УСКОРЕНИЕ МЕТОДОВ ВЫЧИСЛЕНИЯ РАССТОЯНИЯ МЕЖДУ ВЫПУКЛЫМИ МНОГОГРАННИКАМИ*

М. В. Долгополик

25 мая 2022 г.

1°. Рассмотрим простейшую квадратичную задачу математической диагностики [1], которая заключается в нахождении ортогональной проекции произвольной точки $z \in \mathbb{R}^n$ на выпуклый многогранник $G = \operatorname{co}\{p_1, \ldots, p_m\} \subset \mathbb{R}^n$, заданный в виде выпуклой оболочки конечного числа точек. Предположим, что известен некоторый алгоритм $\mathcal{A}$ решения данной задачи.

Для любой точки z и любого выпуклого многогранника G алгоритм $\mathcal{A}$ находит оптимальный план $\mathcal{A}(z, G)$ задачи:

$$\|x - z\| \to \min, \quad x \in G = \operatorname{co}\{p_1, \ldots, p_m\}, \tag{1}$$

где $\|\cdot\|$ — Евклидова норма. Формально можно записать

$$\mathcal{A}(z, G) = \operatorname*{arg\,min}_{x \in G} \|x - z\|.$$

Наша цель — описать общий метод ускорения работы алгоритма $\mathcal{A}$ в случае, когда количество точек m в многограннике G значительно превосходит размерность пространства n. Данный метод основан на сведении исходной задачи к конечной последовательности задач вида:

$$\|x - z\| \to \min, \quad x \in G_k = \operatorname{co}\{p_i \mid i \in I_k\},$$

где $I_k \subset I := \{1, \ldots, m\}$ — некоторое индексное множество, количество элементов $|I_k|$ в котором значительно меньше m. Для простоты мы будем предполагать, что мощность множества $|I_k|$ не зависит от номера итерации и равна некоторому $s \in \mathbb{N}$.

Общая схема метода для ускорения алгоритма $\mathcal{A}$ может быть описана следующим образом:

*Семинар по оптимизации, машинному обучению и искусственному интеллекту «O&ML» http://www.apmath.spbu.ru/oml/

- **Входные параметры:** точка $z \in \mathbb{R}^n$, многогранник $G = \mathrm{co}\{p_1, \ldots, p_m\}$, алгоритм $\mathcal{A}$ решения простейшей квадратичной задачи математической диагностики и параметры $s, d \in \mathbb{N}$ такие, что $d \leqslant s < m$.

- **Инициализация метода:** выберем набор индексов $I_0 \subset I$, $|I_0| = s$, определим $G_0 = \mathrm{co}\{p_i \mid i \in I_0\}$ и положим $k = 0$.

- **Шаг 1:** Найдём ортогональную проекцию $x_k = \mathcal{A}(z, G_k)$ точки z на многогранник G_k. Если точка x_k удовлетворяет условию экстремума

$$\langle x_k - z, p_i - x_k \rangle \geqslant 0 \quad \forall i \in I, \tag{2}$$

то метод прекращает свою работу. Точка x_k — проекция z на исходный многогранник G. В противном случае перейдём на **Шаг 2**.

- **Шаг 2:** Выберем наборы индексов $I_{1k} \subset I_k$ и $I_{2k} \subset I \setminus I_k$, удовлетворяющие условию $|I_{1k}| = |I_{2k}| = d$, и определим

$$I_{k+1} = \Big(I_k \setminus I_{1k}\Big) \cup I_{2k}, \quad G_{k+1} = \mathrm{co}\{p_i \mid i \in I_{k+1}\}.$$

Положим $k = k + 1$ и перейдём на **Шаг 1**.

Предложенный метод основан на последовательном проектировании с помощью алгоритма $\mathcal{A}$ точки z на многогранник G_k, количество точек s в котором значительно меньше, чем в исходном многограннике G. Если проекция z на G_k совпадает с проекцией z на G, то метод прекращает свою работу. В противном случае на шаге 2 метод выбрасывает d точек из набора $\{p_i\}$, $i \in I_k$, и заменяет их на d новых точек из исходного набора $\{p_i\}$, $i \in I$, чтобы построить новый многогранник G_{k+1} и повторить процедуру проектирования. С геометрической точки зрения данный метод заключается в последовательном перемещении многогранника G_k, лежащего в исходном многограннике G, в направлении грани, которой принадлежит проекция точки z на G.

