力学系理論に基づく粒子群最適化法の解析

Analysis of Particle Swarm Optimization Method Based on Dynamical Systems

神野健哉 Kenya JIN'NO

アブストラクト 粒子群最適化法 (PSO) は目的関数の情報が明示的に与えられていないブラックボックス最適化問題の最も効果的な解法の一つである。PSO は多数の粒子が互いに有するパラメータの良解位置情報を共有しながら最適解を探索する。このように多数の探索個体が協力して最適解を探索する手法は群知能最適化と呼ばれる。群知能最適化では、「探索 (exploration)」と「活用 (exploitation)」とのバランスが重要である。しかし、PSO では、各パラメータがどの程度探索と活用に影響を与えるかの詳細が不明である。そこで、我々は確率的な要素を排除した決定論的 PSO を提案し、この PSO のダイナミクスを力学系理論を用いて解析した。決定論的 PSO の各粒子は、その固有値によって動きが決定される。この動きを明確にするために、正則化された位相空間上で探索を行う正準系決定論的 PSO を提案し、その動作の解析を行っている。これらの分析の結果、探索と開拓のためのパラメータ、すなわちグローバルな探索能力とローカルな探索能力に何が帰属するのかを明らかにする。この結果に基づき、我々は局所探索能力を向上させた非線形マップ最適化 (NMO) を提案している。本稿では、これまでの研究の背景を概説し、非線形マップ最適化の解探索能力について考察する。

キーワード 粒子群最適化、力学系理論、決定論、固有値、ダイナミクス、非線形写像

Abstract Particle swarm optimization (PSO) is one of the most effective optimization methods for the black-box optimization problem. PSO involves a large number of particles that share information with each other to search for an optimal solution. The method in which a large number of search individuals cooperate to search for an optimal solution is called swarm intelligence optimization. In group intelligence optimization, the balance between exploration and exploitation is important. However, in PSO, it is unclear to what extent each parameter affects exploration and exploitation. Therefore, we proposed a deterministic PSO without probabilistic elements and analyzed the dynamics of PSO using the dynamical systems theory. Each particle in deterministic PSO has its motion determined by its eigenvalue. To make this motion clearer, a canonical deterministic PSO on a regularized phase space was proposed. The results of these analyses clarified what is attributed to the parameters for exploration and exploitation, i.e., global and local search capabilities. On the basis of this fact, we proposed a nonlinear map optimization (NMO) with improved local search capability. In this paper, we present the background of our proposal and consider the solution-search capability of NMO.

Key words Swarm Optimization, Dynamical System Theory, Deterministic, Eigen Value, Dynamics, Nonlinear Map

1. はじめに

任意に与えられた目的関数の最適値を求める「最適化問題」は、工学分野において非常に重要な問題である。最適化問題は、設計変数が離散値である離散型最適化問題と、設計変数が連続値である連続型最適化問題に大別することができる。このうち連続最適化問題では、目的関数の勾配情報を利用して最適解を探索する勾配法が広く用いられている。しかしながら最適化すべき目的関数が明示的に与えられていない場合、目的関数の勾配を用いることができないため、最適解探索に勾配法を適用す

ることができない。このような問題は「ブラックボックス問題」と呼ばれる。本稿では、ブラックボックス問題の解法に注目する。ブラックボックス問題を解決するために、様々な手法が提案されている⁽¹⁾。

群知能 (Swarm Intelligence, SI) アルゴリズム^{(2)・(3)}はブラックボックス問題に対して多数の単純な探索個体が相互に情報を交換しながら最適解を探索する探索アルゴリズムである。SI アルゴリズムには、蟻コロニー最適化 (Ant Colony Optimization, ACO)⁽⁴⁾、人工蜂コロニーアルゴリズム (Artificial Bee Colony, ABC)⁽⁵⁾、蛍アルゴリズム (Firefly Algorithm, FA)⁽⁶⁾、カッコー探索 (Cuckoo Search, CS)⁽⁷⁾、粒子群最適化 (Particle Swarm Optimization, PSO)^{(8)~(10)}など生体をモデルとして考案された数多くのアルゴリズムがある。多くの SI アルゴリズムは PSO をベースとしているものが多いため、本稿ではこれらの SI アルゴリズムの中で、PSO アルゴリズムに注目する。

PSO は、各次元の各粒子の挙動が二次形式で記述される高次

神野健哉 正員：フェロー 東京都市大学情報工学部知能情報工学科

E-mail kjinno@tcu.ac.jp

Kenya JIN'NO, Fellow, Member (Dept. of Intelligent Systems, Faculty of Information Technology, Tokyo City University, Setagaya-ku, 158-8557 Japan).

電子情報通信学会 基礎・境界ソサイエティ

Fundamentals Review Vol.15 No.2 pp.70-79 2021 年 10 月

©電子情報通信学会 2021

元系であるため、非常に多彩な挙動を示す。また、動作に確率的な要素が加わるため、その挙動の厳密な解析は容易ではない。このため PSO から確率的要素を排除し、決定論的とした系の挙動について、幾つかの解析が行われている。Clerc と Kennedy は、決定論的 PSO を用いて各粒子の探索範囲が発散せずに探索を行うことができる PSO パラメータを特定している⁽¹²⁾。彼らの決定論的 PSO の解析では、各粒子自身がこれまでに発見した最適パラメータ情報 $pbest$ と群の中でこれまでに発見された最適パラメータ情報 $gbest$ は変化しないという「停滞仮定」が適用されている。Clegghorn と Engelbrecht は、これは実際の PSO の挙動と決定論的 PSO の解析結果が異なる原因であると指摘し、この $gbest$ と $pbest$ に弱いカオス振動を印加し、粒子が発散せずにアトラクタに収束するような振る舞いをするパラメータを解析している⁽¹³⁾。これらの決定論的 PSO の結果は、従来の PSO の局所的ダイナミクスの解析をしたものである。

