

令和 2 年 5 月 27 日現在

機関番号：14301

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2017～2019

課題番号：17K00014

研究課題名(和文) グラフ理論的手法に基づく離散最適化アルゴリズムの設計

研究課題名(英文) Design of Algorithms for Discrete Optimization Based on Graph-Theoretical Methods

研究代表者

永持 仁 (NAGAMOCHI, Hiroshi)

京都大学・情報学研究科・教授

研究者番号：70202231

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,600,000円

研究成果の概要(和文)：グラフの分割問題、グラフの2頁埋め込み問題、トラックとドローンを組み合わせた配送計画問題、連結部分グラフを列挙するグラフマイニングの問題などにおいて有用な新しい定式化や拡張を行い、これらに対するアルゴリズムの設計・解析、および計算機実験を通じた有用性の確認を行った。この他、学習後の人工ニューラルネットワーク(ANN)に対して、所望の予測値を出力する入力ベクトルを逆推定するANNの逆問題が混合整数計画法として解けることを発見し、これを用いて化合物の分子構造を推定するシステムの設計・構築を進めている。

研究成果の学術的意義や社会的意義

グラフ理論、グラフ描画に関する成果は離散数学の基礎となるものである。一方、配送計画問題やグラフマイニングに関する成果は産業や商業の部門において作業の効率化、経費節減およびデータからの新しい価値の発見のための技術設計に使われる。ANNの逆問題を組み入れた分子構造を推定するシステムはこれまで困難であった低分子化合物の精緻な探索を可能にしており、今後、計算機を用いた新しい材料開発や低分子の薬の開発などにおいて利用される可能性がある。

研究成果の概要(英文)：We have introduced several new useful formulations and extensions of the graph partitioning problem, the graph 2-page embedding problem, the vehicle-scheduling problem in a truck and drone delivery system, and the subgraph enumeration problem in graph mining. We have designed efficient algorithms for these problems, analyzed their computational complexity theoretically and conducted computational experiments to evaluate the practical performance. We have also discovered that the inverse problem of Artificial Neural Network can be mathematically formulated as a mixed integer program. Based on this, we are constructing a system for inferring molecular structures of chemical compounds.

研究分野：情報科学

キーワード：アルゴリズム 離散最適化 グラフ データマイニング NP-困難 グラフ描画 人工ニューラルネットワーク 機械学習

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。

## 様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

情報学・システム工学上の諸問題に現れる多くの問題は、離散構造を有し、離散最適化問題として定式化することができる。しかし、現実問題に現れる殆どの問題は NP-困難問題であるため、その解決法としては、指数時間計算量の厳密アルゴリズム、あるいは多項式時間計算量の近似アルゴリズムの設計が求められる。近年、高性能化するコンピュータの進歩を受けて、厳密最適解を求めることが必要な応用分野では、指数時間アルゴリズムの高速化の課題が以前にも増して重要になってきている。最近では、分枝限定法、動的計画法、分割統治法などの代表的指数時間アルゴリズムを設計するための理論とその計算量解析技法が整備され、指数時間アルゴリズムの研究が理論的、実用的観点から大きく掘り下げられている。

### 2. 研究の目的

現代社会において生じる情報工学的諸問題の多くは離散構造を有しており、これらを離散最適化問題として定式化することで高度な数学的解法の適用が可能になる。しかし一般に、分枝限定法や整数計画法などの汎用的手法を直接適用するだけでは、効率の良いアルゴリズムを得ることは期待できない。本研究では、広範な現実問題が共有する数学的な構造としてグラフ構造や劣モジュラ構造などを抽出し、それらの構造特性を利用したアルゴリズムを設計するための理論の構築を行う。提案するアルゴリズムの計算機実装も行い、理論と実用的側面を橋渡しする工学的技術についても検討を行い、汎用性が高く、かつ、効率や品質にも理論保証が得られるようなアルゴリズム設計技術の確立を目指す。

