УДК 519.8

П.И. СТЕЦЮК, О.А. БЕРЕЗОВСКИЙ

ЛАГРАНЖЕВАЯ ОЦЕНКА ДЛЯ МАКСИМАЛЬНОГО РАЗРЕЗА ГРАФА С ЗАДАННЫМИ КОЛИЧЕСТВАМИ ВЕРШИН В ОБОИХ ПОДМНОЖЕСТВАХ РАЗБИЕНИЯ*

Рассматривается задача нахождения верхней Лагранжевой оценки Ψ^* для квадратичной формулировки задачи о максимальном взвешенном разрезе графа с заданными количествами вершин в обоих подмножествах разбиения. Показано, что нахождение Ψ^* сводится к решению безусловной задачи минимизации выпуклой функции.

Имеется взвешенный неориентированный граф $G(V,E)$ с множеством вершин $V=\{1,\dots,n\}$ и множеством ребер E. Вес ребра $(i,j)\in E$ задан произвольным вещественным числом w_{ij}. Пусть V_1 и V_2 – непустые и непересекающиеся подмножества вершин графа G, такие что $V_1 \bigcup V_2 = V$. Разрезом графа G есть совокупность тех ребер, концевые вершины которых лежат в разных подмножествах. Вес разреза определяется как сумма весов его ребер.

Рассмотрим задачу нахождения максимального взвешенного разреза графа с заданными количествами вершин в обоих подмножествах разбиения. Не ограничивая общности, будем считать, что количество вершин в подмножестве V_1 равно k, а в подмножестве V_2 – $(n-k)$, где $k<n$. Задача нахождения максимального взвешенного разреза графа с заданными количествами вершин в обоих подмножествах разбиения состоит в нахождении разбиения множества вершин V на два таких подмножества V_1^* и V_2^* ($\left|V_1^*\right|=k$), чтобы соответствующий этому разбиению вес разреза был максимальным.

* Работа выполнена при частичной финансовой поддержке гранта UKM2-2812-KV-06 (CRDF Cooperative Grants Program).

Максимальный вес разреза обозначим $mc(G,w,k)$.

В случае, когда $k = 1,2,3$, задача нахождения максимального взвешенного разреза графа с заданными количествами вершин в обоих подмножествах разбиения является достаточно простой. Так, даже чисто переборные алгоритмы для нее будут иметь сложность $O(|E|)$, $O(|E|^2)$, $O(|E|^3)$ соответственно. Однако с увеличением k сложность задачи возрастает, и при больших $k \le \frac{n}{2}$ задача становится NP-трудной. Так, например, когда $k = \frac{n}{2}$, а n – четное, то эта задача есть задачей нахождения оптимальной бисекции графа, которая есть NP-трудной [1]. Поэтому вопросы, связанные с уточнением верхних оценок для $mc(G,w,k)$, есть актуальными и представляют интерес.

Предметом обсуждения в работе будут верхние Лагранжевые оценки для $mc(G,w,k)$, которые получаются из формулировки задачи нахождения максимального взвешенного разреза графа с заданными количествами вершин в обоих подмножествах разбиения в форме оптимизационной задачи квадратичного типа.

1. Формулировка оптимизационной квадратичной задачи. Пусть вершине $i \in V$ ($i \in \{1,2,\ldots,n\}$) соответствует переменная $x_i \in \{-1,1\}$, такая что

$$x_i = \begin{cases} -1, & \text{если } i \in V_1, \\ +1, & \text{если } i \in V_2. \end{cases}$$

Задача нахождения максимального разреза графа с заданными количествами вершин в обоих подмножествах разбиения формулируется такой оптимизационной задачей квадратичного типа:

$$mc(G,w,k) = \max_{x \in R^n} \left\{ Q(x) = \frac{1}{4} \sum_{(i,j)\in E} w_{ij}(x_i - x_j)^2 \right\} \tag{1}$$

