OR メモランダム

# 双対から齧る Lovászのサンドイッチ定理

松井　知己

## 1. はじめに

サンドイッチを一緒に食べませんか？ と言っても，食べるのは BLT サンド[1]でもハムサンド[2]でもありません．本日用意させていただいたのは，Lovász によるサンドイッチ定理です[3]．

論文 [1] で示された Lovász のサンドイッチ定理は，グラフのクリーク数と頂点彩色数の間にある「Lovász 数」に関する定理です．本日は，このサンドイッチ定理を一緒に食べてみましょう．

実はこのサンドイッチ（定理）を齧るには，最初の一口目に大きな口を開けねばならず，これがなかなか面倒です．（何を言っているかというと）多くの場合この定理の証明は，グラフの頂点彩色数の下界の導入から始まり，その際 orthonormal representation という概念をまず飲み込まねばなりません．これがちょっと大変なのです．そこで本日は，正面から齧るのはやめて，Lovász のサンドイッチ定理を反対側（双対）から示してみましょう．

**最適化の専門家の方へ：要するに何をするの？**

本稿では orthonormal representation の概念を導入「しない」で，最大独立集合問題の半正定値計画緩和問題の最適値として Lovász 数を導入し，そこからサンドイッチ定理を証明します．ちなみに，orthonormal representation の概念を使わない本稿のストーリーは，Lovász 数と重要な関わりのある Shannon capacity についてまったく触れることができないという欠点をもちます．本稿で Lovász 数に興味をもたれた方は，原論文 [1] や Knuth の包括的な論文 [2] をご覧ください．

## 2. 最大独立集合問題

さて最初は，最大独立集合問題から始めましょう[4]．本稿（全体）で扱う無向グラフを $G = (V, E)$ と書き，頂点集合は $V = \{1, 2, \ldots, n\}$ と表します．グラフ $G$ の独立集合とは，互いに隣接しない頂点の部分集合のことです．すなわち，頂点の部分集合 $S \subseteq V$ が独立集合であるとは，$S$ 中の任意の頂点対間に枝が存在しないことです．ただし，空集合も独立集合と呼ぶことにします．独立集合のうち，サイズ（要素数）が最大のものを最大独立集合と呼び，与えられたグラフ $G$ の最大独立集合のサイズを $\alpha(G)$ と表します．たとえば図 1 のグラフの最大独立集合のサイズは 5 です．

では次に，最大独立集合を求める問題を定式化します．ここでのポイントは，最大独立集合は（従来の定式化では）離散的な問題なのに，あえて連続最適化問題として定式化するという点です．与えられたグラフの各頂点 $p \in V$ に対し，連続変数 $y(p)$ を導入し，以下のような（連続）非線形計画問題

$$\text{ISP} : \max. \left( \sum_{p \in V} y(p) \right)^2$$
$$\text{s. t. } \; y(p)y(q) = 0 \quad (\forall \{p, q\} \in E), \tag{1}$$
$$\sum_{p \in V} (y(p))^2 = 1, \tag{2}$$

を作ると[5]，実は次の定理が成り立ちます．

**定理 1.** 問題 ISP の最適値は $\alpha(G)$ である．

**証明.** 以下の証明では問題 ISP の最適値を $z^*$ と書きます．まず最初に $z^* \leq \alpha(G)$ を示しましょう．

問題 ISP の最適解を $\boldsymbol{y}^* = (y^*(1), \ldots, y^*(n))^\top \in \mathbb{R}^V$ とします．最適解で非ゼロの値をもつ変数に対

まつい　ともみ
東京工業大学社会理工学研究科社会工学専攻
〒 152–8550 東京都目黒区大岡山 2–12–1

[1] ベーコン (bacon)，レタス (lettuce)，トマト (tomato).
[2] ハムサンドイッチ定理はストーン・テューキーの定理とも呼ばれる，測度論における定理です.
[3] 単に “sandwich theorem” と言うと，日本で「はさみうちの原理」と呼ばれる定理を指すことが多いようです.
[4] サンドイッチ定理の紹介ならば，クリーク数から話を始めるべきなのかもしれませんが，Lovász 数の導入は最大独立集合が自然であり，どちらで話を始めるか，悩ましいところです.
[5] この定式化はたとえば [3] にも書かれています.


