ПОСТРОЕНИЕ МИНИМАЛЬНОГО ЭЛЛИПСОИДА*

М. А. Кольцов
kolmax94@gmail.com

14 мая 2015 г.

1°. Постановка задачи. В докладе [1] анализировалось решение *задачи Сильвестра* — задачи нахождения шара минимального объёма, который содержит заданное множество точек. Эту задачу можно обобщить: искать не шар, а *эллипсоид* минимального объёма. В отличие от задачи Сильвестра, которую можно решить точно с помощью квадратичного программирования, задачу нахождения минимального эллипсоида удаётся решить лишь приближённо. Данная статья посвящена одному алгоритму, строящему такое приближённое решение.

Теперь поставим задачу формально. Дано множество точек $c_j \in \mathbb{R}^N$, $j \in 1 : m$. Требуется построить эллипсоид $E \subset \mathbb{R}^N$ минимального объёма, который содержит все точки c_j. Эллипсоид E будем задавать таким способом:

$$E = \{x \in \mathbb{R}^n \,|\, \langle M(x-c), x-c\rangle \leqslant 1\} ,$$

где $c \in \mathbb{R}^N$ — центр эллипсоида, а M — симметричная положительно-определённая матрица порядка n.

Известно, что объём эллипсоида вычисляется по формуле

$$V = w_n \left(\det M\right)^{-1/2} ,$$

где w_n — объём единичного n-мерного шара. Таким образом, задачу нахождения минимального эллипсоида можно сформулировать как экстремальную задачу

$$\begin{aligned}
&V := w_n \left(\det M\right)^{-1/2} \to \min \\
&\langle M(c_j - c), c_j - c\rangle \leqslant 1,\, j \in 1 : m \\
&M \text{ положительно определена}
\end{aligned}$$

Отбросим множитель w_n, возведём целевую функцию в степень -2 и перейдём к задаче максимизации определителя матрицы M. В итоге получается экстремальная задача

$$\begin{aligned}
&f := \det M \to \max \\
&\langle M(c_j - c), c_j - c\rangle \leqslant 1,\, j \in 1 : m \\
&M \text{ положительно определена}
\end{aligned} \tag{1}$$

Если среди c_j найдутся $n+1$ афинно независимых точек, то решение задачи (1) существует и единственно (см статью [2]). Нас же пока интересует только алгоритм построения.

*Семинар по конструктивному негладкому анализу и недифференцируемой оптимизации «CNSA & NDO»: `http://www.apmath.spbu.ru/cnsa/`

2°. Оператор сжатия пространства. Алгоритм построения минимального эллипсоида использует оператор сжатия пространства, поэтому рассмотрим сначала его свойства.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ. Пусть $\xi \in \mathbb{R}^n$, $\|\xi\| = 1$ и $\gamma \in (0,1)$. Тогда оператор сжатия R_γ определяется формулой

$$R_\gamma = E - (1-\gamma)\xi\xi^T$$

Здесь $\xi\xi^T$ — это матрица проектирования на прямую $x = \lambda\xi$, $\lambda \in \mathbb{R}$. Вычисление значения R_γ на конкретном векторе $y \in \mathbb{R}^n$ позволяет понять, как действует этот оператор:

$$R_\gamma y = (E - (1-\gamma)\xi\xi^T)y = y - (1-\gamma)\xi\xi^T y = y - (1-\gamma)\cdot\langle\xi, y\rangle\cdot\xi$$

Из этого равенства и определения R_γ очевидны следующие свойства:

1) R_γ — симметричная матрица

2) $R_\gamma\xi = \gamma\xi$

3) $R_\gamma p = p$, если $\langle\xi, p\rangle = 0$

Значит, R_γ имеет собственное число $\lambda_0 = \gamma$ кратности 1 с собственным вектором ξ и собственное число $\lambda_1 = 1$ кратности $n-1$ с собственным подпространством, ортогональным ξ. Если $y = \alpha\xi + p$, где $\langle\xi, p\rangle = 0$, то $R_\gamma y = \gamma\alpha\xi + p$.

Кроме этого, матрица R_γ положительно определена при всех $\gamma \in (0,1)$.

