

球面 SOM によるパレート解集合の可視化の検討 ——ディーゼルエンジン設計問題における事例の検討

吉見真聡^{†1} 西本 要^{†2}
廣安知之^{†3} 三木光範^{†1}

本研究では、自己組織化マップ (SOM: Self-Organizing Maps) におけるデータの配置を 3 次元上で行う球面 SOM を用いて、多目的最適化により得られたパレート解集合の可視化を行う。従来から、平面 SOM を用いたパレート解集合の可視化については研究されているが、類似性の高いパレート解が、マップの端においては近くに配置されない場合があった。本論文では、平面 SOM では判断できないパレート解集合内の類似データの発見を球面 SOM で可能であることを、ディーゼルエンジンの多目的最適設計におけるパレート解集合の特性評価を例に示す。

Discussions of Pareto Solutions for Visualization Multi-objective Optimization Problems Using Spherical Self-organizing Maps ——Case Study Discussions through Diesel Engine Design Problems

MASATO YOSHIMI,^{†1} KANAME NISHIMOTO,^{†2}
TOMOYUKI HIROYASU^{†3} and MITSUNORI MIKI^{†1}

In this paper, Self-Organizing Map (SOM) which is one of neural network systems was applied to illustrate the Pareto solution set which is derived by multi-objective optimization. Especially, this paper describes that Spherical SOM is effective for illustrating the Pareto solution set. These discussions have been performed through the illustration examples of Pareto solution set of multi-objective optimization design problem of diesel engine parameter problems.

1. はじめに

ハードウェアとソフトウェアの急速な性能の向上にともない、数値シミュレーションが“ものづくり”の設計現場において広く利用されるようになってきた。そこでは、建築物や工業製品における作図をコンピュータで行う Computer Aided Design (CAD) から、Finite Element Method (FEM) といったアプリケーションによる設計対象の解析も頻繁に行われている。さらに数値シミュレーションを用いた設計パラメータの最適化¹⁾ および解候補の妥当性の検討も行われるようになってきた²⁾。今後、ますますハードウェアなどの性能が向上すれば、大きく計算時間のかかっていた数値シミュレーションにおいても瞬時に結果を求めることができるようになり、設計者の支援がますます可能となる。

数値シミュレーションにより設計支援を行うためには、問題を最適化問題として定式化することが有効である。最適化問題は、目的関数の値を最大もしくは最小とするような設計変数を制約条件内で決定する問題である。実問題の最適化問題には目的関数が複数存在し、トレードオフの関係が存在するケースが多い。このような問題は多目的最適化問題と呼ばれる。多目的最適化問題において、目的関数間にトレードオフの関係である場合には、互いにすべての目的関数値が劣らない最適点の集合が存在することとなる。これらの最適点の集合はパレート解集合と呼ばれ、これまでパレート解集合を求める数々のアプローチが提案されてきた³⁾。先に述べたように、ハードウェアやソフトウェアの性能が向上すればパレート解集合を瞬時に求めることが可能となる。そうなれば数値シミュレーションの設計において非常に強力なツールとなる。その際には、得られたパレート解集合の中から設計候補となる解を絞り込むフェーズが非常に重要となる。

設計者が得られたパレート解集合の中から設計候補となる解を絞り込むためには、いくつかの解決すべき問題が存在する。その 1 つが得られたパレート解集合内に存在する解の性質を把握することである。すなわち、パレート解集合がどのような性質を持つ解から構成されているのかをクラスタリングなどのデータマイニングから把握しなければならない。そのためには、パレート解集合の分類を設計者に提示する必要があるが、パレート解集合の設計

^{†1} 同志社大学理工学部
Faculty of Science and Engineering, Doshisha University

^{†2} 同志社大学工学部
Faculty of Engineering, Doshisha University

^{†3} 同志社大学生命医科学部
Department of Life and Medical Science, Doshisha University

者への提示には次の問題が存在する。すなわち、各解が目的関数値と設計変数値から構成される多次元であるのに対して、ユーザが視覚的に把握可能な次元数はたかだか 3 ということである。表示するためにはこのギャップを埋める必要がある。これを解決するためには、なんらかの方法でマッピングを生成し、高次元のデータを低次元のデータへと変換する方法が考えられる。山代らは、クラスタリングした結果を、Fuzzy Multiple Discriminant Analysis (FMDA) を用いて次元を抽出している⁴⁾。また、ニューラルネットワークの一種である自己組織化マップ (SOM)⁵⁾ の利用も有効である⁶⁾。ここでは、SOM によりパレート解集合を表示すると、ユーザが理解可能な 3 次元以内にマッピングできるだけでなく、解集合をクラスタリングすることで、設計者に対して非常に有益な情報を提供できる⁶⁾。