2°. Ключевой процедурой в предложенном методе является правило замены индексов на шаге 2. Для того чтобы определить данное правило, нам потребуются следующие вспомогательные утверждения, доказательства которых приведены в работе [4]. Обозначим через $\mathrm{dist}(x, K) = \inf\limits_{y \in K} \|x - y\|$ расстояние от точки x до множества K.

ЛЕММА 1. *Предположим, что выполнено условие убывание расстояния: если точка x_k не удовлетворяет условию (2), то*

$$\mathrm{dist}(z, G_{k+1}) < \mathrm{dist}(z, G_k).$$

Тогда предложенный метод прекращает свою работу через конечное число шагов, а последняя найденная точка x_k *является оптимальным планом задачи* (1).

ЛЕММА 2. *Предположим, что условие убывание расстояния выполнено для любой точки* z *и любого многогранника* G. *Тогда* $s \geqslant n+1$.

Учитывая предыдущую лемму, положим $s = n+1$ и $d = 1$. Определим правило замены индексов следующим образом. Пусть точка x_k не удовлетворяет условию (2). Тогда найдём $i_{2k} \in I$, на котором достигается минимум выражения

$$\min_{i \in I} \langle x_k - z, p_i \rangle,$$

и положим $I_{2k} = \{i_{2k}\}$. Точка $p_{i_{2k}}$ будет включена в многогранник G_{k+1} на шаге 2.

Для того чтобы определить точку, которая удаляется из многогранника G_k, заметим, что точка x_k очевидно не принадлежит внутренности многогранника G_k. Поэтому согласно [5, Предложения 1.15 и 2.3] точка x_k может быть представлена как выпуклая комбинация не более чем n точек из множества $\{p_i\}$, $i \in I_k$. Следовательно, существует индекс $i_{1k} \in I_k$ такой, что

$$x_k \in \operatorname{co}\Big\{p_i \;\Big|\; i \in I_k \setminus \{i_{1k}\}\Big\}.$$

Положим $I_k = \{i_{1k}\}$. Таким образом, приходим к следующей версии метода ускорения алгоритма $\mathcal{A}$, которую мы будем называть *мета-алгоритмом решения простейшей квадратичной задачи математической диагностики.*

- **Входные параметры:** точка $z \in \mathbb{R}^n$, многогранник $G = \operatorname{co}\{p_1, \ldots, p_m\}$ и алгоритм $\mathcal{A}$ решения простейшей квадратичной задачи математической диагностики.

- **Инициализация метода:** выберем набор индексов $I_0 \subset I$, $|I_0| = n+1$, определим $G_0 = \operatorname{co}\{p_i \mid i \in I_0\}$ и положим $k = 0$.

- **Шаг 1:** Найдём ортогональную проекцию $x_k = \mathcal{A}(z, G_k)$ точки z на многогранник G_k. Если точка x_k удовлетворяет условию экстремума

  $$\langle x_k - z, p_i - x_k \rangle \geqslant 0 \quad \forall i \in I,$$

  то метод прекращает свою работу. Точка x_k — проекция z на исходный многогранник G. В противном случае перейдём на **Шаг 2**.

- **Шаг 2:** Найдём $i_{1k} \in I_k$ такое, что

$$x_k \in \operatorname{co}\Big\{p_i \;\Big|\; i \in I_k \setminus \{i_{1k}\}\Big\},$$

и найдём $i_{2k} \in I$ такое, что

$$\langle x_k - z, p_{i_{2k}} \rangle = \min_{i \in I} \langle x_k - z, p_i \rangle.$$

Определим

$$I_{k+1} = \Big(I_k \setminus \{i_{1k}\}\Big) \cup \{i_{2k}\}, \quad G_{k+1} = \operatorname{co}\{p_i \mid i \in I_{k+1}\}.$$

Положим $k = k + 1$ и пререйдём на **Шаг 1**.

