

シミュレーションによる勾配推定の手法

三好 直人

1. はじめに

工学や社会学の分野に見られる多くのシステムには、その設計や運用に関する様々なパラメータがあります。例えば待ち行列システムの場合なら、待合室の容量、サーバの数やその能力などが挙げられるかもしれませんが、このようなシステムの最適化や感度分析を考えると、私たちは与えられたパラメータの値でのシステムの性能だけでなく、パラメータの値を変えると性能がどう変わるのか（あるいは変わらないのか）といった問題にも関心を持つでしょう。本稿では、パラメータが連続量であるような離散事象型のシステムに対して、そのパラメータに関する性能評価量の勾配（傾き）をシミュレーションによって効率良く推定する方法を紹介します。尚、パラメータが離散的な値をとる場合に、1つのパラメータの値でのシミュレーションで複数の異なるパラメータの値での性能を推定する方法については、本特集で石崎氏が解説されていますので、そちらも併せてご覧になることをお勧めします。

シミュレーションによって性能評価量の勾配を推定する方法のうち、最も一般的なものは次の有限差分法 (Finite Difference; FD) と呼ばれる手法でしょう。話を簡単にするため、パラメータを実数 $\theta \in \Theta$ として、システムのふるまいを支配する確率分布が θ には依存しないものとします。ここで Θ はパラメータのとり得る値の範囲を表しています。このときの性能評価量を一般的に $E[\psi(\theta)]$ と表すことにします。これは、性能評価量がシミュレーションにおける1回の試行によって得られる標本 $\psi(\theta)$ の期待値として与えられることを表しています。FDは、適当な微少量 $\Delta\theta$ を用いて、

$$\frac{\psi(\theta + \Delta\theta, \omega_1) - \psi(\theta - \Delta\theta, \omega_2)}{2\Delta\theta}$$

を計算し、これを微分係数の推定値とする方法です。ここで ω_i ($i = 1, 2$) は1回の試行を表す変数ですが、以下では特に記す必要がない場合は省略することにします。また、次節以降で紹介するすべての推定量にも言えることですが、実際にシミュレーションを行う際は、上式で求められる値を（独立な試行を繰り返して）何度か計算したうえで統計的な処理をしなければなりません。見ての通りFDはとても簡単で、シミュレーション・モデルさえできればいつでも適用可能です。しかし、次のような問題点を容易に指摘することができます。まず $\Delta\theta$ の値が大きいと、明らかに微分係数の良い近似にはなりません。だからと言って、逆に $\Delta\theta$ の値が小さすぎると、今度はランダムな量をととても小さな数で割ることになり、推定量の分散が大きくなってしまいます。また、勾配の推定値を得るために必要な試行の回数が、パラメータの種類の数に比例して多くなってしまうことも挙げられるでしょう。

本稿では、シミュレーションにおける1回の試行から1つの勾配の推定値を求める方法として、特に代表的な2つのアプローチを紹介します。1つはサンプルパスからのアプローチで、摂動解析法 (Perturbation Analysis; PA) と呼ばれる手法です。この手法については、これまでも白川 [1]、三好 [2, 3] 等の和文解説がありますので、そちらもご照覧頂ければと思います。もう1つは確率分布からのアプローチで、本特集の逆瀬川氏の記事の中にも出てきている尤度比による測度変換とも関連のある手法です。どちらのアプローチも、どんなモデルにでも利用できるという訳ではありませんが、適用できるモデルに対しては、(FDに比べて) 分散が小さく、かつ効率良く計算できる推定量を与えてくれます。また、この20年くらいの間に大きく発展し、かなり多くのモデルに対して利用できるようになっています。

みよし なおと

東京工業大学 大学院情報理工学研究科

〒152-8552 目黒区大岡山 2-12-1

2. サンプルパスからのアプローチ

摂動解析法 (PA) を適用するときは、(FD と同様に) システムのふるまいを支配する確率分布がパラメータ θ には依存しないことを仮定します。PA には問題に応じて様々な発展形がありますが、その基本となるのは次の無限小摂動解析法 (Infinitesimal PA; IPA) と呼ばれる手法です。

