arXiv:2302.00603v1 [math.NA] 1 Feb 2023

# 利用质心沃罗诺伊剖分对布拉施克-桑塔洛图进行数值近似

Beniamin Bogosel、Giuseppe Buttazzo 和 Edouard Oudet

Abstract. 识别 Blaschke-Santal´o 图是一项重要课题，其核心是确定映射 $F: X \to \mathbb{R}^d$ 的像集 $Y = F(X)$，其中源空间 $X$ 的维数远大于目标空间的维数。在某些情况下，例如形状优化问题中，$X$ 甚至可能是无限维空间的子集。通常采用的蒙特卡洛方法是随机选取 $N$ 个点 $x_1, \ldots, x_N$，这些点位于 $X$ 中，并将它们绘制在目标空间 $\mathbb{R}^d$ 中。然而，这种方法在许多情况下会使 $Y$ 中的区域出现极高或极低的点浓度，从而导致对像集的数值识别相当粗略。与此相反，我们的目标是以恰当的方式选取点 $x_i$，使其在目标空间中均匀分布。这样，我们便能用相对少量的样本 $N$，较好地表示像集 $Y$；当源空间 $X$ 的维数很高（甚至是无限维），且计算 $F(x_i)$ 的代价很高时，这一点尤为有用。我们的方法是恰当地运用质心沃罗诺伊剖分，从而获得高效的数值结果。本文展示了二维和三维实例的模拟。

**关键词：** Blaschke-Santal´o 图、Voronoi镶嵌、蒙特卡洛方法、最优传输、劳埃德算法。

**2020年数学主题分类：** 49Q10,49M20,65C05,65C20,52B35

## 1. Introduction

在若干问题中，我们面临这样一个问题：给定 $X$ 可行选择集以及 $F$ 一个描述给定选择 $x \in X$的表现 $F(x)$的映射，如何确定映射 $F: X \to \mathbb{R}^d$的像。在本文中，我们研究当维数 $d$ 较小时，对 $F(X)$的近似；也就是说，相对于 $X$ 的维数（它甚至可能是无限维的），表现 $F(x)$可以用少数几个输出概括。当 $X$ 是一个形状类时，子集 $F(X) \subset \mathbb{R}^d$ 通常称为 Blaschke-Santal´o 图，其中可能涉及体积、周长、扭转刚度、拉普拉斯算子 $-\Delta$的特征值等类似的几何或分析量（例如参见 [4, 6, 18]）。

即使集合 $X$ 是有限维欧几里得空间 $\mathbb{R}^N$ 的子集，通过数值过程确定像集 $F(X)$ 也可能遇到深刻而意想不到的困难。最直接的方法是利用离散集合 $\{x_i\}_{i\in I}$ 对 $X$ 进行随机均匀采样，并考察相应的输出 $\{F(x_i)\}_{i\in I}$，但这种方法可能无法得到令人满意的近似。通过对 $X$ 进行均匀随机采样，可能很少探索到像集 $F(X)$ 的某些部分。在这种情况下，需要大量样本才能相当准确地描述集合 $F(X)$。这一现象会

产生显著影响，因为在选定样本上计算 $F$ 需要求解一个或多个偏微分方程。例如，在形状优化中，这一过程在计算时间方面可能代价过高。在这类情境下，需要开发一种新方法，以相对较少的采样点精确描述像集 $F(X)$。必须谨慎调整采样方式，以适应映射 $F$ 的复杂性。

本文提出了一种基于沃罗诺伊剖分的新方法，该方法似乎比标准的均匀随机方法高效得多。我们将在接下来的章节中介绍这一数值方法，并给出一些代数示例，清楚地展示该方法的效率。

尺度不变比值所涉及的几何量取值范围的研究由 Santal´o 于 [22] 和 Blaschke 于 [2]开创。如果尺度不变比值的几何图像得到完整刻画，那么这些量之间所有可能的不等式也就为人所知。实践中，通常使用三个几何泛函来构造至少两个尺度不变比值。

近年来，这种方法已在形状优化领域得到研究。我们提及 [6] ，其中讨论了由面积、直径和内切半径给出的图。在 [13]中，研究了体积、周长与第一狄利克雷拉普拉斯特征值之间的不等式。 [10]研究了 Cheeger 不等式，而 [11]则研究了涉及第一狄利克雷特征值、扭转量和体积的不等式。

在大多数情况下，我们无法对由此得到的 Blaschke-Santal´o 图作出完整的解析性理解。因此，有必要借助数值工具。第一种方法是生成随机形状并计算感兴趣的量。上述一些文献展示了这种方法。更严谨的数值方法是求解数值优化问题，以找出图的垂直或水平切片上的极值点。 [12] 采用了这种方法，并使用 [1]和 [3] 中描述的方法，在凸集上进行数值形状优化。

本文提出了一种全新的替代方法，可在 Blaschke-Santal´o 图中生成均匀分布的样本。该方法还隐含地为图提供了边界点。与 [12] 中需要求解多个带约束的数值优化问题不同，我们采用全局迭代过程，并通过数值求解一个全局优化问题来提供该图的几何描述。我们以一个代数例子展示该方法，考察元素属于 $[-1,1]$ 的对称矩阵的迹和行列式。从 $3\times 3$ 矩阵开始，这个简单的例子就已颇具挑战性。第二阶段，我们对具有两条对称轴的凸形状所对应的面积、周长和转动惯量图进行数值研究。

## 2. Approximation framework

**2.1. 最优传输框架。** 考虑连续映射 $F : X \to \mathbb{R}^d$，其中 $X$ 是一个紧致度量空间。为了准确描述像集 $F(X)$，我们可以在 $X$ 中随机选取一些点 $\{x_1,\dots,x_n\}$，对于较大的$n$，集合 $\{F(x_k) : k = 1,\dots,n\}$ $(X)$便可近似描述完整的像集 $F(X)$。然而，即使 $X$ 是欧几里得有限维空间的子集，由于映射 $F$的非线性，要想相当准确地描述像集 $F(X)$，所需的数量 $n$ 也可能极其

高。换言之，在 $X$ 中均匀随机选取点 $\{x_1, \ldots, x_n\}$ 通常无法生成分布良好的序列 $F(x_1) \ldots, F(x_n)$，而且经常会出现聚集/稀疏效应。因此，我们应根据一种非均匀且依赖于函数 $F$ 的概率测度，在 $X$ 中随机选取点 $\{x_1, \ldots, x_n\}$，以获得分布良好的序列 $F(x_1) \ldots, F(x_n)$。如果 $\mathcal{L}$ 是 $F(X)$ 上的勒贝格测度，那么支配在 $X$ 上随机选取点的概率测度 $\mu$ 应满足 $F^{\#}\mu = \mathcal{L}$，其中 $F_{\#}$ 是与函数 $F$ 相关的推前算子，满足

$$\mathcal{L}(B) = F^{\#}\mu(B) = \mu(f^{-1}(B)),$$

对每个可测集 $B \subset F(X)$。

**定理 2.1**。设 $X$、$Y$ 为紧致度量空间，且 $F\colon X \to Y$ 为连续函数，其中 $Y = F(X)$。那么，对每个定义在 $Y$ 上的概率测度 $\nu$，都存在一个定义在 $X$ 上的概率测度 $\mu$，使得

$$F^{\#}\mu = \nu.$$

证明。设 $\nu$ 是定义在 $Y$ 上的概率测度，并设 $(\nu_n)$ 是定义在 $Y$ 上的一列离散概率测度，且 $\nu_n \rightharpoonup \nu$ 弱*收敛。每个 $\nu_n$ 均具有如下形式

$$\nu_n = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} \delta_{y_{n,k}}$$

其中 $y_{n,k}$ 是 $Y$ 中的适当点。由于 $Y = F(X)$，我们可以取 $x_{n,k} \in X$，使得 $F(x_{n,k}) = y_{n,k}$，并定义一个定义在 $X$ 上的离散概率测度 $\mu_n$ 如下

$$\mu_n = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} \delta_{x_{n,k}}.$$

于是 $F^{\#}\mu_n = \nu_n$，并且（必要时取子列）可设 $\mu_n \rightharpoonup \mu$ 弱*收敛于定义在 $X$ 上的某个概率测度 $\mu$。现在令 $n \to \infty$ 趋于极限，得到 $F^{\#}\mu = \nu$。□

通常的均匀蒙特卡洛方法包括取 $\mu$ 作为源空间上的勒贝格测度 $X$。在这种情况下，像点往往在 $Y$ 中分布不均，从而使像集的数值识别 $Y$ 质量较差。相反，我们的目标是构造一个测度 $\mu$（的离散近似），以获得分布均匀的像测度 $\nu$，使其尽可能接近 $Y$ 上的勒贝格测度。定理2.1的证明显然是非构造性的，因为像集 $Y = F(X)$ 事先并不已知。因此，我们需要一种构造性方法，通过近似过程得到上述定理中的概率测度 $\mu$。这就是下一节的目标。

为了进一步阐明我们方法的动机，回顾一下 Monge 提出的经典最优传输问题 [19]。给定概率测度 $\eta$、$\nu$，定义在 $Y$ 上，以及成本函数 $c$：求解 $Y \times Y \to [0, \infty]$

$$\inf_{T:Y\to Y} \left\{ \int_Y c(y, T(y)) d\mu(y) : T^{\#}\eta = \nu \right\}. \tag{2.1}$$

当代价仅为欧几里得距离的平方时 $c(y_1, y_2) = \|y_1 - y_2\|^2$，(2.1) 中的下确界称为 Wasserstein-2距离，记作 $W_2^2(\eta, \nu)$。

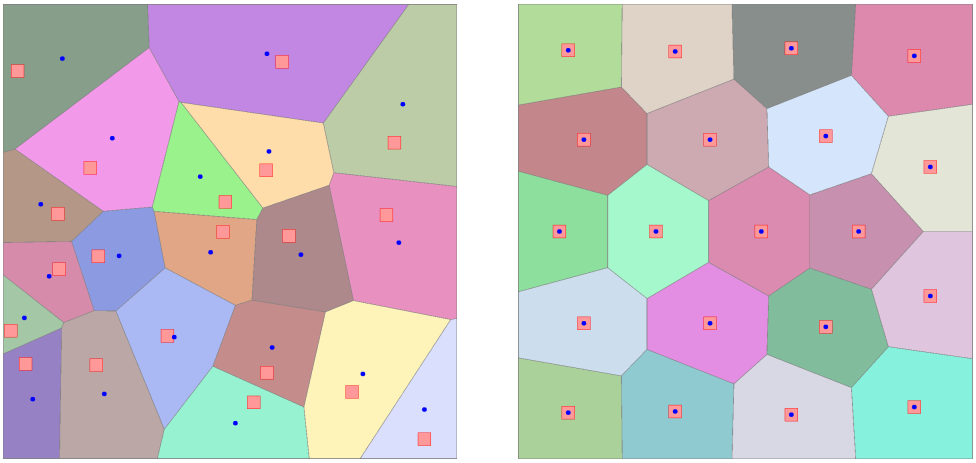

FIGURE 1. 一般沃罗诺伊图（左）与质心 Voronoi 图（右）。点 $(y_i)$ 用正方形表示，沃罗诺伊区域的质心用圆点表示。

我们的目标是用一组离散点逼近图像 $Y = F(X)$ 中的勒贝格测度。若测度 $\eta$ 是离散的，由狄拉克质量之和 $\eta_M = \sum_{i=1}^{M} a_i \delta_{y_i}$ 给出，则已知若 $\eta_M$ 是该问题的解

$$\min\{W_2(\eta_M, \nu) : \#(\mathrm{spt}(\eta_M)) \le M\} \tag{2.2}$$

所谓的选址问题，那么点 $(y_i)_{i=1,\ldots,M}$ 对应于 $Y$ 上的质心 Voronoi 镶嵌。详情请参见 [23, 第 6.4.1 节、方框 6.6、练习39]。

