РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ИНСТИТУТ СИСТЕМНОГО АНАЛИЗА (ИСА РАН)
ДИНАМИКА НЕОДНОРОДНЫХ СИСТЕМ
Под редакцией член-корреспондента РАН Ю.С. Попкова
2005, № 9, с. 123–140.

Голиков А.И., Евтушенко Ю.Г., Кетабчи С.
Вычислительный центр Российской академии наук

О СЕМЕЙСТВАХ ГИПЕРПЛОСКОСТЕЙ, РАЗДЕЛЯЮЩИХ ПОЛИТОПЫ[1]

1. Введение

Среди многочисленных проблем, возникающих в области распознавания, укажем задачу построения гиперплоскостей, разделяющих выпуклые множества. Случай, когда оба множества — полиэдры, заданные с помощью систем линейных неравенств и уравнений, рассмотрен в [1]. Данная работа посвящена построению семейства гиперплоскостей, разделяющих политопы — выпуклые оболочки конечного набора точек. Предлагаемый численный подход к построению семейства разделяющих гиперплоскостей максимальной толщины основан на использовании метода модифицированных функций Лагранжа и обобщенного метода Ньютона для безусловной минимизации кусочно-квадратичной функции. Метод реализован в системе MATLAB и позволяет строить разделяющие гиперплоскости для политопов, заданных несколькими миллионами точек.

Предполагается, что в $\mathbb{R}^n$ задан один набор из m_1 точек и другой набор из m_2 точек. Общее число точек равно $m_1 + m_2 = m$. Выпуклые оболочки, натянутые на эти множества (политопы), обозначены через X_1 и X_2 соответственно.

В разд. 2 ставится задача нахождения вектора, соединяющего две ближайшие точки из двух политопов. Эта задача заменена эквивалентной, для которой построена двойственная задача. Приведены формулы, определяющие семейство гиперплоскостей максимальной толщины, разделяющих политопы.

В разд. 3 метод модифицированных функций Лагранжа (МФЛ) и обобщенный метод Ньютона применяются к прямой задаче, а в разд. 4 — к двойственной. В задачах, где $m \gg n$, целесообразно использовать метод МФЛ для решения двойственной задачи, так как в ней многократно ищется безусловный минимум в $(n+1)$-мерном пространстве. Если $n \gg m$, то метод МФЛ применяется к прямой задаче. Благодаря этому многократная безусловная минимизация обобщенным методом Ньютона проводится в m-мерном пространстве. Численные методы построения семейства гиперплоскостей максимальной толщины, разделяющих политопы, программно реализованы в системе MATLAB. В качестве примера решена задача о разделении политопов, задаваемых пятью миллионами точек.

В разд. 5 и 6 изучается случай, когда политопы пересекаются. В результате использования сжатия (коррекции) выпуклых оболочек получаются два непересекающихся политопа, и для них строится семейство разделяющих гиперплоскостей. В качестве разделяющей гиперплоскости берется гиперплоскость, проходящая через середину семейства. Она условно разделяет исходные политопы.

[1]Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (код проекта 03-01-00465) и по программе поддержки ведущих научных школ (код проекта НШ-1737.2003.1).

2. Построение семейства разделяющих гиперплоскостей максимальной толщины

Введем прямоугольные матрицы M и N размерами $m_1 \times n$, $m_2 \times n$ соответственно. Их строками являются $M_1, \ldots, M_{m_1}$ и $N_1, \ldots, N_{m_2}$ соответственно. Можно сказать, что строки матрицы M задают m_1 точек, строки матрицы N задают m_2 точек из n-мерного евклидова пространства $\mathbb{R}^n$. Выпуклые оболочки множеств, натянутые на $M_1, \ldots, M_{m_1}$ и на $N_1, \ldots, N_{m_2}$ (политопы), будем обозначать, соответственно, через X_1 и X_2:

$$\begin{aligned} X_1 &= \left\{ x_1 \in \mathbb{R}^n : x_1 = \sum_{j=1}^{m_1} w_1^j M_j^\top = M^\top w_1, \;\; w_1 \in S_1 \right\}, \\ X_2 &= \left\{ x_2 \in \mathbb{R}^n : x_2 = \sum_{j=1}^{m_2} w_2^j N_j^\top = N^\top w_2, \;\; w_2 \in S_2 \right\}, \end{aligned}$$

где S_1, S_2 — симплексы, определяемые по формуле

$$S_i = \left\{ w_i \in \mathbb{R}_+^{m_i} : \sum_{j=1}^{m_i} w_i^j = 1 \right\}, \quad i = 1, 2.$$

Полное количество заданных точек равно $m = m_1 + m_2$. Пусть непустые множества X_1 и X_2 не пересекаются. Тогда пустым будет множество точек, принадлежащих одновременно X_1 и X_2, т.е. пусто множество точек w_1 и w_2, удовлетворяющих условиям $M^\top w_1 = N^\top w_2$, $w_1 \in S_1$, $w_2 \in S_2$.

Поставим задачу нахождения кратчайшего расстояния между политопами X_1 и X_2

$$\min_{w_1 \in S_1} \min_{w_2 \in S_2} \frac{\|M^\top w_1 - N^\top w_2\|^2}{2}. \tag{1}$$

Введем в рассмотрение векторы $v_1 \in \mathbb{R}_+^{m_1}$ и $v_2 \in \mathbb{R}_+^{m_2}$ и вместо задачи (1) определим близкую задачу минимизации на положительном ортанте

$$\min_{v_1 \in \mathbb{R}_+^{m_1}} \min_{v_2 \in \mathbb{R}_+^{m_2}} \left[\frac{\|M^\top v_1 - N^\top v_2\|^2}{2} - e_{m_1}^\top v_1 \right] \tag{2}$$

при одном дополнительном условии: $e_{m_1}^\top v_1 = e_{m_2}^\top v_2$, где e_i — вектор из $\mathbb{R}^i$, все компоненты которого равны единице.

Теорема 1. *Если известно* $[w_1^*, w_2^*]$ *— решение задачи* (1)*, то в качестве решения задачи* (2) *можно взять*

$$v_1^* = w_1^*, \qquad v_2^* = w_2^*;$$

если известно $[v_1^*, v_2^*]$ *— решение задачи* (2)*, то решение задачи* (1) *определяется по формулам:*

$$w_1^* = \frac{v_1^*}{\delta_*}, \quad w_2^* = \frac{v_2^*}{\delta_*}, \qquad \delta_* = e_{m_1}^\top v_1^*.$$

Доказательство. Функция Лагранжа для задачи (1) имеет вид

$$L(w_1, w_2, s_1, s_2) = \frac{\|M^\top w_1 - N^\top w_2\|^2}{2} + s_1(1 - e_{m_1}^\top w_1) + s_2(1 - e_{m_2}^\top w_2),$$

где s_1 и s_2 — множители Лагранжа (скаляры).

