Vol.2010-MPS-77 No.29
2010/3/5

球面SOMによるパレート解集合の可視化の検討

吉見真聡[†1]　西本要[†2]　王路易[†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．しかし，特定の変数のみが異なる類似データが，マップの両端に離れて配置される場合があった．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示す．また，GPU による並列プログラムの実装を評価し，高速化における課題を示す．

A Study on Visualization of Pareto Solutions by Spherical Self-Organizing Maps

MASATO YOSHIMI [†1] KANAME NISHIMOTO [†2]
LUYI WANG [†2] TOMOYUKI HIROYASU [†3]
and MITSUNORI MIKI [†1]

In this paper, Self-Organizing Maps (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 described that Spherical SOM is effective for illustrating the Pareto solution set. These discussions have been performed through the real world problem. At the same time, the implementation and parallel method of Spherical SOM by GPUs were also discussed.

†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
Faculty of department of life and medical science, Doshisha University

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伴い，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による設計のパラメータの最適化[1] や，解候補の妥当性についての検討も行われるようになってきた[2]．今後，ますますハードウエ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る．耐震シュミレーションなどの分野にも利用される．

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場合が多い．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が存在する場合には，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[4]．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．そうなれば数値シュミ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が，その一つが，得られたパレート解集合内にどのようなクラスの解が存在するか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ユーザに提示する必要がある．しかしながら，パレート解集合のユーザへの提示には解決すべき問題が存在する．それは，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 2 もしくは 3 であるため，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，1）重要な次元を抽出する方法，2）高次元を低次元に置きかえる方法が考えられる．

前者の代表的な方法が，主成分分析にて寄与率の高い軸を生成し，その空間にマッピングする方法である．吉川らは，クラスタリングした結果を，Fuzzy Multiple Discrimminant Analysis (FMDA) を用いて次元を抽出している[5]．

後者の方法の一つに，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) を利用する方法が提案されている[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，解集合が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，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 SOM に着目する．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．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おり[7]，各データ間の比較的合理的な位置関係を表示できることから位相関係を維持できクラスタリングを行う際にも精度が高いことが報告されている[8]．パレート解集合を解析する場合，どのようなクラスタ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なっているかを把握することも重要である．平面 SOM においては，着目する解がマップの端付近に存在した際に，その近傍を適切に把握することが困難である．

そこで本研究では，球面 SOM によりパレート解集合を表示することで，ユーザがより解の傾向を把握しやすくなることを示す．また，球面 SOM を実装する際には，そのデータ構造と計算処理時間が問題となるため,，実装したデータ構造を検討し，GPU による並列処理を行い計算処理時間の削減を試みる．

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 $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ を，m 個の制約条件 $\mathbf{g}(\mathbf{x})$ 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[12]．

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

多目的最適化問題では，一般に複数の目的関数同士が互いに競合する場合が多いため，全ての目的関数 $f_i(\mathbf{x})$ 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，パレート最適解の集合を求める．

パレート最適解は，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[13]．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，全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）：$\mathbf{x_1}, \mathbf{x_2} \in \Im(\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n))$ とする．

(a) $f_i(\mathbf{x_1}) \leq f_i(\mathbf{x_2})(\forall i = 1, 2, \ldots, k)$ の時，$\mathbf{x_1}$ は $\mathbf{x_2}$ を優越するという．

(b) $f_i(\mathbf{x_1}) < f_i(\mathbf{x_2})(\forall i = 1, 2, \ldots, k)$ の時，$\mathbf{x_1}$ は $\mathbf{x_2}$ を強い意味で優越するという．

もし，$\mathbf{x_1}$ が $\mathbf{x_2}$ を優越しているならば，$\mathbf{x_1}$ の方が $\mathbf{x_2}$ 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最適解の定義について以下に示す．

定義（パレート解）：$\mathbf{x_0} \in \Im(\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n))$ とする．

