

令和 2 年 6 月 1 日現在

機関番号：17104

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2016～2019

課題番号：16K00021

研究課題名(和文) 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おける計算手法に関する研究

研究課題名(英文) Studies on practical procedures considering feasibility on 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) 3,400,000円

研究成果の概要(和文)：ナチュラルコンピューティングの一つとして、生態系を並列分散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における様々な不確実性や制約条件を検証し、実現可能性を考慮した計算モデルの計算能力の検証や、現実的な制約を考慮した効率の良い計算手法の提案を行った。また、並列処理を用いて提案計算モデルのシミュレータの開発を行い、このシミュレータを用いて提案アルゴリズムの正当性、及び、実効性の検証を行なった。

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やDNAの性質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、現実的な制約を考慮した問題解決のためのモデルの提案を行うとともに、効率のよい問題解決の手法(アルゴリズム)の提案を行った。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アルゴリズムを提案できたことになる。また、提案したモデルに対して、高速に動作するシミュレータの開発を行い、このシミュレータを用いて提案アルゴリズムの実際の有効性の検証も行っている。

研究成果の概要(英文)：Computation models based on features and laws of nature have been proposed in the natural computing. The computational models can be considered as a hardware for parallel and distributed processing, and computationally hard problems can be solved on the computational models.

In the present study, I first verified uncertainty and constraint conditions, which have not been considered in the previous researches in the natural computing. I next proposed computational models considering feasibility in the real world, and verified computational power of the proposed model. I also proposed a number of efficient procedures considering practical constraint on the proposed computational model. In addition, I developed simulators for the proposed computational model using parallel processing, and verified correctness and efficiency of the proposed procedures on the developed simulator.

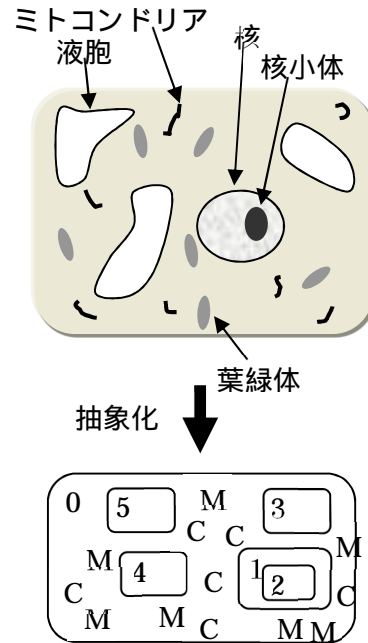
研究分野：アルゴリズム

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いくつかの側面があり、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、生態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の捉え方がある。この研究分野においては、DNA 計算や膜計算など多くの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。

この計算モデルとしてのナチュラルコンピューティングとして、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、右図上は植物細胞の概略図であるが、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つの要素を右図下のように抽象化して計算モデルとして定義した上で、計算を実行している。



この計算モデルとしてのナチュラルコンピューティングの分野において、著者らは本研究着手前までに継続的に効率のよい計算手法に関する研究を行ってきた。この研究において著者らが特に注目したのは、非同期性である。従来のナチュラルコンピューティングの多くにおいては、議論を簡単にするために、すべての生化学的反応は並列かつ同時に発生するという同期的実行の考え方が採用されていた。この同期的実行を仮定すると、計算の実行過程は限定されるので、ナチュラルコンピューティングにおける計算結果が考えやすくなるという長所がある。しかしながら、細胞の生命活動などの生化学的反応は本質的な非同期性を持っている。例えば、生物の細胞が分裂を行う場合に、分裂の条件が整ったからといって全ての細胞が完全に同時に分裂するわけではなく、不規則な順序で細胞分裂が行われていく。このように、生命活動全体での進化に対して同期や特定の順序を仮定することは困難であり、すべての要素は独立して生命活動を行うという非同期性を仮定する方が自然である。

2. 研究の目的

前述の非同期性だけでなく、ナチュラルコンピューティングで利用する生態系のシステムは従来の計算機には存在しない不確実性を持っている。例えば、DNA 計算においてデータを格納するハードウェアとして用いられる DNA は、本来の性質上は反応するはずの2つの DNA が反応を行わなかったり、計算途中で DNA が破損したりするなど、計算上のエラーとなりうる反応を起こす可能性がある。このようにナチュラルコンピューティングにおいては、不確実性のない反応を期待することは困難であり、計算の様々な場面において不確実性が存在することを仮定した上で、計算モデルを定義する方が自然である。

そこで本研究では、まずナチュラルコンピューティングにおける様々な不確実性を検証し、それらの不確実性を計算モデルの一部として定義した上で、実現可能性を考慮した計算モデルの提案を行う。この実現可能性を考慮した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、様々な計算過程の可能性が考えられる。そこで本研究では、実現可能性を考慮した計算モデルについて、不確実性の導入による計算能力の変化について検証を行う。

