アルゴリズム 64－3
(1998. 9. 16)

最大リーフ全域木問題の上界値計算について

藤江 哲也

神戸商科大学 管理科学科

最大リーフ全域木問題とは, 連結無向グラフ G の全域木の中で, リーフ (次数 1 の頂点) 数が最大のものを求める問題である. この問題は NP- 困難であり, いくつかの近似解法, すなわち下界値計算が提案されている. これに対し, 本稿では, 上界値計算に関連した議論を行う. まず, この問題の 0-1 整数計画問題としての定式化を 2 通り与える. 次に, 各定式化について, 定式化に用いた不等式が, 実行可能解集合の凸包として定義される多面体の極大面を定める必要十分条件を与える. 最後に, 緩和問題について触れる.

On Upper Bounding Computaions for the Maximum-Leaf Spanning Tree Problem

Tetsuya Fujie

Department of Management Science
Kobe University of Commerce

Given an undirected graph G, the Maximum-Leaf Spanning Tree Problem is to find a spanning tree in G, whose number of leaves (degree-1 vertices) is maximum. The problem is NP-hard, and several approximation algorithms, that is, lower bounding computations, are proposed. This paper concerns with upper bounding computations. First, we provide two kinds of 0-1 integer programming formulations of the problem. Next, we give necessary and sufficient conditions that the constraints in each formulation define facets of a polytope which is defined as a convex hull of the set of feasible solutions. Finally, relaxation problems are considered.

1 はじめに

$G = (V, E)$ を頂点集合 V と枝集合 E からなる無向グラフとする．G の全域木 (spanning tree) とは，連結で閉路を含まない部分グラフ $T = (V, E')$ のことである．全域木 $T = (V, E')$ において，頂点 $v \in V$ の次数が 1 に等しいとき，v をリーフと呼ぶ．最大リーフ全域木問題 (Maximum-Leaf Spanning Tree Problem : MLSTP) とは，G の全域木の中でリーフ数最大のものを求める問題である．この問題は NP- 困難であることが知られている [6]．Lu and Ravi[7, 8] は幾つかの近似解法を与えている．彼らの得た最良の近似誤差は 3 である．すなわち，少なくとも最適値の 1/3 のリーフを持つ全域木を出力する．一方，Galbiati, Maffioli and Morzenti[5] はこの問題が MAX-SNP 困難であることを示した．よって，近似誤差 $(1 + \epsilon)$ の全域木を求める問題が NP- 困難であるような $\epsilon > 0$ が存在する．

本稿では，上界値計算に関連して，MLSTP の定式化を行なう．そして，実行可能解の凸包として定義される多面体の極大面 (facet)，および妥当不等式に関する結果を与える．また，緩和問題について触れる．本稿では，特に，2 つの定式化を与える．第 2 節は，枝集合と頂点集合に相当する変数を用いた定式化であり，第 3 節は，頂点集合に相当する変数のみを用いた定式化である．なお，本稿の結果は [3] に基づいている．また，本稿の結果の一部は [2] で与えられている．

1.1 準備

$G = (V, E)$ を無向グラフとする．$S \subseteq V$ に対して，$E(S) \equiv \{(i, j) \in E \mid i, j \in S\}$ と定義し，$G[S] \equiv (S, E(S))$ を G の誘導部分グラフと呼ぶ．また，$F \subseteq E$ に対して，$V(F)$ を F の枝に隣接する頂点集合とする．このとき，$G^F \equiv (V(F), F)$ を G の枝誘導部分グラフと呼ぶ．$S \subseteq V$ に対して，$G \setminus S \equiv G[V \setminus S]$, $\delta_G(S) \equiv \{e = (i, j) \in E \mid i \in S, j \in V \setminus S \text{ or } j \in S, i \in V \setminus S\}$ と定義する．意味するところが明らかな場合，$\delta(S) = \delta_G(S)$ とも書く．$F \subseteq E$ に対して，$G \setminus F \equiv (V, E \setminus F)$ と定義する．簡単のため，$G \setminus \{i\}$ を $G \setminus i$, $\delta_G(\{i\})$ を $\delta_G(i)$, $G \setminus \{e\}$ を $G \setminus e$ などと書く場合もある．

G を連結グラフとする．頂点 $v \in V$ は，$G \setminus v$ が非連結であるときカット頂点と呼ぶ．カット頂点を含まない連結グラフのことを 2 連結グラフという．グラフ G のブロックとは，G の極大な 2 連結部分グラフのことである．よく知られているように，G はいくつかのブロック $G_1, G_2, \ldots, G_K$ に分解され，2 つの相異なるブロックは高々 1 つの頂点を共有し，その頂点はカット頂点になる．

