

УНИВЕРСАЛЬНОСТЬ МДМ–АЛГОРИТМА*

В. Н. Малоземов
v.malozemov@spbu.ru

А. В. Плоткин
avplotkin@gmail.com

Н. А. Соловьева
4vinyo@gmail.com

27 февраля 2025 г.

Обозначим через G выпуклую оболочку некоторого конечного множества точек в n -мерном евклидовом пространстве. В докладе рассматривается задача нахождения точки из G с наименьшей евклидовой нормой. На решение этой задачи ориентирован МДМ–алгоритм [1, 2], в котором по умолчанию предполагается, что начало координат (нулевой вектор) не принадлежит множеству G . Однако не всегда заранее известно, выполняется ли последнее условие. Поэтому представляет интерес поведение МДМ–алгоритма, когда $\mathbf{0} \in G$. В докладе показано, что МДМ–алгоритм при выполнении условия $\mathbf{0} \in G$ генерирует последовательность векторов в множестве G , сходящуюся к началу координат.

1°. Постановка задачи. Критерий оптимальности. Пусть в пространстве \mathbb{R}^n заданы m точек,

$$H = \{a_i\}_{i=1}^m.$$

Выпуклую оболочку множества H обозначим G . В дальнейшем считаем, что $\mathbf{0} \in G$. Ставится экстремальная задача

$$\|v\|^2 \rightarrow \min_{v \in G}. \quad (1)$$

При $\mathbf{0} \in G$ задача (1) имеет единственное решение $v_* = \mathbf{0}$.

Обозначим через A матрицу со столбцами a_1, \dots, a_m . Тогда любой вектор v из выпуклой оболочки G множества H допускает представление $v = Ap$, где

$$p \geq \mathbf{0}, \quad \sum_{i=1}^m p[i] = 1. \quad (2)$$

Множество векторов p , удовлетворяющих условию (2), обозначим P . Введем носитель вектора коэффициентов p — индексное множество $M_+(p)$ вида

$$M_+(p) = \{i \in 1 : m \mid p[i] > 0\}.$$

*Семинар по оптимизации, машинному обучению и искусственному интеллекту «О&ML»
<http://oml.cmlaboratory.com/>

Отметим, что $M_+(p) \neq \emptyset$ для любого $p \in P$.

Величина

$$\Delta(p) = \max_{i \in M_+(p)} \langle a_i, v \rangle - \min_{i \in 1:m} \langle a_i, v \rangle,$$

где $v = Ap$, $p \in P$, называется *оценкой плана* v . Оценка плана всегда неотрицательна. Действительно,

$$\Delta(p) \geq \max_{i \in M_+(p)} \langle a_i, v \rangle - \min_{i \in M_+(p)} \langle a_i, v \rangle \geq 0.$$

Следующие три леммы носят подготовительный характер.

ЛЕММА 1. Условие $\mathbf{0} \in G$ выполняется тогда и только тогда, когда

$$\min_{i \in 1:m} \langle a_i, v \rangle \leq 0 \quad \text{при всех } v \in G. \quad (3)$$

Доказательство. Пусть $\mathbf{0} \in G$. В этом случае найдется вектор коэффициентов $p \in P$, такой, что

$$\sum_{i=1}^m p[i]a_i = \mathbf{0}.$$

При любом $v \in G$ в силу определения множества P имеем

$$0 = \sum_{i=1}^m p[i]\langle a_i, v \rangle \geq \min_{i \in 1:m} \langle a_i, v \rangle,$$

что соответствует (3).

Теперь допустим, что выполнено условие (3). Нужно проверить, что $\mathbf{0} \in G$. В противном случае, при $\mathbf{0} \notin G$, возьмем вектор v^* из G с наименьшей евклидовой нормой. Он отличен от нуля. При всех $i \in 1 : m$ имеем

$$\langle a_i, v^* \rangle \geq \langle v^*, v^* \rangle.$$

Отсюда следует, что

$$\min_{i \in 1:m} \langle a_i, v^* \rangle \geq \|v^*\|^2 > 0.$$

Это противоречит условию (3).

