УДК 519.853.3

УСКОРЕННЫЙ ПАРАЛЛЕЛЬНЫЙ МЕТОД ПРОЕКЦИЙ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ О НАИМЕНЬШЕМ РАССТОЯНИИ

Д. В. Долгий[1], **Е. А. Нурминский**[1]

Рассматривается задача нахождения вектора минимальной длины в симплексе конечномерного евклидового пространства. Предложен конечный ускоренный параллельный алгоритм решения данной задачи. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 04–07–90287в) и Программы 14 Президиума РАН.

1. Введение. Предметом настоящей работы является разработка специальной конечной процедуры проекции на простейший вид выпуклого многогранника — симплекса и построение параллельного алгоритма решения данной задачи. Проведенные вычислительные эксперименты демонстрируют высокую вычислительную эффективность алгоритма.

2. Постановка задачи. Объектами исследования являются подмножества и векторы n-мерного евклидового пространства E^n со скалярным произведением xy и нормой $||x||^2 = xx$.

Определим для некоторого множества $X \subset E^n$, представимого в виде объединения семейства множеств $\{X_k,\ k = 1, 2, \dots, N\}$, т.е. $X = \cup_{i=1}^N X_k$, аффинную $\operatorname{aff}(X)$ и выпуклую $\operatorname{co}(X)$ оболочки следующим образом:

$$\operatorname{aff}(X) = x = \sum_{i=1}^{n+1} \lambda_i x_i, \quad \sum_{i=1}^{n+1} \lambda_i = 1, \quad x_i \in X, \quad i = 1, 2, \dots, n+1,$$

$$\operatorname{co}(X) = x = \sum_{i=1}^{n+1} \lambda_i x_i, \quad \sum_{i=1}^{n+1} \lambda_i = 1, \quad \lambda_i \geqslant 0, \quad x_i \in X, \quad i = 1, 2, \dots, n+1.$$

Предметом настоящей работы является решение следующей фундаментальной задачи нахождения расстояния от начала координат до множества $Y = \operatorname{co}(X)$:

$$\min_{z \in Y} ||z||^2. \tag{1}$$

Единственным решением задачи (1) является вектор $z \in Y$, удовлетворяющий следующему условию (на самом деле вариационному неравенству):

$$z(x - z) \geqslant 0 \quad \forall x \in Y, \tag{2}$$

причем условие (2) является необходимым и достаточным.

Эквивалентность (1) и вариационного неравенства (2) послужила основой для разработки многих проективных алгоритмов решения вариационных неравенств [1, 4–6, 7, 8].

3. Метод аффинных подпространств. Для решения задачи (1) в случае, когда $N \leqslant n+1$, разработан метод подходящих аффинных подпространств (МАП) [3]. Метод начинает работу с начального подходящего базиса $I_0 \subset \mathcal{N} = \{1, 2, \dots, N\}$ и заканчивает построением оптимального базиса $i_* \subset \mathcal{N}$ и соответственно $Y_* = \operatorname{co}(X_i,\ i \in I_*)$, для которого $\min\limits_{z \in Y_*} ||z||^2 = \min\limits_{z \in Y} ||z||^2$.

В ходе работы алгоритма строится последовательность базисов I_k, $k = 1, 2, \dots$, и соответствующая последовательность подсимплексов $Y_k = \operatorname{co}(X_i,\ i \in I_k)$, гарантирующих монотонное убывание расстояний со скоростью геометрической прогрессии: $q\rho_k^2 = \min\limits_{z \in Y_k} ||z||^2 > \rho_{k+1}^2 = \min\limits_{z \in Y_{k+1}} ||z||^2$, где $q \in [0, 1)$. Итерационный переход от базиса I_k к базису I_{k+1} состоит в выполнении следующих двух основных шагов.

