Lagrangian Relaxation and Pegging Test for Clique Partitioning Problems

鮏川　矩義

（筑波大学システム情報工学研究科社会システム工学専攻　現所属：東京工業大学大学院社会理工学研究科経営工学専攻）
指導教員：山本芳嗣 教授

1. はじめに

クリーク分割とは，完全無向グラフ (V,E) における枝集合 $A \subseteq E$ で，頂点集合 V のある分割 $\{V_1,\dots,V_p\}$ が存在して，$A = \bigcup_{q=1}^{p} \{\{i,j\} \mid i,j \in V_q\}$ が成立するものである．図 1 はその一例である．

クリーク分割問題は，正負を問わない枝重みが与えられたとき，重みの総和を最大にするクリーク分割を求める問題であり，1989 年に Grötschel と Wakabayashi [2] によって提唱された．クラスタリングと親和性が高く，実社会への応用も盛んに研究されている．既存手法では，各枝に 0-1 変数を与える定式化が用いられているが，大量の変数と制約式を扱うことになり，頂点数が 158 以下の問題例しか解けていない．

しかし，大量の変数のうち，特に実社会の問題例では，最適解での値が簡単に推定できるものも多く含まれており，それらの値を固定することで，解きやすい問題例に変換できる可能性がある．これを実現する方法としては，釘付けテストが知られている．クリーク分割問題の場合，例えば，ある変数が 1 に固定されれば，図 2 に示すように，対応する枝を縮約できる．

本論文では，クリーク分割問題の構造を利用した釘付けテストを提案する．また，釘付けテストの実現に必要となるラグランジュ緩和を効率よく実行するための修正方法を提案する．

2. クリーク分割問題

頂点集合を $V = \{1,\dots,n\}$ とし，各枝 $\{i,j\}$ $(i<j)$ に 0-1 変数 x_{ij} を与え，c_{ij} $(i<j)$ をその重みとすると，以下の 0-1 整数計画問題 (P) として定式化できる [2]．

$$
\begin{array}{lll}
\text{最大化} & \displaystyle\sum_{i<j} c_{ij}x_{ij} & \\
\text{制約} & x_{ij} \in \{0,1\} & (i<j) \\
& x_{ij} + x_{jk} - x_{ik} \le 1 & (i<j<k) \\
& x_{ij} - x_{jk} + x_{ik} \le 1 & (i<j<k) \\
& -x_{ij} + x_{jk} + x_{ik} \le 1 & (i<j<k)
\end{array}
$$

3 種類の不等式制約は，どれも本質的には同じであり，枝集合の推移性を要請する．最適解での値が必ず 0 という「確証が得られた」変数に対応する枝集合を P_0 とする．同様に P_1 を定義する．目的は，釘付けテストによって，なるべく大きな P_0 と P_1 を見つけることである．以降，問題 (Q) に対して，$v(Q)$ を (Q) の最適値，$(Q \mid \cdots)$ を「$\cdots$」なる制約が追加された (Q) の子問題とする．また，v_{low} は Noising 法 [1] によって得られた $v(P)$ の下界値とする．

3. ラグランジュ緩和

釘付けテストでは，以下に示す (P) のラグランジュ緩和問題 $(LR(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v},\boldsymbol{w}))$ が土台となる．緩和の質を決定する $(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v},\boldsymbol{w})$ は乗数ベクトルと呼ばれる．

$$
\begin{array}{ll}
\text{最大化} & \displaystyle\sum_{i<j} c_{ij}x_{ij} + \sum_{i<j<k} u_{ijk}(1 - x_{ij} + x_{jk} + x_{ik}) \\
& \displaystyle\qquad + \sum_{i<j<k} v_{ijk}(1 + x_{ij} - x_{jk} + x_{ik}) \\
& \displaystyle\qquad + \sum_{i<j<k} w_{ijk}(1 - x_{ij} + x_{jk} + x_{ik}) \\
\text{制約} & x_{ij} \in \{0,1\} \quad (i<j)
\end{array}
$$

最適な乗数ベクトルを求める問題は，ラグランジュ双対問題と呼ばれ，劣勾配法によって近似的に解ける．しかし，このままの形では非常に高次元の乗数ベクトルを扱うことになるため，乗数を徐々に生成することを

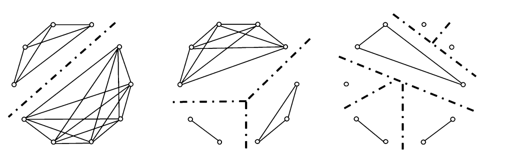

図 1　クリーク分割の例 $(|V| = 10,\ p = 2,3,6)$

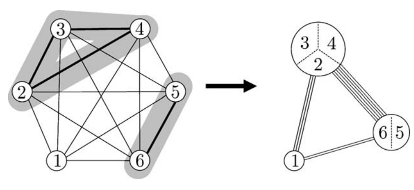

図 2　クリーク分割問題の入力例の規模縮小

提案する．

具体的には，ラグランジュ緩和問題の最適解が壊す制約を見つけ，対応する乗数を徐々に追加する．今回の場合は，大雑把に言って，正の成分がたかだか全体の約 $1/n$ 程度の最適乗数ベクトルが存在するため，考慮する乗数をうまく選べば，ほんの一部の乗数だけを考慮して良い上界値が求まる可能性がある．

