

多目的最適化のための説明変数と目的関数の連携可視化

久保田 真季[‡] 伊藤 貴之[‡]

†お茶の水女子大学 〒112-8610 東京都文京区大塚 2-1-1

E-mail: ‡{makinosuke, itot}@itolab.is.ocha.ac.jp

あらまし 多目的最適化は多くの学術分野および産業分野で利用されているが、それぞれの目的関数間の間にトレードオフの関係があるために、非常に複雑な数値空間を探索する必要がしばしば生じる。本研究では、多目的最適化問題における個体群を可視化することによって、その数値空間の直感的理解を促そうと考えた。本報告が提案する可視化手法では、画面を左右に二分して、その各々に説明変数と目的関数の両方を表示することによって、両者の関係性を明確に表現する。また、その一方において興味ある数値領域を指定操作すると、それに該当する個体群が説明変数と目的関数の両方においてハイライトされる連携機能を有する。これによって興味領域を簡単に絞り込むことができるので、将来の最適化プロセスの改善につながると考えられる。

キーワード 可視化, 多目的最適化, トレードオフ, パレート解

A Linked Visualization System for Multi-objective Optimization

Maki KUBOTA[‡] and Takayuki ITOH[‡]

†Department of Information Sciences, Faculty of Science, Ochanomizu University

2-1-1 Otsuka, Bunkyo-ku, Tokyo, 112-8610 Japan

E-mail: ‡{makinosuke, itot}@itolab.is.ocha.ac.jp

Abstract Multiple-objective optimization techniques have been applied in various academic and industry fields. It is often difficult to optimize all the objectives since they often cause trade-offs. It is also difficult what kinds of trade-offs actually cause. We think visualization of multi-objective optimization results assists users to intuitively understand the distributions of their solutions. This paper proposes a visualization of explanatory variable and objective function spaces in the separate views, so that users can easily understand their relevancy. Also, our technique features the linkage mechanism between the two views. When a user selects certain ranges of the values by a mouse click operation, the technique highlights all the corresponding individuals. This mechanism is useful for users to narrow down the results. We expect the technique assists the understanding of the behavior of the optimization processes and improvement of the future processes.

Keyword Visualization, Multi-objective optimization, Trade-off function, Pareto optimal solutions

1. 概要

多目的最適化問題は複数の目的関数に対して同時に最適化を目指す問題を指す。これを定式化すると、目的関数への引数となる n 次元の説明変数を $\mathbf{x}=(x_1, \dots, x_n)$ とするとき、 m 個の目的関数 $y_j=f_j(\mathbf{x})$ の各々について同時に最適化を目指す問題を指す。このとき、目的関数どうしが互いにトレードオフの関係となっていることで、しばしば問題は複雑化する。言い換えれば多くの場合において、一つの目的関数を最適化する説明変数は、他の目的関数を最適化しないことを意味する。

多目的最適化は既に、航空機、自動車、電車などの工業設計をはじめとして、非常に幅広い分野で利用されている。しかしその問題の複雑さゆえに、最適化のプロセスには熟練を要することが多い。

多目的最適化における説明変数および目的関数はいずれも多次元の変数であると考えると、多次元データの情報可視化手法を適用することでその数値分布の理解を支援できると考えられる。近年では多目的最適化問題を支援するための可視化手法がいくつか提案されている。しかし、その多くは目的関数の数値分布の

みを表示しており，説明変数と目的関数の関係性を直接的に表現しているとはいえない。

そこで本報告では，多目的最適化問題における説明変数と目的関数の両方の数値分布を同時表示する可視化の一手法を提案する．本手法では可視化の画面を左右に二分し，その両方に多次元データ可視化手法を搭載する．そして左側に説明変数，右側に目的関数を表示することで，両者の関係性を明確に表すことを可能にした．さらにその画面上の左右いずれかにおいて，ユーザが特定の変数の数値範囲をマウス操作で指定することで，説明変数および目的関数の両者において該当する個体だけをハイライトする連携機能を設けた．2種類の可視化画面を連携操作するこのような機能は，可視化の分野では学術的には **Coordinate View** あるいは **Linked View** といった既に知られているが，多目的最適化問題にこの仕組みを適用した手法は，我々が調べた限りほとんど見られない．本報告では，この仕組みが多目的最適化問題の数値分布の理解支援につながる例を示す．

