

平成 30 年度 電気通信大学大学院情報理工学研究科 修士論文

適応的個体間距離に基づく複数解探索型 Bat Algorithm

所属	情報学専攻メディア情報学プログラム
学籍番号	1730022
氏名	岩瀬拓哉
主任指導教員	高玉圭樹教授
指導教員	佐藤寛之准教授
提出日	平成 31 年 1 月 28 日

概要

本論文では、複数の多峰性を持つ関数最適化に着目し、最適解と局所解を含む解を可能な限り多く見出す多点探索アルゴリズムを考案するとともに、その有効性を検証することを目的とする。特に、従来の多点探索アルゴリズムは一つの最適解をより早くかつ正確に見出すアプローチが主流であるが、解が1つではなく複数存在する実問題では、一つの最適解だけでなく複数解(最適解及び局所解)を探索することは、有力な解候補を複数持つという意味で重要である。このような複数解探索に基づく手法として、局所解への収束を防ぐ機構である Niching scheme と遺伝的アルゴリズムに代表される進化計算を組み合わせた Niching method が探究されているが、いずれの手法においても密接した解を除き、探索空間内にランダムに解生成するため、乱数に強く依存するという問題がある。この問題を解決するために、本研究では多点探索アルゴリズムの中でも大域探索と局所探索のバランスを調整可能な Bat Algorithm を採用し、個体間距離に基づく動的変化を考慮した Niching scheme を用いることで、最適解だけでなく局所解も同時に探索可能な3つの複数解探索手法を提案する。具体的には、(i) 未探索領域へ解の探索を促す Novelty Search を導入した Novelty Search-based Bat Algorithm (NSBA), (ii) 探索空間の大きさと最適解数から算出される Niche Radius を用いることで、予め各個体の探索領域を決定し、その探索領域内の最良個体から遠ざかる方向に移動させることによって、個体同士と同じ解に留まらせない Niche Radius-based Bat Algorithm (NRBA), (iii) 探索領域を動的に変更することで、NRBA の効果を高めた Bat Algorithm with Dynamic Niche Radius (DNRBA) を考案し、最適解と局所解の数が異なる多峰性関数を用いて比較する。その結果、(1) 従来手法の BA は一つの最適解に収束するのに対し、3つの提案手法は最適解及び局所解を探索することができ、(2) その中でも DNRBA, NRBA, NSBA の順で性能が良いことが明らかになった。

目 次

1	はじめに	1
1.1	背景と目的	1
1.2	論文構成	1
2	Metaheuristic Algorithms	2
2.1	遺伝的アルゴリズム (GA)	2
2.2	進化戦略 (ES)	3
2.3	粒子群最適化 (PSO)	3
2.4	差分進化 (DE)	4
2.5	Bat Algorithm (BA)	6
2.6	Evolution Strategies with Covariance Matrix Adaptation (CMA-ES)	8
2.7	A Fast and Elitist Multi-objective Genetic Algorithm (NSGA-II)	10
3	Niching Scheme	12
3.1	Crowding	12
3.2	Niche Radius	12
3.3	Fitness Sharing	12
3.4	Dynamic Niche Sharing	13
4	Niching Methods	14
4.1	Crowding DE (CDE)	14
4.2	A Dynamic Archive Niching Differential Evolution (dADE)	14
4.3	Niching the CMA-ES via Nearest-Better Clustering (NEA)	17
4.4	Parameterless-Niching-Assisted NSGAII (PNA-NSGAII)	19
5	多峰性最適化問題	20
5.1	最小化問題における評価関数	20
5.2	最大化問題における評価関数	28
6	Novelty Search-based Bat Algorithm (NSBA)	33
6.1	Novelty Search	33
6.2	メカニズム	33
6.3	アルゴリズム	34
6.4	実験	35
6.4.1	評価関数	35
6.4.2	評価基準	35
6.4.3	実験設定	36
6.4.4	実験結果	36
6.5	考察	36
6.5.1	個体数による影響	36
6.5.2	解の分布	37

7 Niche Radius-based Bat Algorithm (NRBA)	46
7.1 メカニズム	46
7.2 アルゴリズム	47
7.3 実験	48
7.3.1 評価関数	48
7.3.2 評価基準	49
7.3.3 実験設定	49
7.3.4 実験結果	49
7.4 考察	50
7.4.1 解の発見数	50
7.4.2 最終世代における解の分布	50
8 Dynamic Niche Radius-based Bat Algorithm (DNRBA)	57
8.1 メカニズム	57
8.2 アルゴリズム	58
8.3 実験	58
8.3.1 評価関数	58
8.3.2 評価基準	59
8.3.3 Peak Ratio	59
8.3.4 Peak Accuracy	59
8.4 実験設定	61
8.5 実験結果と考察	61
8.5.1 Peak Ratio	61
8.5.2 Peak Accuracy	62
9 他の最先端手法との性能比較実験	66
9.1 評価関数	66
9.2 評価基準	66
9.3 比較手法	66
9.4 実験設定	66
9.5 結果と考察	66
10 おわりに	70
10.1 まとめ	70
10.2 今後の課題	70
謝辞	71
参考文献	72

1 はじめに

1.1 背景と目的

実問題の複雑さを多峰性最適化問題として表した時に一つの最適解だけでなく、複数の局所解を探索することは、環境変化によって解が変化した場合や複数の選択の候補解として保持しておくことは非常に重要な意味を持つ。実問題の一例として、「探査機の月面着陸地点選定問題」[25] では一つの最適解と複数の局所解が存在するが、最適解が着陸困難な場所であった場合、他の着陸地点(則ち局所解)を選択肢として保持しておくことで補うことが可能となる。複数解探索手法 (*Niching methods*) [12], [16], [20] は、進化的アルゴリズム (Evolutionary Algorithms:EAs) [7] や多点探索アルゴリズム [6], [9], [17], [22] をベースとした Niching scheme を組み合わせた手法として数多く研究がなされている。しかし、複数解探索する上でいずれの手法も探索する個体が同じ局所解に留まらないための機構が組み込まれているだけであり、未探索領域への探索はランダム性に依存する傾向にある。

そこで本研究では、次の 3 つの複数解探索手法を提案する。(i) 未探索領域を探索可能な Novelty Search を用い、探索範囲の自動調整が可能な Bat Algorithm を組み合わせた Novelty Search-based Bat Algorithm (NSBA) [19]; (ii) 探索空間の大きさと最適解数から算出される Niche Radius を用いることで、予め各個体の探索領域を決定し、その探索領域内の最良個体から遠ざかる方向へ移動し、個体同士が同じ解に留まらず、分散させる Niche Radius-based Bat Algorithm (NRBA) [24]; (iii) 個体の分布密度が高い Niche Radius 内で、評価値の低い個体をその領域から移動させる NRBA を拡張した Bat Algorithm with Dynamic Niche Radius (DNRBA)。これら 3 つの提案手法の探索性能の有効性を検証するため、従来手法と各提案手法を比較する。使用する評価関数は、最適解と局所解の両方を含む関数、最適解のみ存在する関数の 2 つを用意し、探索性能に差異があるか調査する。

1.2 論文構成

本論文の構成は次の通りである。2 章で多峰性最適化問題における、複数解探索手法のベースとなる一般的な EAs と SI について説明し、3 章でその複数解探索へ向けた機構である Niching Scheme について説明する。4 章では、EAs あるいは多点探索アルゴリズムと Niching Scheme を組み合わせた複数解探索手法を説明し、5 章で実験で扱う最小化問題における複数解(最適解と局所解を含む)評価関数と、他の最先端手法との性能比較で扱う最大化問題における複数解探索(最適解のみ)を目的とした評価関数について説明する。6 章から 8 章までは提案手法である NSBA, NRBA 及び DNRBA の説明及び性能比較をした後、9 章にて他の最先端手法との比較実験を行い、10 章で本論文のまとめを行う。

2 Metaheuristic Algorithms

現実問題の複雑さを多峰性関数として表現した問題を最適化するために EAs が用いられるようになった。EAs のメカニズムとして单一の最適解を探索することを目的として設計されており、生物の生殖や突然変異、交叉、適者生存といった過程をモデルとしている。Niching methods のベースとなる EAs や多点探索アルゴリズムの代表的なアルゴリズムを 2.1 節から 2.7 節で紹介する。

2.1 遺伝的アルゴリズム (GA)

遺伝的アルゴリズム (Genetic Algorithm:GA) [7] は生物の進化の過程を模擬したアルゴリズムであり、最適化問題において最も基本的なヒューリスティック手法である。生物は次の世代により良い遺伝子を持った個体を残すため、まずは親集合の中から個体を選択し、選択した個体同士を交叉させる。この時、ある一定の確率で突然変異させる。次に、交叉させて新たに生成された個体を子集合の解候補とし、親と子の個体を評価して、評価値の高い個体は次世代の個体として保存され、評価値の低い個体は淘汰される。各個体に対し、この「選択」、「交叉」、「突然変異」、「評価(淘汰)」を繰り返すことで、環境に対する適合度が高くなっていく(評価値の高い遺伝子が残る)。アルゴリズムの疑似コードは Algorithm 1 に、その手順は以下に記す。

- **STEP1:** 個体の初期化 (1-2 行目)

N 個の個体 x_i を初期集合として生成し、ランダムな評価値を割り当てる。また交叉率と突然変異率を定義する。

- **STEP2:** 選択と交叉 (5-7 行目)

選択した親同士 x_i を交叉率 P_c により交叉させ、子(解候補) x_i^{new} を生成する。

- **STEP3:** 突然変異 (8-10 行目)

突然変異率 P_m により、子(解候補)の評価値を変化させる。

- **STEP4:** 評価 (11-13 行目)

親個体 x_i と子個体 x_i^{new} の評価値を比較し、評価値の高い個体を次世代に残す。

Algorithm 1 Genetic Algorithm

Input: Objective Function $F(x), x = (x_1, x_2, \dots, x_d)$

```

1: Initialize Population  $x_i(i = 1, 2, \dots, N)$ 
2: Initialize  $P_m, P_c$ 
3: while t < Max Generation do
4:   for i=1 to N do
5:     if  $rand(0, 1) < P_c$  then
6:       Generate an offspring  $x_i^{new}$ 
7:     end if
8:     if  $rand(0, 1) < P_m$  then
9:       Replace mutated offspring  $x_i^{new}$ 
10:    end if
11:    if  $F(x_i) < F(x_i^{new})$  then
12:      Replace  $x_i$  with  $x_i^{new}$ 
13:    end if
14:   end for
15:   t=t+1
16: end while

```

2.2 進化戦略 (ES)

2.3 粒子群最適化 (PSO)

最適化手法の一つとして粒子群最適化 (Particle Swarm Optimization:PSO) がある。PSO は、ランダムに個体を初期化するという点において、遺伝的アルゴリズム (GA) に似た性質を持つ。魚や鳥の群れの動きをモデルにしたアルゴリズムであり、個体間のユークリッド距離を速度として新たに解候補を生成する。個体の速度及び生成式は以下の通りである。

$$\mathbf{v}_i^{t+1} = w\mathbf{v}_i^t + c_1r_1 \cdot (\mathbf{x}_{pbest}^t - \mathbf{x}_j^t) + c_2r_2 \cdot (\mathbf{x}_{gbest}^t - \mathbf{x}_i^t) \quad (2.1)$$

$$\mathbf{x}_i^{t+1} = \mathbf{x}_i^t + \mathbf{v}_i^{t+1} \quad (2.2)$$

x_i, v_i は時刻 t における各個体の現在位置と速度を表し、 w, c_1, c_2 は係数、 r_1, r_2 は一様乱数を表す。これらの係数が速度を制限するパラメータとなっており、 w が時刻 t での速度を調整し、 c_1, c_2 は値が 1 より小さいほど局所探索を行い、1 より大きくなると最良個体を含む広い範囲を大域探索するようになる。PSO のアルゴリズムの疑似コードを Algorithm 2 に、その手順を以下に記す。

- **STEP1: 初期個体の生成 (1-3 行目)**

個体 $x_i(i = 1, 2, \dots, N)$ を探索空間内にランダム生成し、係数 c_1, c_2, w を初期化する。

- **STEP2: 解候補の生成と速度の更新 (6 行目)**

速度 v_i により新たに解候補 x_i^{t+1} を生成を生成する。

- **STEP3: 評価 (7-12 行目)**

生成した解候補が t 時点での最良解 x_{pbest} よりも評価値が高ければ更新する.

- **STEP4: STEP2 へ戻る**

終了条件を満たすまで STEP2 へ戻る

Algorithm 2 Particle Swarm Optimization

Input: Objective Function $F(x)$, $x = (x_1, x_2, \dots, x_d)$

 Initialize Population $x_i (i = 1, 2, \dots, N)$ and Velocity v_i

2: $F(x_{gbest}) = \max F(x_i)$

 Initialize c_1, c_2, w

4: **while** $t < \text{Max Iteration}$ **do**

for $i=1$ to N **do**

6: Generate a new solution x_i^{t+1} and update v_i [Eqs.(2.1),(2.2)]

if $F(x_i^{t+1}) > F(x_{pbest})$ **then**

8: Replace the individual x_i^{t+1} as x_{pbest}

end if

10: **if** $F(x_{gbest}) < F(x_{pbest})$ **then**

$x_{gbest} = x_{pbest}$

12: **end if**

end for

14: $t=t+1$

end while

2.4 差分進化 (DE)

差分進化 (Differential Evolution:DE) [17] は進化的計算手法の一つであり、問題に応じて個体間同士の相対距離に基づいた探索戦略を用いることのできる、他のアルゴリズムとは異なる特徴を持つ。DE は以下の手順により探索を繰り返す。

- **STEP1: 個体の初期化**

探索領域内にランダムで個体を生成する。

- **STEP2: 突然変異による解候補の生成**

DE は以下、いずれかの探索戦略を用いて解候補を生成する。

1. DE/rand/1

$$v_{i,j}^{t+1} = x_{r1,j}^t + F \cdot (x_{r2,j}^t - x_{r3,j}^t) \quad (2.3)$$

2. DE/best/1

$$v_{i,j}^{t+1} = x_{gbest,j}^t + F \cdot (x_{r1,j}^t - x_{r2,j}^t) \quad (2.4)$$

3. DE/current-to-best/1

$$v_{i,j}^{t+1} = x_{i,j}^t + F \cdot (x_{gbest,j}^t - x_{i,j}^t) + F \cdot (x_{r1,j}^t - x_{r2,j}^t) \quad (2.5)$$

4. DE/rand/2

$$v_{i,j}^{t+1} = x_{r1,j}^t + F \cdot (x_{r2,j}^t - x_{r3,j}^t) + F \cdot (x_{r4,j}^t - x_{r5,j}^t) \quad (2.6)$$

5. DE/best/2

$$v_{i,j}^{t+1} = x_{gbest,j}^t + F \cdot (x_{r1,j}^t - x_{r2,j}^t) + F \cdot (x_{r3,j}^t - x_{r4,j}^t) \quad (2.7)$$

この時, i, j は個体番号と次元数を表し, r_1, \dots, r_4 は 1 から N までの一様乱数の整数を表す. スケール因子 F は解候補を生成するためのベクトルを制御するための変数で, 0 から 1 までの乱数で表される. 「DE/rand/1」は, 個体の親集団の中から 3 つの個体をランダムに選択し, その相対距離を用いて新たに解候補 $v_{i,j}^{t+1}$ を生成する. 「DE/best/1」は, 個体の親集団の中の最良個体と個体を 2 つランダムに選択し, その最良個体付近に新しい解候補 $v_{i,j}^{t+1}$ を生成する. 「DE/current-to-best/1」は, ランダムに選択した 2 つの個体と, 最良個体と個体自身の相対距離と用い, 最良個体方向へ新たに解候補 $v_{i,j}^{t+1}$ を生成する. 「DE/rand/2」では, 親集合から 5 つの個体をランダムに選択し, 式 (2.3) よりも広い探索領域内に新しく解候補 $v_{i,j}^{t+1}$ を生成する. 「DE/best/2」も同様, 式 (2.4) よりも広い探索領域内に新しく解候補 $v_{i,j}^{t+1}$ を生成する.

• STEP3: 交叉

解に多様性を持たせるため, ここでは STEP2 で生成した解候補 $v_{i,j}^{t+1}$ と個体 x_i を確率的に交叉させ, 新たに解 $u_{i,j}^{t+1}$ を生成する. 生成式は次式の通りである.

$$u_{i,j}^{t+1} = \begin{cases} v_{i,j}^{t+1} & \text{if } (\text{rand}(0, 1) \leq C_r) \text{ or } j = D \\ x_{i,j}^{t+1} & \text{if } (\text{rand}(0, 1) > C_r) \text{ and } j \neq D \end{cases} \quad (2.8)$$

ここで C_r は $[0, 1]$ の範囲内の交叉係数を表す. この交叉係数 C_r が一様乱数以上であれば STEP2 で生成した解候補 $v_{i,j}^{t+1}$ が採用され, 一様乱数未満であれば個体 $x_{i,j}$ が採用される.

• STEP4: 評価

最良個体と生成した解 $u_{i,j}^{t+1}$ を比較し, 評価値の高い方を次世代に引き継ぐ.

• STEP5: 終了条件を満たすまで STEP2 へ戻る

ここでは, 一般的に用いられる DE/rand/1 のアルゴリズムの疑似コードを以下の Algorithm 3 に記す.

Algorithm 3 Differential Evolution (DE/rand/1)

Input: Objective Function $f(x)$, $x = (x_1, x_2, \dots, x_d)$

```

    Initialize Population  $x_i (i = 1, 2, \dots, N)$ 
    Define crossover probability  $C_r$ , and scaling factor  $F$ 
3: while  $t < \text{Max Iteration}$  do
    for  $i=1$  to  $N$  do
        Select random integer  $r_1, r_2 \in \{1, 2, \dots, N | r_1 \neq r_2 \neq i\}$ 
6:    Generate a candidate  $v_{i,j}$  [Eq. (2.3)]
        for  $j = 1$  to  $D$  do
            if  $\text{rand}(0, 1) \leq C_r$  or  $j = D$  then
9:            offspring  $u_{i,j} = v_{i,j}^{t+1}$ 
            else  $\{\text{rand}(0, 1) > C_r$  and  $j \neq D\}$ 
                offspring  $u_{i,j} = x_{i,j}^t$ 
12:           end if
            end for
            if  $f(u_{i,j}^{t+1}) > f(x_{pbest})$  then
15:               Replace the offspring  $u_{i,j}^{t+1}$  as  $x_{pbest}$ 
            end if
        end for
18:     $t=t+1$ 
end while

```

2.5 Bat Algorithm (BA)

Bat Algorithm(BA) [22] は群知能アルゴリズムの一つで、対象物までの方向や距離を知るコウモリの特性（エコロケーション）を利用して周囲の状況を認知し、大域探索と局所探索が進むにつれて探索速度を徐々に落とし、探索性能を自動調節することが可能なアルゴリズムである。各個体の周波数 f_i 、速度 v_i 、位置 x_i は以下の式で定義し、更新される。ラウドネス A は、コウモリが対象物に近づくと値が減少し、移動距離も比例して短くなる。コウモリの行動は以下 3 つで構成される。

- 大域探索: 各コウモリは位置 x_i において、自身が発する周波数 f_i の反響によって対象物との距離を測り、対象物に向かって速度 v_i で移動する。
- 局所探索: 対象物近辺にコウモリを移動させる。
- ランダム探索: 探索領域内にコウモリをランダムで移動させる。

BA で扱う各個体の周波数 f_i 、速度 v_i 、位置 x_i は以下の式で定義される。

$$f_i = f_{min} + (f_{max} - f_{min})\beta \quad (2.9)$$

$$v_i^{t+1} = v_i^t + (x_* - x_i^t) * f_i \quad (2.10)$$

$$\mathbf{x}_i^{t+1} = \mathbf{x}_i^t + \mathbf{v}_i^{t+1} \quad (2.11)$$

個体番号を i とし、各個体の周波数 f_i は個体の速度を制限するパラメータであり、 $[0, 1]$ の区間で表される。ここでは $f_{min} = 0$, $f_{max} = 1$ として設定し、 β は 0 から 1 の乱数が割り当てられる。局所探索では、全個体の最良解（グローバルベスト） \mathbf{x}_* の周辺に新しい解候 x_{loc} を生成する。生成式は次の通りである。

$$\mathbf{x}_{loc} = \mathbf{x}_* + \epsilon A_i^t \quad (2.12)$$

パラメータ ϵ は $1 \times D$ 次元の配列で $[-1, 1]$ 区間のランダムな値が割り当てられる。ランダム探索では解探索空間にランダムで新たに解候補を生成する。生成式は以下の通りである。

$$\mathbf{x}_{rnd} = \mathbf{x}_{lb} + (\mathbf{x}_{ub} - \mathbf{x}_{lb}) * rand(1, D) \quad (2.13)$$

解探索空間の上限と下限をそれぞれ x_{ub}, x_{lb} とし、 $rand$ は 0 から 1 までの乱数が入る。以上より各個体の解候補 x_i^{t+1} , x_{loc} , あるいは x_{rnd} の評価値が各個体の最良解（パーソナルベスト） x_{i*} より良ければ更新され、同時にラウドネス A とその反射波であるパルスレート r も以下の式に基づいて更新される。

$$A_i^{t+1} = \alpha A_i^t \quad (2.14)$$

$$r_i^{t+1} = r_i^t [1 - exp(-\gamma t)] \quad (2.15)$$

解を更新する度にラウドネス A_i は徐々に減少し、それに比例して評価頻度を下げていく。対してパルスレート r_i は増加していき、探索が進むにつれて局所探索頻度が減少する。

従来の BA の疑似コードは以下の Algorithm 4 に記す。

- **STEP1:** 個体の初期化 (1-3 行目)
探索空間内にランダムに個体 $x_i (i = 1, 2, \dots, N)$ を生成し、周波数 f_i , ラウドネス A_i^0 , パルスレート r_i^0 を決定する。
- **STEP2:** 速度の更新と解候補の生成 (6 行目)
速度 v_i により新しく解候補を生成する。
- **STEP3:** 局所探索 (8 行目)
全個体の最良解 x_{gbest} 近辺に新しく解候補 x_{loc} を生成する。
- **STEP4:** ランダム探索 (10 行目)
探索空間内にランダムで解候補 x_{rnd} を生成する。
- **STEP5:** 評価と更新 (11-13 行目)
 $rand < A_i$ を満たす、かつ 3 つの解候補が t 時点での最良解 x_{pbest} よりも評価値が高ければ解を更新する。
- **STEP6:** STEP2 へ戻る
終了条件を満たすまで STEP2 へ戻る。

Algorithm 4 Bat Algorithm

Input: Objective Function $F(x)$

```

1: Initialize Population  $x_i(i = 1, 2, \dots, N)$  and  $v_i$ 
2: Define frequency  $f_i$  at location  $x_i$  [eq.(2.9)]
3: Initialize pulse rates  $r_i$ , and loudness  $A_i$ 
4: while ( $t <$  Max number of iterations) do
5:   for i=1 to N do
6:     Generate a new solution  $x_i$  and velocity  $v_i$  [Eqs.(2.10) to (2.11)]
7:     if ( $rand > r_i$ ) then
8:       Generate a new solution  $x_{loc}$  around a global best solution  $x_i$  [Eq.(2.12)]
9:     end if
10:    Generate a new solution  $x_{rnd}$  randomly [Eq.(2.13)]
11:    if ( $rand < A_i \& \min(F(x_i), F(x_{loc}), F(x_{rnd})) > F(x_{pbest})$ ) then
12:      Accept the new solution, and update pulse rate  $r_i$ 
         & loudness  $A_i$  [Eqs. (2.14)(2.15)]
13:    end if
14:    Evaluate all bats and select a best solution  $x_*$  in the current solutions
15:  end for
16:   $t=t+1$ 
17: end while

```

2.6 Evolution Strategies with Covariance Matrix Adaptation (CMA-ES)

Evolution Strategy with Covariance Matrix Adaptation (CMA-ES) [5][6] は多変量正規分布を用いて解候補を生成し、それらの評価値を基に算出する共分散行列から探索範囲を決定する。CMA-ES の大きな特徴として、変数間の依存度を考慮している（パラメータチューニングを必要としない）という点と、単調に増減する線形的な問題に依存しないという点が挙げられる。CMA-ES には様々な手法がある中で、ここでは一般的な $(\mu|\mu_w, \lambda)$ -CMA-ES [6] を紹介する。具体的なアルゴリズムについては以下の Algorithm 5 に示し、終了条件を満たすまで以下の手順を繰り返す。

- **STEP1: 個体の生成**

まず、正規分布 $N(0, I)$ の範囲で解候補 $z_i(i = 1, 2, \dots, \lambda)$ を独立に生成し、それを基に設計変数 $x_i(i = 1, 2, \dots, \lambda)$ を生成する。生成式は以下の通りである。

$$y_i^t = \sqrt{C^t} z_i \quad (2.16)$$

$$x_i^{t+1} = m^t + \sigma^t y_i \quad (2.17)$$

設計変数 x_i は共分散行列 $N(0, (\sigma^t)^2 C^t)$ の範囲から生成される。生成後、 x_i を評価値で降順（評価値の高い順）にソートして順位付けし、 y_i 及び z_i も同様に順位付けする。 C^t は、その共分散行列の範囲の広がり度合いを $d \times d$ 次元で表し、 σ^t はス

ステップサイズを, m^t は平均値ベクトル(探索範囲の中心)を表す. 初期個体生成時, $C^0 = I, \sigma^0 = 0$ とする. また, $\lambda = 4 + [3In(n)]$, $\mu = [\frac{\lambda}{2}]$ とする.