(a) $\mathbf{x_0}$ を強い意味で優越する $\mathbf{x} \in \Im$ が存在しないとき，$\mathbf{x_0}$ を弱パレート最適解（Weak Pareto-optimal solution）という．

(b) $\mathbf{x_0}$ を優越する $\mathbf{x} \in \Im$ が存在しないとき，$\mathbf{x_0}$ をパレート最適解（Pareto-optimal solution）という．

式 (1) に目的が 2 つ（$k = 2$）の場合におけるパレート最適解の例を示す．図中の黒丸はパレート最適解を，白丸は弱パレート最適解を示している．また，Feasible Region とは実行可能領域を示し，解が存在し得る領域を示している．一般に，図中に実線で示されるパレート最適解集合が形成する面のことを，パレート最適フロントと呼ぶ．また，探索途中で得られた，他のどの解と比較しても劣らない解を非劣解と呼ぶ．

3. 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ている．SOM は教師なしの学習型ニューラルネットワークであり，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

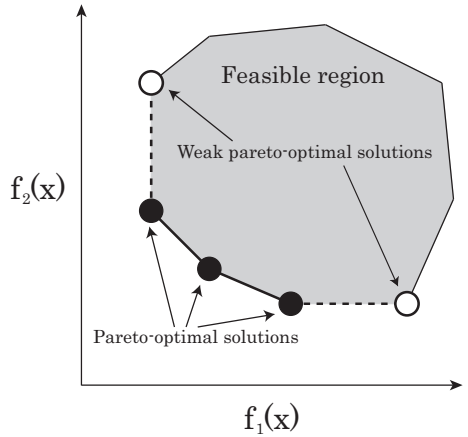

図 1 パレート最適解

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 $x(t)$ を競合層に与え $m_i(t)$ 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．

$$\mathbf{m_i(t+1)} = \mathbf{m_i(t)} + \mathbf{h_{ci}(t)}(\mathbf{x(t)} - \mathbf{m_i(t)}) \tag{2}$$

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

$$\alpha(t) = \alpha(0)(T-t)/T \tag{4}$$

$$\sigma(t) = \sigma(0)(T-t)/T \tag{5}$$

(5) **終了判定**

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

4. 球面 SOM

4.1 球面 SOM とは

競合層の形が球面であるものを特に球面 SOM と呼ぶ．SOM ではニューロンを配置する競合層の形状が結果に大きく影響する．例えば平面の競合層では必ず端が存在する．そのため，一定のニューロン数が得られるように学習領域を確保する際，競合層の端では十分なニューロンが確保できない．

そこで端が存在しない競合層の形状としてトーラスや球面などの閉じた曲面が提案されている．トーラスは実装が容易であるが，3 次元空間ではドーナッツ型をと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 次元空間上でも位置関係の把握が容易であり，可視化を目的とする SOM の競合層の形状として適している．

4.2 構成と実装手順

4.2.1 データ構造

球面 SOM のデータ構造として，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ことにより再帰的に面数を増やすことで，球面に近似した多面体を作成する手法である．ニューロンを測地ドームの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では極座標を用いた場合などに比べて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，もととなる正多面体の面数が多いほど各頂点を均一に配置することができるため，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採用した．

測地ドームは正多面体をもとにしているため，2 次元平面上の展開図として扱うことができる．そのため，図 2 で示すように球面を 2 次元配列で表現することができる．

