

経路積分の概念に基づく確率過程を利用した新たな最適化手法の提案

NEW OPTIMIZATION METHOD USING STOCHASTIC PROCESS BASED ON PATH INTEGRAL

吉田 洋明¹⁾, 今野 友和²⁾, 山口 雄仁³⁾, 石川 芳男⁴⁾

Hiroaki YOSHIDA, Tomokazu KONNO, Katsuhito YAMAGUCHI and Yoshio ISHIKAWA

- 1) 日本大学理工学部精密機械工学科 (〒274-8501 船橋市習志野台 7-24-1, E-mail: yoshida@eme.cst.nihon-u.ac.jp)
- 2) 日本大学大学院理工学研究科 (〒274-8501 船橋市習志野台 7-24-1, E-mail: ykonno@stone.aero.cst.nihon-u.ac.jp)
- 3) 日本大学短期大学部基礎工学科 (〒274-8501 船橋市習志野台 7-24-1, E-mail: eugene@gaea.jcn.nihon-u.ac.jp)
- 4) 日本大学理工学部航空宇宙工学科 (〒274-8501 船橋市習志野台 7-24-1, E-mail: yishi@stone.aero.cst.nihon-u.ac.jp)

We propose a new optimization method using stochastic process. The method that is based on path integral techniques used in quantum mechanics obtains a solution as an expectation. The conventional optimization methods were based on a deterministic approach, since their purpose is to find out an accurate solution. However, these methods have initial condition dependence and risk of falling into local solution. The advantages of this method are not to be affected by initial conditions and not to need techniques based on experience. In the present paper, the new optimization method using stochastic process is formulated, and numerical calculation algorithm is proposed. As a numerical calculation example, an integrated optimization problem for space plane is solved to prove effectiveness of the present method.

Key Words: Integrated optimization, Stochastic process, Path integral, Space plane

1. はじめに

我々は、確率過程を利用した新たな最適化手法を提案する。本手法は、最適解の近似解を求めるものであり、厳密解を求める場合には不向きである。しかしながら、システム設計の初期段階、特に概念設計の段階では、最適解の近似解で十分なことも多い。ところで、厳密解を求める従来の最適化手法は、効率よく解探索を行うためには初期解の設定や経験に基づいたパラメータチューニングが必要であるうえ、高い計算コストが必要であった。また、局所解に停留する危険性も高かった。これに対し、本手法では設定すべきパラメータは1つであり、初期解を設定する必要も無いため、知見の得られていない問題にも容易に適用できる。また、局所解に停留する危険性も無いように、数値計算アルゴリズムも簡潔であるため低い計算コストで容易に最適解の近似解を得ることができる。

本手法は、本来確定論である最適化問題を確率過程に置き換えることで、最適解の近似解を期待値(確率平均)として求めるものである。この着想は、量子力学的運動と古典力学的運動との関連から得られたものである。ニュートン

力学(これを量子力学に対して古典力学と呼ぶ)では粒子の運動は因果的であり、初期条件を指定すればその運動は一意的に定まる。一方、量子力学で定まっているのは粒子の取り得る軌道の確率であり、あらかじめ予測可能なのは粒子の軌道の期待値のみである。古典力学で定まる軌道は「最も確率の高い運動」であり、確率的に発生するそれ以外の軌道も多くがこの古典軌道の周りに連続的に分布するため、期待値と古典軌道は一般的には一致しないものの、ほとんどの場合両者は概ね近いものとなる。従って確率論を用いることで、確定論に従う唯一解の近似解を期待値として求めることができる。

確率論を利用したヒューリスティックな最適化手法として、Simulated Annealing (SA)や Genetic Algorithm (GA)などが挙げられるが、これらの手法は解の探索過程に確率論を導入したものである。これに対し、我々の手法は最適化問題そのものを評価関数値によって決まる確率分布を持つ確率過程に置き換える。そして、最適化問題を真の解をピークとしてその周辺に様々な解が分布する確率現象と捉える。したがって我々の手法には、SAにおけ

