МДМ-МЕТОДУ — 40 ЛЕТ*

В. Н. Малозёмов

malv@math.spbu.ru

10 декабря 2011 г.

1°. Пусть в пространстве $\mathbb{R}^n$ заданы m точек,

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

Обозначим через G выпуклую оболочку множества H.

Ставится задача: *найти точку из G, ближайшую (в евклидовой норме) к началу координат.* Задачу можно записать так:

$$\|v\|^2 \to \min_{v \in G}. \tag{1}$$

Задача (1) имеет решение и оно единственно. Обозначим его v_*.

Вопрос о нахождении v_* возник как вспомогательная задача в оптимальном управлении [1] и негладкой оптимизации [2]. В 1971 году в работе [3] был предложен простой итерационный метод для решения задачи (1), который в дальнейшем получил название "МДМ-метод" (см., например [4, 5]). В данном докладе я возвращаюсь к анализу МДМ-метода с современных позиций.

2°. Отметим прежде всего, что при всех $v \in G$ выполняется неравенство

$$\langle v, v_* \rangle \geqslant \langle v_*, v_* \rangle. \tag{2}$$

Действительно, зафиксируем $v \in G$. В силу выпуклости множества G точка $v_* + t(v - v_*)$ при всех $t \in (0,1)$ принадлежит G, поэтому

$$\langle v_*, v_* \rangle \leqslant \langle v_* + t(v - v_*), v_* + t(v - v_*) \rangle = \langle v_*, v_* \rangle + 2t\langle v_*, v - v_* \rangle + t^2\|v - v_*\|^2.$$

Отсюда следует, что

$$\langle v_*, v - v_* \rangle + \tfrac{1}{2}t\|v - v_*\|^2 \geqslant 0.$$

В пределе при $t \to +0$ получим неравенство, равносильное (2).

Неравенство (2) равносильно также следующему неравенству

$$\|v - v_*\|^2 \leqslant \|v\|^2 - \|v_*\|^2 \quad \forall v \in G. \tag{3}$$

*Семинар по дискретному гармоническому анализу и геометрическому моделированию «DHA & CAGD»: `http://www.dha.spb.ru/`

3°. Обозначим через A матрицу со столбцами $a_1, \dots, a_m$. Тогда любой вектор v из выпуклой оболочки G множества H допускает представление

$$v = Ap, \quad p \geqslant \mathbb{O}, \quad \sum_{i=1}^{m} p[i] = 1. \tag{4}$$

Первичным в этой формуле является вектор коэффициентов p. Носитель вектора p обозначим $M_+(p)$, так что

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

Введём величину

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

где $v = Ap$. Вектор p удовлетворяет условиям, указанным в формуле (4). Множество таких векторов обозначим P.

ЛЕММА 1. *При любом $v = Ap$, $p \in P$, справедливо неравенство*

$$\|v - v_*\|^2 \leqslant \Delta(p). \tag{5}$$

Доказательство. Согласно (2) имеем

$$\begin{aligned} \|v - v_*\|^2 = \|v\|^2 - 2\langle v, v_*\rangle + \|v_*\|^2 \leqslant \|v\|^2 - \langle v, v_*\rangle = \\ = \sum_{i \in M_+(p)} p[i]\langle a_i, v\rangle - \sum_{i=1}^{m} p_*[i]\langle a_i, v\rangle \leqslant \\ \leqslant \max_{i \in M_+(p)} \langle a_i, v\rangle - \min_{i \in 1:m} \langle a_i, v\rangle = \Delta(p). \end{aligned}$$

Лемма доказана. □

Из (5) следует, в частности, что

$$\Delta(p) \geqslant 0 \quad \forall p \in P. \tag{6}$$

ЛЕММА 2. *Равенство в* (6) *достигается тогда и только тогда, когда вектор $v = Ap$ является решением задачи* (1).

Доказательство. Неравенство (5) гарантирует оптимальность вектора $v = Ap$ в случае $\Delta(p) = 0$.

