

研究報告書

「決定グラフを用いた組合せ最適化問題に対する統一的解法の研究」

研究期間：2018年10月～2020年3月

研究者番号：50163

研究者：石島 正和

1. 研究のねらい

本研究では、組合せ最適化問題に対する一般的かつ効率的な解法の構成を目指す。組合せ最適化問題は、複数の選択肢から所望の制約を満たし、かつ、与えられた目的関数を最大化する組合せを発見する問題である。一般的に、組合せの候補数は指数的に増大するため、組合せ最適化問題を解くには指数的な時間を要する。そのため組合せ最適化問題では厳密な最適解だけでなく、近似的な解を得る研究も多くなされている。組合せ最適化問題は非常に基本的な問題であり、現実の様々な問題や、人工知能・機械学習で扱う問題の部分問題として多く現れる。現状では、限られた制約と目的関数の組に対して、個別に解法が提案されている。そのため、制約の修正や追加、目的関数の変更に対して、解法を変更する必要がある。本研究では、決定グラフと呼ばれる制約をコンパクトに表現するグラフ構造を用いることで、組合せ最適化問題に対する統一的な解法の構成を目指す。

決定グラフとは論理関数や集合族をコンパクトに表現するグラフ表現である。組合せ最適化問題における制約が論理関数で与えられるとき、また、選択肢が集合族として与えられるとき、それらを決定グラフで表現することで、それを効率的に扱うことが可能になる場合がある。例えば、選択肢の数が指数的に多い場合であってもその決定グラフは多項式サイズになる例が存在する。また決定グラフの最大の特徴として、様々な演算を提供する点が挙げられる。例えば、制約を表現する決定グラフが与えられた場合、その決定グラフを展開することなく、制約を満たす選択肢の数え上げや、線形関数を最大化するような選択肢の発見、ある分布に従う選択肢のサンプリングなどが効率的に実行可能である。つまり組合せ最適化問題が与えられたとき、その選択肢を表現する決定グラフが効率よく構成可能であり、かつ、解きたいタスクを決定グラフが提供する演算の組合せによって解決できるのであれば、その問題は効率的に解けることを意味する。

本研究では、決定グラフとその演算によって解ける問題を増やすために、主に以下の2点について取り組む。

- ① 決定グラフが提供する演算の種類を増やす
- ② 決定グラフを効率的に構成する手法を増やす

2. 研究成果

(1) 概要

「1. 研究のねらい」で述べたように、本研究課題では主に①決定グラフの演算の充実、②決定グラフの構成法の充実、を目標とした。これらの目標に対して具体的には以下の新たな演算、および決定グラフの作成方法を提案した。

1. 与えられた様々な頑健性の基準を満たすネットワーク全体を表現する決定グラフを効率的に構成する手法を考案した。これと決定グラフの演算を組み合わせることで、与えられた頑健性の基準を満たすネットワークの中からさらに条件を満たすものを効率的に得ることができることを確認した。
2. 決定グラフが提供する線形関数最大化演算の逆問題を解く演算を新たに考案した。これにより、組合せ相関検定の P 値を効率的かつ厳密に計算できることを示した。
3. 与えられたネットワーク(有向グラフ)の強連結部分グラフ全体を表現する決定グラフを効率的に構成する手法を考案した。これにより与えられたネットワークの信頼度(耐故障度)を効率的かつ厳密に計算できることを示した。

なおこれらの番号は「5. 主な業績リスト」の「(1) 論文(原著論文)発表」の順番と対応付けている。1, 3 の結果は②の決定グラフの構成法に対応しており、2 の結果は①の決定グラフの演算に対応している。これらの手法は新たな構成法と新たな演算を提案するだけでなく、それを具体的な現実の問題に適用している。これらの結果と既存の構築法・演算と組み合わせることで、更に複雑な問題や重要な問題が効率的に解けることが期待される。