次に、上記の計算モデルを用いて、どのような計算過程においても最終的に正しい解が得られる確実性の高いロバストな計算手法の提案を行うことを目的とする。前述の計算モデル上で計算困難問題をはじめとする様々な問題に対してロバストなアルゴリズムを示すことにより、ナチュラルコンピューティングにおいて実現可能性の高い計算手法を提案することを目指す。

加えて、提案アルゴリズムの正当性や実効性を検証するために、実現可能性を考慮したこれらの計算モデルに対するシミュレータの開発も併せて行う。提案アルゴリズムの検証のためには実際に細胞等の生化学物を用いた実験を行うことが有効であると考えられるが、生化学分野における技術的な問題により、これらの実証実験を行うには困難が伴う。本研究では、必要となる資源や制約条件なども考慮に入れつつ、提案アルゴリズムの現実的な効率を正確に見積ることのできる実用的なシミュレータの開発を目指す。

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同期式の計算モデルを用いて考えられたものが多く、生化学活動の持つ本質的な不確実性を考慮した計算モデルは数少なかった。そこで、従来から取り組んできた膜計算について、生化学反応の不確実性を定式化するとともに、実際の生態系のシステムを考慮した実現可能な計算モデルとしての提案を行った。

次に、ナチュラルコンピューティングにおいて、効率の良いアルゴリズムの提案を行った。まず取り組んだのが最大充足可能性問題 (MAX-SAT) に対するアルゴリズムである。ナチュラルコンピューティング上の計算手法に関する既存研究の多くは、計算困難問題に対する全解探索を基本として "yes" または "no" の出力のみを行う決定問題に対するアルゴリズムが多く、最適化問題を扱うアルゴリズムは数が少ない。そこで本研究では、最大値を表現するデータ構造を提案し、この提案データ構造を用いて表されたデータに対して、計算困難問題である部分和问题を解くアルゴリズムの提案を行った。

次に、提案計算モデルを用いて、実際の細胞の数の制約条件を考慮し、使用する生化学反応物の個数等に関する評価尺度を加えて、計算困難な問題に対するアルゴリズムの提案を行った。提案を行った計算困難問題は、充足可能性問題 (SAT)、ハミルトン閉路問題、最小彩色問題など学術的にも実用的にも重要な問題である。これらの問題については、実際の膜数の制限に対して、分枝限定法と呼ばれる最適化手法を用いて膜数の削減を行うことにより、効率のよいアルゴリズムの提案を行った。

また、これらの研究と並行して、提案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に、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、実現可能性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行うことにより、アルゴリズムの実効性に関する考察を行っている。

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) 酵素を用いた非同期数値膜計算における部分和问题の解法

膜計算のひとつである数値膜計算 (EN P システム) は、膜構造と経済学に影響を受けた計算モデルであり、数値変数を進化プログラムによって変化させることで計算を行う。加えて、酵素を用いて数値膜計算の進化プログラムを制御する計算モデルを、酵素を用いた数値膜計算と呼ぶ。

本研究では、この酵素を用いた数値膜計算において、非同期性を考慮し、部分和问题を解くアルゴリズムを提案した。また、提案アルゴリズムは、 n 入力の部分和问题に対して、 $O(n)$ 並列ステップ、及び $O(n^2)$ 逐次ステップで実行可能であることを示した。

(2) 非同期膜計算における MAX-SAT の解法

生物の細胞活動においては、それぞれの構成要素が独立した生命活動を行っており、本質的に非同期な動作を行っている。しかしながら、従来の膜計算においては、すべての構成要素が同時に進化するという同期式の動作が仮定されており、生物特有の動作の非同期性を無視した現実的とは言い難い計算モデルとなっていた。

そこで本研究では、生命活動の本質である非同期性を考慮した膜計算モデルを用いて、最大充足可能性問題 (MAX-SAT) を解く P システムを提案した。また、提案アルゴリズムは、 n 個の変数と m 個の節を持つ最大充足可能性問題に対し、 $O(mn)$ 種類のオブジェクトとサイズが $O(m^2n)$ の進化規則を用いて、 $O(mn)$ 並列ステップ、及び $O(mn^2)$ 逐次ステップで実行可能であることを示した。

(3) 分枝限定法を用いた充足可能性問題の解法

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、現実的とは言い難いアルゴリズムとなっていた。

そこで、本研究では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、代表的な計算困難問題である充足可能性問題に対して実現性の高い P システムの提案を行った。この P システムは、与えられる n 変数 m 節の乗法標準形の論理式に対して、論理式を真とする変数割り当てが存在するか否かを計算するものであり、 $O(mn)$ 種類のオブジェクトを用いて、 $O(mn)$ 並列ステップ、及び、 $O(m^2n)$ 逐次ステップで実行可能であることを示した。

