

П.І. СТЕЦЮК

Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України, Київ, Україна,
e-mail: stetsyukp@gmail.com.

О.М. ХОМ'ЯК

Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України, Київ, Україна,
e-mail: khomiak.olha@gmail.com.

Є.А. БЛОХІН

Техаський університет A&M, Колледж-Стейшен, Сполучені Штати Америки,
e-mail: blokhin23@tamu.edu.

А.А. СУПРУН

Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України, Київ, Україна,
e-mail: anton_s2007@ukr.net.

ОПТИМІЗАЦІЙНІ ЗАДАЧІ ДЛЯ МАКСИМАЛЬНОГО k -ПЛЕКСА¹

Анотація. Побудовано квадратичну оптимізаційну задачу для знаходження максимального k -плекса у неорієнтованому графі. Наведено дві сім'ї функціонально-надлишкових квадратичних обмежень, які отримано за допомогою обмежень Булевої задачі для максимального k -плекса. Досліджено вплив функціонально-надлишкових обмежень на покращення точності Лагранжевих двоїстих оцінок для цільової функції квадратичної задачі. Розроблено алгоритм пошуку всіх максимальних k -плексів та наведено результати тестових експериментів для його реалізації за допомогою програмного пакета GLPK (GNU Linear Programming Kit).

Ключові слова: максимальний k -плекс, максимальна кліка, квадратична оптимізаційна задача, Булева задача лінійного програмування, функціонально-надлишкове обмеження, Лагранжева двоїста оцінка.

ВСТУП

Поняття k -плекса для неорієнтованого графу введено в [1] (k — деяке натуральне число). Якщо $k = 1$, то k -плекс збігається з клікою (повним підграфом) графу. Для $k > 1$ k -плекс є ослабленням поняття кліки графу. Отже, вимоги на включення вершини у k -плекс є слабкішими ніж вимоги на включення вершини у кліку. Ці поняття широко використовуються в соціології для виявлення та дослідження окремих підгруп населення, під час кластеризації даних, для оптимізації інформаційних потоків у мережах тощо (див., наприклад, [2–5]). Слід зазначити, що зазвичай оптимізаційні задачі пошуку максимальних клік та k -плексів є NP-складними.

У цій статті описано дослідження за двома оптимізаційними задачами, які призначені для знаходження максимального k -плекса у неорієнтованому графі. Перша задача є квадратичною оптимізаційною задачею, для неї описано застосування техніки Лагранжевих двоїстих оцінок [6, 7]. Друга задача є задачею Булевого лінійного програмування, для неї описано алгоритм знаходження усіх розв'язків [8].

Стаття складається з шести розділів. У розд. 1 наведено загальні відомості про k -плекс, у розд. 2 описано множину допустимих розв'язків для k -плекса графу G за допомогою системи квадратичних обмежень. У розд. 3 розглянуто квадратичну задачу знаходження максимального k -плекса та проаналізовано її зв'язок із Булевою лінійною задачею. Там же розглянуто сім'ї функціонально-надлишкових обмежень для уточнення Лагранжевих двоїстих оцінок у квадратичній задачі, що ґрунтуються на використанні обмежень Булевої лінійної задачі. У розд. 4 проаналізовано зв'язок формулювання квадратичної задачі для 1-плекса з відомим формулюванням квадратичної задачі для пошуку максимальної кліки графу. У розд. 5 розглянуто Лагранжеві двоїсті оцінки для низки

¹ Роботу виконано за підтримки CRDF Global (грант G-202102-68020).

квадратичних задач та показано, що їх можна покращити за допомогою додавання функціонально-надлишкових обмежень [9, 10]. Для обчислення Лагранжевих двоїстих оцінок використано програму DSQTPR [11]. У розд. 6 наведено алгоритм знаходження усіх розв'язків задачі про k -плекс за допомогою пакета GLPK [12].

1. ЗАГАЛЬНІ ВІДОМОСТІ ПРО k -ПЛЕКС

Нехай $G = (V, E)$ — неорієнтований граф із множиною вершин $V = \{1, \dots, n\}$ та множиною ребер E . Ребро графу G , що зв'язує вершини $i \in V$ та $j \in V$, позначимо $(i, j) \in E$. Для графу G будемо використовувати також іншу форму його представлення: $G = (V, \Gamma)$, де $\Gamma = \{\Gamma(i), i=1, \dots, n\}$, а $\Gamma(i)$ — кінцеві вершини тих дуг, у яких початковою вершиною є вершина i . Кількості ребер графу G в обох представленнях зв'язані співвідношенням: $|E| = \frac{1}{2} \sum_{i \in V} |\Gamma(i)|$. Комплементарний до G граф позначимо $\bar{G} = (V, \bar{E})$ і $\bar{G} = (V, \bar{\Gamma})$, де $(i, j) \in \bar{E}$, $\bar{\Gamma} = \{\bar{\Gamma}(i), i=1, \dots, n\}$.

Означення 1. Підмножина вершин S із V називається k -плексом графу G , якщо ступінь кожної вершини в індукованому підграфі $G[S]$ (підграфі, породженому підмножиною S) є не меншим ніж $|S| - k$. Інакше кажучи, $S \subset V$ є k -плексом, якщо виконується така умова:

$$\deg_{G[S]}(i) = |\Gamma(i) \cap S| \geq |S| - k \quad \forall i \in S.$$

Зазначимо, що k -плекс є максимальним за включенням (maximal), якщо він не міститься в жодному іншому k -плексі. Найбільший з максимальних за включенням k -плексів називається максимальним (maximum), його розмір називають k -плексним числом графу G та позначають $\rho_k(G)$ [2]. Очевидно, що 1-плекс є клікою графу G , тому що ступінь кожної вершини в індукованому підграфі $G[S]$ не менший ніж $|S| - 1$, а це означає, що кожна вершина у підграфі $G[S]$ зв'язана з усіма іншими вершинами, тобто підграф $G[S]$ є повним підграфом (клікою) графу G . У цьому випадку $\rho_1(G) = \omega(G)$, де $\omega(G)$ — клікове число графу G , що відповідає розміру максимальної кліки у графі G .

