

阿南工業高等専門学校・専攻科 松保重之, 西丸範生

【抄録】 システムは微分方程式で表されることが多く、合理的なモデル化を行おうとすると多数のパラメータに関する多重積分の実行が必要である。しかし、このように積分変数の数が増えると通常の方法では精度の良い解を得るのは困難である。最近は効率化手法としてモンテカルロ法が用いられるが、通常のモンテカルロ法では積分の数が増えるとやはり非効率である。そこで、本研究では、リヒトマイヤの考案した準乱数と GA を援用した効率的な積分法の開発を試みた。そして、その有効性を数値計算例によって示した。

【キーワード】 準乱数、モンテカルロ法、GA、多重積分、効率化積分

1. はじめに システムは微分方程式で表されることが多く、合理的なモデル化を行おうとすると多数のパラメータに関する多重積分の実行が必要である。また、合理的な信頼性解析においても多数の不規則変数に関する同時確率密度の積分が必要である。しかし、これらの問題のように積分変数の数が増えると通常の方法では精度の良い解を得るのは困難である。最近では、効率化手法としてモンテカルロ法が用いられるが、通常のモンテカルロ法では積分の数が増えるとやはり非効率である。それがたとえ効率化モンテカルロ法でも 15~16 次元の多重積分が実用上限界であると言われている。そこで、本研究では、リヒトマイヤの考案した準乱数と遺伝的アルゴリズム GA を援用した効率的な積分法の開発を試みる。そして、本手法の有効性を幾つかの数値計算例によって示す。

2. 準乱数を用いたモンテカルロ法 本節では、準乱数を用いたモンテカルロ法¹⁾について概説する。モンテカルロ法に基づく計算を行う場合、あらゆる角度から見てランダムな性質を兼ね備えている乱数を必要とする。このような通常の乱数を用いたモンテカルロ法では、N 個の乱数に対し、求めようとする解との誤差が $N^{-1/2}$ でしか収束しないので大変不経済である。しかし、ヘイゼルグロヴが考案した準乱数を用いれば、効率良く近似解を求めることができる。この方法とは、リヒトマイヤの考案した準乱数列 $\xi_n = ([n\alpha_1], [n\alpha_2], \dots, [n\alpha_k])$ (ただし $n=0, 1, \dots$) を用いて、変数ベクトル $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_k)$ の積

分値 $I = \int \dots \int f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$ を $I \approx S(N) = \sum_n C_{Nn} f([n\alpha_1], [n\alpha_2], \dots, [n\alpha_k])$ の形の近似公式で評価するものである。ここで、k は積分の次元数、記号 $[\cdot]$ はその数値の小数点以下の値、係数 α_j ($j=1, 2, \dots, k$) は 0~1 の実数で、実験的に定める定数である。また、 C_{Nn} は $N \rightarrow \infty$ のとき厳密解 I となるように定める定数である。特に、簡単な場合として次式(1)を考えた場合、

$$S_1(N) = \frac{1}{2N+1} \sum_{n=-N}^N f([n\alpha_1], [n\alpha_2], \dots, [n\alpha_k]) \quad (1a)$$

$$S_2(N) = \frac{1}{(N+1)^2} \sum_{n=-N}^N (N+1-|n|) f([n\alpha_1], \dots, [n\alpha_k]) \quad (1b)$$

$S_1(N)$ の誤差は N^{-1} で収束し、 $S_2(N)$ の誤差は N^{-2} で収束することが証明されており、効率の良い数値積分が可能である。ただし、 α_j ($j=1, \dots, k$) は、近似解 $S(N)$ の誤差を最小にするように数値実験によって求める必要があるが、一般に、これを求めるには、膨大な時間を要する。そのため、低次元の多重積分に関する α_j は求められているが、高次元の多重積分に関する α_j は求められていないのが実状である。そこで、本研究では高次元の多重積分に関する α_j を求めるために GA を用いる。

3. GA GA では、問題に対する解(表現型と呼ばれる)を、生物の染色体と同様の符号列(遺伝子型と呼ばれる、通常は 1 次元コードで表される)で表し、この符号列に生物進化のアルゴリズムを適用することによって最適化問題等の解決を図っている²⁾。単

