文章编号:1000-582X(2007)09-0060-04

用带非线性自反馈的神经网络求解最大团问题

刘怀义,杨小帆,孙丽萍,司　沛,王　灿
(重庆大学 计算机学院,重庆 400030)

摘　要:针对饱和非线性动态网络算法(SLDN 算法)解最大团问题容易陷入局部最优这一缺点,提出了解决该问题的一种新的神经网络算法,并构建了新数学模型。该算法在 SLDN 算法基础上加入了非线性自反馈,具备良好的动力学特性。分析了加入非线性自反馈后的收敛性,并且通过仿真实验表明其整体性能要优于 SLDN 算法。

关键词:最大团问题;启发式算法;神经网络;非线性自反馈
中图分类号:TP183　　**文献标志码**:A

最大团问题是一个经典的图论问题,要求找出任意给定图中的一个最大完全子图。人工智能、聚类分析、信号传输、编码理论、移动计算、故障诊断等领域中的许多问题都可以归结为最大团问题[1-6]。最大团问题是一个 NP 难问题,因此,解最大团问题的一条可行途径是设计近似算法或启发式算法[7]。

递归神经网络为近似求解组合最优化问题提供了一种有效工具。在过去的十几年中,神经网络被成功地用于解最大团问题[1-2,5,8-11]。例如:Jagota[2] 设计的 Hopfield 网络, Galán-Marín 等人[9] 提出的竞争 Hopfield 网络等。1999 年,Pekergin 等人[1] 提出了一种饱和线性动态网络(SLDN)来求解最大团问题。这种网络的特点是:在一定范围内,神经元按照线性规则进行状态更新;在该范围之外,神经元处于饱和状态。SLDN 的主要缺点是:容易陷入局部最优。

受上述工作启发,笔者提出了解最大团问题的一种新的神经网络算法。该算法的特点是:在 SLDN 算法中引入了非线性自反馈,使其具有更丰富的动力学特性。仿真实验表明:所提算法能够有效地防止陷入局部最优,尤其适用于顶点数量较多、边密度较大的图。

1　基础知识

在图论中,设图 $G=(V,E)$ 是任意无向图,其中 $V=\{1,2,\cdots,n\}$ 是 G 中顶点的集合,$E\subseteq V\times V$ 是 G 中边的集合。若对 V 的非空子集 C 中任意两个顶点 $v_i,v_j\in C$,必有 $(v_i,v_j)\in E$,则称 C 为团。若对任意 C',$C\subset C'$ 并且 $C\neq C'$,若 C' 不是团,则称 C 为极大团。图 G 的最大团是指对 G 中的任意其它团 C'',都有 $|C|>|C''|$,则称 C 为 G 的最大团。需要指出的是,最大团一定是极大团,反之一般不成立。

独立集的定义是:若 $G=(V,E)$ 是无环图,S 是 G 的非空子集,若 S 中任意两顶点均不相邻,则称 S 为 G 的独立集。G 的独立集称为最大的,如果对 G 中任何异于 S 的独立集 S' 均有 $|S'|\leqslant|S|$。独立集 S 称为极大的,如果对任何 $x\in V\backslash S$,$S\cup\{x\}$ 都不是独立集。

定义 $A=(a_{ij})_{n\times n}$ 为图 G 的邻接矩阵,其中若 $(v_i,v_j)\in E$,则 $a_{ij}=1$;若 $(v_i,v_j)\notin E$,则 $a_{ij}=0$。定义 $G=(V,E)$ 的补图 $\overline{G}=(V,\overline{E})$,其中 $\overline{E}=\{(v_i,v_j)\mid v_i,v_j\in V, v_i\neq v_j,(v_i,v_j)\in E\}$。对 V 的子集 $S\subseteq V$,称 $G(S)=\{S\mid E\cap S\times S\}$ 为由 S 导出的子图。图 $G=(V,E)$ 是完全图当且仅当 V 中的任意二顶点之间都有边相连。显然团 C 是 V 的一个子集,并且 $G(C)$ 是完全图。最大团问题等价于最大独立集问题。求一个图的最大团相当于求其补图的最大独立集。

从邻接矩阵的定义显然可知图 G 的邻接矩阵 $\boldsymbol{A}=$

收稿日期:2007-05-16
基金项目:教育部新世纪优秀人才资助计划(NCET-05-0759);教育部博士点基金资助项目(20050611001);重庆市自然科学基金资助项目(CSTC2006BB2231;CSTC2005BB2191)
作者简介:刘怀义(1979-),男,重庆大学硕士研究生,主要从事智能计算和神经网络方面的研究。杨小帆(联系人),男,教授,博士生导师,(E-mail)xf_yang1964@yahoo.com。

