

最大クリーク問題に対する反復局所探索法における多様化戦略の導入 A Diversification Strategy for Iterated Local Search to Maximum Clique Problem

金原 一歩¹⁾ 片山 謙吾¹⁾ 岡野 傑士¹⁾ 西原 典孝¹⁾
Kazuho Kanahara Kengo Katayama Takeshi Okano Noritaka Nishihara

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]、2 次割当問題 [5] 等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 [6] への導入によって、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。しかしながら、従来 IKLS における多様化の探索は一般にランダム性が強く、次数の大きい頂点を逐次選択する一般的な解法では、より大きなクリークの発見をしづらかった例題も存在し、他のグラフ例題に比べて良好な解を算出しにくいことも確認している。そこで本論文では、より多様性の高い探索を行い高品質な解の算出をめざす多様化戦略を導入した反復局所探索法 (提案 IKLS) を提案する。従来 IKLS との性能比較実験を通して、多様化戦略を導入した提案 IKLS の有効性を示す。

2 最大クリーク問題

最大クリーク問題 (MCP) とは、 V を頂点の集合、 E を頂点間の枝の集合とする無向グラフ $G = (V, E)$ が与えられた時、頂点数が最大となるクリーク (完全グラフになる誘導部分グラフ) を求める問題である。

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 とは現在のクリーク (解) であり、 PA とは、 CC の全頂点に隣接する CC に追加可能な頂点の集合である。 OM は PA の定義を若干緩和した 1 辺不足集合である。

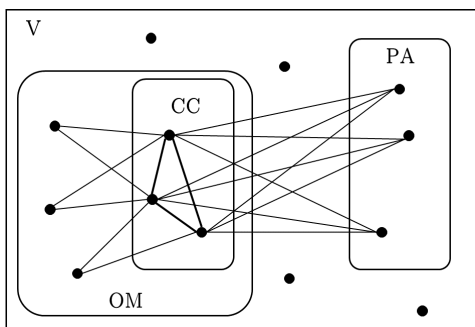


図 1 MCP に対する CC , PA および OM の集合の一例

1) 岡山理科大学

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。

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。

```

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
12 the resulting  $|PA \cap P|$  is maximized;
13 if multiple vertices with the same size of
14 the resulting  $|PA \cap P|$  are found
15 then select one vertex  $v$  among them randomly;
16  $CC := CC \setminus \{v\}, g := g - 1, P := P \setminus \{v\};$ 
17 if  $v$  is contained in  $CC_{prev}$  then  $D := D \setminus \{v\};$ 
18 endif
19 update  $PA, OM,$  and  $deg_{G(PA \cap P)}(i), \forall i \in PA \cap P;$ 
20 until  $D = \emptyset;$ 
21 if  $g_{max} > 0$  then  $CC := CC_{best}$  else  $CC := CC_{prev};$ 
22 until  $g_{max} \leq 0;$ 
23 return  $CC;$ 
end;
```

図 2 MCP に対する k -opt 局所探索法の擬似コード

```

procedure IKLS
input: graph  $G = (V, E)$ ;
output: best clique  $C_{best}$  in  $G$ ;
begin
  generate  $C$ ; compute  $PA, OM$ , and  $deg_G(PA)$ ;
   $C := \text{Local Search}(C, PA, OM, deg_G(PA)); C_{best} := C$ ;
  repeat
     $C := \text{Kick}(C, PA, OM, deg_G(PA))$ ;
     $C := \text{Local Search}(C, PA, OM, deg_G(PA))$ ;
    if  $|C| > |C_{best}|$  then  $C_{best} := C$ ; endif
    if restart=true then
      generate  $C$ ; compute  $PA, OM$ , and  $deg_G(PA)$ ;
       $C := \text{Local Search}(C, PA, OM, deg_G(PA))$ ;
      if  $|C| > |C_{best}|$  then  $C_{best} := C$ ; endif
    endif
  until terminate=true;
  return  $C_{best}$ ;
end;

```

図3 MCPに対する反復k-opt局所探索法

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)、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。