Поняття co - k -плекса графу G , також уведено в [2], є узагальненням поняття незалежної множини вершин графу G . Для $k = 1$ co - k -плекс збігається з незалежною множиною вершин графу. Для $k > 1$ co - k -плекс є ослабленням поняття незалежної множини вершин графу (відомої також як внутрішньо стійка множина).

Означення 2. Підмножина вершин S з V називається co - k -плексом графу G , якщо виконується така умова:

$$\deg_{G[S]}(i) = |\Gamma(i) \cap S| \leq k - 1 \quad \forall i \in S.$$

Отже, $S \subset V$ є co - k -плексом, якщо ступінь кожної вершини в індукованому підграфі $G[S]$ є не більшим ніж $k - 1$. Очевидно, що co -1-плекс є незалежною множиною вершин графу G , оскільки ступінь кожної вершини в індукованому підграфі $G[S]$ дорівнює нулю, а це означає, що кожна вершина у підграфі $G[S]$ не зв'язана з жодною з інших вершин підграфу $G[S]$. Зазначимо, що co - k -плекс і k -плекс для графу G пов'язані між собою як незалежна множина вершин та кліка графу G . Тому підмножина S є co - k -плексом графу G тоді й тільки тоді, коли S є k -плексом для комплементарного графу G .

2. КВАДРАТИЧНІ ОБМЕЖЕННЯ ДЛЯ k -ПЛЕКСА

Нехай вершині $i \in V$ ($i = 1, 2, \dots$) відповідає Булева змінна $x_i \in \{0, 1\}$ така, що

$$x_i = \begin{cases} 1, & \text{якщо } i \in S, \\ 0, & \text{якщо } i \in V \setminus S. \end{cases}$$

Булеві змінні x_i , $i=1, \dots, n$, описують за допомогою квадратичних обмежень-рівностей

$$x_i^2 - x_i = 0 \quad \forall i \in V. \quad (1)$$

Побудуємо такі квадратичні обмеження, щоб підмножина S була k -плексом. Ці обмеження повинні задавати вимоги на те, щоб ступінь кожної вершини $i \in S$ у підграфі $G[S]$ був не меншим за $|S| - k$, інакше кажучи, щоб у підграфі $G[S]$ кількість дуг, що виходять із кожної вершини $i \in S$, була не меншою за $|S| - k$.

Нехай вершина i належить підмножині S , тобто $x_i = 1$. Позначимо $N_e(i)$ ступінь вершини i у підграфі $G[S]$, тобто кількість дуг, що виходять з вершини $i \in S$. Тоді в підграфі $G[S]$ ступені вершин із підмножини S задають за допомогою сім'ї співвідношень

$$N_e(i) = \sum_{j \in \Gamma(i)} x_j \quad \forall i \in S. \quad (2)$$

З рівняння $|S| = \sum_{j \in V} x_j$ та умови, що множина S є k -плексом, одержуємо нерівності

$$N_e(i) \geq |S| - k = \sum_{j \in V} x_j - k \quad \forall i \in S. \quad (3)$$

Із співвідношень (2) та (3) одержуємо сім'ю нерівностей

$$\sum_{j \in \Gamma(i)} x_j \geq \sum_{j \in V} x_j - k \quad \forall i \in S, \quad (4)$$

за виконання яких всі ті вершини $i \in V$, для яких $x_i = 1$, будуть утворювати k -плекс.

Однак, нерівності вигляду (4) не будуть виконуватися для тих вершин $i \in V$, для яких $x_i = 0$, тобто для всіх $x_i \in V \setminus S$. Для того, щоб одержати квадратичні нерівності, що будуть справедливими і для змінних $x_i = 0$, достатньо обидві частини нерівності вигляду (4), що відповідає вершині i , помножити на змінну x_i . Оскільки змінна x_i є невід'ємною, знак нерівності після множення не зміниться і в результаті одержимо такі нерівності:

$$x_i \left(\sum_{j \in \Gamma(i)} x_j \right) \geq x_i \left(\sum_{j \in V} x_j - k \right) \quad \forall i \in V,$$

які можна переписати у вигляді

$$\sum_{j \in \Gamma(i)} x_i x_j \geq \sum_{j \in V} x_i x_j - k x_i \quad \forall i \in V. \quad (5)$$

Квадратичні нерівності (5) разом з обмеженнями (1) повністю описують умови, за яких вершини i належать k -плексу. Дійсно, нерівності (5) справджуватимуться для тих вершин i , для яких $x_i = 1$, оскільки вони переходять в обмеження (4). Нерівності (5) будуть справедливими також для усіх вершин i , для яких $x_i = 0$, тому що вони переходять у тривіальну нерівність $0 \geq 0$.

Зрозуміло, що за допомогою обмежень у вигляді рівностей (1) та у вигляді нерівностей (5) можна описати допустимі Булеві розв'язки, що відповідають k -плексу. При цьому зміст обмежень (5) буде пов'язаний з інтерпретацією ступеня вершини, як цього вимагає поняття k -плекса, тобто ступінь вершини $i \in S$ є більшим або дорівнює $|S| - k$. Дійсно, права частина обмеження (5) для вершини i , що належить k -плексу, вказує кількість ребер, що виходять з i -ї вершини, з урахуванням того, що $x_i x_j = 1$ лише тоді, коли обидві змінні x_i та x_j дорівнюють одиниці.

Нерівність (5) можна спростити. Зазначимо, що

$$\sum_{j \in V} x_j = \sum_{j \in \Gamma(i)} x_j + \sum_{j \in \bar{\Gamma}(i)} x_j + x_i.$$

Тоді нерівності (5) можна записати так:

$$\sum_{j \in \Gamma(i)} x_i x_j \geq \left(\sum_{j \in \Gamma(i)} x_i x_j + \sum_{j \in \bar{\Gamma}(i)} x_i x_j + x_i^2 \right) - kx_i \quad \forall i \in V,$$

звідси

$$\sum_{j \in \bar{\Gamma}(i)} x_i x_j \leq kx_i - x_i^2 \quad \forall i \in V.$$

З урахуванням того, що $x_i = x_i^2$ (див. формулу (1)), останні нерівності можна записати як

$$\sum_{j \in \bar{\Gamma}(i)} x_i x_j \leq (k-1)x_i \quad \forall i \in V. \quad (6)$$

Нерівності (6) разом із рівностями (1) покладемо в основу квадратичної моделі для знаходження максимального k -плекса графу G .