- **STEP2:** μ 個体の荷重和を算出し, 平均ベクトル \mathbf{m}_i^t を更新
評価値で降順ソートした設計変数 \mathbf{x}_i のうち, 上位 μ 個の荷重和を算出し, 次式に従って平均値ベクトル m を更新する.

$$\mathbf{m}^{t+1} = \mathbf{m}^t + \sum_{i=1}^{\mu} w_i (\mathbf{x}_i^t - \mathbf{m}^t) \quad (2.18)$$

この時, 重み w は次式で表される.

$$w_i = In(\frac{\lambda+1}{2}) - In(i) \quad (2.19)$$

重み w は $w_1 \geq w_2 \geq \dots \geq w_\mu > 0$ であり, $\sum_{i=1}^{\mu} w_i = 1$ を満たす.

- **STEP3:** ステップサイズ σ の更新
次式に従って進化パス p_σ 及びステップサイズ σ を更新する.

$$p_\sigma^{t+1} = (1 - c_\sigma)p_\sigma^t + \sqrt{c_\sigma(2 - c_\sigma)} \sqrt{\mu_{eff}} \sum_{i=1}^{\mu} w_i \mathbf{z}_i \quad (2.20)$$

$$\sigma^{t+1} = \sigma^t \exp\left(\frac{c_\sigma}{d_\sigma} \left(\frac{\|p_\sigma^{t+1}\|}{\hat{\chi}_n} - 1\right)\right) \quad (2.21)$$

この時, c_σ は進化パス p_σ の前世代との重みを表し, μ_{eff} は設計変数の上位 μ 個の加重平均の補正値, d_σ はステップサイズの減衰係数, $\hat{\chi}_n$ は n 変量正規分布のノルムの期待値を表す. これらのパラメータは次式で表される.

$$c_\sigma = \frac{4}{n+4} \quad (2.22)$$

$$\mu_{eff} = \frac{1}{\sum_{i=1}^{\mu} w_i^2} \quad (2.23)$$

$$d_\sigma = \frac{1}{c_\sigma} + 1 \quad (2.24)$$

$$\hat{\chi}_n = E[\|N(0, 1)\|] \approx \sqrt{n}(1 - \frac{1}{4n} + \frac{1}{21n^2}) \quad (2.25)$$

ここで n は最適化する数を表す.

- **STEP4:** 共分散行列 C の更新
共分散行列 C 及びその進化パス p_c は次式で更新される.

$$p_c^{t+1} = (1 - c_c)p_c^t + \sqrt{c_c(2 - c_c)} \sum_{i=1}^{\mu} w_i \mathbf{y}_i^t \quad (2.26)$$

$$\mathbf{C}^{t+1} = \mathbf{C}^t + c_1 [p_c^{t+1} (p_c^{t+1})^T + (1 - c_c(2 - c_c)) \mathbf{C}^t] + c_\mu \sum_{i=1}^{\mu} w_i (\mathbf{y}_i (\mathbf{y}_i)^T - \mathbf{C}^t) \quad (2.27)$$

c_σ は共分散行列 C の進化パス p_c の前世代との重みであり、 c_1 及び c_μ は共分散行列 C の更新に用いられる学習率を表す。これらのパラメータは次式で表される。

$$c_1 = \frac{2}{(n + \sqrt{2})^2} \quad (2.28)$$

$$c_\mu = 1 - c_1 \quad (2.29)$$

$$c_c = \frac{4}{n + 4} \quad (2.30)$$

Algorithm 5 CMA-ES

Input: Objective Function $F(x), x = (x_1, x_2, \dots, x_d)$

Calculate parameters [Eqs. (2.22) to (2.25), (2.28) to (2.30)]

while $t < \text{Max Iteration}$ **do**

for $i=1$ to N **do**

 Generate solution $x_i (i = 1, 2, \dots, \lambda)$ within $N(0, \sigma^2 C)$ [Eqs. (2.16),(2.17)]

5: **end for**

 Evaluate and sort solution x_i

for $i=1$ to N **do**

 Update m_i by w_i [Eqs. (2.19),(2.18)]

 Update step size σ and covariance matrix C by the evolution path p_σ and p_c [Eqs. (2.20),(2.21),(2.26),(2.27)]

10: **end for**

$t=t+1$

end while

2.7 A Fast and Elitist Multi-objective Genetic Algorithm (NSGA-II)

NSGA-II [8] は、複数の目的関数を同時に満たす解を探索する手法として一般的に用いられる代表的な手法の一つである。アルゴリズムの手順及び疑似コードを以下に記す。

- **STEP1:** 個体の初期化

初期集合 $Q_i^0 (i = 1, 2, \dots, N)$ の生成と次世代集合 $P^t = \emptyset$ を用意する。

- **STEP2:** 非優越ソート

$R^t = Q^t \cup P^t$ を作成し、 R^t の個体をランク付けし、 $\mathcal{F}_i (i = 1, 2, \dots, N)$ に分類する。その後、新たに $P^{t+1} = \emptyset$ を作成し、 $i = 1$ とする。

- **STEP3:** 混雑距離計算

$|P^{t+1} + \mathcal{F}^i| \leq N$ を満たすまで P^{t+1} に \mathcal{F} を追加し、混雑度ソートを行う。混雑度ソートは、 i 番目の個体に対する個体密集度に基づいて算出される。混雑度計算は次式で表される。

$$d_j = \sum_{m=1}^M \frac{f_m^{I_{j+1}^m} - f_m^{I_{j-1}^m}}{f_m^{\max} - f_m^{\min}} \quad (2.31)$$

この時, M は目的関数の数を表し, I_m は m 番目の目的関数においてソートされた j 番目の個体を意味し, それ以外の全ての個体を $j = 2, \dots, l - 1$ とする.

• **STEP4: 混雑度によるトーナメント選択**

混雑度トーナメント選択は次の 2 つの基準によって評価する個体を選択する.

- 個体の非優越ランク: i_{rank}
- 個体の混雑距離: $i_{distance}$

Algorithm 6 Elitist Non-Dominated Sorting Genetic Algorithm (NSGA-II)

Input: Initialize Population $x_i (i = 1, 2, \dots, N)$, p_c , p_m , η_c and η_m

```

set  $t \leftarrow 0$ ,  $Q_0 = \text{select-cross-mutate } P^0$ 
while  $t < \text{MaxIteration}$  do
    3:    $R^t = P^t \cup Q^t$ 
     $\mathcal{F} = \text{nondominated\_sort}(R^t)$ 
     $P^{t+1} = \emptyset$  and  $i \leftarrow 1$ 
    6:   while  $|P^{t+1}| + |\mathcal{F}^i| \leq N$  do
        corwding-distance( $\mathcal{F}$ )
         $P^{t+1} = P^{t+1} \cup \mathcal{F}^i$ 
    9:    $i \leftarrow i + 1$ 
    end while
    Sort( $\mathcal{F}^i \prec c$ )
    12:   $P^{t+1} = P^{t+1} \cup \mathcal{F}^i[1 : (N - |P^{t+1}|)]$ 
     $Q^{t+1} = \text{select-cross-mutate } (P^{t+1})$ 
     $t \leftarrow t + 1$ 
15: end while

```

3 Niching Scheme

この章では、多峰性最適化問題において、EAs を拡張させて複数の最適解及び局所解探索を行うための機構である Niching Scheme について説明する。EAs は一つの最適解を探索することを目的とした設計であるため、複数の局所解を探索し、保持するには限界がある。この問題を解決するために導入した Niching Scheme について 3.1 節から 3.4 節で紹介する。

3.1 Crowding

Crowding [3] は評価値が類似する個体が同じ場所付近に位置しているとき、その最近傍個体同士を比較し、評価値の高い方を残す。この時、比較する個体は親集合と子集合を含めた全個体における最近傍個体同士が比較対象となる。この動作を毎世代繰り返すことによって同じ局所解に個体が陥らないことを目的とした機構である。

3.2 Niche Radius

Niche Radius は探索空間の大きさと局所解数（あるいは個体数）に基づいて算出される距離であり、Fig. は理想的な個体の分布及び Niche radius を示している。次式で表される。

$$dist = \frac{1}{2} \sqrt{(x_{ub} - x_{lb})^2} \quad (3.1)$$

$$\sigma = \frac{dist}{\sqrt{q}} \quad (3.2)$$

この時、 x_{ub}, x_{lb} は探索空間の上限と下限を表しており、 D は次元数を表す。 q は解の数（あるいは個体数）が適用される。

3.3 Fitness Sharing

Fitness Sharing [4] は Crowding と同様、類似個体の評価値が低い方を淘汰させるための機構として用いられる。ここでは、その類似度を定義することで、同じ類似度を持つ個体同士が評価値を比較する。一般的に、類似度の算出方法は次式で表される。

$$sh(d_{ij}) = \begin{cases} 1 - \left(\frac{d_{ij}}{\sigma}\right)^\alpha & (\text{if } d_{ij} < \sigma) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (3.3)$$

ここで d_{ij} は個体 i, j の間の距離を表し、 α は係数で σ はある恣意的な閾値（あるいは Niche radius）を表す。個体間距離が近いほど Sharing function $sh(d_{ij})$ の値は大きくなり、この数値を基に Niche count m_i を算出する。

$$m_i = \sum_{j=1}^N sh(d_{ij}) \quad (3.4)$$

Niche count m_i は i 番目の個体に対する全個体の密度を表している。この Niche count より、Shared fitness f'_i が次式のように算出される。

$$\phi_i = \frac{F_i}{m_i} \quad (3.5)$$

ここで、 F_i は i 番目の個体の評価値を表す。Shared fitness ϕ_i は、その個体密度である Niche count m_i によって値が大きく変動する。 ϕ_i の値が小さいほど i 番目の個体密度は高く、値が大きければ個体密度は低いということになる。

3.4 Dynamic Niche Sharing

3.3 節で前述した Shared fitness を用い、Dynamic niche sharing [14] は次式で表される。

$$m_i^{dyn} = \begin{cases} n_j & (\text{if individual } i \text{ is within the dynamic niche } j) \\ m_i & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (3.6)$$

4 Niching Methods

4.1 Crowding DE (CDE)

2.4 節で説明した DE をベースとし, Crowding [3] と組み合わせた手法で, 生成された子集合の中から最近傍である子 $u_{i,j_{NN}}$ と親 x_{pbest_i} を選択し, 評価値の低い個体は淘汰され, 評価値の高い方は次世代に引き継がれる.

Algorithm 7 CDE/rand/1)

Input: Objective Function $f(x), x = (x_1, x_2, \dots, x_d)$

```

Initialize Population  $x_i (i = 1, 2, \dots, N)$ 
Define crossover probability  $C_r$ , and scaling factor  $F$ 
3: while  $t < \text{Max Iteration}$  do
    for  $i=1$  to  $N$  do
        Select random integer  $r_1, r_2 \in \{1, 2, \dots, N | r_1 \neq r_2 \neq i\}$ 
        6: Generate a candidate  $v_{i,j}$  [Eq. (2.3)]
        for  $j = 1$  to  $D$  do
            if  $rand(0, 1) \leq C_r$  or  $j = D$  then
                9: offspring  $u_{i,j} = v_{i,j}^{t+1}$ 
            else  $\{rand(0, 1) > C_r \text{ and } j \neq D\}$ 
                offspring  $u_{i,j} = x_{i,j}^t$ 
            12: end if
            end for
            if  $f(u_{i,j_{NN}}^{t+1}) > f(x_{pbest_i})$  then
                15: Replace the offspring  $u_{i,j_{NN}}$  as  $x_{pbest_i}$ 
            end if
        end for
        18:  $t=t+1$ 
    end while

```

4.2 A Dynamic Archive Niching Differential Evolution (dADE)

Niching methods は, 最適解の数が多くなるほど, 個体数を増やすといったアルゴリズムのパラメータチューニングが必要となる. そこで, dADE [12] のアルゴリズムは動的にパラメータを制御する 2 つのメカニズムの改良を行った. 1 つ目のメカニズムとして, 環境に応じてパラメータの値を自動的に変化させ, 2 つ目のメカニズムとして未探索領域に解候補を生成するよう変更を加えた.

- **STEP1: 最近傍個体間距離 R の算出**

DE は主に, 突然変異率 C_r とスケール因子 F の制御によって探索を決定しているが, 複数解探索を行う上では, 探索領域全体を網羅するよう個体を配置させることが重要となる. ここではまず, 個体の密度を算出する.

$$R = \min(r^1, r^2, \dots, r^t) \quad (4.1)$$

$$r^t = \frac{\sum_{i=1}^n dist_i}{n} \quad (4.2)$$

$$dist_i = \min ||x_i^t - x_j^t|| : \forall x_i^t, x_j^t \in P \quad (4.3)$$

この時, r^t は各個体の最近傍個体とのユークリッド距離の平均値を示す. 個体が同じ場所に密集しているほど r の値は 0 に近づくことを意味する.

- **STEP2:** 突然変異率 C_r とスケール因子 F の更新

各世代において, 突然変異率 C_r とスケール因子 F は, 2 つの確率分布 $CR_i \sim N(\mu_{CR}, 0.1)$, $F_i \sim Cauchy(\mu_F, 0.1)$ に従って生成される.

$$\mu_F = (1 - c) \cdot \mu_F + c \cdot \text{mean}_L(S_F) \quad (4.4)$$

$$\mu_{CR} = (1 - c) \cdot \mu_{CR} + c \cdot \text{mean}_A(S_{CR}) \quad (4.5)$$

ここで, c は $c \in [0, 1]$ の係数 (既定値は 0.1) であり, $\text{mean}_L(\cdot)$ は Lehmer mean [23] を指し, 次式で表される.

$$\text{mean}_L = \frac{\sum_{F \in S_F} F^2}{\sum_{F \in S_F} F} \quad (4.6)$$

$\text{mean}_A(\cdot)$ は t 世代目の突然変異率ベクトル S_{CR} の平均値を示す.

- **STEP3:** 交叉

2.4 節と同様, 突然変異率 CR に基づいて解候補 $u_{i,j}$ を決定する.

- **STEP4:** 評価と更新

最良個体と生成した解 $u_{i,j}^{t+1}$ を比較し, 評価値の高い方を次世代に引き継ぐ.

- **STEP5:** Dynamic Archive による各個体の最良解 x_{pbest_i} の再生成

Archive の疑似コードを Algorithm 9 に記す. 各個体の最良解 x_{pbest_i} を p として集合 S に格納し, δ よりも評価値が良ければ update に TRUE を返す (2-7 行目). 次に, update が TRUE, あるいは δ の評価値と p の評価値の差分が accuracy level: ε よりも小さければ (8 行目), p と s のユークリッド距離に着目し, その距離が R 以下であれば s は新しく p として置き換えられ, found に TRUE を返し (9-14 行目), R より大きければ found に TRUE を返す (15-18 行目). 最後に, found が FALSE ならば, 集合 S に p を追加する (21-24 行目). この手順を繰り返すことで, 閾値 ε を満たす最近傍個体同士を比較し, 評価値の低い個体は新たに生成される.

- **STEP6:** STEP1 へ戻る

終了条件を満たすまで STEP1 から STEP5 までの手順を繰り返す.

Algorithm 8 dADE/nrand/1

```

Initialize Population  $x_i (i = 1, 2, \dots, N)$ 
Define crossover probability  $C_r$ , and scaling factor  $F$ 
3: while  $t < \text{Max Iteration}$  do
    Calculate the  $R$  value [Eq. (4.2)]
    for  $i=1$  to  $N$  do
        6: Update parameters  $CR$  and  $F$  [Eqs. (4.4),(4.5)]
        Select random integer  $r_1, r_2 \in \{1, 2, \dots, N | r_1 \neq r_2 \neq i\}$ 
        Generate a candidate  $v_{i,j}$  [Eq. (2.3)]
        9: for  $j = 1$  to  $D$  do
            if  $\text{rand}(0, 1) \leq C_r$  or  $j = D$  then
                offspring  $u_{i,j} = v_{i,j}^{t+1}$ 
            12: else { $\text{rand}(0, 1) > C_r$  and  $j \neq D$ }
                offspring  $u_{i,j} = x_{i,j}^t$ 
            end if
        15: end for
        if  $f(u_{i,j_{NN}}^{t+1}) > f(x_{pbest_i})$  then
            Replace the offspring  $u_{i,j_{NN}}$  as  $x_{pbest_i}$ 
        18: Insert  $x_{pbest_i}$  to Dynamic Archive [Algorithm 9]
            if  $x_{pbest_i}$  is already in Archive (found == TRUE) then
                Re-initialize individual  $x_{pbest_i}$ 
            21: end if
            end if
        end for
        24:  $t=t+1$ 
    end while

```

Algorithm 9 The algorithmic scheme for building a dynamic archive

Input: $p \in \mathbb{R}^D$ a potential solution, $R \in \mathbb{R}$ the niche radius, and ε an accuracy level or acceptance threshold

Output: S - a list of found solutions in a dynamic archive

```

found ← FALSE; update ← FALSE;
if  $S = \emptyset$  then
    3:    $S \leftarrow S \cup p$ ;  $\delta \leftarrow f(p)$ 
else
    if  $f(p) > \delta$  then
        6:    $\delta \leftarrow f(p)$ ; update ← TRUE
    end if
    if update or  $|f(p) - \delta| < \varepsilon$  then
        9:   for each  $s \in S$  do
            if  $\|p - s\| \leq R$  then
                if  $f(p) > f(s)$  then
                    12:    $s \leftarrow p$ ;
                        found ← TRUE;
                        break;
                else
                    15:   found ← TRUE;
                    break;
                end if
            end if
        end for
        21:   if not found then
            22:    $S \leftarrow S \cup p$ 
        end if
    end if
    24:   end if
end if

```

4.3 Niching the CMA-ES via Nearest-Better Clustering (NEA)

CMA-ES が局所解へ収束してしまうことを防ぐため, NEA [16] では次の 2 つの改良を加えた. (i)Niche radius を予想する; (ii) 求めた Niche radius から探索性能を制御する.

- **STEP1: 個体の初期化**

個体を探索空間内にランダムで生成する.

- **STEP2: NBC による個体のクラスタリング**

Nearest-better clustering (NBC) [13] は, 探索空間の個体間距離に応じて各個体の探索範囲をクラスタで分割する手法である. NBC のクラスタリングのイメージを図 4.1 に, 疑似コードを Algorithm 10 に記す. 図 4.1 中の四角や丸, 星は初期生成

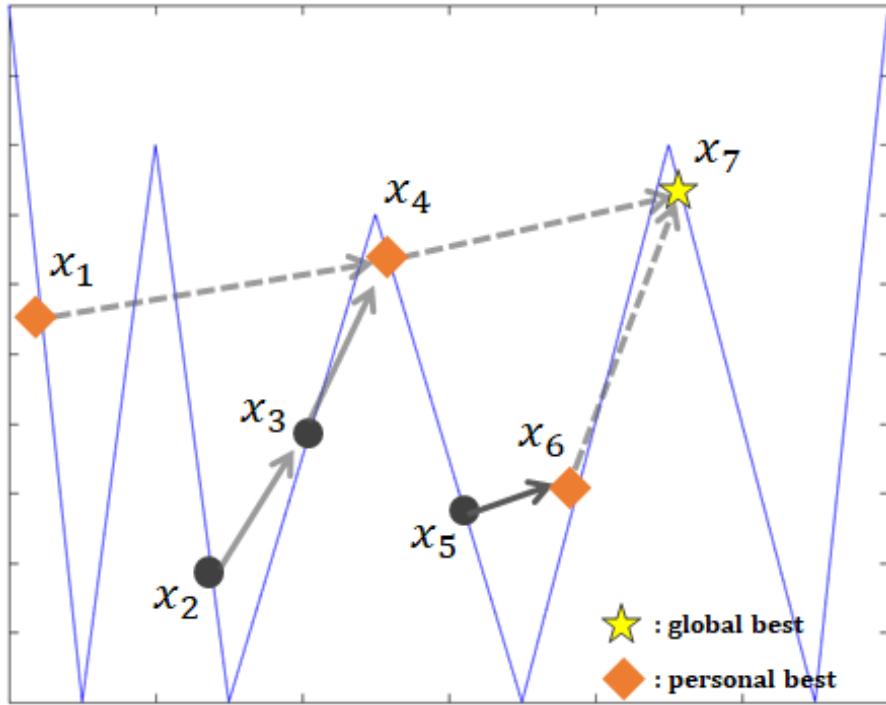


図 4.1: an example of NBC

後の個体 $x_i (i = 1, 2, \dots, 7)$ を表しており、 i 番目の個体 x_i に対してより良い評価値を持つ最近傍個体とエッジ(矢印)を繋げる。この時、エッジの平均値とパラメータ ϕ の乗算よりもエッジが大きい場合、そのエッジ(点線の矢印)を削除し、エッジで繋がれた個体(実線の矢印)を一つのグループとして生成する。ここではクラスタ $C_1 = \{x_1\}, C_2 = \{x_2, x_3, x_4\}, C_3 = \{x_5, x_6\}, C_4 = \{x_7\}$ の 4 つに分類され、各クラスタの最良解(パーソナルベスト)は x_1, x_4, x_6, x_7 であり、全個体の最良解(グローバルベスト)は x_7 である。

- **STEP3: CMA-ES を用いた探索**

分類されたクラスタ毎に CMA-ES により探索を開始する(探索手順は 2.6 節を参照)。

- **STEP4: STEP2 へ戻る**

終了条件を満たすまで STEP2,3 を繰り返す。

Algorithm 10 Nearest-better clustering (NBC)

Calculate all search points mutual distances

Create an empty graph with num (search points) nodes

3: **for** the search points **do**

 Find nearest search point that is better, create edge to it

end for

6: Delete edges of length $> \phi \cdot \text{mean}(\text{length of all edges})$

 Find connected components

4.4 Parameterless-Niching-Assisted NSGAII (PNA-NSGAII)

多目的最適化問題によく用いられる NSGA-II だが、ここでは単目的の最適化問題に対して、どのような問題に対しても適応できるノンパラメトリックな PNA-SNGAII [1] について説明する。

最適解数に対して同じ個体数を用いることが理想的であるため、ここでは次式で個体数を決定する。

$$T^D = N \Rightarrow T \simeq [e^{\frac{I_{nN}}{D}}] \quad (4.7)$$

niching distance v_d を次式で求める。

$$v_d = \frac{x_d^{(U)} - x_d^{(L)}}{T} \forall d = \{1, 2, \dots, D\} \quad (4.8)$$

$$|(x_1 - x_2)_d| \leq \forall d = \{1, 2, \dots, D\} \quad (4.9)$$

$(f_m(x_1) \leq f_m(x_2) \forall m) \wedge (\exists_n | f_n(x_1) < f_n(x_2))$, proximate(x_1, x_2) = 1 if $x_1 \succ x_2$
 x_1 and x_2 are nondominated otherwise

5 多峰性最適化問題

最適化問題において、実問題の複雑さを多峰性と見立てた評価関数を用いることが一般的である。その代表的な多峰性関数を次節で説明する。

5.1 最小化問題における評価関数

実験で用いられる評価関数の最適解の評価値、最適解数、探索範囲を表1に示す。

F_1 : Griewank (2D)

