

「シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築」

平成15年度採択研究代表者

穴井 宏和

(富士通株式会社計算科学ソリューションセンター 研究員)

「数値/数式ハイブリッド計算に基づく ロバスト最適化プラットフォームの構築」

1. 研究実施の概要

【研究のねらい】さまざまな「ものづくり」において、シミュレーション技術は設計・製造の効率化、高品質化、高付加価値化実現に不可欠な技術です。本研究では、計算機パワーをフルに活用して効率的に高品質な処理を実現しうる技術の確立を目的として、数値数式ハイブリッド計算に基づくロバスト最適化プラットフォームの構築を目指します。ものづくりにおける設計問題など理工学・産業上の広範な問題は制約問題・最適化問題に帰着されますが、それら进行处理する技術は、現在のところ数値計算技術がベースとなっています。しかし、実用上重要な多くの問題が数値的計算法では取り扱いが困難な非線形や非凸な問題となることが明らかになってきています。本研究ではこれらの問題に対し有効な解を効率的に提供するために、非線形性や非凸性に囚われない記号・代数計算に基づく制約問題・最適化問題の処理技術を発展させ、これまでの数値計算ベースの技術と相補的に融合させていくことで、今後の設計とシミュレーションを支える新しい一般的方法論とツールの構築を進めていきます。ここで開発する技術は記号計算と数値計算を融合する新しい計算技術パラダイム創設にも繋がります。

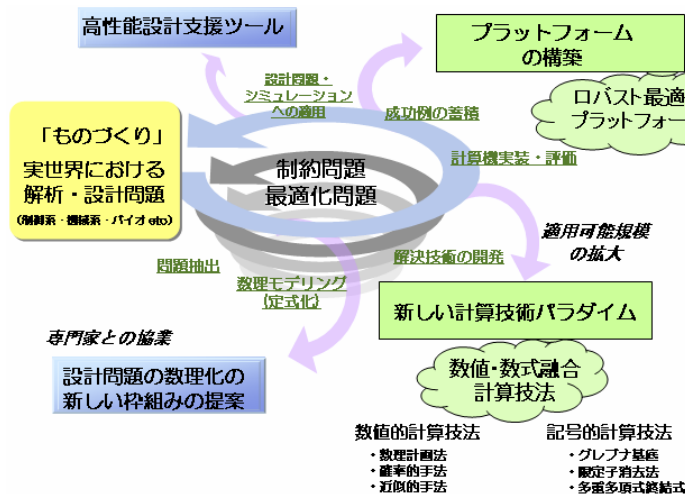


図1：研究目標と研究・開発サイクル

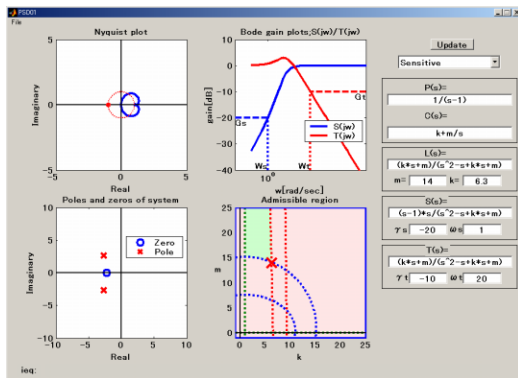
【概要・見通し】これまでの1年半で、(1)ベースとなる代数的技法（グレブナ基底や限定記号消去法等）の基礎検討・計算実験による検証、(2)数値/数式ハイブリッド解法の基礎検討及びツール(SyNRAC)の開発、さらに(3)ロバスト制御系設計の新しい手法とツール(MATLABツールボックス)の開発を行いました。また、(4)有望な適用分野として新たにバイオインフォマティクスに着目し数値・数式ハイブリッド計算によるパラメータ最適化手法の適用検討を開始しました。