这启发了我们的方法，下面几节将对此进行详细说明：在 $X$ 中寻找样本点 $(F(x_i))_{i=1}^{M} \subset Y$，使其像 $(x_i)_{i=1,\ldots,M}$ $F(Y)$ 能够按照（2.2）中的意义，最佳地表示勒贝格测度，即 $(F(x_i))_{i=1,\ldots,M}$ 在像 $Y$ 中构成质心 Voronoi 镶嵌。

**2.2. 质心沃罗诺伊剖分。** 考虑 $D$ 中的一个紧致连通区域（通常是一个长方体）。给定 $M$ 个点 $y_i \in D$，考虑由 $V_{i=1}^{M}$ 对 $D$ 进行划分所构成的相应沃罗诺伊图，使得

$$V_i = \left\{ y \in D \ : \ |y - y_i| \le |y - y_j| \text{ for every } 1 \le j \le M, \ j \ne i \right\}. \tag{2.3}$$

换句话说，$V_i$ 包含 中所有 $D$ 与 $y_i$ 的距离相比其与其余像 $(y_j)_{j \ne i}$ 更近的点。请注意，按照我们的约定，沃罗诺伊单元是有界的，且是 $D$ 的子集。对于一般的点分布，沃罗诺伊单元的体积通常各不相同，也不一定均匀。图 1 展示了正方形 $[-1,1]^2$ 中与 10 个随机点对应的沃罗诺伊图。Voronoi 点以红色方块表示，沃罗诺伊单元的质心以蓝色点表示。

然而，存在一些特殊类型的沃罗诺伊图，其单元大小更加均匀，称为质心沃罗诺伊剖分 (CVT)。对于这类图，点 $y_i$ （它决定了沃罗诺伊单元 $V_i$ ）与区域 $V_i$ 的质心重合。图1 展示了一个 CVT 示例，可以看出，Voronoi 点与相应单元的质心重合。这种配置下的沃罗诺伊区域大小均匀。CVT 的相关应用包括最优量化、数据压缩、最优求积以及

网格生成。更多详情和参考文献，请参见 [7, 8, 16, 17]。存在一些迭代算法，可以从一般的沃罗诺伊图出发生成 CVT。其中最基本的是劳埃德算法，描述如下。

**劳埃德算法。** 给定迭代次数 $M \geq 1$，依次将 Voronoi 点 $y_i$ 替换为其对应沃罗诺伊单元$V_i$的质心 $c_i$。该算法在 [17]中提出，实现起来十分直接。 [21], [9]研究了劳埃德算法的收敛性质。尽管该算法易于实现，但从实际角度来看，它并非效率最高的算法，原因如下。

在 [8], [16] 中证明了，质心沃罗诺伊镶嵌是能量函数的临界点

$$G(y_1, .., y_M) = \sum_{i=1}^{M} \int_{V_i} |x - y_i|^2 dx. \tag{2.4}$$

事实上， [8]中给出的一个直接计算表明

$$\frac{\partial G}{\partial y_i}(y_1, ..., y_M) = 2|V_i|(y_i - c_i), 1 \leq i \leq M \tag{2.5}$$

其中 $c_i$ 是 $V_i$的质心， $1 \leq i \leq M$。为更直接地确定梯度，可以考虑以下替代公式:

$$\begin{aligned} G(y_1, .., y_M) &= \int_D |x|^2 \, dx + \sum_{i=1}^{M} \left( -2y_i \cdot \int_{V_i} x \, dx + |y_i|^2 |V_i| \right) \\ &= \int_D |x|^2 \, dx + \sum_{i=1}^{M} |V_i|(|y_i|^2 - 2y_i \cdot c_i). \end{aligned}$$

注意，二次项是常数，可以忽略，从而得到一个简化的能量函数。

根据梯度公式（2.5），劳埃德算法可视为一种梯度下降算法，用于最小化能量（2.4），且无需进行步长控制[8]。文献 [7], 探讨了用于提升劳埃德算法收敛速度的加速技术，其中讨论了一种牛顿算法。对于数量较少的沃罗诺伊单元，这种方法效率较高，但当 $M$较大时，计算开销很大。

数值优化实践中普遍认为，梯度下降算法在病态问题上的收敛速度较慢 [20]。对于大规模问题，诸如低内存 BFGS 算法（lbfgs）这样的拟牛顿方法 [20,第 7]章 [16]采用了这种拟牛顿方法来最小化（2.4），从而提供了一种更快的质心沃罗诺伊剖分计算方法。众所周知，质心沃罗诺伊剖分不一定唯一；另一方面，通过变分过程得到的质心沃罗诺伊剖分具有更好的稳定性，这一点已在文献 [16]中指出。因此，寻找质心沃罗诺伊剖分的另一种方法如下。

**变分质心 Voronoi 镶嵌。** 使用拟牛顿算法数值最小化能量（2.4）。基准测试见 [16] 表明，这种算法比劳埃德算法更高效。

### 2.3. 使用质心 Voronoi 镶嵌近似 Blaschke-Santal´o 图。

本文旨在提供数值工具，以便近似

Blaschke-Santal´o 图，即映射的像

$$F : X \to \mathbb{R}^d \tag{2.6}$$

其中， $X \subset \mathbb{R}^N$ 是可行参数集，包含上限、下限及其他可能的约束。

给定一个正整数 $M$，考虑一个随机样本集 $x_1, \ldots, x_M \in X \subset \mathbb{R}^N$。正如引言中所强调的，像 $F(x_1) \ldots, F(x_M)$在像集 $F(X) \subset \mathbb{R}^d$中不一定均匀分布。我们的目标是选择点 $x_1, \ldots, x_M$，使其像 $F(x_1) \ldots, F(x_N)$在像集 $F(X)$内均匀分布。

在下文中，我们假设 $F(X)$有界，并考虑 $D$ 一个包围盒，使 $F(X)$严格位于其内部。记 $y_i = F(x_i)$为初始采样的像。显然有 $y_i \in D$。现在考虑与点 $y_i$ 由式(2.3)定义的沃罗诺伊图。由于我们的目标是使这些像分布得更均匀，因此我们寻找点 $y_i = F(x_i)$，使其生成的沃罗诺伊图尽可能接近质心沃罗诺伊剖分。受第 2.2 节回顾的结果启发，我们提出两种近似 Blaschke-Santal´o 图的算法。

**带投影的 Lloyd 算法。** 对于一般的质心沃罗诺伊剖分，Lloyd 算法的实现很简单，只需将点替换为相应的质心。处理布拉施克-桑塔洛图时，对于每个样本 $x_i, i = 1, ..., M$，我们希望将其替换为另一个可行样本 $\bar{x}_i$，使得 $F(\bar{x}_i)$ 是与 $F(x_i)$ 相关联的沃罗诺伊区域的质心。我们面临两个问题：

(a) 给定像集 $F(X)$ 中的一个点 $c$，求一个实现 $c$ 的样本，即求 $x \in X$，使得 $F(x) = c$。(b) 给定一个可能不在像集 $F(X)$ 中的一般点 $c \in \mathbb{R}^d$，求 $x \in X$，使得 $F(x)$ 在某种有待定义的意义上与 $c$ 最接近 。

Bot上述各方面均可通过一个优化问题来处理 ：

$$\min_{x \in X} \|F(x) - c\|. \tag{2.7}$$

当 $X$ 是紧集且 $F$ 至少属于 $C^1$ 问题（2.7）有解，并且可以利用标准数值优化算法高效地求得近似解。

因此，我们得到了以下自然的算法。

**算法1**（Lloyd Blaschke-Santal´o）。 输入：样本数量 $M$，迭代次数 $q$，为图像 $F$（$X$）选择一个包围盒 $D$，容差 $\varepsilon > 0$。初始化：生成 $M$ 个随机样本 $x_i \in X, i = 1, ..., M$循环：对于每次迭代（共 $q$ 次）：

- 计算 $y_i = F$（$x_i$）
- 计算与点 $y_i$ 相关联的受限 Voronoi 图（$V_i$）$_{i=1}^{M}$。计算区域 $V_i, i = 1, ..., M$ 的质心 $c_i$。
- 对于每一个 $c_i$ 求解（2.7），并将 $x_i$ 替换为数值解$x_i$。
- 如果对于每个 $i = 1$，...， $M$我们都有 $\|F(x_i) - F(\bar{x}_i)\| < \varepsilon$则停止。

在我们的实现中以及下文中，问题（2.7）所采用的范数是欧几里得范数。不过，也可以选择其他范数，并可能得到不同的

算法的行为。假设算法1 在给定阈值下收敛$\varepsilon$ 我们得到一组样本配置$(x_i)_{i=1}^M$ 满足:

- 每当 $x_i$ 满足 $V_i$ 的质心 $c_i$ 属于 $F(X)$ 时，我们有 $\|F(x_i)-c_i\|<\varepsilon$。
- 每当 $x_i$ 满足 $V_i$ 的质心 $c_i$ 不属于 $F(X)$ 时，我们有$\|\mathrm{Proj}_{F(X)}(c_i)-F(x_i)\|<\varepsilon$。我们采用投影算子 $\mathrm{Proj}_S(y)=\{z\in S$ 的经典记法: $\|z-y\|$ 是最小的$\}$。特别地， $F(x_i)$ 将是 $F(X)$ 的边界点。

算法1的缺点与 Lloyd 算法相对于变分质心 Voronoi 镶嵌的缺点类似。人们可以将算法1 解释为带投影的不动点算法或梯度下降算法。如下文所述，可以使用拟牛顿方法改进此类算法。

**用于 Blasche-Santal 图的变分质心 Voronoi 镶嵌´图**。与 [16] 类似，我们构造一个最小化问题。我们提出将（2.4）与参数化（2.6）的复合函数最小化。对于给定的样本数 $M$，我们考虑泛函$H$： $X^M\subset(\mathbb{R}^N)^M\to\mathbb{R}$ 定义如下

$$H(x_1,\dots,x_M)=G(F(x_1),F(x_2),\dots,F(x_M)),\tag{2.8}$$

其中 $G$ 在（2.4）中定义。实际计算中，我们使用拟牛顿方法，并结合用于刻画参数集 $X$的界约束和线性约束来最小化 $H$。这类问题可以轻松地使用现有实现处理（`fmincon` 例如 Matlab 中的 Knitro，参见 [5]）。假设在（$F$ 2.6）中定义的函数 $H$ 可微，则

$$\frac{\partial H}{\partial x_i}=DF^T(x_i)\frac{\partial G}{\partial y_i}(F(x_1),\dots,F(x_N))=2|V_i|DF^T(x_i)(F(x_i)-c_i),\tag{2.9}$$

其中 $DF(x_i)\in\mathbb{R}^{d\times n}$ 是 $F$ 在 $x_i$ 处的雅可比矩阵， $c_i$ 是沃罗诺伊区域 $V_i$, $i=1$、...、...、$M$的质心。由此得到以下算法。

**算法2**（变分质心沃罗诺伊剖分 Blaschke-Santal´o）。输入：样本数$M$、迭代次数 $q$、为图像 $F(X)$ 选择包围盒 $D$、容差 $\varepsilon>0$。

初始化：生成 $M$随机样本 $x_i\in X$， $i=1$，.....， $M$优化：利用（2.8）给出的梯度信息最小化：2.9）：

$$\min_{(x_i)\in X^M}H(x_1,...,x_M).$$

在 $X^M$ 上最小化 $H$，将生成像 $F(x_i)$、 $i=1$、.....、 $M$，这些像在 $F(X)$ 中按以下意义均匀分布。

**命题2.2**。假设参数集 $X\subset\mathbb{R}^N$ 是紧致的，且 $F$ 是 $C^1$。设 $x_1^*$、.....、 $x_M^*$在（2.8）上 $X^M$使其最小化，并记 $y_i^*=F(x_i^*)$、 $i=1$、.....、 $M$为相应的像。若$x_i^*$是 $X$的内点，且 $DF(x_i^*)$满秩，则$y_i^*$ 是与$x_i^*$相关联的沃罗诺伊单元的质心。

