Полу-определённое программирование
Полиномиальная оптимизация

Roland Hildebrand

LJK, Université Grenoble Alpes / CNRS

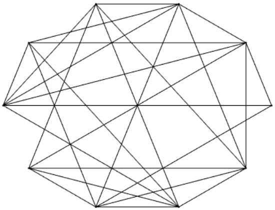
Методы оптимизации, ФУПМ МФТИ, апрель 2021 г.

Задача нахождения максимального разреза (MaxCut)

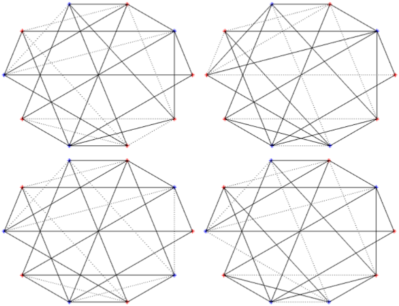
пусть задан граф с неотрицательными весами w_{ij} на рёбрах

требуется разбить множество вершин V графа на два непересекающихся подмножества S, T так, что максимизируется вес *разреза*

$$\sum_{(i,j)\in(S\times T)} w_{ij}$$



граф с n = 10 вершинами и единичными весами на 27 рёбрах



различные разрезы с весом 19

Формализация проблемы

представим разрез в виде вектора $x \in \{-1,+1\}^n$
веса рёбер соберём в симметрической матрице W

тогда вес разреза запишется в виде

$$\frac{1}{4}\left(\mathbf{1}^T W \mathbf{1} - x^T W x\right)$$

заменим вектор x на симметрическую одноранговую матрицу $X = xx^T$, тогда проблема запишется в виде

$$\max_X \frac{1}{4}\langle W, \mathbf{1} - X\rangle$$

с ограничениями

$$X \succeq 0, \ \operatorname{diag}(X) = \mathbf{1}, \ \operatorname{rk} X = 1$$

Полу-определённая релаксация

релаксацию получаем отбрасыванием невыпуклого ограничения на ранг:

$$\max_{X \in \mathcal{S}_+^n} \frac{1}{4}\langle W, \mathbf{1} - X\rangle : \quad \mathrm{diag}(X) = \mathbf{1}$$

обозначим оптимальные значения исходной проблемы MC и её релаксации SR через

$$c_{MC}^{opt} \leq c_{SR}^{opt}$$

оптимальное решение X^* релаксации SR соответствует оптимальному решению x^* исходной задачи MC только если rk $X^* = 1$

тогда оптимальный разрез восстанавливается из факторизации $X^* = xx^T$

Построение суб-оптимальных решений

пусть X^* — оптимальное решение SR произвольного ранга k
тогда факторизация $X^* = FF^T$ даст нам фактор F размера $n \times k$

пусть $\xi \sim \mathcal{N}(0, X^*)$ — гауссовый случайный вектор с ковариацией X^*
тогда $x = \operatorname{sgn} \xi$ определяет *случайный разрез* со значением c_ξ

рассмотрим эквивалентную конструкцию:

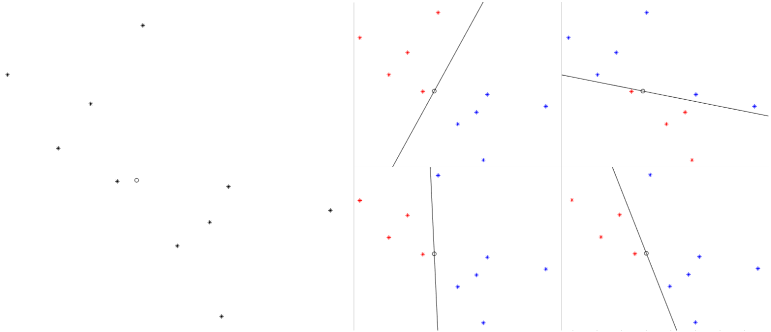
пусть $\psi \sim (0, I)$ — стандартный гауссовый случайный вектор в $\mathbb{R}^k$, и $\xi = F\psi$
пусть $f_1, \dots, f_n \in \mathbb{R}^k$ строки фактора F (на единичной сфере)
тогда $x_i = \operatorname{sgn} \xi_i = \operatorname{sgn} \langle f_i, \psi \rangle$

$$\mathbb{E}\xi\xi^T = X^* = FF^T = F\left(\mathbb{E}\psi\psi^T\right)F^T = \mathbb{E}(F\psi)(F\psi)^T$$