Справедлива следующая теорема (см. [4]).

ТЕОРЕМА 1. *Мета-алгоритм решения простейшей квадратичной задачи математической диагностики корректно определён и удовлетворяет условию убывания расстояния. Более того, данный мета-алгоритм прекращает свою работу за конечное число шагов, а последняя найденная точка x_k является оптимальным планом задачи* (1).

3°. Возникает вопрос о том, как находить индекс $i_{1k} \in I_k$, для которого

$$x_k \in \operatorname{co}\Big\{p_i \;\Big|\; i \in I_k \setminus \{i_{1k}\}\Big\}.$$

Предположим, что выход $\mathcal{A}(z, G_k)$ алгоритма $\mathcal{A}$ представляет из себя не оптимальный план x_k задачи

$$\|x - z\| \to \min, \quad x \in G_k = \operatorname{co}\{p_i \mid i \in I_k\},$$

а коэффециенты α_k выпуклой комбинации, соответствующие оптимальному плану данной задачи, то есть

$$x_k = \sum_{i \in I_k} \alpha_k[i] p_i, \quad \sum_{i \in I_k} \alpha_k[i] = 1, \quad \alpha_k[i] \geqslant 0 \quad \forall i \in I_k.$$

Тогда в качестве индекса i_{1k} можно выбрать любой индекс $i \in I_k$, для которого $\alpha_k[i] = 0$. Такой индекс заведомо существует в случае, когда векторы p_i, $i \in I_k$, аффинно независимы, поскольку в этом случае любой вектор вида

$$x = \sum_{i \in I_k} \alpha[i] p_i, \quad \sum_{i \in I_k} \alpha[i] = 1, \quad \alpha[i] > 0 \quad \forall i \in I_k$$

принадлежит внутренности многогранника G_k согласно [5, Лемма 2.8], в то время как точка x_k не лежит во внутренности многогранника G_k.

В случае когда векторы p_i, $i \in I_k$, аффинно зависимы, некоторые методы решения простейшей квадратичной задачи математической диагностики заведомо находят вектор $\alpha_k = \mathcal{A}(z, G_k)$, по крайней мере одна из компонент которого равна нулю (см., например, [6]). Если же для выбранного алгоритма $\mathcal{A}$ выполнено условие $\alpha_k[i] > 0$ для всех $i \in I_k$, то можно последовательно проверять включение

$$x_k \in \operatorname{co}\left\{p_i \;\middle|\; i \in I_k \setminus \{j\}\right\}$$

для каждого $j \in I_k$, чтобы найти требуемый индекс i_{1k} (см. [2]).

З а м е ч а н и е 1. Предложенный мета-алгоритм представляет из себя некоторую «идеальную» теоретическую схему метода решения простейшей квадратичной задачи математической диагностики. При её практической реализации возникают существенные трудности, связанные с тем, что реальный алгоритм $\mathcal{A}$ находит не оптимальный план, а лишь приближённое решение соответствующих задач проектирования точки на выпуклый многогранник. В частности, из-за конечной точности вычислений может оказаться, что точка x_k принадлежит внутренности многогранника G_k и в этом случае предложенное правило выбора индекса i_{1k} оказывается не применимо. Поэтому рассмотренный мета-алгоритм требует модификаций, учитывающих трудности, связанные с конечной точностью вычислений. Огрублённая (робастная) версия мета-алгоритма для решения простейшей задачи математической диагности, допускающая эффективную практическую реализацию, подробно изложена в работе [4].

4°. Приведём результаты численных экспериментов, демонстрирующие эффективность предложенного метода ускорения работы алгоритмов решения квадратичной задачи математической диагностики.

Данные для численных экспериментов были выбраны следующим образом. Сначала было случано сгенерировано m точек $\{u_1, \ldots, u_m\}$ в n-мерном кубе $[-1, 1]^d$, после чего точки p_i в многограннике G были определены следующим образом:

$$p_i = (1 + 10^{-2} u_i[1], u_i[2], \ldots, u_i[n])^T \quad \forall i \in \{1, \ldots, m\}.$$

В качестве точки z было выбрано начало координат.

