

ファジィ平均を用いた最適化アルゴリズムと その流れ場のコントロールへの応用

千葉大・院・自然科学研究科
千葉大・工・工業数学

水藤 寛
河原田 秀夫

Optimization Algorithm by Use of Fuzzy Average and its Application to Flow Control

Hiroshi Suito and Hideo Kawarada

1 はじめに

最適化問題については、古くから多くの手法が提案されてきている。本研究では、それらのうちでも古典的な最急降下法 (Steepest Descent Method) に簡単な修正を加え (C Method)、またそれによって得られた探索ベクトルの列にファジィ平均とよばれるある種の曖昧さを持った平均化を施すことによって (C-FA Method)、より良い収束性をもたらすことができることを数値実験を通して示す。また、局所的な最小値に陥りやすいという、このような勾配法系統の手法の弱点を克服するために、山越えのアルゴリズム (Mountain Crossing Algorithm) を開発した。そしてこれらのアルゴリズムの応用として、自由表面のコントロールの問題を取り上げた。

本研究の目的は次の3点である。

1. 最適解に至るまでの総計算コストがなるべく小さいアルゴリズムを開発する。
2. 初期値が最適解から遠くても収束するアルゴリズムを開発する。
3. 多数個存在する極小値を系統的に探索して、真の最小値 (最適解) を見つけだすアルゴリズムを開発する。

実用問題への応用においては、目的関数の値を1回求めるのに非常に大きな計算コストを要する問題がしばしば現れる。そのため、本研究においては最適解を得るまでに目的関数の値を計算しなければならなかった回数 (総計算コスト) をもって比較の対象とする。また、数値実験による試行錯誤をくりかえして実用問題に適用可能なアルゴリズムを構築することに重きをおく。

第2節ではC-FA法のアルゴリズムについて述べ、ただひとつの極小値をもつ関数を例にとりてC-FA法と他の手法とで収束性の比較を行う。第3節では山越えのアルゴリズムについて簡単に延べる。第4節ではこれらの手法を自由表面のコントロールに応用した例について述べる。第5節は結論である。

2 極小値探索のアルゴリズム

2.1 勾配法

勾配法によって関数 $f(x)$ の最小値を探索するアルゴリズムは一般に次の形式に書かれる。

$$x^{k+1} = x^k + \alpha^k d^k \quad (1)$$

ここで、 d^k は探索方向ベクトル、 α^k はステップ幅とよばれる。また、 $k, k+1$ はそれぞれ k 回目、 $k+1$ 回目の反復を示す。

探索方向ベクトル d^k は一般に次のように書かれる。

$$d^k = -\frac{1}{H^k} \nabla f(x^k) \quad (2)$$

ここで H^k はHesse行列の k 番目の近似行列で、ニュートン法においては $\nabla^2 f(x^k)$ 自身が使われ、準ニュートン法においては $H^{k+1} = H^k + \Delta H^k$ の形式によって逐次更新されていく系列 H^k が使われる。最急降下法においては単位行列が使われる。

ステップ幅 α^k は、ニュートン法においては常に $\alpha^k = 1$ ととられる。準ニュートン法においては次のWolfeの条件を満たすような α^k を非厳密直線探索によって探して用いる。[1]

$$f(x^k + \alpha^k d^k) - f(x^k) \leq \sigma_1 \alpha^k (\nabla f(x^k))^T d^k \quad (3)$$

$$(\nabla f(x^k + \alpha^k d^k))^T d^k \geq \sigma_2 (\nabla f(x^k))^T d^k \quad (4)$$

ここで σ_1, σ_2 は $0 < \sigma_1 < \sigma_2 < 1$ を満たす定数である。

2.2 C法

ファジイ平均を施す前段階となるC法(Constant approximated Hessian method)は最急降下法に簡単な修正を加えたものである。(1)、(2)式中に現れる $\nabla f, H^k, \alpha^k$ は、以下のようにして決定する。

2.2.1 ∇f の決定

$\nabla f(x^k)$ は片側差分を用いて次のように近似する。

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^k \simeq \begin{cases} \frac{f(x^k + \Delta x, y^k) - f(x^k, y^k)}{\Delta x} & \text{when } x^k \geq x^{k-1} \\ \frac{f(x^k, y^k) - f(x^k - \Delta x, y^k)}{\Delta x} & \text{when } x^k < x^{k-1} \end{cases} \quad (5)$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)^k \simeq \begin{cases} \frac{f(x^k, y^k + \Delta y) - f(x^k, y^k)}{\Delta y} & \text{when } y^k \geq y^{k-1} \\ \frac{f(x^k, y^k) - f(x^k, y^k - \Delta y)}{\Delta y} & \text{when } y^k < y^{k-1} \end{cases} \quad (6)$$

本研究では $\Delta x = \Delta y = 10^{-4}$ とした。

2.2.2 Hesse行列の近似

最急降下法では(3)式中の H^k として単位行列が使われるが、C法においては単位行列を定数倍した H_C を H^k として使う。

$$H_C = \begin{bmatrix} C & 0 \\ 0 & C \end{bmatrix} \quad (7)$$

ここに現れる定数 C は任意の正定数である。本研究ではいくつかの点をサンプリングして $f(x)$ の値を求め、近似的にHessianを計算して、その対角要素のうち最大のものを C として用いた。

2.2.3 ステップ幅の決定

ステップ幅 α^k は前述のWolfeの条件を満たすように決める。具体的には、(2)式と(7)式によって決められた探索ベクトル d_C^k の方向へ黄金分割法[1]を用いて非厳密直線探索を行い、その方向における近似的な最小値を与える α^k を求める。本研究では $\sigma_1 = 10^{-4}$ 、 $\sigma_2 = 0.9$ ととった。

