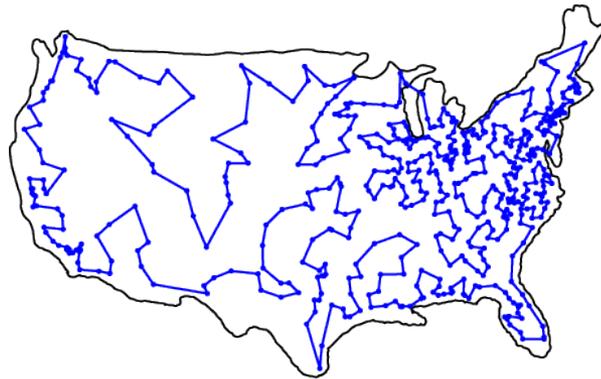


離散数理研究室

教員スタッフ 教授 永持 仁

助教 Aleksandar Shurbevski

学生, 学生居室 8号棟3階西側



NEWS!

グラフ描画の研究分野の創設者で、情報可視化分野の権威であるシドニー大学 Peter Eades 名誉教授が、2016年6～8月本研究科の客員教授として本研究室に滞在されます！

離散最適化とは

離散最適化 (Discrete Optimization) と呼ばれる最適化問題は、近年の計算機パワーの増大に伴い、コンピュータ科学の基礎理論分野として、アルゴリズム理論の発展とともに常に新しい展開を遂げています。具体的な応用例には、ネットワーク上の最適ルートの決定、配送計画、施設の最適配置、ネットワーク上の分散処理、通信や交通ネットワークの設備・運用計画、勤務表や時間割のスケジューリング、工場における資源の配分や生産計画、データの論理的解析および知識獲得、情報可視化問題、VLSIチップ内の配置・配線問題、ゲノム情報解析などが含まれ、大規模でグローバルな視点を要求されるものから、きわめて精細な設計に到るものまで挙げられます。その応用範囲は、オペレーションズリサーチ (OR) , システム工学, バイオインフォマティクス, さらには経営学, 経済学, 社会科学など多岐の領域にわたります。

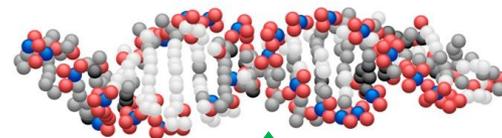
離散最適化は、現実の問題を解決するために導入される数理モデルが離散的構造をもつ場合に有効で、その数学的構造を利用した効率の良いアルゴリズムの開発が求められています。本研究室では、離散数学および離散最適化の理論とアルゴリズムに関する研究、およびそれらのオペレーションズ・リサーチ (OR) の諸問題への適用を主な研究課題としています。



離散数学問題の複雑さの解明とアルゴリズム開発



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

組合せ最適化(目的関数; 制約条件)・離散数学
ネットワーク・グラフ構造解析・設計, スケジューリング,
資源配分(ゲーム理論), ゲノム解析

問題の複雑さの解明: NP困難性, 近似可能性, FPT

アルゴリズムの開発: 理論的性能(時間・領域計算量), 近似性能
実験的評価, 提案法の実装(C言語), データ構造の開発

基礎となる学部講義科目: 「データ構造とアルゴリズム」, 「線形計画」,
「グラフ理論」, 「最適化(離散最適化)」など.

活動学会: 情報処理学会, 電子情報通信学会, 日本OR学会, 応用数理学会,
IEEE, ACMなど.

アルゴリズム開発のための理論的枠組みに対する基礎的研究

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

現在取り組んでいる各種テーマ

グラフ理論

連結性等の性質の証明: 定理

ネットワーク最適化

TSP, スケジューリング問題
計算量・近似性能の改良

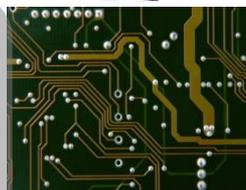
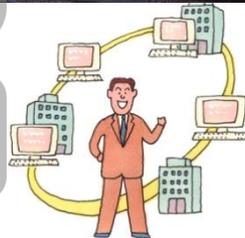
グラフ上の安定解, メカニズム設計

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
レクタ, 多球近似法

化学物質のグラフ構造推定問題

化学研究所との共同研究 **EnuMol**



種々のアルゴリズムの開発

多項式時間
アルゴリズム $O(n^2)$

精度保証つき
近似アルゴリズム

厳密解法・列挙
(分枝限定法・DP)
例: TSP3 $O(1.23^n)$,
MIS $O(1.2^n)$

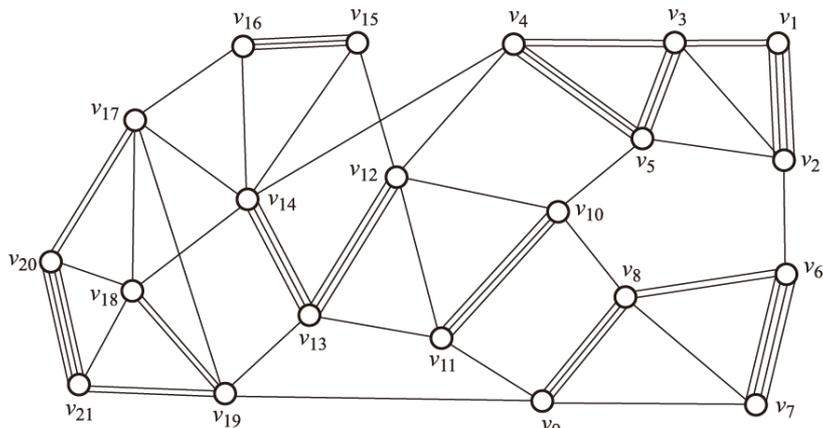
戦略耐性メカニズム

グラフ・ネットワーク 問題を解く難しさ

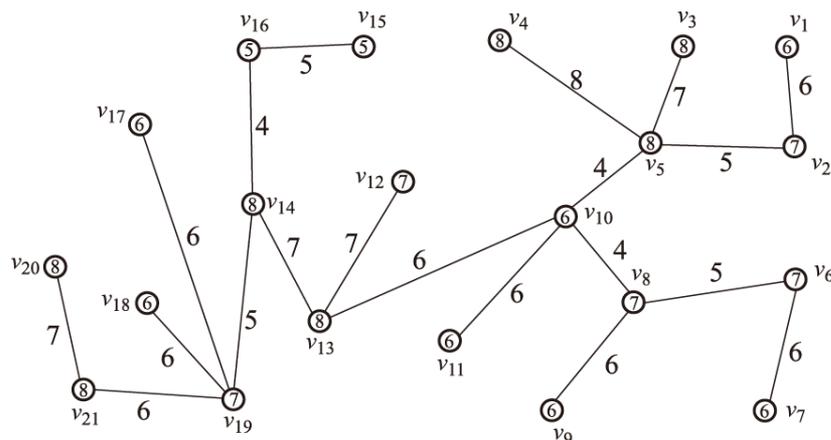
グラフやネットワークに関連して現れる最適化問題に対する理論は、現実に現れる様々な応用問題を解決するための基礎となります。私たちは、幅広いクラスの問題に対して、離散数学やアルゴリズム設計のテクニックなどを用いて、理論的な解析の研究を行っています。

問題の複雑さ 最適化問題には、多項式時間で解ける問題もあれば、多項式時間では解くことが不可能だと予想されている「難しい」問題（NP-困難問題，NP-完全問題）もあります。また多項式時間ではあっても、少ない計算量で解ける「たちの良い」問題から、多くの計算量を必要とする問題まであります。たちの良い問題に対しては、アルゴリズムを提供することだけではなく、その問題の裏にどのような構造が隠れているかを数学的に解析することで、より深く問題を理解し、他の問題に対するアルゴリズム開発の糸口を与えることにつながることを期待できます。また難しい問題に対しては、最適解ではなくて近似解を計算する近似アルゴリズムなどのアプローチがあります。この場合、計算量だけではなく、最適解にどれだけ近い近似解が求められるかを表す近似精度が、そのアルゴリズムの性能を計る指標となります。

私たちは、計算可能性や近似可能性の意味で「易しい」問題から「難しい」問題まで、グラフ理論や離散数学、データ構造やアルゴリズムなどの計算理論、線形計画などの最適化の理論などをツールとして、アルゴリズムの開発や問題構造の解析を行っています。



