

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 2 年 6 月 5 日現在

機関番号：17102

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2017～2019

課題番号：17K00307

研究課題名(和文) Ramsey数に関する計算科学的研究

研究課題名(英文) A Computational Approach to Study Ramsey Numbers

研究代表者

藤田 博 (Fujita, Hiroshi)

九州大学・システム情報科学研究所・准教授

研究者番号：70284552

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)：Ramsey数を確定することは離散数学の有名な難問の一つである。その解決の鍵となる Ramsey グラフについて、persymmetry という対称性を有する稀少な例を発見した。この研究においては、計算科学における各種問題解決手法やソルバーの利用が不可欠である。我々が開発した高性能な SAT ソルバーと MaxSAT ソルバーは、幾つかの主要な国際競技会で上位入賞した。また、Ramsey グラフの探索に特化した局所探索ソルバーを開発し、汎用ソルバーの限界を超える探索能力を得た。深層学習を Ramsey グラフ探索のような離散数学の問題に適用する研究の端緒を開いた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

数学の数ある未解決問題の中でも、その解決に向けて計算科学的手段が本質的な役割を果たす場合が少くない。その一例としての Ramsey 数確定に関する問題において、SAT ソルバー等を利用した計算科学的アプローチが実際に奏功することが確認された。本研究の主要な成果である高性能な SAT ソルバーや MaxSAT ソルバー、およびそれらを利用した問題解決手法は、数学に限らず様々な分野で活用され、多くの実践的な問題解決における貢献が期待される。

研究成果の概要(英文)：We have succeeded in finding some rare Ramsey graphs whose adjacency matrices are persymmetric, that are essential for the study of Ramsey numbers whose determination is one of the most famous and difficult problems in discrete mathematics. For this research, it is indispensable to use various methods and problem solvers in computer science. We have developed high performance SAT solvers and MaxSAT solvers, achieving high rankings in some major international competitions. We have also developed local search based solvers specifically designed to search Ramsey graphs, whose performance exceeded the limit of more general purpose solvers. We have also made a beginning of applying deep learning to discrete mathematics problems like search for Ramsey graphs.

研究分野：知能情報学

キーワード：Ramsey number SAT solver

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

(1) Ramsey 数と Ramsey グラフ：離散数学における有名な難問の一つとして Ramsey 数がある。古典的な Ramsey 数は完全グラフの 2 色辺彩色に関するもので、3 以上の任意の自然数 s, t に対して定義され、 $R(s, t)$ と表される。 $R(s, t)$ の値を直接的に求める公式はなく、既知の Ramsey 数は、 $R(3, 3 \sim 9), R(4, 4), R(4, 5)$ のわずか 9 個である。いくつかの未知 Ramsey 数に関しては上下界が知られており、特に $R(5, 5)$ の現在最良の上下界はそれぞれ 49, 43 である。

自然数 N が Ramsey 数 $R(s, t)$ 未満ならば、 $RG(s, t; N)$ で表される Ramsey グラフが存在する。逆に、Ramsey グラフ $RG(s, t; N)$ が与えられたとき、 $N+1$ は Ramsey 数 $R(s, t)$ の一つの下界である。従来、Ramsey 数の下界を改善するために、計算科学の様々な手法が適用されている。例えば、Exoo らは局所探索、焼き鈍し法、遺伝的手法等様々な探索技法を駆使して成果を挙げた。一方、藤田らは主として SAT ソルバーを用い、長らく進捗が停滞していた $R(4, 8)$ や $R(4, 11)$ の下界の更新に成功した。

(2) 問題解決手段

SCSat ソルバー：命題論理の充足可能性判定問題(SAT)は代表的な NP 完全問題であり、理工学における様々な判定問題が SAT に還元されて解かれている。Ramsey グラフの探索も容易に SAT 問題に帰着できる。我々は、Ramsey グラフの探索に適した SAT ソルバーとして SCSat を既に 3 種類開発している。SCSat1 では $RG(4, 8; 57)$ を世界で初めて発見した。SCSat2 では SCSat1 の格段の機能拡張を目指して開発着手されたが未完成である。SCSat3 は SCSat1 の改良版であるが、成果として世界初となる $RG(4, 11; 100)$ を発見した。

MaxSAT ソルバー：SAT ソルバーを拡張した MaxSAT ソルバーは、最適化問題の解決に威力を発揮するものとして盛んに研究されており、我々も独自の高性能ソルバー QMaxSAT を開発し、改良を続けている。Ramsey グラフ探索にも MaxSAT ソルバーを利用可能と考えられる。

EPR ソルバー：一階述語論理(FOL)の定理証明手法は SAT より強力であるが、計算複雑度や自動化の観点からははるかに困難である。そこで、我々は EPR(Effectively PRopositional) と称する技術に着目した。FOL の高度な問題記述能力と SAT の自動的で高効率な求解能力の双方を併せ持つ、謂わば SAT 以上 FOL 未満の実用的な技術である。我々は MGTP と称する EPR ソルバーの研究開発に長年携わってきている。

