А.М. Крашенинников, Н.И. Гданский, М.Л. Рысин

Линейная классификация объектов с использованием нормальных гиперплоскостей

В системах искусственного интеллекта одной из основных функций является распознавание, позволяющее соотнести исследуемый объект a к одному из ранее выделенных классов $A_1, A_2, \ldots A_k$.

Применение многослойных нейронных сетей для построения нелинейных классификаторов требует выполнения большого объема вычислений либо не дают приемлемого решения. В частности, метод обратного распространения ошибки не всегда дает успешные результаты при обучении многослойных сетей из-за паралича сети или попадания в локальный минимум.

Геометрический подход к распознаванию основан на пространственном представлении совокупности признаков $\{x_i\}$, характеризующих объекты в многомерном евклидовом пространстве U. Каждому объекту a соответствует своя точка $\bar{x}(a)\epsilon U$. При данном способе интерпретации объектов в роли классификатора выступает одна или несколько гиперповерхностей в пространстве U, разделяющих множества точек в U, соответствующие заданным классам $A_1, A_2, \ldots A_k$.

Рассмотрим использование нормальных разделяющих гиперплоскостей на примере пары классов.

Обозначим координаты центров тяжести классов A_1, A_2, через $\bar{C}_1$ и $\bar{C}_2$, радиусы их (расстояния от центра до максимально удаленной точки) - через R_1, R_2, ***Межцентровым*** назовем вектор$\bar{C}_{12}$, соединяющий центрыC_1 иC_2. По определению $\bar{C}_{12} = \bar{C}_2 - \bar{C}_1$. Длину вектора$\bar{C}_{12}$обозначим ρ_{12} и назовем ***межцентровым расстоянием*** множеств A_1, A_2,.

Для упрощения построения разделяющих гиперповерхностей в пространстве U предложено использовать гиперплоскости, нормальные к вектору $\overline{C_1 C_2}$. Для краткости они названы ***нормальными***. Уравнение нормальной плоскости имеет простой вид:

$$N_{12}(\bar{x}, C_0) = (\bar{C}_{12}, \bar{x}_1) + C_0 = 0 \qquad (1)$$

Основной геометрический смысл нормальных гиперплоскостей в том, что при наличии линейной разделимости классов A_1 , A_2 ориентация соответствующей гиперплоскости-классификатора Γ_{12} относительно осей пространства U близка к ориентации осей у нормальных гиперплоскостей $N_{12}\,(C_0)$.

Нормально разделимыми назовем такую пару классов A_1 , A_2 , для которых существует нормальная разделяющая их гиперплоскость. Данный вид является частным случаем линейной разделимости.

Фактически, единственным управляемым параметром плоскости является ее свободный коэффициент C_0 . Обозначим через $\bar{P}_0$ точку пересечения нормальной плоскости с межцентровым вектором $\bar{C}_{12}$, приложенным в точке $\bar{C}_1$. Связь C_0 и $\bar{P}_0$ и следующая:$C_0 = -(\bar{C}_{12}, \bar{P}_0\,)$.

Для определенности будем считать, что условием разделения для точек классов A_1 и A_2 является следующая пара неравенств:

$$N_{12}\,(x, C_0) \geq 0, \text{ если } x\epsilon A_1,$$
$$N_{12}\,(\bar{x}, C_0) < 0, \text{ если } \bar{x}\epsilon A_2. \qquad (2)$$

Соответственно, два класса A_1, A_2, будем называть ***нормально разделимыми***, если для них существует разделяющая их нормальная гиперплоскость. Доказаны две теоремы, описывающие условия существования нормальной разделимости классов в многомерном пространстве признаков.

Теорема 1. Если для классов A_1, A_2, имеющих радиусы R_1, R_2, а также межцентровое расстояние ρ_{12}, выполняется условие

$$\rho_{12} > R_1 + R_2 \qquad (3)$$

то данные классы нормально разделимы и, в частности, классификатором будет являться нормальная гиперплоскость $N_{12}(\bar{x}, C_0)$, у которой свободный коэффициент C_0 принимает следующее значение:

$$\overline{P_0} = \bar{C}_1 + \frac{\overline{C_{12}} \cdot R_1}{(R_1 + R_2)},$$

$$C_0 = -(\bar{C}_{12}, \bar{P}_0) = -(\bar{C}_{12}, \bar{C}_1 + \frac{\overline{C_{12}} \cdot R_1}{(R_1 + R_2)}). \qquad (4)$$

Формула (4) задает положение точки P_0 на межцентровом векторе пропорционально радиусам разделяемых множеств.

