

最大クリーク問題に対する反復 k -opt 局所探索法の探索特性

金原 一歩・岡野 傑士・片山 謙吾*

岡山理科大学大学院工学研究科情報工学専攻

* 岡山理科大学工学部情報工学科

(2018年10月31日受付、2018年12月6日受理)

1 まえがき

組合せ最適化問題に対する代表的な局所探索法として、巡回セールスマン問題やグラフ分割問題に対する Lin と Kernighan による解法 [1, 2] がよく知られている。これは、一般に、可変深度探索法、または (可変) k -opt 局所探索法 (k -opt local search, KLS) などと呼ばれ、単純な近傍操作を連鎖的に適用することで得られる解集合を改めて大きな近傍として捉える、局所探索の一般化のアイデアである。我々の研究グループでは、最大クリーク問題 (maximum clique problem, MCP) [3, 4], バイナリー 2 次計画問題 [5, 6], ノード配置問題 [7], 2 次割当問題 [8] などの困難な問題に対して KLS やその変形アルゴリズムを示し、メタ戦略 [9] への導入によって、極めて良好な結果が得られることを確認しつつある。

最大クリーク問題 (MCP) に対する、反復局所探索 (Iterated local search, ILS) に k -opt 局所探索法 (k -opt local search, KLS) [3] を導入した反復 k -opt 局所探索法 (IKLS) [4] は良好な解を算出することが可能である。IKLS は主に、局所探索として KLS, Kick の処理として LEC-Kick, Restart で構成される。しかしながら、その探索性能は与えられたグラフの特性に依存しており、様々なグラフ例題に対する IKLS の詳細な探索状況については十分な分析には至っていない。そこで、本研究では IKLS の探索状況に応じたクリークのサイズとクリークに隣接している頂点群などのサイズ変化の可視化を通して探索特性の分析を行う。

2 最大クリーク問題

頂点 (vertex) の集合 $V = \{1, \dots, n\}$ とそれらの頂点の対を両端とする無向辺 (undirected edge) の集合 $E \subseteq V \times V$ が与えられた時、 $G = (V, E)$ を無向グラフという。特に、全ての 2 頂点間に 1 つの辺が存在する無向グラフを完全グラフという。 V の部分集合 $V' \subseteq V$ による誘導部分グラフ $G(V') = (V', E \cap V' \times V')$ が完全グラフの時、すなわち、 $\forall i, j \in V', i \neq j$ に対して $(i, j) \in E$ である時、 V' をクリークと呼ぶ。最大クリーク問題 (Maximum Clique Problem, MCP) [10] とは、与えられたグラフ G に含まれるクリーク K の中で、次の目的 (評価) 関数

$$f_{\text{MCP}}(K) = |K| \quad (1)$$

を最大にするクリークを求める問題である。

MCP は実用上重要な組合せ最適化問題であり、通信、符号理論、並列計算、パターン認識などの分野の基本問題として頻繁にあらわれ、最大独立集合問題や最小集合被覆問題などの様々な組合せ最適化問題と等価であることがよく知られている [10]。MCP は NP-困難 [11] に属する問題であることから、多項式時間で厳密な最適解を求めるアルゴリズムは存在しないと考えられている。MCP を厳密に解くために、幾つかのアルゴリズムが提案されている。その多くが分枝限定法にもとづく厳密解法であるが、より大規模で密なグラフに対しては現実的な時間内に厳密解を得るのは困難である。そのため、厳密解に近い解 (近似解) を実行時間内に算出する近似解法の研究が盛んに行われている [10] [12] [13] [14] [15] [16] [17]。

3 MCP に対する k -opt 局所探索法

まず、本論文に頻出する重要な記号 (図 1) について説明する。 $CC^{(t)}$ は内ループの繰り返し l の時点における解 (クリーク) である。 $PA^{(t)}$ は $CC^{(t)}$ の全頂点に隣接する、 $CC^{(t)}$ に追加可能な頂点の集合

$$PA^{(t)} = \{v : v \in (V \setminus CC^{(t)}), (v, i) \in E, \forall i \in CC^{(t)}\}$$

である。 $OM^{(t)}$ は、 PA の定義を若干緩和した 1 辺不足集合と呼ぶ辺集合

$$OM^{(t)} = \{(v, i) : v \in V, i \in CC^{(t)}, (v, i) \notin E, (v, j) \in E, \forall j \in CC^{(t)}, j \neq i\}$$

