

令和 5 年 5 月 25 日現在

機関番号：14301

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2020～2022

課題番号：20K11691

研究課題名(和文) グラフ構造に対する実用的な最適化・列挙アルゴリズムの理論設計と実装開発

研究課題名(英文) Theory design and implementation of practical optimization and enumeration algorithms over graph structure

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) 3,300,000円

研究成果の概要(和文)：グラフ描画において、直線描画と上向き描画を拡張した理論、および、1-平面再埋め込み可能性を導出した。各点にアイテムが与えられたグラフから共通アイテムの集合が極大となる誘導連結部分グラフを列挙する多項式遅延アルゴリズムを設計した。点対比較可能グラフ(PCG)を特定する方法を線形計画法の択一定理と整数計画法への定式化を利用することにより構築した。学習済みの人工ニューラルネットワークを用いて、指定の物性値を有する化学グラフを設計する問題を整数計画問題として定式化を行い、整数計画問題を解いて得られた化学グラフの構造異性体を列挙するアルゴリズムの設計・実装を行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

オペレーションズ・リサーチ(OR)の手法である数理計画法(線形計画法・整数計画法など)とコンピュータサイエンス(CS)の離散構造列挙アルゴリズムを組み合わせることで、グラフ構造の数学的問題を解き、化学グラフ列挙システムを構築した。本研究で示した方法論は、学術的には新しい研究分野の創成につながる可能性がある点で重要である。また、計算機で化合物の分子構造を自動設計するシステムは実装・公開しており、今後利用が広まれば社会的にも大きな影響を与えられよう。

研究成果の概要(英文)：We have obtained a common generalization of straight-line and upward drawings; a theory of 1-plane re-embeddable drawings; a polynomial-delay algorithm for generating all induced connected subgraphs with maximal common item sets in a graph with items on vertices; and a method of finding all PCGs based on an integer programming formulation and an alternative theorem of linear programming. We have also formulated an integer program based method that infers a chemical graph with a desired chemical property using a trained artificial neural network and designed an algorithm for enumerating isomers of the solution of the integer program.

研究分野：離散最適化, グラフ理論, ケモインフォマティクス

キーワード：離散最適化 グラフ理論 アルゴリズム 整数計画法 動的計画法 ケモインフォマティクス

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、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

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数学的に高度な議論の適用が可能になる。しかし一般に、分枝限定法、動的計画法や整数計画法などの汎用的手法を原理的に適用するだけでは、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・ネットワーク構造などを抽出し、構造特性を利用したアルゴリズムを設計することを目指す。

2. 研究の目的

グラフ構造設計、データマイニング、ケモインフォマテクスなど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。この定式化によって、問題の持つ計算の複雑さの解明や、高度な数学的手続きの設計が行えるようになる。しかし、現実問題に現れる離散最適化問題の多くは NP-困難問題である。その解決法として、本研究では、グラフ・ネットワークなどの離散構造上の問題に対して、最適解や実行可能解の列挙を正確に行うことが理論的に保証されたアルゴリズムを主な研究対象とし、a) 計算量の理論的評価、b) 性能の実験的評価、c) 数理計画法ソルバーの利用の三つの観点からアルゴリズムの設計原理、アルゴリズムの実装に関する技法について研究を行う。

3. 研究の方法

本研究では以下の三つの観点から研究を実施する。

(1) 計算量の理論的評価：分枝限定法や動的計画法というアルゴリズムの動作原理に従い、最適化や解の列挙アルゴリズムの設計を行い、計算機科学の観点で、アルゴリズムの計算量の時間計算量・領域計算量の上界を入力サイズ n の関数 $f(n)$ のオーダー $O(f(n))$ として理論的に導く。特に、グラフ連結度、グラフ描画問題、グラフ構造列挙問題に対して厳密アルゴリズムの理論的設計を行う。

(2) 性能の実験的評価：分枝限定法や動的計画法の設計原理に従い、離散最適化や解の列挙アルゴリズムを設計した上で、提案法の有効性を、実装・計算機実験を通して確認する。

(3) 数理計画法ソルバーの利用：高性能なソルバーが開発されている混合整数線形計画法へグラフ・ネットワーク問題や離散最適化問題を定式化する方法を研究する。ソルバーの探索する領域が大きく軽減されるように、同じ離散構造の制約条件を表現するために導入する変数や制約条件の個数のオーダーを減らす方法や不必要な実行可能解を排除するために解の標準形を定義する方法について研究を行う。