るアニーリング過程や GA における交差や突然変異のような解の探索過程は一切含まれていない。その代わり本手法の数値計算では、評価値がよい解ほど高い頻度でこれを発生させるメカニズムを用いることで、期待値として最適解の近似解を求める。また、得られる解は近似解であるものの、ヒューリスティックな手法とは異なり、得られる解に対する数学的な背景があることも本手法の特徴の 1 つである。

ここでは、本手法の定式化を行い、その有効性を示すために、数値計算例として単段式スペースプレーンの統合的最適化問題を探り上げる。

2. 原理

確率過程を利用して、期待値として最適解の近似解を求める我々の手法は、量子力学で用いられている経路積分法概念に基づいている。ここではまず、簡単に経路積分法概念を説明し、これに基づいて最適化手法の定式化を行う。

2.1. 経路積分法

Feynman は 1948 年、量子力学を経路積分法と呼ばれる多重積分形式で再定式化した。経路積分法では、時刻 t_0 から t_f までの粒子の運動を考える際、時間軸を N 個に分割し、各時刻 t_i における粒子の位置 x_i を考える。そして、粒子の軌道はこの x_i の列として定義される。

時刻 $t = t_i$ における粒子の位置を x_i とすれば、 x_i が x_i を含む dx_i の幅に入る確率 P は、確率分布を $P(x_0, x_1, x_2, \dots, x_N)$ として次式で与えられる。

$$P = P(x_0, x_1, x_2, \dots, x_N) dx_0 dx_1 dx_2 \dots dx_N \quad (1)$$

$$P(x_0, x_1, x_2, \dots, x_N) = \frac{1}{A} \exp\left(i \frac{S}{\hbar}\right) \quad (2)$$

ただし、 A は確率を 1 にするための規格化定数であり、 \hbar はプランク定数である。 S は作用積分と呼ばれる量で、

$$S = \int_{t_0}^{t_f} L(x, dx/dt, t) dt \quad (3)$$

ここに、 L はラグランジアンである。

経路積分法によれば、量子力学における全ての物理量はこの確率に基づく期待値のみがあらかじめ予測可能である。たとえば時刻 t_i における粒子の位置 x_i の期待値 $\langle x_i \rangle$ は、

$$\langle x_i \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} x_i \cdot P(x_0, x_1, \dots, x_N) dx_0 dx_1 \dots dx_N \quad (4)$$

また、各変数 (x_0, x_1, \dots, x_N) は各分割点上での位置を表して

いたから、上式における変数の取り得るあらゆる場合とは、可能な全ての経路をカバーすることを意味することになる。これは、時刻 i における位置の期待値は、可能な全ての経路とその確率によって表現されることを示している。

量子力学における経路積分法では、粒子の波動性を反映して式(2)の指数部の作用積分 S に虚数単位 i が掛かっているが、式(4)の期待値の計算において積分に最も寄与するのは S の値が極小になる場所、すなわち S の変分が 0 になる軌道であり、最小作用の原理によれば、それが古典軌道に一致することになる。

したがって、経路の期待値とは、次式のように各分割点毎に計算された位置情報についての期待値からなる点列である。すなわち、

$$\{\langle x_0 \rangle, \langle x_1 \rangle, \langle x_2 \rangle, \dots, \langle x_{N-1} \rangle, \langle x_N \rangle\} \quad (5)$$

そして、もしもこれが古典力学的粒子の運動であり、この経路の確率分布が式(3)の作用積分に基づいて定められた式(2)であるならば、式(5)の期待値で表された経路は、式(3)の作用積分を最小とする古典的経路の近似解となる。

