# CALCULUL GRADIENTULUI FUNCŢIEI DE PENALIZARE ÎN PROBLEMA MAX-CUT

**V. Moraru**
*Universitatea Tehnică a Moldovei*

## INTRODUCERE

Problema determinării tăieturii maxime într-un graf constă în împărţirea vârfurilor în două mulţimi de vârfuri care se leagă între ele cu muchii şi suma ponderilor muchiilor este maximă. Această problemă, numită şi ***problema MAX-CUT***, are diverse aplicaţii în practică (vezi, de ex.[1]). Problema MAX-CUT face parte în caz general din clasa problemelor *NP*-complete [2] şi poate fi rezolvată într-un timp polinomial numai în cazuri speciale, de exemplu, când graful este planar (vezi [3]). O tehnică actuală de rezolvare constă în transformarea problemei originale, dată în spaţiul vectorial $\mathfrak{R}^n$, într-o problemă de programare liniară în spaţiul matricelor simetrice semidefinite de dimensiune $n \times n$. În lucrare problema determinării tăieturii maxime se formulează ca o problemă de programare pătratică cu restricţii pătratice. Se prezintă relaxarea bazată pe programarea semidefinită. Se discută metoda punctului interior şi se propune o procedură efectivă de calcul al gradientului funcţiei de penalizare.

## 1. FORMULAREA PROBLEMEI

Considerăm $G(V,U)$ un graf finit, ponderat şi neorientat unde $V = (v_1, v_2, \ldots v_n)$ este mulţimea vârfurilor (nodurilor). Vom presupune în această lucrare că mulţimea muchiilor $U$ este o mulţime care nu conţine bucle şi muchii multiple. Fiecărei muchii $(v_i, v_j) \in U$ i se asociază o valoare (ponderea) $a_{ij} = a_{ji} \geq 0$. Vom defini $a_{ij} = 0$ în cazul în care $(v_i, v_j) \notin U$, adică în cazul când $v_i$ şi $v_j$ nu sunt adiacente. Matricea de adiacenţă asociată acestui graf va fi notată $A = (a_{ij})$.

Fie $S \subseteq V$ o submulţime nevidă a lui $V$. Prin definiţie, o tăietură (notată în continuare prin $\delta(S)$) este o mulţime de muchii $(v_i, v_j) \in U$ cu proprietatea că dacă $v_i \in S$, atunci $v_j \in V \setminus S$. Se pune problema determinării tăieturii $\delta(S)$ cu valoarea maximă a sumei ponderilor muchiilor, adică a partiţionării mulţimii $V$ în două părţi $S$ şi $V \setminus S$, astfel că suma

$$\sum_{(v_i, v_j) \in \delta(S)} a_{ij}$$

este maxim posibilă oricare ar fi $S \subseteq V$.

Vom introduce variabilele $x_i, i = 1,2..n$, cu $x_i = 1$ sau $x_i = -1$, după cum vârful $v_i$ aparţine sau nu mulţimii $S$:

$$x_i = \begin{cases} 1, & \text{pentru } \forall v_i \in S, \\ -1, & \text{pentru } \forall v_i \in V \setminus S \end{cases}.$$

Dacă vârfurile $v_i$ *şi* $v_j$ aparţin mulţimii $S$ sau mulţimii complementare $V \setminus S$, atunci $x_i = x_j$ şi deci $x_i x_j = x_i^2 = x_j^2 = 1$. În cazul când $x_i = -x_j$, adică $v_i \in S$ şi $v_j \in V \setminus S$ sau $v_i \in V \setminus S$ şi $v_j \in S$, avem $x_i x_j = -1$. Ţinând seama că $a_{ij} = a_{ji}$ şi $x_i x_i = 1$, rezultă că

$$\sum_{(v_i, v_j) \in \delta(S)} a_{ij} = \frac{1}{4} \sum_{i,j} a_{ij} (1 - x_i x_j) =$$
$$= \frac{1}{4} \sum_{i=1}^{n} \left( \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_i x_i - \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_i x_j \right) =$$
$$= \frac{1}{4} x^T \left( Diag(Ae) - A \right) x,$$

unde $x = (x_1, x_2, \ldots, x_n)^T$ şi $e = (1,1,\ldots,1)^T \in \mathfrak{R}^n$, iar ***Diag(Ae)*** este matricea diagonală cu diagonala formată din vectorul ***Ae***.

