Модел. и анализ информ. систем. Т. **19**, № **4** (2012) 72–77

УДК 514.172.45+519.146

Замечания о расположениях точек на квадриках

Селиверстов А. В.

Институт проблем передачи информации им. А. А. Харкевича РАН

e-mail: slvstv@iitp.ru

получена 6 февраля 2012; исправлена 14 марта 2012

Ключевые слова: комбинаторная оптимизация, квадратичное программирование, пустая квадрика, многогранник, фасета

Рассмотрена задача минимизации квадратичного многочлена на множестве всех точек многомерного вещественного пространства, координаты которых равны нулю или единице. Получены некоторые ограничения на взаимное расположение точек минимума, когда их достаточно много.

Обозначим $\mathbb{B} = \{0, 1\}$. Рассмотрим множество $\mathbb{B}^n$ точек n-мерного вещественного пространства, координаты которых принадлежат $\mathbb{B}$. Минимизация квадратичного многочлена на множестве $\mathbb{B}^n$ является, вообще говоря, алгоритмически трудной задачей. Эффективные алгоритмы применимы лишь в частных случаях [1]. В [2, 3] дан обзор эвристических алгоритмов. В [4] рассмотрена минимаксная задача, в которой оптимизация ведётся по двум множествам $\mathbb{B}^n$ и $\mathbb{B}^m$.

Вес точки равен сумме модулей координат. Для точки $\mathbf{a}$ *относительным весом* точки $\mathbf{x}$ назовём сумму модулей координат разности $\mathbf{x} - \mathbf{a}$. Обозначим $\mathbf{0}$ начало координат, $\mathbf{1} \in \mathbb{B}^n$ точку веса n, все координаты которой равны 1, и $\mathbf{e}_i \in \mathbb{B}^n$ точки веса один.

Квадрикой называется множество нулей квадратичного многочлена, может быть неоднородного или приводимого, в аффинном пространстве. В частности, квадрику задаёт каждое из уравнений $x_i^2 = 0$ (двойная гиперплоскость), $x_i(x_i - 1) = 0$ (две параллельные гиперплоскости) и $x_i^2 + 1 = 0$ (без вещественных точек).

Обозначим $N = \frac{n(n-1)}{2}$. Определим отображение $\lambda : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^N$. Пусть $\mathbf{x}$ — вектор-столбец. Тогда координаты $\lambda(\mathbf{x})$ — элементы квадратной матрицы $\mathbf{x}\mathbf{x}^t$, лежащие выше главной диагонали.

Следуя [5], фасетами многогранника называются его грани коразмерности один. Обозначим $\mathbb{V}_n$ образ множества $\mathbb{B}^n$ при отображении $(\mathrm{id}, \lambda) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n \oplus \mathbb{R}^N$; BQP_n — выпуклую оболочку множества $\mathbb{V}_n$. Согласно [6] каждая точка из $\mathbb{V}_n$ — вершина 2-смежностного $(n + N)$-мерного многогранника BQP_n. Общие свойства 2-смежностных многогранников исследуются, например, в [7]. У 3-мерного многогранника BQP_2 четыре вершины, это симплекс. У 6-мерного многогранника BQP_3 восемь вершин и 16 фасет. Не известно эффективного описания всех фасет BQP_n;

описание серий фасет BQP_n представляет практическую ценность [8]. Примеры серий фасет для некоторых типов многогранников приведены в [9, 10, 11].

На квадрике вида $\alpha_0 \cdot f(x_1, \ldots, x_n) + \alpha_1(x_1^2 - x_1) + \cdots + \alpha_n(x_n^2 - x_n) = 0$ при $\alpha_0 \neq 0$ лежат те и только те точки из $\mathbb{B}^n$, которые лежат на квадрике $f = 0$. Эти квадрики назовём $\mathbb{B}$-*эквивалентными*. Каждая квадрика определяет гиперплоскость в $\mathbb{R}^{n+N}$. Действительно, каждая квадрика $\mathbb{B}$-эквивалентна квадрике вида $g = \beta$, где g — квадратичная форма на $\mathbb{R}^n$, β — число. Коэффициенты формы g — это коэффициенты линейной формы на $\mathbb{R}^{n+N}$.