与えられたグラフ G



G の各点对間の局所連結度（最大フロー値）を
全て表現する木構造

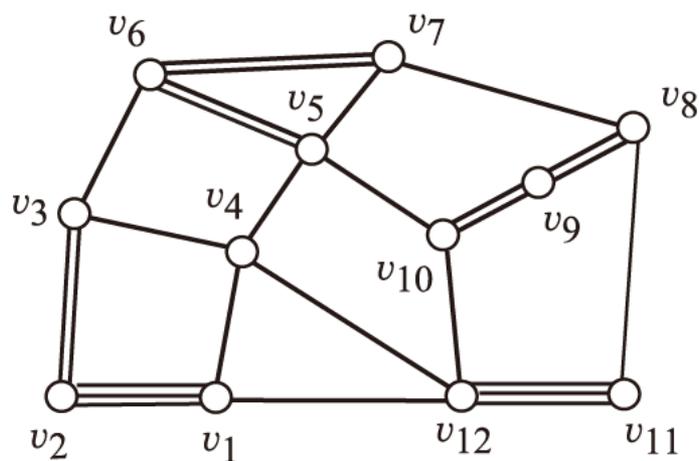
グラフ・ネットワーク問題 に対する理論研究

グラフの連結性に関する最適化問題

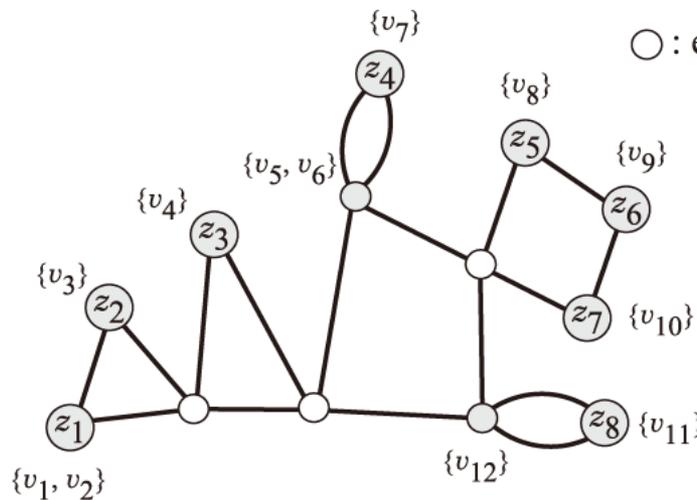
グラフの連結性とは、そのグラフの結びつきの強さを表す指標で、情報ネットワークの耐故障性や通信量などにも関係することから、情報基盤技術や社会経済活動に重要な役割を果たします。ネットワークフローやグラフのカット構造などと深く関係があり、グラフのスパース化、グラフ増大問題、ネットワーク設計問題、供給点配置問題など、世界的に研究が盛んです。私たちのグループは、これらの研究において**最先端の成果**を挙げています。※次頁で成果を執筆した著書を紹介します。

例えば、グラフの連結度を計算する最小カット問題に対しては従来、ネットワークフローに基づく反復アルゴリズムが使われていました。私たちのグループはこの問題に対して、ネットワークフローを用いずに、最大隣接順序というノードの順序づけを利用した高速なアルゴリズムを考案しました。また最近、巡回セールスマン問題が基本構造は次数指定と連結度要求から成るネットワーク設計問題であると考え、より一般化された問題に対する近似アルゴリズムを与えました。

- : non-empty nodes
- : empty nodes



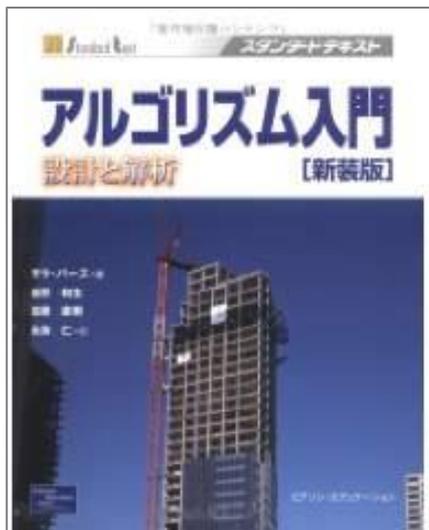
与えられたグラフG



Gの最小カット（4本の枝カット）を
全て表現するカクタス構造

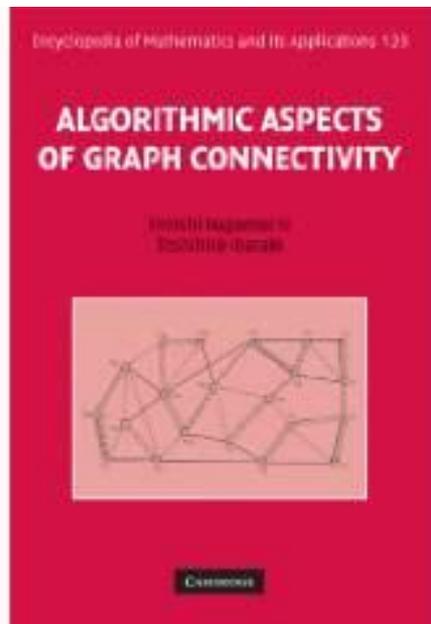
グラフ・ネットワーク問題 に対する理論研究

グラフの連結性に関する最適化問題



岩野, 加藤, 永持 (訳),
アルゴリズム入門 - 設計と解
析 -, アジソン・ウエスレイ社,
Computer Algorithms:
Introduction to Design
and Analysis (2nd edition), Sara
Baase (著), 1998年5月.

これはアメリカのコンピュータ科学のコースでよくテキストとして使われている著書を翻訳したものです。内容の一部は私の大学院の講義でも使っています。



H. Nagamochi, T. Ibaraki (著):
[Algorithmic Aspects of Graph Connectivities](#),
Encyclopedia of Mathematics and Its
Applications,
Cambridge University Press, 2008

これら二冊は、連結度を中心とするグラフ理論、グラフアルゴリズムについて執筆したものです。古典的な内容の必要な収録以外の8割がたは、自身の研究成果から成っています。前の二頁で使われているグラフの図はこれらのテキストで使われているものです。



茨木, 石井, 永持 (著):
[グラフ理論 連結構造と
その応用](#), 朝倉書店, 2010年

NP-完全な グラフ・ネットワーク問題 に対するアルゴリズム

NP-完全なグラフ・ネットワーク問題に対 する厳密アルゴリズムの設計と解析

応用上重要なグラフ・ネットワーク問題には、NP-完全な問題であるものが多く、これらに対しては、現在、多項式時間で解くための構造が見つかっていないので、分枝限定法や動的計画法などで解の候補をすべて探索するアルゴリズムを設計することになります。この場合、時間計算量は、問題サイズ（グラフの節点 n など）の指数関数になりますが、それでも、この計算量を小さくする研究が行われています。以下では、巡回セールスマン問題や独立点集合問題など、グラフ・ネットワークにおける代表的なNP-完全に対して永持らの研究者が得た現在（2015年）世界最良の結果のいくつかを載せています。

多項式領域指数時間アルゴリズムの研究成果

巡回セールスマン問題(TSP):

最大次数3 : $O^*(1.2312^n)$ 時間, 最大次数4 : $O^*(1.6920^n)$ 時間

独立点集合問題:

最大次数3: $O^*(1.0836^n)$ 時間, 最大次数4: $O^*(1.1376^n)$ 時間,

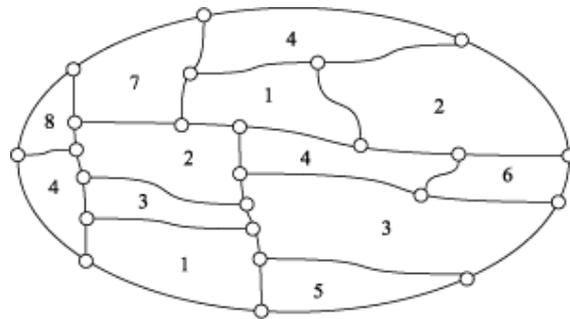
最大次数5: $O^*(1.1737^n)$ 時間, 最大次数6: $O^*(1.1898^n)$ 時間,

最大次数7: $O^*(1.1976^n)$ 時間, 最大次数8以上: $O^*(1.1996^n)$ 時間

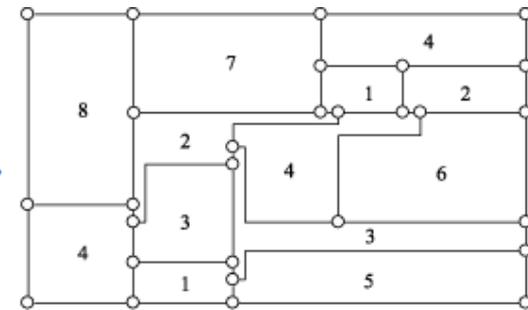
枝支配集合問題: $O^*(1.3160^n)$ 時間

点帰還集合問題: $O^*(1.7266^n)$ 時間

グラフ・ネットワーク問題に対する理論研究



(a)



(b)

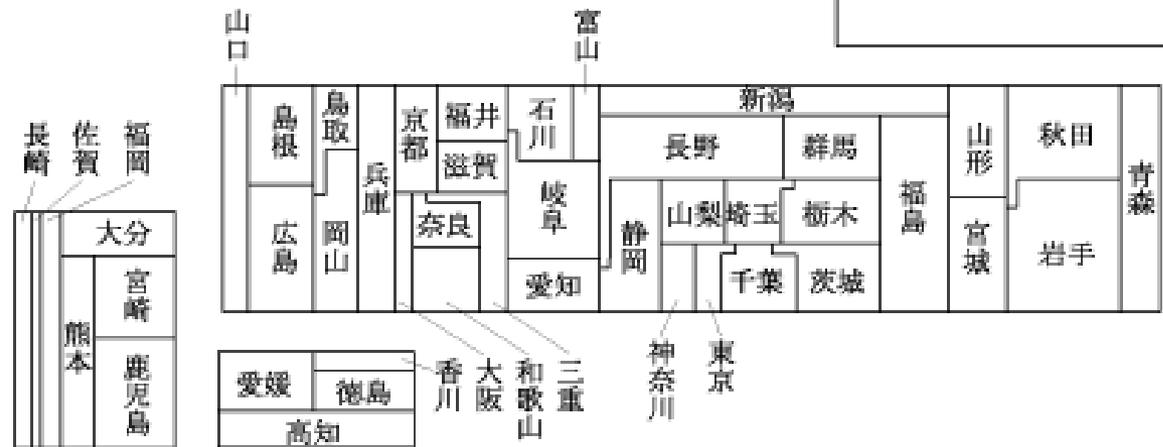
グラフ描画

グラフを視覚化する際、平面や空間にいか「きれい」に埋め込むかということが問題になります。「きれい」には様々な定義がありますが、例えば辺と辺が交差しないことであったり、一本の辺が折れ曲がりの少ない線で描かれていたりという様々な要求が考えられています。私たちのグループでは、この方面でも活発に研究を行っています。

