КВАДРАТИЧНАЯ ЗАДАЧА МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ДИАГНОСТИКИ*

Н. О. Котелина nkotelina@gmail.com

А. Б. Певный pevnyi@syktsu.ru

23 марта 2022 г.

1°. Введение. Пусть в пространстве $\mathbb{R}^n$ задано конечное множество точек $\{p_j\}_{j=1}^m$. В простейшей задаче математической диагностики [1] вводится выпуклая оболочка $G = \operatorname{co}\{p_1, \ldots, p_m\}$ точек $\{p_j\}$ и проверяется включение $p \in G$. Если р $\notin G$, то было бы интересно найти расстояние от p до G,

$$r = \min_{z \in G} \|p - z\|, \tag{1}$$

где $\|p - z\|$ — евклидова норма $p - z$. Данный доклад посвящён численному решению задачи (1).

2°. Математическая постановка задачи. Введём векторы $a_j = p_j - p$ и выпуклую оболочку этих векторов:

$$M = \operatorname{co}\{a_1, \ldots, a_m\}.$$

Требуется найти расстояние от начала координат до многогранника M,

$$r = \min_{z \in M} \|z\|. \tag{2}$$

Здесь и далее используется евклидова норма $\|z\| = \sqrt{\langle z, z\rangle}$ и обычное скалярное произведение $\langle z, y\rangle$ векторов $z, y \in \mathbb{R}^n$. Множество M состоит из векторов $z = \sum\limits_{j=1}^{m} x_j a_j$, с коэффициентами x_j, удовлетворяющими условиям $x_j \geqslant 0$ при всех $j \in 1 : m$ и $x_1 + \cdots + x_m = 1$.

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

Задача (2) эквивалентна задаче квадратичного программирования

$$\begin{aligned} f(x) = \tfrac{1}{2}\langle Dx,\, x\rangle \to \min,\\ x_1 + \dots + x_m = 1,\\ x_j \geqslant 0, \quad j \in 1:m, \end{aligned} \tag{3}$$

где D — матрица с элементами $d_{ij} = \langle a_i,\, a_j\rangle$, $i,\, j \in 1:m$. Матрица D неотрицательно определена, поэтому функция $f(x)$ выпукла.

Пусть x^* — оптимальный план задачи (3). Он существует ввиду компактности множества планов.

Запишем критерий оптимальности в форме Куна–Таккера. Введем обозначения: e — вектор из m единиц, e_i, $i \in 1:m$, – координатные орты в $\mathbb{R}^m$. Ограничения в (3) можно записать в виде $\langle e,\, x\rangle = 1$, $\langle e_i,\, x\rangle \geqslant 0$, $i \in 1:m$. Градиент целевой функции $f'(x)$ равен Dx.

По теореме Куна–Таккера [2] для того, чтобы план x^* был оптимальным, необходимо и достаточно, чтобы нашлось число λ и числа $v_i \geqslant 0$ такие, что

$$\begin{aligned} &Dx^* + \lambda e - \sum_{i=1}^{m} v_i e_i = \mathbb{O},\\ &\langle e,\, x^*\rangle = 1,\\ &x_i^* v_i = 0,\ x_i^* \geqslant 0,\ v_i \geqslant 0,\ i \in 1:m. \end{aligned} \tag{4}$$

Подчеркнем, что ограничению–равенству соответствует множитель Лагранжа λ любого знака, а неравенствам — множители $v_i \geqslant 0$. Условие $x_i^* v_i$ называется условием дополнительности.

Для решения системы (4) можно использовать идеи линейного программирования. Представим λ в виде $\lambda = \lambda_1 - \lambda_2$, $\lambda_1 \geqslant 0$, $\lambda_2 \geqslant 0$. В первое уравнение системы (4) добавим искусственную переменную u со знаком минус. Придем к задаче:

$$\begin{aligned} &\qquad\qquad u \to \min\\ &Dx + (\lambda_1 - \lambda_2)e - \sum_{i=1}^{m} v_i e_i - u e_1 = \mathbb{O},\\ &\langle e,\, x\rangle = 1,\\ &x_i v_i = 0,\ x_i \geqslant 0,\ v_i \geqslant 0,\ i \in 1:m; \qquad u \geqslant 0;\ \lambda_{1,2} \geqslant 0. \end{aligned} \tag{5}$$

При решении этой задачи будем применять модифицированный симплекс-метод с дополнительным условием: если x_i входит в базис, то v_i нельзя вводить в базис, и наоборот.

