

非線形力学系およびその結合モデルを用いた大域的最適化手法に関する研究

平成 18 年度

岡 本 卓

目次

第1章	はじめに	1
1.1	大域的最適化手法と近年の研究展開	1
1.2	Physically Inspired Method と Meta-Heuristics	2
1.3	本研究の位置づけ	3
1.4	本論文の構成	4
第2章	非線形力学系モデルによる大域的最適化手法	6
2.1	上下制限約条件付最適化問題に対する勾配系最適化計算モデル	6
2.2	非線形勾配系最適化計算モデル	7
2.2.1	内部状態表現型モデルとその離散化カオス	8
2.2.2	変数変換型モデルとその離散化カオス	10
2.2.3	制約領域トーラス化型モデルとその離散化カオス	11
2.2.4	各種の離散化勾配系カオスモデルの計算特性	12
2.3	分岐特性調整型カオス最適化手法「水抜き法」	19
2.3.1	目的関数変換による分岐特性調整法	19
2.3.2	目的関数の貯水変換	21
2.3.3	「水抜き法」による大域的最適化	22
2.3.4	探索履歴を利用した改良型水抜き法	26
2.3.5	水抜き法関連手法との比較	27
2.4	非線形散逸系最適化計算モデル	28
2.4.1	周期散逸型モデル	29
2.4.2	徐冷散逸型モデル	29
2.4.3	上下制限約条件付最適化問題に対する非線形散逸系最適化計算モデル	30
2.4.4	離散化非線形散逸系モデル	32
2.5	非線形ハミルトン系最適化計算モデル	34
2.5.1	ハミルトン系モデルと高次元アルゴリズム	34
2.5.2	探索履歴を利用した改良型高次元アルゴリズム	36
2.5.3	離散化高次元アルゴリズム	36
2.6	非線形力学系最適化計算モデルの計算特性とその課題	38
2.6.1	探索軌道の様子	38
2.6.2	大域的最適化性能	44
2.6.3	まとめと課題	48

第 3 章	結合系モデルと同調現象	49
3.1	はじめに	49
3.2	結合構造の種類	49
3.2.1	トポロジーによる結合	50
3.2.2	距離による結合	51
3.2.3	序列による結合 (エリート結合)	51
3.3	結合系同調現象	52
3.3.1	離散時間結合振動子系と比例型結合モデル	52
3.3.2	比例-微分 (PD) 型結合モデル	54
3.3.3	各結合モデルの計算特性と同調現象	55
3.4	PSO モデルと結合系	59
3.5	まとめ	61
第 4 章	結合型非線形力学系モデルによる大域的最適化手法	62
4.1	はじめに	62
4.2	P エリート結合型最適化計算モデル	62
4.2.1	離散化勾配系カオスマodelの P 型エリート結合	62
4.2.2	水抜き法の P 型エリート結合	64
4.2.3	離散化非線形散逸系モデルの P 型エリート結合	64
4.2.4	離散化高次元アルゴリズムの P 型エリート結合	68
4.3	PD エリート結合型最適化計算モデル	69
4.3.1	離散化勾配系カオスマodelの PD 型エリート結合	69
4.3.2	水抜き法の PD 型エリート結合	71
4.3.3	離散化非線形散逸系モデルの PD 型エリート結合	71
4.3.4	離散化高次元アルゴリズムの PD 型エリート結合	73
4.3.5	エリート個体の選択と個体群の挙動	74
4.4	結合型非線形力学系最適化計算モデルによる計算特性	75
4.4.1	エリート個体への引き込みと結合係数設定	75
4.4.2	探索軌道の様子	79
4.4.3	大域的最適化性能	91
4.4.4	まとめと結合構造の選択	101
第 5 章	おわりに	103
5.1	提案手法の総合評価	103
5.2	まとめと今後の課題	107
付 録 A	ベンチマーク問題とその改良問題	117
A.1	Typical Benchmark Problems と Proper Benchmark Problems	117
A.2	ベンチマーク問題集	120
付 録 B	最適化手法の計算量と自動微分	122

付録 C Pseudo Codes	123
C.1 Pseudo Code of Common Functions	123
C.2 Pseudo Code of Annealing type DGCMwT	124
C.3 Pseudo Code of Draining Method	125
C.4 Pseudo Code of DNDM	126
C.5 Pseudo Code of DHA	126
C.6 Pseudo Code of Elite Coupling type DGCM	127
C.7 Pseudo Code of Elite Coupling type Draining Method	128
C.8 Pseudo Code of Elite Coupling type DNDM	129
C.9 Pseudo Code of Elite Coupling type DHA	130
C.10 Pseudo Code of TRUST	131
C.11 Pseudo Code of HDA	132
C.12 Pseudo Code of GRPSO	133
付録 D シミュレーション実行環境	134

第1章 はじめに

1.1 大域的最適化手法と近年の研究展開

工学的な問題を数理的に記述した場合、それらのかかり多くが、方程式を解く問題か、関数を最大化ないしは最小化する問題に帰着される。このうちの後者¹にあたる「等式・不等式条件の下で多くの解候補の中から評価値が最適（すなわち、最大または最小）であるような解を求める問題」は、最適化問題とよばれる。実際の最適化問題の例としては、電力システムの最適潮流計算問題 [1, 2], エネルギーユーティリティ設備（コージェネレーション）の最適運用問題 [2, 3], トラス構造最適化などの構造最適化問題 [4], 金融工学におけるポートフォリオ最適化問題 [5], N.N. (Neural Networks) の学習問題 [6] など、枚挙に暇がない。

これら最適化問題を解くための手法は、最適化手法とよばれ、古くから数多くの手法が提案されてきた。最適化手法は、大きく分けて2つのクラスに分類することができる。1つは、制約条件を規定する関数と目的関数の連続微分可能性を仮定したもとの、これらの勾配情報を用いる「解析的な最適化手法」であり、もう1つは、微分可能性を仮定できない、もしくは、関数形を定式化できない場合に適用される「発見的最適化手法 (Heuristics)」である。ここでいう「発見的」とは、評価値情報のみを利用して試行錯誤的に評価値が小さい領域への探索を行うもので、その局所解への収束性が必ずしも数学的に保証されないという意味である。前者の解析的な最適化手法としては、まず、制約条件がない問題（無制約問題）に対する最急降下法・共役勾配法・ニュートン法と準ニュートン法をあげることができ、さらに制約条件を有する問題に対しては、探索点が制約条件を充足するように、これら手法を拡張した手法が、1960年代から1970年代にかけて数多く提案されてきた [7, 8, 9]。一方、後者のヒューリスティックな最適化手法としては、たとえば、Nelder-Mead法 [10, 11] があり、現場における実用問題の解法として利用されてきた。これら古典的な最適化手法は、いずれのクラスにおいても、本質的には局所最適解しか探索することができず、目的関数・制約条件の凸性を仮定して、局所最適解が大域的最適解となることが保証される場合に限り有効な手法である。

一方、近年では、対象とする問題の大規模化・複雑化に伴い、必ずしも凸性を仮定しない、すなわち、目的関数の多峰性や制約条件の凹凸状に起因して、局所最適解の大域的最適性が保証できない場合に、多数存在する局所最適解への停留を回避して大域的最適解を求める大域的最適化手法の開発に注目が集まっている。大域的最適化手法に関しては、非凸な2次計画問題の多くがNP困難な問題である例 [12, 13, 14] からわかるように、 $P \neq NP$ 予想が肯定されるのであれば、多くの大域的最適化問題を多項式時間内に完全に解く手法は存在しないと考えられている。しかしながら、近年のコンピュータスペック

¹前者についても、その多くは最適化問題に帰着することが可能である

の飛躍的な向上を背景に、現実的な時間内で、大域的最適解、もしくは、それに近い準最適解へ高い精度で収束する手法が開発されてきている。これまでに提案されたこれら手法は、古典的手法と同様に大きく分けて2つのクラスに分類することができる。1つは、“Physically Inspired Method”（以降、PI手法と省略する）ともよばれる力学モデルを用いた大域的最適化手法^[15]であり、もう1つは、Meta-Heuristics（以降、MHと省略する）と総称される大域的最適化手法である。

1.2 Physically Inspired Method と Meta-Heuristics

計算物理学の発展を背景に、特定の現象群を力学的なモデルによって記述し、その振る舞いをコンピュータシミュレーションによって解析することが、1980年代に入って盛んに行われ、さらにこれらの成果に基づいて、これら現象を模倣して最適化計算の実現を図ろうとする試みが行われ始めた。具体的には、神経生理学のモデルを用いたHopfield型N.N.による最適化手法^[16]や、平衡統計力学モデルを用いたSimulated Annealing (SA)^[17]などである。これら力学モデルに着想を得た“Physically Inspired Method”の開発と成功を背景に、1990年代に入って、非線形力学系モデルに着想を得た手法が登場するに至った。本論文で注目するこの非線形力学系モデルを用いた手法としては、勾配系モデルの軌道を制約領域内に閉じ込め、さらに、離散化し不安定化することで発生するカオス軌道を用いた手法「離散化勾配系カオスモデル (DGCM : Discretized Gradient Chaos Model)」^[18, 19, 20, 21]、非線形最適化問題に拡張したアフィンスケーリング法の軌道を、ステップ幅を大きくし不安定化することで発生するカオス軌道を用いた手法「アフィンスケーリングカオスモデル (ASCM : Affine Scaling Chaos Method)」^[22]、連続慣性系モデルの散逸項を特殊な非線形抵抗に置き換えることで発生するカオス軌道を用いた手法「連続非線形散逸系モデル (CNDM : Continuous Nonlinear Dissipative system Model)」^[23, 24]、ハミルトン力学系の自律運動の特性を利用した手法「高次元アルゴリズム (HA : Hamiltonian Algorithm)」^[25]、勾配系の安定性理論を利用した手法「分解点法 (Decomposition Method)」^[2, 26]、などの手法が提案されている。これら手法の特徴は、目的関数を非線形力学系のエネルギー関数に類比的に対応付け、勾配などの力学系から与えられるベクトル量を駆動力とした探索点の自律運動を用いて大域的探索を実行し、その探索領域をアニーリングなどの操作により制限していくことによって大域的最適化を実現することにある。

一方、Meta-Heuristics とは、従来の Heuristics に優れた大域的最適解の探索性能を付加した、もしくは、優れた探索戦略に基づいてそれらを有機的に結合した手法^[27]であり、これまでその多くは、組み合わせ最適化手法として開発されてきた。近年では、連続最適化問題を対象にした手法が提案されてきており注目を集めている。MHにおける優れた探索戦略は、POP (Proximate Optimality Principle: ある探索レベルにおける良い解は、近傍の探索レベルの良い解の近くで発見されるはずであることを保証する原理で、実用的な問題ではしばしば成立する原理^[28])に基づいた目的関数値を考慮した探索の集中化 (Intensification) と、できるだけ多くの解候補を探索するための多様化 (Diversification) の概念によって特徴付けられ、これらをバランスよく実現することが重要であると考えられている^[29]。MHの多くは、多点型最適化モデルであり、個々では確率的に振舞う複数の個体間の情報交換によってこれら探索戦略を実現している。これまでに提案された MH としては、生物

の遺伝・進化の過程を模倣して説明される「遺伝アルゴリズム (GA : Genetic Algorithm)」[6, 30]、鳥の群れの動きとして可視化される社会行動のシミュレーターを先駆けに開発された「Particle Swarm Optimization (PSO)」[31, 32, 33]、他にも「Differential Evolution (DE)」[34]などをあげることができる。

前述の非線形力学系モデルを用いた手法と MH には、それぞれ大域的最適化手法としてメリットとデメリットが存在する。非線形力学系モデルを用いた手法のメリットとしては、1) 探索点が勾配などのベクトル量を駆動力とした自律探索を行うので、常に多様性を失わない大域的探索が可能である点、2) 確定論的方程式に従うので、軌道の解析が可能であり、得られる解に対する定量的な特徴をとらえることが可能な点、をあげることができる。デメリットとしては、モデルによっては、ある性質を持った局所解への収束性という意味での集中化戦略を持つが、一般に、目的関数値を考慮した意味での集中化戦略を持っていない点をあげることができる。一方、MH のメリットとしては、1) POP に基づいた目的関数値を考慮した探索戦略を持っている点、2) 多点探索によって多数の解候補を探索できる点、をあげることができる。デメリットとしては、戦略性を持った駆動力は個体間の情報交換によってのみ与えられるため、ある個体（多くの場合、優秀個体）へ個体群が集中してしまうと本質的な駆動力を失ってしまう点をあげることができる。とくに MH に対しては、問題の変数次元（以降とくに記さない限り、次元と記した場合は、変数次元のことをさすものとする）が高くなると性能が劣化するという報告 [35, 36, 37] があり、これは、前述のデメリットが原因であると考えられる。このように、非線形力学系モデルを用いた手法・MH ともにメリット・デメリットを持っており、高次元多峰性問題に対する有効な手法の開発には至っていない。

ところで、すべての最適化手法は、前述の最適化問題の NP 困難性を考えれば、発見的であるといえる。したがって、この点からみれば、PI 手法は、MH の一種であるとみなすことができる。その一方で、後述する PSO モデルの例にあるように、MH のアルゴリズムを差分方程式として定式化しなおせば、確率的要素を含む力学モデルとしてとらえることができる。したがって、この点からみれば、MH は、PI 手法の一種であるとみなすことができる。このように、PI 手法と MH は、互いに有機的な関係にあるといえ、前述のメリット・デメリットを考えると、そのハイブリッド化には大きな意味があると考えられるが、いまだこのような観点での最適化手法の提案は行われていない。

1.3 本研究の位置づけ

本論文では、PI 手法の中でも非線形力学系モデルを用いた手法に注目し、前述の背景を踏まえて「非線形力学系モデルを基本的駆動モデルとして、そこへ MH の優れた探索戦略を導入した新しい最適化モデルの提案」を行う。

まず、前節で述べたように、非線形力学系モデルを用いた手法では、得られる解に対する特徴を理論的に考察できる可能性があるが、とくに離散化勾配系カオスモデルや非線形散逸系モデルにおいて、そのメカニズムの解明がなされてきたとはいえない。したがって、1 番目のメリットである大域的探索性能のみを、いわば「特徴ある大域的ランダムサーチ」として利用する手法が多く、確定論的探索軌道の特徴を利用した有意な探索戦略を持った手法の提案はなされているとはいえない。そして、これまで提案された手法は、アニーリ

ングなどの操作によって軌道を収束させるか、収束・発散などの操作を加えながら探索を一定時間行い、得られた最良の解を大域的最適解とするなど、いわゆるヒューリスティックの枠組みを出ないものであった。そこで本論文では、単点の非線形力学系モデルに対して、その力学特性解析によって得られた知見をもとに、目的関数値を考慮した探索戦略を導入した改良モデルの提案を行い、非線形力学系モデルの確定論的モデルとしての特長を生かしたモデルを提案する。とくに、離散化勾配系カオスモデルに対しては、安定性解析を用いた分岐特性の解析により、カオスアニーリングによって局所解へ収束するメカニズムを解明したうえで、カオスの探索軌道を目的関数値が小さい領域に引き寄せながら大域的最適解に収束させる手法を提案する。

つぎに、非線形力学系モデルを駆動モデルとして自律探索を行う複数の個体によって結合系を形成した上で、個体群を優秀個体の軌道へ同調させることで、目的関数値を考慮した探索戦略を非線形力学系モデルへ導入した、まったく新しい最適化モデルの提案を行う。一般に、多点型探索モデルは、単点型探索モデルより優れた性能が得られることが期待できるが、提案手法は、最適化手法に特化した新しい結合構造を用いた同調現象によって、個体群全体に対して目的関数値を考慮した戦略を導入することで、単なる探索の多重化以上の効果を持たせるモデルである。また提案手法は、非線形力学系モデルとMHのハイブリッド型手法であり、非線形力学系モデルの立場からもMHの立場からも、それぞれのメリットを生かしながらデメリットを互いに補っている手法であると考えられ、とくに高次元多峰性問題における大域的最適化性能の向上が期待される。

1.4 本論文の構成

本論文の構成は、以下の通りである。

まず、第2章では、非線形力学系を用いた大域的最適化手法のうち、離散化勾配系・連続散逸系・連続保存系から発生するカオス軌道を用いた最適化計算モデルに注目し、上下制限約問題に対する適用を中心として、その計算モデルの導出とその計算特性について議論する。とくに、離散化勾配系から発生するカオス軌道を利用した離散化勾配系カオスモデルについては、その安定性解析から、内部状態表現型と変数変換型の制約閉じ込めモデルの問題点について指摘し、この問題点を持たない制約領域トラス化型モデルの有効性を指摘する。さらに、この考察をもとに、目的関数値が小さい領域ほどカオスの探索点に対して安定で収束しやすくなる目的関数変換法を考え、この変換法を利用した最適化手法「水抜き法」を提案する。連続時間非線形散逸系から発生するカオス軌道を利用した非線形散逸系モデルについては、そのオイラー差分化による離散化モデルを導出した上で、非線形散逸項の選択と慣性質量調整による探索特性の調整について考察する。連続保存系から発生するカオス軌道を利用した高次元アルゴリズムについては、運動領域の狭め方に対して探索履歴を利用した改良手法を提案し、さらにその離散化モデルをSymplectic Euler公式を用いて導出することで、保存力学系としての性質を保ちながら、運動領域を戦略的に狭めていくことができる離散化モデルを導出する。そして、複数の100変数多峰性関数への適用シミュレーションを通して、これらモデルの計算特性とその問題点について体系的に議論する。

第3章では、本論文での提案手法である「非線形力学系モデルを駆動モデルとして自律

探索を行う複数の個体によって結合系を形成する新しい最適化モデル」について、結合非線形振動子系という視点から体系的な考察を行う。具体的には、まず、一般の結合振動子系についての結合構造の種類について整理した上で、この非線形結合振動子系の同調現象について考える。とくに、本論文で扱う最適化モデルの多くが離散時間系のカオス軌道を利用したモデルであることに注目し、離散時間系のカオス軌道に対しても安定的に同調現象を発現する新しい結合モデルの導出を行い、これを多点型離散化勾配系カオスモデルに適用することで、カオス的最適化モデルにおける同調現象発現について確認する。さらに、安定性解析を含めた上で従来型の結合モデルとの比較を行い、新しい結合モデルの離散時間カオスモデルでの安定的な同調現象発現に対する有効性について考察する。また、MHの中からPSOモデルについてとりあげ、その計算特性について簡単に述べた上で、MHが一般的に抱える問題点について指摘する。

第4章では「非線形力学系モデルによって駆動されて自律的な大域的探索を行う複数の個体の軌道が、結合構造の導入によって優秀（エリート）個体に同調していくことで大域的最適化を実現する、新しい多点型大域的最適化モデル」の提案を行う。具体的には、第2章で解説する非線形力学系モデルのうち離散時間モデルである、離散化勾配系カオスモデル、水抜き法、離散化非線形散逸系モデル、離散化高次元アルゴリズムによって駆動する複数の探索個体を準備し、これら探索個体群を、第3章で解説するエリート型移流結合させることで、目的関数値の小さいエリート個体へ各個体が同調していくエリート結合型最適化計算モデルを構築する。そして、エリート個体への引き込みを想定したいくつかのシミュレーションを通して、結合係数設定に対する考察を行い、最後に複数の100変数多峰性関数への適用シミュレーションを通してその有効性を確認する。

第5章では、まず、第2章で提案した「水抜き法」と第4章で提案した「エリート結合型非線形力学系モデル」について、勾配情報を用いる他の大域的最適化手法との比較を行い、その有効性を再評価する。そして、本論文全体のまとめを行った上で、今後の課題や展望について述べる。

なお、付録Aでは、典型的なベンチマーク問題の問題点について指摘し、これら問題を解決した改良型ベンチマーク問題を提案する。また、付録Bでは、自動微分を用いることを前提として勾配計算と目的関数計算が混在するような手法に対する計算量評価の基準を与える。これら考察と提案は、大域的最適化手法の性能比較に対して有用な指針を与えるものである。

第2章 非線形力学系モデルによる大域的最適化手法

2.1 上下限制約条件付最適化問題に対する勾配系最適化計算モデル

N 次元ユークリッド空間 R^N を定義域とする連続微分可能な実数値関数 $E(\mathbf{x}) : R^N \rightarrow R$ を最小にする $\mathbf{x} \in R^N$ を求める, いわゆる無制約最適化問題

$$\min_{\mathbf{x}} E(\mathbf{x}) \quad (2.1)$$

を考える. この最適化問題 (2.1) 式に対して

$$E(\mathbf{x}^o) \leq E(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in R^N \quad (2.2)$$

を満たす $\mathbf{x}^o \in R^N$ を「大域的最適解」とよぶ. また, $\mathbf{x}^* \in R^N$ に対してある近傍 $B(\mathbf{x}^*; r)$ が存在して

$$E(\mathbf{x}^*) \leq E(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in B(\mathbf{x}^*; r) \quad (2.3)$$

が成り立つとき, \mathbf{x}^* を「局所的最適解 (局所解)」とよぶ. さらに

$$E(\mathbf{x}^*) < E(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in B(\mathbf{x}^*; r) \cap \mathbf{x}^* \neq \mathbf{x} \quad (2.4)$$

が成り立つとき, \mathbf{x}^* を「局所的唯一最適解 (孤立局所解)」とよぶ. 最適化問題 (2.1) 式に対するこれら最適解の存在が仮定された下で, それらを求める計算手法は最適化手法とよばれる. 目的関数 $E(\mathbf{x})$ が凸関数であり, 局所的最適解が唯一で大域的最適解と一致する場合は, 勾配などを利用した降下法を適用すれば, ただちに大域的最適解を得ることができる. しかし, 目的関数 $E(\mathbf{x})$ が非凸関数であり, 局所的最適解の唯一性を仮定できない場合, 局所的最適解がすべて孤立局所解であると仮定しても, 制約条件がなく定義域がユークリッド空間全域である場合, 無限個の局所解が存在する可能性がある. 離散的に無限個存在する可能性がある孤立局所解の中で, そのすべてを考慮しつつ大域的最適解 \mathbf{x}^o を求めることは, 現実的には不可能であると考えられる. そこで本論文では, 目的関数 $E(\mathbf{x})$ の孤立局所解を有限個に限定することを目的として, 目的関数 $E(\mathbf{x})$ の定義域を有界領域

$$S = \{\mathbf{x} \mid p_i < x_i < q_i, \quad i = 1, \dots, N\} \quad (2.5)$$

とし

(仮定) (2.5) 式による開集合は十分広く取られており, 目的関数 $E(\mathbf{x})$ の大域的最適解

は、その有界領域の内部に含まれる。

とした下で、上下制限約条件付最適化問題

$$\min_{\mathbf{x}} E(\mathbf{x}) \quad (2.6a)$$

$$\text{subj.to } p_i < x_i < q_i, i = 1, \dots, N \quad (2.6b)$$

を考える。なお、以降では特に記さない限り、 $i = 1, \dots, N$ とする。ここで、上述の仮定の成立が実用上必ずしも確認できず、大域的最適解が定義域の境界に存在しえる場合は、障壁関数を用いて境界上の大域的最適解を定義域内部に摂動させた拡大目的関数最適化問題

$$\min_{\mathbf{x}} E(\mathbf{x}) + \frac{1}{\tau} H_1(\mathbf{x}) \quad (2.7a)$$

$$H_1(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^N \{(x_i - p_i) \log(x_i - p_i) + (q_i - x_i) \log(q_i - x_i)\} \quad (2.7b)$$

$$\text{subj.to } p_i < x_i < q_i \quad (2.7c)$$

$$\text{where } \tau \gg 1 \quad (2.7d)$$

を考えればよい。(2.6)式、(2.7)式のいずれの場合においても、その上下制限約は、最適化問題として定式化された制約条件ではなく、局所解の個数を有限個に限定するために課した制約条件であることを強調しておく。なお、上述のように目的関数 $E(\mathbf{x})$ の定義域を有界領域内に限定することは、これまで提案されてきた定義域を広く探索する機能を持った大域的最適化手法 (SA, PSO, GA など) においても、一般的に行われていることを付記しておく。本章では、非線形力学系を用いた大域的最適化手法のうち、離散化勾配系・連続散逸系・連続保存系から発生するカオス軌道を用いた最適化計算モデルに注目し、最適化問題(2.6)式 (もしくは(2.7)式) に対する適用についてその計算特性を論じる。また、連続系モデルについては、その離散化モデルについても考察する。

2.2 非線形勾配系最適化計算モデル

無制限の最適化問題を解く最も単純な手法として勾配系モデル

$$\frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} = -\nabla E(\mathbf{x}(t)) \quad (2.8)$$

をあげることができるが、勾配系モデルから得られる最適解は、その初期点近傍の局所解であり、大域的最適化手法として有効な手法とはいえない。勾配系モデルに対して大域的探索能力を与える手法として、(2.8)式の軌道を上下制限約内に閉じ込め、オイラー差分化し不安定化させることで、離散時間系のカオス軌道を発生させる、離散化勾配系カオスモデル (DGCM : Discretized Gradient Chaos Model)^[18, 19, 20, 21] が提案されている。DGCMは、上下制限約領域への閉じ込め方について2通りの方法が存在する。また、制約領域へ閉じ込めるモデルを構築する代わりに、制約領域そのものをトーラス化し、この無制限トーラス空間上で、勾配系モデルを不安定化させることで、離散時間系のカオス軌道を発生させるモデルが提案されている^[38, 39]。本節では、これらカオスモデルの導出を行い、さらに、それらモデルの力学的解析^[38, 39, 40, 41, 42, 43, 44] から、得られる最適解とその問題点について考察する。

2.2.1 内部状態表現型モデルとその離散化カオス

最適化問題 (2.6) 式に対し, (2.6b) 式を考慮せずに勾配系モデル (2.8) 式を適用すると, その探索軌道は, 直ちに (2.6b) 式の上下限制約を侵害してしまう. そこで, この軌道を (2.6b) 式の制約条件内部に閉じ込めるために, (2.6b) 式の境界に近づくほど探索点の速度を縮退させるような可変計量行列^[45]

$$M(\mathbf{x}) = \text{diag} \left[\frac{q_i - p_i}{(x_i - p_i)(q_i - x_i)} \right] \quad (2.9)$$

の逆行列 $M^{-1}(\mathbf{x})$ を (2.8) 式の右辺に施したモデル

$$\frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} = -M^{-1}(\mathbf{x}(t)) \nabla E(\mathbf{x}(t)) \quad (2.10)$$

を考える. これを成分表示すると

$$\frac{dx_i(t)}{dt} = - \frac{(x_i(t) - p_i)(q_i - x_i(t))}{q_i - p_i} \frac{\partial E(\mathbf{x}(t))}{\partial x_i} \quad (2.11)$$

となる. なお, (2.11) 式は一般にブレーキ付最急降下法モデルともよばれる. つぎに, 無制約の内部状態変数 \mathbf{u} を導入した表現に (2.11) 式を書き換える. 変数 \mathbf{x} を出力量, それを与える内部状態量を $\mathbf{u} = [u_1, \dots, u_N]^T$ とし, 両者の関係が

$$x_i(t) = f(u_i(t)) \quad (2.12)$$

で書けるとする. (2.12) 式の両辺を t で微分すると

$$\frac{dx_i(t)}{dt} = \frac{df(u_i(t))}{du_i} \frac{du_i(t)}{dt} \quad (2.13)$$

となるので, (2.11) 式と比較すると

$$\frac{df(u_i(t))}{du_i} = \frac{dx_i(t)}{du_i} = \frac{(x_i(t) - p_i)(q_i - x_i(t))}{q_i - p_i} \quad (2.14a)$$

$$\frac{du_i(t)}{dt} = - \frac{\partial E(\mathbf{x}(t))}{\partial x_i} \quad (2.14b)$$

となる. 微分方程式 (2.14a) 式の変数分離形から

$$x_i(t) = f(u_i(t)) = \frac{q_i + p_i \exp(-u_i(t))}{1 + \exp(-u_i(t))} \quad (2.15)$$

が得られるので, (2.14b) 式と組み合わせれば, (2.11) 式と等価な内部状態表現モデルとして

$$\frac{du_i(t)}{dt} = - \frac{\partial E(\mathbf{x}(t))}{\partial x_i} \quad (2.16a)$$

$$x_i(t) = \frac{q_i + p_i \exp(-u_i(t))}{1 + \exp(-u_i(t))} \quad (2.16b)$$

が得られる.

ところで、最適化問題 (2.6) 式の最適解が上下限制約 (2.6b) 式の境界上にある場合、対応する内部状態が発散してしまう。このことを回避するため、最適解を上下限制約領域内に摂動させるエントロピー型障壁関数 (2.7b) 式を考え、これを目的関数 $E(\mathbf{x})$ に加えた新たな最適化問題 (2.7) 式を考える。エントロピー型障壁関数 $H_1(\mathbf{x})$ の \mathbf{x} に関する偏微分が

$$\frac{\partial H_1(\mathbf{x})}{\partial x_i} = \log \left(\frac{x_i - p_i}{q_i - x_i} \right) \quad (2.17)$$

であり、(2.16b) 式から

$$u_i(t) = \log \left(\frac{x_i(t) - p_i}{q_i - x_i(t)} \right) \quad (2.18)$$

であるので、最適化問題 (2.7) 式に対する内部状態表現モデルとして

$$\frac{d\mathbf{u}(t)}{dt} = -\frac{1}{\tau}\mathbf{u}(t) - \nabla E(\mathbf{x}(t)) \quad (2.19a)$$

$$x_i(t) = \frac{q_i + p_i \exp(-u_i(t))}{1 + \exp(-u_i(t))} \quad (2.19b)$$

が得られる。これを離散化幅 $\Delta T = t/k > 0$ でオイラー差分化すると

$$\mathbf{u}(k+1) = \left(1 - \frac{\Delta T}{\tau}\right) \mathbf{u}(k) - \Delta T \nabla E(\mathbf{x}(k)) \quad (2.20a)$$

$$x_i(k) = \frac{q_i + p_i \exp(-u_i(k))}{1 + \exp(-u_i(k))} \quad (2.20b)$$

$$\text{where } \tau \gg 1 \quad (2.20c)$$

が得られる。(2.20) 式の離散化幅 ΔT を大きくとると、その探索軌道は上下限制約 (2.7c) 式の内部に閉じ込められたカオス軌道になることが知られている。本論文では、このモデルを「内部状態表現型 DGCM」とよぶ。このカオス軌道を用いた最適化手法としては、まず ΔT を大きくとってカオス軌道を発生させ制約領域内全域を探索させ、 ΔT を徐々に小さくしていくことで局所探索へ推移させる、いわゆるカオスアニーリングを用いた手法が一般的である。すなわち、アニーリングの方法として線形アニーリングを採用し、これを (2.20) 式に適用したモデル

$$\mathbf{u}(k+1) = \left(1 - \frac{\Delta T(k)}{\tau}\right) \mathbf{u}(k) - \Delta T(k) \nabla E(\mathbf{x}(k)) \quad (2.21a)$$

$$x_i(k) = \frac{q_i + p_i \exp(-u_i(k))}{1 + \exp(-u_i(k))} \quad (2.21b)$$

$$\Delta T(k) = \Delta T_{\max} \left(1 - \frac{k}{k_{\max}}\right) \quad (2.21c)$$

$$\text{where } \Delta T_{\max}, k_{\max} > 0, \tau \gg 1 \quad (2.21d)$$

を用いて最適化を行う。

2.2.2 変数変換型モデルとその離散化カオス

前項と同様に、最適化問題 (2.6) 式に対し、その制約条件 (2.6b) 式を常に侵害しない勾配系最適化モデルを考える。最適化問題 (2.6) 式の変数 \mathbf{x} を 1 階連続微分可能な変換関数 $\phi: R^N \rightarrow S$ を用いて

$$x_i = \phi_i(\mathbf{y}) \quad (2.22)$$

という関係を持つ無制約な変数 \mathbf{y} へ変換すると、最適化問題 (2.6) 式は

$$\min_{\mathbf{y}} E(\phi(\mathbf{y})) \quad (2.23)$$

へと等価変換される。変換問題 (2.23) 式では、変数 \mathbf{y} に制約が課せられていない代わりに、関数 ϕ の値域が定義域 S に限定される。したがって、この変換問題 (2.23) 式において \mathbf{y} 空間上で勾配系モデルを構築し、変換関数 (2.22) 式を通して \mathbf{x} を観測すれば、制約条件を常に侵害しない勾配系最適化モデル

$$\frac{dy_i(t)}{dt} = - \sum_{j=1}^N \frac{\partial E(\mathbf{x}(t))}{\partial x_j} \frac{\partial \phi_j(\mathbf{y}(t))}{\partial y_i} \quad (2.24a)$$

$$x_i(t) = \phi_i(\mathbf{y}(t)) \quad (2.24b)$$

を構築することができる。これを離散化幅 $\Delta T = t/k > 0$ でオイラー差分化すると

$$y_i(k+1) = y_i(k) - \Delta T \sum_{j=1}^N \frac{\partial E(\mathbf{x}(k))}{\partial x_j} \frac{\partial \phi_j(\mathbf{y}(k))}{\partial y_i} \quad (2.25a)$$

$$x_i(k) = \phi_i(\mathbf{y}(k)) \quad (2.25b)$$

が得られる。本論文では、このモデルを「変数変換型 DGCM」とよぶ。たとえば、 ϕ として、(2.20b) 式と同様の

$$x_i = \phi(y_i) = \frac{q_i + p_i \exp(-y_i)}{1 + \exp(-y_i)} \quad (2.26)$$

を用いると、障壁関数

$$H_2(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left\{ \log \left(\frac{x_i - p_i}{q_i - x_i} \right) (= y_i) \right\}^2 \quad (2.27)$$

を考慮した最適化問題に対する変数変換型 DGCM は、(2.25) 式に関して

$$y_i(k+1) = \left(1 - \frac{\Delta T}{\tau} \right) y_i(k) - \Delta T \frac{\partial E(\mathbf{x}(k))}{\partial x_i} \frac{d\phi(y_i(k))}{dy_i}, \quad \tau \gg 1 \quad (2.28a)$$

$$x_i(k) = \phi(y_i(k)) = \frac{q_i + p_i \exp(-y_i(k))}{1 + \exp(-y_i(k))}, \quad \frac{d\phi(y_i)}{dy_i} = \frac{(q_i - p_i) \exp(-y_i)}{\{1 + \exp(-y_i)\}^2} \quad (2.28b)$$

と与えられる。このほかにも、 ϕ に周期関数を用いた変換関数

$$x_i = \phi(y_i) = \frac{q_i - p_i}{2} (\sin(y_i) + 1) + p_i \quad (2.29)$$

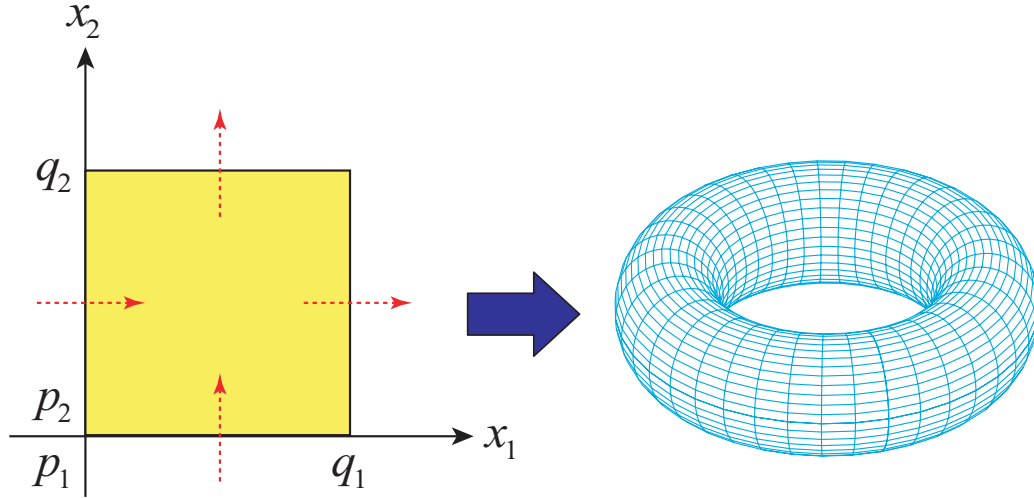


Fig. 2.1 The Image of Toroidalization

を採用した場合の変数変換型 DGCM は, (2.25) 式に関して

$$y_i(k+1) = y_i(k) - \Delta T \frac{\partial E(\mathbf{x}(k))}{\partial x_i} \frac{d\phi(y_i(k))}{dy_i} \quad (2.30a)$$

$$x_i(k) = \phi(y_i(k)) = \frac{q_i - p_i}{2} (\sin(y_i(k)) + 1) + p_i, \quad \frac{d\phi(y_i)}{dy_i} = \frac{q_i - p_i}{2} \cos(y_i(k)) \quad (2.30b)$$

と与えられる.

2.2.3 制約領域トーラス化型モデルとその離散化カオス

上下限制約領域を常に侵害しない勾配系モデルとして, 制約領域のトーラス化^[46]によるモデルが提案されている^[38, 39]. この手法では, 上下限制約の上限と下限をつなげてしまうことで, 探索空間を無制約なトーラス空間に変換し, このトーラス空間上で探索を行うことで制約領域内への閉じ込めを実現する (Fig. 2.1). 具体的には, 最適化モデルによっていったん計算された探索点の位置 $\hat{\mathbf{x}}$ に対し

$$\tilde{f}(\hat{x}_i) = \begin{cases} x_i, & p_i < \hat{x}_i < q_i \\ (\hat{x}_i - p_i) \bmod (q_i - p_i) + p_i, & \hat{x}_i \geq q_i \\ (\hat{x}_i - q_i) \bmod (q_i - p_i) + q_i, & \hat{x}_i \leq p_i \end{cases} \quad (2.31)$$

なる変換関数を通した結果を次の探索点の位置として採用することで探索空間のトーラス化を実現する. この制約領域のトーラス化を用いて離散化勾配系カオスモデルを構築すると

$$\hat{\mathbf{x}}(k+1) = \mathbf{x}(k) - \Delta T \nabla E(\mathbf{x}(k)) (= \mathbf{g}(\mathbf{x})) \quad (2.32a)$$

$$x_i(k+1) = \tilde{f}(\hat{x}_i(k+1)) \quad (2.32b)$$

Table 2.1 Parameters of Annealing type DGCMwT

Parameter	Explanation	How to set
k_{\max}	Steps of a search	Fixed value
ϵ_g	Gradient norm value used as the criterion for local search convergence	Fixed value
ΔT_{\max}	Initial value of the sampling parameter	It is set so that the chaotic trajectory is generated in initial state.

$$\tilde{f}(\hat{x}_i) = \begin{cases} \hat{x}_i, & p_i < \hat{x}_i < q_i \\ (\hat{x}_i - p_i) \bmod (q_i - p_i) + p_i, & \hat{x}_i \geq q_i \\ (\hat{x}_i - q_i) \bmod (q_i - p_i) + q_i, & \hat{x}_i \leq p_i \end{cases} \quad (2.32c)$$

となる．本論文では，このモデルを「制約領域トーラス化型 DGCM (DGCMwT : DGCM with Toroidalization)」とよぶ．さらに，このモデルに対してカオスアニーリングを付加したモデルは

$$\dot{\mathbf{x}}(k+1) = \mathbf{x}(k) - \Delta T(k) \nabla E(\mathbf{x}(k)) \quad (2.33a)$$

$$x_i(k+1) = \tilde{f}(\hat{x}_i(k+1)) \quad (2.33b)$$

$$\Delta T(k) = \Delta T_{\max} \left(1 - \frac{k}{k_{\max}}\right) \quad (2.33c)$$

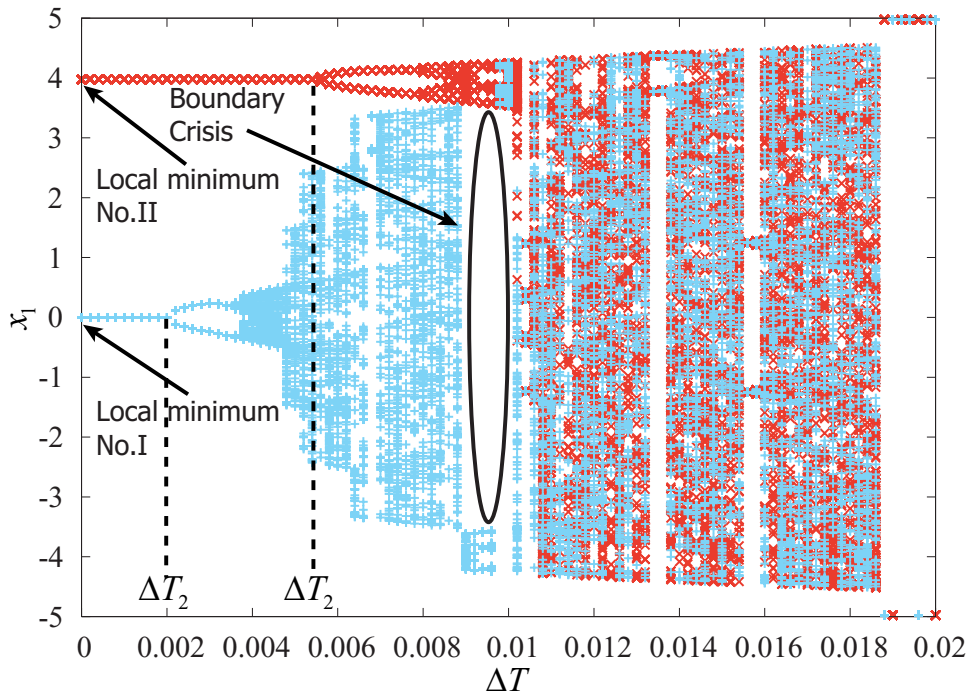
$$\text{where } \Delta T_{\max}, k_{\max} > 0, \tau \gg 1 \quad (2.33d)$$

となる．このモデルを「徐冷型 DGCMwT」とよぶ．この徐冷型 DGCMwT の Pseudo Code を付録 C 章の C.2 節に示す．また，C.2 節の徐冷型 DGCMwT で用いるパラメータを Table 2.1 に示す．

2.2.4 各種の離散化勾配系カオスモデルの計算特性

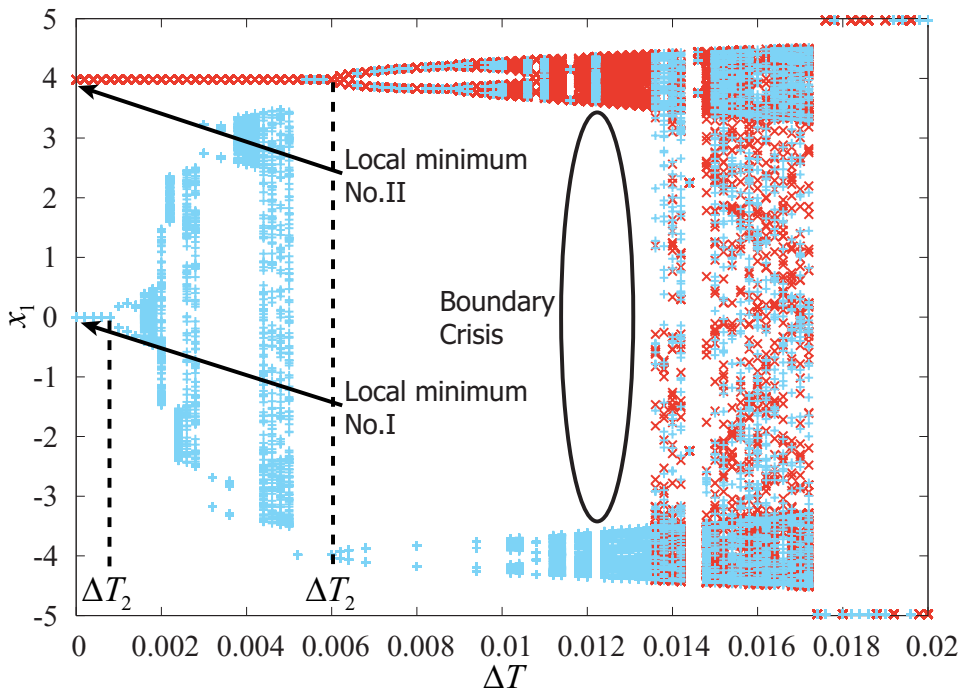
本項では，前述した各種の離散化勾配系カオスモデルについて，それぞれの計算特性とその収束解について考察する [38, 40, 41, 42, 43, 44]．

まず，内部状態表現型 DGCM(2.21) 式と変数変換型 DGCM(2.25) 式によって得られる最適解について考える．ベンチマーク問題 Prob.7 (Original Rastrigin $N = 1$, 付録 A.2 節を参照) に対して，内部状態表現型 DGCM(2.20) 式，変数変換型 DGCM の指数関数型 (2.28) 式，変数変換型 DGCM の周期関数型 (2.30) 式をそれぞれ適用して，各局所解 No.I ($x^* = 0.0$), No.II ($x^* = 3.9789$) から探索を開始した場合の ΔT に対する収束点の分岐図を Figs. 2.2 ~ 2.4 にそれぞれ示す．各カオスモデルを用いて線形アニーリングによって最適化を行う際の軌道は， ΔT_{\max} をカオス領域となる値に， k_{\max} を十分に大きい値にとり，Figs. 2.2 ~ 2.4 の ΔT を大きい値から小さい値に遷移させた場合，言い換えれば，図中の右から左へ遷移させた場合，No.II の局所解に収束する．これは，No.II に対する軌道の固定点収束と 2 周期振動の分岐点（以降「2 周期解分岐点」とよぶ） $\Delta T_2(\mathbf{x}^*)$ が，すべての局所解の中で最も大きく，軌道が不安定化していくとバウンダリクライシスが発生せずカオス軌道へ



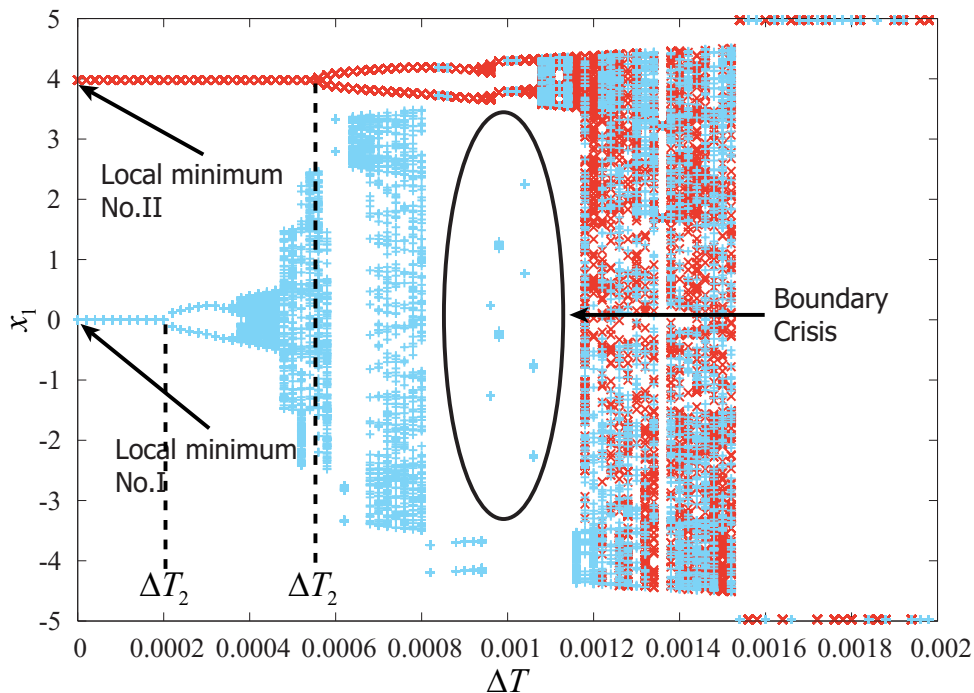
+ The search starts from local minima No.I. × The search starts from local minima No.II.

Fig. 2.2 Bifurcation Diagrams of Application of Inner State Expression Type DGCM



+ The search starts from local minima No.I. × The search starts from local minima No.II.

Fig. 2.3 Bifurcation Diagrams of Application of Variables Transformation Type DGCM (Exponential)



+ The search starts from local minima No.I. x The search starts from local minima No.II.

Fig. 2.4 Bifurcation Diagrams of Application of Variables Transformation Type DGCM (Periodic)

遷移しているためである。この分岐のシナリオによって決まる収束性の議論は、目的関数としてプラトーの存在しない一般の多峰性関数において有効である。この $\Delta T_2(\mathbf{x}^*)$ の大小には、各局所解に対する軌道安定性が関係している。

ここで、任意の局所解 \mathbf{x}^* に対する軌道安定性を考える。内部状態表現型 DGCM において (2.21b) 式により局所解 \mathbf{x}^* に対応する内部状態の不動点、変数変換型 DGCM において (2.25b) 式により局所解 \mathbf{x}^* に対応する変数 \mathbf{y} の不動点をあわせて \mathbf{z}^* と統一して表し、それぞれのダイナミクス (2.21a), (2.25a) 式の右辺を \mathbf{g} と統一して表す (すなわち、 $\mathbf{z}(k+1) = \mathbf{g}(\mathbf{z}(k))$)。ある不動点 \mathbf{z}^* に対する軌道安定性は、不動点近傍の点 $\mathbf{z}^* + \delta\mathbf{z}$ の運動を考えることで決定できる。 $\mathbf{z}(k+1) = \mathbf{z}^* + \delta\mathbf{z}(k+1) = \mathbf{g}(\mathbf{z}^* + \delta\mathbf{z}(k))$ を考えると、テイラー展開

$$\mathbf{g}(\delta\mathbf{z}(k) + \mathbf{z}^*) = \mathbf{g}(\mathbf{z}^*) + D\mathbf{g}(\mathbf{z}^*)\delta\mathbf{z}(k) + \dots \quad (2.34)$$

の1次近似から

$$\mathbf{z}^* + \delta\mathbf{z}(k+1) = \mathbf{g}(\mathbf{z}^*) + D\mathbf{g}(\mathbf{z}^*)\delta\mathbf{z}(k) \quad (2.35a)$$

$$\delta\mathbf{z}(k+1) = D\mathbf{g}(\mathbf{z}^*)\delta\mathbf{z}(k) \quad (2.35b)$$

となる．ここで， $Dg(\mathbf{z}^*)$ はヤコビ行列

$$Dg(\mathbf{z}^*) = \begin{pmatrix} \frac{\partial g_1(\mathbf{z}^*)}{\partial z_1} & \cdots & \frac{\partial g_1(\mathbf{z}^*)}{\partial z_N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial g_N(\mathbf{z}^*)}{\partial z_1} & \cdots & \frac{\partial g_N(\mathbf{z}^*)}{\partial z_N} \end{pmatrix} \quad (2.36)$$

である． K 時刻後の軌道 $\mathbf{z}(k+K) = \mathbf{z}^* + \delta\mathbf{z}(k+K)$ を考えると，(2.35b) 式より K 時刻後のずれの大きさは

$$\delta\mathbf{z}(k+K) = \{Dg(\mathbf{z}^*)\}^K \delta\mathbf{z}(k) \quad (2.37)$$

となる．不動点 \mathbf{z}^* に対する軌道安定性は，ずれ $\delta\mathbf{z}(k+K)$ の収束性によって決まるので，(2.37) 式の $\{Dg(\mathbf{z}^*)\}^K$ の解析が問題となる． $Dg(\mathbf{z}^*)$ の固有値をその絶対値が大きい順に $\lambda_1, \dots, \lambda_N$ ，対応する固有ベクトルを $\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N$ ， \mathbf{p}_i を並べた行列を $P = (\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N)$ とすると

$$\{Dg(\mathbf{z}^*)\}^K = P \begin{pmatrix} \lambda_1^K & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \lambda_N^K \end{pmatrix} P^{-1} \quad (2.38)$$

となり

$$\delta\mathbf{z}(k+K) = P \begin{pmatrix} \lambda_1^K & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \lambda_N^K \end{pmatrix} P^{-1} \delta\mathbf{z}(k) \quad (2.39)$$

となる． \mathbf{p}_i は基底ベクトルであるから，任意のベクトルはその線形結合で分解できるので， $\delta\mathbf{z}(k)$ は

$$\delta\mathbf{z}(k) = d_1\mathbf{p}_1 + \cdots + d_N\mathbf{p}_N \quad (2.40)$$

となるので，結局

$$\begin{aligned} \delta\mathbf{z}(k+K) &= P \begin{pmatrix} \lambda_1^K & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \lambda_N^K \end{pmatrix} P^{-1} (d_1\mathbf{p}_1 + \cdots + d_N\mathbf{p}_N) \\ &= P \begin{pmatrix} \lambda_1^K & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \lambda_N^K \end{pmatrix} (d_1\mathbf{e}_1 + \cdots + d_N\mathbf{e}_N) \\ &= d_1\lambda_1^K\mathbf{p}_1 + \cdots + d_N\lambda_N^K\mathbf{p}_N \end{aligned} \quad (2.41)$$

が得られる．したがって，局所解 \mathbf{x}^* に対する軌道安定性は，対応するヤコビ行列 $Dg(\mathbf{z}^*)$ の絶対値最大の固有値 $\lambda_1(\mathbf{z}^*)$ の大きさによって決定される．ここで，内部状態表現型 DGCM(2.21) 式において， $\tau \gg 1$ の下で $Dg(\mathbf{z}^*)$ を具体的に計算すると

$$Dg(\mathbf{z}^*) = I - \Delta T A_1(\mathbf{z}^*) \quad (2.42a)$$

$$A_1(\mathbf{z}^*) = \begin{pmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial z_1} \frac{\partial^2 E(\mathbf{x}^*)}{\partial x_1^2} & \cdots & \frac{\partial x_N}{\partial z_N} \frac{\partial^2 E(\mathbf{x}^*)}{\partial x_N \partial x_1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial x_1}{\partial z_1} \frac{\partial^2 E(\mathbf{x}^*)}{\partial x_1 \partial x_N} & \cdots & \frac{\partial x_N}{\partial z_N} \frac{\partial^2 E(\mathbf{x}^*)}{\partial x_N^2} \end{pmatrix} \quad (2.42b)$$

となり，変数変換型 DGCM の指数関数型 (2.28) 式，周期関数型 (2.30) 式においては

$$D\mathbf{g}(\mathbf{z}^*) = I - \Delta T A_2(\mathbf{z}^*) \quad (2.43a)$$

$$A_2(\mathbf{z}^*) = \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial x_1}{\partial z_1}\right)^2 \frac{\partial^2 E(\mathbf{x}^*)}{\partial x_1^2} & \cdots & \frac{\partial x_N}{\partial z_N} \frac{\partial^2 E(\mathbf{x}^*)}{\partial x_N \partial x_1} \frac{\partial x_1}{\partial z_1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial x_1}{\partial z_1} \frac{\partial^2 E(\mathbf{x}^*)}{\partial x_1 \partial x_N} \frac{\partial x_N}{\partial z_N} & \cdots & \left(\frac{\partial x_N}{\partial z_N}\right)^2 \frac{\partial^2 E(\mathbf{x}^*)}{\partial x_N^2} \end{pmatrix} \quad (2.43b)$$

となる．ただし，以下では $\partial x_i / \partial z_i = [\partial x_i / \partial z_i]_{z_i = z_i^*}$ を意味している．つぎに，2周期解分岐点 $\Delta T_2(\mathbf{x}^*)$ を $\lambda_1(\mathbf{z}^*)$ を用いて導出する．(2.42a), (2.43a) 式から， $A_1(\mathbf{z}^*)$ や $A_2(\mathbf{z}^*)$ の固有値 $\lambda^a(\mathbf{z}^*)$ により， $D\mathbf{g}(\mathbf{z}^*)$ の固有値 $\lambda(\mathbf{z}^*)$ は

$$\lambda_i(\mathbf{z}^*) = 1 - \Delta T \lambda_i^a(\mathbf{z}^*) \quad (2.44)$$

となる．ここで， $\lambda^a(\mathbf{z}^*)$ の絶対値最大の固有値を $\lambda_1^a(\mathbf{z}^*)$ とすると，局所解近傍で $A(\mathbf{z}^*)$ が正定値行列であるから， $0 < \lambda_1^a(\mathbf{z}^*) \leq 2/\Delta T$ の場合は， $|\lambda_i(\mathbf{z}^*)| < 1$ となり，局所解 \mathbf{x}^* は安定となる．一方， $\lambda_1^a(\mathbf{z}^*) > 2/\Delta T$ の場合

$$\lambda_1(\mathbf{z}^*) = 1 - \Delta T \lambda_1^a(\mathbf{z}^*) < -1 \quad (2.45)$$

となり不安定となる．したがって，ある特定の局所解 \mathbf{x}^* に関して，その収束軌道の固定点収束と2周期振動の境界となる2周期解分岐点 $\Delta T_2(\mathbf{z}^*)$ は， $A(\mathbf{z}^*)$ の絶対値最大の固有値 $\lambda_1^a(\mathbf{z}^*)$ により， $\lambda_1(\mathbf{z}^*)$ が安定となる固有値から不安定となる固有値に変わる境界値として

$$\Delta T_2(\mathbf{z}^*) = \frac{2}{\lambda_1^a(\mathbf{z}^*)} \quad (2.46)$$

と求まる．簡単のため1変数問題の場合を考えると，内部状態表現型 DGCM の場合，(2.42) 式から唯一の固有値 $\lambda_1^a(\mathbf{z}^*)$ は

$$\lambda_1^a(\mathbf{z}^*) = \frac{dx}{dz} \frac{d^2 E(\mathbf{x}^*)}{dx^2} \quad (2.47)$$

となるので， $\Delta T_2(\mathbf{z}^*)$ は

$$\Delta T_2(\mathbf{z}^*) = \frac{2}{\frac{dx}{dz} \frac{d^2 E(\mathbf{x}^*)}{dx^2}} \quad (2.48)$$

となる．変数変換型 DGCM の指数関数型や周期関数型の場合，(2.43) 式から唯一の固有値 $\lambda_1^q(z^*)$ は

$$\lambda_1^q(z^*) = \left(\frac{dx}{dz} \right)^2 \frac{d^2 E(x^*)}{dx^2} \quad (2.49)$$

となるので， $\Delta T_2(z^*)$ は

$$\Delta T_2(z^*) = \frac{2}{\left(\frac{dx}{dz} \right)^2 \frac{d^2 E(x^*)}{dx^2}} \quad (2.50)$$

となる．ここで，内部状態表現型 DGCM と変数変換型 DGCM の指数関数型においては

$$\frac{dx}{dz} = \frac{(q-p) \exp(-z)}{\{1 + \exp(z)\}^2} > 0 \quad (2.51)$$

であるので， x^* が上下制限約境界に近づくほど， $\frac{dx}{dz}$ は小さくなる．同様に多変数問題においても， $\lambda_1^q(\mathbf{z}^*)$ は，境界に近い \mathbf{z}^* に対するものほど小さくなると考えられる．したがって，2周期解分岐点 $\Delta T_2(\mathbf{z}^*)$ も境界に近い \mathbf{x}^* に対するものほど大きくなると考えられる．変数変換型 DGCM の周期関数型においては

$$\left(\frac{dx}{dz} \right)^2 = \left(\frac{q_i - p_i}{2} \right)^2 \cos^2(z) \geq 0 \quad (2.52)$$

であり， $(dx/dz)^2$ が最小の 0 に近づく領域は，(2.30b) 式から境界近傍であることがわかる．したがって，同様に，2周期解分岐点 $\Delta T_2(\mathbf{z}^*)$ は境界に近い \mathbf{z}^* に対するものほど大きくなると考えられる．このように内部状態表現型・変数変換型のいずれモデルにおいても，DGCM は，大きい値の ΔT_2 を持つ境界に近い局所的最適解へ収束しやすい傾向を持っており，この点が大域的最適化モデルとしての問題点の 1 つとして指摘される．

つぎに，DGCMwT の 2 周期解分岐点について考える．ある局所解 \mathbf{x}^* に対する (2.32a) 式の $\mathbf{g}(\mathbf{x}^*)$ のヤコビ行列は

$$D\mathbf{g}(\mathbf{x}^*) = I - \Delta T \nabla^2 E(\mathbf{x}^*) \quad (2.53)$$

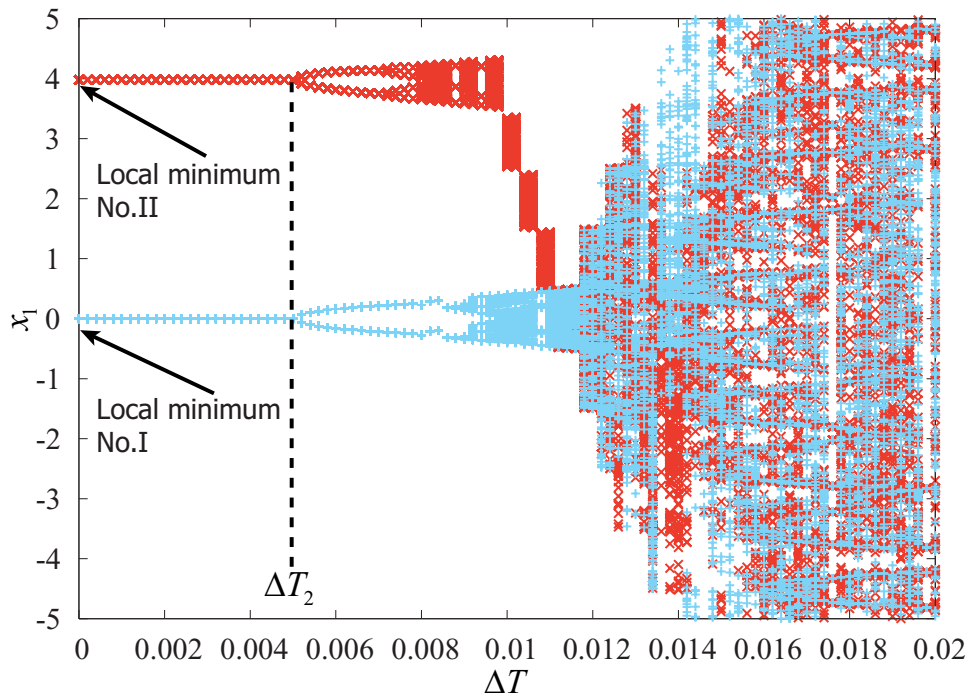
となる．ここで， $\nabla^2 E(\mathbf{x})$ は， $E(\mathbf{x})$ のヘッセ行列である． $\nabla^2 E(\mathbf{x})$ の固有値を $\lambda^{\nabla^2}(\mathbf{x})$ ，そのうち最大固有値を $\lambda_1^{\nabla^2}$ とすると，2周期解分岐点は

$$\Delta T_2(\mathbf{x}^*) = \frac{2}{\lambda_1^{\nabla^2}(\mathbf{x}^*)} \quad (2.54)$$

となる．簡単のために 1 変数の場合を考えると， $\Delta T_2(x^*)$ は

$$\Delta T_2(x^*) = \frac{2}{\frac{d^2 E(x^*)}{dx^2}} \quad (2.55)$$

となる．したがって，DGCMwT は $\frac{d^2 E(x^*)}{dx^2}$ のみが小さい（多変数の場合は $\lambda_1^{\nabla^2}$ が小さい）局所解に収束しやすいといえる．実際，DGCMwT を同様にベンチマーク問題 Prob.7



+ The search starts from local minima No.I. × The search starts from local minima No.II.