Зауважимо, що квадратичним нерівностям (6) можна надати інший зміст, ніж нерівностям (5). Нерівності (6) пов'язані з комплементарним графом \bar{G} і описують таку підмножину вершин S , що ступінь вершини в індукованому цією підмножиною підграфі $\bar{G}[S]$ є не більшим за $(k-1)$. Дійсно, для тих вершин $i \in V$, для яких $x_i = 1$, нерівності (6) рівносильні таким нерівностям:

$$\sum_{j \in \bar{\Gamma}(i)} x_j \leq (k-1) \quad \forall i \in S,$$

а для тих вершин i , для яких $x_i = 0$, вони рівносильні тривіальним нерівностям $0 \geq 0$. Тому опис підмножини S за допомогою нерівностей (6) та рівностей (1) логічно інтерпретувати як опис co - k -плекса для комплементарного графу \bar{G} .

3. КВАДРАТИЧНА БУЛЕВА ЗАДАЧА ДЛЯ $\rho_k(G)$

Враховуючи, що обмеження (1) та (6) описують множину допустимих варіантів утворення k -плекса, для знаходження максимального k -плекса графу G оптимізаційну квадратичну задачу можна сформулювати в такому вигляді:

$$\rho_k(G) = \max_x \sum_{i \in V} x_i \quad (7)$$

за обмежень

$$\sum_{j \in \bar{\Gamma}(i)} x_i x_j \leq (k-1)x_i \quad \forall i \in V, \quad (8)$$

$$x_i^2 - x_i = 0 \quad i \in V. \quad (9)$$

Зрозуміло, що задачу (7)–(9) можна інтерпретувати як задачу знаходження максимального co - k -плекса графу \bar{G} . З (7)–(9) легко одержати формулювання квадратичної оптимізаційної задачі для co - k -плекса графу \bar{G} . Для цього достатньо у сумі лівої частини обмеження (8) замість підсумовування за $j \in \bar{\Gamma}(i)$ здійснити підсумовування за $j \in \Gamma(i)$. Інакше кажучи, якщо обмеження (8) замінити на

$$\sum_{j \in \Gamma(i)} x_i x_j \leq (k-1)x_i \quad \forall i \in V, \quad (10)$$

то одержимо формулювання квадратичної оптимізаційної задачі знаходження максимального co - k -плекса графу \bar{G} .

Формулювання задачі (7)–(9) можна отримати із задачі Булевого лінійного програмування, запропонованої у [2]:

$$\rho_k(G) = \max_x \sum_{i \in V} x_i \quad (11)$$

за обмежень

$$\sum_{j \in \bar{\Gamma}(i)} x_j \leq (k-1)x_i + \bar{d}_i(1-x_i) \quad \forall i \in V, \quad (12)$$

$$x_i \in \{0, 1\} \quad \forall i \in V, \quad (13)$$

де $\bar{d}_i = |\bar{\Gamma}(i)|$. Лінійні обмеження (12) побудовані за схемою, подібною до схеми, використаної у попередньому розділі під час переходу від обмежень (4), справедливих для $i \in S$ (тобто коли $x_i = 1$), до обмежень (5), що є справедливими також для $i \in V \setminus S$ (тобто коли $x_i = 0$). Однак, правило для того, щоб обмеження (12) виконувалися для будь-яких $i \in V \setminus S$, тут буде іншим. Так, коли $x_i = 1$, то обмеження (12) виконуються як нерівності

$$\sum_{j \in \bar{\Gamma}(i)} x_j \leq (k-1) \quad \forall i \in S,$$

які повинні справджуватися для *co-k*-плекса графу \bar{G} , що збігається з *k*-плексом графу G . Коли $x_i = 0$, то обмеження (12) переходять у нерівності

$$\sum_{j \in \bar{\Gamma}(i)} x_j \leq \bar{d}_i = |\bar{\Gamma}(i)| \quad \forall i \in V \setminus S,$$

які є справедливими, бо як верхня границя на ступені вершин, що не входять у *co-k*-плекс графу \bar{G} , використовується максимально можлива кількість ребер, що виходять з кожної з вершин графу \bar{G} . Ті обмеження, де не всі змінні під знаком суми дорівнюють одиниці, будуть надлишковими.

Із задачі лінійного Булевого програмування (11)–(13) можна легко одержати квадратичну задачу (7)–(9). Для цього слід обмеження (13) замінити на відповідний нелінійний аналог (9), а обмеження, яке стосується *i*-ї вершини з (12), помножити на змінну x_i . Через невід'ємність змінних $x_i, i = 1, 2, \dots$, знаки нерівностей під час множення не зміняться, в результаті одержимо

$$\sum_{j \in \bar{\Gamma}(i)} x_i x_j \leq (k-1)x_i^2 + \bar{d}_i(1-x_i)x_i \quad \forall i \in V,$$

звідки, з урахуванням того, що $(1-x_i)x_i = x_i - x_i^2 = 0$ для всіх $i \in V$, приходимо до обмежень (8).

Зрозуміло, що кожна задача (7)–(9) та (11)–(13) має свої переваги та свої недоліки. Найсуттєвіша перевага квадратичної задачі над лінійною Булевою полягає в тому, що незначним удосконаленням задачі (7)–(9) можна сформулювати квадратичні оптимізаційні задачі знаходження максимальних за розміром підмножин графу із сильнішими властивостями, ніж *k*-плекс або *co-k*-плекс, достатньо лише посилити вимогу на включення вершин у ці підмножини. Наприклад, умовимося під «регулярним» *k*-плексом графу G розуміти підмножину його вершин, для яких ступінь вершини дорівнює $|S| - k$. Аналогічно введемо поняття регулярного *co-k*-плекса: у ньому ступінь вершини дорівнює рівно $k - 1$. Тоді для того, щоб сформулювати квадратичні задачі знаходження максимальних із цих підмножин, достатньо в обмеженнях (8) та (10) замість нерівностей використовувати рівності. Інакше кажучи, для знаходження «регулярного» *k*-плекса графу G обмеження (8) слід замінити на обмеження

$$\sum_{j \in \bar{\Gamma}(i)} x_i x_j = (k-1)x_i \quad \forall i \in V,$$

а для знаходження регулярного *co-k*-плекса графу G обмеження (10) слід замінити на такі:

$$\sum_{j \in \Gamma(i)} x_i x_j = (k-1)x_i \quad \forall i \in V.$$

Перевагою лінійної Булевої задачі над квадратичною можна вважати те, що для задачі (11)–(13) легко підраховувати верхні оцінки для $\rho_k(G)$ за допомогою релаксації обмеження (13). У деяких випадках, наприклад, коли $\rho_k(G)$ буде більшим за $n/3$, ці оцінки зазвичай можуть виявитися ефективними оцінками зверху для $\rho_k(G)$. Як наслідок, для деяких спеціальних графів на основі методу гілок та границь можна реалізувати швидкі алгоритми для знаходження $\rho_k(G)$.

