

不確実な最適化問題に対する ロバスト最適化

慶応義塾大学 理工学部
武田朗子

本講演の内容

- ロバスト最適化法の基礎
 - ✓ 概要（考え方、歴史的経緯）
 - ✓ ロバスト最適化問題の解き方
- ロバスト判別モデルの提案
 - 参木君（慶応大M1）、金森先生（名古屋大）との共同研究
 - ✓ ロバスト最適化法を適用
 - ✓ 既存の判別モデル（SVM, MPM, FDA）を含む

判別問題にロバスト最適化を適用

ロバスト最適化法とは？

Ben-Tal & Nemirovski ['98]

不確実性を含んだ最適化問題のモデル化とその解法

目的： どんな状況が起こっても大きな損害を被らないよう、意思決定をしたい

● 電力供給コスト最小にするための生産量は？

$$\begin{array}{ll} \min_{x \geq 0} & \sum_{i=1}^3 u_i x_i \\ \text{s.t.} & \sum_{i=1}^3 x_i \geq d \end{array}$$

3 基の発電機
(燃料：石油, 石炭, ガス)

x_i : 生産量

u_i : 単位コスト, d : 需要量

不確実性大

ロバスト最適化問題

不確実なデータの範囲をあらかじめ設定した上で、
最悪事態の発生を想定して最適化を行なう問題

不確実なデータの範囲を設定: $u \in \mathcal{U}, d \in [d_\ell, d_u]$

$$\begin{array}{ll} \min_{x \geq 0} & \sum_{i=1}^3 u_i x_i \\ \text{s.t.} & \sum_{i=1}^3 x_i \geq d \end{array} \quad \Rightarrow \quad \begin{array}{ll} \min_x & \max_{u \in \mathcal{U}} \sum_{i=1}^3 u_i x_i \\ & \sum_{i=1}^3 x_i \geq d, \quad \forall d \in [d_\ell, d_u] \end{array}$$
$$\quad \Leftrightarrow \quad \sum_{i=1}^3 x_i \geq \max_{d \in [d_\ell, d_u]} d$$

データの不確実性を考えることの大切さ

Ben-Tal & Nemirovski ['00]

PILOT4 (NETLIB library)

1000変数、410制約式、最適解を x^* とする

$$a^\top x \equiv$$

$$\begin{aligned} & -15.79081x_{826} - 8.598819x_{827} - 1.88789x_{828} - 1.362417 \cdots \\ & -0.031883x_{849} - 28.725555x_{850} - 10.792065x_{851} - 0.190 \cdots \\ & -12.290832x_{854} + 717.562256x_{855} - 0.057865x_{856} - 3.785 \\ & -122.163055x_{859} - 6.46609x_{860} - 0.48371x_{861} - 0.615264 \cdots \\ & -84.644257x_{864} - 122.459045x_{865} - 43.15593x_{866} - 1.712 \cdots \\ & +x_{880} - 0.946049x_{898} - 0.946049x_{916} \geq \boxed{23.387405} \equiv b \end{aligned}$$

実数値係数を0.1%ずらす $\rightarrow \bar{a}$

たとえば、 $15.79081 \times 0.001 = 0.0157908$

$a^\top x^* - b \geq 0$ を満たす解 x^* で、摂動を加えた式を評価:
 $\bar{a}^\top x^* - b < -104.9$ (大きく制約式を破る)

ロバスト最適化法の適用例 -1-

ロバスト性を考慮した建築構造設計: 寒野 ['08]

建築構造物は外力に対し、不安定現象を生じないように設計の必要あり

- 構造物に作用する外力を, 正確に予測することは難しい
- 構造物の解析・設計において, 外力のばらつきを考慮

ロバスト化学プロセス設計 Lin, Janak & Floudas ['04]

化学プロセスは反応器、蒸留塔などの単位操作の組み合わせで、原材料から目的物質を製造

- 環境影響(外因)による安全性への影響を考慮して、経済性最大化を達成する必要あり

ロバスト最適化法の適用例 -2-

土谷 & 笹川 [’05]

超電導磁気浮上式列車の磁気シールド最適設計:

車体を強磁性体のシールドで覆い、車内を強力な磁場から遮蔽する必要あり

→車内へ磁場が漏洩しない条件下でシールド重量最小化

→“近似計算”による外部磁場の不確実性を考慮

ロバスト最短路問題(離散最適化):

Yu & Yang [’98]