2.1 無限小摂動解析法 (IPA)

IPA は、単純に 1 回の試行 ω での標本 $\psi(\theta, \omega)$ の微分係数 $d\psi(\theta, \omega)/d\theta$ を計算し、それを性能評価量の微分係数 $dE[\psi(\theta)]/d\theta$ の推定値とする方法です。後の例を見てもらえれば分かると思いますが、大抵の場合、この $d\psi(\theta)/d\theta$ は 1 回の試行で容易に計算することができます。定義から、IPA による推定量が不偏である (推定量の期待値が推定したい量になっている) ためには、微分と期待値の交換;

$$\frac{dE[\psi(\theta)]}{d\theta} = E\left[\frac{d\psi(\theta)}{d\theta}\right]$$

が成り立たなくてはなりません。実際、これは常に成り立つという訳ではなく、次の条件が十分条件として知られています¹。

有限の期待値を持つ確率変数 K が存在して、任意の $\theta, \theta + \Delta\theta \in \Theta$ に対して、 ω ごとに、

$$|\psi(\theta + \Delta\theta, \omega) - \psi(\theta, \omega)| \leq K(\omega) \Delta\theta.$$

この条件は、標本 $\psi(\theta)$ がパラメータ θ に関して連続で区分的に微分可能であることを要求しています。しかし、実際問題への応用を考えたとき、これは厳しい制約になるかもしれません。標本 $\psi(\theta)$ が θ に関して不連続になる場合に対応した IPA の発展形がこれまでにいくつか提案されていますが、それらの多くは次に紹介する平滑化摂動解析法 (Smoothed PA; SPA) と本質的には同じ考えに基づいています。

2.2 平滑化摂動解析法 (SPA)

SPA の基本的な考え方は、次式のように条件付き期待値を用いることによって、微分と期待値の交換を可

能にするというものです:

$$\frac{dE[\psi(\theta)]}{d\theta} = E\left[\frac{dE[\psi(\theta) | \mathcal{Z}]}{d\theta}\right].$$

ここで $\mathcal{Z}$ は、 $\psi(\theta)$ の値を求めるのに必要なサンプルパスの情報全体から適当な一部を除いたものと考えれば良いでしょう。SPA では、上の等式が成り立つための適当な $\mathcal{Z}$ を見つけることや、 $dE[\psi(\theta)|\mathcal{Z}]/d\theta$ 自体の計算が困難になることがあり、場合によっては補助的な試行が必要になることもあります。IPA に比べて格段に広いクラスの問題に適用できるようになっています。ただし、後の例でも見るように、 θ に関して不連続な標本を持つ性能評価量の勾配推定量は、多くの場合、IPA によって導かれる項と SPA の考え方から導かれる複数の項との和で表されることになります。

2.3 PA の応用例

基本的な考え方をより理解してもらうために、次のような単純な (s, S) -政策に従う在庫モデルを考えることにしましょう。これは、在庫が定期的に観測され、そのときの在庫量が s (> 0) よりも少なければ、ちょうど S ($> s$) になるように在庫が直ちに (リード・タイムなしで) 補充されるというモデルです。ただし、在庫が足りなくなった場合も需要は受け付けられるものとして (仮の在庫量が負の値になる)、不足分は観測時に合わせて補充されるものとします。このモデルにおいて、 $n-1$ 番目の観測時点から n 番目の観測時点までの間の需要の量を D_n ($n = 1, 2, \dots$) とすると、在庫量過程 $\{X_n; n = 0, 1, 2, \dots\}$ は次のように再帰的に表されます。

$$X_n = \begin{cases} X_{n-1} - D_n, & X_{n-1} - D_n \geq s \text{ のとき;} \\ S, & X_{n-1} - D_n < s \text{ のとき.} \end{cases} \quad (1)$$

