Обучение распознаванию образов в произвольных метрических пространствах

О.С. Середин

Тульский государственный университет

В.И. Абрамов

Московский физико-технический институт

В.В. Моттль

Вычислительный центр РАН
Московский физико-технический институт

ИОИ-2014, Крит, октябрь 2014

Типовая задача восстановления закономерностей в множествах объектов реального мира

Некоторое множество реально существующих объектов $\omega \in \Omega$.

Некоторое множество значений скрытой характеристики объектов $y \in \mathbb{Y}$.

Природа случайным образом многократно и независимо выбирает пару (ω, y).

Желание наблюдателя:

Иметь инструмент оценивания скрытой характеристики для реальных объектов
$\hat{y}(\omega) : \Omega \to \mathbb{Y}$; $\hat{y}(\omega) \neq y(\omega)$ – ошибка.

Обучение по прецедентам:

Подмножество наблюдаемых объектов, для которых измерено значение функции
$\Omega^* = \left\{ (\omega_j, y_j),\ j = 1, ..., N \right\},\ y_j = y(\omega_j)$.

Задача: Продолжить функцию на все множество Ω, так чтобы можно было в дальнейшем оценивать значение рассматриваемой характеристики $\hat{y}(\omega)$ для новых объектов $\omega \in \Omega \setminus \Omega^*$.

Типовая задача восстановления закономерностей в множествах объектов реального мира

Некоторое множество реально существующих объектов $\omega \in \Omega$.

Некоторое множество значений скрытой характеристики объектов $y \in \mathbb{Y}$.

Природа случайным образом многократно и независимо выбирает пару (ω, y).

Желание наблюдателя:

Иметь инструмент оценивания скрытой характеристики для реальных объектов
$\hat{y}(\omega) : \Omega \to \mathbb{Y}$; $\quad \hat{y}(\omega) \neq y(\omega)$ – ошибка.

Простейшие случаи:

Задача распознавания образов
$\mathbb{Y} = \{y_1, ..., y_m\}$ – конечное неупорядоченное множество; в частности $\mathbb{Y} = \{-1, 1\}$.

Задача восстановления числовой функции
$\mathbb{Y} = \mathbb{R}$ – множество действительных чисел.

Концептуальная база восстановления зависимостей: гипотеза компактности

Множество объектов реального мира	$\omega \in \Omega$
Скрытая характеристика объекта (целевая характеристика)	$y \in \mathbb{Y}$
Искомое решающее правило	$\hat{y}(\omega): \Omega \to \mathbb{Y}$

Основная идея:

Выбрать в множестве объектов некоторую метрику

$\rho(\omega', \omega''): \Omega \times \Omega \to \mathbb{R}$

$\rho(\omega', \omega'') = \rho(\omega'', \omega') \geq 0,\ \rho(\omega', \omega'') > 0$, если $\omega' \neq \omega'',\ \rho(\omega', \omega'') + \rho(\omega'', \omega''') \geq \rho(\omega', \omega''')$

Принимать для близких объектов $\rho(\omega', \omega'') \cong 0$ близкие решения

$\hat{y}(\omega') = \hat{y}(\omega'')$ в задаче распознавания образов $\mathbb{Y} = \{y_1, ..., y_m\}$

$\hat{y}(\omega') \cong \hat{y}(\omega'')$ в задаче восстановления числовой зависимости $\mathbb{Y} = \mathbb{R}$

Выбор метрик удачен, если для них выполняется ***гипотеза компактности*** (Эммануил Маркович Браверман, 1961):

Для пар объектов $\omega', \omega'' \in \Omega$, похожих в смысле выбранной метрики $\rho(\omega', \omega'') \cong 0$, значения целевой характеристики также в большинстве случаев близки $y(\omega') \cong y(\omega'')$.

Диполь в метрическом пространстве

Метрическое пространство объектов реального мира: $\omega \in \Omega$, $\rho(\omega', \omega'')$ – метрика

Диполь в метрическом пространстве – упорядоченная пара: $<\alpha_{-1}, \alpha_1> \in \Omega \times \Omega$

Простейшая реализация гипотезы компактности

Принадлежность произвольного объекта $\omega \in \Omega$ к одному из двух классов

$$\hat{y}(\omega) = \begin{cases} 1, \text{ если } \rho(\alpha_1, \omega) < \rho(\alpha_{-1}, \omega), \\ -1, \text{ если } \rho(\alpha_1, \omega) > \rho(\alpha_{-1}, \omega). \end{cases}$$

Как выбрать диполь?

В множестве объектов Ω слишком мало элементов. К тому же, наблюдатель располагает лишь конечной обучающей совокупностью объектов $\{\omega_j,\ j = 1, ..., N\}$

Более «тонкая» реализация гипотезы компактности для непрерывного метрического пространства

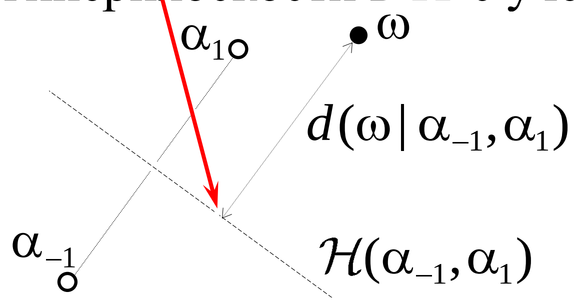
$\tilde{\Omega} \supset \Omega$ – воображаемое непрерывное метрическое пространство, в котором множество реальных объектов является подмножеством, быть может, изолированных элементов.

$\alpha_{-1}, \alpha_1 \in \tilde{\Omega}$, $\mathcal{H}(\alpha_{-1}, \alpha_1) = \{\vartheta \in \tilde{\Omega} : \rho(\alpha_{-1}, \vartheta) = \rho(\alpha_1, \vartheta)\}$ – метрическая гиперплоскость в $\tilde{\Omega}$

$\underbrace{\omega_{\mathcal{H}}(\alpha_{-1}, \alpha_1)} \in \mathcal{H}(\alpha_{-1}, \alpha_1)$ – проекция реального объекта $\omega \in \Omega$ на гиперплоскость в $\tilde{\Omega}$

Решающая функция (score function): расстояние точки от метрической гиперплоскости в $\tilde{\Omega}$ с учетом знака

$$d(\omega | \alpha_{-1}, \alpha_1) = \begin{cases} \rho(\omega_{\mathcal{H}}, \omega), \text{ если } \rho(\alpha_1, \omega) < \rho(\alpha_{-1}, \omega), \\ -\rho(\omega_{\mathcal{H}}, \omega), \text{ если } \rho(\alpha_1, \omega) > \rho(\alpha_{-1}, \omega). \end{cases}$$



Классификация:

$$\hat{y}(\omega) = \begin{cases} 1, \text{ если } d(\omega | \alpha_{-1}, \alpha_1) + b > 0, \\ -1, \text{ если } d(\omega | \alpha_{-1}, \alpha_1) + b < 0. \end{cases}$$

Числовая зависимость: $\hat{y}(\omega) = d(\omega | \alpha_{-1}, \alpha_1) + b$

Идеальные условия для реализации гипотезы компактности: Евклидова метрика в конечномерном линейном пространстве

Вектор действительных признаков $\mathbf{x}(\omega)\in\mathbb{R}^n$ погружает множество реальных объектов в $\mathbb{R}^n$

Естественная евклидова метрика в $\mathbb{R}^n$

$$\rho(\omega',\omega'')=\rho\big(\mathbf{x}(\omega'),\mathbf{x}(\omega'')\big)=\rho(\mathbf{x}',\mathbf{x}'')=\|\mathbf{x}'-\mathbf{x}''\|=\Big[(\mathbf{x}'-\mathbf{x}'')^T(\mathbf{x}'-\mathbf{x}'')\Big]^{1/2}$$

Диполь: $\alpha_1=\mathbf{a}\in\mathbb{R}^n$, $\alpha_{-1}=-\mathbf{a}\in\mathbb{R}^n$; $\mathbf{a}$ – направляющий вектор гиперплоскости

