

D.C. ОПТИМИЗАЦИЯ И ЗАДАЧИ О КЛИКЕ

Т.В. Груздева

Институт Динамики Систем и Теории Управления СО РАН,
gruzdeva@icc.ru

Новосибирск, 2013

Для поиска полного подграфа (**клики**) с максимально возможным количеством вершин или полного подграфа максимально возможного веса (**максимальной взвешенной клики**) предлагается подход, основанный на редукции к непрерывным невыпуклым задачам математического программирования.

Основная цель:

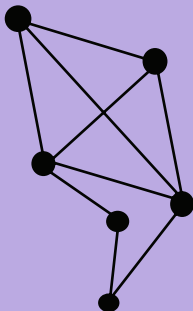
показать, что для решения дискретных задач можно применять методы, разработанные для непрерывных невыпуклых задач оптимизации, и как именно это сделать.

Содержание

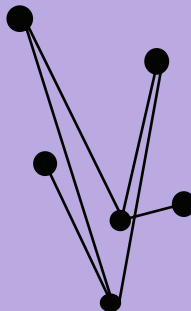
- 1 Постановки задач о клике
- 2 Локальный поиск
- 3 Глобальный поиск
- 4 Построение оценок в задаче размещения с предпочтениями клиентов

Основные определения

Граф $G(V, E, w)$: $w \in Z_+^{|V|}$,
 V – множество вершин,
 E – множество ребер.



Граф $\bar{G}(V, \bar{E}, w)$: $w \in Z_+^{|V|}$,
 V – множество вершин,
 $\bar{E}$ – множество ребер.



ЦЛП постановка задачи о клике

Положим $w_i = 1, i = 1, \dots, n, \text{ supp}(x) \triangleq \{i \in V : x_i = 1\}$.

$$\left. \begin{aligned} f(x) &\triangleq - \sum_{i=1}^n x_i \downarrow \min, \\ x_i + x_j &\leq 1 \quad \forall (i, j) \in \overline{E}, \quad x \in \{0, 1\}^n. \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

Если x^* — решение задачи (1), тогда множество $C_* = \text{supp}(x^*)$ образует максимальную клику мощности $|C_*| = -f(x^*)$ в графе G .

Квадратичная постановка

$$\forall (i, j) \in \bar{E} : x_i, x_j \in \{0, 1\}, x_i + x_j \leq 1 \iff x_i x_j = 0.$$

$$f_1(x) \triangleq - \sum_{i=1}^n x_i + 2 \sum_{(i,j) \in \bar{E}, i > j} x_i x_j = \langle x, (A_{\bar{G}} - I)x \rangle,$$

Теорема (Bomze I.M. et al., 1999). Задача поиска максимальной клики эквивалентна решению следующей задачи оптимизации

$$f_1(x) \triangleq \langle x, \bar{A}x \rangle \downarrow \min, \quad x \in \{0, 1\}^n. \quad (2)$$

где $\bar{A} \triangleq A_{\bar{G}} - I$.

Если x^* — решение задачи (2), тогда множество $C_* = \text{supp}(x^*)$ образует максимальную клику мощности $|C_*| = -f_1(x^*)$ в графе G .

Одна из непрерывных постановок задачи о клике

Включение $x_i \in \{0, 1\}$ равносильно условиям

$$x_i^2 - x_i \geq 0, \quad 0 \leq x_i \leq 1, \quad i = 1, \dots, n.$$

Если просуммировать первые неравенства, получим

$$g(x) \triangleq \left\| x - \frac{e}{2} \right\|^2 - \frac{n}{4} \geq 0, \quad (3)$$

где $e = (1, \dots, 1)^T \in \mathbf{R}^n$.

В этом случае задача (2) может быть переписана в виде

$$\left. \begin{array}{l} f_1(x) \downarrow \min, \quad x \in \Pi, \\ g(x) \geq 0; \end{array} \right\} \quad (4)$$

где $\Pi = \{x \in \mathbf{R}^n \mid 0 \leq x_i \leq 1, \quad i = 1, \dots, n\}$.

