

令和 6 年 4 月 25 日現在

機関番号：17104

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2020～2023

課題番号：20K11681

研究課題名（和文）ナチュラルコンピューティングにおける実行の高速化を実現する計算手法

研究課題名（英文）Algorithms for speeding up execution in natural computing

研究代表者

藤原 暁宏（Fujiwara, Akihiro）

九州工業大学・大学院情報工学研究院・教授

研究者番号：10295008

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,200,000円

研究成果の概要（和文）：ナチュラルコンピューティングでは、生体系を並列分散処理のハードウェアとみなして計算困難問題の解を求める計算モデルとしての研究が注目を集めている。本研究では、従来の研究では考慮されることの少なかったナチュラルコンピューティングの現実世界での実行速度に焦点を当て、アルゴリズムの実行速度を考慮した場合の計算モデルの計算能力の検証や、高速に実行可能な計算操作を用いた計算困難問題に対するアルゴリズムの提案を行なった。また、提案計算モデルに対する並列計算シミュレータを開発し、シミュレータ上において提案アルゴリズムの正当性、及び、実効性の検証を行うとともに、解の精度や計算速度についても評価を行なった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究では、生物の細胞の生命活動などの自然界のシステムを計算に用いるナチュラルコンピューティングにおいて、実行速度を考慮した計算モデルと効率のよいアルゴリズムの提案を行なった。これにより、従来の計算機では正確な解を求めることが非常に困難である問題に対して、実用的な時間で問題を解くナチュラルコンピューティングの実現に一步近づくことができたことになる。また、提案モデルに対して高速に動作するシミュレータの開発を行っており、ナチュラルコンピューティングにおけるアルゴリズムの正確な評価や検証について貢献できているものと考えられる。

研究成果の概要（英文）：In natural computing, many results have been proposed for computational models, which are based on biological systems, as hardware for parallel and distributed processing. In this study, we focused on the execution speed of natural computing in the real world, which has not been considered in previous studies. We first verified the computational capability of proposed models from a practical view of the execution speed of algorithms, and also proposed algorithms for computationally hard problems using fast executable operations. We also developed a parallel simulator for the proposed computational model. We verified the validity and effectiveness of the proposed algorithm and evaluated the accuracy and computational speed of the proposed algorithms using the simulator.

研究分野：アルゴリズム

キーワード：アルゴリズム ナチュラルコンピューティング

1. 研究開始当初の背景

ナチュラルコンピューティングは生体系などの自然界のシステムを計算に用いる計算パラダイムである。このナチュラルコンピューティングは複数の側面を持ち、その一つは、遺伝的アルゴリズムや粒子群最適化に代表されるように、問題を生物の環境として定式化し、生命や自然の振る舞いにヒントを得て解を求めるメタヒューリスティクス的一种として捉える考え方である。一方、生体系を並列処理システムのハードウェアとみなし、このシステムを統合的に制御して問題の解を求める計算モデルとして捉えることもできる。この研究分野においては、分子計算や化学計算など多岐にわたる計算モデルが提案されており、活発な研究が行われている。

このナチュラルコンピューティングにおける計算モデルとして、近年特に注目を集めているのが、著者らが主に研究に取り組んできた膜計算である。この膜計算は、生物の細胞の活動を並列分散計算としてモデル化した計算パラダイムである。例えば、図1上は植物細胞の概略図であり、一番外側の細胞膜には核や液胞といった膜が含まれており、また、各膜は独立した生命活動を行うミトコンドリアや葉緑体といった要素を含んでいる。膜計算では、このような細胞の持つ(a)膜の階層構造と(b)各膜内の独立した生命活動という2つの要素を図1下のように抽象化して計算モデルとして定義し、計算を実行している。

