單純同倫算法的翼狀伸延道路

王則柯

不識廬山眞面目，只緣身在此山中。

—— 蘇軾:《題西林壁》

近年研習向量標號的單純同倫算法, 有一項"初識廬山眞面目"的心得。不久前訪問美國耶魯大學時, 專門向單純算法的創始人報告, 得到驚喜的讚賞。謹不揣淺陋, 精心述作, 期與諸君分享。

同倫方法基本思想

設 $f: R^n \to R^n$ 是歐氏空間的自映照, 這裡, 對於 $x = (x_1, \ldots, x_n) \in R^n$, $f(x) = (f_1(x), \ldots, f_n(x)) \in R^n$。如果 $x \in R^n$ 使得 $f(x) = 0 \in R^n$, 就說 x 是映照 f 的零點。解方程組

$$\begin{cases} f_1(x_1, \ldots, x_n) = 0, \\ \qquad\vdots \\ f_n(x_1, \ldots, x_n) = 0, \end{cases}$$

也就是求映照 f 的零點。

f 可能很複雜。人們想到從一個簡單的輔助的映照 g 開始, 逐漸過渡到 f。爲了過渡, 就按照比方說

$$H(t, x) = tg(x) + (1-t)f(x)$$

確定同倫 $H: [0,1] \times R^n \to R^n$。固定 $t = 1$ 時, H 和 g 一樣; 隨著同倫參數 t 的下降, H 逐漸接近 f; 當到達 $t = 0$ 時, H 就和目標映照一致。所以, H 是連接 g 和 f 的一個同倫。

設 x^1 是輔助映照 g 的已知零點, 則 $(1, x^1)$ 是同倫 H 的零點。如果從 $(1, x^1)$ 出發, 沿著同倫 H 的零點集

$$H^{-1}(0) = \{(t, x) \in [0,1] \times R^n : H(t, x) = 0\}$$

走, 同倫參數 t 下降到 0, 得到一點 $(0, x^0)$, 那麼 $H(0, x^0) = f(x^0) = 0$, 可見 $x^0 \in R^n$ 就是欲求的映照 f 的零點。這就是同倫方法 (Homotopy Methods) 的基本思想。同倫方法在純粹數學和應用數學都有用武之地。如果著眼於數值計算, 亦常稱爲同倫算法 (Homotopy Algorithms)。

實現上述基本思想, 主要有兩種途徑。一是當 f 和 g 都光滑, 並且 $0 \in R^n$ 同時是光滑映照 g 和 H 的正則值時, $H^{-1}(0)$ 由若干簡單的光滑曲線組成。從數學上講, 由

上述 $(1,x^1)$ 出發沿著一條簡單光滑曲線走, 是完全確定的事, 可以用歐拉 (Euler) 折線法、預估校正法 (predictor-corrector) 等多種方法實現。按照這樣的想法, 發展起連續同倫算法 (continuation homotopy algorithms, 參看《數學傳播》第十八卷第二期關於同倫方法的文章)。

另一種途徑, 就是對 $n+1$ 維空間 $[0,1]\times R^n$ 做單純剖分 (simplicial triangulation), 也就是把 $[0,1]\times R^n$ 分割爲一個一個正則相處的 $n+1$ 維單形 (simplices), 定義映照

$$\phi:[0,1]\times R^n\to R^n$$

如下: 在單純剖分的所有頂點 (vertices) 上, ϕ 和 H 取值一樣; 在剖分的每個單形上, ϕ 是仿射的 (affine)。容易知道, 當 H 和 $[0,1]\times R^n$ 的單純剖分 T 確定以後, 上述 ϕ 是唯一地確定的。我們稱映照 ϕ 爲同倫 H 關於剖分 T 的單純逼近 (simplicial approximation), 或 PL(piecewise linear, 分片線性) 逼近。關於單純剖分的詳細討論, 可看代數拓樸 (algebraic topology) 的入門著作, 亦可參看拙著 [7]。

由於 H 連續, 所以當剖分 T 很細緻時, 在任何有界區域裡, ϕ 的零點集

$$\phi^{-1}(0)=\{(t,x)\in[0,1]\times R^n:\phi(t,x)=0\}$$

和同倫 H 的零點集 $H^{-1}(0)$ 就很接近。這樣, 設想 ϕ 的零點集 $\phi^{-1}(0)$ 也都由簡單曲線組成, 那麼由於 ϕ 在每個單形上是仿射的, 所以這些簡單曲線都是簡單折線 (broken lines)。從 ϕ 在 $t=1$ 處的某個零點 $(1,x^1)$ 出發, 沿著 ϕ 的零點集 $\phi^{-1}(0)$ 中的相應折線走, 如果同倫參數 t 下降到 0, 得到一點 $(0,x^0)$, 那麼 x^0 就是 f 的近似零點 (圖1)。按照這樣的想法, 發展起單純同倫算法 (simplicial homotopy algorithms)

