

「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)科学ソリューション事業本部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

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。

これまでに(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、ものづくりにおける設計工程(制御系設計,自動車開発,HDD 設計など)や、新にバイオインフォマティクスへの適用を行いました。ものづくりにおいては、実際の設計過程の工数削減・効率化と設計性能改善への貢献が可能となり、また、生体系のパラメータ推定に対して数値・数式ハイブリッド計算によるパラメータ最適化手法の適用し、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有効性を実証しました。現在開発中のコアとなるソルバ部分及び制御系設計ツールは製品化を目指し、これらの成果を実際のものづくりの現場への適用・普及も行っていく予定です。

2. 研究実施内容

ものづくりにおける設計・製造の効率化・高品質化・高付加価値化実現のための新しいシミュレーション技術の確立を目指し、これまでの数値計算手法に数式処理計算を融合した数値・数式融合計算に基づく最適化手法の開発及びツール化を行ってきました。その成果を、実際のものづくり(制御系設計など)やバイオインフォマティクスの問題に適用してその有効性を実証確認しました。

本プロジェクトの研究開発過程は、図1に示すようなサイクルにて行われています。この研究サイクルをいくつかの適用領域について同時に並行して推進する形で研究活動が進んでおり、以下にまとめるようにサイクルの各々のフェーズにおいて成果が現れています。

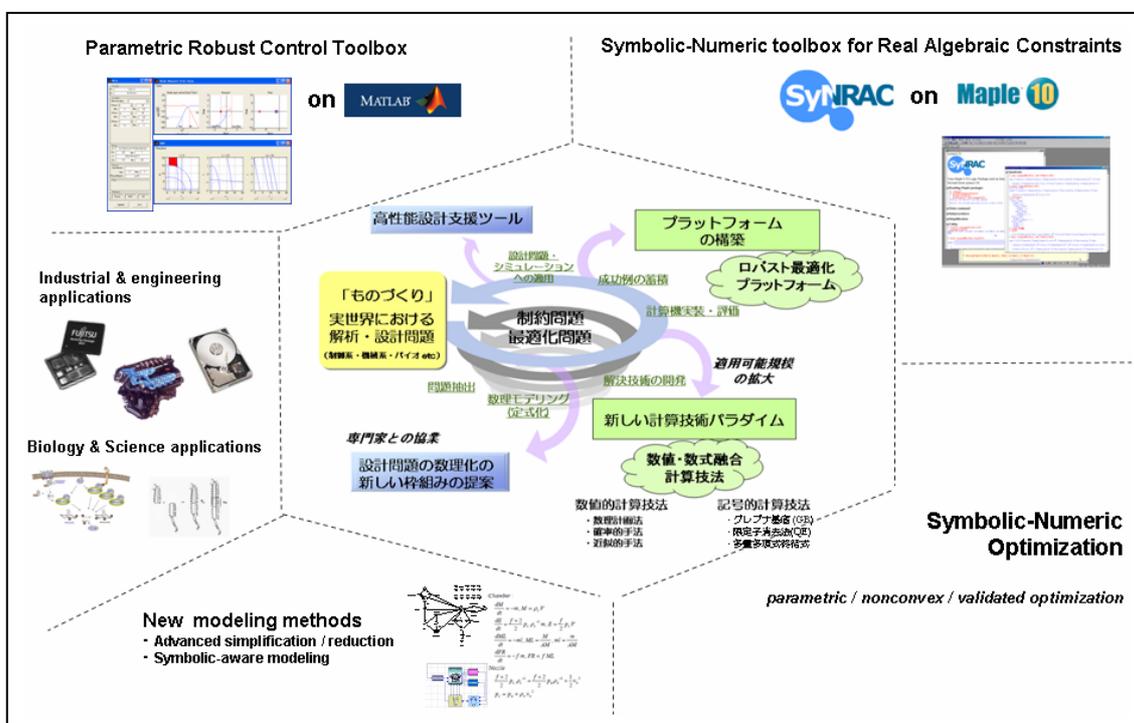


図1：研究目標，研究開発サイクル及び成果

- ・ 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、その効果的な実装を継続中であり、ツール化することが課題です。
- ・ 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ました。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設計手法の開発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行いました。

