

パレート解集合の数値的滑層分割

Numerical Stratification of Pareto sets

2016年8月26日 第10回設計情報学研究会

濱田 直希
(株)富士通研究所 人工知能研究センター

自己紹介

■ 濱田 直希 (はまだ なおき)

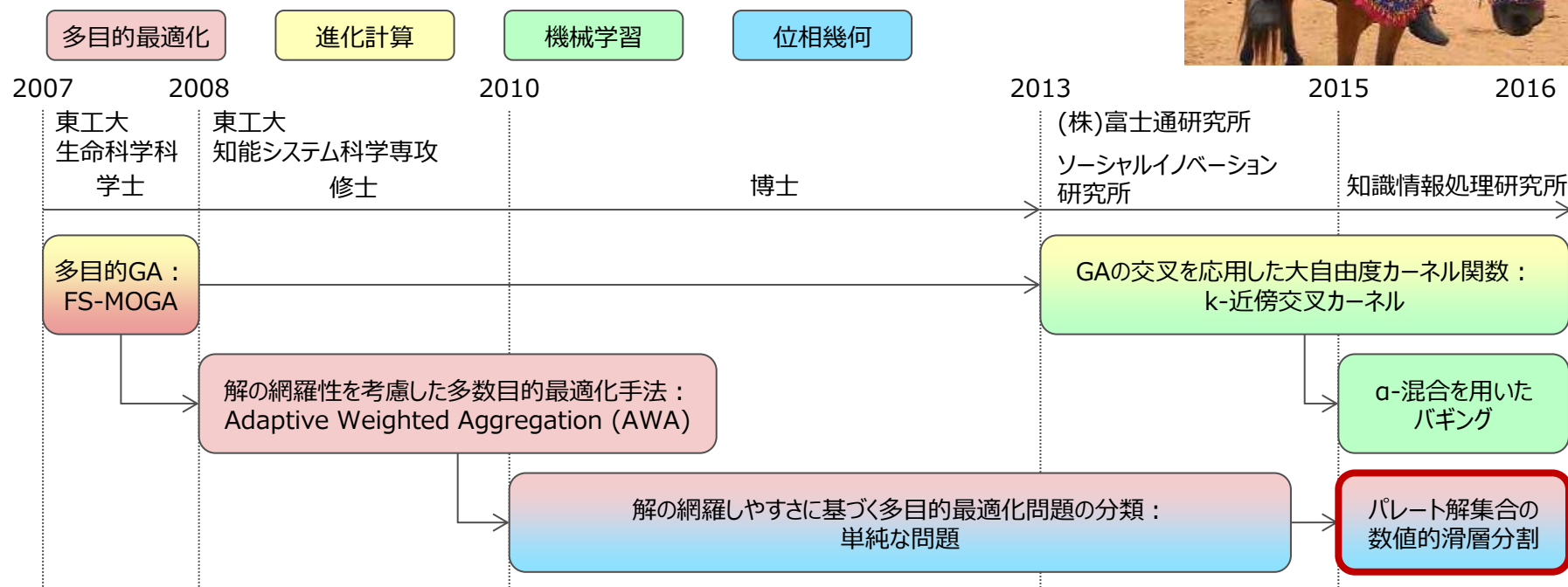
■ 所属

■ 富士通研究所 知識情報処理研究所 AI研究センター

■ 所属学会

■ 進化計算学会, 人工知能学会, 計測自動制御学会

■ 研究テーマ



多目的最適化問題の単純性の推定における，複体構築手法の提案と検証

多目的最適化問題の単純性の推定における，複体構築手法の提案と検証

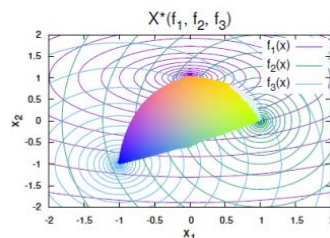
定義 1 (単純な問題) 問題 f が単純 $\stackrel{\text{def}}{\iff}$ すべての部分問題 $g \subseteq f$ について：

(S1) g が k 目的問題ならば $X^*(g) \approx \Delta^{k-1}$,

(S2) g の $X^*(g)$ への制限は埋め込み.

minimize
 $x_1, x_2 \in [-2, 2]$

$$\begin{aligned} f_1(x) &= x_1^2 + 3(x_2 - 1)^2 \\ f_2(x) &= 2(x_1 - 1)^2 + x_2^2 \\ f_3(x) &= 3(x_1 + 1)^2 + 2(x_2 + 1)^2 \end{aligned}$$

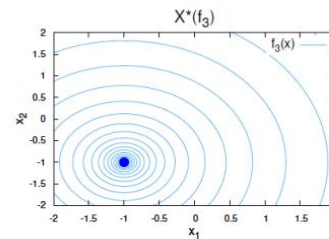
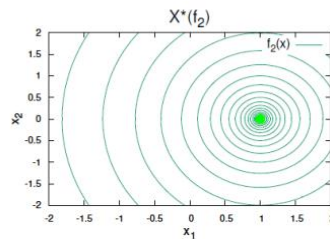
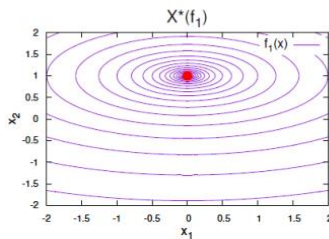
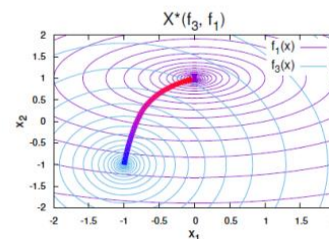
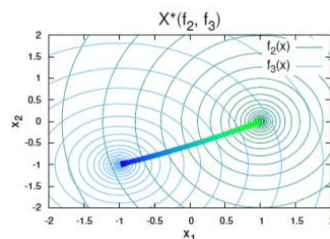
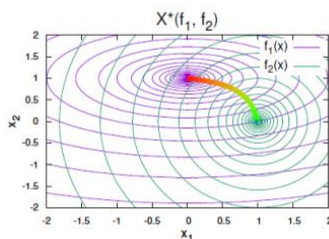


$$\text{RGB}(x) = (y_1(x), y_2(x), y_3(x))$$

$$y_i(x) = \begin{cases} (\bar{f}_i - f_i(x)) / (\bar{f}_i - \underline{f}_i) & (f_i \in g) \\ 0 & (f_i \notin g) \end{cases}$$

$$\bar{f}_i = \max \{ f_i(x) \mid x \in X^*(g) \} + 1e-16$$

$$\underline{f}_i = \min \{ f_i(x) \mid x \in X^*(g) \}$$



多目的最適化問題の単純性の推定における，複体構築手法の提案と検証

定義 1 (単純な問題) 問題 f が単純 $\stackrel{\text{def}}{\iff}$ すべての部分問題 $g \subseteq f$ について：

(S1) g が k 目的問題ならば $X^*(g) \approx \Delta^{k-1}$,

(S2) g の $X^*(g)$ への制限は埋め込み．

ブラックボックス問題の単純性の推定法

推定手順

近似解集合

位相的データ解析

問題の単純性の判定

1. 部分問題 g の近似解集合 $X(g)$ を求める
2. 求めた $X(g)$ から g -劣解を取り除く

※一般には，すべての部分問題に対して個別に近似解集合を求める必要がある

※写像 $g|_{X^*(g)}$ が単射と仮定できる場合には，原問題に対して求めた近似解集合 $X(f)$ から g -劣解を取り除けば $X(g)$ が得られる

※一般的に，近似解集合の濃度が高いほど，単純性の推定精度は高まる傾向がある

1. 近似解集合 $X(g)$ から α 複体 $K(g)$ を構築する

2. 複体 $K(g)$ の (パーシステント) ホモロジーを計算する

3. 各単体 $[x_1, \dots, x_k] \in K(g)$ に対して凸包 $[g(x_1), \dots, g(x_k)]$ を考え，それらの内部が交差するかどうかを計算する

※ α 複体の計算が難しい場合には，AWA [濱田+ 12] や SiCon [Lovison+ 13]，mPS [Lovison+ 15] といった数値解法が出力する複体を用いる

◆ある i について $H_i(K(g)) \not\cong H_i(\Delta^{k-1})$

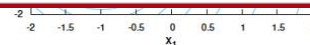
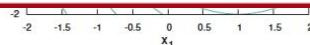
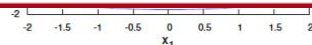
(S1) 不成立

◆内部が交わる凸包のペアが存在

(S2) 不成立

◆上記どちらの条件も満たさない

単純である可能性が高い



多目的最適化問題の単純性の推定における、複体構築手法の提案と検証

定義 1 (単純な問題) 問題 f が単純 $\stackrel{\text{def}}{\iff}$ すべての部分問題 $g \subseteq f$ について:

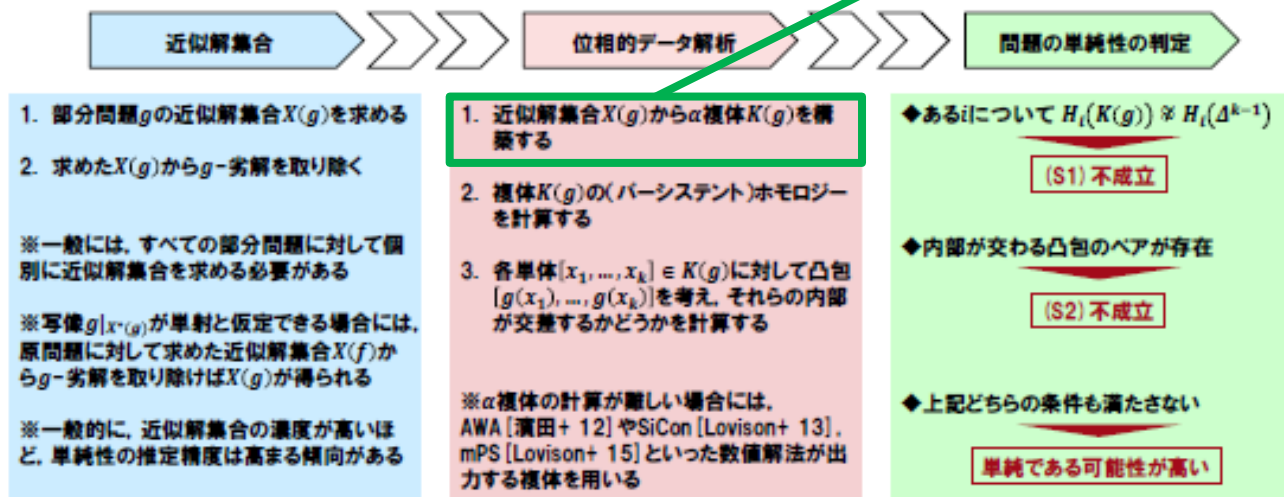
(S1) g が k 目的問題ならば $X^*(g) \approx \Delta^{k-1}$,

(S2) g の $X^*(g)$ への制限は埋め込み.

ブラックボックス問題の単純性の推定法

推定手順

本研究のテーマ



1. 背景 1 : なぜ『単純な問題』を考えるのか？

- パレート解を網羅的に求めるには、その形を把握することが重要
- パレート解集合の形は滑層分割すると把握できる
- 単純な問題を解けば滑層分割が求められる

2. 背景 2 : 問題の単純性の推定

- 実問題が単純かどうか知るには推定が必要
- 推定には位相的データ解析を使う
- 解析で使うRips複体の直径をどう決めるかが課題

3. 本研究の貢献

- パーシステント図を用いたRips複体の直径決定法の提案
- 検証実験
- 考察

1. 背景 1 : なぜ『単純な問題』を考えるのか？

- パレート解を網羅的に求めるには、その形を把握することが重要
- パレート解集合の形は滑層分割すると把握できる
- 単純な問題を解けば滑層分割が求められる

2. 背景 2 : 問題の単純性の推定

- 実問題が単純かどうか知るには推定が必要
- 推定には位相的データ解析を使う
- 解析で使うRips複体の直径をどう決めるかが課題

3. 本研究の貢献

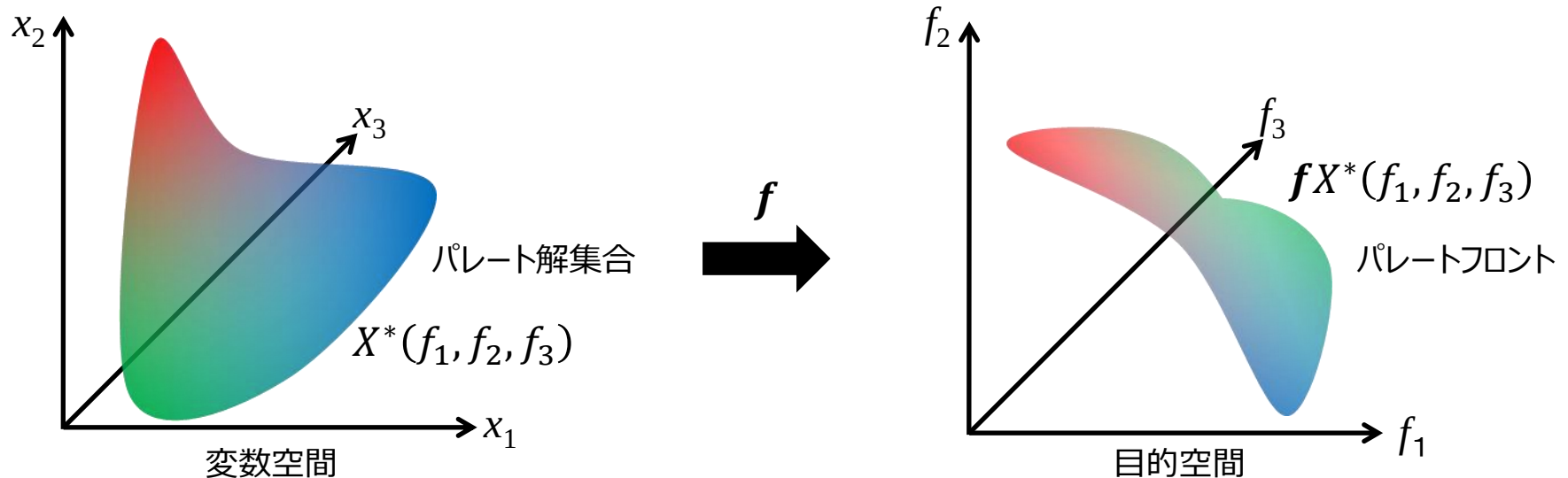
- パーシステント図を用いたRips複体の直径決定法の提案
- 検証実験
- 考察

■ 多目的最適化問題

■ $\underset{x \in X \subseteq \mathbb{R}^n}{\text{minimize}} \underbrace{f(x)}_{\text{評価関数}} := \underbrace{(f_1(x), \dots, f_m(x))}_{\text{目的関数}}$

■ 表記法：目的関数の集合 $\underbrace{f = \{f_1, \dots, f_m\}}_{\text{原問題}} \supseteq \underbrace{g \supseteq h}_{\text{部分問題}}$ について,

- **g -パレート優越**: $x \prec_g y \stackrel{\text{def}}{\iff} \forall f_i \in g, f_i(x) \leq f_i(y) \text{ and } \exists f_j \in g, f_j(x) < f_j(y)$
- **g -パレート解集合**: $X^*(g) := \{x \in X \mid \forall y \in X, y \not\prec_g x\}$
- **g -パレートのフロント**: $gX^*(g) := \{g(x) \in \mathbb{R}^{|g|} \mid x \in X^*(g)\}$
- **g -パレートのフロントの h -面**: $gX^*(h) := \{g(x) \in \mathbb{R}^{|g|} \mid x \in X^*(h)\}$

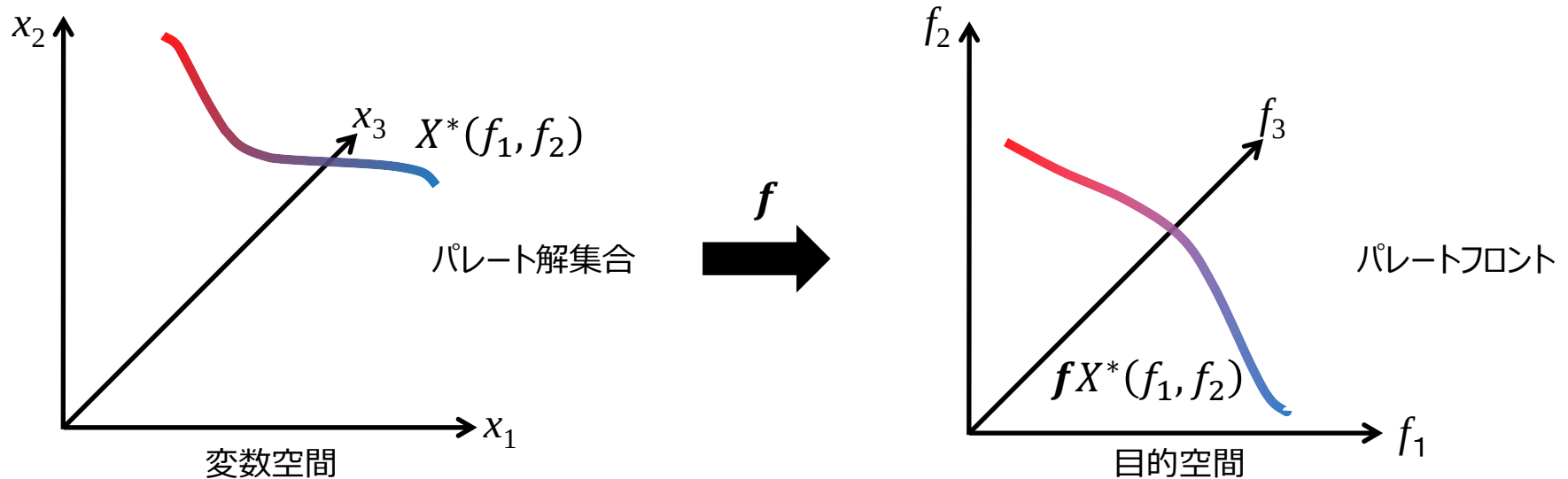


■ 多目的最適化問題

■ $\underset{x \in X \subseteq \mathbb{R}^n}{\text{minimize}} \underbrace{f(x)}_{\text{評価関数}} := \underbrace{(f_1(x), \dots, f_m(x))}_{\text{目的関数}}$

■ 表記法：目的関数の集合 $\underbrace{f = \{f_1, \dots, f_m\}}_{\text{原問題}} \supseteq \underbrace{g \supseteq h}_{\text{部分問題}}$ について,

- **g -パレート優越**: $x \prec_g y \stackrel{\text{def}}{\iff} \forall f_i \in g, f_i(x) \leq f_i(y) \text{ and } \exists f_j \in g, f_j(x) < f_j(y)$
- **g -パレート解集合**: $X^*(g) := \{x \in X \mid \forall y \in X, y \not\prec_g x\}$
- **g -パレートのフロント**: $gX^*(g) := \{g(x) \in \mathbb{R}^{|g|} \mid x \in X^*(g)\}$
- **g -パレートのフロントの h -面**: $gX^*(h) := \{g(x) \in \mathbb{R}^{|g|} \mid x \in X^*(h)\}$



■ 多目的最適化問題

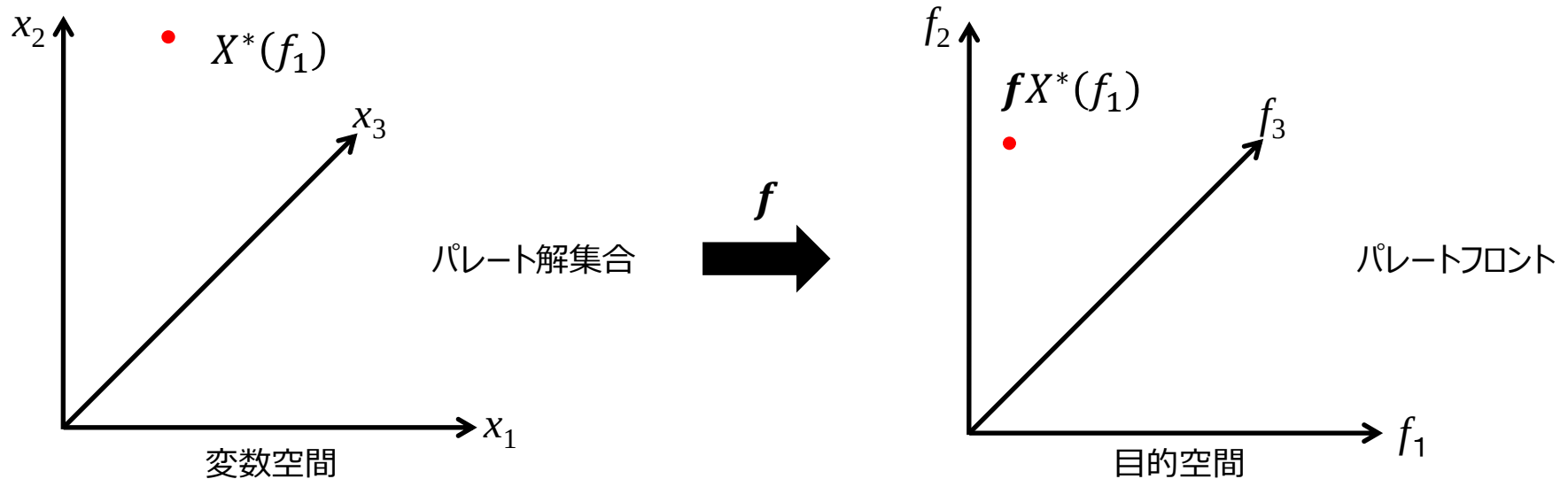
■ $\underset{x \in X \subseteq \mathbb{R}^n}{\text{minimize}} \underline{f(x)} := (\underline{f_1(x)}, \dots, \underline{f_m(x)})$

評価関数 目的関数

■ 表記法：目的関数の集合 $\underline{f} = \{f_1, \dots, f_m\} \supseteq \underline{g} \supseteq \underline{h}$ について,

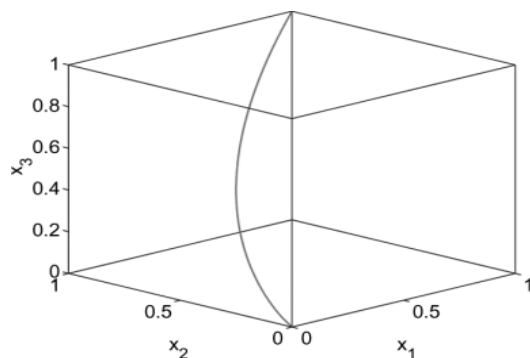
原問題 部分問題

- **g -パレート優越**: $x \prec_g y \stackrel{\text{def}}{\iff} \forall f_i \in g, f_i(x) \leq f_i(y) \text{ and } \exists f_j \in g, f_j(x) < f_j(y)$
- **g -パレート解集合**: $X^*(g) := \{x \in X \mid \forall y \in X, y \not\prec_g x\}$
- **g -パレートのフロント**: $gX^*(g) := \{g(x) \in \mathbb{R}^{|g|} \mid x \in X^*(g)\}$
- **g -パレートのフロントの h -面**: $gX^*(h) := \{g(x) \in \mathbb{R}^{|g|} \mid x \in X^*(h)\}$

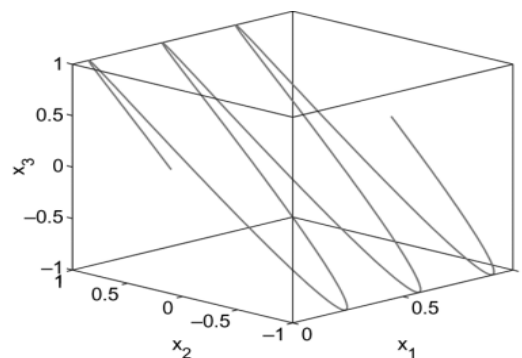


パレート解集合を網羅的に求めるには？

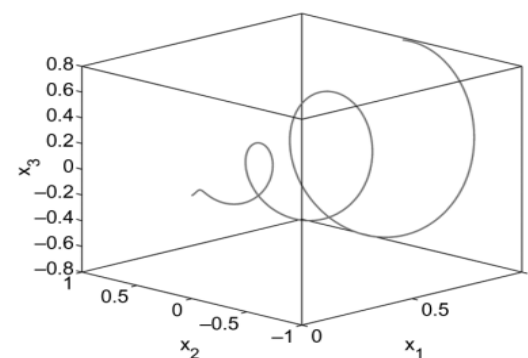
非線形計画問題のパレート解集合の形状は様々



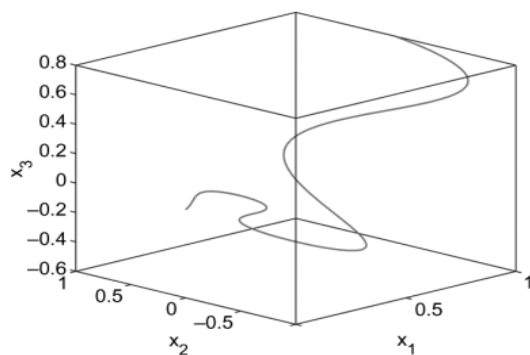
F1, F7, F8 ($n = 10$)



