



## 離散数理分野

教授 永持 仁

講師 趙 亮

助教 福永 拓郎

博士課程3年 1名

博士課程2年 3名

博士課程1年 1名

修士課程2年 4名

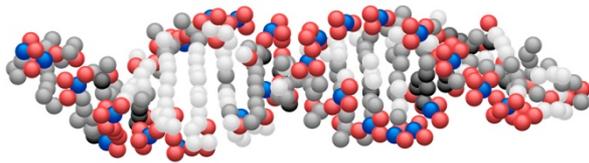
修士課程1年 5名

秘書 1名

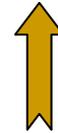
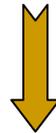
# 離散数学の問題の複雑さの解明とアルゴリズムの開発

## 応用

工学システム, 生産システム, 経営システム,  
コンピュータネットワーク, バイオインフォマティクス...



モデル化



問題解決手法



## 離散数学・組合せ最適化

グラフ・ネットワーク, ネットワーク設計, 資源配分,  
スケジューリング, 配送計画, ゲノム解析

アルゴリズムの開発

データ構造, 計算量評価, ...



問題の複雑さの解明

計算理論, NP困難性, ...

# 現在の研究テーマ

アルゴリズム開発のための理論的枠組み

多面体理論, 双対性, マトロイド, グラフのカット構造, 問題の変換・縮小手法, NP-困難性

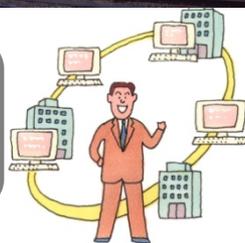
グラフ・ネットワーク連結度問題  
グラフ分割・ネットワーク設計



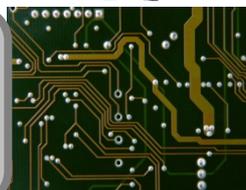
配送計画・スケジューリング問題  
パケットフィルタリング



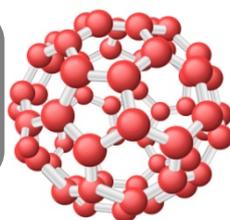