4.2.2 実装のためのパラメータ

球面で SOM を実装するために必要としたパラメータを以下に示す．パラメータは各競合層のニューロン毎に存在する．

接しているマップセルのポインタ群

測地ドームを用いたデータ構造は六角格子をとるため，1 つのニューロンが 6 つのニュー

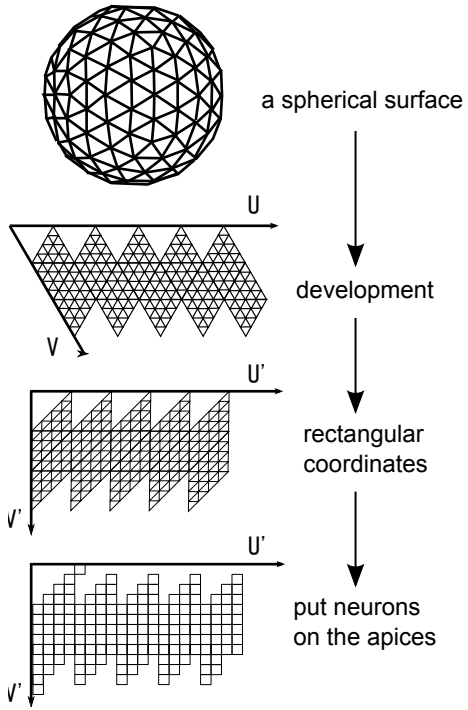

図 2 2 次元配列での球面の表現方法

ロンに隣接する．平面で六角格子を用いる場合は簡単な引数計算のみで隣接するニューロンを取得できるが，球面 SOM の競合層では場所によって取得できない場合がある．球面 SOM の競合層は正二十面体の展開図の形が基準となるため，端の部分では簡単な引数計算では取得できない．そこで，展開図の中央と端における隣接ニューロンの取得が平等に実現できるように，各ニューロンが所持する隣接ニューロンへのリンクのリストである．

重みベクトル

競合層に配置される重みベクトルのデータを保持する．

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かを示す．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計算が必要な展開図内に属するかを示す．

描画時の 3D 頂点

球面を描画する際の 3D 空間上での座標の値を保持する．

4.2.3 距離計算と勝者探索

距離計算と勝者探索は隣接したニューロンに依存しない．さらに球面のデータを 2 次元配列に格納しているため，平面 SOM と同様に全配列データの網羅で実装できる．ただし，計算が必要なデータであるかは有効領域の判定フラグで判断する．

4.2.4 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 では隣接するニューロンへのリンクを用いることで，幅優先探索を利用した近傍ニューロンの探索を実装した．以下に探索の手順を示す．

初めに，勝者選択の行程で得られた勝者ニューロンについて学習を行う．なお，学習の後は学習済み判定フラグで判断する．次に，勝者ニューロンの全ての隣接ニューロンを取得し学習を行う．この際，図 3 で示すように学習を行ったニューロンのリストを作成する．リストのニューロンの隣接ニューロンを学習することで，さらに外のニューロンを学習し新しいリストを作る．また，各ニューロンを学習する直前にフラグを確認することで未学習ニューロンのみに学習を行い，計算が重複して起こらないようにする．このようにニューロンのリ

ストの更新を繰り返すことで順に外にあるニューロンの学習を行い，指定の距離内のニューロンを過不足なく学習する．

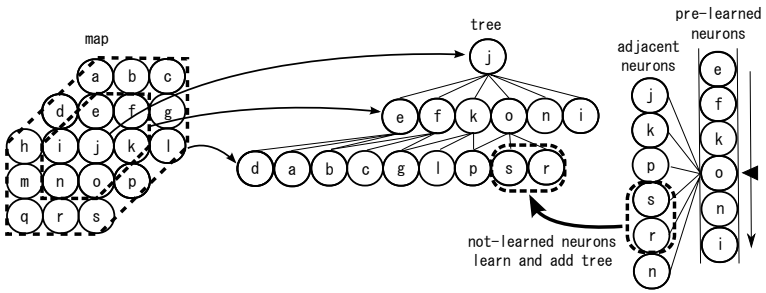

図 3 学習するニューロンの探索

4.2.5 競合層の表示方法

競合層を可視化するために各ニューロンを色付けして表示する必要がある．本論文ではHSV 色空間を利用することで，ニューロンのパラメータ毎に競合層の可視化を行った．彩度 (Saturation) と明度 (Value) を最大値で固定し，色相 (Hue) をパラメータの値に関連付けることで色付ける．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，値の大きなデータを赤色，小さなデータが紫色で表示されるように割りつける．

