ДИСКРЕТНЫЙ АНАЛИЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ОПЕРАЦИЙ
Ноябрь—декабрь 2008. Том 15, № 6. С. 20–33

УДК 519.853.4

# РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ О КЛИКЕ СВЕДЕНИЕМ К ЗАДАЧЕ С D.C. ОГРАНИЧЕНИЕМ*)

*Т. В. Груздева*

**Аннотация.** Рассматриваются задачи поиска максимальной и максимальной взвешенной клик в неориентированном графе. Приведены новые непрерывные постановки задач о клике в виде задач оптимизации с невыпуклым ограничением. Для их решения применена стратегия глобального поиска [4–6], основными этапами которой являются локальный поиск, построение аппроксимаций поверхности уровня и решение линеаризованных задач. На её основе построены приближённые алгоритмы нахождения максимальной и максимальной взвешенной клик. Представлены основные этапы реализации алгоритмов, и приведено численное сравнение с другими методами решения задач о клике.

**Ключевые слова:** максимальная клика, локальный поиск, d.c. программирование, стратегия глобального поиска.

## Введение

Рассматривается известная в дискретной математике NP-трудная задача поиска максимальной клики в простом неориентированном графе $G = (V, E)$, где $V = \{1, \ldots, n\}$ — множество вершин, $E$ — множество рёбер. Предположим, что определён вес $w_i > 0$ для каждой вершины $i \in V$, совокупность весов обозначим через вектор $w = (w_1, \ldots, w_n)^T$. Подмножество вершин $C$ называется *кликой*, если каждая пара вершин является смежной, т. е. соединена ребром. Клика называется *локально максимальной* или *максимальной по включению* (*тупиковой*), если она не содержится в клике большей размерности. Ставится задача о нахождении клики максимального веса (ЗМВК). ЗМВК является обобщением классической комбинаторной задачи поиска клики максимальной мощности (ЗМК), поскольку последняя может быть получена из ЗМВК в случае, когда все веса равны, скажем, $w = e$, где $e = (1, \ldots, 1)^T$.

*) Исследование выполнено при финансовой поддержке программы поддержки ведущих научных школ РФ (проект НШ—1676.2008.1).

Задачи нахождения максимальной и максимальной взвешенной клик имеют большое количество приложений в различных областях математики, экономики, техники. Очень часто они возникают в качестве вспомогательных при решении других задач. В частности, ЗМК и ЗМВК находят применение (см., например, [3, 7–9]) в теории кодирования, диагностике систем, задачах составления расписаний, при решении проблем передачи информации.

К настоящему времени предложено большое количество методов для решения ЗМК (например, [8, 10, 11]), часть из которых основана на различных непрерывных формулировках задачи. Однако проблема поиска максимальной и максимальной взвешенной клик остаётся актуальной до сих пор.

В этой работе рассматривается подход, который использует сведение задач о клике к задачам минимизации выпуклой квадратичной функции на каноническом симплексе с дополнительным невыпуклым ограничением. При этом в постановке задачи участвуют матрицы смежности как исходного, так и дополнительного графов. Алгоритмы решения ЗМК и ЗМВК основаны на условиях глобальной оптимальности для задач с d.c. ограничением и являются реализацией стратегии глобального поиска (СГП) [2, 4–6], которая позволяет находить глобальное решение при выполнении определённых условий. В этой работе СГП применена для построения приближённых алгоритмов поиска максимальной и максимальной взвешенной клик, приведены результаты тестирования алгоритмов на задачах из библиотеки DIMACS, а также сравнение с некоторыми другими алгоритмами решения задач о клике.

## 1. Непрерывные постановки задачи о максимальной клике

Известно [8], что каждому графу можно поставить в соответствие матрицу смежности. Для дополнительного графа $\overline{G}$ матрица смежности $A_{\overline{G}} = [a_{ij}^{\overline{G}}]$ размера $n \times n$ задаётся следующим образом: $a_{ij}^{\overline{G}} = 1$, если $(i, j) \notin E$ и $i \neq j$, и $a_{ij}^{\overline{G}} = 0$ в противном случае.

Рассмотрим следующую задачу оптимизации:

$$\left.\begin{aligned} f(x) \overset{\triangle}{=} \|x\|^2 \to \min, \quad x \in S,\\ F(x) \overset{\triangle}{=} \langle x, \overline{A}x \rangle \leqslant 0, \end{aligned}\right\} \qquad (\mathcal{P}_0)$$

где $S \overset{\triangle}{=} \left\{ x \in \mathbb{R}^n \mid x \geqslant 0,\ \sum\limits_{i=1}^{n} x_i = 1 \right\}$.

Обозначим носитель (спектр) вектора $x \in \mathbb{R}^n$ через $\operatorname{supp}(x)$, так что $\operatorname{supp}(x) = \{i \in \{1, \ldots, n\} \mid x_i > 0\}$.

**Лемма 1.** *Пусть $x \in S$. Ограничение в задаче $(\mathcal{P}_0)$ активно, т. е. $\langle x, \overline{A}x \rangle = 0$ тогда и только тогда, когда множество* $\operatorname{supp}(x)$ *образует клику в графе $G$.*

Доказательство. 1. Предположим, что $\langle x, \overline{A}x \rangle = 0$, но $\operatorname{supp}(x)$ не является кликой. Тогда найдутся $i, j \in \operatorname{supp}(x)$, которые не соединены ребром в графе $G$, т. е. $\overline{a}_{ij} = 1$. Поэтому $\langle x, \overline{A}x \rangle \geqslant \overline{a}_{ij}x_ix_j > 0$, что противоречит сделанному предположению.