Griewank 関数 [15] の概形を図5.1に示し、関数式は次式で表される。

$$F_1(x_i) = \sum_{i=1}^D \frac{x_i}{4000} - \prod_{i=1}^D \cos\left(\frac{x_i}{\sqrt{i}}\right) + 1. \quad (5.1)$$

解空間の探索領域は $x_i \in [-10, 10]$ である ($i = 1, 2$)。最適解の座標は $x_* = [0, 0]$ で、その評価値は $F(x_*) = 0$ である。局所解の座標は $\pm x \approx [6.2800, 8.8769], [3.1400, 4.4385], [0, 8.8769], [6.2800, 0], [9.4200, 4.4385]$ となる。

F_2 : Rastrigin (2D)

Rastrigin 関数 [15] の概形を図5.2に示し、関数式は次式で表される。

$$F_2(x_i) = 10D + \sum_{i=1}^D [x_i^2 - 10 \cos(2\pi x_i)]. \quad (5.2)$$

D は次元数であり、探索領域は $x_i \in [-5, 5]$ である。

F_3 : Six-Hump Camel (2D)

最適解と局所解が各2個存在する Six-Hump Camel Function [15] は以下の式で表される。

$$F_3(x_1, x_2) = (4 - 2.1x_1^2 + \frac{x_1^4}{3})x_1^2 + x_1x_2 + (-4 + 4x_2^2)x_2^2 \quad (5.3)$$

この関数における解空間の探索領域は $x_1 \in [-2, 2], x_2 \in [-1, 1]$ である。最適解の座標は $x_* = [0.0898, -0.7126], [-0.0898, 0.7126]$ であり、その評価値は $F_3(x_*) = -1.0316$ である。また局所解は $\pm x \approx [1.704, -0.7965]$ に位置する。

F_4 : Michalewicz (2D)

Michalewicz Function [15] の式を以下に示す。

$$F_4(x_i) = -\sum_{i=1}^D \sin(x_i) \sin^{2m}\left(\frac{ix_i^2}{\pi}\right) \quad (5.4)$$

最適解 $x_* = [2.20, 1.57]$ の評価値 $F_4(x_*) = -1.8013$ であり、局所解は $x \approx [2.203, 2.7115]$ である。探索領域は $x_i \in [0, 4]$ である ($i = 1, 2$)。

F_5 : Himmelblau (2D)

Himmelblau Function [11] の関数式は次の通りとなる。

$$F_5(x_1, x_2) = (x_1^2 + x_2 - 11)^2 + (x_1 + x_2^2 - 7)^2 \quad (5.5)$$

評価関数に局所解は存在せず、最適解のみ4個持つ関数である。最適解の位置は各々 $x_* = [3, 2], [-2.805118, 3.283186], [-3.779310, -3.283186], [3.584458, -1.848126]$ があり、その評価値は $F_4(x_*) = 0$ である。探索領域は $x_i \in [-5, 5]$ となる ($i = 1, 2$)。

 F_6 : Shubert Function

Shubert 関数の概形及び等高線を図 5.6 に示す。

$$F_6(x_i) = \prod_{i=1}^D \sum_{j=1}^5 j \cos[(j+1)x_i + j], \quad (5.6)$$

D は次元数を表し、最適解の評価値は $F(x_*) = -187.731$ である。この関数では $D \cdot 3^D$ 個の最適解のみ存在し、2次元では 18 個の最適解を持つ。探索範囲は $x_i \in [-10, 10]^D$ ($i = 1, 2, \dots, D$) である。

表 1: Benchmark Test Functions

Function	$F(x_*)$	Num of goptima	Num of loptima	D	Search Range
F_1	0	1	16	2	$x_i \in [-10, 10]$
F_2	0	1	120	2	$x_i \in [-5, 5]$
F_3	-1.0316	2	2	2	$x_1 \in [-2, 2]$ $x_2 \in [-1, 1]$
F_4	-1.8013	1	2	2	$x_i \in [0, 4]$
F_5	0	4	0	2	$x_i \in [-5, 5]$,
F_6	-187.731	18	many	2	$x_i \in [-10, 10]$,

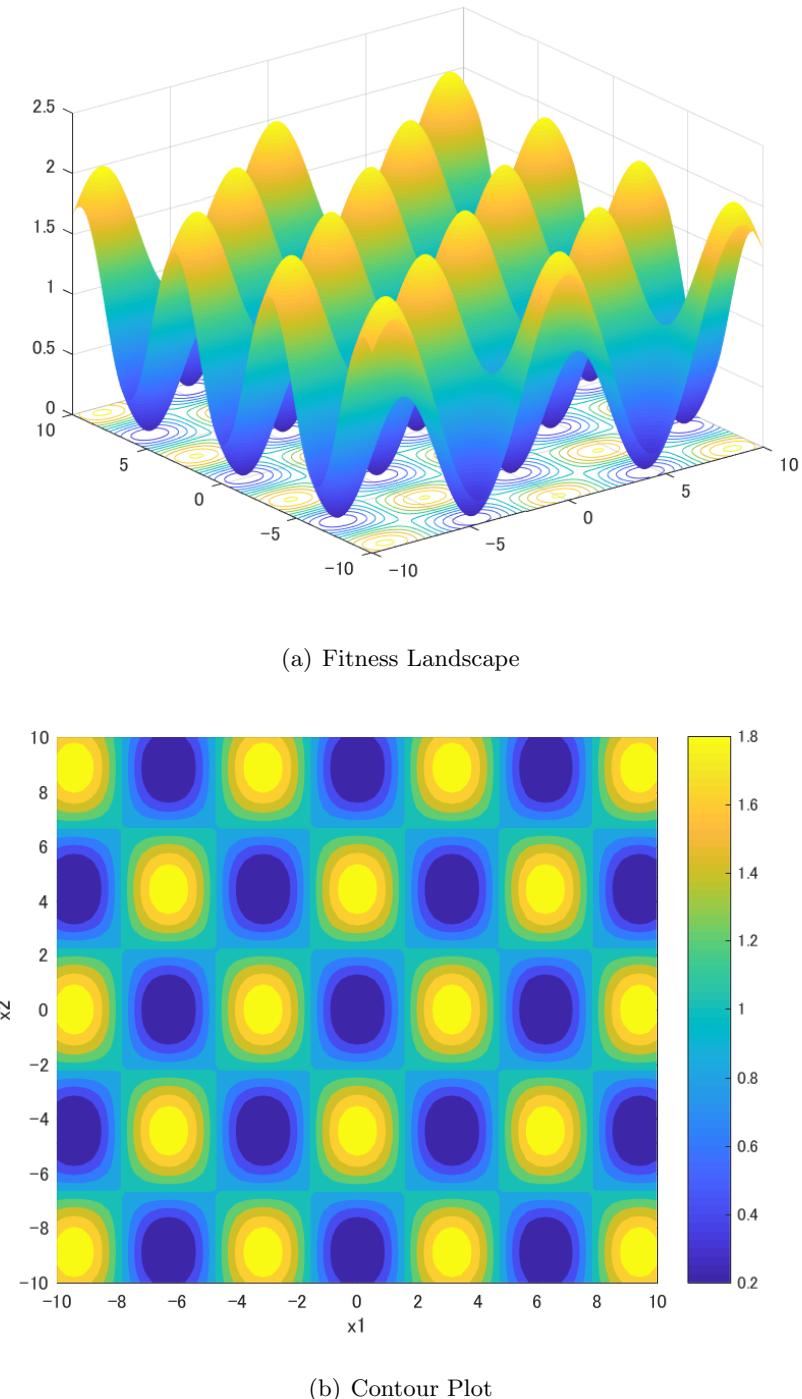
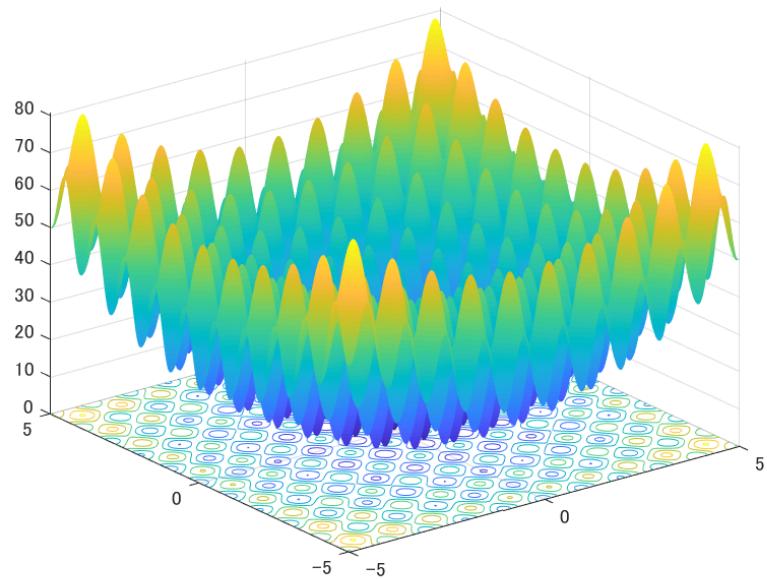
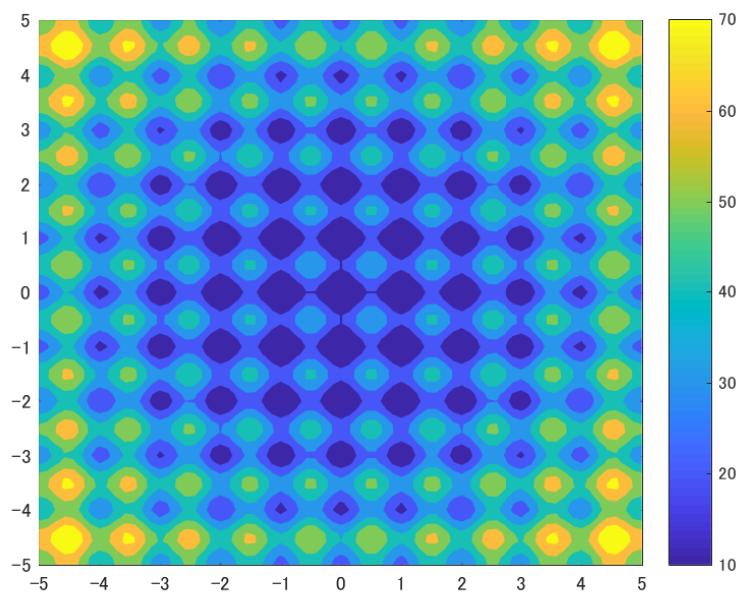


図 5.1: Griewank

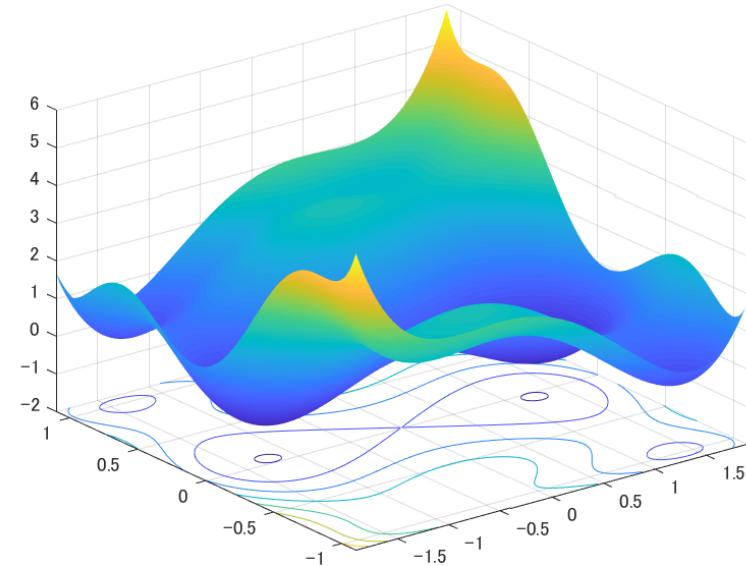


(a) Fitness Landscape

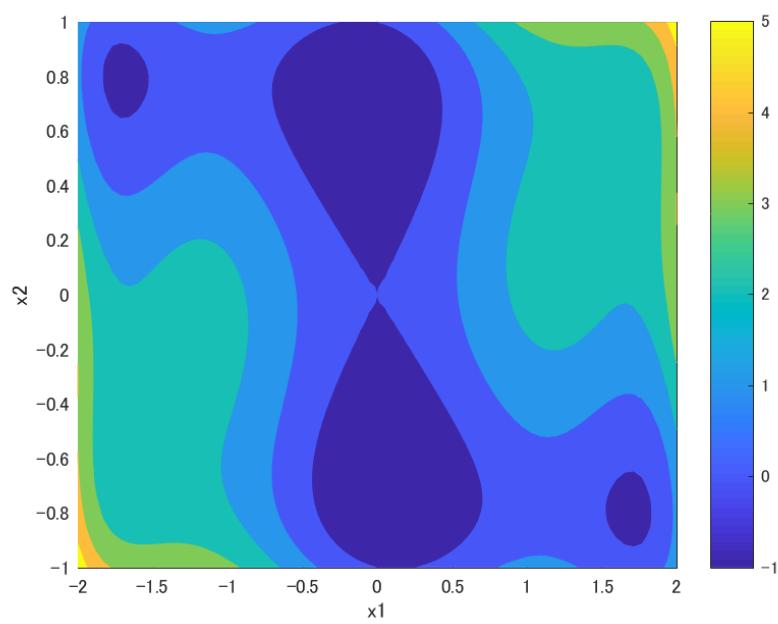


(b) Contour Plot

図 5.2: Rastrigin

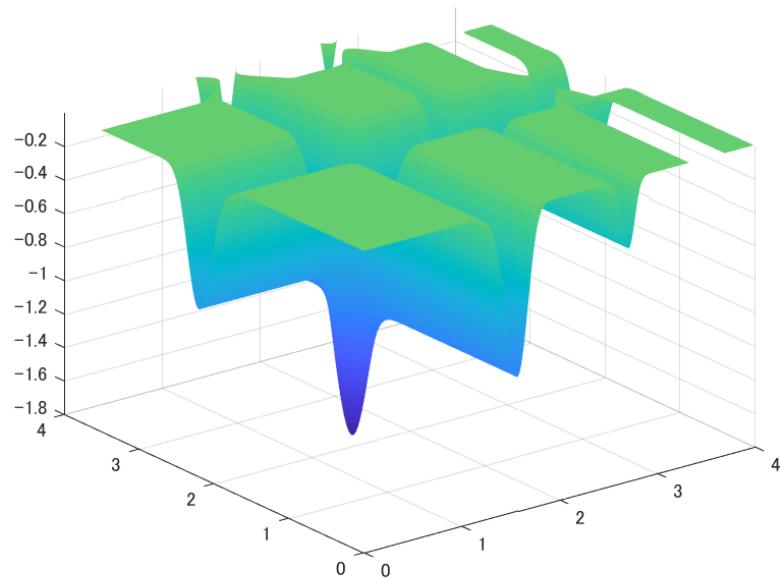


(a) Fitness Landscape

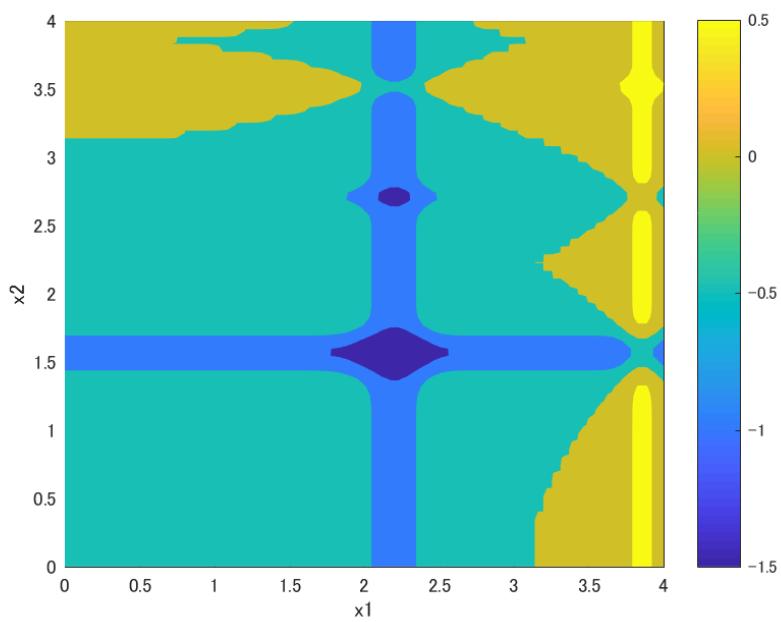


(b) Contour Plot

図 5.3: Six-Hump Camel



(a) Fitness Landscape



(b) Contour Plot

図 5.4: Michalewicz

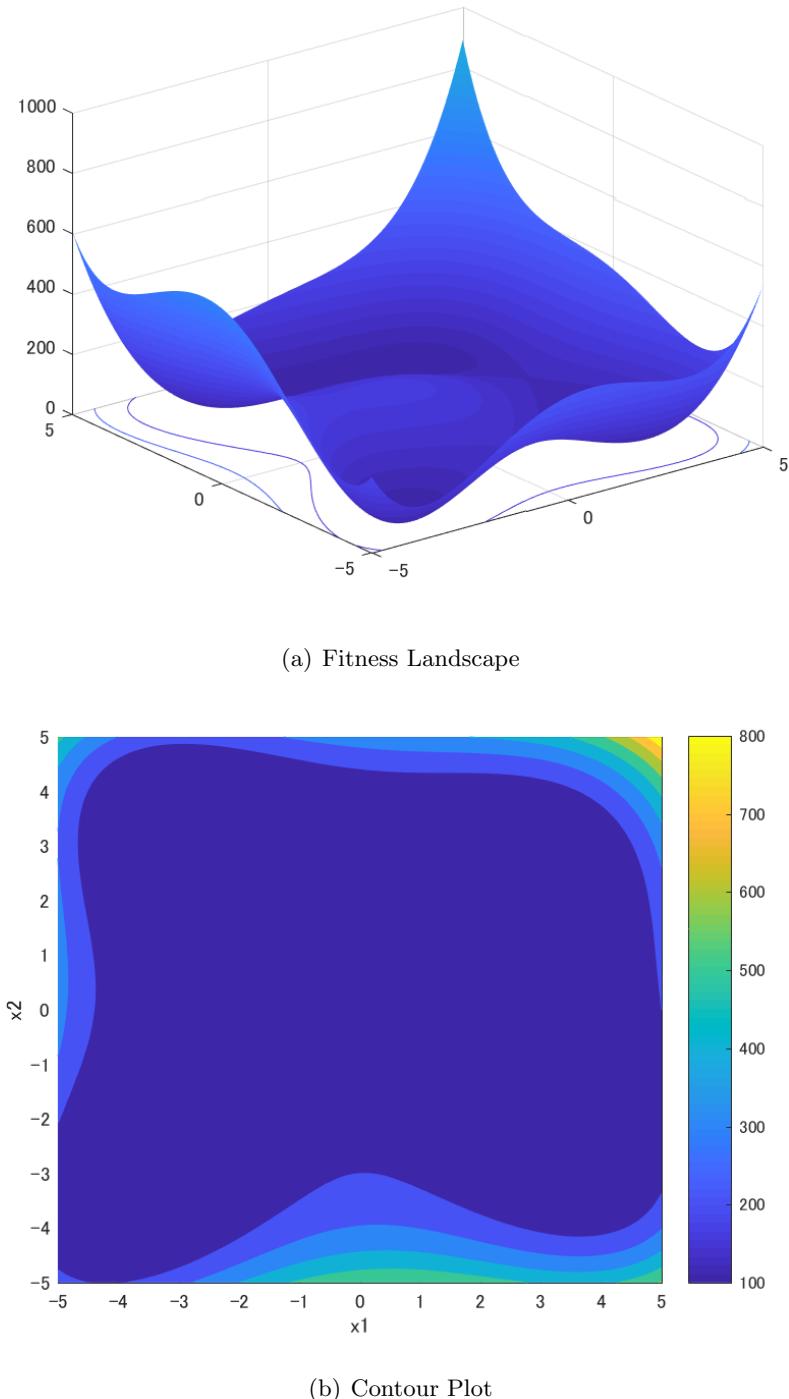
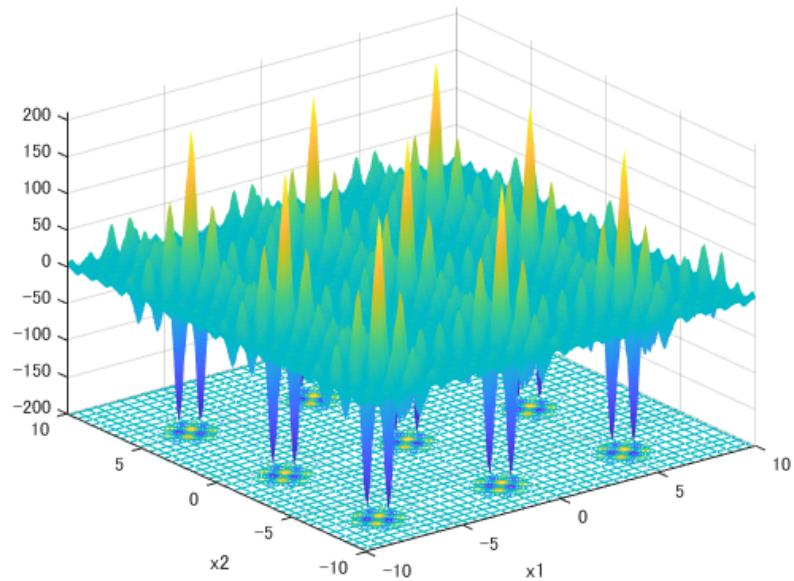
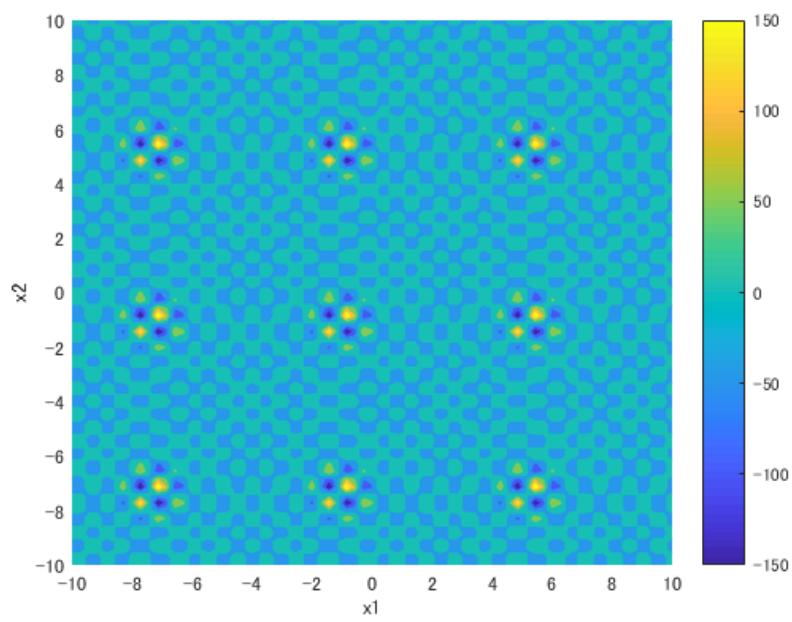


図 5.5: Himmelblau



(a) Fitness landscape



(b) Contour plot

図 5.6: F_6 : Shubert

5.2 最大化問題における評価関数

本実験では、複数最適解を探索する手法の性能を比較するため、CEC (*IEEE Congress on Evolutionary Computation*) 2013 Competition on Niching Methods for Multimodal Function Optimization [21] で扱われたベンチマーク関数を説明する。ベンチマーク関数の最適解の評価値 $F(x_*)$ と最適解数、探索領域を表 2 に示す。

G_1 : Five-Uneven-Peak Trap (1D)

$$G_1(x) = \begin{cases} 80(2.5 - x) & \text{for } 0 \leq x < 2.5, \\ 64(x - 2.5) & \text{for } 2.5 \leq x < 5.0, \\ 64(7.5 - x) & \text{for } 5.0 \leq x < 7.5, \\ 28(x - 7.5) & \text{for } 7.5 \leq x < 12.5, \\ 28(17.5 - x) & \text{for } 12.5 \leq x < 17.5, \\ 32(x - 17.5) & \text{for } 17.5 \leq x < 22.5, \\ 32(27.5 - x) & \text{for } 22.5 \leq x < 27.5, \\ 80(x - 27.5) & \text{for } 27.5 \leq x < 30. \end{cases} \quad (5.7)$$