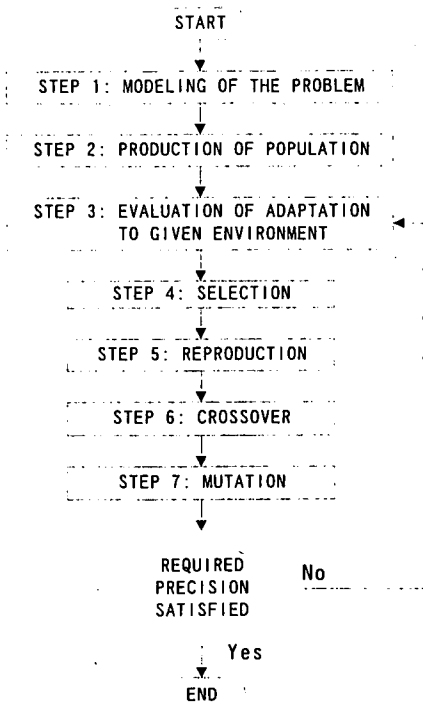


Fig.1 Flow chart of the GA

純 GA は、増殖・淘汰、交差および突然変異の 3 つの基本的な演算から構成される。単純 GA の流れ図を、Fig.1 に示す。単純 GA の計算では、① まず、STEP 1 で、問題に対する解を符号化する。このような符号化の処理は対象問題によって種々の工夫を行う必要がある。② つぎに、STEP 2 で、N 個の生物個体からなる初期生物集団を乱数を用いて発生させる。③ STEP 3 では、発生させた各生物個体の環境への適応度を評価する。GA を最適化問題に適用する場合には、この適応度が当該問題の目的関数に対応する。④ STEP 4 と STEP 5 では、淘汰と増殖を行う。すなわち、現世代の N 個の個体から重複を許して、N 個の次世代の生物個体を乱数により発生させる。ただし、STEP 3 で計算した現世代の各生物個体の適応度に比例して N 個の個体を発生させる。⑤ STEP 6 では、発生させた次世代の N 個体の中から 2 つの個体の組を交差率に従って M 組だけランダムに選択し、それぞれに対して交差を行う。交差は、2 つの個体の遺伝子型をランダムな位置で部分的に入れ換える操作である。⑥ さらに、STEP 7 として突然変異率に従って突然変異と呼ばれる操作を実行する。突然変異では、通常、各個体の遺伝子に相当する各ビットを、突然変異率で、0 を 1 にあるいは 1 を 0 に変更する操作が行われる。

Fig.1 では、STEP 7 までの一連の基本計算後に、次世代の生物集団が所要の精度を満たしているかどうかを判定し、満たしていなければさらに計算を行い、満たしていれば計算を終了している。

4. GA を用いた最適係数 α_j の探索 本研究では、単純 GA を用いて誤差が最小となるように α_j ($j=1, \dots, k$) を求める。誤差の評価式としては、{(多重積分の近似評価値)-(多重積分の厳密解)}² を用いる。

準乱数を用いたモンテカルロ法においては、繰り返し計算回数 N を、一般的に用いられる $N=10000$ とする。また、GA の計算においては、個体総数を 20、遺伝子のビット長を 30、交差の生起確率を 0.4、突然変異率を 0.04 と設定した。交差の生起確率、突然変異率の設定に関しては、低次元での多重積分における最適係数 α_j の探索時に効率良く最適解を得られる値を求め、それらを用いた。なお、GA 計算は、適応度の収束状況に関係なく世代交代数が 10 の時に強制終了させる。これは、低次元での多重積分における最適係数 α_j の探索時に、適応度が十分収束する世代交代数を考慮して決めた。

次に、最適係数 α_j の探索方法を、n 次元の多重積分の場合について述べる。求めようとする探索解は 10 進の数値なので、この表現型をそのまま 2 進数に変換し、それを遺伝子型とした。最適係数 α_j の探索においては、 $\alpha_j(1, 2, \dots, n)$ のうち $\alpha_2 \sim \alpha_n$ の $n-1$ 個の $\alpha_j(2, \dots, n)$ に 0~1 の適当な初期値を与え、 α_1 についてのみ探索計算を行い、係数 α_1 の 1 次近似解を求める。つぎに、その 1 次近似解 α_1 と $\alpha_j(3, \dots, n)$ の初期値を用いて α_2 についても最適化を行い、 α_2 の 1 次近似解を求める。以下同様に $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ の 1 次近似解を求める。さらに同様に、各 α_j のみに着目して最適化を行い $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ の 2 次近似解を求め、収束するまで同様の手順を繰り返した。

5. 数値計算例 以上の条件で効率化積分の開発を試みた。なお、MMX Pentium 200MHz を用いた。
5.1 2 重積分の例 まず、次式(2)~(5)のような 2 重積分を考えた。

$$I_1 = \iint e^{x_1} e^{x_2} dx_1 dx_2 \tag{2}$$

$$I_2 = \iint x_1 x_2 dx_1 dx_2 \tag{3}$$

$$I_3 = \iint x_1^2 x_2^6 dx_1 dx_2 \tag{4}$$

$$I_4 = \frac{1}{2\pi\sqrt{1-\rho^2}} \int_{-2.520}^{3.530} \int_{-2.520}^{3.530} \exp\left(-\frac{1}{2(1-\rho^2)}(x_1^2 - 2\rho x_1 x_2 + x_2^2)\right) dx_1 dx_2 \tag{5}$$