- ・ 計算技法としては、パラメータを含む等式制約のより効率的な新解法の開発とその高速化、及び、効率の良い数値/数式ハイブリッド計算の検討を行いました。開発技術の有効性実証を加速すべく効果的なツール化が課題です。また、制約問題・最適化において応用上重要なクラスである離散最適化問題(変数が離散値をとる)や連続/離散ハイブリッド最適化問題(連続値をとる変数と離散値をとる変数が混在)の凸解析手法について取り組みました。今後はさらに離散凸解析の枠組みの確立を目指します。
- ・ 制御系設計法では、これまで、ロバスト制御系設計手法として、有限周波数KYP補題に基づいた新しい動的システム設計法についての開ループ設計法、及び、SDCに基づく代数計算に基づく設計法を確立しました。今後は、それらの成果をもとにロバスト設計、多入出力系への展開と非凸最適化問題への対応を行うことが今後の課題です。
- ・ バイオインフォマティクスへの応用では、数値・数式ハイブリッド計算によるパラメータ最適化手法アルゴリズムをHIV proteaseのモデルに適用しその有効性を確認しました。今後は、数多くの生体系への適用を通して、数値・数式ハイブリッド計算によるパラメータ最適化手法アルゴリズムの細部の精緻化と有効性の検証を行うことが課題です。
- ・ ツールとしては、数値・数式ハイブリッド計算による実代数制約問題解決用ツールボックス SyNRAC に、不等式制約問題の汎用的な代数的アルゴリズムの核となる柱形代数分解(Cylindrical Algebraic Decomposition)法の基礎実装を完了し、また既存機能の効率化を行いました。また、SyNRACを用いたロバスト制御系設計ツールボックスのプロトタイプの開発を継続しGUIの拡充を中心に機能追加を行いました。今後、SyNRAC の計算効率の向上と新しい数値・数式ハイブリッド計算手法の実装、MATLABロバスト制御系設計ツールの機能拡充・高速化を目指します。また、これらの結果を蓄積しながら、「ロバスト最適化プラットフォーム」構築へ向けた基礎検討を行います。



Maple package for real algebraic constraints

MATLAB toolbox for parametric robust control



The figure shows the Maple 8 interface with a Maple package for real algebraic constraints. The code defines a system and uses the `qe_sdc` and `qe_lin` functions to solve for the admissible region. The output shows the resulting region and a sample point.

```

> read "C:/Program Files/Maple 8/with(combinat)";
[Ch, ball, binomial, cartprod, char,
 decodepart, encodepart, fibonacc,
 multinomial, nextpart, numbcomb,
 partition, permute, powerset, pre,
 setpartition, string1, string2,
 qe_sdc(x^2+a1*x+a0,x);
-a0 < 0 and a1 < 0 and -4 a0+a1^2 < 0 or
-a0 < 0 and -a1 < 0 and -4 a0+a1^2 < 0 or
-a0 < 0 and -a1 < 0 and -4 a0+a1^2 < 0 or
-a0 < 0 and -a1 < 0 and 4 a0-a1^2 < 0 or a0&=0 and -a1 < 0 or
a0&=0 and a1&=0 or -a0 < 0 and a1&=0
> qe_lin([x,y], y>2*x+3 and x>0 and y<=5);
- x/2 < -3/2
> qe_sdc(x^5-x^2+3*x-9,x);
false
> qe_lin([x,y], y<2*x+2 and y<=-3*x+12 and y>(1/3)*x+5);
true
A sample point: [x,y] = [ 52 144
 25 25 ]
Time: 0.1s Bytes: 3.06M Available: 2.62G

```

2. 研究実施内容

● 記号・代数的計算に基づく技法・理論は、制約・最適化問題において従来の手法では困難と考えられている工学・産業上の問題解決へのブレークスルーをもたらすものと期待されていますが、実用化に向けて以下の問題点があります。

- (a) 非専門家が使えるような適用に向けての一般的方法論（問題の定式化（＝モデリング）と計算技法の適用の仕方）・ツールが確立していない、
- (b) 基本的理論・アルゴリズムが実用規模の問題に対応できていない。

そこで、本提案では記号・代数的計算に基づく技法・理論が次世代統合シミュレーション技術の確立に向けて実際に貢献できる基盤技術となる為

- ・ 計算理論・技術研究と実際の解くべき問題を抱える領域の研究が一体となって問題解決技法の開発・有効性検証を行い
- ・ 数値/数式ハイブリッド計算によるアルゴリズムの効率化を行う

ことで、上記の2点(a), (b)を解決していくことを目指します。これらの成果に基づき、

- (c) 数値/数式ハイブリッド計算に基づくロバスト最適化プラットフォームの構築をし、その上で新たな設計・シミュレーションツールを実現する

ことを目標とします。

- (a) 一般的適用方法論の確立とツール化では、制約問題・最適化問題の中で従来の数値計算ベースの技法では本質的に解けなかった問題に適用し、数値計算との融合を図り、具体的な成功事例を導くことを目指します。基礎となる技術

