ДИСКРЕТНЫЙ АНАЛИЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ОПЕРАЦИЙ
Май—июнь 2013. Том 20, № 3. С. 65–70

УДК 514.172.45

О МОНОМАХ КВАДРАТИЧНЫХ ФОРМ

А. В. Селиверстов

Аннотация. Получены некоторые ограничения на взаимное расположение нулей в матрице вещественной квадратичной формы, которая достигает минимума на большом множестве вершин многомерного куба с центром в начале координат и рёбрами, параллельными координатным осям. В частности, если граф матрицы содержит точку сочленения, то множество минимумов соответствующей квадратичной формы не является максимальным по включению среди всех таких множеств для различных квадратичных форм.

Ключевые слова: дискретная оптимизация, квадратичная форма, многогранник, фасета, граф, матрица.

Поиск точек минимума вещественного квадратичного многочлена на множестве вершин многомерного куба является алгоритмически трудной задачей. Эффективные алгоритмы известны лишь в частных случаях. Например, если квадратичные члены составляют трёхдиагональную симметричную матрицу, то минимум можно найти методом псевдобулева программирования [1]. Для квадрата линейной функции с целыми коэффициентами поиск минимума сводится к поиску максимума линейного функционала на множестве вершин куба при одном линейном ограничении, что может быть выполнено методом динамического программирования. Последняя задача допускает вполне полиномиальную аппроксимационную схему [11, 20], обзор методов линейного программирования для её решения дан в [17], другой подход см. в [5]. Замена квадратичного функционала, не меняющая положения минимумов на множестве вершин куба, позволяет иногда уменьшить вычислительную сложность [16]. Другие примеры точно решаемых задач и эвристические алгоритмы можно найти в [1–3,12, 21]. Нами получены ограничения на взаимное расположение нулей в матрицах квадратичных форм, достигающих минимума на максимальном по включению собственном множестве ±1-точек. Точку линейного пространства $\mathbb{R}^{n+1}$ с фиксированным базисом отождествляем со столбцом $x = (x_0, \ldots, x_n)^*$, где знак * означает транспонирование. Симметричная матрица A порядка $n+1$ определяет квадратичную форму $A(x) = x^*Ax$ на $\mathbb{R}^{n+1}$. Моном x_jx_k входит в запись квадратичной формы с матрицей A, если и только если $A_{jk} \neq 0$.

Определим отображение $\lambda : \mathbb{R}^{n+1} \to \mathbb{R}^N$, где $N = \frac{n(n+1)}{2}$, формулой $\lambda(x) = (x_0x_1, \ldots, x_0x_n, x_1x_2, \ldots, x_{n-1}x_n)^*$. Иными словами, компоненты $\lambda(x)$ — элементы квадратной матрицы xx^*, лежащие выше главной диагонали. Очевидно, что $\lambda(-x) = \lambda(x)$. Выпуклая оболочка образов ±1-точек при этом отображении называется *многогранником* BQP_n. Многогранник BQP_n комбинаторно эквивалентен многограннику QP^n из [19]. Например, BQP_2 — симплекс с четырьмя вершинами.

Лежащие выше главной диагонали элементы матрицы A — коэффициенты линейной формы $A(x)$ на $\mathbb{R}^N$. Для симметричной матрицы A порядка $n+1$ обозначим через Φ_A грань многогранника BQP_n, на которой форма $A(x)$ достигает минимума. Грань Φ_A совпадает со всем BQP_n тогда и только тогда, когда матрица A диагональная [10]. *Фасетой* называется грань коразмерности один. Поскольку каждая фасета принадлежит единственной опорной гиперплоскости, симметричная матрица A коэффициентов квадратичной формы $A(x)$ определена фасетой Φ_A многогранника BQP_n с точностью до изменения главной диагонали и умножения на положительное число.

Симметричной матрице A порядка $n+1$ сопоставлен простой неориентированный граф $G(A)$ с $n+1$ вершинами такой, что вершины с номерами j и k смежны, если $A_{jk} \neq 0$. Элементы на главной диагонали не влияют на вид графа. Вершину графа назовём *точкой сочленения*, если её удаление увеличивает число компонент связности графа. Множество вершин графа *независимое*, если любые две из этих вершин несмежны. Если грань Φ_A является фасетой, то граф матрицы A однозначно определён.

Обозначим через $A[i, \ldots, j]$ подматрицу в A, расположенную в строках и столбцах с указанными номерами, $A[i] = A_{ii}$ — диагональный элемент. Через $\pi[i, \ldots, j]$ обозначим проекцию $\mathbb{R}^{n+1}$ на координатное подпространство для координат $x_i, \ldots, x_j$. Если симметричная матрица $A = A' \oplus A''$ разложима в прямую сумму двух матриц A' и A'', то грань Φ_A вложена в пересечение граней $\Phi_{A' \oplus 0} \cap \Phi_{0 \oplus A''}$ [9].