Fig. 1 に、1 次元投げ上げ問題の解として確率分布に従って得られた経路のいくつかを重ね合わせて示す。ただし、確率分布として後述する波動性を除いた式(6)を適用した。横軸は時間、縦軸は上下方向の位置である。厳密解（太線）に近い経路、つまり式(3)の作用積分値が小さい経路ほど、その発生確率が高いため、密に存在している様子が分かる。また、確定論ではあり得ない経路も存在している。これら全ての経路について期待値をとったものが式(3)の作用積分 S の変分を最小とする解、つまりこの場合は古典力学的運動の近似解となる。

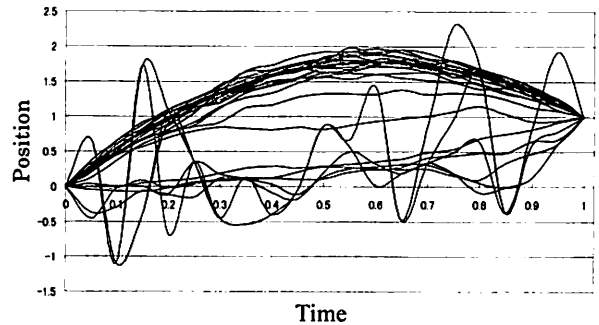


Fig. 1 Paths generated by a probability distribution

以上のように、本来は確定論で扱われるべき問題であっても、経路積分法に基づいてこれを確率論として扱うことによって、作用積分 S を最小とする解の近似解が得られることが分かる。したがって、この作用積分 S を問題毎に決まる任意の評価関数

で置き換えれば、経路積分の考え方に基づいて期待値を求めることで、最適解の近似解を得ることができる。

2.2. 定式化

前節の経路積分法の考え方に基づき、式(3)の作用積分 S を任意の評価関数 $I(x)$ で置き換えることにより、経路積分を一般的な工学的最適化手法として定式化する。

まず、最適化すべき設計変数ベクトルを x 、評価関数を $I(x)$ として式(2)に基づき不必要な波動性を取り除いた確率分布 $P(x)$ を次式のように定義する。

$$P(x) = \frac{1}{A} \exp(-I(x)/h) \quad (6)$$

確率分布を式(6)のように定義することにより、解の発生確率（解空間における解の分布）は評価関数値が最も小さい解すなわち最適解でそのピークとなり、それ以外の解はその周辺に分布することになる。ここに、 h は解のゆらぎを与える任意のパラメータである。すなわち、 h は確率分布 $P(x)$ の幅の大きさを定めるパラメータであり、 h が大きい場合は広く緩やかな分布を、また小さければ狭く急峻な分布を与える。また、 A は確率の総和を1とするための規格化定数である。

つぎに、最適化すべき N 個の設計変数を x_1, x_2, \dots, x_N と表し、設計変数ベクトルの成分とする。すなわち、

$$x = \{x_1, x_2, \dots, x_N\} = x_i \quad (i=1 \sim N) \quad (7)$$

もしも、 x_2 が時間関数であるなら、これを時間軸に沿って M 個に分割して、

$$x_2 = \{x_2^1, x_2^2, \dots, x_2^M\} \quad (8)$$

とする、他の時間関数の設計変数も同様である。

最後に、経路積分の式(4)に基づき、最適解の近似解として期待値を求める。ある1つの設計変数ベクトル x (1つの解) に対する評価関数が $I(x)$ であるとき、その確率分布は式(6)より $P(x)$ であるから、設計変数ベクトル x のある1つの要素 x_i の期待値 $\langle x_i \rangle$ は次式のように表すことができる。

$$\langle x_i \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} x_i \cdot P(x) dx_1 dx_2 \dots dx_N \quad (9)$$

式(9)では積分範囲が $-\infty \sim \infty$ になっているが、これは経路積分の概念を踏襲しているためであり、実際の数値計算では、それぞれの変数が取りうる上下限値の範囲である。また、設計変数が時間関数であるとき、問題によっては両端の値が固定されている場合もあるので、両端については、境界条件によって取り扱いを変える必要がある。