Шаг 1. Решаем задачу $\min\limits_{z \in H_k} ||z||^2 = ||z^k||^2$, H^k — аффинное подпространство $H_k = \operatorname{aff}(x_i,\ i \in Ik)$. Если для z^k выполнено условие (2), то это решение задачи (1) и алгоритм прекращает свою работу. Если это не так, тогда найдется вектор x^{i_k}, для которого $x^{i_k} z^k < ||z^k||^2$, и выполняется следующий шаг.

[1] Институт автоматики и процессов управления Дальневосточного отделения РАН (ИАПУ ДВО РАН), ул. Радио, д. 5, 690041, г. Владивосток; e-mail: d_dol@mail.ru, nurmi@dvo.ru

Шаг 2. Инициализируем счетчик внутреннего цикла $s = 0$ и начинаем внутренний цикл этого шага алгоритма.

Внутренний цикл. Образуем пробный базис $\overline{I}_s = \{I_k, i_k\}$ и новое аффинное подпространство $\overline{H}_s = \text{aff}\,(x_i,\, i \in \overline{I}_s)$. Решаем вспомогательную задачу проекции $\min\limits_{z \in \overline{H}_s} ||z||^2 = ||\overline{z}^s||^2$.

Если $\overline{z}^s \in \overline{Y}_s = \text{co}\,(x^i,\, i \in \overline{I}_s)$, то полагаем $I_{k+1} = \overline{I}_s$ и затем переходим к выполнению следующей $(k+1)$-й итерации. В противном случае полагаем $u^\lambda = \lambda\overline{z}^s + (1-\lambda)z^k$ и находим максимальное λ_s такое, что $u^{\lambda_s} \in \overline{Y}_s$. По построению точка u^λ при $\lambda = \lambda_s$ принадлежит относительной внутренности некоторой минимальной грани $\overline{Y}_{s+1}$, определяемой некоторым набором своих крайних точек x^i, $i \in \overline{I}_{s+1}$, где $\overline{I}_{s+1}$ — некоторое собственное подмножество $\overline{I}_s$ и $\sum\limits_{i \in \overline{I}_{s+1}} \theta_i = 1, \theta_i > 0$ для $i \in \overline{I}_{s+1}$. Увеличиваем счетчик итераций внутреннего цикла $s = s + 1$ и повторяем итерацию внутреннего цикла шага 2.

Конечная сходимость данного метода доказана в работе [2], а его глобальная “лучше, чем геометрическая” скорость сходимости — в [3].

4. Метод вложенных разбиений. В случае большего $(N > n+1)$ количества точек в множестве X метод аффинных подпространств, изложенный выше, не применим. Для решения задачи проекции (1) с условием $N > n + 1$ предлагается метод вложенных разбиений. Этот метод основан отчасти на идее параллельного метода проекции [11], но использует, во-первых, дихотомию множества X, а во-вторых, тот факт, что разбиение множества X может изменяться от итерации к итерации. Первое дает возможность применить метод аффинных подпространств, а второе — существенно ускорить сходимость до гарантии конечности, в отличие от [11].

Рассмотрим дихотомию множества X на Y_1 и Y_2, где $Y_1 = \text{co}\,(x^i,\, i \in I_1)$, $Y_2 = \text{co}\,(x^i,\, i \in I_2)$, $I_1 \cup I_2 = \mathcal{N}$ и не обязательно $I_1 \cup I_2 = \emptyset$.

В первоначальной форме параллельный метод проекций [11] имеет следующий вид.

Шаг 1 (инициализация метода). Делим множество X на два подмножества Y_1^0 и Y_2^0 в соответствии с критерием $\psi(x^i, p^k) = x^i p^0 - ||p^0||^2$, где p^0 — вектор, построенный как выпуклая комбинация точек множества X. Тогда $Y_1^0 = \{x^i \in X : \psi(x^i, p^k) \leqslant 0\}$, $Y_2^0 = \{x^i \in X : \psi(x^i, p^k) > 0\}$.

Далее, k-я итерация метода $(k = 0, 1, 2, \ldots)$ состоит из следующих двух шагов.