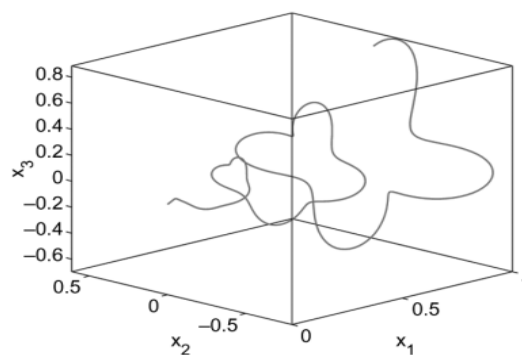
F2, F8 ($n = 30$)



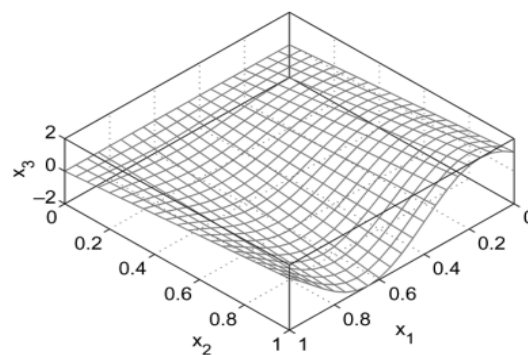
F3 ($n = 30$)



F4 ($n = 30$)



F5 ($n = 30$)



F6 ($n = 10$)

[Li 2010]

様々なパレート解集合に共通する普遍的な構造を知る必要がある

凸計画問題の解は『歪んだ単体』

■ Alberto Lovison(伊・パドヴァ大)

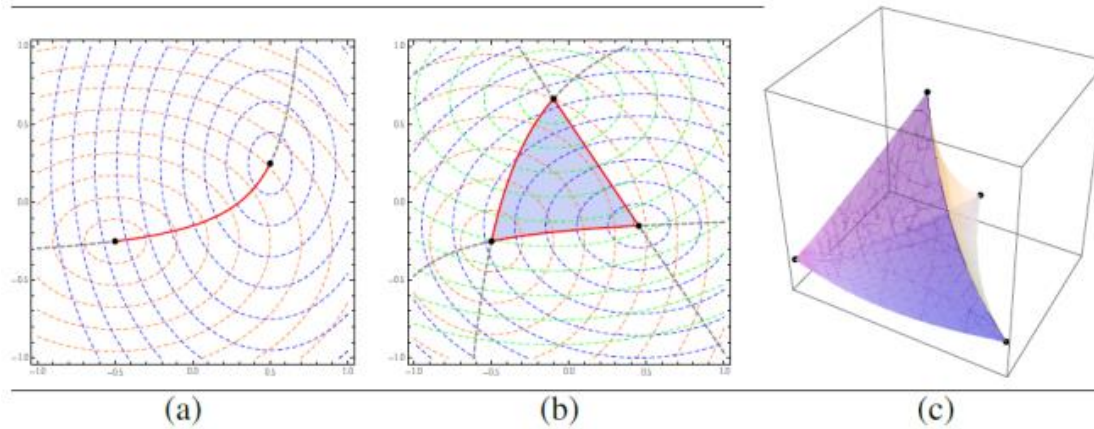


■ 旧所属：ESTECO Research Labs

■ 多目的設計最適化ツールmodeFRONTIERの開発元



■ Operations Researchに大域解析を導入 [Lovison 2014]

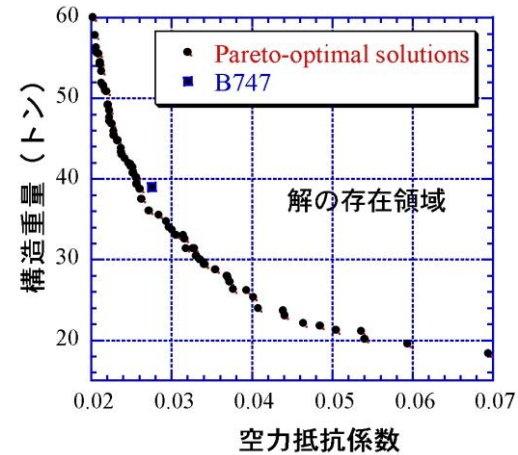


PROPOSITION 2 (Hierarchical decomposition in the convex case). *Let $W \subseteq \mathbb{R}^n$ open and convex. Let $f_i : W \rightarrow \mathbb{R}$, $i = 1, \dots, m$, $m \leq n$, be smooth and convex functions. Then the Pareto set is a curved $m - 1$ simplex, i.e., is diffeomorphic to an $m - 1$ dimensional simplex, i.e., 凸計画問題のパレート解集合は $m-1$ 次元単体と微分同相 the vertices of the curved $m - 1$ simplex coincide with one of the optima of the m functions taken separately. Every $k - 1$ facet of the curved simplex corresponds to the Pareto optimal set of the MO problem defined by a subset of k functions in $\{f_1, \dots, f_m\}$.*

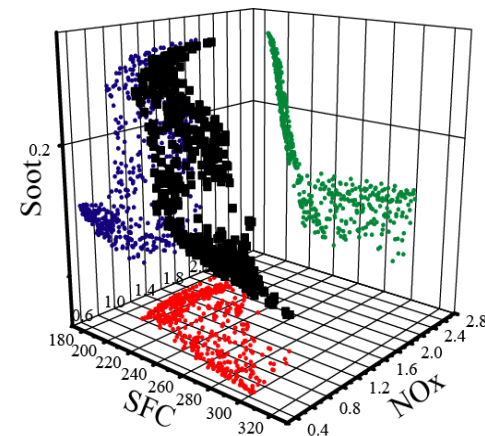
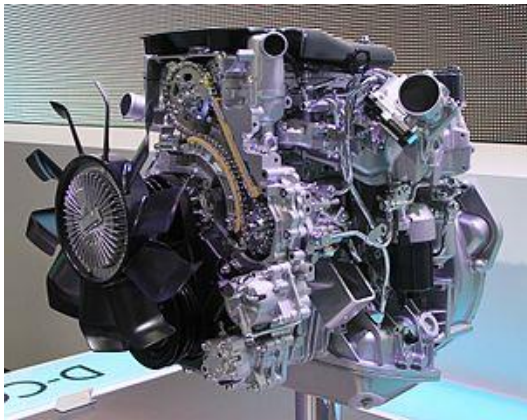
その $k-1$ 次元面は k 目的部分問題のパレート解集合

多くの実問題は実際にそのような解をもつ

工業製品設計において、単体と同相なパレート解集合/フロントが頻出



[大山 2004]



[渡邊 2005]

※ほか22事例中18例で確認 (Optimus適用事例[サイバネット 2014] 2014年8月16日 濱田調べ)

非凸計画の解も『歪んだ単体』に分割できそう

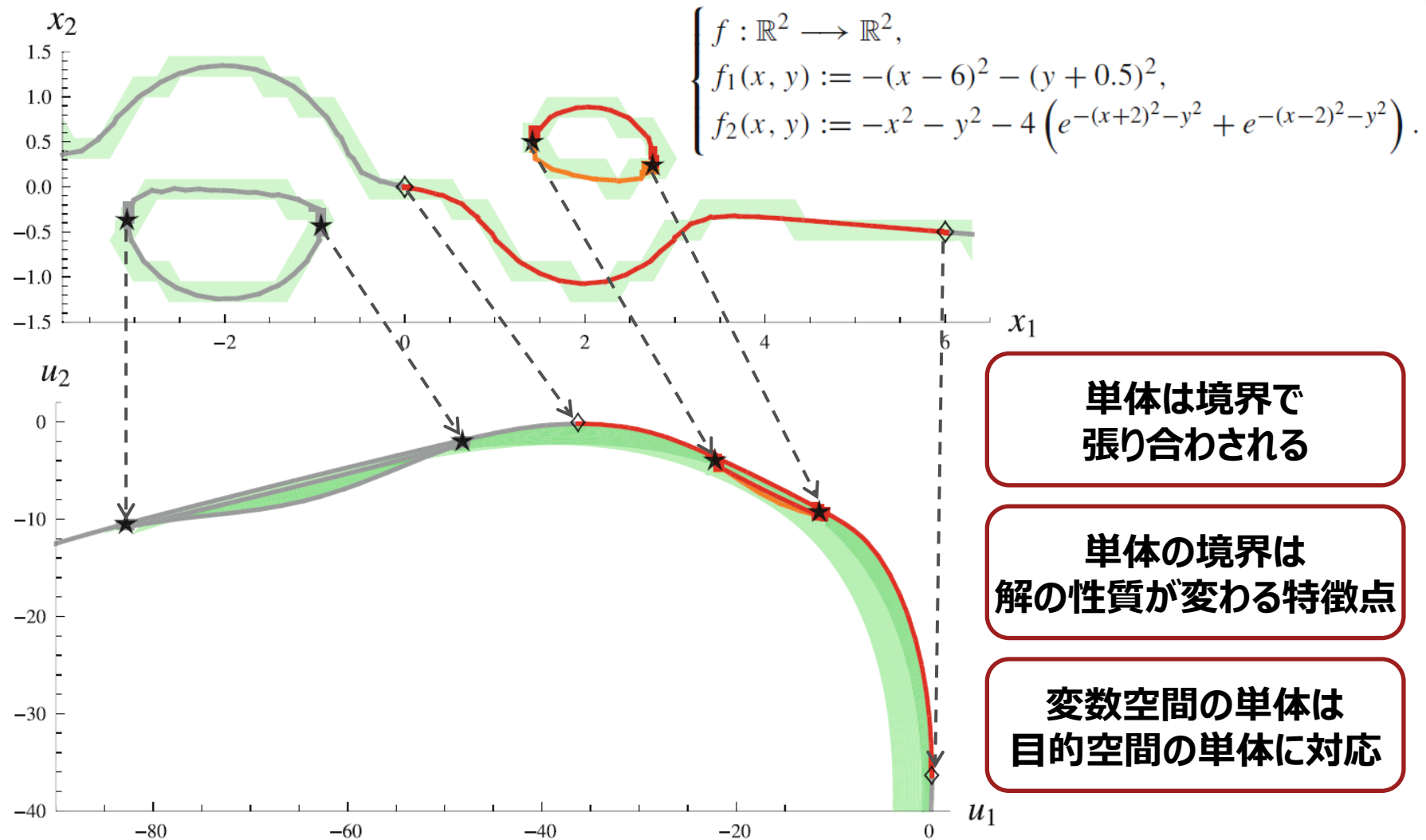


Fig. 1 Upper panel Singular set Σ (gray, orange and red curves), critical set θ (orange and red) and stable critical set θ_s (red) for the function in example 1. Lower panel Image of the function f with the images of the relevant sets Σ , θ and θ_s highlighted. (Color figure online)

[Lovison 2013]

どんな問題の解でも分割可能？

典型的な問題では可能. 不可能な問題も摂動すれば可能な問題に変わる

定理 2 (解の滑層分割可能性¹³⁾) 十分に正則な $f \in C^\mu(M, N)$ の局所プレート解集合は Whitney C^μ 滑層分割可能である. ■

定理 3 (典型性¹³⁾) 十分に正則な写像は $C^\mu(M, N)$ の残留集合, したがって稠密開集合をなす. ■

定理 4 (三角形分割可能性⁹⁾) Whitney滑層分割可能な空間は三角形分割可能である. ■

[濱田 2016]

三角形分割をどう求める？ ➡ 解が『歪んだ単体』となる問題を解けばいい

■ 1950年代：経済学への応用

※詳しくは，[濱田 2015] 1章を参照

- アクティビティ分析を多目的線形計画問題として定式化，解の可縮性を議論

■ 1970年代：大域解析の適用

- 微分トポロジーにより，純粹交換経済の大域的構造を議論

■ 1970-80年代：ORへの波及

- 経済学における成果を一般の凸計画問題などに拡張

■ 1990年代：冬の時代

- 経済学とORにおいてトポロジーの研究が下火に

■ 2000年代：計算機の発達，応用での実証例

- 多目的最適化の産業応用が進み，上記の理論を裏付ける報告が多数

■ 2010年代：雪解け

- ORで初の大域解析の応用，EMOで初のTDAの応用が登場

あまり知られていないが・・・

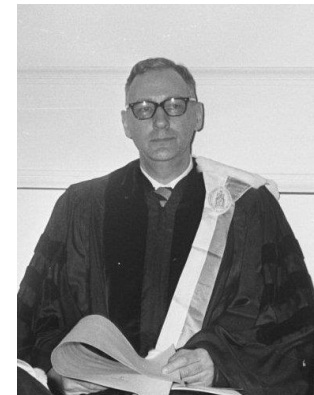
多目的最適化のトポロジー研究には，半世紀を超える歴史がある

■ Tjalling C. Koopmans (1910-1985)

- 資源の最適配分を多目的線形計画問題として扱うことを提唱
- この業績でノーベル経済学賞を受賞(1975)

■ 上記研究で解の可縮性を議論 [Koopmans 1951]

- 証明はスケッチのみだが、のちに別人が厳密化



a nonprimary commodity, expressing that circumstance. The following statement is strongly suggested by our discussion and is believed to be valid.

ASSERTION 4.14: *Whenever the technology matrix A satisfying Postulate B of Section 3 restricts one commodity, “1” say, to nonnegative net outputs but permits positive outputs of it,*

$$(4.52) \quad y = Ax, \quad x \geq 0 \text{ implies } y_1 \geq 0 \text{ and permits } y_1 > 0,$$

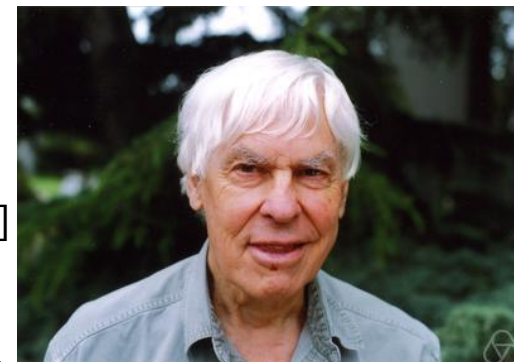
the efficient point set with the origin $y = 0$ deleted is contractible within itself to a point. 原点を除いたパレートフロントは（連続写像で）1点に縮められる

■ Stephen Smale (1930-)

- 高次元Poincare予想解決でフィールズ賞受賞(1966)

■ 純粋交換経済の大域解析 [Smale 1973, 1974a-d, 1976]

- 上記で駆使したモース理論をベクトル値に拡張
- 非凸計画問題のパレート臨界点集合の滑層分割を議論 (stratification)



[Smale 1973]

PROPOSITION Suppose $u: W \rightarrow R^m$ satisfies the rank assumption, jet transversality, and transversality condition A_1 . Then (if not empty!) the critical Pareto set θ is an $(m - 1)$ -dimensional manifold with corners in the sense of Cerf (thesis) or stratified set in the sense of Thom [7]. Thus θ has the structure of an $(m - 1)$ -dimensional manifold θ_i together with its boundary $\partial\theta = \theta - \theta_i$. The boundary is a union of submanifolds of dimension $< m - 1$.

パレート臨界点集合は角付き $m-1$ 次元多様体、
言い換えれば、滑層分割集合となる。

1970-80年代：ORへの波及

- 一般的な凸計画問題などのトポロジーが考察対象に
 - Koopmans流のアプローチを発展
 - パレート解集合/フロントの閉性, 連結性, 可縮性を議論
- Dinh The Luc (1952-)が成果を教科書にまとめる



[Luc 1989]

Chapter 6

Structure of Optimal Solution Sets

線形, 凸, 準凸計画問題の
パレート解集合/フロントの閉性, 連結性, 可縮性

In mathematical programming if an optimization problem has an optimal solution, then the optimal value of the problem is a unique point in the field of real numbers. Due to this fact, the set of optimal solutions has rather simple structure whenever the data of the problem are convex or linear. For instance, the optimal solution set of a linear problem is a polyhedron, the optimal solution set of a convex problem is convex if of course it is nonempty. Such a nice structure of solution sets is no longer true for vector problems. However, some properties which are important in application such as closedness, connectedness or contractibility of these sets are still in hand if the data satisfy certain assumptions. This chapter is devoted to the study of the properties mentioned above of efficient point sets for linear, convex and quasiconvex vector problems.

Lecture Notes in Economics and Mathematical Systems 319
Series Editors: Günter Fandel · Walter Trockel · Herbert Dawid
Dinko Dimitrov · Anke Gerber · Claus-Jochen Haake · Christian
Hofmann · Thomas Pfeiffer · Roman Slowinski · W. Henk M. Zijm

Dinh The Luc Editor

Theory of Vector Optimization

■ 経済学とORにおいてトポロジーの研究が下火に

■ Koopmans流のアプローチは…

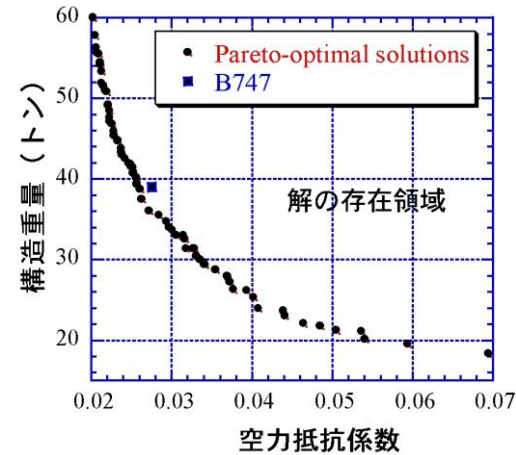
- 凸計画までの範囲では、それほど興味深い位相構造は生じなかった
 - 問題が凸ならばパレート解集合が閉・連結・可縮なのは直感通り
 - それを超えるような意外な結果や有用な結果は得られなかった
- 凸で培われた結果や解析技術は、より広いクラスには拡張が難しかった
 - わずかな拡張のために問題クラスがどんどん複雑化していった
 - 辞書式準凸, 弧状錐準凸, etc.
- そのため、やることがなくなったと思われた

■ Smale流のアプローチは…

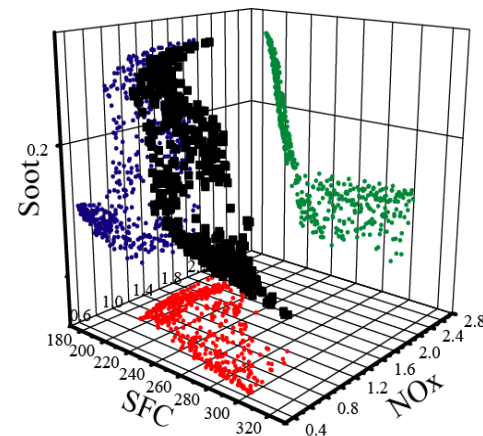
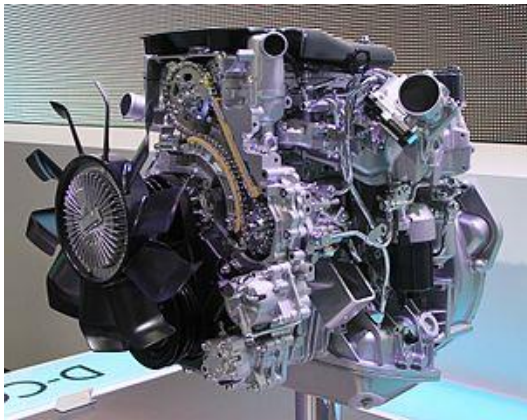
- 非凸計画への有望なアプローチだったにもかかわらず、イマイチ流行らなかった
 - 難解なためフォロワーが生まれにくかった？
- 計算機性能が追い付かなかった
 - 当時は凸計画問題のパレート解を1点求めるだけでもやつのこと
 - 現代のようなパレート解の網羅的探索は考えられなかった
 - そのため、解の大域的性質がわかったところで実用性がなかった

2000年代：計算機の発達，応用での実証例

工業製品設計において，単体と同相なパレート解集合/フロントが頻出



[大山 2004]



[渡邊 2005]

※ほか22事例中18例で確認 (Optimus適用事例[サイバネット 2014] 2014年8月16日 濱田調べ)

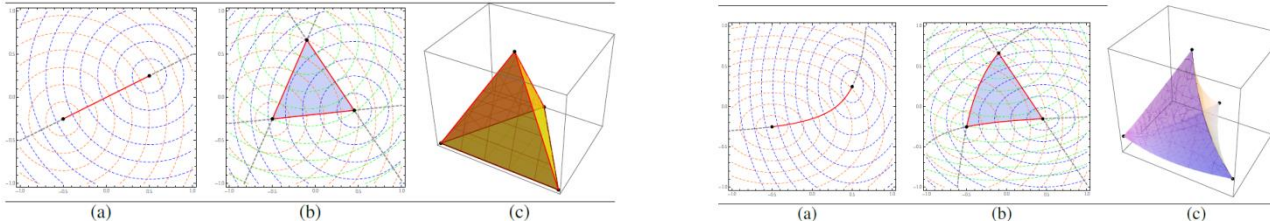
2014年：ORで初の大域解析の応用

■ Alberto Lovison

- 旧所属：ESTECO Research Labs
- 多目的設計最適化ツールmodeFRONTIERの開発元



■ ORにSmale流アプローチを導入 [Lovison 2014]



PROPOSITION 2 (Hierarchical decomposition in the convex case). *Let $W \subseteq \mathbb{R}^n$ open and convex. Let $f_i : W \rightarrow \mathbb{R}$, $i = 1, \dots, m$, $m \leq n$, be smooth and convex functions. Then the Pareto set is a curved $m - 1$ simplex, i.e., is diffeomorphic to an $m - 1$ dimensional simplex, i.e., 凸計画問題のパレート解集合は $m-1$ 次元単体と微分同相 the vertices of the curved $m - 1$ simplex coincide with one of the optima of the m functions taken separately. Every $k - 1$ facet of the curved simplex corresponds to the Pareto optimal set of the MO problem defined by a subset of k functions in $\{f_1, \dots, f_m\}$.*

その $k-1$ 次元面は k 目的部分問題のパレート解集合 i.e. the Pareto set is exactly an $m - 1$ simplex, i.e., the facets are flat.

Hierarchical decomposition in the convex case. This proposition is presented and discussed graphically in [34]. An alternative proof follows straightforwardly from the characterization of the Pareto set in terms of first and second order derivatives by Smale [36] (see also [19, 20, 37, 41, 42]). □

THEOREM 31. *Let $\mu > \min(n, m) + 2$. Then the set of local Pareto optima for a sufficiently regular function $f : W \rightarrow \mathbb{R}^m$ admits a Whitney stratification.*

PROPOSITION 32. *Let $\mu > \min(n, m) + 2$. The set of sufficiently regular functions is residual in $C^\mu(M, \mathbb{R}^m)$ i.e., is a countable intersection of dense sets in the Whitney C^μ topology. Furthermore, being $C^\mu(W, \mathbb{R}^m)$ endowed with the Whitney C^μ topology a Baire space, any residual set is also dense.*

Therefore, for a dense class of smooth functions in any reasonable topology, the Pareto set is a Whitney stratified set. This justifies the fact that one can expect that typically the Pareto set is composed by branches of $m - 1$ dimensional manifolds with boundaries and corners, and if this is not the case, an arbitrarily small perturbation of the objective functions will bring back the situation to the expected case.

