

様式VI

博士学位論文調査報告書

論文題目 On Enumeration of Tree-Like Graphs and Pairwise Compatibility
Graphs

(木状グラフ及び対互換性グラフの列挙)

申請者氏名 Naveed Ahmed Azam

最終学歴 平成 25 年 02 月
クエイド・イ・アザム大学大学院理学研究科数学専攻修士課程修了
令和 3年 3月
京都大学大学院情報学研究科数理工学専攻博士後期課程
研究指導認定見込

学識確認 令和 年 月 日 (論文博士のみ)

論文調査委員 京都大学大学院情報学研究科
(調査主査) 教授 永持 仁

論文調査委員 京都大学大学院情報学研究科
教授 太田 快人

論文調査委員 京都大学大学院情報学研究科
教授 山下 信雄

(続紙 1)

京都大学	博士 (情報学)	氏名	Naveed Ahmed Azam
論文題目	On Enumeration of Tree-Like Graphs and Pairwise Compatibility Graphs (木状グラフ及び対互換性グラフの列挙)		
<p>(論文内容の要旨)</p> <p>本論文では、木状ポリマーポロジを列挙する方法、および、対互換性グラフを列挙する方法について研究を行った。化合物の分子構造を特徴付ける概念には、化学グラフから外縁の非閉路的部分構造を削除し、残りの閉路的構造における経路を短絡化することで得られるポリマーポロジと呼ばれる多重グラフ構造が知られている。与えられた節数および閉路指数を有するポリマーポロジの列挙は非常に困難な問題であるが、本論文では、形状が木状グラフに自己閉路が付与された場合について高速な列挙アルゴリズムが設計できることを示した。まず、与えられた節点数、閉路指数を有する木状ポリマーポロジの総数を数える問題に対して、対象構造間に成り立つ漸化式を導き、これに基づき、列挙対象を具体的に構築することなく総数を算出するアルゴリズムを設計し、その理論的計算量の導出を行うとともに、実装の計算効率の有効性についても実験を通じて確認を行っている (第2章)。次に、木状ポリマーポロジを実際に構築して列挙するアルゴリズムの設計を行った。同型なもの重複生成を防ぐために、対象構造の標準形を定義し、標準形のサブクラス間で成り立つ再帰的關係式を導出することで、動的計画法に基づく列挙アルゴリズムを設計することに成功している。この計算量が対象構造1個当たり線形時間、線形領域であることを理論的に解析し、実装した提案法が実際に高速に対象構造を列挙することを確認している (第3章)。</p> <p>本論文では、次に、生物の進化を表す系統樹の構築に応用を持つグラフの概念である対互換性グラフについて研究を行った。枝に実数値重みをもつ木において、木の葉の対の距離がある上下限の値の範囲内にあるときに、葉の対間に枝を張るという規則により導出されるグラフが対互換性グラフである。この導出の逆問題である、与えられたグラフが対互換性グラフであるかどうかの判定は計算論上非常に困難な問題である。本論文では、グラフが対互換性グラフであるための幾つかの必要条件、十分条件を導いている。さらに、二者択一定理に基づき、グラフに対し、逆像の木などが指定された場合に、二つの線形計画問題を定式化している。一つはグラフが対互換性グラフであるときに限り実行可能となり、他方はグラフが対互換性グラフでないときに限り実行可能となる。いずれの場合でも線形計画問題の解が、対互換性グラフであること、あるいはそうでないことを裏付ける数学的証拠の役割を果たす (第4章)。導出した十分条件、必要条件に基づき、与えられた節点数を持つ対互換性グラフを列挙する方法を設計している。提案法は、互いに非同型なグラフをすべて列挙した後に、対互換性グラフであるための必要条件、十分条件に基づくスクリーニングにより、対互換性グラフの候補の集合を絞り込むことで必要な計算コストを大きく軽減している。実験の結果、節点数が8個、9個の極小な非対互換性グラフを完全に決定することに成功している。(第5章)</p>			

(論文審査の結果の要旨)

本論文では、まず、木状ポリマーポロジの列挙問題の研究を行っている。同型なグラフの重複を避けた列挙アルゴリズムで効率的なものを設計することは一般に困難である。ポリマーポロジの構造を自己閉路は許すが多重辺を持たない木構造に制限をし、これを利用して、木状ポリマーポロジにさらにサブクラスを定義し、サブクラス間に成立する総数に関する漸化式が導出することを示した。これに基づき、木状ポリマーポロジを数え上げる多項式時間アルゴリズムを設計し、実装を行った。対象構造を一切構築することなく極めて高速に作動していることは大変有用である。

本論文では、さらに、木状ポリマーポロジの生成アルゴリズムを設計している。離散構造の列挙を分枝限定法で設計した場合には後戻りの操作による計算が全体の大部分を占めるようになり、対象構造が大きくなると計算効率が急激に悪くなる。本論文では、動的計画法による列挙アルゴリズムを設計するために、木状ポリマーポロジのサブクラス間に成立する再帰的關係式を導出し、節点数 n の木状ポリマーポロジを1個当たり $O(n)$ 時間で構築できる方法を設計・実装した。分枝限定法によらず、動的計画法のパラダイムで高速アルゴリズムが設計できた点で意義が大きい。

本論文では、次に、対互換性グラフの列挙に取り組んでいる。グラフが対互換性グラフであるか否かの判定は、実数値のパラメタを含む定義に従うと有限回の計算では行えない。また、答えが非対互換性グラフである場合には、例え有限時間アルゴリズムが設計できたとしても、答えの正当性を検証する証拠は手に入らない。本論文では、この判定問題を有限時間で解くために、二つの線形計画問題を定式化し、与えられたグラフが対互換性グラフであるとき、その時に限り、前者が実行可能、後者が実行不可能となることを証明した。非対互換性グラフの場合に、後者の実行可能解が答えの数学的証拠となる。計算コストの高い逆問題を解き直すことなく、証拠の実行可能性を調べるだけで極めて高速に正当性の確認を行うことができる。このような答えの正当性の証拠の構築まで注意を払った研究成果は意義深いと考えられる。さらに、本論文では、列挙に必要な総計算時間を大幅に圧縮するために、グラフが極小な非対互換性グラフであるための必要条件、十分条件を興味深いグラフ論的命題の形で導出している。

以上述べたように、本論文におけるグラフ構造の列挙の研究においては、アルゴリズム設計の立場から計算効率を高めるための構造に関する理論が導かれ、提案法の実装も高い計算性能を発揮しており、本論文には大きな学術的価値が認められ、本研究は博士学位論文にふさわしい高度な内容を持っているものと高く評価できる。

以上の点について確認し、令和3年2月15日、論文内容とそれに関連した口頭試問を行った結果、合格と認めた。本論文のインターネットでの全文公表についても支障がないことを確認した。

要旨公開可能日： 年 月 日以降