

非線形最適化へのサポートベクターマシンの応用に関する考察*

An Consideration on Application of Support Vector Machine for Non-linear Optimization*

有村 幹治**・長谷川 裕修***・藤井 勝****・田村 亨*****

By Mikiharu ARIMURA**・Hironobu HASEGAWA***・Masaru HUIJI****・Tohru TAMURA*****

1. はじめに

微分不能かつ多峰性をもつ非線形な目的関数を持つ最適化問題において制約条件を満たす解の存在領域が不明な場合、最適化計算の過程において生成された解候補の出力値を利用することで、少ない解析回数で精度の良い最適解を効率的に探索できる。これは例えば入出力値の関係が完全に把握できない相互作用系シミュレータを評価システムとして用いる最適設計問題において、求められる性能水準が制約条件として複数存在する場合、またシミュレータの各パラメータの初期探索点の上下限値は所与であっても、制約条件を満たすパラメータの組み合わせが不明の場合、パラメータの探索過程において判明した出力値を基に、目的関数の応答曲面と制約曲面を推定することで、パラメータの存在領域を抽出しつつ、最適化を実行するアプローチである。微分不能かつ多峰性をもつ非線形目的関数に対する最適化手法としては、GA等のメタヒューリスティック手法が有力視されるものの、多点探索であるGAは、制約を満足しない解が多数生成される可能性があり、シミュレーションに時間を要する場合、単純にGAを適用することは現実的ではない。この問題は遺伝子列のコーディング方法や制約を満たさない解に対するペナルティ関数の設定等により回避できるが、事前にパラメータの存在領域を知る必要があるため、根本的な問題解決には至っていない。

そこで本研究では、非線形判別分析手法として近年注目されるサポートベクターマシン (Support Vector Machine: 以下SVMと記す) を制約曲面の近似手法として最適化計算に用いることで、少ない解析回数で精度の良い解を得る方法論について考察する。

*キーワード: 非線形最適化、サポートベクターマシン

**正員,工博,(株)ドーコン交通部 (札幌市厚別区厚別中央1-5-4-1 TEL 011-801-1520,FAX 011-801-1521)

***学生員,工修,室蘭工業大学大学院工学研究科建設システム工学専攻博士後期課程 (北海道室蘭市水元町27番1号TEL0143-46-5289、FAX0143-46-5289)

****学生員,工修,室蘭工業大学大学院工学研究科建設システム工学専攻博士後期課程

*****正員,工博,室蘭工業大学工学部建設システム工学科

2. SVM

SVMはVapnikらが、1960年代に提案したOptimal Separating Hyperplaneを基礎とする二値判別手法であり1990年代になってVapnik自身により、カーネル関数を組み込むことで非線形判別にも対応できるモデルとして拡張された。この拡張によりSVMは最も認識性能の優れた手法の一つと言われる¹⁾。

SVMは、線形しきい素子を用いて2クラスのパターン識別器を構成する手法である。SVMの概念図を図-1に示す。データ群とを分離する識別関数 $f(x)$ 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 H_1 、 H_2 間の距離 $1/\|w\|$ を最大化させる $f(x)$ を求める。2種類のデータを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いい、いずれも線形条件のある2次関数の最大化問題に変換される。

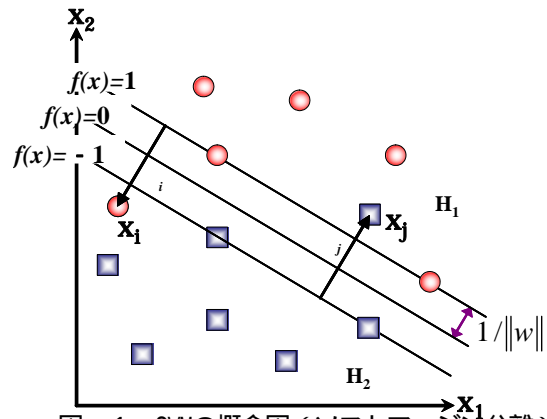
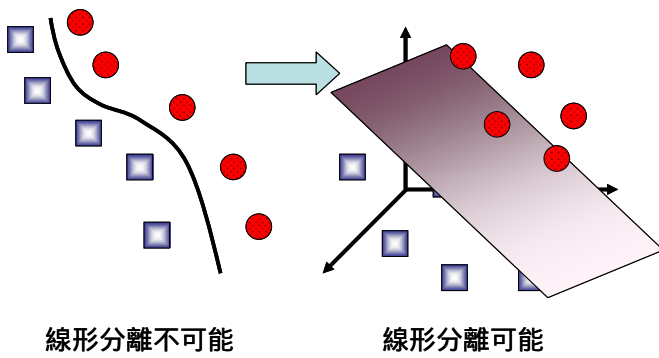


図-1 SVMの概念図 (ソフトマージン分離)