证明。 若 $x_i^*$是 $X$的内点， $\frac{\partial H}{\partial x_i}=0$。根据 (2.9)，若 $DF(x_i^*)$ 满秩，则 $F(x_i^*)=c_i$，即 $F(x_i^*)$ 是区域的质心 $V_i$。□

**注 2.3**。在实践中，如果命题2.3 不适用，可能会出现以下情况。

(a) 如果 $F(x_i)$ 是 $F(X)$ 的边界点，那么 $F(x_i)$ 未必等于区域 $V_i$的质心 $c_i$ 。(b) 对于 $F(X)$ 的内部点，如果雅可比矩阵 $DF$ 不满秩，则这些点可能表现为边界点。我们在数值模拟中观察到了这一现象。

泛函 (2.8) 的最小化过程十分直接，前提是能够计算与一组点相关联的沃罗诺伊图。我们使用了 `compute RVD`根据 [16] 中的结果开发的 Geogram 库例程。-

https://github.com/BrunoLevy/geogram

优化通过 Matlab/Julia 使用 `fmincon` 或在算法 2中使用 Artelys Knitro 软件进行。下一节将介绍有关优化过程的细节，以及与当前问题相关的更多具体方面。

## 3. Application I: algebraic functions

我们先从一个易于表述、但很快便变得棘手的代数例子入手。对于 $d \geq 2$，考虑由实数元素且取值位于区间 $[-1,1]$ 内的对称 $d \times d$ 矩阵所构成的空间 Sym$_d([-1,1])$。我们运用算法研究 (tr,det) 图（tr 表示迹，det 表示行列式）。更准确地说，考虑映射 $F$ : Sym$_d([-1,1]) \to \mathbb{R}^2$，其定义如下

$$F(A) = (\mathrm{tr}(A), \det(A)). \tag{3.1}$$

我们的目标是针对某个特定的 $d$，确定像集 $J$(Sym$_d([-1,1])$)。

对于 $d = 2$，可以对图给出完整的解析描述；而对于$d \geq 3$，问题则变得棘手。另一方面，我们提出的数值方法高效，并能清晰地描述相应的图。

我们将大小为 $d \times d$ 的对称矩阵表示为 $\mathbb{R}^{d(d+1)/2}$ 中的一个向量，即对角线的串接 $j - i = 0$，1，..... $d-1$。按照这一约定，迹的梯度等于

$$\nabla \mathrm{tr}(A) = (1, 1, ..., 1, 0, 0...0),$$

其中前 $d$ 个元素为零。因此，雅可比矩阵 $DF(A)$ 的秩至少为 1。行列式对矩阵各元素的偏导数是伴随矩阵 adj($A$) 的分量。adj($A$) 中位置 ($j$，$i$) 处的元素等于 $(-1)^{i+j}$ 乘以 $A$ 的 ($i$，$j$) 子式；该子式是从 $A$ 中删去第 $i$ 行和第 $j$ 列后得到的矩阵的行列式。特别地，adj($A$) $=$ det($A$)$I$。

因此，雅可比矩阵 $DF(A)$ 的秩为 1，当且仅当矩阵 adj($A$) 是单位矩阵的倍数。于是 det($A$) $= 0$ or $A$ 也是单位矩阵的倍数。特别地，对于所有对角矩阵，雅可比矩阵 $DF(A)$ 的秩均为 1。接下来，我们详细考察 $d = 2$ 这一情形，在此情形下，(tr，det) 图有解析描述。

**二维情形的分析**。对于 $d = 2$，显然有 tr($A$) $\in [-2, 2]$，其极值在对角元素全都等于 $\pm 1$ 时取得。这表明该图包含于 $[-2, 2] \times \mathbb{R}$。

考虑 $A = \begin{pmatrix} a & c \\ c & b \end{pmatrix}$ 并固定 $q = a + b$。则

$$\det(A) = ab - c^2 \leq ab \leq \frac{1}{4}(a+b)^2 \leq q^2/4.$$

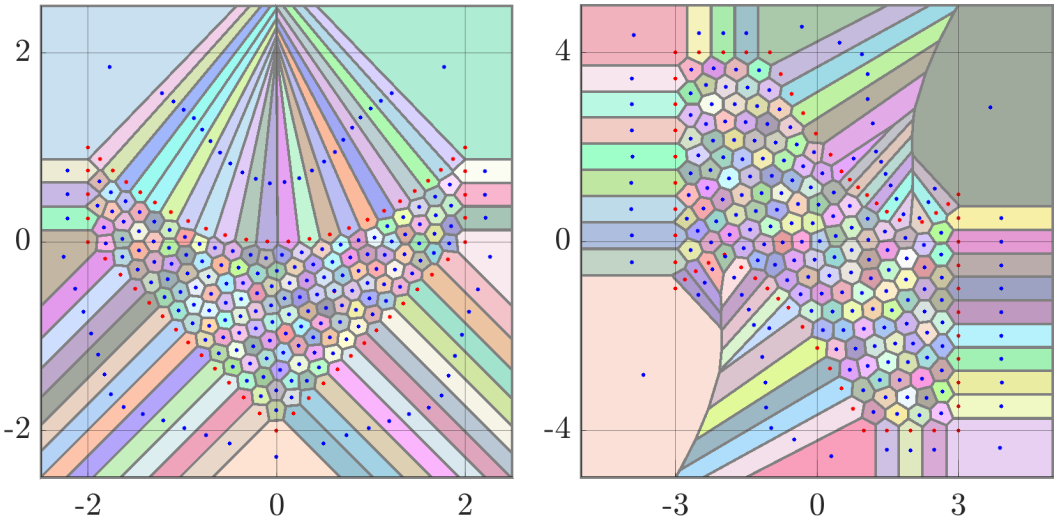


FIGURE 2. 在 Sym 中，(tr,det) 图的近似$_d([-1,1])$，针对以下情形 $d \in \{2,3\}$ 使用算法 1。

因此，该图的上半部分是曲线 $[-2,2] \ni q \mapsto q^2/4$。

我们还有 $ab = a(q-a)$，它在 $[\max\{q-1,-1\},\min\{q+1,1\}]$ 上是凹函数。最小值在区间的某个端点处取得。考察该最小值关于 $q \in [-2,2]$ 的变化，我们发现图的下界由 $q \mapsto |q|-2$ 给出。$A$ 关于变量 $a,b,c$ 的雅可比矩阵当且仅当其为对角矩阵时是奇异的，这对应于上界 $q \mapsto q^2/4$。

**数值算法示例**。接下来，我们将应用第 2 节提出的算法来研究所提出的图。包围盒 $D$ 考虑如下：

- $d=2$: $D=[-2.5,2.5]\times[-2.5,2.5]$
- $d=3$: $D=[-5,5]\times[-5.5]$
- $d=4$: $D=[-6,6]\times[-20,20]$。

我们应用算法 1 来处理 $M=200$ 个样本，最大迭代次数为 $q$ =1000次迭代，容差为 $\varepsilon=10^{-4}$。初始样本在 $[-1,1]^M$中随机选取。结果如图 2所示，所有模拟均在达到最大迭代次数之前完成。我们有以下观察：

- 所提出的方法即使在样本数相当少的情况下，也能成功地近似 Blaschke-Santal´o 图。在迭代过程结束时，样本的像均匀分布于像 $Y_d$ =$F$ (Sym$_d([-1,1])$)。
- 图中内部样本的像 $Y_d$ 接近相应沃罗诺伊单元的重心。
- 像 $y_i$ 对应于位于 $Y_d$ 边界上的样本，对应的沃罗诺伊单元 $V_i$中，$y_i$ 与相应质心 $c_i$ 之间的距离较大。

接下来，我们对2 算法应用于 $M=200$ 个样本。使用软件 Artelys Knitro 执行带约束的数值优化问题，并采用 `active-set`算法。初始样本在 $[-1,1]^M$范围内随机选取。迭代次数上限设为 1000，最优性判据容差设为 $10^{-8}$。所有模拟在这些设置下均达到了最大迭代次数

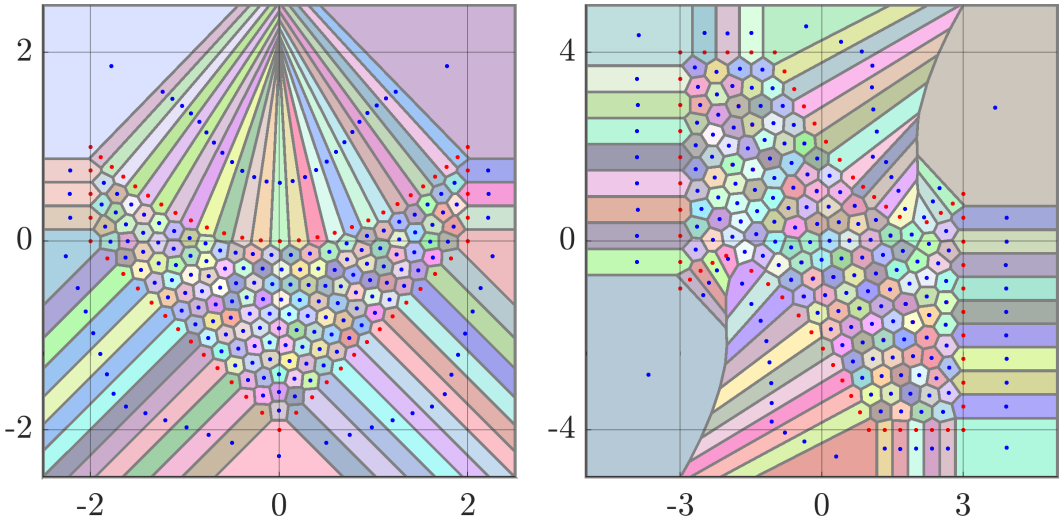


FIGURE 3. Sym中(tr$_d$,$[-1,1]$det) 图的近似，针对 $d \in \{2,3\}$ 种情况使用算法2。

| | 算法1 算法2 | |
|---|---|---|
| $d=2$ | 19.249278 | 19.246159 |
| $d=3$ | 218.595970 | 218.479052 |
| $d=4$ | 2359.898079 | 2356.123844 |

TABLE 1. 图2.4中的能量比较：算法经过1000次迭代后1、2 在图2、3中所示最终配置下的能量。

约束下。结果见图3。可以得出类似的观察结果；再次说明，使用 200 个分布均匀的样本可以非常准确地近似这些图。

函数2.4在两种算法的最优配置下进行求值，结果见表1。显然，算法2 得到的能量更低，因为该算法着重于降低目标值。此外，与劳埃德算法使用的反梯度下降方向相比，使用拟牛顿下降方向已知能够加快收敛。另一方面，劳埃德算法可以大幅调整优化变量（每个样本都会被替换为尽可能接近相应质心的另一个样本）；当应用于初始随机配置或函数2.4变化过于缓慢的区域时，这一特点很有优势。

关于计算成本，算法 1（在我们的直接实现中）计算成本更高，可能是因为每次迭代都需要求解大量规模较小的优化问题（2.7）。算法 2 每次迭代（全局或线搜索）只需计算一个受限 Voronoi 图，并评估相应的成本函数及其梯度。

