# ПОСТРОЕНИЕ МИНИМАЛЬНОГО ЭЛЛИПСОИДА: АЛГОРИТМ ХАЧИЯНА*

М. А. Кольцов

kolmax94@gmail.com

21 апреля 2016 г.

**1°. Постановка задачи.** Будем искать эллипсоид минимального объёма, который содержит все точки некоторого множества точек $a_i \in \mathbb{R}^n$, $i \in 1:m$. Для существования решения будем предполагать, что аффинная оболочка множества $\{a_i\}$ совпадает с $\mathbb{R}^n$.

Эллипсоид будем задавать таким образом:

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

где $M$ — симметричная положительно-определённая матрица, $c$ — центр эллипсоида. Объём вычисляется по формуле

$$\mathrm{vol}(\mathcal{E}) = \omega_n (\det M)^{-1/2},$$

где $\omega_n = \dfrac{\pi^{n/2}}{\Gamma(n/2+1)}$ — объём единичного шара в $n$-мерном пространстве.

Пренебрегая множителем $\omega_n$ и переходя к логарифму целевой функции, задачу о минимальном эллипсоиде можно формально поставить как

$$\begin{gathered} f(M,c) := -\ln\det M \to \min \\ \langle M(a_i - c), a_i - c\rangle \leqslant 1, \quad i \in 1:m, \\ M \succ 0, \end{gathered} \tag{1}$$

где запись $M \succ 0$ означает положительную определённость матрицы $M$.

Таким образом, неизвестными являются одновременно и центр эллипсоида $c$, и его матрица $M$. Попробуем избавиться от переменной $c$. Вложим точки $a_i$ в пространство $\mathbb{R}^{n+1}$ по правилу $q_i := \begin{pmatrix} a_i \\ 1 \end{pmatrix}$. Заметим, что из предположения о существовании решения и определения аффинной независимости

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

следует, что среди $q_i$ найдётся набор из $n+1$ линейно независимых векторов. То есть, множество $\{q_i\}$ содержит базис $\mathbb{R}^{n+1}$.

В пространстве $\mathbb{R}^{n+1}$ будем искать минимальный эллипсоид с центром в начале, который содержит точки $q_i$. Обозначим матрицу этого эллипсоида через $\widetilde{B}$. Тогда новую задачу можно поставить как

$$\begin{gathered} f(\widetilde{B}) := -\ln\det\widetilde{B} \to \min \\ \left\langle \widetilde{B} q_i, q_i \right\rangle \leqslant 1, \quad i \in 1:m, \\ \widetilde{B} \succ 0. \end{gathered} \tag{2}$$

Пусть найдена матрица $\widetilde{B}^*$ — решение задачи (2). Решение исходной задачи (1) будем искать как сечение эллипсоида $\left\{x \middle| \left\langle \widetilde{B}^* \tilde{x}, \tilde{x} \right\rangle \leqslant 1\right\}$ плоскостью $x_{n+1} = 1$. Обозначим блоки этой матрицы через

$$\widetilde{B}^* = \begin{pmatrix} B & b \\ b^\intercal & \widehat{b} \end{pmatrix}.$$

В докладе [1] показано, что в таком случае матрица $M$ и вектор $c$ получаются по формулам

$$M := B/\big(1 + \langle B^{-1}b, b\rangle - \widehat{b}\big), \quad c := -B^{-1}b.$$

На протяжении оставшейся части статьи будет рассматриваться только задача (2).

