

同志社大学学術フロンティア「知能情報科学とその応用」研究プロジェクトにおける代表的研究 - Aグループ - 知的エンジニアリング手法の構築

三木光範*

Mitsunori Miki

1. まえがき

同志社大学学術フロンティア推進事業「知能情報科学とその応用」研究プロジェクトは2000年度から2004年度までの5年間の文部科学省補助金プロジェクトであり、生物の賢さを人工的システムに応用すべく、3つのサブプロジェクトで精力的な研究が行われてきた。ここでは、第1サブプロジェクトである「知的エンジニアリング手法の構築」における代表的な研究を紹介する。

2. 研究の背景と目標

本サブプロジェクトでは知的なシステムを知的なデザイン手法で具体化する手法の構築を行う。これは生物の進化の戦略を模擬するもので、遺伝的アルゴリズムなどの進化的計算手法とシミュレーション技術を用いてコンピュータが自律的に新しく、知的なシステムを具体化する創発的設計の手法を研究する。

1) 進化的計算手法の高度化と実用化

生物は進化というメカニズムを利用し、環境に適合した優れた機能を獲得してきた。この考え方を応用することで、人工的なシステムの設計・開発・運用などの各段階で制約条件を満足しながらある目的を最大限に達成することのできるソリューション(解)をコンピュータが自動的に産み出すことができる。この方法を進化的計算手法とよぶが、この手法を高度化し、実世界の種々の問題解決に応用することを考えている。

特に、本サブプロジェクトでは遺伝的アルゴリズムを分散並列化した分散遺伝的アルゴリズムの研究やシミュレーテッドアニーリングの高度な並列化技術の開

発により、これまで難しかった多くの複雑な最適化問題を解くことに成功している。その中には、電気回路の最適設計問題、光ファイバー通信における利得等化フィルタの最適設計、あるいはコ・ジェネレーションシステムの最適設計など、多くの実最適化問題が含まれている。

2) 超並列PCクラスタの開発

進化的計算手法を実行するには膨大な計算パワーが必要である。この高い計算負荷のために、これまで進化的計算手法は研究段階を抜け出すことができず、実世界の最適化問題に適用することは難しかった。しかしながら、近年、並列計算機の発達は目覚ましく、かつては不可能とされていた計算が可能となり、進化的計算手法の有用性がにわかに注目されることとなった。

一方、そのような並列計算機は非常に高価であるが、市販の高性能のPC(パソコン)を数百台から数千台並べ、市販の高速ネットワークで接続することにより、従来のスーパーコンピュータと同等の性能を出すことができるようになってきた。そこで、本研究サブプロジェクトでは、このPCクラスタ技術のさらなる高度化と実用化への問題点の克服などを目標としている。高性能のPCクラスタの開発によって初めて進化的計算手法が実最適化問題に適用されることになる。

3) 分散コンピューティング環境の構築

生物は膨大な数の個体が分散・並列で自立的に動作しているシステムである。この考え方を基に、地球上のコンピュータを超並列分散コンピューティング環境に変えることができるなら、計算資源の有効利用にも成り、またひとつのサイトに存在するスーパーコンピュータでは不可能であった計算を行うことができる。

* 同志社大学大学院工学研究科

このための技術がグリッド技術である。本サブプロジェクトでは、クラスタ技術の研究に加えてグリッド技術の応用に関する研究も同時に行い、新しい分散コンピューティング環境の効果的な応用を考えている。

4) シミュレーションの並列処理

システムの設計や開発にとって最も重要な技術は、いまやシミュレーション技術である。本サブプロジェクトでは電気機器や化学プラントのシミュレーションに対して効果的な並列処理技術と並列処理アルゴリズムを研究している。特に、粒子法に基づく化学工学の粉体シミュレーションの技術開発に成功し、種々の複雑な現象の解明が、この手法と超並列 PC クラスタを用いて可能になってきた。また、分子動力学を組み込んだシミュレーションにより、結晶の制御などができるようになり、機能性粒子の設計が可能となった。また、磁界解析の並列解析なども行っている。

5) 多目的最適化手法

多目的最適化とは、複数の目的関数を持つ最適化問題を解くことである。近年、自動車や電気製品などでは、安全性と機能性に関する多くの設計要求を同時に満足させるソリューションが求められており、多目的最適化の研究が盛んである。遺伝的アルゴリズムは多目的最適化に適した手法であり、ここではこの手法の高度化や実用化に取り組んでいる。

5) 人間の動特性を考慮した数理モデル

人工システムに人間が関与する場合、人間の動特性などを考慮してシステム設計を行う必要がある。ここでは、そのためにヒューマンダイナミクスを基に人間の筋肉の特性を計測し、それを人工システムに取り込んで全体的に設計する手法を研究している。また、脳波など人間がどのように感じているかをフィードバックすることで、人工システムの設計は人間に優しいものとなる。ここでは、人体の動特性モデルの構築方法を確立することができた。

6) 知的なマンマシンインタフェース

ロボットの動作においてロボットハンドは人間との協調動作のためにも、高度な知的性を持つ動作が要求

される。ここでは、位置制御に基づく把持制御系の最適設計問題を研究している。ロボットハンドが把持している物体のすべりを検知することで、関節の剛性を変化させたり、あるいは把持力の増減を行うシステムを開発した。これにより、ロボットハンドの知的な動作が可能になった。

7) タンパク質の構造解析

最適化問題に帰着できる問題で最も規模の大きな実最適化問題はなんとといってもタンパク質の構造解析であろう。

生命と情報学際分野の研究であるパイオインフォマティクスにおいては、ゲノムに関する研究が一段落し、次はポストゲノム研究に移っている。ここでは、タンパク質の3次元構造の同定問題が大きな注目を集めている。

本サブプロジェクトでは、進化的計算法の応用と、超並列 PC クラスタの応用として、この最大級の最適化問題に取り組んでいる。

タンパク質の構造が持つ複雑な原子・分子エネルギーを計算し、それを最小化することでタンパク質の3次元構造を見出す。すでに分散並列遺伝的アルゴリズムと並列シミュレーテッドアニーリングを組み合わせた新しい方法で、この問題を解ける可能性が大きくなりつつある。高度な進化的計算手法の開発と、1テラフロップスを超える膨大な計算パワーとの組合せで、未知のタンパク質の構造が明らかになる日も近いと思われる。なお、この研究は分子科学研究所との共同研究である。

3. おわりに

ここでは本サブプロジェクトの代表的な研究の概要を紹介した。本サブプロジェクトでは、同志社大学工学部だけでなく、阪南大学、大阪産業大学、ATR、分子化学研究所など、多くの研究機関と共同研究を行い、着実に大きな成果を挙げている。学会での発表や観光される論文も多く、また海外での研究発表のみならず、SuperComputing という世界的規模での講演会・展示会で研究展示を行い、世界での認知度も高い。

* 同志社大学大学院工学研究科