平成29年度 共同利用研究報告書

平成29年1月30日

九州大学 マス・フォア・インダストリ研究所長 殿

所属・職名 株式会社富士通研究所 人工知能研究所 人工知能基盤 PJ 提案者 氏 名 濱田 直希 (はまだ なおき)

下記の通り共同研究の報告をいたします.

記

			※整理番号		201700	13		
1.研究計画題目	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							
2.種別 (○で囲む)	a. 研究集会 I b. 研究集会 II c.短期共同研究 d.短期研究員					d.短期研究員		
3.研究代表者	民"落	濱田 直希	(はまだ なおき)					
	所 属	株式会社富	株式会社富士通研究所				0.20 号	
	部局名	人工知能研	人工知能研究所 人工知能基盤 PJ			名	研究員	
	連絡先	基格先						
	e-mail				TEL			
4.研究実施期間	平成29年9月5日(火曜日)~平成29年9月9日(土曜日)							

5.参加者数・参加者リスト (*別紙「共同利用研究報告書作成上の注意」参照)

(a,b) は参加者数のみ記入し、集会参加者リストを添付.c.の非公開プログラム参加者とd.は参加者リストに記入.

c.は公開プログラムを含めた全参加者数を記入し、公開プログラム参加者リストを添付.)

参加者数: 11 人

参加者リスト(a,b は記入不要, c.は非公開プログラム参加者, d.は共同研究参加者を記入)

氏 名	所属	職名	氏名	所属	職名
佐伯修	九州大学 IMI	教授	竹島由里子	東京工科大学	准教授
脇隼人	九州大学 IMI	准教授	高尾和人	京都大学	助教
高橋成雄	会津大学	教授	北澤直樹	フリー	
山本卓宏	東京学芸大学	准教授	一木俊助	横浜国立大学	学生
千葉一永	電気通信大学	准教授	濱田直希	富士通研究所	研究員
隅田大貴	流体テクノ				

6.本研究で得られた成果の概要

当初計画した課題に対する成果として,既存の Reeb グラフによるニーポイントの検出・可視化手法を拡張し,滑層分割空間としての臨界点を捉えたグラフを求める方法が得られた.加えて,この手法の Reeb 空間への拡張を検討した.3 目的問題の解サンプルに対してソフトウェアを用いて Reeb 空間のファイバーを計算し,そこから得られる情報を調べた.パレート解集合上に目的関数の非自明なファイバーが生じるのは 4 目的以上に限るという理論的結果が得られた.これらの成果について,現在,理論・実験の両面から結果を改良し,論文として執筆中である.さらに,本研究での議論を通して,多目的最適化と特異点論の境界領域において今後研究する価値が高いと思われる 3 つの課題が明らかになった.(1) 特定のニーポイントに対して,最も安定な Reeb グラフを選択する方法.これについては期間中にアルゴリズムまで得られており,順次論文化する予定である.(2) 問題の解が位相的単体となる条件.既存の結果を精密化する予想が得られ,現在その証明に取り組んでいる.(3) パレート解の特異点型の分類.最適化においては,通常用いられる A・同値に代えてパレート順序を保存する A・同値を考える必要があることが判明し,これをパレート A・同値として定義した.これに基づく特異点型の分類は今後の課題である.

「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」 成果報告書

濱田 直希(株式会社富士通研究所)

2018年1月30日

概要

本報告書は 2017 年 9 月 5 日から 9 月 9 日にかけて行われた IMI 短期共同研究「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」の報告書である.

1 はじめに

1.1 背景と目的

産業界における様々な製品やシステムの計画・設計・運用等では、コスト・性能・安全性など、複数の目的関数を考慮した最適化が求められる。近年、解法や計算機の発展により、4つ以上の目的をもつ多数目的最適化問題を解くことが現実的になってきた。一方でその解集合は高次元となるため、単に問題を解くだけでなく、求めた解集合を適切に可視化しなければならない。これまで自己組織化マップなどの汎用的な可視化手法が適用されてきたが、解集合特有の数理的性質を活用できていないため十分に効果的とは言い難い。近年、一般的な多目的最適化問題の解集合は滑層分割可能であることが証明され、解集合を滑層分割

1. 目的関数が複数あることから、解集合上の高さ関数はベクトル値となるため、滑層分割 Morse 理論のベクトル値版を構築する必要がある.

Morse 理論の技術で可視化できることが示唆された。その実現に向けて2つの主要な課題がある:

2. 数値解法で得られる解集合は誤差を含む有限個のサンプル点による近似であるため、滑層分割はサンプルから推測する必要がある.

本研究では、上記 2 点について最適化理論、最適化の実応用、微分トポロジー、可視化の研究者が集い、問題の所在とアプローチを検討し、今後の中長期的な継続研究に繋げることを目的とする.

解集合の可視化が確立されれば、例えばものづくり分野においては、設計プロセスの迅速化・自動化や、発見・発明支援による革新的製品の開発等を促進できる。多目的最適化の応用は多分野に及ぶため、波及効果は大きい、また、本問題設定は、微分トポロジーの未踏領域である写像の定義域次元 > 値域次元の特異点論、特に一般次元の特異点論に相当する。このような数学上の難問に対して産業界からのニーズを示すことは、長期的な数学の発展を促すと期待できる。

1.2 共同研究プログラム

初日の9月5日は、一般公開日として、各参加者が自身の専門分野について講演を行った。講演内容を表 1 に示す。2 日目から5日目(9月6日から9月9日)は、前日までの議論の結果を受けて、個別の課題について議論した。加えて最終日の5日目は、本共同研究以降の継続研究の計画を検討した。