В книге В. А. Даугавет [5] этот метод называется методом дополнительного базиса. Обоснование метода для случая неотрицательно определенной матрицы D дано в статье [4].

3°. Построение начального базиса. Укажем начальный базисный план. В первом столбце матрицы D найдём минимальный элемент

$$d_{i_0 1} = \min_{i \in 1:m} d_{i1}.$$

Если $i_0 = 1$, то ближайшей точкой многогранника M будет a_1. Действительно, $\langle a_i,\, a_1 \rangle \geqslant \langle a_1,\, a_1 \rangle$, а тогда $\langle z,\, a_1 \rangle \geqslant \langle a_1,\, a_1 \rangle$ и $\langle z - a_1,\, a_1 \rangle \geqslant 0$ для всех $z \in M$. Отсюда

$$\|z\|^2 = \|a_1 + (z - a_1)\|^2 = \|a_1\|^2 + 2\langle z - a_1,\, a_1 \rangle + \|z - a_1\|^2 \geqslant \|a_1\|^2.$$

Значит a_1 – ближайшая точка, $z^* = a_1$, $r = \|a_1\|$ и задача (2) решена.

В дальнейшем считаем $i_0 > 1$.

В начальном базисном плане при $d_{i_0 1} \geqslant 0$ базисными переменными будут

$$u,\, v_2, \ldots,\, v_{i_0 - 1},\, \lambda_2, v_{i_0 + 1}, \ldots,\, v_m,\, x_1$$

со значениями

$$u = d_{11} - d_{i_0 1}; \quad v_i = d_{i1} - d_{i_0 1},\, i \neq i_0; \quad \lambda_2 = d_{i_0 1}; \quad x_1 = 1.$$

Это действительно план задачи (5), причем выполнено свойство дополнительности: x_1 входит в базис, а v_1 не входит; v_2 входит, а x_2 – не входит. Для индекса i_0 обе переменные x_{i_0} и v_{i_0} не входят в базис. Выгодно поставить λ_2 на место i_0, тогда в базисной матрице A главная диагональ будет состоять из ± 1.

Приведем пример при $m = 4$, $i_0 = 3$. При $d_{i_0 1} \geqslant 0$ берём $\lambda_2 = d_{i_0 1}$. Базисная матрица A имеет вид:

$$A = \begin{pmatrix} -1 & 0 & -1 & 0 & d_{11} \\ 0 & -1 & -1 & 0 & d_{21} \\ 0 & 0 & -1 & 0 & d_{i_0 1} \\ 0 & 0 & -1 & -1 & d_{41} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{6}$$

Для обращения матрицы A используем обычный прием приписывания справа единичной матрицы. Мы будем просто писать две матрицы рядом. На первом шаге умножим строки $1, 2, \ldots, m$ в двух матрицах на -1:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 & -d_{11} \\ 0 & 1 & 1 & 0 & -d_{21} \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -d_{i_0 1} \\ 0 & 0 & 1 & 1 & -d_{41} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \ \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{7}$$

На втором шаге зарабатываем нули в столбце i_0. Из строк $1, \ldots, i_0 - 1$, $i_0 + 1, \ldots, m$ вычитаем строку i_0:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & -d_{11} + d_{i_0 1} \\ 0 & 1 & 0 & 0 & -d_{21} + d_{i_0 1} \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -d_{i_0 1} \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -d_{41} + d_{i_0 1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{8}$$

На третьем шаге зарабатываем нули в последнем столбце. Из строк с номерами $i = 1, \ldots, i_0 - 1, i_0 + 1, \ldots, m$ вычитаем последнюю строку, умноженную на $-d_{i1} + d_{i_0 1}$. Из строки i_0 вычитаем последнюю, умноженную на $-d_{i_0 1}$. Получим справа обратную матрицу $B = A^{-1}$:

$$B = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 & 0 & d_{11} - d_{i_0 1} \\ 0 & -1 & 1 & 0 & d_{21} - d_{i_0 1} \\ 0 & 0 & -1 & 0 & d_{i_0 1} \\ 0 & 0 & 1 & -1 & d_{41} - d_{i_0 1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{9}$$

Записи можно сократить, если использовать прием замены столбца, описанный в докладе [6], п. 6°.

Если $d_{i_0 1} < 0$, то в базис вводится λ_1 со значением $\lambda_1 = -d_{i_0 1} = |d_{i_0 1}|$ и также на место i_0.