各種探索技術：我々は、局所探索、タブー探索、焼き鈍し法、遺伝的手法、粒子群最適化などの各種探索技術、およびそれらを併用するハイブリッド探索手法を適用するソルバーを開発してきている。

2. 研究の目的

(1) Ramsey 数の下界更新に寄与する Ramsey グラフを発見する。また、Ramsey グラフの選好的探索に際して有用となる対称性等の特徴を明らかにする。

(2) SAT, MaxSAT, EPR 等を基盤として、大規模な組合せ問題を解くための手法を確立する。具体的には、探索空間を劇的に削減したり、希少な解を選好的に探すような探索手法を開発する。特に MaxSAT ソルバーの高効率化を目指す。

(3) 近年発展著しい深層学習が、Ramsey グラフ探索において如何に効果的なツールの一つとなり得るか見極める。

3. 研究の方法

(1) Ramsey グラフ探索：探索域を大幅に削減できるような対称性を重点的に探す。ソルバーについて、SAT や EPR 以外に局所探索等の従来技術も活用する。

(2) SAT/MaxSAT ソルバー：まず、中核となる SAT ソルバーの改良を行う。次に MaxSAT ソルバーについて、大規模な問題に対応可能とするため、新たな基数制約方式の考案と実装を行い、SAT 符号化の規模に関する弱点を解消する。ベンチマーク問題を用いたチューニングを行った上、国際的な競技会に参加し、上位入賞を狙う。

(3) 深層学習：画像中の目標物を計数するような事例研究を通じて、深層学習による計数能力の機械的獲得の可否を確かめる。その成果を、Ramsey グラフの探索に応用する。

4. 研究成果

(1) Ramsey グラフの発見

persymmetry：Ramsey グラフは、その定義により高い対称性を有することが推定される。実際、隣接行列表現が巡回行列となる極めて対称性の高い Ramsey グラフが多い。しかし、頂点数が Ramsey 数に近づくに従い、一般に巡回行列のものは存在しなくなる。我々は、SCSat ソルバーにより、巡回行列の対称性をわずかだけ破った Ramsey グラフを多く発見してきた。本研究では、巡回行列よりはるかに弱い persymmetry という対称性に着目し、頂点数が Ramsey 数近傍の希少な Ramsey グラフを数多く発見することができた。

ソルバーLS-Ramsey：Ramsey グラフ探索には従来局所探索、タブー探索、焼き鈍し法、遺伝的手法など、様々な最適解探索手法が単独にあるいは組み合わせられて適用されてきている。我々は主に SAT ソルバーを用いて探索を遂行してきたが、グラフ規模の増大とともに、現状の計算リソース(特にメモリ量)では対応が著しく困難となった。他方、局所探索等の従来手法では時間

計算量と引き換えにメモリ量を節約できるというメリットがある。しかし、実探索域が往々にして局所最適解近傍に留まり易いという難点がある。LS-Ramsey においては、単位探索行動は 1 個の命題変数値のフリップ操作である。基本的には全変数のうち、評価関数値の改善が最大（あるいは改善が最小）のものがフリップ対象に選ばれる。ただし、フリップされた変数は、その後ある期間選択の対象から外される。この“不活化期間”を動的に適切に調整することにより、同一解への多数回訪問の回避や局所最適解近傍からの脱出が可能となる。この LS-Ramsey を用いて、persymmetric な Ramsey グラフ $RG(4, 6; 35)$ (図 1) や $RG(5, 6; 57)$ (図 2) の発見に成功した。本研究の目標の一つであった $RG(4, 6; 36)$ の発見には未だ到っていないが、残る単色クリーク数が 7 個の準最適グラフを複数得ており、それらの近傍で Ramsey グラフ発見の可能性が高い。

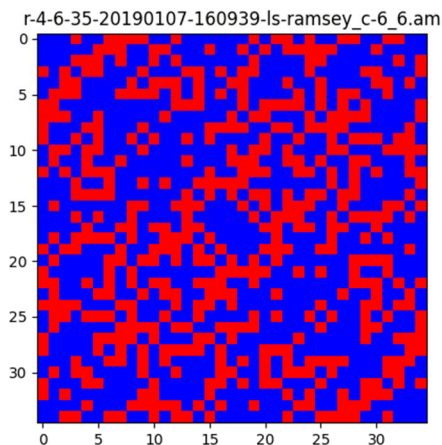


図 1 Ramsey グラフ $RG(4, 6; 35)$

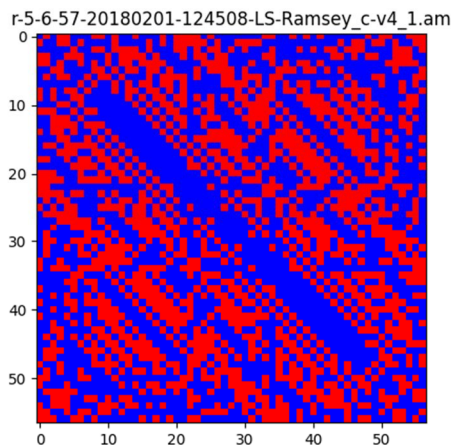


図 2 Ramsey グラフ $RG(5, 6; 57)$

ソルバー DL-Ramsey : 前項の LS-Ramsey の別版ソルバー DL-Ramsey を開発した。局所探索戦略は LS-Ramsey より簡略化されているが、探索能力はほぼ同等である。後述の深層学習のために、学習データ収集を簡便に行う機能を付加している。Python 言語による実装により、汎用の深層学習ツールとの円滑な連携が可能である。