汎用問題ソルバー  
MAX2SAT, 集合被覆問題



グラフ・図形レイアウト  
平面グラフの描画, 平面領域分割  
矩形・非凸多角形3Dパッキング



化学物質のグラフ構造推定問題



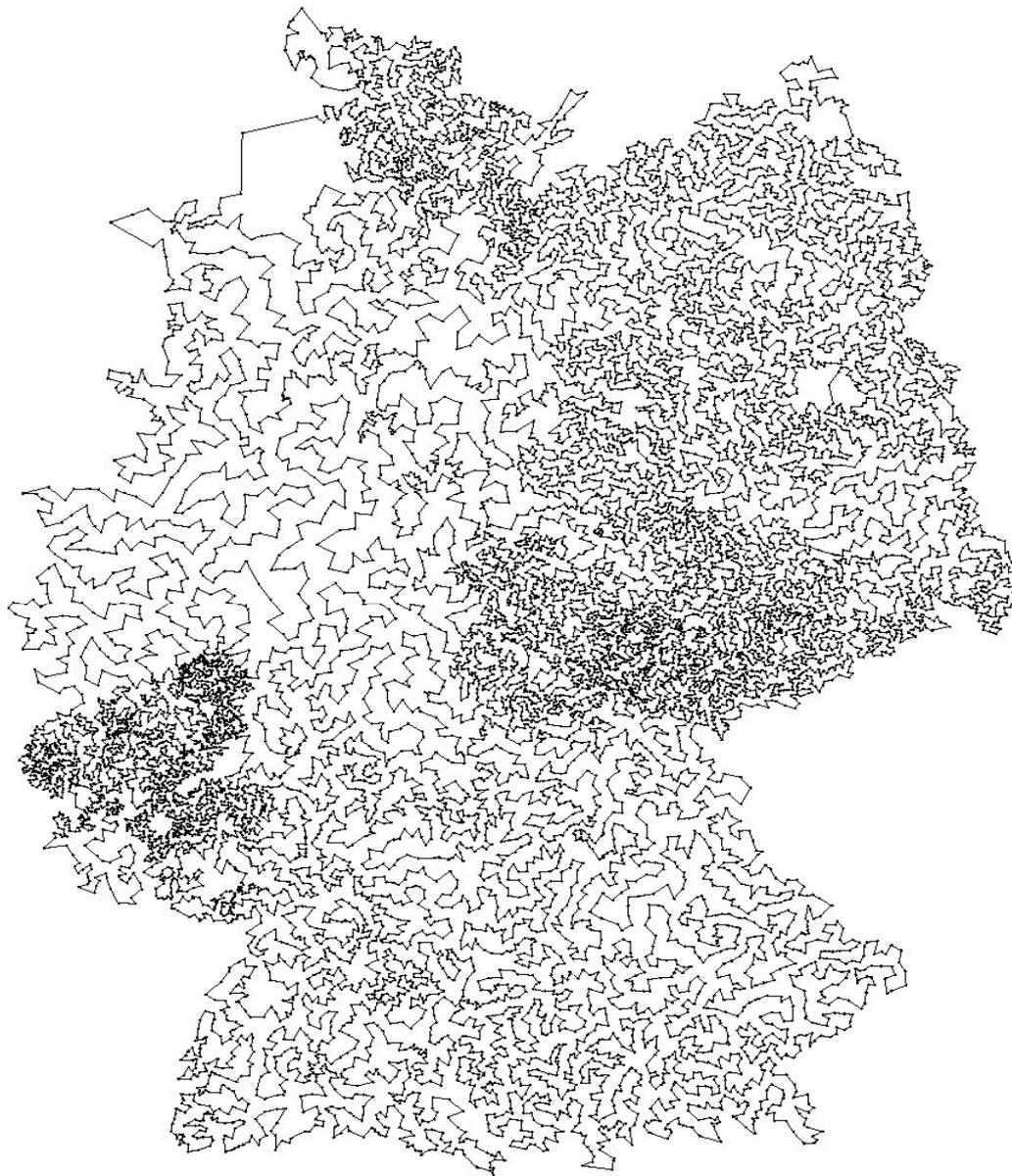
多項式時間  
アルゴリズム

精度保証つき  
近似アルゴリズム

分枝限定法

メタヒューリスティクス

# 巡回セールスマン問題



- 各目的地を一度ずつ訪問
- 総移動距離を最小化
- ドイツ15112都市の例
- 左図は最適解
- <http://www.tsp.gatech.edu/>

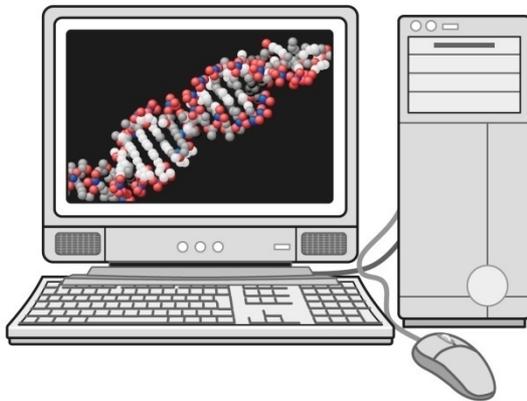
# 化学物質のグラフ構造推定問題

H	O	C	H-H	H-O	H-C	O-O	O-C	C-C
4	1	2	0	0	4	0	2	1

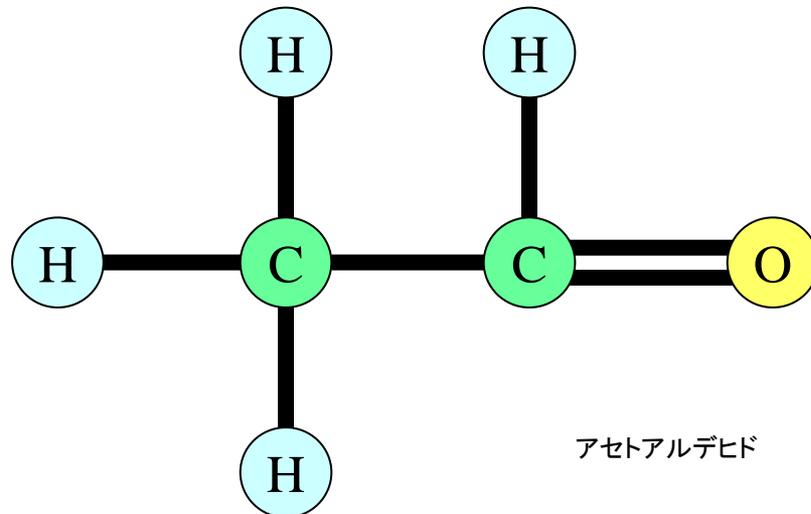
原子の接続要求条件



実現性の判定  
(多項式アルゴリズムの発見)



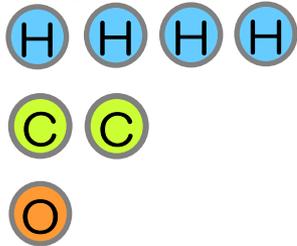
新薬開発への応用



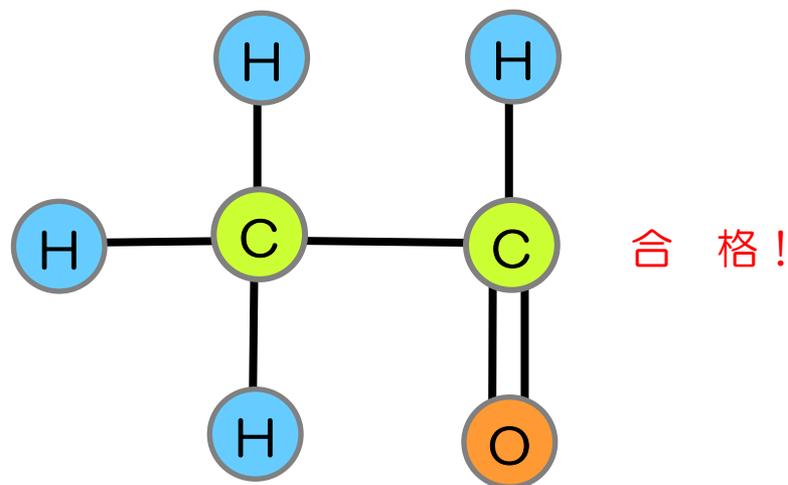
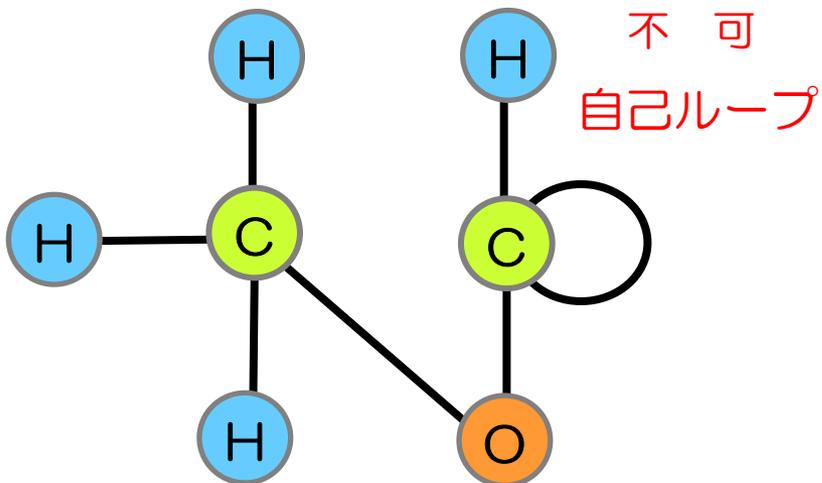
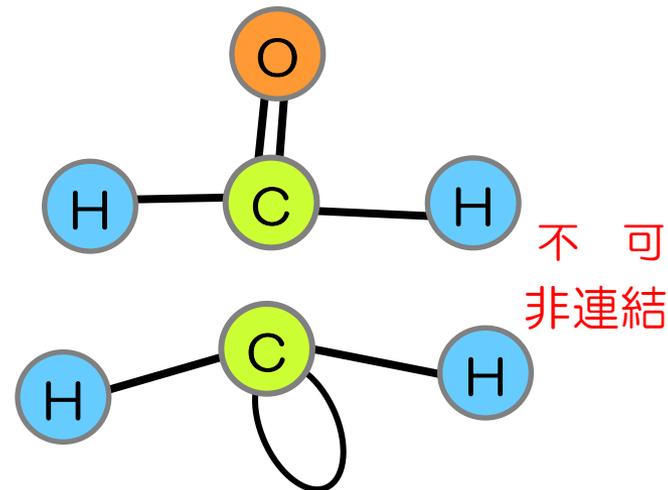
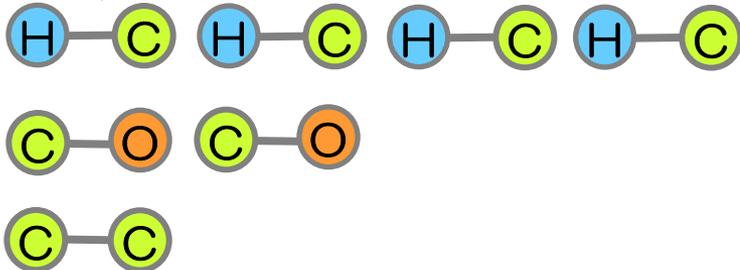
# 化合グラフの構造推定

