

論文の内容の要旨

On the geometry on the periodic graphs: analysis by computation of the graph-metric and application to fast geometric algorithms

(周期グラフ上の幾何について: グラフ距離関数計算による
解析及び高速幾何アルゴリズムへの応用)

氏名 夫 紀恵

周期グラフとは単一の有限グラフを \mathbb{Z}^d 格子上に無限個並べ、各頂点を規則正しくつなぐことによって得られる無限グラフである。周期グラフは結晶格子、一様漸化式、VLSI 回路など様々なもののモデルとして、その基礎的なグラフ理論的性質が結晶学及び計算機科学の分野で調べられてきた。本論文では、距離埋め込みによるグラフ上高速幾何アルゴリズム設計において周期グラフが距離空間とグラフとの橋渡しをすることが期待できること、及び近年のナノテクノロジーの発展により浮上した平面的周期グラフ上の原子再配置問題において高速幾何アルゴリズムが有効であるということをもととして、周期グラフ上の幾何を解析する問題を扱う。

周期グラフ上の幾何は結晶学の観点からも重要な問題であり、数学的手法により解析がなされているが、結果は近似を与えるに留まっており、幾何厳密アルゴリズムを得るのに直接使うことはできない。我々は、計算機代数、離散幾何及び周期グラフにおける議論を活用し、周期グラフ上距離関数を計算する手法を与える。これにより、周期グラフ上の幾何を正確に解析することが可能となる。距離埋め込み理論からの動機及びナノテクノロジーからの動機から、我々は特に平面的周期グラフ及び H 埋め込み可能周期グラフの幾何をもつ凸性を明らかにし、実際に平面上の高速な計算幾何的アルゴリズムが周期グラフに適用可能であることも示す。

具体的には、まず Höfting, Wanke らにより最短路問題が整数計画問題として定式化されていることに着目し、この整数計画問題の解析による距離解析を行う。コヒーレンスと

いう組合せ的性質を定義し、コヒーレントな周期グラフ上では距離が整数線形計画問題により計算できることを示す。コヒーレンスは種々の結晶格子が満たすような性質である。さらに、距離関数計算に必要となる整数線形計画問題をパラメタ化したパラメトリック整数計画問題のための計算代数的アルゴリズムを提案する。コンパイラ最適化などへの応用からパラメトリック整数計画問題アルゴリズムは多く研究されているが、その出力は必ずしも最小ではない。本論文では、これまでのアルゴリズムとは異なる、トーリックイデアルの標準対分解を用いた計算代数的アルゴリズムを提案し、標準対分解の持つ幾何的性質により、このアルゴリズムが理論的に最小の解を出力することを示す。これにより解の幾何の解析が可能となる。さらに、標準対分解のための論理式双対化アルゴリズムによる高速実装を提案し、計算機実験により、従来実装が苦手としていたパラメタの個数が多い場合のパラメトリック整数計画問題で、我々のアルゴリズムが高速である場合があることを示す。また、トーリックイデアルの理論を用いて平面的周期グラフの単模性を示すことで、コヒーレントな平面的周期グラフ上では最短路問題が本質的に簡単になり、一般に NP 困難である最短路問題に対して、強多項式時間アルゴリズムが可能となることを示す。

続いて、 h 埋め込みを実際に計算することによる距離解析を行う。Chepoi, Deza, Grishukhin らによって提案された平面グラフのための h 埋め込みアルゴリズムは無限グラフにも適用可能であるが、一般の周期グラフへの拡張は難しい。本論文では Eon によって結晶の対称性に関する不変量として提案された測地線束を用いた、一般の周期グラフのための h 埋め込みアルゴリズムを提案する。

最後に、原子再配置問題のための高速アルゴリズムを考える。Călinescu, Dumitrescu, Pach らの結果から、この問題は最小重み二部マッチング問題と動作計画問題とに分かれることが分かっている。まず上でのグラフ上距離に関する結果を用い、平面上の計算幾何アルゴリズムにより周期グラフ上のボロノイ図が高速に計算できることを示すことで、Vaidya による最小重み二部マッチングのための幾何アルゴリズムを利用可能とする。グラフ上のボロノイ図としては、組合せ的なアルゴリズムにより算出される Erwig のグラフボロノイ図や、正方格子上的幾何に着目した幾何アルゴリズムにより算出されるデジタルボロノイ図があるが、本論文で提案するアルゴリズムはこれらとは全く異なる新しいアプローチによるものである。また、測地線束による最短路の定数サイズ表現を用いた、動作計画問題のための高速アルゴリズムを与える。具体的に、Chavey が列挙したタイリングのうち、Deza, Grishukhin, Shtogrin らによって h 埋め込み可能であると示されたものを調べることで、多くの結晶構造でこの定数サイズ表現が可能であることも示す。