Для задачи (1) условия Куна–Таккера записываются следующим образом:

$$L_{w_1}(w_1, w_2, s_1, s_2) = M(M^\top w_1 - N^\top w_2) - s_1 e_{m_1} \geq 0_{m_1}, \tag{3}$$
$$w_1^\top L_{w_1}(w_1, w_2, s_1, s_2) = 0, \qquad w_1 \geq 0_{m_1}, \tag{4}$$
$$L_{w_2}(w_1, w_2, s_1, s_2) = -N(M^\top w_1 - N^\top w_2) - s_2 e_{m_2} \geq 0_{m_2}, \tag{5}$$
$$w_2^\top L_{w_2}(w_1, w_2, s_1, s_2) = 0, \qquad w_2 \geq 0_{m_2}, \tag{6}$$
$$L_{s_1}(w_1, w_2, s_1, s_2) = 1 - e_{m_1}^\top w_1 = 0, \tag{7}$$
$$L_{s_2}(w_1, w_2, s_1, s_2) = 1 - e_{m_2}^\top w_2 = 0. \tag{8}$$

Из (4), (6) – (8) имеем

$$s_1 = w_1^\top M(M^\top w_1 - N^\top w_2), \qquad s_2 = -w_2^\top N(M^\top w_1 - N^\top w_2).$$

Функция Лагранжа для задачи (2) имеет вид

$$\hat{L}(v_1, v_2, \gamma) = \frac{\|M^\top v_1 - N^\top v_2\|^2}{2} - e_{m_1}^\top v_1 + \gamma(e_{m_2}^\top v_2 - e_{m_1}^\top v_1). \tag{9}$$

Здесь скаляр γ есть множитель Лагранжа.

Запишем условия Куна–Таккера для задачи (2):

$$\hat{L}_{v_1}(v_1, v_2, \gamma) = M(M^\top v_1 - N^\top v_2) - (1+\gamma) e_{m_1} \geq 0_{m_1}, \tag{10}$$
$$v_1^\top \hat{L}_{v_1}(v_1, v_2, \gamma) = 0, \qquad v_1 \geq 0_{m_1}, \tag{11}$$
$$\hat{L}_{v_2}(v_1, v_2, \gamma) = -N(M^\top v_1 - N^\top v_2) + \gamma e_{m_2} \geq 0_{m_2}, \tag{12}$$
$$v_2^\top \hat{L}_{v_2}(v_1, v_2, \gamma) = 0, \qquad v_2 \geq 0_{m_2}, \tag{13}$$
$$\hat{L}_{\gamma}(v_1, v_2, \gamma) = e_{m_1}^\top v_1 - e_{m_2}^\top v_2 = 0. \tag{14}$$

Из (11), (13) и (14) получаем, что

$$\begin{aligned} (1+\gamma) e_{m_1}^\top v_1 &= \quad v_1^\top M(M^\top v_1 - N^\top v_2), \\ -\gamma e_{m_2}^\top v_2 &= -v_2^\top N(M^\top v_1 - N^\top v_2). \end{aligned}$$

Пусть $[w_1^*, w_2^*, s_1^*, s_2^*]$ — точка Куна–Таккера для задачи (1), а $[v_1^*, v_2^*, \gamma^*]$ — точка Куна–Таккера для задачи (2). Если положить $v_1^* = w_1^*$, $v_2^* = w_2^*$, то условия (3) – (6) совпадают с (10) – (13), а если $\gamma^* = s_1^* - 1 = s_2^*$, то из условий (7) и (8) получается условие (14).

Пусть теперь $[v_1^*, v_2^*, \gamma^*]$ — точка Куна–Таккера для задачи (2) и $\delta = e_{m_1}^\top v_1^*$. Очевидно, что $\delta \neq 0$, так как в противном случае согласно (14) имеем $v_1^* = 0$, $v_2^* = 0$, т.е. X_1 и X_2 пересекаются. Из (14) получаем, что $e_{m_1}^\top v_1^*/\delta = 1$, $e_{m_2}^\top v_2^*/\delta = 1$, т.е. условия (7), (8) выполняются.

Разделим (11) – (13) на δ и выполним подстановки

$$v_1^* = \delta w_1^*, \quad v_2^* = \delta w_2^*, \quad \gamma = \delta s_1^* - 1, \quad \gamma = \delta s_2^*.$$

Тогда получим соотношения (3), (4), вычисленные в точке Куна–Таккера $[w_1^*, w_2^*, s_1^*, s_2^*]$. □

Задача, двойственная к (2), состоит в нахождении

$$\min_{\gamma \in \mathbb{R}} \min_{q \in \mathbb{R}^n} \frac{\|q\|^2}{2} \tag{15}$$

при условии, что

$$Mq - (1+\gamma)e_{m_1} \geq 0_{m_1}, \qquad -Nq + \gamma e_{m_2} \geq 0_{m_2}. \tag{16}$$

Пусть $[q^*, \gamma^*]$ — решение задачи (15) – (16), а $[v_1^*, v_2^*]$ — решение задачи (2). Тогда $q^* = M^\top v_1^* - N^\top v_2^*$ и из теоремы двойственности следует равенство $\|q^*\|^2 = e_{m_1}^\top v_1^* = e_{m_2}^\top v_2^*$.

Пусть $w^* = [w_1^*, w_2^*]$ — решение задачи (1). Тогда точки

$$x_1^* = M^\top w_1^* \in X_1, \qquad x_2^* = N^\top w_2^* \in X_2$$

являются ближайшими из множеств X_1 и X_2 соответственно. Введем вектор $p^* = x_1^* - x_2^*$. К задаче (1) применим принцип линеаризации. Получим, что для любых $w_1 \in S_1$ и $w_2 \in S_2$ выполнены неравенства

$$p^{*\top} M^\top (w_1 - w_1^*) \;\; \geq \;\; 0_{m_1}, \tag{17}$$

$$-p^{*\top} N^\top (w_2 - w_2^*) \;\; \geq \;\; 0_{m_2}. \tag{18}$$

Определим гиперплоскость $\Gamma(\alpha)$, зависящую от скалярного параметра α:

$$\Gamma(\alpha) = \{x \in \mathbb{R}^n : p^{*\top} x - (1-\alpha)\xi - \alpha\beta = 0\},$$

где

$$\xi = p^{*\top} x_1^*, \quad \beta = p^{*\top} x_2^*, \quad 0 \leq \alpha \leq 1. \tag{19}$$

Подставляя в (19) выражения для x_1^* и x_2^*, получим $\|p^*\|^2 = \xi - \beta$, т.е. $\xi \geq \beta$. Пусть $x_1 \in X_1$, $x_2 \in X_2$. Тогда существуют векторы $w_1 \in S_1$, $w_2 \in S_2$ такие, что $x_1 = M^\top w_1$, $x_2 = N^\top w_2$. Поэтому согласно (17) и (18) имеем

$$p^{*\top} x_1 \geq \xi \geq (1-\alpha)\xi + \alpha\beta \geq \beta \geq p^{*\top} x_2. \tag{20}$$

Неравенство (20) имеет место при любых $x_1 \in X_1$, $x_2 \in X_2$, и, следовательно, гиперплоскости $\Gamma(\alpha)$ разделяют множества X_1 и X_2 при любых $0 \leq \alpha \leq 1$. Гиперплоскости $p^{*\top} x = \xi$ и $p^{*\top} x = \beta$ являются опорными к множествам X_1 и X_2 соответственно, так как $p^{*\top} x_1^* = \xi$, $x_1^* \in X_1$ и $p^{*\top} x_2^* = \beta$, $x_2^* \in X_2$.

