共正定値計画法に基づく最大安定集合問題に対するヒューリスティクス

東野　克哉
東京大学工学部計数工学科数理情報工学コース（現：東京大学大学院情報理工学系研究科数理情報学専攻）
指導教員：平井広志 東京大学准教授

1. はじめに

最大安定集合問題とは，与えられた無向グラフにおいて，どの二点も辺で結ばれていないような最大の頂点部分集合を求めるという NP 困難な組合せ最適化問題であり，符号理論や VLSI 設計などに広い応用をもつことが知られている．

最大安定集合問題には Lovász [1] による半正定値計画緩和がよく知られているが，これを基に，de Klerk and Pasechnik [2] は共正定値計画を用いた厳密な再定式化を導入した．さらに共正定値計画問題に対して，線形計画および半正定値計画に基づく近似系列を提案し，これらの系列が十分高次のとき最大安定数を正しく与えることを示した．

本研究では，最大安定集合問題と等価な共正定値計画に対する線形計画近似の最適値について新たな表式を導き，de Klerk and Pasechnik [2] の手法が Motzkin and Straus [3] の標準二次計画による再定式化を離散化したものに対応していることを明らかにする．また，得られた離散二次計画問題の各実行可能解に対応するような安定集合を求めるアルゴリズムを与えることにより，その最適解から最大安定集合を復元できることを示す．さらに，この離散二次計画問題に対して局所探索を行う単純なヒューリスティクスを提案し，計算機実験によって精度の高い安定集合を高速に得られることを確認する．

2. 共正定値計画と最大安定集合問題

$\mathcal{S}_n$ を $n \times n$ 対称行列の集合とする．$M \in \mathcal{S}_n$ が任意の非負ベクトル $x \in \mathbb{R}^n_+$ に対して $x^\top M x \geq 0$ を満たすとき，M は共正定値であるという．また，共正定値行列の全体がなす閉凸錐を共正定値錐といい，$\mathcal{C}_n$ で表す．$A_i, X, C \in \mathbb{R}^{n\times n}$，$b_i \in \mathbb{R}$ として，次の形で表される最適化問題を共正定値計画問題という：

$$\begin{array}{ll} \text{Minimize} & \mathrm{Tr}(C^\top X) \\ \text{subject to} & \mathrm{Tr}(A_i^\top X) = b_i \quad (i = 1, \ldots, m), \\ & X \in \mathcal{C}_n. \end{array}$$

$G = (V, E)$ を無向グラフとする．頂点部分集合 $V' \subseteq V$ が安定集合であるとは，任意の $i, j \in V'$ に対して $\{i, j\} \notin E$ となることをいう．最大安定集合とは G の安定集合のうち大きさが最大のものである．その大きさを最大安定数といい，$\alpha(G)$ で表す．de Klerk and Pasechnik [2] は，無向グラフ G の最大安定数 $\alpha(G)$ が次の共正定値計画問題の最適値に一致することを示した：

$$\begin{array}{ll} \text{Minimize} & \lambda \\ \text{subject to} & \lambda(I + A) - ee^\top \in \mathcal{C}_n, \\ & \lambda \in \mathbb{R}. \end{array}$$

ただし，A は G の隣接行列，n は G の頂点数，$e = (1, \ldots, 1)^\top$ である．この共正定値計画問題に対するアプローチとして，$\mathcal{C}_n$ を以下のような線形計画近似錐で置き換える方法が知られている [2]：

$$\mathcal{C}_n^r = \left\{ M \in \mathcal{S}_n \;\middle|\; P_M^{(r)}(x) \text{ の係数がすべて非負} \right\}.$$

ただし

$$P_M^{(r)}(x) := \left(\sum_{i,j=1}^n M_{ij} x_i^2 x_j^2 \right) \left(\sum_{i=1}^n x_i^2 \right)^r.$$

共正定値錐をこの近似錐で置き換えた問題の最小値を

$$\zeta^{(r)}(G) := \min\{\lambda \mid \lambda(I + A) - ee^\top \in \mathcal{C}_n^r\} \qquad (1)$$

と定義すると，近似錐の系列が包含関係

$$\mathcal{C}_n^0 \subseteq \mathcal{C}_n^1 \subseteq \cdots \subseteq \mathcal{C}_n$$

を満たすことから，

$$\zeta^{(0)}(G) \geq \zeta^{(1)}(G) \geq \cdots \geq \alpha(G)$$

が成り立つ．ここで，$r \geq \alpha(G)^2$ に対して

$$\lfloor \zeta^{(r)}(G) \rfloor = \alpha(G)$$

となることが示されている [2]．すなわち，r が十分大きいとき，問題 (1) は線形計画問題としての最大安定集合問題の定式化とみなすことができる．

 Copyright ⓒ by ORSJ. Unauthorized reproduction of this article is prohibited.

