組合せ論における半正定値計画法の応用

徳重 典英（琉球大学教育学部）

2025 年 1 月 26 日

1 参考文献

線形計画法 (LP) や半正定値計画法 (SDP) は組合せ論の問題にも強力で有効な道具である。以下の論文ではこれらの手法の具体的な応用例を見ることができる。

- Wagner, Adam Zsolt. Refuting conjectures in extremal combinatorics via linear programming. J. Combin. Theory Ser. A 169 (2020), 105130, 15 pp. 極値組合せ論のいくつかの予想について、それらを線形計画問題で記述して解くことで小さい反例を構成している。YouTube のこれも面白い。
- Schrijver, Alexander. New code upper bounds from the Terwilliger algebra and semidefinite programming. IEEE Trans. Inform. Theory 51 (2005), no. 8, 2859–2866. 指定された最小距離をもつ符号のサイズの上界を半正定値計画法で与えている。ここからも読める。
- 田中太初. Terwilliger 代数に基づく符号の半正定値計画限界. 第 51 回代数学シンポジウム (2006) の報告集原稿. Schrijver の論文と同様の内容について、より Terwilliger 代数の側面を強調して扱っている。
- Bansal, Nikhil. Constructive algorithms for discrepancy minimization. 2010 IEEE 51st Annual Symposium on Foundations of Computer Science–FOCS 2010, 3–10. discrepancy 理論における Spencer の問題によい partial coloring を乱択アルゴリズムで与える。そのため乱歩の各ステップで半正定値計画問題を解いて共分散行列を生成する。arXiv 版はこれ。

半正定値計画法を扱った書籍はたくさんある。ここでは二点だけ挙げる。

- Todd, M. J. Semidefinite optimization. Acta Numer. 10 (2001), 515–560. 半正定値計画法を数学的に解説したわかりやすい概説論文。おすすめ。ここからも読める。
- B. Gärtner, J. Matoušek. Approximation algorithms and semidefinite programming. Springer, Heidelberg, 2012. xii+251 pp. ETH Zurich での講義をもとに書かれた本。Lovász のテータ関数や Bansal の乱歩アルゴリズムなども扱っている。

この講演では交差族の問題をとりあげるが、次の本はこれを代数的な側面から扱っている。また association schemes の基礎も学べる。

- Godsil–Meagher. Erdős–Ko–Rado theorems: algebraic approaches. Cambridge Stud. Adv. Math., 2016.

2 ソフトウェア

SDPA は SDP solver で、NEOS server からも利用できる。簡単な使い方をここに書いた。

例えば次の単純な半正定値計画問題を扱ってみよう。

$$\begin{aligned} &\text{minimize} && \alpha \\ &\text{subject to} && S := -\begin{bmatrix} \frac{9}{16} & \frac{3}{16} \\ \frac{3}{16} & \frac{1}{16} \end{bmatrix} + \alpha \begin{bmatrix} \frac{3}{4} & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \\ x_2 & 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} z_1 & z_2 \\ z_2 & z_3 \end{bmatrix}, \\ &&& S \succeq 0, \quad z_1, z_2, z_3 \geq 0. \end{aligned}$$

これは上のように定義された S が半正定値、かつ z_1, z_2, z_3 が非負という制約条件のもとで、目的関数 α を最小化する問題である。変数は $\alpha, x_1, x_2, z_1, z_2, z_3$ の 6 個である。変数 α の最小値は $\frac{1}{4}$ であることを数学的に示せるのだが、この問題を SDPA に解かせよう。そのために次の左欄のような入力ファイルを作成し、NEOS server 上の SDPA にアップロードする。

```
6
2
(2,-3)
{1,0,0,0,0,0}
0 1 1 1 0.5625
0 1 1 2 0.1875
0 1 2 2 0.0625
1 1 1 1 0.75
1 1 2 2 0.25
2 1 1 1 1
3 1 1 2 1
4 1 1 1 -1
4 2 1 1 1
5 1 1 2 -1
5 2 2 2 1
6 1 2 2 -1
6 2 3 3 1
```

```
phase.value = dFEAS
   Iteration = 35
          mu = 6.4453585130804993e-18
relative gap = 1.3840612359273038e-17
         gap = 3.2226792565402498e-17
      digits = 1.6256784703351158e+01
objValPrimal = 2.5000000000000000e-01
objValDual   = 2.5000000000000000e-01
p.feas.error = 4.3368086899420177e-19
d.feas.error = 3.3787568866817071e-31
relative eps = 4.9303806576313200e-32
total time   = 0.000
```