Наоборот, возьмём решение $v_* = Ap_*$ задачи (1) и покажем, что $\Delta(p_*) = 0$. Пусть

$$\Delta(p_*) = \langle a_{i'} - a_{i''}, v_*\rangle,$$

где $i' \in M_+(p_*)$, $i'' \in 1:m$. Введём вектор

$$\hat{v}_* = v_* - p_*[i'](a_{i'} - a_{i''})$$

(коэффициент при $a_{i'}$ передали вектору $a_{i''}$). Очевидно, что $\hat{v}_* \in G$. Имеем

$$\langle \hat{v}_*, v_* \rangle = \langle v_*, v_* \rangle - p_*[i'] \langle a_{i'} - a_{i''}, v_* \rangle = \langle v_*, v_* \rangle - p_*[i'] \Delta(p_*).$$

В силу (2) и положительности $p_*[i']$ получаем $\Delta(p_*) \leqslant 0$. Вместе с неравенством (6) это приводит к равенству $\Delta(p_*) = 0$.

Лемма доказана. $\square$

4°. Обратимся к МДМ-методу. Возьмём начальное приближение $v_0 \in G$.

Пусть уже имеется k-е приближение $v_k = Ap_k$, $p_k \in P$. Опишем построение v_{k+1}.

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

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

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 2, v_k — решение 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 $v_{k+1} = v_k(t_k)$ (см. рис.).

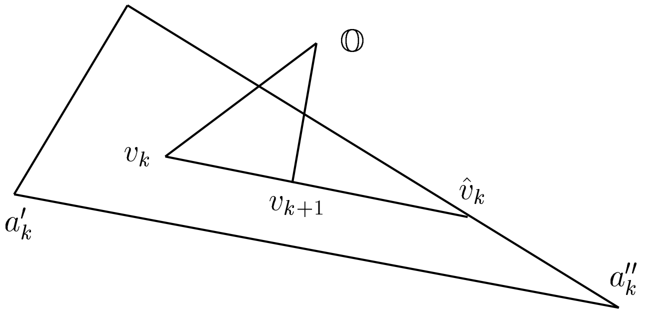

Рис.

Нетрудно понять, что

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

Укажем явную формулу для t_k. Имеем

$$\begin{aligned} \|v_k(t)\|^2 &= \|v_k\|^2 + 2t\langle v_k, \hat v_k - v_k\rangle + t^2\|\hat v_k - v_k\|^2 = \\ &= \|v_k\|^2 - 2tp'_k\,\Delta_k + t^2\|\hat v_k - v_k\|^2. \end{aligned} \tag{7}$$

Абсолютный минимум $v_k(t)$ на $\mathbb{R}$ достигается в точке

$$\hat t_k = \frac{p'_k\,\Delta_k}{\|\hat v_k - v_k\|^2} = \frac{p'_k\,\Delta_k}{(p'_k)^2\,\|a'_k - a''_k\|^2} = \frac{\Delta_k}{p'_k\|a'_k - a''_k\|^2}. \tag{8}$$

Ясно, что $\hat t_k > 0$, поэтому

$$t_k = \begin{cases} \hat t_k, & \text{если } \hat t_k < 1, \\ 1, & \text{если } \hat t_k \geqslant 1. \end{cases}$$

Описание МДМ-метода завершено.

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

$$\Delta_k > 0 \quad \text{и, как следствие,} \quad \|v_{k+1}\| < \|v_k\| \quad \text{при всех} \quad k = 0, 1, \ldots. \tag{9}$$

Покажем, что в этом случае последовательность $\{v_k\}$ сходится к v_* — решению задачи (1).

5°. Начнём со вспомогательных утверждений.

ЛЕММА 3. *Справедливо предельное соотношение*

$$\lim_{k\to\infty} p'_k\,\Delta_k = 0. \tag{10}$$

Доказательство. Допустим противное, то есть что существует бесконечная подпоследовательность $\{p'_{k_s}\Delta_{k_s}\}$, такая, что

$$p'_{k_s}\Delta_{k_s} \geqslant \varepsilon > 0.$$

Обозначим через d диаметр множества G,

$$d = \max_{u\in G,\, v\in G} \|u - v\|.$$

Согласно (7) имеем

$$\|v_{k_s}(t)\|^2 \leqslant \|v_{k_s}\|^2 - 2t\varepsilon + t^2d^2 = \|v_{k_s}\|^2 - t\varepsilon - t(\varepsilon - td^2),$$