3. $\zeta^{(r)}(G)$ の公式と標準二次計画

以下では $r \geq \alpha(G)^2$ として，共正定値計画の線形計画近似に基づく定式化 (1) のような表式を与える．問題 (1) は 1 変数かつ各制約で不等号の向きが等しい単純な線形計画問題であるから，最適値 $\zeta^{(r)}(G)$ は $P_M^{(r)}(x)$ の各係数を非負にする λ の最小値の中での最大の値に一致する．このことから，多項式 $P_M^{(r)}(x)$ を具体的に展開することにより，本研究では以下のような $\zeta^{(r)}(G)$ の公式を与えた：

$$\zeta^{(r)}(G) = \max_{w \in I_n(r+2)} \frac{(r+2)(r+1)}{w^\top (I+A) w - (r+2)}. \quad (2)$$

ただし

$$I_n(r) := \left\{ w \in \mathbb{Z}_+^n \;\middle|\; e^\top w = r \right\}$$

である．また，定式化 (2) における任意の最適解 $w^* \in \arg\min_{w \in I_n(r+2)} w^\top (I+A) w$ から最大安定集合を復元するアルゴリズムを与えた．これによって，最大安定集合問題は $I_n(r+2)$ 上の離散二次関数 $w^{\mathrm{T}}(A+I)w$ の最小化問題に帰着されたことになる．この問題は，以下の Motzkin and Straus [3] による標準二次計画問題としての定式化を離散化したものに対応している：

$$\frac{1}{\alpha(G)} = \min_{x \in \Delta} x^\top (I+A) x. \quad (3)$$

ただし $\Delta = \left\{ x \in \mathbb{R}_+^n \mid e^\top x = 1 \right\}$ であり，(3) の最適解 x^* は，$\{1, 2, \ldots, k\}$ を最大安定集合として，

$$x_1^* = \cdots = x_k^* = \frac{1}{k},\ x_{k+1}^* = \cdots = x_n^* = 0$$

である．

4. 局所探索ヒューリスティクス

離散二次関数 $w^\top (I+A) w$ を最小化する $w \in I_n(r+2)$ を求めるアプローチとして，本研究では素朴な局所探索を考える．$w \in I_n(r+2)$ に対して，その近傍および台を次のように定める：

$$N(w) := \{ w + e_i - e_j \mid i, j \in \{1, \ldots, n\},\ w_j > 0 \},$$
$$S(w) := \{ i \mid w_i \neq 0 \}.$$

ここで $e_i \in \mathbb{R}^n$ は第 i 成分のみ 1 であるような単位ベクトルを表す．

この近傍を用いて，本研究では以下の局所探索ヒューリスティクスを提案した：

[局所探索]

ステップ 1：$w := \beta e$ とする．ただし β は $\beta n \geq \alpha(G)^2 + 2$ を満たすよう選ぶ．

ステップ 2：$w' \in N(w)$ を一つ選ぶ．$w'^\top (I+A) w' \leq w^\top (I+A) w$ ならば $w := w'$ とする．

ステップ 3：ステップ 2 を繰り返して，n 回連続で目的関数値が変わらなければ w を局所最適解とみなし，ステップ 4 へ進む．

ステップ 4：$i, j \in S(w)$，$\{i, j\} \in E$ なる i, j を選ぶ．$w + w_i(e_j - e_i)$，$w + w_j(e_i - e_j)$ のうち $I + A$ に対する二次形式の値が小さいほうを選び，新たに w とする．

ステップ 5：$S(w)$ が安定集合になるまでステップ 4 を繰り返す．

ステップ 6：$S(w)$ とその大きさを出力する．

5. 計算機実験

DIMACS のベンチマークグラフ [4] を用いて提案ヒューリスティクスの評価を行った．使用した計算機に搭載された CPU は 2.4 GHz Intel Core i7 であり，メモリは 16 GB である．精度はグラフの種類に依存するが，9 種類中 5 種類のグラフに対して高精度の安定集合を出力できた．計算時間については，たとえば頂点数 776 の keller5 グラフに対して 5.5 秒であった．

参考文献

[1] L. Lovász, "On the Shannon capacity of a graph," *IEEE Transaction on Information Theory*, **25**, pp. 1–7, 1979.

[2] E. de Klerk and D. V. Pasechnik, "Approximation of the stability number of a graph via copositive programming," *SIAM Journal of Optimization*, **12**, pp. 875–892, 2002.

[3] T. S. Motzkin and E. G. Straus, "Maxima for graphs and a new proof of a theorem of Turán," *Canadian Journal of Mathematics*, **17**, pp. 533–540, 1965.

[4] The Second DIMACS Implementation Challenge, http://dimacs.rutgers.edu/Challenges/

Copyright © by ORSJ. Unauthorized reproduction of this article is prohibited.