

Szimplex fedése gömbökkel

– diplomamunka kivonat –

Cziráki Tamás

A diplomamunkámban szimplexek gömbökkel való lefedhetőségét vizsgálom. Ez a kérdés, mint oly sok másik, egy alkalmazási területről származik. Az [1] cikkben egy keverési feladatot akarnak megoldani, melynek feltételei közt kvadratikus egyenlőtlenségek is szerepelnek. A feladat megoldására egy korlátozás és szétválasztás (*Branch-and-Bound*) algoritmus született. Az algoritmus a nyersanyagok által meghatározott szimplexből indul ki, s minden új részfeladat egy – a kiinduló szimplexnél kisebb – S szimplexen való vizsgálódást jelent. A szimplexen végrehajtandó vizsgálat egy lépése az adott részfeladat megengedettségi vizsgálata. A $h_j(\mathbf{x})$ kvadratikus feltételek megengedettségi vizsgálatánál a $h_j(\mathbf{x})$ feltételek átírhatók $\mathbf{v}_i$ középpontú B_i gömbökké, ahol $\mathbf{v}_i$ az éppen vizsgált szimplex csúcsait jelöli. A B_i gömbök sugarait az [1] cikk 1. és 2. tétele alapján a következő képlet definiálja

$$r_i = \max \left\{ \max_{j: \lambda_j < 0} \frac{\|\nabla h_j(\mathbf{v}_i)\| - \sqrt{\|\nabla h_j(\mathbf{v}_i)\|^2 - 4\lambda_j h_j(\mathbf{v}_i)}}{2\lambda_j}, \max_j \frac{h_j(\mathbf{v}_i)}{\Gamma_j(S)} \right\}.$$

Ahol λ_j a $h_j(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{D}_j \mathbf{x} + \mathbf{e}_j^T \mathbf{x} + f_j$ függvény szimmetrikus $\mathbf{D}_j$ mátrixának legkisebb negatív sajátértéke. Valamint $\Gamma_j(S) = \max_{\mathbf{v} \in S} \left\| \nabla h_j(\mathbf{v}) - \frac{\mathbf{1}^T \nabla h_j(\mathbf{v}) \mathbf{1}}{n} \mathbf{1} \right\|$, mely lényegében a $h_j(\mathbf{x})$ függvény Lipschitz-konstansának becslése.

A fentiek alapján a [2] cikk megfogalmazását követve a szimplex lefedési feladat, röviden SC (*simplex covering*) feladat, a következő. Adott az m dimenziós térben egy n pontból álló S szimplex, amelynek csúcsait jelölje $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n$. Minden $\mathbf{v}_i$ csúcs egyben egy r_i sugarú B_i gömb középpontja is. Az alapfeladatban azt vizsgáljuk, hogy a B_i gömbök uniója mikor fedi le az egész S szimplexet. Formálisan igaz-e, hogy

$$\forall \mathbf{x} \in S, \quad \mathbf{x} \in \cup_i B_i, \tag{1}$$

vagy másképp fogalmazva

$$\exists \mathbf{x} \in S, \quad \mathbf{x} \notin \cup_i B_i. \quad (2)$$

Az (1) és a (2) képletekben megfogalmazott feladat helyett egy vele ekvivalens optimalizálási feladatot oldunk meg, melyet SCO (*simplex covering optimization*) feladatnak nevezünk [2]. Ez a következő függvényre épít:

$$\varphi(\mathbf{x}) = \min_i \{ \|\mathbf{x} - \mathbf{v}_i\|^2 - r_i^2 \} = \min_i \{ d_p(\mathbf{x}, \mathbf{v}_i) \},$$

ahol $d_p(\mathbf{x}, \mathbf{v}_i) = \|\mathbf{x} - \mathbf{v}_i\|^2 - r_i^2$ jelöléssel élünk. Ha $\mathbf{x} \in B_i$ valamely i -re, akkor és csak akkor $\varphi(\mathbf{x}) \leq 0$, így az ekvivalens feladat

$$\forall \mathbf{x} \in S, \quad \varphi(\mathbf{x}) \leq 0.$$

Ám elég csak a

$$\Phi = \max_{\mathbf{x} \in S} \varphi(\mathbf{x}). \quad (3)$$

maximalizálást megoldani. Ugyanis, ha $\Phi > 0$, akkor a szimplexet nem fedi le a csúcaiban elhelyezett gömbök uniója, viszont $\Phi \leq 0$ esetén igen.

