逆問題における数法則発見システムによる疑似逆関数の導出法

長瀬　永遠

富山県立大学　情報基盤工学講座

July 20, 2023

緒言

背景

逆問題の一つであるパラメータ推定は計測分野の実用的かつ重要な問題である．しかし，非線形でモデル化の際に大規模な計算を伴う場合，計算時間や条件の再設定などの点からエンドユーザレベルでは大きな負担となる．

目的

数法則式発見システム（本研究では RF5 を改良して使用）をパラメータ推定の分野に適用し，観測量から未知のパラメータを直接求められる数式を導出する枠組を開発する．

RF5

ニューラルネットと MDL（Minimum Description Length）規準を用いた数法則発見システム．
説明変数を $\mathbf{x}$，目的変数を y としたときに法則式の形式を以下の式 (1) のような多項式とし，式 (2) のように変形することで中間ユニット数 L，全入力ユニットと中間ユニット i との結合重み w_{ij}，全中間ユニットと出力ユニットとの結合重み w_i の 3 層ニューラルネットとみなしその学習問題として定式化する．

$$y = w_0 + \sum_{i=1}^{L} w_i \prod_{j=1}^{M} x_j^{w_{ij}} \tag{1}$$

$$y \to w_0 + \sum_{i=1}^{L} w_i \exp\left(\sum_{j=1}^{M} w_{ij} \ln x_j\right) \tag{2}$$

問題点

従来法の問題点

従来の RF5 では学習アルゴリズムに準ニュートン法を基本枠組とした BPQ(Back Propagation based on Quasi-Newton) アルゴリズムを提案して収束性能を向上させている．しかし，BP 系のアルゴリズムは初期値次第で局所解に陥りやすく，その際は初めから学習し直さなければならないため，多峰性が予想される問題には不向きである．

改善方法

高い大域探索能力を持ち，多峰性問題向きの解法である遺伝的アルゴリズム (GA) を利用した数法則式発見システムを提案する．

手法概要

問題設定

未知の関数 $\theta(\mathbf{x})$ にガウシアンノイズ ϵ が加わった N 個のサンプル $(\mathbf{x_k}, y_k) = (\mathbf{x_k}, \theta(\mathbf{x}+\epsilon)(k = 1 \equiv N)$ を入力データとして，$\theta(\mathbf{x})$ を近似する以下のような式をもとめる問題を考える．

$$\xi(\mathbf{x}) = w_0 + \sum_{i=1}^{L} w_i \prod_{j=1}^{M} x_j^{w_{ij}} \tag{3}$$

評価基準

1. 残差の最小化　$\sum_{k=1}^{N}(y_k - \xi(\mathbf{x_k}))^2 \to min$
2. 数法則式として可能な限り簡潔である＝係数の個数の最小化

1 つ目に偏ると誤差に引きずられた複雑なものに，2 つ目に偏ると本来のモデルを十分に表現しきれない単純なものになる．

実数値 GA とバイナリ GA の併用

データ $\mathbf{x}$ に含まれる不要な変数や感度の低い変数を排除するために実数値遺伝子 w_{ij} と共にバイナリ遺伝子 v_{ij} を用意して式 (6) を以下のようにした．これによって不必要な x を排除しやすくなり，収束までの時間を短縮できる．

$$\xi(\mathbf{x}) = w_0 + \sum_{i=1}^{L} w_i \prod_{j=1}^{M} x_j^{w_{ij} v_{ij}} \quad (4)$$

モデル係数の分離

w_i を重み付き線形最小二乗法，w_{ij} を GA で求めることで全体の計算量を低下させる．

アルゴリズム2

ハイブリット探索

一般にGAは局所探索の手段を持たないため，GAでの大域探索後に準ニュートン法を用いて収束させることを考える．

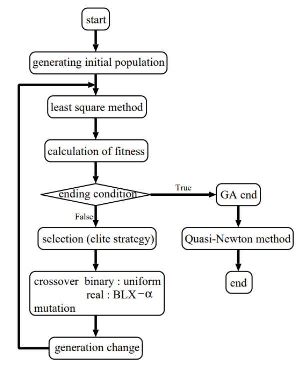

図 1: アルゴリズムのフローチャート

提案手法の検証 1

例題設定

（復元する数式）

$$y = 2.5 - 4x_1^{1.4}x_6^{2.6} + 5.5\frac{x_3^{5.4}}{\sqrt{x_4x_5}} + 1.5x_1^{1.4}x_2^{3.7}x_4^4 + 0\cdot x_7x_8x_9x_{10} \quad (5)$$

