MDM-алгоритм и задача Сильвестра

Малозёмов Василий Николаевич[1] v.malozemov@spbu.ru
Соловьёва Наталья Анатольевна[2] 4vinyo@gmail.com
Тамасян Григорий Шаликович[3,4]⋆ grigoriytamasjan@mail.ru
[1]Санкт-Петербургский государственный университет
[2]Санкт-Петербургский государственный экономический университет
[3]Военно-космическая академия им. А. Ф. Можайского
[4]Институт проблем машиноведения РАН

В пространстве $\mathbb{R}^n$ с евклидовой нормой заданы m точек $a_1, a_2, \ldots, a_m$. Задача Сильвестра ставится так: *найти шар наименьшего объема, содержащий все точки a_i, $i \in 1:m$.*

Запишем формализацию этой задачи

$$\max_{i\in 1:m}\left\{\tfrac{1}{2}\|a_i - x\|^2\right\} \to \min_{x\in\mathbb{R}^n}. \tag{1}$$

Здесь x — центр шара. Задача (1) имеет решение x^* и оно единственно.

Обозначим через A матрицу со столбцами $a_1, a_2, \ldots, a_m$ и через b — вектор из $\mathbb{R}^m$ с компонентами $b[i] = \frac{1}{2}\|a_i\|^2$. Рассмотрим вспомогательную задачу квадратичного программирования

$$\begin{gathered} Q(u) := \tfrac{1}{2}\langle A^T A u, u\rangle - \langle b, u\rangle \to \min, \\ \sum_{i=1}^{m} u[i] = 1, \quad u[i] \geqslant 0 \ \text{ при всех } i \in 1:m. \end{gathered} \tag{2}$$

Множество ее планов обозначим через U. Очевидно, что у задачи (2) существует оптимальный план. Отметим, что целевая функция $Q(u)$ задачи (2) на множестве планов U допускает представление

$$Q(u) = -\tfrac{1}{2}\sum_{i=1}^{m} u[i]\cdot\|a_i - x\|^2, \quad \text{где } x = Au = \sum_{i=1}^{m} u[i]\, a_i.$$

Теорема 1. *Если u^* — оптимальный план задачи (2), то вектор $x^* = Au^*$ будет решением задачи (1). При этом $\max\limits_{i\in 1:m}\left\{\frac{1}{2}\|a_i - x^*\|^2\right\} = -Q(u^*)$.*

Таким образом, задача Сильвестра (1) сводится к задаче квадратичного программирования (2). Для решения задачи (2) существуют известные конечные методы (например, метод Данцига). Они хорошо работают при небольших значениях m и n. Эффективность конечных (базисных) методов связана с использованием формул пересчета параметров при переходе к очередной итерации. Однако при больших m и n последовательный пересчет параметров приводит к критическому накапливанию погрешности вычислений. В связи с этим разрабатываются простые итеративные методы, бесконечные в общем случае, с гарантированной сходимостью. В данном докладе предлагается такой метод для решения задачи (2). Он аналогичен MDM-алгоритму [1], разработанному для нахождения точки из выпуклой оболочки конечного множества, ближайшей к началу координат.

Получим нестандартный вариант критерия оптимальности для задачи (2). Для этого введем *оценку плана* u — величину

$$\Delta(u) = \max_{i\in I^+(u)}\bigl\{\langle a_i, x\rangle - b[i]\bigr\} - \min_{i\in 1:m}\bigl\{\langle a_i, x\rangle - b[i]\bigr\}.$$

Здесь $x = Au$ и $I^+(u) = \{i \in 1 : m \mid u[i] > 0\}$ — носитель плана u. Величина $\Delta(u)$ при всех $u \in U$ неотрицательна.

Теорема 2. *План u задачи (2) будет оптимальным тогда и только тогда, когда $\Delta(u) = 0$.*

С помощью $\Delta(u)$ можно оценить близость вектора $x = Au$ к решению x^* задачи (1).

Теорема 3. *Пусть u — план задачи (2) и $x = Au$. Тогда $\|x - x^*\|^2 \leqslant \Delta(u)$.*

Оценке $\Delta(u)$ при $u \in U$ можно дать эквивалентное определение в терминах исходной задачи (1). А именно, $\Delta(u) = \frac{1}{2}\bigl(\max\limits_{i\in 1:m}\|a_i - x\|^2 - \min\limits_{i\in I^+(u)}\|a_i - x\|^2\bigr)$.

