様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９－１、Ｚ－１９　（共通）

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

令和　６ 年　６ 月 １２ 日現在

機関番号：６２６１５
研究種目：基盤研究(C)（一般）
研究期間：2021～2023
課題番号：２１Ｋ１２０２３

研究課題名（和文）グラフニューラルネットワークを用いた高速SATソルバの研究開発

研究課題名（英文）Development of SAT Solvers by Graph Neural Networks

研究代表者
薗部　知大（Sonobe, Tomohiro）

国立情報学研究所・ビッグデータ数理国際研究センター・特任研究員

研究者番号：５０７４７２６９

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　1,500,000円

研究成果の概要（和文）：充足可能性問題(SAT問題)は計算機科学における重要な問題であり、この問題を解くプログラムであるSATソルバは、その性能の高さから実世界の問題を解くために使用されている。本研究では、機械学習の手法のうち、SAT問題と親和性が高いグラフ構造を用いた学習が可能なグラフニューラルネットワークを用いて、SATソルバの性能向上を一部の問題で達成した。

研究成果の学術的意義や社会的意義
充足可能性問題は回路検証、プログラムのバグの発見、ニューラルネットワークの検証、数学の定理証明などの、様々な現実世界の問題に変換可能であり、それらの問題をSATソルバで解くことで実用的な時間で解の発見が可能であることが知られており、高速化が活発に行われている。本研究では、グラフニューラルネットワークを用いて、特定の問題に対してSATソルバの高速化を実現した。

研究成果の概要（英文）：The satisfiability problem (SAT problem) is known as an important problem in computer science. To solve SAT problems, the SAT solvers are developed and used to tackle real-world problems. The research aims to enhance SAT solvers by leveraging Graph Neural Networks (GNNs), which are suitable for the graph structure of SAT instances. The proposed method shows good performance on specific families of SAT problems.

研究分野：SATソルバ

キーワード：SATソルバ　探索

様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９－１、Ｚ－１９（共通）

１．研究開始当初の背景

充足可能性問題(Satisfiability problem、SAT 問題)とは、真偽の二値を取る Boolean 変数から構成される論理式に対して、式全体を真にするような変数割り当てが存在するか判定する問題であり、計算機科学における古典的な問題として知られている。SAT ソルバは SAT 問題を解くためのプログラムであり、これまでに精力的に研究開発が行われ、回路検証や暗号の解析などの現実世界の様々な問題を SAT 問題に帰着させ、SAT ソルバを用いて実用的な時間でこれらの問題を解くことが可能な水準に達しており、現在も高速化が進められている。

SAT 問題では、Boolean 変数の正負の出現をリテラル(literal)と呼び、リテラルが論理和(OR)で連結された節(clause)をもとに、複数の節をすべて論理積(AND)で連結した乗法標準形(Conjunctive Normal Form, CNF)と呼ばれる形式で一般的に表現される。節はリテラルが論理和で結合されているため、節を真にするためには内部のリテラルのうち最低一つを真にする必要がある。また、CNF は全ての節が論理積で結合されているため、CNF を真にするためには全ての節を真にする必要がある。

SAT ソルバの探索において、ソルバはその探索の過程で探索に重要な影響を及ぼすと考えられる変数や節を特定していき、重要な変数に対して優先的に値を割り振っていくことで探索を進める。現実世界の問題から派生する SAT 問題には、特定の変数に値を割り振ると残りの部分問題が比較的容易に解けるなどの(backbone や backdoor と呼ばれる)、特徴的な構造が備わっている場合がある。実際に、SAT 問題を、変数を頂点、同一節内の変数同士を結ぶ辺としたグラフとして表現したときに、特定の変数間に辺が密に存在するようなクラスタ構造の存在が確認されている。このような重要と考えられる変数や節を、探索を開始する前に特定ができれば、高速な探索の実現が可能であると考えられる。しかし、そのような結果的に探索中に判明する重要な変数を、探索前に効率的かつ高速に発見することは困難であることが知られている。そこで、機械学習の手法を用いることで、それらの処理を効果的に行うことが期待できる。実際に、機械学習の手法を SAT ソルバに応用した研究はいくつか存在し、中でも[1]はグラフニューラルネットワークを用いて重要な変数を予測し、その予測結果をソルバの変数選択処理に活用することで性能向上を実現している。

