SDP релаксация для задачи поиска максимального разреза

Роман Горб

Декабрь 2019

Аннотация

Темой данного курсового проекта является решение NP-полной задачи Max Cut. Начиная с приведения постановки задачи, речь пойдет о построении релаксации в терминах полуопределенного программирования(SDP), затем будет описан и доказан алгоритм Гёманса–Уильямсона восстановления разреза, и, наконец, будет произведен анализ работы его реализации на различных классических наборах тестов.

Содержание

1 Постановка задачи

Дан неориентированный граф $G(V,E)$ с матрицей весов $W \in S^n$, $W \geqslant 0$. Требуется построить такое разбиение множества вершин $V = S \sqcup T$, что суммарный вес ребер, ведущих из S в T, был **максимально** возможным. Иначе говоря, нужно решить следующую задачу оптимизации:

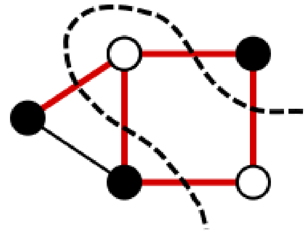


Рис. 1: Пример разреза (ребра, пересекающие разрез, выделены красным)

$$c^* = \max_x \frac{1}{4}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} w_{ij}(1 - x_i x_j)$$

$$s.t.\ x_i = \pm 1$$

2 Построение SDP задачи

Поставленные в задаче бинарные ограничения делают ее задачей дискретной оптимизации. Переформулируем задачу к виду проверки на существование в графе G разреза стоимостью хотя бы k. Эта задача лежит в NP, потому что в качестве сертификата в данном случае можно использовать разрез. Можно доказать сводимость к ней задачи 3-SAT(что хорошо описано, например, у David Steurer[1]), что уже влечет ее NP-полноту. Поэтому имеет смысл построения более простой задачи, которая вычислялась бы за разумное время. Пусть матрица $Y = xx^T$, тогда $x_i x_j = y_{ij}$. Значит ограничение $x_i = \pm 1$ есть тоже самое, что $diag(Y) = (1, \dots, 1)^T$. Заметим, что эти преобразования не поменяли суть задачи, но уже привели ее к следующему виду:

$$\max_x \frac{1}{4}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} w_{ij}(1 - y_{ij})$$

$$s.t.\ Y = xx^T$$

$$diag(Y) = (1, \dots, 1)^T$$

Видим, что матрица Y должна быть одноранговой. Такое ограничение делает задачу невыпуклой, поэтому предлагается избавится от него, заменив его на $Y \in S^n_+$(именно в этом моменте мы делаем не равносильное преобразование и получаем релаксацию). Избавившись от переменной x, получаем следующую задачу:

$$\max_Y \frac{1}{4}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} w_{ij}(1 - y_{ij})$$

$$s.t.\ Y \in S^n_+$$

$$diag(Y) = (1, \dots, 1)^T$$

Убрав слагаемые, которые не зависят от Y, и значок транспонирования у матрицы Y(из симметричности) получаем следующую эквивалентную задачу:

$$\min_Y \frac{1}{4} trace(WY)$$

$$s.t.\ Y \in S^n_+$$

$$diag(Y) = (1, \dots, 1)^T$$

Стандартная форма задачи полуопределенного программирования выглядит следующим образом:

$$\min_X trace(CX)$$
$$s.t.\, trace(A_i X) = b_i$$
$$X \in S^n_+$$
$$C, A_i \in S^n$$

Значит единственное, что осталось, это разобраться с ограничением на след, что делается просто: $Y_{ii} = trace(YE^i)$, где у матрицы E^i все элементы равны 0, кроме $E^i_{ii} = 1$. Значит заменяем ограничение на диагональ Y серией из n ограничений $trace(YE^i) = 1$. Итого, полученная задача **удовлетворяет стандартной форме SDP**.

3 Алгоритм Гёманса–Уильямсона

Когда мы решим релаксированную задачу, мы получим какую-то матрицу $X \in S^n_+$, которая все еще не является ответом(ее элементы могут быть даже не целыми). Поэтому далее будет описан алгоритм, справляющийся с этой трудностью.

3.1 Описание

Так матрица Y симметрична и положительно полуопределена, то у нее есть спектральное разложение $Y = LDL^T$, где D – диагональная матрица, где на диагонали стоят собственные значения. Тогда $Y = UU^T$, где $U = L\sqrt{D}$.
Повторим следующую процедуру много раз и из ответов выберем лучший:

1. Сгенерируем случаный вектор v на единичной сфере(это можно сделать например отнормировав гауссовский вектор).

2. Возьмем за множество $S = \{i | \langle v, u_i \rangle \geqslant 0\}$, где u_i – столбец матрицы U(проще говоря, возьмем те индексы, для которых соответствующие собственные вектора попали в одно полупространство при сечении гиперплоскотью с вектором нормали v).