である。なお、 $OM^{(t)}$ は、 $CC^{(t)}$ に含まれる頂点群の中のいずれか一つの頂点 $i \in CC^{(t)}$ だけに辺が存在しない頂点の集合と捉えることもできる (なお、 $CC \subseteq OM$) (図 1 参照)。 $deg_{G(PA^{(t)})}$ は、 $PA^{(t)}$ により誘導される部分グラフ $G(PA^{(t)})$ 内の各頂点 $v \in PA^{(t)}$ の次数である。

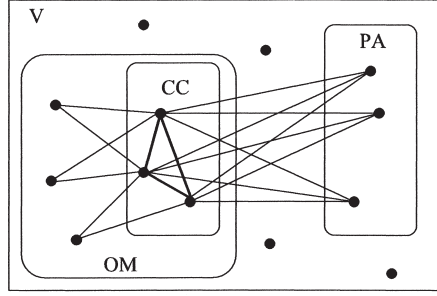


図 1: MCP に対する CC , PA および OM の集合の一例

以下、KLS の基本アルゴリズムについて述べる。KLS は外ループと内ループの 2 つのループ処理で構成され、図 2 における CC は現在の解、 CC_{best} は内ループの繰り返し処理中に得られた最良解である。また、 g は内ループ処理前の解 CC_{prev} と内ループ中に得られる解 CC のそれぞれの評価値の差 $g = |CC| - |CC_{prev}|$ であり、これをゲイン値とよぶ。

KLS の各反復における探索 (k -opt 近傍探索) は、与えられた現在のクリーク (初期解) に対して、連鎖的に複数個の頂点をクリークに追加 (Add) またはクリークから削除 (Drop) する操作によって構成する。まず、現在のクリーク CC からそれらの操作によって生成可能な近傍解の集合を得る。その近傍解の集合から最良解 CC_{best} (すなわち、 k 回の Add・Drop 移動操作により得られた最良解) を選び、その最良解 CC_{best} を次反復の初期解 CC とする。この一連の処理を各反復で対象となる k -opt 近傍内に良好なクリークが存在しなくなるまで反復する。

```

MCP- $k$ -opt-Local-Search( $CC, PA, OM, deg_{G(PA)}$ )
begin
1   repeat
2      $CC_{prev} := CC, D := CC_{prev}, P := \{1, \dots, n\}, g := 0, g_{max} := 0;$ 
3     repeat
4       if  $|PA \cap P| > 0$  then // Add Phase
5         find a vertex  $v$  with  $max_{v \in \{PA \cap P\}} \{deg_{G(PA \cap P)}(v)\};$ 
6         if multiple vertices with the same max degree are found
7           then select one vertex  $v$  among them randomly;
8          $CC := CC \cup \{v\}, g := g + 1, P := P \setminus \{v\}$ 
9         if  $g > g_{max}$  then  $g_{max} := g, CC_{best} := CC;$ 
10        else //Drop Phase (if  $\{PA \cap P\} = \emptyset$ )
11          find a vertex  $v \in \{CC \cap P\}$  such that the resulting  $|PA \cap P|$  is maximized;
12          if multiple vertices with the same size of the resulting  $|PA \cap P|$  are found
13            then select one vertex  $v$  among them randomly;
14           $CC := CC \setminus \{v\}, g := g - 1, P := P \setminus \{v\};$ 
15          if  $v$  is contained in  $CC_{prev}$  then  $D := D \setminus \{v\};$ 
16        endif
17        update  $PA, OM,$  and  $deg_{G(PA \cap P)}(i), \forall i \in PA \cap P;$ 
18      until  $D = \emptyset;$ 
19      if  $g_{max} > 0$  then  $CC := CC_{best}$  else  $CC := CC_{prev};$ 
20    until  $g_{max} \leq 0;$ 
21  return  $CC;$ 
end;
```

図 2: MCP に対する k -opt 局所探索法の擬似コード

Add フェーズ (Line 4–8) は、現在のクリーク CC に追加可能な頂点集合 PA から、頂点 v の部分グラフ $G(PA)$ 内における次数 $deg_G(PA)(v)$ が最大となる頂点 v を選択する処理である。同値の次数を有する頂点が複数存在した場合には、それらの頂点からランダムに選択する。この処理を PA が空集合になるまで繰り返す。次いで、Drop フェーズ (Line 9–14) は、 PA が空集合となっている (CC が拡大不可能な) 場合に実行する。Drop フェーズでは、 CC から頂点 v を削除する際、次の繰り返し時点で、 PA のサイズを最大化する頂点 v を CC から削除する。Drop フェーズは CC から削除できる頂点がない、もしくは少なくとも 1 つ以上の頂点が追加可能になるまで繰り返される。