$\mathbf{0}$ をすべての要素が 0 のベクトルとする．$\boldsymbol{e}_i$ を第 i 成分が 1，他の成分が 0 の単位ベクトルとする．また，ベクトル $\boldsymbol{x} \in R^{|E|}$ と $F \subseteq E$ に対して，$\boldsymbol{x}(F) \equiv \sum_{e \in F} x_e$ と定義する．さらに，集合 E とその部分集合 T に対して，特性ベクトルを $\chi_T \in \{0, 1\}^{|E|}$ と書く．すなわち，「χ_T の第 e 成分が 1 に等しい $\Leftrightarrow e \in T$」である．

2 枝変数と頂点変数による定式化

本節では, MLSTP の, 0-1 ベクトル $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \in \{0,1\}^{|E|} \times \{0,1\}^{|V|}$ を用いた定式化を与える. ここで, $\boldsymbol{x}$ は枝集合, $\boldsymbol{y}$ は頂点集合に相当し, G の全域木 $T=(V,E')$ に対して,

$$\begin{aligned} x_e = 1 &\iff e \in E', \\ y_i = 1 &\Longrightarrow i \text{ は } T \text{ のリーフ} \end{aligned}$$

と定める. このとき, MLSTP は次のように定式化される:

$$\begin{aligned}
\text{最大化} \quad & \sum_{i \in V} y_i & (1)\\
\text{条　件} \quad & \boldsymbol{x}(E) = |V| - 1, & (2)\\
& \boldsymbol{x}(E(S)) \leq |S| - 1 \ (S \subset V \text{ かつ } |S| \geq 2), & (3)\\
& \boldsymbol{x}(\delta(i)) + (|\delta(i)| - 1) y_i \leq |\delta(i)| \ (i \in V), & (4)\\
& x_e \geq 0 \ (e \in E), & (5)\\
& y_i \geq 0 \ (i \in V), & (6)\\
& x_e \ : \ \text{整数} \ (e \in E), & (7)\\
& y_i \ : \ \text{整数} \ (i \in V). & (8)
\end{aligned}$$

制約式 (2), (3), (5), (7) は, $\boldsymbol{x}$ が G の全域木を表現していることを保証する (例えば [9] を参照). そして, 残りの制約式 (4), (6), (8) によって, $\boldsymbol{y}$ は全域木 $\boldsymbol{x}$ のリーフ部分集合の特性ベクトルとなる. ここで, 目的関数が (1) であるので, $(\boldsymbol{x}^*, \boldsymbol{y}^*)$ を (1)~(8) の最適解とするとき, $\boldsymbol{y}^*$ は全域木 $\boldsymbol{x}^*$ のリーフ集合の特性ベクトルになる. よって, (1)~(8) は MLSTP の妥当な定式化である.

Fernandes and Gouveia[1] は, 最近の論文の中で, MLSTP の同様な定式化を与えた. 彼らの定式化では次の制約式を含んでいる:

$$\boldsymbol{x}(\delta(i)) \geq 2 - y_i \quad (i \in V). \tag{9}$$

実際, 制約式 (9) は, $\boldsymbol{y}$ が全域木 $\boldsymbol{x}$ のリーフ集合のみを表現する (リーフ部分集合を禁止する) ときに必要である. [1] では, リーフ数がある定数 k に等しいような全域木問題を考えており, このような問題では制約式 (9) を除去することはできない. しかし, MLSTP では制約式 (9) を除去することができ, また, 本稿の結果は制約式 (9) を除去しなければ得ることができない.

2.1 多面体 P_{EV}

本節では, 定式化 (1)~(8) に関連した多面体 P_{EV} の構造を調べる. ここで,

$$P_{EV} \equiv \operatorname{conv}\left(\left\{(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \in \{0,1\}^{|E|} \times \{0,1\}^{|V|} \,\middle|\, (\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \text{ は(2)}, \ldots, \text{(8)を満たす } \right\}\right)$$