3.2 Корректность

Утверждение:
Обозначим r^* – возвращаемое алгоритмом значение(после одной итерации). Тогда

$$c^* \geqslant \mathbb{E}_v(r^*) \geqslant 0.878p^*$$

Доказательство: Рассмотрим матожидание величины разреза, который нам вернул алгоритм(распишем по определению):

$$\mathbb{E}_v(C) = \mathbb{E}_v \frac{1}{2} \left(\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} w_{ij} \mathrm{I}[sign(v^T u_i) \neq sign(v^T u_j)] \right)$$

$$= \mathbb{E}_v \frac{1}{2} \left(\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} w_{ij} \mathbb{P}(sign(v^T u_i) \neq sign(v^T u_j)) \right)$$

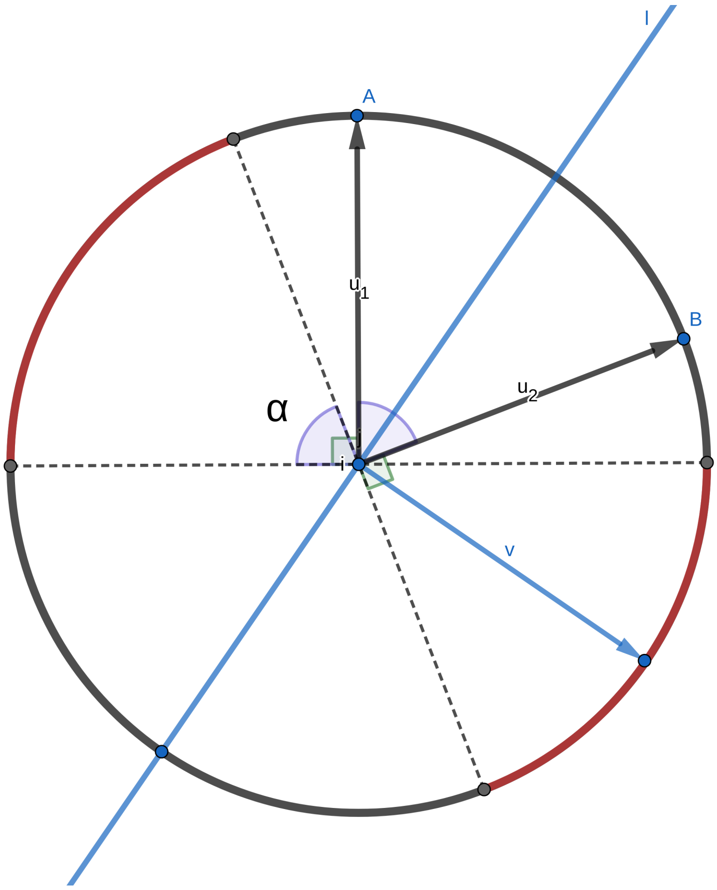


Рис. 2: Иллюстрация леммы для двумерного случая. Для разделимости исходных векторов необходимо и достаточно того, чтобы нормаль к гиперплоскости лежала в отмеченных красным секторах. Вероятность попасть в такие секторы равна $\frac{2\alpha}{2\pi} = \frac{\alpha}{\pi}$, но углы, отмеченные фиолетовым равны(как углы между перпеникулярами – школьный факт), что и требовалось.

Лемма:

$$\mathbb{P}(sign(v^T u_i) \neq sign(v^T u_j)) = \frac{\angle(u_i, u_j)}{\pi} = \frac{\arccos(u_i^T u_j)}{\pi}$$

Доказательство: Проще говоря, хочется доказать, что вероятность отделить друг от друга два вектора случайной гиперплоскостью пропорциональна углу между этими векторами. Из симметрии сферы:

$$\mathbb{P}(sign(v^T u_i) \neq sign(v^T u_j)) = 2\mathbb{P}(v^T u_i \geqslant 0, v^T u_j < 0)$$

Событие из правой части образовано пересечением двух полупространств, угол между которыми как раз равен углу между векторами u_i и u_j(обозначим его θ), поэтому и вероятность такого события есть $\frac{\theta}{2\pi}$. Это доказывает первое равенство, а второе же получается выражение значения угла θ через arccos.

$\square$

Итого:

$$\mathbb{E}_v(C) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} w_{ij}\frac{\arccos(u_i, u_j)}{\pi} = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} w_{ij}\frac{2\arccos(u_i, u_j)}{\pi(1 - u_i^T u_j)}\frac{1 - u_i^T u_j}{1}$$

Из ограничений SDP задачи, по которой получена матрица Y, получаем, что $|u_i| = 1$, значит $|u_i^T u_j| \leqslant 1$, причем выражение под модулем равно единице тогда и только тогда, когда $u_i = u_j$. Поэтому имеет смысл рассмотреть поведение функции $\frac{2\arccos(x)}{\pi(1-x)}$ на промежутке $[-1, 1)$. Оказывается, она **ограничена снизу** на этом промежутке константой $\alpha_{GW} \approx 0.878$, что можно, например, пронаблюдать на построенном графике.

