

「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 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

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。

【概要・見通し】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、新たにバイオインフォマティクスへの適用を行い基盤技術の適用の拡大を図ってきました。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する数値・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や、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、これらの方向性の発展を期して国際会議 Algebraic Biology を立ち上げました。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に向けての活動(契約等)を継続中で当プロジェクトの終了にむけて、製品化を完了しその成果を実際のものづくりの現場への適用・普及も行って行く予定です。

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。

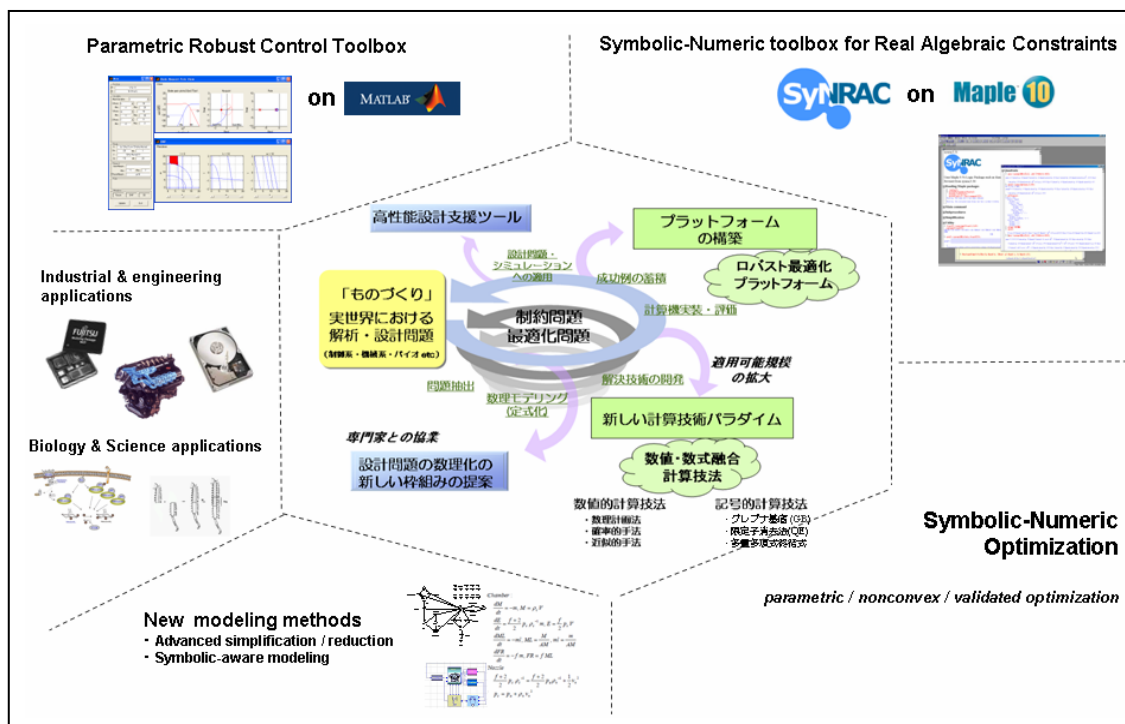
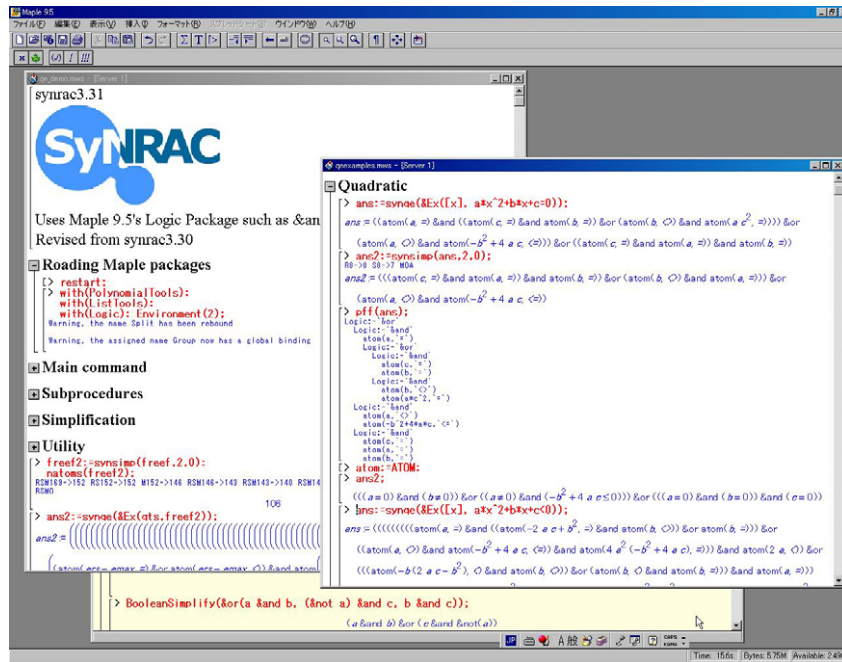