2. Если подмножество вершин $\operatorname{supp}(x)$ является кликой, все вершины из $\operatorname{supp}(x)$ смежные, или $\overline{a}_{ij} = 0$ для любых $i, j \in \operatorname{supp}(x)$. Поэтому

$$\langle x, \overline{A}x \rangle = \sum_{i,j=1}^{n} \overline{a}_{ij}x_ix_j = \sum_{i,j\in \operatorname{supp}(x)} \overline{a}_{ij}x_ix_j = 0.$$

В случае, когда исходный граф $G$ достаточно плотный, матрица смежности $\overline{A}$ дополнительного графа $\overline{G}$ содержит небольшое число ненулевых элементов, что может облегчить поиск максимальной клики. В противном случае удобнее работать с матрицей смежности $A$ исходного графа $G$. С целью использовать для решения ЗМК свойства обеих матриц введём следующую функцию, зависящую от параметров $\alpha$ и $\gamma$:

$$F_{\alpha,\gamma}(x) \stackrel{\triangle}{=} \langle x, [\alpha\overline{A} + \gamma(A + I)]x \rangle - \gamma, \qquad (1)$$

где $I$ — единичная матрица.

**Лемма 2.** *Пусть $x \in S$. Множество* $\operatorname{supp}(x)$ *образует клику в графе $G$ тогда и только тогда, когда $F_{\alpha,\gamma}(x) = 0$ при $\alpha \neq \gamma$.*

Доказательство. Для матриц смежности рассматриваемых графов $G$ и $\overline{G}$ выполняется соотношение $A+\overline{A} = ee^T - I$, где $ee^T$ — матрица, все элементы которой равны 1. Тогда, подставляя в (1) $A + I = ee^T - \overline{A}$, для $x \in S$ получаем

$$\begin{aligned} F_{\alpha,\gamma}(x) = \langle x, [\alpha\overline{A} + \gamma(ee^T - \overline{A})]x \rangle - \gamma = \alpha \langle x, \overline{A}x \rangle - \gamma \langle x, \overline{A}x \rangle \\ = (\alpha - \gamma) \langle x, \overline{A}x \rangle . \end{aligned}$$

Согласно лемме 1 если $F_{\alpha,\gamma}(x) = 0$ при $\alpha \neq \gamma$, то $\operatorname{supp}(x)$ образует клику, и наоборот.

Теперь обратимся к вопросу о знаке неравенства, которое задаёт функция $F_{\alpha,\gamma}(x)$ при решении ЗМК. Если $\langle x, \overline{A}x \rangle \leqslant 0$, то, как видно из доказательства леммы 2, $F_{\alpha,\gamma}(x) \leqslant 0$ при $\alpha > \gamma$ и $F_{\alpha,\gamma}(x) \geqslant 0$ при $\alpha < \gamma$.

Значит, $\operatorname{sign}(\alpha - \gamma)F_{\alpha,\gamma}(x) \leqslant 0$ при $\alpha \neq \gamma$.

Далее рассмотрим задачу оптимизации с параметрами $\alpha$, $\gamma$, $\alpha \neq \gamma$, которая является обобщением задачи $(\mathcal{P}_0)$:

$$\left.\begin{array}{c}\|x\|^2 \to \min, \ \ x \in S, \\ \operatorname{sign}(\alpha - \gamma) F_{\alpha,\gamma}(x) \leqslant 0.\end{array}\right\} \qquad (\mathcal{P})$$

Заметим, что задача $(\mathcal{P}_0)$ является частным случаем задачи $(\mathcal{P})$ при $\gamma \equiv 0$. Если $\alpha \equiv 0$, получаем непрерывную постановку ЗМК, в которой ограничение задаётся матрицей смежности $A$ исходного графа $G$:

$$\left.\begin{array}{c}\|x\|^2 \to \min, \ \ x \in S, \\ \langle x, (A+I)x\rangle - 1 \geqslant 0.\end{array}\right\} \qquad (\mathcal{P}_1)$$

Введём характеристический вектор $z(C)$ клики (множества) $C$:

$$z(C) = \frac{1}{\mathcal{K}} \sum_{i \in C} e^i,$$

где $\mathcal{K} = |C|$ — мощность клики (множества) $C$, а $e^i$ — стандартный базисный вектор в пространстве $\mathbb{R}^n$.

**Теорема 1.** *Пусть графу $G(V,E)$ в соответствие поставлена задача $(\mathcal{P})$, где $\alpha \neq \gamma$. Тогда следующие утверждения эквивалентны*:

(i) *$C$ — локально максимальная клика* (ЛМК), *$z \stackrel{\triangle}{=} z(C)$ — её характеристический вектор*;

(ii) *$z$ — строгий локальный минимум в задаче $(\mathcal{P})$*;

(iii) *$z$ — локальный минимум в задаче $(\mathcal{P})$*, $z \in \operatorname{Arg\,loc\,min}(\mathcal{P})$.

Доказательство. (i) $\Rightarrow$ (ii). Пусть $C$ — ЛМК. Рассмотрим вектор $p = (p_1, \ldots, p_n)$ такой, что

$$\|p\| \leqslant 1/\mathcal{K}, \qquad p_i \geqslant 0 \quad \forall i \notin C, \quad \sum_{i=1}^{n} p_i = 0, \qquad (2)$$

где $\|\cdot\|$ — евклидова норма, и точку $y = z(C) + p$. Нетрудно видеть, что $y \in S$ и $\|y - z(C)\| = \|p\| \leqslant 1/\mathcal{K}$.