Fig. 2.5 Bifurcation Diagrams of Application of DGCMwT

(Original Rastrigin $N = 1$, 付録 A.2 節を参照) に対して適用した場合の分岐図 (Fig. 2.5) をみると, Figs. 2.2 ~ 2.4 にあったような, 制約領域境界付近の局所的最適解へ収束しやすい性質に起因する No.I に対するバウンダリライセンスが解消されていることが確認できる. このように, DGCMwT は, その位置や制約領域に関係なく, 最も安定な局所解を最適解として与える. すなわち, 内部状態表現型 DGCM と変数変換型 DGCM が持っていた「制約境界に近い解に収束しやすい傾向」という問題点を解消しているといえる. よって, 以降本論文では, DGCM を用いる場合は, DGCMwT を採用することにする.

ところで, DGCMwT の軌道が収束しやすい最も安定な局所解は, すべての局所解の中で最も広い引き込み領域を持つ谷の底に存在する. もし目的関数に対して POP がよく成立する場合, このような解は, 目的関数値の小さい解であることが期待される. とくに, 大谷構造 (Big-valley structure: 大量の局所解を持つが, 大域的に凸 (Globally convex) である構造. 組合せ最適化問題の典型的な解構造として知られる) [36] を有する問題の場合, この解は, 大域的最適解かその近傍解である可能性が大きい. このように, DGCMwT は, POP がよく成立する問題に関しては, 優れた集中化戦略を持った手法であるといえる. しかしながら, POP があまり成立しない問題に対しては, 目的関数値を考慮した集中化戦略を持っているとはいえず, また, 軌道が収束する谷は, 1 つのみであり, 多様性についても問題があるといえ, これら問題点の改善が要求される.

2.3 分岐特性調整型カオス最適化手法「水抜き法」

前節の DGCMwT は、その分岐特性の解析から得られる最適解が目的関数値の大小とは関係のない要素で決定されるため、大域的最適化モデルとして有効なモデルとはいえない。そこで本節では、まず、目的関数 $E(\mathbf{x})$ をある変換関数 $f(y)$ で変換することにより、目的関数の大小を考慮した分岐特性の調整を行うことを考える。具体的には、ある閾値より目的関数値が低い領域を平坦化することで、その閾値より低い目的関数値をもつ局所解を一旦埋没させることで、この領域をカオス的挙動をする探索点にとってより強い引き込み領域にする。そして、この閾値を徐々に下げていくことで、より目的関数値が高く安定性が低いために探索点が離脱しやすい元の目的関数の局所解の谷を出現させ、より目的関数値が低い領域へ探索点を閉じ込めながら、目的関数値が最も低い谷にある大域的最適解を得る手法を提案する。さらに、この手法に探索履歴を利用した改良を加え、目的関数値が低い領域への集中化戦略をより強化した手法を提案する [39, 41, 44]。

2.3.1 目的関数変換による分岐特性調整法

最適化問題 (2.6) 式を解くために、目的関数 $E(\mathbf{x})(= y)$ を非線形関数 $f(y) : R^1 \rightarrow R^1$ で変換した $\hat{E}(\mathbf{x})$ を解く代替最適化問題

$$\min_{\mathbf{x}} \hat{E}(\mathbf{x}) = f(E(\mathbf{x})) \quad (2.56a)$$

$$\text{subj.to } p_i < x_i < q_i \quad (2.56b)$$

を考える。ここで、変換関数 $f(y)$ は条件

$$\frac{df(y)}{dy} > 0 \quad (2.57a)$$

$$\frac{d^2f(y)}{dy^2} > 0 \quad (2.57b)$$

を満たすものとする。(2.57) 式の条件のもとでは、代替問題 (2.56) 式に関して、以下の2つの定理が成り立つ。

定理 1 (2.57) 式の条件下では、代替問題 (2.56) 式の局所解と元問題 (2.6) 式の局所解は一致する。

証明 代替目的関数 $\hat{E}(\mathbf{x})$ の勾配は

$$\nabla \hat{E}(\mathbf{x}) = \frac{df(E(\mathbf{x}))}{dy} \nabla E(\mathbf{x}) \quad (2.58)$$

となり、(2.57a) 式を考慮すれば、 $\nabla \hat{E}(\mathbf{x})$ の各成分の正負と元問題の勾配 $\nabla E(\mathbf{x})$ の各成分の正負は一致し、 $\nabla \hat{E}(\mathbf{x}) = 0$ を満たす点と、元問題の勾配が $\nabla E(\mathbf{x}) = 0$ となる点が一致する。さらに、 $\nabla E(\mathbf{x}) = 0$ を満たす \mathbf{x} において $\hat{E}(\mathbf{x})$ のヘッセ行列を計算すると、その i, j 成分は

$$\frac{\partial^2 \hat{E}(\mathbf{x})}{\partial x_i \partial x_j} = \frac{df(E(\mathbf{x}))}{dy} \frac{\partial^2 E(\mathbf{x})}{\partial x_i \partial x_j} \quad (2.59)$$

となり、 \hat{E} と E のヘッセ行列の非負定性も一致する。したがって、代替問題 (2.56) 式の局所解は、元問題 (2.6) 式の局所解と一致する。■

定理 2 (2.57) 式の条件下で、代替問題 (2.56) 式に DGCMwT を適用したときの局所解の安定性は、目的関数値が小さいほど高くすることができる。

証明 代替問題 (2.56) 式に適用した DGCMwT

$$\mathbf{x}(k+1) = \hat{\mathbf{g}}(\mathbf{x}(k)) = \mathbf{x}(k) - \Delta T \nabla \hat{E}(\mathbf{x}(k)) \quad (2.60)$$

の局所解 \mathbf{x}^* の安定性は、そのヤコビ行列 $D\hat{\mathbf{g}}(\mathbf{x}^*)$ の絶対値最大の固有値 $\hat{\lambda}_1$ によって決定される。(2.59) 式において $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$ とおくことにより、 $D\hat{\mathbf{g}}(\mathbf{x}^*)$ は、(2.53) 式と同様に

$$D\hat{\mathbf{g}}(\mathbf{x}^*) = I - \Delta T \frac{df(E(\mathbf{x}^*))}{dy} \nabla^2 E(\mathbf{x}^*) \quad (2.61)$$

と書ける。 $D\hat{\mathbf{g}}(\mathbf{x}^*)$ の固有値を $\hat{\lambda}(\mathbf{x}^*)$ とすると、同様に

$$\hat{\lambda}_i(\mathbf{x}^*) = 1 - \Delta T \frac{df(E(\mathbf{x}^*))}{dy} \lambda_i^{\nabla^2}(\mathbf{x}^*) \quad (2.62)$$

となる。前項と同様の議論から、代替問題に対する 2 周期解分岐点 $\Delta \hat{T}_2$ は、 $\nabla^2 E(\mathbf{x}^*)$ の絶対値最大の固有値 $\lambda_1^{\nabla^2}(\mathbf{x}^*)$ を用いて

$$\Delta \hat{T}_2(\mathbf{x}^*) = \frac{2}{\frac{df(E(\mathbf{x}^*))}{dy} \lambda_1^{\nabla^2}(\mathbf{x}^*)} \quad (2.63)$$

で与えられる。ここで、任意の 2 つの局所解 $\mathbf{x}_1^*, \mathbf{x}_2^*$ を考え、 $E(\mathbf{x}_2^*) > E(\mathbf{x}_1^*)$ とする。このとき、 $df(y)/dy$ は y に関して単調増加であるから

$$\frac{df(E(\mathbf{x}_2^*))}{dy} > \frac{df(E(\mathbf{x}_1^*))}{dy} \quad (2.64)$$

が成立する。代替問題 (2.56) 式における不動点 $\mathbf{x}_1^*, \mathbf{x}_2^*$ における安定性に関して、(2.63) 式を用いて

$$\frac{\Delta \hat{T}_2(\mathbf{x}_1^*)}{\Delta \hat{T}_2(\mathbf{x}_2^*)} = \frac{df(E(\mathbf{x}_2^*))/dy}{df(E(\mathbf{x}_1^*))/dy} \times \frac{\lambda_1^{\nabla^2}(\mathbf{x}_2^*)}{\lambda_1^{\nabla^2}(\mathbf{x}_1^*)} \quad (2.65)$$

を考える。まず、 \mathbf{x}_1^* が \mathbf{x}_2^* より安定な場合、すなわち、元問題 (2.6) 式に対する (2.54) 式において

$$\frac{\Delta T_2(\mathbf{x}_1^*)}{\Delta T_2(\mathbf{x}_2^*)} = \frac{\lambda_1^{\nabla^2}(\mathbf{x}_2^*)}{\lambda_1^{\nabla^2}(\mathbf{x}_1^*)} > 1 \quad (2.66)$$

となっている場合、(2.64) 式と (2.66) 式から、明らかに (2.65) 式に関して

$$\frac{\Delta \hat{T}_2(\mathbf{x}_1^*)}{\Delta \hat{T}_2(\mathbf{x}_2^*)} > 1 \quad (2.67)$$

となる. 一方, \mathbf{x}_2^* が \mathbf{x}_1^* より安定な場合, すなわち, 元問題 (2.6) 式に対する (2.54) 式において

$$\frac{\Delta T_2(\mathbf{x}_1^*)}{\Delta T_2(\mathbf{x}_2^*)} = \frac{\lambda_1^{\nabla^2}(\mathbf{x}_2^*)}{\lambda_1^{\nabla^2}(\mathbf{x}_1^*)} < 1 \quad (2.68)$$

となっている場合でも, (2.64) 式について

$$\frac{df(E(\mathbf{x}_2^*))}{dy} \Big/ \frac{df(E(\mathbf{x}_1^*))}{dy} \gg 1 \quad (2.69)$$

とすることによって, (2.65) 式に関して (2.67) 式の不等式が成り立つようにすることができる. よって, いずれの場合においても, 代替問題 (2.56) 式において, \mathbf{x}_1^* の安定性は \mathbf{x}_2^* より高くなる. ここで, $E(\mathbf{x}_2^*) > E(\mathbf{x}_1^*)$ であったことに留意すれば, (2.69) 式を満たす変換関数 f によって, 元の目的関数 E の値が小さい局所解ほど, 対応する内部状態の安定性を高くすることができる. ■

以上の2つの定理から, (2.57) 式を満たす変換関数 $f(y)$ を用いて目的関数変換した代替問題 (2.56) 式に離散化勾配系カオスモデルを適用した場合, 元問題に適用した場合と比較して, より目的関数値の低い最適解を得る可能性が高くなるといえる.

2.3.2 目的関数の貯水変換

前項で述べた, (2.57) 式を満たす変換関数 $f(y)$ として

$$f(y; \alpha) = y + \frac{1}{\beta} \log \left(1 + e^{-\beta(y-\alpha)} \right) \quad (2.70)$$

を考える. この変換関数において, $\beta = 10$ と固定し (以降, すべて同様の設定とする)¹, α を変化させた場合の y vs $f(y; \alpha)$ の様子を Fig. 2.6 に示す. Fig. 2.6 からわかるように, (2.70) 式は

$$f(y; \alpha) \begin{cases} \approx y, & \text{if } y > \alpha \\ \approx \alpha, & \text{if } y < \alpha \end{cases} \quad (2.71)$$

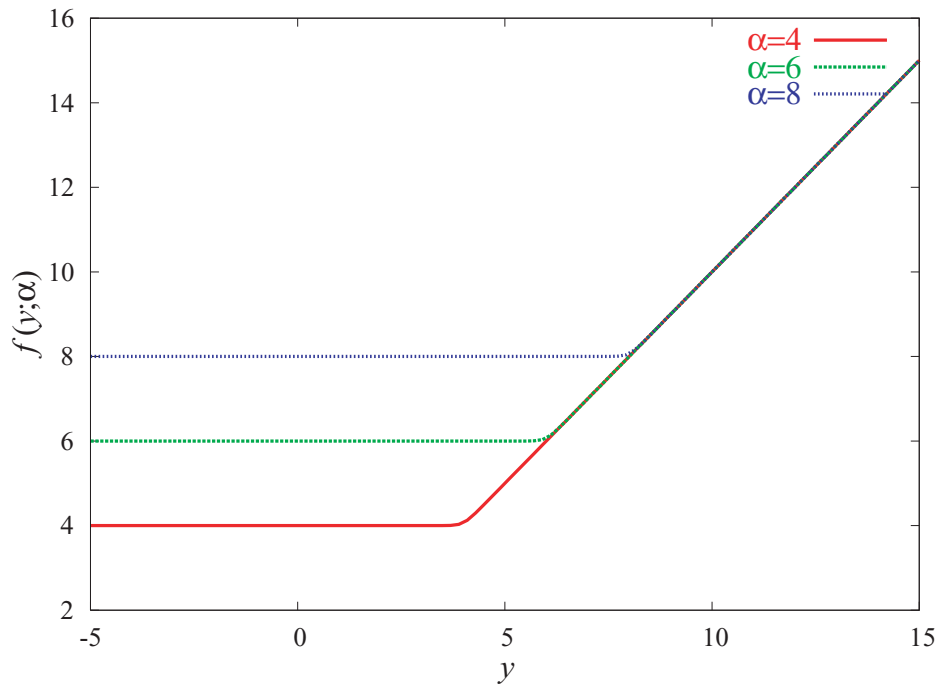
であるから, 代替問題 (2.56) 式の目的関数 (2.56a) 式は

$$\hat{E}(\mathbf{x}) = f(E(\mathbf{x}); \alpha) \begin{cases} \approx E(\mathbf{x}), & \text{if } E(\mathbf{x}) > \alpha \\ \approx \alpha, & \text{if } E(\mathbf{x}) < \alpha \end{cases} \quad (2.72)$$

となる. すなわち, $f(E(\mathbf{x}); \alpha)$ の形状は, $E(\mathbf{x}) > \alpha$ となる領域において元の目的関数の形状と等しく, $E(\mathbf{x}) < \alpha$ となる局所解を持つ谷は, 水が満たされたように平坦化された形状になる. そこで, (2.70) 式による変換を「貯水変換」と, パラメータ α を「水位パラメータ」とそれぞれよぶことにする. ここで, 代替目的関数 $\hat{E}(\mathbf{x}; \alpha) = f(E(\mathbf{x}); \alpha)$ の勾配は

$$\nabla \hat{E}(\mathbf{x}; \alpha) = \frac{1}{1 + e^{-\beta(E(\mathbf{x})-\alpha)}} \nabla E(\mathbf{x}) \quad (2.73)$$

¹経験的に最も良い変換となる値とした


 Fig. 2.6 y vs $f(y; \alpha)$ regarding Eq.(2.70)

となり、この右辺の係数 $\frac{1}{1 + e^{-\beta(E(\mathbf{x}) - \alpha)}}$ は α を閾値としたシグモイド関数となっており、 $E(\mathbf{x}) < \alpha$ となる領域では、勾配 $\nabla \hat{E}(\mathbf{x}; \alpha)$ の大きさは、ほぼゼロに等しくなる（しかし、局所解以外では完全にゼロになることはない）。したがって、代替最適化問題 (2.56) 式に対し、DGCMwT を適用した場合、 $E(\mathbf{x}_1^*) < \alpha$ となる局所解 \mathbf{x}_1^* に対しては、 $\partial f(E(\mathbf{x}_1^*)) / \partial y \approx 0$ である一方、 $E(\mathbf{x}_2^*) > \alpha$ となる局所解 \mathbf{x}_2^* では、 $\partial f(E(\mathbf{x}_2^*)) / \partial y \approx 1$ であるから、 $\lambda_1^{\nabla^2}(\mathbf{x}_1^*)$ と $\lambda_2^{\nabla^2}(\mathbf{x}_2^*)$ の大小に関係なく、 $\Delta \hat{T}_2(\mathbf{x}_1^*) > \Delta \hat{T}_2(\mathbf{x}_2^*)$ となり、 \mathbf{x}_2^* は \mathbf{x}_1^* より不安定な局所解となる。さらに、 \mathbf{x}_1^* の周りは平坦領域であるのに対して、 \mathbf{x}_2^* の周りは元の目的関数の局所解の谷の形状のままであるため、カオスの挙動の探索点にとっては、前者が脱出困難な局所解になるのに対し、後者は離脱しやすい局所解であるといえる。このような性質を生かし、次項では、水位パラメータ α を高い値から低い値へと降下させる、いわば「水抜き」をすることで大域的最適化を図るアルゴリズムを提案する。

2.3.3 「水抜き法」による大域的最適化

本項では、目的関数が形成する谷に水を満たしたごとく、いったん平坦化した後、その水位を徐々に下げていく、いわば「水抜き法」とよぶべき大域的最適化アルゴリズムを提案する。

前節で述べたように、(2.70) 式による目的関数の貯水変換をおこなうと、DGCMwT による探索点を、水位パラメータ α 以上の目的関数値をもつ局所解からは離脱させやすくすると同時に、目的関数値が α 以下の領域に閉じ込めることができる。したがって、この性質を生かすことにより、以下のようなアルゴリズムを設計することができる。

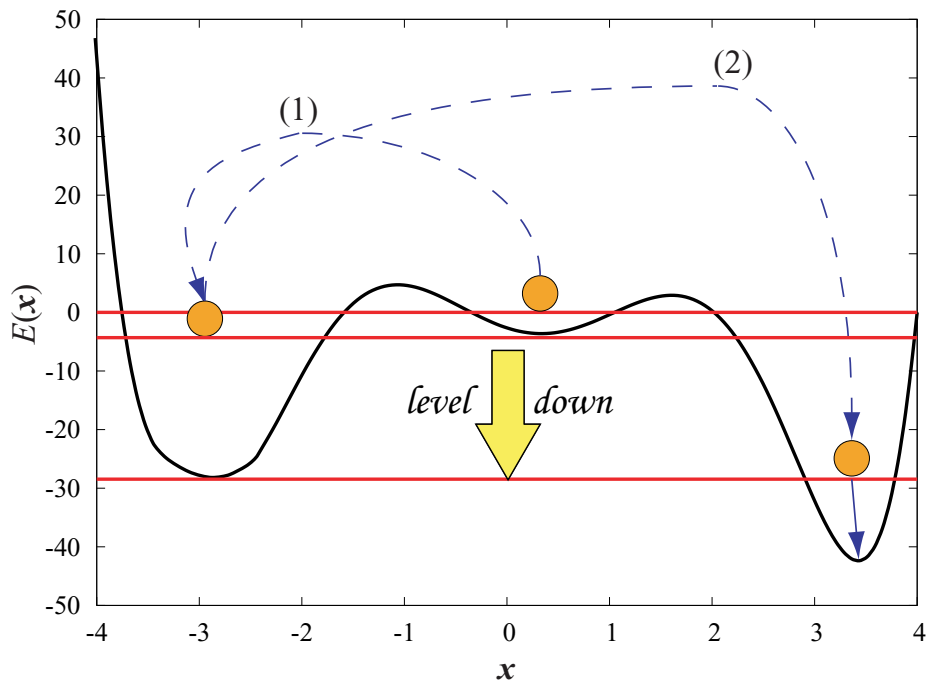


Fig. 2.7 A Concept of "Draining Method"

1. 水位パラメータ α を高い値に設定して探索を開始する。
2. 水位パラメータ α が大きいとき、すなわち、水位が高いときは、局所解が存在する谷がほとんどすべて平坦化されていて、それらがすべて比較的高い安定性を有するために、 T ステップごとのカオス探索のアニーリングにより、それらの局所解のいずれかに探索点が収束する。
3. 水位パラメータ α を下げていくと、それまで水没していた元の目的関数の谷がそのままの形状で水面より上方へ出現するので、そこにある比較的安全性の低い局所解からは探索点が脱出して、より水位の低い平坦化領域へと遷移する。これを繰り返して、終了判定（後述）を満たせば探索を終了し、探索中に得られた最小の解を大域的最適解とする。

以上のコンセプトを図示したものを Fig. 2.7 に示す。この「水抜き法」の概念は、いわば目的関数が形成する凹凸状の谷間にいったん水を満たし、カオス的挙動する探索個体（アメンボのような個体）をその貯水部分に閉じ込めつつ、谷の底の部分から満たした水を抜くプロセスによって、最終的に一番低い谷の部分にその探索個体を閉じ込めるといったイメージで捉えることができる。

ここで、具体的な水位パラメータの下げ方、すなわち、水抜き方法について考える。この方法としては、いくつかの方法が考えられる。まず、文献 [44] で提案した方法について述べる。POP の概念で説明されるように、多くの最適化問題では、より目的関数値の小さい領域の近傍により良い解が存在することが多い。また、そもそも最適化問題において、目的関数値の大きい局所解を求める必要性は低い。したがって、水位パラメータの下げ方としては、 α が高いときは大きく値を下げ、 α が大域的最適値に近づいてきたら小さい幅

で下げていく方法をとることが望ましい。このことから「水抜き方法」として、等比数列型の水位の下げ方を採用する。具体的には、大域的最適値が $E(\mathbf{x}^*) = 0$ の場合

$$\alpha(l+1) = \gamma\alpha(l), \quad 0 < \gamma < 1 \quad (2.74)$$

とする。ここで、 $l = 0, 1, \dots$ は、いわば「水抜き回数 (Draining Steps)」である。大域的最適解が $E(\mathbf{x}^*) \neq 0$ の場合は、各局所解ごとに設定する目標値 E_{desired} を使って、 $\bar{E}(\mathbf{x}) = E(\mathbf{x}) - E_{\text{desired}}$ として、大域的最適値を0 (と予想される値) にした新しい目的関数に対して適用する。具体的なアルゴリズムを List 2.1 に示す。

- **Step1 水位パラメータの初期値設定**

水位パラメータ α の初期値を求めるために、元の目的関数 $E(\mathbf{x})$ に対して DGCMwT (2.32) 式を適用し、解 \mathbf{x}_0^* を求める。 $\alpha = E(\mathbf{x}_0^*) - E_{\text{desired}}$, $\Delta T = \Delta T_{\text{max}}$, $\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{x}_0^*$ とする。

- **Step2 カオス探索実行**

代替目的関数 $\hat{E}(\mathbf{x}; \alpha)$ に対し、 $\tilde{\mathbf{x}}$ を初期点²として、DGCMwT (2.32) 式を T ステップ実行する。その結果を $\tilde{\mathbf{x}}'$ とする。

- **Step3 閉じ込め判定**

If $\|\tilde{\mathbf{x}} - \tilde{\mathbf{x}}'\| < \epsilon_x$ Then

閉じ込めとみなして **Step4** へ

Else

$\Delta T \leftarrow \Delta T - \delta \times \Delta T_{\text{max}}$, $\tilde{\mathbf{x}} = \tilde{\mathbf{x}}'$ とする。

If $\Delta T > 0$ Then

Step2 へ。

Else

Step4 へ。

End If

End If

- **Step4 閉じ込められた谷における局所探索・終了判定**

$\tilde{\mathbf{x}}'$ を初期点として、元の目的関数 $E(\mathbf{x})$ に対し、最急降下法を実行し解 \mathbf{x}^* を求める。

$\alpha \leftarrow \gamma\alpha$, $\Delta T = \Delta T_{\text{max}}$ とする。

If $E(\mathbf{x}^*) < \epsilon_E$ Or $\alpha < \epsilon_\alpha$ Then

\mathbf{x}^* を解として、探索を終了。

Else

Step2 へ。

End If

List 2.1 The Algorithm of “Primitive Draining Method”

²Step4 からループしてきた場合に、この初期点は、Step4 の最急降下法を実行した結果ではなく、前ステップのカオス探索の結果、貯水領域に保存された点であることに注意されたい

List 2.1 の手法は、問題によっては、目標値 E_{desired} が必要、すなわち、あらかじめ大域的最適値を知っておく必要がある。また、水位パラメータ α が下がって、水没していた元の目的関数の谷が水面より上方に出現し、つぎの貯水領域へ遷移する際に、水抜きステップごとに、離散化幅をカオスが発生する値まで戻して探索を行うために、出現した谷近傍を細かく探索せずに、いったん大域的探索を行ってからつぎの貯水領域へ遷移することがある。このような遷移の仕方は、POP に反しているといえる。このように、List 2.1 の手法には、いくつかの問題点が存在する。そこで、文献 [39] では、List 2.1 の問題点を解消した手法を新たに提案した。この改良手法に、さらに修正を加えたアルゴリズムを List 2.2 に示す。

- **Step1 水位パラメータの初期値設定**

水位パラメータ α の初期値を求めるために、元の目的関数 $E(\mathbf{x})$ に対して DGCMwT (2.32) 式を適用し、解 \mathbf{x}_0^* を求める。その時点までに得られた最小の目的関数値を E_{best} とし、 $\alpha = E_{\text{best}}$ として常に更新し、それを与える \mathbf{x}_{best} を記録しておく。 $\Delta T'_{\text{max}} = \Delta T_{\text{max}}$, $\Delta T = \Delta T'_{\text{max}}$, $\tilde{\mathbf{x}}_i = U(p_i, q_i)$ とする。

- **Step2 カオス探索実行**

代替目的関数 $\hat{E}(\mathbf{x}; E_{\text{best}})$ に対し、 $\tilde{\mathbf{x}}$ を初期点として、DGCMwT (2.32) 式を T ステップ実行する。その結果を $\tilde{\mathbf{x}}$ とする。

- **Step3 閉じ込め判定**

If $\|\nabla \hat{E}(\tilde{\mathbf{x}})\| < \epsilon_g$ Then
 閉じ込めとみなして **Step4** へ
 Else
 $\Delta T \leftarrow \Delta T - \delta \times \Delta T'_{\text{max}}$ とする。
 If $\Delta T > 0$ Then
 Step2 へ。
 Else
 Step4 へ。
 End If
 End If

- **Step4 閉じ込められた谷における局所探索・終了判定**

$\tilde{\mathbf{x}}$ を初期点として、元の目的関数 $E(\mathbf{x})$ に対し、最急降下法を実行し解 \mathbf{x}^* を求める。
 $\Delta T'_{\text{max}} \leftarrow \Delta T'_{\text{max}} - \delta \times \Delta T_{\text{max}}$ とする。
 If $E_{\text{best}} < E(\mathbf{x}^o) + \epsilon_E$ Or $\Delta T'_{\text{max}} < 0$ Then
 \mathbf{x}_{best} を解として、探索を終了。
 Else
 $\Delta T = \Delta T'_{\text{max}}$ として、**Step2** へ。
 End If

List 2.2 The Algorithm of “Improved Draining Method” (IDM)

List 2.2 のアルゴリズムは、**Step1, Step4** の下線部にあるように、水位レベルをそれまでに見つかった最小の目的関数値に設定し、さらに、各カオス探索における最大の離散化幅である $\Delta T'_{\max}$ を徐々に減少させることで、カオス的探索点の運動領域を狭めていくことで、目的関数値が小さくなるほどその探索領域を狭めていく探索、すなわち、POP の概念に従った探索を実現している。

2.3.4 探索履歴を利用した改良型水抜き法

前項で提案した List 2.2 の IDM は、探索点が収束した貯水領域の谷底に水位を設定することにより、その谷から即座に探索点を脱出させ、次の貯水領域への遷移を期待するモデルである。POP に従った問題の場合、次の貯水領域は、探索点が脱出した谷のすぐ近傍に存在することが期待されるが、List 2.2 のアルゴリズムでは、探索軌道のカオス性が強いなどの原因で、脱出した谷のすぐ近傍を探索できない場合、次の貯水領域を発見できない可能性がある。List 2.2 のアルゴリズムでは、 $\Delta T'_{\max}$ を徐々に減少させることである程度この問題に対処しているが、本項では、探索履歴を用いた改良を加えることで、脱出した谷近傍への探索の集中化をより強めたモデルを提案する。具体的には、それまでの探索プロセス $i = 0, \dots, k$ の中で最良の点（後述する PSO モデルの **pbest** に相当する点）を記録しておき、この点に DM の探索点を引き寄せる手順を、List 2.2 のアルゴリズムに対して加える。この最良点に対する引き寄せは、DGCMwT による写像と \mathbf{x}_{pb} との内分点による探索点の更新により実現する。具体的には、探索点を DGCMwT (2.32) 式の $\mathbf{g}(\mathbf{x}), \tilde{f}(\hat{x}_i)$ を用いて

$$\hat{\mathbf{x}}(k+1) = \frac{1}{1+c(\tilde{k})} \mathbf{g}(\mathbf{x}(k)) + \frac{c(\tilde{k})}{1+c(\tilde{k})} \mathbf{x}_{pb}(k) \quad (2.75a)$$

$$x_i(k+1) = \tilde{f}(\hat{x}_i(k+1)) \quad (2.75b)$$

$$c(\tilde{k}) = \bar{c} \sin^2 \left(\frac{2\pi\tilde{k}}{\tilde{T}} \right) \quad (2.75c)$$

$$\mathbf{x}_{pb}(k) = \underset{\mathbf{x}(i)}{\operatorname{argmin}} \{E(\mathbf{x}(i)) \mid i = 0, \dots, k\} \quad (2.75d)$$

と更新することで実現する。ただし、 $\mathbf{g}(\mathbf{x})$ は、代替目的関数 $\hat{E}(\mathbf{x}; E(\mathbf{x}_{pb}(k)))$ に対して ΔT を固定した場合の (2.32a) 式で与えられ、 k は、DM 全体を通しての探索ステップ数であり、 \tilde{k} は、各カオス探索ごとの時刻 (List 2.2 **Step2** での時刻、**Step2** 終了時にリセット) である。この (2.75) 式を利用した「探索履歴を利用した改良型水抜き法」の具体的なアルゴリズムを List 2.3 に示す。

- **Step1** 水位パラメータの初期値設定

List 2.2 の **Step1** を実行し、(2.75d) 式を実行する。

- **Step2** カオス探索実行

$\tilde{\mathbf{x}}$ を初期点として、(2.75) 式を T ステップ実行する。その結果を $\tilde{\mathbf{x}}$ とする。

Table 2.2 Parameters of IDM

Parameter	Explanation	How to set
β	β in the transformation function Eq.(2.70)	Fixed value
δ	Decrease rate of the sampling parameter	Fixed value
ϵ_g	Gradient norm value used as the criterion for local search convergence	Fixed value
ϵ_E	ϵ_E in Step4	Fixed value
T	Step number of the chaotic search	Fixed value
ΔT_{\max}	Initial value of the sampling parameter	It is set so that the chaotic trajectory is generated in initial state.

• **Step3** 閉じ込め判定

List 2.2 の **Step3** に同じ.

• **Step4** 閉じ込められた谷における局所探索・終了判定

$\tilde{\mathbf{x}}$ を初期点として, 元の目的関数 $E(\mathbf{x})$ に対し, 最急降下法を実行し解 \mathbf{x}^* を求め, (2.75d) 式を実行する.

$\Delta T'_{\max} \leftarrow \Delta T'_{\max} - \delta \times \Delta T_{\max}$ とする.

If $E(\mathbf{x}_{pb}(k)) < \epsilon_E$ Or $\Delta T'_{\max} < 0$ Then

\mathbf{x}_{pb} を解として, 探索を終了.

Else

$\Delta T = \Delta T'_{\max}$ として, **Step2** へ.

End If

List 2.3 The Algorithm of “Improved Draining Method with Search History” (IDMwSH)

List 2.2 と List 2.3 の Pseudo Code を付録 C 章の C.3 節に示す. また, IDM (List 2.2) で用いるパラメータを Table 2.2 に, IDMwSH (List 2.3) で用いるパラメータを Table 2.3 にそれぞれ示す.

2.3.5 水抜き法関連手法との比較

本節で提案した「水抜き法」同様に目的関数変換を用いる手法が, 文献 [47, 48, 49] でも提案されている. 文献 [47] の手法は, “目的関数全体”の形状を平坦化し, 各局所解間の谷を小さくする座標変換を施すことで, カオス最適化の効率化を目指す手法である. 文献 [48] の手法は, 一度発見した局所解より “目的関数値が高い局所解をすべて削除”し, かつ, その局所解自体を極大解にする関数変換を行って, 一度発見した局所解より目的関数値が低い解を発見しやすくする手法である. 文献 [49] で提案されている手法は, 局所探索によって発見した局所解より目的関数値が低い領域のみを谷として持つ充てん関数とよ

Table 2.3 Parameters of IDMwSH

Parameter	Explanation	How to set
β	β in the transformation function Eq.(2.70)	Fixed value
δ	Decrease rate of the sampling parameter	Fixed value
ϵ_g	Gradient norm value used as the criterion for local search convergence	Fixed value
ϵ_E	ϵ_E in Step4	Fixed value
T	Step number of the chaotic search	Fixed value
\tilde{T}	Period of the attraction to the best solution	$T/2$
ΔT_{\max}	Initial value of the sampling parameter	It is set so that the chaotic trajectory is generated in initial state.
\bar{c}	Weight of the attraction to the best solution	It is set to 0.01 fundamentally. However, it is set to 0.05 in Prob.6 and 0.5 in Prob.5 .

ばれる補助関数を用いて、新たな局所探索の初期点を発見しながら探索を行うトンネリング手法である。これに対して、水抜き法で用いる貯水変換は、ある閾値より“目的関数が低い領域”を“局所的に”平坦化することで、カオス軌道にとっての強力な引き込み領域（脱出困難領域）とする点で、文献 [47, 48, 49] の手法とはまったく異なる概念の目的関数変換であるといえる。

また、文献 [50] では、局所探索によって発見した局所解より目的関数値が ϵ 以上低い点 $\bar{\mathbf{x}}$ を、目的関数を用いた非線形方程式を解くことによって新たに発見し、 $\bar{\mathbf{x}}$ を新たな初期点とした局所探索を繰り返す「 ϵ -近似手法」を提案している。この手法の探索プロセスは、貯水領域の点 $\bar{\mathbf{x}}$ をカオス軌道を用いずに非線形方程式を解くことで発見し、 $\bar{\mathbf{x}}$ から局所探索を行うことで水位を下げていくといえ、改良型水抜き法の探索プロセスをカオスを用いずに実行しているといえる。 ϵ -近似手法の場合、貯水領域上の点 $\bar{\mathbf{x}}$ をヘッセ行列などを考慮しつつ非線形方程式を解くことで求める際の計算量と正確性が、とくに多変数関数において、大きな問題となってくると考えられる。一方、水抜き法で行うカオス軌道を用いた操作は、貯水領域がカオス軌道にとって強力な引き込み領域であるから、非線形方程式を解くことによって求める場合よりはるかに効率的であるといえ、 ϵ -近似手法よりも効率的な探索を行っているといえる。

2.4 非線形散逸系最適化計算モデル

無制約の最適化問題を解く慣性散逸系最適化モデル

$$m \frac{d^2 x_i(t)}{dt^2} + \frac{dx_i(t)}{dt} = -\epsilon \frac{\partial E(\mathbf{x}(t))}{\partial x_i}, \quad m, \epsilon > 0 \quad (2.76)$$

を考える。このモデルは、勾配系モデル (2.8) 式に慣性項を付加したものであり「勾配系モデルで局所的最適解に停留するような初期点からでも、適切な初速度を与えることで勢いをつけて局所解を脱出する」というアイデアに基づいている。つまり、(2.76) 式は、大域的最適解を得る自由度を勾配系モデルより増やしたモデルであるが、依然として、初速度を含めた初期状態依存性という問題が残っている [15]。そこで、単に初速度と慣性を利用して局所解を脱出するのではなく、(2.76) 式の散逸項 $dx_i(t)/dt = \dot{x}_i(t)$ を非線形化することで連続散逸系カオス軌道を発生させ、初期状態に依存することなく能動的に局所解から軌道を脱出させる連続時間非線形散逸系モデル（以降「CNDM : Continuous Nonlinear Dissipative system Model」とよぶ。）が谷 [23] と藤田・安田ら [24] によってそれぞれ提案されている。本節では、まず、CNDM についての紹介を述べた後に、これを上下限制約付最適化問題へ拡張したモデルについて述べる。CNDM は、連続時間系モデルであるので計算コストの面で問題がある。そこで、この点を解消するために、これを離散化したモデルについて述べる。

2.4.1 周期散逸型モデル

谷 [23] は、(2.76) 式の散逸項 $dx_i(t)/dt$ を、探索点の速度 $\dot{x}_i(t)$ とパラメータ ω に依存した非線形抵抗

$$\xi(\dot{x}_i(t), \omega t) = \{d_0 \sin(\omega t) + d_1\} \dot{x}_i(t) + d_2 x_i^2 \operatorname{sgn}\{\dot{x}_i(t)\} \quad (2.77)$$

に置き換えた非線形振動モデルを提案している。非線形抵抗 (2.77) 式の第1項は、角速度 ω で周期的に正抵抗と負抵抗になる時変線形抵抗、第2項は、解軌道の発展を有界にするための2次の正抵抗である。このモデルにおいて、局所解である平衡点は、角速度 ω で周期的に、第1項が正抵抗として働くときはエネルギー散逸により安定化し、負抵抗として働くときは発散構造により不安定化し、それに伴って軌道は局所解間をカオス的に遍歴する。本論文では、この非線形抵抗 (2.77) 式を用いたモデルを「周期散逸型モデル」とよぶ。

2.4.2 徐冷散逸型モデル

藤田・安田ら [24] は、(2.76) 式の散逸項を、探索点の速度 $\dot{x}_i(t)$ とパラメータ d_0 に依存した非線形抵抗

$$\xi(\dot{\mathbf{x}}(t), d_0) = d_1 \left\{ \dot{x}_i(t) - d_0 \dot{x}_i(t) \exp\left(-\frac{\|\dot{\mathbf{x}}(t)\|}{d_2 d_0}\right) \right\} \quad (2.78)$$

に置き換えた非線形振動モデルを提案している。非線形抵抗 (2.78) 式は、探索点が局所解に近づくことでその速度ノルム $\|\dot{\mathbf{x}}(t)\|$ が小さくなると、負抵抗となってエネルギーを受けとることで速度が増して局所解への収束構造を崩すように働き、速度が速いときは正抵抗として働きエネルギーを散逸させる。また、その非線形性は、 d_0 が大きいほど (2.78) 式が負抵抗として働くための $\|\dot{\mathbf{x}}(t)\|$ の範囲を大きくできるという形で制御できる。したがってこのモデルでは、 d_0 の初期値として十分大きな $d_0(0) = d_{0\max}$ をとり、 d_0 を探索終了時間 t_{\max} と現在時間 t で決定される時変パラメータ

$$d_0(t) = d_{0\max} \left(1 - \frac{t}{t_{\max}}\right) \quad (2.79)$$

によって徐々に減少させる, いわゆるアニーリングという操作によって, 探索点の軌道をカオス的軌道から局所解への収束軌道へ移行させることが行われる. 本論文では, この非線形抵抗 (2.78) 式を用いて探索を実行し, そのエネルギー散逸性を (2.79) 式によってアニーリングするモデルを「徐冷散逸型モデル」とよぶ. なお, 徐冷散逸型非線形散逸項を, 慣性系モデルとして解釈できる PSO モデルに対して同様に適用することで, PSO モデルの大域的最適化性能が改善されることが村田ら [51] によって示されている.

2.4.3 上下限制約条件付最適化問題に対する非線形散逸系最適化計算モデル

本項では, CNDM を上下限制約付最適化問題 (2.6) 式に適用できるように拡張したモデルについて考える. CNDM に対しても, 2.2 節で論じた DGCM の場合と同様に, 内部状態表現・変数変換モデルを用いて上下限制約内へ閉じ込める方法 [52], 制約条件のトラス化を用いる方法 [53] が考えられる. また, 連続軌道を用いたモデルであることを考えると, 制約境界面における弾性衝突を用いた手法 [54] も利用できる.

まず, 内部状態表現モデルを用いた手法について考える. 最適化問題 (2.6) 式の制約条件 (2.6b) 式を考慮せずに単に E を最小化する畳み込み積分型勾配系モデル

$$\frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} = -c \int_0^t e^{-a(t-\tau)} \nabla E(\mathbf{x}(\tau)) d\tau, \quad c > 0, a > 0 \quad (2.80)$$

を考える. ここで, (2.80) 式の両辺を t で微分し, $m = 1/a, \epsilon = c/a$ と置くと, 慣性散逸系最適化モデル (2.76) 式が得られる. (2.80) 式から得られる軌道は, ただちに制約条件 (2.6b) 式を侵害してしまう. そこで, 2.2.1 項と同様に, 可変計量行列 (2.9) 式の逆行列を (2.80) 式の右辺に施したモデル

$$\frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} = -c M^{-1}(\mathbf{x}(t)) \int_0^t e^{-a(t-\tau)} \nabla E(\mathbf{x}(\tau)) d\tau \quad (2.81)$$

を考える. これを成分表現すると

$$\frac{dx_i(t)}{dt} = -c \frac{(x_i(t) - p_i)(q_i - x_i(t))}{q_i - p_i} \int_0^t e^{-a(t-\tau)} \nabla E(\mathbf{x}(\tau)) d\tau \quad (2.82)$$

となる. 2.2.1 項と同様に, 無制約の内部状態変数 \mathbf{u} を導入した表現に (2.82) 式を書き換える. 変数 \mathbf{x} を出力量, それを与える内部状態量を \mathbf{u} とし, 両者の関係が (2.12) 式で書けるとする. (2.12) 式の両辺を t で微分すると (2.13) 式となるので, これと (2.82) 式を比較すると

$$\frac{df(u_i(t))}{du_i} = \frac{dx_i(t)}{du_i} = \frac{(x_i(t) - p_i)(q_i - x_i(t))}{q_i - p_i} \quad (2.83a)$$

$$\frac{du_i(t)}{dt} = -c \int_0^t e^{-a(t-\tau)} \nabla E(\mathbf{x}(\tau)) d\tau \quad (2.83b)$$

となる. 2.2.1 項と同様に, (2.83a) 式の変数分離形から (2.15) 式が得られるので, (2.83b) 式と組み合わせれば, (2.82) 式と等価な内部状態表現モデルとして

$$\frac{du_i(t)}{dt} = -c \int_0^t e^{-a(t-\tau)} \nabla E(\mathbf{x}(\tau)) d\tau \quad (2.84a)$$

$$x_i(t) = \frac{q_i + p_i \exp(-u_i(t))}{1 + \exp(-u_i(t))} \quad (2.84b)$$

が得られる。そして、(2.84a)式の両辺を t で微分すれば、上下限制約を侵害しない慣性散逸系モデル

$$m \frac{d^2 u_i(t)}{dt^2} + \frac{du_i(t)}{dt} = -\epsilon \frac{\partial E(\mathbf{x}(t))}{\partial x_i} \quad (2.85a)$$

$$x_i(t) = \frac{q_i + p_i \exp(-u_i(t))}{1 + \exp(-u_i(t))} \quad (2.85b)$$

が得られる。ただし、 $m = 1/a, \epsilon = c/a$ である。さらに、(2.77), (2.78)式の非線形散逸項を、便宜的にパラメータ引数を省略して $\xi(\dot{\mathbf{u}}(t))$ と置くと

$$m \frac{d^2 u_i(t)}{dt^2} + \xi(\dot{\mathbf{u}}(t)) = -\epsilon \frac{\partial E(\mathbf{x}(t))}{\partial x_i} \quad (2.86a)$$

$$x_i(t) = \frac{q_i + p_i \exp(-u_i(t))}{1 + \exp(-u_i(t))} \quad (2.86b)$$

となる。本論文では、このモデルを「内部状態表現型 CNDM」とよぶ。

つぎに、変数変換を用いた手法について考える。2.2.2項と同様に、最適化問題(2.6)式の変数 \mathbf{x} を(2.22)式の関係を持つ無制約な変数 \mathbf{y} へ変換し、最適化問題(2.6)式を等価な無制約最適化問題(2.23)式へ変換する。そして、変換問題(2.23)式において \mathbf{y} 空間上でCNDMを構築し、変換関数(2.22)式を通して \mathbf{x} を観測すれば、制約条件を常に侵害しない慣性散逸系モデル

$$m \frac{dy_i^2(t)}{dt} + \xi(\dot{\mathbf{y}}(t)) = -c \sum_{j=1}^N \frac{\partial E(\mathbf{x}(t))}{\partial x_j} \frac{\partial \phi_j(\mathbf{y}(t))}{\partial y_i} \quad (2.87a)$$

$$x_i(t) = \phi_i(\mathbf{y}(t)) \quad (2.87b)$$

を構築することができる。本論文では、このモデルを「変数変換型 CNDM」とよぶ。変換関数 ϕ については、2.2.2項と同様に、指数関数型の(2.28b)式や、周期関数型の(2.30b)式などが考えられる。

さらに、2.2.3項で述べた制約領域のトーラス化を適用することも可能である。すなわち、速度の状態量 $\mathbf{v}(t)$ を導入して状態方程式化したCNDMと制約条件のトーラス化を実現する(2.31)式の変換関数を用いて

$$\frac{d\hat{x}_i(t)}{dt} = v_i(t) \quad (2.88a)$$

$$\frac{dv_i(t)}{dt} = -\frac{1}{m} \xi(\mathbf{v}(t)) - \frac{\epsilon}{m} \frac{\partial E(\mathbf{x}(t))}{\partial x_i} \quad (2.88b)$$

$$x_i(t) = \tilde{f}(\hat{x}_i(t)) \quad (2.88c)$$

として、トーラス空間上を探索するCNDMを構築すればよい。本論文では、このモデルを「制約領域トーラス化型 CNDM」とよぶ。

また、石亀ら^[54]によって提案された、制約境界面における弾性衝突を用いた手法も利用することができる。この手法では、通常は、探索点を無制約問題に対する最適化モデル

で動作させ、時刻 t において探索点が、一般の不等式制約 $g(\mathbf{x}) \geq 0$ を侵害した場合に、速度 $\mathbf{v}(t)$ を

$$\mathbf{v}(t) \leftarrow \mathbf{v}(t) - \frac{2(\mathbf{v}(t), \nabla g(\mathbf{x}))}{\|\nabla g(\mathbf{x})\|} \nabla g(\mathbf{x}) \quad (2.89)$$

ととり直し、新たに $\mathbf{x}(t)$ を再計算することで、制約境界面における弾性衝突を実現する。上下限制約問題の場合は、(2.89) 式の特別な場合として、制約条件を侵害した成分について、速度の符号を反対にとり直して計算すればよい。この手法は、弾性衝突を行った後に計算された探索点の位置が探索領域内になる場合は問題ないが、制約領域を侵害してしまう場合に制約領域内への閉じ込め機能が破綻してしまう。このような現象は、探索点の軌道が本質的に連続的な軌道となっている場合には発生しないが、離散的な軌道となっている場合には十分に発生する可能性がある。次項で扱う離散化モデルの場合、後者の軌道が発生する可能性があり、本手法を適用することが難しくなる。

2.4.4 離散化非線形散逸系モデル

前述の CNDM は、本質的に連続時間系モデルであるので、その実装においては、Runge-Kutta 法などの数値積分法を用いる必要があり、計算コストの面で問題がある。そこで本項では、CNDM を離散化したモデルについて考える [53]。

まず、前節で述べた上下限制約条件付き問題に対する CNDM の中から、2.2 節の DGCM に対する考察をもとに、離散化しても制約領域境界に探索点がたまりにくい制約領域トラス化型 CNDM(2.88) 式を採用し、これを離散化幅 $\Delta T = t/k > 0$ を用いてオイラー差分化すると

$$\dot{x}_i(k+1) = x_i(k) + \Delta T v_i(k) \quad (2.90a)$$

$$v_i(k+1) = v_i(k) - \frac{\Delta T}{m} \xi(\mathbf{v}(k)) - \frac{\Delta T \epsilon}{m} \frac{\partial E(\mathbf{x}(k))}{\partial x_i} \quad (2.90b)$$

$$x_i(k+1) = \tilde{f}(\dot{x}_i(k+1)) \quad (2.90c)$$

が得られる。本論文では、(2.90) 式のモデルを「離散化非線形散逸系モデル (以降、DNDM : Discretized Nonlinear Dissipative system Model)」とよぶ。ここで、CNDM は、非線形抵抗によって能動的に軌道の不安定化をうながすモデルであったが、DNDM では、これに加えて、離散化幅 ΔT を大きくした場合、離散化による不安定化の効果がさらに加わる。したがって、離散化幅を大きくとって探索を行った場合、連続時間モデルと比較して、よりカオス的な探索軌道が発生することが期待される一方で、探索終了期には離散化幅を小さくすることで安定化を図る必要がある。そこで本論文では、一般の離散化勾配系カオスモデルの場合と同様に、離散化幅 ΔT に対して線形アニーリング

$$\Delta T(k) = \Delta T_{\max} \left(1 - \frac{k}{k_{\max}} \right) \quad (2.91)$$

を適用し探索終了時の安定化を図る。この線形アニーリングを含んだ形での DNDM の Pseudo Code を、周期散逸型 (DNDM (C))、徐冷散逸型 (DNDM (A)) とともに、付録 C 章の C.4 節に示す。また、DNDM (C) と DNDM (A) で用いるパラメータを、それぞれ Tables 2.4,

Table 2.4 Parameters of DNDM (C)

Parameter	Explanation	How to set
k_{\max}	Steps of the search	Fixed value
d_0	Strength of nonlinearity	Fixed value
d_1	Strength of bias to the nevasive resistance	Fixed value
d_2	Strength of original velocity	Fixed value
ω	Period of convergence and divergence	Fixed value
ϵ	Gradient coefficient	Fixed value
ϵ_g	Gradient norm value used as the criterion for local search convergence	Fixed value
ΔT_{\max}	Initial value of the sampling parameter	It is set in order to search for the whole feasiabe region.
m	Inertia weight	It is set taking strength of inertia of gradient into account.

Table 2.5 Parameters of DNDM (A)

Parameter	Explanation	How to set
k_{\max}	Steps of the search	Fixed value
$d_{0\max}$	Initial value of the nonlinearity parameter	Fixed value
d_1	Strength of the dissipative term	Fixed value
d_2	Control parameter which controls velocity norm range where escape energy is given to the search point	Fixed value
ϵ	Gradient coefficient	Fixed value
ϵ_g	Gradient norm value used as the criterion for local search convergence	Fixed value
ΔT_{\max}	Initial value of the sampling parameter	It is set in order to search for the whole feasiabe region.
m	Inertia weight	It is set taking strength of inertia of gradient into account.

2.5 に示す. DNDM は, 周期散逸型・徐冷散逸型ともに, 各局所解付近を探索しつつ, その局所解からは自律的に脱出する能力を持ったモデルであり, 言い換えれば, いくつかの解候補付近を通りながら大域的探索を実行できるモデルである. しかし, 他の非線形力学系モデルと同様に, 目的関数値を考慮した探索戦略は持っておらず, より目的関数値が低い領域への集中化戦略を持っていないという問題がある. また, 徐冷散逸型に関しては, 収束する解は1つに限定されているため, 得られる解候補の多様性についても問題がある.