13:20-13:30	Opening
13:30-14:00	Topology in multi-objective optimization
	濱田 直希 (株式会社富士通研究所 人工知能基盤 PJ·研究員)
14:00-14:30	Global aspect of singularity theory
	佐伯 修 (九州大学 IMI·教授)
14:30-15:00	Driving design informatics – Aiming for innovative aerospace vehicles
	千葉 一永 (電気通信大学 情報理工学研究科・准教授)
15:00-15:20	Break
15:20-15:50	Computation on semidefinite program
	脇 隼人 (九州大学 IMI・准教授)
15:50-16:20	Topology-accentuated visualization for scientific datasets
	竹島 由里子 (東京工科大学 メディア学部・准教授)
16:20-16:50	Visual analytics of multivariate data via fiber topology
	高橋 成雄 (会津大学 コンピュータ理工学部・教授)
16:50-17:20	Discussion
17:20-17:30	Closing

1.3 成果概要

本共同研究の成果を以下にまとめる。当初計画していた課題に対する成果は、下記の 2 章から 4 章である。これらの成果により、高次元解集合のサンプルを Reeb 空間を用いて可視化する技術が得られた。また、本共同研究を通して、今後の継続研究のために必要な分野を超えた研究者の人的ネットワークを形成することもできた。以上から、当初計画の目的は達成されたと考える。

加えて、異分野研究者の交流により、当初計画を上回る成果も生み出された。それらを下記の5章から7章に示す。2017年現在、多目的最適化と特異点論を融合した研究は世界的にも珍しく、確立された研究コミュニティはなく、研究課題さえ未整理な状況にある。そのため、当初計画通りに個別の課題を解決することに留まらず、本研究領域における重要課題を発掘・整理し、隣接領域の研究者に周知し、参入を促すことにより、持続可能な研究コミュニティを立ち上げる必要があった。本共同研究での議論により、新たにいくつかの課題を明らかにし、参加者の興味を喚起することができた。課題の一部については会期中に一定の成果を得ることができた(5章)、残りの課題は特異点論の主要課題である特異点の分類問題と認識問題に重なるものであり、今後中長期的に取り組んでいく必要があることを参加者間で共有し、短期的に着手可能な小問題を設定した(6章と7章)。以下、各章にてそれぞれの成果の詳細を述べる。

- 2章 最適化,可視化,特異点論の研究者間で,多目的最適化問題の解集合の可視化に関する工学的ニーズ および数理技術の現状について情報交換し,共通認識を形成し,問題の所在を明らかにした.
- 3章 既存の Reeb グラフに基づく解集合サンプルの可視化手法を拡張し、(通常の定義では正則点に見えてしまう) 低次元滑層上の臨界点をも捉えた Reeb グラフを求める方法を得た.
- 4章 上記手法を Reeb 空間へ拡張した. 既存の Reeb 空間ソフトウェアを用いて,3目的問題の解集合のサンプルに対して2目的平面への射影のファイバーを計算し,Reeb 空間への拡張が新たにどのような情報をもたらすかを考察した.また,解集合の Reeb 空間に非自明なファイバーが生じる条件を示した.
- 5章 特定のニーポイントに注目した可視化を行うためのグラフ選択法を検討した. ニーポイントに対するグラフの安定半径を定義し, 最も安定なグラフを選択する方法を得た.
- 6章 実問題でしばしば観察される「解集合が位相的単体をなすケース」が生じる数学的条件を検討し、既存の命題をより精密化した条件が得られた。加えて、より複雑な位相型の解集合を上記の貼り合わせで表現する方法を検討し、特異点論において知られる折り目写像というクラスに対しては、そのように表現可能であることを示した。その他のクラスに対する表現は今後の課題である。

7章 パレート点の特異点型を議論した。通常の特異点の分類に用いられる A 同値に代えて、パレート順序を保存する座標変換に基づく分類が必要であることが明らかになり、それをパレート A 同値として定式化した。パレート A 同値に基づく特異点型の分類は今後の課題である。

2 問題の所在

多目的最適化と特異点論の関連性を整理し、それらの数理が工学応用においてどのような意味をもつかを議論した。そのうえで、現状の解集合の可視化技術がどのような問題点をもち、どのように改善できるか(すべきか)を議論した。本章ではその結果をまとめる。

2.1 多目的最適化

ある定義域 $X\subseteq\mathbb{R}^n$ 上で関数 $f:X\to\mathbb{R}$ の最小点を求める問題を(単目的)最適化という。一方,多目的最適化とは,最小化したい関数が複数与えられる問題,言い換えれば,写像 $f=(f_1,\ldots,f_m):X\to\mathbb{R}^m$ を最小化する問題である。成分関数 f_1,\ldots,f_m の値をともに小さくするような点を求めたいが,通常,それぞれの関数の最小点は異なるため,ある関数を最小化することは別の関数の最小化を諦めることにつながる。このトレードオフを考慮して,写像の最小化では,次の半順序の意味での最小点を求めることになる。定義 2.1 写像 $f=(f_1,\ldots,f_m):X\to\mathbb{R}^m$ と $x,y\in X$ について,パレート順序 (Pareto ordering) $x\prec_f y$ $(f(x)\prec f(y)$ とも書く)を以下のように定義する。

- $f_i(y) \leq f_i(x)$ for all $i = 1, \ldots, m$,
- $f_j(y) < f_j(x)$ for some $j = 1, \ldots, m$.

定義 2.2 点 $x \in X$ が写像 $f = (f_1, \ldots, f_m): X \to \mathbb{R}^m$ の局所パレート点 (local Pareto point) であるとは、x のある近傍 U が存在して、すべての点 $y \in U$ が $f(y) \not\prec f(x)$ をみたすことをいう。特に、U = X ととれるとき、x はパレート点 (Pareto point) という。これらの集合とその像について、用語と記号を

パレート集合 (Pareto set)
$$X^*(f) := \{ x \in X \mid x \text{ はパレート点} \},$$
 パレートフロント (Pareto front)
$$f(X^*(f)) := \{ f(x) \in \mathbb{R}^m \mid x \in X^*(f) \},$$
 局所パレートフロント (local Pareto front)
$$f(X_L^*(f)) := \{ x \in X \mid x \text{ は局所パレート点} \},$$

と定める.