Объединение всех гиперплоскостей $\Gamma(\alpha)$, когда α изменятся от 0 до 1, назовем семейством разделяющих гиперплоскостей и обозначим через

$$\Gamma = \bigcup_{\alpha=0}^{1} \Gamma(\alpha).$$

Вектор p^* является нормалью этого семейства. Евклидово расстояние от начала координат до гиперплоскостей $\Gamma(\alpha)$ вычисляется по формуле $|(1-\alpha)\xi + \alpha\beta| / \|p^*\|$. Толщина семейства Γ (евклидово расстояние между граничными плоскостями) равна $\|p^*\|^2 = \xi - \beta$. Среди всех семейств, разделяющих X_1 и X_2, семейство Γ обладает максимальной толщиной, равной $\|p^*\|$.

От решения задачи (1) перейдем к решению задачи (2). Это внесет некоторые коррективы в полученные формулы: вместо p^* в них будет фигурировать q^*, вместо ξ, β — скаляр γ. Имеют место следующие формулы:

$$\begin{gathered} p^* = M^\top w_1^* - N^\top w_2^* = \frac{M^\top v_1^* - N^\top v_2^*}{\theta} = \frac{q^*}{\theta}, \\ \theta = \|q^*\|^2 = \frac{\|q^*\|}{\|p^*\|}, \quad \xi = \frac{1+\gamma^*}{\theta}, \quad \beta = \frac{\gamma^*}{\theta}. \end{gathered} \tag{21}$$

Используя (21), можно показать, что из (20) следуют неравенства

$$q^{*\top}x_1 \geq 1+\gamma^* \geq \alpha\gamma^* + (1+\gamma^*)(1-\alpha) \geq \gamma^* \geq q^{*\top}x_2,$$

справедливые при любых $0 \leq \alpha \leq 1$ и любых $x_1 \in X_1$, $x_2 \in X_2$.

Опорными к множествам X_1 и X_2 будут гиперплоскости $q^{*\top}x = 1+\gamma^*$ и $q^{*\top}x = \gamma^*$ соответственно, расстояние между ними равно $\|p^*\| = \|q^*\|/\theta = 1/\|q^*\|$. Для построения семейства Γ будем решать либо прямую задачу (2), либо двойственную (15) – (16).

3. Численный метод для случая $n \gg m$

Для решения задачи (2) и двойственной к ней задачи (15) – (16) воспользуемся методом модифицированных функций Лагранжа (МФЛ) (см. [2, 3, 4]). Вспомогательную задачу минимизации на положительном ортанте решаем с помощью обобщенного метода Ньютона (см. [5, 6]). Введем скаляр γ и вектор $\lambda \in \mathbb{R}^n_+$, составим модифицированную функцию Лагранжа

$$\begin{aligned} L(v_1, v_2, \lambda, \gamma) \;&=\; \frac{\|M^\top v_1 - N^\top v_2\|^2}{2} - e_{m_1}^\top v_1 + \gamma(e_{m_2}^\top v_2 - e_{m_1}^\top v_1) + \\ &+\; \frac{\tau(e_{m_2}^\top v_2 - e_{m_1}^\top v_1)^2}{2} + \frac{\|(\lambda - \tau v)_+\|^2}{2\tau}, \end{aligned}$$

где τ — коэффициент штрафа, $v^\top = [v_1^\top, v_2^\top]$, вектор $\lambda_0 \in \mathbb{R}^m_+$ и $\gamma_0 \in \mathbb{R}^1$ — произвольные начальные точки. Обычно при расчетах берется $\tau = 100$ и $\lambda = 0_m$, $\gamma_0 = 0$. Последнее слагаемое в функции Лагранжа введено для учета ограничения $v \geq 0_m$, $\lambda \in \mathbb{R}^m_+$ — соответствующий вектор множителей Лагранжа.

С учетом объединения векторов v_1 и v_2 имеем $L(v_1, v_2, \lambda, \gamma) = L(v, \lambda, \gamma)$. Номер итерации будем обозначать дополнительным нижним индексом при соответствующих переменных. Тогда метод МФЛ запишется в виде

$$\gamma_{k+1} = \gamma_k + \tau(e_{m_1}^\top v_{1\,k+1} - e_{m_2}^\top v_{2\,k+1}), \qquad \lambda_{k+1} = (\lambda_k - \tau v_{k+1})_+, \tag{22}$$

где v_{k+1} определяется из следующей задачи безусловной минимизации:

$$v_{k+1} \in \arg\min_{v \in \mathbb{R}^m} L(v, \lambda_k, \gamma_k). \tag{23}$$

В этой задаче функция Лагранжа выпуклая, кусочно-квадратичная и дифференцируемая. Поэтому для ее минимизации можно применить обобщенный метод Ньютона, который для данной задачи сходится глобально за конечное число шагов [5, 6].

В качестве иллюстрации работы метода решались сгенерированные случайным образом задачи (2) с большим числом неотрицательных переменных (до ста тысяч) и средним числом ограничений-равенств (до одной тысячи), т.е. имело место $n \gg m$.

Итак, задавались числа m и n. В матрице M элементы брались случайным образом из интервала $[-50, 100]$, в матрице N — из интервала $[-50, 120]$. По особому определялись первые столбцы матриц M и N. Элементы первого столбца матрицы M брались из интервала $[30, 50]$, а элементы первого столбца матрицы N — из интервала $[100, 120]$. Кроме того, задавались три точки x_1, x_2, x_3 из множества X_1, у которых первые компоненты были равны 50; у трех точек y_1, y_2, y_3 из множества X_2 первые компоненты были равны 100; т.е. $x_1^1 = x_2^1 = x_3^1 = 50$ и $y_1^1 = y_2^1 = y_3^1 = 100$. Для всех $2 \leq i \leq n$ и $1 \leq j \leq 3$ выполняются условия $x_j^i = y_j^i$. Благодаря такому выбору гарантировалось, что расстояние между множествами X_1 и X_2 равно $\|p^*\| = 50$ и оптимальный вектор w^* прямой задачи (9) имеет первую компоненту, равную единице, а остальные компоненты равны нулю. У вектора p^* отлична от нуля только первая компонента, равная 50. Кроме того, тестовая задача имеет неединственное решение, что усложняет расчеты. Для генерации тестовых задач использовалась следующая программа, предназначенная для системы MATLAB.