渋滞等による所要時間の不確実性を考慮した最短路問題

クラス分類モデル (統計的学習):

観測値に観測誤差が含まれることを想定した手法

ポートフォリオ選択 (金融工学):

株価の不確実性を考慮して、最適資産配分を決定

最適化分野でのロバスト最適化法の歴史

ロバスト最適化法

u の属する領域 $\mathcal{U}$ が既知

$$\min_{x \in X} \max_{u \in \mathcal{U}} f(x, u)$$

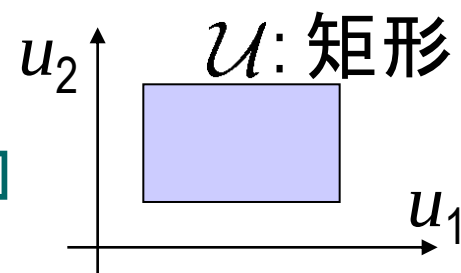
■1973年 A.L.Soyster が 矩形の $\mathcal{U}$

(手法はinexact LPと呼ばれ, 解は“保守的すぎる”)



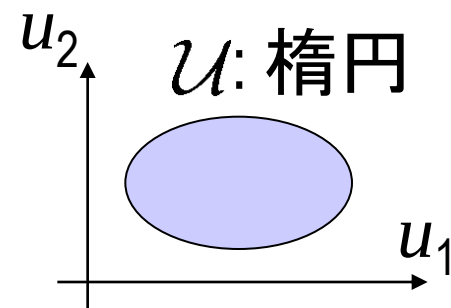
この間、進展なし (論文2本†)

†) reported by Ben-Tal, El Ghaoui & Nemirovski [’09]



■1998年 Ben-Tal & Nemirovskiが楕円形

El Ghaoui & Lebret, Kouvelis & Yuも同時期
に同様の定式化



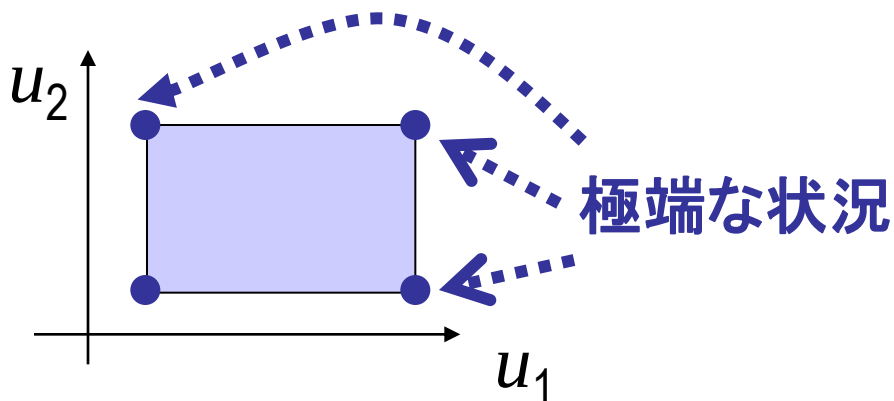
■続々と、研究つづく

近年、ロバスト最適化がうけた理由

- ① 矩形だと、極端な状況を想定するだけ。
この欠点が解消された。
- ② 二次錐計画や半正定値計画に帰着。

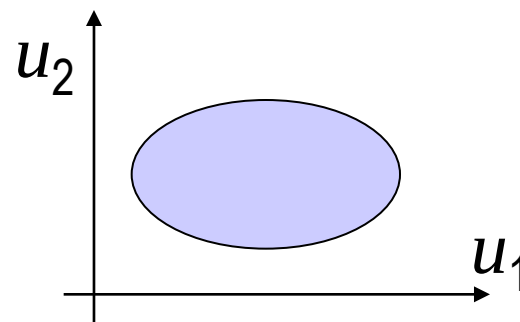
inexact LP
Soyster ['73]

U が矩形



ロバストLP
Ben-Tal & Nemirovski ['98]

U が楕円 etc..