$(a_{ij})_{n\times n}$是实对称的，即 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$，并且 $a_{ii}\equiv 0$。其补图 $\bar{G}$ 的邻接矩阵 $\bar{\boldsymbol{A}}=(a_{ij})_{n\times n}$也是实对称的，且有若 $a_{ij}=0$，则 $\bar{a}_{ij}=1$；若 $a_{ij}=1$，则 $\bar{a}_{ij}=0$ 和 $\bar{a}_{ii}\equiv 0$。Pekergin 等在文献[1]中证明了下列性质。

性质1：$\bar{\boldsymbol{A}}=(\bar{a}_{ij})_{n\times n}$是不定矩阵。

性质2：S 是独立集当且仅当它的特征向量 x 满足方程 $x^{\mathrm{T}}\bar{A}x=0$。

性质2表明：如果 $S\subset V$ 是顶点集的子集并且 $x^S\in\{0,1\}^n$ 是它的特征向量，即 $x_i^S=1$ 当且仅当 $v_i\in S$，$x_i^S=0$ 当且仅当 $v_i\notin S$。其中 $i=1,2,\cdots,n$。

性质2同时还说明：邻接矩阵 $\bar{A}$ 的独立集的特征值是密切相关的，但并不意味着 x 就是极大独立集。标准的求解图的最大独立集的 0-1 二项优化问题的方程如下

$$\min f(x)=x^{\mathrm{T}}\bar{A}x-e^{\mathrm{T}}x,x\in\{0,1\}^n \tag{1}$$

其中：$\bar{A}\in\{0,1\}^{n\times n}$是 $\bar{G}$ 的邻接矩阵，$e=\{1,1,\cdots,1\}^{\mathrm{T}}\in R^n$。

性质3：$x^*\in\{0,1\}^n$ 是使式(1)中 $f(x)$ 的离散全局最小的充分必要条件是集合 S 满足 $x^S=x^*$ 是图 G 的最大独立集。

性质4：$x^*\in\{0,1\}^n$ 离散局部最小化的充分必要条件是 $x^S=x^*$ 是 G 的极大独立集。

由以上性质可以看出，求解图 G 的最大团就等同于求其补图$\bar{G}$的最大独立集，也就是最小化式(1)中的目标函数 $f(x)$。

2　MCP 问题的求解

在文献[1]中，Pekergin 等给出了求解最大团问题的模型。

其能量函数为

$$V=x^{\mathrm{T}}\bar{A}x-e^{\mathrm{T}}x,x\in[0,1]^n。\tag{2}$$

由式(2)的能量函数，定义梯度下降动力学方程

$$\dot{\bar{x}}=-\frac{1}{2}\nabla V=\frac{1}{2}e-\bar{A}x。\tag{3}$$

Pekergin 等同时还指出，式(3)定义的动力学方程如果不限定在 0~1 范围内，是不会稳定的。对求解最大团问题也不会有什么帮助。为了实现问题的求解，修改式(3)定义如下[1]：

$$\dot{\bar{x}}=\begin{cases}\frac{1}{2}-(\bar{A}x)_i & \text{当}\,0\leqslant x_i\leqslant 1\,\text{且非下列两种情况时；}\\ 0 & \text{当}\,x_i=1\,\text{且}\,\frac{1}{2}-(Ax)_i\geqslant\text{时；}\\ 0 & \text{当}\,x_i=0\,\text{且}\,\frac{1}{2}-(Ax)_i\leqslant 0\,\text{时。}\end{cases}\tag{4}$$

任意给定初始条件 $x(0)\in[0,1]^n$，上式定义的微分方程虽然不连续，但是却存在惟一的解，且其解的连续性只与时间相关，而与其是否可微无关。Pekergin 在文献[1]中还证明：对任意给初始条件 $x(0)$，按式(4)计算，式(2)定义的能量函数是单调不增函数，并且最终可以达到稳定点，能够有效地实现图的最大团问题的求解。