Разработанный мета-алгоритм был применён к МДМ-методу [3], а также к методу, основанному на решении задачи квадратичного программирования:

$$\frac{1}{2}\Big\| \sum_{i=1}^{m} \alpha[i] p_i - z \Big\|^2 \to \min, \quad \sum_{i=1}^{m} \alpha[i] = 1, \quad \alpha[i] \geqslant 0, \quad i \in I.$$

Задачи квадратичного программирования решались с помощью стандартной процедуры `quadprog` пакета MATLAB.

Результаты численных экспериментов в случае $n = 3$ приведены на рисунках 1 и 2. Заметим, что среднее количество итераций мета-алгоритма оказалось равным 6. Более подробные результаты численных экспериментов для различных n приведены в работе [4].

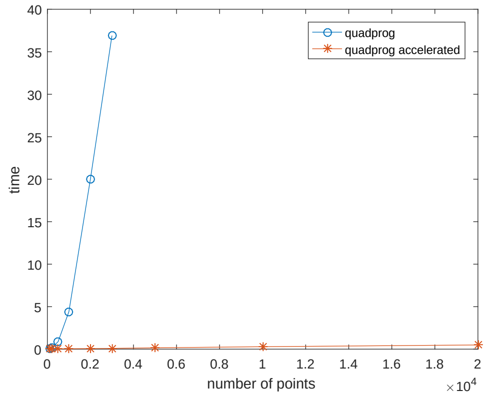

Рис. 1. Результаты численных экспериментов для метода `quadprog`.

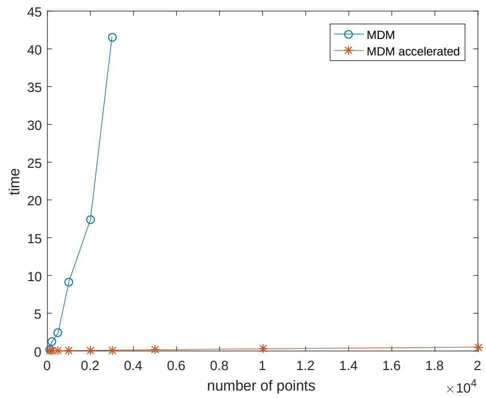

Рис. 2. Результаты численных экспериментов для МДМ метода.

5°. Предложенная техника ускорения работы алгоритмов решения задачи (1) допускает естественное распространения на случай алгоритмов вычисления расстояния между выпуклыми многогранниками.

А именно, рассмотрим задачу вычисления расстояния между выпуклыми многогранниками в $\mathbb{R}^n$:

$$\|x - y\| \to \min, \quad x \in G = \mathrm{co}\{p_1, \ldots, p_m\}, \quad y \in H = \mathrm{co}\{q_1, \ldots, q_\ell\}. \tag{3}$$

Предположим, что задан некоторый алгоритм $\mathcal{A}$ решения данной задачи. Для любой пары многогранников $G, H \subset \mathbb{R}^n$ алгоритм $\mathcal{A}$ находит оптимальный план $(x_*, y_*) = \mathcal{A}(G, H)$ задачи (3).

Метод ускорения работы алгоритма $\mathcal{A}$ в случае, когда количество точек в многогранниках G и H значительно превосходит размерность пространства, заключается в сведении задачи (3) к конечной последовательности задач вида

$$\|x - y\| \to \min, \quad x \in G_k = \mathrm{co}\{p_i \mid i \in I_k\}, \quad y \in H_k = \mathrm{co}\{q_j \mid j \in J_k\},$$

где $I_k \subset I := \{1, \dots, m\}$ и $J_k \subset J := \{1, \dots, \ell\}$ — некоторые индексные множества, количество элементов в которых значительно меньше, чем m и ℓ. С геометрической точки зрения, данный метод заключается в последовательном перемещении многогранников $G_k \subset G$ и $H_k \subset H$ в направлении граней соответствующих многогранников, на которых достигается расстояние между G и H. При этом можно использовать точно такое же правило модификации многогранников G_k и H_k, как и в случае мета-алгоритма для решения простейшей квадратичной задачи математической диагностики.