上の右欄は SDPA からの出力ファイルの一部である。先頭行に `dFEAS` とあるのは双対問題が実行可能になったという意味で、そのときの α の値 `objValDual` をみると、確かに $\frac{1}{4}$（の数値的近似値）が得られている。

3 交差族の問題への SDP の応用

3.1 はじめに

$[n] = \{1, 2, \ldots, n\}$ とし、$[n]$ の k 点部分集合全体を $\binom{[n]}{k}$ とかく。つまり $\binom{[n]}{k} = \{F \subset [n] : |F| = k\}$ である。

正整数 t に対して、集合族 $\mathcal{F} \subset \binom{[n]}{k}$ が t 交差族であるとは、任意の $F, F' \in \mathcal{F}$ について $|F \cap F'| \geq t$ が成り立つことである。例えば $\mathcal{F}_0 := \{F \subset [n] : [t] \subset F\}$ は t 交差族で、そのサイズは $|\mathcal{F}_0| = \binom{n-t}{k-t}$ である。1 交差族（$t = 1$ の場合）は交差族ともいう。

n, k, t を指定したとき、t 交差族 $\mathcal{F} \subset \binom{[n]}{k}$ の最大サイズは何か？ これは Erdős, Ko, Rado によって 1930 年代に提示された問題で、最終的には 1995 年に Ahlswede と Khachatrian によって完全に解決された。k, t に比べて n が十分大きいとき、最大サイズは $|\mathcal{F}_0|$ である。これは Erdős らによって示されていたが、Wilson は 1983 年に最大サイズが $|\mathcal{F}_0|$ であるための n の厳密な条件を半正定値計画法を利用して決定した。Wilson の手法については後述する。

ふたつの集合族 $\mathcal{F}, \mathcal{G} \subset \binom{[n]}{k}$ が互いに t 交差するとは、任意の $F \in \mathcal{F}$ と $G \in \mathcal{G}$ について $|F \cap G| \geq t$ が成り立つことである。最近、Zhang と Wu は次のことを示した。

定理 1 (Zhang–Wu, arXiv:2410.22792)**.** $n \geq (t+1)(k-t+1)$ かつ $t \geq 3$ とする。ふたつの集合族 $\mathcal{F}, \mathcal{G} \subset \binom{[n]}{k}$ が互いに t 交差するならば $|\mathcal{F}||\mathcal{G}| \leq \binom{n-t}{k-t}^2$ である。

彼らの証明は組合せ論的なもので Ahlswede と Khachatrian のアイデアを利用している。我々は $t = 2$ の場合にも上記定理が成立することを半正定値計画法を利用して示した。

定理 2. $n \geq 3(k-1)$ とする。ふたつの集合族 $\mathcal{F}, \mathcal{G} \subset \binom{[n]}{k}$ が互いに 2 交差するならば $|\mathcal{F}||\mathcal{G}| \leq \binom{n-2}{k-2}^2$ である。

この定理の証明についても後述する。なお $t = 1$ の場合は 1986 年に Pyber によって組合せ論的な証明が与えられ、その後、代数的な証明 (Hoffman's ratio bound の利用) も得られている。

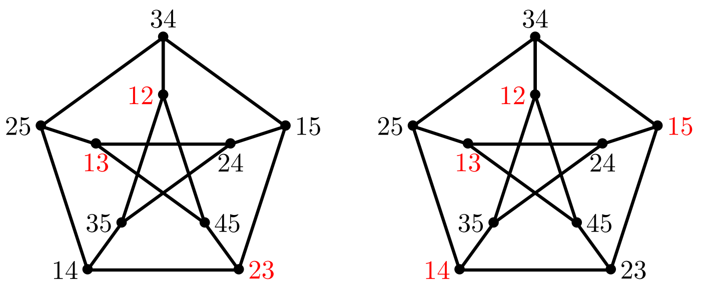
3.2 おもちゃの問題

交差族の問題を半正定値計画法を利用して解くとはどういうことか、$t = 1, k = 2, n = 5$ の場合を例に説明する。すなわち、交差族 $\mathcal{F} \subset \binom{[5]}{2}$ の最大サイズを調べよう。ここで

$$\binom{[5]}{2} = \{12, 13, 14, 15, 23, 24, 25, 34, 35, 45\} \tag{1}$$

である。交差族の例として、$\{12, 13, 23\}$ あるいは $\{12, 13, 14, 15\}$ などがある。後者の例から、交差族の最大サイズは 4 以上であることがわかる。以下では最大サイズが実際 4 であることを示す。

