

2020年度採択分 九州大学マス・フォア・インダストリ研究所 共同利用研究集会

進化計算の数理

編集：濱田直希, 穴井宏和, 梅田裕平, 千葉一永,
佐藤寛之, 能島裕介, 加葉田雄太郎, 一木俊助,
早野健太, 佐伯修

九州大学マス・フォア・インダストリ研究所

2020年度採択分 九州大学マス・フォア・インダストリ研究所 共同利用研究集会

進化計算の数理

編集：濱田 直希, 穴井 宏和, 梅田 裕平, 千葉 一永, 佐藤 寛之, 能島 裕介,
加葉田 雄太郎, 一木 俊助, 早野 健太, 佐伯 修

About MI Lecture Note Series

The Math-for-Industry (MI) Lecture Note Series is the successor to the COE Lecture Notes, which were published for the 21st COE Program “Development of Dynamic Mathematics with High Functionality,” sponsored by Japan’s Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology (MEXT) from 2003 to 2007. The MI Lecture Note Series has published the notes of lectures organized under the following two programs: “Training Program for Ph.D. and New Master’s Degree in Mathematics as Required by Industry,” adopted as a Support Program for Improving Graduate School Education by MEXT from 2007 to 2009; and “Education-and-Research Hub for Mathematics-for-Industry,” adopted as a Global COE Program by MEXT from 2008 to 2012.

In accordance with the establishment of the Institute of Mathematics for Industry (IMI) in April 2011 and the authorization of IMI’s Joint Research Center for Advanced and Fundamental Mathematics-for-Industry as a MEXT Joint Usage / Research Center in April 2013, hereafter the MI Lecture Notes Series will publish lecture notes and proceedings by worldwide researchers of MI to contribute to the development of MI.

October 2018
Osamu Saeki
Director
Institute of Mathematics for Industry

IMI Workshop of the Joint Usage Research Projects

Mathematics of Evolutionary Computation

MI Lecture Note Vol.86, Institute of Mathematics for Industry, Kyushu University
ISSN 2188-1200

Date of issue: February 22, 2022

Editors: Naoki Hamada, Hirokazu Anai, Yuhei Umeda, Kazuhisa Chiba, Hiroyuki Sato,
Yusuke Nojima, Yutaro Kabata, Shunsuke Ichiki, Kenta Hayano, Osamu Saeki

Publisher:

Institute of Mathematics for Industry, Kyushu University

Graduate School of Mathematics, Kyushu University

Motooka 744, Nishi-ku, Fukuoka, 819-0395, JAPAN

Tel +81-(0)92-802-4402, Fax +81-(0)92-802-4405

URL <https://www.imi.kyushu-u.ac.jp/>

はじめに

本会議録は令和2年度 IMI 共同利用研究研究集会 (I) 「進化計算の数理」における議論をまとめたものである。本研究集会は、新型コロナウイルス感染症の影響により次年度への延期を経て、2021年9月7日から9月8日にかけてオンラインで開催された。研究代表者らはこれまで、下記の IMI 短期共同研究をとおして、進化計算が実応用における大域的多目的最適化問題にしばしば効果的である理由を数学者とともに研究してきた。

- 2017年「ベクトル値滑層分割 Morse 理論の構築による多数目的最適化問題の解集合の可視化」*¹
- 2018年「多目的最適化と特異点論：パレート点の特異型の分類」*²
- 2019年「実践と数理に根ざした多目的最適化ベンチマークの開発」*³

これらの共同研究から、進化計算の振舞いへの数理的な理解を深める様々な成果が得られた。なかでも、特異点論における特異ファイバーや折り目特異点といった概念が多目的最適化問題のランドスケープや解集合の大域的構造を特徴付けるために役立った。さらには、それらの大域的構造をより深く解析するために、パレート A 同値に基づく写像芽の分類問題や認識問題といった特異点論の新しい問題が生み出された。進化計算と特異点論の間に双方向の貢献が生まれた事実は、これらの分野が両輪として発展しうる相互関係をもつことを示唆するものであった。これを受けて、今まで10名程度のメンバーで進めてきた共同研究の輪を超えて、より広く分野間の交流を促進するため、本研究集会を以下の趣旨のもとで開催することとした。

製品設計やシステムの運用計画などの多くの産業問題は、与えられた関数の最小点を求める最適化問題として定式化される。関数が非凸であったり導関数が利用できなかつたりしても適用できる汎用的な近似解法として、進化計算は様々な実問題で利用されてきた。進化計算は、実用上は満足のいく近似解を発見できるケースも多いが、その数理的なメカニズムは十分に解明されていない。扱う関数を強く制限すれば、最小点への収束などを保証できるケースがあることは知られている。しかし、進化計算の長所はその汎用性にこそあるため、できるかぎり広いクラスの関数に対して成立する理論が望まれている。

本研究集会の目的は、進化計算の汎用性を裏付ける数学理論の確立に向けて、進化計算と数学の研究者の交流を将来に渡って生み出すことにある。各々の分野の研究者による研究発表を通して、両分野の現状を相互に理解し、今後の研究の方向性を探る。進化計算の側からは、主に現状の進化計算の理論に関する研究を紹介する。数学の側からは、数学者 S. Smale がシリーズ論文 “Global Analysis and Economics I–IV” で創始した、多目的最適化への特異点論的アプローチに関する研究を主に紹介する。

1970年代に創始された S. Smale 流のアプローチは、写像空間においてジェネリックな最適化問題を扱う汎用的な理論でありながらも、分野間の交流不足から今まで進化計算には応用されてこなかった。本研究集会を通して進化計算と数学の交流が深まることにより、進化計算の基礎理論としての検討が進むことが期待できる。将来的には、進化計算の数理が解明されることによって、様々な実問題に直面したときにどの解法を使うべきかを適切に判断したり、解法の収束性などを保証したりできるようになると期待できる。

*¹ https://www.imi.kyushu-u.ac.jp/joint_research/detail/20170013

*² https://www.imi.kyushu-u.ac.jp/joint_research/detail/20180007

*³ https://www.imi.kyushu-u.ac.jp/joint_research/detail/20190009

以上の目的を達成するため、本研究集会は進化計算学会研究会との連動開催という形態をとった。2021年9月7日から9月8日午前にかけて本研究集会在オンラインで開催し、同一のオンライン会場にて9月8日午後から9月9日にかけて第20回進化計算学会研究会を開催した。また、9月8日夜には両研究会の合同でオンライン懇親会を開催した。これにより、数学と進化計算の研究者が双方の研究会に参加し、活気ある交流が行われた。それぞれの研究会には、どちらも140名を超える参加者が集まった。これは過去3回のIMI短期共同研究の公開講演の4倍以上、例年の進化計算学会研究会の2倍以上の規模であり、それぞれの分野で活躍する研究者の大部分に参加していただけたものと推測される。

本研究集会では、5件の招待講演と5件の一般講演、およびオープンディスカッションを行った。招待講演では、はじめに研究代表者から、数学と進化計算の関係性について、大まかな展望を紹介した。つづいて、お互いの分野の先導的な研究者をお招きして、はじめてその分野を知る人に向けて、入門的な内容をご講演いただいた。最後に、分野間交流を広げるきっかけとなるような、それぞれの分野の中でも比較的相手の分野に近いと思われるトピックをご紹介いただいた。一般講演では、主に研究代表者の共同研究メンバーから、これまでの共同研究で得られた研究成果を、より技術的な詳細に踏み込んで紹介していただいた。ここでは、数学と進化計算が具体的にどのように相互に貢献するのかを例示したつもりである。オープンディスカッションでは、数学と進化計算の分野間交流を促進するために必要な、いわゆるイノベーションのジレンマにおける「死の谷」を超えるための方策を、会場からも自由に意見を募って議論した。

加えて、第20回進化計算学会研究会では、進化計算学会 実世界ベンチマーク問題分科会（分科会員にはIMI研究会の組織委員である濱田と能島が含まれる）が運営するイベント「進化計算コンペティション」の事前説明会を行った。この分科会は、上記の2019年IMI短期共同研究から発足したもので、コンペティションを通じて最適化の実問題やその解データを収集し、共同研究で構築した数学理論が実問題で成立するかをデータから検証したり、その理論を進化計算分野に普及したりする取り組みを行っている。

本研究集会により、今までほとんど注目されていなかった数学と進化計算の関係を、従来の共同研究のメンバーを超えて両分野の研究者に広く周知することができ、新たな研究を動機づけることができたと考える。実際、研究代表者の周囲では、新たなメンバーを加えて、特異点論によって解明された解集合の大域的構造を活用した進化計算アルゴリズムの研究が進んでいる。これを契機として、さらに多くの研究者がこの実りある新分野に参入し、数学の産業応用が進展することを望む。

組織委員

濱田 直希	(KLab 株式会社)
穴井 宏和	(富士通株式会社)
梅田 裕平	(富士通株式会社)
千葉 一永	(電気通信大学)
佐藤 寛之	(電気通信大学)
能島 裕介	(大阪府立大学)
加葉田 雄太郎	(長崎大学)
一木 俊助	(東京工業大学)
早野 健太	(慶應義塾大学)
佐伯 修	(九州大学 IMI)

九州大学マス・フォア・インダストリ研究所
共同利用・共同研究 一般研究-研究集会(I) 令和2年度採択分

進化計算の数理

講演予定(一般講演:5件)

進化計算の数理

濱田 直希 (KLab株式会社 開発推進部)

多目的進化アルゴリズム入門

大山 聖 (宇宙科学航空研究開発機構 宇宙科学研究所)

特異点論の見方・やり方・使い方

石川 剛郎 (北海道大学理学研究院数学部門)

確率モデルに基づく進化計算とその応用

白川 真一 (横浜国立大学大学院環境情報研究院)

パレート集合およびフロントの局所構造とその分岐

寺本 央 (関西大学システム理工学部数学科)

一般講演 (ほか5件)

オープンディスカッション

数学と進化計算の

Valley of Deathを越えるには?

連動開催 第20回進化計算学会研究会
09.08(Wed)~09.09(Thu)

2021.09.07~08
(Tue) (Wed)



Zoomミーティングによるオンライン開催 パソコンやスマホで簡単に視聴できます
https://www.imi.kyushu-u.ac.jp/kyodo-riyo/research_meetings/view/27



【運営に関する問い合わせ先】E-mail:hamada-n@klab.com
【問い合わせ先】九州大学マス・フォア・インダストリ研究所
E-mail:imikyoten@jimu.kyushu-u.ac.jp

【共催機関】進化計算学会 【運営責任者】濱田 直希 (KLab株式会社)
【組織委員】穴井 宏和 (富士通株式会社)、梅田 裕平 (富士通株式会社)、千葉 一永 (電気通信大学)、佐藤 寛之 (電気通信大学)、能島 裕介 (大阪府立大学)、
加葉田 雄太郎 (長崎大学)、一木 俊助 (東京工業大学)、早野 健太 (慶應義塾大学)、佐伯 修 (九州大学IMI)

進化計算の数理

Mathematics of Evolutionary Computation

日時： 2021年9月7日 (火) 10:00 ~ 17:00
2021年9月8日 (水) 09:00 ~ 10:20, (懇親会) 18:00 ~ 20:00
場所： Zoom (完全オンライン開催)
研究代表者： 濱田 直希 (KLab株式会社)
連動開催(※)：第20回進化計算学会研究会
2021年9月8日 (水) 10:30 ~ 17:30
2021年9月9日 (木) 09:00 ~ 12:00

プログラムは都合により変更になる場合がありますので予めご了承ください
最新情報はホームページをご覧ください。

申込方法：右記のQRコードより参加登録をお願いいたします



※本研究集会は、数学と進化計算の異分野交流を目的として、第20回進化計算学会研究会と同一のZoom会場にて連続して開催いたします。懇親会は両研究集会の参加者が合同で行います。進化計算学会研究会へもあわせてご参加いただけますと幸いです。

第20回進化計算学会研究会への参加申込(無料)はこちら：
<http://www.jpnssec.org/symposium202102.html>



9月7日 (火)

10:00-10:10
オープニング

10:10-10:50
講演者：濱田 直希 (KLab 株式会社)
講演タイトル：進化計算の数理

講演概要：進化計算は、最適化問題の凸性や導関数を要求しないブラックボックス最適化アルゴリズムである。産業界の様々な問題において、大域的最適解をしばしば精度よく近似できることから広く利用されてきた。一方で、現在でもその動作原理の大部分は数学的に説明できておらず、数値実験を主体としたアルゴリズム開発

には課題も見え始めている。本講演では、進化計算のための大域的最適化の理論として有望と思われる、大域解析学、特に可微分写像の特異点論に基づく方法と最近の研究成果を紹介する。

10:50-11:40

講演者：大山 聖（宇宙科学航空研究開発機構 宇宙科学研究所）

講演タイトル：多目的進化アルゴリズム入門

講演概要：多目的進化アルゴリズムは大域的な最適解を得ることができる、多目的最適化問題のパレート最適解を一度に得ることができるなどの優れた特徴を持ち、産業界において、実問題を解くための最適化手法として大きな注目を集めている。本講演では多目的進化アルゴリズムをこれまで扱ってこなかった方を対象に多目的進化アルゴリズムの基礎と応用について紹介する。

11:40-12:30

講演者：石川 剛郎（北海道大学理学研究院数学部門）

講演タイトル：特異点論の見方・やり方・使い方

講演概要：空間・図形の状態、関数・写像の挙動などが周囲と著しく異なるような点を特異点と呼ぶ。特異点は研究対象の局所的・大域的な情報を顕在化する重要な存在である。数学の一分野としての特異点論の位置付け、特異点論の中心的な問題、安定性、genericity(普及性)、確定性、分類と認識問題、分岐図式や層化の手法など、幾何学からの特異点へのアプローチや特異点論特有の物の見方の一端を紹介し、その応用の可能性をさぐる。

13:30-14:20

講演者：白川 真一（横浜国立大学大学院環境情報研究院）

講演タイトル：確率モデルに基づく進化計算とその応用

講演概要：本講演では、解を生成する確率分布を目的関数値に基づいて更新していくことで最適化を行う進化計算手法に焦点を当てる。このような確率モデルに基づく進化計算の確率的自然勾配法との関連性やその数理的な見通しについて概説する。また、確率モデルに基づく進化計算の応用例として、ニューラルネットワークの構造探索なども紹介する。

14:20-15:10

講演者：寺本 央（関西大学システム理工学部数学科）

講演タイトル：パレート集合およびフロントの局所構造とその分岐

講演概要：この講演では目的関数および拘束条件を与える関数が滑らかな場合にパレート集合とフロントの局所構造を議論する。まずは拘束条件を満たす実行可能解の集合の局所構造を微分同相で分類する。最も一般的な場合にはKKT条件が成立するための十分条件の一つであるKuhn-Tuckerの1次制約想定が満たされるが、感度分析等で系のパラメータを変化させたときに出現する退化した状況ではそれは必ずしも満たされない。そのような退化した状況がパラメータの変化とともにどのように変化するかを議論する。最後に実行可能解の集合を保つ微分同相のもとで目的

関数が定める写像を濱田らにより提案されたパレート A 同値による分類結果を紹介し、パレート集合とフロントの局所構造とその分岐を議論する. この研究は KLab 株式会社濱田直希, 慶応大学早野健太らとの共同研究の成果である.

15:30-17:00

ショートプレゼンテーション 3 件

9月8日 (水)

09:00-10:00

ショートプレゼンテーション 2 件

10:00-10:20

オープンディスカッション「数学と進化計算の Valley of Death を越えるには？」

18:00-20:00

懇親会 (第 20 回進化計算学会研究会との合同)

Contents

Mathematics for Evolutionary Computation	1
Naoki HAMADA (Engineering Division, KLab Inc., Japan)	
Introduction to multiobjective evolutionary algorithm	36
Akira OYAMA (Institute of Space and Astronautical Science, Japan Aerospace Exploration Agency, Japan)	
Singularity theory viewpoints, methods and applications	51
Goo ISHIKAWA (Department of Mathematics, Hokkaido University, Japan)	
Probabilistic Model-Based Evolutionary Computation and Its Applications	69
Shinichi SHIRAKAWA (Faculty of Environment and Information Sciences, Yokohama National University, Japan)	
Local Structures of Pareto Sets and Fronts and Their Bifurcations	85
Hiroshi TERAMOTO (Department of Mathematics, Faculty of Engineering Science, Kansai University, Japan) (joint work with Naoki Hamada (KLab Inc.) and Kenta Hayano (Keio University))	
State-of-the-art Multi-objective Optimization with the SAN (Subpopulation Algorithm based on Novelty)	92
Danilo Vasconcellos VARGAS (Faculty of Information Science and Electrical Engineering, Kyushu University, Japan; Department of Electrical Engineering and Information Systems, School of Engineering, The University of Tokyo, Japan)	
Application of singularity theory to strongly convex multiobjective optimization problems	104
Shunsuke ICHIKI (Department of Mathematical and Computing Science, School of Computing, Tokyo Institute of Technology, Japan)	
All unconstrained strongly convex problems are weakly simplicial	109
Yusuke MIZOTA (Faculty of Science and Engineering, Kyushu Sangyo University, Japan (joint work with Naoki Hamada (KLab Inc.) and Shunsuke Ichiki (Tokyo Institute of Technology))	
Weak Pareto optima are Pareto optima for simplicial problems	125
Kenta HAYANO (Department of Mathematics, Faculty of Science and Technology, Keio University, Japan) (joint work with Naoki Hamada (KLab Inc.))	
Reeb Space-Based Design of Benchmark Problems for Multi-Objective Optimization	130
Daisuke SAKURAI (Kyushu University, Japan) (joint work with Reiya Hagiwara (Kyushu University), Naoki Hamada (KLab Inc.), and Takahiro Yamamoto (Tokyo Gakugei University))	

Mathematics for Evolutionary Computation

Naoki HAMADA

Engineering Division, KLab Inc., Japan

Evolutionary computation is a paradigm of black-box optimization algorithms that do not require the convexity or derivatives of optimization problems. It has been widely used in various fields of industry and science because it can often approximate the global optima with good accuracy in the practical point of view. However, even now, most of its working principles are not mathematically understood, and the benchmark-intensive development of algorithms is beginning to face problems in performance evaluation [1]. In this talk, I will introduce methods and applications of global analysis, in particular singularity theory of differentiable mappings [2, 3], which seems to be promising as a theory of evolutionary computation for global optimization.

REFERENCES

- [1] H. Ishibuchi, L. He, and K. Shang, “Regular Pareto Front Shape is not Realistic,” *2019 IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC)*, 2019, pp. 2034–2041.
- [2] S. Smale, “Global Analysis and Economics: Pareto Optimum and a Generalization of Morse Theory,” *Synthese*, 1975, 31:2, pp. 345–358.
- [3] N. Hamada, K. Hayano, S. Ichiki, Y. Kabata, and H. Teramoto, “Topology of Pareto Sets of Strongly Convex Problems,” *SIAM Journal on Optimization*, 2020, 30:3, pp. 2659–2686.

IMI研究集会 (2021年9月7日~8日) 進化計算の数理

※スライド中の **オレンジの文字** は参考文献へのリンクです。スライドの記述は厳密でない部分があるため、厳密な内容を知りたい場合は参考文献をご参照ください。

KLab株式会社
エンジニアリング本部
リサーチエンジニア
濱田 直希

Creating a World of Excitement

©KLab Inc.



KLab株式会社

エンジニアリング本部
リサーチエンジニア
濱田 直希

理化学研究所

理研AIP-富士通連携センター
客員研究員

経歴

2010/4 ~ 2013/3	東京工業大学	博士 (工学)
2013/4 ~ 2020/6	(株) 富士通研究所	研究員
2020/7 ~ 現在	KLab (株)	リサーチエンジニア
2017/4 ~ 現在	理化学研究所	客員研究員

専門

最適化 (主に進化計算), 機械学習 (主に位相的データ解析), これらの技術のゲームへの応用 (主に数理ラブライブ)

©KLab Inc.

2

社名	KLab株式会社 (クラブかぶしきかいしゃ) KLab Inc.
設立	2000年8月1日
資本金	49億5516万円 (2021年7月末現在)
株式公開市場	東京証券取引所・市場第一部 (3656)
代表者	代表取締役社長CEO 森田 英克 代表取締役副会長 五十嵐 洋介
所在地	本社 (東京都港区、六本木ヒルズ森タワー) 大阪事業所、福岡事業所、仙台事業所
主要関連会社	株式会社スバイスマート 株式会社グローバルギア
海外拠点	可来软件开发 (上海) 有限公司 (KLab China Inc.)
グループ従業員数	正社員 576名 (2021年6月末現在)



代表タイトル

ラブライブ!
スクールアイドル
フェスティバル
ALL STARS

BLEACH
Brave Souls

キャプテン翼
~たたかえドリームチーム~

うたの☆プリンスさまっ♪
Shining Live

©KLab Inc.

3

九州大学IMI共同利用研究 (Webサイトより)

- **九州大学IMI**：“本研究所は日本初の産業数学の研究所であり、多様な数学研究に基礎を置く、新しい産学連携の拠点として平成23年4月に附置研究所として設立されました。平成25年4月には文部科学大臣から共同利用・共同研究拠点「産業数学の先進的・基礎的共同研究拠点」に認定され、理念である「マス・フォア・インダストリ」の具現化を推進しているところです。”
- **共同利用研究**：“拠点の中核事業の一つとして、本研究所では公募制の共同利用研究事業を実施しています。年に1回（11月～1月頃）研究計画を公募しています。”



©KLab Inc.

4

これまでの研究課題

- **2017年**：ベクトル値滑層分割Morse理論の構築による多目的最適化問題の解集合の可視化
- **2018年**：多目的最適化と特異点論：パレート点の特異点の分類
- **2019年**：実践と数理に根ざした多目的最適化ベンチマークの開発
- **2020年**：進化計算の数理（延期→今回の開催）

過去3回の共同利用を通して、様々な数学者の方々と共同研究させていただき、進化計算の数理について数多くの研究成果が得られました。本イベントでは、その一部をお伝えできれば幸いです。

©KLab Inc.

5

プログラム

9月7日(火)

- 10:00-10:10 オープニング
- 10:10-10:50 濱田 直希 (KLab, 理研AIP)
進化計算の数理
- 10:50-11:40 大山 聖 (宇宙科学航空研究開発機構)
多目的進化アルゴリズム入門
- 11:40-12:30 石川 剛郎 (北海道大学)
特異点論の見方・やり方・使い方
- 12:30-13:30 昼食
- 13:30-14:20 白川 真一 (横浜国立大学)
確率モデルに基づく進化計算とその応用
- 14:20-15:10 寺本 央 (関西大学)
パレート集合およびフロントの局所構造とその分岐
- 15:30-16:00 ダニロ ヴァルスコンセロス ヴァルガス (九州大学, 東京大学)
SAN (ノベルティに基づくサブポピュレーションアルゴリズム) による多目的最適化の最先端
- 16:00-16:30 一木 俊助 (東京工業大学)
強凸多目的最適化問題への特異点論の応用
- 16:30-17:00 溝田 裕介 (九州産業大学)
制約なし強凸問題は全て弱単体的である

9月8日(水)

- 09:00-9:30 早野 健太 (慶応義塾大学, 理研AIP)
単体的問題の弱パレート解はパレート解
- 9:30-10:00 萩原 黎弥 (九州大学), 濱田 直希 (KLab), 山本 卓宏 (東京学芸大学), 櫻井 大智 (九州大学)
多目的最適化のためのレーブ空間論に基づくベンチマーク問題設計
- 10:00-10:20 オープンディスカッション
数学と進化計算のValley of Deathを越えるには?
- 10:30-17:30 第20回進化計算学会研究会
- 18:00-20:00 懇親会
(第20回進化計算学会研究会との合同)

9月9日(木)

- 9:00-12:00 第20回進化計算学会研究会

©KLab Inc.

6

このイベントを通して伝えたいこと

- 進化計算にも確かな数理がある
現状知られていないからといって存在しないとは限らない
むしろより高度な数学を応用して初めて見つかるかもしれない
- すべての数学は役に立つ：純粋数学 = 応用数学
工学部で習う数学だけが役に立つ数学ではない
理論と応用は両輪：理論が応用を生み，応用が理論を生む
- できることから始めてみよう
産業的にも学術的にも未解決問題だらけ
いきなり難しいことをしなくても，できることは沢山ある

©KLab Inc.

7

なんだか難しそう…

- 本講演では，以降の講演で登場するトピックを概説します
全体をストーリー仕立てで説明します
各トピックの詳細はそれぞれの先生方の講演で
- 細部は気にせず全体像を掴んでみてください
純粋数学から産業応用までがどう繋がっていくのか？
聞きなれない概念がたくさん…それぞれの位置づけは？
- 「進化計算の数理って面白そう」と思ってもらえたら◎
産業的にも学術的にも未解決問題だらけ
一緒に挑戦してみませんか？

©KLab Inc.

8

内容

- 最適化と進化計算
 - 単目的/多目的最適化とその解集合
 - 進化計算の現状と課題
- 大域的最適化の理論を求めて
 - 最適化におけるトポロジー研究の歴史
 - モース理論と特異点論
- ゲームへの応用
 - 多目的スパースモデリングによるゲームAI設計
 - 敵対的生成ネットワークによるゲームコンテンツ生成

©KLab Inc.

9

最適化と進化計算

Creating a World of Excitement

©KLab Inc.

製品開発で直面する共通の課題

予算, 時間, 規格, etc.

与えられた条件の下で, できるだけ良い製品を作りたい

性能, 安全性, etc.

©KLab Inc.

11

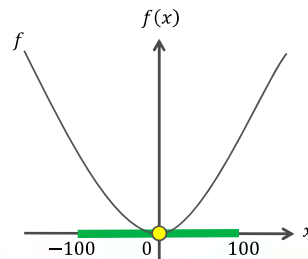
最適化とは

与えられた条件のもとで、最適な選択枝を見つける問題

例: minimize $f(x) = x^2$
subject to $-100 \leq x \leq 100$

目的関数 f の値を最小にする点 x を
制約 $-100 \leq x \leq 100$ を満たす範囲で
見つけよ

答えは $x = 0$ (最適解という)



©KLab Inc.

12

最適化は様々な分野で応用されている

- **工業製品の設計**
 - 新幹線N700系の先頭形状の設計
 - トラス構造の設計
- **人工知能**
 - 機械学習モデルのチューニング
 - ゲームAIの思考ルーチン
- **産業・社会システムの運用**
 - 製品の生産計画
 - 水道の配水計画
- などなど



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
[日経XTECH 2007]

©KLab Inc.

13

最適化すれば最高の製品が作れる！？



速度最高



安全性最高



燃費最高

単一の目的関数を最適化した解はしばしば極端すぎる

©KLab Inc.

14

良い製品を作るためには



速度最高

要はバランス



安全性最高



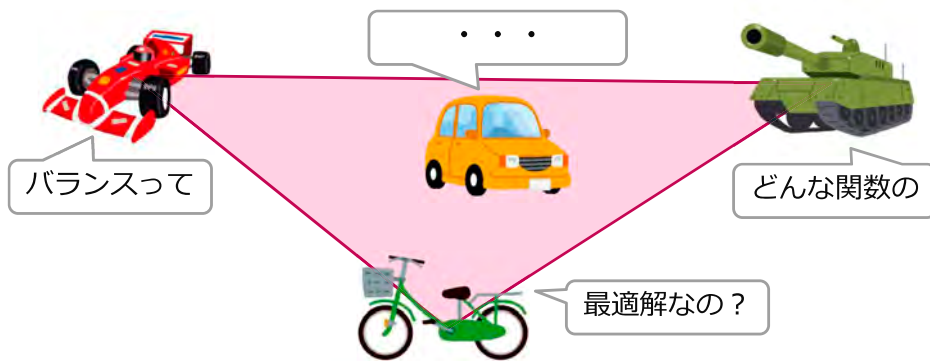
燃費最高

複数の目的関数のバランスをとる必要がある

©KLab Inc.

15

どうすればバランスがとれる？



わからないから、複数の目的関数を最適化しよう

©KLab Inc.

16

多目的最適化とは

複数の目的関数を同時に最適化する問題

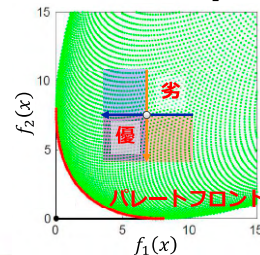
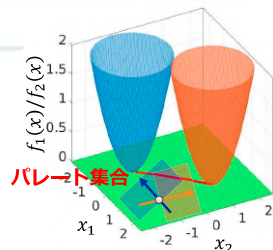
例： minimize $f_1(x_1, x_2) = (x_1 + 1)^2 + (x_2 + 1)^2$
 $f_2(x_1, x_2) = (x_1 - 1)^2 + (x_2 - 1)^2$

subject to $-2 \leq x_i \leq 2 \quad (i = 1, 2)$

目標：パレート解集合を求める（解は点ではなく集合）

[定義] 点 x がパレート解であるとは、
 以下を満たす点 y が存在しないことをいう：

- $f_i(y) \leq f_i(x)$ for all i ,
- $f_j(y) < f_j(x)$ for some j .



©KLab Inc.

17

多目的最適化は様々な分野で応用されている

- **工業製品の設計**
 - 国産旅客機MRJのエンジン取り付け位置の設計
 - 風力発電用の風車の設計
- **人工知能の設計**
 - 機械学習モデルのチューニング
 - ゲームAIの思考ルーチン
- **産業・社会システムの運用**
 - 製品の生産計画
 - 水道の配水計画
- **商用ソルバ**
 - modeFRONTIER
 - Optimus
 - iSight
 - ほが多数



[MONOist 2014]

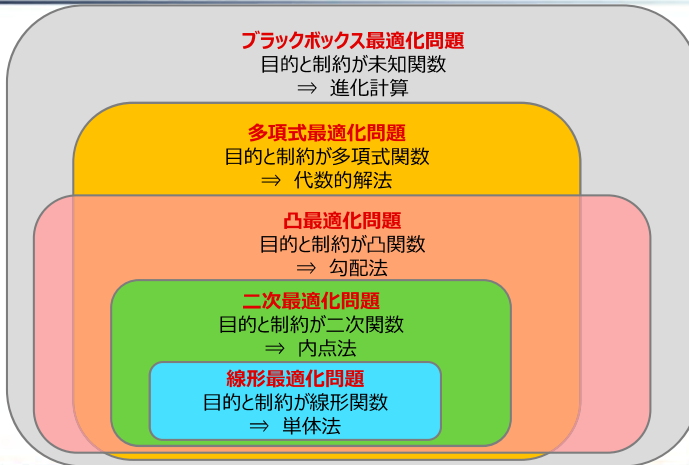


[進化計算コンペティション 2019]

©KLab Inc.

18

最適化問題のクラス



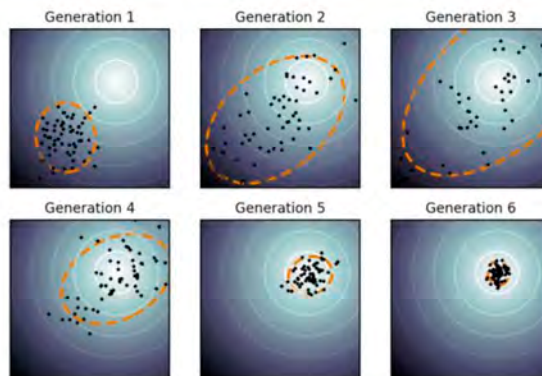
※ 思い切って単純化しています
本当はもっと色々あります

©KLab Inc.

19

進化計算とは：単目的最適化の場合

1. 初期集団の生成
2. 適応度評価
3. 適者生存
4. 終了判定
5. 子集団生成
6. ステップ2へ



右図：CMA-ESの探索イメージ

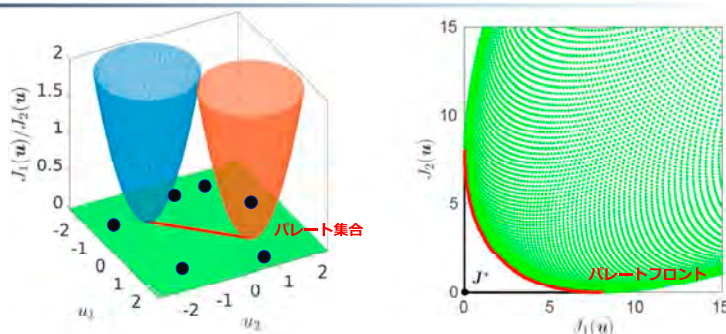
CMA-ESは

- 定義域のアフィン変換に対する不変性
 - 値域の順序同型変換に対する不変性
- をもつため幅広い問題で安定した性能を発揮する

©KLab Inc.

20

進化計算とは：多目的最適化の場合



ランダムサンプリングと選択を繰り返して解に近づく

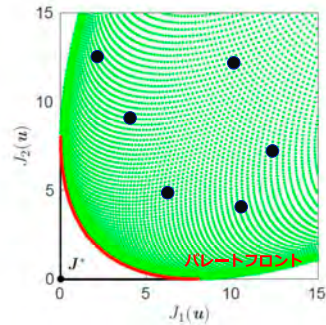
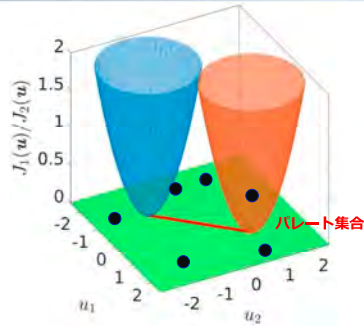
具体的な進化計算手法については下記などを参照：

[Zhou+ 2011] Multiobjective evolutionary algorithms: A survey of the state of the art, *Swarm and Evolutionary Computation* 1(1), pp. 32-49.

©KLab Inc.

21

進化計算とは：多目的最適化の場合



ランダムサンプリングと選択を繰り返して解に近づく

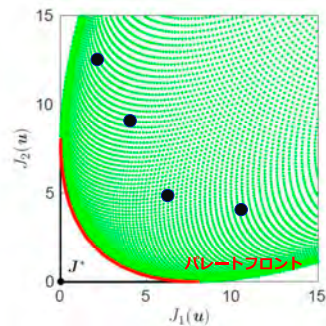
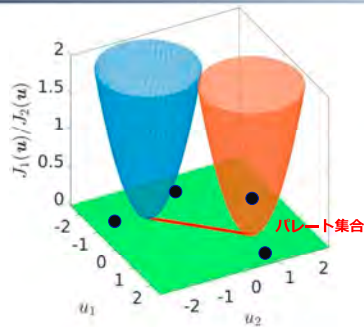
具体的な進化計算手法については下記などを参照：

[Zhou+ 2011] Multiobjective evolutionary algorithms: A survey of the state of the art, *Swarm and Evolutionary Computation* 1(1), pp. 32-49.

©KLab Inc.

22

進化計算とは：多目的最適化の場合



ランダムサンプリングと選択を繰り返して解に近づく

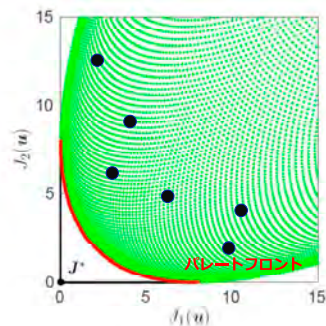
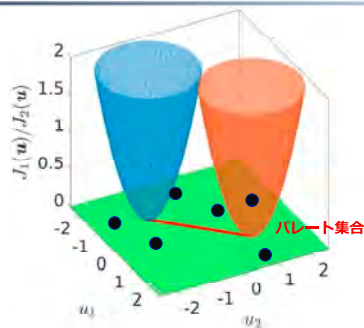
具体的な進化計算手法については下記などを参照：

[Zhou+ 2011] Multiobjective evolutionary algorithms: A survey of the state of the art, *Swarm and Evolutionary Computation* 1(1), pp. 32-49.

©KLab Inc.

23

進化計算とは：多目的最適化の場合



ランダムサンプリングと選択を繰り返して解に近づく

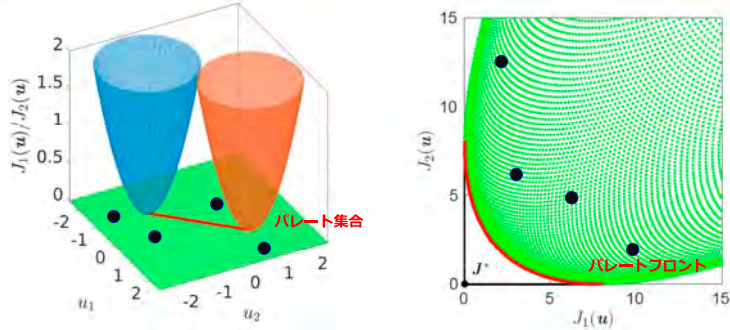
具体的な進化計算手法については下記などを参照：

[Zhou+ 2011] Multiobjective evolutionary algorithms: A survey of the state of the art, *Swarm and Evolutionary Computation* 1(1), pp. 32-49.

©KLab Inc.

24

進化計算とは：多目的最適化の場合



ランダムサンプリングと選択を繰り返して解に近づく

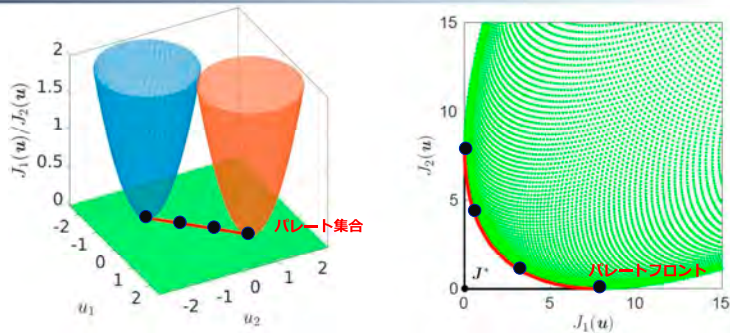
具体的な進化計算手法については下記などを参照：

[Zhou+ 2011] Multiobjective evolutionary algorithms: A survey of the state of the art, *Swarm and Evolutionary Computation* 1(1), pp. 32-49.

©KLab Inc.