研究代表者は、これまで高速な SAT ソルバの研究開発に従事し、主に問題の構造に着目した手法を逐次・並列 SAT ソルバで提案し、高速化を実現してきた。他にも、効率的なグラフアルゴリズムの提案や、グラフニューラルネットワークの構造に関する研究に従事してきた。それらの経験を活用して、SAT 問題のグラフ構造を直接利用可能なグラフニューラルネットワークを用いて、既存の研究とは異なる視点から SAT ソルバの高速化を実現可能と考えられる。

２．研究の目的

与えられた CNF を真にするような変数への値割り当てが存在する場合、対象の CNF は充足可能(satisfiable)と呼び、逆にそのような変数割り当てが存在しない場合は充足不可能(unsatisfiable)と呼ぶ。充足不可能な CNF の場合、対象の CNF に含まれる節の集合の中で、充足不可能な直接の原因となる節集合(すなわち融合法を用いて空となる節を導出可能な節集合)を特定することが可能であり、そのような節集合は unsatisfiable core (UNSAT core)と呼ばれる。つまり、対象の CNF が充足不可能な時、この UNSAT core に該当する節集合だけからなる CNF に探索を行うことができれば、よりサイズの小さい問題を扱うことができ、高速な探索が見込める。しかし、UNSAT core 自体を求めること自体が困難であることが知られているため、探索の開始前に厳密な core を求めることは難しい。そこで、機械学習の手法を用いることで、core に該当する節の予測が可能であることに着目した。

CNF は変数を頂点として、同一の節内に出現する変数同士を結ぶ辺とするグラフによる表現が可能であり、現実世界の問題から派生する SAT 問題の中には、特定の変数同士が密に連結するクラスタ構造が内在することが知られていて、問題に特徴的な構造が備わっている場合がある。そこで、データのグラフ構造を直接的に捉えることが可能なグラフニューラルネットワークを用いることで、UNSAT core に該当する節の予測が可能であると考えた。その出力をもとに、SAT ソルバに対して事前に探索に役立つ情報を与え、SAT ソルバの高速化を目指す。具体的には、節を頂点としたグラフを構築し、各頂点のラベルを UNSAT core に含まれる節かどうかの二値(0 or 1)として、節に該当する頂点のラベルを学習及び予測させるグラフニューラルネットワークを構築する。その後、その予測値を元に、より core に含まれる可能性が高いと予測された節から順に CNF を構築し、元の問題における解が得られるまで incremental に探索を行う。

３．研究の方法

最初に、対象の CNF から、節を頂点、同一の変数を含む二つの節に該当する頂点間に辺を張るグラフ(Clause Incidence Graph, CIG)を構築する。各頂点のラベルは二値であり、1 なら該当する節が UNSAT core に含まれ、0 なら含まれないことに対応する。各頂点の特徴量は各次元が

二値から構成されるn次元ベクトルで(今回はn=300で固定)、各次元i(1 <= i <= n)は対応する節において変数iが含まれていれば1、そうでなければ0となる。このデータをもとに、グラフニューラルネットワーク(GNN)の訓練を行う。GNNは各頂点に対して二次元の予測値を出力し、最終層の出力に対してソフトマックス関数を適用することでその値を正規化する。頂点 v に対して最終的に得られる二次元の値をそれぞれS_v,0 と S_v,1とすると、最終的に、頂点vに対してX_v = S_v,1 – S_v,0というスコアを算出する。直感的にこの値は、ラベルが1(対応する節がUNSAT coreに該当)と予測し、ラベルが0であると予測しないほど高い値となる。Xを各頂点(該当する各節)に対して算出し、この値をもとに節を降順にソートする。先頭の節ほどよりUNSAT coreと予測されやすいものを表す。