### 3. 研究の方法

本研究では、広範な現実問題が共有するグラフ構造などを利用した指数時間厳密アルゴリズム、近似アルゴリズムの設計を行うとともに、計算機実験による有効性の確認、アルゴリズム設計のための一般理論の拡充を行う。計算機科学の計算の基礎理論、オペレーションズ・リサーチの数理計画法という、理論的側面、実用的側面を考慮しながら、離散最適化問題に対してアルゴリズムの設計を行っていく。特に、離散最適化問題の実行可能解の列挙について、家族木に基づく分枝アルゴリズム、動的計画法、高速なアルゴリズムを生み出していく。この目的を達成するために、以下の(1)~(5)の事項について研究を行う。(1) 産業上の応用問題における新しいモデリングの調査、(2) グラフ問題に対するアルゴリズムの設計・改良、(3) 一般の指数時間アルゴリズムの高速化手法、計算量解析手法の開発、(4) 最近のアルゴリズム設計手法を取り入れた近似アルゴリズムの設計、(5) 提案アルゴリズムの実装と計算機実験を通じた分析。

### 4. 研究成果

与えられたグラフを指定された次数の上限制約を満たすように分割するという新しく、かつ自然な問題の定式化を導入し、その計算複雑性について研究成果を得た。まず、この問題が NP-完全性であること証明し、次に、分割の一つの節点集合のサイズをパラメータと見たとき、この問題が FPT であることを、問題に対するカーネルを構築するアルゴリズムを設計することで証明を行った。これは FPT 研究の代表的な結果である、節点カバー問題がカーネルを持つという性質を広く一般化した結果であり、論文は計算機科学の主要な雑誌に掲載されている。

NP - 完全問題である二階層グラフ描画問題を厳密に解くために、整数計画法による新しい定式化を導入し、その計算効率について CPLEX を利用した計算機実験を通じて確認を行った。この結果、グラフの密度が高いほど従来法に比べて高速に問題が解けることが分かった。NP - 完全問題であるグラフ上の最適化問題である枝支配集合問題に対して、指数時間厳密解法の計算時間のオーダーの改善を行った。グラフの二ページ埋め込み描画の線形時間アルゴリズムの簡素化の成果を得た。一連の成果は計算機科学関係の国際会議・学術雑誌に掲載されている。

トラック運搬とトラックからのドローンを用いた配達を組み合わせた新しい配送システムを想定した、配送スケジューリング問題をいくつか新たに定式化し、これらに対して、NP-完全であることの証明を行い、定数倍の理論性能を持つ近似アルゴリズムを設計した。これらの結果は、TSP に対する近似アルゴリズムの設計手法を一般化した方法で得られている。この配送スケジューリング問題に関しては、さらに厳密解法の計算量の理論的解析や整数計画法に基づく方法の実装などを行った。この結果、100 節点程度のネットワークであれば実用的な計算時間で厳密な最適スケジューリングが求められることが分かった。一連の成果はスケジューリング関係の国際会議に採択されている。

施設配置ゲーム問題に対する戦略耐性メカニズムの設計問題において、戦略耐性の強度を緩和したとき、全体コストにおけるメカニズム解と最適解との比率が改良できるかという新しい視点で研究を行い、施設配置空間が直線状である場合、強度の緩和と比率の改善の間のほぼ完全なトレードオフの関係式を発見することができた。この成果は計算機科学関係の国際会議に採

扱われている。

グラフデータマイニングに関して、アイテムを共有する連結誘導部分グラフを列挙する問題に対して、節点集合の交差演算に基づく新しいアルゴリズム COOMA を設計し、その設計と実装を行った。従来、最も性能の高いアルゴリズムは節点の添加操作に基づくアルゴリズム COPINE であったが、COOMA は、計算時間量の上界が出力する解の個数の多項式時間で抑えられる点の特徴であり、実験の結果、アイテム数が少なく、部分グラフの大きい解が多い場合には、COPINE より性能が高いことが示された。さらに、同問題に対して、出力サイズの多項式時間アルゴリズムを設計し、理論的解析、実装による実性能の確認実験を行った。その後、同問題に対して多項式遅延アルゴリズムが設計できることを証明し、提案アルゴリズムの実性能の確認実験を行った。一連の成果は計算機科学の主要な国際会議に採択されている。

生物進化の系統樹の構築に応用を持つ対比較可能グラフ(Pairwise Comparability Graph) について、PCG の二連結成分への分解定理を証明し、これを利用して PCG をすべて列挙する方法を設計した。現在、計算機実験により節点数が 7 および 8 である PCG をすべて特定することができた。得られた成果は計算機科学の国際会議に採択されている。