Code 1. MATLAB Генератор матриц M и N

```
%Code 1: Generate random M,N:
%Input: m1,m2 n; Output: M N
tt=1;tt1=1; ss=2:n;ss=ss'; ss1=n-tt1;
M=rand(m1,n);M(:,tt)=10*M(:,tt)+40*ones(m1,tt1)-10*rand(m1,tt1);
M(:,ss)=50*(M(:,ss)-rand(m1,ss1))-50*rand(m1,ss1)+50*rand(m1,ss1);
N=rand(m2,n);N(:,tt)=10*N(:,tt)+100*ones(m2,tt1)+10*rand(m2,tt1);
N(:,ss)=50*(N(:,ss)-rand(m2,ss1))-50*rand(m2,ss1)+50*rand(m2,ss1);
uu=30*rand(3,n); uu1=uu;uu1(:,1)=50*ones(3,1);
uu2=uu;uu2(:,1)=100*ones(3,1); M=[M;uu1]; N=[N;uu2];
m1=m1+3;m2=m2+3;m=m1+m2; xM=[50 50 50];yM=[50 0 -100];
xN=[100 100 100];yN=[50 0 -100];
plot(M(:,1),M(:,2),'.r',N(:,1),N(:,2),'*bl',xM,yM,xN,yN)}
```

Предлагаемый для решения прямой задачи (2) метод МФЛ представляет собой итерационный процесс (22). Обобщенный метод Ньютона применен к решению задачи (23). Алгоритм реализован в системе MATLAB 7 в виде программы MLF1. Критерием остановки процесса минимизации (23) является выполнение условия $\|v_{k+1} - v_k\| \le tol1$. Критерием остановки итераций (22) является выполнение условий $\|\gamma_{k+1} - \gamma_k\| \le tol2$ и $\|\lambda_{k+1} - \lambda_k\| \le$ $\le tol2$. В качестве начальных условий для всех задач брались нулевые векторы v_0 и λ_0, а также полагалось $\gamma_0 = 0$.

Программа MLF1 сравнивается с программой MATLAB, составленной на базе библиотеки методов оптимизации системы MATLAB. В результате вычислений определялись следующие невязки:

$$\Delta_1 = |d - \|p^*\||, \qquad \Delta_2 = |e_{m_1}^\top v_1 - e_{m_2}^\top v_2|, \qquad \Delta_3 = \|(-v)_+\|_\infty,$$

где $\|a\|_\infty$ есть чебышевская норма вектора a; d есть найденное расстояние между множествами, $\|p^*\| = 50$. Обычно в расчетах полагалось $tol1 = 10^{-8}$, $tol2 = 10^{-8}$.

Для вычислений использовался компьютер с процессором Pentium-4 с тактовой частотой 3 ГГц, оперативной памятью 1 Гб.

Результаты решения случайным образом сгенерированных задач приведены в табл. 1. В первом столбце таблицы указаны размерности m и n. Во втором столбце приведены имена используемых программ. В третьем — даны времена счета (в секундах). В четвертом, пятом и шестом столбцах указаны Δ_1, Δ_2, Δ_3.

Из таблицы следует, что программа MATLAB оказалась более эффективной, чем MLF1, только при решении первой задачи невысокой размерности. На второй и четвертой строках выражение MATLAB* обозначает, что этот метод при стандартных начальных условиях не решил задачу. Поэтому были изменены начальные условия: все компоненты векторов v_0, λ_0 и скаляр γ_0 взяты равными единице. В третьей и шестой задаче (строка 3,6) программа MATLAB не решила задачу ни при стандартных, ни при измененных начальных условиях. В примере, приведенном на четвертой строке, программа MATLAB оказалась лучшей по времени, однако точность определения d была низкой. Для задач большой размерности программа MATLAB существенно уступает программе MLF1.

Таблица 1

Результаты сравнения работы методов MLF1 и MATLAB,
$v_0 = 0_m$, $\lambda_0 = 0_m$, $\gamma_0 = 0$

$m \times n$	МЕТОД	T, sec	Δ_1	Δ_2	Δ_3
50×10^5	MLF1	3,5	$2,5 \times 10^{-12}$	$2,2 \times 10^{-16}$	$6,7 \times 10^{-16}$
	MATLAB	0,25	$1,5 \times 10^{-13}$	$5,4 \times 10^{-19}$	$5,2 \times 10^{-20}$
100×10^5	MLF1	10,9	$7,1 \times 10^{-13}$	$1,5 \times 10^{-18}$	$1,7 \times 10^{-18}$
	MATLAB*	2,4	$8,5 \times 10^{-14}$	$7,0 \times 10^{-15}$	$8,1 \times 10^{-19}$
300×10^4	MLF1	8,5	$1,0 \times 10^{-18}$	$6,7 \times 10^{-18}$	$4,8 \times 10^{-20}$
	MATLAB	*	*	*	*
200×10^5	MLF1	30,8	$9,3 \times 10^{-13}$	$2,1 \times 10^{-18}$	$7,1 \times 10^{-18}$
	MATLAB	7,5	$8,7 \times 10^{-6}$	$2,9 \times 10^{-15}$	$4,0 \times 10^{-16}$
500×10^4	MLF1	25,5	$2,1 \times 10^{-19}$	$4,2 \times 10^{-14}$	$2,2 \times 10^{-19}$
	MATLAB*	77,0	$1,1 \times 10^{-1}$	$5,7 \times 10^{-14}$	$3,9 \times 10^{-16}$
1000×10^4	MLF1	96,6	$4,8 \times 10^{-14}$	$3,4 \times 10^{-19}$	$3,6 \times 10^{-19}$
	MATLAB	*	*	*	*

4. Численный метод для случая $m \gg n$

Рассмотрим двойственную задачу (15) – (16). Аналогично предыдущему разделу объединим вектор q и скаляр γ одним символом $z = [q, \gamma]$ и введем множество

$$Z = \{z \in \mathbb{R}^{n+1} : Az \geq e_m\},$$

где $A = \begin{bmatrix} M & -e_{m_1} \\ -N & e_{m_2} \end{bmatrix}$ — матрица $m \times (n+1)$. Двойственную задачу (15) можно записать в виде

$$\min_{z \in Z} \frac{\|q\|^2}{2}. \tag{24}$$

Для ее решения снова воспользуемся методом модифицированных функций Лагранжа. В данном варианте метода ищется безусловный минимум по q и γ следующей модифицированной функции Лагранжа:

$$L(q, \gamma, v) = \frac{\beta\|q\|^2 + \|[v + \beta(e_m - Az)]_+\|^2}{2},$$

где $v \in \mathbb{R}^m_+$, β — коэффициент штрафа.

На k-м шаге итераций новое значение z_{k+1} находим из условия

$$z_{k+1} \in \arg\min_{z \in \mathbb{R}^{n+1}} \frac{1}{2} \left\{\beta\|q\|^2 + \|[v_k + \beta(e_m - Az)]_+\|^2\right\}. \tag{25}$$

Для определения оптимального вектора v используется следующий итерационный процесс:

$$v_{k+1} = [v_k + \beta(e_m - Az_{k+1})]_+, \tag{26}$$

где вектор v_0 — произвольная начальная точка из множества $\mathbb{R}^m_+$. Обычно при расчетах берется $\beta = 10$ и $v_0 = 0_m$.