ただし、 $X_0 = S$ として、 $\{D_n; n = 1, 2, \dots\}$ は独立で同一な分布に従う正の確率変数の列とします。性能評価量としては、 $n-1$ 番目の観測時点から n 番目の観測時点までにかかる費用を $c(X_{n-1} - D_n)$ として、 m 番目の観測時点までの期待平均費用;

$$E[\psi] = E\left[\frac{1}{m} \sum_{n=1}^m c(X_{n-1} - D_n)\right]$$

を考えます。ただし、関数 $c(x)$ は $x = s$ (補充を行うかどうかの境界) で有限幅のジャンプ (補充にかかる費用) があることを除いて連続で区分的に微分可能であると仮定します。

¹専門的な言い方をしますと、確率 1 で $\psi(\theta)$ が θ に関して Lipschitz 連続で、その Lipschitz 定数が有限の期待値を持つということです。これにより Lebesgue の有界収束定理 (極限と積分の順序の交換に関する定理; 例えば文献 [4] など を参照) を用いることができます。

それでは、この性能評価量に対して、様々なシステム・パラメータに関する偏微分係数の推定量を求めていくことにしましょう。

(i) まず $S = s + r$ として、 r の値を固定したときの s に関する偏微分係数を考えます。今は S の値が s の値に連動していますので、(1) 式あるいは図 1 から、任意の Δs とすべての n に対して $X_n(s + \Delta s) = X_n(s) + \Delta s$ であることが直ちに分かります。よって、 $\partial X_n(s)/\partial s = 1$ であり、 $\partial E[\psi]/\partial s$ に対する IPA による推定量は、

$$\frac{\partial \psi}{\partial s} = \frac{1}{m} \sum_{n=1}^m c'(X_{n-1} - D_n) \quad (2)$$

となります。ここで、 c' は c の導関数です。 X_n の s に関する連続性と $c(x)$ の ($x = s$ 以外での) 連続性から、 ψ も s に関して連続であることが言えますので、(2) 式は不偏推定量になっています。

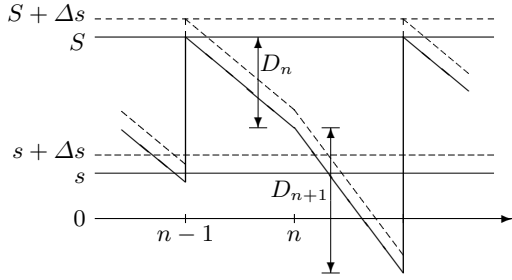


図 1: 仮在庫量の s の値の変化による影響

(ii) 次に、 s の値を固定したときの r に関する偏微分係数を考えましょう。 $S = s + r$ なので、IPA による推定量は (2) 式の右辺と同じになりますが、今度は ψ は r に関して連続にはなりません。このことを図を用いて確認しましょう。図 2 で、実線で表されているのがパラメータ (s, S) のときの仮在庫量過程のサンプルパス、破線で表されているのが $(s, S + \Delta r)$ のときのサンプルパスです。 s の値はそのまま S の値を Δr だけ大きくしたことによって、仮在庫量過程のサンプルパスが大きく変化していることが分かります。この結果、 ψ は r に関して不連続になります。

D_n の分布関数を G と表し、これが密度関数 g を持つものとしましょう。一般に SPA を用いると、たとえ性能評価量が微分可能であっても、右側微分 ($\Delta r \rightarrow 0+$) からの推定量と左側微分 ($\Delta r \rightarrow 0-$) からの推定量は異なった形になります。途中の手続きは省略しますが、SPA を用いて $\partial E[\psi]/\partial r$ に対する右側微分から