Квадрика $f = 0$ *пустая*, если соответствующая ей гиперплоскость в $\mathbb{R}^{n+N}$ является опорной к BQP_n. В этом случае значения многочлена f на $\mathbb{B}^n$ либо все неотрицательные, либо все неположительные. Многочлены f и $-f$ определяют одну и ту же квадрику, но ниже по умолчанию предполагается, что значения многочлена f, определяющего пустую квадрику, неотрицательные в каждой точке из $\mathbb{B}^n$. При таком выборе f на пустой квадрике лежат те и только те точки из $\mathbb{B}^n$, в которых многочлен f достигает минимума. Понятие пустая квадрика является обобщением введённого Б. Н. Делоне понятия *пустая сфера* [12] и понятия *пустой эллипсоид* [8].

Из результатов [13] следует, что пустая квадрика, на которой лежат две или более точек из $\mathbb{B}^n$, $\mathbb{B}$-эквивалентна цилиндру — квадрике неполного ранга.

Теорема 1. *Даны пустая квадрика $f = 0$ в n-мерном пространстве и подмножество $\{\mathbf{s}^{(m)}\} \subset \mathbb{B}^n \backslash \{\mathbf{1}\}$. Пусть точку $\lambda(\mathbf{1}) \in \mathbb{R}^N$ можно представить линейной комбинацией*
$$\lambda(\mathbf{1}) = \sum_m \alpha_m \lambda(\mathbf{s}^{(m)}). \tag{1}$$
Обозначим для каждого индекса i
$$\gamma_i = \left(\sum_m \alpha_m s_i^{(m)} \right) - 1.$$
Пусть для каждого индекса i выполнено строгое неравенство $\gamma_i > 0$. Тогда, если точка $\mathbf{0}$ и все точки из $\{\mathbf{s}^{(m)}\}$ лежат на этой квадрике, то всё множество $\mathbb{B}^n$ лежит на ней.

Доказательство. Поскольку $f(\mathbf{0}) = 0$, квадратичный многочлен f имеет вид
$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i,j} f_{ij} x_i x_j + \sum_i f_i x_i,$$
где для каждого индекса i сумма $f_{ii} + f_i = f(\mathbf{e}_i) \geqslant 0$. Значение f равно сумме значений двух линейных форм F_1 на $\mathbb{R}^n$ и F_2 на $\mathbb{R}^N$, т.е. $f(\mathbf{x}) = F_1(\mathbf{x}) + F_2(\lambda(\mathbf{x}))$, где $F_1(\mathbf{x}) = \sum_i (f_i + f_{ii}) x_i$ и $F_2(\lambda(\mathbf{x})) = \sum_{i \neq j} f_{ij} x_i x_j$. Заменяя $\lambda(\mathbf{1})$ линейной комбинацией (1), получим
$$f(\mathbf{1}) = -\sum_i \gamma_i (f_{ii} + f_i) + \sum_m \alpha_m F_1(\mathbf{s}^{(m)}) + \sum_m \alpha_m F_2(\lambda(\mathbf{s}^{(m)})) = -\sum_i \gamma_i (f_{ii} + f_i).$$
Для каждого индекса i множитель $\gamma_i > 0$. Следовательно, $f(\mathbf{1}) \leqslant 0$. Но поскольку квадрика пустая, это значение неотрицательно $f(\mathbf{1}) \geqslant 0$. Следовательно, $f(\mathbf{1}) = 0$

и для каждого индекса i выполнено $f_{ii} + f_i = 0$. Из неотрицательности значений $f(\mathbf{e}_i + \mathbf{e}_j)$ следует, что для каждой пары индексов $i \neq j$ коэффициенты $f_{ji} = f_{ij} \geqslant 0$. Поскольку $f(\mathbf{1}) = 0$, получаем $f_{ij} = 0$. Тогда многочлен

$$f = \sum_i (f_{ii}x_i^2 + f_i x_i) = \sum_i f_{ii}(x_i^2 - x_i)$$

равен нулю на $\mathbb{B}^n$. □

Замечание. Если в условии (1) теоремы 1 все коэффициенты α_m неотрицательные, то для каждого индекса i выполнено строгое неравенство $\gamma_i > 0$.