直接将所提出的算法应用于大量样本效率较低，因为收敛速度较慢。下文提出一种多重网格策略，以加快收敛。

## 4. Practical aspects: re-centering, multi-grid

在许多数值应用中，常采用多重网格策略来加速模拟。首先在粗网格上进行初始模拟。随后细化离散化，并将当前数值优化器插值到新网格上，作为新一轮优化过程的初始化。重复细化过程，直到达到所需的精度。

我们打算采用下文所述的类似策略。给定一点 $y = F(x) \in F(X)$，我们在 $X$ 中寻找其他点 $(z_i)_{i=1}^k$，使得 $F(z_i)$ 与 $F(x)$ 对$i = 1, ..., k$而言接近 。一种自然的想法是，在 $x$ 周围找到一个椭球，将其映射到 $F(x)$ 周围的$d$维球面。然而，如果 $x$ 是 $F(X)$ 的边界点，就无法找到这样的椭球。不过，如果参数空间的维数 $N$ 大于像的维数 $d$，那么雅可比矩阵 $DF$ 很可能是非奇异的，从而可以在保持像不变的同时，将该点移入约束集 $X$ 的内部。下文将详细阐述这一想法。

**4.1. 重新中心化过程。** 假设 $X = \prod_{i=1}^N [a_i, b_i]$，且 $x_0 \in X, y_0 = F(x_0)$ 满足 $DF(x_0)$ 满秩。隐函数定理意味着，$\{F(x) = y_0 : \ x \in X\}$ 在 $x_0$ 附近局部是一个维数为 $N - d$ 的 $C^1$ 超曲面。假设 $N > d$（在我们的应用中始终如此），若 $\ker F(x_0)$ 未包含于 $x_0$ 处 $\{F(x) = y_0\}$ 的切空间中，则总能找到 $x$，使其位于 $X$ 的内部，且满足 $F(x) = F(x_0)$。特别地，若 $x_0$ 位于 $X$ 的边界上，我们就能在 $X$ 的内部找到另一个具有相同像的元素。

在实际应用中，我们求解如下形式的问题

$$\min_{F(x)=F(x_0)} \left( \sum_{i=1}^N (x^i - 0.5(a_i + b_i))^p \right)^{1/p}. \tag{4.1}$$

Matlab 中可用的通用软件，例如 `fmincon`，能够实现非线性约束 $F(x) = F(x_0)$。幂 $p$取足够大（$p = 10$实际应用中），使得 $x$ 的坐标与 $X$ 的中心坐标之间的最大差异尽可能小。问题 (4.1) 对于前文提出的代数应用而言，计算成本很低。

4.2. **多网格过程。** 第 1和 2 节中提出的算法2 在样本数量较大时可能收敛缓慢。当随机样本主要集中在 Blaschke-Santal´o 图的某些特定区域时，这一点尤其成问题。因此，我们希望找到方法，扩充算法 1 或 2 给出的样本集，初始样本数量则相对较少。下面提出两种细化过程。

**(a) 当前样本周围的球面。** 假设 $N > d$。对于满足 $x_0$ 的点 $DF(x_0)$ 若非奇异，则使用 (4.1) 对其重新居中。首先计算奇异值分解

$$DF(x_0) = USV^T,$$

其中 $U \in \mathbb{R}^{d\times d}$、$S \in \mathbb{R}^{d\times N}$、$V \in \mathbb{R}^{N\times N}$。矩阵 $U$ 和 $V$ 是酉矩阵，而 $S$ 是对角矩阵，其对角线上包含奇异值。假设 $DF(x_0)$ 非奇异，则 $S$ 中的对角元素均非零。此外，若 $(u_i)_{1\le i\le d}$，$(v_j)_{1\le j\le N}$ 分别是 $U$ 和 $V$ 的列，且 $s_i$、$1 \le i \le d$ 是奇异值，则有

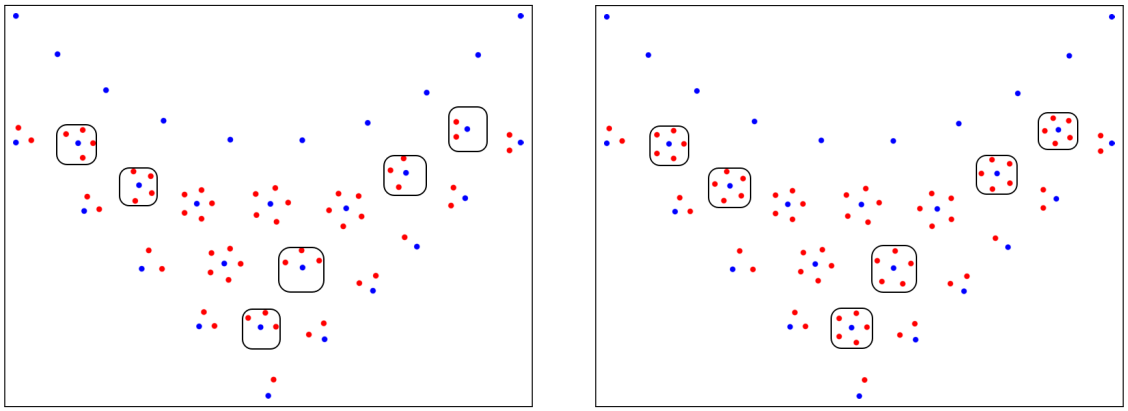

FIGURE 4.细化过程：在重新定心之前应用时，无法在像中的所有内部点周围添加所需数量的点。（左）重新定心后，多网格过程对所有内部点均成功。（右）

分解

$$DF(x_0) = \sum_{i=1}^{d} s_i u_i v_i^T.$$

记$V$为一个矩阵，其列为 $V$ 的前 $d$ 列，并记 $S$ 为一个对角矩阵，其对角线上为 $1/s_i$ 。考虑作为 $V \cdot S \cdot U$的列的向量 $w_i$、$1 \le i \le d$。那么这些向量满足 $DF$（$x_0$）$w_i = e_i$，$i \le i \le d$ 其中（$e_i$）$_{i=1}$，.....，$_d$ 为标准基。考虑矩阵 $W$，其列为$w_i$、 $i = 1$、.....、 $d$。对于 $k \ge 3$，考虑$\theta_j$个均匀分布点 $k$ （$\binom{k}{j=1}$）位于 $\mathbb{S}^{d-1}$ 中，并考虑点 $z_j = x_0 + rW\theta_j$，其中 $r > 0$ 为足够小的半径。实际上， $r$ 等于像 $F$（$x_i$）之间最小距离的三分之一。在点 $z_j$ 中，我们只选择属于 $X$的点。如果 $x_0$ 是 $F$（$X$）的边界点，则点 $z_j$、 $j = 1$、.....、 $d$中可能只有少数满足条件。

每当需要进行细化时，对于奇异值高于某一阈值（$10^{-3}$ 在我们的实现中）的 $DF(x_i)$，都会对每个样本点（$x_i$）$_{i=1}^{M}$ 重复上述过程。

在图 4 中展示了上述方法的一个应用示例。我们采用算法 2给出的结果。在优化过程结束时，一些样本的像可能位于 $X$的边界上。直接应用多网格过程，尝试在当前样本周围的圆上添加点，得到图 4左图所示的结果。对于 $F(X)$ 内部的某些点，由于相关样本位于 $X$的边界上，算法无法添加所需数量的点。在右图中，应用细化过程之前先进行了重新定心。对于 $F(X)$ 内部的所有点，算法都成功添加了规定数量的额外样本，其像接近先前的像。可以观察到，对于上边界（在本例中对应于奇异雅可比矩阵），没有添加任何点，因为无法应用上述过程。

**（b）德劳内三角剖分**。这些三角剖分与沃罗诺伊图密切相关，其计算是计算几何中的标准方法。

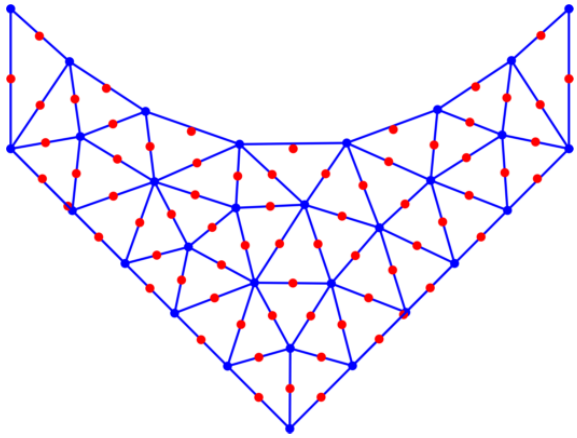

FIGURE 5. 通过投影德劳内三角剖分中某些三角形边的中点进行细化的策略。

德劳内三角剖分是沃罗诺伊图的对偶图，德劳内三角形的外接圆圆心是沃罗诺伊图的顶点。

给定一组样本 $(x_i)_{i=1}^M$ 及其对应的像 $y_i = F(x_i)$, $i = 1, \ldots M$，首先计算 $(y_i)_{i=1}^M$的德劳内三角剖分 $\mathcal{T}$。接下来，选取 $\mathcal{T}$中三角形的所有边。对于每条这样的边，取其中点 $y_m$ 并求解问题

$$\min_{x \in X} \|F(x) - y_m\|. \tag{4.2}$$

如果最小化（4.2）成功，则解 $x_m$ 是一个满足 $F(x) = y_m$的样本。如果 $y_m$ 不属于 $F(X$，那么最小化问题仍会生成一个样本，使其尽可能接近 $y_m$。有两个问题促使我们仅针对 4.2中某些特定边求解（ $\mathcal{T}$。

- 当 $F(X)$ 是非凸的时，德劳内三角剖分 $\mathcal{T}$会包含不属于 $F(X)$的三角形。通常，这类三角形有一个钝角，且有些边明显长于其他边。
- 某些区域的样本可能比其他区域更加密集。因此，对于长度相较于平均长度过短的边，我们选择不将相应的中点添加到图中。

实际中，我们计算 $\ell$ 中三角形边的平均长度 $\mathcal{T}$，并对长度处于4.2范围内的边的中点求解方程（ $[0.5\ell, 1.5\ell]$。图5 展示了同一测试案例下这一细化过程的结果，与图4所示案例相同。

4.3. **全局算法与数值示例**。 综合考虑前述因素后，我们采用以下实用方法。具体而言，我们结合算法1、2 以及细化策略的优点。算法2 将持续运行，直至满足收敛准则或达到最大迭代次数。

**算法3** (Blaschke-Santal´o 多网格近似)。 输入： $M$ - 初始样本数，最大迭代次数 $q_1 \in [20, 100]$ 用于算法1 和 $q_2 \in [1000, 2000]$ 用于算法 2，细化次数 $n_{\text{ref}}$，每次细化时在每个样本周围添加的点数 $n_{\text{add}}$。

初始化：选择 $M$ 个随机样本，位于 $X$。运行算法 1共 $q_1$次迭代，然后运行算法 2。
对于 $k = 1$ 到 $n_{\text{ref}}$，执行：

- 多重网格：执行以下操作之一。– 应用重新中心化过程，对每个由此得到的样本求解 (4.1)。应用第一个细化过程，在每个样本周围最多添加 $n_{\text{添加}}$ 个点。– 或者，使用德劳内三角剖分中三角形的中点来寻找新的样本点。

- 运行算法 1，执行 $q_1$ 次迭代。
- 运行算法 2。

先运行算法 1 几次迭代，再运行算法 2 ，这是因为在初始配置并非最优时，劳埃德算法可能会产生较大的跳跃。

下面我们展示算法3 在实践中如何近似布拉施克-桑塔洛´图。首先，我们将其应用于、图的情形 $d = 2$。我们从一组包含 30 个样本的数据开始，并进行三次细化。模拟所用的样本数依次为 30、104、464 和 2423。图6展示了初始化以及算法各连续阶段的结果。