5 反復局所探索法における多様化戦略

従来IKLSのように次数の大きい頂点を逐次選択する一般的な解法では、より大きなクリークの発見をしづらくした例題も存在し、他のグラフ例題に比べて良好な解を算出しにくいことも確認している。そこで、より多様性の高い探索を行い良質な解を探索するために、探索状況に応じて適応的に探索モードを切り替えるIKLSを提案する。従来IKLSではLEC-Kick、KLSに対して各頂点選択のタイブレーク時にランダムに頂点を選択する。そのため探索の多様性はランダム性の高いものとなっている。提案IKLSでは、探索状況に応じたより多様性の高い探索を行うために、多様化戦略を導入する。多様化戦略とは、KLSで算出された CC_{best} に含まれた頂点の訪問回数を累積した情報を、LEC-Kick及びKLSでの各頂点選択のタイブレーク時に累積回数が最も少ない頂点を選択することで探索が不十分な領域に探索を誘導する方法である。提案法では、多様化戦略を導入した多様化モード及び従来IKLSと同様の従来モードを探索状況に応じて適応的に切り替える。切り替え条件としてIKLSの探索初期は従来モードの探索と同時に、上述の累積情報を蓄積し、Restart後に多様化モードに切り替える。その後、多様化モード中に最良解が更新された場合は、次のRestart後から従来モードに再度切り替える処理を行う。

6 実験結果

多様化戦略を導入した提案IKLSの性能を評価するために、従来IKLSとの比較実験を行った。対象とするグラフはMCPの標準的なグラフ例題を集めたDIMACSベンチマークグラフとした。IKLSの終了条件は、KLSの回数が $n \times 100$ 回に達したとき、もしくは既知の最良解

表1 提案IKLSと従来IKLSの実験結果

instance	提案IKLS			従来IKLS	
	Name	BR	Avg	Best	Avg
C1000.9		68	68(22/25)	67.88	67.80
MANN_a45		345	345(22/25)	344.88	344.80
brock400_2		29	29(23/25)	28.68	27.72
brock800_2		24	24(1/25)	21.12	21.00
brock800_4		26	26(7/25)	22.40	21.60

(BR) 算出時とし、試行回数は各問題例に対して25回とする。Restartを行う条件として、IKLS中のKLSを n 回行っても解 C_{best} が更新されない場合とした。各アルゴリズムは、C++によってコード化し、コンパイラは最適化オプション-O3を付与したg++ (Ver. 7.1.0) である。全ての計算は、計算機 (CPU: Intel Core i7 3.6GHz, RAM: 15.6GiB) 上で実行した。

実験結果から提案IKLSは全37例題において従来IKLSと比べ同等以上の結果であることを観測した。表1に特に解が改善された5例題のみ、提案IKLSの実験結果と従来IKLSの実験結果を示す。表1の左の欄から、問題例名Name、既知の最良解値BR、提案法での25試行中に得られた最良解値とその回数、解の平均値Avg、および従来IKLSでの25試行中に得られた最良解値とその回数、Avgを示す。なお、表中の太字は従来IKLSと比べてより良好な結果であることを示す。brock800_2のグラフにおいては従来IKLSでは算出できなかったサイズ24の既知の最良解値のクリークが25試行中1試行算出できており、それに伴いAvgの値も若干改善されている。また、C1000.9、MANN_a45、brock400_2、brock800_4のグラフでは既知の最良解値のクリークが算出できており、Avgの値についても従来IKLSよりも良好な結果を算出している。これらの結果より、提案法は、従来法では探索が困難であったbrockグラフに対して有効であることを確認した。他のグラフ例題においても同等以上の良好な性能が得られていることから、提案IKLSは従来IKLSに比べMCPに対して有効な探索法であることを示した。

7 むすび

本論文では、多様化戦略を導入した反復k-opt局所探索法を提案した。実験結果より、提案法は、従来法と同等以上の性能であることを示した。今後の課題として、より様々なグラフ例題に対して柔軟に対応できるアルゴリズムを設計するために、良質な解を効率的に探索するオペレータの開発などが考えられる。

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, 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復局所探索法. 電子情報通信学会論文誌 (A), Vol. J96-A, No. 7, pp. 497–501, 2013.
- [6] 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.