arXiv:2303.10101v1 [math.OC] 17 Mar 2023

通过混合整数规划求解紧集上极化问题的界

Jan Rolfes[1*†]、Robert Sch¨uler[2†] 和 Marc Christian Zimmermann[3†]

[1*]优化与系统理论，KTH 皇家理工学院，Lindtstedtsv¨agen25，斯德哥尔摩，114 28，瑞典。[2]数学研究所，罗斯托克大学，Universit¨atsplatz 1，罗斯托克，罗斯托克 18051，德国。[3]数学系，科隆大学，Weyertal 86-90，科隆，50931，德国。

*通讯作者。电子邮箱：jrolfes@kth.se；贡献作者：robert.schueler2@uni-rostock.de；marc.christian.zimmermann@gmail.com；

†这些作者对本研究的贡献相同。

摘要

在几何优化领域，寻找能够达到最大极化（切比雪夫常数）的点配置日益受到关注。本文研究紧集上的无约束最大极化问题。特别地，我们讨论局部最优性的必要条件，例如，局部最优构型总是包含于相应最暗点的凸包中。在此基础上，我们提出两列混合整数线性程序，用于计算最大极化的下界和上界，其中下界具有构造性。此外，我们证明这两列程序收敛至最大极化。

关键词：最大极化，势，混合整数规划，几何优化

MSC 分类：31C20 , 51-08 , 90C11

1 引言

假设给定一组 A 和 N 光源，你需要对它们进行布置，使得 A 中的最暗点尽可能明亮。用不那么形象的术语来说，这个最大-最小问题称为最大极化问题，下面我们用数学语言来表述它。

设 A，$D \subset \mathbb{R}^n$ 为非空集合，且 K：$A \times D \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ 为一个有下界的函数。N 元多重集 $C \subseteq D$ 称为点配置（由 N 个点组成），而支撑在 D 上的所有 N 点配置构成的集合记为 $\mathcal{C}$。我们将与 C 相关联的离散 K 势赋予每个点 $p \in A$，定义为

$$U_{K,A}(p, C) = \sum_{c \in C} K(p, c).$$

对任意点配置，我们定义其极化

$$P_{K,A}(C) = \inf_{p \in A} U_{K,A}(p, C).$$

因此，自然要考虑（最大）极化问题：

$$\mathcal{P}_K(A) = \sup_{C \in \mathcal{C}} P_{K,A}(C). \tag{1}$$

关于这种极化问题表述的更广泛背景和概述，请参阅近期专著 [1, CH. 14]。这类问题已得到广泛研究。特别是，当 $A = D = S^{n-1}$ 为单位球面，且$K(x, y) = \|x - y\|^{-s}$ 与黎曼势相关时，关于少数点的显式最优构型（例如 [2], [3], [4], [5], [6], [7] [8]）、最大极化的界（例如 [4], [7]）以及渐近结果（例如 [9], [10], [11], [12]）方面已有丰富成果。对于更一般的 A选择（例如可求长集），也有渐近结果。更

另一方面，式（1）中所述的极化问题与研究已久的覆盖问题密切相关，即问题是：A 能否用半径为 $r > 0$的球覆盖。特别地，设 $K(x, y) = \mathbb{1}_{[0,r]}(\|x - y\|)$，那么，当且仅当 $1 \leq \mathcal{P}_K(A$时，存在由 N 个球构成的覆盖。关于覆盖问题的一般性讨论，例如可参见 Conway 和 Sloane 的经典著作 [13]。关于紧致度量空间上的覆盖问题，可参阅 [14] 以了解综述；构造性方法则例如见于 [15] 和 [16]。

本文考虑以下类型的极化问题。集合 $A \subset \mathbb{R}^n$ 是一个紧集，且我们不对点配置施加任何限制，即 $D = \mathbb{R}^n$。此外，我们将函数限制为 $K(x, y) = f(\|x - y\|)$，其中 $f : \mathbb{R}_+ \to \mathbb{R}+$ 是一个连续严格单调递减函数，并采用记号 $U_{f, A}(p, C)$，$P_{f, A}(C)$ $\mathcal{P}_f(A)$。如果下标参数可由上下文明确判断，我们就省略它们。

因此，在上述假设下，我们考虑以下优化问题

$$\mathcal{P}_f(A) = \sup_{C \subset \mathcal{C}} P_{f,A}(C). \tag{2}$$

为进行显式计算，我们选取高斯函数 $f(x) = e^{-\alpha x^2}$。这些函数在普适最优性的背景下自然出现（参见 [17]）：回忆一下，函数 $g : (0, \infty) \to \mathbb{R}$ 若无限次可微，且其导数满足 $(-1)^k g^{(k)} \geq 0$ 对所有 k均成立，则称其为完全单调。函数 $g(x) = e^{-\alpha x}$ 是完全单调的，并且我们可以写作 $f(\|x - y\|) = g(\|x - y\|^2)$。在此背景下，函数$f(x) = g(x^2)$称为平方距离的完全单调函数。

伯恩斯坦定理（参见 [18, 定理 9.16]）断言，每个完全单调函数都可以写成一个收敛积分

$$g(x) = \int e^{-\alpha x} d\mu(\alpha).$$

由此可知，平方距离的完全单调函数集合是由高斯函数和常函数 $x \mapsto 1$ 张成的锥。

特别是，常用的黎曼势可以用这种方式表示。

对于下确界 $P_{f,\ A}$ 实际上是最小值的情况，我们再引入一些记号；也就是说，该函数的极小点是 A中的点。在这种情况下，任何这样的极小点都称为 A的**最暗点**。此外，

$$\mathrm{Dark}_A(C) = \{p \in A \ : \ \sum_{c \in C} f(\|p - c\|) = P_{f,A}(C)\}$$

称为 C的**最暗点集**。为解释这种说法，请读者回想一下我们在开头给出的这个问题的解释：我们将光源放置在 C 中的点上，以照亮 A。那么， A 的极化就是 A 中任意一点所能达到的最低亮度；达到这一亮度的点就是“最暗点”。

请注意，要求 A 是紧集是很自然的。事实上，如果 A 无界，那么极化值总会趋于 $N \cdot$无穷 f。如果 A 不是闭集，最暗点可能不存在。举例来说，考虑 A 为开圆盘，而 C仅包含原点的情形。此时，$P_{f,\ A}(C)$在 A中的任何一点都无法取到。在第2 节，我们将给出一些结果，说明局部最优构型与.....之间的联系

其各自最暗点的集合。定理 2.1 指出，这种构型中的点包含于最暗点的凸包中；另一方面，定理 2.5 指出，最暗点位于A 的边界上，或位于该构型的凸包内部。这些限制为最优性提供了必要条件。