◎方程式系の代数制約解法として グレブナ基底計算を利用した方式

◎不等式制約解法として限定子除去法とその具体的実現法(CAD法など)

を中心に、さらに最終的には数値的な解として要求されることに対応するためにも数値計算理論・技術との融合を図ります。

また、制約問題・最適化において応用上重要なクラスである、離散最適化問題(変数が離散値をとる)や連続/離散ハイブリッド最適化問題(連続値をとる変数と離散値をとる変数が混在)に対して有効な離散最適化の凸解析の枠組みを確立することを目指します

また、これらの成果の実際の適用先として、制御系設計とバイオインフォマティクスに着目し、適用問題の抽出を行うとともに、両分野での新しい数値・数式ハイブリッド計算に基づく設計手法、パラメータ最適化手法を確立します。

(b) 適用規模の拡大では、基礎理論をより深く掘下げる精密化、およびアルゴリズムの効率化を行うことにより、扱える問題のスケールを拡大していくことから始めます。

◎ 問題の背後にある数学構造を明確にし、それを利用した高速な計算法

◎ 代数的手法と数値的手法とを融合したアルゴリズム

の2つの方向でのアルゴリズム開発が重要かつ有効であると考え、これまでの研究成果を切り口として研究を進めていきます。

(c) ロバスト最適化プラットフォームの構築では、上記(a)(b)の成果について、まず数値・数式ハイブリッド計算による実代数制約問題解決用ツールボックス SyNRAC と、SyNRACを用いたロバスト制御系設計ツールの構築を進めながら、「ロバスト最適化プラットフォーム」構築へ向けた基礎検討を行います。

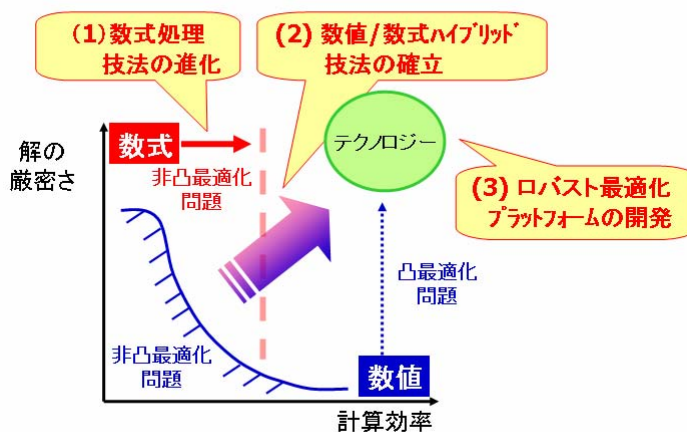


図2：本研究のアプローチと研究課題

●今年度の成果

(a) 制御理論では、有限周波数KYP補題に基づいた新しい動的システム設計法についての開ループ設計法、及び、SDCに基づく代数計算に基づく設計法を確立しツール化を行いました。非線形システムの制御法として、いくつかの重要なクラスに対する適応制御の枠組みを提案しました。さらに、制御理論で重要な多項式の根の正実部の和を正確に評価する方法を計算機代数の手法と限定記号消去法を効果的に組み合わせることにより、

新しい非常に有効な計算法を得ることができました。また、実験データから与えられたモデル(微分方程式系)のパラメータを決定するための数値数式ハイブリッド計算法を開発し、その成果をバイオインフォマティクスの分野へ適用しその有効性を確認しました。

(b) 上位レベルである限定子除去法、パラメータ付きの多項式イデアル操作を中心に研究を行いました。前年度に引き続き、係数にパラメータを含む場合についての一般的な解法についても Comprehensive Groebner basis 計算法の拡張として考え研究を進めました。最も上位である限定記号消去法に関しては、数値計算との融合を用いた計算の効率化を検討し、計算をより高速化させる重要なアイデアである、dynamic evaluation と組み合わせた全く新しい方法を開発しました。その実用化に向けイデアル論的定式化およびモジュラ計算の応用が有効であることも確認しました。また、ここで、汎用的で基本的な数値・数式ハイブリッドの方策として、「数値計算+記号的計算による再計算」の枠組みが非常に有効であることが確認できました。