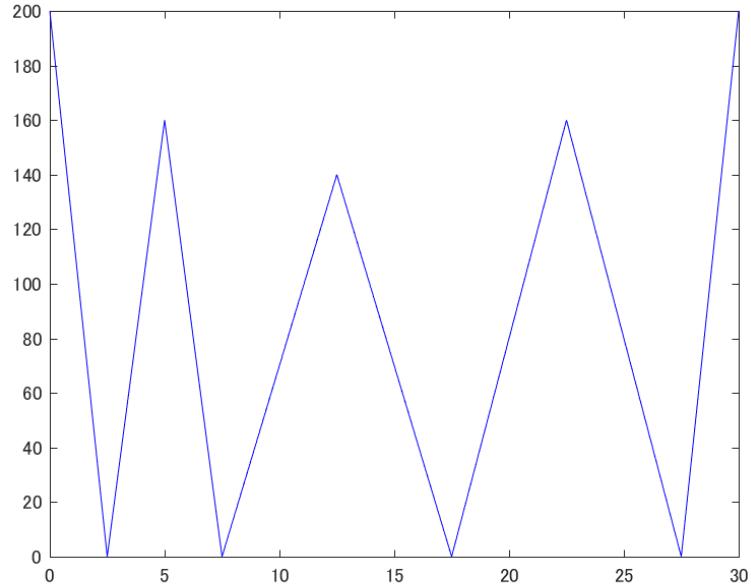


図 5.7: Five-Uneven-Peak Trap

G_2 : Equal Maxima (1D)

$$G_2(x) = \sin^6(5\pi x). \quad (5.8)$$

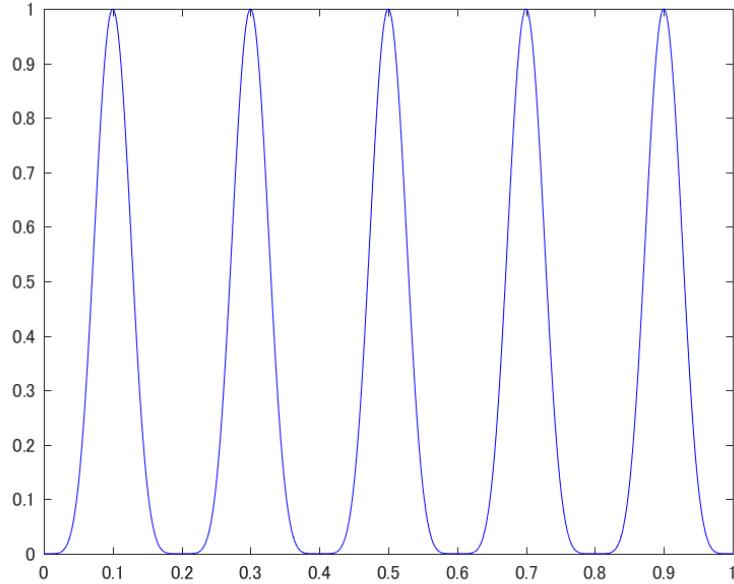


図 5.8: Equal Maxima

 G_3 : Uneven Decreasing Maxima (1D)

$$G_3(x) = \exp(-2\log(2)(\frac{x-0.08}{0.854})^2) \sin^6(5\pi(x^{\frac{3}{4}} - 0.05)). \quad (5.9)$$

 G_4 : Himmelblau (2D)

$$G_4(x, y) = 200 - (x^2 + y - 11)^2 - (x + y^2 - 7)^2. \quad (5.10)$$

 G_5 : Six-Hump Camel Back (2D)

$$G_5(x, y) = -4[(4 - 2.1x^2 + \frac{x^4}{3})x^2 + xy + (4y^2 - 4)y^2]. \quad (5.11)$$

 G_6 : Shubert (2D)

$$G_6(x) = -\prod_{i=1}^D \sum_{j=1}^5 j \cos[(j+1)x_i + j]. \quad (5.12)$$

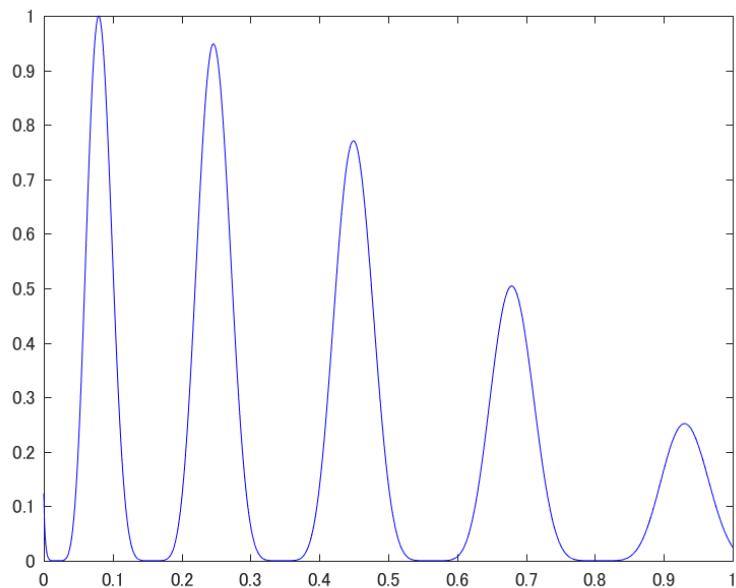


図 5.9: Uneven Decreasing Maxima

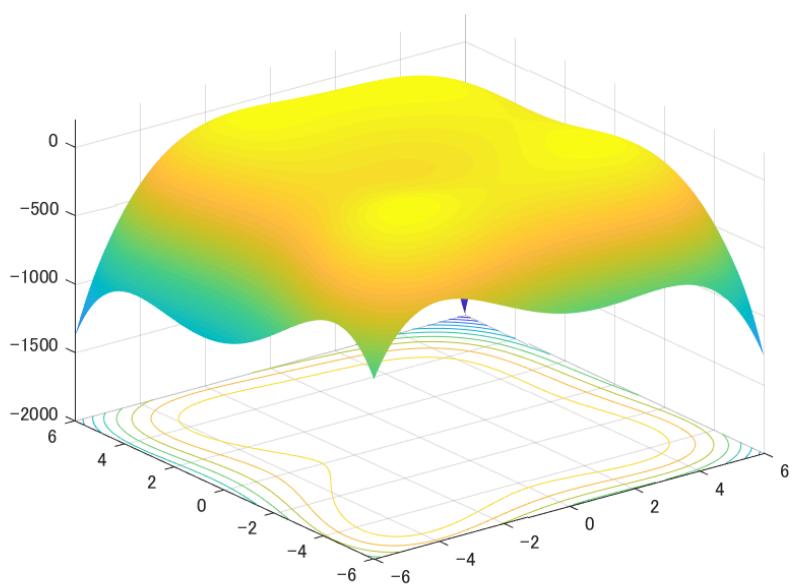


図 5.10: 2D Himmelblau

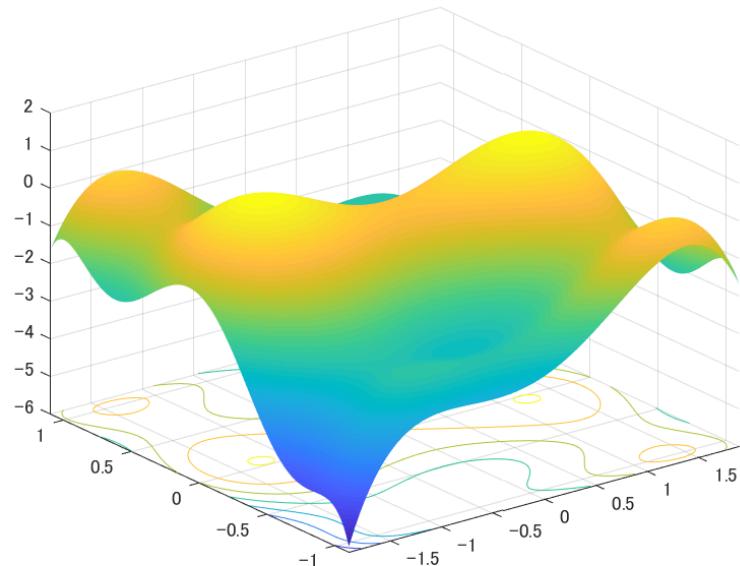


図 5.11: 2D Six-Hump Camel Back

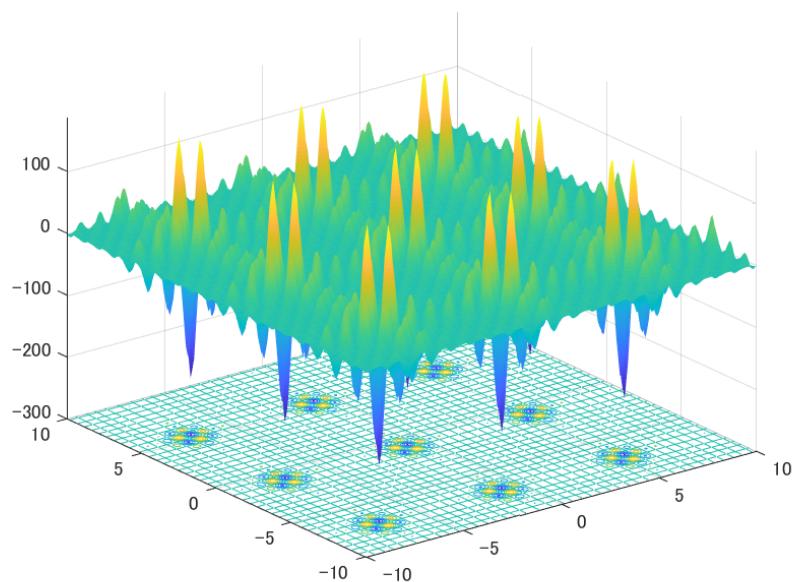


図 5.12: 2D Shubert

表 2: Benchmark Test Functions

Function	$G(x_*)$	Num of goptima	ρ	D	Search Range
G_1	200.0	2	0.01	1	$x \in [0, 30]$
G_2	1.0	5	0.01	1	$x \in [0, 1]$
G_3	1.0	1	0.01	1	$x \in [0, 1]$
G_4	200.0	4	0.01	2	$x, y \in [-6, 6]$
G_5	1.03163	2	0.5	2	$x \in [-1.9, 1.9], y \in [-1.1, 1.1]$
G_6	186.731	18	0.5	2	$x_i \in [-10, 10]$

6 Novelty Search-based Bat Algorithm (NSBA)

本章では多峰性最適化に対し、大域探索と局所探索を自動で切り替えることに優れた Bat Algorithm (BA) と、未探索領域に解を生成する Novelty Search を組み合わせた NSBA [19] を説明する。

6.1 Novelty Search

Novelty Search [10] は未探索領域に新たに解を生成することを目的とした手法である。個体間距離の算出式は次式で表される。

$$\rho(x) = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k dist(x, \mu_i) \quad (6.1)$$

この時、 $\rho(x)$ は個体 x における密度を表しており、 k は個体 x の近傍数、 $dist$ は個体 x と μ_i の距離を表す。図 6.1 は近傍数が 3 の時の解の生成を表す。

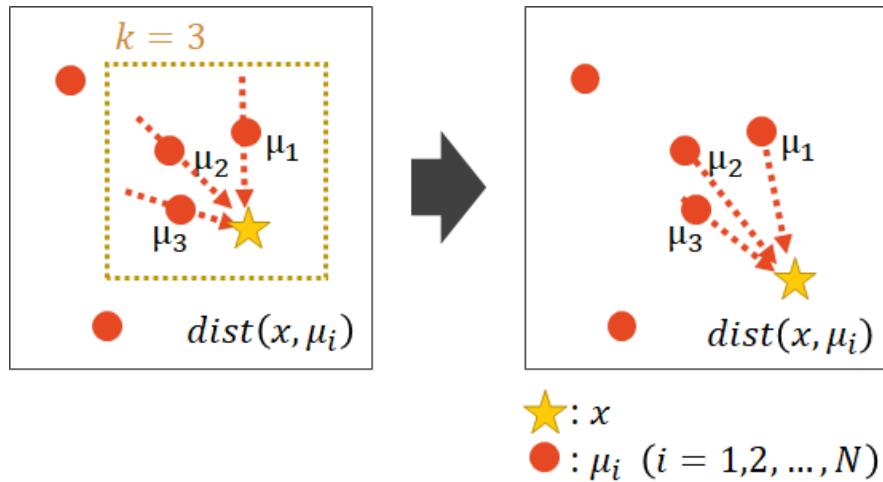


図 6.1: 解候補の生成

6.2 メカニズム

NSBA は BA に Novelty Search を組み込んだ複数解探索手法であり、BA からの変更点を図 6.2 に表す。(6.1) 式を以下のベクトル式に変更することで、密集している個体が疎な方向へ新たに解候補を生成する。

$$\mathbf{d}_i^t = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{(\mathbf{x}_{pbest} - \mathbf{x}_j^t)}{|\mathbf{x}_{pbest} - \mathbf{x}_j^t|^2} \quad (6.2)$$

$$\mathbf{v}_i^{t+1} = \mathbf{v}_i^t + \mathbf{d}_i^t * f_i \quad (6.3)$$

	BA	NSBA
収束方向へ探索	最良個体 方向へ移動	最良個体から <u>離れる方向</u> へ移動
局所探索	最良個体付近	<u>各個体</u> 付近
ランダム探索	解探索空間	BAと同じ

図 6.2: BA からの変更点

この時, x_{pbest} は i 番目の最良個体を表し, このベクトル式から速度 v_i を更新する.

局所探索では, 最良個体 x_{pbest} 付近に新たに解候補を次式で生成される.

$$\mathbf{x}_{loc} = \mathbf{x}_{pbest} + \epsilon A^t, \quad (6.4)$$

ϵ は $[-1, 1]$ 区間における D 次元の一様乱数を表す. ランダム探索では, 探索空間内に新たに解候補を生成する.

$$\mathbf{x}_{rnd} = \mathbf{x}_{lb} + (\mathbf{x}_{ub} - \mathbf{x}_{lb}) * rand(1, D) \quad (6.5)$$

6.3 アルゴリズム

アルゴリズムの疑似コードを以下の Algorithm 11 に記す.

- **STEP1:** 個体の初期化

探索空間内にランダムに個体 $x_i (i = 1, 2, \dots, N)$ を生成し, 周波数 f_i , ラウドネス A_i^0 , パルスレート r_i^0 を決定する (1-3 行目).

- **STEP2:** 速度の更新と解候補の生成

速度 v_i により新しく解候補を生成する (6 行目).

- **STEP3:** 局所探索

最良解 x_{pbest} 近辺に新しく解候補 x_{loc} を生成する (8 行目).

- **STEP4:** ランダム探索

探索空間内にランダムで解候補 x_{rnd} を生成する (10 行目).

- **STEP5:** 評価と更新

$rand < A_i$ を満たす, かつ 3 つの解候補が t 時点での最良解 x_{pbest} よりも評価値が高ければ解を更新する (11-14 行目).

- **STEP6:** STEP2 へ戻る

終了条件を満たすまで STEP2 へ戻る.

Algorithm 11 Novelty Search-based Bat Algorithm**Input:** Objective Function $F(x)$

```

Initialize Population  $x_i (i = 1, 2, \dots, N)$  and  $v_i$ 
Define frequency  $f_i$  at location  $x_i$  [Eq.(2.9)]
Initialize pulse rates  $r_i$ , and loudness  $A_i$ 
while ( $t <$  Max number of iterations) do
    for i=1 to N do
        6:   Generate a new solution  $x_i$  and update velocity  $v_i$  [Eqs.(2.11)(6.2)(6.3)]
        if ( $rand > r_i$ ) then
            Generate a new solution  $x_{loc}$  around the solution  $x_i$  [Eq.(6.4)]
        end if
        Generate a new solution  $x_{rnd}$  randomly (or without  $x_{rnd}$ ) [Eq. (6.5)]
        if ( $rand < A_i \& \min(F(x_i), F(x_{new}), F(x_{rnd})) < F(x_{i*})$ ) then
            12:  Accept the new solution, and update pulse rate  $r_i$ 
                  & loudness  $A_i$  [Eqs. (2.14)(2.15)]
        end if
    end for
    Evaluate the all bats and select a best solution  $x_{i*}$  in the current solutions
end while

```

6.4 実験

本実験では従来の BA と NSBA の性能を比較するため、代表的な以下の多峰性関数を用いる。

6.4.1 評価関数

本実験では 5.1 節で説明した F_1 関数 (Griewank) と F_2 関数 (Rastrigin) を用いる。

6.4.2 評価基準

本実験では Peak Ratio (PR) [20] を採用し、最適解及び局所解の発見率を次式で求める。

$$PR = \frac{\sum_{run=1}^{MR} FPs}{TP * MR} \quad (6.6)$$

ここで、 TP は評価関数の全最適解と局所解数 (Total Peak) を表し、 MR は実験回数 (Max Run) を表す。 FPs は発見した解の数 (Found Peaks) を表す。解発見の定義はピークとその最近傍個体とのユークリッド距離が 0.1 未満であった時、その解を発見したとする。

6.4.3 実験設定

本実験では, F_1 関数では個体数 $N = 50, 100$, F_2 関数では $N = 100, 150$ とした. 2つの関数において, $f_{max} = 1$, $f_{min} = 0$, ラウドネス $A^0 = 1$, パルスレート $r^0 \in rand[0, 1]$ とし, $\alpha = \gamma = 0.9$ と設定した. 世代数は 10000, 実験回数を 30 回とした.

6.4.4 実験結果

- PR と発見した解数

表 3 は BA と NSBA における, 発見した解の数 (FPs) とその発見率 (PR) の 30 試行回数による平均値と標準偏差を示す. 表 3 より 2 つの関数に対し, NSBA は BA よりも FPs 及び PR 値が高いことから探索性能が良好である. 図 6.3, 6.4 は最終世代における解の分布を表し, 白い丸が解の位置である. 図より BA は一つの最適解に収束する傾向にあるが, 一方で NSBA は最適解とその周辺にある複数の局所解に留まっていることが分かった.

- 収束速度

図 6.5 は NSBA と BA の世代数による PR 値の推移を表しており, 縦軸は PR 値, 横軸は世代数を示す. 黒い実線は BA, 黒い点線は NSBA の推移を示している. 図 5(a) から 5(d) で BA は最終世代において, PR 値が 0%付近で収束しているのに対し, NSBA は F_1 関数では 70%まで PR 値が上昇し, 1000 世代以降は徐々に低下する傾向にある. F_2 関数では NSBA の PR 値が 20%から 10%まで減少し, 3000 世代以降は停滞する傾向が見られた.

表 3: Found Peaks and Peak Ratio of BA and NSBA

Function	BA			NSBA		
	Mean	SD	PR	Mean	SD	PR
$F_1 (N = 50)$	1.0	0	5.89 %	6.8	0.7024	40.0 %
$F_1 (N = 100)$	1.0	0	5.89 %	7.267	0.5735	42.75 %
$F_2 (N = 100)$	1.0	0	0.87 %	7.9333	0.8929	6.56 %
$F_2 (N = 150)$	1.0	0	0.87 %	8.0667	0.7717	6.67 %

6.5 考察

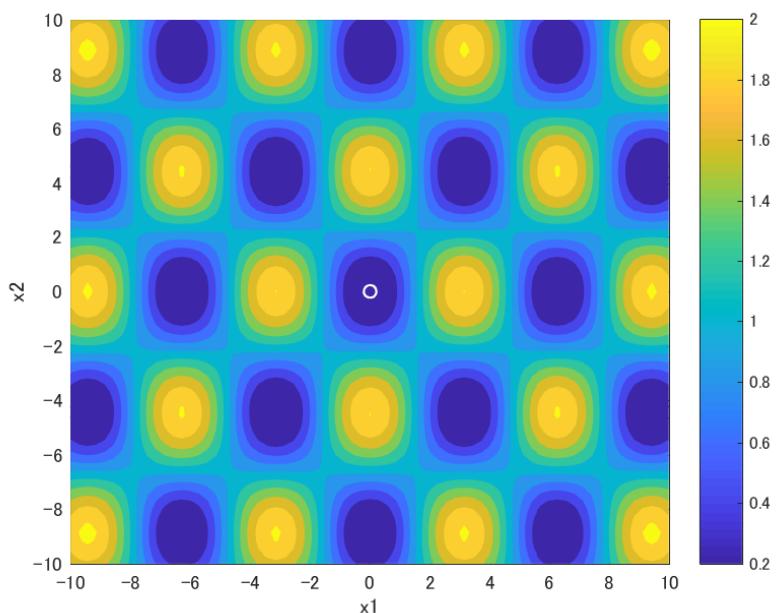
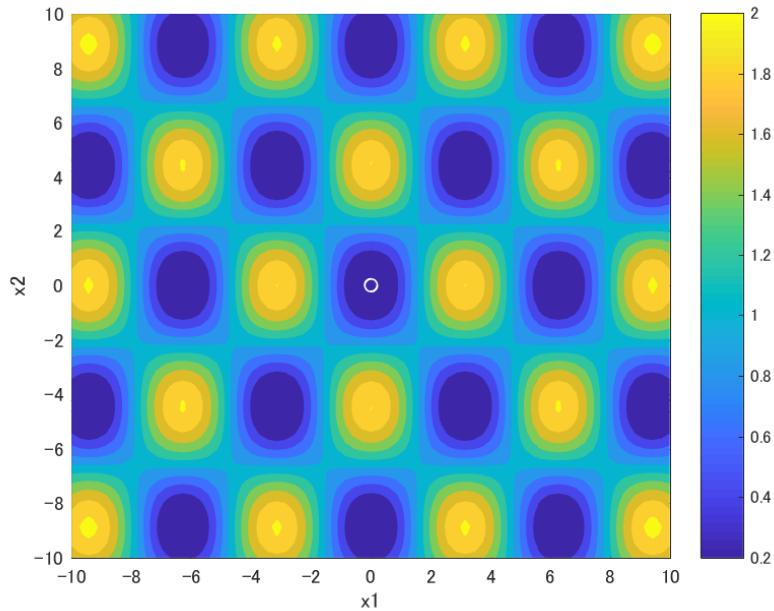
6.5.1 個体数による影響

個体数の変化による影響があるか調査するため, BA と NSBA にて個体数を変えて実験を行った. 表 3 より, BA の PR 値は F_1 , F_2 関数のいずれにおいても個体数による変化がなかった. 一方, NSBA は個体数が増加すると 2 つの関数において PR 値が増加した.

