Серия «Математика»
Том 1 (2007), № 1, С. 149—160

Онлайн-доступ к журналу:
http://isu.ru/izvestia

И З В Е С Т И Я
Иркутского государственного университета

УДК 519.6

Две квадратичные задачи для построения оценок и поиска максимальной клики *

А. А. Кузнецова (kuznet@icc.ru)
ИДСТУ СО РАН, Иркутск

Аннотация. Рассматривается задача поиска максимальной клики и ее сведение к двум непрерывным задачам. На основе непрерывного представления удается получить верхние оценки для размерности максимальной клики. Показано, в каких пределах должен варьироваться параметр, чтобы по решению непрерывной задачи можно было найти максимальную клику.

Ключевые слова: задача о максимальной клике, верхние оценки.

Введение

Как известно, многие задачи целочисленного программирования могут быть сведены к непрерывным [7], причем эти эквивалентные формулировки дают возможность не только разрабатывать новые методы решения, но и обнаружить некоторые свойства этих сложных задач. В данной работе приводится исследование задачи поиска максимальной клики в простом неориентированном графе. Импульсом для проведения подобной работы послужил результат И. Бомзе [3] по регуляризации непрерывной постановки Моцкина-Штрауса [6] в виде задачи максимизации матрицы смежности графа на каноническом симплексе.

Оказалось, что задача максимизации регуляризованной матрицы смежности на каноническом симплексе эквивалентна задаче минимизации регуляризованной матрицы смежности дополнительного графа на этом же множестве. Таким образом, все основные результаты будут приведены для двух задач, в то время как доказательство — для одной из них.

* Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ, проект № 05-01-00110.

Статья построена следующим образом. В п.1 приводится дискретная постановка задачи, далее, в п.2 рассматриваются две квадратичные задачи, зависящие от параметра, и доказывается их эквивалентность. В п.3 показана взаимосвязь между глобальными решениями задач и размерностью максимальной клики в графе. В следующем разделе установлено в каких пределах должен изменяться параметр, чтобы по решению задач можно было находить максимальную клику. В заключении статьи рассмотрен численный эксперимент по нахождению верхних оценок.

1. Постановка задачи

Пусть дан неориентированный граф $G = G(V, E)$, где $V = \{1, \ldots, n\}$ — множество вершин, E — множество ребер. Предположим, что граф является простым, т.е. не содержит петель и кратных ребер. Граф $\bar{G} = \bar{G}(V, \bar{E})$ называется дополнительным, если его множество вершин совпадает с V, а множество ребер дополняет исходный до полного, т.е. $\bar{E} = \{(i,j) \mid i \neq j, (i,j) \notin E\}$.

Подмножество вершин C множества V называется кликой, если каждая пара вершин из C является смежной, т.е. соединена ребром в G. Если подмножество вершин C образует клику в графе G, то оно также будет являться, так называемым, устойчивым множеством в дополнительном графе $\bar{G}$, т.е. множеством, в котором каждая пара вершин является несмежной.

Клика называется локально максимальной или максимальной по включению (тупиковой), если она не содержится в клике большей мощности. Ставится задача о нахождении клики с максимально возможным количеством вершин (ЗМК). Эта задача эквивалентна задаче определения максимального устойчивого множества в дополнительном графе $\bar{G}$. Будем в дальнейшем обозначать произвольную локально максимальную клику (ЛМК) через C, а ее мощность через $\mathcal{K}$, соответственно для максимальной клики применять обозначения C_* и $\mathcal{K}_*$. Введем для произвольной клики C мощности $\mathcal{K}$ характеристический вектор $z(C)$: $z(C) = \frac{1}{\mathcal{K}} \sum\limits_{i \in C} e^i$, где e^i обозначает стандартный базисный вектор в пространстве R^n. Таким образом, $z_i(C) = 0$, если $i \notin C$, и $z_i(C) > 0$, если $i \in C$.

Известно, что каждому графу можно поставить в соответствие квадратную матрицу смежности $A = [a_{ij}]$ размерности n, в которой $a_{ij} = 1$, если $(i,j) \in E$, и $a_{ij} = 0$ в противном случае. Согласно сделанным предположениям матрица A будет симметричной с нулевыми диагональными элементами. Кроме того, нетрудно видеть, что для непустого графа G матрица смежности A не будет знакоопределенной.

