

単目的最適化のための探索空間低次元化に基づく新たなアプローチの提案

開発 拓也^{1,a)} 渡邊 真也^{†1,b)}

概要: 本研究では、単目的最適化に対する新たな低次元化アプローチの提案とその有効性の検証を行う。本アプローチは、変数が多数存在する高次元探索空間での効率的な探索を実現するため探索空間の有望領域周辺の情報量をできるだけ失わない低次元化を実現し、低次元化した空間での探索に切り替えることで探索の効率化を図っている。期待する探索空間の低次元化を次元するためにサンプリングと低次元化手法の2つがポイントとなるが、提案手法では、サンプリング方法にDIRECT(DIviding RECTangle)法、低次元化手法にt-SNEを採用した。代表的なテスト関数を用いた数値実験において複数のサンプリング手法、低次元化手法を用いた場合との比較を行い、提案するアプローチの優位性を示した。

A proposal of a new low-dimensional approach for single optimization problems

Abstract: In this paper, a new single-objective optimization approach based on the dimension reduction of search space is proposed. The proposed approach tries to reduce the dimension of search space considering the keeping of information around prospective area and change the search of algorithm on the reduction search space. There are two key points to realize the expected dimensional reduction; sampling and reduction methods. In the proposed approach, DIRECT (DIviding RECTangle) algorithm is used as sampling and t-SNE is chosen as a reduction method. The effectiveness of the proposed approach could be confirmed by comparing it between other sampling and reduction methods in numerical examples using typical test problems.

1. はじめに

最適化において、設計変数の増加は指数関数的な探索空間の拡大に直結するため、極端に困難性が増すことが知られている [1]。しかしながら、幅広い分野において多変数の問題は存在し、多数の変数を有する高次元空間に対して効果的な最適化アルゴリズムの実現は強く社会から求められている。

一般的に、線形計画問題など特約のクラスの問題に対してはシンプレックス法や内点法、それらを組み合わせたソルバーが既開発されており、ある程度の変数の数を持つ問

題においても現実的な時間内において最適解の導出が可能となっており、特に変数が膨大に存在する場合には列生成法といった効果的な手法がすでに確立している [2], [3]。

また、非線形計画問題に対しても厳密解法を中心に分解に基づくアプローチが複数提案されており、応用を含めてその有効性が検証されている [4]。

しかしながら、多峰性や非凸性といった特徴を有する非線形性が強い連続問題に対して広く適用されている進化計算を含めたヒューリスティック解法においては、多変数の場合に十分に対応できているとは言えず、変数の増加による膨大な探索空間の問題については、一部、分解に基づくアプローチが提案されているのに留まっているのが現状である [4]。

そこで本論文では、多変数の非線形の強い問題に特化した新たなアプローチとして、探索空間低次元化に基づく手法の提案を行う。提案手法では、高次元空間においてサンプリングした点を低次元化し、低次元化されたサンプリン

¹ 室蘭工業大学大学院
The Graduate School of Engineering, Muroran Institute of Technology

^{†1} 現在、室蘭工業大学 しくみ情報系領域
Presently with College of Information and Systems, Muroran Institute of Technology

^{a)} 17043019@mmm.muroran-it.ac.jp

^{b)} sin@csse.muroran-it.ac.jp

グ点を探索の基点とする最適化手法を低次元化空間に適用することで、本来高次元の問題を低次元に落としこんだ最適化を実現している。本手法のポイントは、サンプリング点における高次元空間と低次元空間の関係情報を活用している点、差分進化といった母集団内の解候補の情報のみから新規個体を生成する手法を低次元化空間での最適化に活用している点である。

提案手法では、最良解付近の高次元空間の情報をいかに情報損失なく低次元化できるかが探索性能に大きく関わってくる。そのため、サンプリング点の選出、それらの点に対する具体的な低次元化手法が非常に重要となっていくが、本論文ではサンプリング手法として DIRECT (DIviding RECTangle) アルゴリズム、低次元化手法として t-SNE をそれぞれ採用した。

数値実験として、Rastrigin 関数、Rosenblock 関数といった代表的なテスト関数に対して、サンプリング手法および低次元化手法の違いによる影響、サンプリングと低次元化後の探索に費やす計算資源の割合による影響などの観点から検証を行い、提案手法の有効性について検証を行った。

