УДК 519.8

Н.Г. ЖУРБЕНКО

АЛГОРИТМ ПРОЕКТИРОВАНИЯ НА ПОЛИТОП [1]

Предложен алгоритм определения кратчайшего вектора выпуклой оболочки конечного множества точек евклидового пространства. Алгоритм основан на решении задачи минимизации квадратичной функции в положительном ортанте. Алгоритм предназначен для использования в численных методах оптимизации.

Задано множество $G=\{g_k, k=\overline{1,m}\}$ векторов $g_k \in E^n$ в n-мерном евклидовом пространстве E^n. $Co\{G\}$ – выпуклая оболочка множества G: $Co\{G\}=\{x\in E^n \mid x=\sum_{k=1}^{m}\lambda_k g_k$,

$$\sum_{k=1}^{m}\lambda_k=1, \lambda_k\ge 0, k=\overline{1,m}\}.$$

Задача состоит в определении наименьшего по норме (евклидовой) вектора $p^*\in Co\{G\}$, для которого принято обозначение $Nr\{G\}$. Определение этого вектора обычно представляется следующей простейшей задачей квадратичного программирования:

$$p^*=\arg\min\left(\sum_{k=1}^{m}\lambda_k g_k\right)^2 \qquad (1)$$

$$\sum_{k=1}^{m}\lambda_k=1, \qquad (2)$$

$$\lambda_k\ge 0, k=\overline{1,m}. \qquad (3)$$

Необходимость в решении задачи определения вектора $Nr\{G\}$ возникает во многих алгоритмах оптимизации. При этом алгоритм должен удовлетворять следующим требованиям: учитывать специфические особенности задачи квадратичного программирования (1)–(3); быть эффективным и численно устойчивым; определять представление вектора p^* в виде выпуклой комбинации минимального

[1] Работа выполнена при частичной финансовой поддержке CRDF (Фонда гражданских исследований и развития США, проект UKM2-2812-KV-06).

числа векторов из множества G; учитывать необходимость решения серии задач с последовательным включением в множество G новых векторов. Известно несколько программных реализаций алгоритмов с такими свойствами (например, [1]). Однако опыт их использования показывает недостаточную численную устойчивость этих реализаций для задач больших размерностей в ситуации когда $0 \in Co\{G\}$ (или $p^* \approx 0$). Далее приводится алгоритм, который (как показал опыт его численного использования) существенно устраняет указанный недостаток.

Рассмотрим следующую задачу:

$$\min \frac{1}{2} x^2, \tag{4}$$

$$(x, g_k) \geq t; \; k = \overline{1, m}, \tag{5}$$

где $(\cdot,\cdot)$ – скалярное произведение в E^n; $t > 0$ – (произвольное) положительное число. Двойственная к (4)–(5) задача будет состоять в следующем:

$$\max_u \left\{ \min_x \left\{ \frac{1}{2} x^2 - \left(\sum_{k=1}^{m} u_k g_k, x \right) + t \sum_{k=1}^{m} u_k \mid x \in E^n \right\} \mid u \geq 0 \right\}, \tag{6}$$

где $u \in E^m$ – двойственные переменные задачи (4)–(5) относительно ограничений (5). Решение задачи минимизации по переменным x в (6) очевидно:

$$x = \sum_{k=1}^{m} u_k g_k. \tag{7}$$

Отсюда следует, что (6) состоит в следующем (заменяем операцию $\min$ на $\max$ и изменяем знак целевой функции на противоположный):

$$\min \frac{1}{2} \left(\sum_{k=1}^{m} u_k g_k \right)^2 - t \sum_{k=1}^{m} u_k. \tag{8}$$

$$u \geq 0. \tag{9}$$

Пусть $G = \{g_1, g_2, \ldots, g_m\}$ – матрица $n \times m$; $e \in R^m$, $e = (1,1,\ldots,1)^T$. Здесь и далее $(\ldots)^T$ – операция транспонирования. Тогда задача (8)–(9) представляется в следующей компактной форме:

$$\min \frac{1}{2} (G^T G u, u) - t(e, u), \tag{10}$$

$$u \geq 0. \tag{11}$$

Утверждение 1 . Система ограничений (5) совместна тогда и только тогда, когда $p^* \neq 0$.