Таблица 2

Результаты сравнения работы методов MLF2 и MATLAB,
$v_0 = 0_m$, $z_0 = 0_{n+1}$

$m \times n$	МЕТОД	T, sec	Δ_1	Δ_4
5000×20	MLF2	$0,65$	$1,4 \times 10^{-11}$	$1,5 \times 10^{-20}$
	MATLAB	$0,62$	$4,0 \times 10^{-14}$	$2,3 \times 10^{-15}$
$10^5 \times 10$	MLF2	$6,6$	$3,4 \times 10^{-11}$	$6,1 \times 10^{-12}$
	MATLAB	$7,0$	$7,9 \times 10^{-14}$	$4,6 \times 10^{-20}$
$2 \cdot 10^6 \times 2$	MLF2	$59,5$	$1,1 \times 10^{-12}$	$3,1 \times 10^{-13}$
	MATLAB	$155,3$	$4,0 \times 10^{-13}$	$1,3 \times 10^{-14}$
$10^6 \times 5$	MLF2	$38,5$	$2,3 \times 10^{-11}$	$1,1 \times 10^{-11}$
	MATLAB	$37,3$	$3,8 \times 10^{-14}$	$1,7 \times 10^{-15}$
$4 \cdot 10^6 \times 2$	MLF2	$144,8$	$7,3 \times 10^{-13}$	$1,3 \times 10^{-13}$
	MATLAB	$317,3$	$9,3 \times 10^{-20}$	$5,7 \times 10^{-15}$
$5 \cdot 10^6 \times 2$	MLF2	$167,4$	$1,4 \times 10^{-12}$	$2,9 \times 10^{-20}$
	MATLAB	$*$	$*$	$*$

Предлагаемый метод решения двойственной задачи заключается в использовании итерационного процесса (26) и решения задач безусловной минимизации (25) с помощью обобщенного метода Ньютона.

В приведенных двух вариантах метода модифицированных функций Лагранжа основное время расчетов тратится на решение задач безусловной минимизации. В первом варианте метода (22) минимум ищется в m-мерном пространстве, во втором варианте (26) — в $(n + 1)$-мерном пространстве. Поэтому первый вариант метода наиболее эффективен при $n \gg m$, второй вариант — при $m \gg n$.

Алгоритм (26) реализован в системе MATLAB 7 в виде программ MLF2. Критерием остановки процесса минимизации (25) является выполнение условия $\|z_{k+1} - z_k\| \leq tol1$; критерием остановки процесса итераций (26) является выполнение условия $\|v_{k+1} - v_k\| \leq$ $\leq tol2$, где $tol1$, $tol2$ — некоторые заданные точности. Обычно в расчетах полагалось $tol1 = 10^{-10}$, $tol2 = 10^{-6}$. Результаты вычислений случайным образом сгенерированных задач приведены в табл. 2. Определялись следующие невязки:

$$\Delta_1 = |d - \|p^*\||, \qquad \Delta_4 = \|(Ax - b)_+\|_\infty.$$

Здесь так же, как и в предыдущем разделе, расчеты по программам MATLAB и MLF2 близки в случае задач небольшой размерности.

Для задачи с $m = 4 \cdot 10^6$, $n = 2$ время счета по программе MATLAB в два раза больше, чем по программе MLF2. Задача с $m = 5 \cdot 10^6$, $n = 2$ решена программой MLF2 за 167.4 секунд и не была решена программой MATLAB.

5. Случай пересекающихся политопов при $m \gg n$

При решении практических задач может оказаться, что в результате разного рода погрешностей полученные экспериментальные данные таковы, что политопы X_1 и X_2 пересекаются. В этом случае рекомендуется так скорректировать (сузить) X_1 и X_2, что введенные вместо них множества $\tilde{X}_1$ и $\tilde{X}_2$ не пересекаются и таковы, что $\tilde{X}_1 \subseteq X_1$ и $\tilde{X}_2 \subseteq X_2$. Определим новые множества по формулам

$$\begin{aligned}
\tilde{X}_1 &= \left\{ x \in \mathbb{R}^n : x = \sum_{j=1}^{m_1} w_1^j M_j^\top = M^\top w_1, \ \ w_1 \in \tilde{S}_1 \right\}, \\
\tilde{X}_2 &= \left\{ x \in \mathbb{R}^n : x = \sum_{j=1}^{m_2} w_2^j N_j^\top = N^\top w_2, \ \ w_2 \in \tilde{S}_2 \right\},
\end{aligned}$$

где $\tilde{S}_1$, $\tilde{S}_2$ — сжатые симплексы

$$\tilde{S}_i = \left\{ w_i \in \mathbb{R}_+^{m_i} : \sum_{j=1}^{m_i} w_i^j = 1, \ \ w_i^j \le \sigma \right\}, \quad i = 1, 2.$$

Здесь σ — число из интервала $[1/m, 1]$.

Очевидно, что новые множества таковы, что $\tilde{X}_1 \subseteq X_1$, $\tilde{X}_2 \subseteq X_2$; кроме того, при $\sigma = 1$ множества $\tilde{X}_1$ и X_1, $\tilde{X}_2$ и X_2 совпадают. Вместе с тем σ нельзя брать слишком малым, так как если $\sigma < 1/m$, то $w_i^j < 1/m$, $\sum\limits_{j=1}^{m_i} w_i^j < 1$ и множество $\tilde{S}_i$ будет пустым, поэтому множество $\tilde{X}_i$ тоже будет пустым. Для "сжатых" политопов построим семейство разделяющих гиперплоскостей Γ с направляющими векторами q^*.

Задачу (1) заменим следующей:

$$\min_{w_1 \in \mathbb{R}_+^{m_1}} \min_{w_2 \in \mathbb{R}_+^{m_2}} \|M^\top w_1 - N^\top w_2\|^2 \tag{27}$$

при условиях

$$e_{m_1}^\top w_1 = 1, \quad e_{m_2}^\top w_2 = 1, \quad 0_{m_1} \le w_1 \le \sigma e_{m_1}, \quad 0_{m_2} \le w_2 \le \sigma e_{m_2}.$$

Так же, как и в разд. 1, переходим к задаче минимизации

$$\min_{v_1 \in \mathbb{R}_+^{m_1}} \min_{v_2 \in \mathbb{R}_+^{m_2}} \left(\|M^\top v_1 - N^\top v_2\|^2 - e_{m_1}^\top v_1 \right) \tag{28}$$

при условиях

$$e_{m_1}^\top v_1 = e_{m_2}^\top v_2, \quad 0_{m_1} \le v_1 \le \sigma e_{m_1}, \quad 0_{m_2} \le v_2 \le \sigma e_{m_2}.$$

Можно показать, что если w_1^*, w_2^* — решение задачи (27), то в качестве решения задачи (28) можно взять

$$v_1^* = w_1^*, \qquad v_2^* = w_2^*.$$

Если известны v_1^* и v_2^*, то решения задачи (27) определяются по формулам

$$w_1^* = \frac{v_1^*}{\theta^*}, \qquad w_2^* = \frac{v_2^*}{\theta^*}, \qquad \theta^* = e_{m_1}^\top v_1^*, \tag{29}$$

т.е. решения задач (27) и (28) взаимно однозначно связаны между собой.