Лемма доказана. □

ЛЕММА 2. Пусть $\mathbf{0} \in G$. Тогда при любом $v = Ap$, $p \in P$, справедливо неравенство

$$\|v\|^2 \leq \Delta(p). \quad (4)$$

Доказательство. В силу определения множеств P и $M_+(p)$ имеем

$$\langle v, v \rangle = \sum_{i=1}^m p[i] \langle a_i, v \rangle \leq \max_{i \in M_+(p)} \langle a_i, v \rangle.$$

Теперь заключение леммы следует из определения $\Delta(p)$ и леммы 1. \square

ЛЕММА 3. *Пусть $\mathbf{0} \in G$. План $v = Ap$, $p \in P$, задачи (1) будет оптимальным тогда и только тогда, когда $\Delta(p) = 0$.*

Доказательство. Если v — оптимальный план, то необходимо $v = \mathbf{0}$. Подставив это значение v в формулу для $\Delta(p)$, придем к равенству $\Delta(p) = 0$.

При $\Delta(p) = 0$ в силу леммы 2 получаем $v = \mathbf{0}$, так что v — оптимальный план. Лемма доказана. \square

2°. Описание МДМ–алгоритма. Напомним описание МДМ–алгоритма решения задачи (1).

В качестве начального приближения берем любой ненулевой вектор $v_0 \in G$.

Пусть уже имеется k -е приближение $v_k = Ap_k$, $p_k \in P$. Опишем k -ю итерацию алгоритма, на которой план v_k преобразуется в план v_{k+1} .

Найдём индексы $i'_k \in M_+(p_k)$ и $i''_k \in 1 : m$, такие, что

$$\begin{aligned} \max_{i \in M_+(p_k)} \langle a_i, v_k \rangle &= \langle a_{i'_k}, v_k \rangle, \\ \min_{i \in 1:m} \langle a_i, v_k \rangle &= \langle a_{i''_k}, v_k \rangle. \end{aligned}$$

Для простоты будем использовать обозначения

$$a_{i'_k} = a'_k, \quad a_{i''_k} = a''_k.$$

В этом случае

$$\Delta_k := \Delta(p_k) = \langle a'_k - a''_k, v_k \rangle.$$

Если $\Delta_k = 0$, то согласно лемме 3 вектор v_k является решением задачи (1). Процесс закончен.

Пусть $\Delta_k > 0$. Введём вектор

$$\hat{v}_k = v_k - p'_k(a'_k - a''_k),$$

где $p'_k = p_k[i'_k]$. Очевидно, что $\hat{v}_k \in G$. Рассмотрим отрезок

$$v_k(t) = v_k + t(\hat{v}_k - v_k) = v_k - t p'_k(a'_k - a''_k), \quad t \in [0, 1].$$

В силу выпуклости множества G все точки $v_k(t)$ этого отрезка принадлежат G . Выберем $t_k \in [0, 1]$ из условия

$$\|v_k(t_k)\|^2 = \min_{t \in [0,1]} \|v_k(t)\|^2.$$

Положим $v_{k+1} = v_k(t_k)$.

Коэффициенты разложения вектора v_{k+1} по столбцам матрицы A выглядят так:

$$p_{k+1}[i] = \begin{cases} p_k[i] & \text{при } i \neq i'_k, i \neq i''_k, \\ (1 - t_k)p_k[i'_k] & \text{при } i = i'_k, \\ p_k[i''_k] + t_k p_k[i'_k] & \text{при } i = i''_k. \end{cases}$$

Укажем явную формулу для t_k . Абсолютный минимум квадратичной функции одной переменной $\|v_k(t)\|^2$ на \mathbb{R} достигается в точке

$$\hat{t}_k = \frac{\Delta_k}{p'_k \|a'_k - a''_k\|^2} > 0. \quad (5)$$

Значит,

$$t_k = \min \{1, \hat{t}_k\}.$$

Если $\hat{t}_k \leq 1$, то $t_k = \hat{t}_k$; если $\hat{t}_k > 1$, то $t_k = 1$. В первом случае k -я итерация называется *неусеченной*, во втором — *усеченной*. В силу (5) на неусеченной итерации имеем

$$v_{k+1} = v_k - \frac{\Delta_k (a'_k - a''_k)}{\|a'_k - a''_k\|^2}. \quad (6)$$

На усеченной итерации формула перехода от v_k к v_{k+1} принимает вид

$$v_{k+1} = v_k(1) = v_k - p'_k (a'_k - a''_k), \quad (7)$$

то есть $v_{k+1} = \hat{v}_k$. При этом

$$p_{k+1}[i] = \begin{cases} p_k[i] & \text{при } i \neq i'_k, i \neq i''_k, \\ 0 & \text{при } i = i'_k, \\ p_k[i''_k] + p_k[i'_k] & \text{при } i = i''_k. \end{cases} \quad (8)$$

Описание МДМ-метода завершено.