Следствие 1. *Даны пустая квадрика в n-мерном пространстве и целое число w, где $2 \leqslant w \leqslant n-1$. Если точка $\mathbf{0}$ и все точки из $\mathbb{B}^n$ веса w лежат на этой квадрике, то всё множество $\mathbb{B}^n$ лежит на этой квадрике.*

Доказательство. В этом случае

$$\lambda(\mathbf{1}) = \frac{(n-w)!(w-2)!}{(n-2)!} \sum \lambda(\mathbf{s}),$$

где суммирование происходит по всем точкам $\mathbf{s}$ из $\mathbb{B}^n$ веса w. Для каждого индекса i выполнено

$$\gamma_i = \frac{n-w}{w-1} > 0.$$

□

Пример. Если четыре точки из $\mathbb{B}^3$ с координатами $(0,0,0)$, $(0,1,1)$, $(1,1,0)$ и $(1,0,1)$ лежат на пустой квадрике, то всё $\mathbb{B}^3$ лежит на этой квадрике. В этом случае $\lambda(\mathbf{1}) = \lambda(0,1,1) + \lambda(1,1,0) + \lambda(1,0,1)$ и все $\gamma_i = 1$. Аналогично, если четыре точки из $\mathbb{B}^3$ с координатами $(0,0,1)$, $(0,1,0)$, $(1,0,0)$ и $(1,1,1)$ лежат на пустой квадрике, то всё $\mathbb{B}^3$ лежит на этой квадрике.

Замечание. В посылках теоремы и следствия квадрике принадлежит точка $\mathbf{0}$. Но начало координат можно перенести в любую точку $\mathbf{a} \in \mathbb{B}^n$. При этом вес надо заменить на вес относительно точки $\mathbf{a}$.

Если ослабить требование пустоты квадрики, то единственное ограничение для $n = 3$ таково: если семь точек из $\mathbb{B}^3$ лежат на квадрике, то лежит и восьмая точка. Для больших размерностей известно [14, 15], что если всё $\mathbb{B}^n$ не лежит на квадрике, то доля лежащих на ней точек не превосходит $\frac{3}{4}$. И для многочленов, имеющих достаточно много членов, эта доля стремится к нулю с ростом n.

Пример. Если 5 точек с координатами $(0,0,0,0)$, $(0,1,1,1)$, $(1,1,0,0)$, $(1,0,1,0)$ и $(1,0,0,1)$ лежат на пустой квадрике, то всё множество $\mathbb{B}^4$ лежит на этой квадрике. Действительно, в этом случае

$$\lambda(\mathbf{1}) = \lambda(0,1,1,1) + \lambda(1,1,0,0) + \lambda(1,0,1,0) + \lambda(1,0,0,1).$$

Кроме того, $\gamma_1 = 2$ и $\gamma_2 = \gamma_3 = \gamma_4 = 1$.

Теорема 2. *Даны пустая квадрика в n-мерном пространстве и целое число w, где $2 \leqslant w \leqslant n-2$. Если все точки из $\mathbb{B}^n$ веса w лежат на этой квадрике, но некоторая точка из $\mathbb{B}^n$ другого веса не лежит на ней, то вес каждой точки из $\mathbb{B}^n$, лежащей на этой квадрике, равен одному из трёх значений: $w-1$, w или $w+1$.*

Доказательство от противного. Предположим, что на квадрике лежит точка $\mathbf{a} \in \mathbb{B}^n$ веса $w' \leqslant w-2$. Рассмотрим подмножество $S \subset \mathbb{B}^n$, состоящее из точек, каждая координата которых не меньше соответствующей координаты точки $\mathbf{a}$. Вес точки из S равен w тогда и только тогда, когда относительно $\mathbf{a}$ её вес равен $w - w' \geqslant 2$. Согласно следствию 1 и замечанию после него на квадрике лежит точка $\mathbf{1}$. Каждая точка из $\mathbb{B}^n$ веса w имеет относительно $\mathbf{1}$ вес $n-w \geqslant 2$. По следствию 1 всё множество $\mathbb{B}^n$ лежит на квадрике. Противоречие доказывает, что вес каждой точки из $\mathbb{B}^n$, лежащей на квадрике, больше либо равен $w-1$.

Предположим, что на квадрике лежит точка $\mathbf{a} \in \mathbb{B}^n$ веса $w' \geqslant w+2$. Рассмотрим подмножество $S \subset \mathbb{B}^n$, состоящее из точек, каждая координата которых не больше соответствующей координаты точки $\mathbf{a}$. Вес точки из S равен w тогда и только тогда, когда относительно $\mathbf{a}$ её вес равен $w' - w \geqslant 2$. По следствию 1 на квадрике лежит точка $\mathbf{0}$. Вновь по следствию 1 всё $\mathbb{B}^n$ лежит на квадрике. Противоречие доказывает, что вес каждой точки из $\mathbb{B}^n$, лежащей на квадрике, меньше либо равен $w+1$. □

Замечание. В посылках следствия 1 и теоремы 2 нельзя положить $w = 1$, поскольку на квадрике $(x_1 + \cdots + x_n - 1) \cdot x_1 = 0$ лежат все точки веса один и все точки с координатой $x_1 = 0$ весов от нуля до $n-1$, но не лежит точка $\mathbf{1}$.