これに対し我々は確率的要素に依存しない大域的な最適化システムとして決定論的 PSO のダイナミクスを解析した。また決定論的 PSO は、乱数生成を必要としないため、従来の PSO よりもハードウェア化が容易である^{(14)~(16)}ことから、単に確率論的 PSO のダイナミクスの解析のためではなく、決定論的 PSO そのもので最適解探索を行うことを検討する。そのため決定論的 PSO の挙動を力学系理論で解析した^{(17)~(21)}。

このように PSO を決定論的システムとして解析を行ったのは、私が学生であった当時所属していた研究室では電子回路によるカオス発生回路の研究が精力的に行われており、自分の周りで決定論的システムの解析を行っていた同期生がいたことが非常に大きいように思われる。一見確率論的に動くシステムも実は決定論的システムであり、それを解析する姿を見ているうちにシステムの動作の本質を決定論的システムとして考えるようになったのだと思われる。そのような背景から確率論的システムである PSO を決定論的システムで記述し、解析を行い、更にはカオス現象をシステムに導入した非線形写像最適化を提案するに至っている。本稿ではこのような経緯もあり、PSO の基本的な探索特性を力学系理論で解析した成果を紹介する。

2. 粒子群最適化法

粒子群最適化法 (PSO) は Kennedy と Eberhart によって提案された^{(8), (9)}。PSO はブラックボックス最適化に対して非常に強力な最適化法である^{(22)~(27)}。PSO の探索ダイナミクスは次式で記述される。

$$\mathbf{v}_j(t+1) = w\mathbf{v}_j(t) + c_1\mathbf{r}_1 \circ (\mathbf{pbest}_j(t) - \mathbf{x}_j(t)) + c_2\mathbf{r}_2 \circ (\mathbf{gbest}(t) - \mathbf{x}_j(t)) \quad (1)$$

$$\mathbf{x}_j(t+1) = \mathbf{x}_j(t) + \mathbf{v}_j(t+1) \quad (2)$$

ここで $w \geq 0$ は正の慣性係数、 $c_1 \geq 0$, and $c_2 \geq 0$ は加速度係数、 $\mathbf{r}_1 \in [0, 1]^N$, $\mathbf{r}_2 \in [0, 1]^N$ は N 次元の一様分布乱数である。 $\mathbf{x}_j(t) \in \mathbb{R}^N$ は t 時点における j 番めの粒子の N 次元の設計変数空間内の位置ベクトルを、 $\mathbf{v}_j(t) \in \mathbb{R}^N$ は t 時点における j 番めの粒子の速度ベクトルを表す。 $\mathbf{pbest}_j(t) \in \mathbb{R}^N$ は t

時点までの j 番めの粒子がこれまでに発見した設計変数空間内の最も最適なパラメータの位置ベクトルを、 $\mathbf{gbest}(t) \in \mathbb{R}^N$ は t 時点までの粒子の群の中で発見した設計変数空間内の最も最適なパラメータの位置ベクトルを表す。

各粒子は、これまでに発見した目的関数値が最適となった最適パラメータ情報 $\mathbf{pbest}_j$ と群の中でこれまでに発見された最適パラメータ情報 $\mathbf{gbest}$ の情報を記憶する。これらの情報とともに、粒子は N 次元の設計変数空間を式 (1), (2) に従って移動しながら最適な解を探索する。つまり、全ての粒子は、現在の目的関数の最良の値に向かって移動する。

探索は式 (1), (2) に従うため PSO のパラメータは非常に重要な役割を果たす。このような PSO の探索能力は、慣性係数と加速度係数に依存する。加速度係数には乱数が乗じられているため、このシステムは確率的なシステムである。このような確率的なシステムの動作の厳密な解析は困難である。そこで、Clerc と Kennedy は簡素な決定論的 PSO システムを提案し、そのダイナミクスを理論的に解析している⁽¹²⁾。この単純な決定論的 PSO システムは、確率的な要素を含まない、つまり、元の PSO システムに含まれる確率的なパラメータを固定値にしたものである。彼らは離散時間力学系を代数的な観点から解析し、連続時間力学系とみなした力学系を解析的に分析している。このような解析結果から、以下のような PSO の解探索に有効なパラメータを推奨している^{(12)~(25)}。

$$\begin{cases} w = 0.729, \\ c_1 = c_2 = 1.49445. \end{cases} \quad (3)$$

一方、我々も決定論的 PSO を提案し、PSO の解探索ダイナミクスを力学系理論に基づいて解析している^{(17), (18)}。我々は決定論的 PSO の探索ダイナミクスは、慣性係数と加速度係数で決まるシステムの固有値に依存することを明らかにした。そしてこの固有値を制御することで、PSO の探索性能を制御することができることを数値実験で明らかにした。この結果を基に固有値を容易に制御できる正準型決定論的 PSO を提案し、その動作の解析を行った。この結果は次章に示す。

3. 決定論的 PSO (D-PSO)