2.5 非線形ハミルトン系最適化計算モデル

無制約の最適化問題を解く力学モデルを用いた手法の1つとして、高次元ハミルトン力学系の自律探索軌道の性質を利用した高次元アルゴリズム (HA : Hamiltonian Algorithm) が新上ら [25, 55] によって提案されている。本節では、まず、HA の紹介とその問題点である運動領域の狭め方について紹介する。つぎに、この運動領域の狭め方に関して、探索履歴を用いた新しい改良手法 [56] を提案する。そして最後に、HA の離散版のアルゴリズムについて考える。

2.5.1 ハミルトン系モデルと高次元アルゴリズム

一般に M 個の古典粒子で構成される孤立系は、状態が $N = 3M$ 次元ベクトルの一般化座標 \mathbf{q} と共役運動量 \mathbf{p} の組である位相空間の一点で表され、その時間発展はハミルトン方程式

$$\frac{dq_i(t)}{dt} = \frac{\partial H(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))}{\partial p_i}, \quad \frac{dp_i(t)}{dt} = -\frac{\partial H(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))}{\partial q_i} \quad (2.92)$$

で記述される。一般に、(2.92) 式のハミルトニアン $H(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ は、粒子の運動エネルギー $K(\mathbf{p})$ と、ポテンシャルエネルギー $V(\mathbf{q})$ の和で表され、これと粒子の位相空間の体積は常に一定値 H_0 に保たれる性質がある。

ここで、一般化座標 \mathbf{q} を無制約の最適化問題の変数 \mathbf{x} に、ポテンシャルエネルギー $V(\mathbf{x})$ を目的関数 $E(\mathbf{x})$ に、共役運動量 \mathbf{p} を探索点の速度 \mathbf{v} に、それぞれ対応付けたハミルトン力学系

$$H(\mathbf{x}(t), \mathbf{v}(t)) = E(\mathbf{x}(t)) + K(\mathbf{v}(t)) \quad (2.93a)$$

$$\frac{dx_i(t)}{dt} = \frac{\partial H(\mathbf{x}(t), \mathbf{v}(t))}{\partial v_i} = \frac{\partial K(\mathbf{v}(t))}{\partial v_i} \quad (2.93b)$$

$$\frac{dv_i(t)}{dt} = -\frac{\partial H(\mathbf{x}(t), \mathbf{v}(t))}{\partial x_i} = -\frac{\partial E(\mathbf{x}(t))}{\partial x_i} \quad (2.93c)$$

を考える。エルゴード仮説によると、力学系 (2.93) 式が混合性³を持つと仮定できるとき、(2.93) 式の運動を長時間追跡すると、 x_i と v_i が、それぞれ $[x_i, x_i + \Delta x_i]$, $[v_i, v_i + \Delta v_i]$ の微小区間 $\prod_{i=1}^N \Delta x_i \prod_{i=1}^N \Delta v_i$ に入る総時間 τ は

$$\tau \propto \delta(H_0 - H(\mathbf{x}, \mathbf{v})) \prod_{i=1}^N \Delta x_i \prod_{i=1}^N \Delta v_i \quad (2.94)$$

となる。ここで、 $\delta(y - y_0)$ は、Dirac のデルタ関数であり、 H_0 は、初期状態のハミルトニアン $H_0 = E(\mathbf{x}(0)) + V(\mathbf{v}(0))$ であり、対象とするハミルトン系における保存量である。(2.94) 式は、混合性を持つハミルトン力学系では、 $H(\mathbf{x}, \mathbf{v}) = H_0$ である等エネルギー面を

³混合性とは、任意の初期点から出発した運動は、領域内のどんな場所にも必ずいつかは行き着くことを保証することであり。しばしば、コーヒーにミルクを入れてかき混ぜた際の拡散を例に説明される。最適化問題においては、各変数の運動に対して関連性を持たない場合は、この混合性は保証されない。

場所によらず一様に運動することを示している．ここで，ある点 \mathbf{x} における粒子の滞在時間 $\tau_{\mathbf{x}}$ を考えると

$$\tau_{\mathbf{x}} \propto \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \delta(H_0 - H(\mathbf{x}, \mathbf{v})) dv_1 \cdots dv_N \quad (2.95)$$

となり，運動エネルギー $K(\mathbf{v})$ を

$$K(\mathbf{v}) = \frac{1}{2} \left(\sum_{i=1}^N v_i^2 \right)^\gamma \quad (2.96)$$

とにおいて，さらに計算を進めると

$$\tau_{\mathbf{x}} \propto C(N, \gamma) \{H_0 - E(\mathbf{x})\}^{(N/2\gamma)-1} \prod_{i=1}^N \Delta x_i \quad (2.97)$$

という関係を得る [25, 57]．ここで $C(N, \gamma)$ は， E を含まない探索点の運動とは関係のない係数項である．したがって，(2.93) 式の力学系で探索点を動作させると，目的関数値 E が小さい領域ほど，その滞在時間が長くなることが期待できる．新上ら [25, 55] は，(2.93) 式から得られる軌道が持つ (2.97) 式で示される性質を利用した最適化手法，高次元アルゴリズム (HA : Hamiltonian Algorithm) を提案した．ところで，先ほど述べたエルゴード仮説が成立するには，探索点の運動が混合性を持つことが必要になる．(2.96) 式で与えた運動エネルギーは，この混合性を与える運動エネルギーのとり方の1つであるが，他にも，より混合性を与えることが期待できる

$$K(\mathbf{v}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N a_{ij} v_i v_j, \quad a_{ij} > 0 \quad (2.98)$$

などを用いることもできる．以降本論文では，HA の運動エネルギーとして (2.98) 式を採用することにする．

HA は，探索点が常に動き続けているモデルであり，コンピュータを用いた実装において，完全な連続軌道を得ることができない以上，そのままでは，解の存在を探索点の軌道の濃淡でしか判断できず，具体的な局所解を自動的に絞り込みにくいという問題点がある．具体的な局所解へ収束させる方法としては，保存量であるハミルトニアンを徐々に散逸させることで，探索点の運動可能領域を徐々に狭めていく手法 [58] をあげることができる．この手法では，HA の速度を決定する微分方程式 (2.93c) 式に，エネルギー散逸項を導入した

$$\frac{dv_i(t)}{dt} = -\frac{\partial H(\mathbf{x}(t), \mathbf{v}(t))}{\partial x_i} = -\frac{\partial E(\mathbf{v}(t))}{\partial x_i} - \mu v_i, \quad \mu > 0 \quad (2.99)$$

を用いることで，探索点の運動可能領域を徐々に狭めることを実現している．しかし，この手法は，ハミルトニアンが小さくなった際に，探索点がたまたま存在した領域近傍へ運動可能領域を制限することになり，最適解収束の戦略としては必ずしも適当なものとはいえない．このように，HA には，その適用に際して，いくつかの問題点が存在し，必ずしも高い確率で厳密な大域的最適解を得ることができる手法とはいえない．

2.5.2 探索履歴を利用した改良型高次元アルゴリズム

本項では、前項で指摘した HA の問題点を解消するために、探索履歴を利用した新しいハミルトニアン散逸法を提案する [56]。具体的には、HA を一定時間実行した後に、より目的関数値が小さい領域を集中探索させるような新たなハミルトン系を構築し、この新たな系で HA の探索を繰り返す手法を提案する。この新たなハミルトン系は、1 周期前のハミルトン系での探索で最も目的関数値が小さかった点、すなわち、後述する PSO モデルにおける pbest を新たな初期点とし、さらに、ハミルトニアン全体を減少させることによって構築される。具体的なアルゴリズムを以下に示す。

- **Step1** T の期間 HA を実行

HA(2.93) 式で探索を実行する。

- **Step2** 新たなハミルトン系の構築

If $t = kT$, ($k = 1, \dots$) Then

$$\mathbf{x}_{pb} = \mathbf{x}(t_{pb}), \mathbf{v}_{pb} = \mathbf{v}(t_{pb}), t_{pb} = \underset{\tau}{\operatorname{argmin}}\{E(\mathbf{x}(\tau)) \mid 0 \leq \tau \leq t\} \quad (2.100a)$$

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}_{pb}, \mathbf{v}(t) = \mu \mathbf{v}_{pb}, 0 \leq \mu \leq 1 \quad (2.100b)$$

とする。

\mathbf{x}_{pb} を初期点に局所探索を実行し、最良解を得た場合はこれを保存する。

Step1 へ。

Else

Step1 へ。

End If

List 2.4 The Algorithm of a New HA with Proposed Hamiltonian Dissipative Method

List 2.4 においては、(2.100b) 式の \mathbf{x} の計算によって pbest を新たな初期点とすることを、 \mathbf{v} の計算によってハミルトニアン全体の減少を、それぞれ実現している。このハミルトニアン散逸法により、より目的関数値の小さい領域での集中探索、すなわち、探索の集中化が期待でき、大域的最適解近傍への収束性の改善が期待できる。

2.5.3 離散化高次元アルゴリズム

前述の HA は、2.4 節の CNDM の場合と同様に、本質的に連続時間系モデルであるので、計算コストの面で問題がある。そこで本項では、同様に、HA を離散化したモデルについて考える。

保存力学系モデルである HA に対して、CNDM の場合と同様に、オイラー差分法を適用すると、容易にハミルトニアンなどの保存量が散逸または発散してしまい、その保存性が失われる可能性がある。そこで本論文では、ハミルトニアンを一定値に保ちながら、1 次のオイラー差分型公式を構築できる Symplectic Euler 公式 [59] を用いる。ハミルトン力学系

(2.93) 式に対する, 任意の Symplectic 写像 $(\mathbf{x}(k), \mathbf{v}(k)) \rightarrow (\mathbf{x}(k+1), \mathbf{v}(k+1))$ は, 局所的に母関数 $W(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ によって

$$x_i(k+1) = \frac{\partial W(\mathbf{x}(k), \mathbf{v}(k+1))}{\partial x_i}, \quad v_i(k) = \frac{\partial W(\mathbf{x}(k), \mathbf{v}(k+1))}{\partial v_i} \quad (2.101)$$

とかける. 母関数を離散化幅 ΔT として $W(\mathbf{x}, \mathbf{v}) = x_i v_i + \Delta T H(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ ととると, (2.101) 式は

$$x_i(k+1) = x_i(k) + \Delta T \frac{\partial H(\mathbf{x}(k), \mathbf{v}(k+1))}{\partial v_i} \quad (2.102a)$$

$$v_i(k+1) = v_i(k) - \Delta T \frac{\partial H(\mathbf{x}(k), \mathbf{v}(k+1))}{\partial x_i} \quad (2.102b)$$

となる. (2.102) 式は, Symplectic Euler 公式とよばれ, 1次という低次公式ながらも, 連続軌道の良好な再現性や, ハミルトニアン振動現象 (時間の経過とともに発散をしない) が得られることが検証されている [59]. Symplectic Euler 公式 (2.102) 式を, HA (2.93) 式について, $H(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ の x_i 偏微分について速度 \mathbf{v} が無関係であることに注意して, 具体的に適用すると

$$v_i(k+1) = v_i(k) - \Delta T \frac{\partial E(\mathbf{x}(k))}{\partial x_i} \quad (2.103a)$$

$$x_i(k+1) = x_i(k) + \Delta T \frac{\partial K(\mathbf{v}(k+1))}{\partial v_i} \quad (2.103b)$$

となる. 運動エネルギー $K(\mathbf{v})$ として (2.98) 式を採用し, さらに, 上下制限約条件付最適化問題 (2.6) 式に適用することを考えて, 制約条件を侵害しないために制約条件のトラス化 (2.31) 式を導入すると

$$v_i(k+1) = v_i(k) - \Delta T \frac{\partial E(\mathbf{x}(k))}{\partial x_i} \quad (2.104a)$$

$$\dot{x}_i(k+1) = x_i(k) + \Delta T \left(\frac{1}{2} a_{ii} v_i(k+1) + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N a_{ij} v_j(k+1) \right) \quad (2.104b)$$

$$x_i(k+1) = \tilde{f}(\dot{x}_i(k+1)) \quad (2.104c)$$

が得られる. ここで, (2.104) 式の計算順序は a ~ c の順であることに注意されたい. 本論文では, (2.104) 式のモデルを離散化高次元アルゴリズム (DHA : Discretized Hamiltonian Algorithm) とよぶ. DHA に対しても, HA と同様に, 探索履歴を利用したハミルトニアン散逸法の適用が可能である. このハミルトニアン散逸法を導入した DHA の Pseudo Code を付録 C 章の C.5 節に示す. また, C.5 節の DHA で用いるパラメータを Table 2.6 に示す. なお, C.5 節のアルゴリズムにおいては, 停止条件として, ハミルトニアン散逸によって探索点の速度の更新が十分小さくなる・大域的最適解を得る・一定ステップ数探索を実行する, のいずれかを満たすことを用いている.

Table 2.6 Parameters of DHA

Parameter	Explanation	How to set
k_{\max}	Maximum search steps	Fixed value
a_{ii}, a_{ij}	Coefficients that gives mixing	Fixed value
ϵ_g	Gradient norm value used as the criterion for local search convergence	Fixed value
ϵ_v	Velocity norm value used as the criterion for local search convergence	Fixed value
ϵ_E	Error tolerance with respect to objective function value used as the criterion for convergence to global minima	Fixed value
μ	Dissipative rate of Hamiltonian	Fixed value
T	Period of Hamiltonian dissipation	Fixed value
ΔT	Sampling parameter	It is set in order to search for the whole feasible region.

2.6 非線形力学系最適化計算モデルの計算特性とその課題

本節では、これまで述べた非線形力学系最適化計算モデルの中から、計算コストを考慮して、離散化勾配系カオスモデル (DGCM, 付録 C.2 節), 改良型水抜き法 (IDM, 付録 C.3 節), 探索履歴を利用した改良型水抜き法 (IDMwSH, 付録 C.3 節), 周期散逸型離散化非線形散逸系モデル (DNDM (C), 付録 C.4 節), 徐冷散逸型離散化非線形散逸系モデル (DNDM (A), 付録 C.4 節), 離散化高次元アルゴリズム (DHA, 付録 C.5 節), に注目し, その計算特性と大域的最適化性能を, 付録 A.2 節のベンチマーク問題 Prob.1 ~ Prob.6 への適用を通して確認する.

2.6.1 探索軌道の様子

各モデルの探索軌道を確認するために, DGCM, DNDM をベンチマーク問題 Prob.6 (Modified Rastrigin, $N = 10$) へ適用し, DHA, IDM, IDMwSH を $N = 100$ とした同問題⁴に対して適用した (Sim 2.1). 各モデルで用いたパラメータについては, Table 2.7 に示す. なお, Table 2.7 において, 上段黒字となっているパラメータは, 以降のシミュレーションでも共通の設定であり, 下段赤字となっているものは, Sim 2.1 固有の設定である. Sim 2.1 の結果として, DGCM の探索軌道を Fig. 2.9 に, IDM の探索軌道を Fig. 2.10 に, IDMwSH の探索軌道を Fig. 2.11 に, DNDM (C) の探索軌道を Fig. 2.12 に, DNDM (A) の探索軌道を Fig. 2.13 に, DHA の探索軌道を Fig. 2.14 にそれぞれ示す. なお, Figs. 2.9 ~ 2.14 の図中, 赤のプロットが探索点 x_1 の探索軌道であり, 青のプロットが, それまでの探索で得られた最良目的関数値 (E_{pb} もしくは E_{best}) の推移である. また, 適用対象とした問題の大域的最適解 \mathbf{x}^o の第 1 成分は $x_1^o = -0.433$ であり, 目的関数値は $E(\mathbf{x}^o) = 0.0$ である.

⁴ $N = 10$ では, すぐに探索が終了してしまうので $N = 100$ への適用とした

まず、DGCMの探索軌道 Fig. 2.9 をみると、離散化幅のアニーリングによって、カオスの探索軌道が安定化していくことで、探索点の挙動は、大域的探索から局所的探索へと遷移し、最も安定であると考えられる局所解（この場合は大域的最適解）へ収束している様子が確認できる。

つぎに、DGCMを利用した手法であるIDMの探索軌道 Fig. 2.10 をみると、カオスの探索軌道が、貯水変換によってカオスの探索軌道に対して安定化された領域へ収束することを繰り返しながら、各カオスの探索の離散化幅初期値 $\Delta T'_{\max}$ を徐々に小さくすることで、探索可能領域を小さくしていき、最終的に大域的最適解を得ている様子が確認できる。なお、Fig. 2.10 では、見易さのために探索後期の様子のみを示している。

つぎに、IDMに対して探索履歴の中で最良の点への引き寄せを付加したIDMwSHの探索軌道 Fig. 2.11 をみると、脱出した谷近傍への探索の集中化の強化により、IDMと同様な探索軌道を発現しながら、各カオスの探索の収束期において、脱出した谷の中でもより目的関数値が小さかった谷へ引き寄せられつつ、最終的にIDMと比較して少ない探索ステップ数で大域的最適解へ収束している様子が確認できる。

つぎに、DNDM(C)の探索軌道 Fig. 2.12 をみると、非線形抵抗の安定・不安定の周期に対応して局所解近傍からの収束・発散を繰り返しつつ、離散化幅のアニーリングにより探索軌道の安定化が図られ、最終的にある局所解へ収束している様子が確認できる。なお本論文では、 ω を $\omega = 10.0$ と比較的大きく設定することで、Fig. 2.8 のように \sin の値を激しく変化させ、軌道の収束・発散を激しく切り替え、より多様性を持った探索軌道を発生させることを意図した。Fig. 2.12 からは、この ω の設定の効果が反映されていることも確認できる。なお、 $\omega = 0.5$ でのシミュレーションも行ったが、 $\omega = 10.0$ の場合より劣った結果となっており、よりカオス的な $\omega = 10.0$ の設定に有意性があることを付記しておく。

つぎに、DNDM(A)の探索軌道 Fig. 2.13 をみると、探索点は局所解に近づくことで速度を失いかけると非線形抵抗によってエネルギーを受けとることで収束を回避しつつ大域的探索を実行し、非線形抵抗の強さを決定する d_0 と離散化幅のアニーリングにより探索軌道の安定化が図られ、最終的にある局所解（この場合は大域的最適解）へ収束している様子が確認できる。

最後に、DHAの探索軌道 Fig. 2.14 をみると、探索点は、エネルギーが保存されているので、ハミルトニアン散逸が起こる周期ごとに一樣な探索を行いつつ、総探索ステップ数 6000 ~ 8000 付近において、目的関数値の低い領域を集中的に遷移した後、最終的にハミルトニアン散逸によってエネルギーを失い探索を終了している様子が確認できる。なお、最良解の更新が行われない探索後期においては、同じ初期点にリセットされながら、徐々に探索領域を狭めている。

Table 2.7 Parameter Settings in Sim 2.1

Model	Parameter Settings
DGCM	$k_{\max} = 4000, \varepsilon_g = 10^{-4}$ $\Delta T_{\max} = 0.03$
IDM	$\beta = 10.0, \delta = 0.01, \varepsilon_g = 10^{-4}, \varepsilon_E = 10^{-4}, T = 20$ $\Delta T_{\max} = 0.03$
IDMwSH	$\beta = 10.0, \delta = 0.01, \varepsilon_g = 10^{-4}, \varepsilon_E = 10^{-4}, \tilde{T} = 10, T = 20$ $\Delta T_{\max} = 0.03, \bar{c} = 0.05$
DNDM (C)	$k_{\max} = 4000, d_0 = 4.0, d_1 = -1.0, d_2 = 0.5, \omega = 10.0, \varepsilon = 1.0, \varepsilon_g = 10^{-4}$ $\Delta T_{\max} = 0.02, m = 1.0$
DNDM (A)	$k_{\max} = 4000, d_{0\max} = 4.0, d_1 = 1.0, d_2 = 2.0, \varepsilon = 1.0, \varepsilon_g = 10^{-4}$ $\Delta T_{\max} = 0.02, m = 0.1$
DHA	$k_{\max} = 50000, a_{ii} = 12.0, a_{ij} = 2.0, \varepsilon_g = 10^{-4}, \varepsilon_v = 10^{-6}, \varepsilon_E = 10^{-4}, \mu = 0.5, T = 500$ $\Delta T = 0.004$

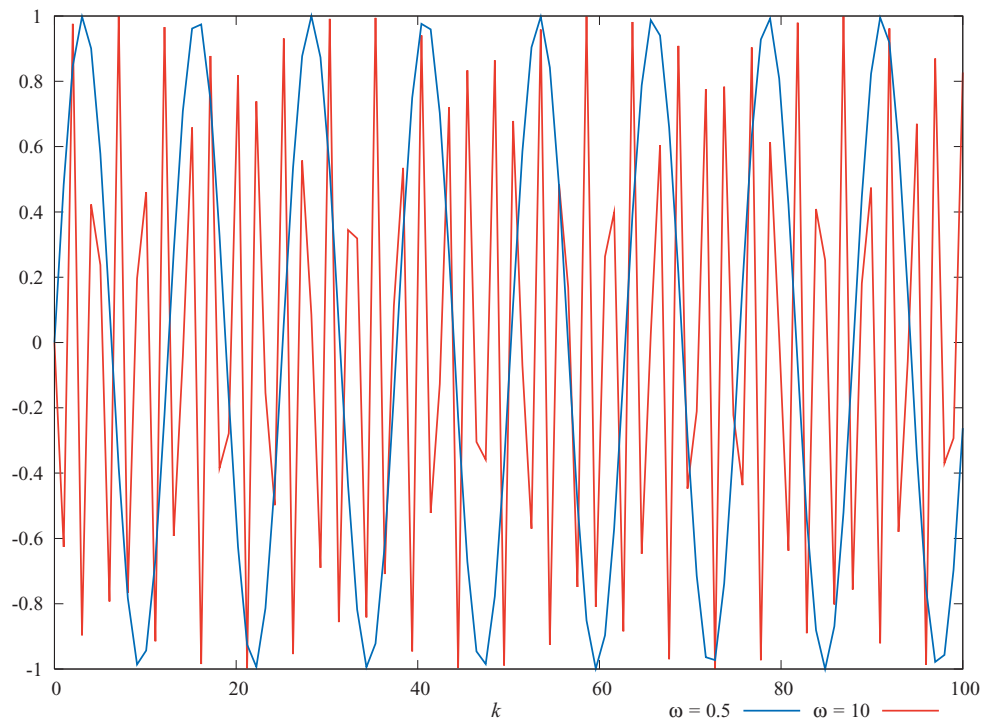


Fig. 2.8 $\sin(\omega k)$ ($\omega = 10, 0.5$)

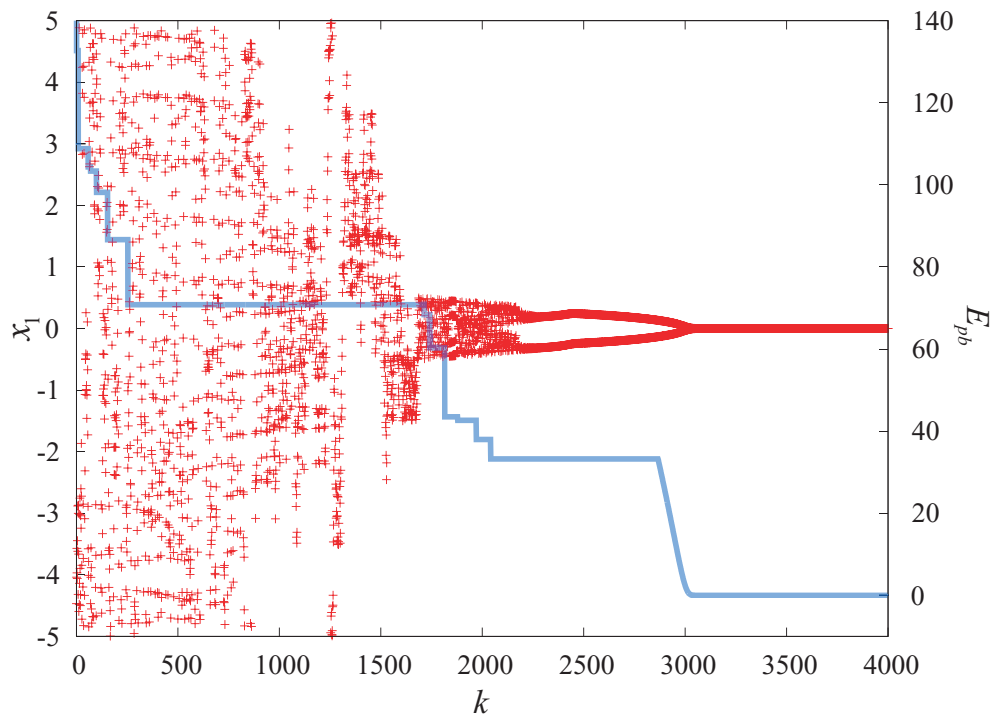


Fig. 2.9 Search Trajectory of DGCM for Prob.6 ($N = 10$).

Red plots show the search trajectory of x_1 .

Blue plots show the transition of the best objective function value of the search history.

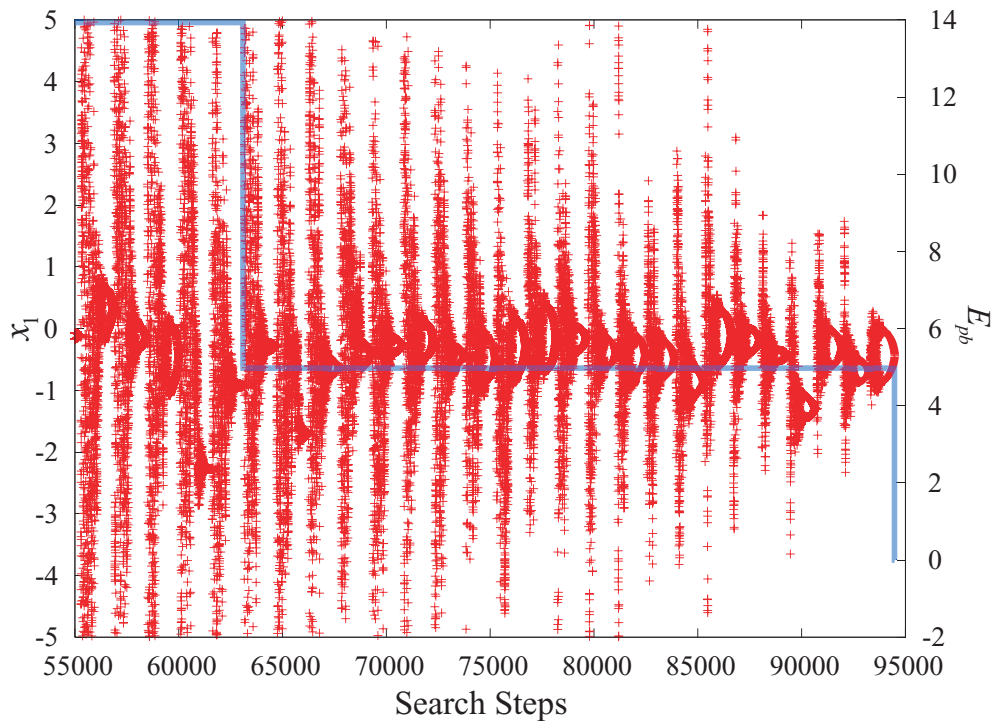


Fig. 2.10 Search Trajectory of IDM for Prob.6 ($N = 100$).

Red plots show the search trajectory of x_1 .

Blue plots show the transition of the best objective function value of the search history.

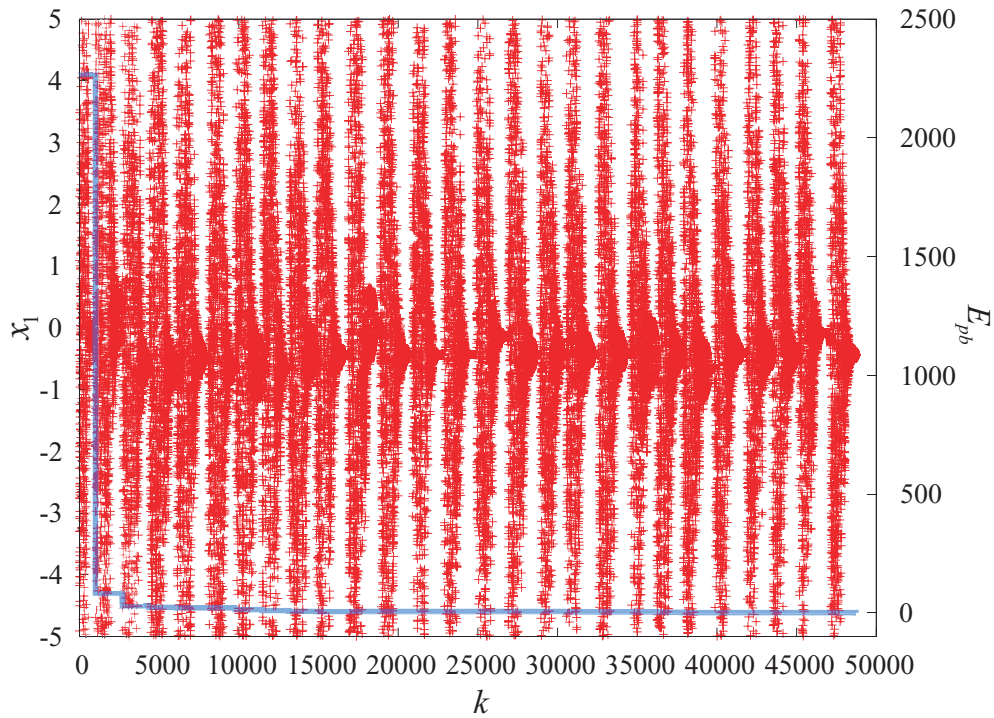


Fig. 2.11 Search Trajectory of IDMwSH for Prob.6 ($N = 100$).

Red plots show the search trajectory of x_1 .

Blue plots show the transition of the best objective function value of the search history.

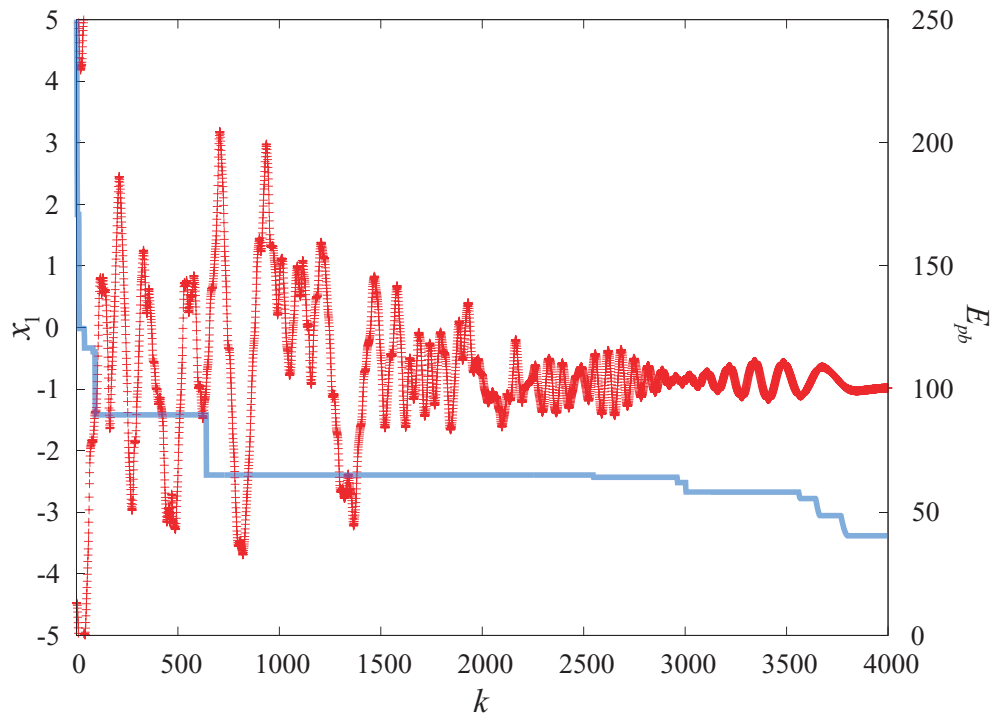


Fig. 2.12 Search Trajectory of DNDM (C) for Prob.6 ($N = 10$).

Red plots show the search trajectory of x_1 .

Blue plots show the transition of the best objective function value of the search history.

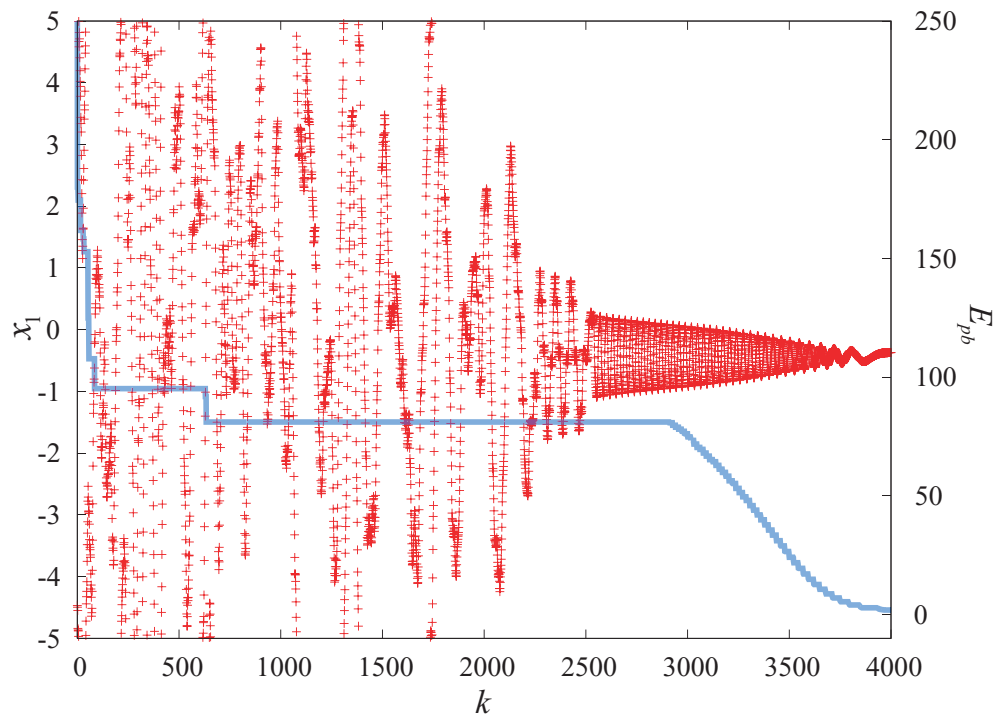


Fig. 2.13 Search Trajectory of DNDM (A) for Prob.6 ($N = 10$).

Red plots show the search trajectory of x_1 .

Blue plots show the transition of the best objective function value of the search history.

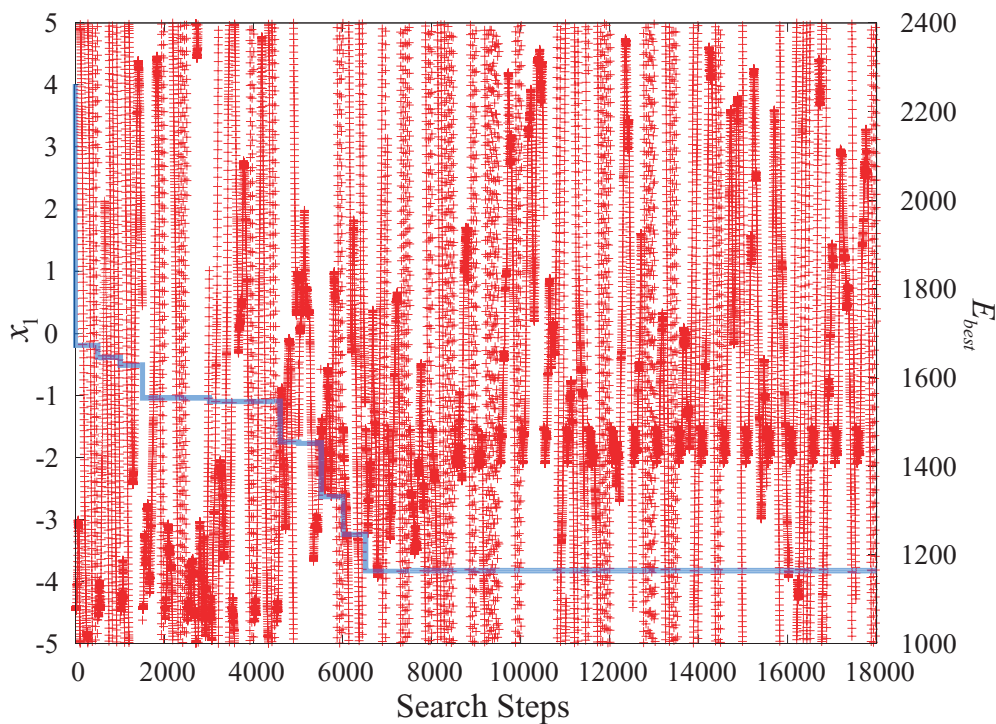


Fig. 2.14 Search Trajectory of DHA for Prob.6 ($N = 100$).

Red plots show the search trajectory of x_1 .

Blue plots show the transition of the best objective function value of the search history.

Table 2.8 Parameter Settings in Sim 2.2

Problem	DGCM	IDM, IDMwSH		DNDM (c)		DNDM (A)		DHA
	ΔT_{\max}	ΔT_{\max}	\bar{c}	ΔT_{\max}	m	ΔT_{\max}	m	ΔT
Prob.1	0.02	0.02	0.01	0.01	0.25	0.01	0.01	0.002
Prob.2	150.0	20.0	0.01	20.0	80.0	4.0	10.0	0.7
Prob.3	0.002	0.002	0.01	0.01	1.0	0.002	0.001	0.002
Prob.4	0.02	0.1	0.01	0.02	1.0	0.02	0.01	0.004
Prob.5	0.07	0.2	0.5	0.05	5.0	0.03	0.1	0.008
Prob.6	0.03	0.03	0.05	0.02	1.0	0.03	0.05	0.004

2.6.2 大域的最適化性能

本項では、各モデルの大域的最適化性能を、複数のベンチマーク問題への適用を通して確認する (Sim 2.2)。ベンチマーク問題としては、付録 A.2 節のベンチマーク問題 Prob.1 ~ Prob.6 を $N = 100$ として用いた。各モデルのパラメータに関しては、問題に関係なく固定のパラメータは Table 2.7 の上段黒字の値を用い、問題に依存するパラメータは、それぞれのパラメータ設定指針にしたがって設定した Table 2.8 の値を用いた。シミュレーションは、初期点 \mathbf{x} をランダムにとり直しながら各 100 回試行し、結果を以下の指標を用いて評価した（以下の説明では大域的最適解を \mathbf{x}^o 、各試行で求めた最小の E を与える解を \mathbf{x}^* とする）。

- CR (Convergence Rate)
大域的最適解への収束率。 $E(\mathbf{x}^*) - E(\mathbf{x}^o) < 10^{-4} (= \epsilon_E)$ を満たす場合に、大域的最適解への収束と判定する。
- DA (Deviation Average)
全試行における誤差 $E(\mathbf{x}^*) - E(\mathbf{x}^o)$ の平均値。
- Var (Variance)
全試行における誤差 $E(\mathbf{x}^*) - E(\mathbf{x}^o)$ の分散。
- Worst
全試行の中で最悪の $E(\mathbf{x}^*)$ 。
- Best
全試行の中で最良の $E(\mathbf{x}^*)$ 。

結果を、Tables 2.9 ~ 2.14 にそれぞれ示す。結果には、計算量見積もりのために、自動微分の計算回数の平均値を AD Calls に、目的関数計算回数の平均値を OF Calls に付記している。自動微分と計算量については、付録 B を参照されたい。結果の中で自明な結果となる場合、すなわち、CR が 100% に対する DA, Var, Worst, CR が 1% 以上に対する Best の場合については、“-”と表記している。また、結果の中で、赤字となっている項目は、全手法の中で最も成績が良かった項目を示し、水色字となっている項目は、本質的に力学特性が異なる DGCM, DNDM, DHA の中で最も成績が良かった項目、緑字となっている項目は、離散化勾配系カオスを利用した手法 DGCM, IDM, IDMwSH の中で最も成績が良かった項目を示す。

まず、DGCM の結果について考える。先に述べたように、DGCM は、最も安定な局所解へ収束する傾向が強い手法であった。この最も安定な局所解が大域的最適解となってい

る **Prob.1** への適用結果 **Table 2.9** をみると、CR が 100% となっている。また、大谷構造を有する **Prob.2** への適用結果 **Table 2.10** をみると、収束率の点では他の手法に劣るが、DA が低い値になっており、さらに Var も小さい値となっている。この結果は、大域的にみて大きな谷底にある局所解のいずれかに収束しているためであると考えられる。その一方で、ある程度目的関数値が小さくなると各局所解の安定性が大きく変わらない **Prob.4**, **Prob.6** への適用結果 **Tables 2.12**, **2.14** をみると、様々な局所解へ収束しているため Var・Worst と Best の差が大きいものとなっている。また、最も安定な局所解が大域的最適解と大きく離れている **Prob.5** への適用結果 **Table 2.13** では、他手法と比較しても良くない結果となっているといえる。**Prob.3** への適用結果 **Table 2.11** でも DGCM は苦戦している。**Prob.3** は、いわゆる綾構造^[36] (Ridge structure: 目的関数の形状を局所的に二次形式として近似した際に、そのヘッセ行列のある1つの固有値の大きさが他の固有値に比べて極めて小さい構造。本問題では、大域的最適解が存在する谷が湾曲していると同時に、湾曲に沿った方向が、それと垂直な方向と比べて、目的関数値の変動が極端に少ない構造) を有するため、勾配によって与えられる降下方向へ長い間下降するモデルに有利な結果が生まれやすい。したがって、カオス的な軌道を発生させる DGCM は苦戦を強いられていると考えられる。

つぎに、DNDM の結果について考える。DNDM の探索点の挙動は、慣性質量 m の設定によって大きく変化させることが可能である。まず、**Table 2.8** にあるように、DNDM (A) で慣性質量 m を小さい値にした **Table 2.9** をみると、DGCM と同等の結果を収めている。慣性質量 m を小さくするということは、DNDM (2.90b) 式の $v_i(k)$ の影響を小さくすることで慣性を小さくし、いわゆる1階の勾配系モデルに近づけることに対応している。このため、DNDM (A) が DGCM と似た構造を持つモデルになるため、このような結果が得られたものと考えられる。その一方で、**Table 2.14** のように結果が改善する場合 (ただし Worst や Var の値から、DGCM に近い構造になっていることがある程度は推察される) や、**Table 2.11** や **Table 2.12** のように悪化する場合も存在する。つぎに、慣性質量 m を大きくした **Table 2.10** をみると、DGCM と比較して DNDM (C), DNDM (A) が収束率の点で良い結果を収めており、とくに、DNDM (C) が高い収束率となっている。慣性質量 m を大きくするということは、慣性を大きくし一度与えた速度ベクトルをゆっくりと変化させる効果をもたらす。**Prob.2** (Griewank 関数) は、多変数問題になると、大きい番号を持った変数成分方向ほど多峰性が小さくなる傾向がある。このため、慣性の調整できない1階の勾配系カオスモデルでは、探索初期においては、多峰性が小さい大きい番号成分での軌道が単峰性関数に対する勾配モデルのごとく振舞い、これに引きずられる形で他の成分も安定化してしまうためカオス軌道が発生しにくい状態が続く。一方、慣性質量を大きくとった DNDM では、この大きい番号成分の単峰性関数最適化による安定化の影響が小さくなるため、全体としてカオス軌道が発生しやすくなる。したがって、DGCM と比較して優れた大域的最適化性能を発揮していると考えられる。また、**Tables 2.9 ~ 2.13** の Var をみると DGCM と比較して大きい値になっており、DGCM と比べて様々な解へ収束していることがわかる。このように DNDM は、慣性質量の設定によってその挙動を変えつつ、様々な解へ収束しえるモデルであるといえる。なお、**Table 2.13** において DNDM (C) の CR が 100% となっている。これは、まず、**Prob.5** が変数間依存がない問題であり、かつ、このシミュレーションで設定したパラメータがたまたま1変数の **Prob.5** に対して極めて有効であることから、この1変数の最適化プロセスが全変数で並列に発生しているためである。言い換え

ば、1変数で完全な結果を収める最適化を100変数で並列に実行しているためである。このベンチマーク問題の特殊な構造による問題点については、付録A.1節を参照されたい。

つぎに、DHAの結果について考える。大谷構造を有する Prob.1 と Prob.2 への適用結果 Table 2.9 と Table 2.10 でよい結果を収めていることと、大谷構造を有するがさらに多峰性の強い Prob.6 への適用結果 Table 2.14 で DGCM と比べて苦戦していることからわかるように、DHA は、大域的にみて凸関数的な形状を持つ問題が得意という意味での問題依存性が、DGCMにも増して強いことがわかる。また、Table 2.12 では、DGCM とかなり似た結果を得ているが、これは、Prob.4 の形状が、ある程度目的関数値が小さくなると凸関数的でなくなり、かつ、存在する谷の形状が近い形をしているため、DGCM を適用しても DHA を適用しても、そのいずれかの解へ収束するためであると想像される。

最後に、IDM と IDMwSH の結果について考える。Tables 2.9 ~ 2.14 をみると、いずれの結果においても、DGCM と比較しての改善がみられる。とくに、全問題で IDM, IDMwSH のいずれかの方法によって、大域的最適解を得ていることは特筆すべき点ではある。これは、前項でみたように、貯水変換によってカオスの探索点に対して安定化された領域へ収束することを繰り返しながら探索を行っているためである。この計算特性が及ぼす影響を問題ごとにみていくと、大谷構造を有する Prob.2 では、前述の計算特性が大域的最適解近傍の探索に対して有効に働いているものと考えられる。綾構造を有する Prob.3 では、探索点が徐々に安定化領域を更新しながら湾曲している谷に閉じ込められつつ探索を繰り返し続けている点が有効に働いているものと考えられる。Prob.4 では、探索の初期では貯水変換が有効に働いているが、各局所解間に距離があるため、ある程度水位が下がってしまうと貯水変換の有効性が小さくなるが、その点を探索の繰り返しによって補っているため最終的に大域的最適解が得られていると考えられる。なお、この探索プロセスのために ΔT_{\max} は、DGCM と比較して大きい値に設定してある。Prob.5 も Prob.4 と同様であると考えられるが、DGCM が陥ってしまう局所解の安定性が極めて大きいため、IDM では、その安定構造を貯水関数では有効に崩すことができていない。IDMwSH では、 c が周期的に変化する場合、最良点への引き寄せの効果によって、この安定構造をある程度崩すことに成功している。そこで、 c を常に \bar{c} で固定するモデルで再度適用を行うと、100%の確率で大域的最適解へ収束させることに成功した。Prob.6 では、前項でみたように、探索初期では、貯水領域への収束を繰り返しながら、徐々に水位を下げていき、ある程度水位が下がると、大域的最適解近傍の探索の繰り返しによって最終的に大域的最適解を発見していると考えられる。つぎに、全問題について IDM と IDMwSH を比較することにより、探索履歴の効果についてみていくと、いずれの場合においても、最良個体への引き寄せによる目的関数値を考慮した探索戦略の付加により、大域的最適化性能の改善が確認できる。

Table 2.9 Results for Prob.1 (Modified Levy No.5, $N = 100$).

Red cells denote the best result of all methods.

	CR	DA	Var	Worst	Best	AD Calls	OF Calls
DGCM	100	-	-	-	-	4001	0
IDM	100	-	-	-	-	1872	0
IDMwSH	100	-	-	-	-	1866	0
DNDM (C)	0	99.1488	107.5450	123.6550	75.5139	4203	1879
DNDM (A)	100	-	-	-	-	4004	2
DHA	64	1.2558	121.1810	109.9460	-	27949	14515

Table 2.10 Results for Prob.2 (Modified Griewank, $N = 100$)

	CR	DA	Var	Worst	Best	AD Calls	OF Calls
DGCM	0	0.00945	1.672e-05	0.0238	0.0013	4021	118
IDM	82	0.10023	0.09034	1.0027	-	58696	3454
IDMwSH	94	0.00003	1.022e-08	0.0005	-	63902	2734
DNDM (C)	96	0.00002	3.445e-09	0.0005	-	4203	519
DNDM (A)	46	0.04234	0.03844	1.0018	-	4201	255
DHA	55	0.01361	0.00933	0.9722	-	14080	1761

Table 2.11 Results for Prob.3 (Modified Rosenbrock's Saddle, $N = 100$)

	CR	DA	Var	Worst	Best	AD Calls	OF Calls
DGCM	0	58.1423	1852.1000	128.5190	0.5209	4203	387
IDM	51	1.7853	3.8328	3.9866	-	94178	13131
IDMwSH	94	2.2304	210.0840	103.9160	-	57288	6188
DNDM (C)	0	3253.5900	5.794e+07	3.232e+04	0.0074	4203	966
DNDM (A)	0	1442.9300	1.936e+07	2.184e+04	35.7295	4203	431
DHA	0	823.6650	1.178e+07	3.456e+04	107.7540	28877	18712

Table 2.12 Results for Prob.4 (Modified 2^N -minima, $N = 100$)

	CR	DA	Var	Worst	Best	AD Calls	OF Calls
DGCM	1	115.226	3044.120	-7550.23	-	4014	20
IDM	40	20.476	356.305	-7776.69	-	101617	5014
IDMwSH	93	1.979	52.040	-7804.96	-	64076	2935
DNDM (C)	0	189.752	6.325e+04	-5966.32	-7804.96	4108	240
DNDM (A)	0	316.368	3.969e+05	-2585.72	-7776.69	4118	282
DHA	1	116.354	3245.150	-7550.50	-	24279	4463

Table 2.13 Results for Prob.5 (Shifted 2^N -minima, $N = 100$)

	CR	DA	Var	Worst	Best	AD Calls	OF Calls
DGCM	0	2827.34	2.068e-23	-5005.89	-5005.89	4001	0
IDM	0	2771.71	1.516e+05	-5005.89	-7787.41	7139	0
IDMwSH	0	892.31	1.654e+04	-6674.02	-7352.58	92908	34
IDMwSH (c is fixed)	100	-	-	-	-	7400	8
DNDM (C)	100	-	-	-	-	4023	61
DNDM (A)	0	2662.51	2.227e+05	-5005.89	-6702.30	4011	15
DHA	0	1185.79	3.065e+04	-6193.37	-7239.49	25618	613

Table 2.14 Results for Prob.6 (Modified Rastrigin, $N = 100$)

	CR	DA	Var	Worst	Best	AD Calls	OF Calls
DGCM	2	224.611	4.946e+04	838.743	-	4001	0
IDM	57	0.647	0.8588	4.975	-	97323	8
IDMwSH	100	-	-	-	-	45049	691
DNDM (C)	0	554.814	2.812e+04	1236.390	266.648	4045	158
DNDM (A)	33	115.634	2.637e+04	872.570	-	4025	110
DHA	0	808.252	3.037e+04	1292.430	494.492	23490	1506

※ Red cells denote the best result of all methods.

Green cells denote the best result among DGCM, IDM and IDMwSH.

Blue cells denote the best result among DGCM, DNDM (C), DNDM (A) and DHA.

2.6.3 まとめと課題

本章では、非線形力学系を用いた手法の中から、離散化勾配系カオスモデル、非線形散逸系モデル、高次元アルゴリズムに注目し、とくに、上下制限約付最適化問題に対する離散時間モデルについて、その計算モデルの導出と計算特性について議論した。離散化勾配系カオスモデルについては、その安定性解析から、内部状態表現型と変数変換型の制約閉じ込めモデルの問題点について指摘し、この問題点を持たない制約領域トラス化型モデルの有効性を指摘した。さらに、この考察をもとに、目的関数値が小さい領域ほどカオスの探索点に対して安定で収束しやすくなる目的関数変換法を考え、この変換法を利用した最適化手法「水抜き法」を提案した。離散化勾配系カオスモデルに対して行ったこれら理論的解析とそれを利用した改良手法の提案は、ヒューリスティックスの1つに過ぎなかったカオスモデルを、確定論的手法としての特長を生かした手法へ発展させた新しい成果である。非線形散逸系モデルについては、そのオイラー差分による離散化モデルを導出した上で、非線形散逸項の選択と慣性質量調整による探索特性の調整について考察した。高次元アルゴリズムについては、運動領域の狭め方に対して探索履歴を利用した改良手法を提案し、さらにその離散化モデルを Symplectic Euler 公式を用いて導出することで、保存力学系としての性質を保ちながら、運動領域を戦略的に狭めていくことができる離散化モデルを導出した。複数の 100 変数多峰性関数への適用シミュレーションを通して、離散化勾配系カオスモデル、離散化非線形散逸系モデル、離散化高次元アルゴリズムについては、それぞれ異なる力学特性による大域的探索を実行しつつ、問題・初期条件によっては大域的最適解へ収束することを確認した。また、水抜き法については、その優れた大域的探索能力を確認した。

本章で扱った非線形力学系モデルは、概して、力学系から与えられた駆動力による自律運動による大域的探索を実行できるので、常に多様性を失わない大域的探索が可能である。しかし、その力学特性によって決定される局所解へ収束するため、ある性質を持った局所解への収束性という意味での集中化戦略を持つが、水抜き法以外では、目的関数値を考慮した意味での集中化戦略を持っておらず、必ずしも目的関数値が低い領域へ遷移するモデルとはなっていない。また、単点探索モデルであるため、水抜き法と DHA 以外では、収束することで真に評価される最適解は1つであり、得られる解の多様性について問題点がある。よって、これら問題点を解消した最適化計算モデルの提案が望まれる。

第3章 結合系モデルと同調現象

3.1 はじめに

前章までに述べてきた非線形力学系を用いた手法は、勾配などの駆動力によって常に多様性を失わない大域的探索を実行できる一方で、水抜き法を除くモデルにおいて、目的関数値を考慮した意味での集中化戦略を持っていないという問題点があった。また、基本的には単点探索モデルであるため、水抜き法と DHA を除いて、収束する最適解は1つであり、得られる解の多様性についても問題点があった。そこで以降では、非線形力学系モデルを駆動モデルとして自律探索を行う複数の個体によって結合系を形成する新しい最適化モデルを考える。このモデルでは、探索個体の多点化によって得られる解に対する多様性を、結合による情報交換によって目的関数値を考慮した探索戦略を、それぞれ付加することをねらいとする。ところで、駆動モデルが非線形力学系モデルであることを考えれば、提案モデルは、結合非線形振動子系であり、この結合非線形振動子系からは、同調現象が発現することが知られている。そこで本章では、まず、結合構造の種類について整理した上で、この非線形結合振動子系の同調現象について考える。とくに、本論文で扱う最適化モデルの多くが離散時間系のカオス軌道を利用したモデルであることに注目し、離散時間系のカオス軌道に対しても安定的に同調現象を発現する結合モデルの導出を行う。また、近年注目を集めている MH の中から PSO (Particle Swarm Optimization) をとりあげ、その計算特性について簡単に述べた上で、MH が一般的に抱える問題点について指摘する。

3.2 結合構造の種類

離散時間結合系を考えるにあたって、まず、連続時間結合振動子系について考える。一般に、連続時間系の N 変数結合振動子系は

$$\frac{d\mathbf{x}^p(t)}{dt} = \mathbf{f}^p(\mathbf{x}^p(t)) + c\Gamma(\{\mathbf{x}^j(t)\}, \mathbf{x}^p(t)), \quad p = 1, \dots, P \quad (3.1)$$

として定式化される。ここで、 Γ は結合構造を表し、 p 番目の振動子 $\frac{d\mathbf{x}^p(t)}{dt} = \mathbf{f}^p(\mathbf{x}^p(t))$ は周期的¹であるとする。また、以降特に記さない限り、結合振動子の数は P であり、 $p = 1, \dots, P$ は省略するものとする。 Γ で代表される結合構造とは、個体空間内における任意の1つの個体に対して一定の「近傍」が定義できた上で、この近傍内の他の個体との「情報交換」を行う構造として定義する。ここで、 \mathbf{x}^p の近傍内の個体 \mathbf{x}^q との情報交換は、 $\mathbf{x} \in R^N$ 上のノルムを利用して

¹この周期には、カオス軌道の無限周期も含まれる

- 順情報交換：特定の個体が近傍内のすべての個体の状態に近づく情報交換

$$\min_{\mathbf{x}^p} G(\mathbf{x}^p; \mathbf{x}^q) = d \|\mathbf{x}^p - \mathbf{x}^q\|, \quad d > 0 \quad (3.2)$$

- 逆情報交換：特定の個体が近傍内のすべての個体から状態から離れる情報交換

$$\min_{\mathbf{x}^p} G(\mathbf{x}^p; \mathbf{x}^q) = -d \|\mathbf{x}^p - \mathbf{x}^q\|, \quad d > 0 \quad (3.3)$$

- 中立情報交換：特定の個体が近傍内のすべての個体の状態と一定の距離 h を保つ情報交換

$$\min_{\mathbf{x}^p} G(\mathbf{x}^p; \mathbf{x}^q) = d (\|\mathbf{x}^p - \mathbf{x}^q\| - h)^2, \quad d > 0, \quad h > 0 \quad (3.4)$$

と、最小化演算を用いて定義される [60]. そして、これら情報交換が各振動子に対して与える影響は、 $G(\mathbf{x}^p; \mathbf{x}^q)$ の逆勾配 $-\nabla G(\mathbf{x}^p; \mathbf{x}^q)$ として与えられる. 本論文では、非線形振動子の同調現象を利用した最適化モデルを構築することを目標とするので、これら情報交換のうち、特定の個体が結合相手と近づく情報交換を行う「順情報交換」に対して主に重点を置いて議論を進める. この情報交換の下で、結合構造は、近傍の定義の仕方により「トポロジーによる結合」「距離による結合」「序列による結合 (エリート結合)」とに分類することができる.