2.3 C-FA法

前節のC法によって求められた探索ベクトルの列 $\{d_C^k\}$ に対してファジイ平均を施すC-FA法(C + Fuzzy Average method)は、次のようにして構成される。

2.3.1 三角型ファジイ数の定義

$a_i \in R (i = 1, 2, 3)$, $a_1 < a_2 < a_3$ とする。また、メンバシップ関数 $\mu_A(x)$ を次のように定義する。

$$\mu_A(x) = \begin{cases} \frac{x - a_1}{a_2 - a_1} & \text{when } a_1 \leq x \leq a_2 \\ \frac{a_3 - x}{a_3 - a_2} & \text{when } a_2 \leq x \leq a_3 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (8)$$

このようなメンバシップ関数 $\mu_A(x)$ を持つ集合を三角型ファジイ数(Triangular Fuzzy Number) A とよび、 $A = (a_1, a_2, a_3)$ と記す。 a_2 は三角型ファジイ数 A の代表値(mean value)という。(図1)

なお、本研究では $a_2 - a_1 = a_3 - a_2$ 、つまり二等辺三角形の三角型ファジイ数を用いた。

2.3.2 ファジイN分割の定義

$a < b$, $a, b \in R$ とし、区間 $[a, b]$ を $N - 1$ 分割($N \geq 3$), ($a = a_1 < a_2 < \dots < a_{N-1} < a_N = b$)して N 個の三角型ファジイ数 $A_i = (a_{i-1}, a_i, a_{i+1})$ ($1 \leq i \leq N$)を定めることを、区間 $[a, b]$ のファジイ N 分割とよぶ。ただし、 $a_0 = a - \frac{b-a}{N-1}$, $a_{N+1} = b + \frac{b-a}{N-1}$ とする。(図2)

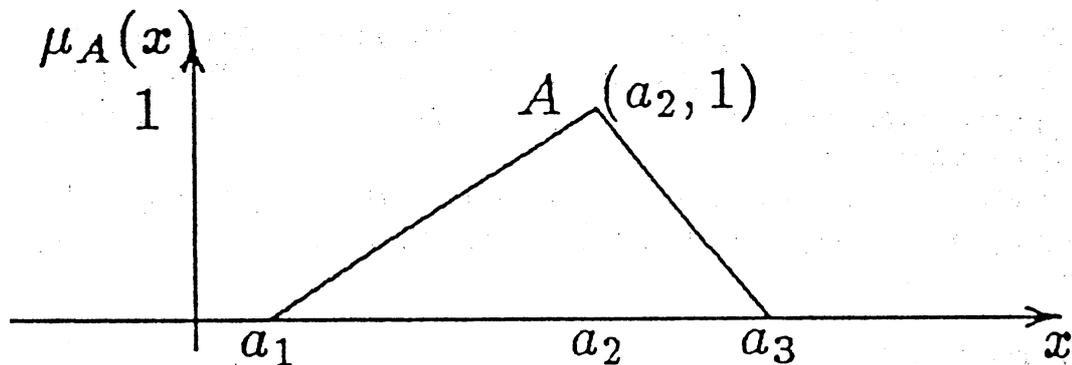


図1 三角型ファジイ数

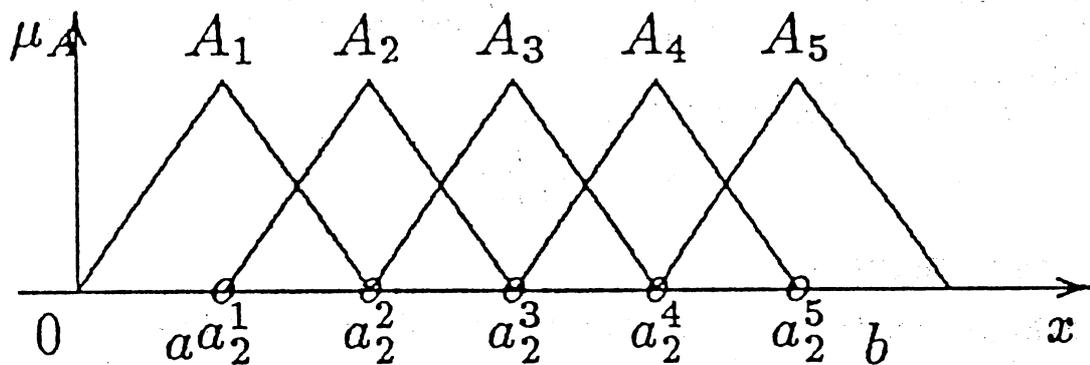


図2 ファジイN分割

2.3.3 重み関数の定義

ファジイ変数として、 $\mathbf{x} = (x_1, x_2) \in R^2$ を選び、 \mathbf{x} に対する重み関数 (weight function) w_{ij} を次のように定義する。

$$w_{ij}(x_1, x_2) = \frac{\min\{\mu_{A_i}(x_1), \mu_{A_j}(x_2)\}}{\sum_{i,j=1}^N \min\{\mu_{A_i}(x_1), \mu_{A_j}(x_2)\}} \quad (9)$$

この重み関数は明らかに次の性質をもつ。

$$0 \leq w_{ij}(x_1, x_2) \leq 1 \quad (10)$$

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N w_{ij}(x_1, x_2) = 1 \quad (11)$$

