Quadratic programming in geometric optimization theory, implementation, and applications

Author(s):
Schönherr, Sven

Publication Date:
2002

Permanent Link:
https://doi.org/10.3929/ethz-a-004448632

Diss. ETH No. 14738

Quadratic Programming in Geometric Optimization: Theory, Implementation, and Applications

DISSERTATION

submitted to the

SWISS FEDERAL INSTITUTE OF TECHNOLOGY
ZURICH, SWITZERLAND

for the degree of
DOCTOR OF TECHNICAL SCIENCES

presented by
SVEN SCHÖNHERR
Diplom-Mathematiker, Freie Universität Berlin, Germany
born on March 17th, 1968, in Berlin, Germany
citizen of Germany

accepted on the recommendation of
Prof. Dr. Emo Welzl, examiner
Prof. Dr. Thomas Liebling, co-examiner
Dr. Bernd Gärtner, co-examiner

2002

Abstract

Many geometric optimization problems can be formulated as instances of linear or quadratic programming. Examples are the polytope distance problem, the smallest enclosing ball problem, the smallest enclosing annulus problem, and the optimal separating hyperplane problem. The resulting linear and quadratic programs share the property, that either the number of variables or the number of constraints is small. This is different from the usual setting in operations research, where both the number of variables and the number of constraints are large, while the matrix representing the constraints is sparse.

We present a solver for quadratic programming problems, which is tuned for applications in computational geometry. The solver implements a generalization of the simplex method to quadratic programs. Unlike existing solvers, it is efficient if the problem is dense and has a small number of variables or a small number of constraints.

A natural generalization of the smallest enclosing ball is the smallest enclosing ellipsoid. This problem is an instance of convex programming which cannot be formulated as a quadratic program. We derive explicit formulae for the primitive operations of a randomized method by Welzl in dimension $d = 2$. Compared to previous solutions, our formulae are simpler and faster to evaluate, and they only contain rational expressions, allowing for an exact solution.

In recent years the focus of interest in the field of computational geometry shifted from the design to practical aspects of the developed algorithms and data structures. One prominent exponent of the new focus is CGAL, the Computational Geometry Algorithms Library. It is a software library of geometric objects, data structures and algorithms written in C++. We implemented our new quadratic programming solver as part of CGAL. Based on it, we realized solutions for the first three geometric optimization problems mentioned above. The implementations are carefully designed to be efficient and easy to use at the same time. The distinguishing features of the solver are almost no overhead when used to solve linear programming problems, user-specifiable program representations, and a combination of exact and floating point

arithmetic. This results in a provably correct and usually very efficient implementation, which is underpinned by the experimental results.

The practical usefulness is shown by two applications in financial business and medicine, where our method solved 'real-world' problems. The quadratic programming solver was used to solve a large portfolio optimization problem as part of a joint project with a big Swiss bank (actually, we showed that the problem was infeasible). In another cooperation with a German company developing medical navigation systems, the smallest enclosing annulus implementation was used to calibrate the tip of medical probes.

We showed in this thesis, that quadratic programming can be used for efficient solutions of some geometric optimization problems and their applications. We developed a solver for linear and quadratic programs, which is tuned for the problems we were interested in. Its realization in CGAL gives always correct results and is very efficient in most practical cases.

Kurzfassung

Viele geometrische Optimierungsprobleme können als Instanzen von Linearem oder Quadratischem Programmieren formuliert werden. Beispiele sind das Problem des Abstands zweier Polytope, das Problem der kleinsten umschliessenden Kugel, das Problem des kleinsten umschliessenden Kugelrings und das Problem der optimal separierenden Hyperebene. Die resultierenden Linearen und Quadratischen Programme haben als gemeinsame Eigenschaft, dass entweder die Anzahl der Unbekannten oder die Anzahl der Nebenbedingungen klein ist. Dies unterscheidet sie vom üblichen Szenario im Bereich Operations Research, wo die Anzahl der Unbekannten und die Anzahl der Nebenbedingungen gross sind, während die Matrix der Nebenbedingungen dünn besetzt ist.

Wir präsentieren einen Löser für Quadratisches Programmieren, der auf Anwendungen in der Algorithmischen Geometrie zugeschnitten ist. Der Löser ist eine Verallgemeinerung der Simplex Methode auf Quadratische Programme. Im Gegensatz zu bereits existieren Lösern ist er effizient, wenn das Problem dicht besetzt ist und eine kleine Anzahl von Unbekannten oder eine kleine Anzahl von Nebenbedingungen hat.

Eine natürliche Verallgemeinerung der kleinsten umschliessenden Kugel ist das kleinste umschliessende Ellipsoid. Dieses Problem ist eine Instanz von Konvexem Programmieren, welche sich nicht als Quadratisches Programm formulieren lässt. Wir leiten explizite Formeln für die Basisoperationen eines randomisierten Algorithmus von Welzl in zwei Dimensionen her. Verglichen mit vorherigen Lösungen sind unsere Formeln einfacher und schneller auswertbar. Sie enthalten nur rationale Ausdrücke und ermöglichen so eine exakte Lösung.

In den letzten Jahren hat sich der Interessenschwerpunkt in der Algorithmischen Geometrie vom Design zu den praktischen Aspekten der entwickelten Algorithmen und Datenstrukturen verschoben. Ein prominenter Vertreter des neuen Schwerpunkts ist CGAL, die Computational Geometry Algorithms Library. Dies ist eine in C++ geschriebene Softwarebibliothek von geometrischen Objekten, Datenstrukturen und Algorithmen. Wir haben unseren neuen Löser für Quadratisches

Programmieren als Teil von CGAL implementiert. Darauf aufbauend haben wir Lösungen für die ersten drei der oben genannten geometrischen Optimierungsprobleme realisiert. Die Implementierungen sind sorgfältig entworfen, um zugleich effizient und einfach benutzbar zu sein. Die herausragenden Merkmale des Lösers sind fast keine Zusatzkosten beim Lösen von Linearen Programmen, eine durch den Benutzer spezifizierbare Repräsentierung des Problems und eine Kombination aus Fliesskomma- und exakter Arithmetik. Daraus ergibt sich eine beweisbar korrekte und in den meisten Fällen sehr effiziente Implementierung. Dies wird durch die experimentellen Ergebnisse unterstrichen.

Die Praxistauglichkeit wird anhand zweier Applikationen in den Bereichen Finanzen und Medizin gezeigt, wo unsere Methode Probleme aus der „realen Welt“ gelöst hat. Der Löser für Quadratische Programme wurde zum Lösen eines grossen Wertpapier-Optimierungsproblems verwendet (genauer gesagt haben wir gezeigt, dass das Problem keine Lösung besass). Im Rahmen einer Zusammenarbeit mit einer deutschen Firma, die ein medizinisches Navigationssystem entwickelt, haben wir die Lösung zur Berechnung des kleinsten umschliessenden Kugelrings zum Kalibrieren der Spitze von medizinischen Instrumenten eingesetzt.

Wir haben in dieser Arbeit gezeigt, dass Quadratisches Programmieren zur effizienten Lösung von einigen geometrischen Optimierungsproblemen und ihren Anwendungen verwendet werden kann. Wir haben einen Löser für Quadratische Programme entwickelt, der auf die betrachteten Probleme zugeschnitten ist. Seine Realisierung in CGAL liefert immer korrekte Ergebnisse und ist in den meisten praktischen Fällen effizient.