

(3) 修正イントンス・サンプリングによる離散変数の最適化 Optimization of the Discrete Parameters using an Importance Sampling

須藤 敦史 星谷 勝
Atsushi SUTOH Masaru HOSHIYA

In most system optimization approaches, continuous optimization techniques have often used. However, in generally, structural system parameters consist of both discrete and continuous elements. Hence, an efficient algorithm which is relevant to a discrete parameters is desirable.

In this study, an algorithm is proposed to estimate the discrete parameters, based on an Importance Sampling procedure of Monte-Carlo method. In this method, discrete parameters which are randomly sampled from an Importance Sampling, are updated with objective function, and numerical examples are worked out to demonstrate the discrete parameters optimization of the proposed algorithm.

Key Words: Monte-Carlo method, Importance Sampling, Discrete parameters optimization

1. はじめに

離散変数を有する最適設計問題の多くは、組み合わせ最適化問題として定式化され、最近では大規模な離散変数を有するシステム最適化の必要性が生じてきている。このような状況下、組み合わせ最適化問題に対して確率的手法としてランダムサーチ(Random Search)¹⁾や生物体の進化現象(環境適応性)を最適化理論として工学モデルに応用了した遺伝的アルゴリズム(Genetic Algorithm;GA)²⁾が、組み合わせ最適化の探索に用いられている。

このうちランダムサーチは、モンテカルロ法³⁾を基本として対象とする確率変数をランダムに発生させ、多くの解候補の集合の中から最適な解を見つける手法であるために、多くの確率変数を有する場合や広い範囲に確率変数が分布する場合には、探索時間が必要とする。

一方、ランダムサーチの中でイントンス・サンプリング法⁴⁾は、構造信頼性設計などにおいて、破壊確率の精度向上や計算時間の効率化を図る目的で用いられている手法である。このイントンス・サンプリング法は、破壊事象の発生確率の高い領域にサンプリング密度関数を設定し、そこにサンプルを集中させて少ないサンプル数で効率的に破壊確率を求めようとする考え方の手法である。この概念を用いて、サンプリング密度関数を実際に得られたサンプルの統計的性質で更新を行いながら、破壊確率を求める手法がアダプティブ・サンプリング法^{5),6)}である。

以上のようにイントンス・サンプリング法の概念は、事象の発生確率の高い領域、言い換えれば限定したサンプル領域にサンプルを集中させることで、少ないサンプル数で精度の高い確率を求めようとする手法であるため、計算時間を要する離散変数の組み合わせ最適化問題の解法として定式化が可能である。

そこで本研究は、ランダムサーチを基本としたアダプティブ・サンプリング法の概念を離散変数の組み合わせ最適化問題に応用し、効率的に最適解を探索する手法(修正イントンス・サンプリング法)の提案を行っている。

* 博士(工学) (株)地崎工業 技術開発部 主任研究員 (〒105 東京都港区西新橋2-23-1)
** Ph. D. 武藏工業大学 工学部 土木工学科 教授 (〒158 東京都世田谷区玉堤1-28-1)

2. 修正イボ-タス・サンプリング法

一般的に最適化問題は目的関数を用いて式(1)のように表される⁷⁾。

$$\text{目的関数: } Z(y) = [g_1(y), g_2(y), \dots, g_n(y)] \quad (1.a)$$

$Z(y)$: 目的関数, y : 変数ベクトル

$y = \{y_1, y_2, \dots, y_m\}$, m : 要素個数

$g_n(y)$: システム要素, n : システム個数

$$Z(y) \rightarrow \min \text{ or } \max$$

$$\text{制約条件: } y \in S \quad \text{ただし} \quad S \subset \Omega \quad (1.b)$$

Ω : 基本空間, S : 許容領域集合

最適化は、許容領域集合に属する変数ベクトルのうちで目的関数を最小もしくは最大にする解または解候補を求める問題となる。また、変数ベクトルが離散変数に場合には組み合わせ最適化問題となる。