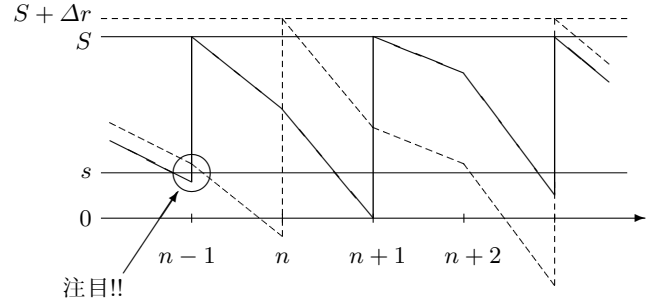


図 2: 仮在庫量の r の値の変化による影響

の不偏推定量を求めると、以下のようになります。

$$\begin{aligned} & \frac{1}{m} \sum_{n=1}^m c'(X_{n-1} - D_n) \\ & + \sum_{n \in L(m)} (\psi_n^+ - \psi_n^-) \frac{g(X_{n-1} - s)}{1 - G(X_{n-1} - s)}. \end{aligned} \quad (3)$$

ここで $L(m) = \{n = 1, \dots, m \mid X_{n-1} - D_n < s\}$ であり、在庫が補充された観測時点を表しています。 ψ_n^+ と ψ_n^- はともに、 n 番目に $D_n = X_{n-1} - s$ という値を用いる以外は元の $\{D_n; n = 1, 2, \dots\}$ と全く同じ列が与えられたときの標本平均費用 ψ の値を表していますが、 n 番目の観測時点（ちょうど $X_{n-1} - D_n = s$ になっている!）において、 ψ_n^+ のほうは補充を行わず $X_n = s$ としたときの値、 ψ_n^- のほうは補充を行って $X_n = S$ としたときの値です。また $g(X_{n-1} - s)/(1 - G(X_{n-1} - s))$ は、 $D_n > X_{n-1} - s$ である (n 番目の観測時点で補充を行った) ことが与えられたときに、 D_n が限りなく $X_{n-1} - s$ に近い値をとる条件付きの率と見ることができます。すなわち、(3) 式の第二項の和の中身は、補充が行われた時点 n において D_n 以外のすべての情報が与えられた ($\mathcal{Z} = \{D_1, \dots, D_{n-1}\} \cup \{D_n > X_{n-1} - s\} \cup \{D_{n+1}, \dots, D_m\}$) ときに、 D_n が限りなく $X_{n-1} - s$ に近い値をとる率と、その際に補充を行った場合と行わなかった場合の平均費用の差との積になっています。一方、(3) 式の第一項は、 r の値の変化によって元々は補充を行っていたのが補充しなくなるというような在庫量過程の不連続な変化が、 m 番目の観測時点までに一度も起こらない場合に対応しています。

(iii) PA の応用例の最後に、 D_n の分布がパラメータ θ を持っているものとして、 θ に関する偏微分係数 $\partial E[\psi]/\partial \theta$ の不偏推定量を導くことにしましょう。 D_n の分布関数とその密度関数を、それぞれ G_θ , g_θ と表します。 θ が分布のパラメータなので、確率分布がパラメータには依存しないという PA の仮定には当

てはまらないと思われるかもしれません。しかし、通常のシミュレーションでは、任意の分布に従う確率変数が $[0, 1]$ 上の一様乱数から作られますので、結局システムのふるまいを支配する確率分布は、一様分布の結合分布と考えることができます。例えば、 G_θ の逆関数を $G_\theta^{-1}(u) = \inf\{y \geq 0 : G_\theta(y) \geq u\}$ と定義すると、 $[0, 1]$ 上の一様乱数 U を用いて、 $G_\theta^{-1}(U)$ が分布 G_θ に従う確率変数になります。このとき G_θ が θ に関して微分可能であれば、 $G_\theta(D_n(\theta)) = U$ の両辺を微分することによって、観測された D_n の微分係数を、

$$\frac{dD_n(\theta)}{d\theta} = -\frac{G'_\theta(D_n(\theta))}{g_\theta(D_n(\theta))}$$