である．また，P_{EV} の射影によって，さらに 2 つの多面体

$$\begin{aligned} P_E &\equiv \mathrm{conv}\left(\left\{\boldsymbol{x} \in \{0,1\}^{|E|} \;\middle|\; {}^{\exists}\boldsymbol{y} \text{ such that } (\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) \in P_{EV}\right\}\right) \\ &= \mathrm{conv}\left(\left\{\boldsymbol{x} \in \{0,1\}^{|E|} \;\middle|\; \boldsymbol{x} \text{ は (2),(3),(5),(7) を満たす}\right\}\right), \\ P_V &\equiv \mathrm{conv}\left(\left\{\boldsymbol{y} \in \{0,1\}^{|V|} \;\middle|\; {}^{\exists}\boldsymbol{x} \text{ such that } (\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) \in P_{EV}\right\}\right). \end{aligned}$$

が定義できる．P_E は全域木多面体 (spanning tree polytope) と呼ばれ，その構造は明らかになっている [9]．P_V は第 3.1節で扱われる．MLSTP では，P_{EV} と P_V が重要であることは明らかである．

まず，P_{EV} に関して次の補題が成り立つ．

補題 2.1 G を連結だが 2 連結ではないグラフとする．$u \in V$ をカット頂点とし，$G_1 \equiv (V_1, E_1)$，$G_2 \equiv (V_2, E_2)$ を $V_1 \cup V_2 = V$，$V_1 \cap V_2 = \{u\}$ であるような誘導部分グラフとする．さらに，$k = 1,2$ に対して，P_{EV}^k を G_k に関する多面体とし，$(\boldsymbol{x}^k, \boldsymbol{y}^k)$ をベクトル $(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) \in P_{EV}$ の制限とする．このとき，

$$P_{EV} = \left\{(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) \in R^{|E|} \times R^{|V|} \;\middle|\; \begin{array}{r} (\boldsymbol{x}^k,\boldsymbol{y}^k) \in P_{EV}^k \\ (k=1,2) \end{array}\right\} \cap \left\{(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) \in R^{|E|} \times R^{|V|} \;\middle|\; y_u = 0\right\}$$

である． ■

この補題により，G を 2 連結グラフと仮定する．

補題 2.2 P_{EV} の affine hull は

$$\mathrm{aff}(P_{EV}) = \left\{(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) \in R^{|E|} \times R^{|V|} \;\middle|\; \boldsymbol{x}(E) = |V| - 1\right\}$$

で与えられる． ■

系 2.3 $\dim(P_{EV}) = |V| + |E| - 1$. ■

以下の結果は，制約式 (3)〜(6) が，P_{EV} の極大面を与えるための条件に関するものである．

補題 2.4 $e \in E$ に対し，$x_e \geq 0$ が P_{EV} の極大面を定めるための必要十分条件は，$G \setminus e$ が 2 連結グラフとなることである． ■

補題 2.5 $i \in V$ に対して，$y_i \geq 0$ は P_{EV} の極大面を定める． ■

補題 2.6 $S \subset V, |S| \geq 2$ に対し，$\boldsymbol{x}(E(S)) \leq |S| - 1$ が P_{EV} の極大面を定めるための必要十分条件は，

(i–1) $|S| \geq 3$ のとき $G[S]$ は 2 連結；

(i–2) $|S| = 2$ のとき $G[S]$ は連結；

(ii) $G \setminus S$ は連結，

で与えられる. ■

最後に, 制約式 (4) の一般化した不等式を考える.

補題 2.7 $i \in V, F \subseteq \delta(i)$ $(|F| \geq 2)$ に対して,

$$\boldsymbol{x}(F) + (|F| - 1)y_i \leq |F| \tag{10}$$

は P_{EV} の妥当不等式である. ■

定理 2.8 $i \in V, F \subseteq \delta(i)$ $(|F| \geq 2)$ に対して, (10)が P_{EV} の極大面を定めるための必要十分条件は, F のどの枝も $G \setminus i$ のカット頂点と隣接していないことである. ■

系 2.9 $|\delta(i)| = 2$ ならば (4) は P_{EV} の極大面を定める. ■

2.2 その他の妥当不等式

(10) 式は, y_i をちょうど 1 つ含む P_{EV} の妥当不等式である. 本節では, P_{EV} の妥当不等式で, 複数の y_i を含むものを与える. これら妥当不等式が極大面を定める必要十分条件は未解決であるが, 多面体の端点列挙プログラム cdd [4] を用いた予備実験によると, これら多くの妥当不等式が極大面を定めている.

次の不等式の妥当性は容易に証明することができる.

補題 2.10

- $G \setminus S$ が非連結であるような $S \subseteq V$ に対して,

$$\boldsymbol{y}(S) \leq |S| - 1 \tag{11}$$

  は P_{EV} の妥当不等式である.

- $e = (i, j) \in E$ に対して,

$$x_e + y_i + y_j \leq 2 \tag{12}$$

  は P_{EV} の妥当不等式である.