その一例として、各辺が平面上の水平もしくは垂直な線分で、かつそれぞれの内面が、指定した面積を持つ少ない角数の多角形になるようなグラフ描画アルゴリズムなどを開発しました。



当時、4回生の学生の卒論。どの内面も最大10角形で描けることを理論的に証明し、学術雑誌に掲載された。



都道府県の面積比通りに実現した直行描画

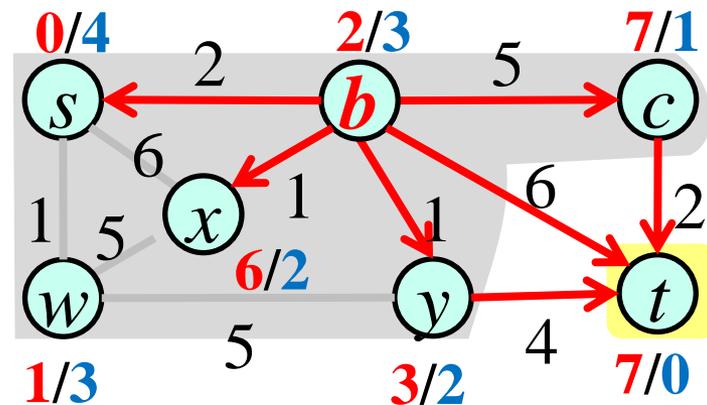
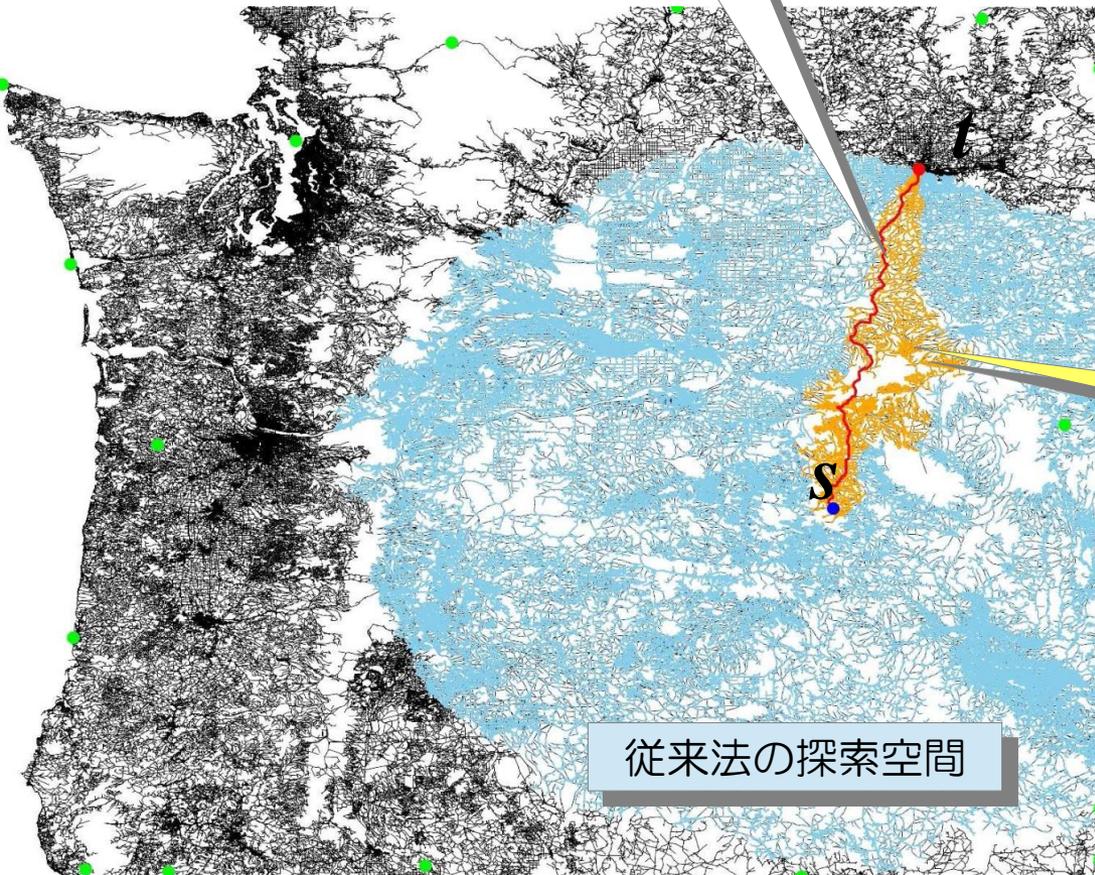
データの前処理による最短経路アルゴリズムの高速化の研究

趙 亮 准教授（総合生存学館）との共同研究

問題：枝重みを持つ無向グラフにおいて与えられた s と t に対して最短な s,t -パスを求めよ。

目的：グラフの前処理によるアルゴリズムの高速化

応用：カーナビ、電車の乗り換え案内など



提案法の探索空間

2点 s, t 間の最短経路は、 s からグラフ探索をすることで求められます。左の道路網の例では、 s から探索範囲が水色の領域に広がっている。

これに対し、予めグラフに前処理を施しておくと、 s からの探索範囲をオレンジ色の領域に狭めることができます。

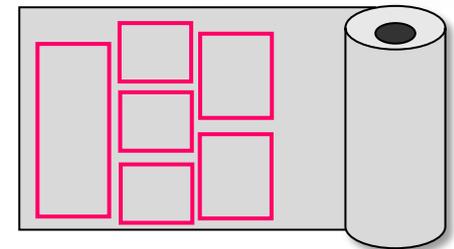
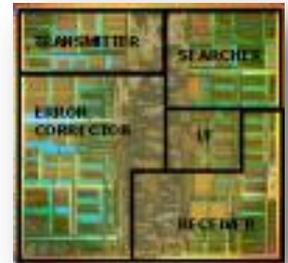
詰め込み問題に対する 実用的なアルゴリズムの 開発

詰め込み問題とは、与えられた図形を容器の中に図形の重複がないように配置する問題です。図形の種類、配置の制約、容器の形状などにより様々なバリエーションがあり、広く応用のある重要な問題です。私たちは詰め込み問題に対する汎用的なフレームワークの構築を目指しています。

詰め込み問題

詰め込み問題は、与えられた図形を容器の中に図形の重複がないように配置する問題です。例えば、以下のような問題を含んでおり、非常に多くの応用があります。

- ◆鉄板の切りだし（長方形の容器に長方形を入れる）
- ◆VLSIの設計（長方形の容器に長方形を入れる。さらに配線の最小化）
- ◆服の型紙の配置（長方形の容器に多角形を入れる）
- ◆シュレッダーにかけられた文書の復元（長方形の容器に多角形を入れる）
- ◆宝石の原石の削り方（多面体に多面体を入れる）
- ◆タンパク質のドッキング（球の集合同士を配置）



ただし、一般的に詰め込み問題は多項式時間で解くことができないと予想されている「難しい」問題です。そこで、私たちはこの問題に対して、広く応用が効くような汎用的な解法の開発を目指しています。問題が比較的易しい場合には、最適な解を実用的な時間で求める厳密解法の研究を、規模の大きい問題や難しい問題に対しては、高速に実用的な解を見つけるような発見的手法の研究を行っています。以下に、この研究室で取り組んでいる問題を個別に紹介します。

詰め込み問題に対する 実用的なアルゴリズム の開発

分枝限定法に基づく矩形充填問題に対する厳密 アルゴリズムの開発

長方形を長方形の容器に配置する問題は、鉄板を材料とする産業などに応用のある問題です。私たちは、幅が固定された容器の中に、与えられた長方形を配置する際に、必要となる容器の長さを最小化する問題に対する厳密解法を提案しています。このアルゴリズムを実装したソルバーを「**レク太**」と呼んでいます。

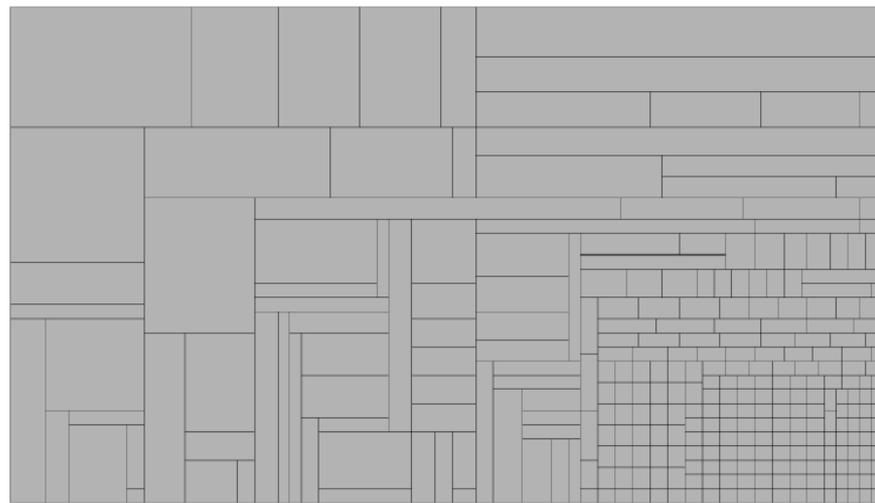
実際の応用上では、長方形の配置の様式に従うことが求められることがあります。その代表的な例として、ギロチンカット制約と2ステージ制約が挙げられます。ギロチンカット制約とは、容器の長方形を端から端まで切り取ることを繰り返すことで、与えられた長方形が切り出せるような配置になっているという制約で、2ステージ制約は、ギロチンカット制約の特殊な場合です。配置の様式の他にも、長方形間のハミング距離が最小となるような配置を求める問題に対する研究も進めています。これは、VLSIの設計で、モジュール間の配線の総距離を短くする問題などへの応用があります。