Постановка Моцкина-Штрауса

Введем характеристический вектор $z(C)$ множества C

$$z(C) = \frac{1}{K} \sum_{i \in C} e^i. \quad (5)$$

$$\left. \begin{aligned} F_G(x) &= \sum_{(i,j) \in E} x_i x_j = \frac{1}{2} \langle x, A_G x \rangle \uparrow \max, \\ x \in S &\triangleq \{x \in \mathbf{R}^n \mid \sum_{i=1}^n x_i = 1, x_i \geq 0, i = 1, \dots, n\}. \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

Теорема (Motzkin T.S., Straus E.G., 1965). Пусть α является максимальным значением целевой функции $F_G(\cdot)$ в задаче (6), $\alpha = \max\{F_G(x), x \in S\}$. Тогда $K_* = (1 - 2\alpha)^{-1}$, причем характеристический вектор $z(C_*)$ является решением задачи (6) для любой максимальной клики C_* .

Постановка Моцкина-Штрауса с регуляризацией Бомзе

$$A = A_G + \frac{1}{2}I, \text{ где } I \text{ — единичная матрица размера } (n \times n).$$

$$F(x) = \frac{1}{2} \langle x, Ax \rangle \uparrow \max, \quad x \in S, \quad (7)$$

Теорема (Bomze I.M. et al., 1997). Пусть дан граф $G = G(V, E)$, и ему поставлена в соответствие задача (7).

Тогда следующие утверждения эквивалентны:

- а) C — локально максимальная клика (ЛМК) размерности $\mathcal{K}$, и $z = z(C)$ — ее характеристический вектор (5);
- б) z — строгий локальный максимум в задаче (7);
- с) z — локальный максимум в задаче (7) ($z \in \text{Arglocmax}(7)$).

При выполнении хотя бы одного из вышеперечисленных

условий $F(z) = \frac{1}{2} - \frac{1}{4\mathcal{K}}.$

ЗМВК как задача d.c. минимизации

Построим квадратную матрицу $B(\gamma) = \|b_{ij}\|_{(n \times n)}$ по следующему правилу:

$$b_{ij} = \begin{cases} \frac{\gamma}{2w_i}, & \text{если } i = j \\ \frac{1}{2w_i} + \frac{1}{2w_j}, & \text{если } i \neq j, (i, j) \notin E, \\ 0, & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

Если $w = e$, $B(\gamma) = A_{\overline{G}} + \frac{\gamma}{2} I_n$.

Определим взвешенный характеристический вектор $z(C, w)$ множества C :

$$z(C, w)_i = \begin{cases} \frac{w_i}{W(C)}, & i \in C, \\ 0, & \text{в противном случае.} \end{cases} \quad (8)$$

ЗМК как задача d.c. минимизации

Рассмотрим следующую невыпуклую задачу:

$$F_{\gamma}(x) = \frac{1}{2} \langle x, B(\gamma)x \rangle \downarrow \min, \quad x \in S. \quad (P_{\gamma})$$

Теорема 1.

Пусть задан простой граф G , $w \in Z_+^n$, $0 < \gamma < 1 + \min_{(i,j) \notin E} \frac{w_i}{w_j}$.

Тогда следующие утверждения эквивалентны:

- 1) C — локально максимальная клика (ЛМК), $z(C, w)$ — ее взвешенный характеристический вектор;
- 2) $z(C, w)$ — строгий локальный минимум в задаче (P_{γ}) ;
- 3) $z(C, w)$ — локальный минимум в задаче (P_{γ}) .

D.C. оптимизация

$$F(x) = g(x) - h(x) \uparrow \max, \quad x \in S, \quad (DC)$$

$$\left. \begin{array}{l} f(x) \downarrow \min, \quad x \in S, \\ F(x) = g(x) - h(x) \geq 0. \end{array} \right\} \quad (DCC)$$

ЗМВК как задача с d.c. ограничением

Задача о максимальной взвешенной клике

$$\left. \begin{aligned} \sum_{i=1}^n \frac{1}{w_i} x_i^2 \downarrow \min, \quad x \in S, \\ F(x) = \langle x, \bar{B}x \rangle \leq 0 \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

где $S = \left\{ x \geq 0 \mid \sum_{i=1}^n x_i = 1 \right\}$, $\bar{B}(G, w) = \| \bar{b}_{ij} \|_{(n \times n)}$:

$$\bar{b}_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{2w_i} + \frac{1}{2w_j}, & \text{если } i \neq j, \quad (i, j) \notin E; \\ 0, & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

Лемма 1.

Пусть $x \in S$, $\text{supp}(x) = \{i \mid x_i > 0\}$.