Предположим, что существует вершина $i$ графа, которая не содержится в клике $C$, $i \notin C$, и $p_i > 0$. Тогда множество $\operatorname{supp}(y)$ не является кликой, так как из условия (2) следует $|p_i| < 1/\mathcal{K}$ и $y_j > 0$ для любых $j \in C$. Тогда по лемме 2 $F_{\alpha,\gamma}(y) \neq 0$ при $\alpha \neq \gamma$. Заметим, что $y_i \geqslant 0$ для любых $i = 1, \ldots, n$, так как $y \in S$; $\overline{a}_{ij} \geqslant 0$ для любых $i, j = 1, \ldots, n$. Тогда $\operatorname{sign}(\alpha - \gamma) F_{\alpha,\gamma}(y) > 0$ при $\alpha \neq \gamma$, т. е. $y$ — недопустимая точка в задаче $(\mathcal{P})$.

Рассмотрим точку $y$ такую, что $y_i > 0 \ \ \forall i \in C$ и $y_i = 0 \ \ \forall i \notin C$. Тогда

$$f(y) = \|z(C) + p\|^2 = f(z(C)) + 2\,\langle z(C), p\rangle + \|p\|^2 > f(z(C)).$$

Следовательно, $z$ — строгий локальный минимум в задаче $(\mathcal{P})$.

(ii) $\Rightarrow$ (iii) очевидно.

(iii) $\Rightarrow$ (i). Пусть $z \in \operatorname{Arg\,loc\,min}(\mathcal{P})$. Предположим, что множество $\operatorname{supp}(z)$ не является кликой. Тогда по лемме 2, рассуждая аналогично первой части доказательства, получим $\operatorname{sign}(\alpha - \gamma)F_{\alpha,\gamma}(z) > 0$ при $\alpha \neq \gamma$, так что точка $z$ оказывается недопустимой в задаче $(\mathcal{P})$. Получили противоречие.

Предположим теперь, что множество $\operatorname{supp}(z)$ является кликой, но не ЛМК, т. е. существует $i \notin \operatorname{supp}(z)$ такой, что множество $\operatorname{supp}(z) \cup \{i\}$ является кликой. Пусть $\mathcal{K} = |\operatorname{supp}(z)|$. Рассмотрим точку $y = z - \delta e^j + \delta e^i$, где $j \in \operatorname{supp}(z)$. Очевидно,

$$y \in S, \quad F_{\alpha,\gamma}(y) = 0 \quad \text{для} \quad 0 < \delta \leqslant z_j. \tag{3}$$

Тогда $\|y\|^2 - \|z\|^2 = -2\delta y_j + 2\delta^2 < 0$ для достаточно малых значений $\delta$. Между тем точка $y$ лежит в окрестности точки $z$ для любого $\delta > 0$. Полученное противоречие доказывает, что $C$ является ЛМК.

Предположим наконец, что $z$ не является характеристическим вектором клики $C$. Тогда существуют вершины $j, l \in C$ такие, что $z_j > 1/\mathcal{K}$ и $z_l < 1/\mathcal{K}$. Вновь рассмотрим точку $y = z - \delta e^j + \delta e^l$. Очевидно, соотношения (3) выполняются, при этом

$$\|y\|^2 - \|z\|^2 = (z_j - \delta)^2 + (z_l + \delta)^2 - z_j^2 - z_l^2 = 2\delta(z_l - z_j) + 2\delta^2 < 0$$

для достаточно малых $\delta$, так как $z_l - z_j < 0$. Полученное противоречие доказывает, что $z$ — характеристический вектор клики $C$.

**Следствие 1.** *Множество $C_* \subset V$ является максимальной кликой в графе $G(V, E)$ тогда и только тогда, когда $z(C_*)$ — решение задачи $(\mathcal{P})$.*

**Замечание 1.** Из теоремы 1 вытекает, что любое глобальное решение $z$ задачи $(\mathcal{P})$ позволяет определить соответствующую ему максимальную клику по правилу: $\ C_* = \{i \in V \mid z_i > 0\}$.

Далее произведём обобщение полученных результатов на ЗМВК.

## 2. Непрерывные постановки задачи о максимальной взвешенной клике

Пусть $C \subset V$ — произвольная клика, $W(C) = \sum\limits_{i\in C} w_i$ — общий вес множества $C$.

Определим взвешенный характеристический вектор $z(C, w)$ множества $C$:

$$z(C,w)_i = \begin{cases} w_i/W(C), & \text{если } \ i \in C, \\ 0 & \text{в противном случае.} \end{cases} \tag{4}$$

Построим квадратную матрицу $\overline{B} = ||\bar{b}_{ij}||_{(n\times n)}$ по следующему правилу [8]:

$$\bar{b}_{ij} = \begin{cases} 1/(2w_i) + 1/(2w_j), & \text{если } i \neq j, \quad (i,j) \notin E; \\ 0 & \text{в противном случае.} \end{cases} \tag{5}$$

В случае, когда $w_i = 1, \ i = 1, \dots, n$, матрица $\overline{B}$ оказывается матрицей смежности дополнительного графа $\overline{G}$.