PSO のそれぞれの粒子は、これまでに発見した $\mathbf{pbest}$ と $\mathbf{gest}$ で構成されたベストポイントに向かって移動する。本稿では、これらをまとめた以下の $\mathbf{p}$ をベストポイントとする。

$$\mathbf{p}_j(t) = \gamma\mathbf{pbest}_j(t) + (1 - \gamma)\mathbf{gest}(t) \quad (4)$$

$$\gamma = \frac{c_1}{c_1 + c_2} \quad (5)$$

γ は $\mathbf{pbest}$ と $\mathbf{gest}$ の混合比を決定するパラメータである。

粒子の各次元変数は独立であるため、一般性を損なわずに一次元の場合を考えることができる。そこで以下では一次元のシステムとして議論する。

式 (1) で定義される従来の PSO のダイナミクスから確率要素を取り除いた一次元の決定論的 PSO は、次のような決定論的な行列形で記述できる。

$$\begin{bmatrix} v_j(t+1) \\ y_j(t+1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w & -c \\ w & 1-c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_j(t) \\ y_j(t) \end{bmatrix} \quad (6)$$

ここで $y_j(t) = x_j(t) - p_j(t)$, $c = c_1 + c_2$ である.

一次元の決定論的 PSO の粒子のダイナミクスは式 (6) の固有値によって特徴付けることができる. 固有値 λ は次式で与えられる.

$$\lambda = \frac{1-c+w}{2} \pm \frac{\sqrt{(1-c+w)^2 - 4w}}{2}. \quad (7)$$

なおこの一次元の決定論的 PSO のダイナミクスは, 式 (6) のように離散時間系であることに注意する. 一次元決定論的 PSO の解軌道の安定性は, その固有値によって決定される. 離散時間システムの固有値が複素平面上の単位円内に存在する場合, システムは安定といえる. すなわち

$$(1-c+w)^2 - 4w \geq 0 \quad (8)$$

である場合, 固有値 λ は実数となる. この場合,

$$\begin{cases} |w| < 1 \\ 0 < c < 2w+2 \end{cases} \quad (9)$$

であれば, 固有値は条件 $|\lambda| < 1$ を満足し, このシステムは安定であるといえる.

一方,

$$(1-c+w)^2 - 4w < 0 \quad (10)$$

である場合, 固有値 λ は複素数となる. この場合,

$$0 < w < 1 \quad (11)$$

であれば, 固有値は複素平面上の単位円内に存在し, システムは安定であるといえる.

これらをまとめると, 一次元決定論的 PSO は図 1 に示す赤の三角形の領域内にパラメータ w と c が設定された場合に安定なシステムであるといえる.

この解析結果から, 従来の確率論的 PSO では, 加速度係数がランダムに決定されるため, システムが不安定状態になる可能性があることが分かる. 不安定状態は解軌道が固定点から離れる方向, すなわちを発散方向に動作することを意味する. このような動作は粒子を局所解から脱出させることには有効であるが, 解軌道が発散してしまう危険性がある.

位相空間での一次元決定論的 PSO の解軌道例を図 2 に示す. 式 (4) のベストポイント p は, この解軌道に対する離散力学系の固定点とみなすことができる. 簡単のため, この固定点を原点とする. 初期値を $(x(0), v(0)) = (5.12, 0.00)$ とする. 図 2 に示すように, 固有値が複素数である場合, 位相空間内での解軌道は固定点を中心にだ円体の螺旋運動となり, 次第に固定点である原点に収束する. このシステムは離散時間系であるため, 各反復での減衰係数 Δ と回転角 θ は, その複素固有値によって次のように導かれる.

$$\Delta = \sqrt{w} \quad (12)$$

図 1 一次元決定論的 PSO のパラメータ w および c の安定領域

$$\theta = \arctan \frac{\sqrt{4w - (1-c+w)^2}}{1-c+w} \quad (13)$$

この位相空間内でのだ円体の螺旋運動と最適値探索能力は密接な関係がある. 原点 (固定点) から離れた点での動きは大域探索能力に相当し, 原点近傍での動きは局所探索能力に相当する. この大域的な動きと局所的な動きとのバランスが, 最適値の探索能力を決定する. これが「探索 (exploration)」と「活用 (exploitation)」のバランスに相当する. 図 2 に減衰定数を $\Delta = 0.95$ とし, 回転角を変えた場合の位相平面での一次元決定論的 PSO の粒子の動作を示す. これらは全て安定であるが, 回転角を大きくすることで軌道が広がるのが分かる. 例えば, 図 2(c) では, 変数 x の範囲が広くなり, 原点付近の探索が不十分である様子が確認できる. これは, 元々の一次元決定論的 PSO の位相空間での位置 x と速度 v による探索空間が直交系ではないことに起因する. そこで主軸を変換し, 各軸が直交するような正準型決定論的 PSO システムを考える.

4. 正準型決定論的 PSO (CD-PSO)

一次元正準型決定論的 PSO (CD-PSO) のダイナミクスは次式のように記述できる.

$$\begin{bmatrix} v_j(t+1) \\ y_j(t+1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \delta & -\omega \\ \omega & \delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_j(t) \\ y_j(t) \end{bmatrix} \quad (14)$$

ここで $y_j(t) = x_j(t) - p_j(t)$ である.

式 (14) は式 (6) を座標変換したものであることに注意する.

このとき式 (14) の固有値 λ は必ず複素数となる.

