件を満たすまで, 2 から 3 まで繰り返す.

このような手順で, 適応度の高い個体を探索する事になる.

5.2.2 (1 + 1)EA

EA を理論的に研究するため, $\mu = \lambda = 1$ に設定する. (1 + 1)EA は, 1 つの親個体と 1 つの子個体を持つ, EA の最も単純な構造である. また, 最適化問題を解く場合には, 最適化問題を二進ビット列 $\mathbf{x} \in \{0, 1\}^L$ の個体で表現する. 最適化問題の適応度関数を $f(\mathbf{x})$ で表し, 最適解の出現を終了条件にする. 従って, (1 + 1)EA は以下の手順に沿って進められていく.

(1 + 1)EA の流れ

1. 初期化: 世代 $t = 0$ に設定する. 二進ビット列 $\mathbf{x} \in \{0, 1\}^L$ をランダムで生成する.
2. 突然変異: \mathbf{x} の各ビットが確率 p_m で反転し, \mathbf{x}' に変異する.
3. 選択: $f(\mathbf{x}) \geq f(\mathbf{x}')$ の場合, $\mathbf{x} := \mathbf{x}'$ で置き換える. 世代 $t = t + 1$ に設定する.
4. 終了条件: \mathbf{x} が最適解になるまで, 2 から 3 まで繰り返す.

ただし, L が二進ビット列の長さで, p_m が突然変異率である.

5.2.3 Leading Ones 問題

Leading Ones 問題とは、適応度が二進ビット列 $\mathbf{x} = \langle x_1, x_2, \dots, x_L \rangle$ の先頭からの連続的なビット 1 の数で表される問題である。Leading Ones 問題の適応度関数は、

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^L \prod_{j=1}^i x_j,$$

となる。すべてのビットが 1 となる時が最適解となる。

5.3 解析

5.3.1 吸収マルコフ連鎖による解析

第 3.1 節では、マルコフ連鎖理論を紹介した。本節では吸収マルコフ連鎖の性質を利用し、第 5.2.2 節の $(1+1)$ EA を解析する [45, 46]。Leading Ones 問題の探索区間は $\Omega = \{0, 1\}^L$ であり、二進ビット列の長さ L が増加すると、 Ω の要素が爆発的に増えていく。そのため、本研究では探索区間 Ω を $(L+1)$ 個の部分集合 $\Omega = S_0 \cup S_1 \cup \dots \cup S_L$ に分ける。ここで、 S_i は、適応度が i になる全ての個体を含む集合である。また、適応度の確率分布を、

$$\mathbf{u}(t) = (u_0(t), u_1(t), \dots, u_L(t)),$$

と定義する。ただし、 $u_i(t)$ は世代 t における個体の適応度が i になる確率を表す。適応度の確率分布は規格化条件から、

$$\sum_{i=0}^L u_i(t) = 1,$$

を満たし、 $\mathbf{u}(0)$ が初期状態を表す。

1 世代で適応度が i から j に遷移する確率を $P_{i,j} = P(j|i)$ で表し、遷移確率と呼ばれる。第 5.2.2 節の $(1+1)$ EA の流れから、

$$P_{i,j} = 0, (i > j),$$

を満たすため、遷移行列 \mathbf{P} は以下の三角行列となる。

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} P_{0,0} & P_{0,1} & \dots & P_{0,L-1} & P_{0,L} \\ 0 & P_{1,1} & \dots & P_{1,L-1} & P_{1,L} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & P_{L-1,L-1} & P_{L-1,L} \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (5.1)$$

ただし、全ての遷移確率 $P_{i,j}$ は非負である。また、規格化条件から、

$$\sum_{j=0}^L P_{i,j} = 1, (0 \leq i \leq L), \quad (5.2)$$

を満たす。進化過程は、

$$\mathbf{u}(t+1) = \mathbf{u}(t)\mathbf{P},$$

と、

$$\mathbf{u}(t) = \mathbf{u}(0)\mathbf{P}^t, \quad (5.3)$$

で表される。遷移行列 \mathbf{P} は吸収マルコフ連鎖の条件を満たし、 L 個の一時状態 $(S_0, S_1, \dots, S_{L-1})$ と1つの吸収状態 S_L を含む。遷移行列 \mathbf{P} の各式を標準化すると、

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} \mathbf{Q} & \mathbf{R} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{pmatrix}, \quad (5.4)$$

となる [59]。ただし、 $L \times L$ の部分行列 \mathbf{Q} は一時状態 $(S_0, S_1, \dots, S_{L-1})$ の間の遷移確率を表す。

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} P_{0,0} & P_{0,1} & \dots & P_{0,L-1} \\ 0 & P_{1,1} & \dots & P_{1,L-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & P_{L-1,L-1} \end{pmatrix}.$$

この時、単位行列 \mathbf{I} は1つの要素1だけを含む。式 (5.4) の各式に合わせるため、適応度の確率分布を以下のように書き換える。

$$\mathbf{u}(t) = (\tilde{\mathbf{u}}(t), u_L(t)). \quad (5.5)$$

式 (5.5) と式 (5.4) を式 (5.3) に代入すると,

$$(\tilde{\mathbf{u}}(t), u_L(t)) = (\tilde{\mathbf{u}}(0), u_L(0)) \begin{pmatrix} \mathbf{Q}^t & (\mathbf{I} + \mathbf{Q} + \mathbf{Q}^2 + \dots + \mathbf{Q}^{t-1})\mathbf{R} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{pmatrix},$$

を得られる。また,

$$u_L(t) = \tilde{\mathbf{u}}(0)(\mathbf{I} + \mathbf{Q} + \mathbf{Q}^2 + \dots + \mathbf{Q}^{t-1})\mathbf{R},$$

とおく。従って, 世代 t における最適解が出現する確率は,

$$T(t) = u_L(t) - u_L(t-1) = \tilde{\mathbf{u}}(0)\mathbf{Q}^{t-1}\mathbf{R},$$

で表される。

世代 t における最適解が出現する確率 $T(t)$ を用いる事で, 最適解が出現する世代数の平均値 \bar{T} を計算することができる。最適解が出現する世代数の平均値 \bar{T} は以下のように定義できる。

$$\begin{aligned} \bar{T} &= \sum_{t=0}^{\infty} T(t)t, \\ &= \tilde{\mathbf{u}}(0)(\mathbf{I} + 2\mathbf{Q} + 3\mathbf{Q}^2 + \dots)\mathbf{R}. \end{aligned} \quad (5.6)$$

部分行列 \mathbf{Q} の任意の要素が非負だという条件と,

$$0 < \sum_{j=0}^{L-1} Q_{i,j} < 1, (0 \leq i \leq L-1),$$

という条件に基づいて,

$$\begin{aligned} (\mathbf{I} + 2\mathbf{Q} + 3\mathbf{Q}^2 + \dots) &= (\mathbf{I} + \mathbf{Q} + \mathbf{Q}^2 + \dots)(\mathbf{I} + \mathbf{Q} + \mathbf{Q}^2 + \dots) \\ &= (\mathbf{I} - \mathbf{Q})^{-2}, \end{aligned} \quad (5.7)$$

が得られる。より計算を簡略化するためにベクトル \mathbf{R} に注目する。規格化条件式 (5.2) と遷移行列の標準化式 (5.4) から,

$$\mathbf{R} = (\mathbf{I} - \mathbf{Q})\boldsymbol{\xi}, \quad (5.8)$$

が得られる． ξ は全ての要素が 1 となる横ベクトルである．これにより，基本行列 M を定義する．

$$M = (I - Q)^{-1}. \quad (5.9)$$

また，ベクトル m を式 (5.10) で定義する．

$$m = M\xi. \quad (5.10)$$

式 (5.7) と式 (5.8) を式 (5.6) に代入すると，最適解が出現する世代数の平均値 \bar{T} は，

$$\bar{T} = \tilde{u}(0)(I - Q)^{-1}\xi, \quad (5.11)$$

となる．また，式 (5.9) と式 (5.10) を式 (5.11) に代入すると，最適解が出現する世代数の平均値 \bar{T} は，

$$\bar{T} = \tilde{u}(0) \cdot m, \quad (5.12)$$

として求めることができる．

世代 t における最適解が出現する確率 $T(t)$ を用いる事で，最適解が出現する世代数の分散 Var を計算することができる．最適解が出現する世代数の分散 Var は以下のように定義できる．

$$\begin{aligned} Var &= \sum_{t=0}^{\infty} T(t)t^2 - \bar{T}^2 \\ &= \tilde{u}(0)(I + 2^2Q + 3^2Q^2 + 4^2Q^3 + \dots)R - \bar{T}^2. \end{aligned} \quad (5.13)$$

ここで，部分行列 Q について式を展開し、以下のように変形する．

$$\begin{aligned} &(I + 2^2Q + 3^2Q^2 + 4^2Q^3 + \dots)(I - Q)^2 \\ &= (I + 2^2Q + 3^2Q^2 + 4^2Q^3 + \dots)(I - 2Q + Q^2) \\ &= (I + 2Q + 2Q^2 + 2Q^3 + \dots) \\ &= 2(I + Q + Q^2 + Q^3 + \dots) - I \\ &= 2(I - Q)^{-1} - I. \end{aligned} \quad (5.14)$$

式 (5.8) と式 (5.14) を式 (5.13) に代入し，式 (5.9) と式 (5.10) を利用して最適解が出現する世代の分散 Var を求める．

$$Var = \tilde{\mathbf{u}}(0)(2\mathbf{M} - \mathbf{I})\mathbf{m} - \bar{T}^2.$$

各一時状態 $(S_0, S_1, \dots, S_{L-1})$ から吸収状態 S_L へ遷移する世代の平均値が式 (5.12) の \mathbf{m} で表されるから，各一時状態から吸収状態へ遷移する世代の分散は以下の縦ベクトル \mathbf{V} で定義できる．

$$\mathbf{V} = (2\mathbf{M} - \mathbf{I})\mathbf{m} - \mathbf{m}_{sq}. \quad (5.15)$$

$$\mathbf{m}_{sq} = (m_0^2, m_1^2, \dots, m_{L-1}^2)^T.$$

初期適応度の確率分布 $\tilde{\mathbf{u}}(0)$ を用いる事で，最適解が出現する世代数の分散 Var は次式で求める事ができる．

$$Var = \tilde{\mathbf{u}}(0) \cdot \mathbf{V}. \quad (5.16)$$

5.3.2 遷移確率

第 5.3.1 節では，Leading Ones 問題の探索区間 Ω を適応度ごとに $(L + 1)$ 個の部分集合 $\Omega = S_0 \cup S_1 \cup \dots \cup S_L$ に分けた．本節では，部分集合の間の遷移確率，いわゆる適応度の遷移確率を求める．世代 t における個体の適応度が i とし，その次の世代 $t + 1$ における個体の適応度が j とし，状態 i から状態 j へ遷移する確率 $P_{i,j}$ を求めていく．

1. $i > j$ の場合

第 5.2.2 節が示す (1+1)EA の選択方式では，世代 $t \rightarrow t + 1$ においてより適応度の高い個体が次世代の親として選択される．このため世代 $t \rightarrow t + 1$ において適応度が悪くなる事はない．そのため，その遷移確率は，

$$P_{i,j} = 0, \quad (5.17)$$

となる．

2. $i < j$ の場合

第 5.2.2 節が示す (1+1)EA により, 世代 $t \rightarrow t+1$ において低い適応度の個体から高い適応度の個体へ遷移するイメージは以下の図で表される.