■

不等式 (11) は第 3 節で再び取り上げる. 本節の主結果は, (10) 式の一般化である次の妥当不等式である.

定理 2.11 $G^F = (S, F)$ を $F \subseteq E$ の枝誘導部分グラフとする. また, G^F は連結であるが 2 連結ではないと仮定する. さらに,

$$\begin{array}{llcl}
G_k^F = (S_k, F_k) & (k = 1, \ldots, K) & : & G^F \text{ のブロック}, \\
u_\ell & (\ell = 1, \ldots, L) & : & G^F \text{ のカット頂点}, \\
b_\ell & (\ell = 1, \ldots, L) & : & u_\ell \text{ を含むブロック数}
\end{array}$$

と定義する．このとき

$$\boldsymbol{x}(F)+\sum_{\ell=1}^{L}(b_\ell-1)y_\ell \le |S|-1 \tag{13}$$

が P_{EV} の妥当不等式であるための必要十分条件は，次の条件を満たすブロック $G_k^F=(S_k,F_k)$ が存在しないことである：

(i) S_k のすべての頂点が G^F のカット頂点である；

(ii) $G\setminus S_k$ が連結である．

■

2.3 緩和問題

本節では，定式化 (1)∼(8) の緩和問題を考える．まず，(8) を除いた，(1) ∼ (7) で定義される緩和問題を考える．容易にわかるように，この緩和問題の任意の最適解は，制約式 (4) を等式で満たす．よって，

$$y_i=\frac{|\delta(i)|-\boldsymbol{x}(\delta(i))}{|\delta(i)|-1}\ (i\in V). \tag{14}$$

ここで，$x_e\le 1$ である (実際，$e=(i,j)$ のとき，(3) で $S=\{i,j\}$ としたものは $x_e\le 1$ となる) ので，(14) 式の y_i は非負である．よって，緩和問題は次の最大全域木問題と等価であることがわかる．

$$\left.\begin{aligned} z_1\equiv\ \ &\text{最大化}\ \sum_{i\in V}\frac{|\delta(i)|-\boldsymbol{x}(\delta(i))}{|\delta(i)|-1}\\ &\qquad=\sum_{i\in V}\frac{|\delta(i)|}{|\delta(i)|-1}-\sum_{e=(i,j)\in E}\left(\frac{1}{|\delta(i)|-1}+\frac{1}{|\delta(j)|-1}\right)x_e\\ &\text{条　件}\ \ \boldsymbol{x}\ \text{は}\ G\ \text{の全域木の特性ベクトル.}\end{aligned}\right\} \tag{15}$$

次に，制約式 (4) に関するラグランジュ緩和を考える．ベクトル $\boldsymbol{\lambda}\equiv(\lambda_1,\ldots,\lambda_{|V|})^T$ を導入すると，ラグランジュ緩和問題は

$$z_{LD}\equiv\min_{\boldsymbol{\lambda}\ge\mathbf{0}} z_{LD}(\boldsymbol{\lambda}),$$

ただし，

$$\begin{aligned} z_{LD}(\boldsymbol{\lambda})\equiv\ \ &\text{最大化}\ \ \sum_{i\in V}y_i+\sum_{i\in V}\lambda_i\left(|\delta(i)|-\boldsymbol{x}(\delta(i))-(|\delta(i)|-1)y_i\right)\\ &\text{条　件}\ \ (\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\ \text{は}\ (2),(3),(5),(6),(7),(8)\ \text{を満たす}\end{aligned}$$

となる．一般に，z_{LD} を求めるのは容易ではないが，本問題の場合には次が示される．

補題 2.12 $z_{LD}=z_1$. ■

(15) の最適解を与える全域木は，多くのリーフを持つとは限らないことに注意する．実際，正則グラフ (regular graph) の場合，(15) に現れる x_e の係数はすべて等しくなり，任意の全域木が (15) の最適解になる．特に，完全グラフの場合，最大リーフ数が $|V|-1$ であるのに対し，リーフ数 2 のハミルトン路も (15) の最適解である．

3 頂点変数による定式化

頂点集合に相当する変数 $\boldsymbol{y}$ のみを用いた定式化は, 次のようにして与えられる.

$$
\begin{aligned}
\text{最大化} \quad & \sum_{i \in V} y_i && (16)\\
\text{条　件} \quad & \boldsymbol{y}(V) \leq |V| - 1, && (17)\\
& \boldsymbol{y}(S) \leq |S| - 1 \ (S \subset V, G \setminus S \text{ は非連結}), && (18)\\
& y_i \leq 1 \ (i \in V), && (19)\\
& y_i \geq 0 \ (i \in V), && (20)\\
& y_i \ : \ \text{整数} \ (i \in V). && (21)
\end{aligned}
$$

この定式化の妥当性は, 次の事実を用いて示すことができる.