図 2 決定論的 PSO の位相平面内での解軌道

図 3 正準型決定論的 PSO の位相平面内での解軌道

$$\lambda = \delta + j\omega$$

(15)

えられる。

式 (14) で記述されるシステムは離散時間システムである。離散時間システムが安定であるためには、システムの固有値が複素平面上の単位円内に存在する必要がある。したがって、パラメータが以下の条件を満たせば、システムは安定であるといえる。

$$\delta^2 + \omega^2 < 1 \quad (16)$$

パラメータが上記の条件を満足すれば粒子は固定点 p_j に収束する。

これらのパラメータから、減衰係数 Δ は以下のように導出することができる。

$$\Delta = \sqrt{\delta^2 + \omega^2} \quad (17)$$

パラメータ δ, ω が条件 (16) を満足しているならば、減衰係数 Δ は以下を満足する。

$$|\Delta| < 1 \quad (18)$$

位相平面上での各粒子の回転角 θ は以下のように導出できる。

$$\theta = \arctan \frac{\omega}{\delta} \quad (19)$$

上述のように、各粒子は位相空間において回転角 θ で回転しながら、減衰係数 Δ で徐々に固定点 p_j に収束していく。

減衰係数 Δ と回転角 θ によって式 (14) は次のように書き換

$$\begin{bmatrix} v_j(t+1) \\ y_j(t+1) \end{bmatrix} = \Delta \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_j(t) \\ y_j(t) \end{bmatrix} \quad (20)$$

一次元正準決定論的 PSO の位相空間における解探索軌道の例を図 3 に示す。これらの図では、固定点を原点としている。位相空間の初期値は $(x(0), v(0)) = (5.12, 0.00)$ とした。図 3 に示すように、解探索軌跡は原点に向かって螺旋状に収束する。図 3 の減衰係数と回転角は図 2 の D-PSO での解探索軌道と同等である。

図 2 に示す D-PSO の円状の螺旋軌道と比較して、図 3 の CD-PSO の解探索軌道は円状の螺旋軌道を描くことが分かる。なお図 2 と図 3 に示す位相空間の横軸が探索領域の座標に対応していることに注意する。つまり、この螺旋運動を横軸に写像した点が実際の探索点となる。この螺旋運動は徐々に縮小し、現在のベストポイントに向かって収束していく。したがって、ベストポイント p_j を更新することが大域的探索能力に、ベストポイントの周辺を探索することは局所的探索能力に関係することとなる⁽²⁸⁾。回転角を黄金角に設定すると、探索点が重ならないため、基本的な局所探索性能は向上する^{(29)・(30)}。またベストポイント p_j の更新に伴い、位相空間の回転半径が減衰係数により解軌道の収束よりも大幅に縮小してしまうことが分かる⁽²⁸⁾。このため局所探索能力を向上させるためには、探索半径が小さくならないことが重要である。しかしながら、従来の PSO では、ベ

ストポイントの更新に伴い、この探索半径が常に縮小してしまう(28)~(33)。これは、探索点の更新が各粒子の座標と速度に基づいて行われることに起因する。そこでこの問題を解決するために、PSO から各粒子の速度の概念を取り除いたシステムを考える。このシステムでは、現在の最適点を中心とした探索は探索半径パラメータで制御され、最適点の更新によって探索半径が減少することはない。このシステムは PSO の概念を継承し、局所探索に非線形写像を用いるため、非線形写像最適化法(NMO)と呼ぶ(31)~(33)。NMO の探索半径は減少せず、探索範囲内の探索点の分布は正規分布に近いという特徴を有する。NMO に関しては次章で詳細を述べる。

5. 非線形写像最適化(NMO)

NMO のダイナミクスは次式で記述される(33)。

$$\begin{cases} \theta_{ij}(t+1) = \theta_{ij}(t) + \gamma |\cos(\theta_{ij}(t))| + \epsilon \\ x_{ij}(t+1) = R_{ij}(t) \cos(\theta_{ij}(t+1)) + p_{ij}(t), \end{cases} \quad (21)$$

ここで $x_{ij}(t)$ は t 時点での i 番目の粒子の j 番目の次元の位置を表し、 $\theta_{ij}(t)$ は t 時点での i 番目の粒子の j 番目の次元の内部状態を表す。 $R_{ij}(t)$ は i 番目の粒子の j 番目の次元の探索範囲である。

$p_{ij}(t)$ は次式で決定される最良位置情報である。

$$p_{ij}(t) = \rho pbest_{ij}(t) + (1 - \rho) gbest_j(t) \quad (22)$$

ここで $pbest_i(t)$ は t 時点までの i 番目の粒子がこれまでに発見した設計変数空間内での最も最適なパラメータの位置ベクトル、 $gbest(t)$ は t 時点までの粒子の群の中で発見した設計変数空間内での最も最適なパラメータの位置ベクトルであり、以下の式で定義される。

$$pbest_i(t) = \arg \min_{\mathbf{x}_i(\tau)} f(\mathbf{x}_i(\tau)), 0 \leq \tau \leq t \quad (23)$$

$$gbest(t) = \arg \min_i f(pbest_i(\tau)), 0 \leq \tau \leq t \quad (24)$$

NMO と PSO の違いは、NMO の探索点が単純な一次元の非線形写像で生成される点である(33)。

NMO の最適解の探索は以下のような戦略に基づき行われる。簡単化のため、2 個の粒子だけで構成される場合を考える。この 2 個の粒子は図 4 に示すように探索空間に配置されているとする。ここで、1 番目の粒子 $\mathbf{x}_1$ が t 時点において現在の群れでの最良位置情報 $gbest(t)$ を与えるとする。各粒子の最良位置情報は式(22)で算出されるため、1 番目の粒子の最良位置情報 $\mathbf{p}_1(t)$ は群の最良位置情報 $gbest(t)$ と一致する。したがって、1 番目の粒子がこれまでよりも目的関数値を発見しなければ、1 番目の粒子は最良位置 $\mathbf{p}_1(t)$ の近傍の矩形領域内を探索する。この矩形領域の大きさは、 t 時点での 1 番目の粒子の j 次元探索範囲パラメータ $R_{1j}(t)$ によって決定される。そして矩形領域の探索点は、非線形マップによって算出される。効率よく多くの点を探索するためには範囲内での探索点が非周期的に生成されることが望ましい。