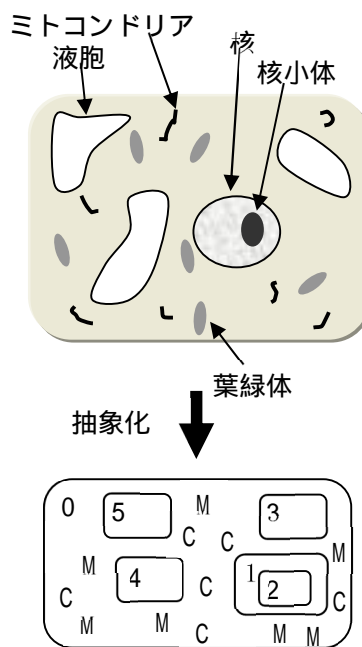


図1 膜計算の概念図

これまでナチュラルコンピューティングの実現に関して

様々な研究が行われており、ナチュラルコンピューティングのプロトタイプの実現されたものもいくつか存在する。しかしながら、実際の生体系素子を用いて実用的な高性能計算機として実現されているものはほとんどない。これは、ナチュラルコンピューティングにおいてハードウェアとして用いられる生体系素子の扱いづらさにも起因しているが、一方で、ナチュラルコンピューティングにおいては、生命活動の超並列性に依存した実行速度に対して深く考察しない計算手法が多く提案されているためだとも考えられる。本研究では、ナチュラルコンピューティングの計算モデルを実際の高性能計算環境に実現するために、実行速度を大幅に高速化させる計算手法についての検討を主に行っていく。

2. 研究の目的

本研究では、以下の3点を主たる研究目的とする。

(1) ナチュラルコンピューティングにおける、現実的な仮定を考慮した計算モデルの提案

ナチュラルコンピューティングにおける従来の計算モデルは、アルゴリズムの提案しやすさや検証の容易性のため、非現実的な仮定がおかれていることが多く、その仮定が計算モデル上のアルゴリズムを実際に実装する場合のハードルとなることが多い。そのため、申請者の先行研究では、非同期性や不確実性などの性質を考慮した計算モデルの提案を行ってきた。

しかし、従来の計算モデルでは生化学操作の実行時間に関する考慮が不足していたため、シミュレーション環境におけるアルゴリズムの実行速度は十分ではなく、実行時間を評価するための計算モデルとしては改善の余地があった。そこで本研究では、実際の生化学反応に基づき、それぞれの生化学反応に必要な時間と資源量を考慮し、それらのパラメータを計算モデルに取り入れることにより、アルゴリズムの実行時間を正確に見積もることができる計算モデルの提案を行いたいと考えている。なお、提案予定の計算モデルは生命活動のより正確なモデル化であるといえるが、その反面、パラメータの導入による計算モデルの複雑化により、計算能力が変化する可能性が考えられる。そこで本研究では、提案予定の計算モデルについて、パラメータの導入による計算能力の変化についても検証を行う。

(2) (1)の計算モデルにおける高速実行可能なアルゴリズムの提案

(1)の計算モデルを用いて、実際のナチュラルコンピューティングにおいて高速実行可能なアルゴリズムの提案を行うことを目的とする。ナチュラルコンピューティングは、その性質上、計算困難問題に対する全解探索は容易であるが、論理演算、数値演算や辞書演算などの基本演算を扱うことが不得手であり、それらの演算の実行に時間がかかることが多い。そこで本研究では、(1)で提案の計算モデルを用いて、まず基本演算を高速に実行可能なデータ構造の提案を行うとともに、提案データ構造を用いて基本演算を高速に実行するアルゴリズムの提案と検証を行う。

次に、提案基本演算アルゴリズムを用いて、計算困難問題に対する高速実行可能な問題の解法を提案する。高速化のための手法としては、分枝限定法等の基本的手法をはじめとして、様々な最適化手法を用いる。対象とする問題は、最大充足割当問題や最大独立点集合といった代表的な最適化問題を始めとして、ナップサック問題や数理計画問題などの実用性の高い計算困難問題を扱い、実用的な時間で高速実行可能なアルゴリズムの提案を行っていく。

(3) 提案アルゴリズムの有効性を検証するためのシミュレータの開発

提案アルゴリズムの正当性や実効性を検証するため、計算モデルに対するシミュレータの開発も併せて行う。本研究では、実行される生化学的操作や資源等の制約条件なども考慮に入れ、提案アルゴリズムの現実的な実行時間を正確に見積もることができる実用的なシミュレータの開発を目指す。本シミュレータは、OSとしてLinuxを用いる並列計算サーバ上で、言語としてpythonを用いて開発を行う予定である。また、上記(2)にて提案したアルゴリズムを本シミュレータ上で動作させ、データ構造とアルゴリズムの有効性の検証を行う。これにより、アルゴリズムの理論的な評価と実際の実行ステップ数やオブジェクト数との相関性の検証を行うとともに、提案計算モデルで仮定した実行時間に関するパラメータが妥当か否かが判断可能だと考えている。