при ограничениях

$$x_i^2 = 1, \ i = 1,\ldots,n, \tag{2}$$

$$\left(\sum_{l=1}^{n} x_i \right)^2 = (n-2k)^2 . \tag{3}$$

Здесь квадратичная функция $Q(x)$ в целевой функции (1) задает вес разреза графа для произвольного разбиения вершин V на подмножества V_1 и V_2. Функцию $Q(x)$ можно записать в такой форме:

$$Q(x) = \frac{1}{4} \sum_{(i,j)\in E} w_{ij}\left(x_i - x_j\right)^2 = \sum_{(i,j)\in E} w_{ij} \left(\frac{x_i - x_j}{2} \right)^2 = \sum_{(i,j)\in E} w_{ij}\, y , \tag{4}$$

где

$$y_{ij} = \left(\frac{x_i - x_j}{2} \right)^2 .$$

Учитывая, что $x_i^2 = 1$ и $x_j^2 = 1$, имеем

$$y_{ij} = \left(\frac{x_i - x_j}{2} \right)^2 = \frac{x_i^2 - 2x_i\, x_j + x_j^2}{4} = \frac{2 - 2x_i\, x_j}{4} = \frac{1 - x_i\, x_j}{2} .$$

Отсюда

$$y_{ij} = \frac{1 - x_i\, x_j}{2} = \begin{cases} 1, & \text{если } x_i = 1 \text{ и } x_j = -1, \\ 1, & \text{если } x_i = -1 \text{ и } x_j = 1, \\ 0, & \text{если } x_i = 1 \text{ и } x_j = 1, \\ 0, & \text{если } x_i = -1 \text{ и } x_j = -1, \end{cases}$$

и суммироваться в функции $Q(x)$ будут веса только тех ребер, вершины которых лежат в разных подмножествах V_1 и V_2.

Итак, целевая функция (1) означает максимизацию веса разреза графа для произвольного разбиения вершин V на подмножества V_1 и V_2. Ограничения (2)–(3) задают условие: разбиение должно быть таким, чтобы одно из подмножеств содержало k вершин из V, а второе – оставшиеся $n - k$ вершин. Ограничения (2) есть записью бинарности переменных x_i, $i = 1, \ldots, n$, и означают, что x_i принадлежит либо подмножеству V_1 ($x_i = -1$), либо подмножеству V_2 ($x_i = 1$). Ограничение (3) задает условие: разность между количеством вершин в двух подмножествах V_1 и V_2 может быть равной либо $k - (n - k) = 2k - n$, либо $(n - k) - k = n - 2k$, т.е.

$$\sum_{i=1}^{n} x_i = \pm (n - 2k) . \tag{5}$$

Возведение в квадрат обеих частей равенства (5) есть квадратичным ограничением (3). В случае оптимальной бисекции графа равенство (5) и его квадратичный аналог (3) упрощаются и переходят соответственно в ограничения

$$\sum_{i=1}^{n} x_i = 0 \quad \text{и} \quad \left(\sum_{i=1}^{n} x_i \right)^2 = 0 .$$

2. Анализ задачи (1)–(3). Задача (1)–(3) является многоэкстремальной задачей нелинейного программирования, где целевая функция (1) и ограничения (2), (3) есть квадратичные функции. Она попадает в класс невыпуклых оптимизационных задач квадратичного типа. Чтобы оценить сверху значение глобального максимума $mc(G, w, k)$, целесообразно применить методику Лагранжевых двойственных оценок для задач квадратичного типа [2, 3]. Пусть Ψ^* – наилучшая оценка из класса лагранжевых двойственных квадратичных оценок [3] для задачи (1)–(3). Для нее справедливо $\Psi^* \geq mc(G, w, k)$, а точность оценки Ψ^* (т.е. близость ее к $mc(G, w, k)$) зависит от структуры графа G и от весов его ребер.

Для самого общего вида оптимизационной задачи квадратичного типа на максимум нахождение оценки вида Ψ^* сводится к задаче минимизации выпуклой недифференцируемой функции, определенной на параметрическом (линейно зависящем от множителей Лагранжа) семействе неположительно определенных симметричных матриц. Оценка Ψ^* может быть найдена с помощью методов недифференцируемой оптимизации [3], однако ее нахождение связано с трудностями учета области неположительной определенности семейства симметричных матриц. Для задачи (1)–(3) этих трудностей можно избежать, если учесть специфику квадратичных функций цели и ограничений.

