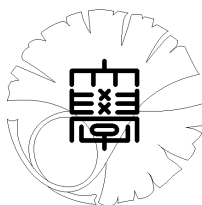


数理科学実践研究レター 2020–16 October 07, 2020

粒子軌道積分法を用いた粒子配置最適化法の検証：
レイアウト最適化問題への応用

by

柴田 翔



UNIVERSITY OF TOKYO
GRADUATE SCHOOL OF MATHEMATICAL SCIENCES
KOMABA, TOKYO, JAPAN

粒子軌道積分法を用いた粒子配置最適化法の検証: レイアウト最適化問題への応用

柴田翔¹ (東京大学大学院理学系研究科地球惑星科学専攻)

Shibata Sho (Earth and Planetary Science, Graduate School of Science, Tokyo University)

概要

自動操縦車の普及が目前に迫った現在、車内のレイアウトを最適化させる手法の研究・開発は急務である。本研究では、様々な目的に最適化された車内レイアウトを、自動的に探索する手法の検証を行なった。物理・天文学の分野で広く使われている粒子軌道積分法は、レイアウト最適化問題に応用できる可能性が高い。具体的には、レイアウトの評価関数を粒子に働く保存力に見立て、非保存力を粒子に働かせることで、系のエネルギーが最小になる粒子配置の探索がどの程度の精度で可能かを検証した。結果、十分な数のランダム探索を行えば、エネルギーを最小化させる粒子配置の探索が可能であることがわかった。この手法は、様々な形の保存力（評価関数）を用いて利用できると期待されるため、車内レイアウト最適化に利用できるかもしれない。

1 はじめに

1.1 背景

自動車や電車、航空機といった運輸用車両内のレイアウトは、それぞれの目的に応じて最適化されることが望ましく、これにより運輸の効率は最大化されると期待される。自動操縦車（RV）が現実のものとなりつつある現在、都市内で流動的に変化する需要に応じて RV を配送し、効率的に運用する方法が検討されている [1]。この方法では、配送する RV の車内レイアウトもそれぞれの需要に応じて最適化されることが求められている。しかしながら、現在検討されている車内レイアウトを最適化させる手法は実験ベースのものであり、時間とコストのかかるものである。また、実際の RV の使用目的は多種多様に渡ると予想され、必要となるレイアウトパターンは膨大な数になると考えられる。全てのレイアウトパターンをプリセットとして用意するのではなく、入力された仕様目的に応じてレイアウトパターンを生成し運用する方法が、将来的には必要となると予想される。

これらの社会背景を鑑み、本研究では任意の使用目的に応じて最適な車内レイアウトを、短時間で生成する手法を検証する。具体的には、物理学や天文学の分野で用いられる粒子の軌道積分法が、RV の車内レイアウト（より一般的にはレイアウト）最適化問題に適応可能かを検証する。後述するように、相互作用するような多粒子系の時間発展とレイアウト最適化過程にはある種の類似が見られる。既に数多くの学術分野で用いられている軌道積分法がレイアウト最適化問題に応用可能であることを示せば、レイアウト最適化問題の発展に大きく貢献できるであろう。

1.2 最適化問題と粒子運動

一般に最適化問題とは、評価関数 $f(\mathbf{x})$ を最大化、あるいは最小化させる変数 $\mathbf{x}$ を探索する問題のことである。レイアウト最適化という問題においては、変数としてレイアウトの構成要素 i と j の相対距離 $r_{i,j}$ が評価関数の主要な変数となると考えられる。一方、天体力学では天体の重力が系の時間発展を支配する力であり、重力もまた天体 i' と j' の相対距離 $r_{i',j'}$ の関数である。そして、系のエネルギーがなんらかの作用によって散逸する場合は、天体は最終的に全体のエネルギーが局所最小となるような配置に落ち着く。これはまさしく、系のエネルギー E を最小化させる最適化問題であり、粒子軌道積分法はレイアウト最適化問題の解法になり得ることを示唆している。

¹s.shibata423@gmail.com

2 研究課題と手法

2.1 研究目的

時刻 $t = 0$ に位置 $\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_{i,0} (i = 1, \dots, N)$ および速度 $\mathbf{v}_i = \mathbf{v}_{i,0} (i = 1, \dots, N)$ を持った N 個の粒子を考える。これらの粒子が、保存力 U と非保存力 $\mathbf{f}_d$ の元で時間発展する場合、運動方程式は

$$\frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = -U + \mathbf{f}_d \quad (1)$$

と書ける。時刻 t における系全体のエネルギー E は、

$$E(t) = U + \frac{1}{2} \sum_i^N v_i^2 = E(0) - \int_0^t \sum_i^N \mathbf{f}_d \mathbf{v}_i dt' \quad (2)$$