Megjegyezzük, hogy a φ függvény szoros kapcsolatban áll a Voronoi diagram egyik lehetséges általánosításával, az úgynevezett erődiagrammal (*power diagram*). Összefoglalóan elmondhatjuk, hogy a Voronoi diagram és az erődiagram is, a $\mathbf{p}_i$ pontok egy halmazára olyan $D(\mathbf{p}_i)$ -vel (erődiagram esetén $D_p(\mathbf{p}_i)$ -vel) jelölt tartományokra bontja a teret, ahol egy adott tartományba azon pontok esnek, melyek közelebb vannak $\mathbf{p}_i$ -hez, mint bármelyik másik $\mathbf{p}_j$, $j \neq i$ ponthoz [2]. Adott az úgynevezett erőfüggvény (*power distance*), $d_p(\mathbf{x}, \mathbf{p}_i) = \|\mathbf{x} - \mathbf{p}_i\|^2 - w(\mathbf{p}_i)$, ahol $w(\mathbf{p}_i)$ a $\mathbf{p}_i$ ponthoz tartozó súly. A számunkra lényeges definíciók a következők.

1.4. Definíció.

$$\Pi_{ij} := \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n : d_p(\mathbf{x}, \mathbf{p}_i) = d_p(\mathbf{x}, \mathbf{p}_j) \}$$

a $\mathbf{p}_i$ és $\mathbf{p}_j$ pontokhoz tartozó erősíkok.

$$D_p(\mathbf{p}_i) := \bigcap_{\mathbf{p}_j \in S, j \neq i} H_p(\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_j) = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n : d_p(\mathbf{x}, \mathbf{p}_i) < d_p(\mathbf{x}, \mathbf{p}_j), \forall j \neq i \}$$

a $\mathbf{p}_i$ ponthoz tartozó erőcella, ahol $H_p(\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_j)$ a Π_{ij} erősíkok által meghatározott $\mathbf{p}_i$ -t tartalmazó féltér. A $D_p(\mathbf{p}_i)$ határát alkotó erősíkok részt lényeges erősíkok résznek nevezzük és $\tilde{\Pi}_{ij}$ -vel jelöljük.

A kapcsolat nyilvánvaló, hisz az SC feladatban az itteni $\mathbf{p}_i$ pontoknak a szimplex csúcsait feleltethetjük meg, míg a $w(\mathbf{p}_i)$ súlyok a B_i gömbök sugarainak a négyzete. A $d_p(\mathbf{x}, \mathbf{p}_i)$ távolság függvények minimuma pedig a φ függvény.

A [2] cikkben már vizsgálták az SCO feladatot. Az ott kapott eredmények a következők.

2.1. Lemma. [2] *Az $\mathbf{x}^*$ pontra igaz, hogy $\mathbf{x}^* \in \operatorname{argmax}_{\mathbf{x} \in S} \varphi(\mathbf{x}) \notin \operatorname{int}(S) \cap \cup_i D_p(\mathbf{v}_i)$.*

Vagyis ha S egy $\mathbf{x}^*$ belső pontjában kapjuk meg az optimum értéket, akkor az rajta kell legyen egy erőcella határán, azaz $\mathbf{x}^* \in \tilde{\Pi}_{ij}$ valamely i -re és j -re. Legyen $\mathbf{x}^*$ a (3) feladat optimum pontja és $\mathbf{x}^* \in S$. Ekkor $\mathbf{x}^*$ előáll a $\mathbf{v}_i$ csúcsok konvex kombinációjaként, azaz $\mathbf{x}^* = \mathbf{V}\alpha$. Ebben az esetben az optimalitás egy szükséges feltétele a következő.

2.1. Tétel. [2] *Tekintsük azt az SCO feladatot, melyre S szimplex csúcsai $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n$, a $\mathbf{v}_i$ csúcshoz tartozó gömb pedig B_i . Legyen $\mathbf{x}^* = \mathbf{V}\alpha$ belső maximum pontja az SCO feladatnak. Ekkor*

$$d_p(\mathbf{x}^*, \mathbf{v}_1) = d_p(\mathbf{x}^*, \mathbf{v}_i), \quad i = 2, 3, \dots, n, \quad (4)$$

azaz minden $d_p(\mathbf{x}, \mathbf{v}_i)$ erőfüggvény ugyanazt az értéket veszi fel az $\mathbf{x}^*$ pontban.

