

Multiobjective Optimization and Visualization of Pareto Solutions

正 大林 茂 (東北大)

Shigeru Obayashi, Institute of Fluid Science, Tohoku University

Key Words: Evolutionary Computation, Datamining, Self-Organizing Map, Artificial Neural Net, CFD

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。これまでの設計トレードオフの検討が、特徴的なパラメータを1次元的に変化させて、性能の変化を調べていたのに比べ、パレート解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。

筆者らは、それらの方法の中で特に多目的遺伝的アルゴリズム(MOGA)と呼ばれる手法を、空力最適化問題に適用してきた⁽¹⁻³⁾。特に最近の研究⁽³⁾では、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、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。しかし、このトレードオフの様子を把握することは困難である。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となるからである。これまでは、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、解を吟味してきたが、実際にはほんの数個の解を調べるにとどまっていた。

本研究ではデータマイニングの手法を取り入れることで、パレート面の性質を考察する。このために、コホネンの自己組織化マップ^(4,5)を導入し、766個のパレート解によって表される3次元パレート面を可視化し、その有効性を検討する。

2. 自己組織化マップ

2.1 データマイニング データマイニングとは、データの爆発に対応して否応なくビジネスの現場で磨かれてきたデータ処理法の総称である。使えるものは何でも使うという立場から、データマイニングの手法は古典的な多変量解析からニューラルネットまで何でも使う。しかし、データマイニングと古典的な手法の違いを際立たせているのは、なんとといっても後者のニューラルネットの利用であろう。

ニューラルネットは、神経回路網のモデル化であり、機械に学習させるという点が特徴的である。この方法では、回帰分析のように特定のモデル(方程式)を仮定しない。別の見方をすると、データの主成分分析のように線形変換の積み重ねで現象を記述するのではなく、ニューラルネットという非線形関数の重み付けでデータの概要を理解しようとする。

また、古典的な統計学では、最良の推定量を採用する。すなわち、統計量の最適性・一意性を積極的に保証する。しかし、ニューラルネットでは、トポロジーやトレーニングを変えれば、得られるニューラルネットも変化する。時間をかけてベスト(最適で一意的)な解を求めるより、必要なときにベターな解を得ること、データ構造をモデル化し検証するのはなく、データの構造を発見することに主眼がおかれている。

2.2 自己組織化マップ 自己組織化マップ(Self-Organizing Map, SOM)^(4,5)は、近年データマイニングの一手法として脚

光を浴びている。SOMは提案者の名前を取ってコホネンネットとも呼ばれる、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。

SOMは記憶のモデル化の研究から生み出された。大脳皮質の特定の領域は、特定の感覚を受け持つように組織化されている(Fig.1)⁽⁶⁾。記憶に対しても幾何学的に組織化されたマップが形成されると考えられている。この神経機能の空間的な順序づけと組織化をモデル化したものがSOMである。

SOMは多次元のデータを圧縮して、低次元(2次元)に写像する。すなわち、SOMを用いると高次元空間の可視化ができる。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(Fig.2)。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(Fig.3)。

このように形成されたマップは、我々が直感的に理解している地図とは異なる。通常地図では、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。その代わりとして、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。本研究ではSOMの作成に、Viscovery® SOMine 3.0J⁽⁷⁾を使用した。

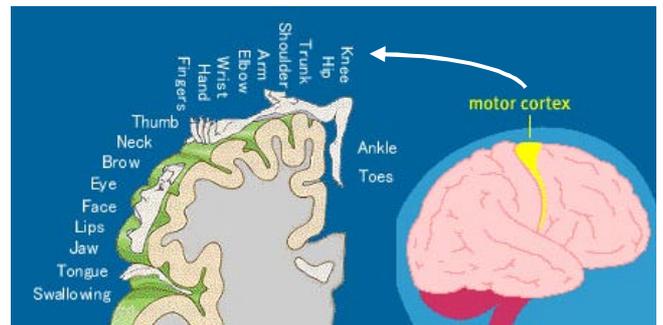


Fig. 1 Brain map of the motor cortex

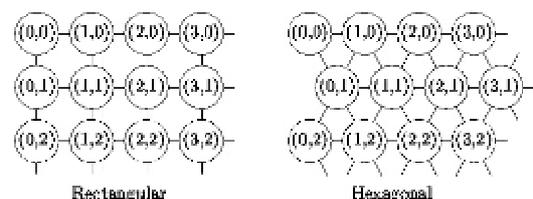


Fig. 2 Different topologies used in the SOM

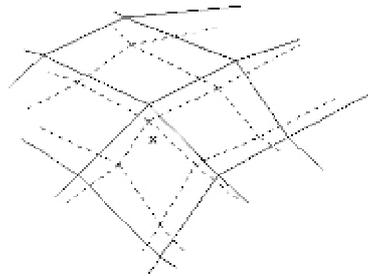


Fig. 3 Updating the best matching unit and its neighbors

3. パレート解の自己組織化マップ

超音速翼の多目的最適化では、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。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次元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.4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.5に極限パレート解の翼平面形を示す。