Теорема 1 задает простейшее по форме достаточное, но не являющееся необходимым условие нормальной разделимости классов. Его преимуществом является то, что в нем не требуется дополнительно рассматривать отдельные точки классов A_1 и A_2. Для краткости вариант разделимости, при котором удовлетворяется условие (3), назовем ***шаровым***.

Пример 1. Рассмотрим в двухмерном пространстве признаков $\{x_1, x_2\}$ множества точек $A_1 = \{(2,2); (3,1); (4,0); (5,1)\}$ и $A_2 = \{(3,6); (4,5); (5,6); (6,7)\}$ (рис.1).

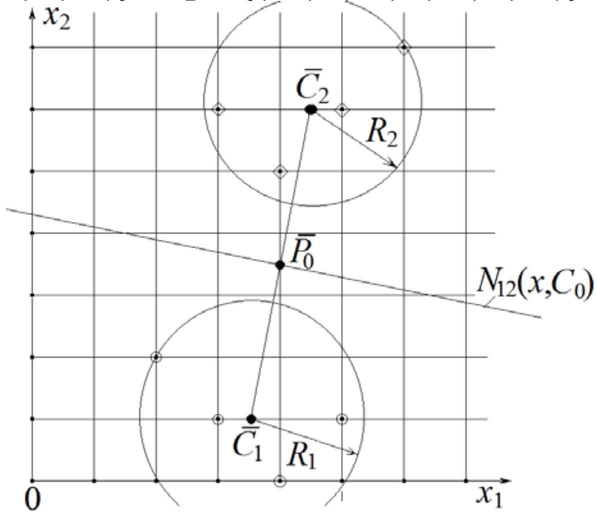

Рис. 1. - Множества точек в двухмерном пространстве признаков.

Координаты центров тяжести, радиусы множеств, межцентровый вектор и межцентровое расстояние следующие: $\bar{C}_1 = (3{,}5; 1)$; $\bar{C}_2 = (4{,}5; 6)$; $R_1 = 1{,}80$; $R_{12} = 1{,}80$; $C_{12} = (1{,}5)$; $\rho_{12} = 5{,}09$. Условие (3) выполняется: $1{,}80 + 1{,}80 < 5{,}09$. Следовательно, шаровая разделимость существует. Координаты точки $\overline{P_0}$ и свободный коэффициент C_0 разделяющей нормальной прямой:

$$\overline{P_0} = \bar{C}_1 + \frac{\overline{C_{12}} \cdot R_1}{(R_1 + R_2)} = (4; 3{,}5), \quad C_0 = -(\bar{C}_{12}, \bar{P}_0) = -21{,}5.$$

Уравнение разделяющей нормальной прямой $N_{12}(\bar{x}, C_0)$:

$$N_{12}(\bar{x}, C_0) = x_1 + 5x_2 - 21{,}5 = 0.$$

Если форма множеств точек $A_1 = \{\overline{x(a_1)}\}$ и $A_1 = \{\overline{x(a_1)}\}$ значительно отличается от шаровой (они являются существенно вытянутыми вдоль одной или нескольких пространственных осей), то нормальная разделимость у классов A_1,A_2 может присутствовать и при значительном нарушении условия Теоремы 1. Изучение этого случая нормальной разделимости требует дополнительного исследования отдельных точек классов.

Для быстрой проверки возможного отсутствия нормальной разделимости классов предложено использовать набор простых условий.

Допустим, для классов A_1, A_2 с межцентровым вектором $\bar{C}_{12}$ и межцентровым расстоянием ρ_{12} построена нормальная плоскость $N_{12}(\bar{x}, C_0)$, которая не является разделяющей. При этом нарушается либо только одно из условий разделимости (2) либо одновременно оба.