каждая строка $f_i \in \mathbb{R}^k$ соответствует вершине графа

случайный разрез определяется разбиением векторов f_i на два подмножества с помощью случайной гиперплоскости $\psi^\perp$

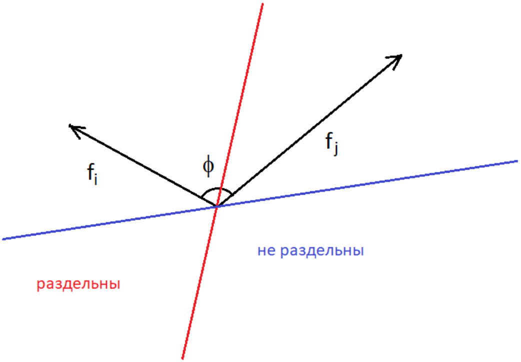
Построение случайных разрезов



слева: $n = 10$ векторов $f_i \in \mathbb{R}^2$

справа: различных разбиений векторов f_i случайными гиперплоскостями вычислим вероятность того, что вершины i, j окажутся в разных подмножествах

$$\mathbb{P}(x_i x_j = -1) = \mathbb{P}(\operatorname{sgn}\langle f_i, \psi\rangle = -\operatorname{sgn}\langle f_j, \psi\rangle) = \frac{\phi(f_i, f_j)}{\pi} = \frac{\arccos X_{ij}^*}{\pi}$$

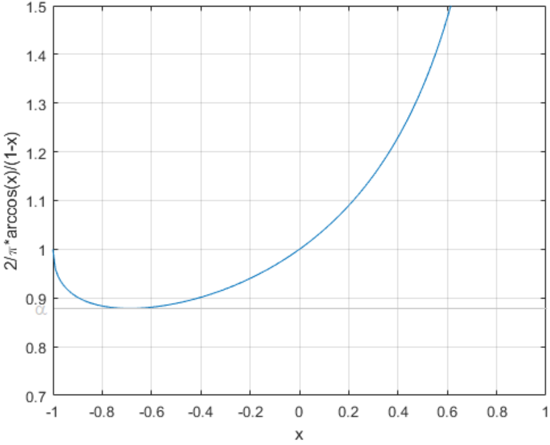


Мат-ожидание веса разреза

мат-ожидание веса случайного разреза задаётся выражением

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_\xi c_\xi = & \frac{1}{4}\langle W, \mathbf{1} - \mathbb{E}_\xi xx^T \rangle \\ = & \frac{1}{2}\sum_{i<j} w_{ij}\mathbb{E}_\xi(1 - x_i x_j) \\ = & \sum_{i<j} w_{ij}\mathbb{P}(x_i x_j = -1) \\ = & \sum_{i<j} w_{ij}\frac{\arccos X^*_{ij}}{\pi} = \frac{1}{2\pi}\langle W, \arccos X^* \rangle \\ \geq & \alpha \cdot \frac{1}{4}\langle W, \mathbf{1} - X^* \rangle = \alpha \cdot c^{opt}_{SR} \end{aligned}$$

где $\alpha = \min_{x\in[-1,1]} \frac{\frac{1}{2\pi}\arccos x}{\frac{1}{4}(1-x)} = \min_{x\in[-1,1]} \frac{2\arccos x}{\pi(1-x)} \approx 0.87856$


1.5
1.4
1.3
1.2
1.1
1
0.9
α
0.8
0.7
2/π*arccos(x)/(1-x)
-1
-0.8
-0.6
-0.4
-0.2
0
0.2
0.4
0.6
0.8
1
x

Теорема Гёманса-Виллиамсона

Теорема (Goemans, Williamson 1995)

Пусть $c_{MC}^{opt}, c_{SR}^{opt}$ — оптимальные значения исходной проблемы максимизации веса разреза и её полу-определённой релаксации. Пусть c_ξ — вес случайного разреза, генерированного с помощью оптимального решения X^* релаксации. Тогда имеем

$$\alpha \cdot c_{SR}^{opt} \leq \mathbb{E} c_\xi \leq c_{MC}^{opt} \leq c_{SR}^{opt},$$

где $\alpha = \min_{x \in [-1,1]} \frac{2 \arccos x}{\pi(1-x)}$.