また、提案アルゴリズムをシミュレーション環境に実装し、実験的評価により、提案アルゴリズムに実用的な有効性があることを示している。

(4) グラフの計算困難問題に対する分枝限定法による問題の解法

グラフにおいては、数多くの計算困難問題が存在する。これらの計算困難問題に対して、膜計算ではいくつかのアルゴリズムが提案されている。しかし、既存のアルゴリズムは、どれも入力サイズに対して膜の数が指数関数的に増加しており、現実的とは言い難いアルゴリズムとなっ

ている。

本研究ではハミルトン閉路問題,及び,最小彩色問題という代表的なグラフの計算困難問題に対して,分枝限定法を用いることにより,生成される膜の数を削減することにより実現性の高いPシステムを示した。最初に提案したハミルトン閉路を求めるPシステムは,与えられる n 頂点の無向グラフに対して, $O(n^2)$ 種類のオブジェクトを用いて, $O(n^2)$ 並列ステップ,及び, $O(n!)$ 逐次ステップで実行可能であることを示した。また,次に提案した最小彩色問題を解くPシステムは,与えられる n 頂点の無向グラフに対して, $O(n^3)$ 種類のオブジェクトを用いて, $O(n^2)$ 並列ステップ,及び, $O(n^n)$ 逐次ステップで実行可能であることを示した。

また,提案アルゴリズムをシミュレーション環境に実装し,実験的評価により,提案アルゴリズムに実用的な有効性があることを示している。

(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,それらは実現可能性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おいて,用いる膜やオブジェクトの数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を示している。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計2件（うち査読付論文 2件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Y. Jimen, A. Fujiwara	4. 巻 Vol. 8, No. 2
2. 論文標題 An asynchronous P system with branch and bound for solving the satisfiability problem	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 International Journal of Networking and Computing	6. 最初と最後の頁 141-152
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.15803/ijnc.8.2_141	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 (accepted)
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 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	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11件（うち招待講演 1件/うち国際学会 9件）

1. 発表者名 Umetsu, A. Fujiwara
2. 発表標題 An asynchronous P system using branch and bound for minimum graph coloring
3. 学会等名 Workshop on Parallel and Distributed Algorithms and Applications (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 A. Fujiwara, K. Umetsu, F. Nozato
2. 発表標題 An asynchronous P system with branch and bound for solving Hamiltonian cycle problem
3. 学会等名 Workshop on Parallel and Distributed Algorithms and Applications (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 K. Umetsu, A. Fujiwara
2. 発表標題 An asynchronous P system with branch and bound for graph coloring
3. 学会等名 第15回情報科学ワークショップ
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Akihiro Fujiwara, Kotaro Umetsu and Fumiya Nozato
2. 発表標題 An asynchronous P system with branch and bound for solving Hamiltonian cycle problem
3. 学会等名 The 9-th International Workshop on Networking, Computing, Systems, and Software (NCSS-9) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 A. Fujiwara
2. 発表標題 Membrane computing with branch and bound for computationally hard problems
3. 学会等名 Workshop on Applied Soft Computing (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Y. Jimen and A. Fujiwara
2. 発表標題 An asynchronous P system using branch and bound for the satisfiability problem
3. 学会等名 Workshop on Parallel and Distributed Algorithms and Applications (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Y. Jimen, A. Fujiwara
2. 発表標題 An asynchronous P system using branch and bound technique for SAT
3. 学会等名 第13回情報科学ワークショップ
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 A. Fujiwara
2. 発表標題 Asynchronous membrane computing for solving computationally hard problems
3. 学会等名 AI workshop (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 T. Shiiba, A. Fujiwara
2. 発表標題 Solving subset sum problem using EN P system with active membrane
3. 学会等名 Joint Joint 8th International Conference on Soft Computing and Intelligent Systems and 17th International Symposium on Advanced Intelligent Systems (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 J. Imatomi, A. Fujiwara
2. 発表標題 An asynchronous P system for MAX-SAT
3. 学会等名 8th International Workshop on Parallel and Distributed Algorithms and Applications (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 A. Fujiwara
2. 発表標題 Asynchronous membrane computings for solving computationally hard problems
3. 学会等名 Workshop on Advanced Distributed Algorithms, (in conjunction with CANDAR'16) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2016年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 藤原 暁宏	4. 発行年 2016年
2. 出版社 森北出版	5. 総ページ数 192
3. 書名 アルゴリズムとデータ構造(第2版)	

〔産業財産権〕

〔その他〕

九州工業大学 大学院 情報工学研究院 藤原研究室ホームページ http://pd-algo.cse.kyutech.ac.jp/

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
---------	---------------------------	-----------------------	----