

カオスダイナミクスに基づく組み合わせ最適化技法を用いた配列モチーフ解析

●池口 徹¹⁾ ◆堀尾 喜彦²⁾ ◆長谷川 幹雄³⁾

1) 埼玉大学工学部 2) 東京電機大学工学部 3) 独立行政法人 情報通信機構モバイルネットワークグループ

〈研究の目的と進め方〉

研究代表者らがその有効性を示してきたカオスダイナミクスを用いた組み合わせ最適化技法を用いて、モチーフ抽出問題に対する効果的な解法を実現する。具体的には、モチーフ抽出に適した新たなコーディング法とカオスサーチ法を考案する。更に、ハードウェアとしてアルゴリズムを実装することにより、大量のモチーフ解析を高速実行できる解析装置のコア部分の開発に繋げることが眼目である。

本研究では、組み合わせ最適化問題の種々の解法の中でも発見的解法に属する探索アルゴリズムの開発であるため、研究自体は実験的解析が主体となる。即ち、計算機を用いた大規模な数値シミュレーションにより、アルゴリズムの有効性を検討する。その際、本課題の特長の一つであるアルゴリズムのハードウェア実装を考慮しつつ、従来法による性能を十分に凌駕できるような手法の開発を目指す。

〈研究開始時の研究計画〉

1) アルゴリズムの開発

ヒューリスティック法にカオスダイナミクスを導入するために、その基盤となるニューラルネットワークを構成する。その際、モチーフ抽出問題に適したニューラルネットワークのコーディング法をまずは模索する。次に、モチーフ解析のベンチマーク問題を用いて、提案コーディング法とそれに基づく探索アルゴリズムを大規模な数値シミュレーションにより検討する。

開発するアルゴリズムは、カオスダイナミクスを用いた手法をその主体とする。具体的には、巡回セールスマン問題、2次割り当て問題など組み合わせ最適化問題に対しても有効とされており、オペレーションズリサーチの分野においても強力な手法として評価の高いタブーサーチ法を中心として、その改良アルゴリズムである、ロバスタブーサーチ、リアクティブタブーサーチ、ジェネティックハイブリッドなども検討する。

2) アルゴリズムのハードウェア化

カオスニューロンを基盤素子とするカオスニューラルネットICを、配列モチーフ解析に適した形でのハードウェア実装方式について検討する。多数のニューロンを結合させるための重み可変シナプス回路や、ネットワークの状態を制御する制御回路も搭載する予定である。その際、ネットワークの状態を汎用コンピュータに取り込むためのI/O回路を実装する。半導体プロセスはHP社の0.5 μ m CMOSプロセスを用いる。この際、回路のレイアウトまでは研究分担者が行ない、製造はアメリカのMOSISサービスを通して行なう。

〈研究期間の成果〉

1) アルゴリズムの開発

モチーフ抽出の一手法としてしばしば用いられるギブスサンプリング法を基にした新しい手法を提案した。具体的には、探索過程において抽出されるべきモチーフ候

補の位置について、尤度を用いた決定論的探索を導入し、局所最適解への収束を避けるために、過去探索した状態を一定期間禁止するタブーサーチ法を提案した。数値実験の結果、ギブスサンプリング法を凌駕する性能を有することを明らかにした。また、タブーサーチ法自体をモチーフ抽出問題に適したアルゴリズムへと改良するため、タブー効果を遅延させる新たな手法を提案した。その結果、解探索に重要な集中化と多様化を実現することができた。

2) アルゴリズムの実装

モチーフ探索に用いるカオスニューロン回路をスイッチト・カレント技術を用いてMOSIS 0.35 μ m CMOS技術で集積回路化した。さらに、このIC10個(ニューロン100個)とPLDを用いて組み合わせ最適化問題解決ハードウェアシステムを構築した。SIカオスニューロンICの内部状態はアナログ値であるため、実数の複雑さが重要な要素となるカオスの探索が高速に実装できた。ここでは、2次割り当て問題を用いてシステムの性能を評価し、非常に良好な結果を得た。これを基に、大規模なモチーフ探索に適応できるシステムの並列・拡張手法を考案した。

〈国内外での成果の位置づけ〉

モチーフ抽出という課題を解くためのメタ戦略をソフト的、ハード的に実現した初めての研究である。

〈達成できなかったこと、予想外の困難、その理由〉

1) アルゴリズムの開発

タブーサーチ法を拡張することにより実現されるカオスサーチについて検討する時間がなかった。カオスサーチを実現する上でも基本的で重要なタブーサーチ法の性能を詳しく解析することに集中したためである。

2) アルゴリズムの実装

探索に最適なパラメータ制御が困難であった。これは多次元の内部状態観測システムの構築が必要となるためである。

〈今後の課題〉

アルゴリズムの開発については、カオスダイナミクスを実現することが必須課題となる。現在、別種のコーディング法による実現とその並列化アルゴリズムの実装についても検討している。アルゴリズムの実装については、現在のシステムアーキテクチャを改良し、さらに大規模な並列システムを構築することでモチーフ解析の実問題を解くことが課題である。

〈研究期間の全成果公表リスト〉

1) 0403201054

E. Mardhana, et al : An Integral Tabu Search for Finding DNA Motifs, *Proceedings of the 2004 RISP International Workshop on Nonlinear Circuits and Signal Processing*, 323-326 (2004).

2) 0403201109

T. Matsuura, et al : A Tabu Search for Extracting Motifs from DNA, *Proceedings of the 2004 RISP International Workshop on Nonlinear Circuits and Signal Processing*, 347-350 (2004)

3) 0404042220

H. Kobayashi et al : Mixed analog/digital system for quadratic assignment problems, *Proceedings of International Joint Conference on Neural Networks*, 2349-2353 (2003)

4) 0404041835

K. Mori et al : Application of 100-neuron chaotic neuro-computer prototype to quadratic assignment problems, *Proceedings of the 2004 RISP International Workshop on Nonlinear Circuits and Signal Processing*, 227-280 (2004)