と書け、十分な時間が経過した後では、 $\sum_i^N \mathbf{v}_i = 0$ となり、粒子はエネルギーが極小値をとるような配置に収束する。最終的に達成される極小値 $E_{lm,k} (k = 1, \dots)$ は、初期条件 $\mathbf{r}_{i,0}, \mathbf{v}_{i,0}$ に依存する。 M 種の初期条件に対して計算を行った時、極小値 $E_{lm,k}$ が達成される割合を P_k と書くことにする (P_k は完全にランダムな $\mathbf{r}_{i,0}, \mathbf{v}_{i,0}$ と十分に大きい M に対しては、エネルギー $E_{lm,k}$ の配置が達成される確率とみなせる)。非保存力 $\mathbf{f}_d$ が

$$\mathbf{f}_d = -C_d \mathbf{v}_i \quad (3)$$

で与えられる時 (C_d は定数)、粒子 i が $\delta \mathbf{x}$ だけ移動した時に失うエネルギー δE は、

$$\delta E = -C_d \mathbf{v}_i \delta \mathbf{x} \quad (4)$$

である。もし、粒子の相互作用によって形成されるポテンシャルの谷が、全て相似な形状であるならば、粒子はより深いポテンシャルの谷でより多くのエネルギーを失い、結果としてエネルギーが低い配置が達成される確率は高くなる。つまりこの時、

$$E_{lm,k} < E_{lm,l} \text{ の時、 } P_k > P_l$$

が成り立つ。

実際に形成されるポテンシャル場は複雑であり、この命題が成り立つかは不明瞭である。本研究では、ポテンシャルを

$$U = U_r + U_{\text{box}}, \quad (5)$$

$$U_r = \sum_j^N C_j r_{i,j}^q \quad (6)$$

の形で与え、4次精度 Hermite 法 [2] を用いて式 (1) を $t = 0$ から $t = t_f$ まで積分し、 $E_{lm,k}$ と P_k を求める。ここで、 C_j, q は定数であり、 U_{box} は時間変動しない位置 $\mathbf{r}_i$ のみの関数である。与える q を変化させて計算を行うことで、 $E_{lm,k}$ と P_k の関係を調べ、上記の命題を検討する。

2.2 パラメータの調整

計算では $N = 5, C_j = 1, C_d = 10$ を用い、 U_{box} は図 1 のような形の関数を使用した。初期条件 $\mathbf{r}_{i,0}, \mathbf{v}_{i,0}$ は、fortran の標準ライブラリから *random* サブルーチンを用いて生成したものを使用した。テスト計算の結果をもとに $t_f = 200, M = 1000$ であれば、本研究の目的には十分であると判断した。テスト計算の結果を図 2 に示す。

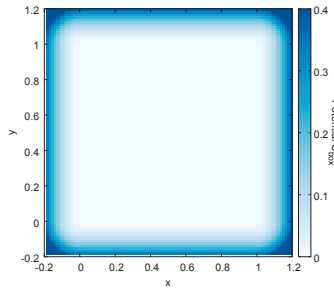


図 1: U_{box} の形。本研究では、 $0 < x < 1$ かつ $0 < y < 1$ の領域を Box 領域と定め、Box 領域外では Box 領域の境界線からの距離 l の指数関数で増加するような U_{box} 関数を用いた。

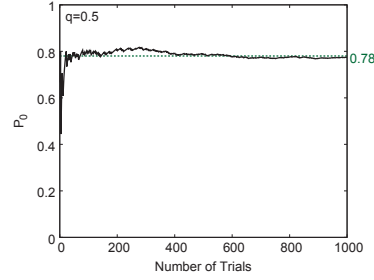


図 2: $q = 0.5$ の時の、試行回数 M と P_0 の関係 ($E_{\text{lm},0} = 10.28$)。試行回数が増えるにつれ P_0 が 0.78 に収束していく様子がわかる。この結果より、本研究では $M = 1000$ であれば十分であると判断した。

3 結果

3.1 $q = 1$ の場合

図 3 に $q = 1$ の場合に得られた粒子配置を示す。本研究で行なった計算では、この 2 つのパターン（もしくはその回転対称）以外の粒子配置は得られなかった。いずれの場合も、4 つの粒子は Box 領域の角 $(0, 0)$ 、 $(1, 0)$ 、 $(0, 1)$ 、 $(1, 1)$ 付近に配置されており、残り 1 粒子が中央付近 $(0.5, 0.5)$ に配置される（以下、パターン 0）か、Box 領域境界線上の中間点付近に配置される（以下、パターン 1）かの違いのみが現れた。パターン 0 では $E_{\text{lm},0} = 10.63$ 、パターン 1 では $E_{\text{lm},1} = 10.68$ で、 $P_0 = 0.64$ ($P_1 = 0.36$) であった。

図 4 に、 $q = 1$ で 4 つの粒子を $(0, 0)$ 、 $(1, 0)$ 、 $(0, 1)$ 、 $(1, 1)$ に配置した時のポテンシャル U のマップを示す。この図から明らかなように、ポテンシャルは中央付近で周りよりも小さくなっている。一方、 $(0.5, 0)$ 、 $(0.5, 1)$ 、 $(0, 0.5)$ 、 $(1, 0.5)$ 付近のポテンシャルは中央部分のポテンシャルと比べると高い値を示している。