Шаг 2. Образуем два множества $Y_1^k = \{Y_1^0, p^k\}$ и $Y_2^k = \{Y_2^0, p^k\}$, для каждого из которых решаем задачу (1): $||z_1^k||^2 = \min\limits_{z \in \text{co}\,(Y_1^k)} ||z||^2$, $||z_2^k||^2 = \min\limits_{z \in \text{co}\,(Y_2^k)} ||z||^2$.

Шаг 3. Решаем задачу $\min\limits_{\lambda \in [0,1]} \left\|\lambda z_1^k + (1-\lambda) z_2^k\right\|^2 = ||p^{k+1}||^2$ и проверяем условие завершения работы алгоритма

$$\psi(x^i, p^k) = x^i p^{k+1} - ||p^{k+1}||^2 \geqslant 0 \quad \forall x^i \in X. \tag{3}$$

Если условие (3) не выполнено, шаги 2 и 3 повторяются.

Заметим, что множества Y_1^0 и Y_2^0 не меняются при переходе от одной итерации к другой. Асимптотическая сходимость данного алгоритма была доказана в работе [3], однако вычислительные эксперименты показали весьма медленную скорость сходимости алгоритма, и, как следствие, возник вопрос об его ускорении. Ключом к ускорению сходимости послужил пересмотр дихотомии множества X на каждой итерации. Оказалось, что изменение разбиения множества X существенно влияет на сходимость алгоритма, в частности, гарантирует конечную сходимость. Данный метод назовем методом вложенных разбиений.

Метод вложенных разбиений выглядит следующим образом.

Шаг 1. Строим начальное приближение — вектор p^0 как выпуклую комбинацию точек множества X.

Шаг 2. Делим множество X на два подмножества Y_1^k и Y_2^k следующим образом:

$$Y_1^k = \{x^i \in X : \psi(x^i, p^k) \leqslant 0\}, \quad Y_2^k = \{x^i \in X : \psi(x^i, p^k) > 0\},$$

где $\psi(x^i, p^k)$ определяется как $\psi(x^i, p^k) = x^i p^k - ||p^k||^2$. Индекс k $(k = 0, 1, 2, \ldots)$ означает порядковый номер итерации.

Шаг 3. Образуем два множества $\overline{Y}_1^k = \{Y_1^k, p^k\}$ и $\overline{Y}_2^k = \{Y_2^k, p^k\}$, для каждого из которых решаем задачу (1): $||z_1^k||^2 = \min\limits_{z \in \text{co}\,(\overline{Y}_1^k)} ||z||^2$, $||z_2^k||^2 = \min\limits_{z \in \text{co}\,(\overline{Y}_2^k)} ||z||^2$.

Шаг 4. Решаем задачу

$$\min_{\lambda \in [0,1]} \left\|\lambda z_1^k + (1-\lambda) z_2^k\right\|^2 = ||p^{k+1}||^2 \tag{4}$$

и проверяем условие завершения работы алгоритма:

$$\psi(x^i, p^k) = x^i p^{k+1} - \|p^{k+1}\|^2 \geqslant 0 \quad \forall x^i \in X. \tag{5}$$

Если условие (5) не выполняется, повторяем шаги 2, 3 и 4 алгоритма. Одна итерация метода вложенных разбиений включает шаги 2, 3 и 4.

Для метода вложенных разбиений справедлива следующая теорема.

Теорема 1. *Метод вложенных разбиений имеет конечную сходимость.*

Доказательство. Пусть $M \subset \mathcal{N} = \{1, 2, \dots, N\}$ и $Y_M = \mathrm{co}\,(\widehat{x}^{\,i},\ i \in M)$, $\|z^M\|^2 = \min\limits_{z \in Y_M} \|z\|^2$, $W_M = \big\{i : \widehat{x}^{\,i} z^M < \|z^M\|^2\big\}$, $U_M = \big\{i : \widehat{x}^{\,i} z^M = \|z^M\|^2\big\}$. Ясно, что $W_M \cap M = \emptyset$.