本研究においては、このような背景から、多目的最適化問題において得られたパレート解集合を SOM により可視化することの検討を行う。さらに SOM の中でも学習データを球面上にマッピングする球面 SOM⁷⁾ に着目する。パレート解集合を解析する場合、どのようなクラスターに解が存在するのかを把握することも重要であるが、着目する解の近辺にどのような解が存在するのか、もしくは着目する複数の解の位置関係がどのようにになっているかを把握することも重要である。SOM において得られたマップ上での近いデータは類似しているという関係がある。一方で、マップ上での遠いデータは類似度が低いかどうかは決定的ではない。そのため、パレート解集合を吟味する設計者はできるだけ類似したデータがマップ上で近接していることが望まれる。平面 SOM においては、中央付近に配置されたデータの周辺の類似度は判定しやすいが、マップの端の付近においては、その類似度の判定が難しい。球面 SOM は、平面 SOM と比較して、マップの端で情報のゆがみがないことが報告されている⁸⁾ だけでなく、球面 SOM は、平面 SOM に対して、マップの端が存在しないという特性を有するために、各データ間の比較的合理的な位置関係を表示でき、クラスタリングを行う際にも高い精度が報告されている^{7),9)}。

本研究では実際に設計問題において得られるパレート解集合を球面 SOM により表示し、類似度の高いデータがマップ上の近傍に配置されることで、平面 SOM よりも設計者がより解の傾向を把握しやすくなることを示す。まず、多目的遺伝的アルゴリズムの研究で頻繁に使用されているテスト関数の結果から得られるパレート解集合を例に、球面 SOM の有効性を検討する。次に、ディーゼルエンジン設計問題を対象として、パレート解集合の表示の有効性の事例を紹介する。近年のエンジンでは、電子制御可能なパラメータが多く存在し、これらを変更することで、エンジン稼働中にもエンジンの燃費や NOx の排出量を制御することが可能である。しかしながらこれらの燃費や NOx の排出量の間にはトレードオフ

の関係があり、パラメータの決定問題は多目的最適化問題として定式化可能である。パレート解集合内に存在する解候補のうち、目的や設計変数の値が近い解候補群が球面 SOM において近い位置に存在し、逆に遠い解候補群が遠い位置に存在する例を示す。

2. 多目的最適化問題

複数の目的を同時に最適化する問題を多目的最適化問題という。多目的最適化問題は一般的に、 n 個の設計変数を扱う k 個の目的関数 $f(x)$ を、 m 個の制約条件 $g(x)$ のもとで最小化 (最大化) する問題として式 (1) のように定式化される¹⁰⁾。

$$\begin{cases} \min(\max) & f_i(x_1, x_2, \dots, x_n) & (i = 1, 2, \dots, k) \\ \text{subject to} & g_j(x_1, x_2, \dots, x_n) \leq 0 & (j = 1, 2, \dots, m) \end{cases} \quad (1)$$

多目的最適化問題では、一般に複数の目的関数どうしが互いに競合する場合が多いため、すべての目的関数 $f_i(x)$ を同時に最適化することはできない。そこで、多目的最適化問題では、ただ 1 つの最適解を求めるかわりに、パレート解の集合を求める。

パレート解は、多目的最適化問題における解の優越関係により定義される¹¹⁾。多目的最適化における解の優越関係の定義を以下に示す。ただし、すべての目的関数の最適化は最小化であると仮定する。

定義 (優越関係): $x_1, x_2 \in \mathfrak{S}(x = (x_1, x_2, \dots, x_n))$ とする。

(a) $f_i(x_1) \leq f_i(x_2)$ ($i = 1, \dots, k$) のとき、 x_1 は x_2 を優越するという。

(b) $f_i(x_1) < f_i(x_2)$ ($i = 1, \dots, k$) のとき、 x_1 は x_2 を強い意味で優越するという。

もし、 x_1 が x_2 を優越しているならば、 x_1 の方が x_2 よりも良い解である。そのため、多目的最適化では、他のどの解にも優越されないような解の探索を行う。次に、この優越関係に基づくパレート解の定義について以下に示す。

定義 (パレート解): $x_0 \in \mathfrak{S}(x = (x_1, x_2, \dots, x_n))$ とする。

(a) x_0 を強い意味で優越する $x \in \mathfrak{S}$ が存在しないとき、 x_0 を弱パレート解 (Weak Pareto-optimal solution) という。

(b) x_0 を優越する $x \in \mathfrak{S}$ が存在しないとき、 x_0 をパレート解 (Pareto-optimal solution) という。

図 1 に目的が 2 つ ($k = 2$) の場合におけるパレート解の例を示す。図 1 の黒丸はパレート解を示している。白丸はあるパレート解からすべての目的において劣っている。そのため、白丸はパレート解の候補から除外することができ、最終的に図 1 に破線で示されるパ

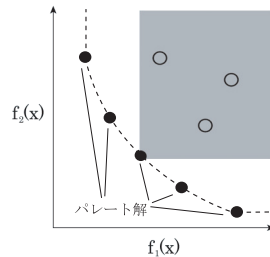


図1 パレート解
Fig.1 Pareto solution.