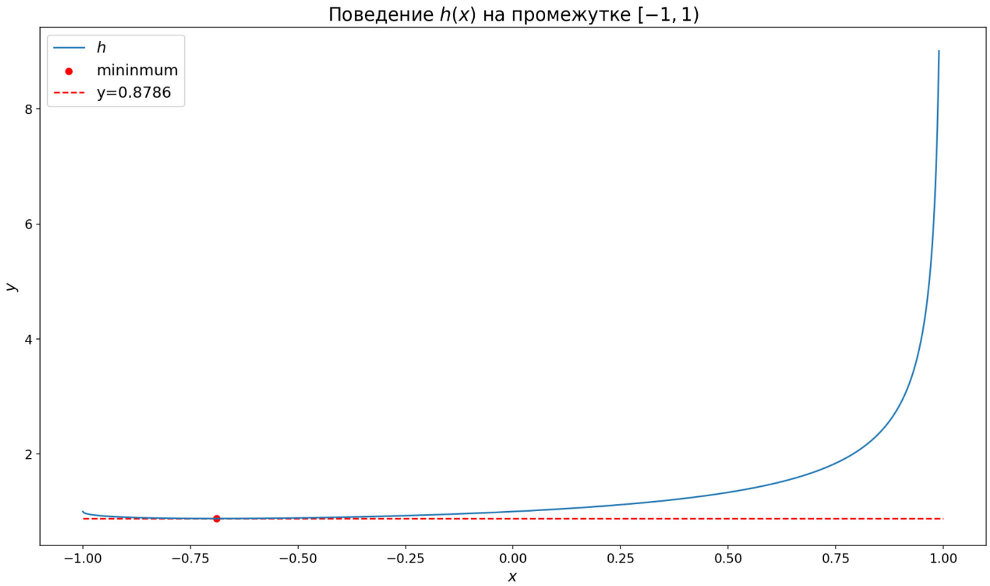


Рис. 3: График функции $h(x)$

Тогда

$$\mathbb{E}_v(C) \geqslant \alpha_{GW} \frac{1}{4} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} w_{ij}(1 - u_i^T u_j) = \alpha_{GW} p^* \geqslant \alpha_{GW} c^*$$

Т.к. любой ответ выданный алгоритмом будет не лушче чем оптимальный c^*, то и их среднее $\mathbb{E}_v(C)$ – тоже. Значит

$$c^* \geqslant \mathbb{E}_v(C) \geqslant \alpha_{GW} \geqslant \alpha_{GW} p^* \geqslant \alpha_{GW} c^*$$

Утверждение доказано.

□

4 Эксперимент

Реализовать описанный выше алгоритм можно с помощью общедоступных пакетов оптимизизации. Таким как раз является популярный пакет CVX для Python3. Все материалы этого проекта, в том числе реализация и результаты тестирования доступны на моем Github.

Стоит отметить, что в отличие от оригинальной статьи, моя реализация **повторяет несколько раз** случайную генерацию векторов на сфере и соответствующего разреза, чтобы по полученному набору ответов взять среднее и максимум. Так как количество таких повторов является не слишком большой константой(я взял 30 для того, чтобы выборочное среднее хорошо приближало теоретический матож), а каждая такая итерация выполняется не слишком долго(из тяжелых операций там происходит только генерация случайного вектора и перемножение матрицы на вектор), то общее время работы возрастет на величину, которой можно принебречь. Оно и логично, внутри cvx наверняка используется что-то уж явно не легче чем перемножение матриц.

Также, мною было реализовано brute force решение экспоненциальной сложности, подсчитывающее точный ответ.

4.1 План эксперимента

1. Зафиксируем несколько типов графов, из которых будем генерировать тест-сеты, а также количество графов в каждом тест сете $m = 50$. Для каждого из типов графов будет по два тест-сета, которые будут отличаться количество вершин в графах, в данном случае это $n = 10, 20$.

2. Сгенерируем графы для каждого из тест-сетов.

3. Запустим на вообще всех графах brute force решение и SDP + алгоритм Гёманса-Уильямсона. Получим соответственно точный ответ, среднее по попыткам и максимум по по пыткам алгоритма для **каждого графа**.

4. Проверим выполнимость теоретического утверждения для среднемго и исследуем насколько эффективным будет модификация с выбором максимума.

4.2 Исследуемые статистики

1. Посчитаем долю средних которые попадут в отрезок $[\alpha_{GW} c^*, c^*]$, где $\alpha_{GW} \approx 0.878$.

2. Построим гистограмму для значения максимума из алгоритма поделить на точный ответ.

4.3 Описание наборов тестов

Для тестирования были выбраны следующие стохастические типы графов(по два тест-сета на каждый в зависимости от количества вершин – 10 и 20):

1. Случайные 3-регулярные и 8-регулярные графы.

2. Графы в модели Эрдёша — Реньи с $p = \frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}$.

3. Графы в модели Альберта-Барабаши со степенью 4 и $\frac{n}{2}$.

4. Графы, построенные по алгоритму Holm-Kim [2].

4.4 Анализ результатов

Приведем сначала визуализации полученных результатов:

	Средние, лежащие в $[0.878c^*, c^*]$ для размера 10, %	Средние, лежащие в $[0.878c^*, c^*]$ для размера 20, %
0	100.0	100.0