これに加えて、本研究では、上記の計算困難問題について、近似解法の評価を行う場合に用いられるベンチマークを使ってシミュレーションを行いたいと考えている。本研究で提案する計算困難問題に対するアルゴリズムは厳密解法を予定しており、近似解法とは異なるため、入力サイズの大きなベンチマークについては実行することができないと予想されるが、比較的サイズの小さいベンチマークについては、最適解に対する解の精度や実行時間の違いなどを比較検証することにより、提案手法の実用的な有効性を示すことができるのではないかと考えている。

3. 研究の方法

先に述べたように、ナチュラルコンピューティングに関する既存の研究は、実行速度に対する深い考察を欠き、生化学活動が持つ現実的な実行時の制約を考慮した計算モデルにおけるアルゴリズムは数少なかった。そこで本研究では、実際の生化学反応に基づいた実行時間と資源量を考慮し、これらのパラメータを計算モデルに組み込むことで、アルゴリズムの実行時間を正確に見積もることができる計算モデルの提案を行った。

次に、提案計算モデルを用いて、実用的な実行時間を実現する効率的なアルゴリズムの提案を行った。まず、基本演算操作である整列、および代表的な計算困難問題であるナップサック問題に対して、高速に実行可能なデータ構造の提案を行い、提案データ構造を用いて整列操作を実行するアルゴリズム、およびナップサック問題を高速に解くアルゴリズムの提案を行った。また、これらの結果を応用し、代表的な計算困難問題である充足可能性問題、部分和问题、最大クリーク問題、シュタイナー木問題に対して、高速に実行可能なアルゴリズムの提案を行った。加えて、一般的なナチュラルコンピューティングのアルゴリズムに対するロバスト性を持たせるための必要条件を理論的に証明し、一般的な計算モデルに対するロバスト性を持たせるための変換手法の提案を行っている。

また、これらの研究と並行して、提案された計算モデルやアルゴリズムの正当性や実効性を検証するため、並列処理を用いたシミュレータの開発を行った。このシミュレータを用いて、実行速度を考慮した提案アルゴリズムの大規模シミュレーションを実施し、アルゴリズムの実効性に関する評価と考察を行っている。

4. 研究成果

本研究に関して得られた主な研究成果を以下に示す。

(1) 非同期膜計算による基本操作の実現

膜計算においては、四則演算やソートなどの基本演算を行うPシステムがいくつか提案されている。しかしながら、既存のPシステムは、基本演算を行うために膨大な数の進化規則を必要とすることに加え、入力によっては計算に使用する膜数が指数関数的に増加するなどの問題がある。本研究では、非同期膜計算モデルを用いて、基本演算の一つであるソートに対して、カウンティングソート、及び、バイトニックソートのアルゴリズムに基づくアルゴリズムを提案するとともに、同じ基本演算である辞書演算を行うアルゴリズムを提案した。

ソートを行う非同期Pシステムは、与えられたmビットのn個の2進数を昇順にソートすることができ、カウンティングソートを行うPシステムは $O(mn)$ 並列ステップ、 $O(mn^2)$ 逐次ステップ、バイトニックソートを行うPシステムは $O(m \log^2 n + \log^3 n)$ 並列ステップ、 $O(mn \log^2 n)$ 逐次ステップで実行可能である。また、辞書演算を行う非同期Pシステムは、mビットのn個の2進数を格納する集合に対して、追加、探索、または削除の操作を $O(m + \log n)$ 並列ステップ、 $O(mn)$ 逐次ステップで実行可能である。

(2) 分枝限定法を用いた計算困難問題の解法

膜計算においては、計算モデルの超並列性を生かして計算困難問題に対して多項式ステップで問題を解く様々なアルゴリズムが提案されてきた。しかしながら、既存のアルゴリズムでは、

入力サイズに対して、膜の数が指数関数的に増加するため、膨大な数の膜の生成を必要とし、現実的な時間では実行が困難なアルゴリズムとなっていた。

本研究では、基本的な最適化手法である分枝限定法を用いて生成される膜の数を削減することにより、実行時間の改善を実現する P システムの提案を行なった。提案を行う問題としては、ナップサック問題、最大独立点集合問題、部分和问题、及び、シュタイナー木という代表的な計算困難問題を対象としている。具体的な提案内容は以下の通りである。