Если система ограничений (5) совместна, то

$$p^* = \sum_{k=1}^{m} u_k^* g_k / \sum_{k=1}^{m} u_k^*, \tag{12}$$

где u^* – решение двойственной задачи (8)–(9) (или, что то же, задачи (6)).

Доказательство. Пусть система ограничений (5) совместна. Тогда исходная (4)–(5) и двойственная (6) задачи разрешимы. Их решения обозначим x^* и u^* соответственно. В силу (7) имеем

$$x^* = \sum_{k=1}^{m} u_k^* g_k. \tag{13}$$

Так как $t > 0$, то $x = 0$ не является допустимой точкой системы (5). Поэтому $x^* \neq 0$. Отсюда, учитывая (13) и (9), $\sum_{k=1}^{m} u_k^* > 0$. Пусть $\overline{p} = \sum_{k=1}^{m} u_k^* g_k / \sum_{k=1}^{m} u_k^* = x^* / \sum_{k=1}^{m} u_k^*$. Из определения $\overline{p}$ следут, что $\overline{p} \in Co\{G\}$.

Докажем, что $\overline{p} = p^*$. Для произвольного $l \in \overline{1,m}$ рассмотрим величину $d_l = (g_l - \overline{p}, \overline{p}) = \left(g_l - x^* / \sum_{k=1}^{m} u_k^*, x^* / \sum_{k=1}^{m} u_k^* \right) = \left(g_l, x^* / \sum_{k=1}^{m} u_k^* \right) - (x^*)^2 / \left(\sum_{k=1}^{m} u_k^* \right)^2$. В силу условия (5) $(g_l, x^*) \geq t$. Поэтому $d_l \geq t / \left(\sum_{k=1}^{m} u_k^* \right) - (x^*)^2 / \left(\sum_{k=1}^{m} u_k^* \right)^2$.

Условие равенства значений функционалов прямой и двойственной задач для оптимальных значений переменных состоит в следующем:

$$\frac{1}{2}(x^*)^2 = -\left(\frac{1}{2}(x^*)^2 - t\sum_{k=1}^{m} u_k^* \right).$$

Отсюда следует: $(x^*)^2 = t\sum_{k=1}^{m} u_k^*$. Используя полученное выражение для $(x^*)^2$, получаем справедливость следующей системы неравенств:

$$d_l = (g_l - \overline{p}, \overline{p}) \geq 0, \forall l = \overline{1,m}. \tag{14}$$

Однако справедливость (14) означает, что $\overline{p}$ является вектором наименьшей длины из выпуклой оболочки множества векторов G, а из единственности такого вектора следует: $\overline{p} = p^*$.

Пусть $p^* \neq 0$. Докажем, что система (5) совместна. Так как $p^* = Nr\{G\}$, то $(g_k - p^*, p^*) \geq 0, k = \overline{1,m}$, или $(g_k, p^*) \geq (p^*)^2, k = \overline{1,m}$, Пусть $\tilde{x} = t/(p^*)^2 p^*$. Тогда $(g_k, \tilde{x}) = t/(p^*)^2 (g_k, p^*) \geq t, k = \overline{1,m}$. Таким образом $\tilde{x}$ удовлетворяет системе (5). Следовательно, система (5) совместна. Утверждение 1 доказано.

Из утверждения 1 следует, что решение задачи поиска наименьшего по норме вектора из выпуклой оболочки системы векторов сводится к решению задачи (8)–(9). Причем, если целевая функция задачи (8)–(9) не ограничена снизу, то $0 \in Co\{G\}$.

Задача (8)–(9) является простейшей задачей квадратичного программирования. Для ее решения предлагается использовать известный алгоритм, основанный на методе сопряженных градиентов в сочетании с операцией проектирования на область допустимых значений переменных: $R^{+} = \{u \mid u \geq 0\}$ (подробное описание алгоритма содержится, например, в [2]). За конечное число шагов этот алгоритм определяет решение задачи (8)–(9) u^* или устанавливает факт неограниченности целевой функции (8). Во втором случае (когда $0 \in Co\{G\}$) определяется некоторая точка $\tilde{u} \geq 0$ и вектор $\eta^* \geq 0, \eta^* \neq 0,$ такие, что на луче $L = \{u \mid u = \tilde{u} + h\eta^*, h \geq 0\}$ целевая функция неограничено убывает.