これらの解概念のうち、パレート集合を網羅的に求めることが理想であるが、特別な仮定をおかないかぎり それは難しい、実用上は、局所パレート集合の一部分を有限個のサンプル点で近似することが多い。

以上より,多目的最適化とは, f_1,\ldots,f_m のトレードオフを実現する点の集合を求める問題であるといえる.ユーザは求めた点集合からトレードオフの様子を観察して,最も好ましいと思われる解を選び出す.したがって多目的最適化では,問題の解を求める技術だけでなく,トレードオフ分析のための技術も重要となる.本研究ではそのための解集合の可視化技術に焦点を当てる.

2.2 特異点論

多目的最適化に関係する特異点論の概念をまとめる。本節では簡単のため,写像はすべて $C_{\mathrm{pr}}^{\infty}(\mathbb{R}^n,\mathbb{R}^m)$ の元,すなわち, C^{∞} 級固有写像とする.

定義 2.3 写像 $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ の微分が特異となる点の集合

$$S(f) := \{ x \in \mathbb{R}^n \mid \operatorname{rank} df(x) < \min(m, n) \}$$

を特異点集合 (singular point set) という.

多目的最適化と特異点論の関係を端的に示すのが、次の定理である.

定理 2.1 ([Lov11]) 写像 $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m \ (n \ge m)$ について,

$$X^*(f) \subseteq X_{\mathbf{L}}^*(f) \subseteq S(f)$$

が成り立つ.

今日の多目的最適化のほとんどの応用では $n \ge m$ であり、したがって(局所)パレート点は特異点である.一方、写像 f は応用事例によって様々なものが使われているので、従来の最適化研究のように凸性などを仮定する(これは写像を強く制限する)のではなく、なるべく多くの写像に通用する一般的な方法論を構築したい.そこで、以下の性質に注目する.

定義 2.4 写像の性質 P がジェネリック (generic) であるとは、Whitney 位相を入れた $C^\infty_{\rm pr}(\mathbb{R}^n,\mathbb{R}^m)$ において、集合

$$\left\{f \in C^{\infty}_{\mathrm{pr}}(\mathbb{R}^n, \mathbb{R}^m) \mid f \text{ は性質 } P \text{ をもつ} \right\}$$

が残留集合であることをいう.

多目的最適化の応用では,写像 f の計算において実験や数値シミュレーションが行われることが少なくない.例えば,航空機の設計では,風洞実験や数値流体シミュレーションを用いて機体の空気抵抗や揚力を評価する [CMT08].それらにはノイズや誤差がつきものであり,したがって写像は自然に摂動されることになる.また,数値解法を用いる場合には,厳密解ではなく近似解を求めるため,これもある種の摂動とみなせる.このように,多目的最適化で扱う写像は多くの場合,摂動を受けたものとなるため,摂動によって構造が変わらない写像を扱うことが妥当と思われる.

定義 2.5 C^{∞} 写像 $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ が C^0 安定 $(C^0$ -stable) とは,f の近傍 $U \subseteq C^{\infty}_{\mathrm{pr}}(\mathbb{R}^n, \mathbb{R}^m)$ が存在して,任意の $g \in U$ が f に C^0 同値であることをいう.ここで,写像 $f,g: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ が C^0 同値とは, C^0 同相写像 $\psi: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ と $\varphi: \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^m$ が存在して $\varphi \circ f = g \circ \psi$ が成り立つことをいう.

$$\mathbb{R}^{n} \xrightarrow{f} \mathbb{R}^{m}$$

$$\downarrow^{\psi} \qquad \qquad \downarrow^{\varphi}$$

$$\mathbb{R}^{n} \xrightarrow{g} \mathbb{R}^{m}$$

さらに、上記の C^0 をすべて C^∞ に取り換えたものを C^∞ 安定という.

そして、そのような写像は多くの場合ジェネリックな存在であることが知られている.

定理 2.2 $C_{\mathrm{pr}}^{\infty}(\mathbb{R}^n,\mathbb{R}^m)$ 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:

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

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 $m-n \le -3$ 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, $m \ge 7$ 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, $m \ge 7$ の最適化も研究が活発化している [LLTY15].今後 $10 \sim 20$ 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.

ジェネリックな写像の局所パレート集合は、様々な次元の多様体を滑らかに貼り合わせることで表現できることが以下のように知られている [Sma73, LP14].

定理 2.3([LP14, Theorem 18]) 十分に正則な写像 [LP14, Definition 30] はジェネリックであり、その 局所パレート集合は Whitney 滑層分割 [LP14, Definition 16] できる. ■

なお、この定理の証明から、局所パレートフロントも同様に Whitney 滑層分割できることが読み取れる.

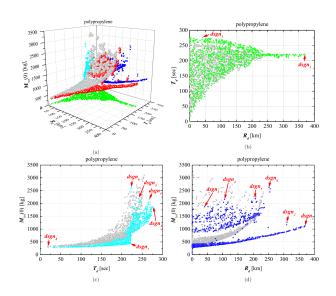


図 1 ある工学応用におけるパレートフロントの注目箇所 [CKS17, Figure 3]. (a) の赤点は 3 目的空間におけるパレートフロント,(b)-(d) はその 2 目的平面への射影である。矢印は実務家が注目した解である。

2.3 工学応用における滑層分割の意味

実務家が多目的最適化をどのように活用しているかを,実際の応用事例を通して議論し,その行為の数学的意味を解釈した.その結果,以下に述べるように,パレート集合の滑層分割を知ることが実用上重要な意味をもつことが確認できた.