この通りの組み合わせをもつ化合物は存在するか？

7 節点

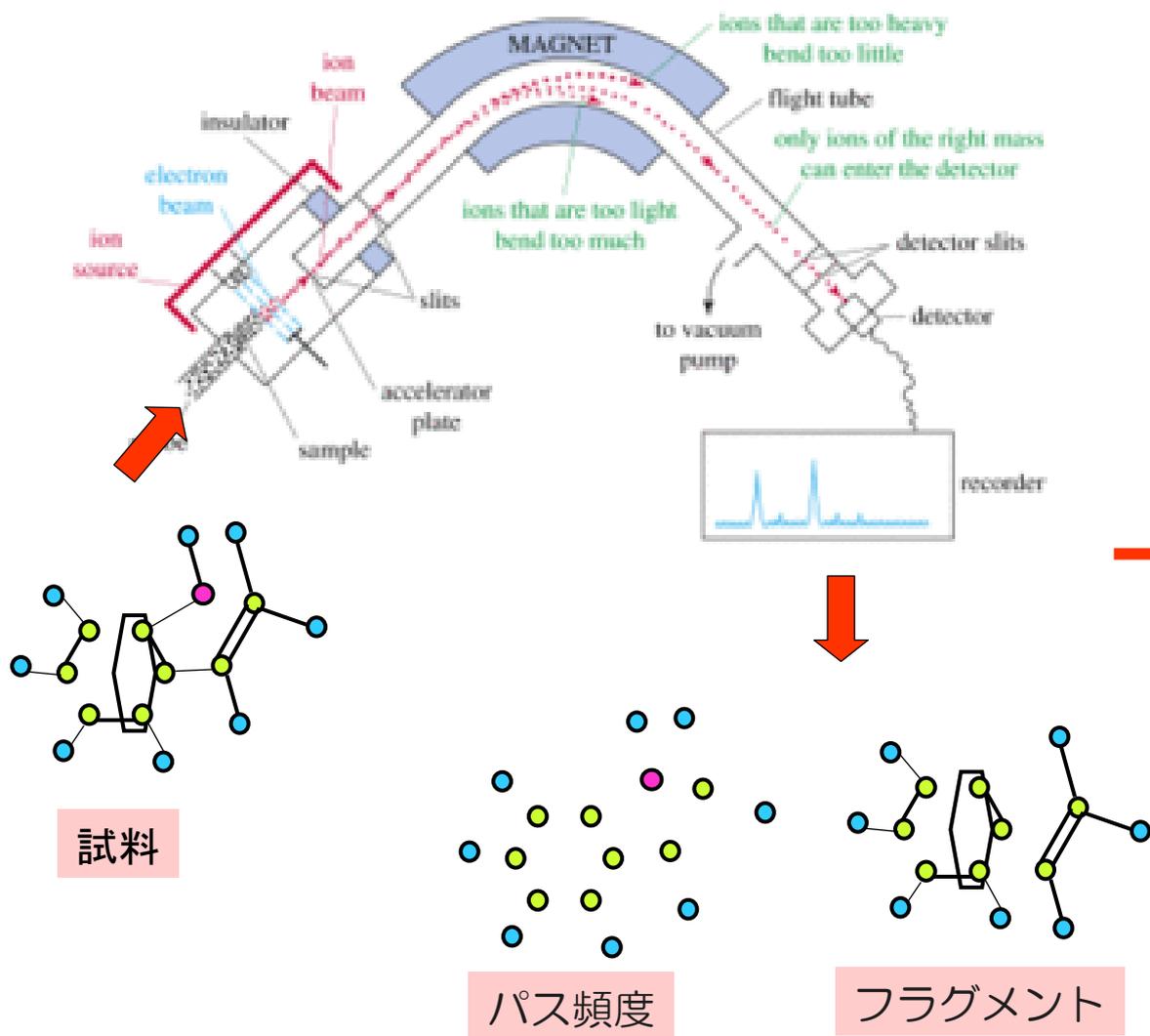


7 本の枝

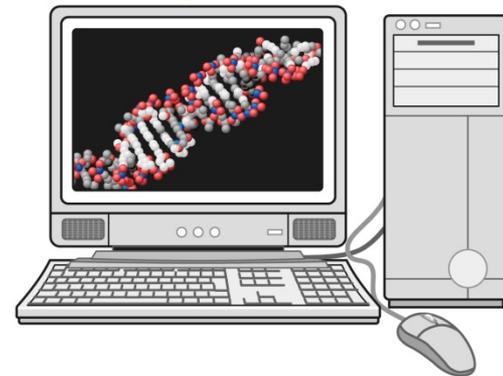
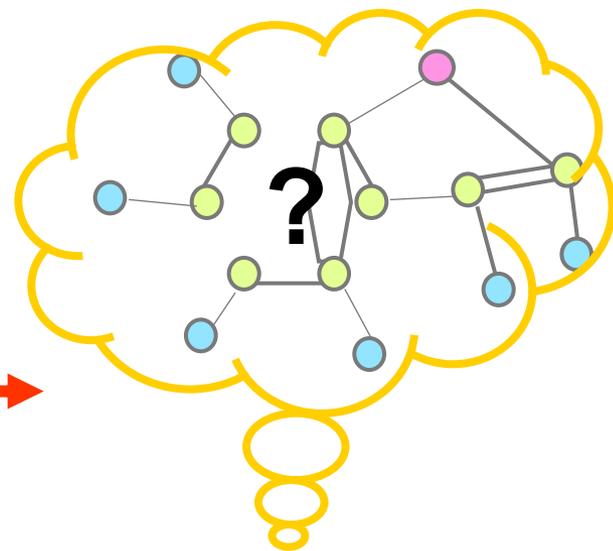


