2009 年夏の LA シンポジウム [1]

最大クリーク抽出問題の単純な最大時間計算量評価

中西 裕陽 †, 富田 悦次 †,a, 若月 光夫 †,b

† 電気通信大学 先進アルゴリズム研究ステーション
a 中央大学研究開発機構
b 電気通信大学 情報通信工学科
E-mail: {hironaka, tomita, wakatuki}@ice.uec.ac.jp

あらまし. 最大クリーク抽出問題（あるいは，それと双対な最大独立節点集合問題）の時間計算量については，Tarjan-Trojanowski(1977) から Robson(2001) や Fomin ら (2006) に至るまで， 長年にわたる逐次的進展がなされているが，それらのほとんどはアルゴリズムあるいは時間計算量解析が非常に複雑である．これに対し本稿では，節点数 n のグラフに対して, 時間計算量が $O(2^{0.334n})$ となる 単純な最大クリーク抽出アルゴリズムと単純な解析を提唱する．本稿の手法 は，一般の最大クリーク抽出問題の最大時間計算量評価改善解析の新しい基礎ともなるものである．

Abstract. Several complicated improvements have been done for the time-complexity of the maximum clique problem, though it is exponential of the number of vertices. In this note, we present a very simple branch-and-bound algorithm for the maximum clique problem. It is based on our preceeding algorithm CLIQUES, which is designed for generating all maximal cliques. Then we give very simple proof that its time-complexity is $O(n^{0.334n})$ for a graph of n vertices. The result can contribute to improve the upper bound of the time-complexity for finding a maximum clique in a general graph.

キーワード. NP 困難, 最大クリーク, 最大独立節点集合, 時間計算量, 最大次数

keyword. NP-Hard, Maximum Clique, Maximum Independent Set, Time-Complexity, Maximum Degree

1 はじめに

無向グラフ中の最大クリークを抽出する問題は理論, 応用の両面で重要な問題であり, 理論と実験の双方から様々な研究がなされている [2]-[11]. 計算量理論の視点から見れば, この問題は自明な計算量が $O(P(n)2^n)$(n はグラフの節点数, $P(n)$ は n の適当な多項式) という解決困難な問題である．この時間計算量はまず Tarjan ら [2] によって改善され, これに Robson[3] が続き, 従来の多項式領域での最良結果は $O(2^{0.288n})$[5] となっていた．一方，Tomita らは極大クリークを全列挙する $O(3^{n/3}) = (2^{0.528n})$-時間アルゴリズムを発表しているが [6]，これを最大クリーク 1 個だけと出力を限定することによ り，当然この計算量は大きく軽減できる．これに従い, Shindo-Tomita はアルゴリズム MAXCLIQUE[4] において，単純な $O(2^{0.3493n})$-時間アルゴリズムを提唱した．

このアルゴリズムは非常に単純であり，理論的オーダ評価では上記 Tarjan らの結果より若干大きくなるものの，実働結果では Tarjan らの結果と比較して非常に高速であった．

筆者らはこれらの結果を受けて, 先述のアルゴリズム MAXCLIQUE を基にした解析過程の見直しを行い, 計算量を改善した一連の結果 [8]，[9]，[11] を発表してきている. 但しこの結果は膨大な場合分けの上に立った非常

に煩雑な計算量解析となっており, 結果を理解しづらいという面があった. そこで本稿においては, 上記の各結果の解析過程を簡単化し, また解析結果の更なる改善を可能にすべくアルゴリズム MAXCLIQUE を改良した単純な分枝限定アルゴリズムを提唱し, その計算量が $O(2^{0.334n})$-時間となることを示す. この値は Shindo-Tomita のオーダ評価結果を改善するものであり, かつ場合分け解析を排除して解析過程を大幅に簡単化することに成功している.

2　諸定義と記法

(1) 本稿で対象とするグラフは, 自己閉路をもたない無向グラフ $G=(V,E)$ である. ここで, V は**節点**の有限集合, E は相異なる 2 節点の非順序対 (v,w)（これを**辺**と呼ぶ) の集合である. 節点 v と w は, $(v,w) \in E$ が成り立つとき**隣接している**という.

集合 V に対して, その要素数を $|V|$ で表す. また，集合 V が順序付き集合である時，その先頭要素を $V[1]$ で表す.

(2) $v \in V$ について, $\Gamma(v)$ を $G=(V,E)$ の内で v に
隣接する全ての節点の集合とする. 即ち,

$\Gamma(v)=\{w \in V \mid (v,w) \in E\}$ ($\not\ni v$).

$|\Gamma(v)|$ を v の次数と呼ぶ.

(3) 節点の部分集合 $W \subseteq V$ について,

$E(W)=\{(v,w) \in W \times W \mid (v,w) \in E\}$

としたとき, $G(W)=(W,E(W))$ を $G=(V,E)$ の W による**誘導部分グラフ**と呼ぶ.

(4) 与えられた $Q \subseteq V$ の誘導部分グラフ $G(Q)$ に対して, 次が成り立つとき, $G(Q)$ は**完全**であるという.

$^{\forall}v,w \in Q$ $(v \neq w)$ に対して $(v,w) \in E$

このとき Q は**クリークである**という. またクリークのサイズを $|Q|$ によって定義する.

自分自身を除くグラフ中の異なる任意のクリークの真部分集合でないクリークを**極大クリーク**といい, 極大クリークのうちでサイズが最大であるものを**最大クリーク**という.

3　アルゴリズム MAXCLIQUE

アルゴリズム MAXCLIQUE を図 1 に示す. このアルゴリズムは基本となる処理である深さ優先探索 EXPAND に, 下記の限定操作を追加した分枝限定アルゴリズムである.