2. 関連研究

2.1 多次元データの可視化手法

一般的に多目的最適化問題における説明変数と目的関数は次元数が大きくなる場合が多い．ゆえに，これらを可視化する際，多次元データの可視化手法が有用である．

散布図は，多次元データの可視化に最も多く用いられる．2次元もしくは3次元であれば，散布図の各座標軸にその各次元を割り当てる．また，4次元以上である場合には，任意の2つの次元を2軸に割り当て形成される散布図群を格子状に配列表示する **Scatter Plot Matrix** を用いるか，次元削減手法を用いて寄与度の高い2個または3個の次元を散布図の各軸に割り当てる．また散布図に割り当てる次元を対話的かつ効果的に選択させる手法も増えている[1]．

それに対して，4個以上の次元を直接的に表現する多次元データ可視化手法も多数発表されている．多次元データを構成する各次元を所定の規則にそってアイコン等のデザインに置き換える手法[2]や，すべての軸を並行に描画して各個体を折れ線表示する **Parallel Coordinate Plot (PCP)**[3]などが知られている．

散布図とそれ以外の手法には原理的に一長一短の関係にある．散布図は広く普及しており，さらに各個体を点で表現することから相対的に多数の個体を表現可能であるが，2,3次元を超える多変数の各値を同時に読み取るのは困難である．それ以外のアイコンベースの手法や **PCP** などは，2,3次元を超える多変数の各値を同時に読み取ることはできるが，個体を線や図形で

表現することから数千個単位の個体を一画面領域に表現するのは難しい．また散布図ほど普及していないことから，利用者に訓練を要する場合がある．

2.2 多目的最適化問題への可視化手法の適用

多目的最適化問題における個体の振る舞いや分布は複雑であり，この理解を可視化によって支援しようという研究は近年になって増えている．

Eddyら[4]は，**Cloud Visualization**という散布図の一種を用いてパレート解を可視化している．大林ら[5]は，自己組織化マップ (**SOM**) を用いてパレート解をクラスタリングおよび可視化している．これらの可視化結果は目的関数の分布を表示しているだけであり，それをもたらした説明変数を直接表現しているものではない．

また，多目的最適化の可視化の中でもパレート解を可視化するのではなく，パレート解が存在する限界領域 (パレートフロンティア) を可視化する手法[6]も提案されている．しかし，この手法も目的関数空間を描いたものであり，それをもたらした説明変数を直接表現しているものではない．

3. 説明変数と目的関数の連携可視化

本章では説明変数と目的関数を連携可視化する手法を提案する．図1に本手法の概観を示す．本手法ではウィンドウを左右に分割し，左側に説明変数を，右側に目的関数を，それぞれ多次元データとみなして可視化する．

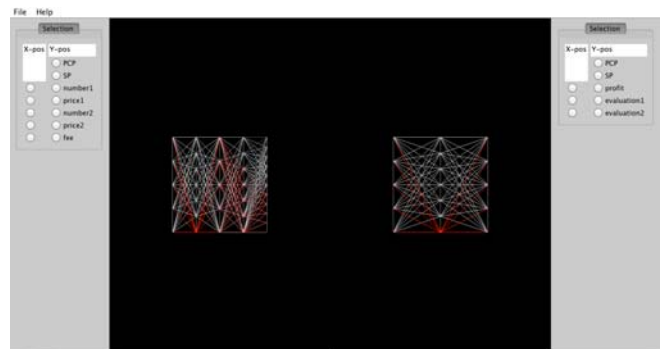


図1 可視化手法の概観

3.1 可視化手法の選択

2.1節でも前述のとおり，多次元データ可視化手法は一長一短の関係にあり，利用者の習熟度や目標設定によって望ましい手法の選択も変わってくる．そこで我々は複数の多次元データ可視化手法を統合的に扱えるのが望ましいと考えた．現時点の我々の実装では，**Parallel Coordinate Plot**と2次元の散布図(**Scatter Plot**)

を可視化手法として搭載している。そして画面両側のボタン選択によって、利用者が必要に応じてそれらの可視化手法を選択できる。

3.2 個体の選択操作と連携可視化

本手法では、利用者のマウス操作によって画面上の特定の矩形領域を指定することで、その領域に描かれている個体だけを選択してハイライト表示させる機能を有する。このとき、説明変数側で選択操作をしたら目的関数側も、逆に目的関数側で選択操作をしたら説明変数側も、というように両方が連携してハイライト表示する。このようにして説明変数と目的関数の両側から興味範囲を絞りこむことができる。図1では赤の折れ線が興味範囲を示している。