交差族の最大サイズの上界を得るため、Kneser グラフ $G = G(5, 2)$ を構成する。頂点集合は $\binom{[5]}{2}$ で、2 頂点 x, y は $x \cap y \neq \emptyset$ のときに隣接する。



グラフの作り方から、交差族は G の独立集合に対応する。ここで $U \subset V(G)$ が独立集合であるとは U 内に辺がないことであり、独立集合の最大サイズを $\mathrm{indep}(G)$ とかいて G の独立数という。つまり交差族の最大サイズは $\mathrm{indep}(G)$ である。

独立数 $\mathrm{indep}(G)$ を評価するため隣接行列 A を導入する。A は 10 次行列でその行と列はそれぞれ $\binom{[5]}{2}$ を (1) の順に対応づけ、その (x, y) 成分は x と y が隣接すれば 1, そうでなければ 0 とする。つまり

$$A = \begin{bmatrix} 0&0&0&0&0&0&0&1&1&1 \\ 0&0&0&0&0&1&1&0&0&1 \\ 0&0&0&0&1&0&1&0&1&0 \\ 0&0&0&0&1&1&0&1&0&0 \\ 0&0&1&1&0&0&0&0&0&1 \\ 0&1&0&1&0&0&0&0&1&0 \\ 0&1&1&0&0&0&0&1&0&0 \\ 1&0&0&1&0&0&1&0&0&0 \\ 1&0&1&0&0&1&0&0&0&0 \\ 1&1&0&0&1&0&0&0&0&0 \end{bmatrix}$$

である。この行列の固有値は $3, 1, -2$ である。

話を進める前に半正定値行列について復習しよう。n 次実対称行列 M が半正定値であるとは、任意の列ベクトル $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ に対して $\boldsymbol{x}^\mathsf{T} M \boldsymbol{x} \geq 0$ が成り立つことである。このとき $M \succeq 0$ と表記する。これは M の固有値がすべて非負であることと同値である。サイズが同じ行列 A, B に対してその内積を $A \bullet B := \mathrm{trace}(A^\mathsf{T} B)$ と定める。この記法を用いると $\boldsymbol{x}^\mathsf{T} M \boldsymbol{x} = M \bullet (\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^\mathsf{T})$ と表示できる。特に $M \succeq 0$ ならば $M \bullet (\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^\mathsf{T}) \geq 0$ である。

G の独立数の評価に戻ろう。G の独立集合 $U \subset V(G)$ で $|U| = \mathrm{indep}(G)$ をみたすものをとり、その特性ベクトルを $\boldsymbol{u} \in \{0,1\}^{10}$ とする。すなわち $\boldsymbol{u}$ の x 成分は $x \in U$ なら 1, そうでなければ 0 である。さらに U の特性行列を $X := \boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^\mathsf{T}$ と定める。定義から x と y が隣接すれば $(X)_{x,y} = 0$ である。一方、x と y が非隣接ならば $(A)_{x,y} = 0$ であった。したがって

$$A \bullet X = \sum_{x,y} (A)_{x,y} \, (X)_{x,y} = 0 \tag{2}$$

がしたがう。また I, J をそれぞれ 10 次の単位行列、成分が全部 1 の行列とすると

$$I \bullet X = |U|, \quad J \bullet X = |U|^2 \tag{3}$$

である。ここで α, β を変数として 10 次対称行列 S を

$$S := \alpha I - J + \beta A$$

と定める。このとき (2) と (3) から

$$S \bullet X = \alpha|U| - |U|^2 \tag{4}$$

である。さらにもし S が半正定値ならば $S \bullet X \geq 0$ だから、(4) より $|U| \leq \alpha$, すなわち $\mathrm{indep}(G) \leq \alpha$ を得る。

さて $\mathrm{indep}(G) \leq 4$ を示したいが、これには $\alpha = 4$ とおいて $S \succeq 0$ となるように β を選べればよい。ここで I, J, A は同時対角化可能であるため $S = 4I - J + \beta A$ の固有値を簡単に求められる。その情報から $\beta = 2$ のとき S の最小固有値が 0 となることがわかる。以上で $\mathrm{indep}(G) = 4$ であることが示せた。