# 逆問題: パス頻度, フラグメントからの化学グラフ推定

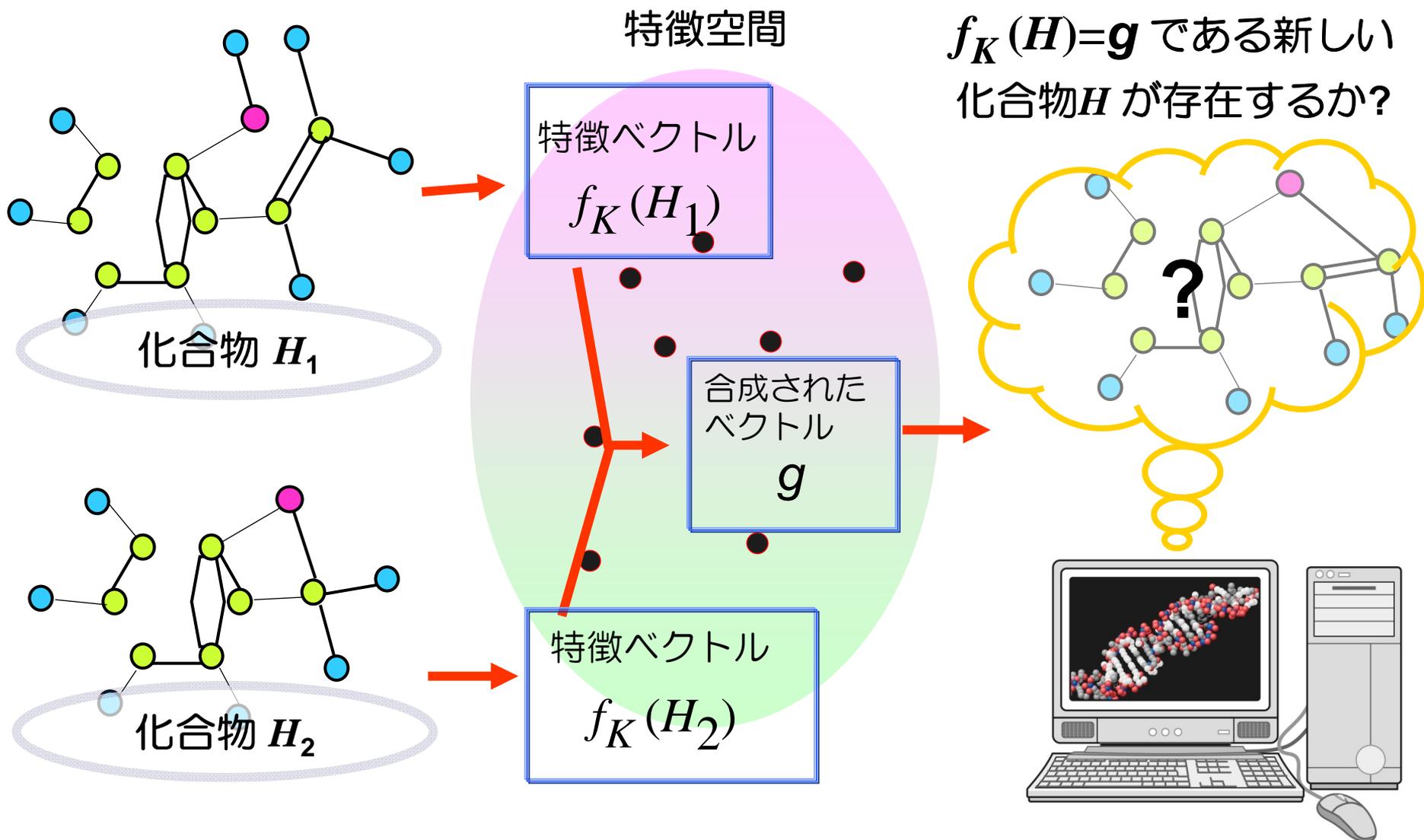
## 質量分析装置 (Mass Spectrum)



$f_K(H)=g$  である  
化合物  $H$  の構造は?