Azokat a pontokat, amelyek eleget tesznek a (4) egyenletnek θ -pontoknak nevezzük. Vagyis egy lehetséges megoldása a (3) feladatnak, ha megkeressük a (4)-nek eleget tevő pontot – ehhez egy lineáris egyenletrendszert kell megoldani – és megvizsgáljuk a θ -pontbeli φ értéket. A [2] cikkben arra is található eredmény, hogy ha a θ -pont kívülre esik és $\varphi(\theta) \leq 0$, akkor a szimplex fedett. Arra az esetre amikor a θ -pont külső pont és $\varphi(\theta) > 0$ egy sejtéssel álltak elő: ilyenkor az optimális megoldás a θ -ponthoz legközelebb eső C oldalon található. A sejtést sikeresen bizonyítottam, a precíz megfogalmazása a diplomamunka 3.1. tétele.

Az általánosság megszorítása nélkül feltehető, hogy a $\theta = \mathbf{V}\alpha$ felírásban $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k \geq 0$ és $\alpha_{k+1}, \alpha_{k+2}, \dots, \alpha_m < 0$, ahol $(1 < k < m)$. Ekkor a θ -ponthoz legközelebbi oldal $C = \operatorname{conv}(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_k)$. Ez azt jelenti, hogy $\mathbf{x}^* = \mathbf{V}\alpha$ felírásban az $\alpha_{k+1} = \alpha_{k+2} = \dots = \alpha_n = 0$. Így a (3) feladatot felírhatjuk, mint egy $k - 1$ dimenziós feladatot a következőképpen.

$$\Phi = \max_{\mathbf{x} \in C} \varphi(\mathbf{x}) = \max \left\{ \varphi(\hat{\mathbf{V}}\hat{\alpha}) : \sum_{i=1}^k \alpha_i = 1, \alpha_i \geq 0, \forall i \right\}, \quad (5)$$

ahol $\hat{\mathbf{V}}$ a $\mathbf{V}$ mátrix első k oszlopából és $\hat{\alpha}$ az α vektor első k eleméből áll. Az (5) feladat átírható a következőképp, melynek ekvivalenciáját a 3.2. tételben láttam be. A $\mathbf{v}_{k+1}, \mathbf{v}_{k+2}, \dots, \mathbf{v}_n$ pontokat merőlegesen vetítsük le Γ síkjára, ekkor az új pontok $\hat{\mathbf{v}}_i = \mathbf{v}_1 + \mathbf{P}(\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_1)$ és hozzátartozó sugarak $\hat{r}_i^2 = r_i^2 - \|\hat{\mathbf{v}}_i - \mathbf{v}_1\|^2$. Így a feladat: adott a C oldal k darab csúcspontja, mely középpontja az $\hat{r}_i$ sugarú $\hat{B}_i$ gömböknek, $i = 1, 2, \dots, k$, valamint rajtuk kívül még $n - k$ darab másik $\hat{B}_i$ gömb középpontja, melyek sugara $\hat{r}_i$. A feladatban azt vizsgáljuk vajon C fedett-e a gömbök által. Ezt SCO_C feladatnak neveztem.

Az SCO_C feladat megoldásához szükség volt a 2.1. lemma általánosításaira. Méghozzá, hogy tudjuk kezelni az SCO_C feladattal járó plusz pontok meglétét, valamint azt az esetet, ha $\mathbf{x}^*$ határpont. Ezek a diplomamunka 3.1. lemmája, valamint a 3.2. fejezet két lemmája. Az SCO_C feladat megoldásával kapcsolatos első tétel a következő.

3.3. Tétel. *Adott a síkon egy szimplex, melynek csúcsaihoz tartozó körök sugarainak négyzete r_1^2 , r_2^2 és r_3^2 . Tegyük fel, hogy ezen körök θ -pontja a szimplexen kívülre esik és a körök uniója nem fedi. Ekkor a θ -pontnak a legközelebbi oldalra eső, az erőegyenes mentén történt vetületei rendre megegyeznek az SCO_C feladatban számolt erőpontokkal. Továbbá ha az SCO feladat optimális megoldása, $\mathbf{x}^*$, nem csúcspont, de határpont, akkor $\mathbf{x}^*$ megegyezik ezen pontok valamelyikével.*