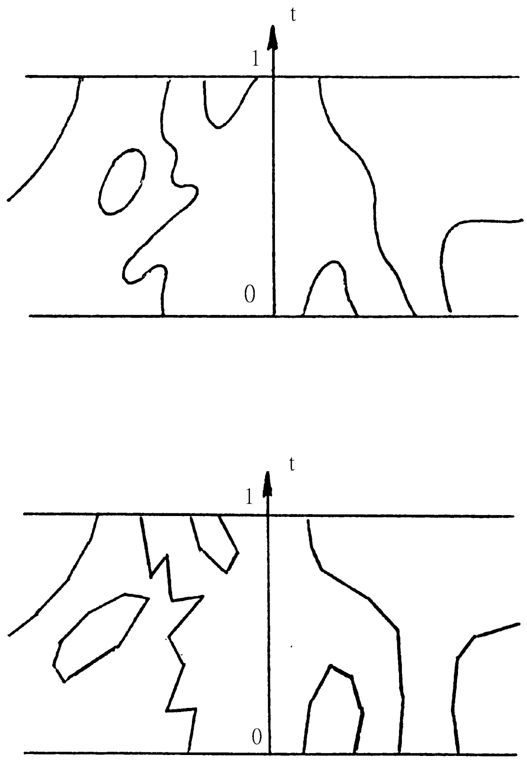


圖1

問題是, ϕ 的零點集 $\phi^{-1}(0)$ 可能相當複雜, 特別是並不都由簡單折線組成, 這就使得"沿著 $\phi^{-1}(0)$ 的折線走", 成爲一件難以把握的事情。

零點集的困難

ϕ 的零點集 $\phi^{-1}(0)$ 可能相當複雜, 指

的是, $\phi^{-1}(0)$ 不但不是由簡單折線組成, 而且在維數上也不整齊。$\phi^{-1}(0)$ 在這裡可能是 0 維, 在那裡可能是1維, 在別的地方可能是2維、3維、一直到 $n+1$ 維。具體來說, $\phi^{-1}(0)$ 一般是一個變維數複形的多面體 (polyhedron of a simplicial complex of variable dimensions).

在本文中, R^n 中$p+1$個仿射無關 (affinely independent) 的點 $a^0,\ldots,a^p$ 的凸包的相對內部 (relative interior), 是一個 p 維單形, 記作 $<a^0,\ldots,a^p>$, $a^0,\ldots,a^p$ 就是這個單形的頂點。單形有良好的幾何性質。首先, 用一個超乎面去切一個單形, 切痕 (交) 必是一個單形。其次, 在 R^m 中用一個 p 維超平面去切一個 m 維單形, 只要切著了, 切痕 (交) 不但是一個單形, 而且一定是一個 p 維單形。這樣兩個簡單的幾何事實, 在下面的討論中將起重要作用。除了單形以外, 球體 (ball) 的幾何性質也很好。但是, 尺寸一致的單形可以分割空間, 球體卻不能。

如果 σ 和 τ 都是單形, 並且 τ 的頂點都是 σ 的頂點, 就說 τ 是 σ 的一個面 (face)。如果 τ 是 σ 的面, 並且 τ 的維數比 σ 的維數小1, 就特別稱 τ 是 σ 的一個界面 (facet)。按照上述定義, σ 也是 σ 自己的面。所以, 有時我們把 σ 的異於自身的面, 叫做眞面。例如, 設 $\sigma=<a^0,a^1,a^2>$, 那麼 σ 有7個面, 其中6個眞面是 $<a^0,a^1>$, $<a^1,a^2>$, $<a^2,a^0>$ 和 $<a^0>$, $<a^1>$, $<a^2>$, 前面3個是 σ 的界面。

因爲我們採用相對開的 (relatively open) 單形的概念, 所以若干單形正則相處, 指的是它們在幾何上互不相交。正則相處的若干單形組成的集合 T 如果滿足下述條件, 就叫做一個單純複合形 (simplicial complex), 簡稱複形: 設 σ 是 T 的元素, 而 τ 是 σ 的面, 那麼 τ 也是 T 的元素。複形中維數最高的單形的維數, 就叫做複形的維數 (dimension)。

複形是一個代數對象, 其元素是單形。單形作爲一個幾何體是一個點集。複形中全體元素 (單形) 作爲點集的併, 叫做該複形的多面體 (polyhedron)。反過來, 複形叫做它的多面體的單純剖分。所以, 做單純剖分, 就是把空間 (多面體) 分割爲幾何性質很好的單形。

如果一個 p 維複形的每一個元素都是某個 p 維元素的面, 就稱這個複形是齊次的 p 維複形。$[0,1]\times R^n$ 的任何單純剖分, 都是一種特別好的齊次的 $n+1$ 維複形。對於齊次複形, 我們約定單形專指它的最高維的元素, 這些單形的面和界面, 都直稱爲複形的面和界面。這樣, $[0,1]\times R^n$ 的任一單純剖分的每個 (n 維) 界面, 頂多是兩個 ($n+1$ 維) 單形的面。具體來說, $[0,1]\times R^n$ 的單純剖分的界面有兩種: 位於 $[0,1]\times R^n$ 的邊界 $\{0,1\}\times R^n=\{0\}\times R^n\cup\{1\}\times R^n$ 的每個界面都只是一個單形的面, 其餘的每個界面都恰好同時是一對單形的面 (參看 [7])。這是 $[0,1]\times R^n$ 的單純剖分的主要性質。

相反, 如果在一個 p 維複形中, 有一個頂點 (0維單形) 不是任何一個 p 維單形的面, 就說這個複形是一個變維數複形。

現在我們證明, 上一節定義的映照 ϕ 的零點集 $\phi^{-1}(0)$, 一定是一個複形的多面體:

設 $\tau\in T$, 總可以找到 T 中一個 $n+1$ 維單形 σ, 使得 τ 是 σ 的面。在 σ 上, $\phi|\sigma:\sigma\to R^n$ 是仿射映照。因爲 $\sigma\subset[0,1]\times R^n\subset R\times R^n$, $\phi|\sigma:\sigma\to R^n$, 可以仿射地擴張爲 $F:R\times R^n\to R^n$。因爲 F 是仿射映照, 其核 $F^{-1}(0)$ 就是 $R\times R^n$ 中的一個超平面。明顯, $\phi^{-1}(0)\cap\tau=F^{-1}(0)\cap\tau$, 等式右端作爲超平面與單形的交, 仍是一個單形。