我们也对 $d \in \{3, 4\}$进行了类似的模拟。最终得到的优化构型分别包含 2684 个和 2043 个单元，如图7所示。

在目前为止展示的所有结果中，沃罗诺伊单元的质心以蓝色显示，样本的像以红色显示。在某些情况下，对于$d \in \{3, 4\}$ ，我们可能会观察到一些内部 Voronoi 点，它们与沃罗诺伊单元的质心并不重合。这种情况尤其容易出现在由 $[-1, 1] \ni t \mapsto (dt,\ t^d)$参数化的曲线附近；这些曲线对应于对角矩阵，而此处 (tr, det) 的雅可比矩阵是奇异的。这些点会在图的内部产生边界行为。

**4.4. 从沃罗诺伊图中提取 Blaschke-Santal´o 图。**只需选取那些像远离其对应沃罗诺伊单元质心的样本，即可恢复 Blaschke-Santal´o 图的边界点。不过，从这些点中提取多边形并非易事。我们采用以下方法，根据数值结果绘制 Blaschke-Santal´o 图：

- 如果所得图是凸的，只需对样本的像取凸包即可。

- 由于优化后的样本构成质心 Voronoi 镶嵌（边界点除外），我们利用其对应的德劳内三角剖分，该剖分覆盖整个图的凸包。然而，位于图外部的三角形近乎扁平（具有很小或很大的角）。我们从德劳内三角剖分中剔除这类三角形（阈值视具体情况设定）。

所得图见图 8。

**4.5. 图的子集。** 在某些情况下，我们需要更详细地了解 Blaschke-Santal´o 图的某些部分。与其增加图中所有位置的点密度，不如只关注感兴趣区域。

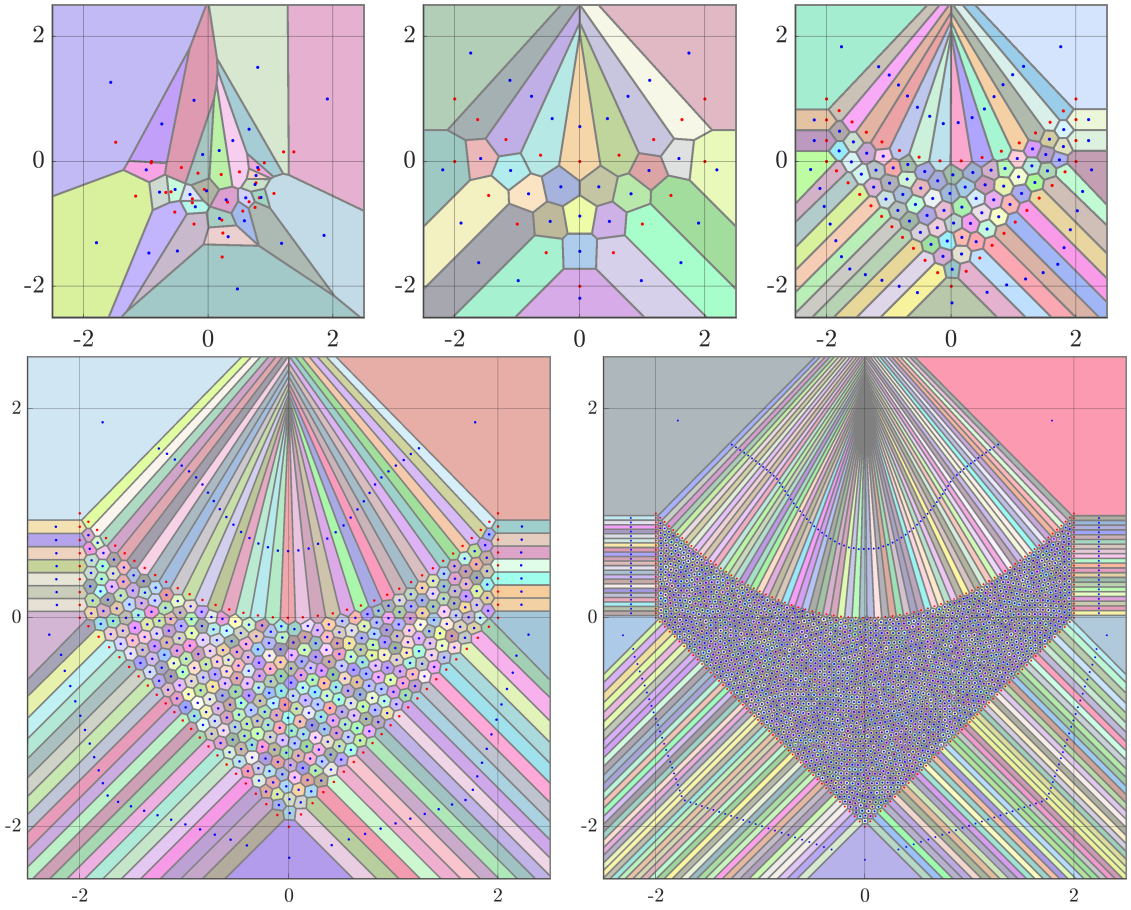


FIGURE 6. 每次细化后的 $d = 2$初始化和优化配置。模拟分别使用了 30 、 104 、 464 和 2423 个样本。

假设我们感兴趣的区域为 $F(X) \cap B(y,\ r)$。那么，我们可以在之前介绍的所有算法中加入额外的约束

$$|F(x_i) - y| \leq r. \tag{4.3}$$

实际的困难在于，约束（4.3）是非线性的。像`fmincon` 和 Knitro 这样的通用软件允许使用非线性约束。如果显式计算非线性约束的梯度，优化算法的表现会有所改善；在我们的情形下，这是可以做到的。然而，加入非线性约束（4.3）会降低所提算法的速度。由于我们只关注目标图的一部分，因此所需样本数量较少，这弥补了速度上的损失。

举例来说，我们展示了包含在圆盘 $B((3.9,1)\ 0.2)$ 内、对应于 $d = 4$ 的（tr,det）图。我们希望探索该图此区域内的极值矩阵，因为边界参数化似乎在这里发生了变化。

4.6. **关于** $d \in \{3, 4\}$。 我们已经看到，情形 $d = 2$ 可以对（tr,det）图的边界给出明确刻画。对于高维，这样的描述难以获得。尽管如此，通过识别图 7 中所示图的极值矩阵，我们能够猜想出相应边界的精确参数化。