25

進化計算とは：多目的最適化の場合



ランダムサンプリングと選択を繰り返して解に近づく

具体的な進化計算手法については下記などを参照：

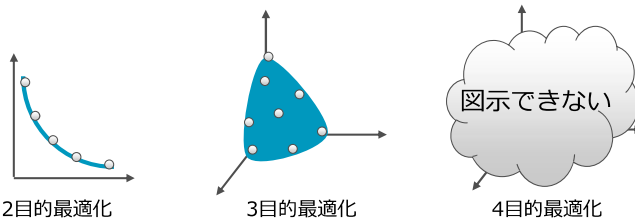
[Zhou+ 2011] Multiobjective evolutionary algorithms: A survey of the state of the art, *Swarm and Evolutionary Computation* 1(1), pp. 32-49.

©KLab Inc.

26

多目的最適化すれば最高の製品が作れる！？

パレート集合やパレートフロントは目的数-1次元になる*



2目的最適化

3目的最適化

4目的最適化

パレートフロントは曲線 パレートフロントは曲面 パレートフロントは立体

*これはジェネリックに（=ほとんどすべての問題で）成立する。正確なステートメントは以下を参照：無制約最適化[Wan 1977], 制約付き最適化[Wan 1978].

4目的以上の最適化問題を解いても理解できない

4目的以上は2~3目的と比べて急に難しくなるため、多数目的最適化とよばれています

©KLab Inc.

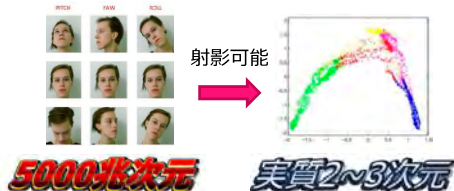
27

なぜ多数目的は難しい？

- パレートフロントには次元削減が通用しない

- 多様体仮説が成り立たない

画像などのデータの場合



多目的最適化のデータの場合



- パレートフロントを近似するサンプルが少量しかとれない

- 最適化計算が重いため、数十点～数百点が限界

©KLab Inc.

28

多数目的最適化は研究の最先端

- 商用ツールのサポートは不十分

- 多数目的に対応したソルバMOEA/Dが搭載されはじめた
 - しかし従来のソルバNSGA-IIのほうが良い解を見つけるケースも
- 高次元データの可視化手法はあまり搭載されていない
 - 解けたとしてもパレートフロントが理解できない

- 学会では解法と可視化手法が研究がさかん

- MOEA/Dを超えるソルバが毎年登場
 - しかし特定のベンチマーク問題への過適応が指摘されている
- パレートフロントの可視化手法いろいろ
 - しかしどの手法も低次元に射影するため情報が欠落する

©KLab Inc.

29

進化計算の性能比較

- 実問題

- リアルだが、公開されることは稀
- 多様な問題があり、標準化が難しい
- 計算時間がかかる（数時間～数日）
 - ➔ 性能比較に使いにくい

- 人工問題

- 公開されるが、リアルとは限らない
- デファクトスタンダードな問題がある
- 計算時間が短い（数秒～数分）
 - ➔ 性能比較に使いやすい

©KLab Inc.

30

人工ベンチマーク問題の歴史

- **1990年代**：標準問題なし
 - 研究者は自分で問題を作っていた
- **2000年代前半**：ZDT [Zitzler+ 2000]
 - 2目的のデファクトスタンダード問題セット
- **2000年代後半**：DTLZ [Deb+ 2001], WFG [Huband+ 2006]
 - ZDTを n 目的に拡張
- **2010年代**：Inverted-DTLZ [Jain+ 2013], Minus-WFG [Ishibuchi+ 2017]
 - DTLZ/WFGでは性能の良かった手法がInverted-DTLZ/Minus-WFGでは性能が悪いことが判明
 - 標準問題のリアリティに疑問が投げかけられた

©KLab Inc.

31

この章のまとめ

- 最適化と進化計算は産業界で活躍している
製品設計, 様々な計画・運用など
様々なソルバの存在
- 実験中心の進化計算には課題も見え始めている
ベンチマーク問題や少数の実問題での性能は信頼できるか？
多数目的最適化問題をどう扱うのか？
- 大域的最適化の理論が求められている
局所解をもつブラックボックス関数を扱うことができ
進化計算の発展に寄与するような理論

©KLab Inc.

32

KLab

大域的最適化の理論 を求めて

Creating a World of Excitement

©KLab Inc.

普遍的な最適化の理論を探す旅



■ コンベックス山脈

- 最適化アルゴリズムの理論を構築するには、ほとんどのケースで「**目的関数が凸 (Convex)**」という仮定が使われる
- この仮定を外したとたんに、理論構築が一気に難しくなる



■ ノーフリーランチ砂漠

- NFL定理「どんな探索アルゴリズムも、すべての関数に対する**平均的な探索性能はランダムサーチと等しい**」*
- 対象問題をむやみに一般化せず、問題に特化した最適化アルゴリズムを作るのが成功の秘訣と信じられている

*組合せ最適化 [Wolpert+ 1997], 連続最適化 [Lockett+ 2017], 多目的組合せ最適化 [Corne+ 2003], 今回の主題である多目的連続最適化に関しては類似の定理はまだ証明されていないため、この議論には少し飛躍がある。

©KLab Inc.

34

大域的最適化の理論を求めて…



大域的最適化のための解析学はないのだろうか…

じつは結構昔からあるらしい (Steve Smale 1980年)

What is Global Analysis? | SpringerLink
https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-1-4613-8101-3_2 - このページを読む
S Smale 著 - 1980 - 被引用数: 10 - 関連記事
There has recently been a lot of activity in that branch of mathematics now referred to as "global analysis." For example, the subject of the 1960 Summer Institute of the American Mathematical...

©KLab Inc.

35

Smaleの文献を辿るとそこには…

STEVESMALE

多目的最適化
発祥の地

GLOBAL ANALYSIS AND ECONOMICS

Pareto Optimum and a Generalization of Morse Theory

Precisely the problem we consider is the following: One is given real differentiable functions $u_i: W \rightarrow \mathbb{R}$ defined on a manifold W say for $i = 1, \dots, m$. What is the nature of curves $\varphi: R \rightarrow W$ with the derivative $d/dt(u_i \circ \varphi)(t)$ positive for all i, t ? For what $x \in W$ does there exist such a φ with $\varphi(0) = x$? The critical Pareto set θ is defined as the set of $x \in W$, for which there is no such φ . The main problem is the study of θ . Another way of looking at this is: how and when can one gradually improve the values of several functions simultaneously? One could consider this subject as part of game theory.

These questions lead to attractive mathematical problems. But especially one obtains a new way of studying utility, Pareto sets in economics, where traditional assumptions of convexity and monotonicity need not play such a key role. Also I believe that the questions of optimizing several functions at once, transcend economics; in other social problems, opti-

目的関数の凸性を仮定することなくパレート集合の性質を解析する [Smale 1975]

Synthese 31 (1975) 345-358. All Rights Reserved
Copyright © 1975 by D. Reidel Publishing Company, Dordrecht-Holland

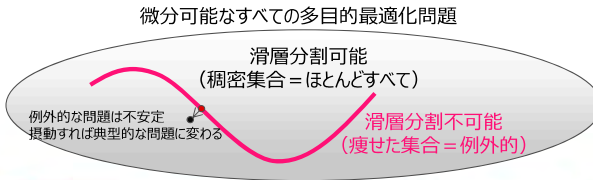
©KLab Inc.

36

“ほとんど全て”の問題に共通する性質がある！

[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m-1次元の滑層分割集合となる。**

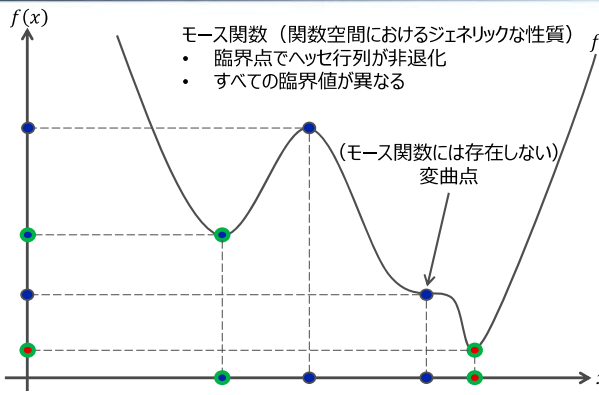


*上記論文には証明は書かれていない、のちに上記とは若干異なる仮定のもとで、いくつかの条件下で類似の命題が示された。無制約最適化のケースは[Wan 1977], 制約付き最適化は[Wan 1978], パレート順序の代わりに一般の凸錐が誘導する順序を用いた一般化は[Vershik+ 1982]を参照。

©KLab Inc.

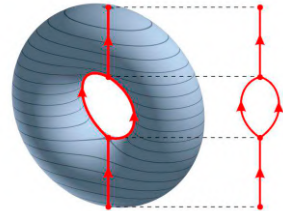
37

単目的最適化とモース理論の関係



モースの補題: 適当な座標変換のもとで臨界点近傍における関数は以下の標準形で表せる

$$f(x) = x_1^2 + \dots + x_i^2 - x_{i+1}^2 - \dots - x_n^2$$



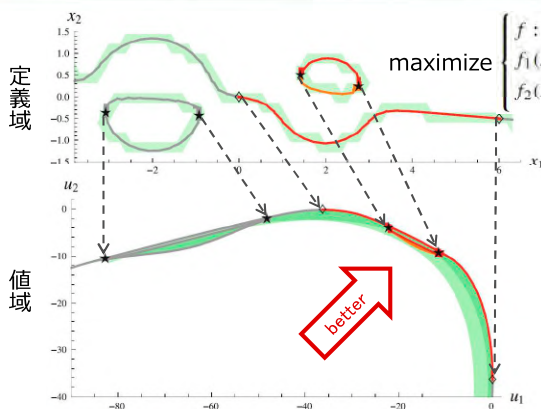
レベルグラフ: 等高線の位相をグラフ化したもの

最小点集合 \subseteq **局所最小点集合** = **安定臨界点集合** \subseteq **臨界点集合**
 定義域で最小値 近傍で最小値 積分曲線が近傍に留まる 微分が0

©KLab Inc.

38

多目的最適化と特異点論の関係



$$f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2, \\ f_1(x, y) := -(x-6)^2 - (y+0.5)^2, \\ f_2(x, y) := -x^2 - y^2 - 4(e^{-(x+2)^2 - y^2} + e^{-(x-2)^2 - y^2}).$$

If 定義域次元 \geq 値域次元

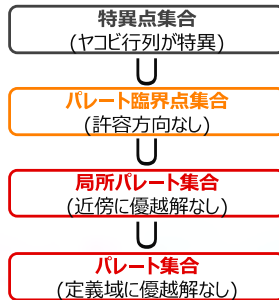


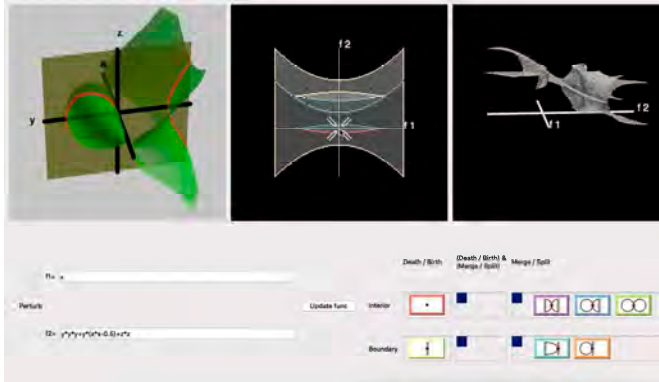
Fig. 1 Upper panel: Singular set Σ (gray, orange and red curves), critical set θ (orange and red) and stable critical set θ_s (red) for the function in example 1. Lower panel: Image of the function f with the images of the relevant sets Σ , θ and θ_s highlighted. (Color figure online)

©KLab Inc.

39

レーブ空間 ($f: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^2$)

- Varying $f_1 = x$ with fixed $f_2 = y^3 + y(x^2 - 0.5) + z^2$



©KLab Inc.

40

写像空間におけるジェネリックな性質は？

定理 2.2 $C_{pr}^\infty(\mathbb{R}^n, \mathbb{R}^m)$ において、 C^0 安定写像は次元対 (n, m) によらずジェネリックである。一方、 C^∞ 安定写像がジェネリックであるのは、 (n, m) が以下のいずれかに該当するとき、かつそのときにかぎる：

$$\begin{cases} n < \frac{6}{7}m + \frac{8}{7} & (m - n \geq 4), \\ n < \frac{6}{7}m + \frac{9}{7} & (3 \geq m - n \geq 0), \\ m < 8 & (m - n = -1), \\ m < 6 & (m - n = -2), \\ m < 7 & (m - n \leq -3). \end{cases}$$

C^r 安定写像：写像に摂動を加えても定義域と値域の C^r 同相変換によってとの写像に戻せる

多目的最適化の標準ベンチマーク問題
ZDT, DTLZ, WFGはいずれも不安定写像である！！

この次元対を結構次元 (nice dimension) という。

実用上ほとんどの最適化問題は $m - n \leq -3$ である。そのため、最後のケース ($m < 7$) に該当するか否かが重要である。今日の最適化の応用では、 $m \geq 7$ を扱うことはまれであるため、当面は C^∞ 安定写像はジェネリックと考えて差し支えない。一方で、まだ実用には遠いが、 $m \geq 7$ の最適化も研究が活発化している [LLTY15]。今後 10~20 年のスパンでは、 C^0 安定写像を扱うことも視野に入れる必要がある。

©KLab Inc.

41

特異点にはどんな種類がある？

特異点の分類において、一般的に用いられる同値関係は以下である。

定義 7.1 $f: (\mathbb{R}^n, x) \rightarrow (\mathbb{R}^m, v)$ と $g: (\mathbb{R}^n, y) \rightarrow (\mathbb{R}^m, w)$ をそれぞれ点 $x, y \in \mathbb{R}^n$ での C^∞ 写像芽とする。以下の図式を可換にする C^∞ 微分同相芽 $\psi: (\mathbb{R}^n, x) \rightarrow (\mathbb{R}^n, y)$ と $\varphi: (\mathbb{R}^m, v) \rightarrow (\mathbb{R}^m, w)$ が存在するとき、点 x と y は A 同値 (A-equivalent) であるという。

$$\begin{array}{ccc} (\mathbb{R}^n, x) & \xrightarrow{f} & (\mathbb{R}^m, v) \\ \psi \downarrow & & \downarrow \varphi \\ (\mathbb{R}^n, y) & \xrightarrow{g} & (\mathbb{R}^m, w) \end{array} \quad (7.1)$$

安定写像の特異点の A 型は分類されている。しかし、 A 同値ではターゲットの座標変換を行うために、「ある点がパレート点であるかどうか」を変えてしまう。パレート点の分類においては、パレート順序を保存するような変換のもとで同値類を考えたいほうがよいと思われる。そのために、本研究ではターゲットの順序を固定した同値関係考えた。

定義 7.2 A 同値の図式 (7.1) において φ が定義 2.1 のパレート順序 \prec を保存する、すなわち

$$\forall f(x), f(y) \in \mathbb{R}^m [f(x) \prec f(y) \Leftrightarrow \varphi \circ f(x) \prec \varphi \circ f(y)]$$

が成り立つものをパレート A 同値 (Pareto A-equivalence) という。

これを用いてパレート点の分類問題は以下のように言い表せる。

問題 7.1 写像のパレート点のパレート A 型を分類せよ。

パレート A 同値による分類は難しいため、実際の分類では $K[G]$ 同値などを使う

©KLab Inc.

42

多目的最適化におけるトポロジー研究の歴史

- 1950年代：経済学におけるトポロジー研究
 - アクティビティ分析を多目的線形計画問題で定式化，解の可縮性を議論
- 1970年代：大域解析による最適化理論の始まり
 - 微分トポロジーにより，純粋交換経済の大域的構造を議論
- 1970-80年代：Operations Research (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で大域解析の応用，進化計算で位相的データ解析の応用が登場

©KLab Inc.

43

1950年代：経済学におけるトポロジー研究



T.C. Koopmans

資源の最適配分を初めて多目的線形計画問題として定式化して解き，ノーベル経済学賞を受賞。その研究の中で解集合の可縮性を議論した。

[Koopmans 1951, p.76]より（証明はスケッチのみ）：

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.

[Koopmans 1951] Analysis of production as an efficient combination of activities. In *Activity Analysis of Production and Allocation*, pp. 33-97.

©KLab Inc.

44

1970年代：大域解析による最適化理論の始まり



S. Smale

© G. Bergman 2008, GFDL1.2

高次元Poincare予想を解決しフィールズ賞受賞。そこで駆使したモース理論を拡張し，経済学における多目的最適化問題の解集合の構造を議論した。

純粋交換経済： m 人の消費者と l 種類の商品がある市場。消費者 i は自身の効用関数 u_i を最大化するよう商品を交換。パレート集合は市場の均衡状態を表す。

maximize $u(x_1, \dots, x_m) = (u_1(x_1), \dots, u_m(x_m))$
 subject to $(x_1, \dots, x_m) \in W := \{(x_1, \dots, x_m) \in \bar{P}^m \mid \sum_{i=1}^m x_i = w\} (\subseteq (\mathbb{R}^l)^m)$
 where $\bar{P} = \{(t_1, \dots, t_l) \in \mathbb{R}^l \mid t_i \geq 0 \text{ for all } i = 1, \dots, l\}$, $w \in \bar{P}$,
 $u_i : \bar{P} \rightarrow \mathbb{R}$: function which is as differentiable as necessary.

PROPOSITION C.1 (Smale [32, Proposition (pp. 533-534)]). Assume that the utility functions u_1, \dots, u_m satisfy the following properties:

- "convexity": $u_i^{-1}[c, \infty)$ is strictly convex for each i , e;
- "monotonicity": Define for all $x', x \in \bar{P}$, $x' > x$ if $x'_i > x_i$ for all i and similarly for $y', y \in \mathbb{R}^m$. Then $x' > x$ implies $u(x') > u(x)$.

Then the Pareto set of the above problem is homeomorphic to the $(m-1)$ -simplex.

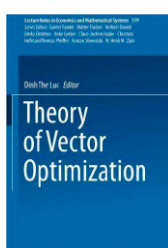
上記の問題のパレート集合は $m-1$ 次元単体と同相

上記の命題は[Hamada+ 2019]より，この命題の初出は[Smale 1973]だが，発表者の知るかぎり今まで証明はされていない。

©KLab Inc.

45

1970-80年代 : Operations Researchへの波及



Chapter 6

Structure of Optimal Solution Sets

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

[Luc 1989]

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.



D.T. Luc

Koopmans流のアプローチを発展させ, 凸最適化におけるパレート集合/フロントの閉集合性, 連結性, 可縮性を議論. 多目的最適化の解集合のトポロジーに関する数少ない教科書を執筆.

©KLab Inc.

46

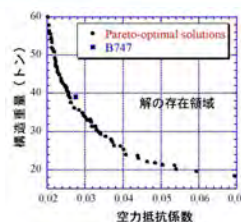
1990年代 : 冬の時代

- Koopmans流のアプローチは…
 - 凸最適化までの範囲では, ほぼ直観通りの結果しか得られなかった
 - 凸で培われた解析技術は, より広いクラスには拡張が難しかった
 - 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…
 - 非凸最適化への有望なアプローチだったが, あまり流行らなかった
 - 当時の計算機では, 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

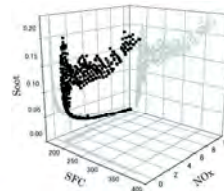
©KLab Inc.

47

2000年代 : 進化計算の発達, 応用での実証例



[大山 2004] 図1

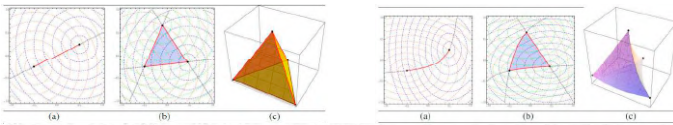


[廣安+ 2003] 図10

©KLab Inc.

48

2010年代 : ORへの大域解析の適用



PROPOSITION 2 (Hierarchical decomposition in the convex case). Let $W \subset \mathbb{R}^n$ 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**. Each one of 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 $\{f_1, \dots, f_m\}$.**

Remark 3. その $k-1$ 次元面は k 目的部分問題のパレート解集合 metric the Pareto set is exactly an $m-1$ simplex, i.e., the facets are flat. **ちなみにこれは誤り 正確な条件はこちら**

Hierarchical decomposition in the convex case. This proposition is 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]). □



A. Lovison

modeFRONTIER開発元のESTECO Research Lab. に勤めていた。今はパドヴァ大学に移籍し、Smale理論を応用した最適化を研究。

[Lovison+ 2014]

そのころ進化計算業界では...

- パレート解を網羅的に探索できるようになってきた
- パレート解のデータが公開されるようになってきた
- 産業問題に理論が当てはまるか検証可能になってきた
- というわけで調べてみた
 - 国際会議GECCO2015~2019採択論文の近似パレートフロントが掲載された実問題を全数調査。

[濱田 2020]「実践と数理に根ざした多目的最適化ベンチマークの開発」成果報告書。

観察1 : 2目的パレートフロントは曲線が頻出

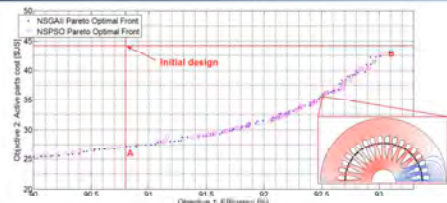
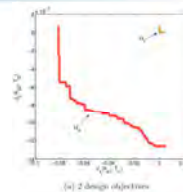
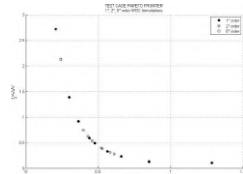


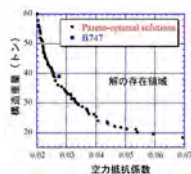
Figure 5: NSGA-II / NSPSO Pareto optimal fronts and 92.5% efficiency optimization geometry [Contreras+ 2016] Fig.5



[Reynoso-Meza+ 2015] Fig.4



[Mastroddi+ 2013] Fig.4



[大山 2004] 図1

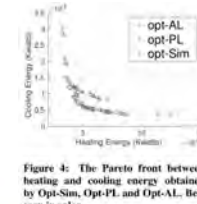
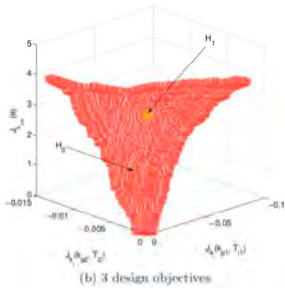


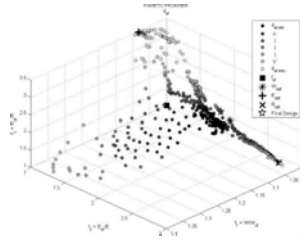
Figure 4: The Pareto front between heating and cooling energy obtained by Opt-Sim, Opt-PL and Opt-AL. Best seen in color.

[Gilan+ 2016] Fig.4

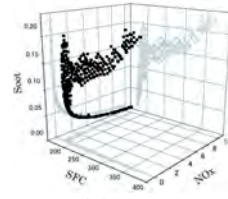
観察1：3目的では曲がった三角形が頻出



[Reynoso-Meza+ 2015] Fig.4



[Mastroddi+ 2013] Fig.4

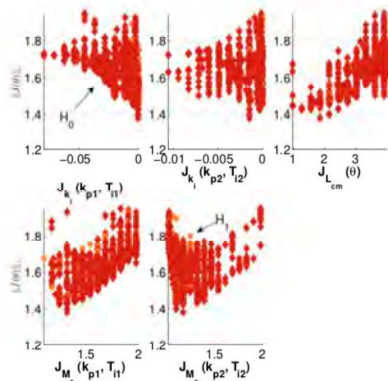


[廣安+ 2003] 図10

©KLab Inc.

52

観察1：m目的では曲がったm-1次元単体が頻出



(c) 5 design objectives [Reynoso-Meza+ 2015] Fig.6

1次元単体 = 線分
2次元単体 = 三角形
3次元単体 = 四面体
...

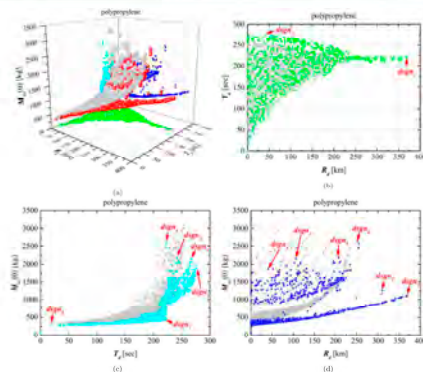
左図は4次元パレートフロントを2次元に射影しているので正確には分からないが、おそらく4次元単体に見える。

23/32件(約72%)のパレートフロントが単体と同相!

©KLab Inc.

53

観察2：パレートフロントの「カド」が大事



論文著者いわく「パレートフロントのカドは性能上のボトルネックを示唆している。カドに位置する解をよく調べることで、性能改善のヒントが得られる可能性が高い。」

[Chiba+ 2013] Fig.3

図1 ある工学応用におけるパレートフロントの注目箇所 [CKS17, Figure 3]. (a) の赤点は3目的空間におけるパレートフロント, (b)-(d) はその2目的平面への射影である。矢印は実務家が注目した解である。

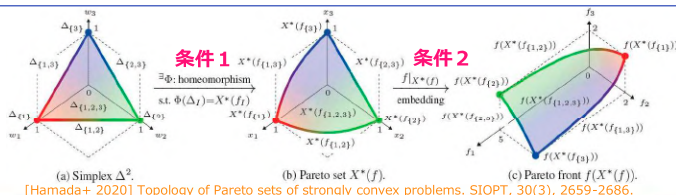
©KLab Inc.

54

観察された性質をちゃんと定義してみた

定義：（弱）単体的な問題

$f = (f_1, \dots, f_m) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m, M = \{1, \dots, m\}$ とする. それぞれの $I = \{i_1, \dots, i_k\} \subseteq M$ について $f_I = (f_{i_1}, \dots, f_{i_k})$ とする. ある C^r -写像 ($0 \leq r \leq \infty$) $\Phi : \Delta^{m-1} \rightarrow X^*(f)$ が存在して $\Phi|_{\Delta_I^{m-1}} : \Delta_I^{m-1} \rightarrow X^*(f_I)$ と $f|_{X^*(f_I)} : X^*(f_I) \rightarrow fX^*(f_I)$ がともに全射な C^r -写像ならば, f を最小化する問題は C^r -弱単体的であるという. さらに $\Phi|_{\Delta_I^{m-1}} : \Delta_I^{m-1} \rightarrow X^*(f_I)$ と $f|_{X^*(f_I)} : X^*(f_I) \rightarrow fX^*(f_I)$ がともに C^r -微分同相写像ならば, 問題は C^r -単体的であるという.



[Hamada + 2020] Topology of Pareto sets of strongly convex problems. SIOPT, 30(3), 2659-2686.

©KLab Inc.

55

定義のポイント

- 単体の面の構造にも言及
 - Smaleは「単体と同相」としか言っていない
 - Lovisonの言及では面の貼合せ構造に曖昧さが残る
- パレート集合/フロントの両方に言及
 - SmaleやLovisonはパレート集合のみ
- 特定の問題クラスとは切り離れた定式化
 - Smaleは純粋交換経済の問題
 - Lovisonは凸最適化問題
- より複雑な解集合を表すための「基本部品」となることも期待
 - ジェネリックな問題のパレート集合/フロントは滑層分割集合 [Wan 1977], [Wan 1978], [Vershik + 1982]
 - 任意のコンパクト滑層分割集合は三角形分割可能 [Johnson 1983]
 - 単体的な問題のパレート集合/フロントを貼り合せて表現できるかも

©KLab Inc.

56

この章のまとめ

- 大域的最適化の理論はある（作れそう）
 - 単目的最適化はモース理論に近い
 - 多目的最適化は特異点論に近い
- 最適化のトポロジー研究には半世紀の歴史がある
 - 実問題での実験結果ともマッチしている
 - しかし最近まで実務家には注目されてこなかった
- 予想やスケッチのままになっている問題が多い
 - ときには命題から考え直すことも必要になる

©KLab Inc.

57

ゲームへの応用

Creating a World of Excitement

©KLab Inc.

モチベーション

- 従来の多目的最適化の応用は重厚長大産業がメイン
 - 多目的最適化は大掛かりになりがち
 - 多数の解でパレートフロントを近似する
 - 解1つ1つの評価に大規模シミュレーション計算（数時間～数日）
 - 産業規模が大きくないとコストに見合う成果を出しにくい
- ゲームにも使えないか？
 - 最近のモバイルオンラインゲームはもはや“カジュアル”ではない
 - 開発費数十億円，ピーク時数百人体制（協力会社含む）
 - 5～10年ものサービス運用期間（リリースからが本当の始まり）
 - 開発・運用の効率化が重要になってきている

©KLab Inc.

59

ゲームに多目的最適化は必要か？

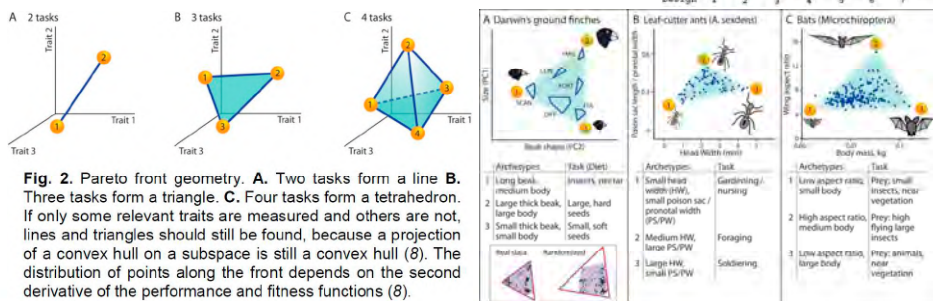
- 単目的最適化はすでに広く応用されている
 - 応用例：物理エンジン，AIの行動計画・経路探索・チームワーク等
 - いずれも**目標が明確**で，**最適解**を求めればOKなタスク
- 最適化がうまくハマった分野は大規模化できる
 - 例：First Person Shooter (FPS)，オープンワールド系ゲーム
 - 単目的最適化はリアル系世界観の演出には向いていた
 - システムチックに開発できるようになり分業化・大規模化が可能に
- 一方，デフォルメ系や“キャラクターもの”のゲームは
 - ゲーム性とともにキャラクターらしさや作品世界の再現が求められる
 - そもそも**目標が1つではなかったり**，**曖昧**だったり
 - いまだ制作者の感性と試行錯誤に頼る部分が大い
 - 多目的最適化でこういった多様性・曖昧性を扱うことができないか？

©KLab Inc.

60

多様性モデリングのための多目的最適化

- Innovization(製品設計のトレードオフ分析) [Deb+ 2008]
- 生物多様性のモデリング [Shoval+ 2012]



©KLab Inc.

61

単目的最適化に対する多目的最適化のメリット

- 目標を1つに定めにくいタスクを扱える
- 良い解を求めつつも多様性を維持できる
- 最適解集合（トレードオフ）の情報をもとに人間が判断できる
- 多目的最適化の解集合はある種の単目的最適化の解を含む

⇒人手での試行錯誤を最適化プロセスの中に取り込み、支援できる
制作者による個性付けやユーザによる感性評価に応用できるかも

©KLab Inc.

62

ゲームAIの新時代の到来 [WIRED 2020]

WIRED

これからのゲームは、AIがキャラクターを自動生成する時代がやってくる

人工知能(AI)を用いてゲームのキャラクターを自動生成できる技術の開発が進んでいる。強化学習モデルで訓練したプログラムは、すでにサッカー選手をリアルに動かしたり、「パックマン」をゼロから構築したりできるレベルにまで進化した。今後はゲームの開発プロセスの自動化や、アニメーションの自動生成などへの応用が期待されている。

TEXT BY WILL KNIGHT
TRANSLATION BY CHIROU DEIA

WIRED.jp

©KLab Inc.

63

ゲームAIとは

- 学問的に体系化されているわけではない
 - ゲーム制作の中で培われた様々な技術の集合体
 - 狭義には、ゲーム内のNPC思考ルーチン
 - 広義には、ゲームに使われるAI技術全般
- 今回は→に基づいて説明します
- その他代表的な教科書・記事
 - [Game AI Pro](#)
 - [実例で学ぶゲームAIプログラミング](#)
 - [人工知能学会 - 私のブックマーク「デジタルゲームの人工知能 \(Artificial Intelligence in Digital Game\)」](#)



【著】三宅 陽一郎

ゲームAI開発者。京都大学で数学を専攻、大阪大学(物理学修士)、東京大学工学系研究科博士課程を経て、2004年よりデジタルゲームにおける人工知能の開発/研究に従事。九州大学客員教授、理化学研究所客員研究員、東京大学客員研究員、国際ゲーム開発者協会日本ゲームAI専門部会チエア、日本デジタルゲーム学会理事、芸術科学会理事、人工知能学会編集委員

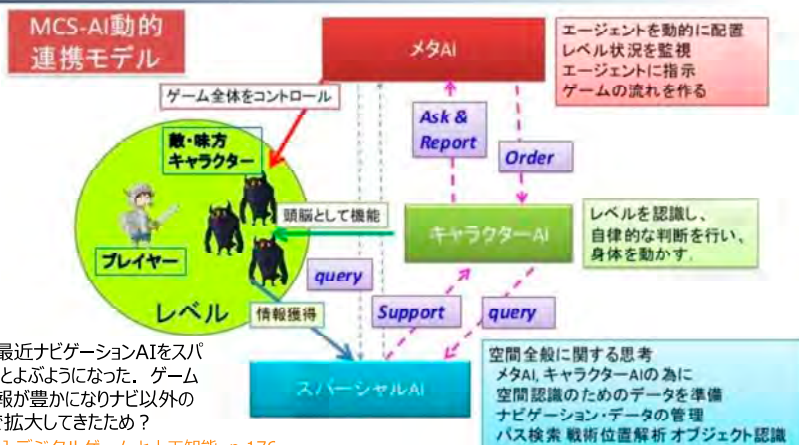
広義のゲームAI = ゲーム中のAI + ゲーム外のAI

ゲームの中、ゲームの外



【三宅 2021】デジタルゲームと人工知能, p.175

ゲーム中のAI = キャラクターAI + メタAI + スパーシャルAI



三宅氏は最近ナビゲーションAIをスパーシャルAIとよぶようになった。ゲームの空間情報が豊かになりナビ以外の機能にまで拡大してきたため？

【三宅 2021】デジタルゲームと人工知能, p.176

キャラクターAIの代表的アプローチ

- ルールベースAI (IF-THENルール)
 - ステートベースAI (有限状態マシン)
 - ビヘイビアベースAI (意思決定木)
 - ゴール志向AI (目標から次の行動を逆算)
 - タスクベースAI (タスクを組み立てて計画)
 - **ユーティリティベースAI (効用関数最大化)**
 - シミュレーションベースAI (予測に基づく計画)
- ルーチンワークや反射的行動の実現に使いやすい
初期のゲームに多い (今でも使う)
- 長期的計画や戦略的行動の実現に使いやすい
FPSやRTSに多い
- キャラクターの個性付けなどに使いやすい
Sim系ゲームに多い

実際のAIはこれらを併用したりアレンジして作ります
これら以外のアプローチをとることも多々あります

©KLab Inc.

67

エンタテインメントゲームのAIに求められるもの

- プレイヤーの良きパートナーであり、良きライバルであること
- ゲームを盛り上げてくれることが最重要
- 強すぎても弱すぎてもダメ
- ワンパターンに陥らず、多様なゲーム展開に導いてほしい
- End-to-Endの全自動AIは必ずしも求められていない
- むしろ、**制作者による個性付けを加える余地がほしい**
- 一方で、**人手でやると煩雑な作業は自動化したい**
- AIの行動に納得性をもたせたい (納得性≠説明性explainable AI)
 - 例：敵AIがメチャクチャ強いぞ！なんで？
 - 説明性：「私の訓練データは53万件です」
 - 納得性：変身⇒「私の戦闘力は53万です」

©KLab Inc.

68

ユーティリティベースAIとは

効用関数(utility function)を最大化する行動を選択するAI
経済学, ゲーム理論, 決定理論などに背景をもつ

$$\text{Given } s \in S, \quad \text{maximize } u_s(a) \text{ subject to } a \in A_s$$

S : 状態の集合

A_s : 状態 s において可能な行動の集合

$u_s(a)$: 状態 s において行動 a をとったときの効用

効用関数は用途に応じて様々：線形和, 多項式, 深層学習など

©KLab Inc.

69

実例 : The Simsシリーズ [Evans 2017]



©KLab Inc.