4. 研究成果

情報可視化に応用を持つグラフ描画問題において、枝当たりの交差が1回までとなるグラフの平面の埋め込みは1-平面的と言われる。1-平面的でない埋め込みも埋め込み直すことで1-平面的にできることがあり、与えられた埋め込みが1-平面的に再埋め込み可能であるための必要十分条件を求め、これに基づき線形時間の判定・再埋め込みアルゴリズムを設計した。さらに、直線描画と上向き描画の共通の拡張である描画概念を導入し、その描画可能性に対する理論的な研究結果を得ることができ、その結果の一つとして、1-平面的描画は常に上向き描画を持つことを証明した。

各点に属性として幾つかのアイテムが与えられたグラフから共通アイテムの集合が極大となる点の部分集合で連結グラフを誘導するものを列挙する問題はデータマイニングの重要な問題である。この列挙問題に対して多項式遅延アルゴリズムを設計し、さらに提案アルゴリズムがより一般的な枠組みで動作することを証明した。これにより連結性を保存する極大な部分グラフを列挙する多くの問題に対して多項式遅延アルゴリズムの存在が明らかとなった。

生物進化の系統樹の構築に応用を持つ点対比較可能グラフ(Pairwise Comparability Graph)については、与えられたグラフがPCGであるかを判定する方法が知られていない。本研究では、与えられたグラフがPCGであるかを特定するための方法を線形計画法の択一定理と整数計画法への定式化を利用することにより構築し、節点数が8であるPCGをすべて特定することに成功した。また、星型PCGについてはそのグラフ構造の完全な特徴付けを発見し、これに基づき与えられたグラフが星型PCGであるかは判定する多項式時間アルゴリズムを設計した。

ループ付きグラフ、木状化学グラフの列挙は、グラフの同型性を考慮する点で難しい問題であるが、これらに対して分枝限定法よりも有効に働く動的計画法に基づいたアルゴリズムの設計に成功した。特に、木状化学グラフの列挙に関しては、グラフを枝構造の頻度ベクトルに置き換える新規発想に基づくもので、分子構造を推定するシステムにおける最終処理段階で、化学グラフの構造異性体を高速に生成するアルゴリズムの根幹を成すものとなっている。

化合物と構造の間の関係を学習し、これをもとに指定の物性値を有する化学グラフ(分子構造のモデル)を設計する問題を混合整数線形計画問題として定式化を行い、整数計画問題を解いて得られた化学グラフの構造異性体を分枝限定法・動的計画法で列挙するという化合物設計の枠

組みにおいて、いくつかの新しい研究を行った。まず、学習に用いる方法を従来から用いていた人工ニューラルネットワーク以外に、線形回帰、決定木を用いる方法を開発し、対象となる物性によっては、これらの機械学習による方法が優れた学習結果を示すことが認められた。さらに、線形回帰に OR の線形計画法を組み合わせた新しい学習方法として適応線形回帰 (Adjustive Linear Regression) を提案し、多くの物性に対して従来の性能を大きく上回る学習結果を得た。線形回帰、決定木、適応線形回帰は人工ニューラルネットワークを用いるよりも必要となる混合整数線形計画問題が簡単になるという利点がある。混合整数線形計画問題を解いて得られる化学グラフは、物性値や分子構造など所望の条件を満たす答えであるが、この化学グラフからさらに同じ条件を満たす構造異性体を生成する方法を二つ設計した。一つは、木状化学グラフの列挙を高速に行う動的計画法を用いるもので、答えの化学グラフを木状化学グラフに分解し、それぞれの木状構造異性体を生成し、これらを統合する方法である。二つ目は、答えを求めた混合整数線形計画問題に制約を付加することで、出力解の近傍を組織的に探索し、別の答えを効率よく生成する方法である。以上の研究成果に基づき、扱える化学グラフの対象を木構造、単環構造、二環構造、一般構造と順に拡大し、設計能力の高度化を進めることができた。開発した分子構造設計アルゴリズムのプログラムコードは Github でマニュアルとともに公開をし、誰もが利用できるようにしている。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計14件（うち査読付論文 14件 / うち国際共著 2件 / うちオープンアクセス 8件）