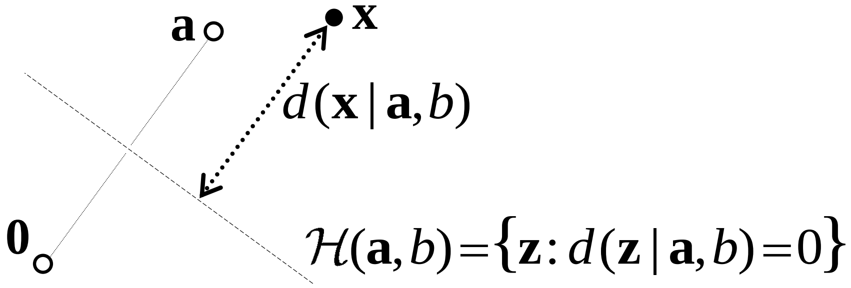
Смещенная гиперплоскость, определяемая диполем: $\mathcal{H}(\mathbf{a},b)=\big\{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n\!:\mathbf{a}^T\mathbf{x}+b=0\big\}$, $\mathbf{a}\in\mathbb{R}^n$

Решающая функция – decision (score) function:

Расстояние от точки $\mathbf{x}(\omega)\in\mathbb{R}^n$ до

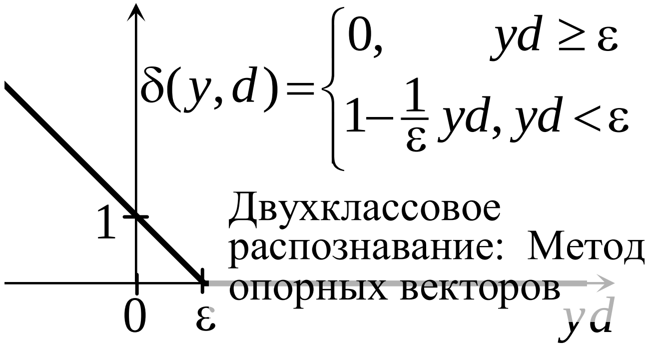
гиперплоскости $d(\mathbf{x}\,|\,\mathbf{a},b)=\dfrac{\mathbf{a}^T\mathbf{x}+b}{(\mathbf{a}^T\mathbf{a})^{1/2}}$,

$d(\mathbf{x}\,|\,\mathbf{a},b)=\mathbf{a}^T\mathbf{x}+b$ при $\|\mathbf{a}\|=1$



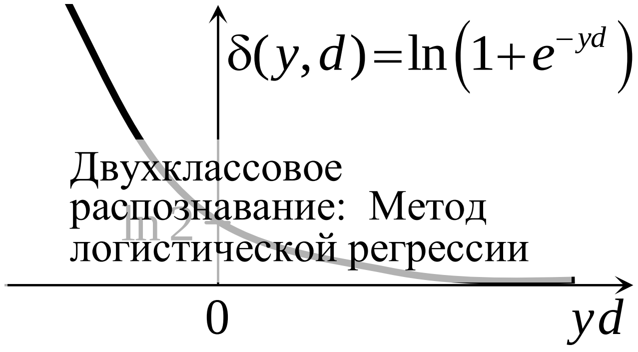
Функция потерь: Степень несоответствия значения решающей функции значению целевой характеристики объекта

Индекс класса объекта $y\in\{-1,1\}$ Числовая характеристика $y\in\mathbb{R}$



$$\delta(y,d)=\begin{cases}0, & yd\ge\varepsilon\\ 1-\frac{1}{\varepsilon}yd, & yd<\varepsilon\end{cases}$$

Двухклассовое распознавание: Метод опорных векторов



$$\delta(y,d)=\ln\left(1+e^{-yd}\right)$$

Двухклассовое распознавание: Метод логистической регрессии

$$\delta(y,d)=(y-d)^2$$

Линейная модель числовой зависимости с квадратичной функцией потерь

Идеальные условия для реализации гипотезы компактности: Евклидова метрика в конечномерном линейном пространстве

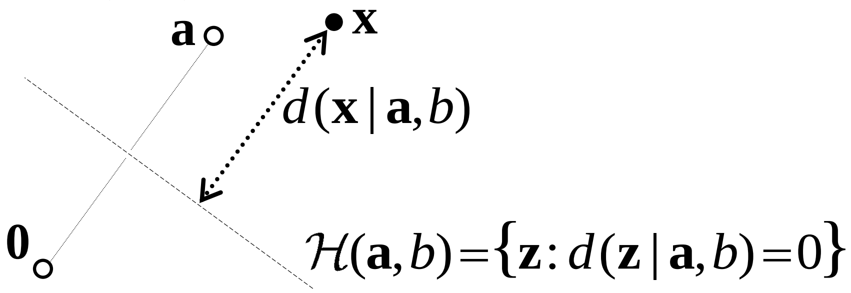
Вектор действительных признаков $\mathbf{x}(\omega)\in\mathbb{R}^n$ погружает множество реальных объектов в $\mathbb{R}^n$

Естественная евклидова метрика в $\mathbb{R}^n$

$$\rho(\omega',\omega'')=\rho\big(\mathbf{x}(\omega'),\mathbf{x}(\omega'')\big)=\rho(\mathbf{x}',\mathbf{x}'')=\|\mathbf{x}'-\mathbf{x}''\|=\Big[(\mathbf{x}'-\mathbf{x}'')^T(\mathbf{x}'-\mathbf{x}'')\Big]^{1/2}$$

Диполь: $\alpha_1=\mathbf{a}\in\mathbb{R}^n$, $\alpha_{-1}=-\mathbf{a}\in\mathbb{R}^n$; $\mathbf{a}$ – направляющий вектор гиперплоскости

Смещенная гиперплоскость, определяемая диполем: $\mathcal{H}(\mathbf{a},b)=\big\{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n\colon \mathbf{a}^T\mathbf{x}+b=0\big\}$, $\mathbf{a}\in\mathbb{R}^n$



Решающая функция – decision (score) function:

Расстояние от точки $\mathbf{x}(\omega)\in\mathbb{R}^n$ до

гиперплоскости $d(\mathbf{x}\,|\,\mathbf{a},b)=\dfrac{\mathbf{a}^T\mathbf{x}+b}{(\mathbf{a}^T\mathbf{a})^{1/2}}$,

$d(\mathbf{x}\,|\,\mathbf{a},b)=\mathbf{a}^T\mathbf{x}+b$ при $\|\mathbf{a}\|=1$

Такой подход основан на индивидуальном представлении объектов

Евклидова метрика определена в конечномерном пространстве признаков $\omega\in\Omega\to\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n$

$$\rho(\omega',\omega'')=\|\mathbf{x}'-\mathbf{x}''\|=\Big[(\mathbf{x}'-\mathbf{x}'')^T(\mathbf{x}'-\mathbf{x}'')\Big]^{1/2}$$

Как быть, если непосредственное измерение лишь некоторого парного отношения есть единственно возможный способ представления объектов реального мира?

Беспризнаковый подход в распознавании образов, метрические методы распознавания*
(Featureless Pattern Recognition, Relational Discriminant Analysis)

Пусть $S(\omega',\omega''):\Omega\times\Omega\to\mathbb{R}$ способ измерения некоторого парного отношения объектов реального мира.

Варианты:

$S(\omega',\omega''):\Omega\times\Omega\to\mathbb{R}$ – произвольная функция, возможно даже не симметричная,

$S(\omega',\omega''):\Omega\times\Omega\to\mathbb{R}^+$ – произвольная метрика,

$S(\omega',\omega''):\Omega\times\Omega\to\mathbb{R}^+$ – Евклидова метрика.

---

*Алгоритмы выбора, оптимизации и коррекции метрик детально разработаны научной школы академика РАН Ю.И. Журавлева и чл.-корр. РАН К.В. Рудакова.

Беспризнаковый подход в распознавании образов (Featureless Pattern Recognition, Relational Discriminant Analysis)

Варианты:

$S(\omega',\omega''):\Omega\times\Omega\to\mathbb{R}$ – произвольная функция, возможно даже не симметричная,

$S(\omega',\omega''):\Omega\times\Omega\to\mathbb{R}^{+}$ – произвольная метрика,

$S(\omega',\omega''):\Omega\times\Omega\to\mathbb{R}^{+}$ – Евклидова метрика.

Механизм работы с произвольными функциями – погружение множества объектов во вторичное признаковое пространство, путем определения векторов вторичных признаков, как отношения с признакообразующими объектами (базисное множество, bag of dissimilarities).

Преимущества – возможность использовать непосредственно алгоритмы «признакового» обучения, напрямую работать с несколькими функциями парного сравнения (ситуация комбинирования многомодального представления объектов).
Недостатки – необходимость отбора и хранения признакообразующих объектов.