Политоп максимальных разрезов

релаксацию можно интерпретировать следующим образом:

определим политоп максимальных разрезов (MaxCut polytope)

$$\mathcal{MC} = \operatorname{conv}\left\{ xx^T \mid x \in \{-1,+1\}^n \right\}$$

и полу-определённое множество

$$\mathcal{SR} = \{X \in \mathcal{S}_+^n \mid \operatorname{diag}(X) = \mathbf{1}\}$$

$\mathcal{SR}$ — вычислительно доступное надмножество сложного политопа $\mathcal{MC}$

оптимальные значения представятся в виде

$$c_{MC}^{opt} = \max_{X \in \mathcal{MC}} \frac{1}{4} \langle W, \mathbf{1} - X \rangle$$

$$c_{SR}^{opt} = \max_{X \in \mathcal{SR}} \frac{1}{4} \langle W, \mathbf{1} - X \rangle$$

Максимизация выпуклой формы на кубе

пусть $Q \in \mathcal{S}_+^n$ — выпуклая квадратичная форма на $\mathbb{R}^n$

проблему максимизации

$$\max_{x \in [-1,1]^n} x^T Q x$$

можно записать в виде

$$\max_{X \in \mathcal{MC}} \langle Q, X \rangle$$

поскольку выпуклая функция достигает максимума на политопе в вершине

заменой $\mathcal{MC}$ на $\mathcal{SR}$ получаем релаксацию

$$\max_{X \in \mathcal{SR}} \langle Q, X \rangle = \max_{X \in \mathcal{S}_+^n} \langle Q, X \rangle : \ \mathrm{diag}(X) = \mathbf{1}$$

Построение субоптимальных решений

пусть X^* — оптимальное решение релаксации
пусть $\xi \sim \mathcal{N}(0, X^*)$ случайный гауссовый вектор, и $x = \operatorname{sgn} \xi$, $X = xx^T$

тогда $X \in \mathcal{MC}$ является (случайным) субоптимальным решением исходной задачи

мат-ожидание элементов X равно

$$\begin{aligned}\mathbb{E}_\xi X_{ij} &= \mathbb{P}(x_i x_j = 1) - \mathbb{P}(x_i x_j = -1) = 1 - 2\mathbb{P}(x_i x_j = -1) \\ &= 1 - 2\frac{\arccos X^*_{ij}}{\pi} = \frac{2}{\pi} \arcsin X^*_{ij}\end{aligned}$$

отсюда мат-ожидание цены

$$\mathbb{E}_\xi \langle Q, X \rangle = \frac{2}{\pi} \langle Q, \arcsin X^* \rangle$$

где arcsin применяется по-элементно

Теорема

Пусть $Q \in \mathcal{S}_+^n$. *Тогда*

$$\frac{2}{\pi} \max_{X \in \mathcal{SR}} \langle Q, X \rangle \leq \max_{x \in [-1,1]^n} x^T Q x \leq \max_{X \in \mathcal{SR}} \langle Q, X \rangle.$$

док-во:

$$\frac{2}{\pi}\langle Q, X^* \rangle \leq \frac{2}{\pi}\langle Q, \arcsin X^* \rangle = \mathbb{E}_\xi \langle Q, X \rangle \leq$$

$$\leq \max_{x \in [-1,1]^n} x^T Q x \leq \max_{X \in \mathcal{SR}} \langle Q, X \rangle$$

$\leq$ поскольку $\arcsin X = X + \frac{X^3}{6} + \frac{3X^5}{40} + \frac{5X^7}{112} + \cdots$ с положительными коэффициентами

Задача о максимальной клике (MaxClique)

Определение

Кликой графа G называют подмножество S вершин такое, что любые две вершины из S соединены ребром. Максимальной кликой называется клика, которая перестаёт быть кликой при добавлении любой дополнительной вершины. Кликовым числом $\alpha(G)$ графа G называется мощность наибольшей клики.

