

# 多目的最適化とデータマイニング

大林 茂 (東北大)

## 1 はじめに

進化的計算法は、大域的な最適化法として知られるが、特に多目的最適化と呼ばれる分野で、トレードオフを表す解の集合であるパレート解を効率的に求めるユニークな方法として注目されている。これまで設計トレードオフの検討が、特徴的なパラメータを1次的に変化させて、性能の変化を調べていたの 비해、パレート解全体は全設計空間における解のトレードオフをグローバルに表している。パレート解の分布を可視化することで、設計者は多くの情報を得ることができる。これは、従来の方法にない利点であるため、近年様々な分野で応用が試みられている。[1]

しかし、目的関数の数が増えるとトレードオフの様子を把握することは困難になる。目的関数が2つや3つなら図示することは明白であるが、それ以上になると高次元空間の可視化が必要となるからである。2次元の目的関数平面に射影したり、既存の設計と比較したりすることで、ある程度解を吟味して「最適」な解を選ぶこともできるが、実際には得られたパレート解中のほんの数個の解を調べるとどまっていることが多い。

単なる「最適化」では、「最適」な解を提示したところで作業が終了するように思える。しかし、設計作業としては、ただ1つの解を持っていても役に立たない。設計の各段階において、各分野とのすり合わせで様々なトレードオフが発生するため、設計空間の中で他の設計候補を常に用意していなければならない。そこで、多目的最適化によるトレードオフ情報の探索により、設計空間の構造を俯瞰的に可視化することができれば、設計者は設計候補を容易に選択できるようになると考えられる。高次元空間に隠されたトレードオフの様子を探るためには、データマイニングの手法が適用できる。このデータマイニングは、パレート面の性質を考察し、設計空間に関する知識を得る試みに他ならない。

設計問題に対するこのようなアプローチは、最適化をしつつ、得ようとしている情報は設計空間の構造であるという点で、最適化技術に新しい切り口を与えるものである。従来、このように可視化までを含んだ設計知識の抽出・提示に対して、統一的な呼称はなかった。そこで我々のグループでは、「最適化」と区別するために、このアプローチを「多目的設計探査(MODE: Multi-Objective Design Exploration)」と呼んでいる。多目的設計探査のアルゴリズムは、実験計画法、応答曲面法、多目的最適化、統計手法、データマイニング手法などからなり、Fig.1のようにまとめることができる[2]。本稿では、可視化に焦点を置き、多目的設計探査の例を紹介する。

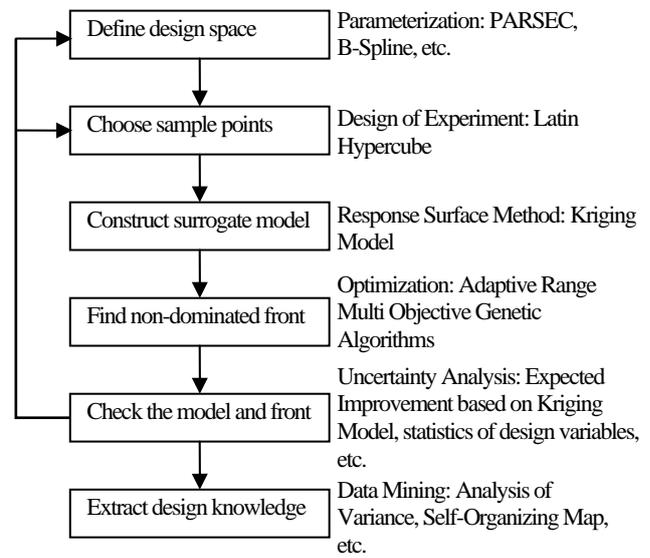


Fig. 1 多目的設計探査(MODE)