Работы школы проф. Р. Дьюина (Делфтский технический университет).

Середин О.С. Линейные методы распознавания образов на множествах объектов произвольной природы, представленных попарными сравнениями. Общий случай. //Известия ТулГУ, Серия Естественные науки, – Тула: Изд-во ТулГУ, Вып. 1, 2012, с. 141-152.
Середин О.С., Моттль В.В., Татарчук А.И., Разин Н.А. Выпуклые селективные критерии метода релевантных векторов в пространстве парных отношений объектов распознавания // Известия ТулГУ, Естественные науки, – Тула: Изд-во ТулГУ, Вып. 1, 2013, С. 165-176.

Беспризнаковый подход в распознавании образов (Featureless Pattern Recognition, Relational Discriminant Analysis)

Варианты:

$S(\omega',\omega''):\Omega\times\Omega\rightarrow\mathbb{R}$ – произвольная функция, возможно даже не симметричная,

$S(\omega',\omega''):\Omega\times\Omega\rightarrow\mathbb{R}^{+}$ – произвольная метрика,

$S(\omega',\omega''):\Omega\times\Omega\rightarrow\mathbb{R}^{+}$ – Евклидова метрика.

Механизм работы с Евклидовой метрикой – SVM в чистом виде.
Действительно, любая Евклидова метрика погружает множество объектов в линейное пространство со скалярным произведением, и как следствие определяет в нем кернел (теорема Мерсера). Для SVM достаточно даже, чтобы был определен условный кернел (*пред-евклидова метрика*, *proto-Euclidian**). Вообще говоря, одной метрике соответствует континуум эквивалентных кернелов, и работать напрямую с метрикой более разумно**.
Также наличие кернела дает преимущества и для схемы с базисной совокупностью***.

* Термин предложен К.В. Воронцовым

** Абрамов В.И., Середин О.С., Моттль В.В. Обучение распознаванию образов по методу опорных объектов в евклидовых метрических пространствах с аффинными операциями // Известия ТулГУ, Естественные науки, – Тула: Изд-во ТулГУ, Вып. 2, Ч. 1, 2013, С.119-136.

*** Середин О.С. Потенциальная функция на множестве объектов распознавания как инструмент их попарного сравнительного представления // Известия ТулГУ, Естественные науки, – Тула: Изд-во ТулГУ, Вып. 1, 2013, С. 177-189.

Беспризнаковый подход в распознавании образов (Featureless Pattern Recognition, Relational Discriminant Analysis)

Варианты:

$S(\omega',\omega''):\Omega\times\Omega\to\mathbb{R}$ – произвольная функция, возможно даже не симметричная,

$S(\omega',\omega''):\Omega\times\Omega\to\mathbb{R}^+$ – произвольная метрика,

$S(\omega',\omega''):\Omega\times\Omega\to\mathbb{R}^+$ – Евклидова метрика.

Механизм работы с произвольной метрикой:

- аналог SVM в псевдоевклидовом линейном пространстве (пространстве Крейна)*,
- аналог SVM для изометрического вложения метрического пространства в банахово пространство ограниченных непрерывных функций в нем (вложение Куратовского)**,
- погружение метрики на основе потоков Риччи***.

---

*Haasdonk, B. Feature Space Interpretation of SVMs with Indefinite Kernels //IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence 27(4), 2005, 482–492.

*Середин О.С., Абрамов В.И., Моттль В.В. Аффинные операции в псевдоевклидовом линейном пространстве. Известия ТулГУ, Естественные науки. Тула: Изд-во ТулГУ, Вып. 2, 2014, с. ???-???.

**Hein M., Bousquet O., Schölkopf B., Maximal margin classification for metric spaces, Journal of Computer and System Sciences, Volume 71, Issue 3, October 2005, Pages 333-359.

***Работы школы проф. Ричарда Вильсона и Эдвина Ханкока (Университет Йорка), напр.
Xu W. Non-Euclidean Dissimilarity Data in Pattern Recognition. Ph.D. Thesis – 2012.
Hancock E. R., Xu E., Wilson R. C. Pattern Recognition with Non-Euclidean Similarities //Man-Machine Interactions 3. – 2014. – C. 3-15.

Инструмент погружения в линейное пространство: Общность элементов метрического пространства

Метрическое пространство Ω с метрикой $\rho(\omega', \omega'')$:

$\rho(\omega, \omega) = 0$, $\rho(\omega', \omega'') > 0$, если $\omega' \neq \omega''$; $\rho(\omega', \omega'') = \rho(\omega'', \omega')$;

$\rho(\omega', \omega'') + \rho(\omega'', \omega''') \geq \rho(\omega', \omega''')$ – неравенство треугольника

Выберем некоторый элемент метрического пространства $\phi \in \Omega$ в качестве «центра»

Двухместная функция общности $K_\phi(\omega', \omega''): \Omega \times \Omega \to \mathbb{R}$

$$K_\phi(\omega', \omega'') = \frac{1}{2}\left[\rho^2(\omega', \phi) + \rho^2(\omega'', \phi) - \rho^2(\omega', \omega'') \right]$$

Аналог известного понятия: подобность произведения Громова (Gromov product similarity)

Свойства:

$K_\phi(\omega', \omega'') = K_\phi(\omega'', \omega')$ – симметричность

$K_\phi(\omega, \omega) = \rho^2(\omega, \phi) \geq 0$ – неотрицательность при $\omega' = \omega''$

$| K_\phi(\omega', \omega'') | \leq \sqrt{K_\phi(\omega', \omega')}\sqrt{K_\phi(\omega'', \omega'')}$ – неравенство типа Коши-Буняковского

$K_{\tilde{\phi}}(\omega', \omega'') = K_\phi(\omega', \omega'') - K_\phi(\omega', \tilde{\phi}) - K_\phi(\omega'', \tilde{\phi}) + K_\phi(\tilde{\phi}, \tilde{\phi})$ – правило переноса центра

$\rho^2(\omega', \omega'') = K_\phi(\omega', \omega') + K_\phi(\omega'', \omega'') - 2K_\phi(\omega', \omega'')$ – возврат к метрике

Очень похоже на скалярное произведение!
Но у нас еще нет линейных операций!?

Матрица общности для конечного метрического пространства

Предположим для простоты, что множество объектов реального мира с метрикой $\rho(\omega',\omega'')$ конечно $|\Omega| = M$, $\Omega = \{\omega_1,\dots,\omega_M\}$.

$\mathbf{K}_\phi = \left[K_\phi(\omega_i,\omega_j), i, j = 1,\dots,M \right]$ – симметрическая матрица общности для центра $\phi \in \Omega$

$\xi_{\phi,1} \in \mathbb{R},\dots,\xi_{\phi,N} \in \mathbb{R}$ собственные числа действительны

$$\mathbf{z}_{\phi,1} = \begin{pmatrix} z_{\phi,11} \\ \vdots \\ z_{\phi,1M} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^M,\dots,\mathbf{z}_{\phi,M} = \begin{pmatrix} z_{\phi,M1} \\ \vdots \\ z_{\phi,MM} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^M$$

собственные векторы действительны

$$\mathbf{z}^T_{\phi,i}\mathbf{z}_{\phi,j} = \begin{cases} 1, \, i = j \\ 0, \, i \neq j \end{cases}, \; i \neq j$$

собственные векторы ортонормированы

$$\underbrace{\xi_{\phi,1} \geq 0,\dots,\xi_{\phi,p_\phi} \geq 0}_{p_\phi}, \; \underbrace{\xi_{\phi,p_\phi+1} < 0,\dots,\xi_{\phi,M} < 0}_{q_\phi}$$

для произвольной метрики матрица может не быть положительно определенной

$p_\phi + q_\phi = M$ – сигнатура общности

Погружение метрического пространства в псевдоевклидово линейное пространство (погружение Крейна)

$$\mathbf{K}_\phi = \sum_{i=1}^{M} \xi_{\phi,i}\mathbf{z}_{\phi,i}\mathbf{z}_{\phi,i}^T = \underbrace{\sum_{i=1}^{p_\phi} \xi_{\phi,i}\mathbf{z}_{\phi,i}\mathbf{z}_{\phi,i}^T}_{p_\phi \ \textit{слагаемых}} - \underbrace{\sum_{i=p_\phi+1}^{M} \bar{\xi}_{\phi,i}\mathbf{z}_{\phi,i}\mathbf{z}_{\phi,i}^T}_{q_\phi \ \textit{слагаемых}} .$$