因爲 T 中各維單形都正則相處, 即都不相交, 就得到 $\phi^{-1}(0)$ 的一個分割 $\phi^{-1}(0)=\cup_{\tau\in T}(\phi^{-1}(0)\cap\tau)$, 所以 $\phi^{-1}(0)$ 是複形 $\{\phi^{-1}(0)\cap\tau:\tau\in T\}$ 的多面體。證畢。

那麼, $\phi^{-1}(0)$ 的困難在哪裡呢? 在於它通常是一個變維數複形的多面體! 而且, 即使 $\phi^{-1}(0)$ 的某個部分是齊次1維的, 這個部分也不一定由簡單折線組成。例如在圖2的 $n=1$ 的情形, 設 $\phi:[0,1]\times R\to R$ 在剖分 T 的頂點上取值如圖所示, 就可知 $\phi^{-1}(0)$ 如粗黑線和陰影所示, 是分成 6 個連通片的一個變維數複形的多面體, 在不同的地方的維數分別是 0,1 和 2。對於一般的 n, $\phi^{-1}(0)$ 在不同的地方可以分別具有維數 $0,1,\ldots,n+1$。在圖2中, 遇到分叉交叉, 究竟往哪裡走好呢? 更不必說遇上高於1維的部分了。這種不知道往哪裡走的不確定性, 破壞了 $\phi^{-1}(0)$ 只由簡單折線組成的設想, 破壞了沿折線走的算法的可行性 (feasibility)。這就是零點集 $\phi^{-1}(0)$ 的困難。

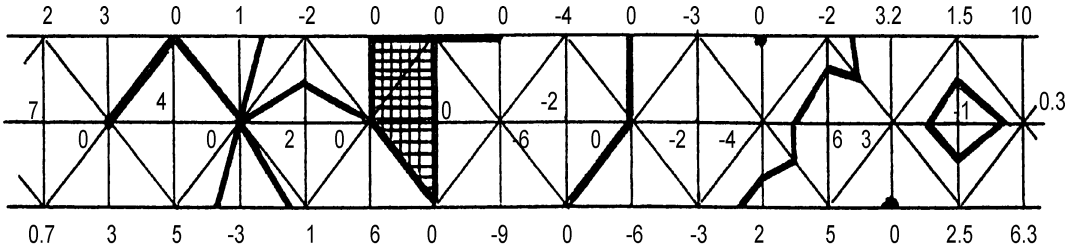


圖2

理想化假設和小擾動技巧

單純同倫算法的直接激勵, 是沿著 ϕ 的零點集 $\phi^{-1}(0)$ 走。但是這有困難, 因爲 $\phi^{-1}(0)$ 並不只由不分叉的簡單折線組成。爲使 $\phi^{-1}(0)$ 只包含不分叉的簡單折線, 數學家們提出 $\phi^{-1}(0)$ 不和 T 的低維面相交的理想化假設[2,3]。前已約定, 剖分 T 的“單形”專指 $n+1$ 維單形, “界面”專指 n 維面, 現再把維數低於 n 的面, 都統稱爲“低維面”。這時易知, 在 $\phi^{-1}(0)$ 不和剖分 T 的低維面相交的理想化假設之下, 對於上節證明中由 $\phi|\sigma:\sigma\to R^n$ 仿射擴張而得的仿射映照 $F:R\times R^n$, 其零點集 $F^{-1}(0)$ 必須是 1 維的一條直線。這樣一來, $\phi^{-1}(0)$ 就一

定是一個維數不超過1的複形的多面體, 於是 $\phi^{-1}(0)$ 只由若干簡單折線組成。

事實上, 在理想化假設之下, $\phi^{-1}(0)$ 的折線和一個界面的交, 必定是界面的內點。這是不發生交叉和分叉的幾何保證。進一步, 因爲折線和各界面的交點必是該界面的內點, 所以按照 $[0,1]\times R$ 的單純剖分的主要性質, 除了折線走到 $\{0\}\times R^n$ 或 $\{1\}\times R^n$ 的情形以外, 折線是不會中途停下來的。由此可見, 如圖3, 在理想化假設之下, $\phi^{-1}(0)$ 的每個連通分支, 都是簡單折線。沿著這些折線走, 在數學上說來是完全確定的事, 也就是說, 算法的可行性成立。剩下的問題, 是從 $t=1$ 處開始的折線是否到達 $t=0$ 處。這已超出本文關於可行性的論題, 屬於計算收斂性討論的範圍。如果你讀過本刊十八卷第二期上關於同倫方法的文章, 就知道只要這些折線是有界的和單調的, 計算收斂性就成立。