在第 3 节中，我们研究极化问题的混合整数近似，以提供上界和下界。这些结果汇总于定理 3.5中。随后，我们在定理 $\mathcal{P}_f(A)$ 3.8 和 3.9中证明，这些界确实收敛到该值。

在第 4节中，我们通过一些基准实例展示该方法的能力与局限性。

2 最暗点与必要条件

本节中，我们将探讨最优构型必须满足的结构性质，以便有可能推翻给定极化的最优性，并缩小最优配置的搜索空间。

特别地，我们有以下必要条件，它将构型的局部最优性与其最暗点集合联系起来：

定理2.1. 若 C 是 (2) 的局部最优解，则

$$C \subset \operatorname{conv} \operatorname{Dark}_A(C).$$

证明。假设 C 是一个构型，且存在 $c \in C$ 使得 $c \notin$凸包(Dark$_A$(C))。下文将讨论如何构造一个新构型C'，使其位于 C 的任意邻域内，并满足 P(C') $> P$(C)。因此， C 不可能是局部最优的。由于 f 连续，包含最暗点的等值线

$$S = \{p \in \mathbb{R}^n \ : \ U(p, C) = P(C)\}$$

是闭集，因此 Dark$_A$(C) $= A \cap S$ 是紧集。所以，凸包(Dark$_A$(C)) 是紧凸集，我们可以找到一个超平面$H = \{x : \ a^\top x = b\}$ ，使其将该集合与 c 严格分离，且满足 $a^\top c < b$。当$\varepsilon > 0$ 足够小时， $c' = c + \varepsilon a$ 仍满足 $a^\top c' < b$。于是得到一个新构型$C' = C \cup \{c'\} \setminus \{c\}$。注意，对于 C 的每个邻域，都存在足够小的 ε ，使得 C' 包含在该邻域中。显然，对于 H 的非负半空间内的所有点 p ，都有 $|c' - p| < |c - p|$。特别地， c' 比 c 更接近所有最暗点；并且由于 f 单调递减

$$U(p, C') > U(p, C) \geq P(C)$$

对 H的非负半空间中的所有点 p 。

还需断言这一结论在负半空间上也成立。由于所有最暗点都位于 H的正侧，点 $p \in A \cap ($ $H \cup H_-$)满足

$$U(p, C) > P(C).$$

由于 $A \cap$($H \cup H_-$)是紧的，因此可得

$$U(p, C) \geq \delta > P(C)$$

对于某个常数 δ。根据 f 的连续性，当 ε 足够小时，我们可以保证

$$U(p, C') > P(C)$$

对所有 $p \in A \cap (H \cup H_-)$ 都成立。综上，

$$P(C') = \inf_{p \in A} U(p, C') > P(C).$$

□

所表述的条件在以下意义上非常“不稳定”：

命题 2.2. 设 C 是一个构型，满足 $C \subset$ 凸包 $\mathrm{Dark}_A(C)$。设 $c \in C$、 $c' \neq c$ 和 $C' = C \cup \{c'\} \setminus \{c\}$。则

1. $P(C') < P(C)$ 以及
2. $C' \nsubseteq$ 凸包 $\mathrm{Dark}_A(C')$。

证明。

1. 考虑经过 c、外法向量为 $c - c'$ 的超平面 H，并取其方向使得 c' 位于负侧。由于 $c \in$ 凸包 $\mathrm{Dark}_A(C)$，负半空间 H 的非负半空间中必定存在一个最暗点 $d \in \mathrm{Dark}_A(C)$（它也可能位于 H 中）。于是 $\|c - d\| < \|c' - d\|$，并且根据单调性， $f(\|c - d\|) > f(\|c' - d\|)$。势 $U(d, C')$ 与 $U(d, C)$ 之差为 $f(\|c' - d\|) - f(\|c - d\|)$，因此上述结果意味着

$$P(C') \leq U(d, C') < U(d, C) = P(C).$$

2. 假设 $C' \subset$ 凸包 $\mathrm{Dark}_A(C')$。那么我们可以将 1. 应用于 C'，并交换 c、 c'的角色。但这将得到 $P(C') < P(C) < P(C')$，这与假设矛盾。

□

因此，只考虑单个分量（如模式搜索）或只移动单个构形点的优化方法，可能会收敛到一个位于最暗点凸包内但并非局部最优的构型。因此，似乎合理的做法是只使用能够一次移动多个点的优化方法。由此还可得出以下结论，这似乎表明优化变量的数量可以减少到仅 $m - 1$ 个向量。

推论 2.3。 给定满足 $|C'| = N - 1$ 的点 C'，至多 存在一个点 c，使得 $\{c\} \cup C' \subset$ 最暗点的凸包 $_A(\{c\} \cup C')$。

我们可以利用定理 2.1进一步研究最暗点的结构。首先，我们讨论如何为 $p \notin$暗$_A(C)$ 找到证书。

引理 2.4。 设 C 是一个构型， $p \in \mathbb{R}^n$ 是任意一点。设

$$N(p, C) = \{p + v \ : \ v \neq 0 \ \textit{and} \ v^\top w \geq 0 \ \textit{for all} \ w \in \mathrm{cone}\{p - c \ : \ c \in C\}\}.$$

1. 对所有 $q \in N(p, C)$，都有 $U(q, C) < U(p, C)$；
2. 若 $(p, C) \cap A \neq \emptyset$，则 $p \notin$ 最暗$_A(C)$。

证明。 令 $q = p + v \in N(p, C)$ 满足 $v \neq 0$。那么对所有 $c \in C$，我们有

$$|c - (p + v)|^2 = |c - p|^2 + 2(p - c)^\top v + |v|^2 > |c - p|^2.$$

由于 f 严格单调递减，因此有 $U(q, C) < U(p, C)$。由此，第二个断言立即成立。 □

如我们刚才所示，上面对点 p 的 $N(p, C)$ 的定义只包含势严格小于点 p 本身处势值的点。我们认为，除了前面的引理和后续定理所涉及的范围外，这个对象也会有用；但在本文中，我们只在此处需要它。

如果回想一下将极化问题可视化为放置光源 C 来照亮 A 的情形，那么上面对点 p 的 $N(p, C)$ 的定义只包含比点 p 本身受照更少的点。（根据锥对偶）这与物理阴影的概念有些关联（最接近的对应物应当是 $-$ 锥 $\{p - c : c \in C\}$）。据此，我们证明以下结果，进一步限制最暗点的位置：