4 MCP に対する反復 k -opt 局所探索法

我々の研究グループでは反復局所探索法 (ILS) に KLS を導入した反復 k -opt 局所探索法 (IKLS) を提案しており、良好な解を算出することが可能である [4]。IKLS の流れを図 3 に示す。IKLS の主要な構成要素は、Local Search (Line 2, Line 5, Line 9), Kick (Line 4), Restart (Line 7–11) であり、これらの反復により探索を行う。Local Search として KLS, Kick として LEC-Kick [4] を用いる。LEC-Kick は、KLS によって得られた局所最適解 C に最低 1 頂点以上隣接している頂点集合から、隣接している数が最も少ない頂点 v を選択する。その後、選択した頂点 v とその頂点 v に隣接している C の頂点集合を新たな C とする Kick である。Restart 処理 (Line 8) として、頂点 $v \in \{V \setminus C_{best}\}$ をランダムに選び、Line 9 の探索の初期解とする処理を行う。

```

procedure IKLS
input: graph  $G = (V, E)$ ;
output: best clique  $C_{best}$  in  $G$ ;
begin
1   generate  $C$ ; compute  $PA$ ,  $OM$ , and  $deg_G(PA)$ ;
2    $C := \text{Local Search}(C, PA, OM, deg_G(PA)); C_{best} := C$ ;
3   repeat
4      $C := \text{Kick}(C, PA, OM, deg_G(PA))$ ;
5      $C := \text{LocalSearch}(C, PA, OM, deg_G(PA))$ ;
6     if  $|C| > |C_{best}|$  then  $C_{best} := C$ ; endif
7     if restart=true then
8       generate  $C$ ; compute  $PA$ ,  $OM$ , and  $deg_G(PA)$ ;
9        $C := \text{Local Search}(C, PA, OM, deg_G(PA))$ ;
10      if  $|C| > |C_{best}|$  then  $C_{best} := C$ ; endif
11     endif
12  until terminate=true;
13  return  $C_{best}$ ;
end;

```

図 3: MCP に対する反復 k -opt 局所探索法

5 実験結果

MCP の代表的なベンチマークグラフである DIMACS の問題例から 10 例題を選び、IKLS の探索状況について CC , PA , OM のサイズの変化を観測すると共に、グラフ G における全頂点の次数の頻度分析および、一つの既知の最良解に含まれた頂点群の次数の頻度分析を行う。図 4, 図 5 に C125.9, 図 6, 図 7 に C250.9, 図 8, 図 9 に DSJC500.5, 図 10, 図 11 に keller5, 図 12, 図 13 に p_hat300_1, 図 14, 図 15 に p_hat700_3, 図 16, 図 17 に brock_200.2, 図 18, 図 19 に brock_400.4, 図 20, 図 21 に gen200_p0.9.44, 図 22, 図 23 に gen200_p0.9.55 の実験結果を示す。集合サイズの変化の図 (図 4, 図 6, 図 8, 図 10, 図 12, 図 14, 図 16, 図 18, 図 20, 図 22) は、可読性に配慮し IKLS の探索初期のみ結果を示している。IKLS は Add, Drop, Kick を繰り返し行っていき、 CC のサイズはある一定の範囲を保ちながら探索を行う。step0 では、 CC は空集合であるため V の全頂点が PA となる。図 4 では、KLS のみの探索で既知の最良解の値 (34) と同じ $|CC|$ の発見に至っている。また、30step 回りで PA が空集合となるまで $|CC|$ が単調増加しているのが確認できる。 PA が空集合になった後は Drop と Add を繰り返して探索を行っている。80step 回りで、Drop が連続して行われた後、 D が空集合となり KLS 内での次の反復に移り、既知の最良解の値 (34) と同じ $|CC|$ を発見したため探索を終了したことが確認できる (IKLS の終了条件として既知の最良解と同じサイズのクリークが算出時とした)。図 6 の 40, 100, 170step 回りで確認できるように KLS では D との関係から反復的に探索を行うためその度に $|OM|$ が増加している。図 8 の 30step, 100step 回りで Restart が行われたため、 $|OM|$ が急