在一般情况下，Pekergin 等的方法能够在一定程度上得到图的最大团。但是实验发现，由于 SLDN 算法是采用的方法是梯度下降法，容易陷入局部最优，从而不能得到全局最优解，即并不一定能得到最大团。针对 SLDN 算法中存在的以上问题，笔者通过在 SLDN 中加入非线性自反馈，提出了一种新的并行算法，它能够在一定程度上改进 SLDN 算法的性能，得到更好的解。定义其更新规则如下：

$$x_i(t+1)=\begin{cases}x_i(t)+\alpha\left\{\frac{1}{2}-[\bar{A}x(t)]\right\}_i-z(t)\left[x_i(t)-\frac{1}{2}\right],\\ \text{当}\,0\leqslant x_i(t)\leqslant 1\text{，且非下列两种情况时；}\\ x(t)\text{，当}\,x_i(t)=1\,\text{且}\,\frac{1}{2}-[Ax(t)]_i\geqslant 0\,\text{时；}\\ x(t)\text{；当}\,x_i(t)=0\,\text{且}\,\frac{1}{2}-[Ax(t)]_i\leqslant 0\,\text{时。}\end{cases}\tag{5}$$

$$z(t+1)=(1-\beta)z(t)。\tag{6}$$

其中 α 是一个正常数，它的大小影响着目标函数的减小速度，其值要求大于0。$z(t)$ 是一个自反馈连接因子且 $z(t)\geqslant 0$。在迭代过程中，对同一时刻 t，$z(t)$ 的值相同，并且作用于所有的神经元。β 是一个常数因子，它影响着自反馈 $z(t)$ 值的变化，其值范围要求在 $0\leqslant\beta\leqslant 1$。

在新算法中，因为 $z(t)$ 随时间的增加而不断减小，$x_i(t)-\frac{1}{2}$随时间有可能为正，亦有可能为负，所以自反馈项 $-z(t)\left[x_i(t)-\frac{1}{2}\right]$亦随时间 t 振荡并且逐步减小，即具有某种类似模拟退火的性质。网络输出通过自反馈，能够有效地改变神经网络的输入值的大小，从而可以跳离局部最优。

3　实验结果及分析

Pekergin 在 SLDN 算法中采用的是在不同顶点个数和不同边密度的随机图中所找出的极大团的平均值作为主要度量指标。笔者的算法是在 SLDN 算法的基础上做了部分改进工作，所以将继续使用这些评价指标，以利于对照比较。

实验结果表明:笔者的算法要优于SLDN算法。对于如图1所示的20个顶点的图,任意给定初始值,用笔者的算法,一般总能迭代求得其最大团,并且其最大团是3;而用SLDN算法,在部分初始值下得到的最大团为2。图1画出了用新算法求得的最大团(不同的非实线线型表示不同的最大团,仅给出了部分):

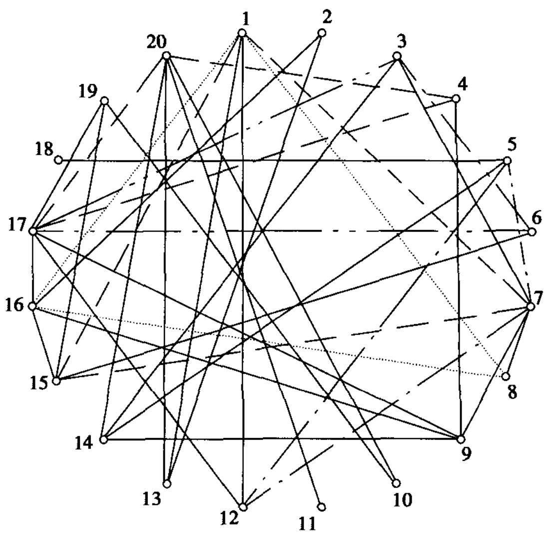

图1 一个顶点数为20的图及其最大团

笔者只选择和SLDN算法做比较,一方面是由于该算法是基于SLDN算法的改进,另外一方面的原因是Pekergin等在文献[1]中对许多已有的求解MCP的算法和SLDN算法都做了详尽的比较,并且表明SLDN算法优于其它算法。由于SLDN算法已表明自身优于其它已有算法,所以只要笔者的算法能够得到比SLDN好的结果,也就表明了该算法会优于其它算法。比较的具体结果如表1。

表1 改进后的算法和SLDN算法求得的最大团的对比

顶点数 $\lvert V \rvert$	边密度	极大团平均值	
		SLDN算法	改进后算法
100	0.25	4.3	4.4
	0.50	7.3	7.6
	0.75	14.3	15.2
400	0.25	5.4	5.9
	0.50	9.1	9.6
	0.75	18.7	20.0
1 000	0.25	6.0	6.5
	0.50	10.2	11.0
	0.75	21.7	23.5