3. 数値計算アルゴリズム

最適解の近似解は式(9)の様に表されるため、これを解析的に実行出来る場合はよいが、一般的に確率分布 $P(x)$ 、特に式(6)の規格化定数 A を求めることは困難である。ここでは、式(9)で表される期待値を数値計算によって求めるアルゴリズムの一例を示す。

前述のように確率分布 $P(x)$ を求めることは困難であるが、モンテカルロ法の一つであるメトロポリス法を利用することで、確率 P に従った解 x を生成する事が出来る。これにより、実験的に期待値を求めるのと同様に、数値計算によって期待値を計算することができる。

最初に数値計算アルゴリズムの考え方を簡単に説明する。まず、評価関数を定め、数値計算を行うべく必要であればしかるべき変数を分割し、式(7)のような設計変数ベクトル x を定める。次に、全ての変数値を乱数によって生成して1組の解 x を発生させるが、その発生確率を評価関数によって定められた式(6)の確率分布に従うようにする。このようにすると、評価値の良い解は頻繁に発生し、逆に評価値の悪い解は、まれにしか発生しないことになる。また、マルコフ過程であるため、過去の解とこれから発生する解の間にはいかなる関係も無い。最後に、この確率分布に従って発生した全ての解を用いて期待値を計算することで、最適解の近似解を得る。

解の生成にメトロポリス法を用いた場合の具体的な計算手順を以下に示す。そして、この計算手順のフローチャートを Fig.2 に示す。また、図中の番号は、以下の計算手順に付けられたステップ番号に対応している。

- Step1. 全ての変数値を乱数によって生成して1組の解を作り、この組を初期解 x_{old} とする。またこのときの評価関数値を I_{old} とする。
 - Step2. 乱数によって新たな解 x_{new} を生成し、このときの評価値 I_{new} を算出する。
 - Step3. メトロポリス法を用いて、解の発生確率が式(6)に示した評価値によって定まる確率分布に従うように解 x_{old} か x_{new} を選択する。具体的には $\Delta I = I_{new} - I_{old}$ により $\Delta I \leq 0$ (新しい解によって評価値が改善された場合) であれば x_{new} を採用するが、 $\Delta I > 0$ (新しい解によって評価値が改悪された場合) であっても $\exp(-\Delta I/h)$ の確率で x_{new} を採用する。
 - Step4. 期待値の計算を行う。
 - Step5. 終了条件を満たしていれば終了し、満たしていなければ乱数による解の生成 (Step2) に戻る。
- 以上の計算が終了したとき、求められた期待値は最適解の近似解となっている。

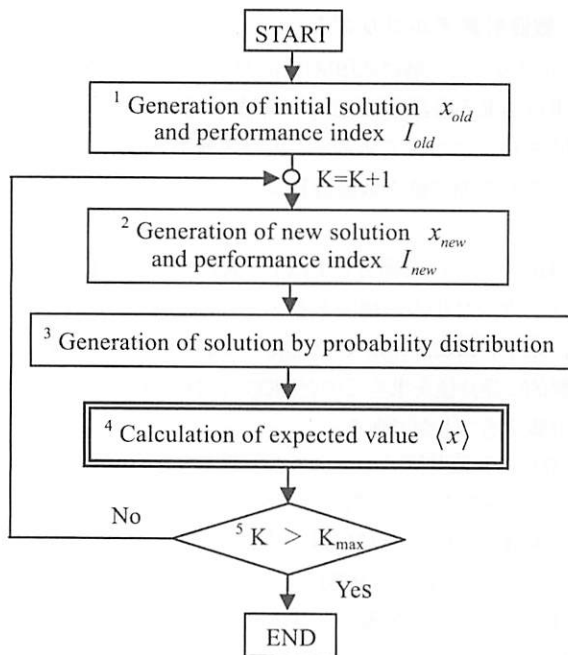


Fig.2 Flow chart of calculation

今回は単純に計算の繰り返し回数の上限值 K_{max} を終了条件としている。これは、計算途中の解の生成がマルコフ過程であり、さらに計算を続行しさえすればよりよい期待値を得ることができるためである。また、もし複数台のコンピュータで計算を行う場合には、上記の計算手順をそれぞれのコンピュータで独立に行い、最後にすべての計算結果について、再度期待値の計算 (Step4)を行えばよい。このとき、コンピュータの数に比例して計算時間が短縮される。