$\langle x, \bar{B}x \rangle = 0 \Leftrightarrow$ множество $\text{supp}(x)$ образует клику в графе G .

ЗМВК как задача с d.c. ограничением

Пусть $C \subset V$ образует клику в графе G и $W(C) = \sum_{i \in C} w_i$.

Введем характеристический вектор взвешенной клики $z(C, w)$:

$$z(C, w)_i = \begin{cases} \frac{w_i}{W(C)}, & \text{если } i \in C, \\ 0, & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

Теорема 2.

Пусть графу $G(V, E, w)$ в соответствие поставлена задача (9).

Тогда следующие утверждения эквивалентны:

- i) C — локально максимальная взвешенная клика веса W ,
 $z(C, w)$ — ее характеристический вектор;*
- ii) z — строгий локальный минимум в задаче (9);*
- iii) z — локальный минимум в задаче (9).*

ЗМВК как задача с d.c. ограничением

$$\Phi_{\alpha,\gamma}(x) \triangleq \langle x, [\alpha \bar{B} + \gamma(B + D)]x \rangle - \gamma \langle d, x \rangle, \quad (10)$$

где $d \in \mathbb{R}^n$, $d_i = \frac{1}{w_i}$, $i = 1, \dots, n$, $D = \text{diag}\{d_1, \dots, d_n\}$ — диагональная матрица ($n \times n$), а матрица $B = \|b_{ij}\|_{(n \times n)}$ построена по следующему правилу:

$$b_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{2w_i} + \frac{1}{2w_j}, & \text{если } (i, j) \in E; \\ 0, & \text{в противном случае.} \end{cases} \quad (11)$$

Лемма 2.

Пусть $x \in S$. Множество $\text{supp}(x)$ образует клику в графе G тогда и только тогда, когда $\Phi_{\alpha,\gamma}(x) = 0$ при $\alpha \neq \gamma$.

ЗМВК как задача с d.c. ограничением

Рассмотрим задачу оптимизации с параметрами $\alpha \neq \gamma$

$$\left. \begin{aligned} \sum_{i=1}^n \frac{1}{w_i} x_i^2 \downarrow \min, \quad x \in S, \\ \text{sign}(\alpha - \gamma) \Phi_{\alpha, \gamma}(x) \leq 0. \end{aligned} \right\} \quad (\mathcal{P}^W)$$

где $\Phi_{\alpha, \gamma}(x) \triangleq \langle x, [\alpha \bar{B} + \gamma(B + D)]x \rangle - \gamma \langle d, x \rangle$

Теорема 3.

Пусть графу $G(V, E, w)$ в соответствие поставлена задача $(\mathcal{P}^W)$, где $\alpha \neq \gamma$. Тогда следующие утверждения эквивалентны:

- i) C — локально максимальная взвешенная клика веса W , $z(C, w)$ — ее характеристический вектор;
- ii) z — строгий локальный минимум в задаче $(\mathcal{P}^W)$;
- iii) z — локальный минимум в задаче $(\mathcal{P}^W)$.

D.C. оптимизация

$$F(x) = g(x) - h(x) \uparrow \max, \quad x \in S, \quad (DC)$$

$$\left. \begin{array}{l} f(x) \downarrow \min, \quad x \in S, \\ F(x) = g(x) - h(x) \geq 0. \end{array} \right\} \quad (DCC)$$

Основные этапы глобального поиска

- а) локальный поиск, доставляющий приближенно критическую точку;
- б) процедуры выхода из критической точки, основанные на условиях глобальной оптимальности.

Идея локального поиска

Процедура локального поиска состоит из двух частей.

1) Сначала, начиная с произвольной точки $x^0 \in S$, строится конечная последовательность $\{x^m\}$ допустимых точек, причем $F(x^m) < F(x^{m+1})$, $m = 0, 1, 2, \dots$

Построение последовательности продолжается до тех пор, пока соответствующее точке x^m множество $\text{supp}(x^m)$ не окажется кликой.

2) Затем строится ЛМК C и соответствующая ей точка локального максимума z в задаче (DC) .

C-процедура

Шаг 0. Положить $m := 0$, выбрать $x^0 \in S$.

Шаг 1. Построить $\text{supp}(x^m)$.

Шаг 2. Если $\text{supp}(x^m)$ является кликой, то положить $x := x^m$ и идти на шаг 5.