木製パズル。レク太が
正解を教えてください。



最適な充填の計算例



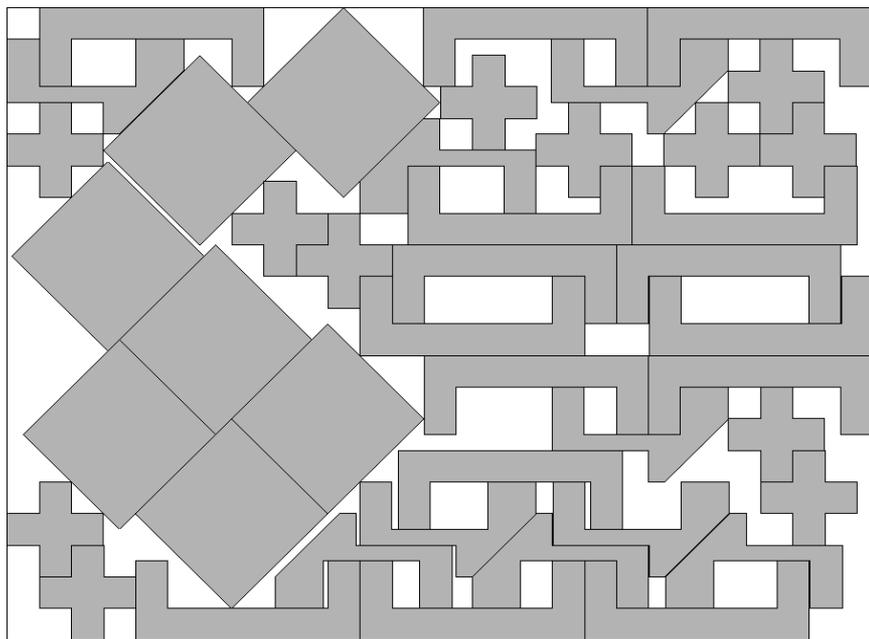
300個の矩形の例題が厳密に解けた例

詰め込み問題に対する 実用的なアルゴリズム の開発

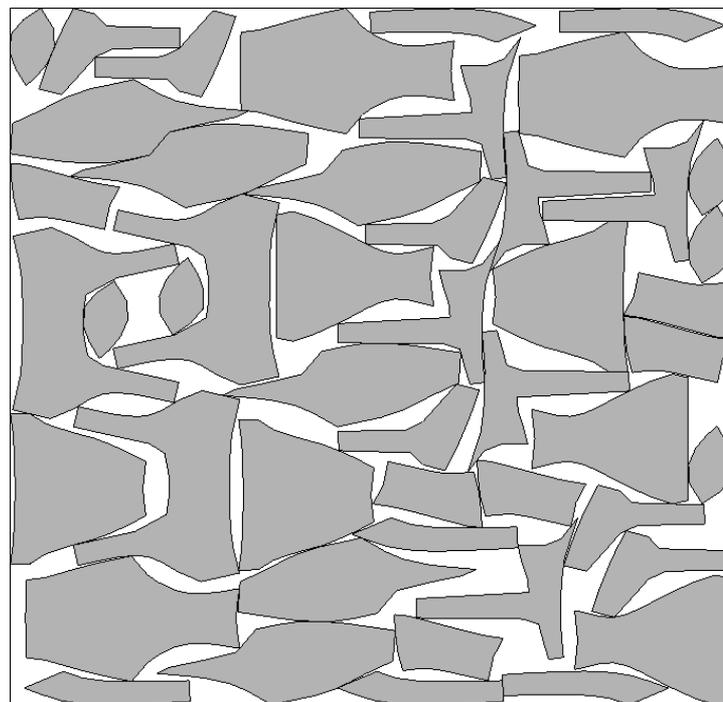
メタヒューリスティックに基づく不規則形状平 面図形の充填アルゴリズムの開発

不規則形状平面図形の充填問題

形状が矩形や凸形状でない場合、厳密に最適解を求めることは、計算時間がかかりすぎて現実的には不可能です。タブーサーチなどメタヒューリスティックに基づいて、できるだけ隙間を少なくするアルゴリズムを設計し、実装しています。以下の例は、充填問題に対するアルゴリズムの性能をテストするために用意されたベンチマーク問題を提案のアルゴリズムで解いた様子です。右のswimは、水着を作るための型を配置する問題から作成されたベンチマーク問題です。



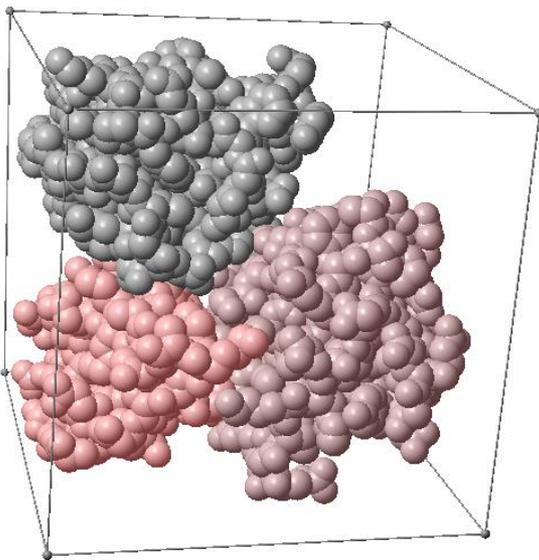
ベンチマーク問題 shapes1



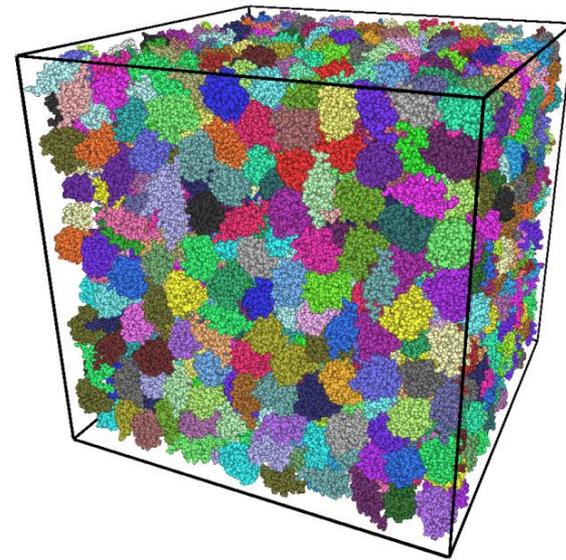
ベンチマーク問題 swim

詰め込み問題に対する 実用的なアルゴリズムの 開発

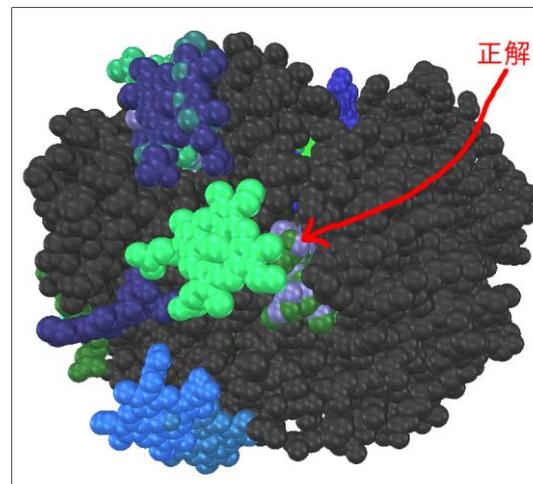
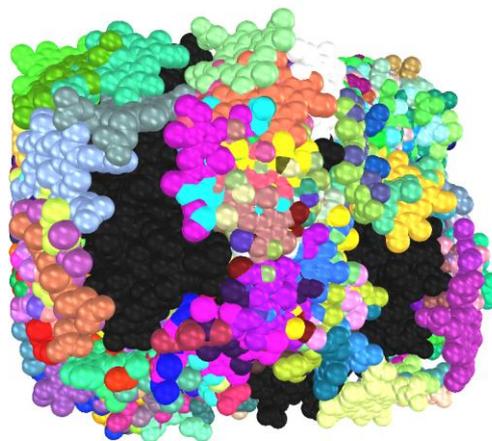
タンパク質の詰め込み問題は、タンパク質の分子を球集合で表し、それぞれのタンパク質が剛体であるという仮定の下で、容器の中に詰め込む問題です。下の図は、複数のタンパク質を立方体の容器に配置した結果です。この問題は、生物情報学で重要なタンパク質のドッキングの特殊な場合になっています。将来的には、ドッキング問題を扱えるようにスキームを拡張していく予定です。