**2°. Вспомогательные сведения.** Пусть $q$ — вектор, а $M$ — симметричная матрица соответствующей размерности. Найдём другое представление для $q^\intercal M q$, используя индексную технику:

$$\begin{aligned} q^\intercal M q = \langle Mq, q\rangle = \left\langle \sum_{k=1}^{n} M[1:n,k]q[k], q \right\rangle = \sum_{k=1}^{n} q[k]\, \langle M[1:n,k], q\rangle = \\ = \sum_{k=1}^{n} q[k] \left( \sum_{j=1}^{n} M[j,k]q[j] \right) = \sum_{k=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} M[j,k]\,(q[j]q[k]) = \\ = \sum_{k=1}^{n} M[j,k]\,(qq^\intercal)\,[j,k] = \operatorname{tr}(M \cdot qq^\intercal). \end{aligned} \tag{3}$$

Нам понадобится ещё одно равенство, называемое «лемма об определителе матрицы» в англоязычной литературе [2]. Пусть $A$ — обратимая матрица, $u$, $v$ – вектора. Тогда

$$\det(A + uv^\intercal) = (1 + v^\intercal A^{-1} u) \cdot \det A. \tag{4}$$

Прежде чем проверить это равенство, заметим, что $\det(A + uv^\intercal) = \det A \cdot \det(E + (A^{-1}u)v^\intercal)$. Следовательно, достаточно проверить только случай $A = E$. В этом случае необходимое равенство следует из свойств определителя и равенства

$$\begin{pmatrix} E & 0 \\ v^\intercal & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} E + uv^\intercal & u \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} E & 0 \\ -v^\intercal & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E & u \\ 0 & 1 + v^\intercal u \end{pmatrix}.$$

Действительно, определитель матрицы справа равен $1 + v^\intercal u$, а определитель средней матрицы в левой части равен $\det(E + uv^\intercal)$. Кроме того, определители остальных матриц равны 1. Значит, равенство доказано.

Рассмотрим теперь общую задачу выпуклого программирования с ограничениями:

$$\begin{aligned} f(x) &\to \min \\ h_i(x) &\leqslant 0, \quad i \in 1:m, \\ x &\in D, \end{aligned}$$

где $D$ – открытое выпуклое множество. Введём неотрицательные числа $\lambda_i$, соответствующие ограничениям задачи. Тогда *функцией Лагранжа* [3] этой задачи называется функция

$$\mathcal{L}(x, \lambda) := f(x) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i h_i(x),$$

а числа $\lambda_i$ называются *множителями Лагранжа.*

Используя функцию Лагранжа, можно записать двойственную по Лагранжу задачу:

$$\begin{aligned} g(\lambda) := \inf_{x \in D} \mathcal{L}(x, \lambda) &\to \max \\ \lambda_i &\geqslant 0, \quad i \in 1:m. \end{aligned}$$

Для любых планов $x$ и $\lambda$ прямой и двойственной задач соответственно верно $f(x) \geqslant g(\lambda)$. Отсюда, если $x^*$ и $\lambda^*$ — решения пары двойственных задач, то

$$f(x^*) \geqslant g(\lambda^*).$$

**3°. Вывод двойственной задачи для задачи о минимальном эллипсоиде.** Попробуем применить двойственность Лагранжа к задаче (2). Введём множители Лагранжа $p_i \geqslant 0$, соответствующие ограничениям $\left\langle \widetilde{B} q_i, q_i \right\rangle - 1 \leqslant 0$, а ограничение $M \succ 0$ будем считать нефункциональным и включим в область определения $\mathcal{L}$. Тогда функция Лагранжа записывается как

$$\mathcal{L}(\widetilde{B}, p) := -\ln\det \widetilde{B} + \sum_{i=1}^{m} p_i \big(q_i^\intercal \widetilde{B} q_i - 1\big).$$

Или, с учётом формулы (3),

$$\mathcal{L}(\widetilde{B}, p) := -\ln\det \widetilde{B} + \sum_{i=1}^{m} p_i \operatorname{tr}(q_i q_i^\intercal \cdot \widetilde{B}) - \sum_{i=1}^{m} p_i.$$

Здесь и далее будем считать, что $\operatorname{dom}\mathcal{L} = \left\{(\widetilde{B}, p) | \widetilde{B} \succ 0, p \in \mathbb{R}^m\right\}$.