ただし、 $I_1 \sim I_3$ の積分範囲は、いずれの積分変数についても 0～1 とする。2 重積分に必要な係数 α_j の計算には、式(1)と(2)の 2 つの多重積分 I_1 、 I_2 の誤差が同時に最小となるように求めた。すなわち、 $\{(I_1 \text{ の近似解}) - (I_1 \text{ の厳密解})\}^2 + \{(I_2 \text{ の近似解}) - (I_2 \text{ の厳密解})\}^2$ が最小となるように α_j を求めた。そして、このようにして求めた係数 α_j を用いて多重積分 I_1 、 I_2 の評価を行った。さらに、このようにして求めた係数 α_j が他の多重積分にも適用可能かどうかを調べるため、式(4)、(5)の 2 重積分 I_3 、 I_4 の計算も行った。ただし、確率積分 I_4 における変数 x_1 と x_2 との間の相関係数 ρ は $\rho=0.5$ として計算した。Table 1 にそれらの結果を示す。

Table 1 I_1 , I_2 , I_3 および I_4 の評価結果

	I_1	I_2	I_3	I_4
近似解	0.249994	2.952491	0.04750	0.001277
厳密解	0.25	2.952492	0.04762	0.001559
誤差(%)	0.0024	0.000034	0.2520	18.09

表より、 I_1 と I_2 については、 I_1 と I_2 の評価誤差を最小化するように求めた α_j を用いたので、ほとんど誤差なく近似解を得ることができていることが分かる。 I_3 については、わずかな誤差を生じたが、工学応用上全く問題のない精度で求められた。 I_4 については多少の誤差は出ているものの、確率計算で通常必要とされる小数点以下 3～4 桁迄は求められた。これは、より良い精度で近似解を得るためには、当該問題を考慮して準乱数の係数 α_j を求める必要があることを示唆しているものと思われる。しかし、一方では、より良い精度を追求するのではなく、工学応用上問題がない程度の精度で多重積分を求めるのであれば、当該積分を厳密に考慮して係数 α_j を求めなくても、貴重な情報を得ることができる可能性があることを示しているものと思われる。

5.2 20 重積分の例 多重積分の計算では、たとえ効率化モンテカルロ法と現在の計算機技術を用いて

も、計算時間、計算精度等の実用上 15～16 重積分が限界と言われている。そこで、本節では次式に示す 20 重積分を考える。

$$I_5 = \int \cdots \int e^{x_1} \cdots e^{x_{20}} dx_1 \cdots dx_{20} \tag{6}$$

$$I_6 = \int \cdots \int x_1 \cdots x_{20} dx_1 \cdots dx_{20} \tag{7}$$

$$I_7 = \int \cdots \int x_1 x_2^2 x_3 x_4^2 \cdots x_{19} x_{20}^2 dx_1 \cdots dx_{20} \tag{8}$$

$I_5 \sim I_7$ の積分範囲は、いずれの積分変数についても 0～1 とし、 I_7 の被積分関数は偶数番目の積分変数のみが 2 乗となる関数である。 I_5 と I_6 の 2 つの積分を用いて誤差が最小となるような係数 α_j を求め、その係数を準乱数に適用して $I_5 \sim I_7$ の多重積分を行った。求めた係数 α_j を Table 2 に、それを用いて評価した積分値を Table 3 に示す。

Table 2 GA を用いて求めた α_j

$\alpha_1=0.799800715$	$\alpha_{11}=0.008184105$
$\alpha_2=0.624814535$	$\alpha_{12}=0.166893143$
$\alpha_3=0.378233883$	$\alpha_{13}=0.279635456$
$\alpha_4=0.090598506$	$\alpha_{14}=0.335897875$
$\alpha_5=0.591701108$	$\alpha_{15}=0.895412654$
$\alpha_6=0.258276487$	$\alpha_{16}=0.621023848$
$\alpha_7=0.685997228$	$\alpha_{17}=0.353808208$
$\alpha_8=0.487376903$	$\alpha_{18}=0.691846907$
$\alpha_9=0.010174199$	$\alpha_{19}=0.589746894$
$\alpha_{10}=0.902656508$	$\alpha_{20}=0.291281272$

Table 3 $I_5 \sim I_7$ の評価結果

	I_5	I_6	I_7
近似解	50338.7200	9.53768E-07	1.8340E-08
厳密解	50337.0712	9.53674E-07	1.6538E-08
誤差 %	0.003	0.010	10.896

Table 3 より、 I_5 と I_6 についてはほとんど誤差なく積分値を得ることができた。 I_7 についても工学応用上十分な精度で求めることができた。しかも、積分値の評価に用いる係数 α_j の探索時間は 7 時間程であり、一度、係数 α_j を求めると種々の積分値の評価がごく短時間で可能であり($I_5 \sim I_7$ の積分の場合、何れも 15 秒以内)、非常に便利であることが分かる。なお、係数 α_j の GA による探索は、適応度の収束に関係なく世代交代数 10 で探索計算を終了するようにしてあるので、適応度の収束状況を考慮して探索を終了するようにすれば、さらなる探索時間の短