(2) SAT/MaxSAT ソルバー : 基本推論エンジンとしての SAT ソルバーについて、多くの極小矛盾節集合を検出・学習することにより、推論効率の改善を図った。その結果、ベンチマーク問題 165 問における平均実行時間について、改善前の 12.2 秒から改善後は 9.4 秒に短縮されるなど、顕著な効果が確認された。この高速化の結果、2018 年度の国際 SAT 競技会において 10 参加ソルバー中第 2 位という好成績を収めた。

MaxSAT ソルバーについては、剰余計算に基づく混合基数制約符号化方式を新たに導入した。その結果、代表的なベンチマーク問題 767 問に対する規定制限記憶量内での符号化成功数について、改善前の 357 問から改善後は 765 問に増加するなど、顕著な効果が確認された。この改良により、2017 年度の国際 MaxSAT 競技会において 10 参加ソルバー中の第 2 位という好成績を収めた。その後もさらなる改良により、より大規模な問題を格段に効率良く解くことができるようになってきている。

(3) 深層学習 : 2 色辺彩色された N 頂点完全グラフ K_N に対し、それに含まれる単色クリーク数を計数する関数 $MC_{(s,t;N)}(K_N)$ が定義される。この関数の零点となる K_N を求めることが我々の目的であるが、これは極めて困難である。サンプル点での関数値を多数収集し、関数の振る舞いを学習することにより零点を効率よく推定する手法が期待される。それには深層学習に基づく敵対的生成ネットワークが有効と考えられる。初期検討の結果、関数 $MC_{(3,3;5)}$ は完全学習できた。今後、関数 $MC_{(4,6;36)}$ における成果が期待される。

(4) 関連研究

MaxSAT の提携構造形成問題への応用 : マルチエージェント分野における提携構造形成問題に対し、MaxSAT ソルバーを応用した。従来の分岐限定法に基づく手法では負の提携利得が含まれる問題に対して効率が大きく劣化する場合があるのに対し、提案手法ではそのような劣化は生じず、問題の多様性に対してより頑健であるという利点が明らかとなった。

深層学習の顕微鏡画像診断への応用 : Ramsey グラフ中の単色クリーク計数関数の回帰学習を目指す研究の関連で、顕微鏡画像中の細胞数の計数に深層学習を用いる研究を行った。初期検討としての実験の結果、正答率 97.26% のモデルを得た。

< 参考文献 >

藤田 博、越村 三幸、SAT とラムゼー数 ~ 数学の未解決問題への挑戦 ~、情報処理、57 巻、8 号、2016、716--719

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計4件（うち査読付論文 4件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 3件）

1. 著者名 Aolong Zha, Miyuki Koshimura, Hiroshi Fujita	4. 巻 24
2. 論文標題 N-level Modulo-Based CNF encodings of Pseudo-Boolean constraints for MaxSAT	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Constraints	6. 最初と最後の頁 133-161
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/s10601-018-9299-0	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 Aolong Zha, Naoki Uemura, Miyuki Koshimura, and Hiroshi Fujita	4. 巻 1
2. 論文標題 Mixed Radix Weight Totalizer Encoding for Pseudo-Boolean Constraints	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 29th International Conference on Tools with Artificial Intelligence	6. 最初と最後の頁 868-875
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1109/ICTAI.2017.00135	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 Aolong Zha, Miyuki Koshimura, and Hiroshi Fujita	4. 巻 1
2. 論文標題 A Hybrid Encoding of Pseudo-Boolean Constraints into CNF	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Conference on Technologies and Applications of Artificial Intelligence	6. 最初と最後の頁 9-12
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1109/TAAL.2017.15	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3件（うち招待講演 0件/うち国際学会 0件）

1. 発表者名 浅倉 健太, 越村 三幸, 池田 大輔, 藤田 博
2. 発表標題 細胞数カウントに向けたCNNを用いた尿中有形成成分の分類
3. 学会等名 火の国シンポジウム2020
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 浅倉 健太, 越村 三幸, 池田 大輔, 藤田 博
2. 発表標題 CNNを用いた尿中有形成成分の分類の初期検討
3. 学会等名 電子情報通信学会医用画像研究会
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	越村 三幸 (Koshimua Miyuki) (30274492)	九州大学・システム情報科学研究院・助教 (17102)	