つまり、この w_{ij} は確率密度分布関数の一種とみなすことができる。そして、 $w_{ij}(x_1, x_2)$ の値は x_1 がファジイ数 A_i の代表値 a_i^j に、 x_2 がファジイ数 A_j の代表値 a_j^i にどのくらい近いかの物差しになっている。

2.3.4 ファジイ変数の選択

ファジイ変数 x_1, x_2 を選択するために、次の量を考える。

$$\begin{aligned} \Delta\theta^k &= \theta_C^k - \theta^{k-1} \\ \Delta\theta^{k-1} &= \theta^{k-1} - \theta^{k-2} \\ \Delta^2\theta^k &= \Delta\theta^k - \Delta\theta^{k-1} \end{aligned} \quad (12)$$

ただし、 $\theta_C^k, \theta^{k-1}, \theta^{k-2}$ はそれぞれ、 d_C^k, d^{k-1}, d^{k-2} と x 軸の正の方向がなす角度である。ここで、 d_C^k は第 k ステップにおいて C 法のアルゴリズムに従って求めた探索ベクトル、 d^{k-1}, d^{k-2} は反復の 1 ステップ前、2 ステップ前に用いた探索ベクトルである。 $\Delta\theta^k, \Delta\theta^{k-1}$ は探索ベクトルの方向の一次の変動を、 $\Delta^2\theta^k$ は二次の変動の大きさを表している。

ファジイ変数として $|\Delta\theta^k|, |\Delta^2\theta^k|$ をとれば、それらは $0 \leq \Delta\theta^k \leq \pi, 0 \leq \Delta^2\theta^k \leq \pi$ を満たす。この区間をファジイ N 分割し、 $2N$ 個の三角型ファジイ数 A_i, A_j についてメンバシップ関数 μ_{A_i}, μ_{A_j} を定義することにする。

2.3.5 相関行列の定義

ファジイ変数 \mathbf{x} に対して、それらの定義域を I_1, I_2 とする。この時、 I_1, I_2 をそれぞれ N 個の三角型ファジイ数 $A_i = (a_{i1}, a_{i2}, a_{i3}), A_j = (a_{j1}, a_{j2}, a_{j3})$ の代表値 a_{i2}, a_{j2} を要素とする集合 $\{a_{i2}^k\}_{k=1}^N, \{a_{j2}^k\}_{k=1}^N$ で近似する。そして x_1 と x_2 の間の相関をファジイ数 A_i, A_j の代表値 a_{i2}^l, a_{j2}^m ($l, m = 1, 2, \dots, N$) の間の相関で近似する。この相関関係は一つの行列 M_{ij} で表すことができる。この行列をファジイ相関行列 (Fuzzy Correlation Matrix) とよぶ。

本研究では、ファジイ相関行列 M_{ij} を次のように定義した。

$$M_{ij} = \frac{\max\{i, j\} - 1}{2(N-1)} \quad (13)$$

2.3.6 ファジイ係数の定義

重み関数 w_{ij} と相関行列 M_{ij} を用いて、ファジイ係数 β^N を次のように定義する。

$$\beta^N = \sum_{i,j=1}^N w_{ij} M_{ij} \quad (14)$$

ここで、添字の N はファジイ分割数を表す。

2.3.7 探索ベクトルに対するファジイ平均

前節で定義されたファジイ係数 β^N を使って、探索ベクトルの列 $\{d^k\}$ に対して次のような平均操作を行う。

$$d^k = \beta^N d^{k-1} + (1 - \beta) d_C^k \quad (15)$$

本研究で採用した相関行列(13)を当てはめると、この平均操作は $\Delta\theta^k, \Delta^2\theta^k$ が共に小さいときは d_C^k をそのまま用い、 $\Delta\theta^k, \Delta^2\theta^k$ が大きい時は1ステップ前の探索ベクトルと平均をとることになっているのがわかる。

この平均操作をファジイ平均とよぶことにする。ファジイ平均操作を言葉で表現すると次のようになる。

1. C法で求めた探索ベクトルの向きが前のステップとあまり変化していなければ、C法で求めた探索ベクトルをそのまま使う。
2. C法で求めた探索ベクトルの向きが前のステップとかなり変化していたら、前のステップでの探索ベクトルといくらか平均して使う。

下線部のようにある種の曖昧さを含んでいることが、ファジイ平均を用いた特徴である。このようにして決められた探索ベクトルを用いて、Wolfeの条件を満たすステップ幅 α^k を求め、反復を進めていく。

2.4 目的関数の選択

C-FA法と他の手法とで収束性の比較を行うため、例として次のような2変数関数を選んだ。

$$z = f(x, y), \quad (x, y) \in D, \quad D = (0, 1) \times (0, 1)$$

$$f(x, y) = \frac{-1}{150} \left(\frac{1}{0.01 + (\frac{\sqrt{3}}{2}x - \frac{y-0.2}{3} - 0.3)^2} + \frac{1}{0.02 + (\frac{x}{2} + \frac{\sqrt{3}}{3}(y-0.2) - 0.4)^2} \right) \quad (16)$$