NSBA は F_1 関数において、40%から 42.75%と探索率が上昇し、 F_2 関数においても 6.56%から 6.67%と僅かに上昇した。このことから個体数を増やすことで探索性能が向上したと考えられる。また、図 6.5 からも個体数の増加により、世代数が増す中で PR 値を維持していることが分かる。 F_1 関数で NSBA($N = 50$) の PR 値は 70%から 30%へと低下しているが、NSBA($N = 100$) では 6000 世代付近から 50%を維持していることが分かる。

6.5.2 解の分布

図 6.5 より PR 値を維持できない原因を分析するため、ここでは PR 値が最も高かった 1000 世代目の解分布に着目し、その時の分布図を図 6.6 に示す。この図から F_1 関数において、NSBA は 1000 世代目ではほぼ全ての最適解及び局所解を探索することができているが、図 6.5 から 1000 世代以降に PR 値が低下している。これは NSBA の収束性能が強いために、一度発見した解よりも評価値の高い解を見つけた場合に移動してしまうことが原因であると考えられる。 F_2 関数においても同じような傾向が見られたが、 F_1 関数よりも多くの局所解が存在することから探索が困難となり、PR 値は探索開始時から最終世代まで、20%から 10%へと低い PR 値であった。



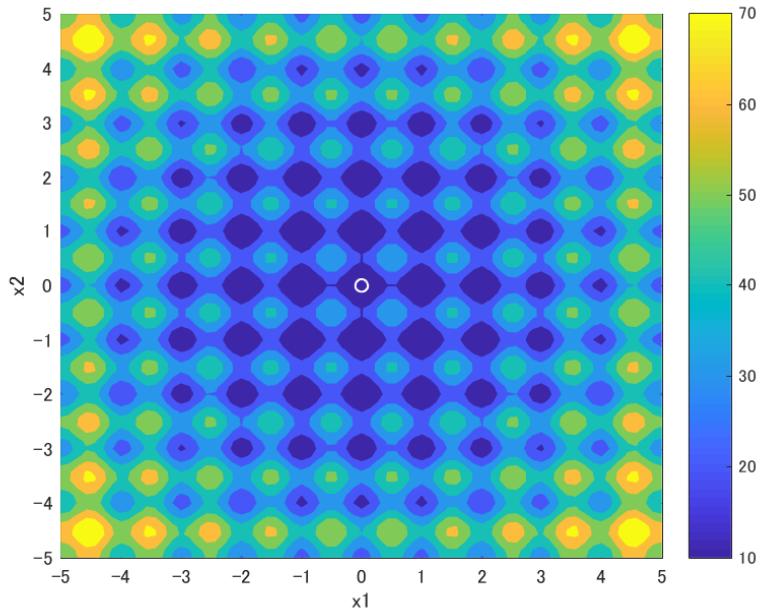
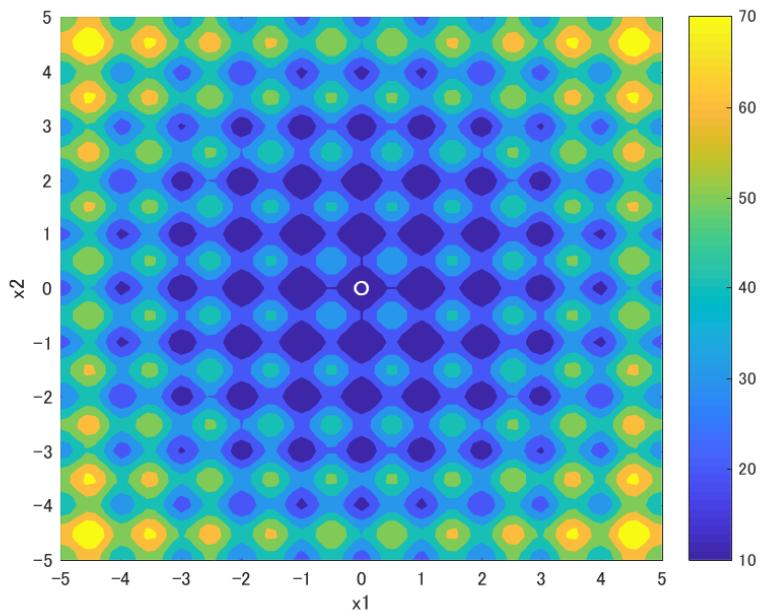
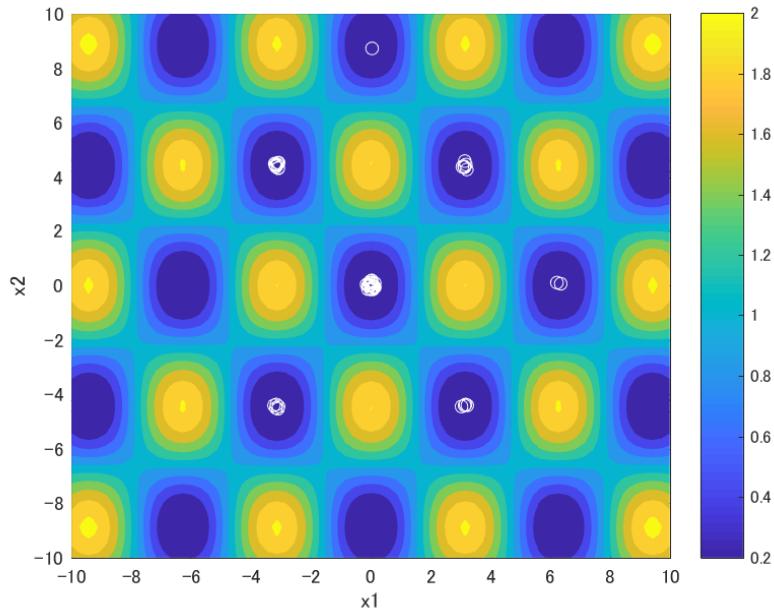
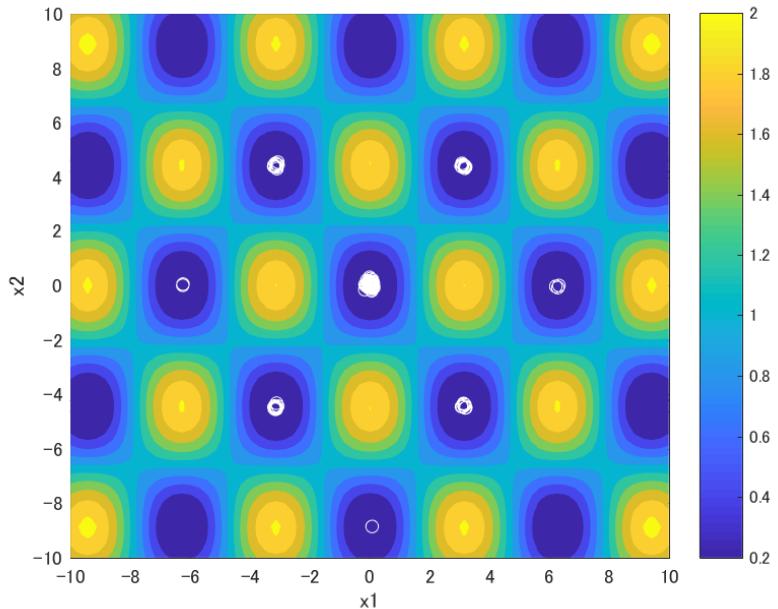
(c) $F_2 : (N = 100)$ (d) $F_2 : (N = 150)$

図 6.3: BA

(a) $F_1 : (N = 50)$ (b) $F_1 : (N = 100)$

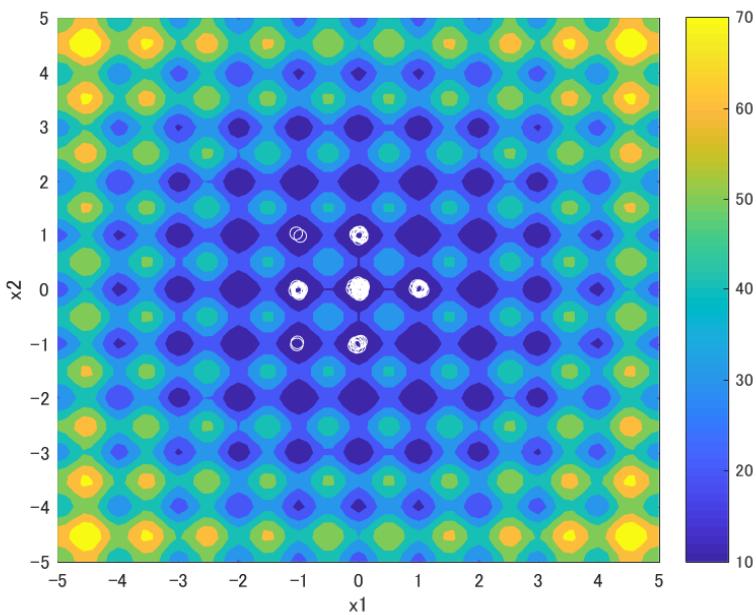
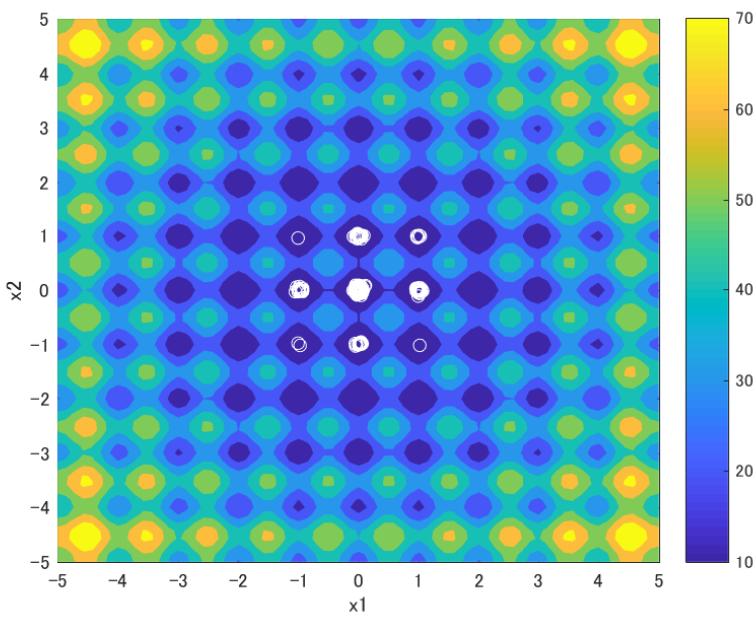
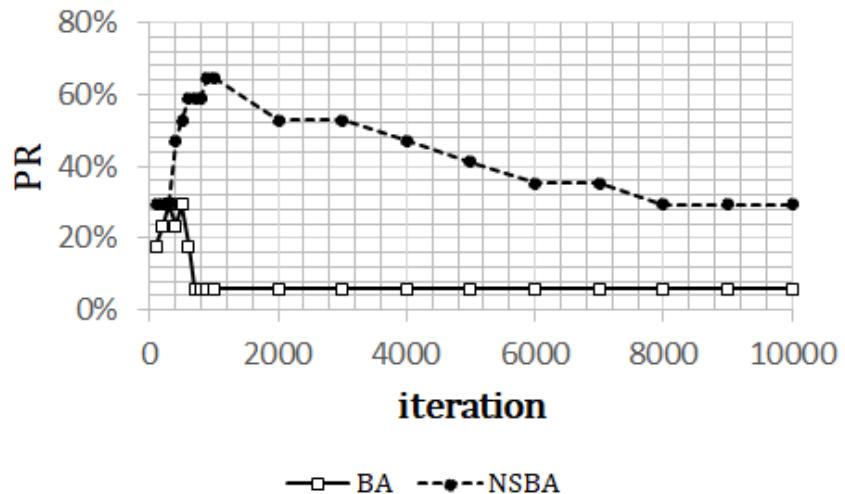
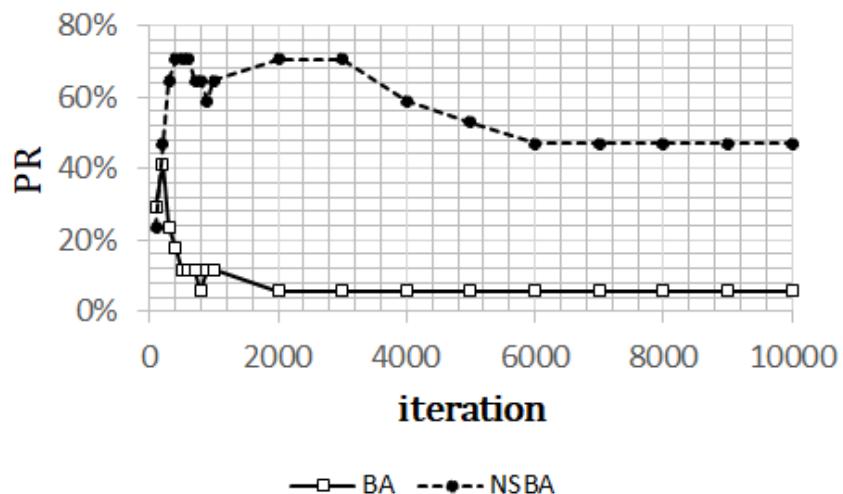
(c) $F_2 : (N = 100)$ (d) $F_2 : (N = 150)$

図 6.4: NSBA

(a) $F_1 : (N = 50)$ (b) $F_1 : (N = 100)$

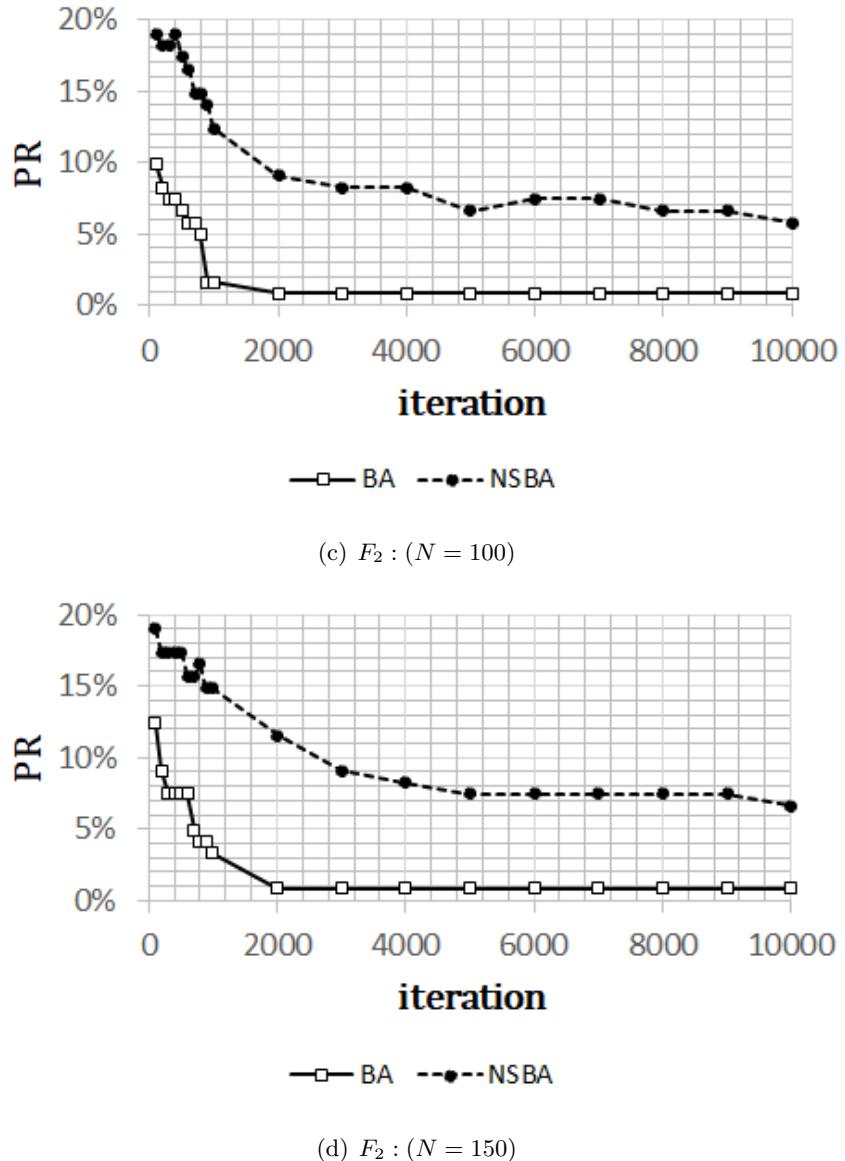
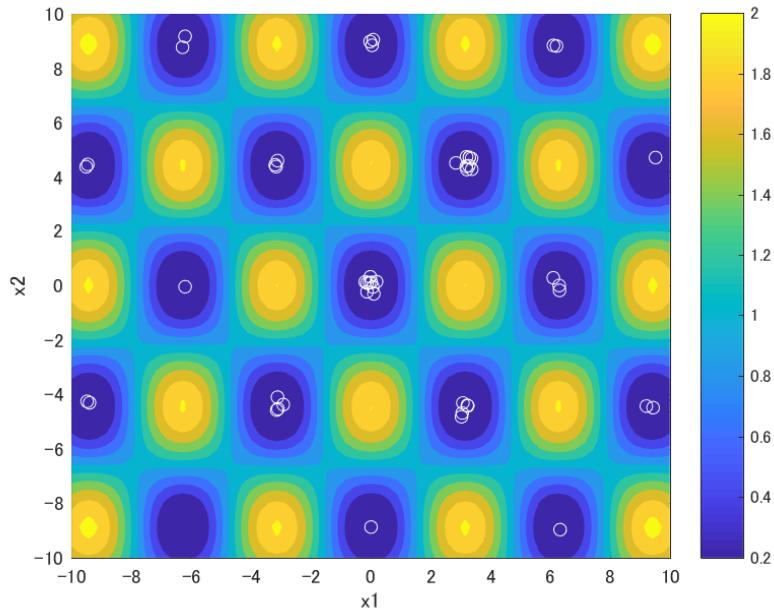
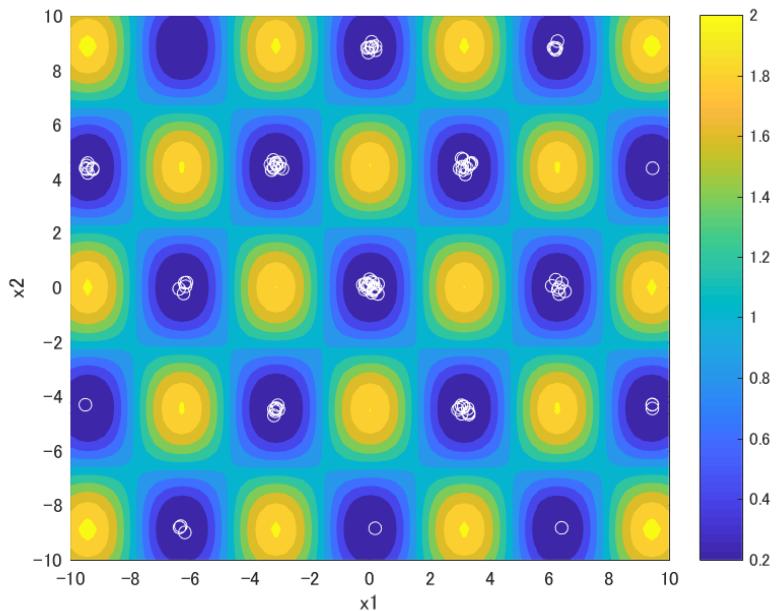


図 6.5: Convergence Speed of Peak Ratio implemented by BA and NSBA

(a) $F_1 : (N = 50)$ (b) $F_1 : (N = 100)$

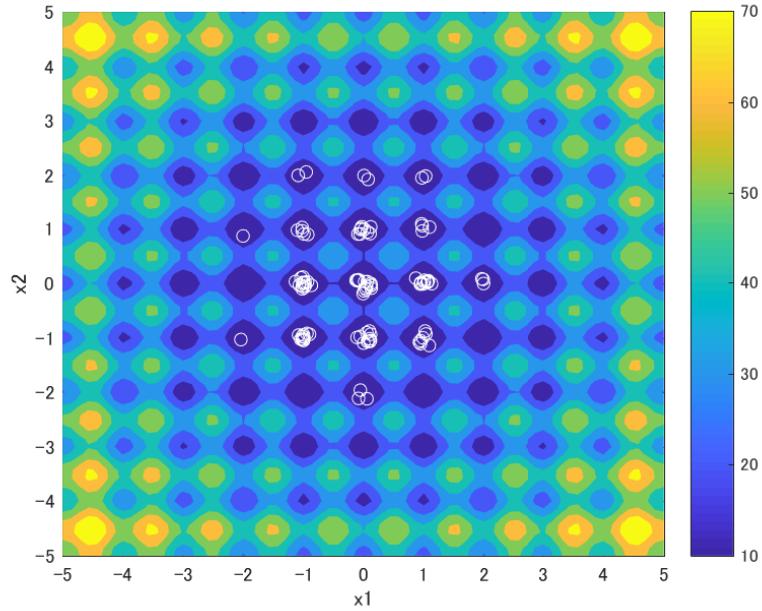
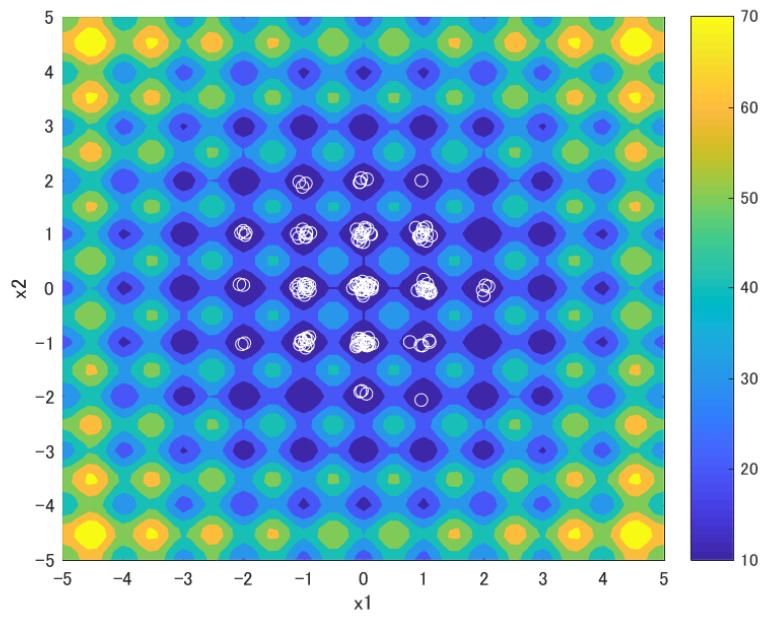
(c) $F_2 : (N = 100)$ (d) $F_2 : (N = 150)$

図 6.6: Distribution of Solutions (NSBA)

7 Niche Radius-based Bat Algorithm (NRBA)

探索空間の分割方法の一つとして Niche Radius が挙げられる。Niche Radius は探索空間のスケールと探索する解の数を元に個体の探索範囲を決定することのできる手法である。これにより、各個体が同じ解に留まることなく分散させ、従来の BA に以下 3 つの変更点を加えることで、最適解だけでなく局所解も同時に探索可能な NRBA [24] を説明する。

7.1 メカニズム

従来手法の BA からの変更点を以下の図 7.1 に表し、その詳細を以下に示す。

	BA	NRBA
収束方向への探索	最良個体方向へ移動	Niche radius(分割した探索範囲)内の最良個体から離れる方向へ移動
局所探索	最良個体付近	Niche radius内の最良個体
ランダム探索	解探索空間	Niche radius内
アルゴリズムの特徴	全個体が最適解へ収束	探索空間内の局所解も捕捉可能

図 7.1: BA からの変更点

- BA からの変更点 1: 大域探索

ここでは Niche Radius を使用し、従来である BA の解候補の生成式 (2.10), (2.11) を次式のように変更を加えた。

$$\mathbf{v}_i^{t+1} = \mathbf{v}_i^t + (\mathbf{x}_i^t - \mathbf{x}_{NR*}) * f_i \quad (7.1)$$

$$\mathbf{x}_i^{t+1} = \begin{cases} \mathbf{x}_i^t + \mathbf{v}_i^{t+1} & (\text{if } d_i^t < \sigma) \\ \mathbf{x}_i^t & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (7.2)$$

個体移動時のイメージ図を図 7.2 に表す。各個体は NR を半径とした円の探索領域が決まっており、個体間距離 d_i が NR より小さい場合において、式 (7.1) にて NR 内の最良解 \mathbf{x}_{NR*} を中心とした円から離れる方向へ個体 \mathbf{x}_i^t が速度 \mathbf{v}_i で移動する。また NR 内に他の個体が存在しない、あるいは最良解 \mathbf{x}_{NR*} は移動をせず、その場所に留まる。この変更により、個体が同じ探索領域内に留まらず分散化をはかる。

- BA からの変更点 2: 局所探索

次に局所探索性能を上げるため、各個体が持つ Niche Radius 内の最良解 \mathbf{x}_{NR*} の周辺に新しい解候補 \mathbf{x}_{loc} を生成するよう変更した。生成式は次の通りである。

$$\mathbf{x}_{loc} = \mathbf{x}_{NR*} + \epsilon A_i^t \quad (7.3)$$

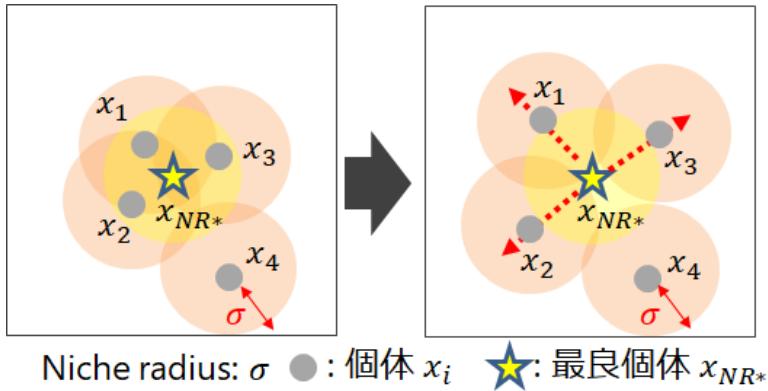


図 7.2: 解候補の生成

ϵ は $1 \times D$ 次元の配列で $[-NR, NR]$ 区間のランダムな値が割り当てられる。この変更により、個体を局所解へ収束するよう促す。

- BA からの変更点 3: ランダム探索

ランダム探索では各個体の持つ NR 内にランダムで解候補を以下の式のように生成する。

$$\mathbf{x}_{rnd} = \mathbf{x}_i^t + rand(1, D, [-NR, NR]) \quad (7.4)$$

$[-NR, NR]$ 区間内の $1 \times D$ 次元の配列により現在位置 \mathbf{x}_i^t 周辺に解候補を生成する。この変更では各個体を最適解あるいは局所解近辺へ移動させることで同じ場所に留まることを避ける。