Знаходження верхніх оцінок для квадратичної задачі (7)–(9) є більш трудомістким, ніж для релаксованої задачі (11)–(13). У тому разі, коли як такі оцінки використовувати Лагранжеві двоїсті оцінки [9], то їхнє знаходження за допомогою методів недиференційованої оптимізації потребуватиме більше часу, ніж у випадку задач лінійного програмування. Однак, для низки графів Лагранжеві двоїсті оцінки можуть виявитися значно точнішими верхніми оцінками, ніж лінійні оцінки. До того ж, є резерв для уточнення Лагранжевих двоїстих оцінок задачі (7)–(9) — це введення функціонально надлишкових обмежень [9].

Лінійні обмеження (12) можна використовувати для побудови функціонально надлишкових обмежень для підвищення точності Лагранжевих двоїстих оцінок у багатоекстремальних квадратичних задачах (7)–(9). Якщо скористатися схемою, застосованою Н.З. Шором для задачі про максимальну незалежну множину вершин графу [5, с. 250], то при цьому до задачі (7)–(9) треба додати два види функціонально надлишкових обмежень. Обмеження першого виду одержано домноженням кожного лінійного обмеження у (12) на ті змінні x_l , які не входять у це обмеження, тобто додаються $n(n-1)$ надлишкових обмежень вигляду

$$\sum_{j \in \bar{\Gamma}(i)} x_l x_j \leq (k-1)x_l x_i + \bar{d}_i(1-x_i)x_l \quad \forall i, l \in V, i \neq l. \quad (14)$$

Функціонально надлишкові обмеження другого типу можна одержати з лінійних обмежень (12) домноженням на $1-x_l$, $l=1, 2, \dots$. Тут уже можна використовувати $i=l$, бо вони дають нові квадратичні обмеження у формі нерівностей. У результаті маємо n^2 обмежень

$$\sum_{j \in \bar{\Gamma}(i)} x_l x_j - \sum_{j \in \Gamma(i)} x_j \leq (k-1)x_l x_i + \bar{d}_i(1-x_i)x_l \quad \forall i, l \in V, i \neq l. \quad (15)$$

Зауважимо, що використання надлишкових обмежень (14), (15) значно збільшує розмірність квадратичної задачі. Однак, якщо до попередньої задачі додавати тільки невелику кількість тих надлишкових обмежень, які уточнюють двоїсту оцінку для наступної задачі, тоді загальна кількість обмежень у кінцевій квадратичній задачі буде невеликою. За такою самою схемою можна застосовувати інші види функціонально надлишкових обмежень для Булевих задач, розглянутих у роботах [13, 14].

4. МАКСИМАЛЬНИЙ 1-ПЛЕКС ТА МАКСИМАЛЬНА КЛІКА

Оскільки для графу G 1-плекс збігається з клікою, природним є те, що знаходження максимального 1-плекса графу G у задачі (7)–(9) відповідає знаходженню максимальної кліки графу G . Якщо $k=1$, то права частина нерівностей (8) дорівнює нулю, і задача (7)–(9) переходить у таку квадратичну оптимізаційну задачу:

$$\rho_1(G) = \omega(G) = \max \sum_{i \in V} x_i \quad (16)$$

за обмежень

$$\sum_{j \in \bar{\Gamma}(i)} x_i x_j \leq 0 \quad \forall i \in V, \quad (17)$$

$$x_i^2 - x_i = 0 \quad i \in V. \quad (18)$$

Задачу (16)–(18) можна розглядати як одне з можливих квадратичних формулювань задачі про знаходження максимальної кліки графу G . Задачі (16)–(18) відповідає рівно n квадратичних обмежень нерівностей (17).

Більш відомим квадратичним формулюванням задачі для максимальної кліки графу G є квадратична оптимізаційна задача [9]

$$\omega(G) = \max \sum_{i \in V} x_i \quad (19)$$

за обмежень

$$x_i x_j = 0 \quad \forall (i, j) \in \bar{E}, \quad (20)$$

$$x_i^2 - x_i = 0 \quad \forall i \in V. \quad (21)$$

Задачу (19)–(21) можна інтерпретувати як очевидний наслідок задачі (16)–(18), оскільки всі змінні $x_i, i=1, \dots, n$, є невід'ємними. Дійсно, згідно з квадратичними обмеженнями (17) сума невід'ємних добутків пар змінних повинна бути не більше нуля, а це еквівалентно (за умови невід'ємності) системі квадратичних рівностей, де кожен окремий добуток двох змінних, що входять в обмеження (17), дорівнює нулю. Це і становить зміст обмежень (20).

Яка з квадратичних моделей є кращою для знаходження максимальної кліки графу G ? Формальною перевагою задачі (16)–(18) є те, що вона містить меншу кількість квадратичних обмежень, ніж задача (19)–(21). Однак, вона програє в точності Лагранжевій двоїстій оцінці.