2 番目の粒子の最良位置情報 $\mathbf{p}_2(t+1)$ は式(22)で計算され

図 4 NMO の解探索方案 $\mathbf{p}_k$ は k 番目の粒子の現在の最良点を示す。大域的探索点は $\mathbf{p}_k$ を基に決定される。赤と青で示した $\mathbf{x}_k$ 周辺の矩形領域はパラメータ $R_{ij}(t)$ で決定される局所探索領域を示す。

図 4 に示すように変更される。そして 2 番目の粒子は、新たに算出された最良位置情報 $\mathbf{p}_2(t+1)$ の近傍の矩形領域内を探索する。この矩形領域での探索も局所探索とみなすことができる。群の最良位置近傍では近接最適性原理からこの局所探索領域の範囲を狭くした方が、より効率的な探索ができる可能性が高い。このため、探索範囲パラメータ $R_{ij}(t)$ を時間関数として定義し、時間の経過とともに探索範囲を狭めることも考慮することができる。しかし本稿では、この探索範囲パラメータは定数として扱う。一方、最良位置情報の動きは、各粒子が有する最良位置 $pbest_i(t)$ に応じて大きく動く。この動きが大域的探索能力と関係する。

最良位置近傍の矩形領域を埋め尽くすように粒子が探索を行うことで各粒子の局所探索能力が向上するといえる。探索点が探索領域を埋める能力をもっているかどうかを分析するために、図 5 に示すような内部状態変数 $\theta_{ij}(t)$ の一次元リターンマップを考える。図 5 (a) に $\gamma = 0.40$ の場合、図 5 (b) に $\gamma = 0.70$ の場合の一次元リターンマップの例を示す。一般性を損なわずに、ここでは簡単化のため $p_{ij}(t) = 0$ の場合を考える。図 5 の一次元リターンマップの横軸は現在の内部状態変数 $\theta_{ij}(t)$ を表し、縦軸は次の内部状態変数 $\theta_{ij}(t+1)$ を表す。このときパラメータは $R(t) = 1.00$, $p_{ij}(t) = 0$ ($\forall t$), $\epsilon = 0.01$ とした。図 5 に示す一次元リターンマップは $\theta_{ij}(t) = \pm 2$ に二つの固定点があるように見えるが、どちらの点も式(21)から分かるように対角線から ϵ 離れているため、固定点は存在しない。つまり、パラメータ ϵ が正の値であれば、この一次元リターンマップは固定点をもたないため、各粒子は探索を続けることができる。この一次元リターンマップの傾きは次のように算出できる。

$$\frac{d\theta_{ij}(t+1)}{d\theta_{ij}(t)} = \begin{cases} 1 - \gamma \sin(\theta_{ij}(t)) & \text{for } \cos(\theta_{ij}(t)) \leq 0, \\ 1 + \gamma \sin(\theta_{ij}(t)) & \text{for } \cos(\theta_{ij}(t)) < 0. \end{cases} \quad (25)$$

ここで粒子の探索点の分布を考える。図 5 に示すように、パラメータ γ によって一次元リターンマップの傾きが変化する。 γ が 0 に近ければ傾きは小さく、 γ が大きければ傾きは大きくなる。図 6 (a) にパラメータ γ の変化による分岐図を示す。図 6 (a) において横軸はパラメータ γ 、縦軸は探索領域における探索点である。 γ は、0.1 から 0.9 まで変化させた。図 6 (a) の分岐図か

(a) $\gamma = 0.40$

(b) $\gamma = 0.70$

図 5 内部状態変数 $\theta_{ij}(t)$ の一次元写像

ら、この一次元リターンマップには幾つかの窓があることが分かる。このような窓の領域にパラメータを設定すると、対応する探索点の時系列は周期をもつことになり、結果として対応する探索点の分布は制限されることになる。

探索点系列の特性を確認するため、図 6(a) に対応した探索点系列のリアプノフ指数を算出する。一次元リターンマップは次のように与えられる。

$$x_{ij}(t+1) = h(x_{ij}(t), \gamma). \quad (26)$$

式 (26) からリアプノフ指数 $\lambda(\gamma)$ は以下のように導出される。

$$\lambda(\gamma) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{t=0}^N \ln \left| \frac{d}{dx_{ij}(t)} h(x_{ij}(t), \gamma) \right| \quad (27)$$

一次元リターンマップのリアプノフ指数が正の値である場合、その時系列はカオス的な動きを呈する⁽³⁴⁾。またリアプノフ指数が 0 である場合、その時系列はトーラス状態を呈しているといえ