この機能によって、例えば将来的に類似したデータセットを分析する際に、最初から数値範囲を絞り込んでおくことで計算量の削減を狙うことができる。

4. 適用例

本研究は企業から提供頂いた業務上の多目的最適化のデータを題材にして進めている。しかし、そのデータでは企業の機密に関わるものであるため、本報告ではそのかわりに、著者自身で作成した以下の簡単な例題を可視化した例を示す。

パーティーの男女別会費を決定する問題を考える。男性および女性の参加者数を n_1 および n_2 、男性および女性の1人当たりの会費を p_1 および p_2 、会場に支払う参加者1名（男女問わず）あたりの代金を c とする。本章では以上の5変数を説明変数とする。それに対して我々は以下の3つの目的関数を設けた。

1) パーティー主催者の利益 f_1 。以下の式で算出する。

$$f_1 = (p_1 n_1 + p_2 n_2) - c (n_1 + n_2)$$

2) 男性参加者の満足度 f_2 。料理の質への不満度 (c の減少に対して単調増加する関数 $g_1(c)$) と、男性に対して女性が少ないことへの不満度 ($n_1 - n_2$ の増加に対して単調増加する関数 $g_2(n_1 - n_2)$) を用いて、以下の式で算出する。

$$f_2 = 1.0 - (g_1 + g_2)$$

3) 女性参加者の満足度 f_3 。料理の質への不満度 (c の減少に対して単調増加する関数 $g_3(c)$) を用いて、以下の式で算出する。

$$f_3 = 1.0 - g_3$$

この3つの目的関数は、会場に支払う代金 c が大きいほど f_2 と f_3 が下がるが f_1 が上がる、というトレードオフを含んでいる。また会費は男性のほうが高く設定されると仮定すると、 n_1 が大きいほうが f_1 が上がるが、 $n_1 - n_2$ が大きいほど f_2 が下がる、というトレードオフを

含んでいる。

以下、これらの説明変数と目的関数を PCP で可視化して連携操作した結果を示す。説明変数の軸は左から順に n_1, p_1, n_2, p_2, c を示し、目的関数の軸は左から順に f_1, f_2, f_3 を示す。

図2(a)は5種類の説明変数の値を数段階に変化させて各目的関数の値を算出した結果である。これに対してマウス操作で利益 f_1 がゼロに近い範囲を指定した結果が図2(b)である。これを見ると f_1 の軸では赤い折れ線が指定された範囲にのみ描かれているのに対して、他の全ての軸において赤い折れ線は上下に分散されている。そこで次の条件として、マウス操作で男性の満足度 f_2 が十分高い範囲を指定した結果が図2(c)である。これを見ると説明変数の3番目の軸である n_2 において、赤い折れ線は上部に集中していることがわかる。このことから、男性の満足度をあげるには女性を多数集めることが必須であることが示唆される。

一方で図2(d)は、説明変数側の範囲を指定した結果である。この結果では n_1 が小さい範囲を指定して、さらに p_1 が大きい範囲を指定している。その結果として女性の満足度 f_3 の軸において、赤い折れ線が下部に集中した。この結果から、女性の満足度を上げるためには男性の会費だけでなく人数も集める必要があることが示唆される。

5. まとめ

本報告では、説明変数と目的関数の両方を1画面に表示して互いに連携操作させることにより、両者の関係性を視覚的に認識しやすくし、多目的最適化問題の数値分布の理解を支援する手法を提案した。

今後の課題として以下があげられる。

可視化手法の拡張と改善: 散布図においては前述の文献[1]のような手法を採用して、可視化すべき次元を選択しやすくする必要がある。また Parallel Coordinate Plot においては、次元間の相関性を考慮して軸順番を決定する手法を採用することで、視認性の向上が期待される。さらに、Parallel Coordinate Plot と散布図にこだわらずに、もっと本報告の目的に合った手法を開拓することも考えたい。

最適化手法との連携: 現時点での我々の実装は、多目的最適化そのものは別のシステムによって実施され、その結果だけを与えられるという前提にたったものである。しかし最適化のプロセスと連携することで、例えば反復計算の世代が進むに沿ってどのように目的関数が最適に近づくかを可視化することや、パレート解に到達したものとそれ以外のものをわけて可視化する、といったことが可能になる。そこで最適化のプログラ

ムと連携した実装を試したい。

さらなる適用事例とユーザテスト: 他の最適化結果において本手法が有効な可視化結果を得られるかを検証するとともに、著者以外の第三者による操作によっても有効な知見を得られるかをユーザテストによって検証したい。