70

Simの行動原理となる8つの欲求

身体的欲求

1. Hunger: 空腹
2. Comfort: 快適
3. Hygiene: 衛生
4. Bladder: トイレ

精神的欲求

5. Energy: 元気
6. Fun: 楽しみたい
7. Social: 話したい
8. Room: 掃除したい

The Simsでは、状態変数として8つの欲求を定義した。これらの欲求の満足度 s_i は時間とともに減少する。Sim (市民) のMood (幸福度) は

$$u_s(a) = \sum_{i=1}^8 w_i (s_i + \Delta s_i(a)) (s_i + \Delta s_i(a)).$$

それぞれのSimはMoodを最大化する行動 a を選択する。

行動 a 満足度変化 $\Delta s_i(a)$
 風呂に入る ⇒ Hygiene +40, Comfort +30
 風呂掃除する ⇒ Room +20
 トイレをする ⇒ Bladder +40
 トイレ掃除する ⇒ Room +30

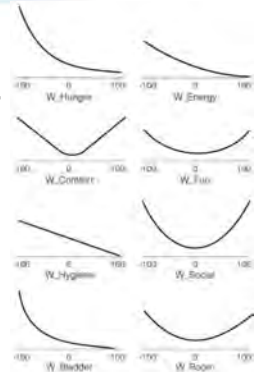
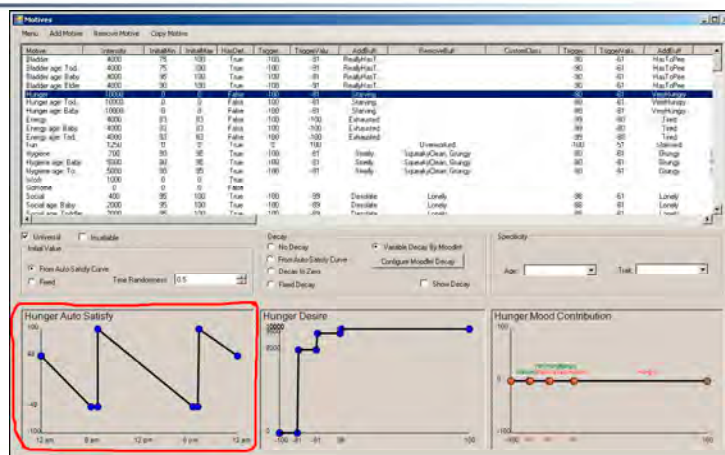


図11 8つの欲求のそれぞれの欲用度曲線
 参考: Kim Furbus, "Simulation and Modeling: Under the Hood of The Sims 3 2012" <http://www.cornellthelab.org/~kimfurbus/pubs/under-the-hood-the-sims-under-the-hood-the-sims-3-revisited.html>

©KLab Inc.

71

The Sims 3で使われた効用関数エディタ



©KLab Inc.

72

スパースモデリングによる キャラクターAIの設計

Creating a World of Excitement

©KLab Inc.

効用関数の自動設計に向けて

- 効用関数の設計は大変
 - ゲームには多数のパラメタがある
 - どのパラメタが意思決定に関係している？
 - どんな関数で表せばよい？
 - 最適性と個性付けの両立は？
 - あまり複雑化するとデバッグ困難に
- 設計を自動化できないか？
 - 人間によるプレイデータを参考にしたり
 - ユーザの評価から学習したり

少数の重要なパラメタに基づく効用関数を機械学習で設計したい

©KLab Inc.

74

多目的スパースモデリング (Elastic Net)

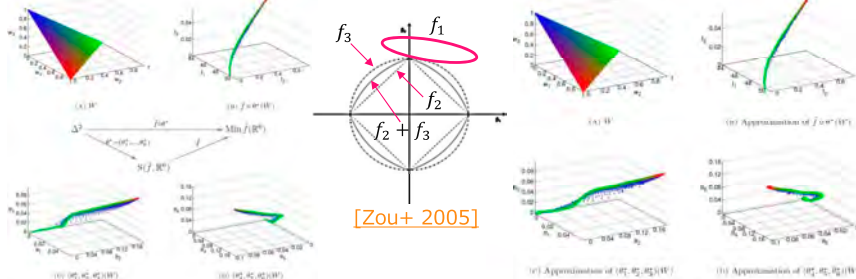
回帰式: $y = \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \dots + \theta_n x_n + \delta$

$\theta^*(w) = \operatorname{argmin}_x w_1 \tilde{f}_1(x) + w_2 \tilde{f}_2(x) + w_3 \tilde{f}_3(x)$

$$\underset{\theta \in \mathbb{R}^n}{\text{minimize}} g_{\mu, \lambda}(\theta) := \underbrace{\frac{1}{2m} \|X\theta - y\|^2}_{f_1} + \underbrace{\mu|\theta|}_{f_2} + \underbrace{\frac{\lambda}{2} \|\theta\|^2}_{f_3}$$

$$\underset{\theta \in \mathbb{R}^n}{\text{minimize}} \tilde{f}(\theta) := (\tilde{f}_1(\theta), \tilde{f}_2(\theta), \tilde{f}_3(\theta))$$

where $\tilde{f}_i(\theta) = f_i(\theta) + \varepsilon f_3(\theta) \quad (i = 1, 2, 3)$



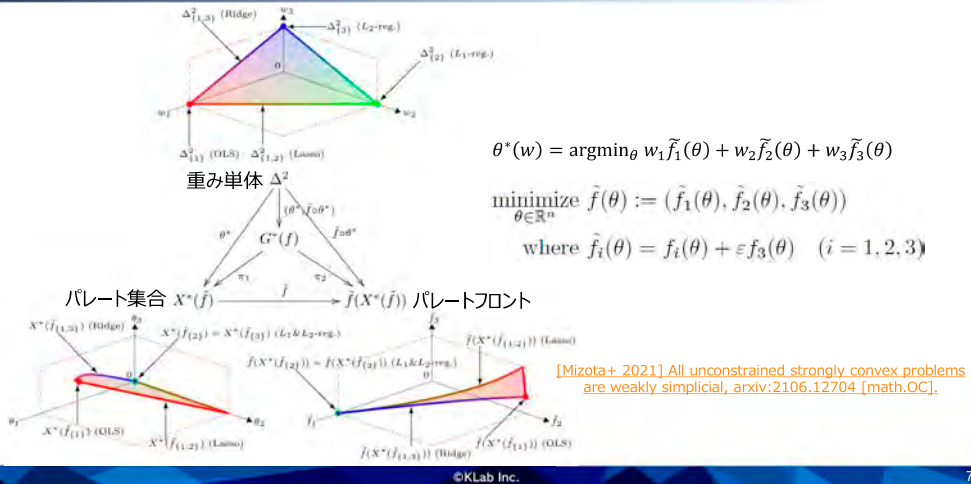
ハイパラをグリッドサーチして得られたモデル群

ハイパラとモデルの関係をベジエ単体で近似

©KLab Inc.

75

多目的Elastic Netの解写像 (solution map)



強凸問題

定義：(強) 凸関数

$X \subseteq \mathbb{R}^n$ を凸集合とする。関数 $f: X \rightarrow \mathbb{R}$ が以下を満たすとき **凸関数** という：
 $f(tx + (1-t)y) \leq tf(x) + (1-t)f(y) \quad (\forall x, y \in X, t \in [0,1])$.

関数 $f: X \rightarrow \mathbb{R}$ が以下を満たすとき **強凸関数** という：ある $\alpha > 0$ が存在して
 $f(tx + (1-t)y) \leq tf(x) + (1-t)f(y) - \frac{1}{2} \alpha t(1-t) \|x - y\|^2 \quad (\forall x, y \in X, t \in [0,1])$.

定義：(強) 凸最適化問題

$X \subseteq \mathbb{R}^n$ を凸集合とする。写像 $f = (f_1, \dots, f_m): X \rightarrow \mathbb{R}^m$ を最適化する問題は、すべての関数 $f_i: X \rightarrow \mathbb{R}$ が (強) 関数であるとき、**(強) 凸最適化問題** という。

©KLab Inc.

77

強凸問題は (弱) 単体的

定理：強凸問題が単体的である条件

$f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ を C^r -強凸写像 ($2 \leq r \leq \infty$) とする。このとき、 f を最小化する問題は C^{r-1} -弱単体的である。さらに、任意の Pareto 解 x について $\operatorname{corank} df_x = 1$ ならば、 f を最小化する問題は C^{r-1} -単体的である。

定理の直感的な意味：
 $\operatorname{corank} df_x = 2$ の点で Pareto 集合がピンチされるため、単体とは同相でなくなる。このような点が存在しなければ、Pareto 集合は単体と同相。

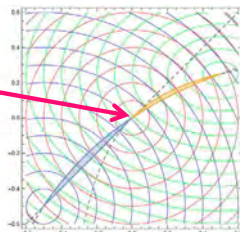


FIG. 3.1. The Pareto set of f . The union of two domains colored with orange and blue is the Pareto set. Color available online.

[Hamada+ 2020] Topology of Pareto sets of strongly convex problems. SIOPT, 30(3), 2659-2686.

この定理の一般化：

- $r = 1$ でも成立 [Hamada+ 2019]
- すべての強凸最適化問題は C^0 -弱単体的 [Mizota+ 2021] (単体的になる条件は未解決)

©KLab Inc.

78

強凸問題はジェネリックな線形摂動で単体的に

定理：強凸問題が摂動で単体的になる条件

$L(\mathbb{R}^n, \mathbb{R}^m)$ を \mathbb{R}^n から \mathbb{R}^m への線形写像全体の空間とし、ユークリッド空間 $(\mathbb{R}^n)^m$ と同一視する。 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ を C^r -強凸写像 ($2 \leq r \leq \infty, n \geq m$) とする。もし $n - 2m + 4 > 0$ ならば、ルベーグ測度0集合 $\Sigma \subset L(\mathbb{R}^n, \mathbb{R}^m)$ が存在し、任意の $\pi \in L(\mathbb{R}^n, \mathbb{R}^m) - \Sigma$ について写像 $f + \pi$ は任意のパレート解 $x \in X^*(f + \pi)$ において $\text{corank } d(f + \pi)_x = 1$ である。つまり、 $f + \pi$ を最小化する問題は C^{r-1} -単体的である。

何の役に立つ？

任意の C^2 -強凸問題は微小なランダム行列（線形写像）を足せば確率1で単体的になる。つまり、弱単体的な問題は簡単に避けられる。

[Hamada+ 2020] Topology of Pareto sets of strongly convex problems. SIOPT, 30(3), 2659-2686.

©KLab Inc.

79

ジェネリックな線形摂動の例

minimize

$$h_\varepsilon(x, y, z) = (f_1(x, y, z) + \varepsilon z, f_2(x, y, z), f_3(x, y, z)),$$

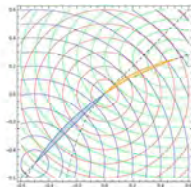
where

$$f_1(x, y, z) = x^2 + y^2 + z^2,$$

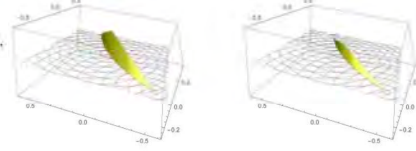
$$f_2(x, y, z) = x + y + x^2 + y^2 + z^2,$$

$$f_3(x, y, z) = -(x + y) + x^2 + 2y^2 + z^2.$$

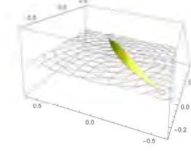
摂動項



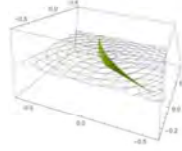
摂動なし($\varepsilon=0$)だと弱単体的



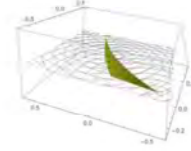
(a) $\varepsilon = -0.5$



(b) $\varepsilon = -0.25$



(c) $\varepsilon = 0.25$



(d) $\varepsilon = 0.5$

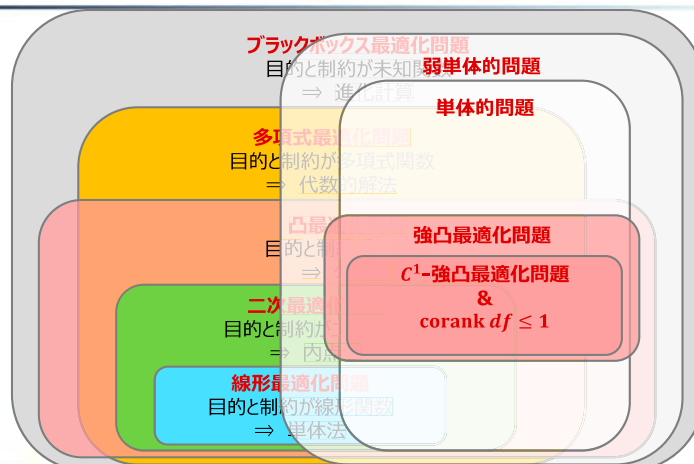
摂動を加える($\varepsilon \neq 0$)と単体的になる

[Hamada+ 2020] Topology of Pareto sets of strongly convex problems. SIOPT, 30(3), 2659-2686.

©KLab Inc.

80

既存の問題クラスとの関係



※ 思い切って単純化しています
本当はもっと色々あります

©KLab Inc.

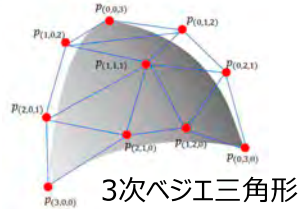
81

弱単体的な問題の解集合はベジエ単体で近似可能

定義：次数 D の $M-1$ 次元ベジエ単体

$$b(t) := \sum_{d \in \mathbb{N}_D^M} \binom{D}{d} t^d p_d \quad (t \in \Delta^{M-1})$$

ベジエ単体 (写像) \leftarrow 多項係数 \leftarrow D 次の単項式 (多重指数)
 \uparrow \uparrow \uparrow
 媒介変数 (M 次元実ベクトル) 制御点 (M 次元実ベクトル) $M-1$ 次元単体



定理：ベジエ単体は単体的なパレートフロントを任意精度で近似可能

$\phi: \Delta^{M-1} \rightarrow \mathbb{R}^M$: C^0 -埋め込み, $X^* := \phi(\Delta^{M-1})$,
 $b: \Delta^{M-1} \rightarrow \mathbb{R}^M$: ベジエ単体(写像), $B := b(\Delta^{M-1})$ と表す。
 このとき

$$\lim_{l \rightarrow \infty} d_H(X^*, B^{(l)}) = 0$$

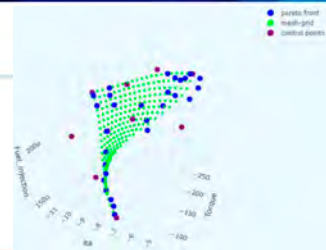
なるベジエ単体の無限列 $\{b^{(l)}\}$ がとれる。ただし d_H はハウスドルフ距離。

[Kobayashi+ 2019] Bezier simplex fitting: Describing Pareto fronts of simplicial problems with small samples in multi-objective optimization. In AAAI-19.

©KLab Inc.

82

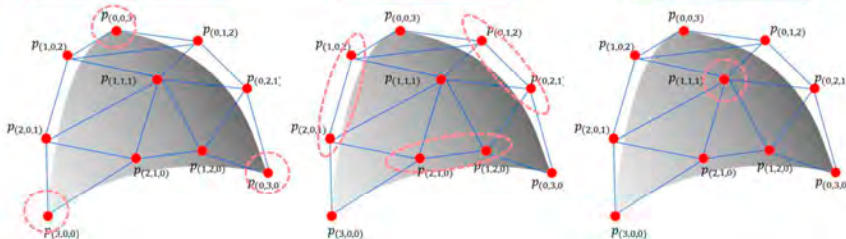
ベジエ単体のフィッティング



頂点を推定

辺を推定

面を推定



©KLab Inc.

83

KLab

敵対的生成ネットワークによるアセット生成

Creating a World of Excitement

©KLab Inc.

リズムアクションゲームの譜面制作

- いわゆる「音ゲー」
- 現在KLabでは3タイトル運用中
- 1タイトルあたり
 - 毎月5~6曲 x 3~5難易度のリリース
 - 1曲あたり50~1000ノーツ
- 1曲あたり40時間の作業

『ラブライブ！スクールアイドルフェスティバル ALL STARS』の機械学習によるコンテンツ制作支援～譜面作成へのディープラーニング応用～



©KLab Inc.

85

九州大学様との共同研究



KLab株式会社（本社：東京都港区、代表取締役社長：森田英成、以下「KLab」）と九州大学 情報基盤研究開発センター（所長：西沢ミユコ）と共同研究センター（所長：藤田啓吾）が、センター長：中野謙二、以下「九州大学」は、機械学習を用いたリズムアクションゲームの譜面制作支援システムについて共同研究を開始いたします。

出典：https://www.klab.com/jp/press/release/2021/03/01/klab_3.html

©KLab Inc.

86

Dance Dance Convolution [Donahue+ 2017]

- 楽曲から譜面を生成

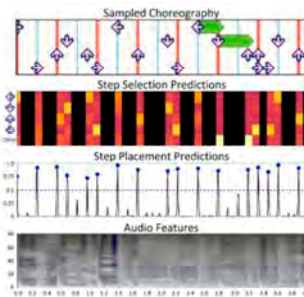


Figure 1. Proposed learning to choreograph pipeline for four seconds of the song *Knife Party feat. Misiajam - Sleaze*. The pipeline ingests audio features (Bottom) and produces a playable DDR choreography (Top) corresponding to the audio.

こちらでデモ版が遊べます：<http://deepx.ucsd.edu/ddc>

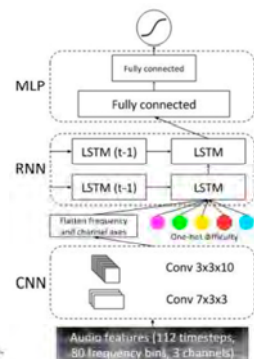


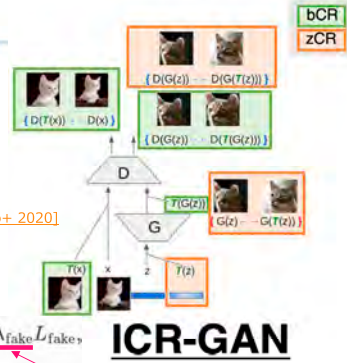
Figure 5. C-LSTM model used for step placement

©KLab Inc.

87

DDCをベースにいろいろ改造

- Wasserstein GAN (WGAN) [Arjovsky+ 2017]
- Transformer-XL [Dai+ 2019]
- SpecAugment [Park+ 2019]
- Improved Consistency Regularization [Zhao+ 2020]
- その他, 独自拡張いろいろ
 - 最終的な損失関数は



Generator Loss

$$L_G^{zCR} = L_G + \lambda_{gen} L_{gen},$$

$$L_G = -D(G(z)),$$

$$L_{gen} = \|G(z) - G(T(z))\|^2.$$

Discriminator Loss

$$L_D^{bCR} = L_D + \lambda_{real} L_{real} + \lambda_{fake} L_{fake},$$

$$L_D = D(G(z)) - D(x),$$

$$L_{real} = \|D(x) - D(T(x))\|^2,$$

$$L_{fake} = \|D(G(z)) - D(T(G(z)))\|^2,$$

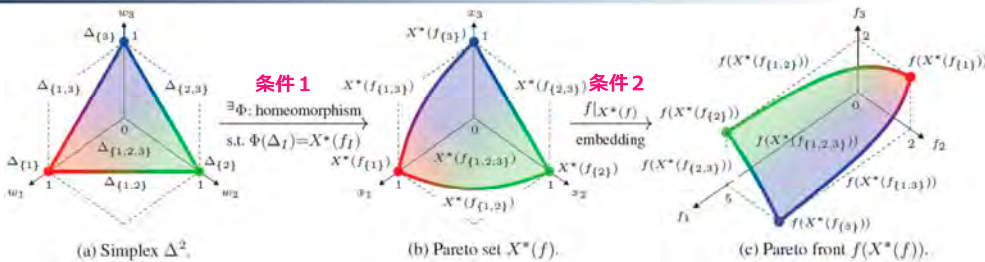
$$L_D^{zCR} = L_D + \lambda_{dis} L_{dis},$$

$$L_{dis} = \|D(G(z)) - D(G(T(z)))\|^2,$$

ICR-GAN

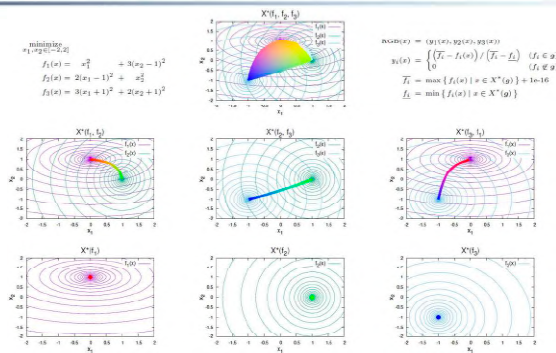
もし単体性が確認できれば
これらのハイパラ最適化を
ベジエ単体で効率化できる

強凸でない問題が単体的かどうか判定するには？



- 実応用では問題クラスが不明なことも → データから判定したい
 - 条件2はなんとかなる
 - 与えられた写像 f を調べるだけ
 - 条件1は難しい (今回はこちらにフォーカス)
 - 同相写像全体の中から制約を満たすものを見つける

条件1を単純化しよう (条件1 ⇔ 条件1a & 1b)



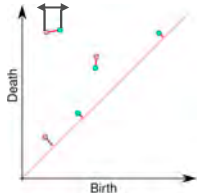
- 条件1a: $X^*(f_I) \simeq \Delta^{|I|-1} (\forall I)$
- 条件1b: $\text{int } X^*(f_I) \cap \text{int } X^*(f_J) = \emptyset (\forall I, J \text{ s.t. } I \neq J)$

[Hamada 2017] Simple problems: The simplicial gluing structure of Pareto sets and Pareto fronts. In GECCO 2017, pp. 315-316.

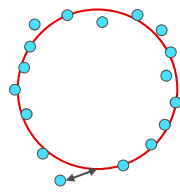
条件1aの否定はパーシステンス図で検定できる

パーシステンス図の安定性定理 :

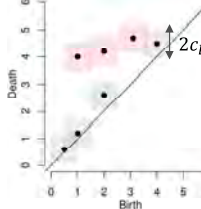
$$\mathbb{P}(W_\infty(\hat{\mathcal{P}}, \mathcal{P}) > c_b) \leq \mathbb{P}(\mathbf{H}(S_n, \mathbb{M}) > c_b) \leq \alpha + O\left(\frac{b}{n}\right)^{1/4} \text{ for } n \rightarrow \infty$$



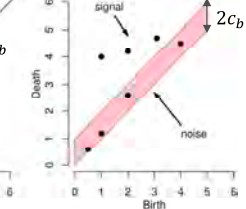
W_∞ : Bottleneck distance



H : Hausdorff distance



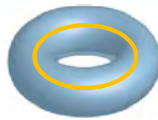
ノイズの α -信頼区間



\mathbb{M} は未知なので、 S_n のブートストラップにより c_b を推定する

[Fasy+ 2014] Confidence sets for persistence diagrams. Ann. Statist. Vol. 42, No. 6, pp. 2301-2339.

パーシステントホモロジー



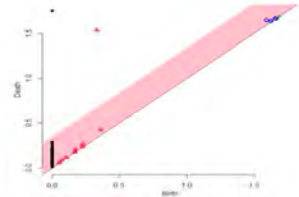
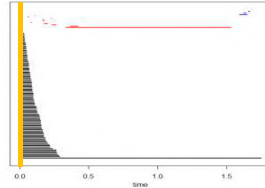
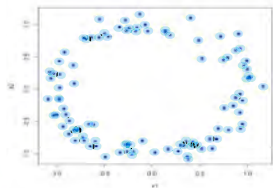
ソリッドトーラス :
中身が詰まったドーナツ

ベッチ数 :
連結成分の数
穴の数
空洞の数

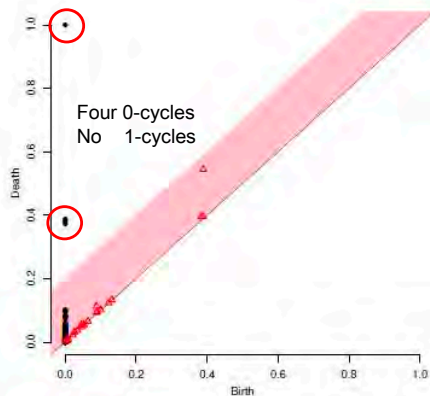
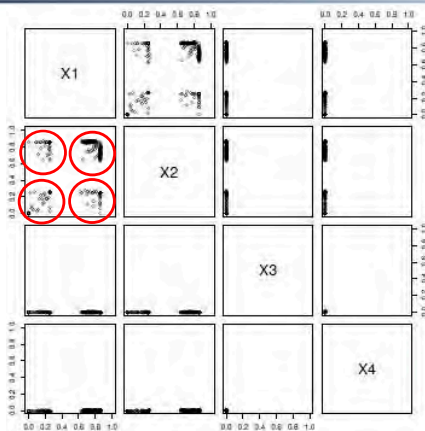
$$\beta_0 = 1$$

$$\beta_1 = 1$$

$$\beta_2 = 0$$



実験 : 確かに1aの否定を検出できた



[Hamada+ 2018] Data-driven analysis of Pareto set topology. In GECCO 2018, pp. 657-664.

条件1aの肯定をパーシステンス図で検定したい

普通は無理

位相空間 X と Y は同相 \rightleftarrows ホモロジー群 $H_*(X)$ と $H_*(Y)$ は同型

なんとかして逆がいえませんか…

©KLab Inc.

94

ある仮定をおけば、ホモロジーから同相がいえる

定理 3. M を n 次元コンパクト C^∞ 多様体とする. もし M と ∂M がともに単連結で,

$$H_q(M) \cong H_q(\Delta^n) \cong \begin{cases} \mathbb{Z} & (q = 0), \\ 0 & (q \neq 0) \end{cases}$$

ならば, M は Δ^n に同相である.

©KLab Inc.

95

証明のエッセンス (証明はJSIAM2020予稿に)

M のホモロジーについての仮定から

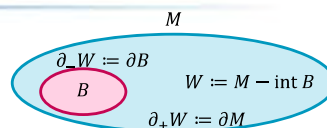
$$H_q(M, \partial M) \cong \begin{cases} \mathbb{Z} & (q = n) \\ 0 & (q \neq n) \end{cases}$$

なので, $H_q(W, \partial_+ W) = 0$ ($\forall q$) が成り立つ. これを長完全系列

$$\cdots \rightarrow H_{q+1}(W, \partial_+ W) \rightarrow H_q(\partial_+ W) \xrightarrow{i_*} H_q(W) \rightarrow H_q(W, \partial_+ W) \rightarrow \cdots$$

に代入すれば, $i_*: H_q(\partial_+ W) \rightarrow H_q(W)$ は同型であることがわかる.

定理 4 (フレビッツの定理の系 [6][Cor. 4.33]). M, N を単連結な CW 複体とし, $f: M \rightarrow N$ を連続写像とする. このとき, f が誘導するホモロジーの準同型 $f_*: H_*(M) \rightarrow H_*(N)$ が同型であれば, f はホモトピー同値である.



定理 5 (h -同境定理). M, N を単連結な n 次元 C^∞ 閉多様体とする. W を単連結な $(n+1)$ 次元コンパクト C^∞ 多様体で $\partial W = M \cup N$ (非交和) とする. 包含写像

$$M \hookrightarrow W, \quad N \hookrightarrow W$$

がともにホモトピー同値であるとき, W は $M \times [0, 1]$ と同相 (注意 6 を参照) である. この同相写像は $M \times \{0\}$ 上で恒等写像であるようにとれる. W を M と N の間の h -同境という.

©KLab Inc.

96

余談

- 仮定「 M と ∂M がともに単連結」は本当に緩いの？
数学的には緩くないが、実用的には物理現象から推測可能
- $n = 3$ の h -同境定理はポアンカレ予想と同値
予想が解けたおかげで、すべての次元で証明できた
- 滑らかなカテゴリーでの $n = 4$ の h -同境定理は未解決
滑らかなカテゴリーでの4次元ポアンカレ予想と同値

ポアンカレ予想は応用数学

©KLab Inc.

97

WGANと最適輸送理論

- WGANはFake分布をReal分布に最適輸送しているとみなせる [Arjovsky+ 2017]

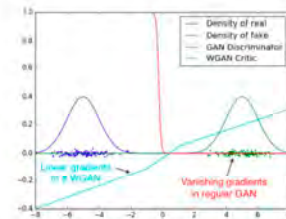
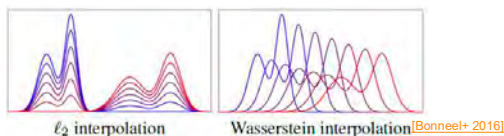


Figure 2: Optimal discriminator and critic when learning to differentiate two Gaussians. As we can see, the discriminator of a minimax GAN saturates and results in vanishing gradients. Our WGAN critic provides very clean gradients on all parts of the space.

- 現状のWGANの生成物は「どこかで見たことのあるモノ」になりがち
- 人の顔などでは良いが、コンテンツ生成では新しさが求められる
- GANの生成物が内挿的であることが原因の1つと思われる
- 外挿できるようにするには多目的最適化が使えるかも？
- 最適輸送理論の多目的最適化版は（私の知る限り）まだ未開拓
- これを研究すればより創造性のあるコンテンツが生成できるかも

©KLab Inc.

98

この章のまとめ

- ゲームAIの設計に多目的最適化が使えるそう
ユーティリティベースAIの設計の省力化
アセット生成
- （弱）単体的な問題は最適化における重要な問題クラス
解集合のトポロジーが単純なため解を網羅しやすい
- 多様性と創造性のモデリングには21世紀の数学が必要
産業的にも学術的にも未解決問題だらけ
一緒に挑戦してみませんか？

©KLab Inc.

99

最後にもう一度伝えたいこと

- 進化計算にも確かな数理がある
現状知られていないからといって存在しないとは限らない
むしろより高度な数学を応用して初めて見つかるかもしれない
- すべての数学は役に立つ：純粋数学 = 応用数学
工学部で習う数学だけが役に立つ数学ではない
理論と応用は両輪：理論が応用を生み，応用が理論を生む
- できることから始めてみよう
産業的にも学術的にも未解決問題だらけ
いきなり難しいことをしなくても，できることは沢山ある

Introduction to multiobjective evolutionary algorithm

Akira OYAMA

Institute of Space and Astronautical Science, Japan Aerospace Exploration Agency,
Japan

Multiobjective evolutionary algorithm (MOEA) has excellent features such as being able to obtain global optimum solutions and being able to obtain Pareto-optimal solutions for a multi-objective optimization problem. In this talk, basics and applications of MOEA [1, 2, 3] are introduced for those who have not dealt with MOEA so far.

REFERENCES

- [1] 大山 聖, “ゼロから始める多目的設計最適化 0 多目的最適化とは?”, 2018, ぶらざ出版社.
- [2] 大山 聖, “ゼロから始める多目的設計最適化 1 多目的設計最適化問題を解く,” 2018, ぶらざ出版社.
- [3] 大山 聖, “ゼロから始める多目的設計最適化 2 基本となる設計最適化手法,” 2018, ぶらざ出版社.

進化計算の数理 多目的進化アルゴリズム入門

宇宙航空研究開発機構 (JAXA)
宇宙科学研究所

大山 聖



この作品はクリエイティブ・コモンズ表示 - 非営利 4.0 国際ライセンスの下に提供されています。

参考文献 (多目的設計最適化)

www.amazon.co.jp

ゼロから始める多目的設計最適化 0 多目的設計最適化とは? 2018/11/17 大山聖 Kindle版 ¥ 0 Kindle unlimited 会員の方は読み放題でお楽しみいただけます。 ¥ 280 Kindle 価格 ★★★★★ * 1	ゼロから始める多目的設計最適化 1 多目的設計最適化問題を解く 2018/11/30 大山聖 Kindle版 ¥ 0 Kindle unlimited 会員の方は読み放題でお楽しみいただけます。 ¥ 280 Kindle 価格 ★★★★★ * 1	ゼロから始める多目的設計最適化 2 基本となる設計最適化手法 2018/12/16 大山聖 Kindle版 ¥ 0 Kindle unlimited 会員の方は読み放題でお楽しみいただけます。 ¥ 280 Kindle 価格 ★★★★★ * 1

大山 聖 多目的進化アルゴリズム入門 2021

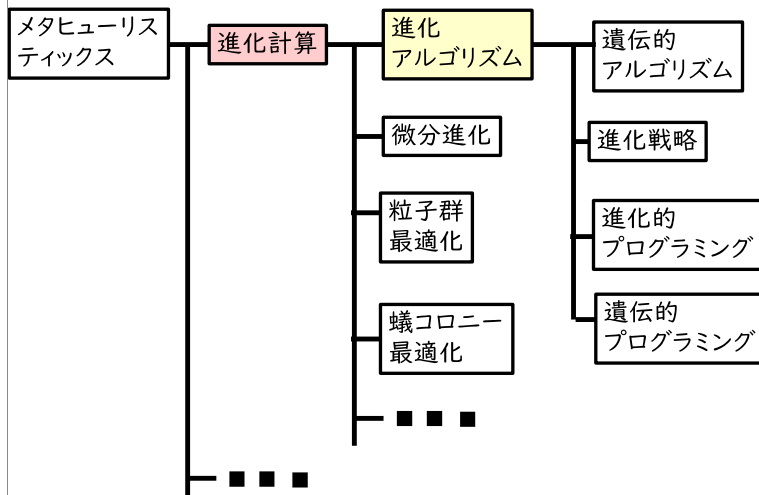
2

多目的進化アルゴリズム入門

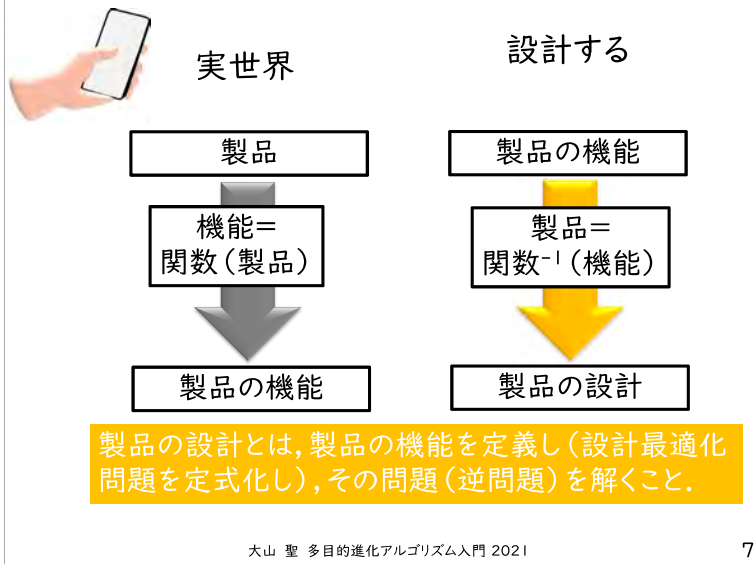
1. 多目的設計最適化とは?
2. 多目的進化アルゴリズム
3. 多目的設計最適化の応用事例

大山 聖 多目的進化アルゴリズム入門 2021

進化アルゴリズムの一番の特徴は
多目的最適化問題を効率的に解くことができること



1. 多目的設計最適化とは？



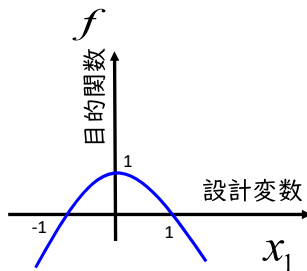
設計最適化問題とは？

ある設計条件において、与えられた制約条件のもと、目的関数を最大化 (あるいは最小化) する設計変数値を持つ解 (最適解) を見つける問題

大山 聖 多目的進化アルゴリズム入門 2021 8

設計最適化問題の例

- 目的関数: $f = 1 - x_1^2$
- 目的: 目的関数の最大化
- 設計変数: x_1
- 制約条件: $-1 < x_1 < 1$



最適解の設計変数の値と目的関数の値は？

大山 聖 多目的進化アルゴリズム入門 2021 9

目的関数が2つ以上の問題を 多目的設計最適化問題と呼ぶ

目的関数が1つの問題を
単目的設計最適化問題と呼ぶ

大山 聖 多目的進化アルゴリズム入門 2021

10

多目的設計最適化問題の例

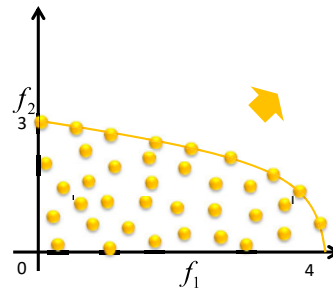
■ 目的関数: $f_1 = 4 - \frac{1}{2}(x_1^2 + x_2^2)$

■ 目的: $f_2 = 1 - \frac{1}{2}(x_1 + x_2)$

■ 目的関数 f_1 の最大化
目的関数 f_2 の最大化

■ 設計変数: x_1, x_2

■ 制約条件: $-2 < x_1 < 2$
 $-2 < x_2 < 2$



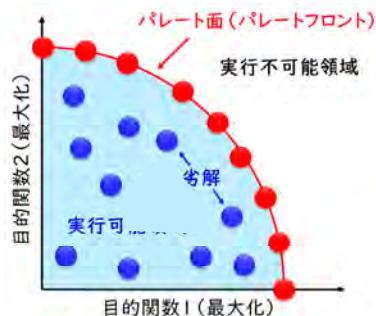
どの解が最適解?