3.2.1 トポロジーによる結合

トポロジーによる結合は、各個体を個体番号をもとに M 次元位相空間に格子状に配置し、近傍をこの位相空間上の隣り合う格子点と定義する結合である. ここで、 M 次元位相空間は円環状、すなわち、それぞれの境界同士がつながっているものとする. たとえば、 $M = 1$ とした場合は、個体 \mathbf{x}^p に対する近傍は $\mathbf{x}^{p\pm 1}$ となり、 $M = 2$ とした場合、格子点配置が

$$\begin{pmatrix} (1, 1) & \cdots & (1, p_2) & \cdots & (1, P_2) \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (p_1, 1) & \cdots & (p_1, p_2) & \cdots & (p_1, P_2) \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (P_1, 1) & \cdots & (P_1, p_2) & \cdots & (P_1, P_2) \end{pmatrix}, \quad \text{where } P_1 + P_2 = P$$

となるから、個体 $\mathbf{x}^{p=(p_1, p_2)}$ に対する近傍は $\mathbf{x}^{q=(p_1\pm 1, p_2\pm 1)}$ となる. さらに、これら近傍に対して片側近傍を採用した場合を「対流結合」、両側近傍を採用した場合を「拡散結合」とよぶ. ここで、 $M = 1$ の下で、ノルムとして $\|\mathbf{x}^p - \mathbf{x}^q\| = \sum (x_i^p - x_i^q)^2$ をとり、 $d = 1/2$ とする. このとき、対流結合によって順情報交換を行う結合構造は

$$\Gamma(\{\mathbf{x}^j(t)\}, \mathbf{x}^p(t)) = -\nabla G(\mathbf{x}^p(t); \mathbf{x}^{p+1}(t)) = \mathbf{x}^{p+1}(t) - \mathbf{x}^p(t) \quad (3.5)$$

となり、いわゆる「最近接対流結合構造」が得られる. また、 $d = 1/4$ として、拡散結合によって順情報交換を行う結合構造は

$$\Gamma(\{\mathbf{x}^j(t)\}, \mathbf{x}^p(t)) = -\nabla G(\mathbf{x}^p(t); \mathbf{x}^{p+1}(t), \mathbf{x}^{p-1}(t)) = \frac{\mathbf{x}^{p+1}(t) - \mathbf{x}^{p-1}(t)}{2} - \mathbf{x}^p(t) \quad (3.6)$$

となり、いわゆる「最近接拡散結合構造」が得られる。なお、堀江らは文献 [61] において、反応拡散系とよばれる拡散型偏微分方程式

$$\frac{\partial x_i(\mathbf{r}; t)}{\partial t} = F_i(\mathbf{x}(\mathbf{r}; t)) + D_i \nabla^2 x_i(\mathbf{r}; t), \quad i = 1, \dots, N \quad (3.7)$$

において、反応項 $F_i(\mathbf{x}(\mathbf{r}; t))$ を勾配系に限定し、拡散係数 D_i を成分によらず一定にしたモデル

$$\frac{\partial x_i(\mathbf{r}; t)}{\partial t} = -\frac{\partial E(\mathbf{x}(\mathbf{r}; t))}{\partial x_i} + D \nabla^2 x_i(\mathbf{r}; t) \quad (3.8)$$

から、Turing の拡散近似を用いることで、(3.1) 式のダイナミクス $\mathbf{f}^p(\mathbf{x}^p(t))$ に勾配系モデルをとり、結合構造 Γ に最近接拡散結合構造をとったダイナミクス

$$\frac{dx_i^p(t)}{dt} = -\frac{\partial E(\mathbf{x}^p(t))}{\partial x_i^p} + c \left(\frac{x_i^{p+1}(t) - x_i^{p-1}(t)}{2} - x_i^p \right) \quad (3.9)$$

を導出している。

3.2.2 距離による結合

距離による結合は、近傍個体を、各個体間の距離に基づいて決定する結合である。具体的には、ある個体 p に対する結合対象個体 q を

$$q = \underset{r}{\operatorname{argmin}} \text{ or } \underset{r}{\operatorname{argmax}} \{ \|\mathbf{x}^r - \mathbf{x}^p\| \mid r = 1, \dots, P \} \quad (3.10)$$

によって決定する。このような近傍定義を用いる例としては、GA におけるシェアリング戦略 [62] などあげることができる。

3.2.3 序列による結合（エリート結合）

序列による結合は、近傍個体を、自身の過去の履歴、ないしは、個体群全体の現在・過去の目的関数値の大小を考慮して決定する、最適化手法に特化した結合である。具体的には、後述する PSO モデルに着想を得た

- pbest (personal best) 型個体：近傍個体を自身の過去の履歴を用いて定義

$$\mathbf{x}_{pb}^p(t) = \underset{\mathbf{x}^p(\tau)}{\operatorname{argmin}} \{ E(\mathbf{x}^p(\tau)) \mid 0 \leq \tau \leq t \} \quad (3.11)$$

- cbest (current best) 型個体：近傍個体を個体群全体の現在時刻の状態を用いて定義

$$\mathbf{x}^{cb}(t) = \underset{\mathbf{x}^p(t)}{\operatorname{argmin}} \{ E(\mathbf{x}^p(t)) \mid p = 1, \dots, P \} \quad (3.12)$$

- gbest (global best) 型個体：近傍個体を個体群全体の全時刻の状態を用いて定義

$$\mathbf{x}_{pb}^{gb}(t) = \underset{\mathbf{x}_{pb}^p(t)}{\operatorname{argmin}} \left\{ E(\mathbf{x}_{pb}^p(t)) \mid p = 1, \dots, P \right\} \quad (3.13)$$

をあげることができる。また、GA におけるルーレット選択に着想を得た

- ルーレット選択型個体：個体群全体の現在時刻の状態を用いて確率的に定義
近傍個体 $\mathbf{x}^q(t)$ を全個体からそれぞれ確率

$$p^q(t) = \frac{E^{wt}(t) - E(\mathbf{x}^q(t))}{\sum_{r=1}^P \{E^{wt}(t) - E(\mathbf{x}^r(t))\}} \quad (3.14a)$$

$$wt = \operatorname{argmax}_p \{E(\mathbf{x}^p) \mid p = 1, \dots, P\} \quad (3.14b)$$

で決定する.

も考えることができる. これら序列による結合では, 個体 \mathbf{x}^p の結合対象となる個体は, 他の個体と結合することがないので, 個体 \mathbf{x}^p は, これら結合相手 (エリート個体とよぶ) に対して「移流結合」を形成することになる. 3.2.1 項と同様に, ノルムとして $\|\mathbf{x}^p - \mathbf{x}^q\| = \sum (x_i^p - x_i^q)^2$ をとり, $d = 1/2$ とし, エリート個体 \mathbf{x}^{el} と移流結合によって順情報交換を行う結合構造は

$$\Gamma(\{\mathbf{x}^j(t)\}, \mathbf{x}^p(t)) = -\nabla G(\mathbf{x}^p(t); \mathbf{x}^{el}(t)) = \mathbf{x}^{el}(t) - \mathbf{x}^p(t) \quad (3.15)$$

となる. 本論文では, この結合構造を「エリート型移流結合構造」とよぶ.

3.3 結合系の同調現象

非線形多体力学系の興味深い性質の1つとして, 結合振動子系における同調現象をあげることができる. 同調現象は, 異なる非線形振動子が結合し情報交換を行うことで, 各振動子間で同期・引き込みを発生することで, 系全体として統一的な振動を創発する物理現象である. 同調現象は, 非線形振動子系では一般的にみられる現象であり, 壁掛け時計の振子の同調から月が地球に対して常に同じ面を向けるような公転運動を伴った月の自転をはじめとした自然現象や, 結合レーザーシステムや結合 BZ 反応振動子系などの物理的・工学的現象など, 数多くの現象が報告されている [63]. これまで本論文で述べてきた非線形力学系最適化モデルも, それらの結合系を構築すれば, 同調現象が創発されることが期待される. そこで本節では, 非線形力学系最適化モデルの中から離散化勾配系カオスモデル (DGCM) に注目し, その結合モデルによる同調現象について考える.

3.3.1 離散時間結合振動子系と比例型結合モデル

連続時間系の微分方程式は, そのポアンカレ写像を考えるなどの操作により, それに対応した離散写像に変換することが可能である. すなわち, 結合がない場合の各振動子の微分方程式

$$\frac{d\mathbf{x}^p(t)}{dt} = \mathbf{f}^p(\mathbf{x}^p(t)), \quad p = 1, \dots, P \quad (3.16)$$

は, 対応する離散写像

$$\mathbf{x}^p(k+1) = \mathbf{g}^p(\mathbf{x}^p(k)), \quad p = 1, \dots, P \quad (3.17)$$

に変換することができる。ここで、離散写像 (3.17) 式によって構成される結合モデルを考える。まず、最も単純に (3.1) 式の連続振動子を対応する離散写像 (3.17) 式で置き換え、さらに、結合構造 Γ の t を k に置き換えると、結合離散写像

$$\mathbf{x}^p(k+1) = \mathbf{g}^p(\mathbf{x}^p(k)) + c\Gamma(\{\mathbf{x}^j(k)\}, \mathbf{x}^p(k)), \quad p = 1, \dots, P \quad (3.18)$$

が得られる。この結合モデルは、連続振動子系と離散写像との対応付けの効果が結合構造に必ずしも反映されているとはいえない。そこで、結合連続振動子系 (3.1) 式を離散化幅 $\Delta T = t/k$ を用いてオイラー差分化した結合離散振動子系を考えると

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{x}^p(t + \Delta T) - \mathbf{x}^p(t)}{\Delta T} &= \mathbf{f}^p(\mathbf{x}^p(t)) + c\Gamma(\{\mathbf{x}^j(t)\}, \mathbf{x}^p(t)) \\ \mathbf{x}^p(t + \Delta T) &= \mathbf{x}^p(t) + \Delta T \mathbf{f}^p(\mathbf{x}^p(t)) + c\Delta T \Gamma(\{\mathbf{x}^j(t)\}, \mathbf{x}^p(t)) \end{aligned} \quad (3.19)$$

が得られ、(3.16) 式のオイラー差分化写像

$$\mathbf{x}^p(t + \Delta T) = \mathbf{x}^p(t) + \Delta T \mathbf{f}^p(\mathbf{x}^p(t)) \quad (3.20)$$

を

$$\mathbf{x}^p(k+1) = \mathbf{g}^p(\mathbf{x}^p(k)), \quad \text{where } t = k\Delta T \quad (3.21)$$

として定義すると、(3.1) 式の離散写像として

$$\mathbf{x}^p(k+1) = \mathbf{g}^p(\mathbf{x}^p(k)) + c\Delta T \Gamma(\{\mathbf{x}^j(k)\}, \mathbf{x}^p(k)), \quad p = 1, \dots, P \quad (3.22)$$

が得られる。このモデルの結合構造は、結合し合っている振動子の状態量の関数 Γ によって表されるが、具体的には、(3.5) 式、(3.6) 式、(3.15) 式のように、振動子の状態量の線形関数で与えられることが一般的であり、しかも比例係数 $c\Delta T$ によってその結合の強弱が規定される。そこで、単に振動子の状態量で結合している (3.22) 式のモデルを「比例 (P) 型結合モデル」と便宜的によぶことにする。このモデルは、 ΔT が小さい場合には、連続結合振動子系 (3.1) 式の良い離散近似となっているが、 ΔT を大きくとった場合については、良い近似となる保証はない。ここで、結合構造 Γ として、最近接対流結合構造 (3.5) 式を採用し、 p 番目の個体の離散写像 \mathbf{g}^p として制約領域トーラス化型離散化勾配系カオスモデル (DGCMwT) (2.32) 式を採用すると

$$\dot{\mathbf{x}}^p(k+1) = \mathbf{x}^p(k) - \Delta T \nabla E(\mathbf{x}^p(k)) + c\Delta T (\mathbf{x}^{p+1}(k) - \mathbf{x}^p(k)) \quad (3.23a)$$

$$x_i^p(k+1) = \tilde{f}(x_i^p(k+1)) \quad (3.23b)$$

$$\tilde{f}(x_i^p) = \begin{cases} x_i^p, & p_i < x_i^p < q_i \\ (x_i^p - p_i) \bmod (q_i - p_i) + p_i, & x_i^p \geq q_i \\ (x_i^p - q_i) \bmod (q_i - p_i) + q_i, & x_i^p \leq p_i \end{cases} \quad (3.23c)$$

$$\text{where } p = 1, \dots, P \quad (3.23d)$$

が得られる [64, 65]。本論文では、このモデルを「P 対流結合型 DGCM」とよぶ。

3.3.2 比例-微分 (PD) 型結合モデル

本項では、DGCMのような離散時間最適化モデルにおいてより安定に同調現象を発現させるP型結合モデルとは別の同調モデルを考える。結合離散振動子系で安定に同調現象を発現するモデルの導出としては、Fujisaka and Yamadaによるポアンカレ写像を用いた導出[66]があるが、本項では、より単純な、比例-微分 (PD : Proportional-Derivative) 型結合構造とオイラー差分法を用いた導出を行う。

連続時間結合振動子系(3.1)式の結合構造 Γ を、各振動子の状態量に加えて、各振動子の状態量の微分である速度によって構成した結合モデル

$$\frac{d\mathbf{x}^p(t)}{dt} = \mathbf{f}^p(\mathbf{x}^p(t)) + c\Gamma \left(\left\{ \mathbf{x}^j(t) + \Delta T \frac{d\mathbf{x}^j(t)}{dt} \right\}, \mathbf{x}^p(t) + \Delta T \frac{d\mathbf{x}^p(t)}{dt} \right), p=1, \dots, P \quad (3.24)$$

を考える。ここで $\Delta T > 0$ である。このモデルの結合構造は、結合し合っている振動子の状態量とその微分である速度の関数 Γ として表される。そこで、(3.22)式のモデルに対応して、これと区別するため(3.24)式の結合構造 Γ を「PD型結合構造」とよぶことにする。この結合構造は、 ΔT 時間後の状態を線形予測して結合しており、予測機能をともなったより強い結合構造であると考えられる。(3.24)式を離散化幅 $\Delta T = t/k$ を用いてオイラー差分法すると

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{x}^p(t + \Delta T) - \mathbf{x}^p(t)}{\Delta T} &= \mathbf{f}^p(\mathbf{x}^p(t)) \\ &+ c\Gamma \left(\left\{ \mathbf{x}^j(t) + \Delta T \frac{\mathbf{x}^j(t + \Delta T) - \mathbf{x}^j(t)}{\Delta T} \right\}, \mathbf{x}^p(t) + \Delta T \frac{\mathbf{x}^p(t + \Delta T) - \mathbf{x}^p(t)}{\Delta T} \right) \end{aligned}$$

$$\mathbf{x}^p(t + \Delta T) = \mathbf{x}^p(t) + \Delta T \mathbf{f}^p(\mathbf{x}^p(t)) + \Delta T c\Gamma(\{\mathbf{x}^j(t + \Delta T)\}, \mathbf{x}^p(t + \Delta T)) \quad (3.25)$$

が得られる。(3.16)式のオイラー差分写像(3.20)式を(3.21)式として定義し、(3.25)式の $\Delta T c$ を新たに c として再定義すると、(3.24)式の離散写像として

$$\mathbf{x}^p(k + 1) = \mathbf{g}^p(\mathbf{x}^p(k)) + c\Gamma(\{\mathbf{x}^j(k + 1)\}, \mathbf{x}^p(k + 1)), p = 1, \dots, P \quad (3.26)$$

が得られる。さらに

$$\mathbf{x}_i = \begin{pmatrix} x_i^1 \\ \vdots \\ x_i^P \end{pmatrix}, X = [\mathbf{x}^1, \dots, \mathbf{x}^P], \mathbf{g}_i(X) = \begin{pmatrix} g_i^1(\mathbf{x}^1) \\ \vdots \\ g_i^P(\mathbf{x}^P) \end{pmatrix} \quad (3.27)$$

として、(3.26)式を $X(k + 1)$ について解くと

$$\mathbf{x}_i(k + 1) = C^{-1} \mathbf{g}_i(X(k)) \quad (3.28)$$

となる。本論文では、(3.26)式のモデル、もしくは、これを解いた(3.28)式のモデルを「比例-微分 (PD) 型結合モデル」とよぶ。このモデルでは、 $k + 1$ 時刻目における結合相手の位置を予測する結合構造が使われており、この新しいモデルを用いることで、従来の結合モデルと比較して、結合離散振動子のより安定な同調現象の発現が期待される。ここで、結合構

造として最近接対流結合構造を採用し、 p 番目の個体の離散写像 g^p として DGCMwT(2.32) 式を採用すると

$$\dot{x}_i(k+1) = C^{-1}g_i(X(k)) \quad (3.29a)$$

$$g_i^p(x^p(k)) = x_i^p(k) - \Delta T \frac{\partial E(x^p(k))}{\partial x_i} \quad (3.29b)$$

$$x_i^p(k+1) = \tilde{f}(x_i^p(k+1)) \quad (3.29c)$$

$$\tilde{f}(x_i^p) = \begin{cases} x_i^p, & p_i < x_i^p < q_i \\ (x_i^p - p_i) \bmod (q_i - p_i) + p_i, & x_i^p \geq q_i \\ (x_i^p - q_i) \bmod (q_i - p_i) + q_i, & x_i^p \leq p_i \end{cases} \quad (3.29d)$$

$$C_{ij} = \begin{cases} c+1 & (j=i) \\ -c & (j=i+1) \\ 0 & (j \neq i, i+1) \end{cases} \quad (3.29e)$$

$$\text{where } p = 1, \dots, P \quad (3.29f)$$

が得られる。本論文では、このモデルを「PD 対流結合型 DGCM」とよぶ。

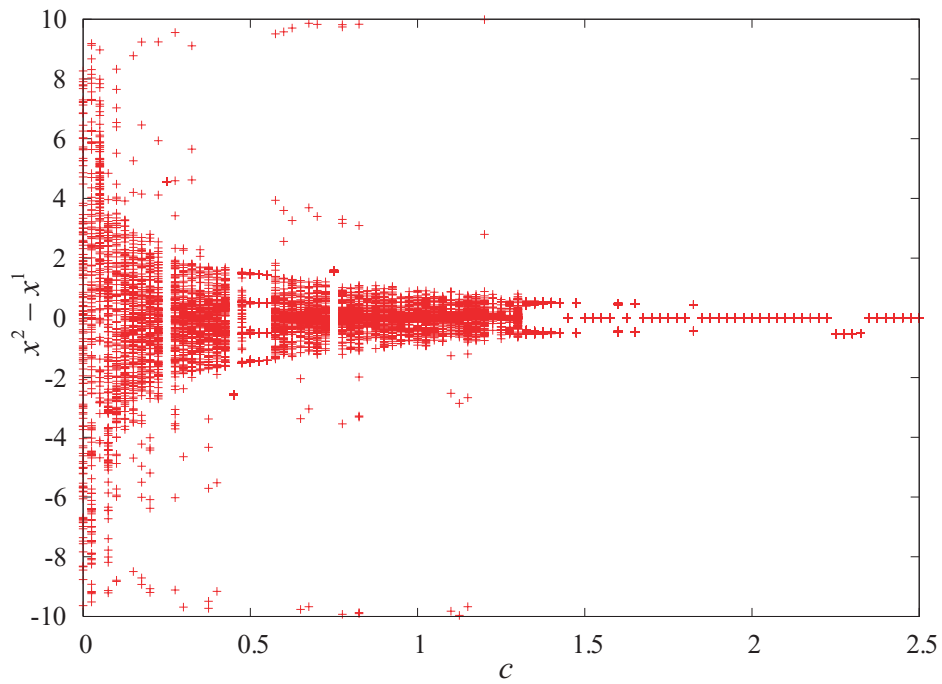
3.3.3 各結合モデルの計算特性と同調現象

本項では、P 対流結合型 DGCM(3.23) 式と PD 対流結合型 DGCM(3.29) 式からの同調現象発現について、数値シミュレーションと安定性解析を通して確認する。

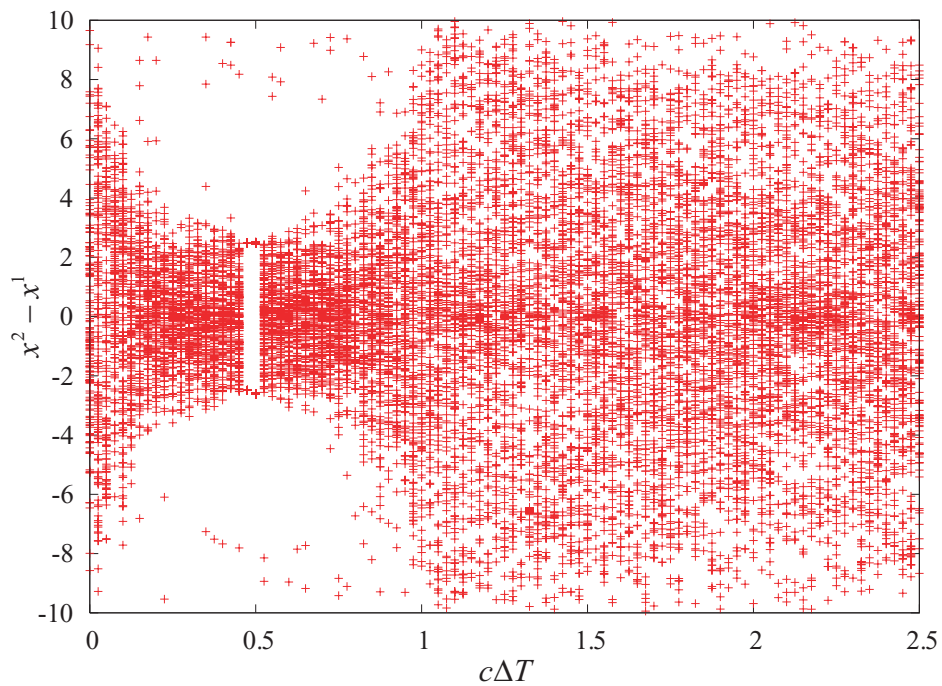
簡単のために、P 対流結合型 DGCM(3.23) 式と PD 対流結合型モデル (3.29) 式において $P=2$ とした場合を考える。このとき、(3.29) 式において結合係数行列 C は

$$C^{-1} = \frac{1}{1+2c} \begin{pmatrix} 1+c & c \\ c & 1+c \end{pmatrix} \quad (3.30)$$

と与えられる。 $P=2$ とした P 対流結合型 DGCM と、(3.30) 式を代入した PD 対流結合型モデルをベンチマーク問題 Prob.7 (Original Rastrigin $N=1$, 付録 A.2 節を参照) へ適用を通して、両結合モデル間の同調現象発現に対する効果の違いについて確認する。この適用においては、離散化幅をカオスの探索軌道が発生する $\Delta T = 0.02$ とし、これらモデルの同調現象発現に対する結合係数依存性を示すために、結合係数 c を、P 対流結合型 DGCM では $c\Delta T = 0.0 \sim 2.5$, PD 対流結合型 DGCM では $c = 0.0 \sim 2.5$ の間で変更しながらシミュレーションを行った。結果として、初期点を $x^1 = 3.9789, x^2 = -3.9789$ としたときの 1000~1150 ステップ間の各振動子の差 $x^1 - x^2$ の $c\Delta T, c$ に対する分岐図を Fig. 3.1(a) と Fig. 3.1(b) に示す。Fig. 3.1(a) をみると、 c を大きい値に設定すると PD 型結合モデルによってカオスの同調現象が安定的に発現している様子がわかる。一方、Fig. 3.1(b) をみると、P 型結合モデルのような不安定な結合モデルからは、カオスの同調現象が発現せず、 c を大きくとるとむしろ両振動子間の距離の発散を引き起こしている。しかしながら、P 型結合モデルでも c を適当な値にとることができれば、振動子間の距離をある程度近づけることには成功することがわかる。



(a) PD-Convection Coupling Type DGCM – Eq.(3.29) ($P = 2$)



(b) P-Convection Coupling Type DGCM – Eq.(3.23) ($P = 2$)

Fig. 3.1 Bifurcation Diagrams of the Differences between Each Oscillator versus $c\Delta T, c$.

Objective function is Prob.7 ($N = 1$).

The initial point of $x^1 = 3.9789$ and the one of $x^2 = -3.9789$. $\Delta T = 0.02$.

つぎに、同調現象発現のための結合係数 c の条件について考える。まず、P 対流結合型モデルについて考える。簡単のため、P 型結合モデル (3.22) 式において $P = 2, N = 1, c\Delta T \rightarrow c$ とし、結合構造 Γ とし最近接対流結合構造 (3.5) 式を採用した

$$\begin{aligned} x^1(k+1) &= g(x^1(k)) + c(x^2(k) - x^1(k)) \\ x^2(k+1) &= g(x^2(k)) + c(x^1(k) - x^2(k)) \end{aligned} \quad (3.31)$$

を考える²。任意の c に対して、同調状態 $x^1(k) = x^2(k)$ は、(3.31) 式の特解になっており、同調現象発現の条件を考えるにあたって重要なのは、その特解の安定性である。そこで、同調状態を $x^*(k) = x^1(k) = x^2(k)$ とおき、同調状態（特解）の安定性について考える。 x^* 周りの点 $x^p(k) = x^*(k) + \delta x^p(k)$ を考え、同調状態において $x^p(k+1) = g(x^*)$ になることを考慮して $x^p(k+1) = g(x^*(k)) + \delta x^p(k+1)$ とすると

$$\begin{aligned} g(x^*(k)) + \delta x^1(k+1) &= g(x^*(k) + \delta x^1(k)) + c \{ x^*(k) + \delta x^2(k) - (x^*(k) + \delta x^1(k)) \} \\ g(x^*(k)) + \delta x^2(k+1) &= g(x^*(k) + \delta x^2(k)) + c \{ x^*(k) + \delta x^1(k) - (x^*(k) + \delta x^2(k)) \} \end{aligned} \quad (3.32)$$

が得られる。 $g(x^*(k) + \delta x^p(k)) = g(x^*(k)) + \frac{dg(x^*(k))}{dx} \delta x^p(k)$ であるから、結局、ずれの運動方程式として

$$\begin{aligned} \delta x^1(k+1) &= \frac{dg(x^*(k))}{dx} \delta x^1(k) + c(\delta x^2(k) - \delta x^1(k)) \\ \delta x^2(k+1) &= \frac{dg(x^*(k))}{dx} \delta x^2(k) + c(\delta x^1(k) - \delta x^2(k)) \end{aligned} \quad (3.33a)$$

から

$$\begin{pmatrix} \delta x^1(k+1) \\ \delta x^2(k+1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{dg(x^*(k))}{dx} - c & c \\ c & \frac{dg(x^*(k))}{dx} - c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta x^1(k) \\ \delta x^2(k) \end{pmatrix} \quad (3.33b)$$

を得る。同調時刻から K 時刻後の同調状態からのずれを考えるために、(3.33b) 式の固有値 μ_1, μ_2 と対応する固有ベクトル $\boldsymbol{\nu}_1, \boldsymbol{\nu}_2$ を求めると

$$\mu_1 = \frac{dg(x^*(k))}{dx}, \quad \mu_2 = \frac{dg(x^*(k))}{dx} - 2c, \quad \boldsymbol{\nu}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\nu}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (3.34)$$

となるから、ベクトル $(\delta x^1(k), \delta x^2(k))^T$ を非ゼロの係数 d_1, d_2 を用いて $\boldsymbol{\nu}_1, \boldsymbol{\nu}_2$ の線形結合に置き換えると

$$\begin{pmatrix} \delta x^1(k+1) \\ \delta x^2(k+1) \end{pmatrix} = d_1 \frac{dg(x^*(k))}{dx} \boldsymbol{\nu}_1 + d_2 \left(\frac{dg(x^*(k))}{dx} - 2c \right) \boldsymbol{\nu}_2 \quad (3.35)$$

となる。これを (3.33) 式に代入すると

²なお、以下の議論に関して、DGCMwT を用いた場合については、探索点が十分内部にある場合、すなわち、(3.23c) 式ないしは (3.29d) 式において、 $p_i < \hat{x}_i^p < q_i$ が採用される場合について考えるものとする

$$\begin{pmatrix} \delta x^1(k+2) \\ \delta x^2(k+2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{dg(x^*(k+1))}{dx} - c & c \\ c & \frac{dg(x^*(k+1))}{dx} - c \end{pmatrix} \times \left\{ d_1 \frac{dg(x^*(k))}{dx} \boldsymbol{\nu}_1 + d_2 \left(\frac{dg(x^*(k))}{dx} - 2c \right) \boldsymbol{\nu}_2 \right\} \quad (3.36)$$

となることからわかるように、結合係数 c に対するずれの時間発展に関しては、固有方向 $\boldsymbol{\nu}_2$ に関するリアプノフ指数

$$\lambda_2 = \lim_{K \rightarrow \infty} \frac{1}{K} \sum_{l=k}^{k+K} \ln \left| \frac{dg(x^*(l))}{dx} - 2c \right| \quad (3.37)$$

の大きさが問題となる。すなわち、 $\lambda_2 > 0$ の場合は、同調状態からのずれは拡大するので同調状態は不安定になるが、 $\lambda_2 < 0$ の場合は、同調状態からのずれはゼロへ縮退するので同調状態は安定になる。(3.37)式からわかるように、結合係数 c を適当な値まで大きくとれば、より安定な同調現象発現を期待することができるが、大きくとりすぎると $\lambda_2 > 0$ となるので同調状態が不安定になってしまう。したがって、同調現象発現のために P 型結合モデルを用いることは、結合係数 c を適当な値に調整する必要があることから、パラメータ設定の複雑さを増すという意味で問題がある。

つぎに、PD 対流結合型モデルについて考える。同様に簡単のため、PD 型結合モデル (3.28) 式において $P = 2, N = 1$ とし、結合構造 Γ とし最近接対流結合構造を採用した

$$\begin{pmatrix} x^1(k+1) \\ x^2(k+1) \end{pmatrix} = C^{-1} \begin{pmatrix} g(x^1(k)) \\ g(x^2(k)) \end{pmatrix} \quad (3.38a)$$

$$C^{-1} = \frac{1}{1+2c} \begin{pmatrix} 1+c & c \\ c & 1+c \end{pmatrix} \quad (3.38b)$$

を考える。同様に、同調状態を $x^*(k) = x^1(k) = x^2(k)$ とおき、同調状態の安定性について考える。 x^* 周りの点 $x^p(k) = x^*(k) + \delta x^p(k)$ を考えると

$$\begin{pmatrix} g(x^*(k) + \delta x^1(k+1)) \\ g(x^*(k) + \delta x^2(k+1)) \end{pmatrix} = C^{-1} \begin{pmatrix} g(x^*(k) + \delta x^1(k)) \\ g(x^*(k) + \delta x^2(k)) \end{pmatrix} \quad (3.39)$$

を得るから、 $g(x^*(k) + \delta x^p(k)) = g(x^*(k)) + \frac{dg(x^*(k))}{dx} \delta x^p(k)$ であることを利用して、ずれの運動方程式として

$$\begin{pmatrix} \delta x^1(k+1) \\ \delta x^2(k+1) \end{pmatrix} = \frac{dg(x^*)}{dx} C^{-1} \begin{pmatrix} \delta x^1(k) \\ \delta x^2(k) \end{pmatrix} \quad (3.40)$$

を得る。したがって、同調状態から K 時刻後の同調状態のずれは

$$\begin{pmatrix} \delta x^1(k+K) \\ \delta x^2(k+K) \end{pmatrix} = \prod_{l=k}^{k+K} \left\{ \frac{dg(x^*(l))}{dx} \right\} (C^{-1})^K \begin{pmatrix} \delta x^1(k) \\ \delta x^2(k) \end{pmatrix} \quad (3.41)$$

となる. C^{-1} の固有値を μ_1, μ_2 , 対応する固有ベクトルを $\boldsymbol{\nu}_1, \boldsymbol{\nu}_2$ とおき, $(\delta x^1(k), \delta x^2(k))^T$ を非ゼロの係数 d_1, d_2 を用いて $\boldsymbol{\nu}_1, \boldsymbol{\nu}_2$ の線形結合に置き換えると

$$\begin{pmatrix} \delta x^1(k+K) \\ \delta x^2(k+K) \end{pmatrix} = \prod_{l=k}^K \left\{ \frac{dg(x^*(l))}{dx} \right\} (d_1 \mu_1^K \boldsymbol{\nu}_1 + d_2 \mu_2^K \boldsymbol{\nu}_2) \quad (3.42)$$

となる. ここで, $\mu_1 = \frac{1}{1+2c}, \mu_2 = 1$ であるので, 同調状態の安定性は, リアプノフ指数

$$\lambda = \lim_{K \rightarrow \infty} \frac{1}{K} \sum_{l=k}^{k+K} \ln \left| \frac{dg(x^*(l))}{dx} \right| \quad (3.43)$$

を用いて

$$\begin{aligned} \lambda + \ln \left(\frac{1}{1+2c} \right) &< 0 \\ \frac{\exp(\lambda)}{1+2c} &< 1 \end{aligned} \quad (3.44)$$

が条件となって決定される. (3.44) 式からわかるように, 結合係数 c を大きくとるほど, より安定な同調現象発現を期待することができる. なお, $P=2, N>1$ の場合については, 同様の議論を行うことは容易ではない. しかしながら, (3.40) 式を

$$\begin{pmatrix} \delta x_i^1(k+1) \\ \delta x_i^2(k+1) \end{pmatrix} = C^{-1} \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{\partial g_i(\mathbf{x}^*(k))}{\partial x_j} \begin{pmatrix} \delta x_j^1(k) \\ \delta x_j^2(k) \end{pmatrix} \right\} \quad (3.45)$$

に置き換えられることを考えると, $P=2, N>1$ の場合にも c は同様の因子となると考えられ, 同様に c を大きくとれば安定な同調現象が発現すると期待される.

3.4 PSO モデルと結合系

ここまで, 結合によって情報交換を行う多点型最適化計算モデルについて考えてきたが, 1.2 節でも述べたように, MH の多くは, 多点型最適化モデルであり, 個々では確率に振舞う個体間の情報交換によって動作するモデルが多い. 本節では, MH の中から, 3.2.3 項のエリート結合の着想を与えた PSO モデルについて, そのダイナミクスと計算特性について簡単に述べる.

PSO (Particle Swarm Optimization) は, 鳥の群れの動きとして可視化される社会行動シミュレータの研究を先駆けに開発された最適化モデル^[67]であり, そのアルゴリズムの単純さと微分不可能問題でも適用可能な応用範囲の広さと, 優れた探索性能から, 近年注目を集めている最適化手法である. 最も単純な PSO モデルは, 無制約最適化問題を解く多体結合型最適化モデルとして

$$v_i^p(k+1) = w v_i^p(k) + c_1 r_{1i}^p(k) (x_{pbi}^p(k) - x_i^p(k)) + c_2 r_{2i}^p(k) (x_{pbi}^{gb}(k) - x_i^p(k)) \quad (3.46a)$$

$$x_i^p(k+1) = x_i^p(k) + v_i^p(k+1) \quad (3.46b)$$

$$\text{where } w, c_1, c_2 > 0 \quad (3.46c)$$

$$r_{1i}^p(k) \leftarrow U(0, 1), r_{2i}^p(k) \leftarrow U(0, 1) \quad (3.46d)$$

$$\mathbf{x}_{pb}^p(k) = \operatorname{argmin}_{\mathbf{x}^p(i)} \{E(\mathbf{x}^p(i)) \mid i = 0, \dots, k\} \quad (3.46e)$$

$$\mathbf{x}_{pb}^{gb}(k) = \operatorname{argmin}_{\mathbf{x}_{pb}^p(k)} \left\{ E(\mathbf{x}_{pb}^p(k)) \mid p = 1, \dots, P \right\} \quad (3.46f)$$

として定式化される．ここで，(3.46d)式は，各時刻各個体各成分で異なる一様乱数を用いることを示している．PSOモデルは，(3.46)式にあるように， p 番目の探索点の速度 $\mathbf{v}^p(k)$ を，現在の探索点の位置 $\mathbf{x}^p(k)$ と，各個体の k 時刻目までの探索履歴の中での最良点である pbest $\mathbf{x}_{pb}^p(k)$ と，全個体で k 時刻目までの探索履歴の中での最良点である gbest $\mathbf{x}_{pb}^{gb}(k)$ とのエリート結合によって更新しながら探索を行うモデルである．PSOモデルを力学的に解釈すれば，確率的な要素を含む線形慣性型離散力学系であり，初速度を $\mathbf{v}(0)$ として，(3.46a)式，(3.46b)式から速度項を消去すると

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_i^p(k+1) &= \mathbf{x}_i^p(k) + w^{k+1} \mathbf{v}_i^p(0) \\ &+ \sum_{l=0}^k w^{k-l} \left\{ c_1 r_{1i}^p(l) \left(\mathbf{x}_{pbi}^p(l) - \mathbf{x}_i^p(l) \right) + c_2 r_{2i}^p(l) \left(\mathbf{x}_{pbi}^{gb}(l) - \mathbf{x}_i^p(l) \right) \right\} \end{aligned} \quad (3.47)$$

となるので， k 時刻目までの pbest や gbest へのエリート結合の畳み込みによって， $k+1$ 時刻目の探索点の位置が決定されていることがわかる．(3.47)式から明らかに，過去の情報に対する重み w を絶対値が1より大きい値にとると，系が発散してしまうことがわかり， $w < 1$ とすべきであることが理解される．しかし， w をあまりに小さい値にとっても過去の情報に対する重みが小さすぎることになる．文献[33]によると， w は0.7～0.8程度に設定することが推奨されている．また c_1, c_2 も大きい値にとりすぎるべきでなく，多くの場合，経験的に1.5～1.7程度に設定することが良いとされている．このような推奨値設定に関する研究は，他にも文献[68, 69]などにもみられる．しかしながら，この推奨値はあくまで経験的に知られている値であり，問題の構造や次元によって最適な値は異なってくる．文献[70]では，単純なPSOモデルを用いていないが，複数のベンチマーク問題・複数の次元に対する適用を通して，この問題を指摘している．

ところで，(3.46)式に再度注目すると，そのダイナミクスは，2つのエリート個体に対する順結合による方向ベクトルの設定とそのベクトルの大きさを各成分で確率的に変更することによって成立している．すなわち，本質的な駆動力は，エリート個体との順結合による情報交換のみであるといえる．したがって，探索点はエリート個体に近づくように動きながら，その近傍を確率的に探索を行うのだが，もしこの探索を行っている間に新しい最良点を発見することができず，全個体がエリート個体近傍に集中してしまえば，本質的な駆動力を失ってしまうことになる．このような現象は，たとえばGAにもみられ，MHが抱える一般的な問題点であるといえる．GAでは，この問題をある程度回避するために，突然変異というオペレータが存在するが，その挙動はやはりランダムサーチと同一といえ，本質的な駆動力とはいえない．PSOにおいては，gbestへの集中化を回避しつつ，常に個体群が探索を実行し続けるという意味での多様性を維持するために，個体群の活性度を用いたアプローチ[35, 71]や，gbestとpbestがある一定の距離を保つようにするアプローチ[72]，

捕食・被食者の行動の概念をとり入れたアプローチ^[73]など、様々な改良手法が提案されている。また、個体群がエリート個体（とくに **gbest**）に停留しそうになると、妥当な方向に対する駆動力を再度与えることでこの停留を回避しようとするアプローチとしては、PSO を周期性を伴ったモデルに変更し、その1周期前の **pbest** と現在の **pbest** を用いて擬似的な勾配を用いて新たな速度を与えるアプローチ^[70]や、上述したように PSO モデルを慣性力学系モデルの一種としてとらえ、2.4.2 項で述べた徐冷散逸系モデルを応用することで、**gbest** に近づこうとするとそれに反発する力を与えることで停留を回避しようとするアプローチ^[51]などの改良手法が提案されている。しかしながら、これら提案手法を用いても、やはり駆動力が個体間の情報交換で与えられるかぎり、個体群のエリート個体への集中による多様性の喪失という問題は解消されているとはいえ、この問題点を解消した新しい大域的最適化手法の提案が望まれている。

3.5 まとめ

本章では、非線形力学系モデルを駆動モデルとして自律探索を行う複数の個体によって結合系を形成する新しい最適化モデルを中心として、結合非線形振動子系とその同調現象についての議論を行った。具体的には、まず、連続時間振動子系を対象として、結合構造を「近傍」と「情報交換」の2つの要素によって定義づけし、情報交換のさせ方と近傍の定義の種類をそれぞれ網羅的に紹介した。つぎに、離散時間振動子系について、P型結合モデルとPD型結合モデルを連続時間振動子系のオイラー差分モデルとして導出した。そして、各個体の振動モデルを離散化勾配系カオスモデルとしたときの同調現象発現について、数値シミュレーションと安定性解析の面から議論し、PD型結合モデルを用いた場合に最適化モデルにおけるカオス同調現象の発現を確認した。3.4節では、MHの1つで、かつ、多点型最適化モデルの1つである PSO モデルに注目し、その計算特性についての考察を行い、この考察を通して、MHが一般的に抱える、探索の駆動力が個体間の情報交換のみによるために生じる問題点について指摘した。次章では、本章で述べた結合構造の中から、P型・PD型のエリート結合構造を用いた新しい最適化モデルについての提案を行う。このモデルは、2.6.3項で指摘した、単点の非線形力学系モデルが抱える問題点をMHの優れた探索戦略の付与によって解消したモデルであると同時に、3.4節で指摘したMHの抱える問題点を、各個体が非線形力学系モデルを駆動力とした自律的大域的探索を実行することで解消しているモデルであり、従来モデルよりも優れた大域的最適化性能が期待できるモデルである。

第4章 結合型非線形力学系モデルによる大域的最適化手法

4.1 はじめに

本章では、非線形力学系モデルによって駆動されて自律的な大域的探索を行う複数の個体の軌道が、P型・PD型結合モデルによってエリート個体に同調していくことで大域的最適化を実現する、新しい多点型大域的最適化モデルを提案する。具体的には、2章で解説した非線形力学系モデルのうち離散時間モデルである、離散化勾配系カオスモデル、水抜き法、離散化非線形散逸系モデル、離散化高次元アルゴリズムによって駆動する複数の探索個体を準備し、これら探索個体群を、P型・PD型のエリート型移流結合させることで、目的関数値の小さいエリート個体へ各個体が同調していくエリート結合型最適化計算モデルを構築する。これらモデルは、非線形力学系モデルに対して、多点化による複数個体の探索による多様化戦略と結合による目的関数値を考慮した探索戦略をより付加することで、2.6.3項で述べた問題点を改善した手法である。本章では、これらエリート結合型最適化モデルについての導出を行った上で、結合係数設定に対する考察を行い、そして複数の100変数多峰性関数への適用シミュレーションを通してその有効性を確認する。

ところで、本章で提案するエリート結合型最適化計算モデルは、後述するように3.4節で解説したPSOモデルを参考にした結合構造を有しており、一見すると、PSOの改良手法のように考えられるかもしれない。しかし、大域的探索を行う駆動力が確率的な揺らぎではなく、非線形力学系から得られる軌道によるものであり、PSOモデルの知見はその結合構造にのみ反映されている点で、本質的にPSOモデルとは異なるメカニズムを持つ大域的最適化モデルであることに注意されたい。また、本章で提案するモデルと同様にPSOモデルを参考にしつつ、勾配を用いたカオス軌道を利用したモデルとしてFlock大域的最適化手法^[74]をあげることができる。この手法では、ランダム性を除去したPSOモデルをベースモデルとし、これに大域的探索能力を与えるために、慣性系のカオス的探索軌道でgbestより良い目的関数値を与える点があればこれに引き寄せる操作を行っている。この手法の本質的な駆動力は、ランダム性を排除したPSOモデルであると考えられ、カオス的探索軌道はむしろ補助的に用いているものといえる。本提案モデルは、駆動モデルとしてカオス軌道を与える非線形力学系モデルを用いている点において、このFlock大域的最適化手法とは異なるモデルであることにも注意されたい。

4.2 Pエリート結合型最適化計算モデル

4.2.1 離散化勾配系カオスモデルのP型エリート結合

3.3.1 項で述べたように、変数 \mathbf{x} のみで構成される離散時間最適化モデルに対する P 型結合モデルは (3.22) 式 (p.53) で与えられる。(3.22) 式の結合構造 Γ として、2つのエリート個体に対するエリート型移流結合構造 (3.15) 式 (p.52) を採用することを考える。エリート個体の選択方法としては、3.2.3 項で定義した4つのエリート個体から自由な組合せを考えることができるが、本論文では、3.4 節で解説した PSO モデルを参考に、1つを各個体の探索履歴中の最良個体である (3.11) 式 (p.51) の pbest で固定し、もう1つを全個体を考慮して決定される gbest, cbest, ルーレット選択型個体の中から選択し、これを \mathbf{x}^{el} と置くことにする。以上をまとめると、P 型のエリート型移流結合構造を持った1階の離散時間最適化モデルとして

$$\mathbf{x}^p(k+1) = \mathbf{g}^p(\mathbf{x}^p(k)) + c_1 \Delta T (\mathbf{x}^{el}(k) - \mathbf{x}^p(k)) + c_2 \Delta T (\mathbf{x}_{pb}^p(k) - \mathbf{x}^p(k)) \quad (4.1)$$

が得られる。 p 番目の個体の離散写像 \mathbf{g}^p として DGCMwT(2.32) 式を採用すると

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{x}}^p(k+1) &= \mathbf{x}^p(k) - \Delta T \nabla E(\mathbf{x}^p(k)) \\ &\quad + c_1 \Delta T (\mathbf{x}^{el}(k) - \mathbf{x}^p(k)) + c_2 \Delta T (\mathbf{x}_{pb}^p(k) - \mathbf{x}^p(k)) \end{aligned} \quad (4.2a)$$

$$\mathbf{x}_i^p(k+1) = \tilde{f}(\hat{x}_i^p(k+1)) \quad (4.2b)$$

$$\tilde{f}(\hat{x}_i^p) = \begin{cases} \hat{x}_i^p, & p_i < \hat{x}_i^p < q_i \\ (\hat{x}_i^p - p_i) \bmod (q_i - p_i) + p_i, & \hat{x}_i^p \geq q_i \\ (\hat{x}_i^p - q_i) \bmod (q_i - p_i) + q_i, & \hat{x}_i^p \leq p_i \end{cases} \quad (4.2c)$$

が得られる。本論文では、このモデルを「P エリート結合型離散化勾配系カオスモデル (P-EC-DGCM: Proportional - Elite Coupling type DGCM)^[64, 65]」とよぶ。このモデルは、カオス的探索個体とエリート個体との結合による情報交換によって、目的関数値を考慮した集中化戦略を実現することが期待されるが、後述するとおり、結合係数 c_1, c_2 をある値に固定したままでは、とくに局所探索段階において、エリート個体近傍への引き込み収束が発生するために探索軌道の多様性が失われる可能性がある。そこで、集中化を実現しながら多様性を維持するために、(4.2) 式の c_1, c_2 を周期関数を用いた時変係数 $\bar{c}_i \sin^2\left(\frac{2\pi k}{T}\right), i = 1, 2$ に置き換えることで、探索軌道のエリート個体近傍への同調・非同調を周期的に繰り返すモデルに変更する。さらに、単点の DGCMwT と同様に、離散化幅 ΔT に対して、線形アニーリング (2.91) 式 (p.32) を適用すると

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{x}}^p(k+1) &= \mathbf{x}^p(k) - \Delta T(k) \nabla E(\mathbf{x}^p(k)) + c_1(k) \Delta T(k) (\mathbf{x}^{el}(k) - \mathbf{x}^p(k)) \\ &\quad + c_2(k) \Delta T(k) (\mathbf{x}_{pb}^p(k) - \mathbf{x}^p(k)) \end{aligned} \quad (4.3a)$$

$$\mathbf{x}_i^p(k+1) = \tilde{f}(\hat{x}_i^p(k+1)) \quad (4.3b)$$

$$\tilde{f}(\hat{x}_i^p) = \begin{cases} \hat{x}_i^p, & p_i < \hat{x}_i^p < q_i \\ (\hat{x}_i^p - p_i) \bmod (q_i - p_i) + p_i, & \hat{x}_i^p \geq q_i \\ (\hat{x}_i^p - q_i) \bmod (q_i - p_i) + q_i, & \hat{x}_i^p \leq p_i \end{cases} \quad (4.3c)$$

$$\Delta T(k) = \Delta T_{\max} \left(1 - \frac{k}{k_{\max}}\right) \quad (4.3d)$$

$$c_i(k) = \bar{c}_i \sin^2\left(\frac{2\pi k}{T}\right), \quad i = 1, 2 \quad (4.3e)$$

Table 4.1 Parameters of Annealing type P-EC-DGCM and PD-EC-DGCM

Parameter	Explanation	How to set
P	Number of agents	Fixed value
T	Period of the reiteration between synchronization and non-synchronization	Fixed value
k_{\max}	Steps of the search	Fixed value
ϵ_g	Gradient norm value used as the criterion for local search convergence	Fixed value
ΔT_{\max}	Initial value of the sampling parameter	It is set so that the chaotic trajectory is generated in initial state.
\bar{c}_1, \bar{c}_2	Maximum coupling coefficients	It is set to a fixed value except Prob.5 in PD type model. In P type model, it is set to a value given by dividing a fixed value by ΔT_{\max} . For Prob.5 , a larger value is used in order to break stabilization structure.

が得られる。本論文では、このモデルを「徐冷型 P-EC-DGCM」とよぶ。この徐冷型 P-EC-DGCM の Pseudo Code を付録 C 章の C.6 節に示す。また、C.6 節の徐冷型 P-EC-DGCM で用いるパラメータを Table 4.1 に示す。

4.2.2 水抜き法の P 型エリート結合

前項の P-EC-DGCM を利用して、水抜き法の P 型エリート結合モデルも考えることができる。すなわち、2.3.3 項の水抜き法 List 2.2 (p.25) の **Step2** のカオス探索において、P-EC-DGCM を適用すればよい。このとき、 $\alpha = E_{\text{best}}$ としていた水位パラメータの設定が問題となる。本論文では、探索の多様性を考慮して、各個体で $\alpha^p = E(\mathbf{x}_{pb}^p)$ と定義することにする。以上の P-EC-DGCM を用いた水抜き法を「P エリート結合型水抜き法 (P-EC-DM : Proportional - Elite Coupling type DM)」とよぶ。この P-EC-DM の Pseudo Code を付録 C 章の C.7 節に示す。また、C.7 節の P-EC-DM で用いるパラメータを Table 4.2 に示す。

4.2.3 離散化非線形散逸系モデルの P 型エリート結合

離散化非線形散逸系モデルの P 型エリート結合モデルを考えるにあたって、まず、畳み込み積分型勾配系モデルの結合モデルから非線形散逸系モデルに対する結合モデルを導出し、さらにこれを離散化した上で、結合構造にエリート結合を採用したモデルを考える。

目的関数 E を最小化する畳み込み積分型勾配系モデル (2.80) 式 (p.30) で探索を行う P 個の多点探索モデルを考え、そこに結合構造を導入したモデル

$$\frac{d\mathbf{x}^p(t)}{dt} = -c \int_0^t e^{-a(t-\tau)} \nabla E(\mathbf{x}^p(\tau)) d\tau + d\Gamma(\{\mathbf{x}^j(t)\}, \mathbf{x}^p(t)) \quad (4.4)$$

Table 4.2 Parameters of P-EC-DM and PD-EC-DM

Parameter	Explanation	How to set
P	Number of agents	Fixed value
β	β in the transformation function Eq.(2.70) (p.21)	Fixed value
δ	Decrease rate of the sampling parameter	Fixed value
ϵ_g	Gradient norm value used as the criterion for local search convergence	Fixed value
ϵ_E	ϵ_E in Step4 of List 2.2 (p.25)	Fixed value
\tilde{T}	Period of the reiteration between synchronization and non-synchronization	$T/2$
T	Step number of the chaotic search	Fixed value
ΔT_{\max}	Initial value of the sampling parameter	It is set so that the chaotic trajectory is generated in initial state.
\bar{c}_1, \bar{c}_2	Maximum coupling coefficients	It is set to a fixed value except Prob.5 and Prob.6 in PD type model. It is set to a value given by dividing a fixed value by ΔT_{\max} except Prob.5 and Prob.6 in P type model.

を考える。これを両辺 t で微分すると

$$\frac{d^2 \mathbf{x}^p(t)}{dt^2} = ace^{-at} \int_0^t e^{a\tau} \nabla E(\mathbf{x}^p(\tau)) d\tau - c \nabla E(\mathbf{x}^p(t)) + d\Gamma \left(\left\{ \frac{d\mathbf{x}^j(t)}{dt} \right\}, \frac{d\mathbf{x}^p(t)}{dt} \right) \quad (4.5)$$

となるから、(4.4) 式を代入すると

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \mathbf{x}^p(t)}{dt^2} = & -a \left[\frac{d\mathbf{x}^p(t)}{dt} - d\Gamma(\{\mathbf{x}^j(t)\}, \mathbf{x}^p(k)) \right] \\ & - c \nabla E(\mathbf{x}^p(t)) + d\Gamma \left(\left\{ \frac{d\mathbf{x}^j(t)}{dt} \right\}, \frac{d\mathbf{x}^p(t)}{dt} \right) \end{aligned} \quad (4.6)$$

となるので、結局、連続時間散逸系最適化モデルの結合モデルとして

$$\begin{aligned} m \frac{d^2 \mathbf{x}^p(t)}{dt^2} + \frac{d\mathbf{x}^p(t)}{dt} = & -\epsilon \nabla E(\mathbf{x}^p(t)) \\ & + c_1 \Gamma(\{\mathbf{x}^j(t)\}, \mathbf{x}^p(k)) + c_2 \Gamma \left(\left\{ \frac{d\mathbf{x}^j(t)}{dt} \right\}, \frac{d\mathbf{x}^p(t)}{dt} \right) \end{aligned} \quad (4.7)$$

が得られる。ただし、 $m = 1/a, \epsilon = c/a, c_1 = d, c_2 = d/a$ とする。さらに、速度の状態量 $\mathbf{v}(t)$ を導入して、(4.7) 式を状態方程式化し、散逸項 $\frac{d\mathbf{x}^p(t)}{dt}$ を非線形散逸項 $\xi(\mathbf{v}^p(t))$ に置き換え、さらに、制約条件のトーラス化を実現する (4.3c) 式の変換関数を導入すると

$$\frac{d\dot{\mathbf{x}}^p(t)}{dt} = \mathbf{v}^p(t) + c_1 \Gamma(\{\mathbf{x}^j(t)\}, \mathbf{x}^p(k)) \quad (4.8a)$$

$$\frac{d\mathbf{v}^p(t)}{dt} = -\frac{1}{m}\xi(\mathbf{v}^p(t)) - \frac{\epsilon}{m}\nabla E(\mathbf{x}^p(t)) + c_2\Gamma(\{\mathbf{v}^j(t)\}, \mathbf{v}^p(t)) \quad (4.8b)$$

$$x_i(t) = \tilde{f}(\dot{x}_i(t)) \quad (4.8c)$$

となる．本論文では，(4.8)式のモデルを「P 結合型連続時間非線形散逸系モデル」とよぶ．つぎに，前章で解説した P 型結合モデルと同様に，(4.8)式を離散化幅 $\Delta T = t/k > 0$ を用いてオイラー差分化すると

$$\dot{\mathbf{x}}^p(k+1) = \mathbf{x}^p(k) + \Delta T \mathbf{v}^p(k) + c_1 \Delta T \Gamma(\{\mathbf{x}^j(k)\}, \mathbf{x}^p(k)) \quad (4.9a)$$

$$\mathbf{v}^p(k+1) = \mathbf{v}^p(k) - \frac{\Delta T}{m}\xi(\mathbf{v}^p(k)) - \frac{\Delta T\epsilon}{m}\nabla E(\mathbf{x}^p(k)) + c_2 \Delta T \Gamma(\{\mathbf{v}^j(k)\}, \mathbf{v}^p(k)) \quad (4.9b)$$

$$x_i(k+1) = \tilde{f}(\dot{x}_i(k+1)) \quad (4.9c)$$

が得られる．本論文では，このモデルを「P 結合型離散化非線形散逸系モデル」とよぶ．さらに，(4.9)式の結合構造 Γ として，2つのエリート個体に対するエリート型移流結合構造(3.15)式(p.52)を採用し，エリート型近傍個体の定義を

- pbest (personal best) 型個体

$$\mathbf{x}_{pb}^p(k) = \mathbf{x}(k_{pb}^p), \mathbf{v}_{pb}^p(k) = \mathbf{v}(k_{pb}^p) \quad (4.10a)$$

$$\text{where } k_{pb}^p = \underset{i}{\operatorname{argmin}} \{E(\mathbf{x}^p(i)) \mid 0, \dots, k\} \quad (4.10b)$$

- cbest (current best) 型個体

$$\mathbf{x}^{cb}(k), \mathbf{v}^{cb}(k) \quad (4.11a)$$

$$\text{where } cb = \underset{p}{\operatorname{argmin}} \{E(\mathbf{x}^p(k)) \mid p = 1, \dots, P\} \quad (4.11b)$$

- gbest (global best) 型個体

$$\mathbf{x}_{pb}^{gb}(k), \mathbf{v}_{pb}^{gb}(k) \quad (4.12a)$$

$$\text{where } gb = \underset{p}{\operatorname{argmin}} \{E(\mathbf{x}_{pb}^p(k)) \mid p = 1, \dots, P\} \quad (4.12b)$$

- ルーレット選択型個体

近傍個体 $\mathbf{x}^q(t), \mathbf{v}^q(k)$ を全個体からそれぞれ確率

$$p^q(k) = \frac{E^{wt}(t) - E(\mathbf{x}^q(k))}{\sum_{r=1}^P \{E^{wt}(k) - E(\mathbf{x}^r(k))\}} \quad (4.13a)$$

$$wt = \underset{p}{\operatorname{argmax}} \{E(\mathbf{x}^p) \mid p = 1, \dots, P\} \quad (4.13b)$$

で決定する．

と拡張し，2つのエリート個体を前項の P-EC-DGCM と同様に選択し，さらに単点の DNDM と同様に，離散化幅 ΔT に対して線形アニーリング(4.3d)式を適用し，P-EC-DGCM と同様に，多様性維持のために結合係数 c_{ij} を(4.3e)式のような周期関数を用いた時変係数に置き換えると

$$\dot{\mathbf{x}}^p(k+1) = \mathbf{x}^p(k) + \Delta T(k)\mathbf{v}^p(k)$$

Table 4.3 Parameters of P-EC-DNDM (C) and PD-EC-DNDM (C)

Parameter	Explanation	How to set
P	Number of agents	Fixed value
$\bar{c}_{11}, \bar{c}_{12}, \bar{c}_{21}, \bar{c}_{22}$	Maximum coupling coefficients	It is set to a fixed value in PD type model. In P type model, it is set to a value given by dividing a fixed value by ΔT_{\max} .
T	Period of the reiteration between synchronization and non-synchronization	Fixed value
k_{\max}	Steps of the search	Fixed value
d_0	Strength of nonlinearity	Fixed value
d_1	Strength of bias to the nevasive resistance	Fixed value
d_2	Strength of original velocity	Fixed value
ω	Period of convergence and divergence	Fixed value
ϵ	Gradient coefficient	Fixed value
ϵ_g	Gradient norm value used as the criterion for local search convergence	Fixed value
ΔT_{\max}	Initial value of the sampling parameter	It is set in order to search for the whole feasible region.
m	Inertia weight	It is set taking strength of inertia of gradient into account.

$$+ c_{11}(k)\Delta T(k) \left(\mathbf{x}^{el}(k) - \mathbf{x}^p(k) \right) + c_{12}(k)\Delta T(k) \left(\mathbf{x}_{pb}^p(k) - \mathbf{x}^p(k) \right) \quad (4.14a)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{v}^p(k+1) = & \mathbf{v}^p(k) - \frac{\Delta T(k)}{m} \xi(\mathbf{v}^p(k)) - \frac{\Delta T(k)\epsilon}{m} \nabla E(\mathbf{x}^p(k)) \\ & + c_{21}(k)\Delta T(k) \left(\mathbf{v}^{el}(k) - \mathbf{v}^p(k) \right) + c_{22}(k)\Delta T(k) \left(\mathbf{v}_{pb}^p(k) - \mathbf{v}^p(k) \right) \end{aligned} \quad (4.14b)$$

$$x_i(k+1) = \tilde{f}(\hat{x}_i(k+1)) \quad (4.14c)$$

$$\Delta T(k) = \Delta T_{\max} \left(1 - \frac{k}{k_{\max}} \right) \quad (4.14d)$$

$$c_{ij}(k) = \bar{c}_{ij} \sin^2 \left(\frac{2\pi k}{T} \right), \quad i = 1, 2, j = 1, 2 \quad (4.14e)$$

が得られる。本論文では、このモデルを「P エリート結合型離散化散逸系モデル (P-EC-DNDM : Proportional - Elite Coupling type DNDM)」とよぶ。この P-EC-DNDM の Pseudo Code を付録 C 章の C.8 節に示す。また、C.8 節の P-EC-DNDM (C) と P-EC-DNDM (A) で用いるパラメータを、それぞれ Tables 4.3, 4.4 に示す。

Table 4.4 Parameters of P-EC-DNDM (A) and PD-EC-DNDM (A)

Parameter	Explanation	How to set
P	Number of agents	Fixed value
$\bar{c}_{11}, \bar{c}_{12}, \bar{c}_{21}, \bar{c}_{22}$	Maximum coupling coefficients	It is set to a fixed value in PD type model. In P type model, it is set to a value given by dividing a fixed value by ΔT_{\max} .
T	Period of the reiteration between synchronization and non-synchronization	Fixed value
k_{\max}	Steps of the search	Fixed value
$d_{0\max}$	Initial value of nonlinearity parameter	Fixed value
d_1	Strength of the dissipative term	Fixed value
d_2	Control parameter which controls velocity norm range where escape energy is given to the search point	Fixed value
ϵ	Gradient coefficient	Fixed value
ϵ_g	Gradient norm value used as the criterion for local search convergence	Fixed value
ΔT_{\max}	Initial value of the sampling parameter	It is set in order to search for the whole feasible region.
m	Inertia weight	It is set taking strength of inertia of gradient into account.