ここで、問題を離散変数を有するシステムの最適化問題を考える。 π ゲームにおいて離散変数ベクトルは、式(1.b)に示すように許容領域集合より抽出されるサンプルベクトルとなり、抽出されるサンプルベクトルの数が多ければ最適な解の組み合わせが得られる確率は高くなる。

ここで、離散変数の k 組目のサンプルベクトルは式(2)に示すようになり、そのときに目的関数を式(3)に示す。

$$y^k = \{y_1^k, y_2^k, \dots, y_{m2}^k\} \quad (2)$$

$$Z(y^k) = [g_1(y^k), g_2(y^k), \dots, g_n(y^k)] \quad (3)$$

m : 離散変数の個数, k : サンプル組数

ここで、最適化は式(4)に示すように目的関数の最小値が得られる解の組み合わせを探索する問題とする。

$$Z(y^k) \rightarrow \min \quad (4)$$

しかし、離散変数が多くなれば、最適解に探索に多大な計算時間を要することになる。このような離散変数の組み合わせ最適化問題は、対象となる基本空間 Ω における確率 P により期待値を可能領域で最大にする問題となる。しかし確率 P が既知でないため、期待値を推定しながら最適化を行う必要が生じる。

そこで、モンテカルロ法の一解析手法であるイボ-タス・サンプリング法を適用し、確率変数をランダムに発生させ目的関数を計算することにより、期待値(最適解)を推定する手法を提案する。この方法は、目的関数の大きさを調べることで期待値が存在する可能性の高い領域を近似改善的に推定していく逐次最適化手である。以下にこの修正イボ-タス・サンプリングのアルゴリズムの詳細を記述する。

最適化ステップ1回目

1). 離散変数ベクトルを許容領域内(D_i)においてランダムに1組サンプルを抽出し、サンプル・ベクトルの目的関数の値を求める。

(領域: D_i ステップ(1)-サンプル1組)

$$y_{(1)}^i = \{y_1^i, y_2^i, \dots, y_{m2}^i\}$$

$$Z(y_{(1)}^i) = [g_1(y_{(1)}^i), g_2(y_{(1)}^i), \dots, g_n(y_{(1)}^i)]$$

2). 1)の手順を i 回繰り返し、 i 組のサンプル・ベクトルに対して目的関数値を求める。

(領域: D_i ステップ(1)-サンプル i 組)

$$y_{(i)}^i = \{y_1^i, y_2^i, \dots, y_{m2}^i\}$$

$$Z(y_{(i)}^i) = [g_1(y_{(i)}^i), g_2(y_{(i)}^i), \dots, g_n(y_{(i)}^i)]$$

3). 上記手順により求められた目的関数値の大きさにより、目的とするサンプル・ベクトルの存在範囲を調べる。そして次のサンプル・ベクトルの探索領域(D_i)を求める。

最適化ステップ2回目

最適化ステップ(1)で限定された探索領域(D_i)において1)~3)の手順を再度行い、次のサンプル・ベクトルの探索領域(D_i)を求める。ここで最適化ステップ2回目以降、領域限定にともなう局所最適化を回避するために、限定以前の許容領域内(D_i)においてサンプル k を再抽出する。

(領域: D_i ステップ(2)-サンプル i 組)

$$y_{(0)}^i = \{y_1^i, y_2^i, \dots, y_{m2}^i\}$$

$$Z(y_{(0)}^i) = [g_1(y_{(0)}^i), g_2(y_{(0)}^i), \dots, g_n(y_{(0)}^i)]$$

(領域: D_i ステップ^o(2)-サンプル k_i 組)

$$y_{(i)}^{k_i} = \{y_1^{k_i}, y_2^{k_i}, \dots, y_{m_2}^{k_i}\}$$

k_i : 再抽出サンプル個数, $k_i = \alpha \cdot i_i$ (α : 再抽出率)

$$Z(y_{(i)}^{k_i}) = [g_1(y_{(i)}^{k_i}), g_2(y_{(i)}^{k_i}), \dots, g_n(y_{(i)}^{k_i})]$$

