

応答曲面法支援のためのSVMに関する基礎的研究

北海学園大学 正会員 ○杉本 博之, 大学院 学生員 阿部 淳一
山口大学 フェロー会員 古川 浩平

1. 研究目的 筆者らは、橋梁構造物に含まれる複数のRC橋脚の離散的耐震設計のためにRBFネットワークを用いる近似法を提案し良好な結果を得た¹⁾。そこでは、GA初期に発生された多数の設計解候補から任意に選ばれた少数の設計解からスタートし、設計過程の進行に伴い設計解を追加して近似の精度を上げて行き、最終的に少ない回数の厳密な非線形時刻歴応答解析により有効な設計解を得ることが出来た。追加される設計解は2点で、一つは局所的な精度を得るための最適設計解あるいはその近傍であり、もう一つは全域的な精度を得るための疎な設計解である。この場合、追加される疎な設計解は許容・非許容の境界領域から遠く、応答曲面の更新に貢献しない場合でも厳密な構造解析が要求されることになるが、出来ることなら境界面近傍の設計解の方が望ましい。これが有効な応答曲面作成に残された大きな課題であった。

一方、現在、サポートベクターマシン (Support Vector Machine, 以下SVM) は、学習機能を有するパターン分類法の一つとして注目を浴びている。SVMはVapnikらが、1960年代に提案したOptimal Separating Hyper Plane (OSH) に源流がある。この手法は超平面を用いてパターンを分離する手法であり、線形分離可能な場合には高い認識能力を示した。しかし、線形分離可能な場合は現実にはほとんど存在せず、必ずしも有効な手法ではなかった。しかし、1990年代になってVapnik自身によって再発見され、カーネルトリック(kernel trick)を組み合わせることにより、非線形識別可能な手法に拡張され、SVMは飛躍的に認識能力を向上させた²⁾。このSVMの識別能力は優れており、現在種々の工学分野で応用されている。またSVMは、識別面からの距離が容易に得られるのも特徴の一つであり、本研究はこの特徴を利用して、構造最適設計における応答曲面形成の支援として、SVMの応用の可能性を検討することを目的としている。

2. SVMの概要 SVMの概念図を図1に示した。□と○を分離する識別関数 $f(\mathbf{x})$ を求める問題になるが、そのときデータの存在する領域の境界面間の距離 $1/\|\mathbf{w}\|$ が出来るだけ大きくなるように求める。完全に分離できる場合をハードマージン、一部分離できない場合をソフトマージンと言う。結局、線形条件のある2次関数の最大化問題に変換されるが、理論の詳細は省略し²⁾、結果のみを示すと以下ようになる。

トレーニングデータの集合を

$\mathbf{S} = \{(\mathbf{x}_1, y_1), \dots, (\mathbf{x}_\ell, y_\ell)\}$, $\mathbf{x}_i \in \mathbf{R}^N$, $y_i \in \{-1, 1\}$ (1)
と表す。つまり、それぞれのデータはN個の成分(入力)とクラス分けのための指標 $\{-1, 1\}$ (出力)から成っている。

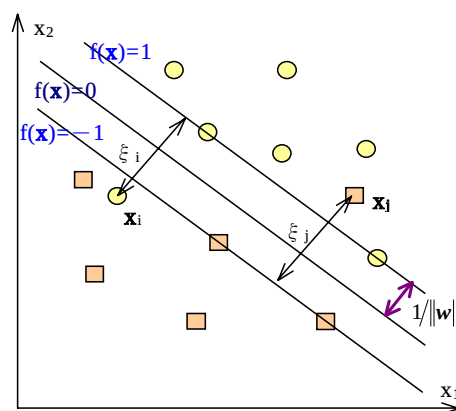


図1 SVMの概念図

いま、すべてのデータの完全な線形分離が不可能(ハードマージン最適化が適応できない)な場合のソフトマージン最適化の問題は、以下のように定義される。 $\mathbf{w}$ は線形識別関数の係数である。

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{w}, b, \xi} \quad & \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2 + C \sum_{i=1}^{\ell} \xi_i \quad \mathbf{w} \in \mathbf{R}^N, b \in \mathbf{R}, \xi \in \mathbf{R}^{\ell} \\ \text{subject to} \quad & y_i(\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_i + b) \geq 1 - \xi_i, i=1, \dots, \ell, \quad \text{および} \quad \xi_i \geq 0, i=1, \dots, \ell \end{aligned} \quad (2)$$

一般に、平面による識別が適切であるとは限らない。より複雑な識別のために、曲面による分離を考える。

まず、入力データ $\mathbf{x}$ を高次元空間(特徴空間)に射像する。ここでカーネル関数を導入すると、式(2)は結局、以下の双対問題となり、Lagrange乗数 α_i^* ($i=1 \sim \ell$)に関する最適化問題となる。