## 2 多目的最適化問題

相反する目標を含む場合、多目的最適化問題の解は単一の点としての解ではなく、「パレート最適解」と呼ばれる集合になる。「パレート最適解」とは、ある目的関数の値を改善するためには少なくとも1つの他の目的関数値を改悪せざるを得ないような最適解のことであり、目的関数間のトレードオフを示す解の集合を形成する。 $k$ 個の目的関数を持つ最小化問題において $\mathbf{X}$ を実行可能解の集合とした場合、 $\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{x}_\beta \in \mathbf{X}$ に対して次式が満たされる時、「 $\mathbf{x}_\beta$ は $\mathbf{x}_\alpha$ に支配されている」あるいは「 $\mathbf{x}_\beta$ は $\mathbf{x}_\alpha$ の劣解」と言う。

$$\mathbf{F}_i(\mathbf{x}_\alpha) \leq \mathbf{F}_i(\mathbf{x}_\beta) \quad i=1, \dots, k \quad (\text{ただし, } \mathbf{x}_\alpha \neq \mathbf{x}_\beta)$$

逆に、上式を満たす $\mathbf{x}_\beta$ が存在しない場合には、「 $\mathbf{x}_\beta$ は $\mathbf{x}_\alpha$ に支配されない」あるいは「 $\mathbf{x}_\beta$ は $\mathbf{x}_\alpha$ の非劣解」と言う。つまり、目的関数空間の実行可能領域にある非劣解の集合がパレート最適解となる。

目的関数空間ではパレート解はトレードオフ曲面を形成する。このパレート面によって目的関数間のトレードオフに関する情報を得ることができる。ここで、目的関数が2つしかない場合目的関数空間は2次元となるので、たとえば一方を良くすれば他方が悪くなる、というグラフが得られる(Fig.2)。この場合、トレードオフの把握は比較的簡単である。しかし、3目的、4目的と増えていくと、特に4次元以上ではそのままプロットすることができないので、トレードオフを一目見て分かるように可視化することは困難になる。そこで、自己組織化マップ(SOM: Self-Organizing Map)の利用を考える。

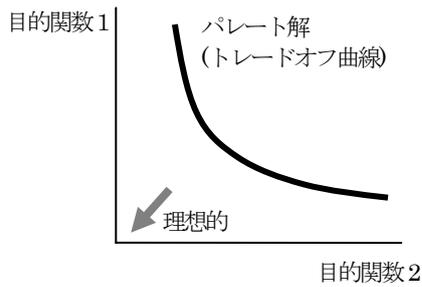


Fig. 2 2目的関数間のトレードオフ関係

### 3 自己組織化マップ (SOM: Self-Organizing Map)

SOM は、提案者の名前を取ってコホネンネットとも呼ばれ、近年脚光を浴びているデータマイニングの一手法である。SOM は、教師なし学習のアルゴリズムを用いるフィードフォワード型のニューラルネットモデルである[3]。

SOM は、入力層と出力層の2層からなり、隠れ層はない。第2層を構成するユニットはあらかじめ平面座標を持っている。第1層に提示された情報はすべて第2層に提示され、第2層のユニットは入力情報にどれだけ似ているかを競争する。競争の結果選ばれた勝者ユニットは、重み付けが更新されてさらに入力に近づく。また、その近傍ユニットも近さに応じて重みを更新される。こうして隣り合うユニットは似たような重みを持つようになり、第2層に新たな位相が形作られる。通常この第2層（出力層）を SOM の結果として図示する。

SOM は、我々が直感的に理解している地図とは異なる。通常の地図では、方角（座標軸）があり、距離（ユークリッド距離）が定義されている。SOM には、方向性がなくユークリッド距離も定義されていない。隣り合うユニットは類似度が高いが、 $n$  個離れたら類似度が  $1/n$  になるわけではないし、異なるユニットはまわりのユニットに対して異なる近さを持っている。その代わりに、SOM は多次元情報を2次元に折りたたんで表現できる。すなわち、SOM を用いると多次元データの可視化ができる。

たとえば3目的最適化の近似パレート集合から目的関数空間の SOM を作る場合、各ユニットは3つの目的関数値に対応して3次元ベクトルを持っている。ユニットの類似度は、この3次元ベクトルのユークリッド距離で測られる。できあがった SOM 上で、ユニットの各成分（3つの目的関数値）について、3つの等高線図を作成することができる。その図を比較すると、トレードオフの有無などパレート面の構造が確認できる。