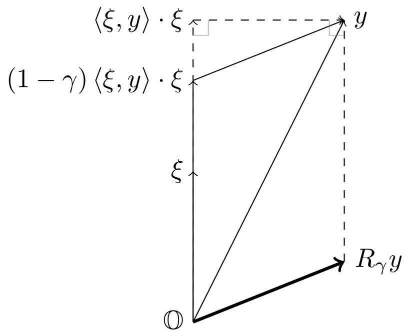


Рис. 1. Оператор сжатия с $\gamma = 0.2$

ЛЕММА 1. *Оператор R_γ обратим и обратный к нему оператор задаётся формулой*

$$R_\gamma^{-1} = E + \frac{1-\gamma}{\gamma}\xi\xi^T$$

Доказательство. Вычислим произведение $R_\gamma \cdot R_\gamma^{-1}$:

$$\left(E - (1-\gamma)\xi\xi^T\right)\left(E + \frac{1-\gamma}{\gamma}\xi\xi^T\right) =$$

$$= E + \frac{1-\gamma}{\gamma}\xi\xi^T - (1-\gamma)\xi\xi^T - \frac{(1-\gamma)^2}{\gamma}\xi\underbrace{\xi^T\xi}_{=1}\xi^T =$$

$$= E + \frac{1-\gamma}{\gamma}\left(\xi\xi^T - \gamma\xi\xi^T - (1-\gamma)\xi\xi^T\right) = E$$

□

К обратному оператору применимы те же рассуждения о собственных числах и собственных векторах, в частности, вектор ξ собственный с собственным числом $\frac{1}{\gamma}$.

Теперь поймём, как оператор сжатия действует на шары и эллипсоиды в $\mathbb{R}^n$. Пусть, для начала, имеется шар с центром в точке c и радиусом r, который задан уравнением

$$\langle x-c, x-c\rangle \leqslant r^2$$

Подействуем на него оператором R_γ, получив новые точки $y = R_\gamma x$ и новый центр $a = R_\gamma c$. Так как R_γ обратим, то $x = R_\gamma^{-1} y$ и $c = R_\gamma^{-1} a$. Подставим эти выражения в уравнение шара

$$\begin{gathered}
\langle x-c, x-c\rangle \leqslant r^2 \\
\left\langle R_\gamma^{-1}(y-a), R_\gamma^{-1}(y-a)\right\rangle \leqslant r^2 \\
\left\langle (R_\gamma^{-2})(y-a), y-a\right\rangle \leqslant r^2 \\
\left\langle \frac{R_\gamma^{-2}}{r^2}(y-a), y-a\right\rangle \leqslant 1
\end{gathered}$$

Получилось уравнение эллипсоида с центром в точке $a = R_\gamma c$ и матрицей $M := \frac{R_\gamma^{-2}}{r^2}$. Как было установлено выше, матрица M имеет собственный вектор ξ, которому соответствует собственное число $\frac{1}{r^2\gamma^2}$, а остальные собственные векторы ортогональны ξ и имеют собственные числа $\frac{1}{r^2}$. Таким образом, оператор сжатия превращает шар радиуса r в эллипсоид, одной из полуосей которого является ξ с длиной $r\gamma$, а длины остальных полуосей равны r — шар «сплющивается» в направлении ξ.

Разобравшись с шаром, подействуем теперь оператором R_γ на эллипсоид, заданный уравнением

$$\langle M(x-c), x-c\rangle \leqslant 1$$

Положим аналогично $x = R_\gamma^{-1} y$, $c = R_\gamma^{-1} a$ и получим новое уравнение эллипсоида в виде

$$\left\langle R_\gamma^{-1} M R_\gamma^{-1}(y-a), y-a\right\rangle \leqslant 1$$