Теорема 3. *Дана квадрика $f = 0$, соответствующая некоторой фасете многогранника* BQP_n, *на которой лежат начало координат* $\mathbf{0}$ *и все точки веса один* $\{\mathbf{e}_i | 1 \leqslant i \leqslant n\}$. *Существует такая пара индексов $i \neq j$, что квадрика $f = 0$ $\mathbb{B}$-эквивалентна квадрике $x_i x_j = 0$.*

Доказательство. Никакая фасета не содержит всех вершин BQP_n. Поэтому рассматриваемая квадрика не может проходить через все точки $\mathbb{B}^n$. Следовательно, f не совпадает ни с одним из многочленов вида $\alpha_1(x_1^2 - x_1) + \cdots + \alpha_n(x_n^2 - x_n)$.

Поскольку $f(\mathbf{0}) = f(\mathbf{e}_i) = 0$, квадрика $f = 0$ $\mathbb{B}$-эквивалентна квадрике вида $F_2(\lambda(\mathbf{x})) = 0$, где F_2 — линейная форма на $\mathbb{R}^N$ с коэффициентами f_{ij}. Действительно, если линейная часть многочлена f равна $\alpha_1 x_1 + \cdots + \alpha_n x_n$, то многочлен без линейных членов $f + \alpha_1(x_1^2 - x_1) + \cdots + \alpha_n(x_n^2 - x_n)$ не равен тождественно нулю и определяет $\mathbb{B}$-эквивалентную квадрику.

Если для некоторой пары индексов $i \neq j$ коэффициент $f_{ij} < 0$, то в точке веса два $\mathbf{e}_i + \mathbf{e}_j$ значение многочлена f отрицательно, что противоречит пустоте квадрики. Следовательно, для каждой пары индексов $i \neq j$ коэффициент $f_{ij} \geqslant 0$. Поскольку фасета не содержит все вершины многогранника, для некоторой пары индексов $i \neq j$ коэффициент $f_{ij} \neq 0$. Следовательно, $f_{ij} > 0$ и для каждой точки $\mathbf{x} \in \mathbb{B}^n$, лежащей на квадрике $f = 0$, либо $x_i = 0$, либо $x_j = 0$. Все эти точки лежат на квадрике $x_i x_j = 0$. Поскольку фасета многогранника не вложена в собственную грань с большим числом вершин, на квадриках $f = 0$ и $x_i x_j = 0$ лежат одни и те же точки из множества $\mathbb{B}^n$. Поскольку эти квадрики соответствуют фасетам BQP_n, получаем, что они $\mathbb{B}$-эквивалентны. □

Теорема 4. *Дана квадрика, соответствующая некоторой фасете многогранника* BQP_n*, и гиперплоскость* H *в* n*-мерном пространстве. Существуют* $n-1$ *точек из множества* $\mathbb{B}^n$*, которые лежат на этой квадрике, но не лежат на* H*.*

Доказательство. Поскольку квадрика соответствует фасете BQP_n, на ней лежат хотя бы $n+N$ точек из $\mathbb{B}^n$, образы которых в $\mathbb{R}^n \oplus \mathbb{R}^N$ при отображении (id, λ) находятся в общем положении. Теорема очевидна, если на гиперплоскости H нет точки из $\mathbb{B}^n$. Без ограничения общности полагаем $\mathbf{0} \in H$, т.е. H задано уравнением $x_k = \alpha_1 x_1 + \dots + \alpha_{k-1}x_{k-1} + \alpha_{k+1}x_{k+1} + \dots + \alpha_n x_n$ для некоторого индекса k. Умножая обе части этого равенства на x_i для разных i и учитывая, что коэффициенты при диагональных членах соответствуют координатам в $\mathbb{R}^n$, а коэффициенты при недиагональных членах соответствуют координатам в $\mathbb{R}^N$, получим n линейных уравнений в $\mathbb{R}^n \oplus \mathbb{R}^N$, справедливых для каждой точки образа пересечения $H \cap \mathbb{B}^n$ при отображении (id, λ). Образы точек из пересечения $H \cap \mathbb{B}^n$ лежат в подпространстве размерности N. Следовательно, среди них не более $N+1$ находятся в общем положении. Хотя бы $n-1$ точек из ранее выбранных $n+N$ точек не лежат на H. $\square$

