

「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 計算科学技術センター 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

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、それらを処理する技術は、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。

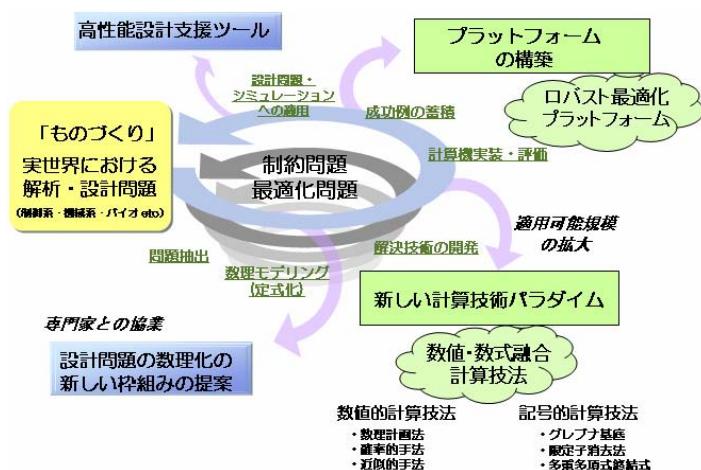


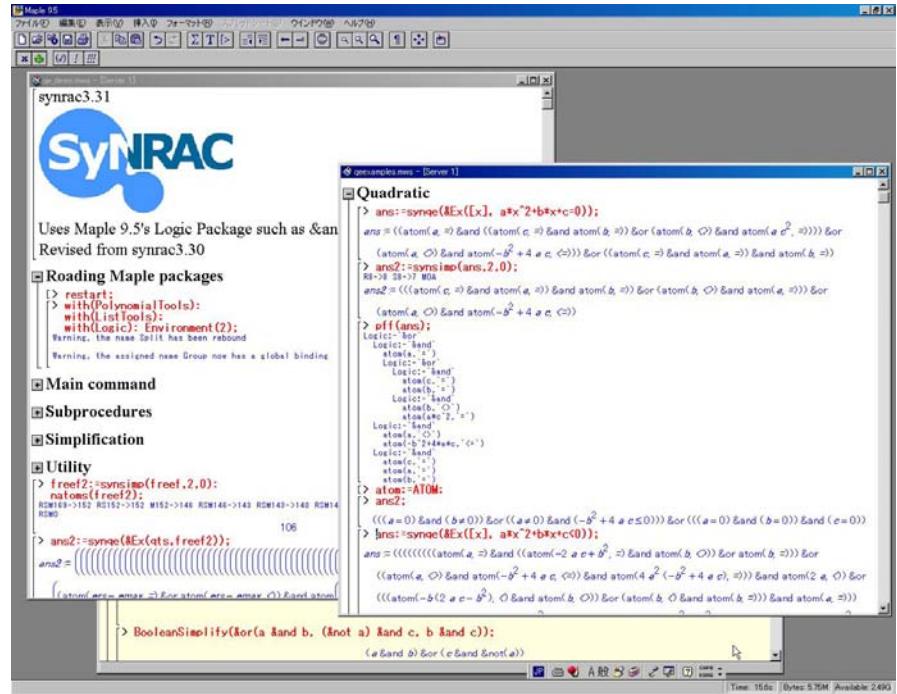
図1:研究目標と研究・開発サイクル

これまでの2年半で、(1)ベースとなる代数的技法(グレブナ基底や限定期号消去法等)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手法確立及びツール(SyNRAC)の開

発・拡充、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)の開発を継続し機能の拡充を行いました。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ックスに着目し、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し、その他、多細胞生物の多様性条件を代数的手法を適用して解析し多様性条件の解析を行いました。