Рассмотрим следующую невыпуклую задачу:

$$\left.\begin{aligned} \phi(x) \overset{\triangle}{=} \sum_{i=1}^{n} x_i^2/w_i \to \min, \quad x \in S, \\ \Phi(x) \overset{\triangle}{=} \left\langle x, \overline{B}x \right\rangle \leqslant 0. \end{aligned}\right\} \tag{$\mathcal{P}_0^W$}$$

**Лемма 3.** *Пусть* $x \in S$. *Равенство* $\left\langle x, \overline{B}x \right\rangle = 0$ *выполняется тогда и только тогда, когда множество* $\operatorname{supp}(x)$ *образует клику в графе* $G$.

Доказательство аналогично доказательству леммы 1.

Далее введём следующую функцию, зависящую от параметров $\alpha$ и $\gamma$:

$$\Phi_{\alpha,\gamma}(x) \overset{\triangle}{=} \left\langle x, [\alpha\overline{B} + \gamma(B + D)]x \right\rangle - \gamma \left\langle d, x \right\rangle, \tag{6}$$

где $d \in \mathbb{R}^n, \quad d_i = 1/w_i, \ i = 1, \dots, n, \quad D = \operatorname{diag}\{d_1, \dots, d_n\}$ — диагональная матрица размера $n \times n$, а матрица $B = ||b_{ij}||_{(n\times n)}$ построена по следующему правилу:

$$b_{ij} = \begin{cases} 1/(2w_i) + 1/(2w_j), & \text{если } (i,j) \in E; \\ 0 & \text{в противном случае.} \end{cases} \tag{7}$$

Заметим, что для точек $x \in S$ выполнено равенство

$$\left\langle x, (\overline{B} + B + D)x \right\rangle = \left\langle d, x \right\rangle. \tag{8}$$

Действительно,

$$\begin{aligned} \left\langle x, (\overline{B} + B + D)x \right\rangle = \sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{j=1}^{n} x_j \left( \frac{1}{2w_i} + \frac{1}{2w_j} \right) = 2 \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} x_i x_j \frac{1}{2w_i} \\ = \sum_{i=1}^{n} x_i \frac{1}{w_i} = \left\langle d, x \right\rangle. \end{aligned}$$

**Лемма 4.** *Пусть $x \in S$. Множество* $\operatorname{supp}(x)$ *образует клику в графе $G$ тогда и только тогда, когда $\Phi_{\alpha,\gamma}(x) = 0$ при $\alpha \neq \gamma$.*

Доказательство. Используя равенство (8), получаем

$$\Phi_{\alpha,\gamma}(x) = \left\langle x, [\alpha\overline{B} + \gamma(B + D)]x\right\rangle - \gamma \left\langle d, x\right\rangle$$
$$= \alpha \left\langle x, \overline{B}x\right\rangle + \gamma \left(\left\langle x, (\overline{B} + B + D)x\right\rangle - \left\langle d, x\right\rangle\right) - \gamma \left\langle x, \overline{B}x\right\rangle = (\alpha - \gamma) \left\langle x, \overline{B}x\right\rangle$$

и по лемме 3 заключаем, что если $\Phi_{\alpha,\gamma}(x) = 0$ при $\alpha \neq \gamma$, то $\operatorname{supp}(x)$ образует клику. Обратное утверждение также верно.

**Замечание 2.** Знак неравенства, которое задаёт функция $\Phi_{\alpha,\gamma}(x)$ при решении ЗМВК, определяется аналогично знаку неравенства с функцией $F_{\alpha,\gamma}(x)$ в ЗМК (см. разд. 1).

Итак, рассмотрим задачу оптимизации с параметрами $\alpha \neq \gamma$, которая является обобщением задачи $(\mathcal{P}_0^W)$:

$$\left.\begin{array}{l} \sum\limits_{i=1}^{n} \frac{1}{w_i} x_i^2 \to \min, \quad x \in S, \\ \operatorname{sign}(\alpha - \gamma)\Phi_{\alpha,\gamma}(x) \leqslant 0. \end{array}\right\} \qquad (\mathcal{P}^W)$$

Заметим, что задача $(\mathcal{P}_0^W)$ является частным случаем задачи $(\mathcal{P}^W)$ при $\gamma \equiv 0$. Если $\alpha \equiv 0$, получаем непрерывную постановку ЗМВК с матрицей $B$, связанной с исходным графом $G$:

$$\left.\begin{array}{l} \sum\limits_{i=1}^{n} \frac{1}{w_i} x_i^2 \to \min, \quad x \in S, \\ \left\langle x, (B + D)x\right\rangle - \left\langle d, x\right\rangle \geqslant 0. \end{array}\right\} \qquad (\mathcal{P}_1^W)$$

**Теорема 2.** *Пусть графу $G(V, E, w)$ в соответствие поставлена задача $(\mathcal{P}^W)$, где $\alpha \neq \gamma$. Тогда следующие утверждения эквивалентны*:

(i) *$C$ — локально максимальная взвешенная клика веса $W$, $z(C, w)$ — её характеристический вектор*;

(ii) *$z$ — строгий локальный минимум в задаче $(\mathcal{P}^W)$*;

(iii) *$z$ — локальный минимум в задаче $(\mathcal{P}^W)$.*

Доказательство аналогично доказательству теоремы 1.

**Следствие 2.** *Множество $C_* \subset V$ является максимальной взвешенной кликой в графе $G(V, E, w)$ тогда и только тогда, когда $z(C_*, w_*)$ — решение задачи $(\mathcal{P}^W)$.*

**Замечание 3.** Из теоремы 2 вытекает, что любое глобальное решение $z$ задачи $(\mathcal{P}^W)$ позволяет определить соответствующую ему максимальную взвешенную клику по правилу: $C_* = \{i \in V \mid z_i > 0\}$.