4. 数値計算例

数値計算例として、単段式スペースプレーンの統合的最適化問題を取り上げる。スペースプレーンの上昇では、機体形状と飛行経路が空力特性を介して相互干渉するため、これらを独立に最適化することはできず、これら両方を最適化する問題は、統合的最適化問題と呼ばれる。スペースプレーンは、現在の技術では実現が困難であるとみられており、初期解の設定も非常に困難であり、実行可能解の存在も明らかではない。従って、従来の最適化手法で最適解を得ることが難しい問題である。

本問題では、飛行経路を求めるために機体形状を決定しておかなければならないため、Fig.2 に示した数値計算アルゴリズムに変更を加えている。具体的には、機体形状とエンジンを決定する静的な機体設計変数と飛行経路を決定する動的な設計変数を分離している。そして、まず乱数により機体設計変数を生成して機体形状を決定し、この機体形状に対してメトロポリス法により、様々な飛行経路を生成して飛行経路の期待値、すなわち最適解をもとめる。次に、別の機体を乱数により生成し

て、またこの機体に対して飛行経路の最適解を求めるという操作を繰り返す。そして最後にこれらの機体とその最適飛行経路の全てから、機体形状と飛行経路の期待値を求めることで、機体形状と飛行経路の最適解を求めている。

4.1. スペースプレーンモデル

今回採り上げるスペースプレーンは、以下の Fig.3 で示すような6つの設計変数で機体形状が決定される。空力性能については、NASA Langley Research Center の単段式円錐型スペースプレーンの空力推算式を用いて推算する。また、機体の重量については、WAATS を用いて推算する。ただし、WAATS の推算式を算出するために使用された機体は古いので、いくつかの推算式は修正してある。

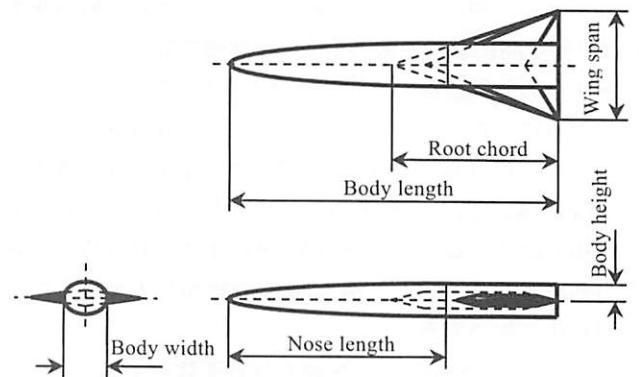


Fig.3 Design variables of spaceplane

4.2. エンジンモデル

スペースプレーンには、低速域用としてエアターボラムジェット (ATR) エンジン、高速域用としてロケット (ROC) エンジンを搭載する。

ATR エンジンの推力 T_{ATR} は、Fig.4 で表される推力係数 C_T を用いて、式(10)のように求められる。ただし、ATR エンジンの比推力 Isp_{ATR} は、Fig.5 で与えられる。

$$T_{ATR} = C_T g_0 S_{ATR} \quad (10)$$

ここで、 S_{ATR} は ATR エンジンのインテーク面積であり、これを設計変数とする。

ROC エンジンの推力 T_{ROC} は設計変数とする。また、ROC エンジンの比推力 Isp_{ROC} については、LE-7A, LE-5B クラスの性能値である 450[sec]とする。