Замечание. Если пустая квадрика соответствует фасете BQP_n, то на каждой координатной гиперплоскости найдутся лежащие на этой квадрике точки из $\mathbb{B}^n$. Более того, для любых двух индексов i и j найдутся лежащие на квадрике точки из $\mathbb{B}^n$, у которых i-я и j-я координаты совпадают. И найдутся такие, у которых i-я и j-я координаты различны. Однако теоремы 1 и 2 показывают, что точки из $\mathbb{B}^n$, лежащие на пустой квадрике, не могут образовать слишком рыхлую конфигурацию. Зная достаточно много точек из $\mathbb{B}^n$, лежащих на пустой квадрике, легче найти другие такие точки или доказать отсутствие таковых. Более того, в этом случае существуют большие классы таких точек, допускающие единое описание.

Автор благодарен А. Н. Максименко и С. А. Пирогову за сделанные замечания.

Список литературы

1. Береснев В. Л. Дискретные задачи размещения и полиномы от булевых переменных. Новосибирск: Издательство Института математики, 2005. 408 с.

2. Billionnet A., Elloumi S. Using a mixed integer quadratic programming solver for the unconstrained quadratic 0-1 problem // Mathematical programming. Ser. A. 2007. V. 109. №1. P. 55–68.

3. Ahlatçioğlu A., Bussieck M., Esen M., Guignard M., Jagla J.-H., Meeraus A. Combining QCR and CHR for convex quadratic pure 0-1 programming problems with linear constraints // Annals of operations research. 2012. V. 199. №1. P. 33–49.

4. Емеличев В. А., Коротков В. В. Об устойчивости лексикографического решения векторной минимаксной квадратичной булевой задачи // Тр. Института матем. НАН Беларуси. 2011. Т. 19. №2. С. 26–36.

5. Емеличев В. А., Ковалев М. М., Кравцов М. К. Многогранники, графы, оптимизация. М.: Наука, 1981. 344 с.

6. Padberg M. The boolean quadric polytope: some characteristics, facets and relatives // Mathematical programming. 1989. V. 45. №1–3. P. 139–172.

7. Максименко А. Н. О числе фасет 2-смежностного многогранника // Модел. и анализ информ. систем. 2010. Т. 17. №1. С. 76–82.

8. Деза М., Лоран М. Геометрия разрезов и метрик. М.: МЦНМО, 2001. 736 с.

9. Zhao W., Posner M. E. A large class of facets for the K-median polytope // Mathematical programming. Ser. A. 2011. V. 128. №1–2. P. 171–203.

10. Galli L., Kaparis K., Letchford A. N. Gap inequalities for non-convex mixed-integer quadratic programs // Operations research letters. 2011. V. 39. №5. P. 297–300.

11. Николаев А. В. Гиперграфы специального вида и анализ свойств релаксаций разрезного многогранника // Модел. и анализ информ. систем. 2011. Т. 18. №3. С. 82–100.

12. Делоне Б. Н. Геометрия положительных квадратичных форм // УМН. 1937. №3. С. 16–62.

13. Селиверстов А. В., Любецкий В. А. О симметричных матрицах с неопределенной главной диагональю // Пробл. передачи информ. 2009. Т. 45. №3. С. 73–78.

14. Селиверстов А. В., Любецкий В. А. О формах, равных нулю в каждой вершине куба // Информационные процессы. 2011. Т. 11. №3. С. 330–335. Электронный научный журнал http://www.jip.ru

15. Costello K. P., Vu V. H. The rank of random graphs // Random structures and algorithms. 2008. V. 33. №3. P. 269–285.

Some Notes about Arrangements of Points on Quadrics

Seliverstov A. V.

Keywords: combinatorial optimization, quadratic programming, empty quadric, polytope, facet

It is considered the minimization of a quadratic polynomial on the set of all points of a multidimensional space, coordinates of which are either zero or one. Some restrictions are imposed on the arrangement of the minimum points when there are many such points.

Сведения об авторе: **Селиверстов Александр Владиславович**, Институт проблем передачи информации им. А. А. Харкевича РАН, старший научный сотрудник, кандидат физико-математических наук