Шаг 3. Выбрать две вершины k и p из $\text{supp}(x^m)$:
 $(k, p) \notin E$, $F(w(k, p)) > F(x^m)$, где
 $w(k, p) : \max\{F(w(k, p)); F(w(p, k))\} > F(x)$,
 и $w(i, j) \triangleq x + x_j(e^i - e^j)$, $1 \leq i, j \leq n$.

Шаг 4. Положить $x^{m+1} := x^m + x_p^m(e^k - e^p)$, $m := m + 1$ и вернуться на шаг 1.

Шаг 5. Найти ЛМК $C \supset \text{supp}(x)$. Положить $\mathcal{K} := |C|$.

Шаг 6. Построить $z(C)$.

Stop. $z = z(C)$ – строгий локальный максимум в задаче (DC) .

Сходимость C-процедуры

Предложение.

Пусть дана некоторая допустимая точка x^0 в задаче (DC) , $x^0 \in S$. Тогда последовательность, генерируемая C-процедурой, сходится к точке строго локального максимума z за конечное число итераций, не превышающее $l = |supp(x^0)|$. Кроме того, если начальная точка x^0 не является локальным максимумом в задаче (DC) , то имеет место строгое улучшение целевой функции в точке z :

$$F(x^0) < F(z), \quad x^0 \neq z.$$

D.C. декомпозиция задачи $\frac{1}{2} \langle x, Ax \rangle \uparrow \max, \quad x \in S$

Пусть $d_i = \sum_{j=1}^n a_{ij}^G$ — степень вершины i в графе G . Благодаря

отсутствию изолированных вершин в G и $\bar{G}$:

$1 \leq d_i \leq n - 2, \quad i = 1, \dots, n$. Тогда

$$\begin{aligned} F(x) &= \frac{1}{2} \langle x, Ax \rangle = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^n x_i^2 + \sum_{(i,j) \in E} x_i x_j = \\ &= \frac{1}{4} \left(\sum_{i=1}^n x_i^2 + 2 \sum_{(i,j) \in E} (x_i + x_j)^2 \right) - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n d_i x_i^2. \end{aligned}$$

Таким образом,

$$\begin{aligned} g(x) &= \frac{1}{4} \left(\sum_{i=1}^n x_i^2 + 2 \sum_{(i,j) \in E} (x_i + x_j)^2 \right), \quad h(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n d_i x_i^2. \\ A_2 &= \text{diag}\{d_1, \dots, d_n\}, \quad A_1 = A + A_2. \end{aligned} \quad (12)$$

Аппроксимация поверхности уровня

Пусть

$$Dir = \{e^1, \dots, e^n \mid e^i = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0), i = 1, \dots, n\}.$$

Тогда для заданных чисел $\zeta > 0$, $\beta > 0$ аппроксимацию $\mathcal{A}(\zeta, \beta)$ можно построить из n векторов, коллинеарных векторам из Dir и лежащих на требуемой поверхности уровня $g(y) = \zeta + \beta$, т.е.

$$y^i = \lambda_i e^i, i = 1, \dots, n, \quad (13)$$

где

$$\lambda_i = \lambda_i(\zeta, \beta) = \left(\frac{2(\beta + \zeta)}{\langle A_1 e^i, e^i \rangle} \right)^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{2(\beta + \zeta)}{d_i + 0.5} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (14)$$

Алгоритм глобального поиска для ЗМК

Шаг 0. $k := 0$. Из точки $x^0 \in S$ посредством C -процедуры получить z^k — локальный максимум задачи (DC) .

Шаг 1. Положить $\zeta_k := F(z^k)$, $\beta_k := g(z^k)$

Шаг 2. Построить аппроксимацию

$$\mathcal{A}(\zeta_k, \beta) = \left\{ y^1, \dots, y^{N_k} \mid g(y^i) = \zeta_k + \beta, i = 1, \dots, N_k \right\}.$$

Шаг 3. Найти решение $u^i \in S, i = 1, \dots, N_k$, линеариз. задачи $h(x) - \langle \nabla g(y^i), x \rangle \downarrow \min, x \in S$.

Шаг 4. Для $i \in \{1, \dots, N_k\}$ из точек $u^i \in S$ C -процедурой получить точки $v^i \in S$.

Шаг 5. Выбрать точку v^j : $F(v^j) = \max_{1 \leq i \leq N_k} F(v^i)$.