アルゴリズム MAXCLIQUE は, 基本となる深さ優先探索 EXPAND に, 以下の 3 つの限定操作

・部分森の同一化

・部分集合森の削減 (1)

・部分集合森の削減 (2)

を加えた分枝限定アルゴリズムである.

基本アルゴリズム EXPAND は, 探索の各レベルにおいて候補節点集合 $SUBG$ 中の節点と最も多く隣接する節点を選択し, この節点の隣接部分と $SUBG$ との積集合を新たな候補節点集合として EXPAND を行うことで, クリークを抽出していく深さ優先探索である.

MAXCLIQUE による最大クリークの探索過程は図 2 に示すような深さ優先探索木の集合 (クリーク探索森と呼ぶ) として表現することができる.

3.1　部分森の同一化

基本アルゴリズムに, 次のような**部分森の同一化**と呼ぶ節点の並べ替え処理を導入する.

(1) 入力節点集合 $SUBG$ 中の最大次数節点 u を先頭に移す

(2)$SUBG-\{u\}$ を, u に隣接する

$SUBG_u = \mathit{\Gamma}(u) \cap SUBG$

と, 隣接しない

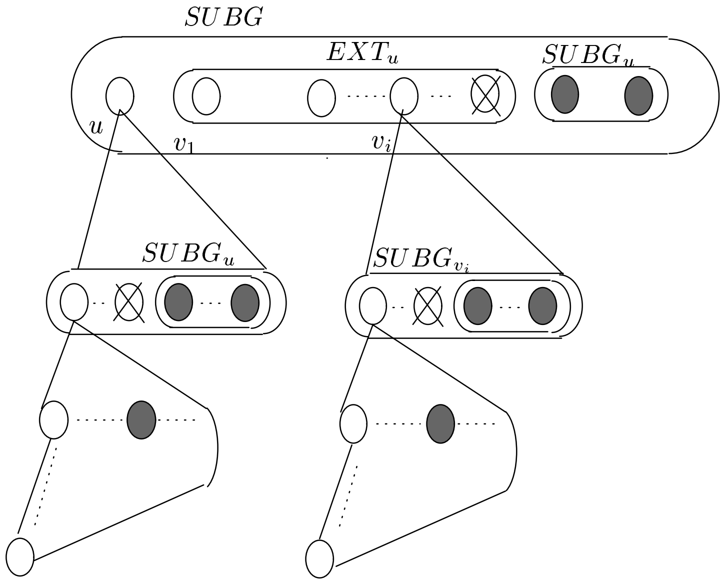
$EXT_u = (SUBG - \{u\}) - SUBG_u$

とに分割する.

(3) この順序付き節点集合

procedure MAXCLIQUE(G)
begin
  global $Q := \emptyset$;
  global $Qmax := \emptyset$;
  global u_0 :=a vertex in V
      that maximizes $|V \cap \Gamma(u_0)|$;
  global $SUBG_{u_0} := \mathit{\Gamma}(u_0) \cap V$;**global** u_1 :=a vertex in $SUBG_{u_0}$ that maximizes $|SUBG_{u_0} \cap \Gamma(u_1)|$;
  global $SUBG_{u_1} := \mathit{\Gamma}(u_1) \cap SUBG_{u_0}$;
    EXPAND$(SUBG_{u_1}, SUBG_{u_0})$
  global $EXT_{u_0} := V - \{u_0\} - SUBG_{u_0}$;
    for $i = 1$ **to** $|EXT_{u_0}| - 1$ **do**
      global $v_i := EXT_{u_0}[i]$;
      global $SUBG_{v_i} := \Gamma(v_i)$;
      global v_{1i} :=a vertex in $SUBG_{v_i}$
        that maximizes $|SUBG_{v_i} \cap \Gamma(v_{1i})|$;
      global $SUBG_{v_{1i}} := \mathit{\Gamma}(v_{1i}) \cap SUBG_{v_i}$;
      EXPAND$(SUBG_{v_{1i}}, SUBG_{v_i})$
    od
end {of MAXCLIQUE}

  procedure EXPAND$(SUBG_v, SUBG)$
  begin
  if $SUBG \neq \emptyset$ **then** u :=a vertex in $SUBG$ that maximizes $|SUBG \cap \Gamma(u)|$;
    $Q := Q \cup \{u\}$;
    $SUBG_u := \mathit{\Gamma}(u) \cap SUBG$;
    EXPAND$(SUBG_v, SUBG_u)$
    $Q := Q - \{u\}$;
    $EXT_u := SUBG - \{u\} - SUBG_u$;
    for $i := 1$ **to** $|EXT_u| - 1$ **do**
      $v_i := EXT_u[1]$;
      $U_i := \Gamma(v_i) \cap EXT_u$;
      if $|U_i| \geq 2$ **then**
      $SUBG_{v_i} := (\mathit{\Gamma}(v_i) \cap SUBG) \cup U_i$;
      $\{i.\ e.\ SUBG_{v_i} = \mathit{\Gamma}(v_i) \cap (EXT_u \cup SUBG_u)\}$
      if $SUBG_{v_i} \not\subseteq SUBG_u$
        and
        $SUBG_{v_i} \not\subseteq SUBG_{v_j}\ (1 \leq j \leq i-1)$
      then $Q := Q \cup \{v_i\}$;
        EXPAND$(SUBG_v, SUBG_{v_i})$;
        $Q := Q - \{v_i\}$; **fi**
  else $\{i.\ e.\ SUBG = \emptyset\}$ **if** $|Q| \geq |Qmax|$ **then**



: 部分森の同一化により探索を行わない節点

: EXT 中の最後尾節点 (常に探索されない)

```
400:          Qmax := Q;
410:            fi od fi fi
420:    end {of EXPAND}
```

図 1 アルゴリズム MAXCLIQUE

$\{u\} \cup EXT_u \cup SUBG_u$
を改めて $SUBG$ とおく.