図1: 研究目標, 研究開発サイクル及び成果

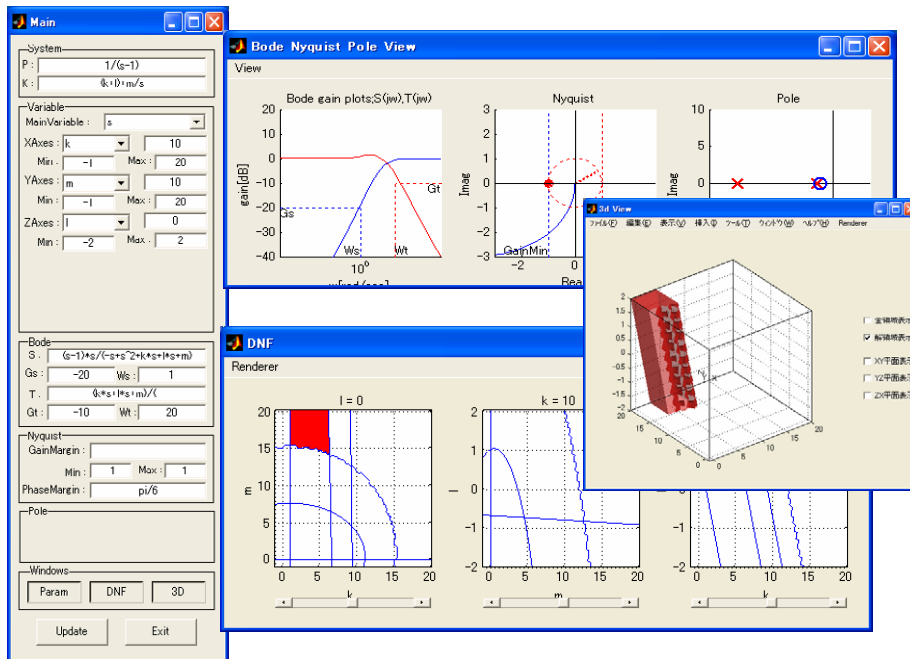
- ・ 計算技法としては、パラメータを含む等式制約のより効率的な新解法の開発とその高速化、及び、効率の良い数値/数式ハイブリッド計算の検討を行いました。特に不等式制約問題

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計算手法を確立し、その効果的な実装を継続中であり最終年度までに SyNRAC の機能として完成の予定です。