大山 聖 多目的進化アルゴリズム入門 2021

11

多目的設計最適化問題の最適解

- 多目的最適化問題では設計目的が相反することが多い
→ 実行可能領域と実行不可能領域が存在する
- その境界を**パレート面**と呼ぶ

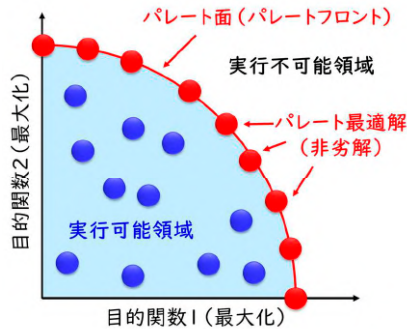


大山 聖 多目的進化アルゴリズム入門 2021

12

多目的設計最適化問題の最適解

- パレート面上にある解をパレート最適解(非劣解)と呼ぶ
- パレート最適解はパレート面上に無数に存在

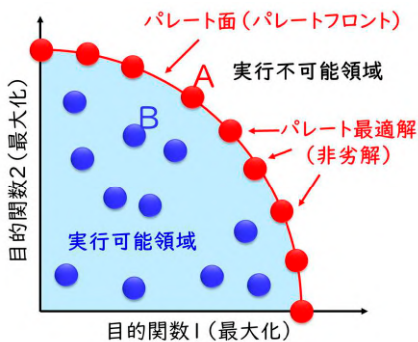


大山 聖 多目的進化アルゴリズム入門 2021

13

多目的設計最適化問題の最適解

- 解Bは解Aより劣っている(最適ではない): 解Bを**劣解**と呼ぶ
解Aより優れている解はない(最適) → 解Aを**非劣解**と呼ぶ

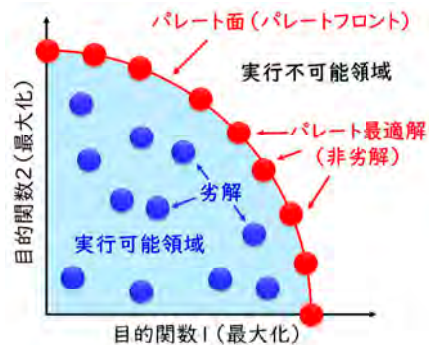


大山 聖 多目的進化アルゴリズム入門 2021

14

多目的設計最適化の目的

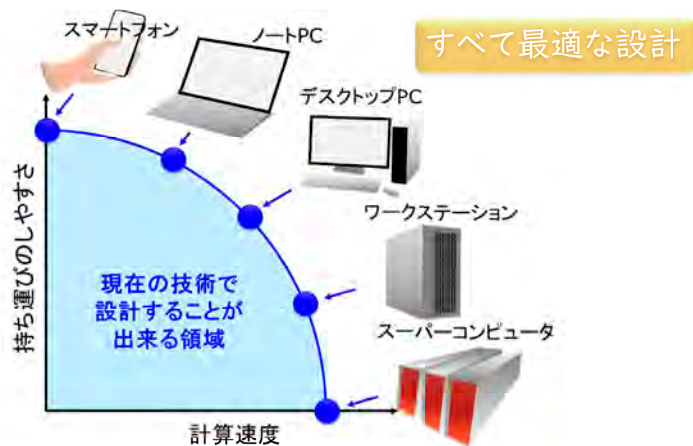
- 多数存在するパレート最適解を見つけること
- それにより目的関数間のトレードオフ面を明らかにすること



大山 聖 多目的進化アルゴリズム入門 2021

15

多目的設計最適化問題の例



大山 聖 多目的進化アルゴリズム入門 2021

16

- コンピュータ: ↑演算性能, ↑モビリティ, ↓販売価格, ...
- 宇宙機軌道設計: ↓到達期間, ↓必要燃料, ↓必要バッテリー
- ポンプ: ↑全圧比, ↑効率, ↓振動, ...
- 車: ↑燃費, ↑安全性, ↓販売価格, ...
- 鉄道車両: ↑速度, ↓運用コスト, ↓騒音, ↓製造コスト, ...
- 発電用タービン: ↑発電量, ↑寿命, ↓製造コスト, ...

現実の設計問題は多目的最適化問題であることが多く、多目的設計最適化手法の研究開発は重要である。

大山 聖 多目的進化アルゴリズム入門 2021

17

まとめ

- 設計最適化とは設計最適化問題を解くこと
- 設計最適化問題とは、ある設計条件において、与えられた制約条件のもと、目的関数を最大化（あるいは最小化）する設計変数値をもつ解（最適解）を見つける問題
- 実世界の設計最適化問題は複数の目的関数を持つ
 - 多目的設計最適化問題であることが多い
- 多目的設計最適化問題では、多数のパレート最適解（非劣解）を得ることが目標

大山 聖 多目的進化アルゴリズム入門 2021

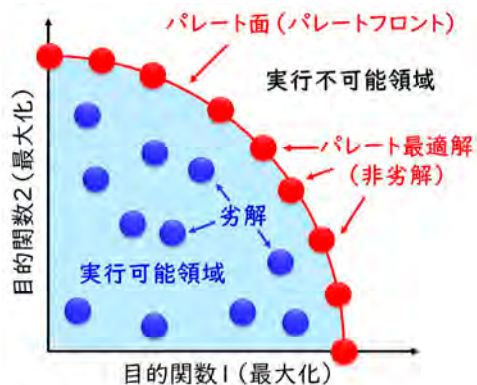
18

2. 多目的進化アルゴリズム

大山 聖 多目的進化アルゴリズム入門 2021

19

多目的設計最適化問題では、多数の**パレート最適解（非劣解）**を得ることが目標



大山 聖 多目的進化アルゴリズム入門 2021

20

多数のパレート最適解（非劣解）を効率的に得ることができる設計最適化手法は？



進化アルゴリズム

大山 聖 多目的進化アルゴリズム入門 2021

21

進化アルゴリズム

生物の進化を模倣した最適化アルゴリズム

大山 聖 多目的進化アルゴリズム入門 2021

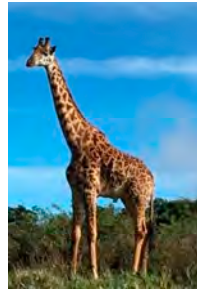
22

生物界では、生物の設計情報は遺伝子上に記録されている

生物の情報: 遺伝子



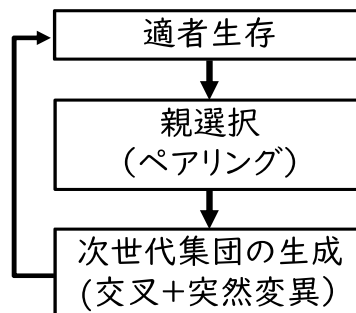
生物の表現形



大山 聖 多目的進化アルゴリズム入門 2021

23

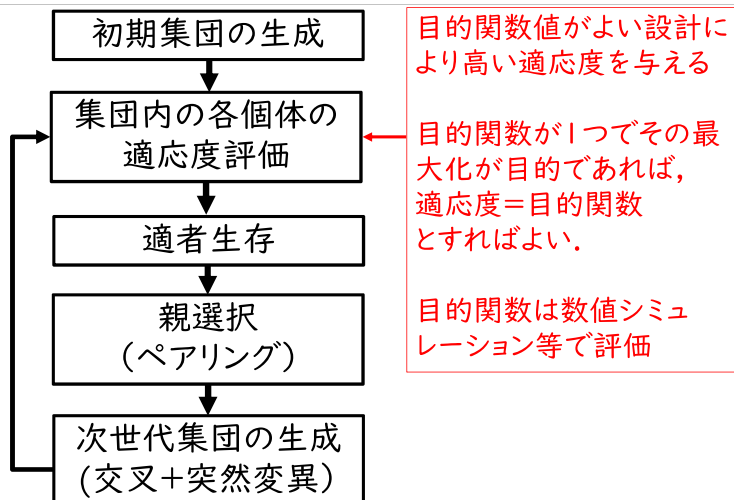
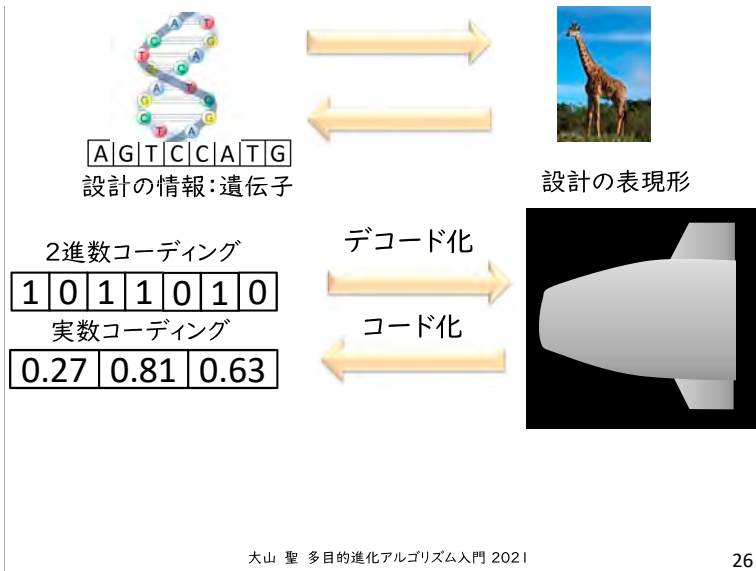
自然界では集団の中でより環境に適した
個体が生き残り、子孫を作っていく



大山 聖 多目的進化アルゴリズム入門 2021

24

進化アルゴリズムでは...



では、目的関数が複数ある 場合はどうするか？

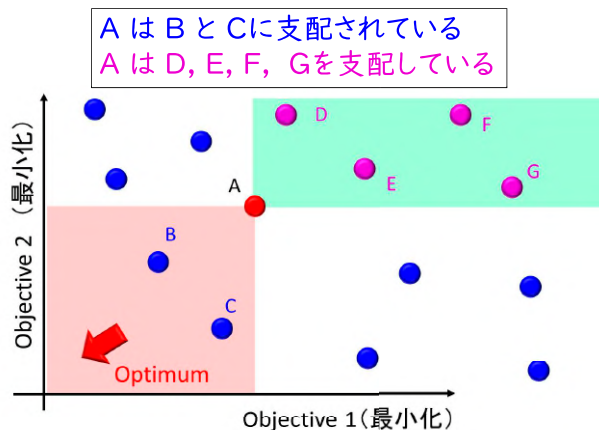
非劣解・劣解の概念 (Goldberg, 1989)

- k 個の目的関数を持つ最小化問題において、 x_α, x_β に対して次式が満たされる時、「 x_β は x_α に支配されている」あるいは「 x_β は x_α の劣解」という

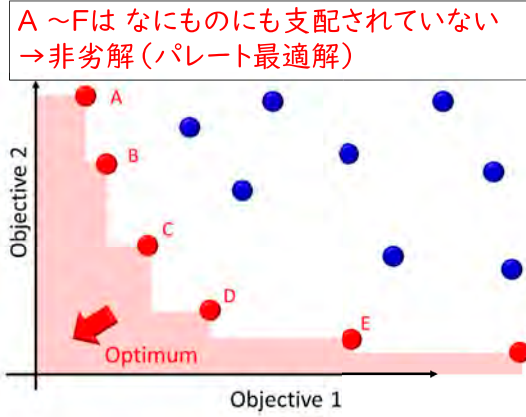
$$F_i(x_\alpha) \leq F_i(x_\beta) \quad i = 1, \dots, k$$

- 逆に、上式を満たす x_β が存在しない場合には、「 x_β は支配されない」あるいは「 x_β は非劣解」という。
- 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

非劣解・劣解の概念の導入 (Goldberg, 1989)



非劣解・劣解の概念の導入 (Goldberg, 1989)

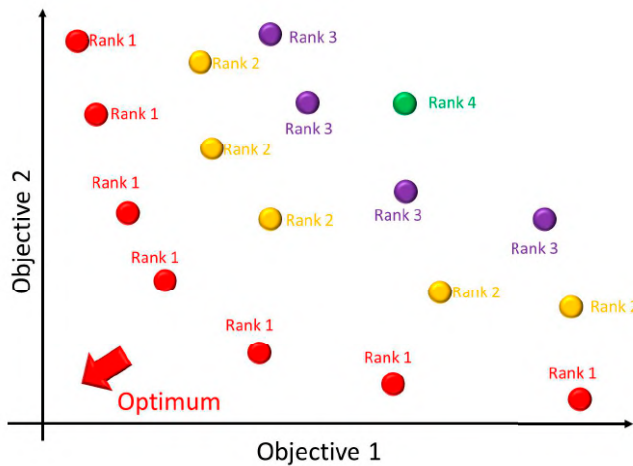


非劣解・劣解の概念を用いて
どうやって解の適応度を定めるか?



パレートランキング

パレートランキング



パレートランキング

パレート面に近い解によりランク (= 適応度) を与える

たとえば,

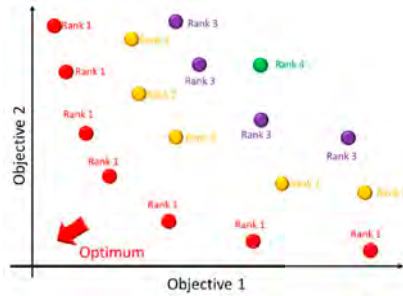
$$\text{Fitness} = 1 / \text{Rank}$$

$$\text{Rank}1 \Rightarrow \text{Fitness}=1$$

$$\text{Rank}2 \Rightarrow \text{Fitness}=1/2$$

$$\text{Rank}3 \Rightarrow \text{Fitness}=1/3$$

...



まとめ

- 進化アルゴリズムは生物の進化を模倣したアルゴリズム
- 進化アルゴリズムを用いる利点
 - 多数のパレート最適解が一度に得られる
 - 大域的な探索が可能
 - 混合問題でも解くことが可能
 - 不連続な目的関数を持つ問題でも解くことができる
 - 他のソフトウェアとのカップリングが容易
 - 並列化が容易・効率が高い

3. 多目的設計最適化の応用事例

ロケット射点形状の 空力音響設計

youtubeでご覧ください

<https://www.youtube.com/watch?v=Y2bo5CbXQ3w>

大山 聖 多目的進化アルゴリズム入門 2021

おわりに

大山 聖 多目的進化アルゴリズム入門 2021

38

まとめ

- 現実の問題は多目的設計最適化問題であることが多い
- 多目的設計最適化問題では、パレート最適解を得ることが目的
- パレート最適解を効率的に得るためには、進化アルゴリズムなどの多目的最適化アルゴリズムを使うことが有効

大山 聖 多目的進化アルゴリズム入門 2021

39

多目的進化アルゴリズムの今後の課題

パレート最適解を得ることが難しい問題が存在する。

また、それらの問題では得られたパレート最適解の分析も難しい。

- 目的関数の数が多い最適化問題(4目的以上)
- 設計変数の数が多い最適化問題(100変数以上)
- 複数の制約条件を持つ最適化問題
- 厳しい制約条件を持つ最適化問題

Singularity theory viewpoints, methods and applications

Goo ISHIKAWA

Department of Mathematics, Hokkaido University, Japan

A point where the situation of the space/figure, or the behaviour of the function/mapping looks very different from nearby points, is called a singular point. Singular points have a significance by showing local-global information of objects under the study. Regarding singularity theory as one of mathematical area, I would like to explain about several central problems of singularity theory, stability, genericity, determinacy, classification and recognition problems, the methods of bifurcation diagrams and stratifications, and so on, and thus, introduce some of geometrical approaches and characteristic viewpoints from singularity theory to try to find its possible applications.

REFERENCES

- [1] V.I. Arnold, *Catastrophe Theory*, Springer (1984).
- [2] V.I. Arnold, S.M. Gusein-Zade, A.N. Varchenko, *Singularities of Differentiable Maps, Volume I, Classification of Critical Points, Caustics and Wave Fronts*, Birkhäuser (1985).
- [3] S. Izumiya, G. Ishikawa, *Applied Singularity Theory*, Kyoritsu Co. (1998) (in Japanese).
- [4] K. Saji, *Criteria for singularities of smooth maps from the plane into the plane and their applications*, Hiroshima Math. J., **40** (2010), 229–239.
- [5] R. Thom, *Ensembles et morphismes stratifiés*, Bull. Amer. Math. Soc. **75**(2) (1969), 240–284.
- [6] R. Thom, *Stabilité Structurelle et Morphogénèse*, Benjamin (1972).
- [7] J. Mather, *How to stratify mappings and jet spaces*, *Singularités d'Applications Différentiables*, Lecture Notes in Math., 535, Springer-Verlag (1976), pp. 128–176.
- [8] H. Whitney, *On singularities of Euclidean spaces I. Mappings of the plane into the plane*, Annals of Math., **62-3** (1955), 374–410.
- [9] H. Whitney, *Collected Papers II*, Birkhäuser (1992).

特異点論の見方・やり方・使い方
Singularity theory:
viewpoints, methods and applications

石川 剛郎 (Goo Ishikawa)

北海道大学理学研究院数学部門

Department of Mathematics, Hokkaido University, Japan

オンライン研究会

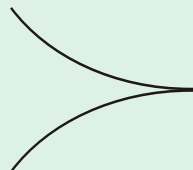
IMI 研究集会「進化計算の数理」

7-8 Sept. 2021

Singularity Theory

【 Singular points, Singularity 】

A **point** where the situation of the space/figure, or the behaviour of the function/mapping looks very **different from nearby points**, is called a **singular point**. Singular points have a significance by showing **local-global information of objects** under the study. (特異点は特異な点)



【 Everything is a singularity 】

「万物は特異点である」 (泉屋・石川「応用特異点論」1998)

Every interesting thing is a singularity.

(興味深いものは、みな特異点である.)

(変わったものに惹かれることこそが人類の繁栄の源... !?)

【 Singularity theory as one of mathematical area 】



【 Differentiable maps 】

A continuous map $f : N \rightarrow M$ between differentiable manifolds N, M is called differentiable if, for any local coordinates on N, M , f is locally expressed as a C^∞ mapping $\mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^m$

$$\begin{cases} f_1 = (y_1 \circ f)(x_1, x_2, \dots, x_n), \\ f_2 = (y_2 \circ f)(x_1, x_2, \dots, x_n), \\ \vdots \\ f_m = (y_m \circ f)(x_1, x_2, \dots, x_n). \end{cases}$$

$C^\infty(N, M)$: the set of all differentiable maps $N \rightarrow M$, endowed with a topology (Whitney C^∞ topology).

Differential calculus, Differential topology, Differential geometry, Analytic geometry, Catastrophe theory, ...

【 Singularities of differentiable ($= C^\infty$) maps 】

Let $f : N \rightarrow \mathbf{R}$ be a **differentiable function** on a differentiable manifold, e.g. $N = \mathbf{R}^n$. For $p \in N$, if

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x_1}(p), \frac{\partial f}{\partial x_2}(p), \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}(p) \right) \neq (0, 0, \dots, 0)$$

then f is transformed to $f(p) + x_1$ under a certain change of coordinates around p , by the **implicit function theorem** (陰関数定理).

A differentiable map $f : N \rightarrow M, \dim(N) = \dim(M)$ is a local diffeomorphism around $p \in N$ if the Jacobi matrix $\left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j}(p) \right)$ is invertible by the **inverse mapping theorem** (逆関数定理).

【 Critical points of and critical values of functions 】

Let $f : N \rightarrow \mathbf{R}$ be a differentiable function on a differentiable manifold.

A point $p \in N$ is a **critical point** of f if

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x_1}(p), \frac{\partial f}{\partial x_2}(p), \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}(p) \right) = (0, 0, \dots, 0)$$

for a system of local coordinates x_1, \dots, x_n of N around p .

The condition is equivalent to that, for any differentiable curve $\gamma : (\mathbf{R}, 0) \rightarrow N, \gamma(0) = p$,

$$\frac{d}{dt} f(\gamma(t))|_{t=0} = 0.$$

【 Variational problems 】

The source space N can be an infinite dimensional space.

Give a functional

$$J : \{y : [a, b] \rightarrow \mathbf{R}, C^1, y(a) = A, y(b) = B\} \longrightarrow \mathbf{R},$$

$$J(y) := \int_a^b L(y, y(x), \dot{y}(x)) dx, \quad L = L(x, y, \dot{y}),$$

$y = y(x)$ is a **critical point** of J is characterized by

$$\frac{\partial L}{\partial y} - \frac{d}{dx} \frac{\partial L}{\partial \dot{y}} = 0,$$

Euler-Lagrange equation.

- geodesics on Riemannian manifolds
- Yang-Mills connections, etc.

[Singular points and singular values of mappings]

A **singular point** of a differentiable mapping $f : N \rightarrow M$ between manifolds N of dimension n and M of dimension m is a point $p \in N$ where the rank of Jacobi matrix

$$\text{rank} \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1} & \frac{\partial f_m}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n} \end{pmatrix} < \min\{n, m\}.$$

A **singular value** $q \in M$ is a point such that $q = f(p)$ for some singular point p .

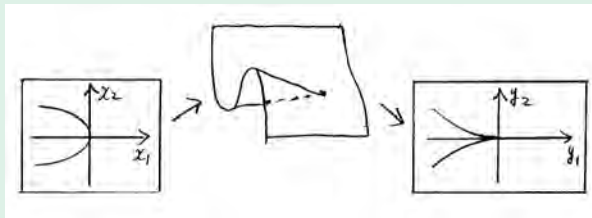
(Then f looks very different at p (resp. at q) from other points around it.)

[Example]

Let $f : \mathbf{R}^2 \rightarrow \mathbf{R}^2$ be the plane-to-plane map defined by

$$y_1 = x_1, \quad y_2 = x_2^3 + x_1x_2, \quad \text{Whitney's cusp map.}$$

$$(x_1, x_2) \mapsto (x_1, x_2, x_2^3 + x_1x_2) \mapsto (x_1, x_2^3 + x_1x_2)$$



H. Whitney, *On singularities of Euclidean spaces I. Mappings of the plane into the plane*, Annals of Math., 62-3 (1955), 374–410.

Viewpoints of Singularity Theory

【 Viewpoints of singularity theory (見方) 】

☆ Describe and understand singularities algebraically, by using partial derivatives, coefficients of Newton-Taylor expansions, based on geometric ideas.

Differentiable maps f and g are called \mathcal{A} -equivalent (right-left equivalent, diffeomorphic) if the diagram commutes

$$\begin{array}{ccc} N & \xrightarrow{f} & M \\ \cong \downarrow & & \downarrow \cong \\ N & \xrightarrow{g} & M \end{array}$$

for some (local or global) diffeomorphisms of N and M ,
 — This means two mappings have the same singularities.

【 Viewpoints of singularity theory 】

- Stability of mappings (写像の特異点の安定性)
- Generic singularities (ジェネリック特異点, 普及特異点)
- Germs and Jets (芽とジェット)
- Transversality (横断性)
- Stratifications (層化, 滑層化, 多様体分割)
- Determinacy (特異点の確定性)
- Classifications (特異点の分類)
- Recognitions, Characterizations (特異点の特徴付け)
- (Uni-)Versality (特異点の普遍開折)
- Bifurcation diagrams (特異点の分岐図式)
- Catastrophe (カタストロフ)

【 Stability 】

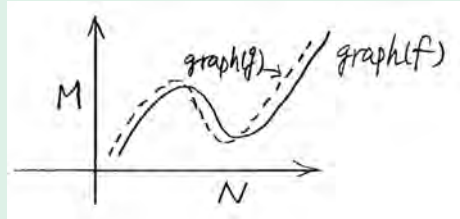
Lyapunov stability in dynamical systems
 — stability of a state
 Structural stability of dynamical systems
 (Andronov-Pontryagin)
 — stability of a system

A system is called stable if any sufficiently small perturbations of the system do not cause a change of quality of the system.

Topological space + Equivalence relation

【 Stability of differentiable maps 】

A differentiable map $f : N \rightarrow M$ is called **stable** (resp, topologically stable) if any differentiable map g **sufficiently near** f is equivalent to f up to diffeomorphisms (resp. homeomorphisms) of N and M .



安定であれば、少しの摂動なら定義域と値域の変換に吸収できる。

【 Equivalence relation of differentiable maps 】

Differentiable maps f and g are called **\mathcal{A} -equivalent** (**right-left equivalent, diffeomorphic**) if the following diagram commutes

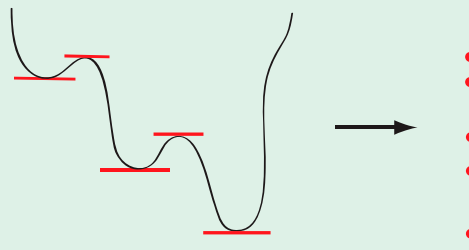
$$\begin{array}{ccc} N & \xrightarrow{f} & M \\ \cong \downarrow & & \downarrow \cong \\ N & \xrightarrow{g} & M \end{array}$$

for some diffeomorphisms of N and M .

人は安定なものしか認識できない...

【 Target-local characterization of stability 】

A differentiable function $f : N \rightarrow \mathbf{R}$ is called a **Morse function** if any critical point $p \in N$ is **non-degenerate**, i.e. $\det \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} (p) \right) \neq 0$ and **critical values are all distinct**.



【 Target-local characterization of stability 】

A proper differentiable function $f : N \rightarrow \mathbf{R}$ is **stable** if and only if f is a Morse function. (Characterization of stable maps).

Any proper functions are approximated by a proper Morse function. (Density of stable maps)

→ generalization by R. Thom and J. Mather.

— **Infinitesimal stability**. (infinitesimal, linear algebraic, characterization of stable maps).

— **Nice range** (of (n, m) such that C^∞ -stability is **generic**).

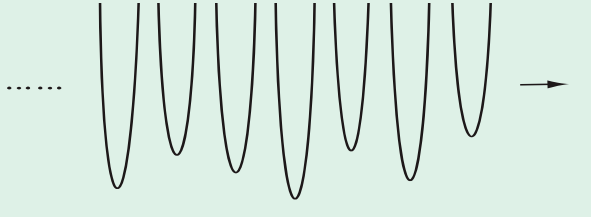
— **Density of topologically stable maps** (Topological stability is **generic**).

【 An unstable Morse function 】

An example of **unstable non-proper** Morse function:

\mathbf{R}_q : a copy of \mathbf{R} ,

$f : N = \coprod_{q \in \mathbf{Q}} \mathbf{R}_q \rightarrow \mathbf{R}$ defined by $f(x_q) = x_q^2 + q$.



【 Genericity 】

ポアンカレの言葉「もっとも興味ある事実とは、幾度も役だつ事実、すなわち繰返しておこる機会のある事実である。」

(ポアンカレ「科学と方法」吉田洋一訳, 岩波文庫 (1953).)

よい特異点

わるい特異点

ふつうの特異点

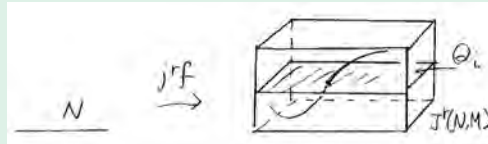
→ Generic singularity theory

Methods of Singularity Theory

【 Genericity (普及性) and transversality (横断性) 】

A property P on elements in $C^\infty(N, M)$ is called **generic** (ジェネリック, 普及) if the set of elements in $C^\infty(N, M)$ with the property P is a countable intersection of open dense subsets of $C^\infty(N, M)$ (**residual set**).

In many cases, generic property is characterized by the **(multi)-transversality** of $m_j^r f : N^{(m)} \rightarrow mJ^r(N, M)$ to some countable family of submanifolds $Q_i \subset mJ^r(N, M)$.



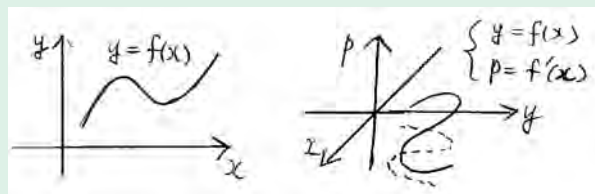
【 Jets 】

Let $f : \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}$ have the **Newton-Taylor series** at $t = t_0$:
 $f(t) = a_0 + a_1(t - t_0) + a_2(t - t_0)^2/2! + a_3(t - t_0)^3/3! + \dots$

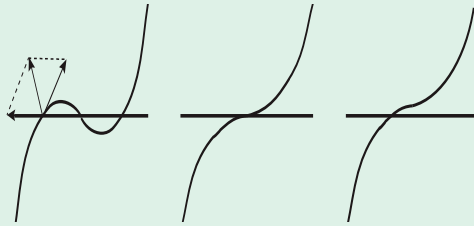
Define the **jet-extension** $j^r f : \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R} \times \mathbf{R} \times \mathbf{R}^r$ by

$$j^r f(t_0) := (t_0, a_0, a_1, a_2, \dots, a_r).$$

In general, a differentiable map $f : N \rightarrow M$ is extended to a differentiable map $j^r f : N \rightarrow J^r(N, M)$.



【 Transversality 】

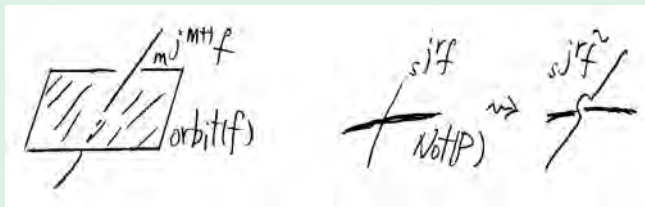


→ Thom-Mather's transversality theorem

【 Stability / Genericity and Transversality 】

$$\begin{aligned}
 f \text{ is stable} &\iff (\text{codimension of } \text{orbit}(f)) \leq n, \\
 P \text{ is generic} &\iff (\text{codimension of } (\text{Not } P)) > n,
 \end{aligned}$$

“codimension” : ジェット空間の中での余次元.



+ Malgrange-Mather's preparation theorem (“代数化”)

【 Determinacy (確定性) of singularities 】

$f : N \rightarrow M$ is called r -determined at a point $p \in N$ if any $g : N \rightarrow M$ with $j^r g(p) = j^r f(p)$ is \mathcal{A} -equivalent (i.e. locally diffeomorphic) to f around p .

Example. $f : \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}, p = 0$.

$$\begin{aligned}
 f &= a_1 x + \dots \\
 f &= a_1 x + a_2 x^2 + \dots \\
 f &= a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + \dots \\
 f &= a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + a_4 x^4 + \dots
 \end{aligned}$$

If $a_1 \neq 0$, then f is 1-determined. (陰関数定理)

If $a_1 = 0, a_2 \neq 0$, then f is 2-determined. (Morse の補題)

If $a_1 = 0, a_2 = 0, a_3 \neq 0$, then f is 3-determined.

..... (胚の発生のアナロジー, R.Thom)

Example. $f : \mathbf{R}^2 \rightarrow \mathbf{R}, p = (0, 0).$

$$\begin{aligned} f &= a_1x + b_1y + \dots \\ f &= a_1x + b_1y + a_2x^2 + 2b_2xy + c_2y^2 + \dots \\ f &= a_1x + b_1y + a_2x^2 + 2b_2xy + c_2y^2 \\ &\quad + a_3x^3 + 3b_3x^2y + 3c_3xy^2 + d_3y^3 + \dots \end{aligned}$$

If $(a_1, b_1) \neq (0, 0)$, then f is 1-determined. (陰関数定理)

If $(a_1, b_1) = (0, 0)$ but the discriminant $a_2c_2 - b_2^2 \neq 0$, then f is 2-determined. (Morse の補題)



There is an algebraic condition on the 3-jet for that f is 3-determined, and so on. (→ [Thom-Varchenko, Fukuda](#)).

[Classification (分類)]

It is known that a proper mapping $f : N \rightarrow M$ between 2-dimensional manifolds is stable if and only if at any singular value $q \in M$, f is \mathcal{A} -equivalent (diffeomorphic) to

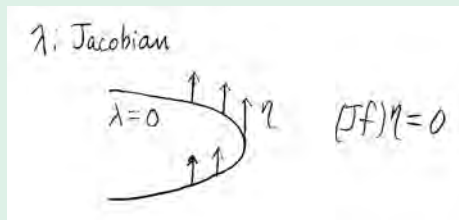
Fold $(x, y) \mapsto (x, y^2)$, **Whitney's cusp** $(x, y) \mapsto (x, y^3 + xy)$, or, **Transverse Fold** $(x, y) \mapsto (x, y^2), (x^2, y) \leftarrow (x, y)$.



- Stable mappings are generic. $(n, m) = (2, 2)$.
- Any generic singularity is geometrically and algebraically characterized.

[Recognition (認識)]

Let $f : (\mathbf{R}^2, 0) \rightarrow \mathbf{R}^2$ be a differentiable map-germ.



Theorem. (Whitney, Saji) f is diffeomorphic to **Whitney's cusp map** $(x, y) \mapsto (x, y^3 + xy)$ at 0 if and only if f is of corank 1, $d\lambda(0) \neq 0$, $(\eta\lambda)(0) = 0$ and $(\eta\eta\lambda)(0) \neq 0$.

【 Stratifications (層化) 】

— Stratification of (semi-)algebraic set, elimination. (Tarski-Seidenberg's theorem).

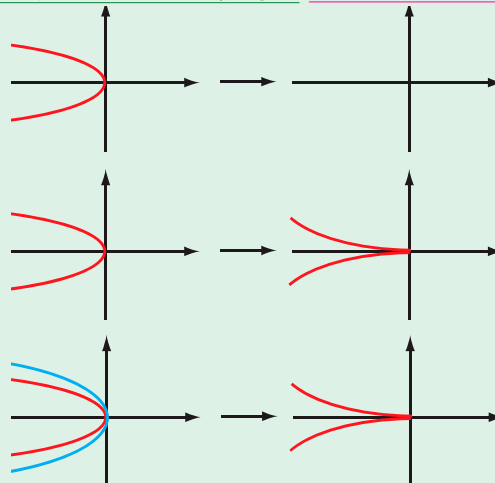
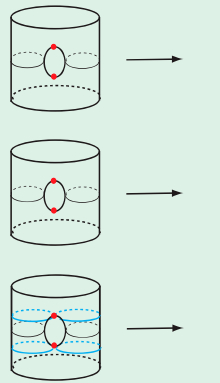
H. Whitney, *Elementary structure of real algebraic varieties*, Ann. of Math. (2)66 (1957), 545–556.

— Stratifications of mappings. (Thom-Mather theory).

R. Thom, *Ensembles et morphismes stratifiés*, Bull. Amer. Math. Soc. 75(2) (1969), 240–284.

J. Mather, *How to stratify mappings and jet spaces*, Singularités d'Applications Différentiables, Lecture Notes in Math., 535, Springer-Verlag (1976), pp. 128–176.

☆ Decomposition of a mapping by smooth manifolds and submersions.



Applications of Singularity Theory



泉屋・石川「応用特異点論」の目次

0. 応用特異点論概説
1. 多様体と可微分写像
2. ベクトル場と微分形式
3. 写像空間と横断性定理
4. マルグランジュの準備定理と写像の特異点
5. 関数と超曲面の特異点論
6. シンプレクティック多様体と接触多様体
7. ラグランジュ特異点とルジャンドル特異点
8. 1階偏微分方程式とルジャンドル特異点

9. その他の応用

一般化されたコーシー問題に現れる特異点／安定アイソトロピック写像の特異点／特異ラグランジュ多様体／可展曲面の特異点／発散型写像芽関式と織物幾何／古典的微分幾何学への応用／サブリーマン幾何とコントロール理論／網状ラグランジュ特異点と網状ルジャンドル特異点／
地震波，海洋音響学／重力場レンズ／ボロノイ図形／結晶，ウルフ図形／モンジュ・アンペール方程式／ベクトル場の特異点／分岐理論／映像理論／...

【 Lagrange / Legendre singularities 】

— Lagrange singularity theory.

Singularity theory of families of functions. symplectic structure, Lagrange submanifold, caustics, ...

— Legendre singularity theory.

Singularity theory of families of hypersurfaces, contact structure, Legendre submanifold, wavefront, ...

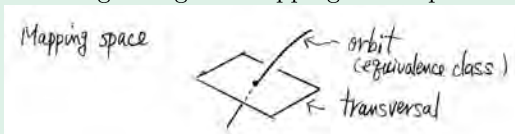
— Applications to differential geometry, height functions, distance square functions, focal set, **frontal**, ...

— Applications to optics, chemistry, biology, economics, ... etc.

【 (Uni-)Versal unfoldings (deformations) 普遍開折 】

A deformation of a singularity of mappings is called **versal** if arbitrary deformation of the singularity is induced from the given deformation.

Versal deformation is obtained by a **transversal** section of the orbit through the given mapping in the space of mapping.

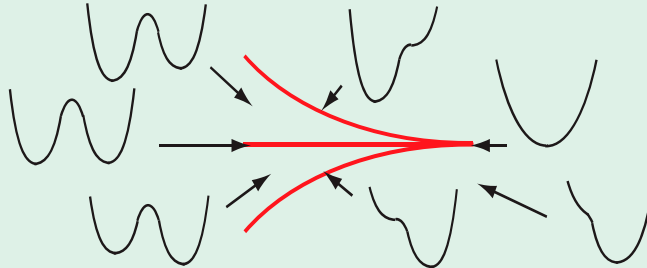


By the finite determinacy of the given map-germ, a versal deformation is characterized by linear algebraic terms, “**infinitesimal versality**”.

【 Bifurcation diagrams (分岐図式) 】

Family of functions \rightarrow symplectic geometry, Lagrange singularity, caustic, Maxwell set, ...

$$F : \mathbf{R} \times \mathbf{R}^2 \rightarrow \mathbf{R}, F(x, a, b) := x^4 + ax^2 + bx$$

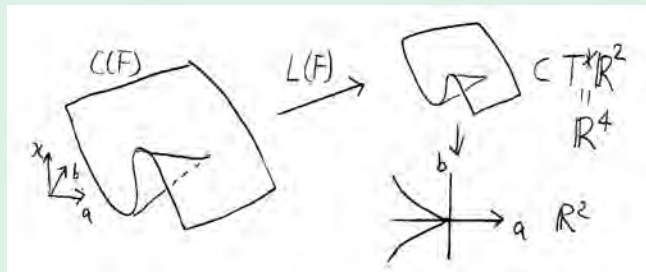


$$F : \mathbf{R} \times \mathbf{R}^2 \rightarrow \mathbf{R}, F(x, a, b) := x^4 + ax^2 + bx,$$

$$C(F) := \{(x; a, b) \mid \frac{\partial F}{\partial x} = 0\}, \text{ catastrophe set,}$$

$$L(F) : C(F) \rightarrow T^*\mathbf{R}^2, (x; a, b) \mapsto \left(\frac{\partial F}{\partial a}, \frac{\partial F}{\partial b}, a, b\right)$$

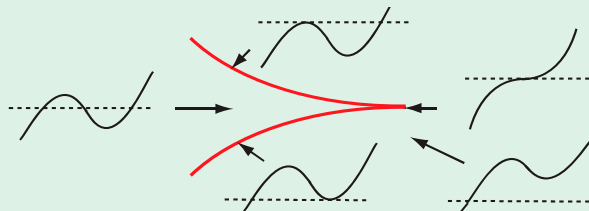
Lagrangian immersion.



【 Bifurcation diagrams (分岐図式), Discriminant 】

Family of hypersurfaces \rightarrow contact geometry, Legendre singularity, wave front, frontal, ...

$$G : \mathbf{R} \times \mathbf{R}^2 \rightarrow \mathbf{R}, G(x, a, b) := x^3 + ax + b,$$



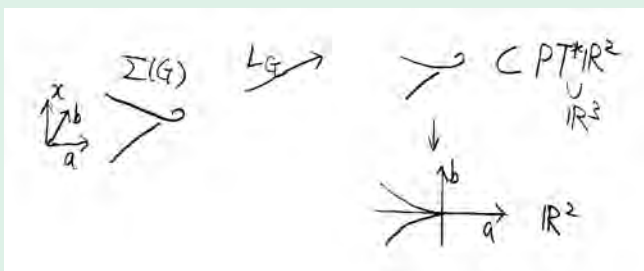
The discriminant is given by the equation $\frac{1}{27}a^3 + \frac{1}{4}b^2 = 0$.