縮が図れるものと思われる。さらに、本例題のように高次元の多重積分の場合は、準乱数を用いたモンテカルロ法の繰り返し回数 $N=10000$ は少し少ないかも知れない。 N を少しずつ変えて I_7 の計算を再度行ったところ、Table 4 に示す結果となった。したがって、より精度の良い解を短時間に求めるためには多重積分の次元数に応じて繰り返し回数 N を定めれば、さらなる効率化が図れるものと思われる ($N=2000000$ の場合の I_7 の計算所要時間はわずか約 2.5 分だった)。

Table 4 N の変化による解の精度の変化

N	100000	1000000	2000000
近似解	1.869E-08	1.737E-08	1.706E-08

5.3 2次元正規確率積分 5.1 節では、積分評価値の精度を厳密に追求しないのであれば、係数 α_j の値を対象外の被積分関数の積分に適用しても工学応用上有意義な精度で解が得られることを、幾つかの例題を通して確認した。このことは工学応用上有益であるが、例題で考えなかった他の積分でも言えるかどうかは、厳密には対象問題ごとに確認する必要がある。そこで、信頼性解析上重要となる正規分布の多重積分を対象に、さらに多くの数値計算を行い、ここで求めた最適係数 α_j が被積分関数、相関係数 ρ の値に関係なく広く適用可能であることを確認した。高次元正規分布の多重積分の精度は効率化モンテカルロ法を用いて検討することができるが、ここでは、その中でも基本であり、その精度が一般の文献³⁾で確認できる 2次元正規分布の結果を示す。

非相関正規分布の場合は、2次元以上の多次元多重積分の厳密解を容易に求めることができる。そこで、相関を有する 2次元正規分布の積分評価に必要な最適係数 α_j は、非相関の 2次元正規分布の積分において探索した最適係数 α_j とほぼ一致するものと仮定した。このような条件で種々の相関係数 ρ の値に対し 2次元正規分布の多重積分 I_4 (式(5)参照)を評価した結果を Table 5 の「本手法で求めた係数の場合」の欄に示す。同表には、計算精度の確認のために文献³⁾で与えられている厳密解も示している。また参考のために、文献¹⁾で求められている係数 α_j を用いた場合の近似解も示している。

Table 5 2次元正規分布の多重積分 I_4 の結果

ρ	文献 ¹⁾ の係数の場合	本手法で求めた係数の場合	厳密解 ³⁾
0.1	0.000248	0.000247	0.0002621
0.3	0.000615	0.000614	0.0007013
0.5	0.001278	0.001278	0.0015598
0.7	0.00239	0.002393	0.0030105
0.9	0.004212	0.004229	0.0053329
0.99	0.004977	0.005013	0.0062094

正規分布の確率密度の関数形が急激な変化を有する大きな ρ の場合には若干の誤差が見られるが、本開発手法によれば、厳密解にほぼ近い計算結果を得ることができることが表より分かる。また、本開発手法によれば、多くの被積分関数を対象に求めた係数 α_j (文献¹⁾の係数)を用いた結果よりも多少良い精度が得られていることも分かる。このことは、 ρ が大きくなるほど顕著である。なお、ここで求めた係数 α_j は、確率変数 x_1, x_2 の積分範囲を 0~1 とした積分で求めたものであるが、このような積分範囲で求めた係数 α_j は、たとえば I_4 (式(5)参照)のような異なる積分範囲の多重積分にも適用できることを、本研究では確認した。

6. まとめ 本研究では、数十次元の多重積分を効率良く計算する目的で多重積分の計算手法の開発を行った。その結果をまとめると以下のようなものである。

- 1) 数値計算により、数十次元の多重積分を実用的な時間内に実用的な精度で求めることができる可能性があることを示した。
- 2) GA のプログラムにおいて、適応度の収束状況によって計算を終了させる等の改良を行えば、係数 α_j の探索時間の短縮が行えるものと思われる。本手法は、多次元確率分布の積分にも効果的であり、数十以上のパラメータを有する信頼性解析の分野での応用が期待される。5.3 節の結果は、確率過程の初通過問題等に適用可能⁴⁾であると考えられる。

参考文献

1) 津田：モンテ…シミュレーション，改訂版，培風館，1987。
2) 安居院・長尾：ジェネティックアルゴリズム，昭晃堂，1993。
3) 山内二郎編：統計数値表，JSA-1972，日本規格協会，1977。
4) S.Matsuho et al.: Basic Study on…Problem, Proc. of the IFIP WG7.5, pp.165-172, 1993。