各手法の詳細については次節で述べる。

(2) 詳細

研究テーマ①「決定グラフが提供する演算の種類を増やす」

本研究課題では、線形関数最大化の逆問題を解く演算を新たに考案した。線形関数最大化演算とは、選択肢の集合を表現する決定グラフと線形関数が与えられたとき、選択肢の中から線形関数の値を最大化する選択肢を発見する演算である。例えば、予算制約を満たす買い物(商品の組合せ)の中で、商品の価値の総和を最大化する買い物を発見したり、与えられたネットワーク上の現在地と目的地を結ぶパスのうち、所要時間が最小であるパスを選択したりできる。

線形関数最大化の逆問題とは、線形関数を定義する重みは未知であるが、その最大値がわかったとき、背後にあると考えられる全ての線形関数(重み)を出力する問題である。本研究課題では重みが 0 か 1 の 2 種類であるような線形関数を考え、線形関数最適化問題の逆問題解(考えられる重み全体)を決定グラフとして出力する。この演算は、観測から背後の線形関数を推定するために利用可能である。本研究プロジェクトではこの演算を利用することで、組合せ的相関検定が効率的に実行できることを示した。

組合せ相関検定とは、グラフ構造とその頂点上(または辺上)の観測が与えられたとき、その観測がグラフ構造に依存して得られているか、または、グラフ構造とは独立に得られているかを検定することである。例えば、都道府県別のインフルエンザの発症率を観測として得たとき、インフルエンザの流行に地域性があるか・ないかを検定できる。また別の例として、侵入者を検知するためのセンサネットワークが与えられたとき、センサの反応が侵入者か・ノイズかを検定できる。この組合せ的相関検定を行うには、現在の観測の Scan 統計量とその P 値を計算する必要がある。Scan 統計量は線形関数の形をしており、その P 値とは Scan 統計量が得られた観測の Scan 統計量の値以上である全ての観測(重み)の確率和である。よって線形関数最大化の逆問題を解く演算により Scan 統計量の P 値は効率的に計算可能となる。4

7都道府県の観測に対して、愚直にP値を計算する場合は数億年の時間を要するが、本手法を用いれば、1日でそのP値を正確に計算することが可能である。

研究テーマ②「決定グラフを効率的に構成する手法を増やす」

本研究課題では、2つの決定グラフを構成する手法を考案した。1つ目の手法は、ネットワークの構成をデザインする際に、与えられた頑健性の基準を満たすネットワークの構成候補全体を表現する決定グラフを構成する。2つ目の手法は、与えられた強連結なネットワークの部分グラフのうち、強連結性を保っているもの全体を表現する決定グラフを構成する。1つ目の手法は、既に知られている決定グラフを構成法と演算を組み合わせることで、ネットワークデザインの頑健さの指標として知られている様々な性質を有するネットワークを表現する決定グラフを構成する。2つ目の手法は、決定グラフを構成する代表的な手法であるフロンティア法と呼ばれる手法によって、強連結な部分グラフ全体を表現する決定グラフを構成できることを示した。強連結な部分グラフ全体を表現する決定グラフを用いれば、ネットワークの信頼性が厳密に計算可能である。よってこれらの手法を用いれば、ネットワークデザインにおいて、頑健性や信頼性が一定以上であるようなネットワークを構成することが可能となる。

上記2つの研究テーマにより、決定グラフを構成できる制約、決定グラフを用いて解けるタスクがより広がった。これらとこれまでに知られている構成法と演算を更に組み合わせることで、まだ効率的な解法が知られていない様々な組合せ最適化問題に対して、効率的な解法を与えることが可能となると期待される。