ロバスト最適化問題のイメージ

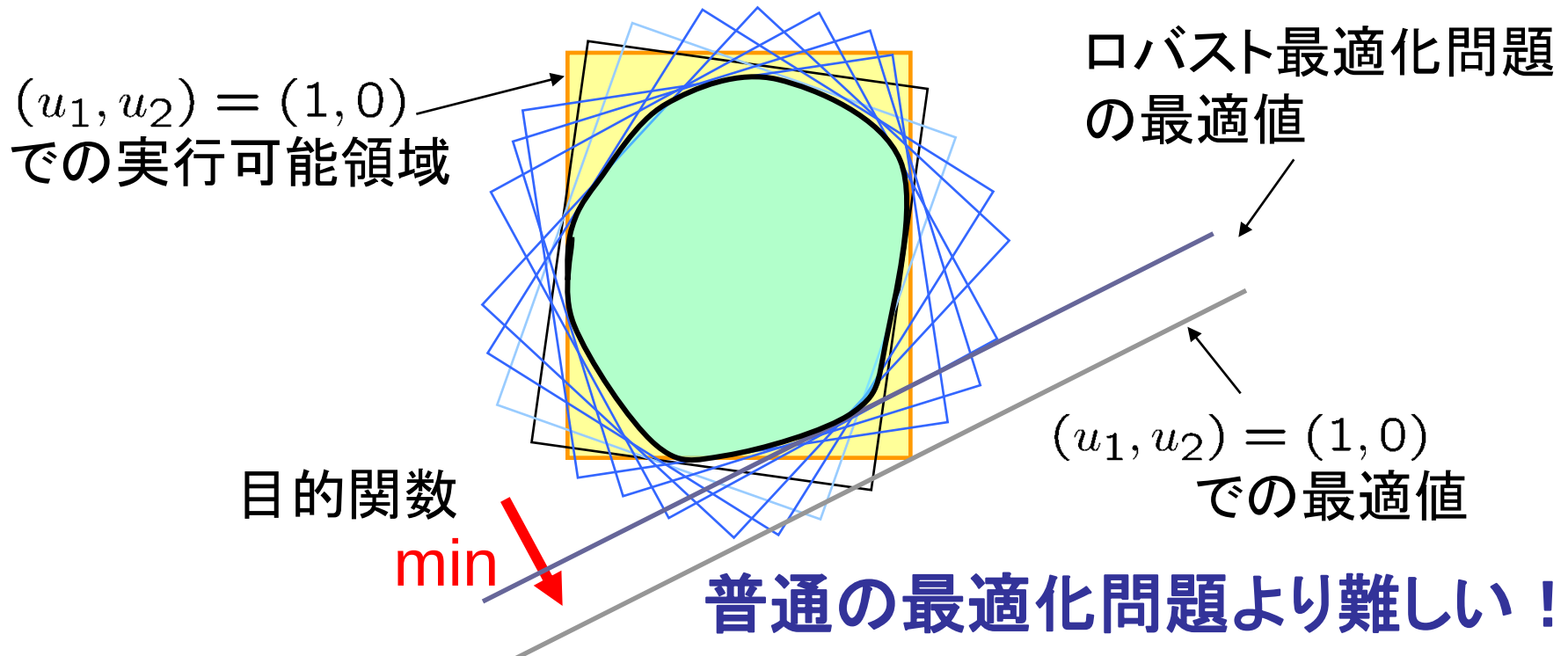
$$\min_x -x_1 + x_2$$

$$\text{s.t.} \quad -1 \leq u_1 x_1 + u_2 x_2 \leq 1$$

$$-1 \leq -u_2 x_1 + u_1 x_2 \leq 1$$

$$\forall u \in \mathcal{U} = \{(u_1, u_2) \mid u_1^2 + u_2^2 = 1\}$$

制約式は無限本



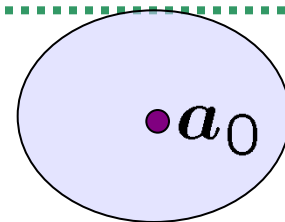
ロバストLP (楕円型不確実性集合)

Ben-Tal & Nemirovski ['99]

$$\min_x c^\top x \quad \text{s.t.} \quad a(u)^\top x \leq b, \quad \forall u \in \mathcal{U}$$

楕円型 $a(u) = a_0 + \sum_i a_i u_i = a_0 + Au$

$$\mathcal{U} = \{ u : \|u\|_2 \leq 1 \} \quad \text{の場合}$$



$$\min_x c^\top x \quad \text{s.t.} \quad a_0^\top x + x^\top Au \leq b, \quad \|u\|_2 \leq 1,$$



$$a_0^\top x + \left(\max_{u: \|u\|_2 \leq 1} x^\top Au \right) \leq b$$

$$u^* = \frac{A^\top x}{\|A^\top x\|_2}$$

$$\min_x c^\top x \quad \text{s.t.} \quad a_0^\top x + \|A^\top x\|_2 \leq b$$

二次錐計画問題

ロバスト最適化の定式化のコツ

ロバスト最適化では.....