この関数の鳥瞰図を図3に示す。

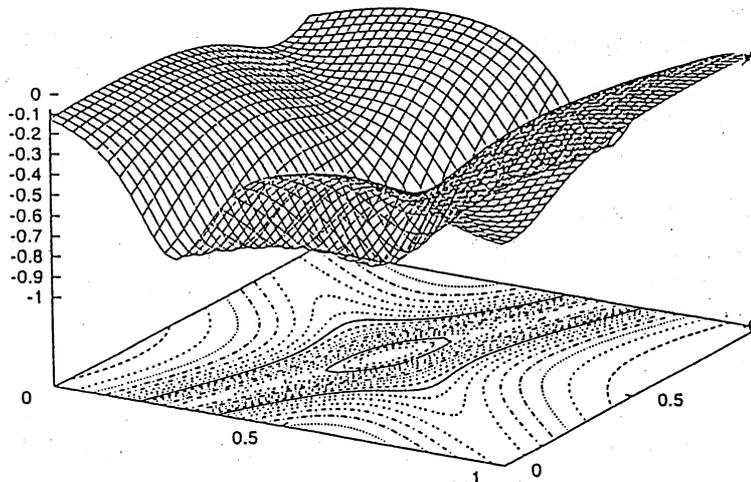


図3 目的関数の鳥瞰図

2.5 収束領域と計算コストの定義

本研究では、収束領域 V を次のように定義する。

$$V = \{x | x^0 = x, \|x^k - x^{min}\| < \epsilon_1, \|x^k - x^{k-1}\| < \epsilon_2, k < k_{max}\} \quad (17)$$

ここで x^k , ($k = 0, 1, 2, \dots$) は探索ベクトルの系列、 x^{min} は $f(x)$ が最小となる x の真の値、 ϵ_1, ϵ_2 は収束判定の基準を与える定数である。つまり、 V はそこを初期値 x^0 として反復を始めると最小値に収束するような点の集合である。本研究では、 $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 10^{-3}$, $k_{max} = 500$ とした。

また、計算コストを以下のように定義する。先に述べたように、本研究では目的関数の値を 1 回求めるのに非常に大きな労力を必要とするような問題を想定しているため、目的関数の値を求める以外の計算時間はすべて無視し、目的関数の値を求めなければならなかった回数 L を数えて計算コストとする。この計算コストは、反復の初期値の関数として次のように書く。

$$L = L(x), x \in V \quad (18)$$

つまり $L(x)$ は、収束領域 V に含まれる x を初期値として反復を開始し、 x^{min} に収束するまでに目的関数の値を計算しなければならなかった回数を表す。

また、種々の初期値から出発した場合の計算コストを、次のようにして各手法ごとに平均する。

$$L_{ave} = \frac{\sum_{(mh,nh) \in V} L(mh, nh)}{\sum_{(mh,nh) \in V} 1} \quad (19)$$

本研究では、 $m, n = 1, 2, \dots, 39$, $h = 0.025$, ととった。

2.6 手法による比較

前述の目的関数 $f(x, y)$ を例として各手法の計算コストを比較してみる。準ニュートン法における H^k の更新方法は多くの形式が提案されているが、ここでは BFGS 公式とよばれるものを用いている。[1]

図 4a から図 4d は、それぞれの手法を用いて種々の初期値から出発した場合の計算コスト $L(x, y) = L(mh, nh)$, ($m, n = 1, 2, \dots, 39$) の分布を示す。黒は収束に至らなかった初期値の分布、灰色から白は収束に至った初期値の分布を表す。灰色から白の部分がその手法の収束領域となる。白に近いほど、計算コスト $L(x, y)$ の値は小さい。

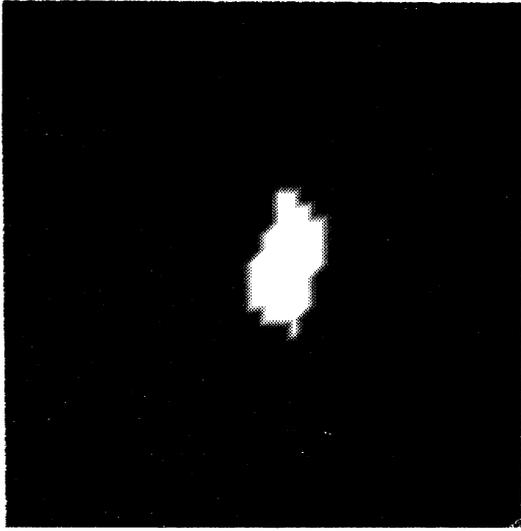
ニュートン法 (図 4a) の収束領域は非常に狭いが、その中からの計算コストは非常に小さい。準ニュートン法 (図 4b) では収束領域がかなり広がっているが、それでも最小値から離れた平坦地から出発した場合は最小値に収束するのが難しいことが読みとれる。

C 法 (図 4c) ではニュートン法や準ニュートン法に比べて収束領域は広がっているが、初期値が最小値に近い場合でも計算コストが大きくなっていることがわかる。

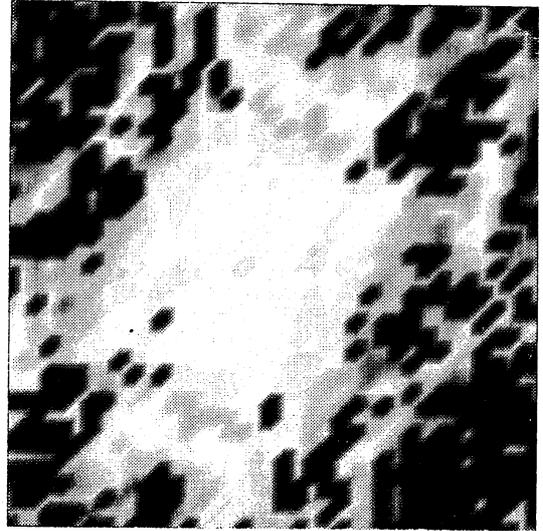
C-FA 法 (図 4d) では、ファジイ平均を施さない C 法に比べてより小さな計算コストで収束していることがわかる。C-FA 法を適用した場合の典型的な探索ベクトル列 d^k の例を図 5, 6 に示す。