定理 *2.5.* 设 C 是 *(2)* 的一个可行配置。那么，$\mathit{Dark}_A(C)$ 中的点要么位于凸包 $\mathit{conv}(C)$ 的内部，要么位于 δA，也就是说 $\mathit{Dark}_A(C) \subset \mathit{int\ conv}(C) \cup \delta A$。此外，若 C 对 *(2)* 是局部最优的，则 $\mathit{Dark}_A(C) \cap \delta A \neq \emptyset$。

证明。令 $p \in \mathrm{Dark}_A(C)$，并假设 $p \notin \mathrm{int}$ 凸包(C)。此外，令 $N(p, C)$ 按引理2.4中的定义。我们可以找到一个超平面 $H = \{x \in \mathbb{R}^n : a^\top x = \beta\}$经过 p，将 C 与 p分隔开，特别是 $a^\top c \leq \beta$ 对所有 $c \in C$ 均成立。于是对所有 $c \in C$

$$a^\top (p - c) = a^\top p - a^\top c = \beta - a^\top c \geq 0,$$

这表明 $p + \lambda a \in N(p, C)$ 对任意 $\lambda > 0$成立。如果 $p \in \mathrm{int}\ A$，那么当 $p + \lambda a$ 足够小时，λ也成立。于是 $A \cap N(p, C) \neq \emptyset$，这与引理 2.4矛盾。因此 $p \in \partial A$结论如所述。

此外，若 C 根据定理22.1， 也对 ($C \subset$2) 局部最优，则我们立即得到 $_A$conv Dark$C$()。现在，假设 Dark$C$() $_A$，那么如上所述，Dark$C$() Cint 凸包 ，并且我们得到

$$C \subseteq \mathrm{conv}\,\mathrm{Dark}_A(C) \subseteq \mathrm{int}\,\mathrm{conv}\,C,$$

这与 C 有限相矛盾。 □

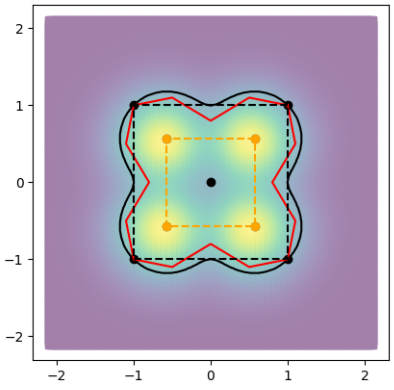

图 1 定理 2.1 和 2.5的示意图。 A 以红色表示，Dark_A 以黑色表示，构型 C 以橙色表示。虚线表示凸包 $\mathrm{conv}\ C$和凸包 $\mathrm{conv}\,\mathrm{Dark}_A(C)$，而黑线表示所有满足 $p \in \mathbb{R}^2$, 的点 $U(p, C) = P(C)$。

总之，局部最优构型 C （2）及其对应的最暗点 Dark_A（C）具有类似的包含性质，如图1所示。

3 极化的混合整数规划方法

本节致力于构建两套混合整数线性规划（MIP）层级，用以近似紧集A 相对于单调递减连续函数 f 的最大极化： $\mathbb{R}_+ \to \mathbb{R}_+$。用于计算下界的混合整数规划是构造性的，即该规划的解是一些构型，其极化有一个由该规划值所给出的下界。这些构型的实际极化可能远远超过这个下界，参见图 3 中的一些数值证据。

首先，我们给出问题（2）的一个等价描述。为此，我们注意到，根据定理 2.1 ，任何局部最优点配置必然支撑在 $\mathrm{conv}(A)$ 上。此外，我们可以通过添加新的约束来消去下确界。由此得到的优化问题为

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_f(A) = \max_{x,C}\ & x && (3)\\ & C \in \begin{bmatrix} \mathrm{conv}(A) \\ N \end{bmatrix} \\ & x \le U_{f,A}(p, C) && \text{对于所有 } p \in A, \end{aligned}$$

其中，$\begin{bmatrix} X \\ N \end{bmatrix}$ 描述了由 X中的元素构成的所有大小为 N 的多重集的集合。现在显然，sup 实际上是 max，因为只需对 x 设置下界（例如 $x \geq 0$），就能轻松使可行域变紧，且不改变程序的值。

3.1 混合整数规划层级

我们注意到，问题（3）是一个具有有限个变量（即 x，C）但具有无限多个约束的优化问题——它是一个半无限规划（SIP）——因此无法使用标准求解器求解。本节余下部分将介绍两个（易于求解的）混合整数规划层级，从上方和下方逼近 $\mathcal{P}(A)$（见定理 3.5）。为此，我们将运用以下概念：用于“控制” f两个函数值之差的函数。

定义 3.1。若对于所有 $c \in \mathrm{conv}(A)$，$p \in A$均满足以下条件，则称函数族 $g_{c,\,p} : \mathbb{R}_+ \to \mathbb{R}+$（其中 $c \in$ 凸包(A)），$p \in A$为一个控制函数族（相对于 f, A）：

1. $g_{c,p}(0) = 0$，*2.* $g_{c,p}$ 连续且单调不减，*3.* 对所有 $c' \in conv(A)$，$|f(\|c-p\|) - f(\|c'-p\|)| \leq g_{c,p}(\|c-c'\|)$，*4.* 对所有 $p \in A$，$|f(\|c-p\|) - f(\|c-p'\|)| \leq g_{c,p}(\|p-p'\|)$，

其中，$\|\cdot\|$ 表示标准欧几里得范数。

注意，f 与一个函数 K 有关，该函数以两个点 c，p 作为参数：$K(c,\ p) = f(\|c-p\|)$。一族控制函数使我们能够控制在改变 c 或 p时，K 的变化方式。

这种控制是定理3.5证明中的一个重要要素。对于连续函数，这与限制 K 的斜率有关，以下示例可以说明这一点：假设函数 $K(c,\ \cdot) = f(\|c-\cdot\|)$对所有 $p \in A$都是利普希茨连续的，且其利普希茨常数为 L。那么，$g_{c,\,p}(\varepsilon) = L \cdot \varepsilon$是 f的一个有效控制函数。

然而，应用全局利普希茨连续性并不能提供非常精确的近似，因为它忽略了特定点 c，p附近的局部信息。因此，我们提供一族更合适的控制函数。

命题 3.2. 对于单调递减且连续的 f，以下是一族控制函数：

$$g_{c,p}(\varepsilon) = \max(\hat{g}_{c,p}(\varepsilon), \hat{g}_{c,p}(-\varepsilon))$$

其中

$$\hat{g}_{c,p}(x) = \begin{cases} f(0) - f(\|c-p\|) \ \ if\ x < -\|c-p\| \\ |f(\|c-p\|+x) - f(\|c-p\|)| \ \ otherwise \end{cases}$$