По определению целевая функция двойственной к (2) задачи равна

$$g(p) := \inf_{\widetilde{B} \succ 0} \mathcal{L}(\widetilde{B}, p) = \inf_{\widetilde{B} \succ 0} \left[ -\ln\det\widetilde{B} + \sum_{i=1}^{m} p_i \operatorname{tr}(q_i q_i^{\intercal} \cdot \widetilde{B}) - \sum_{i=1}^{m} p_i \right].$$

Для того, чтобы упростить это выражение, найдём инфимум аналитически. Известно (см. [3]), что функции $-\ln\det\widetilde{B}$ и $\operatorname{tr}(q_i q_i^{\intercal} \cdot \widetilde{B})$ выпуклы по $\widetilde{B}$ на открытом множестве положительно определённых матриц. Значит, инфимум достигается в точке, где производная по $\widetilde{B}$ выражения под ним равна нулю. Возьмём эту производную:

$$\frac{\partial \mathcal{L}(\widetilde{B}, p)}{\partial \widetilde{B}} = -\widetilde{B}^{-1} + \sum_{i=1}^{m} p_i q_i q_i^{\intercal} = -\widetilde{B}^{-1} + QPQ^{\intercal},$$

где $Q$ — матрица, составленная из точек $q_i$, а $P = \operatorname{diag}(p)$. Для дальнейших рассуждений необходимо, чтобы матрица $QPQ^{\intercal}$ была положительно определена. Проверим, так ли это.

Зафиксируем произвольный ненулевой вектор $x \in \mathbb{R}^{n+1}$. По определению, для положительной определённости $QPQ^{\intercal}$ необходимо, чтобы $\langle QPQ^{\intercal}x, x\rangle > 0$. Распишем скалярное произведение:

$$\left\langle \sum_{i=0}^{m} p_i q_i q_i^{\intercal} \cdot x, x \right\rangle = \sum_{i=1}^{m} p_i \left\langle q_i q_i^{\intercal} \cdot x, x\right\rangle = \sum_{i=1}^{m} p_i \left\langle q_i, x\right\rangle^2.$$

Так как среди $q_i$ содержится базис $\mathbb{R}^{n+1}$, то вектор $x$ не может быть ортогонален сразу всем $q_i$. Значит, если для всех $i$ $p_i > 0$, то матрица $QPQ^{\intercal}$ заведомо положительно определена. На самом деле, достаточно, чтобы числа $p_i$ были положительны на индексах $i$, соответствующих точкам базиса. Будем теперь рассматривать только такие $p$, что $QPQ^{\intercal} \succ 0$. В следующей части будет описан алгоритм, на каждом шаге которого выполнено условие $p > 0$.

Таким образом, единственным решением уравнения $\dfrac{\partial \mathcal{L}(\widetilde{B}, p)}{\partial \widetilde{B}} = 0$ при фиксированном $p$ является матрица $\widetilde{B} = (QPQ^{\intercal})^{-1}$. Подставив это значение в $\mathcal{L}(\widetilde{B}, p)$, получим выражение для целевой функции двойственной задачи $g(p)$:

$$g(p) = \ln\det QPQ^{\intercal} + \sum_{i=1}^{m} p_i \operatorname{tr}\left[q_i q_i^{\intercal} \cdot (QPQ^{\intercal})^{-1}\right] - \sum_{i=1}^{m} p_i.$$

Обозначим $A = QPQ^{\intercal}$ и распишем выражение под первой суммой:

$$\sum_{i=1}^{m} p_i \operatorname{tr}\left[q_i q_i^{\intercal} \cdot (QPQ^{\intercal})^{-1}\right] = \operatorname{tr}\left(\sum_{i=1}^{m} p_i q_i q_i^{\intercal}\right) A^{-1} = \operatorname{tr} AA^{-1} = n+1. \tag{5}$$

В итоге имеем

$$g(p) = \ln\det QPQ^\intercal - \sum_{i=1}^{m} p_i + n + 1. \tag{6}$$

Значит, двойственная задача имеет вид

$$\begin{aligned} g(p) := \ln\det QPQ^\intercal - \sum_{i=1}^{m} p_i + n + 1 \to \max \\ p_i \geqslant 0, \quad i \in 1:m. \end{aligned} \tag{7}$$