続いて、SAT ソルバを用いて CNF を解かせる際に、Counterexample Guided Abstraction Refinement (CEGAR)と呼ばれる手法を用いる。CEGARでは元の問題に含まれる節集合の部分集合から構成される緩和されたCNFから開始し、SATソルバを複数回実行することで最終的な解を得る手法である。節の部分集合から構成されるCNFをSATソルバに解かせ、もし充足不可能と判定されればその時点で残りの節を加えることなく充足不可能と断定できる。つまり、理想的には開始時の節の部分集合がUNSAT coreであれば、全ての節を対象としたCNFではなく、よりサイズの小さいCNFを解くことで充足不可能と判定できる。逆に充足可能と判定された場合は、対応する変数割り当てが元のCNFの解となるのであれば、その解がそのまま最終的な解となり、そうでなければまだ加えられていない節を新たに加えて、再びSATソルバで解の探索を行う。この手順を繰り返し、最終的な解を得る。本研究では、CEGARにおける緩和された部分問題の生成に、上述の GNN から出力された節のスコア X をもとに行う。具体的には、各節をスコア X の値を元に降順にソートし、先頭から半分の節を現在のCNFの節の集合(Cとする)に、残りの半分を今後加える節の集合(Rとする)として、Cを更新する際はRの先頭半分を加え、Rの残りの半分を新たなRとして順次Cに対する解を探索する。使用するSATソルバは、元の問題に新たに節が加えられた問題に対する探索を複数回実行するため、incremental solvingに対応したものを使用する。Incremental solvingでは、直前までの探索から得られた情報(学習した節など)をそのまま次の探索に活用するため、CEGARによる解の探索と親和性が高い。

４．研究成果

上述の手法の成果を確かめるために、計算機を用いて実験を行った。計算機は CPU が Intel Core i9-10980XE、256 GBのRAM、GPUはGeForce RTX 3090、OSはUbuntu 20.04、CUDA言語のバージョン11.3を備えたものを使用した。

使用する GNN として Jumping-Knowledge 接合を加えた二層の Graph Isomorphism Network (GIN)を採用し、隠れ層の特徴ベクトルの次元を32とした。訓練には変数の数を100から300までのランダム生成した5000個のCNFを使用し(変数と節の比を5として作成し、全て充足不可能な問題)、各CNFにおける頂点のラベルはSATソルバに解かせることで決定する。このデータを学習データとして、学習率を0.02、ドロップアウト率を0.5、学習のエポック数を100としてAdam法を用いて訓練を行った。実装にはPython言語バージョン3.9.7とPyTorch Geometric バージョン 2.0.4を用いた。

SAT ソルバの実行に関して、incremental solving に対応した Python 言語から利用可能なPySAT バージョン 0.1.8.dev9 を用いた。SAT ソルバは、PySAT から使用可能なソルバの中からMapleLCMDistChronoBTとGlucose 4.2を採用した。使用するベンチマーク問題として、人工的に生成可能で、変数の数が300個以内でかつ瞬時には解けない充足不可能な問題である、鳩の巣原理とラムゼーの定理をSAT問題に変換したものを採用した。これらの問題は、様々な問題を作成可能なツールである CNFGen を用いて生成した。各 CNF に対する処理時間の上限を 5000 秒とし、5000秒以上かけて解けなかったものはTime Over (TO)とみなす。

図1と2に鳩の巣原理とラムゼー定理のCNFに対する実験結果を示す。図中の列は左からそれぞれ、varsが変数の総数、clausesが節の総数、それ以降の6列は各ソルバの処理時間を示している。MがMapleLCMDistChronoBT(以下、Maple)でGがGlucose 4.2を示し、「+ m」は本研究の提案手法を使用したもので、「+ r」は提案手法で各節に付与するスコアXを乱数にしたものである。紙面の都合上、6種のソルバ全てで100秒以内に解けたものと制限時間内に解けなかったものは省略している。鳩の巣原理では、ランダムな手法は Maple の性能を向上させているが、Glucoseにはほぼ効果がなかった。一方、提案手法はMapleでは4問、Glucoseでは3問多く解けている。ラムゼーの定理では、ランダムな手法はMapleもGlucoseも性能を大きく下げてしまっているが、提案手法はMapleでは多くのCNFに対して処理時間の短縮に成功し、Glucoseは3問多く解くことが可能になった。CEGARでは、元の問題をそのまま解くのと比べてソルバを実行する回数が増えるため、その分のオーバーヘッドがかかるが、GNNを用いて適切に追加する節の順番を構築することで、そのオーバーヘッド以上に処理時間の短縮が可能であることを示すことができた。