证明。我们固定 c, p 并记 $g = g_{c,p}$ 和 $\hat{}g = \hat{}g_{c,p}$. 显然 $g(0) = \hat{}g(0) = 0$。由于 f 是连续的，g也是连续的。

对于 $x \in (-\infty, -\|c-p\|)$，函数 $\hat{g}(x)$ 为常数。对于 $x \in (-\|c-p\|, 0)$，我们有

$$\hat{g}(x) = f(\|c-p\| + x) - f(\|c-p\|)$$

由于 f 递减，因此它是递减的。对于 $x \in (0, \infty)$，我们有

$$\hat{g}(x) = f(\|c-p\|) - f(\|c-p\| + x)$$

由于 f 递减，因此它是递增的。总体而言，$g(\varepsilon) = \max(\hat{g}(\varepsilon), \hat{g}(-\varepsilon))$ 是定义在$\mathbb{R}+$上的递增函数。

由对称性可知，只需证明对于所有 $p' \in$凸包(A)，g 为 $\Delta = |f(\|c-p\|) - f(\|c-p'\|)|$ 提供一个上界。为此，我们使用三角不等式

$$\|c-p\| - \|p'-p\| \le \|c-p'\| \le \|c-p\| + \|p'-p\|$$

并且 f 是一个递减函数。然后，一方面，若 $\|c-p\| \le \|c-p'\|$，我们有

$$\begin{aligned}\Delta &= f(\|c-p\|) - f(\|c-p'\|) \\ &\le f(\|c-p\|) - f(\|c-p\| + \|p'-p\|) = \hat{g}(\|p'-p\|) \le g(\|p'-p\|).\end{aligned}$$

另一方面，若 $\|c-p\| \ge \|c-p'\|$，则得到

$$\begin{aligned}\Delta &= -f(\|c-p\|) + f(\|c-p'\|) \\ &\le -f(\|c-p\|) + f(\|c-p\| - \|p-p'\|) = \hat{g}(-\|p-p'\|) \le g(\|p-p'\|).\end{aligned}$$

□

为了进行显式计算，我们需要对问题的两个方面进行离散化。首先，我们将可能的点配置集合离散化。为此，我们选择一个有限样本$\Lambda \subset$凸包(A)，并且只在以下范围内进行优化

$$C \in \begin{bmatrix} \Lambda \\ N \end{bmatrix}. \tag{4}$$

其次，我们将由 A 参数化的无限多个约束替换为一个有限子集。为此，我们再次选择一个有限样本 $\Gamma \subset A$，并且只考虑以下不等式

$$x \le U(p, C) \text{ for all } p \in \Gamma. \tag{5}$$

然而，这种简单抽样得到的问题未必与原问题相关，因为我们只施加了无穷多个约束中的一部分，并且只允许有限个构型。这两项改动中的任何一项都能给出有效的界，但遗憾的是，它们的作用方向不同。接下来，我们将展示如何利用上述控制函数族克服这一问题，从而得到原问题的下界和上界。

我们先考虑（3）的下界。显然，我们可以将配置的选择限制为由有限样本 Λ 的凸包（A）支撑，如（4）所示，并得到一个计算下界的程序。

离散化约束是较难的部分，因为移除约束会使最大值增大。下面的引理说明，对于某个有限样本 Γ of A，只需对离散化约束作轻微调整，就能推出所有无穷多个原始约束均成立。

引理 3.3。设 $g_{c,p}$ 是一族控制函数。设 $\varepsilon > 0$, Λ 是凸包(A) 的任意有限样本，并且 Γ 是 A 的一个 ε-网。此外，假设 $x \in \mathbb{R}$ $C \subset \begin{bmatrix} \Lambda \\ N \end{bmatrix}$ *satisfy*

$$x \leq \sum_{c \in \Lambda} \mathbb{1}_C(c) \cdot (f(\|c-p\|) - g_{c,p}(\varepsilon)) \ \textit{for all } p \in \Gamma.$$

那么，

$$x \leq \sum_{c \in \Lambda} \mathbb{1}_C(c) \cdot f(\|c-p\|) \ \textit{for all } p \in A.$$

证明。任取 $p \in A$，令 $n(p) = \operatorname{argmin}_{\bar{p} \in \Gamma}\{\|p - \bar{p}\|\}$ 表示距离 $p \in A$ 最近的样本点。注意，由于 Γ 是一个 ε-网，因此 $\|p - n(p)\| < \varepsilon$。那么，

$$\begin{aligned}
\sum_{c \in \Lambda} \mathbb{1}_C(c) f(\|c-p\|) &= \sum_{c \in \Lambda} \mathbb{1}_C(c) \cdot (f(\|c-p\|) - f(\|c-n(p)\|)) \\
&\quad + \sum_{c \in \Lambda} \mathbb{1}_C(c) \cdot \big(f(\|c-n(p)\|) - g_{c,n(p)}(\varepsilon)\big) \\
&\quad + \sum_{c \in \Lambda} \mathbb{1}_C(c) \cdot g_{c,n(p)}(\varepsilon) \\
&\geq - \sum_{v \in \Lambda} \mathbb{1}_C(c) \cdot g_{c,n(p)}(\|p-n(p)\|) \\
&\quad + x \\
&\quad + \sum_{c \in \Lambda} \mathbb{1}_C(c) \cdot g_{c,n(p)}(\varepsilon),
\end{aligned}$$

这大于 x，因为 $g_{c,n(p)}$ 单调不减，且 $\|p - n(p)\| < \varepsilon$。 □

反过来，如果我们考虑对 (3) 的上界，就不能再简单地选取一个有限样本 Λ 来近似上述半无限规划的凸包 (A)。事实上，这样做会限制 (3) 的可行解集合，从而反而降低最大值。下面的引理再次通过对约束作出变体，提供了解决这一问题的方法。

引理 3.4。 设 $g_{c,p}$ 为一族控制函数。设 $\varepsilon > 0$ 和 Λ 是 凸包 (A)的一个 ε-网。此外，假设 $C \in \left[\text{凸包}\left(\begin{array}{c} A \\ N \end{array}\right)\right]$ 和 x 满足

$$x \leq U(p, C) = \sum_{c \in C} f(\|c - p\|) \text{ for all } p \in \Gamma.$$

那么，存在一个构型 $C' \in \left[\begin{array}{c} \Lambda \\ N \end{array}\right]$ 使得

$$x \leq \sum_{c \in C'} f(\|c - p\|) + g_{c,p}(\varepsilon) \text{ for all } p \in \Gamma.$$