図 1 はあるハイブリッドロケット運用問題 [CKS17] のパレートフロントを数値解法で近似した点集合である。最適化した写像は $f:\mathbb{R}^{10}\to\mathbb{R}^3$ で,これは定理 2.2 の結構次元に属している。パレートフロント $f(X^*(f))\subset\mathbb{R}^3$ は,2 つの滑らかな境界付き曲面といくつかの孤立点 * 1 からなり,定理 2.3 が示唆するとおり Whitney 滑層分割集合をなすことが読み取れる。図の矢印は実務家が注目した箇所を示しており,実務家は特に曲面の角や孤立点(いずれも 0 次元滑層)に注目したことが読み取れる。これは,このような点が運用上の性能の限界を示唆するためである。性能の限界を決めている要因が何なのかがわかれば,その要因の解消に注力することで運用を効率的に改良することができる。そのため,解集合のトレードオフ分析においては,そのような限界点を優先的に調べることが頻繁に行われている。特に,滑層の次元が低いほど複数の要因に拘束されているため,性能上のボトルネックに関する情報を多く含んでいると期待される。一方で,高次元の滑層は,低次元の滑層たちを滑らかに補間したものにすぎない。低次元の滑層たちが正確に捉えられていれば,高次元の滑層は比較的少ないデータと計算で復元できる。

このように、滑層分割の構造は工学的には性能の限界に関する情報を豊富に含んでおり、高次元の幾何を効率良く捉えるための特徴点も提供する.したがって、パレート集合やパレートフロントを(付加的構造のない)位相空間として扱うだけでなく、滑層分割集合とみてその滑層の構造を明示的に調べることは実用上有益であるとの知見が得られた.

2.4 解集合可視化の既存手法とその問題点

パレートフロントは \mathbb{R}^m の部分空間なので, $m \leq 3$ ならば散布図によって直接可視化することができる。しかし,m > 3 では高次元空間を可視化するための特別な技術が必要になる。定義上はパレートフロント

^{*1} 結構次元においては、孤立したパレート点は不安定特異点である. したがって、図の孤立点は数値解法が十分に収束していないために生じたアーティファクトである可能性が高い.

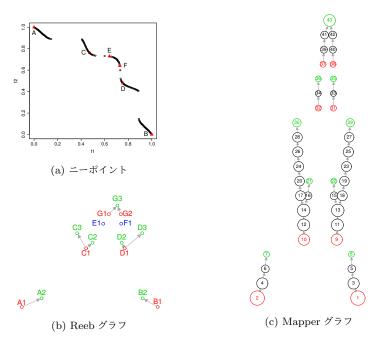


図 2 パレートフロントのニーポイントとそのグラフ表示 [HC17, Figures 2, 3b, 5a].

の点同士には優劣がつかないが、実用上は f_1, \ldots, f_m のトレードオフ比のバランスがとれた中庸な解が特に重要となることが多い。そのような点はニーポイントとよばれる。

定義 2.6([HC17]) 写像 $f=(f_1,\ldots,f_m):\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^m$ が与えられたとき,そのパレートフロント上の 関数 $h:f(X^*(f))\to\mathbb{R}$ (記号を濫用して関数 f_i の値も f_i で表す),

$$h(f_1, \dots, f_m) := \sum_{i=1}^m f_i$$
 (2.1)

の局所最小点をパレートフロントのニーポイント (knee point) という.

Morse 関数では局所最小点と極小点が一致することから,もし図 2a のように真の $f(X^*(f))$ が既知で h が Morse 関数ならば,図 2b のように Reeb グラフを描くことで,次元 m によらずニーポイントとパレートフロントの形状を一挙に可視化できる.ここで,赤で示した入次数ゼロの頂点がニーポイントを表し,出次数はパレートフロントの凸性を表している.実用上 $f(X^*(f))$ は未知なので,数値解法で求めたサンプルを利用して,図 2c のように Reeb グラフを近似する Mapper グラフ [SMC07] を描く.

この方法には以下の問題点がある.

- 1. パレートフロントの滑層分割の構造を取りこぼしてしまう. 滑層は応用上重要な情報を含んでいるため,各滑層ごとのニーポイントも考慮できればより望ましい. これを3章で実現する.
- 2. Reeb グラフによる分析は高次元では情報損失が大きい。高次元パレートフロントの形状をより仔細 に分析するためには、式 (2.1) の関数 h を写像に拡張し、例えば f_1 - f_2 平面への射影の様子なども観察できることが望ましい。これを 4 章で実現する。

3 滑層分割 Reeb グラフへの拡張

滑層分割 Morse 理論に基づいて,Reeb グラフを滑層上の臨界点を扱えるように拡張することを考える. 定義 3.1([GM88, Section 2.1]) Whitney 滑層分割集合 $Z\subset\mathbb{R}^m$ と C^∞ 関数 $f:\mathbb{R}^m\to\mathbb{R}$ に対して,Z の滑層 S の点 $p\in S$ が

$$df(p)|_{T_pS} = 0$$

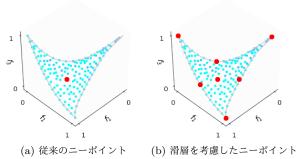


図3 滑層を考慮することによるニーポイントの違い.

を満たすとき、p を $f|_S$ の臨界点 $(critical\ point)$ という.ここで T_pS は p での S の接空間を表す.
通常のニーポイントは図 3a であるが,滑層の構造を考慮すると図 3b のようになる.通常の場合と同様に,滑層分割集合上でも Morse 関数 [GM88, Section 2.1] はジェネリックであり,その極小点は局所最小点と一致する.したがって,各滑層に対して 2.4 節の方法を適用すれば,滑層上のニーポイントを求めることができる.

問題は可視化である.滑層の数だけ Reeb グラフが生じるため,それらを 1 つ 1 つ観察するには手間がかかる.そこで,それぞれの滑層の Reeb グラフの情報を含んだ 1 つの多重グラフに統合する.