Аналогично можно построить матрицу смежности $\bar{A} = [\bar{a}_{ij}]$ для дополнительного графа $\bar{G}$, которая будет обладать теми же свойствами, что и матрица A. При этом,

$$A + \bar{A} = ee^T - I_n, \tag{1.1}$$

где $e = (1, \ldots, 1)^T$ — вектор размерности n, а I_n — единичная матрица размерности n.

Заметим, что подмножество вершин C будет кликой в том и только в том случае, если у подматрицы матрицы смежности A, составленной из строк и столбцов, соответствующих множеству C, нули будут только на главной диагонали. При этом, $\langle z(C), Az(C)\rangle = 1 - \dfrac{1}{\mathcal{K}}$, где $\mathcal{K} = |C|$. С другой стороны, пересечение строк и столбцов матрицы $\bar{A}$, соответствующих множеству C, образует нулевую матрицу тогда и только тогда, когда это множество является кликой, причем $\langle z(C), \bar{A}z(C)\rangle = 0$.

2. Две квадратичные задачи оптимизации, порожденные исходным и дополнительным графами

Рассмотрим две квадратичные матрицы, зависящие от числовых параметров:

$$H_\alpha = A + \alpha I_n, \;\; T_\gamma = \bar{A} + \gamma I_n.$$

Матрицы H_α и T_γ при достаточно малых отрицательных значениях параметров являются отрицательно определенными, а при достаточно больших положительных — положительно определенными. При этом, со значениями α и γ, лежащих в интервале $(-1, 1)$, матрицы не являются знакоопределенными.

Данные матрицы при $\alpha = 0$, $\alpha = -1$, $\alpha = 0.5$ и $\gamma = 0$, $\gamma = 1$ неоднократно использовались для постановки ЗМК, как задачи с целочисленными переменными, так и в непрерывных пространствах [4]. В этой работе будут рассматриваться следующие две квадратичные задачи:

$$F_\alpha(x) = \langle x, H_\alpha x\rangle \uparrow \max, \;\; x \in S, \tag{P_α}$$

$$F_\gamma(x) = \langle x, T_\gamma x\rangle \downarrow \min, \;\; x \in S, \tag{D_γ}$$

где $S = \{x = (x_1, ..., x_n)^T \mid \sum_{i=1}^n x_i = 1, \;\; x_i \geq 0, \;\; i = 1, .., n\}$ — канонический симплекс.

Далее будет установлена эквивалентность задач (P_α) и (D_γ) и представлены свойства их локальных и глобальных решений.

Положим $\mathcal{V}(P_\alpha) = \max(F_\alpha, S)$, $\mathcal{V}(D_\gamma) = \min(F_\gamma, S)$ — значения задач, $Sol(P_\alpha) = \text{Argmax}(F_\alpha, S)$, $Sol(D_\gamma) = \text{Argmin}(F_\gamma, S)$ — множества решений задач.

Предложение 1. *Пусть $\alpha + \gamma = 1$. Тогда значения задач связаны тем же равенством, $\mathcal{V}(P_\alpha) + \mathcal{V}(D_\gamma) = 1$, и множества решений задач совпадают, $Sol(P_\alpha) = Sol(D_\gamma)$.*

Доказательство. Заметим, что задачи (P_α) и (D_γ) имеют решения при любых значениях параметров α и γ.

Пусть имеет место соотношение $\alpha + \gamma = 1$. Тогда для любого допустимого x с учетом равенства $\langle x, ee^T x\rangle = (\sum\limits_{i=1}^{n} x_i)^2 = 1$ и (1.1) имеем

$$F_\alpha(x) = \langle x, H_\alpha x\rangle = \langle x, Ax\rangle + \alpha\langle x, x\rangle = \langle x, ee^T x\rangle - \langle x, x\rangle - \langle x, \bar{A}x\rangle +$$

$$+\alpha\langle x, x\rangle = 1 - \langle x, \bar{A}x\rangle - \gamma\langle x, x\rangle = 1 - \langle x, T_\gamma x\rangle = 1 - F_\gamma(x).$$