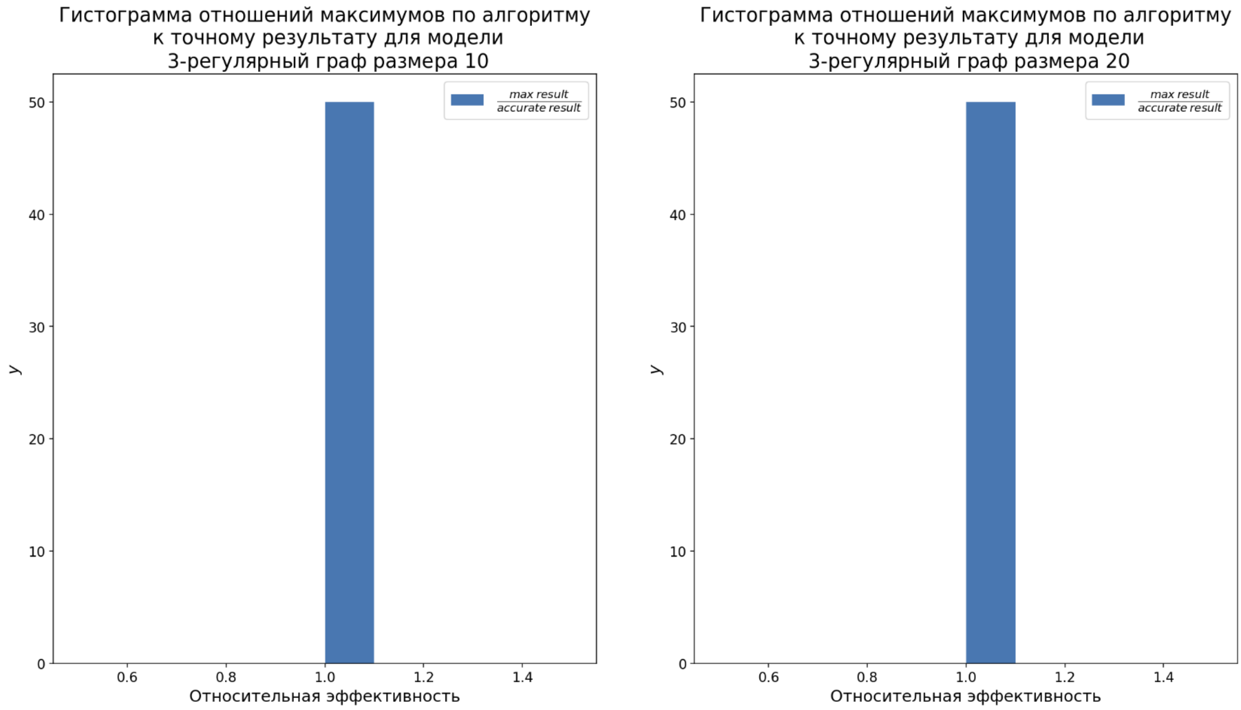
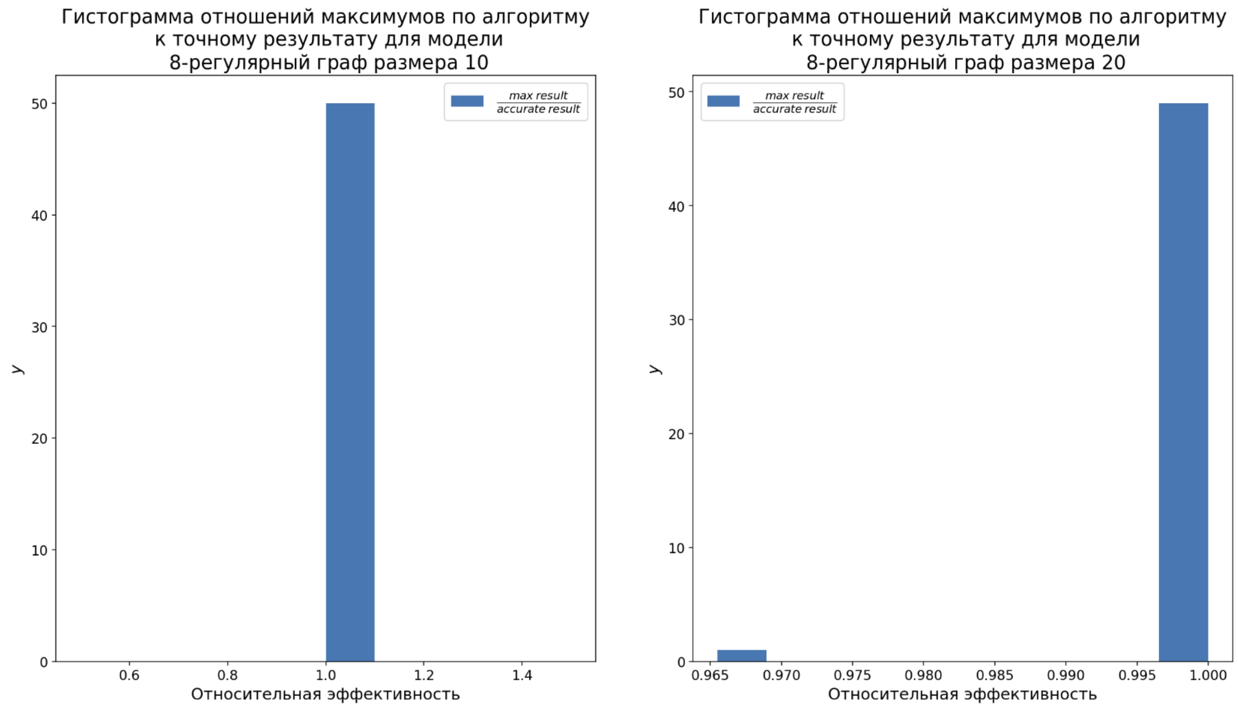
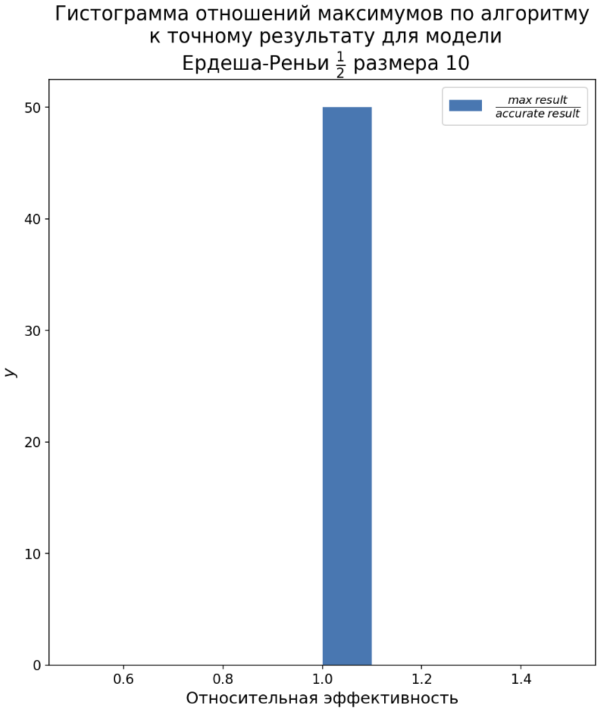