パレート解集合は典型的には、Whitney滑層分割集合となる。
そうになっていない場合には、目的関数をわずかに摂動すればそうできる。

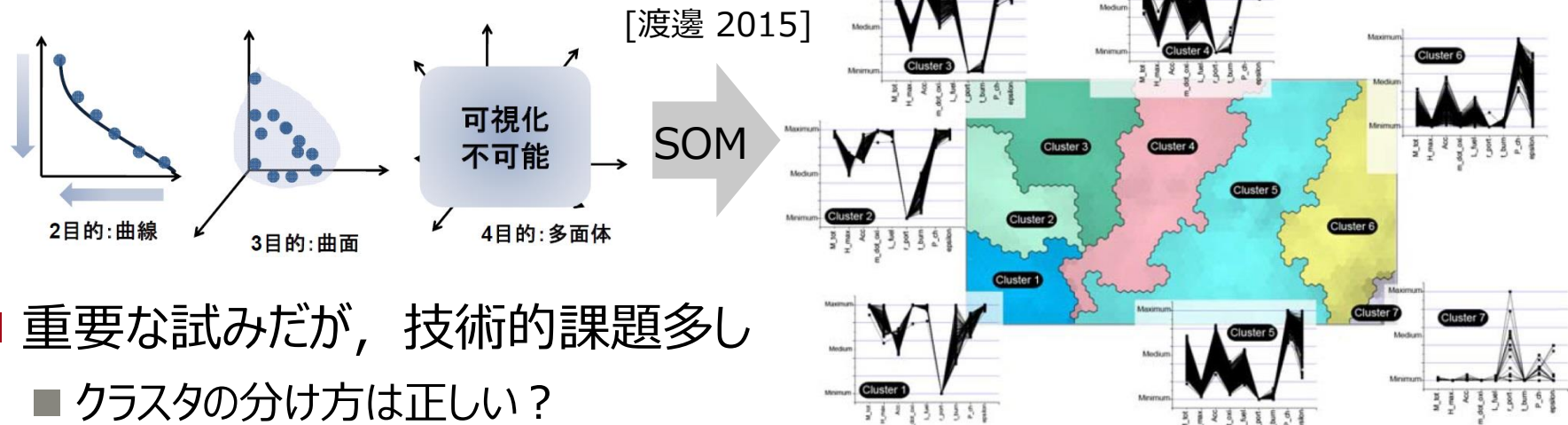
Moreover, the stratification of the Pareto set can be described by polynomial inequalities, derivable from necessary and sufficient algebraic conditions for Pareto optimality. Hence it is important to find a more workable expression of Kuo-conditions. In the Appendix we propose a reformulation to approach the polynomial conditions for v-sufficiency in a more practical way.

パレート解集合の滑層分割は多項不等式で表せる。
その式はパレート最適性の代数的な必要十分条件から得られる。

なぜ滑層分割が大事か？

■ 多目的設計探査 [Obayashi 2005] ⇨ 設計情報学 [Chiba 2009]

- 多目的進化計算で求めた近似解集合からデータマイニングで設計情報を抽出



■ 重要な試みだが，技術的課題多し

- クラスタの分け方は正しい？

- 分類結果がアルゴリズム依存で，設計空間の本質的な情報を抽出できたと言える？

- 多数目的でもうまくいく？

- 目的数が多いほど2次元への射影による情報損失が大きくなるのでは？

■ 滑層分割を使えば，これらの課題を一挙に解決できる！！

- 滑層分割は設計空間の内在的構造のみで決まり，外的要因に左右されない
- 各滑層の代表点とその隣接関係を可視化すれば，多数目的でも情報を損なわない

実問題の滑層分割は計算できるか？

■ 設計問題では，厳密計算はできないことが多い

■ 計算量

- 設計問題は多数の設計変数と目的関数を含む
- 代数的解法の計算量は，設計変数や目的関数の数に対して急増する

■ ブラックボックス関数の存在

- シミュレーションを含む問題では，目的関数や制約関数が代数方程式で与えられない

■ そこでTDAの出番だ！

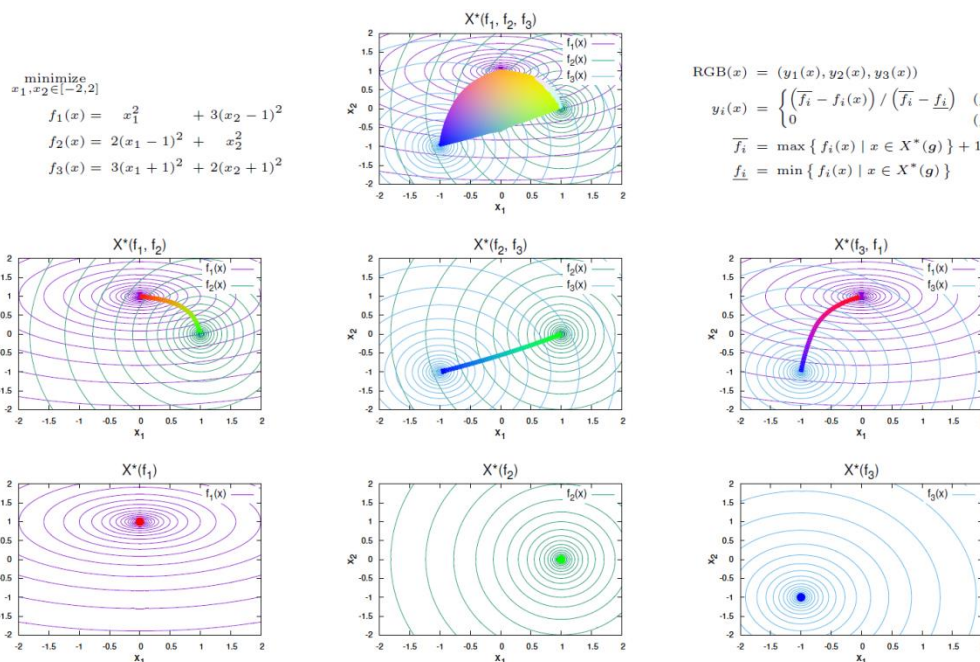
- TDAなら，進化計算などで求めた近似解集合から滑層分割を推定可能！
- それに向けた第1ステップを進化計算シンポジウム2015で発表 [濱田 2015]

2015年：EMOで初のTDAの応用

定義 1 (単純な問題) 問題 f が単純^{def} 全ての部分問題 $g \subseteq f$ について：

(S1) g が k 目的問題ならば $X^*(g) \approx \Delta^{k-1}$,

(S2) g の $X^*(g)$ への制限は埋め込み.



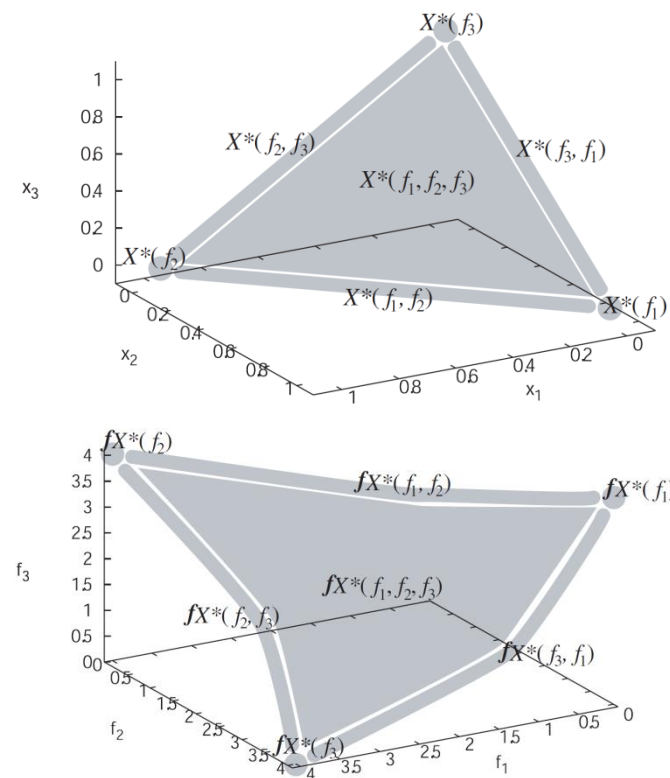
定理 15 単純な問題 f とその部分問題 g を考える.

$$\partial X^*(g) = \bigcup_{h \subseteq g} \text{int } X^*(h), \quad (6)$$

$$\partial f X^*(g) = \bigcup_{h \subseteq g} \text{int } f X^*(h). \quad (7)$$

$$f \partial X^*(g) = \partial f X^*(g), \quad (4)$$

$$f \text{int } X^*(g) = \text{int } f X^*(g). \quad (5)$$

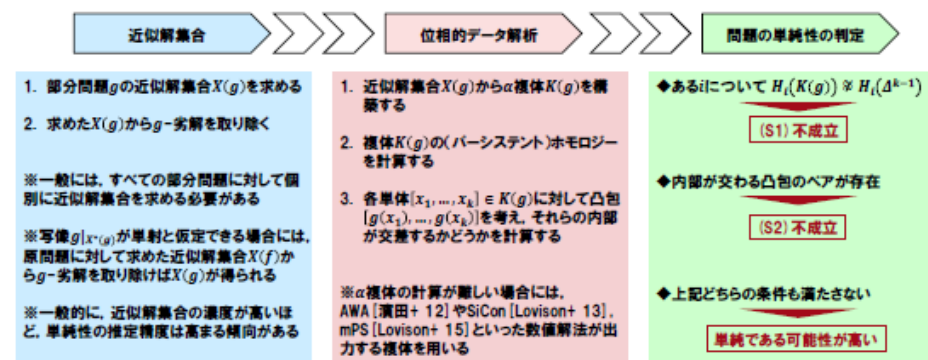


進化計算シンポジウム [濱田 2015]

- 単純な問題の解構造の証明
- ブラックボックス問題の単純性の推定法の提案 **TDA**
- ベンチマーク問題ZDT, DTLZ, WFGの単純性の解析

ブラックボックス問題の単純性の推定法

推定手順



非単純性の検出

定理 16 $|K(g)| \approx X^*(g)$ とする。下記のいずれかの条件が満たされれば、 g は (S1) を満たさない。したがって、 g は単純ではない。

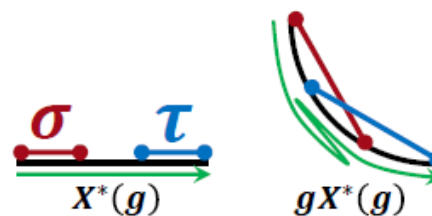
- $H_0(K(g)) \not\cong \mathbb{Z}$
- $\exists i \neq 0 : H_i(K(g)) \neq 0$

	$K(g)$ の例	Δ^{k-1}
位相空間		
	[Edelsbrunner + 10]	
H_0	$\mathbb{Z}$	$\mathbb{Z}$
H_1	$\mathbb{Z}$	$\neq 0$
H_2	0	0

定理 17 K が $K(g)$ の細分であるとする。ある $\sigma \neq \tau \in K(g)$ について $\sigma = [x_1, \dots, x_k], \tau = [y_1, \dots, y_l]$ において、連立 1 次不等式

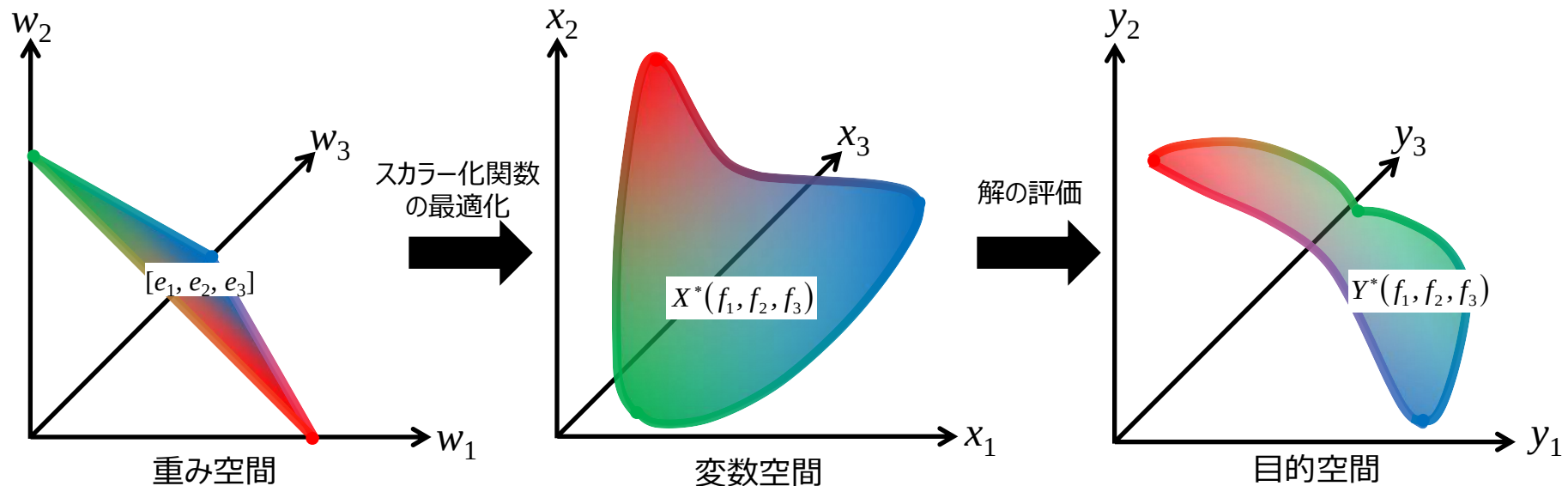
$$\begin{cases} \sum_{i=1}^k a_i g(x_i) = \sum_{j=1}^l b_j g(y_j), \\ \sum_{i=1}^k a_i = \sum_{j=1}^l b_j = 1, \\ a_i, b_j > 0 \end{cases}$$

が解をもてば、 g は (S2) を満たさない。したがって、 g は単純ではない。

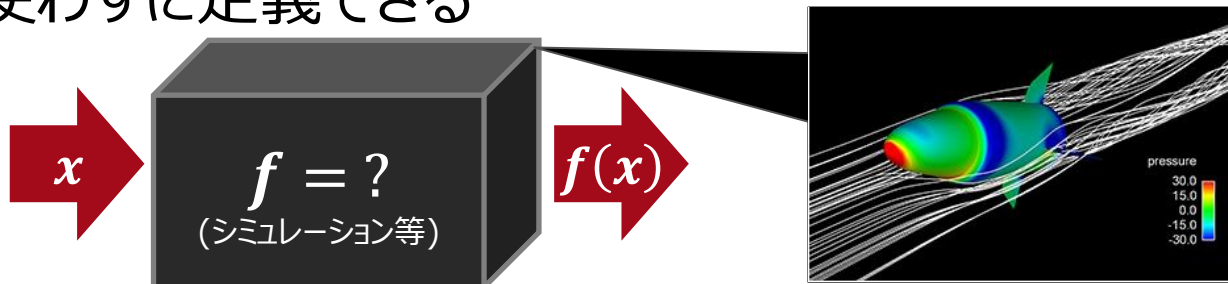


三角形分割の基本部品となる問題の要件

1. パレート解集合が単体と同相
2. パレートフロントも単体と同相
3. 単体の面に相当する滑層が容易に特定できる



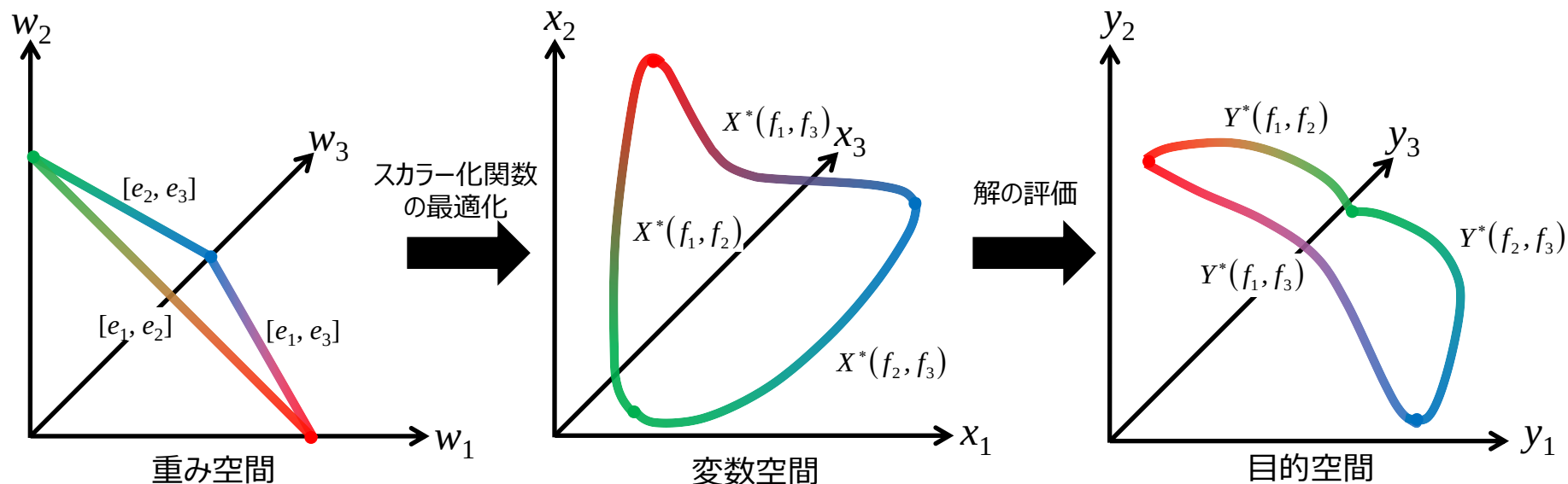
4. 数式を使わずに定義できる



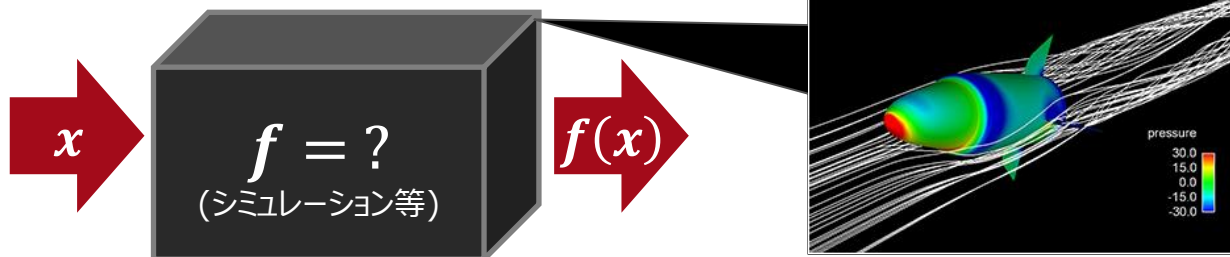
[JAXA 2007]

三角形分割の基本部品となる問題の要件

1. パレート解集合が単体と同相
2. パレートフロントも単体と同相
3. 単体の面に相当する滑層が容易に特定できる



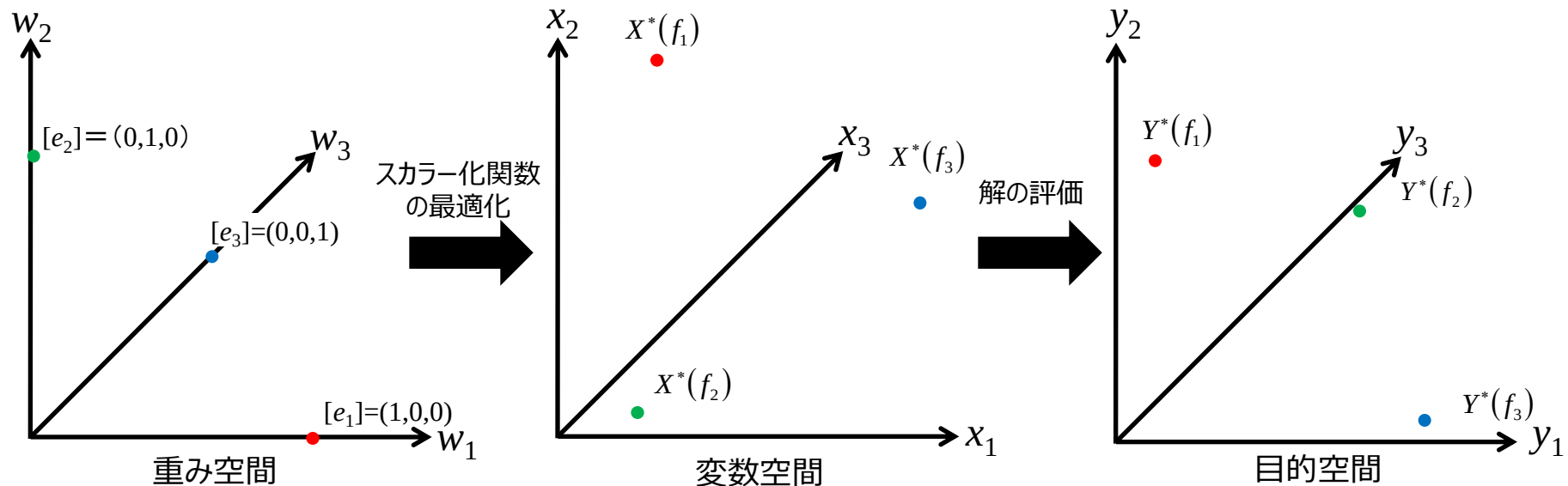
4. 数式を使わずに定義できる



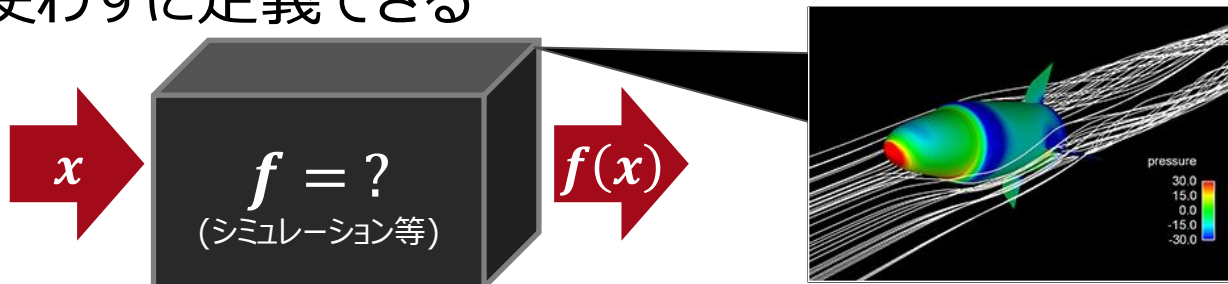
[JAXA 2007]

三角形分割の基本部品となる問題の要件

1. パレート解集合が単体と同相
2. パレートフロントも単体と同相
3. 単体の面に相当する滑層が容易に特定できる



4. 数式を使わずに定義できる



[JAXA 2007]

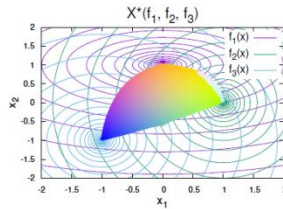
これらの要件を満たす問題…単純な問題 [濱田 2015]

定義 1 (単純な問題) 問題 f が単純^{def} 全ての部分問題 $g \subseteq f$ について:

- (S1) g が k 目的問題ならば $X^*(g) \approx \Delta^{k-1}$, ←要件1
 (S2) g の $X^*(g)$ への制限は埋め込み. ←要件2
- 要件4

minimize
 $x_1, x_2 \in [-2, 2]$

$$\begin{aligned} f_1(x) &= x_1^2 + 3(x_2 - 1)^2 \\ f_2(x) &= 2(x_1 - 1)^2 + x_2^2 \\ f_3(x) &= 3(x_1 + 1)^2 + 2(x_2 + 1)^2 \end{aligned}$$