Здесь $\bar{\xi}_{\phi,i} = -\xi_{\phi,i}$

$$\mathbf{K}_\phi = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{p_\phi}\left[\sqrt{\xi_{\phi,i}}\,z_{\phi,i1}\right]\left[\sqrt{\xi_{\phi,i}}\,z_{\phi,i1}\right] & \cdots & \sum_{i=1}^{p_\phi}\left[\sqrt{\xi_{\phi,i}}\,z_{\phi,i1}\right]\left[\sqrt{\xi_{\phi,i}}\,z_{\phi,iM}\right] \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{i=1}^{p_\phi}\left[\sqrt{\xi_{\phi,i}}\,z_{\phi,iM}\right]\left[\sqrt{\xi_{\phi,i}}\,z_{\phi,i1}\right] & \cdots & \sum_{i=1}^{p_\phi}\left[\sqrt{\xi_{\phi,i}}\,z_{\phi,iM}\right]\left[\sqrt{\xi_{\phi,i}}\,z_{\phi,iM}\right] \end{pmatrix} -$$

$$- \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{q_\phi}\left[\sqrt{\bar{\xi}_{\phi,i}}\,z_{\phi,p_\phi+i,1}\right]\left[\sqrt{\bar{\xi}_{\phi,i}}\,z_{\phi,p_\phi+i,1}\right] & \cdots & \sum_{j=1}^{q_\phi}\left[\sqrt{\bar{\xi}_{\phi,i}}\,z_{\phi,p_\phi+i,1}\right]\left[\sqrt{\bar{\xi}_{\phi,i}}\,z_{\phi,p_\phi+i,M}\right] \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{i=1}^{q_\phi}\left[\sqrt{\bar{\xi}_{\phi,i}}\,z_{\phi,p_\phi+i,M}\right]\left[\sqrt{\bar{\xi}_{\phi,i}}\,z_{\phi,p_\phi+i,1}\right] & \cdots & \sum_{j=1}^{q_\phi}\left[\sqrt{\bar{\xi}_{\phi,i}}\,z_{\phi,p_\phi+i,M}\right]\left[\sqrt{\bar{\xi}_{\phi,i}}\,z_{\phi,p_\phi+i,M}\right] \end{pmatrix}.$$

$$(\mathbf{z}_{\phi,1}\cdots\mathbf{z}_{\phi,M}) = \left(\begin{array}{ccc:ccc} z_{\phi,11} & \cdots & z_{\phi,p_\phi 1} & z_{\phi,p_\phi+1,1} & \cdots & z_{\phi,M1} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ z_{\phi,1M} & \cdots & z_{\phi,p_\phi M} & z_{\phi,p_\phi+1,M} & \cdots & z_{\phi,MM} \end{array}\right)$$

$$\underbrace{\qquad\qquad\qquad}_{p_\phi} \qquad \underbrace{\qquad\qquad\qquad}_{q_\phi}$$

Обозначения элементов матрицы собственных векторов

$$\mathbf{u}_{\phi,i}^T = \underbrace{\left(\sqrt{\xi_{\phi,i}}\,z_{\phi,1i} \ \cdots \ \sqrt{\xi_{\phi,i}}\,z_{\phi,p_\phi i}\right)}_{\in\mathbb{R}^{p_\phi}} \ \underbrace{\left(\sqrt{\bar{\xi}_{\phi,i}}\,z_{\phi,p_\phi+1,i} \ \cdots \ \sqrt{\bar{\xi}_{\phi,i}}\,z_{\phi,Mi}\right)}_{\in\mathbb{R}^{q_\phi}} = \mathbf{v}_{\phi,i}^T$$

$$\mathbf{x}_{\phi,i}^T = (\mathbf{u}_{\phi,i}^T \ \mathbf{v}_{\phi,i}^T) = \left(\sqrt{\xi_{\phi,i}}\,z_{\phi,1i}\cdots\sqrt{\xi_{\phi,i}}\,z_{\phi,p_\phi i} \ \sqrt{\bar{\xi}_{\phi,i}}\,z_{\phi,p_\phi+1,i}\cdots\sqrt{\bar{\xi}_{\phi,i}}\,z_{\phi,Mi}\right) \in \mathbb{R}^M$$

Погружение метрического пространства в псевдоевклидово линейное пространство (погружение Крейна)

$$\mathbf{K}_\phi = \sum_{i=1}^{M} \xi_{\phi,i}\mathbf{z}_{\phi,i}\mathbf{z}_{\phi,i}^T = \underbrace{\sum_{i=1}^{p} \xi_{\phi,i}\mathbf{z}_{\phi,i}\mathbf{z}_{\phi,i}^T}_{p\ \textit{слагаемых}} - \underbrace{\sum_{i=p+1}^{N} \bar{\xi}_{\phi,i}\mathbf{z}_{\phi,i}\mathbf{z}_{\phi,i}^T}_{q\ \textit{слагаемых}}.$$

Здесь $\bar{\xi}_{\phi,i} = -\xi_{\phi,i}$

$$\mathbf{K}_\phi = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_{\phi,1}^T \mathbf{J}_{p_\phi,q_\phi} \mathbf{x}_{\phi,1} & \cdots & \mathbf{x}_{\phi,1}^T \mathbf{J}_{p_\phi,q_\phi} \mathbf{x}_{\phi,M} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{x}_{\phi,M}^T \mathbf{J}_{p_\phi,q_\phi} \mathbf{z}_{\phi,1} & \cdots & \mathbf{x}_{\phi,M}^T \mathbf{J}_{p_\phi,q_\phi} \mathbf{x}_{\phi,M} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{u}_{\phi,1}^T \mathbf{u}_{\phi,1} & \cdots & \mathbf{u}_{\phi,1}^T \mathbf{u}_{\phi,M} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{u}_{\phi,M}^T \mathbf{u}_{\phi,1} & \cdots & \mathbf{u}_{\phi,N}^T \mathbf{u}_{\phi,M} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \mathbf{v}_{\phi,1}^T \mathbf{v}_{\phi,1} & \cdots & \mathbf{v}_{\phi,1}^T \mathbf{v}_{\phi,M} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{v}_{\phi,N}^T \mathbf{v}_{\phi,1} & \cdots & \mathbf{v}_{\phi,M}^T \mathbf{v}_{\phi,M} \end{pmatrix}$$

$\mathbf{J}_{p_\phi,q_\phi} = \begin{pmatrix} \mathbf{I}_{p_\phi \times p_\phi} & \mathbf{0}_{p_\phi \times q_\phi} \\ \mathbf{0}_{q_\phi \times p_\phi} & -\mathbf{I}_{q_\phi \times q_\phi} \end{pmatrix} (M \times M)$ – единичная матрица сигнатуры $p_\phi + q_\phi = M$.

Итак, каждому элементу произвольного конечного метрического пространства $\omega \in \Omega = \{\omega_1, ..., \omega_M\}$ с произвольным центральным элементом $\phi \in \Omega$ поставлен в соответствие вектор действительных признаков $\mathbf{x}_{\phi,\omega} \in \mathbb{R}^M$. Центральному элементу соответствует нулевой вектор $\mathbf{x}_\phi = \mathbf{0} \in \mathbb{R}^M$.

В этом заключается погружение конечного метрического пространства $\Omega = \{\omega_1, ..., \omega_M\}$ в линейное пространство $\mathbb{R}^M$.

Исходное метрическое пространство отображается в конечное множество векторов $\mathbb{R}_{\Omega,\phi}^M = \{\mathbf{x}_{\phi,\omega_1}, ..., \mathbf{x}_{\phi,\omega_M}\} \subset \mathbb{R}^M$ – образ метрического пространства в $\mathbb{R}^M$.