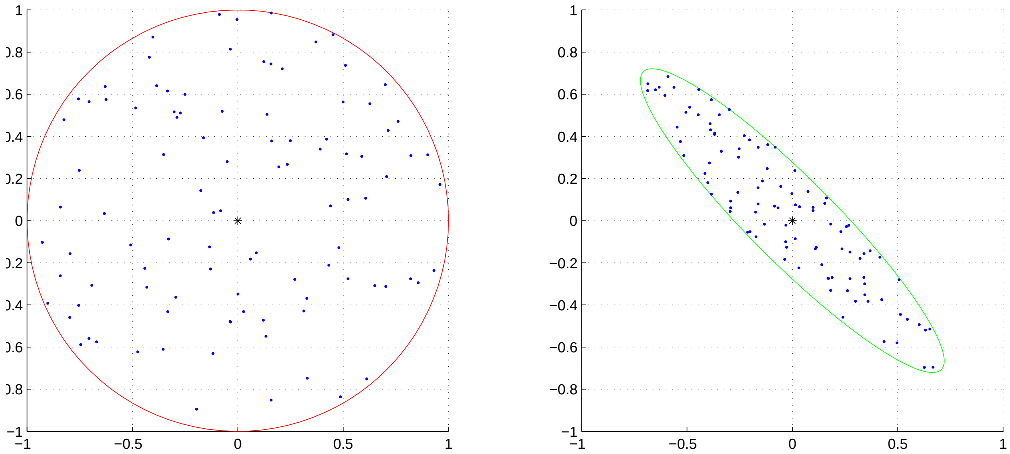
Наглядное представление о работе оператора сжатия даёт рис. 2.

3°. Итеративный алгоритм построения минимального эллипсоида. Для задачи о минимальном эллипсоиде известен итеративный алгоритм, строящий последовательные приближения к ответу. Этот алгоритм, описанный Н.З. Шором в статье [3], основан на достаточно простых идеях.

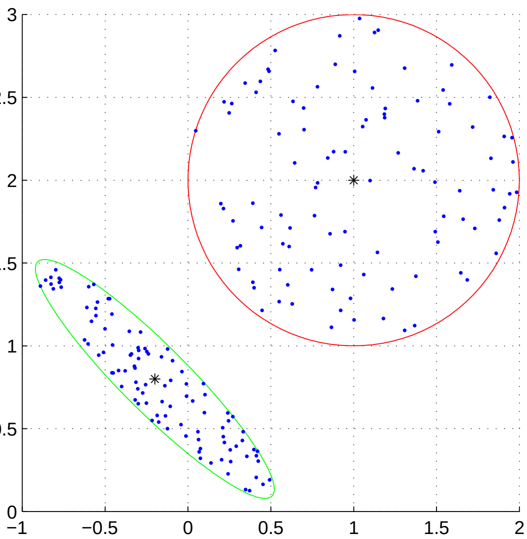
Введём вспомогательную задачу: вложим множество точек c_j в гиперплоскость $x_{n+1} = 1$ пространства $\mathbb{R}^{n+1}$. Обозначим $\tilde{c}_j = \begin{pmatrix} c_j \\ 1 \end{pmatrix}$. В новом пространстве будем искать минимальный эллипсоид с фиксированным центром в нуле. В статье [3] утверждается, что сечение такого эллипсоида плоскостью $x_{n+1} = 1$ и будет решением исходной задачи (см рис. 3).

Поставим формально вспомогательную задачу в терминах матрицы $\tilde{B}$ порядка $n+1$:

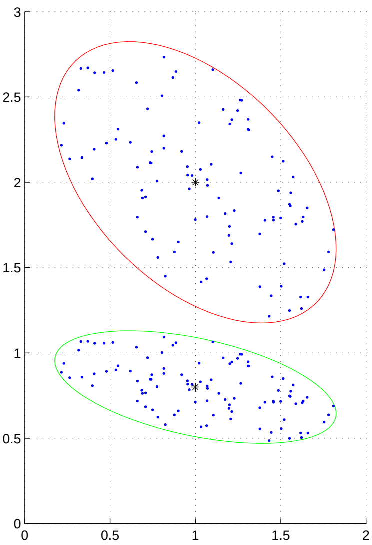
$$\begin{aligned}
&f := \det \tilde{B} \to \max \\
&\left\langle \tilde{B}\tilde{c}_j, \tilde{c}_j\right\rangle \leqslant 1,\ j \in 1:m \qquad (2)\\
&\tilde{B} \text{ положительно определена}
\end{aligned}$$