поэтому при $t \in [0, \varepsilon/d^2]$ будет

$$\|v_{k_s}(t)\|^2 \leqslant \|v_{k_s}\|^2 - t\varepsilon.$$

Положим $t_* = \min\{1, \varepsilon/d^2\}$. Тогда

$$\|v_{k_s+1}\|^2 = \min_{t\in[0,1]} \|v_{k_s}(t)\|^2 \leqslant \|v_{k_s}(t_*)\|^2 \leqslant \|v_{k_s}\|^2 - t_*\varepsilon.$$

Неограниченное число указанных понижений в монотонно убывающей последовательности $\left\{\|v_k\|^2\right\}$ противоречит неотрицательности её элементов. Лемма доказана. □

ЛЕММА 4. *Справедливо предельное соотношение*

$$\varliminf_{k\to\infty} \Delta_k = 0.$$

Доказательство. Допустим противное:

$$\varliminf_{k\to\infty} \Delta_k = \Delta' > 0.$$

В этом случае для достаточно больших $k \geqslant k_0$ будет выполнятся неравенство

$$\Delta_k \geqslant \Delta'/2. \tag{11}$$

Отсюда и из (10) следует, в частности, что

$$p'_k \to 0 \quad \text{при} \quad k \to \infty.$$

Далее, согласно (8) и (11)

$$\hat{t}_k \geqslant \frac{\Delta'}{2p'_k\, d^2},$$

так что $\hat{t}_k \to +\infty$ при $k \to \infty$. На основании определения t_k заключаем, что $t_k = 1$ при $k \geqslant k_1 \geqslant k_0$. Это приводит к соотношению

$$v_{k+1} = \hat{v}_k, \quad k \geqslant k_1. \tag{12}$$

Рассмотрим последовательность

$$v_{k_1},\, v_{k_1+1},\, v_{k_1+2}, \dots . \tag{13}$$

Соотношение (12) показывает, что компоненты $p_k[i]$ вектора p_k, определяющего v_k, получаются путём перераспределения значений $p_{k_1}[i]$, $i \in 1:m$, поэтому в последовательности (13) может быть лишь конечное число попарно различных элементов. Но это противоречит неравенству $\|v_{k+1}\| < \|v_k\|$, справедливому при всех $k = 0, 1, 2, \dots$.

Лемма доказана. $\square$

Теперь легко доказать утверждение о сходимости МДМ-метода.

ТЕОРЕМА 1. *При выполнении условия* (9) *последовательность* $\{v_k\}$, *построенная МДМ-методом, сходится к* v_*.

Доказательство. Согласно лемме 4 существует подпоследовательность $\{\Delta_{k_s}\}$, сходящаяся к нулю. По лемме 1 соответствующая подпоследовательность $\{v_{k_s}\}$ сходится к v_*. В частности, $\|v_{k_s}\| \to \|v_*\|$ при $s \to \infty$. В силу (9) вся последовательность $\big\{\|v_k\|\big\}$ строго убывает, поэтому $\|v_k\| \to \|v_*\|$ при $k \to \infty$. Остаётся сослаться на неравенство (3). Теорема доказана. $\square$

6°. Отметим, что $v_* = \mathbb{O}$ тогда и только тогда, когда $\mathbb{O} \in G$. В этом пункте считаем, что $v_* \neq \mathbb{O}$.

Введём гиперплоскость

$$L = \big\{ x \mid \langle v_*, x \rangle = \langle v_*, v_* \rangle \big\}.$$

ТЕОРЕМА 2. *Если* $v_* \neq \mathbb{O}$, *то, начиная с некоторого номера, все точки последовательности* $\{v_k\}$ *принадлежат* L.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Обозначим $M = 1 : m$,

$$M_0 = \{i \in M \mid a_i \in L\}, \quad M_1 = M \setminus M_0.$$

Согласно (2)

$$\langle a_i, v_* \rangle \geqslant \langle v_*, v_* \rangle, \quad i \in 1 : m,$$

поэтому при $i \in M_1$

$$\langle a_i, v_* \rangle > \langle v_*, v_* \rangle.$$

Положим

$$\tau = \min_{i \in M_1} \langle a_i, v_* \rangle - \langle v_*, v_* \rangle > 0.$$

Очевидно, что

$$\langle a_i, v_* \rangle \geqslant \langle v_*, v_* \rangle + \tau, \quad i \in M_1. \tag{14}$$