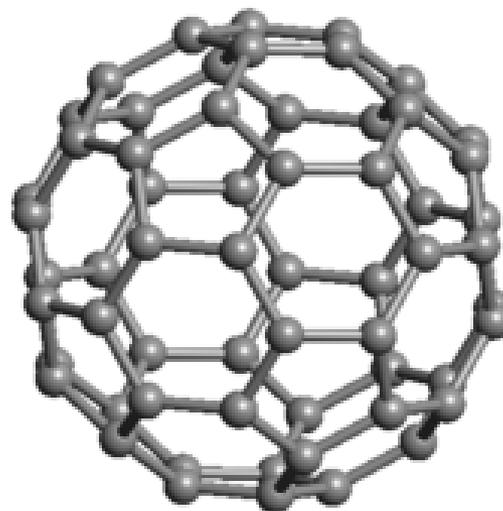
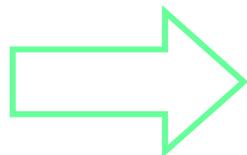
# 逆問題: パス頻度からの化学グラフ推定



# 未知の化合物の発見に向けて



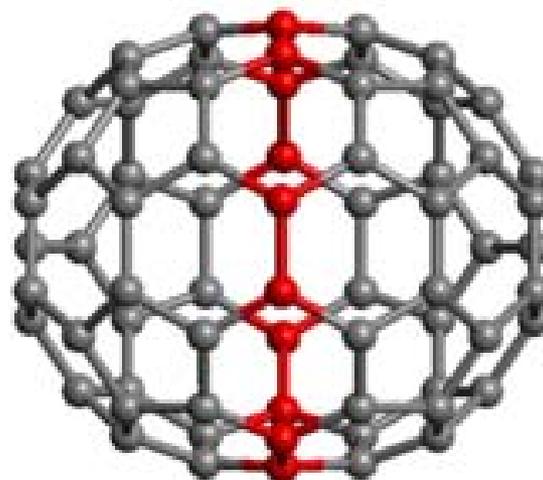
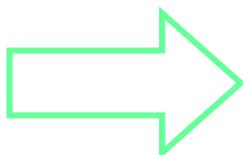
60個の炭素原子



fullerene C60



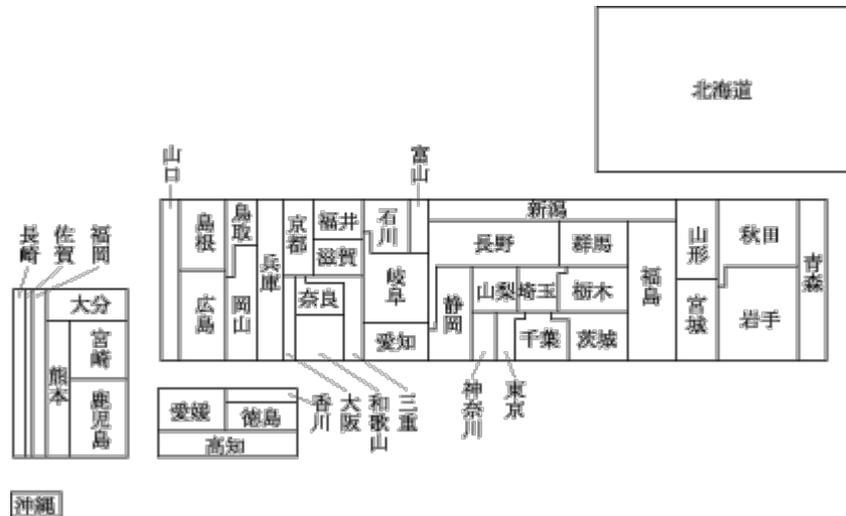
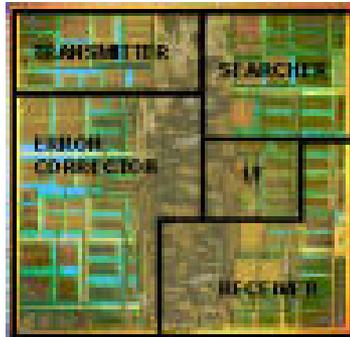
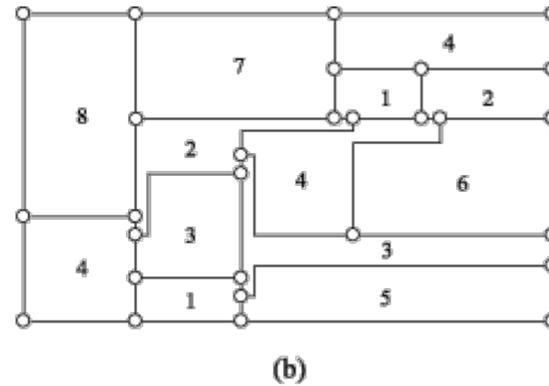
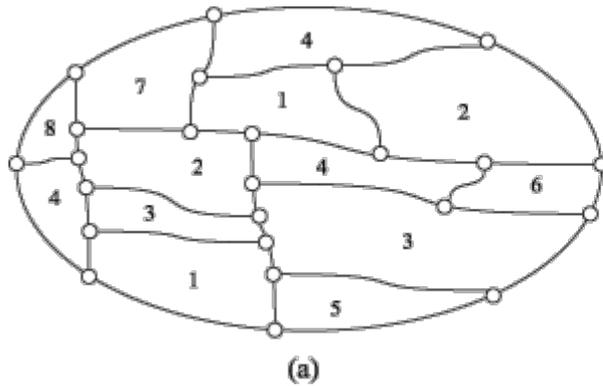
70個の炭素原子