図 5 は探索ベクトルの方向が振動することを押さえるように働いている例である。実線は C 法の探索ベクトル、破線は C-FA 法の探索ベクトルを示す。

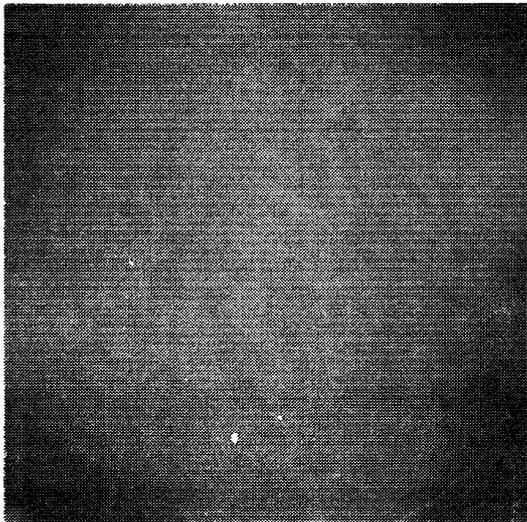
図 6 は逆にファジイ平均操作が探索ベクトルの方向を乱し、それが結果的に収束を早めるように働いている例である。実線は C-FA 法でファジイ分割数 N を 3 とした場合の探索ベクトル、破線は C-FA 法で N を無限大にした場合、つまり「ファジイ平均」が普通の意味の「平均」になった場合の探索ベクトルを示す。