Специфика задачи (1)–(3) состоит в том, что целевая функция (1) и ограничения (2) и (3) есть квадратичными "однородными" функциями, т.е. не содержат линейных членов от переменных x_i, $i = 1, \ldots, n$. Свойство "однородности" квадратичных функций в задаче (1)–(3) позволяет избежать решения задачи минимизации выпуклой функции, которая определена на классе неположительно определенных матриц. Нахождение оценки Ψ^* для задачи (1)–(3) можно свести к безусловной задаче минимизации выпуклой функции, т.е. условие на неположительную определенность семейства симметричных матриц можно учесть автоматически. Так, например, этот факт был использован в [4] для задачи о максимальном разрезе графа. Здесь применим аналогичный подход для нахождения оценки Ψ^* для задачи (1)–(3). При этом понадобятся следующие вспомогательные результаты о точных штрафных функциях.

3. Теорема Б.Н. Пшеничного о точных штрафных функциях. Пусть имеется следующая задача оптимизации:

$$\min_{y \in M} f_0(y) \tag{6}$$

$$f_i(y) = 0, \; i = 1, \ldots, m, \tag{7}$$

где $f_i(y)$, $i = 0, 1, \ldots, m$ – непрерывные функции; $M \subset R^n$ – некоторое множество. Для учета ограничений (7) используем негладкую штрафную функцию в виде функции максимума:

$$\begin{aligned} \Phi_N(y) &= f_0(y) + N \cdot F(y), \\ F(y) &= \max\{0, f_1(y), \ldots, f_m(y)\}. \end{aligned} \tag{8}$$

В работе [5] приводится теорема, которая для специального вида задач (6)–(7) дает возможность устанавливать точное значение штрафного множителя N таким, чтобы решение безусловной задачи минимизации функции (8) совпадало с решением задачи (6)–(7).

Этот результат заключается в следующем. Рассмотрим семейство параметрических задач

$$V(z) = \inf\{f_0(y) : f_i(y) \le z_i, i = 1, \dots, m;\ y \in M\}, \tag{9}$$

зависящее от вектора $z \in R^m$. Очевидно, что

$$V(0) = \inf\{f_0(y) : f_i(y) \le 0, i = 1, \dots, m;\ y \in M\}$$

совпадает с решением задачи (6)–(7). Справедлива следующая теорема [5].

Теорема 1. Пусть $\inf\limits_{t>0} \dfrac{V(te) - V(0)}{t} = -L > -\infty$, где e – m-мерный вектор, все компоненты которого равны единице. Если $N > L$, то тогда точки минимума задач $V(0)$ и $\inf\limits_{y \in M} \Phi_N(y)$, где $\Phi_N(y)$ определяется по формуле (8), совпадают.

Теорема 1 позволяет установить точное значение штрафного множителя при использовании для решения задачи (6)–(7) негладкой штрафной функции в виде функции максимума.

4. Нахождение верхней оценки Ψ^*. Основной результат статьи сформулируем в форме следующей теоремы.

Теорема 2. Пусть $u \in R^{n+1}$ и $K(u)$ – симметричная $(n \times n)$-матрица, элементы которой $K_{ij}(u)$ для $\forall i, j = 1, \dots, n$ линейно зависят от компонент вектора u и определяются по правилу

$$K_{ij} = \begin{cases} -u_i - u_{n+1}, & \text{если } i = j, \\ -u_{n+1} - w_{ij}, & \text{если } (i, j) \in E, \\ -u_{n+1}, & \text{если } (i, j) \notin E. \end{cases}$$

Пусть $\lambda_{\max}(A)$ – максимальное собственное число симметричной матрицы A. Тогда глобальному максимуму $mc(G, w, k)$ в задаче (1)–(3) соответствует верхняя оценка

$$\Psi^* = \frac{1}{2} \sum_{(i,j) \in E} w_{ij} + \frac{1}{4} \psi^*, \tag{10}$$

где ψ^* – решение безусловной задачи минимизации выпуклой функции

$$\psi^* = \min_{u \in R^{n+1}} \left(\sum_{i=1}^{n} u_i + (n - 2k)^2 u_{n+1} + S \max\{0, \lambda_{\max}(K(u))\} \right), \tag{11}$$

при $S > n$.