Построена последовательность $v_0, v_1, \dots, v_k, \dots$ точек из G . Если она конечна, то последний её элемент является решением задачи (1). Вообще говоря, последовательность $\{v_k\}$ бесконечна. Такая ситуация возникает, когда

$$\Delta_k > 0 \quad \text{при всех } k = 0, 1, \dots \quad (9)$$

В дальнейшем считаем, что $\mathbf{0} \in G$ и выполнено условие (9). Рассмотрим вопрос о сходимости бесконечной последовательности $\{v_k\}$.

3°. Предварительный анализ сходимости МДМ–алгоритма. По описанию, на k -й итерации МДМ–алгоритма план v_k задачи (1) преобразуется в план v_{k+1} . Оценим, насколько при этом изменяется значение целевой функции.

ЛЕММА 4. *При всех $k = 0, 1, 2, \dots$ справедливо неравенство*

$$\|v_k\|^2 - \|v_{k+1}\|^2 \geq t_k p'_k \Delta_k. \quad (10)$$

Неравенство выполняется как равенство на неусеченных итерациях и является строгим на усеченных итерациях.

Доказательство. Пусть k -я итерация МДМ–алгоритма будет неусеченной ($\hat{t}_k \leq 1$ и $t_k = \hat{t}_k$). Тогда в силу (6) получим

$$\begin{aligned} \|v_{k+1}\|^2 &= \|v_k\|^2 - \frac{\Delta_k^2}{\|a'_k - a''_k\|^2} = \|v_k\|^2 - p'_k \Delta_k \left(\frac{\Delta_k}{p'_k \|a'_k - a''_k\|^2} \right) = \\ &= \|v_k\|^2 - p'_k \Delta_k t_k, \end{aligned}$$

что соответствует утверждению леммы.

В случае усеченной итерации ($\hat{t}_k > 1$, $t_k = 1$) воспользуемся формулой (7). Запишем

$$\begin{aligned} \|v_{k+1}\|^2 &= \|v_k\|^2 - 2p'_k \Delta_k + (p'_k)^2 \|a'_k - a''_k\|^2 = \\ &= \|v_k\|^2 - p'_k \Delta_k - p'_k \Delta_k \left(1 - \frac{1}{\hat{t}_k} \right) < \|v_k\|^2 - t_k p'_k \Delta_k. \end{aligned}$$

Лемма доказана. □

Из 4 леммы следует, в частности, что

$$\|v_k\| > \|v_{k+1}\| \quad \text{при всех } k = 0, 1, 2, \dots$$

Это значит, что последовательность норм $\{\|v_k\|\}$, состоящая из положительных чисел, является строго убывающей. Она имеет предел

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|v_k\| = \alpha. \quad (11)$$

Покажем, что $\alpha = 0$. Тогда формула (11) примет вид

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|v_k\| = 0.$$

Это, в свою очередь, равносильно предельному соотношению

$$\lim_{k \rightarrow \infty} v_k = \mathbf{0}.$$

Таким образом, вопрос о сходимости МДМ–алгоритма свелся к проверке равенства $\alpha = 0$.

4°. Неусеченные итерации. Напомним, что MDM–алгоритм состоит из неусеченных и усеченных итераций. Рассмотрим более детально неусеченные итерации.

ЛЕММА 5. *Множество неусеченных итераций в MDM–алгоритме бесконечно.*

Доказательство. Допустим противное, что, начиная с некоторого номера \hat{k} , все следующие итерации будут усеченными. Тогда согласно (8) при $k > \hat{k}$ компоненты $p_k[i]$ вектора коэффициентов p_k , определяющего план v_k , будут получаться в результате перераспределения значений $p_{\hat{k}}[l]$, $l \in 1 : m$. Таких перераспределений конечное число. Это гарантирует, что в последовательности $v_{\hat{k}}, v_{\hat{k}+1}, v_{\hat{k}+2}, \dots$ встретятся два одинаковых плана. Такое заключение противоречит строгому убыванию последовательности норм $\{\|v_k\|\}$. \square