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

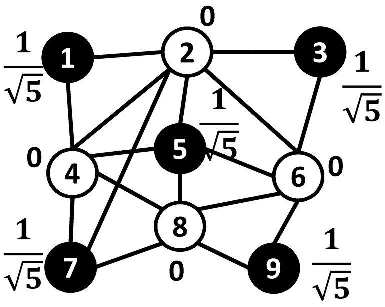


**図 1**　最大独立集合問題．●印が最大独立集合の頂点

応する頂点集合を $S^* = \{p \in V \mid y^*(p) \neq 0\}$ とします．最適解ベクトル $\boldsymbol{y}^*$ 中の非ゼロ要素の集合 $\{y^*(p) \mid p \in S^*\}$ の分散の非負性（あるいはコーシー・シュワルツの不等式）より，

$$\frac{\sum_{p \in S^*} (y^*(p))^2}{|S^*|} - \left(\frac{\sum_{p \in S^*} y^*(p)}{|S^*|}\right)^2 \geq 0$$

が成り立ちます．この不等式と集合 $S^*$ の定義より，問題 ISP の最適値 $z^*$ の上界として

$$\begin{aligned} z^* &= \left(\sum_{p \in V} y^*(p)\right)^2 = \left(\sum_{p \in S^*} y^*(p)\right)^2 \\ &\leq |S^*| \sum_{p \in S^*} (y^*(p))^2 = |S^*| \sum_{p \in V} (y^*(p))^2 = |S^*| \end{aligned}$$

が得られます．上記の最後の等式は，制約 (2) から導かれます．最適解 $\boldsymbol{y}^*$ が制約 (1) を満たすことより，$S^*$ はグラフ $G$ の独立集合であり，$z^* \leq |S^*| \leq \alpha(G)$ が得られます．

次に $z^* \geq \alpha(G)$ を示しましょう．グラフ $G$ の最大独立集合（の一つ）を $T^*$ とし，ベクトル $\widetilde{\boldsymbol{y}} \in \mathbb{R}^V$ を

$$\widetilde{y}(p) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{|T^*|}} & (\forall p \in T^*), \\ 0 & (\forall p \notin T^*), \end{cases}$$

と定義します．集合 $T^*$ が独立集合であることから，ベクトル $\widetilde{\boldsymbol{y}}$ は制約 (1) を満たします．さらに

$$\sum_{p \in V} (\widetilde{y}(p))^2 = |T^*| \left(\frac{1}{\sqrt{|T^*|}}\right)^2 = 1$$

が成り立つことから，制約 (2) も満たします．ゆえにベクトル $\widetilde{\boldsymbol{y}}$ は問題 ISP の許容解となり，不等式

$$z^* \geq \left(\sum_{p \in V} \widetilde{y}(p)\right)^2 = \left(\frac{|T^*|}{\sqrt{|T^*|}}\right)^2 = |T^*| = \alpha(G)$$

が得られます．　□

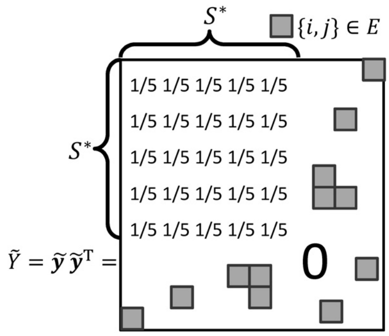


**図 2**　図 1 の問題の最適解 $\widetilde{\boldsymbol{y}}$ に対する行列 $\widetilde{Y} = \widetilde{\boldsymbol{y}}\widetilde{\boldsymbol{y}}^\top$．枝集合 $E$ に対応する要素の描画はイメージです

上記の証明より，ベクトル $\widetilde{\boldsymbol{y}}$ は問題 ISP の最適解となることもわかります[6]．

問題 ISP は，最大独立集合問題を表す方法の一つであり，このように記述することによって問題が簡単になったりするわけではありません．

## 3.　半正定値計画緩和

本節では，最大独立集合問題 ISP の半正定値計画緩和問題を導入し，Lovász 数を定義しましょう．問題 ISP において，二つの変数の積に対応する新たな変数 $y_{pq} = y(p)y(q)$ を導入します．変数 $y(p)$ の二乗に対しては $y_{pp} = y(p)y(p)$ を導入します．変数 $y_{pq}$ を要素にもつ行列を $Y = (y_{pq})$ と書くならば，行列 $Y$ は行と列を $V$ 中の頂点でインデックスされた正方行列であり，変数ベクトル $\boldsymbol{y} = (y(1), \ldots, y(n))^\top$ を用いると，$Y = \boldsymbol{y}\boldsymbol{y}^\top$ と表すことができます．（たとえば図 1 の問題の最適解 $\widetilde{\boldsymbol{y}}$ に対する行列 $\widetilde{Y} = \widetilde{\boldsymbol{y}}\widetilde{\boldsymbol{y}}^\top$ は，図 2 のようになります．）行列 $Y$ が対称な半正定値行列となることは簡単に確認できます[7]．