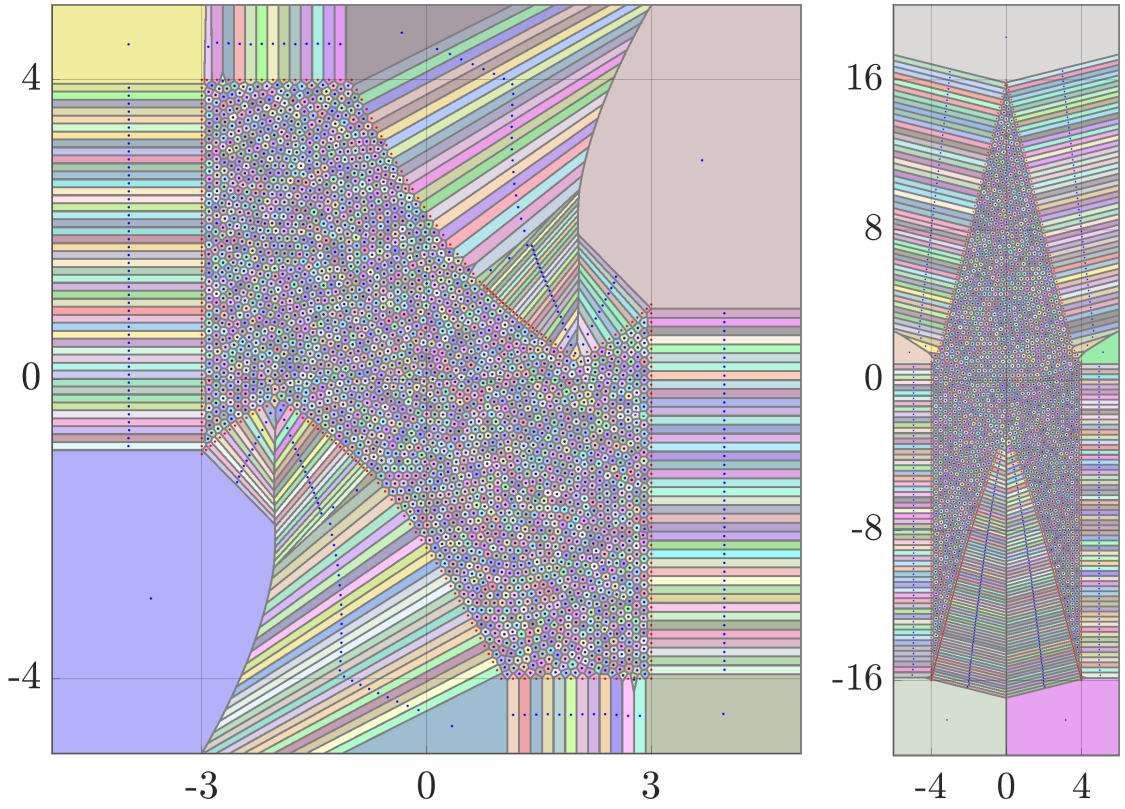


FIGURE 7. 算法 3 给出的结果，适用于 $d = 3$ （2684 个单元）和 $d = 4$ （2043 个单元）。

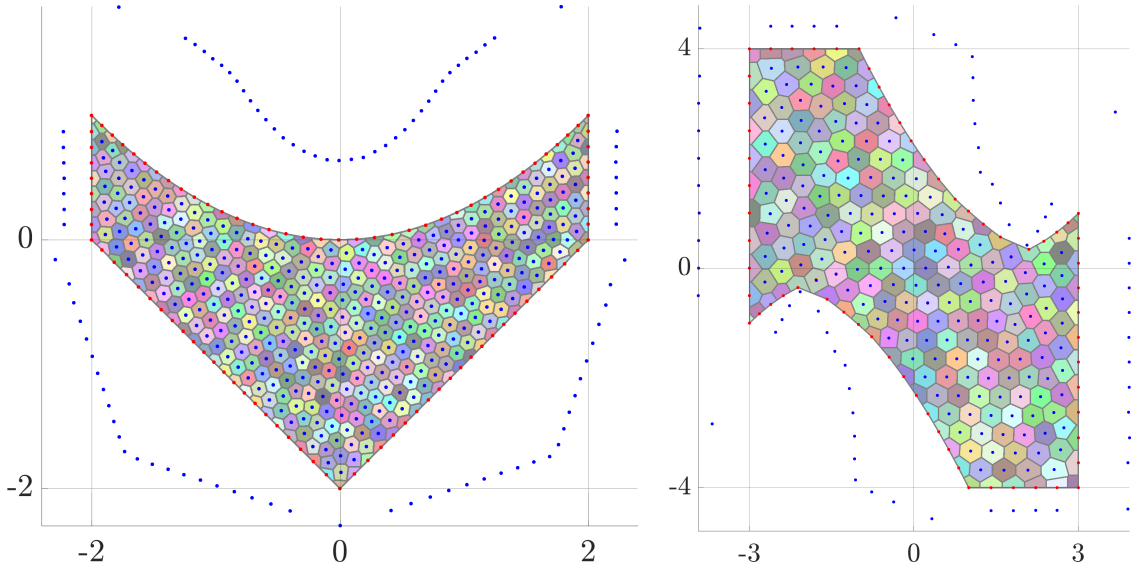


FIGURE 8. 通过从关联的 Delaunay 三角剖分中剔除“扁平”三角形，从最优 Voronoi 镶嵌中提取 Blaschke-Santal´o 图。

我们简要介绍 $d = 3$ 的极值矩阵，以及边界的相应参数化：

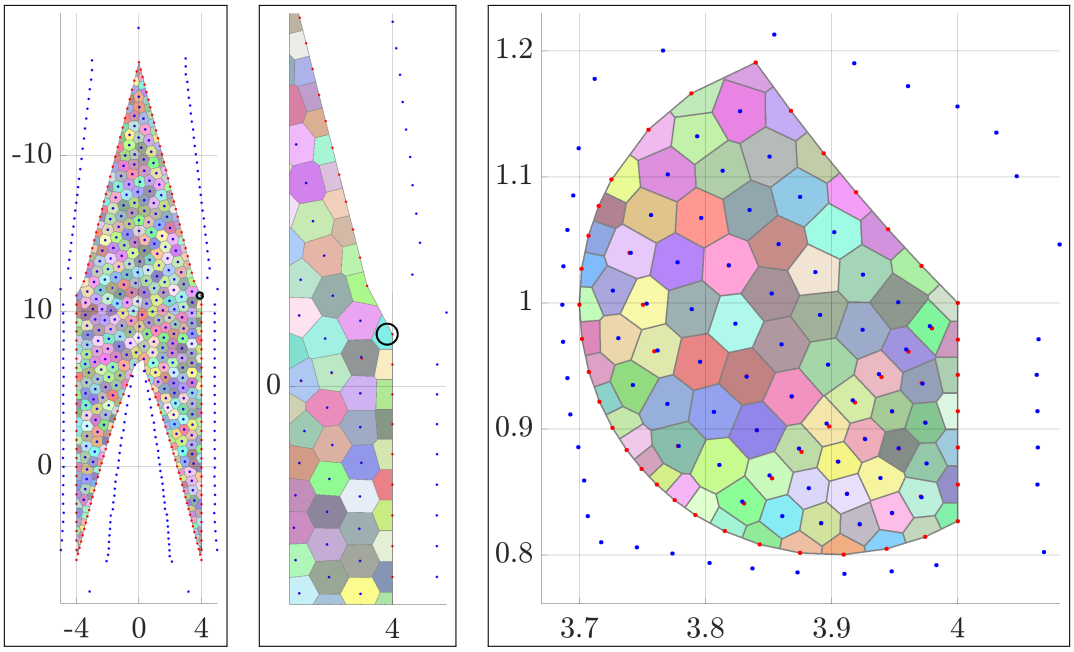


FIGURE 9. 布拉施克-桑塔洛´图（针对 (tr,det)， $d = 4$ （左侧），以点 (4,1)（中心）为中心放大。图形限制在圆盘$B((3.9, 1)0.2)$ 内（对应于中心图像中的小圆），使用算法中的约束（4.3）得到（右侧）。

- 左边界： $A = \begin{pmatrix} -1 & a & a \\ a & -1 & -a \\ a & -a & -1 \end{pmatrix}$ : $[-1, 1] \ni x \mapsto (-3, -2x^3 + 3x^2 - 1)$
- 右边界： $A = \begin{pmatrix} 1 & a & a \\ a & 1 & a \\ a & a & 1 \end{pmatrix}$ : $[-1, 1] \ni x \mapsto (3, 2x^3 - 3x^2 + 1)$
- 上边界第 1 部分： $A = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & a \end{pmatrix}$ : $[-1, 1] \ni x \mapsto (-2 + x, \ 4)$
- 上边界第 2 部分： $A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 1 & a & -1 \\ -1 & -1 & a \end{pmatrix}$ : $[-1, -0.125] \ni x \mapsto (2x + 1, \ x^2 - 2x + 1)$
- 上边界第 3 部分： $\begin{pmatrix} a & -1 & -1 \\ -1 & a & 1 \\ -1 & 1 & a \end{pmatrix}$ : $[0.25, 2/3] \ni x \mapsto (3x, \ x^3 - 3 * x + 2)$
- 上边界部分 4： $[2/3, 1] \ni x \mapsto (3x, \ x^3)$

对 $d = 4$ 也可以作出类似观察。由于对称性，我们仅详细说明边界右半部分：

- Right boundary: $\begin{pmatrix} 1 & -a & -a & a \\ -a & 1 & -a & a \\ -a & -a & 1 & a \\ a & a & a & 1 \end{pmatrix}$ : $[-1, 1] \ni x \mapsto (4, -3x^4 - 8x^3 - 6x^2 + 1)$

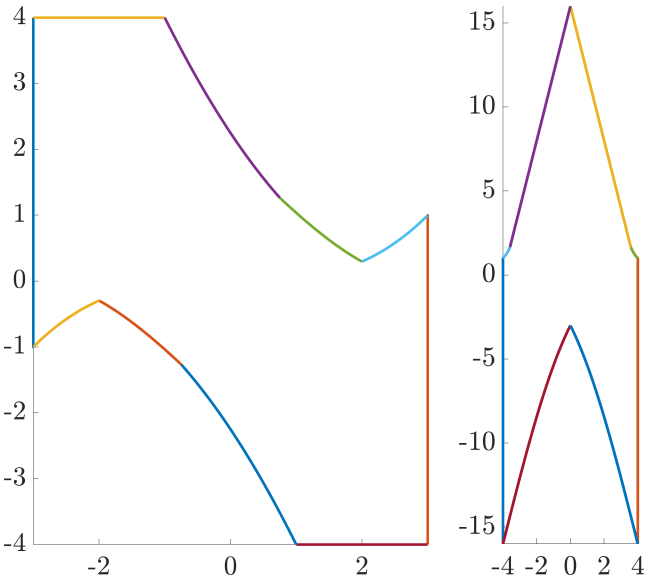


FIGURE 10.（tr，det）（Sym$_d$([−1, 1]) 图边界的直接参数化，适用于 $d = 3$，4。

- Bottom right: $\begin{pmatrix} a & -1 & 1 & 1 \\ -1 & a & 1 & 1 \\ 1 & 1 & a & -1 \\ 1 & 1 & -1 & a \end{pmatrix} : [-1, 1] \ni x \mapsto (4x, x^4 - 6x^2 - 8x - 3)$
- Top right-part 1: $\begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & a & -1 & -1 \\ 1 & -1 & a & 1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 \end{pmatrix} : [-1, \frac{3-\sqrt{2}}{2}] \ni x \mapsto (2x + 2, 8 - 8x)$
- Top right-part 2: $\begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & 1-a \\ 1 & a & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 1 & 1 \\ 1-a & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} : [2 - \sqrt{2}, 1] \ni x \mapsto (x + 3, -(x - 2)(x^2 - 2x + 2))$

所得的参数化边界见图 10。

4.7. **高维。** 所提出的算法可以直接推广到三维图。所有算法方面均保持不变。三维受限 Voronoi 图仍使用 Geogram 库进行计算 [16]。矩阵的（tr $\lambda_1\lambda_2 + \lambda_2\lambda_3 + \lambda_3\lambda_1$，det）图，其中矩阵属于 Sym$_3$([−1, 1])，示例见图 11。与往常一样，$\lambda_1$，$\lambda_2$，$\lambda_3$ 表示该 $3 \times 3$ 矩阵的特征值。

4.8. **与蒙特卡洛方法的比较。** 研究 Blaschke-Santal´o 图的最简单方法，是生成随机样本并计算相应的像。正如第 2.1 节所强调的，这种选择并不一定会在所需的图中产生均匀分布的像。下面，我们逐步生成固定数量的样本点及其相应的像，并将结果的质量和计算成本与前几节提出的算法进行比较。

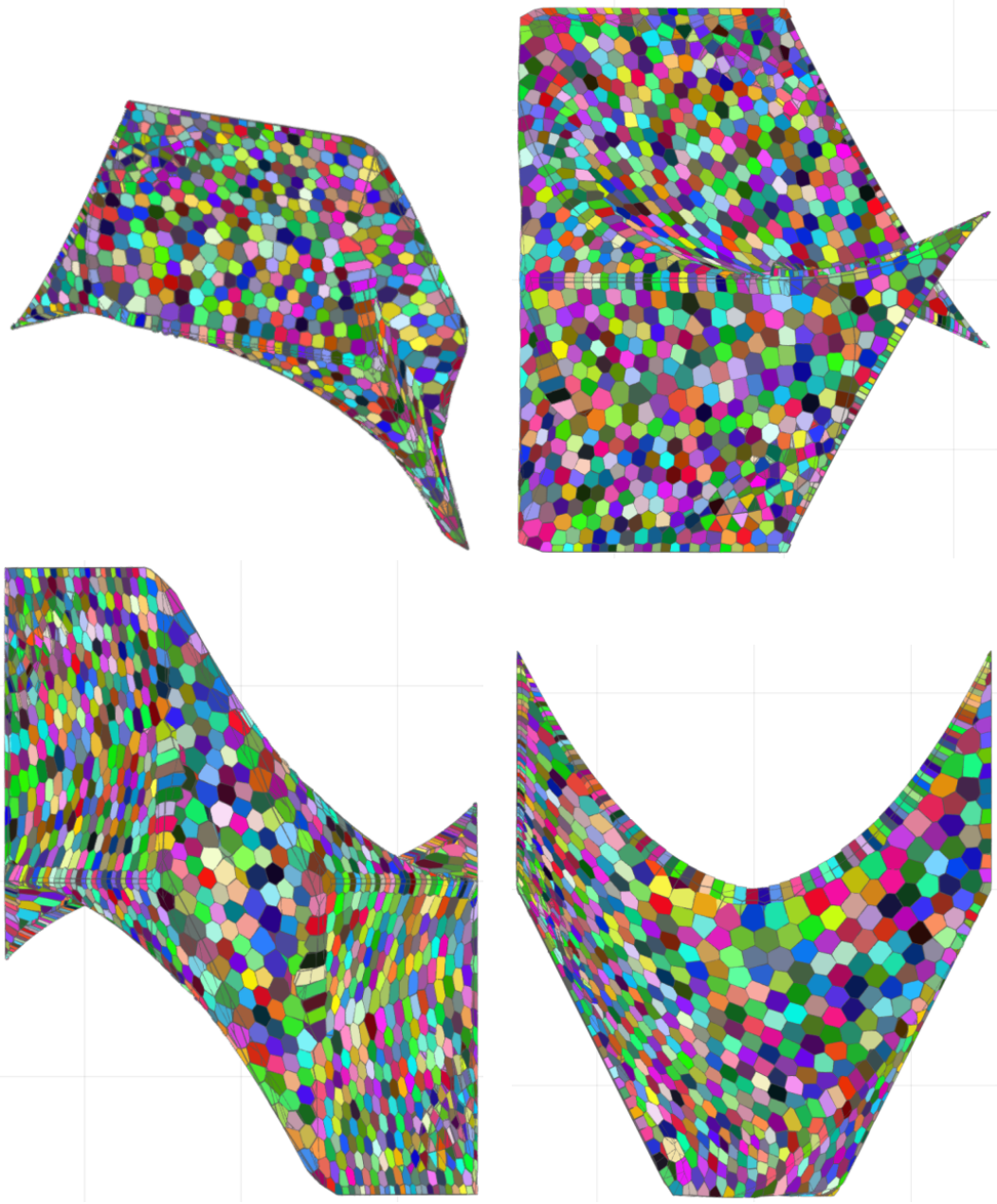

FIGURE 11.三维 Blaschke- Santal´o 图在 $\mathrm{Sym}_3$ 中的 (tr $\lambda_1\lambda_2 + \lambda_2\lambda_3 + \lambda_3\lambda_1$,det) 的不同视图。一般三维视图（左上）、$Oyz$ 视图（右上）、 $Oxz$ 视图（左下）、$Oxy$ 视图（右下）。

.

