社団法人 情報処理学会 研究報告
IPSJ SIG Technical Report

2007－MPS－66 (29)
2007／9／4

正負パレート解の分類による多目的最適化問題の実用上妥当解の予測

田中 秀俊 [1]

概要 ある操作パラメータ群とそのパラメータセットに対する評価指標群からなる多目的最適化問題において、評価指標群をそのまま使って得たパレート解を正解、評価指標群の符号を逆にして得たパレート解を負解とし、操作パラメータ群の空間で正解と負解をサポートベクターマシンにより分類する。このとき得られる判別関数は、正解と負解を最もよく分離する距離規準であり、この規準を用いて正解集合を評価すれば、その中から最も負解から遠い安全な解、実用上妥当解が選択できる。また、パラメータセットのとりうる領域が有界なら、判別関数を目的関数とし、領域を制約とする単目的最適化により、領域内で最も安全な実用上妥当解の予測値が得られる。

Practically Useful Solutions by Classification of Pareto Efficient and Anti-Efficient Solutions

Hidetoshi Tanaka[1]

Abstract Multi-objective optimization problems are solved by the classification of Pareto Efficient and Pareto Anti-Efficient solutions, using support vector machines. Their discriminant vector is used as a scaling vector so that the most practically useful Pareto Efficient Solution is obtained. When the parameter space is bounded, the most practically useful Pareto Efficient Solution is estimated, solving a single objective optimization problem.

1 はじめに

実行1回に数時間を要し、結果の評価指標が多数あるような大規模なシミュレータにおいて、入力パラメータの一部（状況パラメータ）が固定されたときの、残りの入力パラメータ（操作パラメータ）を最適化する問題を考える。たとえば、多数の飛行物体に対して、多数のセンサの観測範囲を自動制御するシミュレータにおいて、あるスケジュールにしたがって飛行物体が飛行した際の、センサ制御用のパラメータを良いものにしたい。センサの制御自体は、飛行物体の運動や分布に対してある程度自動的になされる。しかし、早期に観測を開始しやすい設定や、継続的に観測しやすい設定などがあって、スケジュールが与えられたときにどの設定を選ぶべきかは、シミュレーションを重ねないと分からない部分が多い。また、実行に時間がかかるため、スケジュールのような状況パラメータが与えられたとき、操作パラメータを最適化するために、何度も反復実行するような時間はとれない。

そこで、事前にできるだけ網羅的に実行して事例として蓄積し、スケジュールの類似検索によって良い操作パラメータを獲得するアプローチを考える。スケジュール間の類似度規準も課題のひとつだが、まずは何か用意できるものとする。シミュレーションの結果を表す評価指標群についても、どの指標が良ければシミュレーション全体として良いのか、判断がつかない場合が多い。もしそれらの重要度が与えられていれば、類似度規準および結果評価指標と各重要度の積和による単一目的関数の最適化問題に帰着できる。しかし重要度は事前には不明なので、各評価指標をそのまま複数の目的関数とする多目的関数の最適化問題に帰

[1] 三菱電機株式会社 情報技術総合研究所
Mitsubishi Electric Corp., Info. Tech. R&D Center

着される。そのような問題では、たとえば非劣解（パレート解[1]）を列挙した後、ユーザの意思決定により解を一つ選択する。これによって重要度も決まる。

ここで、評価指標のよしあしを逆にした、負の多目的関数最適化問題を考える。そこから得られる負のパレート解は、いずれかの評価指標が他より悪い解であり、できれば選択したくない解である。そこで、正の多目的関数最適化問題から得られた正のパレート解と、この負のパレート解とについて、操作パラメータ空間内で分類する。これにより、操作パラメータセットに関する判別関数が得られ、ある操作パラメータセットが、正負パレート解のいずれになりそうかの予測が得られる。また、負のパレート解から最も遠い正のパレート解の周辺は、負のパレート解に属しにくいという仮定を置くことができる。この仮定の下に得られる正のパレート解を、本稿では実用上妥当解と呼ぶ。本稿では、この実用上妥当解について検討する。

2 手順

実用上妥当解の提供には、以下の3つのステップを踏む。

1. 評価指標群について正・負のパレート解を算出
2. 操作パラメータ空間で正・負のパレート解を分類
3. 判別境界から最も遠い正のパレート解を選択

以下に、単純な例を用いて手順を示す。まず、表1に、単純な結果指標群とパレート解の例を示す。この表は、$g_1(x_0) = \cos(x_0\pi/6)$、$g_2(x_0) = \sin(x_0\pi/6)$ としている。両指標の最小化では Cl. の列に P で表記した x_0、最大化では N で表記した x_0 がそれぞれパレート解となる。各評価指標の大小とよしあしの関係は、すべて小さい場合を良いとしても一般性を失わない。本稿では、その前提の下に、最小化によるものを正のパレート解、最大化によるものを負のパレート解と呼ぶ。