このような節点の並べ替え処理を行った後に基本アルゴリズムを用いてクリーク探索を行うと, 先頭の u を根とした探索森から u を除いた部分（即ち，u の子節点集合 $SUBG_u$ を根集合とする探索部分森）と, $SUBG$ の最後部の $SUBG_u$ 部分に対する探索木の集合（部分森）とは同一のものとなる. したがって, u を根とする探索木より得られる最大クリークの節点数は, 最後部 $SUBG_u$ 部分の探索から得られる最大クリークの節点数よりも (u の分)1 だけ大きい. そこで最大クリーク抽出においては, 最後部 $SUBG_u$ 部分の探索は行わない. また u と隣接しない各節点の集合

$EXT_u = \{v_1, v_2, ..., v_{|EXT_u|}\}$

を根集合とする探索森の探索において, 最後尾節点 $v_{|EXT_u|}$ の隣接部分はその直前の節点 $v_{|EXT_u|-1}$ までの探索を終えた時点で, $v_1, v_2, ..., v_{|EXT_u|-1}$ のいずれかの節点の隣接部分の部分集合となるため, それまでに得られている最大クリークよりも大とはなり得ない [4]. 従って，節点 $v_{|EXT_u|}$ からの探索は行わない.

後述の部分集合森の削減 (2) との関係上, 特定レベルでの部分森の同一化によるパラメーター, 即ちアルゴリズム 40, 60, 70, 90, 110, 130, 140, 150 および 170 行目において定義した各変数はグローバル変数として扱っている.

3.2 部分集合森の削減 (1)

MAXCLIQUE による探索においては, 節点集合 $SUBG$ の各節点

$u, v_1, v_2, ..., v_{|EXT_u|-1}$
に対してそれぞれ隣接部分
$SUBG_u, SUBG_{v_1}, SUBG_{v_2}, ..., SUBG_{v_{|EXT_u|-1}}$
が
$SUBG_u = \Gamma(u) \cap SUBG$
および
$EXT_u = SUBG - \{u\} - SUBG_u$
として
$v_i = EXT_u[i]$,
$U_i = \Gamma(v_i) \cap (EXT_u - \{v_1, v_2, ..., v_{i-1}\})$ $(1 \le i \le |EXT_u| - 1)$
のもとに
$SUBG_{v_i} := (\Gamma(v_i) \cap SUBG) \cup U_i$ としてそれぞれ定義される. これらの隣接部分は上記の順番で探索が行われる.

このとき次が成立する.

[**命題 1**] 隣接部分
$SUBG_{v_i}$ $(1 \le i \le |EXT_u| - 1)$
がそれ以前に探索された各隣接部分
$SUBG_u, SUBG_{v_1}, ..., SUBG_{v_{i-1}}$
のいずれかの部分集合であるならば, $SUBG_{v_i}$ からの探索で得られる極大クリークのサイズは,
$SUBG_u, SUBG_{v_1}, ..., SUBG_{v_{i-1}}$
までの探索により得られる最大クリークのサイズ以下となる.

(証明) いま各隣接部分
$SUBG_u, SUBG_{v_1}, ..., SUBG_{v_{i-1}}$
のうちに $SUBG_{v_i}$ を部分集合として含むものが少なくとも 1 つあると仮定して, その集合を隣接部分にもつ節点を w, 隣接部分を $SUBG_w$ とおく. また w を含む極大クリークのうち最大のものを Q_s, v_i を含む極大クリークのうち最大のものを Q_{v_i} とおく.

このとき仮定
$SUBG_{v_i} \subseteq SUBG_w$
により
$Q_{v_i} \subseteq Q_s$
すなわち
$|Q_{v_i}| \le |Q_s|$
が成立する.

もし Q_s が探索のその時点における最大クリークであれば題意は成立する. また Q_s が最大クリークでない場合, あるクリーク $Qmax$ が存在して
$|Q_{v_i}| \le |Q_s| \le |Qmax|$
が成立するから, この場合も題意は成立する. **(証明終)**

最大クリーク抽出において [命題 1] の条件が成立する場合には探索を行う必要はないので,MAXCLIQUE において $SUBG_{v_i}$ を定義した時は, これが $SUBG_u, SUBG_{v_1}, ..., SUBG_{v_{i-1}}$ のいずれの部分集合でもないことを確認し, そうでなければ探索を省く. この限定操作を**部分集合森の削減 (1)** と呼ぶ.

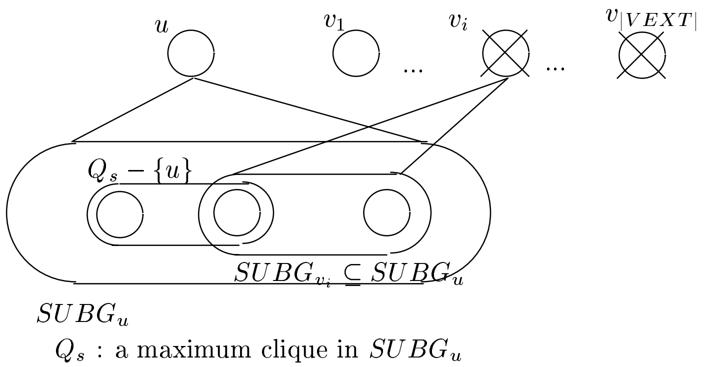


図 3 部分集合森の削減 (1)

3.3　部分集合森の削減 (2)

命題 1 に示したことから, 部分集合森の削減 (1) は, 隣接部分
$SUBG_{v_i}$ $(1 \leq i \leq |EXT_u| - 1)$
がそれ以前に探索された各隣接部分
$SUBG_u, SUBG_{v_1}, ..., SUBG_{v_{i-1}}$
のいずれかの部分集合である
という条件が成立しない場合には探索の効率化を期待できない. しかし下記に示すように, この状況を逆に積極的に利用することで効果を発揮する限定操作を導入することができる.

