ＳＶＭによる制約曲面近似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
大学院　学生員　一間　恵伍，　山口大学　フェロー会員　古川　浩平

１．研究目的　サポートベクターマシン(Support Vector Machine，以下 SVM)は，複数の成分から構成される多数のデータを２つのグループに分類する決定関数(decision function)を誘導する．1960 年代に Vapnik らにより提案された手法は，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が，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．

筆者らは，RC 橋脚の離散的耐震設計等のために RBF ネットワークを用いる近似法を提案し[1)]，設計解の追加論理として SVM を利用することを研究してきた[2)]．これは，SVM で得られるサポートベクター間の領域をアクティブ領域と定義し，そのアクティブ領域のみから疎なデータを追加することにより，近似曲面形成に効果のないデータの追加を避け，最適化の過程の合理性を上げようとするものであった．その研究の過程で，データ数の増加に伴いアクティブ領域の幅が徐々に狭くなる現象が現れた．アクティブ領域が狭くなるということは，データを選ぶという観点からは不都合な現象である．しかし，アクティブ領域は必ずサポートベクター間に形成されるので，それが狭くなる状態の極限を考えれば制約曲面の良質な近似につながる可能性もある．

以上より本研究は，アクティブ領域からデータを追加することにより，制約曲面の近似がどの程度可能かについて基礎的な検討を加えることを目的とする．

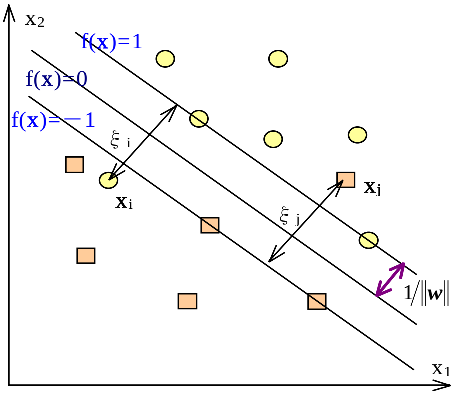
２．SVM の概要[3)]　SVM はまず教師データが与えられてそれにより決定関数を求め，その決定関数を以後のデータの分析に用いるという手法である．最初に与えられる教師データは以下である．

$$\boldsymbol{S} = \{(\boldsymbol{x}_1, y_1), \cdots, (\boldsymbol{x}_\ell, y_\ell)\}\ ,\ \boldsymbol{x}_i \in \boldsymbol{R}^N\ ,\ y_i \in \{-1, 1\} \quad (1)$$

ここで，$\boldsymbol{x}_i$は教師データの成分，y_iはクラス分けのための指標，ℓ は教師データの数，N は教師データの成分の数である．つまり，

$$\boldsymbol{x}_i = (x_1\ x_2 \cdot\cdot\cdot x_N)_i \quad ,\quad i = 1 \sim \ell \quad (2)$$

となる．指標y_iの値は，例えば，設計解が許容であれば＋１，非許容であれば－1 などである．



図－1　SVM の概念図

ソフトマージンの SVM の概念図を図－1 に示した．□と○を分離する決定関数 f(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限界面間の距離 1/||w||が出来るだけ大きくなるように求める．この問題は，結局，線形等号条件のある２次関数の最大化問題として以下のように定義される．**w** は決定関数の係数である．

$$\min_{w,b,\xi} \quad \frac{1}{2}\|w\|^2 + C\sum_{i=1}^{\ell}\xi_i \qquad w \in R^N,\ b \in R,\ \xi \in R^\ell \quad (3)$$

$$\text{ただし，}\quad y_i(w \cdot x_i + b) \geq 1 - \xi_i\ ,\ i = 1 \sim \ell\ ,\ \text{および}\quad \xi_i \geq 0\ ,\ i = 1 \sim \ell$$

ここで，C はスラック変数ξに対する重み係数で，値を大きく設定すればするほど誤判別の度合いが少なくなり，ハードマージンに近づく．一般に，平面による識別が適切であるとは限らないので，曲面による分離を考える．そのため，まず，入力データ $\boldsymbol{x}$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（３）は結局，以下の双対問題となり，Lagrange 乗数α_i^*（i=1～ℓ）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，近似制約曲面，決定関数，構造最適化，アクティブ領域
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

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

$$\text{ただし，}\quad \sum_{i=1}^{\ell}\alpha_i y_i=0\ ,\quad 0\le\alpha_i\le C\quad ,\ i=1,\cdots,\ell \tag{4}$$