によって得ることができます。ここで、 G'_θ は G_θ の θ に関する微分係数です。さらに、もし θ が D_n のスケール・パラメータであるとする、すなわち θ と独立な確率変数 γ が存在して、 $D_n(\theta) = \theta \cdot \gamma$ と表せるとすると、 $dD_n(\theta)/d\theta = D_n(\theta)/\theta$ となり、微分係数の計算がずっと簡単になります。

観測時点での在庫量 X_n の偏微分係数は、 $\tau(n) = \max\{k \leq n : X_k = S\}$ とおくと、(1) 式から簡単に、

$$\frac{\partial X_n}{\partial \theta} = -\sum_{i=\tau(n)+1}^n \frac{dD_i(\theta)}{d\theta}$$

となります。ただし、 $n = \tau(n)$ のときは $\partial X_n / \partial \theta = 0$ です。やはり詳細は省略しますが、 $D_n(\theta)$ が θ に関して単調非減少であると仮定すると、 $\partial E[\psi] / \partial \theta$ に対する SPA による左側微分からの不偏推定量は、以下で与えられます。

$$\begin{aligned} & \frac{1}{m} \sum_{n=1}^m c'(X_{n-1} - D_n) \left(\frac{\partial X_{n-1}}{\partial \theta} - \frac{dD_n}{d\theta} \right) \\ & + \sum_{n \in L(m)} (\psi_n^+ - \psi_n^-) \frac{g_\theta(X_{n-1} - s)}{1 - G_\theta(X_{n-1} - s)} \\ & \times \left(\frac{\partial X_{n-1}}{\partial \theta} + \frac{G'_\theta(X_{n-1} - s)}{g_\theta(X_{n-1} - s)} \right). \end{aligned} \quad (4)$$

少し複雑な形になってしまいましたが、(3) 式と見比べてみると、これらの相違点は、(4) 式の第一項には $X_{n-1} - D_n$ の偏微分係数がかけられ、第二項の和の中身には、ちょうど $X_{n-1} - D_n = s$ となるところでの $X_{n-1} - D_n$ の偏微分係数がかけられているという2点だけであることが分かります。これらは、前の例では $\partial(X_{n-1} - D_n) / \partial r = 1$ であったために陽には現われていなかったものです。

以上の (2)~(4) 式を見てもらえれば、これらの推定量はすべて $\{D_1, \dots, D_m\}$ さえ与えられれば計算で

することが分かります。言い換えると、シミュレーションにおいて標本 ψ を1つ得るのと同じ試行によって、これら偏微分係数の推定値が求められるということです。

さて、この節を終わる前に (3), (4) 式の $\psi_n^+ - \psi_n^-$ を計算するときの注意点について述べておかねばなりません。 ψ_n^+ と ψ_n^- は、ともに同じ入力列 $\{D_1, \dots, D_{n-1}, X_{n-1} - s, D_{n+1}, \dots, D_m\}$ に対する平均費用を表していますが、一方は n 番目の観測時点において $X_n = s$ とした場合、他方は $X_n = S$ とした場合に対応しています。このように、 $\psi_n^+ - \psi_n^-$ は2つの異なるサンプルパスから計算される標本値の差なので、試行の終了を表す m の値が n の値に対して大きいときは、その分散も大きくなることが予想されます。しかし、もしこれら2つのサンプルパスが n 番目の観測時点以降の比較的早い時期に再び一致するならば、サンプルパスの違いが短い時間だけで済みますので、推定量の分散もあまり大きくはなりません。この問題は、確率過程のカップリングと呼ばれる問題として考えることができます。

3. 確率分布からのアプローチ

確率分布からのアプローチでは、(PA のときとは異なり) パラメータ θ に依存するのは確率分布だけで、標本 ψ は θ の影響を受けないものと仮定します。以下では、標本 ψ は実数値確率変数ベクトル Y の関数で、この Y の分布がパラメータ θ を持つものとし、また、性能評価量を $E_\theta[\psi(Y)]$ と表すことにします。