レート解集合が形成する面を得ることができる．この面をパレート最適フロントと呼ぶ．

3. 球面 SOM

3.1 SOM の概要

SOM はデータマイニングの一手法として知られる，教師なしの学習型ニューラルネットワークである．高次元のデータ群から直感的に特徴を把握することは困難である．SOM は多次元のデータを低次元（2次元あるいは3次元）に落とし込むことで，高次元データを可視化し特徴の把握を容易にする．

3.2 SOM のアルゴリズム

SOM は競合層と呼ばれるニューロンが配置された空間と，入力層と呼ばれる入力データ群からなる．順に入力データを用いて学習を繰り返すことで，競合層に学習結果を形成していく．競合層の i 番目のニューロンと入力層の入力データはそれぞれ n 次元の重みベクトルを持ち，ある時刻 t において $\mathbf{m}_i(t)$ ， $\mathbf{x}(t)$ と定義される．また，学習の効果と範囲を示す学習率係数 $\alpha(t)$ ，近傍関数 $h_{ci}(t)$ および近傍幅 $\sigma(t)$ が設定される．基本的な SOM のアルゴリズムは以下の手順で実行される．

(1) 競合層の初期化

$t \leftarrow 0$ とし，競合層の全ニューロンの重みベクトル $\mathbf{m}_i(0)$ に初期値を設定する．

(2) 距離計算

入力データ $\mathbf{x}(t)$ を競合層に与え $\mathbf{m}_i(t)$ との距離 $\|\mathbf{m}_i(t) - \mathbf{x}(t)\|$ を計算する．

(3) 勝者ニューロンの探索

$\|\mathbf{c} - \mathbf{x}(t)\| = \min \|\mathbf{m}_i(t) - \mathbf{x}(t)\|$ を満たす勝者ニューロン c を探索する．

(4) 学習

勝者ニューロン c と競合層における距離が d_{ci} 以内にある全ニューロンの重みベクトルに対して式 (2) を用いて学習を行う．式 (2) の近傍関数 $h_{ci}(t)$ は学習率係数 $\alpha(t)$ を用いて式 (3) で定義され，学習率係数 $\alpha(t)$ と近傍幅 $\sigma(t)$ は式 (4)，式 (5) で定義される．勝者ニューロンから所定の近傍幅 $\sigma(t)$ の距離にあるニューロンまたは平面の端のニューロンまでを範囲として学習が行われる．

$$\mathbf{m}_i(t+1) = \mathbf{m}_i(t) + h_{ci}(t)(\mathbf{x}(t) - \mathbf{m}_i(t)) \quad (2)$$

$$h_{ci}(t) = \begin{cases} 0 & (d_{ci} > \sigma(t)) \\ \alpha(t) & (d_{ci} \leq \sigma(t)) \end{cases} \quad (3)$$

$$\alpha(t) = \alpha(0)(T-t)/T \quad (4)$$

$$\sigma(t) = \sigma(0)(T-t)/T \quad (5)$$

(5) 終了判定

$t < T$ ならば $t \leftarrow t+1$ とし，手順 (2) へ戻って繰り返す． $t = T$ ならば終了する．

$\alpha(0)$ は通常 $[0, 1]$ の範囲の値， $\sigma(0)$ は通常 1 より大きな整数値で平面 SOM の場合は 1 行または 1 列のニューロン数の $1/2$ から $1/3$ 程度の値を使用する．

4. 球面 SOM とその実装

4.1 球面 SOM

SOM は競合層の形状が大きく結果に影響を与え，空間に端が存在する平面状の競合層では，学習領域に含まれるニューロン数がニューロンごとに異なることから，歪みが生じてしまう場合がある．そこで端が存在しない競合層の形状としてはトーラスや球面などの閉じた曲面が提案されている．これらの形状を使用する SOM においては，連続的な空間上で学習が行われるため，空間の端で学習が打ち切られることはなくなる．しかしトーラスは平面 SOM の拡張として実装が容易である一方で，可視化される空間はドーナツ型になるため，ニューロン間の位置関係が把握しにくい．一方でニューロンを球の表面上に配置する球面 SOM は，3次元空間上で位置関係の把握がしやすく，可視化を目的とした SOM の競合層の形状として適しているといえる．

4.2 競合層の構成

球面 SOM を実現するデータ構造として，測地ドームと呼ばれる準正多面体が多く使われている．測地ドームとは正多面体の各辺を二等分する処理を繰り返し，面数を再帰的に増

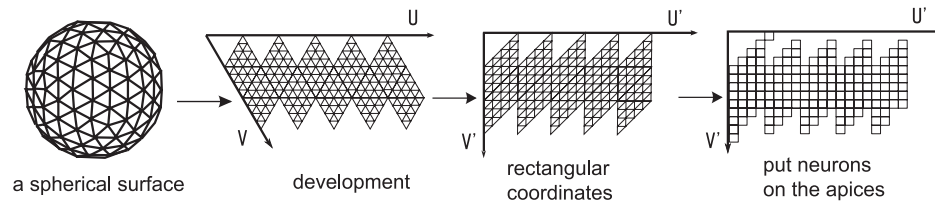


図 2 2次元配列での球面の表現方法

Fig. 2 Description of spherical surface on a two-dimensional array.