参 考 文 献

- [1] N. Elmqvist, P. Dragicevic, J. Fekete, Rolling the Dice: Multidimensional Visual Exploration using Scatterplot Matrix Navigation, IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics, 14(6), 1141-1148, 2008.
- [2] D. A. Keim, Information Visualization and Visual Data Mining, IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics, 8(1), pp. 1-8, 2002.
- [3] A. Inselberg, B. Dimsdale, Parallel Coordinate: A Tool for Visualizing Multi-Dimensional Geometry, IEEE Visualization, 361-370, 1990.
- [4] J. Eddy, K. Lewis, Visualization of Multidimensional Design and Optimization Using Cloud Visualization, ASME Design Engineering Technical Conferences, DETC02/DAC-2006.
- [5] 大林茂, 多目的最適化と情報可視化データマイニング, 豊田研究報告, 58, 109-116, 2005.
- [6] G. Agrawal, K. Lewis, K. Chugh, C.-H. Huang, S. Parashar, C. L. Bloebaum, Intuitive Visualization of Pareto Frontier for Multi-Objective Optimization in N-Dimensional Performance Space, Tenth AIAA/ISSMO Multidisciplinary Analysis and Optimization Conference, Albany, AIAA-2004-4434, 2004.

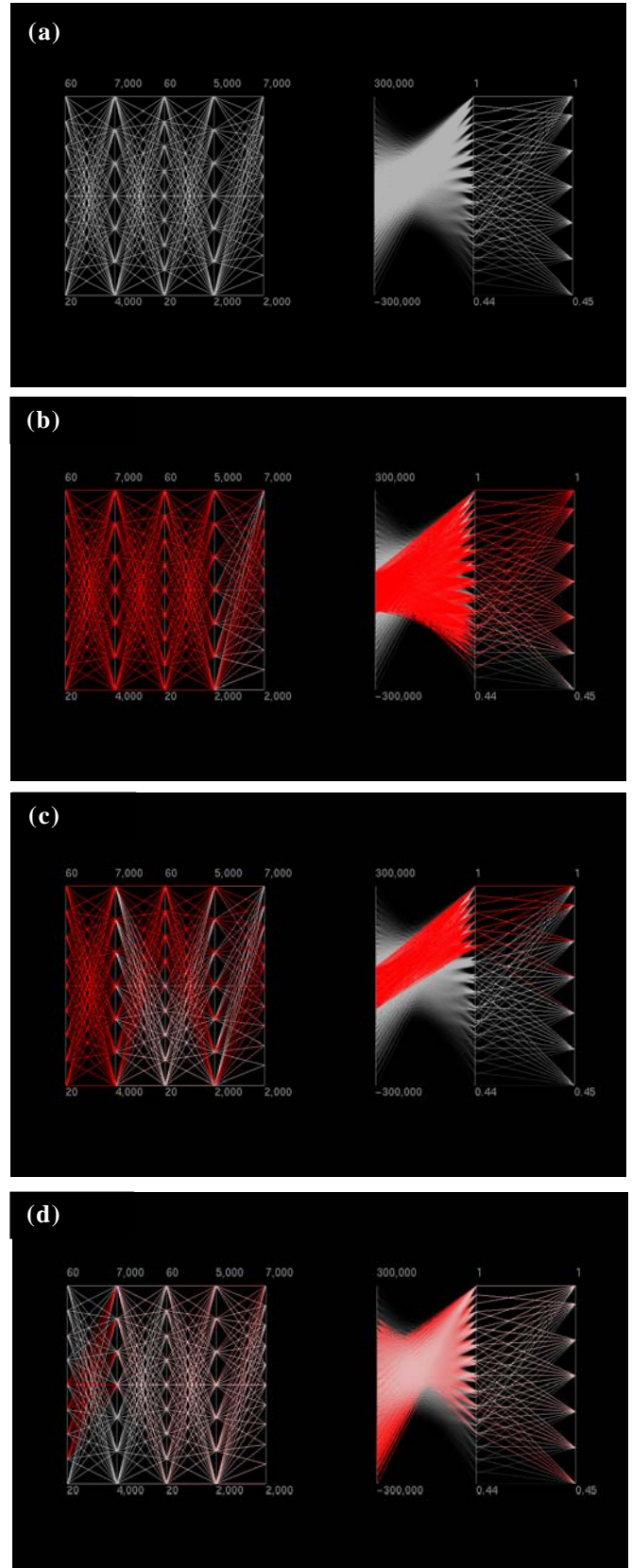


図 2 適用例