(a) Простейший случай — сжатие единичного круга в направлении $(1,1)$ с $\gamma = 0.2$



(b) Сжатие круга в направлении $(1,1)$ с $\gamma = 0.2$



(c) Сжатие эллипса в направлении $(0,1)$ с $\gamma = 0.4$

Рис. 2. Действие оператора сжатия на множество, выделенное красной линией. Результат выделен зелёным цветом

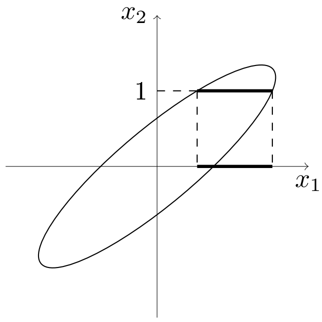


Рис. 3. Сечение эллипса с центром в нуле прямой $x_2 = 1$

Рассмотрим вопрос построения сечения подробнее. Итак, пусть

$$\tilde{E} = \left\{ \tilde{x} \in \mathbb{R}^{n+1} | \left\langle \tilde{B}\tilde{x}, \tilde{x} \right\rangle \leqslant 1 \right\}$$

— минимальный эллипсоид, содержащий точки $\tilde{c}_j$, $j \in 1 : m$. Возьмём две различные точки $\tilde{c}_{j_0}$ и $\tilde{c}_{j_1}$. Отметим, что

$$\left\langle \tilde{B}(\tilde{c}_{j_0} + \tilde{c}_{j_1}), \tilde{c}_{j_0} + \tilde{c}_{j_1} \right\rangle + \left\langle \tilde{B}(\tilde{c}_{j_0} - \tilde{c}_{j_1}), \tilde{c}_{j_0} - \tilde{c}_{j_1} \right\rangle = 2 \left\langle \tilde{B}\tilde{c}_{j_0}, \tilde{c}_{j_0} \right\rangle + 2 \left\langle \tilde{B}\tilde{c}_{j_1}, \tilde{c}_{j_1} \right\rangle \tag{3}$$

Обозначим

$$\tilde{x}_0 = \frac{1}{2}(\tilde{c}_{j_0} + \tilde{c}_{j_1}) = \begin{pmatrix} x_0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \tilde{x}_1 = \frac{1}{2}(\tilde{c}_{j_0} - \tilde{c}_{j_1}) = \begin{pmatrix} x_1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Поделив равенство (3) на 4, получим

$$\left\langle \tilde{B}\tilde{x}_0, \tilde{x}_0 \right\rangle = \frac{1}{2} \left\langle \tilde{B}\tilde{c}_{j_0}, \tilde{c}_{j_0} \right\rangle + \frac{1}{2} \left\langle \tilde{B}\tilde{c}_{j_1}, \tilde{c}_{j_1} \right\rangle - \left\langle \tilde{B}\tilde{x}_1, \tilde{B}\tilde{x}_1 \right\rangle$$

По определению точки $\tilde{c}_{j_0}$ и $\tilde{c}_{j_1}$ принадлежат $\tilde{E}$ и $\tilde{x}_1 \neq \mathbb{O}$, поэтому

$$\left\langle \tilde{B}\tilde{x}_0, \tilde{x}_0 \right\rangle < 1 \tag{4}$$

Представим матрицу $\tilde{B}$ в виде

$$\tilde{B} = \begin{pmatrix} B & b \\ b^T & \hat{b} \end{pmatrix},$$

где B — главный минор порядка n. Очевидно, что B симметрична и положительно определена (по критерию Сильвестра). Аккуратно раскроем скобки в (4):

$$\begin{aligned} \left\langle \tilde{B}\tilde{x}_0, \tilde{x}_0 \right\rangle &= \left\langle \begin{pmatrix} Bx_0 + b \\ \langle b, x_0 \rangle + \hat{b} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} x_0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\rangle = \langle Bx_0 + b, x_0 \rangle + \langle b, x_0 \rangle + \hat{b} = \\ &= \left\langle B(x_0 + B^{-1}b), x_0 + B^{-1}b \right\rangle - \left\langle B(x_0 + B^{-1}b), B^{-1}b \right\rangle + \langle b, x_0 \rangle + \hat{b} = \\ &= \left\langle B(x_0 + B^{-1}b), x_0 + B^{-1}b \right\rangle - \left\langle B^{-1}b, b \right\rangle + \hat{b} < 1 \end{aligned} \tag{5}$$