证明。 令 $C' = \{\{n(c) : \ c \in C\}\}$，其中 $n(c) = \operatorname{argmin}_{c' \in \Lambda} \|c - c'\|$。 那么

$$\begin{aligned} \sum_{c \in C'} f(\|c - p\|) + g_{c,p}(\varepsilon) &= \sum_{c \in C} f(\|n(c) - p\|) - f(\|c - p\|) \\ &\quad + \sum_{c \in C} f(\|c - p\|) + \sum_{c \in C} g_{n(c),p}(\varepsilon) \\ &\geq -\sum_{c \in C} g_{n(c),p}(\|c - n(c)\|) + x + \sum_{c \in C} g_{n(c),p}(\varepsilon) \geq x, \end{aligned}$$

其中最后一个不等式成立，是因为 $g_{n(c),\ p}$ 是非递减的，并且当 Λ 是 $\operatorname{conv}(A)$ 的一个 ε-网时， $\|c - n(c)\| < \varepsilon$。 □

现在我们可以证明本节的主要结果。

定理 3.5。 令 ε_Λ、 $\varepsilon_\Gamma > 0$ 和 Λ 为 $\operatorname{conv}(A)$ 的一个 ε_Λ-网，且 Γ 为A的一个 ε_Γ-网。此外，令 $g_{c,\ p}$ 为一族控制函数。那么我们有如下结论：

$$\begin{aligned} &\max\ x && \text{(6a)} \\ &\quad y \in \{0, \ldots, N\}^\Lambda \\ &\quad \mathbb{1}^\top y = N \\ &\quad x \leq \sum_{c \in \Lambda} y_c \cdot (f(\|c - p\|) - g_{c,p}(\varepsilon_\Gamma)) \qquad \text{for all } p \in \Gamma \\ &\leq \text{最大值 } x && \text{(6b)} \\ &\quad y \in \{0, \ldots, N\}^\Lambda \\ &\quad \mathbb{1}^\top y = N \\ &\quad x \leq \sum_{v \in \Lambda} y_c \cdot f(\|c - p\|) \qquad \text{for all } p \in A \\ &\leq \mathcal{P}(A) && \text{(6c)} \\ &\leq \text{最大化 } x && \text{(6d)} \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
& C \in \begin{bmatrix} \operatorname{conv}(A) \\ N \end{bmatrix} \\
& x \le \sum_{c \in C} f(\|c-p\|) && \text{for all } p \in \Gamma \\
\le \max\ & x && \text{(6e)} \\
& y \in \{0,\dots,N\}^{\Lambda} \\
& \mathbb{1}^{\top} y = N \\
& x \le \sum_{c \in \Lambda} y_c \cdot (f(\|c-p\|) + g_{c,p}(\varepsilon_{\Lambda})) && \text{for all } p \in \Gamma
\end{aligned}
$$

证明。我们证明，左侧不等式的可行解对于右侧不等式也可行，且目标值相同，从而证实所述不等式。首先注意，引理 3.3 表明，(6a) 的一个可行解 x, y 对于 (6b) 也可行，且目标值相同。接下来，我们考虑 (6b) 的一个可行解 x, y，并注意到 y 编码了一个多重集 $C \in \begin{bmatrix} \Lambda \\ N \end{bmatrix} \subseteq \begin{bmatrix} \text{凸包}(& A &) \\ & N & \end{bmatrix}$。此外，$x, C$ 满足 (2) 中的约束，且目标值相同 x。由于删除了关于 $p \in A \setminus \Gamma$ 的约束，(6d) 是 (2) 的松弛，因此下一个不等式可直接得出。最后，若 x, C 是 (6d) 的一个可行解，我们应用引理 3.4 得到一个满足 (6e) 约束的集合 $C' \in \begin{bmatrix} \Lambda \\ N \end{bmatrix}$。然后，通过使用 $\mathbb{1}^{\top} y = N$ 将 C' 编码为 $y \in \{0,\dots,N\}^{\Lambda}$，我们得到 (6e) 的一个可行解，其目标值相同 x。

□

下面简要讨论混合整数程序（6a）和（6e）的计算复杂度。值得注意的是，混合整数线性规划通常指包含二进制变量的优化问题，而这类问题的求解速度显著更快。我们想指出，（$y \in \{0,\dots,N\}^{\Lambda}$）和（6a）以及（6e）中的整数变量可以替换为 $|\Lambda| \cdot \log(N)$个二进制变量。

此外，在定理3.5 的下界中，向量 y 可以取为$y \in \{0,1\}^{\Lambda}$，这仍能给出一个（可能较差的）下界，并显著减少二进制变量的数量。遗憾的是，上界情形下无法立即进行类似的简化。不过，我们引入了另一个概念，旨在以类似方式降低上界情形下的计算复杂度。

定义 3.6。有限子集 $\Lambda \subset \mathbb{R}^n$ 称为 A 的(ε, k)-网，当且仅当

1. $\Lambda \subset A$，*2.* 对于每个 $p \in A$，至少存在 k 个不同的点 $p_1, \dots, p_k \in \Lambda$，使得 $|p_i - p| < \varepsilon$。

利用一个（ε_{Λ}，N）-网，我们可以得到一个类似于定理 3.5 的层级结构，将 y 的可能取值限制为 $\{0,1\}$。

命题 3.7。 设 ε_Λ、$\varepsilon_\Gamma > 0$ 和 Λ 是 $(\varepsilon_\Lambda,\ N)$-网，覆盖 $\mathrm{conv}(A)$，且 Γ 是 A 的一个 ε_Γ- 网。此外，设 $g_{c,\ p}$ 是一族控制函数。那么，

$$
\begin{aligned}
(6d) \leq \max\ & x \\
& y \in \{0,1\}^\Lambda \\
& \mathbb{1}^\top y = N \\
& x \leq \sum_{c\in\Lambda} y_c \cdot (f(\|c-p\|) + g_{c,p}(\varepsilon_\Lambda)) \qquad \textit{for all } p \in \Gamma
\end{aligned}
$$

证明。 证明方法与定理3.5 的证明类似，只需将 $C' = \{\{n(c) : c \in C\}\}$ 引理 3.4 的证明中的集合替换为 C' 个 N 互不相同的点组成的集合 Λ。这是可行的，因为 Λ 是一个 (ε_Λ, N)-网（见定义 3.6）。 □