Обозначим через $\bar{x}\left(a_{1(m1)}\right)$ максимально удаленную от $N_{12}(\bar{x}, C_0)$, в которой нарушается условие разделения (2) для точек $\bar{x} \epsilon A_1$, т.е. $N_{12}(\bar{x}, C_0) < 0$, и модуль $N_{12}(x, C_0)$ максимален. Если для данных точек нарушения нет (у всех $N_{12}(\bar{x}, C_0) \geq 0$), то принимаем в качестве $\bar{x}\left(a_{1(m1)}\right)$ такую точку, в которой модуль $N_{12}(\bar{x}, C_0)$, минимален.

Аналогично через $\bar{x}\left(a_{2(m2)}\right)$ обозначим максимально удаленную от $N_{12}(\bar{x}, C_0)$ точку, в которой нарушается условие разделения (2) для точек $\bar{x} \epsilon A_2$. Для нее $N_{12}(\bar{x}, C_0) \geq 0$ и величина $N_{12}(\bar{x}, C_0)$ максимальна. Если для точек $\bar{x} \epsilon A_2$ нарушения условия разделимости нет (у всех$N_{12}(x, C_0) < 0$), то принимаем в качестве $\bar{x}\left(a_{2(m2)}\right)$ такую точку, в которой модуль $N_{12}(\bar{x}, C_0)$ минимален.

Для исследования более сложных случаев нормальной разделимости введем вспомогательные понятия.

Рассмотрим плоскость $\pi(\bar{P}_0, \bar{V}_j)$, проходящую через точку $\bar{P}_0$ перпендикулярно вектору $\bar{V}_j$. Уравнение для координат любой точки $\bar{P}$ плоскости π, можно задать в виде неявной зависимости вида:

$$F\left(\bar{P}, \pi(\overline{P_0}, \overline{V_j})\right) = \left(\bar{P} - \overline{P_0}, \overline{V_j}\right) = 0$$

Данную функцию можно также использовать для определения расстояния от произвольной точки $\bar{x}(a_{1i})$ до плоскости $\pi(\overline{P_0}, \overline{V_j})$:

$$\rho\left(\bar{x}(a_{1i}), \pi(\overline{P_0}, \overline{V_j})\ \right) = \frac{\left|(\bar{x}(a_{1i}) - \overline{P_0}, \overline{V_j}\right|}{\left|\overline{V_j}\right|},$$

где $\left|\bar{V}_j\right|$ - длина вектора $\bar{V}_j$.

Позицией точки $\bar{\bar{x}}(a_{1i})$ из класса A_1 с центром $\bar{C}_1$ относительно плоскости $\pi(\overline{P_0}, \overline{V_j})$ назовем величину

$$\rho\left(\bar{x}(a_{1i}), \overline{C_1}, \pi(\overline{P_0}, \overline{V_j})\ \right) =$$
$$\rho\left(\bar{x}(a_{1i}), \pi(\overline{P_0}, \overline{V_j})\right) \cdot \mathrm{sign}(\mathrm{F}(\bar{x}(a_{1i}), \pi(\overline{P_0}, \overline{V_j}))) \cdot \mathrm{sign}(\mathrm{F}(\overline{C_1}, \pi(\overline{P_0}, \overline{V_j}))). \quad (5)$$

Смысл введенного понятия в том, что если точка$\bar{x}(a_{1i})$ и центр $\overline{\bar{C_1}}$ множества A_1 лежат по одну сторону от плоскости π, то позиция $\rho\left(\bar{x}(a_{1i}), \overline{C_1}, \pi(\overline{P_0}, \overline{V_j})\ \right)$ положительна. Если они лежат по разные стороны, то величина позиции отрицательна. Так как нормальным вектором к нормальной плоскости π для множества A_1 принимают $(-\bar{C}_{12})$, а для A_2 - $(+\bar{C}_{12})$, то практические формулы для расчета позиций точек множеств A_1 и A_2 принимают следующий вид:

а) $a \epsilon A_1$, $\quad p_1\left(\bar{x}(a), \overline{C_1}, \pi(\overline{P_0}, \overline{V_j})\ \right) = ((\overline{P_0} - \bar{x}(a)), \bar{C}_{12})/\rho_{12}$,

б) $a \epsilon A_2$, $\quad p_2\left(\bar{x}(a), \overline{C_2}, \pi(\overline{P_0}, \overline{V_j})\ \right) = ((\bar{x}(a) - \overline{P_0}), \bar{C}_{12})/\rho_{12}$.