Таким образом, если $\mathcal{V}(P_\alpha)$ — максимальное значение функции $F_\alpha(\cdot)$ на множестве S, то $1 - \mathcal{V}(P_\alpha)$ будет минимальным значением функции $F_\gamma(\cdot)$ на этом же множестве, и наоборот. При этом множества решений задач совпадут. □

Замечание 1. Заметим, что матрица смежности исходного графа будет содержать значительно больше нулей, чем матрица смежности дополнительного графа, если граф разряженный, т.е. когда отношение количества ребер к максимально возможному для данной размерности близко к нулю. И наоборот, в случае плотного графа, для которого количество ребер близко к C_n^2 матрица смежности дополнительного графа будет разряженной. Поэтому с вычислительной точки зрения, предпочтительней использовать матрицу смежности исходного графа, если этот граф разряженный, и матрицу смежности дополнительного графа, если он плотный.

3. Свойства решения непрерывных задач в зависимости от выбора параметра.

Изучим некоторые свойства глобальных решений и стационарных точек в задачах (P_α) и (D_γ) в зависимости от выбора параметров, а также соотношения между оптимальными значениями целевых функций и максимальными кликами в графе G. Для этого введем понятия носителя для точки $x \in S$: $Supp(x) = \{i \in V \mid x_i > 0\}$. Заметим, что $Supp(x) \neq \emptyset$ для любой допустимой точки задачи (P_α) или (D_γ).

Покажем, что при $\alpha < 1$ в задаче (P_α) или $\gamma > 0$ в задаче (D_γ) характеристические векторы клик, не являющихся максимальными, не могут быть глобальными решения соответствующих задач. Доказательство проведем для задачи (D_γ).

Предложение 2. *Пусть $\gamma > 0$ в задаче (D_γ). Тогда для любого $z \in Sol(D_\gamma)$ выполнено неравенство $|Supp(z)| \geq \mathcal{K}_*$, где $\mathcal{K}_*$— размерность максимальной клики.*

Доказательство. Предположим противное. Пусть $\gamma > 0$, но найдется такая точка $z \in Sol(D_\gamma)$, что $m := |Supp(z)| < \mathcal{K}_*$. Можно показать, что $\langle x, x\rangle \geq m^{-1}$ для любого $x \in S$, $|Supp(x)| = m$. Поскольку элементы матрицы $\bar{A}$ и вектора z неотрицательны, имеем

$$F_\gamma(z) = \langle T_\gamma z, z\rangle = \langle \bar{A}z, z\rangle + \gamma\langle z, z\rangle \geq \frac{\gamma}{p}.$$

С другой стороны, для характеристического вектора $z_* := z(C_*)$ максимальной клики C_* размерности $\mathcal{K}_*$ имеем:

$$F_\gamma(z_*) = \langle T_\gamma z_*, z_*\rangle = \langle \bar{A}z_*, z_*\rangle + \gamma\langle z_*, z_*\rangle = \frac{\gamma}{\mathcal{K}_*} < \frac{\gamma}{p} = F_\gamma(z).$$

Получили противоречие с тем, что z — решение задачи.

□

Предложение 3. *Пусть $\alpha < 1$ в задаче (P_α). Тогда для любого $z \in Sol(P_\alpha)$ выполнено неравенство $|Supp(z)| \geq \mathcal{K}_*$.*

Интересно узнать, когда неравенства в предложениях 2 и 3 выполняются, как равенства. Для этого необходимо привести ряд теорем. Приведенные ниже результаты показывают взаимосвязь между значениями задачи и размерностью максимальных клик.

Теорема 1 ([6]). *Если $\mathcal{V}(P_\alpha) = \max(F_\alpha, S)$ — значение задачи (P_α) при $\alpha = 0$, то $\mathcal{K}_* = \dfrac{1}{1 - \mathcal{V}(P_\alpha)}$, причем среди решений задачи есть характеристические векторы $z(C_*)$ максимальных клик C_*.*

Данная теорема была доказана по индукции. Представим этот результат для задачи (D_γ) и докажем его более простым способом.