✓不確実データの表現方法がポイント！

✓その表現方法に制限が大きい

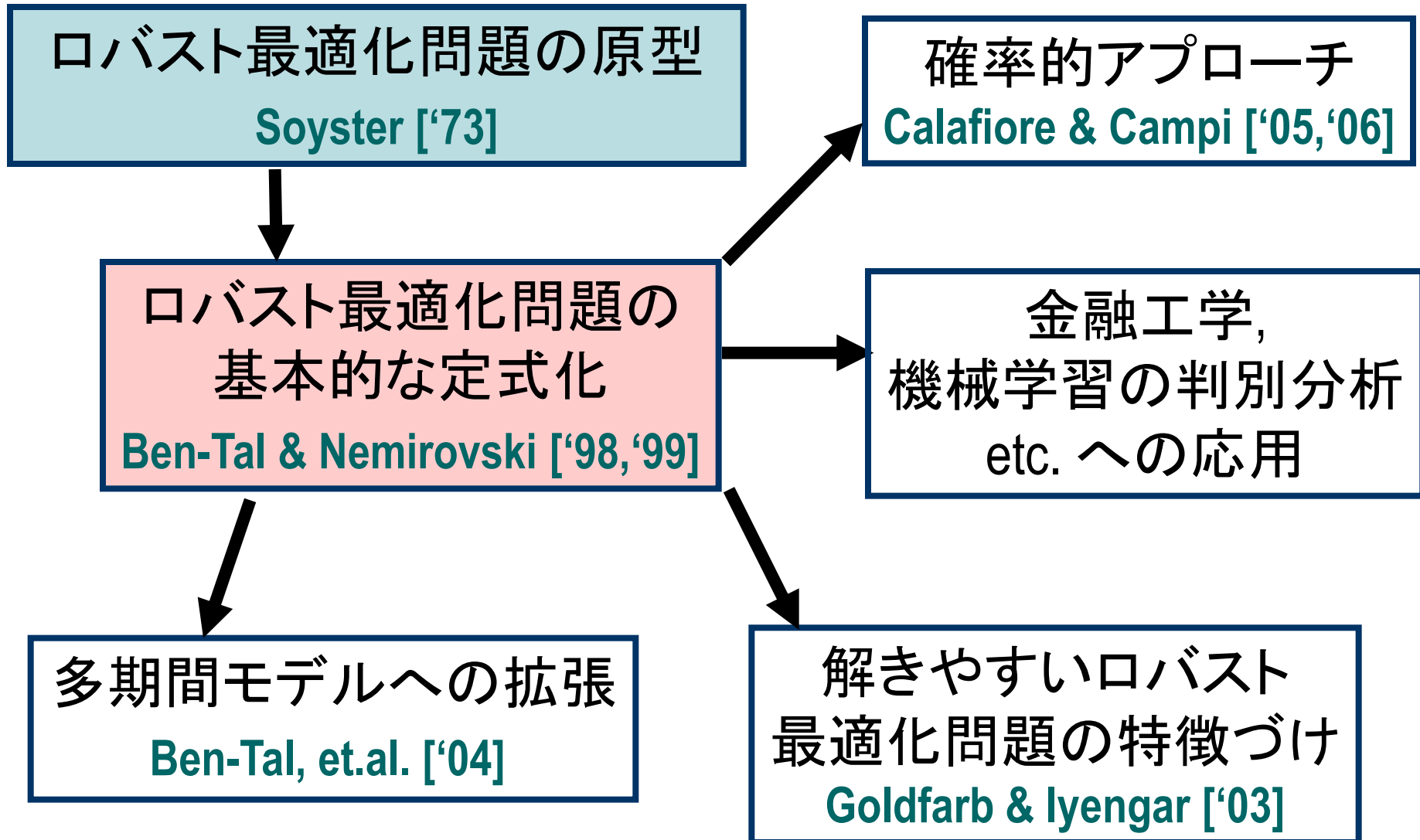
- 不確実データは u について線形、

- u は楕円内を動く, etc.