以下、本稿における構成について述べる。まず 2 章では、提案手法の中でサンプリングとして利用されている DIRECT 法について、3 章では低次元化手法として利用されている t-SNE について概説する。その上で、4 章では提案する低次元化を活用した多変数に特化した手法の詳細について説明する。5 章において提案手法の検証実験を行い、6 章にまとめを述べる。

2. DIRECT(DIviding RECTangle) 法

ここでは提案手法で用いる DIRECT 法について概説する。DIRECT(DIviding RECTangle) 法は、Perttunen jones らによって 1993 年に提案された単目的最適化手法の一つである [5]。この手法は、設計変数空間を N 次元の超立方体として扱い、その中央の点をサンプリングしつつ超立方体を等間隔に分割し、分割によって出来た超直方体の中央点をサンプリングし、さらに分割をすることで探索を進める手法である。

分割する超直方体は、それぞれの超直方体の中心点の評価値と超直方体の領域の広さを基準に決定する。図 1 に 2 次元空間における実際の探索のイメージ図を示す。図 1 において色つきの長方形は分割すべき長方形を、色つきの丸点は分割すべき正方形の中心点を表している。DIRECT 法の詳細については参考文献 [5], [6], [7] を参照されたい。

3. t-SNE(t-distributed Stochastic Neighbor Embedding)

ここでは提案手法で用いる低次元化手法である t-SNE について概説する。t-SNE(t-Distributed Stochastic

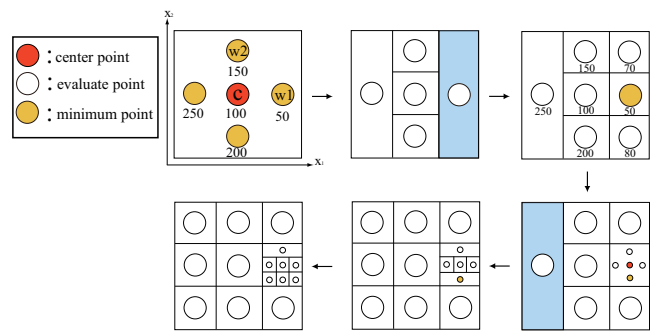


図 1 DIRECT 法による探索

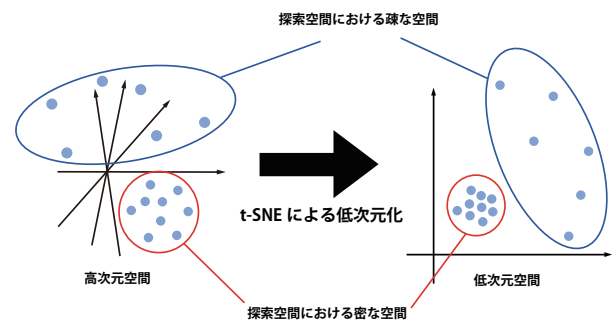


図 2 t-SNE による低次元化のイメージ図

Neighbor Embedding)[8] は、低次元化手法の一つである SNE(Stochastic Neighbor Embedding)[9], 及び Symmetric SNE[10] を改良したものである。このアルゴリズムは、高次元空間におけるある 2 点間の距離と、それに対応する低次元空間のある 2 点間の「近さ」をそれぞれ別の確率分布を用いた同時確率で表現し、二つの確率のカルバック・ライブラー距離 [11] を最適化するという特徴を持つ。カルバック・ライブラー距離を最小にすることで高次元空間における点集合を少ない情報損失で低次元空間に落としこむことが出来る。t-SNE による低次元化のイメージ図を図 2 に示す。図 2 のように、高次元空間で距離の離れた点は低次元空間でより近く、距離の近い点はより近く配置されるアルゴリズムである。t-SNE の詳細については参考文献 [8], [9], [10] を、t-SNE に四分岐の概念を取り入れて演算を高速化した手法である Barnes-Hut t-SNE については参考文献 [12] を参照されたい。

4. 提案手法

最適化問題を取り扱う上で、設計変数の増加は設計変数空間の指数関数的な拡大により最適解の導出を極端に困難にする。この問題を解決するためには設計変数を減らす必要があるが、ただ設計変数を減らすだけでは問題の意味そのものが変化してしまうため、対象とする問題の性質を変化させないように設計変数を減らすアプローチが必要になる。そこで本論文では、低次元化手法における低次元空間と高次元空間の対応付けに着目し、低次元空間上を探索し