一个平凡的 (ε, N)-网，基本上可以通过由 N 个 ε-网组成的多重集获得。不过，实际上通常存在所需点数更少的解，尽管其点数仍多于经典的 ε-网。

3.2 收敛结果

通过定理 $\mathcal{P}(A$中提出的层级结构建立3.5的上界和下界后，我们研究这些界的质量。为此，本节将证明，当 $\varepsilon_\Lambda, \varepsilon_\Gamma$ 都趋于 0 时，界定问题 (6a) 和 (6e) 的解收敛到原问题 (3) 的一个解。两项证明在很大程度上依赖于 [19],中引理 6.1 的证明，该引理证明了更一般的半无限规划中类似的收敛性质，但我们对其做了少量必要修改。首先，我们关注下界，即证明 (6a) 在 $\varepsilon_\Gamma \to 0$ 时收敛到 (6b):

定理 3.8。 设 (ε_k) 是一个收敛于 0的非负序列。此外，对于每个 $k \in \mathbb{N}$，选取一个 ε_k 网 Γ_k，其属于 A。那么，关于 $(x_k,\ y_k)_{k\in\mathbb{N}}$ 的最优解序列 (6a)，相对于 Γ_k 和 ε_k 的任意聚点，都是 (6b)的最优解。

证明。 设 $(\bar{x},\ \bar{y})$ 是 $(x_k,\ y_k)$ 的一个聚点。取一个子序列后，我们可以假设 $(x_k,\ y_k) \to (\bar{x},\ \bar{y})$，其中 $k \to \infty$。现在我们将证明，$(\bar{x},\ \bar{y})$ 对 (6b) 可行，且实际上是其最优解:

任取 $p \in A$，并注意到，由于 Γ_k 是 A的 ε_k-网，因此存在一个序列 (p_k)，满足 $p_k \in \Gamma_k$，且当 $k \to \infty$时 $p_k \to p$。进一步注意，对所有 k，我们有

$$
x_k \leq \sum_{c\in\Lambda} (y_k)_c \cdot (f(\|c-p_k\|) - g_{c,p_k}(\varepsilon_k)) \leq \sum_{c\in\Lambda} (y_k)_c \cdot f(\|c-p_k\|)
$$

并通过取极限

$$
\bar{x} \leq \sum_{c\in\Lambda} \bar{y}_c \cdot f(\|c-p\|).
$$

因此，$(\bar{x},\ \bar{y})$ 是 (6b) 的可行解。

现在，设 $(x,\ y)$ 是 (6b) 的任意解。由于 A 是紧集且 $\varepsilon_k > 0$，我们知道 $g_c = \max_{p\in A} g_{c,\ p}$ 是连续的单调非递减函数，且 $g_c(0) = 0$。现在我们观察到，

$$(x - \sum_{c\in\Lambda} y_c \cdot g_c(\varepsilon_k), y)$$

对 6a) 而言，关于 Γ_k是可行的。由于 (x_k, y_k) 是 (6a) 的最优解，因此有 $x_k \geq x - \sum_{c\in\Lambda} y_c \cdot g_c(\varepsilon_k)$。因此，由于 $g_c(0) = 0$，取极限可得 $\bar{x} \geq x$。由于 x 是任意选取的，我们得出结论，$(\bar{x}, \bar{y})$ 确实是 (6b) 的最优解。 □

注意，当 6b) 收敛到 (6c) 时，$\varepsilon_\Lambda \to 0$ 直接成立，因为效用函数和 f 都是连续的。因此，定理 3.8 意味着 (6a) 收敛到 (6c)，即 (6a) 的值趋于 $\mathcal{P}(A)$，当 $\varepsilon_\Lambda, \varepsilon_\Gamma \to 0$。

此外，采用相同的论证，我们得出 (6d) 收敛到 (6c) 当 $\varepsilon_\Gamma \to 0$，因此只剩下一个收敛性证明，即证明 (6e) 在 6d) 当 $\varepsilon_\Lambda \to 0$时收敛。

以下定理的一个难点在于，改变样本 Λ 时可行解的类型各不相同。(6e) 的可行解具有如下形式 $y \in \{1, \ldots, N\}^\Lambda$其中 $\mathbb{1}^\top y = N$ 而 (6d) 的可行解则是 N个点构成的多重集，其支撑集包含于 conv(A)。注意，这些对象不便于直接讨论收敛性。不过，这两种概念都可以转化为一个元素 $\omega \in (\mathrm{conv}(A))^N$，该元素与 Λ 无关，且便于讨论收敛性。注意，ω 可以按规范方式转换回多重集。

定理 3.9. 设 (ε_k) 是一个收敛于 0 的非负序列。此外，对每个 $k \in N$，选取一个 *conv(A)* 的 ε_k-网 Λ_k。设 (x_k, y_k) 是 *(6e)* 关于 Λ_k, ε_k 的一列最优解。将每个 y_k 与 $\omega_k \in (\mathit{conv}(A))^N$ 视为同一对象，则该序列的任一聚点 $(\bar{x}, \bar{\omega})$ 通过将 $\bar{\omega}$ 视为一个多重集，对应于 *(6d)* 的一个最优解。

证明。 证明与定理 3.8 的证明类似。注意，由于所讨论的问题中元素的顺序并不重要，因此我们可以根据上下文，将 (凸包(A))^N 中的元素视为元组或多重集。假设 (x_k, ω_k) 具有一个聚点 $(\bar{x}, \bar{\omega})$。通过取一个子序列，不妨假设 $(x_k, \omega_k) \to (\bar{x}, \bar{\omega})$。考虑连续函数 $g_p = \max_{c\in\mathrm{conv}(A)} g_{c,p}$ with$g_p(0) = 0$。那么，对于所有 k 和 $p \in \Gamma$，都有:

$$\begin{aligned} x_k &\leq \sum_{c\in\Lambda_k} (y_k)_c \cdot (f(\|c - p\|) + g_{c,p}(\varepsilon_k)) \\ &\leq \sum_{i=1}^{N} f(\|(\omega_k)_i - p\|) + g_p(\varepsilon_k) \end{aligned}$$

取极限可得

$$\bar{x} \leq \sum_{i=1}^{N} f(\|\bar{\omega}_i - p\|)$$

对所有 $p \in \Gamma$。因此 $\bar{x}$， $\bar{\omega}$ 是（6d）的可行解。

现在假设 x， ω 是（6d）的任意解。根据引理3.4 ，存在ω'_k使得 x， ω'_k是（6d）的可行解。由于（x_k， ω_k）是一个最优解，我们有 $x_k \geq x$ ，取极限可得 $\bar{x} \geq x$。因此 $\bar{x}$ 也是（6e）的最优解。

□

注意，定理3.8、3.9 的证明在将 y 限制为二元变量时仍然成立，正如第3.1节末尾所述。

结合定理3.8 和3.9，我们可以得出结论：通过选择合适的序列（ε_Γ）$_k$， （ε_Λ）$_k$，理论上可以将 $\mathcal{P}$（A）的值界定得任意精确。然而，在实践中求解相应的混合整数线性问题将面临计算上的挑战。