Таким образом, мы приходим к следующей теоретической схеме мета-алгоритма для вычисления расстояния между выпуклыми многогранниками:

- **Входные параметры:** выпуклые многогранники $G = \mathrm{co}\{p_1, \dots, p_m\}$, $H = \mathrm{co}\{q_1, \dots, q_\ell\}$ и алгоритм $\mathcal{A}$ вычисления расстояния между выпуклыми многогранниками.

- **Инициализация метода:** выберем наборы индексов $I_0 \subset I$ и $J_0 \subset J$ такие, что $|I_0| = |J_0| = n + 1$. Определим

$$G_0 = \mathrm{co}\{p_i \mid i \in I_0\}, \quad H_0 = \mathrm{co}\{q_j \mid j \in J_0\}$$

  и положим $k = 0$.

- **Шаг 1:** Найдём $(x_k, y_k) = \mathcal{A}(G_k, H_k)$. Если пара (x_k, y_k) удовлетворяет условию экстремума:

$$\langle x_k - y_k, p_i - x_k \rangle \geqslant 0 \quad \forall i \in I, \quad \langle y_k - x_k, q_j - y_k \rangle \geqslant 0 \quad \forall j \in J, \tag{4}$$

  то метод прекращает свою работу. Точка (x_k, y_k) — оптимальный план задачи (3). В противном случае перейдём на **Шаг 2**.

- **Шаг 2:** Если не выполнено первое неравенство в (4), то найдём $i_{1k} \in I_k$ такое, что

$$x_k \in \mathrm{co}\left\{p_i \;\middle|\; i \in I_k \setminus \{i_{1k}\}\right\},$$

и найдём $i_{2k} \in I$ такое, что

$$\langle x_k - y_k, p_{i_{2k}} \rangle = \min_{i \in I} \langle x_k - y_k, p_i \rangle.$$

Определим

$$I_{k+1} = \Big(I_k \setminus \{i_{1k}\} \Big) \cup \{i_{2k}\}, \quad G_{k+1} = \mathrm{co}\{p_i \mid i \in I_{k+1}\}.$$

Если не выполнено второе неравенство в (4), то найдём $j_{1k} \in J_k$ такое, что

$$y_k \in \mathrm{co} \Big\{ q_j \ \Big| \ j \in J_k \setminus \{j_{1k}\} \Big\},$$

и найдём $j_{2k} \in J$ такое, что

$$\langle y_k - x_k, q_{j_{2k}} \rangle = \min_{j \in J} \langle y_k - x_k, q_j \rangle.$$

Определим

$$J_{k+1} = \Big(J_k \setminus \{j_{1k}\} \Big) \cup \{j_{2k}\}, \quad H_{k+1} = \mathrm{co}\{q_j \mid j \in J_{k+1}\}.$$

Положим $k = k + 1$ и пререйдём на **Шаг 1**.

По поводу подробного изучения данного мета-алгоритма и результатов соответствующих численных экспериментов см. [4].

ЛИТЕРАТУРА

1. Котелина В. Н., Певный А. Б. *Квадратичная задача математической диагностики* // Семинар «O & ML». Избранные доклады. 23 марта 2022 г.

2. Малозёмов В. Н., Чернэуцану Е. К. *Простейшая задача математической диагностики* // Семинар «O & ML». Избранные доклады. 9 февраля 2022 г.

3. Малозёмов В. Н. *МДМ-методу 50 лет* // Семинар «CNSA & NDO». Избранные доклады. 10 ноября 2021 г.

4. Dolgopolik M. V. *An efficient acceleration technique for methods for finding the nearest point in a polytope and computing the distance between two polytopes* // arXiv preprint: 2205.04553. 2022.

5. Zeigler G. M. *Lectures on Polytopes.* New York: Springer Verlag, 1995.

6. Wolfe P. *Finding the nearest point in a polytope* // Mathematical Programming. 1976. Vol. 11, no. 1, pp. 128-149.