つつ実際は高次元空間を探索するような手法、低次元化によるヒューリスティックな最適化アルゴリズムに対する新たなフレームワーク (Heuristic Optimization Framework based on Dimension Reduction (HOF-DR)) として提案する。

HOF-DR では、まずはじめに高次元空間のサンプリングを行い、それらの点集合に対して低次元化手法を適用し、高次元サンプリング点を低次元化した情報を得る。ただし、単純に高次元空間をサンプリングしたのでは最適解周辺の情報欠損が大きくなり、低次元空間上で得られる解も低品質なものとなる可能性がある。すなわち、最適解周辺の情報は高精度に、逆に最適解の存在する可能性の少ない領域は荒くサンプリングする必要がある。そこで本論文では高次元空間のサンプリングに DIRECT 法を用いる。DIRECT 法は PSO や GA などの探索手法に比べ、設計変数空間の探索をより網羅的に行うことが出来る手法である。

また、低次元化手法には近年注目を集めている手法である t-SNE を用いる。t-SNE は高次元での各データ点の距離を低次元空間に落としこむ手法であるため、既存の低次元化手法に比べ最適化に用いる情報の損失が少ない。DIRECT 法の探索結果を用いて探索空間を低次元化することで、DIRECT 法によって集中的に探索した領域をより高精度に低次元空間に反映される。

HOF-DR では DIRECT 法と t-SNE を用いて低次元化を行った後の探索手法として、サンプリングした点の情報を基に新規個体を生成する手法である必要があり、そういった意味では差分進化 [13] は最も適したアルゴリズムのひとつであるといえる。そこで本論文では差分進化の中で特に強力な手法として知られている SHADE[14] を用いた。

多次元的设计変数で一定回数探索した後に、それらの情報を元に設計変数を 2 次元に圧縮し再び探索を行うことで、多次元での探索の情報を活かし、探索性能の向上を目指す。

提案手法のポイントは

1. 低次元化の際に用いる元の次元のデータをどうするか
2. 低次元化手法に何を適用するか
3. 全計算資源のうち高次元空間のサンプリングと低次元空間の探索にそれぞれどのくらい計算資源を割くかの 3 つである。それぞれのポイントについて 4.1 節で詳しい説明を行う。また、HOF-DR を適用するにあたり高次元空間上の情報と低次元空間上の情報の対応付けについても 4.2 節で説明する。

4.1 提案手法の流れ

以下に HOF-DR のアルゴリズム全体の流れを示す。

step1. N 次元空間を DIRECT 法を用いてサンプリング

step2. Step1. のサンプリング情報を元に t-SNE を用いて 2 次元に低次元化

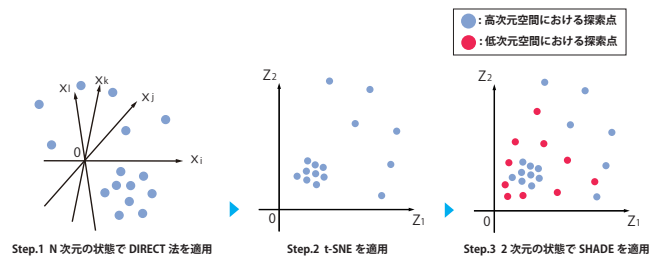


図 3 提案手法における各 Step. の様子

step3. 低次元化空間に探索アルゴリズムを適用

以下に各 step での詳しい説明を示し、具体的な様子を図 3 に示す。図 3 において青点は高次元空間における探索点を表し、赤丸は低次元空間における探索点を表す。

step1. N 次元空間を DIRECT 法を用いてサンプリング

低次元化手法を用いて次元を圧縮するためには、圧縮前の次元においてある程度のサンプリングが必要である。そのため、最初は N 次元の状態での DIRECT 法による探索を行う。