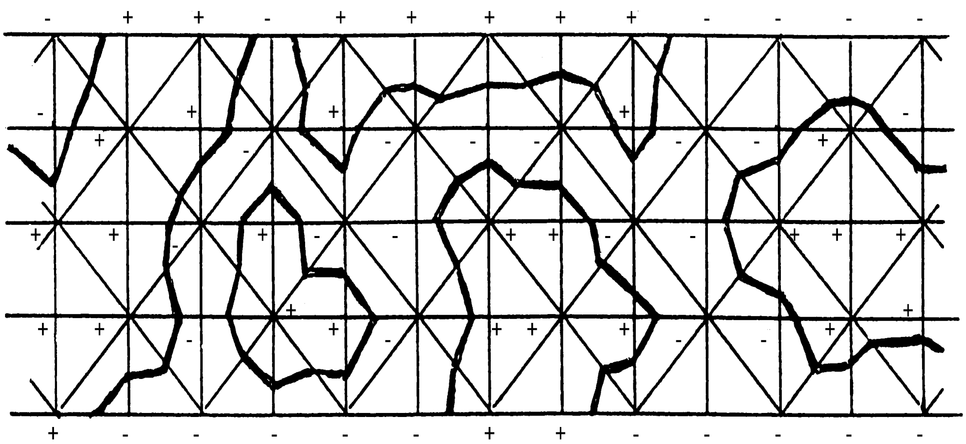


圖3

理想化假設是否合理呢? 對此, 數學家仿照薩德(Sard) 定理[5]證明了, 在某種意義上說, $\phi^{-1}(0)$ 不和 T 的低維面相交, 是一個滿概率 (full probability) 事件[2,3,4]。換言之, 不理想的情況雖然可能發生, 但是發生的機率等於0。這個證明的思想在幾何上是淸楚的: 首先, 適當選取輔助映照, 可以使得 ϕ 在 $t=1$ 處的零點不和 T 的低維面相交。這樣一來, $t=1$ 處的每個界面內頂多只有一個零點, 從而 ϕ 在 $t=1$ 處的零點數目可數。然後, 從 ϕ 在 $t=1$ 上的每個零點出發, 折線穿過一個 $n+1$ 維單形向對面的某個界面射去。很明顯, 當折線以隨機的方向這樣射去的時候, 射中 n 維界面的內部的概率是1, 射中低維面的概率是0。這樣一段一段射過去, 每次射中低維面的概率都是0, 而折線這樣一

段一段行進的過程當然是一個可數的過程, 可數個零測度集合之併集還是測度爲零的集合, 所以每條折線遇上低維面的概率爲0。另一方面, 折線的數目可數, 所以再用一次“可數個零測度集合之併集還是零測度集合”, 就知道只要適當選取補助映照, 理想化假設成立的概率應當是1。這就是關於理想化假設的合理性的數學論證。

另外一些數學家引進所謂小擾動技巧, 來保證理想化假設成立[1]。什麼叫小擾動? 在上述折線的隨機行進之中, 射中低維面的概率雖然是0, 但還是可能射中的。射中了怎麼辦? 偏轉一點點就是了。低維面是不超過$n-1$維的, 而界面則是n維, 界面在維數上占有絕對優勢。所以, 原來要射中低維面, 那麼你把它擾動一點點, 就可以不打在低維面上。這樣, 必要時就擾動一下, 就可以保證理想化假設成立。

平心而論, 理想化假設的提出, 很有歷史意義, 這主要是使得問題變得可以把握。至於實際問題符合理想化假設的概率爲1 的論證, 雖然在“機會均等”的前提下邏輯上站得住脚, 卻難以令人完全信服。現實世界同類事件的發生究竟是否“機會均等”, 實在大可懷疑。以整數爲例, 因爲整數集是無限的, 如果機會均等, 隨機地選中任何預先指定的整數的概率理應是0。但是讀者不妨到大街上試試, 恐怕抽樣不到100人, 就會有人說出“10”這個整數來。可見就這個“整數大街抽樣”試驗數學模型而言, 機會均等的前提難以成立。數學本身也有這樣的例子。如果把多項式和它的係數向量 (或根向量) 視同, 在所有係數向量 (或根向量) 出現的概率都相等的前提下, 很容易從邏輯上推論出在所有多項式之中, 有重根的多項式所占的份額測度爲0的結論。但是正如一些學者指出過的, 實際問題中出現有重根的多項式的概率看來遠遠大於0。至於小擾動技巧, 不但理論上未盡人意, 而且實際做起來也是件麻煩的事。雖說按機會均等的假設, 擾動成功的概率是1, 但是實際上失敗的可能卻遠不等於0。

幸運的是, 就向量標號的單純同倫算法來說, 理想化假設其實是多餘的, 從而小擾動技巧也毫無必要。這是眼睛只盯著零點集 $\phi^{-1}(0)$ 的結果。眼光移開一點, 天地就豁然開朗。我們將分述如次。

n 階撓曲線揭真諦

設 ε 是一個正數。稱

$$J(\varepsilon)=\{(s,s^2,\ldots,s^n)^T\in R^n:0<s<\varepsilon\}$$

爲 R^n 中一段標準 n 階撓曲線。注意, 我們對 $\varepsilon>0$ 的大小沒有要求, 也就是說, 標

準 n 階撓曲線的實際伸延長度是無所謂的。但是, 它必須是以原點0爲一端的那樣一段曲線, 而原點0在 $J(\varepsilon)$ 的上述表示式中理應相當於 $s=0$。一段標準 n 階撓曲線在非退化 (nondegenerate) 仿射變換下的像, 稱爲一段 n 階撓曲線。當然, 標準 n 階撓曲線是 n 階撓曲線。

關於 n 階撓曲線的一個基本的幾何事實是: 如果某個單形包含一段 n 階撓撓曲線, 那麼這個單形的維數至少是 n。

如前, 設 T 是 $[0,1]\times R^n$ 的單純剖分, $\phi:[0,1]\times R^n\to R^n$ 是關於 T 的單純映照或 PL 映照, 即 ϕ 在 T 的每個單形上都是仿射映照。若 v 是剖分 T 的 (單形的) 一個頂點, 就稱 $\phi(v)\in R^n$ 是頂點 v 的向量標號。若 $\tau=<v^0,\ldots,v^n>$ 是 T 的一個界面, 如果 τ 的各項點的向量標號 $\phi(v^0),\ldots,\phi(v^n)$ 的凸包包含 R^n 的原點 0, 就說 τ 是一個含零界面; 如果 τ 的各頂點的向量標號的凸包包含一段標準 n 階撓曲線, 就說 τ 是一個完備界面 (a complete facet)。若 σ 是剖分 T 的一個單形, 則當 σ 有含零界面時, 稱 σ 是含零單形, 當 σ 有完備界面時, 稱 σ 爲完備單形。