まず命題 1 の条件が成立しない場合について整理すると, 以下が成立することがわかる.

[**命題 2**] いま EXPAND の入力を
EXPAND($SUBG_{u_1}, SUBG_{u_0}$)
または
EXPAND($SUBG_{v_{i1}}, SUBG_{v_i}$)

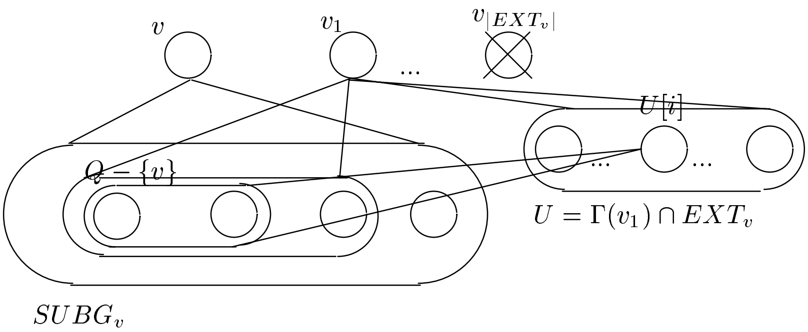
で与えるとき, すなわち EXPAND の再帰の一番上のレベルにおいて, 隣接部分
$SUBG_{v_i}$ $(1 \leq i \leq |EXT_{u_0}| - 1)$
がそれ以前に探索された各隣接部分
$SUBG_{u_0}, SUBG_{v_1}, ..., SUBG_{v_{i-1}}$
のいずれの部分集合でもないとき, $SUBG_{v_i}$ は

$SUBG_{u_0}, SUBG_{v_1}, ..., SUBG_{v_{i-1}}$ のいずれにも含まれない節点
$u \in EXT_{u_0} - \{v_1, v_2, ..., v_{i-1}\}$
を 1 個以上含む.

(証明)u_0 の隣接部分 $SUBG_{u_0}$ の探索終了後に v_1 の隣接部分 $SUBG_{v_1}$ が探索される場合を考える. いま条件から $SUBG_{v_i} \not\subseteq SUBG_{u_0}$
である. このとき $SUBG_{v_i}$ は,
$S \subseteq SUBG_{u_0}$ および $U \subseteq EXT_{u_0}$ $(U_1 \neq \emptyset)$ を用いて

$$SUBG_{v_1} = S \cup U_1$$

と表される集合でなくてはならない. 何故ならば, ここでもし
$U_1 = \emptyset$ とすると



・Check that whether $(Q - \{v\}) \cup \{v_1, U[i]\}$ is a clique
when a maximal clique Q is found in $SUBG_v$.

図 4 部分集合森の削減 (2)

$SUBG_{v_1} = S \cup U_1 = S \subset V_{u_1}$

となってしまうから, 仮定の下において U_1 は空でない集合である. 従って, 題意は成立する.

一般に $1 \leq i \leq |EXT_{u_0}| - 1$ なる i について $SUBG_{v_i}$ が探索されるのは, 既に各隣接部分

$SUBG_{v_1}, ..., SUBG_{v_{i-1}}$

が探索された後であるから, この時点で各節点

$v_1, v_2, ..., v_{i-1}$

は候補節点集合から除外されている.

$SUBG_{u_0}$ のときと同様に, もし $1 \leq j \leq i-1$ なる任意の j について

$SUBG_{v_i} \not\subseteq SUBG_j$

が成り立つとすると, $SUBG_{v_i}$ は集合 $S \subset SUBG_{u_0}$ および $U_i \subseteq EXT_{u_0} - \{v_1, v_2, ..., v_{i-1}\}$ $(U_i \neq \emptyset)$

を用いて

$SUBG_{v_i} = S \cup U_i$

と表される集合となる. **(証明終)**

[命題 2] の結果を利用して, 頭書の結果を得るために次のような処理を EXPAND に加えた.

グラフの最大次数節点 u_0 の隣接部分 $SUBG_{u_0}$ に対する探索において, ある極大クリーク Q が抽出されたとき, 以下を確認する.

(1)$U = \Gamma(v_1) \cap EXT_{u_0}$ とする. すなわち U は
グラフの最大次数節点 u に隣接しない節点のうち,
v_1 に隣接する節点の集合である.
(2)U から順に節点 $U[i]$ $(1 \leq i \leq |U|)$ を取り出し,
隣接部分 $W = \Gamma(v_1) \cap \Gamma(U[i])$ について,
$Q - \{u_0\} \subseteq W$ ならば
$Q \cup \{v_1, U[i]\}$

はクリークである. 何故ならば, いま

$Q - \{u_0\} \subseteq Q$

はクリークであり, W の定義から $Q - \{u_0\}$ 中の全ての節点は互いに隣接する節点 v_1 および $U[i]$ に隣接しているからである.