### 3. Локальный поиск

В данном разделе представлен специальный метод локального поиска (СМЛП) для задач $(\mathcal{P})$ и $(\mathcal{P}^W)$, который принимает во внимание дискретную природу задач о клике, свойства матрицы смежности графа и определённую простоту допустимого множества $S$.

Положим для определённости $\alpha > \gamma \geqslant 0$ и опишем СМЛП для задачи $(\mathcal{P})$. Процедура локального поиска состоит из двух частей.

1. Начиная с произвольной точки $x^0 \in S$, строится конечная последовательность $\{x^m\}$ недопустимых по d.c. ограничению точек, причём

$$F_{\alpha,\gamma}(x^{m+1}) < F_{\alpha,\gamma}(x^m), \;\; m = 0, 1, 2, \ldots .$$

Построение последовательности продолжается до тех пор, пока соответствующее точке $x := x^m$ множество $\operatorname{supp}(x^m)$ не окажется кликой, т. е. останов происходит, когда $F_{\alpha,\gamma}(x^m) = 0$.

2. Строится локально максимальная клика $C$, содержащая $\operatorname{supp}(x)$, $C \supset \operatorname{supp}(x^m)$, и соответствующая ей точка локального минимума $z$ в задаче $(\mathcal{P})$.

Представим процедуру локального поиска для задачи $(\mathcal{P})$ в более алгоритмичной форме.

$\overline{C}$-процедура.

Шаг 0. Выбрать $x^0 \in S$, положить $m := 0$.

Шаг 1. Построить множество $\operatorname{supp}(x^m)$.

Шаг 2. Если $\operatorname{supp}(x^m)$ является кликой, т. е. $F_{\alpha,\gamma}(x^m) = 0$, то положить $x := x^m$ и идти на шаг 5.

Шаг 3. Выбрать две вершины $q$ и $p$ из $\operatorname{supp}(x^m)$ такие, что

$$(q, p) \notin E, \;\; F_{\alpha,\gamma}(\overline{x}(q, p)) < F_{\alpha,\gamma}(x^m),$$

где точка $\overline{x}(q, p)$ строится по правилу: $\overline{x}(q, p) \overset{\triangle}{=} x^m + x_p^m(e^q - e^p)$.

Шаг 4. Положить $x^{m+1} := \overline{x}(q, p)$, $\;m := m+1$ и вернуться на шаг 1.

Шаг 5. Найти локально максимальную клику $C \supset \operatorname{supp}(x^m)$. Положить $\mathcal{K} := |\operatorname{supp}(x)|$.

Шаг 6. Построить характеристический вектор $z(C)$.

STOP: $z(C)$ — локальный минимум в задаче $(\mathcal{P})$.

**Замечание 4.** Выбор пары $(q, p)$ и построение локально максимальной клики $C$ могут быть осуществлены различными способами, например, описанными в [4]. Следовательно, применяя представленную выше схему, можно получить различные варианты реализации $\overline{C}$-процедуры.

## 4. Глобальный поиск

Нетрудно видеть, что задачи $(\mathcal{P})$ и $(\mathcal{P}^W)$ не могут быть отнесены к выпуклым задачам оптимизации [1], поскольку матрицы $A$, $\overline{A}$, $B$ и $\overline{B}$ имеют, вообще говоря, как положительные, так и отрицательные собственные значения. Однако, как известно (см., например, [4]), любая матрица может быть представлена в виде разности двух положительно определённых матриц, следовательно, $(\mathcal{P})$ и $(\mathcal{P}^W)$ относятся к оптимизационным задачам с d.c. ограничением

$$f(x) \to \min, \;\; x \in S, \;\; F(x) = h(x) - g(x) \leqslant 0,$$

и для их решения применима теория глобального поиска [4, 6].

Существуют различные способы представления матрицы в виде разности двух положительно определённых. Например, при $\alpha, \; \gamma > 0$ можно использовать следующее представление матрицы $H = \alpha\overline{A} + \gamma(A + I)$ в задаче $(\mathcal{P})$: $H = H_1 - H_2$, где $H_1 = \alpha\overline{\Lambda} + \gamma(\Lambda + I)$, $H_2 = \alpha(\overline{\Lambda} - \overline{A}) + \gamma(\Lambda - A)$. Здесь

$$\Lambda = \mathrm{diag}\{\lambda_1, \ldots, \lambda_n\}, \;\; \lambda_i = \sum_{j=1}^{n} a_{ij}, \overline{\Lambda} = \mathrm{diag}\{\overline{\lambda}_1, \ldots, \overline{\lambda}_n\}, \;\; \overline{\lambda}_i = \sum_{j=1}^{n} \overline{a}_{ij}.$$

Можно видеть, что $\lambda_i, \overline{\lambda}_i > 0, \; i = 1, \ldots, n$, в силу отсутствия изолированных вершин в графах $G$ и $\overline{G}$. Поэтому матрица $H_1$ положительно определена, а матрица $H_2$ имеет доминирующую диагональ. Тогда функции

$$h(x) = \langle x, H_1 x\rangle - \gamma, \;\; g(x) = \langle x, H_2 x\rangle$$

являются выпуклыми. Таким образом, получено d.c. разложение функции $F_{\alpha,\gamma}(\cdot)$, задающей ограничение в задаче $(\mathcal{P})$.

С учётом представленных выше результатов стратегия глобального поиска для задач с d.c. ограничением [6] преобразуется в силу дискретной природы задач о клике в нижеследующий алгоритм. Опишем его для ЗМК (решение задачи $(\mathcal{P})$).