因爲有限個點的凸包 (convex closure) 是閉集, 所以完備界面一定是含零界面, 完備單形一定是含零單形。但是反之不然。最簡單的例子是, 如果 $\phi(v^0)=\cdots=\phi(v^n)=0$, 那麼 $\tau=<v^0,\ldots,v^n>$ 是含零界面而不是完備界面。事實上, 當 $\phi(v^0),\ldots,\phi(v^n)$ 的凸包包含一段 n 階撓曲線時, $\phi(v^0),\ldots,\phi(v^n)$ 一定仿射無關, 所以它們張成一個 n 維單形 $<\phi(v^0),\ldots,\phi(v^n)>$。這時, 注意單形和 $J(\varepsilon)$ 按照定義都是相對開的, 就知道$J(\varepsilon)\subset<\phi(v^0),\ldots,\phi(v^n)>$。可見, 完備界面的特徵(充分必要條件)是, 它的 $n+1$ 個頂點的向量標號在 R^n 中仍然張成一個 n 維單形, 並且這個單形內含一段標準 n 階撓曲線。此外, 把 ϕ 局限在完備界面 $\tau=<v^0,\ldots,v^n>$, 就給出仿射同胚 (affine homeomorphism) $\phi|\tau:\tau\to\phi(\tau)=<\phi(v^0),\ldots,\phi(v^n)>$。

稍許值得提醒的是, 由於所說的界面和單形都是相對開的, 所以含零界面和含零單形本身不一定有 ϕ 的零點, 但是其閉包 (closure) 上一定有 ϕ 的零點。同樣, 完備界面和完備單形的閉包上一定有 ϕ 的零點。

至此我們知道, 含零單形和完備單形都在閉包的意義上把 ϕ 的零點抓住, 這爲實現“沿著 ϕ 的零點集 $\phi^{-1}(0)$ 走”的想法展現了前景。前已闡明, $\phi^{-1}(0)$ 作爲原點的原像可能相當複雜, 如果沒有理想化假設, $\phi^{-1}(0)$ 本身並不是“沿 $\phi^{-1}(0)$ 走”的良好基礎。這使我們轉而考慮標準 n 階撓曲線 $J(\varepsilon)$ 的原像 $\phi^{-1}(J(\varepsilon))$。有趣

的是, 雖然曲線 $J(\varepsilon)$ 比原點 (只是一個點) 複雜, 但 $J(\varepsilon)$ 的原像 $\phi^{-1}(J(\varepsilon))$ 卻比原點的原像 $\phi^{-1}(0)$ 便於把握。正是關於 $\phi^{-1}(J(\varepsilon))$ 的幾何討論, 最終揭示了向量標號單純同倫算法的無例外的可行性, 再也不必求助於理想化假設和小撓動技巧。

完備單形都恰有一對完備界面

按照定義, 含零單形都有含零界面。那麼, 一個含零單形有幾個含零界面呢? 如果正好是一對, 那麼一個含零界面做進口, 另一個含零界面做出口, 算法就不會迷失方向, 可行性就成立。可惜不是這樣。上一節的簡單例子中, 含零單形的所有界面就都是含零界面。這樣, 如果從一個含零界面進入了這個含零單形, 再怎麼走下去呢? 有許多個門口要選擇, 難免無所適從。

完備單形卻好得多, 每個完備單形都不多不少正好有一對完備界面。下面我們就通俗地說說這一證明的幾何思想, 嚴格的討論可見 [8]和 [6]。

設 σ 是一個完備單形, 那麼按照定義 σ 已有一個完備界面, 把它記作 τ。這樣, $J(\varepsilon) \subset \phi(\tau)$ 對於某個 $\varepsilon > 0$ 成立說明, $\phi|\tau : \tau \to \phi(\tau) \subset R^n$ 是一個仿射同胚映照, 是一個滿秩 (of full rank) 的仿射變換, 從而 $\phi|\sigma : \sigma \to R^n$ 是一個滿秩的仿射變換。

σ 是 $n+1$ 維的單形, 有 $n+2$ 頂點和 $n+2$ 個界面。記 σ 的拓樸邊界 (topological boundary) 爲 $\partial\sigma$, 那麼 $\partial\sigma$ 由這 $n+2$ 個界面和它們的低維面組成。$\phi|\sigma : \sigma \to R^n$ 是從 $n+1$ 維空間到 n 維空間的滿秩的仿射變換。想像 σ 是一個有稜有角的凸球體, 那麼 ϕ 把球殼或球面 $\partial\sigma$ 壓平在 R^n 上。因爲 $J(\varepsilon) \subset \phi(\tau)$, τ 是 $\partial\sigma$ 的一部分, 所以 $\phi(\partial\sigma)$ 把 $J(\varepsilon)$ 蓋住。但 ϕ 把有稜有角的凸球面壓平在 R^n 上蓋住 $J(\varepsilon)$, 那就一定要兩層蓋住。必要時縮小 $\varepsilon > 0$, 就知道一定還有一個界面 τ', 也使得 $J(\varepsilon) \subset \phi(\tau')$。所以, 每個完備單形都有一對完備界面。會不會有第三個完備界面呢? 不會。否則 $\phi(\partial\sigma)$ 就要三層複蓋在 R^n 上了, 這將和 ϕ 是滿秩映照而 $\partial\sigma$ 是凸球面的事實矛盾。