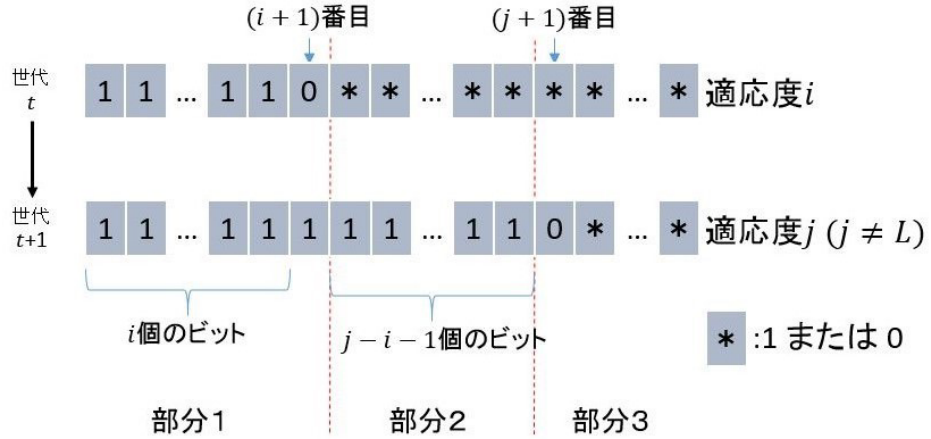


図 5.1: 適応度が i から j へ遷移するイメージ図 ($j \neq L$).

図 5.1 は $j \neq L$ の場合, 適応度が i から j へ遷移するイメージを示す. 遷移確率の計算は, 部分 1 ~ 3 の 3 つの部分に分けられる. ここで, 各ビットが変異する確率は p_m である.

- 部分 1 : i 個のビットは変異せず, $(i + 1)$ 番目のビットが変異する.

$$P_{part1} = (1 - p_m)^i p_m, \quad (5.18)$$

- 部分 2 : $(j - i + 1)$ 個のビットが未知の状態からすべて 1 になる状態へ変異する. * は $\frac{1}{2}$ の確率でビット 1 となり, $\frac{1}{2}$ の確率でビット 0 となる. ビット 1 の場合は変異しない. ビット 0 の場合は変異する.

$$\begin{aligned} P_{part2} &= \sum_{r=0}^{j-i-1} \binom{j-i-1}{r} \frac{1}{2^{j-i-1}} (1 - p_m)^r p_m^{j-i-r-1}, \\ &= \frac{1}{2^{j-i-1}}, \end{aligned} \quad (5.19)$$

ここで, r は $(j - i + 1)$ 個のビットの中にビット 1 の数を表す.

- 部分3: $(j+1)$ 番目のビットが1になる場合は変異しない. $(j+1)$ 番目のビットが0になる場合は変異する.

$$\begin{aligned}
 P_{part3} &= \frac{1}{2}(1 - p_m) + \frac{1}{2}p_m, \\
 &= \frac{1}{2}.
 \end{aligned}$$

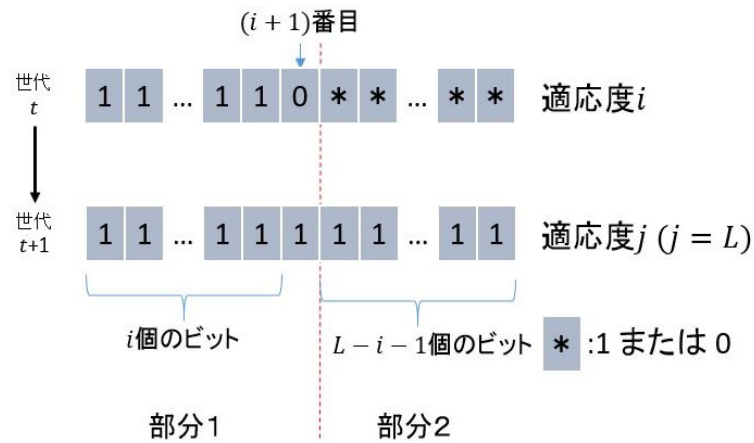


図 5.2: 適応度が i から j へ遷移するイメージ図 ($j=L$).

図 5.2 は $j=L$ の場合, 適応度が i から j へ遷移するイメージを示す. 遷移確率の計算については, 2つの部分に分けられる. 2つの部分の遷移確率はそれぞれ, 式 (5.18) と式 (5.19) で計算される.

従って, $i < j$ の場合の遷移確率は,

$$\begin{aligned}
 P_{i,j} &= \begin{cases} P_{part1}P_{part2}P_{part3} & (j \neq L), \\ P_{part1}P_{part2} & (j = L), \end{cases} \\
 &= \begin{cases} (1 - p_m)^i p_m \cdot \frac{1}{2^{j-i}} & (j \neq L), \\ (1 - p_m)^i p_m \cdot \frac{1}{2^{j-i-1}} & (j = L), \end{cases} \quad (5.20)
 \end{aligned}$$

で計算される.

3. $i=j$ の場合

遷移確率の規格化条件式 (5.2) により, 全体の確率から $i=j$ 以外の確率の和を

引けば求める事ができる。また、 $i > j$ の時 $P_{i,j} = 0$ である。 $i = j$ の場合の遷移確率は、

$$\begin{aligned}
 P_{i,j} &= 1 - \sum_{k=i+1}^L P_{i,k}, \\
 &= \begin{cases} 1 - (1 - p_m)^i p_m & (j \neq L), \\ 1 & (j = L), \end{cases} \quad (5.21)
 \end{aligned}$$

となる。

遷移確率は式 (5.17), 式 (5.20) と式 (5.21) を用いて計算できる。

5.3.3 最適解が出現する世代数の平均値と分散

本章の目的は、最適解が出現する世代数の平均値と分散を求める事である。第 5.3.1 節では、最適解が出現する世代数の平均値と分散の計算式を導いた。第 5.3.2 節では、遷移確率を求めた。本節では遷移確率を、最適解が出現する世代数の平均値と分散に代入し、パラメータでこれらの値を記述する。

まず、表記を簡単にするため、式 (5.22) を定義する。

$$F_i = (1 - p_m)^i p_m. \quad (5.22)$$

遷移行列の各要素は式 (5.17), 式 (5.20) と式 (5.21) を用いて計算できる。式 (5.1) の遷移行列は、

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix}
 1 - F_0 & \frac{1}{2}F_0 & \frac{1}{2^2}F_0 & \dots & \frac{1}{2^{L-2}}F_0 & \frac{1}{2^{L-1}}F_0 & \frac{1}{2^{L-1}}F_0 \\
 0 & 1 - F_1 & \frac{1}{2}F_1 & \dots & \frac{1}{2^{L-3}}F_1 & \frac{1}{2^{L-2}}F_1 & \frac{1}{2^{L-2}}F_1 \\
 0 & 0 & 1 - F_2 & \dots & \frac{1}{2^{L-4}}F_2 & \frac{1}{2^{L-3}}F_2 & \frac{1}{2^{L-3}}F_2 \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\
 0 & 0 & 0 & \dots & 1 - F_{L-2} & \frac{1}{2}F_{L-2} & \frac{1}{2^2}F_{L-2} \\
 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 - F_{L-1} & F_{L-1} \\
 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1
 \end{pmatrix},$$

となる。また、

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} 1 - F_0 & \frac{1}{2}F_0 & \frac{1}{2^2}F_0 & \cdots & \frac{1}{2^{L-2}}F_0 & \frac{1}{2^{L-1}}F_0 \\ 0 & 1 - F_1 & \frac{1}{2}F_1 & \cdots & \frac{1}{2^{L-3}}F_1 & \frac{1}{2^{L-2}}F_1 \\ 0 & 0 & 1 - F_2 & \cdots & \frac{1}{2^{L-4}}F_2 & \frac{1}{2^{L-3}}F_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 - F_{L-2} & \frac{1}{2}F_{L-2} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 - F_{L-1} \end{pmatrix},$$

である。基本行列 \mathbf{M} を求めるため、 $(\mathbf{I} - \mathbf{Q})$ の逆行列を導く。

$$(\mathbf{I} - \mathbf{Q}) = \begin{pmatrix} F_0 & -\frac{1}{2}F_0 & -\frac{1}{2^2}F_0 & \cdots & -\frac{1}{2^{L-3}}F_0 & -\frac{1}{2^{L-2}}F_0 & -\frac{1}{2^{L-1}}F_0 \\ 0 & F_1 & -\frac{1}{2}F_1 & \cdots & -\frac{1}{2^{L-4}}F_1 & -\frac{1}{2^{L-3}}F_1 & -\frac{1}{2^{L-2}}F_1 \\ 0 & 0 & F_2 & \cdots & -\frac{1}{2^{L-5}}F_2 & -\frac{1}{2^{L-4}}F_2 & -\frac{1}{2^{L-3}}F_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & F_{L-3} & -\frac{1}{2}F_{L-3} & -\frac{1}{2^2}F_{L-3} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & F_{L-2} & -\frac{1}{2}F_{L-2} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & F_{L-1} \end{pmatrix}.$$

基本行列 \mathbf{M} の定義式 (5.9) により、

$$\mathbf{M} = (\mathbf{I} - \mathbf{Q})^{-1} = \begin{pmatrix} F_0^{-1} & \frac{1}{2}F_1^{-1} & \frac{1}{2^2}F_2^{-1} & \cdots & \frac{1}{2}F_{L-3}^{-1} & \frac{1}{2}F_{L-2}^{-1} & \frac{1}{2}F_{L-1}^{-1} \\ 0 & F_1^{-1} & \frac{1}{2}F_2^{-1} & \cdots & \frac{1}{2}F_{L-3}^{-1} & \frac{1}{2}F_{L-2}^{-1} & \frac{1}{2}F_{L-1}^{-1} \\ 0 & 0 & F_2^{-1} & \cdots & \frac{1}{2}F_{L-3}^{-1} & \frac{1}{2}F_{L-2}^{-1} & \frac{1}{2}F_{L-1}^{-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & F_{L-3}^{-1} & \frac{1}{2}F_{L-2}^{-1} & \frac{1}{2}F_{L-1}^{-1} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & F_{L-2}^{-1} & \frac{1}{2}F_{L-1}^{-1} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & F_{L-1}^{-1} \end{pmatrix}, \quad (5.23)$$