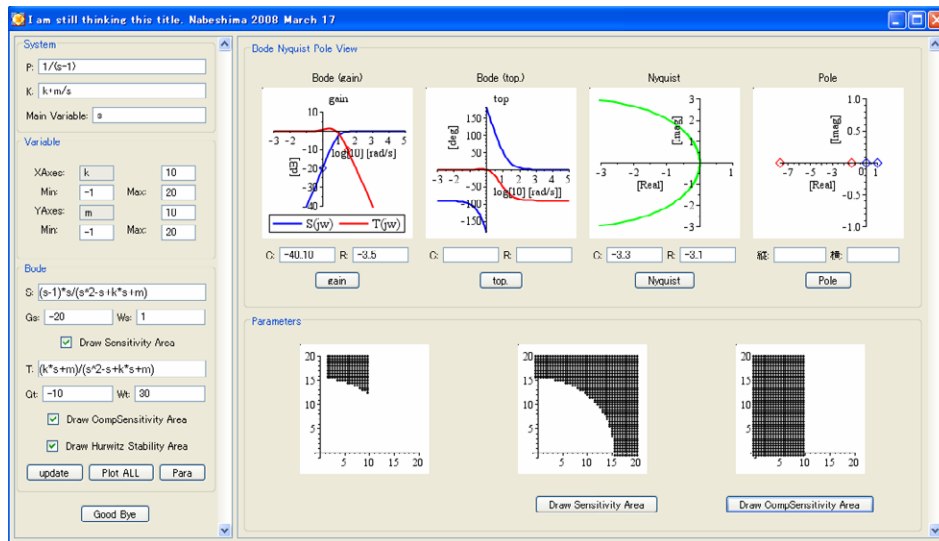
- 区間演算を用いた制約問題を精度保証付きで近似的に解く手法を検討し、電力系の制御などの実際の応用分野への適用において有効であることを確認しました。今後、この区間演算に基づく方法とQEの計算手法の融合による効率的なパラメトリック設計手法の開発にも取り組む予定です。
- 制御系設計法では、これまで、ロバスト制御系設計手法として、有限周波数 KYP 補題に基づいた新しい動的システム設計法についての開ループ設計法、及び、SDC に基づく代数計算に基づく設計法についてそのツール化を行いました。今後は、それらの成果をもとに SyNRAC に基づくロバスト制御系設計法との融合を目指します。
- バイオイン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の改良を行い、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を主題とする第3回目の国際会議 AB2008(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っています。
- 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。Maple ツールとしての製品化を目指し、Maple 上でのプロトタイプを完成させました。
- また、以上の成果にもとづいて、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構築できる「ロバスト最適化プラットフォーム」の確立を目指します。



Maple package for real algebraic constraints



MATLAB toolbox for parametric robust control



Maple toolbox for parametric robust control

3. 研究実施体制

(1)「富士通」グループ

① 研究者名: 穴井 宏和(富士通)

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

(2)「東京大学」グループ

① 研究者名: 原 辰次(東京大学)

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

(3)「立教大学」グループ

① 研究者名: 横山 和弘(立教大学)

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

(4)「神戸大学」グループ

① 研究者名: 野呂 正行(神戸大学)

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

(5)「産業総合技術研究所」グループ

①研究者名:堀本 勝久(産業総合研究所)

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

4. 研究成果の発表等

(1) 論文発表(原著論文)

Aburatani, S., Sun, F., Saito, S., Honda, M., Kaneko, S. and Horimoto, K.,
Gene systems network inferred from expression profiles in hepatocellular carcinogenesis by
graphical Gaussian model. EURASIP J. Bioinfo. Systems Biol., 47214, 2007.

Yoshida, H., Anai, H. and Horimoto, K.,
Derivation of rigorous conditions for high cell-type diversity by algebraic approach. BioSystems,
90, 486-495, 2007

Sato, T., Yamanishi, Y., Horimoto, K., Kanehisa, M. and Toh, H.,
Inference of Protein-Protein Interactions by Using Co-evolutionary Information. In Anai, H.,
Horimoto, K. and Kutsia, T. (eds), Algebraic Biology 2007, Lecture Notes in Computer Science
4545, p.322-333, Springer, Heidelberg, 2007.

Yoshida, H., Nakagawa, K., Anai, H. and Horimoto, K.,
Exact parameter determination for Parkinson's disease diagnosis with PET using an algebraic
approach. In Anai, H., Horimoto, K. and Kutsia, T. (eds), Algebraic Biology 2007, Lecture Notes
in Computer Science 4545, p.110-124, Springer, Heidelberg, 2007.

Yoshida, H., Nakagawa, K., Anai, H. and Horimoto, K.,
An Algebraic-Numeric Algorithm for the Model Selection in Kinetic Networks. Proceedings of
10th CASC, LNCS 4770, p.433-447, Springer, Heidelberg, 2007

Hayashida, M., Sun, F., Aburatani, S., Horimoto, K. and Akutsu, T.,
Integer Programming-based Approach to Allocation of Reporter Genes for Cell Array Analysis.
Proceedings of 10th OSB, Lecture Notes in Operation Research, p.288-301, World Publishing
Corporation, Beijing, 2007.