4.2.4 離散化高次元アルゴリズムのP型エリート結合

離散化高次元アルゴリズムに対しても、前項と同様に、P型エリート結合モデルを考慮することができる。すなわち、離散化高次元アルゴリズム (2.104) 式 (p.37) に対して、P結合型離散化非線形散逸系モデル (4.9) 式と同様に結合系モデル

$$v_i^p(k+1) = v_i^p(k) - \Delta T \frac{\partial E(\mathbf{x}^p(k))}{\partial x_i} + c_2 \Delta T \Gamma(\{\mathbf{v}^j(k)\}, \mathbf{v}^p(k)) \quad (4.15a)$$

$$\begin{aligned} \hat{x}_i^p(k+1) = & x_i^p(k) + \Delta T \left(\frac{1}{2} a_{ii} v_i^p(k+1) + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N a_{ij} v_j^p(k+1) \right) \\ & + c_1 \Delta T \Gamma(\{\mathbf{x}^j(k)\}, \mathbf{x}^p(k)) \end{aligned} \quad (4.15b)$$

$$x_i^p(k+1) = \tilde{f}(\hat{x}_i^p(k+1)) \quad (4.15c)$$

を考え、さらに、結合構造 Γ として、全個体を考慮して決定される \mathbf{gbest} , \mathbf{cbest} , ルーレット選択型の中から選択した1つのエリート個体 $(\mathbf{x}^{el}, \mathbf{v}^{el})$ に対するエリート型移流結合構造を採用し、4.2.1項のP-EC-DGCMと同様に、結合係数 c_i を (4.3e) 式のような周期関数

を用いた時変係数に置き換えると

$$v_i^p(k+1) = v_i^p(k) - \Delta T \frac{\partial E(\mathbf{x}(k))}{\partial x_i} + c_2(k)\Delta T \left(\mathbf{v}^{el}(k) - \mathbf{v}^p(k) \right) \quad (4.16a)$$

$$\begin{aligned} \dot{x}_i^p(k+1) = x_i^p(k) + \Delta T \left(\frac{1}{2} a_{ii} v_i^p(k+1) + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N a_{ij} v_j^p(k+1) \right) \\ + c_1(k)\Delta T \left(\mathbf{x}^{el}(k) - \mathbf{x}^p(k) \right) \end{aligned} \quad (4.16b)$$

$$x_i^p(k+1) = \tilde{f}(\dot{x}_i^p(k+1)) \quad (4.16c)$$

$$c_i(k) = \bar{c}_i \sin^2 \left(\frac{2\pi k}{T} \right), \quad i = 1, 2 \quad (4.16d)$$

が得られる。ここで、(4.16)式のモデルでは、P-EC-DGCM, P-EC-DNDM と異なり pbest とのエリート結合構造を採用していないが、これは、単点のDHAのアルゴリズム List 2.4 (p.36) の Step2 において、探索点の状態をその時点での pbest へリセットする演算があるからであり、pbest への結合がある場合、各個体で pbest への完全同調が発生する可能性があると予想されるからである。本論文では、(4.16)式のモデルを「P エリート結合型離散化高次元アルゴリズム (P-EC-DHA : Proportional - Elite Coupling type DHA)」とよぶ。この P-EC-DHA の Pseudo Code を付録 C 章の C.9 節に示す。また、C.9 節の P-EC-DHA で用いるパラメータを Table 4.5 に示す。ところで、結合のない離散化高次元アルゴリズムは、本質的に保存系のダイナミクスであったが、(4.16)式のダイナミクスは、結合構造の導入により、ハミルトニアン保存性は保障されないことに注意されたい。

4.3 PD エリート結合型最適化計算モデル

4.3.1 離散化勾配系カオスモデルの PD 型エリート結合

3.3.2 項で述べたように、変数 \mathbf{x} のみで構成される離散時間最適化モデルに対する PD 型結合モデルは、(3.26)式 (p.54) で与えられる。(3.26)式の結合構造 Γ として、4.2.1 項と同様に、2つのエリート個体 $\mathbf{x}^{el}, \mathbf{x}_{pb}^p$ に対するエリート型移流結合構造を採用すると

$$\mathbf{x}^p(k+1) = \mathbf{g}^p(\mathbf{x}^p(k)) + c_1 \left(\mathbf{x}^{el}(k+1) - \mathbf{x}^p(k+1) \right) + c_2 \left(\mathbf{x}_{pb}^p(k+1) - \mathbf{x}^p(k+1) \right) \quad (4.17)$$

が得られる。(4.17)式の計算に際して、時刻 k の時点で $\mathbf{x}^{el}(k+1)$ と $\mathbf{x}_{pb}^p(k+1)$ を決定することができない。そこで、1ステップ $k \rightarrow k+1$ におけるエリート個体の更新の可能性は小さいと考えて、 $\mathbf{x}^{el}(k+1) \approx \mathbf{x}^{el}(k)$, $\mathbf{x}_{pb}^p(k+1) \approx \mathbf{x}_{pb}^p(k)$ とおいて、この下で(4.17)式を $\mathbf{x}^p(k+1)$ について解くと

$$\mathbf{x}^p(k+1) = \frac{1}{1+c_1+c_2} \mathbf{g}^p(\mathbf{x}^p(k)) + \frac{c_1}{1+c_1+c_2} \mathbf{x}^{el}(k) + \frac{c_2}{1+c_1+c_2} \mathbf{x}_{pb}^p(k) \quad (4.18)$$

が得られる。 p 番目の個体の離散写像 \mathbf{g}^p として DGCMwT(2.32)式 (p.11) を採用すると

$$\dot{\mathbf{x}}^p(k+1) = \frac{1}{1+c_1+c_2} \mathbf{g}(\mathbf{x}^p(k)) + \frac{c_1}{1+c_1+c_2} \mathbf{x}^{el}(k) + \frac{c_2}{1+c_1+c_2} \mathbf{x}_{pb}^p(k) \quad (4.19a)$$

Table 4.5 Parameters of P-EC-DHA and PD-EC-DHA

Parameter	Explanation	How to set
P	Number of agents	Fixed value
\bar{c}_1, \bar{c}_2	Maximum coupling coefficients	It is set to a fixed value in PD type model. In P type model, it is set to a value given by dividing a fixed value by ΔT_{\max} .
T	Period of Hamiltonian dissipation / Period of the reiteration between synchronization and non-synchronization	Fixed value
k_{\max}	Maximum search steps	Fixed value
a_{ii}, a_{ij}	Coefficients that gives mixing	Fixed value
ϵ_g	Gradient norm value used as the criterion for local search convergence	Fixed value
ϵ_v	Velocity norm value used as the criterion for local search convergence	Fixed value
ϵ_E	Error tolerance with respect to objective function value used as the criterion for convergence to global minima	Fixed value
μ	Dissipative rate of Hamiltonian	Fixed value
ΔT	Sampling parameter	It is set in order to search for the whole feasible region.

$$x_i^p(k+1) = \tilde{f}(\hat{x}_i^p(k+1)) \quad (4.19b)$$

$$g_i(\mathbf{x}^p(k)) = x_i^p(k) - \Delta T \frac{\partial E(\mathbf{x}^p(k))}{\partial x_i} \quad (4.19c)$$

$$\tilde{f}(\hat{x}_i^p) = \begin{cases} \hat{x}_i^p, & p_i < \hat{x}_i^p < q_i \\ (\hat{x}_i^p - p_i) \bmod (q_i - p_i) + p_i, & \hat{x}_i^p \geq q_i \\ (\hat{x}_i^p - q_i) \bmod (q_i - p_i) + q_i, & \hat{x}_i^p \leq p_i \end{cases} \quad (4.19d)$$

が得られる。本論文では、このモデルを「PD エリート結合型離散化勾配系カオスモデル (PD-EC-DGCM : Proportional - Derivative - Elite Coupling type DGCM)^[38]」とよぶ。さらに 4.2.1 項の P-EC-DGCM と同様に、離散化幅 ΔT に対して線形アニーリング (4.3d) 式を適用し、多様性維持のために結合係数 c_i を (4.3e) 式のような周期関数を用いた時変係数に置き換えると

$$\mathbf{x}^p(k+1) = \frac{1}{1 + c_1(k) + c_2(k)} \mathbf{g}(\mathbf{x}^p(k)) + \frac{c_1(k)}{1 + c_1(k) + c_2(k)} \mathbf{x}^{el}(k) + \frac{c_2(k)}{1 + c_1(k) + c_2(k)} \mathbf{x}_{pb}^p(k) \quad (4.20a)$$

$$x_i^p(k+1) = \tilde{f}(\hat{x}_i^p(k+1)) \quad (4.20b)$$

$$g_i(\mathbf{x}^p(k)) = x_i^p(k) - \Delta T(k) \frac{\partial E(\mathbf{x}^p(k))}{\partial x_i} \quad (4.20c)$$

$$\tilde{f}(x_i^p) = \begin{cases} x_i^p, & p_i < x_i^p < q_i \\ (x_i^p - p_i) \bmod (q_i - p_i) + p_i, & x_i^p \geq q_i \\ (x_i^p - q_i) \bmod (q_i - p_i) + q_i, & x_i^p \leq p_i \end{cases} \quad (4.20d)$$

$$\Delta T(k) = \Delta T_{\max} \left(1 - \frac{k}{k_{\max}} \right) \quad (4.20e)$$

$$c_i(k) = \bar{c}_i \sin^2 \left(\frac{2\pi k}{T} \right), \quad i = 1, 2 \quad (4.20f)$$

が得られる。本論文では、このモデルを「徐冷型 PD-EC-DGCM」とよぶ。この徐冷型 PD-EC-DGCM の Pseudo Code を付録 C の C.6 節に示す。また、C.6 節の PD-EC-DGCM で用いるパラメータを Table 4.1 (p.64) に示す。

4.3.2 水抜き法の PD 型エリート結合

前項の PD-EC-DGCM を利用して、水抜き法の PD 型エリート結合モデルも考えることができる。すなわち、4.2.2 節の P-EC-DM と同様に、2.3.3 項の水抜き法 List.2.2 (p.25) の **Step2** のカオス探索において PD-EC-DGCM を適用し、さらに、各個体の水位パラメータを $\alpha^p = E(\mathbf{x}_{pb}^p)$ と定義すればよい。このモデルを「PD エリート結合型水抜き法 (PD-EC-DM : Proportional - Elite Coupling type DM)」とよぶ。この PD-EC-DM の Pseudo Code を付録 C 章の C.7 節に示す。また、C.7 節の PD-EC-DM で用いるパラメータを Table 4.2 (p.65) に示す。ところで、探索履歴を利用した水抜き法の探索点更新式 (2.75) 式 (p.26) を単純に多点化したモデル

$$\mathbf{x}^p(k+1) = \frac{1}{1+c(\tilde{k})} \mathbf{g}(\mathbf{x}^p(k)) + \frac{c(\tilde{k})}{1+c(\tilde{k})} \mathbf{x}_{pb}^p(k) \quad (4.21a)$$

$$x_i^p(k+1) = \tilde{f}(x_i^p(k+1)) \quad (4.21b)$$

$$c(\tilde{k}) = \bar{c} \sin^2 \left(\frac{2\pi \tilde{k}}{\tilde{T}} \right) \quad (4.21c)$$

は、徐冷型 PD-EC-DGCM(4.20) 式で、 \mathbf{x}^{el} がない場合に相当する。すなわち、探索履歴を利用した水抜き法の多点型モデルは、PD-EC-DM の全個体を考慮したエリート個体との結合がなく、自身のエリート個体である pbest とのみ結合している場合と考えられる。したがって、以下では、探索履歴を利用した水抜き法の多点型モデルを PD-EC-DM の pbest 型とよぶ。

4.3.3 離散化非線形散逸系モデルの PD 型エリート結合

離散化非線形散逸系モデルの PD 型エリート結合モデルを考える [53] にあたって、4.2.3 項と同様に、畳み込み積分型勾配系モデルの PD 結合モデル

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{x}^p(t)}{dt} = & -c \int_0^t e^{-a(t-\tau)} \nabla E(\mathbf{x}^p(\tau)) d\tau \\ & + d\Gamma \left(\left\{ \mathbf{x}^j(t) + \Delta T \frac{d\mathbf{x}^j(t)}{dt} \right\}, \mathbf{x}^p(t) + \Delta T \frac{d\mathbf{x}^p(t)}{dt} \right) \end{aligned} \quad (4.22)$$

を考える。これを両辺 t で微分すると

$$\begin{aligned} \frac{d^2\mathbf{x}^p(t)}{dt^2} = & ace^{-at} \int_0^t e^{a\tau} \nabla E(\mathbf{x}^p(\tau)) d\tau - c \nabla E(\mathbf{x}^p(t)) \\ & + d\Gamma \left(\left\{ \frac{d\mathbf{x}^j(t)}{dt} + \Delta T \frac{d^2\mathbf{x}^j(t)}{dt^2} \right\}, \frac{d\mathbf{x}^p(t)}{dt} + \Delta T \frac{d^2\mathbf{x}^p(t)}{dt^2} \right) \end{aligned} \quad (4.23)$$

となるから、(4.22) 式を代入し整理すると、連続時間散逸系最適化モデルの PD 結合モデルとして

$$\begin{aligned} m \frac{d^2\mathbf{x}^p(t)}{dt^2} + \frac{d\mathbf{x}^p(t)}{dt} = & -\epsilon \nabla E(\mathbf{x}^p(t)) \\ & + c_1 \Gamma \left(\left\{ \mathbf{x}^j(t) + \Delta T \frac{d\mathbf{x}^j(t)}{dt} \right\}, \mathbf{x}^p(t) + \Delta T \frac{d\mathbf{x}^p(t)}{dt} \right) \\ & + c_2 \Gamma \left(\left\{ \frac{d\mathbf{x}^j(t)}{dt} + \Delta T \frac{d^2\mathbf{x}^j(t)}{dt^2} \right\}, \frac{d\mathbf{x}^p(t)}{dt} + \Delta T \frac{d^2\mathbf{x}^p(t)}{dt^2} \right) \end{aligned} \quad (4.24)$$

が得られる。ただし、 $m = 1/a$, $\epsilon = c/a$, $c_1 = d$, $c_2 = d/a$ とする。さらに、速度の状態量 $\mathbf{v}(t)$ を導入して、(4.24) 式を状態方程式化し、左辺の散逸項 $\frac{d\mathbf{x}^p(t)}{dt}$ を非線形散逸項 $\xi(\mathbf{v}^p(t))$ に置き換え、さらに、制約条件のトーラス化を実現する (4.20d) 式の変換関数を導入すると

$$\frac{d\hat{\mathbf{x}}^p(t)}{dt} = \mathbf{v}^p(t) + c_1 \Gamma \left(\left\{ \mathbf{x}^j(t) + \Delta T \frac{d\mathbf{x}^j(t)}{dt} \right\}, \mathbf{x}^p(t) + \Delta T \frac{d\mathbf{x}^p(t)}{dt} \right) \quad (4.25a)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{v}^p(t)}{dt} = & -\frac{1}{m} \xi(\mathbf{v}^p(t)) - \frac{\epsilon}{m} \nabla E(\mathbf{x}^p(t)) \\ & + c_2 \Gamma \left(\left\{ \mathbf{v}^j(t) + \Delta T \frac{d\mathbf{v}^j(t)}{dt} \right\}, \mathbf{v}^p(t) + \Delta T \frac{d\mathbf{v}^p(t)}{dt} \right) \end{aligned} \quad (4.25b)$$

$$\mathbf{x}_i^p(t) = \tilde{f}(\hat{\mathbf{x}}_i^p(t)) \quad (4.25c)$$

となる。本論文では、(4.25) 式のモデルを「PD 結合型連続時間非線形散逸系モデル」とよぶ。つぎに、(4.25) 式を離散化幅 $\Delta T = t/k > 0$ を用いてオイラー差分化し、 $c_i \Delta T \rightarrow c_i$ ($i = 1, 2$) と再定義すると

$$\hat{\mathbf{x}}^p(k+1) = \mathbf{F}(\mathbf{x}^p(k), \mathbf{v}^p(k)) + c_1 \Gamma \left(\left\{ \mathbf{x}^j(k+1) \right\}, \mathbf{x}^p(k+1) \right) \quad (4.26a)$$

$$\mathbf{v}^p(k+1) = \mathbf{G}(\mathbf{x}^p(k), \mathbf{v}^p(k)) + c_2 \Gamma \left(\left\{ \mathbf{v}^j(k+1) \right\}, \mathbf{v}^p(k+1) \right) \quad (4.26b)$$

$$\mathbf{x}_i^p(k+1) = \tilde{f}(\hat{\mathbf{x}}_i^p(k+1)) \quad (4.26c)$$

$$F_i(\mathbf{x}^p(k), \mathbf{v}^p(k)) = x_i^p(k) + \Delta T v_i^p(k) \quad (4.26d)$$

$$G_i(\mathbf{x}^p(k), \mathbf{v}^p(k)) = v_i^p(k) - \frac{\Delta T}{m} \xi(\mathbf{v}^p(k)) - \frac{\Delta T}{m} \epsilon \frac{\partial E(\mathbf{x}^p(k))}{\partial x_i} \quad (4.26e)$$

が得られる．本論文では，このモデルを「PD 結合型離散化非線形散逸系モデル」とよぶ．さらに，(4.26) 式の結合構造 Γ として，4.2.3 項と P-EC-DNDM と同様に，2つのエリート個体 $(\mathbf{x}^{el}, \mathbf{v}^{el})$ ， $(\mathbf{x}_{pb}^p, \mathbf{v}_{pb}^p)$ に対するエリート型移流結合構造を採用することを考え，前項と同様に， $(\mathbf{x}^{el}(k+1), \mathbf{v}^{el}(k+1)) \approx (\mathbf{x}^{el}(k), \mathbf{v}^{el}(k))$ ， $(\mathbf{x}_{pb}^p(k+1), \mathbf{v}_{pb}^p(k+1)) \approx (\mathbf{x}_{pb}^p(k), \mathbf{v}_{pb}^p(k))$ とし，さらに，P-EC-DNDM と同様に，離散化幅 ΔT に対して線形アニーリング (4.20e) 式を適用し，多様性維持のために結合係数 c_{ij} を (4.3e) 式のような周期関数を用いた時変係数に置き換えると

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^p(k+1) = & \frac{1}{1+c_{11}(k)+c_{12}(k)} \mathbf{F}(\mathbf{x}^p(k), \mathbf{v}^p(k)) + \frac{c_{11}(k)}{1+c_{11}(k)+c_{12}(k)} \mathbf{x}^{el}(k) \\ & + \frac{c_{12}(k)}{1+c_{11}(k)+c_{12}(k)} \mathbf{x}_{pb}^p(k) \quad (4.27a) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{v}^p(k+1) = & \frac{1}{1+c_{21}(k)+c_{22}(k)} \mathbf{G}(\mathbf{x}^p(k), \mathbf{v}^p(k)) + \frac{c_{21}(k)}{1+c_{21}(k)+c_{22}(k)} \mathbf{v}^{el}(k) \\ & + \frac{c_{22}(k)}{1+c_{21}(k)+c_{22}(k)} \mathbf{v}_{pb}^p(k) \quad (4.27b) \end{aligned}$$

$$x_i^p(k+1) = \tilde{f}(x_i^p(k+1)) \quad (4.27c)$$

$$F_i(\mathbf{x}^p(k), \mathbf{v}^p(k)) = x_i^p(k) + \Delta T(k) v_i^p(k) \quad (4.27d)$$

$$G_i(\mathbf{x}^p(k), \mathbf{v}^p(k)) = v_i^p(k) - \frac{\Delta T(k)}{m} \xi(\mathbf{v}^p(k)) - \frac{\Delta T(k)}{m} \epsilon \frac{\partial E(\mathbf{x}^p(k))}{\partial x_i} \quad (4.27e)$$

$$\Delta T(k) = \Delta T_{\max} \left(1 - \frac{k}{k_{\max}} \right) \quad (4.27f)$$

$$c_{ij}(k) = \bar{c}_{ij} \sin^2 \left(\frac{2\pi k}{T} \right), \quad i = 1, 2, j = 1, 2 \quad (4.27g)$$

が得られる．本論文では，このモデルを「PD エリート結合型離散化散逸系モデル (PD-EC-DNDM : Proportional - Derivative - Elite Coupling type DNDM)」とよぶ．この PD-EC-DNDM の Pseudo Code を付録 C 章の C.8 節に示す．また，C.8 節の PD-EC-DNDM (C) と PD-EC-DNDM (A) で用いるパラメータを，それぞれ Tables 4.3, 4.4 (p.68) に示す．

4.3.4 離散化高次元アルゴリズムの PD 型エリート結合

離散化項次元アルゴリズムに対しても，前項と同様に，PD 型エリート結合モデルを考えることができる．すなわち，離散化高次元アルゴリズム (2.104) 式 (p.37) に対して，前項の PD-EC-DNDM (4.26) 式と同様に結合系モデル

$$\mathbf{v}^p(k+1) = \mathbf{G}(\mathbf{x}^p(k), \mathbf{v}^p(k)) + c_2 \Gamma(\{\mathbf{v}^j(k+1)\}, \mathbf{v}^p(k+1)) \quad (4.28a)$$

$$\mathbf{x}^p(k+1) = \mathbf{F}(\mathbf{x}^p(k), \mathbf{v}^p(k+1)) + c_1 \Gamma(\{\mathbf{x}^j(k+1)\}, \mathbf{x}^p(k+1)) \quad (4.28b)$$

$$x_i^p(k+1) = \tilde{f}(x_i^p(k+1)) \quad (4.28c)$$

$$F_i(\mathbf{x}^p(k), \mathbf{v}^p(k+1)) = x_i^p(k) + \Delta T \left(\frac{1}{2} a_{ii} v_i^p(k+1) + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N a_{ij} v_j^p(k+1) \right) \quad (4.28d)$$

$$G_i(\mathbf{x}^p(k), \mathbf{v}^p(k)) = v_i^p(k) - \Delta T \frac{\partial E(\mathbf{x}^p(k))}{\partial x_i} \quad (4.28e)$$

を考え、4.2.4項のP-EC-DHAと同様に、結合構造 Γ として、gbest, cbest, ルーレット選択型のうち1つのエリート個体 $(\mathbf{x}^{el}, \mathbf{v}^{el})$ に対するエリート型移流結合構造を採用することを考え、前項と同様に、 $(\mathbf{x}^{el}(k+1), \mathbf{v}^{el}(k+1)) \approx (\mathbf{x}^{el}(k), \mathbf{v}^{el}(k))$ とし、さらに、多様性維持のために結合係数 c_i を(4.3e)式のような周期関数を用いた時変係数に置き換えると

$$\mathbf{v}^p(k+1) = \frac{1}{1+c_2(k)} \mathbf{G}(\mathbf{x}^p(k), \mathbf{v}^p(k)) + \frac{c_2(k)}{1+c_2(k)} \mathbf{v}^{el}(k) \quad (4.29a)$$

$$\hat{\mathbf{x}}^p(k+1) = \frac{1}{1+c_1(k)} \mathbf{F}(\mathbf{x}^p(k), \mathbf{v}^p(k+1)) + \frac{c_1(k)}{1+c_1(k)} \mathbf{x}^{el}(k) \quad (4.29b)$$

$$x_i^p(k+1) = \tilde{f}(\hat{x}_i^p(k+1)) \quad (4.29c)$$

$$F_i(\mathbf{x}^p(k), \mathbf{v}^p(k+1)) = x_i^p(k) + \Delta T \left(\frac{1}{2} a_{ii} v_i^p(k+1) + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N a_{ij} v_j^p(k+1) \right) \quad (4.29d)$$

$$G_i(\mathbf{x}^p(k), \mathbf{v}^p(k)) = v_i^p(k) - \Delta T \frac{\partial E(\mathbf{x}^p(k))}{\partial x_i} \quad (4.29e)$$

が得られる。本論文では、(4.29)式のモデルを「PD エリート結合型離散化高次元アルゴリズム (PD-EC-DHA : Proportional - Derivative - Elite Coupling type DHA)」とよぶ。このPD-EC-DHAのPseudo Codeを付録C章のC.9節に示す。また、C.9節のPD-EC-DHAで用いるパラメータをTable 4.5 (p.70)に示す。

4.3.5 エリート個体の選択と個体群の挙動

ここまで、各種非線形力学系モデルのエリート結合型モデルの提案を行ってきた。これらモデルでは、エリート個体 \mathbf{x}^{el} の選択によって、個体群の挙動を変化させることができるが、この点について詳細に述べる。

まず、 \mathbf{x}^{el} として、gbestを選択したgbest型モデルでは、個体群の探索軌道は自律的な大域的探索軌道からgbest近傍への集中的探索軌道へ徐々に遷移していく。しかしながら、gbestと結合しているのみでは、とくに局所探索段階において、全個体がgbestへ引き込まれてしまい、その時点で探索の多様性が失われてしまう可能性がある。そこで、各個体を自身のpbestと結合させることで、このgbestへの一点集中化を抑制し、多様性を維持することを図っている。

一方、 \mathbf{x}^{el} として、cbestもしくはルーレット選択型を選択したcbest・ルーレット選択型モデルでは、各ステップで選択されるcbest・ルーレット選択型個体へ各個体が同調していくため、個体群は、ある程度の多様性を保ちながらも目的関数値が小さい領域を探索する。この場合、pbestは「揺らぎを与える個体」としてよりむしろ「よい状態を保存する個体」として働くものと考えられ、探索後期において、各個体がこのpbestへ引き込まれていくことで、目的関数値の小さい領域の集中化探索へ遷移し、より目的関数値の小さい解へ収束していくことが期待される。

4.4 結合型非線形力学系最適化計算モデルによる計算特性

本節では、4.2節で提案した、Pエリート結合型離散化勾配系カオスマodel (P-EC-DGCM, 付録C.6参照), Pエリート結合型水抜き法 (P-EC-DM, 付録C.7参照), Pエリート結合型離散化非線形散逸系モデル (P-EC-DNDM, 付録C.8参照, Pエリート結合型離散化高次元アルゴリズム (P-EC-DHA, 付録C.9参照) と、4.3節で提案した、PDエリート結合型離散化勾配系カオスマodel (PD-EC-DGCM, 付録C.6参照), PDエリート結合型水抜き法 (PD-EC-DM, 付録C.7参照), PDエリート結合型離散化非線形散逸系モデル (PD-EC-DNDM, 付録C.8参照, PDエリート結合型離散化高次元アルゴリズム (PD-EC-DHA, 付録C.9参照) の計算特性と大域的最適化性能を、結合係数設定についての考察を行ったうえで、付録A.2節のベンチマーク問題 Prob.1 ~ Prob.6 への適用を通して確認する。

4.4.1 エリート個体への引き込みと結合係数設定

3.3.3項では、カオスの探索状態にある2個体が対流結合をしている場合の同調現象についての考察を行ったが、本章で用いるエリート結合は、特にエリート個体として gbest と pbest を選択した場合において、固定点への移流結合構造となるので、3.3.3項の場合とは少し異なる現象が発現することが予想される。そこで本項では、数値シミュレーションを通して、エリート結合における同調現象、すなわち、固定点への引き込み現象発現と結合係数の関係について考察する。

簡単のために $P = 1$ とした P・PDエリート結合型 DGCM において、1つのエリート個体を常に固定点 \mathbf{x}^* とした場合について考える。この場合の P-EC-DGCM は (4.2) 式より

$$\dot{\mathbf{x}}(k+1) = \mathbf{x}(k) - \Delta T \nabla E(\mathbf{x}(k)) + c_1 \Delta T (\mathbf{x}^* - \mathbf{x}(k)) \quad (4.30a)$$

$$x_i(k+1) = \tilde{f}(\dot{x}_i(k+1)) \quad (4.30b)$$

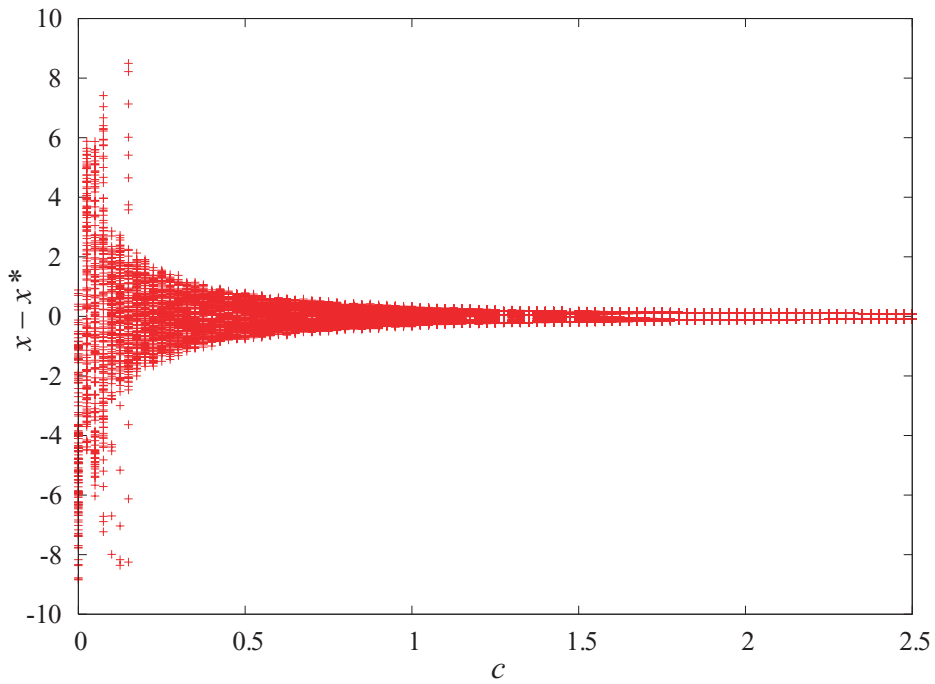
と与えられ、PD-EC-DGCM は (4.19) 式より

$$\dot{\mathbf{x}}(k+1) = \frac{1}{1+c_1} \{x_i(k) - \Delta T \nabla E(\mathbf{x}(k))\} + \frac{c_1}{1+c_1} \mathbf{x}^* \quad (4.31a)$$

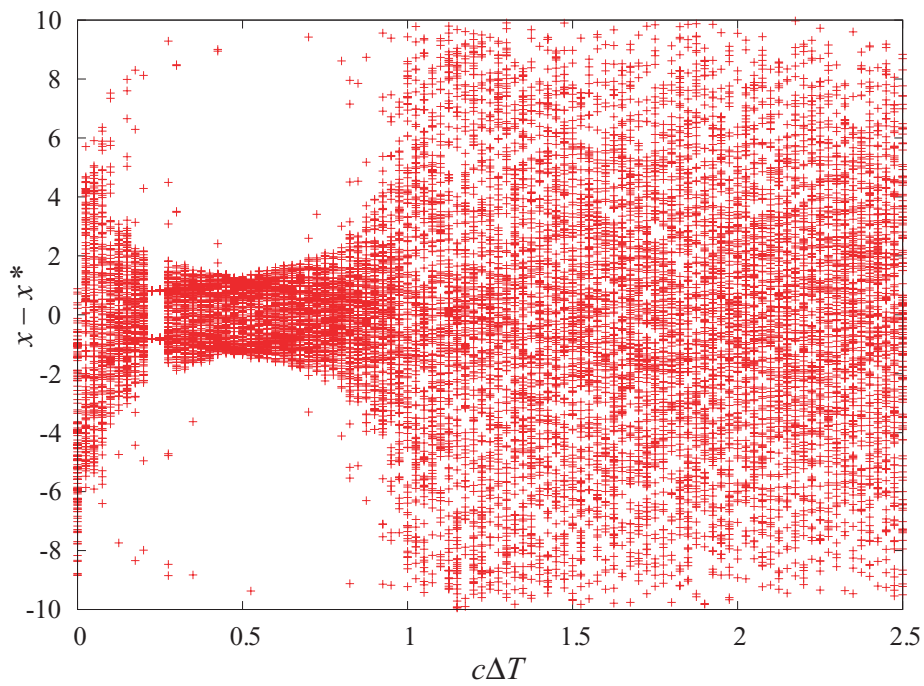
$$x_i(k+1) = \tilde{f}(\dot{x}_i(k+1)) \quad (4.31b)$$

と与えられる。

まず、これらモデルの離散化幅をカオスの探索軌道が発生する $\Delta T = 0.02$ として、ベンチマーク問題 Prob.7 (Original Rastrigin $N = 1$, 付録A.2節を参照) へ適用し、カオス状態での固定点への引き込み現象発現について確認する。カオス状態での引き込み現象発現に対する結合係数依存性を示すために、結合係数 c_1 を、P-EC-DGCM では $c_1 \Delta T = 0.0 \sim 2.5$, PD-EC-DGCM では $c_1 = 0.0 \sim 2.5$ の間で変更しながらシミュレーションを行った。結果として、初期点を $x = 3.9789, x^* = -3.9789$ としたときの 1000~1150 ステップ間の各個体の差 $x - x^*$ の $c \Delta T, c$ に対する分岐図を Fig. 4.1(a) と Fig. 4.1(b) に示す。Fig. 4.1(a) をみると、3.3.3項と同様に、 c を大きい値に設定すると PD 型結合構造によって、カオスの探索軌道が固定点 x^* へ安定的に引き込まれていく様子が確認できる。また $c = 1.5 \sim 2.0$ 付近から、 $x - x^*$ は 2 周期振動に陥っていることが確認できるが、これは、探索点が固定点



(a) PD-Elite Coupling type DGCM – Eq.(4.31)



(b) P-Elite Coupling Type DGCM – Eq.(4.30)

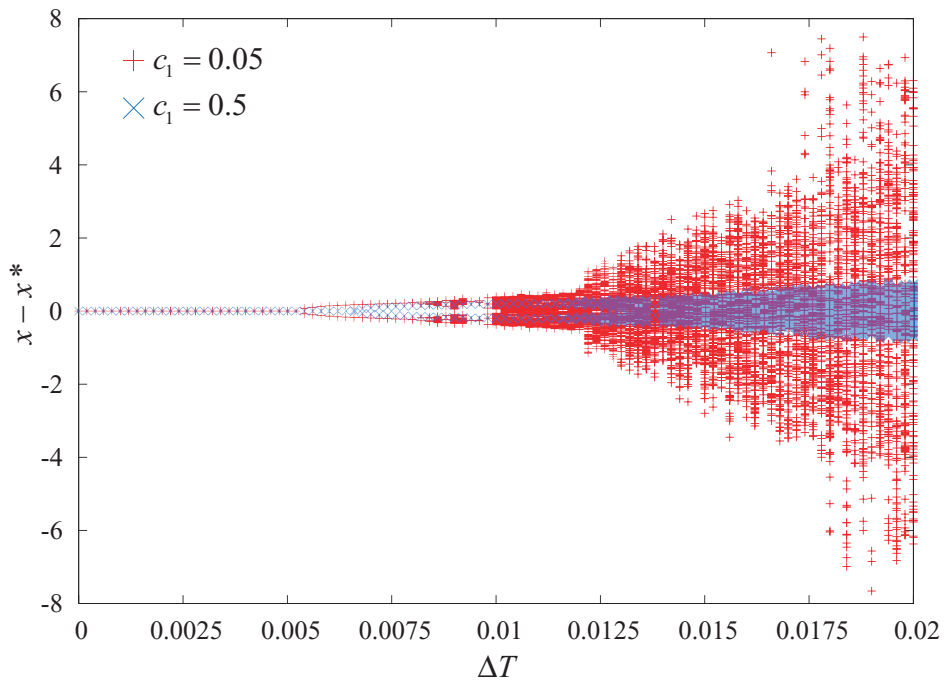
Fig. 4.1 Bifurcation Diagrams of the Differences between Each Oscillator versus $c\Delta T, c$.

Objective function is Prob.7 ($N = 1$).

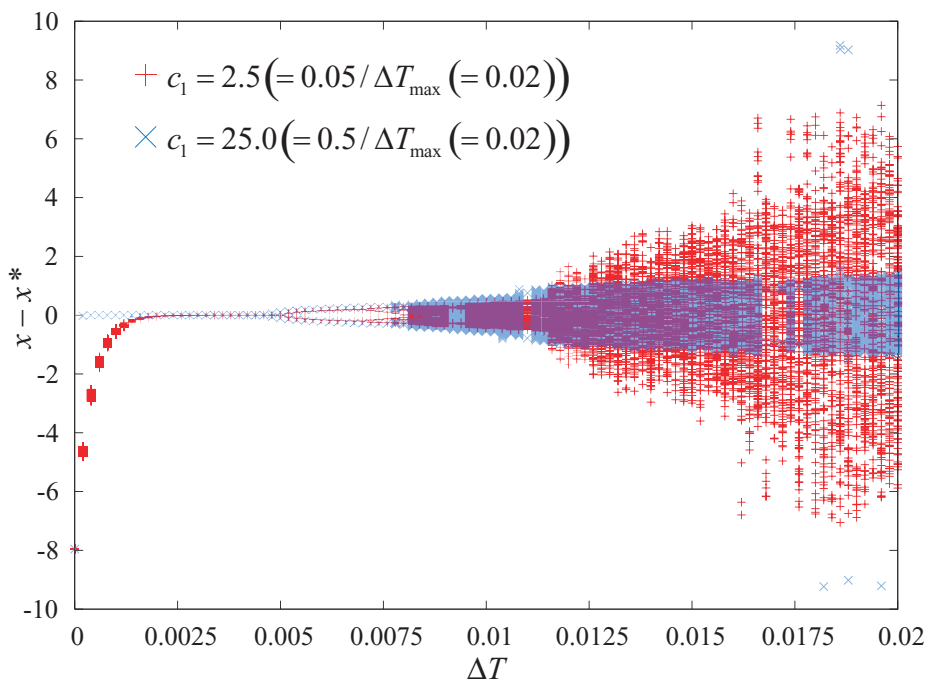
The initial point of $x = 3.9789$ and $x^* = -3.9789$. $\Delta T = 0.02$.

x^* を中心とした2周期振動していることを示している。対流結合型モデルでは、各振動子が互いに移流しあい引き込みあう構造になっているのに対し、エリート結合では、結合対象に一方的に移流していく構造になっている。よって、エリート結合では、完全同調は発生することなく固定点周りを振動するにとどまるため、このような結果となっていると考えられる。一方、Fig. 4.1(b) をみると、P型結合構造では、 c を大きくしても、固定点 x^* へ完全に引き込まれず、さらに大きくとるとむしろ固定点からの距離の発散を引き起こしていることがわかる。しかしながら、 c を適当な値にとれば、3.3.3 項と同様に、固定点 x^* 近傍を集中的に探索する軌道が得られることが期待される。

つぎに、カオス状態以外でのエリート個体への引き込みと結合係数 c の設定について考える。各個体の探索軌道を安定な軌道に変化させる、すなわち、離散化幅 ΔT を小さくすると、各個体の探索領域は狭まることになるので、それにつれてエリート個体へ引き込み現象がより発生しやすくなるものと予想される。このことを確認するために、P-EC-DGCM と PD-EC-DGCM の結合係数 c_1 を、PD-EC-DGCM では $c_1 = 0.5$ と $c_1 = 0.05$ 、P-EC-DGCM では $c_1 = 25.0 (= 0.5/\Delta T_{\max})$ と $c_1 = 2.5 (= 0.05/\Delta T_{\max})$ にそれぞれ固定した下で、ベンチマーク問題 Prob.7 へ適用し、カオス状態以外でのエリート個体への引き込み発現について確認する。Fig. 4.1 からわかるように、この適用における結合係数の設定は、カオス状態では完全な引き込み現象が発現しないことに注意して、カオス状態以外での引き込み現象発現に対する離散化幅依存性を示すために、離散化幅 ΔT を $0.0 \sim 0.02 (= \Delta T_{\max})$ の間で変更しながらシミュレーションを行った。結果として、初期点を $x = 3.9789, x^* = -3.9789$ としたときの1000~1150ステップ間の各個体の差 $x - x^*$ の ΔT に対する分岐図を Fig. 4.2(a) と Fig. 4.2(b) に示す。Fig. 4.2 において、赤のプロットが結合係数 c_1 が小さい (0.05 or 2.5) 場合で、青のプロットが c_1 が大きい (0.5 or 25.0) 場合を示す。Fig. 4.2 をみると、P型・PD型の両モデルで、 ΔT を小さくするにつれて固定点への引き込みが強くなっていき、先に述べたとおり固定点周りへ収束したと考えて差し支えない2周期振動を経て、元の探索軌道が局所解収束軌道になる $\Delta T_2 \approx 0.005$ 付近 (2.2.4 項 Fig. 2.5 (p.18) を参照) で、固定点 x^* へ完全に引き込まれていることがわかる。つぎに結合の強さによる違いについて注目すると、結合係数を大きくとった青のプロットでは、とくにPD型の場合について、赤のプロットと比較して速く固定点周りへの収束といえる2周期振動へ収束してしまっているといえる。また、カオス的探索軌道を発生させる ΔT においても、赤のプロットと比較して固定点周りの狭い領域の探索になってしまっていることがわかる。このように、結合を大きくとりすぎると探索の多様性の面で問題があるといえる。そこで本論文では、結合係数の設定として、赤のプロットのようにカオス的探索領域では大域的に探索を実行することが可能な $c = 0.01 \sim 0.1$ 程度の設定を推奨する。ところで、この結合係数の設定でも、徐冷型 DGCM において探索中期以降といえる $\Delta T \leq 0.01$ で、固定点周りへの収束となっており、やはり探索の多様性に問題があるといえる。そこで本論文では、 c の推奨設定に付け加えて、探索の中期から後期においても、固定点周りへの収束をある程度抑制するために、4.2.1 項で説明したように、結合係数を時変係数に変更し周期的に変化させることを推奨する。



(a) PD-Elite Coupling type DGCM – Eq.(4.31)



(b) P-Elite Coupling Type DGCM – Eq.(4.30)

Fig. 4.2 Bifurcation Diagrams of the Differences between Each Oscillator versus ΔT . Objective function is Prob.7 ($N = 1$).

The initial point of $x = 3.9789$ and $x^* = -3.9789$.

Table 4.6 Parameter Settings in Sim 4.1

Model	Parameter Settings
P-EC-DGCM PD-EC-DGCM	$P = 10, T = 500, k_{\max} = 4000, \varepsilon_g = 10^{-4}$ $\Delta T_{\max} = 0.03, \bar{c}_1 = \bar{c}_2 = 0.05$
P-EC-DM PD-EC-DM	$P = 5, \beta = 10.0, \delta = 0.01, \varepsilon_g = 10^{-4}, \varepsilon_E = 10^{-4}, \tilde{T} = 10, T = 20$ $\Delta T_{\max} = 0.03, \bar{c}_1 = \bar{c}_2 = 0.05$
P-EC-DNDM (C) PD-EC-DNDM (C)	$P = 10, \bar{c}_{11} = \bar{c}_{12} = \bar{c}_{21} = \bar{c}_{22} = 0.05, T = 500$ $k_{\max} = 4000, d_0 = 4.0, d_1 = -1.0, d_2 = 0.5, \omega = 10.0, \varepsilon = 1.0, \varepsilon_g = 10^{-4}$ $\Delta T_{\max} = 0.02, m = 1.0$
P-EC-DNDM (A) PD-EC-DNDM (A)	$P = 10, \bar{c}_{11} = \bar{c}_{12} = \bar{c}_{21} = \bar{c}_{22} = 0.05, T = 500$ $k_{\max} = 4000, d_{0\max} = 4.0, d_1 = 1.0, d_2 = 2.0, \varepsilon = 1.0, \varepsilon_g = 10^{-4}$ $\Delta T_{\max} = 0.02, m = 0.1$
P-EC-DHA PD-EC-DHA	$P = 10, \bar{c}_1 = \bar{c}_2 = 0.05, T = 500$ $k_{\max} = 50000, a_{ii} = 12.0, a_{ij} = 2.0, \varepsilon_g = 10^{-4}, \varepsilon_v = 10^{-6}, \varepsilon_E = 10^{-4}, \mu = 0.5$ $\Delta T = 0.004$

4.4.2 探索軌道の様子

本項では、各エリート結合型モデルの探索軌道について数値シミュレーションを通して確認する。このシミュレーションにおいては、エリート個体 \mathbf{x}^{el} として **gbest** もしくは **cbest** を用いた、P-EC-DGCM, PD-EC-DGCM, P-EC-DNDM, PD-EC-DNDM をベンチマーク問題 **Prob.6** (Modified Rastrigin, $N = 10$) へ適用し、P-EC-DHA, PD-EC-DHA, P-EC-DM, PD-EC-DM を $N = 100$ とした同問題に適用した (Sim 4.1)。各モデルで用いたパラメータについては、Table 4.6 に示す。なお、Table 4.6 において、上段黒字となっているパラメータは、以降のシミュレーションでも共通の設定であり、下段赤字となっているものは、Sim 4.1 固有の設定である。また、結合係数 \bar{c}_i or \bar{c}_{ij} の設定については、PD 型の場合はそのままの値を用い、P 型の場合はこの値を ΔT_{\max} で割った値を用いた。Sim 4.1 の結果として、P-EC-DGCM の探索軌道を Fig. 4.3 に、PD-EC-DGCM の探索軌道を Fig. 4.4 に、P-EC-DM の探索軌道を Fig. 4.5 に、PD-EC-DM の探索軌道を Fig. 4.6 に、P-EC-DNDM (C) の探索軌道を Fig. 4.7 に、PD-EC-DNDM (C) の探索軌道を Fig. 4.8 に、P-EC-DNDM (A) の探索軌道を Fig. 4.9 に、PD-EC-DNDM (A) の探索軌道を Fig. 4.10 に、P-EC-DHA の探索軌道を Fig. 4.11 に、PD-EC-DHA の探索軌道を Fig. 4.12 にそれぞれ示す。なお、Figs. 4.3 ~ 4.12 に図中、赤のプロットが探索点 x_1^1 の探索軌道であり、緑のプロットが x_1^{el} の探索軌道、オレンジのプロットが x_{pb1}^p の探索軌道、青のプロットがそれまでの探索で得られた最良目的関数値 $E(\mathbf{x}_{pb}^{gb}(k))$ (DHA の場合は E_{best}) の推移である。また、適用対象とした問題の大域的最適解 \mathbf{x}^o の第1成分は $x_1^o = -0.433$ であり、目的関数値は $E(\mathbf{x}^o) = 0.0$ である。

まず、P-EC-DGCM, PD-EC-DGCM の探索軌道 Figs. 4.3, 4.4 をみると、DGCM に駆動されて自律的探索を行う各個体が、エリート個体近傍へ引き込まれていくことで、局所解への収束を回避しつつ大域的最適解へ収束していく様子が確認できる。Figs. 4.3, 4.4 では、

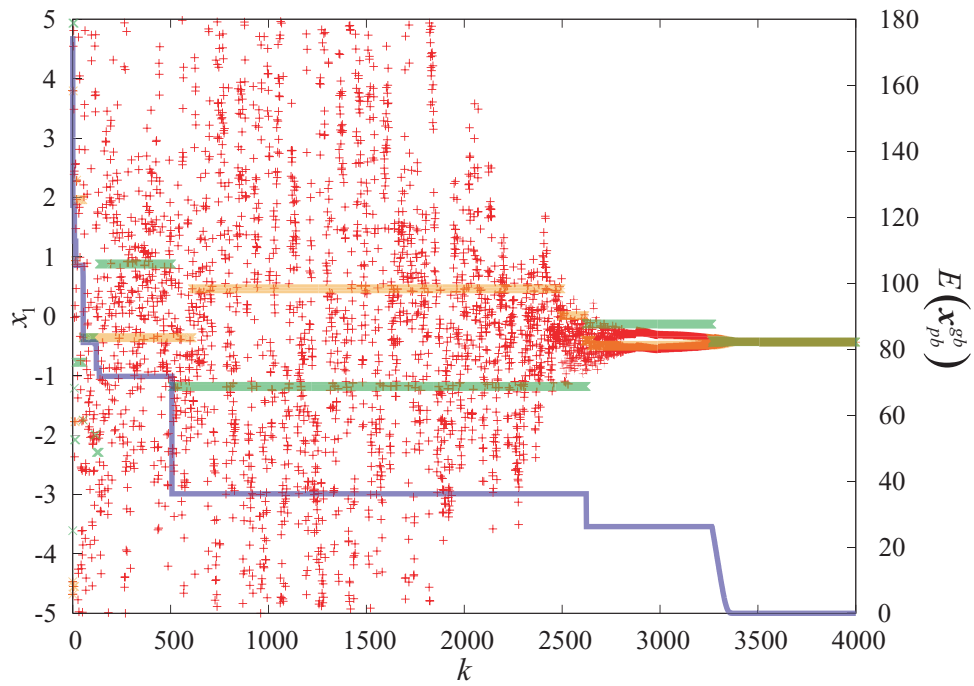
4.3.5 項で述べたとおり、 \boldsymbol{x}^{el} として **gbest** を選択した (a) と **cbest** を選択した (b) で、探索軌道の挙動が異なっている。**gbest** を用いた (a) では、個体群の探索軌道は、離散化幅が大きい探索初期においては、カオス的探索軌道によって実行可能領域を自律的に大域的探索しながら、エリート個体に引き込まれる時期においては、**gbest** と **pbest** の間を集中的に探索している。そして、離散化幅が小さくなった探索後期においては、徐々にエリート個体に引き込まれエリート個体近傍の集中的探索状態へ遷移し、大域的最適解へ収束している。**cbest** を選択した (b) では、カオス的探索軌道による自律的探索を実行しつつ、周期的に **pbest** へ引き込まれ **pbest** 周辺の探索に遷移する。この際、**cbest** との結合により完全に **pbest** へ引き込まれることはない。そして、離散化幅が小さくなった探索後期においては、徐々に **cbest**, **pbest** に引き込まれて各エリート個体近傍の集中的探索状態へ遷移し、**cbest** と **pbest** が重なる大域的最適解へ収束している。

つぎに、P-EC-DM, PD-EC-DM の探索軌道 Figs. 4.5, 4.6 をみると、単点の場合と同様の軌道を用いて大域的最適解へ収束している様子が確認できる。エリート個体の影響についてみると、とくに **gbest** を用いた場合に、局所解への収束期においてエリート個体への引き込みが確認できる。

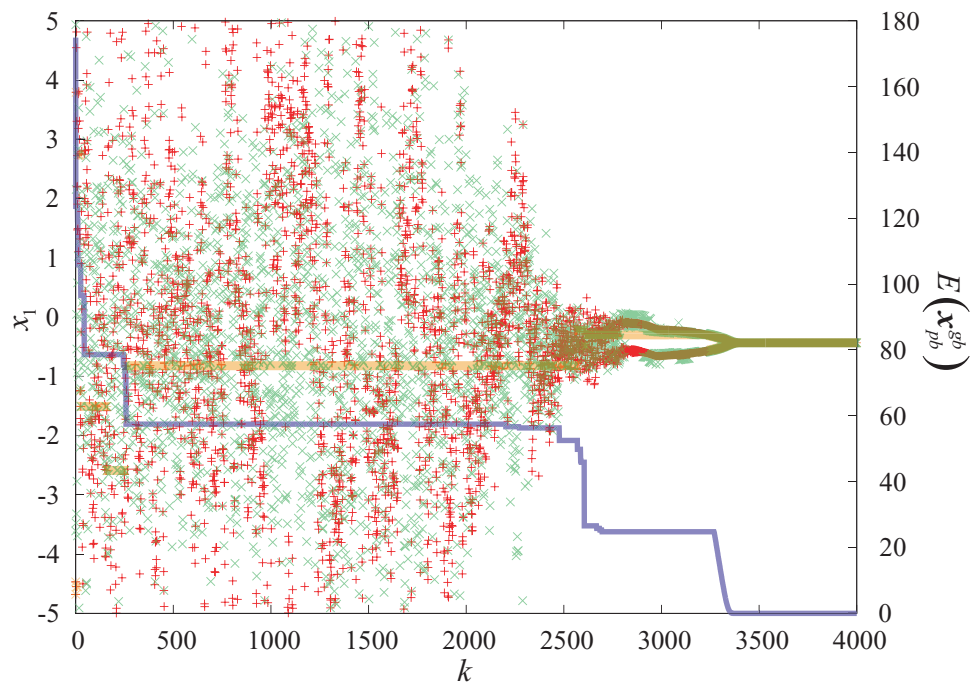
つぎに、P-EC-DNDM (C), PD-EC-DNDM (C) の探索軌道 Figs. 4.7, 4.8 をみると、DNDM (C) に駆動されて自律的探索を行う各個体がエリート個体近傍へ引き込まれながら、P 型では大域的最適解近傍の局所解、PD 型では大域的最適解へ収束している様子が確認できる。また、他の探索軌道と比較して、DNDM (C) では、とくに、エリート個体へ引き込まれている様子が確認できる。これは、Fig. 2.12 (p.42) をみるとわかるように、単点の場合の軌道が他のモデルと比較して連続的であるため、エリート個体へ強く引き込まれる結果になったと考えられる。

つぎに、P-EC-DNDM (A), PD-EC-DNDM (A) の探索軌道 Figs. 4.9, 4.10 をみると、DNDM (A) に駆動されて自律的探索を行う各個体がエリート個体近傍へ引き込まれながら、大域的最適解へ収束している様子が確認できる。エリート個体への引き込みについては、EC-DGCM の場合と同様の挙動となっているが、DNDM (A) では、局所解への収束発散を繰り返すモデルとなっているため、EC-DGCM と比較してエリート個体への引き込みが強く、**gbest** と **cbest** の選択の違いがより色濃く反映されているといえる。

最後に、P-EC-DHA, PD-EC-DHA の探索軌道 Figs. 4.11, 4.12 をみると、他のモデルと同様に、エリート個体に引き込まれながら、単点の場合 Fig. 2.14 (p.43) と比較して目的関数値の小さい局所解へ収束している。また、4.2.4 項で述べたように、EC-DHA は、結合構造の導入よりハミルトニアン保存性が保証されないが、結果からも結合構造の影響でハミルトニアンの散逸が起るため、単点の場合と比較してより速く局所解への収束が発生している様子が確認できる。



(a) x^{el} is gbest



(b) x^{el} is cbest

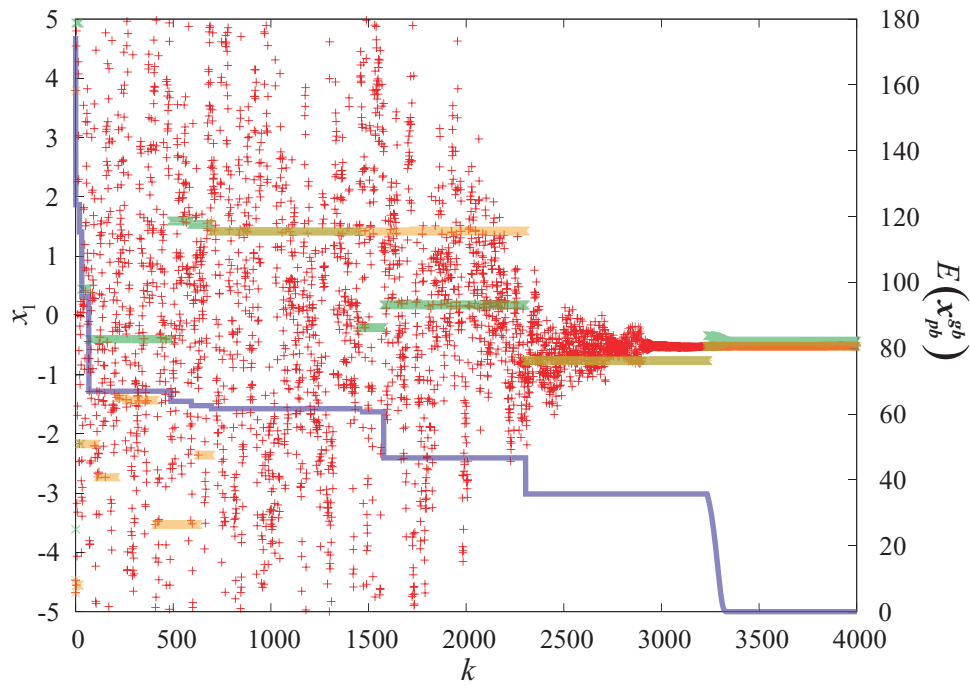
Fig. 4.3 Search Trajectory of P-EC-DGCM for Prob.6 ($N = 10$).