(a) The bifurcation diagram

(b) The Lyapunov exponents

図 6 探索点時系列のパラメータ分岐図とリアプノフ指数 (a) パラメータ分岐図 (b) リアプノフ指数

る。カオス、若しくはトーラス状態である場合、探索点は探索領域内を埋め尽くすことになる。図 6(b) はパラメータ γ に対するリアプノフ指数を示したものである。横軸はパラメータ γ 、縦軸はリアプノフ指数を表す。図 6(b) の結果は、パラメータ γ の多くの値において、リアプノフ指数が小さな正の値またはゼロであることを示している。このとき探索点系列の挙動はカオスまたはトーラス状態となる。すなわち、探索点が探索範囲を埋め尽くすように探索をすることとなり、探索範囲内で効率よく局所探索を行うことができる。

図 7 は $R(t) = 1$ 、 $\epsilon = 0.01$ であるときの探索点の時間発展を示す。図 7 において、縦軸の中心 $x_{ij}(t) = 0$ は現時点での最良位置を示している。

図 7(a) に示すように、 γ が小さい場合、収束速度は遅くなる。逆に、図 7(b) に示すように、 γ が大きい場合、収束速度は速くなる。探索範囲はパラメータ $R_{ij}(t)$ によって制限され、その大きさは局所的な探索能力に影響を与える。したがって、パラメータ $R_{ij}(t)$ と γ は局所探索能力を制御することができる。図 8 は、NMO の探索点の分布を示したものである。探索点の分布から粒

(a) $\gamma = 0.40$

(b) $\gamma = 0.70$

図 7 探索点の時系列 探索点の収束速度はパラメータ γ で制御される

(a) $\gamma = 0.40$

(b) $\gamma = 0.70$

図 8 NMO の探索点分布 探索点分布はパラメータ γ で制御される

子が探索範囲を維持しつつ、中央部を集中的に探索していることが分かる。中央部を詳細に探索することで、局所的な探索能力の向上につながる。探索点は $[p_{ij}(t) - R_{ij}(t), p_{ij}(t) + R_{ij}(t)]$ の範囲に分布している。図 8 は、範囲の中心付近の探索点分布が非常に高いことを示している。このことから探索個体が高い近傍探索能力をもっていることが分かる。

6. 探索能力の検討

NMO の解探索能力を確認するため、幾つかのベンチマーク関数を用いて数値実験を行った。NMO は決定論的システムであるため、NMO の探索結果は各粒子の初期位置にのみ依存する。したがって、粒子の初期位置の分布は非常に重要である。

局所探索能力の向上により、単峰性関数での最適解探索能力が従来の PSO よりも向上することを数値実験で確認した。式 (28) は単峰性関数の一つである「2D-Rotated Shift Ellipse 関数」である。このベンチマーク関数はだ円関数の軸を回転・平行移動させた関数であり、設計変数間の依存関係をもつ。

$$g_1(x, y) = 100 \left((x - 4.3) \cos \frac{\pi}{6} - (y + 0.6) \sin \frac{\pi}{6} \right)^2 + \left((x - 4.3) \sin \frac{\pi}{6} - (y + 0.6) \cos \frac{\pi}{6} \right)^2 \quad (28)$$

式 (28) の関数 g_1 最小値は $(x, y) = (4.3, -0.6)$ で 0 である。こ

の関数をベンチマーク関数として最適解探索を、3 個の粒子で構成された NMO で探索する。図 9 はだ円関数値の等高線と粒子が時間経過とともに探索した点の軌跡を示している。図 9 が示すようにこのだ円関数値の谷に沿って粒子が最適解を探索して様子が分かる。このように、目的関数の谷に沿って探索する能力は、局所探索能力の向上によって得られた。

次にやはり単峰性関数である式 (29) の「2D-Rosenbrock 関数」を考える。

$$g_2(x, y) = 100 (y - x^2)^2 + (x - 1)^2. \quad (29)$$

この関数には、細長い放物線状の平らな谷が存在する。最適解はこの谷の内側にあるため、一般的には最適解の探索は困難といわれる。式 (29) の関数 g_2 の最小値は $(x, y) = (1, 1)$ で 0 である。図 10 はこの関数の関数値の等高線及び 3 個の粒子の探索点の軌跡を示す。その結果、図 10 に示すように NMO の 3 個の粒子が目的関数の谷の中を谷に沿って探索し、最適解を発見できている。これらの結果は、NMO が単峰性関数に対して回転不変性とスケール不変性を有することを示している^{(19)~(21)}。しかし、これらの不変量に関する理論的な解析は、現時点では

図 9 Rotated Shift Ellipse 関数での各粒子の探索点軌跡 各粒子は回転角に応じて移動

(a) Outline drawing

(b) Enlargement around the global minimum

図 10 Rosenbrock 関数での各粒子の探索点軌跡

図 11 Ackley 関数での各粒子の探索点軌跡 (a) 概形 (b) 最良点付近の拡大図

不十分である。

次に、多峰性関数の一つである次式 g_3 のような「2D-Ackley 関数」を考える。

$$g_3(x, y) = 20 - 20 \exp \left(-0.2 \sqrt{\frac{x^2 + y^2}{2}} \right) + e - \exp \left(\frac{\cos(2\pi x) + \cos(2\pi y)}{2} \right) \quad (30)$$

関数 g_3 である Ackley 関数の最小値は $(x, y) = (0, 0)$ で 0 である。図 11 (a) は式 (30) で定義される Ackley 関数の関数値による等高線を示し、図 11 (b) はその最小値付近の拡大図である。この関数は図 11 に示すように最小値の周辺に多数の極小値が存在する。図 11 に示すように、Ackley 関数に対しては NMO の 3 個の粒子は最適解の周辺近くまでは比較的早く移動する。そして 2 個の粒子は最適解を発見できているが、残りの 1 個の粒子は最適解に到達できていないことが分かる。