$\mathcal{R}$-алгоритм для ЗМК

Шаг 0. Положить $k := 0$. Выбрать параметры $\alpha > 0, \; \gamma > 0, \; \alpha \neq \gamma$. Начиная с точки $x^0$, $\overline{C}$-процедурой получить точку $z^0$ локального минимума задачи $(\mathcal{P})$.

Шаг 1. Положить $\beta_k := g(z^k), \;\; \rho_k := f(z^k)$. Построить множество

$$\mathcal{A}_k = \{y^i = \alpha_i e^i \mid g(y^i) = \beta_k, \; i = 1, \ldots, n\}.$$

Шаг 2. Для каждого $i = 1, \ldots, n$ найти $u^i$ — решение линеаризованной задачи

$$h(x) - \langle \nabla g(y^i), x \rangle \to \min, \quad x \in S, \quad f(x) \leqslant \rho_k. \qquad (\mathcal{PL}_i)$$

Шаг 3. Начиная с точки $u^i \in S$, для каждого $i = 1, \ldots n$ получить $\overline{C}$-процедурой точку $v^i$ локального минимума задачи $(P)$.

Шаг 4. Выбрать точку $v^j: \quad f(v^j) = \min\limits_{1 \leqslant i \leqslant n} f(v^i)$.

Шаг 5. Если $f(v^j) < f(z^k)$, то $z^{k+1} := v^j$, $k := k+1$ и идти на шаг 1. Иначе положить $z := z^k$.

STOP: $C := \mathrm{supp}(z)$ — наилучшая найденная локально максимальная клика мощности $\mathcal{K} = |C|$.

**Замечание 6.** Задачи $(\mathcal{PL}_i)$ являются задачами выпуклого квадратичного программирования, и для их решения применимы соответствующие методы выпуклой оптимизации (см., например, [1]) и пакеты прикладных программ, например, Xpress-MP (www.dashoptimization.com).

## 5. Численное тестирование

Алгоритм глобального поиска (АГП) был запрограммирован на C++ и тестирован на PC Pentium-4 (3 gHz). В качестве тестовых были выбраны задачи размерности до 2000 из библиотеки DIMACS (Discrete Mathematics and Computer Science), которые расположены на сайте:
ftp://dimacs.rutgers.edu/pub/challenge/graph/benchmarks

Стартовой для работы АГП выбиралась точка $x^0 = \left(\frac{1}{n}, \ldots, \frac{1}{n}\right)^T$ — барицентр канонического симплекса $S$, как это делается обычно для ЗМК и ЗМВК [8, 10].

При решении ЗМВК для каждой вершины $i$ графа $G$ вес определялся по следующему правилу [11]: $w_i = i \bmod 10, \quad i = 1, \ldots, n$, где mod обозначает операцию деления нацело. Интересно было узнать максимальный вес клики $W_*$ в графах из библиотеки DIMACS с весами, заданными указанным способом, и этот вес был найден с помощью программы Xpress-MP для задач размерности до 500.

Для более объективной оценки подхода к решению задач о клике, основанного на теории глобального поиска в задачах с d.c. ограничениями, было проведено сравнение эффективности АГП с другими методами решения ЗМК и ЗМВК как непрерывных задач. Для этой цели использовались результаты тестирования алгоритма MS-alg, разработанного итальянскими учеными [11], и алгоритма QualexMS С. Бусыгина [12].

Таблица 1

Сравнение алгоритмов решения ЗМК на «p-hat» и «brock» графах

| graph | $n$ | dens | $K_*$ | QualexMS | | MS-alg | | $\mathcal{R}$-alg | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | | $K$ | $T$ | $K$ | $T$ | $K$ | $T$ |
| p-hat300-1 | 300 | 24 | **8** | **8** | 1 | **8** | 0 | **8** | 1 |
| p-hat300-2 | 300 | 49 | **25** | **25** | 1 | **25** | 0 | **25** | 2 |
| p-hat300-3 | 300 | 74 | **36** | 35 | 1 | **36** | 2 | **36** | 4 |
| p-hat700-1 | 700 | 25 | **11** | **11** | 10 | **11** | 158 | **11** | 18 |
| p-hat700-2 | 700 | 50 | $\geqslant$ **44** | **44** | 12 | **44** | 4 | **44** | 5 |
| p-hat700-3 | 700 | 75 | $\geqslant$ **62** | **62** | 11 | **62** | 2 | **62** | 7 |
| p-hat1500-1 | 1500 | 25 | $\geqslant$ **12** | **12** | 95 | **12** | 582 | 11 | 45 |
| p-hat1500-2 | 1500 | 50 | $\geqslant$ **65** | 64 | 111 | **65** | 72 | **65** | 65 |
| p-hat1500-3 | 1500 | 75 | $\geqslant$ **94** | 91 | 108 | **94** | 111 | 93 | 225 |
| brock200_2 | 200 | 50 | **12** | **12** | 0 | **12** | 7 | 11 | 1 |
| brock200_4 | 200 | 66 | **17** | **17** | 0 | **17** | 13 | 16 | 0 |
| brock400_2 | 400 | 75 | **29** | **29** | 3 | 25 | 1120 | 24 | 6 |
| brock400_4 | 400 | 75 | **33** | **33** | 2 | **33** | 348 | 24 | 3 |
| brock800_2 | 800 | 65 | **24** | **24** | 18 | 21 | 3 | 20 | 9 |
| brock800_4 | 800 | 65 | **26** | **26** | 18 | 20 | 8 | 20 | 32 |

В табл. 1 приведены результаты решения ЗМК, полученные двумя выше представленными алгоритмами и АГП ($\mathcal{R}$-alg), для некоторых графов из библиотеки DIMACS. Здесь и в нижеследующих таблицах использованы следующие обозначения: graph — название тестового примера; $n$ — размерность графа; dens — плотность графа: dens$=\frac{|E|}{C_n^2}\times 100\%$. Далее приведены: $K_*$ — известная размерность максимальной клики из библиотеки DIMACS, и для каждого из алгоритмов $K$ — полученная размерность локально максимальной клики и $T$ — время счёта в секундах.