Matricea

$$L = Diag(Ae) - A$$

se numeşte ***matricea Laplace,*** asociată grafului ***G*** cu matricea adiacentă ***A***. Elementele $l_{ij}$ ale acestei matrice satisfac relaţiile:

$$l_{ij} = -a_{ij} = l_{ji}, \quad \forall\, i \neq j,$$

$$l_{ii} = \sum_{j=1}^{n} a_{ij} = \sum_{j \neq i} |l_{ij}| > 0, \quad \forall\, i = 1,2,\ldots,n,$$

deci matricea lui Laplace $L$ este o matrice pozitiv semidefinită.

Notăm $Q=\frac{1}{4}L$. Atunci problema determinării unei tăieturi maxime în grafuri neorientate poate fi reformulată astfel:

$$\left.\begin{array}{l} q(x)=x^TQx \quad \to max \\ \text{în conditiile} \\ x_i^2-1=0, \quad i=1,2,\ldots,n \end{array}\right\} \qquad (1)$$

## 2. RELAXAREA SEMIDEFINITĂ

Problema (1) este o problemă *NP*-completă (vezi, de ex., [4,5]). Ea este un caz particular al unei probleme de programare pătratică cu restricţii pătratice şi este dificilă de rezolvat. În general, rezolvarea problemelor de optimizare combinatorială necesită o enumerare completă a soluţiilor admisibile. De aceea, considerăm relaxarea ei. Ideea de bază constă în relaţia $x^TQx=Tr(Qxx^T)$, unde $Tr(\cdot)$ reprezintă urma matricei, adică $Tr(A)=\sum_{i=1}^{n}a_{ii}$. Notăm $X=xx^T$. Este clar că matricea $X=xx^T$ este pozitiv semidefinită şi $rang(xx^T)=1$. Din $x^2=1,\ i=1,2,.....,n$ rezultă că $diag(xx^T)=e$, unde $diag(X)$ semnifică vectorul, ale cărui componente sunt elementele de pe diagonala principală a matricei $X$. Se demonstrează (vezi, de ex., [6]) că problema considerată (1) este echivalentă următoarei probleme:

$$\left.\begin{array}{l} Tr(QX)\to max \\ diag(X)=e, \\ rang(X)=1, \\ X\succeq 0. \end{array}\right\} \qquad (2)$$

Inegalitatea $A\succeq B\ (A\succ B)$ semnifică că matricea $A$-$B$ este semipozitiv (respectiv pozitiv) definită. Renunţând în (2) la condiţia $rang(X)=1$, se ajunge la problema relaxată

$$\left.\begin{array}{l} Tr(QX)\to max \\ diag(X)=e, \\ X\succeq 0, \end{array}\right\} \qquad (3)$$

Problema (3) este o problemă de programare semidefinită şi duală ei poate fi formulată în felul următor (vezi, de ex.[7-9]):

$$\left.\begin{array}{l} e^Tu \quad \to min \\ \text{în conditiile} \\ Diag(u)-Q\succeq 0 \end{array}\right\} \qquad (4)$$

Domeniul soluţiilor admisibile

$$T=\{u\in\Re^n \,|\, Diag(u)-Q\succeq 0\}$$

pentru problema (4) este o mulţime convexă şi, prin urmare, problema (3) este o problemă de programare convexă, care are o complexitate polinomială (vezi, de ex., [10, §5.3], [11]).

Aşadar, problema duală (4) este mai "uşor" de rezolvat decât problema considerată (1), care este o problemă *NP*-completă.

Notăm $e_i^T=(0,\ldots,0,1,0,\ldots,0)$ vectorul cu unitatea pe poziţia $i$, $i=1,2,\ldots,n$. Fie matricea $E_i=e_ie_i^T$. Atunci putem scrie: $Diag(u)=\sum_{i=1}^{n}u_iE_i$. Cu aceste notări problema (4) devine:

$$\left.\begin{array}{l} e^Tu \quad \to min \\ \text{în restrictiile} \\ u_1E_1+u_2E_2+\ldots+u_nE_n-Q\succeq 0. \end{array}\right\} \qquad (5)$$

Goemans şi Wiliamson [12]au estimat că

$$\begin{array}{l} q^*=max\{x^TQx \,|\, x_i^2=1, \quad i=1,2,\ldots,n\} \\ \quad \le 0.87856 min\{e^Tu \,|\, u\in T\}. \end{array}$$

În cazul rezolvării problemelor generale de programare pătratică cu restricţii pătratice estimări analogice au fost obţinute în [12-15]. Alte relaxări echivalente pot fi găsite în [16-18]

## 3. METODA PUNCTULUI INTERIOR

Asociem problemei duale (4) funcţia de barieră logaritmică [11]:

$$B(u)=ln\,det(Diag(u)-Q).$$

Aici $det$ înseamnă determinantul matricei considerate.