これらの解から、SOMを作るとFig.6のようになる。各目的関数を最小化する解を含むようなクラスターができる。またクラスター間では、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。

Fig.6のSOMのクラスタリングを細分化し、各領域の平均を取ることで、代表的なパレート解を48個作った。この設計変数のデータに対して、新しいSOMを作ってみた(Fig.7)。これによって得られる設計変数のクラスタリングにより、パレート解を形作るためにどのような設計変数が関連を持って働いているのが可視化できる。特に翼平面形に関する設計変数が左下にクラスタを形成しており、平面形が重要であることを裏付けている。これに続くクラスタでは、翼のキャンバーに関する設計変数が主であり、線形翼理論の指摘する重要な性質と一致している。さらに、右に移動するに連れて翼厚に関する設計変数が登場するが、これらの設計変数の重要性に関する並び具合は、一般の翼理論とよく対応する。

SOMによるクラスタリングは、パレート解の可視化のみならず、設計空間の分類・構造の解明にも役立つと考えられる。

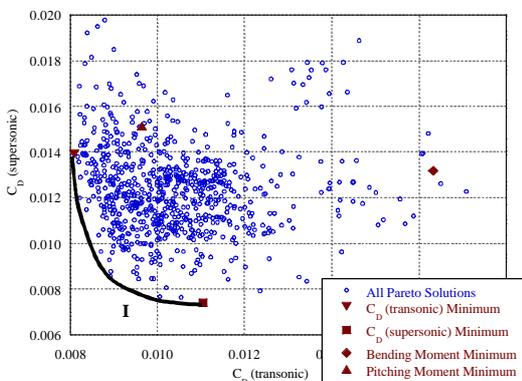


Fig. 4 Projection of Pareto solutions into two-dimensional plane between transonic and supersonic drag coefficients

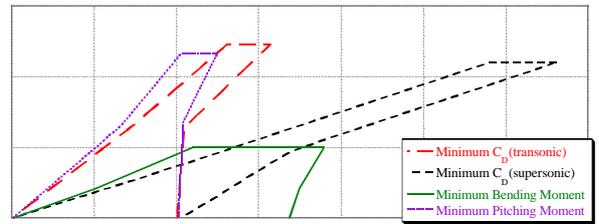


Fig. 5 Planform shapes of the extreme Pareto solutions

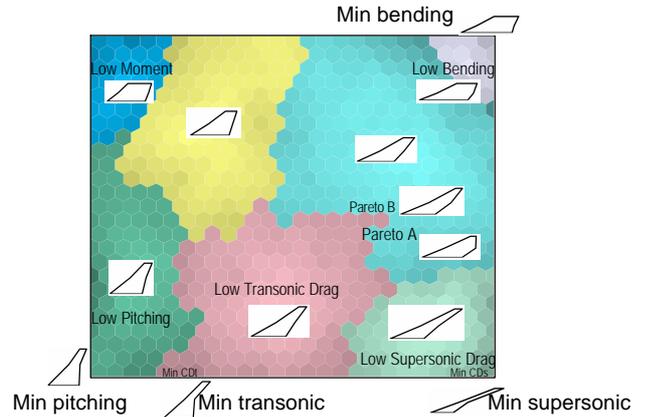


Fig. 6 SOM of Pareto solutions in the objective function space for supersonic wing design

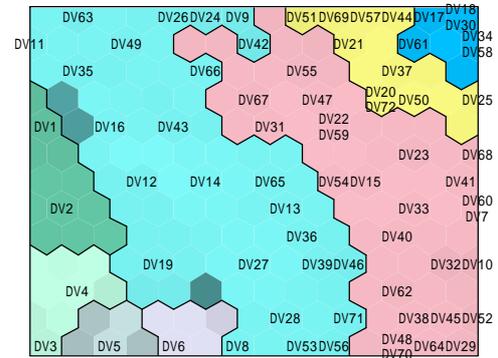


Fig. 7 SOM of design variable space

引用文献

- (1) Obayashi, S., et al., "Multiobjective Evolutionary Computation for Supersonic Wing-Shape Optimization," *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, Vol. 4, No. 2, pp. 182-187, 2000.
- (2) Sasaki, D., et al., "Multiobjective Aerodynamic Optimization of Supersonic Wings Using Navier-Stokes Equations," *Proc. of ECCOMAS 2000 [CD-ROM]*, 2000.
- (3) Sasaki, D., et al., "Navier-Stokes Optimization of Supersonic Wings with Four Design Objectives Using Evolutionary Algorithm," AIAA-2001-2531, June 2001.
- (4) Kohonen, T., *Self-Organizing Maps*. Springer, Berlin, Heidelberg, 1995.
- (5) <http://www.cis.hut.fi/~jhollmen/dippa/node7.html>
- (6) <http://www.pbs.org/wgbh/aso/tryit/brain/mapcortex.html>
- (7) <http://www.eudaptics.com/technology/somine.html>