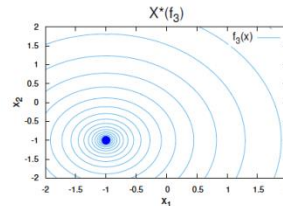
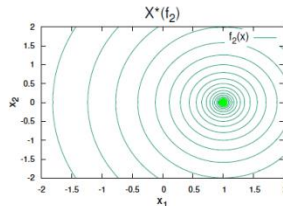
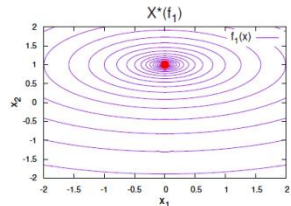
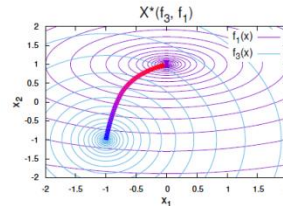
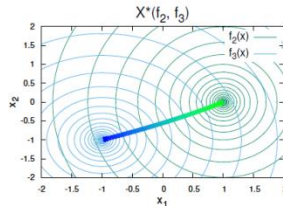
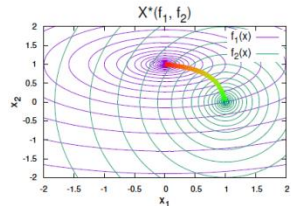


$$RGB(x) = (y_1(x), y_2(x), y_3(x))$$

$$y_i(x) = \begin{cases} (\bar{f}_i - f_i(x)) / (\bar{f}_i - \underline{f}_i) & (f_i \in g) \\ 0 & (f_i \notin g) \end{cases}$$

$$\bar{f}_i = \max \{ f_i(x) \mid x \in X^*(g) \} + 1e-16$$

$$\underline{f}_i = \min \{ f_i(x) \mid x \in X^*(g) \}$$



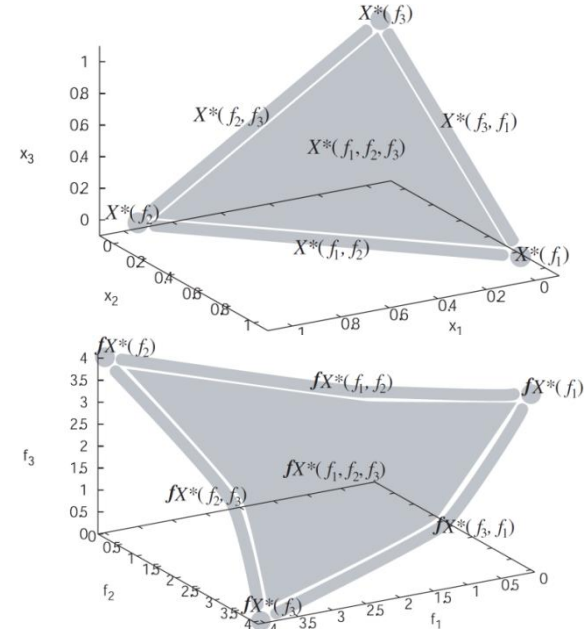
定理 15 単純な問題 f とその部分問題 g を考える.

$$\partial X^*(g) = \bigcup_{h \subset g} \text{int } X^*(h), \quad (6)$$

$$\partial f X^*(g) = \bigcup_{h \subset g} \text{int } f X^*(h) \quad \text{要件3} \quad (7)$$

$$f \partial X^*(g) = \partial f X^*(g), \quad (4)$$

$$f \text{ int } X^*(g) = \text{int } f X^*(g). \quad (5)$$

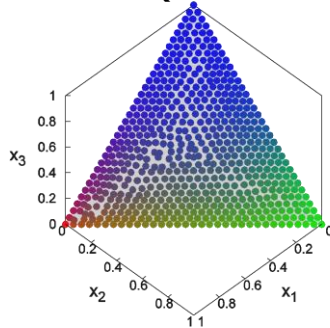


単純な問題の解の滑層分割は，部分問題を解けば得られる

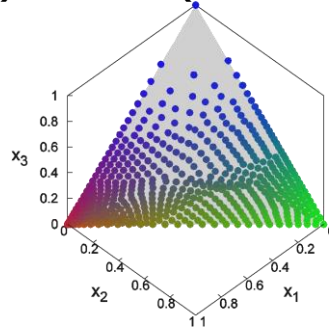
単純な問題の解はAWAで網羅できる [濱田 2012] (※)

変数空間

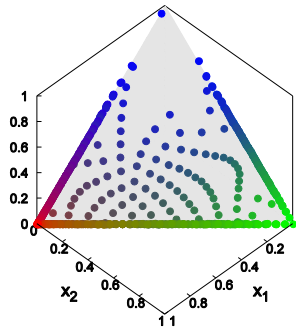
AWA(変数空間)



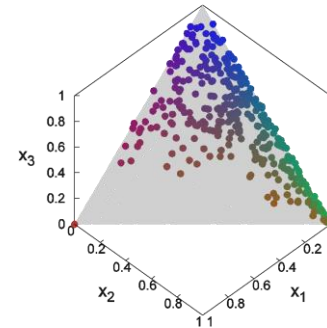
AWA(適応なし)



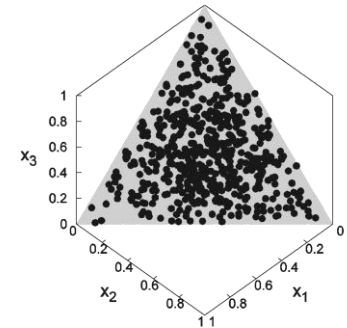
MOEA/D



WSDM



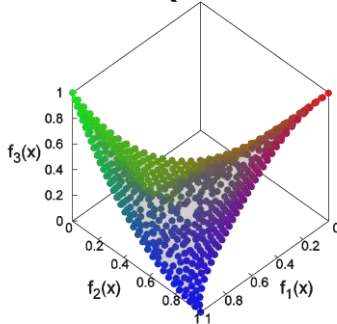
PDM



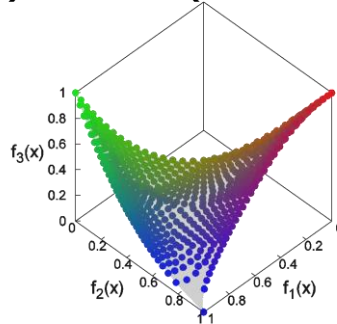
単純な問題MED(40変数3目的)における近似解の分布

目的空間

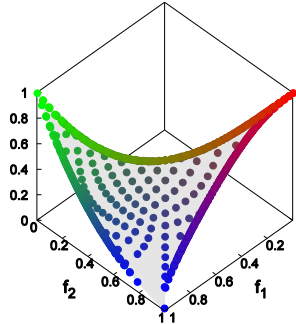
AWA(目的空間)



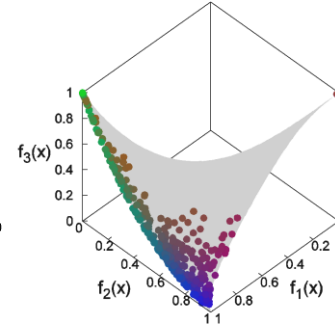
AWA(適応なし)



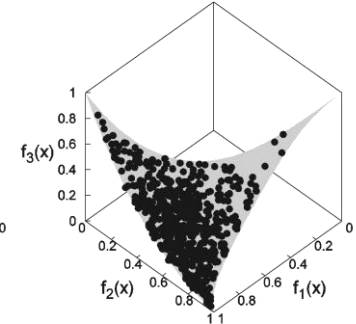
MOEA/D



WSDM



PDM



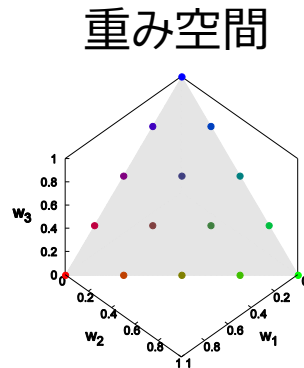
単純な問題MED(40変数3目的)における評価値の分布

AWAの近似解（評価値）はパレート解集合（フロント）全体に分布

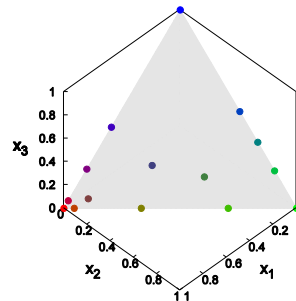
(※) 拡張Chebyshevスカラー化関数の大域最適解を求める必要がある。これは必ずしも可能とは限らない

しかも，少数の点で全体を被覆できる [濱田 2013]

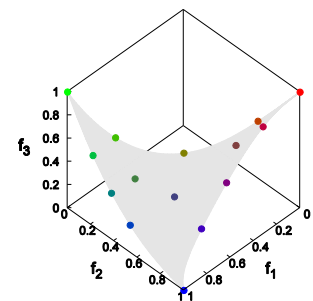
AWA(適応なし)



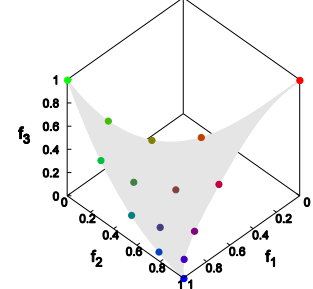
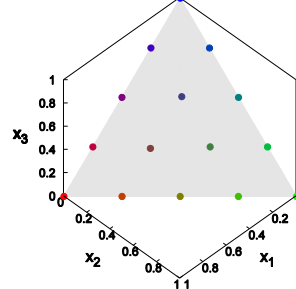
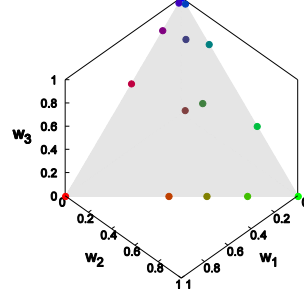
変数空間



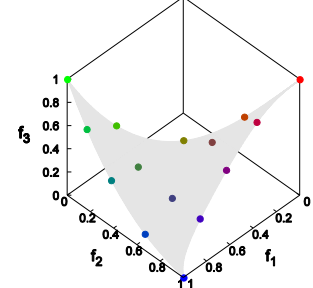
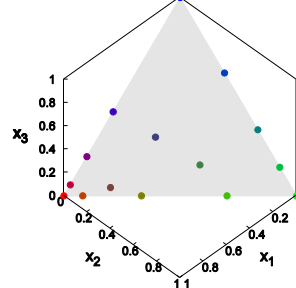
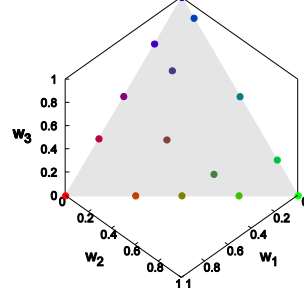
目的空間



AWA(変数空間)



AWA(目的空間)



単純な問題MED(3目的)における重み・解・評価値の分布

わずか15点で3目的の解全体の概形をとらえている

1. 細分

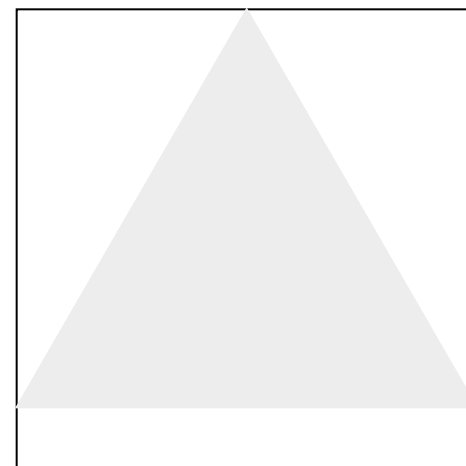
- アドレスを追加
- 追加されたアドレスにガイド点ペアを設定
- ガイド点の重心に重みと解を初期化

2. 再配置

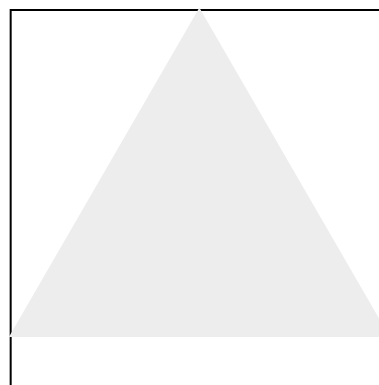
- ステップ1で追加した各アドレスについて,
 - 2.1 重みを用いてスカラー化関数を生成
 - 2.2 解を初期点としてスカラー化関数を最適化
 - 2.3 解の移動距離が小さければ終了
 - 2.4 重みの適応
 - 2.5 ステップ2.1に戻る

3. 終了判定

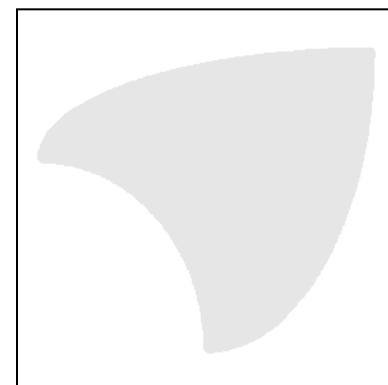
- 反復数の上限に達したら終了
- さもないとステップ1に戻る



アドレス空間



重み空間



変数空間

※図は変数空間での被覆度を向上させる例
設定により目的空間での被覆度向上も可能

Adaptive Weighted Aggregationとは

1. 細分

- アドレスを追加
- 追加されたアドレスにガイド点ペアを設定
- ガイド点の重心に重みと解を初期化

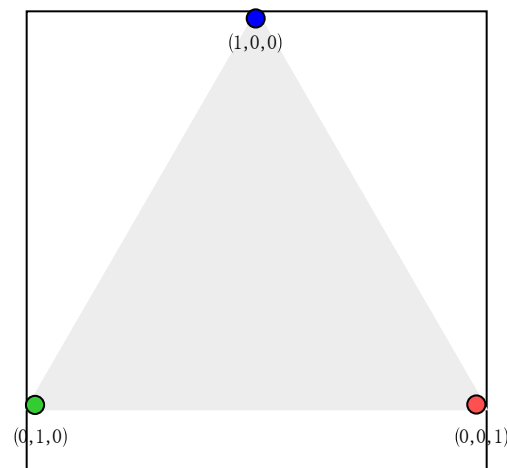
2. 再配置

- ステップ1で追加した各アドレスについて,
 - 2.1 重みを用いてスカラー化関数を生成
 - 2.2 解を初期点としてスカラー化関数を最適化
 - 2.3 解の移動距離が小さければ終了
 - 2.4 重みの適応
 - 2.5 ステップ2.1に戻る

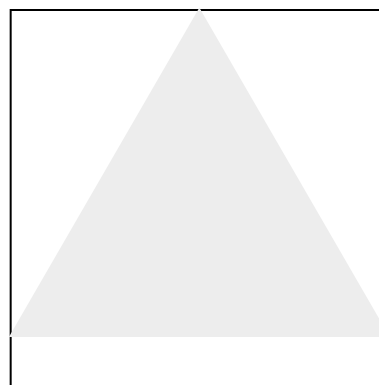
3. 終了判定

- 反復数の上限に達したら終了
- さもなければステップ1に戻る

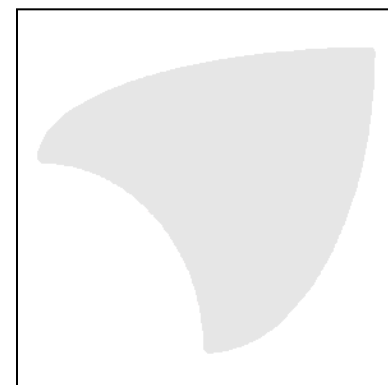
※図は変数空間での被覆度を向上させる例
設定により目的空間での被覆度向上も可能



アドレス空間



重み空間



変数空間

Adaptive Weighted Aggregationとは

1. 細分

- アドレスを追加
- 追加されたアドレスにガイド点ペアを設定
- ガイド点の重心に重みと解を初期化

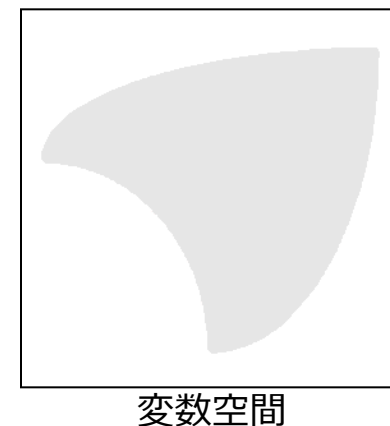
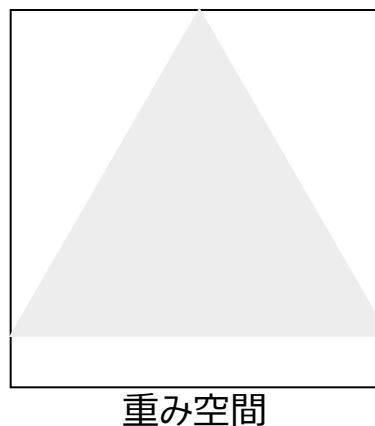
2. 再配置

- ステップ1で追加した各アドレスについて,
 - 2.1 重みを用いてスカラー化関数を生成
 - 2.2 解を初期点としてスカラー化関数を最適化
 - 2.3 解の移動距離が小さければ終了
 - 2.4 重みの適応
 - 2.5 ステップ2.1に戻る

3. 終了判定

- 反復数の上限に達したら終了
- さもないとステップ1に戻る

※図は変数空間での被覆度を向上させる例
設定により目的空間での被覆度向上も可能



Adaptive Weighted Aggregationとは

1. 細分

- アドレスを追加
- 追加されたアドレスにガイド点ペアを設定
- ガイド点の重心に重みと解を初期化

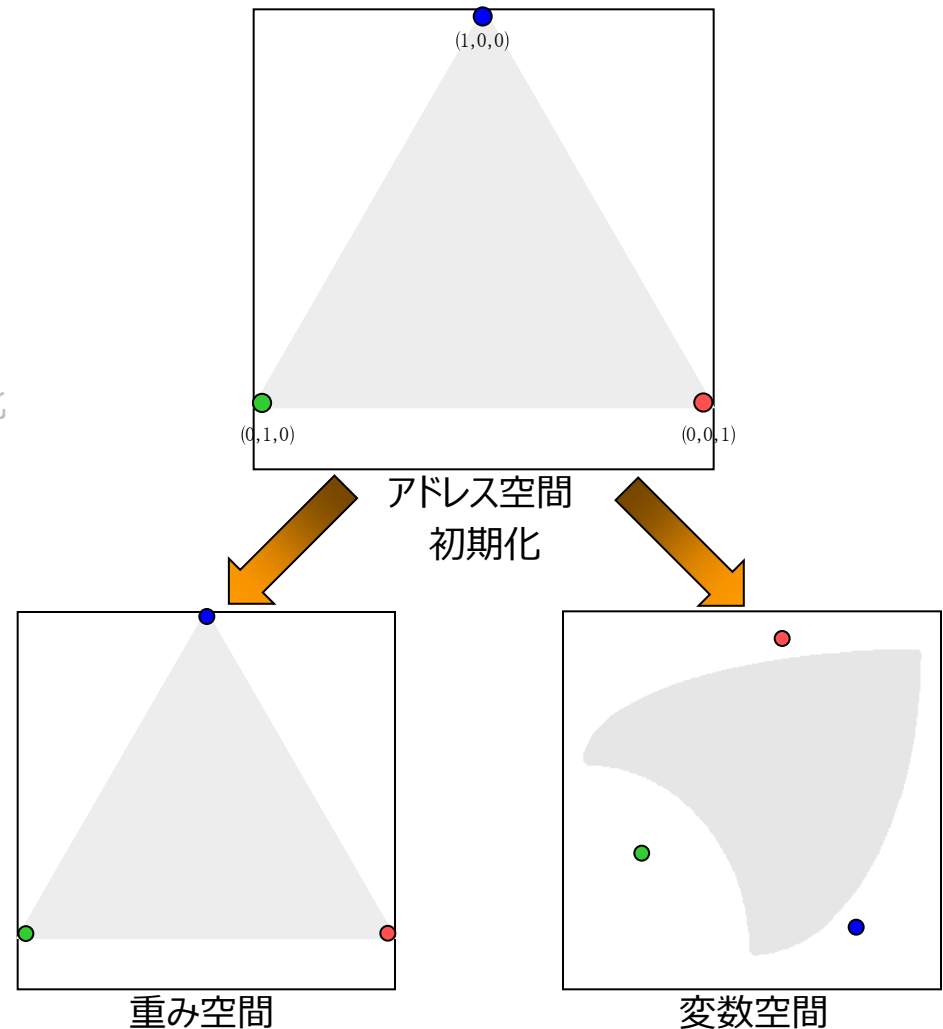
2. 再配置

- ステップ1で追加した各アドレスについて,
 - 2.1 重みを用いてスカラー化関数を生成
 - 2.2 解を初期点としてスカラー化関数を最適化
 - 2.3 解の移動距離が小さければ終了
 - 2.4 重みの適応
 - 2.5 ステップ2.1に戻る

3. 終了判定

- 反復数の上限に達したら終了
- さもなければステップ1に戻る

※図は変数空間での被覆度を向上させる例
設定により目的空間での被覆度向上も可能



1 反復目はガイド点ペアがない
➡ 重みは単体の頂点に、解はランダムに初期化

Adaptive Weighted Aggregationとは

1. 細分

- アドレスを追加
- 追加されたアドレスにガイド点ペアを設定
- ガイド点の重心に重みと解を初期化

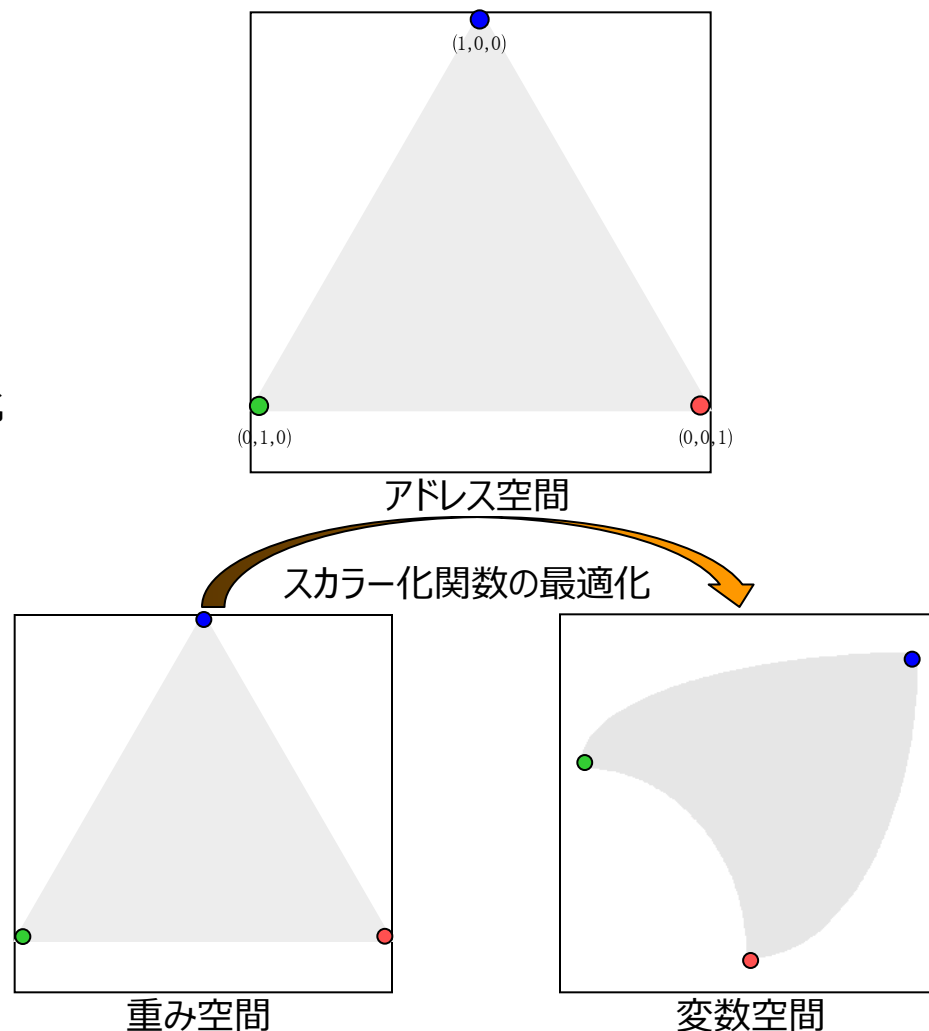
2. 再配置

- ステップ1で追加した各アドレスについて,
 - 2.1 重みを用いてスカラー化関数を生成
 - 2.2 解を初期点としてスカラー化関数を最適化
 - 2.3 解の移動距離が小さければ終了
 - 2.4 重みの適応
 - 2.5 ステップ2.1に戻る