Индефинитное скалярное произведение и псевдоевклидово линейное пространство

Двухместная действительная функция, определенная во всем линейном пространстве $\mathbb{R}^M$:

$$K_\phi(\mathbf{x}', \mathbf{x}'') = \mathbf{x}'^T \mathbf{J}_{p_\phi, q_\phi} \mathbf{x}'' : \mathbb{R}^M \times \mathbb{R}^M \to \mathbb{R} \qquad \mathbf{J}_{p_\phi, q_\phi} = \begin{pmatrix} \mathbf{I}_{p_\phi \times p_\phi} & \mathbf{0}_{p_\phi \times q_\phi} \\ \mathbf{0}_{q_\phi \times p_\phi} & -\mathbf{I}_{q_\phi \times q_\phi} \end{pmatrix} (M \times M)$$

Свойства:	
Симметричность	$K(\mathbf{x}', \mathbf{x}'') = K(\mathbf{x}'', \mathbf{x}')$
Билинейность	$K(c'\mathbf{x}' + c''\mathbf{x}'', \mathbf{x}''') = c'K(\mathbf{x}', \mathbf{x}''') + c''K(\mathbf{x}'', \mathbf{x}''')$
Нет свойства неотрицательности при совпадающих значениях аргументов	$K(\mathbf{x}, \mathbf{x}) < 0$ для некоторых $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^M$
$K_\phi(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = \mathbf{x}_\phi^T \mathbf{J}_{p_\phi, q_\phi} \mathbf{x}_\phi = (\mathbf{u}_\phi^T \mathbf{v}_\phi^T) \begin{pmatrix} \mathbf{I}_{p \times p} & \mathbf{0}_{p \times q} \\ \mathbf{0}_{q \times p} & -\mathbf{I}_{q \times q} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u}_\phi \\ \mathbf{v}_\phi \end{pmatrix} = \mathbf{u}_\phi^T \mathbf{u}_\phi - \mathbf{v}_\phi^T \mathbf{v}_\phi < 0$, если $\mathbf{u}^T \mathbf{u} < \mathbf{v}^T \mathbf{v}$	

Это не скалярное произведение!

Такую функцию принято называть индефинитным скалярным произведением, а линейное пространство $\mathbb{R}^M$ – псевдоевклидовым пространством.

Бесконечномерное пространство с индефинитным скалярным произведением называют пространством Крейна.

> Марк Григорьевич Крейн (1907-1989), профессор Одесского инженерно-строительного института.

Индефинитное скалярное произведение и псевдоевклидово линейное пространство

Двухместная действительная функция, определённая во всем линейном пространстве $\mathbb{R}^M$:

$$K_\phi(\mathbf{x}',\mathbf{x}'') = \mathbf{x}'^T \mathbf{J}_{p_\phi,q_\phi}\mathbf{x}'' : \mathbb{R}^M \times \mathbb{R}^M \to \mathbb{R} \qquad \mathbf{J}_{p_\phi,q_\phi} = \begin{pmatrix} \mathbf{I}_{p_\phi\times p_\phi} & \mathbf{0}_{p_\phi\times q_\phi} \\ \mathbf{0}_{q_\phi\times p_\phi} & -\mathbf{I}_{q_\phi\times q_\phi} \end{pmatrix} (M\times M)$$

Свойства:	
Симметричность	$K(\mathbf{x}',\mathbf{x}'') = K(\mathbf{x}'',\mathbf{x}')$
Билинейность	$K(c'\mathbf{x}' + c''\mathbf{x}'',\, \mathbf{x}''') = c'K(\mathbf{x}',\mathbf{x}''') + c''K(\mathbf{x}'',\mathbf{x}''')$
Нет свойства неотрицательности при совпадающих значениях аргументов	$K(\mathbf{x},\mathbf{x}) < 0$ для некоторых $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^M$
$K_\phi(\mathbf{x},\mathbf{x}) = \mathbf{x}_\phi^T \mathbf{J}_{p_\phi,q_\phi}\mathbf{x}_\phi = (\mathbf{u}_\phi^T \mathbf{v}_\phi^T)\begin{pmatrix} \mathbf{I}_{p\times p} & \mathbf{0}_{p\times q} \\ \mathbf{0}_{q\times p} & -\mathbf{I}_{q\times q} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \mathbf{u}_\phi \\ \mathbf{v}_\phi \end{pmatrix} = \mathbf{u}_\phi^T\mathbf{u}_\phi - \mathbf{v}_\phi^T\mathbf{v}_\phi < 0$, если $\mathbf{u}^T\mathbf{u} < \mathbf{v}^T\mathbf{v}$	

Это не скалярное произведение!

Такую функцию принято называть индефинитным скалярным произведением, а линейное пространство $\mathbb{R}^M$ – псевдоевклидовым пространством.

Однако для образа метрического пространства $\mathbb{R}^M_{\Omega,\phi} = \{\mathbf{x}_{\phi,\omega_1},\ldots,\mathbf{x}_{\phi,\omega_M}\} \subset \mathbb{R}^M$ выполняется равенство $K_\phi(\mathbf{x}_{\phi,\omega},\mathbf{x}_{\phi,\omega}) \geq 0$, $\omega \in \Omega$, причем $K_\phi(\mathbf{x}_{\phi,\omega},\mathbf{x}_{\phi,\omega}) > 0$, если $\omega \neq \phi$.

Длина вектора и расстояние между векторами в псевдоевклидовом пространстве

Индефинитное скалярное произведение $K_{\phi}(\mathbf{x}', \mathbf{x}'') = \mathbf{x}'^{T} \mathbf{J}_{p_{\phi}, q_{\phi}} \mathbf{x}'' : \mathbb{R}^{M} \times \mathbb{R}^{M} \to \mathbb{R}$

Формальное определение длины вектора (это не норма!)

$$r_{\phi}(\mathbf{x}, \mathbf{0}) = (\mathbf{x}^{T} \mathbf{J}_{p_{\phi}, q_{\phi}} \mathbf{x})^{1/2} = \begin{cases} (\mathbf{u}_{\phi}^{T} \mathbf{u}_{\phi} - \mathbf{v}_{\phi}^{T} \mathbf{v}_{\phi})^{1/2}, \text{ если } \mathbf{u}_{\phi}^{T} \mathbf{u}_{\phi} - \mathbf{v}_{\phi}^{T} \mathbf{v}_{\phi} \geq 0, \\ i\,|\mathbf{u}_{\phi}^{T} \mathbf{u}_{\phi} - \mathbf{v}_{\phi}^{T} \mathbf{v}_{\phi}|^{1/2} \text{ мнимая величина, если } \mathbf{u}_{\phi}^{T} \mathbf{u}_{\phi} - \mathbf{v}_{\phi}^{T} \mathbf{v}_{\phi} < 0. \end{cases}$$

Соответственно, расстояние между векторами (это не метрика!)

$$r(\mathbf{x}', \mathbf{x}'') = \big[(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'')^{T} \mathbf{J}_{p_{\phi}, q_{\phi}} (\mathbf{x}' - \mathbf{x}'')\big]^{1/2} =$$

$$= \begin{cases} \big[(\mathbf{u}'_{\phi} - \mathbf{u}''_{\phi})^{T} (\mathbf{u}'_{\phi} - \mathbf{u}''_{\phi}) - (\mathbf{v}'_{\phi} - \mathbf{v}''_{\phi})^{T} (\mathbf{v}'_{\phi} - \mathbf{v}''_{\phi})\big]^{1/2}, \text{ если } (\mathbf{u}'_{\phi} - \mathbf{u}'')^{T} (\mathbf{u}'_{\phi} - \mathbf{u}''_{\phi}) - (\mathbf{v}'_{\phi} - \mathbf{v}''_{\phi})^{T} (\mathbf{v}'_{\phi} - \mathbf{v}''_{\phi}) \geq 0, \\ i\Big|(\mathbf{u}'_{\phi} - \mathbf{u}'')^{T} (\mathbf{u}'_{\phi} - \mathbf{u}''_{\phi}) - (\mathbf{v}'_{\phi} - \mathbf{v}'')^{T} (\mathbf{v}'_{\phi} - \mathbf{v}''_{\phi})\Big|^{1/2}, \text{ если } (\mathbf{u}'_{\phi} - \mathbf{u}''_{\phi})^{T} (\mathbf{u}'_{\phi} - \mathbf{u}''_{\phi}) - (\mathbf{v}'_{\phi} - \mathbf{v}''_{\phi})^{T} (\mathbf{v}'_{\phi} - \mathbf{v}''_{\phi}) < 0. \end{cases}$$

Изометрическое погружение произвольного метрического пространства в псевдоевклидово линейное пространство

Однако для конечного образа метрического пространства $\mathbb{R}_{\Omega,\phi}^{M} = \{\mathbf{x}_{\phi,\omega_1}, \ldots, \mathbf{x}_{\phi,\omega_M}\} \subset \mathbb{R}^{M}$ определена обычная метрика $r(\mathbf{x}_{\phi,\omega'}, \mathbf{x}_{\phi,\omega''}) = \big[(\mathbf{x}_{\phi,\omega'} - \mathbf{x}_{\phi,\omega''})^{T} \mathbf{J}_{p,q} (\mathbf{x}_{\phi,\omega'} - \mathbf{x}_{\phi,\omega''})\big]^{1/2} \in \mathbb{R}$, причем $r(\mathbf{x}_{\phi,\omega'}, \mathbf{x}_{\phi,\omega''}) = \rho(\omega', \omega'')$.