Red plots show the search trajectory of x_1^1 .

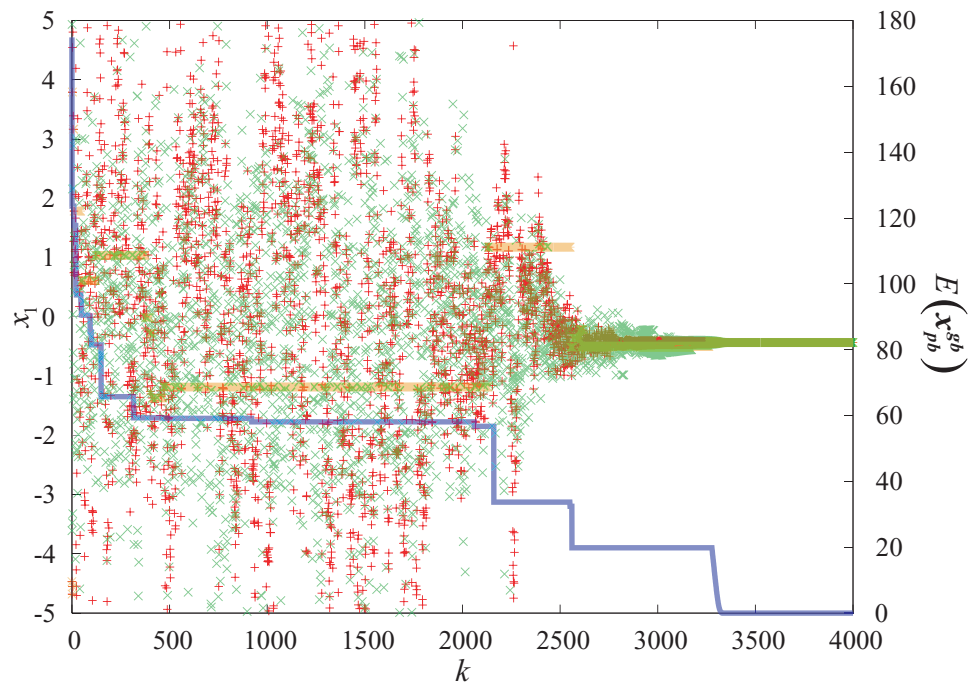
Orange plots show the trajectory of x_{pb1}^1 (pbest).

Green plots show the trajectory of x_1^{el} (gbest or cbest).

Blue plots show the transition of the objective function value of the gbest.



(a) x^{el} is gbest



(b) x^{el} is cbest

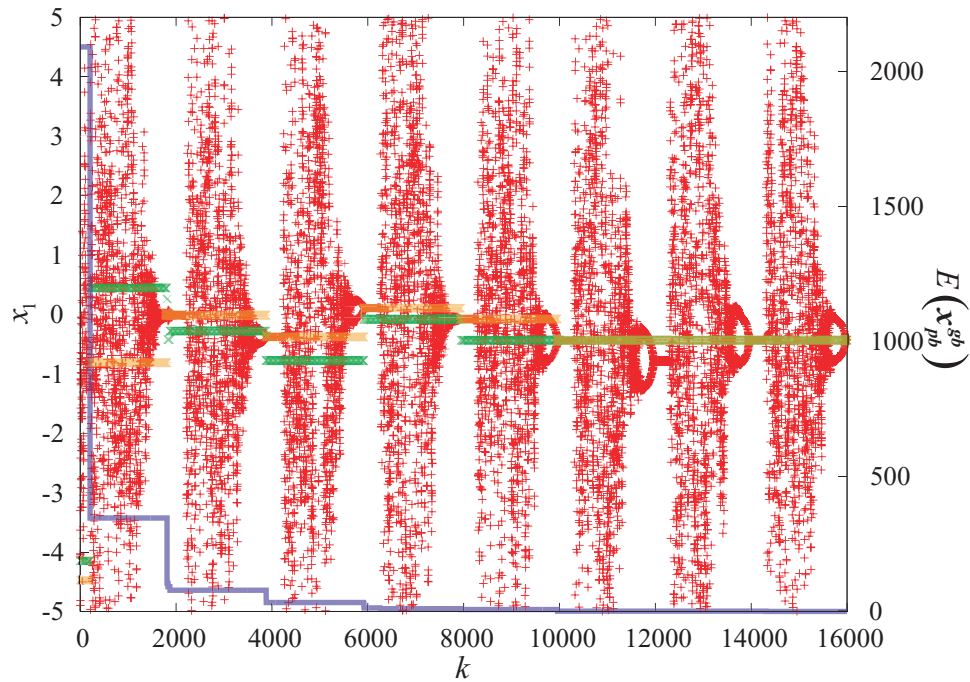
Fig. 4.4 Search Trajectory of PD-EC-DGCM for Prob.6 ($N = 10$).

Red plots show the search trajectory of x_1^1 .

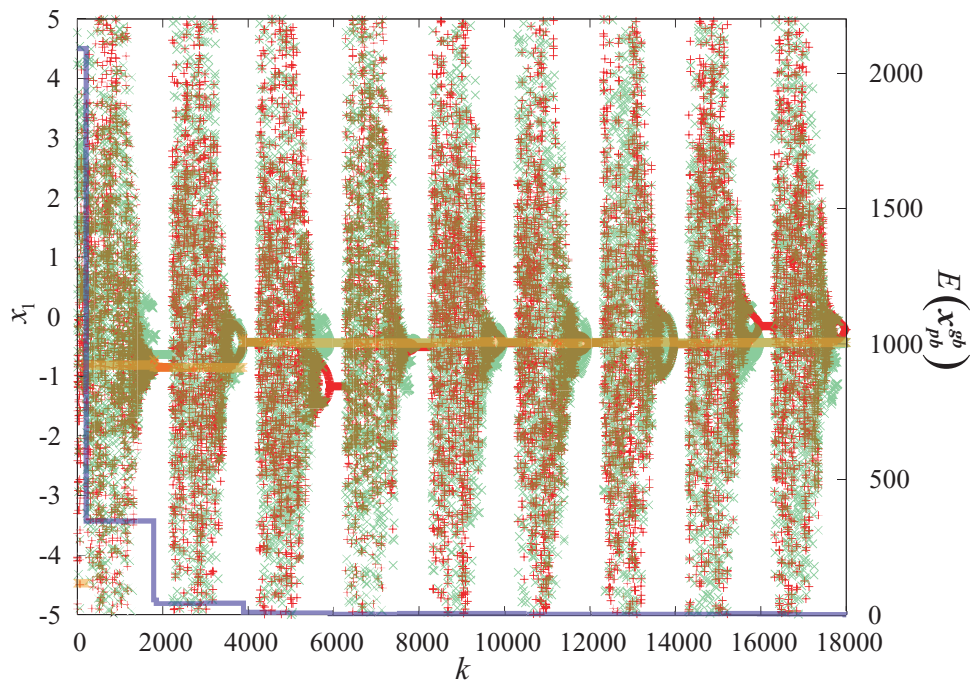
Orange plots show the trajectory of x_{pb1}^1 (pbest).

Green plots show the trajectory of x_1^{el} (gbest or cbest).

Blue plots show the transition of the objective function value of the gbest.



(a) x^{el} is gbest



(b) x^{el} is cbest

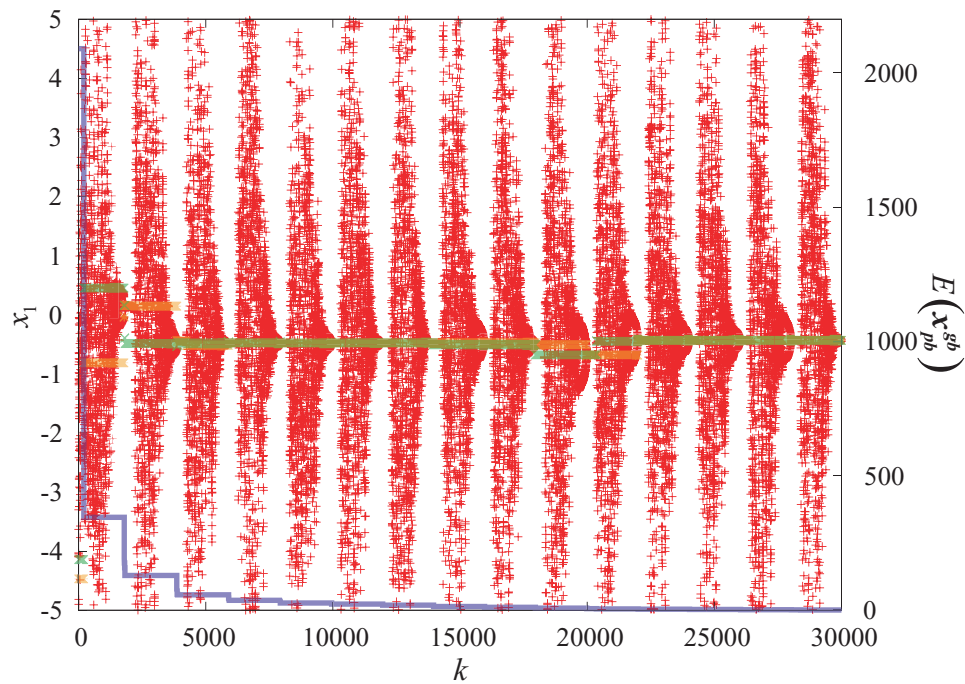
Fig. 4.5 Search Trajectory of P-EC-DM for Prob.6 ($N = 100$).

Red plots show the search trajectory of x_1^1 .

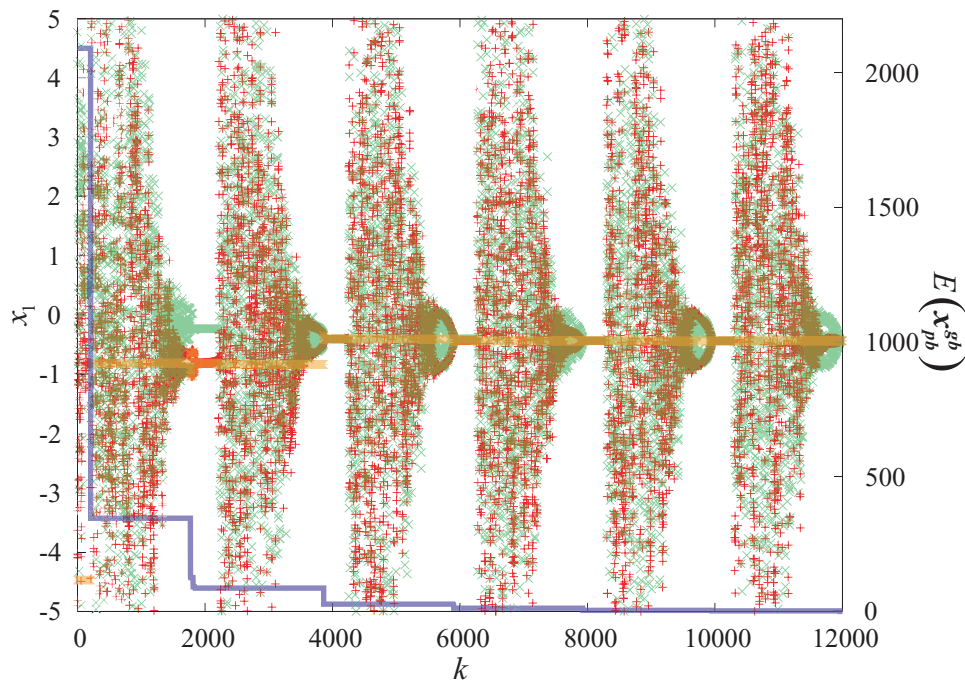
Orange plots show the trajectory of x_{pb1}^1 (pbest).

Green plots show the trajectory of x_1^{el} (gbest or cbest).

Blue plots show the transition of the objective function value of the gbest.



(a) x^{el} is gbest



(b) x^{el} is cbest

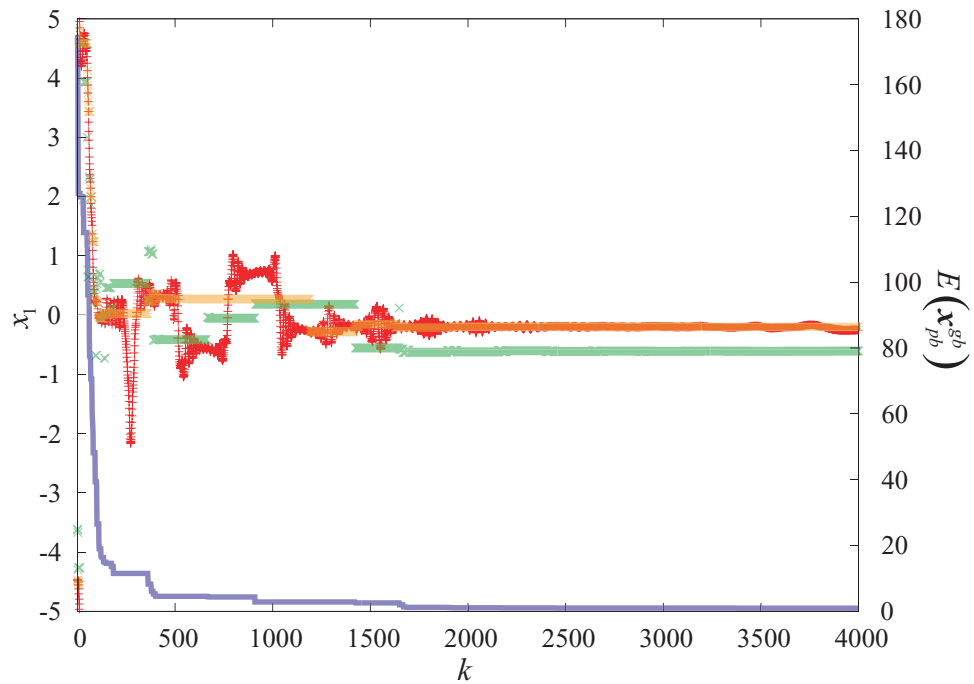
Fig. 4.6 Search Trajectory of PD-EC-DM for Prob.6 ($N = 100$).

Red plots show the search trajectory of x_1^1 .

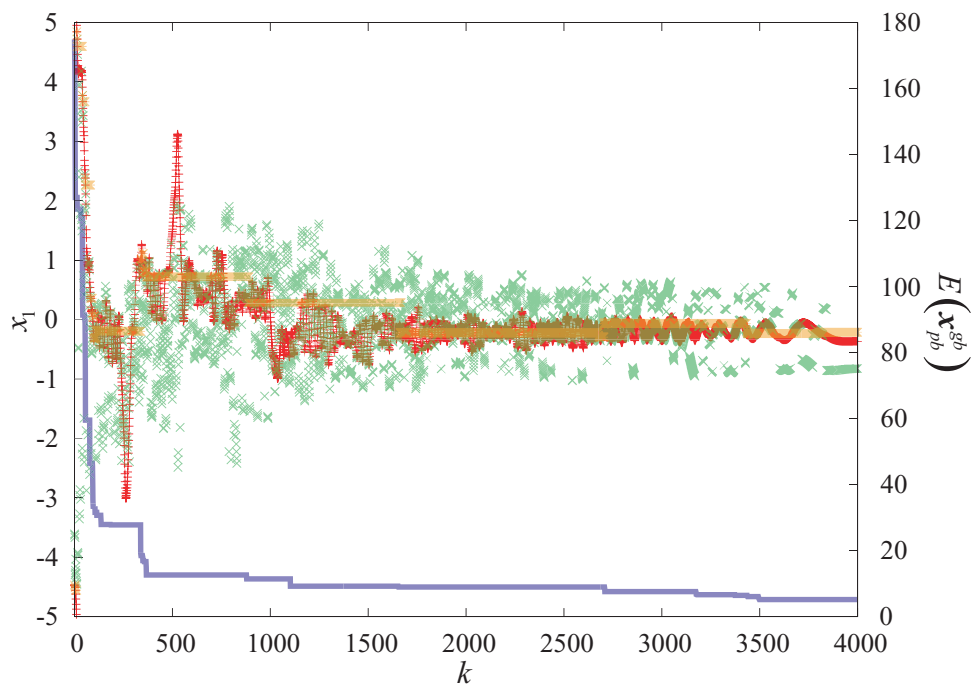
Orange plots show the trajectory of x_{pb1}^1 (pbest).

Green plots show the trajectory of x_1^{el} (gbest or cbest).

Blue plots show the transition of the objective function value of the gbest.



(a) x^{el} is gbest



(b) x^{el} is cbest

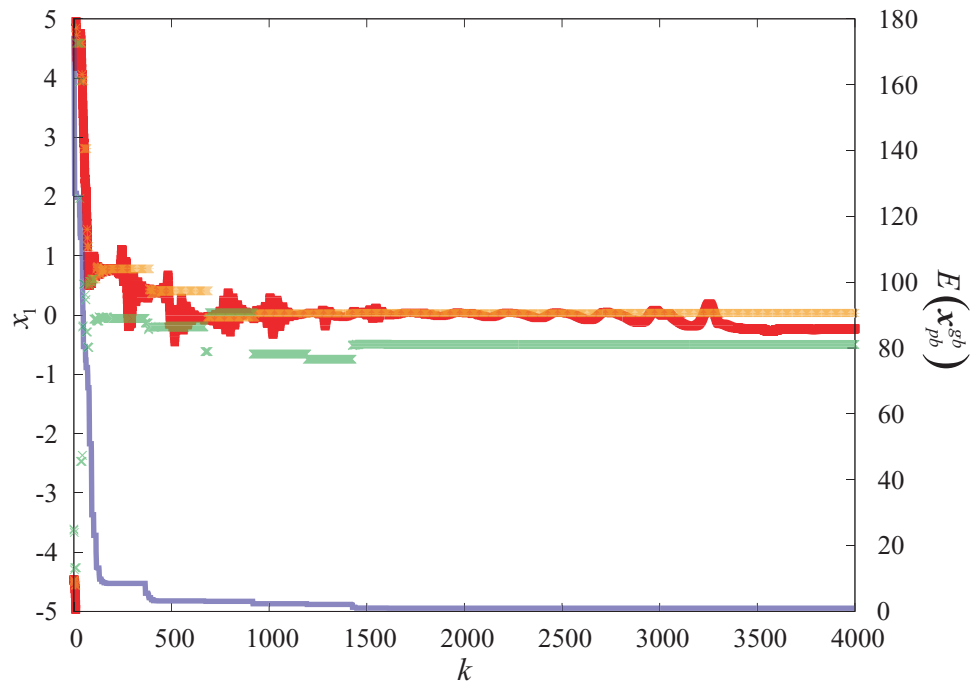
Fig. 4.7 Search Trajectory of P-EC-DNDM (C) for Prob.6 ($N = 10$).

Red plots show the search trajectory of x_1^1 .

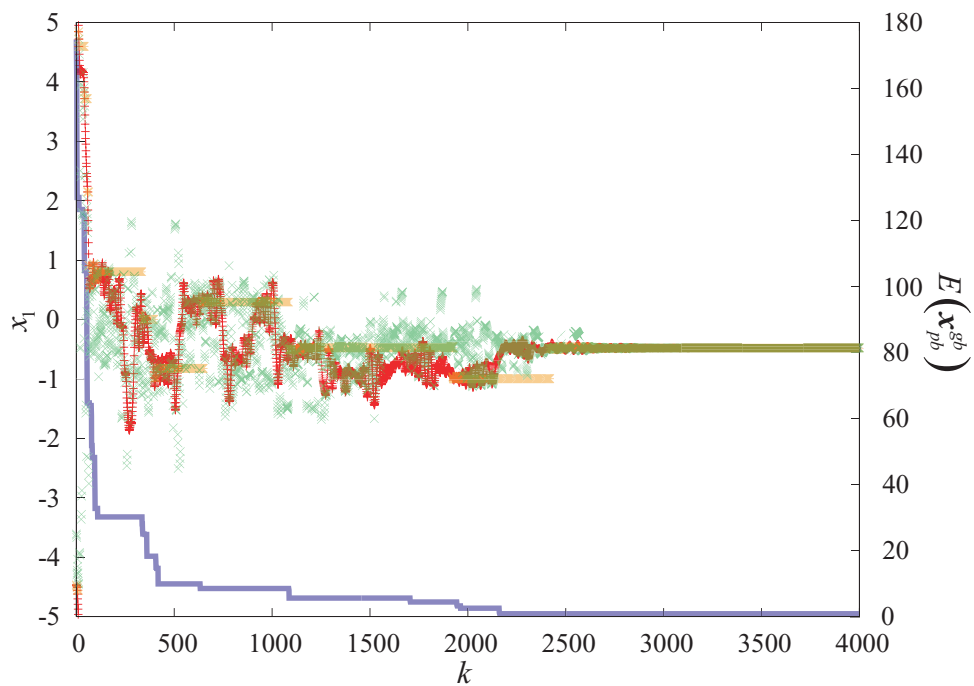
Orange plots show the trajectory of x_{pb1}^1 (pbest).

Green plots show the trajectory of x_1^{el} (gbest or cbest).

Blue plots show the transition of the objective function value of the gbest.



(a) x^{el} is gbest



(b) x^{el} is cbest

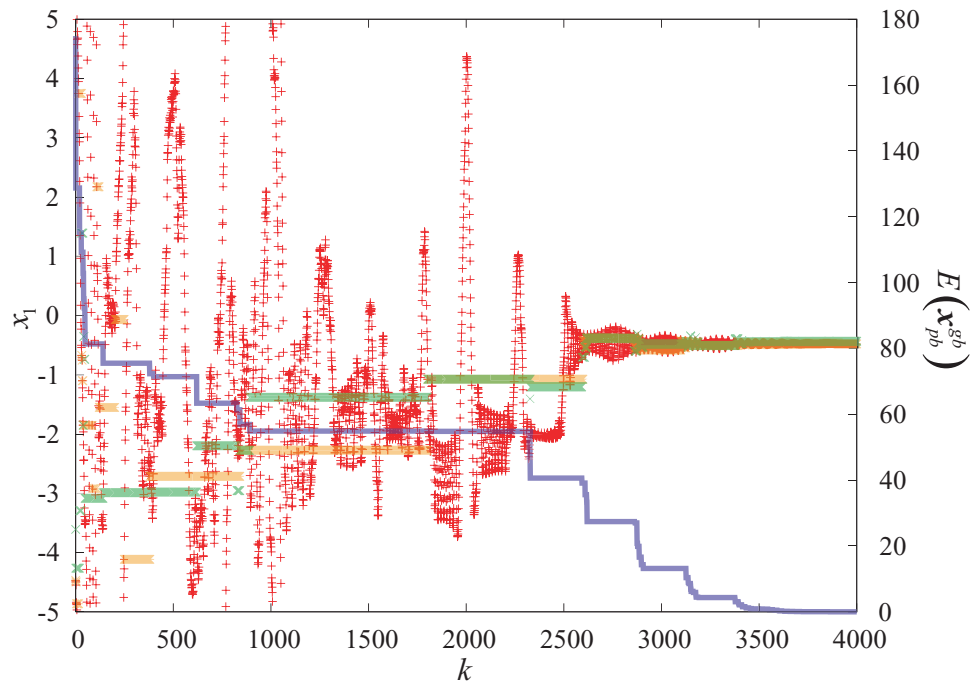
Fig. 4.8 Search Trajectory of PD-EC-DNDM (C) for Prob.6 ($N = 10$).

Red plots show the search trajectory of x_1^1 .

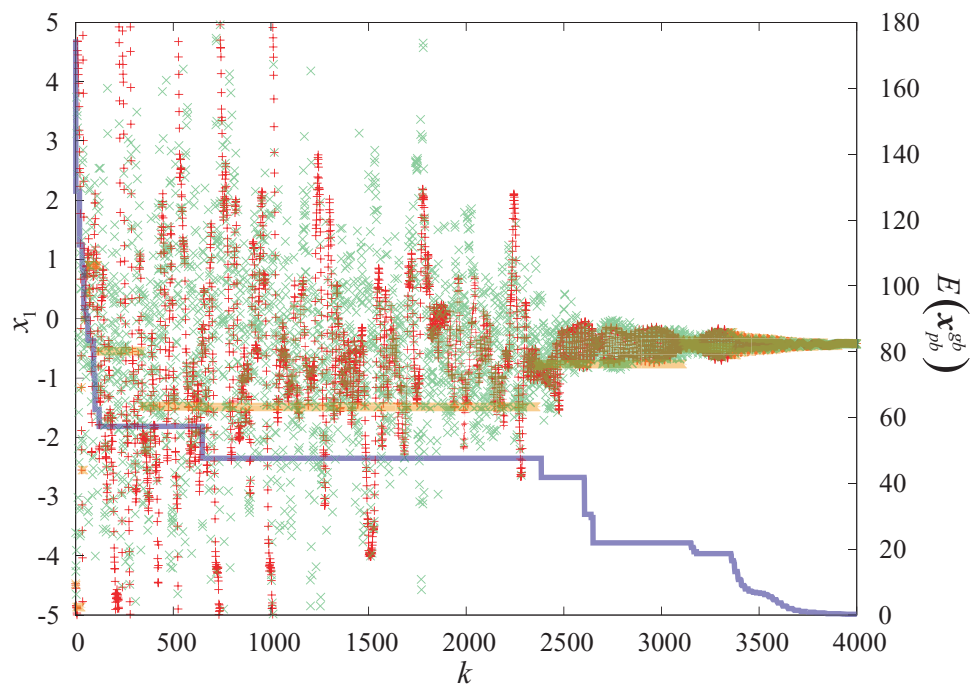
Orange plots show the trajectory of x_{pb1}^1 (pbest).

Green plots show the trajectory of x_1^{el} (gbest or cbest).

Blue plots show the transition of the objective function value of the gbest.



(a) x^{el} is gbest



(b) x^{el} is cbest

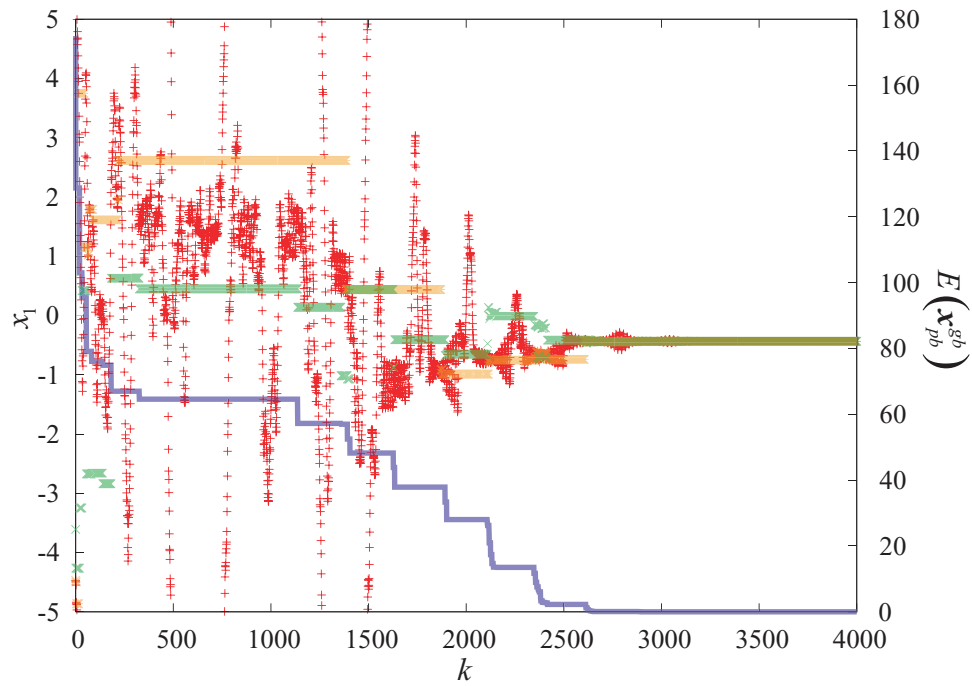
Fig. 4.9 Search Trajectory of P-EC-DNDM (A) for Prob.6 ($N = 10$).

Red plots show the search trajectory of x_1^1 .

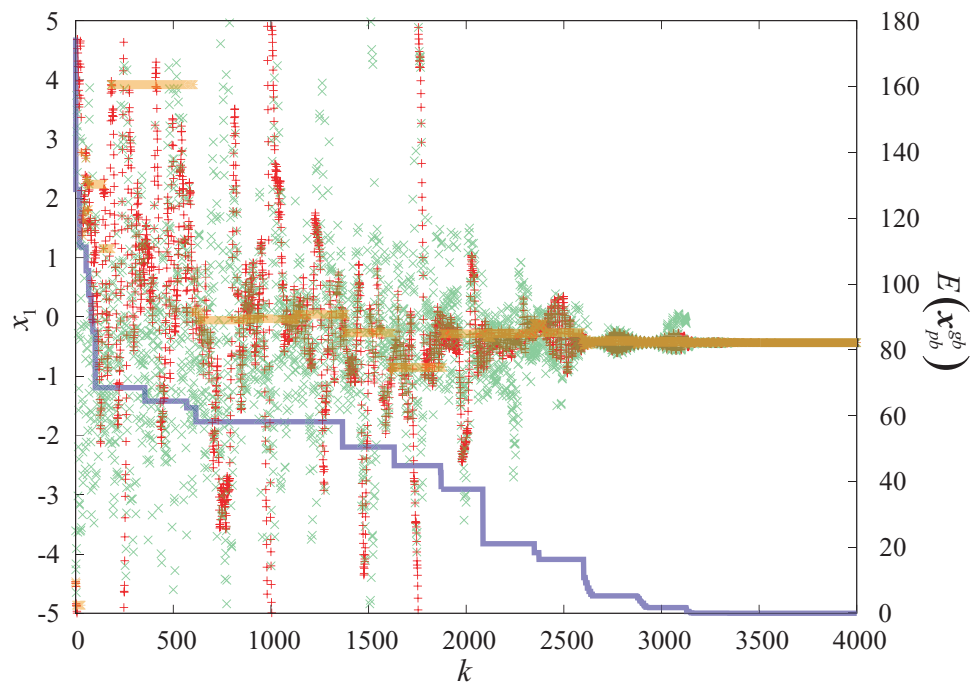
Orange plots show the trajectory of x_{pb1}^1 (pbest).

Green plots show the trajectory of x_1^{el} (gbest or cbest).

Blue plots show the transition of the objective function value of the gbest.



(a) x^{el} is gbest



(b) x^{el} is cbest

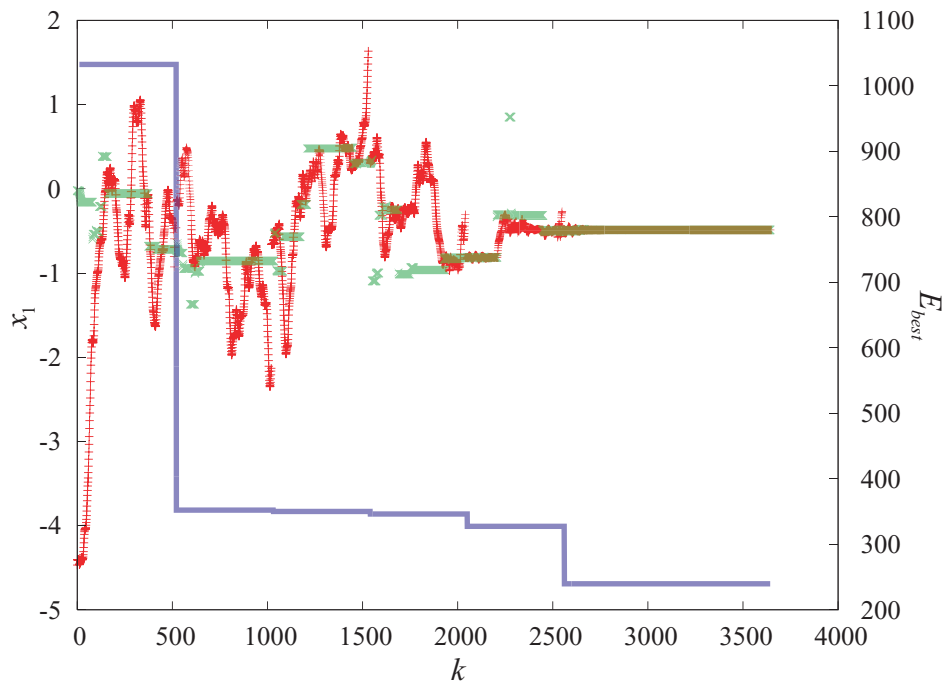
Fig. 4.10 Search Trajectory of PD-EC-DNDM (A) for Prob.6 ($N = 10$).

Red plots show the search trajectory of x_1^1 .

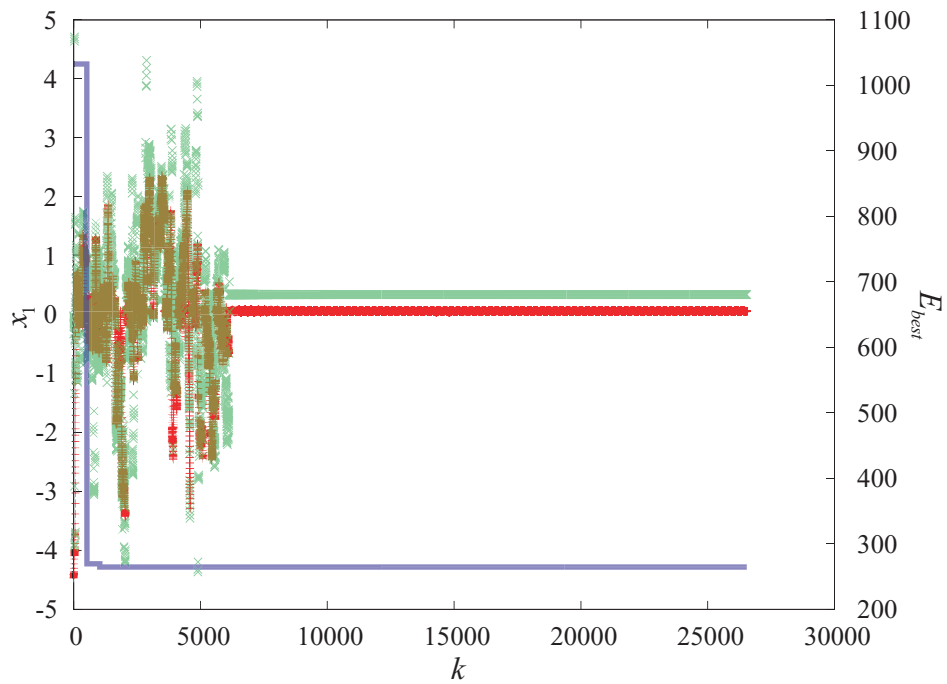
Orange plots show the trajectory of x_{pb1}^1 (pbest).

Green plots show the trajectory of x_1^{el} (gbest or cbest).

Blue plots show the transition of the objective function value of the gbest.

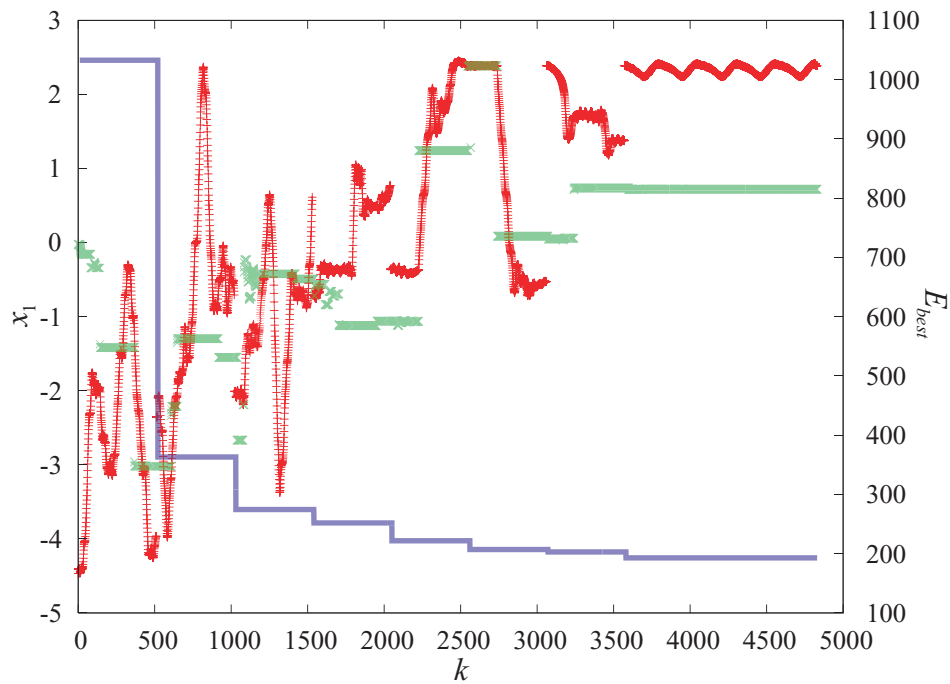


(a) x^{el} is gbest

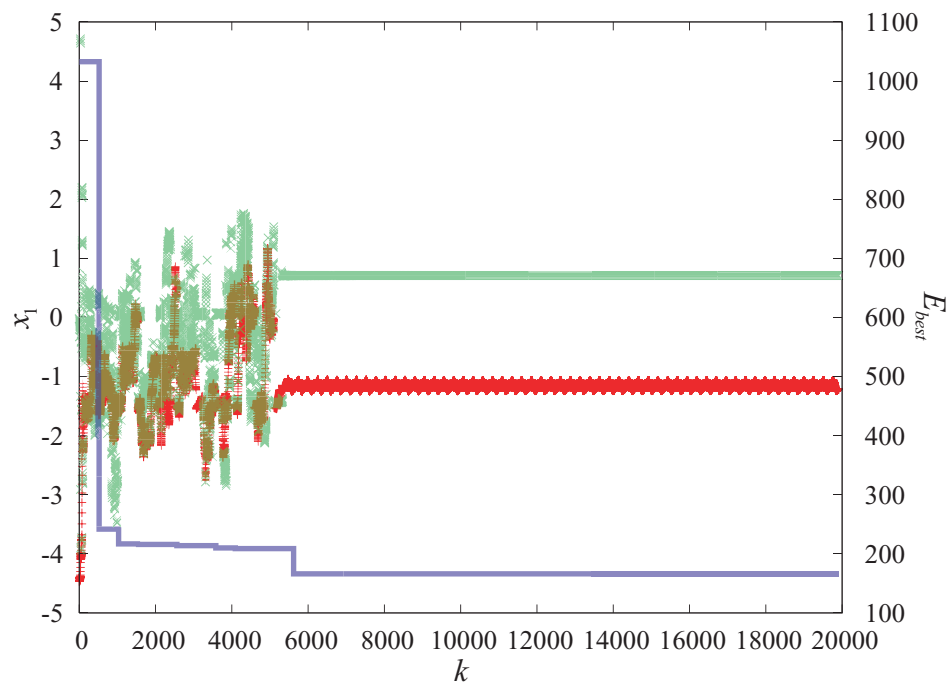


(b) x^{el} is cbest

Fig. 4.11 Search Trajectory of P-EC-DHA for Prob.6 ($N = 100$).
 Red plots show the search trajectory of x_1^1 .
 Green plots show the trajectory of x_1^{el} (gbest or cbest).
 Blue plots show the transition of the objective function value of the gbest.



(a) x^{el} is gbest



(b) x^{el} is cbest

Fig. 4.12 Search Trajectory of PD-EC-DHA for Prob.6 ($N = 100$).
 Red plots show the search trajectory of x_1^l .
 Green plots show the trajectory of x_1^{el} (gbest or cbest).
 Blue plots show the transition of the objective function value of the gbest.

Table 4.7 Parameters Settings in Sim 4.2

Problem	P-EC-DGCM		P-EC-DM		P-EC-DNDM (C)		P-EC-DNDM (A)		P-EC-DHA
	PD-EC-DGCM		PD-EC-DM		PD-EC-DNDM (C)		PD-EC-DNDM (A)		PD-EC-DHA
	ΔT_{\max}	\bar{c}_1, \bar{c}_2	ΔT_{\max}	\bar{c}_1, \bar{c}_2	ΔT_{\max}	m	ΔT_{\max}	m	ΔT
Prob.1	0.02	0.05	0.02	0.01	0.01	0.25	0.01	0.01	0.002
Prob.2	150.0	0.05	20.0	0.01	20.0	80.0	4.0	10.0	0.7
Prob.3	0.001	0.05	0.002	0.01	0.01	1.0	0.002	0.001	0.002
Prob.4	0.03	0.05	0.1	0.01	0.02	1.0	0.02	0.01	0.004
Prob.5	0.1	0.75	0.2	0.5 (fixed)	0.05	5.0	0.03	0.1	0.008
Prob.6	0.03	0.05	0.03	0.05	0.02	1.0	0.03	0.05	0.004

4.4.3 大域的最適化性能

本項では、各エリート結合型モデルの大域的最適化性能を、複数のベンチマーク問題への適用を通して確認する (Sim 4.2). ベンチマーク問題としては、付録 A.2 節のベンチマーク問題 Prob.1 ~ Prob.6 を $N = 100$ として用いた. 各モデルのパラメータに関しては、問題に関係なく固定のパラメータは Table 4.6 の上段黒字の値を用い、問題に依存するパラメータは、それぞれのパラメータ設定指針にしたがって設定した Table 4.7 の値を用いた. シミュレーションは、初期点 \mathbf{x}^p をランダムにとり直しながら各 100 回試行し、結果を p.44 の指標を用いて評価した. 結果を Tables 4.8 ~ 4.13 にそれぞれ示す. 結果の中で、plain がついているものは、同じ個体数で結合がない場合の結果である. また、計算量見込みのために、自動微分の計算回数の平均値を AD Calls に、目的関数計算回数の平均値を OF Calls に付記している. 結果の中で自明な結果となる場合、すなわち、CR が 100% に対する DA, Var, Worst, CR が 1% 以上に対する Best の場合については、“-”と表記している. 結果の中で、赤字となっている項目は、全手法の中で最も成績が良かった項目を示し、水色字となっている項目は、駆動モデルが同一の中で最も成績が良かった項目を示す. また、Method 列の記載において赤字となっている手法は、全手法の中で最も成績が良かった手法であり、水色字となっている手法は、駆動モデルが同一の中で最も成績が良かった手法であり、青色となっている手法は、駆動モデルが同一の中で次点の成績を得た手法である. ここで、手法間比較における成績は、まず、CR が良い順で評価し、CR が同一の場合は DA が良い順で評価している.

まず、P-EC-DGCM, PD-EC-DGCM の結果について考える. Tables 4.8 ~ 4.13 をみると

1. Prob.3 に対する結果である Table 4.10 を除いて、エリート結合の導入によって、結合のない場合と比べて大域的最適化性能が改善されていること
2. P 型, PD 型の比較については、PD 型の方が良い結果を収めていること
3. \mathbf{x}^{el} の選択については、探索の多様性を維持しやすい cbest 型とルーレット選択型のいずれかが最も良い結果を収めていること
4. 3. について、ルーレット選択型は、Tables 4.10 ~ 4.12 で gbest 型, cbest 型と比較して悪い結果を収めているのに対し、cbest 型は、すべての目的関数で安定した結果を収めており、 \mathbf{x}^{el} としては、cbest の選択が推奨されること

がわかる. より詳細に問題ごとにみていくと、単点の DGCM が得意としていた Prob.1 に対する適用結果 Table 4.8 では、その性質がエリート結合型モデルにも反映され、CR が

100%となっている。また、大谷構造を有する **Prob.2** に対する結果 **Table 4.9** をみると、単点の場合と同様に大域的最適解には到達していないが、エリート結合型モデルでは、エリート個体への移流の効果により単点の場合よりさらに大域的最適解に近づいている。綾構造を有し単点の DGCM は苦手としていた **Prob.3** に対する結果 **Table 4.10** をみると、まず plain DGCM の結果から、複数の個体で探索すればいずれかの個体は目的関数値の小さい解へ収束することが理解される。しかし、これに結合構造を導入すると、結果が悪化している。先に述べたように、この問題に対しては、勾配によって与えられる降下方向へ長い間降下するモデルに有利な結果が生まれやすい。よって、エリート結合により降下方向と異なる力が加わってしまうエリート結合型モデルで結果が悪化しているものと考えられる。ある程度目的関数値が小さくなると各局所解の安定性が大きく変わらない **Prob.4**, **Prob.6** への適用結果 **Tables 4.11, 4.13** では、エリート結合の効果により大域的最適化性能が大きく改善されている。これは、各局所解の安定性が大きく変わらないためいずれかの解へ収束していたカオスの探索軌道が、より目的関数値の小さい谷へ引き寄せられたためであるといえる。最も安定な局所解が大域的最適解と大きく離れている **Prob.5** への適用結果 **Table 4.12** では、エリート結合構造の導入により、とくに、PD 型結合構造において cbest とルーレット選択型個体を用いた場合に、カオスの探索軌道に対する安定化構造をある程度崩すことに成功し、結果として、大域的最適化性能が改善されている。なお、この問題においては、**Table 4.7** にあるように、安定化構造の崩壊を図るために結合係数を特別に大きい値に設定していることに注意されたい。

つぎに、P-EC-DM, PD-EC-DM の結果について考える。Tables 4.8 ~ 4.13 をみると

1. すべての問題において、PD 型の pbest 型の CR が 100%であること
2. 全個体を考慮したエリート個体に対する結合構造の導入により最適化性能は若干悪化する場合があります、**Table 4.9** では、その傾向が強く現われていること
3. **Tables 4.10 ~ 4.13** では、結合構造の導入により大域的最適解への収束速度は改善していること、とくに、PD 型の cbest 型では確実に改善していること

が確認できる。とくに、1.については特筆すべき点であるといえよう。2.については、**Prob.2** に対する結果についてその傾向が強いことと、**Prob.1** では最適化性能こそ悪化していないが、大域的最適解への収束速度が P-EC-DM, PD-EC-DM の pbest 型以外で落ちていることを考えれば、水抜き法がもともと得意としていると考えられる大谷構造を有する問題に対しては、全個体を考慮したエリート結合は不利に働いているといえる。一方、3.についての考察と **Tables 4.10 ~ 4.13** では、大域的最適化性能が大きく悪化してはいないことを考えると、水抜き法がある程度苦手としていると考えられる大谷構造を有しない、ないしは、有するが多峰性が強くその構造がカオスの探索軌道の安定性に寄与しない問題に対しては、全個体を考慮したエリート結合は有利に働いているといえる。ところで、最も安定な局所解が大域的最適解と大きく離れている **Prob.5** については、P 型結合構造では、カオスの探索軌道に対する安定化構造を崩すことができないが、PD 型結合構造では、安定化構造を崩すことに成功しているといえる。この結果は、上述の PD-EC-DGCM に対する結果とよく一致している。

つぎに、P-EC-DNDM (C), PD-EC-DNDM (C) の結果について考える。Tables 4.8 ~ 4.13 をみると

1. **Prob.5** に対する結果である **Table 4.12** を除いて，エリート結合の導入によって，結合のない場合と比べて大域的最適化性能が改善されていること
2. \boldsymbol{x}^{el} の選択については，総じてルーレット選択型個体が最も良い結果を示していること
3. 最適化性能が改善されない場合も含めれば，cbest型は，すべての場合で安定した結果を収めていること

が確認できる．より詳細に問題ごとにみていくと，大谷構造を持つ **Prob.1, Prob.2, Prob.6** に対する結果 **Tables 4.8, 4.9, 4.13** では，PD型結合が有利に働いている．これら問題は，POPがよく成立する問題であるため，より安定的に引き込み現象を発現するPD型結合モデルが良い結果を収めていると考えられる．目的関数値が小さくなると各局所解で谷の構造があまり変わらない **Prob.4** に対する結果 **Table 4.11** では，P型結合とPD型結合がほぼ同等の結果となっていることも，上述の指摘を示唆する結果であるといえる．また，前述した綾構造という特殊な構造を持つ **Prob.3** に対する結果である **Table 4.10** では，むしろP型結合が良い結果を収めているが，これは，PD型結合を用いると，P型結合と比べてより降下方向と異なる力が加わってしまうためであると考えられる．結合構造の導入により結果が悪化している **Table 4.12** については，2.6.2項 p.46 で述べた問題構造の特殊性に起因して plain な DNDM (C) が良い結果を収めているためである．

つぎに，P-EC-DNDM (A)，PD-EC-DNDM (A) の結果について考える．**Tables 4.8 ~ 4.13** をみると

1. **Tables 4.8, 4.9, 4.11, 4.12** において，エリート結合の導入によって，結合のない場合と比べて大域的最適化性能が改善されている，もしくは，ほぼ維持されていること
2. **Table 4.13** では，大域的最適化性能の若干の悪化がみられるが，高い収束率を維持していること
3. **Prob.3** に対する結果である **Table 4.10** では，エリート結合導入による大域的最適化性能の改善はみられないこと
4. 結合構造としては，**Table 4.10** 以外ではPD型が，**Table 4.10** では，P型がよい結果を収めていること
5. \boldsymbol{x}^{el} の選択については，**Table 4.12** 以外では，総じてルーレット選択型が良い結果を収めていること
6. 3.に関連して，全体を通して，総じてcbest型が，1番ないしは2番の結果を安定的に収めていること

が確認できる．

最後に，P-EC-DHA，PD-EC-DHAの結果について考える．**Tables 4.8 ~ 4.13** をみると

1. 結合のない場合にCRが100%となる **Table 4.8** と **Table 4.9** を除いて，エリート結合の導入によって大域的最適化性能が改善されていること

2. すべて問題において、P型結合が良い結果を収めていること
3. \boldsymbol{x}^{el} の選択については、Table 4.10 と Table 4.13 を除いて、ルーレット選択型がよい結果を収めていること

が確認できる。とくに、2.については他のモデルと傾向が異なる。P-EC-DHA, PD-EC-DHAでは、駆動モデルであるDHAの探索軌道が連続時間軌道に近い軌道であるため、P型でも十分安定にエリート個体への引き込み現象を発現していて、PD型ではむしろ引き込み現象が強すぎて探索の多様性が失われる傾向にあるため、このような結果になったと考えられる。

Table 4.8 Results for Prob.1 (Modified Levy No.5, $N = 100$).

Red cells denote the best result of all methods.

Sky blue cells denote the best result of methods which are driven by same model.

Blue cells denote the second best result of methods which are driven by same model.

Method	CR	DA	Var	Worst	Best	AD Calls	OF Calls	
plain DGCM	100	-	-	-	-	40021	0	
P-EC-DGCM	cbest	100	-	-	-	40021	0	
	gbest	100	-	-	-	40021	0	
	roulette	100	-	-	-	40021	0	
PD-EC-DGCM	cbest	100	-	-	-	40021	0	
	gbest	100	-	-	-	40021	0	
	roulette	100	-	-	-	40020	0	
plain IDM	100	-	-	-	-	5058	6335	
P-EC-DM	cbest	100	-	-	-	6655	6483	
	gbest	100	-	-	-	5577	6389	
	roulette	100	-	-	-	7765	6736	
PD-EC-DM	pbest	100	-	-	-	5075	6278	
	cbest	100	-	-	-	6459	6348	
	gbest	100	-	-	-	5370	6528	
	roulette	100	-	-	-	7738	6667	
plain DNNDM (C)	0	84.3009	53.7520	101.034	66.6199	41121	10376	
P-EC-DNNDM (C)	cbest	11	0.4303	0.1806	1.688	-	41121	7583
	gbest	9	0.5704	0.2681	2.525	-	41121	7272
	roulette	29	0.0341	0.0068	0.384	-	41121	5857
PD-EC-DNNDM (C)	cbest	89	0.0034	0.0001	0.062	-	41121	1835
	gbest	48	0.0081	0.0013	0.350	-	41121	2272
	roulette	98	0.0006	0.0000	0.031	-	41121	1899
plain DNNDM (A)	100	-	-	-	-	40029	24	
P-EC-DNNDM (A)	cbest	100	-	-	-	40033	23	
	gbest	100	-	-	-	40041	38	
	roulette	100	-	-	-	40292	466	
PD-EC-DNNDM (A)	cbest	100	-	-	-	40029	13	
	gbest	100	-	-	-	40024	6	
	roulette	100	-	-	-	40028	13	
plain DHA	100	-	-	-	-	188571	133964	
P-EC-DHA	cbest	95	0.0011	2.801e-05	0.0308	-	135382	62672
	gbest	80	0.0068	2.000e-04	0.0616	-	148268	55159
	roulette	100	-	-	-	-	120478	54387
PD-EC-DHA	cbest	98	0.0003	3.052e-06	0.0172	-	133241	62355
	gbest	82	0.0087	5.878e-04	0.1846	-	144262	53575
	roulette	99	0.0004	9.355e-06	0.0308	-	120891	53912

Table 4.9 Results for Prob.2 (Modified Griewank, $N = 100$).

Red cells denote the best result of all methods.

Sky blue cells denote the best result of methods which are driven by same model.

Blue cells denote the second best result of methods which are driven by same model.

Method	CR	DA	Var	Worst	Best	AD Calls	OF Calls	
plain DGCM	0	0.00446	1.946e-06	0.0099	0.0013	40113	547	
P-EC-DGCM	cbest	0	0.00336	1.227e-06	0.0059	0.0011	40069	324
	gbest	0	0.00373	2.424e-06	0.0088	0.0010	40087	451
	roulette	0	0.00343	1.646e-06	0.0067	0.0011	40070	332
PD-EC-DGCM	cbest	0	0.00206	1.857e-06	0.0092	0.0002	40425	2741
	gbest	0	0.00252	1.753e-06	0.0068	0.0004	40591	3258
	roulette	0	0.00204	8.483e-07	0.0045	0.0002	40506	3347
plain IDM	100	-	-	-	-	260044	12636	
P-EC-DM	cbest	90	0.00005	2.436e-08	0.0009	-	377233	12864
	gbest	97	0.00002	1.404e-08	0.0007	-	241645	10343
	roulette	91	0.00003	1.064e-08	0.0007	-	337565	12528
PD-EC-DM	pbest	100	-	-	-	-	240830	11865
	cbest	70	0.00013	4.969e-08	0.0009	-	406188	13092
	gbest	90	0.00005	2.003e-08	0.0009	-	356986	13334
	roulette	84	0.00006	2.030e-08	0.0006	-	418054	15782
plain DNDM (C)	96	0.00002	7.200e-09	0.0008	-	41121	1421	
P-EC-DNDM (C)	cbest	99	0.00001	3.892e-10	0.0002	-	41121	1421
	gbest	99	0.00001	3.899e-10	0.0002	-	41121	1421
	roulette	99	0.00001	2.332e-10	0.0002	-	41121	1421
PD-EC-DNDM (C)	cbest	100	-	-	-	-	41121	4614
	gbest	97	0.00001	6.414e-10	0.0002	-	41121	4610
	roulette	100	-	-	-	-	41121	4662
plain DNDM (A)	100	-	-	-	-	41111	1136	
P-EC-DNDM (A)	cbest	100	-	-	-	-	41120	1153
	gbest	100	-	-	-	-	41120	1153
	roulette	100	4.392e-06	7.960e-11	-	-	41119	1150
PD-EC-DNDM (A)	cbest	99	4.738e-06	1.694e-10	0.0001	-	41119	1202
	gbest	99	4.738e-06	1.694e-10	0.0001	-	41119	1348
	roulette	100	-	-	-	-	41118	1206
plain DHA	100	-	-	-	-	50221	10100	
P-EC-DHA	cbest	92	0.00007	4.370e-09	0.0005	-	51559	8984
	gbest	97	0.00005	3.238e-09	0.0005	-	25004	5373
	roulette	100	-	-	-	-	32972	7230
PD-EC-DHA	cbest	96	0.00007	2.908e-09	0.0004	-	42769	8388
	gbest	96	0.00003	6.083e-08	0.0025	-	13059	2809
	roulette	99	0.00006	5.518e-10	0.0001	-	40111	8303

Table 4.10 Results for Prob.3 (Modified Rosenbrock's Saddle, $N = 100$)

Red cells denote the best result of all methods.

Sky blue cells denote the best result of methods which are driven by same model.

Blue cells denote the second best result of methods which are driven by same model.