行列変数 $Y = (y_{pq})$ を用いると，ISP の目的関数は

$$\left(\sum_{p \in V} y(p)\right)^2 = \sum_{p \in V} \sum_{q \in V} y(p)y(q) = \sum_{p \in V} \sum_{q \in V} y_{pq}$$

という線形関数となり，制約 (2) は

$$\sum_{p \in V} (y(p))^2 = \sum_{p \in V} y_{pp} = 1$$

という線形等式で記述されます．ゆえに問題 ISP は

---

6　ちなみに最適解は唯一ではなく，ベクトル $-\widetilde{\boldsymbol{y}}$ も ISP の最適解となっています．

7　$\because y_{pq} = y(p)y(q) = y(q)y(p) = y_{qp}$，かつ $\forall \boldsymbol{a}, \boldsymbol{a}^\top Y \boldsymbol{a} = \boldsymbol{a}^\top \boldsymbol{y}\boldsymbol{y}^\top \boldsymbol{a} = (\boldsymbol{a}^\top \boldsymbol{y})^2 \geq 0$ が成り立ちます．

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

$$
\begin{aligned}
\max. & \sum_{p\in V}\sum_{q\in V} y_{pq} \\
\text{s. t. } & y_{pq}=0 \quad (\forall\{p,q\}\in E), \\
& \sum_{p\in V} y_{pp}=1, \\
& Y=(y_{pq})=\boldsymbol{y}\boldsymbol{y}^{\top}, \qquad (3) \\
& Y \text{ は半正定値対称行列である,} \qquad (4)
\end{aligned}
$$

と書き換えることができます.(制約式 (4) は，上記の問題では冗長な制約式です.) ここで，制約 (3) を除去して得られる緩和問題

$$
\begin{aligned}
\text{SDP} : \max. & \sum_{p\in V}\sum_{q\in V} y_{pq} \\
\text{s. t. } & y_{pq}=0 \quad (\forall\{p,q\}\in E), \\
& \sum_{p\in V} y_{pp}=1, \\
& Y \text{ は半正定値対称行列である,}
\end{aligned}
$$

は半正定値計画問題と呼ばれる問題になり，内点法を用いて多項式時間で解くことができます．問題 ISP と等価な問題から制約 (3) を除いて問題 SDP が得られたことから，SDP は ISP の緩和問題となっています．ゆえに，問題 SDP の最適値を $\vartheta(G)$ と書くと[8]，$\alpha(G)\le\vartheta(G)$ が成り立ちます．この値 $\vartheta(G)$ が Lovász 数と呼ばれるものです[9].

## 4. サンドイッチ定理

さて本日のメインディッシュのサンドイッチ定理を用意しましょう．まずは頂点彩色（数）を定義します．与えられたグラフ $G=(V,E)$ に対し，頂点への色の割当で，隣接する頂点対が同じ色でないものを頂点彩色と呼びます．グラフ $G$ を頂点彩色するために必要な色の最小数を $G$ の彩色数[10]と呼び，$\chi(G)$ と表します．グラフ $G$ の補グラフを $\overline{G}$ と記します[11].

**定理 2.** ［サンドイッチ定理］．任意のグラフ $G$ において $\alpha(G)\le\vartheta(G)\le\chi(\overline{G})$ が成り立つ[12].

ここで「何で $\chi(G)$ じゃなくて $\chi(\overline{G})$ なんだよ！」と感じる方も多いと思います．原論文 [1] での議論の中心になっている Shannon capacity に関する話題には，この形式が自然なようです．ここで補グラフが出てこないように Lovász 数の定義を変えてしまうことも試みられたようですが，結局この形式に落ち着いたようです（たとえば [2] 参照）.

上記の定理に出現する $\alpha(G)$ と $\chi(\overline{G})$ を求める問題は NP-困難であり，これを求める多項式時間解法はないと予想されています．それにもかかわらず，間に挟まれた $\vartheta(G)$ は多項式時間で計算できるという点が，このサンドイッチ定理の有用性（の一つ）を表しています.

サンドイッチ定理の証明に入る前に，補題を一つ紹介しましょう.

**補題 3.** 大きさ $n\times n$ の任意の半正定値対称行列（のペア）$X,Y$ に対し，$X\bullet Y\ge 0$ が成り立つ．ただしここで $X\bullet Y=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}x_{ij}y_{ij}$ である.