3.1 スコア関数法 (SF 法)

ここでは最も簡単な場合として、 Y の確率分布が密度関数 f_θ を持ち、これが θ に関して微分可能である場合を考えます。このとき性能評価量は、

$$E_\theta[\psi(Y)] = \int \psi(y) f_\theta(y) dy$$

と表されます。これを単純に微分すると、もし微分と積分の順序の交換ができるならば、あとは簡単な式変形によって、

$$\begin{aligned} \frac{dE_\theta[\psi(Y)]}{d\theta} &= \int \psi(y) \frac{f'_\theta(y)}{f_\theta(y)} f_\theta(y) dy \\ &= E_\theta \left[\psi(Y) \frac{f'_\theta(Y)}{f_\theta(Y)} \right] \end{aligned} \quad (5)$$

となりますので、結局 $dE_\theta[\psi(Y)]/d\theta$ の不偏な推定量として $\psi(Y) f'_\theta(Y)/f_\theta(Y)$ が得られます。ここで、 f'_θ

は f_θ の θ に関する微分係数です。この $f'_\theta(y)/f_\theta(y)$ はスコア関数 (Score Function; SF) と呼ばれ、しばしば $d \ln f_\theta(y)/d\theta$ の形で表されています。SF を用いると、シミュレーションの際に標本 $\psi(Y)$ と同時に $f'_\theta(Y)/f_\theta(Y)$ を計算しておくだけで、微分係数の推定値を得ることができます。

(5) 式の微分と積分の順序の交換ができるために、(IPA のときと同様の十分条件として) 次の条件が知られています。

任意の y と $\theta, \theta + \Delta\theta \in \Theta$ に対して $|\psi(y) \cdot (f_{\theta+\Delta\theta}(y) - f_\theta(y))| \leq h(y) \cdot \Delta\theta$ を満足し、かつ $\int h(y) dy < \infty$ であるような関数 h が存在する。

この条件は、本質的には密度関数 f_θ に関する条件なので、サンプルパスを調べることを要求する IPA と違って、比較的簡単に確認することができます。また、この条件さえ満たせば、IPA が不偏な推定量を与えられない場合でも、SF により不偏推定量を得ることができます。しかし、IPA と SF の両方が利用できる場合には、IPA による推定量のほうが分散が小さくなることが知られています。

3.2 SF 法の応用例

SF 法の応用例として、2.3 節の在庫モデルの例での (iii) と同じ問題を考えてみましょう。すなわち、需要の量の分布関数とその密度関数を、それぞれ G_θ, g_θ として、パラメータ θ に関する偏微分係数を推定する問題です。ただし、性能評価量を $E_\theta[\psi(D_1, \dots, D_m)]$ と表すことにします。この場合、 $(D_1, \dots, D_m)$ の密度関数は $\prod_{i=1}^m g_\theta(y_i)$ ですので、スコア関数は簡単に $\sum_{i=1}^m g'_\theta(y_i)/g_\theta(y_i)$ となります。ここで g'_θ は g_θ の θ に関する微分係数です。よって、 $\partial E_\theta[\psi]/\partial\theta$ に対する不偏な推定量として、

$$\psi(D_1, \dots, D_m) \sum_{i=1}^m \frac{g'_\theta(D_i)}{g_\theta(D_i)}$$

が得られます。この式は確かに簡単に見えますが、性能評価量 $\psi = (1/m) \sum_{n=1}^m c(X_{n-1} - D_n)$ にさらに $\sum_{i=1}^m g'_\theta(D_i)/g_\theta(D_i)$ という確率変数の和をかけ算していますので、 m の値が大きくなるにつれて推定量の分散も大きくなってしまいうという欠点があります。しかし、このモデルの場合、一旦 $X_n = S$ となると、その時点からの在庫量過程 $\{X_k; k \geq n\}$ がそれまでのふるまいとは独立になるという性質 (再生型であると