この Step はポイントの 1 つ目に対応しており、解空間全体を均等に探索しつつ評価値の良い領域を集中的に探索する DIRECT 法を用いることで、高次元空間内の情報のうち探索に重要な領域とそうでない領域を低次元空間に特徴的に落としこむことを目的としている。

step2. 探索情報を元に t-SNE を用いて 2 次元に低次元化

探索の難易度を下げるために多次元的设计変数を 2 次元に圧縮する。本提案手法のアルゴリズムでは、step1. の探索点を元に t-SNE を適用し、 N 次元を 2 次元に圧縮する。t-SNE のアルゴリズムの特徴より、低次元空間の点集合は高次元空間の各点と対応しており、低次元空間と高次元空間との対応付けが可能である。そのため低次元空間の情報が可逆なものとなり、必要に応じて低次元空間を高次元空間に戻す事が可能となる。

step3. 低次元化空間に探索アルゴリズムを適用

N 次元的设计変数 $x_1 \sim x_n$ を 2 次元に圧縮した設計変数を $z_1 \sim z_n$ とする。 $z_1 \sim z_n$ の中からランダムに探索点を取得し、初期母集団を形成する。各 z_n はそれぞれ高次元空間におけるもとの情報を保持しているため、低次元空間における各探索点の評価は圧縮する前の変数数で行う。

低次元空間での新規個体生成は図 4 のように個体と個体の情報を元に新規個体を生成する。低次元空間と高次元空間の対応付けについては 4.2 節で詳しく説明するが、低次元化後の探索には既存の解情報もしくは現在の母集団の情報に基づき新規個体を生

成する方法を採用する必要がある。すなわち、遺伝的アルゴリズムにおける突然変異のような設計変数を直接変化させることで新規個体を生成する局所探索的なアプローチを利用することができない。これは高次元空間における特定の設計変数を直接変更する事で低次元空間と高次元空間の対応付けが不可能になるからである。そういった意味において、差分進化 (Differential Evolution, DE)[13] や粒子群最適化 (Particle Swarm Optimization, PSO)[15] といった集団的降下法 (population-based descent method) もしくは、DIRECT 法のような既探索点の情報から新たな探索点を決定する方法が有力な候補となる。

上記のように提案手法では元の問題を一定回数探索した後低次元化を行い、低次元化空間を用いて探索を行う。ここで問題になってくるのが、全計算資源の何割を低次元化前の探索に費やすかであり、ポイントの3つ目にあたる。低次元化を行うためには圧縮する前の次元の情報が必要であり、その情報を取得するために圧縮前の次元数で問題を一定回数探索した後低次元化を行う。次元を圧縮するにあたり元の次元の情報が多いほどより特徴を反映したマッピングが可能になる。しかし、低次元化を行う前の探索回数を多くすると低次元化後の探索回数が減少してしまい、結果として十分な探索を行うことが出来ない。低次元化前と低次元化後の最適な探索回数の比率を求めることが出来れば非常に効率よく次元を圧縮することが出来るようになるため、探索性能の向上が見込まれる。

4.2 高次元空間と低次元空間の対応付け

ここでは次元を圧縮する上で、低次元空間において高次元空間の情報をどの様に扱うかについて説明する。t-SNE のアルゴリズムの特徴から、高次元空間における点 x_i と低次元空間における点 z_i がそれぞれ対応している。そのため低次元空間上の各点は高次元空間における情報を保持することが可能であり、低次元空間の情報と高次元空間の情報を対応させる事が出来る。

低次元空間上を探索する場合は、それぞれが保持している高次元空間の情報を元に新たな高次元空間の情報を生成する。2つの次元の対応付けの概念図を図4に示す。図4では4次元を2次元に圧縮した場合を例にしており、既存の点 z_i, z_j を元に新たな探索点 z_k を生成する際の生成方法を示す。 z_i は高次元空間の情報 (x_1, x_2, x_3, x_4) を保持しており、 z_j は高次元空間の情報 (x_a, x_b, x_c, x_d) を保持している。低次元空間上において z_k は2点 z_i, z_j を元に生成され、 z_k の保持する高次元空間の情報は z_i, z_j の保持している高次元情報を元に新たに生成される。