激に増加していることが確認できる。また、図 10 の 170step 辺りで kick が行われたため $|OM|$ が急激に増加していることを確認できる。

次数頻度分布の図(図 5, 図 7, 図 9, 図 11, 図 13, 図 15, 図 17, 図 19, 図 21, 図 23)は横軸が次数, 縦軸が頂点数を示している。図 5 と図 7 と図 15 で確認できる通り, 既知の最良解に含まれる頂点は比較的高次数の頂点で構成されている。しかし, 図 17 と図 19 で示している brock のグラフでは, 既知の最良解に含まれる頂点の次数は比較的広範囲に分布しており, 低次数の頂点も含まれている。この brock のグラフは高次数の頂点を逐次追加していく一般的な解法では, 既知の最良解と同じサイズのクリークを算出するのは他の例題と比べて難しいことが知られている。

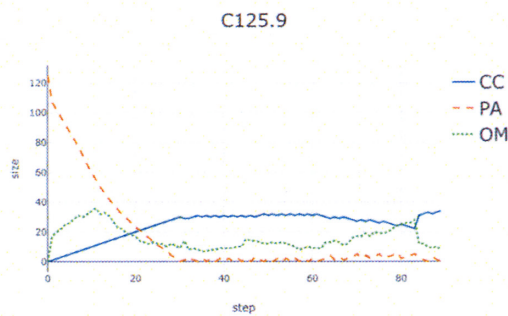


図 4: C125.9 の探索中の集合サイズの変化

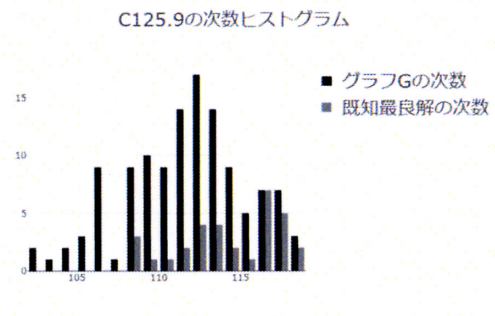


図 5: C125.9 次数頻度分布

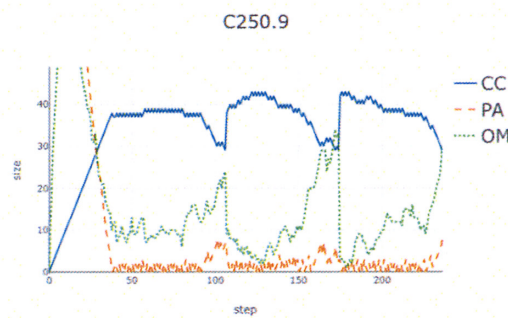


図 6: C250.9 の探索中の集合サイズの変化

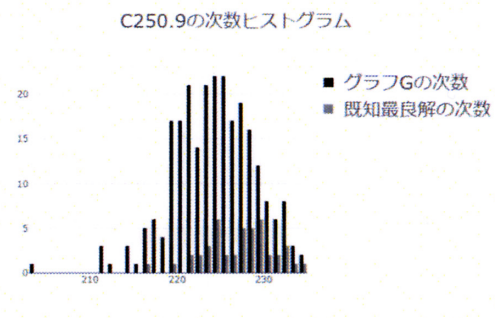


図 7: C250.9 次数頻度分布

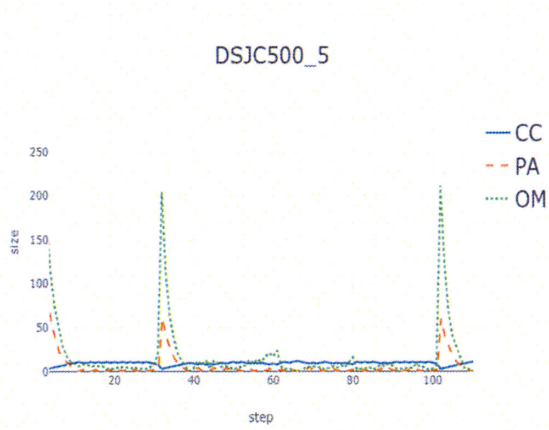


図 8: DSJC500_5 の探索中の集合サイズの変化

