

[MPS]

数理モデルの応用技術

「数理モデル化と問題解決」は、およそ、現実問題を解決する者なら誰でも最初を経なければならぬ段階である。

「数理モデル化と問題解決」における研究は、大雑把に見ると、次の三つに大別される。

- (1) 現実問題から数理的モデルへの抽象化・定式化に関する研究
- (2) 得られたモデルの現実的取り扱いのための加工・整理に関する研究
- (3) モデル自体に含まれるアルゴリズム的要素に関する研究

(1) では、あらゆる現実問題が登場するので、問題の数だけ研究があるといっても過言ではない。分野は、工業生産、経営・管理、行政、交通・運輸、予測、教育、知能など、広範囲である。定式化された結果としては、最適化モデル、グラフ・ネットワークモデル、確率モデルなど、多様である。「数理モデル化と問題解決 (MPS)」研究会が発足して以来、多種多様な現実問題のモデル化が紹介されてきた。ここでは一例として、電子機器組み立ての現場で発生した「基板への部品装着スケジュールの最適化」を挙げることにする (1.1 節)。

(2) は、得られたモデルがコンピュータを用いて解くには大きすぎたり複雑すぎたりする場合に、簡略化や単純化などの整理をするときに現れる。そのような整理はモデル化の段階で済ませておくべきであるという主張もあり得るが、さまざまなモデル化に共通する整理の手法がある場合に、その共通点を取り上げて横断的に論ずることに意味があると考えらるならば、それも重要な研究であるといえる。類似のものをひとまとまりにするためのクラスタリング、グラフの支配集合・最大独立集合・彩色数などはこの方向の研究である。ここでは一例として、グラフにおけるクリーク (最大完全部分グラフ) を求めるアルゴリズムを挙げることにする (1.2 節)。

- (3) には、遺伝的アルゴリズム、シミュレーテッ

ドアニーリング法、セルオートマトン法などの手法が含まれる。これらは、オーソドックスなアルゴリズム研究の観点からはやや異端な手法であり、必ずしも最適解・準最適解を与えてくれるわけではなく、高速とは限らない。にもかかわらず、これらの手法がしばしば注目されるのは、人間社会や自然界の法則が必ずしも最適化に沿っているわけではないと思われる場合に、それらの法則に近いモデルやアルゴリズムをあてはめてみることに意義が見いだされるからである。これらの手法を用いて問題を解いた報告だけでは研究論文としての価値は小さいが、そこに至るモデル化やアルゴリズムにおける特徴的なことを追求することには価値がある。

1.1 基板への部品装着スケジュールの数理モデル化

今日では、電子機器の回路はプリント基板上に構成されるのが普通である。基板上に部品を取り付けるのは、機械 (装着機) によって行われる。装着機の動作はさきわめて高速であり (毎秒 10 個以上)、ハードウェア的には高速化の限界に達しているが、部品の順序づけに関しては、解決すべき課題が多い。今日の装着機の主流は、

- 部品はテープに貼り付けられたリールで供給され、ヘッドに取り付けられてノズルによって吸着されて基板上の指定された場所に取り付けられる
- ノズルは数種類あり、部品とノズルの間には適合・不適合の関係が決められている
- ヘッドには複数のノズルが取り付けられる

というタイプである。

ヘッドは部品供給部と基板の間を往復して部品を装着する。目標は装着時間を最短にすることである。

ヘッドの移動距離を最短にするというのは素朴に思いつくことであるが、ヘッドの加速度まで考慮しなければならない。また、部品供給部における部品の並び、ヘッドにおけるノズルの並び、基板装着時におけるノズル交換の手間、なども考慮しなければならないので、装着点を最短経路で結ぶという単純なモデルでは不十分である。

部品点数の多い基板は、複数の装着機を並べたラ

インで装着される。この場合は、ラインの効率は最も時間を要する装着機で決まるので、装着機間の時間のバランスが問題となる（ラインバランシング問題）。この場合は、個々の装着機における装着時間を見ながら、どの部品をどの装着機に割り付けるかを決めなければならない、きわめて複雑な問題となる。複雑さを避けるために、個々の装着機における装着時間は適当な関数で見積もって、部品をバランスよく装着機に割り付けるという手法がとられることが多いが、本当の最適化となっているのかどうか、検証が必要である。