Теорема 2. *Если $\mathcal{V}(D_\gamma) = \min(F_\gamma, S)$ — значение задачи (D_γ) при $\gamma = 1$, то $\mathcal{K}_* = \dfrac{1}{\mathcal{V}(D_\gamma)}$, причем среди решений задачи есть характеристические векторы $z(C_*)$ максимальных клик C_*.*

Доказательство. Если точка z является глобальным решением задачи (D_γ), то для нее согласно условиям Каруша-Куна-Таккера выполнена следующая система:

$$(T_\gamma z)_i = \mu, \text{ если } z_i > 0; \quad (T_\gamma z)_i \geq \mu, \text{ если } z_i = 0, \tag{3.1}$$

где μ — некоторое число. Учитывая, что $z \in S$, имеем

$$F_\gamma(z) = \langle z, T_\gamma z\rangle = \sum_{i:z_i>0} (T_\gamma z)_i z_i = \mu \sum_{i:z_i>0} z_i = \mu.$$

Пусть C_* — некоторая максимальная клика размерности $\mathcal{K}_*$, $z(C_*)$ — ее характеристический вектор. Нетрудно видеть, что $z(C_*)$ удовлетворяет системе (3.1) с $\mu = F_\gamma(z(C_*)) = \dfrac{1}{\mathcal{K}_*}$. Заметим, что для любой точки $x \in S$ такой, что $Supp(x)$ — клика, $F_\gamma(x) \geq F_\gamma(z(C_*))$. Пусть существует решение задачи z такое, что $Supp(z)$ — не клика, и $F_\gamma(z) < F_\gamma(z(C_*))$. Тогда существуют две вершины k и p из $Supp(z)$ такие, что $(k,p) \notin E$ или $\bar{a}_{kp} = 1$. Рассмотрим точку

$$z^1 = z + x_p e^k - x_p e^p, \tag{3.2}$$

которая является допустимой в задаче и содержит на одну положительную компоненту меньше, чем z. При этом, поскольку z удовлетворяет системе (3.1), то

$$F_\gamma(z^1) = \langle z^1, T_\gamma z^1\rangle = \langle z + x_p e^k - x_p e^p, T_\gamma z + x_p e^k - x_p e^p\rangle =$$
$$= \langle z, T_\gamma z\rangle + 2x_p((T_\gamma z)_k - (T_\gamma z)_p) + x_p^2(\gamma - 2\bar{a}_{kp} + \gamma) = F_\gamma(z).$$

Следовательно z^1 также является решением задачи (D_γ) и для нее выполнена система (3.1). Если $Supp(z^1)$ не является кликой, то можно построить точку z^2, являющуюся решением и содержащую на одну положительную компоненту меньше, чем z^1. Поскольку допустимая точка содержит хотя бы одну положительную компоненту, построение можно продолжать до тех пор, пока не получим точку z^s такую, что $Supp(z^s)$ — клика, и $F_\gamma(z^s) = F_\gamma(z)$. Таким образом, z^s является решением, и $F_\gamma(z) = F_\gamma(z^s) \geq F(z(C_*))$. Получили противоречие. Следовательно, $\mathcal{V}(D_\gamma) = F_\gamma(z(C_*)) = \dfrac{1}{\mathcal{K}_*}$. Отсюда получаем утверждение теоремы.

□

Замечание 2. Из доказательства теоремы 2 вытекает способ построения характеристического вектора $z(C_*)$, если получено решение z задачи (D_γ) при $\gamma = 1$ такое, что $Supp(z)$ — не клика.

Замечание 3. Из теорем 2 и 1 вытекает что, при $\gamma = 1$ в задаче (D_γ) или при $\alpha = 0$ в задаче (P_α) существуют такие решения, что неравенства в предложениях 2 и 3 выполнены как равенства.

Следствие 1. *В задаче (P_α) при $\alpha = 0$ и в задаче (D_γ) при $\gamma = 1$ существует решение, отличное от $z(C_*)$ тогда и только тогда, когда существуют две максимальные клики, отличающиеся только одной вершиной.*

Доказательство. Докажем данное утверждение для задачи (D_γ) при $\gamma = 1$.