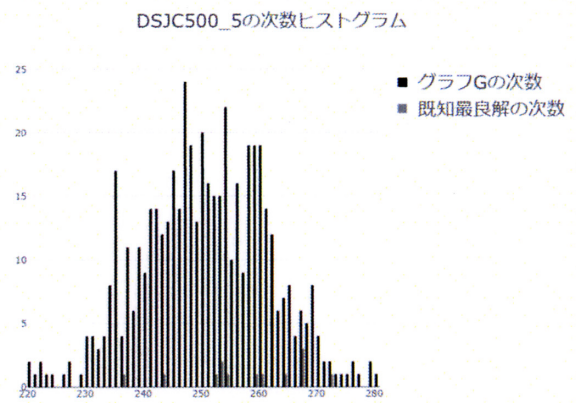


図 9: DSJC500_5 次数頻度分布

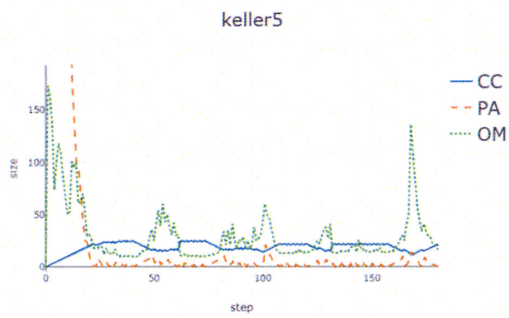


図 10: keller5 の探索中の集合サイズの変化

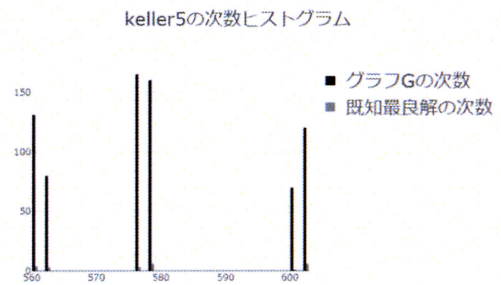


図 11: keller5 の探索中次数頻度分布

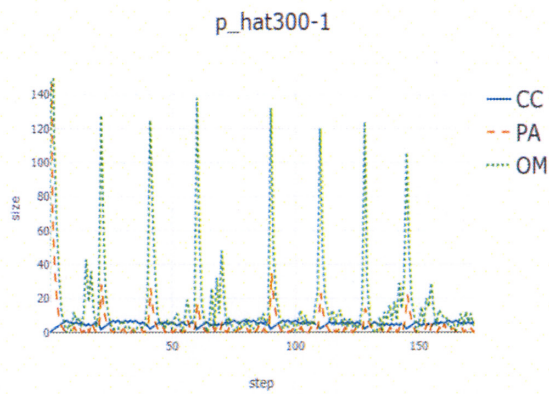


図 12: p_hat300-1 の探索中の集合サイズの変化

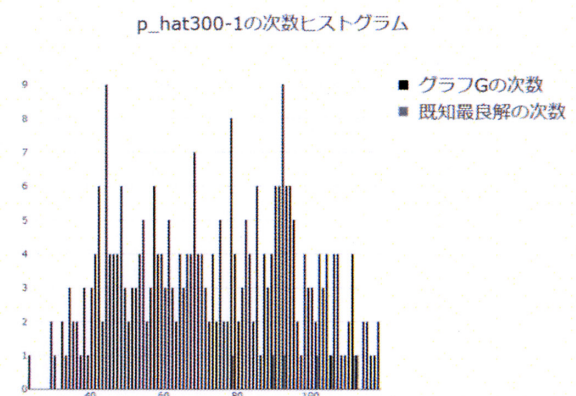


図 13: p_hat300-1 次数頻度分布

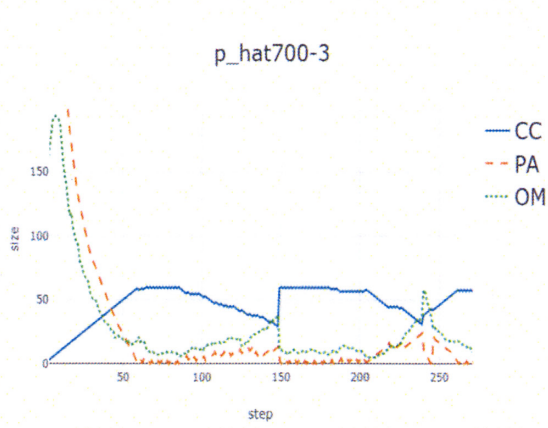


図 14: p_hat700-3 の探索中の集合サイズの変化

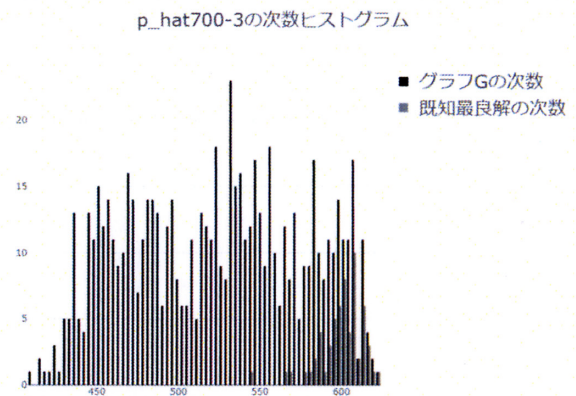


図 15: p_hat700-3 次数頻度分布

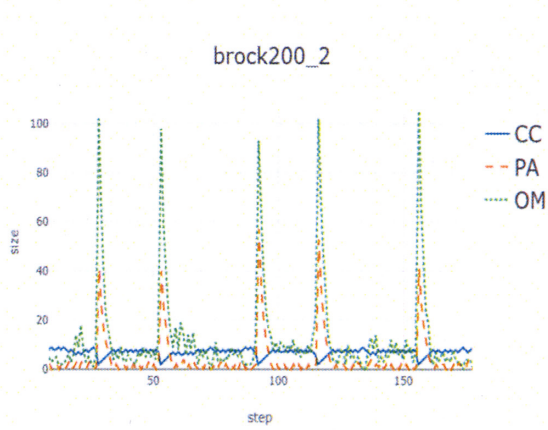


図 16: brock_200.2 の探索中の集合サイズの変化

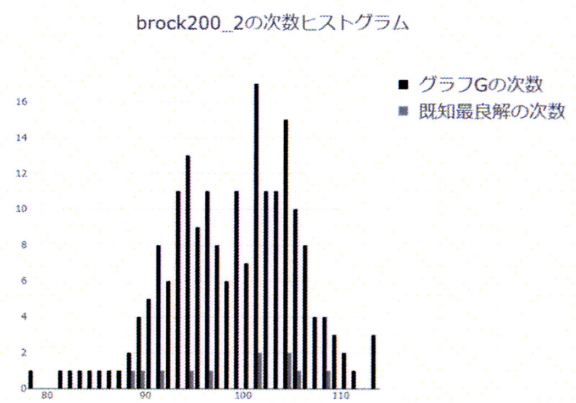


図 17: brock_200.2 次数頻度分布

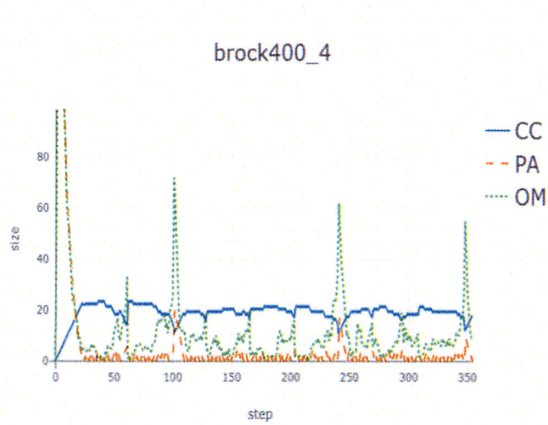


図 18: brock_400.4 の探索中の集合サイズの変化