3. 今後の展開

組合せ最適化問題は、様々な分野の現実問題として出現する。本研究課題では、この組合せ最適化問題に対して、決定グラフを用いた統一的な解法を与えるため、決定グラフの構成できる制約と決定グラフによって解けるタスクを充実させた。更にこれらが充実していけば、多種多様な組合せ最適化問題が決定グラフという単一の枠組みで効率的に解くことが可能となる。例えば、材料系や創薬、医療といった分野では、現実の問題と数理的な問題にはギャップがあることが多く、数理的な問題を解いたとしても期待される材料や薬ができないことは多い。そのような場合、結果に応じて数理的な問題を変更したり、新たに定式化したりする必要がある。一般的に問題が変われば解法も変わるが、統一的な枠組みが存在すれば、解法は変更する必要がないため、定式化と検証のループをより効率的に回すことが可能になる。このように、組合せ最適化問題に対する統一的な枠組みを構成できれば、様々な分野において最適化に基づく知識発見が加速し、産業的にも科学的にも重要な発見・発明につながると期待される。

4. 自己評価

・研究目的の達成状況

「2. 研究成果」に述べたように計画時に掲げた2つのテーマの双方において、一定以上の成果が得られた。

・研究の進め方

与えられた予算をすべて執行し、研究に必要な計算機を購入した。本研究課題で開発したアルゴリズムは、組合せ爆発的に計算メモリを利用するが、本予算で購入したPCらにより、十分な計算機実験を行うことができた。

・研究成果の科学技術及び学術・産業・社会・文化への波及効果

「3. 今後の展開」にも述べたように、組合せ最適化は現実の問題に数多く表れ、それらを統一かつ効率的に解けることは、これまで知られている多くの問題をより現実的な時間で溶けるようになるだけでなく、これまでは効率的な時間で解くことができないと信じられており、定式化さえされていなかったような問題も解けるようになる可能性がある。本研究課題では組合せ最適化問題に対する統一的な解法を構成するための要素技術を複数開発に成功しており、今後の更なる発展により、複雑な現実問題を容易に解ける基盤作りの礎になると期待される。

・研究課題の独創性・挑戦性

一般的に組合せ最適化問題は理論的に効率的に困難であることが知られている問題を多く含む、非常に難しい問題のクラスである。これに対して統一的な解法を与えることは非常に重要かつ学術的にも挑戦的な課題である。本研究課題では、これに対して決定グラフを用いてアプローチした。決定グラフで表現することは組合せ的に多くなる対象を圧縮して処理することを可能にし、決定グラフの演算を増やすことは圧縮したまま処理できるタスクを増やす。課題採択中はこのアプローチの有用性と専門性を認められ、国内の機械学習の代表的なワークショップである IBIS と、オペレーションズリサーチの中心となるワークショップである RAMP で招待講演を行った。これにより、本アプローチが国内の多くの研究者に認知された。

5. 主な研究成果リスト

(1) 論文(原著論文)発表

1. Hirofumi Suzuki, Masakazu Ishihata, Shin-Ichi Minato, Designing Survivable Networks with Zero-suppressed Binary Decision Diagrams. The 14th International Conference and Workshop on Algorithms and Computation (WALCOM-2020), 2020.
2. Masakazu Ishihata, Takanori Maehara. Exact Bernoulli Scan Statistics by Binary Decision Diagrams. The 28th International Joint Conference on Artificial Intelligence (IJCAI-2019). 2019.
3. Hirofumi Suzuki, Masakazu Ishihata, Shin-ichi Minato, Exact Computation of Strongly Connected Reliability by BDDs

(2) 特許出願

研究期間累積件数: 1 件

1. 発 明 者: 石畠正和, 前原貴憲
発明の名称: スキャン統計量およびその P 値の厳密計算法
出 願 人: NTT(出願人), 理化学研究所

(2) その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

1. 石畠正和: “人工知能・機械学習における決定グラフ”, 第 31 回 RAMP 数理最適化シンポジウム (RAMP2019), November, 2019.
2. 石畠正和: “離散構造処理系の機械学習への応用”, 第 21 回情報論的学習理論ワークショップ (IBIS-2018), November, 2018.