3. 終了判定

- 反復数の上限に達したら終了
- さもないとステップ1に戻る

※図は変数空間での被覆度を向上させる例
設定により目的空間での被覆度向上も可能



1 反復目はガイド点ペアがない
➡ 重みの適応はスキップ

Adaptive Weighted Aggregationとは

1. 細分

- アドレスを追加
- 追加されたアドレスにガイド点ペアを設定
- ガイド点の重心に重みと解を初期化

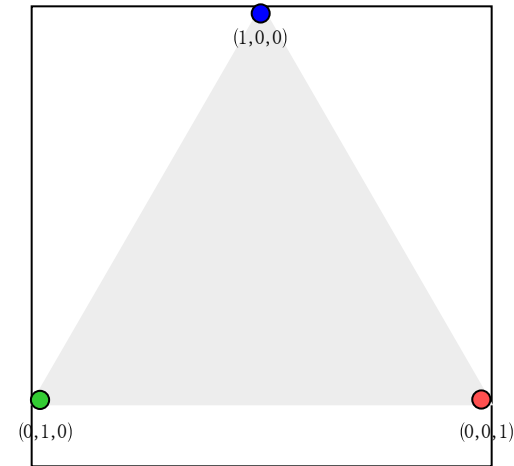
2. 再配置

- ステップ1で追加した各アドレスについて,
 - 2.1 重みを用いてスカラー化関数を生成
 - 2.2 解を初期点としてスカラー化関数を最適化
 - 2.3 解の移動距離が小さければ終了
 - 2.4 重みの適応
 - 2.5 ステップ2.1に戻る

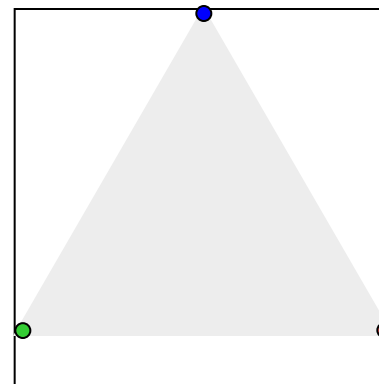
3. 終了判定

- 反復数の上限に達したら終了
- さもなければステップ1に戻る

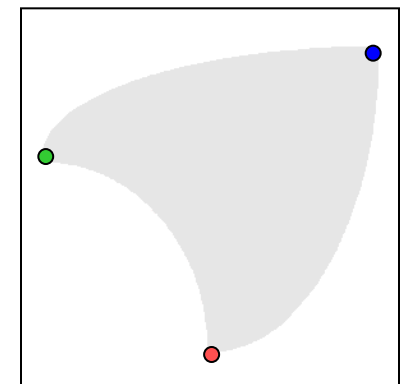
※図は変数空間での被覆度を向上させる例
設定により目的空間での被覆度向上も可能



アドレス空間



重み空間



変数空間

Adaptive Weighted Aggregationとは

1. 細分

- アドレスを追加
- 追加されたアドレスにガイド点ペアを設定
- ガイド点の重心に重みと解を初期化

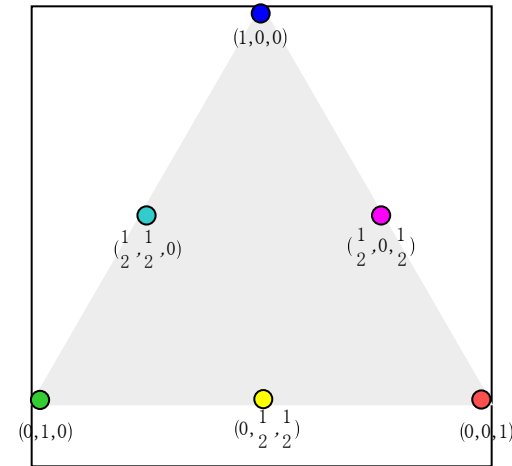
2. 再配置

- ステップ1で追加した各アドレスについて,
 - 2.1 重みを用いてスカラー化関数を生成
 - 2.2 解を初期点としてスカラー化関数を最適化
 - 2.3 解の移動距離が小さければ終了
 - 2.4 重みの適応
 - 2.5 ステップ2.1に戻る

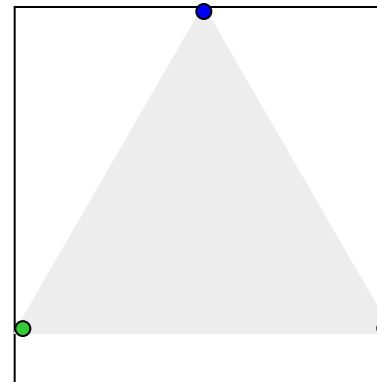
3. 終了判定

- 反復数の上限に達したら終了
- さもないとステップ1に戻る

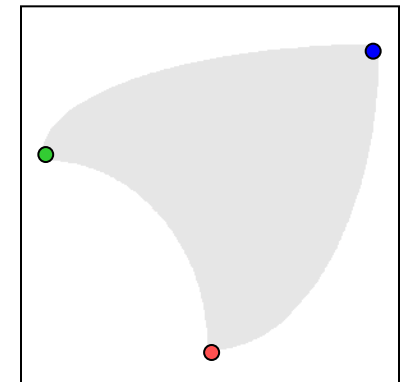
※図は変数空間での被覆度を向上させる例
設定により目的空間での被覆度向上も可能



アドレス空間



重み空間



変数空間

Adaptive Weighted Aggregationとは

1. 細分

- アドレスを追加
- 追加されたアドレスにガイド点ペアを設定
- ガイド点の重心に重みと解を初期化

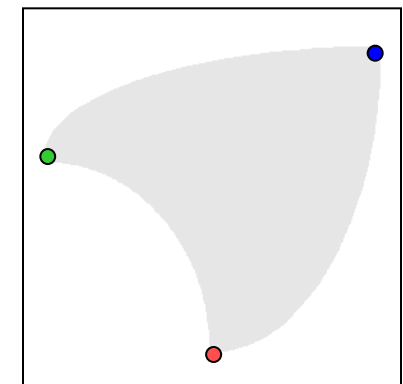
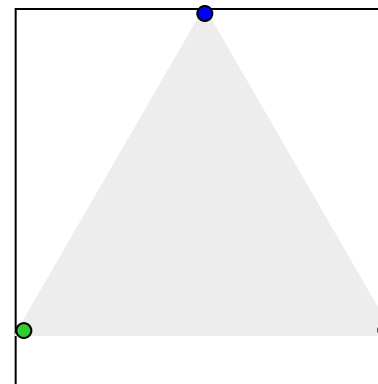
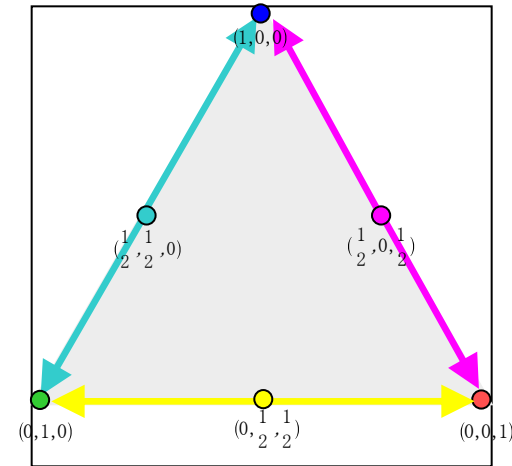
2. 再配置

- ステップ1で追加した各アドレスについて,
 - 2.1 重みを用いてスカラー化関数を生成
 - 2.2 解を初期点としてスカラー化関数を最適化
 - 2.3 解の移動距離が小さければ終了
 - 2.4 重みの適応
 - 2.5 ステップ2.1に戻る

3. 終了判定

- 反復数の上限に達したら終了
- さもないとステップ1に戻る

※図は変数空間での被覆度を向上させる例
設定により目的空間での被覆度向上も可能



Adaptive Weighted Aggregationとは

1. 細分

- アドレスを追加
- 追加されたアドレスにガイド点ペアを設定
- ガイド点の重心に重みと解を初期化

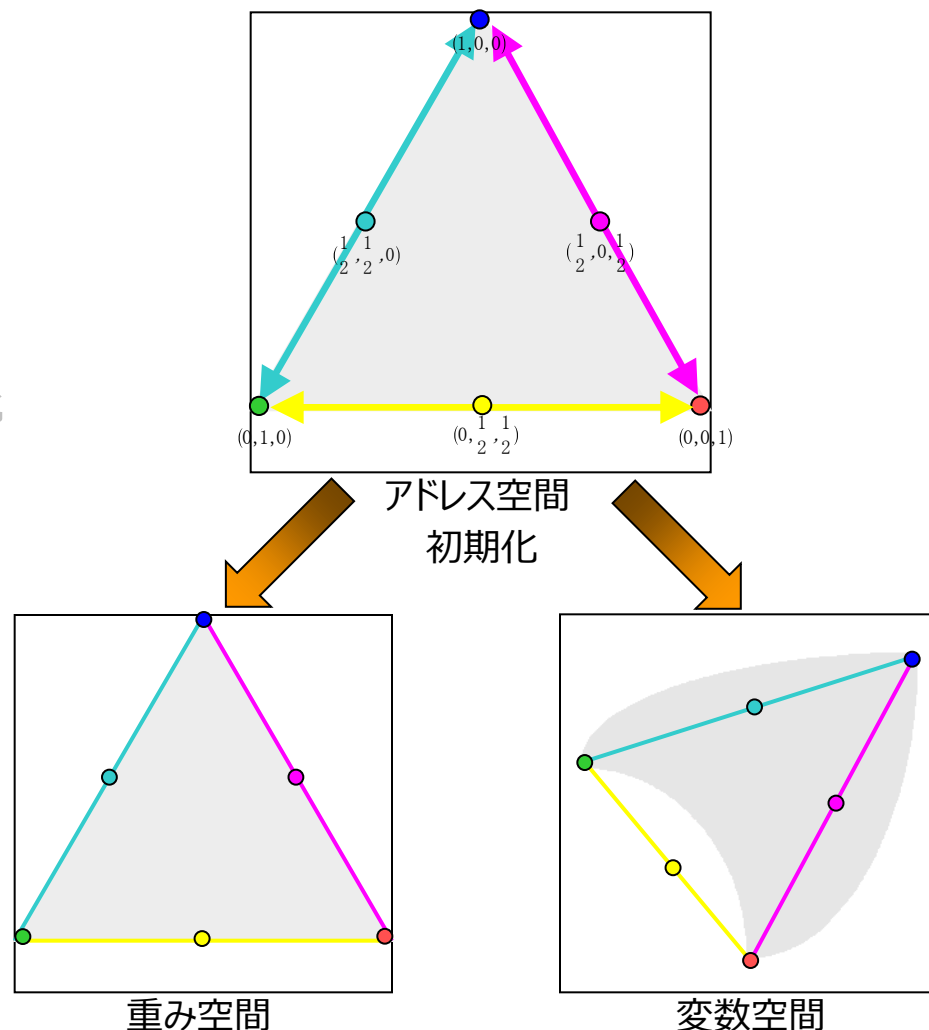
2. 再配置

- ステップ1で追加した各アドレスについて,
 - 2.1 重みを用いてスカラー化関数を生成
 - 2.2 解を初期点としてスカラー化関数を最適化
 - 2.3 解の移動距離が小さければ終了
 - 2.4 重みの適応
 - 2.5 ステップ2.1に戻る

3. 終了判定

- 反復数の上限に達したら終了
- さもないとステップ1に戻る

※図は変数空間での被覆度を向上させる例
設定により目的空間での被覆度向上も可能



Adaptive Weighted Aggregationとは

1. 細分

- アドレスを追加
- 追加されたアドレスにガイド点ペアを設定
- ガイド点の重心に重みと解を初期化

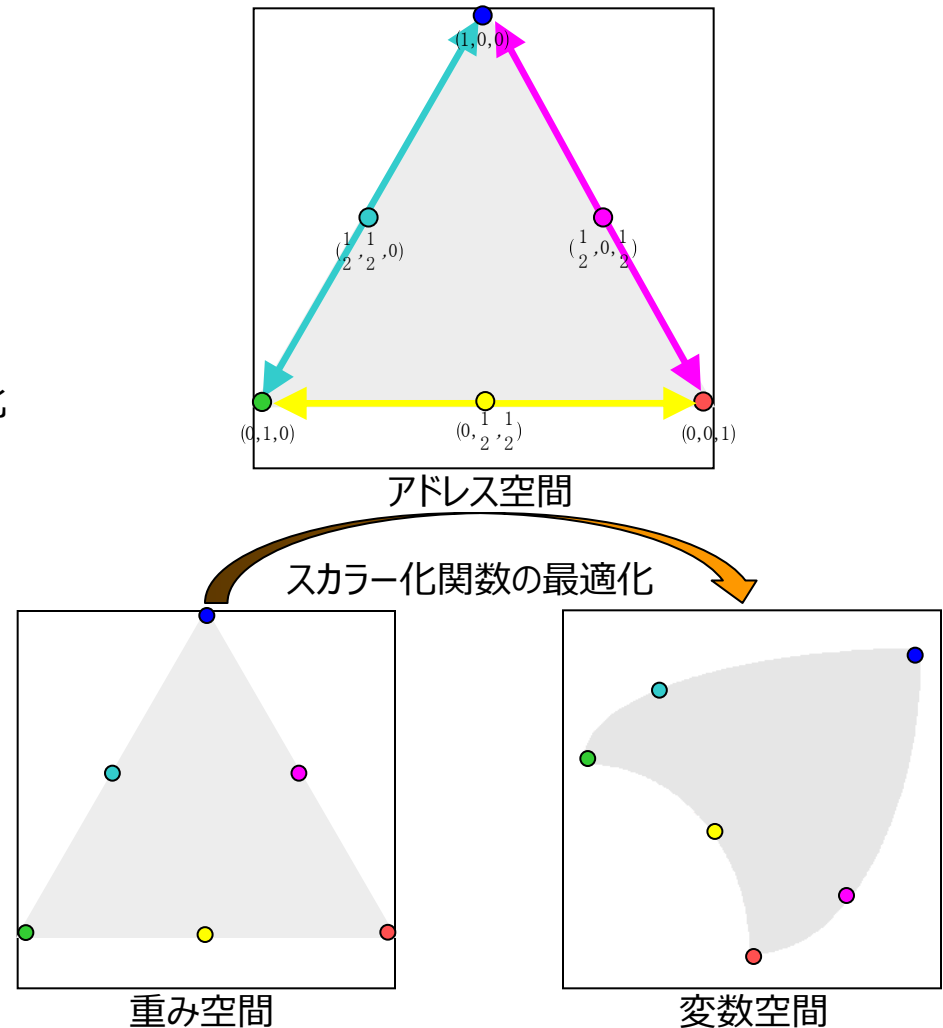
2. 再配置

- ステップ1で追加した各アドレスについて,
 - 2.1 重みを用いてスカラー化関数を生成
 - 2.2 解を初期点としてスカラー化関数を最適化
 - 2.3 解の移動距離が小さければ終了
 - 2.4 重みの適応
 - 2.5 ステップ2.1に戻る

3. 終了判定

- 反復数の上限に達したら終了
- さもないとステップ1に戻る

※図は変数空間での被覆度を向上させる例
設定により目的空間での被覆度向上も可能



Adaptive Weighted Aggregationとは

1. 細分

- アドレスを追加
- 追加されたアドレスにガイド点ペアを設定
- ガイド点の重心に重みと解を初期化

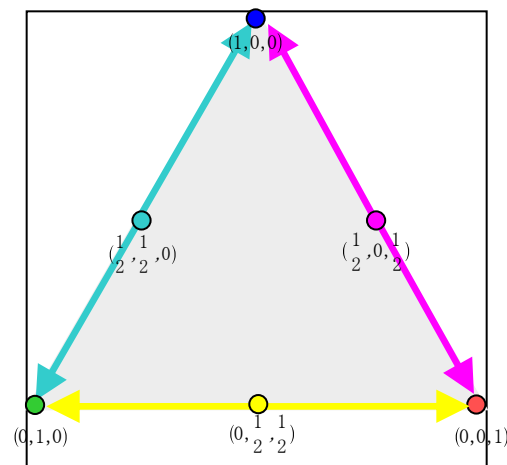
2. 再配置

- ステップ1で追加した各アドレスについて,
 - 2.1 重みを用いてスカラー化関数を生成
 - 2.2 解を初期点としてスカラー化関数を最適化
 - 2.3 解の移動距離が小さければ終了
 - 2.4 重みの適応
 - 2.5 ステップ2.1に戻る

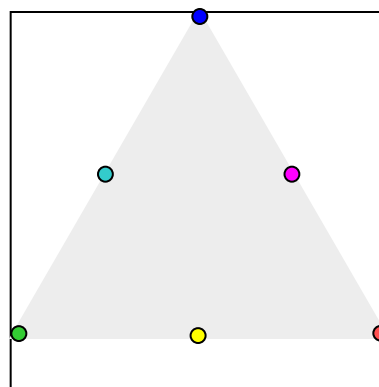
3. 終了判定

- 反復数の上限に達したら終了
- さもないとステップ1に戻る

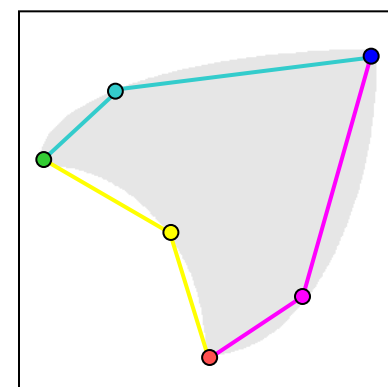
※図は変数空間での被覆度を向上させる例
設定により目的空間での被覆度向上も可能



アドレス空間



重み空間



変数空間

Adaptive Weighted Aggregationとは

1. 細分

- アドレスを追加
- 追加されたアドレスにガイド点ペアを設定
- ガイド点の重心に重みと解を初期化

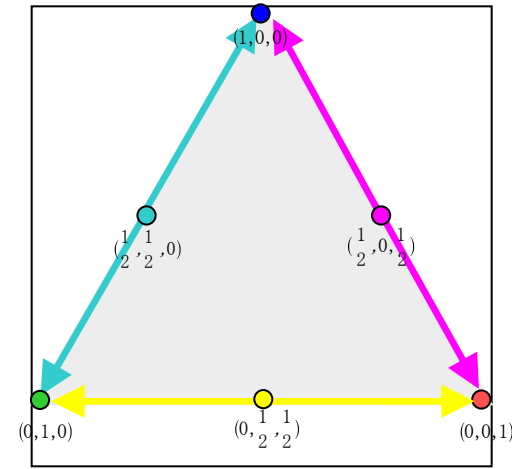
2. 再配置

- ステップ1で追加した各アドレスについて,
 - 2.1 重みを用いてスカラー化関数を生成
 - 2.2 解を初期点としてスカラー化関数を最適化
 - 2.3 解の移動距離が小さければ終了
 - 2.4 重みの適応
 - 2.5 ステップ2.1に戻る

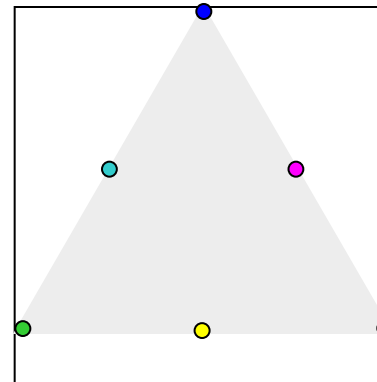
3. 終了判定

- 反復数の上限に達したら終了
- さもないとステップ1に戻る

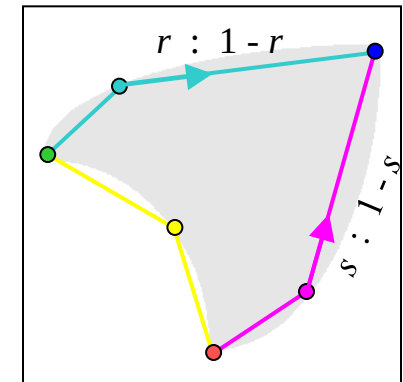
※図は変数空間での被覆度を向上させる例
設定により目的空間での被覆度向上も可能



アドレス空間



重み空間



変数空間

Adaptive Weighted Aggregationとは

1. 細分

- アドレスを追加
- 追加されたアドレスにガイド点ペアを設定
- ガイド点の重心に重みと解を初期化

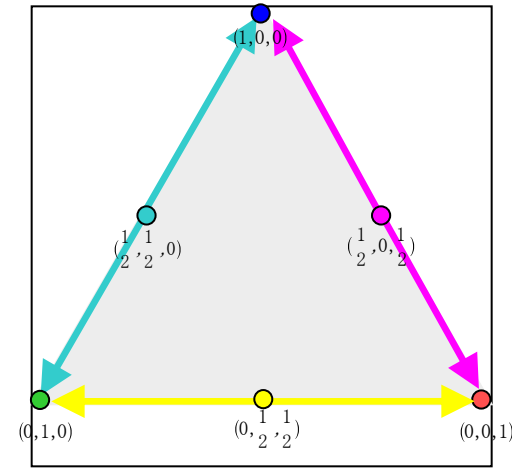
2. 再配置

- ステップ1で追加した各アドレスについて,
 - 2.1 重みを用いてスカラー化関数を生成
 - 2.2 解を初期点としてスカラー化関数を最適化
 - 2.3 解の移動距離が小さければ終了
 - 2.4 重みの適応
 - 2.5 ステップ2.1に戻る

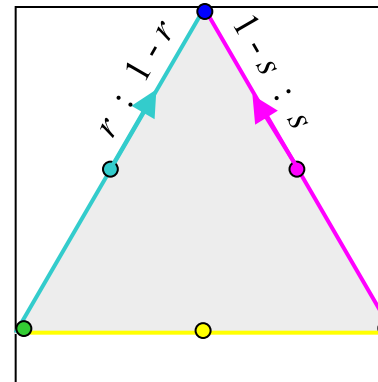
3. 終了判定

- 反復数の上限に達したら終了
- さもないとステップ1に戻る

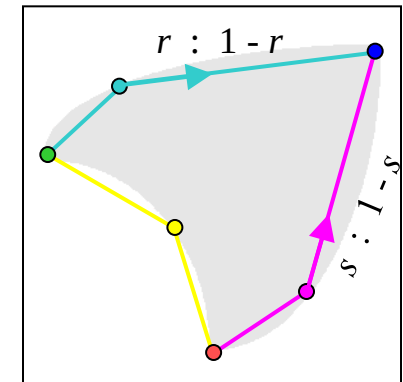
※図は変数空間での被覆度を向上させる例
設定により目的空間での被覆度向上も可能



アドレス空間



重み空間



変数空間

Adaptive Weighted Aggregationとは

1. 細分

- アドレスを追加
- 追加されたアドレスにガイド点ペアを設定
- ガイド点の重心に重みと解を初期化

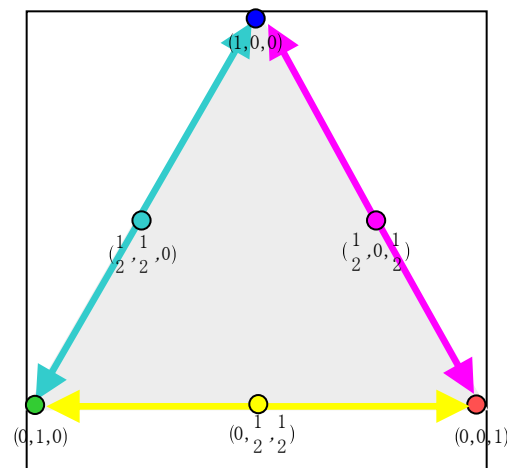
2. 再配置

- ステップ1で追加した各アドレスについて,
 - 2.1 重みを用いてスカラー化関数を生成
 - 2.2 解を初期点としてスカラー化関数を最適化
 - 2.3 解の移動距離が小さければ終了
 - 2.4 重みの適応
 - 2.5 ステップ2.1に戻る