Пусть существует решение z такое, что $Supp(z)$ — не клика. Тогда применяя последовательно формулу (3.2) получим точку z^s такую, что $F_\gamma(z^s) = F_\gamma(z) = \mathcal{V}(D_\gamma)$. При этом $Supp(z^s)$ — не клика, но существуют две вершины k и p, такие что $(k,p) \notin E$, а множества $Supp(z^s) \setminus \{k\}$ и $Supp(z^s) \setminus \{p\}$ — клики. Тогда точки $z^k = z + x_p e^k - x_p e^p$ и $z^p = z + x_k e^p - x_k e^k$ являются решениями задачи и следовательно, характеристическими векторами максимальных клик.

Пусть теперь в графе $G(V,E)$ существуют две максимальные клики C_*^1 и C_*^2 размерности $\mathcal{K}_*$ такие, что $C_*^1 \setminus \{k\} = C_*^2 \setminus \{p\}$. Построим точку $z(\delta) \in S$ такую, что $z_k = \delta$, где $0 < \delta < \dfrac{1}{\mathcal{K}_*}$, $z_p = \dfrac{1}{\mathcal{K}_*} - \delta$, $z_i = \dfrac{1}{\mathcal{K}_*}$, $i \in C^1$, $i \neq k$, $z_i = 0$ в противном случае. Тогда можно проверить, что для точки $z(\delta)$ выполнена система (3.1) с $\mu = \dfrac{1}{\mathcal{K}_*}$, т.е. $z(\delta)$ — решение задачи (D_γ) при $\gamma = 1$. □

И. Бомзе [3] впервые показал, что в задаче (P_α) при $\alpha = 0.5$ существует взаимно-однозначное соответствие между локальными решениями задачи и локально максимальными кликами [3], и следовательно между глобальными решениями и максимальными кликами. Это утверждение не измениться, если выбирать α из интервала $]0,1[$.

Теорема 3 ([3]). *Пусть дан граф $G(V,E)$ и ему в соответствие поставлена задача (P_α). Тогда при $0 < \alpha < 1$ следующие утверждения эквивалентны:*
i) C — локально максимальная клика размерности $\mathcal{K}$, $z = z(C)$ — ее характеристический вектор;
ii) z — строгий локальный максимум в задаче (P_α);
iii) z — локальный максимум в задаче (P_α).

Следствие 2. *C_* — максимальная клика в графе $G(V,E)$ тогда и только тогда, когда $z(C_*)$ — глобальный максимум в задаче (P_α) при $0 < \alpha < 1$.*

Аналогичное утверждение можно доказать для задачи (D_γ).

Теорема 4. *Пусть дан граф $G(V,E)$ и ему в соответствие поставлена задача (D_γ). Тогда при $0 < \gamma < 1$ следующие утверждения эквивалентны:*
i) C — локально максимальная клика размерности $\mathcal{K}$, $z = z(C)$ — ее характеристический вектор;
ii) z — строгий локальный минимум в задаче (D_α);
iii) z — локальный минимум в задаче (D_α).

Следствие 3. *C_* — максимальная клика в графе $G(V, E)$ тогда и только тогда, когда $z(C_*)$ — глобальный минимум в задаче (D_γ) при* $0 < \gamma < 1$.

Замечание 4. Из теорем 3 и 4 вытекает что, при $0 < \alpha < 1$ в задаче (P_α) и при $0 < \gamma < 1$ в задаче (D_γ) неравенства в предложениях 3 и 2 выполнены как равенства.

На основе данных теорем были построены приближенные методы нахождения максимальной клики [2, 5]. Однако для приближенного метода необходим способ оценивания найденного решения. Следующий результат устанавливает соотношение между значением задачи (D_γ), если $\gamma > 0$, и размерностью максимальной клики.

Предложение 4. *Пусть в задаче (D_γ) параметр $\gamma > 0$, и $\mathcal{V}(D_\gamma) = \min(F_\gamma, S)$. Тогда для размерности максимальной клики справедлива следующая оценка:*

$$\mathcal{K}_* \leq \left\lfloor \frac{\gamma}{\mathcal{V}(D_\gamma)} \right\rfloor, \tag{3.3}$$

где $\lfloor \cdot \rfloor$ — ближайшее целое число, не превосходящее исходное.

