

平成23年度北海道大学情報基盤センター共同研究成果報告書

1. 研究領域番号 A 2 大規模問題解決の基盤技術
2. 研究課題名 メニーコアに対応した進化計算並列化技術による大規模問題解決
3. 研究期間 平成23年4月27日 ～ 平成24年3月31日

4. 研究代表者

氏 名	所属機関・部局名	職 名	備 考
佐藤 裕二	法政大学・情報科学部コンピュータ科学科	教授	

5. 研究分担者

氏 名	所属機関・部局名	職 名	備 考
筒井 茂義	阪南大学・大学院企業情報研究科	教授	
藤本 典幸	大阪府立大学・理学部情報数理科学科	教授	
棟朝 雅晴	北海道大学・情報基盤センター	准教授	

6. 共同研究の成果

本共同研究の目的は、幾つかの異なる応用分野（特に大規模問題）を対象として、最適な並列度、進化計算を実装する適切な装置、進化計算を並列化するための技術を確立することである。今年度も昨年に引き続き「メニーコアに対応した進化計算並列化技術による大規模問題解決」に関して、工学分野、バイオ分野、ゲーム分野に関して並行して研究を進め、本共同研究テーマに関するスペシャルセッションを2012年6月開催のIEEE主催の国際会議 World Congress on Computational Intelligence (WCCI)に提案し受理された。また、各グループ間の連携を深め情報交換を行う場として2012年2月に北大情報基盤センターにおいてミニシンポジウムを開催し、研究経過の報告と意見交換を行った。

各グループの具体的な研究成果は以下の通りである。

1) 最適割当て問題の中で最も困難な問題の一つである2次割当て問題 (Quadratic Assignment Problem, QAP) の高速解法にGPUを適用する方法の研究を進めている。2次割当て問題は、TSPと同様、組合せ最適化問題の解法におけるベンチマーク問題として用いられるとともに、病院の部署の最適配置問題や工場の最適立地計画問題など実問題への多くの応用があり、その高速解法は有用な意味を持つ。この解法においては、進化計算とローカルサーチとを組み合わせることが有効であることが知られている。今年度はACO (Ant Colony Optimization) にローカルサーチ (2-opt, タブーサーチ) を組合せてGPUで高速に解く方法を研究した。ここでは特にGPUのマルチスレッド方式であるSIMT (Single Instruction, Multiple Thread) を考慮した方式を提案した。成果に関しては国際会議 CEC-2011 [1], GECCO-2011 [2]および国内学会 [3]で報告予定した。

2) GPGPUを用いた大規模並列化として、自動的に適切な薬剤構造を探索するDe Novo Ligand Dockingへの応用を行った。その結果として、数倍～数十倍の高速化がなされたのみならず、肝臓病の治療薬として有望な薬剤構造を発見することができ、有望な薬剤構造を集めたデータベースであるZINCデータベースに採録されることができた。本成果については、国際的な学術雑誌および情報処理学会のバイオ情報学の論文誌に掲載された[4]。さらに、GPGPUによる進化計算の大規模

(研究成果のつづき)

並列化に関する検討を行い、その成果を進化計算に関する国際会議 CEC2011 で報告を行った[5, 6]。

3) ゲーム分野の実応用の一例として数独を取り上げ、制約充足問題としての条件やメニーコア上での並列化のし易さの観点から、昨年度提案した遺伝子座間のリンケージを考慮した数独解法のための遺伝的操作を GPU GTX460 (Intel Core i7)上で並列実行することにより、通常の単一 CPU の場合と比較して、Java で書かれたプログラムに対して約 70 倍、C で書かれたプログラムに対して約 15 倍高速化が見込まれることを報告した[7-9]。また、本並列化が性能向上の他に縮退故障にも有効であることを示した[10]。さらに提案した遺伝的操作単独の並列化(データ並列)だけでも Intel Core i5 で 30%程度の高速化が見込まれることを示した[11]。

『研究成果の公表』

- [1] S. Tsutsui, N. Fujimoto. Fast QAP Solving by ACO with 2-opt Local Search on a GPU. In Proceedings of the IEEE Congress on Evolutionary Computation. IEEE, pp. 812-819, June 2011.
- [2] S. Tsutsui, N. Fujimoto. ACO with Tabu Search on a GPU for Solving QAPs using Move-Cost Adjusted Thread Assignment. In Proceedings of the Genetic and Evolutionary Computation Conference. ACM, pp. 1547-1554, July 2011.
- [3] 筒井茂義. GPU 計算における SIMT を考慮した QAP の効率的な並列計算解法について, 平成 23 年電気学会電子・情報・システム部門大会論文集, pp. 119-124, 2011 年 9 月 (富山大学)
- [4] Mohamed Wahib, Asim Munawar, Masaharu Munetomo, Kiyoshi Akama: A GPU accelerated Fragment-Based de Novo Ligand Design by a Bayesian Optimization Algorithm, IPSJ Transactions on Bio Informatics (TBIO) , Vol.5, pp.7-17, 2012.
- [5] Mohamed Wahib, Asim Munawar, Masaharu Munetomo and Akama Kiyoshi: On the Optimization of Parallel Genetic Algorithms over Nvidia's GPU, In Proceedings of 2011 IEEE Congress on Evolutionary Computation. IEEE, pp.803-811, June 2011.
- [6] Asim Munawar, Mohamed Wahib, Masaharu Munetomo and Kiyoshi Akama: Advanced Genetic Algorithm to solve MINLP problems over GPU, In Proceedings of 2011 IEEE Congress on Evolutionary Computation, IEEE, pp.318-325, June 2011.
- [7] Y. Sato, N. Hasegawa, and M. Sato. GPU Acceleration for Sudoku Solution with Genetic Operations. In Proceedings of the IEEE Congress on Evolutionary Computation. CD-ROM, IEEE, June 2011.
- [8] Y. Sato, N. Hasegawa, and M. Sato. Acceleration of Genetic Algorithms for Sudoku Solution on Many-core Processors. In Proceedings of the 2011 ACM/SIGEVO GECCO Workshop on Computational Intelligence on Consumer Games and Graphics Hardware CIGPU-2011. pp. 407-414, July 2011.
- [9] 佐藤裕二, 長谷川直広, 佐藤未来子, 並木美太郎. メニーコアプロセッサによる進化計算を用いた数独解法の高速度. SWoPP2011 予稿集. July 2011.
- [10] 佐藤裕二, 北咲也. GPU による進化計算の並列化とサステナビリティに関して. 第 5 回進化計算シンポジウム 2011 論文集.
- [11] H. Inoue, N. Hasegawa, M. Sato, and Y. Sato. Parallelization of genetic operations that takes building-block linkage into account. In Proc. of the 17th Int. Symposium on Artificial Life and Robotics. pp. 129-132. January 2012.