Лемма 1. *Пусть вершина графа $G(A)$ с номером i — точка сочленения порождённых подграфов $G(A[0, \ldots, i])$ и $G(A[i, \ldots, n])$, и пусть $\breve{A} = A[0, \ldots, i] \oplus 0$ — разложимая матрица. Тогда грани Φ_A и $\Phi_{\breve{A}}$ многогранника BQP_n вложены друг в друга: $\Phi_A \subseteq \Phi_{\breve{A}}$.*

Доказательство. Симметричная матрица A имеет вид

$$A = \begin{pmatrix} A[0,\dots,i-1] & B & 0 \\ B^* & A[i] & C^* \\ 0 & C & A[i+1,\dots,n] \end{pmatrix},$$

где B и C — столбцы, содержащие хотя бы один ненулевой элемент. Рассмотрим ограничение формы $A(x)$ на $(i+1)$-мерное линейное подпространство H, заданное системой уравнений $x_j = x_i$ или $x_j = -x_i$, где $j > i$. Это квадратичная форма $A_H(\pi[0,\dots,i]x)$ с матрицей вида

$$A_H = \begin{pmatrix} A[0,\dots,i-1] & B \\ B^* & d_H \end{pmatrix},$$

в которой только один элемент d_H зависит от выбора подпространства H, а остальные совпадают с элементами подматрицы в матрице A.

Форма $A_H(\pi[0,\dots,i]x)$ достигает минимума на H в таких ±1-точках объемлющего пространства, что их проекции $\pi[0,\dots,i]x$ не зависят от выбора H. При этом величина минимального на H значения линейно зависит от элемента d_H. Рассмотрим форму на $\mathbb{R}^{n+1}$ с матрицей

$$\breve{A} = \begin{pmatrix} A[0,\dots,i-1] & B & 0 \\ B^* & A[i] & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Если в ±1-точке форма $A(x)$ достигла своего минимального значения, то в этой же точке форма $\breve{A}(x)$ достигла своего минимального значения.

Теорема 1. *Дана симметричная матрица A порядка $n+1$, определяющая фасету Φ_A многогранника BQP_n. Удаление из графа $G(A)$ любого независимого множества его вершин не увеличивает числа компонент связности. В частности, в графе $G(A)$ нет точек сочленения.*

Доказательство. Пусть множество вершин с номерами от i до j независимое, т. е. матрица $D = A[i,\dots,j]$ диагональная. Пусть при этом удаление из графа $G(A)$ всех вершин с номерами от i до j увеличивает число компонент связности. Тогда матрица A имеет вид

$$A = \begin{pmatrix} A[0,\dots,i-1] & B & 0 \\ B^* & D & C^* \\ 0 & C & A[j+1,\dots,n] \end{pmatrix},$$

где $1 \leqslant i \leqslant j \leqslant n-1$, матрица $D = A[i,\dots,j]$ диагональная, B и C — прямоугольные матрицы.

Рассмотрим ограничение формы $A(x)$ на $(n+i+1-j)$-мерное линейное подпространство H, заданное системой уравнений $x_k = x_i$ или $x_k = -x_i$ для каждого индекса k, $i+1 \leqslant k \leqslant j$. Это ограничение — квадратичная форма $A_H(\pi[0,\ldots,i,j+1,\ldots,n]x)$, у которой граф $G(A_H)$ имеет точку сочленения. По лемме 1 эта форма достигает минимума в каждой ± 1-точке, где достигает своего минимума форма с матрицей

$$\breve{A}_H = \begin{pmatrix} A[0,\ldots,i-1] & B_H & 0 \\ B_H^* & d_H & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Определим разложимую матрицу $\breve{A} = A[0,\ldots,j] \oplus 0$. Все матрицы $\breve{A}_H$ являются ограничением одной и той же матрицы $\breve{A}$ на H. Поэтому форма $\breve{A}(x)$ достигает своего минимума в каждой ± 1-точке, где достигает своего минимума форма $A(x)$. Поскольку матрица A определяет фасету многогранника BQP_n, это возможно, только если матрицы A и $\breve{A}$ отличаются лишь элементами главной диагонали и положительным множителем. Но матрица C содержит ненулевой элемент; противоречие. Теорема 1 доказана.

Фасеты многогранников BQP_n при $n \leqslant 6$ вычислены программой lrs версии 4.2c [13, 14] (http://cgm.cs.mcgill.ca). У BQP_1 две фасеты, у BQP_2 четыре фасеты, у BQP_3 16 фасет, у BQP_4 56 фасет, у BQP_5 368 фасет, а у BQP_6 116764 фасеты. Граф матрицы, определяющей фасету многогранника BQP_n при $n \leqslant 5$, либо полный, либо является объединением клики и одной или нескольких изолированных вершин. Выбирая элементы на главной диагонали, ранг такой матрицы можно снизить до 1. Однако при любых значениях на главной диагонали ранг матрицы

$$A = \begin{pmatrix} * & 0 & 0 & -1 & 1 & 1 & -1 \\ 0 & * & -1 & -1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & -1 & * & 0 & -1 & 1 & 1 \\ -1 & -1 & 0 & * & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & 1 & * & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & * & 0 \\ -1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & * \end{pmatrix}$$

не меньше трёх, а грань Φ_A является фасетой многогранника BQP_6. Эта фасета является симплексом с 21 вершиной.