Теорема 4. *План u задачи (2) будет оптимальным тогда и только тогда, когда для вектора $x = Au$ при всех $s \in I^+(u)$ выполняются равенства*

$$\|a_s - x\| = \max_{i\in 1:m}\|a_i - x\|.$$

Теорему 4 можно переформулировать в геометрических терминах:
план u задачи (2) будет оптимальным тогда и только тогда, когда точки a_s при всех $s \in I^+(u)$ лежат на поверхности шара с центром в точке $x = Au$ и радиусом R, равным $\max\limits_{i\in 1:m}\|a_i - x\|$. Такие точки a_s будем называть *опорными.*

Опишем, как применяется MDM-алгоритм к решению задачи Сильвестра. В качестве начального приближения возьмем произвольный план u_0 задачи (2). Ему соответствует вектор $x_0 = Au_0$.

Пусть уже имеется k-е приближение $u_k \in U$. Ему соответствует вектор $x_k = Au_k$. Проверим план u_k на оптимальность. Для этого выберем индексы $i'_k \in 1 : m$ и $i''_k \in I^+(u_k)$ из условий

$$\langle a_{i'_k}, x_k\rangle - b[i'_k] = \min_{i\in 1:m}\bigl\{\langle a_i, x_k\rangle - b[i]\bigr\},$$
$$\langle a_{i''_k}, x_k\rangle - b[i''_k] = \max_{i\in I^+(u_k)}\bigl\{\langle a_i, x_k\rangle - b[i]\bigr\}.$$

Вычислим оценку $\Delta(u_k) = \langle a_{i''_k} - a_{i'_k}, x_k\rangle - \bigl(b[i''_k] - b[i'_k]\bigr)$. Если $\Delta(u_k) = 0$, то u_k — решение задачи (2), а x_k — решение задачи (1). Процесс закончен.

Пусть $\Delta(u_k) > 0$. В этом случае будем говорить, что план u_k порождает k-ю итерацию. Вычислим $\widetilde{\delta}_k = \frac{\Delta(u_k)}{\|a_{i'_k} - a_{i''_k}\|^2}$ и положим

$$\delta_k = \begin{cases} \widetilde{\delta}_k, & \text{если } \widetilde{\delta}_k \leqslant u_k[i''_k], \\ u_k[i''_k], & \text{если } \widetilde{\delta}_k > u_k[i''_k]. \end{cases}$$

Очевидно, что $0 < \delta_k \leqslant \widetilde{\delta}_k$. Если $\delta_k = \widetilde{\delta}_k$, то k-ю итерацию будем называть *неусеченной.* При $\delta_k < \widetilde{\delta}_k$ получаем *усеченную итерацию.* Формулы

$$u_{k+1} = u_k + \delta_k\big(e_{i'_k} - e_{i''_k}\big), \qquad x_{k+1} = x_k + \delta_k\big(a_{i'_k} - a_{i''_k}\big),$$

где e_i — i-й орт в пространстве $\mathbb{R}^m$, определяют очередное $(k+1)$-е приближение. Описание алгоритма завершено.

Теорема 5. *Количество идущих подряд усеченных итераций конечно.*

MDM-алгоритм может содержать конечные блоки идущих подряд усеченных итераций. При этом существует бесконечная последовательность неусеченных итераций.

Из последовательности $\{u_k\}$ исключим все планы, порождающие усеченные итерации. Останется бесконечная подпоследовательность планов $\{u_{k_j}\}$, порождающих неусеченные итерации.

Теорема 6. *Для векторов $x_{k_j} = Au_{k_j}$ справедливо предельное соотношение $\lim\limits_{j\to\infty} x_{k_j} = x^*$, где x^* — решение задачи (1).*

Теорема 7. *Справедливо предельное соотношение $\lim\limits_{k\to\infty} Q(u_k) = Q(u^*)$, где u^* — некоторое решение задачи (2).*

Замечание 1. Эффективность MDM-алгоритма решения задачи Сильвестра зависит от величины $|I^+(u^*)|$. Наиболее благоприятный случай, когда $|I^+(u^*)| = n + 1$.

Замечание 2. Если план u_k порождает усеченную итерацию, то при переходе от u_k к u_{k+1} мощность $|I^+(u_k)|$ при $u_k[i'_k] > 0$ уменьшается на единицу и остается прежней при $u_k[i'_k] = 0$.

Численные эксперименты выполнялись в Институте проблем машиноведения РАН при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 23-41-00060). В [2] представлено подробное изложение полученных результатов.

[1] *Митчелл Б. Ф., Демьянов В. Ф., Малоземов В. Н.* Нахождение ближайшей к началу координат точки многогранника // Вестник ЛГУ. — 1971. — № 19. — С. 38–45.

[2] *Малозёмов В. Н., Соловьёва Н. А., Тамасян Г. Ш.* MDM-алгоритм и задача Сильвестра. II // Семинар «O & ML». Избранные доклады. 28 сентября 2023 г. (`http://oml.cmlaboratory.com/reps23.shtml#0928`)