Приведем еще оценку уменьшения целевой функции на неусеченной k -й итерации:

$$\|v_k\|^2 - \|v_{k+1}\|^2 \geq \frac{\Delta_k^2}{\delta^2}, \quad (12)$$

где δ — диаметр конечного множества H . Справедливость этой оценки следует из леммы 4. Действительно,

$$\|v_k\|^2 - \|v_{k+1}\|^2 = (\hat{t}_k p'_k) \Delta_k = \frac{\Delta_k^2}{\|a'_k - a''_k\|^2} \geq \frac{\Delta_k^2}{\delta^2}.$$

5°. Сходимость MDM–алгоритма. В реализации MDM–алгоритма решения задачи (1) выделим бесконечную последовательность всех неусеченных итераций. Пусть это будут k_j -е итерации, $j = 1, 2, \dots$ На основании (12) имеем

$$\|v_{k_j}\|^2 - \|v_{k_j+1}\|^2 \geq \frac{\Delta_{k_j}^2}{\delta^2}. \quad (13)$$

Так как последовательность норм $\{\|v_k\|\}$ сходится, то левая часть неравенства (13) стремится к нулю при $j \rightarrow \infty$. Значит,

$$\lim_{j \rightarrow \infty} \Delta_{k_j} = 0.$$

По лемме 2

$$\lim_{j \rightarrow \infty} \|v_{k_j}\| = 0. \quad (14)$$

Сравнивая (14) и (11), заключаем, что $\alpha = 0$.

Таким образом, доказано следующее утверждение.

ТЕОРЕМА (о сходимости MDM–алгоритма). *Пусть $\mathbf{0} \in G$ и выполнено условие (9). Тогда последовательность планов задачи (1), построенная с помощью MDM–алгоритма, сходится к нулевому вектору (к началу координат).*

6°. Численные примеры. Перед тем, как перейти к рассмотрению конкретных примеров, отметим возможную неоднозначность в описании алгоритма. Она заключается в выборе индексов i_k' и i_k'' в случае, когда подходящих индексов несколько. Исследование стратегий выбора индексов выходит за рамки данной работы. Если подходящих индексов несколько, всегда будем выбирать наименьший из них.

Что касается критерия остановки алгоритма, то будем следить за значением оценки Δ_k . Как только она станет меньше выбранного ε , алгоритм завершает работу. В качестве начального приближения во всех примерах берется $v_0 = a_1$.

Рассмотрим первый пример: $a_1 = (-1, 1)$, $a_2 = (2, 1)$, $a_3 = (-1, -3)$. На рисунках 1–6 представлена визуализация работы алгоритма. Синей точкой обозначается текущее приближение v_k , красной стрелкой указывается направление $a_k'' - a_k'$, а желтый цвет имеет отрезок, соединяющий v_k и \hat{v}_k . Всего за две итерации мы получаем $\Delta_2 = 0$. Обе итерации являются неусеченными.

Рассмотрим второй пример: $a_1 = (3, 3)$, $a_2 = (1, -2)$, $a_3 = (-1, 2)$. Здесь нулевой вектор находится на одной из сторон треугольника. На рисунках 7–14 представлена визуализация работы алгоритма. За три итерации мы получаем $\Delta_3 = 0$. На рисунке 11 первая итерация является усеченной.

Рассмотрим третий пример: $a_1 = (2, -2)$, $a_2 = (-2, 0)$, $a_3 = (1, 1)$. На рисунке 15 представлена визуализация работы алгоритма. Рисунок слева демонстрирует общую картину, а справа — заключительные шаги алгоритма. Всего алгоритм сделал 37 шагов для достижения заданной точности $\varepsilon = 10^{-5}$.

Перейдем к заключительному четвертому примеру: $a_1 = (1, -2)$, $a_2 = (-2, 0)$, $a_3 = (1, 0)$. Как и во втором примере, нулевой вектор находится на одной из сторон треугольника. На рисунке 16 представлена визуализация работы алгоритма. Рисунок слева демонстрирует общую картину, а справа — заключительные шаги алгоритма. Всего алгоритм сделал 23 шага для достижения заданной точности $\varepsilon = 10^{-5}$.

Рассмотрим теперь примеры в пространствах большей размерности. Обозначим размерность пространства n и количество точек m , а сами точки будем выбирать случайно равномерно распределенными на кубе $[-10^3, 10^3]^n$. При достаточно большом количестве точек, выбранных указанным способом, нулевой вектор будет находиться внутри выпуклой оболочки. В таблице 1 представлено среднее значение количества итераций, требуемых алгоритму для решения 1000 генерированных примеров при фиксированных n , m и $\varepsilon = 10^{-7}$.