7.2 アルゴリズム

提案手法の NRBA のアルゴリズムの疑似コードを Algorithm 12 に記す。

- STEP1: 個体の初期化

探索空間内にランダムに個体 $x_i (i = 1, 2, \dots, N)$ を生成し、周波数 f_i 、ラウドネス A_i^0 、パルスレート r_i^0 を決定する (1-3 行目)。

- STEP2: 速度の更新と解候補の生成

速度 v_i により新しく解候補を生成する (7 行目)。

- STEP3: 局所探索

最良解 x_{pbest} 近辺に新しく解候補 x_{loc} を生成する (10-11 行目)。

- STEP4: ランダム探索

探索空間内にランダムで解候補 x_{rnd} を生成する (12 行目)。

- STEP5: 評価と更新

$rand < A_i$ を満たす、かつ 3 つの解候補が t 時点での最良解 x_{pbest} よりも評価値が高ければ解を更新する (13-15 行目)。

- **STEP6: STEP2 へ戻る**
終了条件を満たすまで STEP2 へ戻る。

Algorithm 12 Niche Radius-based Bat Algorithm (NRBA)

Input: Objective Function $F(x)$

```

    Initialize Population  $x_i(i = 1, 2, \dots, N)$  and  $v_i$ 
2: Define frequency  $f_i$  at location  $x_i$  [eq.(2.9)]
    Initialize pulse rates  $r_i$ , and loudness  $A_i$ 
4: while ( $t < \text{Max number of iterations}$ ) do
    for i=1 to N do
6:    if  $d_{ij} < NR$  then
        Generate a new solution  $x_i$  and velocity  $v_i$  [Eqs.(7.1) to (7.2)]
8:    end if
    if ( $rand > r_i$ ) then
10:       Generate a new solution  $x_{loc}$  around personal best solution  $x_{NR*}$  in Niche
         radius [Eq.(7.3)]
    end if
12:       Generate a new solution  $x_{rnd}$  randomly in Niche radius [Eq.(7.4)]
    if ( $rand < A_i \& \min(F(x_i), F(x_{loc}), F(x_{rnd})) < F(x_{i*})$ ) then
14:          Accept the new solution, and update pulse rate  $r_i$ 
          & loudness  $A_i$  [Eqs. (2.14)(2.15)]
    end if
16:       Evaluate all bats and select a best solution  $x_*$  in the current solutions
    end for
18:        $t=t+1$ 
end while

```

7.3 実験

最小化問題における最適解と局所解の数が異なる評価関数において、各手法の探索性能にどのような影響があるか調査する。次の4つのパターンの評価関数を用意し、従来手法であるBA、前章で提案したNSBAと比較することで提案手法の探索性能の有効性を検証する。一つの最適解に対して複数の局所解を持つ；複数の最適解に対して同じ数の局所解を持つ；一つの最適解の数に対して一つの局所解を持つ；最適解のみ複数持つ。これらのパターンに適した多峰性関数を用いて実験を行う。

7.3.1 評価関数

本実験で使用するベンチマーク関数は、5.1節で説明した F_1 : Griewank, F_3 : Six-Hump Camel, F_4 : Michalewicz, F_5 : Himmelblau の4つを用いる。

7.3.2 評価基準

本実験において、Congress on Evolutionary Computation (CEC2013) [21] のコンペティションで用いられた評価尺度である Peak Ratio (PR) [20] により評価する。評価式は以下のように設定した。

$$PR = \frac{\sum_{run=1}^{MR} FPs}{TP * MR} \quad (7.5)$$

Max Run (MR) は実験回数を表し、Found Peaks (FPs) は発見した解の数を、Total Peak (TP) は探索領域内の全最適解及び局所解数を表す。また最適解及び局所解の位置座標と最近傍個体とのユークリッド距離が 0.1 未満であれば、その解を発見したと定義する。

7.3.3 実験設定

個体数 $N = 50$ とし、各個体のパラメータ $A_i^0 = 1$, $r_i^0 \in [0, 1]$, $f_{max} = 1$, $f_{min} = 0$, $\alpha = \gamma = 0.9$ と設定した。また Table 1 より、探索領域の上限 x_{ub} と下限 x_{lb} 、各評価関数の解の総数 q として使用した。また次元数 $D = 2$ 、世代数を 10000、実験回数 $MR = 30$ とした。

7.3.4 実験結果

各評価関数について、BA と NSBA、提案手法の NRBA における PR 値を表 4 に示す。表中の Mean (平均値) と SD (標準偏差) は実験回数 30 回での最終世代における発見した最適解及び局所解数を PR 値で表した結果である。各手法の最終世代での個体の分布を図 7.3, 7.5 で表す。またグラフ中の赤い丸は個体の分布を示す。従来手法である BA は全個体の最良解へ向かって進んでしまうため、全ての評価関数において、最適解あるいは評価値の高い局所解に収束した。しかし図 3(d) については局所解は存在しないが、最終世代では一つの最適解へ収束する結果となった。NSBA は全ての評価関数に対して BA よりも PR 値が高く、特に局所解を含まない F_5 関数においては全ての最適解を探索することが可能であった。一方で提案した NRBA は図 7.5 から全評価関数において、全ての解に個体が到達しているように分布しているが、表 4 から全体的に BA や NSBA よりも探索性能が高かったが、最適解や局所解の位置まで到達していないケースが多く見られた。また最適解や局所解に到達していない個体については用いた評価関数によって分布に偏りがあった。

表 4: The value of PR (averaged over 30 runs)

	BA	NSBA	NRBA
Function	Mean \pm SD	Mean \pm SD	Mean \pm SD
F_1	0.0588 ± 0	0.3760 ± 0.0413	0.6922 ± 0.0981
F_3	0.4917 ± 0.0449	0.5 ± 0	0.9917 ± 0.0449
F_4	0.5 ± 0	0.5 ± 0	0.7 ± 0.2450
F_5	0.2417 ± 0.1367	1 ± 0	0.8583 ± 0.1239

7.4 考察

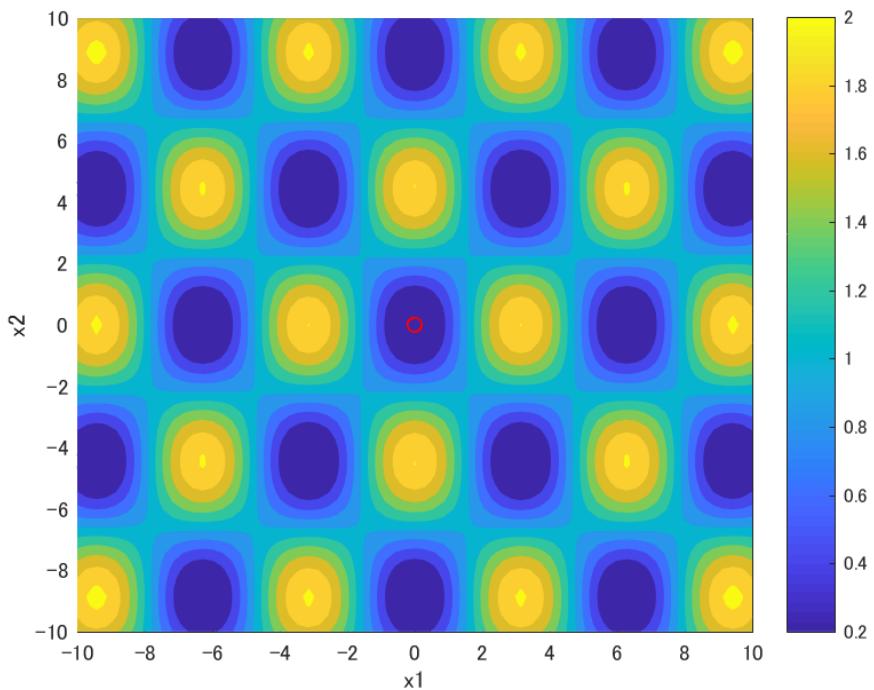
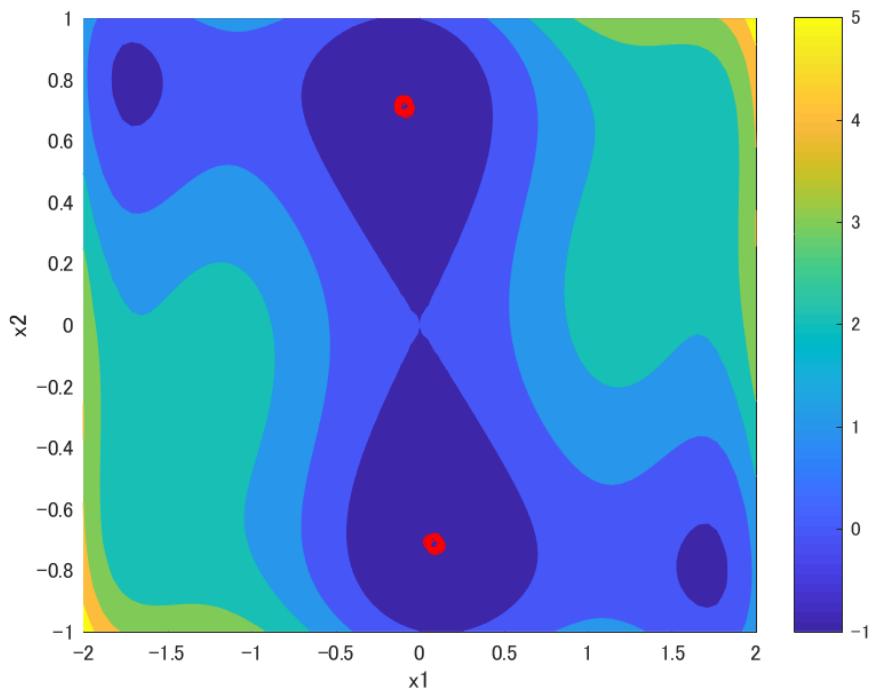
全体的に、BA や NSBA より提案の NRBA のほうが探索した解の数および発見率が高かったことから最適解への収束を防ぎ、複数の局所解へ分散させることができた。また提案手法の探索性能の有効性を確かめるため、評価尺度による解の発見数及び発見率の結果と、最終世代の解の分布という観点から分析を行った。

7.4.1 解の発見数

表 4 から従来手法の BA は全ての評価関数において一つの解へ収束する傾向が強かったが、 F_2 関数では 2 つの解を探索することができた。これは従来手法のアルゴリズムの解候補の生成において、全個体の最良解へ向かって探索をしていることが原因であると考えられる。NSBA についても同様、収束性能が高いために、同じ局所解に複数の個体が密集していることが確認できたが、 F_4 関数においては全ての最適解に到達することが可能であった。これは、最適解の評価値が全て均一であったため、結果として一つの最適解に留まらなかったと考えられる。提案手法の NRBA は全ての評価関数に対して、従来手法よりも発見した解の数が多く、最適解と複数の局所解を探索することができた。評価関数の中でも F_2 関数、次いで F_4 関数の PR の値が高いことから最適解のみ存在する場合と、最適解と局所解の評価値の差が小さい場合において提案手法の探索が有効に働いたと考えられる。また局所解を多く含む F_1 関数や局所解の範囲が非常に狭い F_3 関数では探索性能が落ちたことから今後の課題として手法を改良する必要がある。

7.4.2 最終世代における解の分布

図 7.3 から従来の BA は、最適解への収束が非常に強かった。しかし、図 3(b) では 2 つの最適解に収束していたものの、図 3(d) では複数の最適解へ収束することなく一つの最適解へ収束した。これは、 F_4 関数の方が探索領域が広く、評価値の数値の範囲も広いことから各個体の持つ評価値にバラつきが出やすく、一つの最適解へ収束したと考えられる。図 7.5 より提案手法の NRBA は、図 5(a) では色濃度の濃い領域に各個体を分散させることができたが、図 5(b), 5(c), 5(d) では最適解や局所解でない場所に分布する個体も多く見られた。このことから従来手法から変更した、Niche Radius 内の最良解より個体が遠ざかる機構が働いたと考えられる。以上より探索領域を分割し、各個体の探索領域内での大域探索性能を保ちながらも徐々に局所解へ収束させることができたことが、解の発見率の増加に繋がったと考えられる。

(a) F_1 : Griewank(b) F_3 : Six-Hump Camel

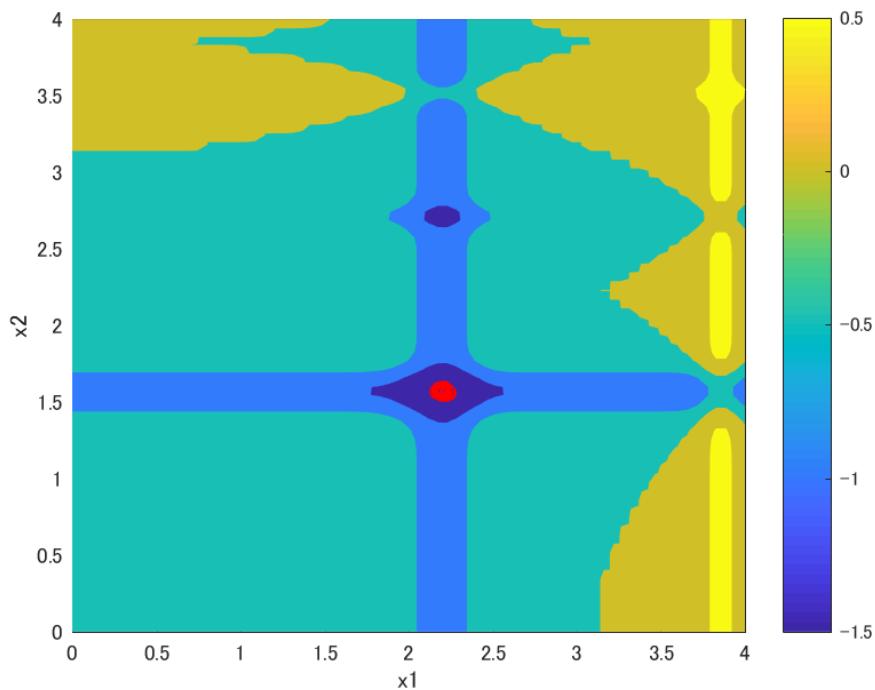
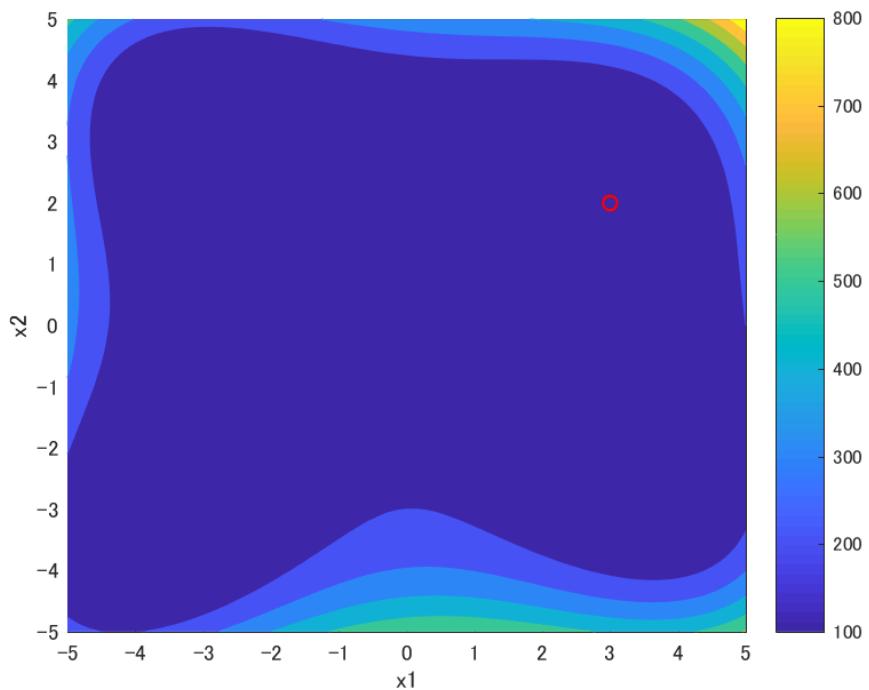
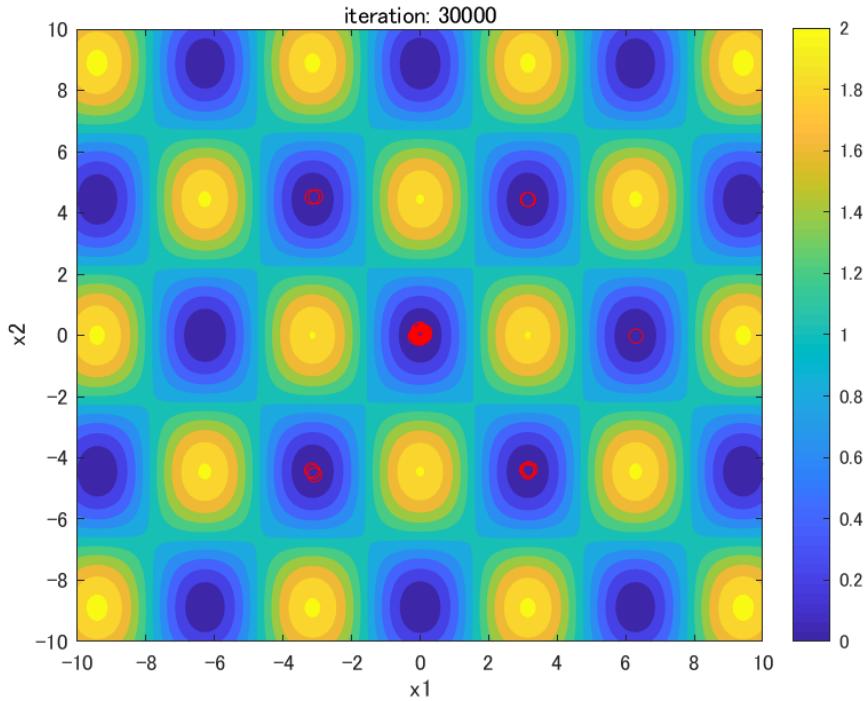
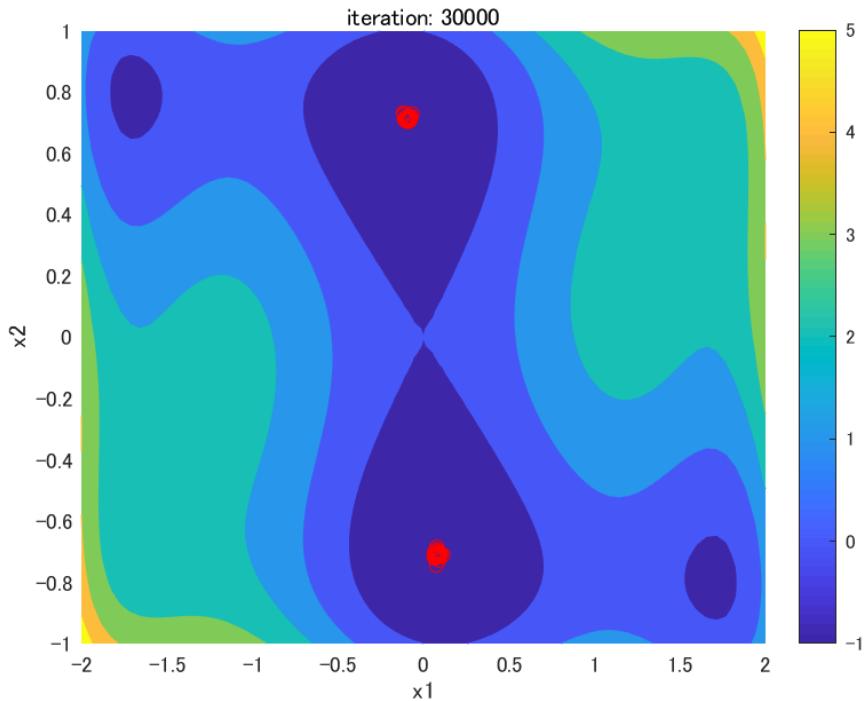
(c) F_4 : Michalewicz(d) F_5 : Himmelblau