我们分别考虑 $10^4$ 和 $10^6$ 个 $\mathrm{Sym}_d([-1,1])$ 中的随机样本，计算（3.1），并在 $\mathbb{R}^2$ 中绘制相应的点。 $d \in\{2,3,4\}$ 的相应结果如图 12所示。利用前几节提出的算法计算得到的 Blaschke-Santal´o 图表示为多边形，而随机样本表示为点。对这些图进行缩放，使其在水平方向和垂直方向上具有相同的宽度。

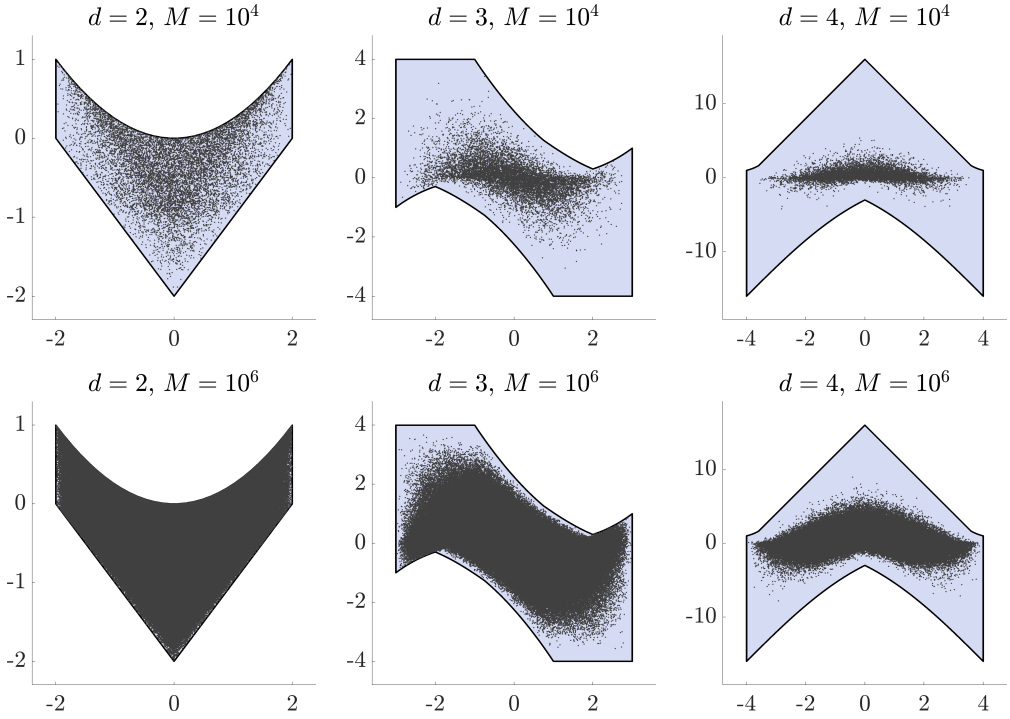


FIGURE 12. 生成 $10^4$ 以及（分别） $10^6$ Sym 中的随机矩阵$d([-1,1])$对应的情形 $d \in \{2,3,4\}$，并绘制由函数（ 3.1 ）给出的相应像。

我们注意到，蒙特卡罗方法效率低下，尤其是在维数增加时。对于 $d \in \{3,4\}$，使用一百万个随机样本仍无法准确描述该图。

相比之下，我们分析了部分模拟的计算成本；这些模拟对 Blaschke-Santal´o 图给出了高质量近似。图 2 和 3 中的模拟使用 $M = 200$ 个样本，迭代次数上限为 1000 次。对于算法 2，最多进行 $200 \times 1000$ 次函数求值和梯度求值。使用 `Geogram` 计算沃罗诺伊图非常高效。算法 1 在将质心投影到样本空间时会额外进行函数求值，但计算量仍处于同一数量级：$O(M \times Q)$，其中 $Q$ 是迭代次数。

## 5. APPLICATION II: EXAMPLE FROM CONVEX GEOMETRY

现在，我们聚焦于凸几何中的一项应用。其他一些研究利用 Blaschke-Santal´o 图考察几何量之间的不等式。其中我们提及 [6], [13], [10], [12], [11]。为了直接应用我们的计算框架，我们考虑一种特殊情形：其中涉及的泛函是光滑的，且相应的图有界。

考虑以下三个量：具有两条对称轴的二维凸形状 Ω 的面积 $A(\Omega)$、周长 $\mathrm{Per}(\Omega)$ 和转动惯量 $W(\Omega)$。由于此时质心位于原点，转动惯量由$W = \int_\Omega |x|^2 dx$给出。

与往常一样，在研究 Blaschke-Santal´o 图时，我们考虑联系这三个泛函的尺度不变量。自然可以考虑：

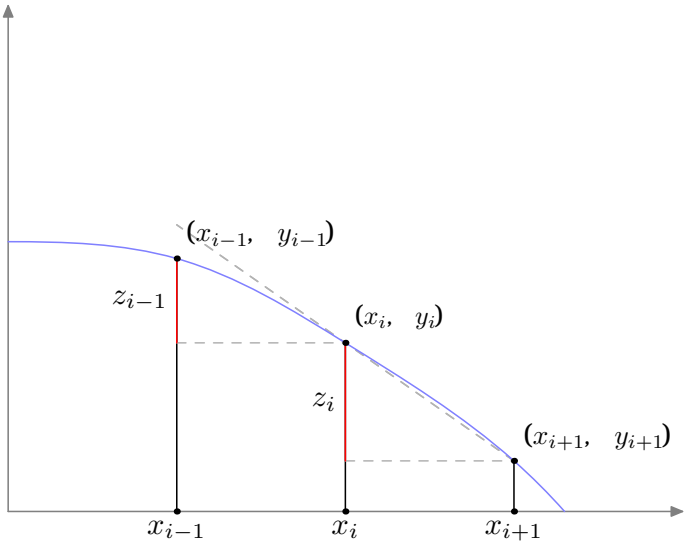


FIGURE 13.利用二阶差分对凹减函数进行参数化。一阶差分 $z_i$ 是递减的。

- 等周比 $A(\Omega)/\mathrm{Per}(\Omega)_2$，其上界为 $\frac{1}{4\pi}$.
- 比值 $A^2(\Omega)/W(\Omega)$，其上界为 $2\pi$。

可以注意到，上文考虑的两个尺度不变比值都在圆盘处取得最大值。关于相应 Blaschke-Santal´o 图的理论细节见 [14]。

我们考虑映射

$$\mathcal{F} : \Omega \mapsto (100A(\Omega)/P^2(\Omega), A^2(\Omega)/W(\Omega)), \tag{5.1}$$

其中加入因子 100，以便使这两个量具有可比性。我们的目标是近似上述映射 $\mathcal{F}$ 的像。

人们提出了多种凸集参数化方法。这里提及超平面 [15], 的交集、使用截断傅里叶级数参数化的支撑函数（见 [1] ），或在离散网格上的取值（见 [3]）。以往提出的方法通常基于对参数集合施加线性不等式约束。为了直接应用我们的框架，采用仅包含边界约束的、更直接的参数化方法会更合适。这促使我们提出一种替代性的、但较为经典的离散化过程。

我们关注具有两条对称轴的凸集。由于我们也处于尺度不变情形，因此只需对凹减函数 $y\colon [0,1] \to \mathbb{R}$进行参数化。给定使用 $q+1$ 个点对 $[0,1]$ 进行的均匀离散化，注意，若 $y_0, ..., y_q$ 是在 $x_i = i/q, i = 0, ..., q$ 处取样得到的凹减函数样本，则：

- 一阶差分为 $z_i = y_i - y_{i+1},\ \ i = 0,\ \ldots\ldots q-1$ 递增
- 二阶差分 $\rho_{i+1} = z_{i+1} - z_i,\ \ i = 0,\ \ldots\ldots q-2$ 非负

e.

反过来，给定非负数值 $\rho_i$，可以构造出一组样本，使其对应的凹减函数的二阶差分为 $\rho_i$ 。因此，我们在参数化中取 $(\rho_i)_{i=1}^{q-1}$ 、 $\rho_0 := z_0$ 和 $y_q$ 作为变量。

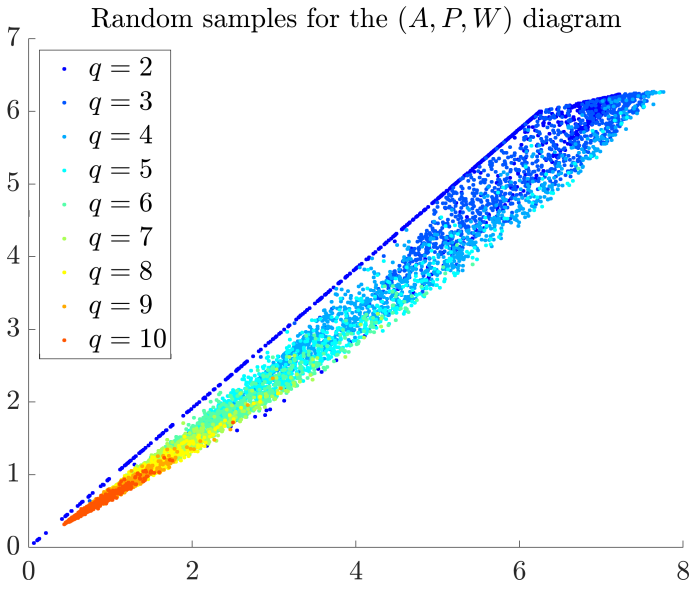


FIGURE 14. 使用 $q$ 个参数进行随机采样，以生成凸形状的 $(A, P, W)$ 图，$q \in \{2, 3, ..., 10\}$。

我们立即得到以下等式

$$y_i = y_q + \sum_{j=i}^{q-1} z_i, \qquad z_i = \sum_{k=0}^{i-1} \rho_k, \qquad i = 0, ..., q-1,$$

这表明，对于 $i = 0, \ldots, q-1$，$y_i$ 可以用 $y_q$ 和 $(\rho_i)_{i=0}^{q-2}$ 表示，具体如下：

$$\begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \ldots \\ y_{q-1} \end{pmatrix} = y_q + A \begin{pmatrix} \rho_0 \\ \rho_1 \\ \ldots \\ \rho_{q-1} \end{pmatrix} \tag{5.2}$$

其中 $A = (A_{ij})$ 由 $A_{ij} = q + 1 - \text{最大值}\{i, j\}$ 当 $1 \le i, j \le q$。离散凸集边界点的坐标为 $(x_i, y_i)$ $i = 0, \ldots, q$，对应第一象限。将它们对称化即可得到其余边界。面积和周长可直接计算。对于转动惯量，我们使用多边形的显式公式，例如见 [24], ，这些公式是格林公式的直接推论。由于所有计算都可以解析地表示为参数的函数，因此所有关注量的偏导数也可以通过解析方式计算。

**（a）随机生成的形状**。给定上述参数化以及一定数量的参数 $q \ge 2$，我们可以生成随机凸形状，并绘制由（5.1）给出的点。我们为 $2 \le q \le 10$ 个参数生成了 1000 个随机形状。结果绘于图14中。可以观察到，$q = 2$ 会在边界上部生成点，而较大的 $q$ 则会生成更靠近原点的点。事实上，随着 $q$ 增大，随机形状生成的点会集中在原点（0，0）附近。