Теорема 2. *Задача, двойственная к* (28)*, состоит в нахождении*

$$\min_{\phi \in \mathbb{R}_+^{m_1}} \max_{\psi \in \mathbb{R}_+^{m_2}} \min_{\gamma \in \mathbb{R}^1} \min_{q \in \mathbb{R}^n} \frac{\sigma\|\phi\|_1 + \sigma\|\psi\|_1 + \|q\|^2}{2} \tag{30}$$

при условии, что

$$Mq - (1+\gamma)e_{m_1} + \phi \geq 0_{m_1}, \qquad -Nq + \gamma e_{m_2} + \psi \geq 0_{m_2},$$

где $\gamma \in \mathbb{R}^1$, $\phi \in \mathbb{R}_+^{m_1}$, $\psi \in \mathbb{R}_+^{m_2}$. *Если* $[v_1^*, v_2^*]$ *— решение задачи* (28) *и* $[q^*, \gamma^*, \phi^*, \psi^*]$ *— решение задачи* (30)*, то*

$$\|q^*\|^2 = e_{m_1}^\top v_1^* - \phi^{*\top} v_1^* - \psi^{*\top} v_2^*. \tag{31}$$

Доказательство. Функция Лагранжа для задачи (28) имеет вид

$$\begin{aligned} \tilde{L}(v_1, v_2, \gamma, \phi, \psi) &= \frac{\|M^\top v_1 - N^\top v_2\|^2}{2} - e_{m_1}^\top v_1 + \gamma(e_{m_2}^\top v_2 - e_{m_1}^\top v_1) + \\ &+ \phi^\top(v_1 - \sigma e_{m_1}) - \psi^\top(v_2 - \sigma e_{m_2}), \end{aligned} \tag{32}$$

где γ, ϕ и ψ — множители Лагранжа.

Запишем двойственную задачу

$$\max_{\gamma \in \mathbb{R}^1} \max_{\phi \in \mathbb{R}_+^{m_1}} \max_{\psi \in \mathbb{R}_+^{m_2}} \min_{v_1 \in \mathbb{R}_+^{m_1}} \min_{v_2 \in \mathbb{R}_+^{m_2}} \tilde{L}(v_1, v_2, \gamma, \phi, \psi). \tag{33}$$

Условия оптимальности внутренней задачи минимизации записываются в виде

$$L_{v_1}(v_1, v_2, \gamma, \phi, \psi) = M(M^\top v_1 - N^\top v_2) - (1+\gamma)e_{m_1} + \phi \geq 0_{m_1}, \tag{34}$$

$$v_1^\top L_{v_1}(v_1, v_2, \gamma, \phi, \psi) = 0, \qquad v_1 \geq 0_{m_1}, \tag{35}$$

$$L_{v_2}(v_1, v_2, \gamma, \phi, \psi) = -N(M^\top v_1 - N^\top v_2) + \gamma e_{m_2} + \psi \geq 0_{m_2}, \tag{36}$$

$$v_2^\top L_{v_2}(v_1, v_2, \gamma, \phi, \psi) = 0, \qquad v_2 \geq 0_{m_2}. \tag{37}$$

Из (35) и (37) имеем

$$\begin{aligned} v_1^\top M(M^\top v_1 - N^\top v_2) &= (1+\gamma)v_1^\top e_{m_1} - v_1^\top \phi, \\ v_2^\top N(M^\top v_1 - N^\top v_2) &= \gamma v_2^\top e_{m_2} + v_2^\top \psi. \end{aligned}$$

Подставляя эти выражения в (32), получим двойственную функцию Лагранжа

$$\begin{aligned} \tilde{L}(v_1, v_2, \gamma, \phi, \psi) &= \frac{\|M^\top v_1 - N^\top v_2\|^2}{2} - e_{m_1}^\top v_1 + \gamma(e_{m_2}^\top v_2 - e_{m_1}^\top v_1) + \\ &+ \phi^\top(v_1 - \sigma e_{m_1}) - \psi^\top(v_2 - \sigma e_{m_2}) = \\ &= \frac{\|M^\top v_1 - N^\top v_2\|^2}{2} - v_1^\top M(M^\top v_1 - N^\top v_2) + \\ &+ v_2^\top N(M^\top v_1 - N^\top v_2) - \sigma\|\phi\|_1 - \sigma\|\psi\|_1 = \\ &= -\frac{\|M^\top v_1 - N^\top v_2\|^2}{2} - \sigma\|\phi\|_1 - \sigma\|\psi\|_1. \end{aligned}$$

Обозначим $q = M^\top v_1 - N^\top v_2$. Отсюда, учитывая (34) и (36), получим двойственную к (28) задачу (30).

Если $[v_1^*, v_2^*]$ — решение задачи (28), а $[\gamma^*, \phi^*, \psi^*]$ — решение двойственной к ней задачи (30), то по теореме двойственности имеем (31). □

Несколько видоизменим задачу (30). Во-первых, к целевой функции добавим $\gamma^2/2$; во-вторых, заменив первые нормы векторов ϕ и ψ на квадраты этих норм, получим следующую целевую функцию:

$$\sigma\|\phi\|_1^2 + \sigma\|\psi\|_1^2 + \frac{\|q\|^2}{2} + \frac{\gamma^2}{2}.$$

Используем известное неравенство между первой и второй нормами:

$$\|\phi\|_1 \le \sqrt{m_1}\|\phi\|_2, \qquad \|\psi\|_1 \le \sqrt{m_2}\|\psi\|_2.$$

Вместо (30) приходим к следующей задаче безусловной минимизации:

$$\min_{q\,\in\,\mathbb{R}^n}\ \min_{\gamma\in\mathbb{R}^1} \frac{\|q\|^2 + \gamma^2 + m_1\sigma\|[(1+\gamma)e_{m_1} - Mq]_+\|^2 + m_2\sigma\|(Nq - \gamma e_{m_2})_+\|^2}{2}. \tag{38}$$

В случае больших m и малых n эту задачу можно решать с помощью обобщенного метода Ньютона, так как целевая функция здесь выпуклая, непрерывно дифференцируемая, кусочно-квадратичная.

Подход, близкий к изложенному, разрабатывался в статьях [5, 7, 8]. Вместе с тем наш подход имеет некоторые отличия: в качестве основной задачи была взята не (27), а близкая к ней задача (28), что упростило получение двойственной задачи (30). Есть отличие в задаче безусловной минимизации (38) по сравнению с аналогичной задачей в [8].

6. Случай пересекающихся политопов при $n \gg m$

В задаче (1) находилась евклидова норма вектора, определяющего кратчайшее расстояние между множествами X_1 и X_2. Вместо этого можно отыскивать чебышевскую норму этого вектора. Тогда задача (1) запишется следующим образом:

$$\min_{w_1\in\mathbb{R}_+^{m_1}}\ \min_{w_2\in\mathbb{R}_+^{m_2}} \|M^\top w_1 - N^\top w_2\|_\infty \tag{39}$$

при условиях

$$e_{m_1}^\top w_1 = 1 = e_{m_2}^\top w_2, \qquad 0_{m_1} \le w_1 \le \sigma e_{m_1}, \qquad 0_{m_2} \le w_2 \le \sigma e_{m_2}.$$

Переходим к следующей задаче минимизации:

$$\min_{v_1\in\mathbb{R}_+^{m_1}}\ \min_{v_2\in\mathbb{R}_+^{m_2}} \left(\|M^\top v_1 - N^\top v_2\|_\infty - e_{m_1}^\top v_1\right) \tag{40}$$

при условиях

$$e_{m_1}^\top v_1 = e_{m_2}^\top w_2, \qquad 0_{m_1} \le v_1 \le \sigma e_{m_1}, \qquad 0_{m_2} \le v_2 \le \sigma e_{m_2}.$$

Можно показать, что если $[w_1^*, w_2^*]$ — решение задачи (39), а $[v_1^*, v_2^*]$ — решение задачи (40), то в качестве решения задачи (40) можно взять

$$v_1^* = w_1^*, \qquad v_2^* = w_2^*.$$

Если известно $[v_1^*, v_2^*]$, то решение задачи (39) определяется по формулам

$$w_1^* = \frac{v_1^*}{\theta^*}, \qquad w_2^* = \frac{v_2^*}{\theta^*}, \qquad \theta^* = e_{m_1}^\top v_1^*,$$

т.е. решения этих задач связаны между собой взаимно однозначным образом.