【 Legendre immersion and front 】

$$\Sigma(G) := \{(x, a, b) \mid G = 0, \frac{\partial G}{\partial x} = 0\}$$

$$L_G : \Sigma(G) \mapsto PT^*\mathbf{R}^2, (x, a, b) \mapsto \left(\left[\frac{\partial G}{\partial a}, \frac{\partial G}{\partial b} \right], a, b \right)$$

Legendrian immersion.



【 Re-visit to Catastrophe Theory 】

☆ **Discontinuity** is studied by using **differentiation**.

☆ **Local models** by differentiable maps describe the phenomena, combined with **differential topology**.

Singularity theory may have various possibilities of known and unknown applications ...

V.I. Arnold (「カタストロフ理論」 蟹江幸博訳, 現代数学社)

“Thom のカタストロフ理論の「陰気な神秘性」(dirk mysticism)”

カタストロフ理論の着実な結果と不思議さ →

Simple singularities and Simple Lie algebras (ADE 分類)

V.I. Arnold, *Normal forms of functions near degenerate critical points, the Weyl groups A_k, D_k, E_k and Lagrange singularities*. *Funct. Anal. Appl.* 6 (1972), 254-272.

[Example of singular points — Singular curves in non-holonomic manifolds]

Let M be a manifold and $D \subset TM$ a completely non-integrable subbundle (which satisfies Hörmander condition) of the tangent bundle of M .

The **End-point mapping** $\text{End} : \mathcal{C} \rightarrow M$, where \mathcal{C} is the space of absolutely continuous integral curves $\gamma : [0, 1] \rightarrow M$ of D , $\dot{\gamma}(t) \in D_{\gamma(t)}$, a.e., $\gamma(0) = p$, is defined by $\text{End}(\gamma) := \gamma(1) \in M$. The singular “point” $\in \mathcal{C}$ is called a “**singular curve**”.



[Tropical geometry]

Tropical addition and tropical multiplication:

$$“x + y” := \max\{x, y\}, “x \cdot y” := x + y, \quad x, y \in \mathbf{R}.$$

Tropical polynomial

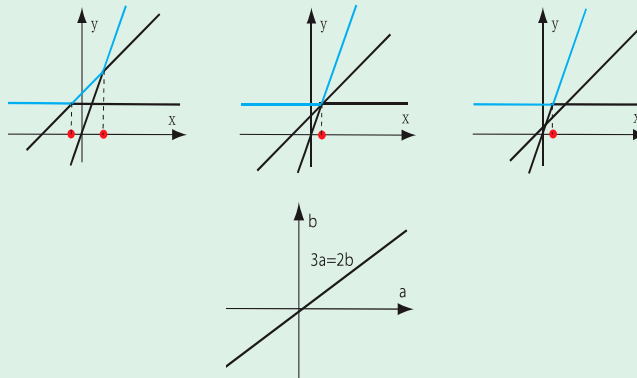
$$\begin{aligned} F := “\sum_{j \in A} c_j x^j” &= “\sum_{(j_1, \dots, j_n) \in A} c_{j_1, \dots, j_n} x_1^{j_1} \cdots x_n^{j_n}” \\ &= \max\{c_j + j_1 x_1 + \cdots + j_n x_n \mid j \in A\} \end{aligned}$$

Tropical variety

$$Y_F := \{x \in \mathbf{R}^n \mid F \text{ is not a linear function in a neighborhood of } x\},$$

[Tropical bifurcation]

Example. $F = “x^3 + ax + b” = \max\{3x, a + x, b\}$.



The bifurcation locus is given by the equation $3a = 2b$ which is a “tropicalization” of $\frac{1}{27}a^3 + \frac{1}{4}b^2 = 0$.

<https://www.math.sci.hokudai.ac.jp/~ishikawa/tropical/ishikawa-tropical07.pdf>
(北大のシステムのセキュリティー強化のため)
http ではなく https として入ってください.

- **実代数多様体の位相幾何**: ヒルベルト第16問題, シンプレクティック位相幾何, 総実位相幾何, トロピカル幾何.
- **非ホロノーム幾何**: サブリーマン幾何, 制御の数理学, ロボティクス工学の基礎理論.
- **スツルム理論**: 2次形式の指標, 写像度, 論理学, 多変数ニュートン法, 計算複雑性.
- **実射影幾何**: 映像理論, グラフィクス工学の基礎理論.
- **半代数集合論**: ナッシュ多様体, 半代数トポロジー, モデュライ理論, ヒルベルト第17問題, 実体論.
- **実関数論**: 実多変数関数論, 劣解析的集合論, 実保型関数論.
- **実代数多様体の分類理論**: 実代数曲線論, 実代数曲面論, 実代数3次元多様体論.

Thank you for your attention.

ご清聴ありがとうございます.

Probabilistic Model-Based Evolutionary Computation and Its Applications

Shinichi SHIRAKAWA

Faculty of Environment and Information Sciences, Yokohama National University,
Japan

This talk focuses on evolutionary computation methods for solving a black-box optimization problem by updating a probability distribution for generating solutions based on the objective function values. We overview the relation of such probabilistic model-based evolutionary algorithms to stochastic natural gradient methods and their mathematical perspective. Several applications of probabilistic model-based evolutionary algorithms, such as neural architecture search [1], are also presented.

REFERENCES

- [1] Y. Akimoto, S. Shirakawa, N. Yoshinari, K. Uchida, S. Saito, and K. Nishida, “Adaptive Stochastic Natural Gradient Method for One-Shot Neural Architecture Search,” *36th International Conference on Machine Learning (ICML 2019)*.

確率モデルに基づく進化計算 とその応用

2021年9月7日（火）
横浜国立大学 白川 真一

YNU

講演内容

- ❖ 進化計算（Evolutionary Computation; EC）とは？
- ❖ 確率モデルに基づく進化計算
- ❖ 確率的自然勾配法としての進化計算
- ❖ ニューラルアーキテクチャサーチへの応用
- ❖ 理論解析の話題

2

進化計算（Evolutionary Computation; EC）

- ❖ きちんとした定義は（たぶん）難しい
 - [Wikipedia] In computer science, evolutionary computation is a family of algorithms for **global optimization** inspired by **biological evolution**. they are a family of **population-based** trial and error problem solvers with a **metaheuristic** or **stochastic optimization** character
 - 逆にいうと柔軟性が高い
- ❖ 本講演で考える進化計算
 - ブラックボックスな目的関数の最適化
 - 多点探索（探索点の確率分布を使う）
 - ランダム性のあるアルゴリズム

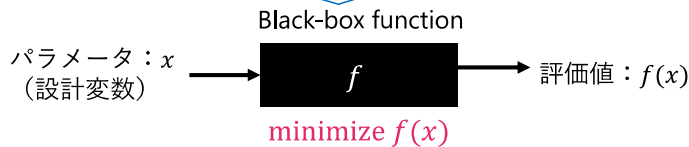


https://en.wikipedia.org/wiki/Evolutionary_computation

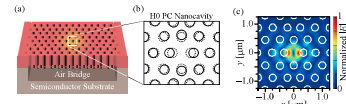
3

ブラックボックス最適化

パラメータを決めると評価値は得られるが、
微分情報を得ることができない
➡ 評価値の情報だけを使って最適化する必要



例: 評価に数値計算が必要な問題 (工学設計など)
組合せ・離散変数最適化問題
評価に人間が関わる問題 (対話型進化計算)
機械学習のハイパーパラメータ最適化, etc.



[Abe+ 20] R. Abe, et al., "Optimization of H0 photonic crystal nanocavity using machine learning." *Optics Letters* (2020).

4

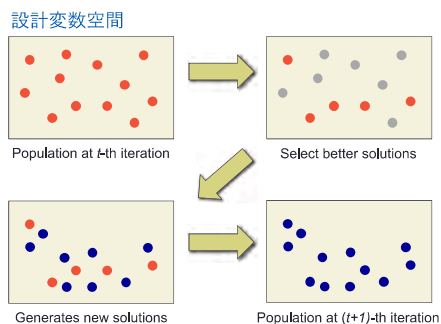
進化計算の主なアルゴリズム

- ❖ 遺伝的アルゴリズム (Genetic algorithms; GA)
- ❖ 進化戦略 (Evolution strategies; ES)
- ❖ 遺伝的プログラミング (Genetic Programming; GP)
- ❖ 分布推定アルゴリズム (Estimation distribution algorithms; EDA)
- ❖ Particle swarm optimization (PSO)
- ❖ Differential evolution (DE)
- ...

5

進化計算アルゴリズムの流れ

1. 複数の解候補 (集団) を生成
2. 集団の中から良い解を選択
3. 選択した個体を使い新しい解を生成
 - 遺伝的操作 (GAの場合: 交叉・突然変異)
 - アルゴリズムによって様々な操作がある
4. 次の世代の集団を決める
5. 2~4を繰り返す



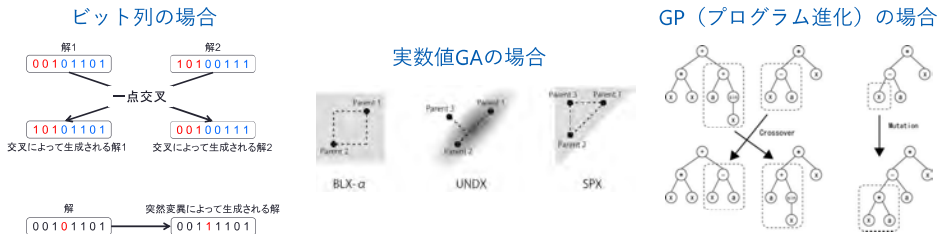
アルゴリズムのモチベーション: 良い解に似た解を生成していく
(多様性も維持しつつ)

6

遺伝的操作の例

問題に合わせて使用者が設計

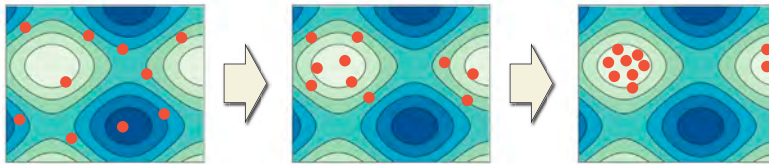
- 遺伝的操作が設計できれば任意の変数の最適化に適用できる
- ヒューリスティック（経験則）



7

確率分布として考えた場合の進化計算

目的関数値の履歴を使ってより良い評価値を得られるであろう解を生成していく

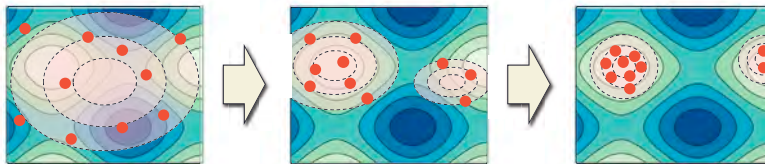


解の分布を有望領域に移動させている

8

確率モデルベースの進化計算

探索点生成分布を陽に定義し更新していく



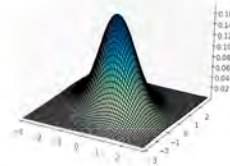
どのように分布を更新するべきか？

9

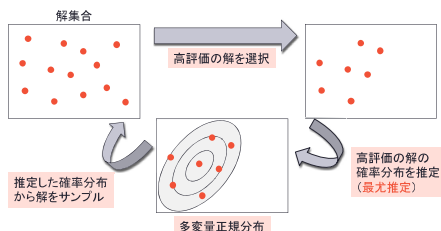
ガウス分布を使った連続変数最適化

多変量正規分布のパラメータを更新していく

$$\mathcal{N}(\mathbf{x}|\boldsymbol{\mu}, \mathbf{C}) = \frac{1}{(2\pi)^{D/2} |\mathbf{C}|^{1/2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \mathbf{C}^{-1}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})\right\}$$



ナイーブな方法：最尤推定に基づく更新

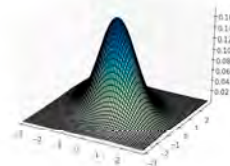


10

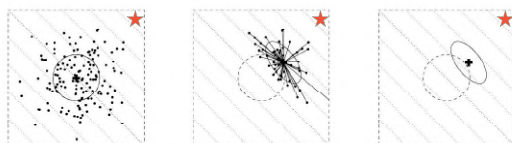
ガウス分布を使った連続変数最適化

多変量正規分布のパラメータを更新していく

$$\mathcal{N}(\mathbf{x}|\boldsymbol{\mu}, \mathbf{C}) = \frac{1}{(2\pi)^{D/2} |\mathbf{C}|^{1/2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \mathbf{C}^{-1}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})\right\}$$



ナイーブな方法：最尤推定に基づく更新



- 解分布の外側に最適解があると初期収束する (解集合を実行可能領域全体からサンプルする必要がある)
- 多くのサンプル数を必要とする

[Hansen 06] N. Hansen: **The CMA Evolution Strategy: A Comparing Review**, Towards a New Evolutionary Computation, Springer (2006)

11

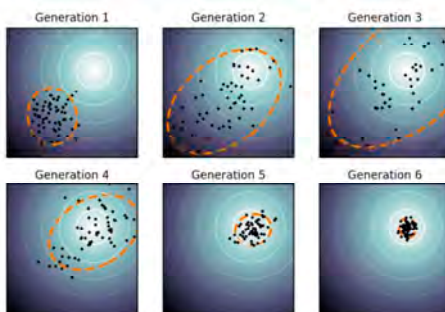
Covariance Matrix Adaptation Evolution Strategies (CMA-ES)

- ❖ 解を生成する確率分布として多変量ガウス分布を保持
- ❖ 多変量ガウス分布からのサンプル、解の評価、分布パラメータ (平均ベクトルと共分散行列) の更新を繰り返す

実際には共分散行列を σ と \mathbf{C} に分解している

$$\mathcal{N}(\mathbf{m}, \sigma^2 \mathbf{C})$$

ステップサイズ (スカラー) 共分散行列



<https://en.wikipedia.org/wiki/CMA-ES>

共分散行列を適応するアルゴリズムであり、探索空間のアフィン変換に対して不変な性質をもつ

12

The CMA-ES

Input: $m \in \mathbb{R}^n$; $\sigma \in \mathbb{R}_+$; $\lambda \in \mathbb{N}_{\geq 2}$, usually $\lambda \geq 5$, default $4 + \lfloor 3 \log n \rfloor$

Set $c_m = 1$; $c_1 \approx 2/n^2$; $c_\mu \approx \mu_w/n^2$; $c_c \approx 4/n$; $c_\sigma \approx 1/\sqrt{n}$; $d_\sigma \approx 1$; $w_{i=1\dots\lambda}$ decreasing in i and $\sum_{i=1}^\mu w_i = 1$, $w_\mu > 0 \geq w_{\mu+1}$, $\mu_w^{-1} := \sum_{i=1}^\mu w_i^2 \approx 3/\lambda$

Initialize $\mathbf{C} = \mathbf{I}$, and $\mathbf{p}_c = \mathbf{0}$, $\mathbf{p}_\sigma = \mathbf{0}$

While not terminate

$\mathbf{x}_i = \mathbf{m} + \sigma \mathbf{y}_i$, where $\mathbf{y}_i \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{C})$ for $i = 1, \dots, \lambda$ **sampling**

$\mathbf{m} \leftarrow \mathbf{m} + c_m \sigma \mathbf{y}_w$, where $\mathbf{y}_w = \sum_{i=1}^\mu w_{\text{rk}(i)} \mathbf{y}_i$ **update mean**

$\mathbf{p}_\sigma \leftarrow (1 - c_\sigma) \mathbf{p}_\sigma + \sqrt{1 - (1 - c_\sigma)^2} \sqrt{\mu_w} \mathbf{C}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{y}_w$ **path for σ**

$\mathbf{p}_c \leftarrow (1 - c_c) \mathbf{p}_c + \mathbf{1}_{[0,2n]} \{ \|\mathbf{p}_\sigma\|^2 \} \sqrt{1 - (1 - c_c)^2} \sqrt{\mu_w} \mathbf{y}_w$ **path for \mathbf{C}**

$\sigma \leftarrow \sigma \times \exp\left(\frac{c_\sigma}{d_\sigma} \left(\frac{\|\mathbf{p}_\sigma\|}{\mathbb{E}\|\mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I})\|} - 1\right)\right)$ **update of σ**

$\mathbf{C} \leftarrow \mathbf{C} + c_\mu \sum_{i=1}^\lambda w_{\text{rk}(i)} (\mathbf{y}_i \mathbf{y}_i^\top - \mathbf{C}) + c_1 (\mathbf{p}_c \mathbf{p}_c^\top - \mathbf{C})$ **update \mathbf{C}**

良い解の方向に
平均ベクトルを更新

平均ベクトルが同じ
方向に動き続けていたら
分散を大きく

良い解の方に分布を
更新

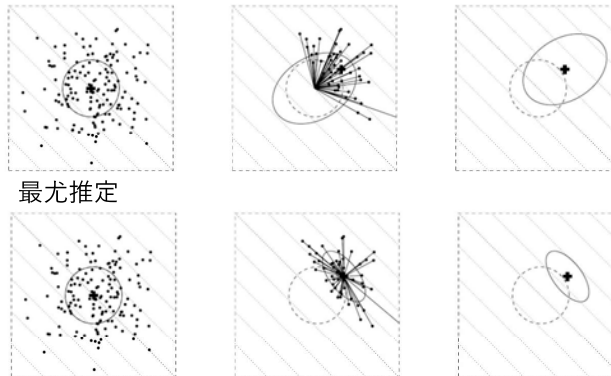
Not covered: termination, restarts, useful output, search boundaries and encoding, corrections for: positive definiteness guaranty, \mathbf{p}_c variance loss, c_σ and d_σ for large λ

from the tutorial slide by Akimoto and Hansen (GECCO 2018)

13

CMA-ESと最尤推定による共分散行列の更新

CMA-ESの rank- μ update



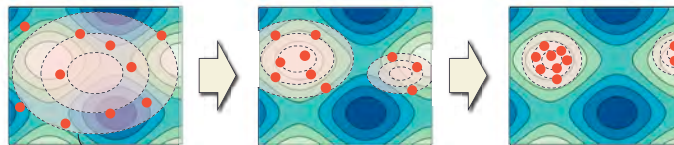
最尤推定

[Hansen 06] N. Hansen: *The CMA Evolution Strategy: A Comparing Review*, Towards a New Evolutionary Computation, Springer (2006)

14

どのように探索分布を更新すべきか？

- 確率分布の良さを評価したい
- その評価値がよくなるように分布を更新する



探索点生成分布: $x \sim p(x; \theta)$

確率分布の良さ: 確率分布 $p(x; \theta)$ の元での目的関数の期待値

$$J(\theta) = \mathbb{E}_{x \sim p_\theta}[f(x)] = \int f(x) p(x; \theta) dx$$

15

目的関数の期待値の最大化

探索分布： $p(x|\theta)$ 評価関数： $f(x)$

探索分布 $p(x|\theta)$ のもとの評価値の期待値：

$$J(\theta) = \mathbb{E}_{x \sim p_\theta}[f(x)] = \int f(x)p(x|\theta)dx$$

確率分布のパラメータを勾配方向に更新することを考える：

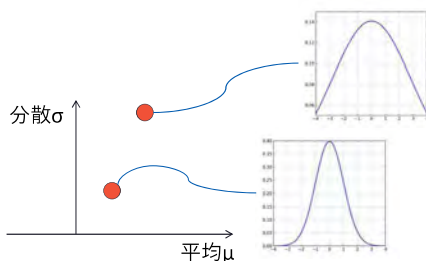
$$\nabla_\theta J(\theta) = \int f(x)\nabla_\theta p(x|\theta)dx$$

[Wierstra+ 08] D. Wierstra, et al., "Natural Evolution Strategies," *CEC 2008*

[Akimoto+ 09] Y. Akimoto, et al.: "Bidirectional Relation between CMA Evolution Strategies and Natural Evolution Strategies," *PPSN 2009*

16

確率分布のパラメータ空間



- 確率分布間の擬距離として KL-divergence を利用
- パラメータ空間はユークリッド空間ではない
- 最急方向は通常の勾配にフィッシャー情報行列の逆行列を掛けたものになる

$$\tilde{\nabla}g(\theta) \propto \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} \arg \max_{\delta\theta} g(\theta + \delta\theta)$$

$$\text{s.t. } D_{\text{KL}}(P_{\theta+\delta\theta} || P_\theta) \leq \varepsilon^2/2$$

目的関数の期待値の自然勾配： $\tilde{\nabla}_\theta J(\theta) = F^{-1}(\theta)\nabla_\theta J(\theta)$

$$= \int f(x)F^{-1}(\theta)\nabla_\theta p(x|\theta)dx$$

17

Information Geometric Optimization (IGO)

- 目的関数の期待値の自然勾配方向に分布パラメータを更新
- 確率モデルベースブラックボックス最適化のフレームワーク
- 自然勾配のモンテカルロ推定

$$\tilde{\nabla}_\theta J(\theta) = \int f(x)F^{-1}(\theta)\nabla_\theta p(x|\theta)dx$$

$$= \int f(x)\tilde{\nabla}_\theta \log p(x|\theta) p(x|\theta) dx$$

$$\approx \frac{1}{\lambda} \sum f(x_i)\tilde{\nabla}_\theta \log p(x_i|\theta)$$

ただし、 $\tilde{\nabla}_\theta \log p(x|\theta) = F^{-1}(\theta)\nabla_\theta \log p(x|\theta)$

指数型分布族であれば解析的に得られる

実際は目的関数値を分位数（ランキング）に基づく利得値に変換する
（目的関数の単調増加変換に対する不変性）

[Ollivier+ 17] Y. Ollivier, L. Arnold, A. Auger, and N. Hansen, "Information-Geometric Optimization Algorithms: A Unifying Picture via Invariance Principles," *Journal of Machine Learning Research* 18 (2017)

18

Information Geometric Optimization (IGO)

1. 確率分布から λ 個の解を生成
2. 各解を評価
3. 更新式に従って確率分布を更新

$$\theta^{t+1} = \theta^t + \eta \sum_{i=1}^{\lambda} w_i \tilde{v}_\theta \log p(x_i | \theta)$$

IGO : 確率的自然勾配法

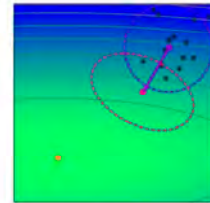
19

確率的自然勾配法によるブラックボックス最適化

確率モデルに多変量正規分布を考えると, 自然勾配方向へのパラメータの更新は次のようになる

$$m^{t+1} = m^t + c_m \sum_{i=1}^{\lambda} w_{\text{rk}(x_i^t)} (x_i^t - m^t)$$

$$C^{t+1} = C^t + c_\mu \sum_{i=1}^{\lambda} w_{\text{rk}(x_i^t)} ((x_i^t - m^t)(x_i^t - m^t)^T - C^t)$$



→ CMA-ESの更新規則 (の一部と) 一致

CMA-ESは自然勾配方向に分布を更新していると考えられる

20

The CMA-ES

Input: $m \in \mathbb{R}^n$; $\sigma \in \mathbb{R}_+$; $\lambda \in \mathbb{N}_{\geq 2}$, usually $\lambda \geq 5$, default $4 + \lfloor 3 \log n \rfloor$

Set $c_m = 1$; $c_1 \approx 2/n^2$; $c_\mu \approx \mu_w/n^2$; $c_c \approx 4/n$; $c_\sigma \approx 1/\sqrt{n}$; $d_\sigma \approx 1$; $w_{i=1 \dots \lambda}$ decreasing in i and $\sum_{i=1}^{\mu} w_i = 1$, $w_\mu > 0 \geq w_{\mu+1}$, $\mu_w^{-1} := \sum_{i=1}^{\mu} w_i^2 \approx 3/\lambda$

Initialize $C = I$, and $p_c = 0$, $p_\sigma = 0$

While not terminate

$x_i = m + \sigma y_i$, where $y_i \sim \mathcal{N}(0, C)$ for $i = 1, \dots, \lambda$ sampling

$m \leftarrow m + c_m \sigma y_w$, where $y_w = \sum_{i=1}^{\mu} w_{\text{rk}(i)} y_i$ update mean

良い解の方向に
平均ベクトルを更新

$p_\sigma \leftarrow (1 - c_\sigma) p_\sigma + \sqrt{1 - (1 - c_\sigma)^2} \sqrt{\mu_w} C^{-\frac{1}{2}} y_w$ path for σ

$p_c \leftarrow (1 - c_c) p_c + \mathbf{1}_{\{0, 2n\}} \{ \|p_\sigma\|^2 \} \sqrt{1 - (1 - c_c)^2} \sqrt{\mu_w} y_w$ path for C

$\sigma \leftarrow \sigma \times \exp \left(\frac{c_\sigma}{d_\sigma} \left(\frac{\|p_\sigma\|}{\mathbb{E}\|\mathcal{N}(0, I)\|} - 1 \right) \right)$ update of σ

$C \leftarrow C + c_\mu \sum_{i=1}^{\lambda} w_{\text{rk}(i)} (y_i y_i^T - C) + c_1 (p_c p_c^T - C)$ update C

良い解の方に分布を
更新

Not covered: termination, restarts, useful output, search boundaries and encoding, corrections for: positive definiteness guaranty, p_c variance loss, c_σ and d_σ for large λ

21

IGOの実現例

- 確率モデルに**ベルヌーイ分布**を考えるとバイナリ列最適化手法のPopulation Based Incremental Learning (PBIL)やCompact GAと一致

[Baluja+ 95] S. Baluja and R. Caruana, "Removing the genetics from the standard genetic Algorithm," *ICML'95*, (1995)

[Harik+ 99] G. R. Harik, F. G. Lobo and D. E. Goldberg, "The compact genetic algorithm," *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, vol. 3, no. 4, pp. 287-297 (1999)

- 確率モデルに**正規分布**を考えると連続最適化手法のCovariance Matrix Adaptation ES (CMA-ES)の一部と一致

[Hansen+ 03] N. Hansen, S. D. Müller, and P. Koumoutsakos, "Reducing the Time Complexity of the Derandomized Evolution Strategy with Covariance Matrix Adaptation (CMA-ES)," *Evolutionary Computation*, 11(1), pp.1-18 (2003)

22

確率的自然勾配法として進化計算を捉えるメリット

- ❖ 確率分布を変えることで任意の変数に対するアルゴリズムを統一的に取り扱える
- ❖ (確率モデル空間での) 勾配法として進化計算を考えられる
- ❖ 理論的な見通しがよく、理論志向のアルゴリズムの改良がしやすい

23

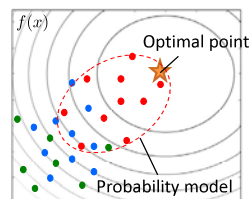
重点サンプリングによるIGOの改良

IGOでは**現在の分布から得られたサンプルのみ**を利用して自然勾配を推定

重点サンプリングによって**過去のサンプル**を再利用し推定精度を向上

重点サンプリングによる自然勾配推定
(推定分散削減効果)

$$\int g(x)p^t(x)dx = \int g(x)\frac{p^t(x)}{\bar{p}(x)}\bar{p}(x)dx$$
$$\approx \frac{1}{\lambda(K+1)} \sum_{k=0}^K \sum_{i=1}^{\lambda} g(x_i^{t-k}) \frac{p^t(x_i^{t-k})}{\bar{p}(x_i^{t-k})}$$



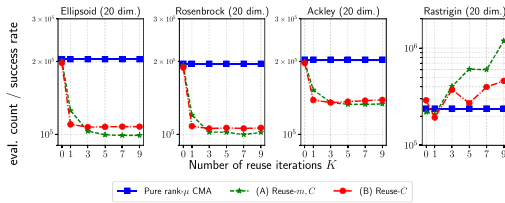
[Shirakawa+ 15] S. Shirakawa, Y. Akimoto, K. Ouchi, and K. Ohara, "Sample Reuse in the Covariance Matrix Adaptation Evolution Strategy Based on Importance Sampling," *GECCO 2015*

現在のサンプル(赤点)と過去のサンプル(青点, 緑点)を自然勾配の推定に利用

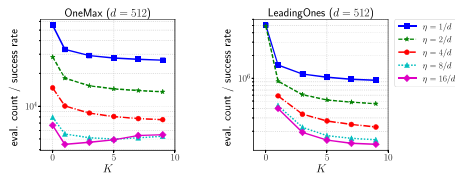
24

サンプル再利用型IGO

ガウス分布の場合
(連続変数最適化)



ベルヌーイ分布の場合
(バイナリ変数最適化)



横軸：再利用する過去の世代数, 縦軸：評価回数 (小さい方がよい)

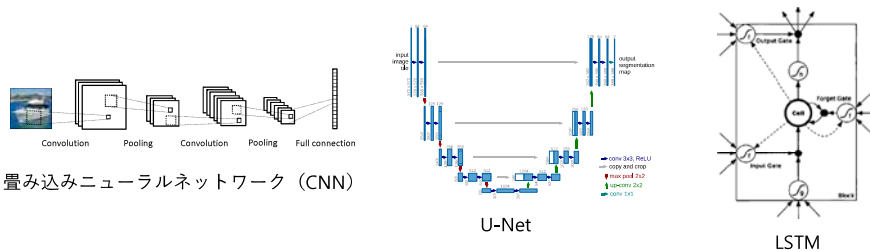
25

確率的自然勾配法に基づく One-Shot Neural Architecture Search

26

ディープニューラルネットワーク

- ❖ 画像認識や自然言語処理などで大きな成功を収める
- ❖ 大量のパラメータをもつ計算モデルをデータに基づいて最適化



[Ronneberger+ 15] O. Ronneberger, P. Fischer, T. Brox, "U-Net: Convolutional Networks for Biomedical Image Segmentation," *MICCAI 2015*
 [Mulder+ 15] W. D. Mulder, S. Bethard, M. Moens, "A survey on the application of recurrent neural networks to statistical language modeling," *Computer Speech & Language*, Vol. 30, Issue 1, pp. 61-98 (2015)

27

ニューラルネットワークの学習

データから定まる損失を小さくするように重みパラメータを最適化



確率的勾配降下法

$$W \leftarrow W - \eta \underbrace{\nabla_W}_{\text{損失関数の勾配}} \mathcal{L}(W, D)$$

$\underbrace{W}_{\text{重みパラメータ}}$

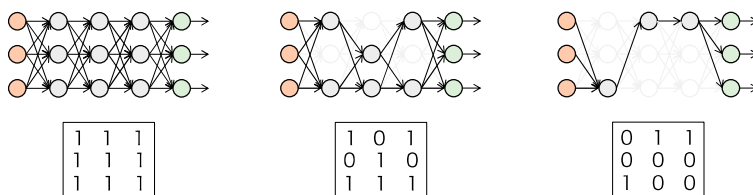
ネットワーク内の処理と損失関数が微分可能であれば良い
= 計算ユニットのつなぎ方や種類は自由（柔軟性が高い）

ネットワーク構造は使用者があらかじめ決める必要がある

28

One-Shot NAS

- ❖ 重みと構造パラメータを同時に最適化するNAS
- ❖ スーパーグラフを考えそのサブグラフとして候補構造を表現する



バイナリ列をNNの学習中に最適化したい

29

問題設定

$$\max_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}, \mathbf{c} \in \mathcal{C}} f(\mathbf{x}, \mathbf{c})$$

$f: \mathcal{X} \times \mathcal{C} \rightarrow \mathbb{R}$: 目的関数（最大化問題とする）

$\mathbf{x} \in \mathcal{X}$: 微分可能な変数（重みパラメータ）

$\mathbf{c} \in \mathcal{C}$: 微分不可能な変数（構造パラメータ, カテゴリカル変数）

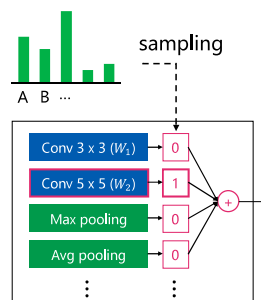
問題を緩和して勾配ベースの最適化を適用したい: \mathbf{c} を微分可能な変数へ緩和

30

問題の緩和（確率緩和）

- カテゴリ変数空間で定義される確率分布族 $\mathcal{P} = \{P_\theta : \theta \in \Theta \subseteq \mathbb{R}^{n_\theta}\}$ を導入する
- 確率分布のもとでの目的関数の期待値の最適化を考える

$$J(\mathbf{x}, \theta) := \int_{\mathbf{c} \in \mathcal{C}} f(\mathbf{x}, \mathbf{c}) p_\theta(\mathbf{c}) d\mathbf{c} = \mathbb{E}_{p_\theta}[f(\mathbf{x}, \mathbf{c})]$$



31

問題の緩和（確率緩和）

- 目的関数 J は, \mathbf{x} と θ の両方に関して微分可能

$$\nabla_{\mathbf{x}} J(\mathbf{x}, \theta) = \mathbb{E}_{p_\theta}[\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}, \mathbf{c})] ,$$

$$\tilde{\nabla}_{\theta} J(\mathbf{x}, \theta) = \mathbb{E}_{p_\theta}[f(\mathbf{x}, \mathbf{c}) \tilde{\nabla}_{\theta} \ln(p_\theta(\mathbf{c}))] .$$

尤度関数 $\ln p_\theta$ は θ に関して微分可能であるとする（その様な確率分布を選ぶ）

- 確率緩和に基づく One-Shot NAS: ENAS [Pham+ 18] や ASNG-NAS [Akimoto+ 19] など

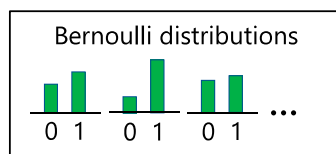
勾配計算にはサンプリングされた構造の計算だけを行えば良い
（メモリ効率と演算量の面で利点）

[Pham+ 18] H. Pham, M. Y. Guan, B. Zoph, Q. V. Le, and J. Dean, "Efficient Neural Architecture Search via Parameter Sharing," *ICML 2018*
[Akimoto+ 19] Y. Akimoto, S. Shirakawa, N. Yoshinari, K. Uchida, S. Saito, and K. Nishida, "Adaptive Stochastic Natural Gradient Method for One-Shot Neural Architecture Search," *ICML 2019*

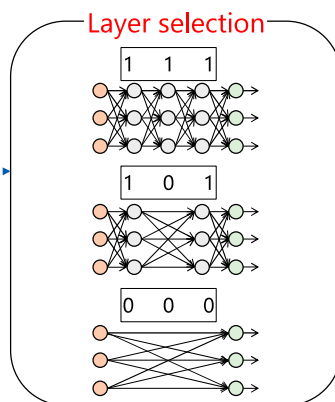
32

ベルヌーイ分布の場合

$$p_\theta(\mathbf{c}) = \prod \theta_k^{c_k} (1 - \theta_k)^{1-c_k}$$



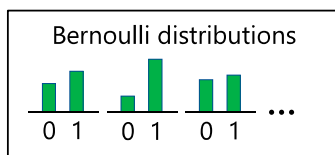
Sampling



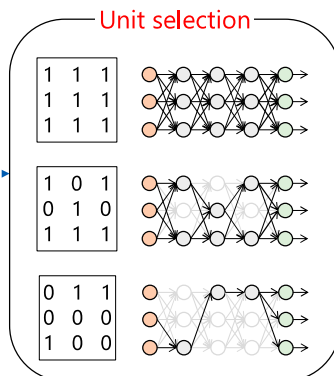
33

ベルヌーイ分布の場合

$$p_{\theta}(\mathbf{c}) = \prod \theta_k^{c_k} (1 - \theta_k)^{1 - c_k}$$



Sampling



34

勾配のモンテカルロ推定

$$\text{重みパラメータに関する勾配の推定} : G_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}, \theta) = \frac{1}{\lambda_{\mathbf{x}}} \sum_{i=1}^{\lambda_{\mathbf{x}}} \nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}, \mathbf{c}_i)$$

更新には深層学習で一般的に用いられる確率的勾配法を利用

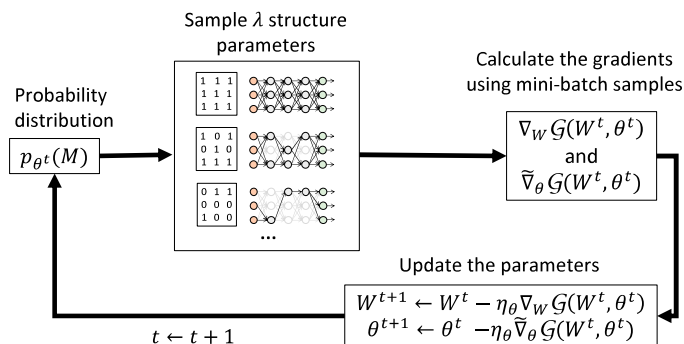
確率分布パラメータに関する勾配の推定 :

$$G_{\theta}(\mathbf{x}, \theta) = \frac{1}{\lambda_{\theta}} \sum_{i=1}^{\lambda_{\theta}} f(\mathbf{x}, \mathbf{c}_i) (T(\mathbf{c}_i) - \theta)$$

ベルヌーイ分布・カテゴリカル分布の場合、 $T(\mathbf{c}_i)$ はバイナリ・One-hotベクトル
これを使った更新は、進化計算アルゴリズムのPBILやcGAに一致する

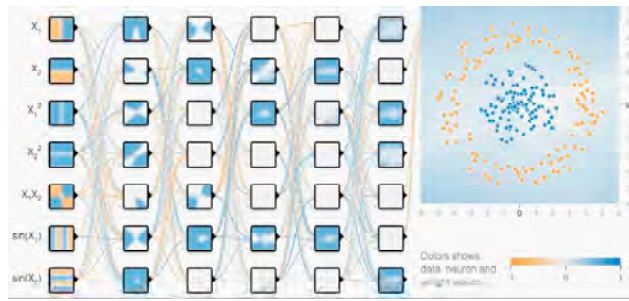
35

最適化の概要



36

Demonstration



The potential of this method is shown in [Shirakawa+ 18] (incl. layer selection, activation selection, connection selection in CNNs, etc.)