**(b) 使用第 2 节提出的数值算法**。

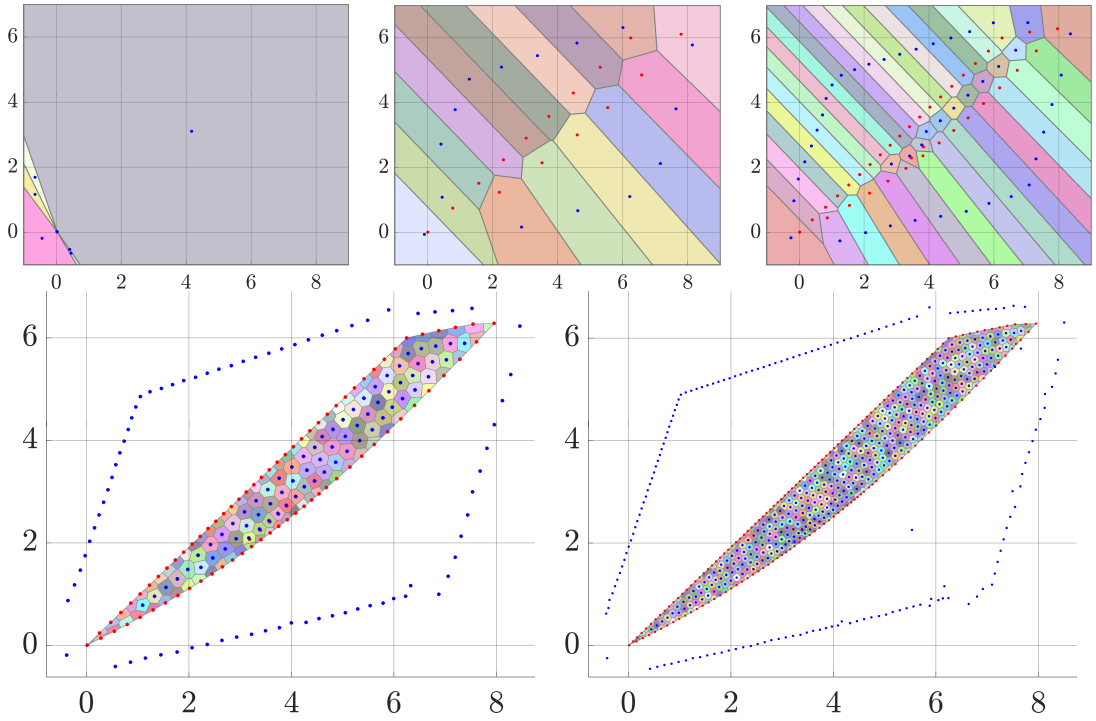

FIGURE 15. （面积、周长、转动惯量）图的数值近似。

我们选择使用（5.2）中的 50 个参数来生成凸形状。我们生成 15 个随机样本，得到非常接近原点的点，如图 15 的第一幅图所示。这些初始点无法提供有关该图几何形状的任何有意义的信息。然而，应用算法 3 后，这些初始样本会均匀分布，如同一图中的第二幅图所示。随后，我们继续这一过程，使用德劳内三角剖分各边的中点向图中添加更多样本。多重网格策略分别使用 15、44、145 和 516 个样本。最终配置在全局迭代过程中使用 $516 \times 50 = 25800$ 个参数。

考察位于布拉施克-桑塔洛图´边界上的形状，如图16所示，我们观察到以下现象：

- 左上边界由菱形构成，这些菱形朝原点方向较为扁平，并逐渐趋向正方形。
- 右上边界由八边形及其他多边形构成，它们逐渐趋向圆盘，对应图的右上角。
- 下边界包含类似体育场形或椭圆的形状。

所提出的基于质心沃罗诺伊剖分的算法，能够非常准确地对该图进行数值描述。与代数情形一样，研究图边界上的形状，有助于深入理解可能的解析界，也可能为开展理论研究、获得完整描述提供指导。关于该图的更多细节见 [14]。

## 6. CONCLUSIONS

我们提出了高效算法，通过生成像均匀分布的样本来近似 Blaschke-Santal´o 图。其关键在于

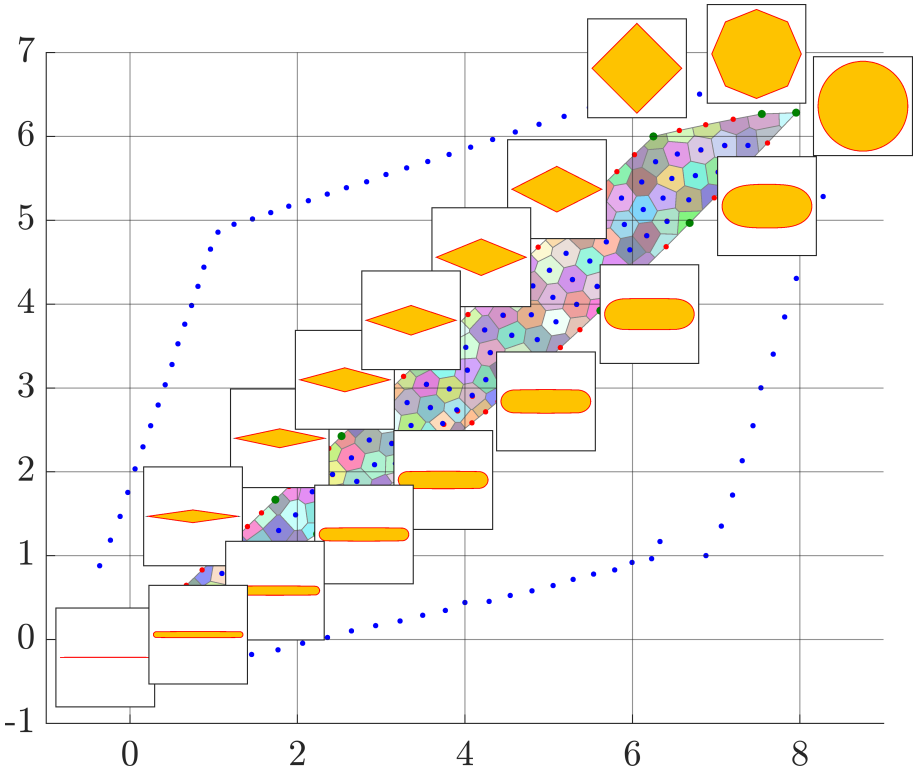


FIGURE 16.对应于（面积、周长、转动惯量）图边界上各点的形状示例。

搜索能够生成质心沃罗诺伊剖分的像。受劳埃德算法以及其中提出的变分方法启发，所提出的算法[16]通过线性代数和形状优化中的示例加以说明。

我们发现，与通常通过生成随机样本的蒙特卡罗方法相比，所提出的算法只需合理的计算成本，便能精确描述 Blaschke-Santal´o 图。采用多重网格策略，可以考虑更多样本，从而进一步改善这些图的描述。

**致谢**。 GB 的工作是项目 2017TEXA3H “梯度流、最优传输与度量测度结构” 的一部分，该项目由意大利研究与大学部资助。该作者是意大利国家高等数学研究所（INdAM）下属的数学分析、概率论及其应用国家小组（GNAMPA）的成员。BB 和 EO 的工作得到 ANR Shapo（ANR-18-CE40-0013）项目的支持。谨向与我们分享初步成果的 [14] 作者致以诚挚谢意。

## REFERENCES

[1] P. R. S. Antunes 和 B. Bogosel。使用支撑函数进行参数化形状优化。《计算与优化应用》，82(1)：107–138，2022。[2] W. Blaschke。关于凸体的一个问题。《德国数学家协会年报》，25：121–125，1916。

[3] B. Bogosel。凸集中的数值形状优化。《应用数学与优化》，（待发表），预印本见 https://arxiv.org。[4] D. Bucur、G. Buttazzo 和 I. Figueiredo。关于拉普拉斯算子的可达特征值。SIAM 数学分析杂志，30(3)：527–536，1999。[5] R. H. Byrd、J. Nocedal 和 R. A. Waltz。K nitro：用于非线性优化的集成软件包。载于《大规模非线性优化》，第 35–59 页。施普林格，2006。[6] A. Delyon、A. Henrot 和 Y. Privat。缺失的（$A$，$D$，$r$）图。格勒诺布尔傅里叶研究所年刊，72(5)：1941–1992，2022。[7] Q. Du 和 M. Emelianenko。计算质心沃罗诺伊剖分的加速方案。数值线性代数及其应用，13(2-3)：173–192，2006。[8] Q. Du、V. Faber 和 M. Gunzburger。质心沃罗诺伊剖分：应用与算法。SIAM 评论，41(4)：637–676，1999 年 1 月。[9] M. Emelianenko、L. Ju 和 A. Rand。$\mathbb{R}^d$中 Lloyd 算法的非退化性与弱全局收敛。SIAM 数值分析杂志，46(3)：1423–1441，2008 年 1 月。[10] I. Ftouhi。关于凸集的 Cheeger 不等式。数学分析及其应用杂志，504(2)：论文编号 125443，第 26 页，2021。[11] I. Ftouhi。关于平面凸集的 P´ólya 不等式。巴黎科学院数学报告，360：241–246，2022。[12] I. Ftouhi。通过数值形状优化对 Blaschke–Santal´ó 图进行最优描述。预印本见 https://hal.science/，2022 年 4 月。[13] I. Ftouhi 和 J. Lamboley。关于体积、周长和第一狄利克雷特征值的 Blaschke-Santal´ó 图。SIAM 数学分析杂志，53(2)：1670–1710，2021。[14] R. Gastaldello、A. Henrot 和 I. Lucardesi。关于面积、周长和转动惯量的 Blaschke-Santal´ó 图。准备中。[15]T. Lachand-Robert 和 E. Oudet。使用凸包方法在凸体内进行最小化。SIAM 优化杂志，16(2)：368–379，2005。[16] Y. Liu、W. Wang、B. L´évy、F. Sun、D.-M. Yan、L. Lu 和 C. Yang。关于质心 Voronoi 镶嵌——能量光滑性与快速计算。ACM 图形学汇刊，28(4)，2009 年 9 月。[17] S. Lloyd。pcm 中的最小二乘量化。IEEE 信息论汇刊，28(2)：129–137，1982。[18] I. Lucardesi 和 D. Zucco。关于扭转刚度和第一狄利克雷特征值的 Blaschke Santal´ó 图。纯粹与应用数学年刊，201：175–201，2022。[19] G. Monge，《关于土方挖填理论的回忆录》。巴黎皇家科学院历史，附同年度的数学与物理回忆录，666–704，（1781）[20] J. Nocedal 和 S. J. Wright。数值优化。施普林格运筹学与金融工程系列。施普林格，纽约，第二版，2006。[21] M. Sabin 和 R. Gray。广义 Lloyd 算法的全局收敛性与经验一致性。IEEE 信息论汇刊，32(2)：148–155，1986 年 3 月。[22] L. A. Santal´ó。关于平面凸图形元素之间不等式的完备不等式系统。数学札记，17：82–104，1959/61。[23] F. Santambrogio。《应用数学家的最优传输》。施普林格国际出版，2015。[24]R. Soerjadi。关于多边形的矩计算及其若干应用。机构知识库，代尔夫特理工大学，1968，见 https://repository.tudelft.nl。

Beniamin Bogosel：应用数学中心，法国国家科学研究中心（CNRS）、巴黎理工学院，巴黎理工学院，91120 帕莱索，法国
beniamin.bogosel@polytechnique.edu
http://www.cmap.polytechnique.fr/~beniamin.bogosel/

Giuseppe Buttazzo：比萨大学数学系，B. Pontecorvo 广场5号，56127 比萨 - 意大利

giuseppe.buttazzo@dm.unipi.it
http://www.dm.unipi.it/pages/buttazzo/

Edouard Oudet：让·孔茨曼实验室（LJK），约瑟夫·傅里叶大学 IRMA大楼，BP 53，数学街51号，38041 格勒诺布尔 Cedex 9 - 法国
edouard.oudet@imag.frhttp://www-ljk.imag.fr/membres/Edouard.Oudet/