複数のラインがある工場では、どの基板をどのラインで扱うかという問題も生ずる。

また、ある基板を処理した後で別の基板の処理に取り掛かるには、ノズル・部品の並びを変更しなければならないという「段取り」が発生するので、基板の処理順序を、納期を含めて、考慮しなければならない。この場合は、個々の基板を最短時間で処理できなくても、ノズル・部品の並びを異なる基板で共通にしまって、段取りの時間を短縮する方が「期」における全体の効率が向上することもある。

顧客によっては、同じ基板を毎日少しずつ納品することを要求されることがある（顧客にとっての在庫ゼロ目標）が、生産側で同じ基板をまとめて作って保管しておくことは避けた（生産側にとっての在庫ゼロ目標）。

このように、部品装着には、無数の問題とモデル化が存在する。

1.2 最大クリーク問題への数理モデル化

(1) 最大クリーク問題

多くの問題は個々の対象物とそれらの間の関係として表される。対象物を節点で表し、節点間に所定の関係が成立している場合には枝を張ると、その問題は節点集合 V と枝集合 E から成るグラフ $G = (V, E)$ となる。グラフ中の部分グラフで、その中のすべての節点対が枝で結ばれているとき、この部分グラフはクリークと呼ばれ、元の問題においては、その中の全対象物間に所定の関係が成立していることを意味する。グラフ中のクリークで、真に大きいクリークに含まれないクリークは極大クリークと呼ば

表1 テストグラフに対する実行時間 [sec]

テストグラフ	dfmax ¹⁾	New ⁴⁾	ILOG ⁵⁾	MCS ⁷⁾
brock400_4	10,633		4,483	248
MANN_a27	$> 10^5$	$> 2,232$	14	0.8
p_hat500-2	133	96	24	0.7
san400_0.7_2	$> 10^5$	113	50	0.1
san400_0.9_1	$> 10^5$		1,259	0.1

れ、そのうちで節点数が最大であるものは最大クリークと呼ばれる。

最大クリーク抽出問題は典型的なNP困難問題であり、大きい問題を解くことは非常に難しいと考えられている。しかし、多くの問題が最大クリーク抽出あるいはそれに関連した問題として数理モデル化できることが分かっており、従来から多くの研究がなされてきた¹⁾²⁾。特に、近年になり最大クリーク抽出アルゴリズムの効率化が進展し^{3)~7)}、それにより一層多くの問題解決への応用が展開されてきている³⁾。

ここで、最大クリーク抽出アルゴリズムの最近の高速化発展の一端を、表1に示す⁷⁾。

(2) 最大クリーク問題の応用

1900年代末までの最大クリーク抽出アルゴリズムとその応用については、文献2)に優れたサーベイが記載されているので、詳細は同文献を参照されたい。そこにおける応用問題 (Selected Applications) としては、符号理論、故障診断、コンピュータビジョンとパターン認識などが具体的文献とともに挙げられている。

ここで、符号理論の主要課題である誤り訂正符号構成問題において、長さ n の 0, 1 符号については、考え得る対象物は 2^n 個のすべての 0, 1 符号となり、これらをグラフの節点とする。実際に使用する符号が d 重誤り訂正可能であるためには各符号間のハミング距離が $2d + 1$ 以上離れていることが必要であり、この条件を満足している節点対だけに枝を張ってグラフを構成する。そこにおける最大クリークを抽出すると、その節点から成る符号の集合は、 d 重誤り訂正可能で最大個数の符号の集合を成す。ハミング距離以外にも考慮すべき条件がある場合には、それらも考慮して枝を張ったグラフを考えればよい。

この他の問題に対しても、同様にして問題に対応したグラフ上の最大クリーク抽出問題にモデル化が実現されれば、後は最大クリーク抽出アルゴリズムを適用することにより元の問題が解決されることとなる。

なお、二つの関係構造 (relational structure) のマッチングはそれらの直積空間中のクリークとして表現できる⁸⁾。これにより、最大クリーク抽出は画像処理分野などへの応用も広がっている。

2000年代以降において、クリーク抽出は生物学、化学分野においても特に盛んに活用されるようになり、文献9)において多くの新しい文献とともに研究成果が紹介されている。極大クリークやそれを緩和した疑似極大クリークを効率よく列挙するアルゴリズムも最近提唱されている^{10) 11)}。