非退化直紋面片

現在看看標準 n 階撓曲線在完備單形中的原像。

設 σ 是完備單形, 它的一對完備界面是 τ_1 和 τ_2, 那麼按定義, 有正數 ε_1 和 ε_2 使得 $J(\varepsilon_i) \subset \phi(\tau_i)$, $i = 1, 2$。取 $\varepsilon = \min\{\varepsilon_1, \varepsilon_2\}$, 就有 $J(\varepsilon) \subset \phi(\tau_1) \cap \phi(\tau_2)$。

ϕ 在 σ 上的局限 $\phi|\sigma : \sigma \to R^n$ 是仿射的, 可以唯一地擴張成爲全空間 $R \times R^n$ 上的仿射映照 $F : R \times R^n \to R^n$。由於 F 將 σ 的界面 τ_1 映成 R^n 中的 n 維單形 $\phi(\tau_1)$, 所以 F 映滿整個 R^n, 從而這個仿射映照的核 $F^{-1}(0)$ 是 $R \times R^n$ 中的一條直線。

對於任何固定的 $s > 0$, 定義 $F_s : R \times R^n \to R^n$ 爲

$$F_s(t, x) = F(t, x) - (s, \ldots, s^n)^T,$$

那麼 F_s 也是仿射的滿映照, 從而 $F_s^{-1}(0)$ 也是 $R \times R^n$ 中的一條直線。按 F_s 的作法, 我

們知道對於 $0 < s < \varepsilon$, 直線 $F_s^{-1}(0)$ 和 $n+1$ 維單形 σ 之交非空。這時, 再注意 σ 是相對開的, 就知道 $F_s^{-1}(0)\cap\sigma$ 是長度非零的開線段。最後注意

$$\phi^{-1}(F(\varepsilon))\cap\sigma = \bigcup_{0<s<\varepsilon}(F_s^{-1}(0)\cap\sigma),$$

就知道 $\phi^{-1}(J(\varepsilon))$ 在 σ 中是一個直紋面片, 只和 τ_1, τ_2 這兩個界面相交, 其交分別是 τ_1 和 τ_2 上的 n 階撓曲線 $\phi^{-1}(J(\varepsilon))\cap\tau_1$ 和 $\phi^{-1}(J(\varepsilon))\cap\tau_2$, 並且這個直紋面片是非退化的, 即直紋面的每條直母線和 σ 的交都具有正的長度。

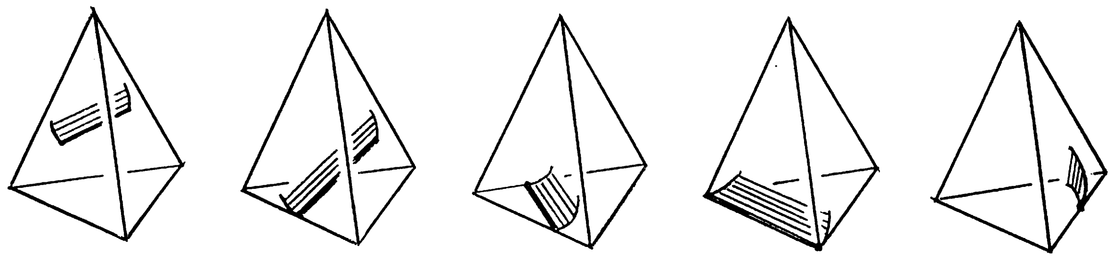
在每個完備單形中, $J(\varepsilon)$ 的原像是一片非退化直紋面片, 恰和兩個完備界面相交, 交線是 n 階撓曲線。把這樣一段一段非退化直紋面片接起來, 就是向量標號單純同倫算法的道路。如果約定把 ε 看作是可以逐段變化的小正數, 那麼可以說, 標準 n 階撓曲線 $J(\varepsilon)$ 的原像集 $\phi^{-1}(J(\varepsilon))$ 中的連通分支, 就是向量標號單純同倫算法的道路。

完備單形都恰有一對完備界面。完備界面如果在 $\{0,1\}\times R^n$, 則只屬於一個完備單形, 如果在 $(0,1)\times R^n$ 上, 則屬於一對完備單形。這樣, 上述連通分支相應的完備界面和完備單形的交錯序列 (無限或有限) 是這個樣子:

$$\ldots, \tau_{k-1}, \sigma_k, \tau_k, \sigma_{k+1}, \sigma_{k+1}, \ldots,$$

而作爲點集, 道路 $\phi^{-1}(J(\varepsilon))$ 被完全包含在 $[0,1]\times R^n$ 的 $n+1$ 維開集 $\cup_i(\tau_i\cup\sigma_i)$ 中, 從而, 不同的道路互不相交。每條道路與相應的序列 $\ldots, \tau_{k-1}, \sigma_k, \tau_k, \ldots$ 同步發展, 構成一幅栩栩如生的圖畫。(見圖4)

圖4是所論直紋面片的若干典型例子。有趣的是, 雖然按定義不包含邊界的直紋面片 $\phi^{-1}(J(\varepsilon))\cap\sigma$ 不退化, 但是它的 $s=0$ 那一端的邊界棱可以退化, 如圖 4(e)。雖然直紋面片 $\phi^{-1}(J(\varepsilon))$ 只和完備單形的一對界面相交, 但它相應於 $s=0$ 的邊界棱既可能不和任何界面相交, 如圖 4(d)(e), 又可能和3個、4個, ..., 甚至所有界面的閉包相交, 如圖4(b)(c)(d)。



(a)　(b)　(c)　(d)　(e)