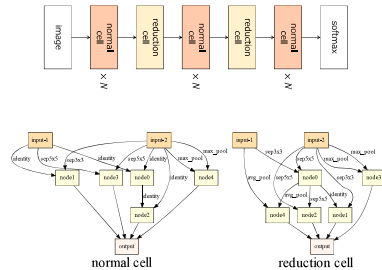
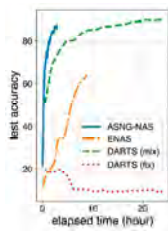
[Shirakawa+ 18] S. Shirakawa, Y. Iwata, and Y. Akimoto, "Dynamic Optimization of Neural Network Structures Using Probabilistic Modeling," *AAAI 2018*.

37

実験：画像分類（CIFAR-10）

- 候補となる構造の探索空間はNASの文献でよく利用されるセルベース構造構造探索によって決定したアーキテクチャで再学習し評価
- 推定自然勾配のSN比を一定に保つような学習率適応法を提案

Method	Search Cost (GPU days)	Params (M)	Test Error (%)
NASNet-A [22]	1800	3.3	2.65
NAONet [9]	200	128	2.11
ProxylessNAS-G [4]	4	5.7	2.08
SMASHv2 [3]	1.5	16.0	4.03
DARTS second order [6]	4	3.3	2.76 (± 0.09)
DARTS first order [6]	1.5	3.3	3.00 (± 0.14)
SNAS [19]	1.5	2.8	2.85 (± 0.02)
ENAS [12]	0.45	4.6	2.89
ASNG-NAS	0.11	3.9	2.83 (± 0.14)



[Akimoto+ 19] Y. Akimoto, S. Shirakawa, N. Yoshinari, K. Uchida, S. Saito, and K. Nishida, "Adaptive Stochastic Natural Gradient Method for One-Shot Neural Architecture Search," *ICML 2019*

38

コンパクトかつ高性能な構造の探索

構造の複雑さを評価する項を目的関数に導入

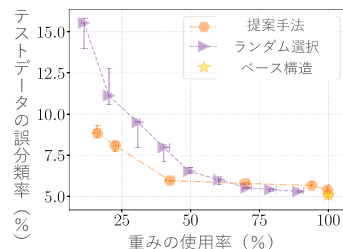
→ ネットワーク中の学習可能なパラメータ数

$$\mathcal{G}(W, \theta) = \underbrace{\mathbb{E}_{P(M|\theta)}[\mathcal{L}(W, M)]}_{\text{損失の期待値}} + \epsilon \underbrace{\sum_{i=1}^d c_i \theta_i}_{\text{重みの個数の期待値 (正則化項)}}$$

こちらは解析的に計算可能

$$\tilde{\nabla}_{\theta} \mathcal{G}(W, \theta) \approx \frac{1}{\lambda} \sum_{k=1}^{\lambda} u_k (M_k - \theta) + \epsilon c \theta (1 - \theta)$$

DenseNetの接続関係最適化



[Saito+19] S. Saito and S. Shirakawa, "Controlling Model Complexity in Probabilistic Model-Based Dynamic Optimization of Neural Network Structures," *ICANN 2019*

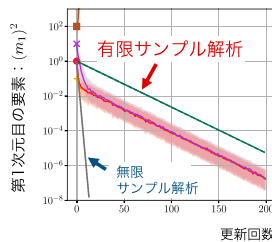
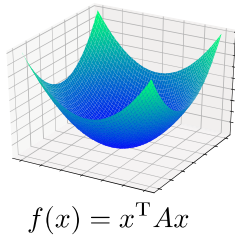
39

理論解析の話題

40

IGOの理論解析

- 凸二次関数上でのIGOアルゴリズムの振る舞いを解析
- 有限のサンプル数で更新した場合の挙動を解析（自然勾配の分散を考慮）
- 最適解へ収束するために戦略パラメータが満たすべき条件を導出



Theorem 3: Consider a single update of m by the update rule (9) on the convex quadratic function $x^T A x$. The expected relative decrease rate of $(m_t)_t^2$ is given by

$$\frac{\mathbb{E}[(m_{t+1})_t^2]}{(m_t)_t^2} = \left(1 - c_{\text{iso}} \frac{\lambda_1}{\lambda_1}\right)^2 + \frac{c_{\text{iso}}^2 H(m_t, \beta, A)}{4n\lambda_1^2} \quad (29)$$

where

$$H_t(m, \beta, A) = \frac{\beta}{(m)_t^2} \left(\text{Tr}(A) + 2\lambda_1 \right)^2 + 2 \left(\text{Tr}(A^2) + 2\lambda_1^2 \right) + 2 \left(\text{Tr}(A) + 2\lambda_1 \right) \left(\sum_{j=1}^d \frac{(m)_t^2}{(m)_t^2} \right) + 4 \left(\lambda_1^2 + \sum_{j=1}^d \lambda_j^2 \frac{(m)_t^2}{(m)_t^2} \right) + \frac{(m)_t^2}{\beta} \left(\sum_{j=1}^d \lambda_j \frac{(m)_t^2}{(m)_t^2} \right)^2. \quad (30)$$

[Uchida+ 20] K. Uchida, S. Shirakawa, and Y. Akimoto, "Finite-Sample Analysis of Information Geometric Optimization with Isotropic Gaussian Distribution on Convex Quadratic Functions," *IEEE Trans. Evolutionary Computation* (2020).

41

進化計算の理論解析：ドリフト理論

- ❖ 関数値の最適化にかかるRuntimeの期待値 $\mathbb{E}[T]$ を見積もりたい
- ❖ 最適化する関数値の状態 $(X_t)_{t \in \mathbb{N}_0}$ がMarkov連鎖 $S \subseteq [0, \infty)$ で表現可能
 - 有限な時間 T で終了する(到達不可能にならない)
 - X_t は最適値までの距離を示す

ドリフト理論の例：

$$X_0 = n, \quad X_T = 0 \text{ のとき}$$

$$\mathbb{E}[X_{t+1} | X_t = x] \leq x - c$$

ならば,

$$\mathbb{E}[T] \leq \frac{n}{c}$$

- ❖ 確率過程の1ステップの情報から全体の期待値/Tail Boundが得られる
- ❖ 強凸かつリプシッツ平滑な関数での (1+1)-ESの線形収束の証明 [Morinaga+ 19]

[Lengler+ 17] J. Lengler and A. Steger, "Drift Analysis and Evolutionary Algorithms Revisited," *Combinatorics, Probability and Computing*, 27, 2017.
 [Morinaga+ 19] D. Morinaga and Y. Akimoto, "Generalized drift analysis in continuous domain: linear convergence of (1 + 1)-ES on strongly convex functions with Lipschitz continuous gradients," *FOGA 2019*

42

講演内容

- ❖ 進化計算 (Evolutionary Computation; EC) とは？
- ❖ 確率モデルに基づく進化計算
- ❖ 確率的自然勾配法としての進化計算
- ❖ ニューラルアーキテクチャサーチへの応用
- ❖ 理論解析の話題

Local Structures of Pareto Sets and Fronts and Their Bifurcations

Hiroshi TERAMOTO

Department of Mathematics, Faculty of Engineering Science, Kansai University,
Japan

(joint work with Naoki Hamada (KLab Inc.) and Kenta Hayano (Keio University))

In this talk, we assume objective functions and functions defining feasible sets are smooth. First, we classify local structures of feasible sets up to diffeomorphism. In the most generic class, Kuhn-Tucker's constraint qualification is satisfied [1] but that is not necessarily the case for other degenerated classes [2, 3]. By using the classification, we discuss their bifurcations. Second, we classify maps defined by objective functions under Pareto- \mathcal{A} equivalence preserving feasible sets and discuss their bifurcations.

REFERENCES

- [1] H. TH. Jongen, P. Jonker, and F. Twilt, "Nonlinear Optimization in Finite Dimensions: Morse Theory, Chebyshev Approximation, Transversality, Flows, Parametric Aspects," *Nonconvex Optimization and Its Applications*, 47, 2013, Springer.
- [2] O. L. Mangasarian and S. Fromovitz, "The Fritz John Necessary Optimality Condition in the Presence of Equality and Inequality Constraints," *J. Math. Anal. Appl.*, 1967, 17, pp. 37–47.
- [3] J. Guddat, H. TH. Jongen, and J. Rueckmann, "On Stability and Stationary Points in Nonlinear Optimization," *J. Austral. Math. Soc. Ser. B*, 1986, 28, pp. 36–56.

パレート集合およびフロントの局所構造とその分岐

寺本 央

関西大学システム理工学部数学科

(早野健太 (慶応大学) と濱田直希 (KLab株式会社) との
共同研究に基づく)

多目的最適化問題

1. $f = (f_1, \dots, f_p) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^p$: 目的関数
2. $g = (g_1, \dots, g_q) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^q$: 不等号拘束条件を決める関数
3. $h = (h_1, \dots, h_r) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^r$: 等号拘束条件を決める関数

本発表では $p + q + r \ll n$ であるとし、 f, g, h は C^∞ であるとする。

拘束条件 $g_1 \leq 0, \dots, g_q \leq 0$ および $h_1 = 0, \dots, h_r = 0$ のもとで f を最小化

一般には p 個の目的関数を同時に最小化できない。



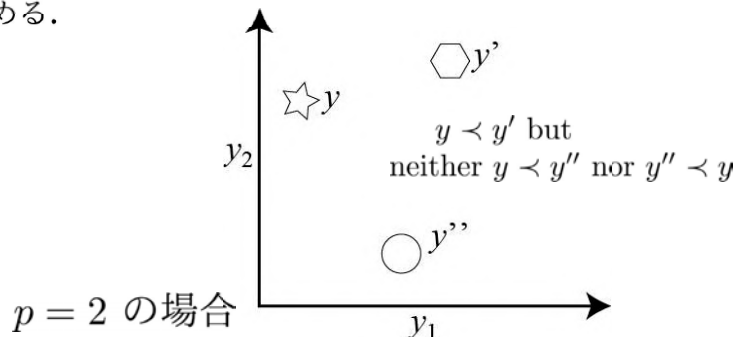
最小点の一般化概念：パレート集合を考える。

パレート順序:

$y, y' \in \mathbb{R}^p$ に対し、

$$y \prec y' \Leftrightarrow \forall i \in \{1, \dots, p\}, y_i \leq y'_i \text{ and } \exists j \in \{1, \dots, p\}, y_j < y'_j$$

と定める。



パレート集合とフロントの定義:

$(g, h) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{q+r}$ とし,

$$M(g, h) = \{x \in \mathbb{R}^n | g(x) \leq 0, h(x) = 0\}$$

とする. ただし $g(x) \leq 0 \Leftrightarrow \forall i \in \{1, \dots, q\}, g_i(x) \leq 0$ および $h(x) = 0 \Leftrightarrow \forall j \in \{1, \dots, r\}, h_j(x) = 0$ としている.

定義 (パレート解) $x \in M(g, h)$ が (f, g, h) のパレート解であるとは

$$\nexists \bar{x} \in M(g, h), f(\bar{x}) \prec f(x)$$

であることをいう. (f, g, h) のパレート解全体の集合をパレート集合とよぶ.

定義 (パレートフロント) パレート集合の f による像をパレートフロントとよぶ.

パレート集合およびフロントの特徴量

TABLE I
RECOMMENDATIONS AND FEATURES FOR MULTIOBJECTIVE TEST PROBLEMS

Recommendation (R) or Feature (F)	Comment
R1: No Extremal Parameters	Prevents exploitation by truncation based correction operators
R2: No Medial Parameters	Prevents exploitation by intermediate recombination
R3: Scalable Number of Parameters	Increases flexibility, demands scalability
K4: Scalable Number of Objectives	Increases flexibility, demands scalability
R5: Dissimilar Parameter Domains	Encourages EAs to scale mutation strengths appropriately
R6: Dissimilar Trade-off Ranges	Encourages normalization of objective values
R7: Pareto Optima Known	Facilitates the use of measures, analysis of results, in addition to other benefits
F1: Pareto Optimal Geometry	Convex, linear, concave, mixed, degenerate, disconnected, or some combination
F2: Parameter dependencies	Objectives can be separable or non-separable
F3: Bias	Substantially more solutions exist in some regions of fitness space than they do in others
F4: Many-to-one mappings	Pareto one-to-one/many-to-one, flat regions, isolated optima
F5: Modality	Uni-modal, or multi-modal (possibly deceptive multi-modality)
F6: Difficult Pareto Set Topology	Pareto set difficult to characterize
F7: Difficult Pareto Front Shape	Pareto optimal front difficult to estimate
F8: Correlation of Position and Distance Functions	Dependencies between position and distance functions
F9: Single Optimal Solution for a High Number of Objectives	Single objective solution for multiple objective functions
F10: Easy Configuration of Features in Scalable Test Problems	Easy way to configure the features of a scalable test problem

S. Zapotecas-Martinez, C. A. C. Coello, H. Aguirre, K. Tanaka, "A Review of Features and Limitations of Existing Scalable Multi-Objective Test Suites", IEEE TEVC, Vol. 23, No. 1, 130 - 142, Feb. 2019.

実行可能解集合の形状

1. $g = (g_1, \dots, g_q) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^q$: 不等号拘束条件を決める関数
2. $h = (h_1, \dots, h_r) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^r$: 等号拘束条件を決める関数

実行可能解集合 (Feasible set)

$$M(g, h) = \{x \in \mathbb{R}^n | g(x) \leq 0, h(x) = 0\}$$

はどのような形状をしているのだろうか?

実行可能解の形状、最も一般的な場合

点 \bar{x} において $g(\bar{x}) = 0$ (q 個の不等式制約が active), $h(\bar{x}) = 0$ かつ勾配ベクトル $\nabla g_i(\bar{x})$ ($i \in \{1, \dots, q\}$) および $\nabla h_j(\bar{x})$ ($j \in \{1, \dots, r\}$) が一次独立であるとする. そのことを拘束条件が点 \bar{x} で線形独立制約想定 (Linear Independence Constraint Qualification (LICQ)) を満たすという. その条件のもと次が成り立つ.

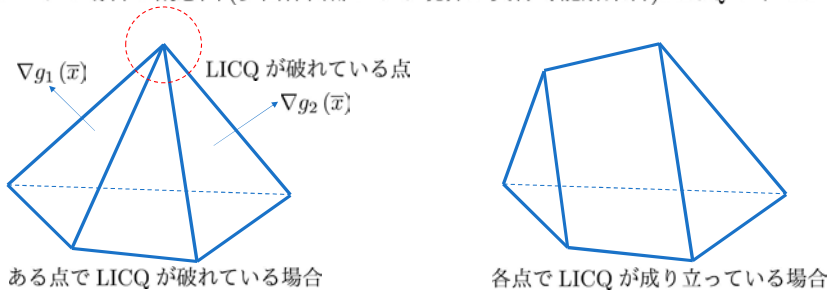
定理 点 \bar{x} のある開近傍 $U \subset \mathbb{R}^n$ と微分同相写像 $\phi: U \rightarrow \phi(U)$ が存在し $\phi(M(g, h) \cap U) = \mathbb{H}^q \times \mathbb{R}^{n-r-q} \cap \phi(U)$ が成り立つ. ただし \mathbb{H} は原点を含む半直線とし, $\phi(\bar{x}) = 0$ とする.

証明は例えば, H. Th. Jongen, P. Jonker and F. Twilt, Nonlinear Optimization in Finite Dimensions, Morse Theory, Chebyshev Approximation, Transversality, Flows, Parametric Aspects の Lemma 3.1.12 を参照.

実行可能解の形状、最も一般的な場合

定理 点 \bar{x} のある開近傍 $U \subset \mathbb{R}^n$ と微分同相写像 $\phi: U \rightarrow \phi(U)$ ($\phi(\bar{x}) = 0$) が存在し $\phi(M(g, h) \cap U) = \mathbb{H}^q \times \mathbb{R}^{n-r-q} \cap \phi(U)$ が成り立つ.

$n = 3, r = 0$ の場合の概念図 (多面体内部および境界が実行可能解集合). LICQ の下では $q \leq n$.



より退化した場合は?

点 \bar{x} において $g(\bar{x}) = 0$ (q 個の不等式制約が active), $h(\bar{x}) = 0$ かつ勾配ベクトル $\nabla h_j(\bar{x})$ ($j \in \{1, \dots, r\}$) が一次独立で, あるベクトル ξ で

$$\forall i \in \{1, \dots, q\}, \nabla g_i(\bar{x}) \cdot \xi < 0$$

かつ

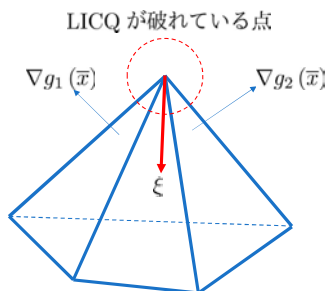
$$\forall j \in \{1, \dots, r\}, \nabla h_j(\bar{x}) \cdot \xi = 0$$

を満たすものが存在するとき, 拘束条件は点 \bar{x} において Mangasarian-Fromovitz 条件 (MFCQ) を満たすという.

O. L. Mangasarian and S. Fromovitz. The Fritz John necessary optimality condition in the presence of equality and inequality constraints. J. Math. Anal. Appl., 17, 37-47, 1967.

より退化した場合の形状は？

LICQ が破れているが、MFCQ が成り立っている拘束条件の例：



図のようにベクトル $\xi \in \mathbb{R}^n$ を選ぶと $\forall i \in \{1, \dots, q\}, \nabla g_i(\bar{x}) \cdot \xi < 0$ となるようにできる. ξ を MF ベクトルとよぶ.

実行可能解の形状(MFCQの下)

点 \bar{x} において $g(\bar{x}) = 0$ (q 個の不等式制約が active) であり MFCQ が満たされているとする. その条件のもと次が成り立つ.

定理 (Guddat, Jongen, Ruckmann) 点 \bar{x} のある開近傍 $U \subset \mathbb{R}^n$ と位相同型写像 $\phi: U \rightarrow \phi(U)$ ($\phi(\bar{x}) = 0$) が存在し,

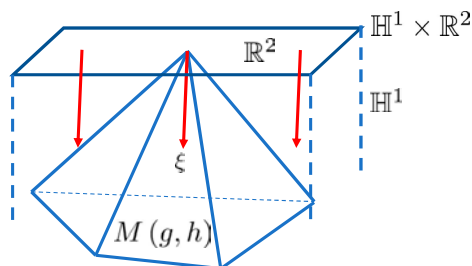
$$\phi(M(g, h) \cap U) = \begin{cases} \mathbb{R}^{n-r} \cap \phi(U) & q = 0 \\ \mathbb{H} \times \mathbb{R}^{n-r-1} \cap \phi(U) & q > 0 \end{cases}$$

が成り立つ.

J. Guddat, H. TH. Jongen and J. Ruckmann, J. Austral. Math. Soc. Ser. B 28 (1986), 36-56. の Theorem A.

GJRのTheorem Aの証明のアイデア

GJR の定理の証明のアイデア



MF ベクトルを点 \bar{x} の周りに定数ベクトル場として拡張して, MF ベクトル場に沿って, $\mathbb{H}^1 \times \mathbb{R}^{n-r-1}$ を $M(g, h)$ に連続的に変形する.

実行可能解の形状の安定性

定義 $(g, h) \in C^2(\mathbb{R}^n, \mathbb{R}^{q+r})$ とする. $M(g, h)$ が安定であるとは (g, h) の $C^2(\mathbb{R}^n, \mathbb{R}^{q+r})$ での C_S^1 近傍 \mathcal{O} で, すべての $(g', h') \in \mathcal{O}$ に対して, $M(g', h')$ が $M(g, h)$ と位相同型となるものが存在することをいう.

定理 (Guddat, Jongen, Rueckmann) $M(g, h)$ はコンパクトであるとする. そのとき $M(g, h)$ が安定であることと $M(g, h)$ の各点で MFCQ が成り立つことが同値となる.

J. Guddat, H. TH. Jongen and J. Rueckmann, J. Austral. Math. Soc. Ser. B 28 (1986), 36-56. の Theorem B.

GJRのTheorem Bの意味するところ

定理 (Guddat, Jongen, Rueckmann) $M(g, h)$ はコンパクトであるとする. そのとき $M(g, h)$ が安定であることと $M(g, h)$ の各点で MFCQ が成り立つことが同値となる.

⇒ 実行可能解集合の位相的形狀 (連結成分の数、穴の数等) に変化がおこるためには MFCQ が破れている必要がある。

関連する分類の研究 (特異点)

- E. A. da Silva and L. A. Favaro. bi-K-equivalence and local R-algebras (Portuguese). Rev. Mat. Estatist., 1:15, 1983.
- J. Montaldi, On contact between submanifolds, Michigan Math. J. 33(2): 195-199, 1986.
- A. Dimca. Function germs defined on isolated hypersurface singularities. Compositio Mathematica, 53:245, 1984.
- D. Siersma. The singularities of C^∞ -functions of right-codimension smaller or equal than eight. Mathematics, 31, 1972.
- D. Siersma. Singularities of functions on boundaries, corners, etc. The Quarterly Journal of Mathematics, 32, 119-127, 1981.

関連する分類の研究 (最適化)

- H. Th. Jongen, P. Jonker, and F. Twilt, One-Parameter Families of Optimization Problems: Equality Constraints, *Journal of Optimization Theory and Applications*, 48, 141-160, 1986.
- T. Matsumoto, S. Shindoh, and R. Hirabayashi. 1-determinacy of feasible sets. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 29(2):339-346, 1991.
- H. Th. Jongen, P. Jonker and F. Twilt, *Nonlinear Optimization in Finite Dimensions, Morse Theory, Chebyshev Approximation, Transversality, Flows, Parametric Aspects*, Springer.
- 単目的最適化の文脈では Parametric Optimization の文脈で, 1, 2 パラメータで一般的におこる実行可能解集合の分岐の研究が盛んに行われていたが, 標準型まで計算し, 余次元で整理している論文はほとんどないようだ.

State-of-the-art Multi-objective Optimization with the SAN (Subpopulation Algorithm based on Novelty)

Danilo Vasconcellos VARGAS

Faculty of Information Science and Electrical Engineering, Kyushu University, Japan;
 Department of Electrical Engineering and Information Systems, School of
 Engineering, The University of Tokyo, Japan

Subpopulation Algorithm based on Novelty (SAN) [1] is arguably the current state of the art in multi-objective optimization. The reason for such a good result lies on using a novelty subpopulation to combine as well as keep track of previous solutions. In this manner, it is possible to each step further expand the search in yet new directions.

REFERENCES

- [1] Y. Jiang and D. V. Vargas, “Preliminary Results for Subpopulation Algorithm Based on Novelty (SAN) Compared with the State of the Art,” *2021 5th IEEE International Conference on Cybernetics (CYBCONF)*, 2021, pp. 67–72.



LABORATORY OF INTELLIGENT SYSTEMS

Assoc. Prof. @ Kyushu University
 Visiting Researcher @ the University of Tokyo
 Researcher @ Mercari
 Lab Leader Danilo Vasconcellos Vargas

2003年～2009年

- 工学部の倍率：～6%
- 学部二年生で論文執筆と採択（機械学習について）。
- ロボカップサークルの設立。

2007年～2008年

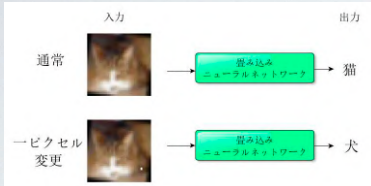
Ulm大学で脳科学、強化学習の勉強。
 NOKIAで仕事（コンピュータビジョン）

2012年～

- 九州大学で准教授（博士取得）
- 東京大学で客員研究員
- IEEE Excellent Student Award獲得
- メルカリとの共同研究

学歴、職歴ハイライト

ロバスト性



我々の研究の発見でした

人工知能の問題点

ロバスト性

通常 → 読み込み (ニューラルネットワーク) → 猫

一ピクセル変更 → 読み込み (ニューラルネットワーク) → 犬

適応性

対象問題 → 読み込み (ニューラルネットワーク) → 玩具車

どのモデル・構造?
ハイパーパラメータの設定?

我々の研究の発見でした

人工知能の問題点

SAN (ノベルティに基づくサブポピュレーションアルゴリズム)による多目的最適化の最先端

絶滅アルゴリズム?

Equilibrium and Extinction in Nature.

diversity

model time (kyr)

Origning extinction (mass extinction)

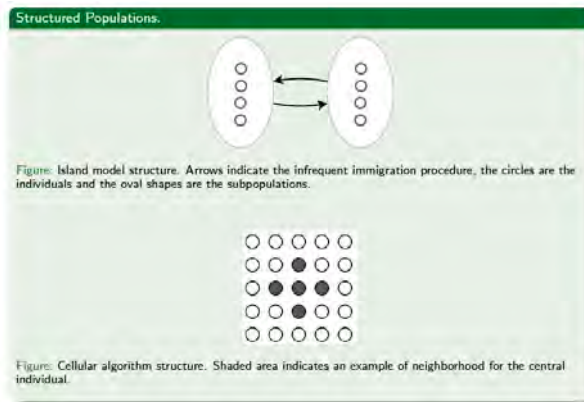
equilibrium (20% area loss after extinction)

- Single-Objective Optimization wants to find the best solution.
- Multi-Objective Optimization wants to find the Pareto front (optimum trade-off of solutions).

OUTLINE

- ① General Subpopulation Framework (GSF) formulation;
- ② Design a GSF algorithm and its state of art solutions;
- ③ A theory about the nature of optimization forces and an empirical evaluation.

STRUCTURED POPULATIONS



GENERAL SUBPOPULATION FRAMEWORK (GSF)

GSF - General Subpopulation Framework

Suppose we have s subpopulations, then \mathcal{P} is the set of subpopulations $\mathcal{P} = \{P_1, \dots, P_s\}$ and \mathcal{A} is the set of panmictic algorithms $\mathcal{A} = \{A_1, \dots, A_s\}$ where a subpopulation P_i is constructed by an algorithm (strategy) A_i . Therefore, the GSF is defined as a 4-tuple $\langle \mathcal{P}, \mathcal{A}, \mathcal{S}, \mathcal{IM} \rangle$, where \mathcal{S} and \mathcal{IM} were previously defined as respectively the vector of subpopulation sizes and the set of interaction probability matrices.

\mathcal{IM} - Subpopulation Interaction Probability Matrix Set

The subpopulation interaction probability matrix set \mathcal{IM} is a set of matrixes of the form:

$$\mathcal{IM} = \{IM_1, IM_2, \dots, IM_m\}, \quad (1)$$

where m is the number of types of interactions used in an optimization algorithm. And each IM_i corresponds to the following matrix:

$$IM_i = \begin{pmatrix} p_{i,1,1} & p_{i,1,2} & \dots & p_{i,1,s} \\ p_{i,2,1} & p_{i,2,2} & \dots & p_{i,2,s} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{i,s,1} & p_{i,s,2} & \dots & p_{i,s,s} \end{pmatrix}, \quad (2)$$

EXAMPLES OF GSF

Island-Based Models

$$IM_1 = \begin{pmatrix} 0 & p_{i,1,2} & \cdots & p_{i,1,s} \\ p_{i,2,1} & 0 & \cdots & p_{i,2,s} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{i,s,1} & p_{i,s,2} & \cdots & 0. \end{pmatrix} \quad (3)$$

Cellular Algorithms

$$IM_c = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & 0 & 0 & \frac{1}{4} & 0 & 0 \\ \frac{1}{4} & 0 & \frac{1}{4} & 0 & \frac{1}{4} & 0 & 0 & \frac{1}{4} & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \frac{1}{4} & 0 & 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & 0 \end{pmatrix}. \quad (4)$$

ADVANTAGES

- Any algorithm can be integrated with the GSF framework, even the ones that do not have populations.
- In AMALGAM, the algorithms compete with each other inside a population. Therefore much of the diversity is lost (the forces deteriorate, to be explained later).

Example



SUBPOPULATION ALGORITHM BASED ON NOVELTY

SANまでの道

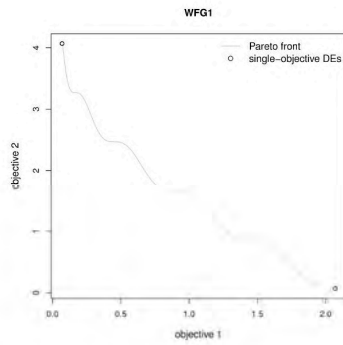


Figure: Solutions of single-objective DEs, each one evolving a different objective. For the test, the WFG1 problem is used with 2 objectives, 20 distance parameters and 4 position parameters. Each DE had a population of 50 individuals, with $CR = 0.6$, $F = 0.5$, and maximum number of generations of 25000.

THE PROBLEM

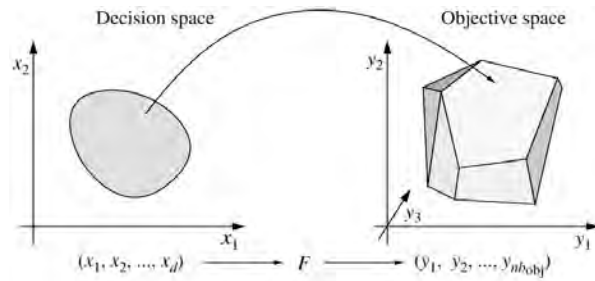


SOLUTION



Trail in Objective Space

IDEA: NOVELTY IN OBJECTIVE SPACE



SOLUTION

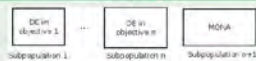
Novelty Search

$$p(x) = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \text{dist}(x, \mu_i), \quad (5)$$

- if more than n_a individuals entered the archive, multiply n_{min} by n_{inc} ;
- if n_r individuals did not enter in the archive, multiply n_{min} by n_{dec} ;

SAN

Subpopulation Algorithm based on Novelty (SAN)



MOEA Subpopulation (Novelty based population)

- 1 Initialize population with random samples uniformly distributed over the search space
- 2 Repeat for each individual in the population until a criterion of convergence is met
 - 1 Apply the same mutation and crossover operators as used by DE
 - 2 Calculate the novelty metric
 - 3 Verify if its novelty metric is above the n_{min} threshold, if it is above insert it on the archive (unlimited in size) and update n_{min}
 - 4 Create a new population by sampling uniformly with replacement from the archive
- 3 Return the archive's non-dominated solutions as the solution set

DE SUBPOPULATION

Differential Evolution Subpopulation

- 1 Initialize population with random samples uniformly distributed over the search space
- 2 Repeat for each individual until a criterion of convergence is met
 - 1 Mutation
 - 2 Crossover
 - 3 Selection
- 3 Return solution

RESULTS FOR TWO OBJECTIVES

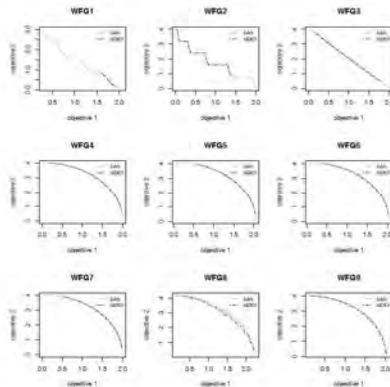


Figure: 50% attainment surfaces for the WFG Toolkit problems (minimization problems). Calculated for

RESULTS: FIVE OBJECTIVES

Table: P-values of comparison between SAN and GDE3 algorithms in many-objective problems with Mann-Whitney significance test using ϵ and hypervolume indicators. Results are marked in bold when the null hypothesis is rejected with a significance level of $\alpha = 0.05$. The alternative hypothesis is that the algorithm in the row is statistically better (smaller quality indicator) than the algorithm in the column.

Algorithm	Problem	SAN		GDE3	
		ϵ	hypervolume	ϵ	hypervolume
SAN	WFG1			$1.0e-16$	$8.4e-18$
	WFG2			$4.7e-6$	$1.6e-15$
	WFG3			$1.9e-12$	$8.4e-18$
	WFG4			$8.4e-18$	$8.4e-18$
	WFG5			$2.9e-13$	$3.0e-7$
	WFG6			$8.4e-18$	$8.4e-18$
	WFG7			$8.4e-18$	$8.4e-18$
	WFG8			$3.3e-17$	0.99
	WFG9			$8.4e-18$	$8.4e-18$
GDE3	WFG1	1	1		
	WFG2	0.99	0.99		
	WFG3	0.99	1		
	WFG4	1	1		
	WFG5	1	1		
	WFG6	1	1		
	WFG7	1	1		
	WFG8	1	0.006		
	WFG9	1	1		

Very simple algorithm which surpassed the state-of-the-art !

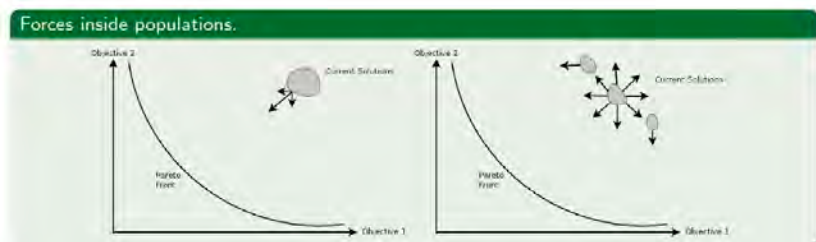
GSF

General Subpopulation Framework's features:

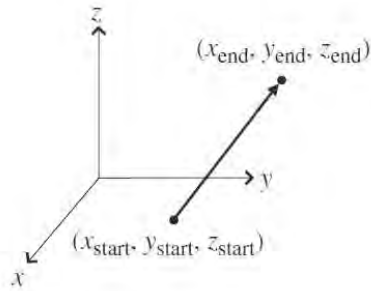
- Integration Capability;
- General Formulation;
- State of Art Solutions.

WHY SUCH AMAZING RESULTS?

HYPOTHESIS:
THE CONFLICT INSIDE POPULATIONS



EXPERIMENT: OBJECTIVE FORCES



Calculating Forces in Objective Space

EMPIRICAL EVALUATION OF FORCES



Figure: Accumulative angles of the forces measured for algorithms GDE3 (left column) and SAN (right column). The forces are measured by calculating the vector from the parent to the offspring in objective space. The scale is linear and the unfeasible solutions as well as forces with zero modulus were eliminated from the graph.

ZERO MODULUS & UNFEASIBLE MOVEMENTS

Table: Percentage of solutions which are either unfeasible or result in zero modulus forces. Both types of solutions are excluded from the calculation of forces and therefore not present in Figure 5.

Problem	Unfeasible Solutions		Zero Modulus Forces	
	SAN	GDE3	SAN	GDE3
WFG1	15.64%	9.76%	13.38%	50.45%
WFG4	15.78%	3.81%	11.27%	55.47%
WFG5	27.44%	13.85%	8.11%	44.54%
WFG8	24.42%	11.06%	0.06%	0.34%

- Unfeasible Solutions - They are excluded from the calculation, since unfeasible solutions can not be mapped to a point in objective space.
- Forces with Zero Modulus - In the case where the resulting child possess the same point in objective space as its main parent, the resulting force would have a zero modulus. In fact, this means that no force was applied at all and therefore it is reasonable to exclude it.

PUBLISHED IN 2015, EVOLUTIONARY COMPUTATION MIT PRESS

D.V.Vargas, J. Murata, H. Takano and A. C. B. Delbem, "General Subpopulation Framework and Taming the Conflict Inside Populations," in *Evolutionary Computation*, vol. 23, no. 1, pp. 1-36, March 2015, doi: 10.1162/EVCO_a_00118.

古くない???

STILL STATE-OF-THE-ART

Problems	M	SAN	NSGA-III	MOEA/D
WFG1	2	0.6896	0.6427	0.6868
		0.6779	0.5286	0.6829
	3	0.9418	0.9475	0.9314
		0.9020	0.9015	0.9182
	5	0.8588	0.8271	0.9971
		0.9736	0.9989	0.9277
	10	0.9689	0.9341	0.8702
		0.9657	0.8971	0.8053
	2	0.9989	0.9977	0.6372
		0.9978	0.9410	0.5042
3	0.9972	0.8655	0.4355	
	0.6323	0.6154	0.6083	
2	0.6258	0.6034	0.5507	
	0.6106	0.5878	0.5240	
3	0.9405	0.9316	0.8723	
	0.9392	0.9219	0.8143	
		0.9368	0.7320	

Problems	M	SAN	NSGA-III	MOEA/D
WFG3	5	0.9972	0.9904	0.8898
		0.9966	0.9837	0.7615
	10	0.9959	0.9760	0.6642
		0.9999	0.9898	0.7482
	2	0.9995	0.9739	0.6865
		0.9988	0.9577	0.6159
	3	0.5836	0.5760	0.5514
		0.5832	0.5627	0.5242
	5	0.6489	0.6242	0.6008
		0.6459	0.6160	0.5830
10	0.6421	0.6097	0.5795	
	0.6888	0.6315	0.5748	
2	0.6850	0.6230	0.5372	
	0.6820	0.6108	0.4807	
3	0.7252	0.6539	0.2818	
	0.7177	0.6133	0.2122	
5	0.7123	0.5566	0.1723	
	0.3357	0.3451	0.3460	
2	0.3299	0.3450	0.3435	
	0.3260	0.3449	0.3422	
3	0.5510	0.5617	0.5500	
	0.5428	0.5616	0.5476	
5	0.5370	0.5613	0.5426	
	0.7766	0.8023	0.7316	
10	0.7717	0.8000	0.7058	
	0.7677	0.7978	0.6572	
2	0.9002	0.9529	0.4040	
	0.8749	0.9440	0.3468	
3	0.8566	0.9188	0.3032	
	0.8336	0.9111	0.3050	
2	0.9129	0.9111	0.3046	
	0.9126	0.9111	0.3019	
3	0.5400	0.5205	0.5124	
	0.5355	0.5205	0.5061	
5	0.7883	0.7555	0.6943	
	0.7593	0.7551	0.6739	
10	0.8439	0.8973	0.6469	
	0.7362	0.7547	0.6479	
2	0.8175	0.8962	0.3660	
	0.8384	0.3236	0.3269	
3	0.3248	0.3188	0.3164	
	0.3156	0.3083	0.3097	
5	0.5532	0.5345	0.5289	
	0.5499	0.5288	0.5204	
10	0.5455	0.5220	0.5106	
	0.7871	0.7647	0.6637	
2	0.7677	0.7587	0.6241	
	0.7521	0.7490	0.6059	
3	0.8387	0.9046	0.2944	
	0.8149	0.8838	0.2423	
5	0.7625	0.8620	0.1724	
	0.3478	0.3450	0.3430	
2	0.3477	0.3450	0.3398	
	0.3477	0.3449	0.3310	
3	0.5841	0.5610	0.5373	
	0.5835	0.5606	0.5277	
5	0.5829	0.5602	0.5149	
	0.8155	0.8027	0.6829	
10	0.7975	0.7966	0.6375	
	0.9212	0.9549	0.3301	
2	0.9032	0.9496	0.3080	
	0.8680	0.9456	0.2242	

WHY PEOPLE ARE USING NSGAIII AND MOEA/D?