Таким образом, метрическое пространство изометрично погружается в псевдоевклидово пространство, причем расстояние между образами его элементов $\mathbf{x}_{\phi,\omega'}$ и $\mathbf{x}_{\phi,\omega''}$ не зависит от выбора центра $\phi \in \Omega$.

Аффинные операции в псевдоевклидовом линейном пространстве

Рассмотрим произвольную конечную неупорядоченную совокупность $\{\mathbf{x}_1,...,\mathbf{x}_n\}$ элементов псевдоевклидова пространства $\mathbf{x}_j \in \mathbb{R}^M$, т.е. совокупность пар векторов $\{(\mathbf{u}_1,\mathbf{v}_1),...,(\mathbf{u}_n,\mathbf{v}_n)\}$, $\mathbf{u}_j \in \mathbb{R}^p$, $\mathbf{v}_j \in \mathbb{R}^{M-p}$, $j=1,...,n$, $n \le M$. Пусть $\mathbf{c}=(c_1 \cdots c_n) \in \mathbb{R}^n$ – вектор коэффициентов при элементах совокупности, в сумме составляющих единицу $\sum_{k=1}^n c_k = \mathbf{1}^T \mathbf{c} = 1$, где $\mathbf{1} \in \mathbb{R}^n$ – вектор, составленный из единиц. Линейная комбинация

$$\mathbf{x}_\mathbf{c} = \sum_{k=1}^n c_k \mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^M, \ \sum_{k=1}^n c_k = \mathbf{1}^T \mathbf{c} = 1,$$

называется аффинной комбинацией элементов $\{\mathbf{x}_1,...,\mathbf{x}_n\}$ коэффициентами $\mathbf{c}=(c_1 \cdots c_n)$. Очевидно, что $\mathbf{x}_\mathbf{c} = (\mathbf{u}_\mathbf{c},\mathbf{v}_\mathbf{c})$, где $\mathbf{u}_\mathbf{c}=\sum_{k=1}^n c_k \mathbf{u}_k \in \mathbb{R}^p$, $\mathbf{v}_\mathbf{c}=\sum_{k=1}^n c_k \mathbf{v}_k \in \mathbb{R}^{M-p}$.

Аффинные операции в псевдоевклидовом линейном пространстве

Теорема. *Квадрат расстояния любого элемента псевдоевклидова пространства* $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^M$ *до аффинной комбинации* $\mathbf{x_c} \in \mathbb{R}^M$ *определяется равенством*

$$r^2(\mathbf{x_c}, \mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{n} c_k r^2(\mathbf{x}_k, \mathbf{x}) - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n} \sum_{l=1}^{n} c_k c_l r^2(\mathbf{x}_k, \mathbf{x}_l).$$

В частности для пары объектов аффинная комбинация векторов $\mathbf{x}' \in \mathbb{R}^M$ и $\mathbf{x}'' \in \mathbb{R}^M$ выражается одним числом c: $\mathbf{x}_c = (1-c)\mathbf{x}' + c\mathbf{x}'' \in \mathbb{R}^M$, и такой вектор мы называем соосным данной паре (диполю). Для любого вектора $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^M$ квадрат расстояния до соосного вектора:

$$r^2(\mathbf{x}_c, \mathbf{x}) = (1-c) r^2(\mathbf{x}', \mathbf{x}) + c r^2(\mathbf{x}'', \mathbf{x}) - c(1-c) r^2(\mathbf{x}', \mathbf{x}'').$$

Аффинное псевдоевклидово пространство, натянутое на изометрический образ метрического пространства

Множество всех векторов псевдоевклидова пространства, являющихся аффинными комбинациями элементов образа $\mathbb{R}^M_{\Omega,\phi}$ исходного метрического пространства $\Omega=\{\omega_1,...,\omega_M\}$, будем называть аффинным образом метрического пространства и обозначать символом

$$\tilde{\mathbb{R}}^M_{\Omega,\phi}=\left\{\mathbf{x_c}=\sum\nolimits_{k=1}^M c_k\mathbf{x}_{\phi,\omega_k},\ \mathbf{1}^T\mathbf{c}=1\right\}\subset\mathbb{R}^M.$$

Частный случай пред-евклидовой метрики:

Теорема. *В случае пред-евклидовой метрики* $\rho(\omega',\omega''):\Omega\times\Omega\to\mathbb{R}$ *для всякой совокупности объектов* $\omega_1,...,\omega_n\in\Omega$, $\phi\in\Omega$, *и коэффициентов* $c_1+...+c_n=1$ *аффинная комбинация* $\mathbf{x}_{\phi,\mathbf{c}}$ *удовлетворяет неравенству*

$$r^2(\mathbf{x}_{\phi,\mathbf{c}},\mathbf{x}_{\phi,\omega})=\sum_{k=1}^n c_k r^2(\mathbf{x}_{\phi,\omega_k},\mathbf{x}_{\phi,\omega})-\frac{1}{2}\sum_{k=1}^n\sum_{l=1}^n c_k c_l r^2(\mathbf{x}_{\phi,\omega_k},\mathbf{x}_{\phi,\omega_l})\geq 0.$$

Вектор $\mathbf{x}_{\phi,\mathbf{c}}$ *является единственным в евклидовом линейном пространстве* $\mathbb{R}^M$.

Диполь в псевдоевклидовом пространстве

Будем называть дискриминантным диполем упорядоченную пару векторов $<\boldsymbol{\alpha}_{-1},\boldsymbol{\alpha}_1>\in\mathbb{R}^M\times\mathbb{R}^M$, а сами векторы $\boldsymbol{\alpha}_{-1},\boldsymbol{\alpha}_1\in\mathbb{R}^M$ – узлами диполя. Рассмотрим множество всех векторов $\mathbf{x}_c\in\mathbb{R}^M$, соосных паре $<\boldsymbol{\alpha}_{-1},\boldsymbol{\alpha}_1>$ со всеми действительными коэффициентами $c\in\mathbb{R}$:

$$\mathbf{x}_c=(1-c)\boldsymbol{\alpha}_{-1}+c\boldsymbol{\alpha}_1\in\mathbb{R}^M.$$

Вектор

$$\mathbf{x}_{1/2}=(1/2)(\boldsymbol{\alpha}_{-1}-\boldsymbol{\alpha}_1),\ \ c=1/2,$$

будем называть центральной точкой диполя.

Условимся рассматривать только такие диполи, квадрат расстояния между узлами которых является положительным:

$$r^2(\boldsymbol{\alpha}_{-1},\boldsymbol{\alpha}_1)=(\boldsymbol{\alpha}_{-1}-\boldsymbol{\alpha}_1)^T\mathbf{J}_p(\boldsymbol{\alpha}_{-1}-\boldsymbol{\alpha}_1)=(\mathbf{u}_{\alpha_{-1}}-\mathbf{u}_{\alpha_1})^T(\mathbf{u}_{\alpha_{-1}}-\mathbf{u}_{\alpha_1})-(\mathbf{v}_{\alpha_{-1}}-\mathbf{v}_{\alpha_1})^T(\mathbf{v}_{\alpha_{-1}}-\mathbf{v}_{\alpha_1})>0.$$

Для таких диполей определено метрическое расстояние между узлами $r(\boldsymbol{\alpha}_{-1},\boldsymbol{\alpha}_1)$.