やすことで、近似的に球面を作成する手法である。ニューロンを測地ドームの各頂点に配置することで、六角格子のデータ構造として扱う。測地ドームを用いた方法は極座標を用いる場合などに比べ、球面上にニューロンをほぼ均一に配置することができる。また、球を近似する多面体の面数が多いほど各頂点を均一に配置できるため、本論文では正多角形の中で最も面数の多い正二十面体を使用する。

正二十面体における正三角形の各面をさらに細かな三角形に分割することで、球面上の頂点数を増やすことができる。これはニューロンの数（マップサイズ）と同じ意味を持つため、たとえば、1つの正三角形（頂点数3）を2段（正三角形4つ）に分割すると、隣接する2面の正三角形（ひし形）に含まれる頂点数は9となる。ここから、隣接するひし形と重複する端の頂点を除くと、各ひし形ごとに持っている頂点数は4になる。同様に、正三角形を3段に分割すると頂点数は9、4段では16と、頂点数を増やすことができ、 n 段では n^2 個となる。正二十面体の展開図にはこのひし形が10面存在するため、この方法で計算に入っていない展開図の最も上と下の頂点の2点を加えて、合計で $10n^2 + 2$ 個の頂点が存在する。

多面体を用いて球面を近似する場合、その展開図は2次元平面に割り付けて取り扱うことができる。そのため、図2で示すように、ニューロン構造体の2次元配列を使用し、その内部に球面の展開図が割り当てられた形で競合層を表現する。

4.3 ニューロンの構造体

SOMでは競合層を、ニューロンを表す構造体の2次元配列として確保する。この競合層に対してSOMの計算を行うが、球面SOMを実現するために各ニューロン構造体が備える変数を以下に示す。

隣接するニューロンへのリンクのリスト

球面SOMにおける各ニューロンの形状は六角格子と見なされるため、隣接するニューロンは6つである。平面SOMの場合は簡単な引数計算で隣接ニューロンの2次元配

列中の位置を取得できるが、球面SOMでは場所によって取得できない場合がある。それは、正二十面体の展開図の端点部分である。端にあるニューロンの隣接ニューロンは、計算では取得できないため、隣接ニューロンへのアドレスのリストを持たせることとし、近傍のニューロンはこのリストを参照して得る実装とした。

重みベクトル

各ニューロンの重みベクトルのデータを一次元配列で保持する実装とした。

ユークリッド距離

距離計算の際に得られた入力データと各ニューロンのユークリッド距離を一時的に保持する。

学習済み判定フラグ

各ニューロンが学習済みであることを示すフラグを持っており、学習の重複を防ぐ。

有効領域の判定フラグ

2次元配列のうち、競合層として有効な部分であることを示すフラグを持っており、距離計算、勝者選択を行う範囲を制限する。

描画時の3次元座標

球面を描画する際の3D空間上での座標の値を保持する。

4.4 距離計算と勝者探索

距離計算はニューロンごとの依存関係がなく並列に計算が進められる。また、勝者探索は各ニューロンが持つユークリッド距離の最小値を求める処理であるので、ニューロン構造体の2次元配列を順次探索することで求められる。これら2つの手順は平面SOMでの処理と同様である。球面SOMで生じる差異は、各ニューロンにおける処理の前に有効領域の判定フラグを確認し、計算対象の配列要素が球面に割り当てられているか否かを判定する。

4.5 学習するニューロンの探索

SOMの学習では、マップのある位置から任意の距離にあるニューロンを取得する必要がある。本論文の球面SOMでは、隣接ニューロンへのリンクを再帰的にたどることで一定の深さの探索木を構成し、任意の範囲に対する学習を実現する。木の探索には幅優先探索を行い、勝者ニューロンとの距離が近い順に学習を行う。以下に探索の手順を示す。

(1) 勝者ニューロンの学習

勝者選択の手順で得られた勝者ニューロンについて学習を行う。この後、重複を避けるために学習済み判定フラグを立てておく。

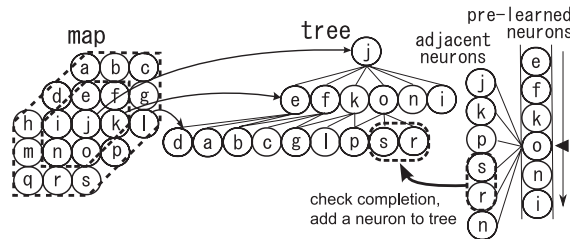


図3 学習するニューロンの探索
Fig. 3 Searching methodology of a learning neuron.

(2) 隣接ニューロンの探索と学習

図3で示すように、勝者ニューロンの隣接ニューロンを取得して、それぞれに対して学習を行う。この後、近傍幅の範囲内で、さらに隣接ニューロンを取得して学習の処理を繰り返す。このとき、学習の前処理として学習済みフラグを確認し、より勝者ニューロンに近いニューロンに対する重複学習を防ぐ。

4.6 競合層の表示方法

競合層の可視化には、各ニューロンを色付けして表示する方法が重要である。本論文では、HSV色空間を利用して重みベクトルの値に応じてニューロンの彩色を行い、競合層の可視化を行った。HSV色空間を用いて、彩度(Saturation)と明度(Value)は最大値で固定し、パラメータに応じた色付けは色相(Hue)部分で行う。色相は[0, 360]で設定できるが、本論文では[0, 280]の範囲を使用して、値の大きなデータは赤色、小さなデータは紫色の傾向が出るような割当てを行っている。

5. 球面 SOM によるテスト関数のパレート解集合の可視化

5.1 ZDT2

実問題において球面 SOM によるパレート解集合の可視化の検討を行う前に、本章では、多目的最適化問題において代表的なテスト関数の1つである ZDT2 から得られるパレート解集合を用いて検討する。ZDT2 は式(6)で定義される単峰性で非凸型な関数である。

$$\begin{aligned} \min f_1 &= x_1 \\ \min f_2 &= g \times h \\ g &= 1 + 9 \sum_{i=2}^n f_i / (n - 1) \end{aligned} \tag{6}$$

表1 SOM の設定
Table 1 Configuration of SOM.