WHY ARE THEY NOT COMPARING WITH SAN?

なぜだろう？

マーケティング不足？

Lab: <http://lis.inf.kyushu-u.ac.jp/>



FEEL FREE TO ASK

Twitter: @onNewHorizons

Application of singularity theory to strongly convex multiobjective optimization problems

Shunsuke ICHIKI

Department of Mathematical and Computing Science, School of Computing,
Tokyo Institute of Technology, Japan

In the industrial world, it is important to optimize several objectives such as cost, quality, safety and environmental impact. A multiobjective optimization problem is an optimization problem for such several objective functions. In this talk, first of all I introduce a topological property of the set of optimal solutions of a strongly convex multiobjective optimization problem. After that, as a main topic of this talk, I give an application of singularity theory to the problem.

REFERENCES

- [1] Naoki Hamada, Kenta Hayano, Shunsuke Ichiki, Yutaro Kabata, Hiroshi Teramoto, Topology of Pareto sets of strongly convex problems, *SIAM Journal on Optimization*, 30, no. 3, 2659–2686, 2020.
- [2] Naoki Hamada, Shunsuke Ichiki, Simpliciality of strongly convex problems, *Journal of the Mathematical Society of Japan*, 73, no. 3, 965–982, 2021.
- [3] Shunsuke Ichiki, An improvement of transversality results and its applications, submitted (2021), available from [arXiv:2101.00854](https://arxiv.org/abs/2101.00854).

強凸多目的最適化問題への特異点論の応用
(Application of singularity theory to strongly convex multiobjective
optimization problems)

一木俊助 (Shunsuke Ichiki)

Tokyo Institute of Technology



- X : a set
- $f = (f_1, \dots, f_\ell) : X \rightarrow \mathbb{R}^\ell$: a mapping
- $L = \{1, \dots, \ell\}$
- $x \in X$: a **Pareto solution** of f
 $\stackrel{\text{def}}{\Leftrightarrow}$ for any $x' \in X$, either (a) or (b) holds.
 - (a) $\forall i \in L, f_i(x) = f_i(x')$.
 - (b) $\exists i \in L$ s. t. $f_i(x) < f_i(x')$.
- $X^*(f) = \{x \in X \mid x : \text{a Pareto solution of } f\}$: the **Pareto set of } f**
- The set $f(X^*(f))$ is called the **Pareto front** of f .
- The problem of determining $X^*(f)$ is called the **problem of minimizing } f .**



- $f = (f_1, \dots, f_\ell) : X \rightarrow \mathbb{R}^\ell, L = \{1, \dots, \ell\}$
For a non-empty subset $I = \{i_1, \dots, i_k\}$ of L ($i_1 < \dots < i_k$),
set

$$f_I = (f_{i_1}, \dots, f_{i_k}).$$

The problem of determining $X^*(f_I)$ is called a **subproblem** of
the problem of minimizing f .

- $$\Delta^{\ell-1} = \left\{ (w_1, \dots, w_\ell) \in \mathbb{R}^\ell \mid \sum_{i=1}^{\ell} w_i = 1, w_i \geq 0 \right\}.$$
- We also denote a face of $\Delta^{\ell-1}$ for a non-empty subset I of L
by

$$\Delta_I = \{ (w_1, \dots, w_\ell) \in \Delta^{\ell-1} \mid w_i = 0 \ (i \notin I) \}.$$

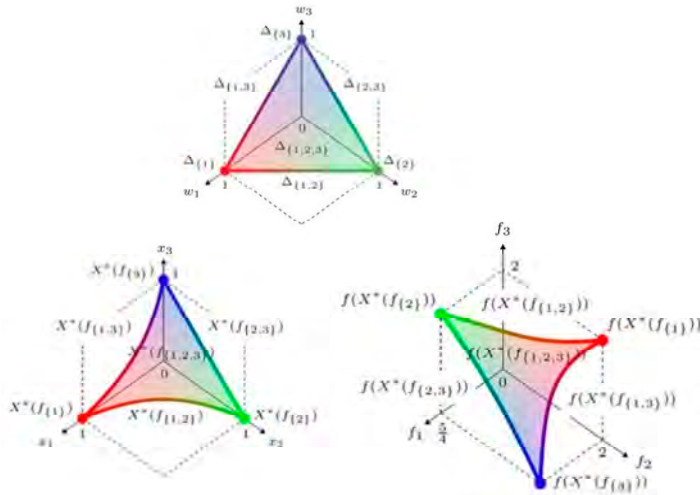


Definition 1 (Simplicial problem, Weakly simplicial problem)

$f : X \rightarrow \mathbb{R}^\ell$ ($X \subset \mathbb{R}^m$), $L = \{1, \dots, \ell\}$

- The problem of minimizing f is **simplicial**
 $\stackrel{\text{def}}{\Leftrightarrow} \exists \Phi : \Delta^{\ell-1} \rightarrow X^*(f)$
 s. t. $\forall I \subset L$ ($I \neq \emptyset$), both
 $\Phi|_{\Delta_I} : \Delta_I \rightarrow X^*(f_I)$ and
 $f|_{X^*(f_I)} : X^*(f_I) \rightarrow f(X^*(f_I))$ are
 homeomorphisms.
- The problem of minimizing f is **weakly simplicial**
 $\stackrel{\text{def}}{\Leftrightarrow} \exists \phi : \Delta^{\ell-1} \rightarrow X^*(f) : \text{continuous}$
 s. t. $\forall I \subset L$ ($I \neq \emptyset$), $\phi(\Delta_I) = X^*(f_I)$.

◀ ▶ ↻ 🔍



Definition 2

X : a convex set of \mathbb{R}^m

- 1 $f : X \rightarrow \mathbb{R} : \text{a strongly convex function}$
 $\stackrel{\text{def}}{\Leftrightarrow} \exists \alpha > 0$ s. t. $\forall x, y \in X, \forall t \in [0, 1]$,

$$f(tx + (1-t)y) \leq tf(x) + (1-t)f(y) - \frac{1}{2}\alpha t(1-t)\|x - y\|^2,$$

where $\|z\|$ is the Euclidean norm of $z \in \mathbb{R}^m$.

(α : a **convexity parameter** of f .)

- 2 $f = (f_1, \dots, f_\ell) : X \rightarrow \mathbb{R}^\ell : \text{a strongly convex mapping}$
 $\stackrel{\text{def}}{\Leftrightarrow} f_i$ is strongly convex for any $i \in L$.

◀ ▶ ↻ 🔍

Theorem 3 (Hamada, I)

- $f = (f_1, \dots, f_\ell) : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^\ell$: a strongly convex C^1 mapping

Then, the problem of minimizing f is always *weakly simplicial*.

If $\text{rank } df_x = \ell - 1$ ($\forall x \in X^*(f)$), the problem of minimizing f is *simplicial*.

Remark 1

For the proof, we use the mapping $x^* : \Delta^{\ell-1} \rightarrow X^*(f)$ defined by

$$x^*(w) = \arg \min_{x \in \mathbb{R}^m} \left(\sum_{i=1}^{\ell} w_i f_i(x) \right).$$



Remark 2

- $f = (f_1, f_2) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^2$ ($f_1(x) = f_2(x) = x^2$)

Then, we have the following.

- f : a strongly convex mapping of class C^∞
- Since $\text{rank } df_0 = 0$ and $X^*(f) = \{0\}$, f does **not** satisfy the assumption of the theorem.

Since $X^*(f) = \{0\}$, f is **not** simplicial.



Lemma 4 (I)

- $f : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^\ell$ ($m \geq \ell$) : a C^2 mapping.
- $\Sigma = \{ \pi \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^m, \mathbb{R}^\ell) \mid \exists x \in \mathbb{R}^m \text{ s. t. } \text{rank } d(f + \pi)_x \leq \ell - 2 \}$

If $m - 2\ell + 4 > 0$, then

$$\begin{cases} \Sigma = \emptyset & \text{if } \ell = 1, \\ \dim_H \Sigma \leq m\ell - (m - 2\ell + 4) & \text{if } \ell \geq 2. \end{cases}$$



Lemma 5

- $f : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^\ell$: a strongly convex mapping

Then, for any $\pi \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^m, \mathbb{R}^\ell)$, the mapping $f + \pi : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^\ell$ is also strongly convex.



Theorem 6 (I)

- $f : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^\ell$ ($m \geq \ell$) : a strongly convex C^2 mapping.
- Let Σ be the set defined by

$$\{ \pi \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^m, \mathbb{R}^\ell) \mid \text{The problem of minimizing } f + \pi \text{ is not simplicial.} \}$$

If $m - 2\ell + 4 > 0$, then

$$\begin{cases} \Sigma = \emptyset & \text{if } \ell = 1, \\ \dim_H \Sigma \leq m\ell - (m - 2\ell + 4) & \text{if } \ell \geq 2. \end{cases}$$



Example 7

- Let $f = (f_1, f_2) : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ be the strongly convex mapping defined by $f_i(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2$ for $i = 1, 2$.
- Let Σ be the set defined by

$$\{ \pi \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^2, \mathbb{R}^2) \mid \text{The problem of minimizing } f + \pi \text{ is not simplicial.} \}$$

Then, we obtain $\dim_H \Sigma \leq 2$ by the previous theorem. Indeed, by the direct calculation, we obtain $\Sigma = B$, where

$$B = \{ \pi = (\pi_1, \pi_2) \in \mathcal{L}(\mathbb{R}^2, \mathbb{R}^2) \mid \pi_1 = \pi_2 \}.$$

Since $\dim_H B = 2$, we cannot improve the evaluation " ≤ 2 ".



All unconstrained strongly convex problems are weakly simplicial

Yusuke MIZOTA

Faculty of Science and Engineering, Kyushu Sangyo University, Japan

(joint work with Naoki Hamada (KLab Inc.) and Shunsuke Ichiki (Tokyo Institute of Technology))

A multi-objective optimization problem is C^0 weakly simplicial if there exists a continuous surjection from a simplex onto the Pareto set such that the image of each subsimplex is the Pareto set of a subproblem. In this talk, we show that all unconstrained strongly convex problems are C^0 weakly simplicial. As an application of this theorem, we reformulate the elastic net as a non-differentiable multi-objective strongly convex problem and approximate its Pareto set and Pareto front by using a Bézier simplex fitting method, which accelerates hyper-parameter search.

REFERENCES

- [1] Yusuke Mizota, Naoki Hamada, and Shunsuke Ichiki. All unconstrained strongly convex problems are weakly simplicial, *preprint*, 2021. <https://arxiv.org/abs/2106.12704>.

All unconstrained strongly convex problems are weakly simplicial

Yusuke Mizota

Kyushu Sangyo University

This is a joint work with
Naoki Hamada (KLab Inc.) and
Shunsuke Ichiki (Tokyo Institute of Technology).

(Paper)

Y. Mizota, N. Hamada, and S. Ichiki,

All unconstrained strongly convex problems are weakly simplicial,
arXiv:2106.12704

1 Introduction

Our motivation of this work is an application for
non-differentiable multi-objective optimization problem.
(elastic net)

$M = \{1, \dots, m\}$

X : an arbitrary set

$f = (f_1, \dots, f_m) : X \rightarrow \mathbb{R}^m$: a mapping

$x \in X$ is a Pareto solution of f

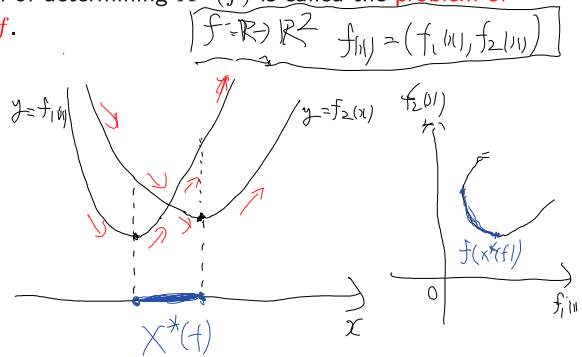
$\stackrel{\text{def}}{\iff}$ There does not exist another point $y \in X$ such that
 $f_i(y) \leq f_i(x)$ for all $i \in M$ and $f_j(y) < f_j(x)$ for at least one
index $j \in M$.

$X^*(f) = \{x \in X \mid x \text{ is a Pareto solution of } f\}$

$X^*(f)$ is called **Pareto set** of f .

$f(X^*(f))$ is called the **Pareto front** of f .

The problem of determining $X^*(f)$ is called the **problem of minimizing f** .



It is known that there is a problem class where one can efficiently compute an approximation of the entire Pareto set and front. It is a C^0 **weakly simplicial** problem.

$$f = (f_1, \dots, f_m) : X \rightarrow \mathbb{R}^m$$

$I = \{i_1, \dots, i_k\}$ ($i_1 < \dots < i_k$): a subset of M

$$f_I = (f_{i_1}, \dots, f_{i_k})$$

The problem of determining $X^*(f_I)$ is called a **subproblem** of the problem of minimizing f .

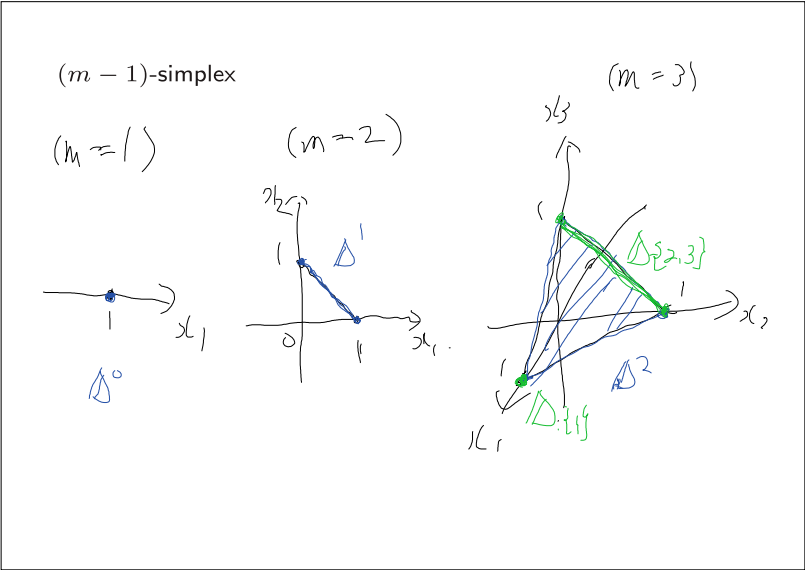
$$\Delta^{m-1} = \left\{ (w_1, \dots, w_m) \in \mathbb{R}^m \mid \sum_{i=1}^m w_i = 1, w_i \geq 0 \right\}.$$

Δ^{m-1} : a $(m-1)$ -simplex

$I \subset M$: non empty

$$\Delta_I = \{ (w_1, \dots, w_m) \in \Delta^{m-1} \mid w_i = 0 \ (i \notin I) \}.$$

Δ_I : a face of Δ^{m-1}



We give the definition of weakly simplicial problems.

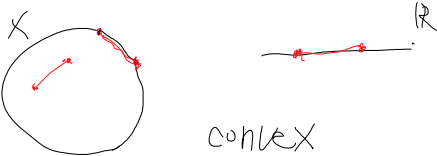
Definition 1. Let $f = (f_1, \dots, f_m) : X \rightarrow \mathbb{R}^m$ be a mapping, where X is a subset of \mathbb{R}^n . The problem of minimizing f is **weakly simplicial** if there exists a C^r mapping $\phi : \Delta^{m-1} \rightarrow X^*(f)$ such that $\phi(\Delta_I) = X^*(f_I)$ for any non-empty subset I of M , where $0 \leq r \leq \infty$.



What's a natural class of mapping f which the problem of minimizing is C^0 weakly simplicial?

One of answers is a **strongly convex mapping**.

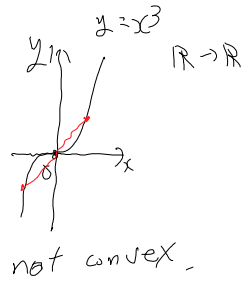
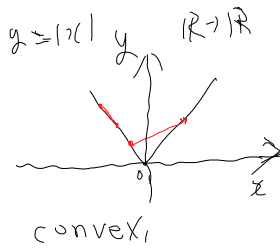
A subset X of \mathbb{R}^n is **convex** if $tx + (1-t)y \in X$ for all $x, y \in X$ and all $t \in [0, 1]$.



Let X be a convex set in \mathbb{R}^n .

$f : X \rightarrow \mathbb{R}$ is **convex** $\stackrel{\text{def}}{\iff} \forall x, y \in X, \forall t \in [0, 1]$

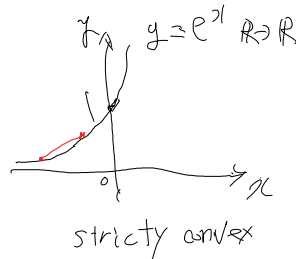
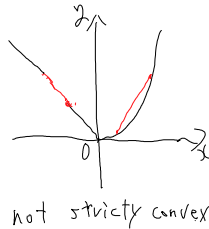
$$f(tx + (1-t)y) \leq tf(x) + (1-t)f(y)$$



$f : X \rightarrow \mathbb{R}$ is **strictly convex** $\stackrel{\text{def}}{\iff} \forall x, y \in X (x \neq y), \forall t \in (0, 1)$

$$f(tx + (1-t)y) < tf(x) + (1-t)f(y)$$

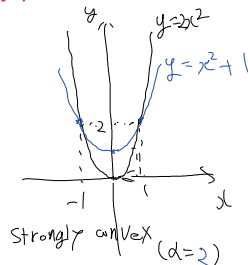
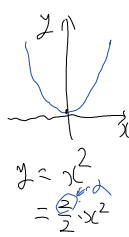
$y = \begin{cases} -x & (x \leq 0) \\ x^2 & (x > 0) \end{cases} \quad \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$



$f : X \rightarrow \mathbb{R}$ is **strongly convex** $\stackrel{\text{def}}{\iff} \exists \alpha > 0, \forall x, y \in X, \forall t \in [0, 1]$

$$f(tx + (1-t)y) \leq tf(x) + (1-t)f(y) - \frac{1}{2}\alpha t(1-t)\|x-y\|^2$$

where $\|z\|$ is the Euclidean norm of $z \in \mathbb{R}^n$. The constant α is called a **convexity parameter** of the function f .



$y = x^4$
not strongly convex

A function $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ is strongly convex with a convexity parameter $\alpha > 0$ if and only if the function $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ defined by $g(x) = f(x) - \frac{\alpha}{2} \|x\|^2$ is convex.

A mapping $f = (f_1, \dots, f_m) : X \rightarrow \mathbb{R}^m$ is **strongly convex** if f_i is strongly convex for any $i \in M$. The problem of minimizing a strongly convex C^r mapping is called the **strongly convex C^r problem**.

Previous work

[HHIKT2020]

N. Hamada, K. Hayano, S. Ichiki, Y. Kabata, and H. Teramoto, Topology of Pareto sets of strongly convex problems, *SIAM J. Optim.* **30** (2020), no. 3, 2659–2686.

[HI]

N. Hamada and S. Ichiki, Simpliciality of strongly convex problems, to appear in *J. Math. Soc. Japan.*, arXiv:1912.09328

Theorem 1 (HHIKT2020, HI). *Let $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ be a strongly convex C^r mapping, where $1 \leq r \leq \infty$. Then, the problem of minimizing f is C^{r-1} weakly simplicial.*

Remark 1. Moreover, it is shown that if the rank of the differential df_x is equal to $m - 1$ for any $x \in X^*(f)$, then the problem of minimizing f is C^{r-1} **simplicial**.

	strongly convex	weakly simplicial
[HHIKT2020]	C^∞ ⋮ C^r ⋮ C^2	C^∞ ⋮ C^{r-1} ⋮ C^1
[HI]	C^1	C^0
Now	C^0	C^0

The main theorem in this talk is the following.

Theorem 2. Let $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ be a strongly convex mapping. Then, the problem of minimizing f is C^0 weakly simplicial.

In the argument of [HI], results for a C^1 strongly convex function proved in [Nesterov2004] are essentially used. But, by preparing some lemmas on strongly convex functions **without differentiability**, Theorem 2 can be proved by the same argument as [HI].

$$\begin{array}{c}
 \boxed{f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}} \\
 \text{C}^1 \text{ strongly convex with a convex parameter } \alpha \\
 \Downarrow \\
 \forall x, y \in X \quad f(y) + \alpha \langle \nabla f_x, y-x \rangle + \frac{\alpha}{2} \|y-x\|^2 \leq f(y)
 \end{array}$$

Remark 2. Note that (strict) convexity of a mapping does not necessarily imply that the problem is C^0 weakly simplicial. For example, the problem of minimizing $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ defined by $f(x) = e^x$ does not have a Pareto solution (i.e. a minimizer). Thus, it is not C^0 weakly simplicial although f is strictly convex.

2 Preliminaries

Reference

[Nesterov2004]

Y. Nesterov, Introductory Lectures on Convex Optimization: A Basic Course. Kluwer Academic Publishers, 2004.

[Miettinen1999]

K. Miettinen, Nonlinear Multiobjective Optimization, volume 12 of International Series in Operations Research & Management Science. Springer-Verlag, GmbH, 1999.

In this section, we prepare some lemmas for the proof of Theorem 2.

We prepare the following lemma in [Nesterov2004]

Lemma 1. *If a function $f : X \rightarrow \mathbb{R}$ is convex and x_0 is a interior point of X , then f is locally Lipschitz continuous at x_0 .*

Lemma 1 implies the following lemma.

Lemma 2. *If a function $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ is strongly convex, then f is continuous.*

We give the following two lemmas in [Miettinen1999].

Lemma 3. *Let $f = (f_1, \dots, f_m) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ be a mapping and let $(w_1, \dots, w_m) \in \Delta^{m-1}$. If $x \in \mathbb{R}^n$ is the unique minimizer of the function $\sum_{i=1}^m w_i f_i$, then $x \in X^*(f)$.*

A mapping $f = (f_1, \dots, f_m) : X \rightarrow \mathbb{R}^m$ is **convex** if f_i is convex for any $i \in M$.

Lemma 4. *Let $f = (f_1, \dots, f_m) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ be a convex mapping. If $x \in X^*(f)$, then there exists some $(w_1, \dots, w_m) \in \Delta^{m-1}$ such that x is a minimizer of $\sum_{i=1}^m w_i f_i$.*

Now, we prepare the following four lemmas on strongly convex functions **without differentiability**.

Lemma 5. *Let $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ be a strongly convex function. Then, $f^{-1}((-\infty, f(0)])$ is compact, where 0 is the origin of \mathbb{R}^n and $(-\infty, f(0)] = \{y \in \mathbb{R} \mid y \leq f(0)\}$.*

Lemma 6. *A strongly convex function $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ has a unique minimizer.*

Lemma 7. Let $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ be a strongly convex function with a convexity parameter $\alpha > 0$ and x_0 be the unique minimizer of f . Then, we have

$$f(x_0) + \frac{\alpha}{2} \|x - x_0\|^2 \leq f(x)$$

for any $x \in \mathbb{R}^n$.

Lemma 8. Let $f_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ be a strongly convex function with a convexity parameter $\alpha_i > 0$, where $i \in M$. Then, for any $(w_1, \dots, w_m) \in \Delta^{m-1}$, the function $\sum_{i=1}^m w_i f_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ is a strongly convex function with a convexity parameter $\sum_{i=1}^m w_i \alpha_i$.

In order to give the last lemma in this section, which is essentially used in the proof of Theorem 2, we prepare the following three lemmas.

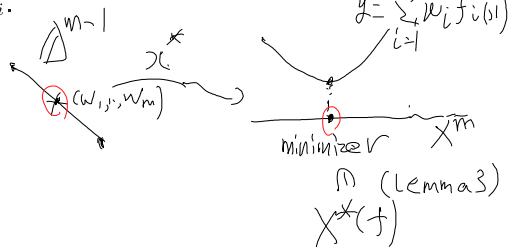
Blue lemmas and propositions are proved by the same argument as [HI] by using red lemmas.

Lemma 9. Let $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ be a strongly convex mapping. Then, $X^*(f)$ is compact. $(C^1 \rightarrow C^0)$

We can define a mapping $x^* : \Delta^{m-1} \rightarrow X^*(f)$ for any strongly convex mapping $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ as follows: $(C^1 \rightarrow C^0)$

$$x^*(w) = \arg \min_{x \in \mathbb{R}^n} \left(\sum_{i=1}^m w_i f_i(x) \right),$$

where $\arg \min_{x \in \mathbb{R}^n} (\sum_{i=1}^m w_i f_i(x))$ is the unique minimizer of $\sum_{i=1}^m w_i f_i$.



$(C^1 \rightarrow C^0)$

Lemma 10. Let $f = (f_1, \dots, f_m) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ be a strongly convex mapping. Let $\alpha_i > 0$ be a convexity parameter of f_i and K_i be the maximal value of $F_i : X^*(f) \times X^*(f) \rightarrow \mathbb{R}$ defined by $F_i(x, y) = |f_i(x) - f_i(y)|$ for any $i \in M$. Then, for any $w = (w_1, \dots, w_m), \tilde{w} = (\tilde{w}_1, \dots, \tilde{w}_m) \in \Delta^{m-1}$, we have that

$$\|x^*(w) - x^*(\tilde{w})\| \leq \sqrt{\frac{K_0}{\alpha_0} \sum_{i=1}^m |w_i - \tilde{w}_i|},$$

where $\alpha_0 = \min \{ \alpha_1, \dots, \alpha_m \}$ and $K_0 = \max \{ K_1, \dots, K_m \}$.

Remark 3. In Lemma 10, the Pareto set $X^*(f)$ is compact by Lemma 9. For any $i \in M$, since f_i is continuous by Lemma 2, the function F_i has the maximal value K_i .

$(C^1 \rightarrow C^0)$

Proposition 1. Let $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ be a strongly convex mapping. Then, the mapping $x^* : \Delta^{m-1} \rightarrow X^*(f)$ is surjective and continuous.

Theorem 2 follows from Proposition 1 as follows:

Let $I = \{ i_1, \dots, i_k \}$ ($i_1 < \dots < i_k$) be an arbitrary non-empty subset of $M = \{ 1, \dots, m \}$. Since $f_I : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^k$ is a strongly convex mapping, $x^*|_{\Delta_I} : \Delta_I \rightarrow X^*(f_I)$ is surjective and continuous by Proposition 1.

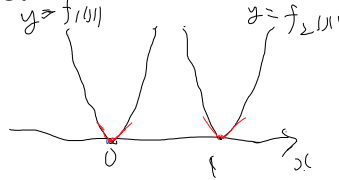
Hence, the problem of minimizing f is C^0 weakly simplicial.

Remark 4. The mapping x^* in Proposition 1 is not necessarily injective even in the case where the minimizers of f_1, \dots, f_m are different as follows. Let $f = (f_1, f_2) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^2$ be the mapping defined by

$$f_1(x) = x^2 + |x|,$$

$$f_2(x) = (x - 1)^2 + |x - 1|.$$

Then, f is strongly convex and non-differentiable.

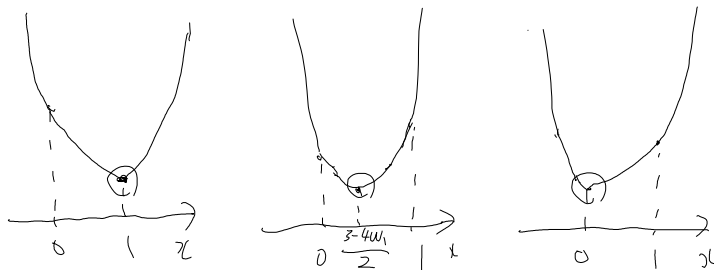


Since the minimizer of f_1 is $x = 0$ and that of f_2 is $x = 1$, these minimizers are different. Let $\varphi : [0, 1] \rightarrow \Delta^1$ be the diffeomorphism defined by $\varphi(w_1) = (w_1, 1 - w_1)$. We can easily obtain the following:

$$x^* \circ \varphi(w_1) = \begin{cases} 1 & \text{if } 0 \leq w_1 < \frac{1}{4}, \\ \frac{3 - 4w_1}{2} & \text{if } \frac{1}{4} \leq w_1 \leq \frac{3}{4}, \\ 0 & \text{if } \frac{3}{4} < w_1 \leq 1. \end{cases}$$

Thus, x^* is not injective.

fig. $(0 \leq w_1 < \frac{1}{4})$ $(\frac{1}{4} \leq w_1 \leq \frac{3}{4})$ $(\frac{3}{4} < w_1 \leq 1)$



3 Application (Linear regression)

We apply the argument of proof of Theorem 2 to the following non-differentiable strongly convex problem:

$$\tilde{f} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^3$$

X : a matrix with m rows and n columns

y : a row vector y of m

$\|\cdot\|$ is the ℓ_2 -norm, $|\cdot|$ is the ℓ_1 -norm, $\varepsilon > 0$ is fixed.

$$\underset{\theta \in \mathbb{R}^n}{\text{minimize}} \tilde{f}(\theta) = (\tilde{f}_1(\theta), \tilde{f}_2(\theta), \tilde{f}_3(\theta))$$

$$\text{where } \tilde{f}_i(\theta) = f_i(\theta) + \varepsilon f_3(\theta) \quad (i = 1, 2, 3).$$

$$f_1(\theta) = \frac{1}{2m} \|X\theta - y\|^2, \quad f_2(\theta) = |\theta|, \quad f_3(\theta) = \frac{1}{2} \|\theta\|^2.$$

Set $h_w(\theta) = w_1 \tilde{f}_1(\theta) + w_2 \tilde{f}_2(\theta) + w_3 \tilde{f}_3(\theta)$.

Then, $\theta^* : \Delta^2 \rightarrow X^*(\tilde{f})$ by

$$\theta^*(w) = \arg \min_{\theta \in \mathbb{R}^n} h_w(\theta).$$

is surjective and **continuous** by Proposition 1.

$$\tilde{f} \circ \theta^* : \Delta^2 \rightarrow \tilde{f}(X^*(\tilde{f}))$$

is also surjective and **continuous**.

We define the Pareto graph of \tilde{f} by

$G^*(\tilde{f}) = \{(\theta, \tilde{f}(\theta)) \in \mathbb{R}^{n+3} \mid \theta \in X^*(\tilde{f})\}$ and the solution mapping by

$$(\theta^*, \tilde{f} \circ \theta^*) : \Delta^2 \rightarrow G^*(\tilde{f}),$$

which is again surjective and **continuous**.

Note that for any $w = (w_1, w_2, w_3) \in \Delta^2 \setminus \Delta_{\{2,3\}}^2$, the point $\theta^*(w)$ is the minimizer of the function $g_{\mu(w), \lambda(w)}$ in elastic-net;

$$g_{\mu, \lambda}(\theta) = \frac{1}{2m} \|X\theta - y\|^2 + \mu(w) |\theta| + \frac{\lambda(w)}{2} \|\theta\|^2$$

where

$$\mu(w) = \frac{w_2}{w_1},$$

$$\lambda(w) = \frac{w_3 + \varepsilon}{w_1},$$

The problem of minimizing $g_{\mu(w), \lambda(w)}(\theta)$ is a generalization of the ordinary least squares (OLS) regression; the lasso regression and the ridge regression. Since $\theta^*(\Delta^2) = X^*(f)$, **calculating $X^*(\tilde{f})$ is useful for the problem of choosing appropriate values for μ and λ .**

3.1 Bézier simplex fitting

[KHSTBS2019]

K. Kobayashi, N. Hamada, A. Sannai, A. Tanaka, K. Bannai, and M. Sugiyama, Bézier simplex fitting: Describing Pareto fronts of simplicial problems with small samples in multi-objective optimization. In Proceedings of the Thirty-Third AAAI Conference on Artificial Intelligence, AAAI-19, pages 2304-2313, 2019.

Let \mathbb{N} be the set of nonnegative integers and

$$\mathbb{N}_d^m = \left\{ (i_1, \dots, i_m) \in \mathbb{N}^m \left| \sum_{k=1}^m i_k = d \right. \right\}.$$

An $(m - 1)$ -dimensional Bézier simplex of degree d in \mathbb{R}^n is a mapping $b : \Delta^{m-1} \rightarrow \mathbb{R}^n$ specified by control points $p_i \in \mathbb{R}^n$ ($i \in \mathbb{N}_d^m$):

$$b(w) = \sum_{i \in \mathbb{N}_d^m} \binom{d}{i} w^i p_i,$$

where $\binom{d}{i} = d! / (i_1! i_2! \cdots i_m!)$ and $w^i = w_1^{i_1} w_2^{i_2} \cdots w_m^{i_m}$.

It is known that **any continuous mapping from a simplex to a Euclidean space can be approximated by a Bézier simplex**:

Theorem 3 (KHSTBS2019). *Let $\phi : \Delta^{m-1} \rightarrow \mathbb{R}^n$ be a continuous mapping. There exists an infinite sequence of Bézier simplices $b^i : \Delta^{m-1} \rightarrow \mathbb{R}^n$ such that*

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \sup_{w \in \Delta^{m-1}} \left\| \phi(w) - b^i(w) \right\| = 0.$$

[TSKH2020]

A. Tanaka, A. Sannai, K. Kobayashi and N. Hamada, Asymptotic risk of Bézier simplex fitting. In Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence, volume 34, pages 2416-2424, Apr. 2020.

In [TSKH2020], an algorithm for adjusting control points so that a Bézier simplex of fixed degree fits a sample of the graph of a continuous mapping $\phi : \Delta^{m-1} \rightarrow \mathbb{R}^n$ was proposed.

Based on the above theorem and algorithm, one can build a Bézier simplex approximation of the solution mapping $(\theta^*, \tilde{f} \circ \theta^*) : \Delta^2 \rightarrow \mathbb{R}^{n+3}$ by using a sample of it.

We see that we can reduce a great deal of computational effort by experiment results in the paper!

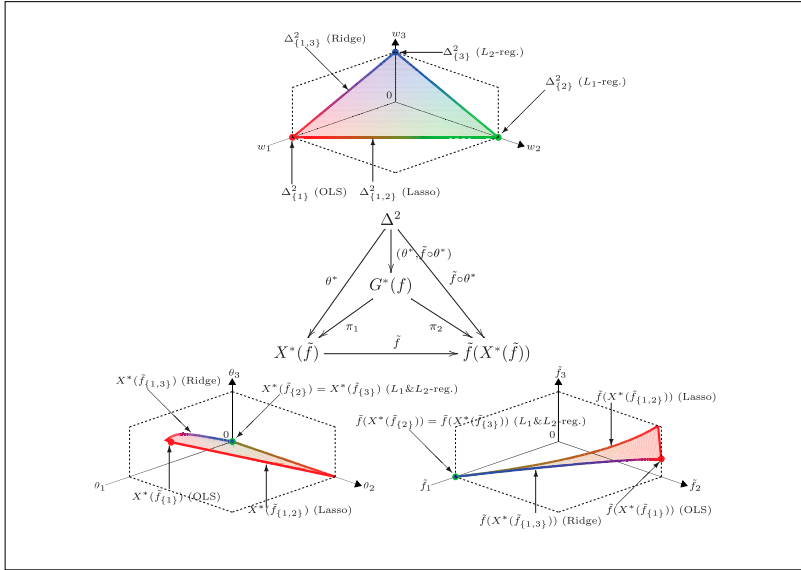


TABLE 1. Datasets

Dataset	Attributes		
	Predictors	Responses	Instances
Blog Feedback ^a [2]	280	1	60,021
Fertility ^b [6]	9	1	100
Forest Fires ^c [4]	12	1	517
QSAR Fish Toxicity ^d [3]	6	1	908
Residential Building ^e [18]	103	2	372
Slice Localization ^f [7]	385	2	53,500
Wine ^g [1]	11	1	178
Yacht Hydrodynamics ^h [15]	6	1	308

^a <https://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/BlogFeedback>

^b <https://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/Fertility>

^c <https://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/Forest+ Fires>

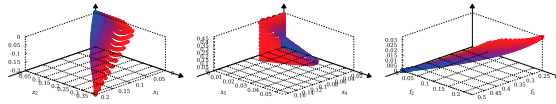
^d <https://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/QSAR+fish+toxicity>

^e <https://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/Residential+Building+Data+Set>

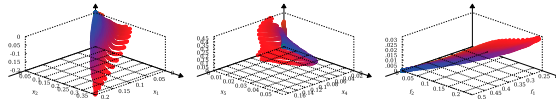
^f <https://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/Relative+location+of+CT+slices+on+axial+axis>

^g <https://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/wine>

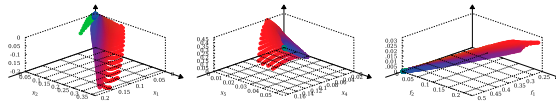
^h <https://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/Yacht+Hydrodynamics>



(A) Ground truth (5151 elastic net models trained with varying hyper-parameters).



(B) Large sample approximation (A Bézier simplex of $d = 25$ trained with 5100 data points).



(C) Small sample approximation (A Bézier simplex of $d = 4$ trained with 51 data points).

FIGURE 3. QSAR Fish Toxicity (left: $(\theta_1^*, \theta_2^*, \theta_3^*)(W)$, mid: $(\theta_4^*, \theta_5^*, \theta_6^*)(W)$, right: $\hat{f} \circ \theta^*(W)$).