Нехай $\psi_{\rho_1}^*(G)$ — оптимальна Лагранжева оцінка для задачі (16)–(18), а $\psi_{\omega}^*(G)$ — оптимальна Лагранжева оцінка для задачі (19)–(21). Кожна з них буде верхньою оцінкою для $\omega(G)$. Верхня оцінка $\psi_{\rho_1}^*(G)$ буде зазвичай гіршою за оцінку $\psi_{\omega}^*(G)$. Це можна пояснити тим, що в задачі (19)–(21) є більша свобода у виборі множників Лагранжа, що відповідають обмеженням (20): кожному з ребер комплементарного графу \bar{G} буде відповідати свій множник Лагранжа. Для обмежень (17) кількість цих множників Лагранжа становить усього n , тобто кожній вершині графу G буде відповідати свій множник Лагранжа. До того ж, свобода вибору множників Лагранжа для обмежень (17) звужена ще й тим, що для кожного з цих множників потрібно врахувати його невід'ємність. Урахування невід'ємності обмежує можливості вибору множників Лагранжа в задачі (16)–(18) порівняно з випадком, коли обмеження (17) замінюють на

$$\sum_{j \in \bar{\Gamma}(i)} x_i x_j = 0 \quad \forall i \in V$$

(вони впливають з обмежень (20), якщо їх згрупувати за вершинами графу G). Зауважимо, що квадратичну задачу з цими обмеженнями замість обмежень (17) можна розглядати як задачу знаходження максимального «регулярного» 1-плекса графу G . Природно, що Лагранжева двоїста оцінка для квадратичної задачі, що відповідає максимальному «регулярному» 1-плексу графу G , буде в багатьох випадках точнішою за оцінку $\psi_{\rho_1}^*(G)$.

Проілюструємо поведінку Лагранжевих двоїстих оцінок $\psi_{\rho_1}^*(G)$ та $\psi_{\omega}^*(G)$ на прикладі двох графів G_1 і G_2 (рис. 1), що складаються всього з п'яти вершин. Тут ребра графів G_1 і G_2 позначено суцільною лінією, а ребра комплементарних графів \bar{G}_1 і \bar{G}_2 — пунктирною. Для графу G_1 (рис. 1, а) системи обмежень для задач (16)–(18) та (19)–(21) будуть такими:

$$\begin{cases} x_1x_2 + x_1x_5 \leq 0, \\ x_1x_2 + x_2x_3 \leq 0, \\ x_2x_3 + x_3x_4 \leq 0, \\ x_3x_4 + x_4x_5 \leq 0, \\ x_4x_5 + x_1x_5 \leq 0, \end{cases} \begin{cases} x_1x_2 = 0, \\ x_2x_3 = 0, \\ x_3x_4 = 0, \\ x_4x_5 = 0, \\ x_1x_5 = 0. \end{cases}$$

Лагранжеві двоїсті оцінки $\psi_{\rho_1}^*(G)$ та $\psi_{\omega}^*(G)$ є однаковими та дорівнюють $\sqrt{5}$. Вони є неточними оцінками зверху, тому що $\omega(G_1) = 2$. Приклад для графу G_1 демонструє, що Лагранжеві двоїсті оцінки $\psi_{\rho_1}^*(G)$ та $\psi_{\omega}^*(G)$ можуть збігатися.

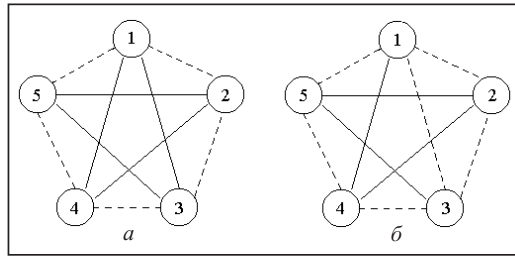


Рис. 1. Приклади графів: G_1 (а), G_2 (б)

Це твердження не виконується для графу G_2 , наведеного на рис. 1, б, що відрізняється від G_1 тим, що з нього вилучено ребро (1, 3). Для графу G_2 системи обмежень задач (16)–(18) та (19)–(21) будуть такими:

$$\begin{cases} x_1x_2 + x_1x_3 + x_1x_5 \leq 0, \\ x_1x_2 + x_2x_3 \leq 0, \\ x_1x_3 + x_2x_3 + x_3x_4 \leq 0, \\ x_3x_4 + x_4x_5 \leq 0, \\ x_4x_5 + x_1x_5 \leq 0, \end{cases} \begin{cases} x_1x_2 = 0, \\ x_1x_3 = 0, \\ x_2x_3 = 0, \\ x_3x_4 = 0, \\ x_4x_5 = 0, \\ x_1x_5 = 0. \end{cases}$$

Цього разу оцінки $\psi_{\rho_1}^*(G)$ та $\psi_{\omega}^*(G)$ є різними. Зокрема, оцінка $\psi_{\omega}^*(G) = 2.0$ є точною верхньою оцінкою для $\omega(G_2)$. Оцінка $\psi_{\rho_1}^*(G) = 2.15222$ не є точною і потребує уточнення. Отже, приклад графу G_2 свідчить про те, що Лагранжева двоїста оцінка для задачі (19)–(21) має перевагу над відповідною оцінкою задачі (16)–(18).

Зазначимо, що якщо для графу G_2 обмеження нерівності замінити на обмеження у формі рівностей, що відповідає знаходженню максимального «регулярного» 1-плекса графу G_1 , то Лагранжева двоїста оцінка дорівнюватиме двом і буде точною верхньою оцінкою для $\omega(G_1)$.

Якщо потрібно знайти більш точну Лагранжеву двоїсту оцінку для максимальної кліки графу G за допомогою однієї з двох розглянутих квадратичних задач, то краще користуватися квадратичною задачею у формі (19)–(21), ніж квадратичною задачею у формі (16)–(18), що для 1-плекса впливає з квадратичного формулювання (7)–(9). Аналогічна ситуація виникає і для квадратичної задачі [9], пов'язаної зі знаходженням максимальної незалежної множини вершин графу.

Однак, ситуація може змінитися, якщо мова йтиме не про знаходження оцінок $\psi_{\rho_1}^*(G)$ та $\psi_{\omega}^*(G)$, а про їхнє поліпшення за допомогою додавання функціонально надлишкових обмежень. Тоді квадратична задача (16)–(18) може мати переваги хоча б тому, що до неї можна додати більшу кількість функціонально надлишкових обмежень. До того ж, коли $k \geq 2$, то для знаходження максимального k -плекса напевно чи можна знайти альтернативу квадратичному формулюванню (7)–(9). Тому дослідження точності Лагранжевих двоїстих оцінок для задачі (7)–(9), що підсилена за рахунок додавання функціонально надлишкових квадратичних обмежень, становить значний інтерес. У результаті може виявитися, що безпосереднє перенесення таких оцінок на окремий випадок $k = 1$ для низки графів може призвести до досить хороших за точністю верхніх оцінок для $\omega(G)$.