後半の $\mathrm{indep}(G) \leq 4$ を示す部分は、α, β を変数とする次の半正定値問題を解いたことになる。

$$\begin{array}{ll} \text{minimize} & \alpha \\ \text{subject to} & S := \alpha\, I - J + \beta\, A \succeq 0. \end{array}$$

この問題の実行可能解 α は $\mathrm{indep}(G) \leq \alpha$ をみたし、最適解は $\alpha = 4$ で、このとき $\beta = 2$ であった。

この問題を設定するために、$A \bullet X = 0$ であることを利用した。これが成り立つのは、x と y が非隣接ならば $(A)_{x,y} = 0$ であることによる。つまり $A \bullet X = 0$ のためには、隣接する x と y に関する $(A)_{x,y}$ の情報は使われない。そこで隣接行列の定義をゆるめて、対称行列 A がグラフ G の隣接行列であるとは、x と y が非隣接ならば $(A)_{x,y} = 0$ をみたすことと再定義する。隣接ペアの値を自由にとれれば、隣接行列の固有値を制御する自由度が増す。次に紹介する Wilson の証明ではこのことを利用する。

3.3 t 交差族の最大サイズを評価する Wilson のアイデア

$\binom{[n]}{k}$ における t 交差族の最大サイズを評価するため、Kneser グラフ $G = G(n, k, t)$ を構成する。頂点集合は $\binom{[n]}{k}$ で、頂点 x と y は $|x \cap y| < t$ のときに隣接する。このとき t 交差族は G の独立集合であるから、t 交差族

の最大サイズは $\mathrm{indep}(G)$ である。ここで次の半正定値問題を考える。

$$\begin{array}{ll} \text{minimize} & \alpha \\ \text{subject to} & S := \alpha I - J + A \succeq 0. \end{array} \tag{5}$$

ただし A は G の隣接行列、すなわち x と y が非隣接ならば $(A)_{x,y} = 0$ だが、隣接ペアの成分は（対称行列である限り）自由に決めてよい。したがってこの問題の変数は α および A の隣接ペア成分である。

G の独立集合 U をとり、その特性行列 X を 3.2 節と同様に定める。このときも (2), (3) が成り立ち、したがって (4) より α が実行可能解であれば $\mathrm{indep}(G) \le \alpha$ を得る。

3.1 節でみたように $\mathrm{indep}(G) \ge \binom{n-t}{k-t}$ である。そこで $\alpha = \binom{n-t}{k-t}$ として

$$\binom{n-t}{k-t} I - J + A \succeq 0$$

をみたすような隣接行列 A があれば $\mathrm{indep}(G) = \binom{n-t}{k-t}$ がわかる。Wilson はそのような A を実際に構成して次のことを示した。

定理 3. $n \ge (t+1)(k-t+1)$ とする。$\mathcal{F} \subset \binom{[n]}{k}$ が t 交差族ならば、$|\mathcal{F}| \le \binom{n-t}{k-t}$ である。

例えば $G = G(8,3,2)$ の場合の Wilson の隣接行列は次のとおりである。

$$(A)_{x,y} = \begin{cases} \frac{1}{2} & \text{if } |x \cap y| = 0, \\ \frac{3}{2} & \text{if } |x \cap y| = 1, \\ 0 & \text{if } |x \cap y| \ge 2. \end{cases}$$

3.4 互いに 2 交差する集合族

互いに t 交差する集合族を調べるために、二部グラフ $H = H(n,k,t)$ を導入しよう。$\binom{[n]}{k}$ のコピーをふたつ作り、それぞれ Ω_1, Ω_2 とする。H の頂点集合は $\Omega_1 \sqcup \Omega_2$ で、2 頂点 $x \in \Omega_1$ と $y \in \Omega_2$ は $|x \cap y| < t$ のとき隣接する。$\binom{[n]}{k}$ の集合族 $\mathcal{F}$ と $\mathcal{G}$ が t 交差するとき、$\mathcal{F}, \mathcal{G}$ に対応する $U_1 \subset \Omega_1$ と $U_2 \in \Omega_2$ の間には辺がない。このような (U_1, U_2) を（仮に）独立集合対とよび、$|U_1||U_2|$ の最大値を $\mathrm{indep}_2(H)$ とかこう[*1]。このとき互いに t 交差する集合族のサイズの積 $|\mathcal{F}||\mathcal{G}|$ の最大値は $\mathrm{indep}_2(H)$ である。二部グラフ H の隣接行列 A はその行と列が $\Omega_1 \sqcup \Omega_2$ で対応づけられ、対角ブロックは零行列、非対角ブロックの (x,y) 成分は x と y が非隣接ならば 0, それ以外の成分は A が対称行列である限り自由に決めてよい（特に非対角ブロック自体は対称行列でなくてもよい)。