定義 3.2 Whitney 滑層分割集合 $Z \subset \mathbb{R}^m$ の 2 つの滑層 S,T について,S が T の閉包 $\operatorname{cl} T$ に含まれる ことを $S \leq T$ で表す. 関数 $f:Z \to \mathbb{R}$ に対して,Z の滑層 S の Reeb グラフ $G_S = (V_S, E_S)$ を

 $V_S := \{ p \in \operatorname{cl} S \mid T \leq S \text{ が存在して } p \text{ は } f|_T$ の臨界点 $\}$,

 $E_S:=\left\{\,(p,q)\in V_S imes V_S\;ig|\; f|_{\mathrm{cl}\,S}^{-1}([f(p),f(q)])\;$ の連結成分 C が存在して $C\cap V_S=\{\,p,q\,\}\,
ight\}$

と定義する. このとき、滑層でラベル付けた多重グラフ $G_Z = (V_Z, E_Z)$ 、

$$V_Z:=igcup_{S:Z\ o\ n\ mea}V_S,$$
 $E_Z:=\{\ (p,q,S)\ |\ Z\ o\ n\ mea$ 層 $\ S\$ が存在して $\ (p,q)\in E_S\ \}$

を Z の滑層分割 Reeb グラフ (stratified Reeb graph) とよぶ.

パレートフロントの滑層分割と各滑層のサンプルが与えられれば、2.4 節と同様に Mapper を用いてこれを近似計算できる。そこで、それらをどう求めるかが問題となる。

問題 3.1 (何らかの意味でジェネリックな)写像 $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ に対して,そのパレートフロントの滑層 分割と各滑層のサンプルを求める方法を作れ.

これは今後の長期的な課題であるが、会期中に部分的な回答が得られた. 詳しくは6章で述べる.

4 Reeb 空間への拡張

Reeb グラフでは式 (2.1) の関数 $h: f(X^*(f)) \to \mathbb{R}$ を用いたが、これを写像 $f(X^*(f)) \to \mathbb{R}^l$ に拡張すると Reeb 空間が得られる。 Reeb 空間を用いてパレートフロントの形状を分析することを考える。

定義 4.1 N, M を C^{∞} 多様体とし, $f: N \to M$ を C^{∞} 写像とする. $r \in M$ に対して,逆像に沿った写像芽 $f: (N, f^{-1}(r)) \to (M, r)$ を r 上のファイバー (fiber) という. $f^{-1}(r)$ が特異点を含むときは特異ファイバー $(singular\ fiber)$,そうでないときは正則ファイバー $(regular\ fiber)$ という.

関数の場合には臨界点の前後で等高線の位相が変化し、その様子をグラフで表現したものが Reeb グラフであった。同様に、写像では特異ファイバーの前後でファイバーの位相が変化し、その様子をセル複体で表現したものが Reeb 空間である。写像 $f: N \to M$ の次元対が $(\dim N, \dim M) = (3, 2), (4, 2), (4, 3)$ の

ケースについては特異ファイバーは分類されている。さらに、(3,2) については Reeb 空間を計算し可視化するソフトウェアも開発されている [SSC+16]. 前節までで用いてきた Mapper を用いても Reeb 空間の近似物を計算できる。そのため、Reeb 空間を計算すること自体よりも、パレートフロントの分析において Reeb 空間からどんな情報が得られるかを理解することが主要な課題となる。

本研究ではこれを探るために、例題として 3 目的ベンチマーク問題 MED [Ham17] のパレートフロント $f(X^*(f)) \subset \mathbb{R}^3$ の 2 目的平面への直交射影 $f(X^*(f)) \to \mathbb{R}^2$,

 $\pi_1: (y_1, y_2, y_3) \mapsto (y_2, y_3),$ $\pi_2: (y_1, y_2, y_3) \mapsto (y_1, y_3),$ $\pi_3: (y_1, y_2, y_3) \mapsto (y_1, y_2)$

のファイバーを観察した。その結果、いずれの射影もすべての点上で自明なファイバー(1 点からなるファイバー)をもつことが確認された。このことから、パレートフロントの射影に対して生じうるファイバーは、一般的な多様体間の写像に対して生じうるファイバーよりも強く制限されていると予想できる。いつ、どのようなタイプの非自明なファイバーが生じるかを理解するために、まず、非自明なファイバーが生じうる条件を考察し、以下を得た。

定理 4.1 $f(X^*(f))$ をランク仮定(ジェネリックな性質の 1 つ)[Sma73, p. 536] を満たす写像 $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ のパレートフロントとする. 直交射影 $\pi: \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^l$ (0 < l < m) の $f(X^*(f))$ 上のファイバーがすべて自明(1 点)となるのは,l-m=-1 のとき,かつそのときにかぎる.

証明 4.1 直交射影のパレートフロントへの制限 $\pi|_{f(X^*(f))}$ が単射である条件を示せばよい.

l-m=-1 のとき, $\pi|_{f(X^*(f))}$ は単射である.なぜなら,もし単射でないとすると,異なる 2 点 $x,y\in f(X^*(f))$ が存在して $\pi(x)=\pi(y)$ である. $x\neq y$ と $\pi(x)=\pi(y)$ を同時に満たすためには,x と y の成分のうち 1 成分だけが異なり,残りの成分は等しくなければならない.これは一方が他方をパレート 優越することを意味するため,2 点がともにパレートフロント上にあることに矛盾する.