Задача (40) эквивалентна следующей задаче линейного программирования: найти

$$\min_{\lambda\in\mathbb{R}^1_+} \; \min_{v_1 \in \mathbb{R}^{m_1}_+} \; \min_{v_2 \in \mathbb{R}^{m_2}_+} (\lambda - e_{m_1}^\top v_1) \tag{41}$$

при условиях

$$-\lambda e_n \leq M^\top v_1 - N^\top v_2 \leq \lambda e_n, \qquad e_{m_1}^\top v_1 = e_{m_2}^\top v_2,$$
$$0 \leq \lambda, \quad 0_{m_1} \leq v_1 \leq \sigma e_{m_1}, \quad 0_{m_2} \leq v_2 \leq \sigma e_{m_2}.$$

Двойственной к задаче (41) является следующая: найти

$$\min_{\gamma\in\mathbb{R}^1} \; \min_{\phi \in \mathbb{R}^{m_1}_+} \; \min_{\psi \in \mathbb{R}^{m_2}_+} \; \min_{u_1 \in \mathbb{R}^{n}_+} \; \min_{u_2 \in \mathbb{R}^{n}_+} \sigma(e_{m_1}^\top \phi + e_{m_2}^\top \psi) \tag{42}$$

при условиях

$$M(u_1 - u_2) - (1+\gamma)e_n + \phi \geq 0_{m_1}, \qquad -N(u_1 - u_2) + \gamma e_n + \psi \geq 0_{m_2},$$
$$e_n^\top u_1 + e_n^\top u_2 = 1, \quad \phi \geq 0_{m_1}, \quad \psi \geq 0_{m_2}, \quad u_1 \geq 0_n, \quad u_2 \geq 0_n.$$

Если $[v_1^*, v_2^*, \lambda^*]$ — решение задачи (41) и $[\phi^*, \psi^*, u_1^*, u_2^*, \gamma^*]$ — решение задачи (42), то имеет место равенство

$$e_{m_1}^\top v_1^* - \|M^\top v_1^* - N^\top v_2^*\|_\infty = \sigma(e_{m_1}^\top \phi^* + e_{m_2}^\top \psi^*). \tag{43}$$

В задаче (42) имеется $m + 2n + 1$ неизвестных и $2m + 2n + 1$ ограничений. Для численного решения этой задачи можно воспользоваться методом штрафов, примененным к двойственной задаче (41). Составим штрафную функцию для задачи (41):

$$\begin{aligned} \Phi(\lambda, v_1, v_2, \varepsilon) = \varepsilon(\lambda - e_{m_1}^\top v_1) \;&+\; \|(M^\top v_1 - N^\top v_2 + \lambda e_n)_+\|^2 + \\ &+\; \|(N^\top v_2 - M^\top v_1 + \lambda e_n)_+\|^2 + \\ &+\; \|(\sigma e_{m_1} - v_1)_+\|^2 + \|(\sigma e_{m_2} - v_2)_+\|^2. \end{aligned} \tag{44}$$

Минимизация функции Φ ведется при условиях $\lambda \in \mathbb{R}^1$, $v_1 \geq 0_{m_1}$, $v_2 \geq 0_{m_2}$.

Целевая функция в этой задаче кусочно-квадратичная, один раз дифференцируемая. Для ее минимизации можно применить обобщенный метод Ньютона. В работе [5] показано, что существует такое ε^*, что при всяком $0 < \varepsilon \leq \varepsilon^*$ решение задачи

$$\min_{\lambda\in\mathbb{R}^1} \; \min_{v_1 \in \mathbb{R}^{m_1}_+} \; \min_{v_2 \in \mathbb{R}^{m_2}_+} \Phi(\lambda, v_1, v_2, \varepsilon) = \Phi(\lambda^*, v_1^*, v_2^*, \varepsilon) \tag{45}$$

дает возможность найти нормальное решение исходной задачи (42).

Необходимые и достаточные условия минимума задачи (45) записываются в виде

$$\begin{aligned} &\Phi_\lambda(\lambda, v_1, v_2, \varepsilon) = \varepsilon + e_n^\top (M^\top v_1 - N^\top v_2 + \lambda e_n)_+ + (N^\top v_2 - M^\top v_1 + \lambda e_n)_+ \geq 0, \\ &\lambda \Phi_\lambda(\lambda, v_1, v_2, \varepsilon) = 0, \qquad\qquad \lambda \geq 0, \end{aligned} \tag{46}$$

$$\begin{aligned} &\Phi_{v_1}(\lambda, v_1, v_2, \varepsilon) = \varepsilon e_{m_1} + M(M^\top v_1 - N^\top v_2 + \lambda e_n)_+ - M(N^\top v_2 - M^\top v_1 + \lambda e_n)_+ \geq 0_{m_1}, \\ &v_1^\top \Phi_{v_1}(\lambda, v_1, v_2, \varepsilon) = 0_{m_1}, \qquad v_1 \geq 0_{m_1}, \end{aligned} \tag{47}$$

$$\begin{aligned} &\Phi_{v_2}(\lambda, v_1, v_2, \varepsilon) = N[\lambda e_n - (M^\top v_1 - N^\top v_2)]_+ - N(M^\top v_1 - N^\top v_2 + \lambda e_n)_+ \geq 0_{m_2}, \\ &v_2^\top \Phi_{v_2}(\lambda, v_1, v_2, \varepsilon) = 0_{m_2}, \qquad v_2 \geq 0_{m_2}. \end{aligned} \tag{48}$$

Для нахождения нормального решения задачи (42) воспользуемся следующей задачей минимизации:

$$\min_{\gamma\in\mathbb{R}^1}\ \min_{\phi\,\in\,\mathbb{R}^{m_1}_+}\ \min_{\psi\,\in\,\mathbb{R}^{m_2}_+}\ \min_{u_1\,\in\,\mathbb{R}^n_+}\ \min_{u_2\,\in\,\mathbb{R}^n_+}\ \left\{\sigma(e^\top_{m_1}\phi + e^\top_{m_2}\psi) + \frac{\varepsilon}{2}(\|\phi\|^2 + \|\psi\|^2 + \|u_1\|^2 + \|u_2\|^2 + \gamma^2)\right\} \tag{49}$$

при условиях

$$M(u_1 - u_2) - (1+\gamma)e_n + \phi \geq 0_{m_1}, \qquad -N(u_1 - u_2) + \gamma e_n + \psi \geq 0_{m_2},$$
$$e^\top_n u_1 + e^\top_n u_2 = 1, \quad \phi \geq 0_{m_1}, \quad \psi \geq 0_{m_2}, \quad u_1 \geq 0_n, \quad u_2 \geq 0_n.$$

Функция Лагранжа для задачи (49) имеет вид

$$\begin{aligned} L(u_1,u_2,\phi,\psi,\gamma,\lambda,v_1,v_2) \ &= \ \frac{\varepsilon}{2}(\|\phi\|^2 + \|\psi\|^2 + \|u_1\|^2 + \|u_2\|^2 + \gamma^2) + \\ &+ \ \sigma(e^\top_{m_1}\phi + e^\top_{m_2}\psi) + v_1^\top[(1+\gamma)e_n - M(u_1 - u_2) - \phi] + \\ &+ \ v_2^\top[N(u_1 - u_2) - \gamma e_n - \psi] + \lambda(1 - e^\top_n u_1 - e^\top_n u_2), \end{aligned} \tag{50}$$

где $v_1 \in \mathbb{R}^{m_1}_+$, $v_2 \in \mathbb{R}^{m_2}_+$, $\lambda \in \mathbb{R}^1$ — множители Лагранжа.

