

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

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。そこで本研究では、多目的最適化によるトレードオフ情報の効率的な提示により、設計空間の構造を俯瞰的に可視化することで、設計者が設計候補を容易に選択できる方法を提案する。このアルゴリズムは、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[1]。

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。そこで本研究では、「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)と名付け、アルゴリズムの構築と応用の研究を行った。

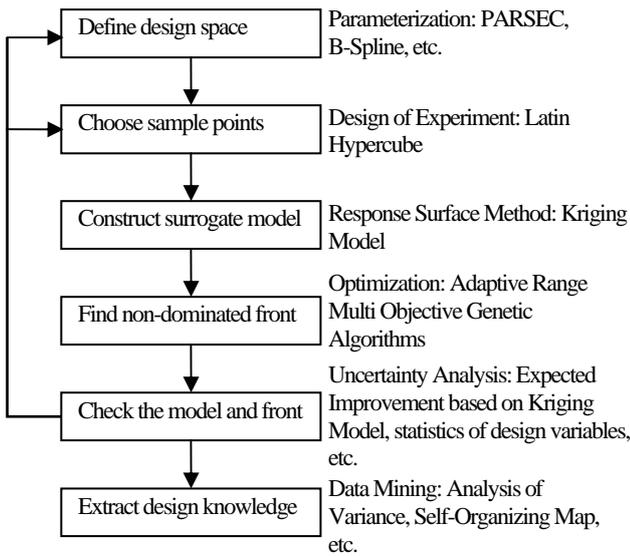


Fig. 1 多目的設計探査(MODE)

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}_β は \mathbf{x}_α に支配されている」あるいは「 \mathbf{x}_β は \mathbf{x}_α の劣解」と言う。

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

逆に、上式を満たす \mathbf{x}_β が存在しない場合には、「 \mathbf{x}_β は \mathbf{x}_α に支配されない」あるいは「 \mathbf{x}_β は \mathbf{x}_α 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。

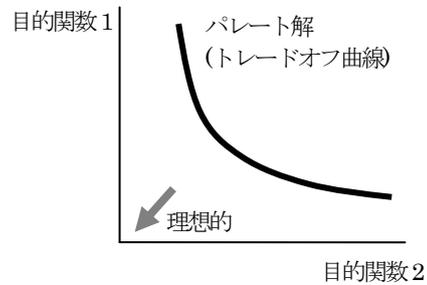


Fig. 2 2目的関数間のトレードオフ関係

本研究の特徴は、トレードオフの可視化法として自己組織化マップを適用していることである。近年、三菱重工との共同研究により、リージョナルジェット機主翼形状に対して CFD と NASTRAN を適用し、空力・構造・空力弾性を考慮した多分野融合最適化システムを構築した。本稿では、この設計探査から得られたデータに基づき、設計空間の構造を自己組織化マップにより可視化した例を報告する[2]。

2 SOMによるトレードオフの可視化

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たことができる。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。本研究では SOM の作成に、Viscovery® SOMine 4.0 を使用した[4]。

3 多分野融合最適化

新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)の援助のもと、YS-11 以来の純国産旅客機研究開発計画が 2003 年より産官学共同研究で進められている。本研究ではその 3次元主翼形状の設計探索について可視化結果を中心に報告する[2]。

目的関数として、Block Fuel(要求飛行距離に必要な燃料量)の最小化を採択、加えて最大離陸重量及び遷音速亜音速間の抵抗値差分の最小化を考え、計 3 目的による最適化問題を解く。翼平面形・胴体を固定、翼の前後桁も一定位置とした。設計変数は翼断面・捻り・上反角とし、総計 35 設計変数で一個体の形状を表現する。さらに 5 つの制約条件を課した。各々の個体形状は、初期形状からの差分値を用いて移動格子法により生成する。詳細は文献 2 を参照されたい。



Fig. 3 翼胴形状(左)と CFD 非構造格子・FEM 構造格子(右)

本システムでは、NASTRAN を用いて構造最適化を行い、荷重による変形やフラッターに関する拘束条件を考慮しつつ、CFD を用いて Block Fuel を評価する。8 個体からなる一世代の評価に 70 回程の Euler 計算と 90 回程程度の N-S 計算を行う必要がある。最適化システムが非常に大規模なものとなったため、最適化自体よりも設計空間の探索を主目的として

進化的アルゴリズムを適用し、すべての目的関数について初期個体よりも改善が得られた 19 世代で計算を終了した。

Fig.4 にその探索により得られた設計空間の俯瞰図を示す。図の右下に 3 目的とも値が低くなるスイートスポットがあることがわかる。一方、Fig.5 では、同じ自己組織化マップを翼キック位置での上反角と遷音速抵抗値で色づけした。これより翼が下反角を持つと抵抗が増加するが、上反角の場合は抵抗が高い場合も低い場合もあり、あまり影響がないことがわかる。一方、上反角を持つことは構造重量の観点からは不利である。

19 世代が終了した時点でのトレードオフ面のほぼ中央にある個体は Block Fuel で 1%の改善しかなかった。しかし、上反角は空力性能改善に効果がないことがわかったので、この個体の上反角をゼロとして翼を作り直して評価したところ、Block Fuel で 3.6%の改善を得ることができた。この例は、比較的少数の設計探索でも、設計空間に関する適切な知識が得られれば、よりよい設計解を見出すことができることを示している。

なお、本稿で紹介した小型旅客機主翼形状の最適化は NEDO 援助のもとで 三菱重工との共同研究により実施した。関係者各位の方に感謝の意を表す。

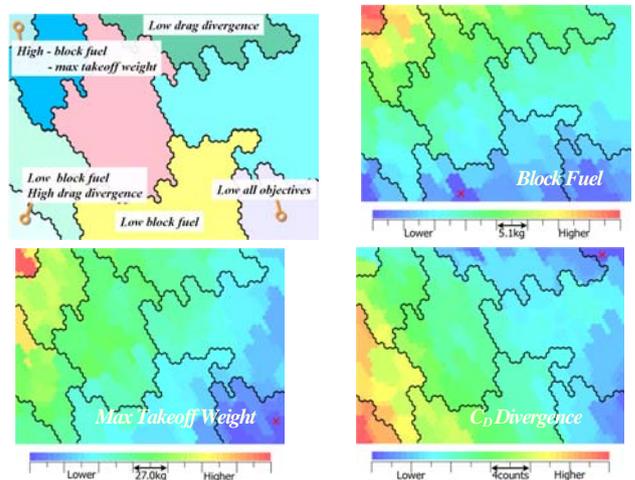


Fig. 4 自己組織化マップによる設計空間の可視化

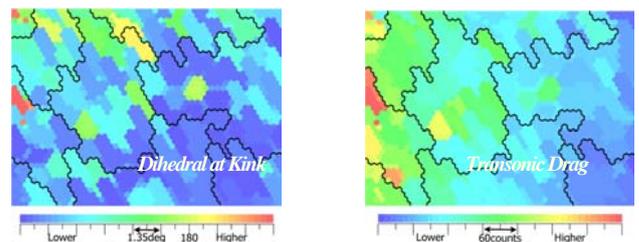


Fig. 5 翼上半角の遷音速抵抗への影響の可視化

参考文献

- [1] 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.
- [2] 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.
- [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)