1. 著者名 Jianshen Zhu, Naveed Ahmed Azam, Fan Zhang, Aleksandar Shurbevski, Kazuya Haraguchi, Liang Zhao, Hiroshi Nagamochi, Tatsuya Akutsu	4. 巻 19
2. 論文標題 A novel method for inferring chemical compounds with prescribed topological substructures based on integer programming	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 IEEE/ACM Transactions on Computational Biology and Bioinformatics	6. 最初と最後の頁 3233-3245
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1109/TCBB.2021.3112598	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 Naveed Ahmed Azam, Aleksandar Shurbevski, Hiroshi Nagamochi	4. 巻 44
2. 論文標題 On the enumeration of minimal non-pairwise compatibility graphs	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Combinatorial Optimization	6. 最初と最後の頁 2871-2892
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10878-021-00799-x	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 Kazuya Haraguchi, Hiroshi Nagamochi	4. 巻 84
2. 論文標題 Enumeration of support-closed subsets in confluent systems	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Algorithmica	6. 最初と最後の頁 1279-1315
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s00453-022-00927-x	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 F. Zhang, J. Zhu, R. Chiewvanichakorn, A. Shurbevski, H. Nagamochi, T. Akutsu	4. 巻 52
2. 論文標題 A New Approach to the Design of Acyclic Chemical Compounds Using Skeleton Trees and Integer Linear Programming	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Applied Intelligence	6. 最初と最後の頁 17058-17072
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10489-021-03088-6	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 S. Hong, H. Nagamochi	4. 巻 892
2. 論文標題 Re-embedding a 1-Plane Graph for a Straight-line Drawing in Linear Time	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Theoretical Computer Science	6. 最初と最後の頁 132-154
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.tcs.2021.09.015	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 N. A. Azam, J. Zhu, Y. Sun, Y. Shi, A. Shurbevski, L. Zhao, H. Nagamochi, T. Akutsu	4. 巻 16
2. 論文標題 A Novel Method for Inference of Acyclic Chemical Compounds with Bounded Branch-height Based on Artificial Neural Networks and Integer Programming	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Algorithms for Molecular Biology	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) 10.1186/s13015-021-00197-2	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 N. A. Azam, Aleksandar Shurbevski, H. Nagamochi	4. 巻 303
2. 論文標題 A Method for Enumerating Pairwise Compatibility Graphs with a Given Number of Vertices	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Discrete Applied Mathematics	6. 最初と最後の頁 171-185
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.dam.2020.08.016	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 永持 仁, 朱 見深, AZAM Naveed Ahmed, 原口 和也, 趙 亮, 阿久津 達也	4. 巻 20
2. 論文標題 機械学習QSARの整数計画法に基づく逆解析法	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Computer Chemistry	6. 最初と最後の頁 106-111
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2477/jccj.2021-0030	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 Yu Shi, Jianshen Zhu, Naveed Ahmed Azam, Kazuya Haraguchi, Liang Zhao, Hiroshi Nagamochi, Tatsuya Akutsu	4. 巻 22
2. 論文標題 An inverse QSAR method based on a two-layered model and integer programming	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 International Journal of Molecular Sciences	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) 10.3390/ijms22062847	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 Yuhei Fukui, Aleksandar Shurbevski, Hiroshi Nagamochi	4. 巻 28
2. 論文標題 Group strategy-proof mechanisms for shuttle facility games	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Information Processing	6. 最初と最後の頁 976-986
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2197/ipsjip.28.976	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 Naveed Ahmed Azam, Aleksandar Shurbevski, Hiroshi Nagamochi	4. 巻 22
2. 論文標題 Enumerating tree-like graphs and polymer topologies with a given cycle rank	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Entropy	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) 10.3390/e22111295	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 Mingyu Xiao, Hiroshi Nagamochi	4. 巻 82
2. 論文標題 Characterizing star-PCGs	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Algorithmica	6. 最初と最後の頁 3066-3090
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s00453-020-00712-8	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 Naveed Ahmed Azam, Aleksandar Shurbevski, Hiroshi Nagamochi	4. 巻 22
2. 論文標題 An efficient algorithm to count tree-like graphs with a given number of vertices and self-loops	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Entropy	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) 10.3390/e22090923	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 Jianshen Zhu, Chenxi Wang, Aleksandar Shurbevski, Hiroshi Nagamochi, Tatsuya Akutsu	4. 巻 13
2. 論文標題 A novel method for inference of chemical compounds of cycle index two with desired properties based on artificial neural networks and integer programming	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Algorithms	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) 10.3390/a13050124	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10件 (うち招待講演 0件 / うち国際学会 10件)