верхней оценкой кликового числа является ϑ-*функция Ловаша*, которую можно вычислить полу-определённой программой

$$\max_{X \succeq 0} \langle X, \mathbf{1} \rangle : \; X \bullet A_{\bar{G}} = 0, \; \mathrm{tr}\, X = 1$$

или двойственной к ней

$$\min \lambda_{\max}(Y + \mathbf{1}) : \; Y \bullet A_G = 0, \; \mathrm{diag}\, Y = 0$$

Задача о максимальной клике

пусть $S \subset V$ — наибольшая клика графа G, и k — её мощность

определим матрицу $X = (X_{ij})$:

$$X_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{k}, & i,j \in S, \\ 0, & \{i,j\} \not\subset S. \end{cases}$$

тогда

$$\mathrm{tr}\, X = 1, \quad X \succeq 0, \quad X \bullet A_{\bar{G}} = 0, \quad \langle X, \mathbf{1} \rangle = k$$

отсюда

$$k \leq \vartheta(G)$$

Определение

Подмножество вершин S графа G называется **независимым***, если любые его два элемента несмежные. Мощность самого большого независимого множество называется* **вершинным числом независимости***.*

независимые множества G соответствуют кликам $\bar{G}$, и вершинное число независимости G равно кликовому числу $\bar{G}$

ϑ-функция Ловаша даёт верхнюю границу

Условия неотрицательности в полиномиальной оптимизации

Определение

Обозначим через $P_{n,d}$ *множество неотрицательных на* $\mathbb{R}^n$ *однородных полиномов* $p : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ *степени* d.

для чётных d множество $P_{n,d}$ является регулярным выпуклым конусом

условия вида $p \in P_{n,d}$ можно интерпретировать как конические ограничения на вектор коэффициентов полинома p

неотрицательность полинома p в общем случае трудно проверить, поэтому релаксируем условием представимости в виде *суммы квадратов* (СК, sum of squares – SOS)

Суммы квадратов

Определение

Обозначим через $\Sigma_{n,d}$ множество однородных полиномов $p : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ степени d, представимых в виде конечной суммы $p(x) = \sum_k q_k^2(x)$, где $q_k(x)$ — однородные полиномы степени $d/2$.

для чётных d множество $\Sigma_{n,d}$ является регулярным выпуклым конусом, и $\Sigma_{n,d} \subset P_{n,d}$

в релаксациях типа сумм квадратов условие $p \in P_{n,d}$ релаксируется более сильным условием $p \in \Sigma_{n,d}$

Точность СК-релаксаций

для чётного d равенство $P_{n,d} = \Sigma_{n,d}$ выполняется тогда и только тогда, когда [Гильберт 1888]

- $d = 2$ (квадрики)
- $n \leq 2$ ($n = 1$: скаляры, $n = 2$: полиномы на $\mathbb{R}$)
- $n = 3$, $d = 4$

во всех других случаях не только имеет место *строгое* включение $\Sigma_{n,d} \subset P_{n,d}$, но даже
не существует полу-определённого представления конуса $P_{n,d}$

пример: полином Моцкина

$$p(x, y, z) = x^4y^2 + x^2y^4 + z^6 - 3x^2y^2z^2$$

является элементом разницы $P_{3,6} \setminus \Sigma_{3,6}$

Полиномы на $\mathbb{R}$

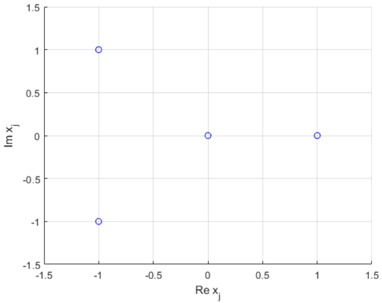
полином $p \in P_{2,d}$ эквивалентен неоднородному полиному $\tilde{p}(x) = p(x, 1)$ степени не больше d