最適化ステップ^o j回目

以降、各最適化ステップ^oにおいてサンプルを行いながら、最適解の探索を行う。ここで、効率的に探索を行うために各ステップ^oにおいてサンプルの数を順次減少させる。

(領域: D_j ステップ^o(j)-サンプル k_{j-1} 組)

$$y_{(j)}^{k_{j-1}} = \{y_1^{k_{j-1}}, y_2^{k_{j-1}}, \dots, y_{m_2}^{k_{j-1}}\}$$

$i > j > \dots > i_{j-1}$: サンプル個数

$$Z(y_{(j)}^{k_{j-1}}) = [g_1(y_{(j)}^{k_{j-1}}), g_2(y_{(j)}^{k_{j-1}}), \dots, g_n(y_{(j)}^{k_{j-1}})]$$

(領域: D_i ステップ^o(j)-サンプル k_{j-1} 組)

$$y_{(j-1)}^{k_{j-1}} = \{y_1^{k_{j-1}}, y_2^{k_{j-1}}, \dots, y_{m_2}^{k_{j-1}}\}$$

k_{j-1} : 再抽出サンプル個数, $k_{j-1} = \alpha \cdot i_{j-1}$ (α : 再抽出率)

$$Z(y_{(j-1)}^{k_{j-1}}) = [g_1(y_{(j-1)}^{k_{j-1}}), g_2(y_{(j-1)}^{k_{j-1}}), \dots, g_n(y_{(j-1)}^{k_{j-1}})]$$

以上の手順を繰り返すことにより、目的関数を最大もしくは最小にする最適解候補を逐次的に求める手法である。ここで、提案する修正イントンス・サンプリング法のアルゴリズムを図-1に示す。

3. 修正イントンス・サンプリング のマルコフ(確率)過程による考察

確率的な最適化問題では、その確率構造が既知でないため期待値の計算が困難な場合が多い。そこで実際は何らかの方法で確率*や期待値の計算を近似的に行う工夫が必要となる。

そこで本節では、提案した修正イントンス・サンプリング法のマルコフ(確率)過程による考察を行う。

前節と同様に許容サンプル領域(D_i)において、ランダムに*i*組のサンプルを抽出するとすると、サンプル・ベクトルは以下のようになる。

(領域: D_i ステップ^o(1)-サンプル1組~*i*組)

$$y_{(i)}^1 = \{y_1^1 \in D_i, y_2^1 \in D_i, \dots, y_{m_2}^1 \in D_i\}$$

$$\vdots$$

$$y_{(i)}^i = \{y_1^i \in D_i, y_2^i \in D_i, \dots, y_{m_2}^i \in D_i\}$$
(5)

本手法では次ステップ^oのサンプル領域 D_j を

上記のサンプルの目的関数値より求める。したがって、*k*回目のサンプル領域 D_k は*k*-1回目のサンプルベクトルにより決定されるため、この過程はマルコフ過程となる。このマルコフ過程をステップ^o回数に対する条件付き確率で表すと式(6)のようになる。

$$f(y_{(k)}^i | y_{(1)}^1, y_{(2)}^1, \dots, y_{(k-1)}^1) = f(y_{(k)}^i | y_{(k-1)}^1) \quad (6)$$

一般にマルコフ過程では、状態*i*から状態*j*への推移を推移確率行列Pを用いて、確率変数の分布 π_i から $\pi_{i,n}$ への状態推移を式(7)のように表す。

$$\pi_{r+1} = \pi_r \cdot P \quad (7)$$

π_r : 時刻*r*における状態確率分布(1~N)

$\pi_0 = [y_1, y_2, \dots, y_N]$, N: 解候補数

$$P = \begin{bmatrix} P_{11} & P_{12} & \cdots & P_{1N} \\ P_{21} & P_{22} & \cdots & P_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ P_{N1} & P_{N2} & \cdots & P_{NN} \end{bmatrix}$$