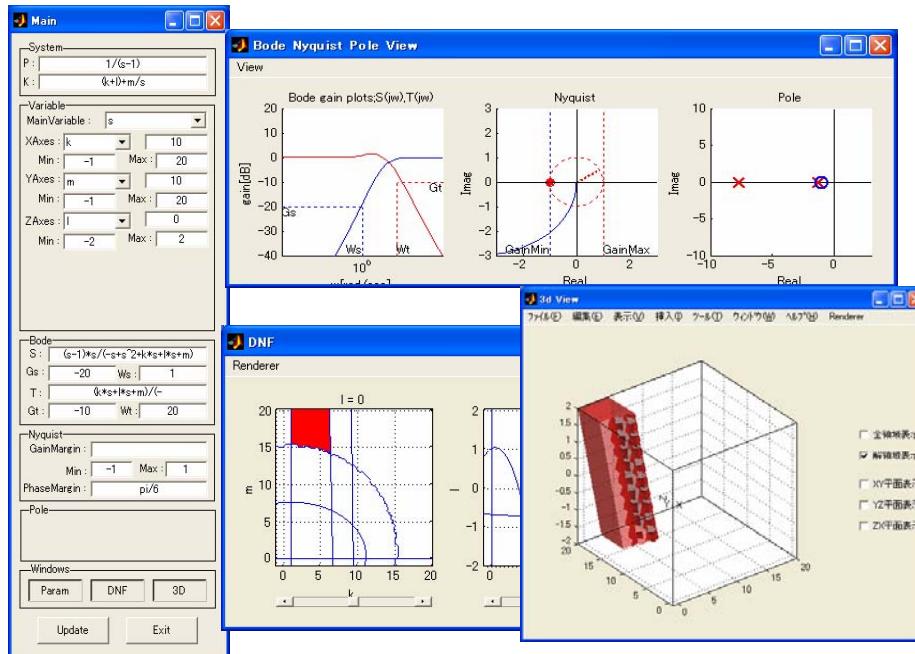
## 2. 研究実施内容

- ・ 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。特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)法について、数値計算を融合した高速手法を確立しました。その効果的なツール化が課題です。
- ・ また、区間演算を用いた制約問題を精度保証付きで近似的に解く手法を検討した。今後、この区間演算に基づく方法とQEの手法の融合による効率的なパラメトリックな法に取り組む予定です。
- ・ さらに、数値・数式ハイブリッド最適化の為の基本的な道具となるべく、連立方程式系や多項式の求解を精度保証付きで効率よく行う計算手法をはじめ、精度保証付き数値計算手法の研究も開始しました。
- ・ 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。また、精度保証付き制御系設計手法の取り組みを開始、代数的な手法をうまく使うことで精度保証を有効に行う手法を提案していくつかの制御系設計問題に適用しました。
- ・ バイオインフォマティックスへの応用では、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 proteinase 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。また、多細胞生物の多様性条件を代数的手法を適用して解析し多様性条件の式を導出しました。このような代数的なアプローチによる生体系の問題に取り組む研究者を集めて AB2006(Algebraic Biology)を開催しました。
- ・ 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、また既存機能の高速化を行いました。



Maple package for real algebraic constraints

- 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、区間演算による精度保証付きで制約問題を解く機能など追加を行いました。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」構築へ向けた検討継続します。



### 3. 研究実施体制

#### 「富士通」 グループ

- ①研究分担グループ長：穴井 宏和（富士通、研究員）
- ②研究項目：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研究分担グループ長：原 辰次（東京大学、教授）
- ②研究項目：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研究分担グループ長：横山 和弘（立教大学、教授）
- ②研究項目：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研究分担グループ長：野呂 正行（神戸大学、教授）
- ②研究項目：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（原著論文）発表

- Hirokazu Anai, “Algebraic Methods for Solving Real Polynomial Constraints and Their Applications in Biology”, Algebraic Biology 2005 (AB2005), Tokyo, Japan. 2006/11/28–31, pp 139–147.
- S.Orii, K.Horimoto, H.Anai, “A New Approach for Symbolic–Numeric Optimization in Biological Kinetic Models”, Algebraic Biology 2005 (AB2005), Tokyo, Japan. 2006/11/28–31, pp 85–95.
- H.Yoshida, H.Anai,S.Orii,K.Horimoto, “Inquiry into Conditions for Cell-type Diversity of Multicellular Organisms by Quantifier Elimination”, Algebraic Biology 2005 (AB2005), Tokyo, Japan. 2006/11/28–31, pp 105–113.
- S.Orii, H.Anai, K. Horimoto, “Symbolic–Numeric Optimization by Quantifier Eliminator: An Application to Biological Kinetic Models”, Proceedings of WMSCI2005, (Orlando, Florida, USA).
- H.Anai, S.Hara, K.Yokoyama, “Sum of roots with positive real parts”, Proceedings of the International Symposium on Symbolic and Algebraic Computation 2005, pp.21–28, 2005.
- H.Anai, K.Yokoyama, “Cylindrical algebraic decomposition via numerical computation with validated symbolic reconstruction”, Algorithmic Algebra and Logic, Proceedings of the A3L 2005, pp.25–30, 2005.
- Hitoshi Yanami, Hirokazu Anai, “SyNRAC: A Maple Toolbox for Solving Real Algebraic Constraints”, Algorithmic Algebra and Logic 2005 -- Conference in Honor of the 60th Birthday of Volker Weispfenning —, (Passau, Germany), 2005/04/03–06, pp275–279.
- G.Renault, K.Yokoyama, A modular method for computing the splitting field of a polynomial accepted to 7th Algorithmic Number Theory Symposium to appear in the Proceedings of ANTS VII (springer).
- M.Fujimoto, M.Suzuki, K.Yokoyama, On polynomial curves in the affine plane to appear in Osaka Journal of Mathematics.
- Masayuki Noro, “Modular Dynamic Evaluation.”, Accepted to International Symposium on Symbolic and Algebraic Computation 2006.
- Yasuhito Kawano, Kinji Kimura, Hiroshi Sekigawa, Kiyoshi Shirayanagi, Masahiro Noro, Masahiro Kitagawa and Masanao Ozawa, “Existence of the exact CNOT on a quantum computer with the exchange interaction”, Quantum Information Processing, Vol. 4, No. 2, June 2005.
- 木村欣司, 野呂正行, 辻本諭, 中村佳正, ”離散戸田方程式を用いた大規模疎行列の連立一次方程式, 行列式, 固有多項式の計算法”, 応用数理学会論文誌, pp307–322, Vol.15, No.3, 2005.