Многогранники BQP_n определены через явное описание их вершин. Для нескольких серий фасет этих многогранников получено явное описание [18, 19]. Известно ограничение на взаимное расположение вершин грани [4, 8]. Однако при больших n задача распознавания опорных гиперплоскостей к BQP_n остаётся алгоритмически трудной. Такие задачи для разных многогранников сводятся друг к другу [6, 7, 15].

ЛИТЕРАТУРА

1. **Береснев В. Л.** Дискретные задачи размещения и полиномы от булевых переменных. — Новосибирск: Изд-во ин-та математики, 2005. — 408 с.
2. **Береснев В. Л.** Алгоритмы локального поиска для задачи конкурентного размещения предприятий // Автоматика и телемеханика. — 2012. — № 3. — С. 12–27.
3. **Береснев В. Л., Гончаров Е. Н., Мельников А. А.** Локальный поиск по обобщённой окрестности для задачи оптимизации псевдобулевых функций // Дискрет. анализ и исслед. операций. — 2011. — Т. 18, № 4. — С. 3–16.
4. **Горбунов К. Ю., Селиверстов А. В., Любецкий В. А.** Взаимное расположение параллельных гиперплоскостей, квадрик и вершин многомерного куба // Пробл. передачи информ. — 2012. — Т. 48, № 2. — С. 113–120.
5. **Колоколов А. А., Орловская Т. Г., Рыбалка М. Ф.** Анализ алгоритмов целочисленного программирования с использованием L-разбиения и унимодулярных преобразований // Автоматика и телемеханика. — 2012. — № 2. — С. 178–190.
6. **Максименко А. Н.** Многогранники задачи о выполнимости являются гранями многогранника задачи коммивояжёра // Дискрет. анализ и исслед. операций. — 2011. — Т. 18, № 3. — С. 76–83.
7. **Максименко А. Н.** Аналог теоремы Кука для многогранников // Изв. вузов. Математика. — 2012. — № 8. — С. 34–42.
8. **Селиверстов А. В.** Замечания о расположениях точек на квадриках // Моделирование и анализ информ. систем. — 2012. — Т. 19, № 4. — С. 72–77.
9. **Селиверстов А. В., Любецкий В. А.** О симметричных матрицах с неопределенной главной диагональю // Пробл. передачи информ. — 2009. — Т. 45, № 3. — С. 73–78.
10. **Селиверстов А. В., Любецкий В. А.** О формах, равных нулю в каждой вершине куба // Информационные процессы. — 2011. — Т. 11, № 3. — P. 330–335.
11. **Схрейвер А.** Теория линейного и целочисленного программирования. Т. 1. — М.: Мир, 1991. — 360 с.
12. **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 // Ann. Oper. Res. — 2012. — Vol. 199, N 1. — P. 33–49.

13. **Avis D.** Computational experience with the reverse search vertex enumeration algorithm // Optim. Methods Softw. — 1998. — Vol. 10, N 2. — P. 107–124.
14. **Avis D., Fukuda K.** A pivoting algorithm for convex hulls and vertex enumeration of arrangements and polyhedra // Discrete Comput. Geom. — 1992. — Vol. 8, N 1. — P. 295–313.
15. **Billera L. J., Sarangarajan A.** All 0-1 polytopes are traveling salesman polytopes // Combinatorica. — 1996. — Vol. 16, N 2. — P. 175–188.
16. **Billionnet A., Elloumi S.** Using a mixed integer quadratic programming solver for the unconstrained quadratic 0–1 problem // Math. Program. — 2007. — Vol. 109, N 1. — P. 55–68.
17. **Fukasawa R., Goycoolea M.** On the exact separation of mixed integer knapsack cuts // Math. Program. — 2011. — Vol. 128, N 1–2. — P. 19–41.
18. **Galli L., Kaparis K., Letchford A. N.** Gap inequalities for non-convex mixed-integer quadratic programs // Oper. Res. Lett. — 2011. — Vol. 39, N 5. — P. 297–300.
19. **Padberg M.** The boolean quadric polytope: some characteristics, facets, and relatives // Math. Program. — 1989. — Vol. 45, N 1–3. — P. 139–172.
20. **Tamir A.** New pseudopolynomial complexity bounds for the bounded and other integer knapsack related problems // Oper. Res. Lett. — 2009. — Vol. 37, N 5. — P. 303–306.
21. **Wang Y., Lü Z., Glover F., Hao J.-K.** Path relinking for unconstrained binary quadratic programming // Eur. J. Oper. Res. — 2012. — Vol. 223, N 3. — P. 595–604.

Селиверстов Александр Владиславович,
e-mail: slvstv@iitp.ru

Статья поступила
28 июня 2012 г.

Переработанный вариант —
10 января 2013 г.