が得られる。式 (5.23) を式 (5.10) に代入し、ベクトル \mathbf{m} の各要素を導く。

$$m_i = F_i^{-1} + \frac{1}{2} \sum_{k=i+1}^{L-1} F_k^{-1}. \quad (5.24)$$

式 (5.22) を使い、式 (5.24) を展開して計算すると、

$$m_i = \frac{1}{(1 - p_m)^i p_m} \left[\frac{1}{2p_m(1 - p_m)^{L-i-1}} - \frac{1}{2p_m} + 1 \right], \quad (5.25)$$

が得られる。次に、ベクトル \mathbf{V} の各要素を導く。ベクトル \mathbf{V} の式 (5.15) を適用するため、 $(2\mathbf{M} - \mathbf{I})$ と \mathbf{m}_{sq} を計算する。

$$2\mathbf{M} - \mathbf{I} = \begin{pmatrix} 2F_0^{-1} - 1 & F_1^{-1} & F_2^{-1} & \dots & F_{L-2}^{-1} & F_{L-1}^{-1} \\ 0 & 2F_1^{-1} - 1 & F_2^{-1} & \dots & F_{L-2}^{-1} & F_{L-1}^{-1} \\ 0 & 0 & 2F_2^{-1} - 1 & \dots & F_{L-2}^{-1} & F_{L-1}^{-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & F_{L-2}^{-1} & F_{L-1}^{-1} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 2F_{L-2}^{-1} - 1 & F_{L-1}^{-1} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 2F_{L-1}^{-1} - 1 \end{pmatrix}. \quad (5.26)$$

$$\mathbf{m} = \begin{pmatrix} F_0^{-1} + \frac{1}{2}(F_1^{-1} + F_2^{-1} + \dots + F_{L-2}^{-1} + F_{L-1}^{-1}) \\ F_1^{-1} + \frac{1}{2}(F_2^{-1} + \dots + F_{L-2}^{-1} + F_{L-1}^{-1}) \\ \vdots \\ F_{L-2}^{-1} + \frac{1}{2}F_{L-1}^{-1} \\ F_{L-1}^{-1} \end{pmatrix}. \quad (5.27)$$

$$\mathbf{m}_{sq} = \begin{pmatrix} \left(F_0^{-1} + \frac{1}{2}(F_1^{-1} + F_2^{-1} + \dots + F_{L-2}^{-1} + F_{L-1}^{-1}) \right)^2 \\ \left(F_1^{-1} + \frac{1}{2}(F_2^{-1} + \dots + F_{L-2}^{-1} + F_{L-1}^{-1}) \right)^2 \\ \vdots \\ \left(F_{L-2}^{-1} + \frac{1}{2}F_{L-1}^{-1} \right)^2 \\ \left(F_{L-1}^{-1} \right)^2 \end{pmatrix}. \quad (5.28)$$

式 (5.26)~ 式 (5.28) を式 (5.15) に代入し、ベクトル \mathbf{V} の各要素を導く。

$$\begin{aligned}
V_i &= (2F_i^{-1} - 1) \left(F_i^{-1} + \frac{1}{2}(F_{i+1}^{-1} + F_{i+2}^{-1} + \cdots + F_{L-1}^{-1}) \right) \\
&\quad + F_{i+1}^{-1} \cdot \left(F_{i+1}^{-1} + \frac{1}{2}(F_{i+2}^{-1} + F_{i+3}^{-1} + \cdots + F_{L-1}^{-1}) \right) \\
&\quad + F_{i+2}^{-1} \cdot \left(F_{i+2}^{-1} + \frac{1}{2}(F_{i+3}^{-1} + \cdots + F_{L-1}^{-1}) \right) \\
&\quad \vdots \\
&\quad + F_{L-2}^{-1} \cdot \left(F_{L-2}^{-1} + \frac{1}{2}F_{L-1}^{-1} \right) \\
&\quad + F_{L-1}^{-1} \\
&\quad - \left(F_i^{-1} + \frac{1}{2}(F_{i+1}^{-1} + F_{i+2}^{-1} + \cdots + F_{L-1}^{-1}) \right)^2 \\
&= F_i^{-2} + \frac{3}{4}(F_{i+1}^{-2} + F_{i+2}^{-2} + \cdots + F_{L-1}^{-2}) - \left\{ F_i^{-1} + \frac{1}{2}(F_{i+1}^{-1} + F_{i+2}^{-1} + \cdots + F_{L-1}^{-1}) \right\} \\
&= F_i^{-2} + \frac{3}{4} \sum_{k=i+1}^{L-1} F_k^{-2} - m_i. \tag{5.29}
\end{aligned}$$

式 (5.22) を使い、式 (5.29) を展開して計算すると、

$$V_i = \frac{1}{(1-p_m)^{2i} p_m^2} \left[\frac{3}{4(2p_m - p_m^2)(1-p_m)^{2(L-i-1)}} - \frac{3}{4(2p_m - p_m^2)} + 1 \right] - m_i, \tag{5.30}$$

が得られる。

ここで、ベクトル \mathbf{V} とベクトル \mathbf{m} が得られ、初期状態における適応度の確率分布を利用し、最適解が出現する世代数の平均値と分散が計算できるようになった。元々の (1+1)EA は、ランダムに初期状態を生成するが、状態が多いため、分析が複雑になる。そのため、本研究は適応度 0 に初期状態を設定した上で、解析を続ける。また、最適解の適応度が L であるため、適応度 0 の初期状態は進化時間が一番長いという理由もある。初期状態の適応度が 0 であれば、個体がすべて一時状態 S_0 に含まれる。この場合、初期状態における適応度の確率分布は

$$\begin{aligned}
\mathbf{u}(0) &= (u_0(0), u_1(0), \dots, u_L(0)), \\
u_k(0) &= \begin{cases} 1 & (k = 0) \\ 0 & (1 \leq k \leq L) \end{cases},
\end{aligned}$$

なる。式 (5.5) を利用し、長さ L の部分ベクトル $\tilde{\mathbf{u}}(0)$ を表す。

$$\tilde{\mathbf{u}}(0) = (1, 0, 0, \dots, 0, 0). \quad (5.31)$$

式 (5.31) を式 (5.12) に代入し、最適解が出現する世代数の平均値 \bar{T} は、

$$\bar{T} = m_0,$$

となる。また、式 (5.25) により、最適解が出現する世代数の平均値 \bar{T} は、

$$\bar{T} = \frac{1}{p_m} \left[\frac{1}{2p_m(1-p_m)^{L-1}} - \frac{1}{2p_m} + 1 \right], \quad (5.32)$$

で得られる。同じく、式 (5.31) を式 (5.16) に代入し、最適解が出現する世代数の分散 Var は、

$$Var = V_0,$$

となる。また、式 (5.30) により、最適解が出現する世代数の分散 Var は、

$$Var = \frac{1}{p_m^2} \left[\frac{3}{4(2p_m - p_m^2)(1-p_m)^{2(L-1)}} - \frac{3}{4(2p_m - p_m^2)} + 1 \right] - \bar{T}, \quad (5.33)$$

で得られる。

5.3.4 最適な突然変異率

(1+1)EA では、突然変異率 p_m の設定が進化速度に大きな影響を与える。ここでは、計算時間がより速くなる突然変異率 p_m について、最適解が出現する世代数の平均値 \bar{T} と分散 Var 、2つの観点から考える。式 (5.32) と式 (5.33) は突然変異率 p_m で記述されているため、突然変異率により \bar{T} と Var の変化を理論的に表せる。後に検討する通り、最適解が出現する世代数の平均値を最小にする突然変異率は $\frac{1}{L} \leq p_m \leq \frac{2}{L}$ の範囲内である。同じく、最適解が出現する世代数の分散を最小にする突然変異率は $\frac{1}{L} \leq p_m \leq \frac{2}{L}$ の範囲内である。そのため、次の式を定義する。

$$p_m = \frac{c}{L}, (1 \leq c \leq 2). \quad (5.34)$$

式 (5.34) を式 (5.32) に代入し、最適解が出現する世代数の平均値 \bar{T} を次式のように書き換える。

$$\bar{T} = \frac{L^2}{2c^2} \left[\left(\frac{L}{L-c} \right)^{L-1} - 1 \right] + \frac{L}{c}. \quad (5.35)$$

ビット長 L が長い場合、 \bar{T} は式 (5.36) のように近似できる。

$$\begin{aligned} \bar{T} &= \frac{L^2}{2c^2} \left[\left(1 + \frac{c}{L-c} \right)^{L-c} \left(\frac{L}{L-c} \right)^{c-1} - 1 \right] + \frac{L}{c}, \\ &\approx \frac{L^2}{2c^2} (e^c - 1), \\ &\approx \frac{e^c - 1}{c^2} \cdot \frac{L^2}{2}. \end{aligned} \quad (5.36)$$

\bar{T} を最小にするパラメータ c を計算するため、式 (5.35) を c で微分して極値を求める。

$$\begin{aligned} \left(\frac{e^c - 1}{c^2} \cdot \frac{L^2}{2} \right)' &= 0, \\ e^c c^{-2} - 2e^c c^{-3} + 2c^{-3} &= 0. \end{aligned}$$

\bar{T} を最小にするパラメータ c を $c_{\bar{T}}$ で表す。

$$c_{\bar{T}} = 2 \left(1 - \frac{1}{e^{c_{\bar{T}}}} \right) \approx 1.59. \quad (5.37)$$

同様に、式 (5.34) を式 (5.33) に代入し、最適解が出現する世代数の分散 Var を次式のように書き換える。

$$Var = \frac{3L^4}{4c^3(2L-c)} \left[\left(\frac{L}{L-c} \right)^{2(L-1)} - 1 \right] + \frac{L^2}{c^2} - \bar{T}.$$

ビット長 L が長い場合、 Var は式 (5.38) のように近似できる。

$$\begin{aligned} Var &= \frac{3L^4}{4c^3(2L-c)} \left[\left(1 + \frac{c}{L-c} \right)^{2(L-c)} \left(\frac{L}{L-c} \right)^{2(c-1)} - 1 \right] + \frac{L^2}{c^2} - \frac{e^c - 1}{c^2} \cdot \frac{L^2}{2}, \\ &\approx \frac{3L^3}{8c^3} (e^{2c} - 1), \\ &\approx \frac{e^{2c} - 1}{c^3} \cdot \frac{3L^3}{8}. \end{aligned} \quad (5.38)$$

Var を最小にするパラメータ c を計算するため、式 (5.35) を c で微分して極値を求める。

$$\begin{aligned} \left(\frac{e^{2c} - 1}{c^3} \cdot \frac{3L^3}{8} \right)' &= 0, \\ 2e^{2c} c^{-3} - 3e^{2c} c^{-4} + 3c^{-4} &= 0. \end{aligned}$$

Var を最小にするパラメータ c を c_{Var} で表すと式 (5.39) を得る.

$$c_{Var} = \frac{3}{2} \left(1 - \frac{1}{e^{2c_{Var}}}\right) \approx 1.41. \quad (5.39)$$

式 (5.37) と式 (5.39) を見ると, \bar{T} を最小にする突然変異率と Var を最小にする突然変異率は異なる. 本研究ではこの2つの観点を考慮し, $c_{\bar{T}}$ と c_{Var} の中間値を最適な突然変異率とする事を提案する.

$$c = \frac{c_{\bar{T}} + c_{Var}}{2} = 1.5.$$

表 5.1 は式 (5.36) と式 (5.38) を用い, 4つの設定について, \bar{T} と Var を求めた結果を示す.