以下の式は多峰性関数の「2D-Rastrigin 関数」である。

$$g_4(x, y) = 20 + (x^2 - 10 \cos(2\pi x)) + (y^2 - 10 \cos(2\pi y)) \quad (31)$$

この 2D-Rastrigin 関数の最小値は $(x, y) = (0, 0)$ で 0 である。

図 12 に 2D-Rastrigin 関数の等高線及び 3 個の粒子の探索点の軌跡を示す。図 12 に示すようにこの関数の関数値平面には多数の窪みが存在し、かつ各窪みは一定の大きさがある。このため、各粒子のパラメータ R_{ij} で決まる探索範囲がこの窪みの大きさよりも小さい場合、その粒子は窪みから脱出できない。例えば図 12 の場合、パラメータ R_{ij} は、関数の局所解である窪みの大きさよりも小さいためここから脱出することができず、最適値探索が失敗する。このように最適値探索が失敗するのは、探索範囲の設定が適切でないことに起因する。しかし、ブラックボックス問題では、与えられた目的関数の局所解の設計変数空間内での大きさが不明であるため、あらかじめ適切な探索範囲を設定することはできない。このため自律的に探索範囲を設定するようにする必要があるが、これは現状未解決の問題である。

以上の結果から、非線形写像の効果で NMO の局所探索能力は向上し、目的関数の微分情報を使用せずに斜面に沿った目的

図 12 Rastrigin 関数での各粒子の探索点軌跡

関数の最適解を探索することが可能になった。しかし、目的関数が多峰性関数の場合、設計変数空間内での局所解の大きさと探索範囲の大きさを自律的に決定する方法が未解決であるため、最適解の探索が困難である場合がある。

7. おわりに

本稿では、従来の PSO の挙動を明らかにするために、我々が提案する正準型決定論的 PSO を紹介し、その動作の解析結果についても紹介した。更に正準型決定論的 PSO の解析結果に基づいて、局所探索能力を向上させた非線形写像最適化手法を紹介し、その解探索能力について考察した。非線形写像最適化は決定論システムであるため従来の群知能アルゴリズムとは大きく異なり、解探索の結果は初期値にのみ依存する。しかしながら大域的探索能力の向上については、まだ十分な議論ができておらず、この点が今後の課題である。

謝辞 本研究は JSPS 科研費 JP15K06077, JP16K14271, JP19K12163, JP20K11978 の助成を受けたものです。また本研究の一部は東北大学電気通信研究所 共同プロジェクト研究によるものです。