Чтобы ещё упростить вид целевой функции, запишем для этой задачи условия Куна–Таккера. Чтобы сделать это, посчитаем сначала производную от $\ln\det QPQ^\intercal$, аккуратно применив правило цепочки:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial p_i} \ln\det QPQ^\intercal = \operatorname{tr}\left(\frac{\partial \ln\det QPQ^\intercal}{\partial QPQ^\intercal} \cdot \frac{\partial QPQ^\intercal}{\partial p_i}\right) = \\ = \operatorname{tr}\left((QPQ^\intercal)^{-1} \cdot q_i q_i^\intercal\right) = q_i^\intercal (QPQ^\intercal)^{-1} q_i. \end{aligned}$$

Следовательно, условия Куна–Таккера для (7) с множителями $\lambda_i$, соответствующими ограничениям $p_i \geqslant 0$, выглядят как

$$\begin{aligned} q_i^\intercal (QPQ^\intercal)^{-1} q_i - 1 + \lambda_i = 0, \\ \lambda_i p_i = 0, \\ \lambda_i \geqslant 0. \end{aligned}$$

Избавимся от переменных $\lambda_i$:

$$q_i^\intercal (QPQ^\intercal)^{-1} q_i \leqslant 1, \tag{8}$$

$$p_i \left(1 - q_i^\intercal (QPQ^\intercal)^{-1} q_i\right) = 0. \tag{9}$$

Просуммировав (9) по $i$ и воспользовавшись ещё раз формулой (5), получаем

$$\sum_{i=1}^{m} p_i = n + 1.$$

Теперь двойственную задачу можно записать как

$$\begin{aligned} g(p) := \ln\det QPQ^\intercal \to \max \\ 1^\intercal p = n + 1, \\ p \geqslant 0. \end{aligned}$$

С помощью замены переменных $u := \dfrac{p}{n+1}$, $U := \operatorname{diag}(u) = \dfrac{1}{n+1}P$ получаем итоговый вид двойственной задачи

$$\begin{aligned} \widehat{g}(u) := \ln\det QUQ^{\intercal} &\to \max \\ 1^{\intercal}u &= 1, \\ u &\geqslant 0. \end{aligned} \tag{10}$$

Таким образом, мы свели нахождение минимального эллипсоида к максимизации функции на стандартном симплексе в $\mathbb{R}^m$.

Пусть найдено решение двойственной задачи $u^*$. Из того, что в точке $u^*$ достигается максимум функции $\widehat{g}$, следует, что $\widehat{g}(u^*) > -\infty$, а значит $QU^*Q^{\intercal}$ положительно определена. Положим $p^* = (n+1)u^*$, $\widetilde{B}^* = (n+1)\cdot(QU^*Q^{\intercal})^{-1}$. В силу (8) эта матрица будет удовлетворять ограничениям задачи (2). Очевидно, что выполняется равенство $f(\widetilde{B}^*) = g(p^*)$. В силу неравенства между целевыми функциями пары двойственных задач, для любой матрицы $\widetilde{B}$, удовлетворяющей ограничениям, верно $f(\widetilde{B}) \geqslant g(p^*) = f(\widetilde{B}^*)$, следовательно, $\widetilde{B}^*$ — решение задачи (2).

4°. **Алгоритм Хачияна.** В статье [4] описан простой алгоритм, решающий двойственную задачу (10). Приведём его вывод.

Во-первых, заметим, что формула (8) для изменённой задачи (10) имеет вид

$$q_i^{\intercal}(QUQ^{\intercal})^{-1}q_i \leqslant n+1.$$

Как было вычислено выше, $\widehat{g}_j(u) := \dfrac{\partial}{\partial u_j}\widehat{g}(u) = q_j^{\intercal}(QUQ^{\intercal})^{-1}q_j$. Значит, если $u^*$ — решение, то

$$\widehat{g}_j(u^*) \leqslant n+1, \quad \forall j \in 1:m. \tag{11}$$

Пусть на $k$-м шаге имеется вектор $u_k$. Найдём, с какой ошибкой $u_k$ удовлетворяет условию (11). То есть, найдём такое минимальное число $\varepsilon$, что

$$\widehat{g}_j(u_k) \leqslant (1+\varepsilon)(n+1), \quad \forall j \in 1:m.$$

Пусть $R \subset 1:m$ — множество индексов, на которых неравенство обращается в равенство. Тогда для $j \notin R$

$$\widehat{g}_j(u_k) < (1+\varepsilon)(n+1) = \widehat{g}_r(u_k), \quad \forall r \in R.$$