Доказательство. Пусть C_* — максимальная клика размерности $\mathcal{K}_*$. Нетрудно видеть, что характеристический вектор $z(C_*)$ является допустимым в задаче (D_γ), и $F_\gamma(z(C_*)) = \dfrac{\gamma}{\mathcal{K}_*}$. Тогда из неравенства $F_\gamma(z(C_*)) \geq \mathcal{V}(D_\gamma)$ следует, что $\mathcal{K}_* \leq \dfrac{\gamma}{\mathcal{V}(D_\gamma)}$, но поскольку $\mathcal{K}_*$ — целое число, то эту оценку можно усилить и получить искомое неравенство (3.3). □

Этот результат для задачи (P_α) выглядит следующим образом.

Предложение 5. *Пусть в задаче (P_α) параметр $\alpha < 1$, и $\mathcal{V}(P_\alpha) = \max(F_\alpha(\cdot), S)$. Тогда для размерности максимальной клики справедлива следующая оценка:*

$$\mathcal{K}_* \leq \left\lfloor \frac{1-\alpha}{1-\mathcal{V}(P_\alpha)} \right\rfloor. \tag{3.4}$$

Замечание 5. Из теорем 4,2 и 3,1 вытекает что, при $0 < \gamma \leq 1$ в задаче (D_γ) и при $0 < \alpha \leq 1$ в задаче (P_α) неравенства в предложениях 4 и 5 выполнены как равенства.

Замечание 6. Таким образом, решив задачу (P_α) или (D_γ) можно найти оценку сверху для размерности максимальной клики. Заметим, что при достаточно больших по модулю значениях параметров эти задачи будут выпуклыми, и для их решения применимы методы квадратичного программирования [1].

Замечание 7. Наиболее известной верхней оценкой является неравенство, полученное в [8]:

$$\mathcal{K}_* \leq \max_{1\leq i\leq n} \lambda_i(A), \tag{3.5}$$

где $\lambda(A)$ — собственное число матрицы смежности A. Неравенство (3.5) выполнено как равенство, тогда и только тогда, когда граф полный. Кроме того, существуют другие способы оценивания размерности максимальной клики на основе собственных чисел [4]. Нахождение оценок вида (3.3), (3.4) существенно отличается от этих способов.

4. Расширенный выбор значений параметров

В теоремах 3 и 4 указаны границы варьирования параметров при которых существует взаимно-однозначное соответствие между решениями задач и кликами в графе. Тем не менее, желательно знать, в каком случае можно расширить границы для выбора параметров, поскольку при достаточно больших по модулю значений параметров задачи (P_α) и (D_γ) становятся выпуклыми. Приведенные ниже две теоремы показывают, при каких значениях параметров часть утверждений из теорем 3 и 4 остаются в силе. Предпочтительнее сначала сформулировать и доказать результат для задачи (D_γ).

Теорема 5. *Пусть дан граф G, C — ЛМК, $z = z(C)$ — характеристический вектор C. Далее, пусть $s = s(C) = \min\limits_{i\notin C} s_i$, где $s_i = \sum\limits_{j\in C} \bar{a}_{ij}$ — количество вершин, несмежных с вершинами из C. Тогда для γ: $0 < \gamma < s$ точка z будет являться строгим локальным минимумом в задаче (D_γ). Если $\gamma > s$, то $z \notin St(D_\gamma)$.*

Доказательство. Не умаляя общности, считаем, что $C = \{1, \ldots, \mathcal{K}\}$. Нетрудно видеть, что для характеристического вектора $z(C) = \dfrac{1}{\mathcal{K}} \sum\limits_{i=1}^{\mathcal{K}} e^i$

$$(\bar{A}z)_i = 0,\ \ i = 1, \ldots, \mathcal{K};\ \ (\bar{A}z)_i = \frac{s_i}{\mathcal{K}},\ \ i = \mathcal{K}+1, \ldots, n. \tag{4.1}$$

Рассмотрим вектор p такой, что $p_i \geq 0,\ i = \mathcal{K}+1, \ldots, n$, и $\sum\limits_{i=1}^{n} p_i = 0$, или $\sum\limits_{i=1}^{\mathcal{K}} p_i = -\sum\limits_{i=\mathcal{K}+1}^{n} p_i$. Пусть дополнительно $|p_i| < r = \dfrac{s-\gamma}{s\mathcal{K}},\ i = 1, \ldots \mathcal{K}$. Тогда любую точку $u \in B(z, r) \cap S$ можно представить, как $u = z + p$.