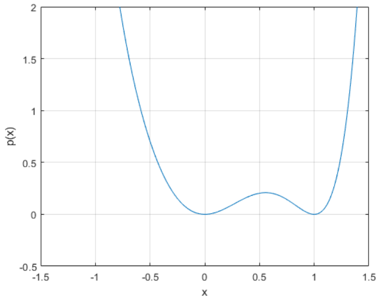
покажем, что любой неотрицательный полином $p : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ степени d представляется в виде суммы квадратов

- d чётное
- $p(x) = a \prod_{j=1}^{d}(x - x_j)$, где $a = (\sqrt{a})^2 > 0$
- вещественные корни имеют чётную кратность $\Rightarrow$ получаем множитель $(x - x_j)^2$
- комплексные корни возникают в сопряжённых парах $a \pm ib$ $\Rightarrow$ получаем множитель $(x - a)^2 + b^2$
- произведение сумм квадратов является суммой квадратов

$$p(x) = x^6 - x^4 - 2x^3 + 2x^2$$

корни и значения на $\mathbb{R}$ полинома $p(x)$





$$p(x) = ((x+1)^2 + 1)x^2(x-1)^2 = (x(x^2-1))^2 + (x(x-1))^2$$

пусть $\mathbf{x} = (x^\alpha)_{|\alpha|=d}$ — вектор всех N мономов степени d
здесь $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n) \in \mathbb{N}^n$ — мульти-индекс, $x^\alpha = \prod_{j=1}^n x_j^{\alpha_j}$, $|\alpha| = \sum_{j=1}^n \alpha_j$

тогда любой однородный полином q_j степени d записывается в виде

$$q_j(x) = \sum_{|\alpha|=d} q_{j,\alpha} x^\alpha = \langle \mathbf{q}_j, \mathbf{x} \rangle$$

где $\mathbf{q}_j = (q_{j,\alpha})_{|\alpha|=d}$ — его вектор коэффициентов

однородный полином p степени $2d$ записывается в виде

$$p(x) = \mathbf{x}^T P \mathbf{x}$$

для некоторой матрицы $P \in \mathcal{S}^N$, поскольку любой моном степени $2d$ является произведением двух мономов степени d

Полу-определённая представимость условия СК

сумму квадратов $p \in \Sigma_{n,2d}$ можно записать в виде

$$p(x) = \sum_{j=1}^{m} q_j(x)^2 = \sum_{j=1}^{m} \langle \mathbf{q}_j, \mathbf{x} \rangle^2 = \mathbf{x}^T P \mathbf{x}$$

где $P = \sum_{j=1}^{m} \mathbf{q}_j \mathbf{q}_j^T \succeq 0$

теперь положим $P = QQ^T \succeq 0$ с $Q = (\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_m)$

отсюда

$$p(x) = \mathbf{x}^T P \mathbf{x} = (Q^T \mathbf{x})^T (Q^T \mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{m} \langle \mathbf{q}_j, \mathbf{x} \rangle^2 = \sum_{j=1}^{m} q_j(x)^2$$

записывается в виде СК полиномов $q_j(x) = \langle \mathbf{q}_j, \mathbf{x} \rangle$

условие $p \in \Sigma_{n,2d}$ *эквивалентно* полу-определённому условию

$$\exists\, P \in \mathcal{S}_+^N : \quad p(x) = \mathbf{x}^T P \mathbf{x}$$

Минимизация полинома на $\mathbb{R}$

рассмотрим задачу

$$\min_{x \in \mathbb{R}} p(x)$$

где p — полином степени $2d$

задача эквивалентна

$$\max t: \;\; p(x) - t \geq 0 \quad \forall\, x \in \mathbb{R}$$

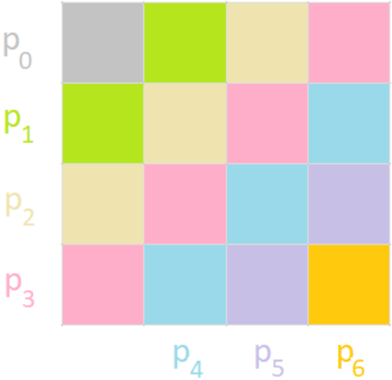
$$\Leftrightarrow \quad \max t: \;\; p(x) - t \quad \text{является СК}$$