	ニューロン数(個)	学習回数(回)	学習率係数の初期値	近傍半径の初期値
平面 SOM	900 (30 × 30)	100,000	0.05	15
球面 SOM	1,002 (10 × 10 × 10 + 2)	100,000	0.05	15

$$h = 1 - \sqrt{x_1/g}$$

5.2 球面 SOM による可視化に見られる特徴

ZDT2 から得られたパレート解の目的関数と、それを決定した設計変数をパラメータとして有するデータについて球面 SOM で可視化を行った。目的関数が2次元、設計変数が10次元の計12次元をデータとして定義し、本実験では100個のデータ群を球面 SOM への入力データとして用いた。

比較のために、平面 SOM として無料配布されている SOM のパッケージ SOM_PAK を利用した。SOM_PAK は競合層の大きさなどを設定でき、学習結果を数値データと可視化用の画像データで出力する。格子の形は六角、近傍関数はステップ関数にそれぞれ設定した。設定に用いた数値を表1に示す。初期設定の試行回数を100,000回と設定したため、100個のパレート解は1,000回ずつ競合層を学習する。

作成した球面 SOM は平面 SOM と条件を等しくするために近傍関数にステップ関数、競合層の初期化にランダムを用いた。設定に用いた数値を表1に示す。

球面 SOM によって得られた結果を図4に示す。色は目的関数の値を示しており、 f_1 の値が高ければ赤く、低ければ紫となる。

図5は平面 SOM での学習結果を示している。色付けの方法は球面 SOM と同じである。そのため、マップの右下に f_1 の値が高いデータが、左下に低いデータがそれぞれ配置されていることが分かる。

図5における点 p_1 から点 p_3 までに置かれたデータの各パラメータを図6に示す。この図より p_1 と p_2 は p_3 と比較して類似したデータであるといえ、 p_1 と p_2 はマップ上でも近傍に配置された方が、パレート解集合を検討する設計者には理解がたやすい。これら3点は平面 SOM では離れた位置に配置されているが、球面 SOM では点 p_1 と点 p_2 は近くに配置された。図6から点 p_1 と点 p_2 は他の点どうしの組合せに比べ類似していることがうかがえた。もちろん、すべてのデータの関係がこのような配置であるわけではないが、このように平面 SOM では発見できないデータの類似関係が球面 SOM で発見可能であることを

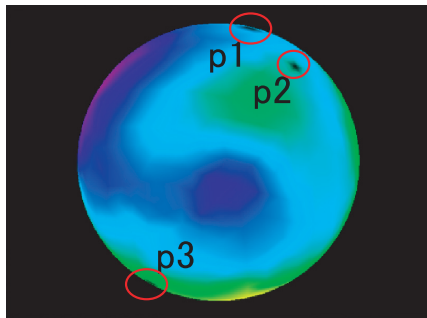


図 4 球面 SOM による ZDT2 の可視化
Fig. 4 Visualization of ZDT2 on a spherical SOM.

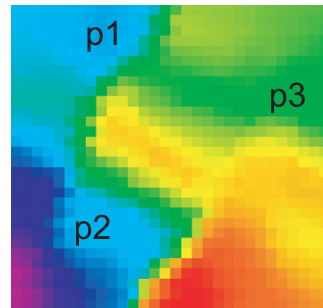


図 5 平面 SOM による ZDT2 の可視化
Fig. 5 Visualization of ZDT2 on a plain SOM.

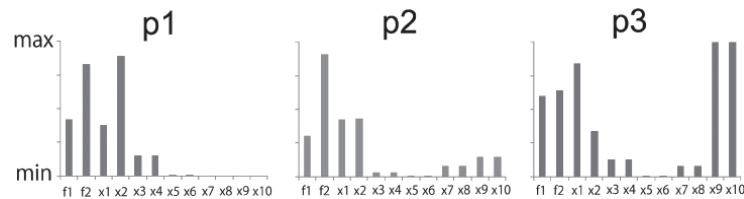


図 6 p1, p2, p3 の各点における目的関数値および設計変数値
Fig. 6 p1, p2, p3 values of objective functions and design variables.

示唆できた．同様な結果がディーゼルエンジン設計問題においても得られることを次章で示す．

6. ディーゼルエンジンの多目的最適化設計問題におけるパレート解集合の可視化の検討

前章では、テスト関数から得られたパレート解集合を用いて球面 SOM の可視化の検討を行った．本章では実問題を事例に、球面 SOM の平面 SOM に対する優位性について検討する．ここで対象とする実問題はディーゼルエンジン燃料噴射スケジューリング問題である．

6.1 ディーゼルエンジン燃料噴射スケジューリング問題

ディーゼルエンジンは燃費、耐久性の面でガソリンエンジンに比べ優れ、排出される CO₂

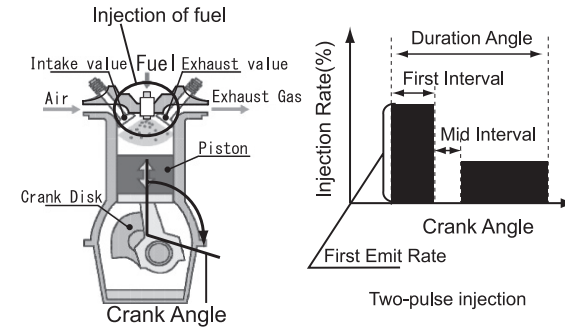


図 7 ディーゼルエンジンの噴射形状
Fig. 7 Injection mechanism of diesel engine.