5. 球面 SOM の GPU 実行に関する検討

5.1 SOM の専用ハードウェアによる高速化

SOM はアルゴリズムの性質上，1 サイクルの計算における距離計算，勝者選択，学習の 3 つの手順はそれぞれ高い並列性を持つことが知られている．そのため近年のマルチコアプロセッサや，列計算向けのハードウェアを用いて高速な実行が期待できる．

SOM の高速実行は 1987 年ころから試みられており，Carpenter らによる SOM のハードウェア・アクセラレータに関する研究が知られている．1992 年には Speckmann が SOM 用の SIMD 型プロセッサ COKOS(COprocessor for KOhonen's Self-organizing map) を開発している．COKOS は並列に動作する 8 つの計算ユニットから構成されており，SOM の並列性を引き出す試みがなされている．

SOM 用アクセラレータを FPGA 上に構成する試みも Porrmann，田向により実装されている[11]．Porrmann はリング状に接続された 6 つの演算モジュールで SOM を計算するハードウェアを実装している．田向は全ニューロンに対する距離を同時に比較し，勝者を選択するハードウェアを実装し，ベクトル次元数 128，マップサイズ 16×16 で性能評価を行っている．また，ユークリッド距離に代わりマンハッタン距離を用いて演算を簡略化することで回路面積も削減している．各重みベクトルごとにデータメモリと演算モジュールが構成されており，このモジュールが競合層のニューロン配置のように接続して並列に計算を実行する．このハードウェアではマップサイズの影響を受けずに計算時間が一定となり，Intel Xeon 2.80GHz の CPU に対して約 350 倍の高速実行が確認されている．

2009 年には設樂がグラフィック専用プロセッサである GPU を用いて，SOM の高速化を試みている[10]．NVIDIA GeForce GTX280 を用いた場合，CPU での実行に比べて 150 倍の速度向上が確認されている．

この高い並列性は球面 SOM においても同様で，並列処理による高速実行が期待できる．本研究では，多数のプロセッシングコアを持つ GPU を対象に，開発環境が公開され研究が盛んな GPU を用いて球面 SOM のアルゴリズムを実装し，マイクロプロセッサと GPU のそれぞれの評価をもとに性能を議論する．

5.2 SOM の並列性の抽出

SOM の計算手順のうち，距離の計算は，入力データごとに全ニューロンに対して演算が実行される．このとき，ニューロン間の演算には依存性が無いため，並列に実行できる．また，勝者選択は並列実行可能な比較処理と，分割統治法によるリダクション演算を用いた最小値探索で構成される．学習の手順は，式 (2) の演算が並列実行できる．グリッド状の平面 SOM ではメモリ空間上に連続的に重みベクトルを配置でき，メモリアクセスに要する時間が小さくなるため，GPU を用いた場合には 100 倍以上の速度向上を引き出すことができる[10]．しかし，球面 SOM のアルゴリズムは平面 SOM と同様の並列性を抽出できる一方で，隣接ニューロンへのアクセスのために各ニューロンが隣接ニューロンのリストを持つ必要があり，メモリの間接参照が必要となる．これを原因としてメモリアクセス回数が増加するため，GPU による演算並列化の効果は減少すると考えられる．

5.3 球面 SOM の計算速度評価

球面 SOM を実行するプログラムをマイクロプロセッサ，GPU で実行した場合の性能を評価した[18]．実装したプログラムコードはそれぞれ，C++および NVIDIA 社の開発環境 CUDA を使用した．

実行環境はマイクロプロセッサ Opteron 1210 HE(2.50GHz，Linux-2.6.26-amd64,

G++4.1.3, -O3) および表 1 に示した 3 種類の GPU 上で実行した．性能計測には，5 次元の重みベクトルを持つ入力データを 102 個，競合層のニューロン数を 25000(20 × 1250) 個，近傍幅 [0, 9] の問題を使用した．計算に要した実行時間を図 4 に，実行時間に占める各処理の割合を図 5 にそれぞれ示す．