正のパレート解のうち、$x_0 = 7$ および $x_0 = 8$ はともに、負のパレート解までの最短距離は4である。残りの正のパレート解 $x_0 = 6$ および $x_0 = 9$ の最短距離は3である。このように、結果指標群間の重要度が不明な場合にも、負のパレート解までの距離、すなわち解の頑健性に類似した概念が定義でき、自動的な意思決定として使える。これを本稿では「実用上妥当解」とする。

表 1: 円周状の結果指標群とパレート解

	Evaluation		Cl.	SVM
x_0	g_1	g_2		
1	0.87	0.50	N	-3.44
2	0.50	0.87	N	-2.11
3	0.00	1.00	N	-1.00
4	-0.50	0.87		-0.11
5	-0.87	0.50		0.55
6	-1.00	0.00	P	1.00
7	-0.87	-0.50	P	1.22
8	-0.50	-0.87	P	1.22
9	0.00	-1.00	P	1.00
10	0.50	-0.87		0.55
11	0.87	-0.50		-0.11
12	1.00	0.00	N	-1.00

実用上妥当解を求めるには、正・負パレート解を求め、両者を操作パラメータ空間で分類する。本稿ではこの分類にサポートベクターマシン (SVM)[2] を採用する。SVM で得られた判別関数（以下、単に SVM 関数）の値の大きい正のパレート解が、求める実用上妥当解である。二次多項式カーネルを用いて分類したときの SVM 関数の値を表1の SVM の列に示す。この例において、最大の SVM 関数値をもつ正パレート解は、$x_0 = 7$ および $x_0 = 8$ となっている。

また、x_0 の範囲をこれら12サンプルでなく実数とするなら、SVM 関数を目的関数とする最大化問題を解くことにより、実用上妥当解という尺度での最適解を予測値とすることができる。この例での実用上妥当解の予測値は、$x_0 = 7.5$ となり、その SVM 関数値は 1.25 である。

3 事例

本章ではセンサ制御シミュレータの簡略化した事例をもとに、数値実験例を示す。表2に、その結果指標群の事例とパレート解の例を示す。本例では、操作パラメータを $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2)$、評価指標を $f_1(\boldsymbol{x}) \sim f_4(\boldsymbol{x})$ としている。操作パラメータのとる値はそれぞれ、$x_1 = \{1, 2, 3\}$、$x_2 = \{1, 2, 3, 4\}$ である。状況パラメータは一致しているものとし、類似度は省略する。

P、N はそれぞれ正・負のパレート解である。

表 2: 結果指標群の事例とパレート解

x		Evaluation				Cl.
x_1	x_2	f_1	f_2	f_3	f_4	
1	1	-6	3	1	-1	
1	2	-6	2	1	-2	P
1	3	-5	1	1	-3	P
1	4	-5	1	2	-3	N
2	1	-6	3	2	-1	N
2	2	-6	2	2	-3	
2	3	-6	1	2	-3	P
2	4	-4	1	1	-3	N
3	1	-6	3	1	-2	
3	2	-6	1	2	-2	
3	3	-6	1	2	-3	P
3	4	-5	1	1	-2	

表3に、これら正・負のパレート解を判別する SVM 関数、線形カーネル (Lin)、二次多項式カーネル (Pol2)、Radial Basis 関数カーネル (RBF) の例を示す。線形カーネルでは、$(x_1, x_2) = (2, 1)$ で誤答を返すような判別関数となっている。二次多項式カーネル、Radial Basis 関数カーネルでは、誤答を返さない判別関数が得られている。

表 3: 操作パラメータと SVM 値

x		SVM Values			Cl.
x_1	x_2	Lin	Pol2	RBF	
1	2	1.00	1.14	0.99	P
1	3	0.01	0.77	1.00	P
1	4	-1.00	-1.00	-0.09	N
2	1	2.50	-1.00	-0.07	N
2	3	0.50	1.00	0.99	P
2	4	-0.50	-0.09	-0.06	N
3	3	1.00	0.99	0.99	P