以上のことから、提案手法では低次元空間における新規個体生成方法が特殊であるため、組み合わせるアルゴリズムを吟味する必要がある。最適化に用いられる事の多い遺

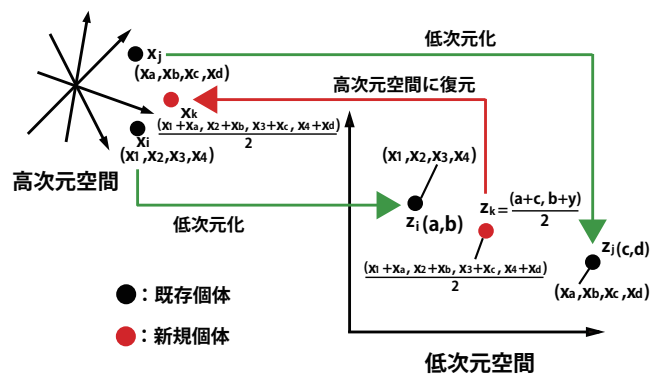


図4 高次元空間と低次元空間の対応付け

伝的アルゴリズムは、アルゴリズムの中に突然変異という操作があるため本手法に用いる事のできないアルゴリズムのひとつである。これは、突然変異によってある特定の変数のみを変異させた場合、高次元空間と低次元空間の対応付けが出来ないからである。

5. 数値実験

本論分では、提案手法の有効性を検証するために有名な最適化ベンチマーク関数である Rastrigin 関数, Rosenblock 関数, RotatedRastrigin 関数に対する数値実験を行った。本章では実験設定と評価手法について説明した後、提案手法と従来手法の実験結果を示す

5.1 実験設定

本提案手法には大きく2つのポイントがあり、低次元化手法の妥当性とサンプリング方法の妥当性を考慮する必要がある。そこで本実験では、適用する低次元化手法の比較と適用するサンプリング方法の比較をする事で提案手法の妥当性を示すとともに、従来手法に比べ低次元化手法を取り入れた探索が有効である事を数値実験を通して示す。本論分では低次元空間の探索に差分進化の中で特に強力な手法として知られている SHADE[14] を用いて実験を行った。

5.2 設定パラメータ

実験で用いた各パラメータについて説明する。本実験ではパラメータ設定を表1のように設定した。評価回数を100000回と設定し、変数数を4段階に分けることで次元数の増加による提案手法の効果がどの程度現れるかを調査した。また本手法の重要な点として、高次元空間のサンプリングに評価回数の何割を割り、何割を低次元化後の探索に用いるかを考慮する必要がある。本論分では、高次元空間のサンプリング回数:低次元空間の評価回数を圧縮比として1:9, 5:5, 9:1の3段階に分けて実験を行った。また、t-SNE の perplexity はデータ点 x_i の近傍をどれだけ見るか、 θ は Barnes-Hut t-SNE に用いるパラメータである。

5.3 評価手法

評価手法は各手法 100000 評価を終了条件として、探索が終了した段階の最良評価値の 10 試行の平均で比較を行う。低次元化手法を用いる場合は、与えられた計算資源（本実験の場合は評価回数）のうち何割を次元圧縮をする為のサンプリング点の取得に費やすかを比較することで、次元圧縮の為のサンプリングとその後の探索の割合による探索性能の差を調査する。

5.4 実験結果

実験 1 として低次元化手法である t-SNE と代表的な低次元化手法である PCA[16] を比較する。実験 2 として低次元化におけるサンプリング方法として DIRECT 法と GridSearch の二つを比較する。GridSearch とは変数空間を等間隔にサンプリングする手法である。

また、各実験結果において比較すべき低次元化手法を用いない場合の探索結果を表 2 に示す。

5.5 実験 1

低次元化手法として t-SNE を用いた場合と PCA を用いた場合の結果を示す。

t-SNE を用いた低次元化による探索結果を表 3 に、PCA を用いた場合の探索結果を表 4 に示す。

表 3, 表 4 から、次元数が増えるにつれて t-SNE を用いた場合が結果が良くなっている事が分かる。特に 20 変数における低次元化は t-SNE を用いた場合の結果が PCA を用いた場合に比べて非常に良い。この事から t-SNE による低次元化が PCA を用いた低次元化に比べて高次元の圧縮に適している事がいえる。また表 2 と比べて Rastrigin 関数, RotatedRastrigin 関数に対して低次元化が特に有効に作用している事がこの実験から示せた。Rosenblock 関数に対しては低次元化の有効性が示されるのが 50 次元の場合になってしまったが、これは Rosenbrock 関数が比較的難しく関数であるため従来手法でも良い結果を導く事が

表 1 実験に用いた各パラメータ

変数数	4,10,20,50
総評価回数	100000
t-SNE の perplexity	20.0
t-SNE の θ	0.7
SHADE の母集団サイズ	50