С помощью функции Лагранжа (50) запишем двойственную задачу

$$\max_{\lambda\in\mathbb{R}^1}\ \max_{v_1\,\in\,\mathbb{R}^{m_1}_+}\ \max_{v_2\,\in\,\mathbb{R}^{m_2}_+}\ \min_{u_1\,\in\,\mathbb{R}^n_+}\ \min_{u_2\,\in\,\mathbb{R}^n_+}\ \min_{\phi\,\in\,\mathbb{R}^{m_1}_+}\ \min_{\psi\,\in\,\mathbb{R}^{m_2}_+}\ L(u_1,u_2,\phi,\psi,\gamma,\lambda,v_1,v_2). \tag{51}$$

Условия оптимальности внутренней задачи минимизации (51) записываются в виде

$$\begin{aligned} &L_{u_1}(u_1,u_2,\gamma,\phi,\psi,\lambda,v_1,v_2) = \varepsilon u_1 - \lambda e_n - (M^\top v_1 - N^\top v_2) \geq 0_n, \\ &u_1^\top[\varepsilon u_1 - \lambda e_n - (M^\top v_1 - N^\top v_2)] = 0, \qquad u_1 \geq 0_n, \end{aligned} \tag{52}$$

$$\begin{aligned} &L_{u_2}(u_1,u_2,\gamma,\phi,\psi,\lambda,v_1,v_2) = \varepsilon u_2 - \lambda e_n - (M^\top v_1 - N^\top v_2) \geq 0_n, \\ &u_2^\top[\varepsilon u_2 - \lambda e_n - (M^\top v_1 - N^\top v_2)] = 0, \qquad u_2 \geq 0_n, \end{aligned} \tag{53}$$

$$\begin{aligned} &L_{\phi}(u_1,u_2,\gamma,\phi,\psi,\lambda,v_1,v_2) = \varepsilon\phi + \sigma e_{m_1} - v_1 \geq 0_{m_1}, \\ &\phi^\top(\varepsilon\phi + \sigma e_{m_1} - v_1) = 0, \qquad \phi \geq 0_{m_1}, \end{aligned} \tag{54}$$

$$\begin{aligned} &L_{\psi}(u_1,u_2,\gamma,\phi,\psi,\lambda,v_1,v_2) = \varepsilon\psi + \sigma e_{m_2} - v_2 \geq 0_{m_2}, \\ &\psi^\top(\varepsilon\psi + \sigma e_{m_2} - v_2) = 0, \qquad \psi \geq 0_{m_2}, \end{aligned} \tag{55}$$

$$L_{\gamma}(u_1,u_2,\gamma,\phi,\psi,\lambda,v_1,v_2) = \varepsilon\gamma - e^\top_n(v_1 - v_2) = 0. \tag{56}$$

Пусть $[v_1^*, v_2^*, \lambda^*]$ — решение задачи (45) и $[u_1^*, u_2^*, \phi^*, \psi^*, \gamma^*]$ — решение задачи (49). Тогда из (46) – (48) и из (52) – (56) получим, что

$$u_1^* = \frac{1}{\varepsilon}(M^\top v_1^* - N^\top v_2^* + \lambda^* e_n)_+, \qquad u_2^* = \frac{1}{\varepsilon}(N^\top v_2^* - M^\top v_1^* + \lambda^* e_n)_+,$$
$$\phi^* = \frac{1}{\varepsilon}(v_1^* - \sigma e_{m_1})_+, \quad \psi^* = \frac{1}{\varepsilon}(v_2^* - \sigma e_{m_2})_+, \quad \gamma^* = \frac{1}{\varepsilon}e^\top_n(v_2^* - v_1^*).$$

Для того чтобы учесть условие неотрицательности векторов v_1 и v_2, воспользуемся методом штрафов. Применив простейший квадратичный штраф, приходим к следующей задаче безусловной минимизации в пространстве $\mathbb{R}^{m+1}$:

$$\begin{aligned}\min_{\lambda\in\mathbb{R}^1}\ \min_{v_1\,\in\,\mathbb{R}^{m_1}}\ \min_{v_2\,\in\,\mathbb{R}^{m_2}}\ \Phi(\lambda,v_1,v_2,\varepsilon)\ =\ &\varepsilon(\lambda^*-e_{m_1}^\top v_1^*)+\|(M^\top v_1^*-N^\top v_2^*+\lambda^*e_n)_+\|^2+\\ +\ &\|(N^\top v_2^*-M^\top v_1^*+\lambda^*e_n)_+\|^2+\\ +\ &\|(\sigma e_{m_1}-v_1^*)_+\|^2+\|(\sigma e_{m_2}-v_2^*)_+\|^2+\\ +\ &\tau\|(-v_1^*)_+\|^2+\tau\|(-v_2^*)_+\|^2,\end{aligned} \tag{57}$$

где τ — коэффициент штрафа. Так как минимизируемая функция кусочно-квадратична, то для решения (57) можно применить обобщенный метод Ньютона, который в данном случае имеет глобальную конечную сходимость.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Голиков А.И., Евтушенко Ю.Г., Кетабчи С.* О семействах гиперплоскостей, разделяющих полиэдры // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2005. Т. 45. № 2. С. 238–253.

2. *Антипин А.С.* Методы нелинейного программирования, основанные на прямой и двойственной модификации функции Лагранжа. М.: ВНИИСИ, 1979.

3. *Гольштейн Е.Г, Третьяков Н.В.* Модифицированные функции Лагранжа. Теория и методы оптимизации. М.: Наука, 1989.

4. *Поляк Б.Т.* Введение в оптимизацию. М.: Наука, 1983.

5. *Mangasarian O.L.* A Finite Newton Method for Classification // Optimizat. Meth. and Software. 2002. V. 17. P. 913–930.

6. *Mangasarian O.L.* A Newton Method for Linear Programming // Data Mining Institute. Technical Report 02-02. March 2002.

7. *Bennett K.P., Bredensteiner E.J.* Duality and Geometry in SVM Classifiers // Proceedings of the 17th International Conference on Machine Learning. 2000. San Francisco. P. 57–64.

8. *Mangasarian O.L., Street W.N., Wolberg W.H.* Breast caner diagnosis and prognosis via Linear Programmig // Operation Research. 1995. Vol. 43. № 4. July–August.