Позицией множества A_1 с центром $\bar{C}_1$ относительно плоскости $\pi(P_0, V_j)$ назовем величину $p\left(A_1, \pi(\overline{P_0}, \overline{V_j})\right) = \min\left\{p\left(\bar{x}(a_{1i}), \bar{C}_{1,} \pi(\overline{P_0}, \overline{V_j})\right)\right\}$, где $a_{1i} \epsilon A_1$.

При анализе нормальной разделимости множеств A_1 и A_2 в качестве нормального вектора плоскости $\overline{V_j}$ примем межцентровый вектор $\bar{C}_{12}$ и на нем же будем рассматривать начальные точки плоскости $\overline{P_0}$.

Критерий нормальной разделимости для классов A_1, A_2 можно задать в следующей форме.

Теорема 2. Классы A_1, A_2 с межцентровым вектором $\bar{C}_{12}$ нормально разделимы тогда и только тогда, когда относительно какой-либо опорной нормальной плоскости

$\pi(\overline{P_0}, \bar{C}_{12})$ для их позиций $\delta_1 = p(A_1, \pi(\overline{P_0}, \bar{C}_{12})$, $\delta_2 = p(A_2, \pi(\overline{P_0}, \bar{C}_{12})$ выполняется условие:

$$\delta_1 + \delta_2 \geq 0 \qquad (6)$$

В частности, в качестве нормально разделяющей плоскости $\pi'(\bar{P}'_0, \bar{C}_{12})$ может быть принята плоскость, полученная сдвигом δ точки $\overline{P_0}$ по вектору $\bar{C}_{12}$:

$$\delta = (\delta_1 + \delta_2) \cdot [\frac{R_1}{R_1 + R_2} - 0{,}5(1 + \mathrm{sign}(\delta_1))],$$

новой точкой P'_0 и свободным параметром C'_0:

$$\bar{P}'_0 = \bar{P}_0 + \delta \cdot \bar{C}_{12}/\rho_{12}, \bar{C}'_0 = C_0 - \delta \cdot \rho_{12}$$

Доказательство теоремы не составляет большого труда. При доказательстве достаточности, в частности, несложно показать, что в тех случаях, когда опорная нормальная плоскость , $\pi(\overline{P_0}, \bar{C}_{12})$ не является разделяющей (а) $\delta_1 > 0$, $\delta_2 < 0$; $|\delta_1| \geq |\delta_2|$; б) $\delta_1 < 0$, $\delta_2 > 0$; $|\delta_2| > |\delta_1|$, то соответствующую разделяющую плоскость можно получить, задавая ее точке пересечения с межцентровым вектором смещение, равное $-(\delta_1 + \delta_2) \cdot R_2 / (R_1 + R_2)$ (в случае а)) и $(\delta_1 + \delta_2) \cdot R_1 / (R_1 + R_2)$ (в случае б)). В качестве опорной плоскости в Теореме 2 удобнее всего использовать нормальную плоскость, используемую в Теореме 1.

Пример 2. Рассмотрим в двухмерном пространстве признаков $\{x_1, x_2\}$ множество точек A_1 ={(1,2);(2,1);(4,1);(5,2)} и A_2 = {(2,3);(3,3);(4,4)} (рис.2).

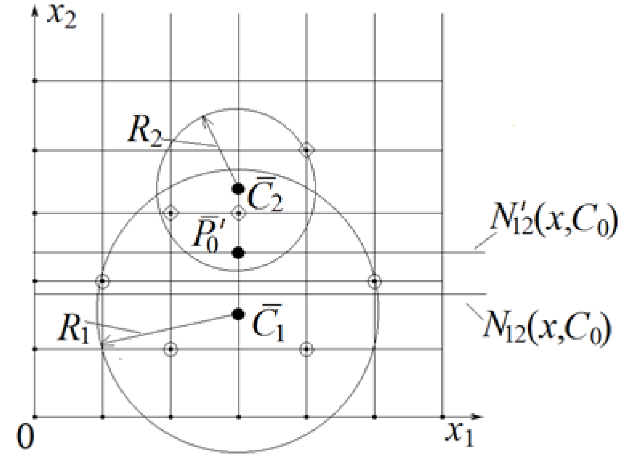

Рис.2. - Множества точек в двухмерном пространстве признаков.