Пусть $\mathbf{x}\in\mathbb{R}^M$ – произвольный вектор в псевдоевклидовом пространстве, например, вектор $\mathbf{x}_{\phi,\omega}$, соответствующий некоторому объекту реального мира $\omega\in\Omega$ согласно идее линейного погружения. Тогда квадрат расстояния между $\mathbf{x}_c$ и $\mathbf{x}$:

$$r^2(\mathbf{x}_c,\mathbf{x})=(1-c)r^2(\boldsymbol{\alpha}_{-1},\mathbf{x})+cr^2(\boldsymbol{\alpha}_1,\mathbf{x})-c(1-c)r^2(\boldsymbol{\alpha}_{-1},\boldsymbol{\alpha}_1).$$

Диполь в псевдоевклидовом пространстве

Центральная идея методологии обучения распознаванию образов в произвольных метрических пространствах, предлагаемая в данной работе, заключается в использовании расстояния с учетом знака $(\hat{c}_{\mathbf{x}} - 1/2)$ как параметрического семейства дискриминантных функций, каждая из которых задает некоторое разбиение псевдоевклидова пространства $\mathbb{R}^M$ на три части, определяемое выбором диполя $<\boldsymbol{\alpha}_{-1}, \boldsymbol{\alpha}_1> \in \mathbb{R}^M \times \mathbb{R}^M$:

$$d(\mathbf{x} \,|\, \boldsymbol{\alpha}_{-1}, \boldsymbol{\alpha}_1) = (\hat{c}_{\mathbf{x}} - 1/2) r(\boldsymbol{\alpha}_{-1}, \boldsymbol{\alpha}_1) \begin{cases} > 0 \Rightarrow \textit{положительная часть,} \\ = 0 \Rightarrow \textit{нейтральная часть,} \\ < 0 \Rightarrow \textit{отрицательная часть.} \end{cases} \qquad (*)$$

Теорема. *Точка минимума* $\hat{c}_{\omega} = \arg\min_{c \in \mathbb{R}} r^2(\mathbf{x}_c, \mathbf{x}_{\omega})$ *определяется выражением*

$$\hat{c}_{\mathbf{x}} = \frac{1}{2} \frac{r^2(\boldsymbol{\alpha}_{-1}, \mathbf{x}) - r^2(\boldsymbol{\alpha}_1, \mathbf{x})}{r^2(\boldsymbol{\alpha}_{-1}, \boldsymbol{\alpha}_1)} + \frac{1}{2},$$

причем значение $\hat{c}_{\mathbf{x}}$ *не зависит от расстояния между узлами диполя* $r(\boldsymbol{\alpha}_{-1}, \boldsymbol{\alpha}_1)$.

Будем называть нейтральное множество, определяемое согласно (*), дискриминантной гиперплоскостью в псевдоевклидовом пространстве $\mathbb{R}^M$:

$$\mathcal{H}(\boldsymbol{\alpha}_{-1}, \boldsymbol{\alpha}_1) = \left\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^M : r^2(\boldsymbol{\alpha}_{-1}, \mathbf{x}) = r^2(\boldsymbol{\alpha}_1, \mathbf{x}) \right\} = \left\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^M : d(\mathbf{x} \,|\, \boldsymbol{\alpha}_{-1}, \boldsymbol{\alpha}_1) = 0 \right\}.$$

Диполь в псевдоевклидовом пространстве

Теорема позволяет записать дискриминантную функцию в метрических терминах:

$$d(\mathbf{x}\,|\,\boldsymbol{\alpha}_{-1},\boldsymbol{\alpha}_1)=\underbrace{\frac{1}{2}\frac{r^2(\boldsymbol{\alpha}_{-1},\mathbf{x})-r^2(\boldsymbol{\alpha}_1,\mathbf{x})}{r^2(\boldsymbol{\alpha}_{-1},\boldsymbol{\alpha}_1)}}_{\text{безразмерный коэффициент}}\underbrace{r(\boldsymbol{\alpha}_{-1},\boldsymbol{\alpha}_1)}_{\text{масштаб}}\begin{cases}>0\Rightarrow \textit{положительная часть},\\ =0\Rightarrow \textit{нейтральная часть},\\ <0\Rightarrow \textit{отрицательная часть}.\end{cases}$$

Представляется естественным искать дискриминантную функцию, наилучшим образом разделяющую обучающую совокупность в смысле $d(\mathbf{x}_{\phi,\omega_j}\,|\,\boldsymbol{\alpha}_{-1},\boldsymbol{\alpha}_1)\gtrless 0$, выражая узлы дискриминантного диполя как неизвестные аффинные комбинации векторов $\{\mathbf{x}_{\phi,\omega_1},...,\mathbf{x}_{\phi,\omega_N}\}$, в которые отображаются объекты самой обучающей совокупности:

$$\boldsymbol{\alpha}_{-1}=\sum\nolimits_{j=1}^{N}c_{-1,j}\mathbf{x}_{\phi,\omega_j},\ \sum_{j=1}^{N}c_{-1,j}=1,$$

$$\boldsymbol{\alpha}_{1}=\sum\nolimits_{j=1}^{N}c_{1,j}\mathbf{x}_{\phi,\omega_j},\quad \sum_{j=1}^{N}c_{1,j}=1.$$

Диполь в псевдоевклидовом пространстве

Теорема. *Для всякой точки* $\mathbf{x}\in\mathbb{R}^M$ *и диполя* $\boldsymbol{\alpha}_{-1},\boldsymbol{\alpha}_1\in\mathbb{R}^M$ *выполняется равенство*

$$r^2(\boldsymbol{\alpha}_{-1},\mathbf{x})-r^2(\boldsymbol{\alpha}_1,\mathbf{x})=\sum_{j=1}^{N}(c_{-1,j}-c_{1,j})r^2(\mathbf{x}_{\phi,\omega_j},\mathbf{x})-\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}\sum_{l=1}^{N}(c_{-1,j}c_{-1,l}-c_{1,j}c_{1,l})\rho^2(\omega_j,\omega_l).$$

В равенстве только первая сумма в правой части зависит от предъявленного объекта $\omega\in\Omega$, являясь линейной комбинацией квадратов его расстояний от объектов обучающей совокупности, причем в качестве коэффициентов выступают разности $c_{-1,j}-c_{1,j}$, сумма которых для любого диполя $\boldsymbol{\alpha}_{-1},\boldsymbol{\alpha}_1\in\mathbb{R}^M$ должна равняться нулю:

$$a_j=c_{-1,j}-c_{1,j},\quad \sum_{j=1}^{N}a_j=0.$$

Значения коэффициентов $(a_1,...,a_N)$ определяют ориентацию диполя в псевдоевклидовом пространстве относительно образов объектов обучающей совокупности $\{\mathbf{x}_{\omega_1},...,\mathbf{x}_{\omega_N}\}$, оставляя свободными как «параллельный перенос» диполя, так и его «сдвиг» вдоль своей оси. Именно этот «сдвиг» и характеризует вторая двойная сумма, которая является константой по отношению к предъявленному объекту $\omega\in\Omega$:

$$b=-\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}\sum_{l=1}^{N}(c_{-1,j}c_{-1,l}-c_{1,j}c_{1,l})\rho^2(\omega_j,\omega_l).$$

Решающее правило и критерий обучения

Эквивалентное выражение для дискриминантной функции, полностью определяется $N+1$ действительными числами $(a_1,...,a_N,b)$:

$$d(\mathbf{x}\,|\,a_1,...,a_N,b)=\frac{1}{2}\left[\sum_{j=1}^{N}a_j r^2(\mathbf{x}_{\omega_j},\mathbf{x})+b\right]\gtrless 0,$$

$$\sum_{j=1}^{N}a_j=0,\quad \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}\sum_{l=1}^{N}\left(-\rho^2(\omega_j,\omega_l)\right)a_j a_l=1.$$

Поскольку достаточно искать дискриминантную функцию, образуемую диполем единичной длины, то такой критерий обучения относительно искомых узлов диполя естественно записать как следующую задачу оптимизации с ограничениями в исходном метрическом пространстве:

$$\begin{cases} 1/\varepsilon^2+C\sum_{j=1}^{N}\delta_j\to\min(a_1,...,a_N,b,\varepsilon,\delta_1,...,\delta_N),\\ \frac{1}{2}y_j\left[\sum_{l=1}^{N}\left(-\rho^2(\omega_j,\omega_l)\right)a_l+b\right]\geqslant\varepsilon(1-\delta_j),\\ \delta_j\geqslant 0,\ \ j=1,...,N,\quad \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}\sum_{l=1}^{N}\left(-\rho^2(\omega_j,\omega_l)\right)a_j a_l=1,\quad \sum_{j=1}^{N}a_j=0.\end{cases}$$

Критерий обучения. Эквивалентный вид.