Method	CR	DA	Var	Worst	Best	AD Calls	OF Calls	
plain DGCM	0	5.181	54.43	73.582	0.5021	41121	2149	
P-EC-DGCM	cbest	0	100.303	3404.45	239.912	0.1843	41121	1929
	gbest	0	136.682	4691.45	255.258	0.1501	41121	2096
	roulette	0	162.735	2790.65	242.809	10.9963	41121	2510
PD-EC-DGCM	cbest	0	102.079	3462.87	246.253	0.2244	41121	1921
	gbest	0	140.765	4702.48	248.926	0.1150	41121	2207
	roulette	0	147.220	3452.61	265.329	2.6512	41121	2242
plain IDM	95	0.1504	0.5128	3.9866	-	381069	45700	
P-EC-DM	cbest	100	-	-	-	-	336442	31921
	gbest	100	-	-	-	-	166689	17831
	roulette	98	0.0001	2.448e-09	0.0005	-	373693	35711
PD-EC-DM	pbest	100	-	-	-	-	227445	25343
	cbest	100	-	-	-	-	217444	23546
	gbest	99	0.0399	0.1573	3.9866	-	204023	24415
	roulette	100	-	-	-	-	266489	28439
plain DNNDM (C)	0	53.347	1845.44	165.937	0.0075	41121	5236	
P-EC-DNNDM (C)	cbest	0	37.375	1557.72	139.064	0.0040	41121	5225
	gbest	0	42.878	2469.73	165.295	0.0007	41121	5140
	roulette	1	25.590	1153.99	135.146	-	41121	5225
PD-EC-DNNDM (C)	cbest	0	95.838	2317.02	232.228	0.0023	41121	5317
	gbest	0	132.057	5967.53	345.856	0.0869	41121	5244
	roulette	0	173.729	4179.46	331.658	63.2513	41121	5691
plain DNNDM (A)	0	91.285	1343.75	144.375	4.808	41121	2380	
P-EC-DNNDM (A)	cbest	0	104.054	1391.50	200.577	4.495	41121	2490
	gbest	0	106.917	1813.23	211.669	6.296	41121	2448
	roulette	0	94.664	1659.40	208.364	0.334	41121	2445
PD-EC-DNNDM (A)	cbest	0	117.693	946.61	173.221	42.838	41121	2127
	gbest	0	171.670	3094.78	391.180	69.616	41121	2496
	roulette	0	108.321	1021.30	142.813	66.794	41121	2127
plain DHA	0	231.544	3197.46	329.646	72.751	306908	193695	
P-EC-DHA	cbest	0	232.872	2769.08	323.376	13.837	329806	209011
	gbest	0	220.640	2752.77	340.464	31.982	305766	191350
	roulette	0	235.310	2245.23	323.728	80.422	310574	196536
PD-EC-DHA	cbest	0	235.256	2337.42	336.218	71.673	319229	201303
	gbest	0	221.979	3576.83	357.115	0.525	292184	184318
	roulette	0	235.519	2877.56	330.133	69.151	331719	208949

Table 4.11 Results for Prob.4 (Modified 2^N -minima, $N = 100$)

Red cells denote the best result of all methods.

Sky blue cells denote the best result of methods which are driven by same model.

Blue cells denote the second best result of methods which are driven by same model.

Method	CR	DA	Var	Worst	Best	AD Calls	OF Calls	
plain DGCM	7	40.9999	398.320	-7748.41	-	40010	0	
P-EC-DGCM	cbest	23	29.9953	414.123	-7774.30	-	40187	321
	gbest	17	33.9790	481.578	-7748.41	-	40188	323
	roulette	9	41.2626	527.548	-7720.14	-	40211	365
PD-EC-DGCM	cbest	84	4.6324	113.765	-7794.10	-	40010	0
	gbest	80	6.2202	169.151	-7776.69	-	40010	0
	roulette	41	16.6818	305.296	-7748.41	-	41020	0
plain IDM	87	3.6755	90.411	-7804.96	-	294283	16284	
P-EC-DM	cbest	89	3.1101	78.260	-7804.96	-	336018	17572
	gbest	94	1.6964	45.085	-7804.96	-	285685	15485
	roulette	94	1.6964	45.085	-7804.96	-	285081	15302
PD-EC-DM	pbest	100	-	-	-	-	202428	11134
	cbest	100	-	-	-	-	159471	8616
	gbest	100	-	-	-	-	105083	6080
	roulette	100	-	-	-	-	121994	6990
plain DNNDM (C)	4	61.0706	778.923	-7691.87	-	40607	1365	
P-EC-DNNDM (C)	cbest	87	3.6755	90.411	-7804.96	-	40145	248
	gbest	80	5.9374	148.606	-7776.69	-	40118	194
	roulette	96	1.1309	30.697	-7804.96	-	40147	249
PD-EC-DNNDM (C)	cbest	81	5.3720	123.026	-7804.96	-	40145	247
	gbest	80	5.6547	127.902	-7804.96	-	40117	192
	roulette	96	1.1309	30.697	-7804.96	-	40142	239
plain DNNDM (A)	0	94.3873	1249.06	-7635.32	-7804.96	40667	1571	
P-EC-DNNDM (A)	cbest	0	89.3587	1003.47	-7635.32	-7804.96	40668	1562
	gbest	0	88.0058	1021.61	-7663.59	-7804.96	40663	1548
	roulette	1	90.4750	1454.88	-7635.32	-	40671	1580
PD-EC-DNNDM (A)	cbest	76	8.4820	263.80	-7776.69	-	40142	226
	gbest	78	9.3553	482.58	-7691.87	-	40170	275
	roulette	92	2.2619	58.83	-7804.96	-	40168	268
plain DHA	8	44.0031	563.918	-7720.14	-	269383	48992	
P-EC-DHA	cbest	8	43.3483	545.157	-7747.78	-	285956	52043
	gbest	12	39.8443	586.742	-7748.41	-	260670	47648
	roulette	11	45.0566	660.689	-7746.67	-	288645	52114
PD-EC-DHA	cbest	6	43.8732	514.565	-7720.14	-	287481	51862
	gbest	10	40.6270	504.191	-7747.17	-	269925	49331
	roulette	7	44.1999	420.729	-7747.59	-	300711	54326

Table 4.12 Results for Prob.5 (Shifted 2^N -minima, $N = 100$)

Red cells denote the best result of all methods.

Sky blue cells denote the best result of methods which are driven by same model.

Blue cells denote the second best result of methods which are driven by same model.

Method	CR	DA	Var	Worst	Best	AD Calls	OF Calls	
plain DGCM	0	2827.34	2.068e-23	-5005.89	-5005.89	40010	0	
P-EC-DGCM	cbest	0	1401.23	2.575e+04	-5938.91	-6758.84	40120	395
	gbest	0	1325.74	1.603e+05	-5345.17	-7182.94	40118	389
	roulette	0	1428.94	3.638e+04	-5769.27	-6815.39	40124	411
PD-EC-DGCM	cbest	3	145.61	6.737e+03	-7465.68	-	40010	0
	gbest	0	1007.10	4.220e+04	-6306.47	-7324.31	40010	0
	roulette	0	215.73	6.358e+03	-7352.58	-7776.69	40967	0
plain IDM	0	45.90	9.622e-02	-7786.10	-7787.41	579615	0	
P-EC-DM	cbest	0	903.90	1.999e+04	-6589.20	-7211.22	1010830	30045
	gbest	0	851.40	9.700e+04	-6089.94	-7578.77	1012360	28323
	roulette	0	1158.96	5.033e+04	-6173.02	-7154.67	1012380	29975
PD-EC-DM	pbest	100	-	-	-	-	31098	61
	cbest	100	-	-	-	-	17641	430
	gbest	84	13.29	2.022e+03	-7550.50	-	86575	555
	roulette	100	-	-	-	-	24640	590
plain DNDM (C)	100	-	-	-	-	40131	328	
P-EC-DNDM (C)	cbest	0	1161.19	6718.93	-6504.38	-6871.94	40149	376
	gbest	0	1163.17	6475.36	-6504.38	-6871.94	40145	363
	roulette	0	1146.49	5953.44	-6504.38	-6900.21	40152	392
PD-EC-DNDM (C)	cbest	8	134.30	7935.92	-7409.13	-	40085	181
	gbest	15	80.30	8133.29	-7267.76	-	40080	167
	roulette	0	998.34	17629.60	-6532.65	-7296.04	40193	457
plain DNDM (A)	0	1908.17	5.972e+05	-5005.89	-6871.94	40062	82	
P-EC-DNDM (A)	cbest	0	1840.88	4.628e+05	-5005.89	-6871.94	40069	96
	gbest	0	1801.58	3.186e+04	-5684.45	-6815.39	40114	188
	roulette	0	1882.73	5.530e+04	-5599.63	-6730.57	40100	159
PD-EC-DNDM (A)	cbest	0	1406.32	3.637e+04	-5825.82	-6815.39	40218	494
	gbest	0	450.11	1.665e+04	-7013.30	-7635.32	40220	486
	roulette	0	1765.11	9.197e+03	-5797.55	-6278.19	40147	246
plain DHA	0	914.928	1.507e+04	-6702.30	-7267.76	258012	6134	
P-EC-DHA	cbest	0	282.452	9.776e+03	-7296.04	-7776.69	201871	5483
	gbest	0	221.946	1.668e+04	-7239.49	-7804.96	19197	1095
	roulette	0	182.929	4.995e+03	-7437.41	-7776.69	469389	13461
PD-EC-DHA	cbest	0	296.023	1.213e+04	-7239.49	-7748.41	165158	4543
	gbest	0	238.628	1.898e+04	-7098.12	-7804.96	19963	1159
	roulette	0	207.244	6.204e+03	-7380.86	-7776.69	461839	13224

Table 4.13 Results for Prob.6 (Modified Rastrigin, $N = 100$)

Red cells denote the best result of all methods.

Sky blue cells denote the best result of methods which are driven by same model.

Blue cells denote the second best result of methods which are driven by same model.

Method	CR	DA	Var	Worst	Best	AD Calls	OF Calls	
plain DGCM	7	10.5764	267.892	89.5463	-	40010	0	
P-EC-DGCM	cbest	50	0.7960	2.138	12.9345	-	40081	302
	gbest	19	1.4626	1.930	9.9496	-	40083	310
	roulette	46	0.8059	0.905	3.9798	-	40092	355
PD-EC-DGCM	cbest	93	0.0696	0.064	0.9950	-	40010	0
	gbest	9	3.1043	7.787	18.9042	-	40010	0
	roulette	99	0.0099	0.010	0.9950	-	40993	0
plain IDM	100	-	-	-	-	418587	34	
P-EC-DM	cbest	100	-	-	-	-	140718	2611
	gbest	100	-	-	-	-	93537	1723
	roulette	100	-	-	-	-	160091	3327
PD-EC-DM	pbest	100	-	-	-	-	146886	1856
	cbest	100	-	-	-	-	56456	1132
	gbest	100	-	-	-	-	160748	2959
	roulette	100	-	-	-	-	61539	1659
plain DNNDM (C)	0	439.620	5034.63	585.032	238.788	40253	886	
P-EC-DNNDM (C)	cbest	0	37.540	23.91	50.743	25.869	40079	231
	gbest	0	59.290	86.58	83.576	42.783	40080	235
	roulette	0	41.440	29.92	61.687	30.844	40077	226
PD-EC-DNNDM (C)	cbest	0	27.222	41.17	44.773	14.924	40096	262
	gbest	0	24.765	54.19	48.753	11.940	40103	269
	roulette	0	32.177	12.02	38.803	23.879	40112	347
plain DNNDM (A)	98	0.0199	0.0194	0.9950	-	40142	605	
P-EC-DNNDM (A)	cbest	77	0.2885	0.3424	2.9849	-	40131	550
	gbest	30	1.2039	1.2136	5.9698	-	40131	550
	roulette	30	2.6267	6.8211	9.9496	-	40131	552
PD-EC-DNNDM (A)	cbest	63	0.5671	0.8762	3.9798	-	40154	615
	gbest	7	3.4127	5.7863	11.9395	-	40152	598
	roulette	87	0.2388	0.6557	5.9698	-	40146	602
plain DHA	0	598.185	4097.42	760.141	442.754	276417	19707	
P-EC-DHA	cbest	0	148.527	656.61	264.658	89.546	266475	7894
	gbest	0	213.388	1120.85	299.482	134.319	32344	1964
	roulette	0	226.999	890.57	300.477	146.259	318676	8342
PD-EC-DHA	cbest	0	151.811	534.08	221.875	98.501	189493	6103
	gbest	0	213.627	974.75	297.492	139.294	33526	2024
	roulette	0	229.079	1095.40	322.366	145.264	286145	7816

4.4.4 まとめと結合構造の選択

本章では、非線形力学系を用いた手法の中から、離散化勾配系カオスモデル、水抜き法、離散化非線形散逸系モデル、離散化高次元アルゴリズムに注目し、これらによって駆動され自律的大域的探索を行う複数の探索個体による探索モデルを考え、さらに、これらの個体群をエリート移流型結合させることで、目的関数値の小さいエリート個体へ各個体が同調していくエリート結合型最適化計算モデルを提案し、その体系化を行った。複数の100変数多峰性関数への適用シミュレーションを通して、問題の構造による悪影響、単点のモデルがそもそも得意な場合の悪影響なども散見されるが、総じてエリート結合の効果によって大域的最適化性能が改善され、高い確率での大域的最適解への収束を確認した。ここで、各手法の比較を行うために、総計算量がほぼ等しくなるEC-DGCM, EC-DNDM (C), EC-DNDM (A) のそれぞれで最も良い結果を得た場合と、単点のPD-EC-DMのpbest型であるTables 2.9 ~ 2.14 (p.46, p.47) のIDMwSH (計算量が比較的近い)ため、EC-DHAの中で最も良い結果を得た場合を1つの表にまとめたものをTables 4.14 ~ 4.19に示す。これら表の中で、[c]はcbest型、[g]はgbest型、[r]はルーレット選択型を表し、[all]は、cbest型、gbest型、ルーレット選択型のすべてで同様の結果であることを示す。また、赤色のセルは全手法の中で最も良かった項目を示し、水色のセルはEC-DGCM, EC-DNDM (C), EC-DNDM (A)の中で最も良かった項目を示す。Tables 4.14 ~ 4.19から、PD-EC-DMのpbest型と比較してもエリート結合型非線形力学系モデルが遜色のない結果を得ているといえる。また、Tables 4.14 ~ 4.19と前項までの考察から、全体の結果として

- 駆動モデルである非線形力学系モデルとしては、慣性質量を含むパラメータ調節がうまく行く場合は、DNDM (C)を選択し、それ以外では、DGCMを選択すること
- 結合構造として「PD型結合」を選択すること (EC-DHAを除いて)
- 結合構造としてEC-DHAでは「P型結合」を選択すること
- 全体を考慮したエリート個体の選択としては、安定的に性能を発揮する「cbest」か、適用が妥当な場合には優れた性能を発揮する「ルーレット選択型個体」のいずれかを用いること

が推奨される。前項で述べたように、適用対象となる問題・駆動モデルとなる非線形力学系モデルの選択によっては、推奨した組合せより優れた性能を発揮する組合せが存在することも付記しておく。

Table 4.14 Best Results for Prob.1 (Modified Levy No.5, $N = 100$).
Red cells denote the best result of all methods.

	CR	DA	Var	Worst	Best
P-EC-DGCM [all]	100	-	-	-	-
PD-EC-DGCM [all]	100	-	-	-	-
PD-EC-DNDM (C) [r]	98	0.001	1.858e-05	0.031	-
P-EC-DNDM (A) [all]	100	-	-	-	-
PD-EC-DNDM (A) [all]	100	-	-	-	-
PD-EC-DM (pbest)	100	-	-	-	-
P-EC-DHA [r]	100	-	-	-	-

Table 4.15 Best Results for Prob.2 (Modified Griewank, $N = 100$)

	CR	DA	Var	Worst	Best
PD-EC-DGCM [r]	0	0.0020	8.483e-07	0.0045	0.0002
PD-EC-DNDM (C) [c,r]	100	-	-	-	-
P-EC-DNDM (A) [all]	100	-	-	-	-
PD-EC-DNDM (A) [r]	100	-	-	-	-
PD-EC-DM (pbest)	94	2.702e-05	1.022e-08	0.0005	-
P-EC-DHA [r]	100	-	-	-	-

 Table 4.16 Best Results for Prob.3 (Modified Rosenbrock's Saddle, $N = 100$)

	CR	DA	Var	Worst	Best
plain DGCM	0	5.181	54.43	73.582	0.5021
P-EC-DNDM (C) [r]	1	25.590	1153.99	135.146	-
plain DNDM (A)	0	91.285	1343.75	144.375	4.8082
PD-EC-DM (pbest)	94	2.230	210.08	103.916	-
P-EC-DHA [g]	0	220.640	2752.77	340.464	31.9818

 Table 4.17 Best Results for Prob.4 (Modified 2^N -minima, $N = 100$)

	CR	DA	Var	Worst	Best
PD-EC-DGCM [c]	84	4.6324	113.765	-7794.10	-
P-EC-DNDM (C) [r]	96	1.1309	30.697	-7804.96	-
PD-EC-DNDM (C) [r]	92	2.2619	58.835	-7804.96	-
PD-EC-DNDM (A) [r]	92	2.2619	58.835	-7804.96	-
PD-EC-DM (pbest)	93	1.9791	52.0401	-7804.96	-
P-EC-DHA [g]	12	39.8443	586.742	-7748.41	-

 Table 4.18 Best Results for Prob.5 (Shifted 2^N -minima, $N = 100$)

	CR	DA	Var	Worst	Best
PD-EC-DGCM [c]	3	145.608	6736.8	-7465.68	-
plain DNDM (C)	100	-	-	-	-
PD-EC-DNDM (A) [g]	0	450.113	16654.1	-7013.30	-7635.32
PD-EC-DM (pbest)	100	-	-	-	-
P-EC-DHA [r]	0	182.929	4995.5	-7437.41	-7776.69

 Table 4.19 Best Results for Prob.6 (Modified Rastrigin, $N = 100$)

	CR	DA	Var	Worst	Best
PD-EC-DGCM [r]	99	0.010	0.010	0.995	-
PD-EC-DNDM (C) [g]	0	24.765	54.187	48.753	11.9395
plain DNDM (A)	98	0.020	0.019	0.995	-
PD-EC-DM (pbest)	100	-	-	-	-
P-EC-DHA [g]	0	148.527	656.606	264.658	89.5462

※ Red cells denote the best result of all methods.

Sky blue cells denote the best result among EC-DGCM, EC-DNDM (C) and EC-DNDM (A)

第5章 おわりに

5.1 提案手法の総合評価

本論文では、2章において、離散化勾配系カオスモデルについて、その安定性解析から得られた知見をもとに「水抜き法」を提案し、さらに、自身の最良点とのPD結合型モデルによる改良手法を提案した。前章では、各種非線形力学系モデルを駆動モデルとしたエリート結合型非線形力学系モデルを体系的に提案した。前章までに、これら提案モデルの有効性を100変数多峰性関数に対する適用を通して確認したが、本節では、さらに以下にあげる3つの他の勾配情報を用いた大域的最適化手法を同様のベンチマーク問題に適用し、その結果との比較を通して、提案モデルの有効性を再評価することにする。

- *TRUST (Terminal Repeller Unconstrained Subenergy Tunneling)*^[75]
トンネリングアルゴリズムと関数変換手法のハイブリッド型手法である。この手法における関数変換は、すでに発見した局所解より目的関数値が大きい領域を平らにする変換であり、トンネリングの過程において用いられる。この関数変換は、水抜き法の貯水変換と逆の概念に基づいている。
- *HDA (Hybrid Descent Algorithm)*^[76]
SAと最急降下法のハイブリッド型手法である。この手法では、SAによる確率的な大域的探索を、すでに発見した解より目的関数値が小さい新たな解を発見するまで実行した後、最急降下法による局所的探索へ切り替え、局所解を発見後、SAに切り替えるというプロセスを繰り返す手法である。
- *GRPSO (hybrid GRdient and Particle Swarm Optimization)*^[77]
最急降下法とPSOのハイブリッド手法である。この手法では、PSOを大域的探索段階で利用し、最急降下法を局所探索段階で利用する。文献[77]では、PSOについて、Repulsion Technique^[48]が用いられていたが、本論文で用いる付録A.2節のベンチマーク問題においては、このRepulsion Techniqueが有効に機能しないため、本節での比較ではRepulsion Techniqueを用いずに適用する。

これら比較手法のPseudo Codeを付録C章のC.10～C.12節に示す。比較手法のパラメータは、各文献[75, 76, 77]の設定を参考に、問題ごとに最高の性能が発揮されるように試行錯誤的に設定した。設定したパラメータをTables 5.1～5.3に示す。ここで、Tables 5.1～5.3の局所探索に用いる最急降下法の離散化幅 ΔT については、軌道がカオス的にならないような設定を用いている。計算終了条件については、提案手法に対して総計算量(B.1)式(p.122)の C がフェアになるように設定すべきである。総計算量 C については、提案手法の中で本節の比較に用いる「単点の探索履歴付水抜き法 ($P = 1$ としたPD-EC-DMの

Table 5.1 Parameter Settings of TRUST

Problem	ϵ	ϵ_x	a	ρ_{\max}	c	ΔT
Prob.1	10^{-4}	10^{-4}	2.0	10.0	1.0	10^{-5}
Prob.2	10^{-3}	10^{-2}	2.0	10.0	10.0	1.0
Prob.3	10^{-4}	10^{-4}	2.0	10.0	1.0	10^{-3}
Prob.4	10^{-3}	10^{-4}	2.0	1.0	1.0	10^{-3}
Prob.5	10^{-3}	10^{-4}	2.0	10.0	1.0	10^{-3}
Prob.6	10^{-3}	10^{-3}	2.0	10.0	1.0	10^{-3}

Table 5.2 Parameter Settings of HDA

Problem	δ	N_c	N_p	α	T_{\max}	ΔT	ϵ_g
Prob.1	10^{-6}	100	10	0.9	0.7	0.02	10^{-4}
Prob.2	10^{-6}	100	10	0.9	0.7	1.0	10^{-4}
Prob.3	10^{-6}	100	10	0.9	0.7	0.002	10^{-4}
Prob.4	10^{-6}	100	10	0.9	0.7	0.02	10^{-4}
Prob.5	10^{-6}	100	10	0.9	0.7	0.02	10^{-4}
Prob.6	10^{-6}	100	10	0.9	0.7	0.02	10^{-4}

Table 5.3 Parameter Settings of GRPSO

Problem	w	c_1	c_2	P	T_{ps0}	ΔT	ϵ_g
Prob.1	0.7	1.6	1.6	10	2000	0.02	10^{-4}
Prob.2	0.7	1.6	1.6	10	2000	1.0	10^{-4}
Prob.3	0.7	1.6	1.6	10	2000	0.002	10^{-4}
Prob.4	0.7	1.6	1.6	10	2000	0.02	10^{-4}
Prob.5	0.7	1.6	1.6	10	2000	0.02	10^{-4}
Prob.6	0.7	1.6	1.6	10	2000	0.02	10^{-4}

pbest 型¹⁾」と「エリート結合型非線形力学系モデル (HDA を除く)」の総計算量が大きく変わらないことに注目して、簡単のためにエリート結合型非線形力学系モデルの総計算量 $C = 40000 (= 10 (= P) \times 4000 (= k_{\max}))$ とし、比較手法の終了条件は、総計算量が 40000 に達することとした。シミュレーションは、初期点 \mathbf{x} をランダムにとり直しながら各 100 回試行し、結果を p.44 の指標を用いて評価した。結果を Tables 5.4 ~ 5.9 にそれぞれ示す。結果の中で、DM となっている行は、単点の探索履歴付水抜き法の結果であり、EC-NDM となっている行は、EC-DGCM, EC-DNDM (C), EC-DNDM (A) の中で最も良い結果を得た場合、すなわち、前章の Tables 4.14 ~ 4.19 の中で赤字もしくは水色となっている場合である。結果の中で自明な結果となる場合、すなわち、CR が 100% に対する DA, Var, Worst, CR が 1% 以上に対する Best の場合については、“-”と表記している。結果の中で、赤字となっている項目は、全手法の中で最も成績が良かった項目を示す。また、Method 列の記載において赤字となっている手法は、全手法の中で最も成績が良かった手法である。ここ

¹⁾前章で示したように、 $P = 5$ とした場合を用いれば、すべての問題で 100% の収束率となるが、計算量の面で他のモデルと大きく離れてしまうため、本節での比較には用いない

で、手法間比較における成績は、まず、CRが良い順で評価し、CRが同一の場合はDAが良い順で評価している。結果をみると

1. すべての結果において、提案手法のDMかEC-NDMが、最も良い結果を収めていること
2. Table 5.4のHDA, Table 5.5のHDA, Table 5.6のTRUST, Table 5.8のHDAを除けば、提案手法は他手法と比較して極めて優れた結果を収めていること

が確認でき、提案手法は、他手法と比較しても優れた大域的最適化性能を有しているといえる。

Table 5.4 Results for Prob.1 (Modified Levy No.5, $N = 100$).

Red cells denote the best result of all methods.

	CR	DA	Var	Worst	Best	AD Calls	OF Calls
DM	100	-	-	-	-	1866	0
EC-NDM	100	-	-	-	-	40021	0
TRUST	0	149.441	346.58	203.583	109.186	5861	631581
HDA	100	-	-	-	-	708	785842
GRPSO	0	54.960	414.66	162.846	28.983	339	733727

Table 5.5 Results for Prob.2 (Modified Griewank, $N = 100$).

Red cells denote the best result of all methods.

	CR	DA	Var	Worst	Best	AD Calls	OF Calls
DM	94	2.702e-05	1.022e-08	0.0005	-	63902	2734
EC-NDM	100	-	-	-	-	41118	1206
TRUST	0	1.0738	5.701e-05	1.0935	1.0586	34955	88289
HDA	2	0.0044	1.156e-05	0.0159	-	1211	678810
GRPSO	0	0.6080	7.193e-02	0.9959	0.0384	1748	669411

Table 5.6 Results for Prob.3 (Modified Rosenbrock's Saddle, $N = 100$).

Red cells denote the best result of all methods.

	CR	DA	Var	Worst	Best	AD Calls	OF Calls
DM	94	2.230	210.08	103.916	-	57288	6188
EC-NDM	1	25.590	1153.99	135.146	-	41121	5225
TRUST	4	1.403	3.62	3.995	-	13192	294889
HDA	0	41.341	3982.47	290.025	0.0028	2132	416566
GRPSO	0	331.148	1994.45	449.064	203.681	101	438895

Table 5.7 Results for Prob.4 (Modified 2^N -minima, $N = 100$).

Red cells denote the best result of all methods.

	CR	DA	Var	Worst	Best	AD Calls	OF Calls
DM	93	1.9791	52.0401	-7804.96	-	64076	2935
EC-NDM	96	1.1309	30.6965	-7804.96	-	40142	239
TRUST	0	512.815	11520.8	-6979.15	-7546.64	398	554430
HDA	0	191.130	5135.2	-7435.10	-7776.69	694	550293
GRPSO	0	194.709	6689.2	-7437.41	-7804.96	58	559194

Table 5.8 Results for Prob.5 (Shifted 2^N -minima, $N = 100$).

Red cells denote the best result of all methods.

	CR	DA	Var	Worst	Best	AD Calls	OF Calls
DM	100	-	-	-	-	7400	8
EC-NDM	100	-	-	-	-	40131	328
TRUST	35	47.07	2680.2	-7607.05	-	3342	531537
HDA	100	-	-	-	-	763	568939
GRPSO	0	1009.36	12638.3	-6560.93	-7182.94	44	579370

Table 5.9 Results for Prob.6 (Modified Rastrigin, $N = 100$).

Red cells denote the best result of all methods.

	CR	DA	Var	Worst	Best	AD Calls	OF Calls
DM	100	-	-	-	-	45049	691
EC-NDM	99	0.0099	0.0098	0.9950	-	40993	0
TRUST	0	1298.30	21200.9	1637.44	971.939	85	798303
HDA	0	1211.31	24914.6	1537.19	656.667	1621	767636
GRPSO	0	670.00	23737.7	1303.37	454.694	50	799012

5.2 まとめと今後の課題

本論文では「非線形力学系モデルを基本的駆動モデルとして、そこにメタヒューリスティックス (MH) の優れた探索戦略を導入した新しい最適化モデル」の提案を行った。

第2章では、単点の非線形力学系モデルの中から、離散化勾配系カオスモデル、非線形散逸系モデル、高次元アルゴリズムに注目し、とくに、上下制限約付最適化問題に対する離散時間モデルについて、その計算モデルの導出と計算特性について議論した。そして、計算特性についての議論をもとに、MH で用いられる優れた探索戦略を考慮した改良モデルを提案した。具体的には、離散化勾配系カオスモデルについては、その安定性解析から、内部状態表現型と変数変換型の制約閉じ込めモデルの問題点について指摘し、この問題点を持たない制約領域トラス化型モデルの有効性を指摘した。さらに、この考察をもとに、目的関数値が小さい領域ほどカオス的探索点に対して安定で収束しやすくなる目的関数変換法を考え、この変換法を利用した最適化手法「水抜き法」を提案した。非線形散逸系モデルについては、そのオイラー差分化による離散化モデルを導出した上で、非線形散逸項の選択と慣性質量調整による探索特性の調整について考察した。高次元アルゴリズムについては、運動領域の狭め方に対する問題点を指摘し、これに対し探索履歴を利用した改良手法を提案した。さらにその離散化モデルを Symplectic Euler 公式を用いて導出することで、保存力学系としての性質を保ちながら、運動領域を戦略的に狭めていくことができる離散化モデルを導出した。

第3章では、第4章の「エリート結合型非線形力学系モデル」の提案に対する基礎的検討として、結合型最適化計算モデルへの適用を中心に、結合非線形振動子系に対する体系的な考察を行った。具体的には、まず、一般の結合振動子系についての結合構造の種類について整理した上で、この非線形結合振動子系の同調現象についての考察を行った。とくに、本論文で扱う最適化モデルの多くが離散時間系のカオス軌道を利用したモデルであることに注目し、離散時間系のカオス軌道に対しても安定的に同調現象を発現する PD 型結合モデルの導出を行い、これを多点型離散化勾配系カオスモデルに適用することで、カオス的探索軌道を有する最適化モデルにおける同調現象発現について確認した。さらに、従来型の P 型結合モデルと PD 型結合モデルについて、2 個体 1 変数カオス結合系での同調現象発現に対する安定性解析を行い、PD 型結合モデルを用いて結合係数を大きくとれば、カオス結合系でも安定的に同調現象を発現することを確認した。また、MH の中から PSO モデルについて取り上げ、その計算特性についての考察から、MH が一般的に抱える、探索の駆動力が個体間の情報交換のみによるために生じる問題点について指摘した。

第4章では、非線形力学系を用いた手法の中から、離散化勾配系カオスモデル、水抜き法、離散化非線形散逸系モデル、離散化高次元アルゴリズムに注目し、これらによって駆動され自律的大域的探索を行う複数の探索個体による探索モデルを考え、さらに、これらの個体群を P 型・PD 型のエリート移流型結合させることで、目的関数値の小さいエリート個体へ各個体が同調していく「エリート結合型非線形力学系モデル」の提案と体系化を行った。本提案モデルは、2 章で指摘した、単点の非線形力学系モデルが抱える MH の優れた探索戦略の付与によって解消したモデルであると同時に、3 章で指摘した MH の抱える問題点を、各個体が非線形力学系モデルを駆動力とした自律的大域的探索を実行することで解消しているモデルであるといえる。

本論文で提案した手法の中で、優れた大域的最適化性能を確認した「水抜き法」は、こ

れまでヒューリスティックスの枠組みを出なかつた離散化勾配系カオスモデルに対して、探索軌道と収束解のメカニズムを理論的に解析した結果をもとに、MHの探索戦略の1つである目的関数値を考慮した集中化戦略を与えた手法であり、ヒューリスティックスの1つに過ぎなかつた手法を確定論的手法としての特長を生かした手法へ発展させた手法であった。また、同様に優れた大域的最適化性能を確認した「エリート結合型非線形力学系モデル」は、各個体が、非線形力学系モデルによる自律運動を駆動力に、多様性を失わない大域的探索を実行しつつ、エリート個体へ同調していくことで、単なる探索の多重化だけでなく目的関数値を考慮した探索戦略をより付加したモデルである。これら2つのモデルは、第1章で指摘した、非線形力学系モデルとMHのメリットを生かしながら互いのデメリットを補ったモデルであり、これまでの大域的最適化手法と比較して優れた性能が期待できるモデルである。実際、勾配情報を利用した他手法との比較においても優れた大域的最適化性能を確認した。

最後に、課題と今後の展望について述べる。まず、本論文で提案した最適化モデルは、最も単純な連続微分可能な上下制限約付最適化問題というクラスにしか適用できず、より広いクラスへの適用が課題となる。上下制限約以外の制約条件つき問題への拡張については、最も単純にペナルティ関数法の適用を考えることも可能ではあるが、常に制約条件を侵害しない手法として、線形等式制約条件付き問題に対する勾配射影法^[78]や、不等式・線形等式制約条件付き問題に対する可変計量勾配射影法^[45]とそれと等価な変数変換モデル^[52, 79, 80]や、制約境界面における弾性衝突を用いた手法^[54]などの適用も考えられる。また、最適化の変数に連続値をとらない離散変数最適化に対しては、2次緩和問題の適用^[81, 82, 83]、混合整数最適化に対しては、周期関数を用いたペナルティ関数を利用した手法^[84]の応用が考えられる。つぎに、本論文では、とくに離散化勾配系カオスモデルについて、その安定性解析を通して得られる最適解の特性について議論したが、その結合系モデルについての安定性解析は行っていない。これを含めて、提案した結合系モデルの理論的解析も今後の課題である。さらに、本論文で提案したエリート結合型非線形力学系モデルで提示したスキーム、すなわち、複数の自律的探索個体がエリート個体に同調していくことで大域的最適化を達成するスキームは、駆動モデルを非線形力学系モデルとしなくても十分に応用可能なものと考えられる。たとえば、駆動モデルとしてSAなどを用いれば、勾配情報に依らない最適化モデルを構築することができる。また、PD結合型モデルは、そのモデル式(4.18)式(p.69)からわかるように、 p 番目の探索個体による軌道とエリート個体との合議・協調型最適化モデルともみなすことができる。そこで、探索個体ごとに別の目的関数を対象としたモデルを考えれば、多目的最適化への応用も予想される。今後の展望として、これらエリート結合型最適化モデルのスキームを応用した新しい最適化手法の構築も図っていきたい。

謝辞

本研究は、筆者が、慶應義塾大学大学院理工学研究科基礎理工学専攻博士課程在学中、慶應義塾大学物理情報工学科 相吉英太郎 教授の御指導のもとに行ったものである。この間、および、同学理工学部物理情報工学科在学中、同学大学院理工学研究科修士課程在学中の5年間にわたり、御指導を賜りました相吉英太郎 教授に謹んで感謝の意を表します。

また、本論文の副査として、貴重かつ有益なご指摘を賜った、慶應義塾大学理工学部物理情報工学科 足立修一 教授、慶應義塾大学 志水清孝 名誉教授、首都大学東京大学院理工学研究科 安田恵一郎 教授、各先生に厚く謝意を表します。先生方のご指導・ご指摘により、本論文の意義がより明確にかつ高いものとなりました。重ねて感謝申し上げます。

本研究の実施にあたっては、2005年4月～2006年3月に、慶應義塾先端科学支援センター研究助成金、慶應義塾大学大学院奨学金、慶應義塾大学理工学部物理情報工学科リサーチアシスタント (RA) への任用に伴う支援、2006年4月～2007年3月に、日本学術振興会特別研究員 (DC2) への任用に伴う支援、平成18年度日本学術振興会科学研究費補助金 (特別研究員奨励費, No.18-5977) の支援を賜りました。厚く謝意を表します。

また、本論文に関する成果の公表にあたって共著者となっている方をはじめとして、本研究を進めるにあたって貴重な議論、支援を賜った慶應義塾大学理工学部相吉研究室の現所属学生、および、卒業された後輩、同期、先輩の皆様に厚く御礼を申し上げます。

2007年2月

参考文献

- [1] 関根 泰次, 横山 明彦, 安田 恵一郎, 林 康弘, 田辺 隆也, 岡本 浩, 多田 泰之: “電力系統の最適潮流計算”, 日本電気協会, Japan (2002).
- [2] 最適化手法の新展開とその産業応用調査専門委員会: “電気学会技術報告 第983号最適化手法の新展開とその産業応用”, 電気学会, Japan (2004).
- [3] 福山 良和: “メタヒューリスティック手法の電力・エネルギー分野への適用例”, 電学論 B, Vol.124, No.5, pp.679–682 (2004).
- [4] 三井 和男, 大崎 純, 大森 博司, 田川 浩, 本間 俊雄: “発見的最適化手法による構造のフォルムとシステム”, コロナ社, Japan (2004).
- [5] 枇々木 規雄, 田辺 隆人: “ポートフォリオ最適化と数理計画法”, 朝倉書店, Japan (2005).
- [6] 電気学会 GA・ニューロを用いた学習法とその応用調査専門委員会編: “学習とそのアルゴリズム: ニューラルネットワーク, 遺伝アルゴリズム, 強化学習”, 森北出版, Japan (2002).
- [7] 志水 清孝, 相吉 英太郎: “数理計画法”, 昭晃堂, Japan (1984).
- [8] 相吉 英太郎, 志水 清孝: “数理計画法演習”, 朝倉書店, Japan (1985).
- [9] 田村 明久, 村松 正和: “最適化法”, 共立出版, Japan (2002).
- [10] W. H. Press, W. T. Vetterling, S. A. Teukolsky, B. P. Flannery: “ニューメリカルレシピ・イン・シー 日本語版- C言語による数値計算のレシピ”, 技術評論社, Japan (1993).
- [11] J. A. Nelder, R. Mead: “A Simplex Method for Function Minimization”, *Comput. J.*, Vol.7, No.4, pp.308–313 (1965).
- [12] S. Sahni: “Computationally Related Problems”, *SIAM Journal on Computing*, Vol.3, No.4, pp.262–279 (1974).
- [13] P. M. Pardalos, S. A. Vavasis: “Quadratic Programming with One Negative Eigenvalue is NP-Hard”, *J. Global Optimiz.*, Vol.1, No.1, pp.15–22 (1991).
- [14] R. Horst, P. M. Pardalos, N. V. Thoai: “Introduction to Global Optimization 2nd Edition”, *Kluwer Academic Publishers*, Netherlands (2001).
- [15] 堀江 亮太, 相吉 英太郎: “力学モデルによる大域的最適化手法-非線形ダイナミクスと非線形最適化”, システム/制御/情報, Vol.45, No.4, pp.205–211 (2001).

- [16] J. J. Hopfield, D. W. Tank: ““Neural” Computation of Decisions in Optimization Problems”, *Biol. Cybern.*, Vol.52, No.3, pp.141–152 (1985).
- [17] S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt, M. P. Vecchi: “Optimization by Simulated Annealing”, *Science*, Vol.220, No.4598, pp.671–680 (1983).
- [18] K. Aihara, T. Takabe, M. Toyoda: “Chaotic Neural Networks”, *Phys. Lett. A*, Vol.144, No.6-7, pp.333–340 (1990).
- [19] L. Chen, K. Aihara: “Chaotic Simulated Annealing by a Neural Network Model with Transient Chaos”, *Neural Networks*, Vol.8, No.6, pp.915–930 (1995).
- [20] 徳田 功, 小野寺 浩二, 徳永 隆治, 合原 一幸, 長島 知正: “最適化問題を解くカオスの力学系の大域的分岐シナリオとその最適化手法の検討”, *信学論 (A)*, Vol.J80-A, No.6, pp.936–948 (1997).
- [21] 増田 和明, 相吉 英太郎: “離散化カオス写像と悪化受理法によるハイブリッド型大域的最適化手法”, *電学論 C*, Vol.122, No.5, pp.892–899 (2002).
- [22] K. Tatsumi, Y. Yamamoto, T. Tanino: “A New Chaos Generator Based on the Affine Scaling Method for Global Optimization Problems”, *Pacific Journal of Optimization*, Vol.2, No.2, pp.261–276 (2006).
- [23] 谷 敦: “カオスの最急降下法を適用したニューラルネットにおける学習および記憶想起の動特性について”, *信学論 (A)*, Vol.J74-A, No.8, pp.1208–1215 (1991).
- [24] 藤田 得光, 安田 恵一郎, 横山 隆一: “散逸系カオスを用いた大域的最適化手法”, *信学論 (A)*, Vol.J77-A, No.6, pp.881–889 (1994).
- [25] 新上 和正: “高次元アルゴリズム –最適化問題を解く 1 つの方法–”, *日本ファジィ学会誌*, Vol.11, No.3, pp.382–395 (1999).
- [26] H. D. Chiang, C. C. Chu: “A Symetric Search Method for Obtaining Multiple Local Optimal Solutions of Nonlinear Programming Problems”, *IEEE Trans. Circuits and Systems I*, Vol.43, No.2, pp.99–109 (1996).
- [27] 室田 一雄 編: “離散構造とアルゴリズム IV”, 近代科学社, Japan (1995).
- [28] F. Glover, M. Laguna: “Tabu Search”, *Kluwer Academic Publishers*, Netherlands (1997).
- [29] 安田 恵一郎: “進化論的計算手法とメタヒューリスティクス”, *電学論 C*, Vol.122-C, No.3, pp.320–323 (2002).
- [30] D. E. Goldberg: “Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning”, *Addison-Wesley* (1989).
- [31] J. Kennedy, R. C. Eberhart: “Particle Swarm Optimization”, *Proc. of IEEE Int. Conf. Neural Networks*, pp.1942–1948 (1995).

- [32] J. Kennedy, R. C. Eberhart, Y. Shi: “Swarm Intelligence”, *Morgan Kaufmann Publishers*, USA (2001).
- [33] M. Clerc: “Particle Swarm Optimization”, *ISTE*, UK (2006).
- [34] R. Stone, K. Price: “Differential Evolution – A Simple and Efficient Heuristic for Global Optimization Over Continuous Spaces”, *J. Global Optimiz.*, Vol.11, No.4, pp.341–359 (1997).
- [35] K. Yasuda, N. Iwasaki: “Adaptive Particle Swarm Optimization using Velocity Information of Swarm”, *Proc. of IEEE Int. Conf. on Systems, Man, and Cybernetics, 2004*, pp.3475–3481 (2004).
- [36] 佐久間 淳, 小林 重信: “実数値 GA による非線形関数の最適化: 探索空間の高次元化における問題点とその解決法”, *Proc. of MYCOM2001 オンライン資料集* (2001).
- [37] 佐久間 淳, 小林 重信: “実数値 GA におけるサンプリングバイアスを考慮した外挿的交叉 EDX”, *人工知能学会誌*, Vol.17, No.6, pp.699–707 (2002).
- [38] T. Okamoto, E. Aiyoshi: “The Global Optimization using a Synchronization of Multiple Agents Moving Autonomously with the Chaotic Dynamical Model”, *Proc. of IEEEJ EIS Conf.*, pp.464–471 (2006).
- [39] T. Okamoto, E. Aiyoshi: “The Improved Draining Method and Its Application to Proper Benchmark Problems”, *Proc. of SICE-ICCAS 2006*, pp.2190–2195 (2006).
- [40] 岡本 卓, 相吉 英太郎: “新しい結合構造による多体系大域的最適化”, *Proc. of 電気学会研究会 産業計測制御研究会*, pp.45–50 (2005).
- [41] 渡辺 祐樹, 岡本 卓, 相吉 英太郎: “目的関数理め立て法によるカオス最適化”, *Proc. of 電気学会 電子・情報・システム部門大会*, pp.459–465 (2005).
- [42] 初瀬 渉, 岡本 卓, 相吉 英太郎: “分岐パラメータ調整型カオスアニーリングによる大域的最適化手法”, *Proc. of 計測自動制御学会 システム・情報部門学術講演会 2005 (SSI2005)*, pp.286–291 (2005).
- [43] 相吉 英太郎, 岡本 卓: “カオス力学系のチューニングと大域的カオス最適化手法”, *Proc. of 平成 18 年電気学会全国大会*, pp.3–S19(9)–3–S19(12) (2006).
- [44] 渡辺 祐樹, 岡本 卓, 相吉 英太郎: “目的関数変換による分岐調整を利用したカオス最適化手法: 大域的最適化手法「水抜き法」の提案”, *電学論 C*, Vol.126, No.12 (2006).
- [45] 堀江 亮太: “最適化の視点による非線形現象論的数理モデルの合目的論”, *計測と制御*, Vol.42, No.1, pp.60–71 (2003).
- [46] J. Chao, W. Ratanaswan, S. Tsujii: “A New Global Optimization Method and Supervised Learning of Multilayer Neural Networks”, *IEICE Trans*, Vol.E73, No.11, pp.1796–1799 (1990).

- [47] 新妻 弘崇, 石井 信, 伊藤 実: “座標変換を用いたカオス最適化手法”, *信学論 (A)*, Vol.J82-A, No.9, pp.1428–1436 (1999).
- [48] K. E. Parsopoulos, M. N. Vrahatis: “On the Computation of All Global Minimizers through Particle Swarm Optimization”, *IEEE Trans. Evolutionary Computation*, Vol.8, No.3, pp.211–224 (2004).
- [49] R. P. Ge, Y. F. Qin: “A Class of Filled Functions for Finding Global Minimizers of a Function of Several Variables”, *J. Optimiz. Theory Appl.*, Vol.54, No.2, pp.241–252 (1987).
- [50] 呂 敏, 志水 清孝: “ ϵ -近似手法による多変数関数の大域最適化”, *信学論 (A)*, Vol.J75-A, No.4, pp.769–777 (1992).
- [51] 村田 秀樹, 安田 恵一郎, 相吉 英太郎: “非線形散逸項を有する Particle Swarm Optimization 法の提案”, *電学論 C*, Vol.127, No.5 (2007).
- [52] 岡本 卓, 相吉 英太郎: “非線形散逸力学系の内部状態モデルを用いた制約条件付大域的最適化手法”, *システム制御情報学会論文誌*, Vol.16, No.12, pp.662–669 (2003).
- [53] 岡本 卓, 相吉 英太郎: “多点型離散化非線形散逸系モデルの同調現象を用いた大域的最適化手法”, *Proc. of 計測自動制御学会 システム・情報部門学術講演会 2006 (SSI2006)*, pp.159–164 (2006).
- [54] 石亀 篤司, 相原 徹, 湯淺 英考: “カオスの最急降下法を用いた制約条件付最適化”, *システム制御情報学会論文誌*, Vol.12, No.5, pp.316–318 (1999).
- [55] M. Mizukami, M. Hirano, K. Shinjo: “Simultaneous Alignment of Multiple Optical Axes in a Multistage Optical System using Hamiltonian Algorithm”, *Opt. Eng.*, Vol.40, No.3, pp.448–454 (2001).
- [56] 岡本 卓, 山村 幸大, 相吉 英太郎: “メタヒューリスティックスの概念を用いた多体型高次元アルゴリズムによる大域的最適化”, *Proc. of SCI'06*, pp.135–136 (2006).
- [57] 小松 崎彰, 斎藤 茂, 行田 弘一, 大平 孝: “高次元アルゴリズムによるエスパアンテナのリアクタンス最適化—ハミルトン力学に基づく手法によるアンテナ設計”, *信学論 (B)*, Vol.J85-B, No.3, pp.381–390 (2002).
- [58] 森川 貴展, 伊藤 秀隆, 隈元 昭: “複数の力学系軌道を用いた大域的最適化における相互作用の効果に関する数値的検討”, *電学論 C*, Vol.120, No.11, pp.1580–1586 (2000).
- [59] 前田 茂: “シンプレクテック写像の応用について—ハミルトン系の離散版”, *応用数理*, Vol.8, No.3, pp.30–39 (1998).
- [60] 小林 容子, 相吉 英太郎: “マルチエージェント・アルゴリズムによる組合せ最適化手法”, *電気学会産業計測制御研究会*, pp.47–52 (2003).
- [61] 堀江 亮太, 相吉 英太郎: “最適化問題に対する拡散結合型多体勾配系とそのニューラルネットワーク実現”, *計測自動制御学会論文集*, Vol.35, No.3, pp.435–443 (1999).

- [62] D. E. Goldberg, J. Richardson: “Genetic Algorithms with Sharing for Multimodal Function Optimization”, *Proc. of The Second International Conference on Genetic Algorithms on Genetic Algorithms and their Application*, pp.41–49 (1987).
- [63] E. Mosekilde, Y. Maistrenko, D. Postnov: “Chaotic Synchronization”, *World Scientific* (2002).
- [64] 岡本 卓, 宮澤 さや香, 相吉 英太郎: “PSO 結合型離散化勾配系カオスモデルによる大域的最適化”, *Proc. of 電気学会 電子・情報・システム部門大会*, pp.451–458 (2005).
- [65] 岡本 卓, 相吉 英太郎: “PSO 結合型離散化勾配系カオスモデルによる大域的最適化”, *電学論 C*, Vol.126, No.7, pp.857–864 (2006).
- [66] H. Fujisaka, T. Yamada: “Stability Theory of Synchronized Motion in Coupled-Oscillator Systems. II”, *Progress of Theoretical Physics*, Vol.70, No.5, pp.1240–1248 (1983).
- [67] K. E. Parsopoulos, M. N. Vrahatis: “Recent Approaches to Global Optimization Problems through Particle Swarm Optimization”, *Natural Computing*, Vol.1, No.2-3, pp.235–306 (2002).
- [68] M. Clerc, J. Kennedy: “The Particle Swarm – Explosion, Stability, and Convergence in a Multidimensional Complex Space”, *IEEE Trans. Evolutionary Computation*, Vol.6, No.1, pp.58–73 (2002).
- [69] I. C. Trelea: “The Particle Swarm Optimization Algorithm: Convergence Analysis and Parameter Selection”, *Information Processing Letters*, Vol.85, No.6, pp.317–25 (2003).
- [70] 平岡 創土, 岡本 卓, 相吉 英太郎: “進化的パラメータ調整機能を有する適応型 PSO”, *Proc. of 計測自動制御学会 システム・情報部門学術講演会 2005 (SSI2005)*, pp.313–318 (2005).
- [71] 岩崎 信弘, 安田 恵一郎: “Particle Swarm Optimization の解析と適応化—適応型 PSO の提案—”, *Proc. of 計測自動制御学会 システム・情報部門学術講演会 2004 (SSI2004)*, pp.269–274 (2004).
- [72] 飯間 等, 黒江 康明: “自律探索機能を強化した Particle Swarm Optimization による関数最適化”, *Proc. of 電気学会 電子・情報・システム部門大会*, pp.446–450 (2005).
- [73] 東谷 光晴, 石亀 篤司: “捕食・被食者の行動の概念を取り入れた PSO による最適化”, *Proc. of 電気学会 電子・情報・システム部門大会*, pp.1078–1081 (2005).
- [74] 志水 清孝: “Flock 大域的最適化手法”, *信学論 (A)*, Vol.J89-A, No.5, pp.380–384 (2006).
- [75] J. Barhen: “TRUST: A Deterministic Algorithm for Global Optimization”, *Science*, Vol.276, No.5315, pp.1094–1097 (1997).
- [76] K. F. C. L. Yiu, Y. L. Liu, K. L. L. Teo: “A Hybrid Descent Method for Global Optimization”, *J. Global Optimiz.*, Vol.28, No.2, pp.229–238 (2004).

- [77] Y. J. Wang, J. S. Zhang, Y. F. Zhang: “A Fast Hybrid Algorithm for Global Optimization”, *Proc. of Machine Learning and Cybernetics, 2005*, pp.3030–3035 (2005).
- [78] J. B. Rosen: “The Gradient Projection Method for Nonlinear Programming. Part I. Linear Constraints”, *SIAM. J. Appl. Math.*, Vol.8, No.1, pp.181–217 (1960).
- [79] 岡本 卓, 相吉 英太郎: “超球面上の連続散逸系カオスを用いた制約条件付き大域的最適化”, *電学論 C*, Vol.124, No.9, pp.1888–1895 (2004).
- [80] 増田 和明, 相吉 英太郎: “シンプレックス上のカオス力学系と正規化制約付大域的最適化手法”, *電学論 C*, Vol.126, No.6, pp.1147–1154 (2003).
- [81] 電気学会 GA 等組合せ最適化手法応用調査専門委員会編: “遺伝アルゴリズムとニューラルネットワークスケジューリングと組合せ最適化”, *コロナ社*, Japan (1998).
- [82] T. Okamoto, E. Aiyoshi: “Combinatorial Optimization by the Nonlinear Dynamics Constrained on a Hypersphere”, *Proc. of 電気学会研究会産業計測制御研究会*, pp.105–110 (2004).
- [83] 岡本 卓, 相吉 英太郎: “非線形散逸系モデルによる制約条件付き大域的最適化”, in *電気学会技術報告 第 983 号 最適化手法の新展開とその産業応用*, 電気学会, Japan, pp.31–38 (2004).
- [84] 北山 哲史, 安田 恵一郎: “Particle Swarm Optimization による混合整数計画問題の一解法”, *電学論 C*, Vol.125, No.5, pp.813–820 (2005).
- [85] A. V. Levy, A. Montalvo: “The Tunneling Algorithm for the Global Minimization of Functions”, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, Vol.6, No.1, pp.15–29 (1985).
- [86] A. O. Griewank: “Generalized Descent for Global Optimization”, *J. Optimiz. Theory Appl.*, Vol.34, No.1, pp.11–39 (1981).
- [87] H. H. Rosenbrock: “An Automatic Method for Finding the Greatest or Least Value of a Function”, *Comput. J.*, Vol.3, No.3, pp.175–184 (1960).
- [88] L. A. Rastrigin: “Systems of Extremal Control”, *Nauka*, USSR (1974).
- [89] H. P. Schwefel: “Numerische Optimierung von Computer-Modellen Mittels der Evolutionsstrategie”, *Birkhauser Stuttgart* (1977).
- [90] J. J. Liang, P. N. Suganthan, K. Deb: “Novel Composition Test Functions for Numerical Global Optimization”, *Proc. of Swarm Intelligence Symposium, 2005 (SIS 2005)*, pp.68–75 (2005).
- [91] J. Liang, S. Baskar, P. Suganthan, A. Qin: “Performance Evaluation of Multiagent Genetic Algorithm”, *Natural Computing*, Vol.5, No.1, pp.83–96 (2006).
- [92] W. Zhong, J. Liu, M. Xue, L. Jiao: “A Multiagent Genetic Algorithm for Global Numerical Optimization”, *IEEE Trans. on SMC-B*, Vol.34, No.2, pp.1128–1141 (2004).

- [93] F. Van Den Bergh, A. P. Engelbrecht: “A Cooperative Approach to Particle Swarm Optimization”, *IEEE Trans. Evolutionary Computation*, Vol.8, No.3, pp.225–239 (2004).
- [94] “Journal of Global Optimization”, *Springer*, USA (1991-).
- [95] “IEEE Transaction on Evolutionary Computation”, *IEEE*, USA (1997-).
- [96] “IEEE Transactions on Systems, Man and Cybernetics. Part B, Cybernetics”, *IEEE*, USA (1996-).
- [97] 久保田 光一, 伊理 正夫: “アルゴリズムの自動微分と応用”, *コロナ社* (1998).
- [98] A. Griewank, D. Juedes, J. Utke: “Algorithm 755; ADOL-C: A Package for the Automatic Differentiation of Algorithms Written in C/C++”, *ACM Trans. on Mathematical Software*, Vol.22, No.2, pp.131–167 (1996).
- [99] A. Walther, A. Griewank: “ADOL-C”,
URL: <http://www.math.tu-dresden.de/~adol-c/>
Last updated on Oct 6th 2006.
- [100] 今野 浩, 山下 浩: “非線形計画法”, *日科技連出版社*, Japan (1978).
- [101] L. Armijo: “Minimization of Functions having Lipschitz Continuous First Partial Derivatives”, *Pacific Journal of Mathematics*, Vol.16, No.1, pp.1–3 (1966).
- [102] Y. Onishi: “CPPLAPACK”,
URL: <http://cpplapack.sourceforge.net/>
Last updated on Mar 25th 2005.
- [103] R. C. Whaley, A. Petitet: “Minimizing Development and Maintenance Costs in Supporting Persistently Optimized BLAS”, *Softw. Pract. Exper.*, Vol.35, No.2, pp.101–121 (2005).