Пусть $\delta_M = \min\limits_{i \in W_M} \big\{\|z^M\|^2 - \widehat{x}^{\,i} z^M\big\}$, если $W_M \neq \emptyset$, и $\delta_M = 0$ — в противном случае. Если $W_M = \emptyset$, z_M — решение задачи построения проекции (2).

Ясно, что $\delta_M > 0$ для $W_M \neq \emptyset$, а в силу конечного числа M существует $\delta > 0$, такое, что $\delta_M \geqslant \delta > 0$ для M, таких, что $W_M \neq \emptyset$.

Лемма 1. *Существует $\gamma > 0$, такое, что $\min\limits_{z \in \mathrm{co}\,(\widehat{x}^{\,i},\, i \in U_M \cup W_M)} \|z\|^2 \leqslant \|z^M\|^2 - \gamma$ для всех M, таких, что $W_M \neq \emptyset$.*

Доказательство следует из элементарных оценок. Имеем:

$$\|\overline{z}^M\|^2 = \min_{z \in \mathrm{co}\,(\widehat{x}^{\,i},\, i \in U_M \cup W_M)} \|z\|^2 \leqslant \min_{z \in \mathrm{co}\,(z^M, \widehat{x}^{\,i},\, i \in W_M)} \|z\|^2, \tag{6}$$

что вытекает из того, что $z_M \in \mathrm{co}\,(\widehat{x}^{\,i},\ i \in U_M)$. Пусть x^M такое, что

$$\widehat{x}^M z^M - \|z^M\|^2 = \max_{i \in W_M} \big\{\widehat{x} z^M - \|z^M\|^2\big\} = -\delta_M \leqslant \delta < 0.$$

Тогда, продолжая цепочку неравенств (6), получим

$$\|\overline{z}^M\|^2 \leqslant \min_{z \in co(z^M, x^M)} \|z\|^2 = \min_{\lambda \in [0,1]} \big\|z^M + \lambda(x^M - z^M)\big\|^2.$$

В этой задаче минимум достигается при $\lambda_M = -z^M \dfrac{x^M - z^M}{\|x^M - z^M\|^2} = \dfrac{\delta_M}{\|x^M - z^M\|^2} > 0$ и его значение равно

$$\|z^M\|^2 - \frac{\big(z^M(x^M - z^M)\big)^2}{\|x^M - z^M\|^2} \leqslant \|z^M\|^2 - \frac{\delta_M^2}{2}\big(\|x^M\|^2 + \|z^M\|^2\big)^2 \leqslant \|z^M\|^2 - \frac{\delta_M^2}{2}\,\Delta^2 \leqslant \|z^M\|^2 - \frac{\delta^2}{2}\,\Delta^2,$$

где $\Delta = \max\limits_{z \in X} \|z\| = \max\limits_{i \in N} \|\widehat{x}^{\,i}\|$.

При работе алгоритма определяются множества $U_k = \big\{i : \widehat{x}^{\,i} z^k = \|z^k\|^2\big\}$, $W_k = \big\{i : \widehat{x}^{\,i} z^k < \|z^k\|^2\big\}$ и $\|z^{k+1}\|^2 = \min\limits_{z \in co(\widehat{x}^{\,i}, i \in U_k \cup W_k)} \|z\|^2$ (или $i \in Z_k \supset U_k \cup W_k$), $\|z^k\|^2 = \min\limits_{\widehat{x}^{\,i} \in co(\widehat{x}^{\,i}, i \in U_k)} \|z\|^2$.

Применим лемму для z^{k+1} и z^k: $0 < \|z^{k+1}\|^2 \leqslant \|z^k\|^2 - \gamma$ с $\gamma \geqslant \dfrac{\delta^2}{2}\,\Delta^2$. Отсюда следует, что за конечное число шагов будет выполнено условие $W_k = \emptyset$. Теорема доказана.