クリーク $Q \cup \{v_1, U[i]\}$ は Q よりサイズが 1 大きいため, 最大クリーク抽出においては Q を保持する必要はない. そこで Q を新たに

$(Q - \{u_0\}) \cup \{v_1, U[i]\}$

によって書き換える.

$SUBG_{v_1}$ が少なくとも 1 個 EXT_{u_0} 中の節点を含んでいれば, 部分集合森の削減 (1) は実行されない.

ここで更に上記処理を追加すると, $SUBG_{u_0}$ に含まれる全ての極大クリークについて, もし $SUBG_{v_1}$ にそれらのクリークより 1 だけサイズが大きいものが存在するならば, 抽出することができる. アルゴリズム上でこの処理を実現するためには MAXCLIQUE の 400 - 410 行間に図 6 に示す 401 - 409 行を挿入すればよい.

以上から $SUBG_{w_1}$ については, EXT_{u_0} 中の節点が 2 個以上含まれている場合にのみ探索を実行する. EXPAND によって極大クリークが抽出されたときに実行される上記の処理を, **部分集合森の削減 (2)** と呼ぶ.

4 最大時間計算量評価

節点集合が V で, $|SUBG| = n$, 最大次数 $\Delta \le n-1$ であるグラフに対する MAXCLIQUE(G) の最大時間計算量を $T(|V|)$ とする. また節点集合 $SUBG$ に対する EXPAND($SUBG_v$, $SUBG$) の最大時間計算量を $t(|SUBG|)$ とする.

この定義のもと, 次の関係式が成り立つ.

$T(|V|) \le t(|SUBG_{u_0}|) + \sum_{i=1}^{|EXT_{u_0}|-1} t(|SUBG_{v_i}|) + Cn^2$... (T1)

同様にして, いま $SUBG$ 中で次数 $|SUBG \cap \Gamma(u)|$ が最大である節点を v とし,

$EXT_u = SUBG - \{u\} - SUBG_u = \{w_1, w_2, ..., w_{EXT_u - 1}\}$

とおくと,

$t(|SUBG|) \le t(|SUBG_u|) + \sum_{i=1}^{|EXT_u|-1} t(|SUBG_{w_i}|) + C(\Delta+1)^2$... (T2-0)

が成立する. (T2-0) は EXPAND が任意の再帰レベルでみたす関係を示したものであるから, いま $SUBG = SUBG_{u_0}$ とすれば

$t(|SUBG_{u_0}|) \le t(|SUBG_{u_1}|) + \sum_{i=1}^{|EXT_{u_0}|-1} t(|SUBG_{v_i}|) + C(\Delta+1)^2$... (T2-1)

である. また $SUBG = SUBG_{v_{1i}}$ とすれば

$t(|SUBG_{v_{1i}}|) \le t(|SUBG_{v_{1i}}|) + \sum_{i=1}^{|EXT_{v_{1i}}|-1} t(|SUBG_{v_i}|) + C(\Delta+1)^2$... (T2-2)

(T2-1) および (T2-2) は EXAPND の再帰における一番上のレベルであり, 後述するようにこのレベルにおいては部分集合森の削減 (2) が適用される.

各式末尾の Cn^2 および $C(\Delta+1)^2$ はこのような問題分割に必要な全ての処理に要する多項式オーダーの計算量の上界であり, ここで定数 $C > 0$ は以下の様に定義する.

手続き EXPAND($SUBG_v$, $SUBG$) に対し, 次の再帰レベルの候補節点集合となる $SUBG_u$ および $SUBG_{v_i}$ ($1 \le i \le |EXT_u| - 1$) を常に空集合で与える処理を EXPAND_0 とする. このとき EXPAND_0 の時間計算量を

401: **if** $v \in SUBG_{u_0}$ **then**
402: $EXT_v := SUBG_{u_0} - \{v\} - SUBG_v$;
403: **else** $EXT_v := SUBG_{v_i} - \{v\} - SUBG_v$; (*i.e.* the case $v = v_i$) **fi**
404: $w_1 := EXT_v[1]$;
405: $U := \Gamma(w_1) \cap EXT_v$;
406: **for** $i := 1$ **to** $|U|$ **do**
407: $W := \Gamma(w_1) \cap \Gamma(U[i])$;
408: **if** $Qmax - \{u_0\} \subset W$ **then**
409: $Qmax := (Qmax - \{v\}) \cup \{w_1, U[i]\}$;

図 5 部分集合森の削減 (2)

考える.

まず最大次数節点 u_0 の選択および, 集合 $SUBG_u$ と EXT_u の定義に要する手数が $O(n^2)$ となる. ここでそのような上界 $C_1 n^2$ を与える定数を C_1 とする.

$SUBG_{u_0} = \emptyset$ であるから, $SUBG_u$ に関してアルゴリズムは空集合性の判定に要する $O(n)$ の時間計算量のみで実行を終了する. そのような上界 $C_2 n$ を与える定数を C_2 とする.

v_i についても, 集合

$U_i = \Gamma(v_i) \cap EXT_u$

を定義したとき, u がグラフの最大次数であることから

$U_i = \emptyset \cap EXT_u = \emptyset$

となり, $|U_i| = 0 < 2$ であるから, 部分集合森の削減 (2) によってこの時点でアルゴリズムは実行を終了する. これに要する時間計算量は $O(n^2)$ であるから, いまそのような上界 $C_3 n^2$ を与える定数を C_2 とする.