Воспользуемся теоремой 1, в силу которой найдётся индекс k_0, такой, что при $k \geqslant k_0$

$$\max_{i \in 1:m} \big| \langle a_i, v_k \rangle - \langle a_i, v_* \rangle \big| \leqslant \tfrac{\tau}{4}.$$

При тех же k и $i \in M_0$

$$\langle a_i, v_k \rangle \leqslant \langle a_i, v_* \rangle + \tfrac{\tau}{4} = \langle v_*, v_* \rangle + \tfrac{\tau}{4}, \tag{15}$$

в то время как при $i \in M_1$ согласно (14)

$$\langle a_i, v_k \rangle \geqslant \langle a_i, v_* \rangle - \tfrac{\tau}{4} \geqslant \langle v_*, v_* \rangle + \tfrac{3\tau}{4}. \tag{16}$$

Значит, при $k \geqslant k_0$

$$\min_{i \in 1:m} \langle a_i, v_k \rangle = \min_{i \in M_0} \langle a_i, v_k \rangle. \tag{17}$$

Запишем представление

$$v_k = \sum_{i \in M_0} p_k[i] a_i + \sum_{i \in M_1} p_k[i] a_i.$$

Покажем, что в последовательности

$$v_{k_0},\ v_{k_0+1},\ v_{k_0+2}, \ldots \tag{18}$$

встретится элемент v_k, у которого $p_k[i] = 0$ при всех $i \in M_1$.

Допустим противное. На основании (15) и (16) получим

$$\min_{i \in 1:m} \langle a_i, v_k \rangle \leqslant \langle v_*, v_* \rangle + \tfrac{\tau}{4},$$
$$\max_{i \in M_+(p_k)} \langle a_i, v_k \rangle \geqslant \langle v_*, v_* \rangle + \tfrac{3\tau}{4}.$$

Отсюда следует, что

$$\Delta_k \geqslant \tau/2, \quad k \geqslant k_0. \tag{19}$$

Далее, в силу определения M_0 и τ имеем

$$\langle v_k - v_*, v_* \rangle = \Big\langle \sum_{i=1}^{m} p_k[i](a_i - v_*), v_* \Big\rangle =$$

$$= \sum_{i \in M_1} p_k[i]\langle a_i - v_*, v_* \rangle \geqslant \tau \sum_{i \in M_1} p_k[i].$$

Левая часть этого неравенства стремится к нулю при $k \to \infty$, поэтому

$$\lim_{k\to\infty} \sum_{i \in M_1} p_k[i] = 0.$$

Выберем столь большое $k_1 \geqslant k_0$, чтобы при $k \geqslant k_1$ выполнялось неравенство

$$\sum_{i \in M_1} p_k[i] \leqslant \frac{\tau}{2d^2}.$$

На основании (8) и (19) получим

$$\hat{t}_k = \frac{\Delta_k}{p'_k\|a'_k - a''_k\|^2} \geqslant \frac{\tau}{2d^2 \sum_{i\in M_1} p_k[i]} \geqslant 1.$$

Значит, $t_k = 1$ и $v_{k+1} = \hat{v}_k$ при $k \geqslant k_1$. Как установлено при доказательстве леммы 4, отсюда следует, что в последовательности v_{k_1}, v_{k_1+1}, $v_{k_1+2}, \ldots$ может быть лишь конечное число попарно различных элементов. Это противоречит строгому убыванию $\|v_k\|$.

Итак, в последовательности (18) встретится элемент v_k, имеющий представление

$$v_k = \sum_{i\in M_0} p_k[i]a_i, \quad p_k \geqslant \mathbb{O}, \quad \sum_{i \in M_0} p_k[i] = 1. \tag{20}$$

В частности, v_k принадлежит гиперплоскости L. Согласно описанию МДМ-метода и соотношению (17) последующие элементы последовательности эту плоскость не покинут.

Теорема доказана. □

7°. Лемма 4 допускает усиление.

ТЕОРЕМА 3. *Справедливо предельное соотношение*

$$\lim_{k\to\infty} \Delta_k = 0.$$

Д о к а з а т е л ь с т в о. В случае $v_* = \mathbb{O}$ (когда $v_k \to \mathbb{O}$) утверждение очевидно. Действительно,

$$\Delta_k \leqslant \max_{i\in 1:m}\langle a_i, v_k\rangle - \min_{i\in 1:m}\langle a_i, v_k\rangle.$$

Правая часть этого неравенства стремится к нулю при $k \to \infty$. Остаётся учесть неотрицательность Δ_k.