キーワード サポートベクターマシン, 応答曲面法, 識別関数, 構造最適化, カーネル

連絡先 〒064-0926 札幌市中央区南26条西11丁目 TEL(011)841-1161 FAX(011)551-2951

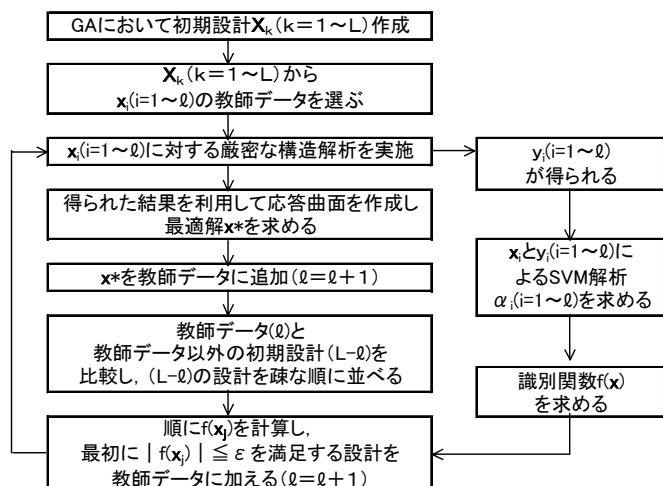


図2 SVMを応答曲面作成の支援に用いた流れ図

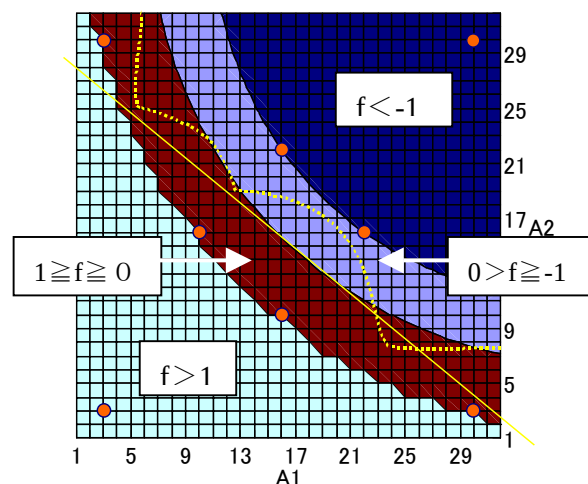


図3 SVMによる設計空間近似の例

$$\max_{\alpha} \text{imize} \quad W(\alpha) = \sum_{i=1}^{\ell} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{\ell} \alpha_i \alpha_j y_i y_j K(x_i, x_j) \quad \alpha \in R^{\ell} \quad (3)$$

$$\text{subject to} \quad \sum_{i=1}^{\ell} \alpha_i y_i = 0, \quad 0 \leq \alpha_i \leq C, \quad i=1, \dots, \ell$$

また、識別関数(discriminate function)は、 $f(x) = \sum_{j \in S_v} \alpha_j^* y_j K(x_j, x) + b^*$ (4) で与えられる。Kはカーネル関数である。本研究では、Gauss カーネルを用いる。b*はバイアスと呼ばれる値である。式(3)の最適解(Lagrange 乗数) α_i^* (i=1~l) は大部分が0になるが、 $\alpha_i^* > 0$ の教師データがサポートベクターと呼ばれる。式(4)の S_v はサポートベクトルの集合を現す。

本研究では、カーネル関数として次式の Gauss カーネルを用いる。

$$K(x_i, x_j) = \exp \left[-\frac{\|x_i - x_j\|^2}{2r^2} \right], \quad (i, j = 1, \dots, \ell) \quad (5)$$

r は半径であり、式(2)のCとともに事前に入力が必要なパラメータとなる。

式(3)の目的関数は凸な2次関数であり、最適化問題としては数値計算上扱いやすい問題である。

3. SVMによる応答曲面形成の支援 研究目的にも書いたように、離散的な変数を扱う最適化問題に応答曲面法を応用する場合、追加される教師データは“疎”な設計解でも許容と非許容の境界面から遠く離れた点では意味がなく、従来はその決定は難しい問題であった。ところが、式(4)の識別関数で計算される値は現在の教師データから形成される境界面からの距離を表す。しかも、式(4)が与えられればその計算は簡単であるし、式(4)を決める式(3)の最適化問題は扱いやすい最適化問題で数百の設計変数まで容易にかつ精度良く求めることが出来る。図2にSVMを応答曲面作成の支援に用いた場合の流れ図の例を示す。図の左の流れが、従来の教師データの追加の論理であり、流れの後半部分に識別関数による判定が入る。識別関数の作成は図の右に示した計算である。厳密な構造解析の結果から各教師データが許容 ($y=-1$) あるいは非許容 ($y=1$) の情報を得てSVMの解析を行い、 α_i (i=1~l) を求めて識別関数を得ることが出来る。

図3は、交差梁³⁾の設計空間をSVMにより近似した例である。点線で示した曲線が厳密な制約曲線である。図中に点で示した8点を教師データとした例であるが、 $-1 \leq f(x) \leq +1$ の領域(赤紫と薄い青紫)が制約曲線を含んで示されており、有効な追加設計解の選択の可能性を示している。

4. まとめ 現在、学習機能を有するパターン分類法の一つとして注目を浴びているSVMを、応答曲面作成の支援に用いる試みを説明した。一つの設計解の解析、照査に多くの時間がかかる構造物の最適設計には、応答曲面法の利用は必要であるが、SVMは少ない構造解析回数で有効な応答曲面を提供しうられる。

参考文献 1) 阿部, 渡邊, 杉本: RBF ネットワークによる制約条件近似とRC橋脚の最適耐震設計に関する研究土木学会論文集 Vol.62, No.2, 2006. 2) N. Cristianini & J. Shawe-Taylor: An Introduction to Support Vector Machines and other kernel-based learning methods, Cambridge University Press, 2000. 邦訳 大北剛: サポートベクターマシン入門, 共立出版, 2005. 3) 山田他編著: 最適構造設計—概念・方法・応用—, 丸善, 1983.