以上から EXPAND_0 の実行に要する時間計算量は

$C_1 n^2 + C_2 n + C_3 n^2 < (C_1 + C_2 + C_3) n^2$ である. ここで定数 C を

$C = C_1 + C_2 + C_3$ によって定義すると, EXPAND_0 は $O(n^2)$ の処理である.

この定数 C を (T1), (T2-0), (T2-1) および (T2-2) 式の C とする [6].

また EXPAND の計算量は, その性質上対象とする節点集合のサイズに関して単調である. 即ち次が成立する.

ある集合 $SUBG$ について, $|SUBG| = \Delta$ とするとき,

$t(\Delta) \geq t(\Delta - 1) \geq t(\Delta - 2) \geq ... \geq t(0)$ (T3)

である.

あるグラフが与えられたとき, MAXCLIQUE(G) はそのグラフに対応したクリーク探索森を形成する. すなわち MAXCLIQUE(G) の計算量とはそのようなクリーク探索森を形成するために必要な計算量である.

全体の計算量評価を行うにあたり, まずは本稿において導入した限定操作の効果について評価を行う.

いま (T2), (T3) における親節点集合 $SUBG_{u_1}$ および $SUBG_{v_{1i}}$ 中の最大次数節点の次数 e, f について考える.

これらの次数は親節点集合のサイズより必ず 1 以上減少するから, これを $k \geq 1$ を用いて $\Delta - k$ と表すと, (T2-1) または (T2-2) 式から分割される部分問題の総数は, 部分森の同一化によって

$\Delta - ((\Delta - k) - 1) = k - 1$

個であるが, 限定操作の導入によりこの部分問題数は少なくともひとつ減少させることができる.

即ち, 以下の補題が成立する.

[**補題 1**] 節点集合が V で, $|V| = n$, 最大次数が $\Delta \geq 0$ なる任意のグラフにおいて, $u_0 \in V$ を最大次数節点とする. $SUBG_{u_0} = V \cap \Gamma(u_0)$ として, (T2) および (T3) 式によって

$t(|SUBG_{u_0}|) \leq t(|SUBG_{u_1}|) + \sum_{i=1}^{|EXT_{u_1}|-1} t(|SUBG_{v_i}|) + C(\Delta + 1)^2$

$t(|SUBG_{v_{1i}}|) \leq t(|SUBG_{v_{1i}}|) + \sum_{i=1}^{|EXT_{v_{1i}}|-1} t(|SUBG_{v_i}|) + C(\Delta + 1)^2$

なる問題分割が発生するとき, ある

$1 \leq j \leq |EXT_v| - 1$ $(v \in \{u_1, v_{11}, v_{12}, ..., v_{1|EXT_{u_1}|-1}\})$ において

$SUBG_{v_j} \subseteq SUBG_v$

又は

$SUBG_{v_j} \subseteq SUBG_{v_i}$ $(1 \leq i \leq |EXT_v| - 1)$

なる $SUBG_{v_j}$ が少なくとも 1 つ存在する.

(証明) まず $v = u_1$ なる場合について示す. いま $SUBG_{u_1}$ 探索後, $SUBG_{v_1}$ に部分集合森の削減 (1) が適用される場合, 題意は成立する.

以下では $SUBG_{v_1}$ に部分集合森の削減 (1) が適用されない場合を考える.

部分集合森の削減 (2) により, このとき $SUBG_{v_1}$ は v_1 でない EXT_{u_1} の節点を 2 個以上含む.

ここで, この 2 個の節点のうちどちらかの隣接部分が $SUBG_{v_1}$ の探索終了後に探索される場合を考える.
この隣接部分が限定操作を受けないとき, [命題 2] によりこの隣接部分は $SUBG_{v_1}$ に含まれない EXT_{u_1} の節点を少なくとも 1 個含んでいなければならない.

いますべての v_i $(1 \leq i \leq |EXT_{u_1}| - 1)$ においてこの関係が成り立つとする.

このとき $i = 1$ から順に, 関係が成立する場合の EXT_{u_1} の残り節点数を考えると

$SUBG_{v_1}$ は EXT_{u_1} の節点を 2 個以上含むから, $SUBG_{v_1}$ の探索が終了した時点で $v_2, ..., v_{|EXT_{u_1}|-1}$ が隣接部分に含むことのできる節点の個数は, EXT_{u_1} から除外される節点 v_1 および $SUBG_{v_1}$ が含む 2 個を除いた

$|EXT_{u_1}| - 1 - 2$

個以下であるが, $SUBG_{v_1}$ が含む 2 個自身については

$|EXT_{u_1}| - 1 - 1$

個以下となる.

同様に考えると, $SUBG_{v_i}$ $(1 \leq i \leq |EXT_{u_1}| - 1)$ の探索が終了した時点で, $v_{i+1}, ..., v_{|EXT_{u_1}|-1}$ が隣接部分に含むことができる節点の個数は

$|EXT_{u_1}| - i - 1$

個以下である. 従ってもし v_1 を除く全ての v_i の隣接部分において, 含むことができる節点の個数が最少の 1 個であったとしても, $i = |EXT_{u_1}| - 1$ において節点の個数は 0 個となり, その隣接部分は

$SUBG_{u_1}, SUBG_{v_1}, ..., SUBG_{v_{i-1}}$

のいずれかの部分集合となる. すなわち $j = |EXT_{u_1}| - 1$ とすると

$SUBG_{v_j} \subseteq SUBG_{u_1}$

又は

$SUBG_{v_j} \subseteq SUBG_{v_i}$ $(1 \leq i \leq |EXT_{u_1}| - 1)$

である. 以上から題意の $SUBG_{v_j}$ の存在が示せた.