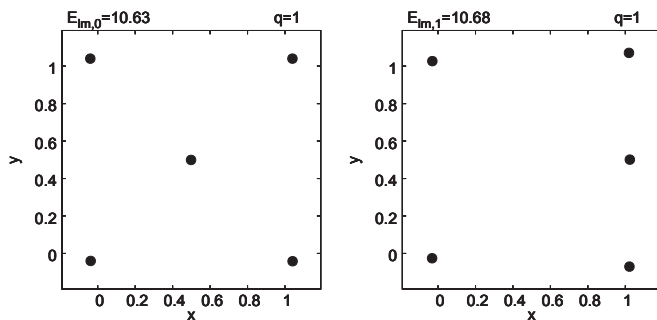


図 3: 数値計算の結果得られた 2 つの粒子配置パターン。左の配置が達成される割合 P_0 は 0.64 であった。

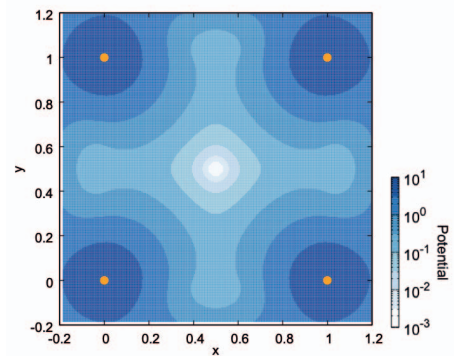


図 4: $q = 1$ で 4 つの粒子を Box 領域の角に配置した時のポテンシャル。中央付近のポテンシャルが低くなっており、5 目目の粒子は中央へ配置される割合が高くなったと考えられる。

3.2 q 依存性

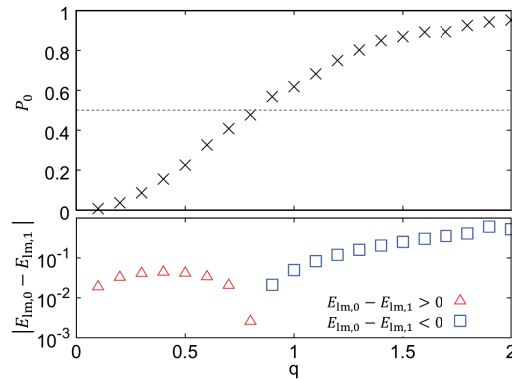


図 5: 上：数値計算によって得られた P_0 と q の関係。破線は $P_0 = 0.5$ 。下：達成された 2 パターンの粒子配置がもつエネルギーの差 $E_{lm,0} - E_{lm,1}$ と q の関係。

図 5 に q に対してパラメータスタディを行なった結果を示す。上部パネルは P_0 の q 依存性を示しており、 P_0 は q の増加に伴って滑らかに増加していることがわかる。下部パネルはパターン 0 とパターン 1 のエネルギー差 $E_{lm,0} - E_{lm,1}$ の q 依存性を示している。これらの図から明らかなように、「 $E_{lm,k} < E_{lm,l}$ の時、 $P_k > P_l$ 」が成り立っている。

4 終わりに

数値計算を用いた検証の結果、今回の条件の範囲内では「 $E_{lm,k} < E_{lm,l}$ の時、 $P_k > P_l$ 」が成り立っていることがわかった。この命題を厳密に証明することは困難であり本研究の主目的から外れるので、その点の検証は行わない。しかしながら、今回の結果からレイアウト最適化問題の解法として、粒子軌道積分法が有用であることが示された。本研究では $N = 5$ でポテンシャルの形は $r_{i,j}^q$ と限定的ではあったが、図 5 に見られるように、粒子配置の実現確率 P_k がエネルギー $E_{lm,k}$ を反映している結果を見ると、粒子数が異なる場合や、ポテンシャルがより複雑な形をもつ場合であっても、同様の結果が得られることが期待される。本研究の今後の発展としては、 P_k と $E_{lm,k}$ の粒子数依存性、ポテンシャル依存性をより詳細に検証していくことが考えられる。また、たとえ厳密な最適解探索が行えないとしても、目的に応じた適切なレイアウト探索は可能であろう。したがって、本研究の動機である RV 車内レイアウト最適化の問題に、本研究が応用されることにも期待したい。

謝辞 本研究では、課題の提供から解法の検証・議論まで、様々な方々にご助力いただきました。特に、課題の提供や現実への応用を絡めたアドバイス等でご協力いただいた日産自動車株式会社の高松敦様、原加代子様、数学的な知見を用いて有用なアドバイスを数多くいただいた数理科学研究科の金井雅彦様、間瀬崇史様、鮑園園様、同じ FMSP コース生として積極的に議論に参加していただいた竹内大智様、長谷川隆祥様には、改めて感謝いたします。また、本研究は FMSP から様々なサポートを頂くことで完遂されました。再度感謝いたします。

参考文献

- [1] L Martinez, P Crist - International Transport Forum, Paris, 2015
- [2] Makino, J. & Aarseth, S. J. 1992, pasj, 44, 141