言います) を用いることによって、より分散の小さな不偏推定量;

$$\frac{1}{m} \sum_{n=1}^m c(X_{n-1} - D_n) \sum_{i=\tau(n-1)+1}^n \frac{g'_\theta(D_i)}{g_\theta(D_i)}$$

を得ることができます。ここで $\tau(n) = \max\{k \leq n : X_k = S\}$ です。この式と (4) 式とを見比べてみると、SPA より SF のほうがはるかに簡単に実装できることが分かります。ただし、対象となる確率過程が再生型でない場合、または再生型であっても再生の間隔が長くなるような場合には、SF による勾配推定量の分散は大きくなるということに注意しなければなりません。

3.3 弱微分法 (WD 法)

SF 法は、分布が密度関数を持つ場合 (または離散型の場合) でないと利用できません。ここでは、さらに一般的な問題を考えてみましょう。次に紹介するのは弱微分法 (Weak Derivative; WD) と呼ばれる手法です。確率変数ベクトル Y の分布を表す確率測度を、一般的に $\mu_\theta(A) = P_\theta(Y \in A)$ と書くことにしましょう。このとき性能評価量は、

$$E_\theta[\psi(Y)] = \int \psi(y) \mu_\theta(dy)$$

と表されます。

確率測度 μ_θ は、任意の有界で連続な ψ に対して、

$$\begin{aligned} \lim_{\Delta\theta \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta\theta} \left(\int \psi(y) \mu_{\theta+\Delta\theta}(dy) - \int \psi(y) \mu_\theta(dy) \right) \\ = \int \psi(y) \mu'_\theta(dy) \end{aligned}$$

となるような μ'_θ が存在するとき、 θ に関して弱微分可能であるという。

上の μ'_θ は符号付き測度と呼ばれるものになっていますが、すべての θ で $\int \mu_\theta(dy) = 1$ である (確率なので) ことから、 μ'_θ は有限で $\int \mu'_\theta(dy) = 0$ であることが分かります。実は、この μ'_θ は 2 つの確率測度 $\mu_\theta^+, \mu_\theta^-$ および正規化定数 c_θ を用いて、 $\mu'_\theta = c_\theta (\mu_\theta^+ - \mu_\theta^-)$ と表すことができ²、結局、

$$\frac{dE_\theta[\psi(Y)]}{d\theta} = c_\theta (E_\theta^+[\psi(Y)] - E_\theta^-[\psi(Y)]) \quad (6)$$

が得られます。ここで、 E_θ^+, E_θ^- はそれぞれ、 $\mu_\theta^+, \mu_\theta^-$ に関する期待値です。すなわち、シミュレーションに

²ここでは Hahn-Jordan 分解 (文献 [4] 参照) と呼ばれる概念を用います。

において確率分布 μ_θ^+ に従う Y と μ_θ^- に従う Y を生成すれば（これら2つは同じ $[0, 1]$ 上の一様乱数列から作られる!）、微分係数の推定値が計算できるという訳です。ここで、 ψ の有界性や連続性といった条件は、ある程度緩めることができます。

(6) 式の $(c_\theta, \mu_\theta^+, \mu_\theta^-)$ を見つけることは、はっきり言ってあまり容易ではありません。しかし、(適当な条件付き期待値と併せて用いることによって) かなり一般的な問題に利用することができます。また、SF 法が適用できるならば WD 法を用いることも可能ですが、一般にこの逆は成り立ちません。

3.4 WD 法の応用例

WD 法は、ある意味で最も直接的な方法と言えるかもしれません。次のごく簡単な例を見てみましょう。 Y を実数値確率変数、 g を Y の分布の密度関数として、

$$\begin{aligned} E[h_\theta(Y)] &= \int h_\theta(y) g(y) dy, \\ h_\theta(y) &= \begin{cases} h(y) & y \leq \theta \text{ のとき;} \\ H & y > \theta \text{ のとき,} \end{cases} \end{aligned}$$