[1] D. Selsam, N. Bjorner. Guiding high-performance SAT solvers with unsat-core predictions. In Proceedings of the 22nd International Conference on Theory and Applications of Satisfiability Testing, pp. 336–353, 2019.

図 1. 鳩の巣原理問題に対する実験結果

vars	clauses	M	M+ m	M+ r	G	G+ m	G+ r
110	561	0.74	30.59	21.47	126.91	117.71	133.38
120	672	0.81	47.74	45.74	371.32	164.99	191.47
143	871	2.81	139.77	259.55	4649.31	3411.10	3451.84
132	738	4.02	91.57	67.33	1094.35	2664.49	1229.29
154	1015	4.76	152.98	180.91	4563.32	3590.34	TO
130	793	73.05	40.22	64.53	237.53	174.07	477.71
140	924	77.42	74.30	65.57	430.58	358.77	459.66
150	1065	96.13	53.38	89.84	453.51	251.02	516.30
160	1216	113.78	130.57	129.72	349.27	240.81	352.08
156	949	123.39	593.50	561.74	TO	TO	TO
170	1377	128.15	114.77	145.71	346.19	381.32	687.60
165	1170	1007.61	372.70	1019.73	TO	1849.93	TO
176	1336	1691.67	310.92	667.95	TO	3342.48	TO
187	1513	2345.21	292.32	1727.49	TO	1389.69	TO
168	1106	TO	2208.52	2145.21	TO	TO	TO
180	1275	TO	1846.09	3760.63	TO	TO	TO
192	1456	TO	2127.14	TO	TO	TO	TO
204	1649	TO	4757.85	TO	TO	TO	TO

図 2. ラムゼーの定理問題に対する実験結果

vars	clauses	M	M+ m	M+ r	G	G+ m	G+ r
171	4845	0.75	1.11	29.37	0.08	0.12	927.51
190	5985	1.21	1.12	1605.75	0.09	0.10	2915.29
210	7315	1.15	0.98	301.97	0.06	0.07	TO
231	8855	1.05	1.31	1305.39	0.09	0.11	TO
253	10626	1.13	1.27	1142.41	0.07	0.08	4881.76
276	12650	1.17	1.04	229.35	0.09	0.08	TO
300	14950	1.04	0.97	414.94	0.07	0.07	TO
91	2366	884.20	806.31	TO	4489.39	TO	TO
105	3458	654.99	225.78	547.97	TO	2833.58	3847.70
120	4928	1338.75	967.02	TO	TO	TO	TO
136	6868	894.89	425.49	TO	TO	4789.32	TO
153	9384	1120.60	243.60	TO	TO	TO	TO
171	12597	699.99	155.79	TO	TO	TO	TO
190	16644	1131.59	612.36	TO	TO	TO	TO
210	21679	1012.25	95.05	TO	TO	1141.46	TO
231	27874	988.05	1236.08	TO	TO	TO	TO
253	35420	1456.57	331.45	TO	TO	3719.25	TO
276	44528	802.75	889.78	TO	TO	TO	TO
300	55430	44.39	697.32	TO	TO	TO	TO

５．主な発表論文等

〔雑誌論文〕　計1件（うち査読付論文　1件／うち国際共著　0件／うちオープンアクセス　1件）

１．著者名 Sonobe Tomohiro	４．巻 15
２．論文標題 An Experimental Survey of Extended Resolution Effects for SAT Solvers on the Pigeonhole Principle	５．発行年 2022年
３．雑誌名 Algorithms	６．最初と最後の頁 479～479
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.3390/a15120479	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0件

〔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

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