3個のタンパク質形状物体に対して計算により得た充填例



千個のタンパク質形状物体に対して計算により得た充填例



タンパク質とリガンドのドッキング問題の計算例

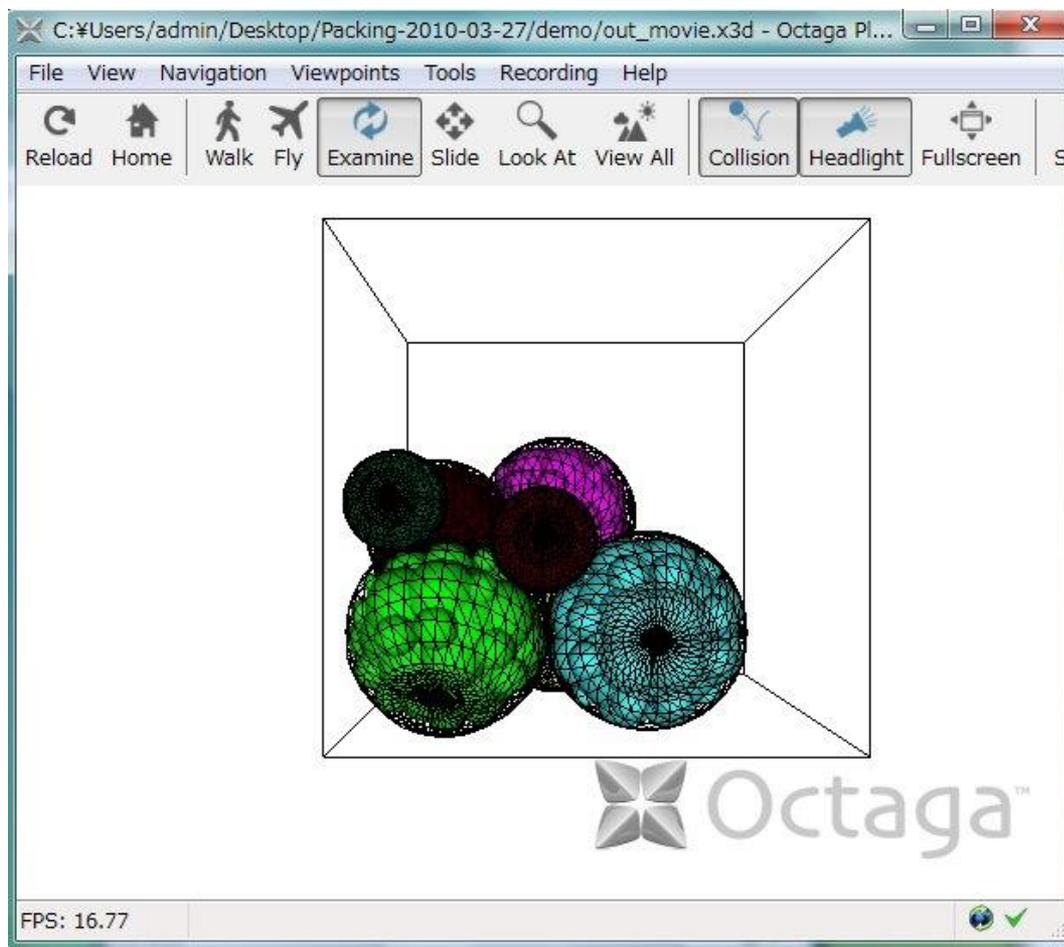
詰め込み問題に対する実用的なアルゴリズムの開発

物体の球集合近似と非線形最適化に基づく平行移動・自由回転用のパッキングソルバーの開発

多球近似法 (Multi-sphere Scheme)

図形の回転には、任意の回転角を許す自由回転というものがあります。従来、図形の自由回転を許す詰め込み問題は困難だと考えられてきました。私たちは、図形を二次元なら円、三次元なら球の集合で近似することで、任意の図形の自由回転を許した状態で重複のない配置を求めるというスキームを提案しています。もちろん回転を許さない場合も扱うことができます。

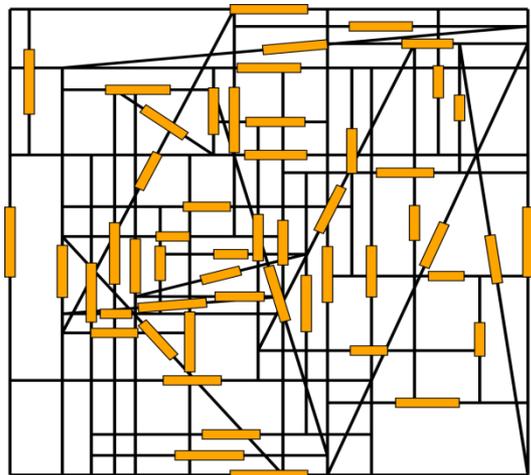
2009年京都大学情報学エデュテインメントの支援を受けて、このパッキングソルバーのGUIインターフェイスを作りました。ソルバーの詳細を知らない人でも比較的簡単に問題を解いたり、結果を確認したりできるようになりました。右図のスナップショットは、入力として与えられた八個のリンゴの形状の物体を、物体がお互いに重ならないようにコンパクトにドッキングさせた様子を示しています。なおX3Dファイルでは三次元の構造になっており、様々な角度や距離から見る事ができます。さらには出力ファイルには計算途中の様子も記録されています。



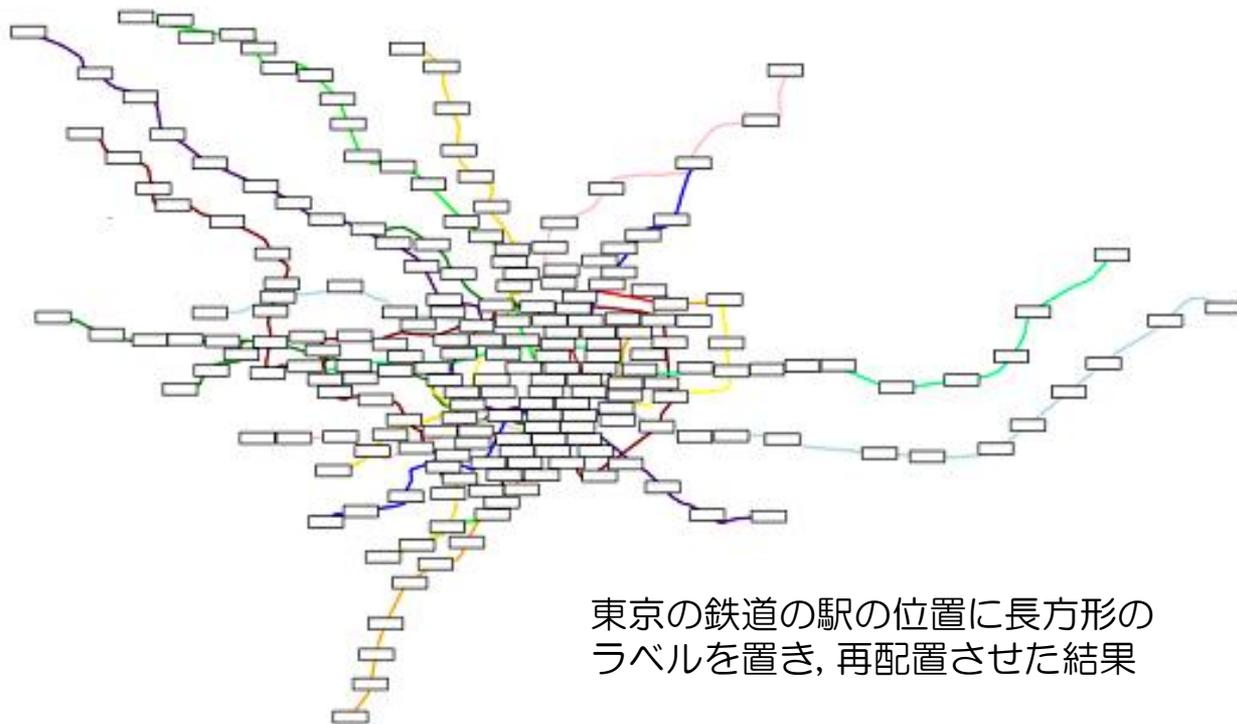
詰め込み問題に対する 実用的なアルゴリズムの 開発

物体の球集合近似と非線形最適化に基づく平行移動・自由回転用のパッキングソルバーの応用例

ラベルの再配置問題とは、与えられたラベルの配置において、いくつかのラベル同士が重複している場合に、その重複を取り除くように、ラベルを再配置させるという問題です。再配置の際には、元の配置からあまり変化しないことを考慮に入れる必要があります。この問題は可視化における重要な操作です。私たちは、multi-sphere schemeの中の局所的なアルゴリズムを適用することで、元の配置からあまり変化させずにラベルを再配置させることに成功しました。



道路地図上での道路名ラベルの配置の計算結果

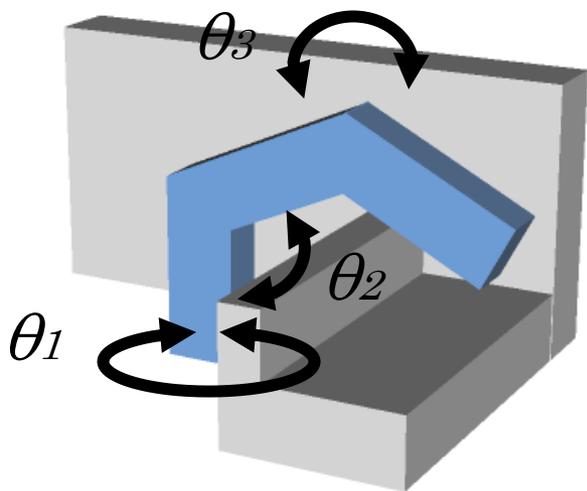


東京の鉄道の駅の位置に長方形のラベルを置き、再配置させた結果

詰め込み問題に対する実用的なアルゴリズムの開発

多球近似法の確率ロードマップ法への応用

ロボットアームなど、障害物を避けながら初期姿勢から目的の姿勢にロボットの位置や形状を連続的に変化させる過程を求める問題は、産業の多くの現場で現れます。この問題では、ロボットの位置や形状の持つ自由度が多くなると高次元の空間での経路探索を行う必要があり、計算コスト非常に高くなります。確率ロードマップ法はこの空間内で適当なサンプル点集合を取り、これらを衝突を生じさせない経路によりつなぎ合わせ一つの連結なグラフ（マップ）を事前に作成しておくことで、空間内で指定された2点（初期姿勢、目的の姿勢に対応）の間の経路探索の計算を軽減させることができます。マップを作製する過程で障害物に衝突しない姿勢を求める問題が現れるため、ここで私たちは、multi-sphere schemeを用いより効率的にマップの作成を行えないか研究を進めています。