の量が少ないという特徴も持っている．しかし、近年自動車エンジンに対する環境面からの厳しい要求が高まっており、環境規制を満たすためにガソリンエンジン、ディーゼルエンジンともに排ガスを減らす低エミッション化の研究が行われている^{12)–14)}．

近年のディーゼルエンジンにおいては、再循環率やスワール比などを電氣的に制御可能になっており、かつ、燃料の噴射時期やその時間的な割合についても変更することが可能である．また、これらの値を変化させることで燃料消費量 (SFC) や排出される窒素酸化物 (NO_x) などを変化させることも可能であることが知られている．そのため、電氣的に制御可能なパラメータを操作することで SFC, NO_x の排出量、すす (Soot) の排出量を同時に削減する設計が試みられている．この最適化問題をディーゼルエンジン燃料噴射スケジューリング問題と呼ぶ．本問題は、NO_x と Soot, NO_x と SFC の間にトレードオフの関係があることから多目的最適化問題として取り扱われている．

本論文では図 7 に示す 2 段階噴射について取り扱う．過給圧、再循環率、噴射開始角度、スワール比のように、現在もしくは将来的に電子制御で変更できるパラメータを設計変数とする．本実験に用いた 11 次元のデータを表 2 に示す．これらの設計変数は文献 15) のとおりである．

排気特性が最適となるように設計変数を調整することで、目的関数である SFC, NO_x, Soot におけるパレート解が得られる．得られたパレート解における 3 次元の目的関数と 8 次元の設計変数を合わせた 11 次元のデータを本実験の検証に用いる．目的関数の SFC の空間で示したものが、図 8 と図 9 である．

表 2 入力データの設計変数と目的関数
Table 2 Design variables and objective function of input data.

名称	p1	p2	p3	p4	p5
目的関数					
燃料消費量	458.7836	226.3017	260.8934	290.4700	160.1595
窒素酸化物の排出量	0.0004	0.0006	0.0006	0.0004	6.2650
すすの排出量	0.0963	0.0875	0.0752	0.1063	0.0006
設計変数					
過給圧	3.5000	3.5688	3.4938	3.5188	3.4938
再循環率	0.2906	0.2906	0.2906	0.2906	0.0000
スワール比	5.5781	5.0156	5.9531	4.3125	5.9844
最初の噴射期間	8.2813	14.5160	12.7660	15.3910	3.0000
中間無噴射期間	13.5938	3.0000	3.6566	3.7500	17.2500
二度目の噴射期間	10.3594	13.5313	13.5313	17.4688	-1.2500
噴射開始角度	9.7656	8.8281	9.3750	8.8281	5.7656
最初の燃料噴射量(率)	0.5445	0.7953	0.5047	0.7625	0.7883

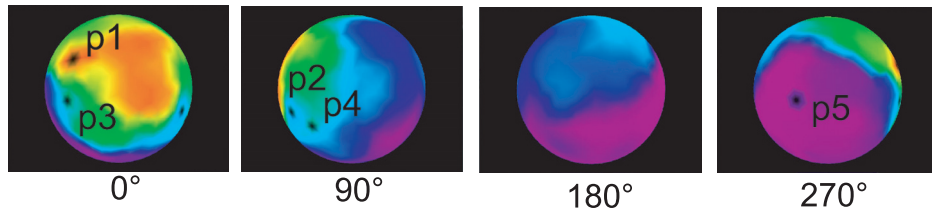


図 8 球面 SOM における SFC の空間の可視化
Fig. 8 Virtualization of SFC space on a spherical SOM.

6.2 SOM によるパレート解集合の可視化

球面 SOM を用いて、ディーゼルエンジン燃料噴射スケジューリング問題によって得られた 100 個のパレート解の学習を 1,000 回繰り返した。比較に用いた SOM.PAK の設定および球面 SOM の設定は表 1 に示したテスト関数と同じものを用いた。

提案する球面 SOM によって得られた結果を図 8 に示す。ここでは、左へ 90 度ずつ回転させた様子を示している。球面上には、目的関数の SFC (燃料消費量) の値を色で表示している。すなわち、SFC の値が高ければ赤く、低ければ紫となる。したがって、球面 SOM で解の分布を学習させると、SFC の値が高いものが赤い島状に配置される。

平面 SOM での学習結果を図 9 に示す。SFC の値が高いものが左上に集まって表示され、右上、右下、左下という順番で値が小さくなりながら配置されていることが分かる。

球面 SOM の結果も平面 SOM と同様に値を徐々に低下させながら配置されていること

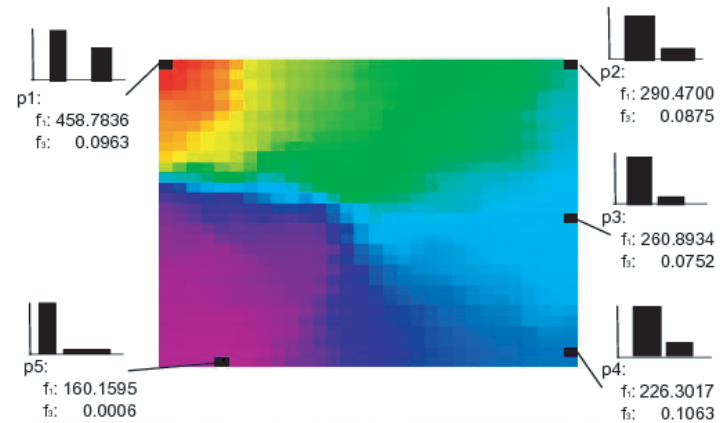


図 9 平面 SOM における SFC の空間の可視化
Fig. 9 Virtualization of SFC space on a plain SOM.