SVMが優れた認識性能を発揮するのは、未学習データに対して高い識別性能(汎化性能)を得るための工夫として、線形分離不可能なデータを高次元の特徴空間に写像し、カーネル関数を用いて内積計算を簡略化しつつ、特徴空間上で分離マージンを最大化させる超平面を凸2次計画問題により厳密に求めることが挙げられる(図-2)。カーネル関数に使用される代表的な核関数としては、多項式型カーネル、シグモイド型カーネル、確率密度関数であるガウシアンを用いたガウス型カーネルが挙げられる。なお、SVM理論の詳細は参考文献1)に詳しい。



線形分離不可能 線形分離可能
 図 - 2 高次元空間写像と線形分離イメージ

3. SVMを用いた制約曲面近似

本研究では例題として、以下の2変数の制約条件付き最適化問題を考える。

$$\begin{aligned} & \text{Minimize } f(x_1, x_2) \\ & g_i(x_1, x_2) \leq 0; i = 1, \dots, m \\ & (x_1, x_2) \in R^n \end{aligned}$$

ただし、パラメータの上下限值、目的関数、制約関数の形状は未知であり、非凸の可能性がある。パラメータ候補が制約条件を満足するかどうか知るためには、生成されたパラメータ候補の評価計算を行う必要があり、その計算には時間コストを要するものとする。ここでは、SVMを応用することで、できるだけ少ない解析回数で、精度の良いパラメータ群を発見する方法を考察する。

基本的なアイデアは、複数のパラメータ入力に対して、目的関数値及び制約関数値を計算し、制約条件の判定結果情報を教師信号として用い、SVMにより識別関数を近似の制約曲面として生成し、その近傍の解を抽出し、新たに教師信号として追加することで、制約曲面を逐次、近似することである。計算過程を以下に示す。

任意の初期パラメータ集合を生成する。

パラメータ集合の解析・評価計算を実行する。目的関数値と制約条件の充足状況から教師信号 (10 r-1) を作成する。

教師信号集団からSVMにより制約関数の近似曲線を判別関数として得る。

同様に教師信号集団の目的関数値を用いて目的関数の応答曲面をRBFネットワーク等より作成し、近似の最適値を得る。

判別関数のマージン領域中の任意のパラメータ₁及び目的関数の応答曲面より得られた近似の最適値を構成するパラメータ₂について評価計算を実施する(図-3)。₁及び₂の評価計算の結果を新しい教師信号として教師信号集団に加えて、からのプロセスを繰り返す。

以上より、評価システムの応答曲面と制約曲面を同時に推定しながら真のパラメータ解周辺で探索を行う。

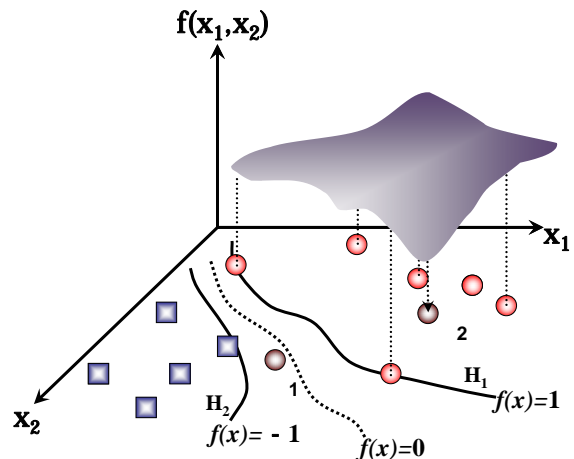


図 - 3 教師信号の追加

なお、目的関数値の推定には応答曲面法やニューラルネットワーク、RBFネットワークによる近似方法が考えられる。SVMの役割は制約を満たすパラメータの存在領域の推定であり、逐次、判別関数が存在するマージン領域から新しい教師信号としてパラメータ₁を追加し、判別関数の存在領域としてのマージン領域を狭めることで、近似の制約関数としての判別関数の精度を上げる効果があるものと考えられる。データが存在する領域の境界面H1, H2間の距離をマージンとして最大化させるSVMの特徴により、制約関数の存在領域が特定されることを利用する方法といえる。

この方法の問題点として、追加された教師信号₁近傍の判別関数の形状は精緻化されるものの、判別関数全体の関数形状の近似にはあまり寄与しないことが考えられる。制約関数の近傍に最適値が存在する場合、ある程度疎な解空間に教師信号を追加して全体の判別関数の形状を近似する等の工夫が必要になるものと思われ、効率的な教師信号の選択と追加方法は今後の課題である。

4. おわりに

本稿ではSVMを用いた制約曲面近似による非線形最適化問題へのアプローチ方法を考察した。なお、講演時には簡単な計算過程を示すことで、非線形最適化問題におけるSVMの可能性について言及する。

参考文献

- 1) 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.)