表 5.1: 4つの突然変異率の場合, \bar{T} と Var を求めた結果

| c | 1 | 1.41 | 1.5 | 1.59 |
|-----------|-------------------|---------------------------|--------------------------|---------------------------|
| p_m | $\frac{1}{L}$ | $1.41 \times \frac{1}{L}$ | $1.5 \times \frac{1}{L}$ | $1.59 \times \frac{1}{L}$ |
| \bar{T} | $0.86 \times L^2$ | $0.78 \times L^2$ | $0.77 \times L^2$ | $0.77 \times L^2$ |
| Var | $2.40 \times L^3$ | $2.11 \times L^3$ | $2.12 \times L^3$ | $2.15 \times L^3$ |

表 5.1 から, $p_m = 1.5 \times \frac{1}{L}$ が総合的に良いと判断できる.

5.3.5 成功確率

本研究では, 成功確率 S を一定の世代範囲内で最適解が出現する確率と定義する. (1+1)EA の世代による最適解が出現する分布は正規分布に類似しているため, 正規分布を利用して成功確率を求める. まず, 式 (5.36) と式 (5.38) を用い, 正規分布の平均値と分散を表す.

$$\mu_{\bar{T}} = \bar{T} = \frac{e^c - 1}{c^2} \cdot \frac{L^2}{2}, \sigma_{Var}^2 = Var = \frac{e^{2c} - 1}{c^3} \cdot \frac{3L^3}{8}.$$

(1+1)EA の成功確率に関する正規分布関数は,

$$f_S(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{Var}^2}} \exp\left(-\frac{(t - \mu_{\bar{T}})^2}{2\sigma_{Var}^2}\right),$$

で表される。また、標準正規分布表により、

$$f(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{z^2}{2}\right), (\mu = 0, \sigma^2 = 1),$$
$$\int_{-2.58}^{2.58} f(z) > 99\%,$$

がある。 $f_S(t)$ を標準正規分布に変換する式は、

$$z = \frac{t - \mu_{\bar{T}}}{\sigma_{Var}},$$

となる。従って、成功確率が $S > 99\%$ となる世代範囲、

$$\left[\bar{T} - 2.58 \sqrt{Var}, \bar{T} + 2.58 \sqrt{Var}\right],$$

を得られる。

5.4 実験

本節では、Leading Ones 問題を用い、(1+1)EA の計算を行い、マルコフ連鎖を用いた理論的な予測と(1+1)EA の実験の結果との比較を行う。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。初期状態は、1 番目のビットを 0 に設定し、それ以外のビットではランダムに {1,0} を生成する。Leading Ones 問題の適応度関数により、初期状態の適応度は 0 となる。乱数列を変えながら同じ実験を 10,000 回繰り返し、それらを集計した結果と理論的な結果とを比較する。

まず、最適な突然変異率が存在する範囲を調べるために、突然変異率を変化させた時の、最適解が出現する世代数の平均値と分散を示す。図 5.3 はビット長 $L = 10$ の時の、最適解が出現する世代数の平均値を示す。図 5.4 はビット長 $L = 10$ の時の、最適解が出現する世代数の分散を示す。式 (5.32) と式 (5.33) が厳密な計算式となるため、ビット長が短い場合でも、理論的な結果と実験の結果はよく一致する。図 5.3 では、最適解が出現する世代数の平均値を最小にする突然変異率を判別しにくい。しかし、その範囲が [0.1, 0.2] となる事は分かる。同様に、図 5.4 から、最適解が出現する世代数の分散を最小にする突然変異率は [0.1, 0.2] の範囲内となる事が分かる。

図 5.5 はビット長 $L = 50$ の時の、最適解が出現する世代数の平均値を示す。図 5.5 から、最適解が出現する世代数の平均値を最小にする突然変異率が [0.02, 0.04] の範

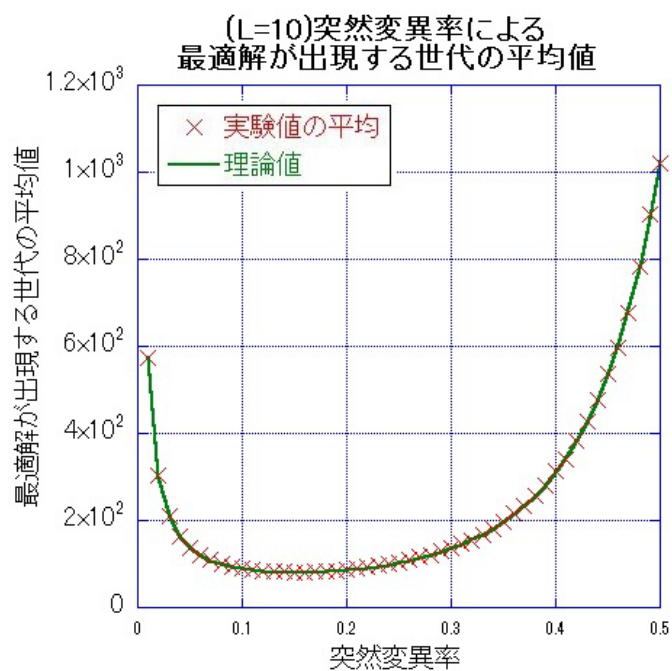


図 5.3: ($L = 10$) 突然変異率による最適解が出現する世代数の平均値.

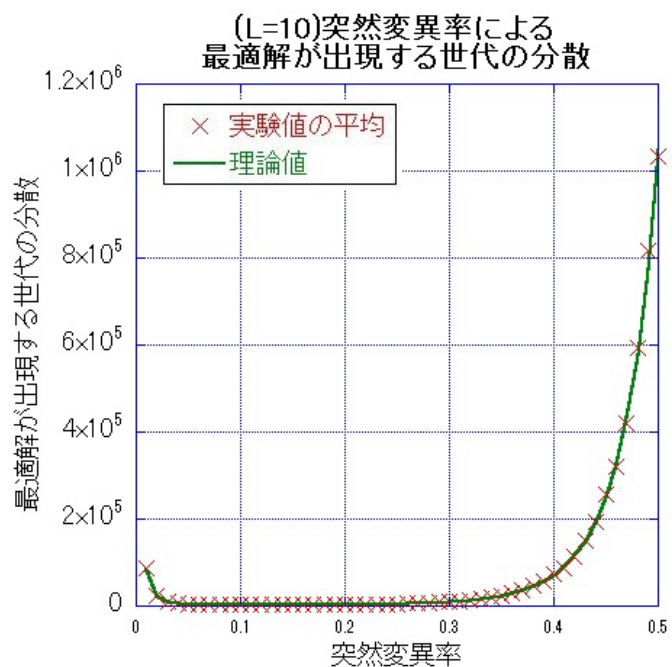


図 5.4: ($L = 10$) 突然変異率による最適解が出現する世代数の分散.

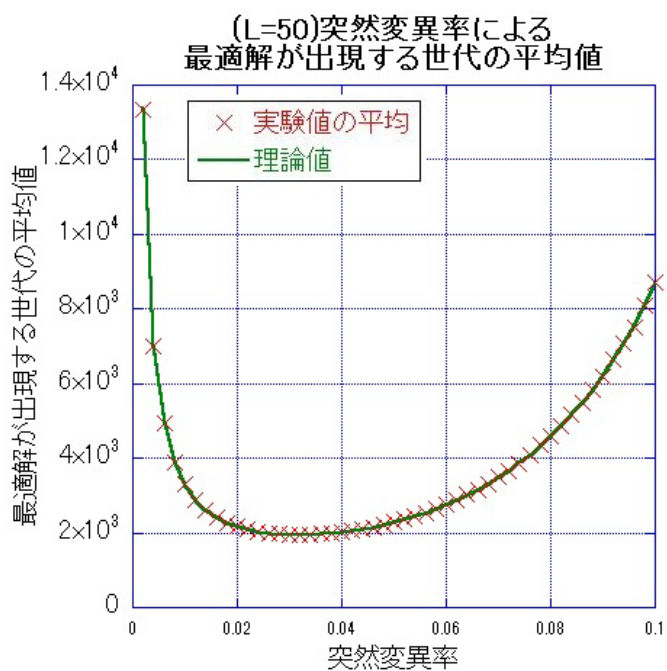


図 5.5: ($L = 50$) 突然変異率による最適解が出現する世代数の平均値.

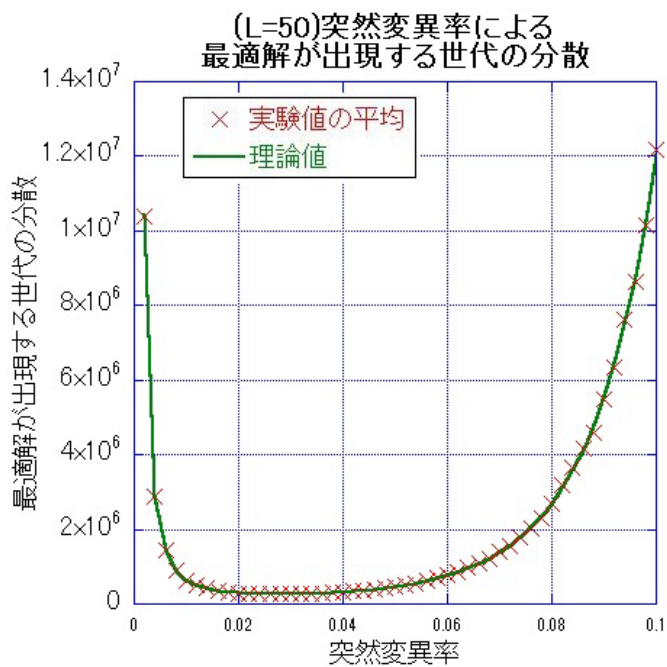


図 5.6: ($L = 50$) 突然変異率による最適解が出現する世代数の分散.

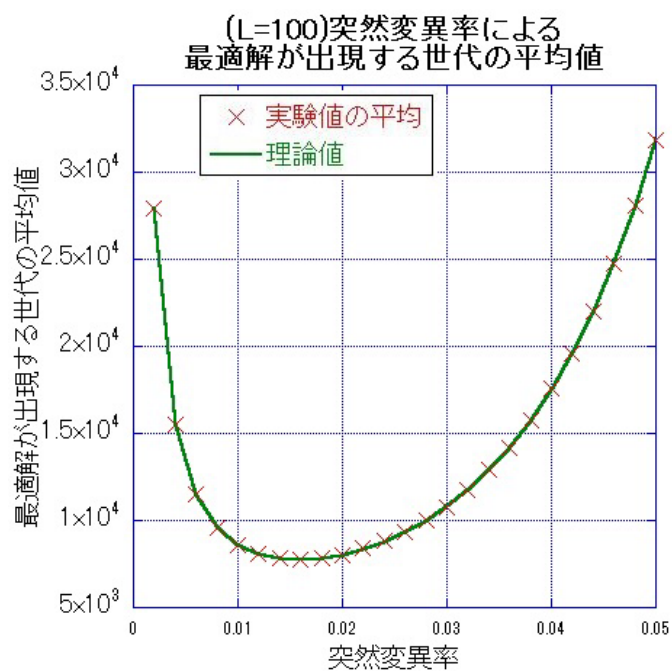


図 5.7: ($L = 100$) 突然変異率による最適解が出現する世代数の平均値.