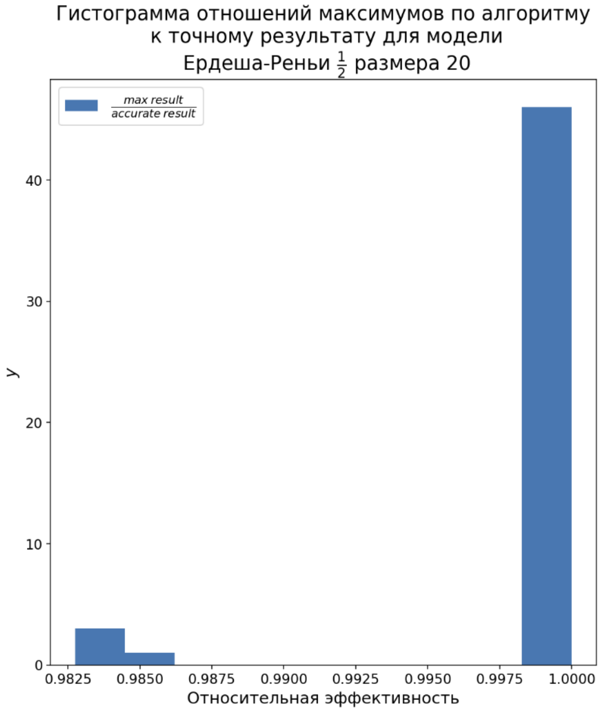
Рис. 4:

	Средние, лежащие в $[0.878c^*, c^*]$ для размера 10, %	Средние, лежащие в $[0.878c^*, c^*]$ для размера 20, %
0	100.0	100.0

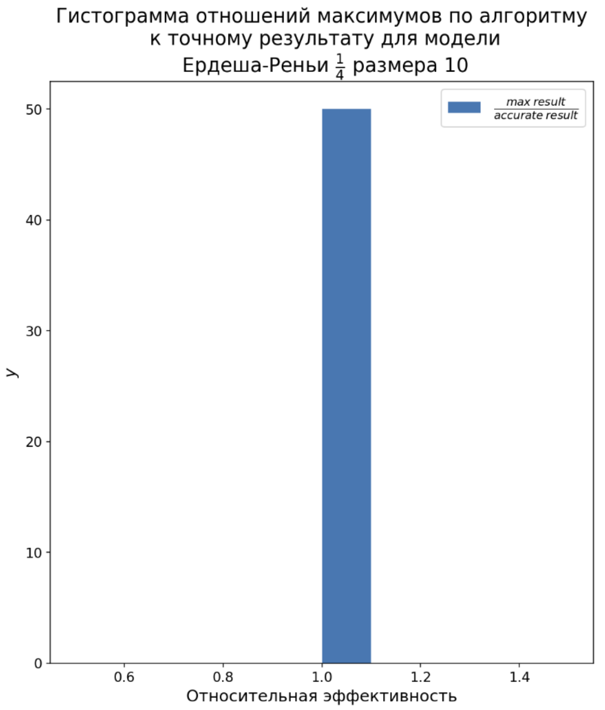


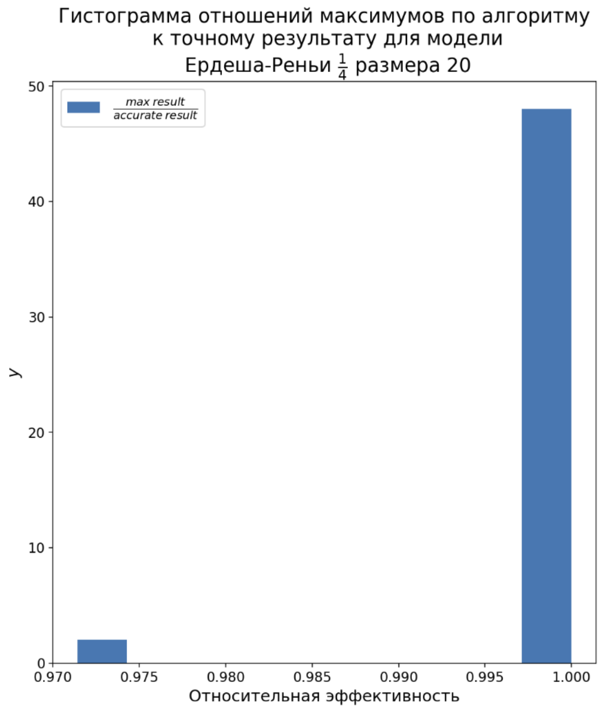
	Средние, лежащие в $[0.878c^*, c^*]$ для размера 10, %	Средние, лежащие в $[0.878c^*, c^*]$ для размера 20, %
0	100.0	100.0