の θ に関する微分を考えます。ここで H は定数です。実は、この $E[h_\theta(Y)]$ は簡単に微分することができて、

$$\frac{dE[h_\theta(Y)]}{d\theta} = g(\theta) (h(\theta) - H) \quad (7)$$

が直ちに得られるのですが、これを WD 法の言葉で言うと以下ようになります。

まず、このままでは θ が確率分布のパラメータではありませんので、分布のパラメータになるように評価量を変形します。 a を θ より大きな任意の定数として、確率測度 μ_θ を、

$$\mu_\theta(A) = \int_{A \cap (-\infty, \theta]} g(y) dy + (1 - G(\theta)) \delta_a(A)$$

によって定義します。ここで $\delta_a(A)$ は $a \in A$ のとき1、それ以外は0となるディラック測度です。この μ_θ を用いると、 $E[h_\theta(Y)] = \int h(y) \mu_\theta(dy)$ と表すことができます。ただし、 $h(a) = H$ としています。このとき (7) 式は、WD 法において $c_\theta = g(\theta)$ 、 $\mu_\theta^+ = \delta_\theta$ 、 $\mu_\theta^- = \delta_a$ とした場合に対応しています。すなわち、WD 法の結果は元の評価量を直接微分した形になっています。もちろん、この例がこのまま利用できるような問題はあまり考えられませんが、適当な条件付き期待値と併せて用いることによって、例えば2.3節の在庫モデルの例の (ii) のような問題も扱うことができます。

4. おわりに

以上、離散事象型のシミュレーションにおける勾配推定手法について、サンプルパスからのアプローチと確率分布からのアプローチを紹介してきました。紙面の都合で、大まかな枠組と簡単な応用例しか紹介できませんでしたが、より深い理論的な枠組と、より広い一般的な応用については、下記の参考文献と其中で紹介されている文献をご覧ください。特に、定常状態での性能評価量の勾配を考えるとときに重要な一致性の条件（観測するサンプルパスの長さを無限にすると、推定量は定常状態での性能評価量の勾配に収束するのか?）については省かざるを得ませんでした。是非文献でご確認ください。実は、参考文献も最小限度に止めてあります。IPA と簡単な SPA については文献 [5]、SPA をはじめとする PA の様々な発展形とその応用については文献 [6] にまとめられています。また、SF 法については文献 [7]、WD 法については文献 [8] をご覧下さい。文献 [7]、[8] では、最適化問題への応用についても詳しく述べられていますので、シミュレーションによる最適化を考えるときにも参考になると思います。

参考文献

- [1] 白川浩: “シミュレーションによる待ち行列モデルの最適化について,” オペレーションズ・リサーチ, Vol. 35, pp. 80–86 (1990).
- [2] 三好直人: “摂動解析法による確率離散事象システムの勾配推定,” システム/制御/情報, Vol. 42, pp. 440–446 (1998).
- [3] 三好直人: “待ち行列モデルに対する摂動解析法,” 応用数理, Vol. 9, pp. 114–123 (1999).
- [4] 伊藤清三: ルベーク積分入門, 裳華房 (1963).
- [5] Glasserman, P.: Gradient Estimation via Perturbation Analysis, Kluwer (1991).
- [6] Fu, M. C. and Hu, J.-Q.: Conditional Monte Carlo: Gradient Estimation and Optimization Applications, Kluwer (1997).
- [7] Rubinstein, R. Y. and Shapiro, A.: Discrete Event Systems: Sensitivity Analysis and Stochastic Optimization by the Score Function Method, Wiley (1993).
- [8] Pflug, G. Ch.: Optimization of Stochastic Models: The Interface between Simulation and Optimization, Kluwer (1996).