表 1 CPU の性能

名称	SP 数 (個)	コアクロック (GHz)	メモリクロック (GHz)
GeForce8400GS	16	0.45	0.4
GeForce GTX280	240	1.27	1.1
Tesla C1060	240	1.30	0.8

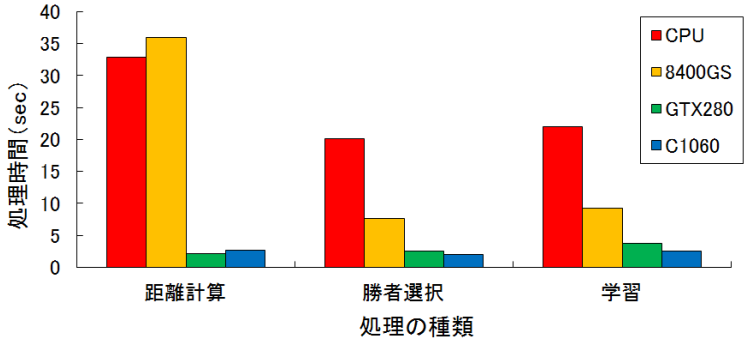

図 4 各処理が要した実行時間

図 4 から，演算コア (SP) の多い GPU を用いた場合，マイクロプロセッサと比較して 10 倍程度の実行時間の向上が確認された．アルゴリズムから引き出される並列性の効果は，処理の並列度が高い場合は，SP 数に比例して向上する．

図 5 に示すように，並列演算の効果は，球面 SOM の距離計算で大きく現れている．SP 数の少ない 8400GS では動作周波数が低いこともあり，プロセッサよりも計算時間を要するが，240 ユニットの SP を持つ GPU では 10 倍以上の性能向上が確認できる．また一方で，勝者選択や学習の手順では，距離計算よりも並列度が低いため，SP 数に比例した性能向上が飽和しており，SP 数が 240 個の GPU では計算時間の割合が逆転している．

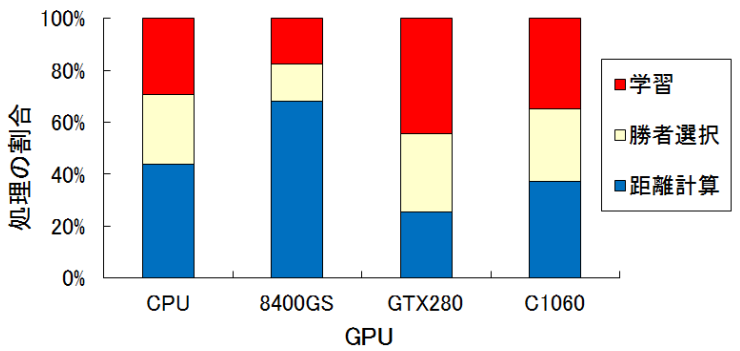

図 5 実行時間に占める各処理の割合

これらの結果から，GPU を用いて球面 SOM の並列実行を試みた場合，通常の SOM と同様に近年のマイクロプロセッサよりも高速な実行が可能であることが確認された．関連研究[10] のグリッド平面の SOM に比べると，隣接ニューロンがメモリ上に連続配置されていないことから，高速化の割合は低くなっている．今後，GPU のアーキテクチャに合わせたデータ配置を検討することにより，計算速度を向上させるとともに，メモリアクセスの頻度や時間等，プロセッサの性質に合わせた実装を検討する研究を行う予定である．

6. パレート解の可視化における球面 SOM の有用性

本章では，多目的最適化問題から得られたパレート解の可視化において，球面 SOM を用いることが有用であることを示す．各種の設計問題においてパレート解の中から，設計の候補解を選択するためには，さまざまな視点からの検討が問題となる．例えば，得られたパレート解の目的関数値のみを評価するだけでなく，設計変数も考慮しなければならない．また，パレート解を何らかの形でクラスタリングを行い，類似の解の代表のみをユーザに提示すべきである点などが必要である．そのため，SOM を利用することで，設計問題においてパレート解の中から，設計の候補解を選択することがより容易になるものと考えられる．

