

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 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

2. 研究代表者名及び主たる研究参加者名(研究機関名・職名は研究参加期間終了時点)

研究代表者： 穴井 宏和(富士通(株)テクニカルコンピューティングソリューション事業本部
計算科学ソリューション統括部 統括部長付)

主たる共同研究者：

原 辰次(東京大学大学院情報理工学系研究科 教授)

横山 和弘(立教大学理学部数学科 教授)

野呂 正行(神戸大学理学部数学科 教授)(平成16年10月～)

堀本 勝久((独)産業技術総合研究所生命情報科学研究センター チーム長)(平成18年4月～)

3. 研究内容及び成果

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ある。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た。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るが、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る。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る。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た。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る。

これまでに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、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った。また、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、自動車エンジン開発、電力プラント設計、HDD 設計、回路設計など)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た。ものづくりにおいては、産業界における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その有効性を実証した。さらにこれら研究分野の発展を期して国際会議Algebraic Biologyを立ち上げた。

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)を継続中である。当プロジェクトの終了後になるが、2009年度の製品化を目指す。また、他分野向けのツールの開発(ファミリー化)も想定中で、それらの成果を実際のものづくりの現場への実適用・普及も行っていく予定ある。

富士通穴井グループは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・効率化を行った。さらに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った。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った。

そしてものづくりの現場から抽出してきた制約・最適化の問題に対し、抽出された制約問題・最適化問題の有効な定式化の検討を行い、東大、立教大、神戸大グループと定期的にセミナーを開催して情報共有し、基礎となる代数的アルゴリズムの開発成果を効果的に融合することを留意しながら、定式化された問題に適した数値/数式ハイブリッド解法の開発を共同で行った。

また開発した数値・数式ハイブリッドアルゴリズムを、東大グループと共同で制御系設計へ適用し、さらに産総研グループとはバイオインフォマティクスへ適用し、それぞれ有効性を確認し適用にあたっての一般的方法論の確立を行った。

東京大学原グループは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・産業上の重要なシステム・制御理論問題の抽出と、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および適用に当たっての一般的方法論の確立を行った。その結果、システム・制御理論を中心とした実応用における設計問題において現れる設計問題を抽出し、物理的な拘束条件を考慮した最適化問題として定式化した。さらにそれらの問題に対する数値/数式ハイブリッド解法に関する検討を、富士通グループ及び立教大学グループと共同で定期的にセミナーを開催し情報共有しながら行った。

立教大学横山グループは本研究においてベースとなるグレブナ基底や限定記号消去等代数的技法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・効率化を行った。さらに記号・代数計算のポイントとなるパラメータを持ったままの最適化計算の基礎となるグレブナー基底・終結式の基本演算の改良を行うとともに、その効果的な適用事例を発掘し有効性を検証した。特に具体的な事例の発掘は、富士通グループ及び東大グループと定期的にセミナーを開催し情報共有しつつ効果的に行った。

神戸大学野呂グループは本研究においてベースとなる等式制約に対するグレブナ基底、終結式等代数的技法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った。記号・代数計算のポイントとなるパラメータを持ったままの最適化計算の基礎となる基本演算、特に有理数体の拡大体上での基本演算の高速化およびDynamic evaluation技法の実用化を行うとともに、その数値・数式ハイブリッド最適化アルゴリズムへの効果的な適用を行い有効性を検証した。特に具体的な数値・数式ハイブリッド最適化アルゴリズムへの適用には、富士通グループ及び立教大グループと定期的に交流し情報共有しつつ効果的に行った。

産業技術総合研究所堀本グループは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、数値計算との融合を含め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った。バイオインフォマティクスにおける最適化の具体的な問題を抽出し、代数計算に適した最適化問題として定式化するとともに、富士通グループと定期的に打ち合わせを行い、それらの問題に対する数値/数式ハイブリッド解法に関する検討を富士通グループと共同で行った。産総研グループは本プロジェクトの研究チームに参加したのが平成18年10月からではあるが、それまでも定期的に打ち合わせを行っており、そこで蓄積してきた共同研究成果を基に数値/数式ハイブリッド最適化に基づく新しい生体系解析技術の開発を行った。

4. 事後評価結果

4-1. 外部発表(論文、口頭発表等)、特許、研究を通じての新たな知見の取得等の研究成果の状況

数値・数式ハイブリッド最適化プラットフォームに関して、ソフト及び実装の両面において、妥当な成果が出たものと判断できる。積極的に論文発表が行われ、その結果各種論文賞等、多数の受賞を受けるなど内外の学術誌、特に国際的な学術誌においても高い評価を得ている。特許出願は1件と少ないが、産総研と共同でバイオ関連の応用に関する特許を出願するなど新分野の開拓姿勢は評価できる。

論文・発表等の研究成果にも現れているがツールの開発・製品化に向けた活動などに対する社会的期待が高まっており、実用化に向けた取り組みを数値・数式計算をシミュレーション分野で伸ばそうとする姿勢を高く評価したい。数学の基礎に関するアルゴリズム開発から実用段階のプラットフォーム開発までそれらが関連づけて進められてきており当初研究計画に合わせて着実に研究開発を推進した。

4-2. 成果の戦略目標・科学技術への貢献

これまで困難だった非凸性、非線形性を本質的に解決できる手法であり、パラメータ空間による可能領域の可視化も可能であるためものづくりのエンジニアに対する貢献も大きい。また他に類似の研究を行っているグループは国内外ともにほとんどなく、当プロジェクトは世界的にユニークであり、その研究内容は基礎研究からものづくりまで有効である新しいシミュレーション技術として非常に重要であると考えられる。

同時に、数式処理の分野で世界のトップレベルにある研究者や Maplesoft 社の開発技術者との交流も密に行いながら研究を推進しており、基礎研究および応用研究ともに常に最先端の研究成果を取り入れながら研究を推進した。アルゴリズム研究等の基礎研究成果だけではなく、ツールの開発・製品化も見込まれ、実用として制御系設計をはじめとして、発電機制御などさまざまな分野向けのツール開発も期待できる。研究代表者が所属する研究機関においてはすでにもものづくり基盤技術としてHDDの形状最適化やSRAMの最適設計への適用を図っており、数値・数式ハイブリッド計算による設計支援手法の有効性を検証している。

今後種々の現実のプロセスでの最適化は、資源、エネルギーなど多くの観点から必要なことであり、今後の一層の強化と適用範囲の拡大を期待したい。

4-3. その他の特記事項(受賞歴など)

チーム全体の実施体制として、基礎研究である代数数学、数式処理、数値計算の研究者と実用研究である制御、バイオの各分野の研究者が集まったチーム構成であり、目標達成に向けて理想的な研究開発体制であった。またこの研究体制の中から開発中のソフトウェアの製品化に向けて実装担当の人材を確保など柔軟に行ったことも評価する。他の研究チームに比べ、研究チーム内の各研究グループ間の打合せはかなり頻繁に行っており、それがCREST研究期間内でソフトウェアツールの製品化まで効率よく行うことができた要因でもある。また研究費は主にポスドクなどの人件費に使われているが、本研究内容、研究体制から判断し研究費の分配・執行は適正であった。

以上