三自由度を持つ
ロボットアーム

この研究成果でbest paper award the ICT Innovations 2013を受賞しました。



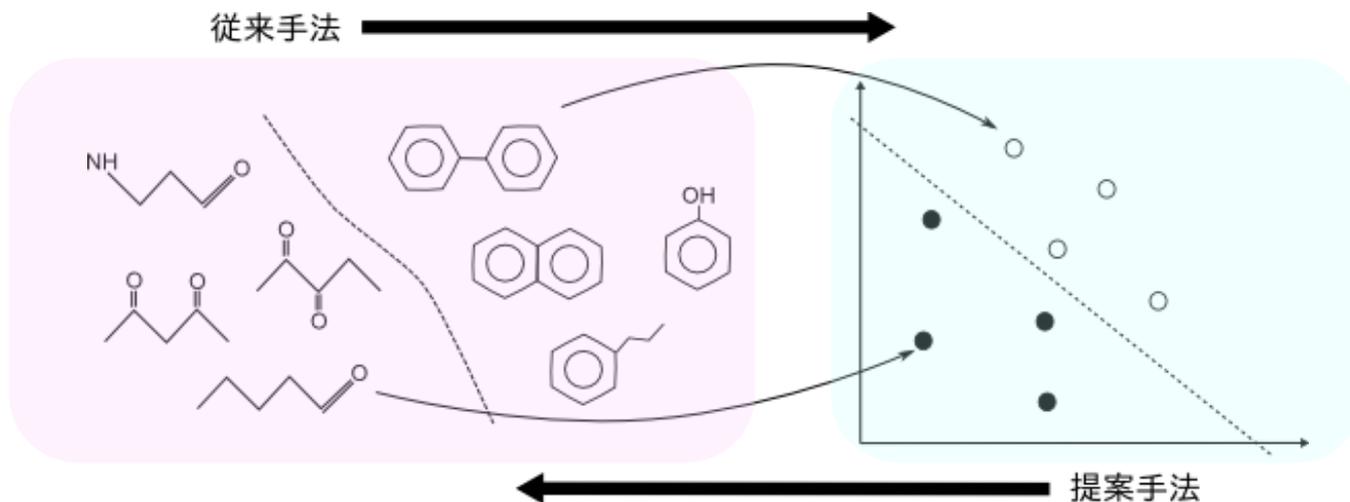
平面上を移動する7節ロボット問題をmulti-sphere schemeによりモデル化した様子

化学グラフの推定問題に対するアルゴリズムの研究

化学研究所 阿久津研究室との共同研究

新規化合物の設計は薬学，医学，農学などにおいて重要であり，ポストゲノム時代における生体生命情報学の主要目標の一つです．このプロジェクトでは，新規化学構造を計算機により導き出す計算手法について，理論基盤構築および実用的アルゴリズムの両面から研究します．

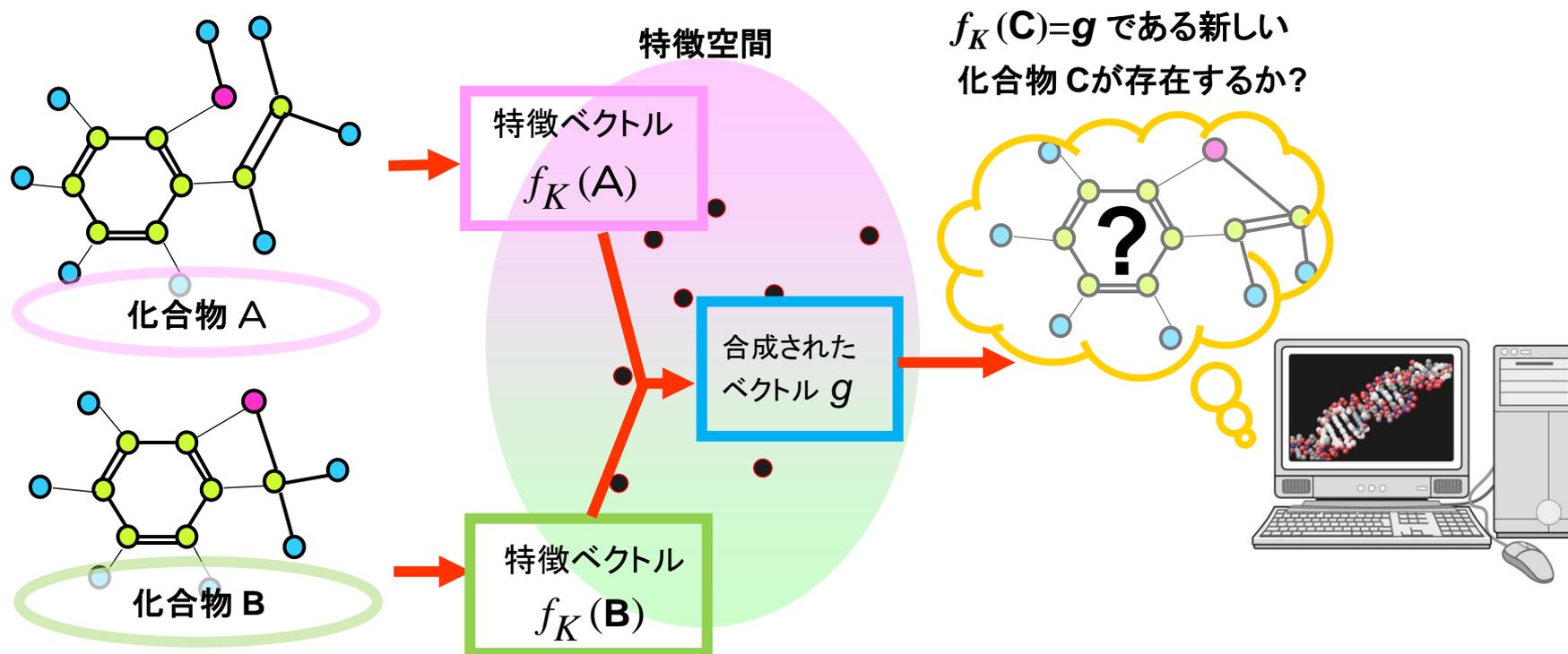
新規化合物の設計は薬学，医学，農学などにおいて重要であり，ポストゲノム時代における生体生命情報学の主要目標の一つです．そのために様々な情報解析手法が研究されてきましたが，その一つに化学構造とその活性の関係を解析・推定する「構造活性相関」があります．この構造活性相関について，近年，様々な機械学習が応用されるようになってきました．特に，サポートベクターマシンを用いる方法では，下の図に示すように，通常，対象となるデータを，有限次元のユークリッド空間，もしくは，無限次元のヒルベルト空間の点（特徴ベクトルとよばれる）に対応付ける写像を定義し，写像された空間における超平面を用いることにより，分類や予測を行います．活性予測のためには，化学構造を特徴ベクトルに変換する必要がありますが，通常，化学構造はグラフ構造として入力され，そのグラフが特徴ベクトルに変換されます．



化学グラフの推定問題に対するアルゴリズムの研究

化学研究所 阿久津研究室との共同研究

本研究は、従来手法の逆を行うことにより新規化学構造を計算機により導き出す計算手法について研究します。具体的には、「特徴ベクトルから、もとの化学構造を推定する」ことにより新規な化学構造を導き出す方法について、理論基盤構築および実用的アルゴリズムの両面から研究しています。この方法が開発できると様々な応用の可能性があります。例えば、化合物Aと化合物Bの中間の性質を持つ化合物Cを設計したいとしましょう（下図参照）。この場合、Aの特徴ベクトルとBの特徴ベクトルの中点を計算し、それを逆写像することにより中間の性質を持つと期待される化合物Cの構造を得ることができます。本研究のアイデアや成果を数年で薬剤設計に応用することは難しいですが、十年、もしくは、二十年先の薬剤設計に役立つ可能性はあると考えています。



化学グラフの推定問題に対するアルゴリズムの研究

化学研究所 阿久津研究室との共同研究

▶ グラフの逆写像問題の計算論的側面について現在の研究をより深化させ、どのような種類のグラフ、どのような種類の特徴ベクトルであれば、厳密解・近似解が理論的に効率よく数え上げができるのかを明らかにする。

▶ 特徴ベクトルから化学構造に対応するグラフ構造を実用的な時間で計算するためのアルゴリズムを開発する。この場合、特徴ベクトル以外にも、化合物が備えるべき制約条件を入力できるようにする。水素原子を除いて50~100原子程度の化合物まで対応することを目標とする。

▶ 開発したアルゴリズムを実際に利用可能とする WEB サーバーを作成・公開し、商業目的以外にはフリーで利用できるようにする。
現在、木状化合物の構造異性体、ベンゼン異性体、外平面状化合物の立体異性体などを列挙するプログラムからなるソルバー **EnuMol** を以下のサイトで公開しています。

<http://sunflower.kuicr.kyoto-u.ac.jp/tools/enumol2/>

以下では **EnuMol** の取り扱っている問題について説明します。

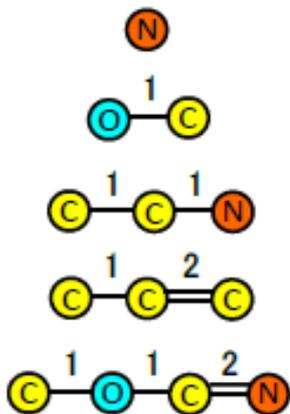
化学グラフの推定問題に対するアルゴリズムの研究

化学研究所 阿久津研究室との共同研究

Enumolでは、元素の種類と個数だけの情報をもつ組成式に加え、特定のパスの現れる回数を上下限として指定した入力から、条件を満たす化学グラフをすべて重複なく列挙する問題を扱っています。