- 郷田雅美, 岩雅史, 木村欣司, 中村佳正, "高精度特異値計算ルーチンの開発とその性能評価" 情報処理学会論文誌 コンピューティングシステム, Vol.46, No.SIG12(ACS11), pp299-311 2005 年 8 月.
- Masami Takata, Iwasaki Masashi, Kinji Kimura, Yoshimasa Nakamura, "An Evaluation of Singular Value Computation by the Discrete Lotka-Volterra System" In Proceedings of International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications, June 2005, Vol. II, pp.410-416.
- 郷田雅美, 岩雅史, 木村欣司, 中村佳正, "高速特異値分解のためのライブラリ開発", 情報処理学会論文誌 コンピューティングシステム, 採録決定.
- Masami Takata, Iwasaki Masashi, Kinji Kimura, Yoshimasa Nakamura, "Performance of A New Singular Value Decomposition Scheme for Large Scale Matrices", The IASTED International Conference on Parallel and Distributed Computing and Networks, 2005.
- 木村欣司, 宮島信也, 萩田武史, "計算機代数と精度保証付き数値計算による大域領域における非線形連立代数方程式の全実根の探索法", 日本シミュレーション学会, 投稿中.
- Tsuyoshi Kiyama, Shinji Hara, Tetsuya Iwasaki, 「Effectiveness and limitation of circle criterion for LTI robust control systems with control input nonlinearities of sector type」, International Journal of Robust and Nonlinear Control, vol.15 2005.
- Shinji Hara, Tetsuya Iwasaki, Daisuke Shiokata, 「Robust PID Using Generalized KYP Synthesis: Direct open-loop shaping in multiple frequency ranges」, Control System Magazine, vol.26, no.1 2005.
- Tetsuya Iwasaki, Shinji Hara, 「Generalized KYP Lemma: Unified Frequency domain Inequalities with Design Applications」, IEEE Transactions on Automatic Control vol.50, no.1 2005.
- M. Kanno and M. C. Smith, 「Validated Numerical Computation of the  $L^\infty$ -norm for Linear Dynamical Systems」, Journal of Symbolic Computation.
- 木山健, 坂元拓海, 原辰次, 「拡張された線形化法に基づく一般的ロバスト制御系設計」, シミュレーション vol.24, no.2 2005.
- 塩形大輔, 原辰次, 「一般化 KYP 補題に基づく制御系設計ツール」, シミュレーション vol.25, no.1 2005.
- 管野政明, 「精度保証付き制御系解析・設計」, 京都大学数理解析研究所講究録.
- W. M. Haddad, T. Hayakawa, S. G. Nersesov, and V. Chellaboina, "Hybrid adaptive control for nonlinear impulsive dynamical systems," *Int. J. Adapt. Control Signal Process.*, vol. 19, no. 6, pp. 445-469, 2005.
- W. M. Haddad, T. Hayakawa, and J. M. Bailey, "Adaptive control for nonlinear nonnegative dynamical systems with applications to clinical pharmacology," *Syst. Contr. Lett.*, vol. 55, pp. 62-70, 2006.

- W. M. Haddad, Q. Hui, V. Chellaboina, T. Hayakawa, “Adaptive control of mammillary drug delivery systems with actuator amplitude constraints and system time delays,” *Eur. J. Contr.*, to appear.
- W. M. Haddad, T. Hayakawa, and M. C. Stasko, “Direct adaptive control for nonlinear matrix second-order systems with time-varying and sign-indefinite damping and stiffness operators,” *Asian J. Contr.*, to appear.