SOM による可視化には、さらにクラスタリングを組み合わせることができる。もともと SOM では近傍ユニットが似たもの同士になるので、SOM 上でクラスタリングを行うことは、もとデータからクラスタリングを行うよりはるかに容易である。クラスタの特徴は、各成分のトレードオフなどから見出すことができる。このように SOM は高次元の可視化ツールと位置づけることができる。ここでは SOM の作成に、Viscovery® SOMine 4.0 を使用した[4]。

### 4 SOM によるトレードオフの可視化

超音速翼の多目的最適化問題を考え、超音速巡航抵抗・遷音速巡航抵抗・翼根の曲げモーメント・ピッチングモーメントの4つを最小化した[5]。4つの目的関数に対して、3次元翼を72の設計変数で表現して形状最適化を行い、多目的進化的計算法により766個のパレート解を求めた。これらのパレート解は、4次元目的関数空間内の3次元のトレードオフ曲面を構成している。得られたパレート解は4次元目的関数空間内の3次元曲面となる。これを2次元面で可視化する最も単純な方法は、2目的関数空間に射影することである。そこで、2目的として超音速巡航抵抗と遷音速巡航抵抗を取ると、Fig.3になる。図中の曲線 I は両抵抗間のトレードオフを表す。Fig.4に極限パレート解の翼平面形を示す。

これらのパレート解から、SOM を作ると Fig.5 ようになる。なお、理解しやすいように、各目的関数を最小化する解（極限パレート解）と各クラスタで代表的な解の翼の平面形を入れた。この図から、極限パレート解を含むようなクラスタができていることが分かる。またクラスタ間では、ピッチングモーメントの小さい翼と遷音速抵抗の小さい翼に類似性があり、また遷音速抵抗と超音速抵抗の小さい翼にも類似性があることが分かる。これらに共通することはアスペクト比が高いことである。図中の Pareto A, B は既存の設計より4目的すべてで優れた解であり、実用的な解はアスペクト比を抑えたものであることが確認できる。

このマップを構成するニューロンは、4つの目的関数値を持っている。そこで、このマップを各目的関数値で色づけすると Fig.6 を得る。この図から詳細なトレードオフの様子を見てとることができる。

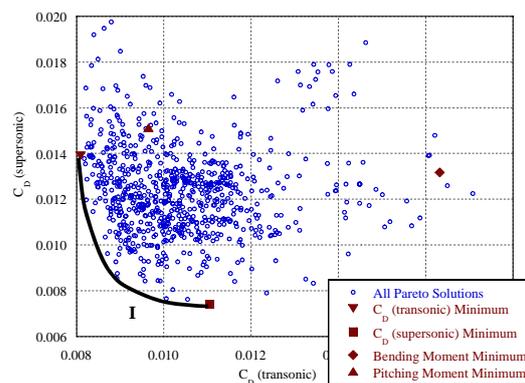


Fig. 3 遷音速抵抗と超音速抵抗による目的関数平面に投影されたパレート解

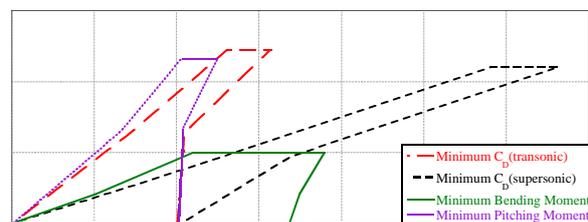


Fig. 4 極限パレート解の翼平面形

ここで紹介した多目的最適化例では、進化計算が用いられている。進化計算は多数の関数評価を必要とするため、実行するにはそれなりの計算リソースが必要となるが、応答曲面法と組み合わせれば、計算時間の短縮も可能である。また、計算機ハードの進歩は1年で約2倍とも言われている。多目的設計探査がデスクトップでできるようになる日も遠くはない。