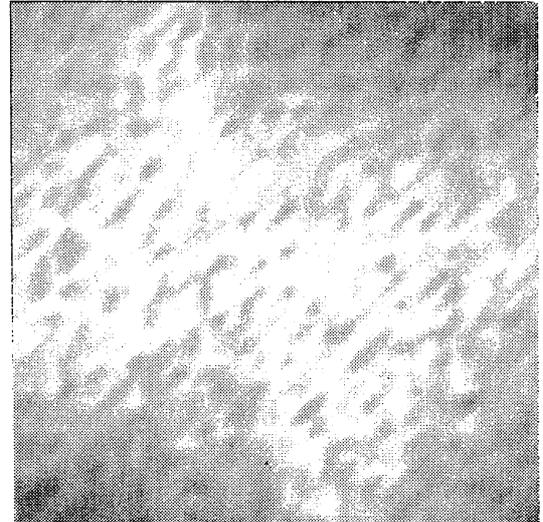
(a) ニュートン法



(b) 準ニュートン法



(c) C法



(d) C-FA法

図4 各手法ごとの収束領域と総計算コスト

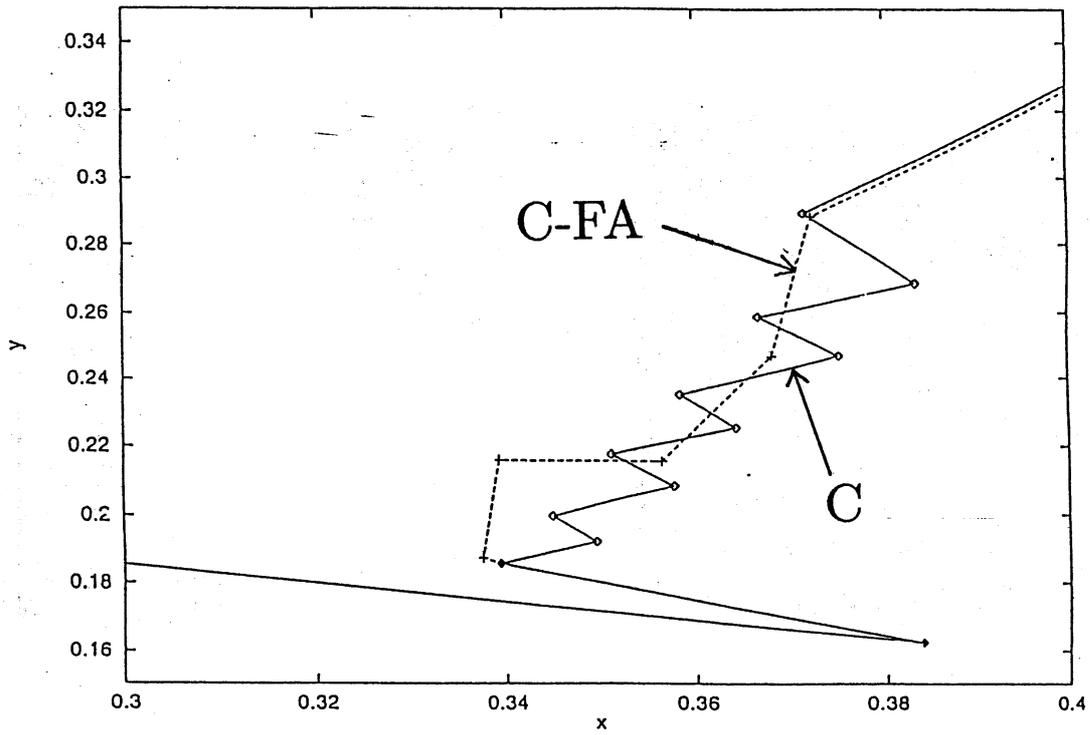


図5 ファジィ平均による安定化作用

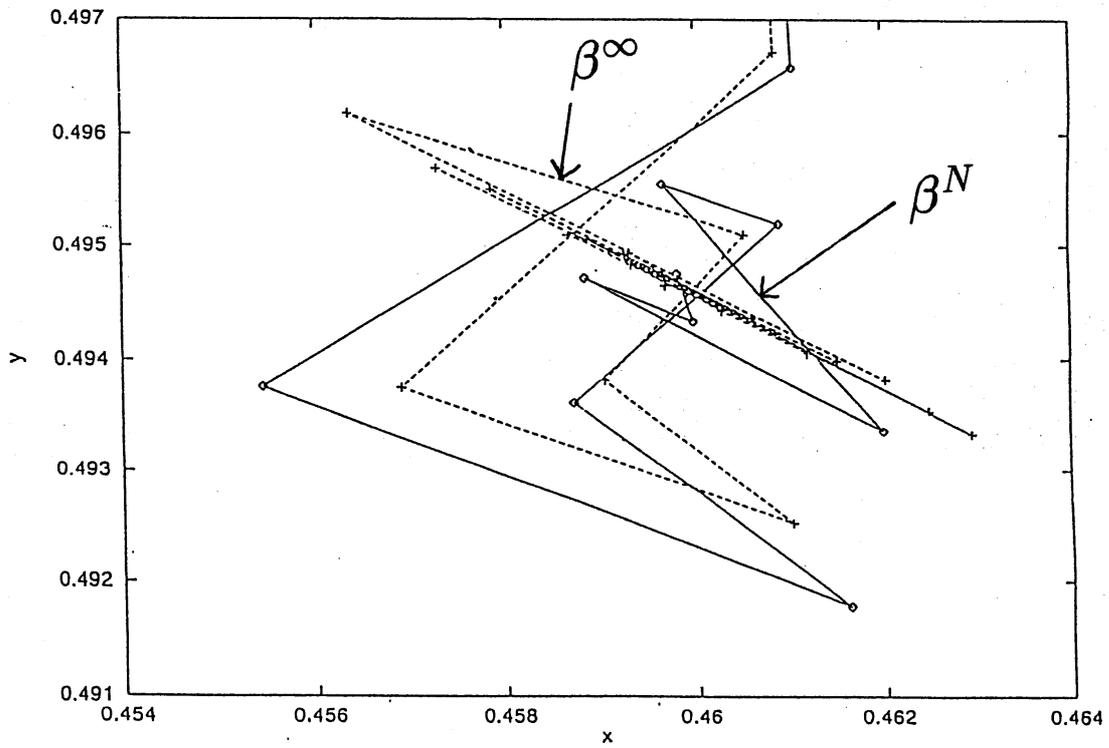


図6 ファジィ平均による攪乱作用

表1に各手法ごとの計算コストの平均値 L_{ave} と、収束に至らなかった初期値の数 $|W|$ を示す。計算を行った初期値の数は全部で $39 \times 39 = 1521$ 個である。

手法	L_{ave}	$ W /1521$
ニュートン	38	1447/1521
準ニュートン	118	473/1521
C	155	0/1521
C-FA	119	0/1521

表1 手法ごとの比較

C法では準ニュートン法 (BFGS公式) に比べて収束域が広がっているが、平均計算コストは大幅に増加してしまっているのがわかる。それに対してC-FA法ではC法に比べて平均計算コストが大幅に減少している。そのため、準ニュートン法と同程度の計算コストでずっと広い収束領域を実現できている。

3 山越えのアルゴリズム (Mountain Crossing Algorithm)

前節で述べたC-FA法は、ひとつの局所的な最小値 (極小値) を求めるためのアルゴリズムである。現実の問題においては、極小値が多数存在するのが普通であろう。多くの極小値の中から真の最小値を探し出す手法としては、遺伝的アルゴリズム (Genetic Algorithm)、焼きなまし法 (Simulated Annealing) などが提案されているが、本研究では新たに山越えのアルゴリズム (Mountain Crossing Algorithm) を開発した。このアルゴリズムは、以下に述べるようにDown-hill、Up-hillを繰り返して系統的に極小値を数えあげてゆくものである。

1. C-FA法によってひとつの極小値を探索する。(Down-hill)
2. 適当に定めた方向への1次元探索によって近似的な極大値を探索する。(Up-hill)
3. 2で求めた近似的な極大値を初期値とし、C-FA法によって別の極小値を探索する。
4. 2、3の手続きを繰り返す。すると過去に探索済みの極小値に再度到達するケースが出てくる (このケースをREVISITと呼ぶ)
5. REVISITのケースがある回数続くようになったら反復を終了する。
6. 探索した複数の極小値の中でもっとも小さいものを最小値とする。

4 流れのコントロールへの応用

4.1 最適制御問題の概要

磁気テープの製造工程の中に、磁性体を含んだ流体をフィルム面に塗布する工程がある。この塗布工程の概念図を図7に示す。

品質向上の観点からは塗布された塗料の表面はできるだけ平坦であることが望ましい。また製造効率の観点からは塗布の速度はできるだけ速いことが望ましい。そして、このふたつの要請を両立させることは容易ではない。そこで、このふたつの要請をいかにして両立させるかという最適制御の問題が発生する。