Для уточнення верхніх оцінок можна використовувати квадратичні нерівності з двох сімейств функціонально-надлишкових квадратичних обмежень. Це сімейства квадратичних обмежень (14) та (15), описані у розд. 3. Для графів G_1 та G_2 , наведених на рис. 1, нижче буде показано, що за допомогою функціонально-надлишкових обмежень із сімей (14) і (15) Лагранжеві двоїсті оцінки можна зробити точними верхніми оцінками для $\rho_2(G_1)$ та $\rho_2(G_2)$.

5. УТОЧНЕННЯ ЛАГРАНЖЕВИХ ОЦІНОК ДЛЯ МАКСИМАЛЬНОГО 2-ПЛЕКСА

Розглянемо задачу знаходження максимального 2-плекса для графу G_1 з рис. 1, а. Її формулюють у вигляді такої квадратичної задачі:

$$\rho_2(G_1) = \max_{x \in R^5} (x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5) \quad (22)$$

за обмежень

$$\begin{cases} x_1x_2 + x_1x_5 \leq x_1, \\ x_1x_2 + x_2x_3 \leq x_2, \\ x_2x_3 + x_3x_4 \leq x_3, \\ x_3x_4 + x_4x_5 \leq x_4, \\ x_4x_5 + x_1x_5 \leq x_5, \end{cases} \quad (23)$$

$$x_i^2 - x_i = 0, \quad i = 1, 2, 3, 4, 5. \quad (24)$$

Тут $\rho_2(G_1) = 3$. Водночас Лагранжева двоїста оцінка для задачі (22)–(24) дорівнює 3.618034. Вона є менш точною ніж лінійна верхня оцінка, отримувана у результаті релаксації задачі Булевого програмування (11)–(13), і дорівнює $10/3 = 3.333333$. Задачі лінійного програмування відповідають такі лінійні обмеження:

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_5 \leq 2, \\ x_1 + x_2 + x_3 \leq 2, \\ x_2 + x_3 + x_4 \leq 2, \\ x_3 + x_4 + x_5 \leq 2, \\ x_1 + x_4 + x_5 \leq 2, \end{cases} \quad (25)$$

які впливають з обмежень (12).

Як Лагранжева двоїста оцінка, так і лінійна оцінка є неточними верхніми оцінками. Покращити Лагранжеву двоїсту оцінку, що відповідає задачі (22)–(24), можна, додаючи до квадратичної задачі (22)–(24) функціонально-надлишкові обмеження із сім'ї (14). Їх побудовано домноженням лінійних обмежень (25) на змінні $x_i, i = 1, \dots, n$. Послідовне додавання таких обмежень робить Лагранжеву двоїсту оцінку більш точною. У разі послідовного додавання функціонально-надлишкових квадратичних обмежень із сім'ї (14), наведених у табл. 1, спостерігається монотонне зменшення оцінки ψ^* . У результаті додавання чотирьох додаткових обмежень верхня оцінка ψ^* стає точнішою за лінійну, а в результаті додавання всіх п'яти обмежень оцінка ψ^* стає точною верхньою оцінкою для $\rho_2(G_1)$.

Схожа, але дещо інша ситуація виникає і у випадку задачі знаходження максимального 2-плекса для графу G_2 з рис. 1, б. Її формулюють у вигляді квадратичної задачі

$$\rho_2(G_2) = \max_{x \in R^5} (x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5) \quad (26)$$

за обмежень

$$\begin{cases} x_1x_2 + x_1x_3 + x_1x_5 \leq x_1, \\ x_1x_2 + x_2x_3 \leq x_2, \\ x_1x_2 + x_2x_3 + x_3x_4 \leq x_3, \\ x_3x_4 + x_4x_5 \leq x_4, \\ x_4x_5 + x_1x_5 \leq x_5, \end{cases} \quad (27)$$

$$x_i^2 - x_i = 0, \quad i = 1, 2, 3, 4, 5, \quad (28)$$

Таблиця 1. Покращення верхньої оцінки для задачі (22)–(24)

$+n$	Лінійні обмеження	$\times x_i$	Квадратичні обмеження	y^*
+1	$x_1 + x_2 + x_5 \leq 2$	$\times x_2$	$x_1x_2 + x_2x_5 \leq x_2$	3.56878
+2	$x_1 + x_2 + x_3 \leq 2$	$\times x_3$	$x_1x_3 + x_2x_3 \leq x_3$	3.52727
+3	$x_2 + x_3 + x_4 \leq 2$	$\times x_4$	$x_2x_4 + x_3x_4 \leq x_4$	3.42929
+4	$x_3 + x_4 + x_5 \leq 2$	$\times x_5$	$x_3x_5 + x_4x_5 \leq x_5$	3.21298
+5	$x_1 + x_4 + x_5 \leq 2$	$\times x_1$	$x_1x_4 + x_1x_5 \leq x_1$	3.00000

при цьому їй відповідає $\rho_2(G_2) = 3$. Лагранжева двоїста оцінка для задачі (26)–(28) дорівнює 3.37332 і є точнішою ніж лінійна верхня оцінка, що дорівнює 3.4. Задачі лінійного програмування відповідають такі лінійні обмеження вигляду (12):

$$\begin{cases} 2x_1 + x_2 + x_3 + x_5 \leq 3, \\ x_1 + x_2 + x_3 \leq 2, \\ x_1 + x_2 + 2x_3 + x_4 \leq 3, \\ x_3 + x_4 + x_5 \leq 2, \\ x_1 + x_4 + x_5 \leq 2. \end{cases} \quad (29)$$