Рассмотрим приращение целевой функции с $u \neq z$, т.е. $p \neq 0$.

$$\langle T_\gamma u, u\rangle - \langle T_\gamma z, z\rangle = 2\langle \bar{A}z, p\rangle + 2\gamma\langle z, p\rangle + \langle \bar{A}p, p\rangle + \gamma\langle p, p\rangle.$$

Поскольку элементы матрицы $\bar{A}$ неотрицательные, при построении оценки снизу будем учитывать только элементы $\bar{a}_{ij}$, $i = 1, \ldots, \mathcal{K}$; $j = \mathcal{K}+1, \ldots, n$. Кроме того, будем использовать соотношения (4.1) и предположения на вектор p. Итак,

$$\langle \bar{A}z, p\rangle = \frac{1}{\mathcal{K}} \sum_{\mathcal{K}+1}^{n} s_i p_i; \quad \langle z, p\rangle = \frac{1}{\mathcal{K}} \sum_{1}^{n} p_i = \frac{1}{\mathcal{K}} \sum_{1}^{\mathcal{K}} p_i = -\frac{1}{\mathcal{K}} \sum_{\mathcal{K}+1}^{n} p_i;$$

$$\langle \bar{A}p, p\rangle \geq -2 \sum_{\mathcal{K}+1}^{n} s_i \frac{s-\gamma}{s\mathcal{K}} p_i = -\frac{2}{\mathcal{K}} \sum_{\mathcal{K}+1}^{n} \frac{s_i}{s}(s-\gamma) p_i.$$

Объединяя полученные выражения, имеем:

$$\begin{gathered}
\langle T_\gamma u, u\rangle - \langle T_\gamma z, z\rangle \geq \\
\geq \frac{2}{\mathcal{K}} \sum_{\mathcal{K}+1}^{n} s_i p_i - \frac{2\gamma}{\mathcal{K}} \sum_{\mathcal{K}+1}^{n} p_i - \frac{2}{\mathcal{K}} \sum_{\mathcal{K}+1}^{n} \frac{s_i}{s}(s-\gamma) p_i + \gamma \sum_{1}^{n} p_i^2 = \\
= \frac{2}{\mathcal{K}} \sum_{\mathcal{K}+1}^{n} \left(s_i - \gamma - \frac{s_i}{s}(s-\gamma) \right) p_i + \gamma \sum_{1}^{n} p_i^2 = \frac{2\gamma}{\mathcal{K}} \sum_{\mathcal{K}+1}^{n} \left(\frac{s_i}{s} - 1 \right) p_i + \gamma \sum_{1}^{n} p_i^2 \geq \\
\geq \gamma \sum_{1}^{n} p_i^2 > 0.
\end{gathered}$$

Пусть теперь $\gamma > s$. Покажем, что в этом случае вектор $z = z(C)$ не удовлетворяет условиям Каруша-Куна-Таккера. Действительно, пусть $s_j = s$ для некоторого $j > \mathcal{K}$. Тогда

$$(T_\gamma z)_i = \frac{\gamma}{\mathcal{K}} = \lambda, \ i = 1, \ldots, \mathcal{K}; \ \ (T_\gamma z)_j = \frac{s}{\mathcal{K}} < \frac{\gamma}{\mathcal{K}} = \lambda.$$

Таким образом, $z(C)$ не является стационарной точкой, а следовательно, и локальным минимумом. □

Теорема 6. *Пусть дан граф G, C — ЛМК, $z = z(C)$ — характеристический вектор C. Далее, пусть $s = s(C) = \min\limits_{i \notin C} s_i$, где $s_i = \sum\limits_{j \in C} \bar{a_{ij}}$ — количество вершин, несмежных с вершинами из C. Тогда для α: $(1-s) < \alpha < 1$ точка z будет являться строгим локальным максимумом в задаче (P_α). Если $\alpha < (1-s)$, то $z \notin St(P_\alpha)$.*