効率的な最大/極大クリーク抽出アルゴリズムやその拡張アルゴリズムを基として、文献2) 9) 中以外にも、次のような応用分野への適用が発表されている³⁾。

- ・ バイオインフォマティクス^{12) 13) 14)}、他
- ・ 画像処理¹⁵⁾、他
- ・ 量子論理回路の最適設計
- ・ DNA 計算におけるDNA系列設計
- ・ データマイニング^{16) 17)}、他

今後、最大クリーク抽出あるいはそれに関連した組合せ最適化手法の一層の高速化に合わせ、さらなる応用への展開が期待される。

(中森眞理雄, 富田悦次)

[参考文献]

- 1) Johnson, D. S. and Trick, M. A. (Eds.): Cliques, Coloring, and Satisfiability, DIMACS Series in Discrete Mathematics and Theoretical Computer Science, Vol. 26, American Mathematical Society (1996).
- 2) Bomze, I. M., Budinich, M., Pardalos, P. M. and Pelillo, M.: The maximum clique problem, In: Du, D.-Z. and Pardalos, P. M. (Eds.): Handbook of Combinatorial Optimization, Suppl. Vol. A, Kluwer Academic Publishers, pp. 1-74 (1999).
- 3) Tomita, E.: The maximum clique problem and its applications—Invited Lecture—, IPSJ SIG Technical Report, 2007-MPS-67/2007-BIO-11, pp. 21-24 (2007).
- 4) Östergård, P. R. J.: A fast algorithm for the maximum clique problem, Discrete Applied Mathematics, Vol. 120, pp. 197-207 (2002).
- 5) Régin, J.-C.: Using constraint programming to solve the maximum clique problem, CP 2003, Lecture Notes in Computer Science, Vol. 2833, pp. 634-648 (2003).
- 6) Tomita, E. and Kameda, T.: An efficient branch-and-bound algorithm for finding a maximum clique with computational experiments, Journal of Global Optimization, Vol. 37, pp. 95-111 (2007).
- 7) Tomita, E., Sutani, Y., Higashi, T., Takahashi, S. and Wakatsuki, M.: A simple and faster branch-and-bound algorithm for finding a maximum clique, WALCOM 2010, Lecture Notes in Computer Science, Vol. 5942, pp. 191-203 (2010).
- 8) Barrow, H. G. and Burstall, P. M.: Subgraph isomorphism, matching relational structures and maximal cliques, Information Processing Letters, Vol. 4, pp. 83-84 (1976).
- 9) Butenko, S. and Wilhelm, W. E.: Clique-detection models in computational biochemistry and genomics—Invited Review—, European Journal of Operational Research, Vol. 173, pp. 1-17 (2006).
- 10) Tomita, E., Tanaka, A. and Takahashi, H.: The worst-case time complexity for generating all maximal cliques and computational experiments, Theoretical Computer Science, Vol. 363, pp. 28-42 (2006).
- 11) Uno, T.: An efficient algorithm for solving pseudo clique enumeration problem, Algorithmica, Vol. 56, pp. 3-16 (2010).
- 12) Strickland, D. M., Barnes, E. and Sokol, J. S.: Optimal protein structure alignment using maximum cliques, Operations Research, Vol. 53, pp. 389-402 (2005).
- 13) Bahadur, D. K. C., Tomita, E., Suzuki, J., Horimoto, K. and Akutsu, T.: Protein threading with profiles and distance constraints using clique based algorithms, Journal of Bioinformatics and Computational Biology, Vol. 4, pp. 19-42 (2006).
- 14) Li, X., Wu, M., Kwok, C.-K. and Ng, S.-K.: Computational approaches for detecting protein complexes from protein interaction networks: a survey, BMC Genomics, Vol. 11 (2010).
- 15) 堀田一弘, 富田悦次, 高橋治久: 最大クリーク抽出に基づく向きの変化に依存しない人物の顔検出, 情報処理学会論文誌, Vol. 44, SIG14 (TOM9), pp. 57-70 (2003).
- 16) 米森力, 松永務, 関根純, 富田悦次: クリークを用いた企業間関係の構造分析, 日本データベース学会論文誌, Vol. 7, pp. 55-60 (2009).
- 17) Matsunaga, T., Yonemori, C., Tomita, E. and Muramatsu, M.: Clique-based data mining for related genes in a biomedical database, BMC Bioinformatics, Vol. 10 (2009).