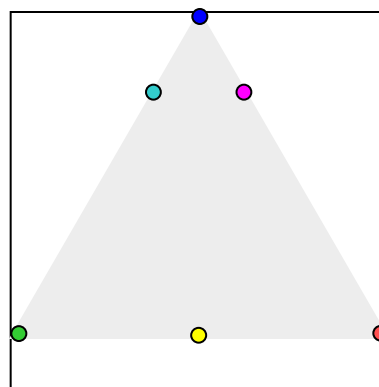
3. 終了判定

- 反復数の上限に達したら終了
- さもないとステップ1に戻る

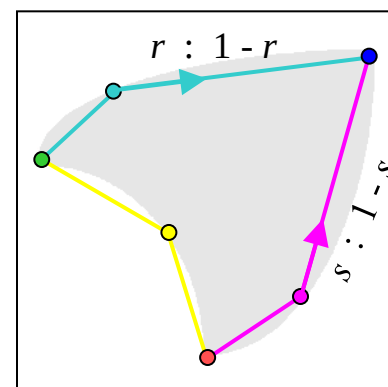
※図は変数空間での被覆度を向上させる例
設定により目的空間での被覆度向上も可能



アドレス空間



重み空間



変数空間

重みの適応

Adaptive Weighted Aggregationとは

1. 細分

- アドレスを追加
- 追加されたアドレスにガイド点ペアを設定
- ガイド点の重心に重みと解を初期化

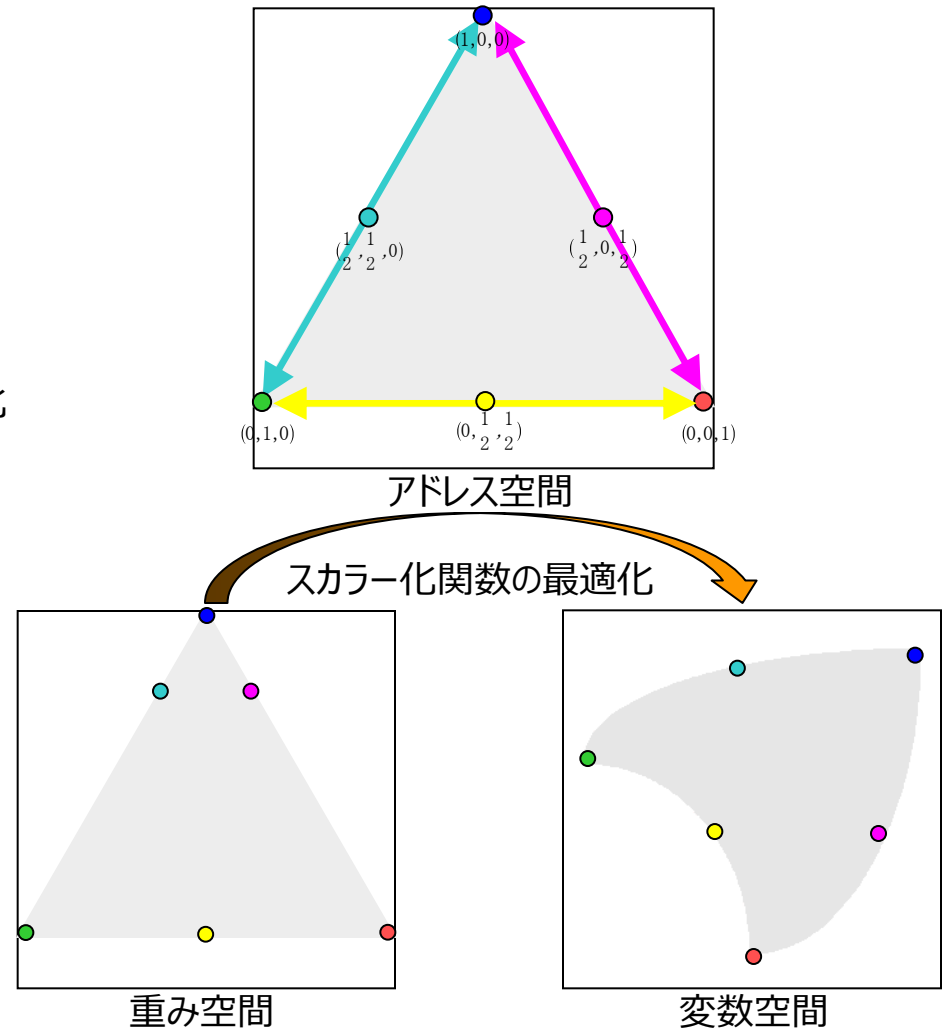
2. 再配置

- ステップ1で追加した各アドレスについて,
 - 2.1 重みを用いてスカラー化関数を生成
 - 2.2 解を初期点としてスカラー化関数を最適化
 - 2.3 解の移動距離が小さければ終了
 - 2.4 重みの適応
 - 2.5 ステップ2.1に戻る

3. 終了判定

- 反復数の上限に達したら終了
- さもないとステップ1に戻る

※図は変数空間での被覆度を向上させる例
設定により目的空間での被覆度向上も可能



1. 細分

- アドレスを追加
- 追加されたアドレスにガイド点ペアを設定
- ガイド点の重心に重みと解を初期化

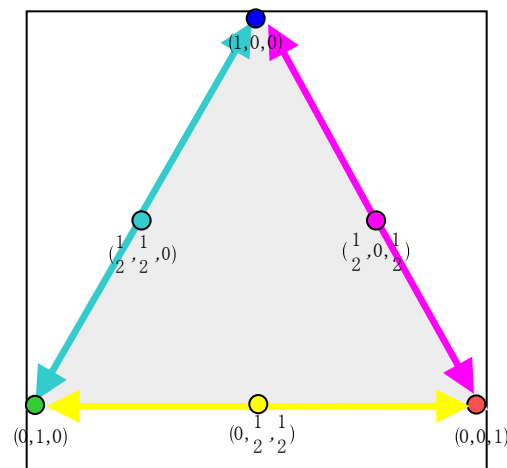
2. 再配置

- ステップ1で追加した各アドレスについて,
 - 2.1 重みを用いてスカラー化関数を生成
 - 2.2 解を初期点としてスカラー化関数を最適化
 - 2.3 解の移動距離が小さければ終了
 - 2.4 重みの適応
 - 2.5 ステップ2.1に戻る

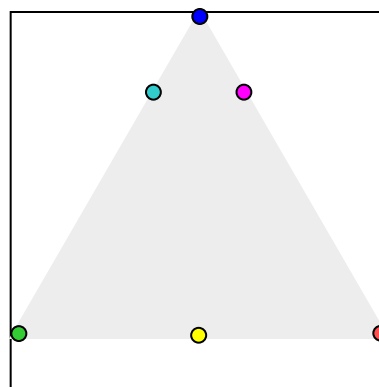
3. 終了判定

- 反復数の上限に達したら終了
- さもないとステップ1に戻る

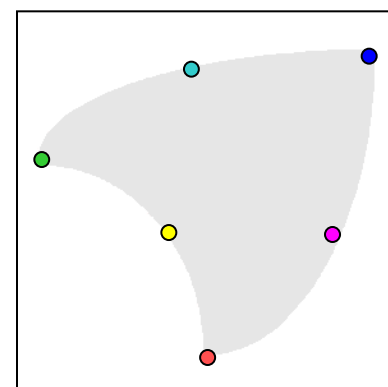
※図は変数空間での被覆度を向上させる例
設定により目的空間での被覆度向上も可能



アドレス空間



重み空間



変数空間

Adaptive Weighted Aggregationとは

1. 細分

- アドレスを追加
- 追加されたアドレスにガイド点ペアを設定
- ガイド点の重心に重みと解を初期化

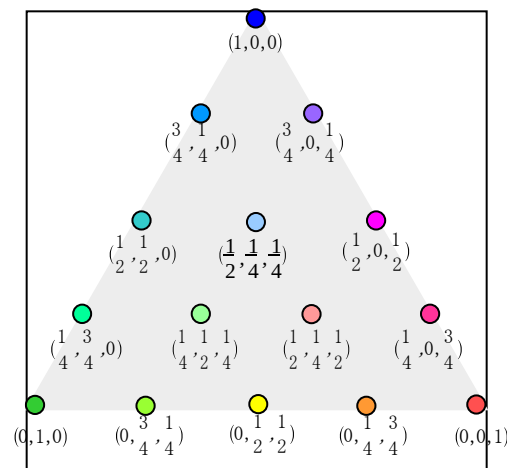
2. 再配置

- ステップ1で追加した各アドレスについて,
 - 2.1 重みを用いてスカラー化関数を生成
 - 2.2 解を初期点としてスカラー化関数を最適化
 - 2.3 解の移動距離が小さければ終了
 - 2.4 重みの適応
 - 2.5 ステップ2.1に戻る

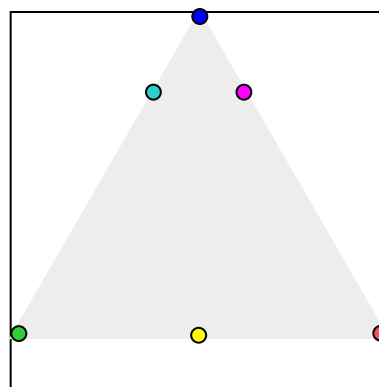
3. 終了判定

- 反復数の上限に達したら終了
- さもないとステップ1に戻る

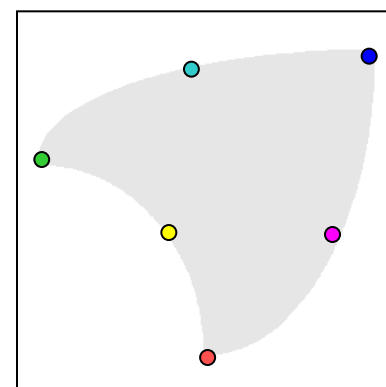
※図は変数空間での被覆度を向上させる例
設定により目的空間での被覆度向上も可能



アドレス空間



重み空間



変数空間

Adaptive Weighted Aggregationとは

1. 細分

- アドレスを追加
- 追加されたアドレスにガイド点ペアを設定
- ガイド点の重心に重みと解を初期化

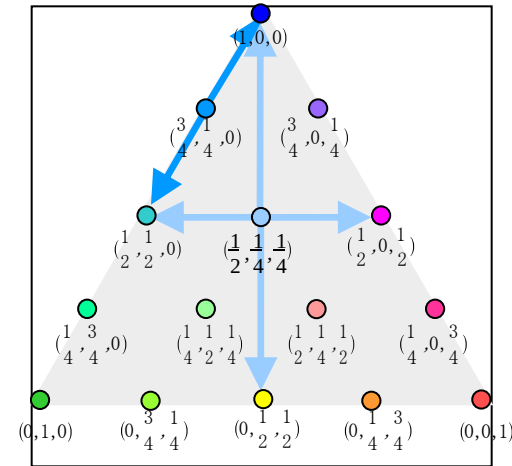
2. 再配置

- ステップ1で追加した各アドレスについて,
 - 2.1 重みを用いてスカラー化関数を生成
 - 2.2 解を初期点としてスカラー化関数を最適化
 - 2.3 解の移動距離が小さければ終了
 - 2.4 重みの適応
 - 2.5 ステップ2.1に戻る

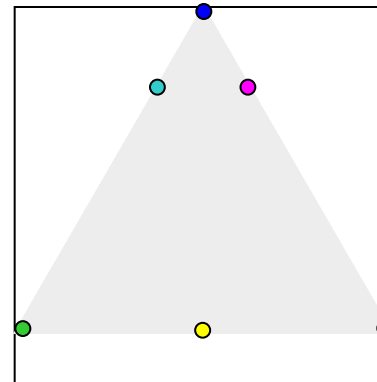
3. 終了判定

- 反復数の上限に達したら終了
- さもないとステップ1に戻る

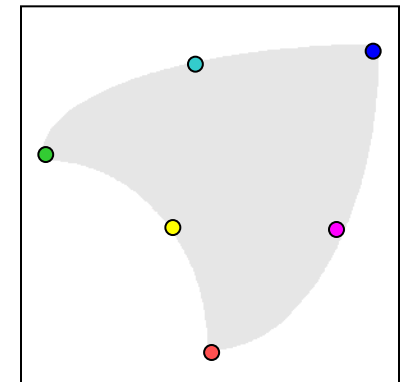
※図は変数空間での被覆度を向上させる例
設定により目的空間での被覆度向上も可能



アドレス空間



重み空間



変数空間

Adaptive Weighted Aggregationとは

1. 細分

- アドレスを追加
- 追加されたアドレスにガイド点ペアを設定
- ガイド点の重心に重みと解を初期化

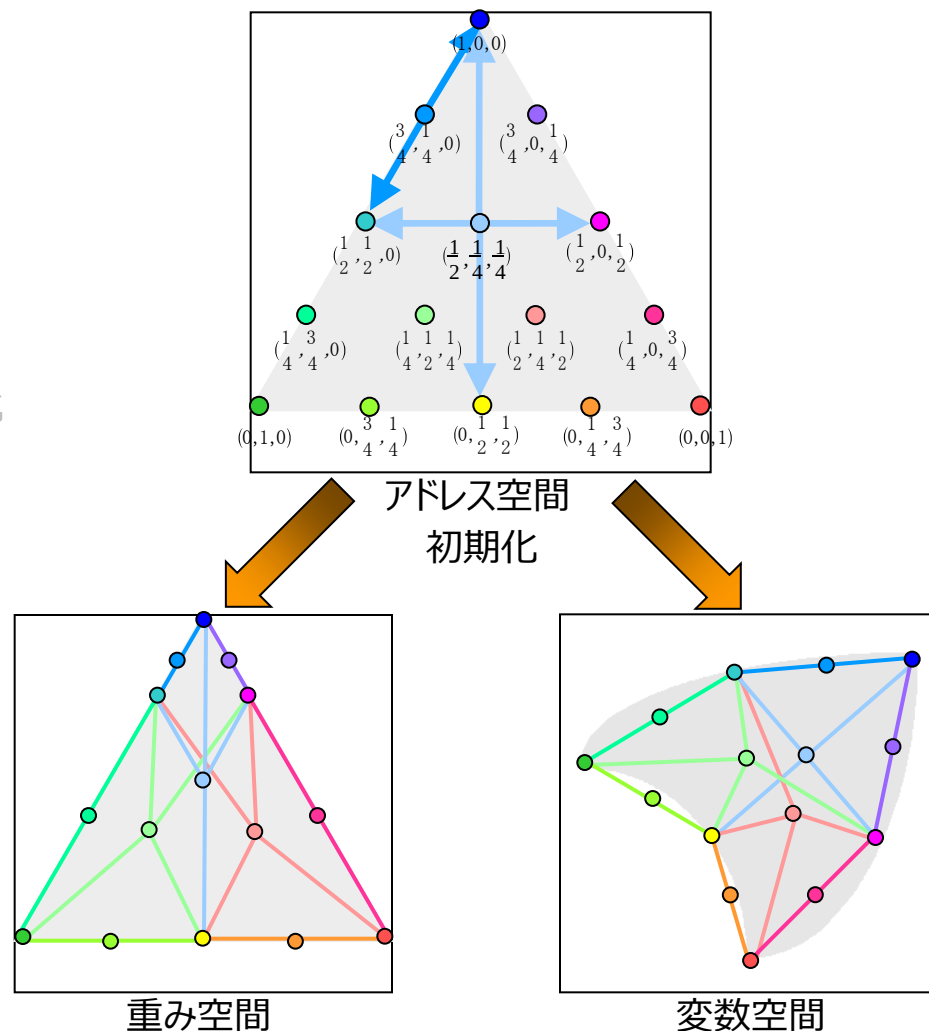
2. 再配置

- ステップ1で追加した各アドレスについて,
 - 2.1 重みを用いてスカラー化関数を生成
 - 2.2 解を初期点としてスカラー化関数を最適化
 - 2.3 解の移動距離が小さければ終了
 - 2.4 重みの適応
 - 2.5 ステップ2.1に戻る

3. 終了判定

- 反復数の上限に達したら終了
- さもないとステップ1に戻る

※図は変数空間での被覆度を向上させる例
設定により目的空間での被覆度向上も可能



Adaptive Weighted Aggregationとは

1. 細分

- アドレスを追加
- 追加されたアドレスにガイド点ペアを設定
- ガイド点の重心に重みと解を初期化

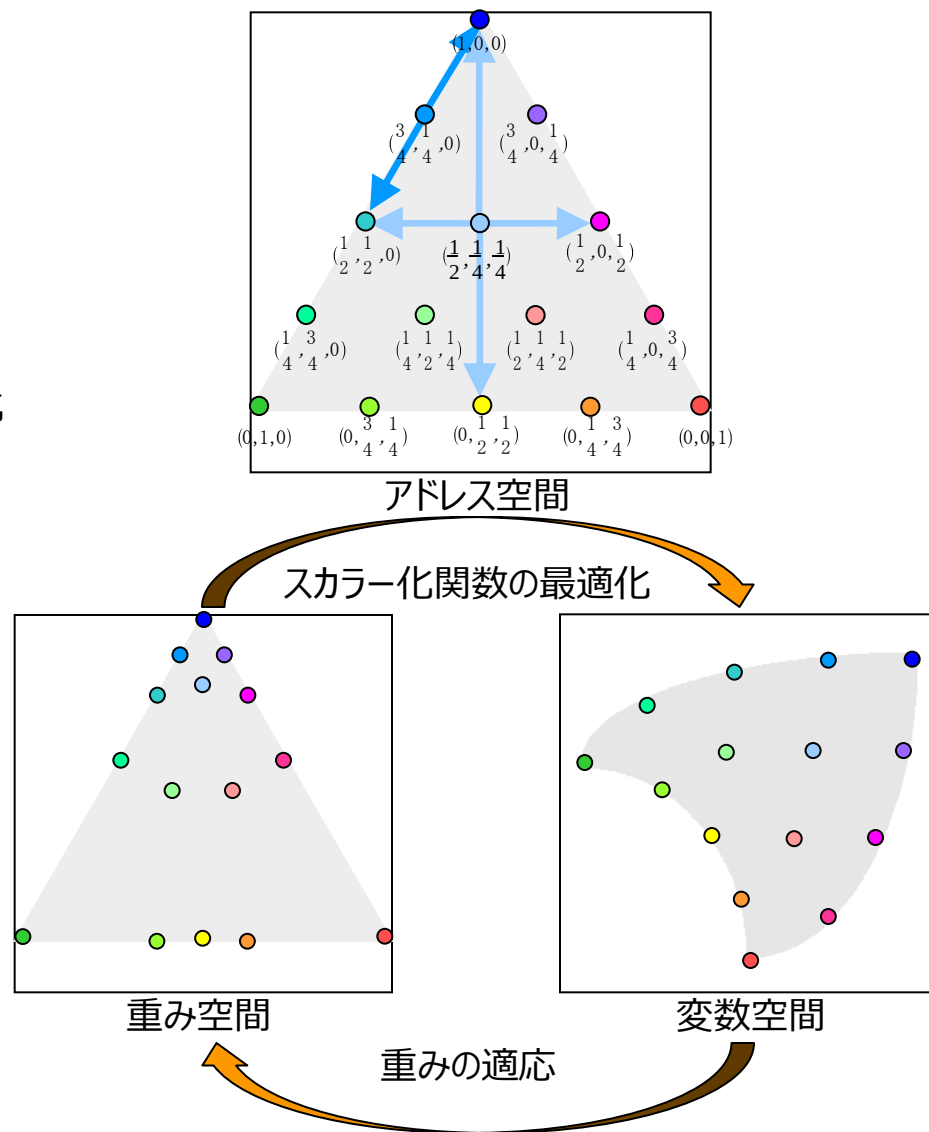
2. 再配置

- ステップ1で追加した各アドレスについて,
 - 2.1 重みを用いてスカラー化関数を生成
 - 2.2 解を初期点としてスカラー化関数を最適化
 - 2.3 解の移動距離が小さければ終了
 - 2.4 重みの適応
 - 2.5 ステップ2.1に戻る

3. 終了判定

- 反復数の上限に達したら終了
- さもないとステップ1に戻る

※図は変数空間での被覆度を向上させる例
設定により目的空間での被覆度向上も可能

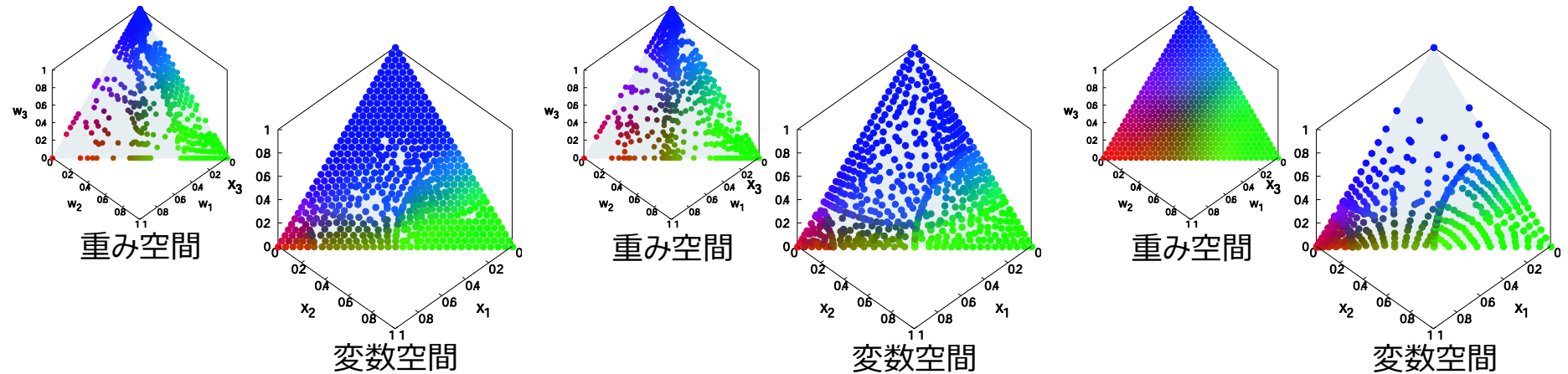


単純でない問題は単純な問題の張り合わせ [濱田 2013] **FUJITSU**

WO-AWA(変数空間)

AWA(変数空間)

AWA(適応なし)

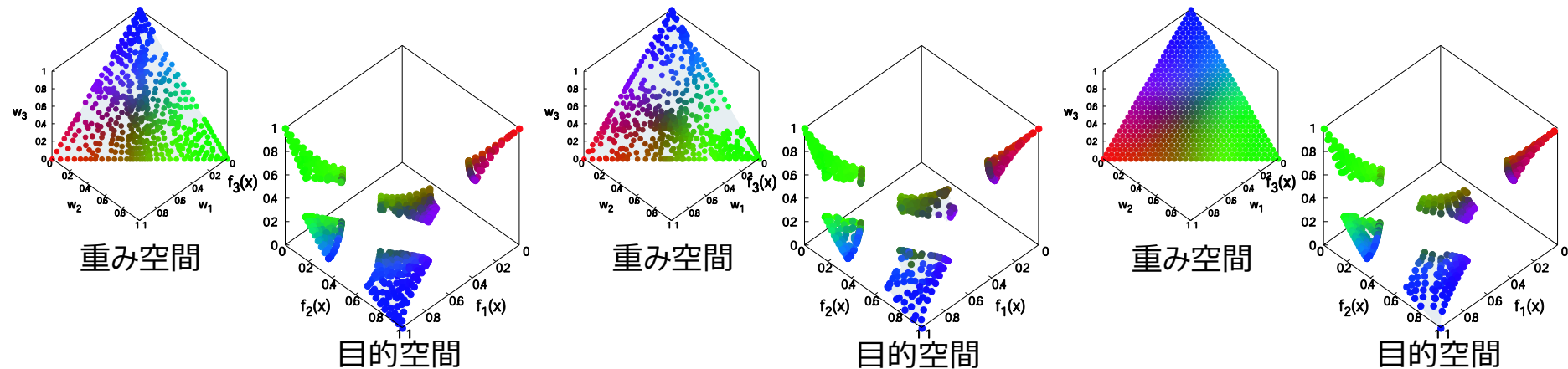


非単純な問題Gapped-MED(3目的)の近似解とそれに対応する重み

WO-AWA(目的空間)

AWA(目的空間)

AWA(適応なし)



非単純な問題Gapped-MED(3目的)の評価値とそれに対応する重み

1. 背景 1 : なぜ『単純な問題』を考えるのか？

- パレート解を網羅的に求めるには、その形を把握することが重要
- パレート解集合の形は滑層分割すると把握できる
- 単純な問題を解けば滑層分割が求められる

2. 背景 2 : 問題の単純性の推定

- 実問題が単純かどうか知るには推定が必要
- 推定には位相的データ解析を使う
- 解析に使うRips複体の直径をどう決めるかが課題

3. 本研究の貢献

- パーシステント図を用いたRips複体の直径決定法の提案
- 検証実験
- 考察

問題が単純かどうか，どうすればわかる？

定義 1 (単純な問題) 問題 f が単純 $\stackrel{\text{def}}{\Leftrightarrow}$ すべての部分問題 $g \subseteq f$ について：