Выберем какое-нибудь $r \in R$. Из формулы видно, что $\widehat{g}_r(u_k) = \max\bigl\{\widehat{g}_j(u_k) \mid j \in 1:m\bigr\}$ и

$$\varepsilon = \frac{\widehat{g}_r(u_k) - (n+1)}{n+1}.$$

Хачиян предлагает следующее: в качестве $u_{k+1}$ выбрать точку из отрезка $[u_k, e_r]$, где $e_r$ — $r$-й орт $\mathbb{R}^m$, максимизирующую $\widehat{g}(u_{k+1})$. То есть, выбрать число $\alpha \in (0,1)$ и положить

$$u_{k+1} = (1-\alpha)u_k + \alpha e_r.$$

Покажем, как найти такое $\alpha$. Для этого распишем $\widehat{g}(u_{k+1})$:

$$\begin{aligned}\widehat{g}(u_{k+1}) &= \ln\det\bigl[Q\left((1-\alpha)U_k + \alpha E_r\right)Q^\intercal\bigr] = \ln\det\bigl[(1-\alpha)QU_kQ^\intercal + \alpha q_r q_r^\intercal\bigr] = \\ &= \ln\left[(1-\alpha)^{n+1}\det\left(QU_kQ^\intercal + \frac{\alpha}{1-\alpha}q_r q_r^\intercal\right)\right].\end{aligned}$$

Применим формулу (4):

$$\det\left(QU_kQ^\intercal + \frac{\alpha}{1-\alpha}q_r q_r^\intercal\right) = \left(1 + \frac{\alpha}{1-\alpha}q_r^\intercal (QU_kQ^\intercal)^{-1} q_r\right)\det QU_kQ^\intercal.$$

Таким образом,

$$\begin{aligned}\widehat{g}(u_{k+1}) &= \ln\left[(1-\alpha)^{n+1}\left(1 + \frac{\alpha}{1-\alpha}q_r^\intercal (QU_kQ^\intercal)^{-1} q_r\right)\det QU_kQ^\intercal\right] = \\ &= \ln\left[(1-\alpha)^n\bigl(1 + \alpha(\widehat{g}_r(u_k) - 1)\bigr)\det QU_kQ^\intercal\right] = \\ &= n\ln(1-\alpha) + \ln\bigl(1 + \alpha(\widehat{g}_r(u_k) - 1)\bigr) + \ln\det QU_kQ^\intercal.\end{aligned}$$

Возьмём производную по $\alpha$:

$$\frac{\mathrm{d}\widehat{g}(u_{k+1})}{\mathrm{d}\alpha} = -\frac{n}{1-\alpha} + \frac{\widehat{g}_r(u_k) - 1}{1 + \alpha(\widehat{g}_r(u_k) - 1)}.$$

Приравнивая нулю и решая относительно $\alpha$, получаем единственное решение

$$\alpha = \frac{\widehat{g}_r(u_k) - (n+1)}{(n+1)(\widehat{g}_r(u_k) - 1)}.$$

Так как $\widehat{g}_r(u_k) = (1+\varepsilon)(n+1) > n+1 > 1$, то $\alpha > 0$. Кроме того,

$$\alpha < 1 \Leftrightarrow \widehat{g}_r(u_k) - n - 1 < n \cdot \widehat{g}_r(u_k) - n + \widehat{g}_r(u_k) - 1 \Leftrightarrow \widehat{g}_r(u_k) > 0.$$

Значит, $\alpha$ действительно лежит в $(0,1)$. Так как $\widehat{g}(u_{k+1})$ выпукла по $\alpha$, $u_{k+1}$ — искомая точка максимума на отрезке $(0,1)$.