TABLE 2. Optimal degree d^* and its approximation error (average \pm standard deviation over 10 trials).

Dataset	Large sample		Small sample	
	d^*	Test MSE	d^*	Test MSE
Blog Feedback	30	5.21E-04 \pm 4.28E-04	1	5.62E-03 \pm 1.26E-04
Fertility	30	4.71E-05 \pm 1.34E-05	3	7.56E-03 \pm 1.82E-03
Forest Fires	30	5.52E-05 \pm 3.08E-05	3	7.17E-03 \pm 1.11E-03
QSAR Fish Toxicity	25	4.16E-05 \pm 1.09E-05	4	3.66E-03 \pm 1.41E-03
Residential Building	25	3.55E-04 \pm 2.55E-04	3	6.94E-03 \pm 7.20E-04
Slice Localization	30	5.95E-04 \pm 4.38E-04	3	8.83E-03 \pm 1.60E-03
Wine	30	6.71E-05 \pm 1.42E-05	3	7.00E-03 \pm 5.63E-04
Yacht Hydrodynamics	30	6.75E-05 \pm 4.32E-05	3	3.51E-03 \pm 3.62E-04

Weak Pareto optima are Pareto optima for simplicial problems

Kenta HAYANO

Department of Mathematics, Faculty of Science and Technology, Keio University,
Japan

(joint work with Naoki Hamada (KLab Inc.))

For lots of real-world problems, the sets of Pareto optima have the shape of a simplex and their faces are Pareto optima of sub-problems. Such a problem is called a simplicial problem. In this talk, we show that weak Pareto optima are Pareto optima for simplicial problems using a topological method.

単体的問題の 弱パレート解はパレート解

早野 健太 (慶應義塾大学)

2021/9/8 「進化計算の数理」

joint work with 濱田 直希 (KLab株式会社)

- ・専門は(低次元)トポロジー-(位相幾何学), 特異点論
- ・2013/3: 大阪大で博士(理学)取得
- ・2013/11-2016/3: 北海道大
- ・2016/4-現在: 慶應大

定理 (Hamada - H.)

(弱)単体的な問題の弱パレート解はパレート解

◎この結果の意義

- ・単体的問題は実応用で頻出する。
GECCO 2015~2019の実問題のうち約70%が
単体的と推測される(2019 IMI 短期共同研究)
 - ・パ-システントモロジ-を用いて単体的か推定できる(Hamada)
 - ・弱パレート解はスカラー化で比較的容易に求められる。
- 多くの(実)問題がスカラー化で解けることがわかる!!

◎多目的最適化とパレート解 (定ぎの確認)

$U \subset \mathbb{R}^n$, $f = (f_1, \dots, f_m) : U \rightarrow \mathbb{R}^m$, $M := \{1, \dots, m\}$

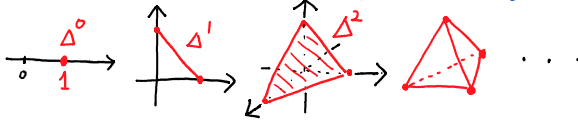
- ・ $x \in U$ が **パレート解** ($X^*(f) \subset U$)
: $\Leftrightarrow \forall x' \in U$ に対し 次のいずれかが成立
 - 任意の $i \in M$ に対し, $f_i(x) = f_i(x')$
 - $f_i(x) < f_i(x')$ となる $i \in M$ が存在
- ・ $x \in U$ が **弱パレート解** ($X^m(f) \subset U$)
: $\Leftrightarrow \forall x' \in U$ に対し, $f_i(x) \leq f_i(x')$ となる $i \in M$ が存在
- ・ $I = \{i_1, \dots, i_k\} \subset M$ に対し,
 $f_I := (f_{i_1}, \dots, f_{i_k})$: 部分問題 (と呼ぶ)

@ (m次元) 単体とは?

$$\left\{ (w_1, \dots, w_{m+1}) \in \mathbb{R}^{m+1} \mid w_i \geq 0, \sum_{i=1}^{m+1} w_i = 1 \right\} =: \Delta^m$$

- 点, 線分, 三角形, 四面体, ... etc.

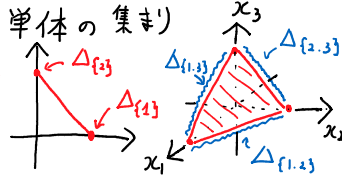
m = 0, 1, 2, 3, ...



- 境界も(次元の1つ低い)単体の集まり

$$\Delta_I := \{ (w_1, \dots) \in \Delta^m \mid \forall i \notin I, w_i = 0 \}$$

$I \subset M$



@ 単体的問題とは?

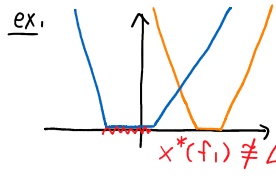
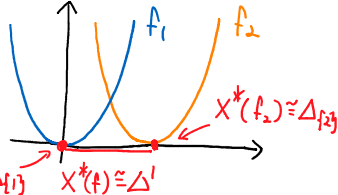
→ パレート解が単体で各面と部分問題の解が対応しているもの

$$x^*(f) \cong \Delta^{m-1}$$

$$x^*(f_I) \cong \Delta_I$$

解が対応しているもの

ex. $f_1(x) = x^2$
 $f_2(x) = (x-2)^2$



は単体的ではない。

@ 主結果

定理 (Hamada - H.)

(弱)単体的な問題の弱パレート解はパレート解

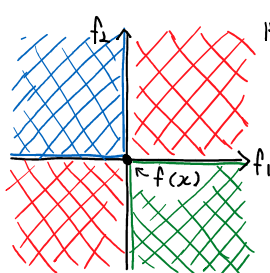
※ 証明はトポロジ- (位相幾何学) の技術
 空間の“つながり方”を調べる技術

を援用して、背理法で行う。

以下でまず2目的, 3目的の場合で
 どのように示すか説明する。

◎ 2目的の場合

$x \in X^w(f)$, $x \notin X^*(f)$ が存在すると仮定



$f = (f_1, f_2) : U \rightarrow \mathbb{R}^2$ の
値域の \mathbb{R}^2

$\mathbb{R}^2 \cdot f(x) \notin f(X^*(f))$

• パレトフロントは と交わらない。
 $f(X^*(f))$

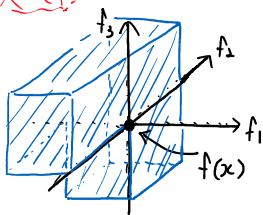
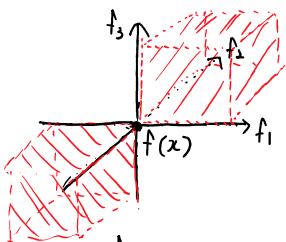
• $f(X^*(f_1))$ (点) は 内にある。

• $f(X^*(f_2))$ は 内にある。

• $f(X^*(f_1))$ と $f(X^*(f_2))$ を結ぶ
 内の道 $f(X^*(f))$ がある?
↳ 矛盾 !!

◎ 3目的の場合

$x \in X^w(f)$, $x \notin X^*(f)$ が存在すると仮定

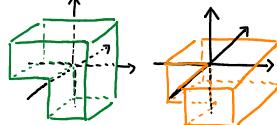


• $f(x) \notin f(X^*(f))$

• パレトフロントは と
交わらない。

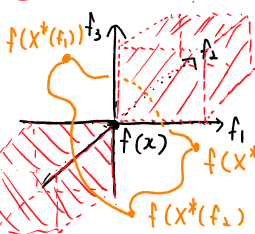
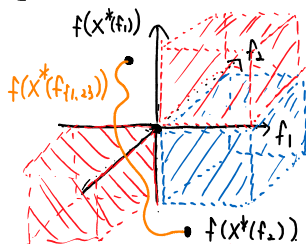
• $f(X^*(f_1))$ (点) は に入る

• $f(X^*(f_2)) \in$, $f(X^*(f_3)) \in$



これだけでは矛盾は起きない...

◎ 3目的の場合 (前ページの続き)





• $f(X^*(f_{f_1, f_2}))$ は $f(X^*(f_1))$ と
 $f(X^*(f_2))$ を結ぶ曲線で
 には入らない。



• $X^*(f_{f_1, f_2}), X^*(f_{f_1, f_3})$ を考えると。
 $f(X^*(f))$ の境界は “ $f(x)$ の
まわりを1周する” ことがわかる。

• の内部は と
交わらない三角形 $f(X^*(f))$ で
埋められる? “あり得ない!!”

◎ 一般の m 目的の場合

$$R_{\geq} := \{(y_1, \dots, y_m) \in \mathbb{R}^m \mid y_i \geq f_i(x) \text{ for any } i\}$$

2目的の  , 3目的の 

	$f(X^*(f))$ の境界	矛盾の導き方
2目的		2点を曲線($f(X^*(f))$)で結ばない
3目的		内部を三角形($f(X^*(f))$)で埋められない
m 目的	R_{\geq} を通さない $\partial \Delta^{m-1}$	内部を $m-1$ 単体($f(X^*(f))$)で埋められない

□ が $\partial \Delta^{m-1}$ と $\mathbb{R}^m \setminus (R_{\geq} \cup f(\omega))$ の“ホモロジー”-群の同型を誘導”することからわかる。

Reeb Space-Based Design of Benchmark Problems for Multi-Objective Optimization

Daisuke SAKURAI

Kyushu University, Japan

(joint work with Reiya Hagiwara (Kyushu University), Naoki Hamada (KLab Inc.), and Takahiro Yamamoto (Tokyo Gakugei University))

When studying solvers for optimization problems, evaluation is an important task – this is especially true for multi-objective optimization, where the evaluation is itself a research topic. For this purpose, a wide range of studies have been conducted on constructing benchmark problems [1]; yet, it has remained to be incredibly challenging to control the difficulty of the benchmark. In this context, we present our ongoing study to achieve the required control, adapting the singularity theory as the basis. The proposed approach is made possible thanks to the relationship between the singularity theory and Pareto optima, which is the extension of optimum solutions in usual optimization problems. Although this relationship has been known for a while, we stand on the point of view of differential topology and Reeb space theory to construct a new mathematical model to describe the behavior of a solver. When designing the benchmark problem, one can control the multi-modality of multi-objective optimization problems. According to our view point, the modality consists of factors such as (i) regions in which the solver tends to be trapped around global and local optima and (ii) how one such includes another. In the presentation, we provide a rather rough introduction to the mathematical background, including recent research directions, and discuss the progress and outlook.

REFERENCES

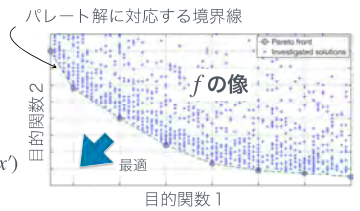
- [1] P. Kerschke, H. Wang, M. Preuss, C. Grimme, A. Deutz, H. Trautmann, and M. Emmerich. “Towards Analyzing Multimodality of Continuous Multiobjective Landscapes,” *International Conference on Parallel Problem Solving from Nature (PPSN)*, 2016, pp. 962–972.

多目的最適化のための レーブ空間論に基づくベンチマーク問題設計

萩原黎弥⁽¹⁾、濱田直希⁽²⁾、山本卓宏⁽³⁾、櫻井大督⁽¹⁾
 (1)九州大学、(2) KLab (株)、(3) 東京学芸大学

多目的最適化

- ・ 目的関数組 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$
- ・ 「最適」な点 x :
 - ・ パレート解 : $f_i(x) > f_i(x')$ ならば $f_j(x) < f_j(x')$
 - ・ 局所パレート解 (locally Pareto) :
 x が定義域で局所的にパレート解



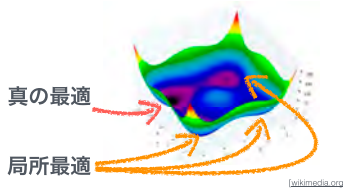
<https://www.sciencedirect.com/topics/engineering/pareto-front>

2

多目的&多峰性?

単目的の最適化

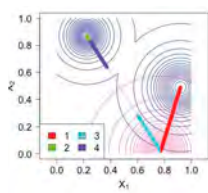
多目的の最適化



多峰性の構造 : 谷の広さ, 繋がりがかた etc.

3

Kerschkeらの多峰性研究



等値線 : 目的関数1
 等値線 : 目的関数2

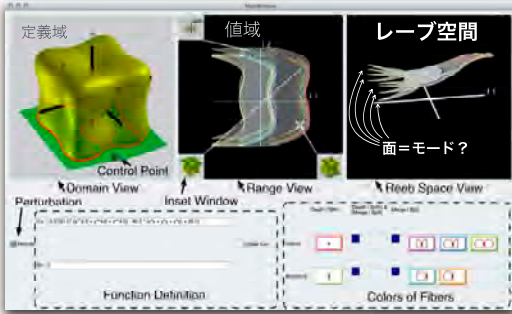
- ・ 多峰性：（局所）パレート解 (多色) の接続性
- ・ ↑を基にソルバを特徴づけ
 (局所バ解に接続している大局バ解に辿り着くか?)
- ・ 未解決：
 - ・ 局所バから離れたところでのソルバ挙動：？
 - ・ 任意の点のモード（「峰」）：？
 - ・ モードの厳密なモデル：？

Kerschke, Pascal, Hao Wang, Mike Preuss, Christian Grimme, André Dautz, Heiko Trautmann, and Michael Emmerich. "Towards analyzing multimodality of continuous multiobjective landscapes." In International Conference on Parallel Problem Solving from Nature, pp. 982-992. Springer, Cham, 2016.

4

櫻井の可視化研究と多峰性

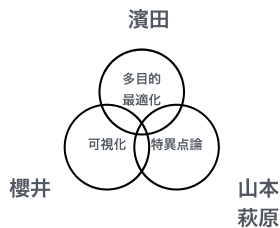
[Sakurai et al., 16]



- ・ 特異ファイバー理論の具体例構築支援 (2016)
- ・ 実は多目的最適化の多峰性構造が見えている？

5

共同研究スタート

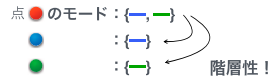
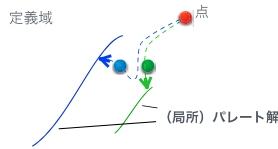


モードのモデル化
 → ベンチマークの多峰性構造を制御へ
 (Work In Progress)

6

我々のモード・多峰性

- ・ 定義域の点 x のモード :
- ・ 総ての目的関数値を増やさずに到達できる局所パレート解連結成分



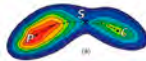
- ・ 多峰性 : 多数のモードの構造

大局パレート解と局所がつながってる場合はTODO

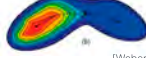
7

階層性と多峰性

細かいモード構造



荒いモード構造



[Weber et al., 07]

可視化研究でも重要

- ・ 小さいモード領域が大きいモード領域に入る
- ・ 小さい領域 :
- ・ 写像の微細な特徴
- ・ ソルバの評価 :
- ・ 微細なモードに繊細か?
- ・ 局所解から抜け出せるか?

8

レーブ空間論と多峰性



- ・ f のレーブ空間 :
- ・ 逆像の連結成分を同一視した空間 (レーブグラフの一般化)
- ・ 点の所属するモード :
- ・ レーブ空間に沿って解を改善しながら進めるパレート解連結成分
- ・ ソルバがモードに沿う=レーブ空間に沿う

9

ベンチマーク問題の設計方針

- ・ 多峰性の構造（モード，階層性）を制御したい
- ・ 多項式写像：階層性の制御が難しい
- ・ 今回：多項式写像を模倣する区分線形写像を構成
- ・ 3変数2目的とする

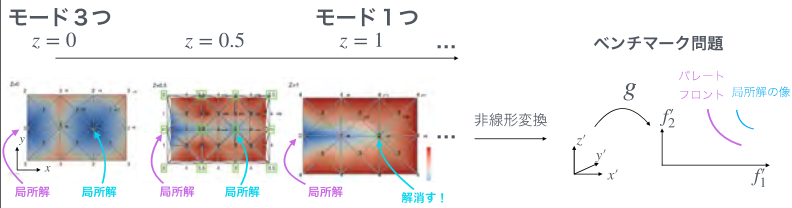
既存ベンチマークの多峰性は不明

人工ベンチマーク問題の歴史

- 1990年代：標準問題なし
 - 研究者は勝手に問題を作っていた
- 2000年代前半：ZDT (Zitz+Deb+2000)
 - 目的のフロンティアをテスト問題セット
- 2000年代後半：DTLZ (Deb+2005), WFG (Huband+2006)
 - ZDTを目的に拡張
- 2010年代：Inverted-DTLZ (Ishida+2013), Minus-WFG (Miyabe+2017)
 - DTLZ/WFGでは性能の良から手法がinvertide DTLZ/Minus-WFGでは性能が悪いことが判明
 - 標準問題のアーカイブに疑問が投げかけられた

10

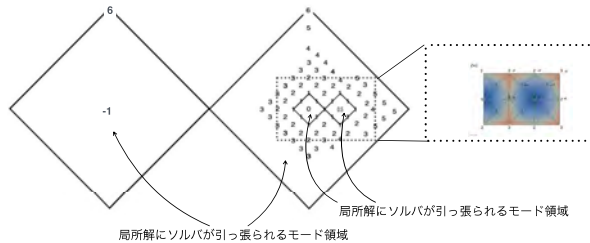
モードの空間的広がりを指定



※モース関数族
 $f_1 = x^3 + zx + y^2$
 の離散化
 ($f_2 = z$)

11

モードの階層構造を指定



- 各々切片で入れ子にして3Dに
- ミソ：区分線形写像なので簡単に入れ子にできる

12

今後

- ・ パレートと局所パレートの識別
- ・ 実際にソルバのベンチマーク
 - ・ どのモードを発見するか
 - ・ 局所パレートのモードに惑わされないか

13

まとめ

- ・ 我々の研究の方向性
- ・ 多峰性のモードをモデル化
- ・ 3変数2目的のベンチマーク (WIP)
 - ・ 多峰性の
 - ・ 階層構造
 - ・ 容易な制御

14

MI レクチャーノートシリーズ刊行にあたり

本レクチャーノートシリーズは、文部科学省 21 世紀 COE プログラム「機能数学の構築と展開」(H.15-19 年度)において作成した COE Lecture Notes の続刊であり、文部科学省大学院教育改革支援プログラム「産業界が求める数学博士と新修士養成」(H19-21 年度)および、同グローバル COE プログラム「マス・フォア・インダストリ教育研究拠点」(H.20-24 年度)において行われた講義の講義録として出版されてきた。平成 23 年 4 月のマス・フォア・インダストリ研究所 (IMI) 設立と平成 25 年 4 月の IMI の文部科学省共同利用・共同研究拠点として「産業数学の先進的・基礎的共同研究拠点」の認定を受け、今後、レクチャーノートは、マス・フォア・インダストリに関わる国内外の研究者による講義の講義録、会議録等として出版し、マス・フォア・インダストリの本格的な展開に資するものとする。

平成 30 年 10 月
マス・フォア・インダストリ研究所
所長 佐伯修

2020年度採択分 九州大学マス・フォア・インダストリ研究所 共同利用研究集会

進化計算の数理

発行 2022年2月22日
編集 濱田直希, 穴井宏和, 梅田裕平, 千葉一永, 佐藤寛之, 能島裕介, 加葉田雄太郎,
一木俊助, 早野健太, 佐伯修
発行 九州大学マス・フォア・インダストリ研究所
九州大学大学院数理学府
〒819-0395 福岡市西区元岡744
九州大学数理・IMI 事務室
TEL 092-802-4402 FAX 092-802-4405
URL <https://www.imi.kyushu-u.ac.jp/>
印刷 城島印刷株式会社
〒810-0012 福岡市中央区白金2丁目9番6号
TEL 092-531-7102 FAX 092-524-4411

シリーズ既刊

Issue	Author/Editor	Title	Published
COE Lecture Note	Mitsuhiro T. NAKAO Kazuhiro YOKOYAMA	Computer Assisted Proofs - Numeric and Symbolic Approaches - 199pages	August 22, 2006
COE Lecture Note	M.J.Shai HARAN	Arithmetical Investigations - Representation theory, Orthogonal polynomials and Quantum interpolations- 174pages	August 22, 2006
COE Lecture Note Vol.3	Michal BENES Masato KIMURA Tatsuyuki NAKAKI	Proceedings of Czech-Japanese Seminar in Applied Mathematics 2005 155pages	October 13, 2006
COE Lecture Note Vol.4	宮田 健治	辺要素有限要素法による磁界解析 - 機能数理学特別講義 21pages	May 15, 2007
COE Lecture Note Vol.5	Francois APERY	Univariate Elimination Subresultants - Bezout formula, Laurent series and vanishing conditions - 89pages	September 25, 2007
COE Lecture Note Vol.6	Michal BENES Masato KIMURA Tatsuyuki NAKAKI	Proceedings of Czech-Japanese Seminar in Applied Mathematics 2006 209pages	October 12, 2007
COE Lecture Note Vol.7	若山 正人 中尾 充宏	九州大学産業技術数理研究センター キックオフミーティング 138pages	October 15, 2007
COE Lecture Note Vol.8	Alberto PARMEGGIANI	Introduction to the Spectral Theory of Non-Commutative Harmonic Oscillators 233pages	January 31, 2008
COE Lecture Note Vol.9	Michael I.TRIBELSKY	Introduction to Mathematical modeling 23pages	February 15, 2008
COE Lecture Note Vol.10	Jacques FARAUT	Infinite Dimensional Spherical Analysis 74pages	March 14, 2008
COE Lecture Note Vol.11	Gerrit van DIJK	Gelfand Pairs And Beyond 60pages	August 25, 2008
COE Lecture Note Vol.12	Faculty of Mathematics, Kyushu University	Consortium "MATH for INDUSTRY" First Forum 87pages	September 16, 2008
COE Lecture Note Vol.13	九州大学大学院 数理学研究院	プロシーディング「損保数理に現れる確率モデル」 — 日新火災・九州大学 共同研究2008年11月 研究会 — 82pages	February 6, 2009

シリーズ既刊

Issue	Author/Editor	Title	Published
COE Lecture Note Vol.14	Michal Beneš, Tohru Tsujikawa Shigetoshi Yazaki	Proceedings of Czech-Japanese Seminar in Applied Mathematics 2008 77pages	February 12, 2009
COE Lecture Note Vol.15	Faculty of Mathematics, Kyushu University	International Workshop on Verified Computations and Related Topics 129pages	February 23, 2009
COE Lecture Note Vol.16	Alexander Samokhin	Volume Integral Equation Method in Problems of Mathematical Physics 50pages	February 24, 2009
COE Lecture Note Vol.17	矢嶋 徹 及川 正行 梶原 健司 辻 英一 福本 康秀	非線形波動の数理と物理 66pages	February 27, 2009
COE Lecture Note Vol.18	Tim Hoffmann	Discrete Differential Geometry of Curves and Surfaces 75pages	April 21, 2009
COE Lecture Note Vol.19	Ichiro Suzuki	The Pattern Formation Problem for Autonomous Mobile Robots —Special Lecture in Functional Mathematics— 23pages	April 30, 2009
COE Lecture Note Vol.20	Yasuhide Fukumoto Yasunori Maekawa	Math-for-Industry Tutorial: Spectral theories of non-Hermitian operators and their application 184pages	June 19, 2009
COE Lecture Note Vol.21	Faculty of Mathematics, Kyushu University	Forum "Math-for-Industry" Casimir Force, Casimir Operators and the Riemann Hypothesis 95pages	November 9, 2009
COE Lecture Note Vol.22	Masakazu Suzuki Hoon Hong Hirokazu Anai Chee Yap Yousuke Sato Hiroshi Yoshida	The Joint Conference of ASCM 2009 and MACIS 2009: Asian Symposium on Computer Mathematics Mathematical Aspects of Computer and Information Sciences 436pages	December 14, 2009
COE Lecture Note Vol.23	荒川 恒男 金子 昌信	多重ゼータ値入門 111pages	February 15, 2010
COE Lecture Note Vol.24	Fulton B.Gonzalez	Notes on Integral Geometry and Harmonic Analysis 125pages	March 12, 2010
COE Lecture Note Vol.25	Wayne Rossman	Discrete Constant Mean Curvature Surfaces via Conserved Quantities 130pages	May 31, 2010
COE Lecture Note Vol.26	Mihai Ciucu	Perfect Matchings and Applications 66pages	July 2, 2010

シリーズ既刊

Issue	Author/Editor	Title	Published
COE Lecture Note Vol.27	九州大学大学院 数理学研究院	Forum “Math-for-Industry” and Study Group Workshop Information security, visualization, and inverse problems, on the basis of optimization techniques 100pages	October 21, 2010
COE Lecture Note Vol.28	ANDREAS LANGER	MODULAR FORMS, ELLIPTIC AND MODULAR CURVES LECTURES AT KYUSHU UNIVERSITY 2010 62pages	November 26, 2010
COE Lecture Note Vol.29	木田 雅成 原田 昌晃 横山 俊一	Magma で広がる数学の世界 157pages	December 27, 2010
COE Lecture Note Vol.30	原 隆 松井 卓 廣島 文生	Mathematical Quantum Field Theory and Renormalization Theory 201pages	January 31, 2011
COE Lecture Note Vol.31	若山 正人 福本 康秀 高木 剛 山本 昌宏	Study Group Workshop 2010 Lecture & Report 128pages	February 8, 2011
COE Lecture Note Vol.32	Institute of Mathematics for Industry, Kyushu University	Forum “Math-for-Industry” 2011 “TSUNAMI-Mathematical Modelling” Using Mathematics for Natural Disaster Prediction, Recovery and Provision for the Future 90pages	September 30, 2011
COE Lecture Note Vol.33	若山 正人 福本 康秀 高木 剛 山本 昌宏	Study Group Workshop 2011 Lecture & Report 140pages	October 27, 2011
COE Lecture Note Vol.34	Adrian Muntean Vladimír Chalupecký	Homogenization Method and Multiscale Modeling 72pages	October 28, 2011
COE Lecture Note Vol.35	横山 俊一 夫 紀恵 林 卓也	計算機代数システムの進展 210pages	November 30, 2011
COE Lecture Note Vol.36	Michal Beneš Masato Kimura Shigetoshi Yazaki	Proceedings of Czech-Japanese Seminar in Applied Mathematics 2010 107pages	January 27, 2012
COE Lecture Note Vol.37	若山 正人 高木 剛 Kirill Morozov 平岡 裕章 木村 正人 白井 朋之 西井 龍映 柴 伸一郎 穴井 宏和 福本 康秀	平成23年度 数学・数理科学と諸科学・産業との連携研究ワーク ショップ 拡がっていく数学 ～期待される“見えない力”～ 154pages	February 20, 2012

シリーズ既刊

Issue	Author/Editor	Title	Published
COE Lecture Note Vol.38	Fumio Hiroshima Itaru Sasaki Herbert Spohn Akito Suzuki	Enhanced Binding in Quantum Field Theory 204pages	March 12, 2012
COE Lecture Note Vol.39	Institute of Mathematics for Industry, Kyushu University	Multiscale Mathematics: Hierarchy of collective phenomena and interrelations between hierarchical structures 180pages	March 13, 2012
COE Lecture Note Vol.40	井ノ口順一 太田 泰広 寛 三郎 梶原 健司 松浦 望	離散可積分系・離散微分幾何チュートリアル2012 152pages	March 15, 2012
COE Lecture Note Vol.41	Institute of Mathematics for Industry, Kyushu University	Forum “Math-for-Industry” 2012 “Information Recovery and Discovery” 91pages	October 22, 2012
COE Lecture Note Vol.42	佐伯 修 若山 正人 山本 昌宏	Study Group Workshop 2012 Abstract, Lecture & Report 178pages	November 19, 2012
COE Lecture Note Vol.43	Institute of Mathematics for Industry, Kyushu University	Combinatorics and Numerical Analysis Joint Workshop 103pages	December 27, 2012
COE Lecture Note Vol.44	萩原 学	モダン符号理論からポストモダン符号理論への展望 107pages	January 30, 2013
COE Lecture Note Vol.45	金山 寛	Joint Research Workshop of Institute of Mathematics for Industry (IMI), Kyushu University “Propagation of Ultra-large-scale Computation by the Domain-decomposition-method for Industrial Problems (PUCDIP 2012)” 121pages	February 19, 2013
COE Lecture Note Vol.46	西井 龍映 栄 伸一郎 岡田 勘三 落合 啓之 小磯 深幸 斎藤 新悟 白井 朋之	科学・技術の研究課題への数学アプローチ —数学モデリングの基礎と展開— 325pages	February 28, 2013
COE Lecture Note Vol.47	SOO TECK LEE	BRANCHING RULES AND BRANCHING ALGEBRAS FOR THE COMPLEX CLASSICAL GROUPS 40pages	March 8, 2013
COE Lecture Note Vol.48	溝口 佳寛 脇 隼人 平坂 貢 谷口 哲至 鳥袋 修	博多ワークショップ「組み合わせとその応用」 124pages	March 28, 2013

シリーズ既刊

Issue	Author/Editor	Title	Published
COE Lecture Note Vol.49	照井 章 小原 功任 濱田 龍義 横山 俊一 穴井 宏和 横田 博史	マス・フォア・インダストリ研究所 共同利用研究集会 II 数式処理研究と産学連携の新たな発展 137pages	August 9, 2013
MI Lecture Note Vol.50	Ken Anjyo Hiroyuki Ochiai Yoshinori Dobashi Yoshihiro Mizoguchi Shizuo Kaji	Symposium MEIS2013: Mathematical Progress in Expressive Image Synthesis 154pages	October 21, 2013
MI Lecture Note Vol.51	Institute of Mathematics for Industry, Kyushu University	Forum “Math-for-Industry” 2013 “The Impact of Applications on Mathematics” 97pages	October 30, 2013
MI Lecture Note Vol.52	佐伯 修 岡田 勘三 高木 剛 若山 正人 山本 昌宏	Study Group Workshop 2013 Abstract, Lecture & Report 142pages	November 15, 2013
MI Lecture Note Vol.53	四方 義啓 櫻井 幸一 安田 貴徳 Xavier Dahan	平成25年度 九州大学マス・フォア・インダストリ研究所 共同利用研究集会 安全・安心社会基盤構築のための代数構造 ～サイバー社会の信頼性確保のための数理学～ 158pages	December 26, 2013
MI Lecture Note Vol.54	Takashi Takiguchi Hiroshi Fujiwara	Inverse problems for practice, the present and the future 93pages	January 30, 2014
MI Lecture Note Vol.55	栄 伸一郎 溝口 佳寛 脇 隼人 洪田 敬史	Study Group Workshop 2013 数学協働プログラム Lecture & Report 98pages	February 10, 2014
MI Lecture Note Vol.56	Yoshihiro Mizoguchi Hayato Waki Takafumi Shibuta Tetsuji Taniguchi Osamu Shimabukuro Makoto Tagami Hirotake Kurihara Shuya Chiba	Hakata Workshop 2014 ~ Discrete Mathematics and its Applications ~ 141pages	March 28, 2014
MI Lecture Note Vol.57	Institute of Mathematics for Industry, Kyushu University	Forum “Math-for-Industry” 2014: “Applications + Practical Conceptualization + Mathematics = fruitful Innovation” 93pages	October 23, 2014
MI Lecture Note Vol.58	安生健一 落合啓之	Symposium MEIS2014: Mathematical Progress in Expressive Image Synthesis 135pages	November 12, 2014

シリーズ既刊

Issue	Author/Editor	Title	Published
MI Lecture Note Vol.59	西井 龍映 岡田 勘三 梶原 健司 高木 剛 若山 正人 脇 隼人 山本 昌宏	Study Group Workshop 2014 数学協働プログラム Abstract, Lecture & Report 196pages	November 14, 2014
MI Lecture Note Vol.60	西浦 博	平成26年度九州大学 IMI 共同利用研究・研究集会 (I) 感染症数理モデルの実用化と産業及び政策での活用のための新たな展開 120pages	November 28, 2014
MI Lecture Note Vol.61	溝口 佳寛 Jacques Garrigue 萩原 学 Reynald Affeldt	研究集会 高信頼な理論と実装のための定理証明および定理証明器 Theorem proving and provers for reliable theory and implementations (TPP2014) 138pages	February 26, 2015
MI Lecture Note Vol.62	白井 朋之	Workshop on “ β -transformation and related topics” 59pages	March 10, 2015
MI Lecture Note Vol.63	白井 朋之	Workshop on “Probabilistic models with determinantal structure” 107pages	August 20, 2015
MI Lecture Note Vol.64	落合 啓之 土橋 宜典	Symposium MEIS2015: Mathematical Progress in Expressive Image Synthesis 124pages	September 18, 2015
MI Lecture Note Vol.65	Institute of Mathematics for Industry, Kyushu University	Forum “Math-for-Industry” 2015 “The Role and Importance of Mathematics in Innovation” 74pages	October 23, 2015
MI Lecture Note Vol.66	岡田 勘三 藤澤 克己 白井 朋之 若山 正人 脇 隼人 Philip Broadbridge 山本 昌宏	Study Group Workshop 2015 Abstract, Lecture & Report 156pages	November 5, 2015
MI Lecture Note Vol.67	Institute of Mathematics for Industry, Kyushu University	IMI-La Trobe Joint Conference “Mathematics for Materials Science and Processing” 66pages	February 5, 2016
MI Lecture Note Vol.68	古庄 英和 小谷 久寿 新甫 洋史	結び目と Grothendieck-Teichmüller 群 116pages	February 22, 2016
MI Lecture Note Vol.69	土橋 宜典 鍛冶 静雄	Symposium MEIS2016: Mathematical Progress in Expressive Image Synthesis 82pages	October 24, 2016
MI Lecture Note Vol.70	Institute of Mathematics for Industry, Kyushu University	Forum “Math-for-Industry” 2016 “Agriculture as a metaphor for creativity in all human endeavors” 98pages	November 2, 2016
MI Lecture Note Vol.71	小磯 深幸 二宮 嘉行 山本 昌宏	Study Group Workshop 2016 Abstract, Lecture & Report 143pages	November 21, 2016

シリーズ既刊

Issue	Author/Editor	Title	Published
MI Lecture Note Vol.72	新井 朝雄 小嶋 泉 廣島 文生	Mathematical quantum field theory and related topics 133pages	January 27, 2017
MI Lecture Note Vol.73	穴田 啓晃 Kirill Morozov 須賀 祐治 奥村 伸也 櫻井 幸一	Secret Sharing for Dependability, Usability and Security of Network Storage and Its Mathematical Modeling 211pages	March 15, 2017
MI Lecture Note Vol.74	QUISPEL, G. Reinout W. BADER, Philipp MCLAREN, David I. TAGAMI, Daisuke	IMI-La Trobe Joint Conference Geometric Numerical Integration and its Applications 71pages	March 31, 2017
MI Lecture Note Vol.75	手塚 集 田上 大助 山本 昌宏	Study Group Workshop 2017 Abstract, Lecture & Report 118pages	October 20, 2017
MI Lecture Note Vol.76	宇田川誠一	Tzitzéica 方程式の有限間隙解に付随した極小曲面の構成理論 —Tzitzéica 方程式の楕円関数解を出発点として— 68pages	August 4, 2017
MI Lecture Note Vol.77	松谷 茂樹 佐伯 修 中川 淳一 田上 大助 上坂 正晃 Pierluigi Cesana 濱田 裕康	平成29年度 九州大学マス・フォア・インダストリ研究所 共同利用研究会 (I) 結晶の界面, 転位, 構造の数理 148pages	December 20, 2017
MI Lecture Note Vol.78	瀧澤 重志 小林 和博 佐藤憲一郎 斎藤 努 清水 正明 間瀬 正啓 藤澤 克樹 神山 直之	平成29年度 九州大学マス・フォア・インダストリ研究所 プロジェクト研究 研究会 (I) 防災・避難計画の数理モデルの高度化と社会実装へ向けて 136pages	February 26, 2018
MI Lecture Note Vol.79	神山 直之 畔上 秀幸	平成29年度 AIMaP チュートリアル 最適化理論の基礎と応用 96pages	February 28, 2018
MI Lecture Note Vol.80	Kirill Morozov Hiroaki Anada Yuji Suga	IMI Workshop of the Joint Research Projects Cryptographic Technologies for Securing Network Storage and Their Mathematical Modeling 116pages	March 30, 2018
MI Lecture Note Vol.81	Tsuyoshi Takagi Masato Wakayama Keisuke Tanaka Noboru Kunihiro Kazufumi Kimoto Yasuhiko Ikematsu	IMI Workshop of the Joint Research Projects International Symposium on Mathematics, Quantum Theory, and Cryptography 246pages	September 25, 2019
MI Lecture Note Vol.82	池森 俊文	令和2年度 AIMaP チュートリアル 新型コロナウイルス感染症にかかわる諸問題の数理 145pages	March 22, 2021

シリーズ既刊

Issue	Author/Editor	Title	Published
MI Lecture Note Vol.83	早川健太郎 軸丸 芳揮 横須賀洋平 可香谷 隆 林 和希 堺 雄亮	シェル理論・膜理論への微分幾何学からのアプローチと その建築曲面設計への応用 49pages	July 28, 2021
MI Lecture Note Vol.84	Taketoshi Kawabe Yoshihiro Mizoguchi Junichi Kako Masakazu Mukai Yuji Yasui	SICE-JSAE-AIMaP Tutorial Advanced Automotive Control and Mathematics 110pages	December 27, 2021
MI Lecture Note Vol.85	Hiroaki Anada Yasuhiko Ikematsu Koji Nuida Satsuya Ohata Yuntao Wang	IMI Workshop of the Joint Usage Research Projects Exploring Mathematical and Practical Principles of Secure Computation and Secret Sharing 114pages	February 9, 2022



Institute of Mathematics for Industry
Kyushu University

九州大学マス・フォア・インダストリ研究所
九州大学大学院 数理学府

〒819-0395 福岡市西区元岡744 TEL 092-802-4402 FAX 092-802-4405
URL <http://www.imi.kyushu-u.ac.jp/>