**証明の概要.** （証明の詳細は，専門書 [4] などをご覧ください.）行列 $X$ が半正定値対称行列であることから，行列 $X^{1/2}$ を定義することができる．これを用いると

$$
\begin{aligned}
X\bullet Y &= \mathrm{tr}(XY)=\mathrm{tr}(X^{1/2}X^{1/2}Y) \\
&= \mathrm{tr}(X^{1/2}YX^{1/2})
\end{aligned}
$$

と変形することができる．このとき行列 $X^{1/2}YX^{1/2}$ は半正定値対称行列であり，対角成分はすべて非負となることから，$\mathrm{tr}(X^{1/2}YX^{1/2})\ge 0$ が成り立つ. □

では，サンドイッチをいっしょに食べましょう！

**サンドイッチ定理の証明.** 前節において $\alpha(G)\le\vartheta(G)$ はすでに示しました．以下では，補グラフ $\overline{G}$ の任意の頂点彩色 $c$ に対し，使用している色数 $\chi$ は $\vartheta(G)$ 以上であることを示しましょう．頂点彩色 $c$ で使用している色の集合を $\{1,2,\ldots,\chi\}$ という番号で表し，各頂点の色（番号）を表す写像を $c:V\to\{1,2,\ldots,\chi\}$ とします．与えられた頂点彩色 $c$ に対し，行と列が頂点集合でインデックスされた行列 $X=(x_{pq})$ を

---

[8] 記号 $\vartheta$（シータ）は，ギリシャ文字 $\theta$ の変体文字です.
[9] 正確には，上記の問題 SDP は，論文 [1] で導入された値（Lovász 数）を求める半正定値計画問題の双対問題となっています.
[10] 染色数とも呼ばれます.
[11] グラフ $G=(V,E)$ の補グラフ $\overline{G}=(V,\overline{E})$ とは，頂点集合 $V$ と枝集合 $\overline{E}=\{\{p,q\}\mid p\ne q,\{p,q\}\notin E\}$ からなる無向グラフです.

[12] 与えられた無向グラフ $H$ に対し，その補グラフ $\overline{H}$ の最大独立集合サイズ $\alpha(\overline{H})$ を，グラフ $H$ のクリーク数と呼び，$\omega(H)$ と記します．補グラフ $\overline{G}$ を改めて $H$ と書くならば，サンドイッチ定理の不等式は $\omega(H)\le\vartheta(\overline{H})\le\chi(H)$ と書くことができます．サンドイッチ定理は，この形式で記述されることが多いようです.


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

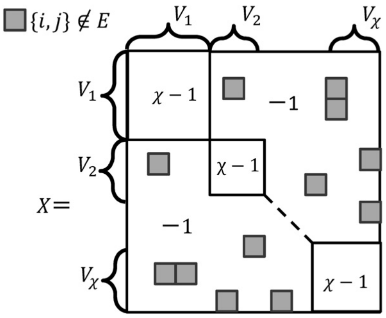


**図 3**　行列 $X$，ただし $V_i = \{p \in V \mid c(p) = i\}$

$$x_{pq} = \begin{cases} \chi - 1 & (c(p) = c(q)), \\ -1 & (c(p) \neq c(q)), \end{cases}$$

と定義します（図 3）．行列 $X$ が対称行列であることは明らかですね．

まず最初に，行列 $X$ が半正定値行列であること，すなわち $[\forall \boldsymbol{u} \in \mathbb{R}^V, \boldsymbol{u}^\top X \boldsymbol{u} \geq 0]$ を示しましょう．以下では，列ベクトル $\boldsymbol{u} \in \mathbb{R}^V$ の要素を $\boldsymbol{u} = (u(1), u(2), \ldots, u(n))^\top$ と書くこととします．頂点彩色 $c$ において，色 $i \in \{1, 2, \ldots, \chi\}$ で塗られた頂点部分集合を $V_i$，すなわち $V_i = \{p \in V \mid c(p) = i\}$，と書き，$u(V_i) = \sum_{p \in V_i} u(p)$ という記号を準備します．このとき行列 $X$ の定義から，