- 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てきましたが、それらのツール化の実装を進めました。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クスへの応用では、PET 装置を用いたパーキンソン病の診断法について、数式处理的なアプローチに基づいて患者負担の少ない新しい診断法を開発しました。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についての研究を継続しました。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第 2 回目の国際会議 AB2007(Algebraic Biology)の開催を企画しています。
- 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、数値数式融合計算による高速化の実装を進めました。また、既存機能の高速化を継続して行いました。
- また、SyNRAC を用いたロバスト制御系設計ツールボックスの開発を継続し GUI の拡充・高速化を行い、ツールとしての完成度を向上させました。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」構築へ向けた検討を継続します。その上で制御系設計だけでなくさまざまなものづくりの新しい設計支援ツールを具体的に構築することを目指します。

3. 研究実施体制

(1)「富士通」グループ

①グループリーダー

穴井 宏和(富士通(株)科学ソリューション事業本部・計算科学ソリューションセンター センター長付)

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
産業上のさまざまな分野より抽出される制約・最適化問題に対して有効な記号・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・効率化を行う。それらのアルゴリズムについて実装した検証をしつつロバスト最適化プラットフォームの構築を行う。また、研究グループ(原教授(東大)・横山教授(九大)・野呂教授(神戸大)、堀本勝久(産業総合研究所))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う。

(2)「東京大学」グループ

①グループリーダー

原 辰次(東京大学情報理工学研究所 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
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う。

(3)「立教大学」グループ

①グループリーダー

横山和弘(立教大学理学部数学科 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
記号・代数計算と従来の数値を融合させた新世代シミュレーション技術のための基礎となる計算法を構築し、実際の問題規模に対応できるようにその効率化を図る。すなわち、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・効率化を行う。

(4)「神戸大学」グループ

①グループリーダー

野呂正行（神戸大学理学部数学科 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

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う.

(5)「(独)産業技術総合研究所」グループ

①グループリーダー

堀本勝久 ((独)産業技術総合研究所 チーム長)

②研究項目

・記号・代数計算に基づく計算技法のシステムズ・バイオロジへの適用方法論の確立と実証評価

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を生体系解析へ適用し, 蓄積された実験データに基づいて新しい知見を抽出することを目指します. そのために, 数値計算と数式処理が融合したロバスト最適化の手法の確立とその適用の方法論の確立を行う.

4. 研究成果の発表等

(1)論文発表(原著論文)

○ H.Anai, S.Orii, K.Horimoto

“Symbolic-numeric estimation of parameters in biochemical models by quantifier elimination,”
To appear in Journal of Bioinformatics and Computational Biology (JBCB) (Vol.4, No.5)
Vol.4, pp.1097-1117 (2006)

○ H. Anai & S. Hara,

“A parameter space approach to fixed-order robust controller synthesis by quantifier elimination” International Journal of Control (Vol.79, No.11),pp1321-1330, November 2006.

○ M.Fujimoto, M.Suzuki and K.Yokoyama,

On polynomial curves in the affine plane,
Osaka Journal of Mathematics, Vol.43, 597-608.

○穴井宏和, 原辰次

数式処理を用いた多項式のロバスト根配置とその制御系設計への応用
シミュレーション学会誌論文. 論文誌 第25巻,第3号
特集号「ロバスト計算と精度保証」pp28-35, 9月, 2006.

○穴井宏和, 原辰次

限定記号消去法に基づくロバスト制御系設計ツール

シミュレーション学会論文誌 第 25 巻, 第 1 号, pp53-61, 3 月, 2006.

○管野 政明:

SISO H^∞ ループ整形問題の準最適制御器の精度保証付き計算,

シミュレーション学会論文誌, 25(3), 185-193, 2006