пусть $\mathbf{x} = (1, x, \dots, x^d)^T$, с индексацией от 0 до d
тогда $p(x) - t$ является СК $\Leftrightarrow \exists\, P \in \mathcal{S}_+^{d+1}$: $p(x) - t = \mathbf{x}^T P \mathbf{x}$
сравним коэффициенты при степенях x
получаем полу-определённую программу

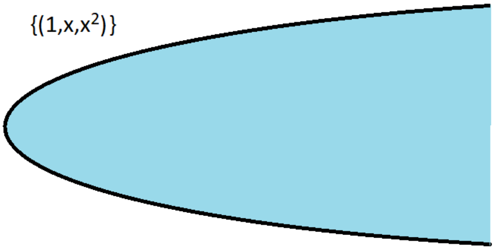
$$\max_{t, P \succeq 0} t: \quad p_k = \sum_{i+j=k} P_{ij},\; k = 1, \dots, 2d;\; p_0 - t = P_{00}$$

Условие неотрицательности: полиномы на $\mathbb{R}$

полином $p : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ степени $2d$ является неотрицательным тогда и только тогда, когда существует $P \in \mathcal{S}_+^{d+1}$ такая, что суммы элементов P по косым диагоналям равны коэффициентам полинома p



минимизация полинома общего вида на $\mathbb{R}$ — невыпуклая задача



минимизируем линейный функционал не на моментной кривой

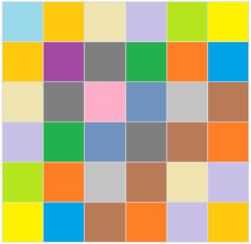
$$\{(1, x, \dots, x^d) \mid x \in \mathbb{R}\}$$

а на её выпуклой оболочке

оболочка имеет полу-определённое представление рассмотрим квартику

$$p(x,y) = p_{00} + p_{10}x + p_{01}y + \cdots + p_{40}x^4 + p_{04}y^4$$

имеем $p(x,y) \geq 0$ тогда и только тогда, когда существует $P \in \mathcal{S}^6_+$ такое, что представленные ниже суммы элементов P равны коэффициентам p



p_{00} p_{10} p_{20} p_{30} p_{40} p_{01} p_{11} p_{21}
p_{31} p_{02} p_{12} p_{22} p_{03} p_{13} p_{04}

здесь $\mathbf{x} = (x^2, y^2, 1, y, x, xy)^T$

Коположительные матрицы

Определение

Матрица $A \in \mathcal{S}^n$ называется коположительной если $x^T A x \geq 0$ для всех $x \in \mathbb{R}^n_+$. Множество коположительных матриц образует коположительный конус $\mathcal{COP}^n$.

коположительность A эквивалентна неотрицательности квартики

$$p_A(x) = \sum_{i,j=1}^{n} A_{ij} x_i^2 x_j^2$$

достаточным условием является представимость p_A в виде СК: $p_A \in \Sigma_{n,4}$
оно эквивалентно существованию разложения $A = P + N$ на $P \in \mathcal{S}^n_+$, $N \geq 0$

это условие также необходимо при $n \leq 4$

Задача о максимальной клике

кликовое число графа G можно представить в виде оптимального значения коположительной программы

$$\min_{Z \in \mathcal{COP}^n} \alpha : \quad Z = \alpha(I + A_{\bar{G}}) - \mathbf{1} = (\alpha - 1)\mathbf{1} - \alpha A_G$$