4.2 コスト関数の定義

コントロールパラメタとして次の二つを選ぶ。

1. P_{in} : 塗料注入口の入り口の圧力
2. V_{film} : フィルムのスピード

これら二つを変数とするコスト関数 $J_h(P_{in}, V_{film})$ を次のように定義する。

$$J_h(P_{in}, V_{film}) = \frac{1}{V_{film}} + \frac{1}{\epsilon_r} \int_{x_0}^{x_1} \int_{y_0}^{y_1} (\eta(x, y) - \eta_{ave})^2 dx dy + \frac{1}{\epsilon_h} |\eta_{ave} - h|$$

ただし、 $\eta = \eta(x, y)$ は、塗布された流体の、領域 $(x_0, x_1) \times (y_0, y_1)$ における自由表面形状、 η_{ave} は $(x_0, x_1) \times (y_0, y_1)$ における平均の厚さをあらわす。また、 h は塗布された流体の望ましい厚さであり、 ϵ_r, ϵ_h は品質向上の優先度をあらわすペナルティパラメタである。このように定義されたコスト関数 $J_h(P_{in}, V_{film})$ を用いると、解くべき最適制御問題は、コスト関数 J_h の最小値を与える (P_{in}, V_{film}) を求める最小値問題で表現されることになる。

コスト関数の値を求めるために必要な自由表面の形状 $\eta(x, y)$ は数値計算によって求め、C-FA 法と山越えのアルゴリズムによって上述の最小値問題を解くことにする。

4.3 自由境界問題の数値解法

自由表面の形状を計算するためには、特異摂動による補助領域法 (Fictitious domain method via singular perturbation) [4,5] を用いた。具体的には、超関数を使って表現された非定常 Navier-Stokes 方程式を差分法を用いて解く。その際、MAC 法にしたがって圧力についての Poisson 方程式を解いてから、運動方程式を解く。この方法では流体の存在する部分を特性関数を用いて表現するので、表面形状が変化するたびに差分格子を再生成する必要はない。

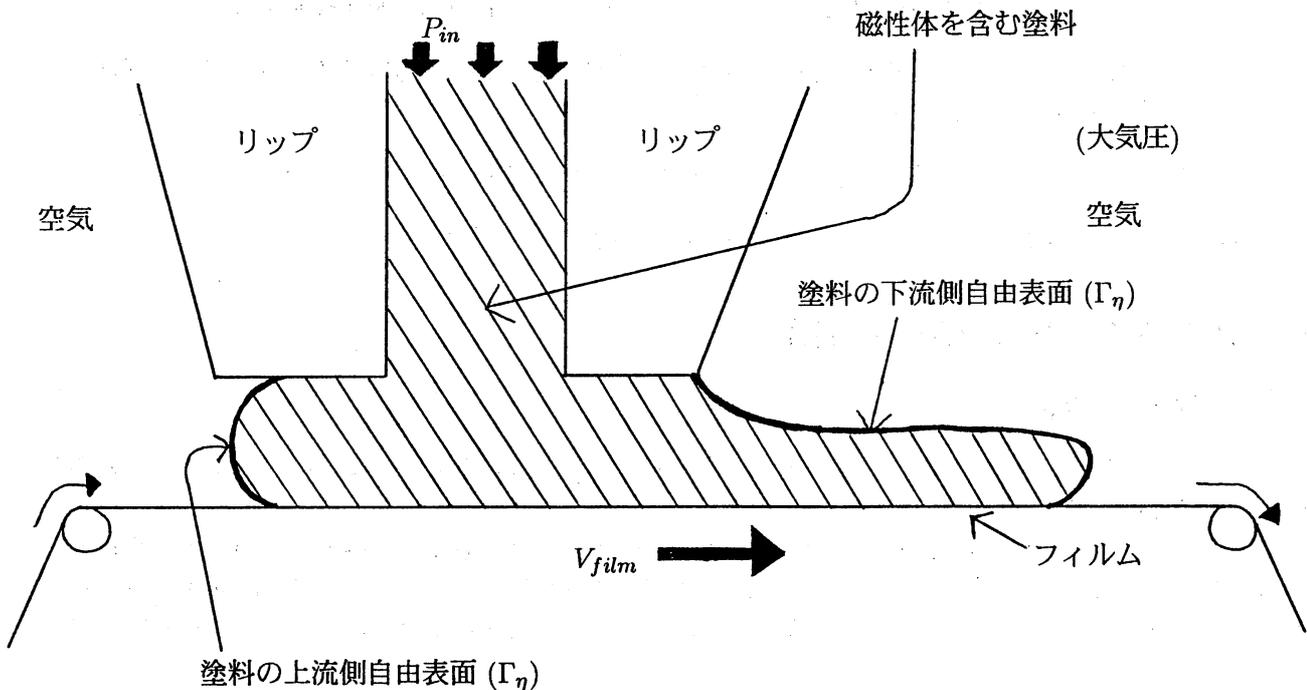


図7 塗布工程の概念図

4.4 結果

図8に $J_h(P_{in}, V_{film})$ の等高線と、C-FA法と山越えのアルゴリズムによる探索ベクトル列の例を示す。 J_h の等高線は、説明のために多くの (P_{in}, V_{film}) の値について J_h を計算して描いたものである。○は各極小値、△は近似的な極大値を示す。C-FA法による極小値探索(Down-hill)と、1次元探索による近似的な極大値探索(Up-hill)を繰り返して、極小値を数えあげて行く過程が観察される。二重丸は数えあげた極小値を比較して得られた真の最小値である。