✓その制限を満たせば、扱いやすい問題に変換できる

- どのような問題構造をしていけば扱いやすい問題に変換できる？
- 条件を満たさない場合は、無限本制約をすべて考慮するのでなく、うまくサンプリングすることによる確率的解法

ロバスト最適化研究の様々な流れ



本講演の内容

- ロバスト最適化法の基礎
 - ✓ 概要（考え方、歴史的経緯）
 - ✓ ロバスト最適化問題の解き方
- ロバスト判別モデルの提案
 - 参木君（慶応大M1）、金森先生（名古屋大）との共同研究
 - ✓ ロバスト最適化法を適用
 - ✓ 既存の判別モデル（SVM, MPM, FDA）を含む

判別問題にロバスト最適化を適用

肝臓疾患の判別

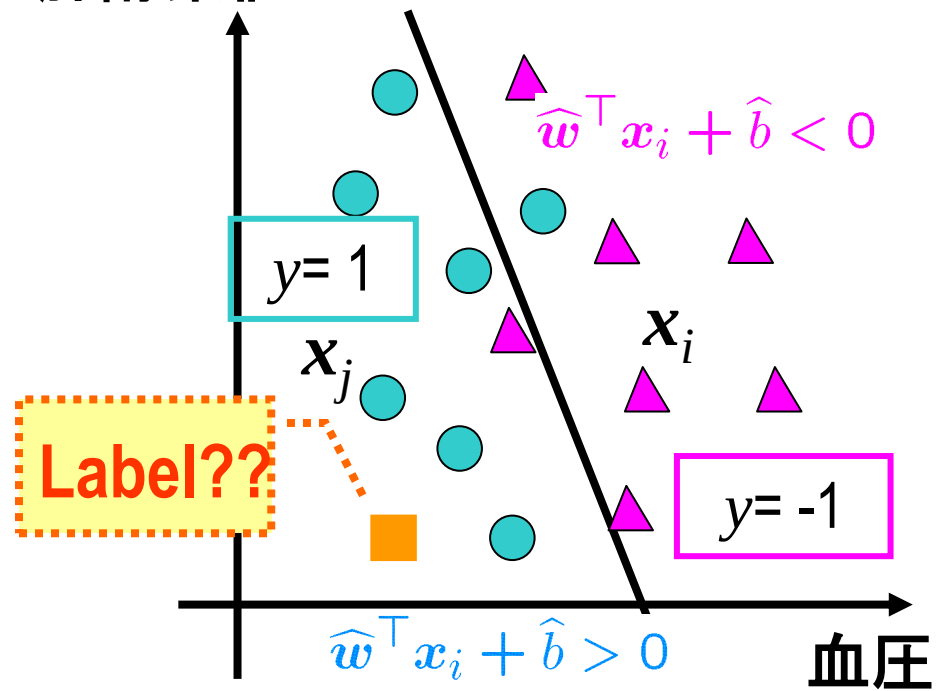
特徴ベクトル

$x_i =$ { 赤血球の濃さ
.....
肝酵素値
一日の飲酒量 }

$y_i =$ { 1 健康
-1 肝臓疾患 }

$i = 1, \dots, m$

肝酵素値



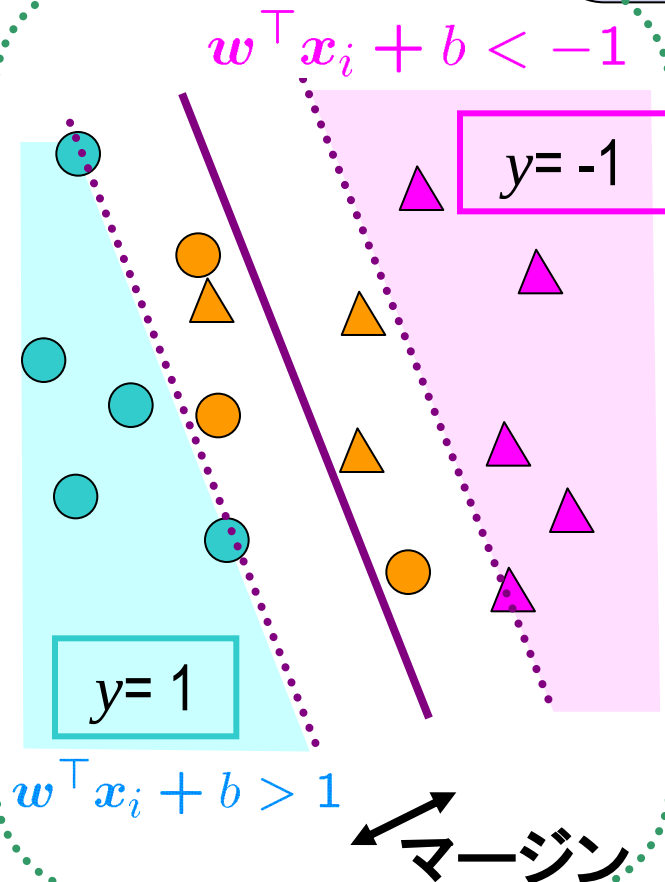
➡
$$h(x) = \text{sign}(w^T x + b)$$

線形判別関数を扱うがカーネル法により非線形関数に拡張可能

学習に用いなかった未知のデータ x
のラベル y をうまく予測したい

C-SVM (support vector machine)

線形分離不可能



$$\begin{aligned} \min_{w, b, z} \quad & \frac{1}{2} \|w\|^2 + C \sum_{i=1}^m z_i \\ \text{s.t.} \quad & y_i (w^T x_i + b) \geq 1 - z_i, \quad i = 1, \dots, m \\ & z \geq 0 \end{aligned}$$

正則化項 + 損失関数の最小化

$$\frac{1}{2} \|w\|^2 + C \sum_{i=1}^m [1 - y_i (w^T x_i + b)]^+$$

マージン最大化

訓練エラー最小化