Часто для задачи (1)–(3) необходимо не только найти ее решение p^*, но и определить представление этого решения в виде выпуклой комбинации векторов из множества G. Если $0 \notin Co\{G\}$, такое представление определяется, очевидно, формулой (12). В следующем утверждении это представление определяется и для случая $0 \in Co\{G\}$.

Утверждение 2. Пусть на луче $L = \{u \mid u = \tilde{u} + h\eta^*, h \geq 0\}$, где $\tilde{u} \geq 0,$ $\eta^* \geq 0$ и $\eta^* \neq 0$, целевая функция (10) неограничено убывает. Тогда $0 \in Co\{G\}$. При этом

$$0 = \sum_{k=1}^{m} \eta_k^* g_k / \sum_{k=1}^{m} \eta_k^* . \tag{15}$$

Доказательство. Так как целевая функция исходной задачи (4)–(5) очевидно ограничена снизу, а целевая функция двойственной задачи (10)–(11) неограничена снизу, то система ограничений исходной задачи (5) несовместна. Поэтому (см. утверждение 1) $0 \in Co\{G\}$.

На луче L целевая функция (10) неограничено убывает, поэтому для $\forall h > 0$ $(g(\tilde{u} + h\eta^*), \eta^*) < 0,$ где $g(u) = G^T G u - te$ – градиент этой функции. Тогда $(G^T G\tilde{u} - te, \eta^*) + h \mid G\eta^* \mid^2 < 0,$ для $\forall h > 0.$ Отсюда следует равенство $G\eta^* = 0.$ Поделив это равенство на положительное число $\sum_{k=1}^{m} \eta_k^*$, получаем (15).

Опишем алгоритм представления вектора p^* (решение задачи) в виде выпуклой комбинации минимального числа векторов из множества G.

Пусть $p^* \neq 0.$ Тогда определен вектор u^* и справедлива формула (12). Нулевые значения компонент вектора u^* фиксируем. Это можно интерпретировать как исключение из множества G всех векторов g_k, для которых $u_k^* = 0$. Поэтому, не ограничивая общности, будем считать, что $u_k^* > 0, k = 1,2,\ldots m.$ Так как u^* – решение задачи (10)–(11), то градиент ее целевой функции в точке u^* равен нулю: $g(u^*) = G^T G u^* - te = 0.$ Рассмотрим систему линейных уравнений (m уравнений, n неизвестных):

$$G\eta = 0. \tag{16}$$

Пусть существует ненулевое решение системы (16) η. Заметим, что если $m > n$, ненулевое решение, очевидно, существует. Рассмотрим прямую $L = \{u \mid u = u^* + h\eta\}$. Для $u \in L$, $g(u) = g(u^*) + hG^T G\eta = 0.$ Прямая L, очевидно, пересекает границу положительного ортанта $u \ge 0$ хотя бы в одной точке. Причем определение такой точки $\tilde{u}^*$ элементарно просто (поэтому соответствующий алгоритм не приводится). Заметим, что $\tilde{u}^* \ge 0,$ при этом хотя бы одна компонента вектора $\tilde{u}^*$ равна нулю. Так как $g(\tilde{u}^*) = 0,$ то $\tilde{u}^*$ – решение задачи. Таким образом, мы уменьшили (по крайней мере, на единицу) число векторов в представлении решения задачи p^*. Описанная процедура применяется до тех пор, пока существует ненулевое решение соответствующей системы (16). Число векторов в представлении решения задачи гарантировано не превышает n.

Пусть $p^* = 0.$ Тогда, как указывалось выше, определен вектор $\eta^* \ge 0$, $\eta^* \ne 0$. $G\eta^* = 0$ и справедлива формула (15). Нулевые значения компонент вектора η^* фиксируем. Аналогично вышерассмотренному случаю это можно интерпретировать как исключение из множества G всех векторов g_k, для которых $\eta_k^* = 0.$ Поэтому, не ограничивая общности, будем считать, что $\eta_k^* > 0,$ $k = 1,2,\ldots m.$ Так как u^* – решение задачи (10)–(11), то градиент ее целевой функции $g(u^*) = G^T G u^* - te = 0.$ Рассмотрим систему линейных уравнений ($m+1$ уравнений, n неизвестных):

$$G\eta = 0, \tag{17}$$

$$(\eta, \eta^*) = 0. \tag{18}$$

Пусть существует ненулевое решение системы (16) η. Заметим, что если $m + 1 > n,$ то ненулевое решение, очевидно, существует. Рассмотрим прямую $L = \{u \mid u = \eta^* + h\eta\}$. Для $u \in L$, $G\eta = 0.$ Прямая L, очевидно, пересекает границу положительного ортанта $u \ge 0$ в двух точках. Причем определение этих точек элементарно просто (поэтому соответствующий алгоритм не приводится).