fullerene C70

# グラフ描画

## 内面の面積指定付き描画アルゴリズム



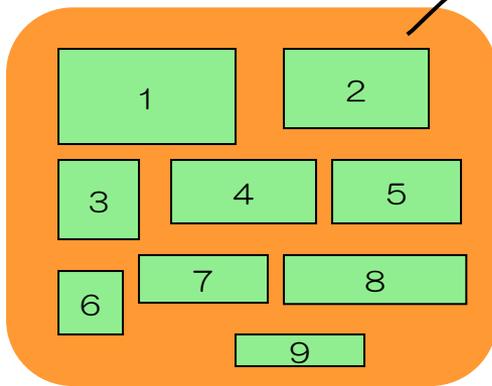
どの内面(都道府県)も最大10角形で描ける=>理論的に証明

# 矩形詰め込みパズル

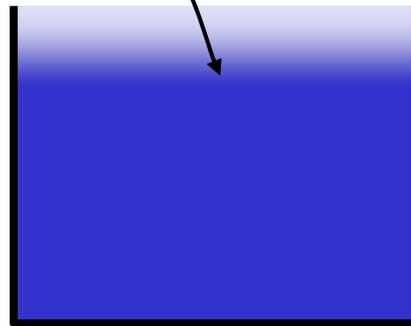


# 矩形パッキング問題

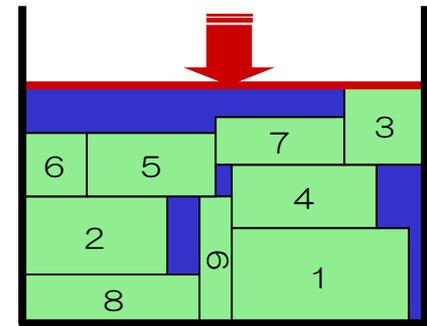
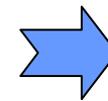
与えられた長方形を入れ物に詰める  
制約：長方形同士が重ならない  
目的：最上辺の高さをできるだけ低く



与えられた長方形



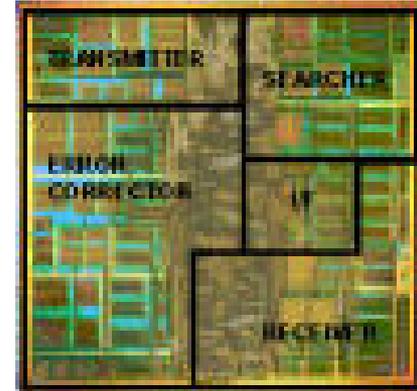
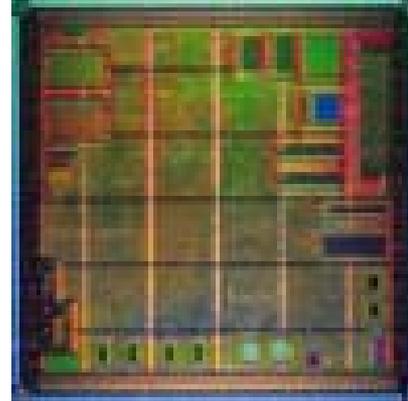
入れ物