$C (>0)$: 2つの目的の間の
トレードオフを制御するパラメータ

正則化=ロバスト化

Xu-Caramanis-Mannor ['09]

正則化項

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{w}, b, \mathbf{z}} \quad & \delta \|\mathbf{w}\| + \sum_{i=1}^m z_i \\ \text{s.t.} \quad & y_i(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i^o + b) \geq 1 - z_i, \\ & z_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, m \end{aligned}$$

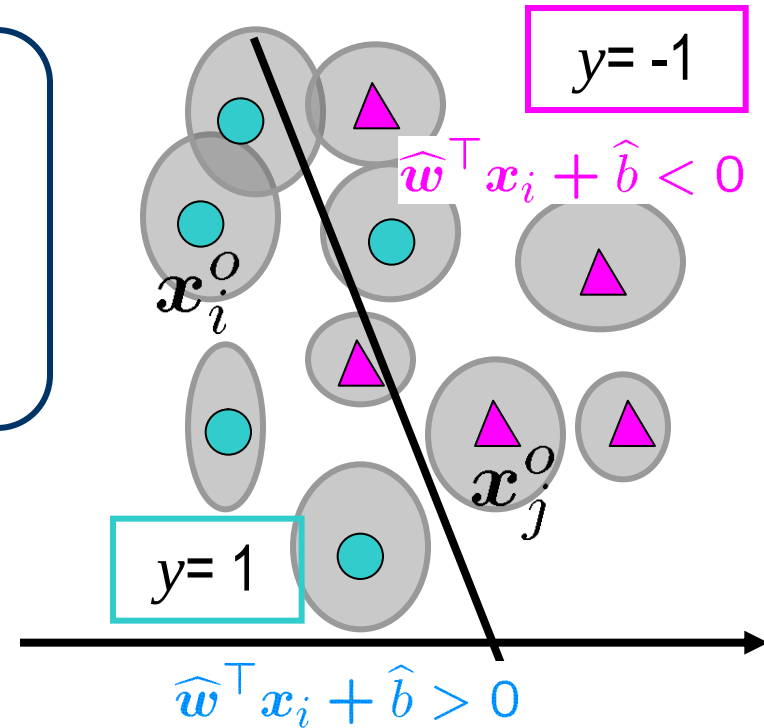
等価

正則化項を除く

$$\min_{\mathbf{w}, b} \sum_{i=1}^m [1 - y_i(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i^o + b)]^+$$

ロバスト化

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{w}, b} \max_{(\Delta \mathbf{x}_1, \dots, \Delta \mathbf{x}_m) \in \mathcal{U}} \quad & \sum_{i=1}^m [1 - y_i \{\mathbf{w}^\top (\mathbf{x}_i^o + \Delta \mathbf{x}_i) + b\}]^+ \\ \mathcal{U} = \quad & \{(\Delta \mathbf{x}_1, \dots, \Delta \mathbf{x}_m) : \sum_{i=1}^m \|\Delta \mathbf{x}_i\| \leq \delta\} \end{aligned}$$