圖4

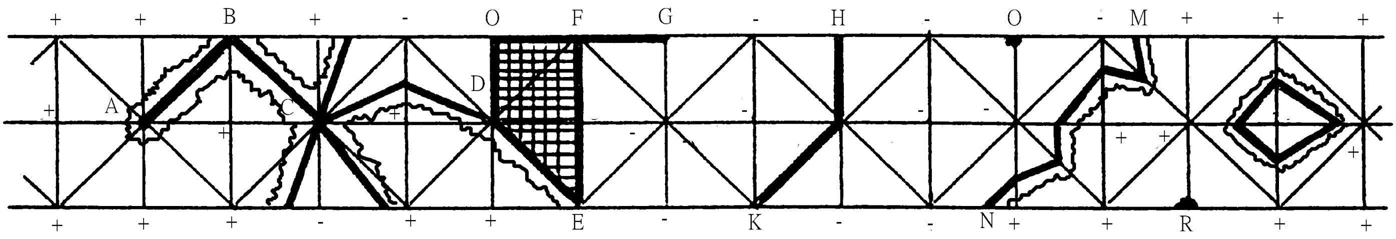


圖5

問題就在邊界稜上。正是因爲老是盯著邊界稜即算法的原始激勵 $\phi^{-1}(0)$ 上, 人們才窮於應付, 只好借助理想化假設和小擾動技巧。現在轉而觀察 $\phi^{-1}(J(\varepsilon))$, 看起來離開 $\phi^{-1}(0)$ 了, 反而豁然開朗, 得窺眞諦。這是0距離的轉移, 因爲 $\phi^{-1}(J(\varepsilon))$ 和 $\phi^{-1}(0)$ 雖然並不相交, 卻緊緊挨著。

翼狀二維結構使道路暢通

現在整體地看看非退化直紋面片的道路是怎樣引導計算進行的。圖5是圖2的繼續, 這時 $n=1$。因爲 $n=1$ 時的 $J(\varepsilon)$ 只是一個開區間, 所以直紋面片 $\phi^{-1}(J(\varepsilon))\cap\sigma$ 平坦, 只從 $\phi^{-1}(0)$ 向 ϕ 值的正方向滲延一點點, 在圖5中用波紋線表示。圖中淸楚地看到, $\phi^{-1}(J(\varepsilon))$ 有6個簡單的連通分支, 可以作爲可行計算的道路。雖然只有兩條道路從 $t=1$ 走到 $t=0$, 但幾何上不交叉和無分叉, 保證計算的可行性對所有6條道路都成立。至於是否從 $t=1$ 走到 $t=0$, 是收斂性的問題, 不是本文討論的可行性問題。

圖5中C點和D點, 都是沿 $\phi^{-1}(0)$ 走的話叫人無所適從的地方, 現在 $\phi^{-1}(J(\varepsilon))$ 揭示了道路之所在, 涇渭分明, 暢通無阻。如果像以前那樣認 $\phi^{-1}(0)$ 作道路, 那麼 AB 稜和 CB 稜其實各被走了兩次 (在 $n>1$ 情形, 可以被走過更多次)。這些無所適從和重複使用的情況, 正是可行性困難的根源。現在轉而以 $\phi^{-1}(J(\varepsilon))$ 爲道路, 一切迎刃而解。

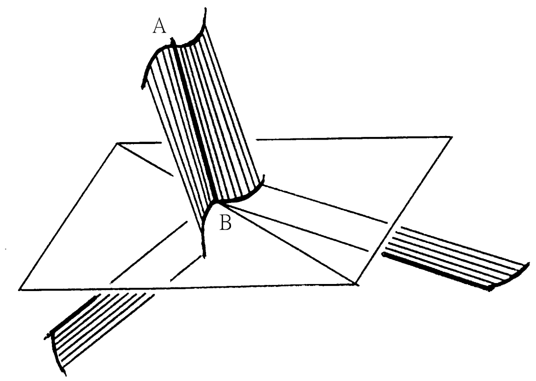


圖6

當 $n>1$ 時, 每個非退化直紋面片都是撓曲的, 宛如一片飛機翅膀, 不再平坦。所以, 我們把 $\phi^{-1}(J(\varepsilon))$ 道

路叫作分段翼狀道路。它們像高架公路系統。零點集 $\phi^{-1}(0)$ 作爲高架公路系統的邊界稜, 重合在一起, 但是相應的分段直紋面片"公路", 卻能順利地擦邊而過, 相安無事。

多麼美妙的高架公路系統。急功近利, 緊盯著算法的直接激勵 $\phi^{-1}(0)$ 不放, 使人們的眼睛長期蒙上迷霧。不識廬山眞面目, 只緣身在此山中。信哉! 只有把著眼點從 $\phi^{-1}(0)$ 移到 $\phi^{-1}(0)$, 從含零單形移到完備單形, 從1維折線移到2維分段翼狀道路, 才能洞察向量標號單純同倫算法機制的眞面目。

總結以上討論, 對於向量標號單純同倫算法來說, 一旦不管用什麼辦法找到了一個完備界面, 隨後的全部計算就在完備界面和完備單形的完全確定的交錯序列中進行。這就是無例外可行性的含義。在輔助層, 人們有充分的自由形成需要的完備界面。這就爲向量標號單純同倫算法的有效使用開創了廣闊的天地。

$\phi^{-1}(0)$ 作爲原點這一個點的原像可以相當複雜, $\phi^{-1}(J(\varepsilon))$ 作爲標準 n 階撓曲線的原像卻整齊得多, 規律得多。比之原點, $J(\varepsilon)$ 當然複雜得很, 但是它的原像卻反而具有淸晰得多的幾何構造。這種迎難反易的"反變"現象, 道理既深刻又簡單, 就留給讀者去玩味吧。