В качестве начального приближения $u_0$ можно взять вектор $(1,\ldots,1)/m$. Так как $u_0 > 0$, то $QU_0Q^\intercal \succ 0$, и целевая функция $\widehat{g}(u_0)$ корректно определена. Кроме того, на каждом шаге $\alpha_k < 1$, значит, если $u_k > 0$, то и $u_{k+1} > 0$. Таким образом, алгоритм корректный.

Опишем ещё раз последовательность действий на $k$-м шаге алгоритма:

- Вычислить $\nabla \widehat{g}(u_k)$.
- Найти максимальную компоненту градиента $\widehat{g}_r(u_k)$.
- Вычислить $\varepsilon = \dfrac{\widehat{g}_r(u_k) - (n+1)}{n+1}$.
- Если $\varepsilon$ меньше требуемой погрешности $\varepsilon_0$, закончить вычисления. В противном случае, вычислить $\alpha := \dfrac{\widehat{g}_r(u_k) - (n+1)}{(n+1)(\widehat{g}_r(u_k) - 1)}$.
- Положить $u_{k+1} := (1-\alpha)u_k + \alpha e_r$ и перейти на следующий шаг.

Кроме того, заметим, что на каждом шаге матрица $QUQ^\intercal$ умножается на $1-\alpha$ и к ней прибавляется одноранговая матрица $\alpha q_r q_r^\intercal$. В таком случае нет необходимости каждый раз заново вычислять обратную матрицу, а можно применить формулу обновления (см. [4]):

$$(QU_{k+1}Q^\intercal)^{-1} = \left(1 + \frac{\varepsilon}{n \cdot (1+\varepsilon)}\right)(QU_kQ^\intercal)^{-1} - \frac{\varepsilon}{n \cdot (1+\varepsilon)^2} b_k b_k^\intercal,$$

где $b_k := (QU_kQ^\intercal)^{-1} q_r$.

Были проведены численные эксперименты при $\varepsilon_0 = 10^{-5}$ и различных размерностях основного пространства $n$ и различном количестве двойственных переменных $m$ (то есть количестве точек $q_i$). Результаты приведены в табл. 1. В столбце «точность» содержится относительная ошибка $\delta$, то есть

$$\delta = \frac{\left|(\det M)^{-1/2} - (\det M^*)^{-1/2}\right|}{(\det M^*)^{-1/2}},$$

где $M^*$ — известная матрица минимального эллипсоида.

Таблица 1. Численные результаты алгоритма Хачияна

| $n$ | $m$ | число итераций | точность | время (с) |
|---|---|---|---|---|
| 2 | 104 | 199993 | $7 \cdot 10^{-6}$ | 17.2 |
| 2 | 504 | 199994 | $7 \cdot 10^{-6}$ | 78.8 |
| 5 | 510 | 499990 | $1.4 \cdot 10^{-5}$ | 261.3 |

Если в алгоритме критерий останова по $\varepsilon$ (по точности выполнения ограничений) заменить на останов по внутренней сходимости, то число итераций и время работы сократится, но относительная точность не изменится. Отметим, что даже в случае с четырьмя точками в $\mathbb{R}^2$, одна из которых лежит внутри треугольника, образованного тремя другими, алгоритм делает порядка 80 тысяч шагов и работает около 4 секунд.

**5°. Комбинированный алгоритм.** Как было продемонстрировано в предыдущем разделе, применение одного только алгоритма Хачияна не приносит желаемых результатов из-за низкой точности и большого времени работы. Поэтому были предприняты попытки изменить алгоритм так, чтобы он работал быстрее и точнее.