4. 釘付けテスト

まず，素朴な釘付けテストを紹介する．その後で，推移性制約を利用した変数固定法と，図 2 に示した発想に基づいた変数固定法について説明する．

ラグランジュ緩和問題 $(LR(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v},\boldsymbol{w}))$ の最適解を $\bar{\boldsymbol{x}}$ とし，$r(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v},\boldsymbol{w})_{ij}$ を目的関数における x_{ij} の係数とする．このとき，以下が成立する．

定理 1 (素朴な釘付けテスト)**.**

$$v(LR(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v},\boldsymbol{w})) - |r(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v},\boldsymbol{w})_{ij}| < v_{low}$$

が満たされるならば，任意のの最適解 $\boldsymbol{x}^*$ で $x^*_{ij} = \bar{x}_{ij}$ が成立する．

ここで，$\bar{x}_{ij} = 0$ ならば $P_0 := P_0 \cup \{\{i,j\}\}$ として初期の P_0 を構成する．P_1 についても同様である．

推移性の制約を利用して P_0 と P_1 をさらに大きくすることを考える．まず，P_1 は，枝集合を二項関係と考えたとき，推移的な関係であるため，$P_1 :=$（P_1の推移閉包）とできる．次に，(V, P_1) なる無向グラフを考える．その連結成分を $\{(V_1, P_1(V_1)), \ldots, (V_t, P_1(V_t))\}$ とする．ここで，ある 2 つの連結成分 $(V_s, P_1(V_s))$ と $(V_t, P_1(V_t))$ の間に P_0 に属する枝があれば，推移性の制約から，$P_0 := P_0 \cup \{\{i,j\} \mid i \in V_s, j \in V_t\}$ と更新できることがわかる．

今，$P_1 \neq \emptyset$ であったとすれば，その枝を縮約することで小規模な問題が得られる．そして，もう一度同じ手順，すなわち，ラグランジュ緩和と釘付けテストを実行することで，新たに固定される変数が見つかる可能性や，上界値が改善される可能性がある．

しかし，枝の縮約を反映するには，いくつかのデータを書き換える必要があり，頻繁に行えば，計算時間の増大を招く．そこで，書き換えを行わずに P_1 の情報を釘付けテストに反映することを考える．本論文では，これを改良釘付けテストと呼ぶ．

枝 $\{s,t\} \notin P_0 \cup P_1$ を選び，$S_= := \{i \mid \{i,s\} \in P_1\} \cup \{s\}$，$T_= := \{j \mid \{j,t\} \in P_1\} \cup \{t\}$ と定義する．また，$ST_=$ を，$S_=$ と $T_=$ を結ぶ枝に対応する変数の添え字集合とする．このとき，以下が成立する．

定理 2 (改良釘付けテスト)**.** 定数 $\xi \in \{0,1\}$ に対し，

$$v(LR(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v},\boldsymbol{w})) - \sum_{(i,j)\in R_\xi} |r(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v},\boldsymbol{w})_{ij}| < v_{low}$$

が満たされるならば，任意のの最適解 $\boldsymbol{x}^*$ で $x^*_{st} = 1 - \xi$ が成立する．ただし，$R_\xi = \{(i,j) \in ST_= \mid \bar{x}_{ij} = \xi\} \cup \{(i,j) \mid \{i,j\} \in P_{(1-\xi)}\}$ である．

5. 数値実験

提案手法では，劣勾配法，釘付けテスト，考慮する乗数の追加の，3 ステップを繰り返し，上界値の改善が鈍くなったとき，終了する．実験に使った問題例は，大きく分けて，[2] で解かれた実社会の問題例と乱数による問題例である．

[2] で解かれた実社会の問題例は頂点数 30 から頂点数 158 までの問題がある．提案手法は，問題例を効率よく縮小し，しばしば厳密に解いている．厳密解が得られなかった問題例は「労働者の分類 (1984)」であるが，この場合にも頂点数は 34 から 8 までに減っている．

乱数による問題例では解きやすい構造がなく，頂点数が 100 を超えると，固定できる変数はほとんどない．しかし，ラグランジュ双対問題は，提案手法によってほぼ最適に解けている．

一方，[2] の問題例を模した乱数による問題例では，提案手法は効率よく規模を縮小する．例えば，頂点数 300 の問題例が，約 7 分の計算の後，頂点数 27 の問題例に変換され，P_0 の情報も付加して商用のソルバーに渡すと，数秒で最適解が求まる，などが観測された．

参考文献

[1] I. Charon and O. Hudry: Noising methods for a clique partitioning problem, *Discrete Applied Mathematics*, **154**, 754–769, 2006.

[2] M. Grötschel and Y. Wakabayashi: A cutting plane algorithm for a clustering problem, *Mathematical Programming*, **45**, 59–96, 1989.