ЛЕММА 2. *Справедливы неравенства*

$$0 < -\left\langle B^{-1}b, b\right\rangle + \hat{b} < 1$$

Доказательство. Пусть, во-первых, $\tilde{x} = \begin{pmatrix} -B^{-1}b \\ 1 \end{pmatrix} \neq \mathbb{O}$. Матрица $\tilde{B}$ положительно определена, так что $\left\langle \tilde{B}\tilde{x}, \tilde{x} \right\rangle > 0$. Рассуждения, аналогичные (5), приводят к равенству $\left\langle \tilde{B}\tilde{x}, \tilde{x} \right\rangle = -\left\langle B^{-1}b, b\right\rangle + \hat{b}$, что доказывает левое неравенство.

Для доказательство правого неравенства заметим, что в неравенстве (5) слагаемое $\left\langle B(x + B^{-1}b), x + B^{-1}b\right\rangle$ неотрицательное в силу положительной определённости B. Тогда имеем

$$1 > \left\langle B(x + B^{-1}b), x + B^{-1}b\right\rangle - \left\langle B^{-1}b, b\right\rangle + \hat{b} \geqslant -\left\langle B^{-1}b, b\right\rangle + \hat{b}$$

Неравенство доказано. □

Теперь последнее неравенство из (5) поделим на положительное число $1 + \left\langle B^{-1}b, b\right\rangle - \hat{b}$, введём обозначения

$$c := -B^{-1}b, \quad M := B/(1 + \left\langle B^{-1}b, b\right\rangle - \hat{b}) \tag{6}$$

и окончательно получим

$$\langle M(x - c), x - c\rangle \leqslant 1 \text{ — уравнение минимального эллипсоида в } \mathbb{R}^n$$

Алгоритм решения задачи (2) устроен следующим образом. Текущее множество точек $\tilde{c}_j^{(k)}$ хранится в виде столбцов матрицы X_k, текущая матрица последовательности операторов сжатия обозначается A_k. Изначально X_0 состоит из исходных точек $\tilde{c}_j \in \mathbb{R}^{n+1}$, а $A_0 = E_{n+1}$. Один шаг работы алгоритма состоит из нескольких простых действий:

- Найти среди векторов $\tilde{c}_j^{(k)}$ вектор $\tilde{c}_{j_k}^{(k)}$ с максимальной нормой $\tau_{k+1} = \|\tilde{c}_{j_k}^{(k)}\|$
- Вычислить единичный вектор направления сжатия $\xi_{k+1} = \dfrac{\tilde{c}_{j_0}^{(k)}}{\tau_{k+1}}$
- Построить оператор сжатия R_{k+1} вдоль вектора ξ_{k+1} с коэффициентом α_{k+1}
- Вычислить новые точки $\tilde{c}_j^{(k+1)}$, умножив матрицу R_{k+1} на матрицу X_k, и сохранить результат в X_{k+1}
- Добавить матрицу R_{k+1} к последовательности операторов сжатия, умножив её на матрицу A_k, и сохранить результат в A_{k+1}

Коэффициенты α_k в соответствии со статьей [3] выбираются из условий

$$\alpha_k = 1 - \beta_k, \quad \beta_k > 0, \quad \beta_k \xrightarrow[k\to\infty]{} 0, \quad \sum_{k=1}^{\infty} \beta_k = \infty$$

Пусть вычисления остановлены после шага m. Тогда из описания алгоритма следует, что

$$X_m = R_m \cdot R_{m-1} \cdots R_1 \cdot X_0 = A_m \cdot X_0$$

Также известно, что точки $\tilde{c}_j^{(m)}$ лежат внутри сферы с радиусом τ_m и центром в начале координат. С учётом этих двух фактов можно получить матрицу искомого эллипсоида:

$$\left\langle \tilde{c}_j^{(m)}, \tilde{c}_j^{(m)} \right\rangle \leqslant \tau_m^2$$
$$\langle A_m\tilde{c}_j, A_m\tilde{c}_j\rangle \leqslant \tau_m^2$$
$$\langle A_m^T A_m\tilde{c}_j, \tilde{c}_j\rangle \leqslant \tau_m^2$$
$$\left\langle \frac{A_m^T A_m}{\tau_m^2}\tilde{c}_j, \tilde{c}_j \right\rangle \leqslant 1$$