が分かる。したがって大林¹⁶⁾が平面 SOM での設計空間の分類・構造の把握を行えると示したと同様に、球面 SOM でも可能であるといえ、パレート解表示は有効であることが再確認された。

6.3 平面 SOM と球面 SOM におけるデータ配置の違い

平面 SOM が、パレート解表示する上で有効であることは再確認されたが、競合層の端に配置されたデータに類似したデータが遠くに配置される可能性がある。そこで、図 9 において示した平面 SOM に配置された各データが、球面 SOM ではどのように配置されているかを検討する。

図 9 における点 p1 から p5 までの各目的関数の値および設計変数の値を表 2 にまとめて示す。まず、図 9 における点 p2 および p4 に着目する。これらの目的関数値および設計変数の値は比較的類似しており、SOM 上では近傍に配置されることが期待される。しかしながら、実際には平面 SOM 上では、右端に対峙して配置されている。これによりデータの類似性の観点でいえば、左の開いたコノ字にデータが配置されている。しかしながら、これらのデータの類似性は、1 つ 1 つのデータを設計者が把握しなければ理解できないことになる。本研究の目的は、変換後のデータを設計者が参照してそれらの類似性を判断したいことにあるため、類似したデータは、マップ上でも近傍に隣接することが望ましい。一方で、図 8 から分かるように球面 SOM においては p2 および p4 は近傍に配置されてい

る。よって、球面 SOM によるパレート解表示では、平面 SOM において境界に分散して配置されていた類似したデータがマップ上で隣接して配置されていることが分かる。

次に、図 9 における点 p_1 および p_3 に着目する。図 9 に示したとおり、噴射形状が異なるために、SFC の値は異なっている。そのため、図 8 においても表示している色分布は異なっている。しかしながら、図 9 の平面 SOM においては、 p_1 と p_3 の距離が離れて配置されているのに対して、図 8 の球面 SOM においては、比較的近い位置に配置されている。これは、表 2 において、最初の噴射期間から最初の燃料噴射量が噴射形状を表す設計変数であるが、これらの値が両ポイントで異なっているのに対して、それ以外の、設計変数の値は比較的似通っている。そのため、平面 SOM から判別すると p_1 と p_3 はまったく異なるデータと見なされるが、球面 SOM においては、クラスタとしては異なるがその中でも近いデータであることが理解できる。このように、球面 SOM では、平面 SOM で実現できなかったクラスターリングが実現できている可能性がある。

これらの結果から、球面 SOM は従来の平面 SOM の有用性を持つだけでなく、近傍の情報をより正確に表現することが可能である。したがって、球面 SOM はパレート解の表示に適しているといえる。

7. 結 論

本研究では、ニューラルネットワークの一種である自己組織化マップ (SOM) を利用して、多目的最適化により得られたパレート解集合を可視化することを検討した。利用した SOM は現在、広く利用されている平面 SOM ではなく、球面上にデータを配置する球面 SOM である。

多目的最適化で得られたパレート解は、目的関数および設計変数の数に応じた次元数を持っている。しかし、ユーザが理解するには 2 次元もしくは 3 次元で表示する必要がある。SOM は次元数を減らすとともに、データの類似度に応じてクラスターリングを行う手法である。目的関数だけでなく設計変数も考慮したいユーザには非常に適した表示方法であるといえる。球面 SOM では、マップの端が存在しないため、類似したデータがマップ上の近い位置により存在するように学習する方法であるといえる。多目的最適化の実問題であるディーゼルエンジン噴射スケジュール問題で得られたパレート解集合を利用して、球面 SOM のパレート解表示における有用性を検討した。その結果から平面 SOM と同様にユーザによるデータ解析が容易になったとともに、平面 SOM ではうまく配置できないデータが球面 SOM では配置可能であることを示した。本論文では球面 SOM の有効性はテスト関数の

例と実問題一例での検討にとどまるが、これにより平面 SOM では表現できないクラスターリングが、球面 SOM では実現できる可能性がある。これらの結果から、パレート解集合の特性を理解するために球面 SOM を利用することが強力な選択肢の 1 つといえる。

今後は、さらなる事例を通じて球面 SOM の有効性を検討する必要がある。また、球面 SOM によりパレート解を表示することでユーザが解およびクラスタを理解するためには、配置されたパレート解の位置と設計変数をリンクさせ表示させるシステム実装の作り込みが必須である。