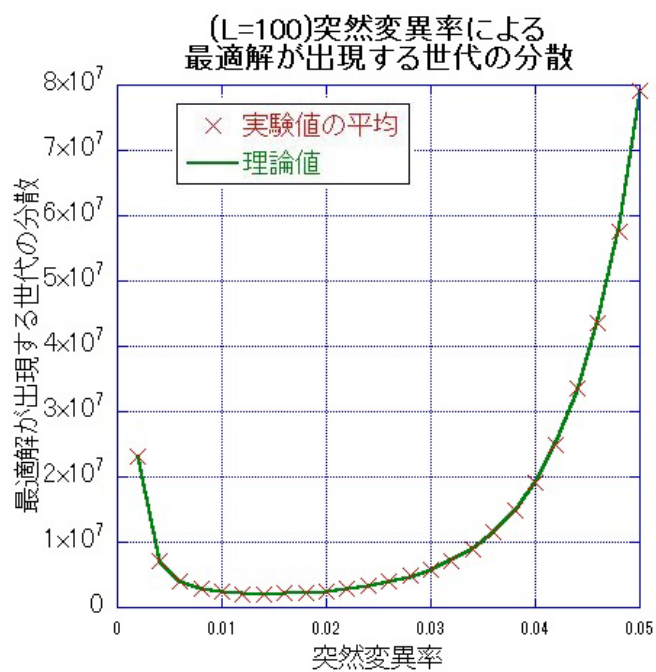


図 5.8: ($L = 100$) 突然変異率による最適解が出現する世代数の分散.

圈内となる事が分かる。図 5.6 はビット長 $L = 50$ の時の、最適解が出現する世代数の分散を示す。図 5.6 から、最適解が出現する世代数の分散を最小にする突然変異率が $[0.02, 0.04]$ の範囲内となる事が分かる。図 5.7 はビット長 $L = 100$ の時の、最適解が出現する世代数の平均値を示す。図 5.7 から、最適解が出現する世代数の平均値を最小にする突然変異率が $[0.01, 0.02]$ の範囲内となる事が分かる。図 5.8 はビット長 $L = 100$ の時の、最適解が出現する世代数の分散を示す。図 5.8 から、最適解が出現する世代数の分散を最小にする突然変異率が $[0.01, 0.02]$ の範囲内となる事が分かる。以上から、最適な突然変異率は $[\frac{1}{L}, \frac{2}{L}]$ の範囲内に存在すると考えられる。以上の結果は、理論的な結果と実験の結果がよく一致する。

最適な突然変異率の範囲 $[\frac{1}{L}, \frac{2}{L}]$ が分かったため、次の実験はこの範囲内の突然変異率を設定して行う。式 (5.34) のパラメータ c を用いて、突然変異率 $p_m = c/L$ を表す。最適な突然変異率を調べるために、パラメータ c による最適解が出現する世代数の平均値と分散を示す。図 5.9 はビット長 $L = 10$ の時の、パラメータ c による最適解が出現する世代数の平均値を示す。図 5.10 はビット長 $L = 10$ の時の、パラメータ c による最適解が出現する世代数の分散を示す。図 5.9 と図 5.10 から、理論的な結果と実験の結果が一致していない事が分かる。これは、式 (5.36) と式 (5.38) が近似式で、ビット長が長いことを前提としており、ビット長 $L = 10$ の場合はこの前提が成り立たず、理論的な結果と実験の差が生じるものと考えられる。

図 5.11 はビット長 $L = 50$ の時の、パラメータ c による最適解が出現する世代数の平均値を示す。図 5.12 はビット長 $L = 50$ の時の、パラメータ c による最適解が出現する世代数の分散を示す。図 5.13 はビット長 $L = 100$ の時の、パラメータ c による最適解が出現する世代数の平均値を示す。図 5.14 はビット長 $L = 100$ の時の、パラメータ c による最適解が出現する世代数の分散を示す。図 5.11~図 5.14 において、近似式 (5.36) と近似式 (5.38) での理論的な結果と実験の結果はほぼ一致している。図 5.11 と図 5.13 から、最適解が出現する世代数の平均値を最小にするパラメータ c は 1.59 に近い。図 5.12 と図 5.14 から、最適解が出現する世代数の分散を最小にするパラメータ c は 1.41 に近い。この結果が本研究の理論的な結果とよく一致している。

次に、本研究で提案する最適な突然変異率 $c = 1.5$ を設定し、 $(1 + 1)$ EA の実験を

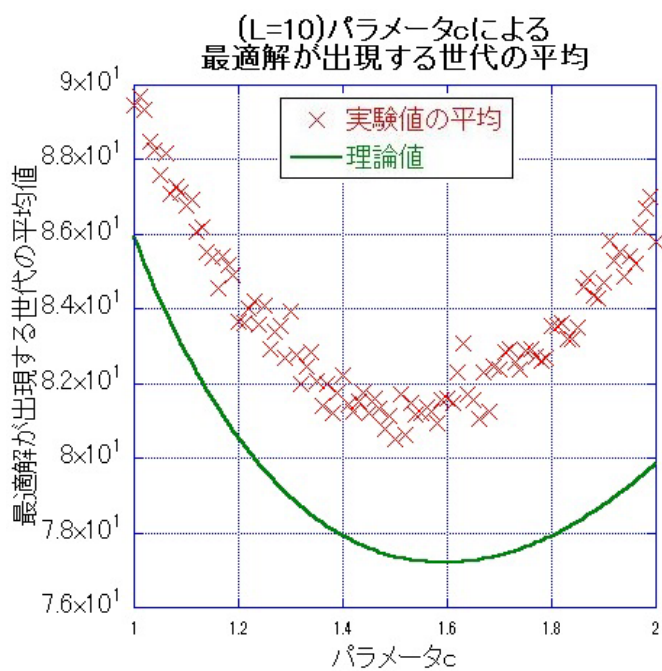


図 5.9: ($L = 10$) パラメータ c による最適解が出現する世代数の平均値.

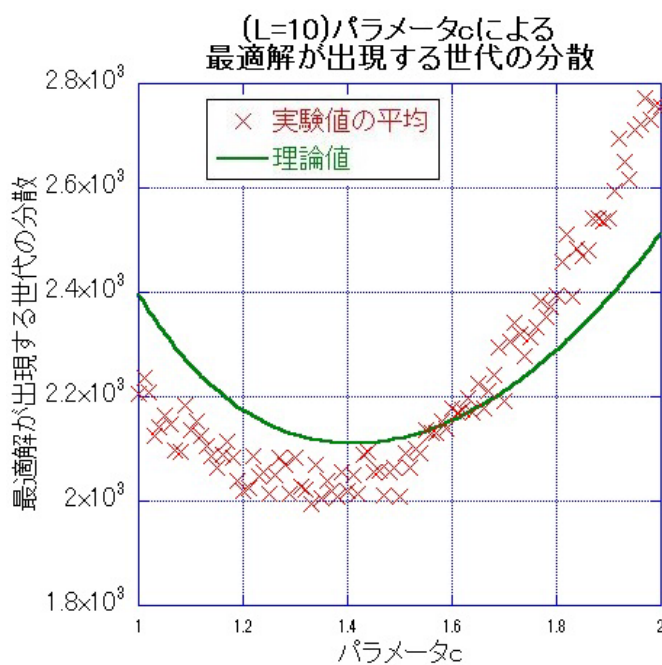


図 5.10: ($L = 10$) パラメータ c による最適解が出現する世代数の分散.

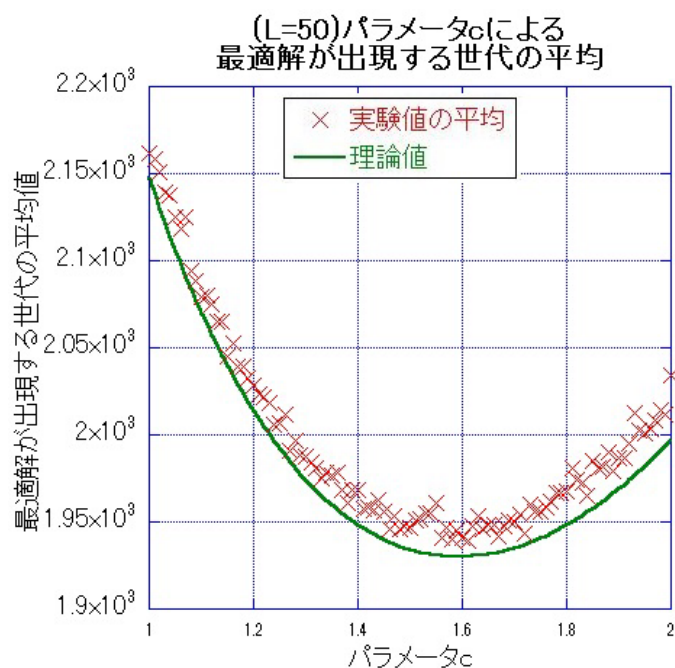


図 5.11: ($L = 50$) パラメータ c による最適解が出現する世代数の平均値.

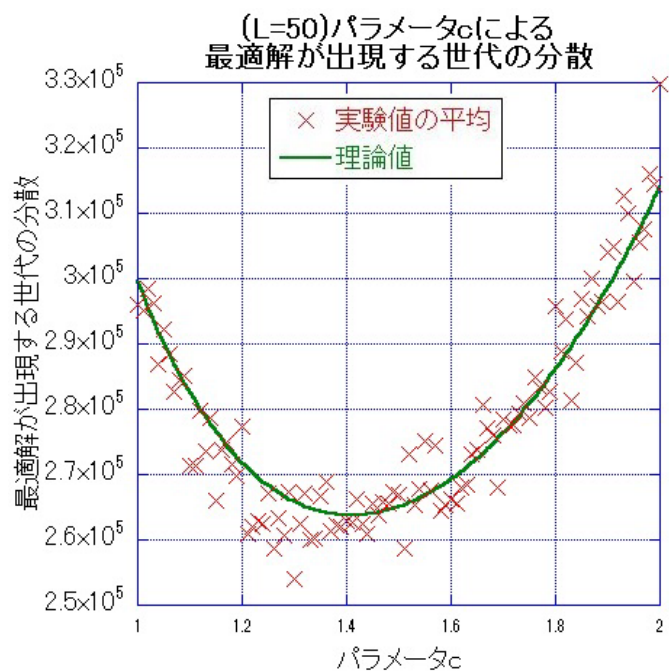


図 5.12: ($L = 50$) パラメータ c による最適解が出現する世代数の分散.