離散最適化問題や連続/離散ハイブリッド最適化問題に対して有効な離散最適化の凸解析の枠組み確立の試みを行いました。

(c) ツール構築では、数値・数式ハイブリッド計算による実代数制約問題解決用ツールボックス SyNRAC に、不等式制約問題の汎用的な代数的アルゴリズムの核となる柱形代数分解(Cylindrical Algebraic Decomposition)法の基礎実装を完了し、また既存機能の効率化を行いました。また、SyNRACを用いたロバスト制御系設計ツールボックスのプロトタイプの開発を継続しGUIの拡充を中心に機能追加を行いました。

●平成17年度の見通し

平成16年度までに得られた基本アイデアの実現、すなわち本格的なアルゴリズム構築とシステム実装を進展させます。特に、(1) parameter を含んだまま扱う等式制約、不等式制約解法を確立し、(2) 限定子除去法において、数値・数式融合を推進し、計算量の壁を破る高速な計算システム(SyNRAC)を構築することを目指します。これらの計算理論、計算技術は、新たなシミュレーションの核となる技術と考えています。

これらの基本算法及びそのツール化の成果をもとに、これまで開発してきた制御系ツールボックスの機能拡充と高速化を行います。さらに、具体的な制御を対象としたツールボックスの開発を行いながら、ロバスト最適化プラットフォーム構築へ向けた基礎検討を行います。

3. 研究実施体制

富士通グループ

①富士通株式会社 計算科学技術センター 研究員 穴井宏和

②研究実施項目：数値/数式ハイブリッド手法の開発とロバスト最適化プラットフォームの構築

概要：産業上のさまざまな分野より抽出される制約・最適化問題に対し、有効な

記号・代数計算に基づく技法と数値/数式ハイブリッド技法の開発・効率化を行います。それらのアルゴリズムについて実装・検証をし、ロバスト最適化プラットフォームの構築を行います。

また、研究グループ(原教授(東大)・横山教授(立教大)・野呂教授(神戸大))をはじめとした計算技法と応用分野の国内外の最先端研究機関との交流と、新規技術の情報発信を中心となって行います。

東京大学グループ

①東京大学 大学院情報理工学系研究科 教授 原 辰次

②研究実施項目：数値的最適化手法と記号・代数計算に基づく計算技法の一般的適用方法論の確立

概要：従来の数値計算に基づく技法では解決が困難である実際の工学・産業上の重要な問題（特に、システム・制御理論）の抽出と、抽出された制約問題・最適化問題に対する有効な数値/数式ハイブリッド解法の開発、適用に当たっての一般的方法論の確立を行います。

立教大学グループ

①立教大学 理学部数学科 教授 横山和弘

②研究実施項目：記号・代数計算に基づく計算技法の一般的適用方法論の確立と適用規模の拡大

概要：本研究においてベースとなる代数的技法（グレブナ基底や限定記号消去法等）の適用可能規模の拡大を目指し、代数的計算に基づく手法の基礎理論の数値計算理論との融合を通じての精密化、および、アルゴリズムの開発・効率化を行います。

神戸大学グループ

①神戸大学 理学部数学科 教授 野呂正行

②研究実施項目：記号・代数計算に基づく計算技法の一般的適用方法論の確立と実証評価

概要：本研究においてベースとなる等式制約に対する代数的技法（グレブナ基底、終結式等）の適用可能規模の拡大を目指し、代数的計算に基づく手法の基礎理論の精密化、および、アルゴリズムの開発・効率化を行い計算機による実装評価を行います。