Шаг 6. Если $F(v^j) > \zeta_k$, то $z^{k+1} := v^j$, $k := k + 1$ и вернуться на шаг 1. Иначе $z := z^k$, STOP:

$C := \text{supp}(z)$ — максимальная клика, $\mathcal{K} = |C|$.

Алгоритм глобального поиска для ЗМК

Шаг 0. Положить $k := 0$. Выбрать $\alpha > 0$, $\gamma > 0$, $\alpha \neq \gamma$.

Начиная из точки x^0 $\overline{C}$ -процедурой получить z^0 — локальный минимум задачи (P).

Шаг 1. Положить $\beta_k := g(z^k)$, $\rho_k := f(z^k)$. Построить множество $A_k = \{y^i = \lambda_i e^i \mid g(y^i) = \beta_k, i = 1, \dots, n\}$.

Шаг 2. Для каждого $i = 1, \dots, n$ найти u^i — решение линейаризованной задачи

$$h(x) - \langle \nabla g(y^i), x \rangle \downarrow \min, \quad x \in S, \quad f(x) \leq \rho_k. \quad (\mathcal{PL}_i)$$

Шаг 3. Начиная с точки $u^i \in S$ для каждого $i = 1, \dots, n$, получить $\overline{C}$ -процедурой v^i — локальный минимум задачи (P).

Шаг 4. Среди всех v^i , $i = 1, \dots, n$, выбрать точку v^j :

$$f(v^j) = \min_{1 \leq i \leq n} f(v^i)$$

Шаг 5. Если $f(v^j) < f(z^k)$, то положить $z^{k+1} := v^j$, $k := k + 1$ и идти на Шаг 1. Иначе положить $z := z^k$, STOP:

$C := \text{supp}(z)$ — максимальная клика, найденная алгоритмом,
 $K = |C|$

Влияние параметров α и γ на решение ЗМК

<i>graph</i>	<i>n</i>	<i>dens</i>	K_*	$K(\mathcal{P}_0)$	$(\mathcal{P})$		
					K	α	γ
p-hat500-3	500	75	≥ 50	49	50	0.9	0.1
p-hat1000-3	1000	75	≥ 68	65	67	0.8	0.2
p-hat1500-3	1500	75	≥ 94	93	94	0.8	0.2
brock200_2	200	50	12	11	12	0.7	0.3
brock200_4	200	66	17	16	17	0.2	0.8
brock400_1	400	75	27	24	25	0.6	0.4
brock400_2	400	75	29	24	25	0.4	0.6
brock400_3	400	75	31	24	25	0.4	0.6
brock400_4	400	75	33	24	25	0.6	0.4

Задача размещения с предпочтениями клиентов

Обозначим $W_{ij} = \{k \in I \mid g_{kj} > g_{ij}\}, i \in I$.

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{i \in I} \sum_{j \in J} c_{ij} x_{ij} + \sum_{i \in I} f_i y_i \downarrow \min_{x, y}, \\ y_i + \sum_{k \in W_{ij}} x_{kj} \leq 1, \quad i \in I, j \in J, \quad (1) \\ \sum_{i \in I} x_{ij} = 1, \quad j \in J, \quad (2) \\ x_{ij} \leq y_i, \quad i \in I, j \in J, \quad (3) \\ x_{ij}, y_i \in \{0, 1\}, \quad i \in I, j \in J. \end{array} \right.$$

$$\sum_{k \in K_i} (x, y)_k \leq 1, \quad K_i \in \mathcal{K} \quad (4)$$

Построение правильных неравенств

Построить граф для задачи упаковки множества
и вектор весов $w := x^*$ (LP)

Найти локально-максимальные клики

Сохранить M клик с весом > 1

Построить M нарушенных неравенств

Вычислительный эксперимент

<i>name</i>	<i>opt</i>	<i>gap1</i>	<i>gap2</i>
132_1	1122749,51	1,95	0
132_2	1157721,88	4,49	1,3
132_3	1146301,43	3,55	0
132_4	1036779,43	1,61	0
133_1	1103271,99	0,28	0
133_2	1035442,98	0,47	0
133_3	1171331,30	2,97	0
133_4	1083636,49	1,64	0,61
134_1	1179639,43	1,99	0
134_2	1121632,95	0,00	0
134_3	1171408,55	4,30	1,61
134_4	1210465,88	5,58	3,14