轉軸運算

本文的全部討論都是幾何的。數學思維喜歡幾何, 機器實現依賴代數。在計算機上實現分段翼狀道路的算法, 就不免需要代數的描述。爲了討論完整, 應當介紹代數描述, 這也便於使用向量標號單純同倫算法的讀者自行編製計算程序或者開發軟體。這個介紹是粗略的, 有興趣的讀者可以進一步參考拙著 [7]。

首先指出, 完備界面 $\tau =< v^0, \ldots, v^n >$ 的代數特徵 (即充分必要條件) 是, 矩陣方程

$$L_\tau W = I, \quad W \succ 0$$

有可行解, 這裡, $n+1$ 階方陣

$$L_\tau = \begin{bmatrix} 1 & \cdots & 1 \\ \phi(v^0) & \cdots & \phi(v^n) \end{bmatrix}$$

稱爲界面 τ 的標號矩陣, $\phi(v^i)$ 稱爲頂點 v^i 的向量標號, I 是 $n+1$ 階單位方陣, $W \succ 0$ 表示 $n+1$ 階矩陣 W 字典式正, 即 W 的每行都不全爲0, 每行的頭一個非0元素都大於0。

對單形重心坐標和對范達蒙行列式比較熟悉的讀者, 容易自己寫出證明。

在完備界面和完備單形組成的計算序列

$$\ldots, \tau_{k-1}, \sigma_k, \tau_k, \sigma_{k+1}, \tau_{k+1}, \ldots$$

中, 若計算已到達 $\tau_k =< v^0, \ldots, v^n >$, 那麼單形 σ_{k+1} 還有另外 $n+1$ 個界面。問題

是如何確定哪一個是唯一的另一個完備界面。注意我們已有

$$L_{\tau_k}W = I, \quad W \succ 0,$$

所以 $W = L_{\tau_k}^{-1}$。設 σ_{k+1} 的和 τ_k 相對的唯一頂點是 v, 計算 $W\begin{bmatrix} 1 \\ \phi(v) \end{bmatrix}$, 得到一個 $n+1$ 維列向量。用這個列向量中的正元素除 W 的相應各行, 除得的各行中有唯一的一行是字典式最小的, 設這行是第 j 行, 那麼 τ_{k+1} 就是 σ_{k+1} 的和頂點 v^j 相對的那個界面, 即 $\tau_{k+1} =< v^0, \ldots, v^{j-1}, v, v^{j+1}, \ldots, v^n >$。所謂行 $a = (a_0, \ldots, a_n)$ 比行 $b = (b_0, \ldots, b_n)$ 字典式小, 就是按 $j = 0, 1, \ldots, n$ 的次序比較 a_j 和 b_j, 頭一對比出大小來的是 $a_j < b_j$。這樣比出來字典式最小的行是唯一的, 不然的話, W 的各行就將線性相關, 和 W 滿秩的事實矛盾。

上述從 τ_k, σ_{k+1} 得到 τ_{k+1} 的做法, 稱爲轉軸 (pivoting) 運算。從代數觀點來說, 就是類似意義的矩陣方程

$$L_{\sigma_{k+1}}W = I, \quad \succeq 0$$

有一對基礎可行解, 相當於 $(n+1)\times(n+2)$ 矩陣 $L_{\sigma_{k+1}}$ 有兩組基底。轉軸運算就是從基底 L_{τ_k} 轉移到基底 $L_{\tau_{k+1}}$ 的運算。這種矩陣基底字典式取主元轉移的做法, 最早出現在線性規劃單純形算法 (simplex method of linear programming) 的文獻中。從單形 σ_k 翻過界面 τ_k 到達新的單形 σ_{k+1}, 就是所謂轉軸運算。

最後指出, 本刊第十七卷第三期《多項式求根的攀籐算法》, 用的是整數標號, 給每個頂點一個整數。現在用向量標號, 就是給每個頂點 v 一個向量 $\phi(v)$。整數標號算法沒有可行性的麻煩, 可惜它不能對付數理經濟學的集值映照 (set-valued mappings) 的計算問題, 參看拙著 [7]。至於轉軸運算做法, 除了一個用同標號整數頂替, 一個用矩陣基底轉移之外, 其餘完全一樣。它們都是單純同倫算法。

反覆做矩陣運算, 本來是可怕的事情。好在向量標號單純同倫算法中的矩陣運算, 除了行運算之外, 就是每次後乘 (postmultiply) 一個特別簡單的矩陣。這屬於算法實施的專門細節討論, 本文限於篇幅, 集注於問題的幾何方面, 就只好割愛了。數學家總愛追求他的論題的美學價值。幾何實在很美。

參考文獻

1. Todd, M. J., The Computation of Fixed Points and Applications, Springer, 1976.
2. Eaves, B. C., in Nonlinear Programing, Cottle,R.W. et al eds,. 1976.
3. Eaves, B. C. & Scarf, H., Math. Op. Res., (1976), 1.
4. Garcia C. B. & Zangwill, W. I., Pathways to Solutions, Fixed Pints, and Equilibria, Prentice-Hall, 1981.
5. Milnor, J. W. Topology from the Differentiable Viewpoint, 1965.
6. 王則柯, 高堂安, 同倫方法引論, 重慶出版社, 1990.
7. 王則柯, 單純不動點算法基礎, 中山大學出版社, 1986, 廣州.
8. WANG, Z., Acta Mathematica Sinica, New Series, 7(1991), 1-3.

9. WANG, Z., Annals of Operations Research, 24(1990),261-271.
10. Gao, T. and Wang, Z., in Fixed Point Theory and Applications, ed by K. K. Tan, World Scientitic, Singapore, 1992.

—本文作者任教於廣州中山大學數學研究所系—