文 献

- (1) J.A. Nelder and R. Mead, "A simplex method for function minimization," The Computer Journal, vol.7, no.4, pp.308–313, 1965. DOI:10.1093/comjnl/7.4.308
- (2) G.B. Wang, "Swarm intelligence in cellular robotic systems," NATO ASI Series, vol.102, pp.703–712, 1993. DOI:10.1007/978-3-642-58069-7_38
- (3) E. Bonabeau, M. Dorigo, and G. Theraulaz, Swarm Intelligence, Oxford University Press, 1999.
- (4) M. Dorigo and T. Stützle, Ant Colony Optimization, MIT Press, 2004.
- (5) D. Karaboga, "An idea based on honey bee swarm for numerical optimization," Technical Report TR06, Erciyes University, Engineering Faculty, Computer Engineering Department, 2005.
- (6) X.-S. Yang, Nature-Inspired Metaheuristic Algorithms, Luniver Press, 2008.
- (7) X.-S. Yang and S. Deb, "Cuckoo search via Lévy flights," Proc. NaBIC 2009. DOI:10.1109/NaBIC.2009.5393690.
- (8) J. Kennedy and R. Eberhart, "Particle swarm optimization," Proc. IEEE ICNN1995, pp.1942–1948, 1995. DOI:10.1109/ICNN.1995.488968
- (9) J. Kennedy, "The particle swarm: Social adaptation of knowledge," Proc. IEEE ICEC1997, pp.303–308, 1997. DOI:10.1109/ICEC.1997.592326
- (10) M. Clerc, Particle Swarm Optimization, Wiley-ISTE, 2006.
- (11) P. Thakur and A. Pal, Solution of Problems of Optimization in Engineering Applications using PSO Algorithm, Amazon's Kindle International Publisher, 2018.
- (12) M. Clerc and J. Kennedy, "The particle swarm — explosion, stability, and convergence in a multidimensional complex space," IEEE Trans. Evol. Comput., vol.6, no.1, pp.58–73, 2002. DOI:10.1109/4235.985692
- (13) C.W. Cleghorn and A.P. Engelbrecht, "A generalized theoretical deterministic particle swarm model," Swarm Intelligence, vol.8, pp.35–59, 2014. DOI:10.1007/s11721-013-0090-y
- (14) H. Yoshitaka, K. Kawata, Y. Fukuyama, S. Takayama, and Y. Nakanishi, "A particle swarm optimization for reactive power and voltage control considering voltage security assessment," IEEE Trans. Power Syst., vol.15, no.4, pp.1232–1239, 2000. DOI:10.1109/59.898095
- (15) A. Farmahini-Farahani, S.M. Fakhraie, and S. Safari, "Scalable architecture for on-chip neural network training using swarm intelligence," Proc. EDAA2008, pp.1340–1345, 2008. DOI:10.1109/DATE.2008.4484865
- (16) M.R. AlRashidi and M.E. El-Hawary, "A survey of particle swarm optimization applications in electric power systems," IEEE Trans. Evol. Comput., vol.13, no.4, pp.913–918, 2009. DOI:10.1109/TEVC.2006.880326
- (17) K. Jin'no, "A novel deterministic particle swarm optimization system," Journal of Signal Processing, vol.13, no.6, pp.507–513, 2009.
- (18) T. Shindo and K. Jin'no, "Analysis of dynamics characteristic of deterministic PSO," NOLTA, vol.4, no.4, pp.451–461, October, 2013. DOI:10.1587/nolta.4.451
- (19) Y. Hariya, T. Kurihara, T. Shindo, and K. Jin'no, "A study of robustness of PSO for non-separable evaluation functions," Proc. NOLTA2015, pp.724–727, 2015. DOI:10.34385/proc.47.B4L-E-3
- (20) Y. Hariya, T. Shindo, and K. Jin'no, "An improved rotationally invariant PSO: a modified standard PSO-2011," Proc. IEEE WCCI2016, pp.1839–1844, 2016. DOI:10.1109/CEC.2016.7744012
- (21) Y. Hariya, T. Shindo, and K. Jin'no, "A novel particle swarm optimization for non-separable and ill-conditioned problems," Proc. IEEE SMC2016, pp.2110–2115, 2016. DOI:10.1109/SMC.2016.7844551
- (22) M. Clerc, "The swarm and the queen: towards a deterministic and adaptive particle swarm optimization," Proc. ICEC 1999, pp.1951–1957, 1999. DOI:10.1109/CEC.1999.785513
- (23) I.C. Trelea, "The particle swarm optimization algorithm: convergence analysis and parameter selection," Info. Proc. Lett., vol.85, pp.317–325, 2003. DOI:10.1016/S0020-0190(02)00447-7
- (24) E.F. Campana, G. Fasano, D. Peri, and A. Pinto, "Particle swarm optimization: efficient globally convergent modifications," Proc. III ECCM 2006, p.412, 2006. DOI:10.1007/1-4020-5370-3.412
- (25) V. Kaidirkamanathan, K. Selvarajah, and P.J. Fleming, "Stability analysis of the particle dynamics in particle swarm optimizer," IEEE Trans. Evol. Comput., vol.10, no.3, pp.245–255, 2006. DOI:10.1109/TEVC.2005.857077
- (26) R. Mendes, J. Kennedy, and J. Neves, "The fully informed particle swarm: simpler, maybe better," IEEE Trans. Evol. Comput., vol.8, no.3, pp.204–210, 2004.

DOI:10.1109/TEVC.2004.826074

- (27) F. Bergh and A.P. Engelbrecht, “A cooperative approach to particle swarm optimization,” IEEE Trans. Evol. Comput., vol.8, no.3, pp.225–239, 2004. DOI:10.1109/TEVC.2004.826069
- (28) K. Jin’no, T. Shindo, T. Kurihara, T. Hiraguri, and H. Yoshino, “Canonical deterministic particle swarm optimization to sustain global search,” Proc. IEEE SMC2014, pp.2470–2475, 2014. DOI:10.1109/SMC.2014.6974292
- (29) R. Sano, T. Shindo, K. Jin’no, and T. Saito, “PSO-based multiple optima search systems with switched topology,” Proc. IEEE CEC2012, pp.3301–3307, 2012. DOI:10.1109/CEC.2012.6252973
- (30) K. Jin’no, R. Sano, and T. Saito, “Particle swarm optimization with switched topology,” NOLTA, vol.6, no.2, pp.181–193, April 2015. DOI:10.1588/nolta.6.181
- (31) K. Jin’no, “Nonlinear map optimization,” Proc. IEEE WCCI2018, pp.2082–2088, 2018. DOI:10.1109/CEC.2018.8477914
- (32) K. Jin’no, “Analysis of dynamics of nonlinear map optimization,” Proc. ICAND2018, pp.186–198, 2018. DOI:10.1007/978-3-030-10892-2_19
- (33) K. Jin’no, T. Sasaki, and H. Nakano, “Search property of nonlinear map optimization,” IEEE CEC2019, pp.3214–3221, 2019. DOI:10.1109/CEC.2019.8790227
- (34) K.T. Alligood, T.D. Sauer, and J.A. Yorke, Chaos: An Introduction to Dynamical Systems, Springer, 1996. DOI:10.1007/0-387-22492-0_3

(幹事団提案, 2021 年 6 月 16 日受付, 2021 年 7 月 20 日再受付)

神野健哉 (正員：フェロー)

1991 法政大学工学部電気工学科電気電子専攻卒業, 1993 法政大学大学院工学研究科電気工学専攻修士課程修了, 1996 法政大学大学院工学研究科電気工学専攻博士後期課程修了. 博士 (工学). 1996 上智大学理工学部電気・電子工学科助手, 1998 日本工業大学工学部電気電子工学科助手, 2004 関東学院大学工学部情報ネット・メディア工学科准教授. 2009 日

本工業大学工学部電気電子工学科教授. 2018 東京都市大学情報工学部知能情報工学科教授. 1998 本会学術奨励賞受賞. 2018–2019 NOLTA ソサイエティ会長. 人工ニューラルネットワーク, 群知能最適化, 機械学習に関する研究に従事.