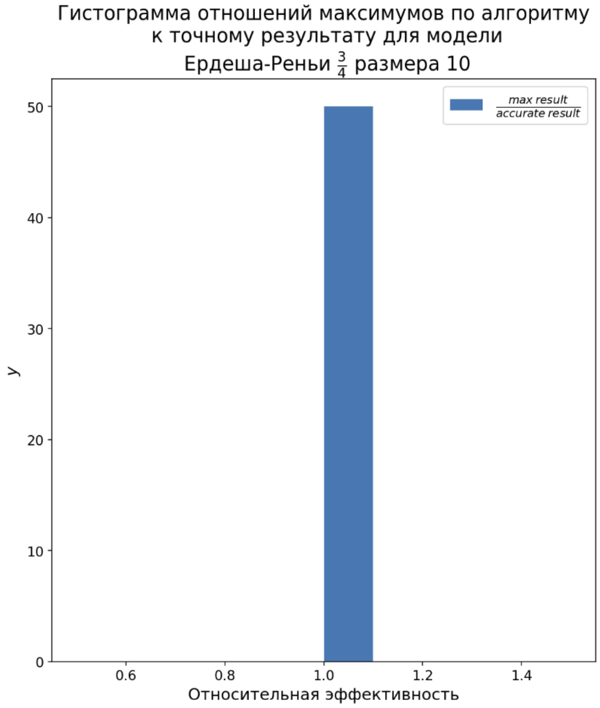


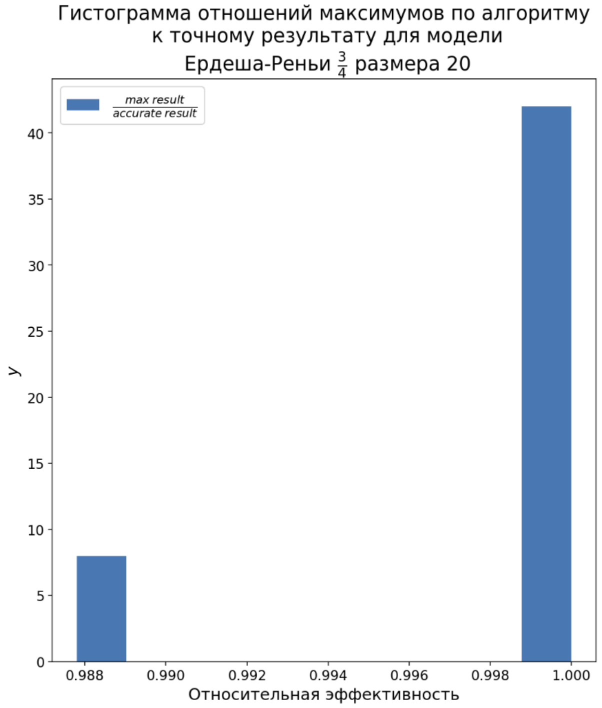
	Средние, лежащие в $[0.878c^*, c^*]$ для размера 10, %	Средние, лежащие в $[0.878c^*, c^*]$ для размера 20, %
0	100.0	100.0



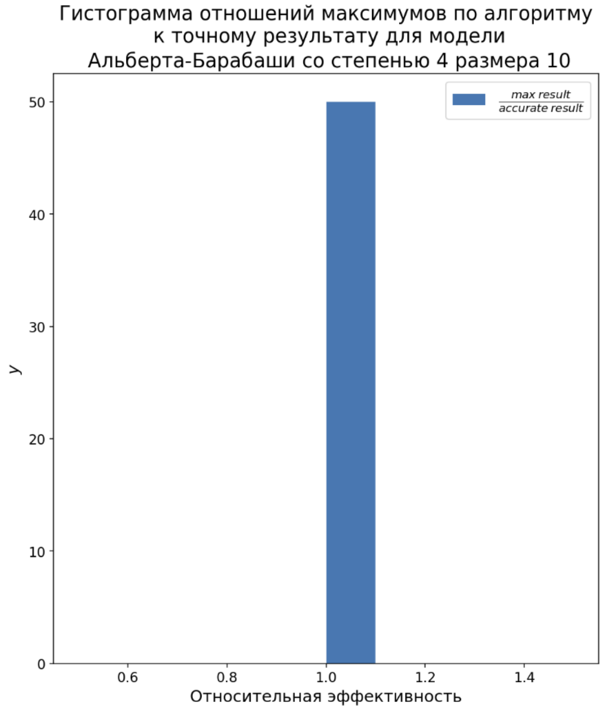


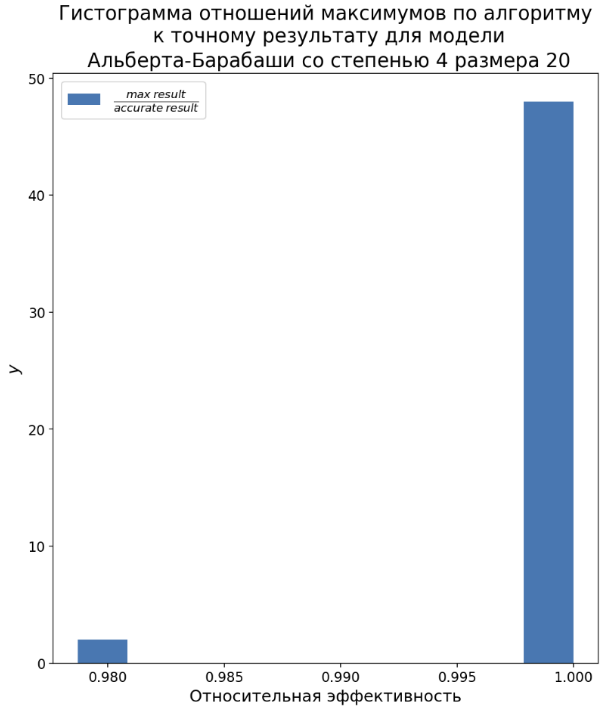
	Средние, лежащие в $[0.878c^*, c^*]$ для размера 10, %	Средние, лежащие в $[0.878c^*, c^*]$ для размера 20, %
0	100.0	100.0