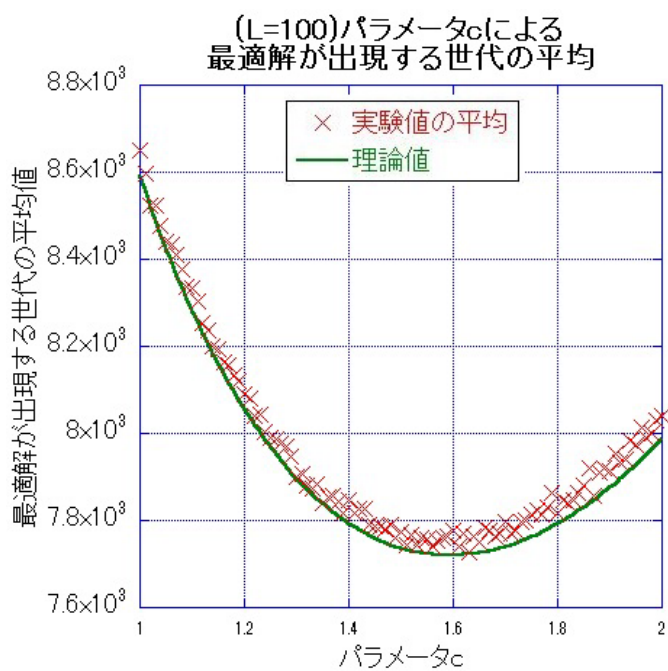


図 5.13: ($L = 100$) パラメータ c による最適解が出現する世代数の平均値.

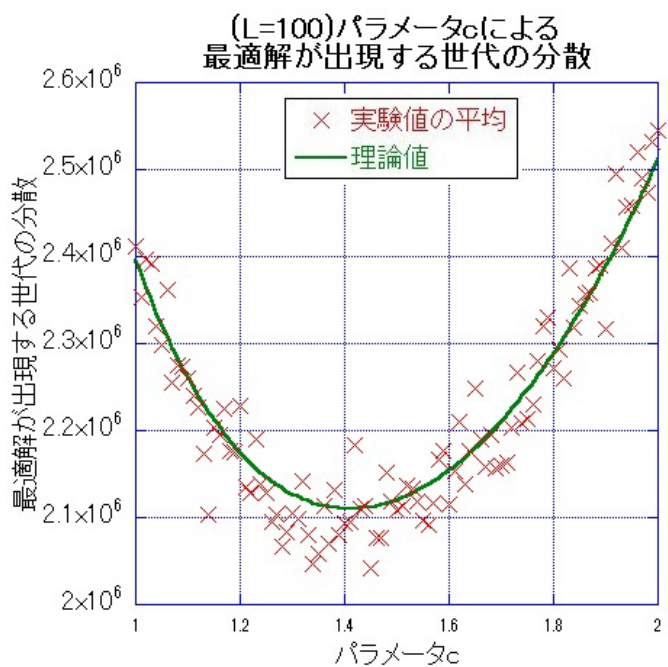


図 5.14: ($L = 100$) パラメータ c による最適解が出現する世代数の分散.

行う。

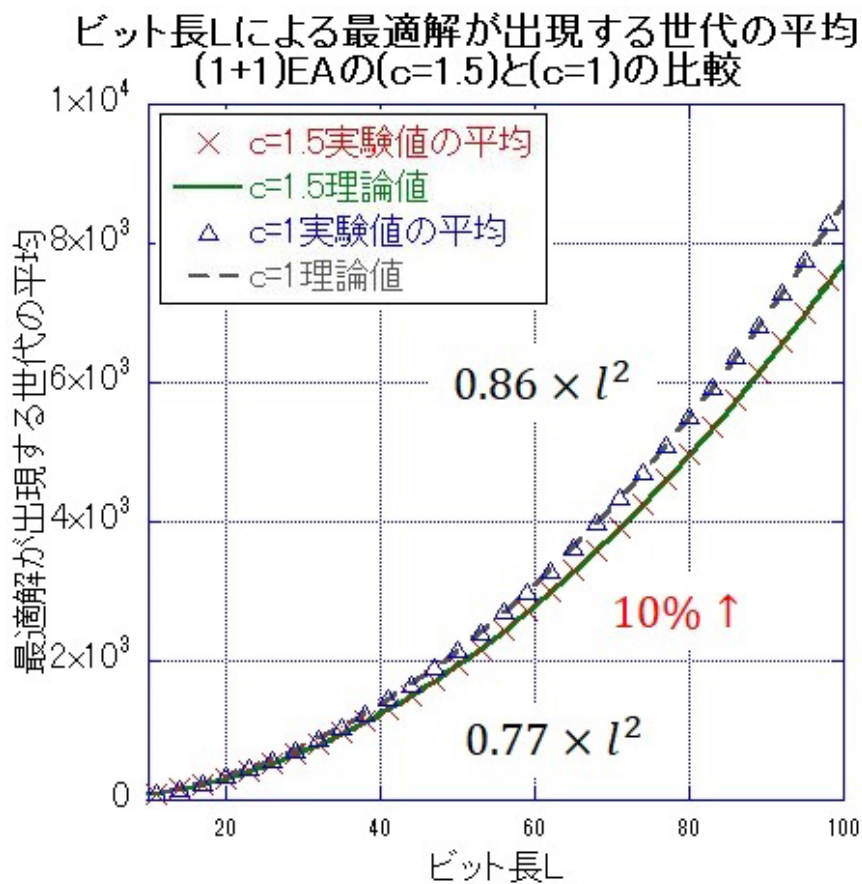


図 5.15: ビット長 L による最適解が出現する世代数の平均値 ($c = 1.5$ と $c = 1$ の比較).

図 5.15 は、ビット長 L による最適解が出現する世代数の平均値を示す。図 5.15 に示す通り、 $c = 1.5$ の場合は $c = 1$ の場合より、最適解が出現する世代数の平均値が 10% 向上する。

図 5.16 は、ビット長 L による最適解が出現する世代数の分散を示す。図 5.16 に示す通り、 $c = 1.5$ の場合は $c = 1$ の場合より、最適解が出現する世代数の分散が 12% 向上する。

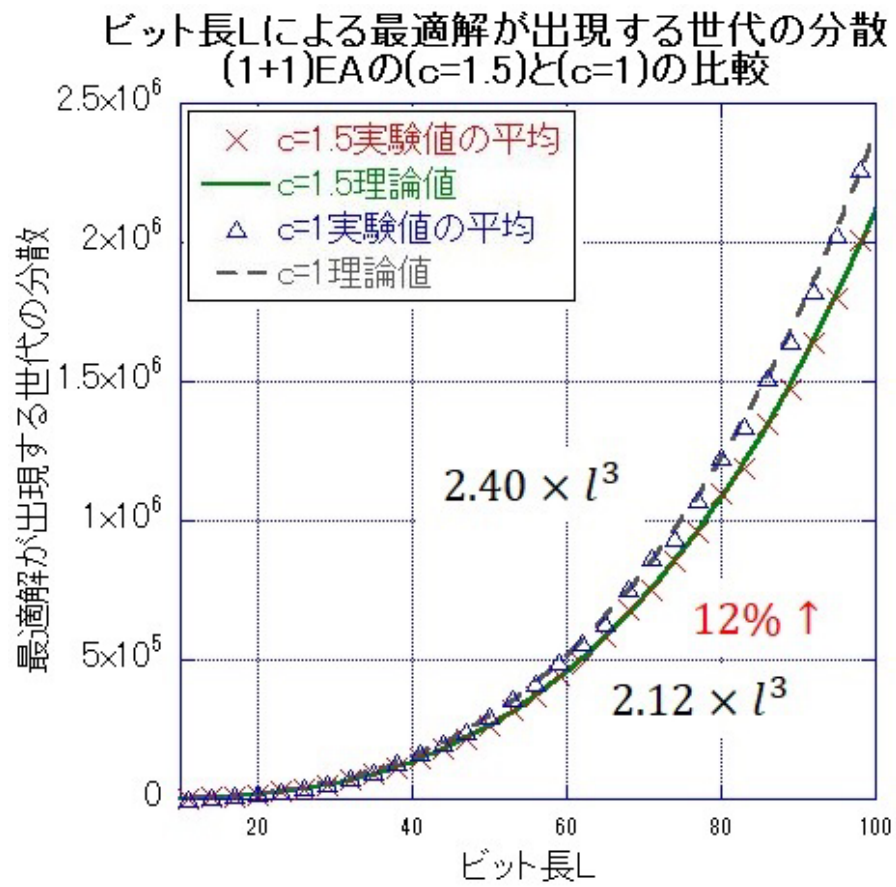


図 5.16: ビット長 L による最適解が出現する世代数の分散 ($c = 1.5$ と $c = 1$ の比較).

($L=100, c=1$)世代数による最適解の出現分布

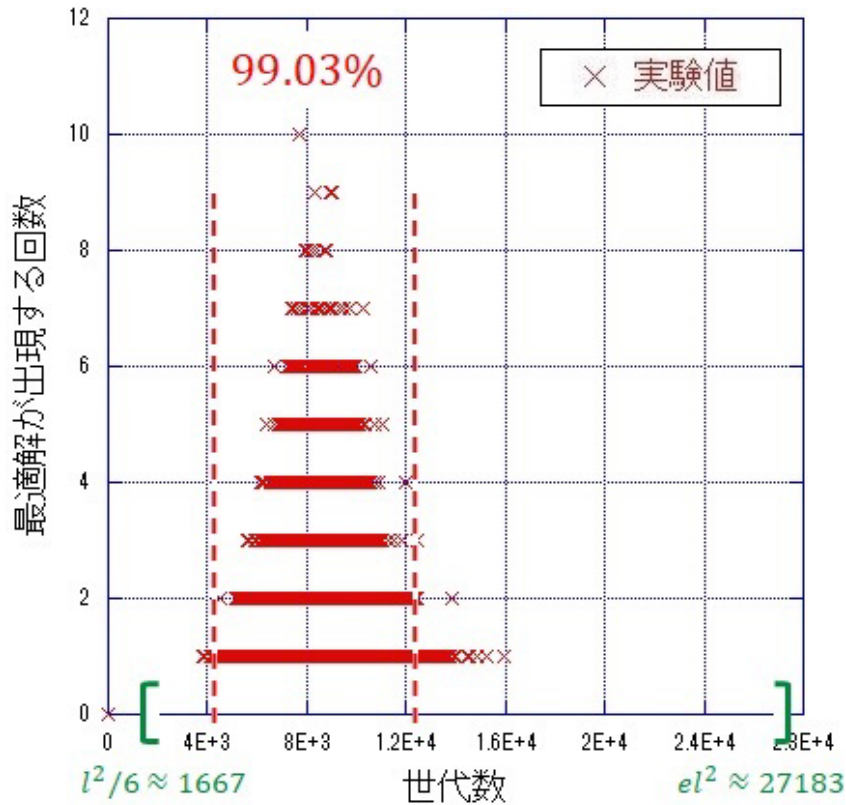


図 5.17: $L = 100, c = 1$ の場合, 世代数による最適解の出現回数の分布.