SOM の有用性の確認と球面 SOM の利便性を検討するために，数値実験を行った．対象は文献[3] で利用されたディーゼルエンジンの燃焼噴出スケジューリング問題である．文献[3] で得られた解を基に，平面 SOM と球面 SOM でのパレート解の表示の違いを説明する．

6.1 SOM におけるパレート解の可視化

多目的最適化問題では, 取り扱われるデータが 4 次元以上の高次元であることが多い. 導出さてたパレート解が高次元の場合ではそれを直感的に把握することが困難であるため，人間が直感的に理解できるように可視化する試みがなされている.

SOM を用いたパレート解の可視化は 2001 年に大林によって検証されている[6)9)]. 小林は超音速翼の多目的最適化問題において得られたパレート解について SOM を用いた可視化を行っている. それにより，代表的なパレート解における類似関係と特徴の発見が可能であることを示している. また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もって働いているか可視化できることから，技術者のための設計支援ツールとして良いと考えられる.

6.2 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 CO_2 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[14)–16)].

近年，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気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 (NOx) 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，電気的に制御可能なパラメータを操作することで，NOx の排出量，すす (Soot) の排出量，SFC を同時に削減する設計を試みる. 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，NOx と Soot，NOx 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 6 に示す 2 段階噴射について取り扱う. 噴射開始位置（Start Angle），再循環率（Exhaust gas recirculation Rate：EGR Rate），スワール比（Swirl Ratio），過給圧（Boost Pressure）といった現在，もしくは将来的に電子制御によって変更可能な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[3)] の通りである.

排気特性が最適となるように設計変数を用いた最適化を行うことで，目的関数である NOx，すす (Soot)，SFC におけるパレート解が得られる. 得られたパレート解を，目的関数のうち NOx と SFC の空間で示したものが，図 8 である.

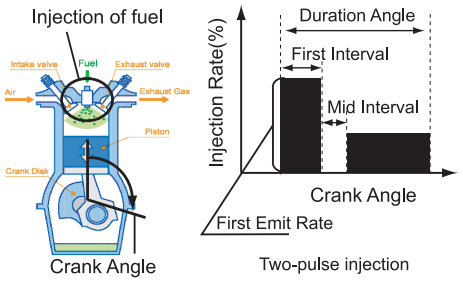

図 6 ディーゼルエンジンの噴射形状

表 2 設計変数と目的関数

	名称	関数・変数名
目的関数	燃料消費量	f_1
	NOx の排出量	f_2
	Soot の排出量	f_3
設計変数	過給圧	x_1
	再循環率	x_2
	最初の噴射期間	x_3
	中間無噴射期間	x_4
	二度目の噴射期間	x_5
	最初の噴射角度	x_6
	スワール比	x_7
	最初の燃料噴射量 (率)	x_8

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.

6.3 SOM によるパレート解の可視化

提案する球面 SOM を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パレート解で学習させた. 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 3 に示す. 初期設定の試行回数を 100000 回と設定したため，100 個のパレート解は 1000 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 3 に示す. また，4.2.4 節で説明したように球面 SOM の競合層は正 20 面体が基準となるため，ニューロン数は 20 の倍数

Vol.2010-MPS-77 No.29
2010/3/5

となる．

表 3 SOM の設定

	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)	100000	0.05	15
球面 SOM	1000 (20 × 50)	100000	0.05	15

提案する球面 SOM によって得られた結果を図 7 に示す．ここでは，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 f_1(燃料消費量) の値を表示している．すなわち，f_1 の値が高ければ赤く，低ければ紫となる．従って，球面 SOM で解の分布を学習させると，f_1 の値が高いものが島状に配置される．