4 计算结果

本节通过数值实验展示本文提出的混合整数规划方法的能力与局限。所有计算均使用 Gurobi，在一台配备两颗 Intel(R) Xeon(R) CPU E5- 2660v@2.00GHz 处理器（每颗有 14 个核心）和 256 GB 内存的 HP DL380 Gen9 服务器上完成。我们首先考察一个简单的示例，其中 A 是一个等边三角形，构型的规模为 $N = 3$。此外，我们选取 $f(x) = e^{-5\|x\|^2}$ 作为势函数，并选取 $\varepsilon_\Gamma = 0.014, \varepsilon_\Lambda = \varepsilon_\Gamma/3$ 作为 $\Gamma \subseteq A$ 和$\Lambda \subseteq \mathrm{conv}(A)$ 的相应离散化宽度。最后，我们将 (6a) 和 (6e) 都限制为二进制变量 $y \in \{0,1\}^\Lambda$，而非整数变量 $y \in \{0,\ldots,N\}^\Lambda$，如定理 3.5下文所述。由于我们预计所得构型由三个彼此分离的点组成，因此这不应显著影响界的质量。

我们在图 2中展示由 (6a) 给出的构型。该结果约经过 10 小时后获得。

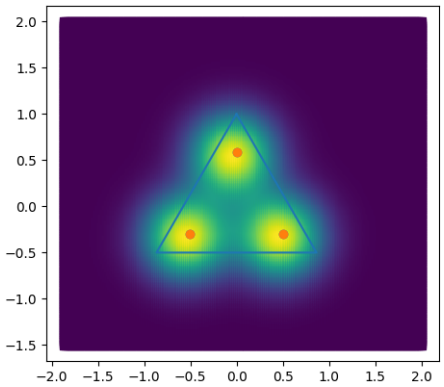

图 2 式（6a）的最优构型，满足 $\varepsilon = 0.014$，并给出了相应的 f势热力图（颜色由深蓝渐变为绿色，再到黄色）。构型中的点以橙色圆圈表示。

接下来，我们评估上述示例中关于收敛性的数值证据。为此，我们展示 (6a) 和 (6e) 的二元版本在 ε_Λ 和 ε_Γ 逐渐减小时的表现。这里，(6e) 的二元变体由命题 3.7 推导而来。具体而言，对于每个 $\varepsilon \in \{0.04, 0.038, \ldots, 0.014\}$，我们使用 $\varepsilon_\Lambda = \varepsilon/3$、$\varepsilon_\Gamma = \varepsilon$ 计算下界，并使用 $\varepsilon_\Gamma = \varepsilon_\Lambda = \varepsilon$ 计算上界。我们选择这些缩放方式以便更好地比较，因为上界情形中的 (ε_Λ, 3)-网包含更多采样点，因此比 (ε_Λ, 1)-网产生更多变量。此外，我们使用经过缩放的 A_2 格点，并在边界上补充额外的采样点，以生成样本 Λ 和 Γ。这种构造确保 Λ 和 Γ 确实分别是 ε_Λ 网和 ε_Γ 网。所得界如图 3 所示。

显然，较小的 ε 并不总能得到更好的界，尽管可以清楚地看到界之间的间隙有缩小的趋势，这与我们在定理3.8 和3.9中证明的收敛结果一致。这种方法的一个缺点是相应混合整数规划的计算运行时间会随着 Γ 和 Λ的样本量增加而大幅延长：当 $\varepsilon = 0.04$ 时仅需几秒，而当 $\varepsilon = 0.014$时则需要10小时。

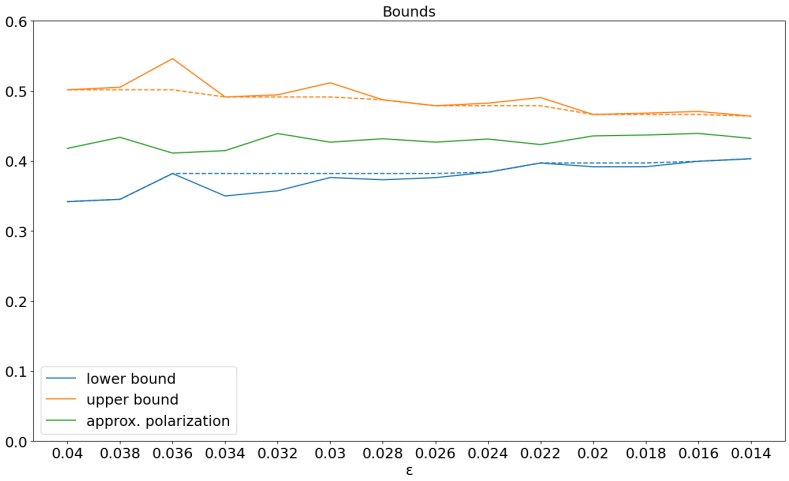

图 3 随着 ε 取值递减而计算出的上界和下界，以及相应的运行最优值（虚线）；还展示了下界构型的近似极化。

作为另一个学术示例，我们采用相同的方法，对 $\varepsilon = \varepsilon_\Lambda = \varepsilon_\Gamma$ 和不同的凸、非凸乃至非连通 A进行不同的合适选取，以展示我们方法的广泛适用性。图4展示了通过对下界混合整数规划（6a）进行二元近似所得到的极化。

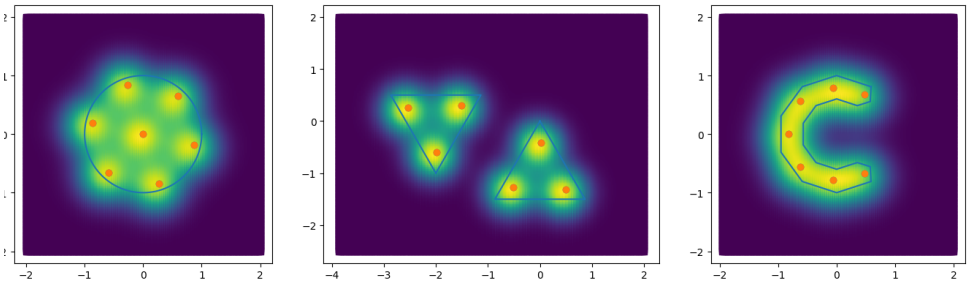

图 4 不同 6a）的最优构型 A 以橙色表示，并以热力图展示相应的势（颜色由深蓝渐变至绿色，再至黄色）。相应形状的边界 A 以蓝色突出显示（从左至右：Ball、三角形、非凸形状）。