В ходе численных экспериментов была обнаружена следующая закономерность — в начале своей работы алгоритм делает достаточно большие шаги $\alpha$, быстро получая эллипсоид, близкий к искомому. Затем же алгоритм начинает делать очень короткие шаги, с $\alpha \approx 10^{-5}$, постепенно увеличивая эллипсоид и приближаясь к решению. Это связано с тем, что на каждом шаге алгоритм производит изменение в направлении только одной координаты, как бы «подтягивая» эллипсоид к точке, которая дальше всего от него находится. Таким образом, если текущий эллипсоид уже достаточно близок к оптимальному, то алгоритму приходится поочерёдно немного подтягивать его к точкам, лежащим вне.

На основе этого наблюдения и статьи [5] возникла идея улучшения алгоритма. Во-первых, в 1948 году Джон доказал, что минимальный эллипсоид определяется не более $(n^2+3n)/2$ точками, где $n$ — размерность пространства. То есть, в нашем случае только $l = \big((n+1)^2 + 3(n+1)\big)/2$ точек из исходных $m$ определяют искомый эллипсоид. Кроме того, из формулы (8) и её эквивалента для вектора $u$ видно, что те точки $a_i$, для которых $\widehat{g}_i(u) \geqslant n+1$, лежат на границе или вне эллипсоида, задаваемого $u$. Значит, если их количество не превосходит $l$, можно предположить, что только эти точки и задают эллипсоид, который мы ищем. Будем дальше работать уже только с ними. Для корректности задания целевой функции на этих точках необходимо потребовать, чтобы они так же содержали аффинно независимое множество. Таким образом, в «активное» множество всегда будет входить не более $l$ и не менее $n+1$ точек.

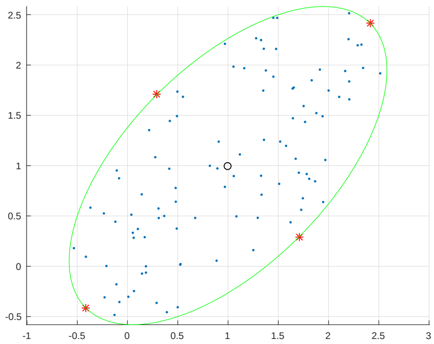
Во-вторых, раз увеличение эллипсоида в направлении только одной точки приводит к очень маленьким шагам, разумно попытаться увеличивать его сразу в нескольких направлениях. В первую очередь для этого был испытан обычный градиентный метод наискорейшего подъёма. В процедуре линейного поиска использовано условие Армихо. В качестве направления подъёма выбирается направление градиента, спроецированное на стандартный симплекс. Кроме того, линейный поиск останавливается при достижении какой-либо компонентой вектора нуля. Таким образом обеспечивается выполнение ограничений двойственной задачи на каждом шаге градиентного метода. Критерий останова используется тот же, что и в алгоритме Хачияна.

На рис. 1 наглядно представлена работа такого комбинированного подхода, а подробные результаты его применения приведены в табл. 2.

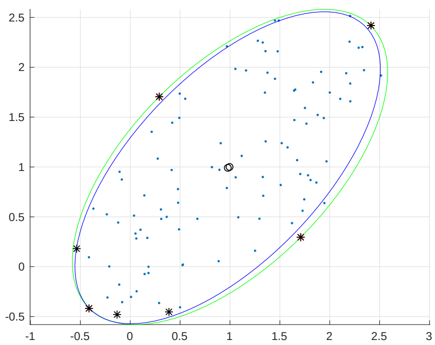
Таблица 2. Численные результаты комбинированного алгоритма

| $n$ | $m$ | алгоритм Хачияна | активные точки | градиентный метод | точность | время (с) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 2 | 104 | 18 | 7 | 40 | $2 \cdot 10^{-9}$ | 0.3 |
| 2 | 504 | 123 | 9 | 85 | $8 \cdot 10^{-8}$ | 0.7 |
| 5 | 510 | 92 | 26 | 87 | $2 \cdot 10^{-7}$ | 0.8 |
| 10 | 1020 | 80 | 74 | 220 | $2 \cdot 10^{-6}$ | 2.4 |

Здесь столбцы «алгоритм Хачияна» и «градиентный метод» содержат количество шагов соответствующих алгоритмов, в столбце «активные точки» содержится число точек в активном множестве после остановки алгоритма Хачияна, а столбец «точность» имеет тот же смысл, что и в предыдущей таблице. Для вычислений использовалась погрешность $\varepsilon_0 = 10^{-5}$.