- ナップサック問題に対する非同期 P システムは、与えられた n 個のアイテムに対して、アイテムの価値の合計、各アイテムの重さ及びナップサック容量のうちの最大値を N とするとき、 $O(N^2)$ 種類のオブジェクト、及び、 $O(nN^2)$ 種類の進化規則を用いて、 $O(n \log n)$ 並列ステップ、及び、 $O(n2^n)$ 逐次ステップで実行可能である。
- 最大独立点集合に対する非同期 P システムは、与えられた n 頂点のグラフに対して、最大独立集合を求めることができ、 $O(n^3)$ 種類のオブジェクト、及び、 $O(n^3)$ 個の進化規則を用いて、 $O(n^2)$ 並列ステップ、 $O(2^n)$ 逐次ステップで実行可能である。
- 部分和问题を解く非同期 P システムは、与えられた m ビットの目標値 T と m ビットの n 個の 2 進数からなる集合 S に対し、要素の総和が T となる S の部分集合を求めることができ、 $O(mn+n^2)$ 並列ステップ、 $O(m2^n+n2^n)$ 逐次ステップで実行可能である。
- 最小シュタイナー木を求める非同期 P システムは、 n 個の頂点と m 個の辺をもつグラフに対し、 $O(n^2)$ 並列ステップ、 $O(2^m+n^2)$ 逐次ステップで実行可能である。

なお、これらのアルゴリズムについては、提案シミュレータを用いて提案手法と既存手法の比較実験を行い、実験結果により提案手法では大幅な実行時間の削減ができることを示している。

(3) 高度な最適化手法を用いた充足可能性問題の解法

計算困難問題に対する多くの膜計算においては、入力サイズに対して、膜の数が指数関数的に増加するため、膨大な数の膜が生成され、現実的には時間では実行できないアルゴリズムとなっている。そのため、(2)で説明のように分枝限定法などの基本的最適化手法を用いて実行時間の改善を行う研究が行われているが、大規模な問題に対して、更なる実行時間の削減が必要である。

本研究では、DPLL や Bron-Kerbosh 法などの高度な最適化手法を用いて生成される膜の数を更に削減し、充足可能性問題、及び、最大クリーク問題に対して大幅な実行時間の改善を実現する P システムの提案を行なった。具体的な提案内容は以下の通りである。

- 最適化手法として DPLL を用いる充足可能性問題に対する非同期 P システムは、与えられた n 変数 m 節の乗法標準形の論理式に対して、充足可能か否かを計算するものであり、 $O(mn)$ 種類のオブジェクト、及び $O(m^2n^2)$ 種類の進化規則を用いて、 $O(mn^2)$ 並列ステップ、及び、 $O(mn2^n)$ 逐次ステップで実行可能である。
- Bron-Kerbosh 法を用いる最大クリーク問題に対する非同期 P システムは、与えられた n 頂点のグラフに対して、 $O(n^2)$ 並列ステップ、及び、 $O(n^22^n)$ 逐次ステップで実行可能である。

なお、これらのアルゴリズムについては、提案シミュレータを用いて(2)の手法と提案手法の比較実験により大幅な実行時間の削減が実現されていることを示している。

(4) ロバスト性を持つ非同期膜計算の提案

膜計算においては、生物の細胞活動を計算ハードウェアとして用いることを想定しているが、その細胞が何らかの原因で停止したり、消失したりする可能性は否定できない。したがって、そのような停止や消失が起こっても計算が続けられるようにロバスト性を持つアルゴリズムが必要となる。

本研究では、各オブジェクトおよび膜が非同期に動作するという非同期膜計算モデルを用いて、複数のオブジェクトが消失した場合でも正しい解を得ることができるアルゴリズムの提案を行なった。最初に、 m ビットの入力に対し論理積と排他的論理和を計算する非同期膜計算の提案を行なった。次に、2 入力の加算と乗算に対してロバスト性を持つ非同期膜計算の提案を行なった。また、本研究で提案のロバスト性について、適用可能な膜計算の性質について考察を行っている。