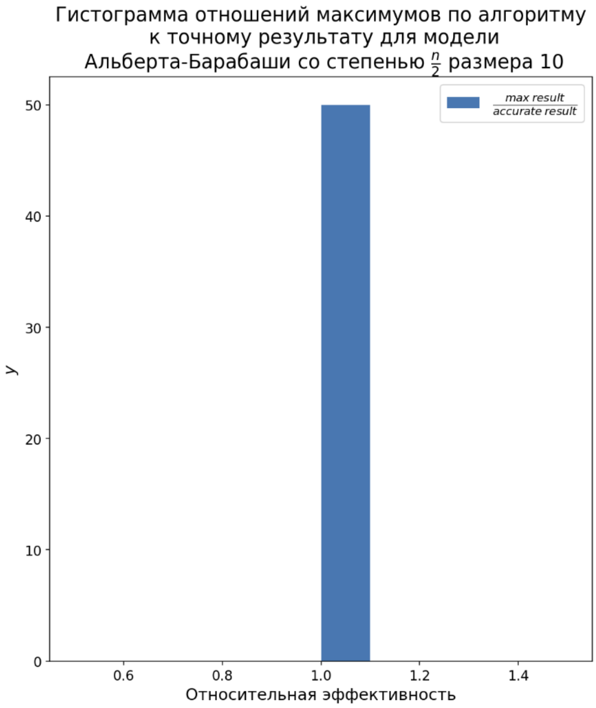


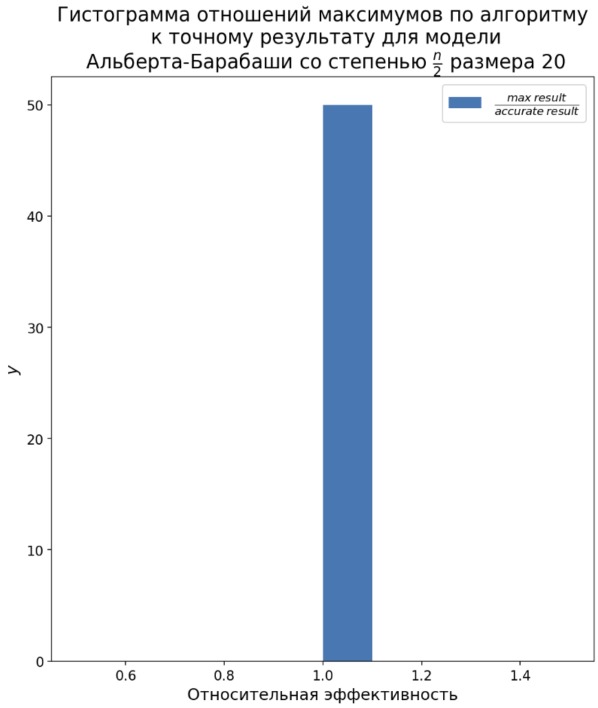
	Средние, лежащие в $[0.878c^*, c^*]$ для размера 10, %	Средние, лежащие в $[0.878c^*, c^*]$ для размера 20, %
0	100.0	100.0



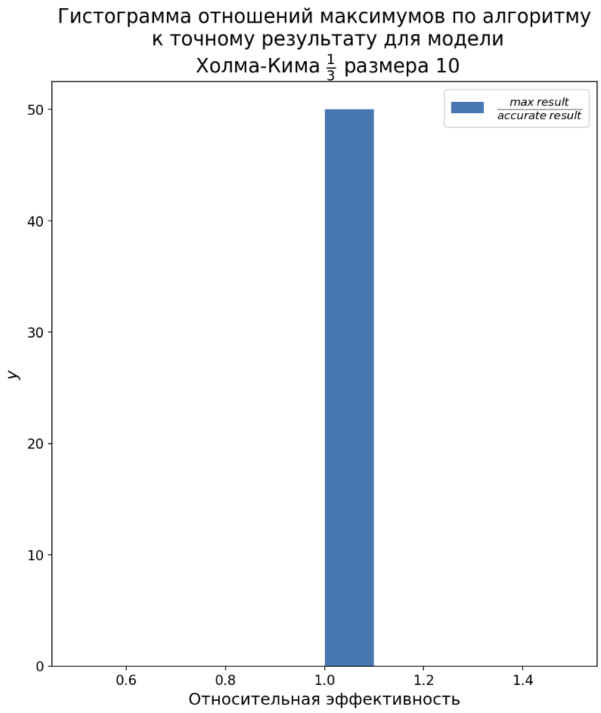


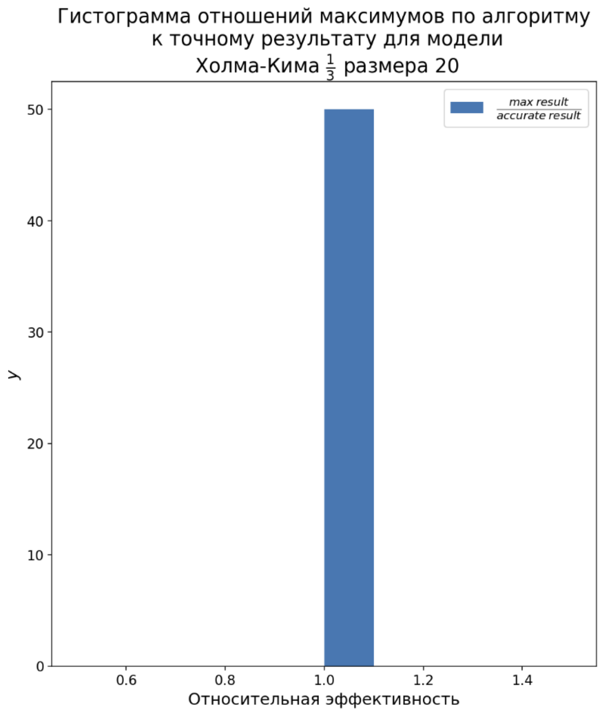
	Средние, лежащие в $[0.878c^*, c^*]$ для размера 10, %	Средние, лежащие в $[0.878c^*, c^*]$ для размера 20, %
0	100.0	100.0