$v = v_{11}, v_{12}, ..., v_{1|EXT_{u_1}|-1}$ なる各場合も全く同様にして示せる. **(証明終)**

補題 1 のような集合 $SUBG_{v_j}$ に対しては, 部分集合森の削減 (1) が適用され, $t(|SUBG_{v_j}|) = 0$ となる.

主要定理証明に先立ち, まず最大次数 Δ をパラメーターとして用いた EXPAND による各子問題の時間計算量評価結果を以下に与える.

[**補題 2**] 節点集合が $SUBG$ で, 最大次数が $\Delta \geq 0$ なる任意のグラフにおいて, EXPAND($SUBG_{u_1}$, $SUBG_{u_0}$) およびは EXPAND($SUBG_{v_{1i}}$, $SUBG_{v_i}$) の最大時間計算量上界はそれぞれ $t(\Delta)$ によって与えられるが, このとき定数 C' を

$C' = 250C$

とすると

$t(\Delta) \leq C' 2^{0.3338\Delta} (\Delta + 1)^2$

である.

(証明) 以下ではまず (T2-1) 式を用いて EXPAND($SUBG_{u_1}$, $SUBG_{u_0}$) についての題意の成立を示す. 証明は最大次数 Δ に関する数学的帰納法に
よる.

先ず, $\Delta = 0$ の場合, $SUBG_{u_1} = \emptyset, SUBG_{v_i} = \emptyset$ $(1 \leq i \leq |EXT_{u_1}| - 1)$
であるから, 定数 C の定義により

$t(\Delta) \leq C(\Delta + 1)^2 < 250C(\Delta + 1)^2$

$= C' \cdot 1 \cdot (\Delta+1)^2 = C' \cdot 2^{0.3338 \cdot 0} \cdot (\Delta+1)^2$

である．従って題意は成立する．

次に，ある $\Delta \geq 0$ 以下の全ての Δ において

$t(|SUBG_{u_1}|) \leq C' 2^{0.3338\Delta}(\Delta+1)^2$

が成立すると仮定する．この仮定のもとで, 節点数 n, 最大次数 $\Delta+1$ であるグラフについての計算に要する計算量を考える．

この節点の子節点の最大次数は Δ 以下であるから, そのような最大次数子節点 u_1 の次数を $\Delta - k (0 \leq k \leq \Delta)$ とおく．このとき $t(\Delta+1)$ は, (T2-1) 式により

$t(\Delta+1)$

$\leq t(\Delta-k) + \sum_{i=1}^{|EXT_{u_1}|-1} t(|SUBG_{v_i}|) + C(\Delta+2)^2$

ただし補題 1 により, $SUBG_{v_i}$ $(1 \leq i \leq |EXT_{u_1}|-1)$ のうち少なくとも 1 つは探索されないから, ある $1 \leq j \leq |EXT_{u_1}|-1$ において

$t(|SUBG_{v_j}|) = 0$

としてよい．即ち

$t(\Delta+1)$

$\leq t(\Delta-k)$

$+ \sum_{i=1}^{j-1} t(|SUBG_{v_i}|)$

$+ \sum_{i=j+1}^{|EXT_{u_1}|-1} t(|SUBG_{v_i}|)$

$+C(\Delta+2)^2$

である．

節点 u_1 は $SUBG_{u_0}$ 中最大の次数の節点であるから, $v_1, v_2, ..., v_{|EXT_{u_1}|-1}$ の $SUBG_{u_0}$ における次数は u_1 以下である．ここからいま $|SUBG_{v_i}|$ $(1 \leq i \leq |EXT_{u_1}|-1)$ のサイズを $0 \leq k_i \leq \Delta - k$ を用いてそれぞれ

$\Delta - k - k_1, \Delta - k - k_2, ..., \Delta - k - k_{|EXT_{u_1}|-1}$

と表すと

$t(\Delta+1)$

$\leq t(\Delta - k) + t(\Delta - k - k_1)$

$+ ... + t(\Delta - k - k_{j-1})$

$+ t(\Delta - k - k_{j+1})$

$+ ... + t(\Delta - k - k_{|EXT_{u_0}|-1})$

$+C(\Delta+2)^2$

となる．(T3) 式を用いると

$t(\Delta+1)$

$\leq t(\Delta-k) + t(\Delta-k)$

$+ ... + t(\Delta-k)$

$+ t(\Delta-k)$

$+ ... + t(\Delta-k)$

$+C(\Delta+2)^2$

となる．したがって帰納法の仮定により

$t(\Delta+1)$

$\leq C' 2^{0.3338(\Delta-k)}((\Delta-k)+1)^2$

$+C' 2^{0.3338(\Delta-k)}((\Delta-k)+1)^2 + ...$

$+C' 2^{0.3338(\Delta-k)}((\Delta-k)+1)^2$

$+C' 2^{0.3338(\Delta-k)}((\Delta-k)+1)^2 + ...$

$+C'2^{0.3338(\Delta-k)}((\Delta-k)+1)^2$
$+C((\Delta+2)^2$
$\leq C'2^{0.3338(\Delta-k)}(\Delta+2)^2$
$+C'2^{0.3338(\Delta-k)}(\Delta+2)^2+...$
$+C'2^{0.3338(\Delta-k)}(\Delta+2)^2$
$+C'2^{0.3338(\Delta-k)}(\Delta+2)^2+...$
$+C'2^{0.3338(\Delta-k)}(\Delta+2)^2$
$+C((\Delta+2)^2$

以上から
$t(\Delta+1)$
$\leq((\Delta+1)-(\Delta-k)-1-1)\cdot C'2^{0.3338(\Delta-k)}(\Delta+2)^2$
$+C(\Delta+2)^2$