(5) 実現可能性を考慮したナチュラルコンピューティングに対するシミュレータの開発

ナチュラルコンピューティングにおいては、実際の細胞などの生化学的物質を用いた計算は容易ではないため、提案アルゴリズムの検証が困難である。そこで、ナチュラルコンピューティングでの生物の活動をシミュレーションするシミュレータが開発されているが、それらは生化学反応に基づいた実行時間と資源量を考慮していないため、本研究で提案したアルゴリズムを検証するには不十分であった。

本研究では、ナチュラルコンピューティングにおいて、アルゴリズムの実行時間を正確に検証可能なシミュレータを構築した。このシミュレータはプログラミング言語 python を用いて実装され、シミュレーション処理の高速化を達成している。また、本研究において提案したアルゴリズムをシミュレータ上に実装し、実験的評価により提案アルゴリズムの有効性に関して評価と考察を行っている。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計3件（うち査読付論文 3件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 3件）

1. 著者名 Noguchi Takuya, Fujiwara Akihiro	4. 巻 12
2. 論文標題 An asynchronous P system with a DPLL algorithm for solving SAT	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 International Journal of Networking and Computing	6. 最初と最後の頁 238 ~ 252
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.15803/ijnc.12.2_238	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 K. Umetsu, A. Fujiwara	4. 巻 10
2. 論文標題 P systems with branch and bound for solving two hard graph problems	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 International Journal of Networking and Computing	6. 最初と最後の頁 159 ~ 173
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.15803/ijnc.10.2_159	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Noguchi Takuya, Fujiwara Akihiro	4. 巻 13
2. 論文標題 An asynchronous P system with the Bron-Kerbosch algorithm for solving the maximum clique	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 International Journal of Networking and Computing	6. 最初と最後の頁 131 ~ 148
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.15803/ijnc.13.2_131	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

〔学会発表〕 計10件（うち招待講演 0件/うち国際学会 10件）

1. 発表者名 N. Tojima, A. Fujiwara
2. 発表標題 Robustness proofs for asynchronous P systems
3. 学会等名 10th International Symposium on Applied Engineering and Science (SAES2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1 . 発表者名 T. Noguchi, A. Fujiwara
2 . 発表標題 An asynchronous P system for solving the maximum clique problem with the Bron-Kerbosch algorithm
3 . 学会等名 4th International Workshop on Parallel and Distributed Algorithms and Applications (国際学会)
4 . 発表年 2022年

1 . 発表者名 N. Tojima, A. Fujiwara
2 . 発表標題 Robust Asynchronous P Systems for Basic Operations
3 . 学会等名 The 2021 International Conference on Computational Science and Computational Intelligence (国際学会)
4 . 発表年 2021年

1 . 発表者名 K. Nagao, A. Fujiwara
2 . 発表標題 An asynchronous P system with branch and bound for solving the subset sum problem
3 . 学会等名 13th International Workshop on Parallel and Distributed Algorithms and Applications (国際学会)
4 . 発表年 2021年

1 . 発表者名 T. Noguchi, A. Fujiwara
2 . 発表標題 An asynchronous P system with a DPLL algorithm for solving a satisfiability problem
3 . 学会等名 Ninth International Symposium on Computing and Networking (国際学会)
4 . 発表年 2021年

1. 発表者名 K. Nagao, A. Fujiwara
2. 発表標題 An asynchronous P system for bitonic sort
3. 学会等名 International Conference on Foundations of Computer Science (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Y. Nakano, A. Fujiwara
2. 発表標題 An asynchronous P system with branch and bound for solving the knapsack problem
3. 学会等名 The Ninth International Symposium on Computing and Networking (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 K. Nagao, A. Fujiwara
2. 発表標題 An asynchronous P system for counting sort
3. 学会等名 The Ninth International Symposium on Computing and Networking (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 K. Umetsu, A. Fujiwara
2. 発表標題 An asynchronous P system using branch and bound for maximum independent set
3. 学会等名 11th International Workshop on Networking, Computing, Systems, and Software (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 R. Ueno, A. Fujiwara
2. 発表標題 An asynchronous P system for solving the minimum Steiner tree with branch and bound
3. 学会等名 15th International Workshop on Parallel and Distributed Algorithms and Applications (国際学会)
4. 発表年 2023年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 藤原暁宏	4. 発行年 2023年
2. 出版社 森北出版	5. 総ページ数 200
3. 書名 Pythonで学ぶ アルゴリズムとデータ構造	

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関