化合物	化学グラフ
原子	節点
(多重)結合	(多重)枝
原子の種類	節点の色

部分パス:
節点の色と枝の多重度の列



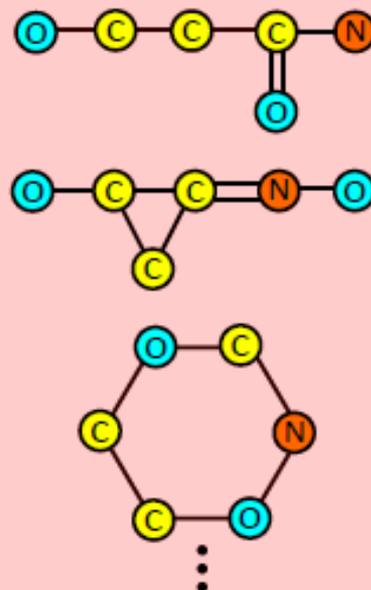
入力

化学グラフが含むべき
部分パスの本数の
上限と下限

部分パス	下限	上限
	2	2
	1	1
	3	3
	0	2
	0	2
	1	3
	0	2
⋮	⋮	⋮

出力

各部分パスの本数が
上下限の間にある
全ての化学グラフ



化学グラフの推定問題に対するアルゴリズムの研究

化学研究所 阿久津研究室との共同研究

以下は具体例の一つです. 入力として, 組成式 CON_2 とパス頻度の上界, 下界をそれぞれ指定するベクトル g_U と g_L とが与えられたとき, EnuMolでの計算結果は以下のように出てきます.

input

feature vector g_U of $K=1$

O	N	C	O1O	O1N	O1C	N1O	N1N	N1C	C1O	C1N	C1C
1	2	3	0	1	1	1	0	2	1	2	2

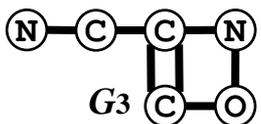
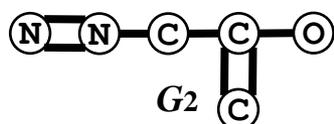
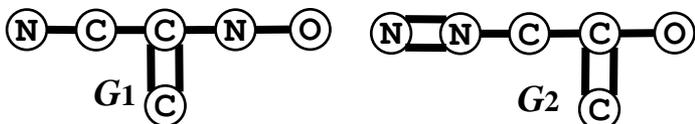
O2O	O2N	O2C	N2O	N2N	N2C	C2O	C2N	C2C
0	0	0	0	2	0	0	0	2

feature vector g_L of $K=1$

O	N	C	O1O	O1N	O1C	N1O	N1N	N1C	C1O	C1N	C1C
1	2	3	0	1	0	1	0	1	0	1	2

O2O	O2N	O2C	N2O	N2N	N2C	C2O	C2N	C2C
0	0	0	0	0	0	0	0	2

output



...

2D Diagram - Mozilla Firefox

ファイル(F) 編集(E) 表示(V) 履歴(S) ブックマーク(B) ツール(T) ヘルプ(H)

http://sunflower.kuicr.kyoto-u.ac.jp/~ykato/chem/view.php

Print Close

#0 C(c1ccccc1O)(OC(C)=O)=O

Page top

#1 C(c1ccccc1O)(OCC=O)=O

Page top

#2 C(c1ccccc1O)OC(C=O)=O

Page top

EnuMol: Enumeration of tree-like chemical graphs
<http://sunflower.kuicr.kyoto-u.ac.jp/tools/enumol2>

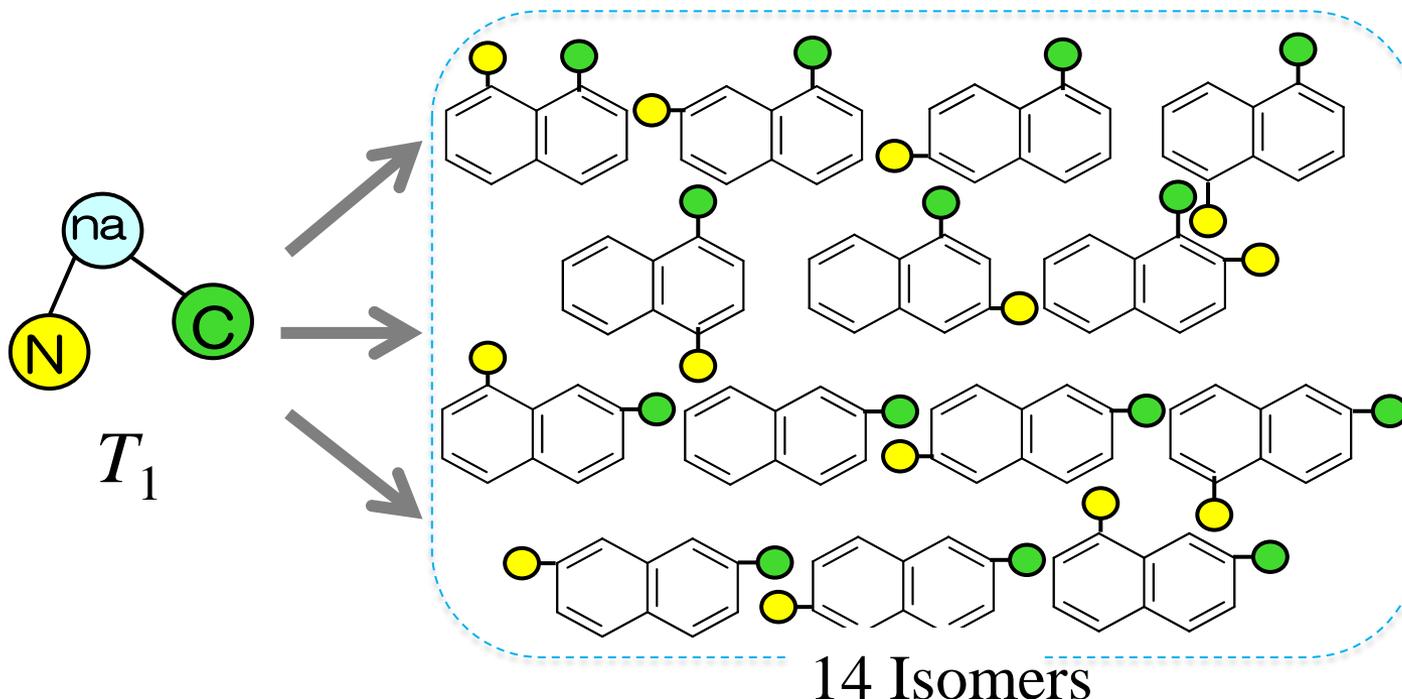
化学グラフの推定問題に対するアルゴリズムの研究

化学研究所 阿久津研究室との共同研究

EnuMolの開発では、他にも、立体異性体やベンゼンやナフタレン異性体の列挙アルゴリズムの設計・実装が進められています。

立体異性体では、木状化学グラフあるいは外平面化学グラフが与えられたとき、不斉炭素の作る立体異性体を列挙するDPアルゴリズムも設計されています。

ベンゼンやナフタレン異性体 ベンゼン環やナフタレン環を1原子を見た木状化学グラフから、もの環の形状に戻したときに現れる異性体をすべて列挙するDPアルゴリズムも設計されています。下図は、ナフタレン環を1原子naと見たとき、N-na-Cというグラフから14通りのナフタレン異性体を作り出されることを示しています。



化学グラフの推定問題に対するアルゴリズムの研究

化学研究所 阿久津研究室との共同研究

EnuMol の開発において、対象とする化学グラフは、木状あるいは、木に $k \leq 4$ 本枝の追加された構造、 k -増大木を優先的に考えています。それは、化合物のデータベースに登録されている構造の90%が木から4-増大木までで占められていることと、木構造には離散数学として取り扱いやすい性質があるからです。

NCI DBにおける存在比



木

藤原 (2008)
石田 (2008)
清水 (2011)
鈴木 (2012)

1-増大木

鈴木 (2014)

2-増大木

山下 (2013) 田村 (2015)

3-増大木

西山 (2014) 山下 (2015) —

4-増大木

芳香族異性体

ベンゼン 李 (2014)

ナフタレン 何 (2016)

立体異性体

木 今田 (2011)

外平面グラフ 今田 (2011)

ここで、名前が挙がっている人は、いずれも本研究室で卒論、修論のテーマとして研究したEnuMolの開発に貢献してもらいました。

安定解，戦略耐性メカニ ズムの問題

安定解はゲーム理論における均衡解，戦略耐性メカニズムは社会選択システムにおける安定した決定方法

選挙の方式やオークションなど複数のプレイヤーが存在する問題では，最適化の尺度がプレイヤー個々に存在する意味で，目的関数が一つの最適化問題とは違った「安定した解」を求める方法が必要になる。

これはゲーム理論における均衡解を探す研究である。離散構造での例としては，結婚問題，ルームメイト問題などがよく知られている。

結婚問題：同人数の男性，女性グループの間で完全なペア（マッチング）を作る。ここで，各人は相手グループの異性に選好の全順序をあらかじめ持っている。マッチングを作ったとき，ペアにならなかった男女の組で現在のペアになっている相手よりも互いに選好度の高いものがあると，このマッチングはプレイヤーによって自主的には維持されない，不安定なものになってしまいます。こういう不安定要素を持たないマッチングを安定マッチングという。