図 5.17 は $L = 100, c = 1$ の場合の, 世代数による最適解の出現回数の分布を示す. Droste ら [31] の研究結果により, 突然変異率 $p_m = 1/L$ の場合, Leading Ones 問題における (1+1)EA の計算時間は $[L^2/6, eL^2]$ の範囲内となる. $[L^2/6, eL^2]$ という結果は, 実際の最適解が出現する世代数と比べ, 範囲が広い事が分かった. 本研究は, 成功確率が $S > 99\%$ となる範囲を予測する方法を提案した. 実際の (1+1)EA を行った結果, その予測された範囲内の成功確率は 99.03% となる.

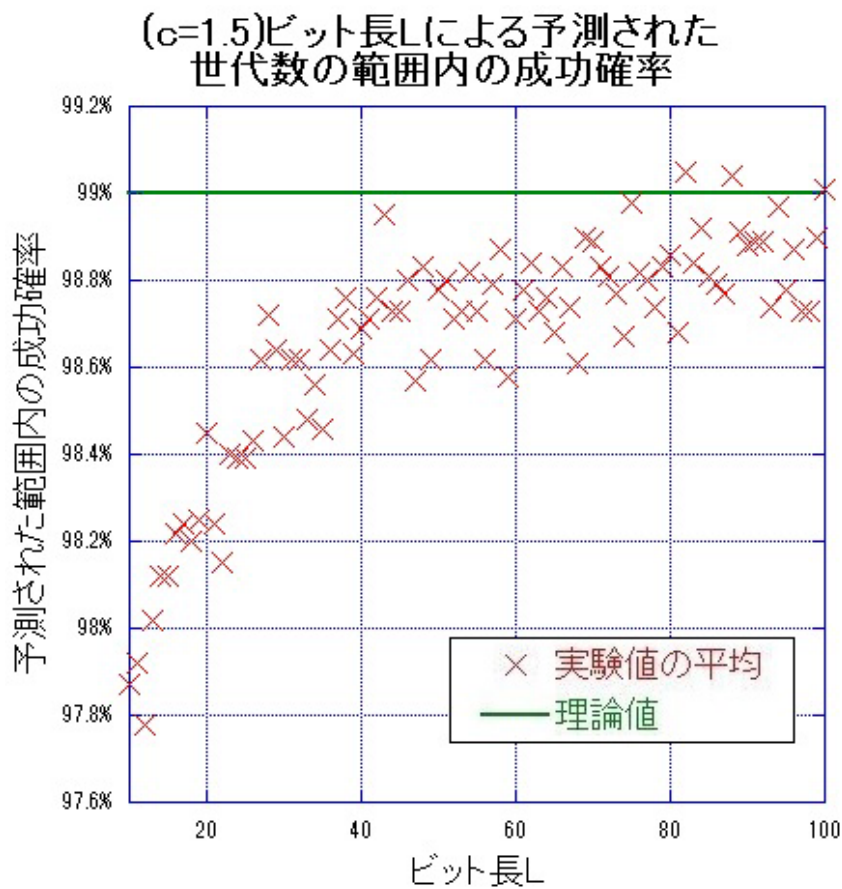


図 5.18: $c = 1.5$ の場合, ビット長 L による予測された世代範囲内の成功確率.

図 5.18 は $c = 1.5$ の場合の, ビット長 L による予測世代範囲内の成功確率を示す. 本研究では成功確率が $S > 99\%$ となる範囲を予測する方法を提案した. しかし, この予測方法はビット長が長い場合の近似式を用いて計算するため, ビット長が短い時に誤差が生じる. 図 5.18 のように, ビット長が長くなると, 予測された範囲内の成功確率は 99% の周りに上がる.

5.5 まとめ

本研究では $(1 + 1)EA$ について, Leading Ones 問題を取り上げ, 吸収マルコフ連鎖理論を用いて進化過程の理論的な解析を行った. $(1 + 1)EA$ が $(\mu + \lambda)EA$ を単純化

した構造になるため、(1+1)EA による解析結果は一般的な EA の解析に役立つ。

まず、吸収マルコフ連鎖理論を用いて、最適解が出現する世代数の平均値と分散を突然変異率で表す式を導いた。(1+1)EA でのシミュレーション実験により、導出した式の正確性を確かめた。シミュレーションにより、最適解が出現する世代数の平均値と分散を最小にする突然変異率が $[\frac{1}{L}, \frac{2}{L}]$ に存在することを示した。次に、最適解が出現する世代数の平均値を最小にする突然変異率が $\frac{c_L}{L} = \frac{1.59}{L}$ となることを導いた。Bottcher ら [32] の論文も同様の結果を挙げている。本研究では、最適解が出現する世代数の分散も解析の観点とした。その結果、最適解が出現する世代数の分散を最小にする突然変異率は $\frac{c_{Var}}{L} = \frac{1.41}{L}$ となることを導いた。これらの結果を踏まえ、本研究では最適な突然変異率として $\frac{1.5}{L}$ を提案した。また、最適解が出現する確率が 99% 以上となる世代の範囲が予測する手法も提案した。シミュレーション実験により、ビット長が長くなると、予測された範囲の精度が高くなることも示した。

今後の課題としては、Leading Ones 問題以外の最適化問題にこの解析方法を適用し、分析することが挙げられる。

第6章 結言

6.1 結論

EA は、生物の進化を模した問題解決手法である。EA は、これまで探索や最適化などの様々な分野で多くの成果を上げて来た。しかし、応用面での成功と比べ、EA の理論的な解明は大きく遅れている。本論文では、近年注目を集めているマルコフ連鎖理論を用いて、EA に関する課題に取り組んだ。特に、GA と (1+1)EA, 2 種類の EA を対象に、その求解性能について理論的解析を行った。

本論文では、以下の3つの課題について解析を行った。

1) GA では選択、突然変異、交叉などの遺伝的操作を行い、与えられた問題に対する最適解を確率的に探索していく。このとき、個体数 N , 突然変異率 p_m など様々なパラメータがあり、問題ごとに適切なパラメータを選択することが効率的に問題を解くために重要である。本研究では OneMax 問題において、最適解の出現時間を GA の計算性能を評価する指標とし、計算パラメータが最適解の出現時間へ与える影響を解析した。具体的には、最適解の出現時間を2つの部分に分けて解析した。1つはマルコフ連鎖理論を採用し、1次スキーマの収束時間を解析した。もう1つはシミュレーションにより収束後の最適解の出現時間を解析した。1次スキーマの収束時間の理論的解析結果は実験結果をよく再現した。また、シミュレーションによる解析も収束後の最適解の出現時間を推定できることを示した。結論としては、突然変異率が大きくなると収束時間は速くなり、収束後の最適解の出現時間は遅くなる。収束時間と収束後の最適解の出現時間から、GA 全体の最適解の出現時間の最大値を推定できる。以上の結果から、最適解の出現時間を速くする最適な突然変異率が存在する。

2) 非対称突然変異を用いる GA の進化過程を解析した。一般に、突然変異は遺伝子座間の連鎖を弱め、集団を連鎖平衡の状態へ導く。しかし、本研究は非対称突然

変異が集団を連鎖不平衡の状態へ導く場合があるということを発見した。

3)(1+1)EA について、Leading Ones 問題を取り上げ、吸収マルコフ連鎖理論を用いて進化過程の理論的な解析を行った。(1+1)EA が $(\mu + \lambda)$ EA を単純化した構造になるため、(1+1)EA による解析結果は一般的な EA の解析に役立つ。まず、吸収マルコフ連鎖理論を用いて、最適解が出現する世代数の平均値と分散を突然変異率で表す式を導いた。(1+1)EA でのシミュレーション実験により、導出した式の正確性を確かめた。シミュレーションにより、最適解が出現する世代数の平均値と分散を最小にする突然変異率が $[\frac{1}{L}, \frac{2}{L}]$ に存在することを示した。次に、最適解が出現する世代数の平均値を最小にする突然変異率が $\frac{c_T}{L} = \frac{1.59}{L}$ となることを導いた。Bottcher ら [32] の論文も同様の結果を挙げている。本研究では、最適解が出現する世代数の分散も解析の観点とした。その結果、最適解が出現する世代数の分散を最小にする突然変異率は $\frac{c_{Var}}{L} = \frac{1.41}{L}$ となることを導いた。これらの結果を踏まえ、本研究では最適な突然変異率として $\frac{1.5}{L}$ を提案した。また、最適解が出現する確率が 99% 以上となる世代の範囲が予測する手法も提案した。シミュレーション実験により、ビット長が長くなると、予測された範囲の精度が高くなることも示した。

6.2 今後の課題

今後の課題としては、本研究で得られた結果がより複雑な最適化問題にも適用できるかどうかを確認する必要がある。OneMax 問題と Leading Ones 問題では、進化過程を理論的に解析できる。しかし、現実の最適化問題ではこれらの理論結果を得ることは困難で、マルコフ連鎖理論を用いる解析方法について開発していく必要がある。

参考文献

- [1] A. Auger and B.Doerr: "Theory of Randomized Search Heuristics", World Scientific, New Jersey, 2011
- [2] 三宮信夫, 喜多一, 玉置久, 岩本貴司: GA の理論, システム制御情報学会編「遺伝的アルゴリズムと最適化」, pp.63–81, 1998
- [3] 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」, **45**, pp.12–21, 2004
- [4] 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」, **43**, pp.1050–1060, 2002
- [5] J. H. Holland: Adaptation in Natural and Artificial Systems, MIT Press, Massachusetts, 1992
- [6] L. Altenberg: The Schema Theorem and Price's Theorem, Foundations of Genetic Algorithms, Vol. 3, pp.23-49, 1995
- [7] Q. Ma: Stochastic analysis of OneMax problem by using Markov chain, The Seventeenth International Symposium on Artificial Life and Robotics, pp.19–21,2012
- [8] D. A. Levin, Y. Peres and E. L. Wilmer: Markov Chains and Mixing Times, American Mathematical Society, Providence,2008
- [9] T. Jansen and D. Sudholt: Analysis of an Asymmetric Mutation Operator, Evolutionary Computation, Vol. 18(1), pp.1-26, 2010