$=(k-1)C'2^{0.3338(\Delta-k)}(\Delta+2)^2+C(\Delta+2)^2$
$=C'2^{0.3338\Delta}(\frac{k-1}{2^k}+\frac{1}{250\cdot 2^{0.3338\Delta}})(\Delta+2)^2$
$\leq C'2^{0.3338\Delta}(\frac{k-1}{2^{0.3338k}}+0.001)(\Delta+2)^2.$
$k\geq 0$ において $\frac{k-1}{2^{0.3338k}}<1.258$ であるから

$t(\Delta+1)\leq C'2^{0.3338\Delta}(1.258+0.001)(\Delta+2)^2$
$=C'2^{0.3338\Delta}\cdot 1.259\cdot(\Delta+2)^2$
$<C'2^{0.3338\Delta}\cdot 2^{0.3338}\cdot(\Delta+2)^2$
$<C'2^{0.3338(\Delta+1)}((\Delta+1)+1)^2$
である.
従って, 帰納法による帰結により, 任意の $\Delta\geq 0$ において補題の関係が成立する.
上記はEXPAND($SUBG_{u_1}, SUBG_{u_0}$) についての題意の成立を示したが, (T2-2) 式を用いればEXPAND($SUBG_{v_{1i}}$, $SUBG_{v_i}$) についても全く同様にして題意の成立を示すことができる. **(証明終)**

これより, 次が成立する.

[**定理**] 節点数 n のグラフにおいて
$T(n)=O(2^{0.334n})$
である.

(証明) (T1) 式により, いま
$T(|V|)\leq t(\Delta)+\sum_{i=1}^{|EXT_u|-1}t(|SUBG_{v_i}|)+Cn^2$
である. ここで [補題 2] を用いれば
$T(|V|)\leq(n-\Delta-1)C'2^{0.3338\Delta}(\Delta+1)^2+Cn^2$
$\leq n\cdot C'2^{0.3338n}n^2+Cn^2$
いま定数 $C''=2.5\cdot 10^9$ とすると, 任意の n において
$n^2<C''2^{0.0001n}$
が成立するから
$T(n)<n\cdot C'C''2^{0.3338n}\cdot 2^{0.0001n}+Cn^2$
$=C'C''n\cdot 2^{0.3339n}+Cn^2$
$\leq C'C''n^2\cdot 2^{0.3339n}+Cn^2$

$= (1 + \frac{1}{C'C''})2^{0.3339n}n^2$
$< (1 + \frac{1}{C'C''})C''2^{0.3339n} \cdot 2^{0.0001n}$
$= (1 + \frac{1}{C'C''})C''2^{0.334n}$
従って，$T(n) = O(2^{0.334n})$ である．

(証明終)

5 むすび

一般グラフに対する最大クリーク抽出問題が, 単純なアルゴリズムによって $O(2^{0.334n})$-時間で解決できることを示した.

一般の最大クリーク抽出問題の最大時間計算量に対して，筆者らは従来の評価 [2]-[5], を大幅に改善する 多項式計算領域における結果を発表してきたが [8]，[9], [11], 本稿における手法は，その一般結果をより単純明快に証明する新しい基礎ともなる．

謝辞 有益なコメントを頂いた, 京都大学　伊藤大雄 准教授, 岩間一雄 教授に感謝いたします．なお, 本研究は科研費基盤研究 (B), (C) の補助を受けている．

参考文献

[1] M. R. Garey, D. S. Johnson, “ Computers and Intaractability: A Guide to the Theory of NP-Completeness, ” W. H. Freeman & Co. (1979).

[2] R. E. Tarjan, A. E. Trojanowski, “ Findig a maximum independent set, ”SIAM J. on Computing 6, 537-546 (1977).

[3] J. M. Robson: “Algorithms for maximum independent sets,” J. of Algorithms, 7, pp.425-440 (1986).

[4] M. Shindo, E. Tomita, “ A simple algorithm for finding a maximum clique and its worst-case time complexity, ” Systems and Computing in Japan 21, 1-13 (1990).

[5] F. V. Fomin, F. Grandoni, D. Kratsch, “ Measure and conquer: A simple $O(2^{0.288n})$ independent set algorithm, ” Proc. ACM-SIAM Symp. On Discrete Algorithms, 18-25 (2006).

[6] E. Tomita, A. Tanaka, H. Takahashi, “ The worst-case time complexity for generating all maximal cliques and computational experiments, ” Theoretical Computer Science 363, 28-42 (2006).

[7] 中西裕陽, 富田悦次, “ 最大クリークを抽出する単純なアルゴリズムの最大次数 4 のグラフにおける計算量,” 信学技報, COMP2007-18, 1-7 (2007).

[8] 中西裕陽, 富田悦次,“ 最大クリークを抽出する計算量 $O(2^{0.24945n})$ の多項式領域アルゴリズム, ” 信学技報, COMP2007-46, 33-40 (2007).

[9] 中西裕陽, 富田悦次,“ 最大クリークを抽出する計算量 $O(2^{0.19669n})$ の多項式領域アルゴリズム, ” 情処研報, 2007-AL-115, 17-24 (2007).

[10] E. Tomita, “ The maximum clique problem and its applications (Invited lecture), ” IPSJ SIG Tech. Rep., 2007-MPS-67, 21-24 (2007).

[11] 中西裕陽, 富田悦次,“ 最大クリークを抽出する計算量 $O(2^{0.19171n})$ の多項式領域アルゴリズム,” 情処研報, 2008-AL-116, 15-22 (2008).