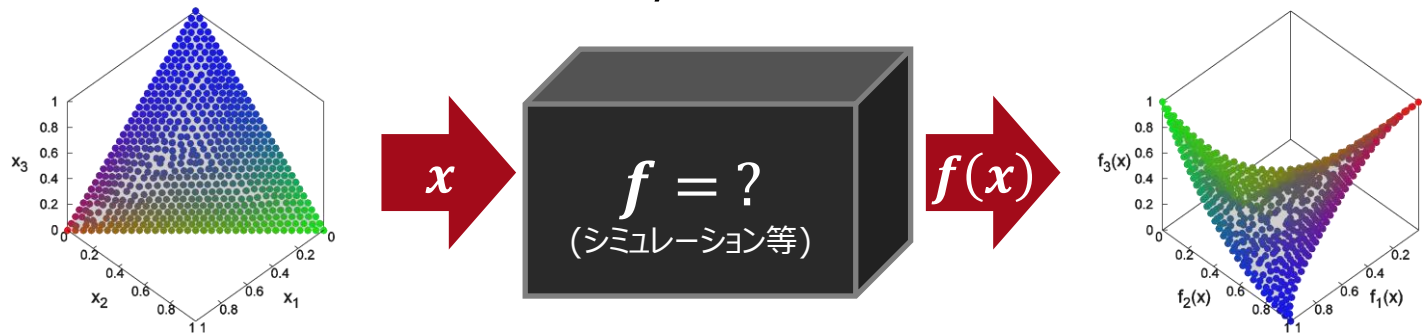
(S1) g が k 目的問題ならば $X^*(g) \approx \Delta^{k-1}$,

(S2) g の $X^*(g)$ への制限は埋め込み．

■ 問題の性質が与えられれば，判定可能なこともある

■ 典型的な凸計画問題 + ある程度の正則条件 $\Rightarrow$ 単純 など

■ しかしブラックボックスな状況では，問題の性質は不明



ブラックボックス問題の単純性は近似解集合から推定する

近似解集合

1. 部分問題 g の近似解集合 $X(g)$ を求める
2. 求めた $X(g)$ から g -劣解を取り除く

※一般には、すべての部分問題に対して個別に近似解集合を求める必要がある

※写像 $g|_{X^*(g)}$ が単射と仮定できる場合には、原問題に対して求めた近似解集合 $X(f)$ から g -劣解を取り除けば $X(g)$ が得られる

※一般的に、近似解集合の濃度が高いほど、単純性の推定精度は高まる傾向がある

位相的データ解析

1. 近似解集合 $X(g)$ から複体 $K(g)$ を構築する
2. 複体 $K(g)$ の (パーシステント) ホモロジーを計算する
3. 各単体 $[x_1, \dots, x_k] \in K(g)$ に対して凸包 $[g(x_1), \dots, g(x_k)]$ を考え、それらの内部が交差するかどうかを計算する

※複体の計算が難しい場合には、AWA [濱田 2012] や SiCon [Lovison 2013], mPS [Lovison 2015] といった数値解法が出力する複体を用いる

問題の単純性の判定

◆ある i について $H_i(K(g)) \neq H_i(\Delta^{k-1})$

(S1)不成立

◆内部が交わる凸包のペアが存在

(S2)不成立

◆上記どちらの条件も満たさない

単純である可能性が高い

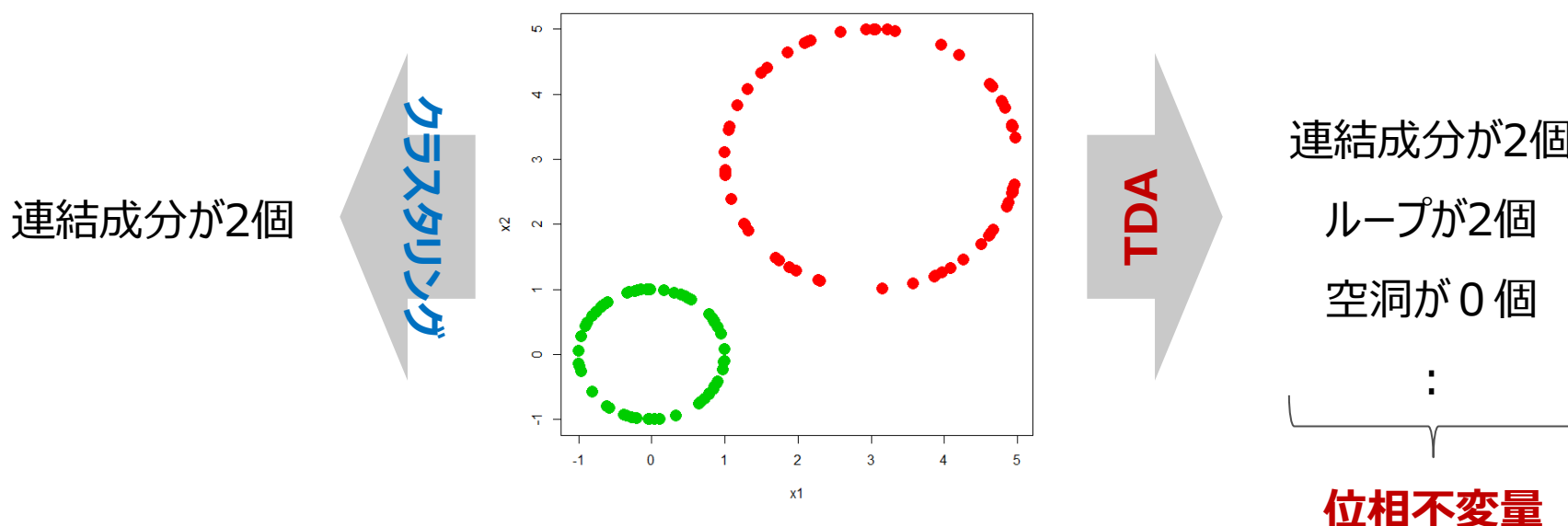
非単純性の検出を試み、検出されなければ単純とみなす

(cf. 健康診断：不健康な証拠を探し、見つからなければ健康とみなす)

位相的データ解析とは？

■ 位相的データ解析(TDA; Topological Data Analysis)

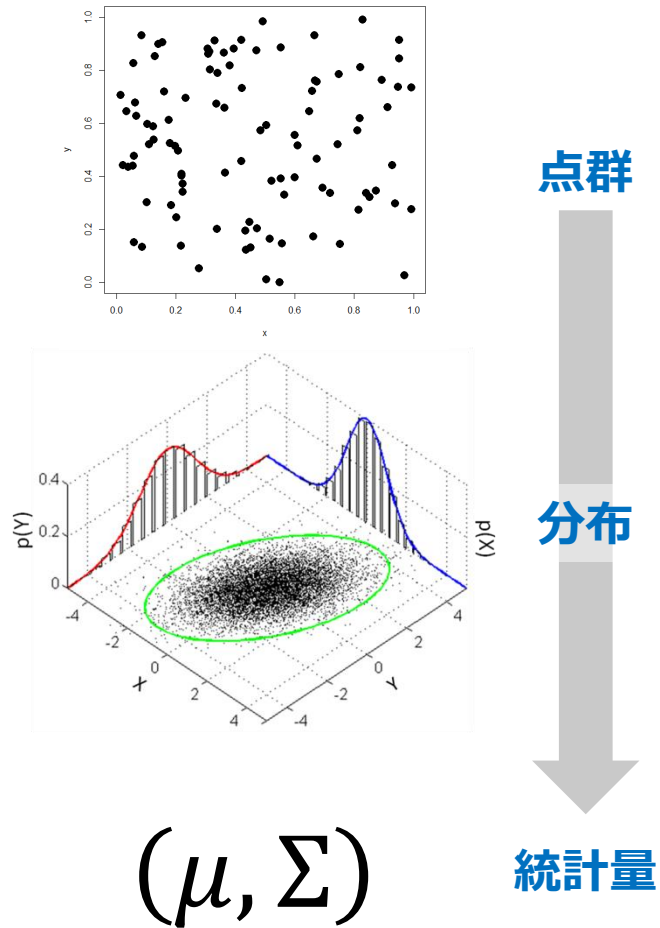
- データの“繋がり方”を解析する技術
- Topology（位相幾何）という数学を使って解析する
- 連続変形で不変な量 = 位相不変量を使ってデータを要約する



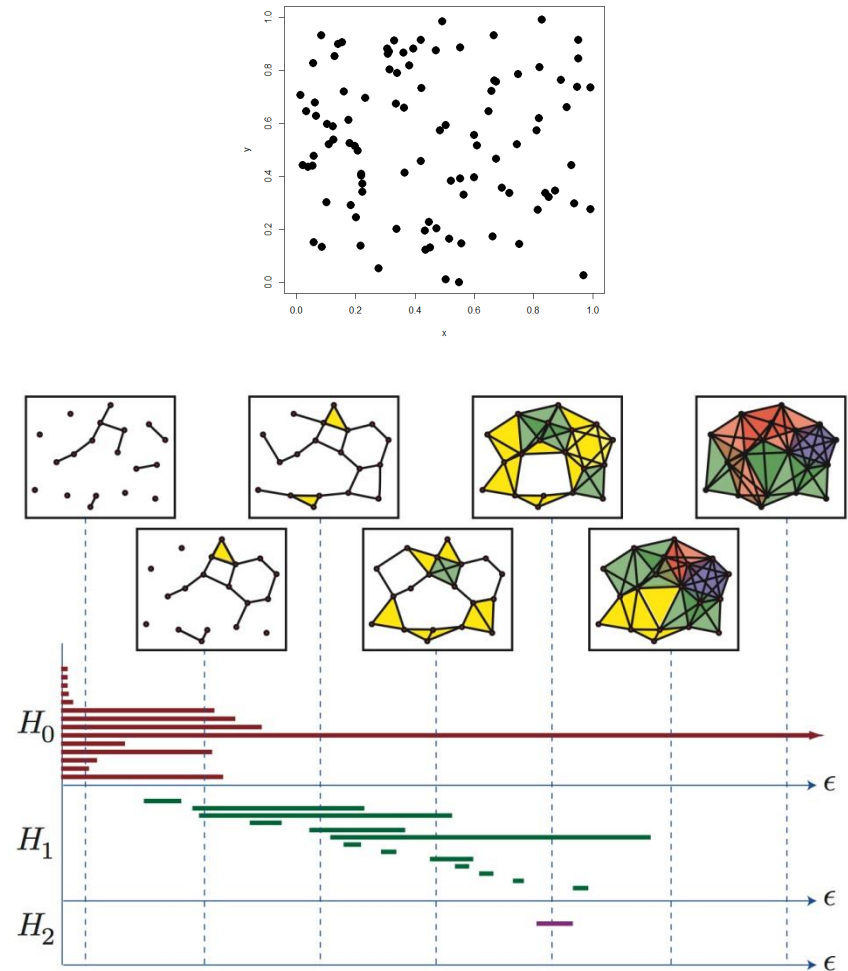
TDAは高次元の穴の個数まで検出できる
(クラスタ = 連結成分は0次元の穴に相当する)

従来の統計的データ解析との違い

統計的データ解析



位相的データ解析



[Ghrist 2008]

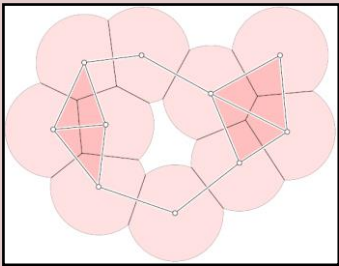
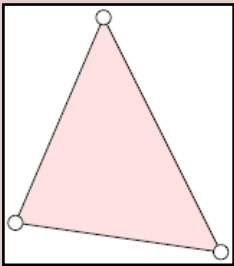
※TDAは統計的アプローチを置き換えるものではありません。
実際のデータ解析では、両方を組み合わせて使います。

(S1)不成立の検出方法

(S1) g が k 目的問題ならば $X^*(g) \approx \Delta^{k-1}$

定理 16 $|K(g)| \approx X^*(g)$ とする. 下記のいずれかの条件が満たされれば, g は(S1)を満たさない. したがって, g は単純ではない.

- $H_0(K(g)) \neq \mathbb{Z}$
- $\exists i \neq 0 : H_i(K(g)) \neq 0$

	$K(g)$ の例	Δ^{k-1}
位相空間		
H_0	$\mathbb{Z}$	$\mathbb{Z}$
H_1	$\mathbb{Z}$	0
H_2	0	0

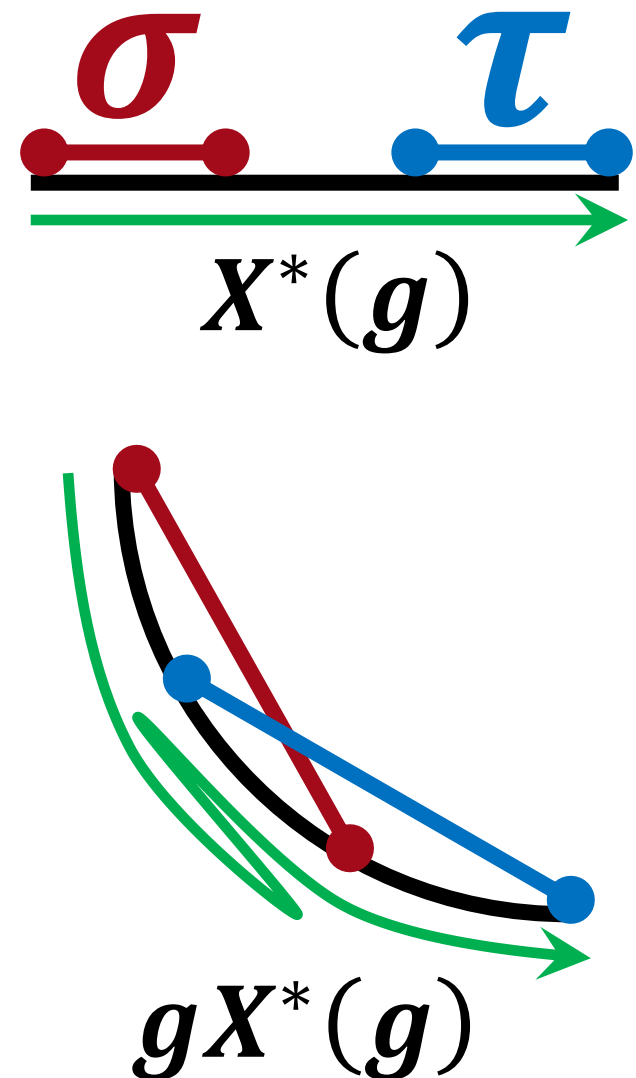
(S2)不成立の検出方法

(S2) g の $X^*(g)$ への制限は埋め込み

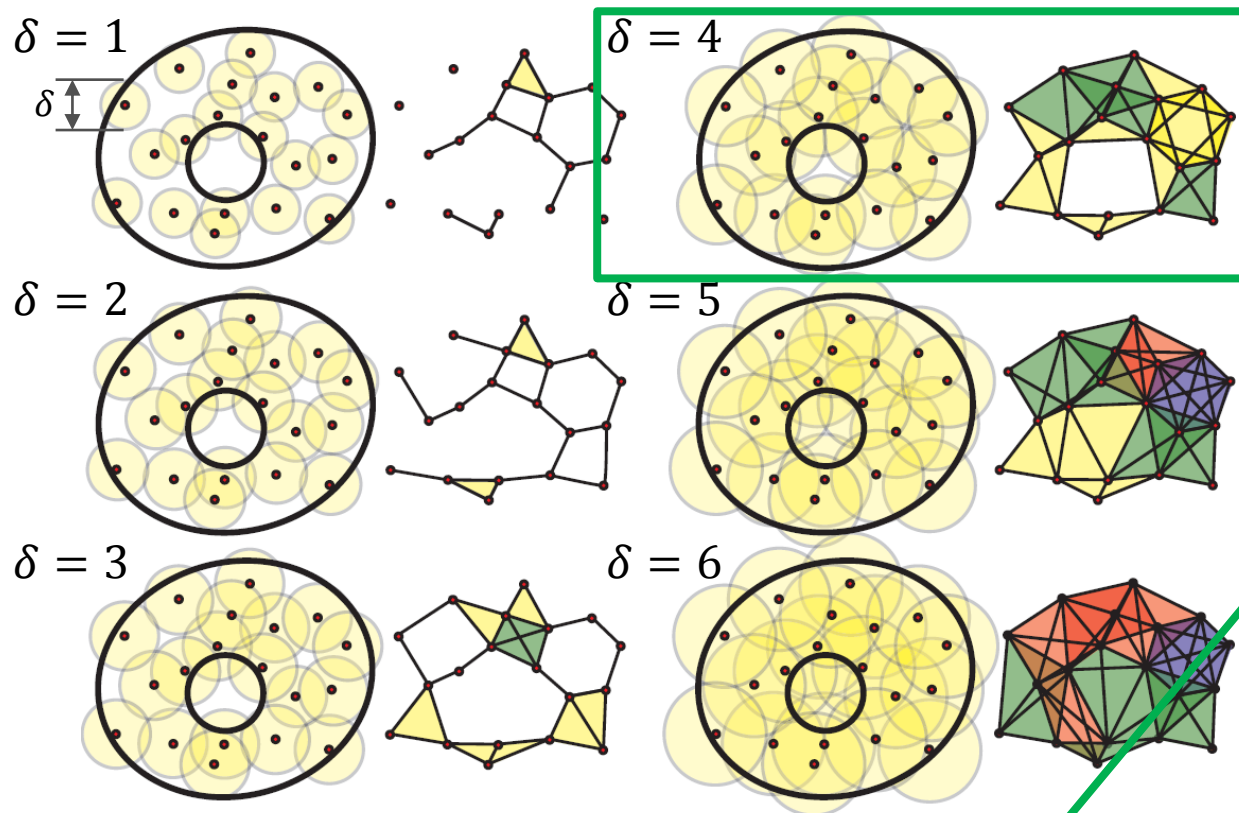
定理 17 K が $K(g)$ の細分であるとする. ある $\sigma \neq \tau \in K(g)$ について $\sigma = [x_1, \dots, x_k], \tau = [y_1, \dots, y_l]$ とおいて, 連立1次不等式

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^k a_i g(x_i) = \sum_{j=1}^l b_j g(y_j), \\ \sum_{i=1}^k a_i = \sum_{j=1}^l b_j = 1, \\ a_i, b_j > 0 \end{cases}$$

が解をもてば, g は (S2) を満たさない. したがって, g は単純ではない.



Rips複体とホモロジー群



推定に適切な
直径 δ は
どうすれば
わかる?

FIGURE 3. A sequence of Rips complexes for a point cloud data set representing an annulus. Upon increasing ϵ , holes appear and disappear. Which holes are real and which are noise?

[Ghrist 2008]

δ	1	2	3	4	5	6
H_0	$\mathbb{Z}^6$	$\mathbb{Z}$	$\mathbb{Z}$	$\mathbb{Z}$	$\mathbb{Z}$	$\mathbb{Z}$
H_1	$\mathbb{Z}^2$	$\mathbb{Z}^3$	$\mathbb{Z}^3$	$\mathbb{Z}$	0	0

1. 背景 1 : なぜ『単純な問題』を考えるのか？

- パレート解を網羅的に求めるには、その形を把握することが重要
- パレート解集合の形は滑層分割すると把握できる
- 単純な問題を解けば滑層分割が求められる

2. 背景 2 : 問題の単純性の推定

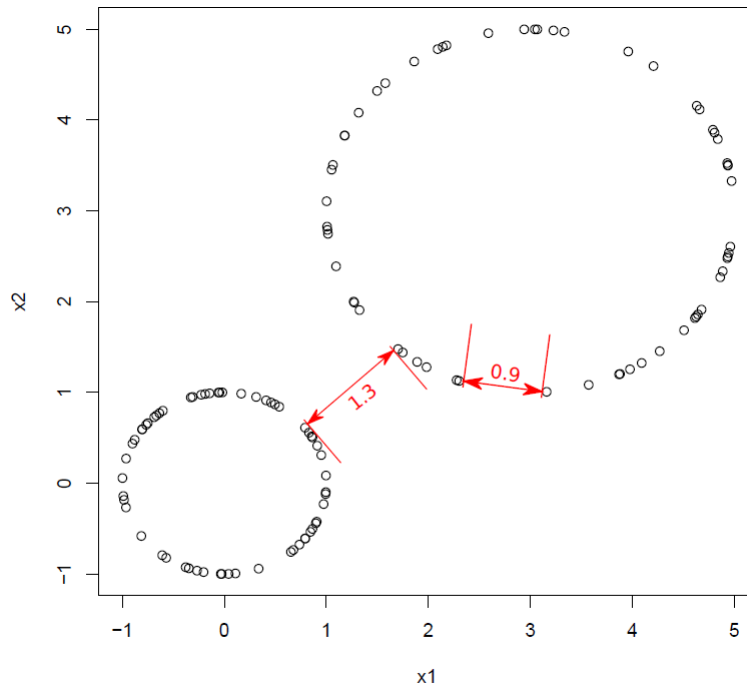
- 実問題が単純かどうか知るには推定が必要
- 推定には位相的データ解析を使う
- 解析で使うRips複体の直径をどう決めるかが課題

3. 本研究の貢献

- パーシステント図を用いたRips複体の直径決定法の提案
- 検証実験
- 考察

提案：パーシステント図を用いた直径の決定

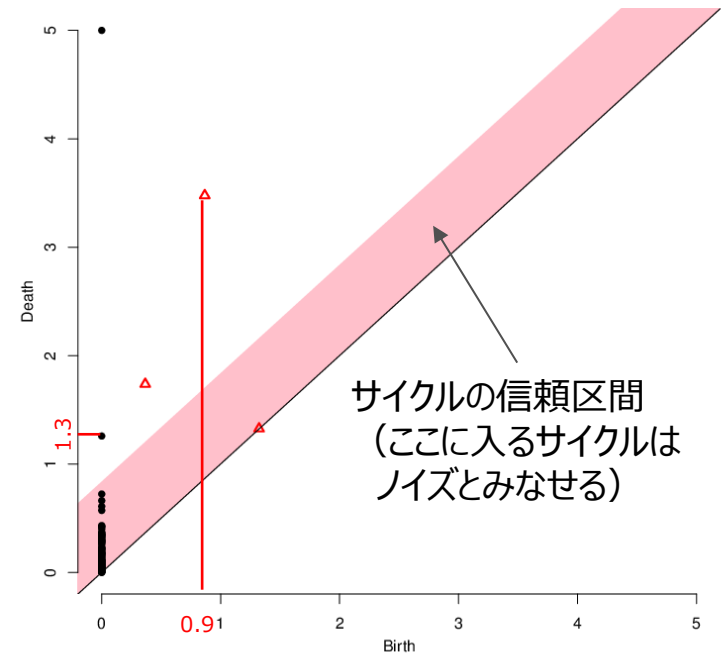
従来: 散布図による方法



1~2次元でしか使えない

$$0.9 \leq \delta < 1.3$$

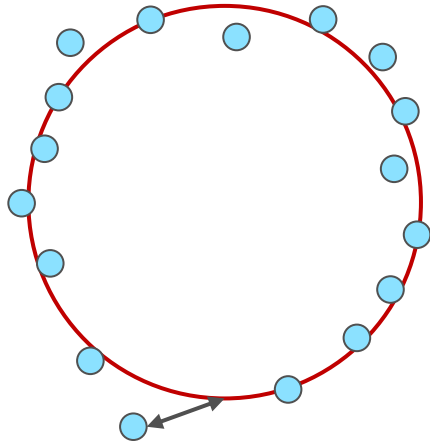
提案: パーシステント図による方法



N次元でも使える

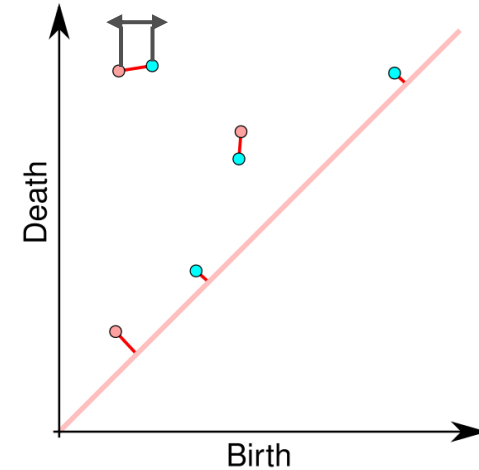
$$0.9 \leq \delta < 1.3$$

H : ハウスドルフ距離

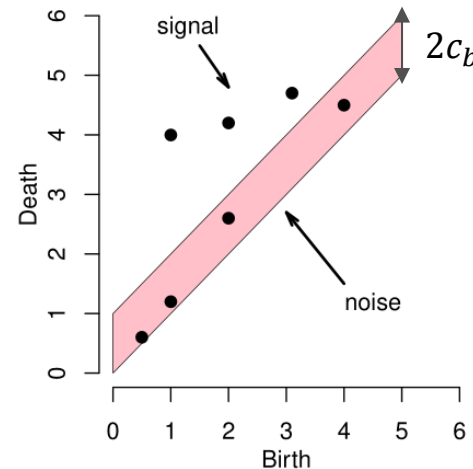
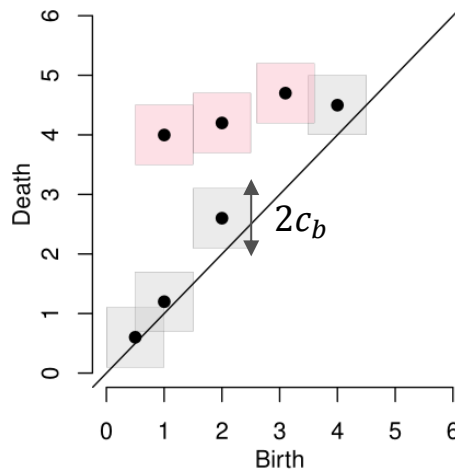