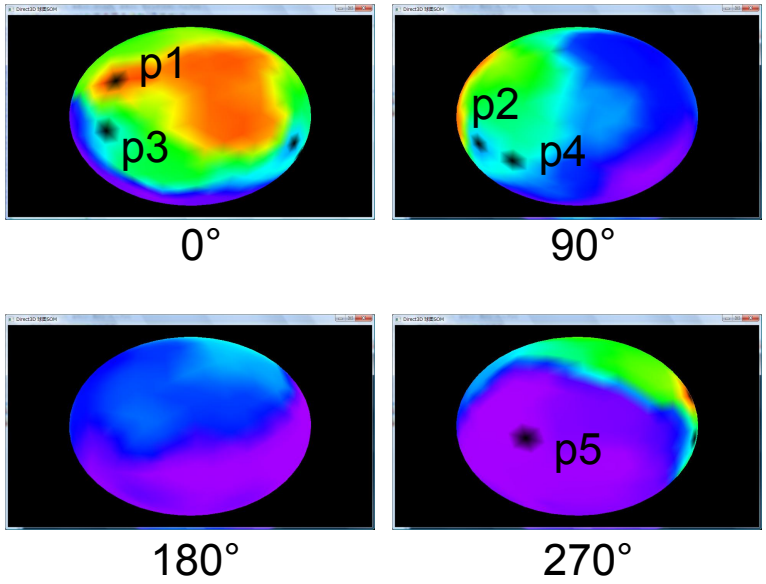

図 7 球面 SOM における SFC の空間の可視化

平面 SOM での学習結果を図 8 に示す．f_1 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わかる．

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がわかる．従って大林が平面 SOM での設計空間の分類・構造の把握を行えると示したことと同様に，球面 SOM でも可能であると言え，パレート解表示は有効であることが再確認された[9]．

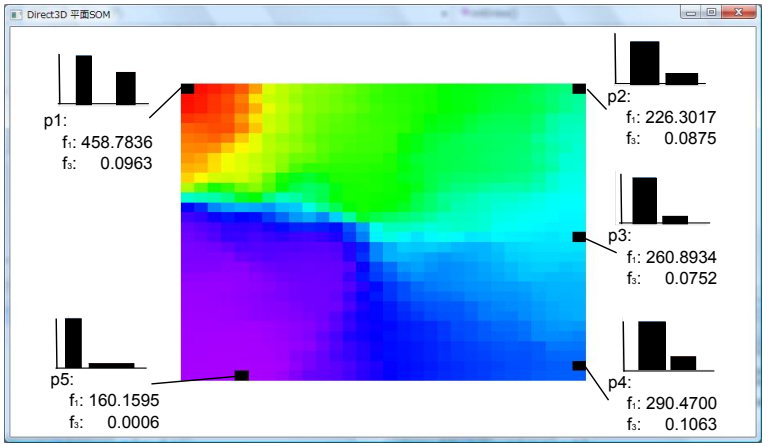

図 8 平面 SOM における SFC の空間の可視化

6.4 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，境界においては，各競合層に配置されたデータにゆがみが生じる可能性がある．そのため，図 8 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 8 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 4 にまとめて示す．

まず，図 8 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．これは，類似したデータがすべて右端に偏って配置されたため，実際には近いデータにもかかわらず，距離をおいて配置されてしまったためであると考えられる．一方で，図 7 からもわかるように球面 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境界のゆがみの影響を受けていないことが分かる．

表 4 入力データの値

data	f_1	f_3	f_3	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8
$p1$	458.7836	0.0004	0.0963	3.5000	0.2906	5.5781	8.2813	13.5938	10.3594	9.7656	0.5445
$p2$	226.3017	0.0006	0.0875	3.5688	0.2906	5.0156	14.516	3.0000	13.5313	8.8281	0.7953
$p3$	260.8934	0.0006	0.0752	3.4938	0.2906	5.9531	12.766	3.6566	13.5313	9.3750	0.5047
$p4$	290.4700	0.0004	0.1063	3.5188	0.2906	4.3125	15.391	3.7500	17.4688	8.8281	0.7625
$p5$	160.1595	6.2650	0.0006	3.4938	0.0000	5.9844	3.0000	17.2500	-1.2500	5.7656	0.7883