Доказательство. Доказательство теоремы 2 проведем в два этапа. На первом этапе покажем справедливость (10), предполагая, что ψ^* – лагранжева оценка для некоторой новой задачи квадратичного типа. На втором этапе покажем, что ψ^* вычисляется согласно (11), где нижняя граница на негладкий штраф S, равная n, устанавливается с помощью теоремы 1.

Первый этап. Учитывая (4), функцию $Q(x)$ можно записать в виде

$$Q(x) = \frac{1}{2}\sum_{(i,j)\in E} w_{ij} - \frac{1}{2}\sum_{(i,j)\in E} w_{ij}x_i x_j = \frac{1}{2}\sum_{(i,j)\in E} w_{ij} + \frac{1}{4}\sum_{(i,j)\in E}(-2)w_{ij}x_i x_j \ .$$

Следовательно, задача (1)–(3) эквивалентна задаче

$$mc(G,w,k) = \frac{1}{2}\sum_{(i,j)\in E} w_{ij} + \frac{1}{4}q^*, \tag{12}$$

где q^* – решение такой задачи квадратичного типа

$$q^* = \max_{x\in R^n} \frac{1}{4}\sum_{(i,j)\in E}(-2)w_{ij}x_i x_j \ , \tag{13}$$

при ограничениях

$$x_i^2 = 1,\ i = 1,\ldots,n\ , \tag{14}$$

$$\left(\sum_{l=1}^{n} x_i\right)^2 = (n-2k)^2\ . \tag{15}$$

Пусть ψ^* – верхняя лагранжевая оценка для задачи (13)–(15). Тогда из (12) имеем

$$mc(G,w,k) = \frac{1}{2}\sum_{(i,j)\in E} w_{ij} + \frac{1}{4}q^* \le \Psi^* = \frac{1}{2}\sum_{(i,j)\in E} w_{ij} + \frac{1}{4}\psi^*,$$

что означает справедливость равенства (10) при условии, что ψ^* – верхняя лагранжевая оценка, соответствующая задаче (13)–(15).

Второй этап будет состоять в нахождении оценки ψ^* для задачи (13)–(15), согласно методике Н.З.Шора [3], и доказательстве того, что ψ^* вычисляется согласно (11).

Пусть $u \in R^{n+1}$ – вектор множителей Лагранжа, соответствующий ограничениям (14)–(15). Для задачи (13)–(15) запишем функцию Лагранжа

$$L(x,u) = \sum_{(i,j)\in E}(-2)w_{ij}x_i x_j + \sum_{i=1}^{n} u_i(1-x_i^2) + u_{n+1}\left((n-2k)^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2\right) =$$

$$= x^T K(u)x + \sum_{i=1}^{n} u_i + u_{n+1}(n-2k)^2\ .$$

Рассмотрим функцию $\psi(u) = \max_{x\in R^n} L(x,u)$. Она имеет следующую форму:

$$\psi(u) = \begin{cases} +\infty, & \text{если } \lambda_{\max}(K(u)) > 0 \\ \sum_{i=1}^{n} u_i + u_{n+1}(n-2k)^2, & \text{если } \lambda_{\max}(K(u)) \le 0 \end{cases},$$

где $\lambda_{\max}(K(u))$ – максимальное собственное число матрицы $K(u)$. Наилучшая двойственная Лагранжевая оценка $\psi^* = \min_{u \in R^{n+1}} \psi(u)$, которая может быть получена в результате решения задачи выпуклого программирования:

$$\psi^* = \min_{u \in R^{n+1}} \left(\sum_{i=1}^{n} u_i + u_{n+1}(n-2k)^2 \right) \tag{16}$$

при ограничении

$$\lambda_{\max}(K(u)) \le 0\,. \tag{17}$$

Заменим задачу (16)–(17) задачей безусловной оптимизации, используя для учета ограничения (17) негладкую штрафную функцию в виде функции максимума:

$$\psi_S = \min_{u} \left(\sum_{i=1}^{n} u_i + (n-2k)^2 u_{n+1} + S \max\{0, \lambda_{\max}(K(u))\} \right), \tag{18}$$

где S – штрафной множитель ($S > 0$).