5. Модификации метода вложенных разбиений. Метод вложенных разбиений допускает различные модификации. Базой для них служит следующая

Лемма 2. *Для метода вложенных разбиений справедливо $z_2^k = p^k$.*

Доказательство. Для z_2^k справедливо неравенство $z_2^k x \geqslant \|z_2^k\|^2$ для любого $x \in \mathrm{co}\,(Y_2^k, p^k)$. Вместе с тем, по построению $xp^k \geqslant \|p^k\|^2$ для любого $x \in \mathrm{co}\,(Y_2^k, p^k)$, причем последнее неравенство выполняется со знаком равенства лишь в случае $x = p^k$. В силу того, что z_2^k — проекция начала координат на множество $\mathrm{co}\,(Y_2^k, p^k)$, найдутся такие λ_i^*, θ^*, что

$$z_2^k = \sum_{i=1}^{n_k} \lambda_i^* x^i + \theta^* p^k, \quad \sum_{i=1}^{n_k} \lambda_i^* + \theta^* = 1, \quad \lambda_i^*, \theta^* \geqslant 0, \quad n_k \subset I_2.$$

Умножив z_2^k скалярно на p^k, получим

$$z_2^k p^k = \sum_{i=1}^{n_k} \lambda_i^* x^i p^k + \theta^* \|p^k\|^2 \geqslant \sum_{i=1}^{n_k} \lambda_i^* \|p^k\|^2 + \theta^* \|p^k\|^2 = \|p^k\|^2.$$

Имеем $z_2^k p^k \geqslant \|p^k\|^2$ и $z_2^k x \geqslant \|z_2^k\|^2$ для любого $x \in \operatorname{co}(Y_k^2, p^k)$, в том числе и для $x = p^k$, т.е. $z_2^k p^k \geqslant \|z_2^k\|^2$.

Складываем полученные два неравенства для $z_2^k p^k$: $\|p^k\|^2 + \|z_2^k\|^2 \leqslant 2 z_2^k p^k$. Отсюда $\|p^k - z_2^k\|^2 \leqslant 0$, или $z_2^k = p^k$.

В силу справедливости утверждения леммы 2 и очевидного неравенства $\|z_1^k\| \leqslant \|z_2^k\|$ количество вычислений в данном алгоритме можно уменьшить за счет использования на очередной итерации в качестве проекции z_2^{k+1} на множество $\operatorname{co}(Y_2^{k+1}, p^{k+1})$ проекцию z_1^k на множество $\operatorname{co}(Y_1^k, p^k)$ предыдущей итерации.

Существенное уменьшение количества итераций возможно за счет включения во множество Y_1^k части точек множества Y_2^k при последовательном переходе от одной итерации к другой. Критерий включения может быть разный, что, в свою очередь, влияет на общее количество итераций. В частности, предлагается включать во множество Y_1^k половину точек множества Y_2^k с наименьшей проекцией на вектор p^k.

6. Численный эксперимент. Для численных экспериментов с алгоритмом исходный симплекс генерировался случайным образом как набор векторов с компонентами, представляющими независимые равномерно распределенные случайные величины. Для генерации стресс-тестов использовалось масштабирование, так что последняя координата каждого вектора имела масштаб измерений в 1000 раз меньше, чем по остальным координатам. Точнее говоря, исходный набор данных представлял в каждом тесте совокупность из m векторов вида $x = (x_1, x_2, \ldots, x_n)$ размерности n, компоненты которых вычислялись как

$$x_i = \begin{cases} 100(\xi_i - 0.5), & i = 1, 2, \ldots, n-1, \\ 0.1\xi_n, \end{cases}$$

где ξ_i, $i = 1, 2, \ldots, n$, — независимые равномерно распределенные на [0,1] случайные величины.

Алгоритм, изложенный в данной работе, был реализован на языке Octave [12], свободно распространяемом матрично-векторном вычислителе, весьма удобном для подобных экспериментов.

Ниже представлена расшифровка эксперимента для случая симплекса, образованного $m = 180$ векторами в пространстве $n = 40$. Матрица X содержит 180 векторов, сгенерированных случайным образом в 40-мерном пространстве. Начальное значение для генерации (40×180)-матрицы X исходных данных в Octave задается командой (seed, 31415292).