Выберем одну из этих точек $\tilde{\eta}^* \geq 0.$ Заметим, что $\tilde{\eta}^* \geq 0,$ $\tilde{\eta}^* \neq 0,$ при этом хотя бы одна компонента вектора $\tilde{\eta}^*$ равна нулю. Так как $G\eta^* = 0,$ то для решения задачи справедливо представление (15). Таким образом, мы уменьшили (по крайней мере, на единицу) число векторов в представлении решения задачи в виде выпуклой комбинации. Описанная процедура применяется до тех пор, пока существует ненулевое решение соответствующей системы (17)–(18). Число векторов в представлении решения задачи гарантировано не превышает $n+1$.

Заметим, что гарантированное минимальное число векторов в представлении решения задачи в виде их выпуклой комбинации соответствует, разумеется, известной теореме Каратеодори (для случая $p^* \neq 0$ с учетом того, что точка p^* принадлежит границе множества $Co\{G\}$).

Переходим к схеме использования описанного алгоритма в режиме решения серии задач с последовательным включением в множество G новых векторов. Пусть $\tilde{G} = G \cup g_{m+1}$. Для множества G предполагаются известными вектор $p = Nr\{G\} \neq 0$ и $u^* \in R^m$ – решение двойственной задачи (10)–(11). Необходимо решить задачу (10)–(11), соответствующую множеству $\tilde{G}$. Обычно при решении этой задачи в качестве начальной точки используют точку $\tilde{u}^0 = (u^{*T}, 0)^T \in R^{m+1}$. Как показал опыт, эффективность алгоритма несколько выше, если начальную точку выбирать следующим образом. Пусть $\tilde{p} = Nr\{p, g_{m+1}\} = \mu p + (1-\mu) g_{m+1}$, где $0 < \mu < 1$ (представляют интерес обычно именно такие значения μ). Тогда определим начальную точку для алгоритма решения задачи (10)–(11) по формуле

$$\tilde{u}^0 = (u^{*T}, (1/\mu - 1)(u^*, e). \tag{19}$$

Легко проверить, что при этом выполняется равенство

$$\tilde{p} = \sum_{k=1}^{m+1} \tilde{u}_k^0 g_k / \sum_{k=1}^{m+1} \tilde{u}_k^0. \tag{20}$$

Сравнение формулы (20) с (12) поясняет смысл такого выбора начальной точки.

Формулу (19) целесообразно использовать для выбора значения параметра t, который можно рассматривать как параметр нормировки задачи (10)–(11). Его целесообразно выбирать в соответствии со следующим равенством:

$$|\tilde{G}^T \tilde{G} \tilde{u}^0 | = t | \tilde{e} | = t\sqrt{m+1},$$

где $\tilde{e} = (1,1,\ldots 1)^T \in R^{m+1}$. Такой выбор соответствует требованию равенства норм квадратичной и линейной составляющих градиента целевой функции задачи (10)–(11) в точке $\tilde{u}^0$.

В заключение отметим, что разработана программная реализация изложенного алгоритма в форме класса C^{++}.

Н.Г. Журбенко

АЛГОРИТМ ПРОЕКТУВАННЯ НА ПОЛІТОП

Запропоновано алгоритм визначення найкоротшого вектора випуклої оболонки кінцевої множини точок евклідового простору. Алгоритм базується на розв'язанні задачі мінімізації квадратичної функції у позитивному ортанті і призначений для використання в числових методах оптимізації.

N.G. Zhurbenko

THE ALGORITHM OF PROJECTING ON A POLYTOPE

The algorithm for determining of the nearest vector belonging to a convex hull of finite set in the Euclidean space is suggested. The algrithm is based on solving quadratic minimization problem in a positive orthant. The algorithm is designed for use in numerical optimization methods.

1. *Wolfe P.* Finding the nearest point in a polytope // Math. Program. – 1976. – 11, N 2. – P. 128–149.
2. *Пшеничный Б.Н., Данилин Ю.М.* Численные методы в экстремальных задачах. – М.: Наука, 1975. – 376 с.

Получено 11.04.2008