参 考 文 献

- 1) 廣安知之, 石田裕幸, 三木光範, 横内久猛: 多数目的最適化を利用したパラメータチューニング, 情報処理学会論文誌: 数理モデル化と応用 (TOM), Vol.2, No.3, pp.14-26 (2009).
- 2) 尼崎太郎の科学大好き!: 新型新幹線「N700 系」の“顔”を生んだ「遺伝的アルゴリズム」の秘密. <http://trendy.nikkeibp.co.jp/article/column/20070705/1001439/>
- 3) 金 美和, 廣安知之, 三木光範: 目的関数空間と設計変数空間におけるパレート最適解の多様性を維持するアーカイブメカニズム, 情報処理学会論文誌: 数理モデル化と応用 (TOM), Vol.46, No.17, pp.102-113 (2005).
- 4) 山代大輔, 吉川大弘, 古橋 武: 可視化手法を用いた多目的最適化問題における満足解の選択支援, 知能と情報: 日本知能情報ファジィ学会誌, Vol.20, No.6, pp.850-859 (2008).
- 5) コホネン, T. (著), 大北正昭 (監修), 徳高平蔵, 堀尾恵一, 大森又茂, 藤村喜久郎 (翻訳): 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).
- 6) 大林 茂: 多目的最適化と情報可視化データマイニング, 豊田研究報告, Vol.58, pp.109-116 (2005).
- 7) 徳高平蔵, 大北正昭, 藤村喜久郎 (編): 自己組織化マップとその応用, シュプリンガー・ジャパン (2007).
- 8) 高塚正浩, Xin, W.Y.: 球面 SOM のデータ構造と量子化誤差の考察およびインタラクティブ性の向上, 知能と情報: 日本知能情報ファジィ学会誌, Vol.19, No.6, pp.611-617 (2007).
- 9) 徳高平蔵, 藤村喜久郎, 大北正昭: 球面 SOM を用いたクラスタ分析, バイオメディカル・ファジィ・システム学会誌, Vol.8, No.1, pp.29-39 (2006).
- 10) 坂和正敏, 石井博昭, 西崎一郎: ソフト最適化 (日本ファジィ学会編ソフトコンピューティングシリーズ第 2 巻), 朝倉書店 (1995).
- 11) 三宮信夫, 喜多 一, 玉置 久, 岩本貴司: 遺伝的アルゴリズムと最適化: システム制御情報ライブラリー 17, 朝倉書店 (1998).
- 12) 野田 明: エミッションクリーン化技術の現状と展望 (ガソリン), 自動車技術, Vol.55,

No.9, pp.17-22 (2001).

- 13) 青柳友三：エミッションクリーン化技術の現状と展望（ディーゼル），自動車技術，Vol.55, No.9, pp.10-16 (2001).
- 14) 木村修二，白河 暁：超クリーンディーゼルへの挑戦，自動車技術，Vol.55, No.9, pp.41-45 (2001).
- 15) 小林賢二，廣安知之，三木光範：ネットワークインバージョンを利用した多目的遺伝的アルゴリズムのための多様性維持メカニズム，情報処理学会論文誌：数理モデル化と応用（TOM），Vol.1, No.1, pp.27-42 (2008).
- 16) 大林 茂：多目的最適化とパレート解の可視化，計算力学講演会講演論文集，No.14, pp.699-700 (2001).

(平成 22 年 2 月 4 日受付)

(平成 22 年 4 月 5 日再受付)

(平成 22 年 5 月 25 日再受付 (2))

(平成 22 年 6 月 14 日採録)



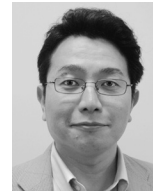
吉見 真聡（正会員）

2004 年慶應義塾大学理工学部情報工学科卒業。2009 年同大学大学院理工学研究科開放環境科学専攻後期博士課程修了。博士（工学）。2006 年度より日本学術振興会特別研究員（DC1）。現在，同志社大学理工学部助教。リコンフィギャラブルシステム，並列処理，知的システムの研究に従事。電子情報通信学会，人工知能学会各会員。



西本 要

2010 年同志社大学工学部を卒業。進化計算，専用ハードウェアを用いた高性能計算の研究に従事。現在は日本ヒューレット・パッカード株式会社に勤務。



廣安 知之（正会員）

1997 年早稲田大学大学院理工学研究科後期博士課程修了。早稲田大学理工学部助手，同志社大学工学部助手。知識工学科専任講師，インテリジェント情報工学科准教授を経て，2008 年から生命医科学部教授。進化的計算，最適設計，並列処理，設計工学，医療画像工学等の研究に従事。IEEE，電子情報通信学会，計測自動制御学会，人工知能学会，日本機械学会，超並列計算研究会，日本計算工学会各会員。



三木 光範（正会員）

1950 年生。1978 年大阪市立大学大学院工学研究科博士課程修了，工学博士。大阪市立工業研究所研究員，金沢工業大学助教授を経て，1987 年大阪府立大学工学部航空宇宙工学科助教授，1994 年同志社大学工学部知識工学科教授。専門分野は最適設計，並列処理，システム工学，知的システムの設計。現在の研究テーマは，並列分散最適化に基づく知的オフィス環境の創造および知的照明システムの研究。主な著書は『進化する人工物』（オーム社），『工学問題を解決する適応化・知能化・最適化法』（技法堂出版）等。IEEE，人工知能学会，システム制御情報学会，電気学会，建築学会，空気調和・衛生工学会等各会員。知的オフィス環境コンソーシアム会長。