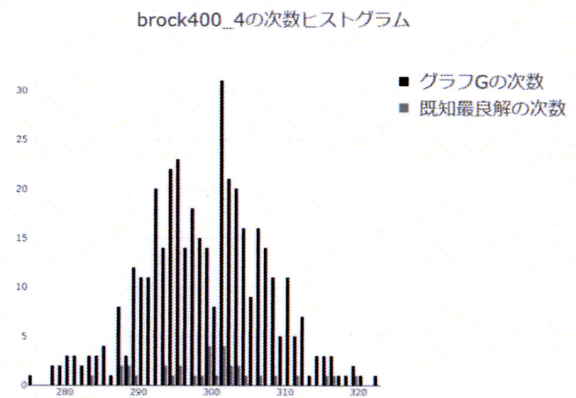


図 19: brock_400.4 次数頻度分布

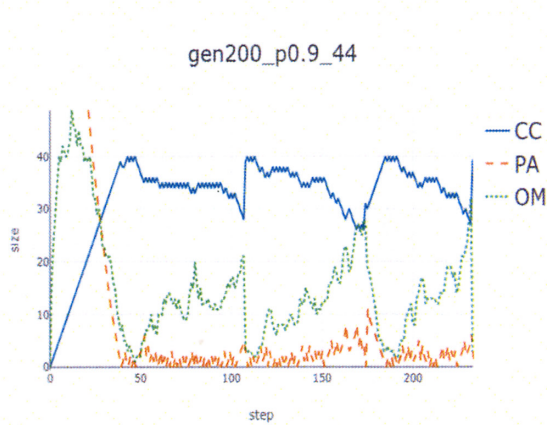


図 20: gen200_p0.9_44 の探索中の集合サイズの変化

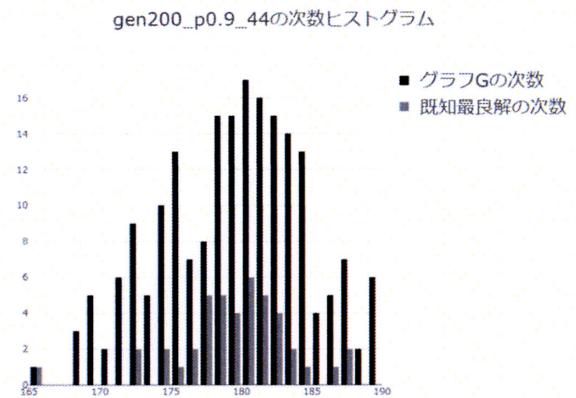


図 21: gen200_p0.9_44 次数頻度分布

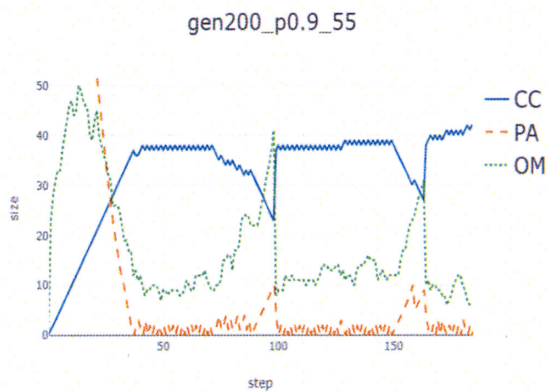


図 22: gen200_p0.9_55 の探索中の集合サイズの変化

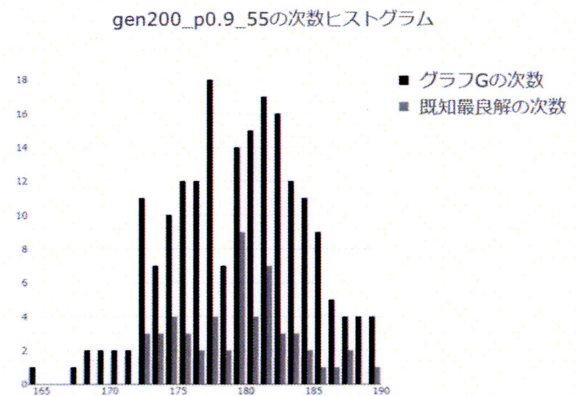


図 23: gen200_p0.9_55 次数頻度分布

6 むすび

本論文では、MCP に対する IKLS の探索における CC, PA, OM の各集合サイズの変化について分析した。 CC が増加するごとに、反比例して PA は減少し、 OM は一時的に増加した後 CC のサイズに反比例して増減することを示した。各グラフに対する探索では KLS 内での反復時、Kick 時、Restart 時 CC, PA, OM にどのような変化があらわれるのか確認した。また、IKLS の詳細な探索状況、既知の最良解に含まれる頂点のグラフ G における次数の分布を示した。C125.9, C250.9 や p-hat700-3 などのグラフでは既知の最良解に含まれる頂点は比較的高次数の頂点で構成されていることを示した。特に brock のグラフでは既知の最良解に含まれる頂点の次数は広範囲に分布し、低次数の頂点も含まれることを示した。

参考文献

- [1] B.W. Kernighan and S. Lin. An efficient heuristic procedure for partitioning graphs. *Bell System Technical Journal*, Vol. 49, pp. 291–307, 1970.
- [2] S. Lin and B.W. Kernighan. An effective heuristic algorithm for the traveling salesman problem. *Operations Research*, Vol. 21, pp. 498–516, 1973.
- [3] K. Katayama, A. Hamamoto, and H. Narihisa. An effective local search for the maximum clique problem. *Information Processing Letters*, Vol. 95, No. 5, pp. 503–511, 2005.
- [4] K. Katayama, M. Sadamatsu, and H. Narihisa. Iterated k -opt local search for the maximum clique problem. In *Evolutionary Computation in Combinatorial Optimization, LNCS 4446*, pp. 84–95. Springer, 2007.