Покажем, что если штрафной множитель S установить больше n, то решения задачи (18) и задачи (16)–(17) совпадают. Согласно (9) функция $V(te)$ для задачи (16)–(17) имеет вид

$$V(t) = \inf\left\{ \sum_{i=1}^{n} u_i + (n-2k)^2 u_{n+1} : \lambda_{\max}(K(u)) \le t \right\} =$$

$$= \inf\left\{ \sum_{i=1}^{n} u_i + (n-2k)^2 u_{n+1} : \lambda_{\max}(K(u) + tI) \le 0 \right\} =$$

$$= \inf\left\{ \sum_{i=1}^{n} \tilde{u}_i + (n-2k)^2 \tilde{u}_{n+1} - nt : \lambda_{\max}(K(\tilde{u}_i)) \le 0 \right\} =$$

$$= V(0) - nt,$$

где $\tilde{u}_i = u_i + t$, $i = \overline{1,n}$, $\tilde{u}_{n+1} = u_{n+1}$. Тогда

$$\inf_{t>0} \frac{V(t) - V(0)}{t} = \inf_{t>0} \frac{V(0) - nt - V(0)}{t} = -n = -L > -\infty\,.$$

и согласно теореме 1 при $S > L = n$

$$\psi_S = \min_{u \in R^{n+1}} \left(\sum_{i=1}^{n} u_i + (n-2k)^2 u_{n+1} + S \max\{0, \lambda_{\max}(K(u))\} \right) = \psi^*\,.$$

Теорема доказана.

Таким образом, теорема 2 дает возможность нахождение верхней оценки взвешенной мощности максимального разреза графа с заданными количествами вершин в обоих подмножествах разбиения свести к задаче минимизации выпуклой недифференцируемой функции. Для ее решения целесообразно применять r-алгоритм [3], который на практике зарекомендовал себя эффективным методом решения подобных задач.

П.І. Стецюк, О.А. Березовський

ЛАГРАНЖЕВА ОЦІНКА ДЛЯ МАКСИМАЛЬНОГО РОЗРІЗУ ГРАФА ІЗ ЗАДАНИМИ КІЛЬКОСТЯМИ ВЕРШИН В ОБОХ ПІДМНОЖИНАХ РОЗБИТТЯ

Розглядається задача знаходження верхньої Лагражевої оцінки Ψ^* для квадратичної постановки задачі про максимальний зважений розріз графа із заданими кількостями вершин в обох підмножинах розбиття. Показано, что знаходження Ψ^* зводиться до розв'язування безумовної задачі мінімізації випуклої функції.

P.I. Stetsyuk, O.A. Berezovskyi

LAGRANGIAN BOUND FOR MAXIMUM CUT OF A GRAF WITH GIVEN NUMBERS OF VERTICES IN BOTH PARTITION SUBSETS

The problem of finding upper Lagrange bound Ψ^* for quadratic formulation of maximum cut problem with given numbers of vertices in both partition subsets is considered. It's shown that finding Ψ^* reduce to solving unconstraint problem of minimizing convex function.

1. *Гэри М., Джонсон Д.* Вычислительные машины и труднорешаемые задачи. – М.: Мир, 1982. – 416 с.
2. *Шор Н.З., Стеценко С.И.* Квадратичные экстремальные задачи и недифференцируемая оптимизация. – Киев: Наук. думка, 1989. – 208 с.
3. *Shor N.Z.* Nondifferentiable Optimization and Polynomial Problems. – Dordrecht, Kluwer, 1998. – 394 p.
4. *Шор Н.З. Березовский О.А.* Новые алгоритмы решения задачи о максимальном взвешенном разрезе графа // Кибернетика и системный анализ. – 1995. – № 2. – С.100–106.
5. *Пшеничный Б.Н.* Метод линеаризации. – М.: Наука, 1983. – 136 с.

Получено 05.06.2006