$\geq$

W_∞ : ボトルネック距離



$$\mathbb{P}(W_\infty(\hat{\mathcal{P}}, \mathcal{P}) > c_b) \leq \mathbb{P}(\mathbf{H}(\mathcal{S}_n, \mathbf{M}) > c_b) \leq \alpha + O\left(\frac{b}{n}\right)^{1/4} \text{ for } n \rightarrow \infty$$



実際には $\mathbf{M}$ は未知なので、 $\mathcal{S}_n$ のブートストラップにより c_b を推定する

提案手法で決めた直径で，単純性が正しく推定できるか？

■ ベンチマーク問題：40変数6目的MED [濱田 2012]

■ 単純性は証明済み [濱田 2015]

MED(m 目的)

$$\underset{x \in R^{40}}{\text{minimize}} \quad f(x) := (f_1(x), \dots, f_m(x)),$$

■ 近似解集合：AWA(変数空間)

■ 1287点(内点が得られる4反復で停止)

$$f_i(x) = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \|x - e_i\| \right)^{p_i}, \quad p_i = \exp\left(2 \frac{i-1}{m-1} - 1\right).$$

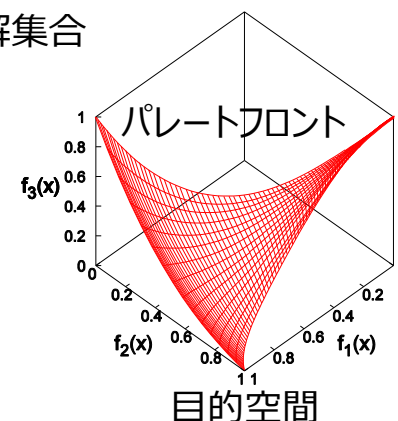
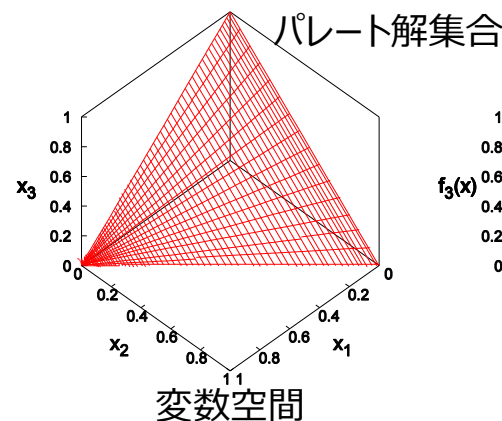
■ 単純性の推定

■ 原問題の(S1)(S2)不成立を検出

- (S1) 0~2次ホモロジー群を確認
- (S2) 5次元開単体の交差を確認

➡これらで非単純性が検出されなければOKとする

※理想的には全部分問題で全次元を確認すべきだが，計算量の都合で省略



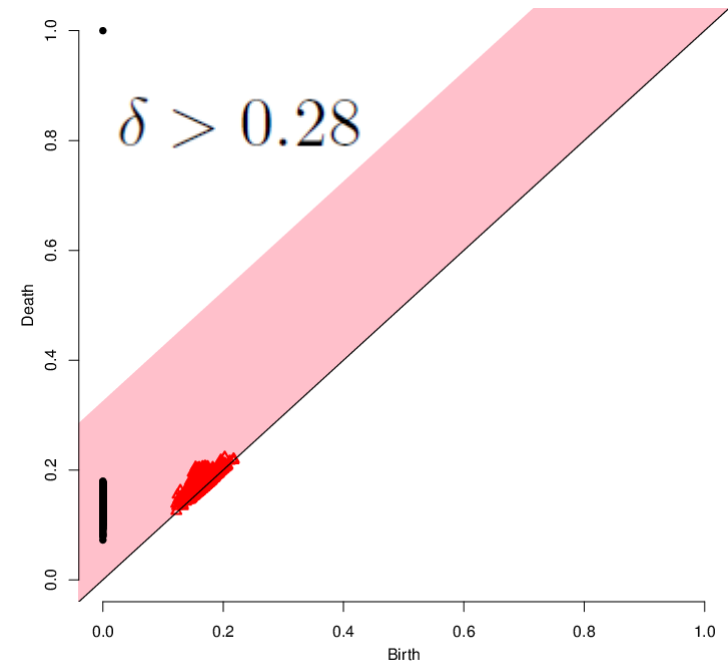
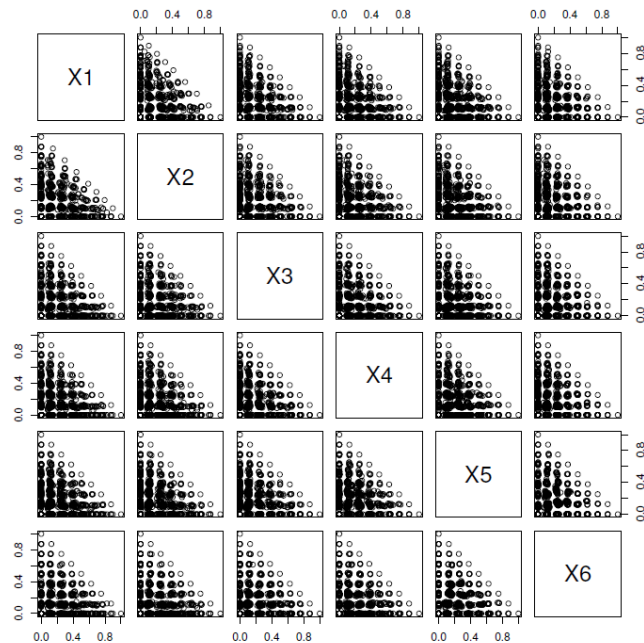


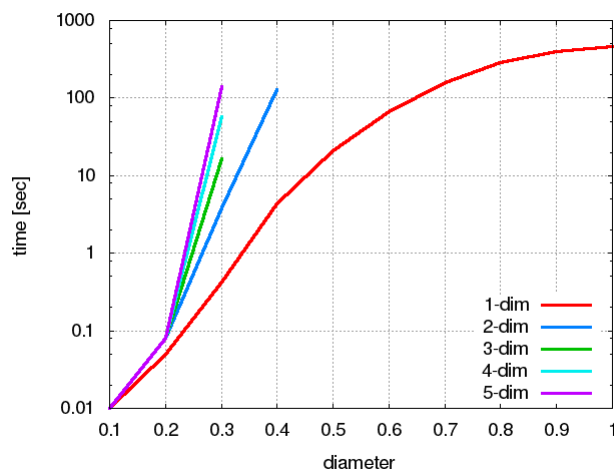
Fig. 6 40変数6目的MEDに対するAWA(変数空間)の近似解集合. $x_7 = \dots = x_{40} = 0$ のため, $x_1, \dots, x_6$ のみを表示している.

$$H_i(K_{\delta=0.3}(f)) \simeq \begin{cases} \mathbb{Z} & (i = 0), \\ 0 & (i = 1, 2) \end{cases}$$

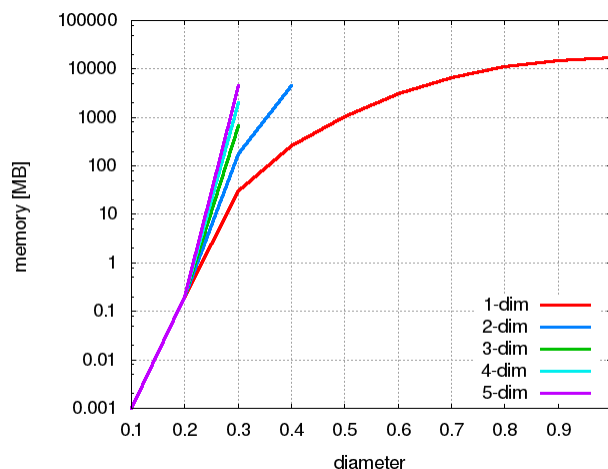
➡(S1)不成立は検出されず
(同様に(S2)も確認)

考察 1 : パーシステント図の計算量

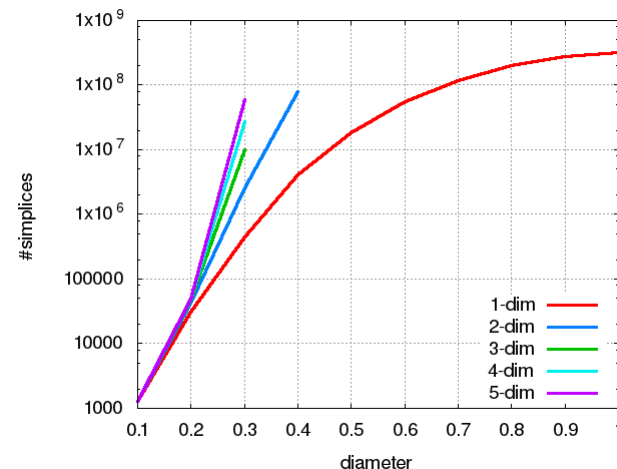
パレート解集合は5次元 ➡ 5次ホモロジー群まで計算するのが理想だが...



計算時間



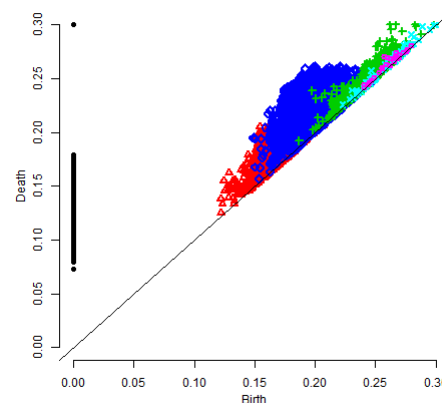
メモリ



単体の数

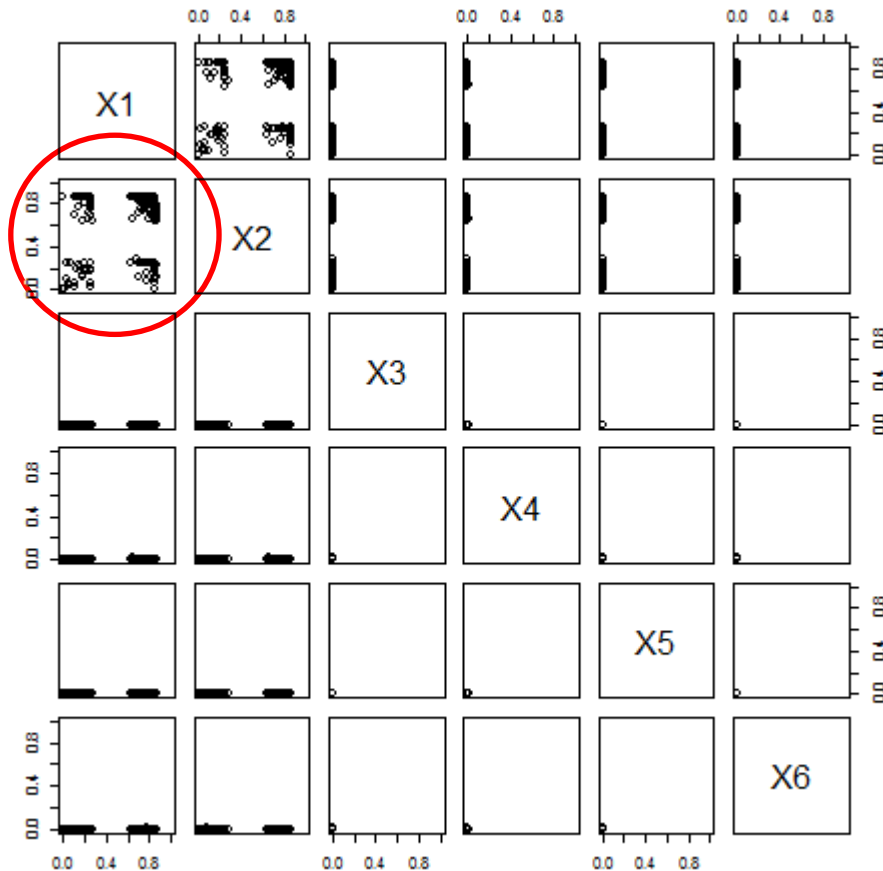
2次以上のホモロジー群はメモリ不足により
ノイズ的サイクルがすべて消滅する時刻まで
パーシステント図を計算できなかった

Xeon 3.5GHz, 64bit, 16GB RAM
シングルスレッドで計測

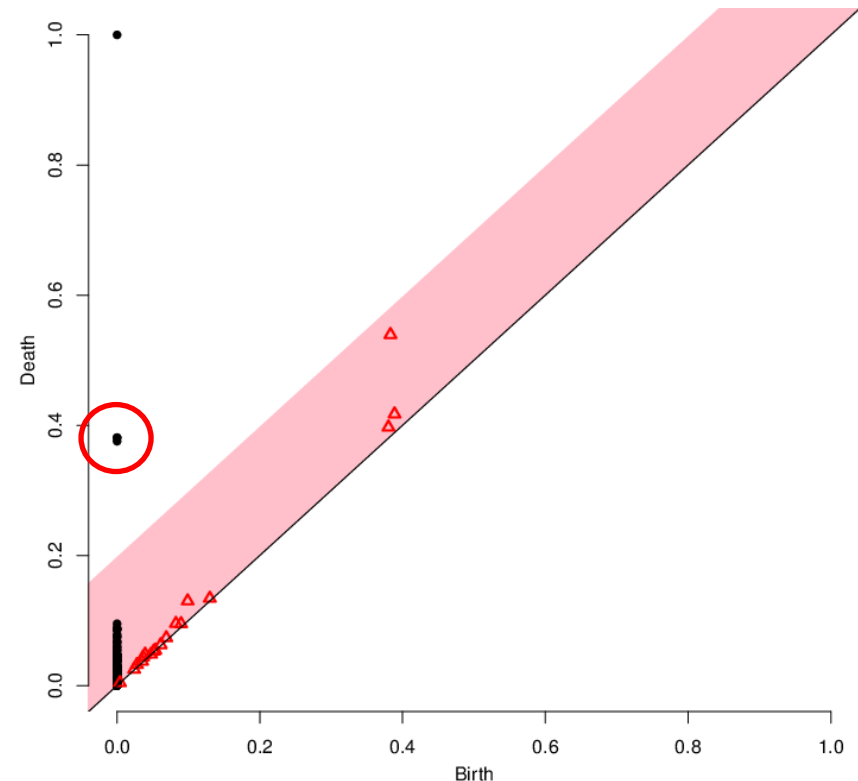


Rips複体の高次ホモロジー群は計算困難

考察 2 : 単純でない問題の非単純性の検出



22変数3目的DTLZ7に対して
MOEA/Dにより300点の近似解集合を求めた



1次までのパーシステントホモロジー群を計算
➡ 本質的な0次サイクルを4つ検出

(S1)不成立はパーシステント図で検出できる

考察 3 : 推定結果から何がわかるか？

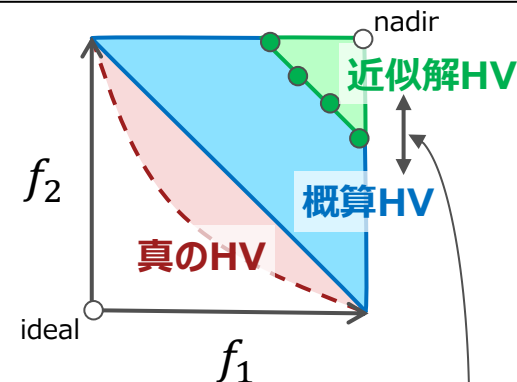
■ 単純であると推定された場合

※近似解集合はパレート解集合を十分被覆していると仮定する。
これは別途, Hypervolumeなどを計測して確認が必要。

- パレート解集合/フロントは『歪んだ単体』
- 滑層 = 部分問題のパレート解集合/フロント
- 各滑層には一部の目的を重視した解が連なっている

■ 単純でないとして推定された場合

- (S1)不成立 ➡ パレート解集合に穴が空いている
 - 穴を形成する単体はホモロジー群の生成元から特定できる
- (S2)不成立 ➡ 2つの可能性がある：
 1. パレート解集合に(目的数-1)次元ではない領域がある
 2. パレート解集合に同じ評価値をとる領域がある
 - これらの変則的な領域は交差した単体から特定できる
- 該当する単体については慎重な検討が必要
- それ以外の単体は単純な問題と同じ要領で理解できる



あまりにも乖離が大きい場合,
被覆できていない可能性がある。
(概算HVはideal/nadirから計算可能)

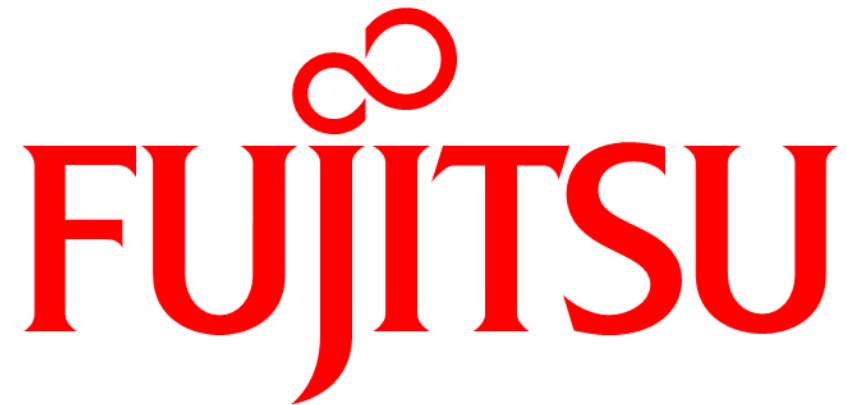
■ まとめ

- 多目的最適化問題の単純性の推定において、パーシステント図を用いてRips複体の直径を決定する方法を提案
- この直径を用いたとき、正しい推定結果が得られることを数値実験により確認

■ 今後の課題

- 高次元でのスケーラブルな複体構築とパーシステントホモロジー計算
- 本質的サイクルとノイズ的サイクルが混在するケースへの対処
- 信頼区間の擬陽性、偽陰性の定量的評価
- パーシステント図から直径を決定するプロセスの自動化

- [Chiba 2009] K. Chiba, Y. Makino and T. Takatoya. "Design-informatics approach for intimate configuration of silent supersonic technology demonstrator". AIAA Paper 2009-0968, 47th AIAA Aerospace Sciences Meeting (2009).
- [Fasy 2014] B.T. Fasy, F. Lecci, A. Rinaldo, L. Wasserman, S. Balakrishnan and A. Singh. "Confidence sets for persistence diagrams". arXiv:1303.7117 (2014).
- [Ghrist 2008] R. Ghrist. "Barcodes: the persistent topology of data". Bulletin of the American Mathematical Society, Vol. 45, No. 1, pp. 61-75 (2008).
- [JAXA 2007] 宇宙航空研究開発機構 (JAXA). "シミュレーション技術とは" (2007). <http://stage.tksc.jaxa.jp/jedi/jedi-WRS/SimIntro.html>
- [Koopmans 1951] T.C. Koopmans. "Analysis of production as an efficient combination of activities". In Activity Analysis of Production and Allocation (Proceedings of a Conference), No. 13 in Cowles Commission Monograph, pp. 33-97, John Wiley & Sons (1951).
- [Li 2009] H. Li and Q. Zhang. "Multiobjective optimization problems with complicated Pareto sets, MOEA/D and NSGA-II". IEEE Transactions on Evolutionary Computation, vol. 13, No. 2, pp. 284-302 (2009).
- [Lovison 2013] A. Lovison. "Global search perspectives for multiobjective optimization". Journal of Global Optimization, vol. 57, pp. 385-398 (2013).
- [Lovison 2014] A. Lovison and F. Pecci. "Hierarchical stratification of Pareto sets". arXiv:1407.1755 (2014).
- [Lovison 2015] A. Lovison and M.E. Hartikainen. "On generalizing Lipschitz global methods for multiobjective optimization". EMO 2015, Part II, LNCS 9019, pp.264-278 (2014).
- [Luc 1989] D.T. Luc. "Theory of vector optimization". LNEMS 319, Springer-Verlag (1989).
- [Obayashi 2005] S. Obayashi, S. Jeong and K. Chiba. "Multi-objective design exploration for aerodynamic configurations". AIAA Paper 2005-4666 (2005).
- [Smale 1973] S. Smale. "Global analysis and economics I: Pareto optimum and a generalization of Morse theory". In Dynamical Systems, pp. 531-544. Academic Press (1973).
- [Smale 1974a] S. Smale. "Global analysis and economics IIA: Extension of a theorem of Debreu". Journal of Mathematical Economics, Vol. 1, No. 1, pp. 1-14 (1974).
- [Smale 1974b] S. Smale. "Global analysis and economics III: Pareto optima and price equilibria". Journal of Mathematical Economics, Vol. 1, No. 2, pp. 107-117 (1974).
- [Smale 1974c] S. Smale. "Global analysis and economics IV: Finiteness and stability of equilibria with general consumption sets and production". Journal of Mathematical Economics, Vol. 1, No. 2, pp. 119-127 (1974).
- [Smale 1974d] S. Smale. "Global analysis and economics V: Pareto theory with constraints". Journal of Mathematical Economics, Vol. 1, No. 3, pp. 213-221 (1974).
- [Smale 1976] S. Smale. "Global analysis and economics VI: Geometric analysis of Pareto optima and price equilibria under classical hypotheses". Journal of Mathematical Economics, Vol. 3, No. 1, pp. 1-14 (1976).
- [大山 2004] 大山 聖. "設計の最適化について(2)". PLAINセンターニュース, 第132号 (2004). http://www.isas.jaxa.jp/docs/PLAINnews/132_contents/132_1.html
- [サイバネット 2014] サイバネットシステム株式会社. "適用事例". 汎用型最適設計支援ツール Optimus : サイバネット (2014). <http://www.cybernet.co.jp/optimus/example/example/>
- [濱田 2012] 濱田 直希, 永田 裕一, 小林 重信, 小野 功. "被覆度を考慮したマルチスタート法による多目的連続関数最適化: Adaptive Weighted Aggregation". 進化計算学会論文誌, Vol. 3, No. 2, pp. 31-46 (2012).
- [濱田 2013] 濱田 直希, 永田 裕一, 小野 功. "重みと解が区分連続かつ多対一に対応する状況へのAdaptive Weighted Aggregationの拡張に関する一検討". 計測自動制御学会 第40回知能システムシンポジウム 講演論文集, pp. 301-306 (2013).
- [濱田 2015] 濱田 直希. "単純な問題—解が位相的単体をなす多目的最適化の問題クラスについて—". 第9回進化計算シンポジウム講演論文集, pp. 75-88 (2015).
- [濱田 2016] 濱田 直希. "単純な問題のためのパレート解集合の数値的滑層分割". 第10回進化計算学会研究会資料集, pp. 220-229 (2016).
- [渡邊 2005] 渡邊 真也. "多目的遺伝的アルゴリズムの紹介と適用事例". 第二回ベストシステムズHPCフォーラム—HPC用ソフト技術の革新についての研究会— (2005). <http://www.bestsystems.co.jp/seminar/200502.html>
- [渡邊 2015] 渡邊 真也. "パレート解分析に関する技術動向". 日本機械学会 計算力学部門 設計情報学研究会 DI Lecture Series 8 (2015). <http://www.ifs.tohoku.ac.jp/cmd/reference.html>



shaping tomorrow with you