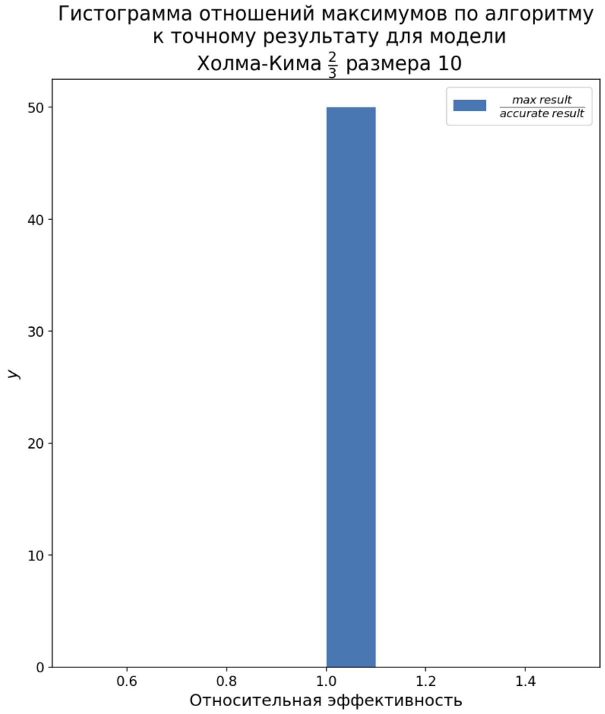


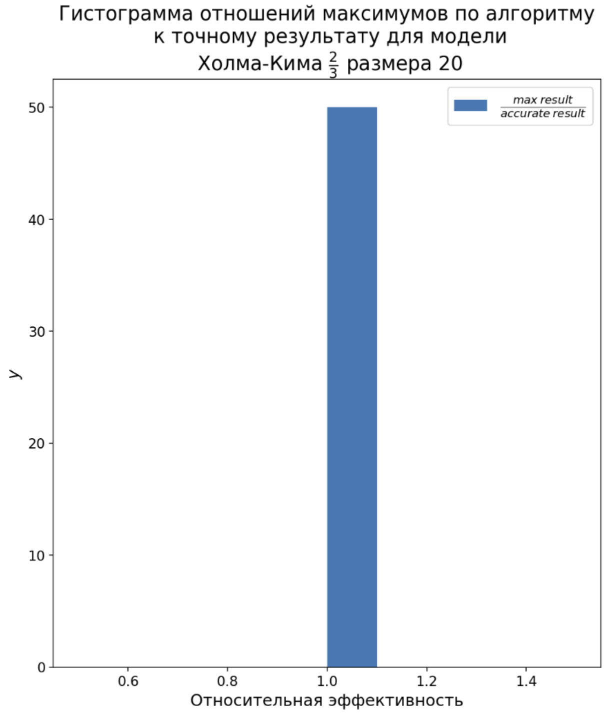
	Средние, лежащие в $[0.878c^*, c^*]$ для размера 10, %	Средние, лежащие в $[0.878c^*, c^*]$ для размера 20, %
0	100.0	100.0





	Средние, лежащие в $[0.878c^*, c^*]$ для размера 10, %	Средние, лежащие в $[0.878c^*, c^*]$ для размера 20, %
0	100.0	100.0





1. Как видим, доказанное теоретически утверждение согласуется со всем полученными результатами.
2. На данных размерах графов и при всех рассмотренных их стохастических типах идея, брать из всех результатов максимум, отлично себя показала и дает точный реультат в более чем 80% случаев.
3. На затраты по памяти не стоит обращать внимание, потому что при данных размерах графа они близки к нулю.
4. Что касается времени, то на рассматриваемых тестовых данных переборное решение требует порядка 20 секунд в среднем на один граф, в то время как SDP решение требует порядка времени порядка 1 секунды.

5 Заключение

Подводя итоги, можно сказать, что в течение выполнения проекта удалось ознакомиться с алгоритмом Гёманса-Уильямсона, вопроизвести его доказательство, реализовать его, добавив, хоть и несложную, но всё-таки модификацию, а также протестировать его на тест-сетах разнообразных типов случайных графов. Результаты эксперимента согласуются с теоретически доказанныи фактами, а модификация показывает результаты с приемлимым уровнем точности, хотя стоит отметить, что для более тщатательного исследования необходимо значительно увеличить размеры графов, что требует огромных вычислительных мощностей, которыми я, к сожалению, не обладаю.

Список литературы

[1] David Steurer: Reduction from 3 SAT to MAX CUT,

http://www.cs.cornell.edu/courses/cs4820/2014sp/notes/reduction-maxcut.pdf

[2] P. Holm and B. J. Kim: "Growing scale-free networks with tunable clustering", Phys. Rev. E, 65, 026107, 2002.
https://networkx.github.io/documentation/networkx-1.9.1/reference/generated/networkx.generators.random_graphs.barabasi_albert_graph.html