H.Yanami and H. Anai,

Maple package SyNRAC and its application to robust control design problems,

Future Generation Computer Systems Vol. 23 , pp.721–726. 2007.

N.Hyodo, M. Hong, H.Yanami,S.Hara, and H. Anai

Solving and visualizing nonlinear parametric constraints in control based on quantifier elimination,

Applicable Algebra in Engineering Communication and Computing, 18 (6): pp497–512 Dec, 2007.

H.Yoshida, K.Horimoto, and H.Anai

Inference of Probabilities over a Stochastic IL-System by Quantifier Elimination,

Mathematics in Computer Science, Volume 1, Number 3, Birkhäuser Basel, 2008.03

M. Kanno, H. Anai, and K. Yokoyama,

On the Relationship between the Sum of Roots with Positive Real Parts and Polynomial Spectral Factorization,

In T. Boyanov et al., editors, Numerical Methods and Applications --- 6th International Conference, NMA 2006, Borovets, Bulgaria, August, 2006, Revised Papers, volume 4310 of Lecture Notes in Computer Science (LNCS), 320–328, Springer, 2007.

S. Hara, T. Bakhtiar, and M. Kanno,

The Best Achievable H_2 Tracking Performances for SIMO Feedback Control Systems,

Journal of Control Science and Engineering, 2007, Article ID 93904, 12 pages, 2007.

S. Hara and M. Kanno,

Sum of Roots Characterization for H_2 Control Performance Limitations,

SICE Journal of Control, Measurement, and System Integration, 1(1), 58–65, 2008

S. Hara and M. Kanno,

When is a Linear Continuous-time System Easy or Hard to Control in Practice?,

In V. D. Blondel et al., editors, Recent Advances in Learning and Control, volume 371 of Lecture Notes in Control and Information Sciences (LNCIS), 111–124, Springer, 2008

K.Yokoyama,

On systems of algebraic equations with parametric exponents II,

Applicable Algebra in Engineering Communication and Computing, Vol. 18, 603–630, 2007.

M. Kaneko, M. Noro, K. Tsurumaki,

On a conjecture for the dimension of the space of the multiple zeta values, IMA Volume 148 on "Software for algebraic geometry", Springer (2008), 47-58.

Y. Kurata, M. Noro,

Computation of Discrete Comprehensive Groebner Bases Using Modular Dynamic Evaluation, Proc. ISSAC2007, ACM Press (2007), 243-250.

M.Kida, G.Renault and K.Yokoyama,

Quintic polynomials of Hashimoto-Tsunogai, Brumer, and Kummer

(with M. Kida, G. Renault), to appear in International Journal of Number Theory.

G.Renault, K.Yokoyama,

Multi-modular algorithm for computing the splitting field of a polynomial,

International Symposium on Symbolic and Algebraic Computation (ISSAC) 2008,

Hagenberg, Austria, July, 2008 To be published

M. Kanno, K. Yokoyama, H. Anai, and S. Hara,

Symbolic Optimization of Algebraic Functions,

International Symposium on Symbolic and Algebraic Computation (ISSAC) 2008,

Hagenberg, Austria, July, 2008 To be published

管野政明, 大西政彦, 原辰次:

「有限周波數位相・ゲイン特性に着目した連続時間制御対象の制御しやすさの特徴づけ」 計測自動制御学会論文集, 43(10), 855-862, 2007

管野政明, 内山裕貴, 原辰次:

「離散時間 H_2 最適制御問題に対する精度保証付き計算」
システム制御情報学会論文誌, 20(11), 451-453, 2007

鍋島克輔

「パラメトリック・グレブナ基底計算のテクニック」

日本数式処理学会論文誌 To be published

鍋島克輔

「係数ドメインを多項式環とする多項式環上の簡約グレブナ基底について」

京都大学数理解析研究所講究録 “Computer Algebra – Design of Algorithms,
Implementations and Applications” To be published

(2) 特許出願

平成 19 年度国内特許出願件数： 0 件 (CREST 研究期間累積件数： 1 件)