В базисной матрице A столбец i_0 умножится на -1, а в матрице B строка i_0 умножится на -1. В программе матрицы A вообще не будет, а матрица $B[1 : m+1,\ 1 : m+1]$ заполняется по следующему алгоритму:

1) заполнить B нулями;

2) для $i = 1, 2, \ldots, m$ выполнить присваивания
   $B[i, i_0] := 1;\ \ B[i, i] := -1;\ \ B[i, m+1] := d[i, 1] - d[i_0, 1];$

3) $B[i_0, m+1] := d[i_0, 1];\ \ B[m+1, m+1] := 1;$

4) Если $d[i_0, 1] < 0$, то у элементов $B[i_0, i_0]$ и $B[i_0, m+1]$ поменять знак.

4°. Вычисление оценок. Двойственный вектор $y = c_b B$, где c_b — это строка из коэффициентов целевой функции при базисных переменных. Она имеет вид $c_b = (1, 0, \ldots, 0)$ на всех итерациях. Отсюда

$$y[k] = B[1,\ k], \quad k \in 1 : m+1.$$

Чтобы обеспечить выполнение условия $x_i v_i = 0$ введём булевский массив $xv[1:m]$, где $xv[i] = true$, если x_i или v_i входят в базис. Введем также булевскую переменную

$$bl = \begin{cases} true, & \lambda_1 \text{ или } \lambda_2 \text{ входят в базис;} \\ false, & \text{иначе.} \end{cases}$$

В начале $xv[i] := true$ для всех $i \neq i_0$, $xv[i_0] := false$. Положим также $bl := true$. Среди переменных, которые в принципе можно ввести в базис, выбирается переменная с максимальной оценкой. Переменным присвоим номера: x_i имеет номер i, v_i – номер $-i$, λ_1 – номер $m+1$, λ_2 – номер $m+2$, а переменная u будет иметь номер 0.

Алгоритм определения переменной, вводимой в базис

```
max := 0;
Для j = 1, 2, ..., m выполнить действия
   Если xv[j] = false, то
      Δ(x_j) := Σ_{k=1}^{m} B[1, k] · d[k, j] + B[1, m+1];
      Если Δ(x_j) > max, то {max := Δ(x_j); j_0 := j}
      Δ(v_j) = −B[1, j];
      Если Δ(v_j) > max, то {max := Δ(v_j); j_0 := −j}
   Если bl = false, то вычисляем оценки
      Δ(λ_1) = Σ_{k=1}^{m} B[1, k];
      Если Δ(λ_1) > max, то {max := Δ(λ_1); j_0 := m+1}
      Δ(λ_2) = −Σ_{k=1}^{m} B[1, k];
      Если Δ(λ_2) > max, то {max := Δ(λ_2); j_0 := m+2}
Если max = 0, то текущий план является оптимальным.
Если max > 0, то переменную с номером j_0 вводим в базис.
```

Остальные шаги модифицированного симплекс-метода подробно описаны в докладе [1].

5°. Программная реализация. В 2017 году в Сыктывкарском университете была выполнена дипломная работа, где описанный метод реализован на C++. В работе был, в частности, такой пример: $m = n = 100$, $a_j = e_j$, $j \in 1:n$. Ближайшей к началу координат точкой многогранника M будет $z^* = (\frac{1}{n}, \frac{1}{n}, \ldots, \frac{1}{n})$. Программа выдала $z^* = (0.01, 0.01, \ldots, 0.01)$ на 99-ой итерации.

ЛИТЕРАТУРА

1. Малозёмов В. Н., Чернэуцану Е. К. *Простейшая задача математической диагностики* // Семинар «O & ML». Избранные доклады. 9 февраля 2022 г. (http://www.apmath.spbu.ru/oml/reps22.shtml#0209)

2. Гавурин М. К., Малозёмов В. Н. *Экстремальные задачи с линейными ограничениями.* Л.: Изд-во ЛГУ, 1984. 176 с.

3. Певный А. Б. *К нахождению точки многогранника, ближайшей к началу координат* // Сб. “Оптимизация”. 1973. Вып. 10 (27). С. 54–58.

4. Даугавет В. А., Лазарев А. В. *Развитие метода Данцига в квадратичном программировании* // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1986. Т. 26. № 3. С. 430–438.

5. Даугавет В. А. *Численные методы квадратичного программирования* // СПб. Изд-во СПбГУ, 2004. 128 с.

6. Малозёмов В. Н. *Модифицированный симплекс-метод* // Семинар «DHA & CAGD». Избранные доклады. 20 ноября 2010 г. (http://dha.spb.ru/reps10.shtml#1120)