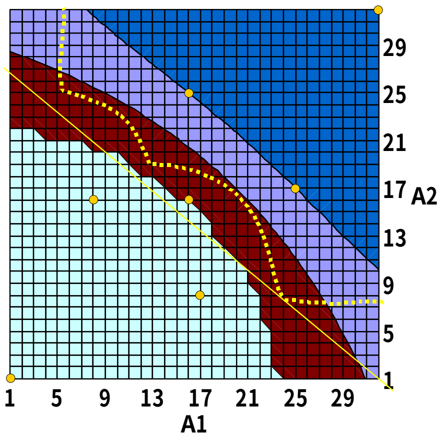
ここで，Kはカーネル関数である．決定関数及び Gauss カーネルはそれぞれ式（4），（5）で表される．

$$f(\boldsymbol{x})=\sum_{j\in Sv}\alpha_j^{*}y_j\boldsymbol{K}(\boldsymbol{x}_j,\boldsymbol{x})+b^{*} \tag{5}$$

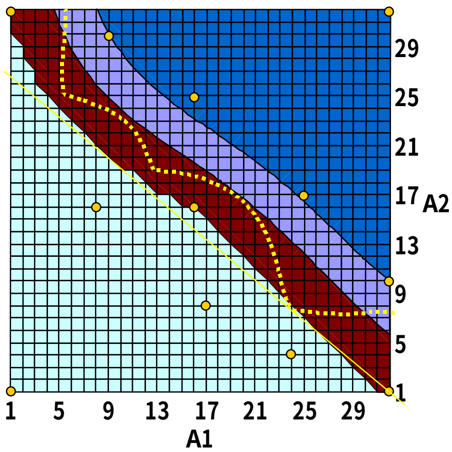
$$K(x_i,x_j)=\exp\left[-\left\|x_i-x_j\right\|^2/2r^2\right]\quad ,\quad (i,j=1\sim\ell) \tag{6}$$

ここで，r は半径，Sv はサポートベクトルの集合，b*はバイアスと呼ばれる値である．

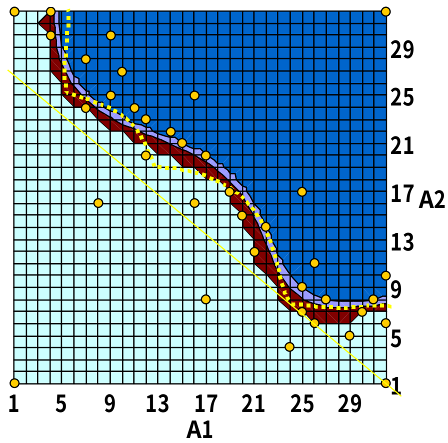
３．SVM による制約曲面の近似　SVM による制約曲面の近似の可能性を検討するために，比較的複雑な制約曲線を形成する交差梁の問題[4] を例として検討する．設計変数は，x_1，x_2の 2 変数問題であるが，それぞれ 1～32 の範囲の値をとるものとする．初期には，図－2 に示す中央の 5 設計に，設計解の許容，非許容が自明である(1, 1)と(32, 32)を加えた 7 設計を与えて SVM による計算を開始する．初期に任意に設定された 350 の設計からアクティブ領域（－１≦f(**x**)≦＋1）内の設計を判別し，それらの設計間の距離を計算して，疎の程度の高い順に設計を追加して計算を進める．追加する設計の数は，ここでは，1 回目は 5 設計，2 回目は 4 設計，3 回目は 3 設計，以降 2 設計の追加とする．r=0.5 および C=∞の場合の計算結果の一部を図－3，4 に示す．点線は厳密な制約曲線，青紫と赤紫の境目が近似曲線であるが，8 回目で比較的良好な近似曲線が得られている．



図－２　初期状態



図－３　２回目(5 点追加)



図－４　８回目（20 点追加）

パラメータの C と半径 r の効果について簡単に触れると以下のようになる．C の値が小さく設定されると，式(4)の最適化問題において，Lagrange 乗数$\alpha_i{}^{*}$が上限値で抑えられる場合が多くなり，その場合は対応する設計は誤判定される可能性が高くなる．本報告の計算においては，上限値に抑えられないように大きな値を設定している．半径 r は，大きめの値を設定すると分離曲面は平面的になり，小さめの値を設定すると曲面（線）によく追随する分離曲面が得られる．また，小さめの値の場合に，実際の制約曲面とは離れた場所に独立してアクティブ領域が現れることがある．C と r の値の設定については，今後さらに検討する必要がある．

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，制約曲面近似に用いることを試みた．有効性が示されると，従来視覚化が困難であった多変数最適化問題において，設計空間の視覚化と簡便な最適化手法の開発につながる．本報告で示した例を含めて，いくつかの計算例では良好な結果を示しているが，パラメータの設定，あるいは本文では触れていないがデータの正規化等になお課題を残している．その上で多変数最適化問題における多次元空間の近似の精度と合理性などを検討したい．

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, No2, 2006.　2）H. Sugimoto, J. Abe & K. Furukawa: Basic Research on SVM as Support System of Constraints Approximation, *Proc. of The 4th CJK Joint Symposium on Optimization of Structural and Mechanical Systems*, General Lecture, 2006.　3）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.　4）山田他編著：最適構造設計－概念・方法・応用－，丸善，1983.