補題 3.1 $S \subseteq V$ に対して, S がある全域木のリーフ部分集合になり得るための必要十分条件は, 任意の $T \subseteq S$ に対して $G \setminus T$ が連結となることである. ■

3.1 多面体 P_V

本節では, 多面体 P_V の構造を調べる. 多面体 P_{EV} と同様に, G を 2 連結グラフと仮定できる.

補題 3.2 P_V は *full dimensional* である. ■

以下の結果は, 制約式 (17)~(21) が P_V の極大面を与えるための条件に関するものである.

補題 3.3 $i \in V$ に対して, $y_i \geq 0$ は P_V の極大面を定める. ■

補題 3.4 $i \in V$ に対して, $y_i \leq 1$ が P_V の極大面を定めるための必要十分条件は $G \setminus i$ が 2 連結となることである. ■

補題 3.5 $\boldsymbol{y}(V) \leq |V| - 1$ が P_V の極大面を定めるための必要十分条件は, G が完全グラフとなることである. ■

定理 3.6 $G \setminus S$ が非連結であるような $S \subseteq V$ に対して, (18) が P_V の極大面を定めるための必要十分条件は,

(i) 任意の真部分集合 $S' \subset S$ に対して, $G \setminus S'$ は連結である;

(ii) $G_1 \equiv G[S_1], \ldots, G_K \equiv G[S_K]$ を $G \backslash S$ の連結成分とする. ここで, $S_1, \ldots, S_K$ は $V \setminus S$ の分割である. また, $j \in V \setminus S$ に対し, $j \in S_k$ であるとき $\sigma(j) = k$ と定義する. このとき, 任意の $j \in V \setminus S$ に対し, $i \in S$ が存在して $G[\{i\} \cup S_{\sigma(j)} \setminus j]$ が連結となる.

■

4 おわりに

本稿では, 最大リーフ全域木問題に対する上界値計算のアプローチとして, 2通りの定式化を行ない, 関連する多面体構造を調べた. また, 1つ目の定式化については緩和問題について考察した. 今後は, これらの方法を実装することが課題である. 予備実験によると, 第2.3節で与えた緩和問題は, 計算時間は短いが, 枝密度が小さくなるにつれて上界値の精度が悪くなる. したがって, このような問題に対しては, 2つ目の定式化の緩和問題に基づく上界値計算が必要と思われ, 今後の課題である.

参考文献

[1] L. M. Fernandes and L. Gouveia, "Minimal Spanning Trees with a Constraint on the Number of Leaves," *European Journal of Operational Research* **104** (1998) 250–261.

[2] 藤江 哲也, "最大リーフ全域木問題について," 日本オペレーションズ・リサーチ学会秋季研究発表会アブストラクト集, 272–273, 1997.

[3] T. Fujie, "The Maximum-Leaf Spanning Tree Problem : Formulations and Facets," 投稿中.

[4] K. Fukuda, cdd Reference Manual, Institute for Operations Research, Swiss Federal Institute of Technology, Zurich, Switzerland (1995).

[5] G. Galbiati, F. Maffioli and A. Morzenti, "A Short Note on the Approximability of the Maximum Leaves Spanning Tree Problem," *Information Processing Letters* **52** (1994) 45–49.

[6] M. R. Garey and D. S. Johnson, *Computers and Intractability: A Guide to the Theory of NP-Completeness*, Freeman, New York (1979).

[7] Hsueh-I Lu and R. Ravi, "The Power of Local Optimization: Approximation Algorithms for Maximum-Leaf Spanning Tree," *Thirtieth Annual Allerton Conference on Communication, Control and Computing* (1992) 533–542.

[8] Hsueh-I Lu and R. Ravi, "A Near-linear-time Approximation Algorithm for Maximum-leaf Spanning Trees," Tech Report CS96–06, Department of Computer Science, Brown University (1996).

[9] T. L. Magnanti and L. A. Wolsey, Optimal Trees, in *Network Models*(M. Ball et al. eds.), North-Holland, Amsterdam (1995).

[10] G. L. Nemhauser and L. A. Wolsey, *Integer and Combinatorial Optimization*, Wiley, New York (1988).