此外，我们简要总结了这些额外形状的计算结果 A，见下表4 。我们选择了相应的样本宽度，以便能在合理的时间内求解对应的混合整数规划。值得注意的是， A

A N	Ball 7	两个扭曲三角形 6	非凸形状 7
下界	0.391063	0.381283	0.918088
$\varepsilon = \varepsilon_\Lambda = \varepsilon_\Gamma$	0.0625	0.025	0.025
计算时间 以秒为单位	6145	1238	2020
上界	0.942982	0.506328	1.12719
$\varepsilon = \varepsilon_\Lambda = \varepsilon_\Gamma$	0.0875	0.0375	0.03125
计算时间 单位：秒	6741	858	879
gap	约 59%	约 25%	约 19%

形状会显著影响我们混合整数规划方法的运行时间。Ball 的对称群很大，这似乎可能导致运行时间增加，因为在 Gurobi 等求解器使用的分支定界树中，处处都可能找到较好的解。如果确实如此，对称性约化技术或许能带来显著改进。

5 展望

我们在第2 节中看到，最暗点的位置与局部最优构型中各点的位置相互交织。我们猜想，这些结果可以推广，尤其是利用 A 的对称性，或要求 A 为凸集，甚至为多胞体。此外，将这些结果推广到其他 D的取值也会很有意思。

然而，显然这类结果存在局限。例如，考虑 $A = D = S^{n-1}$ 单位球面。在这种情况下，定理2.1 显然没有适用的变体。

本文没有讨论局部或全局最优点配置的显式计算，即使是在 n边形或单位球这类简单集合上也没有。不过，数值实验表明，这类配置呈现出某种结构。我们希望能利用第2 节结果的推广，为某些配置获得最优性证明。这里我们想特别指出一个我们所知的相关结果：对于某些衰减较缓的黎曼势，当 A 等于闭的 d维单位球时，最优点配置由 N 个原点副本组成（见 [1, 定理 14.2。6]）。我们在正多胞体上的数值实验中也观察到了类似现象。

第3 节介绍的混合整数规划层级给出了可证明的上界和下界，并且这些界会收敛至最优解。然而，不出所料，由于混合整数规划是 NP完全的，要为足够精细的样本计算这些界非常耗时。一个自然的问题是，能否利用数学规划中的知名技术（例如凸松弛、内近似、列生成或局部细化）来加速计算，从而为更精细的样本获得结果。然而，这些技术大多只能对所讨论的混合整数规划层级提供近似，这可能会限制使用更精细样本所带来的收益。

此外，针对问题的具体实例，谨慎地调整样本的选取可能会有所帮助。例如，如果我们对最优构型和/或最暗点的正确位置有猜想，就可以将这些信息

融入样本，同时保留样本的 ε-网性质。此外，这些思路或许能帮助我们在高度结构化的情形下，利用我们的界对最优性进行解析证明。

数据可用性。 由于本研究未生成或分析任何数据集，因此无需为本文共享数据。

致谢。 作者谨感谢 Frank Vallentin 提供的宝贵建议。M.C.Z. 获得德国研究联合会资助的“极值离散几何中的谱界”项目（项目编号：414898050）的部分资助。

参考文献

[1]Borodachov, S.V., Hardin, D.P., Saff, E.B.：《可求长集上的离散能量》。Springer 数学专著丛书。Springer，???（2019）。https://books.google.se/books?id=Eie7DwAAQBAJ[2] Stolarsky, K.：单位圆上到某些点集的距离之和。《太平洋数学杂志》59(1)，241–251（1975）[3] Ambrus, G.：离散几何中的解析与概率问题。博士论文，伦敦大学学院（2009）[4] Ambrus, G., Ball, K.M., Erd´elyi, T.：单位圆的切比雪夫常数。《伦敦数学学会会报》45(2)，236–248（2013）https://doi.org/10.1112/blms/bds082[5] Nikolov, N., Rafailov, R.：关于圆上到某些点集的距离幂之和。《太平洋数学杂志》253(1)，157–168（2011）[6] Hardin, D.P., Kendall, A.P., Saff, E.B.：离散势中圆上等距点的极化最优性。《离散与计算几何》50，236–243（2013）[7]Erd´elyi, T., Saff, E.B.：高维中的黎曼极化不等式。《逼近理论杂志》171，128–147（2013）[8]Borodachov, S.：单纯形的高维球面极化问题。《离散与计算几何》67，525–542（2022）https://doi.org/10.1007/ s00454-021-00308-1[9] Borodachov, S.V., Bosuwan, N.：d 维流形子集上离散黎曼 d-极化的渐近性质。《势分析》41(1)，35–49（2014）[10] Borodachov, S., Hardin, D., Reznikov, A., Saff, E.：黎曼势的最优离散测度。《美国数学会汇刊》370(10)，6973–6993（2018）

[11] Hardin, D.P., Petrache, M., Saff, E.B.：无约束极化（切比雪夫）问题：基本性质与黎斯核渐近性质。《势分析》，1–44（2020）[12] Anderson, A., Reznikov, A., Vlasiuk, O., White, E.：低光滑度集合上的极化与覆盖。《数学进展》410, 108720（2022）[13] Conway, J.H., Sloane, N.J.A., Bannai, E., Borcherds, R.E., Leech, J., Norton, S.P., Odlyzko, A.M., Parker, R.A., Queen, L., Venkov, B.B.：《球堆积、格与群》。数学科学基础丛书。Springer，???（2013）。https://books.google.se/books?id=hoTjBwAAQBAJ[14] Nasz´odi, M.：载于：Ambrus, G., B´ar´any, I., B¨or¨oczky, K.J., Fejes T´oth, G., Pach, J.（编），《平移覆盖的多种面貌》，第335–358页。Springer，柏林、海德堡（2018）。https://doi.org/10.1007/978-3-662-57413-3 14 . https://doi.org/10.1007/978-3-662-57413-3 14[15] Nasz´odi, M.：关于几何中的一些覆盖问题。《美国数学会会刊》144(8)，3555–3562（2016）https://doi.org/10.1090/proc/12992[16] Rolfes, J.H., Vallentin, F.：紧致度量空间的贪心覆盖。《匈牙利数学学报》155, 130–140（2017）[17]Cohn, H., Kumar, A.：球面上点的普适最优分布。《美国数学会杂志》20(1)，99–148（2007）[18] Simon, B.：《凸性：解析视角》第187卷。剑桥大学出版社，???（2011）[19] Shapiro, A.：半无限规划、对偶性、离散化与最优性条件。《优化》58(2)，133–161（2009）