表 2 SHADE のみの各変数における最小の評価値

	Rastrigin	Rosenblock	RotatedRastrigin
4 変数	0	7.71E-05	0.2363
10 変数	1.9709	0.3337	17.9472
20 変数	53.8648	14.4935	96.0281
50 変数	408.514	1767.88	474.677

出来るからである。逆に Rastrigin 関数, RotatedRastrigin 関数に関しては多峰性, 変数依存性といった要素があるため問題の難易度が Rosenbrock 関数に比べて高く、そのような問題に対して提案手法が有効である事が示せた。

5.6 実験 2

サンプリング方法として DIRECT 法を用いた場合と GridSearch を用いた場合の結果を以下に示す。なお本実験では低次元化手法に t-SNE を用いた。GridSearch を用いた場合の探索結果を表 5 に示す。表 3 と比較すると、いずれの場合も DIRECT 法を用いた場合が GridSearch によるサンプリングに比べて良好な結果を示した。

DIRECT 法の集中的な探索により高次元空間の重要な領域、つまり最適解周辺に対しての情報が多くサンプリングされる事により低次元化後の探索においてもその情報が有効に活用できている事が結果からわかる。GridSearch によるサンプリングは探索空間全体をサンプリングはするが、そのようなサンプリングの場合は探索に不必要な情報もあ

表 3 t-SNE を用いた低次元化による各変数の評価値

	圧縮比	Rastrigin	Rosenblock	RotatedRastrigin
4 変数	1:9	0.0587	2.58E-07	0.1477
	5:5	0.0469	4.46E-05	0.0070
	9:1	0.4508	2.9E-06	0.5404
10 変数	1:9	16.8403	1.0519	10.7333
	5:5	26.0797	3.00997	10.9505
	9:1	31.3037	6.6062	11.0678
20 変数	1:9	42.3781	17.963	110.018
	5:5	44.4685	17.7493	94.9139
	9:1	58.6052	17.7088	95.1754
50 変数	1:9	216.5461	51.6574	376.2324
	5:5	132.8928	51.5147	397.586
	9:1	163.5708	50.6561	430.8627

表 4 PCA を用いた低次元化による各変数の評価値

	圧縮比	Rastrigin	Rosenblock	RotatedRastrigin
4 変数	1:9	0.03064	1.1E-07	0.0014
	5:5	0.0982	2.1E-05	0.0011
	9:1	0.4156	5.33E-06	0.7166
10 変数	1:9	18.7968	1.2553	10.91216
	5:5	26.1829	3.7612	10.9501
	9:1	30.4302	6.626	11.0592
20 変数	1:9	38.6189	18.7572	110.4213
	5:5	49.5309	17.7614	95.8393
	9:1	60.4024	17.7333	97.2652
50 変数	1:9	214.44	50.674	361.265
	5:5	122.717	51.5994	399.9678
	9:1	131.033	51.6707	405.202

り、低次元化後の探索に大きく影響していると思われる。

実験2の結果から、提案する手法は期待する効果を得られていることが分かった。一方で問題によっては有効に働かないため、組み合わせるアルゴリズムや評価回数を変える必要がある。

6. おわりに

本論分では多変数を有する最適化問題に対して、探索空間の低次元化に基づく手法を提案した。提案手法は最適化手法と低次元化手法を組み合わせしており、それにより低次元空間の探索においても実質的には高次元空間を探索するようなアルゴリズムである。

提案した手法で用いた各手法の優位性を示すために複数の組み合わせによる数値実験を行った結果、以下の事柄を明らかにする事ができた。

- 提案手法による低次元化の有効性
- 複数の低次元化手法で従来手法に対して有効な結果
- 低次元化手法を適用するためのサンプリング方法を選ぶ必要がある

複数の低次元化手法を用いて実験した結果、いずれの場合も従来手法に対してよい結果を示せたことから提案手法による低次元化が多変数最適化に対して有効である事が分かり、特に低次元化手法としてt-SNEが有効であることが分かった。また、低次元化手法を適用するためのサンプリング方法に関しても、DIRECT法によるサンプリングが低次元化やその後の探索に適したアルゴリズムである事も判明した。

本提案手法は単目的最適化に対してのアプローチであったため、より実用的なアルゴリズムの実現を目標に、今後は多目的最適化に対して本提案手法の適用を検討している。また、本実験では一意にt-SNEが有効であることが示せなかったため、この点についての検証も進める予定である。