Mivel ez csupán a síkbeli esetre oldja meg a feladatot, ezért a következőkben általánosabban vizsgáltam a kérdést, így született a következő tétel, mely a diplomamunka 3.4. tételének erősebb változata. Azonban még előtte fontos megjegyezni, hogy az SCO feladattal ellentétben az SCO_C feladatban több θ -pontot is meg tudunk határozni. Lényeges θ -pontnak nevezzük ezek közül azokat, amelyeknél a φ függvény értéke megegyezik $\varphi_{i_1, i_2, \dots, i_k}$ függvény értékével, ahol $\varphi_{i_1, i_2, \dots, i_k}(\mathbf{x}) := \min_{\mathbf{x} \in T_{i_1, i_2, \dots, i_k}} \{d_p(\mathbf{x}, \mathbf{v}_j), j = i_1, i_2, \dots, i_k\}$, és $T_{i_1, i_2, \dots, i_k} = \text{conv}(\mathbf{v}_{i_1}, \mathbf{v}_{i_2}, \dots, \mathbf{v}_{i_k}, \theta_{i_1, i_2, \dots, i_k})$ és $\theta_{i_1, i_2, \dots, i_k}$ $\mathbf{v}_{i_1}, \mathbf{v}_{i_2}, \dots, \mathbf{v}_{i_k}$ pontok alapján számolt θ -pont.

3.5. Tétel. *Az m dimenziós térben adott egy k csúccsal bíró C szimplex és rajta kívül $n - k$ pont, valamint e pontokhoz tartozó körök sugarai. Tegyük fel, hogy az így kapott SCO_C feladat optimális megoldása, $\mathbf{x}^*$, belső pontja a szimplexnek, valamint a pontok által definiált $\binom{n}{k}$ darab θ -pont közül legalább egy szintén belső és lényeges. Ekkor az $\mathbf{x}^*$ pont ezen θ -pontok legnagyobbika φ -ben.*

Ezzel már majdnem megoldottuk az SCO_C feladatot, általánosan, m dimenzióra, de sajnos arra az esetre semmit nem állít tételünk, ha mindegyik lényeges θ -pont a szimplexen kívülre esik. Ezzel kapcsolatban született a következő síkbeli tétel.

3.6. Tétel. *Adott a síkon egy szimplex (háromszög) és rajta kívül $n - 3$ pont, valamint e pontokhoz tartozó körök sugarai. Tegyük fel, hogy az SCO_C feladat pontjai által definiált lényeges θ -pontok mind a szimplexen kívülre esnek. Ekkor bármely lényeges θ -pontnak valamely oldalra eső, az erőegyenesei mentén történt vetületei rendre megegyeznek a szimplex fentebb taglalt vetítése után számolt erőpontokkal. Továbbá ha az SCO_C feladat optimális megoldása, $\mathbf{x}^*$, nem csúcspont, de a határon van, akkor $\mathbf{x}^*$ megegyezik ezen pontok valamelyikével.*

A fenti tételeket a diplomamunkában példákon ábrákkal szemléltetjük, így elősegítve a mélyebb megértést.

Összefoglalásképpen elmondhatjuk, hogy az SCO feladat egy eset kivételével megoldottnak tekinthető a korábbi cikkek és e diplomamunka alapján. A fennmaradó egy eset az, amikor az adatokból számolt θ -pont a szimplexen kívülre esik és $\varphi(\theta) > 0$, valamint az ezután megkonstruált új SCO_C feladat lényeges θ -pontjai is a szimplexen kívülre esnek. Ez az eset általánosan m dimenziós problémára még nem megoldott, viszont részsikerként könyvelhető el, hogy megvan a megoldás a síkon. További kutatási lehetőség ezen eset egyszerűbb általános megoldása. Ezek után a téma gyakorlati lezárásaképp a tételekre építhető algoritmus összeállítása és implementálása következhet. Az így kapott módszert alkalmazhatnánk a problémát adó keverési feladatokon.

Hivatkozások

- [1] L. G. Casado, I. García & E. M. T. Hendrix, „Infeasibility spheres for finding robust solutions of blending problems with quadratic constraints”, *Journal of Global Optimization*, vol. 39, no. 4, pp. 577–593, 2007.
- [2] L. G. Casado, I. García, E. M. T. Hendrix & B. G.-Tóth „On determining the cover of a simplex by spheres centered at its vertices”, *Journal of Global Optimization*, vol. 50, no. 4, pp. 645–655, 2009.