由表1可以看出:在相同的情况下,改进后的新算法求得的团的平均值要高于SLDN算法的结果,也就是说它能够得到更好的解。

实验中采用的是随机产生的网络和初始输入$x(0)$,并给定适当的负反馈初始值$z(0)$,按照式(5)规则进行迭代。在迭代初期,神经元的状态迁移会非常激烈,能够在一定程度上打破单一梯度下降限制,使网络逃离局部最优。根据式(6),随着时间的演变,自反馈权$z(t)$将会逐步趋向于0。整个网络在非线性自反馈非常小的时候,梯度下降法迭代将占主导地位,此时的网络相当于SLDN网络。依据文献[1],将会得到一个有效的稳定的解。

仿真过程中发现,负反馈$z(0)$初始值对迭代的收敛速度有很大的影响。$z(0)$初始值过小,会使迭代陷入局部最优。$z(0)$初始值过大,算法收敛缓慢,有时其收敛速度甚至会低于SLDN算法。常数因子α,β对算法的收敛速度也有很大的影响。一般情况下α越大,收敛越快;β值有一定影响,但表现不是很明显,尤其是顶点数较少时。

另外仿真实验还表明SLDN算法对每个初始值并不是都能够收敛到有效解。在有些情况下,部分顶点并不是收敛到目标值0或者1,而是0.5,即不能得到有效解。而改进后的算法则一般不存在这个问题。

以上表明,改进后的算法的确能够比SLDN算法得到更好的最大团的结果。

4 结 语

笔者通过对SLDN算法的研究,发现其在某些初始条件下并不能收敛到图的一个团,或者得到的结果比较差。为了解决这个问题,通过在SLDN中加入非线性自反馈,提出了一种新的改进算法。它能够在给定任意初值的的情况下得到图的一个团,并且可以在一定程度上避免算法陷入局部最优,得到比SLDN算法更好的次优解。

参考文献:

[1] PEKERGIN F, MORGÜLÖ, GÜZELIS C. A saturated linear dynamical network for approximating maximum clique [J]. IEEE Transactions on Circuits and Systems-I, 1999, 46(6): 677-685.
[2] JAGOTA A. Approximating maximum clique with a Hopfield network [J]. IEEE Transactions on Neural Networks, 1995, 6(3): 724-735.
[3] KATAYAMA K, HAMAMOTO A, NARIHISA H. An effective local search for the maximum clique problem[J]. Infor-

mation Processing Letters, 2005, 95 : 503-511.

[4] MASSARO A, PELILLO M. Matching graphs by pivoting [J]. Pattern Recognition Letters, 2003, 24 (8) : 1099-1106.

[5] JAIN B J, WYSOTZKI F. Solving inexact graph isomorphism problems using neural networks [J]. Neurocomputing, 2005, 63 : 45-67.

[6] STIEBITZ M, SKREKOVSKI R. A map colour theorem for the union of graphs [J]. Journal of Combinatorial Theory, Series B, 2006, 96 (1) : 20-37.

[7] GAREY M, JOHNSON D. Computers and intractability: a guide to the theory of NP-completeness[M]. New York: W H Freeman & Co, 1979.

[8] WANG J, TANG Z, WANG R. Maximum neural networks with nonlinear self-feedback for maximum clique problem[J]. Neurocomputing, 2004, 57: 485-492.

[9] GALáN-MARíN G, MéRIDA-CASERMEIRO E, MU ÑOZ-PÉREZ J. Modeling competitive Hopfield networks for the maximum clique problem [J]. Computers & Operations Research, 2003, 30 (4) : 603-624.

[10] 张军英, 许进, 保铮. 基于 Hopfield 网络的图的最大团和最大独立集算法 [J]. 电子科学学刊, 1996, 18 (S1): 122-127.

[11] HAYKIN S. Neural networks: a comprehensive foundation [M]. Beijing: Tsinghua University Press, 1999.

Using a Neural Network with Nonlinear Self-feedback to Solve the Maximum Clique Problem

LIU Huai-yi, YANG Xiao-fan, SUN Li-ping, SI Pei, WANG Can

(College of Computer Science, Chongqing University, Chongqing 400030, China)

Abstract: As the MCP is NP-hard, an efficient approach to treating this problem is to design appropriate recurrent neural networks. We develop a new algorithm for the MCP, which can, to a certain extent, prevent the associated neural network from falling into local optimal points. The proposed algorithm incorporates nonlinear self-feedback into the SLDN algorithm and has distinguished dynamical characteristics. Simulation results show that the performance of proposed algorithm is statistically superior to the SLDN algorithm.

Key words: maximum clique problem; heuristic algorithm; neural network; non-linear self-feedback

(编辑　吕建斌)