表 5 GridSearch によるサンプリングにおける各変数の評価値

	圧縮比	Rastrigin	Rosenblock	RotatedRastrigin
4 変数	1:9	0.1217	3.44E-07	0.1304
	5:5	1.1784	0.0003	1.3632
	9:1	4.6857	1.0825	6.1163
10 変数	1:9	30.9807	3.969488	32.1913
	5:5	39.7571	9.725162	40.7427
	9:1	54.1906	281.3766	55.5898
20 変数	1:9	271.3552	844408	161.132
	5:5	248.0586	648059.1	156.9508
	9:1	625.7441	554839.2	180.6184
50 変数	1:9	1446.988	1354792	2164.488
	5:5	663.1085	1381420	2194.338
	9:1	2180.714	1493293	2111.461

参考文献

- [1] 渡邊真也：パレート解分析のための技術動向，システム/制御/情報 = Systems, control and information：システム制御情報学会誌，Vol. 60, No. 7, pp. 272–277 (2016).
- [2] 久保幹雄，松井知己，田村明久（編）：応用数理計画ハンドブック，朝倉書店 (2002).
- [3] Lübbecke, M. and Desrosiers, J.: Selected Topics in Column Generation, *Operations Research*, Vol. 53, pp. 1007–1023 (2004).
- [4] Conejo, A., Castillo, E., Minguéz, R. and Garcia-Bertrand, R.(eds.): *Decomposition Techniques in Mathematical Programming Engineering and Science Applications*, Springer (2006).
- [5] R., J. D.: Lipschitzian optimization without the Lipschitz constant, *J. Optimization Theory and application*, Vol. 79, No. 1, pp. 157–181 (online), DOI: 10.1007/BF00941892 (1993).
- [6] 路易 王，裕幸石田，知之廣安，光範三木，久猛横内：211 DIRECT 法の多目的最適化問題への適用，最適化シンポジウム講演論文集，Vol. 2008, No. 8, pp. 201–206 (2008).
- [7] HIROYASU, T., WANG, L., ISHIDA, H. and MIKI, M.: DIRECT 法の多目的最適化問題への拡張，*IPSI SIG Notes*, Vol. 2008, No. 41, pp. 5–8 (2008-05-09).
- [8] van der Maaten, L. and Hinton, G. E.: Visualizing High-Dimensional Data Using t-SNE, *Journal of Machine Learning Research*, Vol. 9, pp. 2579–2605 (2008).
- [9] Hinton, G. E. and Roweis, S. T.: Stochastic Neighbor Embedding, *Advances in Neural Information Processing Systems 15* (Becker, S., Thrun, S. and Obermayer, K., eds.), MIT Press, pp. 857–864 (2003).
- [10] Cook, J., Sutskever, I., Mnih, A. and Hinton, G. E.: Visualizing Similarity Data with a Mixture of Maps, *Proceedings of the Eleventh International Conference on Artificial Intelligence and Statistics (AISTATS-07)* (Meila, M. and Shen, X., eds.), Vol. 2, Journal of Machine Learning Research - Proceedings Track, pp. 67–74 (2007).
- [11] 赤穂昭太郎（編）：カーネル多変量解析 非線形データ解析の新しい展開，岩波書店 (2008).
- [12] van der Maaten, L.: Accelerating t-SNE using Tree-Based Algorithms, *Journal of Machine Learning Research*, Vol. 15, pp. 3221–3245 (online), available from <<http://jmlr.org/papers/v15/vandermaaten14a.html>> (2014).
- [13] Storn, R. and Price, K.: *Differential Evolution: A Simple and Efficient Adaptive Scheme for Global Optimization Over Continuous Spaces*, TR: International Computer Science Institute, ICSI (1995).
- [14] 田邊遼司：関数最適化問題に対する適応型差分進化法の研究，博士論文，東京大学大学院 (2016).
- [15] Kennedy, J. and Eberhart, R. C.: Particle swarm optimization, *Proceedings of the 1995 IEEE International Conference on Neural Networks*, Vol. 4, Perth, Australia, IEEE Service Center, Piscataway, NJ, pp. 1942–1948 (1995).
- [16] F.R.S., K. P.: LIII. On lines and planes of closest fit to systems of points in space, *Philosophical Magazine Series 6*, Vol. 2, No. 11, pp. 559–572 (1901).