Table 1: GA の設定

Population size	400	
Initial group generation	real-coded : uniform random numbers	
	binary-coded : 60[%] → 0 , 40[%] → 1	
Searching range	[-10, 10]	
Selection	elite strategy	once per 100 generations : 30[%] of higher ranks
		others : 60[%] of higher ranks
Crossover	real-coded : BLX-α ($\alpha = 0.2$)[13]	
	binary-coded : uniform crossover (crossover rate = 50[%])	
Mutation	once per 100 generations : mutation rate=50[%]	
	others : mutation rate=5[%]	
GA ending condition	less than 1[%] of fitness improvement per 500 generations / over 5000 generations	

例題 1

項数 L を推定する課題について考える．サンプル数 $N = 100$ とし，y に標準偏差が y の 0.5[%] となるガウシアンノイズを加えた．各 L について導出された数式に対する c-AIC は表 2 のようになり，L=3 が最小と分かった．また，得られた数式 $\hat{y}$ を以下に示す．

Table 2: 各 L についての c-AIC

Number of term L	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
c–AIC	1350.0	1243.0	$\boxed{463.4}$	467.2	475.4	475.4	481.1	485.1	489.3	494.6

$$\begin{aligned}\hat{y} =& 2.41 - 3.95 x_1^{1.41} x_6^{2.61} + 5.50 x_3^{5.40} x_4^{-0.50} x_5^{-0.50} \\ &+ 1.50 x_1^{1.40} x_2^{3.70} x_4^{4.00} x_9^{-4.50\times10^{-3}}\end{aligned} \tag{6}$$

TOYAMA Prefectural University

提案手法の検証3

例題2

$L=3$ と仮定してノイズの標準偏差 σ およびデータ数 N についての設定を変えてその影響を評価した．入力データが少ない場合やノイズが大きい場合は式に不必要な x も選ばれ，厳密な式の形の復元は難しいことが分かる．一方，Error に着目するとある程度の精度が出ていることが分かり，近似関数を求めるという観点では，本手法が最低限の機能を有している．

Table 3: 各条件における $\hat{y}$ と Error

N, σ	Estimated result $\hat{y}$	Error[%]
$100, 0.01y_k$	$2.27 - 3.92x_1^{1.42}x_6^{2.61} + 5.52x_3^{5.39}x_4^{-0.49}x_5^{-0.50} + 1.49x_1^{1.42}x_2^{3.70}x_4^{4.00}$	0.290
$50, 0.01y_k$	$1.67 - 3.45x_1^{1.41}x_6^{2.74} + 5.44x_2^{0.30}x_3^{5.04}x_5^{-0.45} + 1.18x_1^{1.51}x_2^{3.90}x_3^{-0.24}x_4^{4.19}$	2.213
$100, 0.05y_k$	$1.40 - 3.31x_1^{1.49}x_6^{2.75} + 5.16x_3^{5.49}x_4^{-0.47}x_5^{-0.50} + 1.44x_1^{1.46}x_2^{3.70}x_4^{4.00}$	1.026
$500, 0.05y_k$	$2.56 - 4.08x_1^{1.41}x_3^{-0.05}x_6^{2.58} + 5.48x_2^{0.04}x_3^{5.38}x_4^{-0.48}x_5^{-0.51} + 1.50x_1^{1.42}x_2^{3.69}x_3^{-0.04}x_4^{3.99}$	0.950
$50, 0.001y_k$	$2.51 - 4.00x_1^{1.40}x_6^{2.60} + 5.49x_3^{5.41}x_4^{-0.50}x_5^{-0.50} + 1.50x_1^{1.40}x_2^{3.70}x_4^{4.00}$	0.089
	$2.5 - 4x_1^{1.4}x_6^{2.6} + 5.5x_3^{5.4}x_4^{-0.5}x_5^{-0.5} + 1.5x_1^{1.4}x_2^{3.7}x_4^{4.0}$ (Original)	

TOYAMA Prefectural University

結言

数法則発見システムをパラメータ推定の分野に適用し，未知パラメータを直接求められる逆解析用の数式を導出する枠組みを開発した．あらかじめこのような数式を導出しておくことで，エンドユーザが行うパラメータ推定作業において効率化が見込まれる．