5. Численное построение оценок

На основе предложения 4 были найдены оценки для размерностей максимальных клик на задачах из библиотеки DIMACS. В качестве параметра γ выбирали число $|\min\limits_{1\le i\le n}\lambda_i(\bar{A})|$, где $\lambda_i(\bar{A})$ — собственное число матрицы смежности дополнительного графа. Для решения полученной выпуклой задачи использовался пакет Xpress-MP. Кроме того, было проведено сравнение с оценкой вида (3.5). Результаты тестирования представлены в табл. I В таблице приняты следующие обозначения: graph — название файла,содержащего матрицу смежности; n — размерность графа, dens — плотность графа, т.е. отношение количества ребер графа к максимально возможному C_n^2 при данной размерности, $\mathcal{K}_*$ — размерность максимальной клики, w_1 — оценка из [8]: $w_1 = \lfloor \max\limits_{1\le i\le n}\lambda_i(A)+1\rfloor$; w_2 — оценка, полученная по формуле (3.3).

Таблица I. Результаты тестирования двух способов построения оценок для МК

graph	n	dens	$\mathcal{K}_*$	w_1	w_2
c-fat200-1	200	0.077	12	17	17
c-fat200-2	200	0.163	24	33	33
c-fat200-5	200	0.426	28	85	72
brock200_1	200	0.745	21	149	40
brock200_2	200	0.496	12	100	25
brock200_3	200	0.605	15	121	31
brock200_4	200	0.658	17	132	34
san200_0.7_1	200	0.700	30	140	93
san200_0.7_2	200	0.700	18	143	108
san200_0.9_1	200	0.900	70	180	113
san200_0.9_2	200	0.900	60	180	95
san200_0.9_3	200	0.900	44	180	84
sanr200_0.7	200	0.697	18	139	36
sanr200_0.9	200	0.898	≤ 42	179	64
keller4	171	0.649	11	111	32
MANN_a9	45	0.927	016	41	16

Как видно из таблицы, верхняя оценка, найденная на основе решения выпуклой задачи, во всех примерах оказалась меньше, чем оценка на основе максимального собственного числа, причем в некоторых случаях различие оказалось существенным (в 2–3 раза). Особенно хорошие оценки вторым способом удалось получить на разряженных и плотных графов.

Список литературы

1. *Васильев Ф.П.* Численные методы решения экстремальных задач. — М.: Наука, 1988.
2. *Кузнецова А.А., Карпачева О.Н.* Два метода локального поиска с параметрами для задачи о максимальной клике // Методы оптимизации и их приложения.: Тр. Междунар. конф. — Иркутск: ИСЭМ СО РАН, 2005. — Т. 1. — С. 527–533.
3. *Bomze I.* Evolution towards the maximum clique // J. of Global Optimization. — 1997. — V. 10. — P. 143–164.
4. *Bomze I.M., Budinich M., Pardalos P.M., Pelillo, M.* The maximum clique problem // Handbook of Combinatorial Optimization. /Ed. by D.-Z. Du , P.M. Pardalos. — Kluwer, 1999. — Suppl. Vol. A. — P. 1–74.
5. *Kuznetsova A., Strekalovsky A.S.* On solving the maximum clique problem // J. of Global Optimization. — 2001. — V. 21, N. 3. — P. 265–288.
6. *Motzkin T.S., Straus, E.G.*, Maxima for graphs and a new proof of a theorem of Turán // Canad. J. Math. — 1965. — V. 17. — P. 533–540.
7. *Pardalos P.M.* Continuous approaches to discrete optimization problems // Nonlinear Optimization and Applications/ Eds. by G.Di. Pillo and F. Giannessi. — New York: Plenum Press, 1996. — P. 313–328.
8. *Wilf H. S.* The eigenvalues of a graph and its chromatic number //J. London Math. Soc. — 1967. — Vol. 42. — P. 330–332.

A. A. Kuznetsova

Two quadratic problems for estimating and searching a maximum clique

Abstract. We consider the maximum clique problem and its formulation as two continuous problems. Using these continuous formulations some upper bounds for the maximum clique cardinality are obtained. The parameter variation segment is received as well.