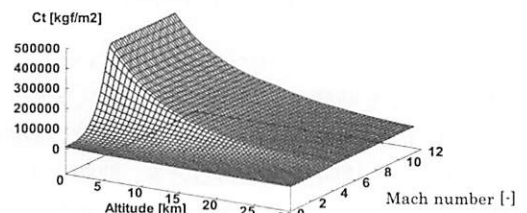


Fig.4 Thrust factor of ATR engine : C_T

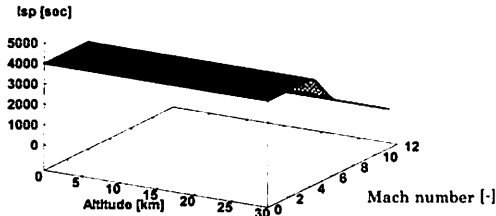


Fig.5 Specific impulse of ATR engine : I_{sp_ATR}

エンジン設計変数の取り得る範囲は次式のように設定する。

$$\text{ATR エンジンインテーク面積 [m}^2\text{]} : 17.0 \leq S_{ATR} \leq 23.0 \quad (11)$$

$$\text{ロケットエンジン推力 [MN]} : 1.0 \leq T_{ROC} \leq 7.6 \quad (12)$$

4.3. 飛行計画

スペースプレーンは滑走路に静止した状態から高度 100[km]まで上昇する。終端条件は速度 7669[m/s]、経路角 0[deg]である。滑走路を離陸後、マッハ数 6.0 または高度 30[km]に達した時点で ATR エンジンから ROC エンジンへと切り替える。また、上昇飛行中の拘束条件として、経路角 ± 90 [deg] 以内、最大動圧 100[kPa]、最大荷重倍数 4.0[-]を設ける。

4.4. 運動方程式

地球の自転効果は無視し、スペースプレーンの運動を赤道面内の垂直 2 次元運動に制限する (Fig. 6)。制御変数である迎角の時間履歴 $\alpha(t)$ を与えると、上昇飛行時の運動方程式は式 (13) で表される。

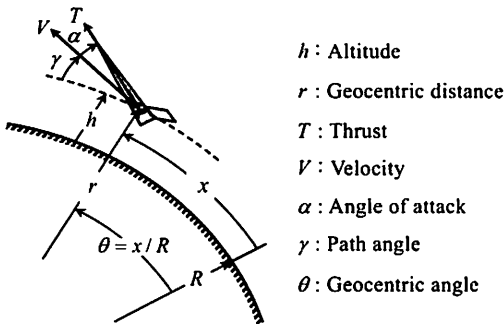


Fig.6 Variables of spaceplane

$$\begin{aligned} \frac{dr}{dt} &= V \sin \gamma \\ \frac{d\theta}{dt} &= \frac{V \cos \gamma}{r} \\ \frac{dV}{dt} &= \frac{T \cos \alpha - D}{m} - g(r) \cdot \sin \gamma \\ \frac{d\gamma}{dt} &= \frac{T \sin \alpha + L}{mV} - \frac{g(r) \cdot \cos \gamma}{V} + \frac{V \cos \gamma}{r} \\ \frac{dm}{dt} &= -\frac{T}{g_0 \cdot I_{sp}} \end{aligned} \quad (13)$$

ここに、 D :抗力、 L :揚力、 $g(r)$:重力加速度、 m :質量である。また、飛行経路を決定する設計変数すなわち迎角の取り得る範囲は次式のように設定する。

$$\text{迎角の時間履歴} : -1.0 \leq \alpha(t) \leq 20.0 \quad (14)$$

4.5. 評価関数

スペースプレーンが最小の推進剤質量でミッションを達成するよう、本問題の評価関数は消費推進剤質量 M_c と初期搭載推進剤質量 M_i の比 M_c/M_i (: 最小) を用いる。これが 1.0 より大きくなれば推進剤の不足を意味し、1.0 より小さくなれば余った推進剤をペイロードに変換できることを意味する。また、4.3. 飛行計画で設定した終端条件・拘束条件を満たさなかった場合には、評価関数にその超過分をペナルティとして加え、評価値を悪化させる。