機械学習で用いられる人工ニューラルネットワーク(ANN)に対して、学習後に新しい入力ベクトルに対して ANN はその推定値を返すが、逆に所望の推定値を与えて、これに対応する入力ベクトルを構築する問題は「ANN の逆問題」であり、化学グラフの推定問題に応用のある問題である。この逆問題を混合整数計画法として解く方法を理論的に示した。これは創薬開発の計算機支援技術の新しい扉を開く重要な結果である。この結果を用いて化合物の分子構造を推定するシステムを構築し始め、現在、木構造、単環構造で非水素原子数が 30 ~ 40 個の分子構造を推定することができるようになっている。得られた成果の論文はバイオインフォマティクスの主要な国際会議に採択されている。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計15件（うち査読付論文 15件 / うち国際共著 6件 / うちオープンアクセス 8件）

1. 著者名 Seok-Hee Hong, Hiroshi Nagamochi	4. 巻 255
2. 論文標題 A linear-time algorithm for testing full outer-2-planarity	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Discrete Applied Mathematics	6. 最初と最後の頁 234-257
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.dam.2018.08.018	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Haraguchi Kazuya, Momoi Yusuke, Shurbevski Aleksandar, Nagamochi Hiroshi	4. 巻 23
2. 論文標題 COOMA: A Components Overlaid Mining Algorithm for Enumerating Connected Subgraphs with Common Itemsets	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Graph Algorithms and Applications	6. 最初と最後の頁 434 - 458
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7155/jgaa.00497	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 S.-H. Hong, H. Nagamochi	4. 巻 725
2. 論文標題 Simpler algorithms for testing two-page book embedding of partitioned graphs	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Theor. Comput. Sci.	6. 最初と最後の頁 79-98
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/978-3-319-08783-2_41	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Mingyu Xiao, Hiroshi Nagamochi	4. 巻 659
2. 論文標題 Complexity and kernels for bipartition into degree-bounded induced graphs	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Theor. Comput. Sci.	6. 最初と最後の頁 72-82
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/978-3-319-13075-0_34	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 該当する

1. 著者名 Mingyu Xiao, Hiroshi Nagamochi	4. 巻 34
2. 論文標題 A refined algorithm for maximum independent set in degree-4 graphs	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 J. Combinatorial Optimization	6. 最初と最後の頁 830-873
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10878-017-0115-3	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 該当する

[学会発表] 計24件 (うち招待講演 0件 / うち国際学会 23件)

1. 発表者名 N. A. Azam, R. Chiewvanichakorn, F. Zhang, A. Shurbevski, H. Nagamochi T. Akutsu
2. 発表標題 A method for the inverse QSAR/QSPR based on artificial neuralnetworks and mixed integer linear programming
3. 学会等名 BIOINFORMATICS2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Kazuya Haraguchi, Hiroshi Nagamochi
2. 発表標題 Experimental Comparison of Connector Enumeration Algorithms
3. 学会等名 the Third International Workshop on Enumeration Problems and Applications (WEPA2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 R. Chiewvanichakorn, C. Wang, Z. Zhang, A. Shurbevski, H. Nagamochi, T. Akutsu
2. 発表標題 A method for the inverse QSAR/QSPR based on artificial neural networks and mixed integer linear programming
3. 学会等名 10th International Conference on Bioscience, Biochemistry and Bioinformatics (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Kazuya Haraguchi, Hiroshi Nagamochi
2. 発表標題 A Polynomial-delay Algorithm for Enumerating Connectors under Various Connectivity Conditions
3. 学会等名 The 30th International Symposium on Algorithms and Computation (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Akutsu, H. Nagamochi
2. 発表標題 A Mixed Integer Linear Programming Formulation to Artificial Neural Networks
3. 学会等名 2nd International Conference on Information Science and System (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 K. Haraguchi, Y. Momoi, A. Shurbevski, H. Nagamochi
2. 発表標題 COOMA: A Components Overlaid Mining Algorithm for Enumerating Connected Subgraphs with Common Itemsets
3. 学会等名 WEPA 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔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
研究 分 担 者	Shurbevski A  (SHURBEVSKI Aleksandar)  (70750230)	京都大学・情報学研究科・助教    (14301)	