Среди задач серий «p-hat» и «brock» (см. табл. 1) пакеты MS-alg и QualexMS не нашли клику максимально известной размерности в 3 задачах, а $\mathcal{R}$-алгоритм — в 8 задачах. Особенно сложными оказались для АГП задачи серии «brock».

В табл. 2 приведены сравнительные результаты тестирования алгоритмов решения ЗМВК по весу клики $W$ и по времени счёта $T$ в секундах. Для $\mathcal{R}$-alg приведены результаты решения задачи $\left(\mathcal{P}_0^W\right)$.

Можно заметить, что QualexMS работает быстрее других алгоритмов, но по весу максимальной клики он во всех задачах, за исключением одной, проиграл двум другим алгоритмам. В то же время $\mathcal{R}$-алгоритм нашёл вес клики не хуже, чем два других алгоритма, в большинстве задач из табл. 2, в том числе в трёх задачах был найден максимальный из полученных весов $W$. Интересно, что на «brock» графах при решении

ЗМВК $\mathcal{R}$-алгоритм сработал более эффективно по сравнению с другими алгоритмами, особенно на размерности 800 (см. табл. 2), в то время как задачи именно этой серии оказались сложными для него при решении ЗМК (см. табл. 1).

Таблица 2

Сравнение алгоритмов решения ЗМВК на «p-hat» и «brock» графах

| graph | $n$ | dens | $W_*$ | QualexMS | | MS-alg | | $\mathcal{R}$-alg | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | | $W$ | $T$ | $W$ | $T$ | $W$ | $T$ |
| p-hat300-1 | 300 | 25 | **71** | **71** | 0 | **71** | 2 | **71** | 2 |
| p-hat300-2 | 300 | 50 | **180** | 177 | 0 | **180** | 0 | **180** | 5 |
| p-hat300-3 | 300 | 75 | **260** | 256 | 0 | **260** | 6 | 257 | 1 |
| p-hat700-1 | 700 | 25 | $\geqslant$**77** | 74 | 7 | **77** | 36 | **77** | 1 |
| p-hat700-2 | 700 | 50 | $\geqslant$**284** | 274 | 8 | **284** | 200 | 283 | 72 |
| p-hat700-3 | 700 | 75 | $\geqslant$**418** | 403 | 8 | **418** | 43 | 415 | 53 |
| p-hat1500-1 | 1500 | 25 | $\geqslant$**89** | 80 | 61 | **89** | 1113 | **89** | 81 |
| p-hat1500-2 | 1500 | 50 | $\geqslant$**416** | 395 | 72 | **416** | 758 | **416** | 356 |
| p-hat1500-3 | 1500 | 75 | $\geqslant$**595** | 560 | 74 | **595** | 518 | 593 | 828 |
| brock200_2 | 200 | 50 | **77** | 76 | 0 | 76 | 0 | **77** | 1 |
| brock200_4 | 200 | 66 | **114** | 112 | 0 | **114** | 1 | **114** | 2 |
| brock400_2 | 400 | 75 | $\geqslant$**178** | 168 | 1 | **178** | 1256 | **178** | 84 |
| brock400_4 | 400 | 75 | $\geqslant$**175** | 173 | 1 | **175** | 114 | 174 | 10 |
| brock800_2 | 800 | 65 | $\geqslant$**158** | 143 | 11 | 155 | 1842 | 156 | 144 |
| brock800_4 | 800 | 65 | $\geqslant$**154** | 144 | 11 | 153 | 803 | **154** | 33 |

Обнадёживающими выглядят результаты сравнения MS-alg и $\mathcal{R}$-alg по решению ЗМВК на серии «C» графов (см. табл. 3). В задачах размерности 1000-2000 АГП нашёл клики веса большего чем MS-alg.

Таблица 3

Сравнение алгоритмов решения ЗМВК на «C» графах

| graph | $n$ | dens | $W_*$ | MS-alg | | $\mathcal{R}$-alg | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | | $W$ | $T$ | $W$ | $T$ |
| C125.9 | 125 | 90 | **215** | **215** | 5 | **215** | 3 |
| C250.9 | 250 | 90 | **304** | **304** | 13 | 292 | 7 |
| C500.9 | 500 | 90 | $\geqslant$**385** | **385** | 3364 | 379 | 48 |
| C1000.9 | 1000 | 90 | $\geqslant$**483** | 470 | 554 | **483** | 375 |
| C2000.9 | 2000 | 90 | $\geqslant$**561** | 531 | 2431 | **561** | 1007 |
| C2000.5 | 2000 | 50 | $\geqslant$**126** | 113 | 324 | **126** | 605 |

Наконец, неожиданным оказалось влияние выбора параметров $\alpha$ и $\gamma$ на решение задач о клике. В табл. 4 приводятся результаты вычислительного эксперимента по изучению этого влияния при решении ЗМК. Здесь $K(\mathcal{P}_0)$ — размерность локально максимальной клики, полученной

с помощью решения задачи ($\mathcal{P}_0$) (задачи ($\mathcal{P}$), где $\alpha = 1$, $\gamma = 0$), а для клик, полученных с помощью решения задачи ($\mathcal{P}$), указана размерность $K$ и значения параметров $\alpha$ и $\gamma$, при которых клика была найдена. Максимальную клику удалось найти ещё в четырёх задачах в дополнение к данным табл. 1.