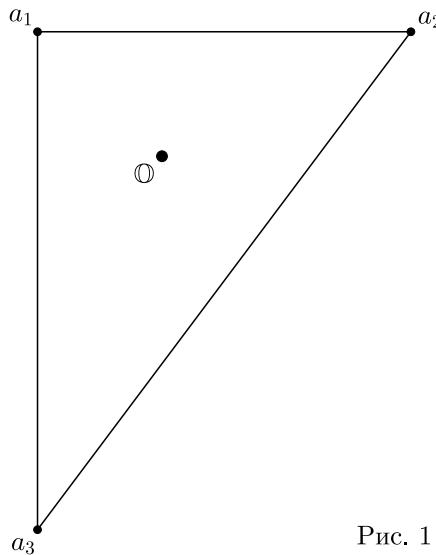


Рис. 1

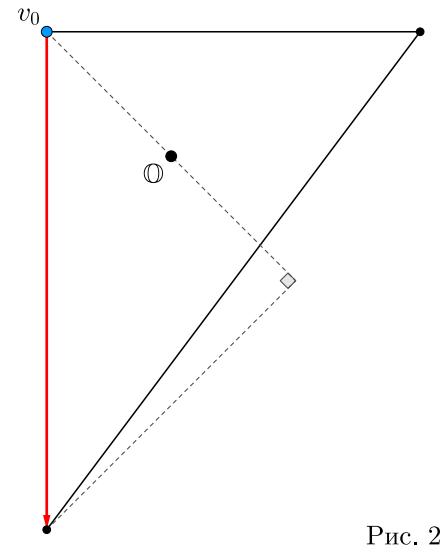


Рис. 2

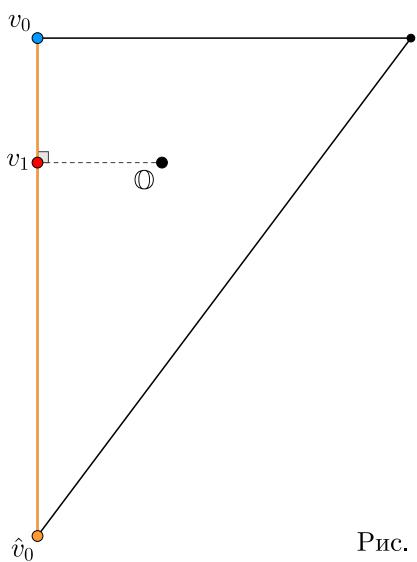


Рис. 3

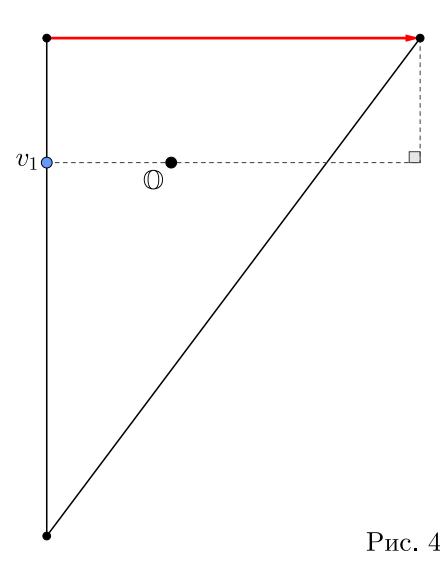


Рис. 4

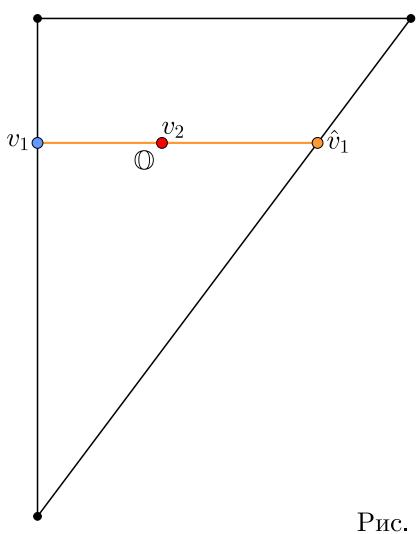


Рис. 5

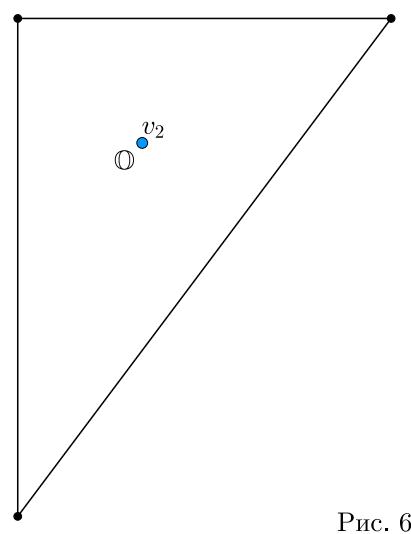


Рис. 6

Рис. 1–6: Первый пример

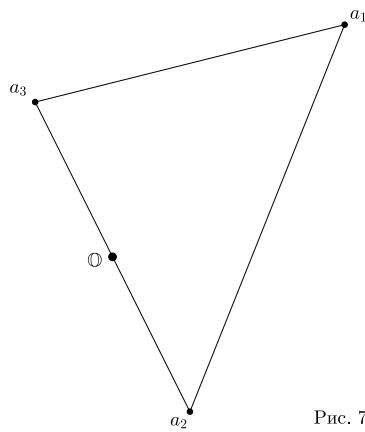


Рис. 7

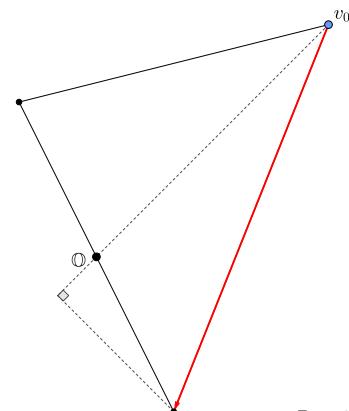


Рис. 8

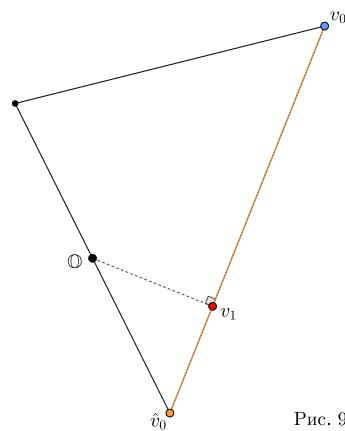