次に，図 8 における点 $p1$ および $p3$ に着目する．図 8 に示したとおり，噴射形状が異なるために，f_1 の値は異なっている．そのため，図 7 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 8 の平面 SOM においては，$p1$ と $p3$ の距離が離れて配置されているのに対して，図 7 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 4 において，x_4 から x_8 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 $p1$ と $p3$ 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．従って，球面 SOM はパレート解の表示に適していると言える．

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 (Self-Organizing Maps, 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．まず，球面 SOM の実装方法および並列処理について説明を行い検討を行った．

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共に，データの類似度に応じてクラスタ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言える．しかし，平面 SOM においてはマップの端付近に存在するデータに対して歪みが生じるため，データ間の検討が難しい．球面 SOM はこれらの問題を解決する方法の 1 つである．

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共に，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．これにより，平面 SOM では表現できないクラスタリングが，球面 SOM では実現できる可能性があることを明らかとなった．これらの結果から，パレート解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一つと言える．

今後は，球面 SOM の実装において様々な大きさの問題について性能を評価する．また，球面 SOM の実行に GPU を用いる利点を明らかにするとともに，課題であるメモリアクセスの効率を上げる手法について検討する予定である．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) 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/?P=2
3) 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)
4) 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, Vol. 46, No. SIG 17(TOM13)， pp.102-113， (2005)
5) 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もん

属解の選択支援，日本知能情報ファジィ学会誌：知能と情報，Vol.20, No.6, pp.850 - 859, (2008)
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，(2005/5)
7) 高塚 正浩，*Ying Xin WU*：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ビティの向上，日本知能情報ファジィ学会誌：知能と情報，Vol.19, No.6, pp.611 - 617, (2007)
8) 徳高, 平蔵，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
9) 大林 茂：多目的最適化とパレート解の可視化, 第 14 回計算力学講演会：計算力学講演会講演論文集, pp.699-700，(2001)
10) 設樂 明宏，西川 由理，吉見 真聡，天野 英晴：グラフィックプロセッサを用いた自己組織化マップの実装と評価，HOKKE-2009：IPSJ SIG Notes，pp.31-36，(2009)
11) H. Tamukoh, T. Aso, K. Horio, T. Yamakawa : Self-organizing map hardware accelerator system and its application to realtime image enlargement, Neural Networks, 2004. Proceedings. 2004 IEEE International Joint Conference on, Vol. 4, (2004)
12) 坂和 正敏，石井 博昭，西崎 一郎：ソフト最適化, 朝倉書店，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，(1995)
13) 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, 朝倉書店, システム制御情報ライブラリー 17, (1998)
14) 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)
15) 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)
16) 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)
17) 伊藤 昇平, 中村 兼仁：コモンレールによるディーゼル排気ガスの浄化, 自動車技術 : Vol.55, No.9, pp.46 - 52, (2001)
18) 西本 要，吉見真聡，廣安知之，三木光範：GPU を用いた球面 SOM の実アプリケーションによる評価，HOKKE-17：IPSJ SIG Note，(2009)

訂正箇所

(1)　著者順

- 訂正前

  吉見真聡
  西本要
  王路易
  廣安知之
  三木光範

  MASATO YOSHIMI
  KANAME NISHIMOTO
  LUYI WANG
  TOMOYUKI HIROYASU
  MITSUNORI MIKI

- 訂正後

  西本要
  吉見真聡
  王路易
  廣安知之
  三木光範

  KANAME NISHIMOTO
  MASATO YOSHIMI
  LUYI WANG
  TOMOYUKI HIROYASU
  MITSUNORI MIKI

(2)　表 1 のラベル

- 訂正前
  CPU の性能

- 訂正後
  GPU の性能