図 7.3: BA

(a) F_1 : Griewank(b) F_3 : Six-Hump Camel

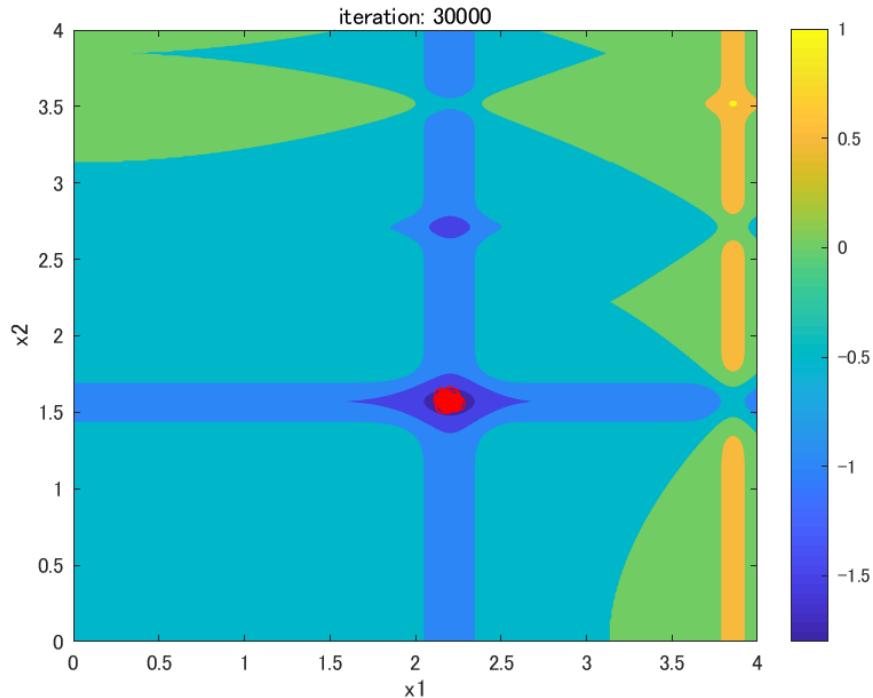
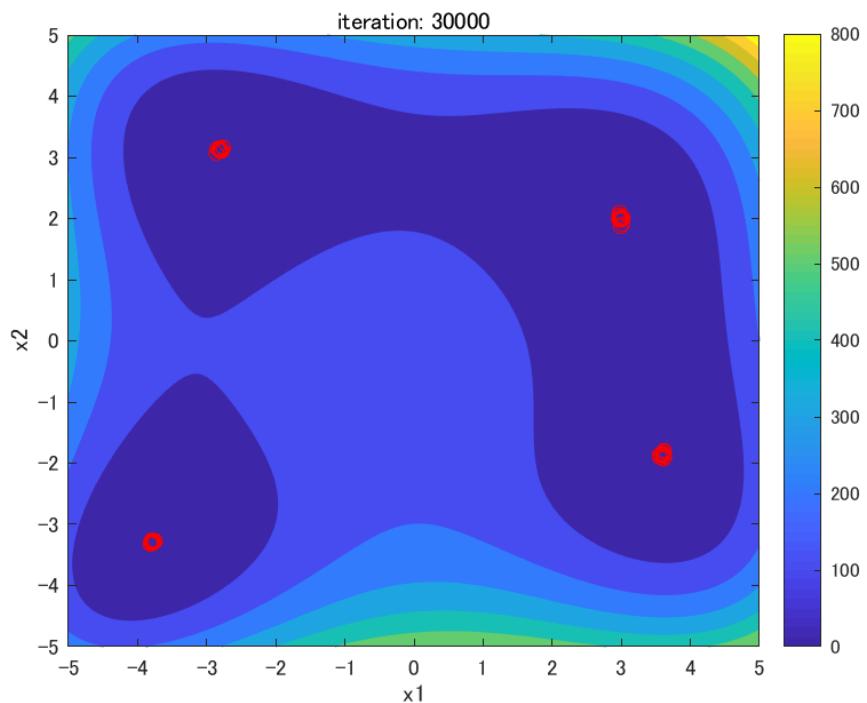
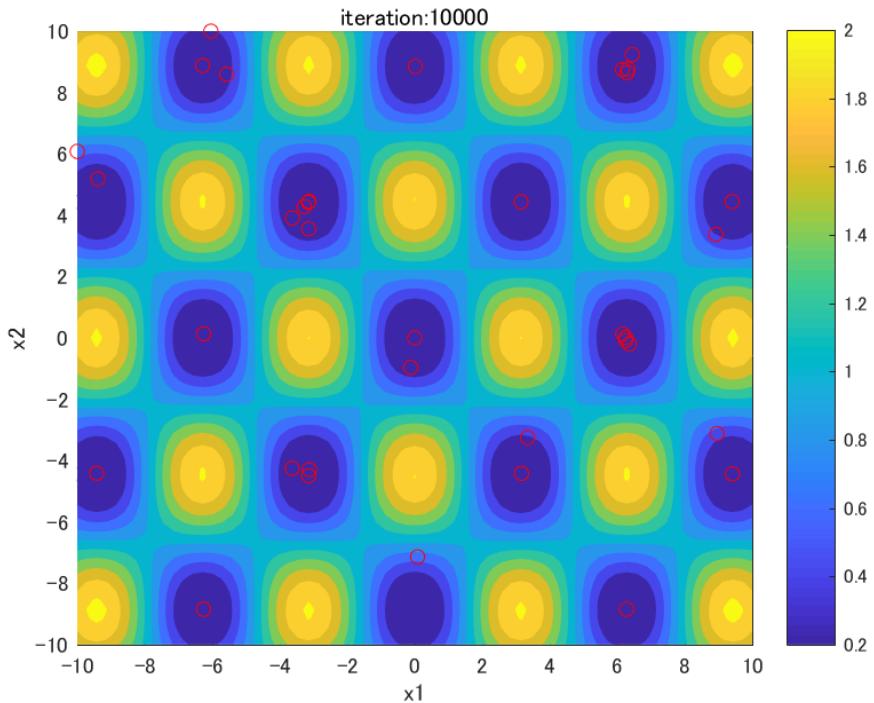
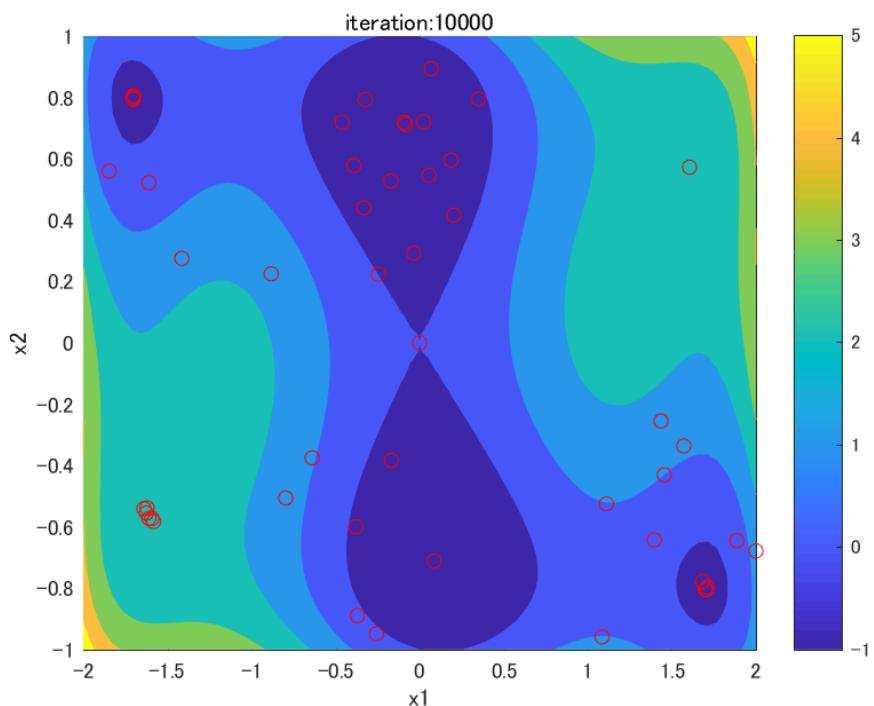
(c) F_4 : Michalewicz(d) F_5 : Himmelblau

図 7.4: NSBA

(a) F_1 : Griewank(b) F_3 : Six-Hump Camel

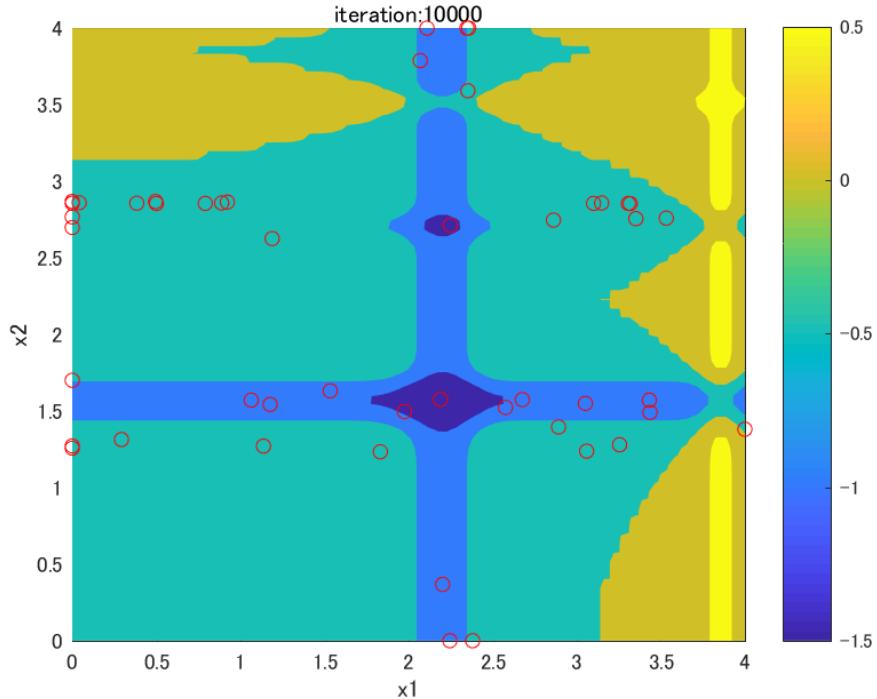
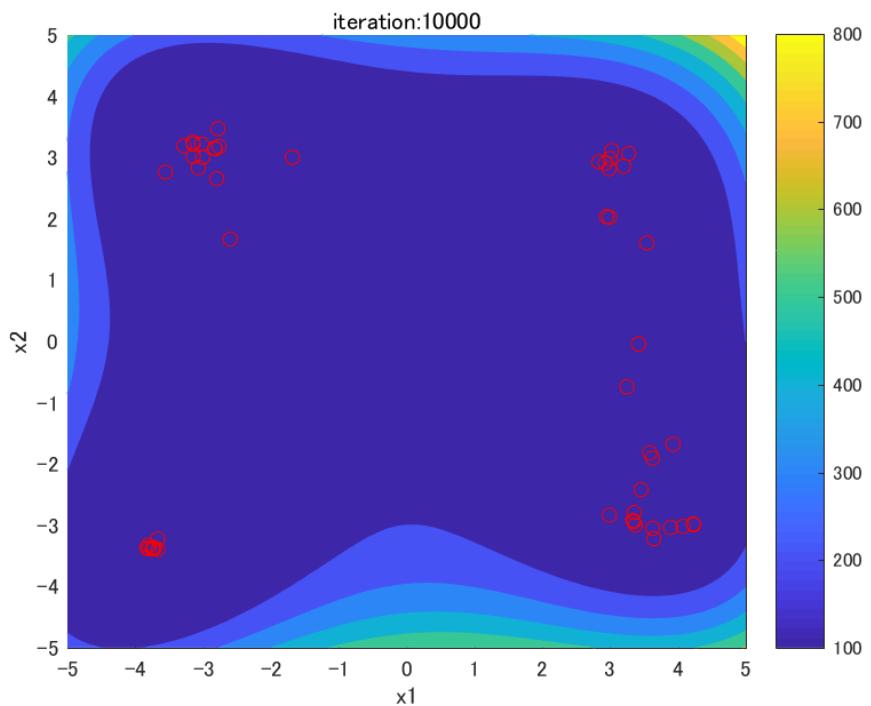
(c) F_4 : Michalewicz(d) F_5 : Himmelblau

図 7.5: NRBA

8 Dynamic Niche Radius-based Bat Algorithm (DNRBA)

本章では、NRBA で局所解に収束しなかった個体を最適解や局所解へ移動させることで、収束性能を高めることを目的とした Dynamic Niche Radius を BA に適用させた DNRBA を提案する。

8.1 メカニズム

3.4 節で説明した Dynamic Niche Sharing [14] より、探索領域に属する個体が同じ局所解に収束することを避けるため、本研究では以下の変更を加えた。

$$m_i^{dyn} = \begin{cases} \sigma & (\text{if } m_i < \sigma) \\ m_i & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (8.1)$$

$$v_i^{t+1} = v_i^t + (x_i^t - x_{NR*}) * f_i \quad (8.2)$$

v_i , x_i は個体の速度と位置を表し、 x_{NR*} は x_i が属する Niche Radius 内の最良個体を示す。 (8.1) 式に基づいて、個体の更新式は以下で表される。

$$x_i^{t+1} = \begin{cases} x_i^t + v_i^{t+1} & (\text{if } m_i < \sigma) \\ x_i^t & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (8.3)$$

ここでは個体の分布密度が高いほど、個体 x_i の持つ Niche Count m_i の範囲内にある最良個体 x_{NR*} から遠ざかる方向へ新たに解候補を生成する。探索範囲決定のイメージ図 8.1 に示す。

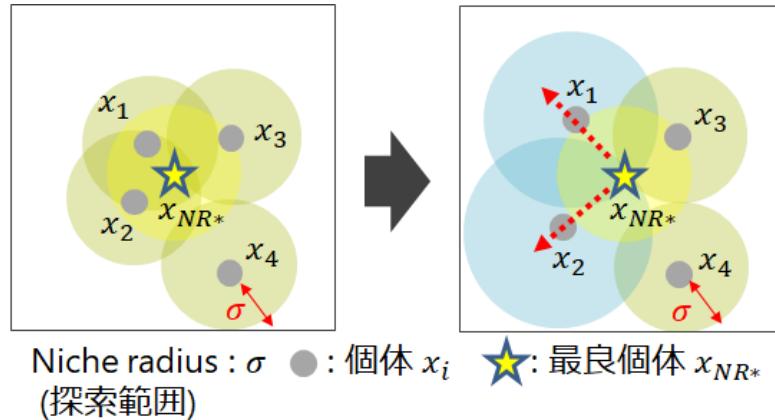


図 8.1: Dynamic Niche Radius のイメージ図

局所探索では (8.1) 式で算出した最良個体 x_{NR*} が持つ m_i の範囲内で個体 x_i が新たに解候補 x_{loc} を生成する。

$$x_{loc} = x_{NR*} + A_i^t * rand(1, D, [-m_i, m_i]) \quad (8.4)$$

ランダム探索では、個体 x_i の持つ m_i の範囲内で新たに解候補 x_{rnd} を生成することで、局所解への収束性能を高める。生成式は次式で表される。

$$x_{rnd} = x_i^t + rand(1, D, [-m_i, m_i]) \quad (8.5)$$

8.2 アルゴリズム

DNRBA のアルゴリズムの疑似コードを以下の Algorithm 13, 14 に記す。

- **STEP1:** 個体の初期化

探索空間内にランダムに個体 $x_i (i = 1, 2, \dots, N)$ を生成し、周波数 f_i 、ラウドネス A_i^0 、パルスレート r_i^0 を決定する (1-3 行目)。

- **STEP2: Dynamic Niche Radius 算出**

Algorithm 13 により、各個体の持つ niche count m_i を算出する (5 行目)。

- **STEP3: 速度の更新と解候補の生成**

速度 v_i により新しく解候補を生成する (8 行目)。

- **STEP4: 局所探索**

最良解 x_{pbest} 近辺に新しく解候補 x_{loc} を生成する (10-11 行目)。

- **STEP5: ランダム探索**

探索空間内にランダムで解候補 x_{rnd} を生成する (13 行目)。

- **STEP6: 評価と更新**

$rand < A_i$ を満たす、かつ 3 つの解候補が t 時点での最良解 x_{pbest} よりも評価値が高ければ解を更新する (14-16 行目)。

- **STEP6: STEP2 へ戻る**

終了条件を満たすまで STEP2 へ戻る。

8.3 実験

DNRBA の収束性能を検証するため、ここでは BA と比較する。本実験では最小化問題における、最適解と局所解を持つ Griewank 関数と Shubert 関数を用いた。

8.3.1 評価関数

本実験では、評価関数は 5.1 節で説明した F_1, F_6 関数を使用する。

Algorithm 13 Dynamic Niche Radius

Input: Current Population $x_i (i = 1, 2, \dots, N)$ and v_i

```

for i=1 to N do
  2:   for j=1 to N do
    Calculate  $d_{ij}$  between individuals  $i, j$ 
    4:     if ( $d_{ij} < \sigma$ ) then
         $sh(d_{ij}) = (1 - \frac{d_{ij}}{\sigma})$  [Eq.(3.3)]
    6:     else
         $sh(d_{ij}) = 0$  [Eq.(3.3)]
    8:   end if
    9:   end for
10:    $m_i = \sum_{j=1}^N sh(d_{ij})$  [Eq.(3.4)]
11: end for
12: for i=1 to N do
    13:   if ( $m_i < \sigma$ ) then
        14:      $m_i^{dyn} = \sigma$  [Eq.(8.1)]
    15:   else
        16:      $m_i^{dyn} = m_i$  [Eq.(8.1)]
    17:   end if
18: end for
return Dynamic Niche Radius  $m_i^{dyn}$ 

```

8.3.2 評価基準**8.3.3 Peak Ratio**

本実験では CEC2013 Competition で用いられた Peak Ratio (PR) [21] を用い、発見した解の数の割合を求める。PR の算出式は次式で表される。

$$PR = \frac{\sum_{run=1}^{MR} FPs}{TP * MR} \quad (8.6)$$

Max Run (MR) は実験回数を表し、Found Peaks (FPs) は発見した解の数を、Total Peak (TP) は探索領域内の全最適解及び局所解数を表す。また最適解及び局所解の位置座標と最近傍個体とのユークリッド距離が 0.1 未満であれば、その解を発見したと定義する。

8.3.4 Peak Accuracy

探索する個体が最適解にどのくらい近づいているかを計測する尺度として Peak Accuracy (PA) [21] を用いる。PA の算出式は以下で表される。

$$PA = \sum_{j=1}^{TP} |F(s_j) - F(x_{NN_j})|, \quad (8.7)$$

Algorithm 14 Bat Algorithm with Dynamic Niche Radius (DNRBA)**Input:** Objective Function $F(x)$

```

Initialize Population  $x_i (i = 1, 2, \dots, N)$  and  $v_i$ 
Define frequency  $f_i$  at location  $x_i$  [Eq.(2.9)]
3: Initialize pulse rates  $r_i$ , and loudness  $A_i$ 
while ( $t <$  Max number of iterations) do
    Calculate Dynamic Niche Radius (Algorithm 2)
6:   for i=1 to N do
        if  $d_{ij} < NR$  then
            Generate a new solution  $x_i$  and velocity  $v_i$  [Eqs.(8.2) and (8.3)]
        9:   end if
        if ( $rand > r_i$ ) then
            Generate a new solution  $x_{loc}$  around personal best solution  $x_{NR*}$  in Niche
            radius [Eq.(8.4)]
        12:  end if
            Generate a new solution  $x_{rnd}$  randomly in Niche radius [Eq.(8.5)]
            if ( $rand < A_i \& \min(F(x_i), F(x_{loc}), F(x_{rnd})) < F(x_{i*})$ ) then
                Accept the new solution, and update pulse rate  $r_i$ 
                & loudness  $A_i$  [Eqs. (2.14) and (2.15)]
            15:   end if
            Evaluate all bats and select a best solution  $x_*$  in the current solutions
18:   end for
end while

```

この時, $F(s_j)$ は j 番目の最適解の評価値を表し, その最近傍個体 x_{NN_j} の評価値との差分和を求める. 則ち, PA 値が 0 に近づくほど, 個体が最適解に位置していることを示す.

8.4 実験設定

本実験では $f_{max} = 1$, $f_{min} = 0$, ラウドネス $A^0 = 1$, パルスレート $r^0 \in [0, 1]$ と設定した。また $\alpha = \gamma = 0.9$ とし、個体数を 100, 世代数を 30000 としてランダムシードを変えた実験を 30 回行った。

8.5 実験結果と考察

本節では DNRBA の性能の効果を確かめるため、各評価関数における PR と PA に着目する。表 5, 6 は、BA と DNRBA のアルゴリズムにおける PR と PA の結果を表す。各評価関数の PR と PA の 30 試行の平均値及び標準偏差を示している。また図 8.2, 8.4 は最終世代の個体の分布を白い丸で表す。

表 5: PR and PA of BA and DNRBA (averaged over 30 runs)

$\varepsilon = 1.0E - 1$				
	BA		DNRBA	
Function	PR (Mean and SD)	PA (Mean and SD)	PR (Mean and SD)	PA (Mean and SD)
F_1	0.2725 ± 0.0598	0.2416 ± 0.0149	0.9373 ± 0.1176	0.0094 ± 0.0155
F_6	0.4889 ± 0.1819	1.8160 ± 0.4990	0.4241 ± 0.388	2.4123 ± 0.6780

表 6: PR and PA of BA and DNRBA (averaged over 30 runs)

$\varepsilon = 1.0E - 2$				
	BA		DNRBA	
Function	PR (Mean and SD)	PA (Mean and SD)	PR (Mean and SD)	PA (Mean and SD)
F_1	0.2725 ± 0.0608	0.2416 ± 0.0151	0.9373 ± 0.1176	0.0094 ± 0.0155
F_6	0.0556 ± 0.0619	1.8160 ± 0.4990	0.0426 ± 0.0477	2.4123 ± 0.6780

8.5.1 Peak Ratio

表 5 より $\varepsilon = 1.0E - 1$ の F_1 関数では、BA よりも DNRBA の PR 値の方が高く、図 4(a) からほぼ全ての最適解と局所解を発見していることが分かる。対して F_6 関数では、図 2(b), 4(b) から個体が全最適解に位置しているように見て取れるが、DNRBA よりも BA の方が僅かに PR 値が高かった。このことから最適解しか存在しない関数については

BA のほうが探索性能則ち収束性能が高いことが分かった。 $\varepsilon = 1.0E-2$ についても同様、PR 値は F_1 関数は DNRBA の方が高く、 F_6 関数では BA の方が高かった。

8.5.2 Peak Accuracy

表 5, 6 から F_1 関数では、BA より DNRBA の方が PA 値が高かったが、 F_6 関数では BA の方が PA 値が高かった。これは、従来 BA の収束する方向へ解候補を生成する機構が働いていることが一つの要因として考えられる。加えてランダム探索において、探索空間内に解候補を生成することで PA 値がより良くなつたと考えられる。