- [5] 片山謙吾, 成久洋之. パイナリー 2 次計画問題に対する変形 k -opt 局所探索法. 電子情報通信学会論文誌 (A), Vol. J84-A, No. 3, pp. 430–435, 2001.
- [6] P. Merz and K. Katayama. Memetic algorithms for the unconstrained binary quadratic programming problem. *BioSystems*, Vol. 78, No. 1–3, pp. 99–118, 2004.
- [7] K. Katayama, H. Yamashita, and H. Narihisa. Variable depth search and iterated local search for the node placement problem in multihop WDM lightwave networks. In *Proc. of 2007 IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC-2007)*, pp. 3508–3515, 2007.
- [8] 片山謙吾, 北田雅享, 南原英生, 西原典孝. 二次割当問題に対する遺伝的反复局所探索法. 電子情報通信学会論文誌 (A), Vol. J96-A, No. 7, pp. 497–501, 2013.
- [9] 柳浦睦憲, 茨木俊秀. 組合せ最適化—メタ戦略を中心として—. 朝倉書店, 2001.
- [10] Qinghua Wu and Jin-Kao Hao. A review on algorithms for maximum clique problems. *European Journal of Operational Research*, Vol. 242, No. 3, pp. 693 – 709, 2015.
- [11] M.R. Garey and D.S. Johnson. *Computers and Intractability: A Guide to the Theory of NP-Completeness*. Freeman, New York, 1979.
- [12] J. Abello, P.M. Pardalos, and M.G.C. Resende. On maximum clique problems in very large graphs. In J. Abello and J. Vitter, editors, *External Memory Algorithms*, Vol. 50 of *DIMACS Series on Discrete Mathematics and Theoretical Computer Science*, pp. 119–130. American Mathematical Society, 1999.
- [13] R. Battiti and M. Protasi. Reactive local search for the maximum clique problem. *Algorithmica*, Vol. 29, No. 4, pp. 610–637, 2001.
- [14] D.S. Johnson and M.A. Trick. *Cliques, Coloring, and Satisfiability*. Second DIMACS Implementation Challenge, DIMACS Series in Discrete Mathematics and Theoretical Computer Science. American Mathematical Society, 1996.
- [15] E. Marchiori. Genetic, iterated and multistart local search for the maximum clique problem. In *Applications of Evolutionary Computing, LNCS 2279*, pp. 112–121. Springer-Verlag, 2002.
- [16] Una Benlic and Jin-Kao Hao. Breakout local search for maximum clique problems. *Computers & Operations Research*, Vol. 40, No. 1, pp. 192 – 206, 2013.
- [17] Wayne Pullan. Phased local search for the maximum clique problem. *Journal of Combinatorial Optimization*, Vol. 12, No. 3, pp. 303–323, Nov 2006.

Search Properties of Iterated k -opt Local Search to Maximum Clique Problem

Kazuho KANAHARA, Takeshi OKANO and Kengo KATAYAMA*

Graduate School of Engineering,

Okayama University of Science,

**Department of Information and Computer Engineering,*

Faculty of Engineering,

1-1 Ridai-cho, Okayama, 700-0005, Japan

(Received October 31, 2018; accepted December 6, 2018)

We developed an effective Iterated k -opt Local Search (IKLS) for MCP which introduced k -opt Local Search (KLS) in the framework of Iterated Local Search. IKLS consists of KLS as a local search, LEC-Kick as a perturbation technique, Restart strategy that diversifies the search by moving to other search points. However, its search performance depends on the properties of the given graph, and detailed search situation of IKLS has not been analyzed on the various problem instances of the MCP. Therefore, in this research, we analyze the search properties through the visualization of the clique size and the vertices adjacent to the clique while the IKLS is performed on the various problem instances of the MCP.

Keywords: combinatorial optimization; maximum clique problem; iterated local search.