Notăm

$$C(u)=Diag(u)-Q=\sum_{i=1}^{n}u_iE_i-Q.$$

Din formula Cauchy-Benet:

$$C(u)\times adj(C(u)) = det(C(u))\times I$$

avem

$$\frac{\partial\, det(C(u))}{\partial C} = adj(C(u)),$$

unde $adj(\bullet)$ este matricea adjunctă. Luând în considerare cele de mai sus, putem calcula

$$\frac{\partial B(u)}{\partial u_i} = \frac{1}{det(C(u))}\times Tr(E_i \times adj(C(u))) = \\ = Tr(E_i \times C^{-1}(u)).$$

Dar

$$C^{-1}(u) = \frac{1}{det(C(u))}\, adj(C(u)).$$

Prin urmare

$$\nabla B(u) = diag(C^{-1}(u)). \qquad (6)$$

Metoda punctului interior pentru problema (4) constă în rezolvarea şirului de probleme de optimizare necondiţionată:

$$e^T u - \mu_k \ln det(Diag(u) - Q) \to min \\ u \in \Re^n, \qquad (7)$$

unde parametrul de barieră $\mu_k$ este un număr real fixat şi $\mu_k \downarrow 0$. Condiţia de optimalitate pentru problema de optimizare necondiţionată (7) este

$$e - \mu_k diag(C^{-1}(u)) = 0. \qquad (8)$$

Problema (7) poate fi rezolvată cu ajutorul metodelor de gradient (metoda celei mai rapide descreşteri, metoda gradientului conjugat ş.a.), criteriul de stopare fiind îndestularea aproximativă a condiţiei (8). Aceasta necesită calculul gradientului funcţiei de barieră $B(u)$ dat prin formula (6). După cum se vede din (6), avem nevoie de elementele de pe diagonala principală a matricei inverse $C^{-1}(u)$. Este bine cunoscut că inversarea matricelor este o operaţie costisitoare şi trebuie evitată în practică. În continuare ne vom opri asupra unei proceduri efective de calcul al gradientului funcţiei de barieră. În această procedură, determinarea elementelor diagonale ale matricei considerate se reduce la minimizarea necondiţionată a unor funcţii pătratice generate de una şi aceeaşi matrice.

## 4. O PROCEDURĂ EFICIENTĂ DE CALCUL AL GRADIENTULUI

Punem problema determinării $\nabla B(u)$. Observăm că

$$z^T C^{-1}(u) z = \max_{y\in\Re^n}\{2z^T y - y^T C(u) y\},\ \forall z \in \Re^n.$$

Într-adevăr, fie $y_*$ soluţia optimă, adică $2C(u)y_* = 2z$, ori $y_* = C^{-1}(u)z$. Rezultă, că

$$\max_y\{2z^T y - y^T C(u) y\} = \\ = 2z^T C^{-1}(u)z - z^T C^{-1}(u)C(u)C^{-1}(u)z = \\ = z^T C^{-1}(u)z.$$

Notăm elementele de pe diagonala principală a matricei $C^{-1}(u)$ prin $\bar{c}_{ii}(u)$. Aşa cum $\bar{c}_{ii} = e_i^T C^{-1}(u)e_i$, din cele de mai sus rezultă că

$$\bar{c}_{ii} = -\min_{y\in\Re^n}\{y^T C(u) y - 2e_i^T y\},\ i = 1,2,\ldots,n.$$

Prin urmare calculul elementelor $\bar{c}_{ii}(u)$ se reduce la minimizarea a $n$ funcţii pătratice cu una şi aceeaşi matrice pozitiv definită $C(u)$.

Fie acum cunoscută factorizarea Cholesky pentru matricea $C(u)$, adică $C(u) = F^T(u)F(u)$, unde $F(u)$ este o matrice inferior triunghiulară.

Atunci

$$\bar{c}_{ii} = -\min_y\{y^T F^T(u)F(u)y - 2e_i^T y\} = \\ = -\min_y\{\|F(u)y\|_2^2 - 2e_i^T y\}.$$

Notăm prin $r_i \in \Re^n$ soluţiile sistemului de ecuaţii liniare:

$$F^T(u)r_i = e_i,\ i = 1,2,\ldots,n \qquad (9)$$

şi deci

$$r_i = F^{-T}(u)e_i.$$

De aici avem

$$r_i^T r_i = e_i^T F^{-1}(u) F^{-T}(u) e_i = \\ = e_i^T C^{-1}(u) e_i = \bar{c}_{ii}.$$

Aşa dar, având factorizarea Cholesky, componentele gradientului funcţiei de barieră $B(u)$ pot fi calculate astfel:

$$\frac{\partial B(u)}{\partial u_i} = \bar{c}_{ii} = r_i^T r_i, \; i = 1,2,\ldots n,$$

unde vectorii $r_i$ sunt soluţiile sistemului (9).