Рис. 9

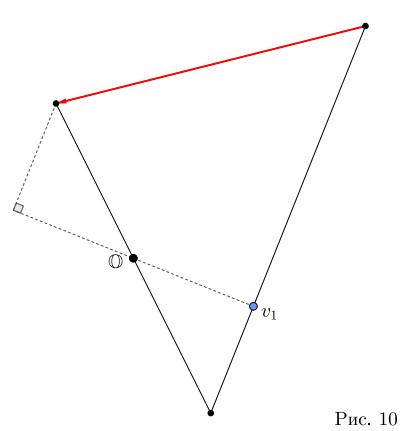


Рис. 10

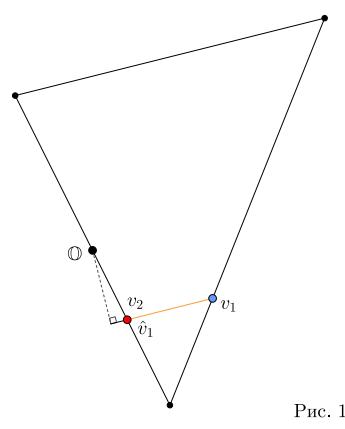


Рис. 11

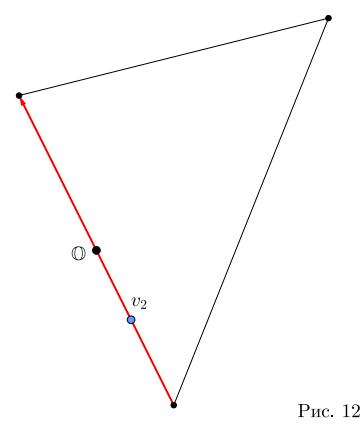


Рис. 12

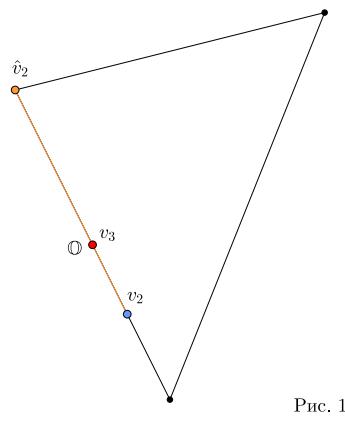


Рис. 13

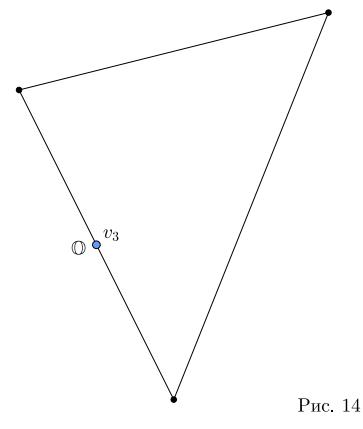


Рис. 14

Рис. 7–14: Второй пример

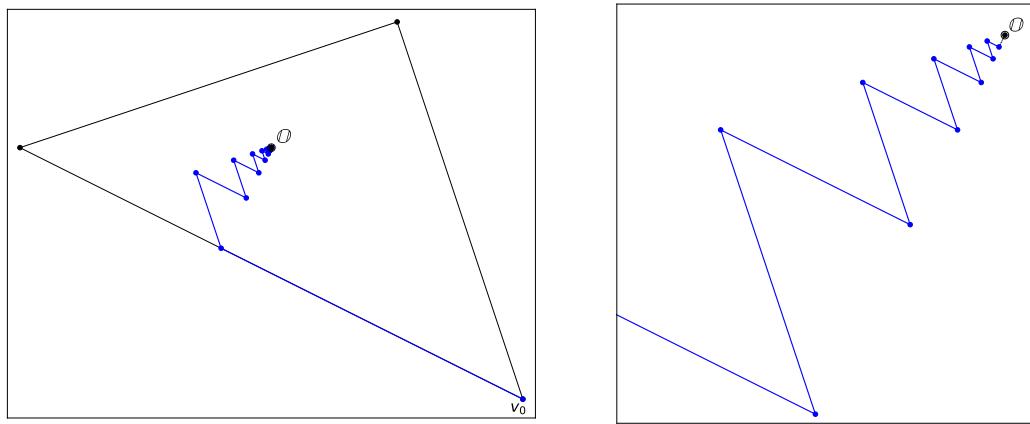


Рис. 15: Третий пример

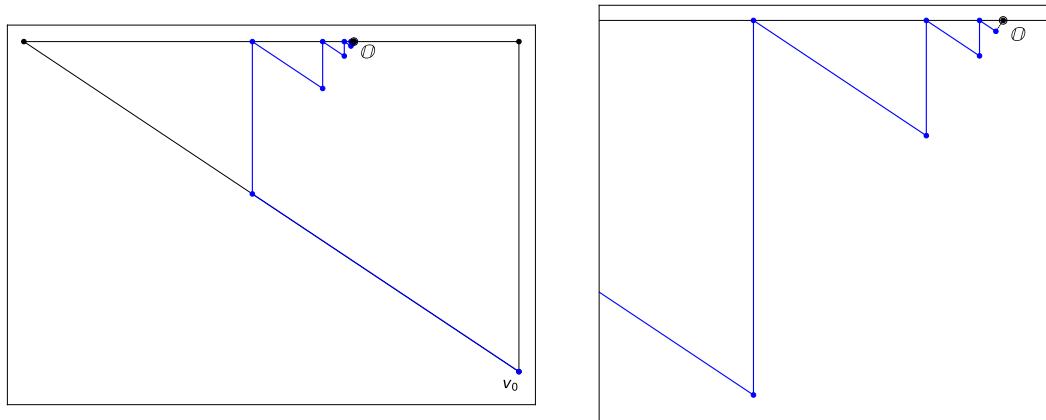


Рис. 16: Четвертый пример

Таблица 1. Среднее количество итераций для различных n и m

n	m	Среднее количество итераций
3	30	54.2
5	50	83.9
10	100	164.1
20	200	329.9
50	500	820.5

ЛИТЕРАТУРА

1. Митчелл Б. Ф., Демьянов В. Ф., Малоземов В. Н. *Нахождение ближайшей к началу координат точки многогранника* // Вестник ЛГУ. 1971. № 19. С. 38–45.
2. Малоземов В. Н. *МДМ-методу – 50 лет* // Семинар «OML». Литература. Публикации участников семинара.
(<http://oml.cmlaboratory.com/literatura.shtml>)