ここで本手法では、サブルを抽出しながら領域を限定してゆく。これを推移確率行列では、限定した領域の推移確率行列の要素を1にし、また排除した領域では0にしていると言える。このように唯一の推移確率行列を推定してゆく過程を吸収マルコフ過程と言う。しかし、ここでは確率が既知でないため、得られるサブル値によって吸収的な推移確率行列の推定を行う。

推移確率をマルコフ連鎖の時刻0からTまでの状態確率分布の履歴が y_0, y_1, \dots, y_T となる確率を考えると式(8)となる。

$$P_{y_0, y_1} \cdot P_{y_1, y_2} \cdots P_{y_{T-1}, y_T} = \prod_{i=1}^S \prod_{j=1}^S P_{ij}^{n_{ij}} \quad (8)$$

n_{ij} :状態iからjへの推移回数

y_0 :Given

いま、推移確率行列は未知であるため推移回数 n_{ij} (サブル)より推定する。ここで、 P_{ij} を未知パラメータとして式(8)の対数尤度関数Lを求めるとき次式となる。

$$\log L = \sum_{i=1}^S \sum_{j=1}^S n_{ij} \log P_{ij} \quad (9)$$

また、上式を最大にする推移確率 P_{ij} の推定値は式(10)のようになる。

$$P_{ij} = n_{ij} / n_i \quad (10)$$

$$\therefore n_i = \sum_{j=1}^S n_{ij}$$

したがって、推定値はマルコフ連鎖の状態iからjに推移したサブル数の要素を列の総数で割った値となる。しかし、本手法では式(10)に示した推移確率行列を近似的にサブルを抽出する領域に置き換えている。

4. 数値 解析

提案手法の離散変数の組み合わせ最適化問題への適応性を確認する目的で、図-2に示す既製型鋼を用いたトス構造物の最小重量設計問題を検討する。設計変数はトス部材の数と同じ5変数(表-1)とし、各部材がとり得る断面積を表-2に示す。

表-2 部材の断面積

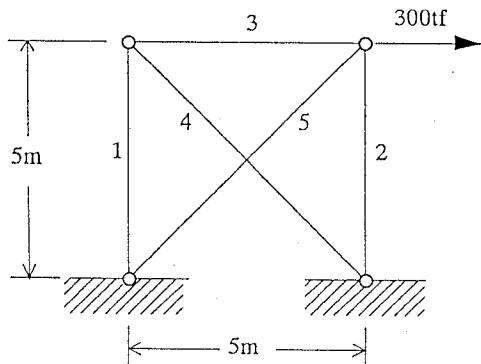


图-2 5部材トス

表-1 部材-変数表

状態変数	1	2	3	4	5
部材番号	1	2	3	4	5

No	断面積(cm ²)
0	22.72
1	29.94
2	38.36
3	54.08
4	67.55
5	70.21
6	80.42
7	90.64
8	100.90
9	133.60
10	138.80
11	148.80
12	163.90
13	167.10
14	179.10

No	断面積(cm ²)
15	195.40
16	209.40
17	217.90
18	221.70
19	238.20
20	259.40
21	278.70
22	301.70
23	319.20
24	343.80
25	349.40
26	400.50
27	451.60
28	502.70

ここで、使用鋼材の重量最小を目的としているため、目的関数は鋼材の総体積とする。また、サンプリングを行う領域の限定基準と優先順位は以下に示す順序とする。

- 1) ト拉斯の構造解析より部材が降伏(応力の絶対値が $2,100 \text{ kgf/cm}^2$ を上回る)する場合
- 2) 目的関数が平均値より大きい(重量大)場合

ここでは、本手法の離散変数の組み合わせ最適化問題に対する適用性を確認するとともに、サンプルサイズの大きさの検討を行った。各解析ケースを表-3に、解析結果を図-3に示す。また解析ケースより得られた各ステップの解析最適解を表-4に示す。なお最適化を行った回数は10回(領域限定9回)とし、限定以前の領域におけるサンプルの再抽出率は10%としている。