Remarcăm că dacă se cunoaşte factorizarea Cholesky $C(u) = F^T F$ uşor poate fi calculată şi valoarea funcţiei-scop în problema (7):

$$e^T u - \mu_k \ln det(C(u)) = \\ = \sum_{i=1}^{n} u_i - \mu_k \ln(det(F(u)))^2 = \\ = \sum_{i=1}^{n} u_i - 2\mu_k \ln(f_{11} \cdot f_{22} \cdot \ldots \cdot f_{nn}) = \\ = \sum_{i=1}^{n} u_i - 2\mu_k (f_{11} + f_{22} + \ldots + f_{nn}).$$

## Bibliografie


1. **Poljak S., Tuza Z**. *The max-cut problem – a survey. In Lovasz L., Seymour P., editors, Special Year on Combinatorial Optimizations. DIMACS Series in Discrete Mathematics and Theoretical Computer science. American Mathematical Society. 1995.*

2. **Garey M., Johnson D., Stochmeyer**. *Some simplified NP-complete graph problems. Theoretical Computer Science, 1: 237-267, 1976.*

3. **Hadlock F.** *Finding a maximum cut of a planar graph in polynomial time. SIAM Journal on Computing, 4,:221-225, 1975.*

4. **Murty K. G.** *Some NP-complete problems in quadratic and nonlinear programming. Mathematical Programming, 39: 117-129,1987.*

5 **Pardalos P.M., Vavasis S.A**. *Quadratic programming with one negative eigenvalue is NP-hard. J. Global Optim., 1(1):, 1991.*

6. **Laurent M., Poljak S**. *On a positive semidefinite relaxation of the cut polytope. Linear Algebra and its Applications, 223/224, 439-461, 1995.*

7. **Wolcowicz H., Anjos M.F.** *Semidefinite programming for discrete optimization and matrix completion problems. June 30, 2000. Research Report CORR 2000-38. University of Waterloo, Ontario, 88 pages.* [http://orion.math.uwaterloo.ca/~hwolkowi/henry/reports](http://orion.math.uwaterloo.ca/~hwolkowi/henry/reports)

8. **Vandenberghe L., Boyd S.** *Semidefinite programming. SIAM Review, 38, 49-95, 1996.*

9. **Lemarechal C., Oustry F.** *Semidefinite relaxations and Lagrangian duality with application to combinatorial optimization. Technical report nr. 3710, Juine, 1999, INRIA, Montbonnot st. Martin, France. 40 pages.*

10. **Ben- Tal A., Nemirovski A.** *Convex optimization in engineering: Modeling, Analysis, Algorithms. Faculty of Industrial Engineering and Management, Technion- City, Halfa 32000, Israel., 1998. 299 p.*

11. **Nesterov Y.E., Nemirovski A.S.** *Interior point polynomial algorithms in convex programming. SIAM Publications. SIAM, Philadelphia, USA, 1994.*

12. **Goemans M., Williamson D.P.** *Improved approximation algorithms for maximum cut and satisfiability problems using semidefinite programming. J. Assoc. Comput. Mach., 42(6): 1115-1145, 1995.*

13. **Nesterov Y.** *Semidefinite relaxation and nonconvex quadratic optimization. Optimization Methods and Software, 9: 141`-160, 1998.*

14 **Ye Y.** *Approximation quadratic programming with bound and quadratic constraints. Math. Programming, 84(2): 219-226, 1999.*

15 **Bertsimas D., Ye Y.** *Semidefinite relaxations, multivariate normal distributions and order statistics. Working Paper, Department of Management Science, The University of Iowa, 1997.*

16. **Poljak S., Wolkowicz H**. *Convex relaxations of (0,1) quadratic programming. Mathematics of Operations Research, 20(3): 550-561, 1995.*

17. **Poljak S., Rendl F.** *Solving the max-cut problem using eigenvalues. Discrete Applied Mathematics, 62:249-278, 1995.*

18. **Moraru V.** *Determinarea tăieturii maxime într-un graf folosind programarea semidefinită. Analele Academiei de Studii Economice din Moldova. 498-504, 2001.*