Сходимость алгоритма метода вложенных разбиений

	Простой			Модифицированный		
k	$\lvert Y_1^k\rvert$	$\lvert Y_2^k\rvert$	γ	$\lvert Y_1^k\rvert$	$\lvert Y_2^k\rvert$	γ
1	103	77	1.4259e-5	107	73	8.8047e-6
2	53	127	1.6226e-6	76	104	8.0904e-6
3	85	95	4.0042e-6	67	113	2.3769e-6
4	59	121	1.0308e-6	45	135	4.1006e-7
5	52	128	9.4053e-7	42	138	1.3291e-7
6	105	75	1.6121e-5	40	140	1.9523e-15
7	54	126	1.1471e-6			
8	47	133	3.9930e-7			
9	45	135	2.8230e-7			
10	42	138	8.4993e-8			
11	43	137	1.5126e-7			
12	40	140	1.9523e-15			

Эксперимент проводился дважды:

1) для случая реализации алгоритма метода вложенных разбиений без модификаций (простой алгоритм);

2) для случая включения на каждой итерации во множество Y_1^k части точек множества Y_2^k (модифицированный алгоритм).

Условие отбора точек в модифицированное множество Y_1^k выглядит следующим образом:

$$x^i p^k \leqslant \|p^k\|^2 + \delta, \quad \text{где} \quad \delta = \frac{1}{10}\,(\max_{x^i \in Y_2^k} x^i p^k - \min_{x^i \in Y_2^k} x^i p^k).$$

Результаты эксперимента представлены в таблице, где k — порядковый номер итерации, Y_1^k, Y_2^k — дихотомия множества X на k-й итерации, $|Y_1^k|$, $|Y_2^k|$ — мощности данных множеств, $\gamma = \dfrac{\|p^k\|^2 - \min\limits_{x^i \in X} x^i p^k}{\|p^0\|^2 - \min\limits_{x^i \in X} x^i p^0}$, p^0 — центр тяжести множества X (шаг 1 алгоритма), p^k — решение задачи (4) на k-й итерации.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Коннов И.В.* Методы решения конечномерных вариационных неравенств. Казань: ДАС, 1998.
2. *Нурминский Е.А.* Ускорение итеративных методов проекции на многограннике // Исследовано в России. 2005. 51–62 (http://zhurnal.ape.relarn.ru).

3. *Нурминский Е.А.* Метод подходящих аффинных подпространств для проекции на симплекс // ЖВМ и МФ. 2005. **45**, № 11. 1996–2004.
4. *Еремин И.И.* Противоречивые модели оптимального планирования. М.: Наука, 1988.
5. *Wang C., Xiu N.* Convergence of the gradient projection method for generalized convex minimization // Computational Optimization and Applications. 2000. **16**, № 2. 111–120.
6. *Шпирко С.В., Антипин А.С., Голиков А.И.* Равновесное программирование: постановка задачи, методы решения // Информационный бюллетень РФФИ. 1996. **4(1)**. 438.
7. *Zhang J., Xiu N.* Some recent advances in projections-type methods for variational inequalities // Journal of Computational and Applied Mathematics. 2003. **152**, № 1, 2. 559–585.
8. *Панин В.М., Скопецкий В.В., Лаврина Т.В.* Модели и методы конечномерных вариационных неравенств // Кибернетика и системный анализ. 2000. **6**. 47–64.
9. *Censor Y., Cohen N., Kutscher (Kotzer) T., Shamir J.* Summed squared distance error reduction by simultaneous multiprojections and applications // Applied Mathematics and Computations. 2002. **126**. 157–179.
10. *Golub G., Pereyra V.* Separable nonlinear least squares: the variable projection method and its applications // Inverse Problems. 2003. **19**, № 2. R1–R26.
11. *Нурминский Е.А.* Параллельный метод проекции на выпуклую оболочку семейства множеств // Известия ВУЗов. Математика. 2003. **12**, № 499. 78–82.
12. GNU Octave (http://www.octave.org).

Поступила в редакцию
26.09.2006