4. 主な研究成果の発表

(1) 論文発表

- Hirokazu Anai, Kazuhiro Yokoyama
Numerical Cylindrical Algebraic Decomposition with Certificated Reconstruction
SCAN2004 (Fukuoka, Japan) 2004/10/4-8, p31
- Hirokazu Anai, Hitoshi Yanami, Kei Sakabe, Shinji Hara
Fixed-structure robust controller synthesis based on symbolic-numeric computation: design algorithms with a CACSD toolbox (Invited paper)
CCA/ISIS/CACSD 2004 (Taipei, Taiwan), 2004/09/2-4, 1540-1545
- Kei Sakabe, Hitoshi Yanami, Hirokazu Anai, Shinji Hara
A MATLAB toolbox for robust control synthesis by symbolic computation
SICE2004 (Sapporo, Japan) 2004/08/4-6, pp1968-1973
- Hitoshi Yanami, Hirokazu Anai
Development of SyNRAC --Formula description and new functions --
CASA2004 (Krakow, Poland), 2004/06/7-9)
LNCS 3039, pp286-294(Springer-Verlag)
- 坂部啓, 屋並仁史, 穴井宏和, 原辰次
A MATLAB Toolbox for Parametric Robust Control System Design based on symbolic computation
数理解析研究所講究録 1395 「Computer Algebra -- Algorithms, Implementations and Applications」 pp 231-237, 2003
- 屋並仁史, 穴井宏和
SyNRAC: A Maple package for solving real algebraic constraints
数理解析研究所講究録 1395 「Computer Algebra -- Algorithms, Implementations and Applications」 pp 238-244, 2003
- 野呂正行,
Dynamic Evaluationの実装について,
数式処理, Vol. 11, No. 3, 4, p21-28(2005).
- 野呂正行,
代数体上のイデアルのグレブナー基底計算について,
研究集会「CA-ALIAS' 05」, 京都大学数理解析研究所(2005).
- M. Noro and K. Yokoyama,
Implementation of prime decomposition of polynomial ideals
over small finite fields,
Journal of Symbolic Computation, Vol. 38, 1227-1246, 2004.
- K. Yokoyama,

On systems of algebraic equations with parametric exponents, ISSAC 2004, full paper in Proceedings of the 2004 International Symposium on Symbolic and Algebraic Computation, ACM Press, pp.312-319, 2004.

- C. Dong, C. H. Lam, K. Tanabe, H. Yamada, and K. Yokoyama,
\$Z_3\$ symmetry and \$W_3\$ algebra in lattice vertex operator algebras,
Pacific Journal of Mathematics Vol. 215, 245-296, 2004.
- T. Iwasaki, S.Hara,
"Generalized KYP Lemma: Unified Frequency Domain Inequalities With Design Applications,"
IEEE Transactions on Automatic Control, 50[1] 41- 59 (2005)
- 高松吉郎, 原 辰次, 室田一雄, " 連続/離散ハイブリッド凸最適化とその最適性
規準, "
システム制御情報学会論文誌, 17 [9] (2004)
- T. Iwasaki, S. Hara, F. Alexander L.,
"Restricted Frequency Inequality is Equivalent to Restricted
Dissipativity,"
IEEE CDC2004, 426-431 (2004)
- H. Fujioka, S. Hara, Y. Yamamoto,
"Sampled-Date Control Toolbox: Object-Oriented Software for Sampled-Date
Feedback Control Systems," CCA2004, 19-24 (2004)
- S. Hara, D. Shiokata, T. Iwasaki,
"Fixed Order Controller Design Via Generalized KYP Lemma(1)," CCA2004,
1527-1532 (2004)
- D. Shiokata, S. Hara, T. Iwasaki,
"From Nyquist/bode to GKYP design --- Design algorithms with CACSD tools,"
SICE2004, 1780-1785 (2004)
- T. Bakhtiar, S. Hara, "Tracking performance limits for SIMO discrete-time
feedback control systems,"
SICE2004, 1825-1830 (2004)
- S. Hara, T. Iwasaki,
"Dynamical system design via generalized KYP lemma," MTNS2004 (2004)
- T. Iwasaki, S. Hara,
"Robust Control Synthesis with General Frequency Domain Specifications:
Static Gain Feedback Case," ACC2004, 4613-4618 (2004)
- Satoru IWATA, Satoko MORIGUCHI, Kazuo MUROTA,
"A Capacity Scaling Algorithm for M-Convex Submodular Flow,"

IPCO (Integer Programming and Combinatorial Optimization) X,
Columbia University, New York City, USA, 2004年6月

- 岩田覚, 森口聡子, 室田一雄,
``M凸劣モジュラ流に対する容量スケーリング法,"
統計数理研究所共同研究レポート178, 最適化: モデリングとアルゴリズム18
(2005), 52--68
- S. Moriguchi and K. Murota,
``Discrete Hessian Matrix for L-convex Functions,"
Mathematical Engineering Technical Reports METR 2004-30,
University of Tokyo (2004)
- T. Hayakawa, W. M. Haddad, N. Hovakimyan, and J. M. Bailey, ``Neural
network adaptive dynamic output feedback control for nonlinear
nonnegative systems using tapped delay memory units," in Proc. Amer.
Contr. Conf., (Boston, MA), pp. 4505-4510, July 2004.