 $l-m \leq -2$ のとき, $\pi|_{f(X^*(f))}$ は単射になりえない.なぜなら,ランク仮定を満たす写像のパレートフロントには (m-1) 次元の近傍をもつ点が存在するため, $l(\leq m-2)$ 次元への単射は存在しない. 口次元対 (m,l) のうち,l=1 のケースは Reeb グラフなので除けば,最小のケースは (m,l)=(3,2) である.しかし,この場合にも直交射影の Reeb 空間を観察することは上記のように無意味である.したがって,直交射影の Reeb 空間がはじめて有用となるのは (4,2) のケースである.このとき,ランク仮定よりパレートフロントはジェネリックに 3 次元なので,調べるべき写像 $\pi|_{f(X^*(f))}$ は (3,2) 次元となる.先述のように,(3,2) の特異ファイバーはすでに分類されている.しかし,パレートフロントの直交射影という特別な設定において,一般論で現れる特異ファイバーのうちどのタイプが生じ,どのタイプが生じえないのかは分かっていない.そこで,以下の問題を考えたい.

以上が当初計画の課題に対する成果となる.次章以降では、当初計画を超えて議論したトピックについて報告する.

5 安定度による Mapper グラフの選択法

式 (2.1) の関数 h を用いて検出されるニーポイントがユーザにとって好ましい解であるためには、パレートフロントの座標 f_1, \ldots, f_m を適切にスケールしておく必要がある。しかし、座標の各成分は速度・力・コストなど異なる物理量を表すケースが多く、それらの間のバランスのとれたスケールを選択することは最適化問題を定式化したユーザ自身にも難しい。事前にスケールを決めかねる場合には、重み付けした関数

$$h_w(f_1, \dots, f_m) := \sum_{i=1}^m w_i f_i.$$
 (5.1)

Algorithm 1 最安定重みの計算

```
Require: パレートフロントサンプル X:=\{x_1,\ldots,x_n\in\mathbb{R}^m\}, ニーポイント集合 Y\subseteq X, 重み格子 L^m_k
 1: for w \in L_k^m do
       G_w \leftarrow (X, h_w) \mathcal{O} \text{ Mapper } \mathcal{I} \mathcal{I} \mathcal{I}
        if \forall y \in Y が h_w の極小点 then
 4:
           B_w \leftarrow 1
 5:
        else
           B_w \leftarrow 0
 6:
 7:
      end if
 8: end for
9: for w \in L_k^m do
10: R_w \leftarrow \min_{v \in L_k^m, B_v = 1} | w - v |
11: end for
12: w^* \leftarrow \arg\max_{w \in L_k^m} R_w
13: return w^*
```

を考え、この重み $w=(w_1,\ldots,w_m)$ を単体格子

$$L_k^m := \left\{ (w_1, \dots, w_m) \in \{0, \dots, k\}^m \mid \sum_{i=1}^m w_i = k \right\}$$

上で動かして、パレートフロントのサンプルのうち極小点になる回数が多い点に注目するという利用法が提案されている [HC17]. 極小点になる回数が多い点は、座標のスケール選択の不確かさに対してロバストなニーポイントである. 加えて、サンプルのとり方による影響を受けにくい傾向もある.

このようにしてニーポイントを選んだときには、どのグラフによってそれを可視化するかが問題となる. 選ばれたニーポイントは多数のグラフに対して極小点になっているので、その中からどのグラフを提示するべきかを選ぶ必要がある.本研究では、その方法を議論した.

先述のように「選択された座標スケールは不確かなものである」という前提に立つと、グラフ(を作るための関数 h_w の重み w)は、スケールの変化に対してなるべく安定したものを選ぶことが望ましい。本研究では、この安定の意味を「ユーザが注目したニーポイントが、スケールが変化してもニーポイントであり続けること」と考え、以下のような安定度を定義した。

定義 5.1 有限集合 $X \subset \mathbb{R}^m$ とその部分集合 Y が与えられたとする. B_v は Y のすべての点が h_v の極小点であるとき 1, そうでなければ 0 をとる変数とする. このとき, 与えられた格子 L_k^m について, 重み $w \in L_k^m$ の安定半径 $(stable\ radius)$ を

$$R_w := \min_{v \in L_k^m, B_v = 1} | w - v |$$

と定める. R_w が最大値をとる w を最安定 $(most\ stable)$ という.

Algorithm 1 は最安定な重みを選び出すアルゴリズムである。選ばれた重みで Mapper グラフを描くことで,スケールの不確かさにロバストな可視化が得られる。なお,アルゴリズムの入力となるパレートフロントサンプル X は数値解法などで求め,ニーポイント集合 Y は先述の方法で選ぶ。たとえば,極小点になる回数が多い I 個を選んだり,さらにその中から特に注目したいものをピックアップしたりすればよい。アルゴリズム 3 行目の「 $\forall y \in Y$ が h_w の極小点」の判定では,2 行目で求めた Mapper グラフ G_w の入次数ゼロの頂点に属する点を極小点とする(詳しくは [HC17])。

このアルゴリズムについて何らかの理論的な保証を与えることが今後の課題である.

6 解集合が位相的単体となる条件

6.1 単純な問題

パレート集合とパレートフロントはジェネリックには滑層分割集合をなすが、実用上は特に、しばしば曲がった単体をなすことが理論的にも実験的にも観察されている.この事実は古くから様々な文献において

指摘されてきた。たとえば、Smale [Sma73, pp. 533–534, Proposition] は純粋交換経済において m 人の 消費者それぞれの効用関数が単調な狭義凸関数であると仮定したとき、パレート集合が (m-1) 次元閉単体と同相になることに言及した。近年では、Lovison ら [LP14, Proposition 2] がより一般的な問題設定の もとで、さらに踏み込んだ主張をしている:滑らかな m 目的凸計画問題では、

- パレート集合は (m-1) 次元単体と微分同相であり、
- 単体の各頂点は個々の目的関数の最小点に相当し,
- 単体の各 (k-1) 次元面は $k(\leq m)$ 個の目的関数を最適化する部分問題のパレート集合にあたる. しかし、問題が滑らかかつ凸という条件だけでは不十分であり、反例が作れる *2 . 加えて、パレートフロントが同様の構造をもつことに言及していないという不十分さもある. このように、「パレート集合とパレートフロントが曲がった単体をなす」という言葉の意味は、未だ数学的に正確に定義されておらず、したがって厳密な証明も与えられていなかった. そこで、本研究ではこの厳密化に取り組んだ.

