Une approche par moindres carrés semidéfinis pour le problème k-cluster

Jérôme Malick,[1] and Frédéric Roupin[2]

[1] CNRS, Laboratoire J. Kunztmann, 51 rue des Mathématiques, 38400 Grenoble, France.
jerome.malick@inrialpes.fr

[2] CEDRIC-CNAM, 292 rue Saint-Martin, 75141 Paris Cedex France.
roupin@cnam.fr

Nous présentons une application au problème k-cluster d'une nouvelle approche de type optimisation semidéfinie : une approche par "moindres carrés semidéfinis" [4,5].

Le problème k-cluster est un problème d'optimisation combinatoire NP-difficile (même dans les graphes bipartis). Soient un graphe non orienté de n sommets $G = (V, E)$ et un entier $1 \leq k \leq n$; on cherche un sous-graphe de G de k sommets avec un nombre maximal d'arêtes. Ce problème peut se formuler comme un programme quadratique en variables 0-1 :

$$(k\text{-cluster}) \quad \begin{cases} \max \quad y^\top A\, y \\ \quad e^\top y = k \\ \quad y \in \{0,1\}^n, \end{cases}$$

avec $e = (1, \ldots, 1) \in \mathbf{R}^n$ et A la matrice d'adjacence de G. Plusieurs approches par programmation mathématique ont été proposées pour résoudre ce problème - en particulier par programmation linéaire [2], semidéfinie [3,6] ou quadratique convexe [1].

Pour obtenir une relaxation par moindres carrés semidéfinis, nous utilisons une reformulation des contraintes binaires par une contrainte dite "sphérique" [4]. Voici schématiquement l'idée de cette reformulation. La première étape consiste à opérer un changement de variable pour écrire la contrainte de bivalence sous la forme $x \in \{-1, 1\}^n$, puis à homogénéiser les formes quadratiques en ajoutant une variable pour finalement obtenir un problème d'optimisation purement quadratique en $x \in \mathbf{R}^{n+1}$:

$$(\text{QP}) \quad \begin{cases} \max \quad x^\top Q_1\, x \\ \quad x^\top Q_2\, x = 2k - n \\ \quad x \in \{-1,1\}^{n+1}, \end{cases}$$

avec Q_1 et Q_2 dépendant de A et e (plus précisément, $Q_2 = [0, e^\top; e, \text{zeros}(n,n)]$). On applique ensuite le classique "lifting" dans l'espace des matrices symétriques que l'on munit du produit scalaire

$$\langle X, Y \rangle = \text{trace}(XY) \qquad \text{pour } X, Y \text{ matrices symétriques.}$$

Ceci consiste à introduire la matrice symétrique de rang 1 de taille $n+1$ qui s'écrit $X = xx^\top$ pour réécrire de manière équivalente le problème de k-cluster comme :

$$(\text{SDP}) \quad \begin{cases} \max \quad \langle Q_1, X \rangle \\ \quad \langle Q_2, X \rangle = 2k - n \\ \quad \text{diag}(X) = e \\ \quad \text{rang}(X) = 1 \\ \quad X \succeq 0 \end{cases}$$

La dernière contrainte signifie que la matrice X est semi-définie positive (SDP). L'étape finale - c'est ici le point clé et original de la formulation - consiste alors à remarquer que dans cette situation la contrainte de rang 1 est précisement équivalente à la contrainte $\|X\|^2 = (n+1)^2$, que l'on appelle contrainte sphérique.

Nous montrons que la dualisation de la contrainte sphérique conduit alors à un programme semidéfini de moindres carrés. Le calcul d'une borne duale revient essentiellement à résoudre

$$\begin{cases} \min \quad \|X - Q_1/\alpha\|^2 \\ \quad \langle Q_2, X\rangle = 2k - n \\ \quad \operatorname{diag}(X) = e \\ \quad X \succeq 0 \end{cases}$$

Un problème de ce type peut être résolu numériquement par des méthodes efficaces même pour de grandes tailles (voir [5]). Un avantage majeur de cette approche est la réduction possible du temps de résolution de la relaxation en échange d'une dégradation de la qualité de la borne (en fixant la valeur du paramètre α). Cette possibilité est particulièrement appréciable dans le contexte d'une résolution exacte (de type Branch&Bound par exemple). Nous comparons notre approche avec les différentes relaxations proposées (en particulier les liens de dominance théorique), et nous donnons de premiers résultats numériques effectués sur des instances classiques du problème k-cluster.

Références

1. Billionnet A., Elloumi S., et Plateau M.-C. : Improving the performance of standard solvers for quadratic 0-1 programs by a tight convex reformulation : the QCR method. A paraître dans Discrete Applied Mathematics, 2009.
2. Billionnet A. : Different formulations for solving the heaviest k-subgraph problem. Information Systems and Operational Res., 43(3), 171-186, 2005.
3. Jäger G., et Srivastav A. : Improved approximation algorithms for maximum graph partitioning problems. Journal of combinatorial optimization 10(2), 133-167, 2005.
4. Malick, J. : The spherical constraint in Boolean quadratic programs. Journal of Global Optimization 39(4), 609-622, 2007.
5. Malick, J. : A dual approach to semidefinite least-squares problems. SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications 26(1), 272-284, 2004.
6. Roupin, F. : From linear to semidefinite programming : an algorithm to obtain semidefinite relaxations for bivalent quadratic problems. Journal of Combinatorial Optimization, 8(4), 2004.