1. 発表者名 Jianshen Zhu, Naveed Ahmed Azam, Shengjuan Cao, Ryota Ido, Kazuya Haraguchi, Liang Zhao, Hiroshi Nagamochi and Tatsuya Akutsu
2. 発表標題 Molecular design based on integer programming and quadratic descriptors in a two-layered model
3. 学会等名 The 21st International Conference on Bioinformatics (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 J. Zhu, K. Haraguchi, H. Nagamochi, T. Akutsu
2. 発表標題 Adjustive Linear Regression and Its Application to the Inverse QSAR
3. 学会等名 The 13th International Conference on Bioinformatics Models, Methods and Algorithms (BIOINFORMATICS 2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1 . 発表者名 N. A. Azam, J. Zhu, K. Haraguchi, L. Zhao, H. Nagamochi, T. Akutsu
2 . 発表標題 Molecular Design Based on Artificial Neural Networks, Integer Programming and Grid Neighbor Search
3 . 学会等名 The IEEE International Conference on Bioinformatics and Biomedicine (BIBM2021) (国際学会)
4 . 発表年 2021年

1 . 発表者名 K. Tanaka, J. Zhu, N. A. Azam, K. Haraguchi, L. Zhao, H. Nagamochi, T. Akutsu
2 . 発表標題 An Inverse QSAR Method Based on Decision Tree and Integer Programming
3 . 学会等名 The 17th International Conference on Intelligent Computing (国際学会)
4 . 発表年 2021年

1 . 発表者名 J. Zhu, N. A. Azam, K. Haraguchi, L. Zhao, H. Nagamochi, T. Akutsu
2 . 発表標題 An Improved Integer Programming Formulation for Inferring Chemical Compounds with Prescribed Topological Structures
3 . 学会等名 The 34th International Conference on Industrial, Engineering & Other Applications of Applied Intelligent Systems (IEA/AIE 2021) (国際学会)
4 . 発表年 2021年

1 . 発表者名 Naveed Ahmed Azam, Jianshen Zhu, Ryota Ido, Hiroshi Nagamochi, Tatsuya Akutsu
2 . 発表標題 Experimental results of a dynamic programming algorithm for generating chemical isomers based on frequency vectors
3 . 学会等名 The Fourth International Workshop on Enumeration Problems and Applications (国際学会)
4 . 発表年 2020年

1 . 発表者名 Seok-Hee Hong, Hiroshi Nagamochi
2 . 発表標題 Path-monotonic upward drawings of plane graphs
3 . 学会等名 The 26th International Computing and Combinatorics Conference (国際学会)
4 . 発表年 2020年

1 . 発表者名 Naveed Ahmed Azam, Aleksandar Shurbevski, Hiroshi Nagamochi
2 . 発表標題 On the enumeration of minimal non-pairwise compatibility graphs
3 . 学会等名 The 26th International Computing and Combinatorics Conference (国際学会)
4 . 発表年 2020年

1 . 発表者名 Ren Ito, Naveed Ahmed Azam, Chenxi Wang, Aleksandar Shurbevski, Hiroshi Nagamochi, Tatsuya Akutsu
2 . 発表標題 A novel method for the inverse QSAR/QSPR to monocyclic chemical compounds based on artificial neural networks and integer programming
3 . 学会等名 The 21st International Conference on Bioinformatics & Computational Biology (国際学会)
4 . 発表年 2020年

1 . 発表者名 F. Zhang, J. Zhu, R. Chiewvanichakorn, A. Shurbevski, H. Nagamochi, T. Akutsu
2 . 発表標題 A new integer linear programming formulation to the inverse QSAR/QSPR for acyclic chemical compounds using skeleton trees
3 . 学会等名 The 33rd International Conference on Industrial, Engineering and Other Applications of Applied Intelligent Systems (国際学会)
4 . 発表年 2020年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 永持仁 (分担執筆)	4. 発行年 2023年
2. 出版社 技術情報協会	5. 総ページ数 657
3. 書名 ケモインフォマティクスにおけるデータ収集の最適化と解析手法 (第6章 化学物質・材料設計への活用事例 6節「機械学習と離散最適化に基づく新規物質設計」)	

〔産業財産権〕

〔その他〕

分子構造設計アルゴリズムに開発したプログラムコードの公開サイトGitHub https://github.com/ku-dml/mol-Infer
--

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 (Aleksandar Shurbevski) (70750230)	京都大学・情報学研究科・助教 (14301)	削除

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関		
オーストラリア	シドニー大学		
中国	電子科学技術大学		