著者らの先行研究では、このような状況を正確に表すための概念を導入した.

定義 6.1 ([Ham17, Definition 3.1]) 問題 f が単純 (simple) であるとは、すべての部分問題 $g \subseteq f$ が以下をみたすことをいう:

(S1) 問題 $q: X \to \mathbb{R}^k$ のパレート集合 $X^*(q)$ は (k-1) 次元単体 Δ^{k-1} と同相

(S2) 写像 $g|_{X^*(q)}: X^*(g) \to \mathbb{R}^k$ が C^0 埋め込み

定義より、単純な問題の部分問題は単純である.単純な問題では、どの部分問題も単体と同相な解集合をもつことが証明されている.

定理 6.1([Ham17, Proposition 3.6]) 単純な問題 f とその k 目的部分問題 $g \subseteq f$ について

$$X^*(g) \approx g(X^*(g)) \approx f(X^*(g)) \approx \Delta^{k-1}$$
(6.1)

が成り立つ.

加えて,これらの解集合は面関係をもつことも証明されている.

定理 6.2([Ham17, Lemma 3.15, Theorem 3.18]) 単純な問題 f とその部分問題 $g\subseteq f$ は以下をみたす:

$$\partial X^*(g) = \bigsqcup_{h \subset g} \operatorname{int} X^*(h),$$

$$\partial f(X^*(g)) = \bigsqcup_{h \subset g} \operatorname{int} f(X^*(h)),$$

$$f(\partial X^*(g)) = \partial f(X^*(g)),$$

$$f(\operatorname{int} X^*(g)) = \operatorname{int} f(X^*(g)).$$
(6.2)

ここで、 ∂ と int はそれぞれ、境界付き C^0 多様体としての境界と内部を表す.

このように、問題が単純ならば、パレート集合とパレートフロントがともに単体の位相型と面関係をもつことが保証される。残された課題は、「問題がいつ単純になるか」を調べることである。本研究ではこれを議論し、以下の予想を立てた。

予想 6.1 狭義凸計画問題 $f = (f_1, \ldots, f_m) : X \to \mathbb{R}^m$ は、以下の条件をみたすとき単純である.

- f が連続で、
- それぞれの f_1, \ldots, f_m が最小点をもち,
- それらの最小点は X において一般の位置にある.

証明は会期後にまで渡って検討したが、これにも反例があることが確認された. 現在、上記に加えてジェット横断性を用いた証明を試みている.

6.2 局所的に単純な問題

単純な問題は、より複雑な問題の解集合を表すための基本部品としても重要である。定理 2.3 でみたように、パレート集合はジェネリックには滑層分割集合をなす。滑層分割集合は三角形分割可能であることが

 $^{*^2}$ 異なる目的関数の最小点が一致する可能性があり,そのときパレート集合は (m-1) 次元単体と微分同相にならない.

知られている。そこで、単純な問題の解集合を貼り合わせて全体を表現する方法が考えられる。

定義 6.2 問題 $f: X \to \mathbb{R}^m$ のパレート集合の各点 x に対して,x の近傍 U が存在して,問題 $f|_U: U \to \mathbb{R}^m$ が単純な問題であるとき,f は局所的に単純 (locally simple) であるという.

特異点論においてよく知られた事実から,特別な写像についてはそれが可能であることが示された.

定理 6.3 折り目写像 $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ は局所的に単純である.

証明 6.1 はじめに、f自身が単純な問題の条件(S1)と(S2)をみたすことを示す。折り目写像は $n \ge m$ なので、定理 2.1 よりパレート集合 $X^*(f)$ は特異点集合 S(f) の部分集合である。各パレート点 $x \in X^*(f)$ の近傍 U として閉球を十分小さくとれば、 $U \cap X^*(f)$ も閉単体と同相になるので、(S1)をみたす。一般に、折り目写像の特異点集合への制限 $f|_{S(f)}:S(f)\to\mathbb{R}^m$ ははめ込みであり、はめ込みの制限ははめ込みである。したがって、 $f|_{X^*(f)}:X^*(f)\to\mathbb{R}^m$ ははめ込みである。定義より、はめ込みは各点の近傍において埋め込みである。よって、 $f|_{U\cap X^*(f)}:U\cap X^*(f)\to\mathbb{R}^m$ は埋め込みとなり、(S2)をみたす。

次に、f の部分問題について示す。f の各パレート点は、部分問題の写像 g の折り目特異点であるか、正則点であるかのいずれかになる。前者なら上記と同様に示すことができ、後者なら自明である。

7 パレート点の特異点型

6.2 節の結果により、折り目写像については、パレート集合をカバーする戦略が立てられた。残念ながら、 折り目写像はジェネリックではなく、安定写像には他にも様々な種類の特異点が生じうる。そこで、一般的 な安定写像のパレート集合をカバーする戦略を立てるために、パレート点にどのような特異点が生じうるか を理解する必要がある。

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 $f:(\mathbb{R}^n,x)\to (\mathbb{R}^m,v)$ と $g:(\mathbb{R}^n,y)\to (\mathbb{R}^m,w)$ 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 $\psi:(\mathbb{R}^n,x)\to (\mathbb{R}^n,y)$ と $\varphi:(\mathbb{R}^m,v)\to (\mathbb{R}^n,w)$ が存在するとき,点 x と y は A 同値 (A-equivalent) であるという.

$$(\mathbb{R}^{n}, x) \xrightarrow{f} (\mathbb{R}^{m}, v)$$

$$\downarrow^{\varphi}$$

$$(\mathbb{R}^{n}, y) \xrightarrow{g} (\mathbb{R}^{m}, w)$$

$$(7.1)$$

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を考えた。

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 \mathcal{A} 同値 (Pareto \mathcal{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 \mathcal{A} 型を分類せよ.