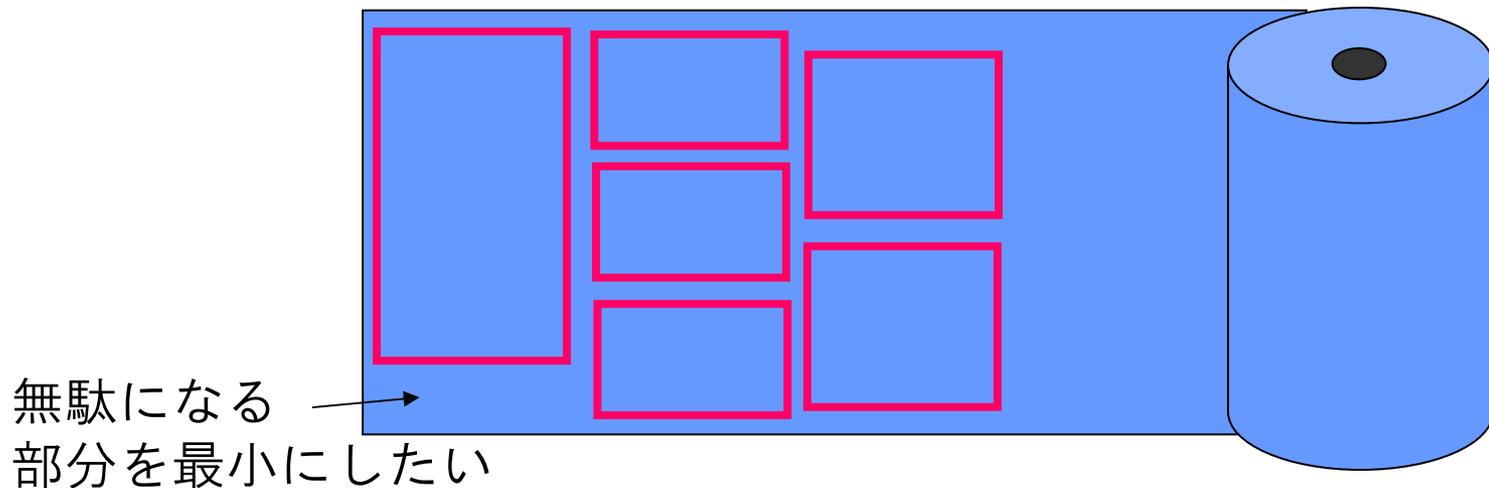
詰めた結果

# パッキング問題の応用例

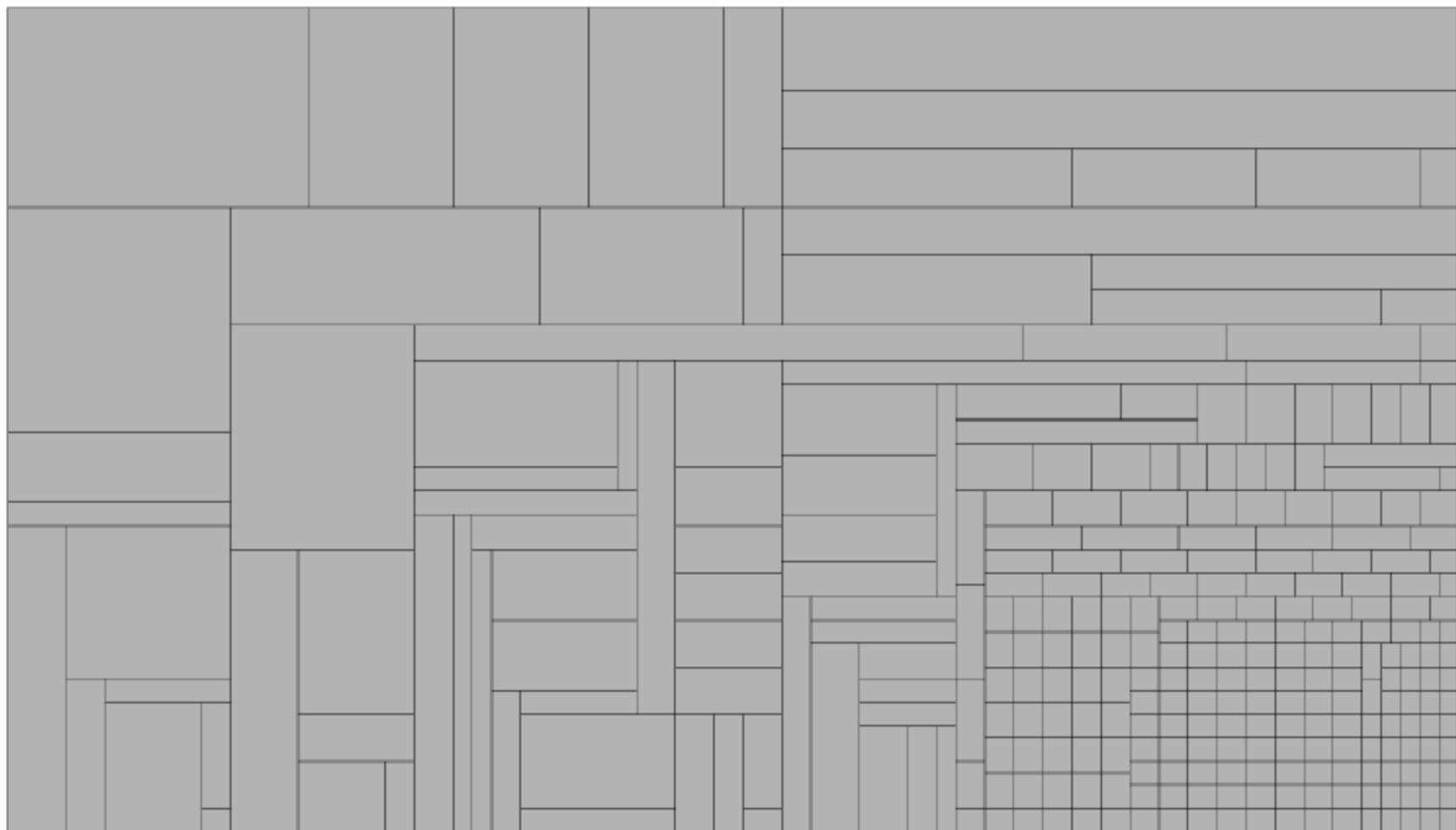
## VLSIのレイアウト設計



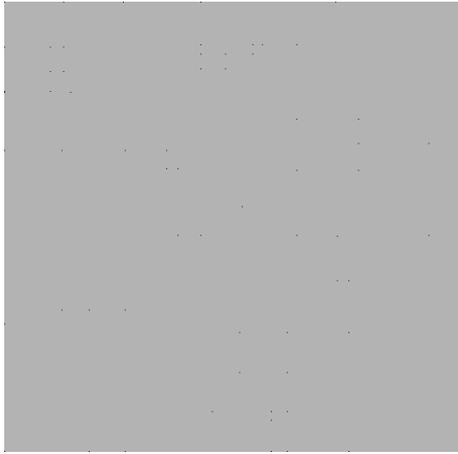
## 部材の切り出し



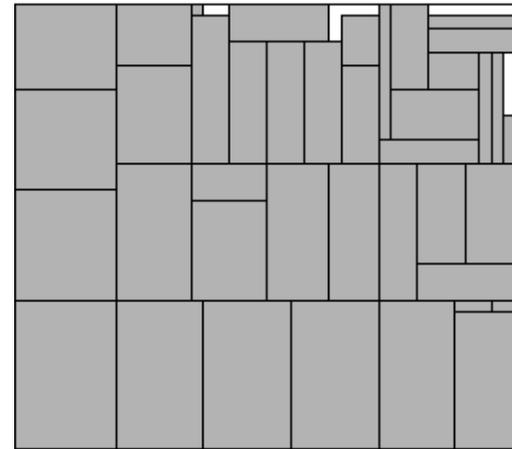
なんと300矩形の例題が厳密に解けた！



## 長方形の完全パッキングとストリップパッキングの配置例

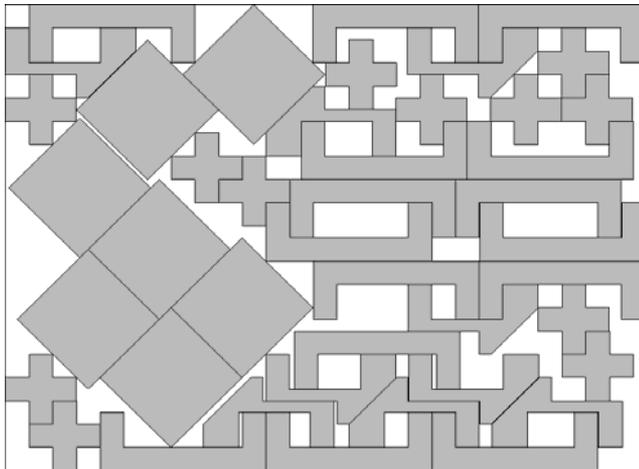


n4a

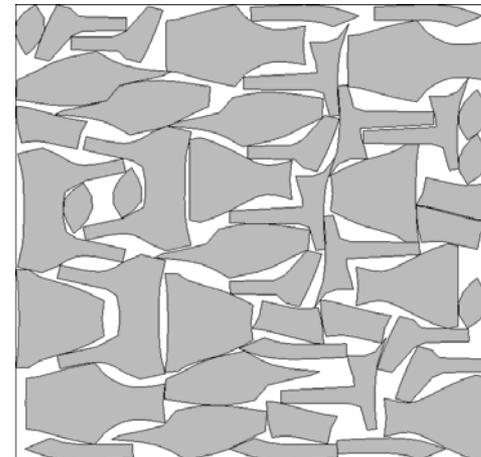


beng06

## 非凸多角形のストリップパッキングの配置例

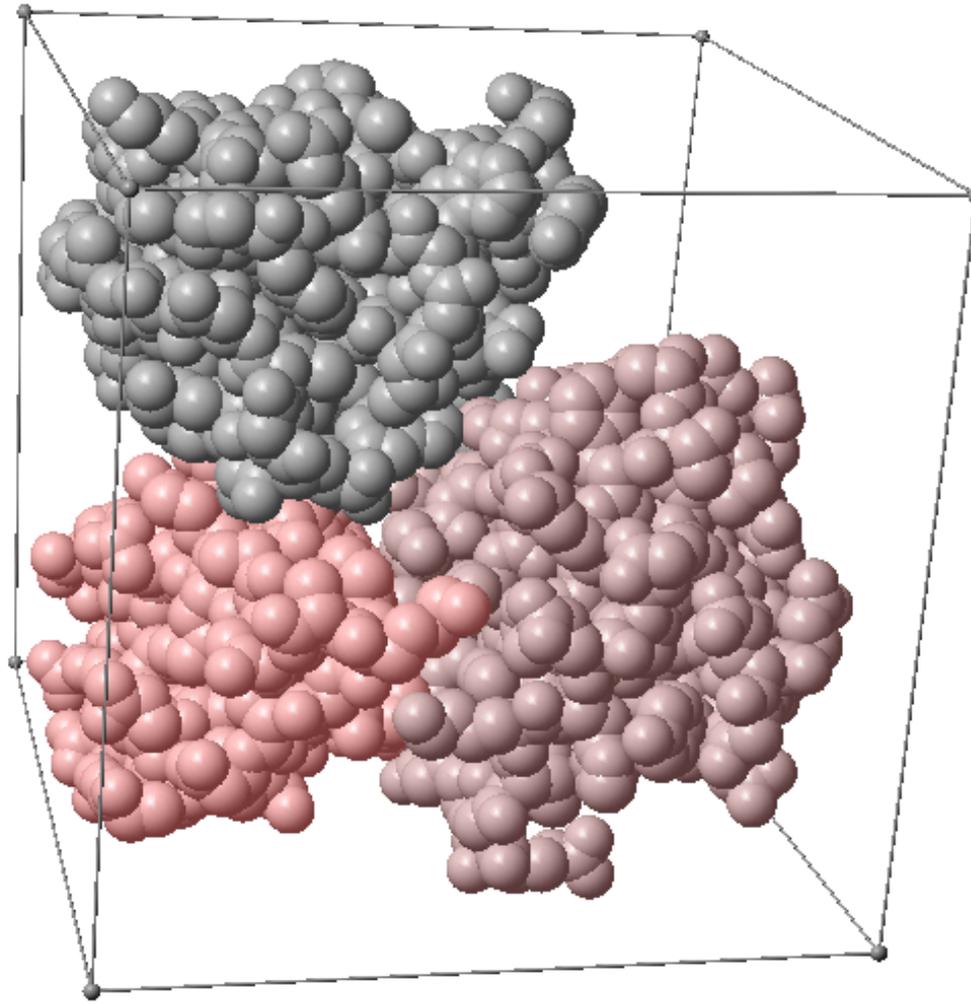


shapes1



swim

# 複雑形状物体の3Dパッキング問題



三つのタンパク質のドッキング計算

# 活躍している学生

## 日本オペレーションズ・リサーチ学会学生論文賞

橋本英樹 (2003年9月受賞), 祖父江謙介 (2004年9月受賞),  
西原理 (2005年9月受賞), 劔持光俊 (2005年9月受賞),  
坂下麻里子 (2005年9月受賞), 今道貴司 (2006年9月受賞),  
川口晃史 (2006年9月受賞), 松本一輝 (2006年9月受賞)

## 日本スケジューリング学会学術賞

劔持光俊 (2006年10月受賞), 今道貴司 (2006年10月受賞)

## 第一回京都大学総長賞

今道貴司 (2006年3月受賞)

## プログラミングコンテスト

橋本英樹, S. Boussier, M. Vasquez チーム

Challenge ROADEF 2007 (仏) の  
Junior categoryで優勝



パズルっぽいもの、グラフ、図形、ネットワーク、アルゴリズム  
などに興味のある方は離散数理分野をのぞいてみてください！



離散数学・離散アルゴリズムに興味のある方は  
離散数理分野をのぞいてみてください