表4に、変域を $x_1 = 0 \sim 4$、$x_2 = 0 \sim 5$ に拡大した場合の二次多項式カーネル SVM 関数値を示す。正・負のパレート解は、数値の左肩にそれぞれ P および N で示している。この二次多項式カーネル SVM 関数値によれば、変域が $x_1 = 1 \sim 3$、$x_2 = 1 \sim 4$ のときの実用上妥当解は $(x_1, x_2) = (1, 2)$ である。変域が $x_1 = 0 \sim 4$、$x_2 = 0 \sim 5$ になった場合の実用上妥当解の予測は $(x_1, x_2) = (0, 2)$ である。

表 4: 操作パラメータと SVM 値 (Pol2)

x_2	x_1				
	0	1	2	3	4
0	-0.74	-2.30	-4.09	-6.12	-8.39
1	1.00	0.12	^{N}-1.00	-2.35	-3.94
2	1.35	^{P}1.14	0.70	0.02	-0.89
3	0.30	^{P}0.77	^{P}1.00	^{P}1.00	0.76
4	-2.14	^{N}-1.00	^{N}-0.09	0.58	1.02
5	-5.98	-4.16	-2.58	-1.23	-0.11

4 考察および課題

パレート解の算出では、遺伝的アルゴリズム等の多点探索の方法により、複数の解を列挙する例 [3] は報告されているが、著者らの知る限りではそれらが一般性をもって数式等に集約されて表現される報告はない。本稿で述べた方法は、非常にゆるい方法ではあるが、パレート解になりそうな領域を数式で示すことに成功している。

線形カーネルによる判別関数では、ソフトマージンの概念の下、誤答を許している。このような負のパレート解の誤答は、SVM 関数値が高くなる。誤答を含むような判別関数で実用上妥当解を予測するときには、そうでない場合に比べてリスクが高くなっていると考えられる。このリスクの評価は、今後の検討課題のひとつである。

評価指標群に冠する事前知識はなくとも、事例から相関係数を求めておくことはできる。評価指標群が多すぎるようであれば、相関係数が高い同士をまとめる等、絞り込むことができる。さらに、相互に類似した評価指標群を自動的にまとめる手段としては、主成分分析が考えられる。一方、各評価指標に意味があるなら、傾向が類似していても特に減らす必要はないとも考えられる。評価指標群をまとめることの是非と、実用上妥当解への影響は、今後の検討課題のひとつである。各評価指標のとる値の粒度や正規化の妥当性も、検討課題に挙げられる。

本稿では、スケジュール間の類似度については検討を省略した。評価指標群について正・負のパレート解

を求める際、類似度は正のみを用いればよい。負の類似度を用いる理由はないと思われる。

前章までで示したように、多数の評価指標群に関する正と負のパレート解という2値のラベルによって、操作パラメータ空間で事例を分類すると、正のパレート解の中で最も負のパレート解になりにくい解を求めることができる。ここでは他に事前知識を仮定せず、パレート解というラベリング手段だけを用いている。なにか事前知識があって、各指標だけでなく指標群に対する善悪が分かるのであれば、それを用いて「好ましいかどうか」の2値ラベリングを行い、同様の手順を踏んで別の実用上妥当解、「好ましい解のうち好ましくない解から最も遠い解」を得ることができる。

また、操作パラメータ空間で事例を分類したが、状況パラメータ空間を含めた中で事例を分類すると、判別関数の係数から、操作パラメータと状況パラメータの重要度が得られるようになる。この件については稿を改め、別の事例で検討する。

5 まとめ

多目的最適化問題において、評価指標群から正負パレート解集合を得、操作パラメータ群の空間で、両者をサポートベクターマシンにより分類する。このとき得られる判別関数は、正解と負解を最もよく分離する距離規準であり、この規準を用いて正解集合を評価すれば、その中から最も負解から遠い安全な解、実用上妥当解が選択できる。また、パラメータセットのとりうる領域が有界なら、判別関数を目的関数とし、領域を制約とする単目的最適化により、領域内で最も安全な実用上妥当解の予測値が得られる。

参考文献

[1] K.M. Miettinen. Nonlinear Multiobjective Optimization. Kluwer Academic Publishers, 1999.

[2] T. Joachims. Making large-scale SVM learning practical. In B. Schölkopf, C. Burges, and A. Smola, editors, *Advances in Kernel Methods*, pp.169–184. MIT Press, 1999.

[3] 渡邉真也. 遺伝的アルゴリズムによる多目的最適化に関する研究. 同志社大学大学院工学研究科知識工学専攻博士論文, 2003.