Координаты центров тяжести, радиусы множеств, межцентровой вектор и межцентровое расстояние следующие:

$\bar{C}_1 = (3; 1{,}5)$; $\bar{C}_2 = (3; 3{,}33)$; $R_1 = 2{,}06$; $R_2 = 1{,}20$; $\bar{C}_{12} = (0; 1{,}83)$ $\rho_{12} = 1{,}83$.

Условие (3) не выполняется: 2,06 + 1,20 > 1,83. Следовательно, шаровой разделимости не существует. Проверим выполнение условий Теоремы 2. Координаты точки P_0 и свободный коэффициент C_0 опорной нормальной прямой:

$$\bar{P}_0 = \bar{C}_1 + \bar{C}_{12} \cdot R_1/(R_1 + R_2) = (3{,}00; 2{,}66),\ \bar{C}_0 = -(\bar{C}_{12}, \bar{P}_0) = -4{,}86.$$

Примем в качестве опорной прямой N_{12} (x, C_0) линию:

$$N_{12}\ (\bar{x}, C_0) = x_2 - 1{,}80 = 0$$

Позиции точек множества A_1 относительно опорной прямой равны: -0,20; 0,80; 0,80, -0,20. Позиция множества A_1 относительно опорной плоскости N_{12} (x, C_0) равна $\rho\big(A_1, N_{12}(x, C_0)\big) = \min\{-0{,}20; 0{,}80; 0{,}80; -0{,}20\} = -0{,}20$.

Позиции точек множества A_2 относительно опорной прямой равны: 1,20; 1,20; 2,20.Позиция множества A_1 относительно опорной плоскости $N_{12}(x, C_0)$ равна

$$\rho\big(A_2, N_{12}(x, C_0)\big) = \min\{1{,}20; 1{,}20; 2{,}20\} = 1{,}20.$$

Условия Теоремы 2 выполняются: -0,20+1,20 = 1,00 > 0. Рассчитываем смещение δ по межцентровому вектору, новое положение точки $\bar{P}'_0$ и новое значение свободного параметра разделяющей прямой C'_0:

$$\delta = (-0{,}20 + 1{,}20)\ [2{,}06/(2{,}06 + 1{,}20) - 0{,}5(1 - 1)] = 0{,}63;$$

$\bar{P}''_0 = \bar{P}'_0 + \delta \cdot \bar{C}_{12}/\rho_{12} = (3{,}00; 1{,}80) + 0{,}63 \cdot$ (0;1,83)/1,83= (3; 2,43);

$C'_0 = -\left(C_{12}, \bar{P}'_0\right) = -(0; 1{,}83)(3; 2{,}43) = -4{,}45.$

Уравнение нормальной разделяющей линии имеет вид:

$N'_{12}(x, C_0) = (\bar{x}, \bar{C}_{12}) + C'_0 = 1{,}83x_2 - 4{,}45 = 0.$

После сокращения на 0,83 данное уравнение принимает вид:

$N'_{12}(x, C_0) = x_2 - 2{,}43 = 0.$

Принцип линейной нормальной классификации объектов в многомерных пространствах признаков может быть использован для построения классификаторов для нелинейно разделимых множеств, более эффективных в плане сложности вычислений по сравнению с многослойными нейросетями.

Список литературы:

1. Каллан Р. Основные концепции нейронных сетей = The Essence of Neural Networks First Edition. — 1-е. // «Вильямс», 2001. — С. 288.
2. Комарцова Л. Г., Максимов А. В. Нейрокомпьютеры. — 1-е. // Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2002. — С. 320.
3. Круглов В. В., Борисов В. В. Искусственные нейронные сети. Теория и практика.// Телеком, 2001. — С. 382.
4. Патрик Э. Основы теории распознавания образов. // Сов. радио, 1980.
5. Ясницкий Л.Н. Введение в искусственный интеллект. — 1-е. // Издательский центр «Академия», 2005. — С. 176.