Таблица 4

Влияние параметров $\alpha$ и $\gamma$ на решение ЗМК

| graph | $n$ | dens | $K_*$ | $K(\mathcal{P}_0)$ | $(\mathcal{P})$ | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | | | $K$ | $\alpha$ | $\gamma$ |
| p-hat500-3 | 500 | 75 | $\geqslant$ **50** | 49 | **50** | 0,9 | 0,1 |
| p-hat1000-3 | 1000 | 75 | $\geqslant$ **68** | 65 | 67 | 0,8 | 0,2 |
| p-hat1500-3 | 1500 | 75 | $\geqslant$ **94** | 93 | **94** | 0,8 | 0,2 |
| brock200_2 | 200 | 50 | **12** | 11 | **12** | 0,7 | 0,3 |
| brock200_4 | 200 | 66 | **17** | 16 | **17** | 0,2 | 0,8 |
| brock400_1 | 400 | 75 | **27** | 24 | 25 | 0,6 | 0,4 |
| brock400_2 | 400 | 75 | **29** | 24 | 25 | 0,4 | 0,6 |
| brock400_3 | 400 | 75 | **31** | 24 | 25 | 0,4 | 0,6 |
| brock400_4 | 400 | 75 | **33** | 24 | 25 | 0,6 | 0,4 |

При решении ЗМВК с изменением параметров $\alpha$ и $\gamma$ удалось улучшить результат только в задаче brock800_2 , где при $\alpha = 0{,}8$ и $\gamma = 0{,}2$ была найдена клика веса 158, в то время как при $\alpha = 1$ и $\gamma = 0$ максимальный найденный вес $W$ =156 (см. табл. 2).

В заключение подчеркнём, что для решения задач о клике, а особенно ЗМВК большой размерности ($n \geqslant 800$), представляется выигрышным применять подход, основанный на условиях глобальной оптимальности для задач с d.c. ограничением, о чём свидетельствуют результаты тестирования данного метода на графах из библиотеки DIMACS и сравнение с другими подходами к решению задач о клике. Отметим также, что ранее разработан алгоритм [4, 10] для решения задач о клике как задач d.c. максимизации. Этот алгоритм по сравнению с $\mathcal{R}$-алгоритмом на графах, например, серии «brock800» находит клику мощности, большей на единицу, но при решении ЗМВК на этой серии задач вес клики оказывается меньше с разницей около 5%. Однако если принять во внимание возможность комбинации $\mathcal{R}$-алгоритма и алгоритма, разработанного ранее [4, 10], то шансы на успех применения теории глобального поиска для задач о клике как непрерывных задач оптимизации несомненно возрастают.

## ЛИТЕРАТУРА

1. **Васильев Ф. П.** Методы оптимизации. — М.: Факториал Пресс, 2002. — 824 с.

2. **Груздева Т. В., Стрекаловский А. С.** Локальный поиск в задачах с невыпуклыми ограничениями // Журн. вычисл. математики и мат. физики. — 2007. — Т. 47, № 3. — С. 397–413.
3. **Оре О.** Теория графов. — М.: Мир, 1982. — 336 с.
4. **Стрекаловский А. С.** Элементы невыпуклой оптимизации. — Новосибирск: Наука, 2003. — 352 с.
5. **Стрекаловский А. С.** Об экстремальных задачах с d.c. ограничениями // Журн. вычисл. математики и мат. физики. — 2001. — Т. 41, № 12. — С. 1833–1843.
6. **Стрекаловский А. С.** Минимизирующие последовательности в задачах с d.c. ограничениями // Журн. вычисл. математики и мат. физики. — 2005. — Т. 45, № 3. — С. 435–447.
7. **Berman P., Pelc A.** Distributed Fault Diagnosis for Multiprocessor Systems // Proceedings of the 20th Annual International Symposium on Fault-Tolerant Computing. — Newcastle upon Tyne, UK, 1990. — P. 340–346.
8. **Bomze I. M., Budinich M., Pardalos P. M., Pelillo M.** The maximum clique problem // Handbook of Combinatorial Optimization. Vol. A. — Dordrecht: Kluwer, 1999. — P. 1–74.
9. **Kovalyov M. Y., Ng C. T., Edwin Cheng T. C.** Fixed interval scheduling: Models, applications, computational complexity and algorithms // European J. Operational Research. — 2007. — V. 178. — P. 331–342.
10. **Kuznetsova A., Strekalovsky A. S.** On solving the maximum clique problem // J. Global Optim. — 2001. — N 3. — P. 265–288.
11. **Mannino C., Stefanutti E.** An augmentation algorithm for the maximum weighted stable set problem // Comput. Optimization and Applications. — 1999. — V. 14, N 3. — P. 467–371.
12. QualexMS: QUick ALmost EXact maximum weight clique solver based on a generalized Motzkin-Straus formulation, ver. 1.2, Stanislav Busygin, 2000–2007 (http://clp.pisem.net/LINKS/TSP/NP-CompletenessPage_20010710.htm)


*Груздева Татьяна Владимировна,*
e-mail: gruzdeva@icc.ru

Статья поступила
14 июля 2008 г.
Переработанный вариант —
20 августа 2008 г.