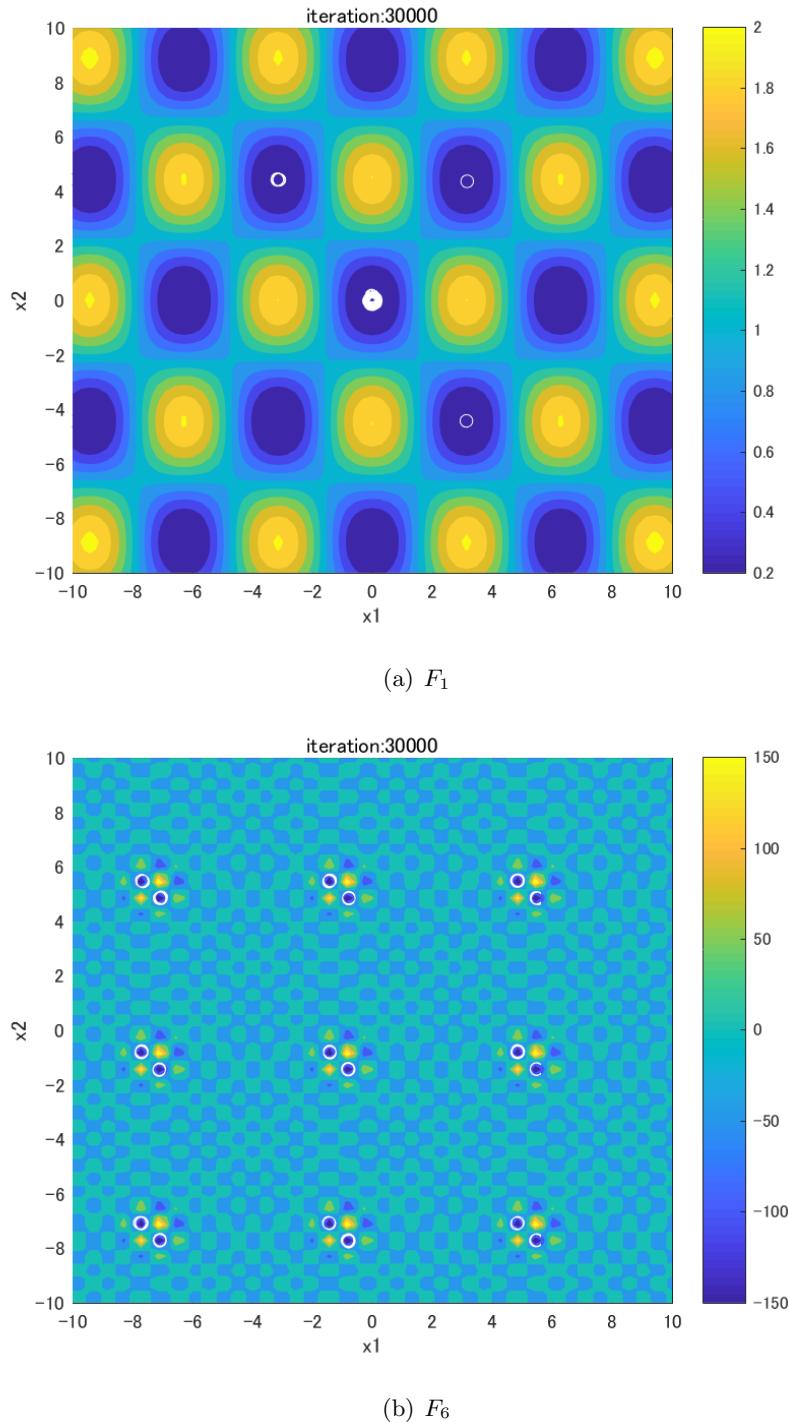


図 8.2: BA

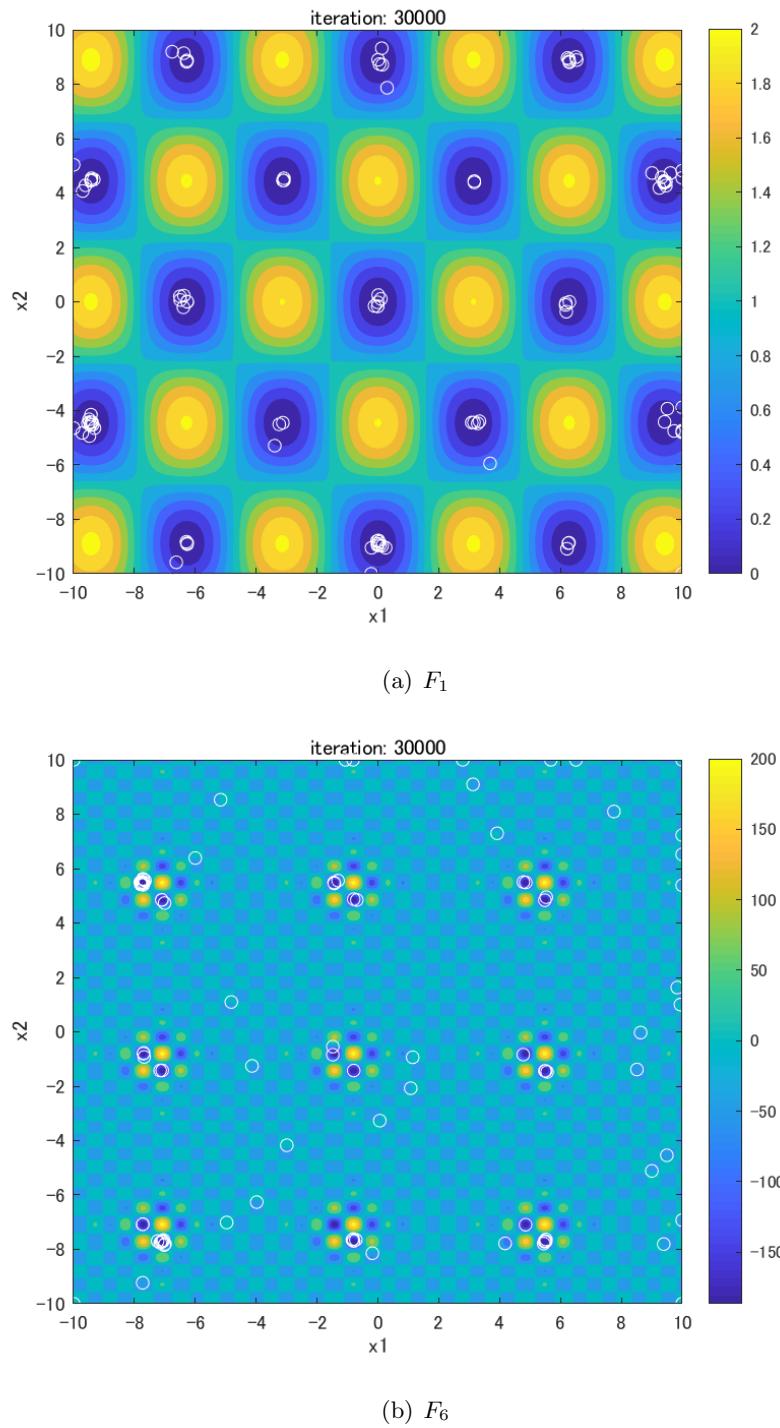


図 8.3: NRBA

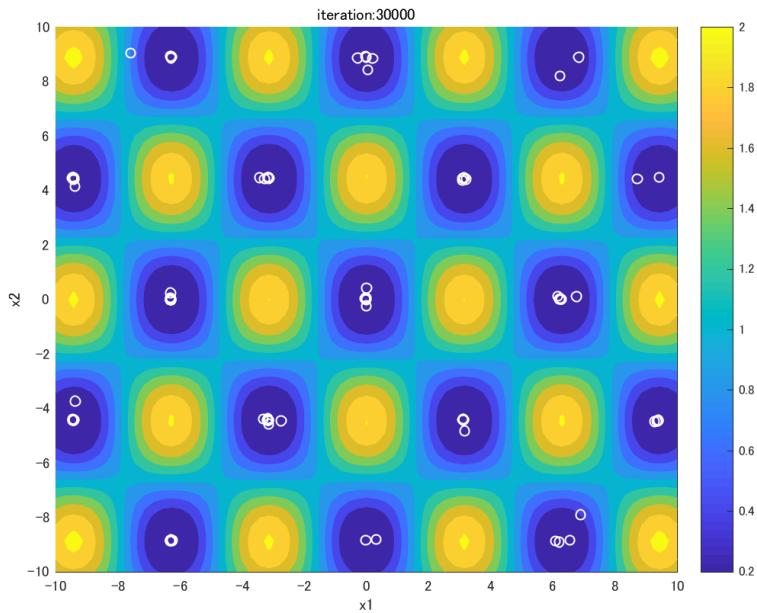
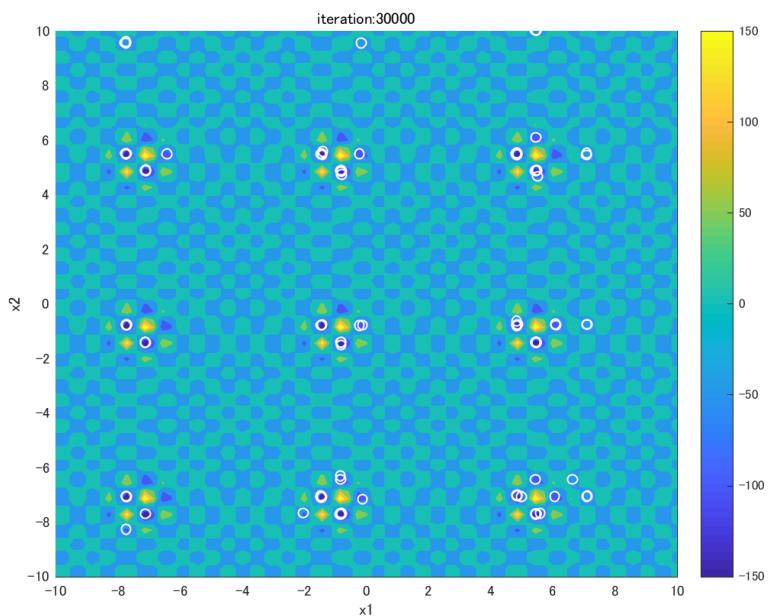
(a) F_1 (b) F_6

図 8.4: DNRBA

9 他の最先端手法との性能比較実験

9.1 評価関数

使用するベンチマーク関数とその概形は 5.2 節で説明した 6 つの評価関数を用いる。

9.2 評価基準

本コンペティションでは PR [21] によりアルゴリズムの性能評価を行う。各評価関数で割り当てられた評価回数 (MaxFEs) と accuracy level ε を用いて PR は次式で表される。

$$PR = \frac{\sum_{run=1}^{NR} NPF_{run}}{NKP * NR} \quad (9.1)$$

NPF_{run} は、そのシードにおけるアルゴリズムが発見した最適解数を示し、NKP は評価関数が持つ全最適解数を示す。NR は実験の試行回数を示す。

9.3 比較手法

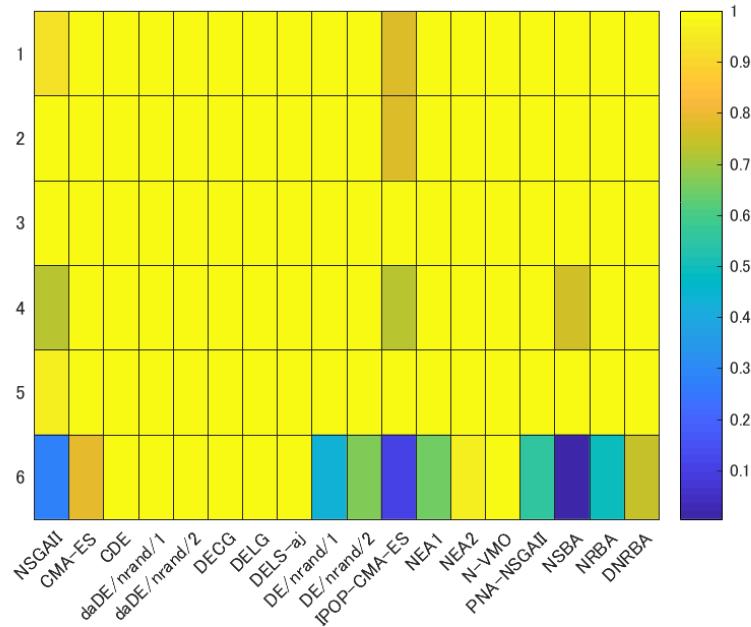
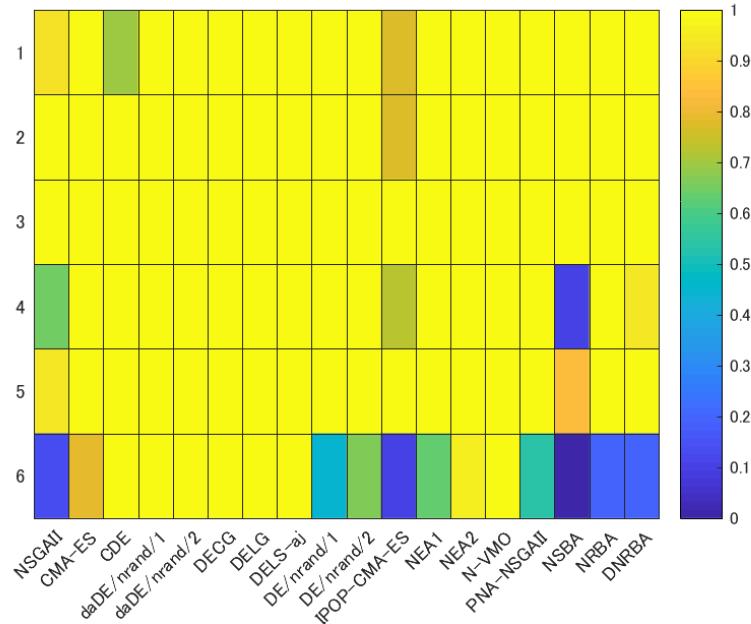
2, 4 章で紹介した DE や CMA-ES, NSGAI, CDE, dADE, NEA に加え、本コンペティションでは次の手法 [1] [18] [2] と比較実験を行った。

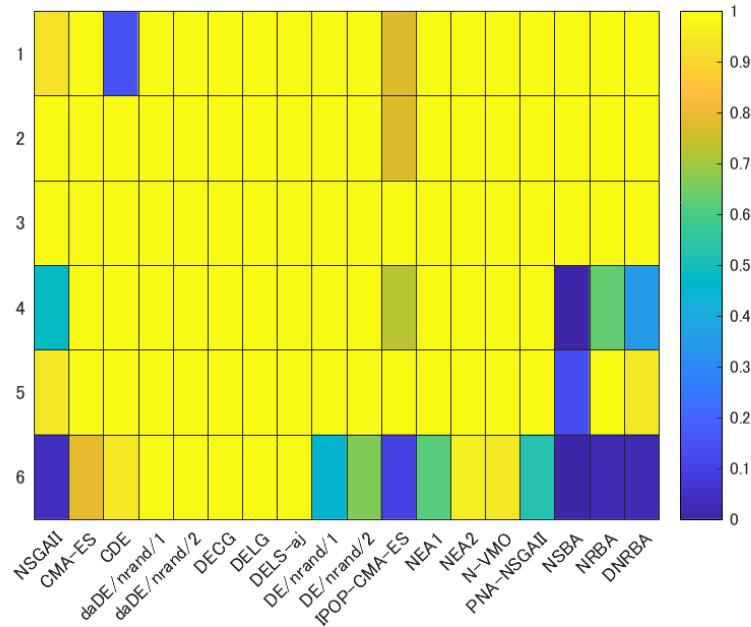
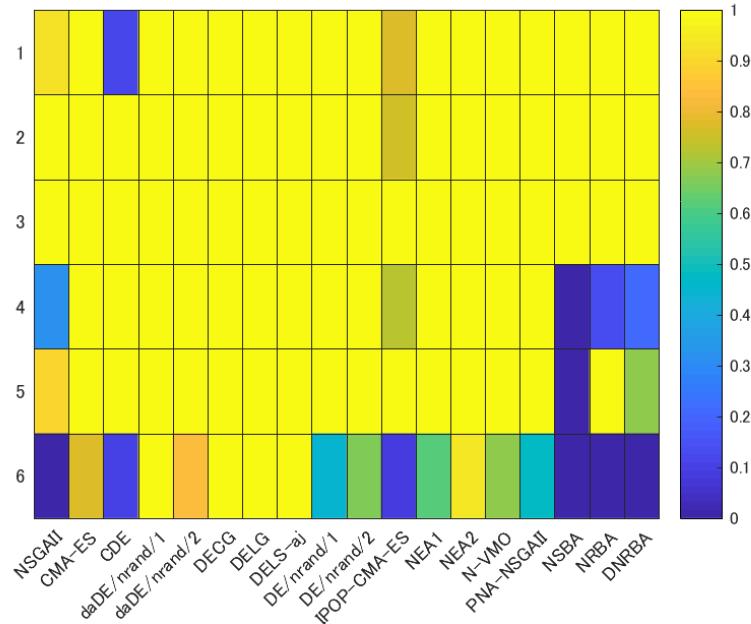
9.4 実験設定

本実験では $f_{max} = 1$, $f_{min} = 0$, ラウドネス $A^0 = 1$, パルスレート $r^0 \in [0, 1]$ と設定した。また $\alpha = \gamma = 0.9$ とし、個体数 $N = 100$, 世代数を G_1 から G_5 までは 50000, G_6 は 200000 とし、ランダムシードを変えた実験を 50 回行った。

9.5 結果と考察

図 9.1 から 9.5 は accuracy level ε を変えた時の PR 値をヒートマップ化したものである。 $\varepsilon = 1.0E-1$ では G_1 から G_5 関数までは NSGAI, IPOP-CMA-ES, NSBA の探索性能が低いことが分かる。特に G_6 関数において、IPOP-CMA-ES と NSBA が最も PR 値が低く、次いで NSGAI, DE/nrand/1, NRBA が低かった。提案した 3 つの手法の中では DNRBA が最も PR 値が高かったが、 $\varepsilon = 1.0E-2$ では NRBA と DNRBA はほぼ同等の探索性能であり、 $\varepsilon = 1.0E-3$ では G_4 関数において NRBA の方が PR 値が高かった。 $\varepsilon = 1.0E-4$ では G_4 , G_5 関数で DNRBA よりも NRBA の方が PR 値が高く、 $\varepsilon = 1.0E-5$ では全ての関数において NRBA よりも DNRBA の方が PR 値が高かった。また、表 7 は全ての関数における PR 値の中央値と、平均及び標準偏差を示す。この結果から、提案手法の一つである NSBA は最も探索性能が悪かったが、NRBA, 次いで DNRBA は他の手法とほぼ同等の探索性能を示すことが可能であった。この結果から、全体的に NRBA の方が探索性能が高かったが、 G_6 関数のような最適解周辺の勾配が激しく難しい問題に対しては DNRBA のほうが有効であった。

図 9.1: $\varepsilon = 1.0E - 1$ 図 9.2: $\varepsilon = 1.0E - 2$

図 9.3: $\varepsilon = 1.0E - 3$ 図 9.4: $\varepsilon = 1.0E - 4$

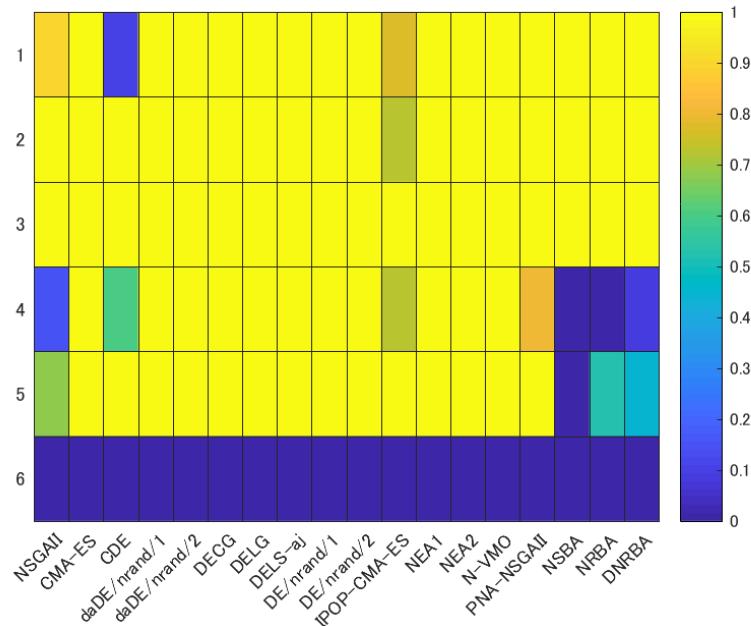
図 9.5: $\varepsilon = 1.0E - 5$

表 7: Overall Performance of the PR value (averaged over 50 runs)

Algorithm	Median	Mean	St.D
NSGAII	0.9350	0.7274	0.0646
CMA-ES	1.0	0.9371	0.1423
CDE	1.0	0.8229	0.2087
dADE/nrand/1	1.0	0.9663	0.1820
dADE/nrand/2	1.0	0.9611	0.1774
DECG	1.0	0.9662	0.1820
DELG	1.0	0.9658	0.1814
DELS-aj	1.0	0.9666	0.1825
DE/nrand/1	1.0	0.8919	0.0801
DE/nrand/2	1.0	0.9225	0.1221
IPOP-CMA-ES	0.7760	0.7240	0.0162
NEA1	1.0	0.9166	0.1142
NEA2	1.0	0.9608	0.1747
N-VMO	1.0	0.9540	0.1738
PNA-NSGAII	1.0	0.8960	0.0929
NSBA	0.1850	0.3358	0.0384
NRBA	0.9520	0.7659	0.1165
DNRBA	0.9070	0.7540	0.1519

10 おわりに

この章では本論文のまとめを 10 節で行い, 今後の課題を 10.2 節で行う.

10.1 まとめ

本論文では, 多峰性最適化問題における複数解探索手法のアプローチとして 3 つの解探索手法を提案した. (i) 未探索領域へ解の探索を促す Novelty Search を導入した Novelty Search-based Bat Algorithm (NSBA); (ii) 探索空間の大きさと最適解数から算出される Niche Radius を用いることで, 予め各個体の探索領域を決定し, その探索領域内の最良個体から遠ざかる方向に移動させることによって, 個体同士を同じ解に留まらせない Niche Radius-based Bat Algorithm (NRBA); (iii) 探索領域を動的に変更することで, NRBA の効果を高めた Bat Algorithm with Dynamic Niche Radius (DNRBA). 提案手法の有効性を検証するため, CEC2013 Competition on Niching Methods for Multimodal Function Optimization で扱われた評価関数を用いて, 他の最先端手法との比較実験を行った. 実験の結果として, 複雑な多峰性を持つ関数においては DNRBA の方が探索性能が高いが, 一般的には NRBA のほうが探索性能が高かった. これは, 局所解へ陥ってしまった個体を最適解へ移動させる機構を持つ Dynamic Niche Radius が複雑な関数においては有効だが, 容易な問題に対しては局所解へ陥ることがないため, NRBA の方が有効であったと考えられる.

10.2 今後の課題

今後の課題に対する及第点は以下が挙げられる.

- 勾配の激しい評価関数に対する局所探索性能の向上
- 発見した最適解及び局所解の保持
- 個体が同じ最適解及び局所解に収束させない機構の改良

謝辞

本論文の執筆並びに研究を進める上で御指導頂いた高玉圭樹教授に感謝の意を表します。また、論文執筆において校正・校閲をして頂いた博士課程の高野諒さん、上野史人さん、日々の研究テーマに関して助言をして頂いた佐藤寛之准教授、並びに日々研究を共にしている研究室の皆様、研究を支えて頂いている皆様にこの場を借りて感謝致します。

参考文献

- [1] S. Bandaru and K. Deb. A parameterless-niching-assisted bi-objective approach to multimodal optimization. *in Proc. Congr. Evol. Comput.(CEC)*, pp. 95–102, 2013.
- [2] R. Bello D. Molina, A. Puris and F. Herrera. Variable mesh optimization for the 2013 cec special session niching methods for multimodal optimization. *inProc. Congr. Evol. Comput. (CEC)*, pp. 87–94, 2013.
- [3] A. Kenneth De John. *An Analysis of the Behavior of a Class of Genetic Adaptive Systems*, Vol. 36. University of Michigan Ann Arbor, MI, USA, 1975.
- [4] D. E. Goldberg and J. Richardson. Genetic algorithms with sharing for multimodal function optimization. *in Proc. of the Second International Conference on Genetic Algorithms*, pp. 41–49, 1987.
- [5] N. Hansen and A. Ostermeier. Convergence properties of evolution strategies with the derandomized covariance matrix adaptation: The $(\mu/\mu_i, \lambda)$ -cma-es. *EUFIT'97, 5th Europ. Congr. on Intelligent Techniques and Soft Computing, Proceedings*, pp. 650–654, 1997.
- [6] N. Hansen and A. Ostermeier. Completely derandomized self-adaptation in evolution strategies. *Evolutionary Computation*, Vol. 9(2), pp. 159–195, 2001.
- [7] J. H. Holland. Adaptation in natural and artificial systems. *University of Michigan Press, Ann Arbor, MI*, 1975.
- [8] A. Pratap K. Deb, S. Agarwal and T. Meyarivan. A fast and elitist multi-objective genetic algorithm: Nsga-ii. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, Vol. 6, No. 2, pp. 182–197, 2002.
- [9] J. Kennedy and R. Eberhart. A new optimizer using particle swarm theory. *Proc. Sixth International Symposium on Micro Machine and Human Science*, pp. 39–43, 1995.
- [10] J. Lehman and K. O. Stanley. Exploiting openendedness to solve problems through the search for novelty. *In ALIFE*, pp. 329–336, 2008.
- [11] D. Hocaog lu and A. C. Sanderson. Multimodal function optimization using minimal representation size clustering and its application to planning multipaths. *in Documentation for Genetic and Evolutionary Algorithms for use with MATLAB:GEATbx version 3.7*, Vol. 5, No. 1, pp. 81–104, 1997.
- [12] X. Li M. G. Epitropakis and E. K. Burke. A dynamic archive niching differential evolution algorithm for multimodal optimization. *inProc.Congr. Evol. Comput. (CEC)*, pp. 79–86, 2013.

- [13] L. Schönemann M. Preuss and M. Emmerich. Counteracting genetic drift and disruptive recombination in $(\mu + /, \lambda)$ -ea on multimodal fitness landscapes. In *Proceedings of Genetic and Evolutionary Computation*.
- [14] B. Miller. Genetic algorithms with dynamic niche sharing for multimodal function optimization. In: Proceedings of the 1996 IEEE International Conference on Evolutionary Computation (ICEC' 96), 1996.
- [15] H. Pohlheim. Examples of objective functions. in *Documentation for Genetic and Evolutionary Algorithms for use with MATLAB:GEATbx version 3.7*, 2005.
- [16] M. Preuss. Counteracting genetic drift and disruptive recombination in $(\mu + /, \lambda)$ -ea on multimodal fitness landscapes. In *Proceedings of the 12th annual conference companion on Genetic and evolutionary computation*, pp. 1711–1718, 2010.
- [17] K. Price R. Storn. Differential evolution a simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spacesy. *International computer science institute*, Vol. 46, No. 2, 1995.
- [18] J. Ronkkonen. Continuous multimodal global optimization with differential evolution-based methods. 2009.
- [19] F. Uwano H. Sato T. Iwase, R. Takano and K. Takadama. Novelty search-based bat algorithm: Adjusting distance among solutions for multimodal optimization. *Proceedings of The 22nd Asia Pacific Symposium on Intelligent and Evolutionary Systems (IES 2018)*, pp. 29–34, 2018.
- [20] R. Thomsen. Multimodal optimization using crowding-based differential evolution. In *the IEEE Congress on Evolutionary Computation*, Vol. 2, pp. 1382–1389, 2004.
- [21] A. Engelbrecht X. Li and M. G. Epitropakis. Benchmark functions for cec' 2013 special session and competition on niching methods for multimodal function optimization. *Evol. Comput.*, 2013.
- [22] X. S. Yang. A metaheuristic bat-inspired algorithm. in: *Nature Inspired Cooperative Strategies for Optimization*, Vol. 284, pp. 65–74, 2010.
- [23] J. Zhang and A. Sanderson. Jade: Adaptive differential evolution with optional external archive. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, Vol. 13, No. 5, pp. 945–958, 2009.
- [24] 上野史 佐藤寛之 高玉先生岩瀬拓哉. 複数解探索を考慮した分散型 bat algorithm. *SICE Symposium on Systems and Information 2018*, 2018.
- [25] 西山万里, 大嶽久志, 星野健, 橋本樹明, 渡辺毅, 立川智章, 大山聖. 月周回衛星「かぐや」のデータを用いた多目的最適化による月着陸最適候補地の選定. 宇宙科学情報解析論文誌 第五号, 2015.