付録A ベンチマーク問題とその改良問題

A.1 Typical Benchmark Problems と Proper Benchmark Problems

大域的最適化手法の能力比較を行う場合には、通常、標準的とされるベンチマーク問題への適用を以って行われることが多い。この標準的なベンチマーク問題としてはLevy No.5関数^[85]、Griewank関数^[86]、Rosenbrock's Saddle関数^[87]、 2^N -minima関数^[35]、Rastrigin関数^[88]、Schwefel関数^[89]などをあげることができる。これまで多くのアルゴリズムについて、この標準的なベンチマーク問題への適用を通してその有効性が確認されてきた。しかしながら、これら標準的なベンチマーク問題には

1. 大域的最適解 \mathbf{x}^o の各成分の値がすべて同じ値になっていること (Levy No.5 関数, Griewank 関数, Rosenbrock's Saddle 関数, 2^N -minima 関数, Rastrigin 関数, Schwefel 関数)
2. 大域的最適解 \mathbf{x}^o が原点であること (Griewank 関数, Rastrigin 関数)
3. 1. と 2. が原因で、大域的最適解が設定した定義域の中央に存在すること (Griewank 関数, Rastrigin 関数)
4. 大域的最適解 \mathbf{x}^o が制約境界近傍存在すること (Schwefel 関数)
5. 変数間の依存関係がないこと (2^N -minima 関数, Rastrigin 関数, Schwefel 関数)

などの問題点が存在することがLiangらによって指摘されている^[90,91]。Liangらは、さらに、上記の性質を持つ問題に対しては

- 1. に対して、変数間で値をコピー・交換する演算 (Fig. A.1) をもつ手法
- 2. に対して、探索範囲を限定した局所探索を行う手法。たとえば、探索の中心を l とし、探索半径を r として $[l(1-r), l(1+r)]$ の範囲で局所探索を行う場合、 $l < 0$ となった場合に原点に近づきやすくなる。
- 2. に対して、何らかの理由で原点が安定解になってしまう手法¹
- 3. に対して、複数の個体の探索点の位置の平均値を使った演算をもつ手法。たとえば、mean-centric crossover operator。
- 4. に対して、探索点間、もしくは、すでに見つかった解から遠ざかる演算をもつ手法
- 4. に対して、制約条件を侵害した際に、制約境界に探索点を引き戻す演算をもつ手法¹

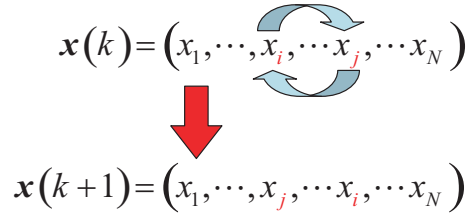


Fig. A.1 The operator which copies or exchanges each component's value between i th component and j th component

- 5. に対して，変数ごとに最適化を行う演算をもつ手法
- 5. に対して，1 変数問題としてみたときに極めて有効な演算を持つ手法．たとえば，p.46 で述べた DNDM (C) が Prob.5 に対して極めて有効だった例¹．

が有効に働いてしまうことを指摘している．これら標準的なベンチマーク問題の特殊構造に対して有効な演算を持つ手法としては

- MAGA^[92] : 1, 2, 5 に有効
- DE^[34] : 1 に有効
- TRUST^[75] : 4, 5 に有効
- Predator-Pray PSO^[73] : 4 に有効
- CPSO^[93] : 5 に有効

などをあげることができる．このように標準的なベンチマーク問題は，一般的な問題と比較して特殊な構造を持った問題であり，標準的なベンチマーク問題への適用のみで大域的最適化手法の能力比較を行うことは適切ではない．そこで本論文では，これら問題点を解消した新しいベンチマーク問題を用いて最適化性能の確認を行う．具体的には，元の大域的最適解を \mathbf{x}_o^o とし，一様乱数 $U(a, b)$ を用いて新たに生成した大域的最適解を \mathbf{x}_n^p を用いて，大域的最適解を成分ごとにランダムに再配置した新たな最適化問題

$$\min_{\mathbf{x}} E(\mathbf{z}(\mathbf{x})) \quad (\text{A.1a})$$

$$\text{subj.to } p_i - x_{oi}^o < x_i < q_i - x_{oi}^o \quad (\text{A.1b})$$

$$\text{where } \mathbf{z}(\mathbf{x}) = \mathbf{x} - \mathbf{x}_n^o + \mathbf{x}_o^o \quad (\text{A.1c})$$

$$x_{ni} = U(a, b) \quad (\text{A.1d})$$

を用いることで上述の問題点 1~4. を解消し，5. に関しては，座標軸を回転させた新たな最適化問題

$$\min_{\mathbf{x}} E(\mathbf{z}(\mathbf{x})) \quad (\text{A.2a})$$

$$\text{where } \mathbf{z}(\mathbf{x}) = R(\alpha)\mathbf{x} \quad (\text{A.2b})$$

¹これらは，Liang らの指摘ではなく，本論文オリジナルの指摘

$$R(\alpha) = T^{12} \times T^{13} \times \dots \times T^{1N} \times T^{23} \times \dots \times T^{N-1N} \quad (\text{A.2c})$$

$$T_{kl}^{ij} = \begin{cases} \cos \alpha & k = i, l = i \\ -\sin \alpha & k = i, l = j \\ \sin \alpha & k = j, l = i \\ \cos \alpha & k = j, l = j \\ 1 & k = l \neq i, j \\ 0 & \text{not above,} \end{cases} \quad (\text{A.2d})$$

$$T^{ij} \text{ is } N \times N \text{ matrix} \quad (\text{A.2e})$$

を用いることで解消する。また、ランダムな再配置が必要、かつ、回転が必要な問題については、(A.1) 式の新たな最適解 \mathbf{x}_n^o と (A.2) 式の回転行列 $R(\alpha)$ を用いた

$$\min_{\mathbf{x}} E(\mathbf{z}(\mathbf{x})) \quad (\text{A.3a})$$

$$\text{subj.to } p_i - x_{oi}^o < x_i < q_i - x_{oi}^o \quad (\text{A.3b})$$

$$\text{where } \mathbf{z}(\mathbf{x}) = R(\alpha) (\mathbf{x} - \mathbf{x}_n^o) + \mathbf{x}_o^o \quad (\text{A.3c})$$

を用いることで問題点を解消する。本論文では、標準的なベンチマーク問題に対し、これら (A.1) 式 ~ (A.3) 式の処理を施した新しいベンチマーク問題を Proper Benchmark Problem とよぶ。

A.2 ベンチマーク問題集

本節では、本論文のシミュレーションで用いるベンチマーク問題について記す。なお“Modified”となっている問題は、前節で述べた Proper Benchmark Problem である。なお、[Prob.2](#)については、変数次元が高くなっても難易度が落ちないように修正を加えてあることに注意されたい。

Prob.1 Modified Levy No.5 関数. オリジナルは、文献 [85].

$$\left\{ \begin{array}{l} \min_{\mathbf{x}} E(\mathbf{y}(\mathbf{x})) = \\ \frac{\pi}{N} \left[B \sin^2(\pi y_1) + \sum_{i=1}^{N-1} \{(y_i - A)^2 (1 + B \sin^2(\pi y_{i+1}))\} + (y_N - A)^2 \right] \\ y_i = A + 10.0 z_i, \quad \mathbf{z} = \mathbf{x} - \mathbf{x}_n^o, \quad x_{ni}^o = U(-0.8, 0.8), \quad \mathbf{x}_o^o = \mathbf{0.0} \\ \text{subj.to } |x_i| < 1.0, \quad i = 1, \dots, N \\ \text{where } A = 1.0, \quad B = 5.0 \\ \text{minima: } E(\mathbf{y}(\mathbf{x}_n^o)) = 0.0 \end{array} \right.$$

Prob.2 Modified Griewank 関数. オリジナルは、文献 [86].

$$\left\{ \begin{array}{l} \min_{\mathbf{x}} E(\mathbf{z}(\mathbf{x})) = \frac{1}{ND} \sum_{i=1}^N \{z_i^2\} - \prod_{i=1}^N \left\{ \cos \left(\frac{z_i}{\sqrt{i+1}} \right) \right\} + 1.0 \\ \mathbf{z} = \mathbf{x} - \mathbf{x}_n^o, \quad x_{ni}^o = U(-20.0, 20.0), \quad \mathbf{x}_o^o = \mathbf{0.0} \\ \text{subj.to } |x_i| < 25.0, \quad i = 1, \dots, N \\ \text{where } D = 2000.0 \\ \text{minima: } E(\mathbf{z}(\mathbf{x}_n^o)) = 0.0 \end{array} \right.$$

Prob.3 Modified Rosenbrock's Saddle 関数. オリジナルは、文献 [87].

$$\left\{ \begin{array}{l} \min_{\mathbf{x}} E(\mathbf{z}(\mathbf{x})) = \sum_{i=1}^{N-1} \{100.0(z_{i+1} - z_i^2)^2 + (z_i - 1)^2\} \\ \mathbf{z} = \mathbf{x} - \mathbf{x}_n^o + \mathbf{x}_o^o, \quad x_{ni}^o = U(-2.4, 0.4), \quad \mathbf{x}_o^o = \mathbf{1.0} \\ \text{subj.to } -2.0 - x_{oi}^o < x_i < 2.0 - x_{oi}^o, \quad i = 1, \dots, N \\ \text{minima } E(\mathbf{z}(\mathbf{x}_n^o)) = 0.0 \end{array} \right.$$

Prob.4 Modified 2^N -minima 関数. オリジナルは、文献 [35].

$$\left\{ \begin{array}{l} \min_{\mathbf{x}} E(\mathbf{z}(\mathbf{x})) = \sum_{i=1}^N \{z_i^4 - 16.0z_i^2 + 5.0z_i\} \\ \mathbf{z} = R(\alpha)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_n^o) + \mathbf{x}_o^o, \quad x_{ni}^o = U(-1.0, 7.0), \quad \mathbf{x}_o^o = -\mathbf{2.9305}, \quad \alpha = \pi/4 \\ \text{subj.to } -5.0 - x_{oi}^o < x_i < 5.0 - x_{oi}^o, \quad i = 1, \dots, N \\ \text{minima: } E(\mathbf{z}(\mathbf{x}_n^o)) = -78.319N \end{array} \right.$$

Prob.5 Shifted 2^N -minima 関数.

$$\left\{ \begin{array}{l} \min_{\mathbf{x}} E(\mathbf{z}(\mathbf{x})) = \sum_{i=1}^N \{z_i^4 - 16.0z_i^2 + 5.0z_i\} \\ \mathbf{z} = \mathbf{x} - \mathbf{x}_n^o + \mathbf{x}_o^o, x_{ni}^o = U(-0.1, 0.1), \mathbf{x}_o^o = -\mathbf{2.9035} \\ \text{subj.to } -5.0 - x_{oi}^o < x_i < 5.0 - x_{oi}^o, i = 1, \dots, N \\ \text{minima: } E(\mathbf{z}(\mathbf{x}_n^o)) = -78.319N \end{array} \right.$$

Prob.6 Modified Rastrigin 関数. オリジナルは, 文献 [88].

$$\left\{ \begin{array}{l} \min_{\mathbf{x}} E(\mathbf{z}(\mathbf{x})) = AN + \sum_{i=1}^N z_i^2 - A \cos(B\pi z_i) \\ \mathbf{z} = R(\alpha)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_n^o), x_{ni}^o = U(-4.0, 4.0), \mathbf{x}_o^o = \mathbf{0.0}, \alpha = \pi/4 \\ \text{subj.to } |x_i| < 5.0, i = 1, \dots, N \\ \text{where } A = 10.0, B = 2.0 \\ \text{minima: } E(\mathbf{z}(\mathbf{x}_n^o)) = 0.0 \end{array} \right.$$

Prob.7 Original Rastrigin 関数.

$$\left\{ \begin{array}{l} \min_{\mathbf{x}} E(\mathbf{x}) = AN + \sum_{i=1}^N x_i^2 - A \cos(B\pi x_i) \\ \text{subj.to } |x_i| < 5.0, i = 1, \dots, N \\ \text{where } A = 10.0, B = 2.0 \\ \text{minima: } E(\mathbf{x}^o(= 0.0, \dots, 0.0)) = 0.0 \end{array} \right.$$

付録B 最適化手法の計算量と自動微分

一般に、最適化手法の比較においては、その計算量は同等のものとするべきである。最適化研究分野に関する論文誌^[94, 95, 96]に散見されるように、一般に最適化手法の計算量は、目的関数の計算量がそのほとんどを占めることを考慮して、目的関数計算回数 (Objective Function Calls) で計られることが多い。しかし、本論文で扱ったような、勾配計算と目的関数計算が混在するような手法に対する計算量評価の基準は、現在のところ、確立しているとはいえない。これは、目的関数計算量に対する勾配計算量の比率が、問題の構造や、勾配そのものが解析的に与えられるかどうかの計算条件によって大きく異なるため、統一的な指標が構築できないからであると推察される。

そこで本論文では、目的関数を計算するアルゴリズムが与えられれば、その勾配を自動的に計算することが可能な自動微分^[97] (Automatic Differentiation) に注目する。自動微分を用いて勾配を計算する場合、その計算量は元の目的関数計算量のたかだか定数倍となる性質がある。したがって、勾配計算に自動微分を用いることを絶対条件とすれば、勾配の関数形が解析的に与えられるかどうかなどの計算条件に関わらず、目的関数計算量に対する勾配計算量の比率をある程度統一的に見積もることが可能になる。そして、自動微分を用いる条件下で、勾配計算と目的関数計算が混在する手法の計算量を定義すれば、目的関数計算のみの手法を含めた上でフェアな計算量定義をすることができる。具体的には、本論文で用いた自動微分計算ライブラリである ADOL-C 1.10^[98, 99] の `tapeless forward mode` において、目的関数と勾配が同時に計算できることを考慮し、自動微分計算回数 (AD Calls)、目的関数計算回数 (OF Calls)、目的関数計算と自動微分計算の計算量比を η として、総計算量 C を

$$C = \text{AD Calls} + \text{OF Calls}/\eta \tag{B.1}$$

と定義すればよい。ただし η は、問題ごとにあらかじめテストを行って決定しておく値を用いる。Table B.1 に、本論文で用いるベンチマーク問題に対する η の値を示す。

Table B.1 η for each benchmark problems in this paper

Problem	η
Prob.1 ($N = 100$)	18.5
Prob.2 ($N = 100$)	17.5
Prob.3 ($N = 100$)	11.0
Prob.4 ($N = 100$)	14.0
Prob.5 ($N = 100$)	14.5
Prob.6 ($N = 100$)	20.0

付録C Pseudo Codes

C.1 Pseudo Code of Common Functions

本節の関数群は、以降のコードで共通に利用する。

/ Toroidalization function */*

```
function execToroidalization( $x$ )  
  for  $i \leftarrow 1$  to  $N$   
    if  $x_i \geq q_i$  then  
       $x_i \leftarrow (x_i - p_i) \text{fmod}(q_i - p_i) + p_i$   
    else if  $x_i \leq p_i$  then  
       $x_i \leftarrow (x_i - q_i) \text{fmod}(q_i - p_i) + q_i$   
    end if  
  end for  
  return  $x$   
end function
```

/ pbest update function */*

```
function setPbest( $x, x_{pb}, E_{pb}, v, v_{pb}$ )  
  if  $E(x) < E_{pb}$  then  
     $x_{pb} \leftarrow x, E_{pb} \leftarrow E(x), v_{pb} \leftarrow v$   
  end if  
  return  $x_{pb}, E_{pb}, v_{pb}$   
end function
```

/ Steepest descent method with linear search */*

```
function execSteepestDescent( $x, \epsilon_g, \Delta T$ )  
  for  $i \leftarrow 1$  to 100  
    /* Convergence criterion */  
    if  $\|\nabla E(x)\| < \epsilon_g$  then  
      break for  
    end if  
    /* Steepest descent with linear search */  
     $\alpha \leftarrow \Delta T$   
    while  $\alpha > 10^{-10}$   
       $x_{tmp} \leftarrow x - \alpha \nabla E(x)$   
      if  $E(x_{tmp}) \leq E(x) - 0.5\alpha \|\nabla E(x)\|^2$  then  
         $x \leftarrow x_{tmp}$   
        break while  
      end if  
       $\alpha \leftarrow 0.5\alpha$   
    end while  
     $x \leftarrow \text{execToroidalization}(x)$   
  end for  
  return  $x$   
end function
```

青字は、速度状態量 v を含む場合。上記アルゴリズム中、直線探索には、Armijo の方法 [100, 101] を用いている。次ページ左半分に setEliteAgents procedure を記載。

```

/* Elite agents update */
procedure setEliteAgents
  /* pbests update */
  for  $p \leftarrow 1$  to  $P$ 
     $\mathbf{x}_{pb}^p, E_{pb}^p, \mathbf{v}_{pb}^p \leftarrow \text{setPbest}(\mathbf{x}^p, \mathbf{x}_{pb}^p, E_{pb}^p, \mathbf{v}^p, \mathbf{v}_{pb}^p)$ 
  end for
  /* gbest update */
  for  $p \leftarrow 1$  to  $P$ 
    if  $E_{pb}^p < E_{gb}$  then
       $gb \leftarrow p, E_{gb} \leftarrow E_{pb}^p$ 
    end if
  end for
  /* Elite agent update */
  if elite type is gbest then
    /* Elite agent is set as gbest */
    for  $p \leftarrow 1$  to  $P$   $\mathbf{x}^{el(p)} \leftarrow \mathbf{x}_{pb}^{gb}, \mathbf{v}^{el(p)} \leftarrow \mathbf{v}_{pb}^{gb}$  end for
  else if elite type is cbest then
    /* Elite agent is set as cbest */
     $E_{cb} \leftarrow \infty$ 
    for  $p \leftarrow 1$  to  $P$ 
      if  $E(\mathbf{x}^p) < E_{cb}$  then
         $cb \leftarrow p, E_{cb} \leftarrow E(\mathbf{x}^p)$ 
      end if
    end for
    for  $p \leftarrow 1$  to  $P$   $\mathbf{x}^{el(p)} \leftarrow \mathbf{x}^{cb}, \mathbf{v}^{el(p)} \leftarrow \mathbf{v}^{cb}$  end for
  else if elite type is roulette then
    /* Elite agent is selected by roulette selection */
     $E_{wt} \leftarrow -\infty, E_{sum} \leftarrow 0.0$ 
    /* Worst agent update and summation of  $E$  */
    for  $p \leftarrow 1$  to  $P$ 
      /* Worst agent update */
      if  $E(\mathbf{x}^p) > E_{wt}$  then
         $E_{wt} \leftarrow E(\mathbf{x}^p)$ 
      end if
      /* Summation of  $E$  */
       $E_{sum} \leftarrow E_{sum} + E(\mathbf{x}^p)$ 
    end for
    /* Selection probabilities computation */
    for  $p \leftarrow 1$  to  $P$ 
       $pr^p \leftarrow \frac{E_{wt} - E(\mathbf{x}^p)}{E_{sum}}$ 
    end for
    /* Roulette selection */
    for  $p \leftarrow 1$  to  $P$ 
       $r \leftarrow U(0,1), sum \leftarrow 0.0$ 
      for  $q \leftarrow 1$  to  $P$ 
         $sum \leftarrow sum + pr^q$ 
        if  $r < sum$  then
           $\mathbf{x}^{el(p)} \leftarrow \mathbf{x}^q, \mathbf{v}^{el(p)} \leftarrow \mathbf{v}^q$ 
          break for
        end if
      end for
    end for
  end if
end procedure

```

C.2 Pseudo Code of Annealing type DGCMwT

```

main
  /* Step1 Initialization */
  Set following parameters:  $\Delta T_{max}, k_{max}, \epsilon_g$ 
  /* Search point is initialized randomly */
  for  $i \leftarrow 1$  to  $N$ 
     $x_i \leftarrow U(p_i, q_i)$ 
  end for
   $E_{pb} \leftarrow \infty$ 
  /* Step2 Main Search Procedure */
  for  $k = 0$  to  $k_{max} - 1$ 
    /* DGCM Search */
     $\Delta T \leftarrow \Delta T_{max} \left(1 - \frac{k}{k_{max}}\right)$ 
     $\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{x} - \Delta T \nabla E(\mathbf{x})$ 
    execToroidalization( $\mathbf{x}$ )
    /* pbest update */
     $\mathbf{x}_{pb}, E_{pb} \leftarrow \text{setPbest}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_{pb}, E_{pb})$ 
  end for
  /* Step3 Local Search */
   $\mathbf{x}^* \leftarrow \text{execSteepestDescent}(\mathbf{x}_{pb}, \epsilon_g, \Delta T)$ 
   $\mathbf{x}_{pb}, E_{pb} \leftarrow \text{setPbest}(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}_{pb}, E_{pb})$ 
  return  $\mathbf{x}_{pb}, E_{pb}$ 
end main

```


C.3 Pseudo Code of Draining Method

```

main
/* Step1 Initialization */
Set following parameters:  $\beta, \Delta T_{\max}, \delta, \varepsilon_g, \varepsilon_E, T, \tilde{T}, \bar{c}$ 
/* Search point is initialized randomly */
for  $i \leftarrow 1$  to  $N$ 
     $x_i \leftarrow U(p_i, q_i)$ 
end for
 $E_{pb} \leftarrow \infty$ 
/* Step2 Execution of Plain DGCMwT and
Set water level  $\alpha (= E_{pb})$  */
 $\Delta T \leftarrow \Delta T_{\max}$ 
/* Execution of plain DGCMwT */
while  $\Delta T > 0$ 
     $x \leftarrow x - \Delta T \times \nabla E(x)$ 
     $x \leftarrow \text{execToroidalization}(x)$ 
     $\Delta T \leftarrow \Delta T - \delta \times \Delta T_{\max} \times 0.1$ 
end while
 $x^* \leftarrow \text{execSteepestDescent}(x, \varepsilon_g, \Delta T_{\max})$ 
 $x_{pb}, E_{pb} \leftarrow \text{setPbest}(x^*, x_{pb}, E_{pb})$ 
/* Search point is reset */
for  $i \leftarrow 1$  to  $N$ 
     $x_i \leftarrow U(p_i, q_i)$ 
end for

/* Step 3 Main Search Procedure */
 $\Delta T'_{\max} \leftarrow \Delta T_{\max}$ 
while true
    /*  $\Delta T$  are reset */
     $\Delta T \leftarrow \Delta T'_{\max}$ 
    /* Chaotic Search at  $\alpha (= E_{pb})$  */
    while  $\Delta T > 0$ 
         $g \leftarrow \frac{\nabla E(x)}{(1 + \exp(-\beta \times (E(x) - E_{pb})))}$ 
        for  $k \leftarrow 0$  to  $T - 1$ 
             $x \leftarrow x - \Delta T \times g$ 
             $c \leftarrow \bar{c} \sin^2\left(\frac{2\pi k}{\tilde{T}}\right)$ 
             $x \leftarrow \frac{1}{1+c}x + \frac{c}{1+c}x_{pb}$ 
             $x \leftarrow \text{execToroidalization}(x)$ 
             $g \leftarrow \frac{\nabla E(x)}{(1 + \exp(-\beta \times (E(x) - E_{pb})))}$ 
             $x_{pb}, E_{pb} \leftarrow \text{setPbest}(x, x_{pb}, E_{pb})$ 
        end for
        /* Confinement Check */
        if  $\|g\| < \varepsilon_g$  then
            break while
        end if
         $\Delta T \leftarrow \Delta T - \delta \times \Delta T'_{\max}$ 
    end while
    /* Local Search and  $\Delta T'_{\max}$  update */
     $x^* \leftarrow \text{execSteepestDescent}(x, \varepsilon_g, \Delta T_{\max})$ 
     $x_{pb}, E_{pb} \leftarrow \text{setPbest}(x^*, x_{pb}, E_{pb})$ 
     $\Delta T'_{\max} \leftarrow \Delta T'_{\max} - \delta \times \Delta T_{\max}$ 
    /* Termination Decision */
    if  $\Delta T'_{\max} < 0$  or  $E_{pb} < E(x^o) + \varepsilon_E$  then
        break while
    end if
end while
return  $x_{pb}, E_{pb}$ 
end main

```

黒字で記載されている部分のみで Improved Draining Method (IDM) を構成，赤色で囲った部分を採用した全体で Improved Draining Method with Search History (IDMwSH) を構成。

C.4 Pseudo Code of DNDM

```

main
/* Step1 Initialization */
Set following parameters:  $\Delta T_{\max}, k_{\max}, d_1, d_2, m, \varepsilon, \varepsilon_g$ 
Set following parameters:  $d_0, \omega$ 
Set following parameters:  $d_{0\max}$ 
/* Search point is initialized randomly */
for  $i \leftarrow 1$  to  $N$ 
     $x_i \leftarrow U(p_i, q_i)$ 
end for
/* Velocity initialization with gradient */
 $\mathbf{v} \leftarrow -\frac{\Delta T_{\max}}{m} \nabla E(\mathbf{x})$ 
 $E_{pb} \leftarrow \infty$ 
/* Step2 Main Search Procedure */
for  $k \leftarrow 0$  to  $k_{\max} - 1$ 
    /* Parameter settings at  $k$  */
     $\Delta T \leftarrow \Delta T_{\max} \left(1 - \frac{k}{k_{\max}}\right)$ 
     $d_0 \leftarrow d_{0\max} \left(1 - \frac{k}{k_{\max}}\right)$ 
    /* Gradient computation */
     $\mathbf{g} \leftarrow \nabla E(\mathbf{x})$ 
    /* Position update */
     $\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{x} + \Delta T \mathbf{v}$ 

```

```

/* Velocity update */
for  $i \leftarrow 1$  to  $N$ 
     $v_i \leftarrow v_i - \frac{\Delta T}{m} \left\{ \left( d_0 \sin(\omega k) + d_1 \right) v_i + \text{sgn}(v_i) d_2 v_i^2 \right\} - \frac{\Delta T \varepsilon}{m} g_i$ 
     $v_i \leftarrow v_i - \frac{\Delta T d_1}{m} \left\{ v_i - d_0 v_i \exp\left(-\frac{\|\mathbf{v}\|}{d_0 d_2}\right) \right\} - \frac{\Delta T \varepsilon}{m} g_i$ 
end for
execToroidalization( $\mathbf{x}$ )
/* pbest update */
 $\mathbf{x}_{pb}, E_{pb} \leftarrow \text{setPbest}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_{pb}, E_{pb})$ 
end for
/* Step3 Local Search */
 $\mathbf{x}^* \leftarrow \text{execSteepestDescent}(\mathbf{x}_{pb}, \varepsilon_g, \Delta T)$ 
 $\mathbf{x}_{pb}, E_{pb} \leftarrow \text{setPbest}(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}_{pb}, E_{pb})$ 
return  $\mathbf{x}_{pb}, E_{pb}$ 
end main

```

赤色で囲った部分を採用した場合が DNDM (C), オレンジ色で囲っている部分を採用した場合が DNDM (A).

C.5 Pseudo Code of DHA

```

main
/* Step1 Initialization */
Set following parameters:  $\Delta T, \mu, \varepsilon_g, \varepsilon_v, \varepsilon_E, k_{\max}, a_{ii}, a_{ij}, T$ 
/* Search point is initialized randomly */
for  $i \leftarrow 1$  to  $N$ 
     $x_i \leftarrow U(p_i, q_i)$ 
end for
/* Velocity initialization with gradient */
 $\mathbf{v} \leftarrow -\Delta T \nabla E(\mathbf{x})$ 
 $E_{pb} \leftarrow \infty, E_{best} \leftarrow \infty$ 
/* Step2 Main Search Procedure */
 $k \leftarrow 1$ 
while true
    /* Velocity update */
     $\mathbf{v} \leftarrow \mathbf{v} - \Delta T \nabla E(\mathbf{x})$ 
    /* Position update */
    for  $i \leftarrow 1$  to  $N$ 
         $x_i \leftarrow x_i + \Delta T \left( \frac{1}{2} a_{ii} v_i + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N a_{ij} v_j \right)$ 
    end for
    execToroidalization( $\mathbf{x}$ )
    /* pbest update */
     $\mathbf{x}_{pb}, E_{pb}, \mathbf{v}_{pb} \leftarrow \text{setPbest}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_{pb}, E_{pb}, \mathbf{v}, \mathbf{v}_{pb})$ 

```

```

/* Local search and building a new Hamiltonian system */
if  $k \% T = 0$  then
    /* Building a new Hamiltonian system */
     $\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{x}_{pb}, \mathbf{v}_{pb} \leftarrow \mu \mathbf{v}_{pb}, \mathbf{v} \leftarrow \mathbf{v}_{pb}$ 
    /* Local search */
     $\mathbf{x}^* \leftarrow \text{execSteepestDescent}(\mathbf{x}, \varepsilon_g, \Delta T)$ 
     $\mathbf{x}_{best}, E_{best} \leftarrow \text{setPbest}(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}_{best}, E_{best})$ 
    /* Convergence criterion (Objective Function) */
    if  $E_{best} < E(\mathbf{x}^o) + \varepsilon_E$ 
        break while
    end if
end if
end if
/* Convergence criterion (Gradient) */
if  $\|\mathbf{v}\| < \varepsilon_v$  or  $k > k_{\max}$  then
    break while
end if
 $k \leftarrow k + 1$ 
end while
/* Step3 Local Search */
 $\mathbf{x}^* \leftarrow \text{execSteepestDescent}(\mathbf{x}_{best}, \varepsilon_g, \Delta T)$ 
 $\mathbf{x}_{best}, E_{best} \leftarrow \text{setPbest}(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}_{best}, E_{best})$ 
return  $\mathbf{x}_{best}, E_{best}$ 
end main

```

C.6 Pseudo Code of Elite Coupling type DGCM

```

main
  /* Step1 Initialization */
  Set following parameters:
     $\Delta T_{\max}, k_{\max}, \varepsilon_g, P, \text{elite type}, \bar{c}_1, \bar{c}_2, T$ 
  /* Initialization of each agent */
  for  $p \leftarrow 1$  to  $P$ 
    /* Initialization of search point */
    for  $i \leftarrow 1$  to  $N$ 
       $x_i^p \leftarrow U(p_i, q_i)$ 
    end for
    /* Initialization of  $E_{pb}$  */
     $E_{pb}^p \leftarrow \infty$ 
  end for
  /* Initialization of  $E_{gb}$  */
   $E_{gb} \leftarrow \infty$ 
  /* Elite agent update */
  do setEliteAgents

  /* Step2 Main Search Procedure */
  for  $k = 0$  to  $k_{\max} - 1$ 
    /* Time varying parameter settings at  $k$  */
     $\Delta T \leftarrow \Delta T_{\max} \left(1 - \frac{k}{k_{\max}}\right)$ 
     $c_1 \leftarrow \bar{c}_1 \sin^2\left(\frac{2\pi k}{T}\right), c_2 \leftarrow \bar{c}_2 \sin^2\left(\frac{2\pi k}{T}\right)$ 
    /* DGCM Search of each agent */
    for  $p \leftarrow 1$  to  $P$ 
       $x_{back}^p \leftarrow x^p$ 
       $x^p \leftarrow x^p - \Delta T \nabla E(x^p)$ 
    end for
    /* Elite coupling and toroidalization */
    for  $p \leftarrow 1$  to  $P$ 
       $x^p \leftarrow x^p + c_1 \Delta T (x^{el(p)} - x_{back}^p) + c_2 \Delta T (x_{pb}^p - x_{back}^p)$ 
       $x^p \leftarrow \frac{1}{1+c_1+c_2} x^p + \frac{c_1}{1+c_1+c_2} x^{el(p)} + \frac{c_2}{1+c_1+c_2} x_{pb}^p$ 
      execToroidalization( $x^p$ )
    end for
    /* Elite agents update */
    do setEliteAgents
  end for
  /* Step3 Local Search */
  for  $p \leftarrow 1$  to  $P$ 
     $x \leftarrow \text{execSteepestDescent}(x, \varepsilon_g, \Delta T)$ 
  end for
   $x^{gb} \leftarrow \text{execSteepestDescent}(x_{pb}^{gb}, \varepsilon_g, \Delta T)$ 
  do setEliteAgents
  return  $x_{pb}^{gb}, E_{gb}$ 
end main

```

赤色で囲った部分を採用した場合が P-EC-DGCM, オレンジ色で囲った部分を採用した場合が PD-EC-DGCM.

C.7 Pseudo Code of Elite Coupling type Draining Method

```

main
/* Step1 Initialization */
Set following parameters:
 $\beta, \Delta T_{\max}, \delta, \varepsilon_g, \varepsilon_E, T, \tilde{T}, \bar{c}_1, \bar{c}_2, P$ 
/* Initialization of each agent */
for  $p \leftarrow 1$  to  $P$ 
  /* Initialization of search point */
  for  $i \leftarrow 1$  to  $N$ 
     $x_i^p \leftarrow U(p_i, q_i)$ 
  end for
  /* Initialization of  $E_{pb}$  */
   $E_{pb}^p \leftarrow \infty$ 
end for
/* Initialization of  $E_{gb}$  */
 $E_{gb} \leftarrow \infty$ 
/* Elite agent update */
do setEliteAgents
/* Step2 Execution of Plain DGCMwT and
Set water level  $\alpha (= E_{pb})$  */
/* Execution of plain DGCMwT */
for  $p \leftarrow 1$  to  $P$ 
   $\Delta T \leftarrow \Delta T_{\max}$ 
  while  $\Delta T > 0$ 
     $x^p \leftarrow x^p - \Delta T \times \nabla E(x^p)$ 
     $x^p \leftarrow \text{execToroidalization}(x^p)$ 
     $\Delta T \leftarrow \Delta T - \delta \times \Delta T_{\max} \times 0.1$ 
  end while
   $x^p \leftarrow \text{execSteepestDescent}(x^p, \varepsilon_g, \Delta T_{\max})$ 
end for
/* Elite agent update */
do setEliteAgents
/* Search points are reset */
for  $p \leftarrow 1$  to  $P$ 
  for  $i \leftarrow 1$  to  $N$ 
     $x_i^p \leftarrow U(p_i, q_i)$ 
  end for
end for
/* Step 3 Main Search Procedure */
 $\Delta T'_{\max} \leftarrow \Delta T_{\max}$ 
while true
  /*  $\Delta T$  are reset */
   $\Delta T \leftarrow \Delta T'_{\max}$ 
  /* Each agent's confined state is reset */
  for  $p \leftarrow 1$  to  $P$  confined $^p \leftarrow$  false end for
  while  $\Delta T > 0$ 
    for  $k \leftarrow 0$  to  $T-1$ 
      /* Time varying parameter settings at  $k$  */
       $c_1 \leftarrow \bar{c}_1 \sin^2\left(\frac{2\pi k}{\tilde{T}}\right), c_2 \leftarrow \bar{c}_2 \sin^2\left(\frac{2\pi k}{\tilde{T}}\right)$ 
      /* Chaotic Search at  $\alpha (= E_{pb})$  */
      for  $p \leftarrow 1$  to  $P$ 
        if confined $^p$  is false then
           $x_{back}^p \leftarrow x^p$ 
           $g^p \leftarrow \frac{\nabla E(x^p)}{(1 + \exp(-\beta \times (E(x^p) - E_{pb}^p)))}$ 
           $x^p \leftarrow x^p - \Delta T \times g^p$ 
        end if
      end for
      /* Elite coupling and toroidalization */
      for  $p \leftarrow 1$  to  $P$ 
        if confined $^p$  is false then
           $x^p \leftarrow x^p + c_1 \Delta T (x^{el(p)} - x_{back}^p) + c_2 \Delta T (x_{pb}^p - x_{back}^p)$ 
           $x^p \leftarrow \frac{1}{1+c_1+c_2} x^p + \frac{c_1}{1+c_1+c_2} x^{el(p)} + \frac{c_2}{1+c_1+c_2} x_{pb}^p$ 
           $x^p \leftarrow \text{execToroidalization}(x^p)$ 
        end if
      end for
      /* Elite agents update */
      do setEliteAgents
    end for
    /* Confinement Check */
    for  $p \leftarrow 1$  to  $P$ 
      if confined $^p$  is false then
         $g^p \leftarrow \frac{\nabla E(x^p)}{(1 + \exp(-\beta \times (E(x^p) - E_{pb}^p)))}$ 
        if  $\|g^p\| < \varepsilon_g$  then
          confined $^p \leftarrow$  true
        end if
      end if
    end for
    /* Chaotic search termination check */
    if all agents are confined then
      break while
    end if
     $\Delta T \leftarrow \Delta T - \delta \times \Delta T'_{\max}$ 
  end while
  /* Local Search and  $\Delta T'_{\max}$  update */
  for  $p \leftarrow 1$  to  $P$ 
     $x_{back}^p \leftarrow x^p$ 
     $x^p \leftarrow \text{execSteepestDescent}(x^p, \varepsilon_g, \Delta T_{\max})$ 
  end for
  do setEliteAgents
  /* Search points are reset */
  for  $p \leftarrow 1$  to  $P$   $x^p \leftarrow x_{back}^p$  end for
   $\Delta T'_{\max} \leftarrow \Delta T'_{\max} - \delta \times \Delta T_{\max}$ 
  /* Termination Decision */
  if  $\Delta T'_{\max} < 0$  or  $E_{gb} < E(x^o) + \varepsilon_E$  then
    break while
  end if
end while
return  $x_{pb}^{gb}, E_{gb}$ 
end main

```

赤色で囲った部分を採用した場合が P-EC-DM, オレンジ色で囲った部分を採用した場合が PD-EC-DM.

C.8 Pseudo Code of Elite Coupling type DNDM

```

main
  /* Step1 Initialization */
  Set following parameters:
     $\Delta T_{\max}, k_{\max}, d_1, d_2, m, \epsilon, \epsilon_g, P, \text{elite type}, \bar{c}_{11}, \bar{c}_{12}, \bar{c}_{21}, \bar{c}_{22}, T$ 
  Set following parameters:  $d_0, \omega$ 
  Set following parameters:  $d_{0\max}$ 
  /* Initialization of each agent */
  for  $p \leftarrow 1$  to  $P$ 
    /* Initialization of search point */
    for  $i \leftarrow 1$  to  $N$ 
      /* Position initialization */
       $x_i^p \leftarrow U(p_i, q_i)$ 
    end for
    /* Velocity initialization with gradient */
     $\mathbf{v}^p \leftarrow -\frac{\Delta T_{\max}}{m} \nabla E(\mathbf{x}^p)$ 
    /* Initialization of  $E_{pb}$  */
     $E_{pb}^p \leftarrow \infty$ 
  end for
  /* Initialization of  $E_{gb}$  */
   $E_{gb} \leftarrow \infty$ 
  /* Elite agent update */
  do setEliteAgents
  /* Step2 Main Search Procedure */
  for  $k \leftarrow 0$  to  $k_{\max} - 1$ 
    /* Time varying parameter settings at  $k$  */
     $\Delta T \leftarrow \Delta T_{\max} \left(1 - \frac{k}{k_{\max}}\right)$ 
     $c_{11} \leftarrow \bar{c}_{11} \sin^2\left(\frac{2\pi k}{T}\right), c_{12} \leftarrow \bar{c}_{12} \sin^2\left(\frac{2\pi k}{T}\right)$ 
     $c_{21} \leftarrow \bar{c}_{21} \sin^2\left(\frac{2\pi k}{T}\right), c_{22} \leftarrow \bar{c}_{22} \sin^2\left(\frac{2\pi k}{T}\right)$ 
     $d_0 \leftarrow d_{0\max} \left(1 - \frac{k}{k_{\max}}\right)$ 
    /* DNDM Search of each agent */
    for  $p \leftarrow 1$  to  $P$ 
      /* Gradient computation */
       $\mathbf{g}^p \leftarrow \nabla E(\mathbf{x}^p)$ 
      /* Position update */
       $\mathbf{x}_{back}^p \leftarrow \mathbf{x}^p$ 
       $\mathbf{x}^p \leftarrow \mathbf{x}^p + \Delta T \mathbf{v}^p$ 
      /* Velocity update */
       $\mathbf{v}_{back}^p \leftarrow \mathbf{v}^p$ 
      for  $i \leftarrow 1$  to  $N$ 
         $v_i^p \leftarrow v_i^p - \frac{\Delta T}{m} \left\{ (d_0 \sin(\omega k) + d_1) v_i^p \right.$ 
           $\left. + \text{sgn}(v_i^p) d_2 \{v_i^p\}^2 \right\} - \frac{\Delta T \epsilon}{m} g_i^p$ 
         $v_i^p \leftarrow v_i^p - \frac{\Delta T d_1}{m} \left\{ v_i^p - d_0 v_i^p \exp\left(-\frac{\|\mathbf{v}^p\|}{d_0 d_2}\right) \right\}$ 
           $- \frac{\Delta T \epsilon}{m} g_i^p$ 
        end for
      end for
      /* Elite coupling and toroidalization */
      for  $p \leftarrow 1$  to  $P$ 
         $\mathbf{x}^p \leftarrow \mathbf{x}^p + c_{11} \Delta T (\mathbf{x}^{el(p)} - \mathbf{x}_{back}^p) + c_{12} \Delta T (\mathbf{x}_{pb}^p - \mathbf{x}_{back}^p)$ 
         $\mathbf{v}^p \leftarrow \mathbf{v}^p + c_{21} \Delta T (\mathbf{v}^{el(p)} - \mathbf{v}_{back}^p) + c_{22} \Delta T (\mathbf{v}_{pb}^p - \mathbf{v}_{back}^p)$ 
         $\mathbf{x}^p \leftarrow \frac{1}{1+c_{11}+c_{12}} \mathbf{x}^p + \frac{c_{11}}{1+c_{11}+c_{12}} \mathbf{x}^{el(p)} + \frac{c_{12}}{1+c_{11}+c_{12}} \mathbf{x}_{pb}^p$ 
         $\mathbf{v}^p \leftarrow \frac{1}{1+c_{21}+c_{22}} \mathbf{v}^p + \frac{c_{21}}{1+c_{21}+c_{22}} \mathbf{v}^{el(p)} + \frac{c_{22}}{1+c_{21}+c_{22}} \mathbf{v}_{pb}^p$ 
        execToroidalization( $\mathbf{x}^p$ )
      end for
      /* Elite agent update */
      do setEliteAgents
    end for
    /* Step3 Local Search */
    for  $p \leftarrow 1$  to  $P$ 
       $\mathbf{x} \leftarrow \text{execSteepestDescent}(\mathbf{x}, \epsilon_g, \Delta T)$ 
    end for
     $\mathbf{x}^{gb} \leftarrow \text{execSteepestDescent}(\mathbf{x}_{pb}^{gb}, \epsilon_g, \Delta T)$ 
    do setEliteAgents
    return  $\mathbf{x}_{pb}^{gb}, E_{gb}$ 
  end main

```

赤色で囲った部分を採用した場合が P-EC-DNDM, オレンジ色で囲った部分を採用した場合が PD-EC-DNDM. さらに, 紺色で囲った部分を採用した場合が DNDM (C), 青色で囲った部分を採用した場合が DNDM (A).

C.9 Pseudo Code of Elite Coupling type DHA

```

main
  /* Step1 Initialization */
  Set following parameters:
     $\Delta T, \mu, \varepsilon_g, \varepsilon_v, \varepsilon_E, k_{\max}, a_{ii}, a_{ij}, T, P, \text{elite type}, \bar{c}_1, \bar{c}_2$ 
  /* Initialization of each agent */
  for  $p \leftarrow 1$  to  $P$ 
    /* Initialization of search point */
    for  $i \leftarrow 1$  to  $N$ 
      /* Position initialization */
       $x_i^p \leftarrow U(p_i, q_i)$ 
    end for
    /* Velocity initialization with gradient */
     $v^p \leftarrow -\Delta T \nabla E(x^p)$ 
    /* Initialization of  $E_{pb}$  */
     $E_{pb}^p \leftarrow \infty$ 
  end for
  /* Initialization of  $E_{gb}$  */
   $E_{gb} \leftarrow \infty, E_{best} \leftarrow \infty$ 
  /* Elite agent update */
  do setEliteAgents
  /* Step2 Main Search Procedure */
   $k \leftarrow 1$ 
  while true
    /* Time varying parameter settings at  $k$  */
     $c_1 \leftarrow \bar{c}_1 \sin^2\left(\frac{2\pi k}{T}\right), c_2 \leftarrow \bar{c}_2 \sin^2\left(\frac{2\pi k}{T}\right)$ 
    /* DHA Search of each agents */
    for  $p \leftarrow 1$  to  $P$ 
      /* Velocity update */
       $v_{back}^p \leftarrow v^p$ 
       $v^p \leftarrow v^p - \Delta T \nabla E(x^p)$ 
      /* Position update */
       $x_{back}^p \leftarrow x^p$ 
      for  $i \leftarrow 1$  to  $N$ 
         $x_i^p \leftarrow x_i^p + \Delta T \left( \frac{1}{2} a_{ii} v_i^p + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N a_{ij} v_j^p \right)$ 
      end for
    end for
  end while
  /* Elite coupling and toroidalization */
  for  $p \leftarrow 1$  to  $P$ 
     $x^p \leftarrow x^p + c_1 \Delta T (x^{el(p)} - x_{back}^p)$ 
     $v^p \leftarrow v^p + c_2 \Delta T (v^{el(p)} - v_{back}^p)$ 
     $x^p \leftarrow \frac{1}{1+c_1} x^p + \frac{c_1}{1+c_1} x^{el(p)}$ 
     $v^p \leftarrow \frac{1}{1+c_2} v^p + \frac{c_2}{1+c_2} v^{el(p)}$ 
    execToroidalization( $x^p$ )
  end for
  /* Elite agent update */
  do setEliteAgents
  /* Local search and building a new Hamiltonian system */
  if  $k \% T = 0$  then
    for  $p \leftarrow 1$  to  $P$ 
      /* Building a new Hamiltonian system */
       $x_{pb}^p \leftarrow x_{pb}^p, v_{pb}^p \leftarrow \mu v_{pb}^p, v^p \leftarrow v_{pb}^p$ 
      /* Local search */
       $x^* \leftarrow \text{execSteepestDescent}(x^p, \varepsilon_g, \Delta T)$ 
       $x_{best}, E_{best} \leftarrow \text{setPbest}(x^*, x_{best}, E_{best})$ 
    end for
    /* Convergence criterion (Objective Function) */
    if  $E_{best} < E(x^o) + \varepsilon_E$ 
      break while
    end if
    /* Convergence criterion (Gradient) */
    if  $\|v^{gb}\| < \varepsilon_v$  or  $k > k_{\max}$  then
      break while
    end if
     $k \leftarrow k + 1$ 
  end while
  /* Step3 Local Search */
  for  $p \leftarrow 1$  to  $P$ 
     $x^* \leftarrow \text{execSteepestDescent}(x^p, \varepsilon_g, \Delta T)$ 
     $x_{best}, E_{best} \leftarrow \text{setPbest}(x^*, x_{best}, E_{best})$ 
  end for
  return  $x_{best}, E_{best}$ 
end main

```

赤色で囲った部分を採用した場合が P-EC-DHA, オレンジ色で囲った部分を採用した場合が PD-EC-DHA.

C.10 Pseudo Code of TRUST

```

/* Initial point of tunneling creation procedure */
function createInitPointofTunnel
  if  $m = -1$  then
    /* Initialization after Local Search */
     $d \leftarrow 1.0, m \leftarrow 0$ 
     $j$  is choosed randomly in  $\{1, \dots, N\}$ 
    /* Perturbation */
     $x_j \leftarrow x_j + \varepsilon$ 
  else if  $d > 0.0$  then
    /* Positive direction search is finished. Then,
    Negative direction search is started. */
     $d \leftarrow -1.0, \mathbf{x} \leftarrow \mathbf{x}_{\min}$ 
    /* Perturbation */
     $x_j \leftarrow x_j - \varepsilon$ 
  else
    /* Positive and negative direction search is finished. */
    if  $m = N - 1$  then
      /* Tunneling of all components are finished.
      Hence,  $\rho$  is decreased and Tunneling phase is
      restarted. */
       $\rho \leftarrow \rho \times 0.9, m \leftarrow -1$ 
      do createInitPointofTunnel
    else
      /* Tunneling of next component is started */
       $d \leftarrow 1.0$ 
       $j \leftarrow j + 1$ 
      if  $j = N + 1$  then
         $j \leftarrow 1$ 
      end if
       $\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{x}_{\min}$ 
      /* Perturbation */
       $x_j \leftarrow x_j + \varepsilon$ 
    end if
  end if
end procedure

/* main function */
main
  /* Step1 Initialization */
  Set following parameters:  $\varepsilon, \varepsilon_x, a, \rho_{\max}, c, \Delta T, \eta, C_{\max}$ 
  /* Search point initialized randomly*/
  for  $i \leftarrow 1$  to  $N$ 
     $x_i \leftarrow U(p_i, q_i)$ 
  end for
  /* Initialization of best solution*/
   $E_{\min} \leftarrow E(\mathbf{x}), \mathbf{x}_{\min} \leftarrow \mathbf{x}$ 
  /* First phase is Local Search */
  phase  $\leftarrow$  Local Search

  /* Step2 Main Search */
  while true
    if phase is Local Search then
      /* Local Search Phase */
       $\bar{\mathbf{x}} \leftarrow \mathbf{x}$ 
      for  $i \leftarrow 1$  to  $N$ 
         $x_i \leftarrow x_i - \frac{c\Delta T}{1 + \exp(E(\mathbf{x}) - E_{\min} + a)} \frac{\partial E(\mathbf{x})}{\partial x_i}$ 
      end for
      /* Search region check */
      if  $x_i > q_i$  then
         $x_i \leftarrow q_i$ 
      else if  $x_i < p_i$  then
         $x_i \leftarrow p_i$ 
      end if
    end for
    /* Local Search termination check */
    if  $\|\bar{\mathbf{x}} - \mathbf{x}\| < \varepsilon_x$  then
      /* Switching to tunneling phase */
       $\mathbf{x}_{\min} \leftarrow \mathbf{x}, E_{\min} \leftarrow E(\mathbf{x})$ 
      phase  $\leftarrow$  Tunneling
       $\rho \leftarrow \rho_{\max}, m \leftarrow -1$ 
      do createInitPointofTunnel
    end if
  else
    /* Tunneling Phase */
    /* Tunneling Phase termination check */
    if  $E(\mathbf{x}) < E_{\min}$  then
      phase  $\leftarrow$  Local Search
    end if
    /* Tunneling */
     $\mathbf{x}_j \leftarrow \mathbf{x}_j + d\Delta T \times \rho |x_j - x_{\min j}|^{1/3} \times \theta(E(\mathbf{x}) - E_{\min})$ 
    /* Search region check */
    if  $x_j > q_j$  or  $x_j < p_j$  then
      if  $x_j > q_j$  then
         $x_j \leftarrow q_j$ 
      else if  $x_j < p_j$  then
         $x_j \leftarrow p_j$ 
      end if
    end if
    do createInitPointofTunnel
  end if
end while
  /* Termination check */
  if  $\eta \times \text{OF Calls} + \text{AD Calls} > C_{\max}$  then
    return  $\mathbf{x}_{\min}, E_{\min}$ 
  end if
end main

```

$\theta(x)$ はヘビサイド関数である。また、終了条件を計算量を用いて設定しているため、実装においては、一時変数への代入等を用いることで、目的関数・自動微分の呼び出し回数が最小になるようにした。なお、これは C.11, C.12 節でも同様である。

C.11 Pseudo Code of HDA

```

/* Steepest descent method with linear search */
function oneStepSD( $x, \epsilon_g, \Delta T$ )
     $\alpha \leftarrow \Delta T$ 
    while  $\alpha > 10^{-10}$ 
         $x_{imp} \leftarrow x - \alpha \nabla E(x)$ 
        if  $E(x_{imp}) \leq E(x) - 0.5\alpha \|\nabla E(x)\|^2$  then
             $x \leftarrow x_{imp}$ 
            break while
        end if
         $\alpha \leftarrow 0.5\alpha$ 
    end while
     $x \leftarrow \text{execToroidalization}(x)$ 
    return  $x$ 
end function

/* SA Procedure*/
function execSA( $x, T$ )
    /* Perturbation */
     $A \leftarrow \{1, \dots, N\}$ 
    Elements of  $A$  are permuted at random
     $t$  is chosen randomly in  $\{1, \dots, N\}$ 
     $\bar{x} \leftarrow x$ 
    for  $i \leftarrow 1$  to  $t$ 
         $j \leftarrow i$  th element of  $A$ 
         $\bar{x}_j \leftarrow U(p_j, q_j)$ 
    end for
    /* Decision of acceptance */
     $D \leftarrow E(\bar{x}) - E(x)$ 
    if  $D < -\delta$  or  $U(0,1) < T \exp(-D/T)$  then
         $x \leftarrow \bar{x}$ 
    end if
    return  $x$ 
end function

/* main function */
main
    /* Step1 Initialization */
    Set following parameters:
         $\delta, N_c, N_p, \alpha, T_{max}, \Delta T, \epsilon_g, \eta, C_{max}$ 
    /* Search point initialized randomly*/
    for  $i \leftarrow 1$  to  $N$ 
         $x_i \leftarrow U(p_i, q_i)$ 
    end for
    /* Initialization of  $E_{pb}$  and  $E_{back}$ */
     $E_{pb} \leftarrow \infty$ 
     $E_{back} \leftarrow E(x)$ 
    /* First phase is Local Search */
    phase  $\leftarrow$  Local Search

```

```

/* Step2 Main Search */
while true
    if phase is Local Search then
        /* Local Search Phase */
        for  $k \leftarrow 1$  to 100
            /* Steepest decent with Linear Search */
             $x \leftarrow \text{oneStepSD}(x, \epsilon_g, \Delta T)$ 
            /* pbest update */
             $x_{pb}, E_{pb} \leftarrow \text{setPbest}(x, x_{pb}, E_{pb})$ 
            /* Termination check */
            if  $\eta \times \text{OF Calls} + \text{AD Calls} > C_{max}$  then
                return  $x_{pb}, E_{pb}$ 
            end if
            /* Convergence check of local search */
            if  $\|\nabla E(x)\| < \epsilon_g$  then
                break for
            end if
        end for
        /* Phase switch check */
        if  $E_{pb} - E_{back} < -\delta$  then
            phase  $\leftarrow$  SA
             $T \leftarrow T_{max}$ 
             $E_{back} \leftarrow E_{pb}$ 
        end if
    else
        /* SA Phase */
        for  $i \leftarrow 1$  to  $N_c$ 
            for  $j \leftarrow 1$  to  $N_p$ 
                /* update  $x$  */
                execSA( $x, T$ )
                /* pbest update */
                 $x_{pb}, E_{pb} \leftarrow \text{setPbest}(x, x_{pb}, E_{pb})$ 
                /* Termination check */
                if  $\eta \times \text{OF Calls} + \text{AD Calls} > C_{max}$  then
                    return  $x_{pb}, E_{pb}$ 
                end if
            end for
        end for
        /* update T */
         $T \leftarrow \alpha T$ 
    end for
    /* Phase switch check */
    if  $E_{pb} - E_{back} < -\delta$  then
        phase  $\leftarrow$  Local Search
         $E_{back} \leftarrow E_{pb}$ 
    end if
end if
end while
end main

```


C.12 Pseudo Code of GRPSO

```

/* Steepest descent method with linear search */
function oneStepSD( $\mathbf{x}, \varepsilon_g, \Delta T$ )
     $\alpha \leftarrow \Delta T$ 
    while  $\alpha > 10^{-10}$ 
         $\mathbf{x}_{tmp} \leftarrow \mathbf{x} - \alpha \nabla E(\mathbf{x})$ 
        if  $E(\mathbf{x}_{tmp}) \leq E(\mathbf{x}) - 0.5\alpha \|\nabla E(\mathbf{x})\|^2$  then
             $\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{x}_{tmp}$ 
            break while
        end if
         $\alpha \leftarrow 0.5\alpha$ 
    end while
     $\mathbf{x} \leftarrow \text{execToroidalization}(\mathbf{x})$ 
    return  $\mathbf{x}$ 
end function

/* PSO Procedure */
procedure execPSO
    for  $p \leftarrow 1$  to  $P$ 
        /* Velocity update */
        for  $i \leftarrow 1$  to  $N$ 
             $v_i^p \leftarrow wv_i^p + c_1 \times U(0,1) \times (x_{pbi}^p - x_i^p)$ 
                 $+ c_2 \times U(0,1) \times (x_{pbi}^{gb} - x_i^p)$ 
            if  $v_i^p > \bar{v}_i$  then
                 $v_i^p \leftarrow \bar{v}_i$ 
            else if  $v_i^p < -\bar{v}_i$  then
                 $v_i^p \leftarrow -\bar{v}_i$ 
            end if
        end for
        /* Position update */
         $\mathbf{x}^p \leftarrow \mathbf{x}^p + \mathbf{v}^p$ 
    end for
end procedure

/* Check whether phase is switch to local search phase
and switch of phase */
procedure switchToLS
    if  $\mathbf{x}$  lies in feasible region and  $E_{gb} < E_{\min}$  then
         $E_{\min} \leftarrow E_{gb}, \mathbf{x}_{\min} \leftarrow \mathbf{x}_{pb}^{gb}$ 
        phase  $\leftarrow$  Local Search
         $k \leftarrow 0, \mathbf{x}^{gb} \leftarrow \mathbf{x}_{pb}^{gb}$ 
    end if
end procedure

/* PSO initialization and phase switch procedure */
procedure switchToPSO
    phase  $\leftarrow$  PSO,  $k \leftarrow 0$ 
    /* gbest is reset */
     $E_{gb} \leftarrow \infty$ 
    /* Initialization of each agent */
    for  $p \leftarrow 1$  to  $P$ 
        for  $i \leftarrow 1$  to  $N$ 
             $x_i^p \leftarrow U(p_i, q_i), v_i^p \leftarrow 0$ 
        end for
    end for
    do setEliteAgent

/* Phase switch check */
do switchToLS
end procedure

/* main function */
main
/* Step1 Initialization */
Set following parameters:  $w, c_1, c_2, P, T_{pso}, \Delta T, \varepsilon_g, \eta, C_{\max}$ 
/* v max setting */
 $\bar{v} \leftarrow 0.5 \times (q - p)$ 
/* Search point initialized randomly */
for  $i \leftarrow 1$  to  $N$ 
     $x_i \leftarrow U(p_i, q_i)$ 
end for
/* Initialization of  $E_{gb}$  and  $E_{\min}$  */
 $E_{gb} \leftarrow \infty, E_{\min} \leftarrow \infty$ 
/* Elite agent update */
do setEliteAgent
/* First phase is Local Search */
phase  $\leftarrow$  Local Search
 $k \leftarrow 0, \mathbf{x}^{gb} \leftarrow \mathbf{x}_{pb}^{gb}$ 
/* Step2 Main Search */
while true
    if phase is Local Search then
        /* Local Search Phase (gbest only) */
         $\mathbf{x}^{gb} \leftarrow \text{oneStepSD}(\mathbf{x}^{gb}, \varepsilon_g, \Delta T)$ 
         $k \leftarrow k + 1$ 
        /* pbest update */
         $\mathbf{x}_{pb}^{gb}, E_{pb}^{gb} \leftarrow \text{setPbest}(\mathbf{x}^{gb}, \mathbf{x}_{pb}^{gb}, E_{pb}^{gb})$ 
        /* Convergence check of local search */
        if  $\|\nabla E(\mathbf{x}^{gb})\| < \varepsilon_g$  or  $k = 100$  then
            /* Best solution update */
             $E_{\min} \leftarrow E_{pb}^{gb}, \mathbf{x}_{\min} \leftarrow \mathbf{x}_{pb}^{gb}$ 
            /* Phase is switched to PSO phase */
            do switchToPSO
        end if
    else
        /* PSO Phase */
        do execPSO
         $k \leftarrow k + 1$ 
        do setEliteAgent
        /* Phase switch check */
        do switchToLS
        /* If PSO runs for  $T_{pso}$  times, then PSO is reset */
        if  $k > T_{pso}$  then
            do switchToPSO
        end if
    end if
    /* Termination check */
    if  $\eta \times \text{OF Calls} + \text{AD Calls} > C_{\max}$  then
        return  $\mathbf{x}_{\min}, E_{\min}$ 
    end if
end while
end main

```

付録D シミュレーション実行環境

本章では、シミュレーション実行環境について示す。

- **OS**
SuSE Linux 10.0
- **マシンスペック**
RAM : 1.0GB
CPU : AMD Opteron™ 252 ×2 2.5GHz L2 Cache 1MB
- **実行言語・ライブラリ**
C++ with CPPLAPACK, ATLAS and ADOL-C
CPPLAPACK^[102] (LAPACK / BLAS Wrapper) : CPPLAPACK-2005_03_25
ATLAS^[103] (BLAS ライブラリ) : ATLAS 3.6.0
ADOL-C^[98, 99] (自動微分計算) : ADOL-C 1.10.0 tapeless forward mode
- **コンパイラ**
PGI Compiler 6.0