Через те, що Лагранжева двоїста оцінка є точнішою за лінійну, може скластися враження, що точну оцінку ψ^* простіше одержати за допомогою додавання функціонально-надлишкових обмежень (14), тобто тих, що побудовані з лінійних обмежень (29) домноженням на змінні $x_i, i = 1, \dots, 5$. Однак, це не так, і максимальна за точністю Лагранжева двоїста оцінка, якої можна досягти на цьому шляху, дорівнює 3.02316. Лише у випадку додавання функціонально-надлишкових обмежень у вигляді (15) можна домогтися того, щоб Лагранжева двоїста оцінка стала точною. Наприклад, після додавання до квадратичної задачі (26)–(28) функціонально-надлишкового обмеження вигляду (14)

$$x_1x_1 + x_1x_4 + x_1x_5 - 2x_1 \leq 0,$$

одержаного із п'ятого обмеження (29) домноженням на x_1 , оцінка ψ^* досягає значення 3.21576. Після додавання обмеження вигляду (15)

$$-x_1x_3 - x_1x_4 - x_1x_5 + 2x_1 + x_3 + x_4 + x_5 \leq 2,$$

отриманого домноженням четвертого обмеження з (29) на $(1 - x_1)$, оцінка ψ^* стає рівною 3.01571. А після додавання ще й обмежень вигляду (15)

$$-2x_1x_2 - x_2^2 - x_2x_3 - x_2x_5 + 2x_1 + 4x_2 + x_3 + x_5 \leq 3,$$

одержаних домноженням першого обмеження з (29) на $(1 - x_2)$, оцінка ψ^* стає точною та дорівнює 3.0.

6. ЗАСТОСУВАННЯ GLPK ДЛЯ ЗНАХОДЖЕННЯ ВСІХ РОЗВ'ЯЗКІВ

Задача (11)–(13) може мати як один, так і багато розв'язків. Для того, щоб знайти всі її розв'язки, можна скористатись алгоритмом [8], який полягає у послідовному доповненні задачі додатковим лінійним обмеженням, що відсікає вже знайдені розв'язки. Нехай уже знайдено m максимальних k -плексів $S_j, j = 1, \dots, m$. Додамо до задачі (11)–(13) таку сім'ю лінійних обмежень:

$$\sum_{i \in V(S_j)} x_i \leq \rho_k(G) - 1/2, \quad j = 1, \dots, m. \quad (30)$$

Таблиця 2. Витрати часу (в секундах) на пошук n_{sol} максимальних k -плексів у графі “1zc.128”: $k = 1, 2, \dots, 8$, $ncalls = 1001$

k	ρ_k	n_{sol}	t_{min}	t_{max}	t_{avr}	k	ρ_k	n_{sol}	t_{min}	t_{max}	t_{avr}
1	8	2	1.09	1.11	1.10	5	11	630	5.93	49.04	14.25
2	8	2	2.61	2.71	2.66	6	13	56	4.68	17.80	7.85
3	8	2	10.32	11.39	10.84	7	15	196	2.74	9.73	4.66
4	10	728	2.92	16.08	7.14	8	15	> 1000	19.99	218.16	58.61

Якщо в задачі (11)–(13), (30) значення цільової функції дорівнює значенню цільової функції у задачі (11)–(13), то це означає, що знайдено новий $(m + 1)$ максимальний k -плекс, який не збігається із жодним із m наявних. Якщо в задачі (11)–(13), (30) значення цільової функції є меншим за значення цільової функції у задачі (11)–(13), то це означає, що отримано достатню умову того, що інших максимальних k -плексів не існує, окрім тих m , які були знайдені раніше.

Описаний алгоритм для пошуку $n_{sol} < ncalls$ розв’язків у задачі (11)–(13) реалізовано мовою Octave. Задачі лінійного Булевого програмування (11)–(13) та (11)–(13), (30) розв’язують за допомогою octave-функції **glpk** [12], яка використовує відомий пакет GLPK для розв’язання задач лінійного програмування та змішаного цілочисельного програмування. Зауважимо, що за кожний послідовний запуск функції **glpk** алгоритм або знаходить ще один максимальний k -плекс, або закінчує свою роботу, якщо всі n_{sol} k -плексів уже знайдено. Якщо кількість розв’язків у задачі (11)–(13) є більшою за $ncalls$, то в результаті роботи алгоритму отримуємо $ncalls$ максимальних k -плексів. Для того, щоб продовжити пошук нових k -плексів, потрібно збільшити величину $ncalls$.

Алгоритм перевірено низкою тестових прикладів. Дані для графу зчитано з текстового файлу в DIMACS-форматі. Нижче наведено результати обчислювальних експериментів для пошуку всіх максимальних k -плексів для графу “1zc.128” (128 вершин, 2240 ребер) для різних значень $k = 1, 2, \dots, 8$ (табл. 2) та для пошуку всіх максимальних клік у чотирьох графах типу “1zc” з 128, 256, 512, 1024 вершинами (табл. 3). Кількості вершин та ребер для графів “1zc.256”, “1zc.512” та “1zc.1024” наведено в першому стовпчику табл. 2. Максимальний за розмірами граф “1zc.1024” містить 1024 вершини та 33280 ребер. Обчислювальні експерименти здійснено на комп’ютері з процесором Intel Core i5-9400f (частота 2.9 ГГц, оперативна пам’ять 16 Гб).

Таблиця 3. Витрати часу (в секундах) на пошук максимальних клік у графах типу “1zc” з 128, 256, 512, 1024 вершинами: $ncalls = 3$

n , $ E $	Знайдені максимальні кліки	t_{avr}
128, 2240	{64, 96, 112, 120, 124, 126, 127, 128} {1, 2, 3, 5, 9, 17, 33, 65}	1.10
256, 5632	{1, 2, 3, 5, 9, 17, 33, 65, 129} {128, 192, 224, 240, 248, 252, 254, 255, 256}	13.43
512, 13824	{1, 2, 3, 5, 9, 17, 33, 65, 129, 257} {256, 384, 448, 480, 496, 504, 508, 510, 511, 512}	234.92
1024, 33280	{1, 2, 3, 5, 9, 17, 33, 65, 129, 257, 513} {512, 768, 896, 960, 992, 1008, 1016, 1020, 1022, 1023, 1024}	3808.30

У табл. 2 наведено кількості знайдених розв'язків задачі (11)–(13) (стовпчик n_{sol}); найменші (стовпчик t_{min}) та найбільші (стовпчик t_{max}) значення часу, витраченого на розв'язання однієї із задач (11)–(13), (11)–(13), (35). Середній час (стовпчик t_{avr}) визначено як сумарний час, витрачений програмою **glpk** на розв'язання задач (11)–(13), (11)–(13), (35), поділений на величину $(n_{\text{sol}} + 1)$.

У табл. 3 наведено по дві знайдені максимальні кліки для чотирьох графів типу “1zc”. Оскільки кількість знайдених клік менша за $\mathbf{ncalls} = 3$, то це гарантує, що інших максимальних клік немає.