(a) Тестовое множество и известный минимальный эллипсоид (зелёный)



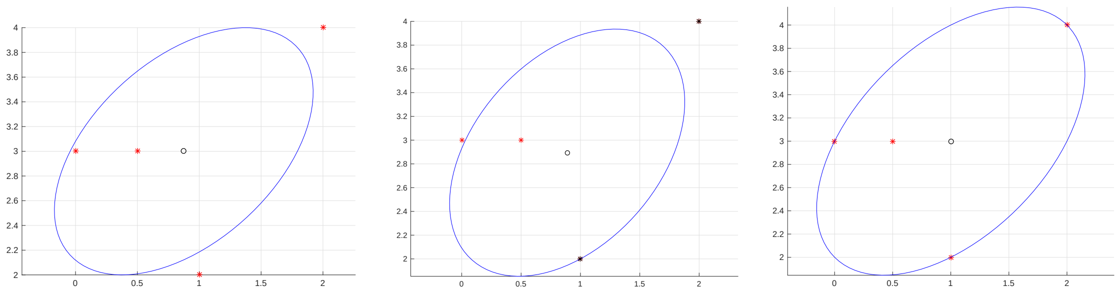
(b) Активное множество и построенный алгоритмом Хачияна эллипсоид (синий)

Рис. 1. Иллюстрация работы комбинированного алгоритма при $n = 2$, $m = 104$

К сожалению, в некоторых случаях алгоритм зацикливается или выдает неверный ответ. Такое происходит, например, при $n = 30$, $m = 560$ — в этом случае градиентный метод начиная с 1890-го шага начинает делать циклические шаги, не имея возможности никак остановиться. При этом достигается относительная точность только $10^{-4}$. Это может быть связано с недостатками процедуры линейного поиска, а также с общей неприменимостью простых градиентных методов вблизи решения.

Кроме того, нельзя исключать неправильное построение активного множества алгоритмом Хачияна. Действительно, рассмотрим случай, представленный на рис. 2. Здесь взяты три точки, образующие треугольник, и одна точка внутри него. После одного шага алгоритма Хачияна активное множество сократилось до двух точек (рис. 2(d)). Но аффинная оболочка такого множества не совпадает с $\mathbb{R}^2$, так что по нему невозможно построить минимальный эллипсоид. Если же подать на вход градиентного метода все четыре точки, то за 10 шагов получаем минимальный эллипсоид (рис. 2(e)).

В дальнейшем планируется применить метод сопряженных градиентов с условием Вулфа, а также реализовать изменение активного множества между шагами градиентного метода.




(c) Тестовое множество и эллипсоид, соответствующий $u_0$

(d) Построенное активное множество (черные точки) и соответствующий эллипсоид

(e) Минимальный эллипсоид, построенный градиентным методом

Рис. 2. Испытание метода в случае четырёх точек

## ЛИТЕРАТУРА

1. Кольцов М.А. *Построение минимального эллипсоида* // Семинар «CNSA & NDO». Избранные доклады. 14 мая 2015 г. (`http://www.apmath.spbu.ru/cnsa/reps15.shtml#0514`).

2. Brookes, M. *The Matrix Reference Manual*, 2011 (электронный ресурс), (`http://www.ee.imperial.ac.uk/hp/staff/dmb/matrix/intro.html`).

3. Boyd S., Vandenberghe L. *Convex optimization*. Cambridge University Press, 2004.

4. Khachiyan, L. G. *Rounding of Polytopes in the Real Number Model of Computation* // Mathematics of Operations Research, 1996, vol. 21, no. 2, pp. 307–320.

5. Sun P, Freund R. *Computation of Minimum-Volume Covering Ellipsoids* // Operations Research, 2004, vol. 52, no. 5, pp. 690–706.