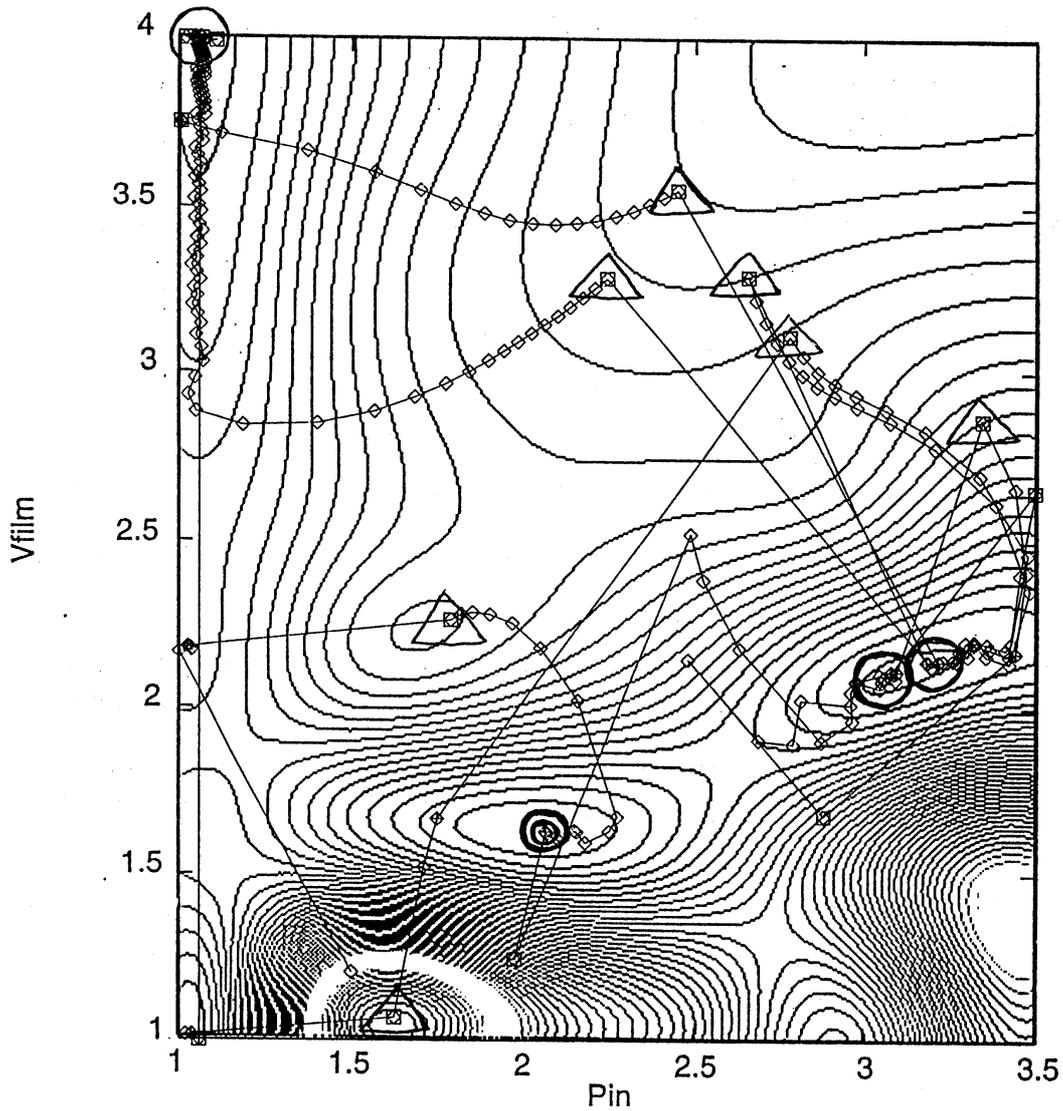


図8 コスト関数の等高線と探索ベクトル列

5 結論

1. 最急降下法の変形であるC法にファジイ平均を施したC-FA法によって、準ニュートン法と同程度の計算コストでより広い収束域を実現することができた。ファジイ平均という操作が収束過程に及ぼしている作用として次のようなものが考えられる。

- 安定化作用 … 本研究で採用したファジイ平均の定義から明らかなように、ファジイ平均操作には探索ベクトルの方向についての大きな振動を押さえる働きがある。(図5)
- 攪乱作用 … 前項とは逆に、ファジイ平均操作は探索ベクトルの方向を乱すように働き、それが結果的に収束を早めている場合もある。(図6)

これらの作用が絡み合って、結果的により良い収束性をもたらしているものと思われる。

また、本研究では収束判定の基準を $\|x^k - x^{k-1}\| < 10^{-3}$ と、比較的甘くとっている。もし実用上これ以上の精度が必要ならば、C-FA法が収束してからニュートン法に移行すれば十分な精度が得られる。

2. C-FA法と山越えのアルゴリズムの組み合わせにより、最適制御問題の答えを効率的に見つけ出すことができた。

6 参考文献

1. 藤田宏, 今野浩, 田辺國士, 岩波講座応用数学「最適化法」, 岩波書店, 1994.
2. 市田浩三, 吉本富士市, 「スプライン関数とその応用」, 教育出版, 1979.
3. 高倫山, 「数値解析におけるファジイ平均の応用に関する研究」, 千葉大学大学院自然科学研究科学学位論文, 1994.
4. Kawarada, H., “Application of Fictitious Domain Method to Free Boundary Problems”, Indo-French Conf. on Mathematical Methods for Partial Differential Equations, 1994.
5. Fujita, H., Kawahara, H. and Kawarada, H., “Distribution Theoretic Approach to Fictitious Domain Method for Neumann Problems”, East-West J. Numer. Math., Vol.3, No. 2, pp.111-126, 1995.