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{u}^\top X \boldsymbol{u} \\ &\quad = \chi \textstyle\sum_{i=1}^{\chi} \sum_{p \in V_i} \sum_{q \in V_i} u(p)u(q) \\ &\qquad - \textstyle\sum_{p \in V} \sum_{q \in V} u(p)u(q) \\ &\quad = \chi \sum_{i=1}^{\chi} \left( \sum_{p \in V_i} u(p) \right)^2 - \left( \sum_{p \in V} u(p) \right)^2 \\ &\quad = \chi \sum_{i=1}^{\chi} \bigl(u(V_i)\bigr)^2 - \left( \sum_{i=1}^{\chi} u(V_i) \right)^2 \\ &\quad = \chi^2 \left( \frac{\sum_{i=1}^{\chi} \bigl(u(V_i)\bigr)^2}{\chi} - \left( \frac{\sum_{i=1}^{\chi} u(V_i)}{\chi} \right)^2 \right) \geq 0 \end{aligned}$$

が成り立ちます．上式の最後の不等式は，$\chi$ 個の数値の集合 $\{u(V_1), u(V_2), \ldots, u(V_\chi)\}$ の分散の非負性（あるいはコーシー・シュワルツの不等式）から得られます．以上より，行列 $X$ は半正定値対称行列であることが示されました．さて証明の仕上げです．

問題 SDP の最適解を $Y$ としましょう．行列 $X$ と $Y$ は半正定値対称行列より $X \bullet Y \geq 0$ が成り立ちます．以下では，$X \bullet Y = \sum_{p \in V} \sum_{q \in V} x_{pq} y_{pq}$ の各項について個別に議論しましょう．

(1) 任意の頂点 $p \in V$ において，$x_{pp} y_{pp} = (\chi - 1) y_{pp}$ が成り立つ．

(2) グラフ $G$ 上で枝のない頂点対 $\{p, q\} \notin E$ に対し，$\{p, q\}$ は補グラフ $\overline{G}$ の枝であり，与えられた（$\overline{G}$ の）頂点彩色 $c$ において異なる色が塗られていることから $x_{pq} y_{pq} = -y_{pq}$ が成り立つ．

(3) グラフ $G$ 上で枝となっている頂点対 $\{p, q\} \in E$ に対し，問題 SDP の制約式から $y_{pq} = 0$ が成り立っており，$x_{pq} y_{pq} = 0 = -y_{pq}$ が得られる．

以上より，次の不等式

$$\begin{aligned} 0 \leq X \bullet Y &= \sum_{p \in V} \sum_{q \in V} x_{pq} y_{pq} \\ &= (\chi - 1) \sum_{p \in V} y_{pp} + \sum_{(p,q) \in W} (-y_{pq}) \\ &= \chi \sum_{p \in V} y_{pp} + \sum_{p \in V} \sum_{q \in V} (-y_{pq}) \\ &= \chi - \sum_{p \in V} \sum_{q \in V} y_{pq} = \chi - \vartheta(G) \end{aligned}$$

が成り立ち，$\vartheta(G) \leq \chi$ が得られます，ただし $W = \{(p, q) \mid p \in V, q \in V, p \neq q\}$ です．この不等式は $\overline{G}$ の任意の頂点彩色について成り立つことから，最小色数の頂点彩色についても成り立ち，求める不等式 $\vartheta(G) \leq \chi(\overline{G})$ が得られます．　□

## 5. おわりに

本稿では，最大独立集合問題から Lovász 数を導入してみました．本稿の証明からもわかるように，サンドイッチ定理は，Lovász 数を求める半正定値計画問題の弱双対定理（のさらに特殊ケース）であり，その証明自体はとてもシンプルに書くことができます．実は，証明において双対問題を定義する必要さえありません．

本稿では，最大独立集合問題を（連続）非線形計画問題として定式化しました．サンドイッチ定理自体は 30 年以上前の結果ですが「従来は離散最適化問題として取り扱われてきた問題を，改めて（連続）非線形計画問題として捉える」という研究が，近年さらに増えているように感じます．離散最適化問題の解の特性ベクトルの凸包を記述する不等式について議論する，という「多面体論的アプローチ」に対して，この軛からの脱却というパラダイムシフトが起こっているのかなぁ，などとぼんやり感じています．

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

## 参考文献

[1] L. Lovász, "On the Shannon capacity of a graph," *IEEE Transactions on Information Theory*, **IT-25**, pp. 1–7, 1979.
[2] D. Knuth, "The sandwich theorem," *The Electronic Journal of Combinatorics*, **1**, pp. 1–48, 1994.
[3] I. Dukanovic and F. Rendl, "Semidefinite programming relaxations for graph coloring and maximal clique problems," *Mathematical Programming*, **109**, pp. 345–365, 2007.
[4] 寒野善博，土谷隆，『基礎系 数学 最適化と変分法』，丸善出版，2014.


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