以上より、本問題の評価関数 I を次式のように設定する。

$$I = M_c/M_i + \text{penalty} \quad (15)$$

4.6. 結果

本手法により得られた機体形状を Fig. 7 に迎角の時間履歴を Fig. 8 に示す。また、このときのスペースプレーンの運動の状態、すなわち高度、動圧、荷重倍数の時間履歴をそれぞれ以下の Fig. 9 から Fig. 11 に示す。

Fig. 9 に示す高度のグラフから、ATR エンジンからロケットエンジンへの切り替えが高度 30[km]で行われていること、ロケットエンジンに切り替えた後一旦高度を下げていることが分かる。そして、Fig. 10 の動圧のグラフから、これに伴って動圧が拘束条件を破っていることが分かる。また、Fig. 11 の荷重倍数のグラフには、ロケットエンジンに切り替えてから荷重倍数

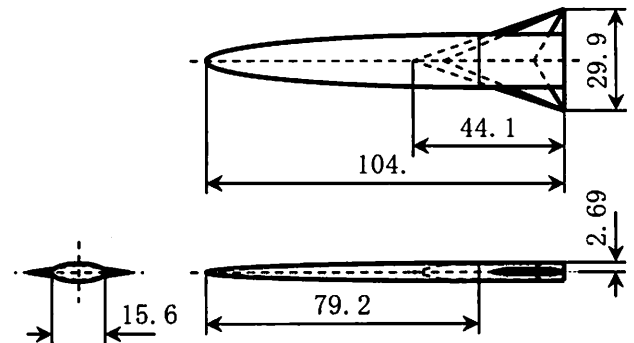


Fig.7 Solution of spaceplane

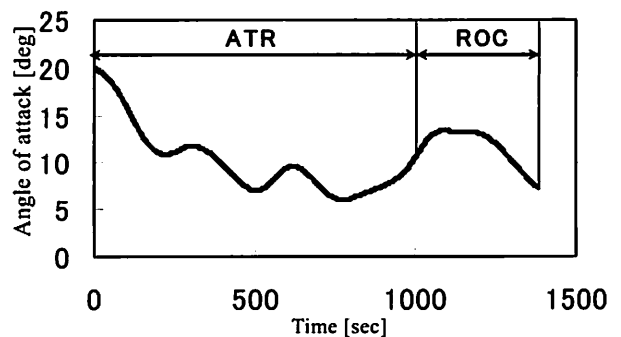


Fig.8 Solution of control variable

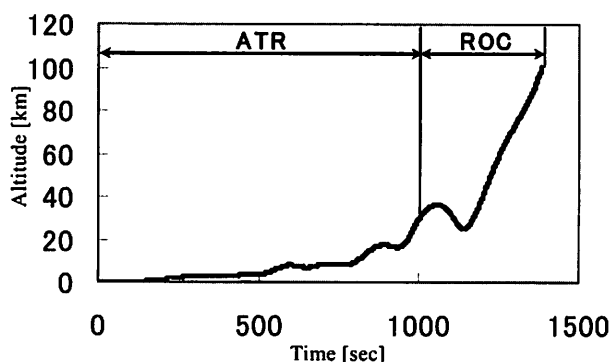


Fig.9 Altitude vs. time

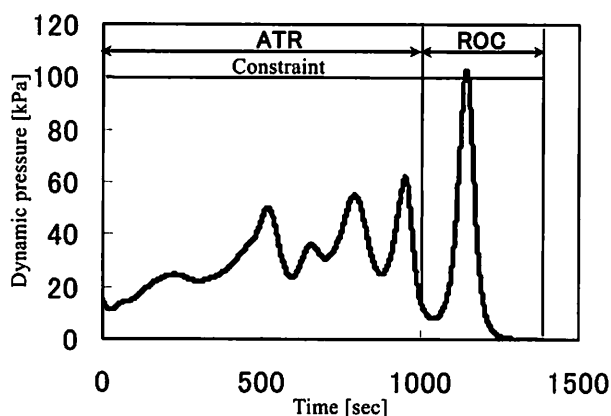


Fig.10 Dynamic pressure vs. time

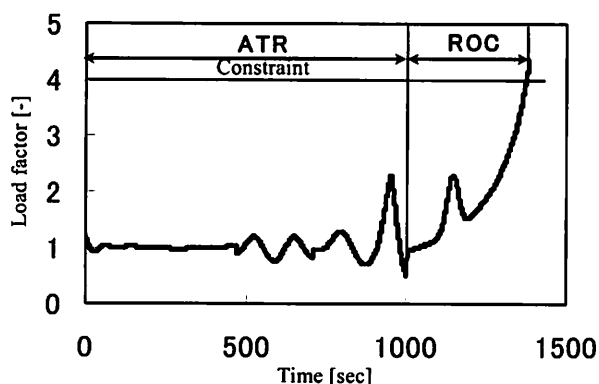


Fig.11 Load factor vs. time

が増加し始め、終端で拘束を破っていることが示されている。これらの拘束を破る現象は、いずれもロケットエンジンによる上昇時に発生しており、これは、ロケットエンジン推力を一定としたことに起因すると見られる。つまり、ATR エンジンからロケットエンジンに切り替えた直後は、機体質量が大きいため大きな推力を必要とするが、終端直前では質量が減少しているため、小さい推力しか必要としない。従って、エンジン切り替え直後の状態に合わせた推力では終端での荷重倍数が過大

になり、また終端状態に合わせた推力ではエンジン切り替え直後の推力が不足し、高度低下と動圧の増大を招くことになる。今回の結果は、これら二つの拘束を破る現象が、評価関数への影響を最も小さくするような解であることを示している。従って、ロケットエンジンの推力調整を加えると、これらの拘束を破る現象を低減出来る可能性が高い。