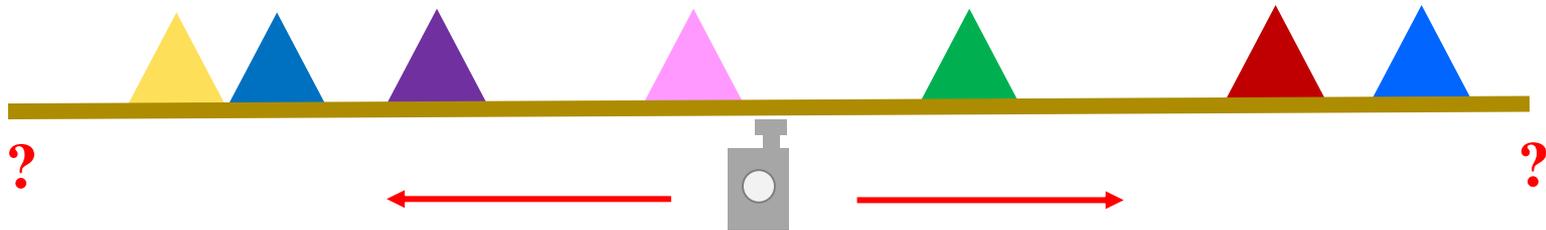
ルームメイト問題：結婚問題と同様，単所の区別はなく， $2n$ 人の学生を二人一組で同室に振り分けるとき，やはり安定マッチングを見つけない。

前者は常に安定マッチングがあるが後者は安定マッチングを持たないことがある。

安定解，戦略耐性メカニズムの問題

安定解はゲーム理論における均衡解，戦略耐性メカニズムは社会選択システムにおける安定した決定方法

解を求める方法の詳細が予め全プレイヤーに周知されているとき、方法の決定する解が自分に都合よくなるように、プレイヤーが自分の発信する情報を操作することがあり、この恣意的な操作によっても解が都合よく変動しないような方法を「戦略耐性メカニズム」という。こちらは、社会選択システムにおける安定した決定方法と見ることができ、その存在性の証明や設計は社会システムの基盤を構築する上で重要な問題である。



例を一つ上げる。上図のように線分上の場所に、キャンプを張っている人たち（プレイヤー）がいて、あなた（メカニズム実行者）は、近くへの配置が嫌われる施設（仮設トイレ，ごみ回収施設のように悪臭が出るものなど）の置き場所を決めるため、メールでテントの場所を全員から無記名で聞き、それを基に施設を線分のどちらの端に置くかを決める。決める方法（メカニズム）は全プレイヤーに予め周知され、プレイヤーは自分のいる位置からは施設を遠いほうに置いてほしいため、自分の本当の居場所とは違う場所をメールすることがあるとする。さて、集まったメールの場所を基に、プレイヤー全員からの距離の和が大きくなる端に施設を置くのが自然な方法に思えるが、これではプレイヤーに知らせる位置情報を恣意的に操作することで得を許してしまうことがある。幸い、この問題にはこのズルを許さない戦略耐性メカニズムが存在する。

本研究室では、線分に限らず、木形状，グラフ形状の場合について戦略耐性メカニズムの存在や単一目的関数の最適化問題とのギャップの評価を行ってきている。

離散数理分野における最近の修士論文のタイトル

H21年度

- ◆ Improved algorithms for enumerating tree-like chemical graphs with given path frequency
(パス頻度に基づく木状化合物列挙に対する改良型アルゴリズム)
- ◆ Approximating Objects with Spheres in Multi-sphere Scheme
(多球近似アプローチにおける物体の近似)
- ◆ A Study on Algorithms for a Covering Problem in Large-scale Networks
(大規模ネットワークにおける被覆問題のアルゴリズムに関する研究)

H22年度

- ◆ An exact algorithm for the score-maximizing Tsumego problem
(地合最大化詰碁問題に対する厳密解法について)
- ◆ Enumeration of Stereoisomers of Outerplanar Chemical Graphs Using Dynamic Programming
(動的計画法を用いた外平面的化学グラフの立体異性体の列挙)
- ◆ Efficient Unranking Algorithms of Combinations
(順位から組合せを生成する効率的なアルゴリズム)
- ◆ Orthogonal Drawings for Plane Graphs with Specified Rectangles and Line Width
(矩形と線幅の指定された平面グラフの直行描画法)
- ◆ Discretization and Approximation Schemes for Maximizing the Area Covered by Radius-Variable Disks Inside Simple Polygons
(単純な多角形を容器とした円被覆問題に対する離散化と近似スキーム)
- ◆ An approach based on binary tree representations to global search in packing problem
(充填問題に対する大域的探索における二分木表現に基づくアプローチ)

離散数理分野における最近の修士論文のタイトル

H23年度

- ◆ Enumerating Tree-like Chemical Graphs of Path Frequencies within Given Upper and Lower Bounds
(与えられた上下限内のパス頻度をもつ木状化学グラフの列挙)
- ◆ A study on practical speed-up techniques for A* algorithms
(A*アルゴリズムに対する実用的高速化手法について)

H24年度

- ◆ A Study on Data Structures for A* Algorithms
(A*アルゴリズムのためのデータ構造について)
- ◆ An Enumeration Algorithm for Chemical Graphs of Monocyclic Structure Given Upper and Lower Bounds on Path Frequency
(上下限付きパス頻度用いた環構造を一つ持つ化学グラフのための列挙アルゴリズム)
- ◆ An Application of Multi-Sphere Scheme to Robot Path Planning with 3D-motion
(3次元運動ロボット経路計画問題に対する多球近似充填スキームの応用)
- ◆ Algorithms for the Next-to-Shortest Path in Undirected Graphs with Nonnegative Weights
(非負の枝重みを持つ無向グラフにおいて二番目に短いパスを求めるアルゴリズム)

H25年度

- ◆ A Shortest Path Algorithm with Preprocessing for Complex Networks
(複雑ネットワークに対する前処理付き最短路アルゴリズムについて)
- ◆ Design of Exact Algorithms for Pathwidth of Graphs
(グラフのパス幅に対する厳密アルゴリズムの設計)
- ◆ Mechanism Design for Obnoxious Facility Game in the Circle Metric
(忌避型設配置ゲームにおける戦略耐性メカニズムの特徴付け)

(続く)

離散数理分野における最近の修士論文のタイトル

H25年度（続き）

- ◆ A Study on Independent Distance Dominating Sets in Large-scale Graphs
（大規模グラフにおける距離つき独立枝支配集合に関する研究）
- ◆ Enumerating Benzene Isomers of Tree-like Chemical Graphs
（木状化学グラフに対するベンゼン環異性体の列挙）

H26年度

- ◆ Group Strategy-Proof Mechanisms Parameterized by Threshold on Benefit Increase in Line Metric Obnoxious Facility Game
（直線空間上の忌避型施設配置ゲームに対する利得増加についての閾値パラメータ付き戦略耐性メカニズム）
- ◆ Implementation of an Exact Algorithm for Maximum Independent Set Problem in Degree-3 Graphs
（3-正則グラフにおける最大独立集合問題に対する厳密アルゴリズムの実装）
- ◆ Enumerating Chemical 3-Augmented Trees with Two Cyclic Components
（二つの閉路成分を持つ3-増大木化学グラフの列挙法）
- ◆ Fixed-parameter Tractability of Almost Binary Boolean Constraint Satisfaction Problem
（2値2変数制約充足式に対する制約削除問題の固定パラメータ容易性）

H27年度

- ◆ Exact Algorithms for Minimum Edge Dominating Set and Lowest Edge Dominating Set
（最小枝支配集合と下限枝支配集合に対する厳密アルゴリズム）
- ◆ A Bounding Procedure for Solving Traveling Salesman Problem in Degree-3 Graphs
（3正則グラフに対する巡回セールスマン問題の限定手続き）
- ◆ Resource Cut, a New Bounding Procedure to Algorithms for Enumerating Tree-like Chemical Graphs
（木状化学グラフ列挙アルゴリズムにおける新しい限定操作リソースカットの導入）

離散数理分野における最近の卒業論文のタイトル

H23年度

- ◆ 忌避型施設配置ゲームにおける戦略耐性メカニズムの特徴付け
- ◆ GPUによるグラフィカルゴリズムの並列化に付いて
- ◆ グラフのパス幅計算の高速化とその応用

H24年度

- ◆ 木状空間の忌避型施設配置ゲームに対する戦略耐性メカニズムに関する考察
- ◆ 最短路問題に対するALTアルゴリズムの高速化
- ◆ 上下限パス頻度ベクトルを満たす二閉路的グラフの列挙法

H25年度

- ◆ パラメタ付き枝支配集合問題に対するアルゴリズム
- ◆ 三閉路構造をもつ化学グラフの列挙アルゴリズム

H26年度

- ◆ 木状化学グラフにおけるナフトレン異性体の列挙
- ◆ 上下限パス頻度ベクトルを満たす単一ブロック2-増大木構造をもつ化学グラフの列挙
- ◆ クラウドサービスをを用いたk最近傍計算
- ◆ 最小費用二部全域木問題に対するマトロイド交差アルゴリズムの実装と改良

H27年度

- ◆ 巡回セールスマン問題を解く分割統治における限定操作の導入
- ◆ 動的計画法による木状化合物の列挙アルゴリズム
- ◆ 二部グラフ巡回セールスマン問題に対する近似アルゴリズムの実験的評価

研究室の学生生活

定期ゼミ等

- 研究会（週1）：研究の進捗報告・検討
- 輪講（週1）：専門書・論文を読む（板書・会話は英語）
- 新入生ゼミ（前期）：4回生，外部からの新M1向け
- 列挙グループゼミ：化学グラフ列挙メンバーによる打ち合わせ会

研究テーマ：選択指定（応相談），成果が出れば国内外での会議で発表

修士論文：全員英語で書く

国際会議，学術雑誌
への掲載を目指す。

設備：机，パソコン，ノートPCなど充実

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，プログラミングなどについて興味のある方は
離散数理研究室をのぞいてみてください！

<http://www-or.amp.i.kyoto-u.ac.jp/>