ロバスト判別モデル

分類問題の観測データには、観測誤差等による不確実性がある

→ ロバスト最適化法による、データの不確実性に頑健な判別モデル

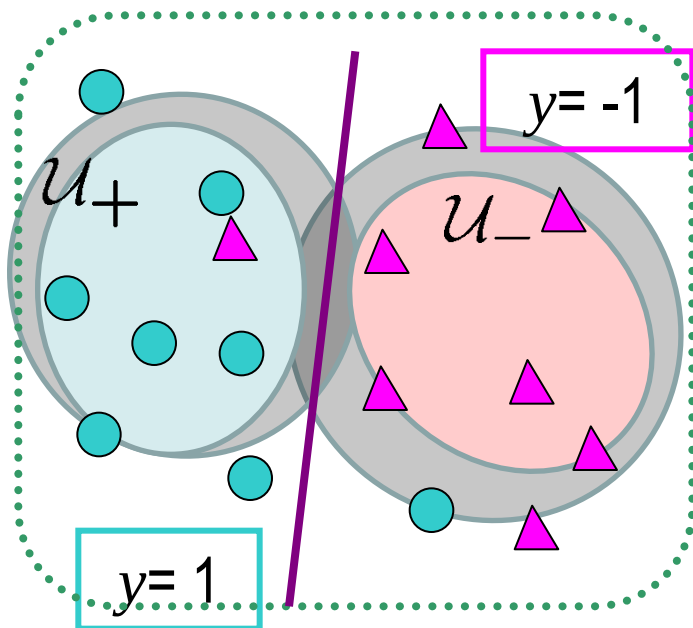
$$\max_{\|w\|=1} \min_{x_+ \in \mathcal{U}_+, x_- \in \mathcal{U}_-} (x_+ - x_-)^\top w$$

入力データ

- ✓ 各クラスの観測点の平均 (x_+, x_-) を不確実な入力
- ✓ x_+, x_- の動きうる範囲 ($\mathcal{U}_+, \mathcal{U}_-$) を設定
- ✓ 最悪な x_+^*, x_-^* を想定して最適化

ロバスト判別モデルの幾何的解釈

$$\max_{\|w\|=1} \min_{x_+ \in \mathcal{U}_+, x_- \in \mathcal{U}_-} (x_+ - x_-)^\top w$$



2つの不確実性集合が交わらない
→ $\|w\| = 1$ は $\|w\| \leq 1$ にしてOK

$$\min_{x_+ \in \mathcal{U}_+, x_- \in \mathcal{U}_-} \|x_+ - x_-\|$$

最適解は $w = x_+^* - x_-^*$

2つの不確実性集合が交わる
→ $\|w\| = 1$ は $\|w\| \geq 1$ にしてOK

“求解の難しさ”は“不確実性集合をどう設定するか”による

ロバスト判別モデルの特徴

$$\max_{\|\mathbf{w}\|=1} \min_{\mathbf{x}_+ \in \mathcal{U}_+, \mathbf{x}_- \in \mathcal{U}_-} (\mathbf{x}_+ - \mathbf{x}_-)^{\top} \mathbf{w}$$

- ✓ $\mathcal{U}_+, \mathcal{U}_-$ の与え方により、SVMや minimax probability machine (MPM), フィッシャー判別モデル(FDA)と等価

- ✓ 確率分布の不確実性を考慮した期待損失最小化:

$$\min_{\mathbf{w}: \|\mathbf{w}\|=1, b} \max_{\substack{p(\mathbf{x}|+1) \in \mathcal{P}_+ \\ p(\mathbf{x}|-1) \in \mathcal{P}_-}} \mathbb{E}[\ell(y(\mathbf{x}^{\top} \mathbf{w} + b))]$$

の上下限の最小化と等価

- ✓ $\mathcal{U}_+, \mathcal{U}_-$ に交わりがないならば凸最適化問題に変形可能、交わりがあるならば本質的に非凸最適化問題

→ 局所最適解法の提案と、よい数値実験結果の報告

まとめ

- SVMや minimax probability machine (MPM), フィッシャー判別モデルを含む、ロバスト判別モデルを提案
- U_+, U_- として交わりのある楕円を想定し、MPMの非凸判別モデル(新しいモデル)の提案

これから

- 新しい不確実性集合 → 新しいモデル
どんな不確実性集合を想定したらいい？
- 統一的な判別モデルから得られることは？