Матрица $\tilde{B} := A_m^T A_m / \tau_m^2$ симметрична, положительно определена и является (приближённым) решением вспомогательной задачи о минимальном эллипсоиде. Окончательное решение основной задачи получается по формулам (6).

4°. Практическое испытание алгоритма. Алгоритм был реализован в среде MATLAB и испытан на тестовых данных. Коэффициенты β_k были равны $1/(k+1)$. В качестве тестовых данных было сгенерировано множество случайных точек внутри эллипсоида с центром в точке $(1, 2)$ с полуосями $2, 1$, который вытянут в направлении $(-1, 1)$.

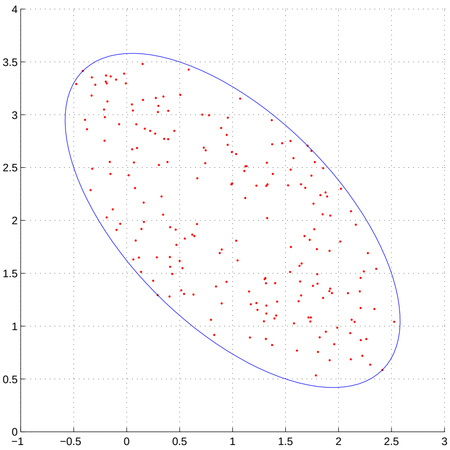
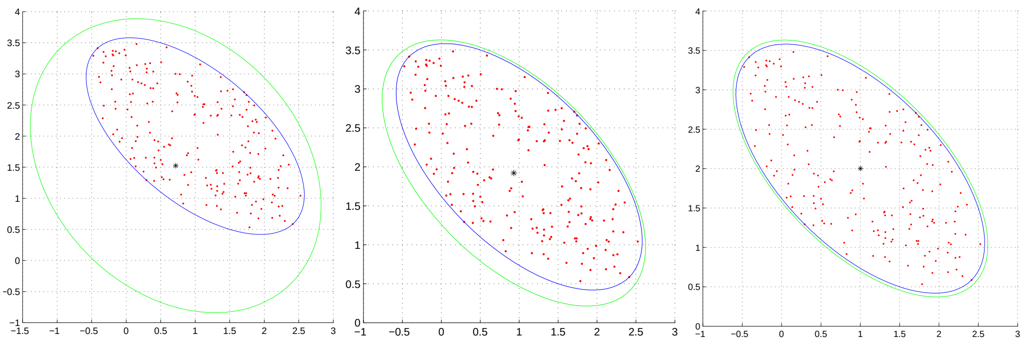


Рис. 4. Тестовое множество точек. Синим отмечена граница минимального эллипсоида

Алгоритм сходится к решению достаточно хорошо, уже после 50-ти шагов построенный эллипсоид близок к искомому.



(a) 10 шагов (b) 30 шагов (c) 50 шагов

Рис. 5. Результат работы алгоритма. Зелёным обозначен построенный эллипсоид

ЛИТЕРАТУРА

1. Кольцов М.А. *Решение задачи Сильвестра в MATLAB* // Семинар «CNSA & NDO». Избранные доклады. 26 февраля 2015г. (`http://www.apmath.spbu.ru/cnsa/reps15.shtml#0226`)

2. Danzer L., Laugwitz D., Hanfried L. *Über das Löwnersche Ellipsoid und sein Analogon unter den einem Eikörper einbeschriebenen Ellipsoiden* // Arch. Math, 1957. Vol. 8, No 3.

3. Шор Н.З., Стеценко С.И. *Алгоритм последовательного сжатия пространства для построения описанного эллипсоида минимального объёма* // Исследование методов решения экстремальных задач, 1990.