здесь $\mathbf{1}$ — матрица, состоящая из единиц

верхняя оценка на $\alpha(G)$ получается полу-определённой релаксацией

$$\min_{Z \succeq 0} \lambda : \quad Z \leq \lambda(I + A_{\bar{G}}) - \mathbf{1} = (\lambda - 1)\mathbf{1} - \lambda A_G$$

она получается заменой $\mathcal{COP}^n$ на $\mathcal{S}_+^n + \mathcal{N}^n$
здесь $\mathcal{N}^n$ — конус по-элементно неотрицательных симметрических матриц

сложнее и сильнее, чем ϑ-функция Ловаша

Полиномиальная оптимизация

рассмотрим проблему *полиномиальной оптимизации*

$$\min_{x \in K} f_0(x)$$

где

$$K = \{x \mid f_i(x) = 0,\ g_j(x) \leq 0\}$$

базовое полу-алгебраическое множество

все функции f_i, g_j — полиномы

пусть $P_{K,d}$ — конус полиномов степени, не превосходящей d, неотрицательных на K

проблема запишется в виде конической программы над конусом $P_{K,d}$

$$\max \tau : \quad f_0(x) - \tau \in P_{K,d}$$

здесь $d \geq \deg f_0$

Конус СК $\Sigma_{K,d}$

необходимо аппроксимировать конус $P_{K,d}$ полу-определённо представимым конусом

пусть $\Sigma_{K,d}$ — множество всех полиномов степени, не превосходящей d, представимых в виде конечной суммы

$$p(x) = \sigma_0(x) + \sum_i p_i(x) f_i(x) - \sum_j \sigma_j(x) g_j(x)$$

где σ_i — СК, а p_i — произвольные полиномы

можно усилить релаксацию, работая с представлениями вида

$$p(x) = \sigma_0(x) + \sum_i p_i(x) f_i(x) - \sum_j \sigma_j(x) g_j(x) + \sum_{i,j} \sigma_{i,j}(x) g_i(x) g_j(x)$$

и т.д.

Релаксация СК

имеем $\Sigma_{K,d} \subset P_{K,d}$, поэтому значение τ_d полу-определённой программы

$$\max \tau : \quad f_0(x) - \tau \in \Sigma_{K,d}$$

не больше значения τ^* исходной проблемы

последовательность τ_d возрастает с d

Теорема (Putinar 1993, Lasserre 2001)

Пусть K — компакт. Тогда $\lim_{d\to\infty} \tau_d = \tau^*$.

Пример

минимизируем полином $p(x,y)$ на квадрате $[-1,1]^2$

СК релаксация запишется в виде

$$\begin{aligned} &\max \tau : \\ p(x,y) - \tau = &\sigma_0(x,y) - \sigma_1(x,y)\cdot(x-1) - \sigma_2(x,y)\cdot(-x-1) \\ &- \sigma_3(x,y)\cdot(y-1) - \sigma_4(x,y)\cdot(-y-1) \end{aligned}$$

где $\sigma_0,\dots,\sigma_4$ — СК

Дальнейшие релаксации

сложность СК релаксаций быстро возрастает с n и d

условие неотрицательной определённости $A \succeq 0$ можно заменить более сильными, простыми условиями

- DSOS (diagonally dominant sum of squares): диагональный элемент доминирует 1-норму строки, SDP $\to$ LP
- SDSOS (scaled diagonally dominant sum of squares): матрица A является суммой положительно определённых 2×2 подматриц, SDP $\to$ SOCP

Программное обеспечение

релаксации типа сумм СК можно строить и решать с помощью пакета SOStools (A. Papachristodoulou, J. Anderson, G. Valmorbida, S. Prajna, P. Seiler, P.A. Parrilo)
`http://www.cds.caltech.edu/sostools/`

другие пакеты

- Sparse-BSOS (разреженные проблемы большой размерности, T. Weisser, J.-B. Lasserre, K.-C. Toh)
- SOSOPT (представимость в виде СК и оптимизация, P. Seiler)
- SPOT (наподобие SOStools, A. Megretski)
- SPOTless (DSOS, SDSOS, A. Megretski, M. Tobenkin, F. Permenter, A. Majumdar)

Спасибо за внимание