推進剤消費率（消費推進剤質量 M_c と初期搭載推進剤質量 M_i の比） M_c/M_i は 1.327 となった。これは、機体に搭載した推進剤のみではミッションを達成できないことを意味している。しかし、評価関数には拘束条件を破った場合のペナルティが含まれているため、前述のようにロケットエンジン推力の調整を加えると、評価値が大きく改善される可能性がある。

6. 結言

経路積分法概念に基づき、確率過程を利用して期待値として最適解の近似解を求める手法を定式化し、新しい最適化手法を提案した。そして、その数値計算アルゴリズムについて示した。また、数値計算例として、8つの静的設計変数と1つの動的設計変数が相互干渉するスペースプレーンの統合的最適化問題採り上げ、その計算結果を示すことで本手法の有効性を確認した。

参考文献

- (1) Feynman, R. P. and Hibbs, A. R.: Quantum Mechanics and Path Integrals, (1965), McGraw-Hill Inc.
- (2) Glatt, C. R.: WAATS—Computer Program for Weights Analysis of Advanced Transportation System, NASA CR-2420(1974).
- (3) Pamadi, B. N.: A Simple Analytical Aerodynamic Model of Langley Winged-Cone Aerospace Plane Concept, NASA CR-194987(1994).
- (4) 神山新一, 佐藤明 : モンテカルロ・シミュレーション, (1997), 朝倉書店.
- (5) 吉田洋明, 他 4 名 : 工学的問題における確率過程を用いた最適化手法, 第14回計算力学講演会講演論文集 (2001), pp.315-316.
- (6) 今野友和, 他 4 名 : スペースプレーンの機体形状と飛行経路の統合的最適化—確率過程による新たな最適化手法を適用して—, 第15回設計工学・システム部門講演会論文集(2005), pp.429-432.
- (7) 吉田洋明, 山口雄仁, 石川芳男: 新たな最適化手法を用いた工学システム設計ツールの提案, 日本航空宇宙学会論文集, Vol.53(2005), No.620, pp.398-407.