Пусть $v_* \neq \mathbb{O}$. Согласно (20) при больших k

$$\max_{i\in M_+(p_k)}\langle a_i, v_k\rangle \leqslant \max_{i\in M_0}\langle a_i, v_k\rangle.$$

Принимая во внимание (17), приходим к неравенству

$$\Delta_k \leqslant \max_{i\in M_0}\langle a_i, v_k\rangle - \min_{i\in M_0}\langle a_i, v_k\rangle.$$

В силу теоремы 1 и определения M_0 имеем

$$\lim_{k\to\infty}\bigl[\max_{i\in M_0}\langle a_i, v_k\rangle - \min_{i\in M_0}\langle a_i, v_k\rangle\bigr] = \max_{i\in M_0}\langle a_i, v_*\rangle - \min_{i\in M_0}\langle a_i, v_*\rangle = 0.$$

Остаётся учесть неотрицательность Δ_k.

Теорема доказана. $\square$

8°. МДМ-метод позволяет за конечное число шагов строго отделить начало координат от G в случае, когда $\mathbb{O} \notin G$.

ТЕОРЕМА 4. *Условие $\mathbb{O} \notin G$ выполняется тогда и только тогда, когда при некотором k*

$$\Delta_k < \|v_k\|^2. \tag{21}$$

Неравенство (21) *гарантирует, что гиперплоскость*

$$\langle v_k, x\rangle - \langle v_k, a_k''\rangle = 0 \tag{22}$$

строго отделяет начало координат от множества G.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Пусть $\mathbb{O} \notin G$. Справедливость неравенства (21) при некотором k следует из того, что $\Delta_k \to 0$ и $v_k \to v_*$, $v_* \neq \mathbb{O}$.

Наоборот, на основании (21) и (5) получаем

$$\|v_k - v_*\|^2 < \|v_k\|^2.$$

Такое неравенство возможно только при $v_* \neq \mathbb{O}$.

Перепишем неравенство (21) в развёрнутом виде

$$\langle a_k' - a_k'', v_k\rangle < \langle v_k, v_k\rangle.$$

Отсюда следует, что
$$-\langle a_k'', v_k\rangle < \langle v_k, v_k - a_k'\rangle.$$
Так как
$$\langle v_k, v_k\rangle = \sum_{i\in M_+(p_k)} p_k[i]\langle a_i, v_k\rangle \leqslant \langle a_k', v_k\rangle,$$
то
$$-\langle a_k'', v_k\rangle < 0. \tag{23}$$

Вместе с тем, при всех $v \in G$
$$\langle v_k, v\rangle = \sum_{i=1}^{m} p[i]\langle v_k, a_i\rangle \geqslant \langle a_k'', v_k\rangle,$$
так что
$$\langle v_k, v\rangle - \langle v_k, a_k''\rangle \geqslant 0. \tag{24}$$
На основании (23) и (24) заключаем, что гиперплоскость (22) строго отделяет начало координат от множества G.

Теорема доказана. □

ЛИТЕРАТУРА

1. Gilbert E. G. *An iterative procedure for computing the minimum of quadratic form on a convex set* // J. SIAM Control. 1966. Vol. 4. No. 1. P. 61–80.

2. Demyanov V. F. *Algorithms for some minimax problems* // J. Computer and System Sciences. 1968. Vol. 2. No. 4. P. 342–380.

3. Митчелл Б. Ф., Демьянов В. Ф., Малоземов В. Н. *Нахождение ближайшей к началу координат точки многогранника* // Вестник ЛГУ. 1971. № 19. С. 38–45.

4. Barbero A., Lopez J., Dorronsoro J. R. *An accelerated MDM algorithm for SVM Training* // European Symposium on Artificial Neural Networks — Advances in Computational Intelligence and Learning. Bruges (Belgium), 23–25 April 2008. P. 421–426.

5. Lazaro J. L. *On the relationship among the MDM, SMO and SVM-Light algorithms for Training Support Vector Machines* // Master's thesis. Universidad Autonoma de Madrid. Madrid, 2008.