表-3 解析ケース

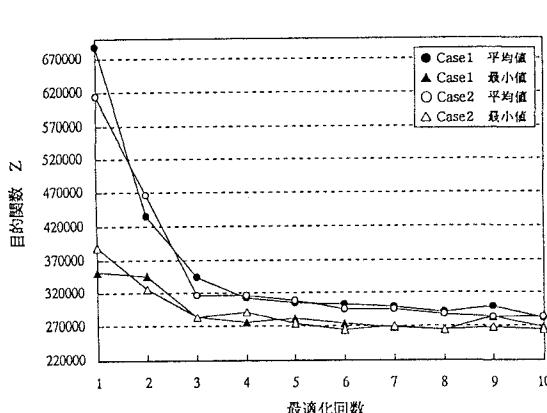


図-3 5部材ト拉斯の解析結果

解析 ケース	変数列個数	減少個数
Case1 (5部材ト拉斯)	80	8
Case2 (5部材ト拉斯)	50	5

表-4 各ステップの最適解

No.	1	2	3	4	5	最小値	平均値
1	1	22	3	1	15	352199.44	688704.50
2	1	16	9	1	15	347809.44	435280.25
3	6	13	0	1	14	282933.59	343634.06
4	5	12	0	1	14	276228.59	313235.13
5	6	12	0	1	14	281333.50	305438.34
6	6	10	0	2	14	274737.44	302257.84
7	4	10	0	2	14	268302.44	298474.69
8	5	10	0	1	14	263678.59	290512.34
9	5	12	2	1	14	284048.56	298482.66
10	5	11	0	1	14	268678.59	281078.09

図-3より、目的関数の平均・最小値ともに一様に減少しており、最小目的関数も3回程度の領域限定でほぼ収束している。ここで最適解は[1,9,0,1,14:240944.3cm³]になることにより、本解析では最適解に近い準最適解が得られたことになる。

5. 結 論

本研究では、離散変数を有するシステムの組み合わせ最適化手法に対して、モンテカルロ法を基本としたアダプティブ・サンプリング法の概念を用いた修正イントーソ・サンプリング法の提案を行った。加えて、マルコフ過程による提案手法の考察を行い、その適用性を数値解析により検証した結論を以下に示す。

(1) 本手法はマルコフ過程によりサンプルベクトルを抽出し、吸収状態推移確率を推定してゆく手法である。ただし、推移確率を近似的にサンプルを抽出する領域に置き換え、最適解近傍のみがサンプルとして得られるようにしている。

(2) 本手法は多点探索手法であり、目的関数の偏微分係数を用いない手法であるため、離散変数を有するシステムの最適化問題に適用が可能である。

参考 文 献

- 1) Torn, A., Zilinskas, A.: Global Optimization, Springer, 1989.
- 2) Goldberg, D. E.: Genetic Algorithm in Search, Optimization and Machine Learning, Addison-Wesley Publishing Company, 1989.
- 3) Rubinstein, R. Y.: Simulation and Monte Carlo Method, John Wiley & Sons, New York, 1981.
- 4) 星谷 勝・忽那幸浩:重要サンプリングとカルマカルによる信頼性解析, 土木学会論文集, No. 427/1-17, pp. 193-192, 1991.
- 5) Bucher, C. G., : Adaptive Sampling -An Iterative Fast Monte-Carlo Procedure, Structural Safety, Vol. 5, pp. 119-125, 1988.
- 6) 白木 渡・G. I. Schueller:条件付き破壊確率を用いた繰り返しモンテカルロ法とその構造物の動的信頼性度評価への応用, 構造工学論文集, Vol. 35A, pp. 467-477, 1989.
- 7) 土木学会構造工学委員会編:構造システムの最適化-理論と応用-, 土木学会, 1988.
- 8) 森村英典・高橋幸雄:マルコフ解析, 日科技連, 1995.