ВИСНОВКИ

Побудовано квадратичне формулювання оптимізаційної задачі (7)–(9) для знаходження максимального k -плекса у неорієнтованому графі. Показано, що її можна отримати з відомої лінійної моделі у формі задачі лінійного Булевого програмування (11)–(13), домножуючи обмеження на невід'ємні змінні для кожної вершини графу. Спорідненість понять k -плекса та кліки дає підстави рекомендувати для її розв'язання запропонований Н.З. Шором підхід, пов'язаний з Лагранжевими оцінками та використанням надлишкових обмежень. Цей підхід забезпечив низку важливих теоретичних результатів для задачі про максимальну незалежну множину вершин графу [9, 10].

Із прикладів квадратичних задач (22)–(24) та (26)–(28) для знаходження максимальних 2-плексів графів G_1 та G_2 видно, що функціонально-надлишкові обмеження виду (14) та (15) відіграють значну роль у поліпшенні точності Лагранжових двоїстих оцінок. За їхньою допомогою Лагранжеву двоїсту оцінку ψ^* можна зробити точною для $\rho_2(G_1)$ та $\rho_2(G_2)$. Однак, це не означає, що для будь-якої квадратичної задачі (7)–(9) за допомогою обмежень виду (14) та (15) можна домогтися того, щоб Лагранжева двоїста оцінка була точною. Для підвищення точності Лагранжових двоїстих оцінок можна використовувати й інші способи побудови функціонально-надлишкових обмежень [9, 10].

Розроблено алгоритм пошуку всіх максимальних k -плексів для неорієнтованого графу. В основу алгоритму покладено послідовне додавання до задачі лінійного Булевого програмування додаткового обмеження, яке відсікає вже знайдені максимальні k -плекси. Алгоритм реалізовано мовою Octave за допомогою програмного пакета GLPK. Наведено результати обчислень для пошуку всіх максимальних k -плексів для $k = 1, 2, \dots, 8$ для графу “1zc.128” та всіх максимальних клік для графів типу “1zc” з 128, 256, 512, 1024 вершинами.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Seidman S.B., Foster B.L. A graph theoretic generalization of the clique concept. *J. of Math. Sociology*. 1978. Vol. 6. P. 139–154.
2. Balansundaram B., Butenko S., Hicks I.V. Clique relaxations in social network analysis: The maximum k -plex problem. *Operations Research*. 2011. Vol. 59, N 1. P. 133–142.
3. Guo J., Komusiewicz C., Niedermeier R., Uhlmann J. A more relaxed model for graph-based data clustering: s -plex cluster editing. *SIAM J. Discrete Math.* 2010. Vol. 24, N 4. P. 1662–1683.
4. McClosky B., Hicks I.V. Combinatorial algorithms for the maximum k -plex problem. *J. of Combinatorial Optimization*. 2012. Vol. 23, N 1. P. 29–49.
5. Pattillo J., Veremyev A., Butenko S., Boginski V. On the maximum quasi-clique problem. *Discrete Applied Mathematics*. 2013. Vol. 161, N 1–2. P. 244–257.
6. Стецюк П.І., Бардадим Т.О., Ляшко В.І. Квадратична задача для максималь k -плекса в неорієнтованому графі. *Журнал обчислювальної та прикладної математики*. 2017. № 1 (124). С. 80–87.

7. Стецюк П.І., Ляшко В.І., Бардадим Т.О. Властивості квадратичної задачі про максимальний k -плекс у неорієнтованому графі. *Наукові записки НаУКМА. Комп'ютерні науки*. 2017. Т. 198, № 1(124). С. 80–87.
8. Стецюк П.І., Хом'як О.М. Застосування пакету GLPK для знаходження всіх розв'язків задачі про k -плекс. *Матеріали XXIII Міжнародного науково-практичного семінару імені А.Я. Петренюка «Комбінаторні конфігурації та їхні застосування», присвяченого 70-річчю Львівської академії Національного авіаційного університету (13–15 травня 2021, Запоріжжя–Кропивницький, Україна)*. Запоріжжя–Кропивницький, 2021. Кропивницький: ПП «Ексклюзив-Систем», 2021. С. 174–179.
9. Shor N.Z. *Nondifferentiable optimization and polynomial problems*. London; Boston; Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1998. 394 p.
10. Стецюк П.І. Двойственные оценки в квадратичных экстремальных задачах. Кишинэу: Эврика, 2018. 504 с.
11. Shor N.Z., Stetsyuk P.I. Dual solution of quadratic-type problems by r -algorithm (subroutine DSQTPr). *Abstracts of the Second International Workshop "Recent Advances in Non-Differentiable Optimization"* (1–4 October, 2001, Kyiv, Ukraine). Kyiv, 2001. P. 36.
12. Eaton J.W., Bateman D., Hauberg S. *GNU Octave Manual Version 3*. Network Theory Ltd, 2008. 568 p.
13. Стецюк П.І. О функционально избыточных ограничениях для булевых оптимизационных задач квадратичного типа. *Кибернетика и системный анализ*. 2005. Т. 41, № 6. С. 168–171.
14. Стецюк П.І. Новые модели квадратичного типа для задачи о максимальном взвешенном разрезе графа. *Кибернетика и системный анализ*. 2006. Т. 42, № 1. С. 63–75.

P.I. Stetsyuk, O.M. Khomiak, Ye.A. Blokhin, A.A. Suprun

OPTIMIZATION PROBLEMS FOR THE MAXIMUM k -PLEX

Abstract. A quadratic optimization problem for finding the maximum k -plex in an undirected graph is constructed. Two families of superfluous quadratic constraints are presented, which are obtained by means of constraints of the Boolean linear programming problem for the maximum k -plex. The influence of superfluous constraints on the improvement of the accuracy of Lagrangian dual bounds for the objective function of the quadratic problem is investigated. An algorithm for searching all the maximum k -plexes is developed and the results of test experiments for its implementation using the GLPK software package (GNU Linear Programming Kit) are presented.

Keywords: maximum k -plex, maximum clique, quadratic optimization problem, Boolean linear programming problem, superfluous constraint, Lagrangian dual bound.

Надійшла до редакції 21.01.2022