#### 参考文献

- [1] Third International Conference on Evolutionary Multi-Criterion Optimization, Coello Coello, Hernández Aguirre, and Zitzler (Eds.), LNCS 3410, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, March 2005.
- [2] Obayashi, S., Jeong, S. and Chiba, K., "Multi-Objective Design Exploration for Aerodynamic Configurations," AIAA Paper 2005-4666, 35th AIAA Fluid Dynamics Conference and Exhibit, 6-9 June 2005, Toronto Canada.
- [3] コホネン、自己組織化マップ、改訂版、シュプリンガー・フェアラーク東京、2005.
- [4] <http://www.mindware-jp.com/somine/index.html> (2005年7月)
- [5] Obayashi, S., and Sasaki, D., "Visualization and Data Mining of Pareto Solutions Using Self-Organizing Map," Evolutionary Multi-Criterion Optimization, Fonseca, Fleming and Zitzler (Eds.), Lecture Notes in Computer Science 2632, Springer-Verlag, Berlin, April 2003, pp. 796-809.
- [6] Chiba, K., Obayashi, S., Nakahashi, K. and Morino, H., "High-Fidelity Multidisciplinary Design Optimization of Aerostructural Wing Shape for Regional Jet," AIAA Paper 2005-5080, June 2005.

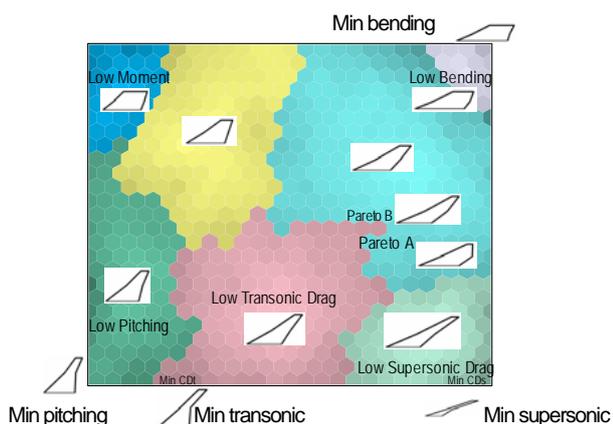


Fig. 5 超音速翼最適化の目的関数空間に進化計算によって生成されたパレート解の自己組織化マップ

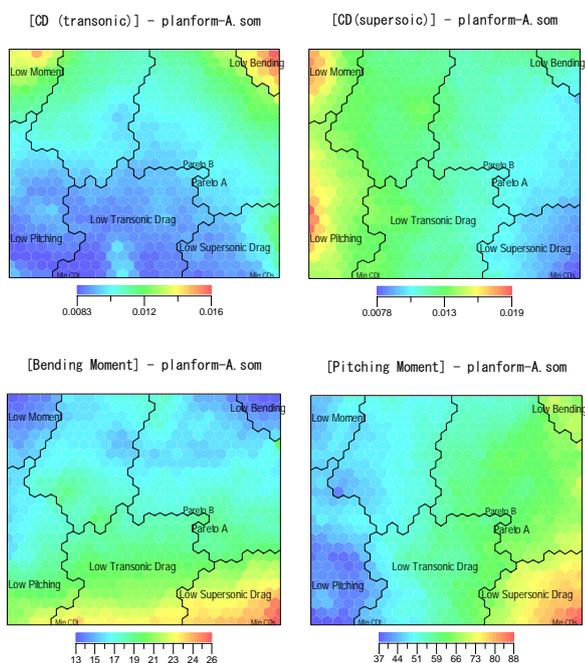


Fig. 6 前図の自己組織化マップを各目的関数値でカラー等高線表示をしたマップ

## 5 まとめ

本稿では、多目的最適化とデータマイニングから、多目的設計探査という考え方を導き、パレート面を SOM で可視化した例を示した。多目的進化計算で得られたすべての解を用いれば、設計空間そのものを可視化することができる。筆者らのグループでは、進化計算そのものを収束させなくても、設計空間の情報から近道をして、よりよい設計を見出した例も報告している[6]。多目的設計探査によって、

- トレードオフ情報から設計空間の構造を探る
- 高次元設計空間の俯瞰的可視化を行う
- 設計空間のスイートスポットを見いだす

ことができる。