以上をふまえて次の半正定値計画問題を考える。この設定は 2013 年に須田と田中によって導入された[*2]。

$$\begin{array}{ll} \text{minimize} & \alpha \\ \text{subject to} & S := \dfrac{1}{2}\begin{bmatrix} \alpha I & -J \\ -J & \alpha I \end{bmatrix} + A - Z \succeq 0, \quad Z \ge 0. \end{array} \tag{6}$$

ここで I, J はそれぞれ $\binom{n}{k}$ 次の単位行列、すべての成分が 1 の行列で、A と Z はそれぞれ $2\binom{n}{k}$ 次の隣接行列、非負行列である。(U_1, U_2) が H の独立集合対であるとき、U_i の特性ベクトルを $\boldsymbol{u}_i$, $\boldsymbol{u}_1/\sqrt{|U_1|}$ と $\boldsymbol{u}_2/\sqrt{|U_2|}$ を

[*1] ここだけの用語、記号です。

[*2] 彼らはこの設定を用いて互いに交差する（ベクトル空間の）部分空間族に関する Erdő–Ko–Rado 型の定理を得た。

並べて得られる $2\binom{n}{k}$ 次元列ベクトルを $\boldsymbol{u}$ とし、さらにこの独立集合対の特性行列を $X := \boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^{\mathsf{T}}$ と定める。このとき $A \bullet X = 0$ であるから

$$S \bullet X = \alpha - \sqrt{|U_1||U_2|} - Z \bullet X$$

である。したがってもし S が半正定値ならば $S \bullet X \geq 0$ だから

$$\alpha \geq \sqrt{|U_1||U_2|} + Z \bullet X \geq \sqrt{|U_1||U_2|}$$

を得る。つまり (6) の実行可能解 α は $|U_1||U_2| \leq \alpha^2$ をみたす。

(6) は Z がなければ (5) の自然な一般化にみえる。この Z の直感的な意味は何だろうか。Z の対角ブロックは零行列と仮定してもよい。このとき $A - Z$ を新たな「隣接行列」だとみなそう。H は二部グラフだから Ω_1 内にも Ω_2 内にも辺はない。しかし仮想的に Ω_i 内にもいくつか辺を加え、それに対応して「隣接行列」に負の値を与えること、これが Z の意味するものと考えられる。

$t = 2$, $n \geq 3(k-1)$ の場合には、$\alpha = \binom{n-2}{k-2}$ に対して $S \succeq 0$ となる隣接行列 A および非負行列 Z を構成できる。このようにして定理 2 が示される。

3.5 問題と文献

交差族に関する未解決問題、予想はたくさんあるが、ここでは次の予想だけ述べておこう。

予想 1. $k \geq l \geq t \geq 1$, $n \geq (t+1)(k-t+1)$ とする。このとき $\mathcal{F} \subset \binom{[n]}{k}$ と $\mathcal{G} \subset \binom{[n]}{l}$ が互いに t 交差するならば、$|\mathcal{F}||\mathcal{G}| \leq \binom{n-t}{k-t}\binom{n-t}{l-t}$ である。

この予想は $t = 1$ のときは正しい。

ここまで部分集合のつくる交差族を扱ってきたが、部分空間のつくる交差族や置換のつくる交差族も研究されている。それ以外にも分割や完全マッチングに関する交差族も考えられる。これらについては Godsil–Meagher の本（特に 16 章の Open Problems）をみるとよい。

半正定値計画法を用いた交差族に関する論文として以下のものがある。

- S. Suda, H. Tanaka. A cross-intersection theorem for vector spaces based on semidefinite programming. *Bull. Lond. Math. Soc.*, 46 (2014) 342–348.
- S. Suda, H. Tanaka, N. Tokushige. A semidefinite programming approach to a cross-intersection problem with measures. *Math. Program.*, 166 Ser. A (2017) 113–130.
- H. Tanaka, N. Tokushige. Extremal problems for intersecting families of subspaces with a measure. arXiv:2404.17385 (2024)

以下の論文は二部グラフの独立集合対などについて、より詳しい半正定値限界を研究している。

- M. Laurent, S. Polak, L.F. Vargas. Semidefinite approximations for bicliques and biindependent pairs. Mathematics of Operations Research, Published Online:13 Mar 2024. arXiv 版はこれ。