Разделим обе части ограничений-неравенств во второй строке критерия на ε

$$y_j\left[\sum_{l=1}^{N}\left(-\rho^2(\omega_j,\omega_l)\right)\frac{a_l}{2\varepsilon}+\frac{b}{2\varepsilon}\right]\geqslant 1-\delta_j$$

и выполним замену переменных:

$$\overline{a}_l=\frac{a_l}{2\varepsilon},\overline{b}=\frac{b}{2\varepsilon}.$$

С учетом этой замены ограничение-равенство в последней строке критерия примет вид:

$$2\sum_{j=1}^{N}\sum_{l=1}^{N}\left(-\rho^2(\omega_j,\omega_l)\right)\overline{a}_j\overline{a}_l=\frac{1}{\varepsilon^2}.$$

Мы приходим к следующей задаче обучения, эквивалентной исходной задаче:

$$\begin{cases}\sum_{j=1}^{N}\sum_{l=1}^{N}\left(-\rho^2(\omega_j,\omega_l)\right)\overline{a}_j\overline{a}_l+\overline{C}\sum_{j=1}^{N}\delta_j\rightarrow\min(\overline{a}_1,...,\overline{a}_N,\overline{b},\delta_1,...,\delta_N),\ \overline{C}=C/2,\\ y_j\left[\sum_{l=1}^{N}\left(-\rho^2(\omega_j,\omega_l)\right)\overline{a}_l+\overline{b}\right]\geqslant 1-\delta_j,\quad \delta_j\geqslant 0,\ j=1,...,N.\end{cases}$$

Двойственная форма задачи обучения

Теорема. *Двойственная форма задачи обучения имеет вид:*

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^{N} \lambda_j - \frac{1}{4} \sum_{j=1}^{N} \sum_{l=1}^{N} y_j y_l \left(-\rho^2(\omega_j, \omega_l) \right) \lambda_j \lambda_l \to \max(\lambda_1, ..., \lambda_N), \\ \sum_{j=1}^{N} y_j \lambda_j = 0, 0 \leqslant \lambda_j \leqslant \bar{C}, j = 1, ..., N. \end{cases}$$

Ее решение $(\lambda_1, ..., \lambda_N)$ полностью определяет параметры решающего правила распознавания:

$$\bar{a}_j = \frac{1}{2} y_j \lambda_j, \ \sum_{j=1}^{N} \bar{a}_j = 0, \ \bar{b} = \frac{(1/2) \sum\limits_{j: 0 < \lambda_j < \bar{C}} \lambda_j \sum\limits_{l: \lambda_l > 0} \rho^2(\omega_j, \omega_l) y_l \lambda_l - \bar{C} \sum\limits_{j: \lambda_j = \bar{C}} y_j}{\sum\limits_{j: 0 < \lambda_j < \bar{C}} \lambda_j},$$

а также значение максимального зазора в

$$\frac{1}{\varepsilon^2} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N} \sum_{l=1}^{N} y_j y_l \left(-\rho^2(\omega_j, \omega_l) \right) \lambda_j \lambda_l .$$

Скорректированная двойственная форма задачи обучения

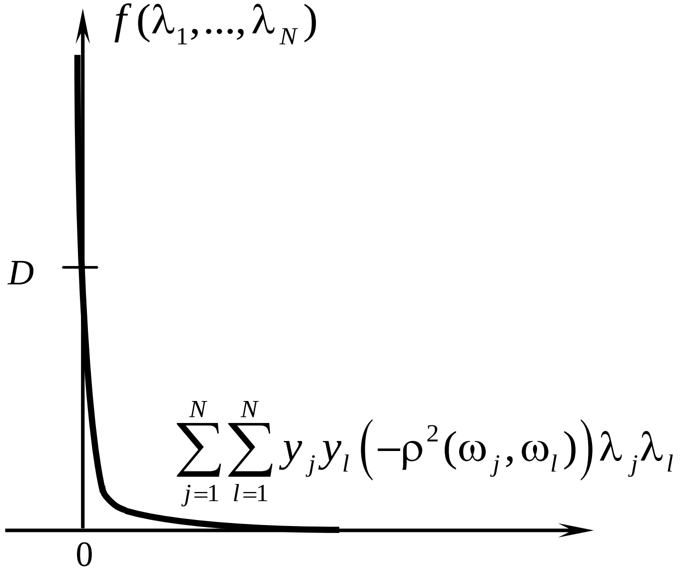
Введение дополнительного ограничения $\sum_{j=1}^{N}\sum_{l=1}^{N} y_j y_l \left(-\rho^2(\omega_j,\omega_l)\right)\lambda_j\lambda_l \geq 0$ в двойственную задачу существенно усложнит решение двойственной задачи, являвшейся до сих пор стандартной задачей квадратичного программирования. Вместо строгого ограничения удобно использовать подходящую штрафную функцию, «почти точно» выражающую его требование.

Предлагается следующий вид штрафной функции:

$$f(\lambda_1,\dots,\lambda_N) = D\exp\left\{-D\sum_{j=1}^{N}\sum_{l=1}^{N} y_j y_l \left(-\rho^2(\omega_j,\omega_l)\right)\lambda_j\lambda_l\right\},$$

где D – достаточно большое число, значение которого само должно ассоциироваться с «очень большим» штрафом, например, $D = 10^{10}$.

Скорректированная двойственная форма задачи обучения



$$f(\lambda_1,...,\lambda_N)\begin{cases} \to\infty, \sum_{j=1}^{N}\sum_{l=1}^{N} y_j y_l \left(-\rho^2(\omega_j,\omega_l)\right)\lambda_j\lambda_l \to -\infty, \\ = D \gg 0, \sum_{j=1}^{N}\sum_{l=1}^{N} y_j y_l \left(-\rho^2(\omega_j,\omega_l)\right)\lambda_j\lambda_l = 0, \\ \to 0, \sum_{j=1}^{N}\sum_{l=1}^{N} y_j y_l \left(-\rho^2(\omega_j,\omega_l)\right)\lambda_j\lambda_l \to \infty. \end{cases}$$

Предлагается вместо «наивной» двойственной задачи решать задачу

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^{N}\lambda_j - \frac{1}{4}\sum_{j=1}^{N}\sum_{l=1}^{N} y_j y_l \left(-\rho^2(\omega_j,\omega_l)\right)\lambda_j\lambda_l - D\exp\left\{-D\sum_{j=1}^{N}\sum_{l=1}^{N} y_j y_l \left(-\rho^2(\omega_j,\omega_l)\right)\lambda_j\lambda_l\right\} \to \max_{\lambda_1,...,\lambda_N}, \\ \sum_{j=1}^{N} y_j\lambda_j = 0,\ 0 \leqslant \lambda_j \leqslant C/2,\ j = 1,...,N. \end{cases}$$

Скорректированная двойственная форма задачи обучения

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^{N}\lambda_j - \frac{1}{4}\sum_{j=1}^{N}\sum_{l=1}^{N} y_j y_l \left(-\rho^2(\omega_j,\omega_l)\right)\lambda_j\lambda_l - D\exp\left\{-D\sum_{j=1}^{N}\sum_{l=1}^{N} y_j y_l \left(-\rho^2(\omega_j,\omega_l)\right)\lambda_j\lambda_l\right\} \to \max_{\lambda_1,\ldots,\lambda_N}, \\ \sum_{j=1}^{N} y_j\lambda_j = 0,\ 0\leqslant\lambda_j\leqslant C/2,\ j=1,\ldots,N. \end{cases}$$

Двойственная задача универсальна, но она не является квадратичной, поскольку функция штрафа не является таковой. Задача относится к общему классу задач выпуклого (вогнутого) программирования, если метрика заведомо является евклидовой, и легко численно решается.

Однако, в случае неевклидовой метрики двойственная задача теряет свойство вогнутостости, поскольку квадратичная форма $\sum_{j=1}^{N}\sum_{l=1}^{N} y_j y_l \left(-\rho^2(\omega_j,\omega_l)\right)\lambda_j\lambda_l$ не является условно неотрицательно определенной. Однако присутствие штрафной функции, отсекающей область отрицательных значений этой квадратичной формы, существенно нивелирует невогнутость целевой функции, и, как показывает опыт, задача хорошо решается обычными методами выпуклого (вогнутого) программирования.