- [10] B. Doerr, N. Hebbinghaus and F. Neumann: Speeding Up Evolutionary Algorithms through Asymmetric Mutation Operators, *Evolutionary Computation* 15(4), pp.401–410, 2007
- [11] B. Doerr and S. Pohl: Run-Time Analysis of the (1+1) Evolutionary Algorithm Optimizing Linear Functions Over a Finite Alphabet, *GECCO '12 Proceedings of the 14th annual conference on Genetic and evolutionary computation*, pp.1317–1324, 2012
- [12] A. E. Nix and M. D. Vose: Modelling Genetic Algorithm with Markov Chains, *Annals of Mathematical and Artificial Intelligence*, Vol. 5, pp.79–88, 1992
- [13] H. Suzuki and Y. Iwasa: Crossover Accelerates Evolution in GAs with a Babel-like Fitness Landscape, *Mathematical Analyses, Evolutionary Computation* Vol.7, pp.275–310 1999; Errata: Vol.8, pp.121–122, 2000
- [14] D. E. Goldberg: The Race, the Hurdle, and the Sweet Spot: Lessons from Genetic Algorithms for the Automation of Design Innovation and Creativity, *Evolutionary Design by Computers*, Morgan Kaufmann, San Francisco, pp.105–118, 1999
- [15] B. K. Ambati, J. Ambati and M.M. Mokhtar: Heuristic combinatorial optimization by simulated Darwinian evolution: A polynomial time algorithm for the traveling salesman problem, *Biological Cybernetics*, Vol.65, pp.31–35, 1991
- [16] J. He, G. Z. Sun and X. Yao: A New Approach for Analyzing Average Time Complexity Of Population-Based Evolutionary Algorithms on Unimodal Problems, *IEEE Transaction on System, and Cybernetics-part B: Cybernetics*, Vol.39, No.5, pp.1092–1106, 2009
- [17] J. Jens: A Blend of Markov-Chain and Drift Analysis, *Parallel Problem Solving from Nature-PPSN X*, pp 41–51, 2008
- [18] D. E. Goldberg: Genetic Algorithms and Walsh Functions: Part I, A Gentle Introduction, *Complex Systems*, Vol. 3, Issue 2, pp 129–152, 1989

- [19] D. E. Goldberg: Genetic Algorithms and Walsh Functions: Part II, A Gentle Introduction, *Complex Systems*, Vol. 3, Issue 2, pp 153–171, 1989
- [20] JR. Lobry and N. Sueoka: Asymmetric directional mutation pressures in bacteria, *enome Biology* 3, pp.58.1–58.14, 2002
- [21] K. Wada, H. Doi and S. Tanaka: A neo-Darwinian algorithm: Asymmetrical mutation due to semiconservative DNA-type replication promote evolution, *Proceedings of National Academy of Science, USA* 90, pp.11934–11938, 1993
- [22] I. Wegener: Methods for the analysis of evolutionary algorithms on pseudo-Boolean function, *Evolutionary Optimization*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, pp.349–369, 2001
- [23] H. Furutani, H. Tagami, M. Sakamoto and Y. Du: Markov Chain Analyses of Random Local Search and Evolutionary Algorithm, *Journal of Robotics, Networks and Artificial Life*, Vol. 1, Issue 3, pp.220–224, 2014
- [24] H. Furutani, M. Sakamoto, Y. Du and K. Aoki: Analysis of Asymmetric Mutation Model in Random Local Search, *Journal of Robotics, Networks and Artificial Life*, Vol. 1, Issue 1, pp.1–4, 2015
- [25] S. Droste, T. Jansen and I. Wegener: A rigorous complexity analysis of the (1+1) evolutionary algorithm for linear functions with Boolean inputs, *Evolutionary Computation*, 6, 2, pp.185–196, 1998
- [26] T. Back: Optimal Mutation Rates in Genetic Search, *Proceedings of the 5th International Conference on Genetic Algorithms*, pp.2–8, 1993
- [27] F. Neumann and C. Witt: On the runtime of randomized local search and simple evolutionary algorithms for dynamic makespan scheduling, *IJCAI'15 Proceedings of the 24th International Conference on Artificial Intelligence*, pp.3742–3748, 2015

- [28] F. Neumann and I. Wegener: Randomized local search, evolutionary algorithms, and the minimum spanning tree problem, *Theoretical Computer Science*, Vol. 378, Issue 1, pp.32–40, 2007
- [29] D. Sudholt: General Lower Bounds for the Running Time of Evolutionary Algorithms, *Parallel Problem Solving from Nature*, PPSN XI, pp.124–133, 2010
- [30] C. Doerr and J. Lengler: The (1+1)Elitist Black-Box Complexity of LeadingOnes, *Algorithmica*, pp.1–25, 2017
- [31] S. Droste, T. Jansen and I. Wegener: On the analysis of the (1+1) evolutionary algorithm, *Theoretical Computer Science*, 276, pp.51–81, 2002
- [32] S. Bottcher, B. Doerr and F. Neumann: Optimal Fixed and Adaptive Mutation Rates for the LeadingOnes Problem, *Parallel Problem Solving from Nature*, PPSN XI, pp.1–10, 2010
- [33] 古谷博史, 藤林由紀, 村田真知子: 遺伝的アルゴリズムにおける交叉の役割の連鎖解析, *情報処理学会研究会報告, 数理モデル化と問題解決 Vol33-14* pp.53–56, 2001
- [34] R. A. Fisher: On the Dominance Ratio, *Proceedings of the Royal Society of Edinburgh*, Vol.42, pp.321–341, 1922
- [35] R. A. Fisher: *The Genetical Theory of Natural Selection*, 2nd edition, Dover, New York, 1958
- [36] S. Wright: Evolution in Menderian Populations, *Genetics*. Vol.16, pp.97–159, 1931
- [37] J. W. J. Ewens: *Mathematical Population Genetics. I. Theoretical Introduction*, Second Edition. Springer-Verlag, New York, 2004
- [38] J. F. Crow and M. Kimura: *An Introduction to Population Genetics Theory*, Harper and Row, New York, 1970

- [39] K. A. De Jong, W. M. Spears and D. F. Gordon: Using Markov Chains to Analyze GAFOs, Foundations of Genetic Algorithms, Vol.3, pp.115–157, 1995
- [40] H. Asoh and H. Muhlenbein: 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
- [41] H. Furutani: Schema Analysis of Genetic Algorithms on Multiplicative Landscape, Proceedings of the Simulated Evolution and Learning Conference, SEAL '02, pp.230–235, 2002
- [42] H. Furutani: 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
- [43] 古谷博史, 張玉安, 坂本真人: 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, 情報処理学会論文誌「数理モデル化と応用」, **2**, pp.54–63, 2009
- [44] Y. Zhang, Q. Ma, M. Sakamoto and H. Furutani: Effect of Mutation to Distribution of Optimum Solution in Genetic Algorithm, Proceedings of Fourth International Workshop on Natural Computation (IWNC 2009), pp.345–352, 2009
- [45] 渡部隆一: 数学ワンポイント双書 31, マルコフ・チェーン, 共立出版, 東京, 1979
- [46] R.B. シナジ: マルコフ連鎖から格子確率モデルへ, シュプリンガー・フェアラーク, 東京, 2001
- [47] J. G. Kemeny and J. L. Snell: Finite Markov Chains, Springer-Verlag, New York, 1976
- [48] 豊田秀樹: マルコフ連鎖モンテカルロ法, 朝倉書店, 2008

- [49] B. S. Weir: Genetic Data Analysis II, Sinauer Associates, Massachusetts, 1996
- [50] J. Maynard Smith: Evolutionary Genetics, 2nd edition, Oxford University Press, Oxford, 1998
- [51] 棟朝雅晴: 遺伝的アルゴリズムーその理論と先端的手法ー, 森北出版, 東京, 2008
- [52] 古谷博史: 遺伝的アルゴリズムにおける交叉の Walsh 解析, 情報処理学会論文誌, Vol42, No.9, pp.2270–2283, 2001
- [53] Y. Du, Q. Ma, Y. Zhang, M. Sakamoto and H. Furutani: Runtime Analysis of One-Max Problem in Genetic Algorithm, Journal of Robotics, Networks and Artificial Life, Vol. 1, No. 3, pp.225-230, 2014
- [54] W. Y. Tan: Stochastic Models with Applications to Genetics, Cancers, AIDS and Other Biomedical Systems, World Scientific, Singapore, 2002
- [55] 張玉安: マルコフ連鎖を用いた遺伝的アルゴリズムにおける計算効率の研究, 宮崎大学農学工学総合研究科博士学位論文, 2010
- [56] 古賀仁信, 安永 和馬, 馬 青蓮, 坂本 真人, 古谷 博史: 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, 研究報告数理モデル化と問題解決, 2012-MPS-91(35), pp.1-6, 2012
- [57] J.W.J. Ewens: Mathematical Population Genetics, Theoretical Introduction, Second Edition. Springer-Verlag, New York, 2004
- [58] Y. Zhou, Z. Guo and J. He: On the Running Time Analysis of the (1+1) Evolutionary Algorithm for the Subset Sum Problem, Bio-Inspired Computational Intelligence and Applications, pp.73–82, 2007
- [59] M. Iosifescu: "Finite Markoc Processes and Their Applications", Dover Publications, Inc. Mineola, New York, 1980

謝辞

本論文の作成にあたって、多くの方々からご指導、ご協力をいただきました。特に指導教員である山森 一人教授には、テーマの方向付けの際、全般について温かくご指導頂きました。心より感謝いたします。

多くの方々のご協力により、本論文を完成させることができたことをありがたく思っております。この場を借りてお礼申し上げます。

本研究を遂行するにあたり、多大なるご指導を賜った古谷 博史教授と山森 一人教授、坂本 真人准教授、明石 良教授、青木 謙二准教授、辻川 亨教授をはじめ、山森研究室の方々に御礼を申し上げます。

最後になりましたが、私を支えてくれた家族、親戚、友人にも、深く感謝します。

公表論文

学術雑誌発表論文

1. Yifei Du, QinLian Ma, Kenji Aoki, Makoto Sakamoto, Hiroshi Furutani, Yu-an Zhang(2015), Hitting Time Analysis of OneMax Problem in Genetic Algorithm, Journal of Robotics, Networks and Artificial Life, Vol. 2, Issue 2, pp.131-134.
2. Yifei Du, Kenji Aoki, Makoto Sakamoto, Kunihito Yamamori, Hiroshi Furutani(2017), Asymmetric mutation model in genetic algorithm, Artificial Life and Robotics, Vol. 22, Issue 1, pp.17-23.
3. Yifei Du, Kenji Aoki, Makoto Sakamoto, Hiroshi Furutani, Kunihito Yamamori(2017), Markov chain analysis of Leading Ones problem, Artificial Life and Robotics, Vol. 22, Issue 4, pp.443-448.
4. Hiroshi Furutani, Makoto Sakamoto, Yifei Du, Kenji Aoki(2015), Analysis of Asymmetric Mutation Model in Random Local Search, Journal of Robotics, Networks and Artificial Life, Vol. 1, Issue 1, pp.1-4.

国際学会発表

1. Asymmetric Mutation Model in Genetic Algorithm, The Twenty-First International Symposium on Artificial Life and Robotics 2016 (AROB 21st 2016).
2. Markov chain analysis of Leading Ones problem, The Twenty-Second International Symposium on Artificial Life and Robotics 2017 (AROB 22nd 2017).

国内学会発表

1. 非対称突然変異モデル遺伝的アルゴリズムにおける連鎖の役割, 第107回数理モデル化と問題解決研究発表会(平成28年).