これに取り組むことは今後の課題である。なお、パレート点は像の境界に位置することから、パレート点には(通常の A 同値の意味での) A_k 型の Morin 特異点

$$f_k(x) = (x_1, \dots, x_{m-1}, x_m^{k+1} + \sum_{i=1}^{k-1} x_i x_m^{k-i} \pm x_{m+1}^2 \pm \dots \pm x_n^2) \quad (1 \le k \le m)$$

しか現れないかもしれないとの指摘が会期中になされた.まずは低次元のケースからこれを確認することが出発点になると思われる.

8 まとめ

本共同研究では、多目的最適化問題の解集合の可視化について、最適化・特異点論・可視化の研究者で議論し、産業応用におけるニーズに基づいて既存の可視化手法の問題点を明らかにし、既存手法を滑層分割集合上の Reeb 空間へと拡張した、得られた成果については、順次論文等で公表していく予定である。

最適化と特異点論の融合はいまだ萌芽的段階にあるため、本研究では個別の課題を解決するだけでなく、 以下のような取り組みも重要な目標として据えていた.

- ◆ 本分野の主要な研究課題を発掘し、その中でも数年~数十年スパンの大目標となる課題、およびそれ を解決するために直近で取り組むべき小課題へと整理し、分野発展の道筋を示すこと。
- それらの課題に対して組織的に研究を継続できるようにするためのコミュニティを形成すること.

当初計画を越えて活発な議論が交わされた結果、著者らがこれまでに開発した手法および本研究で開発した手法は、折り目写像に対しては期待通りに機能することがわかった.一方で、最終的には(何らかの意味で)ジェネリックな写像に対して通用する汎用的な方法論を目指すべきであることも確認された.折り目写像はある程度広い応用をカバーするものの、ジェネリックではない.折り目以外の特異点も考慮して、手法をより完全なものに近付けるためには、以下が必要となる.

- 1. パレート点の特異点型を(最適化問題の構造を保つ同値関係で)分類すること.
- 2. それらの特異点型に対する認識問題(非標準形で与えられた特異点のタイプを調べる問題)を解く方法を開発すること(これには理論的解法と数値的解法の両方を含む).
- 3. 折り目以外の特異点の写像芽に対しても、本研究で開発した手法を拡張すること.
- これらを実現するために、本稿の各章末で挙げた問題を解くことが重要な第一歩となる.

加えて、本研究を通して、参加者間で課題認識を共有し、継続研究を行うための人的ネットワークを形成することができた。今回の参加者およびその周囲の最適化・特異点論・可視化の研究者を交えて、上記の問題に対して、来年度以降も継続的にアプローチしていく予定である。

最後に、このような実り多い共同研究の機会を提供し、ご支援をいただいた事務局および関係者の皆様、 多忙なスケジュールをぬってご参加いただいた参加者の皆様に感謝したい.

参考文献

- [CKS17] Kazuhisa Chiba, Masahiro Kanazaki, and Toru Shimada, Effective operations of extinction-reignition with simple control of oxidizer flux on a single-stage sounding hybrid rocket, Proceedings of the 19th AIAA Non-Deterministic Approaches Conference, AIAA SciTech Forum (AIAA 2017-0588), 01 2017.
- [CMT08] K. Chiba, Y. Makino, and T. Takatoya, Evolutionary-based multidisciplinary design exploration for silent supersonic technology demonstrator wing, Journal of Aircraft 45 (2008), no. 5, 1481–1494.
- [GM88] M. Goresky and R. MacPherson, Stratified morse theory, vol. 14, Ergebnisse der Mathematik und ihrer Grenzgebiete, no. 3, Springer Berlin Heidelberg, 1988.
- [Ham17] Naoki Hamada, Simple problems: The simplicial gluing structure of Pareto sets and Pareto fronts, Proceedings of the Genetic and Evolutionary Computation Conference Companion (New York, NY, USA), GECCO '17, ACM, 2017, pp. 315–316.
- [HC17] N. Hamada and K. Chiba, Knee point analysis of many-objective pareto fronts based on reeb graph, 2017 IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC), June 2017, pp. 1603–1612.
- [LLTY15] Bingdong Li, Jinlong Li, Ke Tang, and Xin Yao, Many-objective evolutionary algorithms: A survey, ACM Comput. Surv. 48 (2015), no. 1, 13:1–13:35.
- [Lov11] A. Lovison, Singular continuation: Generating piecewise linear approximations to Pareto sets via global analysis, SIAM Journal on Optimization 21 (2011), no. 2, 463–490.

- [LP14] A. Lovison and F. Pecci, *Hierarchical stratification of Pareto sets*, ArXiv e-prints (2014), http://arxiv.org/abs/1407.1755.
- [Sma73] S. Smale, Global analysis and economics I: Pareto optimum and a generalization of Morse theory, Dynamical Systems (M. M. Peixoto, ed.), Academic Press, 1973, pp. 531–544.
- [SMC07] G. Singh, F. Memoli, and G. Carlsson, Topological Methods for the Analysis of High Dimensional Data Sets and 3D Object Recognition, Proceedings of the Symposium on Point Based Graphics (Prague, Czech Republic), Eurographics Association, 2007, pp. 91– 100.
- [SSC⁺16] D. Sakurai, O. Saeki, H. Carr, H. Y. Wu, T. Yamamoto, D. Duke, and S. Takahashi, Interactive visualization for singular fibers of functions $f: \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^2$, IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics **22** (2016), no. 1, 945–954.